Universidade Federal do Paraná

Laboratório de Estatística e Geoinformação - LEG

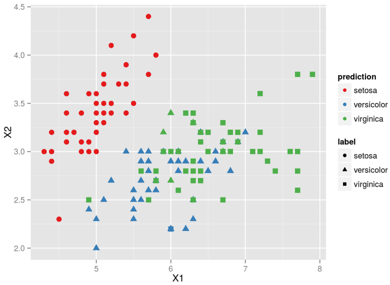
Classificação

Eduardo Vargas Ferreira

Tipos de aprendizado

Introdução

- Em muitos problemas, a variável Y assume valores em um conjunto não ordenado $\mathcal{C}$, por exemplo:
  - ⋆ `E-mail` $\in$ {`spam`, `ham`};
  - ⋆ `Dígito` $\in \{0, 1, \ldots, 9\}$;
  - ⋆ `Alzheimer` $\in$ {`com Alzheimer`, `sem Alzheimer`};
- Nestes casos, estamos diante de um **problema de classificação**;



Introdução

- Considere um problema binário, em que Y assume somente dois valores, c_1 ou c_2. Para um dado $\boldsymbol{x}$, escolheremos c_1 quando

$$\mathrm{P}(Y = c_1|\boldsymbol{x}) \geq \mathrm{P}(Y = c_2|\boldsymbol{x}),$$

- Tal classificador é conhecido como **Classificador de Bayes**. Escolhemos nossa função, tal que,

$$h(\boldsymbol{x}) = \underset{d \in \{c_1, c_2\}}{argmax} \ \mathrm{P}(Y = d|\boldsymbol{x}).$$

O classificador de Bayes é um padrão ouro inalcançável!

Plug-in classifier

- A solução é então estimar $\mathrm{P}(Y = c_i|\mathbf{x})$, para $i \in \mathcal{C}$, ou seja

  - ⋆ Estimamos $\mathrm{P}(Y = c|\boldsymbol{x})$ para cada categoria $c \in \mathcal{C}$;
  - ⋆ Tomamos $\hat{h}(\boldsymbol{x}) = \underset{c \in \mathcal{C}}{argmax}\ \widehat{\mathrm{P}}(Y = c|\boldsymbol{x})$.

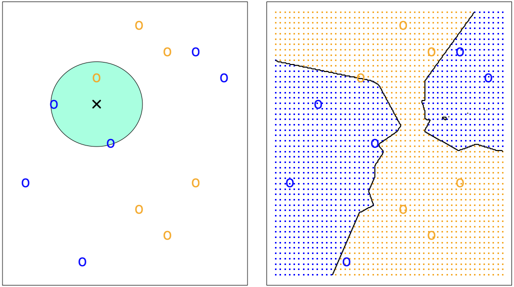
- Essa abordagem é conhecida como **plug-in classifier**.

K-Nearest Neighbors

K-Nearest Neighbors

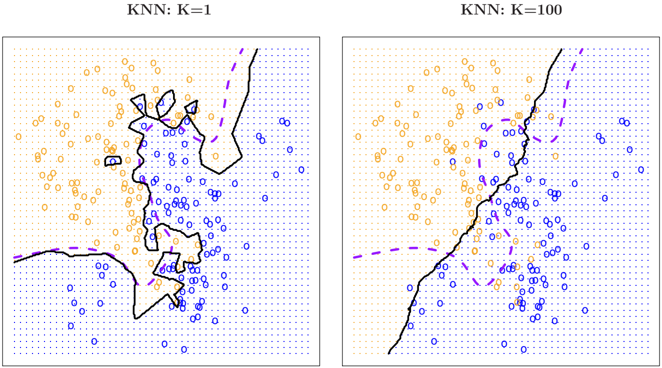
- O KNN estima a distribuição condicional de $Y|X$ de acordo com as classes dos K vizinhos de determinada observação x_0, ou seja:

$$P(Y = j \mid X = x_0) = \frac{1}{K} \sum_{i \in \mathcal{N}_0} \mathbb{I}(y_i = j).$$



