Recapitulando...

Estou trabalhando com o dataset Swarm Behaviour, que na realidade contém 3 datasets, cada um determinando se uma simulação de 'boids' está alinhada, reunida ou agrupada. Em teoria, os dados (com exceção da classe final) deveriam ser iguais, porém enquanto isso é o caso para 'Aligned' e 'Grouped', os dados de 'Flocking' são parcialmente diferentes. Esta diferença é suficiente para desconsiderar o dataset em comparações com os outros dois, a quantidade de entradas distintas é muito grande.

Para fins de simplicidade, optei por trabalhar apenas com o dataset 'Aligned'. O formato dos dados é idêntico aos outros dois, portanto todos os scripts funcionam para os 3 datasets. Cada linha do dataset contém 2400 features, e classifica uma simulação de acordo com o critério determinado. No caso de 'Aligned', a classe pode ser '0': Not Aligned ou '1': Aligned.

Faço o balanceamento dos dados utilizando uma mistura de Undersampling e Oversampling, e então aplico PCA para reduzir a dimensionalidade do dataset. Devido a recomendações vistas em artigos, e a fim de reduzir overfitting (um problema que ao meu ver tem sido constante nos passos a seguir) opto uma redução de cerca de 90% na dimensionalidade para 250 features, mantendo cerca de 82% da variância.

Por fim tenho uma função que recebe um modelo e os conjuntos de treino e teste, faz a validação cruzada de acordo com as especificações do projeto, imprime a acurácia, o classification report e o desvio padrão, além de retornar os dados relevantes para um dicionário para uso futuro.

Variação paramétrica dos modelos requisitados na especificação do projeto:

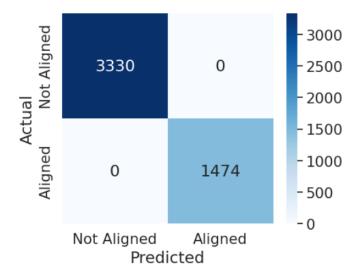
K-NN

Eu tinha preparado um algoritmo para escolher o melhor 'n' para o dataset, mas depois de rodar valores de ´1' a '31' ele retornou que o melhor valor de K é 1, e quando rodo o algoritmo tenho como resultado:

```
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
# Create a KNeighborsClassifier object
knn = KNeighborsClassifier(n_neighbors=1)
knn_dict = run_model(knn, X_train, y_train, X_test, y_test)
Mean train score: 1.000
Mean test score: 1.000
Standard deviation of test scores: 0.000
Accuracy: 1.000
Classification Report:
           precision
                    recall f1-score
                                   support
         0
               1.00
                              1.00
                       1.00
                                      3330
               1.00
                       1.00
                              1.00
                                      1474
                                      4804
                               1.00
   accuracy
  macro avg
               1.00
                       1.00
                               1.00
                                      4804
               1.00
                       1.00
                              1.00
                                      4804
weighted avg
```

Com a seguinte confusion matrix:

parâmetros em seu estado default.



Fiquei honestamente perplexo, pelos meus conhecimentos o K do K-NN é o principal hiperparâmetro e mesmo com 1 o classificador é um 'fit perfeito'. O processo de seleção e ajuste de parâmetros, da forma como é descrito no artigo https://www.kdnuggets.com/2020/05/hyperparameter-optimization-machine-learning-models.html não faz sentido nesse caso, pois seria retornado apenas o K com o valor de 1 e os

O problema não está na função que fiz para rodar os modelos, pois uma implementação tradicional do knn também resulta nesta acurácia:

```
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier

# Create a KNeighborsClassifier object
knn = KNeighborsClassifier(n_neighbors=1)

knn.fit(X_train, y_train)

# Make predictions on test data
y_pred = knn.predict(X_test)

# Calculate accuracy score
accuracy = accuracy_score(y_test, y_pred)
print("Accuracy:", accuracy)

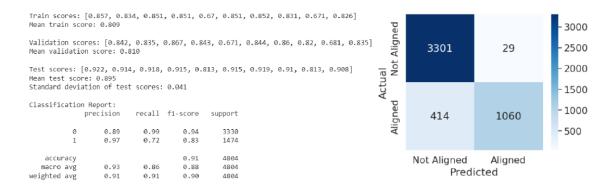
Accuracy: 1.0
```

Eu não sei para onde ir com esse modelo em específico. Posso ajustar os parâmetros a fim de reduzir um suposto 'overfitting' (o que inclusive faço em modelos seguintes), mas com relação a escolha de parâmetros por grid search, random search ou outro método, neste caso não posso fazer nada.

