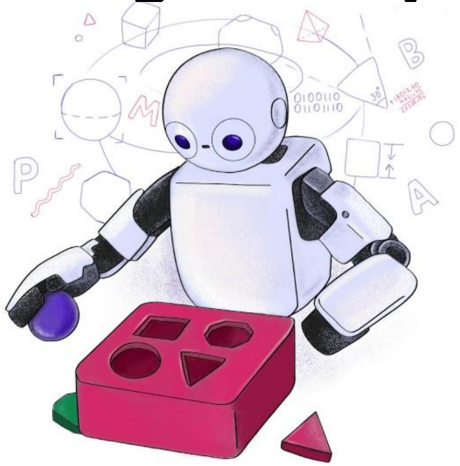
T320 - Introdução ao Aprendizado de Máquina II: *Classificação (Parte II)*



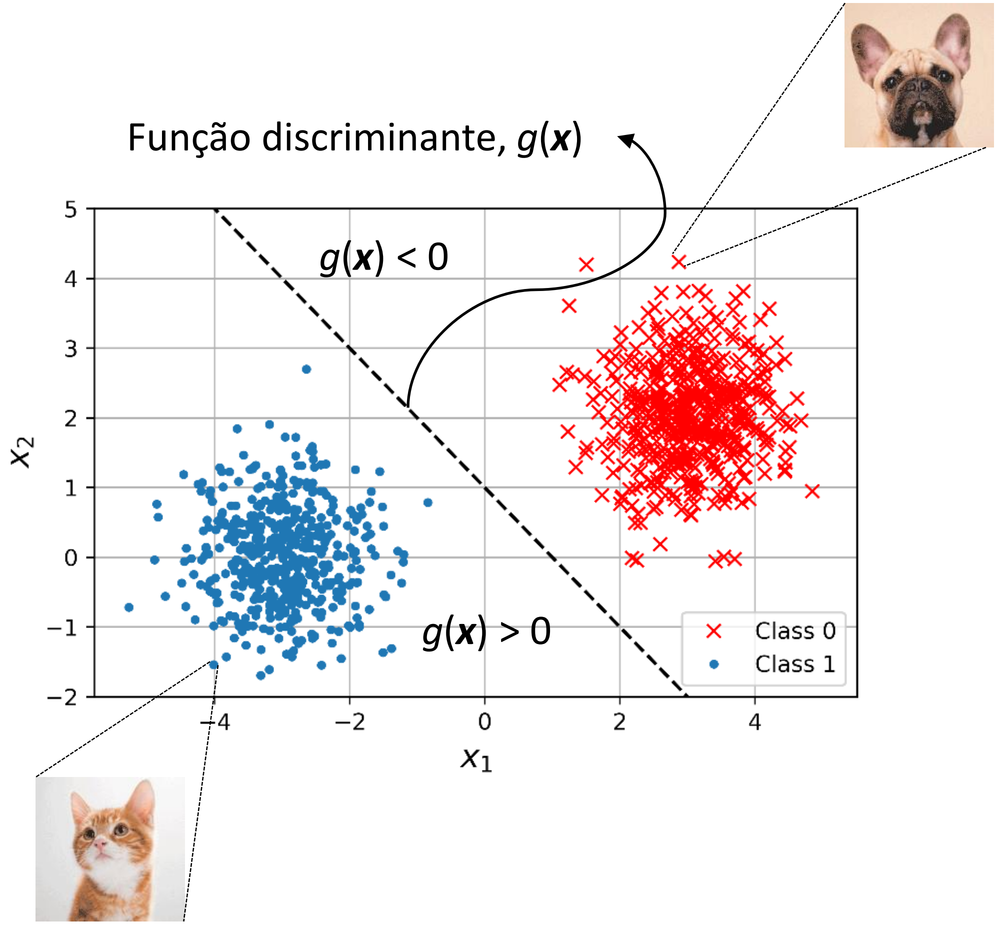
Inatel

Felipe Augusto Pereira de Figueiredo
felipe.figueiredo@inatel.br

Recapitulando

- Anteriormente, vimos alguns exemplos de aplicação de algoritmos de ***classificação***:
  - Detecção de spam.
  - Análise de sentimentos.
  - Reconhecimento de objetos, faces, letras/dígitos.
- Definimos o problema da classificação e concluímos que ele também é um problema de ***aprendizado supervisionado***.
- Aprendemos que as classes são separadas através de ***funções discriminantes*** e que o desafio é encontrar funções adequadas e seus respectivos pesos.
- A partir desta aula, começaremos a discutir como encontrar os pesos.

Classificação linear



- Como vimos, o objetivo da ***classificação*** é usar vetores de atributos, $\boldsymbol{x}$, de, por exemplo, um e-mail ou uma imagem, para ***identificar*** a qual classe ele pertence.
- Um ***classificador linear*** atinge esse objetivo ***tomando uma decisão*** (e.g., os ***if***s e ***else***s) ***com base*** no valor de ***combinações lineares dos atributos em relação aos pesos***, i.e., na saída de uma ou mais ***funções discriminantes lineares***.

Classificação linear

- Portanto, a saída de um ***classificador linear*** é dada por

produto escalar

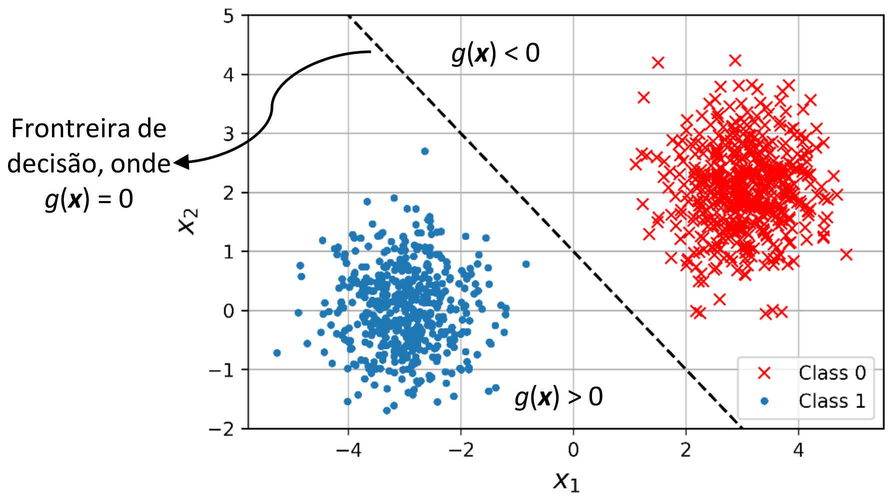
$$\hat{y} = h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}) = f(g(\boldsymbol{x})) = f\left(\sum_{k=0}^{K} a_k x_k\right) = f(\boldsymbol{a}^T\boldsymbol{x}),$$

onde $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})$ é conhecida como ***função hipótese de classificação***, $\boldsymbol{x} = [1, x_1, \ldots, x_K]^T$ é o vetor de atributos com o primeiro elemento sendo o atributo de *bias*, $x_0 = 1$, e $f(.)$ é uma ***função de limiar de decisão***.

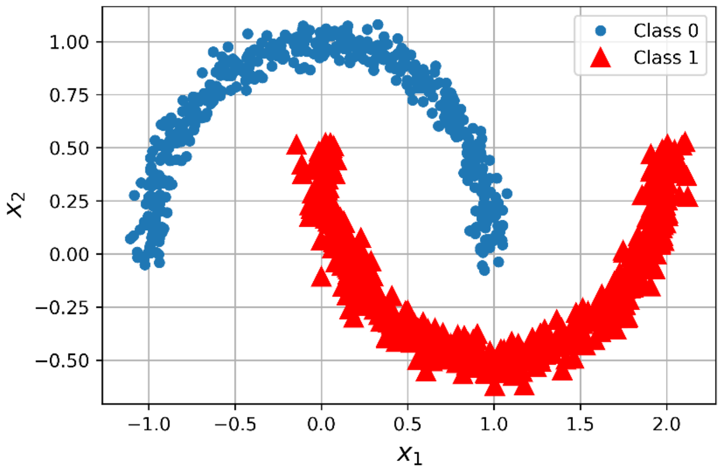
  - ***Função de limiar de decisão*** é uma função que mapeia a saída da ***função discriminante linear***, $g(\boldsymbol{x})$, na saída desejada, ou seja, na classe $C_q, q = 1, \ldots, Q$, do objeto.
  - Ela é apenas uma ***formalização matemática*** para os ***if***s e ***else***s que usamos para decidir as classes dos atributos.

