O que é Aprendizado de Máquina (Machine Learning)?

 Antes de entrarmos em Redes Neurais, Tensorflow, Keras API, etc... é uma boa ideia entender algumas ideias fundamentais sobre aprendizado de máquina.

- Visão geral:
 - o O que é Machine Learning
 - o O que é Deep Learning?
 - Qual a diferença entre Aprendizado
 Supervisionado e Não Supervisionado
 - o Processo de Aprendizagem Supervisionado
 - o Avaliando o desempenho
 - Overfitting

O que é Machine Learning?

- O aprendizado de máquina é um método de análise de dados que automatiza a construção de modelos analíticos.
- Usando algoritmos que aprendem de forma iterativa com os dados, o aprendizado de máquina permite que os computadores encontrem informações ocultas, sem serem explicitamente programados onde procurar.

Para que é utilizado?

- Detecção de fraude.
- Resultados de pesquisas na web.
- Anúncios em tempo real em páginas da web.
- Pontuação de crédito.
- Previsão de falhas de equipamentos.
- Novos modelos de pricing.
- Detecção de intrusão de rede.

- Mecanismos de recomendação.
- Segmentação de clientes.
- Análise de sentimento de texto.
- A rotatividade de clientes.
- Reconhecimento de padrões e imagens.
- Filtragem de spam de e-mail.

O que são Redes Neurais (Neural Networks)?

- As Redes Neurais são uma maneira de modelar matematicamente sistemas de neurônios biológicos.
- Essas redes podem então ser utilizadas para resolver tarefas que muitos outros tipos de algoritmos não podem (por exemplo, classificação de imagens).
- Deep Learning simplesmente se refere a redes neurais com mais de uma camada oculta.

- Existem diferentes tipos de aprendizado de máquina nos quais nos concentraremos:
 - Aprendizado Supervisionado
 - Aprendizado Não Supervisionado

- Machine Learning
 - Modelos analíticos automatizados.
- Neural Networks
 - Um tipo de arquitetura de aprendizado de máquina modelada a partir de neurônios biológicos.
- Deep Learning
 - Uma rede neural com mais de uma camada oculta.

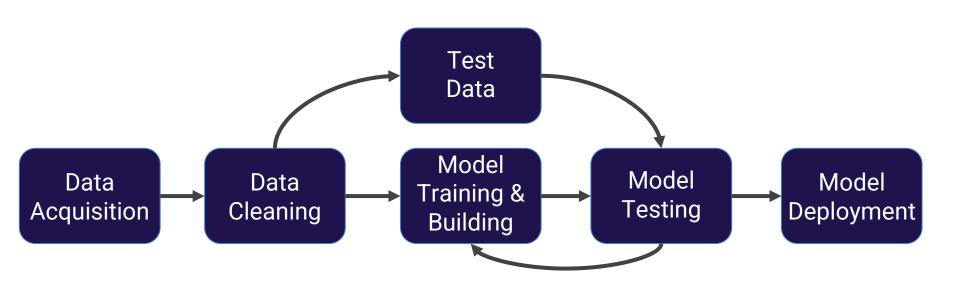
 Vamos começar aprendendo sobre uma das tarefas mais comuns de aprendizado de máquina: Aprendizado Supervisionado!

Aprendizado Supervisionado (Supervised Learning)

- Os algoritmos de aprendizado supervisionado (supervised learning) são treinados usando exemplos rotulados (labeled), como uma entrada em que a saída desejada é conhecida.
- Por exemplo, um segmento de texto pode ter um rótulo de categoria, como:
 - Spam versus E-mail Legítimo
 - Análise Positiva versus Negativa do Filme

- A rede recebe um conjunto de entradas junto com as saídas corretas correspondentes, e o algoritmo aprende comparando sua saída real com as saídas corretas para encontrar erros.
- Em seguida, ele modifica o modelo de acordo.

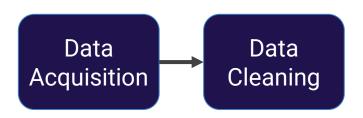
 O aprendizado supervisionado é comumente usado em aplicativos em que dados históricos preveem eventos futuros prováveis.

