## Mini-projeto MLP (Multilayer Perceptron)

- Guilherme Morone (gma2)
- Lucca Morosini (lmg2)
- Mateus Elias (meap)
- Williams Santiago (wssf)

### Importando dependências e definindo funções úteis

```
import pandas as pd
from scipy.stats import pearsonr
import seaborn as sns
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.preprocessing import OrdinalEncoder, MinMaxScaler
from sklearn.model_selection import train_test_split, learning_curve
from sklearn.metrics import confusion_matrix, ConfusionMatrixDisplay, precision_score, recall_score, f1_score, accuracy_score, roc_auc_score, roc_curve, RocCurveDisplay, auc
from sklearn.neural_network import MLPClassifier
import numpy as np
```

```
In [2]: # Definindo o DataFrame com os resultados das predições dos modelos de cada Leva

def build_dataframe(results):
    df = pd.DataFrame(results)
    df['metric'] = (df.precision + df.recall + df.roc) / 3
    df = df.sort_values(by=['metric', 'precision', 'roc', 'recall'], ascending=False).reset_index(drop=True)
    return df
```

```
# Calculando o dicionário com os resultados das predições dos modelos por leva

def plot_model_stats(NCOLS, models, model_names, X_test, y_test, leva):
    fig, ax = plt.subplots(ncols=NCOLS, figsize=(20,4))
    fig.tight_layout()

    results = []

    for i in range(NCOLS):
        results += [plot_confusion_matrix(models[i], X_test, y_test, ax[i], model_names[i], leva)]
        ax[i].set_title(model_names[i])

    plt.show()
    return results
```

```
In [4]: # Define o yhat, a matriz de confusão e os scores necessários para um modelo de uma determinada leva
        def plot_confusion_matrix(model, X, y, ax, model_name, leva):
            y pred = model.predict(X)
            y_pred_prob = model.predict_proba(X)[:, 1]
            cm = confusion_matrix(y, y_pred, labels=model.classes_)
            display = ConfusionMatrixDisplay(confusion_matrix=cm, display_labels=model.classes_)
            display.plot(ax=ax)
            data = {
                'model_name': model_name,
                'model_shape': model.hidden_layer_sizes,
                'leva': leva,
                'precision': round(precision score(y, y pred), 4),
                'recall': round(recall_score(y, y_pred), 4),
                'roc': round(roc_auc_score(y, y_pred_prob), 4)
            }
            return data
```