- Na ***teoria original*** dos classificadores lineares, as ***funções discriminantes*** seguiam equações de ***hiperplanos***: $\sum_{k=0}^{K} a_k x_k$.

Classes linearmente separáveis



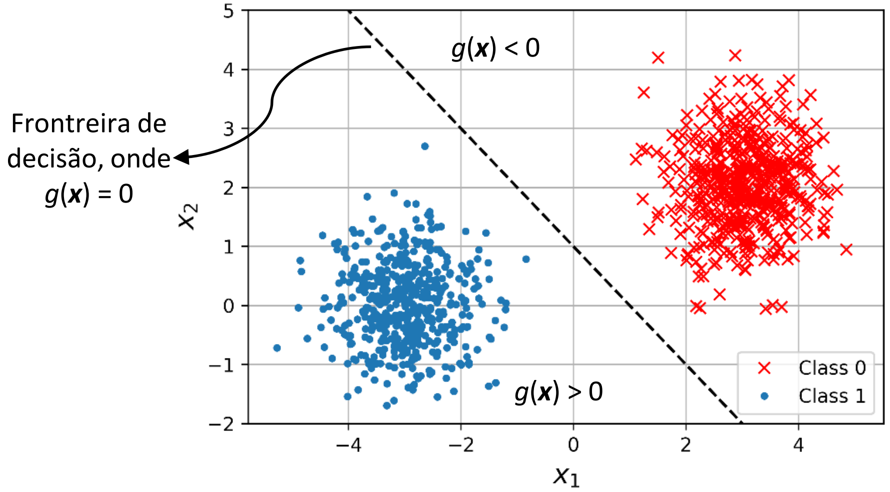
Classes linearmente separáveis.



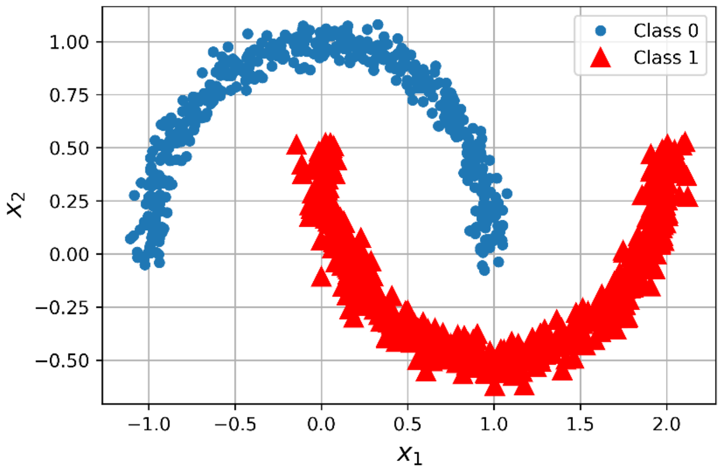
Classes não-linearmente separáveis.

- Dado um ***conjunto de treinamento***, a tarefa do ***classificador*** é a de ***aprender*** uma ***função hipótese de classificação***, $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})$, que receba um exemplo de entrada (e.g., x_1 e x_2) e retorne a classe do exemplo.
- Para que um ***classificador linear*** aprenda uma boa separação, as classes devem ser ***linearmente separáveis***.
- Isso significa que as classes devem ser ***suficientemente separadas*** umas das outras para garantir que a ***superfície de decisão*** seja um ***hiperplano***.

Classes linearmente separáveis



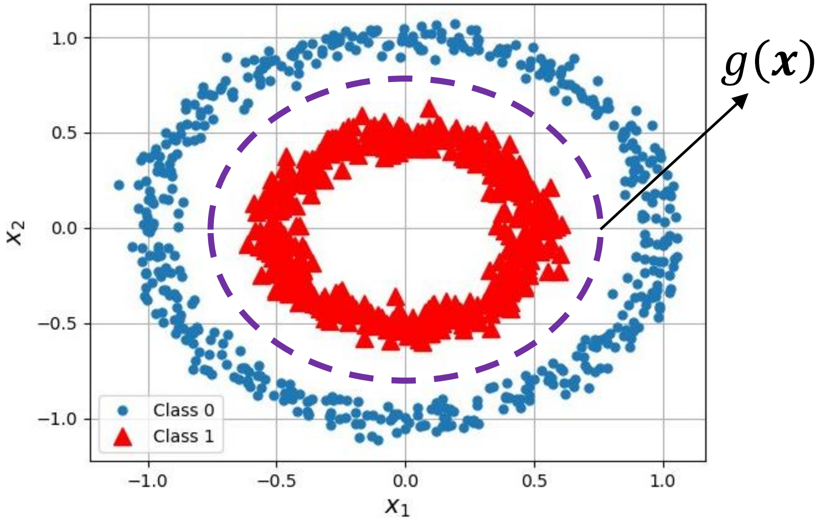
Classes linearmente separáveis.

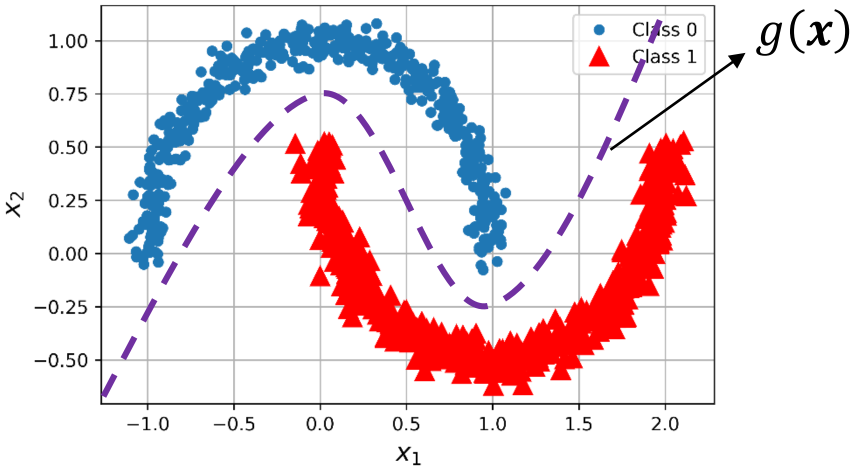


Classes não-linearmente separáveis.

- Classes que podem ser separadas por um ***hiperplano*** são chamadas de ***linearmente separáveis***.
- Na primeira figura, a ***fronteira de decisão*** é definida por um ***hiperplano***, i.e., uma reta.
- Na segunda figura, devido à disposição das classes, não existe um ***hiperplano*** que as separe.
- ***Originalmente***, ***classificação linear*** é usada quando as classes podem ser separadas por ***hiperplanos***: $\sum_{k=0}^{K} a_k x_k$.

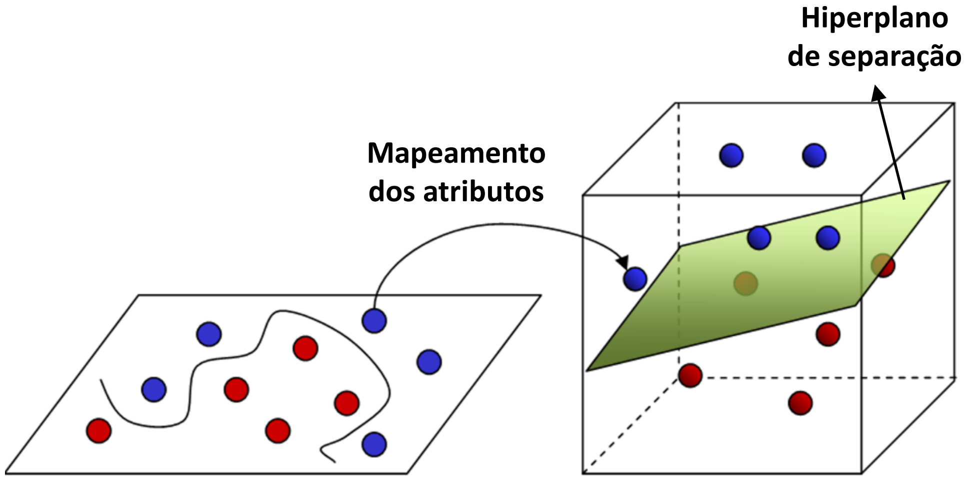
Classificação não-linear





- Mas e se não pudermos separar as classes com um ***hiperplano***, ou seja, se elas não forem ***linearmente separáveis***?
- Nestes casos, usamos ***polinômios***.
- Os polinômios podem fazer ***mapeamentos não lineares*** dos atributos no valor de saída:
  - $g(\boldsymbol{x}) = (x_1 - a)^2 + (x_2 - b)^2 - r^2$, Círculo centrado em (a, b) e com raio r.
  - $g(\boldsymbol{x}) = \frac{(x_1-a)^2}{c^2} + \frac{(x_2-b)^2}{d^2} - 1$, Elipse centrada em (a, b), com largura $2c$ e altura $2d$.
  - $g(\boldsymbol{x}) = (x_1 - a)(x_2 - b) - c$, Hipérbole retangular com eixos paralelos às suas assíntotas.

