Introduction to ML Term Project

110550142 黄芷柔

1. Read csv file(有更改 helper.cpp)

由於直接讀取時,遇到空的資料會出現錯誤訊息:

```
terminate called after throwing an instance of 'std::invalid_argument'
  what(): stof
```

因此在讀資料時,如果偵測到空格就先輸入-1(原本數據裡沒有-1)。如果某一行的最後是逗號,代表那行缺最後一個資料,先在那行後面加上-1。

```
vector<float> row;
if(line[line.size()-1]==','){
    line+="-0.1";
}
stringstream ss(line);
string cell;

while (getline(ss, cell, ',')) {
    if (!cell.empty()) {
        row.push_back(stof(cell));
    } else {
        row.push_back(-1.0);
    }
}
data.push_back(row);
```

2. Data Preprocessing:

觀察資料,可以看出 F1~F17 是 Numerical Data,F18~F77 是用 0/1 表的資料,可當作 Categorical Data 處理。

```
for (int col = 0; col < 17; ++col) {
    if(IsVal==0){
        float mean_val = 0.0;
        for (int row = 0; row < df.size(); ++row) {
            | if(df[row][col]!=-1)mean_val += df[row][col];
        }
        mean_val /= df.size();
        preprocess_parameter[col][0]=mean_val;

        float std_dev = 0.0;
        for (int row = 0; row < df.size(); ++row) {
            | if(df[row][col]!=-1)std_dev += pow(df[row][col] - mean_val, 2);
        }
        std_dev = sqrt(std_dev / df.size());
        preprocess_parameter[col][1]=std_dev;
    }

// Apply Z-score_normalization to each element in the column
for (int row = 0; row < df.size(); ++row) {
        if(df[row][col]!=-1)df[row][col] = (df[row][col] - preprocess_parameter[col][0]) / preprocess_parameter[col][1];
        if(df[row][col]!=-1)df[row][col]=0;
    }
}</pre>
```

Numerical Data:用 Standardization 做 Normalization,先取不是-1 數據的平均跟標準差,再把每個數據代入以下算式,最後把空的數字用 0 取代 (Standardization 後的平均是 0)。

$$a_{i}^{'}=\frac{a_{i}-\overline{a}}{sd(a)}$$

```
for (size_t col = 17; col < 77; ++col) {
    if(IsVal==0){
        int cnt0=0,cnt1=0;
        for (int row = 0; row < df.size(); ++row) {
            if(df[row][col]==0)cnt0++;
            if(df[row][col]==1)cnt1++;
        }
        int mod;
        if(cnt0>cnt1){
            mod=0;
        }else{
            mod=1;
        }
        preprocess_parameter[col][0]=mod;
    }
    for(int row=0;row<df.size();row++){
        if(df[row][col]==-1)df[row][col]=preprocess_parameter[col][0];
    }
}</pre>
```

Categorical Data:計算數據的眾數,用眾數取代空的數據。

變數 IsVal 是紀錄數據是否為 validation,為了預防 potential data leakage issue,每個 fold 分出 train data 跟 validation data 後,先 preprocess train data,接著再用 train 算出來的 parameters(numeric data 的平均和標準差,categorical data 的眾數)用 global vector 處存,處理 validation data。

3. Classifiers

(1) Naïve Bayes:

```
private:
    // Implement private function or variable if you needed
    unordered_map<int, vector<float>> class_probabilities;
    unordered_map<int, vector<vector<float>>> class_parameters;
```

Class probabilities 負責記錄各種結果的機率,class parameters 是紀錄每個 feature 計算條件機率會用到的數據。

fit:

```
unordered_map<int, vector<vector<float>>> separated_data;
for (size_t i = 0; i < X.size(); ++i) {
    int label = y[i][0];
    separated_data[label].push_back(X[i]);
}

size_t total_samples = X.size();
for (auto &entry : separated_data) {
    int label = entry.first;
    size_t class_samples = entry.second.size();
    float class_probability = static_cast<float>(class_samples) / total_samples;
    class_probabilities[label] = {class_probability};
}
```

