Introdução ao Aprendizado de Máquina

Lucas Gonçalves de Moura Leite

Aula de hoje

- Aprendizado Supervisionado
  - Naive Bayes
  - Random Forest
  - Gradient Boosted Decision Tree
  - Redes Neurais
- Aprendizado Não-supervisionado
  - Redução de dimensionalidade
  - Clustering

Naive Bayes

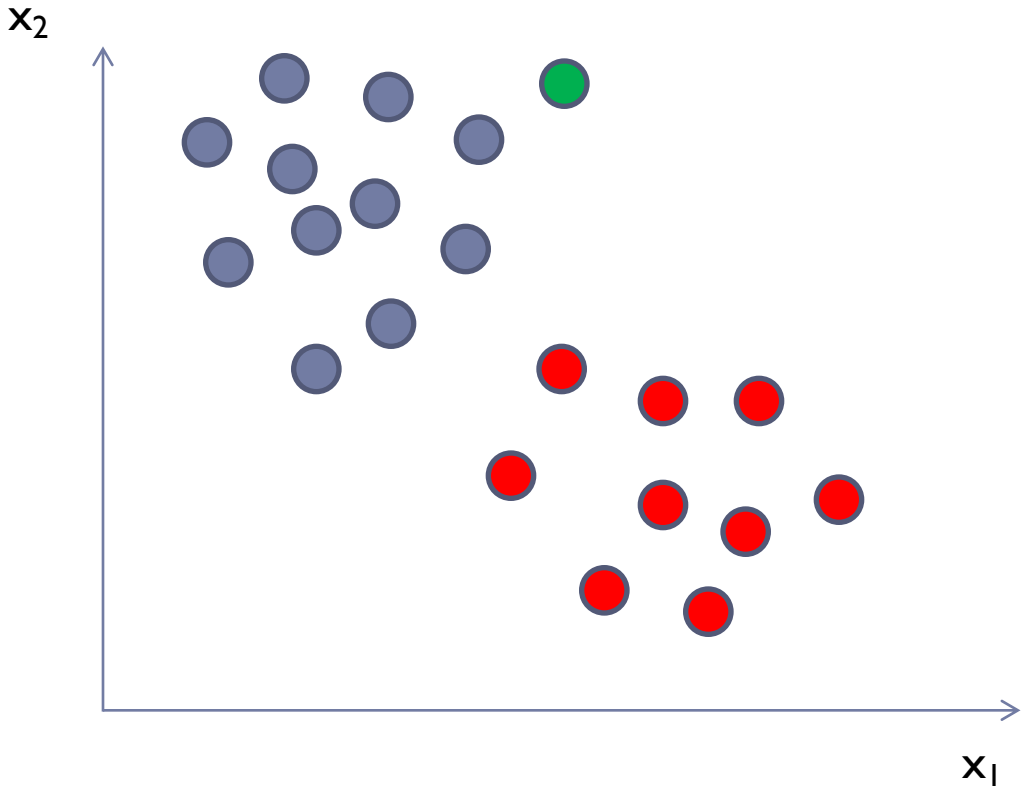
Naive Bayes

- Assume que os atributos são descorrelacionados
- Hipótese simplifica o modelo
  - Custo de treinamento
- Em geral possui desempenho pior que outros classificadores
- Pode ter bom desempenho para algumas aplicações
- Calcular a probabilidade de um determinado dado pertencer a uma das classes

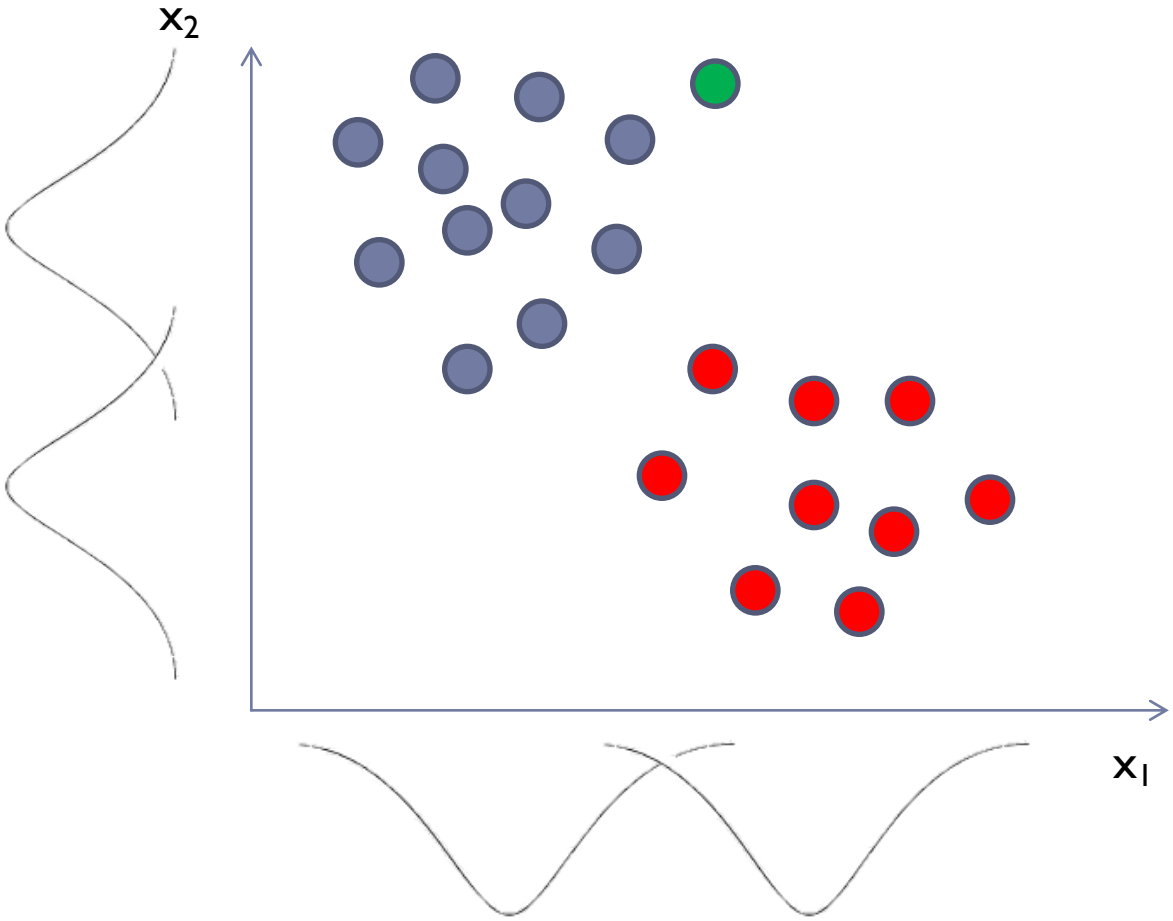
Naive Bayes – Scikit-learn

- Bernoulli
  - Atributos binários
- Multinomial
  - Atributos discretos
- Gaussian
  - Atributos reais

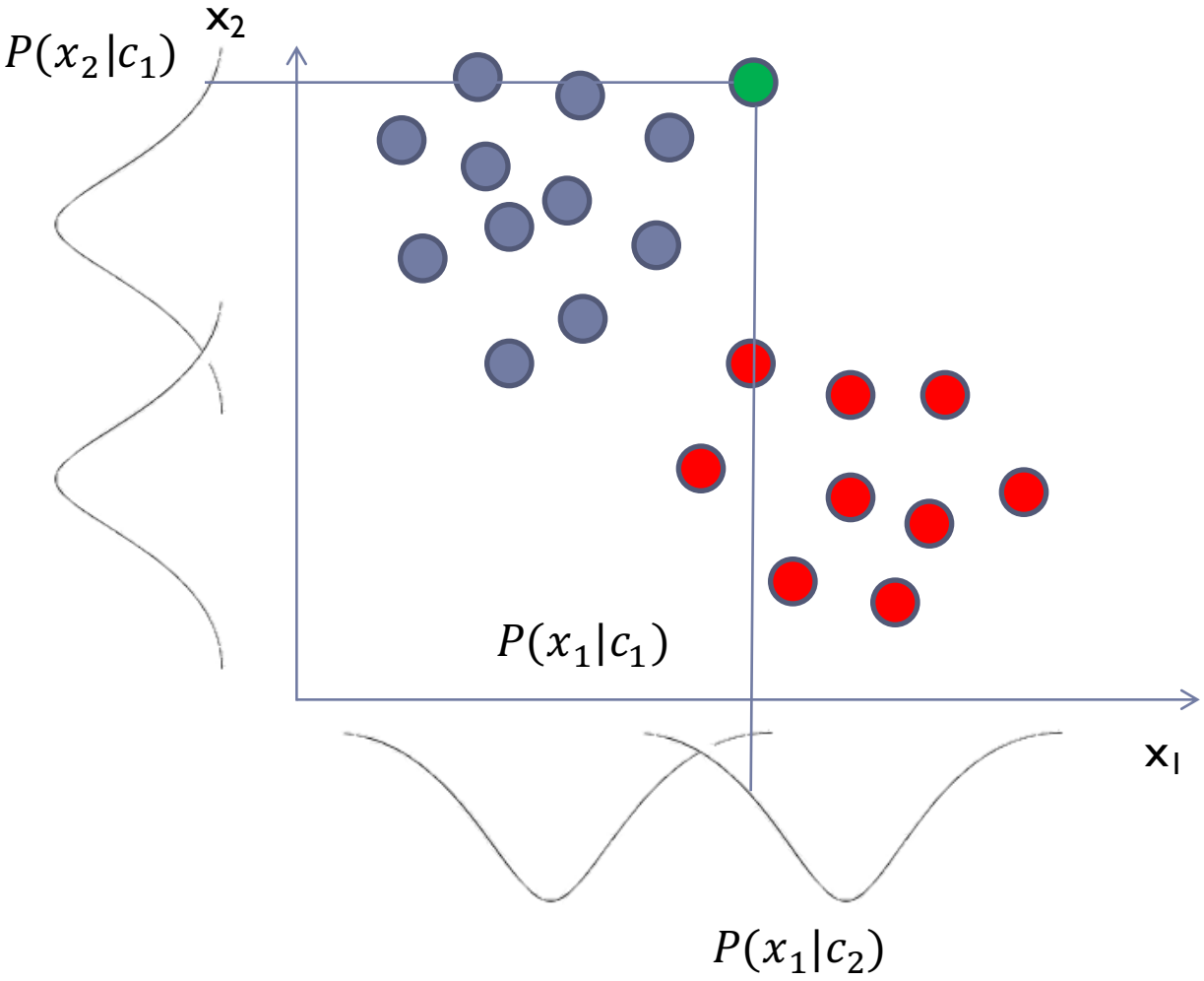
Gaussian Naive Bayes



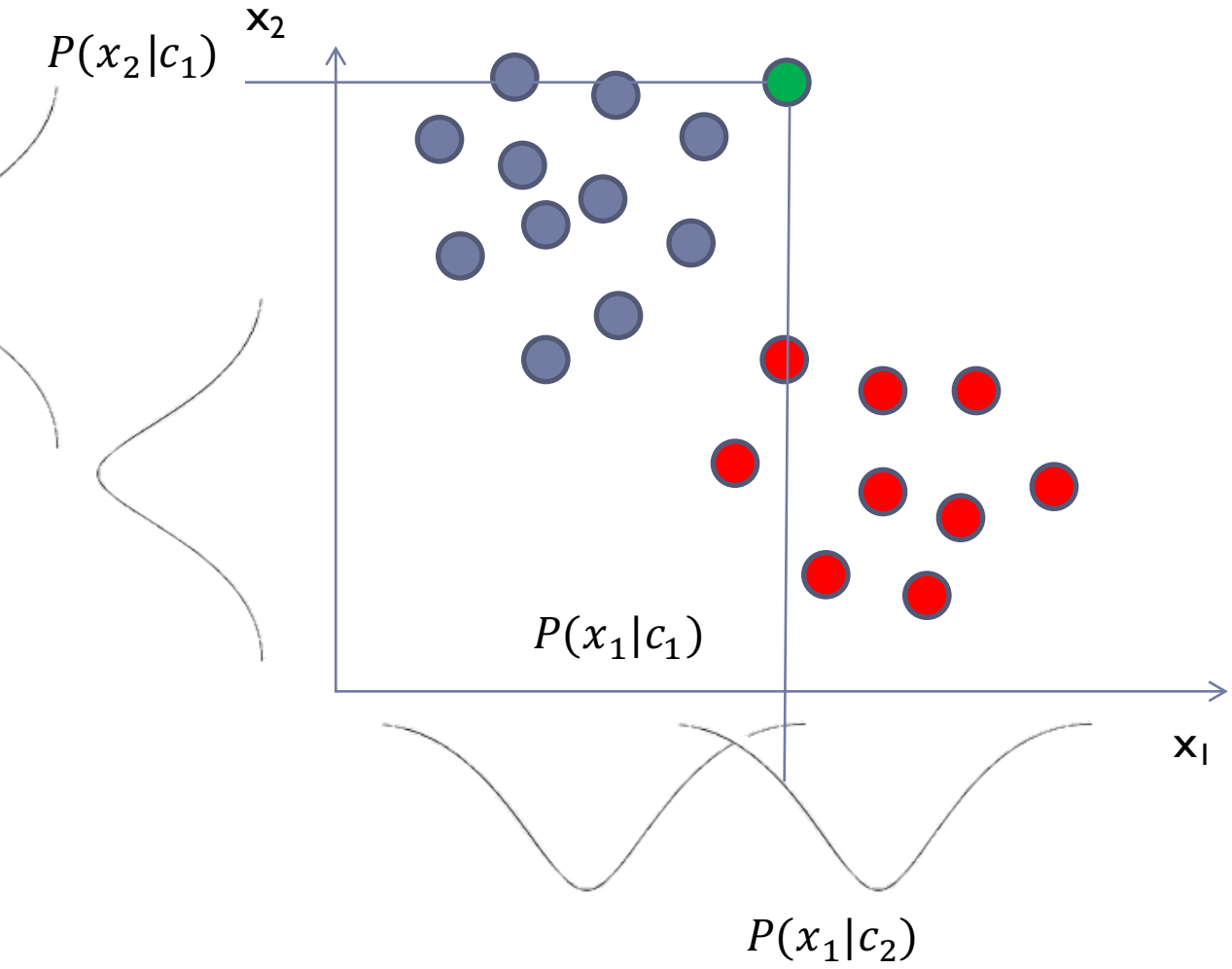
Gaussian Naive Bayes



Gaussian Naive Bayes



Gaussian Naive Bayes



$$P(c_1|x) = \prod_{i=1}^{N} p(x_i|c_1)$$

$$P(c_2|x) = \prod_{i=1}^{N} p(x_i|c_2)$$

Naive Bayes

- Criar modelo independente para cada atributo
  - Custo computacional baixo
- Classificador Linear/Quadrático
- Sem hiperparâmetros
- Muito utilizado para dados com alta dimensão
  - Classificação de textos

Exercício

- Usar o Gaussian Naive Bayes para os dados breast cancer

```
from sklearn.naive_bayes import GaussianNB
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X_C2, y_C2,
                                                    random_state=0)

nbclf = GaussianNB().fit(X_train, y_train)
```

Random Forest

Ensemble Models (Comitê de maquinas)

- Foi demonstrado que a combinação de modelos tende a gerar melhores resultados que os seus componentes individuais.
- Diferentes modelos cometem erros diferentes (overfitting de formas diferentes)
- A combinação alivia o efeito do overfitting
  - Os modelos devem ser diversos

Random Forest

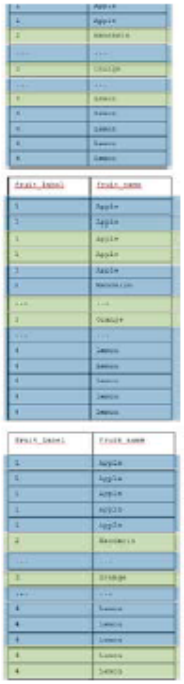
- Ensemble de árvores
- Muito usada
  - Excelentes resultados em muitas aplicações
- Modulo sklearn.ensemble
  - RandomForestClassifier
  - RandomForestRegressor
- Como tornar as árvores diversas ?

