Scikit-learn - Classificação e Máquinas de Vetores de Suporte

Thiago Teixeira Santos
thiago.santos@embrapa.br

24 de novembro de 2017

Preparação:

```
In [1]: import numpy as np

        # Importa o módulo de plotagem
        import matplotlib.pyplot as plt

        # Configura a matplotlib para operar interativamente no notebook.
        # Para detalhes, execute: %matplotlib?
        %matplotlib inline

        # Configura o tamanho padrão da figura largura X altura, em polegadas
        plt.rcParams['figure.figsize'] = (10, 8)
```

Cria 3 datasets de exemplo:

```
In [2]: from sklearn.datasets import make_moons, make_circles, make_classification

        X, y = make_classification(n_features=2, n_redundant=0, n_informative=2,
                                   random_state=1, n_clusters_per_class=1)
        rng = np.random.RandomState(2)
        X += 2 * rng.uniform(size=X.shape)

        datasets = [make_moons(noise=0.3, random_state=0), make_circles(noise=0.2,
                                                                          factor=0.5, random_state
```

```
In [3]: def plot_classification(name, clf, X, y, cmap=plt.cm.RdBu):
            '''Esta função recebe um classificador e um conjunto de dados
            na forma de um array X com dimensões M x 2 (M amostras com 2
            características) e as M classes esperadas na forma de um
            array y. Ela então exibe graficamente os dados e a fronteira
            de decisão aprendida pelo classificador (previamente treinado).
            '''
            score = clf.score(X, y)
            x_min, x_max = X[:, 0].min(), X[:, 0].max()
            y_min, y_max = X[:, 1].min(), X[:, 1].max()
            xx, yy = np.meshgrid(np.arange(x_min, x_max, 0.2), np.arange(y_min, y_max, 0.2))
```

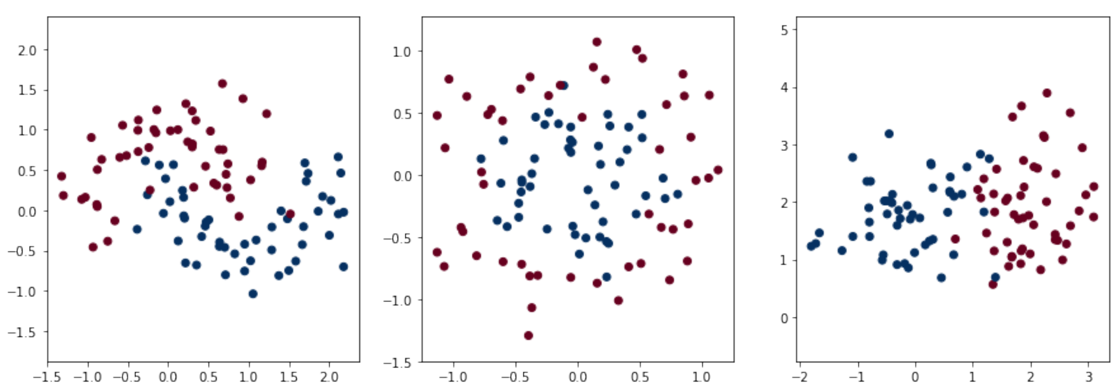
```
    if hasattr(clf, "decision_function"):
        Z = clf.decision_function(np.c_[xx.ravel(), yy.ravel()])
    else:
        Z = clf.predict_proba(np.c_[xx.ravel(), yy.ravel()])[:, 1]

    Z = Z.reshape(xx.shape)
    plt.contourf(xx, yy, Z, cmap=cmap, alpha=.8)
    if hasattr(clf, "decision_function"):
        plt.contour(xx, yy, Z, [0.0], colors='k', linestyles=['solid'])
    else:
        plt.contour(xx, yy, Z, [0.5], colors='k', linestyles=['solid'])

    plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=y, cmap=cmap)
    plt.xlim(xx.min(), xx.max())
    plt.ylim(yy.min(), yy.max())
    plt.title(name + " - Score %.2f" % score)
```

1 Classificação

1.1 Problema

Considere os seguintes dados, classificados em **duas classes**, exibidas em azul e vermelho:

```
In [4]: fig = plt.figure(figsize=(15, 5))
        for i, (X, y) in enumerate(datasets):
            plt.subplot(1,3,i+1)
            plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=y, cmap=plt.cm.RdBu)
            plt.axis('equal')
```



Gostaríamos de criar um **classificador** capaz de apropriadamente **separar** duas classes e corretamente classificar novas entradas.

