Aprendizado de Máquina: Classificação de Dados

Prof. Arnaldo Candido Junior UTFPR – Medianeira

Abordagens de Aprendizado



Classificação

- Atribuir objetos a uma dentre várias categorias pré-definidas
- Ex.:
 - Classificação de letras e números
 - Reconhecimento de faces
 - Análise de crédito
 - Diagnóstico médico

Classificação (2)

- Dado um conjunto de treinamento, em que cada exemplo possui um conjunto de atributos e um deles o rótulo ou classe
 - Encontrar um modelo para o atributo classe como uma função dos valores de entrada
 - Função alvo ou modelo de classificação

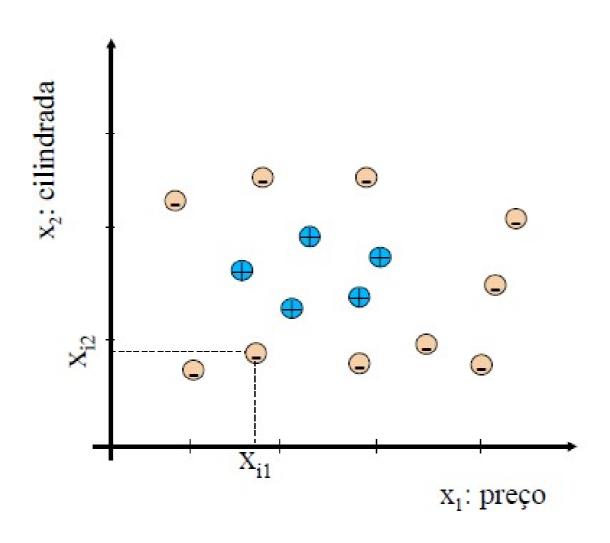
Classificação (3)

- Utilidades do modelo de classificação
 - Modelagem descritiva: explica como são descriminados objetos de diferentes classes
 - Extração de conhecimento: resume os dados
 - Modelagem preditiva: permite predizer o rótulo de novos dados de entrada
 - Não vistos anteriormente

Classificação (4)

- Supor a tarefa de aprender a classificar carros em duas classes
 - Carro esporte (+)
 - Carro passeio (-)
- Dados de entrada:
 - Características de um carro
 - Preço (x_{i1}) e cilindrada (x_{i2})

Classificação (5)



Classificação (6)

- Dados exemplos de treinamento, encontrar um modelo
- Modelagem descritiva: o que representa um carro de passeio?
- Modelagem preditiva: qual a classe de um novo carro?

Teoria do Aprendizado Estatístico

- Fornece uma interpretação estatística sobre o aprendizado de máquina
- Vamos usar uma notação diferente da tradicional
 - Notações variam muito de acordo com autor ou algoritmo

Notação

- x, x₁, u, v, ...: valores de instâncias (sem a classe) ou escalares
- x̂, x̂₁, û, v̂, ...: instâncias ou pontos ou vetores
 Note que: x̂ = (x₁, x₁, ..., xₙ)
- f(x̂), d: classe real (ou desejada) de uma instância.
 - Vale 1 ou 0 na classificação binária (foco inicial) (alternativamente, "+" ou "-")

Notação ₍₂₎

- h: hipótese o recorte no espaço que permite que a classificação aconteça
- h(x̂), y: classe predita para uma instância
- h*: hipótese ótima aquela que mais se aproxima de f
- X: um dataset ou uma matrizes

Notação (3)

- Exemplo:
 - Instância Gol (x̂);
 - Preço: R\$ 30.000 (x₁)
 - Cilindrada: 1.000 (x₂)
 - Classe: passeio (0 classe positiva)
 - Notação: $\hat{x} = (30.000, 1.000)$ $f(\hat{x}) = 0$

Notação (4)

- Uma instância é dada por seus atributos:
 x̂ = (x₁, x₂, ..., xₙ)
- Um conjunto de dados (dataset) é dado por várias instâncias

$$X = \begin{bmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \\ \vdots \\ \hat{x}_n \end{bmatrix} \qquad X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1n} \\ x_{21} & & & x_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nn} \end{bmatrix}$$

Notação (5)

 No aprendizado supervisionado, os datasets são rotulados, isto é, dados são pares x̂ e y

$$X = \begin{bmatrix} \hat{x}_{1} & d_{1} \\ \hat{x}_{2} & d_{2} \\ \vdots & \vdots \\ \hat{x}_{n} & d_{n} \end{bmatrix} \qquad X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1n} & d_{1} \\ x_{21} & & & x_{2n} & d_{2} \\ \vdots & & & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nn} & d_{n} \end{bmatrix}$$

Teoria do Aprendizado Estatístico (2)

- Como exemplo, utilizaremos hipóteses na forma de retângulos (hipercubos)
 - São mais fáceis de interpretar
 - Formato:

$$h(\hat{x}) = 1$$
 Se $v_1 \le x_1 \le v_2$ E $v_3 \le x_2 \le v_4$
0 caso contrário

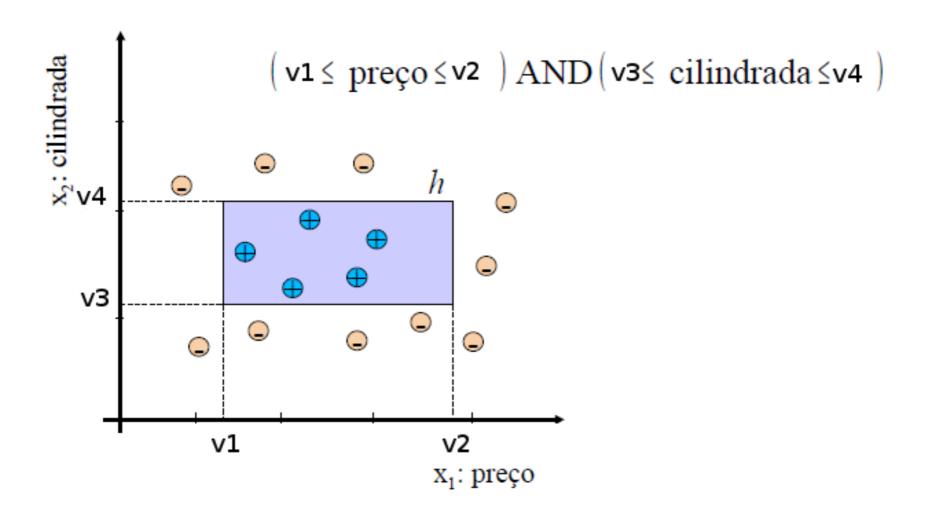
v₁, v₂, v₃ e v₄ delimitam o hipercubo

Teoria do Aprendizado Estatístico (3)