LVQ

Após instalar o pacote de LVQ do sk_learn no colab (ele não está podendo ser importado da forma tradicional).

Uma primeira execução do LVQ resultou no seguinte classification report e matriz de confusão:



A fim de ajustar os hiperparâmetros, realizei o seguinte GridSearch:

```
[36] from sklearn_lvq import GlvqModel
     from sklearn.model_selection import GridSearchCV
     # Define the hyperparameter grid
     param grid = {
         'prototypes_per_class': [2, 3, 4],
         'beta': [1, 2, 3],
         'max_iter': [1000, 2500, 5000],
     # Initialize the LVQ model
     lvq = GlvqModel()
     # Create the grid search object
     grid_search = GridSearchCV(lvq, param_grid=param_grid, cv=3, n_jobs=-1, verbose=1)
     # Fit the grid search to the data
     grid_search.fit(X_train, y_train)
     # Print the best hyperparameters and accuracy score
     print("Best parameters:", grid_search.best_params_)
     print("Best score:", grid_search.best_score_)
     Fitting 3 folds for each of 27 candidates, totalling 81 fits
     Best parameters: {'beta': 3, 'max_iter': 2500, 'prototypes_per_class': 4}
     Best score: 0.8560658338899029
```

Levando em conta que tenho os seguintes parâmetros disponíveis para ajuste:

prototypes_per_class: This parameter controls the number of prototypes used for each class.

max_iter: This parameter determines the maximum number of iterations for the optimization algorithm to converge.

gtol: This parameter determines the tolerance for the change in the objective function value that indicates convergence. Common values are between 1e-6 and 1e-3.

beta: This parameter controls the learning rate of the optimization algorithm. Common values are between 1 and 10.

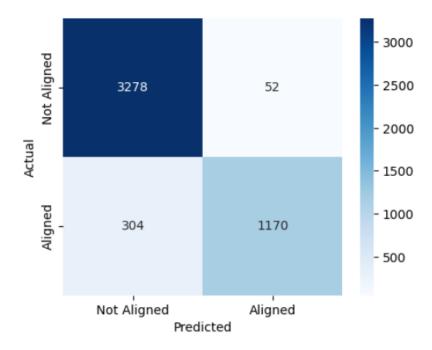
c: This parameter controls the regularization strength.

random_state: This parameter controls the random seed used for the initialization of the algorithm.

Nesta execução eu usei apenas 3 como o valor para cross validation, a fim de reduzir um pouco o longo tempo da busca. Os valores e parâmetros foram escolhidos para a grid search com base nos valores comuns associados a eles.

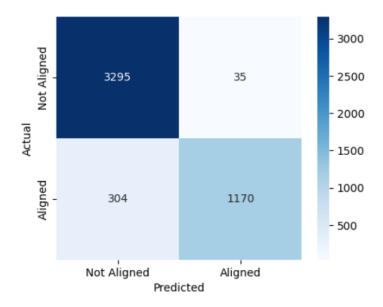
De qualquer forma, usando os valores descobertos no grid search, executo o modelo novamente:

```
from sklearn_lvq import GlvqModel
        lvq = GlvqModel(prototypes_per_class=4, initial_prototypes=None, max_iter=2500, gtol=1e-05, beta=3, c=None, random_state=42)
       lvq_dict = run_model(lvq, X_train, y_train, X_test, y_test)
       Train scores: [0.906, 0.852, 0.852, 0.906, 0.902, 0.9, 0.851, 0.85, 0.853, 0.851] Mean train score: 0.872
       Test scores: [0.891, 0.849, 0.86, 0.9, 0.894, 0.897, 0.858, 0.843, 0.862, 0.865]
       Mean test score: 0.872
Standard deviation of test scores: 0.020
       Accuracy: 0.926
       Classification Report:
                                   recall f1-score
                      precision
                                                        support
                                     0.98
                   0
                           0.92
                                                0.95
                                                           3330
                                                          1474
                           0.96
                                     0.79
                                                0.87
                                                0.93
                                                           4804
            accuracy
                           0.94
                                     0.89
                                                0.91
                                                           4804
       weighted avg
                                                           4804
                           0.93
                                     0.93
                                                0.92
```



Temos notavelmente uma melhora na acurácia, o que é refletido na matriz de confusão.

