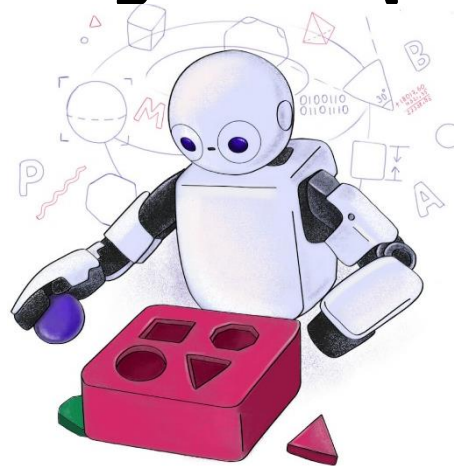


T320 - Introdução ao Aprendizado de Máquina II: *Classificação (Parte IV)*



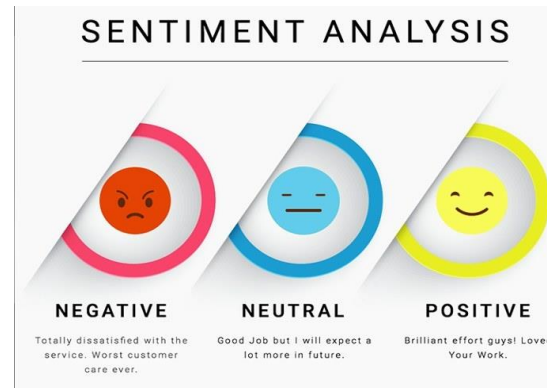
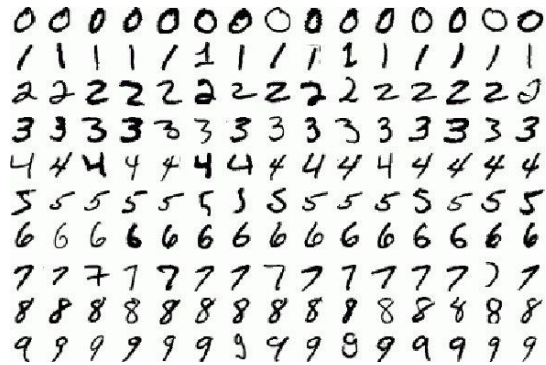
Inatel

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

Recapitulando

- Anteriormente, aprendemos uma nova ***função de limiar***, chamada de ***função logística***, com a qual foi possível encontrar uma solução para o problema de classificação usando o algoritmo do ***gradiente descendente***.
- Classificadores que utilizam a ***função logística*** como ***função de limiar*** são conhecidos como ***regressores logísticos*** e são utilizados em problemas de ***classificação binária***, ou seja, problemas com apenas 2 classes, após a discretização do valor de saída.
- Na sequência, veremos como lidar com problemas de classificação que envolvem mais de 2 classes, também chamados de ***classificação multi-classes***.

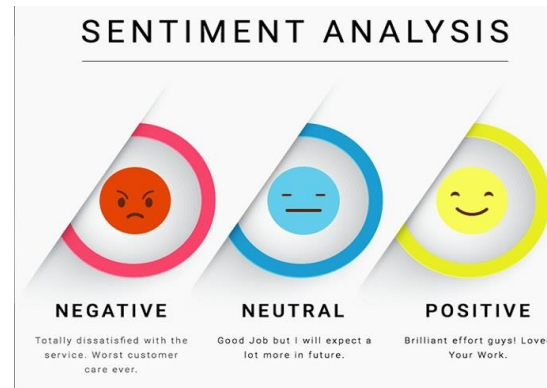
Casos multi-classe



- Até agora, nós vimos como classificar utilizando ***regressão logística***.
- Nesse caso, os dados pertencem a apenas 2 classes (i.e., $Q = 2$).
- Porém, e quando o problema possuir mais de 2 classes (i.e., $Q > 2$)?
- Por exemplo
 - Reconhecimento de dígitos escritos à mão: 10 dígitos.
 - Classificação de texto: Esportes, Economia, Política, Entretenimento, etc.
 - Classificação de sentimentos: Neutro, Positivo, Negativo.

