Final Homework : Don't Overfit! II

108B (5403) Machine Learning　王傳鈞 0416047、謝仁杰 0412246

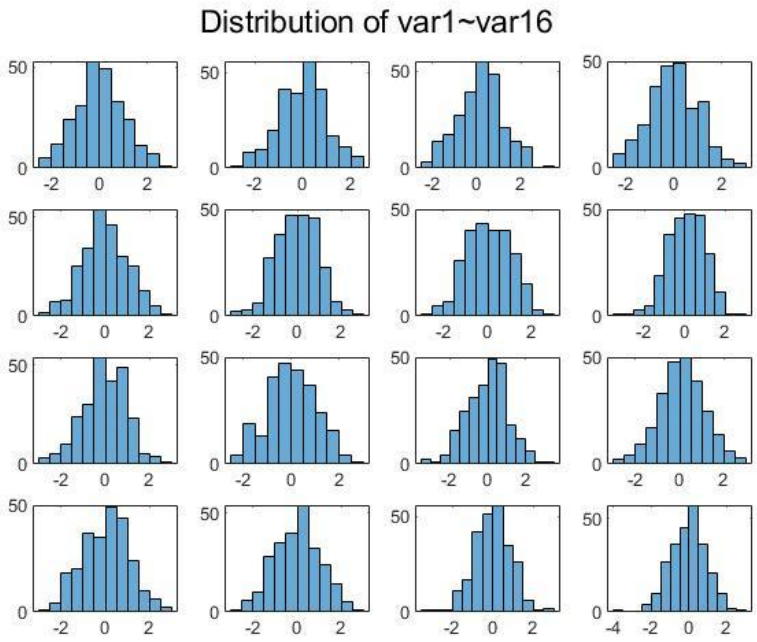
簡介

此題目為 binary classification 問題，參賽者要用題目給予的 250 個 training data 訓練模型，分類 19750 個 testing data，每個 data 有 300 個 feature，但沒有說明 data 的出處和 feature 的意義。此題目用 AUCROC 計算分數，以下為比賽結束時，各名次的分數 (Public leaderboard)：

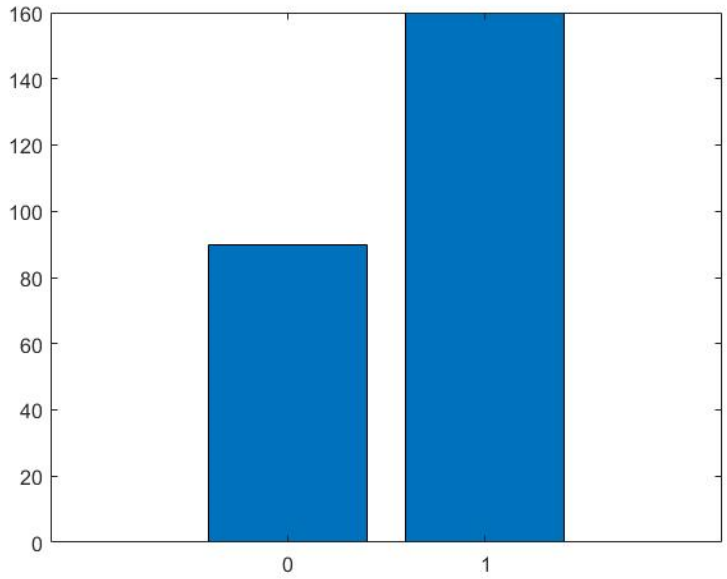
名次	Public Leaderboard Score
1st	0.930
Top 10%	0.868
20%	0.854
30%	0.848
40%	0.844
50%	0.813
60%	0.757
70%	0.722
80%	0.669

Data Exploration & Visualization

因為比賽提供的 training data 太少，而且 feature 太多，在不做任何預處理的情況下容易發生 overfitting。首先，我們可以從以下直方圖可看出每個 feature 大致符合中心位置約為零的常態分布。



接著，從 target 的分佈可以看出 training data 非常不平衡，所以需要做 oversampling，以避免模型出現傾向分類為特定一種 label 的行為。



Data Cleaning & Feature Selection

為了避免各 feature 的 scale 不同，所以我們先對訓練集資料(training data)和測試集資料(testing data)做標準化。針對 label 分佈不平衡的現象，我們採用

SMOTE 演算法來處理 training data，控制 positive label 和 negative label 的數目到達一致。

SMOTE：此演算法利用插值來增加少數類的樣本數，使 training data 中 target 為 1 的 instances 和 target 為 0 的 instances 一樣多。

