SIECI NEURONOWE

Raport z laboratoriów 1-4

Student: Van Hien Le - 257795

Narzędzia i technologie

- Python, Pandas, Numpy, Scikit-learn, PyTorch
- Jupyter Notebook

Dataset

Zbiór danych używany w tym ćwiczeniu to zbiór danych chorób serca, do którego można uzyskać dostęp pod adresem https://archive.ics.uci.edu/dataset/45/heart+disease.

Analiza eksploracyjna

1. Import danych

Instalacja bibliotek i pobieranie zbioru danych:

```
!pip install ucimlrepo
!pip install scikit-learn

from ucimlrepo import fetch_ucirepo, list_available_datasets
list_available_datasets()

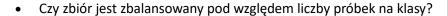
heart_disease = fetch_ucirepo(id=45)
X = heart_disease.data.features
y = heart_disease.data.targets
```

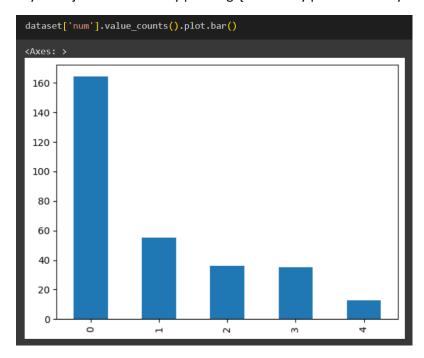
Pierwsze 10 przykładów zbioru danych:

Kształt zbioru danych:

```
dataset.shape
```

2. Balans klas





Zbiór danych nie jest zbalansowany pod względem liczby próbek na klasę. Liczba próbek klasy 0 jest znacznie wyższa niż pozostałych.

3. Cechy liczbowe

Jakie są średnie i odchylenia cech liczbowych?

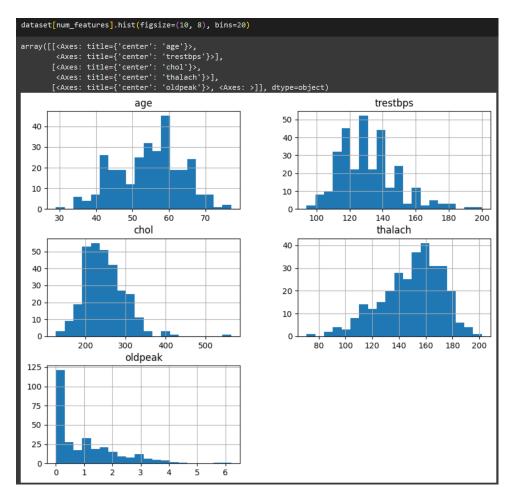
Cechy liczbowe w zbiorze danych to "age", "trestbps", "chol", "thalach" i "oldpeak".

Średnie i odchylenia:



• Dla cech liczbowych: czy ich rozkład jest w przybliżeniu normalny?

Histogram cech liczbowych:

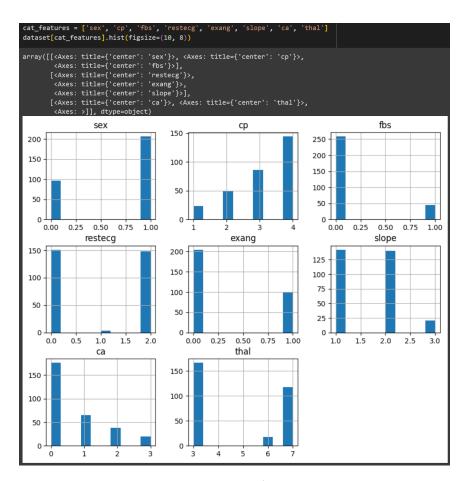


Patrząc na histogramy, możemy rozpoznać, że rozkład normalny istnieje w cechach "age", "chol" i "thalach", ale wydaje się, że nie istnieje w cechach "trestbps" i "oldpeak".