## Lendo a base de dados e fazendo pré-processamento inicial

```
In [5]:
          base = pd.read_csv("../dataset/observations.csv")
 In [6]:
          base.shape
Out[6]: (310, 14)
          base.head()
Out[7]:
                                                                                                                                     Unnamed:
                 Col1
                          Col2
                                    Col3
                                              Col4
                                                         Col5
                                                                  Col6
                                                                           Col7
                                                                                   Col8
                                                                                           Col9
                                                                                                  Col10
                                                                                                             Col11
                                                                                                                     Col12 Class_att
          0 63.027817 22.552586 39.609117 40.475232
                                                    98.672917
                                                              -0.254400 0.744503
                                                                                12.5661
                                                                                        14.5386
                                                                                                15.30468
                                                                                                         -28.658501
                                                                                                                   43.5123 Abnormal
                                                                                                                                          NaN
          1 39.056951 10.060991 25.015378 28.995960 114.405425
                                                              4.564259 0.415186 12.8874 17.5323 16.78486
                                                                                                         -25.530607 16.1102 Abnormal
                                                                                                                                          NaN
                                                                                                                                     Prediction
                                                                                                                                     is done by
          2 68.832021 22.218482 50.092194 46.613539 105.985135 -3.530317 0.474889 26.8343 17.4861 16.65897
                                                                                                         -29.031888 19.2221 Abnormal
                                                                                                                                         using
                                                                                                                                        binary
                                                                                                                                     classificat...
          3 69.297008 24.652878 44.311238 44.644130 101.868495 11.211523 0.369345 23.5603 12.7074 11.42447 -30.470246 18.8329 Abnormal
                                                                                                                                          NaN
          4 49.712859
                      9.652075 28.317406 40.060784 108.168725 7.918501 0.543360 35.4940 15.9546
                                                                                                8.87237 -16.378376 24.9171 Abnormal
                                                                                                                                          NaN
 In [8]:
          # Dropando coluna não necessária 'Unnamed: 13'
           base = base.drop(columns=['Unnamed: 13'])
 In [9]:
           # Renomeando colunas (no Kaggle encontramos os nomes das features)
           base.columns = ['pelvic_incidence', 'pelvic_tilt', 'lumbar_lordosis_angle', 'sacral_slope', 'pelvic_radius',
           'degree_spondylolisthesis', 'pelvic_slope', 'direct_tilt', 'thoracic_slope', 'cervical_tilt', 'sacrum_angle',
            scoliosis_slope', 'class']
In [10]:
           # Ordinal encoding para a target feature
           # 1 --> Abnormal
           # 0 --> Normal
           oe = OrdinalEncoder(dtype=np.intc, categories=[['Normal', 'Abnormal']])
           # Aplicação do tranform na base e adicionando coluna de inteiros TARGET
           base['TARGET'] = oe.fit_transform(base['class'].to_numpy().reshape(-1,1))
In [11]:
          base.describe()
                pelvic_incidence
                                pelvic_tilt lumbar_lordosis_angle sacral_slope pelvic_radius degree_spondylolisthesis pelvic_slope
                                                                                                                         direct_tilt thoracic_slope
          count
                     310.000000
                               310 000000
                                                   310.000000
                                                               310.000000
                                                                           310.000000
                                                                                                  310.000000
                                                                                                              310.000000
                                                                                                                        310.000000
                                                                                                                                      310.000000
                      60.496653
                                17.542822
                                                    51.930930
                                                                42.953831
                                                                            117.920655
                                                                                                   26.296694
                                                                                                               0.472979
                                                                                                                         21.321526
                                                                                                                                       13.064511
          mean
            std
                      17.236520
                                10.008330
                                                     18.554064
                                                                13.423102
                                                                             13.317377
                                                                                                   37.559027
                                                                                                               0.285787
                                                                                                                          8.639423
                                                                                                                                        3.399713
           min
                     26.147921
                                -6.554948
                                                    14.000000
                                                                13.366931
                                                                            70.082575
                                                                                                  -11.058179
                                                                                                               0.003220
                                                                                                                          7.027000
                                                                                                                                        7.037800
           25%
                     46.430294
                                10.667069
                                                    37.000000
                                                                33.347122
                                                                            110.709196
                                                                                                    1.603727
                                                                                                               0.224367
                                                                                                                         13.054400
                                                                                                                                       10.417800
           50%
                     58.691038
                                16.357689
                                                    49.562398
                                                                42.404912
                                                                            118.268178
                                                                                                   11.767934
                                                                                                               0.475989
                                                                                                                         21.907150
                                                                                                                                       12.938450
           75%
                     72.877696
                                22.120395
                                                    63.000000
                                                                52.695888
                                                                            125.467674
                                                                                                   41.287352
                                                                                                                         28.954075
                                                                                                                                       15.889525
                                                                                                               0.704846
                     129.834041
                                49.431864
           max
                                                    125.742385
                                                               121.429566
                                                                            163.071041
                                                                                                  418.543082
                                                                                                               0.998827
                                                                                                                         36.743900
                                                                                                                                       19.324000
         Entendendo a relação dois a dois entre as features da base na determinância da classe alvo
In [12]:
          pairs = []
           # pairs tem todas as combinações das 12 features 2 a dois
           for i in range(12):
```

for j in range(12):
 if i != j:

coli = base.columns[i]

```
colj = base.columns[j]
if ([coli, colj] not in pairs) and ([colj, coli] not in pairs):
    pairs.append([coli, colj])
```

Os scatter plots abaixo mostram algumas das distribuições das features duas a duas e como essa relação entre elas é determinante na definição do TARGET como **Abnormal** ou **Normal**.