Exemplo:

•
$$h(\hat{x}) = 0$$
 Se $1.000 \le x_1 \le 30.000$ E
 $1.000 \le x_2 \le 2.000$
1 caso contrário

Teoria do Aprendizado Estatístico (4)



Teoria do Aprendizado Estatístico (5)

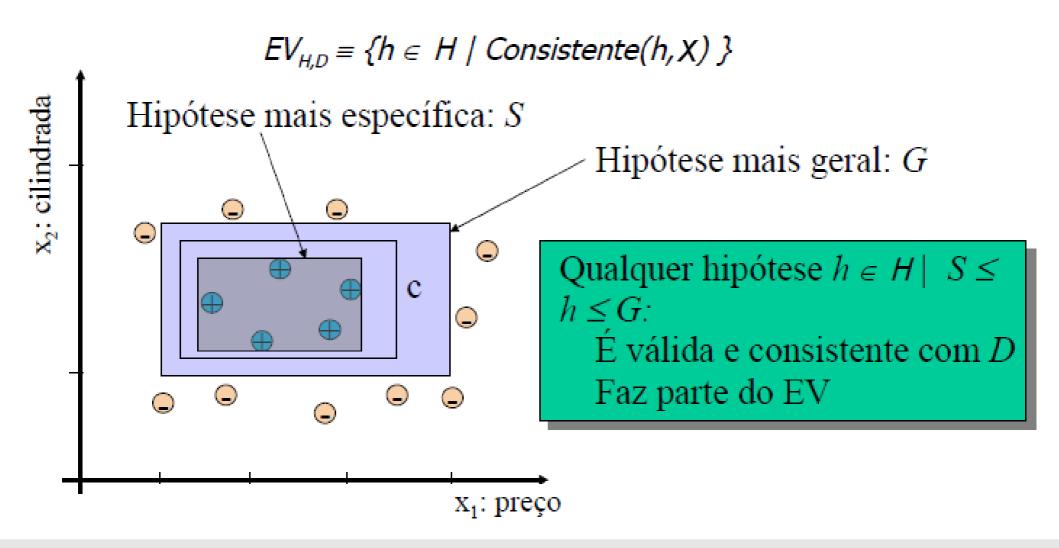
- Falso positivo (classe de referência: passeio):
 h(x̂) = 1; f(x̂) = 0
- Falso negativo: $h(\hat{x}) = 0$; $f(\hat{x}) = 1$
- Erro empírico conta o número de erros que a hipótese h comete em um determinado dataset D

$$e(h|X) = \sum_{\hat{x} \in X} h(\hat{x}) \neq f(\hat{x})$$

Teoria do Aprendizado Estatístico (6)

- Chamaremos de H o conjunto de todas as hipóteses possíveis sobre um dataset
 - Normalmente, H é infinito
- Tentaremos encontrar h que melhor generalize os dados (isto é, h*)
- h* idealmente deve incluir todos os exemplos positivos e nenhum exemplo negativo
- Obs: pode haver mais de um h*

Teoria do Aprendizado Estatístico (7)



Teoria do Aprendizado Estatístico (8)

- Fronteira específica:
 - É mais propensa a falsos negativos para dados não vistos em treinamento
- Fronteira geral:
 - É mais propensa a falsos positivos

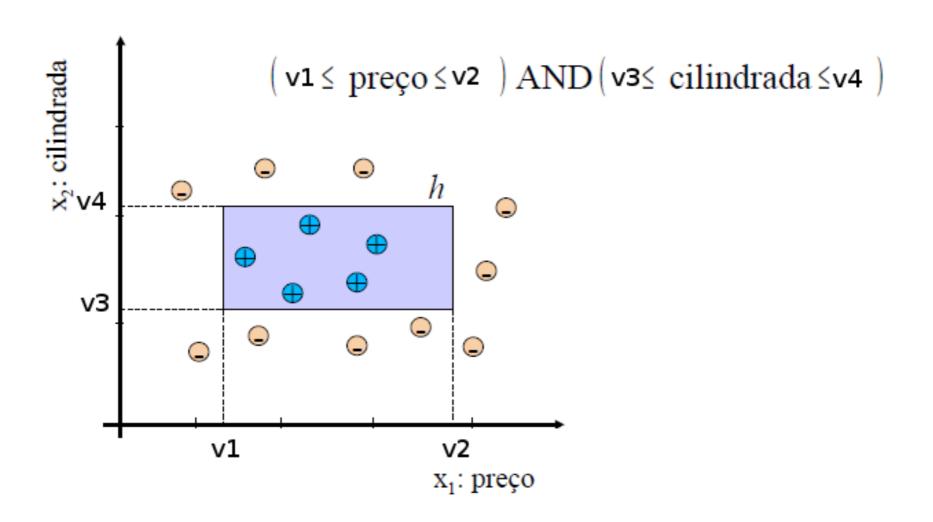
Espaços

- Temos dois espaços importantes
 - Espaço de instâncias
 - Espaço de hipóteses
 - Subespaço de versões

Espaço de instâncias

- Cada ponto é uma instância
- Tem a forma de nuvem de pontos
- Objetivo: recortar esse espaço
- É o que estudamos até o momento:
 - No exemplo dado, é o R²

Espaço de instâncias (2)