Classificação não-linear

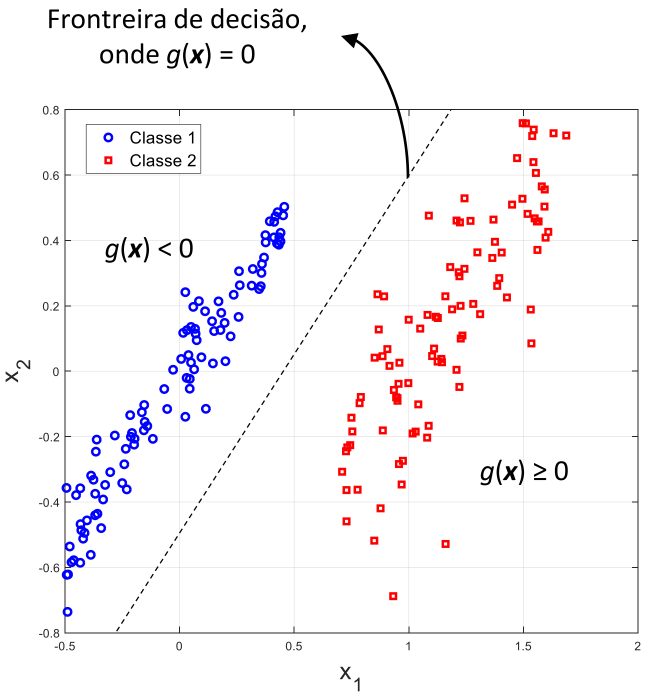


- Os polinômios podem aplicar ***transformações não-lineares aos atributos originais***, levando ao ***aumento das dimensões de entrada***, e.g.:

$$
\begin{aligned}
g(\boldsymbol{x}) &= (x_1 - a)^2 + (x_2 - b)^2 - r^2 \\
&= x_1^2 - 2ax_1 + x_2^2 - 2bx_2 + (a^2 + b^2 - r^2) \\
&= a_1 z_1 + a_2 z_2 + a_3 z_3 + a_4 z_4 + a_0
\end{aligned}
$$

- O polinômio ***cria novas coordenadas*** no espaço de atributos.
- As transformações ***mapeiam*** os atributos para um ***espaço de maior dimensão*** onde a separação pode se tornar ***mais fácil***, até linear.

Função de limiar de decisão



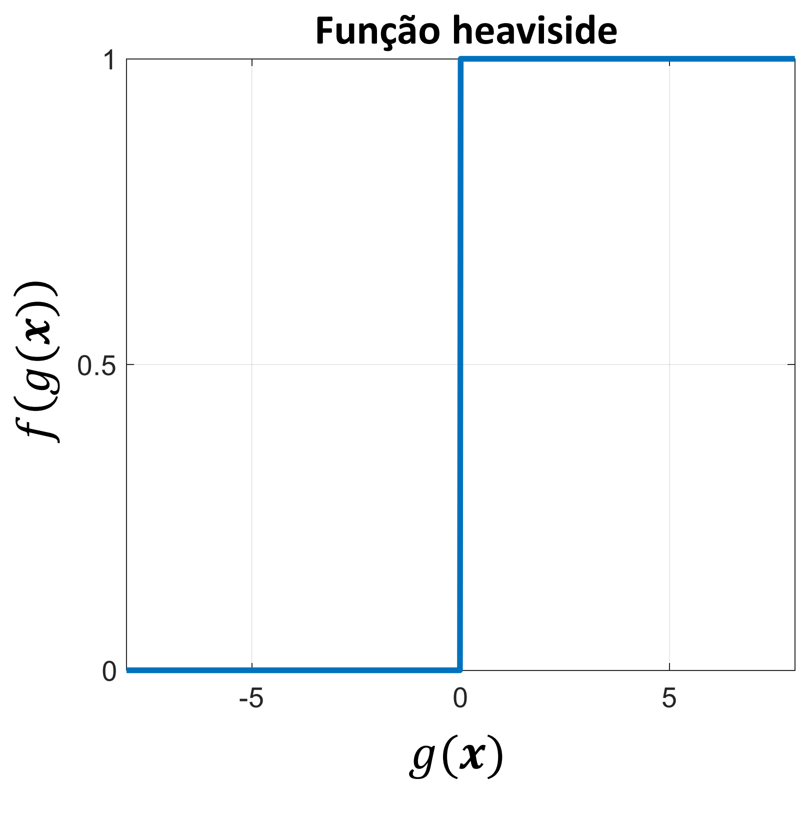
- Para o exemplo ao lado, podemos definir a ***função hipótese de classificação*** como duas ***condições***:

$$\hat{y} = h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 0, & g(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{a} < 0 \text{ (Classe } -) \\ 1, & g(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{a} \geq 0 \text{ (Classe} +) \end{cases}$$

if e ***else***

- Percebam que a saída da ***função*** é ***binária***.
- O mapeamento entre o valor da função discriminante, $g(\boldsymbol{x})$, e a saída 0 ou 1 é feito através da ***função de limiar de decisão***, $f(g(\boldsymbol{x}))$.
  - No caso acima ela é feita por uma ***estrutura condicional***.
- Como implementar essas ***condições*** através de uma função matemática?

Função de limiar de decisão rígido

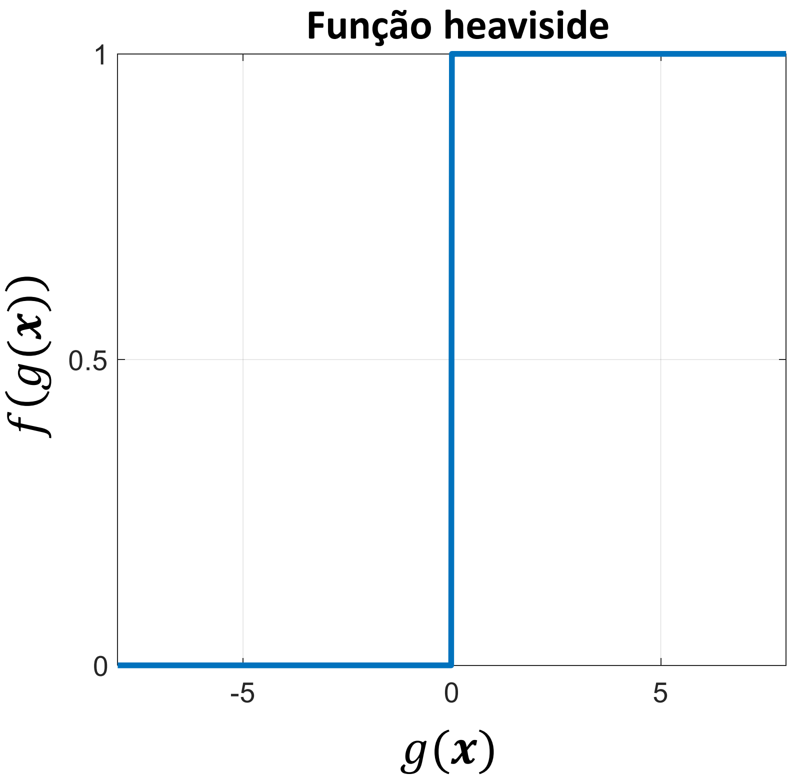


- Uma ***função de limiar de decisão*** simples que mapeia o valor de $g(\boldsymbol{x})$ em 2 valores de saída é a ***função de limiar de decisão rígido***.
- Ela é mostrada na figura ao lado e é definda como

$$f(g(\boldsymbol{x})) = \begin{cases} 0, & g(\boldsymbol{x}) < 0 \\ 1, & g(\boldsymbol{x}) > 0 \\ \text{Indeterminado}, & g(\boldsymbol{x}) = 0 \end{cases}$$