Random Forest

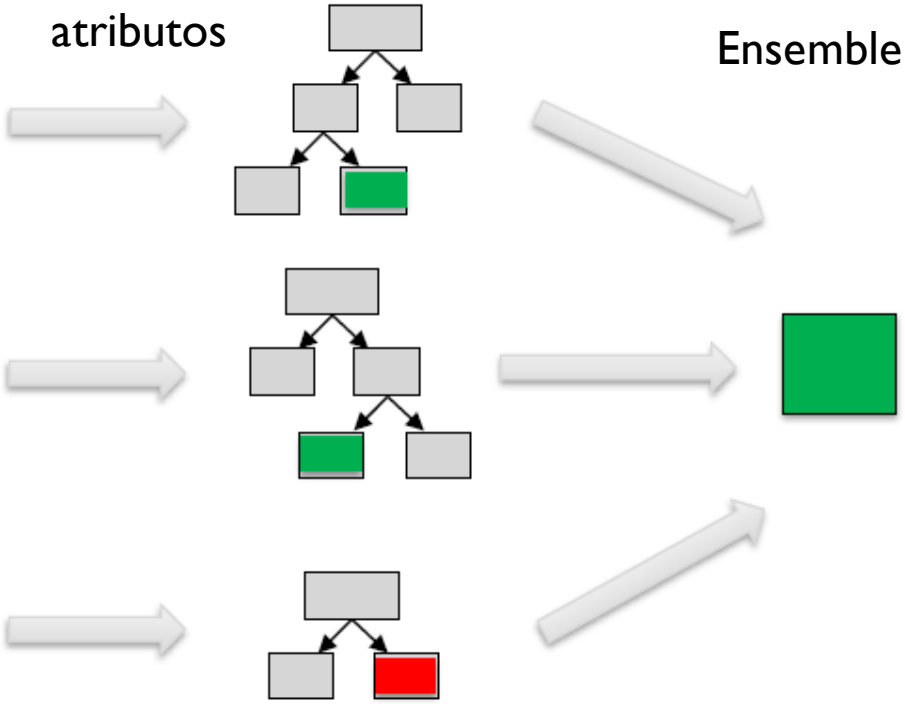
Dados originais

fruit_label	fruit_name
1	Apple
1	Apple
1	Apple
1	Apple
1	Apple
2	Mandarin
...	...
3	Orange
...	...
4	Lemon
4	Lemon
4	Lemon
4	Lemon
4	Lemon

N conjuntos aleatórios (bootstrap)



Subconjunto aleatório dos atributos



Ensemble

n_estimator

max_features

Random Forest

- Dados
  - Bootstrap
- Atributos
  - Seleção aleatória
- Resultado
  - Regressão
    - Média da saídas das árvores
  - Classificação
    - Probabilidade fornecida por cada árvore
    - Probabilidade média para cada classe

Random Forest

- Vantagens
  - Boa performance
  - Não é muito sensível a escolha dos parâmetros
  - Facilmente paralelizável
- Desvantagens
  - Sem interpretabilidade
  - Desempenho deficiente para dados com muitos atributos

Exercício

- Usar o Random Forest para os dados breast cancer

```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
clf = RandomForestClassifier(max_features = 8, random_state = 0)
```

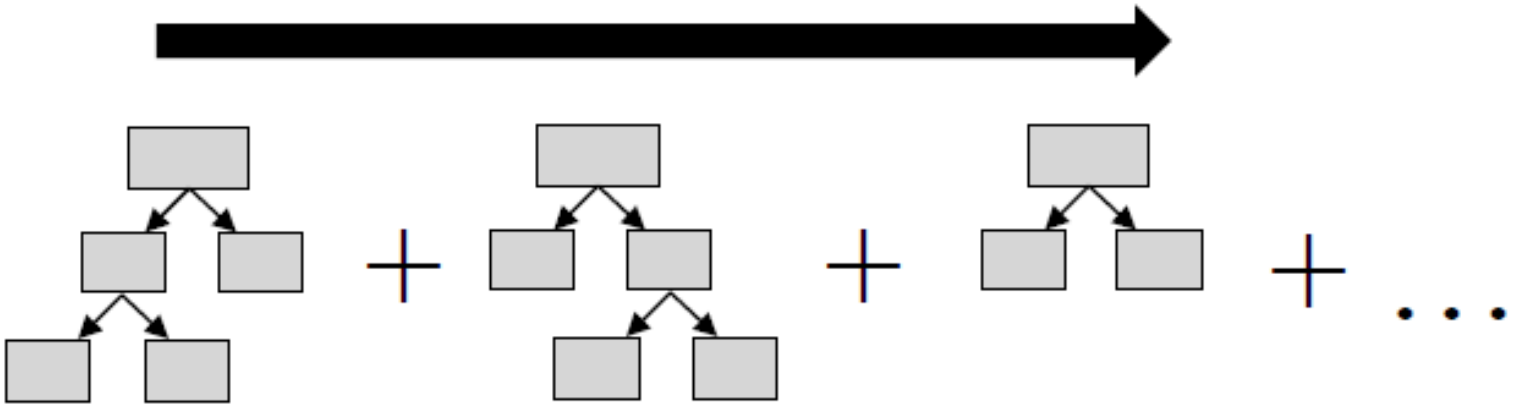
Gradient Boosted Decision Tree

Gradient Boosted Decision Tree

- Ensemble model
- Random Forest
  - Árvores em paralelo
- GBDT
  - Árvores em série

Gradient Boosted Decision Tree

- Weak Learners
- Cada nova árvore busca corrigir os erros da anterior



Gradient Boosted Decision Tree

- Parâmetros
  - learning_rate: define o quanto uma nova árvore tentará corrigir os erros da anterior
  - max_depth: profundidade da árvore
  - n_estimators: numero de árvores

Gradient Boosted Decision Tree

- Vantagens
  - Boa performance
  - Não é muito sensível a escolha dos parâmetros
  - Uso do modelo tem baixo custo computacional
- Desvantagens
  - Sem interpretabilidade
  - Treinamento é custoso
  - Desempenho deficiente para dados com muitos atributos

Exercício

- Usar o GBDT para os dados breast cancer
- Usar os parâmetros
  - learning_rate=0.1,max_depth=3
  - learning_rate=0.1,max_depth=2

```
from sklearn.ensemble import GradientBoostingClassifier
clf = GradientBoostingClassifier(random_state = 0)
```

Redes Neurais

Redes Neurais

- Funcionamento inspirado no neurônio biológico.
- Tarefas de Aprendizado de Máquina
  - Classificação
  - Regressão

Neurônio Biológico x Neurônio Artificial

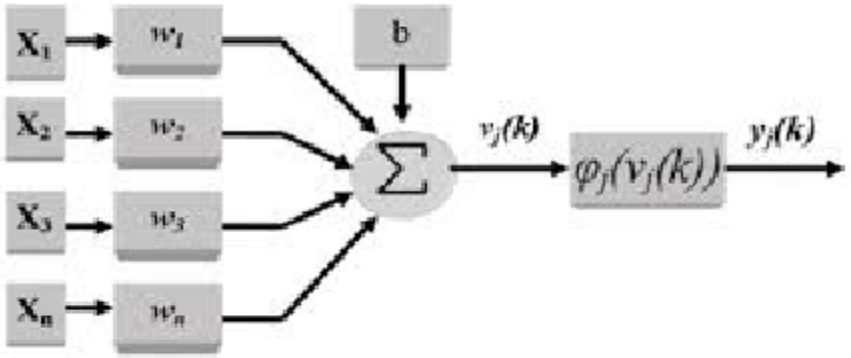


Figura 2: Representação do neurônio artificial.

Neurônio Biológico x Neurônio Artificial

McCulloch-Pitts

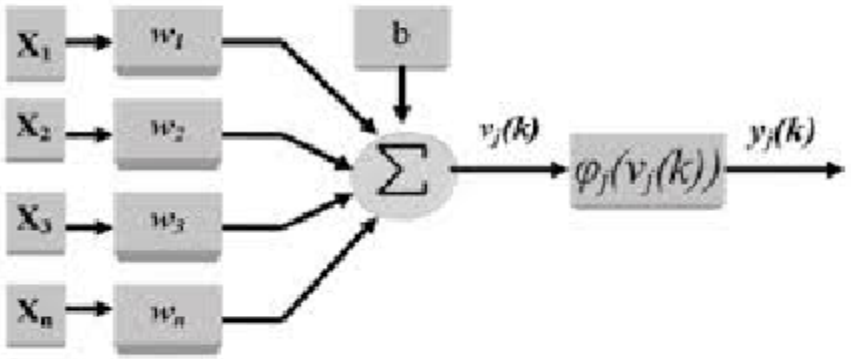


Figura 2: Representação do neurônio artificial.

Modelo de McCulloch-Pitts

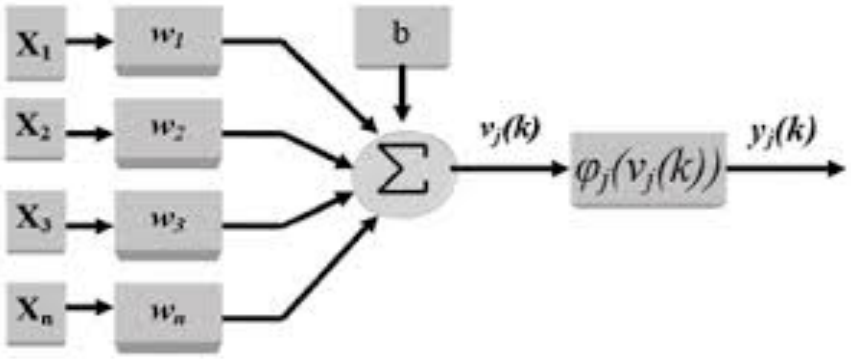


Figura 2: Representação do neurônio artificial.

$$v_j = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots - b$$

$$\varphi(v_j) = 1 \; se \; v_j > 0$$
$$\varphi(v_j) = 0 \; se \; v_j < 0$$

Perceptron

Modelo + Regra de aprendizado

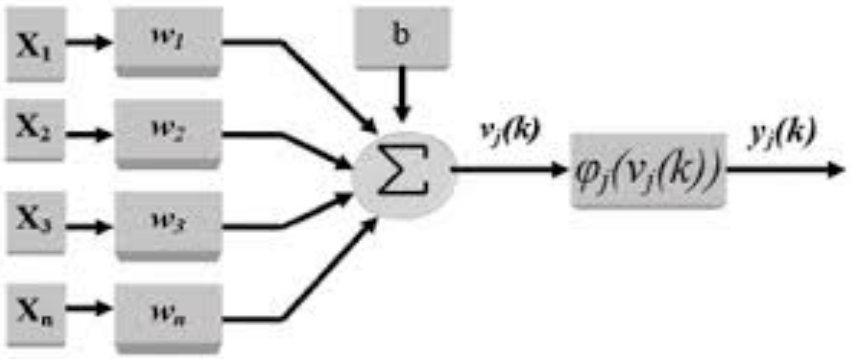
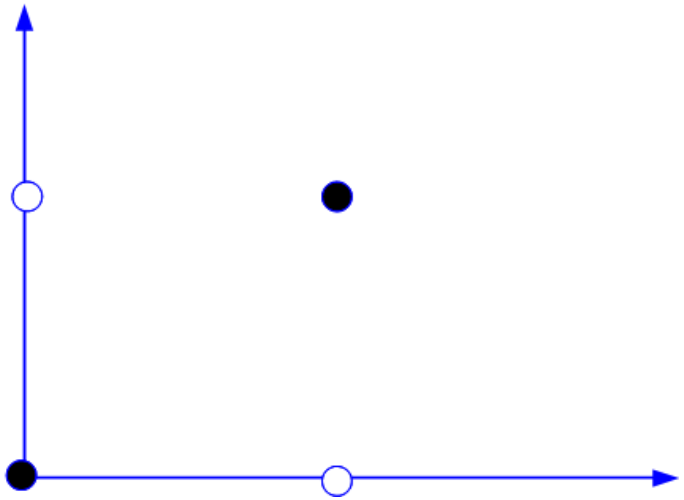


Figura 2: Representação do neurônio artificial.

