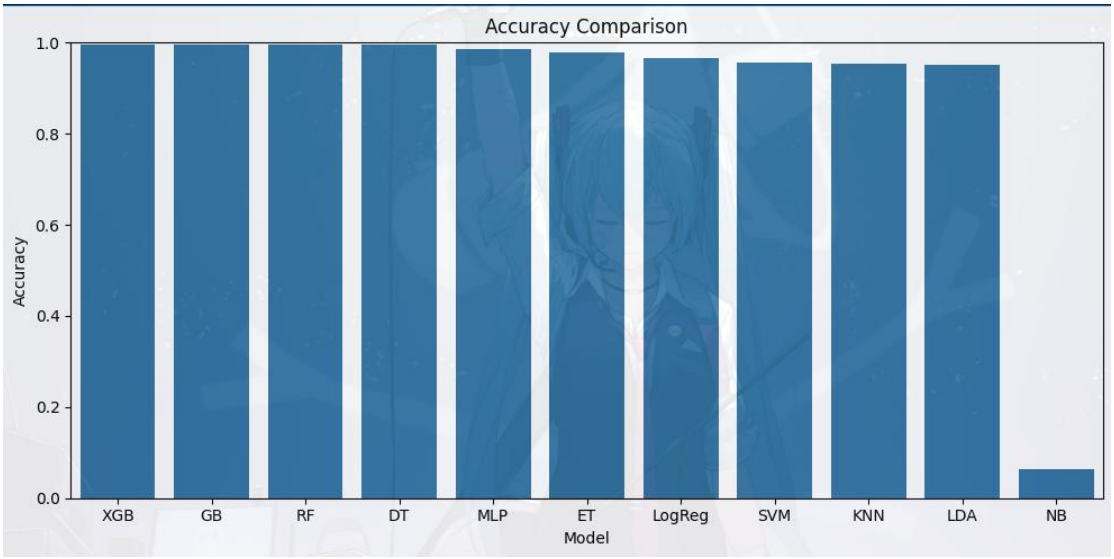
海大資工 AI 機器學習作業報告

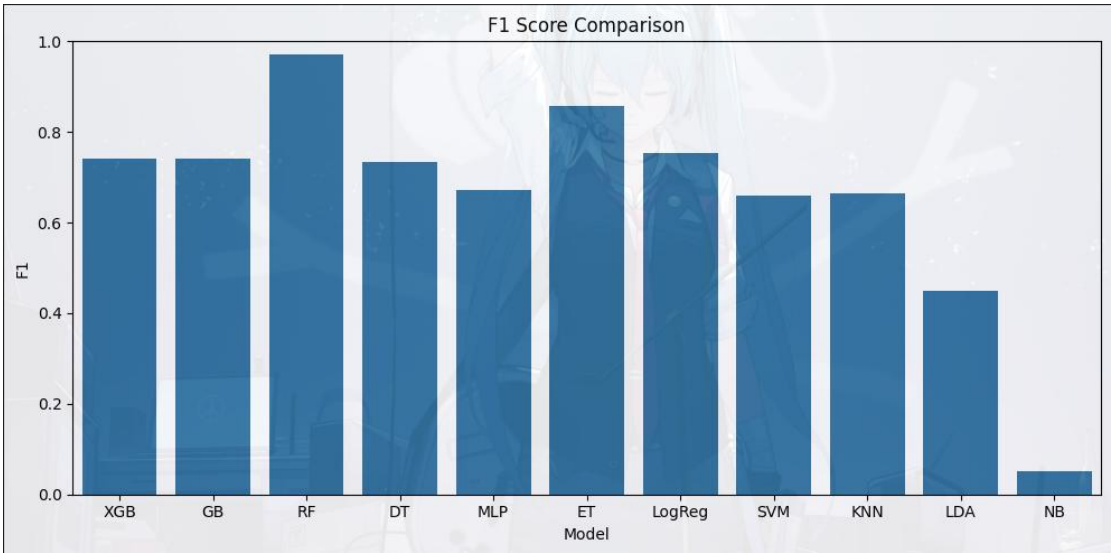
以下時間皆以訓練資料 80%，測試資料 20%為前題設計。

甲、 機器學習實驗結果, F1 以 0~1 區間表示

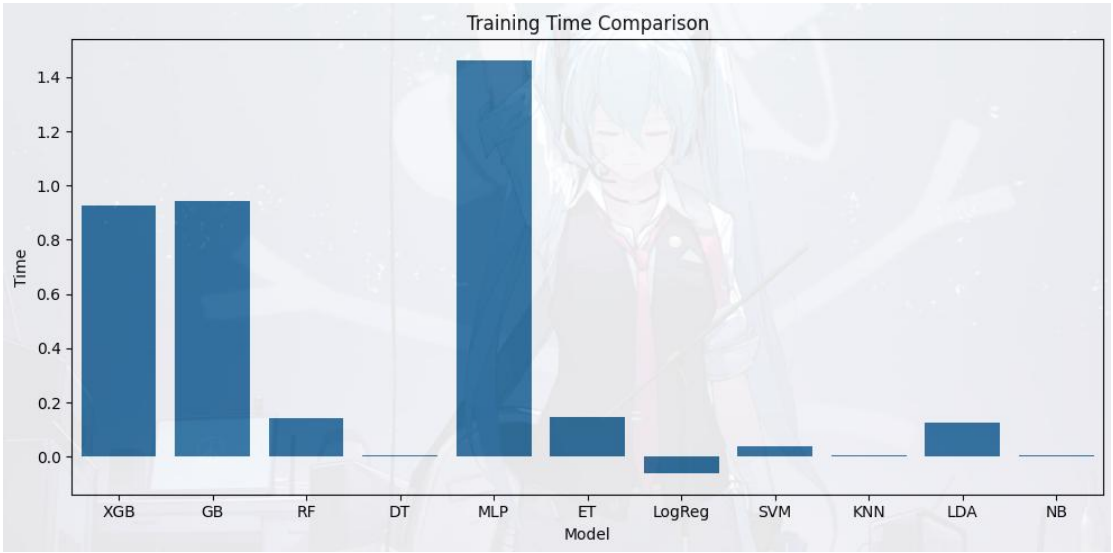
系統	分類器	系統設定	Accuracy	F1	Time (s)
A	LogReg	max_iter=1000, 其餘預設	96.6176%	0.7529	-0.0625
B	KNN	預設	95.2941%	0.6643	0.00440
C	DT	預設	99.5588%	0.7327	0.00687
D	RF	預設	99.7159%	0.9714	0.14040
E	GB	預設	99.7059%	0.7415	0.94173
F	XGB	預設	99.7059%	0.7415	0.92828
G	ET	預設	97.7941%	0.8585	0.14812
H	SVM	預設	95.7353%	0.6592	0.04027
I	NB	預設	6.3235%	0.0512	0.00465
J	MLP	max_iter=1000, 其餘預設	98.5294%	0.6729	1.46302
K	LDA	預設	95.1471%	0.4486	0.12631



圖(一)：各方法正確性結果圖



圖(二)：各方法 F1 結果圖



圖(三)：個方法訓練時間結果圖

甲、　系統比較

為確保模型能順利收斂並取得穩定的分類結果，將 LogisticRegression 與 MLPClassifier 的最大迭代次數 (max_iter) 調整為 1000。

在 RF 中，正確率高，且透過 F1 分數也可知泛用性高，適合分類的任務。反觀 XGB 與 GB，雖正確率高，但 F1 分數偏低，顯示泛用性有待商確，且訓練時間偏高。ET 的 F1 數值顯示，這是個在資源有限的高泛用性模型。DT 在訓練的時間極短，容易過擬合，泛用性差。MLP 雖準確率高，但訓練時間久，F1 值也不是非常優秀，泛用性需多加斟酌。LogReg 展現了穩定可靠的泛用性，且訓練速度極快，適合初步的快速分析。SVM 雖訓練時間短，但不管是正確性抑或是泛用性，都不是很好，顯示在分類這工作的能力

