Nome: Samuel Felipe dos Santos

PROJETO 1 - EXPERIMENTO MLP

Relatório realizado para disciplina de Redes Neurais, contendo experimentos realizados com a rede SOM. O relatório foi desenvolvido fazendo uso da ferramenta Jupyter Notebook, e pode ser melhor visualizado em https://github.com/felipe-samuel/NeuralNetworksProjects/blob/master/project_01-mlp_experiments.ipynb (https://github.com/felipe-samuel/NeuralNetworksProjects/blob/master/project_01-mlp_experiments.ipynb)

Objetivos

Utilizar a rede MLP para:

- Realizar testes com 3(ou mais) datasets selecionados do repositório da UCI para várias configuração da rede;
- Ilustrar graficamente o processo de aprendizagem pela redução do erro quadrático médio;

Considerar:

- Impacto do termo de momentum
- Impacto da regularização L2

Metodologia

Nessa seção será explicada a metodologia experimental utilizada para realizar os experimentos.

Bibliotecas utilizadas

Foi utilizada a linguagem de programação Python 3.0 em conjunto com a biblioteca Sklearn.

```
import numpy as np
from sklearn.datasets import load_iris, load_breast_cancer, fetch_california_housing
from sklearn.model_selection import StratifiedShuffleSplit, GridSearchCV, learning_curve
from sklearn.preprocessing import StandardScaler, LabelEncoder
from sklearn.neural_network import MLPClassifier, MLPRegressor
from sklearn.metrics import log_loss, mean_squared_error
import matplotlib.pyplot as plt
import pandas as pd
import dill
from IPython.display import HTML
```

Datasets

Foram escolhidos os seguintes três datasets para avaliação dos resultados:

- Iris Dataset: consiste de 50 amostras de cada uma das 3 espécies da flor iris, que esta disponivel no pacote Sklearn:
- Breast Cancer Wisconsin (Diagnostic) Dataset: características computadas a partir de imagens biomédicas, e
 utilizadas para classificar se há câncer de mama, mais detalhes podem ser encontrados em
 https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Breast+Cancer+Wisconsin+(Diagnostic) (https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets
 /Breast+Cancer+Wisconsin+(Diagnostic)). Foi utilizada a versão disponibilizada no pacote Sklearn;
- Alcohol QCM Sensor Dataset Dataset: consiste de amostras de álcool que podem ser classificadas em 5 tipos (1-octanol, 1-propanol, 2-butanol, 2-propanol, 1-isobutanol). Os atributos de cada amostra consistem de medições realizadas por sensores com diferentes configurações, que atribuidas sobre a amostra no formato de gás em diferentes concentrações. Foi utilizado a versão do dataset disponível em https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets//alcohol+QCM+Sensor+Dataset), onde se encontram mais detalhes.

Pré-processamento dos dados

Inicialmente os dados são divididos em conjuntos de Treinamento (80% dos dados) e Validação (20%) de maneira estratificada, mantendo a proporção de classes do dataset original em cada conjunto.

```
def trainValSplit( X, Y, testSize=0.2, randomState=0 ):
    sss = StratifiedShuffleSplit(n_splits=1, test_size=testSize, random_state=randomState
)
    splits = sss.split(X, Y)
    return splits
```

Os dados então são normalizados utilizando a função <u>StandardScaler (https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.preprocessing.StandardScaler.html)</u> da biblioteca Sklearn, que realiza a seguinte operação:

```
z = (x - u) / s
```

Onde x é uma amostra, u é a média das amostras do treino e s o desvio padrão do treino.

```
def Normalize( X, train_index ):
    scaler = StandardScaler()
    scaler.fit(X[train_index])
    X = scaler.transform(X)
    return X
```

Otimização de Hiperparâmetros da Rede

Foi utilizado a rede MLPClassifier (https://scikit-learn.org/stable/modules/generated

/sklearn.neural_network.MLPClassifier.html) que utiliza a perda de entropia cruzada (Cross-entropy loss) (https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.log_loss.html), sendo fixado o otimizador SGD. Foi utilizada a técnica de Grid Search (https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model_selection.GridSearchCV.html) disponível na biblioteca Sklearn, que realiza uma pesquisa exaustiva sobre os valores de hiperparâmetors especificados.

