

Άσκηση 1. Επιβλεπόμενη Μάθηση: Ταξινόμηση. Μελέτη datasets του UCI Machine Learning Repository



Περιγραφή της άσκησης

Κάθε ομάδα του εργαστηρίου των Νευρωνικών θα μελετήσει ως προς την ταξινόμηση 2 datasets από το UCI Machine Learning repository. Το ένα dataset είναι μικρό (Small) με λιγότερα από 1000 δείγματα και το άλλο μεγάλο (Big) με περισσότερα από 1000 δείγματα. Υπάρχουν 12 S και 12 B datasets προς μελέτη και καμία από τις 118 ομάδες του εργαστηρίου δεν έχει τον ίδιο συνδυασμό (S,B) datasets με άλλη.

Μπορείτε να βρείτε τα (S,B) που έχουν ανατεθεί στην ομάδα σας στον πίνακα [Ομάδες - UCI Datasets](#) (οι βάρδιες βρίσκονται σε δύο φύλλα). Για να δείτε ποια datasets του UCI αντιστοιχούν στους κωδικούς σας καθώς και με ποια αρχεία δεδομένων πρέπει να δουλέψετε, συμβουλευτείτε τον πίνακα [UCI classification datasets](#).

Η κάθε ομάδα θα παραδώσει στο mycourses **δύο jupyter notebooks** (τα αρχεία ipynb και τα αντίστοιχα αρχεία py με σκέτο κώδικα Python) σε ένα zip file. Θα συνδυάζετε κώδικα για την υλοποίηση και markdown για τις απαντήσεις, εξηγήσεις και εκτιμήσεις σας. Χρησιμοποιήστε το markdown formatting για να οργανώσετε το notebook σε sections.

Notebook 1 (Small): Στο πρώτο notebook θα εκπαιδεύσετε και βελτιστοποιήσετε τους ταξινομητές α) dummy και β) kNN στο μικρό dataset (S) χωρίς τη χρήση pipelines και gridsearchcv (θα υλοποιήσετε εσείς την αλυσίδα του pipeline και την διαδικασία gridsearchcv). Θα χρησιμοποιήσετε 20% για test set και σχήμα 10-fold για cross-validation.

Notebook 2 (Big): Στο δεύτερο notebook θα εκπαιδεύσετε και βελτιστοποιήσετε τους ταξινομητές α) dummy classifiers, β) Gaussian Naive Bayes, γ) kNN και δ) Multi-Layer Perceptron (MLP) στο μεγάλο dataset (B) με κανονική χρήση των pipelines και gridsearchcv του scikit. Θα χρησιμοποιήσετε 30% για test set και σχήμα 5-fold για cross-validation.

Στόχος: Με εξαίρεση τους dummy classifiers, στόχος σας είναι για τους υπόλοιπους ταξινομητές να βρείτε για τον καθένα ξεχωριστά σε κάθε dataset α) τη βέλτιστη αρχιτεκτονική μετασχηματιστών (στάδια προ-επεξεργασίας) και β) τις βέλτιστες υπερ-παραμέτρους (τόσο των μετασχηματιστών όσο και του ταξινομητή) μέσω grid search και cross validation.

Μετρικές: Θα χρησιμοποιήσετε 2 διαφορετικές μετρικές απόδοσης στο cross-validation για την επιλογή του μοντέλου: α) f1_micro και β) f1_macro.

Παραδοτέα εντός κάθε notebook

Το κάθε notebook θα αποτελείται από τα ακόλουθα sections:

A. Στοιχεία ομάδας

1. Αριθμός ομάδας, ονοματεπώνυμά και AM σας

B. Εισαγωγή του dataset

1. Σύντομη παρουσίαση του dataset (τι περιγράφει).
2. Αριθμός δειγμάτων και χαρακτηριστικών, είδος χαρακτηριστικών. Υπάρχουν μη διατεταγμένα χαρακτηριστικά και ποια είναι αυτά;
3. Υπάρχουν επικεφαλίδες; Αρίθμηση γραμμών;
4. Ποιες είναι οι ετικέτες των κλάσεων και σε ποια κολόνα βρίσκονται;
5. Χρειάστηκε να κάνετε μετατροπές στα αρχεία text και ποιες;
6. Υπάρχουν απουσιάζουσες τιμές; Πόσα είναι τα δείγματα με απουσιάζουσες τιμές και ποιο το ποσοστό τους επί του συνόλου;
7. Ποιος είναι ο αριθμός των κλάσεων και τα ποσοστά δειγμάτων τους επί του συνόλου; Αν θεωρήσουμε ότι ένα dataset είναι μη ισορροπημένο αν μια οποιαδήποτε κλάση είναι 1.5 φορές πιο συχνή από κάποια άλλη (60%-40% σε binary datasets) εκτιμήστε την ισορροπία του dataset.
8. Διαχωρίστε σε train και test set. Εάν υπάρχουν απουσιάζουσες τιμές και μη διατεταγμένα χαρακτηριστικά διαχειριστείτε τα και αιτιολογήστε τις επιλογές σας.

Γ. Baseline classification

1. Εκπαιδεύστε στο train τους classifiers με default τιμές (απλή αρχικοποίηση). Κάντε εκτίμηση στο test set (μαζί με τους dummy) και τυπώστε για κάθε estimator: confusion matrix, f1-micro average και f1-macro average.
2. Για κάθε averaged metric, εκτυπώστε bar plot σύγκρισης με τις τιμές του συγκεκριμένου f1 για όλους τους classifiers.
3. Σχολιάστε τα αποτελέσματα των plots και των τιμών precision, recall, f1 των πινάκων σύγκρισης.

