(助教抱歉,由於我寫完 hw2 才看到您的評語,這次先繳交 py 檔+PDF,下次就改繳交單一份 html)

Q1 Curse of Dimensionality

(a) 試簡述何謂維度的詛咒?試列舉一案例說明。

Ans:

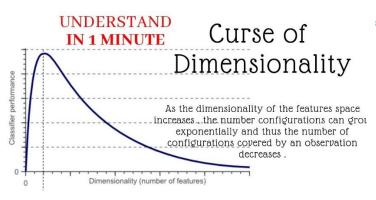
模型的參數數量與模型本身的複雜度與資料集的特徵維度呈正相關,

模型的參數數量越多,使模型達成收斂需要的資料筆數也就越多,當樣本數不足時會導致

- 1. 花很長時間學習但演算法不易收斂
- 2. 收斂時出現多重解 (multiple solutions) 或過度配適

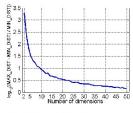
簡而言之,特徵從零變多模型的預測能力一開始會提升,當過了最適的特徵個數,預測績效立即呈現指數遞減。(如下圖左)

舉例: 植栽的數據集有花齡、品種、施肥、澆水量等特徵;若特徵數量越多,特徵空間中的樣本點就會變得更疏離,對樣本取距離 min 和 max 會顯得沒有差別,降低模型的適配度。(如下圖右)



Curse of Dimensionality

- When dimensionality increases, data becomes increasingly sparse in the space that it occupies
- Definitions of density and distance between points, which is critical for clustering and outlier detection, become less meaningful



 Randomly generate 500 points
 Compute difference between max and min distance between any pair of points

R Tan Steinhach Kumar Introduction to Data Mining 4/19/2004 44

(b) 避免維度詛咒的方法有哪些?

Ans:

- 1. 避免使用過多特徵,僅使用最適的特徵個數數量的作為訓練資料。
- 2. 檢查特徵間是否有共線性關係,若有則整合或剔除具共線性關係的特徵們。
- (c) 試找一個開放數據 (e.g. Kaggle 開放數據或第一次作業紅酒數據集)並選一種方法 (e.g. 線性迴歸或決策樹),用模擬方法 固定樣本數但逐步增加變數個數,試著重新繪製圖 3.12,呈現維度與預測 (或分類)績效間的關係。

Ans: 我使用 hw1 的紅酒數據集,一共有 28 個特徵以及一個標籤欄位。重要變數如(1)(2) 之程式輸出,重要程度為 f18 > f2 > f14 > ... > f12。

- (1) 整體資料先做線性迴歸。
- (2) 依 p value 小至大排序選出重要變數。

```
# (1) 整體資料先做線性迴歸;
# (2) 依 p value 小至大排序選出重要變數;
furnace_model = sm.OLS(furnace_y, furnace_X_const)
furnace_result = furnace_model.fit()
# print(furnace_result.summary())
print('rsquared:', furnace_result.rsquared, '\nrsquared_adj:', furnace_result.rsquared_adj)

furnace_pvalues = furnace_result.pvalues
print(furnace_pvalues.sort_values().head(3)) # p 越小影響力越大
print(furnace_pvalues.sort_values().tail(3)) # p 越大影響力越小

sorted_pvalues = list(furnace_pvalues.sort_values().keys())
print(f"sorted_pvalues: {sorted_pvalues}")
```

```
sorted_pvalues: ['Intercept', 'f18', 'f2', 'f14', 'f15', 'f22', 'f17', 'f25', 'f6', 'f5', 'f8', 'f10', 'f16',
'f26', 'f1', 'f11', 'f13', 'f21', 'f19', 'f7', 'f24', 'f20', 'f3', 'f23', 'f27', 'f0', 'f4', 'f9', 'f12']
```

(3) 將重要的變數一個個依序放入迴歸並計算 adjusted R2 作為預測準確度。 變數數量之於準確度的相關性如下圖左,可以看到當變數個數從 1 增加到 4 個時,模型 準確度快速增長,18 個變數為峰值。但此資料集在維度增加時,並未展現如下圖右的指數 遞減情形,或許可以推論資料集的維度數量適中,未達維度詛咒的標準。

