

Lista 3 - Fundamentos em Redes Neurais e Aprendizagem Estatística

Lorran de Araújo Durães Soares*

2024

Introdução

Este documento refere-se à elaboração da terceira lista de exercícios da disciplina de Fundamentos de Redes Neurais e Aprendizagem Estatística, promovida pelo Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC) sob a orientação do professor Gilson Antonio Giraldi. A lista consiste em três questões, que serão apresentadas neste formato de artigo, detalhando o passo a passo necessário para a resolução e implementação de cada uma. Todas as questões foram implementadas na linguagem Python, utilizando notebooks do tipo iPynb e empregando bibliotecas como **Keras** (CHOLLET et al., 2024), **Pandas** (TEAM, 2024b), **Matplotlib** (TEAM, 2024a), **Numpy** (DEVELOPERS, 2024a), **Scikit-learn** (DEVELOPERS, 2024b), **OpenCV** (OpenCV Team, 2024), **Seaborn** (WASKOM et al., 2024) e **PIL** (CONTRIBUTORS, 2024). As implementações de todas as questões serão disponibilizadas ao final da explicação de cada uma delas neste documento.

Para a realização de todas as questões, foi utilizada a base de imagens CIFAR-10, fornecida pelo **Keras**. Esse conjunto de dados é composto por 60.000 imagens coloridas de dimensão 32x32 pixels, distribuídas em 10 classes. Entretanto, foi realizada uma filtragem para trabalhar com a classificação de apenas duas classes de imagens, aviões e carros, reduzindo o conjunto para 12.000 imagens. Algumas dessas imagens são ilustradas na Figura 1. Além disso, devido a limitações de hardware, todos os exercícios foram realizados utilizando apenas 1.200 das 12.000 imagens.

*lorranspbr@gmail.com



Figura 1 – Amostra do conjunto de dados

A opção de usar um mesmo banco de dados em todas as questões se objetivou em realizar uma comparação entre as diferentes estratégias de classificação que cada exercício pede.

Pré-processamento

Para a realização dos exercícios 1 e 3, foi realizado um pré-processamento dos dados, necessário para a execução das operações nessas questões e para obter uma melhor acurácia nos resultados.

As seguintes operações foram realizadas:

- Conversão para escala de cinza: realizada através da biblioteca **OpenCV**, utilizando a função **cvtColor**;
- Vetorização das imagens: realizada através do método **reshape** da biblioteca **Numpy**;
- Normalização das features: realizada através da ferramenta **StandardScaler** da biblioteca **Scikit-Learn**. O **StandardScaler** ajusta cada feature do conjunto de dados de acordo com a fórmula:

$$z = \frac{x - \mu}{\sigma}$$

Onde:

- x é o valor original da feature.
- μ é a média dos valores da feature.
- σ é o desvio padrão da feature.

Além disso, em todas as questões foi realizado o cálculo da quantidade de imagens de cada classe no conjunto de treinamento, com o intuito de observar possíveis desbalanceamentos de dados. Como mostra a Figura 2, as duas classes tinham números de dados bem parecidos, não sendo necessário, portanto, a exclusão ou adição de novos dados no conjunto de treinamento para a realização dos exercícios.

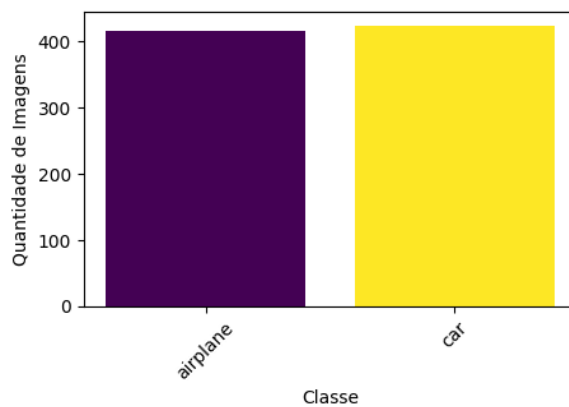


Figura 2 – Histograma da quantidade de imagens por classe no conjunto de treinamento

Questão 1

1. Considere um banco de dados de imagens e um problema de classificação. Aplique validação cruzada leave-one-out multi-fold explicada na seção 8.5 de (GIRALDI, 2024), com $K = 4$, e SVM como segue:

- SVM Linear não separável com espaço de características obtido através do KPCA.
- SVM Kernel não separável com espaço de características obtido através do PCA.
- Compare os resultados dos itens (a) e (b).