4. Cechy kategoryczne

Dla cech kategorycznych: czy rozkład jest w przybliżeniu równomierny?
 Cechy kategoryczne w zbiorze danych to "sex", "cp", "fbs", "restecg", "exang", "slope", "ca" i "thal".

Histogram cech kategorycznych:



Patrząc na histogramy, możemy zauważyć, że cechy kategoryczne tego zbioru danych nie mają równomiernego rozkładu.

5. Brakujące dane

Czy w zbiorze danych brakuje jakichś danych?



W zbiorze danych brakuje 6 wartości, 4 w kolumnie "ca" i 2 w kolumnie "thal".

Jaką strategię można zastosować, aby zastąpić brakujące dane?

Dla cechy numerycznej "ca" możemy zastąpić brakujące dane wartościami mediany. Dla cechy kategorycznej 'thal' możemy zastąpić brakujące wartości najczęściej występującą wartością tej cechy:

```
ca_median = dataset['ca'].median()
ca_median

0.0

thal_mode = dataset['thal'].mode()[0]
thal_mode

3.0

dataset['ca'].fillna(ca_median, inplace=True)
dataset['thal'].fillna(thal_mode, inplace=True)
```

Kod przekształcający zbiór danych w macierz cech liczbowych (przykłady x cechy)

W przypadku cech kategorycznych używam 'one hot encoder' do kodowania wartości:

```
column_names = ['cp', 'restecg', 'thal', 'slope']
dataset[column_names] = dataset[column_names].astype('int64')
dataset_encoded = pd.get_dummies(dataset, columns=column_names)
dataset_encoded.rename(columns=mapped_column_names, inplace=True)
```

Kształt zbioru danych po przekształceniu to (303, 23)

Regresja logistyczna

1. Przygotowanie i wstępne przetwarzanie danych

Ponieważ celem jest utworzenie klasyfikatora binarnego, przedefiniowujemy klasy w następujący sposób:

- 0: brak chorób serca
- 1: ma chorobę serca

```
X = dataset_encoded.drop('num', axis=1)
y = dataset_encoded['num']

y = y.replace([1, 2, 3, 4], 1)
y.value_counts()

0    164
1    139
Name: num, dtype: int64
```

W kroku wstępnego przetwarzania danych używamy standardowego skalera ze scikit-learn do skalowania cech numerycznych:

```
from sklearn import preprocessing
scaler = preprocessing.StandardScaler().fit(X[num_features])
X[num_features] = scaler.transform(X[num_features])
```

2. Implementacja regresji logistycznej

```
import numpy as np
def sigmoid(z):
 return 1 / (1 + np.exp(-z))
 def init (self, learning rate=1e-3, max iterations=500,
batch_size=5, convergence threshold=1e-5, random state=0):
    self.learning rate = learning rate
    self.max iterations = max iterations
    self.batch size = batch size
    self.convergence threshold = convergence threshold
    self.random state = random state
    self.cost list = []
    self.theta = None
  def loss(self, y, pred):
    return -(y * np.log(pred) + (1 - y) * np.log(1 - pred))
  def fit(self, X, y):
    self.theta = np.zeros(X.shape[1] + 1)
   X bias = np.c [np.ones(X.shape[0]), X]
    np.random.seed(self.random state)
    for epoch in range(self.max iterations):
      loss batch = []
      for i in range(0, len(y), self.batch size):
        X batch = X bias[i:i + self.batch size]
       y batch = y[i:i + self.batch size]
```

```
preds = sigmoid(X_batch.dot(self.theta))
    gradient = X_batch.T.dot(preds - y_batch) / len(y_batch)
    self.theta -= self.learning_rate * gradient
    loss_batch.append(np.mean(self.loss(y_batch, preds)))

cost = np.mean(loss_batch)
    if (len(self.cost_list) > 0 and abs(cost - self.cost_list[-1]) <
self.convergence_threshold):
        break
        self.cost_list.append(cost)

def predict(self, X):
        X_bias = np.c_[np.ones(X.shape[0]), X]
        preds = sigmoid(X_bias.dot(self.theta))
        y_preds = [1 if pred > 0.5 else 0 for pred in preds]
        return y_preds
```

- + Używana funkcja aktywacji to funkcja sigmoidalna. Hiperparametry modelu to "learning_rate", "max_iterations", "batch_size", "convergence_threshold", i "random_state".
- + Funkcja strat jest funkcją entropii krzyżowej.
- + Model uczy się według rozmiaru paczki, który jest przekazywany jako hiperparametr.
- + Proces uczenia się zostaje zakończony, gdy osiągnie maksymalną liczbę iteracji lub osiągnie próg zbieżności.