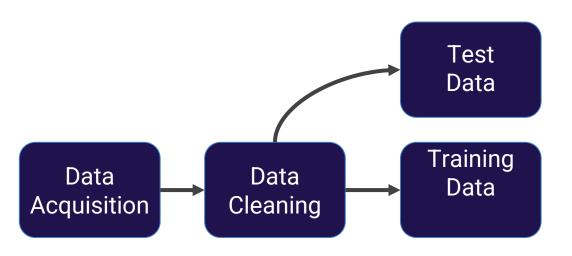


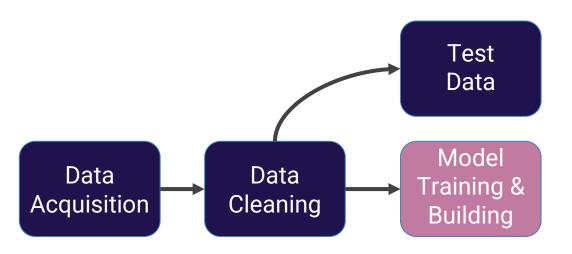
Obtenha seus dados! Clientes, Sensores, etc...

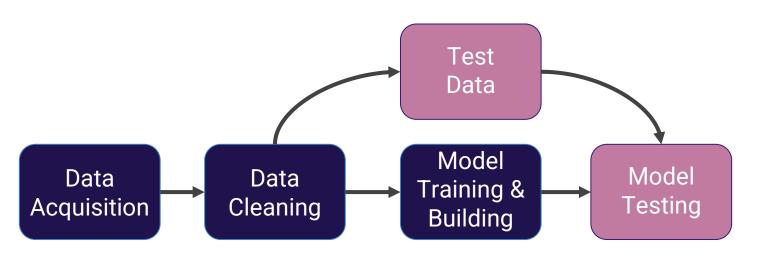


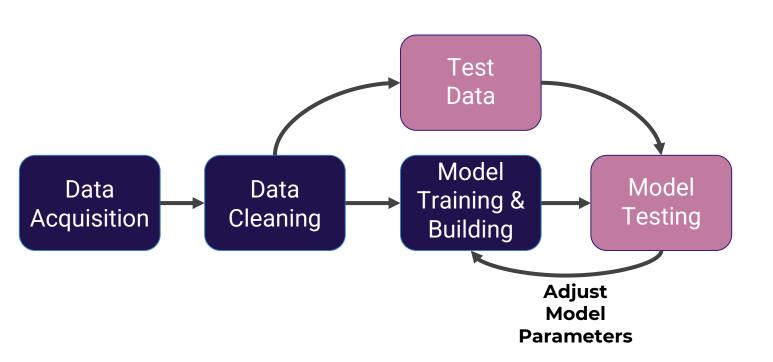
Limpe e formate seus dados (utilizando Pandas)

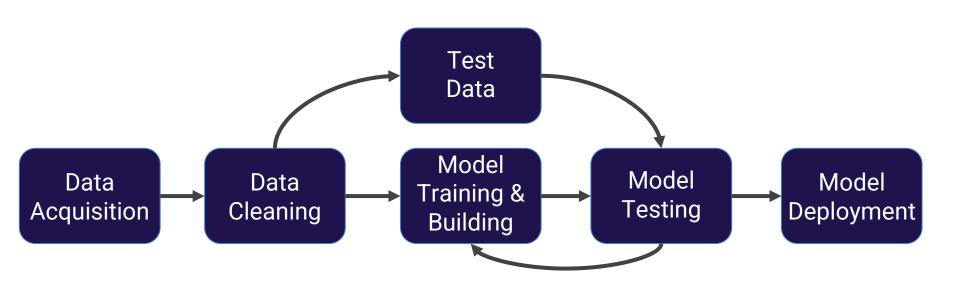












- O que acabamos de ver é uma abordagem simplificada para o aprendizado supervisionado. Ela contém um problema!
- É justo usar nossa única divisão dos dados para avaliar o desempenho de nossos modelos?
- Afinal, tivemos a chance de atualizar os parâmetros do modelo repetidamente.

- Para corrigir esse problema, os dados geralmente são divididos em 3 conjuntos
 - Training Data
 - Utilizado para treinar parâmetros do modelo
 - Validation Data
 - Utilizado para determinar quais hiperparâmetros do modelo devem ser ajustados
 - Test Data
 - Utilizado para obter alguma métrica de desempenho final

- Isso significa que depois de vermos os resultados no conjunto de teste final (final test set), não podemos voltar e ajustar nenhum parâmetro do modelo!
- Essa medida final é o que rotulamos como o verdadeiro desempenho do modelo.

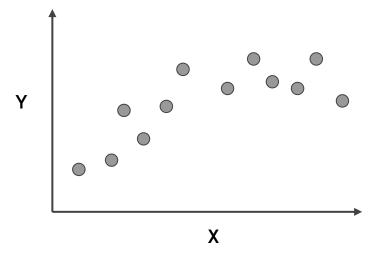
- Simplificaremos nossos dados utilizando uma divisão simples de treinamento/teste (train/test split).
- Vamos simplesmente treinar e depois avaliar em um conjunto de teste (deixando a opção para os alunos voltarem e ajustarem os parâmetros).
- No futuro, você poderá facilmente realizar outra divisão para obter 3 conjuntos de dados, caso desejar.

