Modelos Preditivos

Departamento de Engenharia Informática (DEI/ISEP) Fátima Rodrigues

mfc@isep.ipp.pt

Raciocínio

Capacidade humana em trabalhar com conhecimento, factos e estratégias de resolução de problemas por forma a obter conclusões

Entender

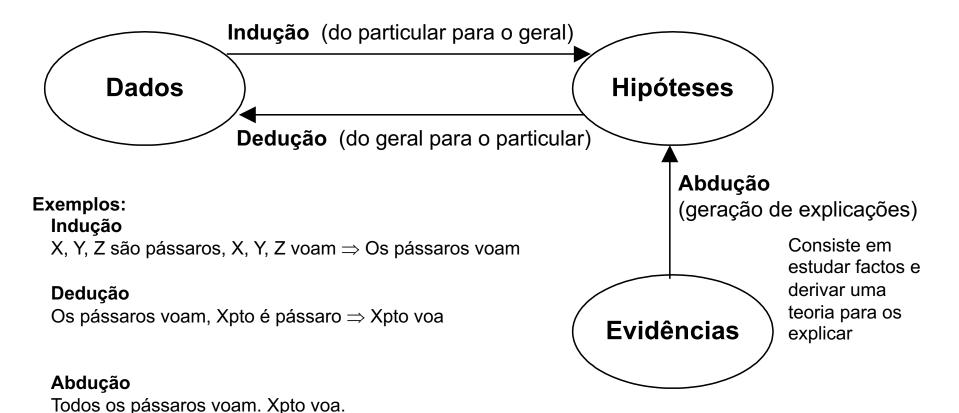
- como os humanos raciocinam
- como trabalham com a informação relativa a um dado problema

Permite

delinear o processo de inferência num algoritmo de Data Mining

Mecanismos de Raciocínio

Hipótese: Xpto é um pássaro



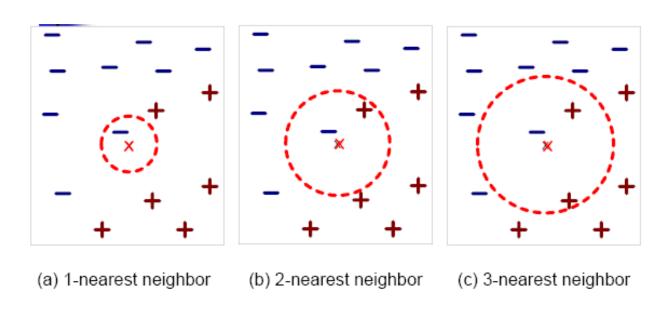
Aprendizagem Baseada em Instâncias

Aprendizagem Baseada em Instâncias

- Método dos k-vizinhos mais próximos
- Raciocínio Baseado em Memória

Método mais antigo (1967) e difundido

Prevê valores desconhecidos de registos num conjunto de dados baseando-se na combinação dos valores dos **k-registos mais próximos, mais similares** do conjunto de dados histórico



Aprendizagem baseada em instâncias

A previsão de um valor (discreto/contínuo) é feita com base nos valores mais próximos

É baseada em dois conceitos fundamentais

-Função de distância

mede a distância entre dois registos

-Função de combinação

combina os resultados a partir dos vizinhos

Distância entre exemplos

Se o conjunto de treino tem N atributos o novo exemplo a classificar x_q tem também N atributos $x_q \in \mathcal{R}, t=1,...N$

A distância entre dois pontos x_i e y_i é normalmente calculada usando a **distância euclidiana**

$$dist(x,y) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2}$$

Os atributos devem ser normalizados

Propriedades da Função de Distância

Para que uma função *possa* ser usada como função *distância* é necessário e suficiente que as seguintes condições para quaisquer objetos *d*, *p*, *q* sejam satisfeitas:

- 1. $d(p, q) \ge 0$
- 2. d(p, p) = 0
- 3. d(p, q) = d(q, p) (Simetria)
- 4. $d(p, r) \le d(p, q) + d(q, r)$ (designaldade triangular)

