Lista 10 - Redes Neurais Artificiais

August 17, 2021

Felipe Bartelt de Assis Pessoa - 2016026841

1 Multilayer Perceptron (MLP)

Para se avaliar o desempenho de MLPs ao se alterar o número de neurônios na camada escondida e suas respectivas funções de ativação, utilizou-se os métodos de MLP intrínsecos ao `scikit-learn` para aproximar dois *datasets*, um de regressão e outro de classificação.

Para ambos os conjuntos de dados, obteve-se os erros médios em 10 iterações, variando-se o número de neurônios da camada intermediária entre 1 e $2 \cdot h$, sendo h o número de variáveis do conjunto. Essas iterações foram feitas para cada uma das funções de ativação disponíveis nos modelos do `sklearn`: identidade, sigmoid, tanh e ReLU.

1.1 Boston Housing

O primeiro *dataset* a ser testado é o Boston Housing, que é fornecido diretamente pela biblioteca `sklearn`. Fez-se a normalização *standardization* sobre as amostras e dividiu-se o conjunto em conjunto de treino e teste, sendo o conjunto de teste 30% do total.

[60]:
```
from sklearn.datasets import load_boston
from sklearn.neural_network import MLPClassifier, MLPRegressor
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.metrics import mean_squared_error
import numpy as np
import plotly.express as px
import plotly.graph_objects as go
from plotly.subplots import make_subplots
```

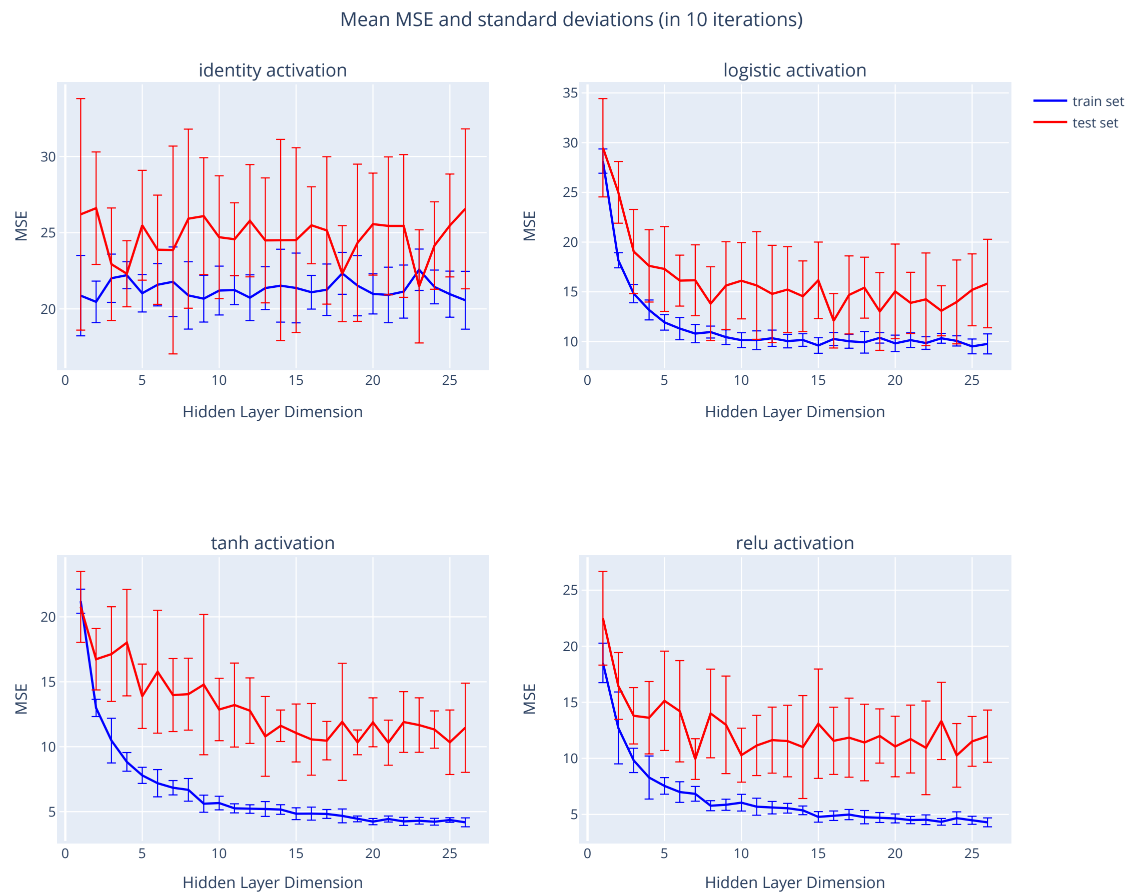
Utilizou-se o método LBFGS como otimizador de custo do MLP, tomando máximo de iterações = 2000 e tolerância de erro 0.01. Definiu-se ainda um parâmetro de regularização igual a 15, de forma a se obter resultados melhores nos dados de teste, evitando o *overfitting*. Esse valor de regularização foi definido por meio de alguns testes e análise de erro.

