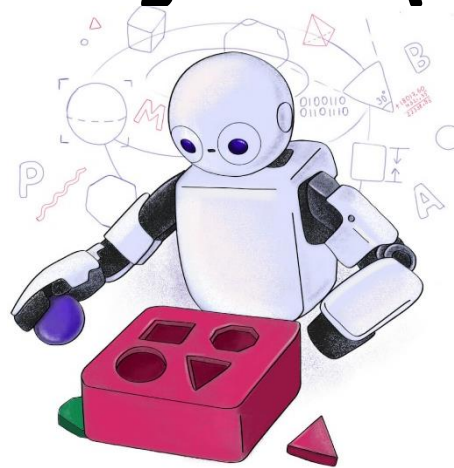


T320 - Introdução ao Aprendizado de Máquina II: *Classificação (Parte II)*



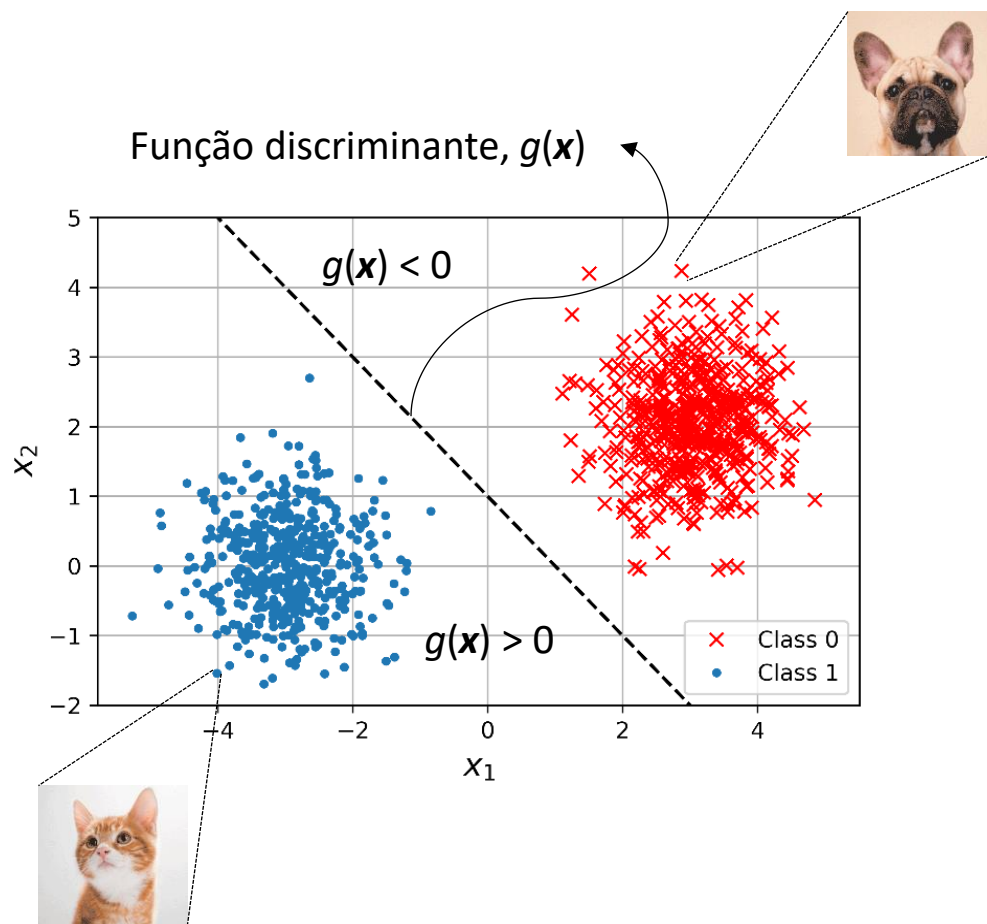
Inatel

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 concluimos 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 as características (i.e., vetores de atributos, x) de, por exemplo, um e-mail ou imagem, para identificar a qual classe ele pertence.
- Um **classificador linear** atinge esse objetivo **tomando uma decisão** (i.e., os **ifs** e **elses**) **com base** no valor de **combinações lineares dos atributos em relação aos pesos**, ou seja, na saída de uma ou mais **funções discriminantes lineares**.

Classificação linear

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

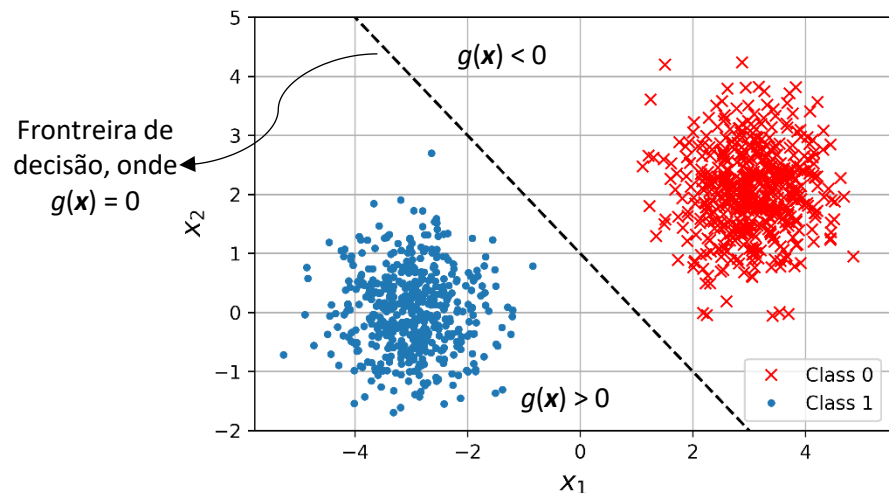
$$\hat{y} = h_a(\mathbf{x}) = f(g(\mathbf{x})) = f(a_0 + \cdots + a_K x_K) = f\left(\sum_{k=0}^K a_k x_k\right) = f(\mathbf{a}^T \mathbf{x}),$$

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

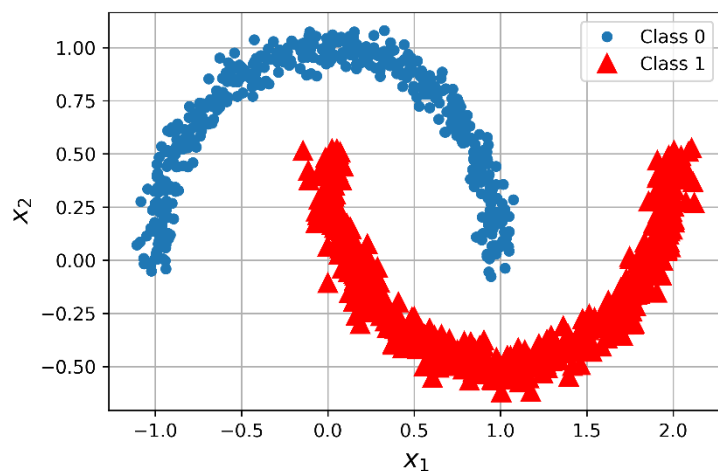
produto
escalar

- **Função de limiar de decisão** é uma função que mapeia a saída da **função discriminante linear**, $g(\mathbf{x})$, na saída desejada, ou seja, na classe C_q , $q = 1, \dots, Q$, do objeto.
- Ela é apenas uma **formalização matemática** para os **ifs** e **elses** que usamos para decidir as classes dos exemplos (i.e., atributos) de entrada.
- Na teoria original dos classificadores lineares, as **funções discriminantes** seguiam equações de hiperplanos: $\sum_{k=0}^K a_k x_k$.

