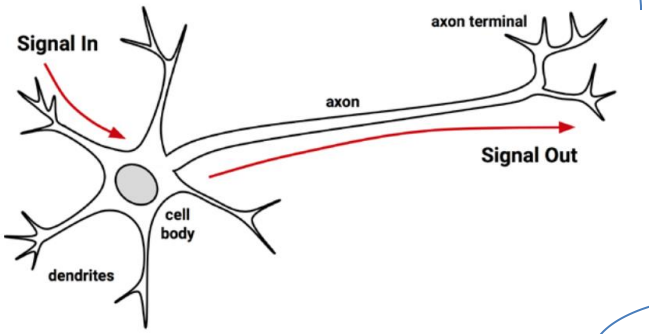
INSTITUTO FEDERAL
Santa Catarina
Câmpus São José

Aplicação de Técnicas de Aprendizagem de Máquina utilizando R

Mário de Noronha Neto e Richard Demo Souza

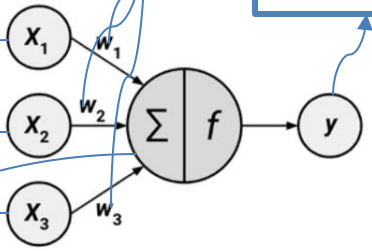
Redes Neurais

Estrutura de um neurônio biológico (Dendritos, núcleo, axônio e terminais do axônio)



Pesos de cada entrada de acordo com sua **importância**.

Variável de saída



Sinais de **entrada** recebidos pelos dendritos

Os sinais de entrada **são somados** e enviados para uma função de ativação, denotada por '***f***'.

Neurônio artificial

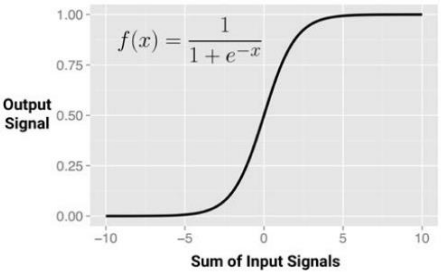
Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition

Redes Neurais - Funções de ativação

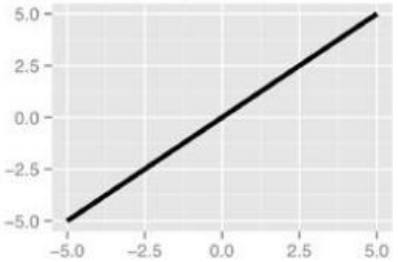
Função de ativação: Uma função que tem a finalidade de processar a informação de entrada da rede antes de encaminhá-la adiante.

$$y(x) = f\left(\sum_{i=1}^{n} w_i x_i\right)$$

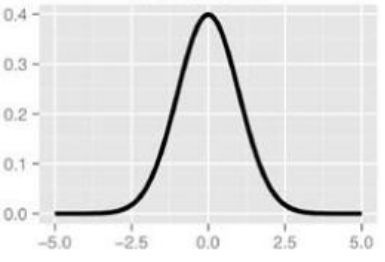
Sigmoid



Linear

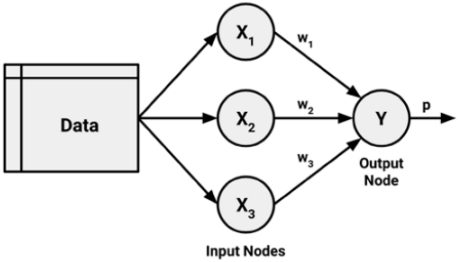


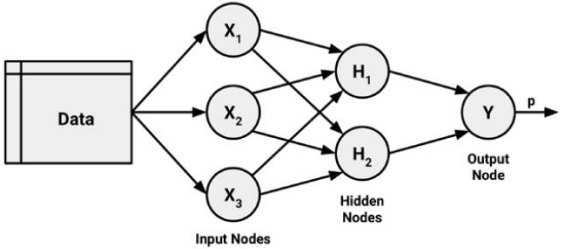
Gaussiana

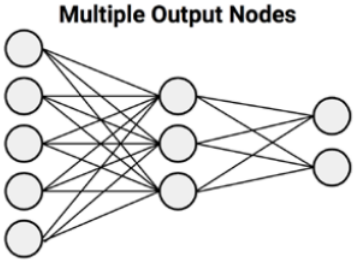


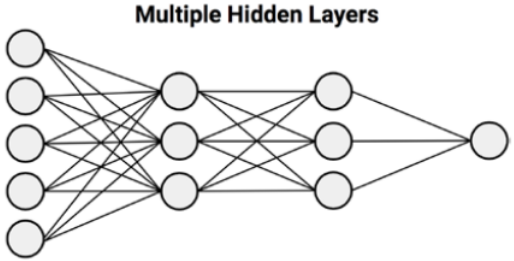
Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition

Redes Neurais - Topologias









Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition

Redes Neurais

Strengths	Weaknesses
• Can be adapted to classification or numeric prediction problems • Capable of modeling more complex patterns than nearly any algorithm • Makes few assumptions about the data's underlying relationships	• Extremely computationally intensive and slow to train, particularly if the network topology is complex • Very prone to overfitting training data • Results in a complex black box model that is difficult, if not impossible, to interpret

Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition

Exemplo: Modelando a resistência de concreto.

Passo 1: Coleta de dados

Dataset utilizado:

O *dataset* utilizado neste exemplo pode ser encontrado no repositório de ML da UCI (http://archive.ics.uci.edu/ml). Este conjunto possui 1030 exemplos de concretos com oito características descrevendo os componentes utilizado em sua mistura, tais como cimento, areia e agua, todos em kg por metro cúbico. A combinação dessas características está relacionada à resistência do concreto (variável *strength*)

Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition

Passo 2: Explorando e preparando os dados

```
concrete <- read.csv("concrete.csv")
str(concrete)

'data.frame':   1030 obs. of  9 variables:
 $ cement      : num  141 169 250 266 155 ...
 $ slag        : num  212 42.2 0 114 183.4 ...
 $ ash         : num  0 124.3 95.7 0 0 ...
 $ water       : num  204 158 187 228 193 ...
 $ superplastic: num  0 10.8 5.5 0 9.1 0 0 6.4 0 9 ...
 $ coarseagg   : num  972 1081 957 932 1047 ...
 $ fineagg     : num  748 796 861 670 697 ...
 $ age         : int  28 14 28 28 28 90 7 56 28 28 ...
 $ strength    : num  29.9 23.5 29.2 45.9 18.3 ...
```

Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition

Passo 2: Explorando e preparando os dados

Utilizando a função *summary* e *hist.,* podemos observar que as características possuem escalas bem distintas e que distribuições distantes de uma distribuição normal. Desta forma, a normalização dos dados para uma escale entre 0 e 1 pode ser apropriada antes de realizar o treinamento. **Lembrando que qualquer transformação feita antes do processo de treinamento deve ser desfeita futuramente para obter os dados na unidade original de medida**.

```
> normalize <- function(x) {
    return((x - min(x)) / (max(x) - min(x)))
  }
> concrete_norm <- as.data.frame(lapply(concrete, normalize))

> summary(concrete_norm$strength)
    Min. 1st Qu.  Median    Mean 3rd Qu.    Max.
  0.0000  0.2664  0.4001  0.4172  0.5457  1.0000

> summary(concrete$strength)
   Min. 1st Qu.  Median    Mean 3rd Qu.    Max.
   2.33   23.71   34.44   35.82   46.14   82.60
```

Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition

Passo 2: Explorando e preparando os dados

Como o *dataset* extraído do arquivo .csv já está organizado de forma aleatória, podemos separar as sequências de teste e treinamento como apresentado a seguir. Utilizaremos 75% dos dados para o treinamento e 25% para testes.

```
> concrete_train <- concrete_norm[1:773, ]
> concrete_test <- concrete_norm[774:1030, ]
```

Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition

Passo 3: Treinando o modelo

Neural network syntax

using the `neuralnet()` function in the `neuralnet` package

Building the model:

```
m <- neuralnet(target ~ predictors, data = mydata,
               hidden = 1)
```

- `target` is the outcome in the `mydata` data frame to be modeled
- `predictors` is an R formula specifying the features in the `mydata` data frame to use for prediction
- `data` specifies the data frame in which the `target` and `predictors` variables can be found
- `hidden` specifies the number of neurons in the hidden layer (by default, 1)

The function will return a neural network object that can be used to make predictions.

Making predictions:

```
p <- compute(m, test)
```

- `m` is a model trained by the `neuralnet()` function
- `test` is a data frame containing test data with the same features as the training data used to build the classifier

The function will return a list with two components: `$neurons`, which stores the neurons for each layer in the network, and `$net.result`, which stores the model's predicted values.

