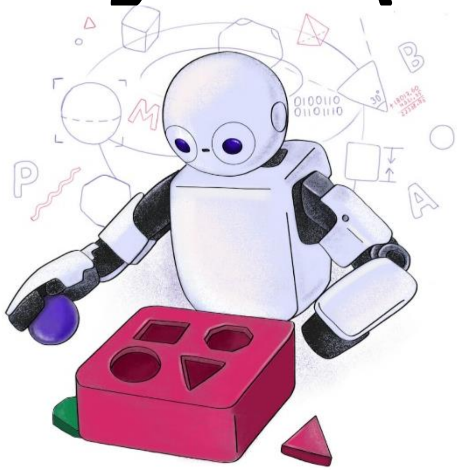
T320 - Introdução ao Aprendizado de Máquina II: *Classificação (Parte IV)*



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 se encontrar uma solução com ***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 2 classes apenas.
- 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*** quando os dados pertencem a apenas 2 classes (i.e., $Q = 2$), mas e quando existem 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.
- Existem algumas abordagens para classificação multi-classe:
  - Um-contra-o-Resto
  - Um-contra-Um
  - Regressão softmax
- As 2 primeiras abordagens 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.

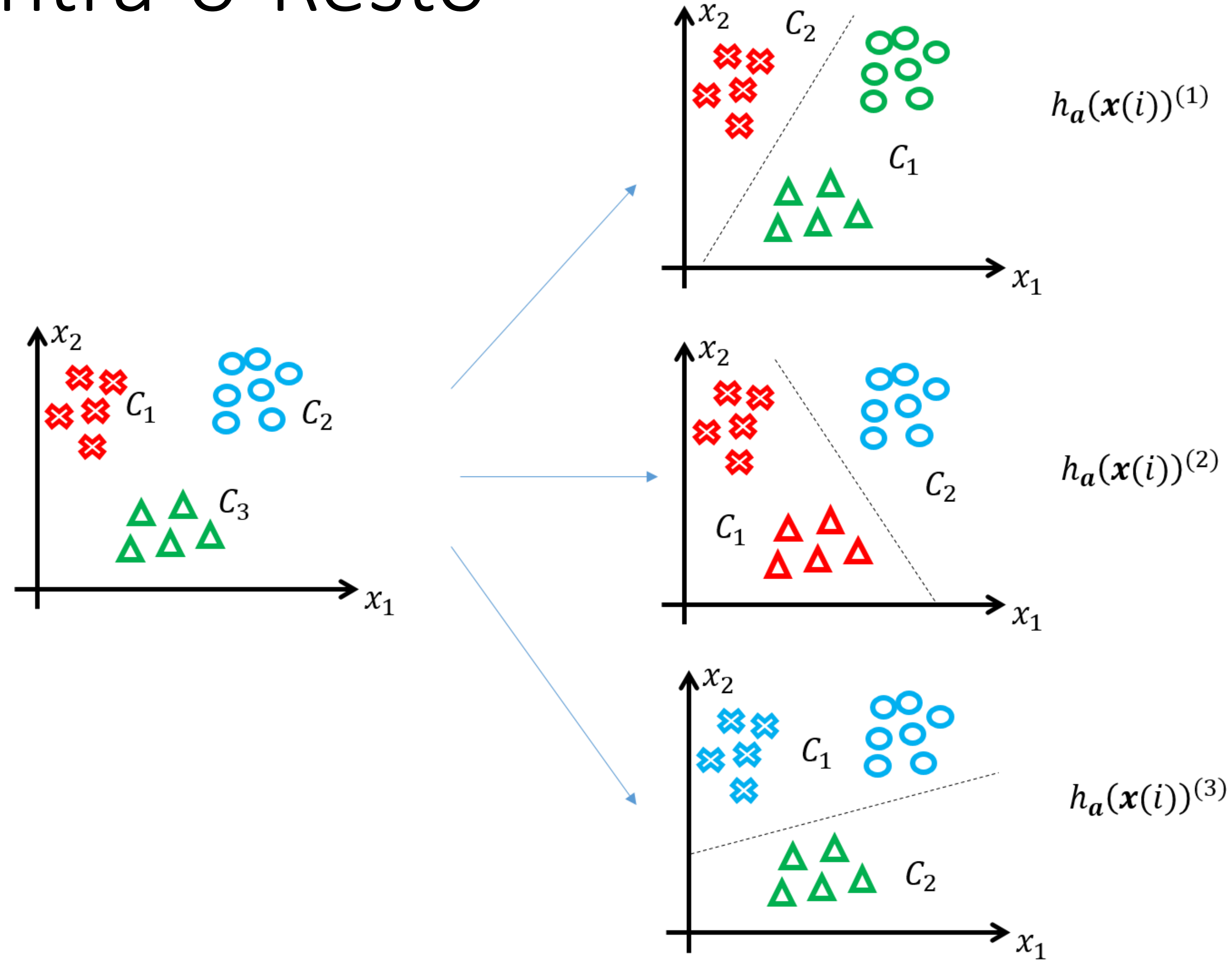
Um-Contra-o-Resto

- Nesta abordagem, nós treinamos um ***classificador binário*** (e.g., ***regressor logístico***), representado por sua função hipótese, $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}(i))^{(q)}$, para cada classe q para predizer a probabilidade de $\hat{y} = q$, ou seja, $P(\hat{y} = q | \boldsymbol{x}; \boldsymbol{a})$.
- Em outras palavras, cria-se Q ***classificadores binários***, onde para cada classificador, a classe positiva $C_2 = q$ e a classe negativa C_1 é a junção de todas as outras $Q - 1$ classes.
- Portanto, o ***classificador*** deve indicar a classe positiva caso o exemplo pertença à classe q, e a classe negativa caso o exemplo pertença a qualquer outra classe.
- Para cada novo exemplo de entrada, $\boldsymbol{x}$, realiza-se as predições e escolhe-se a classe que maximize

$$C_q = \arg\max_{q} h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}(i))^{(q)}.$$

- A vantagem desta abordagem é que se treina apenas Q ***classificadores***.
- A 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.

