ML Final Project Report

1. 隊名及隊員

隊名: NTU_r07943004_荳荳與水豚

隊員: R07943004 莊育權、R07943023 楊仲萱、R07943123 馬咏治

2. 題目

Human Protein Atlas Images Classification

3. Introduction

A. Database [1]

此 Database 會給多個細胞圖，需要根據這些圖片去預測出裡面有哪些不同種的蛋白質。蛋白質種類總共有 28 種，如下表所示:

Number	Class Name	Number	Class Name
0	Nucleoplasm	14	Microtubules
1	Nuclear membrane	15	Microtubule ends
2	Nucleoli	16	Cytokinetic bridge
3	Nucleoli fibrillar center	17	Mitotic spindle
4	Nuclear speckles	18	Microtubule organizing center
5	Nuclear bodies	19	Centrosome
6	Endoplasmic reticulum	20	Lipid droplets
7	Golgi apparatus	21	Plasma membrane
8	Peroxisomes	22	Cell junctions
9	Endosomes	23	Mitochondria
10	Lysosomes	24	Aggresome
11	Intermediate filaments	25	Cytosol
12	Actin filaments	26	Cytoplasmic bodies

13	Focal adhesion sites	27	Rods & rings

而每張圖片當中會有四個 channel，分別是紅、綠、藍和黃，而這四種 channel 分別代表著 microtubules、the protein of interest、nucleus 和 endoplasmic reticulum 的資訊。

B. Motivation

由於我們三個人都有做跟生醫相關的研究，此 Database 已經事先研究過裡面分類的種類有嚴重 Class imbalance 的問題，而這個問題也時常在生醫訊號或者生醫影像上做 Classification 產生，主要原因是每個疾病或者現象，通常都會有一種類比較容易出現，而有些比較特殊的疾病一定會比較小機率出現，同時如果醫生要對每一筆資料去做 label 實在太耗時間，對於這些問題，就會需要用其他技巧彌補這個不足。因此我們三位覺得以這個當作我們 Final Project 的題目，也對於未來我們的研究有所幫助!

4. Data Preprocessing

A. RGBY

由於此 Database 中的每個影像都有四種不同顏色的 channel，每個 channel 也分別帶有不同種生物特性，而通常 library 裡 pretrained 好的 model 輸入維度只有三種 channel(紅、綠、藍)，因此在這部分我們會嘗試以下兩種方式:

1)由於黃色是紅色加綠色，因此我們將黃色 channel 訊號一半的值給紅色，另一半給綠色。這樣的優點是我們不用另外去更動到 pretrained 好的 model，缺點是黃色所代表的資訊可能就會遺失掉。

2)不管是我們自己所設計的 model，或者是 library 裡 pretrained 好的 model，我們都將其輸入 data 的 channel 設定成 4，這樣就可以確保黃色 channel 的資訊不會不見。

B. Data Augmentation

由於此 Database 所帶有的資料量，對於訓練一個複雜的 model 來說，仍然過於小，因此很容易就會產生 overfitting 的現象。在處理資料過少這方面的問題，再把資料丟進去 model 做 training 的時候，會先經過 Data Augmenter，如下圖程式所示:

```
def augumentor(self,image):
    augment_img = iaa.Sequential([
        iaa.OneOf([
            iaa.Affine(rotate=90),
            iaa.Affine(rotate=180),
            iaa.Affine(rotate=270),
            iaa.Affine(shear=(-16, 16)),
            iaa.Fliplr(0.5),
            iaa.Flipud(0.5),

        ])], random_order=True)

    image_aug = augment_img.augment_image(image)
    return image_aug
```

