於血液透析前施打 EPO,預測 4 週後是否符合 HGB 值為 11~12g/dL 及 HGB 變化量為-0.5~0.5 之間

學生: 張詠哲 授課教授:何信瑩

一. 摘要 Abstract

血液透析是一種治療腎功能不全的方法,它通過機器來過濾血液中的廢物和多餘的液體,以維持身體的正常功能。而紅血球生成素(EPO)可以刺激骨髓產生紅血球,從而提高血液中的血紅蛋白(Hb)水平。

在透析病人中,由於腎臟功能受損,通常會導致貧血。因此,為了提高透析病人的 Hb 水平,醫生會透過施打 EPO 來刺激紅血球生成。然而 EPO 價格高昂,過量的 EPO 使用也可能導致一些副作用,如高血壓、血栓等,因此掌握好 EPO 的施打劑量不僅是經濟價值考量也有安全考量。所以醫生需要追蹤透析病人的 Hb 水平,以確保病人的貧血得到適當的治療,同時也要使 EPO 可以使用得精準。

本篇研究目的是想要透過一些機器學習的方法來預測腎臟病患者治療貧血的雙目標:

- 1. HGB 值維持在 11~12 g/dL (血紅蛋白濃度充足)
- 2. HGB 值和上次相比變化為 -0.5~0.5 g/dL (變化小)

所採用的方式是先利用統計配上基因演算法或是 RFECV 的方式找出較好的一組特徵,其中使用的分類模型包括: Random Forest(RF)、SVM、XGBoost 等等。其中因為 RF和 XGBoost,SVM 的部分也會使用 Bagging 的方式做成集成模型(estimator = 100)來評估。最後再評估哪個模型在表現最好的前提下所用的特徵最少。

最後的結果為統計方法 + RFECV + RF 的結果最好。test auc = 0.975、test MCC = 0.814、test acc = 0.939

二. 引言 Introduction

血液透析(Hemodialysis)是將血液抽出體外,經過血液透析機的滲透膜,清除血液中的新陳代謝廢物和雜質後,再將已淨化的血液輸送回體內。血液透析可用於腎衰竭、腎臟病患或血液中毒等身體無法自行排出毒害物質的情況。

而 EPO 紅血球生成素是一種 Hormone,可以控制紅血球生成,或紅血球的產生,大部份的紅血球生成素是經由腎臟製造,而腎衰竭或是腎臟病的患者會因為腎功能不完全,腎臟中製造紅血球生成素的細胞受損,導致其不能正常製造紅血球生成素,因此容易產生貧血。而透過施打 EPO 可以刺激骨髓產生紅血球,從而提高血液中的血紅蛋白 (Hb)水平,來達到預防貧血的效果。但是 EPO 的價格很高,且過量的 EPO 使用也會導致紅血球太多、Hb 濃度太高,導致一些副作用,例如高血壓、血栓等,有可能會因此合

併中風之類的風險。而施打不夠又會導致貧血沒有得到很好的改善。一般施打 EPO 的患者大約會在 2~4 周觀察一次 Hb 的狀況,因此若是可以在施打前預測患者 4 周後的 Hb 情況,就可以看說這次 EPO 大概要施打多少。

而機器學習是人工智慧(Artificial Intelligence, AI)的一個分支,用於檢驗數據,透過過往數據與資料找尋其中規則,建立系統以幫助預測未來發生事件的機率。近年來,AI應用於醫療行業的發展熱度不斷提升,致力於預測疾病風險、發病率等。機器學習即是訓練電腦從資料中學習,透過演算法找出大量資料中的關聯性,並隨著經驗累積而進行改善,最後得以分析出最佳決策或預測。

因此本篇的研究目標是想要使用一些機器學習以及統計的方式去預測腎臟病患者在施打 EPO 後,4 周的 1)HGB 值維持在 11~12 g/dL (血紅蛋白濃度充足)以及 2)HGB 值和上次相比變化為 -0.5~0.5 g/dL (變化小)。

三. 資料集 Dataset

此次的資料集如下:

● 様本數: 7084

● 欄位:

■ 離散型: 41 個(d1~d39、d499、d500)

■ 連續型: 477 個(c40~c498、c501~c516)

Label: ∆HGB (符合 label 為 1,不符合 label 為 0)

-> 即每個樣本 28 天後的 HGB 值減去此樣本當次 HGB 值,若此樣本的 28 天後找不到 HGB 值,則再往後 7 天內找看看有沒有,如果還是沒有則將此樣本丟掉不用,也就是每個樣本的 35 天後仍找不到 HGB 值則丟掉不用。

