Sensor Drift Dataset

黃泰揚 00857114

問題描述:

前陣子研究機器學習的相關論文，發現有個很經典的機器學習訓練問題叫”感測器飄移 (sensor drift)”，發生原因是由於感測器會因老化、污染、甚至移位，此專題的目標是利用訓練的結果辨認該問題；同時根據課程所學來進行各種延伸探討。

為此，我準備了一個出現 sensor drift 問題的資料集:
https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Gas+Sensor+Array+Drift+Dataset+at+Different+Concentrations

這個資料集包含由 16 個化學感測器對 6 種不同氣體(丙酮、乙醛、乙醇、乙烯、阿摩尼亞、甲苯)於不同濃度下，從 2008/1 至 2011/2，歷經 36 個月所取得的 13910 樣本。每個樣本有 128 特徵(16x8)。這個問題是根據此 128 特徵，判斷氣體是那 6 種氣體裡的哪一種氣體。此資料集的樣本依照收集的時間順序安排，並分成 10 個資料檔，batch1.dat、...、batch10.dat。其中 batch2~10 應該會出現誤差越來越大的趨勢。

如果沒注意到 sensor drift 發生了，就直接把 batch1~10 合成一個資料集做訓練，那後果可想而知(underfitting 或訓練出來了但在實際預測時準確率很低)，而避免發生 sensor drift 的方法其實不少，定期校準感測器/定期重新訓練分類器/只使用出現問題的資料做訓練都可以有效解決(實際上還有一種專門處理該問題的方法叫做 domain adaptation，但是太難了我不會)。

由於理論上 batch1 的資料集誤差是最少的，所以我利用 batch1 訓練多個分類器模型，並拿其他 batch 來做預測，看是否可以根據這個結果判斷是否出現感測器飄移的問題。

1.練習使用 scikit-learn 中的 pipeline 功能建置模型:

為了使 batch1 的訓練誤差盡量小，使用 pipeline+K-fold 來選取最佳超參數
這裡根據期中考前所教的內容建置了 4 種模型:

svm_linear0:假設該問題線性可分(實際上應該不可)，來找 sv 的模型。

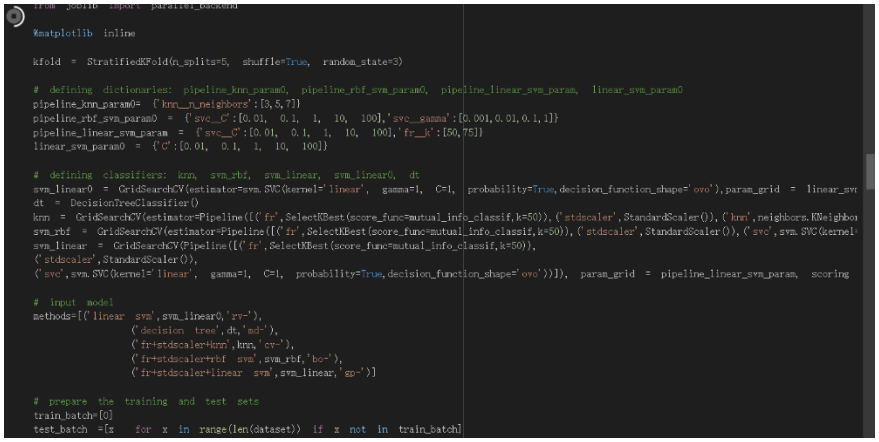
dt:用決策樹來建置的模型。

svm_linear:在進行線性 svm 前，使用資料分群，先進行 stdscaler(標準化特徵)，以下三種分類器都有使用。

svm_rbf:找到的 sv 不限定為直線。

knn:找前 k 個最接近的訓練樣本演算法(這裡的 k=[3,5,7])