此 augumentor 函式會將影像做前置處理，例如旋轉、移動、翻轉等處理，因此就會產生很多被前置處理過的影像，而這些影像就可以用來增加訓練用的資料量。

5. Model Description

A. 類 DenseNet 的 CNN

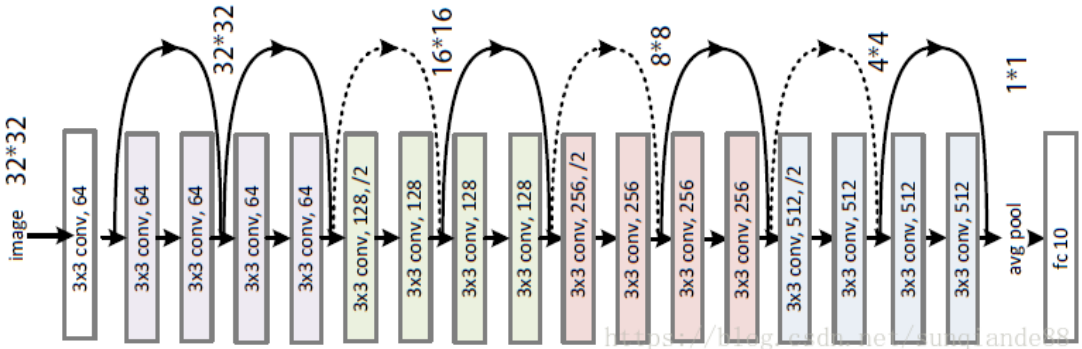
一開始我們參考類似於 CVPR2017 最佳論文[2]中所提出的 DesneNet 架構，運用 keras 的 concatenate 將後面一層的網路架構跟前面的網路架構都去做連結，以下為我們的架構程式碼:

```
init = Input(input_shape)
x = BatchNormalization(axis=-1)(init)
x = Conv2D(8, (3, 3),activation='relu')(x)
x = BatchNormalization(axis=-1)(x)
x = Conv2D(8, (3, 3),activation='relu')(x)
x = BatchNormalization(axis=-1)(x)
x = Conv2D(16, (3, 3),activation='relu')(x)
x = BatchNormalization(axis=-1)(x)
x = MaxPooling2D(pool_size=(2, 2))(x)
x = Dropout(dropRate)(x)
c1 = Conv2D(16, (3, 3), padding='same',activation='relu')(x)
c2 = Conv2D(16, (5, 5), padding='same',activation='relu')(x)
c3 = Conv2D(16, (7, 7), padding='same',activation='relu')(x)
c4 = Conv2D(16, (1, 1), padding='same',activation='relu')(x)
x = Concatenate()([c1, c2, c3, c4])
x = BatchNormalization(axis=-1)(x)
x = MaxPooling2D(pool_size=(2, 2))(x)
x = Dropout(dropRate)(x)
```

```
x = Conv2D(32, (3, 3),activation='relu')(x)
x = BatchNormalization(axis=-1)(x)
x = MaxPooling2D(pool_size=(2, 2))(x)
x = Dropout(dropRate)(x)
x = Conv2D(64, (3, 3),activation='relu')(x)
x = BatchNormalization(axis=-1)(x)
x = MaxPooling2D(pool_size=(2, 2))(x)
x = Dropout(dropRate)(x)
x = Conv2D(128, (3, 3),activation='relu')(x)
x = BatchNormalization(axis=-1)(x)
x = MaxPooling2D(pool_size=(2, 2))(x)
x = Dropout(dropRate)(x)
x = Flatten()(x)
x = Dropout(0.5)(x)
x = Dense(28,activation='relu')(x)
x = BatchNormalization(axis=-1)(x)
x = Dropout(0.1)(x)
x = Dense(28)(x)
x = Activation('sigmoid')(x)
```

B. Pretrained Resnet18

第二種 model 是使用 library 內建已經用 ImageNet 訓練好的 Resnet18，架構來自 CVPR2015 最佳論文獎[3]，架構如下圖所示 [4]:

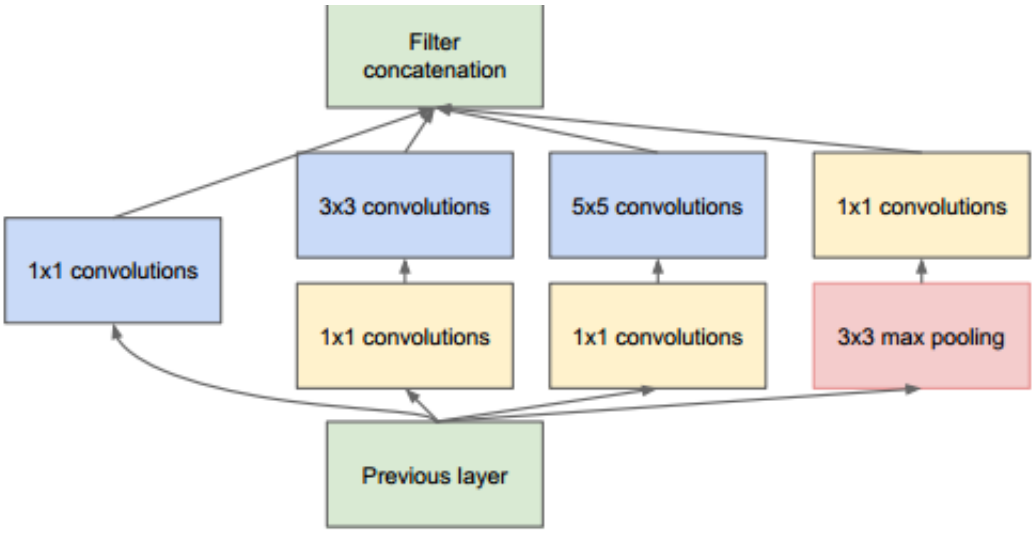


其基本精神為，假定某段神經網絡的輸入是 x，期望輸出是 H(x)，如果我們直接把輸入 x 傳到輸出作為初始結果，那麼此時我們需要學習的目標就是 F(x)=H(x)- x。ResNet 的結構可以極快地加速超深神經網絡的訓練，模型的準確率也有非常大的提升。

C. Pretrained Inception V2

第三種模型架構是用 Google 所提出來的 Inception [5]，並且是使用已經用 ImageNet 訓練過的 model。其本身 Inception Google 有陸陸續續提出不同的版本，而其 Version 1 的基本精神為，傳統的 Convolution Network 是將 Convolution layer stack 在一起，而 Inception 最大的改變就是 Inception 模塊疊加的形式跟傳統的不太一樣。按論文裡面的說法就是，用 Inception（稠密的可利用的組件）近似一個稀疏結構。將 1x1，3x3，5x5 的 conv 和 3x3 的 pooling，stack 在一起，一方面增加了網絡的寬度，另一方面增加了網絡對尺度的適

應性。主要特點是提高了網絡內部計算資源的利用率，架構如下圖所示[6]:



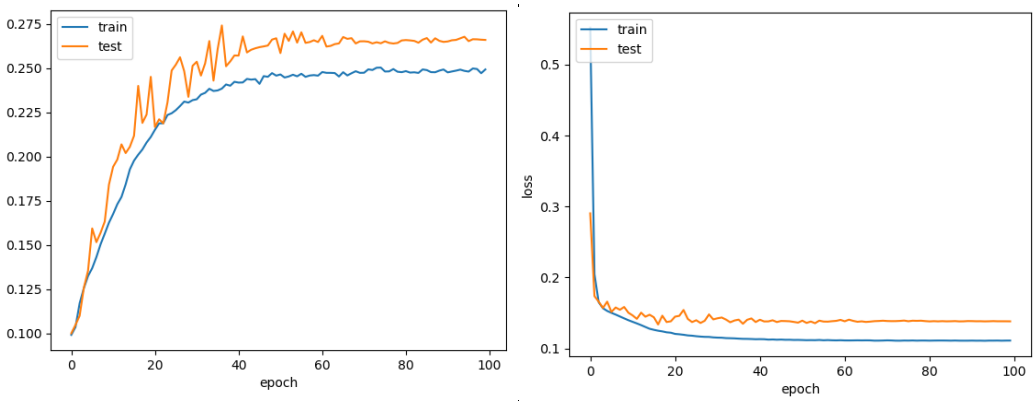
而 InceptionV2 又被稱之為 BN-Inception，其在 Version 1 的基礎上，進行了改進，一方面加入了 Batch Normalization Layer，減少了 Internal Covariate Shift（內部 neuron 的數據分佈發生變化），使每一層的輸出都規範化到一個 N(0, 1)的高斯分布曲線，另外一方面學習 VGG 用 2 個 3x3 的 conv 替代 inception 模塊中的 5x5，既降低了參數數量，也加速計算。