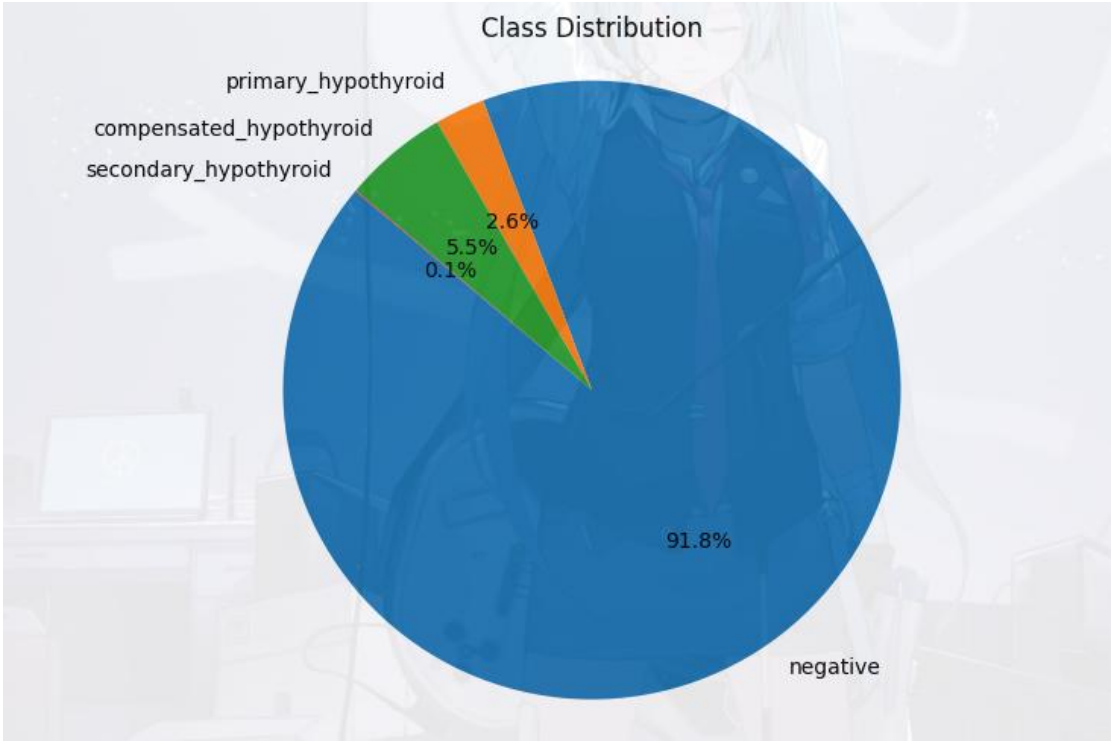
是較不足的。KNN 則不同，在訓練時間相比 SVM 短非常多的前提下，正確率與其不相上下，泛用性更是反超 SVM。LDA 與 NB 在其他方法的比較下，則顯示不適合分類的工作，尤其 NB，在正確性上幾乎可說沒有任何優勢。

乙、　結論

在 Ensemble 的方法中(RF, GB, XGB, ET)整體表現較優，是在分類工作上的好選擇。Boosting 的方式(GB, XGB)雖準確率高，但在 F1 的數值相比 Ensemble 的方法來說，低了不少，顯示在少數類別的預測能力上有所不足。傳統的模型(LogReg, LDA, NB)雖訓練速度快，但面對複雜資料時，表現較差。

乙、深度學習實驗結果

在資料處理時，列出蒐集到的資料結果分布圖，顯示原始資料分布。



圖(四)：蒐集資料結果分布圖

甲、CNN 模型

對於模型，首先建立 Conv1D(64)的卷積層用來抽取局部特徵，處理結構化、序列型資料。利用 Batch Normalization + Activation + Pooling 保持數值穩定，降低維度。再建 Convid(128)的卷積層已抽取更深層特徵。隨後以 Flatten 將多為輸出轉為向量給 Dense(64)使用，以 Dense + Dropout 建立分類邏輯避免過擬合。最後輸出分類結果。