四. 方法 Method

先看看資料 label 的分布狀態,發現到0和1的分布有些不平衡, $0:1\approx3.31:1$,因此為了保留每個類別的樣本百分比,採用 Stratified Shuffle Split 並且以7:3的方式切分,接著特徵選擇方面分為3個實驗:

baseline: 不調超參數,也不做特徵挑選

實驗一: 單純用統計方式(離散型用 Chi-Square test、連續型用 Mann Whitney U test),把 p-value < 0.05 的特徵挑出來

實驗二: 統計方式 + Simple genetic algorithm(SGA)

實驗三: 統計方法 + RFECV

而模型方面會從 sklearn 中選出幾個分類用的模型,例如:Random Forest、XGBoost、SVC 之類的作為使用模型,其中因為 RF 和 XGBoost 皆為集成模型,因此為了公平比較,SVC 的部分也會使用 Bagging 的方式做成集成模型(estimator = 100)來當作比較模型 (但因為 SVC 本身複雜度大($O(N^3)$) 因此在做 SGA、RFECV 或是 BO 時只會單純使用一

個 SVC 來做挑選)。而超參數挑選會使用 Bayesian Optimization (BO),其迭代次數設定為 300。SGA、RFECV、BO 的評分標準設定為 5-fold cross validation、scoring=roc_auc。之後再從這些實驗中找出表現最好以及使用特徵最小的特徵(考量的標準是由 Test 的 AUC、Accuracy、MCC,以及所使用 feature number 決定,但主要還是以 AUC 為評斷標準)。最後順便從表現最好的模型中找出各個特徵的重要程度。

因為 RFECV 以及 BO 是上課中沒有提到的因此以下為 2 者的簡單介紹:

1. RFECV 是 Recursive Feature Elimination + Cross validation。他會依據模型提供的 coef 以及 feature importance的 attribute 來遞迴地從資料集中刪除特徵。其中會使用 cross validation 來評估每個特徵子集的性能。以下是 RFECV 的流程圖

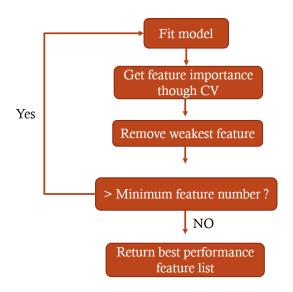


Figure 1. RFECV 演算法流程

2. Bayesian Optimization (BO) 貝葉斯優化是一種 black box 優化算法,用於求解表達式未知的函數的極值問題。它會根據一組採樣點處的函數值預測出任意點處函數值的概率分佈,這通過 Gaussian Process Regression 以及 Acquisition Function (AF)來實現。用於計算每一個點值得探索的程度,求 Acquisition Function 的極值從來確定下一個採樣點。最後返回這組採樣點的極值作為函數的極值。

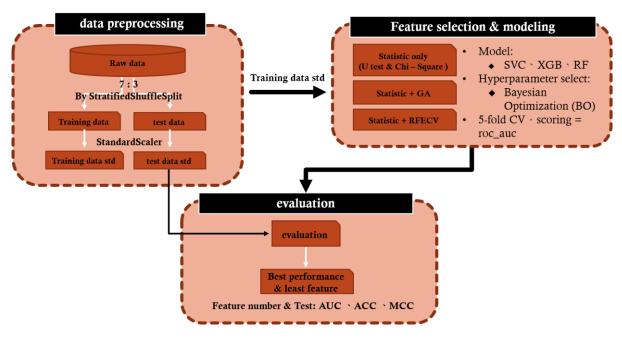


Figure 2. 方法流程圖

五. 結果 Result

5.1 Baseline

Baseline 的部分是不做超參數挑選以及特徵挑選,但是也是會把資料標準化。

```
feature = x_train.columns
x_rdt_std = std(x_train)
x_rds_std = std(x_test)

x_rdt_std = pd.DataFrame(x_rdt_std)
x_rds_std = pd.DataFrame(x_rds_std)

x_rds_std.columns = feature
x_rds_std.columns = feature
```

