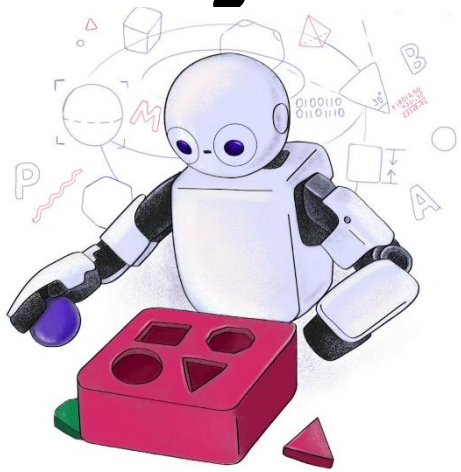
TP555 - Inteligência Artificial e Machine Learning:

Classificação Linear



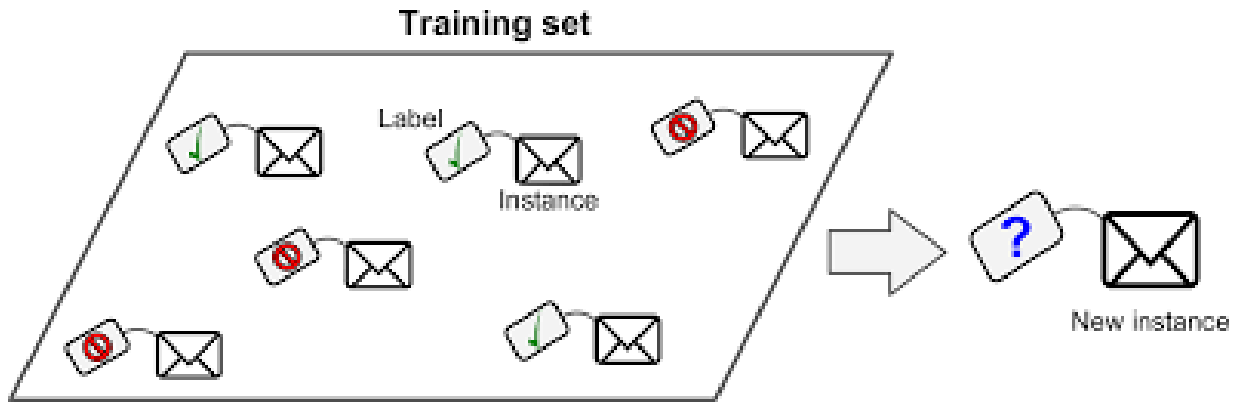
Inatel

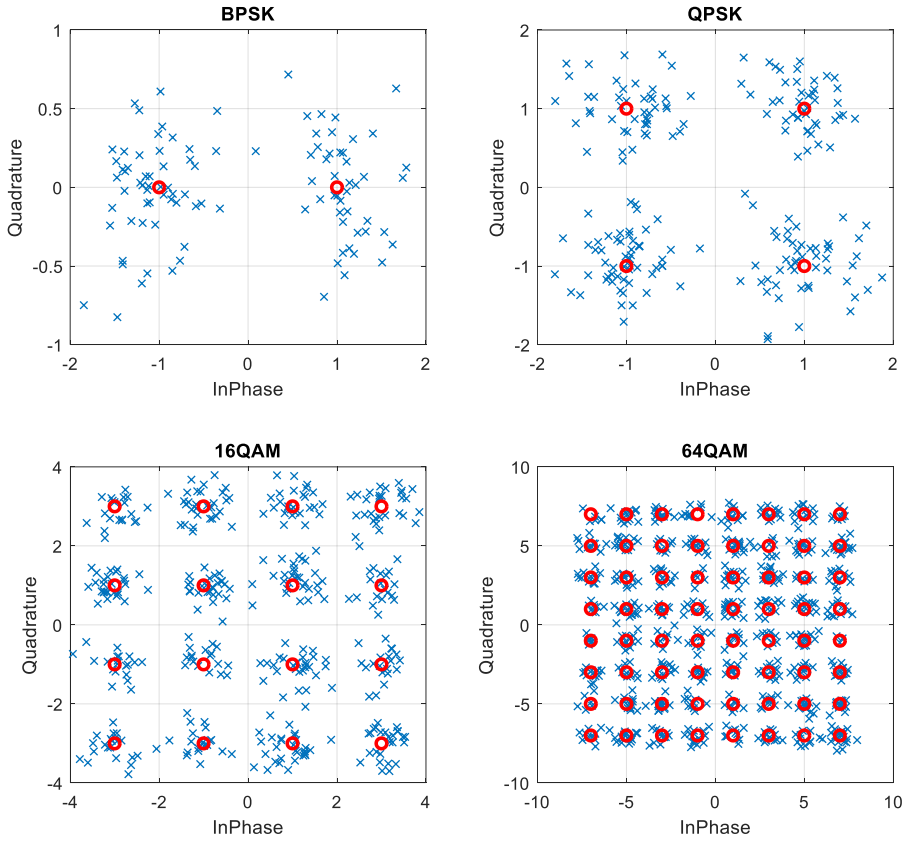
Felipe Augusto Pereira de Figueiredo
felipe.figueiredo@inatel.br

Tópicos abordados

- Abordagens para classificação linear:
  - Regressão logística
  - Classificação Bayesiana
- Métricas para avaliação de classificadores.