Classificação linear



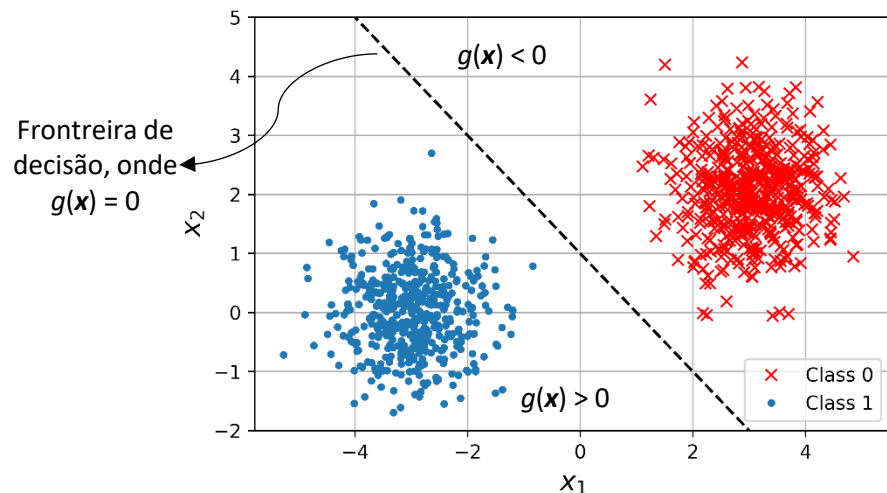
Classes linearmente separáveis.



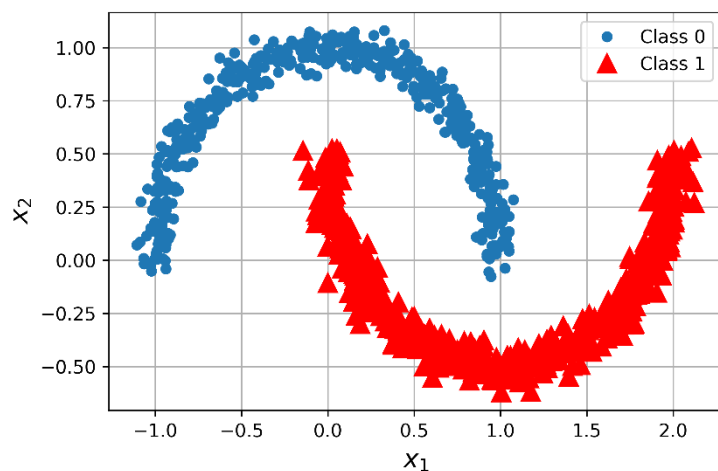
Classes não-linearmente separáveis.

- Dado um **conjunto de treinamento**, a tarefa do **classificador** é a de **aprender** uma **função hipótese de classificação**, $h_a(x)$, 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**.

Classificação linear



Classes linearmente separáveis.



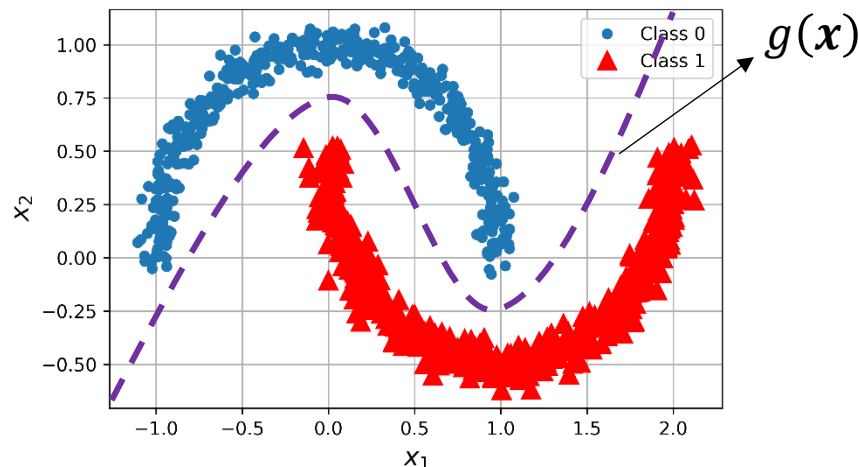
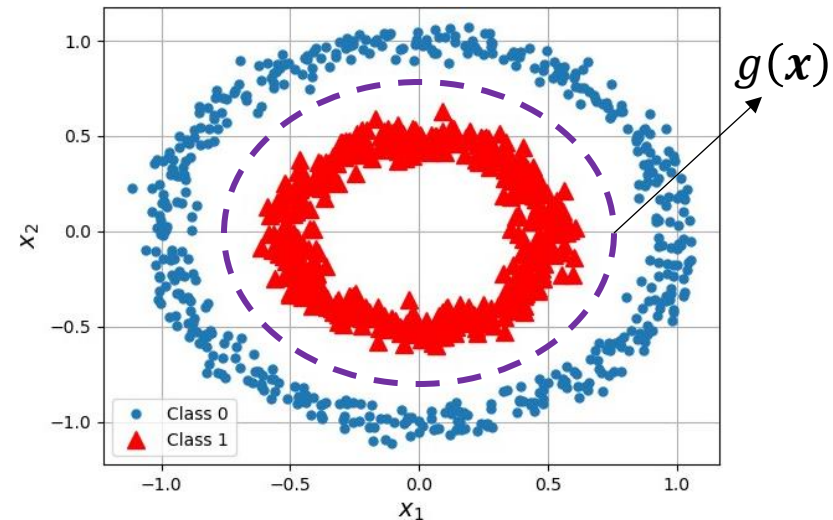
Classes não-linearmente separáveis.

- Classes que podem ser separadas por um **hiperplano** são chamadas de **linearmente separáveis**.
- Na primeira figura, a **fronteira de decisão** é definida por uma **função discriminante** que tem formato de uma **reta**:

$$g(\mathbf{x}) = 1 - x_1 - x_2.$$

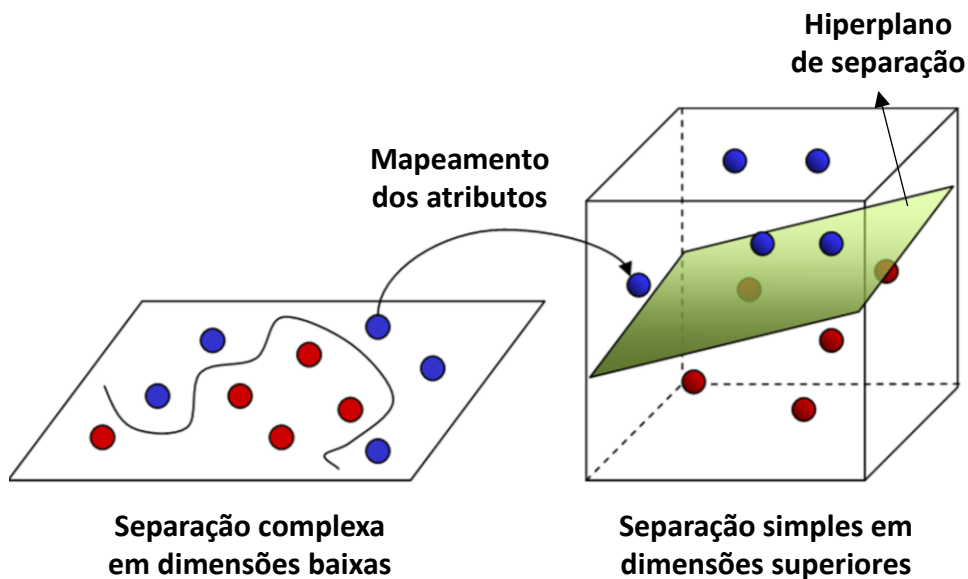
- Na segunda figura, devido à proximidade das classes, não existe um **hiperplano** que as separe.
- Originalmente, **classificação linear** é usada quando as classes podem ser separadas por **superfícies de decisão lineares**.
- Ou seja, as **funções discriminantes** são **hiperplanos**: $\sum_{k=0}^K a_k x_k$.

Classificação não-linear



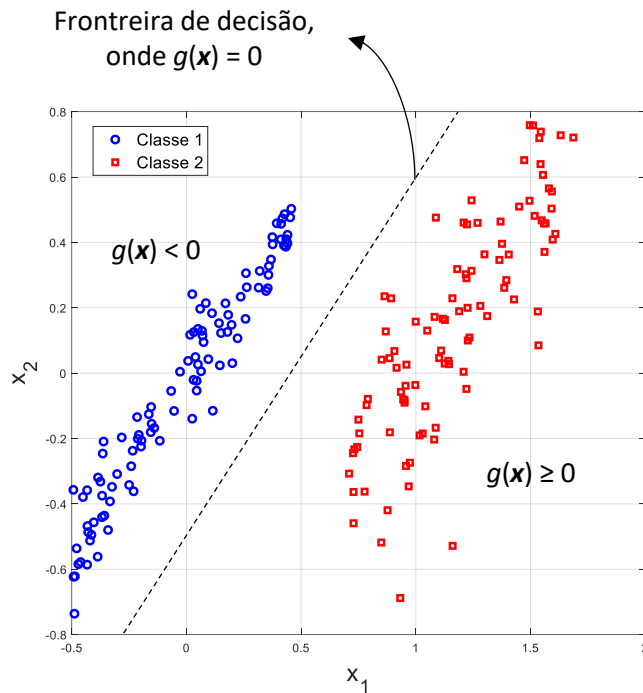
- Mas e se não pudermos separar as classes com um **hiperplano**, ou seja, se elas não forem **linearmente separáveis**?
- Nestes casos, usamos **funções discriminantes não-lineares**, como, por exemplo, **polinômios**:
 - $g(x) = (x_1 - a)^2 + (x_2 - b)^2 - r^2$, Círculo centrado em (a, b) e com raio r .
 - $g(x) = \frac{(x_1 - a)^2}{c^2} + \frac{(x_2 - b)^2}{d^2} - 1$, Elipse centrada em (a, b) , com largura $2c$ e altura $2d$.
 - $g(x) = (x_1 - a)(x_2 - b) - c$, Hipérbole retangular com eixos paralelos às suas assíntotas.

Classificação não-linear



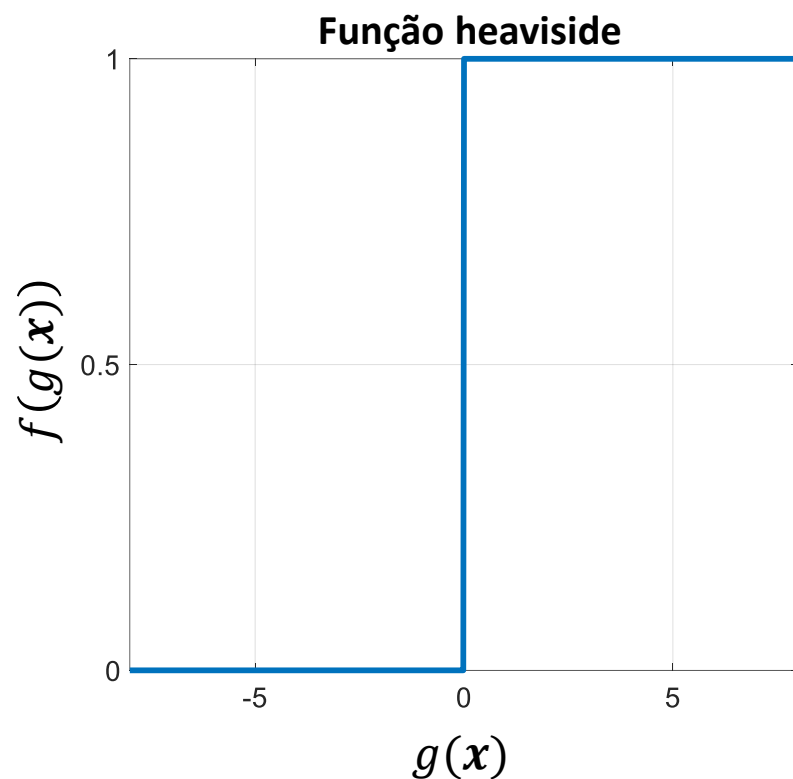
- As **função discriminantes não-lineares** aplicam **transformações não-lineares aos atributos originais**, levando ao **aumento das dimensões de entrada**.
 - $$\begin{aligned} g(\mathbf{x}) &= (x_1 - a)^2 + (x_2 - b)^2 - r^2 \\ &= x_1^2 - 2ax_1 + x_2^2 - 2bx_2 + (a^2 + b^2 - r^2) \\ &= a_1z_1 + a_2z_2 + a_3z_3 + a_4z_4 + a_0 \end{aligned}$$
- Essas transformações realizam **mapeamentos não-lineares dos atributos** para um **espaço de dimensão superior** onde as classes possam ser mais facilmente separadas.

Função de limiar de decisão



- Para o exemplo ao lado, podemos definir a **função hipótese de classificação** como duas **condições**:
$$\hat{y} = h_a(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0, & g(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{a} < 0 \text{ (Classe 1)} \\ 1, & g(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{a} \geq 0 \text{ (Classe 2)} \end{cases} \quad \left. \begin{array}{l} \text{if} \\ \text{else} \end{array} \right\}$$
- Percebam que a saída da **função hipótese de classificação** é **binária**, ou seja, como temos **2 classes**, temos apenas **2 possíveis valores de saída**, 0 ou 1.
- O mapeamento entre o valor da função discriminante, $g(\mathbf{x})$, e a saída 0 ou 1 é feito através da **função de limiar de decisão**, $f(g(\mathbf{x}))$.
- Como implementar essas **condições** através de uma função matemática?