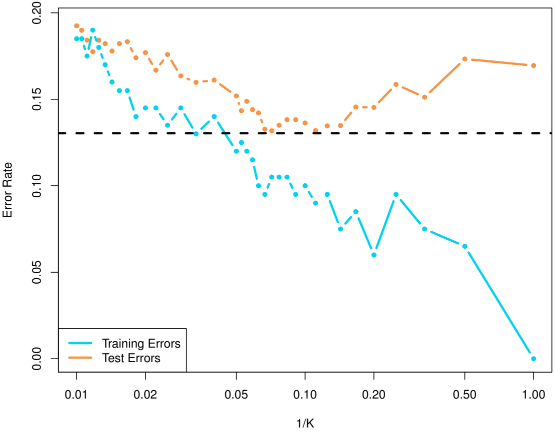
K-Nearest Neighbors

- A escolha de K tem um efeito drástico no classificador KNN obtido



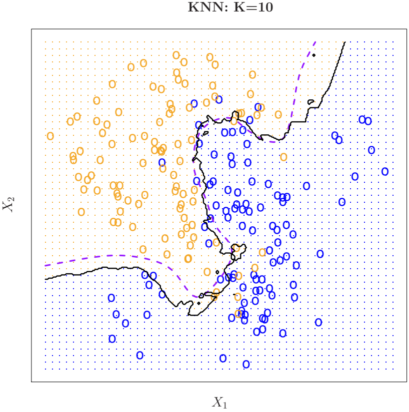
K-Nearest Neighbors

- Temos que escolhê-lo de acordo com o resultado do teste. A linha pontilhada representa o classificador de Bayes.



K-Nearest Neighbors

- Temos que escolhê-lo de acordo com o resultado do teste. A linha pontilhada representa o classificador de Bayes.

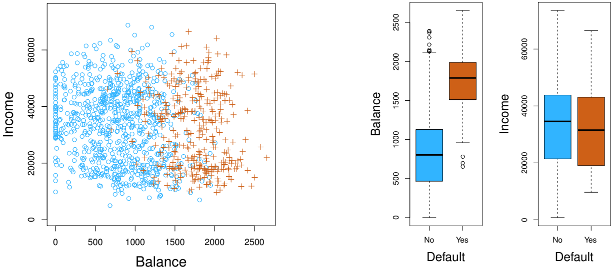


Regressão logística

Exemplo: Inadimplência no cartão de crédito

- Nosso objetivo é prever se um cliente será ou não inadimplente no próximo mês. Para tanto, temos três variáveis explicativas:

    - ⋆ `Student`: se o cliente é ou não estudante;
    - ⋆ `Income`: rendimento anual do cliente;
    - ⋆ `Balance`: o valor devido no mês atual.

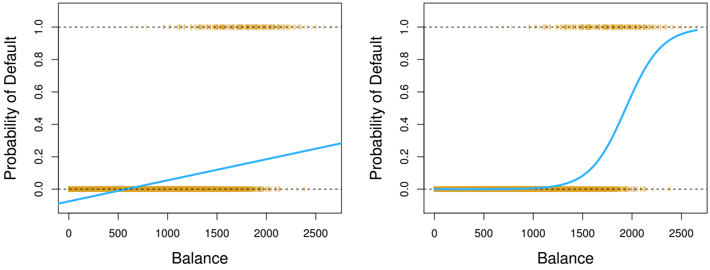


Podemos utilizar regressão linear?

- Suponha que para classificação da variável `Default` codificamos da forma:

$$Y = \begin{cases} 0, & \text{se } \texttt{No} \ , \\ 1, & \text{se } \texttt{Yes} \ . \end{cases}$$

- Podemos simplesmente realizar uma regressão linear de Y em X e classificar como `Yes` se $\hat{Y} > 0.5$?