我們使用以下三種 feature selection 的方法：

(1) Pearson's correlation coefficient

先算出 training data 中各 feature 與 target 之間的 correlation，然後保留 $|correlation| > 0.05$的 features，其餘全數刪除，不參與接下來任何步驟。

(2) LB Probing

上傳 testing data 當中的某個 feature 當作答案，並用 AUC 結果來推估該 feature 和 ground truth label 之間的關聯程度，然後只保留 $|score - 0.5| \geq 0.04$的 features。這是被許多 Kaggle 參賽者應用的技巧，可以當作一種啟發 model selection 靈感或是挖掘更多 data pattern 的技巧。

(3) Do nothing

完全不刪除任何 features，直接進行模型訓練。

Training a Model

我們用兩種不同的演算法來訓練預測模型，每種演算法都使用 grid search 找出最佳參數。

最初，我們打算本課程裡著墨最多的 support vector machine (SVM) 來解題；但是，經過眾多嘗試之後，我們發現 SVM 受限於輸出結果只能為「0」或「1」，反而失去了某種程度的靈活性。

考量到本題目以 AUCROC 當作 leaderboard score，因此我們的重點應該放在針對每個 testing data，盡可能正確地給出其屬於 label 0 或 1 的「機率值」，到底以什麼數值範圍的資料上傳並不會影響 AUCROC。為此，我們改以回歸分析的角度來思考，藉由預測其屬於 label 0 或 1 的「機率值」，來提升 AUCROC。

(1) Logistic regression (LogReg)

(2) Support vector regression (SVR)

由以上的結果，我們可以推得以下幾個特點：

(1) LogReg 不管應用在哪一種 feature selection 方法，都比 SVR 來的優秀

在本題目的討論版上，有許多參賽者皆提及 logistic regression 相當適合本題目。根據我們是過眾多的模型裡 (包含 decision tree、KNN、discriminant analysis、naïve Bayes、 SVM、SVR、XGBoost 等)，基本上呈現兩種現象：①

Submission and Description	Private Score	Public Score	Use for Final Score
20200703T185302_LogReg_Mode3.csv a few seconds ago by a2468834 Logistic Regression with Whole 300 Features	0.826	0.842	☐
20200703T185255_LogReg_Mode2.csv a few seconds ago by a2468834 Logistic Regression with LB Probing	0.869	0.891	☐
20200703T185225_LogReg_Mode1.csv a minute ago by a2468834 Logistic Regression with Pearson's Correlation Coefficient	0.832	0.846	☐

若模型本身就能建立複雜的分類策略，則 AUCROC 分數會很差；②若我們使用了

Submission and Description	Private Score	Public Score	Use for Final Score
20200703T185338_SVR_Mode3.csv just now by a2468834 Support Vector Regression with Whole 300 Features	0.656	0.686	☐
20200703T191009_SVR_Mode2.csv a minute ago by a2468834 Support Vector Regression with LB Probing	0.862	0.888	☐
20200703T185424_SVR_Mode1.csv 2 minutes ago by a2468834 Support Vector Regression with Pearson's Correlation Coefficient	0.701	0.746	☐

太多參數，建立出過複雜的模型 (例如採用高維度 polynomial kernel 的 SVM)，則 AUCROC 分數比起相同模型但是簡單參數來的差。

因此，我們推測本題目因為提供的 training instance 數目本來就不多 (只有 250 筆，甚至少於 feature 數目)，所以本質上就不適合複雜的模型，容易落入 overfitting 之處境。

(2) 「完全不做 feature selection」顯然不是好方法，對於 LogReg 和 SVR 皆是

這個現象完全可以在事前預見，因為本題目提供的 training instance 數目相當少(只有 250 筆)，甚至小於 feature 數目，所以若不採取 feature selection 或是 oversampling 方式擴增樣本數，則可以肯定必面臨 overfitting 之處境。

Conclusion

一開始，我們依據題目所給的 dataset，來嘗試許多 feature selection 方法，並建立很多不同的分類模型，但顯然距離 baseline(約 0.64)相當遙遠。然而，我們在無意間看到有參賽者討論 training data 不一致的情形。此時，我們才意識到也許題目因為某種緣故，所以目前放置的資料集並不為本題所屬。後續又發現有些參賽者使用相當簡單的模型，就能輕鬆達到還不錯的分數，這又印證了我們的猜想。因此，我們從這個解題的過程，學習到確認資料來源的重要性。

透過這次解題的經驗，我們充分聊解到 overfitting 是如何發生與如何避免。在本課程中，我們理解到機器學習之目的是建立可以預測未知資料的模型，而非建立只能分類手上資料的模型，要如何區別這兩種狀況的不一致，就是察覺是否落入 overfitting，這也是我們覺得這個題目值得一試的原因。