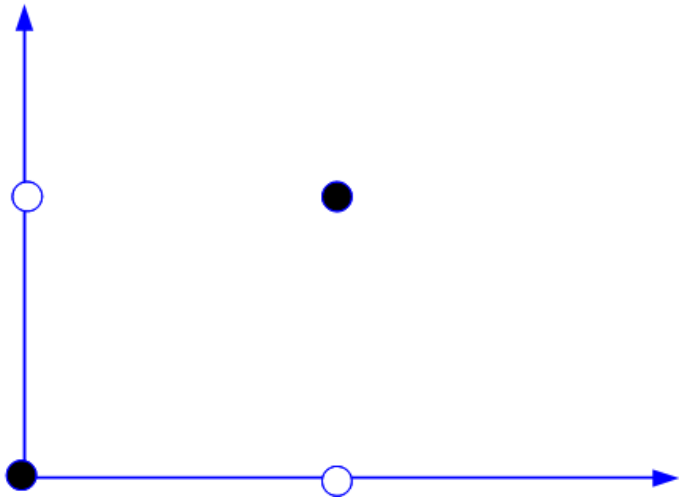
Perceptron

Entrada (x)	Saída (y)
0,0	0
0,1	1
1,0	1
1,1	0



Perceptron

Entrada (x)	Saída (y)
0,0	0
0,1	1
1,0	1
1,1	0

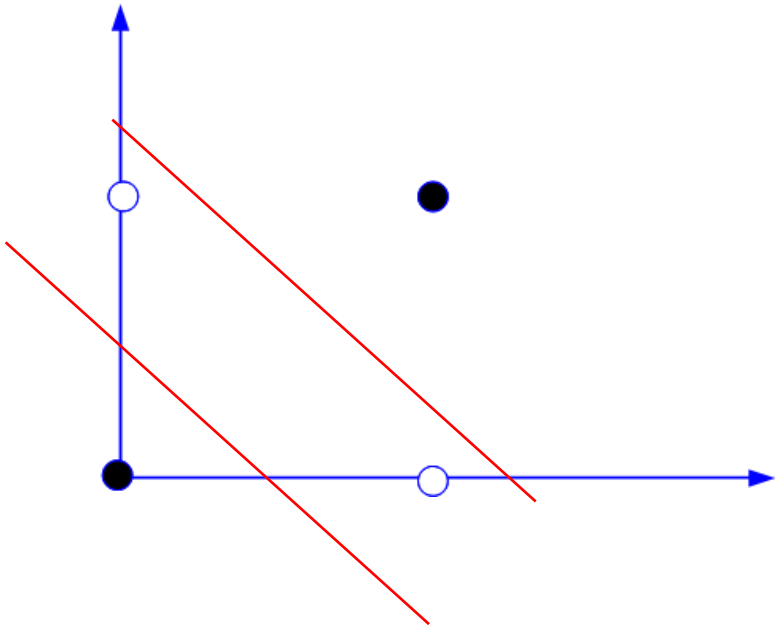


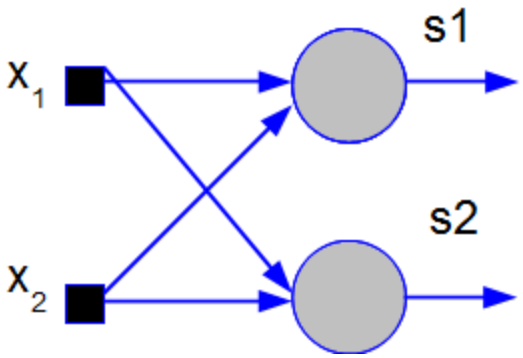
x_1 ■

x_2 ■

Perceptron

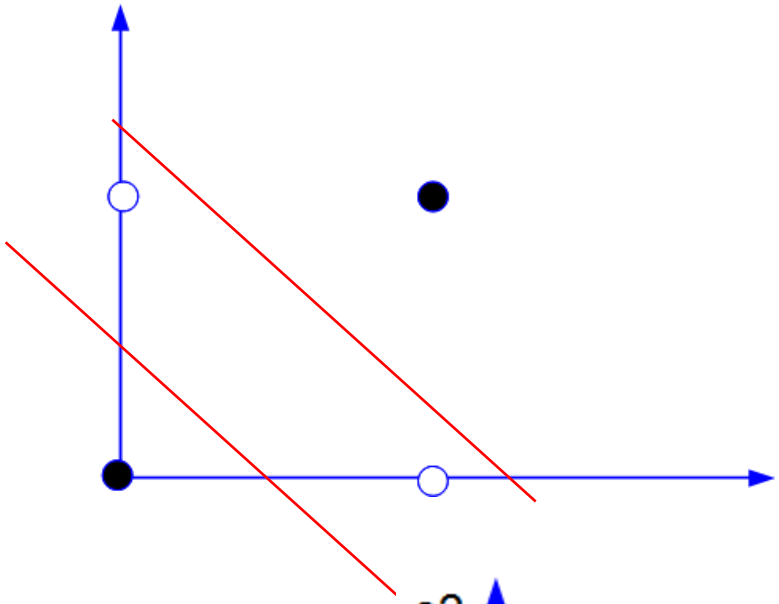
Entrada (x)	Saída (y)
0,0	0
0,1	1
1,0	1
1,1	0

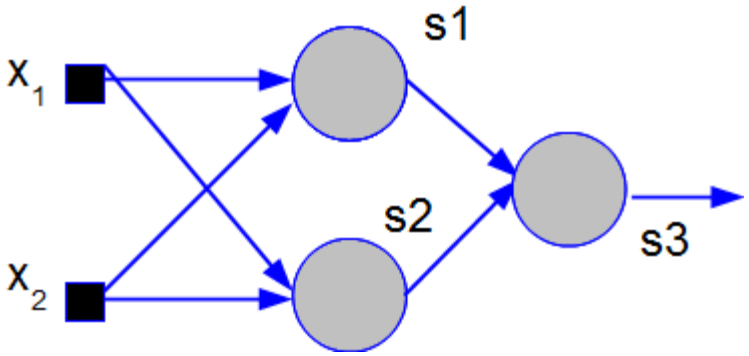


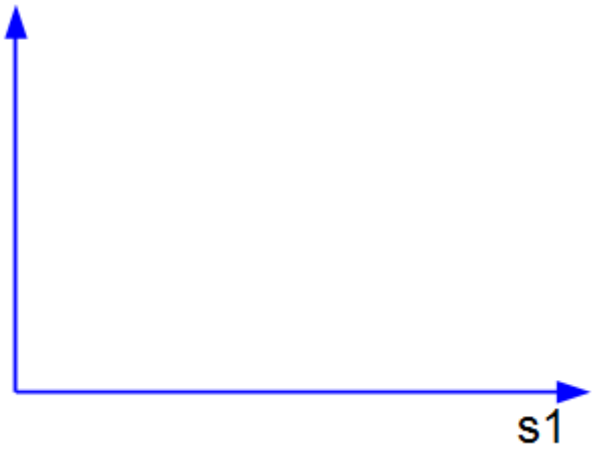


Perceptron

Entrada (x)	Saída (y)
0,0	0
0,1	1
1,0	1
1,1	0

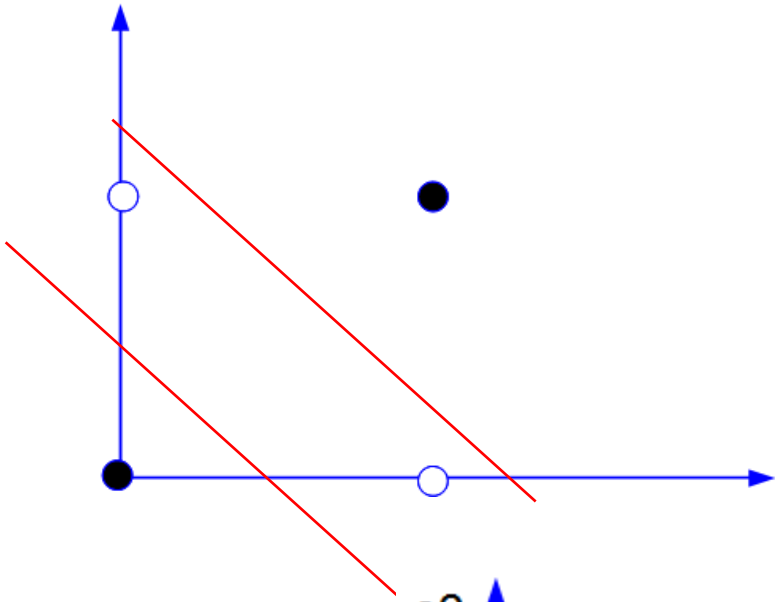


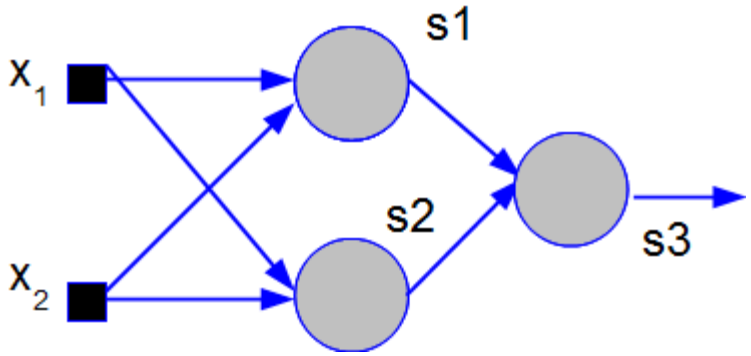




Perceptron

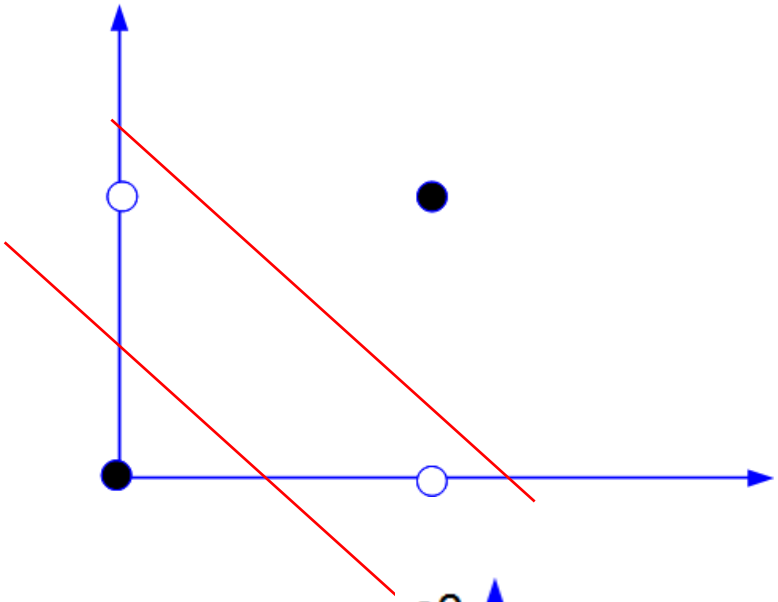
Entrada (x)	Saída (y)
0,0	0
0,1	1
1,0	1
1,1	0