Sobreajuste e Subajuste (Overfitting and Underfitting)

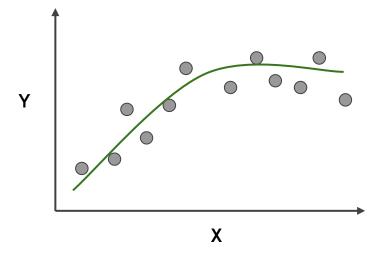
 Agora que entendemos o processo completo de aprendizado supervisionado, vamos abordar os tópicos importantes de overfitting e underfitting.

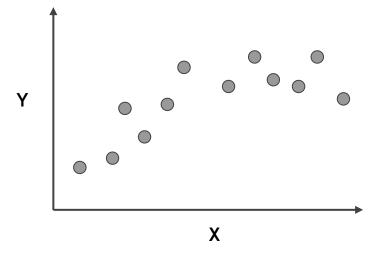
- O modelo se ajusta demais ao ruído dos dados.
- Isso geralmente resulta em baixo erro nos conjuntos de treinamento (training sets), mas alto erro nos conjuntos de teste/validação (test/validation sets).

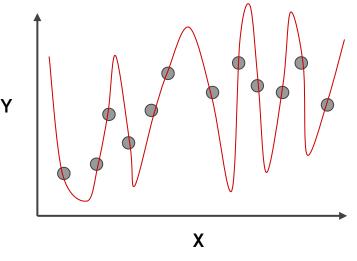
Data

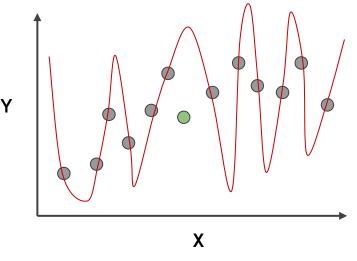


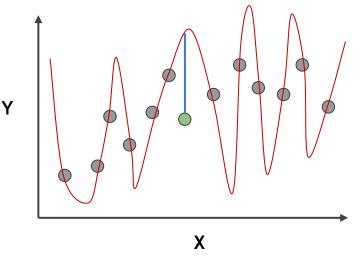
Good Model







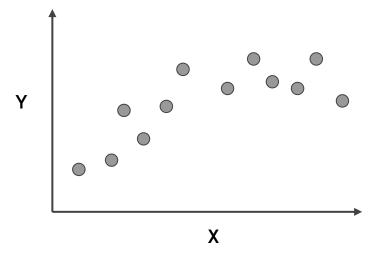




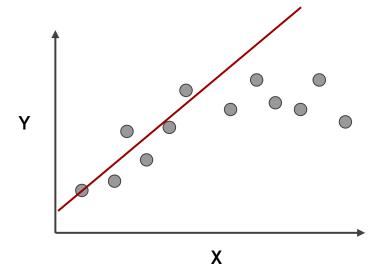
Underfitting

- O modelo não captura a tendência implícita dos dados e não se ajusta bem aos dados.
- o Baixa variância, mas alto viés (bias).
- O underfitting é muitas vezes o resultado de um modelo excessivamente simples.

Data

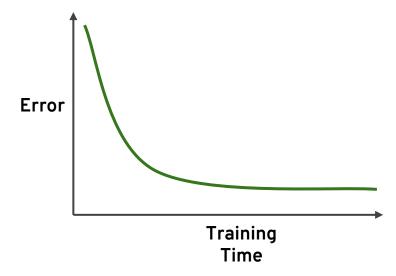


Underfitting

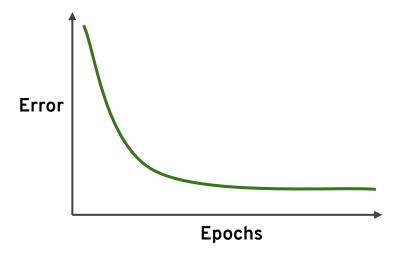


- Esse conjunto de dados era fácil de visualizar, mas como podemos averiguar a existência de underfitting ou overfitting ao lidar com conjuntos de dados multidimensionais?
- Primeiro vamos imaginar que treinamos um modelo e depois medimos seu erro ao longo do tempo de treinamento.

