Avaliação de Técnicas de Classificação*

Tiago C A Amorim (RA: 100675)^a, Taylon L C Martins (RA: 177379)^b

Keywords: Classificação, Regressão Logística, k-Vizinhos mais Próximos, Validação Cruzada Estratificada

1. Introdução

Este relatório apresenta as principais atividades realizadas no desenvolvimento das atividades propostas na Lista 02 da disciplina IA048: Aprendizado de Máquina, primeiro semestre de 2024. O foco deste exercício é de construir a avaliar o desempenho de algoritmos de classificação usando duas versões da base de dados de um mesmo estudo.

2. Tarefa Proposta

Nesta atividade, vamos abordar o problema de reconhecimento de atividades humanas (HAR, do inglês human activity recognition) a partir de informações capturadas por sensores de smartphones. Em particular, vamos trabalhar com a base de dados UCI HAR [1], que contém registros de sensores inerciais presentes em um smartphone preso à cintura de 30 sujeitos realizando atividades cotidianas. Cada pessoa realizou seis atividades, as quais correspondem aos seguintes rótulos:

Atividade ¹		Rótulo
Caminhar	(Walking)	1
Subir escadas	$(W.\ upstairs)$	2
Descer escadas	$(W.\ downstairs)$	3
Sentado	(Sitting)	4
Em pé	(Standing)	5
Deitado	(Laying)	6

Tabela 1: Rótulos da base de dados.

Foram capturadas as amostras dos três eixos (x, y e z) do acelerômetro (ACC, do inglês accelerometer) e do giroscópio (GYR, do inglês gyroscope) presentes no smartphone, empregando uma taxa de amostragem de 50 Hz. O conjunto completo de amostras foi particionado aleatoriamente em treinamento (70% dos voluntários) e teste (30% dos voluntários).

2.1. Primeira parte

Primeiramente, será explorada uma versão do conjunto de dados na qual já houve pré-processamento e extração de características. No caso, cada amostra contém 561 atributos derivados de uma mesma janela de 2,56 s dos 6 sinais disponíveis (ACC: x,y,z; GYR: x,y,z), considerando suas representações tanto no domínio do tempo quanto no domínio da frequência.

- (a) Construa uma solução para este problema baseada no modelo de regressão logística. Descreva a abordagem escolhida para resolvê-lo (softmax, classificadores binários combinados em um esquema um-contra-um ou um-contra-todos). Obtenha, então, a matriz de confusão para o classificador considerando os dados do conjunto de teste. Além disso, adote uma métrica global para a avaliação do desempenho (médio) deste classificador. Discuta os resultados obtidos.
- (b) Considere, agora, a técnica k-nearest neighbors (kNN). Adotando um esquema de validação cruzada, mostre como o desempenho do classificador, computado com a mesma métrica adotada no item (a) varia em função do parâmetro k. Escolhendo, então, o melhor valor para k, apresente a matriz de confusão para os dados de teste e o desempenho medido nesse conjunto. Comente os resultados obtidos, inclusive estabelecendo uma comparação com o desempenho da regressão logística.

2.2. Segunda parte

Agora, vamos utilizar os dados "brutos" combinados de ACC e GYR como entradas dos classificadores. Para isso, devemos recorrer aos registros disponibilizados no diretório 'Inertial Signals', os quais estão separados por eixo e por sensor, sendo que cada amostra individual agora é formada por 128 valores (atributos), que correspondem às amplitudes instantâneas de aceleração (ACC) ou velocidade angular (GYR) dentro de uma janela de 2,56 s.

(a) Monte, então, a nova matriz de entrada concatenando os seis sinais temporais e, então, repita o procedimento experimental detalhado nos itens (a) e (b). Ao final, com base no desempenho obtido, teça uma análise comparativa entre a abordagem do item anterior e

 $[^]a$ Doutorando no Departamento de Engenharia de Petróleo da Faculdade de Engenharia Mecânica, UNICAMP, Campinas, SP, Brasil b Aluno especial, UNICAMP, Campinas, SP, Brasil

^{*}Relatório número 02 como parte dos requisitos da disciplina IA048: Aprendizado de Máquina.

 $^{^1{\}rm Foram}$ adicionados os termos originais entre parênteses para facilitar a comparação com os gráficos, que foram construídos com os termos em inglês.

a abordagem baseada nos sinais "brutos" empregada nesta segunda parte.