Alguns pares de features como *pelvic\_radius* e *lumbar\_lordosis\_angle*, bem como *sacral\_slope* e *degree\_spondylolisthesis* se distribuem de tal maneira que é visível uma separação entre regiões de casos 'Normais' e 'Anormais'.

```
fig, ax = plt.subplots(nrows=3, ncols=5, figsize=(30,10))
i=0
j=0
for k in range(4, 49, 3):
    if j >= 5:
        j=0
        i += 1
    pair = pairs[k]
    data = base[[pair[0], pair[1], 'class']]
    sns.scatterplot(data=data, x=pair[0], y=pair[1], hue="class", ax=ax[i][j])
    j += 1

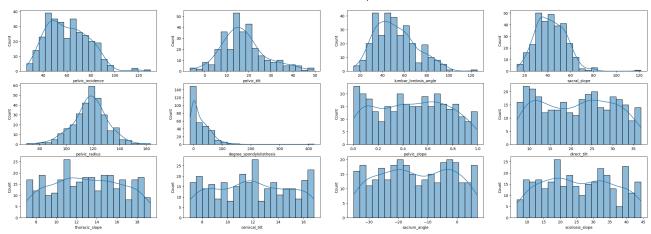
plt.show()
```

## Histograma com distribuições

Aqui percebemos que algumas features se distribuem na base de maneira próxima a uma distribuição normal, enquanto outras se aproximam mais de distribuições uniformes. A estimativa de densidade kernel **(KDE)** nos ajuda a chegar a tais conclusões.

```
In [14]: # Histograma das 12 features da base original pré-processada
fig, ax = plt.subplots(nrows=3, ncols=4, figsize=(30,10))

i = 0
j = 0
for k in range(12):
    if j >= 4:
        j = 0
        i += 1
    sns.histplot(data=base, x=base.columns[k], bins=20, kde=True, ax=ax[i][j])
    j += 1
```



## Separando a base em treino e teste.

```
In [15]:
        base = base.drop(columns=['class'])
In [16]:
         # Matriz de features X e vetor TARGET y
         X_ = base.loc[:, base.columns != 'TARGET']
         y = base.TARGET
         # Separando a base pré-processada em bases treino e teste
         # seguindo uma proporção de 25% para a de teste
         X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(
         X_, y_, test_size=0.25, random_state=42)
In [17]:
         # Inicializando scaler para realizar scaling nas
         # matrizes de features de treino e teste
         scaler = MinMaxScaler()
         X_train = pd.DataFrame(scaler.fit_transform(X_train))
          X_test = pd.DataFrame(scaler.fit_transform(X_test))
In [18]:
         X_train.shape
Out[18]: (232, 12)
In [19]:
         X_test.shape
Out[19]: (78, 12)
```

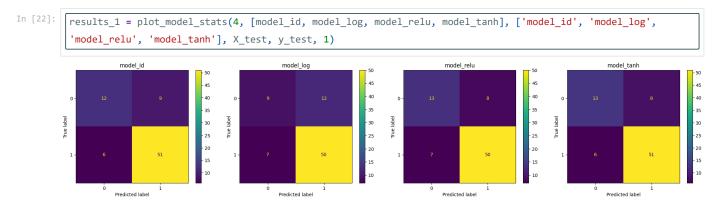
#### Treinando modelos diferentes

Para a avaliação dos modelos, iremos considerar como métrica a média aritmética entre o **Recall, Precision e ROC scores.** Assim, priorizamos os modelos que minimizam os falsos negativos (mais importantes na predição do diagnóstico) e falsos positivos, bem como aqueles que definem uma melhor curva ROC.

```
In [20]: total_results = None
```

#### Primeira leva: comparando as funções de ativação em modelos com 1 hidden layer

Os modelos convergem mais rapidamente a depender da função de ativação utilizada. Isso é perceptível na verificação experimental do 'max\_iter' para garantir convergência durante o treinamento.



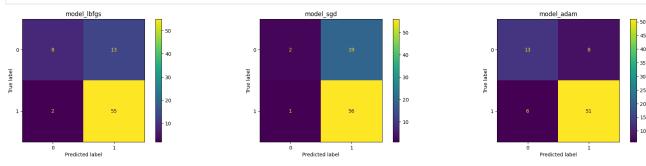
O modelo cuja função de ativação é 'tanh' obtém a melhor métrica definida em comparação com os outros modelos.