Figure 3. baseline 擷取資料示意圖

而以下是跑完3個模型的指標以及圖。

5.1.1 SVC

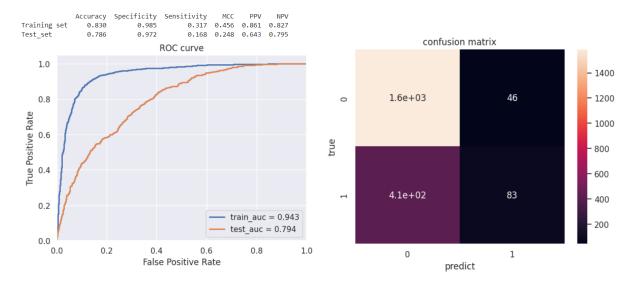


Figure 4. baseline SVC result

5.1.2 XGB

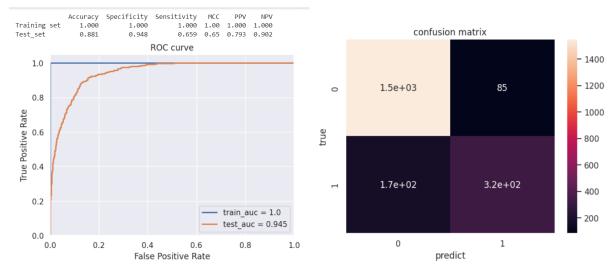


Figure 5. baseline XGB result

5.1.3 RF

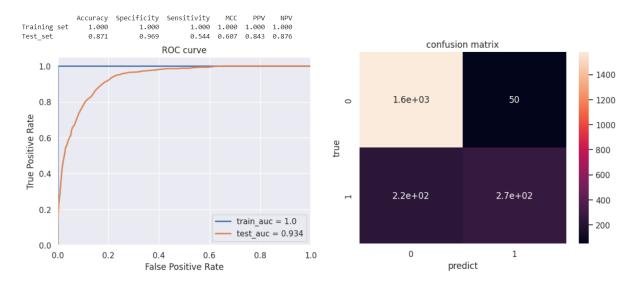


Figure 6. baseline RF result

可以看到說除了 SVC 的 test AUC = 0.794 比較低之外,其餘 XGB 和 RF 都有道 0.94 左右,還不錯。但是應該可以再做更好。

5.2 實驗一: Statistic only

連續型特徵用 Mann Whitney U test 挑出 p-value < 0.05 的特徵,離散型特徵用 Chi-Square test 挑出 p-value < 0.05 的特徵,挑出來共 166 個。之後利用 Standard Scaler 標準 化做成標準化後的訓練集以及測試集。

```
c_s = pd.concat([c, y_train], axis = 1)
d_s = pd.concat([d, y_train], axis = 1)
                                                                                                                                                                                                                                                                                                       c_s = c_s[c_s['label'] >= 0]
d_prefeature = []
                                                                                                                                                                                                                                                                                                        columns = list(c_s. columns)
p value = []
                                                                                                                                                                                                                                                                                                        c_prefeature = []
                                                                                                                                                                                                                                                                                                        p_value = []
d_s = d_s[d_s['label'] >= 0]
                                                                                                                                                                                                                                                                                                        for i in columns:
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       value1=[]
columns = list(d_s.columns)
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       value0=[]
for i in columns:
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       my_co1 = c_s[[i,'label']]
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       table = pd. crosstab(d_s['label'], d_s[i])
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       value1. append (my_col.iloc[j, 0])
                              chi2, p, dof, expected = chi2_contingency(table)
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        \hspace{.1cm} \hspace{.
                              p_value. append (p)
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       continue
                              if p < 0.05:
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       value 0. \; append \, (my\_col. \; iloc[j, 0])
                                             d_prefeature.append(i)
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       result = mannwhitneyu(value0, value1, alternative= 'two-sided')
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       p_value.append(result[1])
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       if result[1] < 0.05:
d_p_value = pd.DataFrame([columns, p_value]).T
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      c_prefeature.append(i)
d_p_value = d_p_value.rename(columns = {0:'features', 1:'p_value'})
                                                                                                                                                                                                                                                                                                        c_p_value = pd.DataFrame([columns, p_value]).T
print(d_p_value)
                                                                                                                                                                                                                                                                                                        c_p_value = c_p_value.rename(columns = {0:'features', 1:'p_value'})
print(d_prefeature[0:-1])
                                                                                                                                                                                                                                                                                                        print(c_p_value)
                                                                                                                                                                                                                                                                                                        print(c prefeature[0:-1])
```

```
x_pretrain_std = std(x_pretrain)
x_pretest_std = std(x_pretest)

x_pretrain_std = pd. DataFrame(x_pretrain_std)
x_pretest_std = pd. DataFrame(x_pretest_std)

x_pretrain_std.columns = prefeature
x_pretrain_std.index = train_index
x_pretest_std.columns = prefeature
x_pretest_std.index = test_index
```