Espaço de hipóteses

- Cada ponto representa uma hipótese / recorte / classificador
- Tem a forma de encosta
- Objetivo: descer a encosta

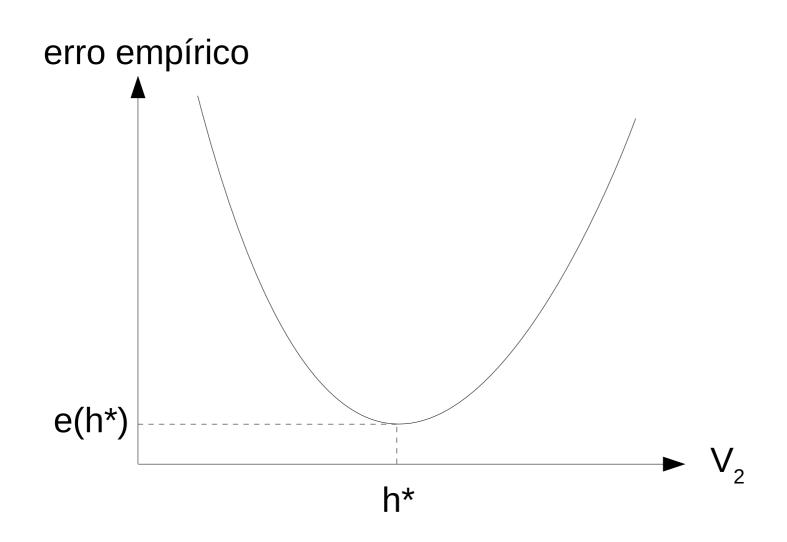
Espaço de hipóteses

- Todo o recorte no espaço de instâncias se transforma em um ponto no espaço de hipóteses
- Precisamos converter nossos retângulos e seus respectivos erros empíricos em pontos
 - No exemplo, isto pode ser feito da seguinte forma: h = (v₁, v₂, v₃, v₄, e)

Espaço de hipóteses (2)

- Versão original (R⁵): $h = (v_1, v_2, v_3, v_4, e)$
- Simplificando para visualização (R²): H = (v₂, e)
 - Lembrando: v₂ armazena o preço máximo de um veículo de passeio
 - v₂ grande → falsos negativos
 v₂ pequeno → falsos positivos

Espaço de hipóteses (3)



Espaço de hipóteses (4)

- Regra informal: coisas parecidas andam juntas
 - h's parecidos possuem erros empíricos parecidos
 - Percorremos hipóteses em H em busca de h*
 - Formalmente: estamos minimizando o erro empírico

Espaço de hipóteses (5)

- Classificadores fazem uma busca no espaço de hipóteses
 - Informada: no exemplo, heurística = erro empírico
 - Normalmente gulosa: se não encontrar h*, se contenta com uma aproximação boa o bastante h'
 - Normalmente descida de encosta (down hill): minimiza uma função de custo
 - Obs: erro empírico não é a melhor função de custo, pois não é suave, existem outras...

Subespaço de versões

- É um pedaço do espaço de hipóteses no qual...
 - ... cada hipótese separa perfeitamente o conjunto de treinamento X (erro empírico = 0)
 - Ou seja, ótimo global da encosta
 - Pode ser vazio (comum)
 - Pode ter uma ou mais fronteiras específicas
 - Pode ter uma ou mais fronteiras gerais

Subespaço de versões (2)

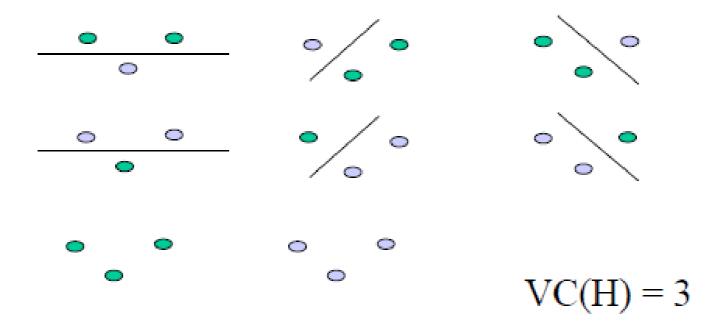
- É propenso a hipóteses que fazem overfitting
 - Acertar o conjunto de treinamento sugere memorização
 - Por causa disso, avaliações normalmente são feitas por um dataset separado, chamado de conjunto de teste

Dimensão VC

- Dá uma ideia do poder de um classificador
 - E também se ele é propenso a overfitting
- N pontos podem ser rotulados de 2^N possíveis maneiras como +/-
- Mede a capacidade de um classificador de classificar corretamente esses 2^N problemas
 - Dimensão varia de acordo com conjunto de treinamento

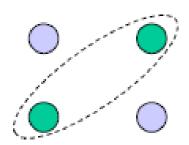
Dimensão VC (2)

- Seja um classificador linear em um espaço bidimensional
 - Para os três pontos abaixo, temos 8 problemas de separação (2³)
 - Todos os problemas são linearmente separáveis



Dimensão VC (3)

- Seja um classificador linear em um espaço bidimensional
- N = 4 -- 16 problemas
 - Alguns problemas não são linearmente separáveis

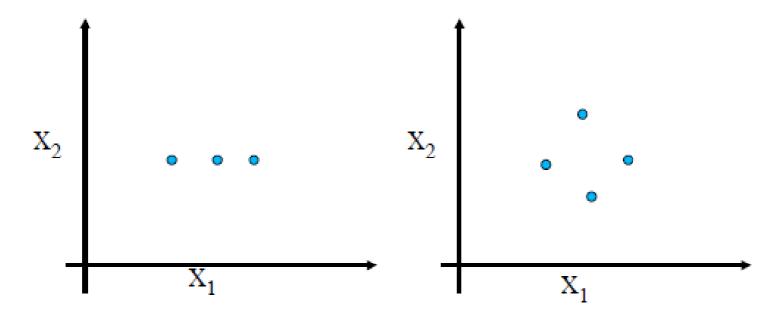


$$VC(H) = 3$$

VC(H) para um classificador linearmente separável em um espaço bidimensional é 3

Dimensão VC (4)