Casos multi-classe

0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4
5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5
6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6
7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7
8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8
9 9 9 9 9 9 9 9 9 9 9 9 9 9 9 9



- Quando $Q > 2$, chamamos o problema de classificação **multi-classes**.
- Existem algumas abordagens para a **classificação multi-classe**:
 - Um-Contra-o-Resto
 - Um-Contra-Um
 - Regressão Softmax
- As duas primeiras podem ser aplicadas a qualquer tipo de **classificador binário** e não apenas ao **regressor logístico**.
- A terceira abordagem é uma generalização do **classificador logístico** para problemas multi-classe.

Um-Contra-o-Resto

- Nesta abordagem, treina-se **um classificador binário** para cada classe q , para predizer a probabilidade $P(C_q | \mathbf{x}(i); \mathbf{a})$, $\forall q \in \{1, \dots, Q\}$, onde C_q é a classe positiva e as demais formam a classe negativa.
- Em outras palavras, treina-se Q **classificadores binários**, onde para cada classificador, a classe positiva é a q -ésima classe e a classe negativa é a junção de todas as outras, $Q - 1$, classes.
- Fazendo isso, nós **transformamos um problema com Q classes em Q problemas binários**.
- Cada um dos Q classificadores binários é representado pela função hipótese $h_a^q(\mathbf{x}(i))$.

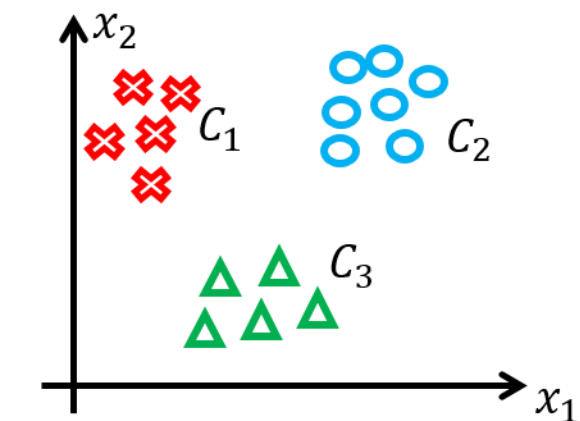
Um-Contra-o-Resto

- Portanto, o q -ésimo *classificador* deve indicar a classe positiva caso o exemplo pertença à q -ésima classe, ou à classe negativa caso o exemplo pertença a qualquer uma das outras $Q - 1$ classes.
- Após o treinamento, para cada exemplo de entrada, $\mathbf{x}(i)$, realiza-se Q previsões e escolhe-se a classe que maximize $h_a^q(\mathbf{x}(i))$

$$C_q = \arg \max_q h_a^q(\mathbf{x}(i)).$$

- A **vantagem** desta abordagem é que treina-se apenas Q **classificadores**.
- Uma **desvantagem** é que cada **classificador binário** precisa ser treinado com um conjunto negativo que é $Q-1$ vezes maior, o que pode aumentar o tempo de treinamento e a possibilidade de **classes desbalanceadas**.

Um-Contra-o-Resto



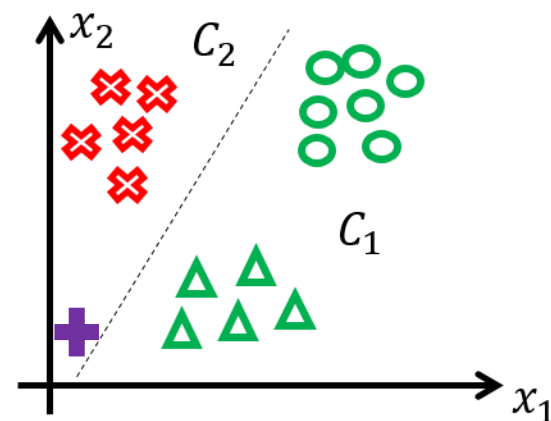
$$Q = 3$$

Passamos a ter **3**
classificadores binários.