Foram otimizados os seguintes hiperparâmetros:

- Camadas Ocultas: foram testadas 1 e 2 camadas ocultas, podendo cada uma conter 25, 50, 75 ou 100 neuronios;
- alpha: parâmetro que indica a penalidade L2 (termo de regularização), sendo observado os valores de 0.0001, 0.00001, 0.000001, 0.0000001 e 0.0;
- Taxa de aprendizado inicial: Foram usados os valores de 0.0001, 0.0005, 0.001, 0.005 e 0.01;
- Decaimento da taxa de aprendizado: o decaimento dos pesos foi realizado de três maneiras:
 - (1) Constante: onde não há decaimento;
 - (2) Invscaling: a cada espaço de tempo t a taxa de aprendizado é dividida por pow(t, 0.5);
 - (3) Adaptativa: a taxa de aprendizado é dividida por 5 quando o perda na validação não mehora por duas épocas consecutivas.
- Momentum: foram utilizados os valores de 0.0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9 e 1.0.

Análise dos hiperperâmetros de Momentum e Regularização L2

Após serem encontrados os melhores hiperparâmetros para rede, esses são fixados, variando apenas o momentum e o alpha (termo da regularização L2), um de cada vez, sendo possível assim analisar o impacto de cada um.

É observada a função de perda e a acurácia, para o conjunto de treinamento e validação ao final de cada época. O processo é repetido 10 vezes, sendo mostrado no final um gráfico com a média.

```
tables = []
    if regression == False:
       model = MLPClassifier
       model = MLPRegressor
    for p in parameters[varying parameter]:
       dfs = []
       for i in range(10):
           if varving parameter == 'momentum':
               mlp = model( hidden layer sizes=hidden layer sizes, activation='relu', so
lver='sgd', alpha=alpha,
                           learning rate= 'constant', learning rate init=lri, momentum=
p, max iter=1, warm start=True)
           elif varying_parameter == 'alpha':
               mlp = model( hidden_layer_sizes=(100,100), activation='relu', solver='sgd
', alpha=p,
                           learning_rate= 'constant', learning_rate_init=lri, momentum=
momentum, max iter=1, warm_start=True)
           else:
               raise ValueError('input error')
           run_table = []
           for epoch in range(200):
               if regression == False:
                  mlp.partial_fit(x, y, classes = classes)
               else:
                   mlp.partial_fit(x, y)
               if regression == False:
                   pred = mlp.predict_proba(x_val)
                   loss_val = log_loss(y_val, pred)
                   pred = mlp.predict(x_val)
                   loss_val = mean_squared_error(y_val, pred)
               loss = mlp.loss
               score = mlp.score(x, y)
               score_val = mlp.score(x_val, y_val)
               run table += [[epoch, loss, loss val, score, score val]]
           dfs += [pd.DataFrame( data=run table, columns=['epochs', 'loss', 'loss val',
'acc', 'acc val'] )]
       tables += [pd.Panel({n: df for n, df in enumerate(dfs)}).mean(axis=0)]
    return tables
```

```
def plot learning curve(tables, params, colors, param name):
   plt.rcParams['figure.figsize'] = [15, 10]
   f, axarr = plt.subplots(2, 2)
   fig = plt.figure(figsize=(10,5))
   train_val = ['treino', 'validação']
   for i in range(len(tables)):
       axarr[0,0].plot(tables[i]['epochs'], tables[i]['acc'], color=colors[i], label = p
aram name+'='+str(params[i]) )
   axarr[0,0].set title('Treinamento', fontsize=25)
   axarr[0,0].set xlabel('épocas')
   axarr[0,0].set_ylabel('acurácia', fontsize=25)
   for i in range(len(tables)):
        axarr[0,1].plot(tables[i]['epochs'], tables[i]['acc val'], color=colors[i], label
= param name+'='+str(params[i]) )
   axarr[0,1].set title('Validação', fontsize=25)
   axarr[0,1].set xlabel('épocas')
   for i in range(len(tables)):
       axarr[1,0].plot(tables[i]['epochs'], tables[i]['loss'], color=colors[i], label =
param_name+'='+str(params[i]) )
   axarr[1,0].set_xlabel('épocas')
   axarr[1,0].set_ylabel('perda', fontsize=25)
   for i in range(len(tables)):
       axarr[1,1].plot(tables[i]['epochs'], tables[i]['loss_val'], color=colors[i], labe
l = param name+'='+str(params[i]) )
   axarr[1,1].set_xlabel('épocas')
   f.subplots_adjust(hspace=0.3)
   axarr[0,0].legend(loc='upper left', bbox to anchor=(-0.1, 1.3), ncol=7)
```