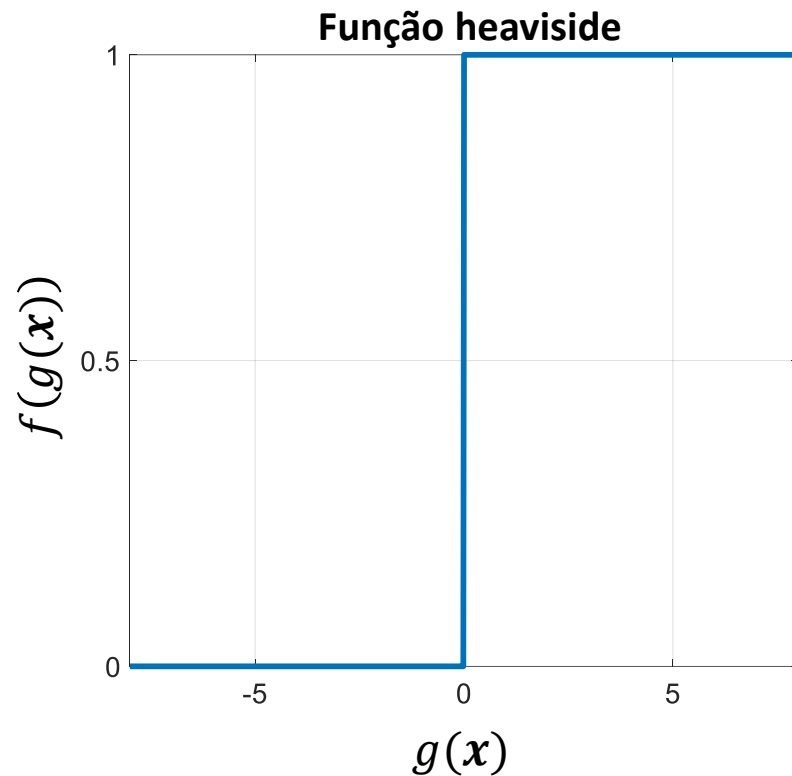
Função de limiar de decisão rígido



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

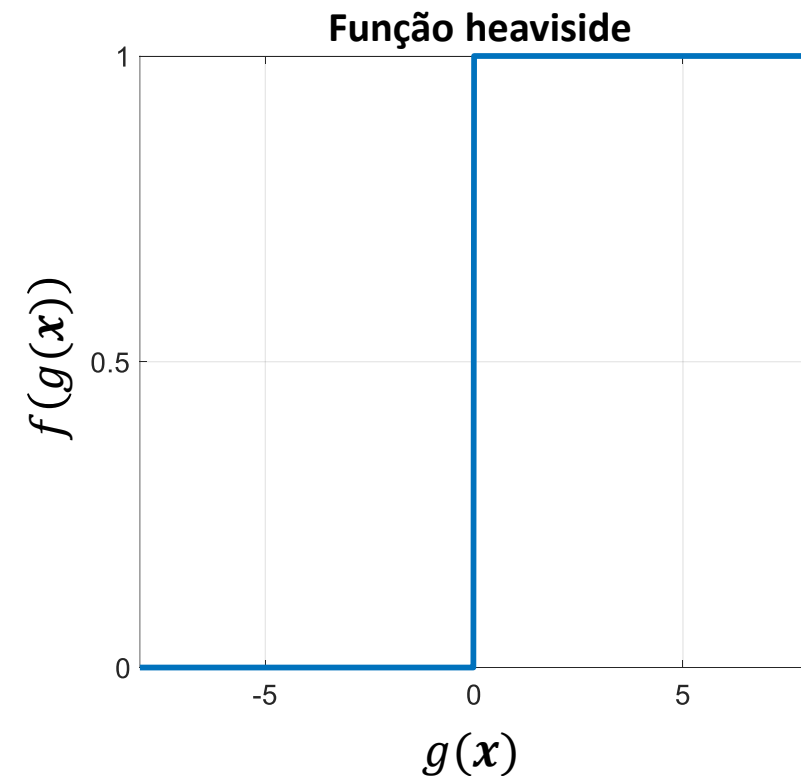
- Uma **função de limiar de decisão** simples que faz o mapeamento do valor de $g(x)$ em apenas 2 valores de saída é chamada de **função de limiar de decisão rígido**.
- A **função de limiar de decisão rígido** é mostrada na figura ao lado e é definida como
$$f(g(x)) = \begin{cases} 0, & g(x) < 0 \\ 1, & g(x) > 0 \\ \text{Indeterminado}, & g(x) = 0 \end{cases}$$

Classificação com limiar de decisão rígido



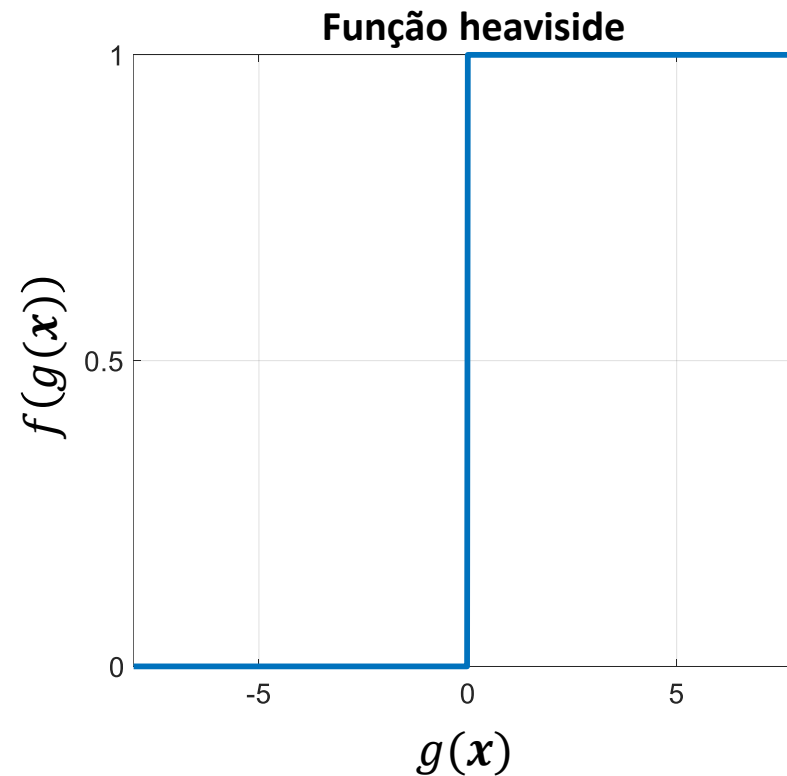
- Agora que a **função hipótese de classificação**, $h_a(x)$, tem uma forma matemática bem definida, precisamos pensar em como encontrar os pesos, a .

Classificação com limiar de decisão rígido



- Nós queremos encontrá-los 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**) fazendo a derivada parcial do erro em relação aos pesos igual a zero e resolvendo a equação para os pesos;
 - ii. e através do algoritmo do **gradiente descendente**.
- Entretanto, com a **função de limiar rígido**, **nenhuma das duas abordagens é possível** devido à **derivada** de $f(g(x))$ ser igual a zero em todos os pontos exceto em $g(x) = 0$, onde ela é indeterminada.

Classificação com limiar de decisão rígido



Portanto, como podemos encontrar os pesos com essa limitação?

