

POLITECHNIKA WROCŁAWSKA
WYDZIAŁ ELEKTRONIKI

KIERUNEK: INFORMATYKA
SPECJALNOŚĆ: SYSTEMY INFORMATYKI W MEDYCYNIE

PRACA DYPLOMOWA
MAGISTERSKA

Analiza porównawcza wybranych metod
selekcji cech w zadaniu klasyfikacji danych
niezbalansowanych.

Comparative analysis of feature selection
techniques in imbalanced data classification
problems.

AUTOR:
Maciej Hajduk

OPIEKUN PRACY:
dr inż. Paweł Trajdos, KSSK

Spis treści

1	Wstęp	3
1.1	Wprowadzenie	3
2	Analiza problemu	5
2.1	Przegląd literaturowy	5
2.2	Cel selekcji cech	6
2.3	Podstawowy podział	6
2.3.1	Metody Rankingowe	7
2.3.2	Metody opakowane	7
2.3.3	Metody wbudowane	7
2.4	Selekcja cech a ekstrakcja	7
3	Szczegółowa charakterystyka zagadnienia	10
4	Założenia i plan eksperymentu	12
4.1	Ocena działania algorytmów	12
5	Wyniki	12
6	Wnioski	14
7	Bibliografia	16
8	Zawartość płyty CD	18

1 Wstęp

1.1 Wprowadzenie

Celem pracy jest porównanie różnych metod selekcji cech w problemie trenowania algorytmów uczenia maszynowego na danych niezbalansowanych. W jej ramach, przedstawione i opisane zostaną popularne obecnie metody selekcji oraz przeprowadzone zostaną eksperymenty dla przykładowych zbiorów danych, zarówno naturalnych jak i sztucznie wygenerowanych, celem których będzie stworzenie rankingu algorytmów. Autor sprawdzi, jak właściwie przeprowadzona selekcja wpływa na jakość wyników dostarczanych przez klasyfikator i jak przytoczone przez niego metody radzą sobie z danymi, w których występuje znaczna przewaga liczebności jednej bądź kilku klas. Aspekt inżynierski opierać się będzie na implementacji zaproponowanych w pracy eksperymentów, co pozwoli na kompleksowe porównanie algorytmów.

Praca swoim zakresem obejmuje

Praca składa się z pięciu rozdziałów:

Rozdział pierwszy: Na rozdział pierwszy składają się omówienie analizy wybranego problemu, przegląd przedstawienie motywacji podjęcia tego tematu oraz przegląd literatury.

Rozdział drugi: Szczegółowa charakterystyka zagadnienia...

Rozdział trzeci: Założenia i plan eksperymentu. W rozdziale trzecim zawarte zostaną informacje związane z inżynierskim aspektem pracy, czyli projekt systemu, plan poszczególnych eksperymentów i opis danych, jakie użyte zostaną podczas doświadczeń.

Rozdział czwarty: Wyniki eksperymentów...

Rozdział piąty: Podsumowanie otrzymanych wyników, wnioski...

Udało się zrealizować wszystkie postawione cele.

2 Analiza problemu

Uczenie maszynowe to bardzo dynamicznie rozwijająca się gałąź informatyki. Niezwykła ekspansja wynika z zapotrzebowania na wykrywanie prawidłowości, uogólnianie oraz precyzowanie danych. Takie możliwości pozwoliły znaleźć zastosowanie dla algorytmów sztucznej inteligencji w bardzo wielu różnych branżach - począwszy od medycyny, poprzez finanse, produkcję i branżę rozrywkową. Tak duży przekrój różnych zastosowań wymaga ciągłego ulepszania istniejących już wzorców oraz wymyślania nowych, lepszych i bardziej efektywnych algorytmów. W większości praktycznych problemów do klasyfikacji obiektów, autor programu operuje na dużej ilości cech. Należy jednak pamiętać, że w tym przypadku wiele, nie oznacza wcale lepszych rezultatów. Należy przytoczyć pojęcie „przekleństwa wielowymiarowości”. Oznacza ono, że większy wymiar wymaga od programisty znacznie większej ilości danych, oraz wraz ze wzrostem ilości cech wykładniczo rośnie liczba możliwych wariantów, co znacznie zwiększa złożoność obliczeniową naszych algorytmów.