6. Experiment and Discussion

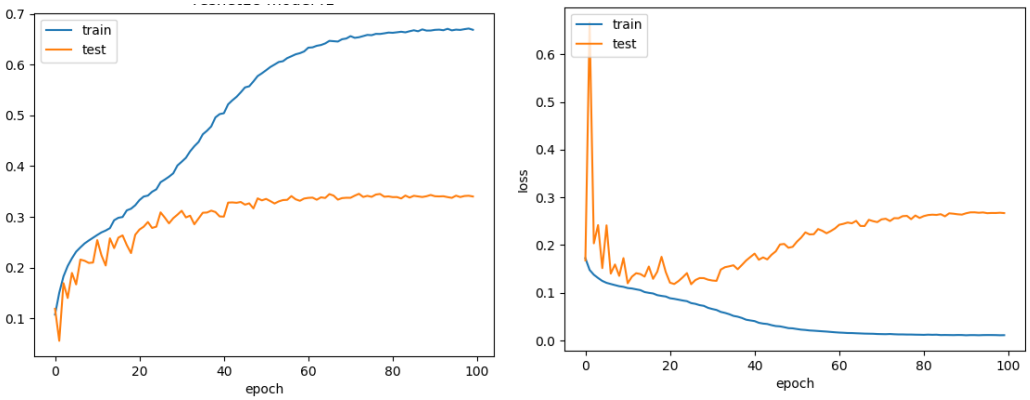
A. Different Classifiers

在這部分我們實驗了上述所提及的三個模型架構，看每個模型架構對於 f1 loss 的影響。

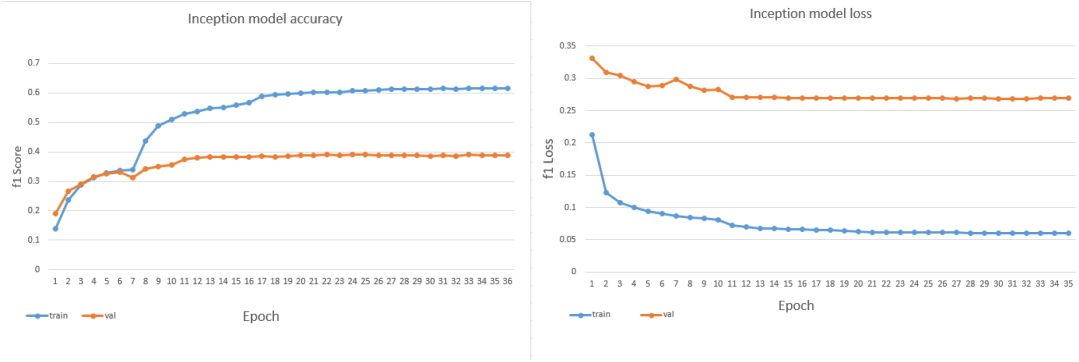
下圖為類 DenseNet 未被 pretrained 過的 CNN 在訓練過程中的 f1_score 和 f1_loss:



下圖為 ResNet18 在訓練過程中的 f1_score 和 f1_loss:



下圖為 InceptionV2 在訓練過程中的 f1_score 和 f1_loss:



由上面這六張圖可以發現以下兩點:

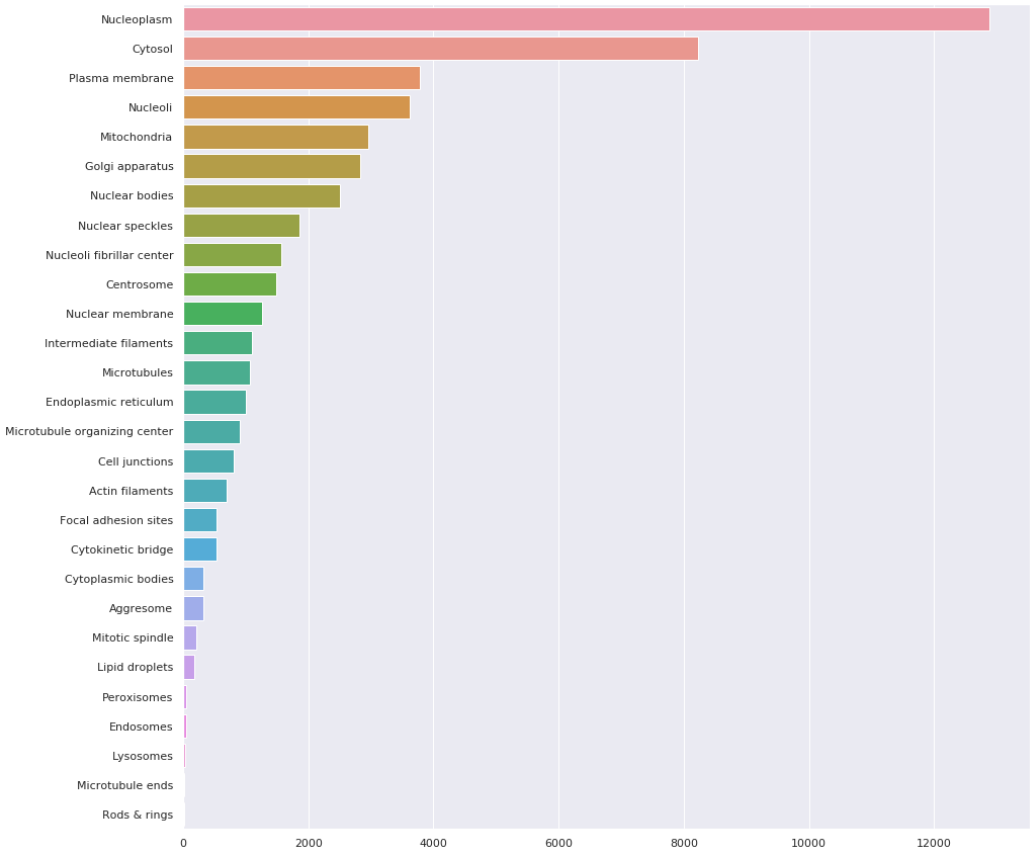
1) 後面兩個模型 ResNet 和 InceptionV2 表現得比沒有經過 pretrained 過得 DenseNet 還要好，可以得知有經過 pretrained 過的模型，可能因為其權重的 initialization 是有意義的，比起沒有經過 pretrained 的模型權重隨機亂給的 performance 還來的好很多。

2) 後面兩個模型 ResNet 和 InceptionV2 雖然表現比較好，但可以很明顯地發現他們都有很嚴重 overfitting 的問題，而較為簡單的類 DenseNet 卻比較不明顯，主要可能是因為後面兩個模型複雜度太高，很容易就 over training。

	Train		Test	
	F1 score	F1 loss	F1 score	F1 loss
DenseNet	0.247	0.12	0.261	0.14
ResNet18	0.656	0.02	0.333	0.25
InceptionV2	0.61	0.05	**0.398**	0.26

B. Class Imbalance

在一開始就有提到此 Human Protein Database 有很嚴重 Class Imalance 的問題，而整個蛋白質種類出現的次數，如下圖所示[7]:



因此可以發現此 Database 的蛋白質類別有很嚴重 Class Imbalance 的問題，而一開始在嘗試訓練模型的時候，去看每個模型預測出來的結果，可以發現裡面所預測出來的類別，在 Database 很少出現的類別幾乎很少被預測出來，而比較常出現的前幾名，其實幾乎在蠻多圖上都可以看到的。造成這個現象大概原因就是某些類別在訓練資料中太少出現，而模型在訓練的過程中會一直看到前幾名一直出現的類別，因此前幾名的類別會被訓練的較好，且整個模型可能都被前幾名出現的類別索引導，因此較常出現的類別會在模型做預測的時候，較容易出現。

因此在處理 Class Imbalance 這方面的問題，我們這裡嘗試了兩種方法:

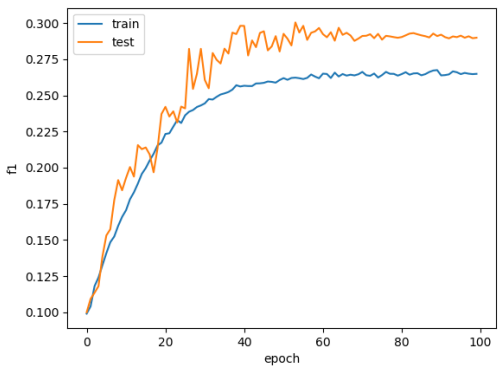
1) 在文獻上，比較常用到的方法就是對於每個類別的權重(Class Weight)去做調整。例如，一開始在訓練模型的時候，如果每個種類的權重都沒有去做更改的話，對於 Cost function 來說，每個類別只要犯錯的懲罰都是一樣的，但當如果給類別權重的話，如下程式圖所示:

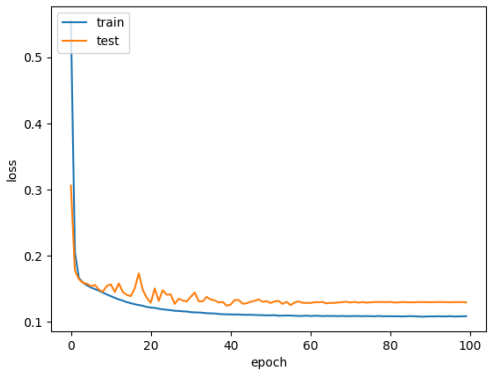
```
weight = [1,1,1,1,1,1,1,1,4,4,4,1,1,1,1,4,1,1,1,1,2,1,1,1,1,1,1,4]
class_weight = {0: weight[0],
                1: weight[1],
                2: weight[2],
                3: weight[3],
                4: weight[4],
                5: weight[5],
                6: weight[6],
                7: weight[7],
                8: weight[8],
                9: weight[9],
                10: weight[10],
                11: weight[11],
                12: weight[12],
                13: weight[13],
                14: weight[14],
                15: weight[15],
                16: weight[16],
                17: weight[17],
                18: weight[18],
                19: weight[19],
                20: weight[20],
                21: weight[21],
                22: weight[22],
                23: weight[23],
                24: weight[24],
                25: weight[25],
                26: weight[26],
                27: weight[27]}
```

當最後一個類別只要犯錯，其所受到的懲罰就會是平常的四倍，也就代表著我們將較少出現類別在模型 Cost function 的重要性調高，這樣模型在訓練的過程中，為了降低 Cost function 就比較不會去忽略較少出現的 Class。

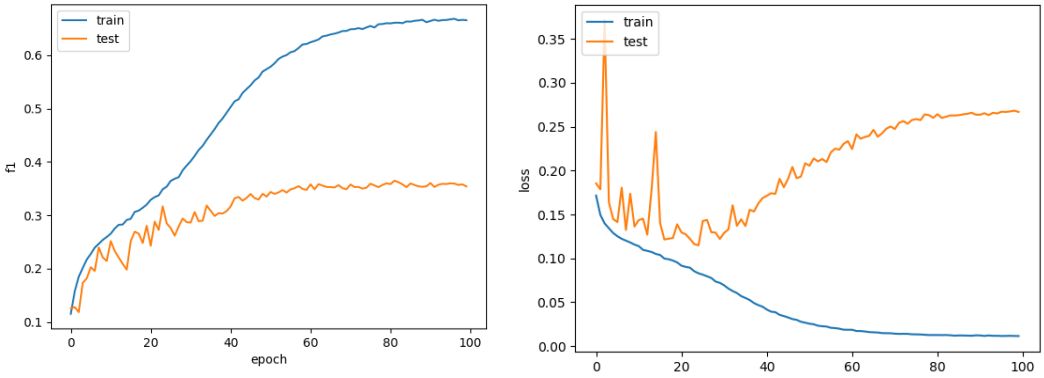
在這部分我們使用類 DenseNet 的 CNN 和 ResNet18 去比較，加上 Class Weight 之後，訓練模型的結果是否有比較好:

下圖為類 DenseNet 的 CNN 加上 Class Weight 後的 f1 score 和 f1 loss:





下圖為 ResNet18 加上 Class Weight 後的 f1 score 和 f1 loss:



可以去比較在 A 部分 Different Classifiers 的模擬結果和上面這些圖的模擬結果，可以觀察出加上權重之後，在訓練模型時的 f1 score 的確比沒有加上權重的 f1 score 還要來的高:

	Train		Test	
	F1 score	F1 score w/ weight	F1 score	F1 score w/ weight
DenseNet	0.247	**0.261**	0.261	**0.285**
ResNet18	0.656	**0.71**	0.333	**0.358**