Layer (type)	Output Shape	Param #
conv1d_12 (Conv1D)	(None, 41, 64)	256
batch_normalization_12 (BatchNormalization)	(None, 41, 64)	256
activation_12 (Activation)	(None, 41, 64)	0
max_pooling1d_12 (MaxPooling1D)	(None, 20, 64)	0
dropout_18 (Dropout)	(None, 20, 64)	0
conv1d_13 (Conv1D)	(None, 20, 128)	24,704
batch_normalization_13 (BatchNormalization)	(None, 20, 128)	512
activation_13 (Activation)	(None, 20, 128)	0
max_pooling1d_13 (MaxPooling1D)	(None, 10, 128)	0
dropout_19 (Dropout)	(None, 10, 128)	0
flatten_6 (Flatten)	(None, 1280)	0
dense_12 (Dense)	(None, 64)	81,984
dropout_20 (Dropout)	(None, 64)	0
dense_13 (Dense)	(None, 4)	260

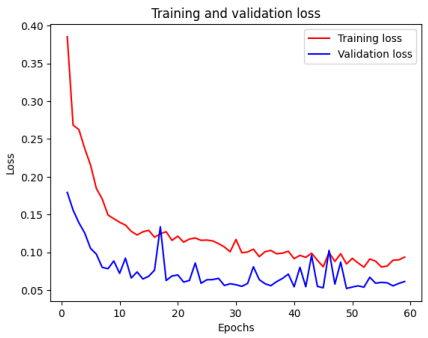
Total params: 107,972 (421.77 KB)

Trainable params: 107,588 (420.27 KB)

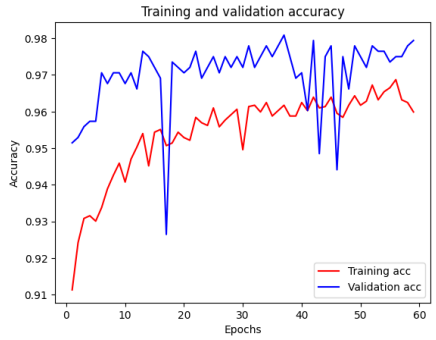
Non-trainable params: 384 (1.50 KB)

圖(五)：CNN 模型結構

從左圖可見訓練與驗證的損失函數趨勢向下，學習過程大致上趨於穩定;右圖的正確性函數在訓練時學習效果良好，呈現趨勢向上，無明顯停滯或震盪，訓練初期穩定，中期雖出現震盪，但整體正確性依然是相當高的，是個作為分類的不錯選擇，雖 CNN 本身適合圖片分析，可在此實驗呈現出文字類的分類工作也有不錯的成效。



圖(六)：CNN 損失函數



圖(七)：CNN 正確性函數

乙、LSTM 模型

在模型設計上，首先用 LSTM(64)處理時間序列資料，學習長期關係如病患過去的症狀。而後使用 Batch Normalization 來穩定模型的訓練速度與表現避免梯度消失問題。加上 Dropout 防止過擬合，試圖提高泛用性。再使用 LSTM(32)健力第二層時間記憶，提高時間的依賴特徵，再加上 Batch Normalization 與 Dropout 提高穩定性。第三次使用 Dense(64) + Activation 將時間特徵轉為高為抽象特徵，最後經由 Dropout 後使用 Dense(4)分類至四個結果。

Model: "sequential"

Layer (type)	Output Shape	Param #
lstm (LSTM)	(None, 41, 64)	16,896
batch_normalization (BatchNormalization)	(None, 41, 64)	256
dropout (Dropout)	(None, 41, 64)	0
lstm_1 (LSTM)	(None, 32)	12,416
batch_normalization_1 (BatchNormalization)	(None, 32)	128
dropout_1 (Dropout)	(None, 32)	0
dense (Dense)	(None, 64)	2,112
activation (Activation)	(None, 64)	0
dropout_2 (Dropout)	(None, 64)	0
dense_1 (Dense)	(None, 4)	260

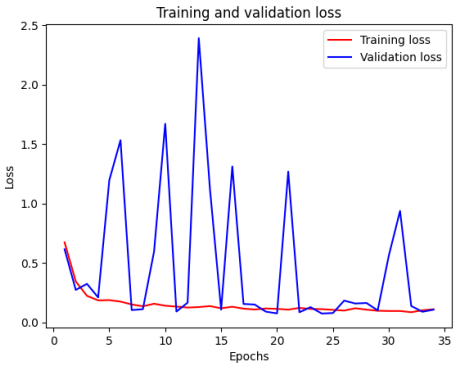
Total params: 32,068 (125.27 KB)