As mais importantes funções nesta categoria são:

Distância de Minkowski

$$dist(i,j) = \sqrt[q]{|x_{i1} - x_{j1}|^q + |x_{i2} - x_{j2}|^q + \dots + |x_{in} - x_{jn}|^q}$$

- Distância Euclidiana (q=2)
- Distância de Manhattan (q=1)

Algoritmo K-Vizinhos mais Próximos

Tendo N exemplos de treino $(x_n, f(x_n))$ n = 1,2,...,N

Para um novo registo x_q encontra os K-vizinhos mais próximos em $(x_n, f(x_n))$

Se $f(x_n)$ é discreto $f(x_q)$ é a moda $f(x_k)$ (k-vizinhos mais próximos)

Se $f(x_n)$ é contínuo $f(x_q)$ é a média (k-vizinhos mais próximos)

$$f(x_q) := \frac{\sum_{i=1}^k f(x_i)}{k}$$

Problema da Dimensionalidade

Para calcular a distância entre os pontos, o método utiliza **todos** os atributos da instância

Problema

Quando alguns destes atributos não são igualmente importantes?

Ao atribuir-se a mesma importância aos atributos, ou seja, se os atributos não forem distinguidos está-se a distorcer a noção de semelhança entre dois casos

$$dist(i,j) = \sqrt{w_i |x_{i1} - x_{j1}|^2 + w_2 |x_{i2} - x_{j2}|^2 + \dots + w_n |x_{in} - x_{jn}|^2}$$

$$\sum_{i=1}^{n} w_i = 1$$

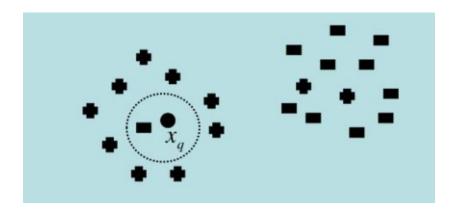
A determinação dos **pesos dos atributos** depende do objetivo da aprendizagem

Escolha K

Valores frequentes de K: 1, 3, 5,, valores ímpares

Menores valores de K:

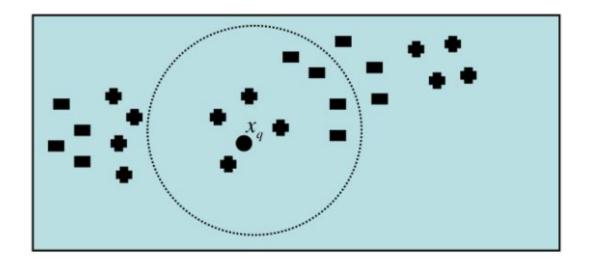
pode aumentar a contribuição de exemplos ruidosos



Escolha K

Valores elevados de K:

 pode aumentar a contribuição de exemplos pouco similares e logo, menos relevantes



K deve ser estimado experimentalmente

Vantagens / Desvantagens

- ✓ Processa qualquer número de variáveis dependentes
- ✓ Pode ser usada para prever quer valores contínuos quer valores discretos
- ✓ Qualquer função de distância pode ser usada
- ✓ Fácil de implementar
- ✓ Facilmente atualizado por expansão ou substituição do conjunto de treino
- √ É fácil entender os resultados
- × Computacionalmente intensivo o calculo das distâncias entre casos
- X Os resultados dependem da função distância usada, da função combinação e do número de vizinhos usados
- Necessita de grandes conjuntos de treino
- × Sensibilidade a valores isolados e variáveis irrelevantes
- X Ausência de qualquer modelo para "mostrar" ao utilizador

Aprendizagem Baseada em Probabilidades

Teoria Bayesiana - Motivação

Aprendizagem Bayesiana

Usa dados acerca de eventos passados para estimar a probabilidade de eventos futuros

→ requer **Probabilidades à priori**

A Teoria Bayesiana faz duas assunções:

- Os atributos são igualmente importantes
- Os atributos são estatisticamente independentes (sabendo a sua classe)
 - i.e., saber o valor de um atributo n\u00e3o diz nada acerca do valor de outro atributo (se a classe for conhecida)
- Assunções de independência normalmente não são corretas!
- No entanto ... no esquema de aprendizagem Bayesiana funciona bem