1.2 Os K vizinhos mais próximos

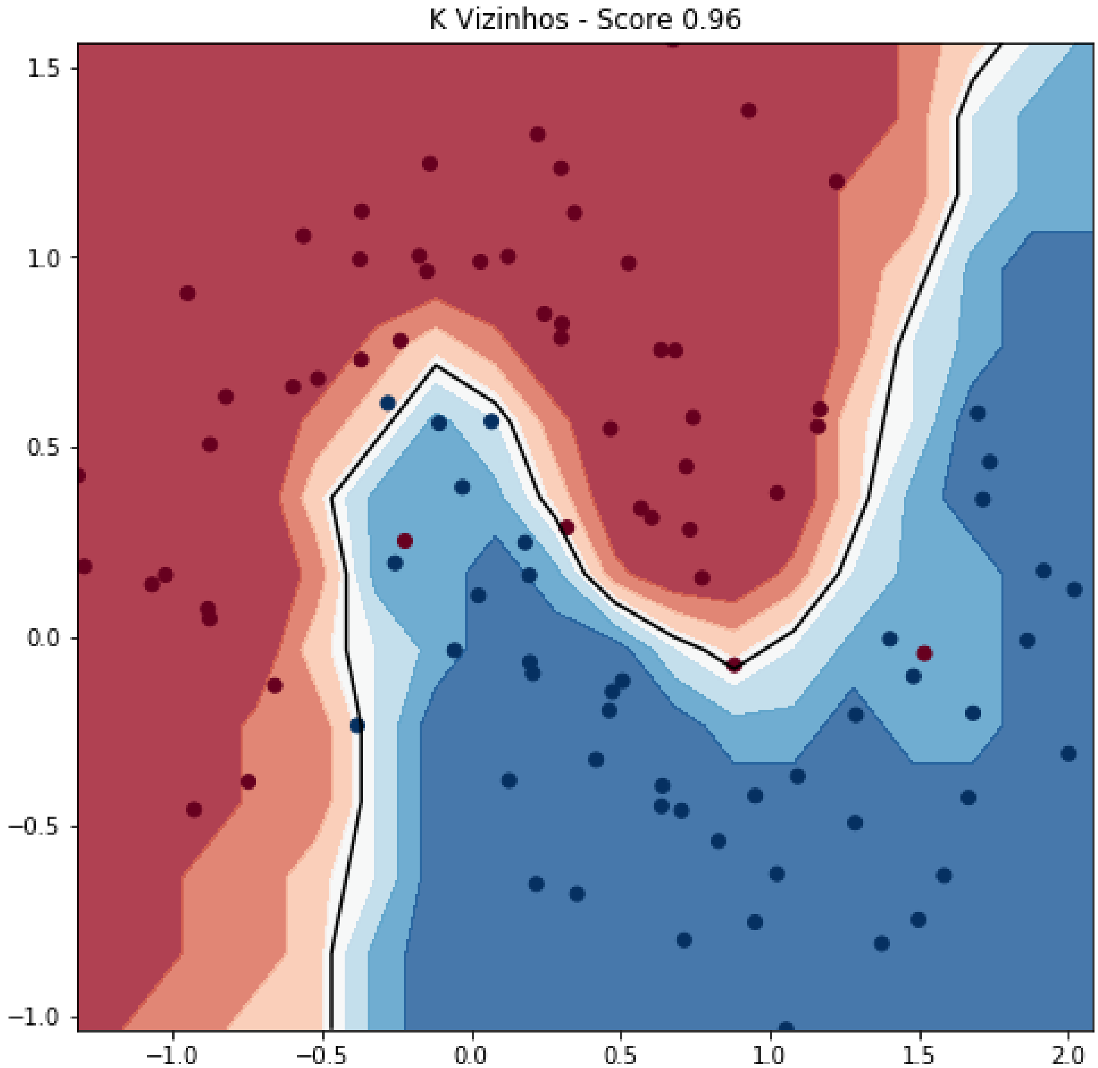
O *K vizinhos mais próximos* é um classificador simples mas comumente utilizado. Ele armazena o conjunto de treinamento como um conjunto de *exemplos*. Quando desejamos classificar uma nova amostra (ponto) x, o classificador simplesmente busca os K pontos x_i mais próximos de x no conjunto de treinamento e faz uma votação: a classe atribuída a x é a classe mais observada entre os K vizinhos.

In [5]:
```
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
knn = KNeighborsClassifier(n_neighbors=5)
```

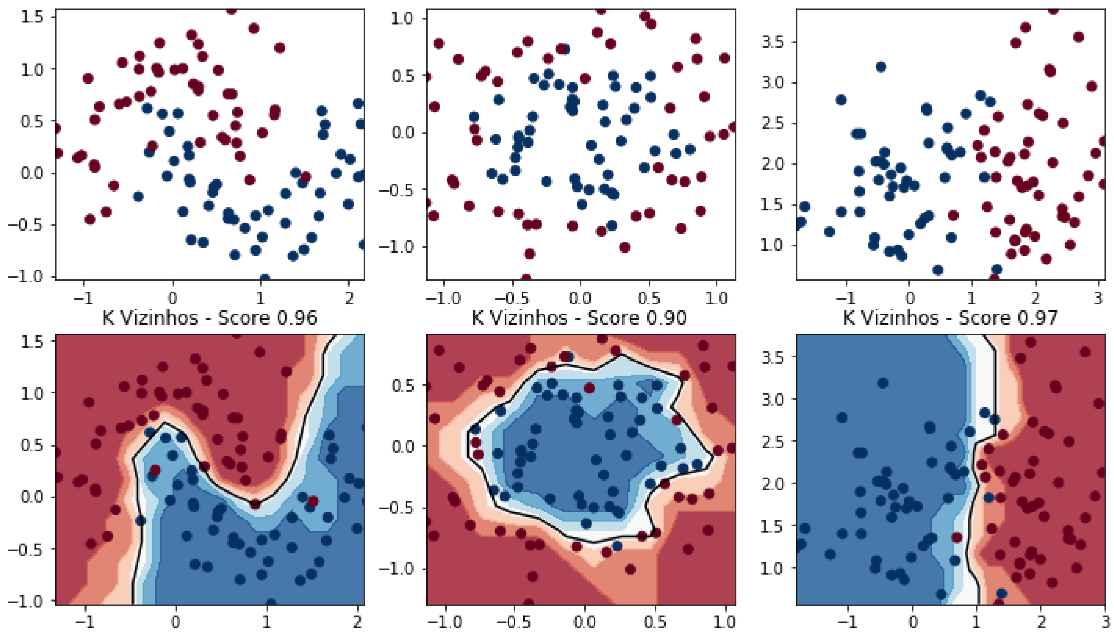
In [6]:
```
X, y = datasets[0]
knn.fit(X, y)
```

Out[6]:
```
KNeighborsClassifier(algorithm='auto', leaf_size=30, metric='minkowski',
           metric_params=None, n_jobs=1, n_neighbors=5, p=2,
           weights='uniform')
```

In [7]:
```
fig = plt.figure(figsize=(8, 8))
plot_classification('K Vizinhos', knn, X, y, plt.cm.RdBu)
```