Figure 7. 統計及標準化程式碼

而以下是跑完3個模型的指標以及圖。

5.2.1 SVC

```
svc_optimizer.max
                      {'target': 0.8935633696390705,
                        params': {'C': 32.13162009624968, 'gamma': 0.0078125}}
             Accuracy Specificity Sensitivity MCC PPV NPV 0.982 0.991 0.953 0.950 0.970 0.986 0.859 0.918 0.663 0.595 0.709 0.900
Training set
Test_set
                                 ROC curve
                                                                                                  confusion matrix
    1.0
                                                                                                                                          - 1400
                                                                                                                                           1200
   0.8
                                                                                                                   1.3e+02
                                                                                          1.5e+03
                                                                               0
True Positive Rate
                                                                                                                                           1000
    0.6
                                                                            true
                                                                                                                                           800
    0.4
                                                                                                                                           600
                                                                                           1.7e+02
                                                                                                                   3.3e+02
    0.2
                                                                                                                                           400
                                                 - train_auc = 0.997
                                                 - test_auc = 0.903
                                                                                                                                           200
    0.0
       0.0
                                           0.6
                   0.2
                               0.4
                                                        0.8
                                                                    1.0
                                                                                              0
                                                                                                                       1
                             False Positive Rate
                                                                                                        predict
```

Figure 8. Statistic only SVC with BO result

5.2.2 XGB

```
xgb_optimizer.max

{'target': 0.9621020228553245,
  'params': {'gamma': 0.6894903888318535,
  'learning_rate': 0.2749218496878777,
  'max_depth': 47.86651040794286,
  'n_estimators': 124.90230343161514}}
```

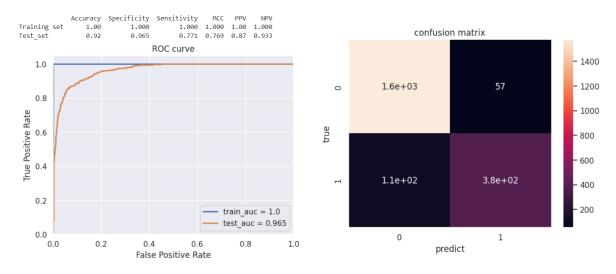
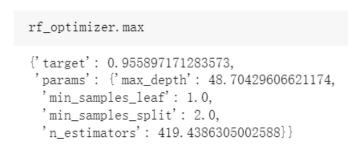


Figure 9. Statistic only XGB with BO result

5.2.3 RF



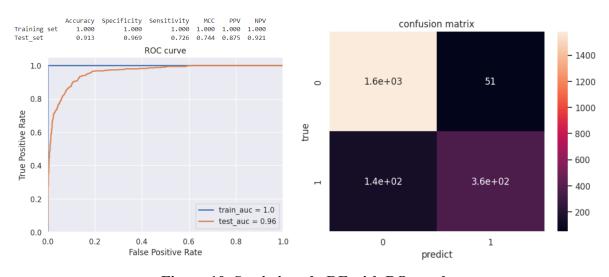


Figure 10. Statistic only RF with BO result

由上面的結果圖可以看出,經過統計方法挑出一些和 label 相關的特徵後,不僅使 特徵數下降,所有指標也都有提升。SVC 也來到了 test AUC 為 0.9 左右,相較於 baseline 的 0.79 上升很多,XGB 以及 RF 也都有明顯提升,到了 0.96 左右。

5.3 實驗二: Statistic + SGA

接著是實驗統計方式初篩完後,再使用基因演算法進一步挑選特徵。這部分是利用實驗一所產生的特徵再去跑基因演算法。基因演算法的子代數是設定 50、交配率 =0.5、突變率 =0.3。

而以下是跑完3個模型的指標以及圖。

5.3.1 SVC

因為若是用 bagging SVC 去跑的話會非常久,超過 colab 使用時間,因此這部分只使用一個 SVC 去做 GA,最後評估時才會再利用挑出來的特徵做 bagging。最後是跑出了 26 個特徵。

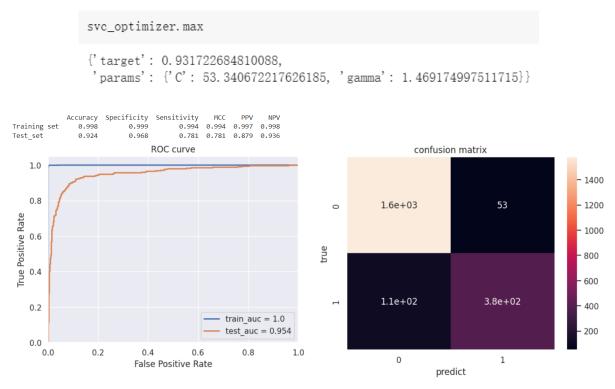


Figure 11. Statistic + GA SVC with BO result

5.3.2 XGB

特徵數跑出了 51 個,而 BO 挑出的超參數結果: gamma = 0.01562 、 learning rate = 0.1328 、 max_depth = 60 、 n_estimator = 398 。