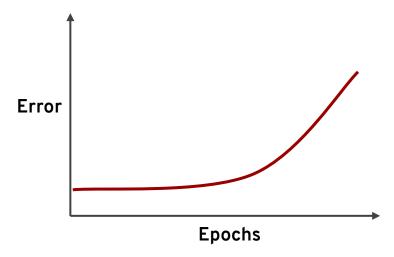
Good Model



Good Model



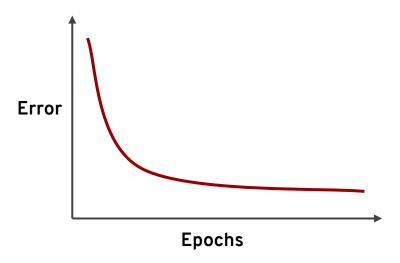
Bad Model



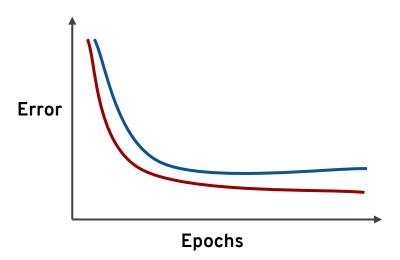
 Ao pensar em overfitting e underfitting, queremos verificar a relação do desempenho do modelo no conjunto de treinamento (training set) versus o conjunto de teste/validação (test/validation set).

 Vamos imaginar que dividimos nossos dados em um training set e um test set

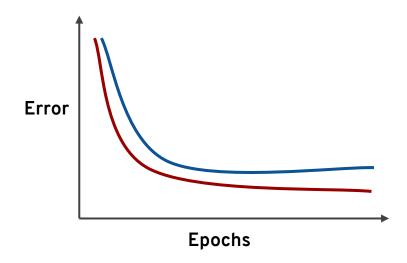
Primeiro vemos o desempenho no training set



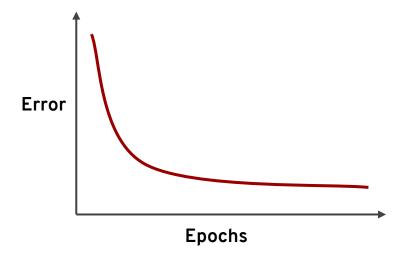
• Em seguida, verificamos o desempenho no test set



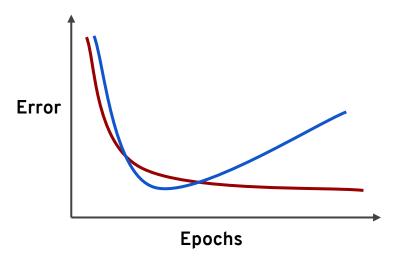
 Idealmente, o modelo teria um bom desempenho em ambos, com comportamento semelhante.



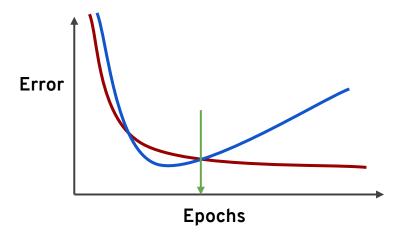
 Mas o que acontece se ajustarmos demais (overfit) aos dados de treinamento? Isso significa que teríamos um desempenho ruim em novos dados de teste!



 Mas o que acontece se ajustarmos demais (overfit) aos dados de treinamento? Isso significa que teríamos um desempenho ruim em novos dados de teste!



 Esta é uma boa indicação de ter treinado demais nos dados de treinamento. Deve-se procurar um ponto para cortar o tempo de treinamento!



- Vamos verificar essa ideia novamente quando começarmos a criar modelos!
- Por enquanto apenas fique atento a esse possível problema!

Avaliando o Desempenho (Evaluating Performance)

CLASSIFICAÇÃO (CLASSIFICATION)

- Acabamos de saber que, após a conclusão do nosso processo de machine mearning, usaremos métricas de desempenho (performance metrics) para avaliar o desempenho do nosso modelo.
- Vamos discutir as métricas de classificação (classification metrics) com mais detalhes!

- As principais métricas de classificação (classification metrics) que precisamos entender são:
 - Acurácia (Accuracy)
 - Revocação (Recall)
 - Precisão (Precision)
 - Pontuação-F1 (F1-Score)

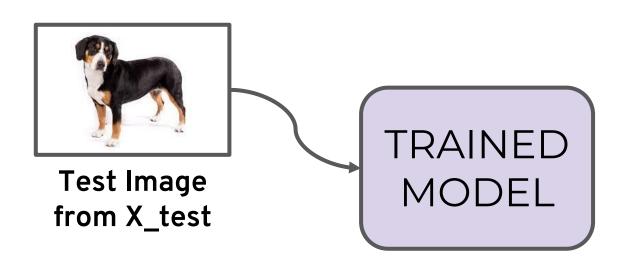
 Mas primeiro, devemos entender o raciocínio por trás dessas métricas e como elas realmente funcionarão no mundo real!