Teoria de Probabilidades

Teoria da Probabilidade

- É uma aproximação matemática para processar informação incerta
- Propõe a existência de um valor P(E) Probabilidade que consiste na possibilidade de ocorrência de um evento E a partir de uma sequência de experiências de eventos aleatórios
- Se uma determinada experiência for realizada um número considerável de vezes, então podemos ter quase a certeza que a frequência relativa do evento E é aproximadamente igual a P(E)
- O conjunto de todos os possíveis resultados de uma experiência (eventos) é denominado espaço da amostra S
- A probabilidade total de todos os possíveis resultados de um ensaio é sempre 100%

Probabilidade Discreta

Experiências com resultados discretos

$$P(E) = \frac{W(E)}{n}$$

A probabilidade de um evento discreto é dada pelo nº de vezes que esse evento correu dividido pelo nº total de experiências

Exemplo

Se 10 mensagens em 50 forem spam \Rightarrow P(spam) = 10/50 = 20%

Para um espaço amostral com dois possíveis eventos: spam/não-spam P(não-spam) = 1 - P(spam) = 1-0.20 = 80%

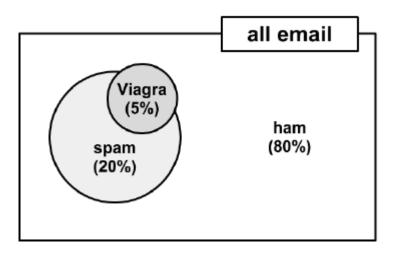
Isso funciona porque spam e não-spam são **mutuamente exclusivos** e **exaustivos**: os eventos não podem ocorrer ao mesmo tempo e são os únicos resultados possíveis no espaço amostral

Probabilidade Conjunta

- Muitas vezes, estamos interessados em monitorar vários eventos não mutuamente exclusivos no mesmo espaço amostral
- Se alguns eventos ocorrem simultaneamente com o evento de interesse, é útil usá-los para fazer previsões

Exemplo

Considere, por exemplo, um segundo evento com base no resultado que a mensagem de e-mail contém a palavra Viagra



Probabilidades Conjunta

- Pretende-se estimar a probabilidade de Spam e Viagra ocorrerem conjuntamente, ou seja P(Spam ∩ Viagra)
- Se Spam e Viagra fossem dois eventos independentes

$$P(Spam \cap Viagra) = P(Spam) \times P(Viagra)$$

```
P(Spam) = 20\%
 P(Viagra) = 5\% \Rightarrow P(Spam \cap Viagra) = 0.20 \times 0.05 = 0.01 (1%)
```

Mas como a P(Spam) e P(Viagra) são altamente dependentes, significa que **o cálculo não é correto**

Probab. Condicional – Teorema de Bayes

As relações entre os eventos dependentes podem ser descritas por meio do **Teorema de Bayes**, como mostrado na seguinte fórmula:



$$P(A \mid B) = \frac{P(B \mid A)P(A)}{P(B)} = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$$

A notação P(A|B) pode ser lido como a probabilidade do evento A, uma vez que o evento B ocorreu

Isto é conhecido como **probabilidade condicional**, uma vez que a probabilidade de A é dependente (isto é, é condicionada) pelo evento B

Probabilidade Condicional

 Se uma mensagem for selecionada aleatoriamente da caixa de correio e essa mensagem contiver a palavra Viagra (evento B), qual é a probabilidade da mensagem ser Spam (evento A)?