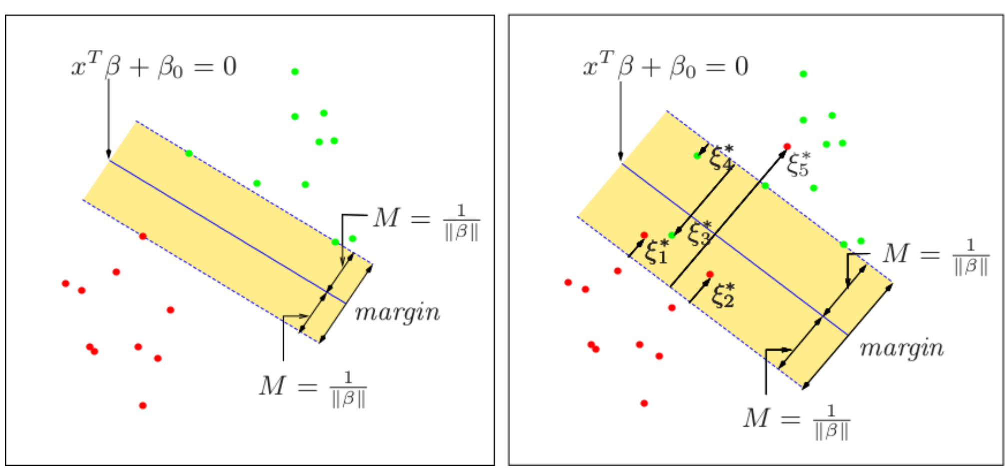

```
In [8]: fig = plt.figure(figsize=(12, 7))
        for i, (X, y) in enumerate(datasets):
            plt.subplot(2, 3, i+1)
            plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=y, cmap=plt.cm.RdBu)
            plt.xlim(X[:, 0].min(), X[:, 0].max())
            plt.ylim(X[:, 1].min(), X[:, 1].max())
        for dataset_idx, (X, y) in enumerate(datasets):
            plt.subplot(2, 3, 3+dataset_idx+1)
            knn.fit(X, y)
            plot_classification('K Vizinhos', knn, X, y, plt.cm.RdBu)
```



1.3 Máquinas de suporte vetorial (SVM)

Duas perguntas surgem quando utilizamos K vizinhos:

1. Todas as amostras são mesmo necessárias para definir a superfície de decisão?
2. Qual a melhor forma de obter uma boa superfície de decisão?



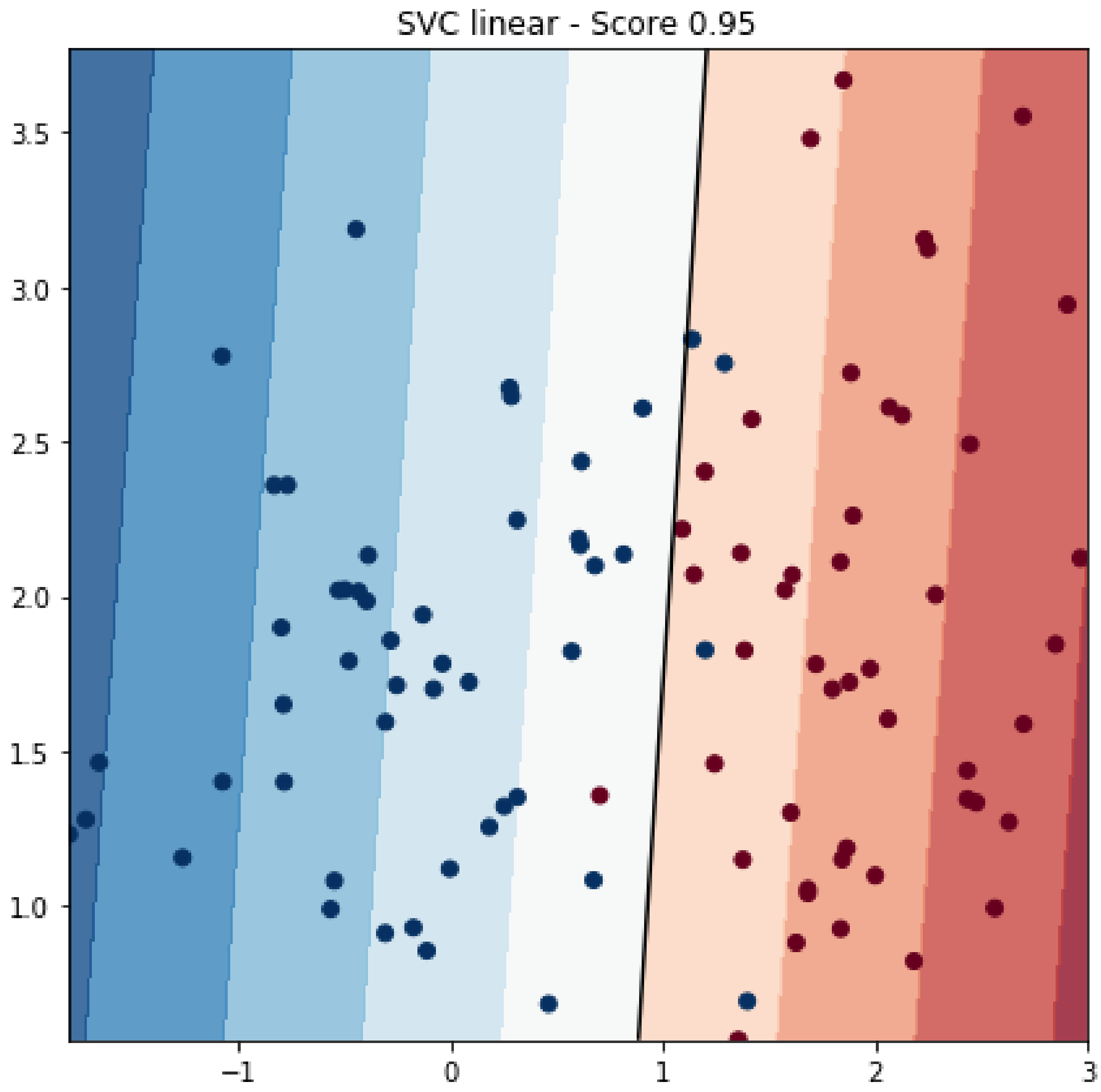
Maximização da margem

Figura retirada do (excelente!) *The Elements of Statistical Learning*, escrito por Trevor Hastie, Robert Tibshirani e Jerome Friedman (capítulo 12, página 418). O livro foi disponibilizado on-line pelos autores, em PDF.

Máquinas de vetores de suporte encontram o **hiperplano**, capaz de separar as amostras das duas classes, que apresenta a **maior margem de segurança** (acima, com largura $2M$). Quando as classes não são perfeitamente separáveis pelo hiperplano, alguns pontos ξ_j podem estar no lado errado da margem por um montante de $\xi_j^* = M\xi_j$ (pontos no lado correto apresentam $\xi_j^* = 0$). A margem é maximizada respeitando-se um "orçamento" de $\sum \xi\_i \leq$ constante.