Out[23]:	model_name		$model\_shape$	leva	precision	recall	roc	metric
	0	model_tanh	(5,)	1	0.8644	0.8947	0.8922	0.883767
	1	model_id	(5,)	1	0.8500	0.8947	0.8739	0.872867
	2 model_relu		(5,)	1	0.8621	0.8772	0.8571	0.865467
	3	model_log	(5,)	1	0.8065	0.8772	0.8388	0.840833

#### Segunda leva: comparando os solvers em modelos com 1 hidden layer e 'tanh' como função de ativação nos neurônios

Os modelos convergem mais rapidamente a depender do solver aplicado. Isso é perceptível na verificação experimental do 'max\_iter' para garantir convergência durante o treinamento.

```
In [24]: model_lbfgs = MLPClassifier(hidden_layer_sizes=(5,), activation="tanh", random_state=42, solver='lbfgs',
    max_iter=2950).fit(X_train, y_train)
    model_sgd = MLPClassifier(hidden_layer_sizes=(5,), activation="tanh", random_state=42, solver='sgd',
    max_iter=350).fit(X_train, y_train)
    model_adam = MLPClassifier(hidden_layer_sizes=(5,), activation="tanh", random_state=42, solver='adam',
    max_iter=900).fit(X_train, y_train)
```



O optimizer padrão 'adam' é aquele que tem a melhor performance, de acordo com nossa métrica, quando comparado aos outros solvers.

Out[26]:	model_name		$model\_shape$	leva	precision	recall	roc	metric	
	0	model_adam	(5,)	2	0.8644	0.8947	0.8922	0.883767	
	1	model_lbfgs	(5,)	2	0.8088	0.9649	0.7853	0.853000	
	2	model sqd	(5,)	2	0.7467	0.9825	0.6182	0.782467	

Terceira leva: comparando quantidade de neurônios ativados com 'tanh' em modelos com 1 hidden layer configurados com o default 'adam' solver

Os modelos convergem mais rapidamente a depender da quantidade de neurônios na hidden layer. Isso é perceptível na verificação experimental do 'max\_iter' para garantir convergência durante o treinamento.

```
model_1 = MLPClassifier(hidden_layer_sizes=(5,), activation="tanh", random_state=42,
    max_iter=900).fit(X_train, y_train)
model_2 = MLPClassifier(hidden_layer_sizes=(8,), activation="tanh", random_state=42,
    max_iter=1275).fit(X_train, y_train)
model_3 = MLPClassifier(hidden_layer_sizes=(16,), activation="tanh", random_state=42,
    max_iter=1600).fit(X_train, y_train)
model_4 = MLPClassifier(hidden_layer_sizes=(32,), activation="tanh", random_state=42,
    max_iter=1600).fit(X_train, y_train)
```

O modelo de nome 'model\_4' é aquele com melhor métrica calculada. Assim, considerando os resultados das levas anteriores, com uma única hidden layer, 32 neurônios melhor resolvem esse problema. Vale ressaltar que, para esse caso, os modelos não melhoram sempre à medida que cresce a quantidade de neurônios.

Predicted label

Predicted label

Predicted label

Out[29]:		model_name	model_shape	leva	precision	recall	roc	metric
	0	model_4	(32,)	3	0.8730	0.9649	0.9357	0.924533
	1	model_2	(8,)	3	0.8710	0.9474	0.9323	0.916900
	2	model_3	(16,)	3	0.8462	0.9649	0.9373	0.916133
	3	model_1	(5,)	3	0.8644	0.8947	0.8922	0.883767

## Quarta leva: comparando quantidade de neurônios ativados com 'tanh' em modelos com 2 hidden layers configurados com o default 'adam' solver

Os modelos convergem mais rapidamente a depender da quantidade de neurônios nas duas hidden layers. Isso é perceptível na verificação experimental do 'max\_iter' para garantir convergência durante o treinamento.

```
In [30]: model_5 = MLPClassifier(hidden_layer_sizes=(5,5), activation="tanh", random_state=42,
    max_iter=1150).fit(X_train, y_train)
    model_6 = MLPClassifier(hidden_layer_sizes=(8,4), activation="tanh", random_state=42,
    max_iter=1275).fit(X_train, y_train)
    model_7 = MLPClassifier(hidden_layer_sizes=(16,8), activation="tanh", random_state=42,
    max_iter=1600).fit(X_train, y_train)
    model_8 = MLPClassifier(hidden_layer_sizes=(32,16), activation="tanh", random_state=42,
    max_iter=1600).fit(X_train, y_train)
```

```
results_4 = plot_model_stats(4, [model_5, model_6, model_7, model_8], ['model_5', 'model_6', 'model_7', 'model_8'], X_test, y_test, 4)

model_5

model_5

model_6

model_7

model_7

model_7

model_7

model_8

predicted label

predicted label

predicted label

predicted label
```