Regressão logística

- A regressão logística utiliza a forma

$$P(Y = 1|X) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 X}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 X}}.$$

- Com um pouco de algebrismo, chegamos em

$$log\left[\frac{P(Y = 1|X)}{1 - P(Y = 1|X)}\right] = \beta_0 + \beta_1 X.$$

Variável	**Coeficiente**	**Erro padrão**	**Estatística *t***	**p-valor**
`Intercepto`	-3,5041	0,0707	-49,55	$< 0,0001$
`Student[Yes]`	0,4049	0,1150	3,52	0,0004

$$log\left[\frac{P(\texttt{Default} = \texttt{Yes} \mid \texttt{Student})}{1 - P(\texttt{Default} = \texttt{Yes} \mid \texttt{Student})}\right] = -3,5241 + 0,4049 \cdot \texttt{Student[Yes]}$$

Regressão logística com várias variáveis

- Agora o caso de mais de um preditor, o modelo geral torna-se

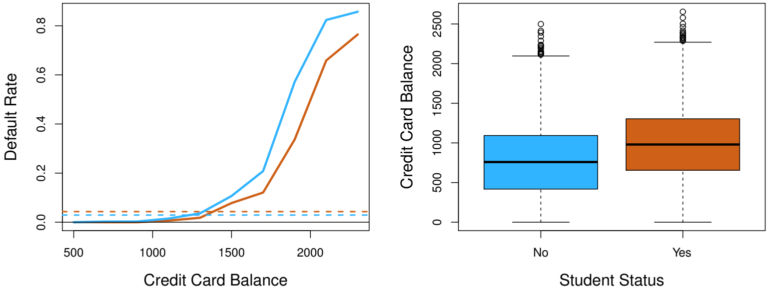
$$log\left[\frac{P(Y=1|\boldsymbol{X})}{1-P(Y=1|\boldsymbol{X})}\right]=\beta_0+\beta_1X_1+\ldots+\beta_pX_p.$$

Variável	Coeficiente	Erro padrão	Estatística t	p-valor
`Intercepto`	-10,8690	0,4923	-22,08	$< 0,0001$
`Balance`	0,0057	0,0002	24,74	$< 0,0001$
`Income`	0,0030	0,0082	0,37	0,7115
`Student[Yes]`	-0,6468	0,2362	-2,74	0,0062

- Por que o coeficiente de `Student` é negativo agora, enquanto era positivo anteriormente? **Confundimento**.

Confundimento

- Os resultados são diferentes, especialmente quando existe correlação entre os preditores.



Regressão multinomial

Regressão multinomial

- Até agora, discutimos o caso de regressão logística com duas classes. É fácil generalizar para mais classes

$$P(Y = k|\boldsymbol{X}) = \frac{e^{\beta_{0k}+\beta_{1k}X_1+\ldots+\beta_{pk}X_p}}{\sum_{l=1}^{K} e^{\beta_{0l}+\beta_{1l}X_1+\ldots+\beta_{pl}X_p}}$$

- Por exemplo, podemos classificar um paciente na sala de emergência de acordo com seu sintoma

$$Y = \begin{cases} 1, & \text{se } \texttt{AVC}\ , \\ 2, & \text{se } \texttt{overdose de droga}\ , \\ 3, & \text{se } \texttt{ataque epilético}\ . \end{cases}$$

Outra abordagem

- Uma alternativa para estimar $P(Y|X)$ consiste em modelar a distribuição de X, em cada classe separadamente, utilizando o **Teorema de Bayes**:

$$P(Y = k|X = x) = \frac{P(Y = k)P(X = x|Y = k)}{P(X = x)}$$

- Que escrevendo de outra forma fica

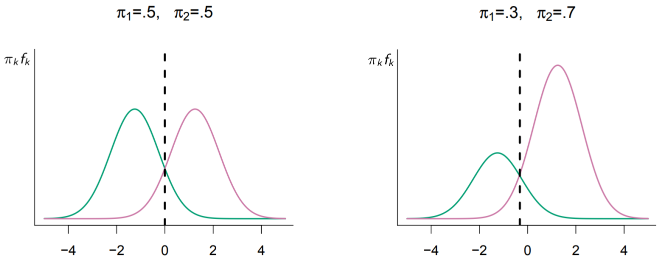
$$P(Y = k|X = x) = \frac{\pi_k f_k(x)}{\sum_{l=1}^{K} \pi_l f_l(x)}$$