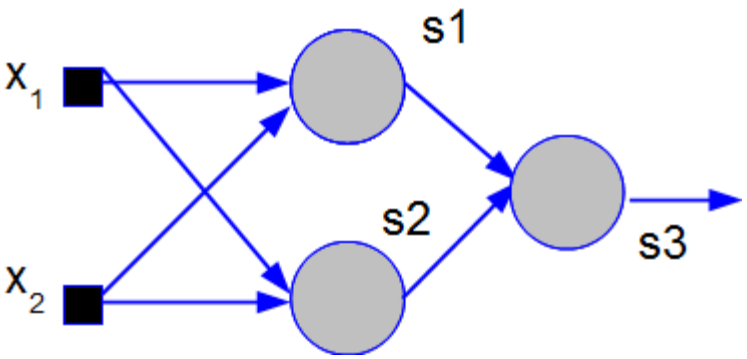


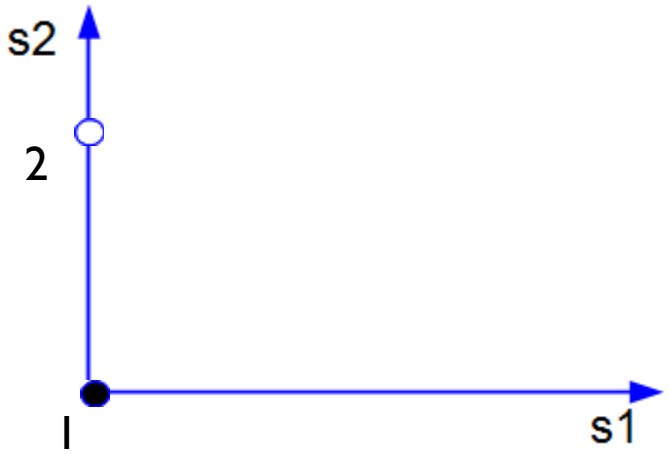


Perceptron

Entrada (x)	Saída (y)
0,0	0
0,1	1
1,0	1
1,1	0

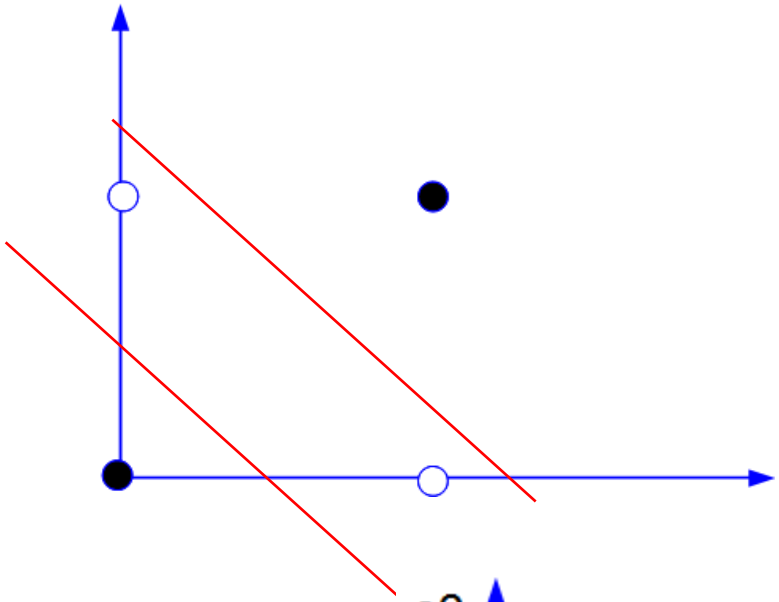


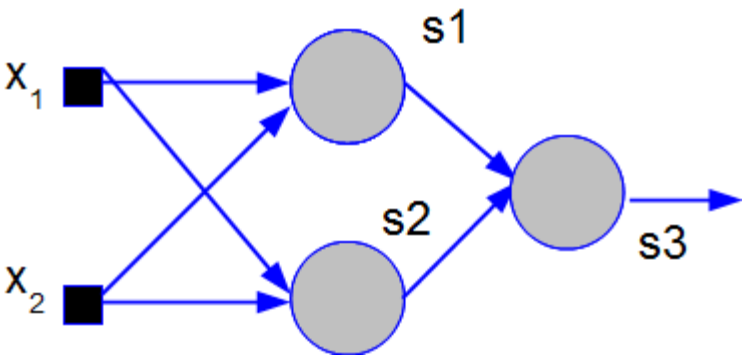


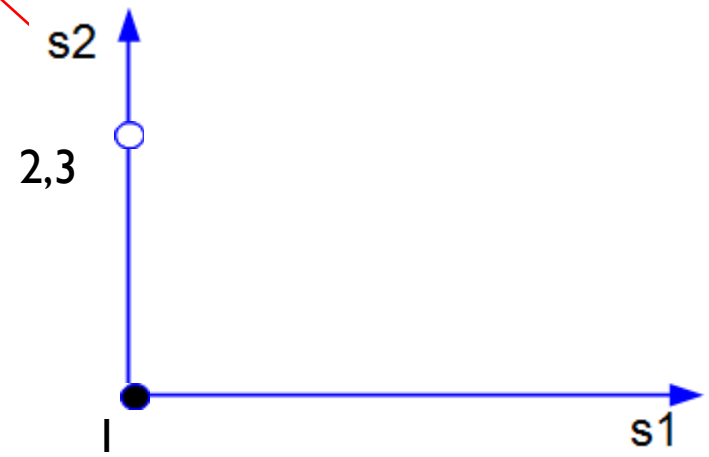


Perceptron

Entrada (x)	Saída (y)
0,0	0
0,1	1
1,0	1
1,1	0

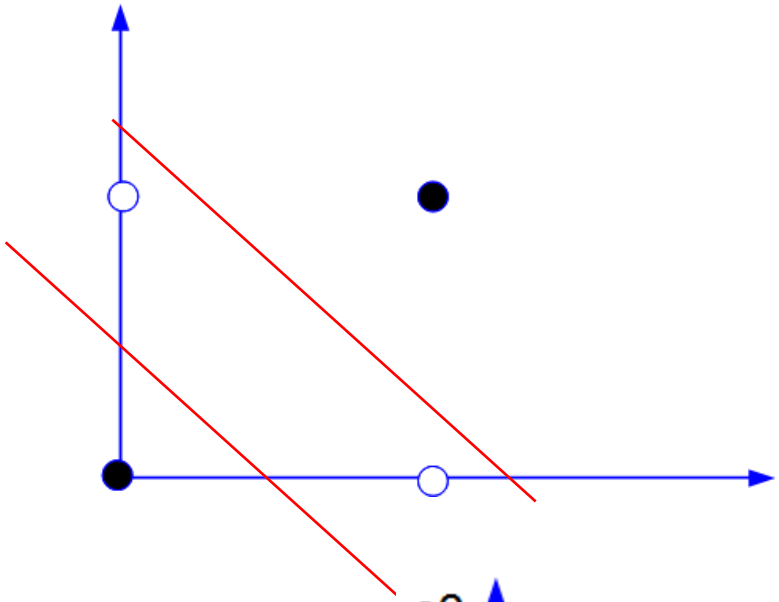


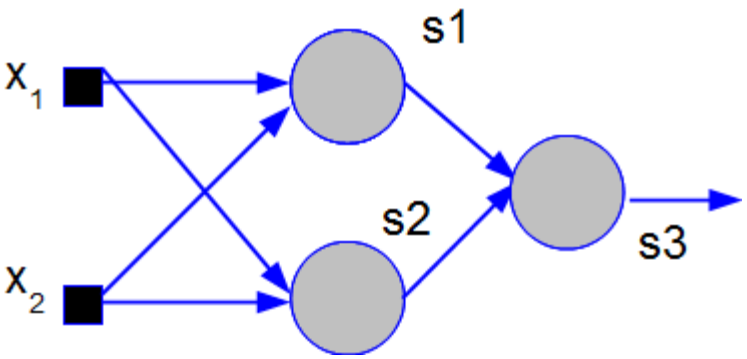


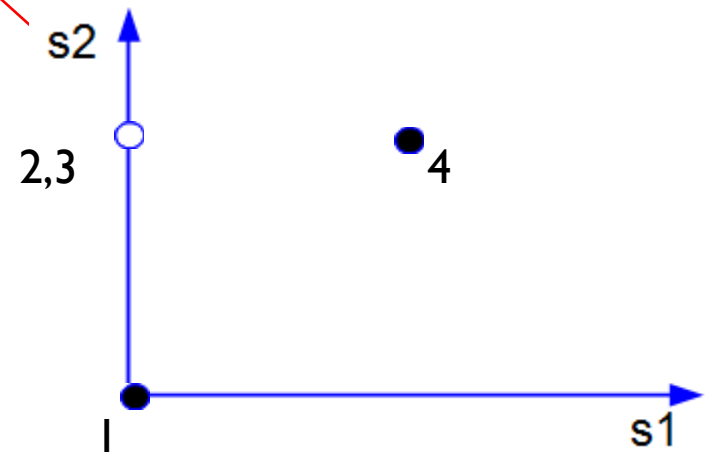


Perceptron

Entrada (x)	Saída (y)
0,0	0
0,1	1
1,0	1
1,1	0

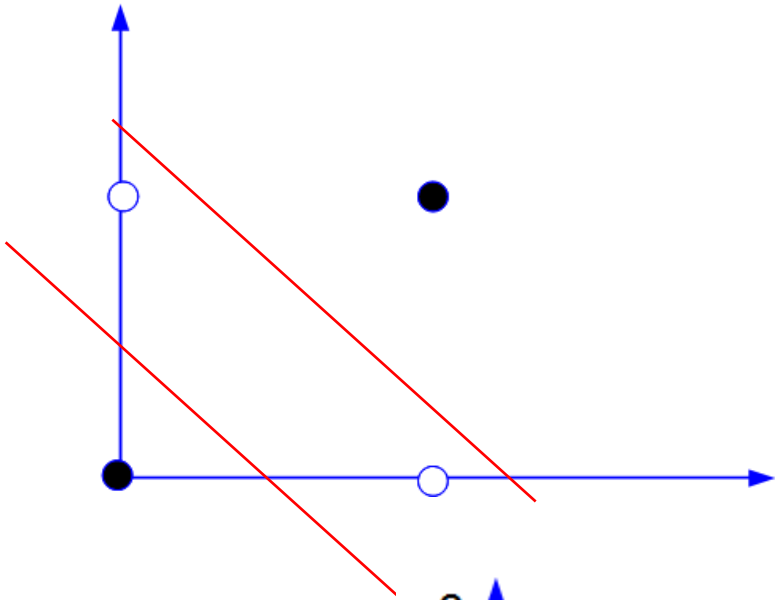


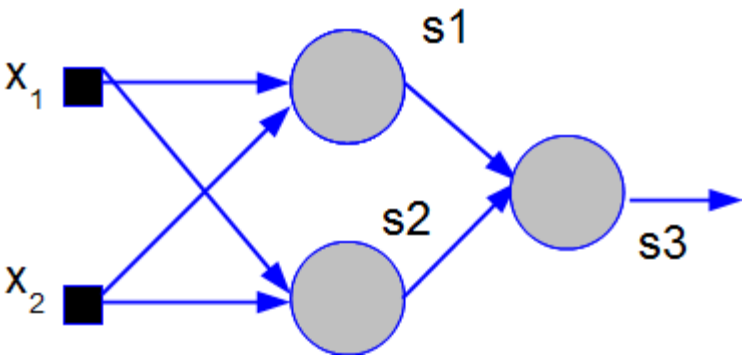


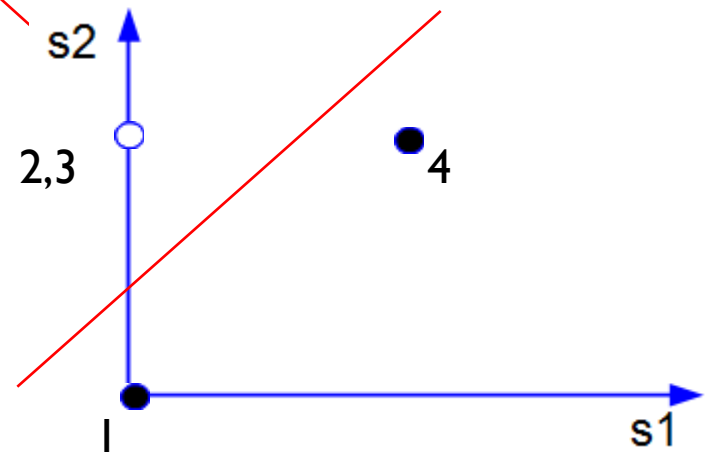


Perceptron

Entrada (x)	Saída (y)
0,0	0
0,1	1
1,0	1
1,1	0





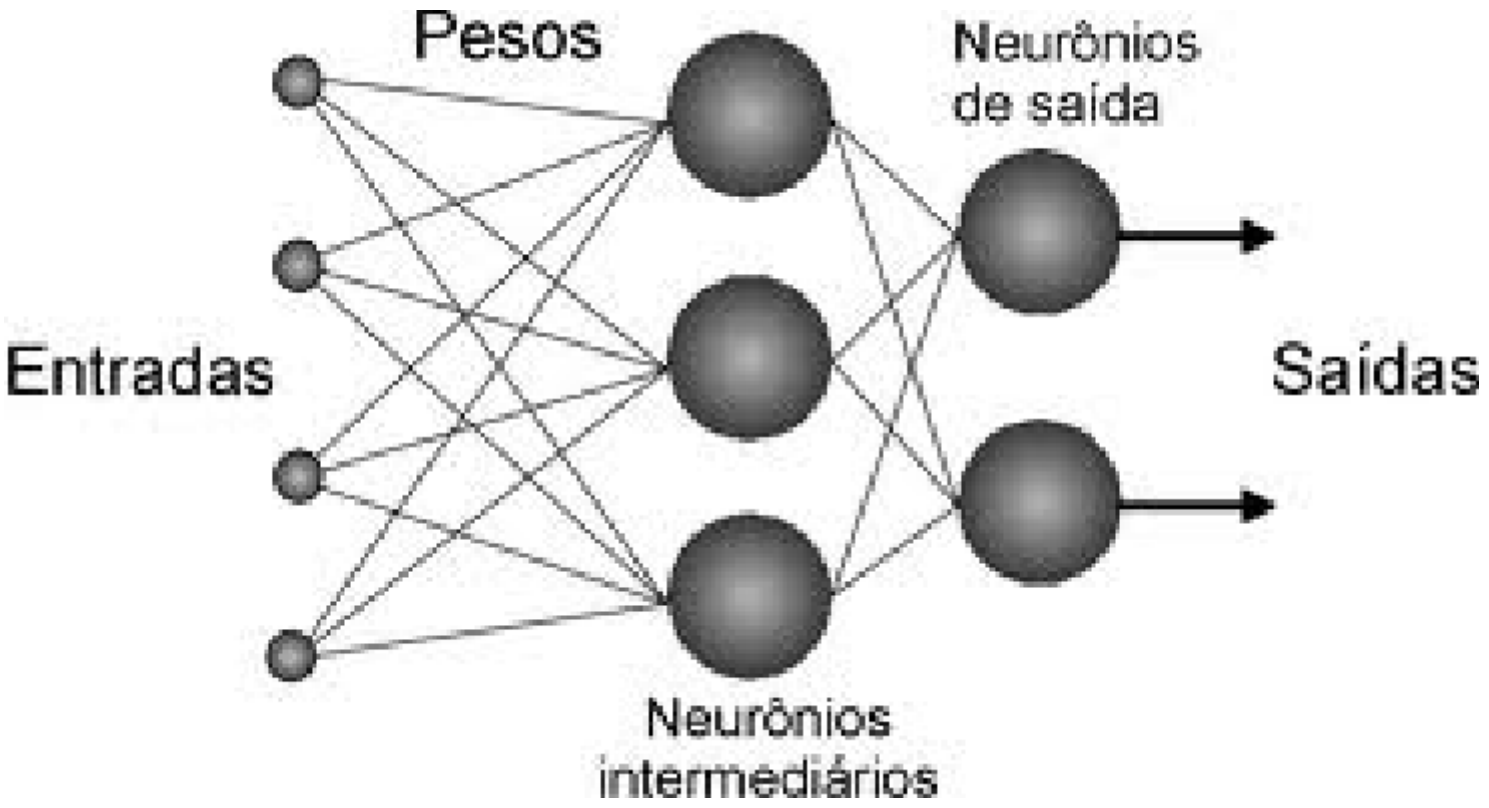


Perceptron de Múltiplas Camadas

- Rede MLP (MultiLayer Perceptron)
  - Problemas não linearmente separáveis

Redes MLP

- Redes com múltiplas camadas de neurônios artificiais



Redes MLP

- Scikit-learn

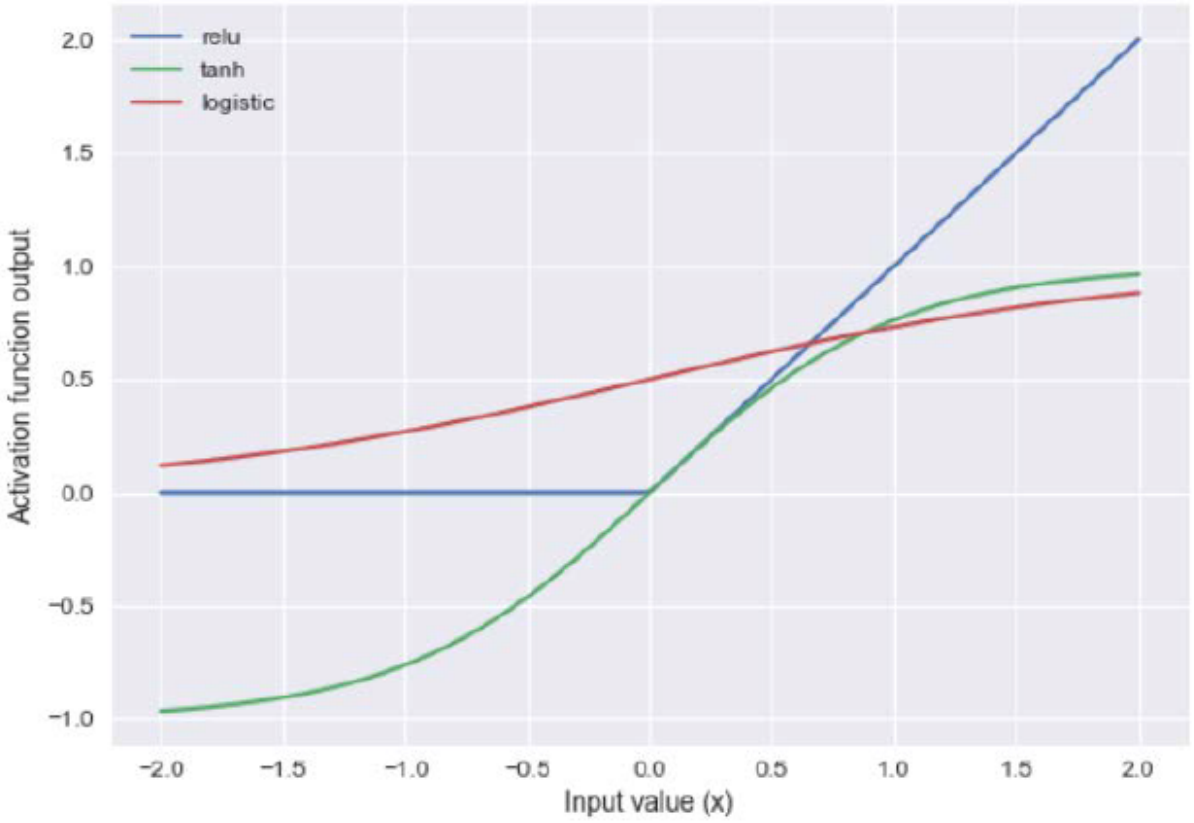
```
from sklearn.neural_network import MLPClassifier
nnclf = MLPClassifier(hidden_layer_sizes = 10, solver='lbfgs',
                      random_state = 0).fit(X_train, y_train)
```

