Aprendizagem Baseada em Instâncias

Fabrício Barth

Setembro de 2019

Sumário

- Problema (**Blue Flag Iris**)
- Espaço Euclidiano
- Aprendizagem Baseada em Instâncias (Modelos Baseados em Distâncias)
- Regra *kNN* (**k** vizinhos mais próximos)

Problema

Blue Flag Iris

- Considere uma base de dados sobre um determinado tipo de flor.
- Esta base de dados possui informações sobre o **comprimento** e **largura** das **sépalas** e das **pétalas** de várias flores parecidas (todas azuis).

- A *Blue Flag Iris* é classificada em três tipos:
  - ⋆ Iris Setosa.
  - ⋆ Iris Versicolor.
  - ⋆ Iris Virginica.

Blue Flag Iris - Dados

```
1   @ATTRIBUTE sepallength  REAL
2   @ATTRIBUTE sepalwidth   REAL
3   @ATTRIBUTE petallength  REAL
4   @ATTRIBUTE petalwidth   REAL
5   @ATTRIBUTE class        {Iris-setosa,Iris-versicolor,
6                           Iris-virginica}
7   @DATA
8   5.1,3.5,1.4,0.2,Iris-setosa
9   4.9,3.0,1.4,0.2,Iris-setosa
10  4.7,3.2,1.3,0.2,Iris-versicolor
11  5.0,3.6,1.4,0.2,Iris-versicolor
12  6.6,2.9,4.6,1.3,Iris-virginica
13  5.2,2.7,3.9,1.4,Iris-virginica
```

Todas as medidas são em cm.

Blue Flag Iris - Problema

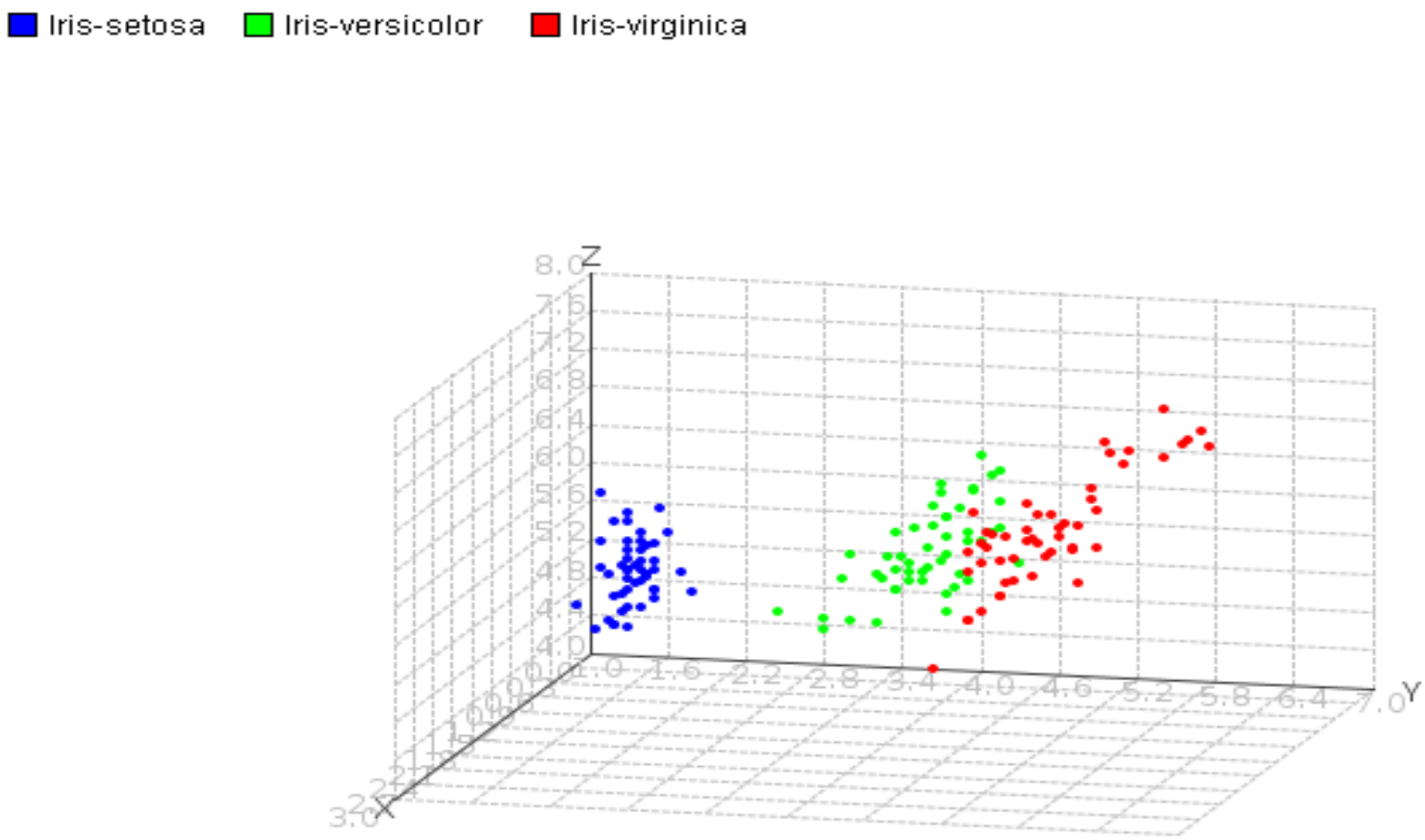
- O que faz uma *Blue Flag Iris* ser do tipo *Iris Setosa*, *Iris Versicolor* ou *Iris Virginica*?
- Como extrair esta informação a partir dos dados existentes?