- Então temos que

$$\delta_k(x) \propto argmax\ \pi_k f_k(x)$$

Outra abordagem

- $\pi_k = P(Y = k)$ é a **probabilidade marginal** ou **priori** para classe k. Pode ser estimada utilizando as proporções amostrais em cada classe.



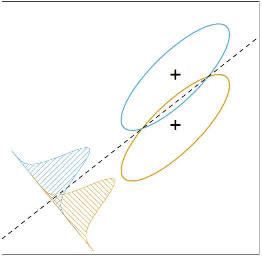
- $f_k(x) = P(\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x} | Y = k)$ é a **densidade** para X na classe k (diferentes distribuições levam a diferentes métodos).

Análise de discriminante

Análise de discriminante

- Ao considerarmos para $f_k(x)$ a distribuição Normal em cada classe, nos leva à **análise de discriminante linear** ou **quadrática**, pois

$$
\begin{aligned}
\delta_k(x) &\propto argmax\ \pi_k f_k(x) \\
&= argmax \left\{ log \pi_k - \frac{1}{2} log|\Sigma_k| - \frac{1}{2}\langle x - \mu_k, \Sigma_k^{-1}(x - \mu_k)\rangle \right\}.
\end{aligned}
$$



$$
\begin{aligned}
\hat{\pi}_k &= \frac{n_k}{n} \\
\hat{\mu}_k &= \frac{1}{n_k} \sum_{i:y_i=k} x_i \\
\hat{\Sigma}_k &= \frac{1}{n_k - 1} \sum_{i:y_i=k} (x_i - \hat{\mu}_k)(x_i - \hat{\mu}_k)^t
\end{aligned}
$$

Análise de discriminante

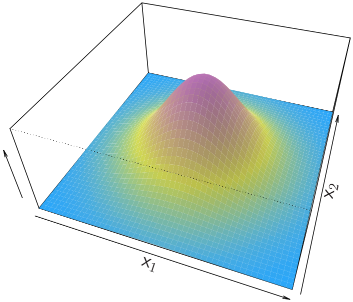
- Quando $f_k(x)$ possui matriz de covariância, $\mathbf{\Sigma}_k$, diferente em cada classe, temos a **análise de discriminante quadrático (ADQ)**

$$\begin{aligned}\delta_k(x) &\propto argmax\ \pi_k f_k(x)\\ &= argmax \left\{ log \pi_k - \frac{1}{2} log|\Sigma_k| - \frac{1}{2}(x-\mu_k)^t \Sigma_k^{-1}(x-\mu_k) \right\}.\end{aligned}$$

- Se todas as classes compartilharem o mesmo $\Sigma = \sum_k \frac{n_k - 1}{n-K}\hat{\Sigma}_k$, estamos diante da **análise de discriminante linear (ADL)**

$$\begin{aligned}\delta_k(x) &\propto argmax\ \pi_k f_k(x)\\ &= argmax \left\{ log \pi_k - \frac{1}{2}\mu_k^t \Sigma^{-1}\mu_k + x^t \Sigma^{-1}\mu_k \right\}.\end{aligned}$$