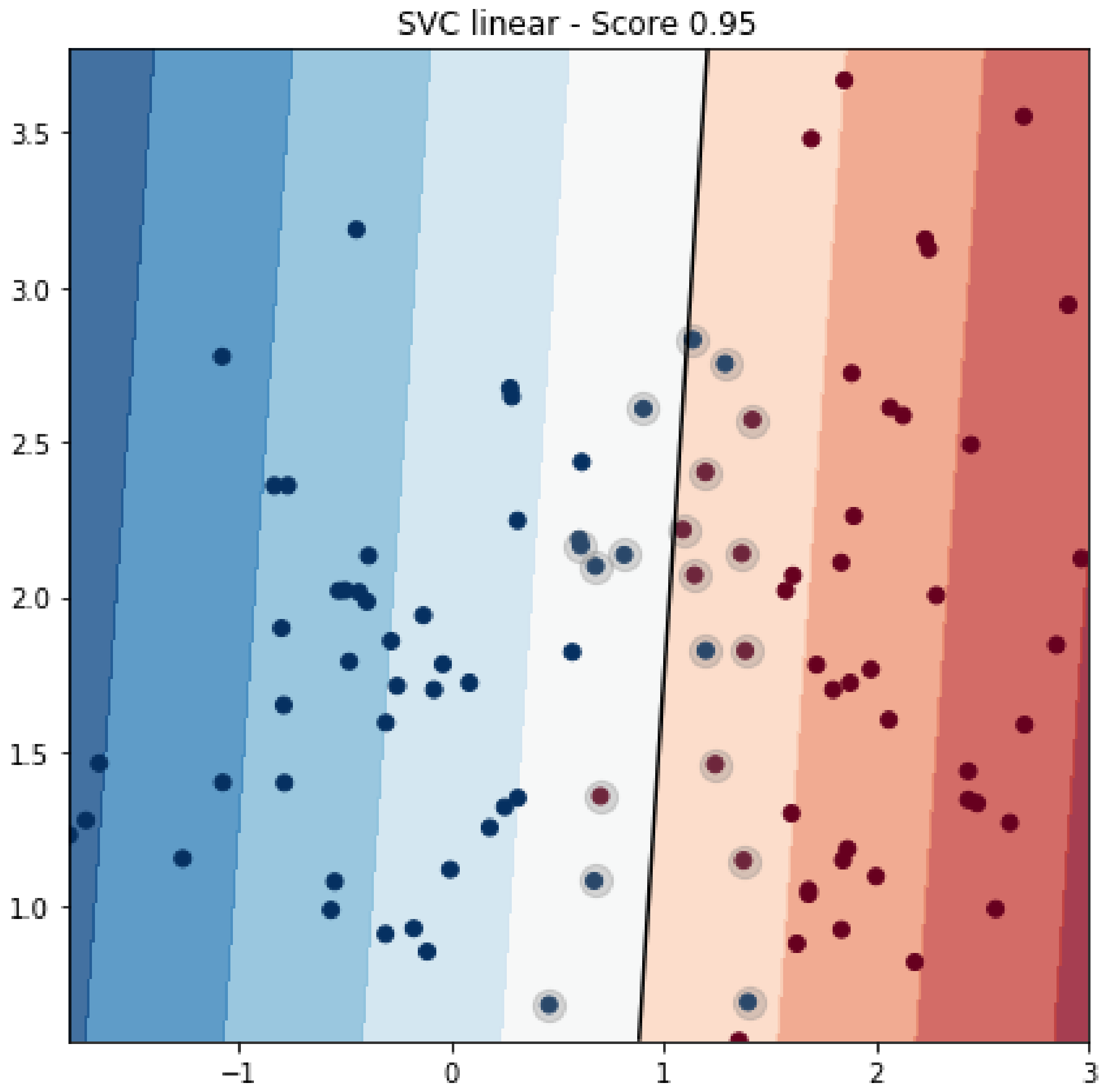
O problema de otimização em questão é comumente com técnicas de *quadratic programming*. Felizmente, a scikit-learn realiza este trabalho para nós.

```
In [9]: from sklearn.svm import SVC

        svc = SVC(kernel='linear')
        X, y = datasets[2]
        svc.fit(X, y)

Out[9]: SVC(C=1.0, cache_size=200, class_weight=None, coef0=0.0,
          decision_function_shape='ovr', degree=3, gamma='auto', kernel='linear',
          max_iter=-1, probability=False, random_state=None, shrinking=True,
          tol=0.001, verbose=False)

In [10]: fig = plt.figure(figsize=(7, 7))
         plot_classification('SVC linear', svc, X, y, plt.cm.RdBu)
```




```
In [11]: fig = plt.figure(figsize=(7, 7))
         plot_classification('SVC linear', svc, X, y, plt.cm.RdBu)
         plt.scatter(svc.support_vectors_[:,0], svc.support_vectors_[:,1], s=150, marker='o', co
```

```
Out[11]: <matplotlib.collections.PathCollection at 0x7fc3a5938c50>
```



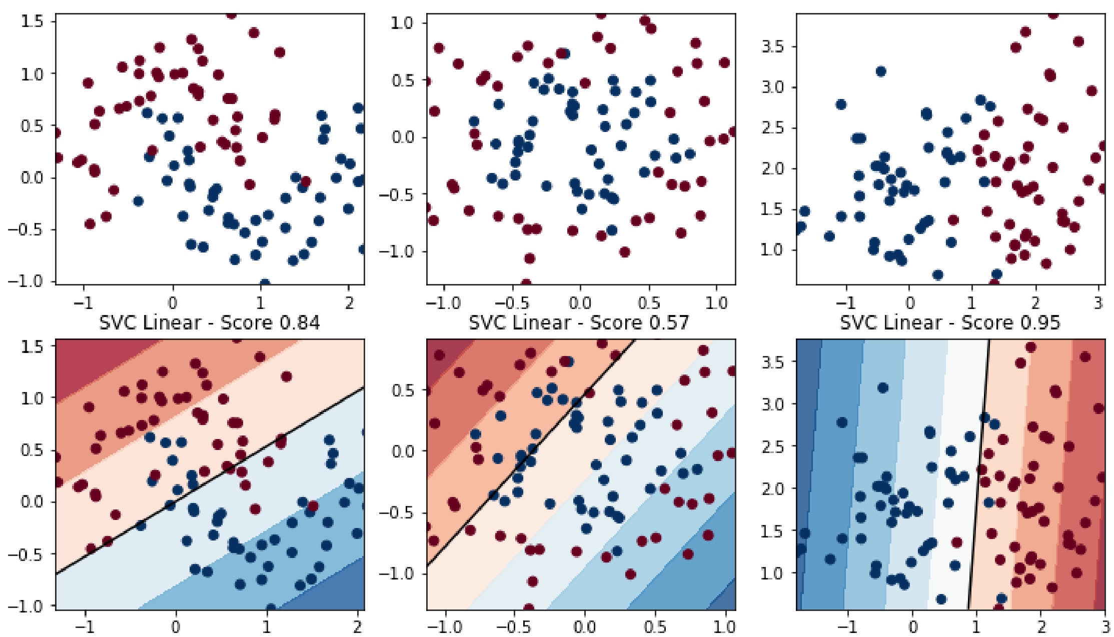

```
In [12]: print X.shape
         print svc.support_vectors_.shape
```

```
(100, 2)
(19, 2)
```