Para a realização deste exercício, especificamente para o proposto na letra a, foi inicialmente realizado o cálculo do KPCA através da biblioteca **Scikit-Learn** com a função **KernelPCA**. Primeiramente, foi escolhido um kernel polinomial para o cálculo da matriz KPCA com todas as componentes, para posteriormente selecionar as principais componentes. A projeção do conjunto na base KPCA está ilustrada na Figura 3.

Após o cálculo, foi plotado o gráfico da variância explicada cumulativa, mostrado na Figura 4. Para a escolha das componentes principais, utilizando a biblioteca **Numpy** com a função **argmax**, foi calculado o número de componentes necessário para explicar no mínimo 95% da variância dos dados, resultando em 435 componentes. A partir disso, a matriz KPCA calculada anteriormente foi reduzida para este número de componentes.

Utilizando então um $K\text{-fold} = 4$, através da função **SVC** da biblioteca **Scikit-Learn**, foi construído o SVM, com o objetivo de obter as acurácias presentes na Tabela 1 no conjunto de validação e de testes.

Conjunto	Fold 1	Fold 2	Fold 3	Fold 4	Média
Validação	0.60	0.69	0.57	0.60	0.615
Teste	0.72	0.74	0.71	0.72	0.7225

Tabela 1 – Acurácia da classificação do SVM Linear com o KPCA

A fim de promover uma visualização gráfica de como seria o plano de separação para apenas as duas primeiras componentes obtidas pelo cálculo do KPCA, ao realizar o treinamento do SVM