- Depende de:
 - Espaço de hipóteses
 - Número de atributos
 - Quais são os N dados escolhidos de X

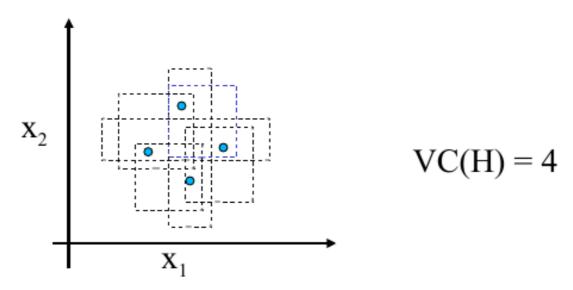


Dimensão VC (5)

- Seja um classificador na forma de retângulo em um espaço bidimensional
 - N = 4 (16 problemas)

Dimensão VC (6)

- Seja um classificador na forma de retângulo em um espaço bidimensional
 - N = 4 (16 problemas)
 - Todos os problemas são separáveis por um retângulo



Dimensão VC (7)

- Independe da distribuição de probabilidade com que exemplos são gerados
 - Depende do número de atributos
 - Depende da representação das hipóteses
 - Se H for uma tabela de busca
 - Dimensão VC é infinita

Dimensão VC (8)

- Pode parecer pessimista
 - Muitas das possíveis combinações dado-classe não ocorrem na prática
 - Dados reais são mais regulares: exemplos de uma mesma classe tendem a estar próximos
 - "Coisas parecidas andam juntas"
 - Na prática, classificadores separam conjuntos maiores de dados

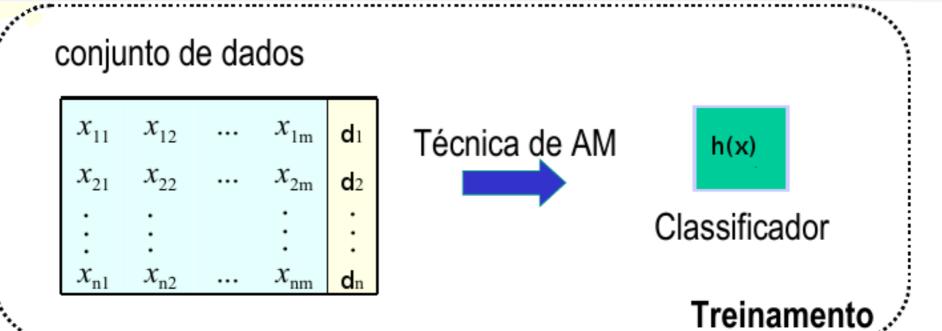
Dimensão VC ₍₉₎

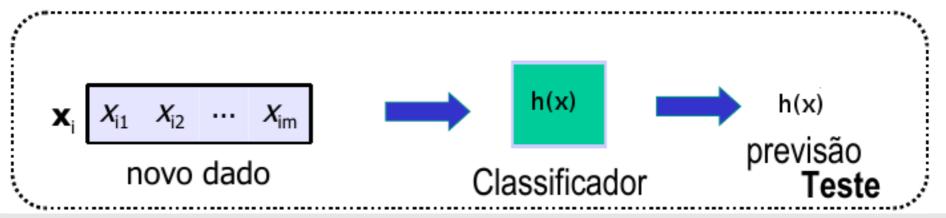
- Dimensão VC é um conceito teórico
 - É difícil de calcular com exatidão para a maioria dos classificadores
 - Quanto mais flexível o classificador, maior tende a ser sua dimensão VC

Classificação

- Técnica de classificação: abordagem sistemática para construir um classificador
 - Ex. RNs, SVMs, árvores de decisão
 - Cada técnica emprega um algoritmo de aprendizado para procurar pela melhor hipótese no espaço de hipóteses
 - Modelo gerado deve se ajustar aos dados e permitir a predição da classe de novos exemplos

Classificação (2)



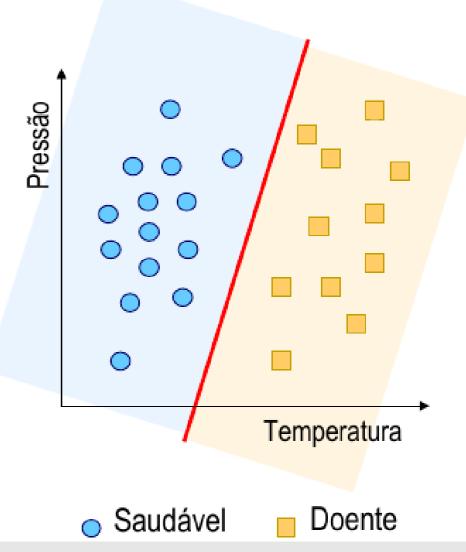


Tipos de Classificação

- Classificação Binária
- Classificação com uma Classe (detecção de novidades)
- Classificação Multiclasse
- Classificação Multi-rótulos
- Classificação com Ranking
- Classificação Hierárquica
- Existem outras

Classificação Binária

- Mais comum
 - Dados podem pertencer a uma dentre 2 classes
 - Classe positiva
 - Classe negativa

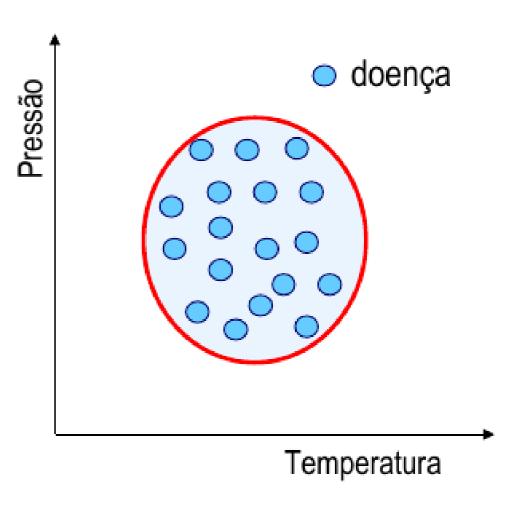


Classificação Binária (2)