Apenas 19 pontos foram necessários - esses são os **vetores de suporte** e correspondem aos pontos ξ_j

```
In [13]: fig = plt.figure(figsize=(12, 7))

         for i, (X, y) in enumerate(datasets):
             plt.subplot(2, 3, i+1)
```

```python
    plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=y, cmap=plt.cm.RdBu)
    plt.xlim(X[:, 0].min(), X[:, 0].max())
    plt.ylim(X[:, 1].min(), X[:, 1].max())

for dataset_idx, (X, y) in enumerate(datasets):
    plt.subplot(2, 3, 3+dataset_idx+1)
    svc.fit(X, y)
    plot_classification('SVC Linear', svc, X, y, plt.cm.RdBu)
```



1.4 Problema: classes mal separadas por hiperplanos

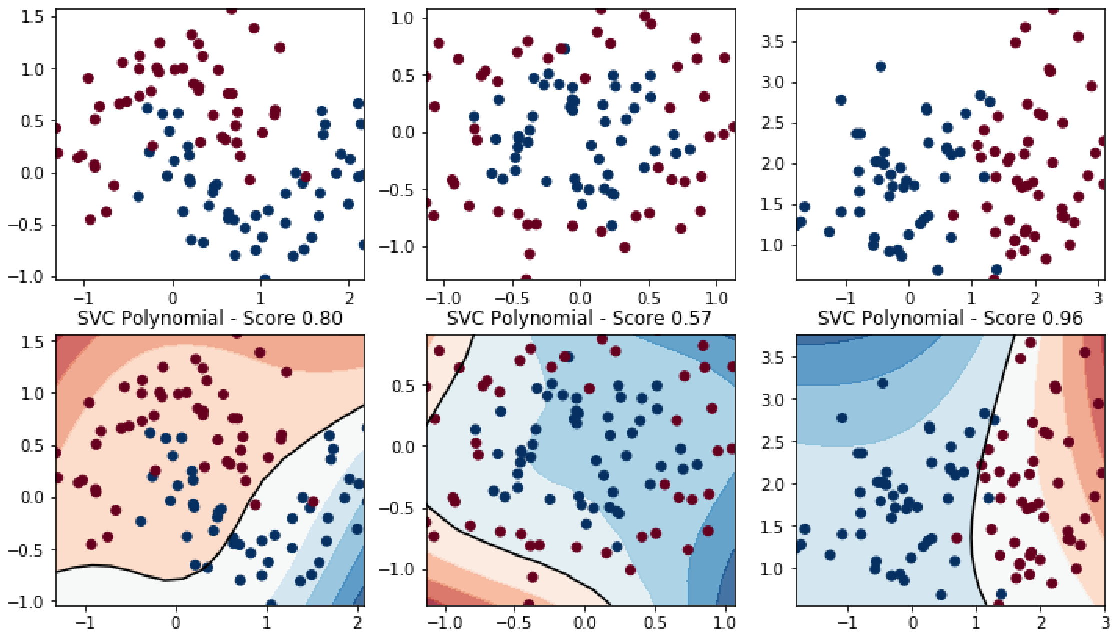
Solução: transformar o espaço original para uma espaço com *mais dimensões* em que as classes são separáveis por um hiperplano (veja este vídeo para um exemplo).

Na prática, não precisamos encontrar um novo espaço explicitamente. Um tipo especial de função h, chamada *kernel*, pode ser utilizada para transformar as amostras x_i. Uma SVM, treinada para achar um hiperplano para os dados transformados $h(x_i)$, encontra uma fronteira não-(hiper)plana no espaço original dos pontos x_i. Este procedimento é comumente chamado de *the kernel trick*.

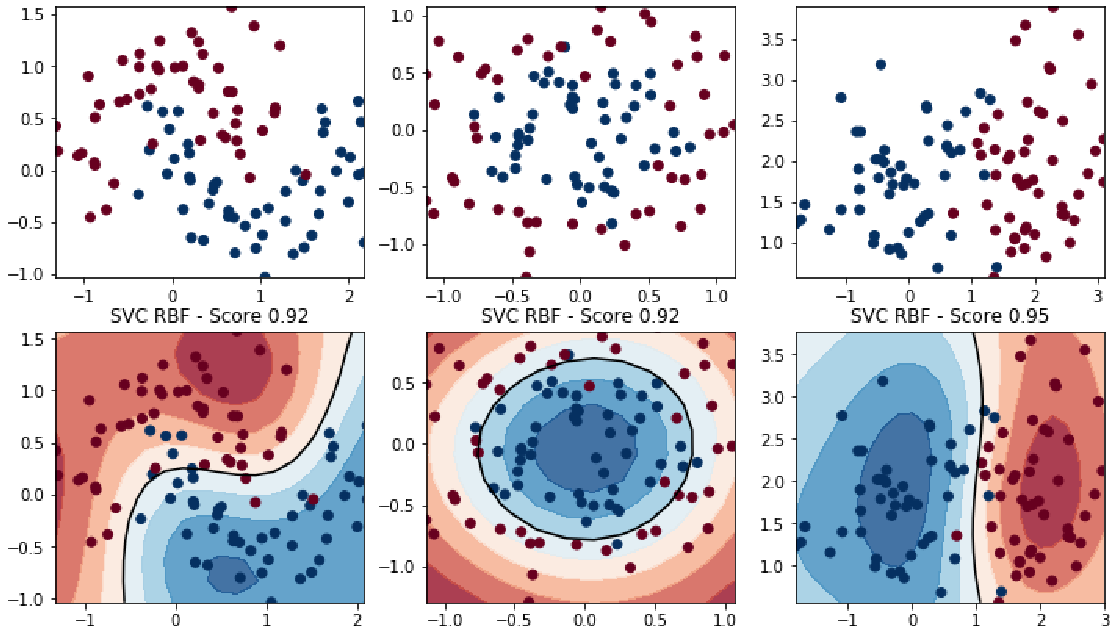
In [14]:
```python
svc = SVC(kernel='poly', degree=3)
svc
```