先根據結果是0或1把數據分成兩疊,再除以全部數據數,得到 class probabilities。

```
for (auto &entry : separated_data) {
   int label = entry.first;
   vector<vector<float>> class_data = entry.second;
   size_t num_features = class_data[0].size();

  vector<float> mean_values(17, 0.0);

  vector<float> std_dev_values(17, 0.0);

  for (size_t i = 0; i < 17; ++i) {
        for (size_t j = 0; j < class_data.size(); ++j) {
            mean_values[i] /= class_data.size();
        }

        for (size_t i = 0; i < 17; ++i) {
            for (size_t j = 0; j < class_data.size();
        }

        for (size_t j = 0; j < class_data.size();
        }

        for (size_t j = 0; j < class_data.size(); ++j) {
            std_dev_values[i] += pow(class_data[j][i] - mean_values[i], 2);
        }
        std_dev_values[i] = sqrt(std_dev_values[i] / class_data.size());
    }

    vector<vector<float>> parameters;
    parameters.push_back(mean_values);
        parameters.push_back(std_dev_values);
        class_parameters[label] = parameters;
}
```

接著,用之前分類好的 data 處理每個 feature 的條件機率,F1~F17 是 numeric data,用 normal distribution 計算機率,算出每項的平均和標準 差,存入 class parameter 以便之後預測時計算。

F18~F77 是 categorical data,計算 0 和 1 在那個結果下出現的次數,再用計算出的次數除以該結果的總數,把機率存到 class parameter。

Predict:

分別計算每個 test data 不同結果的機率,把每個條件機率的 log 值相加,numeric data 代入這個算式:

$$N(x, \mu, \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

Categorical data 依照 feature 的值找出 class parameter 存的條件機率。 兩個種類的數據如果有遇到條件機率=0 的話,就設成 0.00001

```
int predicted_label;
if(result[1]>result[0]){
    predicted_label=1;
    }else{
        predicted_label=0;
    }
    predictions.push_back({static_cast<float>(predicted_label)});
}
```

算出機率後,最大的作為預測結果。

Predict probability:

```
class_probability[label] = final_probability;
}
class_probability[0]=class_probability[0]/total_prob;
class_probability[1]=class_probability[1]/total_prob;
probabilities.push_back(class_probability);
}
return probabilities;
```

算機率的流程跟 *predict* 相同,只是最後算出來的 log 值要 exponential。 predict 時只需要比大小,只有算出 P(D|h)*P(h),而 predict probability 需要算出 P(h|D),h 是 hypothesis,D 是 data,因此算完兩種結果的 P(D|h)*P(h)後,相加得到 P(D),再拿原本算的 P(D|h)*P(h)除以 P(D),得到 P(h|D),回傳最後算出的機率。

(2) KNN

```
KNearestNeighbors(int k = 3): k(k) {

private:
    // Implement private function or variable if you needed
    int k;
    vector<vector<float>>train_X;
    vector<vector<float>>train_y;
```

把 KNN 的 k 設成 3,用最接近的三個點預測結果。train_X, train_y 用來儲存 fit 時收到的 X, y,在 predict 時用來預測。

Fit

```
void fit(vector<vector<float>> &x, vector<vector<float>> &y) override {
    // Implement the fitting logic for KNN
    train_X=X;
    train_y=y;
}
```

把輸入的 X, y 放在 train_X, train_y

```
vector<vector<float>> predictions;
for(const auto &sample:X){
    vector<float>distances;
    for(int j=0;j<train_X.size();j++){
        float dis=coutDistance(sample,train_X[j]);
        distances.push_back(dis);
    }
    vector<int> indices(distances.size());
    iota(indices.begin(), indices.end(), 0);
    partial_sort(indices.begin(), indices.begin() + k, indices.end(),
        [&distances](int i, int j) { return distances[i] < distances[j]; });</pre>
```

建一個 vector<vector<float>>prediction,作為回傳的值。計算輸入的 X 和 每個 train_X 的距離,存在 vector<float>distance 裡。再建立 vector<float>indices,大小跟 distance 一樣,是 train_X 的數量,內容設為從 0 開始的 連續整數,接著把 indices 依據距離大小排序,取前 k 個最小的。

算距離是用 Euclidean Distance,取每個 feature 差的平方,全部加在一起 後開根號。

```
unordered_map<int, int> class_counts;
for (int i = 0; i < k; ++i) {
    int neighbor_index = indices[i];
    int label = static_cast<int>(train_y[neighbor_index][0]);
    class_counts[label]++;
}
int predict_label=-1;
int max_cnt=-1;
for (const auto &pair : class_counts) {
    if (pair.second > max_cnt) {
        max_cnt = pair.second;
        predict_label = pair.first;
    }
}
predictions.push_back({static_cast<float>(predict_label)});

//return vector<vector<float>>();
return predictions;
```