- Existem várias métricas para avaliação dos classificadores
- Problema:
 - Desbalanceamento das classes
 - Nem toda tarefa de classificação é binária

Classificação com Uma Classe

- Dados somente da classe +1 (positiva)
- Ou poucos dados
- Obter exemplos negativos: difícil, custoso



Classificação com Uma Classe (2)

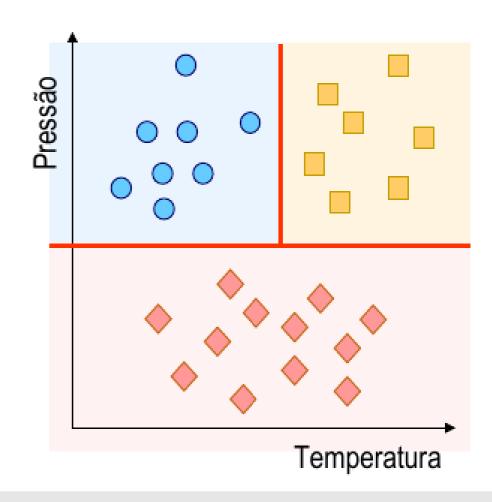
- Aprendizado com apenas exemplos positivos
 - Contra-exemplos (normalmente condições anômalas) são caros, difíceis de obter
 - Ou difíceis de caracterizar
- Exemplos negativos são importantes na definição do grau de generalização
 - Ausência dificulta indução de um classificador adequado

Problemas Multiclasses

- Várias técnicas de AM podem induzir apenas classificadores binários
- Existe um grande número de problemas reais com mais que 2 classes
 - Problemas de classificação multiclasses
 - Para serem resolvidos, são utilizadas estratégias multiclasses

Problemas Multiclasses (2)

- Dados em várias classes
 - {1, 2, ..., k}
 - Classes mutuamente excludentes
 - gripe
 - sarampo
 - amigdalite



Problemas Multiclasses (3)

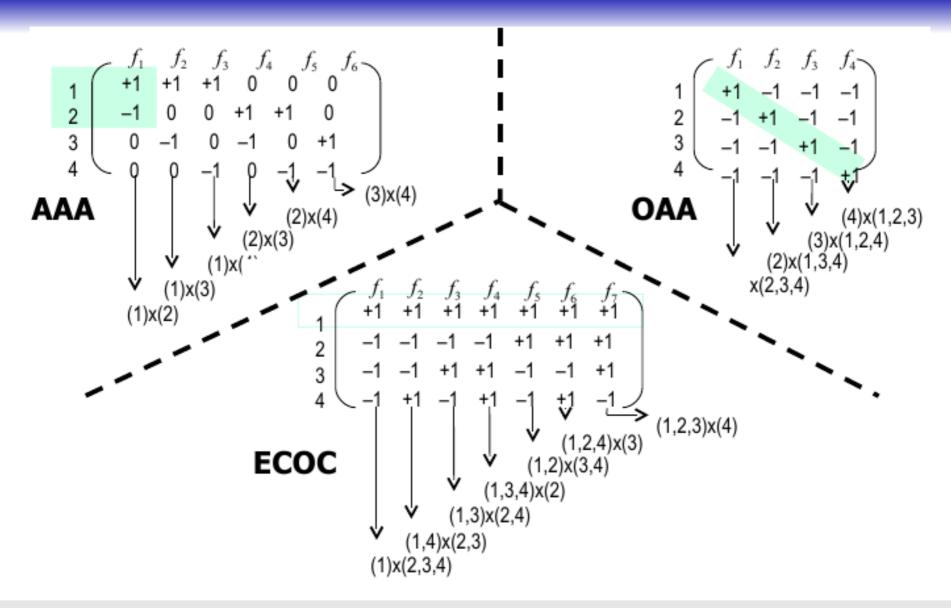
- Duas abordagens têm sido utilizadas:
 - Modificação do Algoritmo de classificação
 - Operações internas refeitas
 - Decomposição do problema multiclasse (foco da aula)
 - Um problema multiclasse é transformado em em múltiplos problemas binários

Problemas Multiclasses

Decomposição

- Geralmente reduz a complexidade do problema
- Permite processamento paralelo
- Veremos decomposição por Matrizes de Códigos (a seguir)

Matrizes de códigos



Matrizes de códigos (2)

- OAA (one against all): um contra todos
 - *n* classes → *n* classificadores
 - C_i: compare a classe i contra todas as demais
 - Classe escolhida: aquela que obteve o maior score

Matrizes de códigos (3)

- AAA (all against all): todos contra todos
 - C₁: classe 1 contra classe 2; C₂: classe 1 contra classe 3; ...
 - Classe escolhida: é feita uma votação em cada classificador
 - Também chamado de "one against one"

Matrizes de códigos (4)

- ECOC (error correction output codes): correção de erro dos códigos de saída
 - Flexibiliza o número de classificadores
 - Dois casos:
 - Caso 1: mais classificadores do que classes:
 - Saída mais confiável
 - Caso 2: menos classificadores do que classes
 - Menor custo de classificação

Matrizes de códigos (5)

- Caso 1: mais classificadores do que classes
 - Representamos classes por mapas de bits.
 - Para 4 classes, precisamos de 4 bits
 - Projetista define número de classificadores a ser utilizado
 - Por sorteio, cada classificador emite um mapa de bits diferente

Matrizes de códigos (6)

- Caso 1: exemplos
 - Classificador 1: sorteado classe 1 contra o resto
 - Saídas: 1000 para classe positiva, 0111 para negativa
 - Classificador 2: sorteado classes 2 e 3 contra o resto
 - Saídas: 0110 para positiva; 1001 para negativa
 - ...
 - Interpretando a saída: fazer a média ponderada entre os bits de todas as saídas: classe mais votada ganha