Aplicando uma abordagem baseada em instâncias

- Muitos métodos de aprendizagem constroem uma descrição geral e explícita da função alvo a partir de exemplos de treinamento.
- Os métodos de aprendizagem baseados em instâncias simplesmente **armazenam** os exemplos de treinamento.

- A generalização é feita somente quando uma nova instância é classificada.
- Métodos de aprendizagem baseados em instâncias assumem que as instâncias podem ser representadas como pontos em um **espaço euclidiano**.

Espaço Euclidiano



x = Petal Width, y = Petal Length, z = Sepal Length.

Espaço Euclidiano

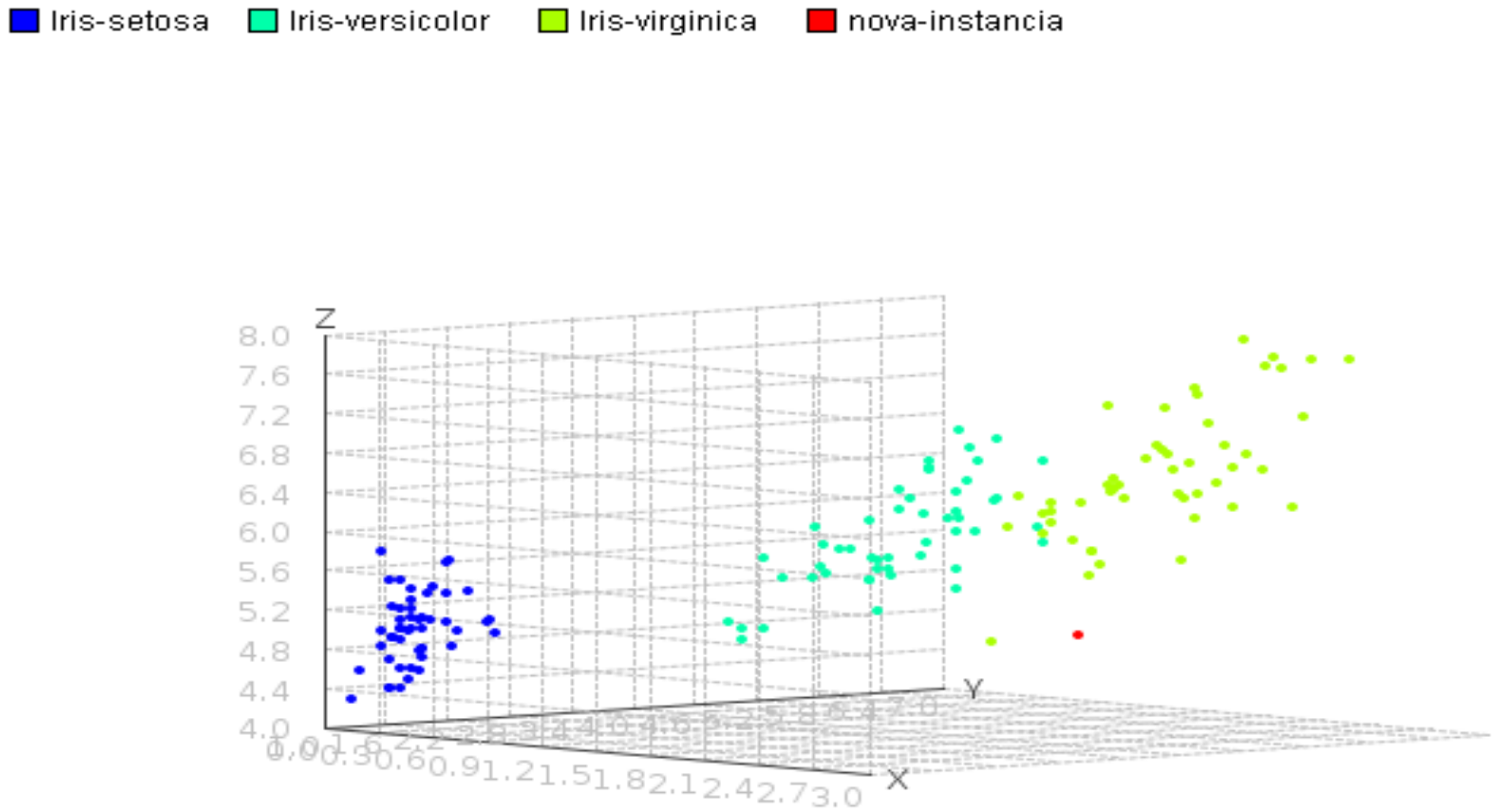
- (Petal Width, Petal Length) **2-dimensional**
- (Petal Width, Petal Length, Sepal Length) **3-dimensional**
- (Petal Width, Petal Length, Sepal Length, Sepal Width) **4-dimensional**

Aprendizagem Baseada em Instâncias

- A aprendizagem consiste somente em armazenar os exemplos de treinamento.
- Após a aprendizagem, para encontrar o valor do conceito alvo associado a uma nova instância, um conjunto de instâncias similares são buscadas na memória e utilizadas para classificar a nova instância.

- No final, teremos um conjunto de distâncias (medida de similaridade) entre a nova instância e todos os exemplos de treinamento.
- Qual o valor do conceito alvo (classe) atribuímos à nova instância? **O conceito alvo associado ao exemplo de treinamento mais similar !!**

Exemplo com nova instância



x = Petal Width, y = Petal Length, z = Sepal Length.

Aprendizagem k-NN

- k-NN = *K Nearest Neighbor* = k vizinhos mais próximos.
- O algoritmo k-NN é o método de aprendizagem baseado em instâncias mais elementar.