Trainable params: 31,876 (124.52 KB)

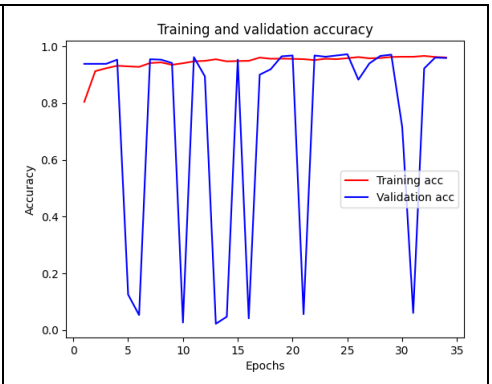
Non-trainable params: 192 (768.00 B)

圖(八)：LSTM 模型結構

先看到左圖的損失函數，再訓練時，確實表現出學習的樣子，趨勢向下，但驗證集卻劇烈波動，顯示出嚴重的過度擬合，猜測某些 epoch 無法有效的泛化。這情況也在右方的正確性中顯示，訓練時表現也沒啥問題，可驗證集呈現出劇烈波動，猜測模型過度技藝訓練資料，泛化能力不足。



圖(九)：LSTM 損失函數



圖(十)：LSTM 正確性函數

丙、MLP 模型

首先利用 Dense 將輸入特徵映射到 hidden layer 中，經過 Batch Normalization 加速收斂。藉由 ReLU 的非線性轉換，增強模型的表達能力，透過 Dropout 防止過擬合的發生。再將以上過程複製一次，最終經由 Dense 輸出至四個分類中。

Model: "sequential"

Layer (type)	Output Shape	Param #
dense (Dense)	(None, 16)	672
batch_normalization (BatchNormalization)	(None, 16)	64
activation (Activation)	(None, 16)	0
dropout (Dropout)	(None, 16)	0
dense_1 (Dense)	(None, 8)	136
batch_normalization_1 (BatchNormalization)	(None, 8)	32
activation_1 (Activation)	(None, 8)	0
dropout_1 (Dropout)	(None, 8)	0
dense_2 (Dense)	(None, 4)	36

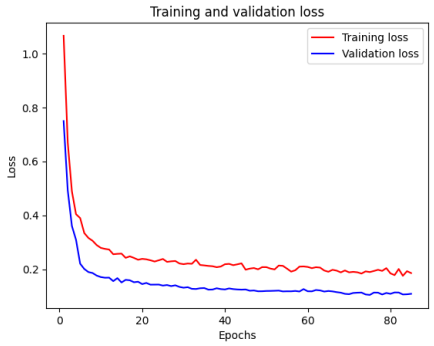
Total params: 940 (3.67 KB)

Trainable params: 892 (3.48 KB)

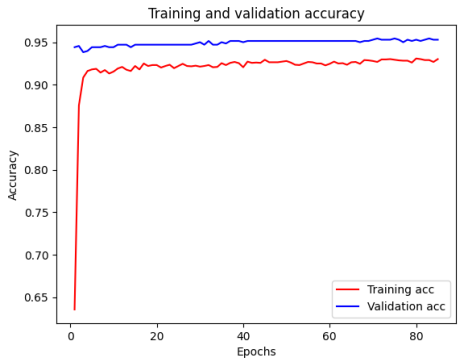
Non-trainable params: 48 (192.00 B)

圖(十一)：MLP 模型結構

左圖的損失函數訓練與驗證集皆呈現出趨勢向下的結果，可訓練的 loss 始終高於驗證集，猜測可能為 Dropout 影響。右圖的正確性整體呈現出趨勢向上，且訓練與驗證集差距不大，未發生過擬合，整體而言收斂良好，適合此分類的工作。