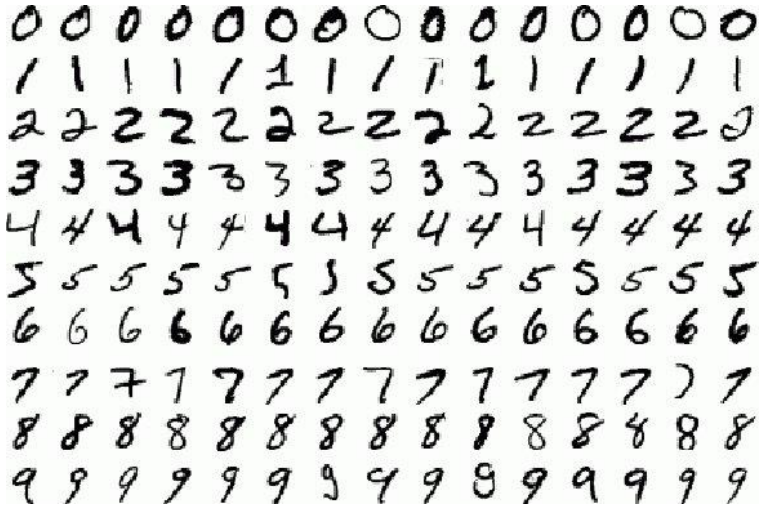
Motivação

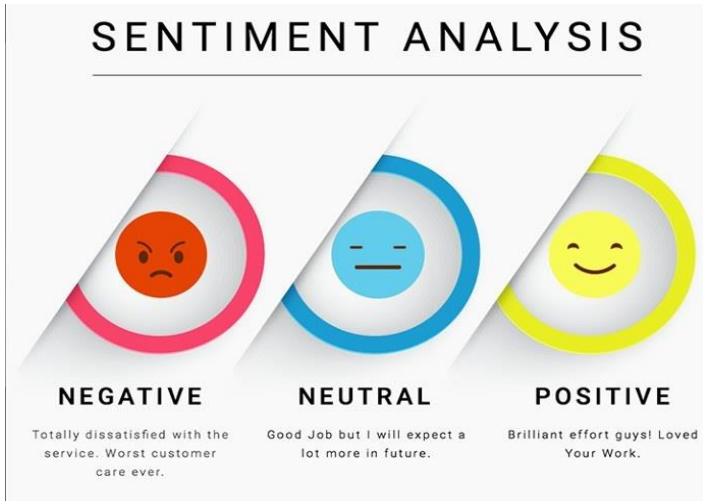




- Classificação de emails entre SPAM e pessoal (HAM).
- Detecção de símbolos (classificação de símbolos).
- Classificação de modulações (QPSK, AM, FM, etc.)

Motivação





- Reconhecimento de dígitos escritos à mão.
- Classificação de texto.
- Classificação de sentimentos.

Definição do problema

Problema: atribuir a cada exemplo de entrada o ***rótulo*** correspondente a uma das Q classes existentes, $C_q, q = 1, \dots, Q$, à qual o exemplo pertence.

- Este tipo de desafio é característico de problemas conhecidos como ***classificação***.

- Semelhante ao problema da regressão linear, existe um conjunto de treinamento com exemplos e rótulos $\{\boldsymbol{x}(i); y(i)\}_{i=0}^{N-1}$ que é utilizado para treinar um ***classificador***, onde
  - $\boldsymbol{x}(i) = [x_1(i) \quad \cdots \quad x_K(i)]^T \in \mathbb{R}^{K\times 1}$ representa o *i*-ésimo vetor exemplo de entrada, o qual é caraterizado por K atributos, $x_1, \dots, x_K$
  - e $y(i) \in \mathbb{R}$ representa o *i*-ésimo ***rótulo***. Como veremos a seguir, y pode ser um escalar $\mathbb{R}^1$ ou um vetor $\mathbb{R}^{Q\times 1}$.

Representação da saída desejada

- A saída desejada para um dado exemplo de entrada deve ser o ***rótulo*** da classe à qual ele pertence.
- Sendo assim, a saída y de um ***classificador***, é uma variável categórica (ou seja, ***discreta***).
- Portanto, para realizarmos o treinamento do modelo, é necessário escolher uma ***representação numérica*** para a saída desejada, ou seja, y.
- Assim, como veremos a seguir, duas opções podem ser adotadas, dependendo do tipo de classificação a ser feita.

Representação da saída desejada

- **Classificação binária**: existem apenas duas classes possíveis, C_1 e C_2. Portanto, neste caso, podemos utilizar ***uma única saída escalar binária*** para indicar a classe correspondente ao exemplo de entrada:

$$y(i) = \begin{cases} 0, & \boldsymbol{x}(i) \in C_1 \\ 1, & \boldsymbol{x}(i) \in C_2 \end{cases}$$

- Assim, $y(i) \in \mathbb{R}^1$, de maneira que o classificador realiza um mapeamento $\mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}^1$
- Também é possível utilizar $y(i) = -1$ para $\boldsymbol{x}(i) \in C_1$, ou seja

$$y(i) = \begin{cases} -1, & \boldsymbol{x}(i) \in C_1 \\ 1, & \boldsymbol{x}(i) \in C_2 \end{cases}$$