Resultados

Dataset 1: Iris

```
def loadIris():
    iris = load_iris()
    return iris.data, iris.target
iris_X, iris_Y = loadIris()
```

```
iris_train_index, iris_val_index = next(trainValSplit(iris_X,iris_Y))
```

```
scaler = StandardScaler()
scaler.fit(iris_X[iris_train_index])
iris_X = scaler.transform(iris_X)
```

```
mlp = MLPClassifier()
gs = GridSearchCV(mlp, parameters, cv=trainValSplit(iris_X,iris_Y), n_jobs=8, verbose=10)
gs.fit(iris_X, iris_Y)
```

Pode ser observado abaixo as 10 mehores configurações da rede encontradas pelo Grid Search, podendo ser obeservado que todas obtiveram 100% de acurácia no conjunto de validação e acurácias altas no de treino. De forma geral os melhores resultados foram obtidos com o parâmetro o maior valor testado para o parâmetro da regularição L2 testado, as camadas ocultas com maior quantidade de neurônios e os 2 valores de momentum mais altos.

As taxas de aprendizado de 0.001, 0.005 e 0.01 aprezentaram resultados similares, assim como os metodos de decaimento constante e adaptativo.

Esses resultados ocorreram possivelmente devido a se tratar de um dataset fácil, desse modo, a maioria das configurações do modelo obtiveram resultados satisfatórios.

```
iris_results_table = pd.read_csv('results/MLP/iris_grid_search_sample.csv')
iris_results_table
```

	alpha	Camadas	Decaimento	lr	Momentum	Acc Validação	Acc Treino
0	0.0001	(100, 100)	constant	0.001	1.0	1	0.975000
1	0.0001	(100, 100)	constant	0.010	0.9	1	0.975000
2	0.0001	(100, 100)	adaptive	0.010	0.9	1	0.975000
3	0.0001	(100, 75)	constant	0.005	0.9	1	0.950000
4	0.0001	(100, 75)	constant	0.010	0.9	1	0.966667
5	0.0001	(100, 50)	constant	0.001	1.0	1	0.958333
6	0.0001	(100, 50)	constant	0.010	0.9	1	0.966667
7	0.0001	(100, 50)	adaptive	0.010	0.9	1	0.966667
8	0.0001	(100, 25)	constant	0.010	0.9	1	0.966667
9	0.0001	(100, 25)	adaptive	0.005	1.0	1	0.950000

Para a realização das próximas etapas, foi utilizado a rede com os seguintes parâmetros como base.