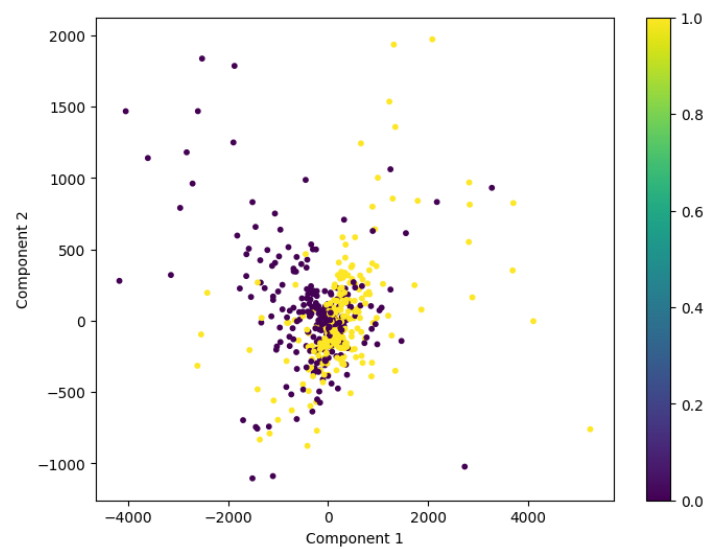


Figura 3 – Projeção do conjunto de treinamento na base obtida pelo KPCA

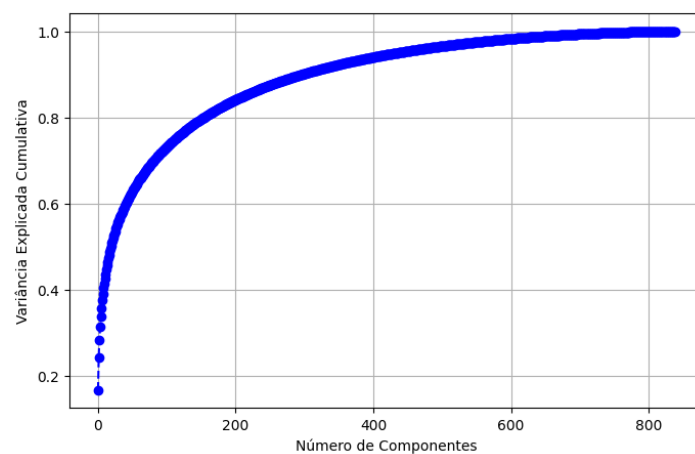


Figura 4 – Gráfico da variância explicada cumulativa por componentes KPCA

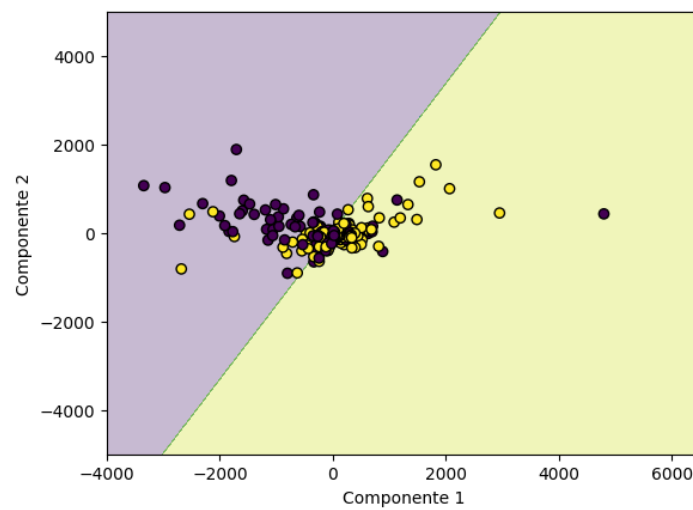


Figura 5 – Reta de decisão do SVM Linear com KPCA

linear, obteve-se a reta de separação mostrada na Figura 5, juntamente com a projeção do conjunto de treinamento nessas duas direções. Neste caso, a acurácia média obtida foi de 61%.