3. Weryfikacja modelu

Podział danych na dane treningowe i dane testowe:

```
from sklearn.model_selection import train_test_split

X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.2, random_state=42)
```

Dopasowanie modelu i metryki:

```
model = LogisticRegression(learning_rate=2e-3, max_iterations=1000, batch_size=5, convergence_threshold=1e-5, random_state=42)
model.fit(X_train, y_train)

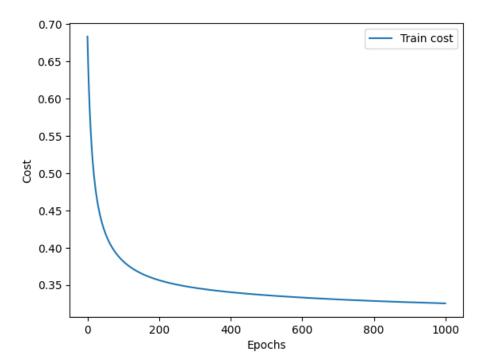
y_preds = model.predict(X_test)

from sklearn.metrics import accuracy_score
from sklearn.metrics import precision_score
from sklearn.metrics import recall_score
from sklearn.metrics import fl_score

print("Recall: %.2f" % recall_score(y_test, y_preds))
print("Precision: %.2f" % precision_score(y_test, y_preds))
print("F1: %.2f" % fl_score(y_test, y_preds))
print("Accuracy: %.2f" % accuracy_score(y_test, y_preds))

Recall: 0.91
Precision: 0.85
F1: 0.88
Accuracy: 0.87
```

Wykres kosztu trenowania w każdej iteracji:



Sieć neuronowa

1. Architektura modelu

Siecią neuronową w tym zadaniu jest wielowarstwowy perceptron (MLP) służący do binarnej klasyfikacji chorób serca. Kluczowe komponenty modelu:

- Model składa się z warstwy wejściowej, po której następuje wiele warstw ukrytych i warstwa wyjściowa.
- Używana funkcja aktywacji to funkcja sigmoidalna.
- Wagi i biasy są randomizowane w określonym zakresie odchylenia standardowego.
- Model wykorzystuje entropię krzyżową jako funkcję kosztu i aktualizuje swoje wagi i biasy przez mini-batch gradient descent.