O modelo de nome 'model\_8' é aquele com melhor métrica calculada. Assim, considerando os resultados das levas anteriores, com duas hidden layers, 48 neurônios (32 na primeira e 16 na segunda camada) melhor resolvem esse problema. Vale ressaltar que, para esse caso, os modelos não

melhoram sempre à medida que cresce a quantidade de neurônios.

```
model_name model_shape leva precision
                                                recall
                                                          roc
                                                                 metric
0
       model 8
                      (32, 16)
                                       0.8871 0.9649 0.9373 0.929767
1
       model_5
                                       0.8730
                                                       0.9390
                                                               0.925633
                         (5, 5)
                                               0.9649
2
       model_7
                        (16, 8)
                                       0.8485
                                              0.9825 0.9398 0.923600
       model 6
                         (8.4)
                                       0.8462
                                              0.9649 0.9315 0.914200
```

## Análise de correlação de Pearson para feature selection



Esses coeficientes de correlação são os mais próximos de 0 para essas 6 features e são estatisticamente significativos, dado que seus p-values são maiores que a referência padrão 0.05. Assim, podemos interpretar o fato de que essas features não são tão determinantes para classificação dos nossos registros.

```
In [34]:
    target_corr = []
    for col in base.columns:
        res = pearsonr(base[col], base.TARGET)
        if res.pvalue > 0.05:
            target_corr.append({'feature': col, 'statistic': res.statistic, 'p-value': res.pvalue})
        target_corr = pd.DataFrame(target_corr)
        target_corr
```

```
Out[34]:
                               statistic
                     feature
                                          p-value
                               0.055865
                 pelvic_slope
                                        0.326887
                    direct_tilt
                              -0.039591 0.487351
              thoracic_slope
                             -0.049354 0.386500
                              0.100044 0.078618
                  cervical tilt
               sacrum_angle
                              0.026887 0.637238
           5 scoliosis_slope -0.069315 0.223620
```

Removendo as features selecionadas e definindo uma nova base que será treinada em novos modelos para avaliação da performance.

Out[36]:		$pelvic\_incidence$	pelvic_tilt	$lumbar\_lordosis\_angle$	sacral_slope	$pelvic\_radius$	${\bf degree\_spondylolisthesis}$	TARGET
	0	63.027817	22.552586	39.609117	40.475232	98.672917	-0.254400	1
	1	39.056951	10.060991	25.015378	28.995960	114.405425	4.564259	1
	2	68.832021	22.218482	50.092194	46.613539	105.985135	-3.530317	1
	3	69.297008	24.652878	44.311238	44.644130	101.868495	11.211523	1
	4	49.712859	9.652075	28.317406	40.060784	108.168725	7.918501	1

#### Redefinindo matriz de features e vetor TARGET após a feature selection

```
In [37]: X_corr_ = corr_base.loc[:, corr_base.columns != 'TARGET']
y_corr_ = corr_base.TARGET

X_train_corr, X_test_corr, y_train_corr, y_test_corr = train_test_split(
X_corr_, y_corr_, test_size=0.25, random_state=42)
```

Matrizes de features de treino e teste agora com apenas 6 features das 12 originais após remoção.

```
In [38]: X_train_corr.shape

Out[38]: (232, 6)
```

```
In [39]: X_test_corr.shape
```

```
Out[39]: (78, 6)
```

```
# Realizando scaling nas bases de treino e teste

X_train_corr = pd.DataFrame(scaler.fit_transform(X_train_corr))

X_test_corr = pd.DataFrame(scaler.fit_transform(X_test_corr))
```

# Quinta leva: comparando quantidade de neurônios ativados com 'tanh' em modelos com 1 hidden layers configurados com o default 'adam' solver após feature selection

Os modelos convergem mais rapidamente a depender da quantidade de neurônios na hidden layer. Isso é perceptível na verificação experimental do 'max\_iter' para garantir convergência durante o treinamento.