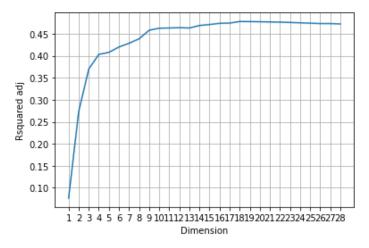
```
# (3) 將重要的變數一個個依序放入迴歸並計算 adjusted R2 作為預測準確度
# formula string format: 'Label ~ param1 + param2 ...'
numOfTest = len(sorted_pvalues[1:])
rsquared_adj_lst = []

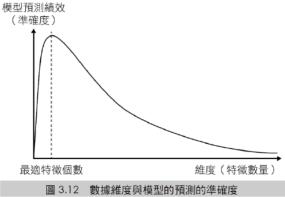
for i in range(1, numOfTest+1):
    formula_str = make_formula(i)
    result = smf.ols(formula=formula_str, data=furnace_data).fit()
    print(f'rsquared_adj with {i} params: {result.rsquared_adj}')
    rsquared_adj_lst.append(result.rsquared_adj)

plt.plot(rsquared_adj_lst)

Python

rsquared_adj with 1 params: 0.0768328566497618
rsquared_adj with 2 params: 0.2733340635593492
rsquared_adj with 3 params: 0.3698974444769454
rsquared_adj with 4 params: 0.403183398054795
rsquared_adj with 5 params: 0.40785545925955646
```



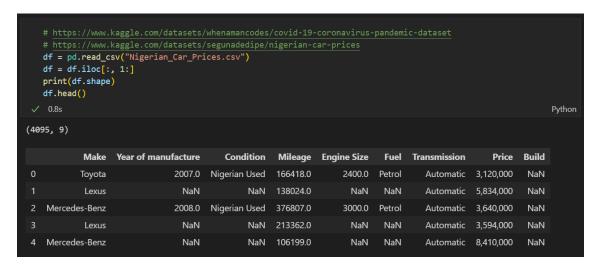


Q2 Data Quality

(a)試找一個開放數據,會用什麼方法來確認資料品質的好壞?

Ans: 我會由(c)小題的三項指標,來應用於(b)小題的 SOP。

數據: <a href="https://www.kaggle.com/datasets/segunadedipe/nigerian-car-prices 尼日利亞汽車價格的資料集,共9個欄位和 4095 筆資料。



1. 遺漏比例 (Missing value rate)

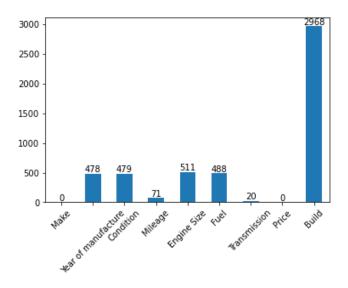
整體的遺漏比例為 13.61% 是可以接受的。

而 build 欄位遺漏數為 2968 筆 (比例為 72%), 缺失率非常高, 經檢視發現 build 的值皆為 'SUV'車型, 空值可能 Sedan, CUV, Truck 等其他車型, 故可以以二分法進行填補, 不需刪除此欄位。

```
# Missing value rate
# ref https://datatofish.com/check-nan-pandas-dataframe/
numOfNanCell = df.isnull().sum().sum()
numOfTotalCall = df.shape[0]*df.shape[1]
missRate = numOfNanCell / numOfTotalCall
print(f"Missing value rate is {100*missRate:.2f}%. ({numOfNanCell} out of {numOfTotalCall})")
df.isnull().sum().plot(kind='bar')

> 0.3s

Python Python Python
Missing value rate is 13.61%. (5015 out of 36855)
```



2. 特徵的獨立性 (Independence)

採用最常使用的 Durbin-Watson 之 D 檢定法,當 DW 值接近 2 左右,通常沒有違反獨立性。我們將廠牌當作 Label 的情形下,此數據為 DW 值為 1.7066 具獨立性。

Ps: 進行 OLS 之前需要先填補空值,以及將類別型資料轉為數值資料。

```
def format_float(x: str):
   return x.replace(',','')
df['Price'] = df['Price'].apply(lambda x: format_float(x))
for col_name in ['Year of manufacture', 'Mileage', 'Engine Size', 'Price']:
   df[col_name] = pd.to_numeric(df[col_name])
   df[col_name].fillna(value=df[col_name].mean(), inplace=True)
for col_name in ['Make', 'Condition', 'Fuel', 'Transmission', 'Build']:
   df[col_name] = pd.factorize( df[col_name] )[0]
df.head()
                                                                                                         Python
Make Year of manufacture Condition Mileage Engine Size Fuel Transmission
                                                                                 Price Build
              2007.000000
                                 0 166418.0 2400.000000
                                                                           0 3120000
              2007.898535
                                 -1 138024.0 3274.976562
                                                                          0 5834000
              2008.000000
                                 0 376807.0 3000.000000
                                                                          0 3640000
              2007.898535
                                     213362.0 3274.976562
                                                                              3594000
              2007.898535
                                 -1 106199.0 3274.976562
                                                                          0 8410000
```