Aby uniknąć problemów generowanych przez zbyt dużą ilość cech, a jednocześnie wykorzystać cech, które zapewniają jak najlepszą separowalność klas, zazwyczaj pierwszym krokiem w zadaniu klasyfikacji jest selekcja lub ekstrakcja najodpowiedniejszych cech.

2.1 Przegląd literaturowy

W rozdziale zostaną pokrótce opisane wybrane artykuły naukowe zajmujące się tematyką selekcji cech. Jest to, szczególnie ostatnio, często poruszany problem, co skutkuje dużym przekrojem prac, również w ujęciu czysto dziedzinowym - jak wykorzystanie konkretnych algorytmów dla bardzo konkretnych zastosowań.

Wstępną analizę problemu przedstawił Jakub Piątkowski w pracy *Analiza i rozwój metod doboru cech dla dużych problemów klasyfikacyjnych*. Autor wymienia istniejące metody doboru cech i szczegółowo je opisuje. Jest to dobre wprowadzenie do problematyki klasyfikacji i selekcji cech, a każda przytoczona metoda ma również podłoże matematyczne opisane odpowiednimi wzorami. W podobnej pracy *Redukcja wymiarowości i selekcja cech w zadaniach klasyfikacji i regresji z wykorzystaniem uczenia maszynowego*, twórca zacytował wyniki swoich eksperymentów, które pozwoliły mu na tworzenie rankingów algorytmów. Tezy postawione przez autora zostaną sprawdzone w tej pracy. Szczegółowo do problemu podszedł mgr Wiesław Chmielnicki, w swojej rozprawie: *Efektywne metody selekcji cech i rozwiązywania problemu wieloklasowego w nadzorowanej klasyfikacji danych*. Oprócz opisu znanych metod, artykuł zawiera również sugestie dotyczące nowych algorytmów hybrydowych, które w niektórych przypadkach dają lepsze wyniki niż metody tradycyjne. Mark A. Hall porusza interesujący temat w swojej książce *Correlation-based Feature Selection for Machine Learning*, badając wartość zestawu cech na podstawie korelacji pomiędzy nimi. Autor przeprowadził szereg eksperymentów, porównał swoją metodę z metodami powszechnie stosowanymi, starając się między innymi wyodrębnić

problemy, dla których jego algorytm jest najbardziej skuteczny. Twórcy pracy *A Survey on Evolutionary Computation Approaches to Feature Selection* zajęli się przeglądem znanych metod tworząc dokument podsumowujący każdą z nich, z jej wadami oraz zaletami. Artykuł jest oparty na przeglądzie najnowszych prac w zadanej dziedzinie i pozwala na dobranie odpowiedniej metody do danego zadania. Ważna dla tematu tej pracy jest również rozprawa *Zastosowanie wybranych metod przekształcania i selekcji danych oraz konstrukcji cech w zadaniach klasyfikacji i klasteryzacji* mgr inż. Piotra Płońskiego, podsumowująca niejako cały proces uczenia maszynowego i roli, jaką pełni selekcja cech w kontekście dobrze działającego systemu analizy danych.

2.2 Cel selekcji cech

Selekcja cech polega na identyfikacji tych elementów puli cech, które uznawane są za najlepsze deskrytory rozważanych kategorii. Zaletą selekcji jest możliwość zbadania tych deskryptorów, które są istotne z punktu widzenia danego zadania klasyfikacji, czyli jednocześnie zrozumienia różnic między analizowanymi kategoriami. Poprzez proces selekcji cech tracimy niestety bezpowrotnie część początkowych cech, a wiedza w cechach wybranych jest często dublowana. Z tego powodu nie selekcja, a ekstrakcja cech jest obecnie najpowszechniejszą strategią służącą przygotowaniu reprezentacji analizowanych danych. \ Selekcja cech jest odpowiedzialna za wybór najbardziej istotnych atrybutów badanych obiektów, co przekłada się bezpośrednio na poprawne działanie klasyfikatora. Dyspozycja coraz większymi bazami danych zmusza do optymalizacji tego procesu. Gwałtownie rosnąca liczba cech stanowi poważny problem - powoduje nie tylko wydłużenie procesu uczenia oraz wzrost złożoności klasyfikatora, ale niesie ze sobą także ryzyko spadku poprawnej klasyfikacji. Związane jest to z tak zwanym "przekleństwem wymiarowości". Zjawisko to zachodzi, gdy ilość cech znacznie przewyższa liczebność samego zbioru danych. Zadaniem selekcji cech jest również lepsze zrozumienie problemu oraz zmniejszenie kosztów archiwizacji przyszłych danych. W kolejnych rozdziałach opisane zostaną trzy główne metody tworzenia algorytmów selekcji: metody rankingowe - zwane filtrami, metody opakowane oraz metody wbudowane. Dla każdej z wymienionych metod zostanie określona idea, oraz przedstawione zostaną algorytmy reprezentujące daną metodologię.