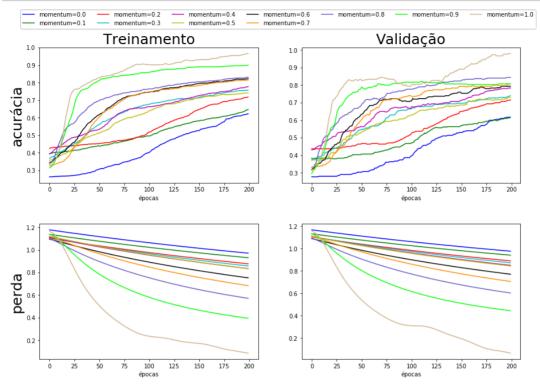
```
iris_results_table.loc[[0]]
```

	alpha	Camadas	Decaimento	lr	Momentum	Acc Validação	Acc Treino
0	0.0001	(100, 100)	constant	0.001	1.0	1	0.975

Abaixo pode ser observada a **curva de aprendizado do Momentum para o melhor modelo encontrado**. De forma geral, é possível observar que quanto maior o valore de momentum, mais rápido a rede converge para uma perda menor e uma acurácia mais alta.

```
m_tables = generate_learning_curve(iris_X[iris_train_index], iris_Y[iris_train_index], ir
is_X[iris_val_index], iris_Y[iris_val_index], 'momentum')
```

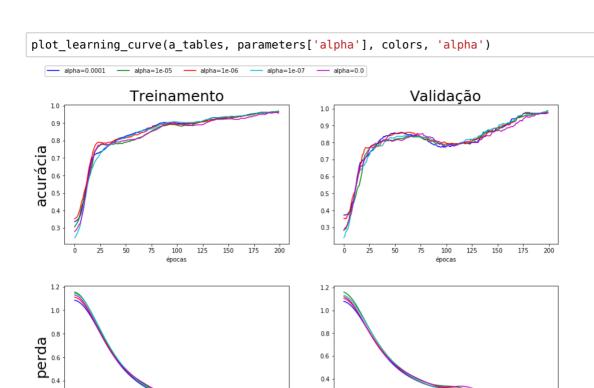




<Figure size 720x360 with 0 Axes>

A curva de aprendizado da Regularização L2 para o melhor modelo encontrado representada a seguir mostra que não houve grande impacto do termo de regularização L2 (alpha) nos resultados.

```
a_tables = generate_learning_curve(iris_X[iris_train_index], iris_Y[iris_train_index], ir
is_X[iris_val_index], iris_Y[iris_val_index], 'alpha')
```



<Figure size 720x360 with 0 Axes>

0.2

Dataset 2: breast cancer wisconsin dataset

100

```
def loadBCWD():
    BCWD = load_breast_cancer()
    return BCWD.data, BCWD.target
BCWD_X, BCWD_Y = loadBCWD()
```

0.2

175

125 150

```
BCWD_train_index, BCWD_val_index = next(trainValSplit(BCWD_X,BCWD_Y))
```

```
scaler = StandardScaler()
scaler.fit(BCWD_X[BCWD_train_index])
BCWD_X = scaler.transform(BCWD_X)
```

```
mlp = MLPClassifier()
gs = GridSearchCV(mlp, parameters, cv=trainValSplit(BCWD_X,BCWD_Y), n_jobs=-1, verbose=10
)
gs.fit(BCWD_X, BCWD_Y)
```

```
BCWD_results =pd.DataFrame.from_dict(gs.cv_results_)
```

```
export\_csv = BCWD\_results.to\_csv(r'results/MLP/BCWD\_grid\_search.csv', index = None, heade r=True)
```

A tabela abaixo apresenta as configurações da rede com as melhores acurácias no conjunto de validação de de treinamento, onde, assim como no dataset anterior, foram obtidas acurácias altas (98,2456% na validação e próximo de 100% no treino). O parametors alpha e a quantidade de camadas não aparentam não afetar muito o resultado, já que foram obtidos resultados com desempenho bom com a maioria das combinações desses parâmetros. O decaimento constante e adaptativo se sairam melhor, assim como taxas de aprendizado entre 0.01 e 0.005 e momentum alto (entre 0.9 e 1).