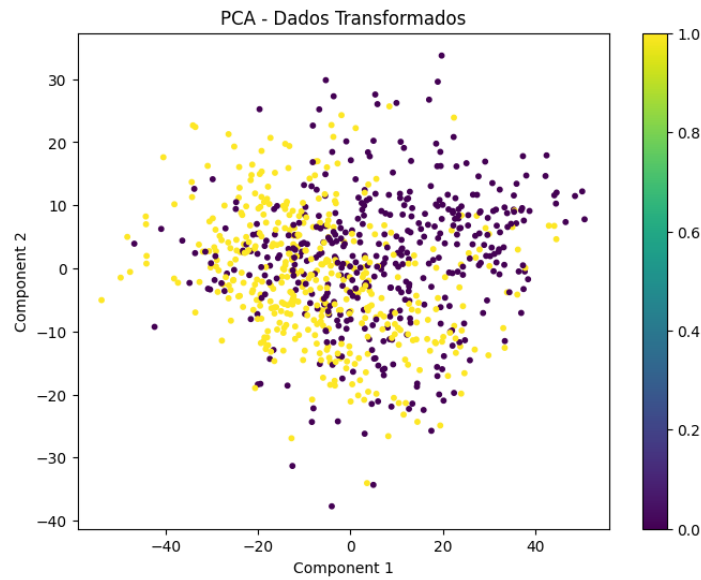


Figura 6 – Projeção do conjunto de treinamento na base PCA

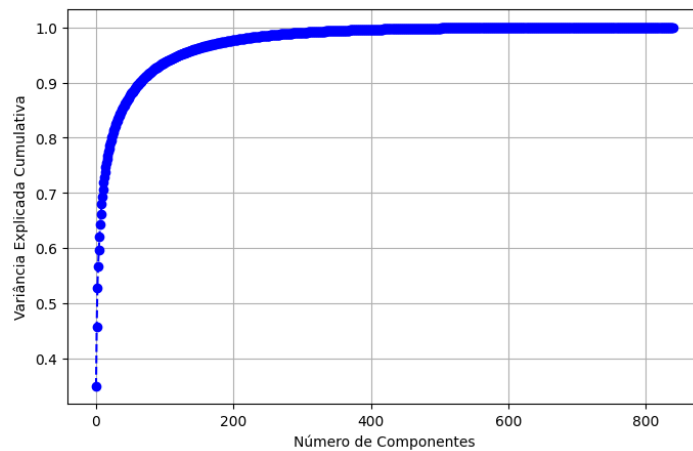


Figura 7 – Gráfico da variância explicada cumulativa para as componentes do PCA

De maneira parecida como feito anteriormente para o item a, agora especificamente referente ao item b, foi inicialmente realizado o cálculo do PCA utilizando a biblioteca **Scikit-Learn** com a função **PCA**. Neste primeiro passo, foram calculadas todas as componentes principais, permitindo posteriormente a seleção das mais relevantes. A projeção do conjunto de dados na base PCA está representada na Figura 6.

Após o cálculo das componentes principais, foi gerado o gráfico da variância explicada cumulativa, conforme ilustrado na Figura 7. Para identificar as componentes principais, foi utilizada a função **argmax** da biblioteca **Numpy**, determinando o número de componentes necessário para explicar pelo menos 95% da variância dos dados, resultando em 123 componentes. Com isso, a matriz PCA foi reduzida para conter apenas essas componentes.

Em seguida, foi aplicado um **K-fold** com valor 4, e, utilizando a função **SVC** da biblioteca

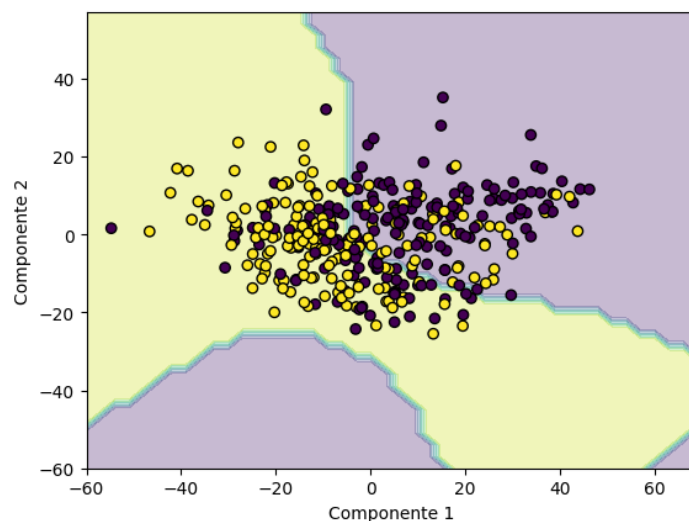


Figura 8 – Curva de decisão do SVM Polinomial com PCA

Scikit-Learn, foi construído um SVM com kernel polinomial, com o objetivo de obter as acurácias mostradas na Tabela 2 para os conjuntos de validação e de teste.

Conjunto	Fold 1	Fold 2	Fold 3	Fold 4	Média
Validação	0.60	0.69	0.57	0.60	0.615
Teste	0.72	0.74	0.71	0.72	0.7225

Tabela 2 – Acurácia da classificação do SVM Polinomial com o PCA

Com o intuito de visualizar graficamente o plano de separação utilizando apenas as duas primeiras componentes obtidas pelo PCA, foi treinado um SVM polinomial, e a curva de separação foi gerada, como mostrado na Figura 8. Essa figura também mostra a projeção do conjunto de treinamento nas duas primeiras direções principais. Nesse cenário, a acurácia média alcançada foi de 61%.

Questão 2

2. Considere um banco de dados e um problema de classificação. Aplique a validação cruzada multi-fold leave-one-out explicada na seção 8.5 de (GIRALDI, 2024), com $K = 5$, para um modelo de CNN. Utilize as facilidades disponíveis em bibliotecas para a implementação de redes neurais, como Keras, TensorFlow, etc.

- Mostre a representação gráfica da evolução das etapas de treinamento e validação (ver Figura 8.8 da monografia do curso).
- Realize uma análise estatística do desempenho (seção 8.6) dos cinco modelos aplicados sobre a \mathbb{D}_{te} .