Em seguida ainda alterei o parâmetro gtol para 1e-03, o que resultou em uma redução de acurácia para 88%, e em seguida testei como 1e-06. O modelo que levava cerca de 3 minutos para rodar levou 15 devido a isso, mas houve uma pequena melhora na acurácia:



Árvore de decisão

Para este modelo, como de praxe, realizo uma execução sem determinar os parâmetros:

```
dt = DecisionTreeClassifier(random_state=42)
      dt_dict = run_model(dt, X_train, y_train, X_test, y_test)
      Mean train score: 1.000
      Test scores: [0.999, 0.999, 0.999, 0.999, 0.999, 1.0, 0.999, 0.999, 0.999]
      Mean test score: 0.999
      Standard deviation of test scores: 0.000
      Accuracy: 0.949
      Classification Report:
                           recall f1-score support
               0
                     0.99
                             0.93
                                     0.96
                                             3330
                     0.87
                             0.99
                                     0.92
                                             1474
                                             4804
                                     0.95
         accuracy
        macro avg
                     0.93
                            0.96
                                     0.94
                                             4804
      weighted avg
                     0.95
                             0.95
                                     0.95
                                             4804

    [47] print("Maximum depth of decision tree:", dt.tree_.max_depth)

      Maximum depth of decision tree: 11
```

Temos uma acurácia de 94,9% e uma profundidade de 11.

Em seguida executo um Grid Search com valores e parâmetros comumente utilizados em árvores de decisão, e tenho o seguinte resultado:

```
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
        from sklearn.model_selection import GridSearchCV
         # Create a decision tree classifier object
         dt = DecisionTreeClassifier(random_state=42)
         # Define the grid search parameters
         param_grid = {'max_depth': [5, 10, 20, 50, None],
                        'min_samples_split': [2, 5, 10, 20],
                       'min_samples_leaf': [1, 2, 4, 8],
'max_features': ['sqrt', 'log2', None]}
         # Perform the grid search
         grid_search = GridSearchCV(dt, param_grid, cv=5, n_jobs=-1, verbose=2)
         grid_search.fit(X_train, y_train)
         # Print the best parameters and score
         print("Best parameters found: ", grid_search.best_params_)
         print("Best score: ", grid_search.best_score_)
        Fitting 5 folds for each of 240 candidates, totalling 1200 fits
Best parameters found: {'max_depth': 20, 'max_features': None, 'min_samples_leaf': 1, 'min_samples_split': 2}
         Best score: 0.9992455020313408
```

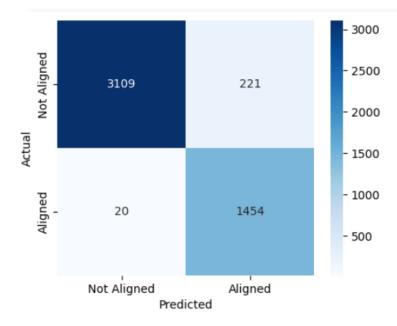
Executando o modelo com os parâmetros encontrados, temos como resultado:

```
    [51] from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier

       dt = DecisionTreeClassifier(max_depth=20, min_samples_leaf=1, min_samples_split = 2, max_features = None, random_state=42)
       dt_dict = run_model(dt, X_train, y_train, X_test, y_test)
       Test scores: [0.999, 0.999, 0.999, 0.999, 0.999, 1.0, 0.999, 0.999, 0.999, 0.999] Mean test score: 0.999
       Standard deviation of test scores: 0.000
       Accuracy: 0.949
       Classification Report:
                               recall f1-score support
                   precision
                               0.93
                        0.99
                        0.87
                                 0.99
                                          0.92
                                                    1474
                                          0.95
                                                    4804
                        0.93
                                 0.96
          macro avg
                                           0.94
                                                    4804
       weighted avg
```

[52] print("Maximum depth of decision tree:", dt.tree_.max_depth)

Maximum depth of decision tree: 11



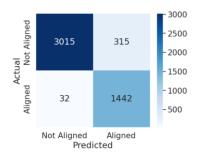
Considerando que os valores encontrados eram quase todos o padrão de inicialização de Decision Trees, o resultado que temos é exatamente igual ao que tínhamos antes, quando iniciamos a árvore sem parâmetro algum. O que pode ser feito agora é ajustar os parâmetros a fim de tornar o encaixe da árvore mais geral. Uma execução da árvore onde reduzo a profundidade máxima para 5, e dobro os valores de min_samples_leaf e min_samples_split termina com um resultado quase igual:

Nesse caso, acredito que para compensar a profundidade reduzida a árvore ficou mais larga. O atributo que mais importa portanto nessa execução, e que suponho que reduz ao máximo overfitting é o 'max_features', que reduz bastante a acurácia do modelo se trocado para 'sqrt' ou 'log2', um grid_search ou random_search com um número limitado de atributos pode se provar interessante na entrega seguinte. Apreciaria feedback com relação a isso.