2. Implementacja modelu

```
class MLP():
    def __init__(self, hidden_layers, batch_size=50, learning_rate=1e-3,
stand_dev=1.0, max_iter=500, random_state=42):
    self.hidden_layers = hidden_layers
    self.num_layers = len(hidden_layers) + 1
    self.batch_size = batch_size
    self.learning_rate = learning_rate
    self.stand_dev = stand_dev
    self.max_iter = max_iter
    self.random_state = random_state
    self.train_cost_list = []
    self.test_cost_list = []
```

```
def wandb init(self, input size, output size):
    self.input size = input size
    self.output size = output size
    np.random.seed(self.random state)
    self.weights = [np.random.normal(0, self.stand dev, (input size,
self.hidden layers[0]))]
    self.bias = [np.random.normal(0, self.stand dev, ((1, self.hidden layers[0])))]
    for i in range(self.num layers - 2):
      self.weights.append(np.random.normal(0, self.stand dev,
(self.hidden layers[i], self.hidden layers[i + 1])))
      self.bias.append(np.random.normal(0, self.stand dev, ((1,
self.hidden layers[i + 1]))))
    self.weights.append(np.random.normal(0, self.stand dev, (self.hidden layers[-
1], output_size)))
    self.bias.append(np.random.normal(0, self.stand_dev, ((1, output_size))))
 def sigmoid(self, x):
   x = np.array(x, dtype=np.float128)
   return 1 / (1 + np.exp(-x))
    return -np.sum(y * np.log(pred) + (1 - y) * np.log(1 - pred), axis=1)
 def feedforward(self, X):
   layer outputs = [X]
    for i in range(self.num layers):
     z = np.dot(layer_outputs[-1], self.weights[i]) + self.bias[i]
      layer outputs.append(a)
    return layer outputs
 def backward(self, y, layer outputs):
    deltas = [None] * self.num layers
   error = y - layer_outputs[-1]
    deltas[-1] = error * self.sigmoid derivative(layer outputs[-1])
    for i in range(self.num layers - 2, -1, -1):
self.sigmoid_derivative(layer_outputs[i + 1])
```

```
for i in range(self.num layers - 1, -1, -1):
    self.weights[i] += self.learning rate * np.dot(layer outputs[i].T, deltas[i])
    self.bias[i] += self.learning rate * np.sum(deltas[i])
  self.wandb init(X.shape[1], 1)
    self.batch size = X.shape[1]
  for epoch in range(self.max iter):
    X, y = shuffle(X, y, random_state=self.random_state)
    for i in range(0, len(y), self.batch size):
      y batch = y[i:i + self.batch size]
      layer outputs = self.feedforward(X batch)
      self.backward(y batch, layer outputs)
      train loss batch.append(np.mean(self.loss(y batch, layer outputs[-1])))
    self.train cost list.append(np.mean(train loss batch))
    self.test cost list.append(np.mean(self.loss(y test,
  outputs = self.feedforward(X)[-1]
  y preds = [1 if pred > 0.5 else 0 for pred in outputs]
def get metrics(self, X, y):
  print("F1: %.2f" % f1 score(y, preds))
 print("Accuracy: %.2f" % accuracy score(y, preds))
```

3. Konfiguracje eksperymentów

a. Wstępne przetwarzanie danych

Przed podziałem zbioru danych na zbiór uczący i testowy normalizujemy dane liczbowe przy użyciu skalowania min-max:

```
X_normalized = X.copy()
X_normalized[num_features] = (X[num_features] - X[num_features].min()) / (X[num_features].max() - X[num_features].min())
```

Podział zbioru danych na zbiór uczący i zbiór testowy:

```
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X_normalized, y, test_size=0.2, random_state=42)
X_train_non_norm, X_test_non_norm, y_train_non_norm, y_test_non_norm = train_test_split(X, y, test_size=0.2, random_state=42)
```

b. Konfiguracje hiperparametrów

Domyślna konfiguracja:

```
default_conf = {
   "max_iter": 1000,
   "learning_rate": 10e-4,
   "stand_dev": 1.0,
   "batch_size": 50,
   "random_state": 42,
   "hidden_layers": [15, 15]
}
```

Konfiguracje do testowania różnych wymiarów warstw ukrytych:

```
# Hidden layer dimensions configs
hld_config1 = {
    **default_conf,
    "hidden_layers": [8, 15]
}
hld_config2 = {
    **default_conf,
    "hidden_layers": [2, 2]
}
hld_config3 = {
    **default_conf,
    "hidden_layers": [30, 30]
}
```

Konfiguracje do testowania różnych szybkości uczenia się:

```
#Learning rates configs
lr_config1 = {
    **default_conf,
    "learning_rate": 0.1
}
lr_config2 = {
    **default_conf,
    "learning_rate": 10e-4
}
lr_config3 = {
    **default_conf,
    "learning_rate": 10e-5
}
```

Konfiguracje do testowania różnych odchyleń standardowych podczas inicjalizacji wag:

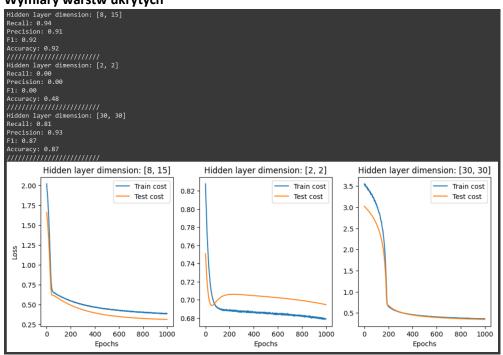
```
#Standard deviations configs
sd_config1 = {
         **default_conf,
         "stand_dev": 0.1
}
sd_config2 = {
         **default_conf,
         "stand_dev": 1.0
}
sd_config3 = {
         **default_conf,
         "stand_dev": 10.0
}
```

Konfiguracje do testowania różnej liczby ukrytych warstw:

```
#Number of layers configs
nol_config1 = {
    **default_conf,
    "hidden_layers": [15]
}
nol_config2 = {
    **default_conf,
    "hidden_layers": [15, 15]
}
nol_config3 = {
    **default_conf,
    "hidden_layers": [15, 15, 15, 15]
}
```

4. Wyniki

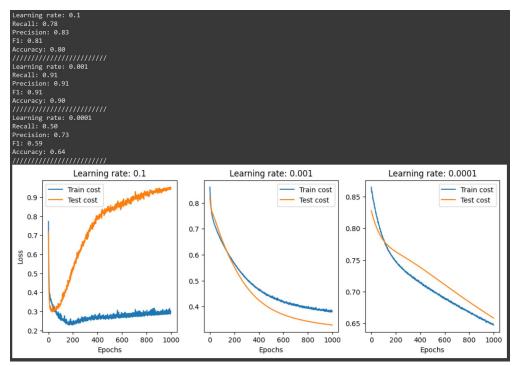
a. Wymiary warstw ukrytych



Model z ukrytymi warstwami [2, 2] ma dość wysokie koszty trenowania i testowania i nie może uczyć się wzorca danych (wyniki Recall, Precision i F1 wynoszą 0,00). Dzieje się tak dlatego, że architektura modelu jest zbyt prosta.

Pozostałe modele dość dobrze demonstrują zdolność do uczenia się wzorca danych.

b. Wartości współczynników uczenia się

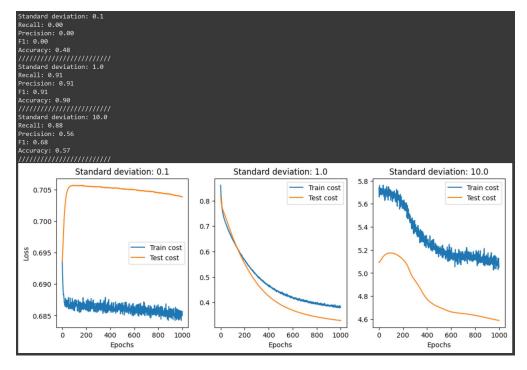


Model ze współczynnikiem uczenia się 0,1 wykazuje nadmierne dopasowanie i oscylacje, koszt trenowania i koszt testowania spadają zbyt szybko i zaczynają ponownie rosnąć, model nie jest zbieżny.

Z drugiej strony, model ze współczynnikiem uczenia się 0,0001 zajmuje dużo czasu, aby się zbiegać, wymaga wielu epok, aby osiągnąć akceptowalną wydajność.

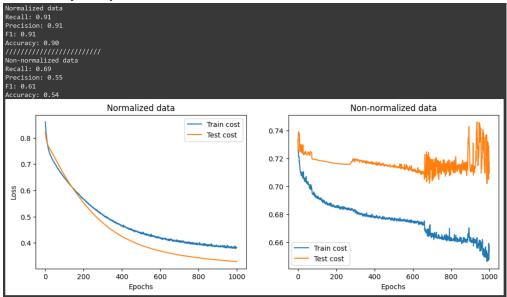
Model ze współczynnikiem uczenia się 0,001 jest stabilny i może dobrze uogólniać na niewidoczne dane.

