Resumo sobre Aprendizado de Máquina

1 Introdução ao Aprendizado de Máquina

O aprendizado de máquina é uma subárea da inteligência artificial que se concentra no desenvolvimento de algoritmos que permitem que sistemas aprendam a partir de dados e melhorem seu desempenho ao longo do tempo. Existem três tipos principais de aprendizado de máquina: aprendizado supervisionado, aprendizado não supervisionado e aprendizado por reforço.

2 Tipos de Aprendizado de Máquina

2.1 Aprendizado Supervisionado

Definição: O aprendizado supervisionado envolve o uso de um conjunto de exemplos rotulados, onde cada exemplo é descrito por um conjunto de **características de entrada** $\{X_1, X_2, \ldots, X_m\}$ e um conjunto de **características-alvo** $\{Y_1, Y_2, \ldots, Y_k\}$. O objetivo é aprender uma função que mapeia as características de entrada para as características-alvo.

Aplicações:

- Predição de Atividades: Um smartwatch pode prever a atividade do usuário (ex: dormir, caminhar) com base na frequência cardíaca e no movimento.
- Previsão de Enchentes: Prever a probabilidade de uma área inundar com base na topografia, clima e uso do solo.
- Reconhecimento de Escrita: Prever palavras que alguém escreveu à mão em um tablet com base na forma das letras.

2.2 Aprendizado Não Supervisionado

Definição: No aprendizado não supervisionado, o modelo é treinado em dados que não possuem rótulos. O objetivo é identificar padrões ou estruturas ocultas nos dados.

Aplicações:

- Agrupamento de Clientes (Customer Segmentation): Técnicas como K-means são usadas para segmentar clientes em grupos com características semelhantes.
- Redução de Dimensionalidade: Algoritmos como Análise de Componentes Principais (PCA) reduzem a quantidade de variáveis em um conjunto de dados, preservando as características mais importantes.
- Detecção de Anomalias: Identificar padrões incomuns em dados, que podem ser sinais de fraudes ou defeitos em processos industriais.

2.3 Aprendizado por Reforço

Definição: No aprendizado por reforço, um agente aprende a tomar decisões por meio de interações com o ambiente. O agente recebe recompensas ou punições com base em suas ações, aprendendo a maximizar as recompensas cumulativas ao longo do tempo.

Aplicações:

• Robótica: Treinar robôs para realizar tarefas complexas, como caminhar ou pegar objetos, por tentativa e erro.

- Jogos: Algoritmos como AlphaGo, que superam jogadores humanos em jogos de tabuleiro ou vídeo games.
- Sistemas de Recomendação: Adaptar continuamente as sugestões com base nas interações e preferências dos usuários ao longo do tempo.

3 Principais Tarefas do Aprendizado Supervisionado

O aprendizado supervisionado pode ser aplicado em várias tarefas principais, cada uma com seus próprios objetivos e métodos.

3.1 Classificação

Na classificação, o objetivo é categorizar as entradas em uma ou mais classes discretas. Exemplos incluem:

- Diagnóstico Médico: Classificar pacientes como tendo ou não uma determinada doença com base em sintomas e exames.
- Detecção de Spam: Classificar emails como spam ou não-spam.

3.2 Regressão

A tarefa de regressão envolve prever um valor contínuo para as entradas. Exemplos incluem:

- Previsão de Preços: Prever o preço de uma casa com base em características como tamanho, localização, etc.
- Previsão de Vendas: Estimar o número de vendas de um produto com base em campanhas de marketing e outras variáveis.

3.3 Detecção de Anomalias

Detecção de anomalias é a tarefa de identificar entradas que se desviam significativamente do padrão esperado. Exemplos incluem:

- Fraude em Cartões de Crédito: Identificar transações que são possivelmente fraudulentas.
- Monitoramento de Equipamentos: Detectar falhas potenciais em equipamentos industriais antes que ocorram.

3.4 Classificação Multiclasse e Multirrotulo

Além da classificação binária, onde as entradas são atribuídas a uma de duas classes, existem problemas mais complexos, como:

- Classificação Multiclasse: Onde cada entrada pode ser classificada em uma de várias classes (por exemplo, classificação de espécies animais).
- Classificação Multirrotulo: Onde cada entrada pode pertencer a várias classes simultaneamente (por exemplo, marcar tópicos relevantes em um artigo).