Aplicando o teorema de Bayes calcula-se a probabilidade posterior que mede o quão provável a mensagem poderá ser Spam

Probab. marginal Probab. à priori
$$P(Spam | Viagra) = \frac{P(Viagra | Spam)P(Spam)}{P(Viagra)}$$

Probab. à posteriori

Teorema de Bayes

Supondo que temos 100 mensagens (20 spam/80 ham) na nossa caixa de correio:

5 mensagens contêm a palavra Viagra, e se destas 4 forem Spam
 P(Viagra|Spam) = 4/20 = 0.20 -> probabilidade marginal

$$P(Spam | Viagra) = \frac{P(Viagra | Spam)P(Spam)}{P(Viagra)}$$

$$P(Spam | Viagra) = \frac{0.2 \times 0.2}{0.05} = 0.8$$

Portanto, **80%** é a probabilidade de uma mensagem ser spam, uma vez que contém a palavra *Viagra*

Teorema de Bayes

Se adicionarmos mais termos ao nosso filtro de spam:

	Via	gra	Dink	neiro	Fitr	ness	Unsub	scribe	
Frequência	Sim	Não	Sim	Não	Sim	Não	Sim	Não	
Spam	4	16	10	10	0	20	12	8	20
Não Spam	1	79	14	66	8	72	23	57	80
Total									100

Qual a probabilidade de uma mensagem ser spam se Viagra = Sim, Dinheiro = Não, Fitness = Não, e Unsubscribe = Sim:

$$P(Spam | W_1 \cap \neg W_2 \cap \neg W_3 \cap W_4) = \frac{P(W_1 \cap \neg W_2 \cap \neg W_3 \cap W_4 | Spam)P(Spam)}{P(W_1 \cap \neg W_2 \cap \neg W_3 \cap W_4)}$$

Fórmula computacionalmente muito difícil de resolver!

Classificador Bayesiano Naive (Ingénuo)

Suposição Naive Bayes

$$P(a_i, a_2, ..., a_n | v_j) = \prod_i P(a_i | v_j)$$

Ou seja, as variáveis a_1 , a_2 , ..., a_n , são independentes

Seja o valor v_j do atributo a prever de uma instância da amostra com n atributos previsores com valores $a_1, a_2, ..., a_n$ a probabilidade do valor v_j do atributo a prever é igual ao produto das probabilidades individuais de cada atributo

Fazendo a substituição no Classificador Bayesiano Naive

$$V_{MPP} = \underset{v_j \in V}{\operatorname{arg\,max}} \ P(v_j) \times \prod_i P(a_i \mid v_j)$$

VMPP é o valor previsto pelo classificador Bayesiano

Suposição Naive Bayes

$$P(Spam | W_1 \cap \neg W_2 \cap \neg W_3 \cap W_4) = \frac{P(W_1 \cap \neg W_2 \cap \neg W_3 \cap W_4 | Spam)P(Spam)}{P(W_1 \cap \neg W_2 \cap \neg W_3 \cap W_4)}$$

Naive Bayes assume independência condicional de classe, o que significa que os eventos são independentes desde que condicionados ao mesmo valor de classe

Assumindo independência condicional a fórmula pode ser simplificada:

$$P(Spam \mid W_1 \cap \neg W_2 \cap \neg W_3 \cap W_4) = \frac{P(W_1 \mid spam)P(\neg W_2 \mid spam)P(\neg W_3 \mid spam)P(W_4 \mid Spam)P(Spam)}{P(W_1)P(\neg W_2)P(\neg W_3)P(W_4)}$$

O resultado desta fórmula deve ser comparado com a probabilidade da mensagem ser não-spam

Suposição Naive Bayes

	Via	gra	Dinh	neiro	Fitr	ness	Unsub	scribe	
Frequência	Sim	Não	Sim	Não	Sim	Não	Sim	Não	
Spam	4	16	10	10	0	20	12	8	20
Não Spam	1	79	14	66	8	72	23	57	80
Total									100

$$P(Spam \mid W_1 \cap \neg W_2 \cap \neg W_3 \cap W_4) = \frac{4}{20} \times \frac{10}{20} \times \frac{20}{20} \times \frac{12}{20} \times \frac{20}{100} = 0.012$$

$$P(\text{n\~ao Spam} \mid W_1 \cap \neg W_2 \cap \neg W_3 \cap W_4) = \frac{1}{80} \times \frac{66}{80} \times \frac{72}{80} \times \frac{23}{80} \times \frac{80}{100} = 0.002$$