Out[14]:
```
SVC(C=1.0, cache_size=200, class_weight=None, coef0=0.0,
  decision_function_shape='ovr', degree=3, gamma='auto', kernel='poly',
  max_iter=-1, probability=False, random_state=None, shrinking=True,
  tol=0.001, verbose=False)
```

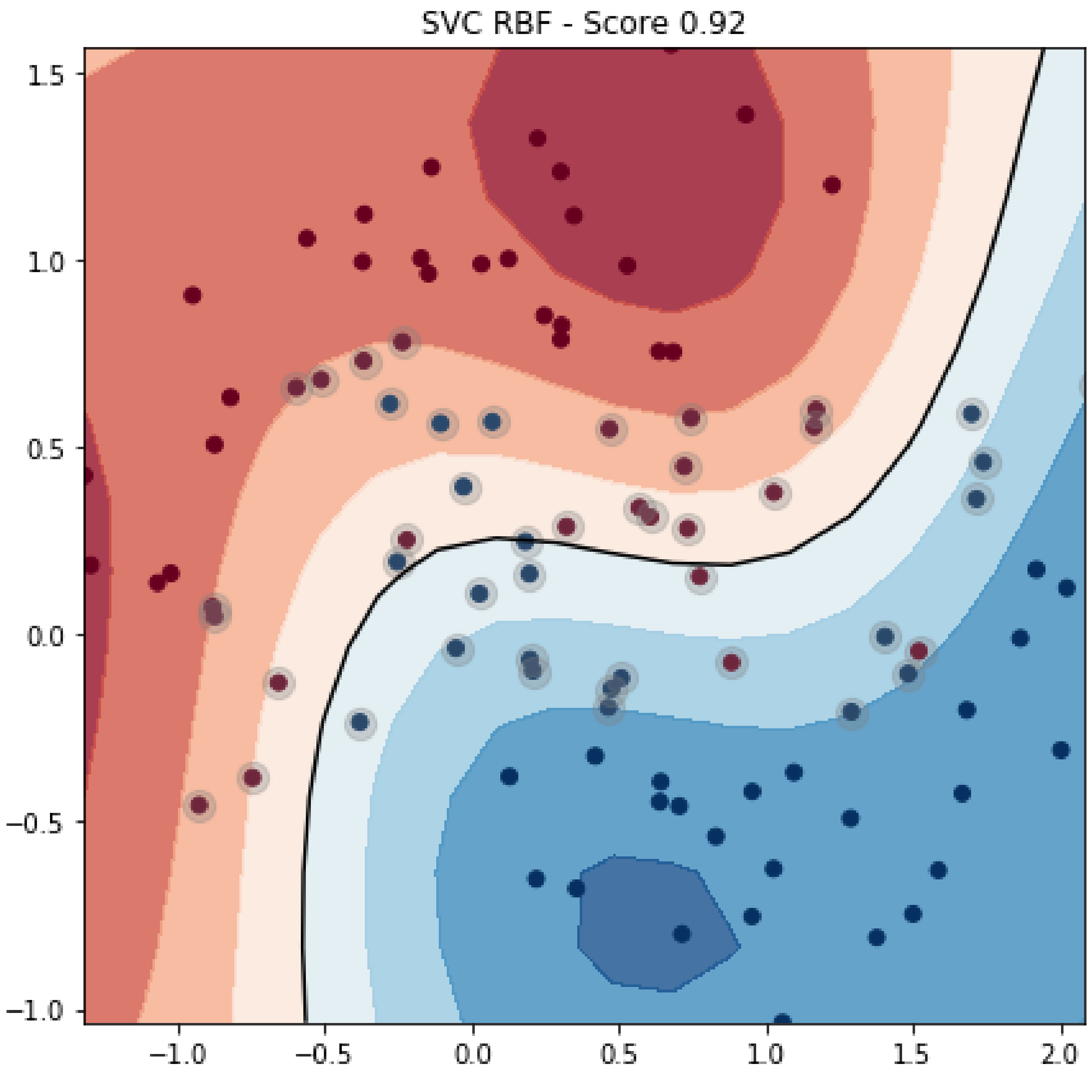
```
In [15]: fig = plt.figure(figsize=(12, 7))
         for i, (X, y) in enumerate(datasets):
             plt.subplot(2, 3, i+1)
             plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=y, cmap=plt.cm.RdBu)
             plt.xlim(X[:, 0].min(), X[:, 0].max())
             plt.ylim(X[:, 1].min(), X[:, 1].max())
         for dataset_idx, (X, y) in enumerate(datasets):
             plt.subplot(2, 3, 3+dataset_idx+1)
             svc.fit(X, y)
             plot_classification('SVC Polynomial', svc, X, y, plt.cm.RdBu)
```




```
In [16]: svc = SVC(kernel='rbf')

In [17]: fig = plt.figure(figsize=(12, 7))
         for i, (X, y) in enumerate(datasets):
             plt.subplot(2, 3, i+1)
             plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=y, cmap=plt.cm.RdBu)
             plt.xlim(X[:, 0].min(), X[:, 0].max())
             plt.ylim(X[:, 1].min(), X[:, 1].max())
         for dataset_idx, (X, y) in enumerate(datasets):
             plt.subplot(2, 3, 3+dataset_idx+1)
             svc.fit(X, y)
             plot_classification('SVC RBF', svc, X, y, plt.cm.RdBu)
```




```
In [18]: fig = plt.figure(figsize=(7, 7))
         X, y = datasets[0]
         svc.fit(X, y)
         plot_classification('SVC RBF', svc, X, y)
         plt.scatter(svc.support_vectors_[:,0], svc.support_vectors_[:,1], s=150, marker='o', co

Out[18]: <matplotlib.collections.PathCollection at 0x7fc3a6e98c50>
```