圖(十二)：MLP 損失函數



圖(十三)：MLP 正確性函數

丁、Transformer 模型

首先需要提及的是，這是個有關於時間的模型，本人將 41 個特徵當作 41 個時間點為前提，在第一層的 input 接收 41 個特徵，將輸入映射至高維空間(Dense_10)，再經由 TransformerEncoder 捕捉時間的全局依賴關係，加上個 Dropout 防止過擬合。壓縮時間維度成為向量，送入全連階層，而後再經過一次 Dropout，最終輸出至四個對應結果。

Model: "functional_5"

Layer (type)	Output Shape	Param #
input_layer_4 (InputLayer)	(None, 41, 1)	0
dense_10 (Dense)	(None, 41, 64)	128
transformer_encoder_2 (TransformerEncoder)	(None, 41, 64)	83,200
dropout_13 (Dropout)	(None, 41, 64)	0
global_average_pooling1d_2 (GlobalAveragePooling1D)	(None, 64)	0
dense_13 (Dense)	(None, 64)	4,160
dropout_14 (Dropout)	(None, 64)	0
dense_14 (Dense)	(None, 4)	260

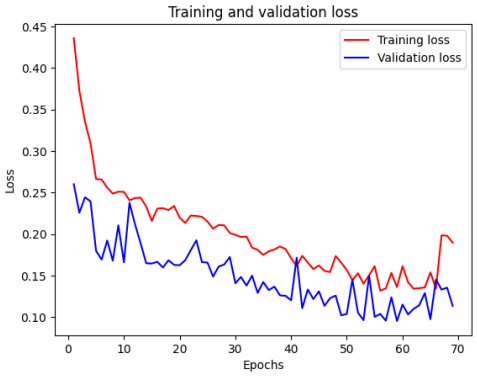
Total params: 87,748 (342.77 KB)

Trainable params: 87,748 (342.77 KB)

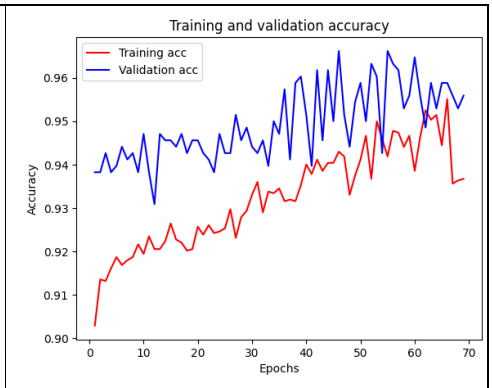
Non-trainable params: 0 (0.00 B)

圖(十四)：Transformer 模型結構

左圖中的損失函數整體而言表現出趨勢向下，本人觀察到訓練集與實驗集差距漸漸縮短，表現出學習效果良好。右圖的正確性函數在訓練時整體而言穩定向上，可驗證時卻不是如此，雖然趨勢也是向上，但在 0.93~0.96 區間震動較大，反映出了不穩定性，雖是如此，整體而言正確性依然是相當高的，表示 Transformer 在分類的工作上具有出色的泛化能力。