Classificação com limiar de decisão rígido

- Uma possível abordagem para o problema da aprendizagem quando utilizamos o **limiar de decisão rígido** 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

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

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

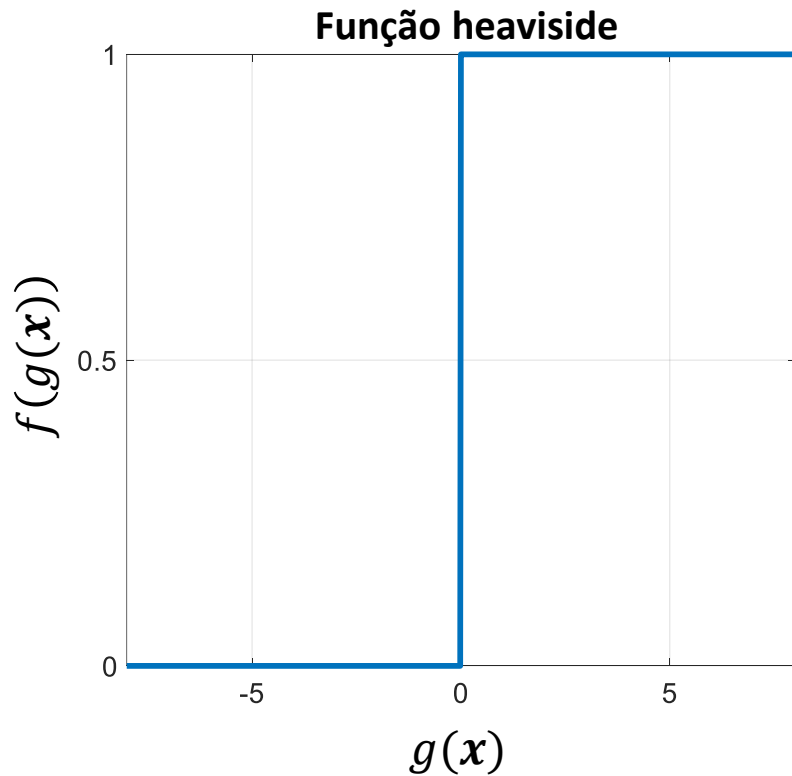
- A regra é idêntica à regra de atualização para a **regressão linear** quando utilizamos o **gradiente descendente estocástico**.

Classificação com limiar de decisão rígido

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

- Por razões que discutiremos mais adiante, esta regra é chamada de ***regra de aprendizagem do perceptron***.
- Essa regra de aprendizagem é ***aplicada a um exemplo por vez***, escolhido de forma ***aleatória***, assim como fizemos com o ***gradiente descendente estocástico***.
 - Ou seja, ***atualiza-se os pesos usando-se apenas um exemplo, tomado de forma aleatória*** do conjunto de treinamento, por vez.
- Como estamos considerando classificadores, os quais têm valores de saída iguais a 0 ou 1, o comportamento da regra de atualização será diferente do comportamento para a regressão linear, como veremos a seguir.

Classificação com limiar de decisão rígido



- Observem a equação de atualização dos pesos

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

onde $\mathbf{a} = [a_0 \quad a_1 \quad \cdots \quad a_K]^T$ e $\mathbf{x}(i) = [x_0(i) \quad x_1(i) \quad \cdots \quad x_K(i)]^T$.

- Ambos, o valor esperado, y , e a saída da **função hipótese de classificação**, $h_{\mathbf{a}}(\mathbf{x})$, assumem os valores 0 ou 1. Portanto, existem **apenas 3 possibilidades**.

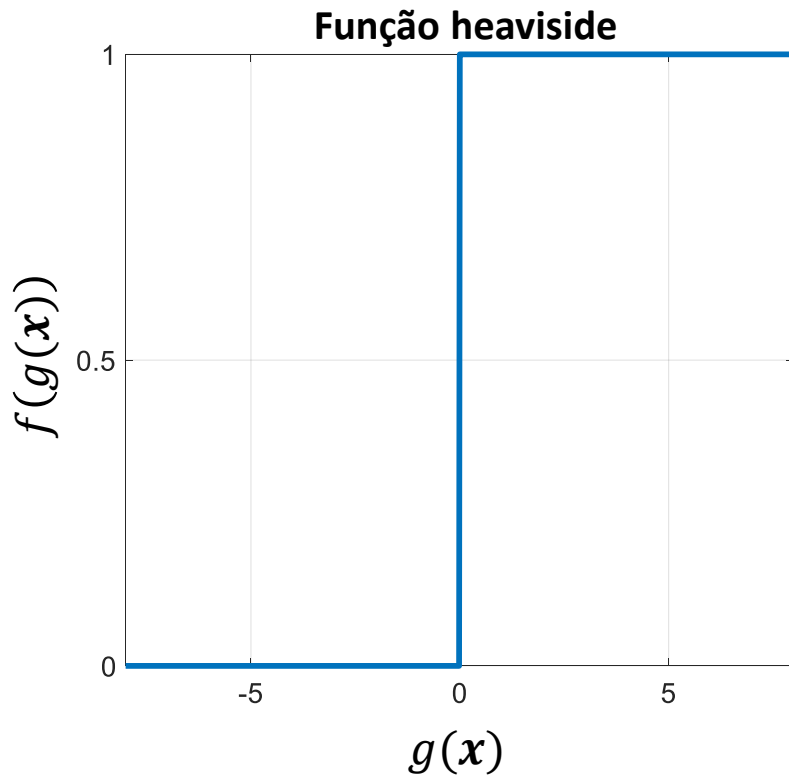
- Primeira possibilidade

- Se o valor de saída do classificador for igual ao esperado, i.e., $h_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}(i)) = y(i)$, então

$$y(i) - h_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}(i)) = 0.$$

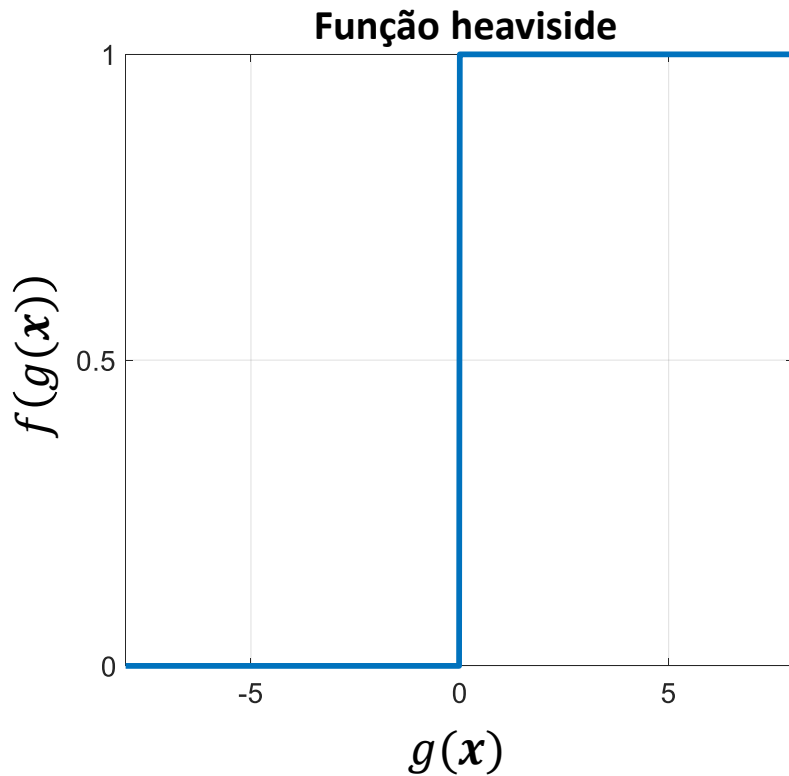
- Portanto, **os pesos não são atualizados**.