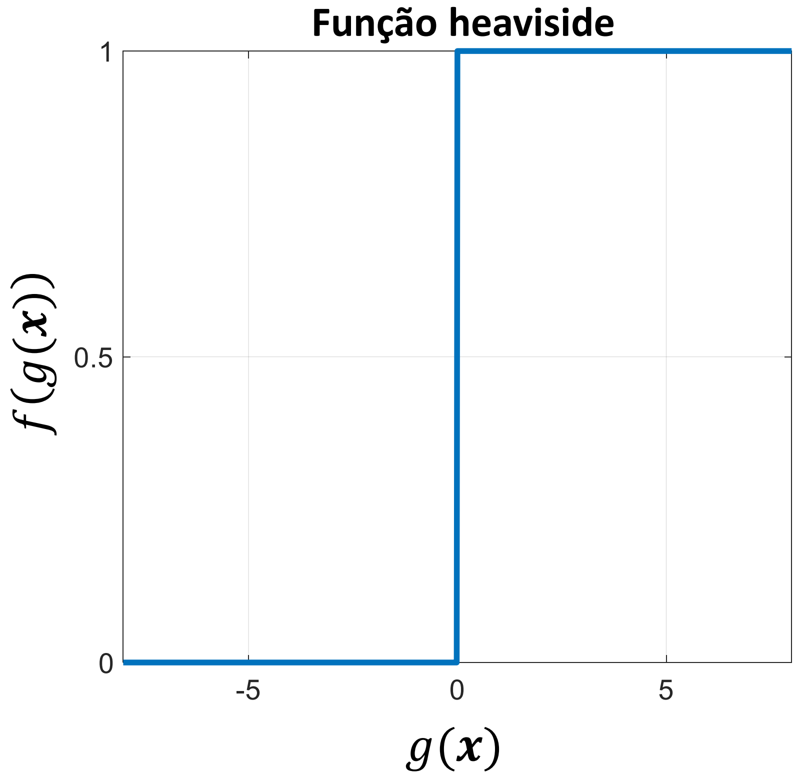
Conhecida também como ***função heaviside ou degrau unitário.***

Classificação com limiar de decisão rígido



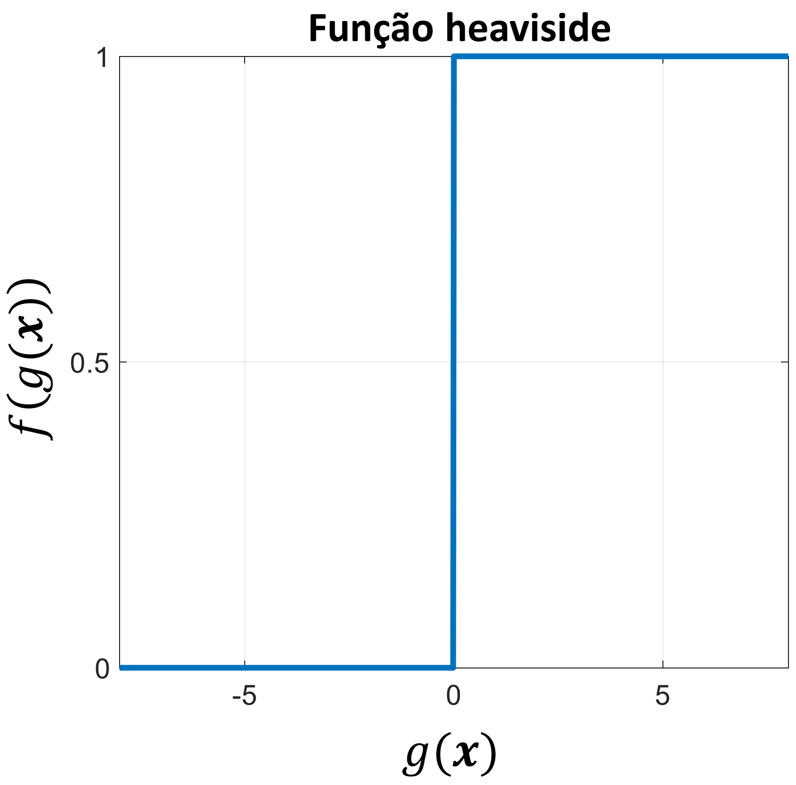
- Agora que a ***função hipótese de classificação***, $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})$, tem uma ***forma matemática bem*** definida, precisamos pensar em ***como encontrar os pesos***, $\boldsymbol{a}$.

Classificação com limiar de decisão rígido



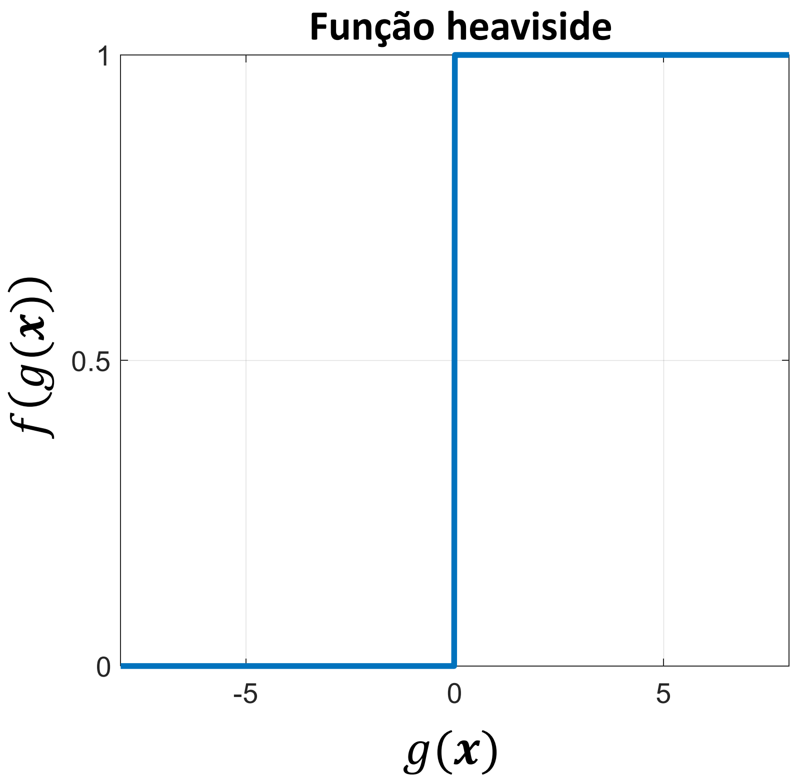
- Queremos encontrar os pesos de tal forma que ***o erro de classificação seja minimizado***, i.e., que os exemplos sejam classificados corretamente.
- No caso da ***regressão linear***, nós fizemos isso de duas maneiras:
  i. de forma fechada (através da ***equação normal***) tomando a derivada parcial do erro em relação aos pesos, igualando a zero e resolvendo a equação em relação aos pesos;
  ii. e através do algoritmo do ***gradiente descendente***, com as derivadas parciais do erro em função aos pesos.

Classificação com limiar de decisão rígido



- Entretanto, com a ***função de limiar rígido***, ***nenhuma das duas abordagens é possível*** devido à ***derivada*** de $f(g(\boldsymbol{x}))$ ser igual a zero em todos os pontos exceto em $g(\boldsymbol{x}) = 0$, onde ela é indeterminada.

Classificação com limiar de decisão rígido



Como encontramos os pesos dada essa limitação?

Classificação com limiar de decisão rígido

- Uma possível solução é utilizar uma ***regra intuitiva*** de atualização dos ***pesos*** que ***converge para uma solução dado que exista uma função discriminante adequada e que as classes não se sobreponham***.
- Essa ***regra intuitiva de atualização dos pesos*** é dada pela seguinte equação

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a} + \alpha\Big(y(i) - h_{\boldsymbol{a}}\big(\boldsymbol{x}(i)\big)\Big)\boldsymbol{x}(i), \forall i,$$

onde α é o passo de aprendizagem, o qual deve ser sempre maior do que zero.