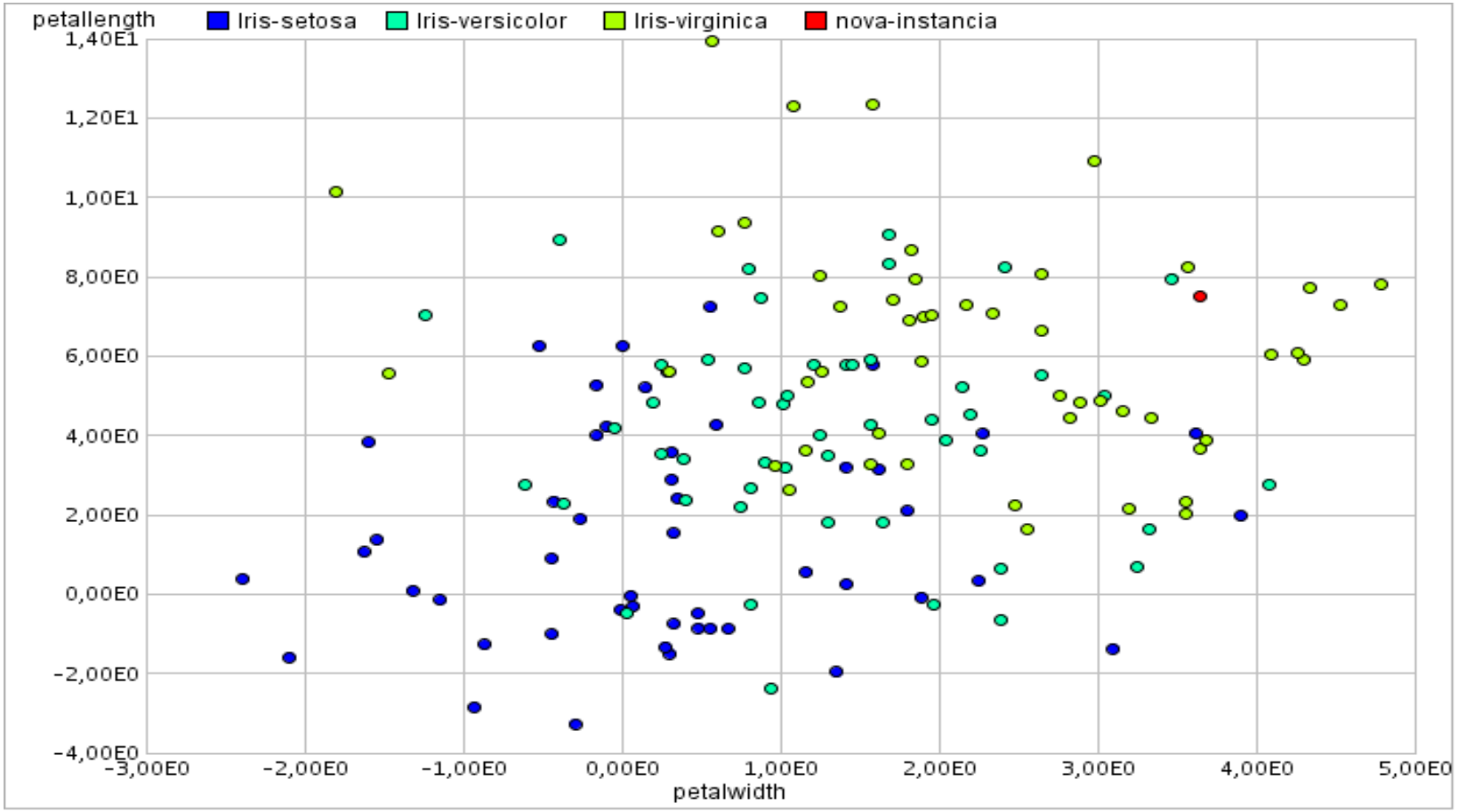
- O algoritmo *k*-NN assume que todas as instâncias correpondem a pontos em um espaço *n*-dimensional $(\Re^n)$.
- Os "vizinhos mais próximos" de uma instância são definidos em termos da distância Euclidiana.

$$| \overrightarrow{x} - \overrightarrow{y} | = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2} \qquad (1)$$