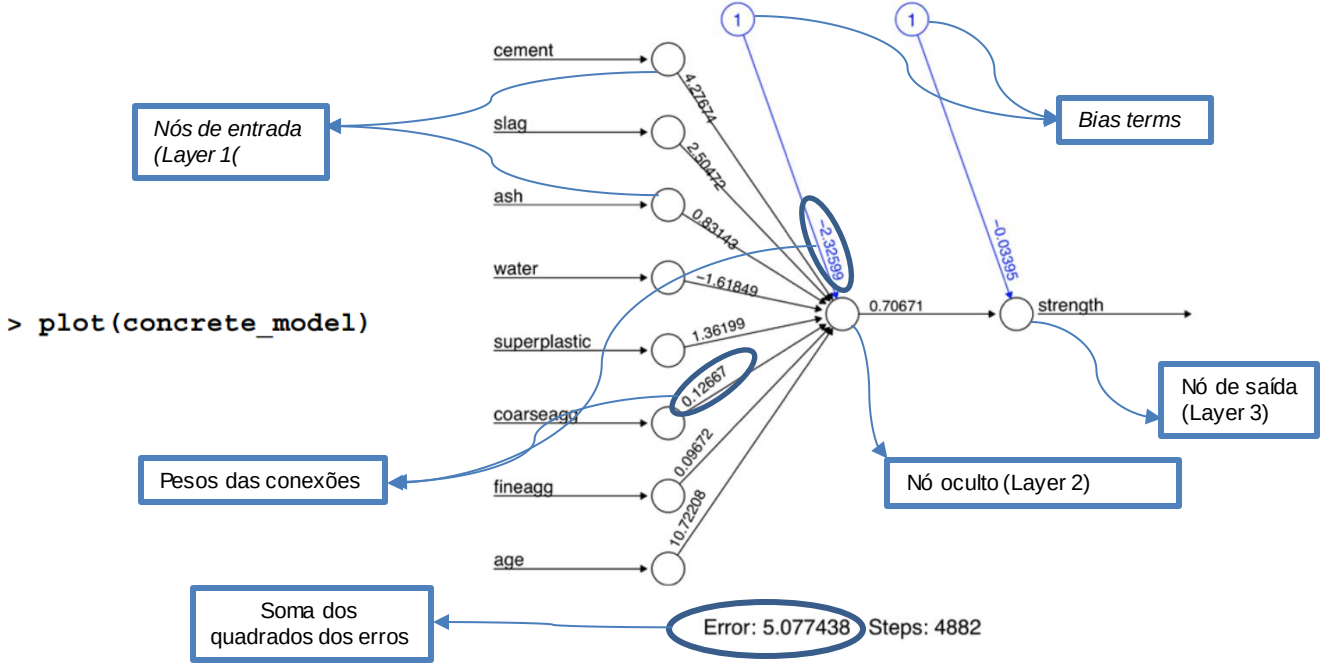
Example:

```
concrete_model <- neuralnet(strength ~ cement + slag
  + ash, data = concrete)
model_results <- compute(concrete_model,
  concrete_data)
strength_predictions <- model_results$net.result
```

Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition

Passo 3: Treinando o modelo

```
> concrete_model <- neuralnet(strength ~ cement + slag
  + ash + water + superplastic + coarseagg + fineagg + age,
  data = concrete_train)
```




```
> plot(concrete_model)
```

Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition

Passo 4: Avaliando o modelo

```
> model_results <- compute(concrete_model, concrete_test[1:8])

> predicted_strength <- model_results$net.result

> cor(predicted_strength, concrete_test$strength)
             [,1]
[1,] 0.8064655576
```