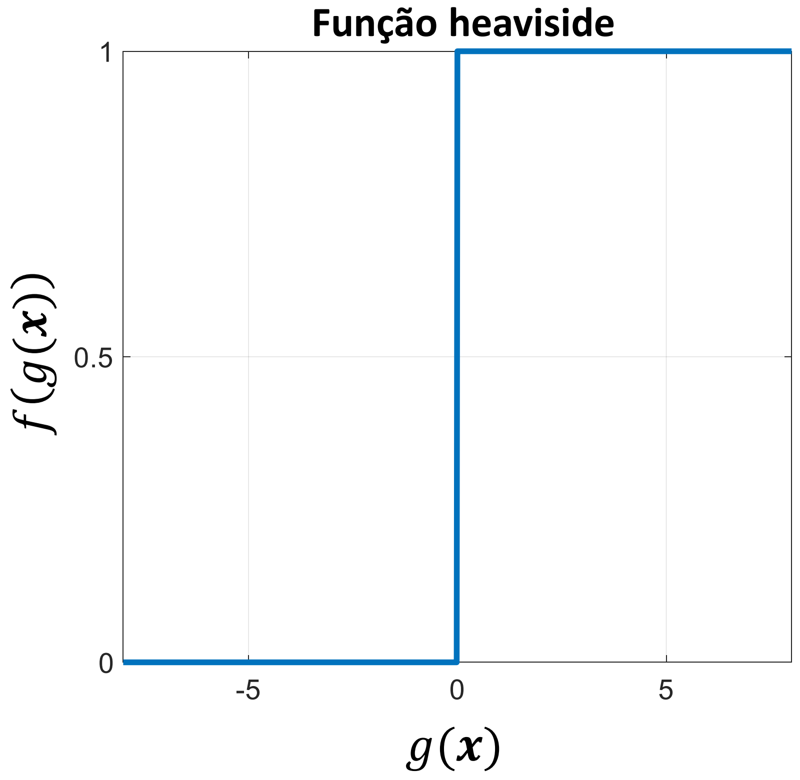
- A regra é idêntica à regra de atualização dos pesos para a ***regressão linear*** quando utilizamos o ***gradiente descendente estocástico (GDE)***.

Classificação com limiar de decisão rígido

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a} + \alpha\left(y(i) - h_{\boldsymbol{a}}\big(\boldsymbol{x}(i)\big)\right)\boldsymbol{x}(i), \forall i.$$

- Por razões que discutiremos mais adiante, esta regra é chamada de ***regra de aprendizagem do perceptron***.
- Os pesos são atualizados usando-se apenas ***um exemplo por vez***, escolhido de forma ***aleatória*** do conjunto de treinamento, assim como fizemos com o GDE.
- Como classificadores binários têm rótulos e valores de saída iguais a 0 ou 1, o comportamento da regra de atualização é diferente do comportamento do GDE.
- Como veremos a seguir, existem apenas 3 possibilidades para a regra.

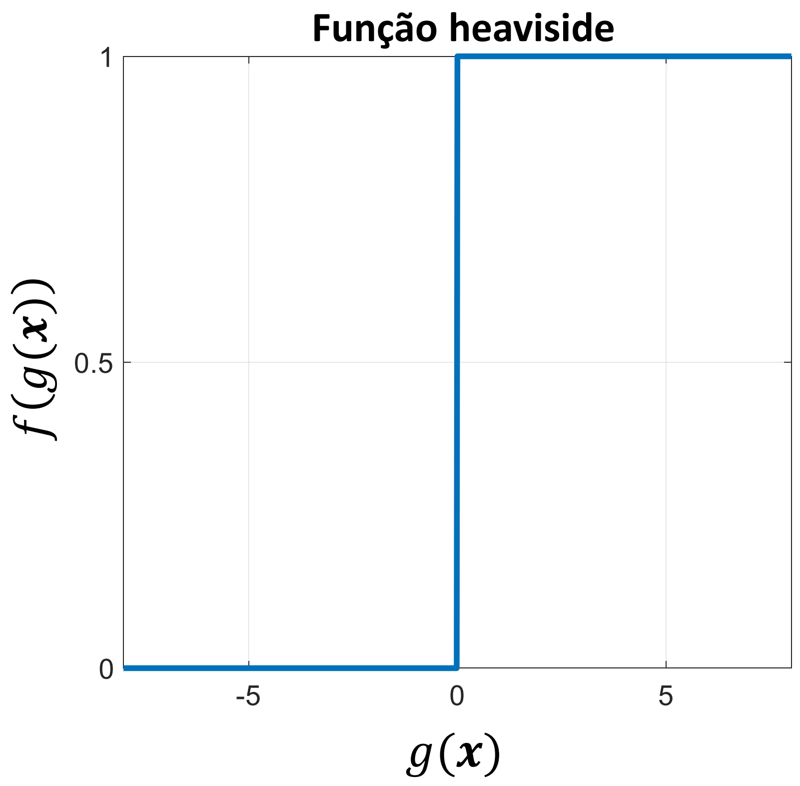
Classificação com limiar de decisão rígido



- Primeira possibilidade
  - Se o valor de saída do classificador for igual ao esperado, i.e., $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}(i)) = y(i)$, então
$$y(i) - h_{\boldsymbol{a}}\big(\boldsymbol{x}(i)\big) = 0.$$
- Observem que se na equação de atualizaçao dos pesos $y(i) - h_{\boldsymbol{a}}\big(\boldsymbol{x}(i)\big) = 0$
$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a} + \alpha\Big(y(i) - h_{\boldsymbol{a}}\big(\boldsymbol{x}(i)\big)\Big)\boldsymbol{x}(i),$$

então, ***os pesos não são atualizados***.

Classificação com limiar de decisão rígido

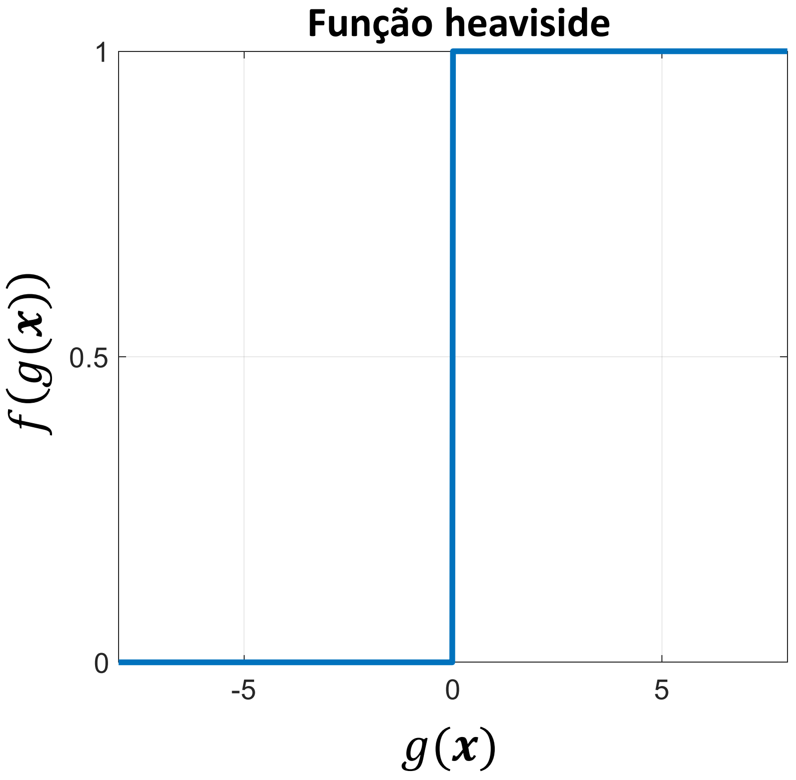


- Equação de atualizaçao dos pesos

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a} + \alpha\left(y(i) - h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}(i))\right)\boldsymbol{x}(i).$$

- Segunda possibilidade
  - Se $y(i) = 1$, mas $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}(i)) = 0$, então
$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a} + \alpha\boldsymbol{x}(i).$$
  - Assim, o k-ésimo peso, a_k, tem seu valor ***aumentado*** quando o valor de $a_k \times x_k$ é positivo e ***diminuído*** quando o valor de $a_k \times x_k$ é negativo.
    - Isso faz sentido, pois nós queremos ***aumentar*** o valor de $g(\boldsymbol{x})$, de tal forma que $g(\boldsymbol{x}) > 0$ e, consequentemente, $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})$ tenha como saída o valor 1.
    - Lembrando que $g(\boldsymbol{x}) = a_0 + a_1x_1 + \cdots + a_Kx_K$.