3. Aplicação

Toda a avaliação foi feita em um único notebook Jupyter, em Python. Foi feito o uso da biblioteca Scikit-learn [2] para fazer as diferentes manipulações nos dados. O código pode ser encontrado em https://github.com/Tiago CAAmorim/machine_learning.

3.1. Conjuntos de Dados

Os dados foram disponibilizados em formato tabular, já com uma separação entre os dados de treino e de teste (tabela 2). Os dados pré-processados são formados por 561 atributos, enquanto que os dados brutos são formados por 768 atributos². Uma descrição de cada um dos atributos é feita pelos autores no pacote do conjunto de dados [1].

Conjunto	Número de Amostras
Treino Teste	7 352 (71.4%) 2 947 (28.6%)
Total	10 299 (100%)

Tabela 2: Tamanho da base de dados.

Aparentemente o desbalanço entre as classes não é significativo, mas existe (figura 1). A menor classe tem cerca de 30% menos amostras que a maior classe. De toda forma será utilizada a **acurácia balanceada** como métrica da qualidade do classificador (média dos *recalls* de cada classe).

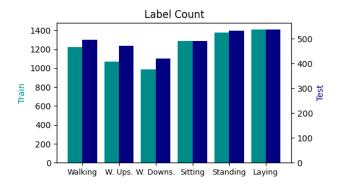


Figura 1: Número de amostras por classe.

3.2. Dados Pré-processados

Os dados pré-processados estão normalizados no intervalo [-1;1], à exceção de alguns dos atributos (figura 2). Desta forma, em um primeiro momento não existe necessidade de normalizar os dados.

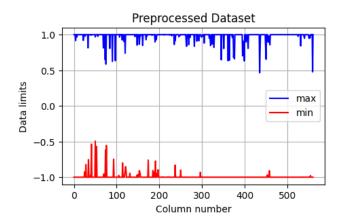


Figura 2: Limites dos atributos do conjunto de treinamento dos dados pré-processados.

3.2.1. Regressão Logística

O classificador de regressão logística foi construído com a classe **LogisticRegressionCV** do *Scikit-Learn*. Esta classe realiza a otimização do parâmetro de regularização junto com validação cruzada. Foram utilizadas as seguintes opções para o ajuste deste modelo:

- 1. Validação cruzada estratificada em 5 pastas.
- 2. Normalização do tipo l_2 $(\frac{1}{2}||w||_2^2)$, com otimização do seu inverso $(c=\frac{1}{l_2})$
- 3. Função objetivo da otimização: acurácia balanceada.
- 4. Estratégia: Softmax associado a entropia cruzada.

O modelo ajustado tem $l_2 = 0.3594$. A acurácia balanceada na validação cruzada foi de 0.9932, e com os dados de teste foi de 0.9598. Observa-se que o classificador tem um bom desempenho (tabela 3).

Ao analisar por classe, fica claro que o desempenho não é uniforme. A classe **Sentado** tem um valor de *recall* bem mais baixo que as demais, pois o classificador tem dificuldade em distinguir **Sentado** de **Em pé** (figura 3).

Classe	Recall	F1 score
$Todas^3$	0.9598	0.9606
Caminhar Subir escadas Descer escadas Sentado Em pé Deitado	0.9940 0.9427 0.9690 0.8717 0.9812 1.0000	0.9686 0.9569 0.9795 0.9214 0.9372 1.0000

Tabela 3: Resultados do classificador de regressão logística para os dados pré-processados.

 $^{^2\}mathrm{Neste}$ estudo foram ignorados os dados de aceleração total, que são 384 atributos adicionais.

 $^{^3}Recall$ médio é a acurácia balanceada.

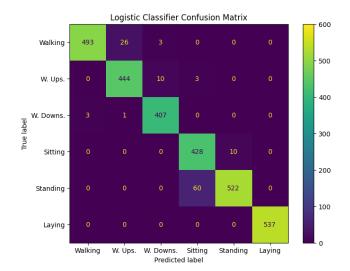


Figura 3: Matriz de confusão do classificador de regressão logística para os dados pré-processados.

3.2.2. k-Vizinhos mais Próximos

Na primeira tentativa de construção de um classificador de k-Vizinhos mais Próximos (kNN) foram utilizadas as opções padrão da classe KNeighborsClassifier do Scikit-Learn: distância euclidiana e pesos uniformes. Novamente foi utilizada a validação cruzada estratificada em 5 pastas.

O valor ótimo de \mathbf{k} ficou em 17^4 (figura 4). Este classificador com opções padrão (Vanilla) ficou com acurácia balanceada na validação cruzada igual a 0.8999, e com os dados de teste igual a 0.8999⁵.