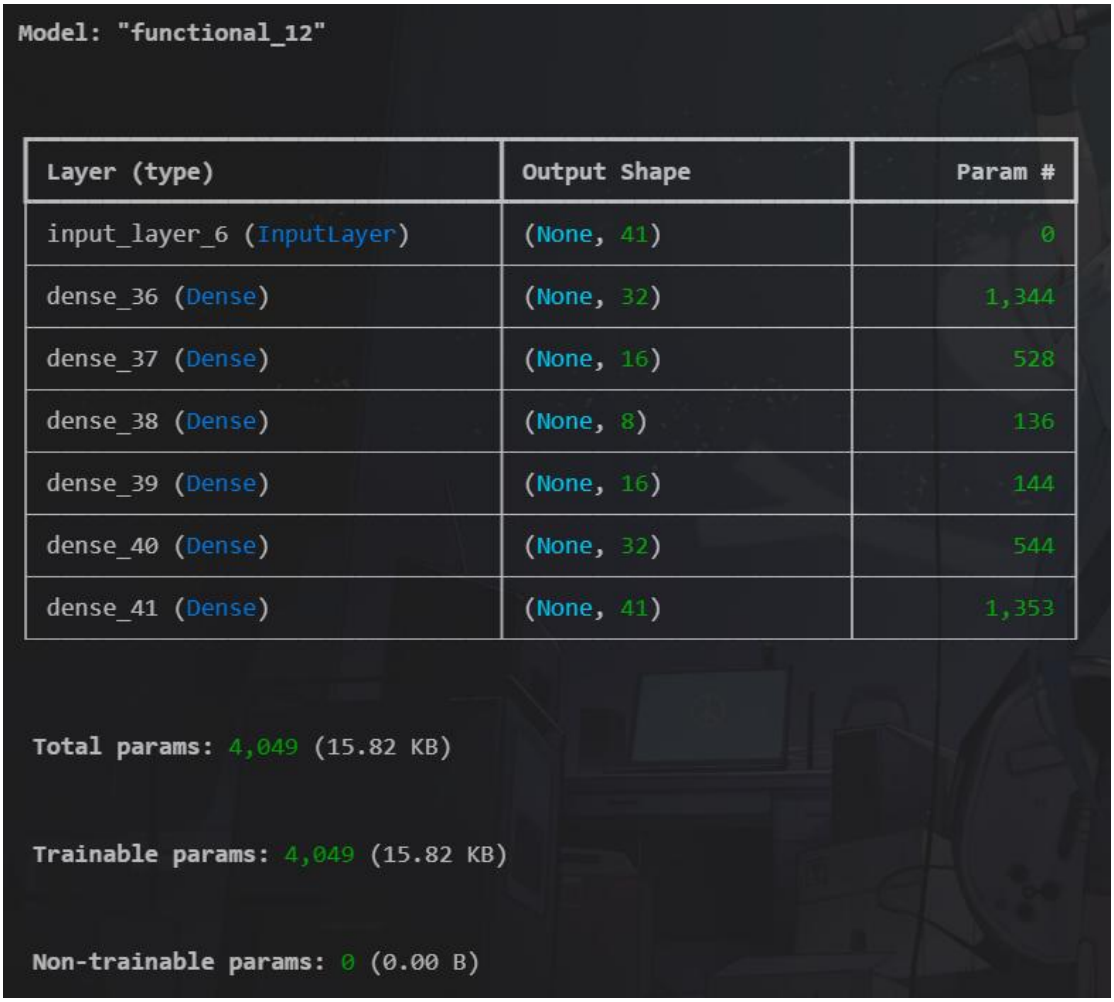
圖(十五)：Transformer 損失函數



圖(十六)：Transformer 正確函數

戊、Autoencoder 模型

首先在輸入層將原始資料(41 特徵)對應到 41 維度，經過第一層降維提取特徵，第二層進一步壓縮取出特徵，第三層維最小瓶頸曾，保留最重要資訊，而後開始重建還原原始維度特徵結構，最終輸出層與輸入層同為 41 維度，用以誤差的計算。



Model: "functional_12"

Layer (type)	Output Shape	Param #
input_layer_6 (InputLayer)	(None, 41)	0
dense_36 (Dense)	(None, 32)	1,344
dense_37 (Dense)	(None, 16)	528
dense_38 (Dense)	(None, 8)	136
dense_39 (Dense)	(None, 16)	144
dense_40 (Dense)	(None, 32)	544
dense_41 (Dense)	(None, 41)	1,353

Total params: 4,049 (15.82 KB)

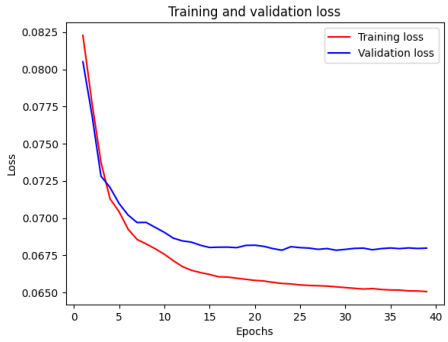
Trainable params: 4,049 (15.82 KB)

Non-trainable params: 0 (0.00 B)