BCWD_results_table = pd.read_csv('results/MLP/BCWD_grid_search_sample.csv')
BCWD_results_table

	alpha	Camadas	Decaimento	lr	Momentum	Acc Validação	Acc Treino
0	1.000000e-04	(50, 100)	constant	0.010	0.9	0.982456	0.997802
1	0.000000e+00	(25, 25)	constant	0.010	0.9	0.982456	0.997802
2	1.000000e-05	(75, 100)	adaptive	0.010	1.0	0.982456	0.995604
3	1.000000e-06	(25, 75)	constant	0.010	0.9	0.982456	0.995604
4	0.000000e+00	(100, 25)	constant	0.005	0.9	0.982456	0.995604
5	0.000000e+00	(75, 75)	constant	0.010	0.8	0.982456	0.995604
6	1.000000e-04	(25, 75)	constant	0.010	0.8	0.982456	0.993407
7	1.000000e-04	(25, 75)	adaptive	0.010	0.7	0.982456	0.993407
8	1.000000e-07	25	adaptive	0.010	0.9	0.982456	0.993407
9	1.000000e-07	(50, 100)	adaptive	0.005	0.9	0.982456	0.993407

Para os experimentos variando o Momentum e o alpha, será considerada a configuração da rede a seguir como base.

BCWD_results_table.loc[[0]]

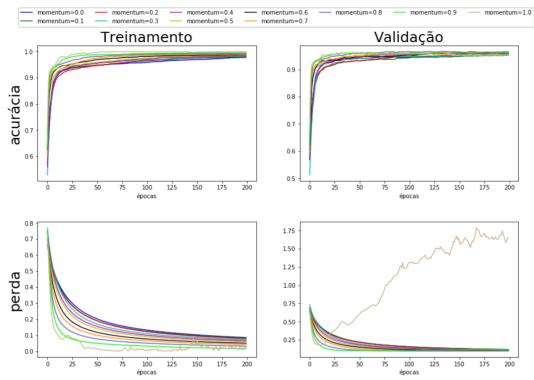
	alpha	Camadas	Decaimento	lr	Momentum	Acc Validação	Acc Treino
0	0.0001	(50, 100)	constant	0.01	0.9	0.982456	0.997802

A curva de aprendizado do Momentum para o melhor modelo encontrado a seguir. Nela pode ser observado que no geral os resultados foram similares para diferentes valores de momentum, no entanto, os valores mais altos foram levemente melhores que os mais baixos.

Olhando para função de perda no entanto, e possível verificar que para o valor mais alto possível de momentum (1.0) a perda aumenta muito no conjunto de treinamento indicando que pode estar ocorrendo sobreajuste.

 $\begin{tabular}{ll} BCWD_m_tables = generate_learning_curve(BCWD_X[BCWD_train_index], BCWD_Y[BCWD_train_index], BCWD_X[BCWD_val_index], bCWD_Y[BCWD_val_index], bCWD_val_index], bCWD_val_inde$

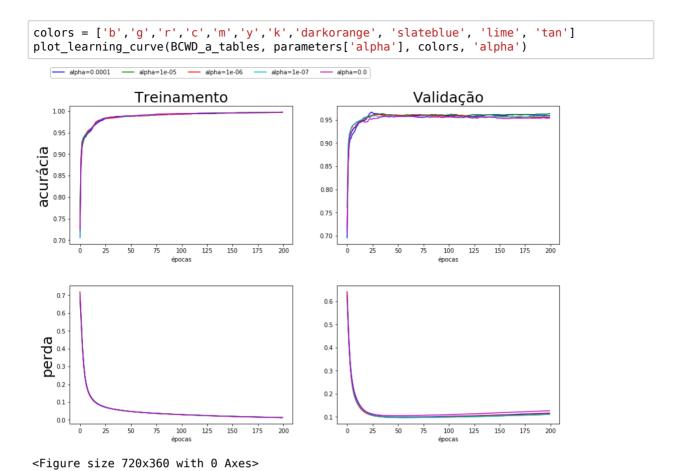




<Figure size 720x360 with 0 Axes>

Já para a **curva de aprendizado da Normalização L2 para o melhor modelo encontrado**, assim como no dataset Iris, o alpha não aparenta ter muita influência no resultado.