Representação da saída desejada

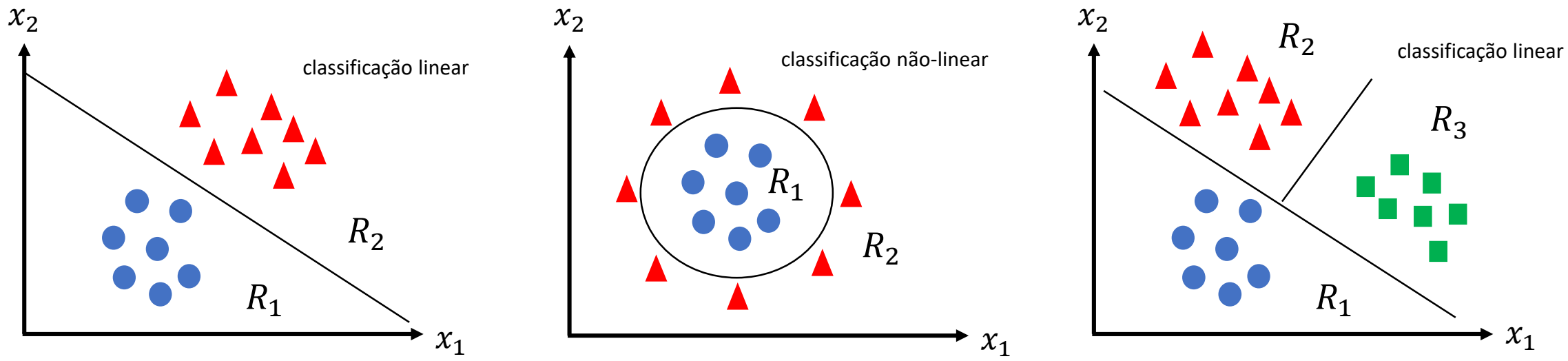
- **Classificação multi-classes**: existem mais de 2 classes possíveis ($Q > 2$).
  - Uma estratégia bastante utilizada para representar estas classes é conhecida como ***one-hot encoding***.
- ***One-hot encoding***: utiliza uma representação binária para cada uma das variáveis categóricas.
  - Neste caso, o ***classificador*** produz múltiplas saídas, cada uma representando a ***possibilidade*** (ou probabilidade) do padrão pertencer a uma classe específica.
  - **Exemplo**: imaginemos um classificador de notícias com quatro classes possíveis: *esportes*, *política*, *ciências* e *variedades*. Como vocês as representariam com o ***one-hot encoding***?

$$\left.\begin{array}{ll} \textit{esportes:} & [1 \quad 0 \quad 0 \quad 0]^T \\ \textit{política:} & [0 \quad 1 \quad 0 \quad 0]^T \\ \textit{ciências:} & [0 \quad 0 \quad 1 \quad 0]^T \\ \textit{variedades:} & [0 \quad 0 \quad 0 \quad 1]^T \end{array}\right\}$$

Assim, $\boldsymbol{y}(i) \in \mathbb{R}^{Q \times 1}$, de maneira que o classificador realiza um mapeamento $\mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}^Q$.

Fronteiras de decisão de um classificador

- O espaço K dimensional (i.e., $\mathbb{R}^K$) criado pelos atributos de entrada é dividido em ***regiões de decisão*** $R_i, i = 1, \ldots, \mathrm{Q}$, as quais são delimitadas ou separadas pelas ***fonteiras de decisão***, que correspondem a ***superfícies*** (ou ***superfícies de decisão***) no espaço dos atributos onde ocorre uma indeterminação, ou, analogamente, um empate entre diferentes classes possíveis.
- As ***fronteiras de decisão*** podem ser ***lineares*** (e.g., retas e planos) ou ***não-lineares*** (e.g., círculos e esferas).
- Como podemos ver, as ***fronteiras de decisão*** são definidas por funções (lineares ou não) que separam ou discriminam as classes. Essas funções são normalmente chamadas de ***funções discriminates***, pois vão separar as classes.



Regiões de decisão em problemas de classificação binária e multi-classes.

Funções discriminates lineares

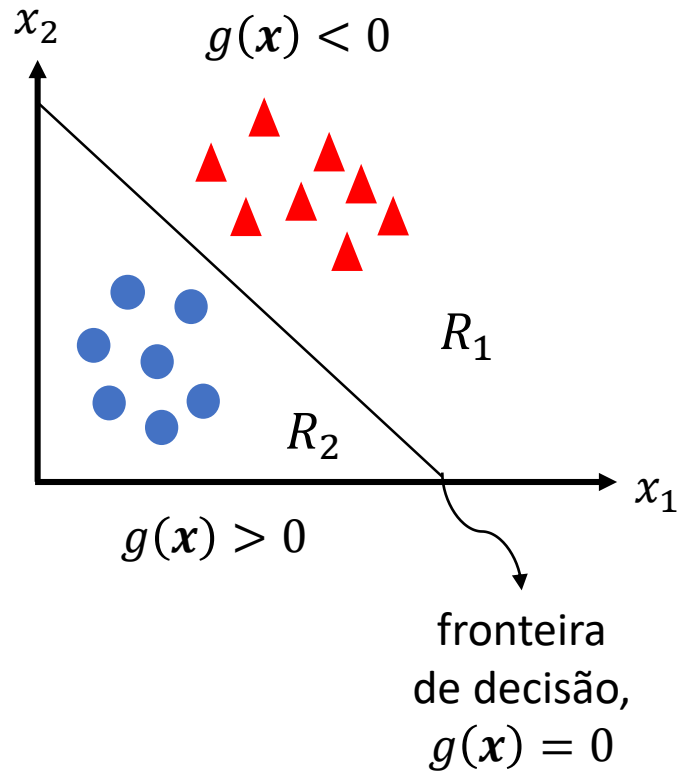
- Em geral, uma ***função discriminante linear*** pode ser escrita da seguinte forma

$$g(\boldsymbol{x}) = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \ \ldots + a_K x_K = \boldsymbol{a}^T \boldsymbol{x},$$