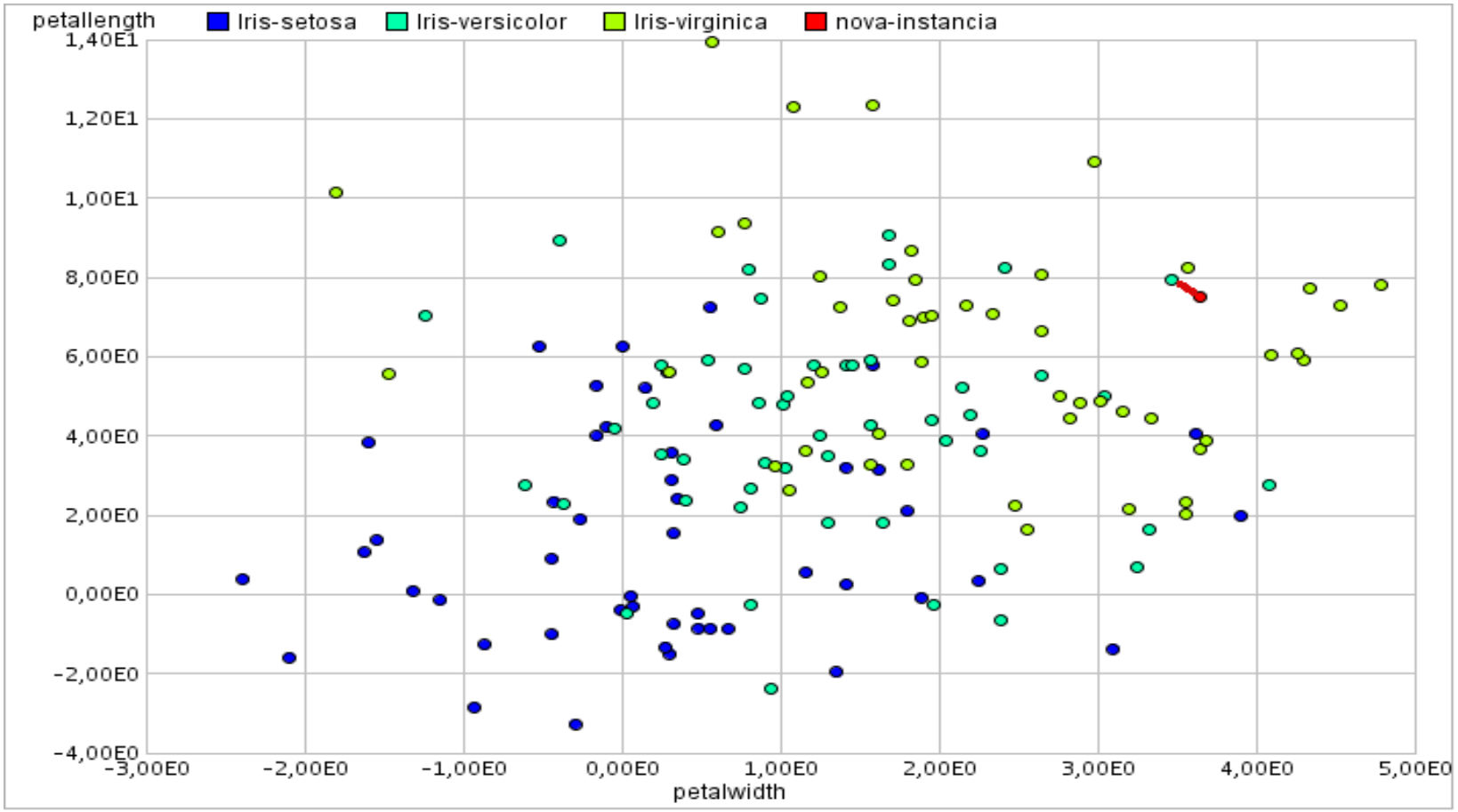
Aprendizagem k-NN

- **A regra dos vizinhos mais próximos**:
- Classificar a nova instância, atribuindo a ela o rótulo mais freqüente entre as k amostras mais próximas.