Parâmetros

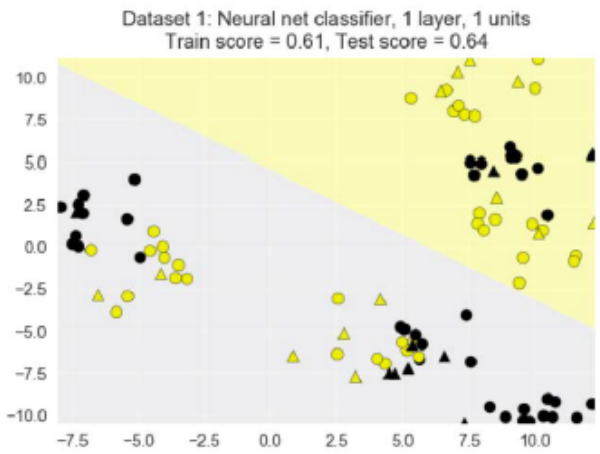
- Função de ativação
- Número de camadas
- Número de neurônios por camada
- Parâmetro de regularização (alpha)

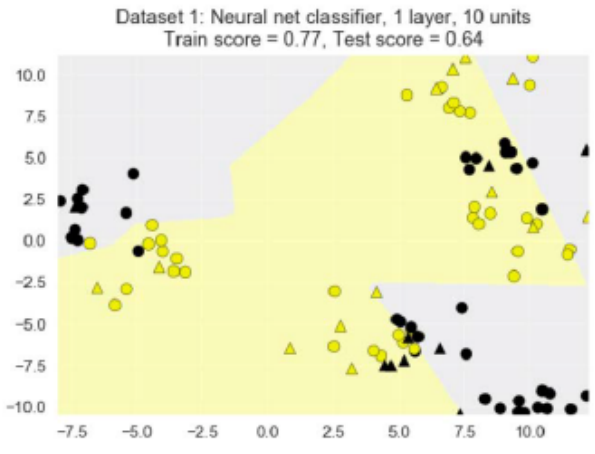
Funções de Ativação

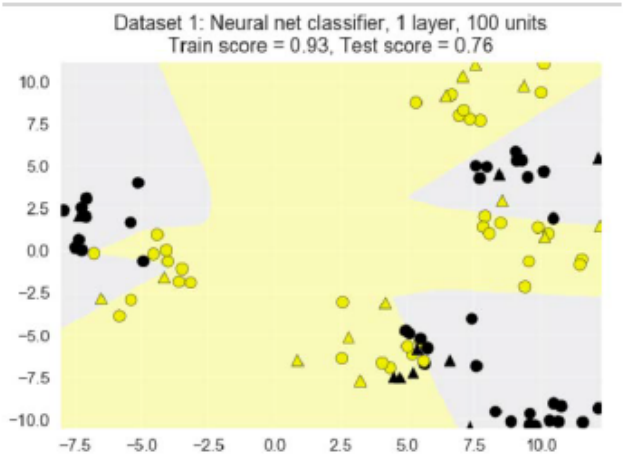
- RELU - default



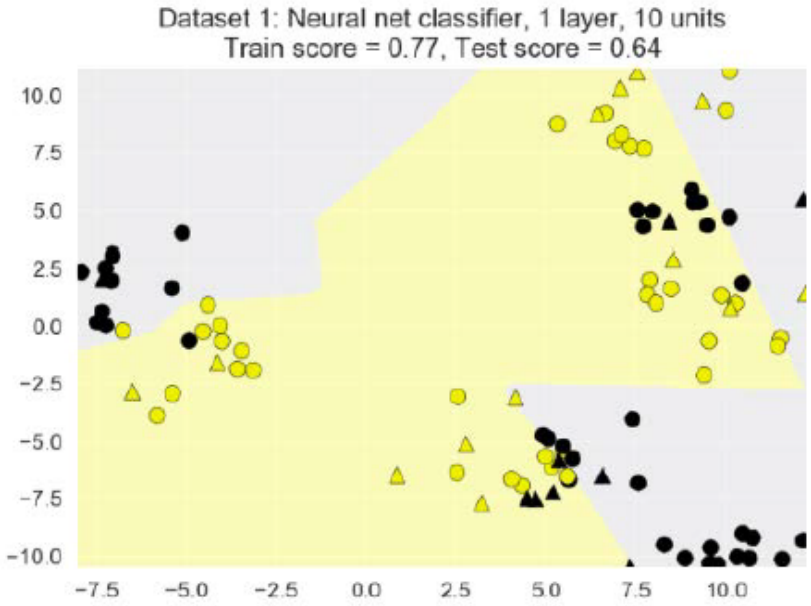
Efeito de numero de neurônios

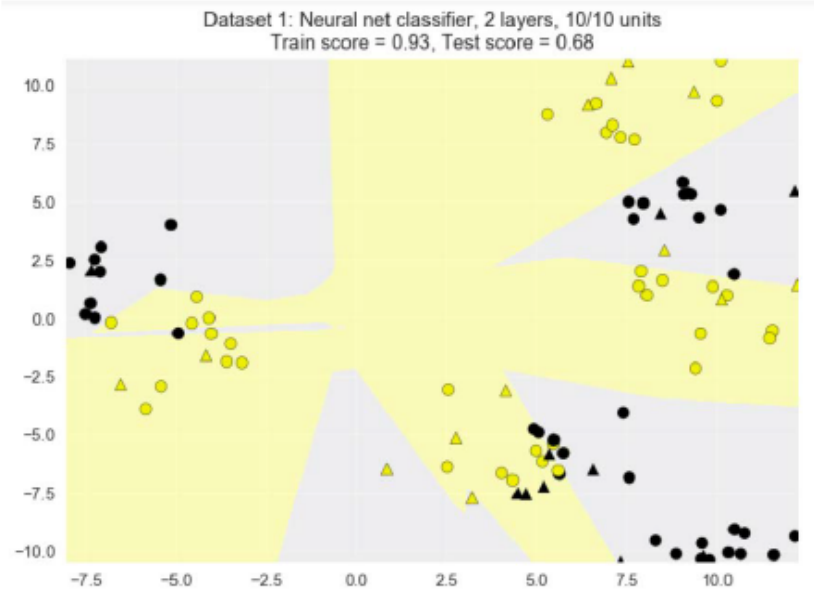




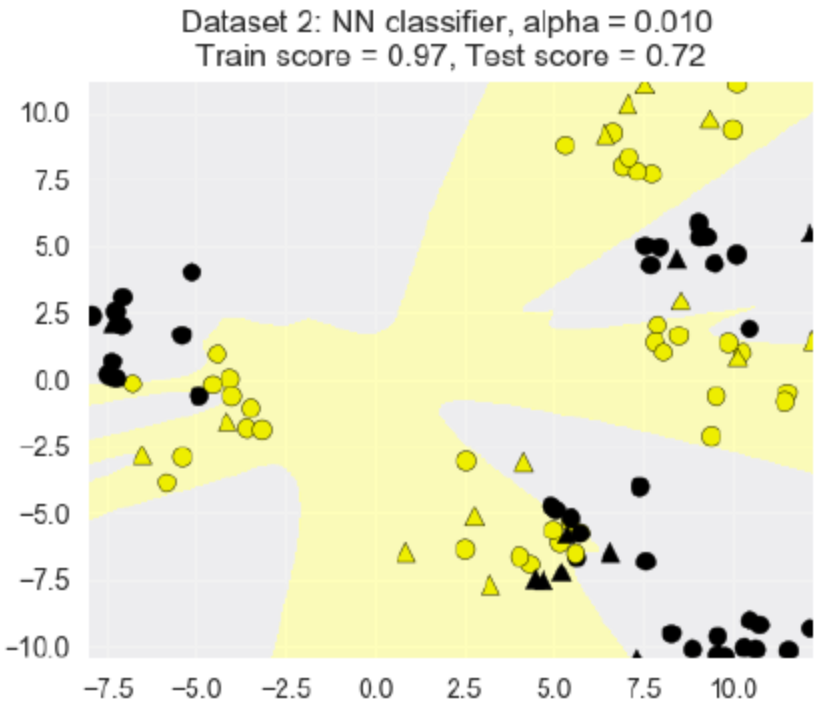


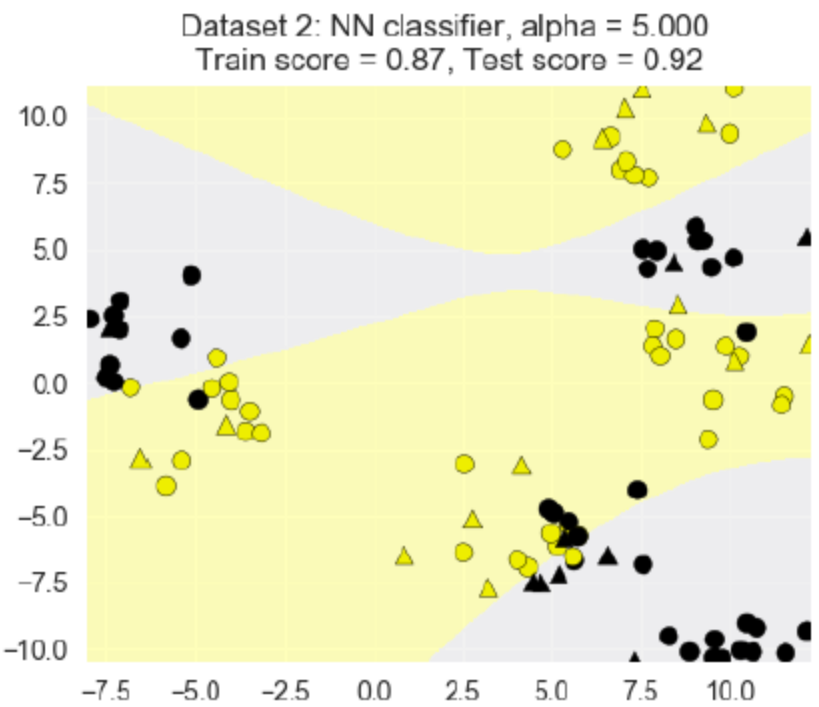
Efeito de numero de camadas





Efeito de alfa





MLP para regressão

- Semelhante a classificação

```
from sklearn.neural_network import MLPRegressor
mlpreg = MLPRegressor(hidden_layer_sizes = [100,100],
                      activation = 'relu',
                      alpha = 1,
                      solver = 'lbfgs').fit(X_train, y_train)
```

Rede MLP

- Vantagens
  - Boa performance
  - Formam a base para algoritmos estado da arte em muitas aplicações
- Desvantagens
  - Grande tempo de treinamento
  - Grande quantidade de hiperparâmetros

Aprendizado Não Suervisionado

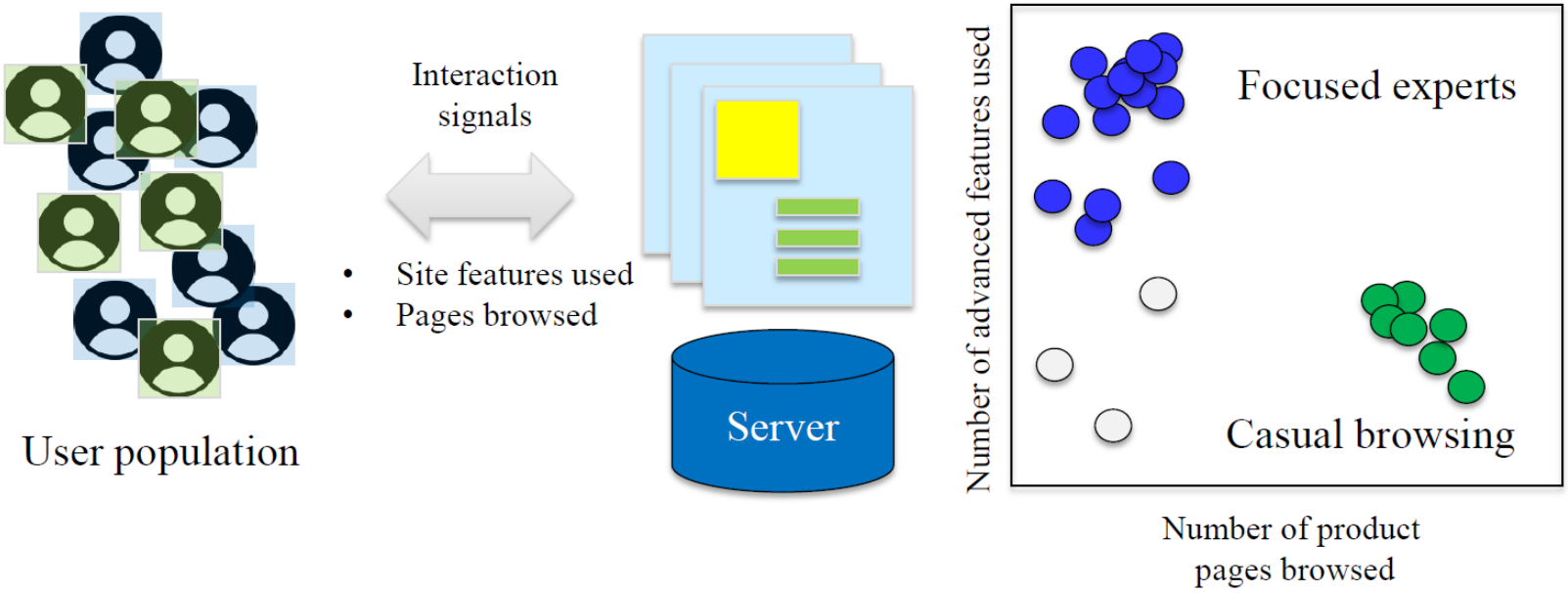
Aprendizado Não Supervisionado

- Tarefa de analisar dados que não possuem rótulos
- Inferir a estrutura do conjunto de dados

- Tarefas não supervisionadas
  - Visualizar a estrutura de dados multidimensionais
  - Comprimir ou sumarizar dados
  - Descobrir agrupamentos (clusters) ou outliers