設 undered_map<int,int>class_count,用 indices 找出對應 y 值,紀錄 k 個數據裡結果是 0 跟 1 幾個。接著找出占 k 個中數目最多的 class,作為預測的 label,轉成 float 後存入 predictions。每個 X 的預測數據跑完後回傳 predictions。

predit probability

vector<unordered_map<int, float>> probabilities;

一開始先設 vector<unordered_map<int,float>>probabilities 紀錄要回傳的 結果,Predict probability 跟 predict 算 distances,依據 distances 對 indices 排序並出前 k 個的方式一樣。

```
unordered_map<int, float> class_probabilities;
for (int i = 0; i < k; ++i) {
    int neighbor_index = indices[i];
    int label = static_cast<int>(train_y[neighbor_index][0]);
    class_probabilities[label]++;
}

for (auto &pair : class_probabilities) {
    pair.second /= k;
}

probabilities.push_back(class_probabilities);
}
```

設 unordered_map<int, float>class_probabilities 用來存 sample X 的 label 和相對應的機率,用 indices 找出對應 y 值作為 label,計算 k 個資料裡每個 class 出現的次數,算完後把各個 class 的數量除以 k,得到機率。把算出來的機率存進 probabilities,全部算後完回傳 probabilities。

(3) MLP

```
private:
    // Implement private function or variable if you needed
    int input_size;
    int hidden_size;
    int output_size;
    int epochs;
    float learning_rate;

    vector<vector<float>> inputLayer;
    vector<vector<float>> hiddenLayer;
    vector<vector<float>> outputLayer;

    vector<vector<float>> inputWeights;
    vector<vector<float>> inputWeights;
    vector<vector<float>> hiddenWeights;
```

input_size, hidden_size, output_size 分別是指各個 layer 的 node 數。 epochs 跟 learning_rate 是訓練時會用到的參數。inputLayer, hiddenLayer, outputLayer 用來記錄每層訓練的狀況。inputWeight 是 inputLayer 到 hiddenLayer 的 weight,hiddenWeight 則是 hiddenLayer 到 outputLayer 的 weight。

初始化時,input_size 設為 77(feature 數),hidden_size 設為 77,output_size 設為 1(用這個 node 算出來數值大小判斷結果)。把 epochs 設 10,learning_rate 設 0.05。而 inputWeight 跟 hiddenWeight 是用 default_random_engine 跟平均為 0 標準差為 1 的 normal_distributoin 生成的隨機變數。

fit

```
void fit(vector<vector<float>> &X, vector<vector<float>> &y) override {
    // Implement training logic for MLP including forward and backward propagation
learning rate = 0.05;
    for (int epoch = 0; epoch < epochs; ++epoch) {
        cout<<"epoch:"<<epochs<'"/"<<epochs<<endl;

        learning_rate=(20*learning_rate)/(20+epoch);

        for (size_t i = 0; i < X.size(); ++i) {
            vector<vector<float>> input = {X[i]};
            vector<vector<float>> target = {y[i]};

            __forward_propagation(input);
            __backward_propagation(target);
}
```

訓練時,為了讓每個 iteration 初始 learning rate 一樣,一開始把 learning rate 設成 0.05,learning rate 的是配合 epoch 做變化 epoch 越後面 learning rate 越小。每個 epoch 中,一次拿一個 train X 和 train Y 進行 forward propagation 跟 backward propagation,直到全部 train X 訓練完,這個 epoch 才結束。總共執行 epochs=10 次。

predict

```
vector<vector<float>> predict(vector<vector<float>> &X) override {
    // Implement prediction logic for MLP
    vector<vector<float>> predictions;
    for (auto &sample : X) {
        vector<vector<float>> input = {sample};

        _forward_propagation(input);
        float threshold = 0.5;
        vector<float>predicted_label;
        predicted_label.push_back((outputLayer[0][0]> threshold) ? 1 : 0);

        predictions.push_back(predicted_label);

    }
    return predictions;
    //return vector<vector<float>>();
}
```

首先設 predicions 用來儲存預測結果。把 test X 一個一個進行 forward propagation,接著比較 outputLayer[0][0]跟 threshold 大小,因為 forward propagation 是用 sigmoid,結果界在 $0^{\sim}1$,如果超過 0.5 預測是 1,否則 是 0。

Predict probability

```
unordered_map<int, float> class_probabilities;

class_probabilities[0] = 1-outputLayer[0][0];
class_probabilities[1] = outputLayer[0][0];

probabilities.push_back(class_probabilities);
```