Um-Contra-o-Resto

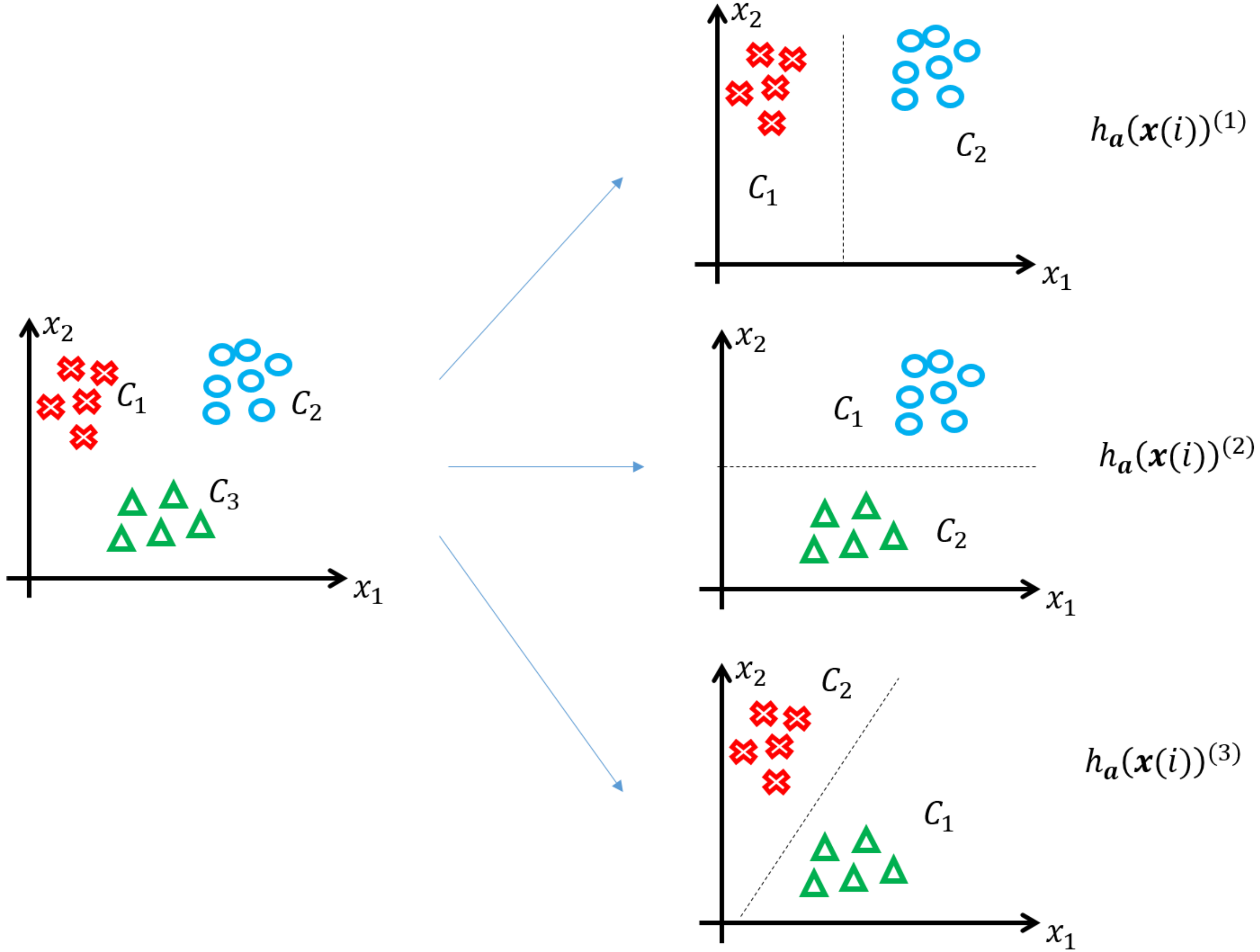


Um-Contra-Um

- Nesta abordagem, treina-se $Q(Q-1)/2$ ***classificadores binários***.
- Cada ***classificador*** é construído para fazer a distinção entre exemplos pertencentes a cada um dos possíveis ***pares*** de classes.
  - 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.
- No final, cada exemplo é classificado conforme o ***voto majoritário*** entre os ***classificadores***.
- A principal vantagem da abordagem ***Um-Contra-Um*** é que cada ***classificador*** precisa ser treinado apenas na parte do conjunto de treinamento para as duas classes que ele deve distinguir.
- A desvantagem é que por exemplo, se $Q=10$, temos que treinar 45 ***classificadores***.

Exemplo: ClassificationOfFourClassesWithOvAandOvO.ipynb

Um-Contra-Um



x_2
x_1
C_1
C_2
C_3
$h_a(\boldsymbol{x}(i))^{(1)}$
$h_a(\boldsymbol{x}(i))^{(2)}$
$h_a(\boldsymbol{x}(i))^{(3)}$

Regressão Softmax

- Também conhecida como ***regressão logística multinomial***.
- A ideia é ter um ***único*** classificador que classifique mais de 2 classes.
  - Por exemplo, para um problema com 4 classes, teríamos um único classificador, mas com 4 saídas.
- É importante salientar que ele prediz ***apenas uma classe de cada vez***, ou seja, ele é ***multi-classe*** e não ***multi-label***, portanto, ele deve ser usado apenas com ***classes mutuamente exclusivas***, como por exemplo diferentes tipos de plantas, dígitos, categorias de notícias, etc.
- Portanto, você não poderia usá-lo para reconhecer várias pessoas em uma foto, por exemplo.
- É uma abordagem mais robusta que as anteriores e que consiste em criar um modelo em que cada saída representa a ***probabilidade*** de um exemplo pertencer a uma classe específica.

Regressão Softmax

- Isto é feito a partir de uma generalização da ***regressão logística*** chamada de ***função softmax***, a qual é definida como

Cada classe tem seu próprio vetor de pesos dedicado.