BCWD_a_tables = generate_learning_curve(BCWD_X[BCWD_train_index], BCWD_Y[BCWD_train_index], BCWD_X[BCWD_val_index], BCWD_Y[BCWD_val_index], 'alpha', classes = [0,1], alpha=0.0001, momentum=0.9, hidden_layer_sizes=(50,100), lri=0.01)



Dataset 3: Alcohol QCM Sensor Dataset Data Set

```
def loadQCM():
    QCM3 = pd.read csv('datasets/QCM Sensor Alcohol Dataset/QCM3.csv', sep=';', header=0
)
    QCM3['MIP'] = 1.0
    QCM3['NP'] = 1.0
    QCM6 = pd.read csv('datasets/QCM Sensor Alcohol Dataset/QCM6.csv', sep=';', header=0
)
    QCM6['MIP'] = 1.0
    0CM6['NP'] = 0.0
    QCM7 = pd.read csv('datasets/QCM Sensor Alcohol Dataset/QCM7.csv', sep=';', header=0
    QCM7['MIP'] = 1.0
    QCM7['NP'] = 0.5
    QCM10 = pd.read csv('datasets/QCM Sensor Alcohol Dataset/QCM10.csv', sep=';', header=
0)
    QCM10['MIP'] = 1.0
    QCM10['NP'] = 2.0
    QCM12 = pd.read csv('datasets/QCM Sensor Alcohol Dataset/QCM12.csv', sep=';', header=
    QCM12['MIP'] = 0.0
    QCM12['NP'] = 1.0
    QCM = pd.concat([QCM3,QCM6,QCM7,QCM10,QCM12], ignore index=True)
    QCM_X = np.concatenate([np.array(QCM)[:,0:10], np.array(QCM)[:,15:17]], axis=1)
    QCM_Y_OneHot = np.array(QCM)[:,10:15]
    QCM_Y = np.zeros(len(QCM_Y_0neHot))
    for i in range(len(QCM_Y_OneHot)):
        for j in range(len(QCM_Y_OneHot[i])):
            if QCM_Y_OneHot[i, j] == 1:
                QC\overline{M}_{\overline{Y}}[i] = j
                break
    return QCM X, QCM Y
QCM X, QCM Y = loadQCM()
```

```
QCM_train_index, QCM_val_index = next(trainValSplit(QCM_X, QCM_Y))
```

```
scaler = StandardScaler()
scaler.fit(QCM_X[QCM_train_index])
QCM_X = scaler.transform(QCM_X)
```

```
mlp = MLPClassifier()
gs = GridSearchCV(mlp, parameters, cv=trainValSplit(QCM_X,QCM_Y), n_jobs=-1, verbose=10)
gs.fit(QCM_X, QCM_Y)
```

```
QCM_results =pd.DataFrame.from_dict(gs.cv_results_)
```

```
\label{eq:csv} \begin{split} & export\_csv = QCM\_results.to\_csv(r'results/MLP/QCM\_grid\_search.csv', index = None, header= \\ & True) \end{split}
```

A tabela abaixo mostra os melhores resultados encontrados pelo Grid Search. Novamente foram encontrados diversas configurações da rede que atingiram o resultado máximo de acurácia para o treinamento e validação, sendo possível verificar que até mesmo a rede de uma camada obteve o resultado máximo.

QCM_results_table = pd.read_csv('results/MLP/QCM_grid_search_sample.csv')
QCM_results_table

	alpha	Camadas	Decaimento	lr	momentum	Acc Validação	Acc Treino
0	0.0001	100	constant	0.005	1	1	1
1	0.0001	50	constant	0.010	1	1	1
2	0.0001	(100, 75)	constant	0.005	1	1	1
3	0.0001	(100, 75)	adaptive	0.005	1	1	1
4	0.0001	(100, 50)	adaptive	0.005	1	1	1
5	0.0001	(75, 100)	constant	0.010	1	1	1
6	0.0001	(75, 75)	constant	0.005	1	1	1
7	0.0001	(75, 50)	adaptive	0.005	1	1	1
8	0.0001	(75, 50)	adaptive	0.010	1	1	1
9	0.0001	(50, 75)	constant	0.010	1	1	1