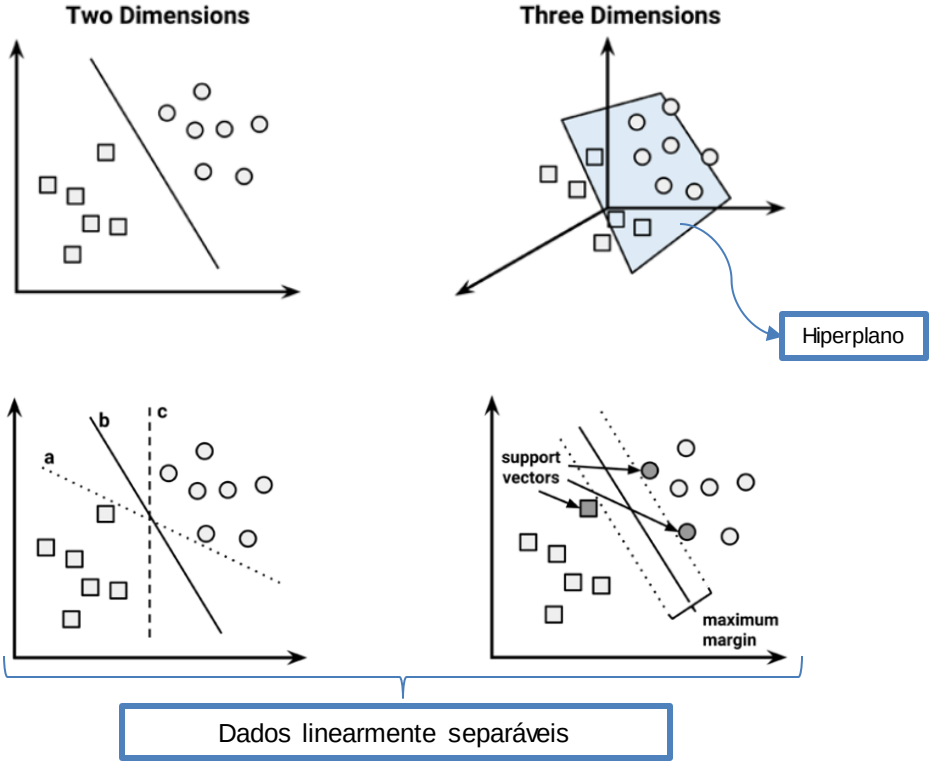
Retorna duas componentes $neurons, a qual armazena os valores do neurônio em cada camada da rede, e $net.result, o qual armazena os valores previstos.

Como este exemplo é um problema de predição numérica, podemos utilizar a função *cor ()* para avaliar o desempenho da NN.

Este valor indica que existe uma correlação relativamente forte entre as variáveis. Uma NN com topologia mais complexa é capaz de aprender conceitos mais difíceis. **Tente aumentar o número de camadas e nós ocultos e avalie o resultado.**

Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition

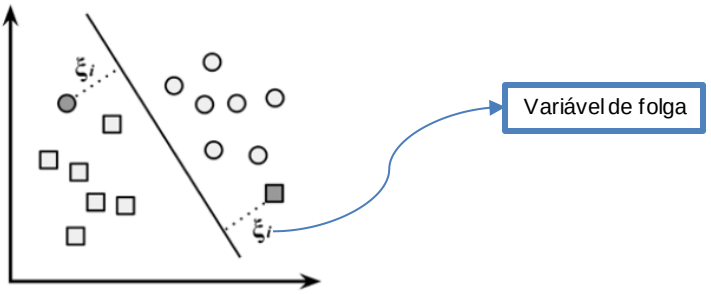
Support Vector Machines - SVM

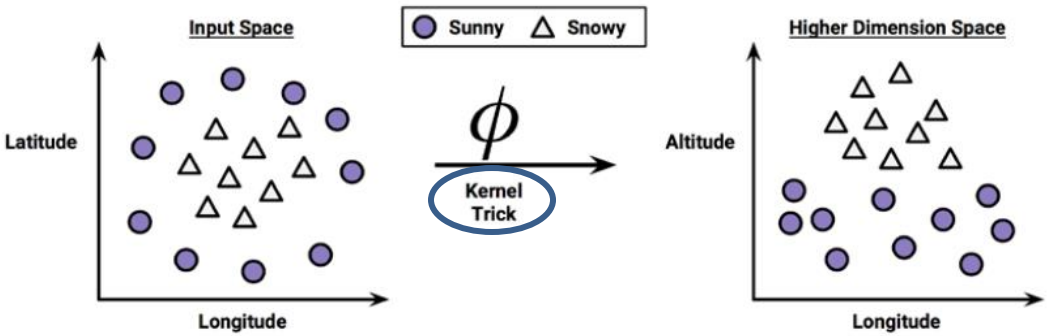


Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition

Support Vector Machines - SVM

relação não linear entre as variáveis





Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition

Support Vector Machines - SVM

Strengths	Weaknesses
• Can be used for classification or numeric prediction problems • Not overly influenced by noisy data and not very prone to overfitting • May be easier to use than neural networks, particularly due to the existence of several well-supported SVM algorithms • Gaining popularity due to its high accuracy and high-profile wins in data mining competitions	• Finding the best model requires testing of various combinations of kernels and model parameters • Can be slow to train, particularly if the input dataset has a large number of features or examples • Results in a complex black box model that is difficult, if not impossible, to interpret

Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition

Exemplo: OCR com SVM

Passo 1: Coleta de dados

Dataset utilizado:

O *dataset* utilizado neste exemplo pode ser encontrado no repositório de ML da UCI (http://archive.ics.uci.edu/ml). Este conjunto possui 20000 das 26 letras do alfabeto inglês, contendo 20 variações de formas e distorções, conforme exemplo a seguir. Neste exercício, vamos considerar que já desenvolvemos o algoritmo para particionar o documento em regiões retangulares, cada uma consistindo em um único caractere (glifo). Quando os glifos são escaneados pelo computador, eles são convertidos em pixels e 16 características são armazenadas, tais como as dimensões horizontais e verticais do glifo, a proporção de pixels pretos e a posição horizontal e vertical média dos pixels.

Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition

Passo 2: Explorando e preparando os dados

```
> letters <- read.csv("letterdata.csv")
> str(letters)
```

```
'data.frame':   20000 obs. of  17 variables:
 $ letter: Factor w/ 26 levels "A","B","C","D",..
 $ xbox  : int  2 5 4 7 2 4 4 1 2 11 ...
 $ ybox  : int  8 12 11 11 1 11 2 1 2 15 ...
 $ width : int  3 3 6 6 3 5 5 3 4 13 ...
 $ height: int  5 7 8 6 1 8 4 2 4 9 ...
 $ onpix : int  1 2 6 3 1 3 4 1 2 7 ...
 $ xbar  : int  8 10 10 5 8 8 8 8 10 13 ...
 $ ybar  : int  13 5 6 9 6 8 7 2 6 2 ...
 $ x2bar : int  0 5 2 4 6 6 6 2 2 6 ...
 $ y2bar : int  6 4 6 6 6 9 6 2 6 2 ...
 $ xybar : int  6 13 10 4 6 5 7 8 12 12 ...
 $ x2ybar: int  10 3 3 4 5 6 6 2 4 1 ...
 $ xy2bar: int  8 9 7 10 9 6 6 8 8 9 ...
 $ xedge : int  0 2 3 6 1 0 2 1 1 8 ...
 $ xedgey: int  8 8 7 10 7 8 8 6 6 1 ...
 $ yedge : int  0 4 3 2 5 9 7 2 1 1 ...
 $ yedgex: int  8 10 9 8 10 7 10 7 7 8 ...
```

Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition

Passo 2: Explorando e preparando os dados

O SVM requer que todas as características de entrada sejam numéricas. Com neste caso todas as características de entrada são inteiros, não há necessidade de converter fatores em números, entretanto suas escalas estão um pouco diferentes. Esta etapa não será feita aqui, pois o pacote de SVM utilizado faz isto automaticamente! Neste caso, nos resta fazer a divisão dos dados em sequências de treinamento e teste e podemos pular direto para a etapa de treinamento do modelo

```
> letters_train <- letters[1:16000, ]
> letters_test  <- letters[16001:20000, ]
```

Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition

Passo 3: Treinamento do modelo

Support vector machine syntax

using the `ksvm()` function in the `kernlab` package

Building the model:

```
m <- ksvm(target ~ predictors, data = mydata,
          kernel = "rbfdot", C = 1)
```

- `target` is the outcome in the `mydata` data frame to be modeled
- `predictors` is an R formula specifying the features in the `mydata` data frame to use for prediction
- `data` specifies the data frame in which the `target` and `predictors` variables can be found
- `kernel` specifies a nonlinear mapping such as `"rbfdot"` (radial basis), `"polydot"` (polynomial), `"tanhdot"` (hyperbolic tangent sigmoid), or `"vanilladot"` (linear)
- C is a number that specifies the cost of violating the constraints, i.e., how big of a penalty there is for the "soft margin." Larger values will result in narrower margins

The function will return a SVM object that can be used to make predictions.

Making predictions:

```
p <- predict(m, test, type = "response")
```

- `m` is a model trained by the `ksvm()` function
- `test` is a data frame containing test data with the same features as the training data used to build the classifier
- `type` specifies whether the predictions should be `"response"` (the predicted class) or `"probabilities"` (the predicted probability, one column per class level).

The function will return a vector (or matrix) of predicted classes (or probabilities) depending on the value of the type parameter.

Example:

```
letter_classifier <- ksvm(letter ~ ., data =
  letters_train, kernel = "vanilladot")
letter_prediction <- predict(letter_classifier,
  letters_test)
```

Linear

Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition

Passo 4: Avaliando o desempenho

```
> letter_predictions <- predict(letter_classifier, letters_test)
```

```
> table(letter_predictions, letters_test$letter)
letter_predictions   A   B   C   D   E
                 A 144   0   0   0   0
                 B   0 121   0   5   2
                 C   0   0 120   0   4
                 D   2   2   0 156   0
                 E   0   0   5   0 127
```

Exemplo: 5 vezes em que a letra E foi confundida com a letra D

Fonte: Brett Lantz – Machine Learning with R – Second Edition