Classificação com limiar de decisão rígido

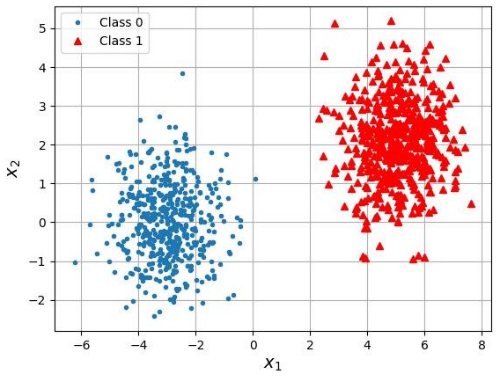


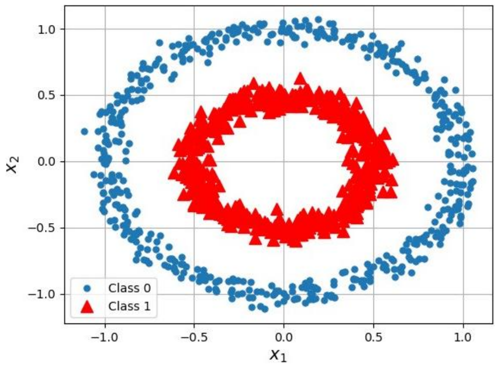
- Equação de atualizaçao dos pesos

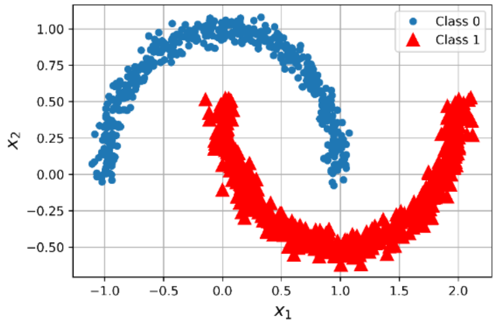
$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a} + \alpha\left(y(i) - h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}(i))\right)\boldsymbol{x}(i).$$

- Terceira possibilidade
  - Se $y(i) = 0$, mas $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}(i)) = 1$, então
    $$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a} - \alpha\boldsymbol{x}(i).$$
  - Assim, o k-ésimo peso, a_k, tem seu valor ***diminuído*** quando o valor de $a_k \times x_k$ é positivo e ***aumentado*** quando o valor de $a_k \times x_k$ é negativo.
    - Isso faz sentido, pois nós queremos ***diminuir*** o valor de $g(\boldsymbol{x})$, de tal forma que $g(\boldsymbol{x}) < 0$ e, consequentemente, $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})$ tenha como saída o valor 0.
    - Lembrando que $g(\boldsymbol{x}) = a_0 + a_1x_1 + \cdots + a_Kx_K$.

Classificação com limiar de decisão rígido



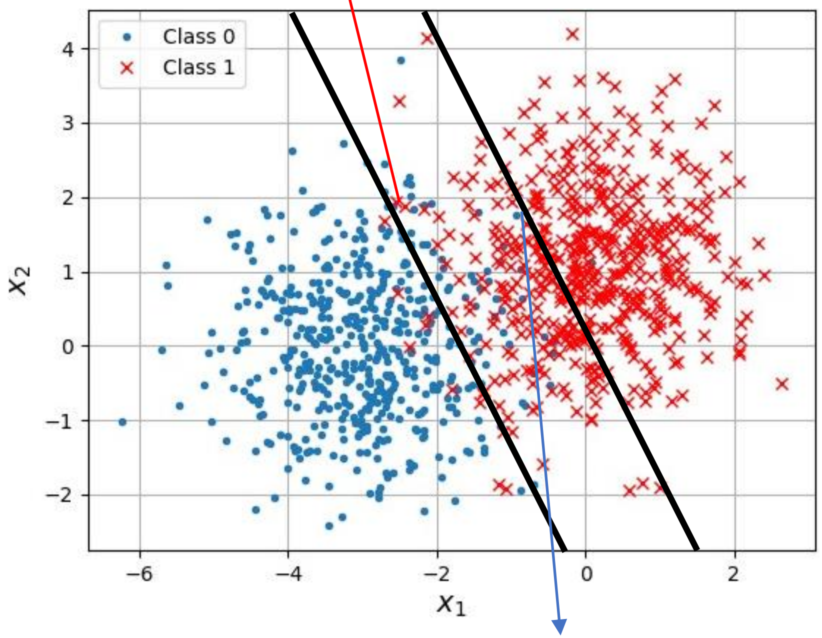




- A ***regra de aprendizagem do perceptron*** converge para um ***separador perfeito*** quando:
  - As classes são ***suficientemente separadas*** umas das outras, ou seja, não se sobrepõem.
  - E existe uma ***função discriminante adequada para o problema***, mesmo que não seja um ***hiperplano***.
    - ✓ Ou seja, não precisa ser um problema linearmente separável.
- ***Separador perfeito:*** com erro de classificação igual a zero, ou seja, todos os exemplos são perfeitamente classificados.
- Porém, na prática essa situação não é muito comum.

Classificação com limiar de decisão rígido

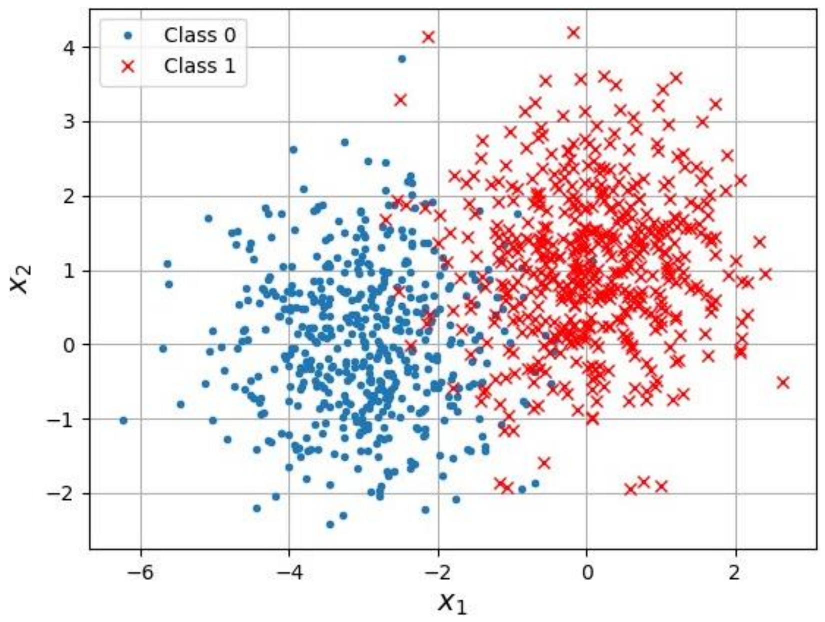
$g(\boldsymbol{x})$ devido à amostra vermelha



$g(\boldsymbol{x})$ devido à amostra azul

- Quando as classes se sobrepõem, a ***regra de aprendizagem do perceptron*** falha em convergir para uma solução perfeita.
- Nesse caso, a regra não converge para uma solução ***estável*** para ***valores constantes do passo de aprendizagem***, α, assim como acontece com o GDE.
- Não há convergência, pois o objetivo é encontrar um erro de igual a 0.
- Além disso, os pesos são ajustados para uma única amostra por vez.