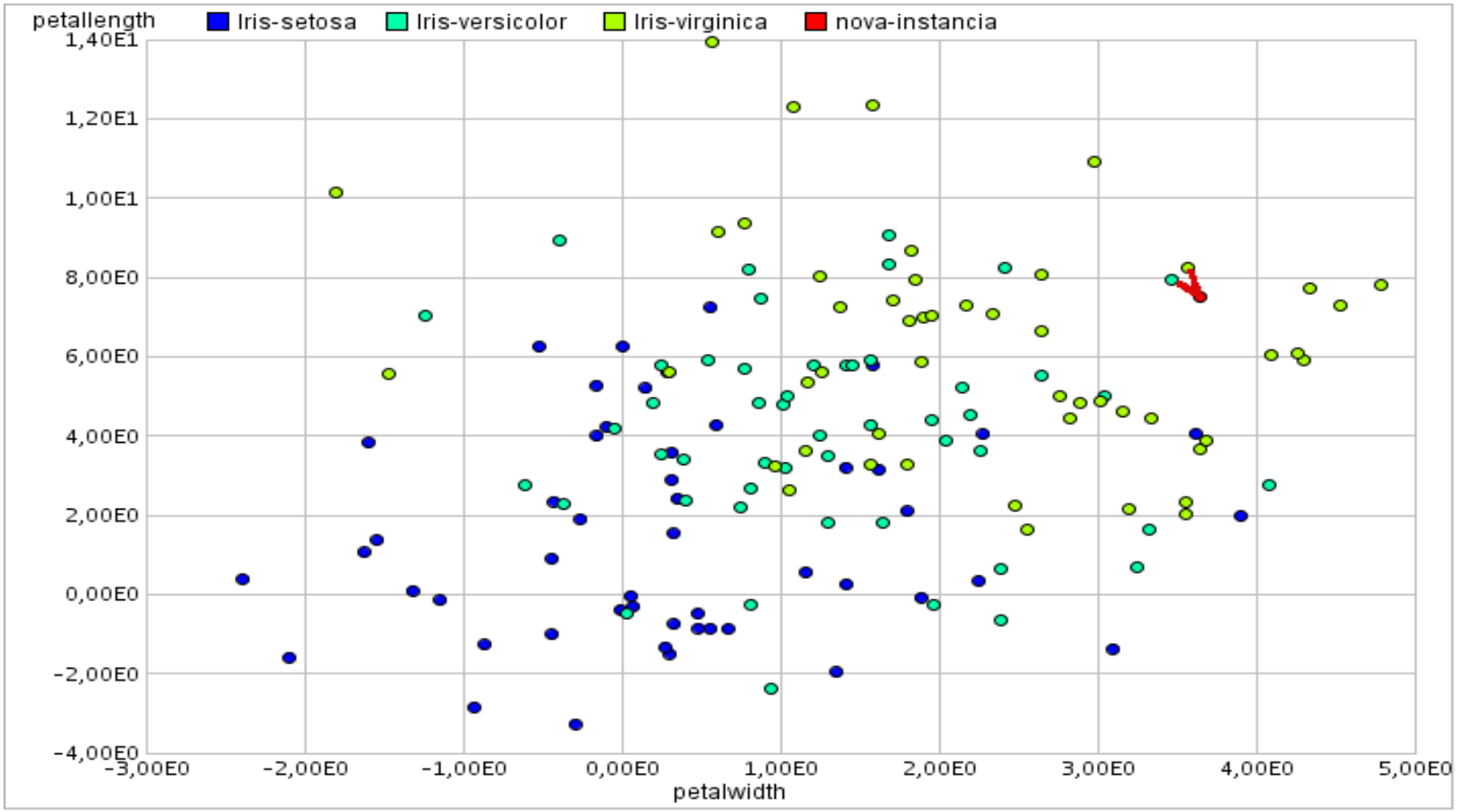
Classificando a nova instância



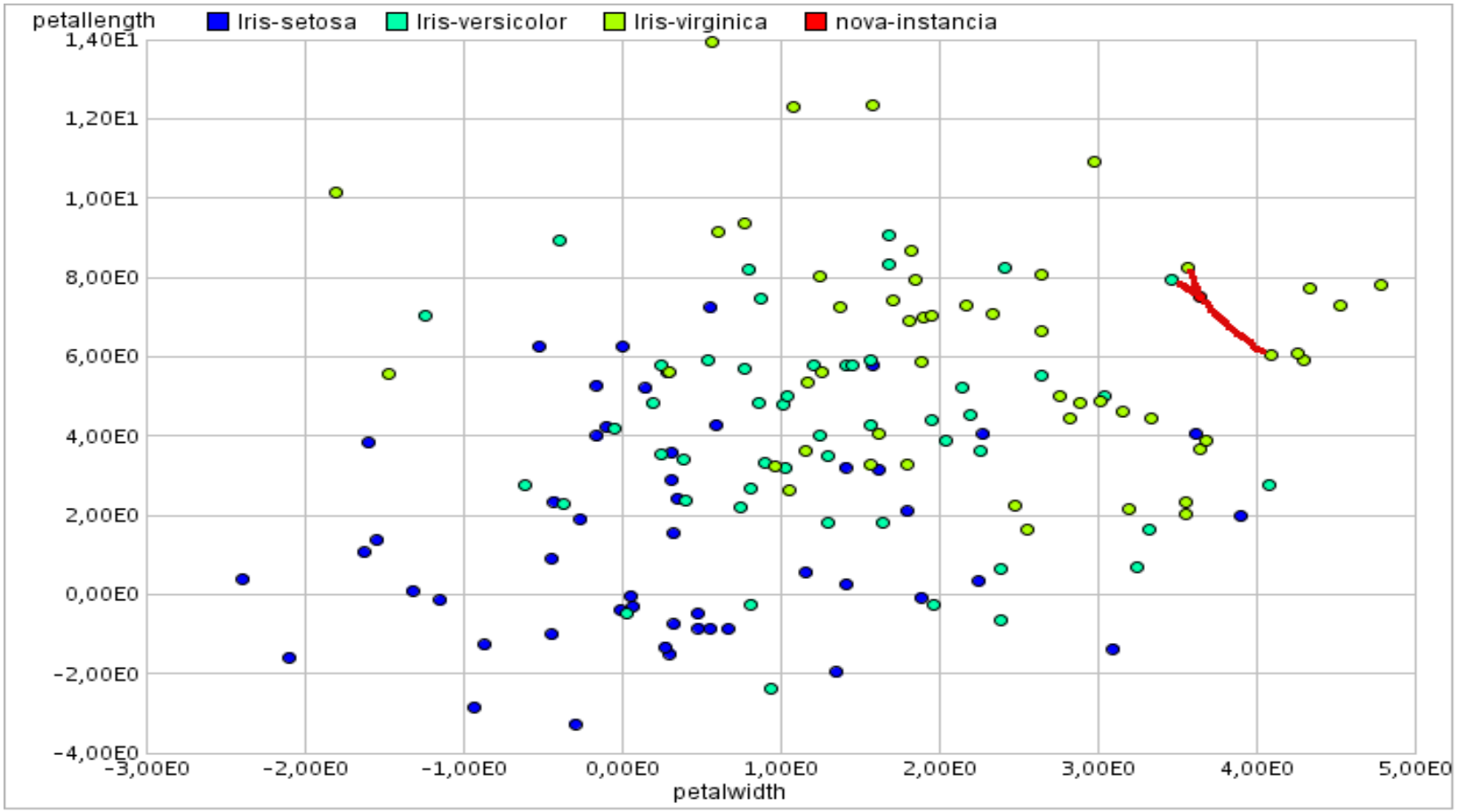
Classificando a nova instância (k=1)