做法跟 predict 相似,把 test X 一個一個 forward propagation 後,得到預測結果,因為 forward propagation 是用 sigmoid,outputLayar[0][0]界在0~1,就作為結果是 1 的機率,1- outputLayar[0][0]則當作結果是 0 的機率,把機率存在 class_probabilities,算完放入 probabilities,全部的 test X 預測完後,回傳 probabilities。

Forward propagation

```
void _forward_propagation(vector<vector<float>> &X) {
    // Implement forward propagation for MLP
    inputLayer = X;
    hiddenLayer = activate(dotProduct(inputLayer, inputWeights));
    outputLayer = activate(dotProduct(hiddenLayer, hiddenWeights));
}
```

inputLayer 設成輸入的 X,inputLayer(size: 1*input_size)乘以 inputWeights(size: input_size*hidden_size),再用 sigmoid activate,得到 hiddenLayer。

hiddenLayer(size: 1*hidden_size)乘以 hiddenWeight(size: hidden_size*output_size),用 sigmoid activate 後,得到 outptLayer。

dotProduct 是輸入兩個 vector<vector<float>>進行矩陣乘法,回傳的矩陣一樣是 vector<vector<float>>。

Activate 是用 sigmoid,算法是把輸入的矩陣每一項都帶入:

$$\frac{1}{1+e^{-x}}$$

最後可以得到界在0~1的值。

Backward propagation

```
void _backward_propagation(vector<vector<float>> &target) {
    // Implement backwardpropagation for MLP

    vector<vector<float>> out_error;
    vector<float>out_error_temp;

    out_error_temp.push_back(outputLayer[0][0]-target[0][0]);
    out_error.push_back(out_error_temp);

    vector<vector<float>> outputGradient = multiply(out_error,(1-outputLayer[0][0])*outputLayer[0][0]);
    hiddenWeights = subtract(hiddenWeights, multiply(dotProduct(transpose(hiddenLayer),outputGradient), learning_rate));

    vector<vector<float>> hiddenGradient = dotProduct(outputGradient, transpose(hiddenWeights));
    for(int i=0;ichidden_size;i++){
         hiddenGradient[0][i]*=hiddenLayer[0][i]*(1-hiddenLayer[0][i]);
    }
    inputWeights = subtract(inputWeights, multiply(dotProduct(transpose(inputLayer), hiddenGradient), learning_rate*10));
}
```

$$\Delta w_{ji} = -\eta \frac{\partial E_d}{\partial w_{ji}} = -\eta \cdot \frac{\partial E_d}{\partial net_j} \cdot x_{ji} = \eta \cdot \delta_j \cdot x_{ji}$$

參考講義的算式求得△hiddenWeight。

首先求 error=output-target,雖然算出來只有一項,但用矩陣 out_error 儲存方便之後運算,設 outGradient=out_error*(1-o)*o。最後算出 hiddenWeight= hiddenWeight - (trans(hiddenLayer)*outputGradient*learning rate)

接著求 hiddenGradient,参考以下算式

$$\delta_{j} = o_{j} \cdot (1 - o_{j}) \sum_{m \in Downstream(j)} \delta_{m} \cdot w_{mj}$$

先求出 outputGradient* trans(hiddenWeight),得到 size=1*hidden size 的矩陣,接著這個矩陣的每項乘以對應的 $o_j \cdot (1-o_j)$, o_j 是 hiddenLayer 裡對應的項,可以得到 hiddenGradient。最後用 hiddenGradient 更新 inputWeight,也就是每項 inputWeight 減 inputLayer* hiddenGradient* learning rate*10(hidden layer 的 learning rate 比 output layer 的 learning rate 大十倍的效果較好)。

```
vector<vector<float>> transpose(const vector<vector<float>> &matrix) {
    // Transpose a matrix
    size_t m = matrix.size();
    size_t n = matrix[0].size();

    vector<vector<float>> result(n, vector<float>(m, 0.0));

    for (size_t i = 0; i < m; ++i) {
        for (size_t j = 0; j < n; ++j) {
            result[j][i] = matrix[i][j];
        }
    }

    return result;
}</pre>
```