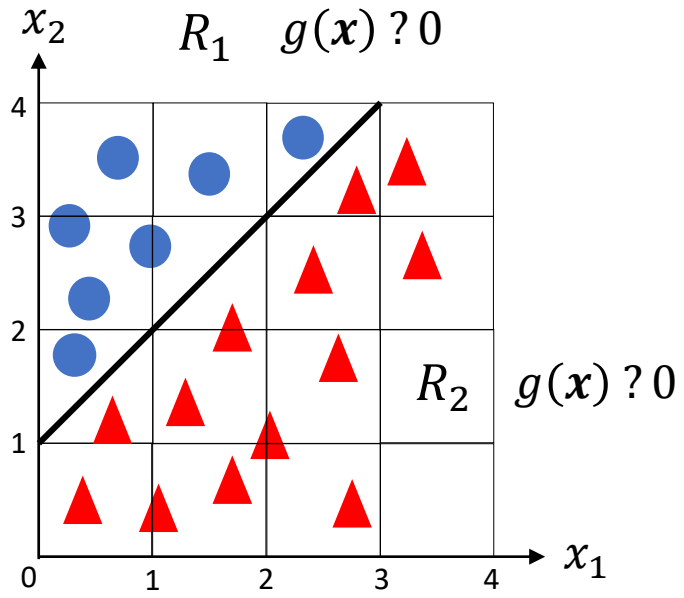
que nada mais é do uma combinação linear dos pesos, assim como nós vimos na regressão linear.

- $g(\boldsymbol{x})$ também pode ser visto como um ***hiperplano*** que separa as classes. Um ***hiperplano*** pode ser 1 ponto em 1D, uma reta em 2D e um plano em 3D.
  - O bias, a_0, dá o deslocamento com relação à origem
  - E os restante dos pesos determinam a orientação do ***hiperplano***.
- A ideia aqui é encontrar os pesos da ***função discriminate*** de tal forma que

$$C_q = \begin{cases} 1, & g(\boldsymbol{x}) < 0 \\ 2, & g(\boldsymbol{x}) > 0 \\ \text{uma ou outra}, & g(\boldsymbol{x}) = 0 \end{cases}$$

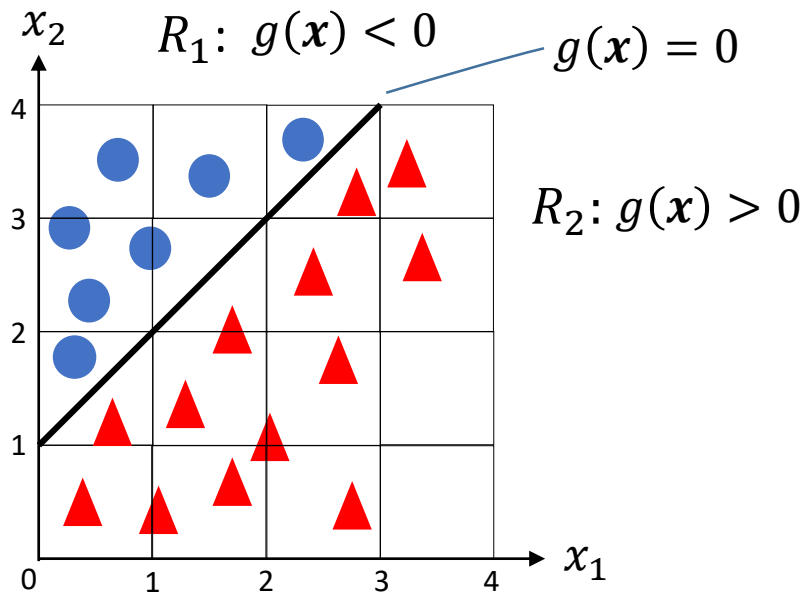


Exemplo: Encontrar a função discriminante, $g(\boldsymbol{x})$



- Dada a seguinte função discriminante: $g(x) = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2$
- Encontre os pesos e as regiões de decisão.

Exemplo: Encontrar a função discriminante, $g(\boldsymbol{x})$



- Temos 3 incógnitas e 3 equações:
  - $(x_1 = 0, x_2 = 1) \rightarrow 0 = a_0 + a_2 \therefore a_0 = -a_2$
  - $(x_1 = 1, x_2 = 2) \rightarrow 0 = a_0 + a_1 + 2a_2 \therefore a_1 = -(a_0 + 2a_2)$
  - $(x_1 = 2, x_2 = 3) \rightarrow 0 = a_0 + 2a_1 + 3a_2 \therefore a_1 = -(a_0 + 3a_2)/2$
- Resolvendo o sistema, encontramos $a_0 = 1, a_1 = 1, a_2 = -1$, então
  - $g(x) = 1 + x_1 - x_2$

Classificação linear

- Como vimos anteriormente, o objetivo da ***classificação*** é usar as características (i.e., atributos) de, por exemplo, um objeto para identificar a qual classe (ou grupo) ele pertence.
- Um ***classificador linear*** atinge esse objetivo tomando uma decisão de classificação com base no valor de uma ***combinação linear*** dos atributos, ou seja, na saída de uma ***função discriminate linear***.
- A saída de um classificador linear é dada por

$$y = f\left(\sum_{k=1}^{K} a_k x_k\right) = f(\boldsymbol{a}^T \boldsymbol{x}),$$

onde $\boldsymbol{x} = [1, x_1, \dots, x_K]^T$ e $f(.)$ é a ***função de limiar de decisão***, que é uma função que converte a saída da ***função discriminate linear***, $\boldsymbol{a}^T \boldsymbol{x}$ (que nada mais é do que o produto escalar dos vetores de peso e atributos), na saída desejada, ou seja, na classe C_q do objeto.