2.3 Podstawowy podział

W kolejnych rozdziałach opisane zostaną trzy główne metody tworzenia algorytmów selekcji: metody rankingowe - zwane filtrami, metody opakowane oraz metody wbudowane. Dla każdej z wymienionych metod zostanie określona idea, oraz przedstawione zostaną algorytmy reprezentujące daną metodologię.

2.3.1 Metody Rankingowe

Najprostsze podejście do problemu selekcji cech reprezentowane jest właśnie poprzez metody rankingowe, nazywane też filtrami. Jak sama nazwa wskazuje do zadania selekcji przy pomocy metod rankingowych podchodzimy wyróżniając w zbiorze cech następujące grupy: cechy istotne, nieistotne i redundantne. Istotne to takie cechy, które odróżniają od siebie klasy, nieistotne to takie których wartości dla problemu klasyfikacji są przypadkowe, a cechy redundantne to takie których role z powodzeniem mogą przyjąć inne cechy. Metody rankingowe polegają więc na znalezieniu pewnej miary pozwalającej stworzyć taki ranking cech, a potem wybrać najlepsze cechy, a odrzucić najgorsze. Metody rankingowe zazwyczaj są najszybsze i - co istotne - nie zależą one od używanej metody analizy danych. Ich istotną wadą stanowi brak możliwości uwzględnienia zależności pomiędzy cechami. Kolejne opisane typy metod selekcji cech tej wady nie posiadają.

2.3.2 Metody opakowane

Podstawowymi metodami selekcji cech są metody opakowane, tak zwane wrappery. W przeciwieństwie do metod rankingowych, w których selekcja cech i klasyfikator pozostają niezależne, w algorytmach opakowanych selekcji, ocena atrybutów dokonuje się przy użyciu konkretnego modelu. To właśnie efektywność samego klasyfikatora służy za miarę skuteczności metody. Zaletą tej metody jest jej uniwersalność i dokładność, natomiast wadą - wysoka złożoność obliczeniowa. Dla efektywności tych algorytmów istotny jest sposób ustalania podzbioru cech. Wśród wielu metod wyszukiwania tegoż, wyróżnić można najprostszą - przeszukanie całego zbioru podzbiorów. Jest to jednak rozwiązanie bardzo kosztowne. Wobec tego typowymi strategiami są: przeszukiwanie w przód, przeszukiwanie wstecz oraz tworzenie indywidualnego rankingu.

2.3.3 Metody wbudowane

Metody wbudowane zawierają się w algorytmie klasyfikacji i to na etapie tworzenia modelu przypisuje się poszczególnym cechom wagi lub przeprowadza się ich eliminację. Do algorytmów klasyfikacji z wbudowaną metodą selekcji zaliczyć można popularne LASSO i RIDGE. W literaturze natknąć się też można na przypasowanie do tej kategorii metody wektorów nośnych (SVM) czy też analizy składowych głównych (PCA). Zaletą tych metod jest ich szybkość, ponieważ użycie ich nie wiąże się z dodatkowymi operacjami na zbiorze.

2.4 Selekcja cech a ekstrakcja

Selekcja cech ma na celu wybranie pewnych atrybutów opisujących dane pod kątem tego, czy nadają się one do dalszego wykorzystania w klasyfikacji, przy jednoczesnym odrzuceniu innych danych. Zawsze rozważana jest ona w kontekście kolejnych zadań i nie można oceniać jej skuteczności w oderwaniu od wyników metody klasyfikacji wykorzystującej wybrane zmienne. W

większości przypadków budowany jest złożony model, który może zawierać jeden lub więcej algorytmów selekcji i co najmniej jeden klasyfikator. Ekstrakcja cech natomiast polega na utworzeniu nowego zestawu zmiennych poprzez liniową lub nieliniową kombinację oryginalnych danych. W przeciwieństwie do selekcji, gdzie celem jest zawsze uzyskanie podzbioru wszystkich atrybutów, wykorzystanie ekstrakcji wiąże się z wymiarem przestrzennym mniejszym, równy lub nawet większy od wymiaru przestrzeni startowej.