SVM

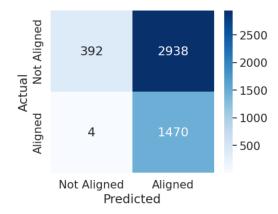
Com relação a SVM, confesso não ter realizado uma busca por hiperparâmetros como orientado. Primeiramente testei os diferentes kernels com o resto dos parâmetros default:

Linear, que apresentou um resultado razoavél:



Poly, que depois de 23 minutos de execução apresentou um resultado desastroso:

```
[50] from sklearn.svm import SVC
         svm = SVC(kernel='poly')
        svm_dict = run_model(svm, X_train, y_train, X_test, y_test)
        Train scores: [0.557, 0.559, 0.977, 0.559, 0.561, 0.562, 0.56, 0.559, 0.558, 0.558] Mean train score: 0.601
        Test scores: [0.553, 0.565, 0.981, 0.57, 0.561, 0.564, 0.554, 0.558, 0.555, 0.548]
        Standard deviation of test scores: 0.127
        Classification Report:
                                   recall f1-score support
                       precision
                            0.99
                                      0.12
                                                 0.21
            accuracy
                                                 0.39
                                                           4804
                            0.66
                                      0.56
           macro avg
                                                 0.36
                                                           4804
        weighted avg
                                      0.39
```



E então RBF, que foi um 'fit perfeito':

```
from sklearn.svm import SVC
 svm = SVC(kernel='rbf', random_state=42)
svm_dict = run_model(svm, X_train, y_train, X_test, y_test)
Test scores: [1.0,\ 0.999,\ 1.0,\ 1.0,\ 0.999,\ 1.0,\ 1.0,\ 1.0,\ 0.999,\ 0.999] Mean test score: 1.000
Standard deviation of test scores: 0.000
Accuracy: 1.000
Classification Report:
                       recall f1-score support
            precision
          0
                 1.00
                         1.00
                                  1.00
                                            3330
                                            1474
          1
                 1.00
                          1.00
                                  1.00
    accuracy
                                   1.00
                                            4894
                 1.00
                         1.00
   macro avg
                                   1.00
                                            4804
weighted avg
                                            4804
                 1.00
                          1.00
                                  1.00
```

Eu tinha lido em um artigo sobre SVM que o kernel rbf era propenso a overfitting. Mas devido a esse resultado, optei por explorar mais esse kernel, alterando os valores dos parâmetros 'C' e 'gamma' manualmente a fim de generalizar o modelo. Novamente, uma busca pelos melhores parâmetros nesse caso não faz muito sentido pois retornaria os valores padrão com o kernel rbf.

C = 0.1 e gamma = 0.01:

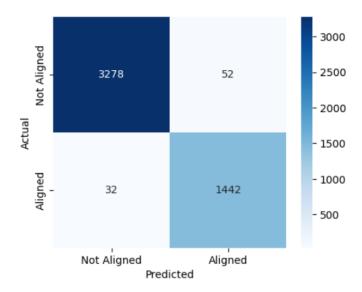
```
[57] from sklearn.svm import SVC
     svm = SVC(kernel='rbf', C= 0.1, gamma= 0.01, random state=42)
     svm_dict = run_model(svm, X_train, y_train, X_test, y_test)
    Train scores: [0.998, 0.998, 0.999, 0.998, 0.998, 0.998, 0.998, 0.998, 0.999, 0.998]
Mean train score: 0.998
     Test scores: [0.998, 0.999, 0.998, 0.998, 0.998, 0.999, 0.999, 0.999, 0.997, 0.999]
     Mean test score: 0.998
     Standard deviation of test scores: 0.001
     Accuracy: 1.000
     Classification Report:
                  precision
                              recall f1-score support
                      1.00 1.00 1.00
1.00 1.00 1.00
                0
                                                      3330
                1
                                                     1474
                     1.00
1.00 1.00 1.00
1.00 1.00 1.00
                                                      4804
        accuracy
                                                      4804
        macro ave
     weighted avg
                                                      4804
```