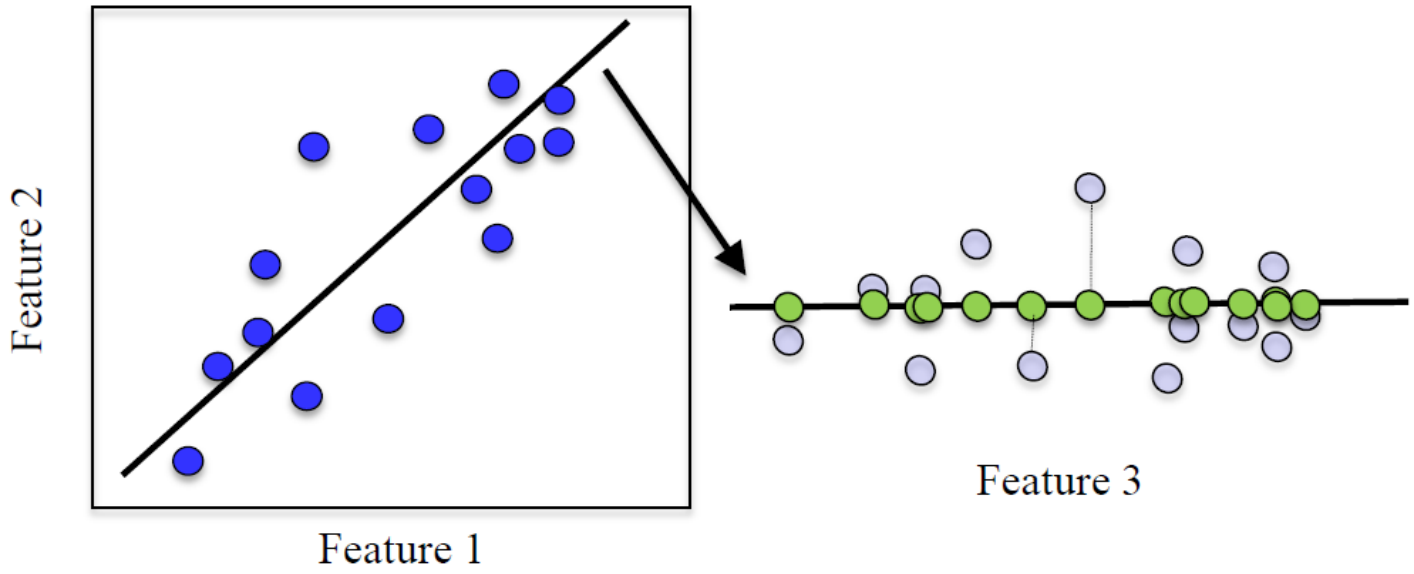
Agrupamento (clustering)

- Segmentação
- Tratamento diferenciado



Redução de dimensionalidade

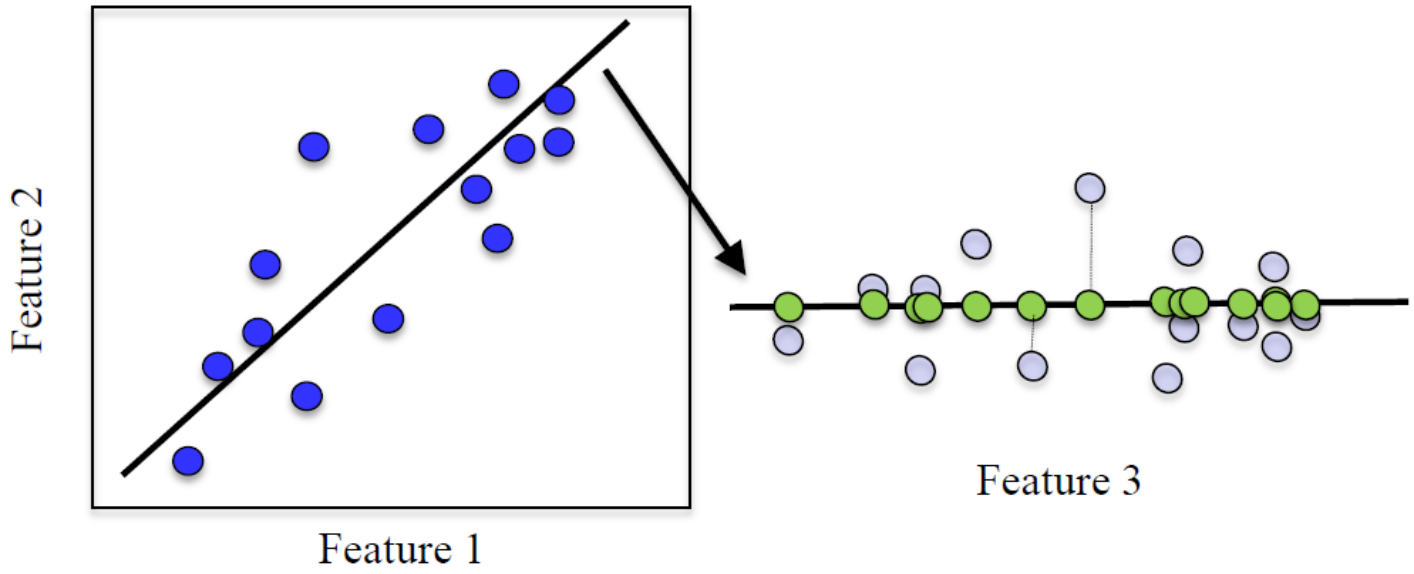
- Encontrar aproximação do conjunto de dados original em um espaço de dimensão reduzido



Redução de dimensionalidade

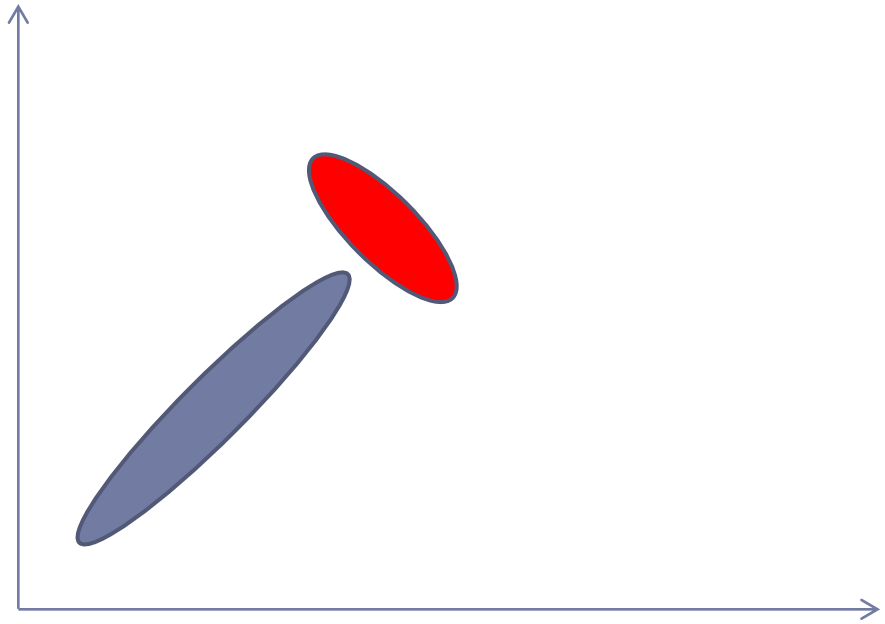
Redução de dimensionalidade

- Visualização dos dados
- Redução da complexidade de modelos de AM



Análise de Componentes Principais (PCA)

- Idéia



PCA

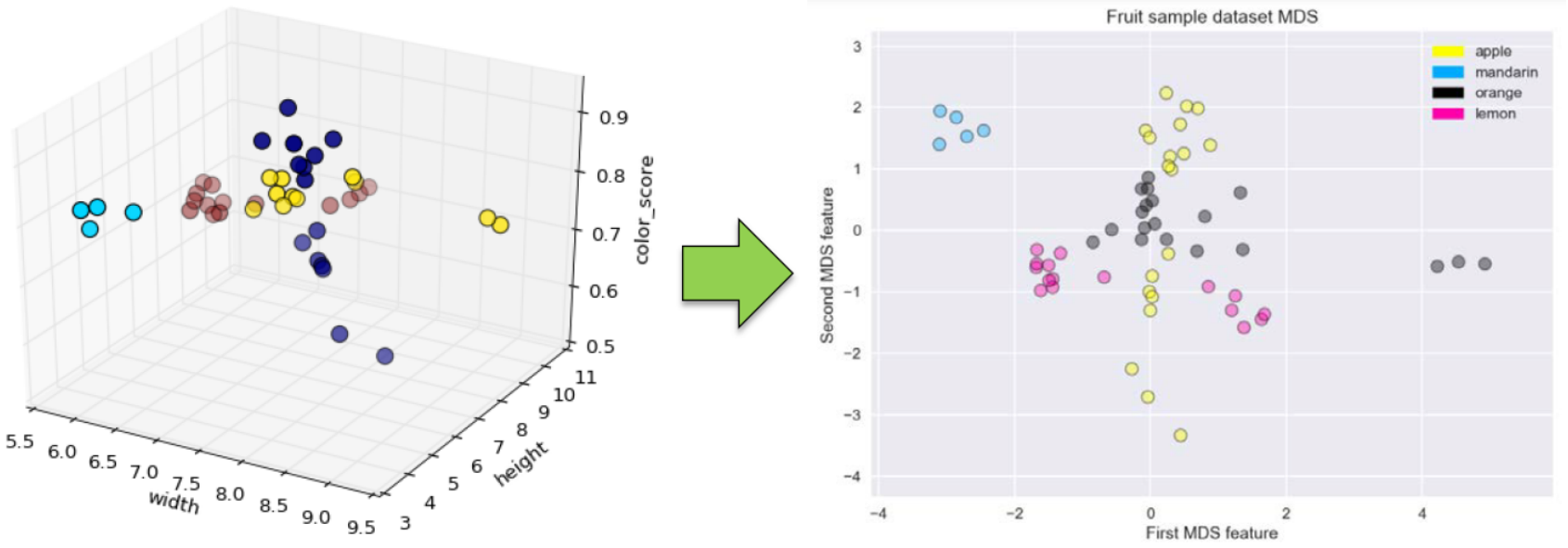
- Informação = Variância
- Rotacionar os dados
  - Transformação linear
  - Novos atributos são um combinação linear dos atributos originais

PCA na prática

- Toma os dados de entrada
- Subtrai as médias
- Calcula a matriz de covariância
- Calcula os autovalores e autovetores
- Escolhe os k maiores autovalores
- Utiliza os k autovetores correspondentes para criar k novos atributos

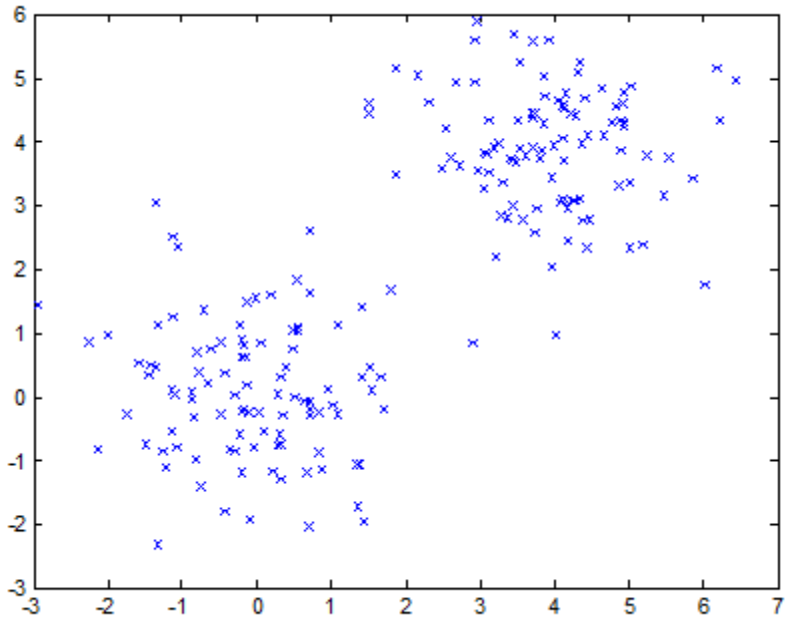
Escalonamento Muldimensional (MDA)

- Transformação nos dados que preserva relações de vizinhança
- Somente visualização

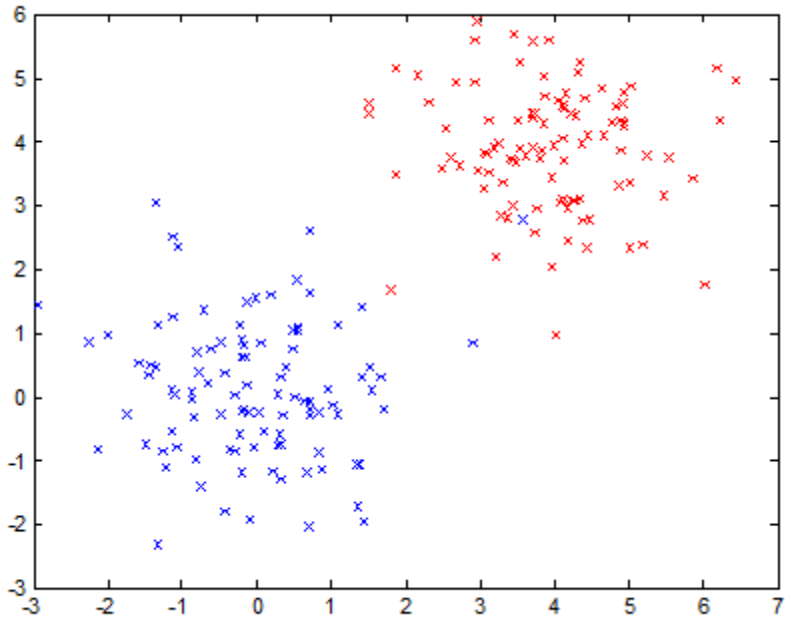


Clustering

Classificação Não Supervisionada



Classificação Não Supervisionada



Classificação Não Supervisionada

- Quantos grupos existem ?
- Quais os componentes destes grupos ?

Classificação Não Supervisionada

- Quantos grupos existem ?
- Quais os componentes destes grupos ?
- Métodos de Agrupamento
  - Hierárquico
  - Não Hierárquico

Agrupamento Hierárquico

- Os dados iniciam em grupos definidos
- Dados similares são agrupados formando pequenos grupos
- Pequenos grupos são agrupados formado grupos maiores
- Procedimento é repetido até que todos pertençam a um grupo

Agrupamento Hierárquico

- Dados são ditos semelhantes de acordo com alguma medida de distância.