Matrizes de códigos (7)

- Caso 2: menos classificadores do que classes
 - Para 4 classes (C₁, C₂, C₃, C₄) e 2 classificadores usamos dois bits: C₁ = 00; C₂ = 01; C₃ = 10; C₄ = 11
 - Classificador 1: aprende a emitir primeiro bit
 0 = C₁ ou C₂
 1 = C₃ ou C₄
 - Classificador 2: aprende a emitir segundo bit 0 = C₁ ou C₃;
 1 = C₂ ou C4

Matrizes de códigos (8)

• Exercício: Considere que a saída ECOC do exemplo anterior foi:

$$f_1 = -1$$
 $f_2 = +1$
 $f_3 = -1$
 $f_4 = +1$
 $f_5 = -1$
 $f_6 = +1$
 $f_7 = -1$

Calcule a classe escolhida

Matrizes de códigos (8)

- Testar no Weka:
 - Meta-classificador multi-classe para classificadores baseados em duas classes
 - weka.classifiers.meta.multiclassifier
 - Testar: AAA, OAO, ECOC

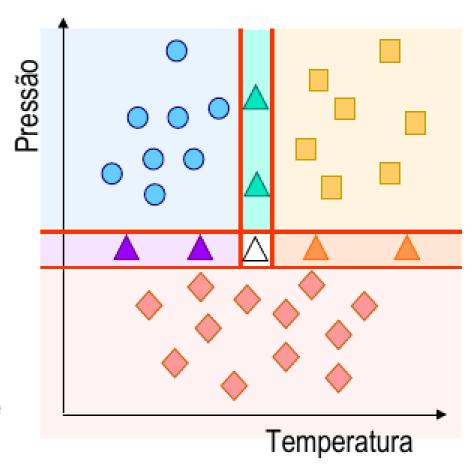
Classificação Multirrótulos

- Dados em várias classes
 - {1, 2, ..., k}
 - Classes sobrepostas



- amigdalite A sarampo e amigdalite

△ gripe, sarampo e amigdalite



Classificação Multirrótulos (2)

- Duas abordagens:
 - Adaptar algoritmo de classificação para saída multirrótulo
 - Reduzir problema para multiclasse (foco da aula)

Classificação Multirrótulos (3)

- Estratégias para reduzir problema para multiclasse:
 - 1. Usar matrizes de código
 - 2. Criar rótulos
 - 3. Eliminar instâncias
 - 4. Eliminar rótulos

Classificação Multirrótulos (4)

- Estratégia 1: usar matrizes de códigos
 - Reduz multiclasse para binário OU
 - Reduz multirrótulo para binário

Problema Multi-rótulo:

Instância 1: classes A and B

Instância 2: classe A

Instância 3: classes A and B

Instância 4: classe C

Instância 5: classe B

Instância 6: classe A

Problema com única classe:

Classificador Positiva Negativa

1, 2, 3, 6 4,5

1, 3, 5 2, 4, 6

1, 2, 3, 5, 6

Classificação Multirrótulos (5)

• Estratégia 2: criar novos rótulos

Problema Multirrótulo:

Instância 1: classes A and B

Instância 2: classe A

Instância 3: classes A and B

Instância 4: classe C

Instância 5: classe B

Instância 6: classe A

Problema monorrótulo:

Instância 1: classe D

Instância 2: classe A

Instância 3: classe D

Instância 4: classe C

Instância 5: classe B

Instância 6: classe A

Classificação Multirrótulos (6)

• Estratégia 3: eliminar instâncias

Problema Multi-rótulo:

Instância 1: classes A and B

Instância 2: classe A

Instância 3: classes A and B

Instância 4: classe C

Instância 5: classe B

Instância 6: classe A

Problema Um-rótulo:

Instância 2: classe A

Instância 4: classe C

Instância 5: classe B

Instância 6: classe A

Classificação Multirrótulos (7)

• Estratégia 4: eliminar rótulos

Problema Multirrótulo:

Instância 1: classes A and B

Instância 2: classe A

Instância 3: classes A and B

Instância 4: classe C

Instância 5: classe B

Instância 6: classe A

Problema Um-rótulo:

Instância 1: classe A

Instância 2: classe A

Instância 3: classe B

Instância 4: classe C

Instância 5: classe B

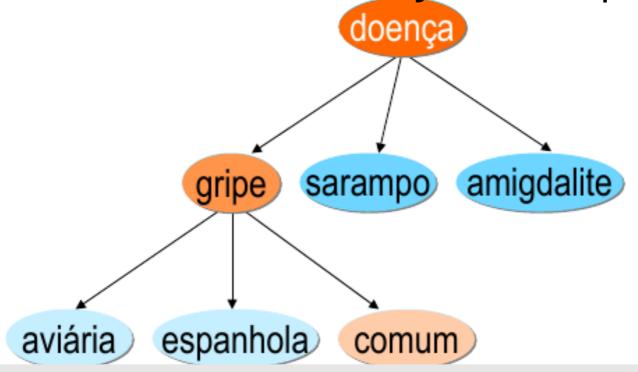
Instância 6: classe A

Classificação Hierárquica

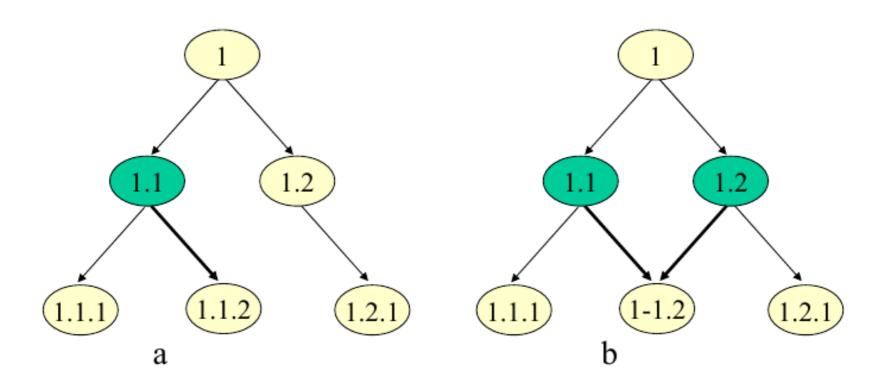
- Problemas de classificação em que:
 - Classes podem ser divididas em subclasses
 - Classes podem ser agrupadas em superclasse
- Classificação baseada em uma hierarquia
 - Predição obrigatória ou opcional em nós-folha