Análise de discriminante



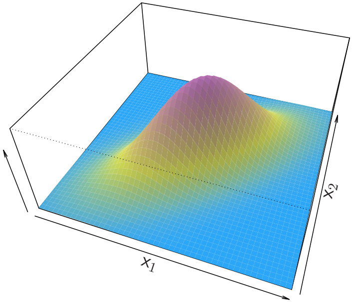
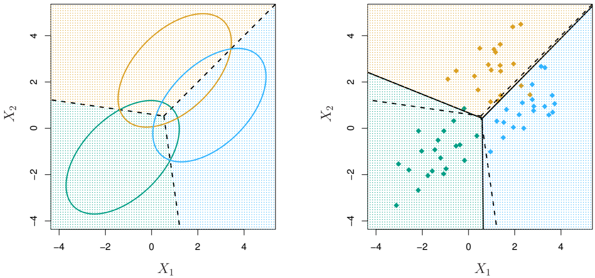


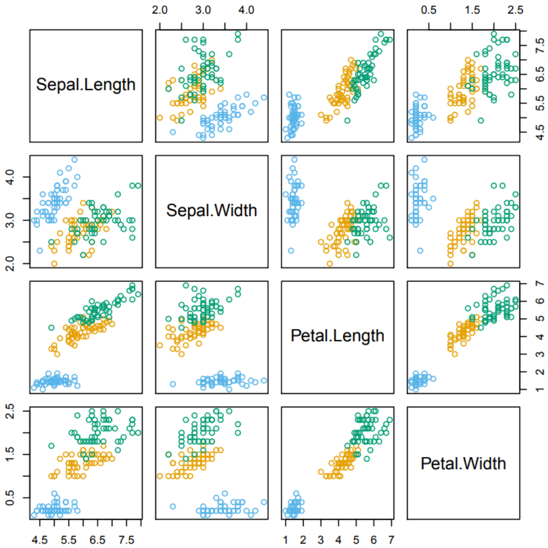
Ilustração: $p = 2$ e $k = 3$ classes

- No exemplo abaixo, temos $\pi_1 = \pi_2 = \pi_3 = 1/3$;



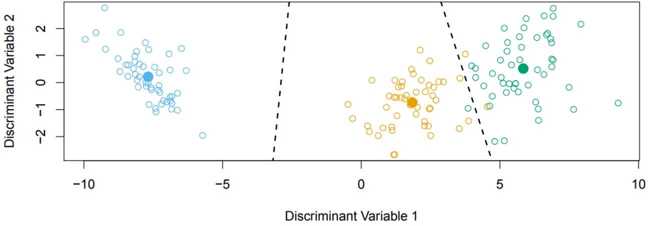
- A linha pontilhada é conhecida como **fronteira de decisão de Bayes** (*Bayes decision boundaries*);

Exemplo: `Iris Data`



Exemplo: Iris Data

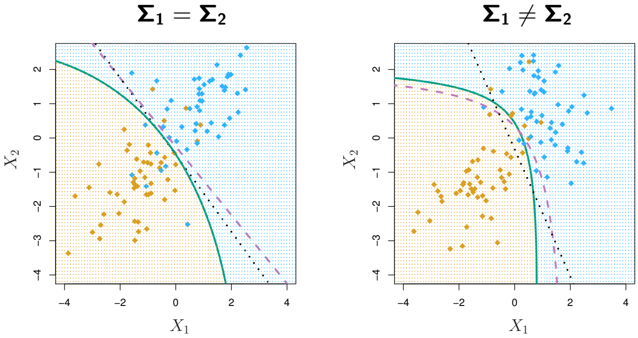
- Temos 4 variáveis, 3 espécies com 50 observações em cada classe;



- Análise de discriminante linear classifica corretamente 147/150 observações dos dados de treino.