1.5 Exercício - *Iris*

```
In [19]: from sklearn.datasets import load_iris
         iris = load_iris()

In [20]: print iris.DESCR

Iris Plants Database
====================

Notes
-----
Data Set Characteristics:
    :Number of Instances: 150 (50 in each of three classes)
```

:Number of Attributes: 4 numeric, predictive attributes and the class
:Attribute Information:
- sepal length in cm
- sepal width in cm
- petal length in cm
- petal width in cm
- class:
    - Iris-Setosa
    - Iris-Versicolour
    - Iris-Virginica

:Summary Statistics:

	Min	Max	Mean	SD	Class Correlation
sepal length:	4.3	7.9	5.84	0.83	0.7826
sepal width:	2.0	4.4	3.05	0.43	-0.4194
petal length:	1.0	6.9	3.76	1.76	0.9490 (high!)
petal width:	0.1	2.5	1.20	0.76	0.9565 (high!)

:Missing Attribute Values: None
:Class Distribution: 33.3% for each of 3 classes.
:Creator: R.A. Fisher
:Donor: Michael Marshall (MARSHALL%PLU@io.arc.nasa.gov)
:Date: July, 1988

This is a copy of UCI ML iris datasets.
http://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Iris

The famous Iris database, first used by Sir R.A Fisher

This is perhaps the best known database to be found in the pattern recognition literature. Fisher's paper is a classic in the field and is referenced frequently to this day. (See Duda & Hart, for example.) The data set contains 3 classes of 50 instances each, where each class refers to a type of iris plant. One class is linearly separable from the other 2; the latter are NOT linearly separable from each other.

References

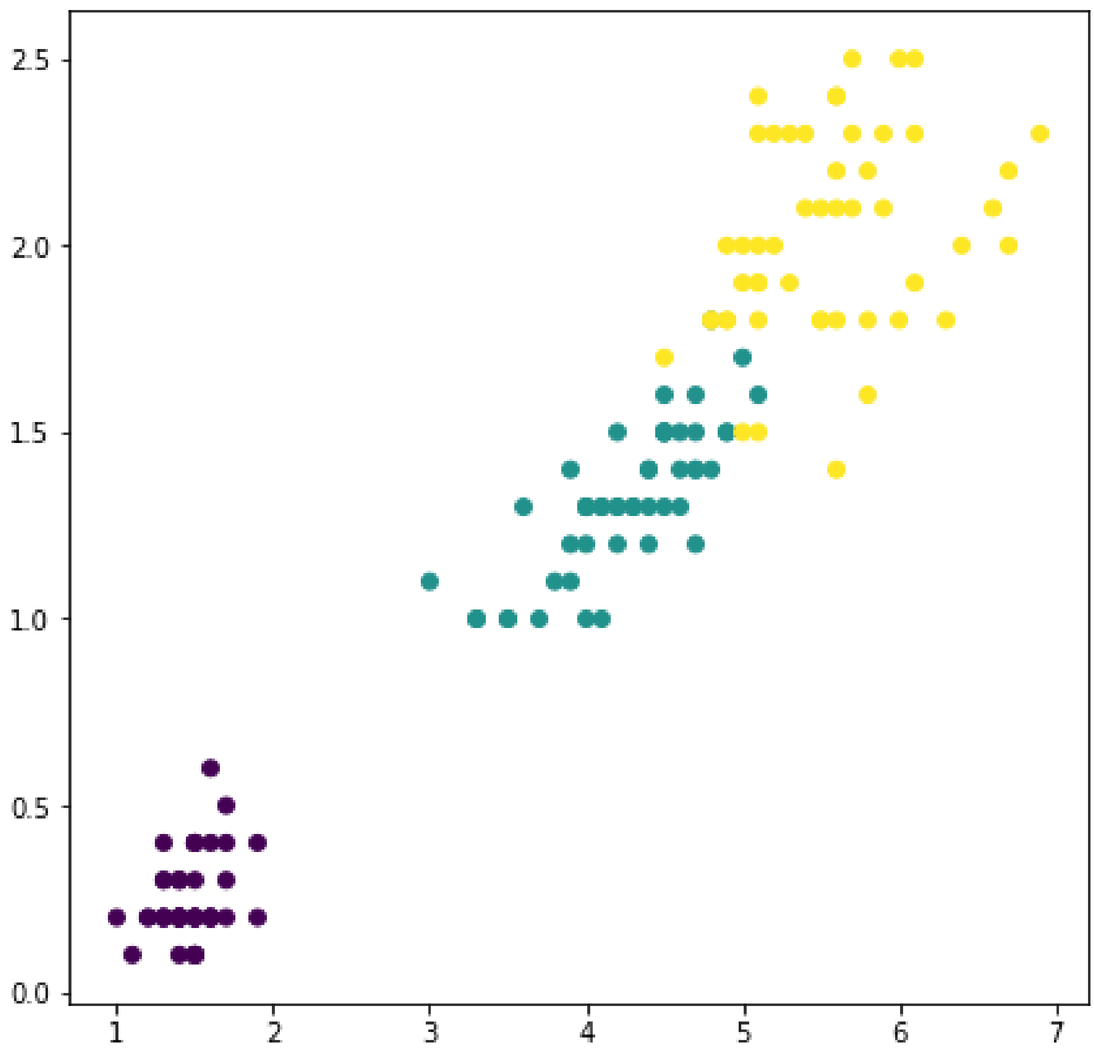
- Fisher,R.A. "The use of multiple measurements in taxonomic problems" Annual Eugenics, 7, Part II, 179-188 (1936); also in "Contributions to Mathematical Statistics" (John Wiley, NY, 1950).
- Duda,R.O., & Hart,P.E. (1973) Pattern Classification and Scene Analysis. (Q327.D83) John Wiley & Sons. ISBN 0-471-22361-1. See page 218.
- Dasarathy, B.V. (1980) "Nosing Around the Neighborhood: A New System Structure and Classification Rule for Recognition in Partially Exposed

```
  Environments".  IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine
  Intelligence, Vol. PAMI-2, No. 1, 67-71.
- Gates, G.W. (1972) "The Reduced Nearest Neighbor Rule".  IEEE Transactions
  on Information Theory, May 1972, 431-433.
- See also: 1988 MLC Proceedings, 54-64.  Cheeseman et al"s AUTOCLASS II
  conceptual clustering system finds 3 classes in the data.
- Many, many more ...
```

In [21]:
```python
X = iris.data[:,2:]
y = iris.target
```

In [22]:
```python
fig = plt.figure(figsize=(7, 7))
plt.scatter(X[:,0], X[:,1], c=y, cmap=plt.cm.viridis)
```

Out[22]:
```
<matplotlib.collections.PathCollection at 0x7fc3ad93e0d0>
```



Crie um classificador capaz de separar as 3 classes de plantas.