c. Inicjalizacja wag z odchyleniem standardowym



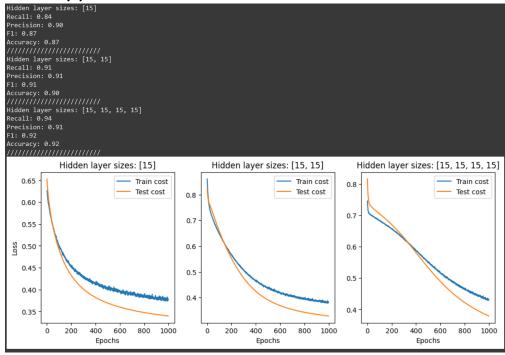
Model z odchyleniem standardowym wynoszącym 10,0 może wymagać wielu epok do zbieżności, ponieważ koszt trenowania i koszt testowania są nadal bardzo wysokie w pierwszych 1000 epok. Model w środku może się efektywnie zbiegać i wymaga mniejszej liczby epok, aby osiągnąć dobrą wydajność. Model po lewej stronie nie może się zbiegać, prawdopodobnie z powodu eksplozji gradientów podczas propagacji wstecznej, co spowodowało niestabilne aktualizacje wag.

d. Normalizacja danych



Patrząc na dwa wykresy, wiemy, że model nie może uczyć się na nieznormalizowanych danych, ponieważ model bardzo oscyluje, zwłaszcza gdy zwiększa się liczba epok. W przypadku danych znormalizowanych model może uczyć się całkiem dobrze przy bardzo małych oscylacjach.

e. Liczba ukrytych warstw



W rezultacie model z największą liczbą ukrytych wartsw [15, 15, 15, 15] ma najlepszą wydajność z wynikiem Recall wynoszącym 0,94. Wygląda na to, że wraz ze wzrostem

liczby warstw wydajność modelu ma tendencję do poprawy, zwłaszcza pod względem metryk Recall i Accuracy.

Odtworzenie architektury sieci w PyTorch z optimizerami

1. Architektura sieci

```
class MLP(nn.Module):
    def __init__(self, input_size, hidden_sizes, output_size):
        torch.manual_seed(42)
        super(MLP, self).__init__()
        self.input_layer = nn.Linear(input_size, hidden_sizes[0])

        self.hidden_layers = nn.ModuleList()
        for i in range(len(hidden_sizes) - 1):
            self.hidden_layers.append(nn.Linear(hidden_sizes[i], hidden_sizes[i + 1]))

        self.output_layer = nn.Linear(hidden_sizes[-1], output_size)

        self.sigmoid = nn.Sigmoid()

    def forward(self, X):
        X = self.sigmoid(self.input_layer(X))

        for hidden_layer in self.hidden_layers:
            X = self.sigmoid(hidden_layer(X))

        X = self.sigmoid(self.output_layer(X))

        return X
```

- Zdefiniowana sieć neuronowa odziedziczona z modułu nn.Module zawiera 2 następujące metody:
- + init: Aby zainicjować parametry modelu
- + forward: Aby wysłać sygnał do przodu i obliczyć predykcje

2. Petla treningowa

```
def train_one_epoch(model, optimizer, loss_fn, data_loader):
    train_loss = 0.0
    for (index, batch) in enumerate(data_loader):
        X, y = batch
        optimizer.zero_grad()
        outputs = model.forward(X)
        loss = loss_fn(outputs, y)
        loss.backward()
```

```
optimizer.step()
    train loss += loss.item()
  avg loss = train loss / len(data loader)
  return avg loss
def train(model, optimizer, loss fn, num epochs, batch size, X train,
y train, X test, y test):
  train loss list = []
 test loss list = []
DataLoader(TensorDataset(torch.tensor(X train.values).float(),
torch.tensor(y train).float()), batch size=batch size, shuffle=True)
  test data loader =
DataLoader(TensorDataset(torch.tensor(X train.values).float(),
torch.tensor(y train).float()), batch size=batch size, shuffle=True)
  for i in range(num epochs):
    loss = train one epoch(model, optimizer, loss fn,
train data loader)
    train loss list.append(loss)
    with torch.no grad():
      outputs = model(torch.tensor(X test.values).float())
      test loss = loss fn(outputs.squeeze(),
torch.tensor(y test).float().squeeze())
      test loss list.append(test loss)
```