Exemplo simulado: Bayes, ADL e ADQ

- No exemplo, temos a fronteira de decisão de Bayes em rosa, ADL pontilhado e ADQ em verde, em um problema com 2 classes;



Regressão logística versus ADL

- Regressão logística maximiza a **verossimilhança condicional**

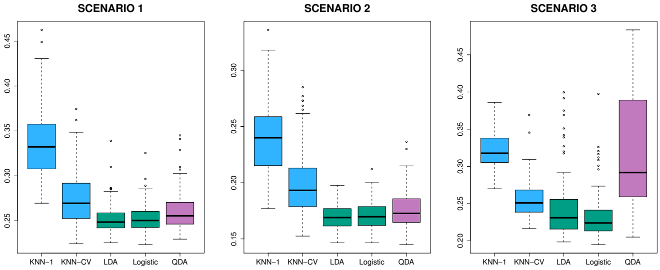
$$\prod_i p(x_i, y_i) = \underbrace{\prod_i p(y_i|x_i)}_{logistica} \underbrace{\prod_i g(x_i)}_{ignorado}$$

- ADL maximiza a **verossimilhança completa**

$$\prod_i p(x_i, y_i) = \underbrace{\prod_i p(x_i|y_i)}_{normal \ \ f_k} \underbrace{\prod_i p(y_i)}_{bernoulli \ \ \pi_k}$$

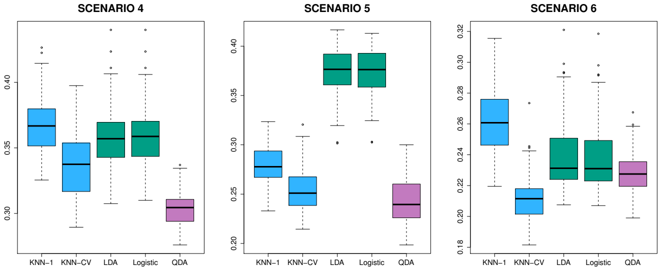
Qual classificador escolher?

- **Cenário 1:** 20 observações em cada classe. Todas não correlacionadas e normalmente distribuídas;
- **Cenário 2:** Semelhante ao cenário 1, mas em cada classe, os preditores têm correlação de -0,5;
- **Cenário 3:** Semelhante ao cenário 1, mas com distribuição *t de student*.



Qual classificador escolher?

- **Cenário 4:** Os dados são normalmente distribuídos, com correlação de 0,5 em uma classe e -0,5 em outra;
- **Cenário 5:** As respostas foram geradas utilizando os preditores: X_1^2, X_2^2 e $X_1 \times X_2$ (ou seja, limite de decisão quadrático);
- **Cenário 6:** As respostas foram geradas utilizando funções não lineares mais elaboradas.



Naive bayes

Naive bayes

- Se supusermos que as componentes de $\boldsymbol{x}$ são independentes **condicionalmente à classe Y** estamos diante do **Naive Bayes**;

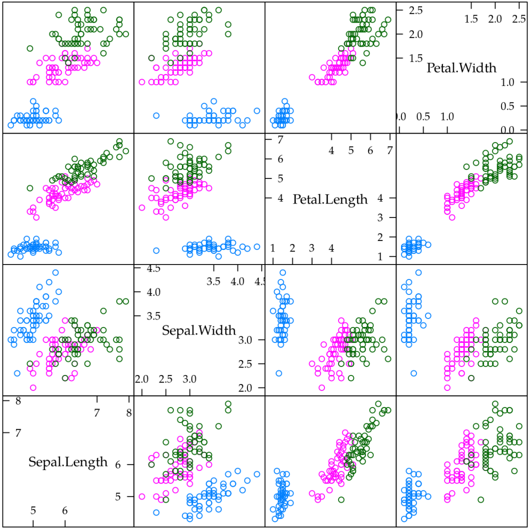
- Naive Bayes assume distribuição normal, com $\boldsymbol{\Sigma}_k$ diagonal:

$$\delta_k(x) \propto log\left[\pi_k \prod_{j=1}^{p} f_{kj}(x_j)\right] = -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{p}\frac{(x_j - \mu_{kj})^2}{\sigma_{kj}^2} + log(\pi_k).$$

- Apesar de tal suposição não ser razoável, em muitos problemas ela é conveniente, e leva a bons classificadores.