Agrupamento Hierárquico

- Dados são ditos semelhantes de acordo com alguma medida de distância.
  - Euclidiana
    - $D_E(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{s}) = \sqrt{\sum_{j=1}^{p} (r_j - s_j)^2}$
  - Manhattan
    - $D_M(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{s}) = \sum_{j=1}^{p} |r_j - s_j|$

Agrupamento Hierárquico

- Dados são ditos semelhantes de acordo com alguma medida de distância.
  - Euclidiana
    - $D_E(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{s}) = \sqrt{\sum_{j=1}^{p}(r_j - s_j)^2}$
  - Manhattan
    - $D_M(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{s}) = \sum_{j=1}^{p}|r_j - s_j|$
- Similaridade entre grupos pode ser medida pela distância entre centróides
- Gráfico semelhante a uma árvore

Agrupamento Hierárquico

- Exemplo
  - Dados
    - [1 2],[1 1],[3 3] e [4 3]
  - Calcula-se uma matriz de distâncias (d^2)

	1	2	3	4
1	0	1	5	10
2	1	0	8	13
3	5	8	0	1
4	10	13	1	0

Agrupamento Hierárquico

- [1 2],[1 1],[3 3] e [4 3]

	1	2	3	4
1	0	1	5	10
2	1	0	8	13
3	5	8	0	1
4	10	13	1	0

Agrupamento Hierárquico

- [1 2],[1 1],[3 3] e [4 3]

	1,2	3	4
1,2	0		
3		0	1
4		1	0

$c_{1,2} = [1\ 1{,}5]$

Agrupamento Hierárquico

- [1 1.5],[3 3] e [4 3]

	1,2	3	4
1,2	0	6.25	11.25
3	6.25	0	1
4	11.25	1	0

$c_{1,2} = [1\ 1{,}5]$

Agrupamento Hierárquico

- [1 1.5],[3 3] e [4 3]

	1,2	3	4
1,2	0	6.25	11.25
3	6.25	0	1
4	11.25	1	0

$c_{1,2} = [1\ 1{,}5]$

Agrupamento Hierárquico

- [1 1.5],[3 3] e [4 3]

	1,2	3,4
1,2	0	
3,4		0

$C_{3,4}$ = [3.5 3]

Agrupamento Hierárquico

- [1 1.5] e [3.5 3]

	1,2	3,4
1,2	0	8
3,4	8	0

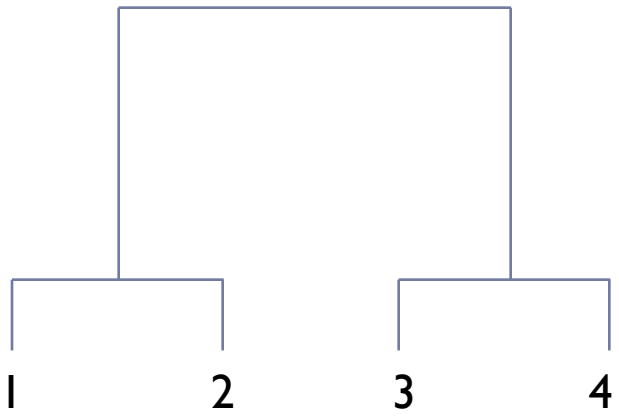
$C_{3,4}$ = [3.5 3]

Agrupamento Hierárquico

- [1 1.5] e [3.5 3]

	1,2	3,4
1,2	0	8
3,4	8	0

$C_{3,4}$ = [3.5 3]

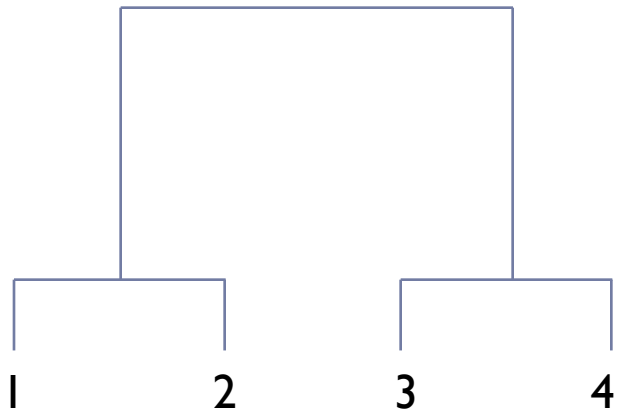


Agrupamento Hierárquico

- [1 1.5] e [3.5 3]

	1,2	3,4
1,2	0	8
3,4	8	0

$C_{3,4}$ = [3.5 3]



Dendrograma

Agrupamento não Hierárquico

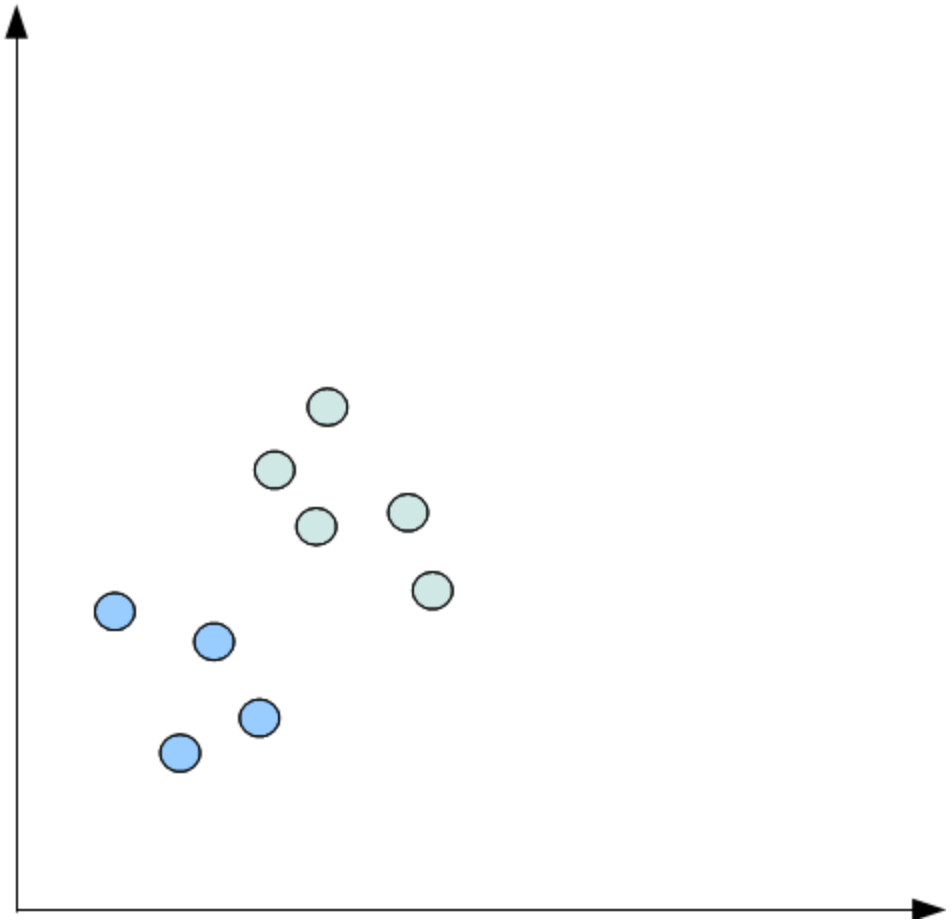
- Pontos pertencem a algum grupo
- Pontos mudam de grupo de forma a satisfazer um determinado critério

K-médias

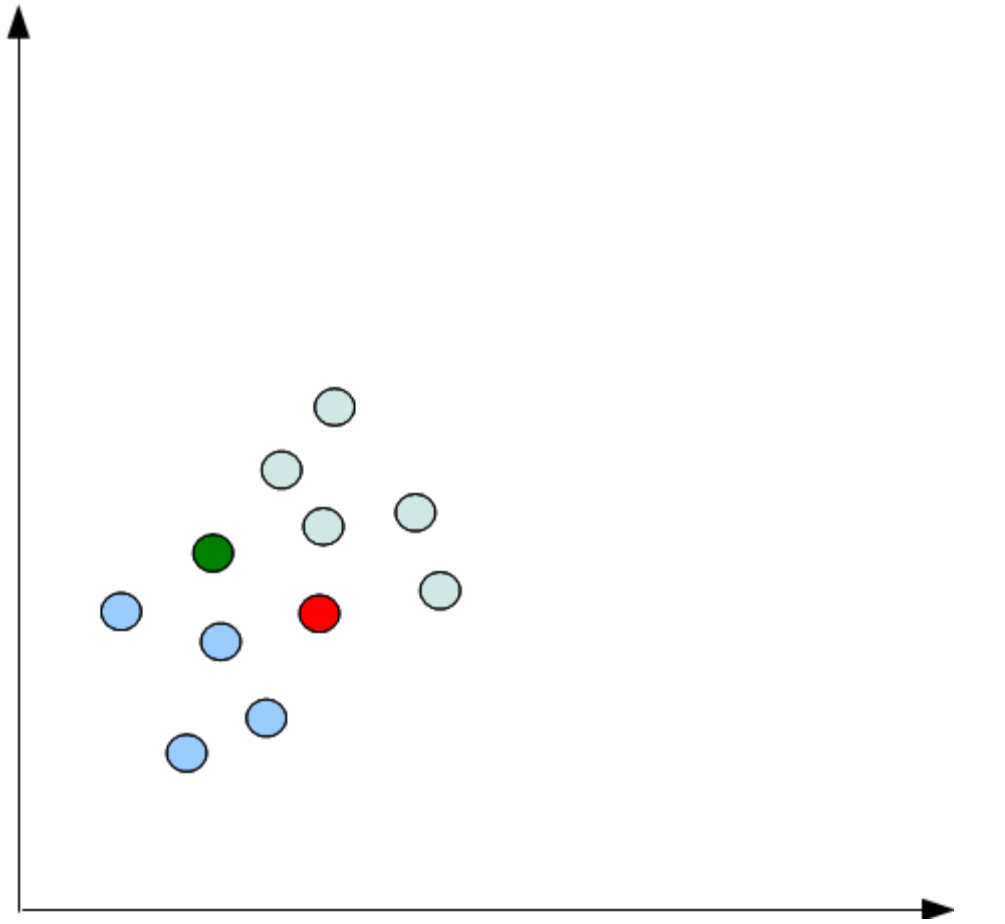
K-médias

- É necessário conhecer o número de clusters
- k centroides são escolhidos aleatoriamente (podem ser escolhidos k membros da população)
- Calcula-se a distância deste pontos para todos os outros
- Os pontos passarão a pertencer ao grupo cuja distância é a menor
- Centróides são recalculados como a média dos pontos do grupo