- ***Classificadores lineares*** sãos frequentemente usados em situações em que a velocidade da classificação é um problema, pois ele geralmente é o classificador mais rápido. Lembre-se que a classificação envolve apenas um produto escalar e um mapeamento.
- Além disso, os ***classificadores lineares*** geralmente funcionam muito bem quando o número de atributos é grande, como no caso da classificação de documentos (milhares de palavras, por exemplo).

Teoria Bayesiana de decisão

- A teoria Bayesiana de decisão é uma ***abordagem estatística*** para o problema de ***classificação***.
- Ela explora o conhecimento de probabilidades ligadas às classes e aos atributos, bem como dos ***custos*** associados a cada decisão, para realizar a classificação de cada novo exemplo.
- **Definições**: Considere que um exemplo (conjunto de atributos) a ser classificado seja descrito por um vetor de atributos $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{K\times 1}$. Cada exemplo pertence a uma, e somente uma, classe C_q, sendo que existem ao todo Q classes possíveis.
  - $P(C_q)$ denota a probabilidade ***a priori*** associada à classe C_q.
  - Em outras palavras, $P(C_q)$ indica a probabilidade de um exemplo arbitrário (e desconhecido) pertencer à classe C_q.

Teoria Bayesiana de decisão

- Agora suponha, que um exemplo $\boldsymbol{x}$ seja observado. De posse do conhecimento das características deste exemplo, qual deve ser a decisão quanto à classe a que ele pertence?
  - Uma opção intuitiva e bastante poderosa é escolher a classe que se mostre a mais provável tendo em vista os atributos específicos do exemplo, $\boldsymbol{x}$.
  - Ou seja, a decisão é tomada em favor da classe cuja probabilidade ***a posteriori*** (ou seja, já levando em consideração o conhecimento do vetor de atributos) seja máxima.
  - A probabilidade ***a posteriori*** corresponde à probabilidade condicional $P(C_q|\boldsymbol{x})$.
  - Como calculamos $P(C_q|\boldsymbol{x})$?
- **Teorema de Bayes**

$$P(C_q|\boldsymbol{x}) = \frac{P(\boldsymbol{x}|C_q)P(C_q)}{P(\boldsymbol{x})}$$

onde o termo $P(\boldsymbol{x}|C_q)$ é denominado de ***verossimilhança*** (***likelihood***) e o termo $P(\boldsymbol{x})$ é normalmente chamado de ***evidência***.

Máxima probabilidade a posteriori (MAP)

- A opção intuitiva sugerida anteriormente é conhecida como o critério ou decisor da ***máxima probabilidade a posteriori*** (MAP, do inglês ***maximum a posteriori probability***), cuja decisão para o exemplo $\boldsymbol{x}$ é dada pela classe C_q que maximiza $P(C_i|\boldsymbol{x})$, ou seja, em forma matemática:

$$\text{MAP: } C_q = \arg \max_{C_i, i=1,\ldots,Q} P(C_i|\boldsymbol{x}).$$

Probabilidade a posteriori

- Observe que, com base no teorema de Bayes, a solução para a equação acima é equivalente àquela que maximiza o numerador, $P(\boldsymbol{x}|C_i)P(C_i)$, de forma que:

$$\text{MAP: } C_q = \arg \max_{C_i, i=1,\ldots,Q} P(\boldsymbol{x}|C_i)P(C_i),$$

já que o denominador $P(\boldsymbol{x})$ não depende das classes testadas, servindo apenas como fator de escala no critério.

Máxima verossimilhança (ML)

- O ***decisor de máxima verossimilhança*** (ML, do inglês ***maximum likelihood***) parte do pressuposto de que não há informação estatística consistente sobre as classes, i.e., sobre $P(C_i)$.
- Portanto, o critério ML toma a decisão em favor da classe que apresenta o maior valor para a probabilidade $P(\boldsymbol{x}|C_i)$. Neste sentido, o ML escolhe a classe C_q mais plausível, ou seja, a mais verossímil, em relação ao padrão observado:

$$\text{ML: } C_q = \arg \max_{C_i, i=1,\ldots,Q} P(\boldsymbol{x}|C_i)$$

- **OBS**.: se compararmos as expressões associadas aos critérios MAP e ML, percebemos que a diferença fundamental entre eles reside no fato de o MAP explicitamente incorporar o conhecimento das ***probabilidades a priori***, i.e., $P(C_i)$. Curiosamente, quando temos um cenário em que as classes são equiprováveis, i.e., $P(C_i) = 1/Q$ e independentes do índice, i. Então, maximizar a ***probabilidade a posteriori*** fornecerá a mesma solução que o ML.

Exemplo: diagnóstico de doenças

Vamos supor que estamos trabalhando no diagnóstico de uma nova doença, e que fizemos testes em 100 indivíduos distintos. Após coletarmos os resultados, descobrimos que 20 deles possuíam a doença (20%) e 80 estavam saudáveis (80%), sendo que dos indivíduos que possuíam a doença, 90% receberam positivo no teste da doença, e 30% deles que não possuíam a doença também receberam o teste positivo.

- **Pergunta**: Se um novo indivíduo realizar o teste e receber um resultado positivo, qual a probabilidade dele realmente possuir a doença?