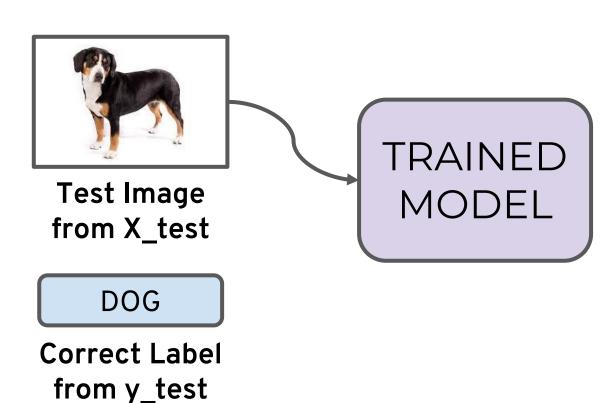
- Normalmente, em qualquer tarefa de classificação, seu modelo pode alcançar apenas dois resultados:
 - Ou seu modelo estava correto em sua previsão.
 - Ou seu modelo estava incorreto na previsão.

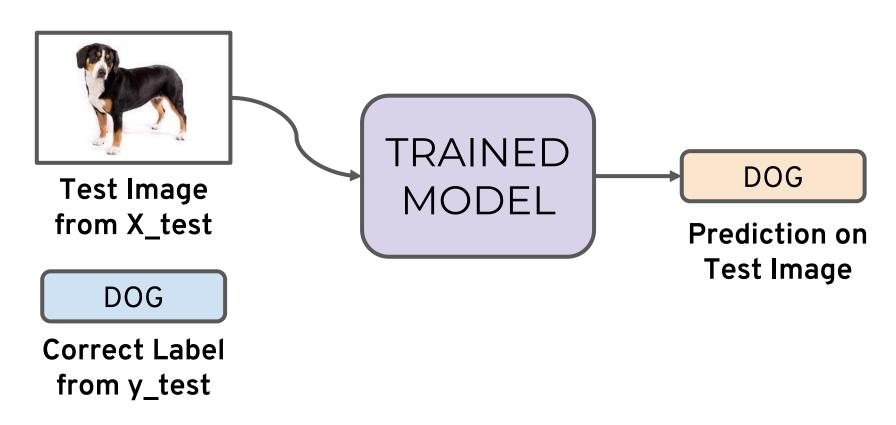
- Felizmente, incorreto versus correto se expande para situações em que você tem várias classes.
- Para fins de explicação das métricas, vamos imaginar uma situação de classificação binária (binary classification), onde temos apenas duas classes disponíveis.

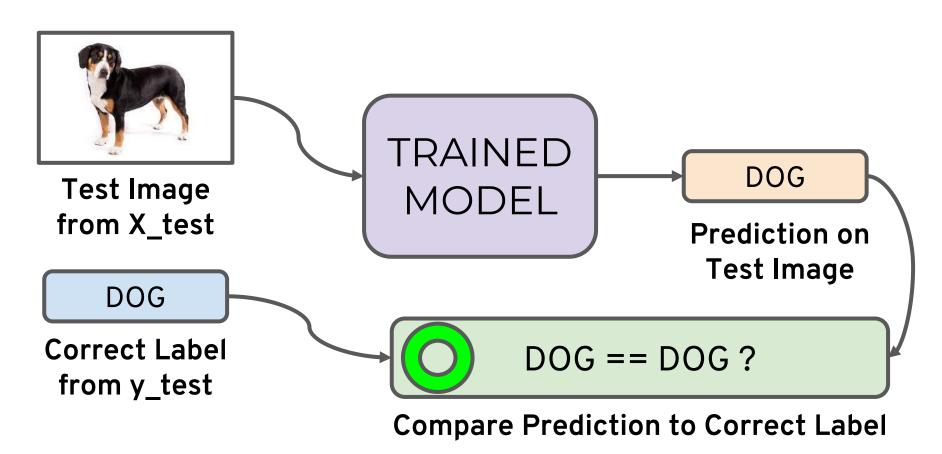
- Em nosso exemplo, tentaremos prever se uma imagem é um cachorro ou um gato.
- Como isso é aprendizado supervisionado, primeiro ajustaremos/treinaremos um modelo (fit/train) nos dados de treinamento (training data) e, em seguida, testaremos (test) o modelo nos dados de teste (testing data).
- Assim que obtivermos as previsões do modelo a partir dos dados X_test, compararemos com os valores y verdadeiros (os rótulos corretos).