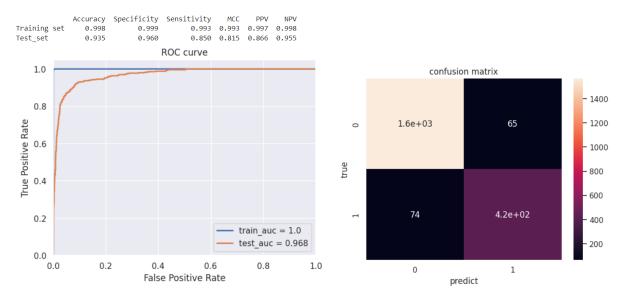


Figure 12. Statistic + GA XGB with BO result

5.3.3 RF 特徵數跑出了 35 個。

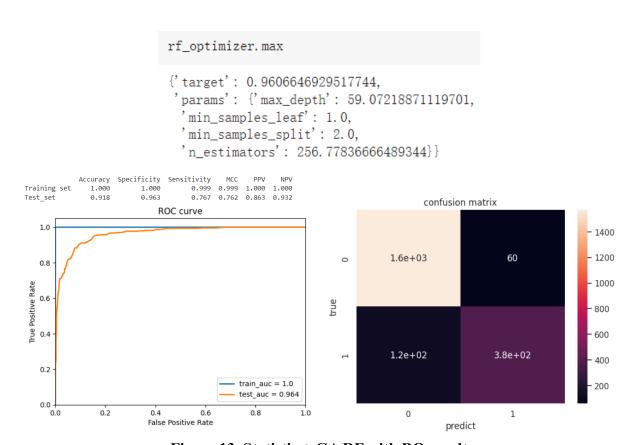


Figure 13. Statistic + GA RF with BO result

5.4 實驗三: Statistic + RFECV

這部分和 GA 相同,也是利用實驗一挑出的特徵再使用 RFECV。

```
def rfe(model, x_train, y_train):
    rfecv = RFECV(estimator = model, step = 1, cv = 5, scoring='roc_auc').fit(x_train, y_train)
    print("Optimal number of features : %d" % rfecv.n_features_)
    print("Support is %s" % rfecv.support_)
    print("Ranking of features : %s" % rfecv.ranking_)

return rfecv.n_features_, rfecv.support_
```

Figure 14. RFECV 程式碼

5.4.1 SVC

因為 RFECV 是需要傳入帶有 coef 或是 feature importance attribute 的模型,但是當 SVC的 kernel=rbf 時,是沒有這2的 attribute。因此替代方法是利用 permutation importance 的 package 算出 SVC 特徵的特徵重要度後,接著把重要度為 0 的去掉,再自己實作一個 RFECV。而 **Figure 16** 是順手做了依照重要度剃除特徵後每個特徵數下的 5-fold CV AUC 表現圖。最後挑出的特徵數為 25 個 、 BO 所挑出的超參數: C=218.3 、 gamma =12.79。

```
permut_model = cuSVC(kernel = "rbf").fit(x_pretrain_std, y_train)
perm = permutation_importance(permut_model, x_pretrain_std, y_train, n_repeats = 5, scoring = "roc_auc", random_state=0)
score = []
best_threshold = 0
best_score = 0
for i in threshold.iloc[:,0]:
    temp_feature = svc_prefeature.loc[:, importance[importances_mean"] >= i].index]
   temp_svc = cuSVC(kernel = "rbf").fit(temp_feature, y_train)
   mean_score = cross_val_score(temp_svc, temp_feature, y_train, cv = 5, scoring = "roc_auc").mean()
   score. append (mean_score)
    if(mean_score > best_score):
       best_score = mean_score
       best\_threshold = i
max = len(threshold)
score, reverse()
print("best_threshold: ", best_threshold)
print("best_score: ", best_score)
plt.figure(figsize = (8, 5))
plt.plot(range(1, max+1), score)
plt.xticks(range(1, max+1, 9))
plt.show()
```

Figure 15. 實作類似 RFECV 的程式碼

best_threshold: 0.0035495524296676128 best_score: 0.8720550582779735



1 10 13 20 37 40 33 04 73 02 31 10010311012713014313410.