Predicted label

Predicted label

Predicted label

Predicted label

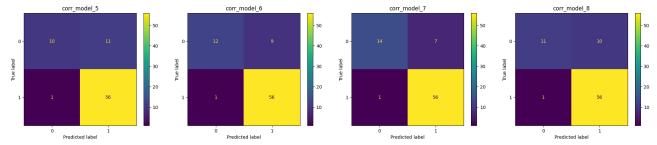
O modelo de nome 'corr\_model\_4' é o que obtém melhor métrica dentre os demais. Analisando sua matriz de confusão, percebemos que ele é aquele com menor taxa de falsos negativos e positivos simultaneamente.

```
Out[43]:
              model_name model_shape leva precision
                                                          recall
                                                                    roc
                                                                          metric
           0 corr_model_4
                                                         0.9825
                                                                0.9432 0.933567
                                                  0.8750
              corr_model_3
                                    (16,)
                                                  0.8730
                                                         0.9649
                                                                 0.9424 0.926767
             corr model 1
                                            5
                                                  0.8710
                                                        0.9474 0.9357 0.918033
                                     (5,)
             corr model 2
                                     (8)
                                            5
                                                  0.8333 0.9649 0.9365 0.911567
```

Sexta leva: comparando quantidade de neurônios ativados com 'tanh' em modelos com 2 hidden layers configurados com o default 'adam' solver após feature selection

Os modelos convergem mais rapidamente a depender da quantidade de neurônios nas duas hidden layers. Isso é perceptível na verificação experimental do 'max\_iter' para garantir convergência durante o treinamento.





Aqui na sexta leva, conseguimos encontrar o melhor modelo entre os demais treinados anteriormente. O 'corr\_model\_7' é aquele com melhor recall, precision e com uma das melhores ROC curves (atrás apenas em cerca de 0.08% do maior roc score calculado).

Out[46]:	model_name		$model\_shape$	leva	precision	recall	roc	metric	
	0	corr_model_7	(16, 8)	6	0.8889	0.9825	0.9424	0.937933	
	1	corr_model_6	(8, 4)	6	0.8615	0.9825	0.9432	0.929067	
	2 corr_model_8		(32, 16)	6	0.8485	0.9825	0.9424	0.924467	
	3	corr_model_5	(5, 5)	6	0.8358	0.9825	0.9398	0.919367	

#### Conclusão

Em cada uma das 'levas' de treinamento de modelos diferentes, avaliamos alguns hiperparâmetros para seguir adiante em busca de melhores modelos. Após alguns treinamentos, foi possível concluir que modelos com função de ativação 'tanh' e solver 'adam' melhor se encaixam para classificar essa base original. Ademais, após a análise de correlação de Pearson, conseguimos melhorar nossa performance e definir modelos com menos neurônios (sejam divididos em uma ou duas hidden layer) que performam melhor que outros com duas camadas e mais neurônios.

Finalmente, o modelo que sugerimos como o que melhor se encaixa têm as seguintes propriedades:

- tanh como função de ativação das unidades de processamento
- default adam solver
- precision score: 88.89%
- recall score: 98.25%
- roc score: 94.24%

• duas hidden layers: a primeira com 16 neurônios e a segunda com 8

Abaixo estão os melhores modelos em cada leva de treinamento de acordo com nossa métrica.

```
Out[47]:
             model_name model_shape leva precision recall
                                                                  roc
                                                                        metric
          5 corr_model_7
                                 (16, 8)
                                                0.8889 0.9825 0.9424 0.937933
           4 corr_model_4
                                   (32,)
                                                0.8750 0.9825 0.9432 0.933567
                  model_8
                                (32, 16)
                                                0.8871 0.9649 0.9373 0.929767
                                                0.8730 0.9649 0.9357 0.924533
                  model 4
                                   (32,)
                                                0.8644 0.8947 0.8922 0.883767
              model_tanh
                                    (5,)
           1 model_adam
                                    (5,)
                                                0.8644 0.8947 0.8922 0.883767
```

```
In [50]:
    fig, ax = plt.subplots(ncols=2, figsize=(20,4))
    ax[0].plot(losses_corr_4, label='corr_model_4')
    ax[0].plot(losses_corr_7, label='corr_model_7')
    ax[0].plot(losses_8, label='model_8')
    ax[0].plot(losses_4, label='model_4')
    ax[0].plot(losses_tanh, label='model_tanh')
    ax[0].plot(losses_adam, label='model_adam')
    ax[0].legend()
    ax[0].set_ylabel('loss')
    ax[0].set_xlabel('iterations')
    ax[0].set_title('Curvas de loss para os melhores modelos de cada leva')

sns.barplot(data=greatests_plot, x="model_name", y="value", edgecolor='black', hue='variable', ax=ax[1])
    ax[1].set_ylim(0.75, 0.995)

plt.show()
```