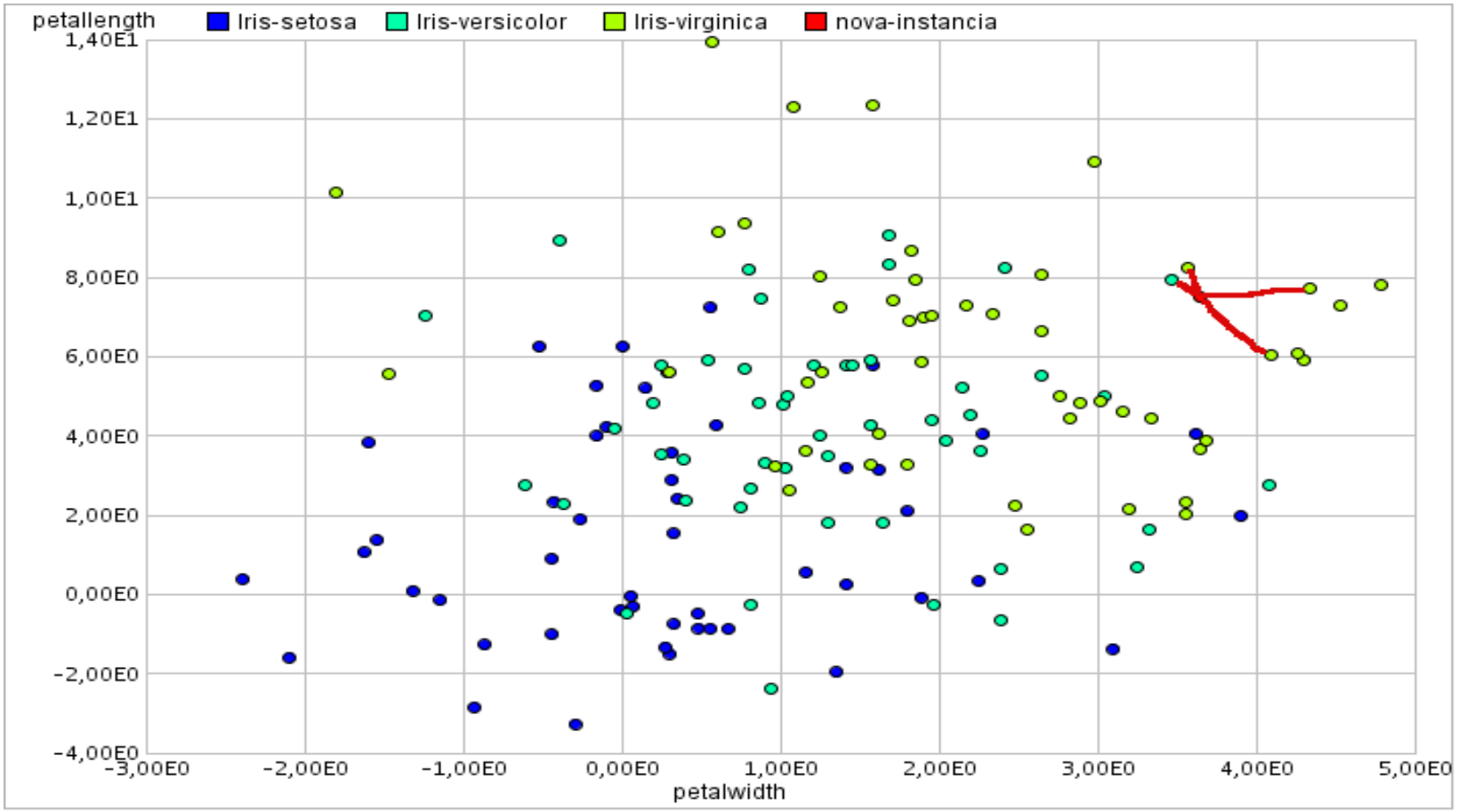
Classificando a nova instância (k=2)



Classificando a nova instância (k=3)



Classificando a nova instância (k=4)



Exemplo *k*-NN

- k=3 (valor ímpar) e $e_i = (0.10, 0.25)$
- Exemplos de treinamento:
  - $\star$ $(0.15, 0.35, c_1)$
  - $\star$ $(0.10, 0.28, c_2)$
  - $\star$ $(0.09, 0.30, c_5)$
  - $\star$ $(0.12, 0.20, c_2)$

- Os vetores mais próximos a e_i, com suas classes, são:
  - $\star$ $(0.10, 0.28, c_2)$
  - $\star$ $(0.12, 0.20, c_2)$
  - $\star$ $(0.15, 0.35, c_1)$
- Uma votação atribui a classe c_2 a e_i, pois c_2 é a classe representada com mais freqüencia.

Knn no Python

```
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier

knn = KNeighborsClassifier(n_neighbors = k)
knn.fit(X_train, y_train)
y_pred = knn.predict(X_test)
```

Como escolher o melhor k?

- Escolher o valor de **k** é crítico.
- Um **k** muito pequeno resulta em uma solução que não tolera ruído.
- Um **k** muito grande vai contra a filosofia do **KNN**.
- Regra genérica para escolha de k:

$$k = n^{(1/2)} \tag{2}$$

- Executar a primeira validação com

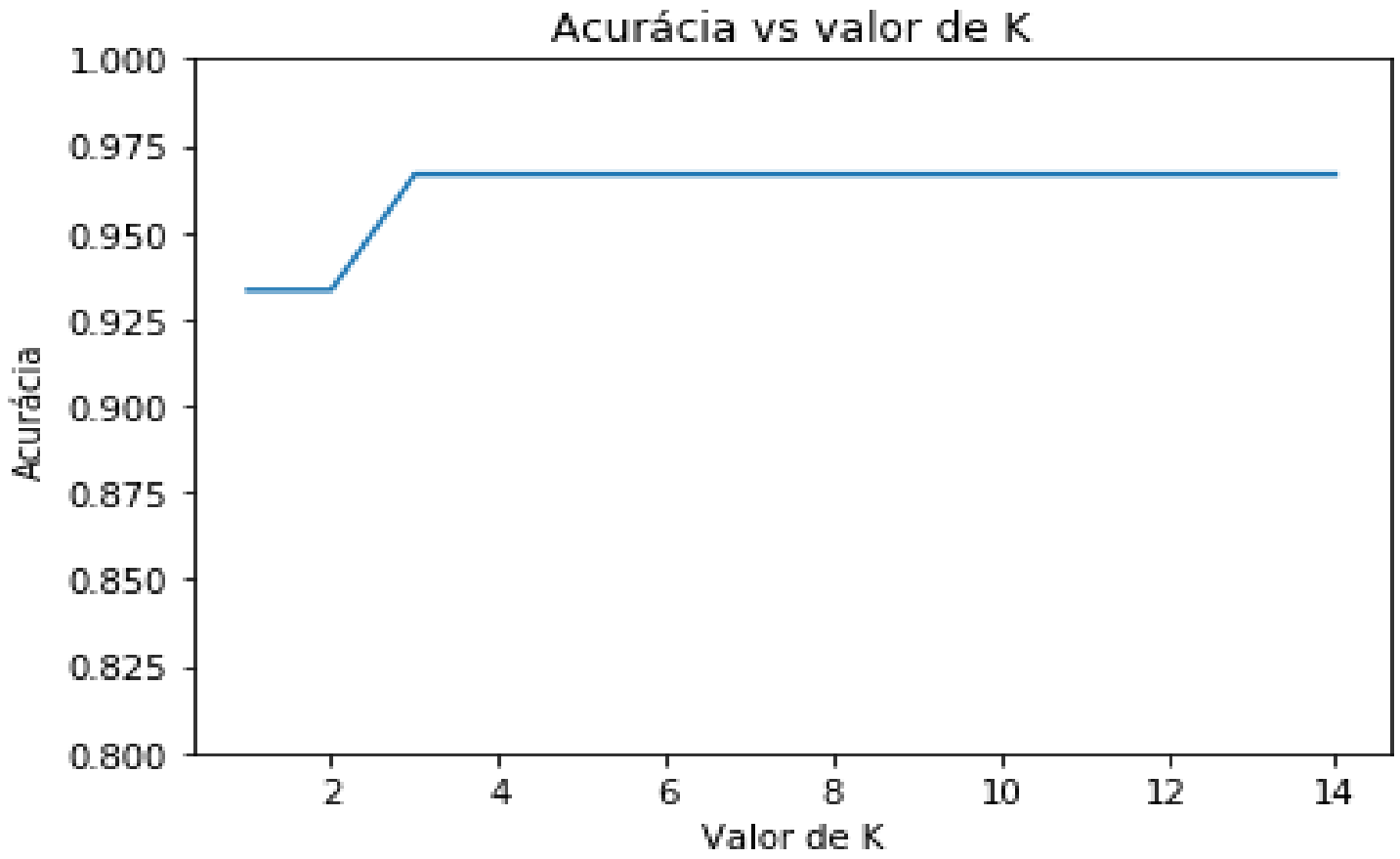
$$k = n^{(1/2)} \tag{3}$$

- Medir a acurácia e executar outra validação com $k + 1$ e assim sucessivamente até a nova acurácia não for melhor que a acurácia anterior.

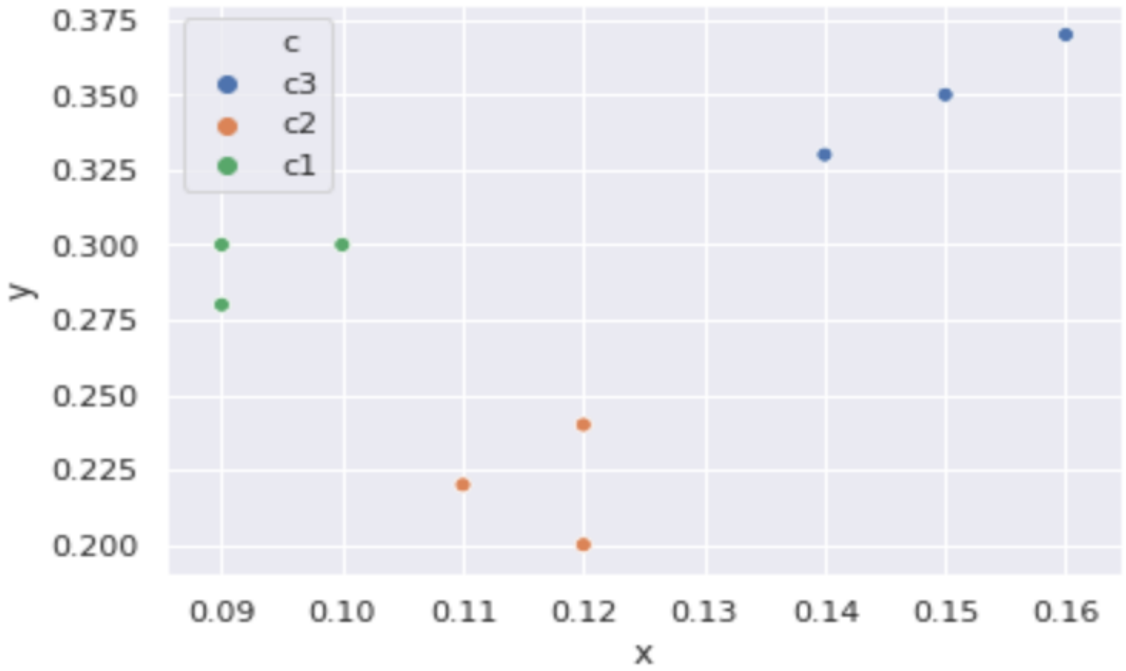
Outra forma para encontrar K

```
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
from sklearn import metrics

k_range = range(1,15)
scores = {}
scores_list = []

for k in k_range:
    knn = KNeighborsClassifier(n_neighbors = k)
    knn.fit(X_train, y_train)
    y_pred = knn.predict(X_test)
```

```
    scores[k] = metrics.accuracy_score(y_test,
                                       y_pred)
scores_list.append(scores[k])
```