Classificação Hierárquica (2)

- Dados hierarquicamente organizados
 - {1, 1.1, 1.2, ..., k, k.1, k.2}
 - Classes assumem uma relação hierárquica



Tipos de Hierarquia



- (a) Árvore
- (b) Grafo Direcionado Acíclico (DAG)

Classificação Hierárquica

- Principais abordagens
 - Transformação em um problema de classificação plana (escolher um nível da árvore)
 - Um classificador por nível sem respeitar hierarquia
 - Top-down: um classificador por nível da raíz até as folhas, respeitando hierarquia
 - Big-bang: um classificador só que analisa a hierarquia como um todo

Classificação Hierárquica (6)

- Avaliação
 - Custo uniforme
 - Mais utilizada
 - Custo baseado em distância
 - Baseada na distância entre classe predita e classe verdadeira
 - Custo baseado na semântica
 - Quanto mais similares as classes, menor a penalização

Classificação com Ranking

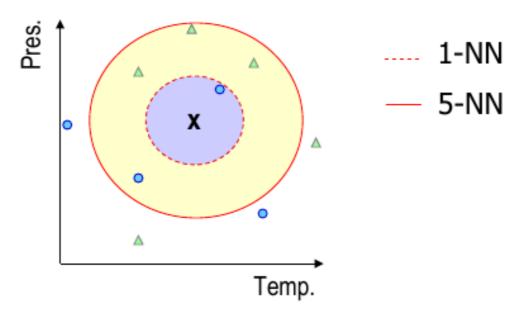
- Caso especial de classificação multirrótulos
 - Responde com as N classes que podem ser atribuídas ao exemplo de entrada
 - Ordenadas por relevância
 - Muito utilizada em recuperação de informação
 - Taxa de erro pode ser medida pela comparação de rankings

Técnicas de classificação

- Algumas técnicas de classificação:
 - k-vizinhos mais próximos
 - Regras de Decisão
 - Árvores de Decisão
 - Redes Neurais Artificiais
 - Support Vector Machines

k-vizinhos mais próximos

- Aprendizado baseado em instância
 - Classifica de acordo com distância aos vizinhos



Simples Armazenamento de dados (não há modelo explícito)

k-vizinhos mais próximos (2)

Para cada novo exemplo
Definir a classe dos k exemplos mais
próximos
Classificar exemplo na classe
majoritária de seus vizinhos

k-vizinhos mais próximos (3)

- Quantos vizinhos
 - K muito grande
 - Vizinhos podem ser muito diferentes
 - Predição tendenciosa para classe majoritária
 - Custo computacional mais elevado
 - K muito pequeno
 - Não usa informação suficiente
 - Previsão pode ser instável
- Distâncias podem ser ponderadas

k-vizinhos mais próximos (4)

 Testar no Weka: KNN com diferentes valores de k e diferentes distâncias

Regras de Decisão

Organiza informações em regras do tipo:

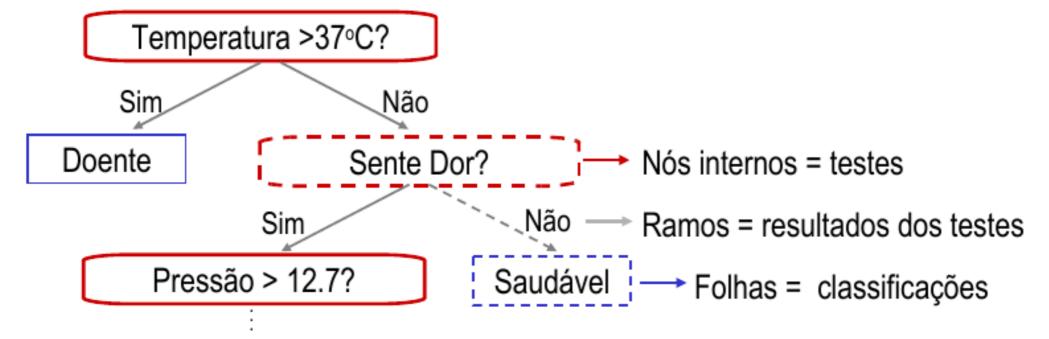
se X então Y senão Z

se temperatura > 37°C e pressão > 12.7 então Doente senão Saudável

Simples
Dificuldade em lidar com dados contínuos
Pouca robustez a dados de grande dimensão

Árvore de Decisão

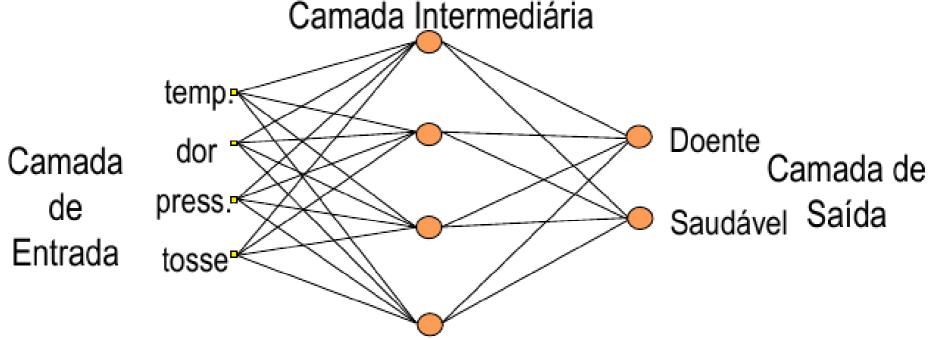
Estrutura composta de nós e ramificações