Exemplo: diagnóstico de doenças (Solução)

Informações que possuímos:

2 classes: possui doença e não possui doença	1 atributo: resultado do teste: + ou –

- Pergunta em forma probabilistica: $P(\text{doença} \mid +)$, ou seja, probabilidade do indivíduo ter a doença dado que o resultado observado é positivo?
- Probabilidades:

$P(+\mid \text{doença}) = 0.9$	$P(+\mid \text{sem\_doença}) = 0.3$
$P(\text{doença}) = 0.2$	$P(\text{sem\_doença}) = 0.8$
$P(+) = P(+\mid \text{doença})P(\text{doença}) + P(+\mid \text{sem\_doença})\ P(\text{sem\_doença}) = 0.42$	

- Usando o teorema de Bayes

$$P(\text{doença}\mid +) = \frac{P(+\mid \text{doença})P(\text{doença})}{P(+)} = 0.429$$

$$P(\text{sem\_doença}\mid +) = \frac{P(+\mid \text{sem\_doença})P(\text{sem\_doença})}{P(+)} = 0.571$$

A probabilidade dele não ter a doença mesmo tendo seu teste positivo é de aproximadamente 57%, ou seja, a probabilidade de ***falsos positivos*** é alta. Portanto, este não é um teste confiável.

Classificador naïve Bayes

- São classificadores que assumem que os ***atributos*** são ***estatisticamente independentes*** uns dos outros.
- Ou seja, a alteração do valor de um atributo, não influencia diretamente ou altera o valor de qualquer um dos outros atributos.
- Assim a probabilidade da classe C_q dado o vetor de atributos $\boldsymbol{x}$ pode ser reescrita como

$$P\left(C_q|\boldsymbol{x} = [x_1 \quad \cdots \quad x_K]^T\right) = \frac{P\left(\boldsymbol{x}|C_q\right)P\left(C_q\right)}{P(\boldsymbol{x})} = \frac{P\left(x_1|C_q\right)\ldots P\left(x_K|C_q\right)P\left(C_q\right)}{P(x_1)\ldots P(x_K)}$$

- Com a independência dos atributos, os decisores MAP e ML são dados por

$$\text{MAP: } C_q = \arg\max_{C_i, i=1,\ldots,Q} P(x_1|C_i)\ldots P(x_K|C_i)P(C_i),$$

$$\text{ML: } C_q = \arg\max_{C_i, i=1,\ldots,Q} P(x_1|C_i)\ldots P(x_K|C_i)\,.$$

- Aplicações típicas do classificador naïve Bayes incluem filtragem de spam, classificação de documentos e de sentimentos.

Classificador naïve Bayes

Vantagens

- Fácil de ser implementado e altamente escalável.
- Funciona bem mesmo com poucos dados.
- Rápido para realizar as classificações, e portanto, pode ser utilizado em aplicações de tempo-real.
- Além de simples, ele é conhecido por apresentar performance melhor do que métodos de classificação altamente sofisticados em algumas aplicações.

Desvantagens

- Assume que todos os atributos são independentes, o que muitas vezes não é verdade na prática.
- Não consegue classificar caso uma das probabilidades condicionais seja igual a zero, mas existem formas de se driblar esse problema (e.g., técnica da suavização de Laplace).
- É necessário se conhecer ou se assumer (veremos a seguir) as probabilidades condicionais dos atributos.

Tipos de classificadores naïve Bayes

- Na prática, as probabilidades condicionais dos atributos x_k de uma classe, C_q, $P(x_k|C_q), \forall k$, são geralmente modeladas usando-se o mesmo tipo de distribuição de probabilidade, como as distribuições Gaussiana, Multinominal e de Bernoulli.
- Portanto, tem-se 3 tipos diferentes de classificadores dependendo da suposição feita para a probabilidade condicional $P(x_k|C_q)$:
  - Classificador naïve Bayes Gaussiano
  - Classificador naïve Bayes Multinomial
  - Classificador naïve Bayes Bernoulli

Classificador naïve Bayes Gaussiano

- Até agora, vimos os cálculos quando os ***atributos*** são ***categóricos***. Mas como calcular as probabilidades quando os atributos são variáveis contínuas?
- Quando lidamos com ***atributos*** x_1, ..., x_K, que apresentam ***valores contínuos***, uma suposição típica é que os valores dos atributos sejam distribuídos de acordo com uma ***distribuição normal*** (ou **Gaussiana**).
- Para se encontrar os parâmetros do classificador faz-se o seguinte:
  - Primeiro, segmenta-se os atributos, x_1, ..., x_K, de acordo com a classe a que pertencem;
  - Em seguida, calcula-se a média, μ_{x_k,C_q}, e a variância, $\sigma^2_{x_k,C_q}$, de cada atributo x_k em relação à classe, C_q, a que pertence.
- Assim, a probabilidade condicional $P(x_k|C_q)$ pode ser calculada inserindo-se o valor de x_k na equação da distribuição Normal parametrizada com μ_{x_k,C_q} e $\sigma^2_{x_k,C_q}$.

$$P(x_k|C_q) = \frac{1}{\sigma_{x_k,C_q}\sqrt{2\pi}} e^{-(x_k-\mu_{x_k,C_q})^2 \Big/ 2\sigma^2_{x_k,C_q}}.$$

- **OBS**.: Essa é outra suposição forte, pois muitos atributos não seguem uma distribuição normal. Embora isso seja verdade, supondo uma distribuição normal torna os cálculos muito mais fáceis.