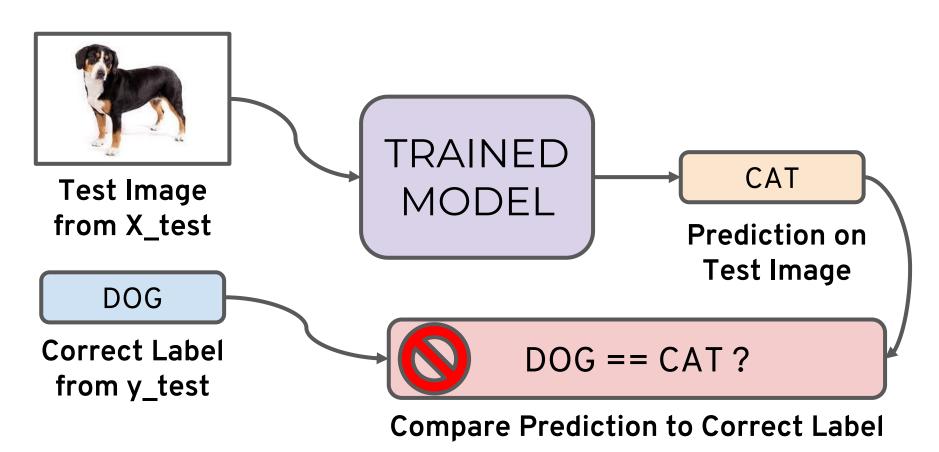
TRAINED MODEL











- Repetimos esse processo para todas as imagens em nossos dados X_test.
- No final teremos uma contagem de correspondências corretas e uma contagem de correspondências incorretas.
- A principal constatação que precisamos fazer é que: no mundo real, nem todas as correspondências incorretas ou corretas têm o mesmo valor!

- Também, no mundo real, uma única métrica não contará a história completa!
- Para entender tudo isso, vamos trazer de volta as 4 métricas que mencionamos e ver como elas são calculadas.
- Poderíamos organizar nossos valores previstos em comparação com os valores reais em uma matriz de confusão (confusion matrix).

- Accuracy
 - Acurácia, em problemas de classificação, é
 o número de previsões corretas feitas
 pelo modelo dividido pelo número total
 de previsões.

- Accuracy
 - Por exemplo, se o conjunto X_test tiver 100 imagens e nosso modelo previu corretamente 80 imagens, teremos 80/100.
 - 0.8 ou 80% accuracy.

- Accuracy
 - Acurácia é útil quando as classes de destino são bem equilibradas
 - Em nosso exemplo, teríamos aproximadamente a mesma quantidade de imagens de gatos e cães.

- Accuracy
 - Acurácia não é uma boa escolha com classes desequilibradas!
 - Imagine que tivéssemos 99 imagens de cães e 1 imagem de um gato.
 - Se nosso modelo fosse simplesmente uma linha que sempre previsse cachorro, obteríamos 99% de acurácia!

Accuracy

- Acurácia não é uma boa escolha com classes desequilibradas!
- Imagine que tivéssemos 99 imagens de cães e 1 imagem de um gato.
- Se nosso modelo fosse simplesmente uma linha que sempre previsse cachorro, obteríamos 99% de acurácia!
- Nesta situação, é útil entender a definição de recall e precision

- Recall
 - Capacidade de um modelo para encontrar todos os casos relevantes dentro de um conjunto de dados.
 - A definição precisa de revocação é: o número de verdadeiros positivos (true positives) dividido pelo número de verdadeiros positivos mais o número de falsos negativos (false negatives).

- Precision
 - Capacidade de um modelo de classificação para identificar apenas os pontos de dados relevantes.
 - A precisão é definida como o número de verdadeiros positivos (true positives)
 dividido pelo número de verdadeiros positivos mais o número de falsos positivos (false positives).

- Recall e Precision
 - Muitas vezes você tem um trade-off entre Revocação e Precisão.
 - Enquanto a revocação expressa a capacidade de encontrar todas as instâncias relevantes em um conjunto de dados, a precisão expressa a proporção dos pontos de dados que nosso modelo diz que são relevantes, são de fato relevantes.

- F1-Score
 - Nos casos em que queremos encontrar uma combinação ideal de precision e recall, podemos combinar as duas métricas usando o que é chamado de Pontuação-F1.