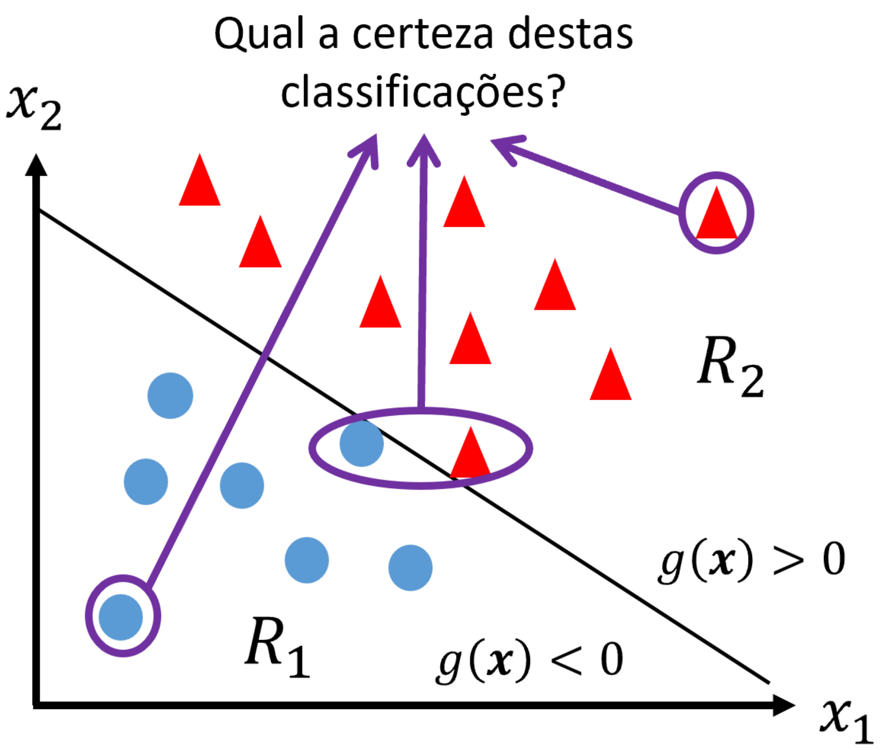
Classificação com limiar de decisão rígido



- Porém, se ***α decrescer de acordo com as iterações de treinamento***, então a regra tem uma chance de convergir para uma solução de ***erro mínimo*** quando os exemplos são apresentados de forma aleatória.
  - Abordagem similar a que usamos com o GDE.
- Podemos também usar o ***early-stop*** e ***guardar*** os ***pesos*** que resultaram no ***menor erro de validação***.

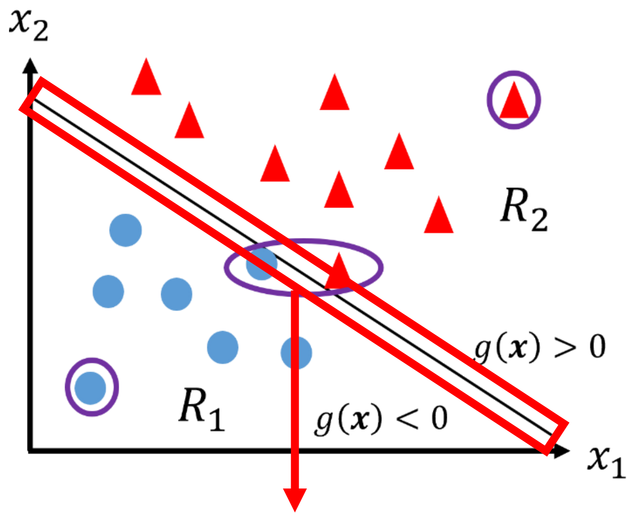
[Exemplo: classificador_linear_com_limiar_rigido.ipynb]

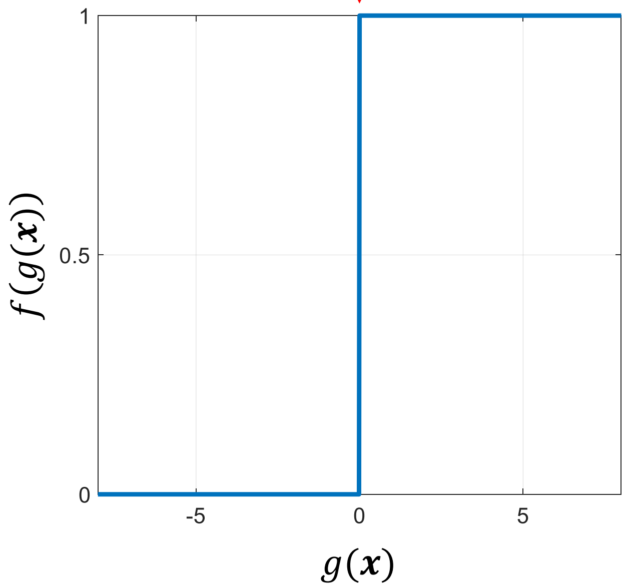
Classificação com limiar de decisão rígido



- Outro problema com classificadores que usam ***limiar de decisão rígido*** é a ***falta de informação sobre a confiança*** quanto a uma classificação.
- Na figura ao lado, dois exemplos estão bem próximos da ***fronteira de decisão*** enquanto outros dois estão bem distantes dela.
- Como o classificador com ***limiar de decisão rígido*** classificaria esses exemplos?

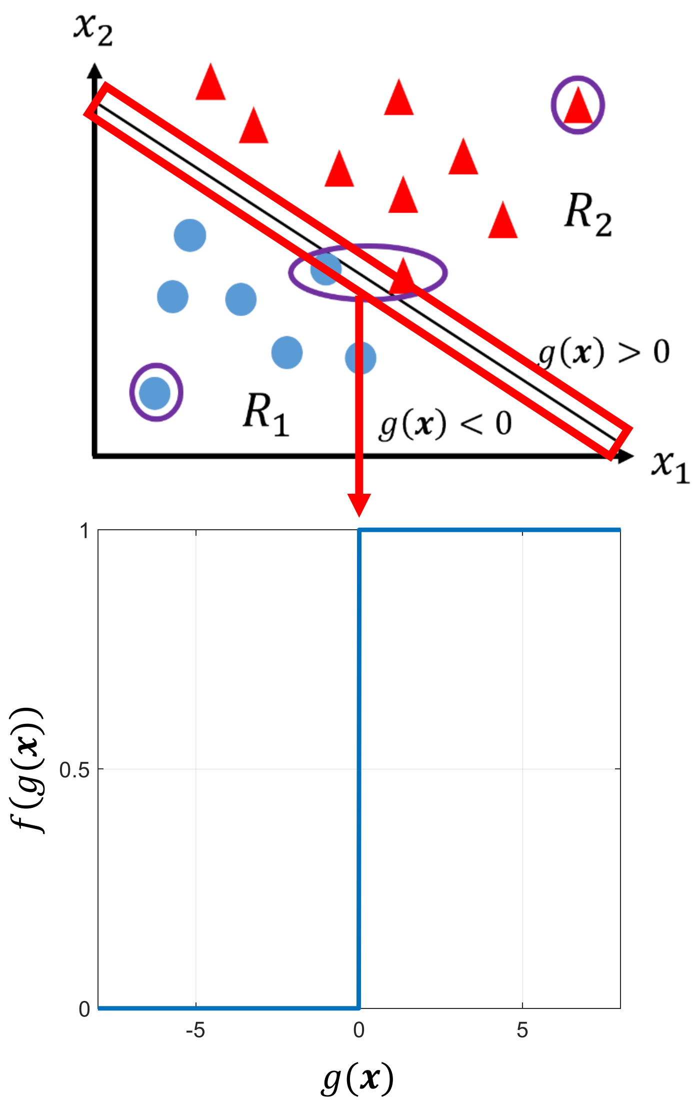
Classificação com limiar de decisão rígido





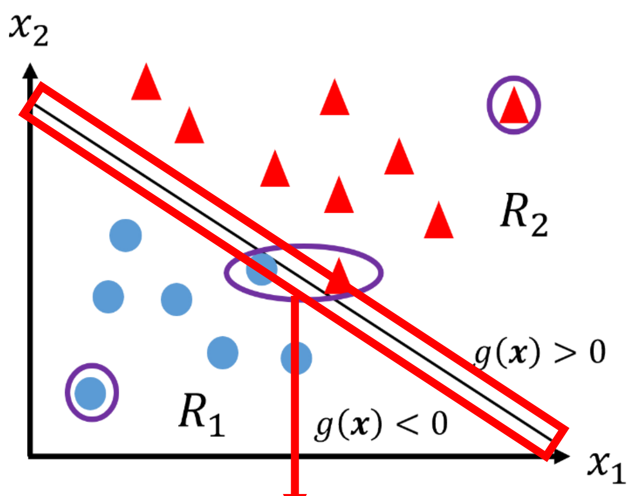
- Olhando para a função de ***limiar de decisão rígido***, percebemos que o classificador faz predições ***muito confiantes*** sempre iguais 0 para $g(\boldsymbol{x}) < 0$ e iguais a 1 quando $g(\boldsymbol{x}) > 0$, ***independente se o exemplo está distante ou próximo da fronteira de decisão***.