Classificação com limiar de decisão rígido



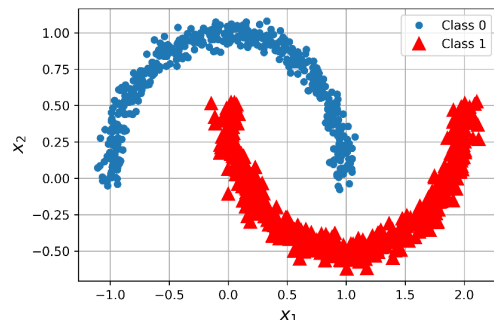
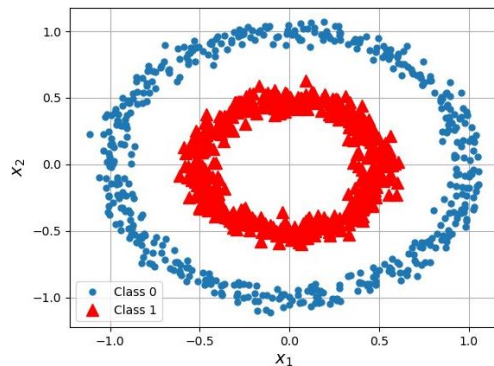
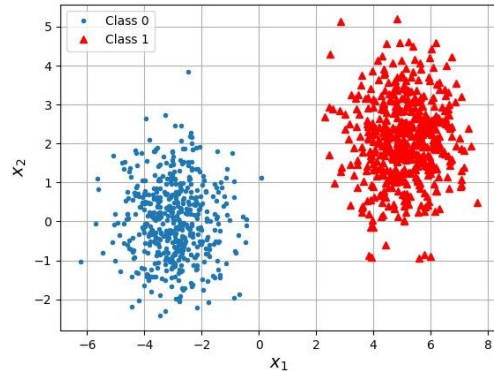
- Equação de atualização dos pesos
$$\mathbf{a} = \mathbf{a} + \alpha \left(y(i) - h_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}(i)) \right) \mathbf{x}(i).$$
- Segunda possibilidade
 - Se $y(i) = 1$, mas $h_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}(i)) = 0$, então
$$\mathbf{a} = \mathbf{a} + \alpha \mathbf{x}(i).$$
 - Assim, o k -ésimo peso, 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 $g(\mathbf{x})$, de tal forma que $g(\mathbf{x}) > 0$ e, conseqüentemente, $h_{\mathbf{a}}(\mathbf{x})$ tenha como saída o valor 1.
 - Lembrando que $g(\mathbf{x}) = a_0 + a_1x_1 + \dots + a_Kx_K$.

Classificação com limiar de decisão rígido



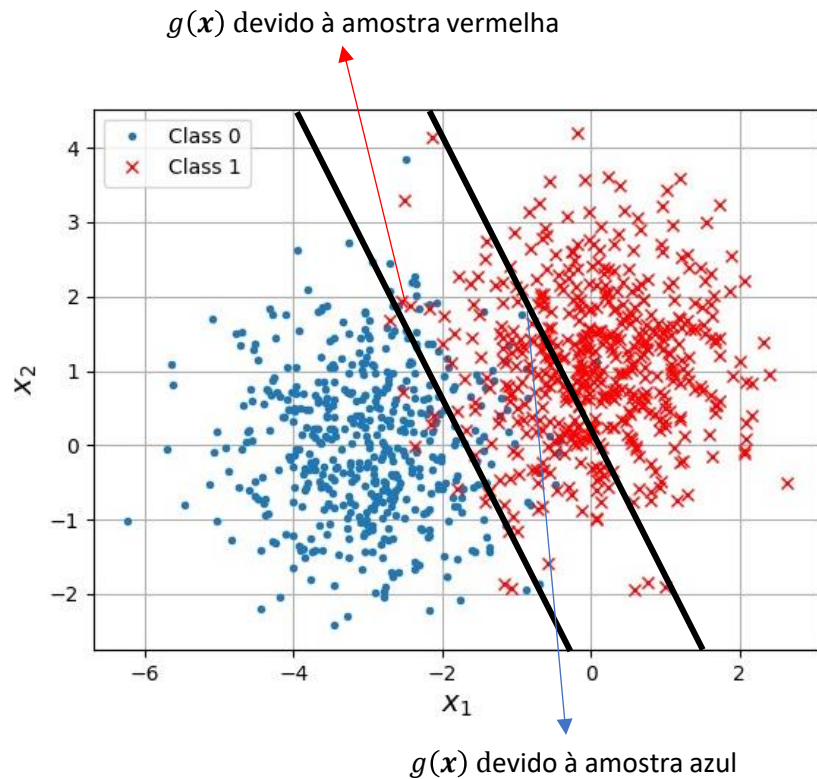
- Equação de atualização dos pesos
$$\mathbf{a} = \mathbf{a} + \alpha \left(y(i) - h_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}(i)) \right) \mathbf{x}(i).$$
- Terceira possibilidade
 - Se $y(i) = 0$, mas $h_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}(i)) = 1$, então
$$\mathbf{a} = \mathbf{a} - \alpha \mathbf{x}(i).$$
 - Assim, o k -ésimo 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 $g(\mathbf{x})$, de tal forma que $g(\mathbf{x}) < 0$ e, consequentemente, $h_{\mathbf{a}}(\mathbf{x})$ tenha como saída o valor 0.
 - Lembrando que $g(\mathbf{x}) = a_0 + a_1x_1 + \dots + a_Kx_K$.

Classificação com limiar de decisão rígido



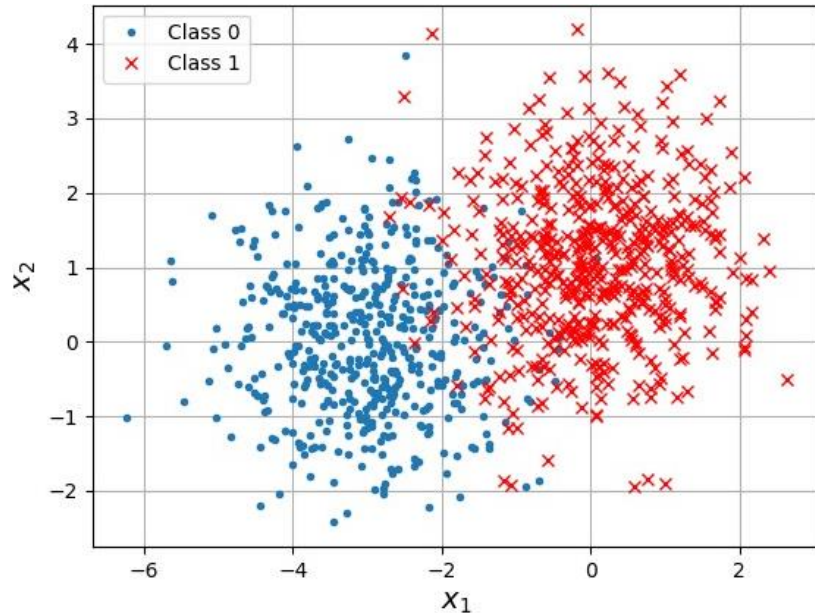
- A **regra de aprendizagem do perceptron** converge para um **separador perfeito** quando:
 - As classes são **suficientemente separadas** umas das outras, ou seja, não se sobrepõem.
 - E existe uma **função discriminante adequada para o problema**, mesmo que não seja um **hiperplano**.
 - ✓ Ou seja, 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