Δ. Βελτιστοποίηση ταξινομητών

1. Για κάθε ταξινομητή βελτιστοποιήστε την απόδοσή του στο training set μέσω της διαδικασίας προεπεξεργασίας και εύρεσης βέλτιστων υπερπαραμέτρων (δεν έχουν όλοι οι ταξινομητές υπερπαραμέτρους). Κάντε εκτίμηση στο test set (μαζί με τους dummy) και τυπώστε για κάθε estimator: confusion matrix, f1-micro average και f1-macro average.
2. Για το τελικό fit του κάθε ταξινομητή στο σύνολο του training set και για το predict στο test set εκτυπώστε πίνακες με τους χρόνους εκτέλεσης.
3. Για κάθε averaged metric, εκτυπώστε bar plot σύγκρισης με τις τιμές του συγκεκριμένου f1 για όλους τους classifiers.
4. Τυπώστε πίνακα με τη μεταβολή της επίδοσης των ταξινομητών πριν και μετά τη βελτιστοποίησή τους.
5. Σχολιάστε τα αποτελέσματα των plots και των τιμών precision, recall, f1 των πινάκων σύγχυσης, τη μεταβολή της απόδοσης και τους χρόνους εκτέλεσης.

Βασικές υπερπαραμέτροι προς βελτιστοποίηση:

kNN: στο μικρό notebook n_neighbors. στο μεγάλο notebook n_neighbors, metric, weights

MLP: hidden_layer_sizes (χρησιμοποιήστε μόνο ένα επίπεδο κρυμμένων νευρώνων), activation, solver, max_iter, learning_rate, alpha

Συμβουλές

Ξεκινήστε με μια επανάληψη όλων των notebooks του μαθήματος.

Μελετάτε πάντοτε και πλήρως το documentation των συναρτήσεων που χρησιμοποιείτε. Στα notebooks του μαθήματος καλύπτουμε ένα μικρό μέρος των δυνατοτήτων της βιβλιοθήκης.

Μελετήστε καλά την περιγραφή του dataset στη σελίδα του στο UCI και δείτε προσεκτικά τα txt αρχεία των δεδομένων.

Υπάρχουν ευκολότερα και δυσκολότερα datasets, δεν είναι αναγκαστικό να έχετε πάντα υψηλές τιμές του f1 σε απόλυτους αριθμούς. Για παράδειγμα σε ένα dataset μπορεί ένα f1 0.9 από ένα ταξινομητή να θεωρείται χαμηλό και σε ένα άλλο ένα f1 0.6 από κάποιον ταξινομητή να θεωρείται κορυφαίο. Το ζητούμενο είναι κάθε φορά να παίρνετε το βέλτιστο από τον κάθε ταξινομητή για το dataset που μελετάτε. Μπορείτε να συμβουλευτείτε τη [δημοσιευμένη έρευνα](#) για τις αποδόσεις των ταξινομητών στο dataset που δουλεύετε.

Συμβουλευτείτε **απαραίτητα** το [FAQ](#) για την αρχιτεκτονική (pipeline) του εκτιμητή, το grid search και διάφορα θέματα επεξεργασίας των datasets.

Ορίστε συναρτήσεις για πράξεις που κάνετε συχνά και επαναπαραγοντοποιήστε όπου χρειάζεται. Θα αξιολογηθεί και η ποιότητα του κώδικα.

Θα αξιολογηθούν επίσης η οργάνωση του notebook, η χρήση του markdown και η παρουσίαση (plots, πίνακες κλπ) των αποτελεσμάτων.

Πριν παραδώσετε βεβαιωθείτε ότι έχετε συμπεριλάβει όλα τα παραδοτέα και στα δύο notebooks. Εάν απουσιάζει κάποιο παραδοτέο χάνετε αυτομάτως τα μόρια που του αντιστοιχούν.

Δεν χρειάζεται να παραδώσετε τα data files, θα πρέπει όμως στα notebooks να έχετε τρέξει όλα τα κελιά και να είναι ορατή η έξοδος τους όταν τα κάνετε download για να τα ανεβάσετε στο mycourses. Μην ξεχάσετε και τα αντίστοιχα αρχεία Python (.py) μέσα στο zip.

Όλα τα filenames των .ipynb και .py αρχείων σας παρακαλούμε να έχουν τη μορφή: αριθμός ομάδας - dataset για παράδειγμα A65-S13.ipynb και A65-S13.py, A65-B13.ipynb και A65-B13.py.

Για απορίες, πρώτα συμβουλευτείτε το [FAQ](#) το οποίο περιέχει λήμματα ειδικά για την Άσκηση 1. Αν εξακολουθείτε να έχετε απορία σε κάποιο θέμα μπορείτε να απευθύνεστε στο nnlab@islab.ntua.gr (παρακαλούμε όχι ατομικά email). Το FAQ θα ανανεώνεται με απαντήσεις στις ερωτήσεις που θα στέλνετε στο nnlab. Εάν αφήσετε την άσκηση για την τελευταία στιγμή και σας προκύψουν απορίες, πιθανότατα δεν θα προλάβουμε να τις απαντήσουμε οπότε είναι καλύτερο να αρχίσετε να την δουλεύετε νωρίς.

Ημερομηνία παράδοσης

Πέμπτη 13 Δεκεμβρίου 2018 αυστηρά (θα αγνοηθούν αιτήματα για παράταση).

Καλή επιτυχία!