Exemplo: Probabilidade da prática de esportes

Nesse exemplo vamos usar o classficador Naive Bayes Gaussiano para calcular a probabilidade dos jogadores jogarem ou não, com base nas condições climáticas. Baseado nos dados abaixo, qual a probabilidade dos jogadores jogarem se temperatura = 25 °C e humidade = 62%?

Temperatura [°C]	Humidade [%]	Jogar?
29.44	85	Não
26.67	90	Não
28.33	86	Sim
21.11	96	Sim
20.00	80	Sim
18.33	70	Não
17.78	65	Sim
22.22	95	Não
20.56	70	Sim
23.89	80	Sim
23.89	70	Sim
22.22	90	Sim
27.22	75	Sim
21.67	91	Não

Exemplo: Probabilidade da prática de esportes

Primeiro, precisamos calcular a média e variância para cada atributo, ou seja, para temperatura e humidade.

Temperatura [°C]	
E[temp. | jogar=sim]	22.78
std(temp. | jogar=sim)	3.42
E[temp. | jogar=não]	23.67
std(temp. | jogar=não)	4.39

Humidade [%]	
E[hum. | jogar=sim]	79.11
std(hum. | jogar=sim)	10.22
E[hum. | jogar=não]	86.20
std(hum. | jogar=não)	9.73

P(jogar=sim)	9/14
P(jogar=não)	5/14

$P(\text{temp.}=25 \mid \text{jogar=sim}) = \frac{1}{3.42\sqrt{2\pi}} e^{-(25-22.78)^2 / 2(3.42)^2} = 0.0944$

$P(\text{hum.}=62 \mid \text{jogar=sim}) = \frac{1}{10.22\sqrt{2\pi}} e^{-(62-79.11)^2 / 2(10.22)^2} = 0.0096$

$P(\text{temp.}=25 \mid \text{jogar=não}) = \frac{1}{4.39\sqrt{2\pi}} e^{-(25-23.67)^2 / 2(4.39)^2} = 0.0869$

$P(\text{hum.}=62 \mid \text{jogar=não}) = \frac{1}{9.73\sqrt{2\pi}} e^{-(62-86.2)^2 / 2(9.73)^2} = 0.0019$

Agora calculamos as probabilidades:

- *P*(jogar=sim | temp.=25, hum.=62) = *P*(temp.=25 | jogar=sim) *P*(hum.=62 | jogar=sim)*P*(jogar=sim) = 5.83e-4
- *P*(jogar=não | temp.=25, hum.=62) = *P*(temp.=25 | jogar=não) *P*(hum.=62 | jogar=não)*P*(jogar=não) = 5.78e-5

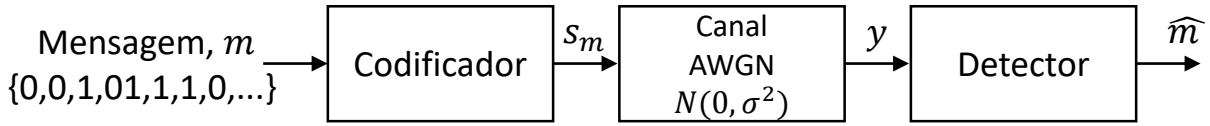
Portanto, a probabilidade é maior para o caso deles jogarem.

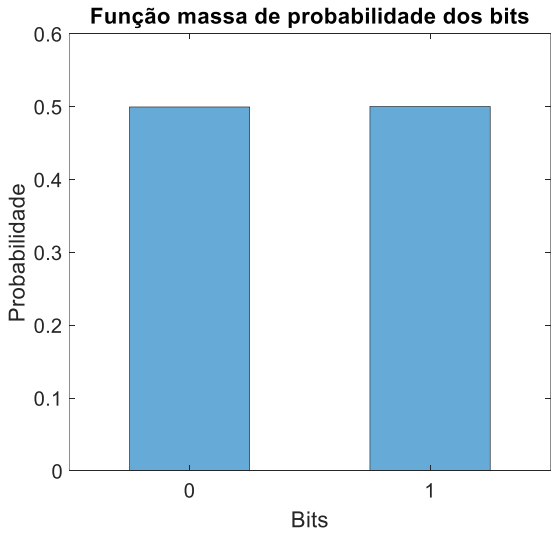
Exemplo: Detecção de símbolos BPSK em canais AWGN

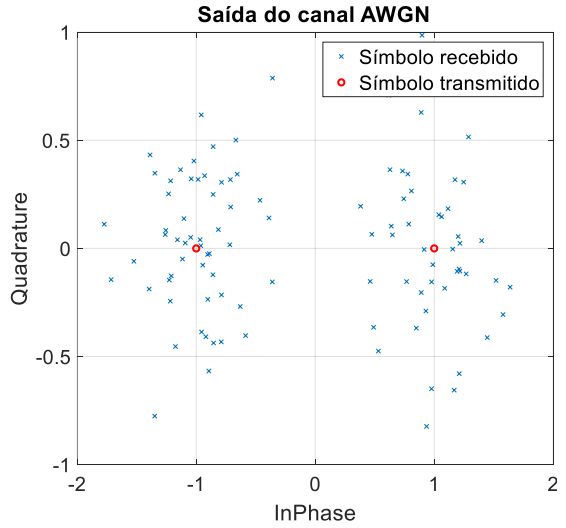
- Imagine um codificador que converte o m-ésimo bit de uma mensagem composta por 0s e 1s nos símbolos s_0 = -1 e s_1 = 1, para $m = 0$ e 1, respectivamente.
- Em seguida, os símbolos codificados passam por um canal AWGN cuja saída é dada por