Figure 16. SVC 個特徵數的 5-fold CV AUC 表現圖

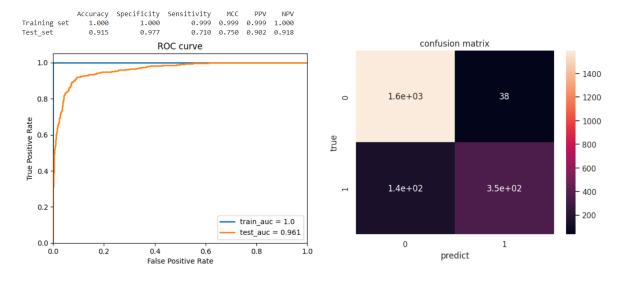


Figure 17. Statistic + RFECV SVC result

5.4.2 XGB

特徵數跑出了 70 個,BO 挑出的超參數結果: gamma = 0.03434 、 learning rate = 0.1396 、 max_depth = 23 、 n_estimator = 323 。

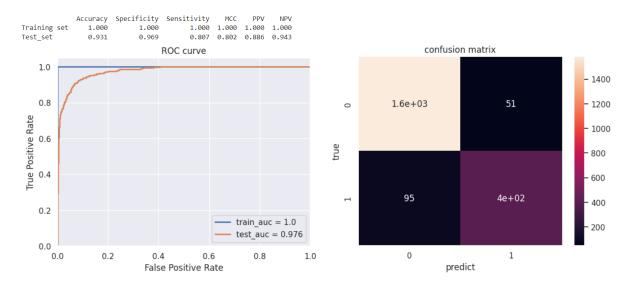


Figure 18. Statistic + RFECV XGB result

5.4.3 RF

特徵數跑出了 15 個,BO 挑出的超參數結果: max_depth = 39、min_samples_leaf = 1 、 min_sample_ split = 2 、 n_estimator = 406。

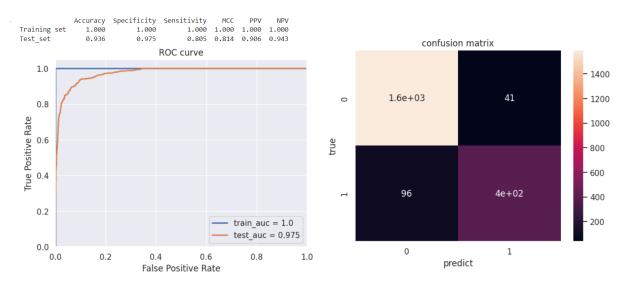


Figure 19. Statistic + RFECV RF result

5.5 Result Overview

由於上面結果圖的各指標比較不明顯,因此以下為統整上面的指標以及特徵數總表。 但因為主要會考量的指標只有 AUC、accuracy、MCC,因此只有統整這 3 個以及特徵數。 圖表上面顏色較淺的為 training set 的結果,下面橘色的是 test 的結果。

SVC (bagging · base estimator 100)	Feature number	Accuracy	AUC	мсс
baseline	516	0.830	0.943	0.456
Statistic only	166	0.982	0.997	0.950
Statistic + GA	26	0.998	1.0	0.994
Statistic + RFECV	25	1.0	1.0	0.999
baseline	516	0.786	0.794	0.248
Statistic only	166	0.859	0.903	0.595
Statistic + GA	26	0.924	0.954	0.781
Statistic + RFECV	25	0.915	0.961	0.750

表格 1. SVC result overview

XGB	Feature number	Accuracy	AUC	MCC
baseline	516	1.0	1.0	1.0
Statistic only	166	1.0	1.0	1.0
Statistic + GA	51	0.998	1.0	0.993
Statistic + RFECV	70	1.0	1.0	1.0
baseline	516	0.881	0.945	0.650
Statistic only	166	0.920	0.965	0.769
Statistic + GA	51	0.935	0.968	0.866
Statistic + RFECV	70	0.931	0.976	0.802

表格 2. XGB result overview

RF	Feature number	Accuracy	AUC	MCC
baseline	516	1.0	1.0	1.0
Statistic only	166	1.0	1.0	1.0
Statistic + GA	35	1.0	1.0	0.999
Statistic + RFECV	15	1.0	1.0	1.0
baseline	516	0.871	0.934	0.607
Statistic only	166	0.913	0.960	0.744
Statistic + GA	35	0.918	0.964	0.762
Statistic + RFECV	15	0.936	0.975	0.814