$C_1(+)$

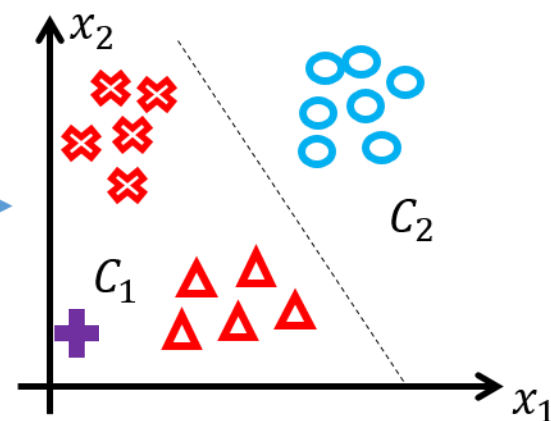
$C_2(+)$

$C_3(+)$

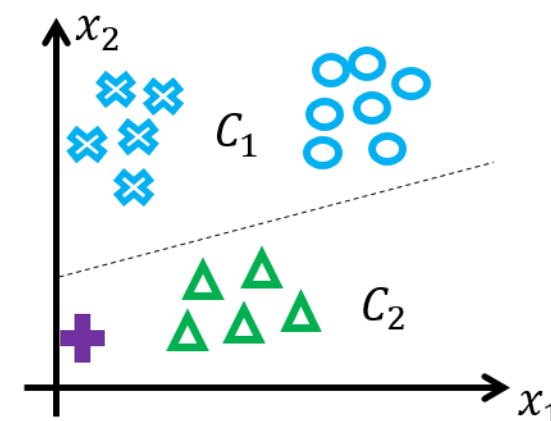


$$h_a^1(\mathbf{x}(i)) = 0.55$$

A qual classe pertence? 



$$h_a^2(\mathbf{x}(i)) = 0.05$$



$$h_a^3(\mathbf{x}(i)) = 0.85$$

----- Fronteira de decisão

 Exemplo de validação

Um-Contra-Um

- Nesta abordagem, treina-se $Q(Q - 1)/2$ **classificadores binários**.
- Cada **classificador** é treinado para classificar os exemplos pertencentes a **cada um dos possíveis pares de classes**.
 - Por exemplo, se $Q = 4$, então treina-se 6 **classificadores** para classificar entre C_1/C_2 , C_1/C_3 , C_1/C_4 , C_2/C_3 , C_2/C_4 , e C_3/C_4 .
- **Transformamos um problema com Q classes em $Q(Q - 1)/2$ problemas binários.**
- No final, cada exemplo é classificado conforme o **voto majoritário** entre os **classificadores**.
- Ou seja, a classe que receber mais votos é a classe atribuída ao exemplo.

Um-Contra-Um

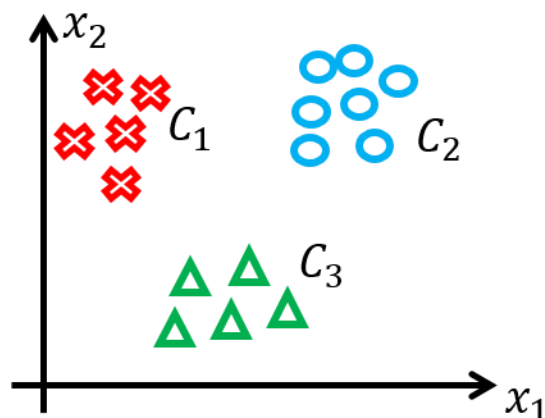
- A principal **vantagem** dessa abordagem é que cada classificador precisa ser **treinado apenas com as duas classes** que ele deve distinguir, portanto, a **chance de desbalanceamento é menor**.
- Além disso, o **tempo de treinamento de cada classificador também é menor**, pois treina-se cada um deles com pares de classes.
- A **desvantagem** é que, por exemplo, se $Q = 10$, temos que treinar 45 classificadores.
- Consequentemente, o **tempo total de treinamento pode ser alto**.