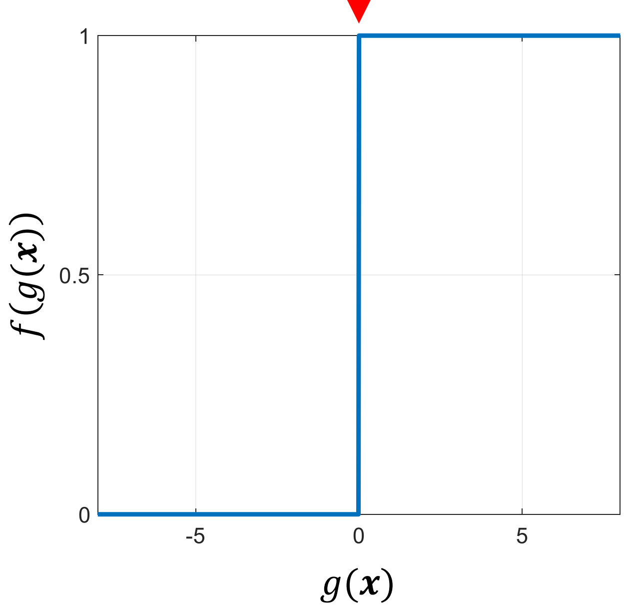
Classificação com limiar de decisão rígido



- Exemplos ***mais distantes da fronteira*** têm uma ***probabilidade maior*** de ***realmente pertencerem à classe da região onde se encontram e não serem outliers***.
  - Quanto maior o valor absoluto de $g(\boldsymbol{x})$, mais distante da fronteira está o exemplo.
- Por outro lado, exemplos próximos da fronteira têm probabilidade menor de pertencerem à classe onde estão.
  - Quanto menor o valor absoluto de $g(\boldsymbol{x})$, mais próximo da fronteira está o exemplo.

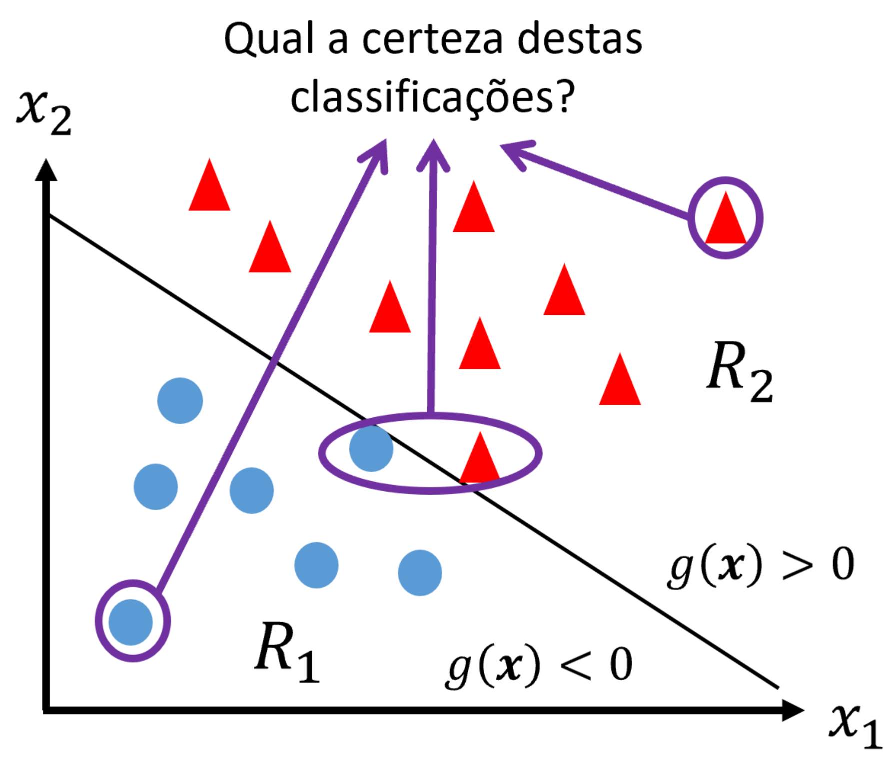
Classificação com limiar de decisão rígido





- Assim, usando ***limiar de decisão rígido***, os dois ***pontos azuis*** são classificados como pertencentes à ***classe negativa*** (valor 0) e os dois ***triângulos vermelhos*** classificados como pertencentes à ***classe positiva*** (valor 1), mesmo tendo valores ***absolutos de*** $g(\boldsymbol{x})$ ***bem diferentes***.
  - Pontos muito próximos da fronteira de decisão têm valor absoluto de $g(\boldsymbol{x})$ próximo de zero.
  - Já pontos muito distantes têm valor absoluto de $g(\boldsymbol{x})$ muito maior do que zero.

Classificação com limiar de decisão rígido



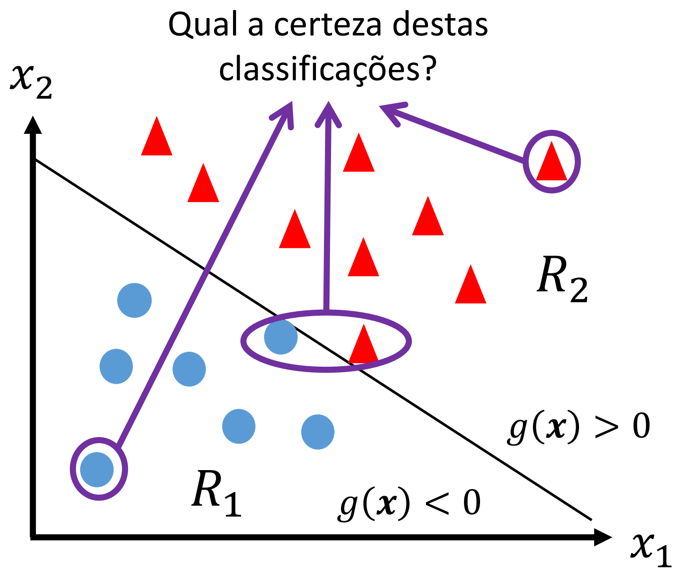
- Em resumo, ***pontos distantes da fronteira*** de decisão ***deveriam ter uma confiança*** (ou probabilidade) de ***pertencerem a uma determinada classe bem maior do que pontos próximos***.
- Porém, isso não é refletido na saída do classificador com limiar de decisão rígido.
- Entretanto, em muitas situações, nós precisamos de predições mais graduadas, que indiquem incertezas quanto à predição.

[Exemplo: classificação_rígida.ipynb]

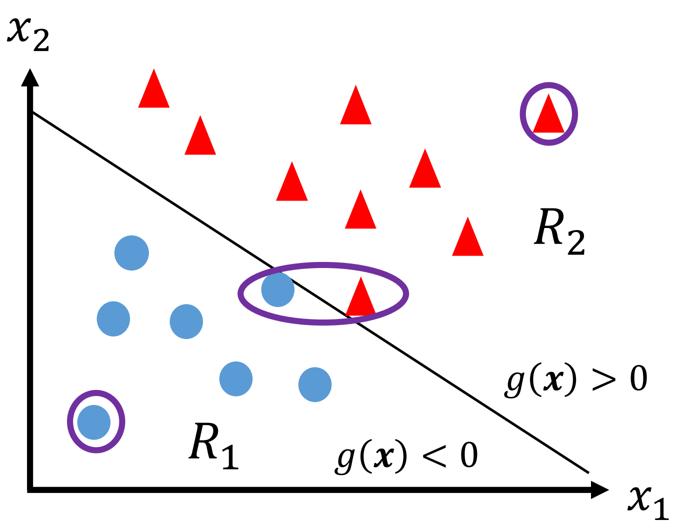
Tarefas

- **Quiz**: “*T320 - Quiz - Classificação (Parte II)*” que se encontra no MS Teams.
- **Exercício Prático**: **Laboratório #2**.
  - Pode ser acessado através do link acima (Google Colab) ou no GitHub.
  - Se atentem aos prazos de entrega.
  - Instruções para resolução e entrega dos laboratórios.

Obrigado!



Qual a certeza destas classificações?
x_2
x_1
R_1
R_2
$g(\boldsymbol{x}) > 0$
$g(\boldsymbol{x}) < 0$



x_2
x_1
R_1
R_2
$g(\boldsymbol{x}) > 0$
$g(\boldsymbol{x}) < 0$