- Funkcja train_one_epoch:
- + Trenuje model przez jedną epokę (przebieg przez cały zbiór danych treningowych).
- + Oblicza i zwraca średnią stratę treningową dla tej epoki.
- + Wykorzystuje optymalizator, funkcję straty i DataLoader do iteracyjnego treningu modelu na batchach danych.
- Funkcja train:
- + Przeprowadza trening modelu przez określoną liczbę epok.
- + Oblicza i zwraca listy strat treningowych i testowych dla każdej epoki.
- + Wykorzystuje funkcję **train_one_epoch** do treningu modelu w każdej epoce.
- + Przyjmuje parametry: model, optymalizator, funkcję straty, liczbę epok, rozmiar batcha danych oraz dane treningowe i testowe.

3. Konfiguracja i procedura eksperymentu

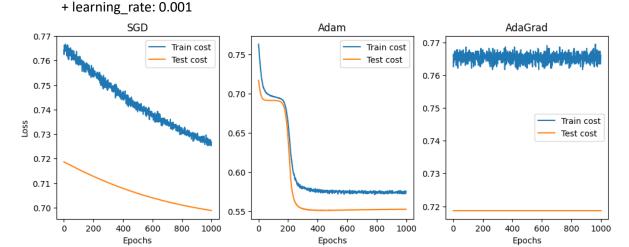
- Wybrane 3 optimizery: SGD, Adam, AdaGrad
- Domyślne parametry modelów:
- + hidden sizes: [15, 15, 15, 15]
- + num_epochs: 1000
- Dla każdego optimizera, testowane będą różne kombinacji konfiguracji parametrów, w tym:
- + batch_size: 10, 50 i 200
- + learning rate: 0.01, 0.001, 0.0001

4. Wyniki eksperymentu

- Eksperyment 3 optimizerów z domyślnymi parametrami:

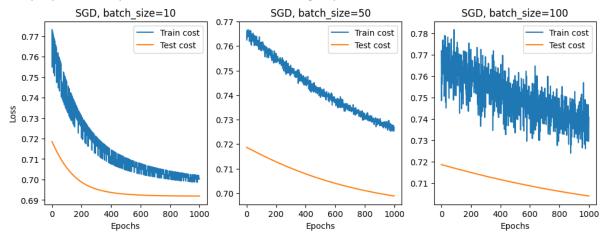
+ hidden_sizes: [15, 15, 15, 15]

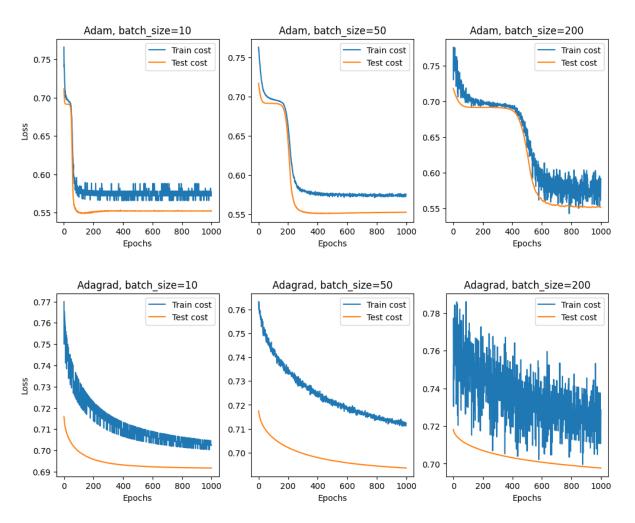
+ num_epochs: 1000 + batch_size: 50



Wstępne analizy:

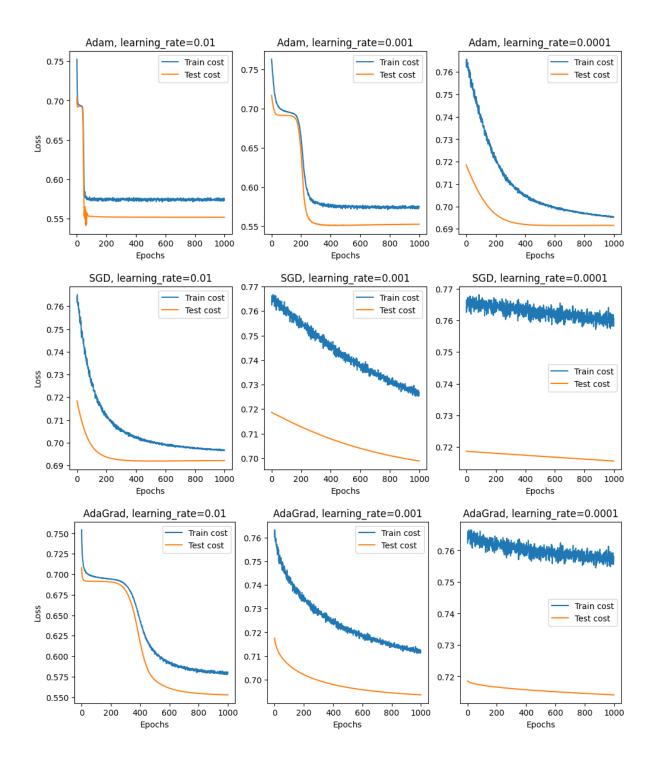
- + Optimizer Adam wydaje się najskuteczniejszy w tym eksperymencie. Szybko zmniejsza stratę i utrzymuje niewielką lukę pomiędzy stratami treningowymi i testowymi, co sugeruje dobrą generalizację.
- + SGD wykazuje uczenie się, ale może być podatne na nadmierne dopasowanie lub może skorzystać na harmonogramie tempa uczenia się lub większej regularyzacji.
- + AdaGrad wydaje się najmniej skuteczny w tym eksperymencie. Jego wydajność można potencjalnie poprawić, dostosowując szybkość uczenia się lub inne hiperparametry.
- Eksperyment różnych rozmiarów batcha dla każdego optimizera:





Wnioski:

- + Szybkość zbieżności: Adam zbiega najszybciej, Adagrad nieco wolniej, a SGD najwolniej.
- + Stabilność: Adam jest najbardziej stabilny przy wszystkich rozmiarach batcha, podczas gdy SGD i Adagrad wykazują większą zmienność przy małym rozmiarze batcha.
- + Przetrenowanie: Adam i Adagrad mogą wykazywać przetrenowanie przy małym rozmiarze batcha, podczas gdy przy większych rozmiarach batcha oba wykazują lepsze uogólnienie.
- + Optymalny rozmiar batcha: Dla SGD jest to 50, dla Adama większe batche są lepsze, a Adagrad poprawia swoje działanie przy większych batcha.
- + Końcowe wartości strat: Adam osiąga najniższe straty, sugerując, że jest najskuteczniejszym optimizerem dla tego zadania.
- + Szum w treningu: Małe batche powodują większy szum dla SGD i Adagrad, podczas gdy Adam jest odporny na rozmiar batcha.
- Eksperyment różnych współczynników learning_rate batcha dla każdego optimizera:



Wnioski:

- + Adam szybko zbiega do niskiej straty przy różnych współczynnikach uczenia, z najwyższym współczynnikiem uczenia (0.01) osiągając szybką konwergencję.
- + SGD przy wyższym współczynniku uczenia (0.01) może dochodzić do przeuczenia, a przy niższych współczynnikach uczenia konwerguje wolniej; przy najniższym współczynniku uczenia (0.0001) postęp jest minimalny.
- + AdaGrad dobrze radzi sobie z wyższym współczynnikiem uczenia (0.01), ale podobnie jak SGD, przy niższym współczynniku uczenia konwergencja jest wolniejsza.

+ Adam wydaje się być najbardziej odporny na wybór współczynnika uczenia i osiąga

konsekwentnie niższe straty w porównaniu do SGD i AdaGrad.