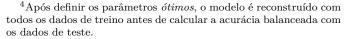
Este classificador teve resultados inferiores ao do classificador de regressão logística para todas as classes (tabela 4). As dificuldades de distinguir Sentado e Em pé aumentaram com relação ao classificador de regressão logística, assim como a distinção entre Caminhar, Subir escadas e Descer escadas (figura 5).

O F1-score também seria uma boa escolha para avaliar a qualidade dos classificadores, pois, assim como a acurácia balanceada, respondeu aos problemas observados em ambas matrizes de confusão dos classificadores construídos.

3.2.3. Otimização do k-Vizinhos mais Próximos

Foram realizados alguns testes para tentar melhorar o resultado do classificador de k-Vizinhos mais Próximos. A primeira tentativa foi uma busca em grade ao redor do melhor ${\bf k}$ encontrado, buscando os melhores hiperparâmetros para o classificador de k-Vizinhos mais Próximos.

Foram testados diferentes valores de ${\bf p}$ para a métrica de Minkowski e o uso de pesos ponderados pelo inverso



 $^{^5{\}rm A}$ coincidência de valores levantou suspeitas quanto ao código desenvolvido. O código foi verificado mais de uma vez, e nenhum erro foi encontrado. Os valores diferem na quinta casa decimal.

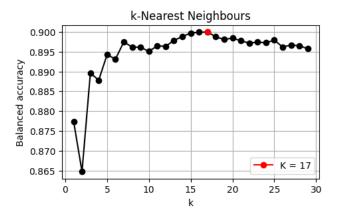


Figura 4: Otimização do parâmetro ${\bf k}$ do classificador de k-Vizinhos mais Próximos para os dados pré-processados.

Classe	Recall	F1 score
Todas	0.8999	0.9017
Caminhar	0.9839	0.9104
Subir escadas	0.9108	0.9022
Descer escadas	0.7667	0.8530
Sentado	0.7984	0.8578
Em pé	0.9436	0.8885
Deitado	0.9963	0.9981

Tabela 4: Resultados do classificador de k-Vizinhos mais Próximos para os dados pré-processados.

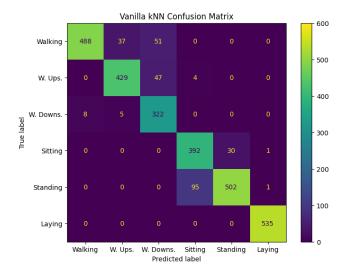


Figura 5: Matriz de confusão do classificador de k-Vizinhos mais Próximos para os dados pré-processados.

da distância (tabela 5). O classificador com os hiperparâmetros ótimos ($kNN\ opt1$) mostrou um pequeno ganho na acurácia balanceada: 0.9045 na validação cruzada e 0.9146 nos dados de teste.

Como alguns dos dados de entrada não estava *exata-mente* escalados em [-1;1], a segunda tentativa foi aplicar uma escala [0;1] aos dados pré-processados (*kNN scaled*).

Hiperparâmetro	Padrão ($Vanilla$)	Otimizado
Distância	Euclidiana	Manhattan
Pesos	Uniforme	Distância

Tabela 5: Hiperparâmetros do classificador k-Vizinhos mais Próximos.

O resultado foi novamente um pequeno incremento na acurácia balanceada: 0.9059 na validação cruzada e 0.9153 nos dados de teste.

A última etapa na busca por um classificador de k-Vizinhos mais Próximos de melhores resultados foi avaliar os parâmetros de entrada. Foi feita uma otimização gulosa dos parâmetros que são utilizados na construção do classificador de k-Vizinhos mais Próximos. A cada iteração são avaliados todos os parâmetros de entrada. A cada passo da iteração é retirado um dos parâmetros de entrada e o modelo é reconstruído. Se a acurácia balanceada aumentar, este parâmetro é retirado permamentemente. O algoritmo termina quando nenhum parâmetro é retirado em uma iteração.

Para este estudo foi feita apenas uma iteração, ou seja, a retirada de cada atributo foi testada uma única vez. Este procedimento excluiu 65 dos 561 atributos ($kNN\ trimmed$), e levou a uma acurácia balanceada de 0.9218 na validação cruzada e de 0.9192 nos dados de teste.

Uma possível etapa adicional seria a otimização do peso de cada atributo no cômputo das distâncias. Este procedimento seria a otimização de 496 pesos. Devido ao custo computacional envolvido em uma otimização de tantos parâmetros, optou-se por considerar a avaliação concluída. Resultados adicionais desta análise de otimização são apresentados no notebook construído para esta tarefa.