- F1-Score
 - A pontuação F1 é a média harmônica de precisão e recall levando ambas as métricas em consideração na equação a seguir:

$$F_1 = 2 * \frac{precision * recall}{precision + recall}$$

- F1-Score
 - Utilizamos a média harmônica em vez de uma média simples porque ela pune valores extremos.
 - Um classificador com precisão de 1.0 e recall de 0.0 tem uma média simples de 0.5, mas uma pontuação F1 de 0.

 Também podemos visualizar todas as imagens classificadas corretamente versus classificadas incorretamente na forma de uma matriz de confusão (confusion matrix).

Confusion Matrix

		predicted condition		
	total population	prediction positive	prediction negative	
true condition	condition positive	True Positive (TP)	False Negative (FN) (type II error)	
	condition negative	False Positive (FP) (Type I error)	True Negative (TN)	

		predicted	I condition			
	total population	prediction positive	prediction negative	$= \frac{\Sigma \text{ condition positive}}{\Sigma \text{ total population}}$		
true condition	condition positive	True Positive (TP)	False Negative (FN) (type II error)	True Positive Rate (TPR), Sensitivity, Recall, Probability of Detection $= \frac{\Sigma \text{ TP}}{\Sigma \text{ condition positive}}$		
	condition negative	False Positive (FP) (Type I error)	True Negative (TN)	False Positive Rate (FPR), Fall-out, Probability of False Alarm $= \frac{\sum FP}{\sum \text{ condition negative}}$		
	$= \frac{\text{Accuracy}}{\sum \text{total repulation}}$	Positive Predictive Value (PPV), $= \frac{\Gamma}{\Sigma} \frac{\Sigma}{\Gamma} \frac{TP}{\Sigma} \frac{TP}{\Gamma}$	False Omission Rate (FOR) $= \frac{\Sigma \text{ FN}}{\Sigma \text{ prediction negative}}$	Positive Likelihood Ratio (LR+) $= \frac{TPR}{FPR}$		
		False Discovery Rate (FDR) $= \frac{\Sigma \text{ FP}}{\Sigma \text{ prediction positive}}$	$\begin{aligned} & \text{Negative Predictive Value (NPV)} \\ &= \frac{\Sigma \text{ TN}}{\Sigma \text{ prediction negative}} \end{aligned}$	Negative Likelihood Ratio (LR–) $= \frac{FNR}{TNR}$		

- O ponto principal a ser lembrado com a matriz de confusão (confusion matrix) e as várias métricas calculadas é que todas elas são fundamentalmente maneiras de comparar os valores previstos versus os valores verdadeiros.
- O que constitui métricas "boas" dependerá realmente da situação específica!

- Ainda confuso sobre a matriz de confusão (confusion matrix)?
- Sem problemas! Confira a página da Wikipedia, ela tem um diagrama muito bom com todas as fórmulas para todas as métricas.
- Ao longo do treinamento, geralmente apenas imprimimos métricas (por exemplo, acurácia).

- Vamos relembrar essa ideia de:
 - O que é uma acurácia boa o suficiente?
- Tudo depende do contexto da situação!
- Você criou um modelo para prever a presença de uma doença?
- A presença da doença é bem equilibrada na população em geral? (Provavelmente não!)

- Muitas vezes, os modelos são usados como testes de diagnóstico rápidos antes de fazer um teste mais invasivo (por exemplo, fazer um teste de urina antes de fazer uma biópsia)
- Também precisamos considerar o que está em jogo!

- Muitas vezes temos um trade-off entre precision/recall. Precisamos decidir se o modelo deve se concentrar na correção de falsos positivos (false positives) versus falsos negativos (false negatives).
- No diagnóstico de doenças, provavelmente é melhor ir na direção dos falsos positivos, por isso nos certificamos de classificar corretamente o maior número possível de casos de doenças!

 Tudo isso para dizer que machine learning não é realizado em um "vácuo", mas sim em um processo colaborativo onde devemos consultar especialistas no domínio (por exemplo, médicos)

Avaliando o Desempenho (Evaluating Performance)

REGRESSÃO (REGRESSION)

- Vamos tomar um momento agora para discutir a avaliação de modelos de regressão
- A regressão é a tarefa executada por um modelo quando ele tenta prever valores contínuos (ao contrário de valores categóricos, que é classificação)

- Já discutimos algumas métricas de avaliação, como accuracy ou recall.
- Esses tipos de métrica não são úteis para problemas de regressão, precisamos de métricas projetadas para valores contínuos!