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

O somatório de termos exponenciais normaliza o valor da *q*-ésima saída de tal forma que o somatório das Q saídas seja igual a 1.

onde $\boldsymbol{a}_q = \left[a_0^q, \quad a_1^q, \quad \cdots \quad a_K^q\right]^{\boldsymbol{T}}$ é o ***vetor de pesos*** associado à q-ésima saída do classificador, $h_{\boldsymbol{a}}^{q}\left(\boldsymbol{x}(i)\right)$ é a ***função hipótese*** associada à q-ésima classe e

$$g_q\left(\boldsymbol{x}(i)\right) = \boldsymbol{x}(i)^T \boldsymbol{a}_q = a_0^q + a_1^q x_1 + \cdots + a_K^q x_K = a_0^q + \sum_{k=1}^{K} a_k^q x_k\,,$$

é a ***função discriminante*** para a q-ésima classe.

- A ***função softmax*** estende a ideia do ***regressor logístico*** ao mundo multi-classes.
- Ou seja, a função softmax atribui probabilidades, no intervalo [0, 1], a cada classe em um problema com várias classes.
- Essas probabilidades devem somar 1.
- O objetivo é encontrar um ***modelo*** (i.e., seus ***pesos***) que estime 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.
- A ***função de erro médio*** para a ***regressão softmax*** é dada por

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

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

onde $1\{\cdot\}$ é a ***função indicadora***, de modo que 1{uma condição verdadeira} = 1 e 1{uma condição falsa} = 0 e $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{K+1 \times Q}$ é a matriz com os ***pesos*** para todas as ***funções hipótese*** das Q classes. A matriz $\boldsymbol{A}$ contém os vetores de pesos de cada classe.

- Usando-se a representação ***one-hot-encoding***, a equação acima pode ser re-escrita como

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

onde $\boldsymbol{y}(i) = [1\{y(i)+1 == 1\}, \quad \cdots, \quad 1\{y(i)+1 == Q\}]^{T}$ é o vetor com ***one-hot-encoding*** e

$$\boldsymbol{h}_{\boldsymbol{a}}\left(\boldsymbol{x}(i)\right) = \left[h_{\boldsymbol{a}}^{1}\left(\boldsymbol{x}(i)\right), \quad \cdots, \quad h_{\boldsymbol{a}}^{Q}\left(\boldsymbol{x}(i)\right)\right]^{T} = \left[P(C_1 \mid \boldsymbol{x}; \boldsymbol{a}_1) \quad \cdots \quad P\left(C_Q \mid \boldsymbol{x}; \boldsymbol{a}_Q\right)\right]^{T}.$$

- Observem que, quando existem apenas duas classes ($Q = 2$), a ***função de erro*** acima é equivalente à ***função de erro*** do ***regressor logístico***.

Regressão Softmax

- Usamos o algoritmo do ***gradiente descendente*** para encontrar os ***pesos*** que ***minimizam*** a ***função de erro médio***.
- A atualização iterativa dos ***pesos*** da q-ésima classe, C_q, é dada por
$$\boldsymbol{a}_q = \boldsymbol{a}_q - \alpha \frac{\partial J_e(\boldsymbol{A})}{\partial \boldsymbol{a}_q}$$
- A derivada de $J_e(\boldsymbol{A})$ com respeito a cada vetor de pesos, $\boldsymbol{a}_q$, tem uma expressão semelhante àquela obtida para a ***regressão logística***:
$$\frac{\partial J_e(\boldsymbol{A})}{\partial \boldsymbol{a}_q} = -\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1}\left[y^q(i) - h_{\boldsymbol{a}}^q\big(\boldsymbol{x}(i)\big)\right]\boldsymbol{x}(i)^T.$$
- $\sum_{q=1}^{Q} h_{\boldsymbol{a}}^q\big(\boldsymbol{x}(i)\big) = \sum_{q=1}^{Q} P\big(C_q \,\big|\boldsymbol{x}; \boldsymbol{a}_q\big) = 1$, ou seja, o somatório da ***probabilidade condicional*** de todas as classes é igual a 1.
- $0 \leq h_{\boldsymbol{a}}^q\big(\boldsymbol{x}(i)\big) \leq 1$, ou seja, temos, um vetor
$$\boldsymbol{h}_{\boldsymbol{a}}\big(\boldsymbol{x}(i)\big) = \left[h_{\boldsymbol{a}}^1\big(\boldsymbol{x}(i)\big) \quad \cdots \quad h_{\boldsymbol{a}}^Q\big(\boldsymbol{x}(i)\big)\right] \in \mathbb{R}^{Q\times 1}$$