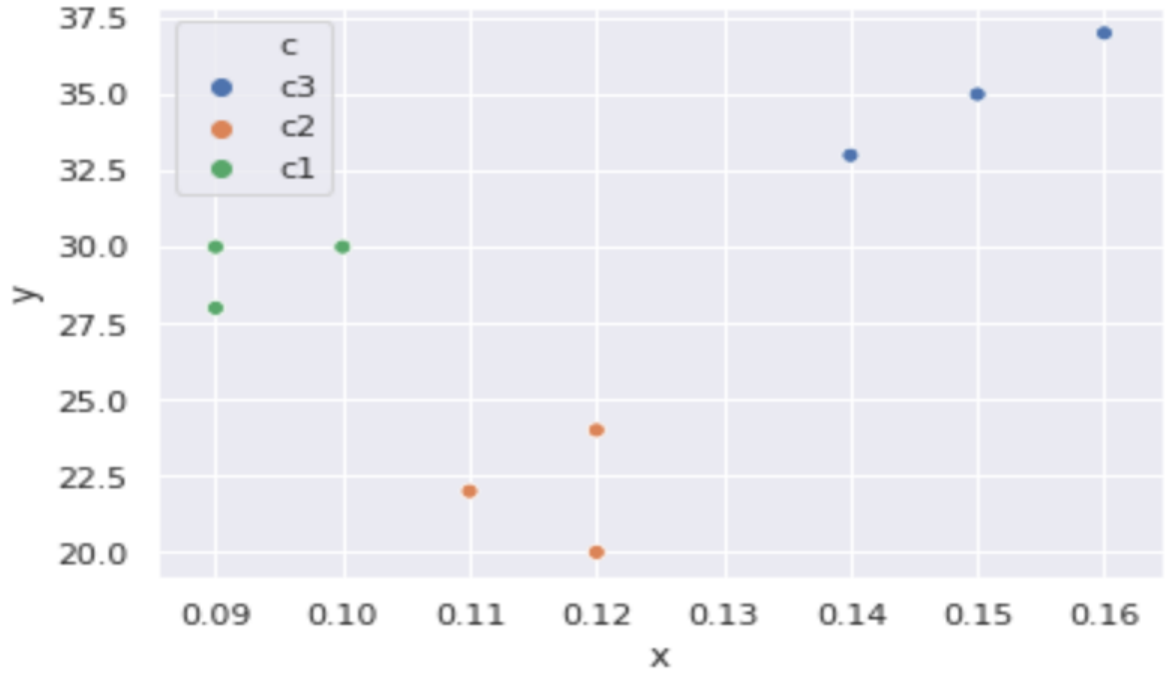

Acurácia vs valor de K
1.000
0.975
0.950
0.925
0.900
0.875
0.850
0.825
0.800
Acurácia
2
4
6
8
10
12
14
Valor de K

Cálculo da distância e identificação do exemplo mais próximo




```
new_point = [[0.14, 0.3]]
from sklearn.neighbors import NearestNeighbors
neigh = NearestNeighbors(n_neighbors=1)
neigh.fit(df[['x','y']], df['c'])
print(neigh.kneighbors(new_point))
```

```
(array([[0.03]]), array([[7]]))
```




```
new_point = [[0.14, 30]]

neigh = NearestNeighbors(n_neighbors=1)
neigh.fit(df[['x','y']], df['c'])
print(neigh.kneighbors(new_point))
```

```
(array([[0.04]]), array([[4]]))
```

Cuidado: normalizar dados

- Objetivo: Manter todos os valores entre 0 e 1.
- Ao utilizar o pacote $sklearn.preprocessing.MinMaxScaler$, a transformação implementada é:

```
X_std = (X - X.min(axis=0)) / (X.max(axis=0) - X.min(axis=0))
X_scaled = X_std * (max - min) + min
```

onde, max e min são fornecidos por parâmetro. Os valores $default$ são 1 e 0, respectivamente.

- Ver https://github.com/fbarth/ml-espm/blob/master/scripts/python/04_02_knn.ipynb

Knn no R

```
data(iris)

normalize <- function(x){
return ((x - min(x)) / (max(x) - min(x)))
}

iris_norm <- as.data.frame(lapply(iris[1:4], normalize))
summary(iris_norm)

set.seed(1234)
ind <- sample(2, nrow(iris), replace=TRUE, prob=c(0.67, 0.33))

iris.training <- iris_norm[ind==1, 1:4]
iris.test <- iris_norm[ind==2, 1:4]

iris.trainLabels <- iris[ind==1, 5]
iris.testLabels <- iris[ind==2, 5]

library(class)
iris_pred <- knn(train = iris.training, test = iris.test, cl = iris.trainLabels, k=3)

t <- table(iris_pred, iris.testLabels)
t
```

Considerações

- **Vantagens**:
  - ⋆ A informação presente nos exemplos de treinamento nunca é perdida.
- **Desvantagens**:
  - ⋆ Toda a computação ocorre no momento da classificação!!!
  - ⋆ A computação aumenta com a quantidade de exemplos de treinamento.

Referências

- https://github.com/fbarth/ml-espm/blob/master/scripts/python/04_01_knn.ipynb
- https://github.com/fbarth/ml-espm/blob/master/scripts/python/04_02_knn.ipynb

References

[Mitchell, 1997] Mitchell, T. M. (1997). *Machine Learning*. McGraw-Hill.