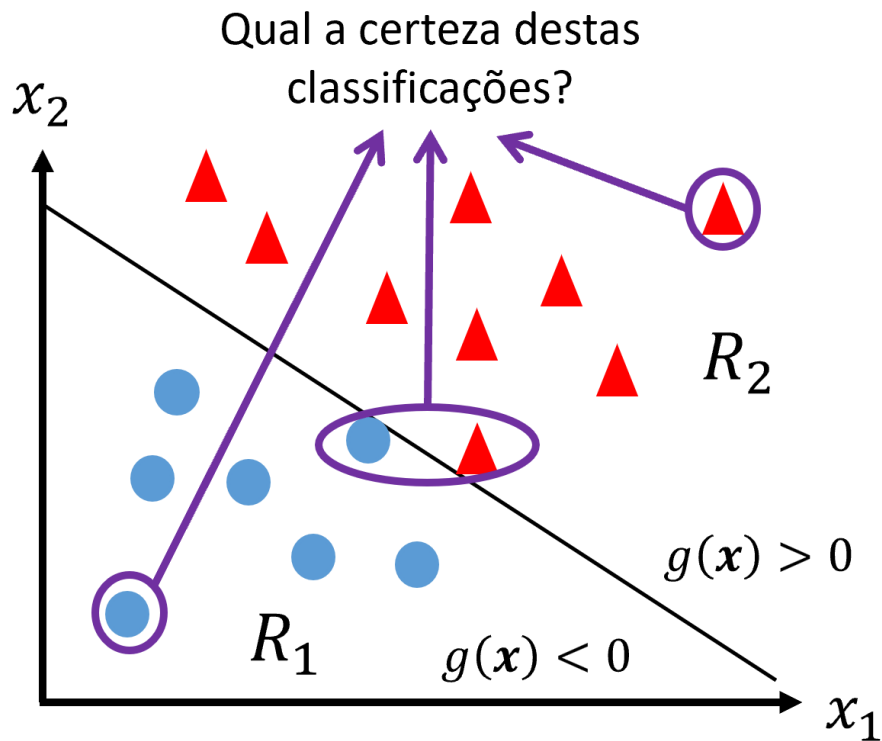
- Quando as classes se sobrepõem, a **regra de aprendizagem do perceptron** falha em convergir para uma solução perfeita.
- Nesse caso, a regra não converge para uma solução **estável** para **valores fixos do passo de aprendizagem**, α , assim como acontece com o GDE.
- Não há convergência pois o objetivo é encontrar um erro de classificação igual a 0.

Classificação com limiar de decisão rígido



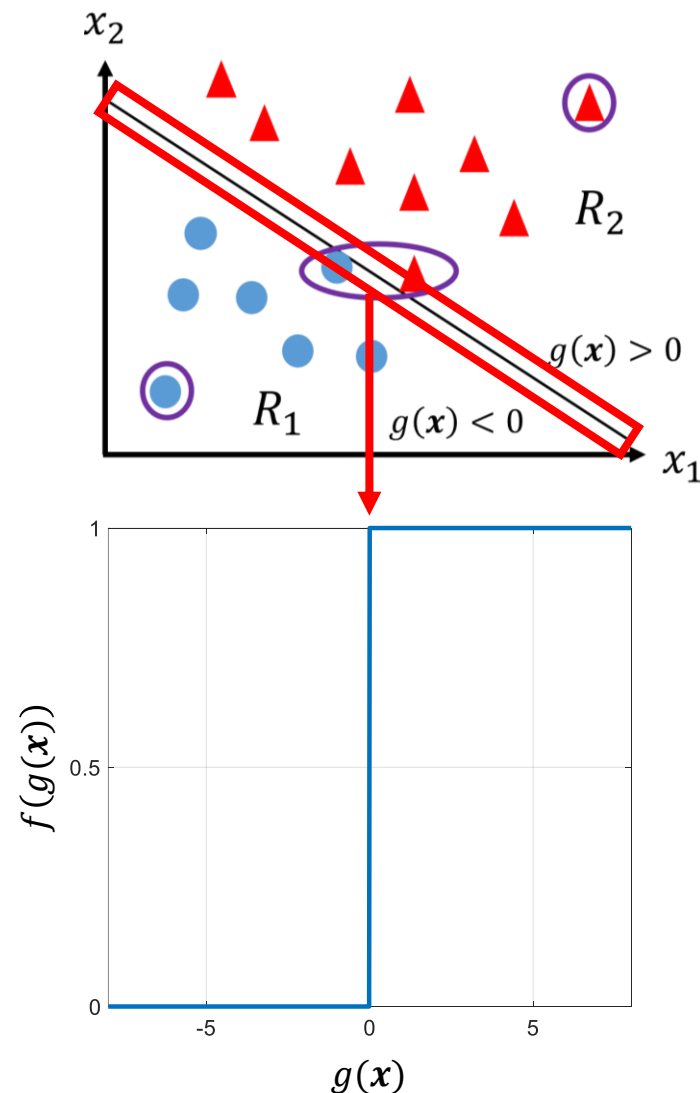
- Porém, se α decrescer de acordo com as iterações de treinamento, então a regra tem uma chance de convergir para uma solução de erro mínimo quando os exemplos são apresentados de forma aleatória.
 - Similar ao que fizemos com o GDE.
- Podemos também usar o **early-stop** e **guardar** os **pesos** que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