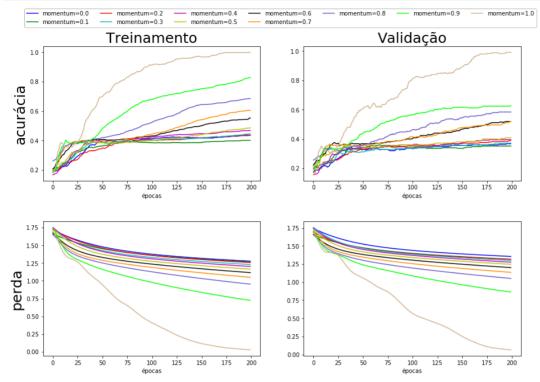
Para os demais experimentos nesse dataset foi considerado a seguinte configuração da rede como base.

QCM_results_table.loc[[0]]

	alpha	Camadas	Decaimento	lr	momentum	Acc Validação	Acc Treino
0	0.0001	100	constant	0.005	1	1	1

A **curva de aprendizado do Momentum para o melhor modelo encontrado** é apresentada a seguir, podendo ser observado que o momentum teve uma grande influência no resultado, mostrando aumentos de desempenho significativos quando o valor desse era aumento.

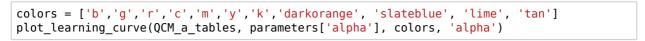


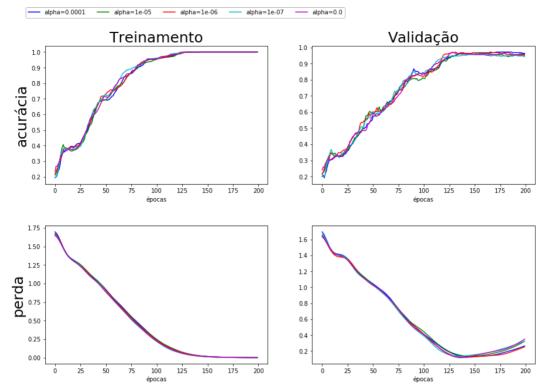


<Figure size 720x360 with 0 Axes>

A curva de aprendizado da normalização L2 para o melhor modelo encontrado pode ser vista a seguir, onde novamente não foi obtida grandes diferenção nos resultados para diferentes valores de alpha.

QCM_a_tables = generate_learning_curve(QCM_X[QCM_train_index], QCM_Y[QCM_train_index], QCM_X[QCM_val_index], QCM_Y[QCM_val_index], 'alpha', classes = [0,1,2,3,4], alpha=0.0001, h idden_layer_sizes=100, lri=0.005, momentum=1)





<Figure size 720x360 with 0 Axes>

Conclusão

Pode ser observado que para a maioria dos experimentos foi possível obter acurácia alta tanto para o conjunto de treinamento quanto o de validação para diversas configurações diferentes da rede. Acredito que isso se deve ao datasets escolhidos serem fáceis para o método sendo utilizado. Por esse motivo, alterações nos parâmetros como alpha e a quantidade de neurônios e camadas não apresentaram grandes diferenças de desempenho na rede.

O aumento do momentum para os datasets Iris Dataset e o Alcohol QCM Sensor apresentou melhoria considerável no desempenho da rede, acredito que isso ocorra devido a pequena quantidade de dados nesses datasets (150 e 125 amostras, respectivamente), onde valores mais altos de momentum fazem com que os pesos sejam atualizados de maneira mais rápida, e dessa forma, conseguindo chegar em valores altos de acurácia rápido, mesmo com poucos dados.

Pode ser observado que para a dataset Breast Cancer Wisconsin (Diagnostic), que é maior, possuindo 569 exemplos, o momentum teve uma importância um pouco menor apresentando resultados mais similares para diferentes vaores de momentum, mas ainda sim, valores mais altos se sairam melhor, com exceção do momentum=1.0 que apresentou sobre ajuste.