1.5.1 Solução

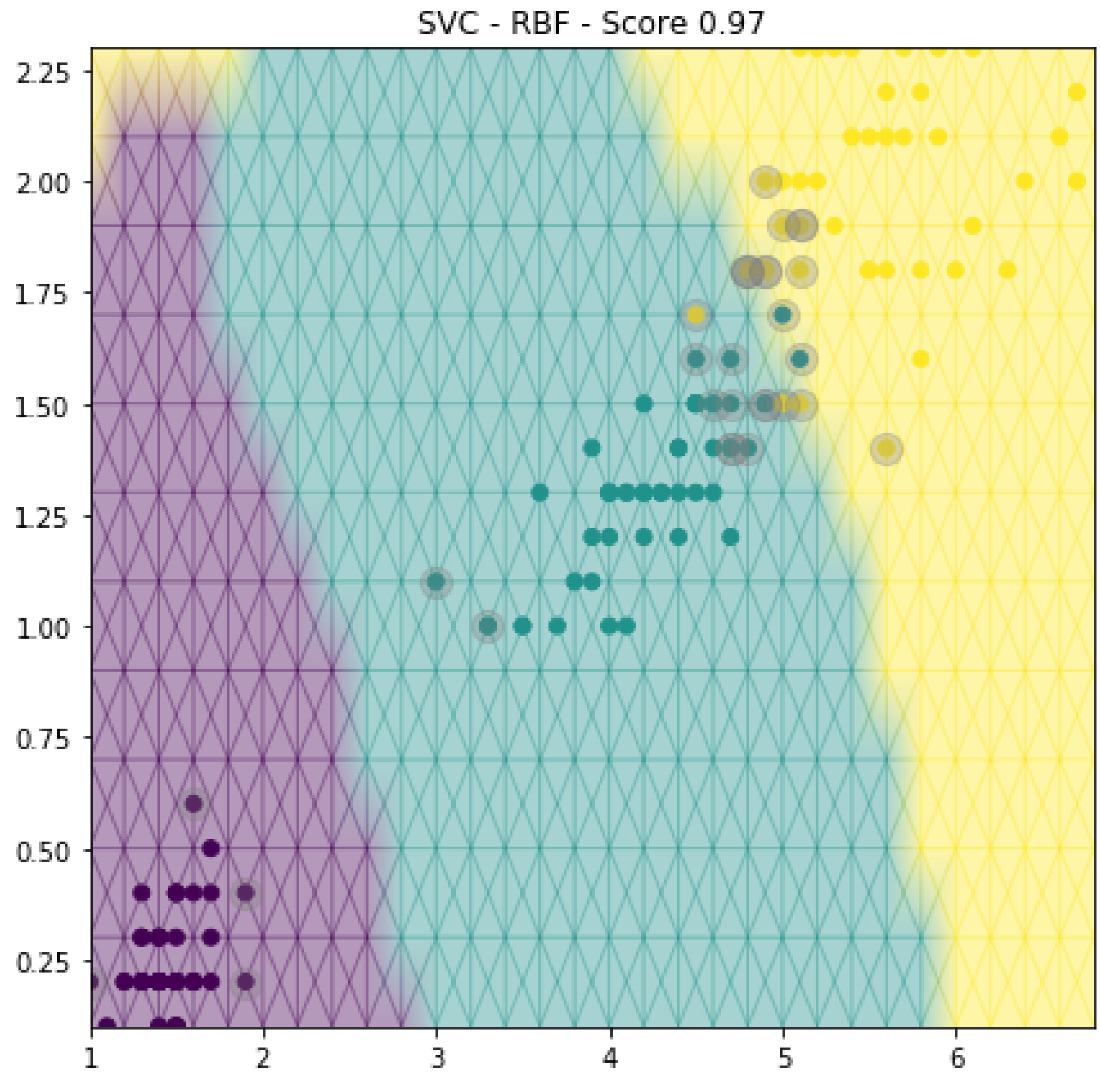
In [23]:
```
svc = SVC(kernel='rbf')
svc.fit(X, y)
```

Out[23]:
```
SVC(C=1.0, cache_size=200, class_weight=None, coef0=0.0,
  decision_function_shape='ovr', degree=3, gamma='auto', kernel='rbf',
  max_iter=-1, probability=False, random_state=None, shrinking=True,
  tol=0.001, verbose=False)
```

In [24]:
```
def plot_multi_class(name, clf, X, y, cmap=plt.cm.viridis):
    score = clf.score(X, y)

    h = 0.2
    x_min, x_max = X[:, 0].min(), X[:, 0].max()
    y_min, y_max = X[:, 1].min(), X[:, 1].max()
    xx, yy = np.meshgrid(np.arange(x_min, x_max, h), np.arange(y_min, y_max, h))

    Z = clf.predict(np.c_[xx.ravel(), yy.ravel()])
    Z = Z.reshape(xx.shape)
    plt.pcolormesh(xx, yy, Z, cmap=cmap, shading='gouraud', alpha=0.4, edgecolors='None
    plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=y, cmap=cmap)
    plt.xlim(xx.min(), xx.max())
    plt.ylim(yy.min(), yy.max())
    plt.title(name + " - Score %.2f" % score)
```

In [25]:
```
fig = plt.figure(figsize=(7, 7))
plot_multi_class('SVC - RBF', svc, X, y)
plt.scatter(svc.support_vectors_[:,0], svc.support_vectors_[:,1], s=150, marker='o', co
```

Out[25]:
```
<matplotlib.collections.PathCollection at 0x7fc3a6f03f10>
```


SVC - RBF - Score 0.97
2.25
2.00
1.75
1.50
1.25
1.00
0.75
0.50
0.25
1
2
3
4
5
6