Redução do gamma para 0.001

```
[ ] from sklearn.svm import SVC
     svm = SVC(kernel='rbf', C= 0.1, gamma= 0.001, random_state=42)
     svm_dict = run_model(svm, X_train, y_train, X_test, y_test)
    Train scores: [0.873, 0.873, 0.873, 0.873, 0.871, 0.874, 0.872, 0.874, 0.874, 0.872]
    Mean train score: 0.873
     Test scores: [0.86, 0.873, 0.88, 0.864, 0.865, 0.868, 0.878, 0.873, 0.875, 0.885]
     Mean test score: 0.872
     Standard deviation of test scores: 0.007
     Accuracy: 0.881
     Classification Report:
                  precision recall f1-score support
                      0.92 0.91
0.80 0.82
               0
                                           0.91
                                                      3330
               1
                                        0.81
                                                     1474
    accuracy 0.88 macro avg 0.86 0.86 0.86 weighted avg 0.88 0.88 0.88
                                                      4804
                                                      4804
                                                      4804
```

Temos uma redução razoável na acurácia devido a essa mudança. Com a intenção de encontrar um balanço entre performance e generalização optei por aumentar o valor do gamma para 0.005:

```
✓ D
       from sklearn.svm import SVC
        svm = SVC(kernel='rbf', C= 0.1, gamma= 0.005, random_state=42)
        svm_dict = run_model(svm, X_train, y_train, X_test, y_test)
       Train scores: [0.983, 0.983, 0.983, 0.983, 0.983, 0.983, 0.983, 0.983, 0.983, 0.983]
       Mean train score: 0.983
       Test scores: [0.982, 0.983, 0.985, 0.981, 0.981, 0.979, 0.989, 0.981, 0.981, 0.985]
       Mean test score: 0.983
       Standard deviation of test scores: 0.003
        Accuracy: 0.983
       Classification Report:
                                  recall f1-score support
                     precision
                                                        1474
                  1
                                              0.97
            accuracy
                                              0.98
                                                        4804
                          0.98
                                    0.98
           macro avg
                                              0.98
                                                        4804
       weighted avg
                                                        4804
                          0.98
                                    0.98
                                              0.98
```



A busca por parâmetros não foi como especificado, mas considerando o tempo de execução do modelo (chegando a 15~20 minutos) que inviabiliza uma busca por grade, além da maldição desse dataset que gosta de retornar acurácia de 100% em determinados modelos, fiquei satisfeito com os parâmetros encontrados. Espero que tenha sido aceitável.

Random Forest

Para Random Forest, tentei fazer um grid search inicialmente com diferentes valores para n_estimators, max_depth, min_samples_split e min_samples_leaf, mas logo percebi que provavelmente ia levar tempo demais. Uma execução do modelo sem hiperparâmetros resulta em:

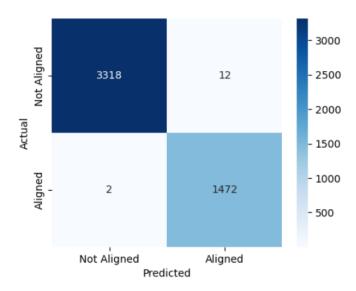
```
√ [79] from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier

     rf = RandomForestClassifier()
     rf_dict = run_model(rf, X_train, y_train, X_test, y_test)
     Mean train score: 1.000
     Mean test score: 1.000
     Standard deviation of test scores: 0.000
     Accuracy: 1.000
     Classification Report:
                precision
                         recall f1-score support
              0
                   1.00
                          1.00
                                  1.00
                                          3330
              1
                   1.00
                           1.00
                                  1.00
                                          1474
                                         4804
        accuracy
                                  1.00
        macro avg
                  1.00
                          1.00
                                  1.00
                                         4804
                  1.00
                                  1.00
                                          4804
     weighted avg
                           1.00
```