3. 資訊量/熵 (Entropy)

我們可以對任何類別型的特徵衡量其熵,我們挑 Label (廠牌)作範例,由結果得知有49個品牌,Entropy 是2.367 具有足夠的資訊量。

(b)確認資料品質的標準作業流程。

Ans:

- 1. 檢查資料對母體的占比性(Proportion)與時效性(Timeliness)。=>離群值偵測
- 2. 檢查資料的格式與豐富性,如一致性(consistency)、多元性(diversity)。=>正規化

- 3. 檢查資料的安全性(Confidentiality、Integrity、Availability) =>遺漏值填補
- 4. 檢查資料的準確及完善,如準確性(accuracy)、數據解釋性(interpretability)。=>建模

(c)試建議三個可能衡量數據品質的量化指標 (i.e. KPIs)。

Ans:

- 1. 遺漏比例 (Missing value rate): num of missing data / num of total data.
- 2. 特徵的獨立性 (Independence): Durbin-Watson Test, A value of 2.0 indicates there is no autocorrelation detected in the sample.
- 3. 資訊量/熵 (Entropy): Shannon Entropy can describe the information richness of data (uncertainty). We can calculate the Entropy of each feature as well as the Entropy of label.

Q3 決策支援

- 1. 適應性: 隨著時間的推移和模型是否需要重新訓練以維持績效水平,不適應性稱為 drift(飄移),細部包括 drift detection(偵測), drift understanding(何原因發生飄移), drift adaptation(如何更新模型)。
- 2. 擴充性: Transfer Learning, 將 A 主題上訓練的模型,搬移至 B 主題使用,此舉是基於 A、B 主題的數據在空間分布上有可能有特徵空間的交集。例如將 Tesla 自小客車的自 駕行車模型,轉移至大貨車的自動駕駛上。
- 3. 我的數據資料較為老舊,汽車出廠年份大約為 2000 多年,對於 2022 年的汽車適應性可能有偏移的現象,可再加入新樣本作訓練。若論應用於他國汽車買賣的擴充性,我覺得應該適配,因為汽車的規格在全球化之下有一定的共通規範,對於估價的應用,具有擴充性。

Q4 Missing Value

遺漏值填補的方法包括了統計量填補 、預測式與生成式填補

- (a) 試說明這些方法分別適用於什麼樣情形?
- ✓ 統計量填補 (statistics imputation): 以 mean, min, max 或不偏估計量來填補的方法。 以 mean 填補可以保持平均數不變,以 min, max 填補可以樂觀或悲觀的態度做解 釋。當我們需要解釋資料的樣貌,或是演算法不能接受空值時,此法是最直接的做 法。
- ✓ 預測式填補 (predictive imputation): 有 KNNI, MICE 等方式,MICE 會先用 mean 來填補所有的遺漏值,再逐一建立預測模型來填補一個欄位。此方法適用於生成與原始資料分布相似的資料點,引用論文的一句話: If the original variable is skewed, the imputed values will also be skewed. If the original variable is bounded by 0 and 100, the imputed values will also be bounded by 0 and 100.
- ✓ 生成式填補 (generative imputation): 是將「生成對抗網路」(generative adversarial network, GAN) 的模型應用在填補上,以「生成模型」生成填補數據,再以「判別模型」判別生成後的數據為實際還是是被生成的。適用於圖像生成、聲音生成等領域,被大量應用"創造"上,如 NovelAI,繪圖軟體輔助渲染背景等。GAN 只須建單一模型,也改善預測式填補需建多個不同模型的缺點,考量效能時可擇此法。

Ref:

- 1. https://statisticalhorizons.com/predictive-mean-matching/
- 2. https://www.ibm.com/docs/zh-tw/spss-statistics/25.0.0?topic=values-missing-value-analysis
- (b) 為什麼某特徵存在大量遺漏值不宜直接刪除?