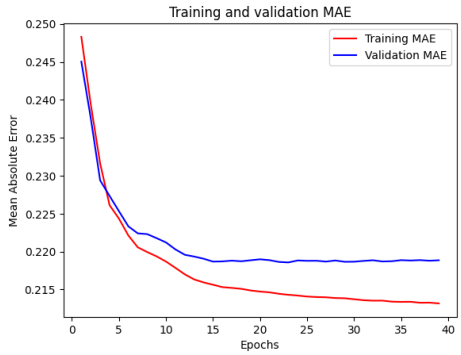
圖(十七)：Autoencoder 模型結構

首先針對為何選用 MAE 函數而非正確性函數作出解釋，Autoencoder 做為一個重建模型，MAE 相比於正確性函數更能反映出重建誤差，準確率適合拿來作為分類模型的指標，而非重建的效果分析。

左圖的損失函數訓練與驗證集接穩定下降，表示模型重建穩定，沒有過擬合現象發生。MAE 曲線大致走向與損失函數相同，表現出泛化能力良好。



圖(十八)：Autoencoder 損失函數



圖(十九)：Autoencoder 之 MAE 函數

己、深度學習實驗總表

	Accuracy (0~1)	Loss (0~1)
CNN	0.9852	0.0497
LSTM	0.9694	0.0649
MLP	0.9440	0.1167
Transformer	0.9478	0.1083

	MAE (0~1)	Loss (0~1)
Autoencoder	0.2179	0.0675

根據上表，可知 CNN 在正確率及損失函數的表現上，皆呈現出最佳，為本次實驗的深度學習模型中的最適合擔任分類工作的模型。LSTM 的表現也不錯。這結果屬實令我感到驚訝，CNN 適合做的是抽取影像的特徵，而 LSTM 擅長的是有時間順序的資料，可在這甲狀腺的分類中，似乎兩者皆不太符合各自擅長領域，可正確率、損失函數的呈現結果又還不錯。

MLP 和 Transformer 表現相比於前兩者就略遜不少，或許可將原因歸咎於資料量的筆數不夠大量，或許資料更充足，經過更充分的訓練，可將損失函數的表現呈現得更加出色，正確率也有所提升。

最後，來談談 Autoencoder，這是本人有意挑選的模型，此模型目

的在於重建，而不在分類，可預期到的結果為如上表所示，損失函數的呈現不是太良好。基於目的(重建)的不同，比較正確率是沒有意義的，轉而比較 MAE 函數，以反應出重建誤差。而即使損失函數呈現結果看起來不錯，也僅代表模型能還原輸入，無法保證對於不同類別的資料有不錯的分類能力。

丙、實驗感想

經過本次的實驗，我想我學習到最多的部分是如何比較，不管是機器學習抑或是深度學習，都遇到了參數設定上注定不可能完全一樣，意思是我無法準確控制到操作變因為模型不同，其餘參數都相同。每個模型各自著重的點都不同，一開始的想法是盡量以預設為前提，期望可以達到模型各自參數上的差別最小化，但深入了解模型各自的參數後，這根本就是種奢望，在機器學習的部分也可以看到我在兩種模型的最大推論次數設定 1000，期望不會遇到無法收斂的問題，而其他模型並不見的會有這問題，抑或是壓根運作機制就不同，這就造成了點差異。

在深度學習上，我刻意每個模型都挑選了擅長不同領域的，期望看出在這資料分類的工作中有顯著的差異，可最明顯的是 Autoencoder，而這是不用經過實驗就應該預期的到的，其他竟然正確率都有高達九成，這明顯與我期望看到的不太相符，或許真的是資料上的筆數差異造成不管是訓練、驗證都無法完美的審視模型的可靠性，只有在損失函數的部分凸顯出了 MLP 與 Transformer 在資料上的不足所出現的短版損失函數實驗結果不太好，其他皆沒有太大差異。

在這次的作業中，環境的設置上也是不少的問題，我第一次跑需要機器學習與深度學習的作業，不用想也知道 tensorflow 肯定會撞到一堆版本問題，在不搞砸自己電腦環境的前提下，我使用 Docker devcontainer 為開發工具，可沒料到的是，GPU 的調用竟是如此的困難，在 Rebuild 無數次後，我舉了白旗，靠著資料筆數沒那麼大的前提下用 CPU 撐完了期末，我想這是我最困擾的部分，看著訓練的速度慢的可以…真的是想起 GPU 的好。