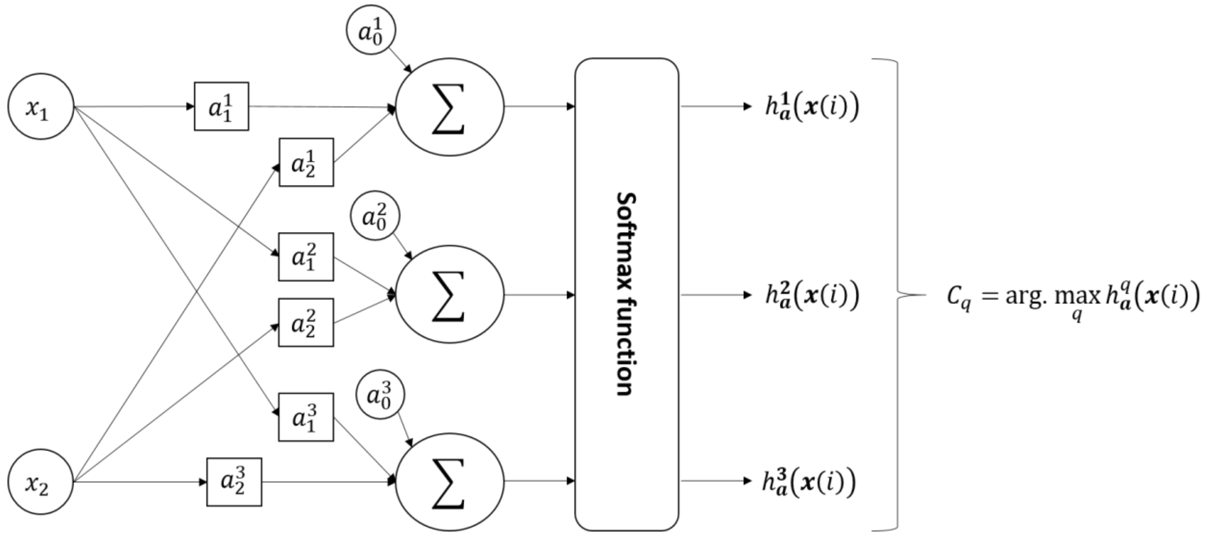
que atende os requisitos de uma ***função probabilidade de massa*** (PMF, do inglês ***probability mass function***) ***multinomial***.

Regressão Softmax

- Após o treinamento, o classificador prediz a classe com a maior probabilidade estimada, que é simplesmente a classe com maior valor para $g_q(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{a}_q$

$$C_q = \text{arg.} \max_q h_{\boldsymbol{a}}^q(\boldsymbol{x}(i)) = \text{arg.} \max_q P(C_q \mid \boldsymbol{x}(i); \boldsymbol{a}_q) = \text{arg.} \max_q \boldsymbol{x}(i)^T \boldsymbol{a}_q .$$

- Assim como o classificador de regressão logística, o classificador de regressão softmax prevê a classe com a maior probabilidade estimada (que é simplesmente a classe com a maior valor para o produto escalar $\boldsymbol{x}(i)^T \boldsymbol{a}_q$).
- A arquitetura de um regressor softmax é mostrada abaixo.



A ideia por trás da ***regressão softmax*** é bastante simples: dado um exemplo $\boldsymbol{x}$, o modelo Softmax primeiro calcula uma pontuação $g_q(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{a}_q$ para cada classe q, em seguida, estima a probabilidade de cada classe aplicando a função softmax às pontuações.

[Exemplo: softmax_regressor_with_scikit_learn.ipynb]

Tarefas

- **Quiz**: *"T320 - Quiz - Classificação (Parte IV)"* que se encontra no MS Teams.
- **Exercício Prático**: **Laboratório #4**.
    - Pode ser baixado do MS Teams ou do GitHub.
    - Pode ser respondido através do link acima (na nuvem) ou localmente.
    - Instruções para resolução e entrega dos laboratórios.
    - **Atividades podem ser feitas em grupo, mas as entregas devem ser individuais.**

Obrigado!