[179]:
```
%%capture --no-stdout
X, y = load_boston(return_X_y=True)
standardize = StandardScaler()
X = standardize.fit_transform(X)
act_funs = ['identity', 'logistic', 'tanh', 'relu']
```

```
dim_list = np.arange(1,27)
reg_par = 15
fig = make_subplots(rows=2, cols=2, subplot_titles=tuple(k+' activation' for k␣
↪in act_funs))
mses, stds = [], []

for i, act_fun in enumerate(act_funs):
    mse_train_list, mse_test_list = [], []

    for hidden_dim in dim_list:
        mlp_reg = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=hidden_dim,
                               activation=act_fun, solver='lbfgs',
                               alpha=reg_par, max_iter=2000, tol=0.01);
        mse_train, mse_test = [], []

        for _ in range(10):
            X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size␣
↪= 0.3)
            mlp_reg.fit(X_train, y_train);
            yhat_train = mlp_reg.predict(X_train)
            yhat_test = mlp_reg.predict(X_test)
            mse_train.append(mean_squared_error(yhat_train, y_train))
            mse_test.append(mean_squared_error(yhat_test, y_test))

        mse_train_stat = (np.mean(mse_train), np.std(mse_train))
        mse_test_stat = (np.mean(mse_test), np.std(mse_test))
        mse_train_list.append(mse_train_stat)
        mse_test_list.append(mse_test_stat)

    mean_train, std_train = list(zip(*mse_train_list))
    mean_test, std_test = list(zip(*mse_test_list))
    mses.append(np.array(mean_test))
    stds.append(np.array(std_test))
    fig.add_scatter(x=dim_list, y=mean_train, error_y= {'type':'data',
                    'array':std_train, 'thickness':1}, name='train set',
                    row = 1*(i>1)+1, col=2**(i%2), line={'color':'blue'},
                    showlegend=(i==0))
    fig.add_scatter(x=dim_list, y=mean_test, error_y = {'type':'data',
                    'array':std_test, 'thickness':1}, name='test set',
                    row = 1*(i>1)+1, col=2**(i%2), line={'color':'red'},
                    showlegend=(i==0))
    fig.update_yaxes(title_text="MSE", row= 1*(i>1)+1, col=2**(i%2))
    fig.update_xaxes(title_text="Hidden Layer Dimension", row= 1*(i>1)+1,␣
↪col=2**(i%2))
```

Os erros quadráticos médios e seus desvios padrão, dentro das 10 iterações, são mostrados na figura abaixo:

[180]:
```
fig.update_layout(height=800, width=1000, title={'text':"Mean MSE and standard␣
↪deviations (in 10 iterations)", 'x':0.5, 'y':0.98}, margin = {'b':10, 't':
↪80, 'r':2, 'l':2, 'pad':2})
fig.show(renderer='svg',height=800, width=1000)
```



Ainda, mostra-se os menores MSE obtidos por cada função de ativação e o número de neurônios necessários para tal resultado:

[187]:
```
min_idx = np.argmin(mses, axis=1)
print('Menores MSEs médios para cada função de ativação:')
print('função\t\t\tn° neurônios\t\t\tMSE')
print('-'*68)
for i, idx in enumerate(min_idx):
    print(f'{act_funs[i]+"    "*(i>1)}\t\t   {idx+1}\t\t\t {mses[i][idx]}')
```

```
Menores MSEs médios para cada função de ativação:
função                  n° neurônios                  MSE
--------------------------------------------------------------------
identity                   23                     21.47780861103719
logistic                   16                     12.086023597411685
```

```
tanh                         21                          10.312929511015502
relu                         7                           9.931570157176079
```

Por meio dos resultados gráficos e melhores MSE obtidos, pode-se dizer que a função de ativação identidade nos neurônios da camada intermediária não é uma boa escolha para essa aplicação. Obteve-se menor erro ao se utilizar a função $\tanh(\cdot)$, com 21 neurônios na camada intermediária. A função de ativação logística sigmoidal unipolar obteve menor MSE ≈ 12.1, com 16 neurônios e, dessa forma, pode ser mais vantajoso seu uso ao da tangente hiperbólica desde que se consiga reduzir ainda mais o MSE nos dados de teste. Por último, observa-se que o comportamento da ReLU foi o melhor de todos, obtendo o menor MSE geral 9.93 com apenas 7 neurônios na camada intermediária, que corresponde à, aproxidamente, metade do número de variáveis do conjunto.