3 Szczegółowa charakterystyka zagadnienia

W tym rozdziale omówiona zostanie szczegółowa analiza zagadnienia.

4 Założenia i plan eksperymentu

Temat projektu zakłada przeprowadzenie szeregu eksperymentów porównujących skuteczność popularnych metod selekcji cech. Praca swoim zakresem obejmie eksperymenty przeprowadzone na kilku, wybranych zbiorach danych. Zakłada się użycie zbiorów naturalnych - to znaczy zebranych w ramach rzeczywistych pomiarów. Bazy danych, użyte w ramach badań implikują skupienie się w większości na problemach wieloklasowych, których elementy są opisywane przez dużą liczbę cech. Hipoteza, z którą twórca będzie konfrontować wyniki eksperymentów, to założeniem że wszystkie, badane metody selekcji poradzą sobie podobnie z postawionym zadaniem, a poza względami wydajnościowymi, nie ma znaczenia funkcja, która zostanie użyta. Technologia, w jakiej zostaną przeprowadzone doświadczenie to język Python w wersji 3.8 oraz biblioteki `scikit-learn` i `pandas`.

4.1 Ocena działania algorytmów

Ważnym elementem badań jest sposób, w jaki weryfikowane są otrzymane wyniki. Sposoby te, różnić się będą w zależności od zastosowanego algorytmu, gdyż dla przykładu, metody opakowane wykonują selekcje cech równolegle z klasyfikacją danych. Dla metod rankingowych i opakowanych klasyfikatorami badającymi skuteczność powziętych działań będzie KNN - Algorytm K Najbliższych Sąsiadów. Pod uwagę brane będą funkcja straty (loss), która informuje o dopasowaniu modelu do danych, oraz dokładności (accuracy), która wylicza skuteczność klasyfikacji. Porównany zostanie również ranking cech uzyskany przez każdą z metod. Bardzo ważnym kryterium będzie czas potrzebny na wykonanie danej operacji. Eksperymenty zostaną uruchomione kilkakrotnie w izolowanym środowisku a czasy potrzebne na pełną klasyfikację uśrednione dla wykluczenia czynników zewnętrznych.

W celu określenia, która z testowanych metod daje najlepsze wyniki klasyfikacji wykorzystany zostanie test statystyczny - test Wilcoxon. Do jego wykonania użyte zostaną wartości dokładności (accuracy) uzyskane dla każdej z badanych metod.

W celu określenia, która z testowanych metod daje najlepsze wyniki klasyfikacji wykorzystany zostanie test statystyczny - test Wilcoxon. Do jego wykonania użyte zostaną wartości dokładności (accuracy) uzyskane dla każdej z badanych metod.

5 Wyniki

6 Wnioski

7 Bibliografia

- [1] Feature Selection for High-Dimensional and Imbalanced Biomedical Data Based on Robust Correlation Based Redundancy and Binary Grasshopper Optimization Algorithm, Garba Abdulrauf Sharifai and Zurinahni Zaino; 2020.
- [2] A Survey on Evolutionary Computation Approaches to Feature Selection, Bing Xue; Mengjie Zhang; Will N. Browne; Xin Yao, 2015.
- [3] Correlation-based Feature Selection for Machine Learning, Mark A Hall, University of Waikato, 1999.
- [4] Efektywne metody selekcji cech i rozwiązywania problemu wieloklasowego w nadzorowanej klasyfikacji danych, Wiesław Chmielnicki, IPPT PAN, 2012
- [6] Zastosowanie wybranych metod przekształcania i selekcji danych oraz konstrukcji cech w zadaniach klasyfikacji i klasteryzacji, Piotr Płoński, Politechnika Warszawska, 2016.
- [7] Analiza i rozwój metod selekcji cech dla dużych problemów klasyfikacyjnych, Jakub Piątkowski, Uniwersytet Mikołaja Kopernika, 2006.
- [8] Feature Selection in Imbalance data sets, International Journal of Computer Science Issues, 2013.

8 Zawartość płyty CD

Do pracy dołączono płytę CD o następującej zawartości:

- kod źródłowy programu znajdujący się w folderze /src
- gotową, zbudowaną w katalogu /dist aplikację
- katalog /docs zawierający kod źródłowy tej pracy
- plik w formacie pdf zawierający pracę