表格 3. RF result overview

六. 討論 Discussion

由結果的 3 個總整表可看出,隨著特徵挑選過後各模型的表現都有提升。其中提升幅度最大的是 SVC,從原本 baseline 的 test AUC 為 0.794 提升到 statistic + RFECV 的 0.961。而 XGB 以及 RF 也從 baseline 的 0.94 左右提升到 0.97 多,且特徵數都有減少。雖然就 training set 以及 test set 的 accuracy 以及 MCC 這兩個指標相差較大(大約差了 7% 以及 20%)看下來有一些 overtraining 的現象,但是 AUC 相差大約只有 1.5%左右,我認為是因為我在做挑超參數以及特徵挑選時,BO、GA、RFECV 所用的 scoring 都為 AUC 為主造成的,所以我覺得是可以接受的且可理解的結果。

表格 4 為各模型最好的 test AUC 結果以及其挑選特徵的方式:

首先可以看到 test AUC 最好的結果都為統計方法 + RFECV 挑出來的,但是這不代表 RFECV 就勝過 GA。我認為可能的原因是因為我的 GA 子代數設定的不夠,只有迭代 50 次而已,而且 SGA 不會像 RFECV 一樣會把不重要的特徵去掉,它比較隨機一點,單純把表現好的特徵集留下來繼續演化。也許迭代數再多一些也會收斂到最佳解,只是它有可能會收斂到 local optimization。但是 GA 相較於 RFECV 對於大型特徵空間和多目標優化問題就擁有較強的搜索能力和靈活性(可以自己調突變率或是交配率)。而 RFECV 若是特徵間有較強的共線性則容易 overtraining。因此若是可以結合兩種特徵挑選的特性也許可以有更好的表現。

最後比較可看出即便 SVC 也同樣使用 bagging 做成集成模型,但表現依舊略輸 RF 以及 XGB,我認為有可能是因為我 SVC 在 bagging 時只固定 base estimator 為 100 個(再多會跑很久),因此才造成 SVC 的結果略輸 RF 以及 XGB,也許把 estimator 的數量也當作超參數挑選會造成不一樣的結果。但就目前的結果表現為XGB \approx RF > SVC。 XGB的 AUC 略勝 RF 0.1%,但是 RF的 accuracy 以及 MCC 表現都好於 XGB。

	Feature selection	Feature num	Accuracy	AUC	мсс
SVC (bagging · base estimator 100)	Statistic + RFECV	25	0.915	0.961	0.750
XGB	Statistic + RFECV	70	0.931	0.976	0.802
RF	Statistic + RFECV	15	0.936	0.975	0.814

表格 4. Test score (best auc of every model)

因此我再對這兩個模型 (RF & XGB)做一次 test set 的 boostrap resample,即針對 test set 做可放回的重複抽樣,直到 sample 數和原始的 test set 一樣多,接著測表現,去模擬面對其他未知資料集時的表現。這樣迭代 10000 次,大致得出這兩個模型指標的平均,中位數以及 95%信心區間,如表格 5。由表格 5 可看出兩個模型的 AUC 表現一樣,但是 RF 的 accuracy 、 MCC 都略高於 XGB。因此也許這表示在面對未知的數據集時這個 RF 模型表現會略好於這次訓練的 XGB 模型。

Mean / (95% CI)	Feature num	Accuracy	AUC	MCC
XGB	70	0.931 / (0.921, 0.943)	0.975 / (0.969, 0.981)	0.802 / (0.774, 0.835)
RF	15	0.939 / (0.929, 0.949)	0.975 / (0.969, 0.981)	0.814 / (0.794, 0.852)

表格 5. Test set boostrap resampling score (iter = 10000 times)