Suposição Naive Bayes

$$P(Spam \mid W_1 \cap \neg W_2 \cap \neg W_3 \cap W_4) = \frac{4}{20} \times \frac{10}{20} \times \frac{20}{20} \times \frac{12}{20} \times \frac{20}{100} = 0.012$$

$$P(\text{n\~ao Spam} \mid W_1 \cap \neg W_2 \cap \neg W_3 \cap W_4) = \frac{1}{80} \times \frac{66}{80} \times \frac{72}{80} \times \frac{23}{80} \times \frac{80}{100} = 0.002$$

Convertendo estes números em probabilidades:

$$P(spam) = \frac{0.012}{(0.012 + 0.002)} = 0.857$$
 $P(n\tilde{a}o\ spam) = 1 - 0.857 = 0.143$

Segundo o padrão de palavras da mensagem: esta mensagem é spam com **85,7%** de probabilidade, e não-spam com **14,3%** de probabilidade

Classificador Bayesiano: Problemas

Se a probabilidade condicional de um dos atributos for nula, a probabilidade da classe será também nula

Por outro lado se os exemplos de treino não cobrirem todos os valores possíveis dos atributos, não será possível classificar determinados registos

Exemplo:

Considere-se outra mensagem com os termos: Viagra, Dinheiro, Fitness e Unsubscribe:

$$P(Spam \mid W_1 \cap W_2 \cap W_3 \cap W_4) = \frac{4}{20} \times \frac{10}{20} \times \frac{0}{20} \times \frac{12}{20} \times \frac{20}{100} = 0$$

$$P(n\tilde{a}o\ spam\ |\ W_1\cap W_2\cap W_3\cap W_4) = \frac{1}{80}\times\frac{14}{80}\times\frac{8}{80}\times\frac{23}{80}\times\frac{80}{100} = 0.00005$$

$$P(spam) = \frac{0}{(0+0.0099)} = 0$$
 Contudo a mensagem contém muitos termos relacionados com spam!

Estimativa Laplace

Este problema pode ser tratado usando a **estimativa Laplace** para cálculo das probabilidades condicionais

O estimador de Laplace essencialmente adiciona uma pequena quantidade a cada uma das contagens na tabela de frequência, o que assegura que cada característica tem uma probabilidade não nula

Tipicamente, o estimador de Laplace é ajustado para 1, o que garante que cada combinação de características da classe é encontrado nos dados pelo menos uma vez

Estimativa Laplace

Tabela de frequência inicial

	Via	gra	Dink	neiro	Fitr	ness	Unsub	scribe	
Frequência	Sim	Não	Sim	Não	Sim	Não	Sim	Não	
Spam	4	16	10	10	0	20	12	8	20
Não Spam	1	79	14	66	8	72	23	57	80
Total									100

Tabela de frequência com a estimativa Laplace

	Via	gra	Dink	neiro	Fitr	ness	Unsub	scribe	
Frequência	Sim	Não	Sim	Não	Sim	Não	Sim	Não	
Spam	5	17	11	11	1	21	13	9	22
Não Spam	2	80	15	67	9	73	24	58	82
Total									104

Estimativa Laplace

	Via	gra	Dinh	neiro	Fitr	ness	Unsub	scribe	
Frequência	Sim	Não	Sim	Não	Sim	Não	Sim	Não	
Spam	5	17	11	11	1	21	13	9	22
Não Spam	2	80	15	67	9	73	24	58	82
Total									104

$$P(Spam \mid W_1 \cap W_2 \cap W_3 \cap W_4) = \frac{5}{22} \times \frac{11}{22} \times \frac{1}{22} \times \frac{13}{22} \times \frac{22}{104} = 0.00065$$

$$P(n\tilde{a}o Spam | W_1 \cap W_2 \cap W_3 \cap W_4) = \frac{2}{82} \times \frac{15}{82} \times \frac{9}{82} \times \frac{24}{82} \times \frac{82}{104} = 0.00011$$

O estimador de Laplace pode ser ajustado para qualquer valor, o valor 1 é o mais usado