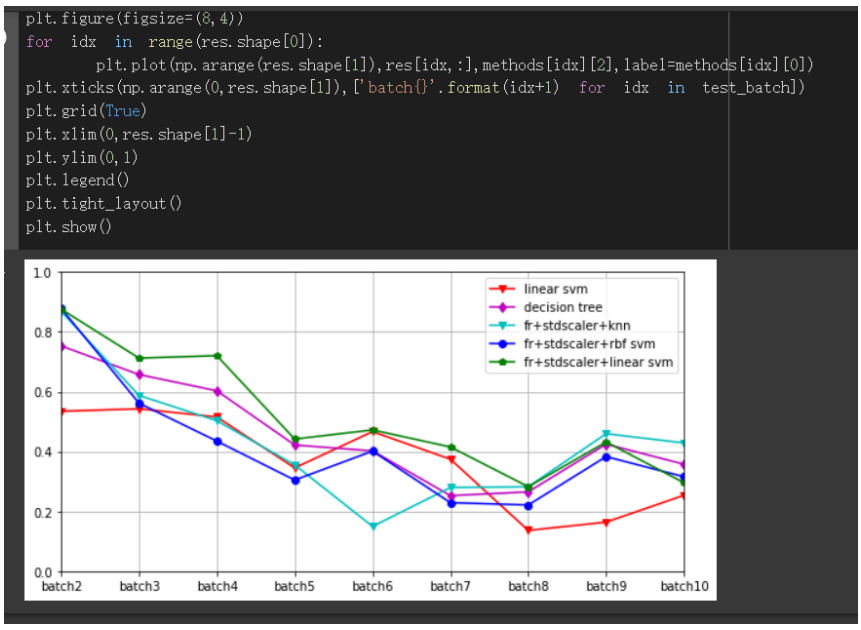
*svm 系列的超參數 C(對誤差容忍度，越高找到的線會越崎嶇)=[0.01,0.1,1,10,100],其中 rbf 的超參數 gamma(越大找到的 sv 越少)=[0.001,0.01,0.1,1]



2.將結果可視化:

可以看出隨著時間推移，各模型的準確度開始逐漸下降，不過由於我並沒有無誤差的數據資料，所以無法確定何種模型的辨認效果一定較好，但大部分都是可以清楚辨認的(不過 linear svm0 模型看起來似乎有 underfitting 的情形)。

然後比較意外的結果是資料分群對於 svm linear 的提升效果非常顯著，甚至高過分類能力較高的 svm rbf。



3. 練習建構多層 FNN:

四個 FNN 的神經架構如下：

model1: 128->BN->512-512->Dropout(0.1)->6

model2: 128->128->128->128->6

model3: 128->BN->512->128->64->6

model4: 128->32->32->32->32->Dropout(0.1)->6

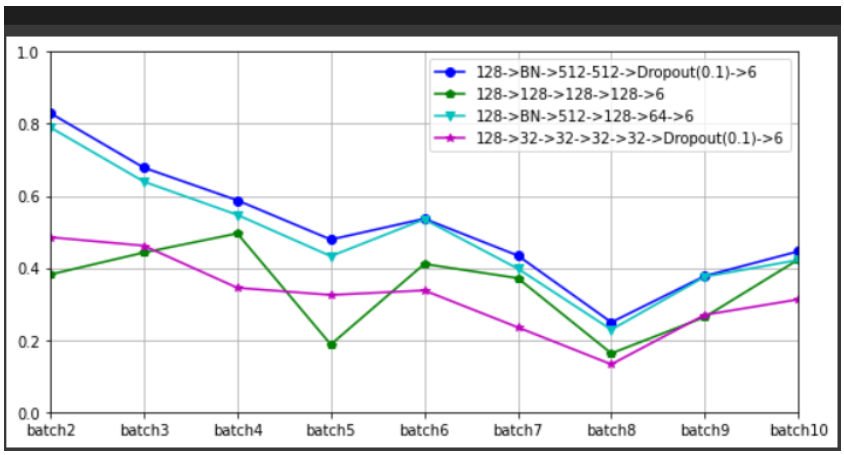
其中第一個數字表示輸入向量的維數，最後一個數字表示輸出單元的數量，另一個數字表示隱藏層的單元數，BN 表示批量歸一化層，Dropout(0.1) 表示 dropout 層，dropout ratio 設置為 0.1。隱藏單元的激活函數是 relu，輸出單元的激活函數是 softmax。損失函數是 sparse categorical cross entropy ，優化器是 adam。

```
def def_model1():
        model    = tf.keras.Sequential()
        model.add(tf.keras.layers.InputLayer(input_shape=(128,)))
        model.add(tf.keras.layers.BatchNormalization())
        model.add(tf.keras.layers.Dense(512,activation='relu'))
        model.add(tf.keras.layers.Dense(512,activation='relu'))
        model.add(tf.keras.layers.Dropout(0.1))
        model.add(tf.keras.layers.Dense(6,activation='softmax'))
        model.compile(optimizer='adam',loss='sparse_categorical_crossentropy',metrics=['accuracy'])
        return  model

def def_model2():
        model    = tf.keras.Sequential()
        model.add(tf.keras.layers.InputLayer(input_shape=(128,)))
        model.add(tf.keras.layers.Dense(128,activation='relu'))
        model.add(tf.keras.layers.Dense(128,activation='relu'))
        model.add(tf.keras.layers.Dense(128,activation='relu'))
        model.add(tf.keras.layers.Dense(6,activation='softmax'))
        model.compile(optimizer='adam',loss='sparse_categorical_crossentropy',metrics=['accuracy'])
        return  model

def def_model3():
        model    = tf.keras.Sequential()
        model.add(tf.keras.layers.InputLayer(input_shape=(128,)))
        model.add(tf.keras.layers.BatchNormalization())
        model.add(tf.keras.layers.Dense(512,activation='relu'))
        model.add(tf.keras.layers.Dense(128,activation='relu'))
        model.add(tf.keras.layers.Dense(64,activation='relu'))
        model.add(tf.keras.layers.Dense(6,activation='softmax'))
        model.compile(optimizer='adam',loss='sparse_categorical_crossentropy',metrics=['accuracy'])
```

4. 和單一分類器的比較訓練結果:

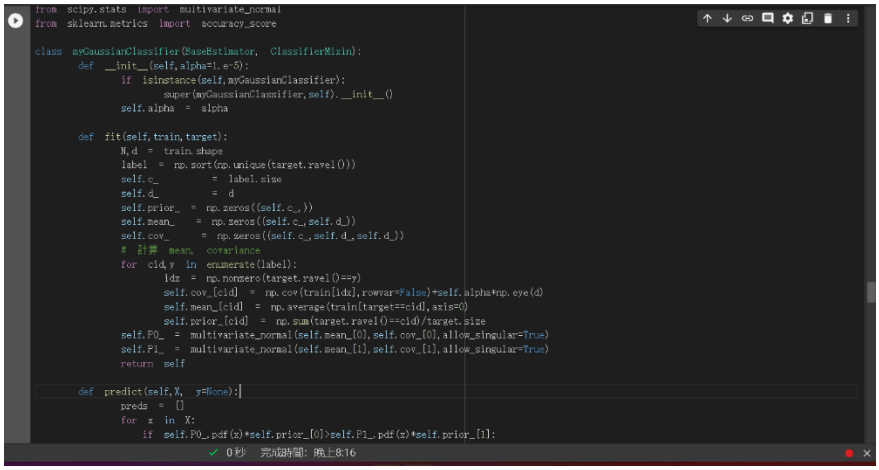
由於 FNN 理論上對於此問題為較精準的分類器(因為此資料集的 Feature 很多，所以透過刪減不必要的資訊應該可以大幅增加學習的效率)，所以推論藍線的兩種模型應該更接近實際的誤差值。