E uma execução com parâmetros designados a reduzir overfitting resultam em algo semelhante:

```
✓ [77] from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
          \texttt{rf} = \texttt{RandomForestClassifier} (\texttt{n\_estimators} = 100, \texttt{random\_state} = 42, \texttt{max\_depth} = 5, \texttt{min\_samples\_split} = 4, \texttt{min\_samples\_leaf} = 2, \texttt{max\_features} = \texttt{'sqrt'}) 
         rf_dict = run_model(rf, X_train, y_train, X_test, y_test)
         Train scores: [0.998, 0.998, 0.999, 0.998, 0.998, 0.998, 0.999, 0.998, 0.998, 0.999]
         Test scores: [0.998, 0.998, 0.999, 0.997, 0.999, 0.996, 0.999, 0.998, 0.996, 0.998]
Mean test score: 0.998
         Standard deviation of test scores: 0.001
         Accuracy: 0.997
         Classification Report
                        precision
                                        recall f1-score support
                                                       1.00
                                                                   4804
             macro avg
                               1.00
                                           1.00
                                                        1.00
                                                                    4804
```

Acredito que a pequena perda de acurácia compensa o tempo de execução menor e a maior generalização do modelo



Por fim, para essa entrega, fiz

MLP

Rodando sem determinação de parâmetros tenho como resultado:

```
v [60] from sklearn.neural_network import MLPClassifier
      mlp = MLPClassifier(random_state=42)
      mlp_dict = run_model(mlp, X_train, y_train, X_test, y_test)
   Mean train score: 1.000
      Mean test score: 1.000
      Standard deviation of test scores: 0.000
      Accuracy: 1.000
      Classification Report:
                        recall f1-score
                precision
                                        support
              0
                    1.00
                           1.00
                                   1.00
                                           3330
                    1.00
                           1.00
                                   1.00
                                           1474
                                   1.00
                                           4804
         accuracy
                    1.00
                           1.00
                                   1.00
                                           4804
        macro avg
      weighted avg
                    1.00
                           1.00
                                   1.00
                                           4804
```

Nunca pensei que ia ficar tão frustrado com esses classificadores "perfeitos". Otimista com o tempo de execução do mlp (1 minuto), resolvi executar Random Search por parâmetros para ver no que dava.

DUAS HORAS DEPOIS, tive o seguinte resultado:

```
[61] from sklearn.neural_network import MLPClassifier
       from sklearn.model_selection import RandomizedSearchCV
from scipy.stats import randint as sp_randint
        # define the parameter space
       activation: [ relu , 'tann ],
'solver': ['adam', 'lbfgs', 'sgd'],
'alpha': [0.0001, 0.001, 0.01],
'learning_rate': ['constant', 'adapt'
'max_iter': sp_randint(500, 2000)}
                                                   'adaptive'],
        # create the MLP classifier object
       mlp = MLPClassifier()
         create the randomized search object
       n_jobs=-1, random_state=42, verbose=2)
        # fit the randomized search object to the data
        clf.fit(X_train, y_train)
       # print the best parameters and score
print("Best parameters: ", clf.best_params_)
        print("Best score: ", clf.best_score_)
       Fitting 5 folds for each of 50 candidates, totalling 250 fits
Best parameters: {'activation': 'relu', 'alpha': 0.0001, 'hidden_layer_sizes': 320, 'learning_rate': 'constant', 'max_iter': 1595, 'solver': 'adam'}
Best score: 1.0
Best parameters: {'activation': 'relu', 'alpha': 0.0001,
'hidden layer sizes': 320, 'learning rate': 'constant', 'max iter':
1595, 'solver': 'adam'}
Best score: 1.0
```

Sem surpresa nenhuma, o a execução do MLP com esses parâmetros resultou em 100% de acurácia:

Eu acredito que nesse caso, eu devo fazer como fiz com SVM e tentar generalizar o modelo a fim de combater overfitting. Apreciaria feedback para ver se devo seguir este caminho.

Ainda não realizei a execução de Comitê de Redes Neurais Artificiais e Comitê Heterogêneo. De acordo com a agenda da disciplina ainda temos uma entrega de variação paramétrica no dia 03/05, então estou optando por deixar esses dois modelos, além de mais refinamentos dos parâmetros dos modelos aqui apresentados, para essa próxima entrega. Apreciaria saber se estou indo pelo caminho certo, e honestamente o que interpretar desses resultados de acurácia de 100%.

Como uma consideração final, vendo a descrição do projeto final novamente, uma das etapas é "Extrair uma árvore de decisão e identificar quais são os primeiros atributos utilizados na construção da árvore.

Propor sugestões de decisões com base nos atributos encontrados"

No meu caso acho essa etapa impossível. Já começo com 2400 features, então fazer decisões sobre a influência de uma sobre o resultado final é complicado. Em seguida eu aplico PCA, com as features resultantes sendo uma incógnita para todos nós.

-Andrey Moutelik