Classificação com limiar de decisão rígido



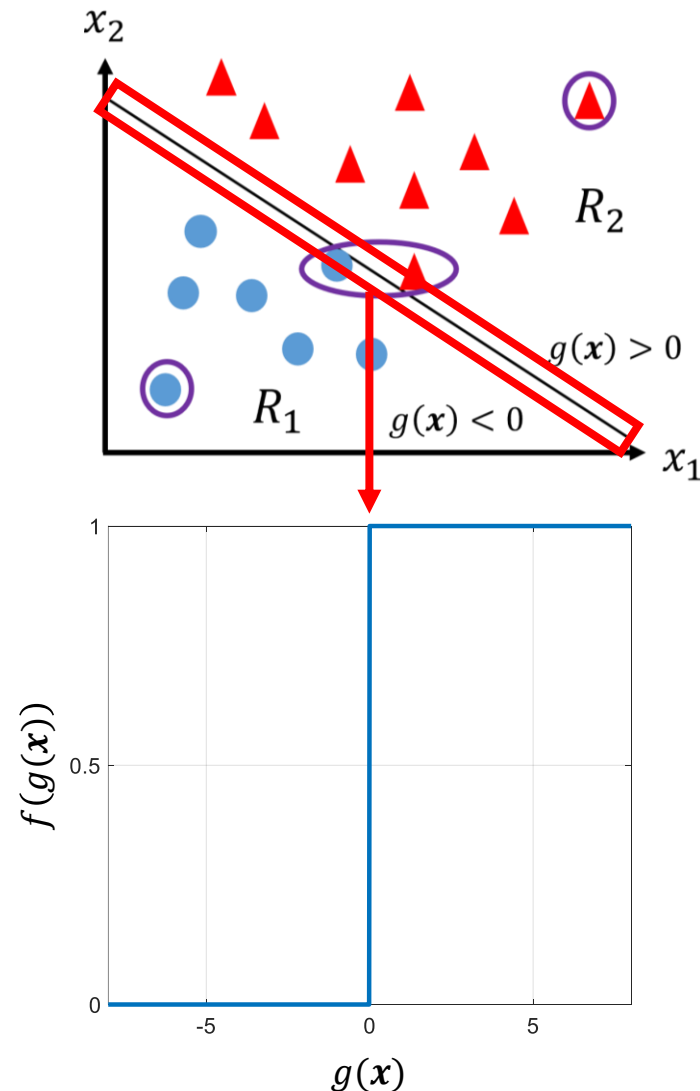
- Outro problema com classificadores que usam **limiar de decisão rígido** é a **falta de informação sobre a confiança** quanto a uma classificação.
- Na figura ao lado, dois exemplos estão bem próximos da **fronteira de decisão** enquanto outros dois estão bem distantes dela.
- Como o classificador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

Classificação com limiar de decisão rígido



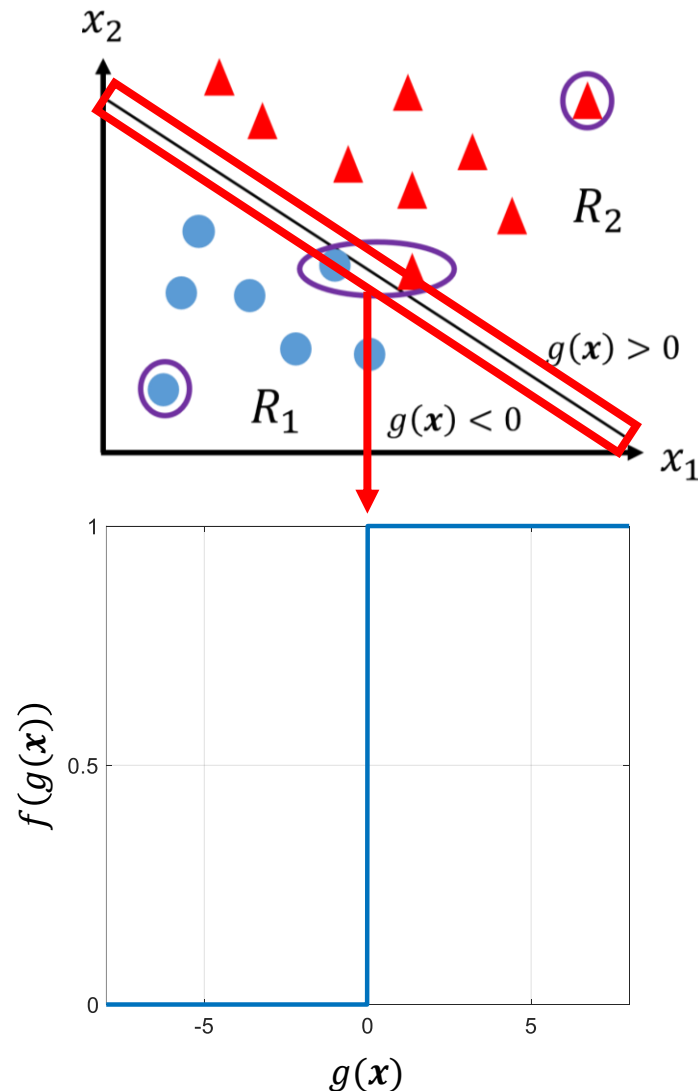
- Olhando para a função de **limiar de decisão rígido**, percebemos que o classificador faz previsões ***muito confiantes*** sempre iguais 0 para $g(x) < 0$ e iguais a 1 quando $g(x) > 0$, ***independente se o exemplo está distante ou próximo da fronteira de decisão***.

Classificação com limiar de decisão rígido



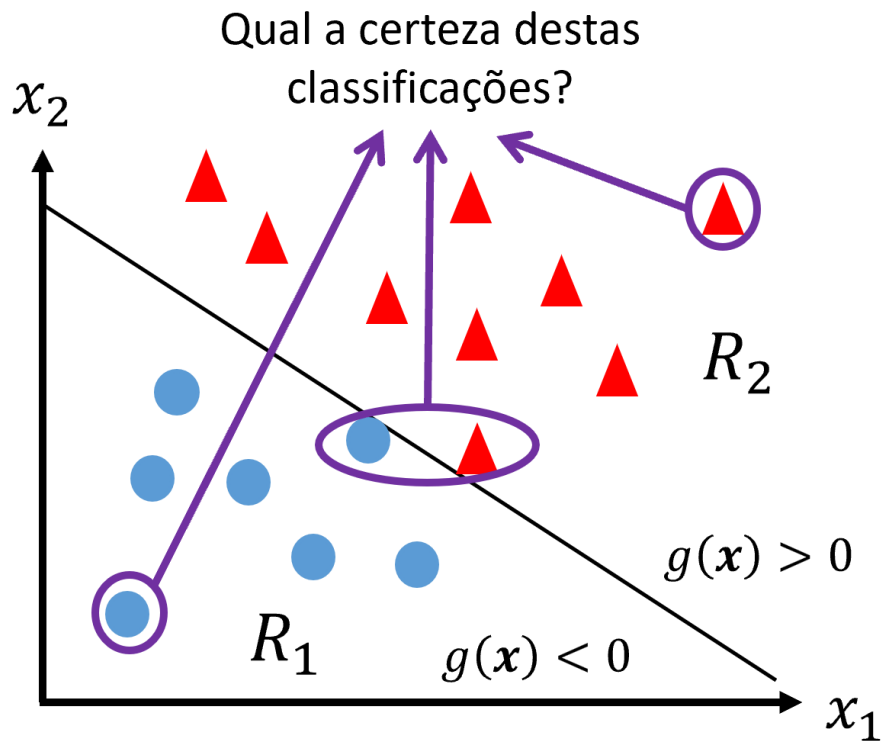
- Exemplos *mais distantes da fronteira* têm uma *probabilidade maior* de *realmente pertencerem à classe da região onde se encontram e não serem outliers*.
 - Quanto maior o valor absoluto de $g(x)$, mais distante da fronteira está o exemplo.

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 $g(x)$ bem diferentes**.
 - Pontos muito próximos da fronteira de decisão têm valor absoluto de $g(x)$ próximo de zero.
 - Já pontos muito distantes têm valor absoluto de $g(x)$ 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 previsões mais graduadas, que indiquem incertezas quanto à predição.

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!