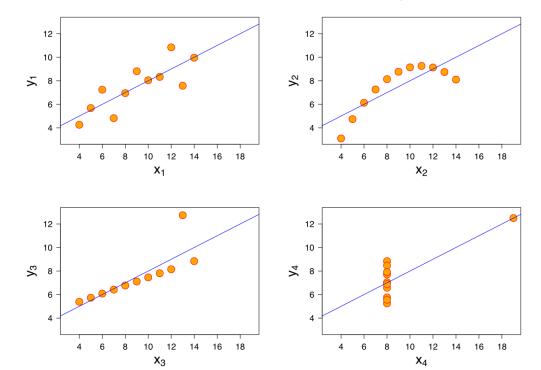
- Por exemplo, tentar prever o preço de uma casa com base em suas características é uma tarefa de regressão.
- Tentar prever o país em que uma casa se encontra, considerando suas características, seria uma tarefa de classificação.

- Vamos discutir algumas das métricas de avaliação mais comuns para regressão:
 - Erro Absoluto Médio (Mean Absolute Error)
 - Erro Quadrático Médio (Mean Squared Error)
 - Distância Quadrática Média (Root Mean Square Error)

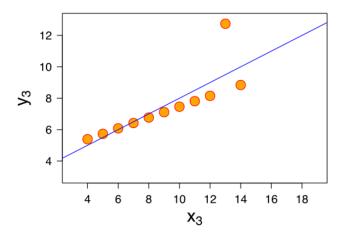
- Erro Absoluto Médio (Mean Absolute Error MAE)
 - É a média do valor absoluto dos erros.
 - Fácil de entender

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|y_i-\hat{y}_i|$$

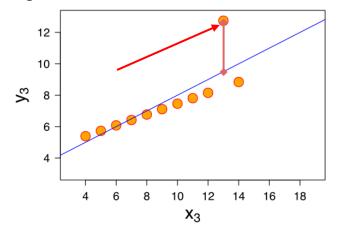
O MAE, no entanto, não punirá grandes erros.



O MAE, no entanto, não punirá grandes erros.



 Queremos que nossas métricas de erro levem isso em consideração!



- Erro Quadrático Médio (Mean Squared Error MSE)
 - É a média dos erros ao quadrado.
 - Erros maiores são mais perceptíveis em comparação ao MAE, o que torna o MSE um método mais popular que o MAE.

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_{i}-\hat{y}_{i})^{2}$$

- Distância Quadrática Média (Root Mean Square Error RMSE)
 - É a raiz quadrada da média dos erros ao quadrado.
 - É o mais popular (tem as mesmas unidades que y)

$$\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\mathring{y}_i)^2}$$

- Dúvida mais comuns dos alunos:
 - o "Este valor de RMSE é bom?"
 - Contexto é tudo!
 - Um RMSE de R\$ 10 é fantástico para prever o preço de uma casa, mas horrível para prever o preço de uma barra de chocolate!

- Compare sua métrica de erro com o valor médio do rótulo (label) em seu conjunto de dados para tentar obter uma intuição de seu desempenho geral.
- O conhecimento do domínio sendo estudado também desempenha um papel importante aqui!

- Também é necessário considerar o contexto de importância em que será aplicado o modelo.
- Por exemplo, podemos criar um modelo para prever quanta medicação deve ser administrada a um paciente. Neste caso, pequenas flutuações no RMSE podem ser muito significativas.

Aprendizado Não Supervisionado (Unsupervised Learning)

- Vimos o aprendizado supervisionado, onde o rótulo era conhecido devido ao histórico de dados rotulados (historical labeled data).
- Mas o que acontece quando não temos um histórico de rótulos?

- Existem certas tarefas que se enquadram no aprendizado não supervisionado:
 - Agrupamento (Clustering)
 - Detecção de Anomalia (Anomaly Detection)
 - Redução de Dimensionalidade (Dimensionality Reduction)

- Clustering
 - Agrupando pontos de dados não rotulados (unlabeled data) em categorias/clusters.
 - Os data points são atribuídos a um cluster com base em sua semelhança.

- Anomaly Detection
 - Tentativas de detectar discrepâncias em um conjunto de dados.
 - Por exemplo, transações fraudulentas em um cartão de crédito.

- Dimensionality Reduction
 - Técnicas de processamento de dados que reduzem o número de features em um conjunto de dados, seja para compactação ou para entender melhor as tendências implícitas em um conjunto de dados.

- Unsupervised Learning
 - É importante observar que essas são situações em que **não temos** a resposta correta para os dados históricos!
 - O que significa que a avaliação é muito mais difícil e com mais nuances!

Unsupervised Process



 Futuramente exploraremos processos de aprendizado não supervisionados com estruturas de rede neural especializadas, como autoencoders.