Teorema de Bayes

A aplicação do teorema de Bayes como classificador requer que se conheçam:

- duas probabilidades a priori P(decisão_i)
- uma probabilidade condicional P(x|decisão_i)

Este classificador é ótimo no sentido em que, em média, nenhum outro classificador pode obter melhores resultados usando a mesma informação

Na prática estas probabilidades são desconhecidas

 Estimativas fiáveis destas probabilidades a partir de um conjunto de exemplos requerem um número infinito de exemplos

Assumem-se simplificações no calculo de P(x|decisão)

Assume-se que os atributos são independentes da decisão

→Classificador Bayesiano Naive

Classificador Bayesiano Naive: Exemplo

Tempo	Temperatura	Humidade	Vento	Joga ?
Sol	elev	elev	N	N
Sol	elev	elev	S	N
Nublado	elev	elev	N	S
Chuva	med	elev	N	S
Chuva	baixa	normal	N	S
Chuva	baixa	normal	S	N
Nublado	baixa	normal	S	S
Sol	med	elev	N	N
Sol	baixa	normal	N	S
Chuva	med	normal	N	S
Sol	med	normal	S	S
Nublado	med	elev	S	S
Nublado	elev	normal	N	S
Chuva	med	elev	S	N

Sol baixa elev S ?

Segundo o Classificador Bayesiano Naive é necessário calcular

$$v_{NB} = \underset{v_j \in V}{argmax} P'(v_j) \prod_{a_i \in x} P'(a_i \mid v_j)$$

Classificador Bayesiano Naive: Exemplo

Tabelas de Frequência

Tempo	I	Não	Sim
Sol	I	3	2
Nublado		0	4
Chuva		2	3

Temper.	I	Não	Sim
elev		2	2
med	I	2	4
baixa		1	3

Humidade	I	Não	Sim
elev		4	3
normal		1	6

Vento	I	Não	Sim
N		2	6
S	l	3	3

Tabelas de Probabilidades

Temp.	١	Não	Sim
elev	I	2/5	2/9
med		2/5	4/9
baixa		1/5	3/9

Humidade	I	Não	Sim
elev	I	4/5	3/9
normal		1/5	6/9

Vento	I	Não	Sim
N	I	2/5	6/9
S		3/5	3/9

$$P(\text{jogar}=\text{Sim}|x) = P(\text{jogar}=\text{Sim}) \times P(\text{Sol}|\text{Sim}) \times P(\text{baixa}|\text{Sim}) \times P(\text{elev}|\text{Sim}) \times P(\text{S}|\text{Sim})$$
$$= 9/14 \times 2/9 \times 3/9 \times 3/9 \times 3/9 = 0.0053$$

$$P(jogar=N\tilde{a}o|x) = P(jogar=N\tilde{a}o)\times P(Sol|N\tilde{a}o)\times P(baixa|N\tilde{a}o)\times P(elev|N\tilde{a}o)\times P(S|N\tilde{a}o)$$

=
$$5/14 \times 3/5 \times 1/5 \times 4/5 \times 3/5 =$$
0.021

$$P(jogar=N\tilde{a}o|x) > P(jogar=Sim|x) \Rightarrow Sol baixa elev$$

Probabilidades a partir de Atributos Contínuos

Atributos contínuos

- Discretizar
- Partição baseada em dois valores: (A < v) ou (A > v)
- Estimativa baseada na densidade de Probabilidade :
 - Assume-se que o atributo segue uma distribuição normal ou binomial
 - Usa-se a amostra para estimar os parâmetros da distribuição

média:
$$\mu = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$$
 desvio padrão: $\sigma^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \mu)^2$

e para estimar a Probabilidade condicional P(A_i|c)

$$P(A_i \mid c_j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{ij}^2}} e^{-\frac{(A_i - \mu_{ij})^2}{2\sigma_{ij}^2}}$$

Atributos Numéricos

Tempo	Temperatura	Humidade	Vento	Joga ?
Sol	85	85	N	N
Sol	80	90	S	N
Nublado	83	86	N	S
Chuva	70	96	N	S
Chuva	68	80	N	S
Chuva	65	70	S	N
Nublado	64	65	S	S
Sol	72	95	N	N
Sol	69	70	N	S
Chuva	75	80	N	S
Sol	75	70	S	S
Nublado	72	90	S	S
Nublado	81	75	N	S
Chuva	71	91	S	N

Sol 66 90 S ?