而我們去觀察模型預測出來的類別，發現原本在訓練資料較少出現的類別，在有加權重模型的 output prediction 出現的比例比沒有加權重的還來的多，代表對較少出現的類別加上權重，的確可以讓模型不會只去 fit 較常出現的類別，也可以來減緩 Class Imbalance 的影響。

2) 第二種方法為，通常經過模型預測出來的數值會介於 0-1 之間，而正常來說我們會將 0.5 當做一個臨界點，大於 0.5 就算是這個類別，而小於的話就是沒有這個類別。而在這方面我們去對每一種 Class 找出最適合他的 threshold，可以使得每個類別的 f1 score 最高，如下程式碼所示:

```
rng = np.arange(0, 1, 0.001)
f1s = np.zeros((rng.shape[0], 28))
lastFullValPred = np.empty((0, 28))
lastFullValLabels = np.empty((0, 28))
for i in range(len(vg)):
    im, lbl = vg[i]
    scores = bestModel.predict(im)
    lastFullValPred = np.append(lastFullValPred, scores, axis=0)
    lastFullValLabels = np.append(lastFullValLabels, lbl, axis=0)

for j,t in enumerate(rng):
    for i in range(28):
        p = np.array(lastFullValPred[:,i]>t, dtype=np.int8)
        scoref1 = off1(lastFullValLabels[:,i], p, average='macro')
        f1s[j,i] = scoref1

T = np.empty(28)
for i in range(28):
    T[i] = rng[np.where(f1s[:,i] == np.max(f1s[:,i]))[0][0]]
print(T)
np.save("threshold.npy",T)
```

這部分由於是在 Inference 的時候，去用 validation data 去找最能使 f1 score 最高的 threshold，因此就沒有圖可以放。但實驗出來的結果，的確會比沒有去選 threshold 的還來的好:

	w/o threshold	w/ threshold
kaggle pubic	0.329	**0.343**

C. Ensemble

為了能更加提高我們的 f1 score，在這部分我們使用 ensemble 的方法將不同種模型去做整合。但在這部分由於每個訓練出來的模型檔案太過龐大，於是我們在這採取另外一種方法，我們將兩種不同模型 output 出來的 ans.csv 去做 merge 的動作，也就是 A 預測出來的類別跟 B 預測出來的類別一起合併，而出來的分數的確是會上升，可以推測出 ensemble 方法還是有用的:

	w/o ensemble	w/ ensemble
kaggle pubic	0.440	**0.444**

7. Conclusion

在這個比賽當中為了解決 Class Imabalance 和提高我們的排名，我們嘗試了使用很多種不同的方法，以下為我們嘗試方法的統整:

1) 調整 Data Augmentor 的參數
2) 運用不同種模型去做訓練
3) 解決 Class Imbalance 的問題
4) 調整 threshold
5) 使用 ensemble 的方法

我們一開始使用 pretrained 好的模型，發覺出來的分數都是 0.3 多，一直沒辦法過 strong baseline，後來才去 kernel 發現這筆 database 有很嚴重的 Data Imbalance 的問題，於是上網 survey 如何去處理 Data Imbalance 的方法，最後才終於過 strong。然而為了拚 ranking，我們原本只使用 ResNet18，最後才去嘗試 InceptionV2，並且經過不斷地調整 threshold，還有一些參數才上升至 0.46。而以下也統整出幾個我們覺得對於這個比賽有效提升分數的小技巧:

1) 調整每個類別的資料權重
2) 去訓練每個類別的 threshold
3) 直接使用 output file 達到 ensemble 的效果

因此在這比賽我覺得最重要的是，**你如何去處理好 Data Imbalance 的問題**，如果處理好基本上過 strong 不難

8. Reference

[1]https://www.kaggle.com/c/human-protein-atlas-image-classification
[2]https://arxiv.org/abs/1608.06993
[3]https://arxiv.org/abs/1512.03385
[4]https://blog.csdn.net/sunqiande88/article/details/80100891
[5]https://arxiv.org/abs/1502.03167
[6]https://blog.csdn.net/yuanchheneducn/article/details/53045551
[7]https://www.kaggle.com/allunia/protein-atlas-exploration-and-baseline