Compreensibilidade do modelo Dificuldade em lidar com dados contínuos Pouca robustez a dados de grande dimensão

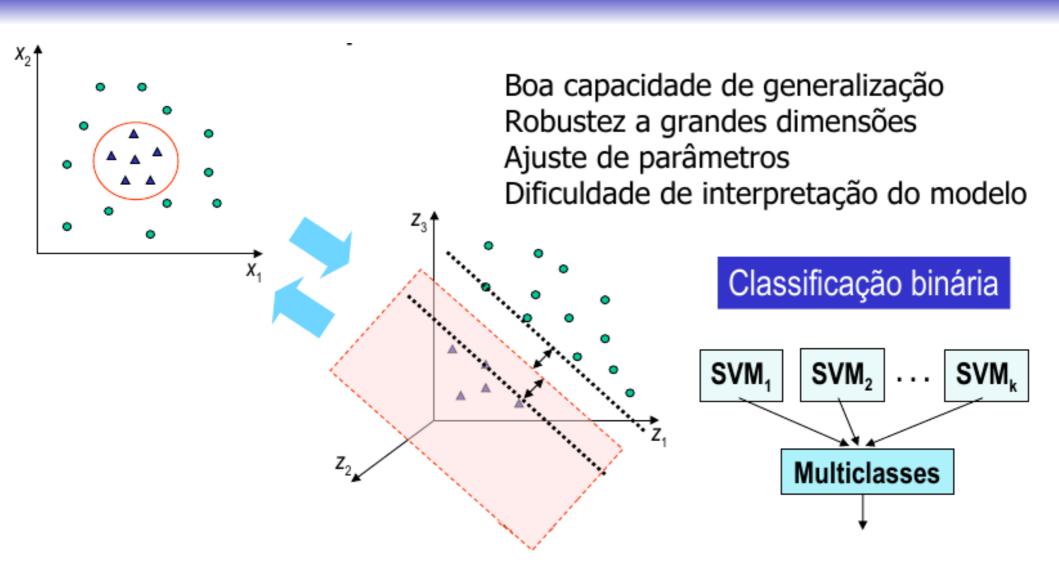
Redes Neurais Artificiais

Inspiradas na estrutura/funcionamento do cérebro



Capacidade de representar funções de formas variadas Ajuste de parâmetros Dificuldade de interpretação do modelo

Support Vector Machines



Técnicas de Classificação

- Componentes algoritmos de classificação em AM:
 - Representação: viés (bias); super- e subajustamento (over- e under-fitting)
 - Critério de avaliação: taxa de acerto; desempenho computacional; compreensibilidade
 - Método de busca: busca de parâmetros; busca do modelo

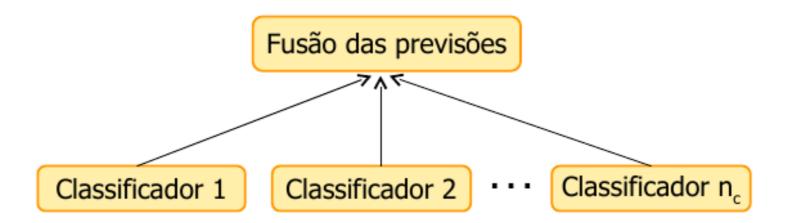
Não há técnica universal

Combinação de Classificadores

- Binário → multiclasse (homogêneo):
 - AAA, OAA, ECOC
- Classificadores instáveis (homogêneo): Bagging, boosting
- Classificadores diferentes para obter recortes mais poderosos (heterogêneo)
 - Voto, média, outro classificador

Combinação de Classificadores (2)

- Melhorar o desempenho
- Bagging
- Boosting



Combinação de Classificadores (3)

- Bagging (Bootstrap Agregating):
 - Cada classificador é treinado com uma diferente amostra do conjunto de treinamento
 - Mesmo tamanho do conjunto original
 - Classe definida por votação
 - Filosofia: só existe um jeito de acertar; mas existem vários jeitos de errar
 - Na média, acerto é mais "votado" do que os vários erros

Combinação de Classificadores (4)

- Bagging :
 - Indicado para classificadores instáveis
 - Pequena mudança nos dados de treinamento afeta muito a classificação
 - Testar:
 - weka.classifier.meta.bagging

Combinação de Classificadores (5)

- Boosting
 - Conjunto de técnicas: ex.adaboost
 - Melhora desempenho de algoritmos fracos
 - Pouco melhores que classificação aleatória
 - Desempenho dos classificadores é influenciado pela escolha do conjunto de treinamento
 - Exemplos mais difíceis são escolhidos com maior probabilidade

Combinação de Classificadores (6)

- Boosting
 - Instável
 - Pouco indicado para dados com ruídos e pequenos conjuntos de dados
 - weka.classifier.meta.adaboost

Combinação de Classificadores (7)

- Heterogêneo
 - Classificadores de diferentes abordagens
 - Treinados com
 - Todo conjunto de dados
 - Parte do conjunto de dados
 - Avaliação
 - Voto: weka.classifier.meta.vote
 - Stacking: weka.classifier.meta.stacking
 - Outro classificador

Exercícios vistos em aula

- Rodar no Weka
- 1. Testar algoritmos de regressão para base Iris
- 2. Knn com diferentes valores de k e diferentes distâncias

Exercícios vistos em aula (2)

- 3. Meta-classificador multi-classe para classificadores baseados em duas classes (weka.classifiers.meta.multiclassifier)
 - Testar: AAA, OAO, ECOC
- 4. Meta-classificadores baseados em votação (weka.classifiers.meta.vote)

Pontos chaves

- Tipos de classificação (binária, uma classe, multiclasse, multi-rótulo, hierárquica, etc)
- K-vizinhos mais próximos (KNN)
- Espaços: de instância, de hipóteses e de versões
- Matrizes de código e combinação de classificadores
- Dimensão VC

Agradecimentos/referências

Notas de aula do Prof. André de Carvalho (USP)