É necessário calcular

$$P(A_i \mid c_j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{ij}^2}} e^{-\frac{(A_i - \mu_{ij})^2}{2\sigma_{ij}^2}}$$

Classificador Bayesiano Naive: Exemplo

Tabelas de Probabilidades

Tempo	Não	Sim
Sol	3/5	2/9
Nublado	0/5	4/9
Chuva	2/5	3/9

Temper | Não Sim
$$\mu = 74,6 \ \mu = 73,0$$
 $\sigma = 7,893 \ \sigma = 6,164$

Humidade | Não Sim

$$μ = 86,2$$
 $μ = 79,11$
 $σ = 9,731$
 $σ = 10,126$

$$P(Temper = 66 | Joga = S) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(6.164)^2}} e^{-\frac{(66-73)^2}{2\times6,164^2}} = 0.0590$$

$$P(Temper = 66 | Joga = N) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(7.893)^2}} e^{-\frac{(66-74,6)^2}{2\times7,893^2}} = 0.0472$$

$$P(Humidade = 90 | Joga = S) = 0.041$$

$$P(Humidade = 90 | Joga = N) = 0.042$$

Classificador Bayesiano Naive: Exemplo

Tabelas de Frequência

Tempo	I	Não	Sim
Sol	I	3	2
Nublado		0	4
Chuva		2	3

Temper.	Não	Sim
	65	68
	71	75
	85	
	80	69
	72	75

Humidade	Não	Sim
	70	70
	91	70
	85	
	90	90
	95	90

Vento	I	Não	Sim
N		2	6
S		3	3

Tabelas de Probabilidades

Temper | Não
 Sim

$$\mu$$
 =74,6,0
 μ =73,0

 σ =7,89
 σ =6,16

Humidade | Não Sim

$$μ = 86,2$$
 $μ = 79,11$
 $σ = 9,73$
 $σ = 10,22$

Vento	•	Não	SIm
N		2/5	6/9
S	I	3/5	3/9

$$P(jogar=Sim|x) = P(jogar=Sim) \times P(Sol|Sim) \times P(66|Sim) \times P(90|Sim) \times P(S|Sim)$$

$$= 9/14 \times 2/9 \times 0.0590 \times 0.041 \times 3/9 = 0.00012$$

$$P(jogar=N\tilde{a}o|x) = P(jogar=N\tilde{a}o) \times P(Sol|N\tilde{a}o) \times P(66|N\tilde{a}o) \times P(90|N\tilde{a}o) \times P(S|N\tilde{a}o)$$

=
$$5/14 \times 3/5 \times 0.0472 \times 0.042 \times 3/5 =$$
0.00025

$$P(jogar=N\tilde{a}o|x) > P(jogar=Sim|x) \Rightarrow Sol 66 90$$

Ν

Classificador Naive Bayes - Vantagens

- Robusto no tratamento de valores isolados
 - Valores isolados afetam pouco o cálculo das probabilidades
- Robusto no tratamento de atributos irrelevantes
 - Atributos afetam pouco as probabilidades relativas entre classes
- Fácil de implementar
- Capaz de classificar amostras com valores ausentes
- Considera todos os atributos como igualmente importantes
- Complexidade computacional linear em todas as variáveis do problema

Classificador Naive Bayes - Desvantagens

- Calculo de um número muito elevado de probabilidades
- Amostras suficientemente representativas (elevada dimensão)
 para se obterem probabilidades precisas
 - Deve ser usado se disponível um conjunto de treino médio ou grande
- Suposição de independência condicional
- Não capta dependências entre variáveis
- Desempenho pode ser afetado pela presença de atributos correlacionados