1.2 Statlog (Heart)

O segundo conjunto de testes utilizado foi o Statlog(Heart), baixado diretamenta da UCI. Novamente os dados foram normalizados por meio de *standardization* e separados em conjunto de treino e teste, com proporção idêntica à anterior.

Utilizou-se o método LBFGS como otimizador de custo do MLP, tomando máximo de iterações = 2000 e tolerância de erro 0.01. Definiu-se ainda um parâmetro de regularização igual a 3, de forma a se obter resultados melhores nos dados de teste, evitando o *overfitting*. Esse valor de regularização foi definido por meio de alguns testes e análise de erro.

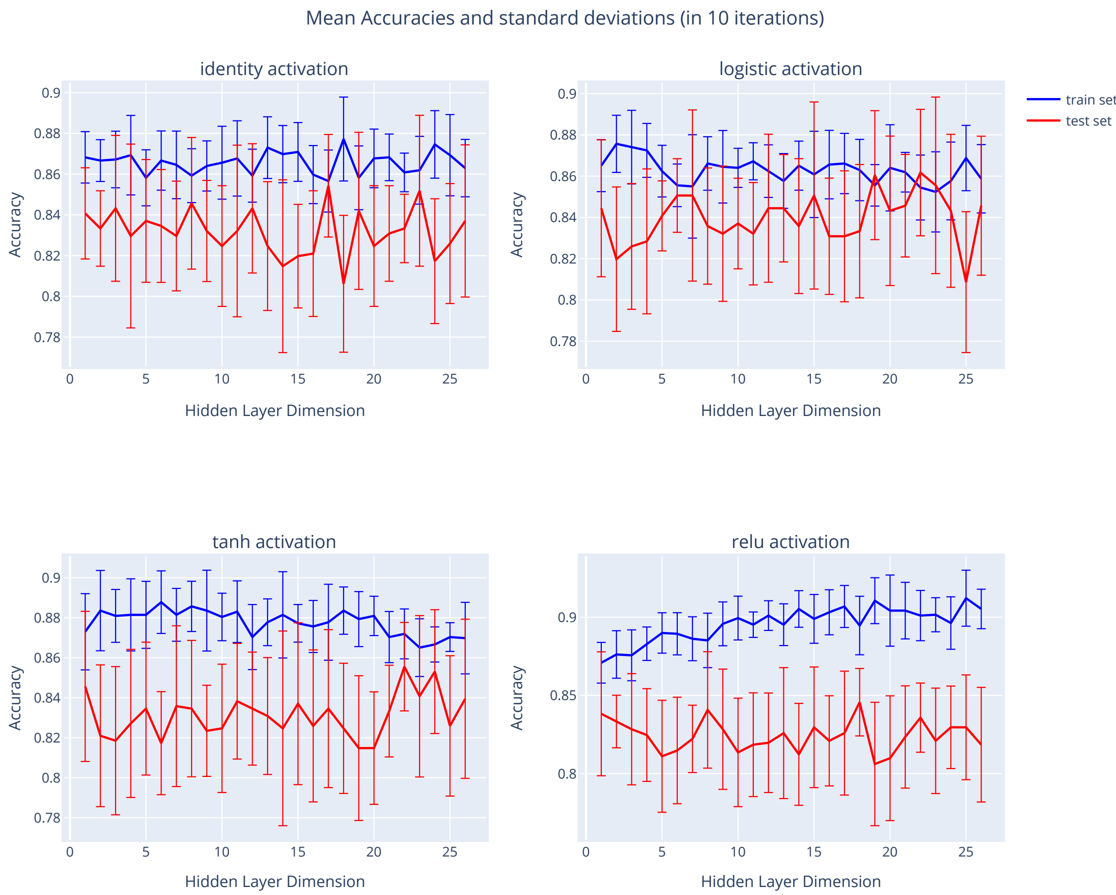
[193]:
```
data = np.loadtxt('heart.dat')
X = np.copy(data[:, 0:-1])
y = np.copy(data[:, -1])
y[y==2]=0
```