Um-Contra-Um

$$Q = 3$$

$$\frac{Q(Q-1)}{2} = 3$$

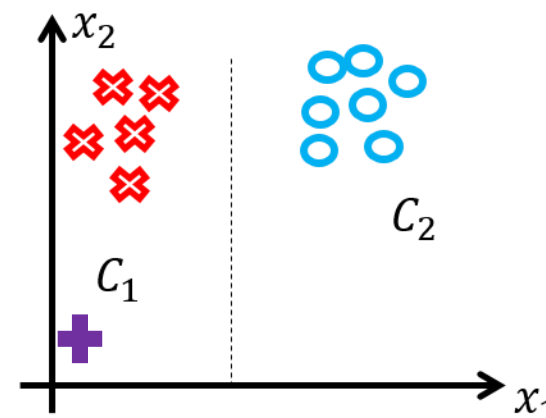
Passamos a ter **3**
classificadores binários.



$C_2(+)/C_1(-)$

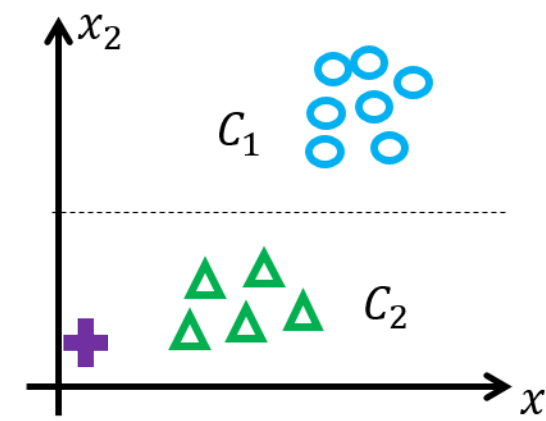
$C_3(+)/C_2(-)$

$C_1(+)/C_3(-)$

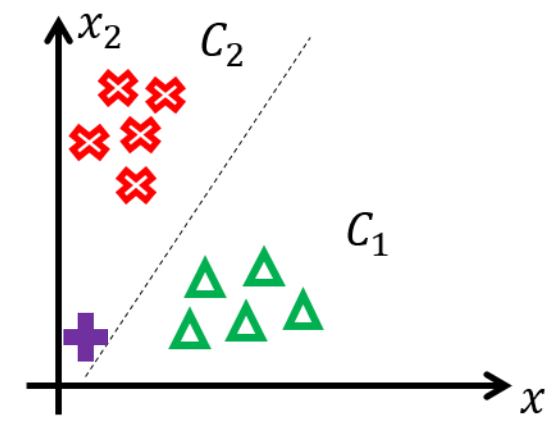


$$h_a^1(\mathbf{x}(i)) = 0.05 \text{ (voto em } C_1\text{)}$$

A qual classe pertence? **+**



$$h_a^2(\mathbf{x}(i)) = 0.85 \text{ (voto em } C_3\text{)}$$



$$h_a^3(\mathbf{x}(i)) = 0.55 \text{ (voto em } C_1\text{)}$$

----- Fronteira de decisão

+ Exemplo de validação

Regressão softmax

- Também conhecida como ***regressão logística multinomial***.
 - Pois as saídas deste regressor podem ser interpretadas como as ***probabilidades de uma variável categoricamente distribuída*** (as classes) ***dado um conjunto de variáveis*** (atributos e pesos).
 - Em outras palavras, a regressão ***softmax estima a probabilidade de um exemplo de entrada pertencer a cada classe possível***.
- É uma generalização do regressor logístico para problemas com ***múltiplas classes***, em geral, $Q > 2$.
- A ideia é treinar um ***único*** classificador com Q saídas, onde cada saída representa a ***probabilidade*** de um exemplo pertencer a uma das Q classes.
 - Por exemplo, para um problema com 4 classes, teremos um único classificador, mas com 4 saídas.

Regressão softmax

- Prediz ***apenas uma classe por classificação***, portanto, ele deve ser usado apenas com ***classes mutuamente exclusivas*** como por exemplo diferentes tipos de plantas, dígitos, carros, etc.
 - ***Classes mutuamente exclusivas***: exemplos pertencem a apenas uma das Q classes.
 - Já notícias e animais, por exemplo, podem pertencer a várias a várias classes ao mesmo tempo.
- Para termos um ***único*** classificador, o ***regressor softmax possui uma função hipótese de classificação***, $h_a^q(\mathbf{x}(i))$, e, consequentemente, ***uma função discriminante***, $g_q(\mathbf{x}(i))$, ***para cada classe*** q .