但實驗結果顯示 svm linear + 資料集群，似乎是這個問題的最佳解。



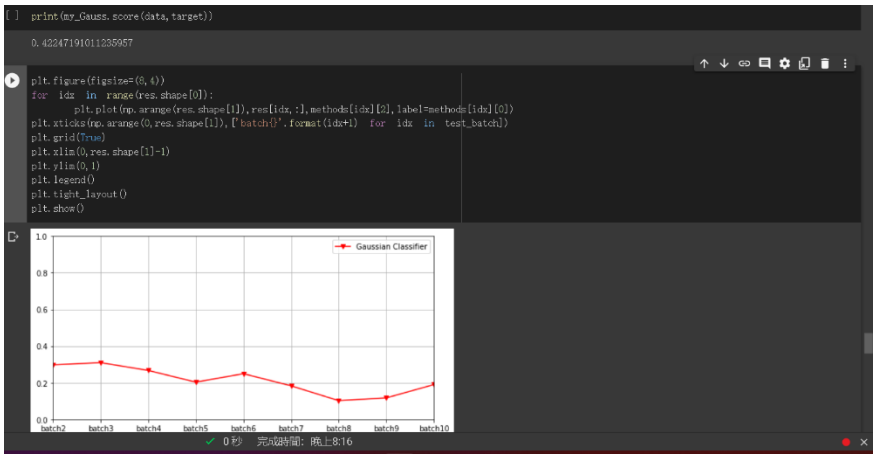
5. 使用自定義模型 myGaussianClassifier:

使用第三章的內容來製作高斯分類器，假設 P(X|C=i),∀iP(X|C=i),∀i 呈現高斯分佈 N(μ i, Σ i)，看一下高斯分類器的分類能力如何。



可以看出高斯分類器由於模型過於簡單，對於複雜的問題效果很差。

10~30%的準確度和用猜的差不多(1/6=0.166)



6. 判斷模型相似度:

這裡使用看起來訓練效果最好的 fr+stdscaler+linear svm 來當作基準(不比較 FNN 是由於該系列不支援 cross_val_score)

根據顯著水準(significance level)來定義:

以 paired t-test 顯著程度 0.05 前提下，平均準確率最高那個分類器與另外 6 個分類器，判斷在平均準確率上是否有顯著差異。

```
for i in range(len(methods_score)):
    method_t,method_pvalue = stats.ttest_1samp (methods_score[4]-methods_score[i],0)
    print("{} pvalue = {}".format(methods[i][0],method_pvalue))
```

```
linear svm pvalue = 0.10870095132492331
decision tree pvalue = 0.0777416409478997
fr+stdscaler+knn pvalue = 1.0
fr+stdscaler+rbf svm pvalue = 0.20799999999999935
fr+stdscaler+linear svm pvalue = nan
Gaussian Classifier pvalue = 1.5343629751998116e-07
```

可以看到一個很有趣的結果，居然只有 Gaussian Classifier 不具有顯著差異，如果只從前面幾個的數據來判斷，和 fr+stdscaler+linear svm 最像的分類器應該是 decision tree，實際上前面 5 個分類器的結果也和前面的實驗吻合，但前面的實驗忽略了一個很重要的數據:batch 1 本身的訓練成果，我認為這可能是主要原因。

結果討論&實驗心得:

1.這個問題其實很容易發現:可以看出即使不使用多層的神經網路，基本的機器學習技術也足以判斷是否發生了感測器位移。

2.沒有完美的模型:每種模型都有他是和分類的問題，很多時候模型複雜不一定是好的，像在此問題當中 linear svm + stdscale 就是相對較好的策略，但它並不是最複雜/跑最快/參數最多的。

3.多層神經網路的建置訣竅:由低維->高維->低維通常是相對較好的策略。

4.機器學習上的”相似”和直觀的”相似”差很多:如果完全不看分類結果，我會認為和 linear svm + stdscale 最像的會是 linear rbf + stdscale 或是直接 linear svm 模型，但就算看了分類結果，我也不會想到 gaussian classifier 會是最像的，只有實際算出來才知道。

再研究機器學習相關論文時，偶然看到的這個問題給了我很大的啟發，有時候資料訓練不起來不一定是訓練模型本身的問題(overfitting/underfitting)，外在因素也要考量，因為機器學習的課程對測試資料的正確性這部份很少著墨，所以我藉由這專題特別去研究。