[224]:
```
%%capture --no-stdout

X = standardize.fit_transform(X)
dim_list = np.arange(1,27)
reg_par = 3
fig = make_subplots(rows=2, cols=2, subplot_titles=tuple(k+' activation' for k␣
 ↪in act_funs))
mses, stds = [], []

for i, act_fun in enumerate(act_funs):
    acc_train_list, acc_test_list = [], []

    for hidden_dim in dim_list:
        mlp_clf = MLPClassifier(hidden_layer_sizes=hidden_dim,
                                activation=act_fun, solver='lbfgs',
                                alpha=reg_par, max_iter=2000, tol=0.01);
        acc_train, acc_test = [], []

        for _ in range(10):
            X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size␣
 ↪= 0.3)
```

```
            mlp_clf.fit(X_train, y_train);
            acc_train.append(mlp_clf.score(X_train, y_train))
            acc_test.append(mlp_clf.score(X_test, y_test))

        acc_train_stat = (np.mean(acc_train), np.std(acc_train))
        acc_test_stat = (np.mean(acc_test), np.std(acc_test))
        acc_train_list.append(acc_train_stat)
        acc_test_list.append(acc_test_stat)

    mean_train, std_train = list(zip(*acc_train_list))
    mean_test, std_test = list(zip(*acc_test_list))
    mses.append(np.array(mean_test))
    stds.append(np.array(std_test))
    fig.add_scatter(x=dim_list, y=mean_train, error_y= {'type':'data',
                    'array':std_train, 'thickness':1}, name='train set',
                    row = 1*(i>1)+1, col=2**(i%2), line={'color':'blue'},
                    showlegend=(i==0))
    fig.add_scatter(x=dim_list, y=mean_test, error_y = {'type':'data',
                    'array':std_test, 'thickness':1},  name='test set',
                    row = 1*(i>1)+1, col=2**(i%2), line={'color':'red'},
                    showlegend=(i==0))
    fig.update_yaxes(title_text="Accuracy", row= 1*(i>1)+1, col=2**(i%2))
    fig.update_xaxes(title_text="Hidden Layer Dimension", row= 1*(i>1)+1,␣
↪col=2**(i%2))
```

As acurácias médias e seus desvios padrão, dentro das 10 iterações, são mostrados na figura abaixo:

[225]:
```
fig.update_layout(height=800, width=1000, title={'text':"Mean Accuracies and␣
↪standard deviations (in 10 iterations)", 'x':0.5, 'y':0.98}, margin = {'b':
↪10, 't':80, 'r':2, 'l':2, 'pad':2})
fig.show(renderer='svg',height=800, width=1000)
```



Ainda, mostra-se as melhores acurácias médias obtidas por cada função de ativação e o número respectivo de neurônios necessários para tal resultado.

[226]:
```python
min_idx = np.argmax(mses, axis=1)
print('Maiores acurácias médios para cada função de ativação:')
print('função\t\t\tn° neurônios\t\t\tAcurácia')
print('-'*68)
for i, idx in enumerate(min_idx):
    print(f'{act_funs[i]+"    "*(i>1)}\t\t   {idx+1}\t\t\t {mses[i][idx]}')
```

```
Maiores acurácias médios para cada função de ativação:
função                  n° neurônios                      Acurácia
--------------------------------------------------------------------
identity                   17                     0.8543209876543211
logistic                   22                     0.8617283950617283
tanh                       22                     0.8555555555555555
relu                       18                     0.845679012345679
```

Por meio dos resultados obtidos, pode-se notar que a função de ativação identidade obteve comportamento muito melhor para o problema de classificação do que o problema de regressão, obtendo neste conjunto de dados, melhor acurácia média de 85.4%, com 17 neurônios na camada intermediária. As funções de ativação sigmoidais unipolar e tangente hiperbólica obtiveram melhores acurácias médias para o mesmo número de neurônios, 22, porém a função logística obteve uma acurácia melhor, de 86.2%, em comparação com a acurácia obtida por tanh: 85.6%. Por último, a função de ativação ReLU obteve a pior das acurácias, de valor 84.6% com 18 neurônios.

Em suma, nota-se a importância de um conjunto de validação cruzada para que se defina o melhor número de neurônios de uma rede, seu parâmetro de regularização e função de ativação das camadas.