Regressão softmax

- A **função hipótese de classificação** associada à q -ésima classe, $h_a^q(\mathbf{x}(i))$, é obtida passando-se a **função discriminante** da q -ésima classe, $g_q(\mathbf{x}(i))$, através da **função softmax**,

$$P(C_q \mid \mathbf{x}(i), \mathbf{a}_q) = h_a^q(\mathbf{x}(i)) = \frac{e^{g_q(\mathbf{x}(i))}}{\sum_{j=0}^{Q-1} e^{g_j(\mathbf{x}(i))}} = \frac{e^{\mathbf{x}(i)^T \mathbf{a}_q}}{\sum_{j=0}^{Q-1} e^{\mathbf{x}(i)^T \mathbf{a}_j}} \in \mathbb{R} [0, 1],$$

onde $\mathbf{a}_q = [a_0^q \quad a_1^q \quad \cdots \quad a_K^q]^T \in \mathbb{R}^{K+1 \times 1}$ é o **vetor (coluna) de pesos** da q -ésima **função discriminante**, $g_q(\mathbf{x}(i))$, e i indica o número da amostra.

- O somatório de termos exponenciais no denominador **normaliza** o valor da q -ésima saída de tal forma que o somatório das Q saídas seja igual a 1.
- Cada função discriminante tem seu próprio vetor de pesos, \mathbf{a}_q .

Regressão softmax

- Assim como com o regressor logístico, podemos usar equações de **hiperplanos** ou **polinomiais** como **funções discriminantes**.
- A **função softmax** estende a ideia do **regressor logístico** ao mundo multi-classes.
- Ou seja, a **função softmax** atribui uma **probabilidade condicional**, $P(C_q | \mathbf{x}(i), \mathbf{a}_q)$, a cada classe, q , em um problema com múltiplas classes, onde **a soma destas Q probabilidades deve ser igual a 1**

$$P(C_0 | \mathbf{x}(i), \mathbf{a}_0) + P(C_1 | \mathbf{x}(i), \mathbf{a}_1) + \cdots + P(C_{Q-1} | \mathbf{x}(i), \mathbf{a}_{Q-1}) = 1.$$

- Portanto, o objetivo é encontrar um **modelo** (i.e., os **pesos** das Q funções hipótese) que **atribua uma alta probabilidade para a classe alvo** e, consequentemente, **uma baixa probabilidade para as demais classes**.

Regressão softmax

- Assim como fizemos anteriormente, precisamos definir uma **função de erro** e **minimizá-la** para encontrarmos os **pesos** das **Q funções hipótese** do classificador softmax.

- A **função de erro médio** para a **regressão softmax** é dada por

$$J_e(\mathbf{A}) = -\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{q=0}^{Q-1} 1\{y(i) == q\} \log \left(h_a^q(\mathbf{x}(i)) \right),$$

O erro tende a 0 quando $h_a^q(\mathbf{x})$ tende a 1, caso contrário, o erro aumenta.

onde $1\{\cdot\}$ é a **função indicadora**, de modo que $1\{\text{uma condição verdadeira}\} = 1$ e $1\{\text{uma condição falsa}\} = 0$, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{K+1 \times Q}$ é a matriz com os **pesos** das **Q funções hipótese** e $y(i)$ é o i -ésimo valor esperado.

- A matriz \mathbf{A} contém em suas colunas os vetores de pesos, \mathbf{a}_q , de cada uma das **Q funções discriminantes**.
- Essa função também é conhecida como **função da entropia cruzada**.