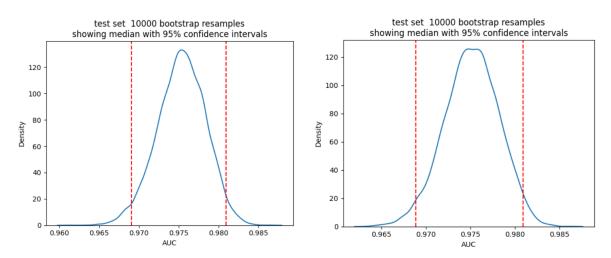


Figure 20. RF(left) & XGB(right) boostrap resample AUC result

最後我也看了一下 RF 選出來的 15 個特徵的重要度,可以看到只有連續型的特徵被選出來,沒有半個離散型的特徵,而其中最重要的特徵是 c59。

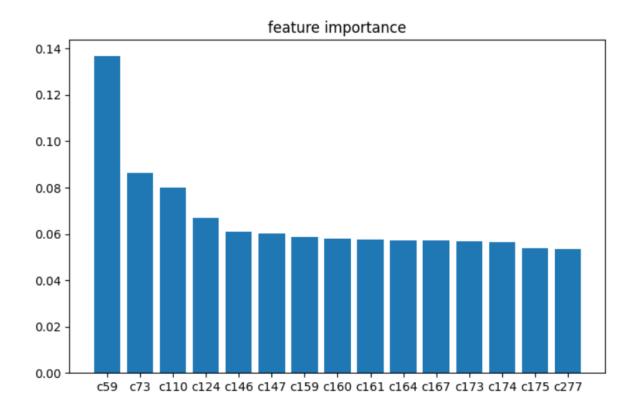


Figure 21. Feature importance of RF's features

七. 參考資料 Reference

https://deap.readthedocs.io/en/master/

https://github.com/bayesian-optimization/BayesianOptimization

https://scikit-learn.org/stable/

八. 修課心得 Course Review

這堂課應該把大部分機器學習(ML)會碰到的問題都有講述過一遍,諸如二分類、多分類、回歸,更甚至於存活的問題,也講了一些基因演算法以及深度學習(DL)。由於上學期已經有修過老師的計算生物學,因此這學期上課又再補齊了更多的基礎,像是PCA的算法,ML以及DL的基礎知識,還有一些分類器的基本原理。相較於上學期比較懵懂還要自己花時間查更多資料來學習這些基本,這次上課起來就比較能聽懂在幹嘛,有些地方還有"原來是這樣"的感覺,尤其是上學期聽不是很懂的IBCGA,這學期大概有了解運作原理,原本想在期末專題時來自己實做一次IBCGA,但是考慮到硬體的不足還有對於要怎麼建那麼大的田口直交表有一些不確定,因此就只有使用了單純的基因演算法。

雖然這學期也有修資工系的人工智慧概論,但我認為方向完全不一樣,資工系比較偏向原理的概述,像是 A* search 演算法、影像識別的概念、一些 NLP 的原理、Transformer、Attention 機制、還有一些 reinforcement learning 的演算法......等等。而這門課雖然沒有

講到那麼多的原理(當然可能也是考量到有些人可能會聽不懂),可是我覺得學到的是要如何思考以及解決一個機器學習的問題還有一些避免 overfitting 的一些方法,像是一般在生醫的問題主要就是特徵太多,樣本數太少(又寬又扁),以至於問題 underdetermined,找出來的特徵數不穩健,容易 overtraining。這在一般工業上特徵數少、樣本數爆多的情況是完全不同的解決方式。還有老師在聽每個人報告的時候有時會提醒說主題要明確,當拿到一個問題的時候,它可以簡化成甚麼樣的問題: 二分類? 多分類? 回歸? 存活?當目標明確後就可以比較精確的思考解決方法、要用甚麼模型。還有就是當你的結果不太好的時候,可以思考說是這個資料集的上限就是這樣,還是說你沒有把它的資訊用盡。像是在講肺癌那邊的時候說到當有2個目標且都有相關,可是你選擇一邊預測好的特徵的時候,另外一邊可能就預測不太好,反之亦然。那就找2邊都相關的特徵(反正2個目標有相關),之後再自己訂好你2個目標的權重要怎麼給,那這樣就像夾擠定理一樣,把範圍限縮,找出來的特徵自然就比較穩健。

而作業方面和上學期的有些像,因此則這次基於上學期的基礎,再看看能不能有所突破,看能不能再使表現更好,再優化作法以及邏輯或是換個更難的方法做。對於做法也有一些更新的理解。像是一些模型的用法以及超參數挑選或是特徵挑選。而期末專題選了和上學期不一樣的資料集,想說換個東西做做看。也嘗試了上學期沒有嘗試到的基因演算法還有在論文讀到的 bayesian optimization。還挺開心的。

總結這學期的心得,嘗試了很多不一樣的東西,也對碰的問題有更多的想法或是知道要怎麼去思考一個機器學習的問題,也大概知道自己在做甚麼。但再 AI 這個大領域面前還是一個菜鳥。因此之後也會盡量去精進自己的實力。不要讓自己只是淪為套膜仔,盡量去理解背後的原理以及算法,或是再去接觸更多的問題!

以下為這次作業完整程式碼的 github:

https://github.com/zyz-2299mod10/BioML/blob/main/finalproject/BioML_finalproject.ipynb