

TP555 - AI/ML

Lista de Exercícios #6

k-NN

1. Neste exercício você irá calcular as distâncias entre as amostras no conjunto de treinamento e a amostra de validação para encontrar, dependendo do valor do hiperparâmetro k do algoritmo k-NN, a qual classe a amostra de validação pertence. Use a norma Euclidiana ($p = 2$ na distância de Minkowski) para calcular a distância entre os pontos do conjunto de treinamento e a amostra de validação. Em seguida, encontre a qual classe a amostra de validação pertence quando $k = 3$ e 5 , respectivamente. Após o cálculo das distâncias, use os métodos ***predict*** e ***kneighbors***, da classe ***KNeighborsClassifier*** para conferir os resultados que você encontrou.

(Dica: a documentação da classe ***KNeighborsClassifier*** pode ser encontrada neste link:

<https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.neighbors.KNeighborsClassifier.html>)

Conjunto de Treinamento			Amostra de Validação		
x1	x2	y	x1	x2	y
4	7	0	6	5	?
5	6	0			
3	4	0			
6	9	0			
6	4	1			
7	6	1			
8	0	1			
10	10	1			
12	3	1			

2. Crie um classificador para o conjunto de dados de dígitos escritos à mão da biblioteca SciKit-Learn que atinja mais de 97% de precisão no conjunto de validação. Em seguida:
 - a. Imprima a precisão atingida pelo classificador.
 - b. Plote a matriz de confusão.
 - c. Imprima as principais métricas de classificação com a função ***classification_report***.

(Dica: a classe **KNeighborsClassifier** funciona muito bem para esta tarefa, você só precisa encontrar bons valores para os hiperparâmetros **weights** and **n_neighbors** da classe **KNeighborsClassifier**).

(Dica: a documentação da classe **KNeighborsClassifier** pode ser encontrada em:

<https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.neighbors.KNeighborsClassifier.html>)

(Dica: utilize o **GridSearchCV** da biblioteca SciKit-Learn para encontrar os hiperparâmetros **weights** e **n_neighbors** que otimizam a performance do classificador k-NN. Utilize os valores 'uniform' e 'distance' para o hiperparâmetro **weights** e os valores 1, 2, 3, 4, 5, 10, 15, e 20 para o hiperparâmetro **n_neighbors**. O **GridSearchCV** pode demorar cerca de 1 hora para encontrar o conjunto ótimo de hiperparâmetros dependendo do hardware que você tem.).

Grid Search

Uma maneira de ajustar os hiperparâmetros de um algoritmo de ML seria ajustá-los manualmente, até encontrar uma combinação ótima de valores. Entretanto, isso seria um trabalho muito tedioso e talvez você não tenha tempo para explorar muitas combinações. Em vez disso, você pode utilizar o **GridSearchCV** da biblioteca Scikit-Learn para que ele faça a busca por você. Tudo o que você precisa fazer é dizer com quais hiperparâmetros você deseja experimentar e quais valores testar, e o **GridSearchCV** avaliará todas as combinações possíveis de valores de hiperparâmetros, usando validação cruzada. Abaixo segue um exemplo de como utilizar o **GridSearchCV**. Sua documentação pode ser encontrada em

https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model_selection.GridSearchCV.html

```
from sklearn import svm, datasets
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
iris = datasets.load_iris()
parameters = {'kernel':('linear', 'rbf'), 'C':[1, 10]}
svc = svm.SVC()
clf = GridSearchCV(svc, parameters, cv=5, verbose=3, n_jobs=-1)
clf.fit(iris.data, iris.target)
clf.best_params_
clf.best_score_
```

Exemplo de código-fonte para leitura da base de dados

```
# Import all necessary libraries.
import numpy as np
from sklearn.datasets import load_digits
from sklearn.model_selection import train_test_split

# Load the digits dataset.
digits = load_digits()
```

```

# Plot some digits from the data-set.
plt.figure(figsize=(20, 5))
for i in range(0,10):
    ax = plt.subplot(1, 10, i+1)
    plt.imshow(digits.images[i], cmap=plt.cm.gray_r, interpolation='nearest')
    plt.title('Training: %i' % digits.target[i])
plt.show()

# To apply a classifier on this data, we need to flatten the image, to turn the data in a
(samples, feature) matrix:
n_samples = len(digits.images)
data = digits.images.reshape((n_samples, -1))

# Split data into train and test subsets.
x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(data, digits.target, test_size=0.2,
shuffle=False)

```

3. Neste exercício você vai comparar a performance dos classificadores: GaussianNB, Logistic Regression e k-NN. Utilize o código abaixo para criar amostras pertencentes a 2 classes. As amostras serão divididas em 2 conjuntos, um para treinamento e outro para validação. Apenas para o caso do classificador k-NN, utilize **grid search** para encontrar os valores ótimos para os hiperparâmetros **weights** e **n_neighbors**. Utilize os valores 'uniform' e 'distance' para o hiperparâmetro **weights** e os valores 1, 2, 3, 4, 5, 10, 15, e 20 para o hiperparâmetro **n_neighbors**. Plote um único gráfico comparando a curva ROC e a área sob a curva de cada um dos classificadores. Analisando as curvas ROC e os valores das áreas sob as curvas, qual classificador apresenta a melhor performance?

```

# Import all necessary libraries.
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.datasets import make_classification

# generate 2 class dataset
x, y = make_classification(n_samples=10000, n_classes=2, weights=[0.9,0.5],
random_state=42)

# Split data into train and test subsets.
x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(x, y, test_size=0.8)

```

4. Utilize **grid search** para encontrar os hiperparâmetros ótimos da **regressão** com k-NN com o seguinte conjunto de dados:

```

# Import all necessary libraries.
import numpy as np
from sklearn.model_selection import train_test_split

N = 1000
np.random.seed(42)

```

```
x = np.sort(5 * np.random.rand(N, 1), axis=0)
y = np.sin(x).ravel()
y_orig = np.sin(x).ravel()

# Add noise to targets.
y += 0.1*np.random.randn(N)

# Split data into train and test subsets.
x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(x, y, test_size=0.2)
```

Utilize os seguintes hiperparâmetros com o **GridSearch**:

```
# Set parameters for grid-search.
param_grid = [{'weights': ['uniform', 'distance'], 'n_neighbors': [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 15, 20]}]
```

Em seguida faça o seguinte:

- A. Plote um gráfico que mostre os dados originais, os ruidosos e a aproximação encontrada com os parâmetros ótimos do k-NN regressor.
- B. Qual o erro quadrático médio (MSE) para o conjunto de validação/teste?