Regressão softmax

- Usando-se a codificação **one-hot**, a equação de erro médio pode ser reescrita como

$$J_e(\mathbf{A}) = -\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \mathbf{y}(i)^T \log \left(\mathbf{h}_a(\mathbf{x}(i)) \right),$$

onde $\mathbf{y}(i) = [1\{y(i) == 0\}, \dots, 1\{y(i) == Q - 1\}]^T \in \mathbb{R}^{Q \times 1}$ é um vetor coluna utilizando a codificação **one-hot** e $\mathbf{h}_a(\mathbf{x}(i)) \in \mathbb{R}^{Q \times 1}$ é um vetor coluna com as saídas das Q **funções hipóteses**

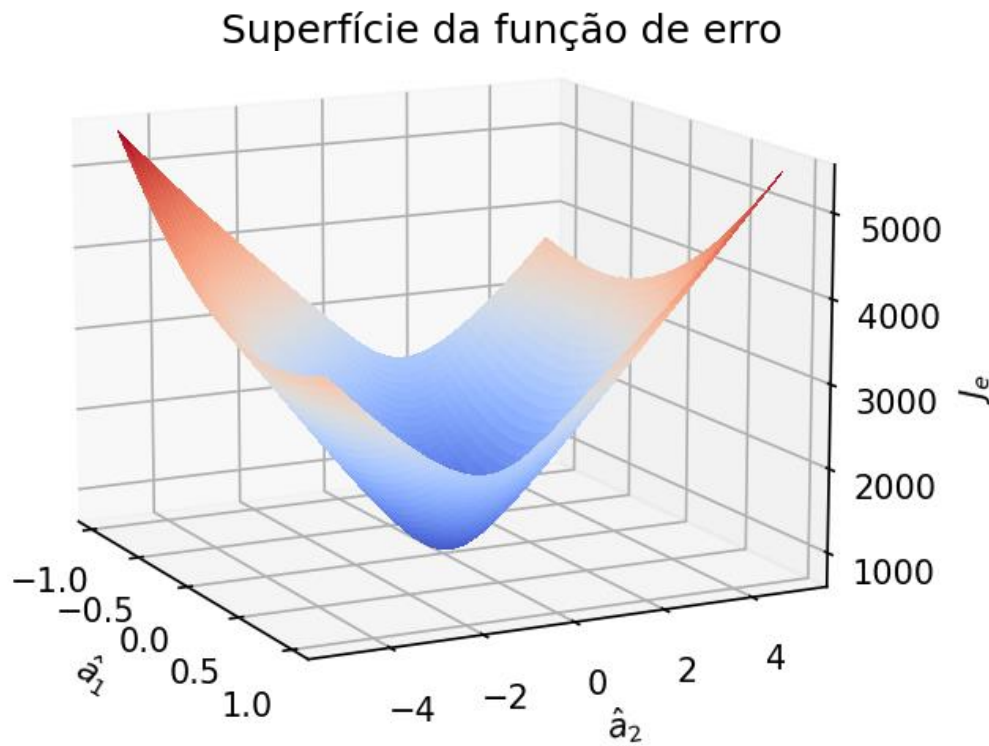
$$\begin{aligned} \mathbf{h}_a(\mathbf{x}(i)) &= \left[h_a^0(\mathbf{x}(i)) \quad \dots \quad h_a^{Q-1}(\mathbf{x}(i)) \right]^T \\ &= \left[P(C_0 \mid \mathbf{x}(i), \mathbf{a}_0) \quad \dots \quad P(C_{Q-1} \mid \mathbf{x}(i), \mathbf{a}_{Q-1}) \right]^T. \end{aligned}$$

Regressão softmax

$$J_e(\mathbf{A}) = -\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \mathbf{y}(i)^T \log \left(\mathbf{h}_a(\mathbf{x}(i)) \right).$$

- Notem que quando existem apenas duas classes ($Q = 2$), a ***função de erro médio*** é equivalente à ***função de erro médio*** do ***regressor logístico***.
- Ou seja, mesmo tendo sido pensado para o caso onde $Q > 2$, o regressor softmax pode ser usado quando $Q = 2$.
- Entretanto, existe um problema com essa função de erro médio.
- A ***função de erro médio não é linear*** e, portanto, ***não existe uma forma fechada*** para encontrarmos os pesos.

Regressão softmax



- Porém, ela é **convexa** e, portanto, é **garantido que o algoritmo do gradiente descendente encontre o mínimo global**.
- Sendo assim, usaremos o algoritmo do **gradiente descendente** para encontrar os **pesos** das Q funções discriminantes que **minimizam a função de erro médio**.