Foi possível melhorar os resultados com relação a otimizar apenas o número de vizinhos, mas o incremento foi relativamente pequeno. Os resultados com os dados de teste seguiram na mesma direção dos resultados com a validação cruzada. Em todas as tentativas os resultados ficaram abaixo daqueles do classificador de regressão logística.

3.3. Dados Brutos

Os dados brutos (raw) de aceleração e do giroscópio nas três direções levam a um conjunto de dados com 768 atributos. Os dados não estão normalizados (figura 6). Os dados pré-processados estavam aproximadamente em [-1;1] e foi pequeno, para o modelo de k-Vizinhos mais Próximos, o ganho de mudar a escala para [0;1]. Foi decidido escalar os dados brutos para [-1;1].

3.3.1. Regressão Logística

Para construir o classificador de regressão logística com os dados brutos foram aplicadas as mesmas opções e rotinas discutidas anteriormente (seção 3.2.1). O modelo ajustado aos dados brutos tem $l_2 = 21.5443$, valor maior que

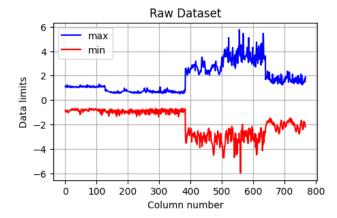


Figura 6: Limites dos atributos do conjunto de treinamento dos dados brutos.

o obtido no ajuste com os dados pré-processados (0.3594). Este maior valor do parâmetro de regularização pode ser resultado de uma maior dificuldade do modelo em generalizar os ajustes feitos nos modelos construídos durante a validação cruzada.

A acurácia balanceada na validação cruzada foi de 0.3911, e com os dados de teste 0.2999. O resultado ficou **muito** abaixo do alcançado com os dados pré-processados (tabela 6 e figura 7).

Classe	Recall	F1 score
Todas	0.2999	0.2957
Caminhar Subir escadas Descer escadas Sentado Em pé	$\begin{array}{c} 0.2560 \\ 0.2527 \\ 0.2881 \\ 0.0754 \\ 0.6015 \end{array}$	0.3409 0.3434 0.3523 0.1054 0.3760
Deitado	0.3259	0.2564

Tabela 6: Resultados do classificador de regressão logística para os dados brutos.

3.3.2. k-Vizinhos mais Próximos

Na avaliação com os dados pré-processados os ganhos com as otimizações foram relativamente pequenos. Nesta análise com os dados brutos decidiu-se por construir apenas o classificador de k-Vizinhos mais Próximos que utiliza os hiperparâmetros padrão (vanilla). Apenas o valor de $\bf k$ foi otimizado.

O classificador de k-Vizinhos mais Próximos *ótimo* foi com apenas um vizinho (\mathbf{k} =1), ou seja, é retornada a classe da amostra mais próxima do dado de entrada (figura 8). A acurácia balanceada na validação cruzada foi de 0.7424, e com os dados de teste 0.7191. Os resultados foram significativamente melhores que os do classificador de regressão logística (tabela 7), mas inferiores aos dos classificadores construídos com os dados pré-processados.

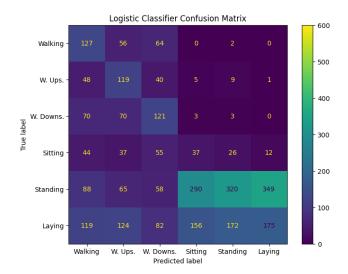


Figura 7: Matriz de confusão do classificador de regressão logística para os dados brutos.

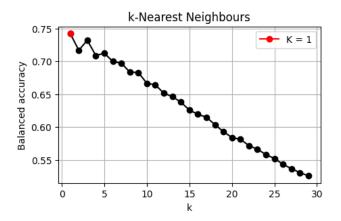


Figura 8: Otimização do parâmetro ${\bf k}$ do classificador de k-Vizinhos mais Próximos para os dados brutos.

4. Análise dos Resultados

Os resultados dos classificadores logístico e k-Vizinhos mais Próximos são significativamente piores quando treinados com os dados brutos. O classificador de k-Vizinhos mais Próximos se mostrou mais *robusto* que o classificador logístico (figura 10).

Uma análise de componentes principais pode ajudar a explicar a dificuldade do modelo classificador de regressão logística em trabalhar com os dados brutos. Foram construídos gráficos com os dados pré-processados nas principais direções (figura 11). Fica evidente que é possível realizar uma separação dos dados por meio de hiperplanos, que é a forma com que o classificador de regressão logística separa os dados.