4 Avaliação de Predições

4.1 Funções de Perda

Dado um conjunto de exemplos E e uma característica-alvo Y, seja $\hat{Y}(e)$ a predição para o exemplo e. A **perda** é uma medida de quão próxima a predição está do valor real. Algumas funções de perda comuns são:

• Perda 0-1 (L0):

$$loss(p, a) = \begin{cases} 1 & \text{se } p \neq a \\ 0 & \text{se } p = a \end{cases}$$

• Perda Absoluta (L1):

$$loss(p, a) = |p - a|$$

• Perda Quadrática (L2):

$$loss(p, a) = (p - a)^2$$

• Perda de Pior Caso (L ∞):

$$loss_{\infty} = \max_{e \in E} |\hat{Y}(e) - Y(e)|$$

4.2 Erro Médio

O erro médio em um conjunto de dados E para uma predição \hat{Y} é dado por:

$$\frac{1}{|E|} \sum_{e \in E} \text{loss}(\hat{Y}(e), Y(e))$$

onde |E| é o número de exemplos em E.

5 Métricas de Avaliação de Classificadores

5.1 Taxa de Verdadeiros Positivos (Recall)

A taxa de verdadeiros positivos é definida como a proporção de positivos reais que foram corretamente classificados:

$$Recall = \frac{tp}{tp + fn}$$

5.2 Taxa de Falsos Positivos

A taxa de falsos positivos é definida como a proporção de negativos reais que foram incorretamente classificados como positivos:

Taxa de Falsos Positivos =
$$\frac{fp}{fp + tn}$$

6 Áreas de Aplicação e Desafios

Os métodos de aprendizado supervisionado, não supervisionado e por reforço são amplamente aplicados em várias áreas como saúde, finanças, e segurança, mas enfrentam desafios como overfitting, necessidade de grandes volumes de dados e questões éticas relacionadas à privacidade e viés.

7 Avaliação de Modelos de Aprendizado Supervisionado

A avaliação de modelos de aprendizado supervisionado é crucial para garantir que o modelo generalize bem para novos dados, ou seja, dados que não foram usados durante o treinamento. Abaixo estão alguns dos principais conceitos e práticas para a avaliação de modelos:

7.1 Divisão de Conjuntos de Dados

Uma prática comum para avaliar modelos supervisionados é dividir o conjunto de dados em dois ou três subconjuntos: treinamento, validação, e teste.

- Conjunto de Treinamento: Usado para treinar o modelo, ou seja, ajustar os parâmetros do modelo de acordo com os dados.
- Conjunto de Validação: Usado para ajustar hiperparâmetros e evitar overfitting. A validação permite comparar diferentes configurações de modelos para selecionar a melhor.

• Conjunto de Teste: Usado para avaliar o desempenho do modelo em dados não vistos, garantindo que o modelo generalize bem.

Uma divisão típica pode ser 60% dos dados para treinamento, 20% para validação, e 20% para teste, mas isso pode variar dependendo do tamanho e da natureza do conjunto de dados.

7.2 Validação Cruzada (Cross-Validation)

Para garantir uma avaliação mais robusta, especialmente em casos onde o conjunto de dados é pequeno, é comum usar validação cruzada. Na validação cruzada, o conjunto de dados é dividido em várias partes (ou folds). O modelo é treinado em k-1 partes e testado na parte restante. Esse processo é repetido k vezes, e o desempenho final é a média dos resultados em todas as partes.

7.3 Métricas de Avaliação

Além da função de perda, existem várias métricas que podem ser usadas para avaliar a performance de modelos de aprendizado supervisionado:

- Acurácia: Proporção de predições corretas sobre o total de exemplos.
- Precisão (Precision): Proporção de predições positivas corretas entre todas as predições positivas feitas pelo modelo.
- Revocação (Recall): Proporção de positivos reais que foram corretamente identificados pelo modelo.
- F1-Score: A média harmônica entre a precisão e a revocação, útil para casos de classes desbalanceadas.
- Erro Quadrático Médio (MSE): Média dos quadrados das diferenças entre os valores previstos e os valores reais, usada principalmente em regressão.
- Coeficiente de Determinação (R^2) : Mede a proporção da variância nos dados dependentes que é explicada pelo modelo, também usada em regressão.

7.4 Curvas ROC e AUC

Para problemas de classificação, especialmente quando há um desbalanceamento entre as classes, as curvas ROC (Receiver Operating Characteristic) e a métrica AUC (Area Under the Curve) são amplamente utilizadas. A curva ROC plota a taxa de verdadeiros positivos (Recall) contra a taxa de falsos positivos para diferentes limiares de decisão. O AUC mede a área sob essa curva, indicando a capacidade do modelo em distinguir entre as classes.

7.5 Overfitting e Underfitting

- Overfitting: Ocorre quando o modelo se ajusta muito bem aos dados de treinamento, capturando ruídos e padrões não generalizáveis, resultando em baixa performance no conjunto de teste.
- Underfitting: Ocorre quando o modelo é muito simples para capturar os padrões nos dados de treinamento, resultando em baixa performance tanto no treinamento quanto no teste.

Para evitar overfitting, técnicas como regularização (ex: L1, L2), poda de árvores (no caso de árvores de decisão), e métodos de ensemble (ex: Random Forest, Gradient Boosting) podem ser aplicadas.