Universidade Tecnológica Federal do Paraná Especialização em Ciência de Dados Métodos e Modelos Avançados em Ciência de Dados "Atividade 06 - PSO"

Prof. Dr. Rafael Gomes Mantovani

Objetivo da atividade

Objetivo desta atividade é aplicar o algoritmo de Otimização de Enxame de Partículas (*Particle Swarm Optimization - PSO*) para resolver uma sub-tarefa do nosso *pipeline* de ciência de dados.

1 O que fazer?

Nessa atividade você pode optar por uma entre duas tarefas diferentes envolvendo o uso do PSO:

- realizar o ajuste de hiperparâmetros de um classificador (hyperparameter tuning); ou
- realizar seleção automatizada de atributos (feature selection).

1.1 Ajuste de Hiperparâmetros

Se a tarefa escolhida for o ajuste de hiperparâmetros:

- escolha um algoritmo para ter seus hiperparâmetros ajustados. Esse algoritmo deve ter pelo menos 3 hiperparâmetros ajustáveis (dimensões do problema);
- escolha um dataset, pode ser classificação ou regressão. Evite os datasets convencionais (iris, wine, glass, digits), e os datasets já usados nos notebooks da disciplina.
- Divida o dataset escolhido em partições de treino e teste. Divida os dados usando *holdout* na proporção 2/3 (treino) e 1/3 (teste).
- aplique o PSO para otimizar os hiperparâmetros do algoritmo usando o conjunto de treinamento;
- avalie os melhores hiperparâmetros encontrados pelo PSO no conjunto de teste;
- Repita o processo 5x, variando a amostragem na divisão treino/teste (. Os valores de hiperparâmetros encontrados são iguais?
- compare os resultados obtidos com a performance do mesmo algoritmo usando os seus hiperparâmetros default (sem ajuste) nas mesmas praticões de dados;
- faça experimentos com diferentes configurações do PSO, variando tamanho da população e número de iterações.

1.2 Seleção Automatizada de Atributos

Se a tarefa escolhida for a seleção de atributos:

- escolha um algoritmo de aprendizado de máquina;
- escolha um dataset, pode ser classificação ou regressão. Evite os datasets convencionais (iris, wine, glass, digits), e os datasets já usados nos notebooks da disciplina. **Priorize datasets com alta dimensionalidade, isto é, um número elevado de atributos** (>50).
- Divida o dataset escolhido em partições de treino e teste. Divida os dados usando *holdout* na proporção 2/3 (treino) e 1/3 (teste).

- aplique o PSO para encontrar o melhor subconjunto de atributos do dataset usando a partição de treinamento e o algoritmo selecionado;
- avalie o subconjunto de atributos encontrado pelo PSO na partição de teste. Quantos e quais atributos foram retornados pela otimização?
- Repita o processo 5x, variando a amostragem na divisão treino/teste. Os mesmos atributos foram retornados nas 5 execuções?
- compare os resultados obtidos com a performance do mesmo algoritmo usando o dataset original (com todas as features);
- faça experimentos com diferentes configurações do PSO, variando tamanho da população e número de iterações.

1.3 Relatório com análises experimentais

Independente da tarefa escolhida, elabore um relatório técnico (documento pequeno, .pdf, ou notebook) com os experimentos realizados. Explique as etapas/experimentos realizados e justifique suas escolhas. Apresente os resultados, de preferência por meio de figuras/gráficos/tabelas, e descreva conclusões críticas com base nestes resultados observados.

2 Opcinal: o que também pode fazer?

Se você conseguiu realizar uma das duas tarefas acima e ainda tem algum tempo para dedicar aos estudos:

- Implemente a sua versão do PSO;
- compare seu algoritmo com as implementações existentes;
- quão bem seus códigos foram em relação as ferramentas da literatura? Como seu código poderia ser futuramente melhorado?

3 Alguns links que podem ser úteis

- mlr3 Machine Learning in R: framework em R para implementação de soluções de Aprendizado de Máquina. Ele é bem completo, quase tudo já está implementado, o problema pode ser entender como encaixar cada peça. Link: https://mlr3.mlr-org.com;
- pso PSO in R: implementação do PSO no R. Link: https://cran.r-project.org/web/packages/pso/pso.pdf
- Exemplo de uso do PSO com R: https://rpubs.com/Argaadya/intro-PSO
- scikit learn Machine Learning in Python contapartida do mlr mas em Python. https://scikit-learn.org/stable/
- pyswarms: implementação do PSo no Python. Link:https://pypi.org/project/pyswarms/

Outros links:

- https://pyswarms.readthedocs.io/en/latest/examples/usecases/train_neural_network.html
- https://pyswarms.readthedocs.io/en/development/examples/feature_subset_selection.html
- https://machinelearningmastery.com/tune-machine-learning-algorithms-in-r/
- https://www.openml.org
- https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets.php