因為這些"有值"的樣本有機會代表了某種 Integrity,很可能是 systematic missing,如 某年度以後的機台才能紀錄零件承受的壓力,而大部分的機台都無此紀錄,因此我們 需要對這個壓力欄位做額外的填補而非直接刪除來得合常理。

Q5 鋼板判別模型 (30%)

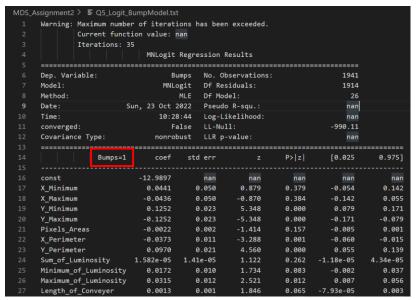
在 UCI Machine Learning Repository 開放數據中包含了一個鋼板缺陷數據 (steel plates faults dataset https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/steel+plates+faults),一共包含了 1,941 個觀測值,而每個觀測值具有 27 個特徵以及作為目標值的 7 種缺陷。試挑選出凹凸不平 (Bumps)以及刮痕(K_Scratch)兩種缺陷進行分析。試著參考網路資源學習並撰寫程式, 使用此數據回答下列問題。

(a) 試將羅吉斯迴歸分析的結果呈現如下表,並試著解釋任一特徵與目標值之間的關係。 Ans:

```
num of bump samples: 402 out of 1941
num of scatch samples: 391 out of 1941
```

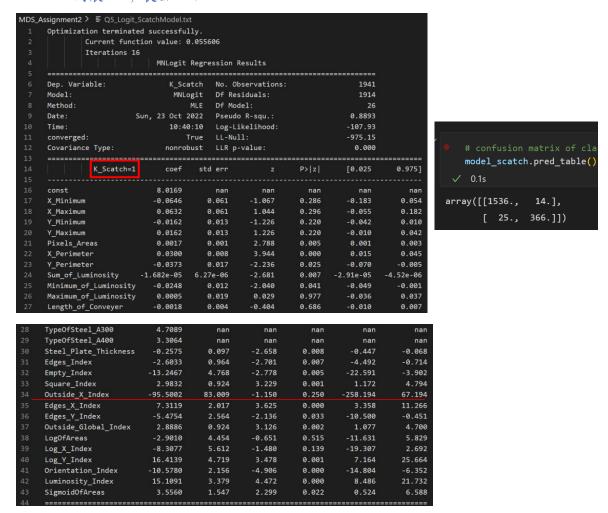
我們先實驗二次判別模型,分別建兩個模型,各自判斷凹凸不平和刮痕:

1. Bumps 凹凸不平=>1, 良品=>0



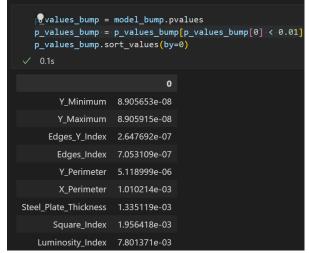
| | TypeOfSteel_A300 | -6.0621 | nan | nan | nan | nan | nan |
|----|-----------------------|---------|--------|--------|----------|---------|---------|
| | TypeOfSteel_A400 | -6.9937 | nan | nan | nan | nan | nan |
| | Steel_Plate_Thickness | -0.0051 | 0.002 | -3.208 | 0.001 | -0.008 | -0.002 |
| | Edges_Index | 1.1659 | 0.235 | 4.960 | 0.000 | 0.705 | 1.627 |
| | Empty_Index | -3.2953 | 3.045 | -1.082 | 0.279 | -9.264 | 2.673 |
| | Square_Index | 1.1437 | 0.369 | 3.097 | 0.002 | 0.420 | 1.868 |
| | Outside_X_Index | 43.4036 | 66.951 | 0.648 | 0.517 | -87.818 | 174.625 |
| | Edges_X_Index | -1.8628 | 0.744 | -2.503 | 0.012 | -3.321 | -0.404 |
| | Edges_Y_Index | 5.1532 | 1.001 | 5.147 | 0.000 | 3.191 | 7.116 |
| | Outside_Global_Index | 0.4553 | 0.331 | 1.375 | 0.169 | -0.194 | 1.104 |
| | LogOfAreas | -1.9522 | 3.785 | -0.516 | 0.606 | -9.371 | 5.467 |
| | Log_X_Index | 6.2231 | 4.181 | 1.488 | 0.137 | -1.971 | 14.418 |
| | Log_Y_Index | 4.2860 | 4.020 | 1.066 | 0.286 | -3.592 | 12.164 |
| | Orientation_Index | -1.2111 | 1.149 | -1.054 | 0.292 | -3.464 | 1.042 |
| | Luminosity_Index | -6.8484 | 2.574 | -2.661 | 0.008 | -11.894 | -1.803 |
| | SigmoidOfAreas | -0.3590 | 0.760 | -0.472 | 0.637 | -1.848 | 1.130 |
| 44 | | | | | ======== | | |