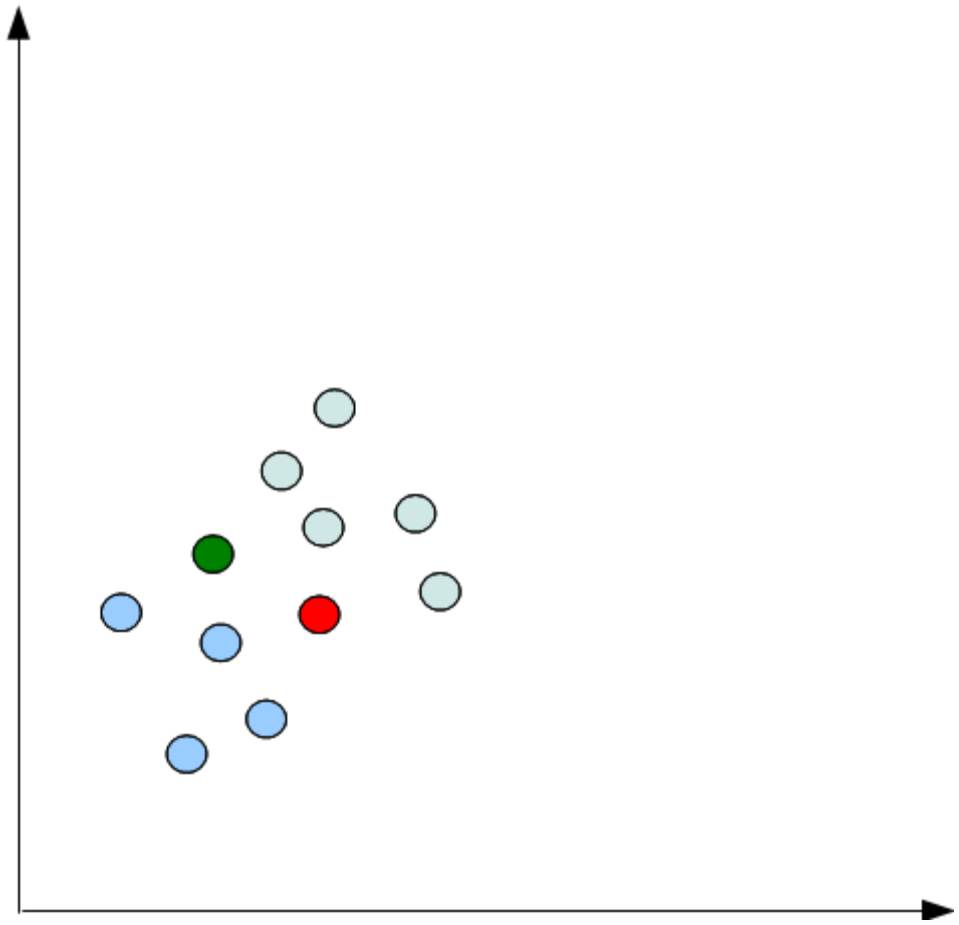
K-médias



K-médias

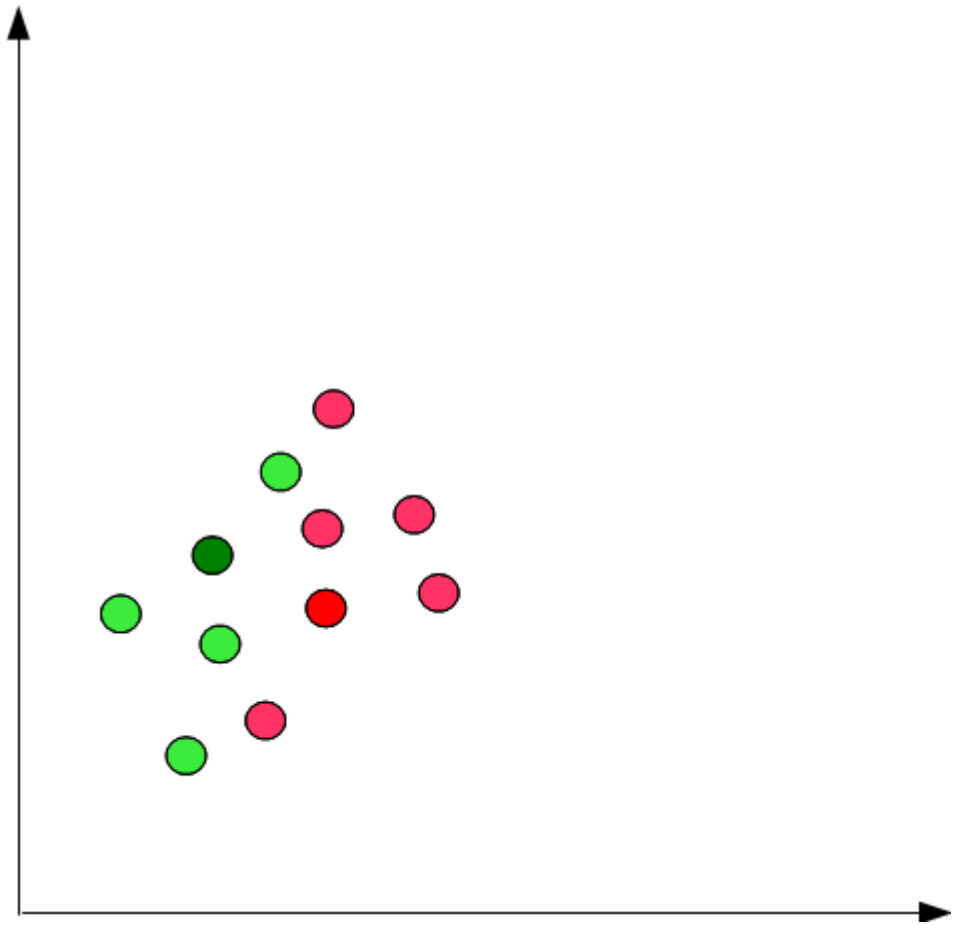


K-médias



1 – Calcular distâncias

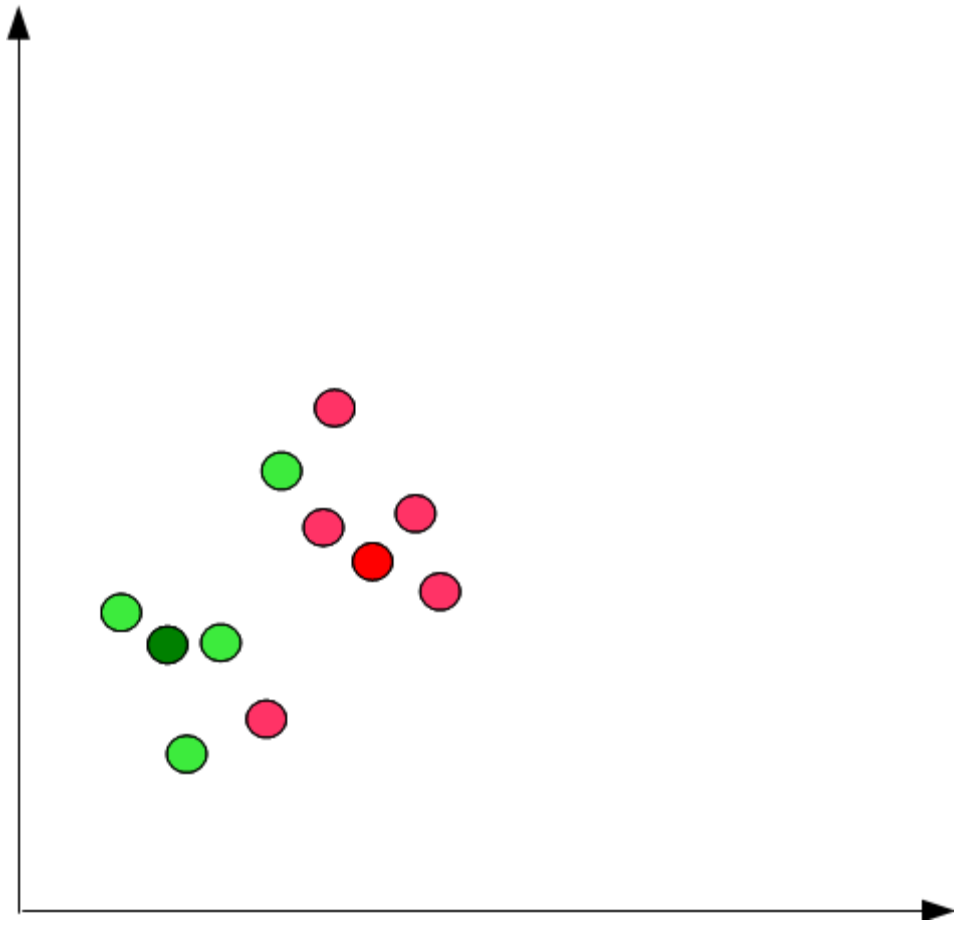
K-médias



1 – Calcular distâncias

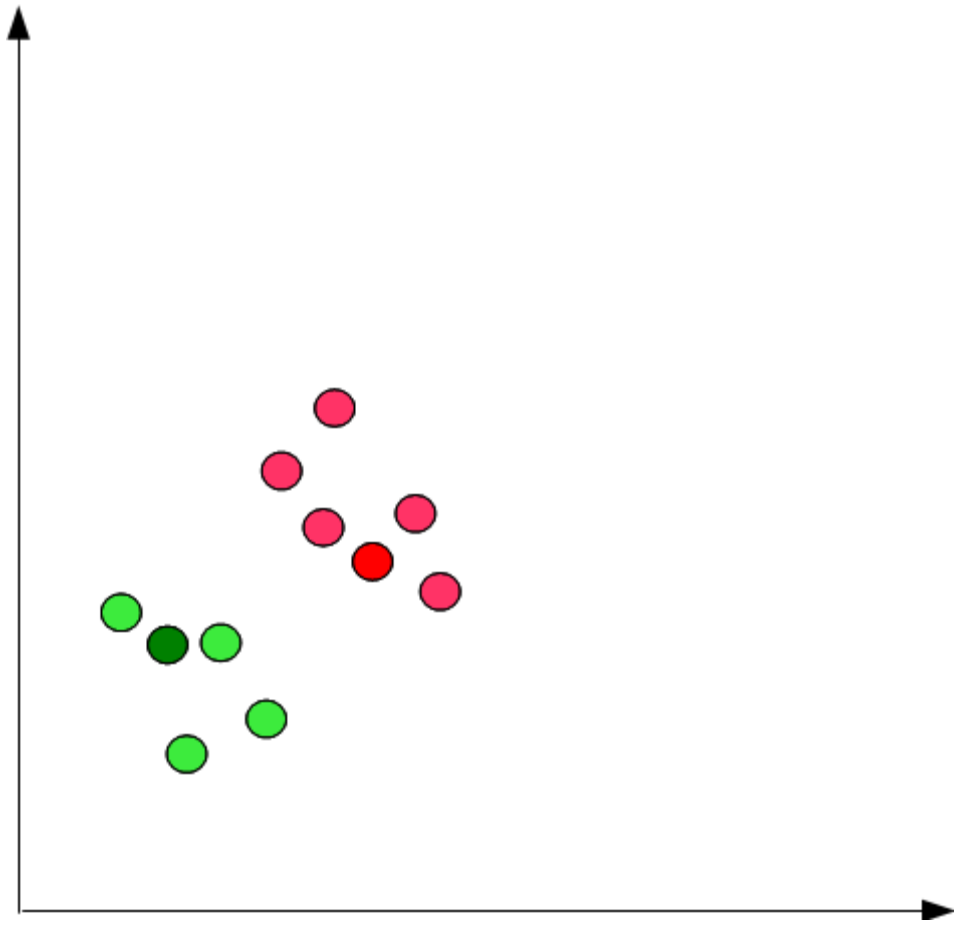
2 – Atribuir Grupos

K-médias



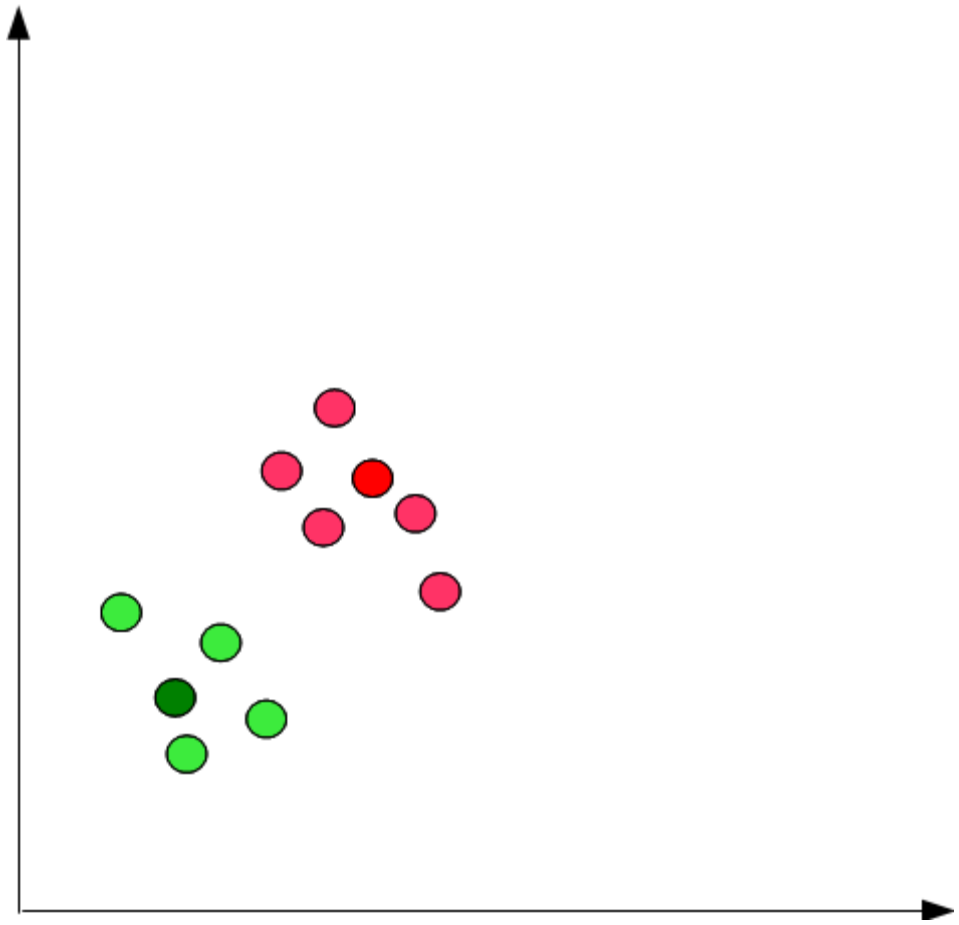
1 – Calcular distâncias
2 – Atribuir Grupos
3 – Recalcular centróides

K-médias



1 – Calcular distâncias
2 – Atribuir Grupos
3 – Recalcular centróides

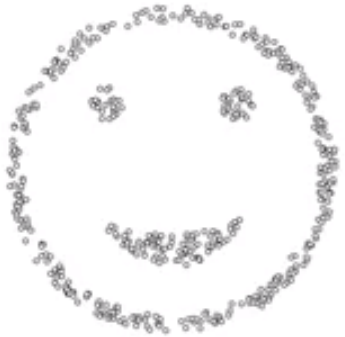
K-médias

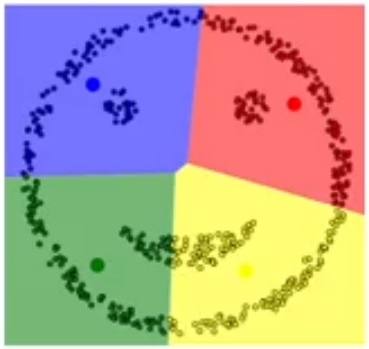


1 – Calcular distâncias
2 – Atribuir Grupos
3 – Recalcular centróides

Limitações do K-médias

- Funciona bem para clusters de tamanhos parecidos, bem separados e com aspecto de hyper-esfera
- Atributos numéricos

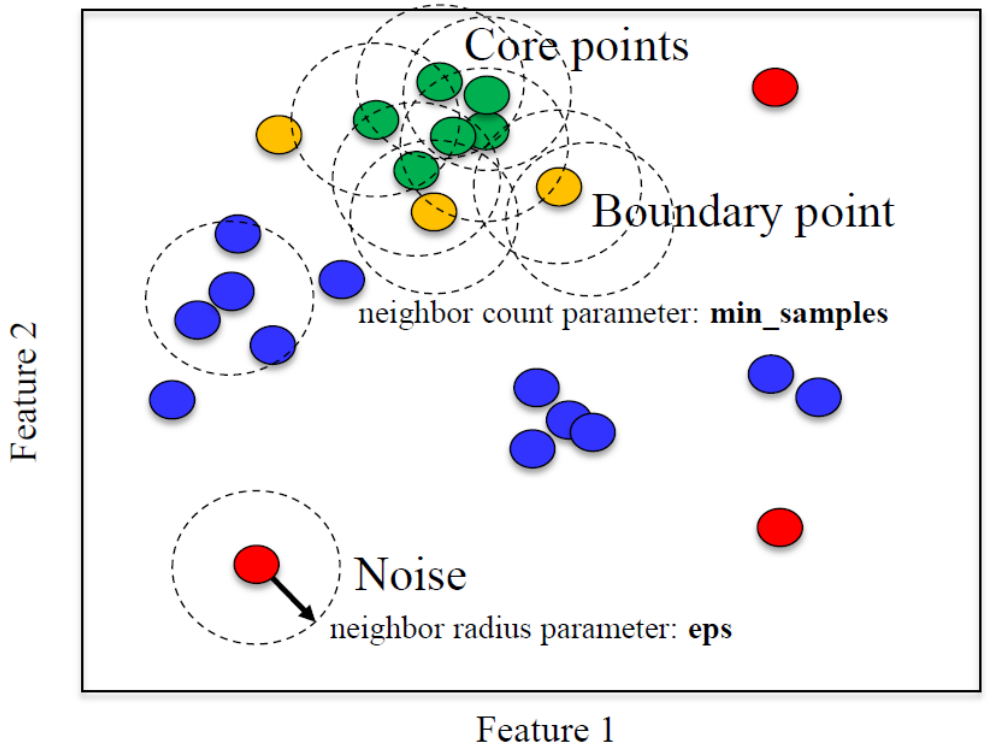




DBSCAN

- Density based spatial clustering for applications with noise
  - Não precisa especificar o numero de classes
  - Clusters mais complexos
  - Identifica outliers automaticamente
- Idéia
  - Clusters são áreas onde existem muitos pontos separados por regiões vazias
- Parâmetros
  - min_samples, eps

DBSCAN



- Core Points – Ponto que possui pelo menos min_samples dentro da região definida por eps
- Todos os Core points que estão a uma distancia eps, são colocados no mesmo cluster
- Pontos que não pertencem a um grupo são outliers
- Pontos a uma distancia eps de Core points que não são core points, serão boundary points