Em contraste, os mesmos gráficos com os dados brutos (figura 12) mostram que a estratégia de separar com hiperplanos não funciona neste cenário. O classificador de k-Vizinhos mais Próximos conseguiu um resultado melhor que o de regressão logística, mas foi necessário utilizar o

Classe	Recall	F1 score
Todas	0.7191	0.7352
Caminhar	0.8427	0.8875
Subir escadas	0.8450	0.9108
Descer escadas	0.6452	0.7844
Sentado	0.7026	0.5862
Em pé	0.5846	0.5466
Deitado	0.6946	0.6959

Tabela 7: Resultados do classificador de k-Vizinhos mais Próximos para os dados brutos.

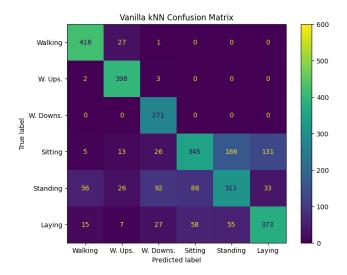


Figura 9: Matriz de confusão do classificador de k-Vizinhos mais Próximos para os dados brutos.

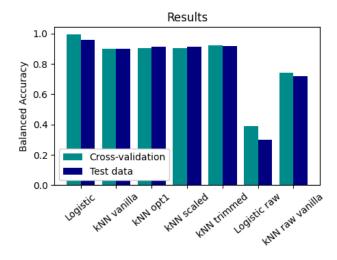


Figura 10: Resultados dos classificadores construídos.

valor limite de ${\bf k}$ igual a um.

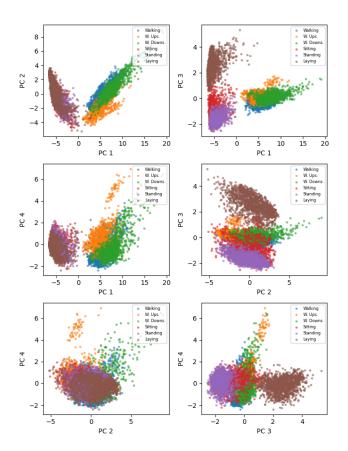


Figura 11: Dados pré-processados nas direções dos quatro maiores componentes principais.

5. Conclusão

Os resultados dos experimentos relizados mostram que o classificador de regressão logística é muito dependente da possibilidade de separar os dados utilizando hiperplanos. A significativa diferença entre o classificador construído com os dados brutos e o construído com os dados pré-processados mostra que é preciso buscar representações dos dados linearmente separáveis para utilizar este classificador.

O classificador de k-Vizinhos mais Próximos foi menos eficiente que o de regressão logística com os dados préprocessados, e conseguiu um desempenho $aceit\'{a}vel$ com os dados brutos. O fato do ${\bf k}$ ótimo ser um no classificador construído com os dados brutos é indicativo da dificuldade em separar as amostras no espaço dos dados brutos.

Referências

- D. Anguita, A. Ghio, L. Oneto, X. Parra, J. L. Reyes-Ortiz, et al., A public domain dataset for human activity recognition using smartphones., in: The European Symposium on Artificial Neural Networks, Vol. 3, 2013, p. 3.
- [2] F. Pedregosa, G. Varoquaux, A. Gramfort, V. Michel, B. Thirion, O. Grisel, M. Blondel, P. Prettenhofer, R. Weiss, V. Dubourg, J. Vanderplas, A. Passos, D. Cournapeau, M. Brucher, M. Perrot, E. Duchesnay, Scikit-learn: Machine learning in Python, Journal of Machine Learning Research 12 (2011) 2825–2830.

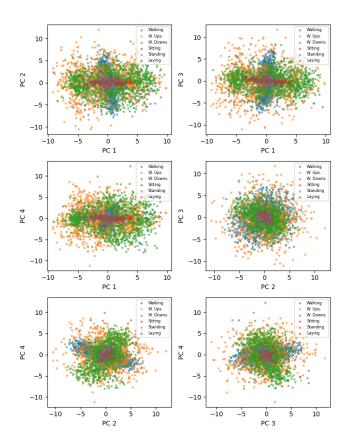


Figura 12: Dados brutos nas direções dos quatro maiores componentes principais.

[3] L. Van der Maaten, G. Hinton, Visualizing data using t-sne., Journal of machine learning research 9 (11) (2008).