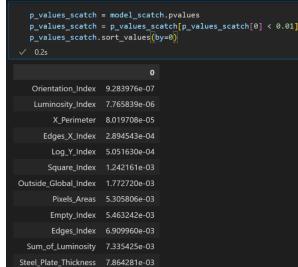
2. Scratch 刮痕=>1, 良品=>0



由上結果可看出Outside_X_Index特徵在Bump模型的coef是43.40,表示強烈的正相關影響力;而在Scatch模型的coef是-95.50,表示強烈的負相關。因此Outside_X_Index特徵可有效鑑別兩種不良品。

(b) 基於上述(a)的結果,將上述特徵以t value進行排序後,哪些特徵的迴歸係數在統計上是顯著的呢(p-value<0.01)?





Scatch模型與各種index較為相關。(右圖)

也可以看到Bump模型對於與Y有關的特徵,和與Edge有關的特徵較相關。(左圖)

- (c) 試問配適一個羅吉斯迴歸模型是否合適?試若配適不佳,試說明其可能的原因為何?若照上題各為了一個不良品特徵建模,則結果合適。 綜合Scatch模型的Pseudo R Square為0.8893,和兩模型的confusion matrix來看, Logistic regression表現不錯。
- (d) 試問配適一個線性判別分析模型是否合適?若配適不佳,試說明其可能的原因為何? 因為判別分析是生成模型,建構各個類別的機率分布(如Naïve Bayes),再形成一個 分類器。生成模型不像判別模型會受到二元分類前後順序的相依性影響。在多類別 的情況下(這題class = 3),生成模型較有優勢。

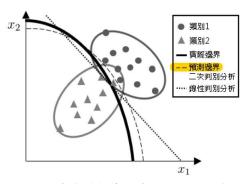
我們先把資料轉成3個類別,有別於Q1~Q3的二元類別。

建立一個線性判別分析模型,可以看到預測 Normal 和 KScatch 的準確度不錯。

```
import numpy as np
   from sklearn.discriminant_analysis import LinearDiscriminantAnalysis
   clf = LinearDiscriminantAnalysis()
   clf.fit(x, y_true)
   from sklearn.metrics import classification_report
   y_pred = clf.predict(x)
   report = classification_report(y_true, y_pred, target_names=['Noraml','Bumps','K_Scatch'])
   print(report)
                                                                                                                Pvthon
             precision
                          recall f1-score support
     Noraml
                  0.80
                            0.89
                                      0.84
                                                1148
                                      0.54
      Bumps
                  0.61
                            0.48
                                                 402
                  0.96
                            0.84
                                      0.90
                                                 391
   K_Scatch
                                      0.79
                                                1941
   accuracy
                  0.79
                            0.74
                                      0.76
                                                1941
  macro avg
                                      0.79
                                                1941
weighted avg
                  0.79
                            0.79
```

(e) 試問配適一個二次判別分析模型是否合適?若配適不佳,試說明其可能的原因為何? 依照講義p49頁的敘述,二次判別分析會建立了這個假設,分別估計類別間各自多變量常態分配的共變異矩陣,表現應比線性模型來得準確。(bias變精確,variance變低)

類效果不佳。若使用二次判別分析的結果如圖中虛線曲線,與真實的決策邊界較為相近。



可以看到二次判別分析模型,分辨 Normal 和 KScatch 更優秀(precision 0.92, 0.99)。也注意到sklearn警告我們資料集具有共線性,也許是造成bumps被overfit的原因,其recall為0.94。

```
from sklearn.discriminant_analysis import QuadraticDiscriminantAnalysis
clf = QuadraticDiscriminantAnalysis()
   from sklearn.metrics import classification_report
   y_pred = clf.predict(x)
    report = classification_report(y_true, y_pred, target_names=['Noraml','Bumps','K_Scatch'])
   print(report)
            precision recall f1-score support
     Noraml
              0.92 0.43 0.59 1148
              0.36 0.94 0.52 402
      Bumps
   K_Scatch
                 0.99
                          0.91
                                     0.95
                                      0.63
                                               1941
    accuracy
macro avg 0.76 0.76 0.68 1941 weighted avg 0.82 0.63 0.64 1941
\verb|c:\Users\luweb\AppData\Local\Programs\Python\Python310\lib\site-packages\sklearn\discriminant\_analysis.py:887:
UserWarning: Variables are collinear
```