Transpose function 是輸入 matrix, 會把新的 matrix[j][i]的值設為 matrix[i][j], 最後回傳 transpose matrix。

```
vector<vector<float>> subtract(const vector<vector<float>> &A, const vector<vector<float>> &B) {
    size_t m = A.size();
    size_t n = A[0].size();

    vector<vector<float>> result(m, vector<float>(n, 0.0));

    for (size_t i = 0; i < m; ++i) {
        for (size_t j = 0; j < n; ++j) {
            result[i][j] = A[i][j];
        }
    return result;
}</pre>
```

substract 是輸入兩個大小相同的矩陣,相同位置的項相減,回傳減完的 結果矩陣。

Multiply 是輸入一個 matrix 跟 scalar,矩陣的每項都乘上 scalar,回傳乘完的結果。

Discussion:

1. implementation challenges:

Naïve Bayes:

主要是要注意 numeric data 跟 categorical data 要分開處理,以及要處理 categorical data 的 feature 條件機率=0,這次 term project 是分配一個很小的值。除此之外沒有遇到太大的問題。

KNN:

k 的大小難以決定,太小的話怕容易被特定值干擾,太大的話怕被無關的數據影響,嘗試了大一些的數字效果不太好,最後決定 k=3。另外 feature數多,計算距離需要花比較多時間。

MLP:

MLP 比前兩個 model 複雜,很容易搞混變數的形式跟位置造成錯誤的結果。原本打算照 frame 給的 input size=64, hidden size=64, output size=64,但只需要判斷 0/1 的話,一個 output node 也可以達成,較簡單且花較少時間。Activate 的方式 sigmoid 效果看起來比 relu 好,可能是沒有那麼多層,還沒遇到 weight vanishing。另外 epochs 跟 learning rate 也難以決定,需要多次嘗試和比較。

2. prediction results:

Naïve Bayes:

1	0.861111	0.8	0.769231	0.833333	0.695182	0.920139
1	0.75	0.608696	0.538462	0.7	0.43756	0.851923
1	0.694444	0.56	0.411765	0.875	0.431254	0.848214
1	0.833333	0.769231	0.714286	0.833333	0.644658	0.875
1	0.75	0.571429	0.461538	0.75	0.432771	0.727679
1	0.694444	0.421053	0.363636	0.5	0.22563	0.723214
1	0.805556	0.758621	0.733333	0.785714	0.597148	0.896104
1	0.75	0.64	0.615385	0.666667	0.449823	0.638889
1	0.771429	0.666667	0.615385	0.727273	0.498581	0.814394
1	0.742857	0.571429	0.5	0.666667	0.401363	0.777778

KNN:

2	0.75	0.526316	0.714286	0.416667	0.397033	0.756944
2	0.833333	0.625	0.833333	0.5	0.5547	0.803846
2	0.861111	0.666667	0.714286	0.625	0.5815	0.866071
2	0.805556	0.631579	0.857143	0.5	0.545921	0.888889
2	0.805556	0.363636	0.666667	0.25	0.322329	0.790179
2	0.777778	0.333333	0.5	0.25	0.236228	0.544643
2	0.805556	0.666667	1	0.5	0.615882	0.849026
2	0.75	0.470588	0.8	0.333333	0.397573	0.628472
2	0.685714	0.47619	0.5	0.454545	0.253012	0.632576
2	0.771429	0.333333	0.666667	0.222222	0.286896	0.615385

MLP:

			-			
3	0.777778	0.636364	0.7	0.583333	0.482382	0.885417
3	0.916667	0.857143	0.818182	0.9	0.800315	0.923077
3	0.916667	0.842105	0.727273	1	0.805823	0.964286
3	0.916667	0.857143	1	0.75	0.816497	0.9375
3	0.972222	0.933333	1	0.875	0.919145	0.883929
3	1	1	1	1	1	1
3	1	1	1	1	1	1
3	0.972222	0.956522	1	0.916667	0.938083	1
3	0.971429	0.952381	1	0.909091	0.934199	0.916667

三個結果相比,MLP 的表現較 Naïve Bayes, KNN 好。 Naïve Bayes, KNN 的表現差不多,整體上 Naïve bayes 的 accuracy 比 KNN 低,但 f1 score 和 mcc 表現得比 KNN 稍好。

3. key insights

根據前面結果可以發現 MLP 的結果較好。我認為可能這個數據的 features 之間不是完全 conditional independent,也不能單純就距離判斷結果,可能有更複雜的關係。MLP 有 back propagation,會對比 output 跟 target 的差異,進而修正 Model,使得 model 可以判斷哪個 feature 比較重要,而 Naïve Bayes 跟 KNN 沒有這個機制,運算時會以同樣比重考慮所有的 features。這代表或許有些 features 跟結果沒有關係,會干擾預測結果。