Regressão softmax

- A atualização dos **pesos** da q -ésima função discriminante, $g_q(\mathbf{x}(i))$, é dada por

$$\mathbf{a}_q = \mathbf{a}_q - \alpha \frac{\partial J_e(\mathbf{A})}{\partial \mathbf{a}_q}, \forall q.$$

- Considerando o **hiperplano** como **função discriminante**, a derivada da **função de erro médio**, $J_e(\mathbf{A})$, com respeito ao vetor de pesos, \mathbf{a}_q , é dada por

$$\frac{\partial J_e(\mathbf{A})}{\partial \mathbf{a}_q} = -\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} [1\{y(i) == q\} - h_a^q(\mathbf{x}(i))] \mathbf{x}(i) = -\frac{1}{N} \mathbf{X}^T (\mathbf{y}_q - \hat{\mathbf{y}}_q),$$

Forma matricial 

onde \mathbf{y}_q e $\hat{\mathbf{y}}_q$ são vetores coluna ambos com dimensão $N \times 1$ contendo os q -ésimos elementos dos vetores *one-hot* e de saída do regressor softmax para cada um dos N vetores de atributo, respectivamente.

Regressão softmax

$$\frac{\partial J_e(\mathbf{A})}{\partial \mathbf{a}_q} = -\frac{1}{N} \mathbf{X}^T (\mathbf{y}_q - \hat{\mathbf{y}}_q).$$

- Notem que essa expressão do vetor gradiente é **idêntica** àquela obtida para o caso da **regressão logística**.
- O vetor gradiente pode ser reescrito levando em consideração todos os Q vetores de peso:

$$\frac{\partial J_e(\mathbf{A})}{\partial \mathbf{A}} = -\frac{1}{N} \mathbf{X}^T (\mathbf{Y} - \mathbf{H}_A),$$

onde \mathbf{Y} e \mathbf{H}_A são matrizes com dimensão $N \times Q$ contendo em cada linha os vetores $\mathbf{y}(i)^T$ e $\mathbf{h}_a(\mathbf{x}(i))^T$ para todos os N exemplos, respectivamente.

Regressão softmax

$$\frac{\partial J_e(A)}{\partial A} = -\frac{1}{N} X^T (Y - H_A)$$

- Como aconteceu com a regressão logística, notem que o **vetor gradiente** da **função de erro** *depende do formato da função discriminante* adotada.
- Entretanto, como vimos antes, esta *dependência afeta apenas a matriz de atributos, X*.
- Portanto, *para formatos* de **função discriminante** diferentes de um hiperplano, basta *criar a matriz de atributos, X, seguindo o formato da função*.

Regressão softmax

- O regressor softmax apresenta duas propriedades:
 - $0 \leq h_a^q(\mathbf{x}(i)) \leq 1$, ou seja, a saída da q -ésima função hipótese sempre será um valor dentro do intervalo $[0, 1]$;
 - $\sum_{q=0}^{Q-1} h_a^q(\mathbf{x}(i)) = \sum_{q=0}^{Q-1} P(C_q | \mathbf{x}(i); \mathbf{a}_q) = 1$, ou seja, o somatório das **probabilidades condicionais** de todas as Q classes é igual a 1.

- Estas duas propriedades fazem com que o vetor

$$\mathbf{h}_a(\mathbf{x}(i)) = [h_a^0(\mathbf{x}(i)) \quad \cdots \quad h_a^{Q-1}(\mathbf{x}(i))]^T \in \mathbb{R}^{Q \times 1},$$

que contém todas as saídas do regressor softmax atenda os requisitos de uma **função massa de probabilidade multinomial**.