Para a realização deste exercício, foram utilizadas as 12.000 imagens da base de dados CIFAR-10, com o objetivo de disponibilizar mais dados para o treinamento. Além disso, para a determinação

dos hiperparâmetros da rede neural e do otimizador, foi realizado um *grid search* por meio da biblioteca **Scikit-Learn** utilizando a ferramenta **GridSearchCV**. Os hiperparâmetros considerados estão presentes na Tabela ???. Além disso, os valores correspondentes ao número de neurônios na camada CNN são dobrados, e na MLP são reduzidos pela metade, a cada camada subsequente.

Após este processo, foi determinado que os melhores hiperparâmetros são:

Para o treinamento do modelo, utilizando a biblioteca **Keras**, foi considerada uma estratégia de *early stopping* da classe **callbacks** da função **fit** para evitar o *overfitting*. Considerando a métrica de *val_accuracy* como a quantidade a ser monitorada no *early stopping*, temos que os seguintes parâmetros para este critério de parada foram considerados:

- *min_delta* = 0.01: quantidade mínima para ser considerada como melhoria;
- *patience* = 4: número de épocas sem melhorias a quais o treinamento será interrompido;
- *restore_best_weights* = True: restaura para a rede os pesos referentes à época com melhor resultado na métrica escolhida.

Então, foi realizado o treinamento do modelo usando $K - Fold = 5$, como determinado pela questão. A evolução da acurácia e da loss, para o treinamento e a validação, estão presentes nos gráficos das figuras ???. Através do gráfico, podemos perceber que a estratégia do *early stopping* funcionou em evitar o *overfitting*.

Com as ferramentas **confusion_matrix** e **classification_report**, presentes na biblioteca **Scikit-Learn**, podemos então calcular as métricas estatísticas descritas na seção 8.6 de (GIRALDI, 2024), obtendo então os resultados, sobre o conjunto de teste, presentes na tabela tal.

Como pode ser observado, o modelo de $K - fold$ igual a tal teve o melhor resultado, mas em média, os modelos tiveram acurácias parecidas.

Questão 3

Considere um banco de dados de imagens e um problema de classificação.

- Aplique a validação cruzada multi-fold leave-one-out explicada na seção 8.5 de (GIRALDI, 2024), com $K = 4$ usando LDA no espaço reduzido de PCA e realize a classificação sobre o conjunto de teste. Analise os resultados.*
- Aplique a validação cruzada multi-fold leave-one-out explicada na seção 8.5 de (GIRALDI, 2024), com $K = 4$ e SVM Kernel não separável com espaço de características obtido através da Análise Discriminante de Componentes Principais (DPCA).*
- Compare os resultados obtidos nos itens (a) e (b) acima.*

Referências

CHOLLET, F. et al. *Keras documentation*. 2024. <<https://keras.io/>>. Accessed: 2024-08-22. Citado na página 1.

CONTRIBUTORS, P. *Pillow documentation*. 2024. <<https://pillow.readthedocs.io/>>. Accessed: 2024-08-22. Citado na página 1.

DEVELOPERS, N. *NumPy documentation*. 2024. <<https://numpy.org/doc/>>. Accessed: 2024-08-22. Citado na página 1.

DEVELOPERS, S. learn. *Scikit-learn documentation*. 2024. <<https://scikit-learn.org/stable/>>. Accessed: 2024-08-22. Citado na página 1.

GIRALDI, G. A. Fundamentals of neural networks and statistical learning. 2024. Citado 3 vezes nas páginas 3, 7 e 8.

OpenCV Team. *OpenCV documentation*. 2024. <<https://opencv.org/>>. Accessed: 2024-08-22. Citado na página 1.

TEAM, M. D. *Matplotlib documentation*. 2024. <<https://matplotlib.org/stable/contents.html>>. Accessed: 2024-08-22. Citado na página 1.

TEAM, P. D. *Pandas documentation*. 2024. <<https://pandas.pydata.org/docs/>>. Accessed: 2024-08-22. Citado na página 1.

WASKOM, M. et al. *Seaborn: statistical data visualization*. 2024. <<https://seaborn.pydata.org/>>. Accessed: 2024-08-22. Citado na página 1.