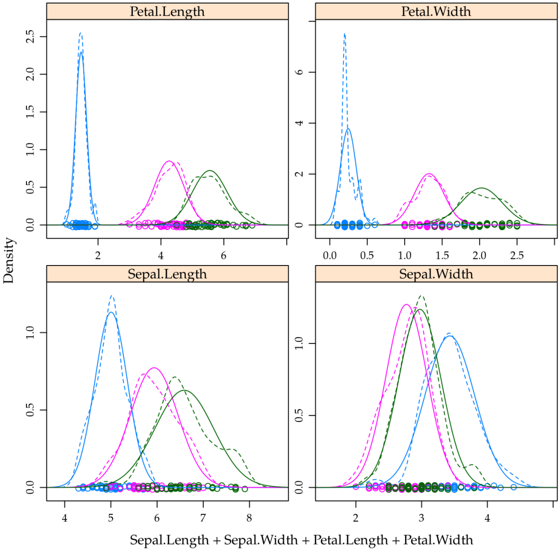
- Lembre-se que estamos interessados classificar, e obter estimadores viciados não altera esta decisão.

Exemplo: Iris Data



Scatter Plot Matrix

Exemplo: Iris Data



Tipos de erro

Tipos de erro

- Voltando ao exemplo do cartão de crédito, temos a seguinte situação:

		Default observado		
		Não	Sim	Total
Default predito	Não	9644	252	9896
	Sim	23	81	104
	Total	9667	333	10000

- Tivemos $\dfrac{23+252}{10000} = 2,75\%$ erros de classificação;

- Se classificarmos todos como Não, teríamos $\dfrac{333}{10000} = 3,33\%$ de erro;

Falso positivo: fração de negativos classificados como positivo, $\dfrac{23}{9667} = 0,2\%$;

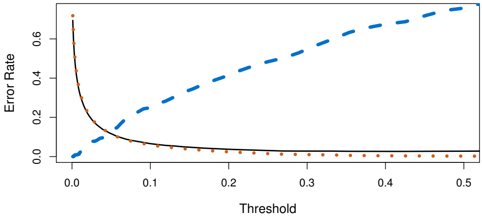
Falso negativo: fração de positivos classificado como negativo, $\dfrac{252}{333} = 75,7\%$.

Variando o threshold

- Podemos mudar as taxas de erro, alterando a fronteira de decisão para algum valor $\in [0, 1]$:

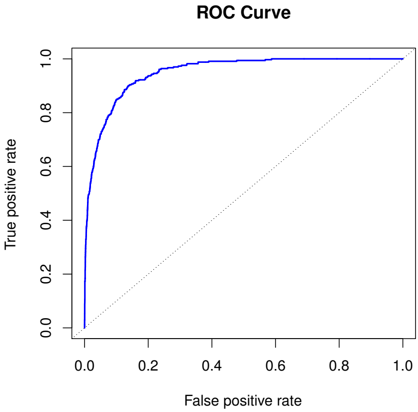
$$\widehat{\mathrm{P}}(\texttt{Default} = \texttt{Yes} \mid \texttt{Balance, Student}) \geq \text{threshold}.$$

- Abaixo, em azul temos a taxa de falso negativo, em laranja falso positivo e em preto a taxa de erro total.



Curva ROC

- A curva ROC (*receiver operator characteristic*) nos ajuda nesta escolha do *threshold*. Ela apresenta as duas taxas de erro ao mesmo tempo.



Referências

- James, G., Witten, D., Hastie, T. e Tibshirani, An Introduction to Statistical Learning, 2013;
- Hastie, T., Tibshirani, R. e Friedman, J., The Elements of Statistical Learning, 2009;
- Lantz, B., Machine Learning with R, Packt Publishing, 2013;
- Tan, Steinbach, and Kumar, Introduction to Data Mining, Addison-Wesley, 2005;

- Some of the figures in this presentation are taken from "An Introduction to Statistical Learning, with applications in R"(Springer, 2013) with permission from the authors: G. James, D. Witten, T. Hastie and R. Tibshirani