Regressão softmax

- Após o treinamento, durante a **fase de predição**, o classificador atribui ao exemplo de entrada, $\mathbf{x}(i)$, a classe, q , com a **maior probabilidade estimada**, ou seja, atribui a classe, q , da função hipótese com maior valor:

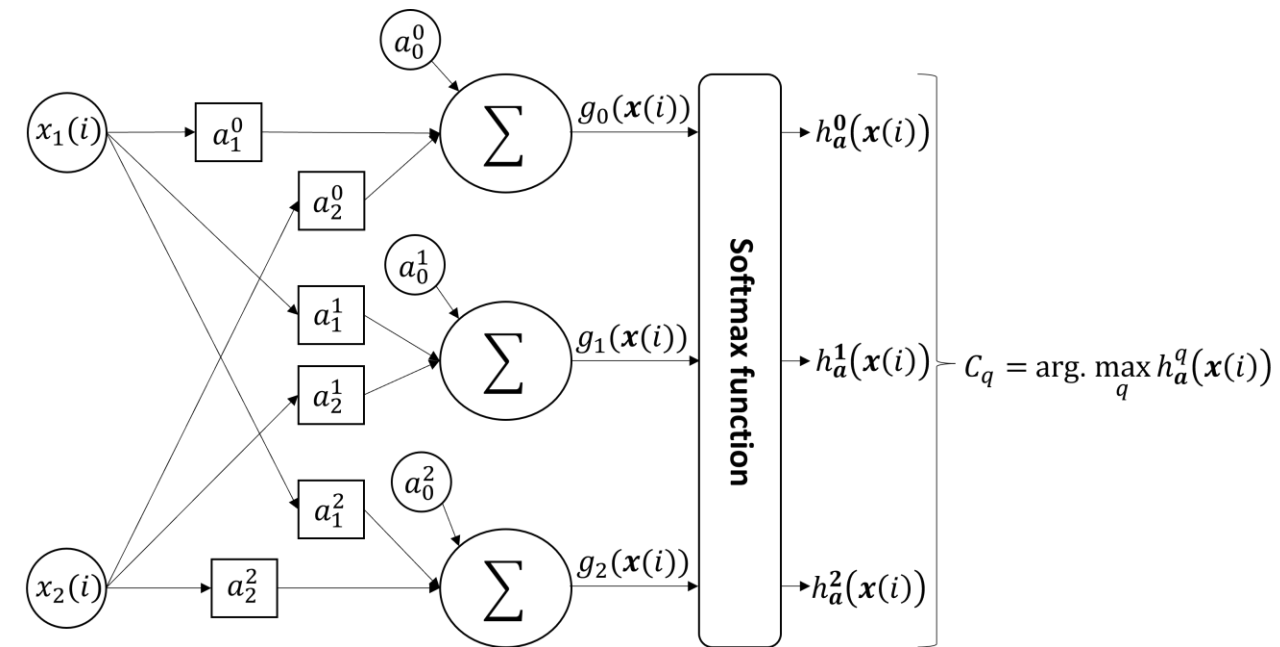
$$C_q = \arg. \max_q h_a^q(\mathbf{x}(i)) = \arg. \max_q P(C_q \mid \mathbf{x}(i); \mathbf{a}_q).$$

- Uma outra forma de reescrevermos o problema de maximização acima é lembrarmos que a **classe com maior probabilidade** é simplesmente a **classe com maior valor de função discriminante**, $g_q(\mathbf{x}(i)) = \mathbf{x}(i)^T \mathbf{a}_q$

$$C_q = \arg. \max_q g_q(\mathbf{x}(i)) = \arg. \max_q \mathbf{x}(i)^T \mathbf{a}_q.$$

- **OBS.:** A **normalização** é fundamental para garantir que as saídas do modelo sejam **interpretáveis como probabilidades** e para **garantir um treinamento estável**.

Regressão softmax



- A arquitetura de um **regressor softmax** para um problema com três classes (i.e., $Q = 3$) e dois atributos (x_1 e x_2) é mostrada ao lado.
- A ideia por trás da **regressão softmax** é bastante simples:
 - dado um exemplo de entrada, $x(i)$,
 - o regressor softmax calcula uma “**pontuação**”, para cada classe q , i.e., as saídas das Q funções discriminantes $g_q(x(i)) = x(i)^T a_q, \forall q$.
 - e, em seguida, estima a probabilidade de cada classe aplicando a função softmax às “**pontuações**”.

Tarefas

- **Quiz:** “*T320 - Quiz - Classificação (Parte IV)*” que se encontra no MS Teams.
- **Exercício Prático:** [Laboratório #4](#).
 - 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!