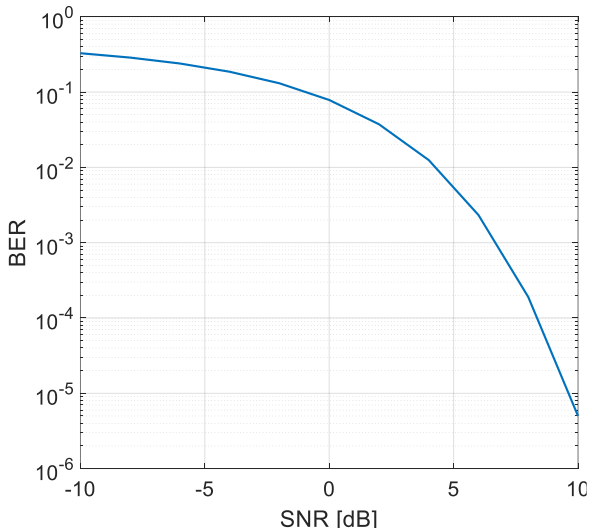
$$y = s_m + w, \text{ onde } w \sim N(0, \sigma^2).$$

- Finalmente, o detector tem a tarefa de recuperar os bits transmitidos de tal forma que a probabilidade de erro, $P_e = P(\hat{m} \neq m)$, seja minimizada.









Exemplo: Detecção de símbolos BPSK em AWGN

- Detector MAP para esse problema é dado por:

$$S_m = \arg \max_{S_m,\, m=0,1} P(S_m|y) = \arg \max_{S_m, m=0,1} P(y|S_m)P(S_m)$$

- Se o símbolo s_0 é transmitido, então o sinal recebido é dado por: $y = s_0 + w$

$$P(y|s_0) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(y+1)^2/2\sigma^2}.$$

- Se o símbolo s_1 é transmitido, então o sinal recebido é dado por: $y = s_1 + w$

$$P(y|s_1) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(y-1)^2/2\sigma^2}.$$

- Como $P(S_0)$ = $P(S_1)$ = 1/2, então o detector MAP é equivalente ao ML, e assim

$$S_m = \arg \max_{S_m, m=0,1} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(y-S_m)^2/2\sigma^2} = \arg \max_{S_m, m=0,1} (y - S_m)^2.$$

Exemplo: Detecção BPSK com Scikit-Learn

```
# Import all necessary libraries.
import numpy as np
from scipy.special import erfc
from sklearn.naive_bayes import GaussianNB
from sklearn.model_selection import train_test_split

# Number of BPSK symbols to be transmitted.
N = 1000000
# Instantiate a Gaussian naive Bayes classifier.
gnb = GaussianNB()

# Create Es/N0 vector.
EsN0dB = np.arange(-10,12,2)
ber_theo = ber_simu = np.zeros(len(EsN0dB))
for idx in range(0,len(EsN0dB)):
    EsN0Lin = 10.0**(-(EsN0dB[idx]/10.0))
    # Generate N BPSK symbols.
    x = (2.0 * (np.random.rand(N) >= 0.5) - 1.0).reshape(N, 1)
    # Generate noise vector
    noise = np.sqrt(EsN0Lin/2.0)*np.random.randn(N, 1)
    # Pass symbols through AWGN channel.
    y = x + noise
    # Split array into random train and test subsets.
    x_test, x_train, y_test, y_train = train_test_split(x, y, random_state=42)
    # Fit.
    gnb.fit(y_train, x_train.ravel())
    # Predict.
    detected_x = gnb.predict(y_test).reshape(len(y_test), 1)
    # Simulated BPSK BER.
    ber_simu[idx] = 1.0 * ((x_test != detected_x).sum()) / len(y_test)
    # Theoretical BPSK BER.
    ber_theo[idx] = 0.5*erfc(np.sqrt(10.0**((EsN0dB[idx]/10.0))))
```

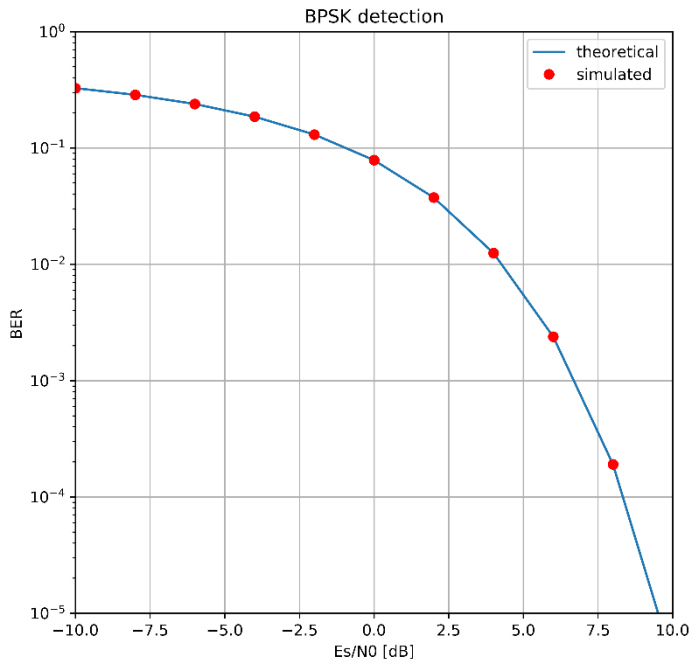
Importa classe GaussianNB do módulo naive_bayes do biblioteca SciKit-Learn.

Instancia objeto da classe GaussianNB.

Divide o conjunto em treinamento e validação.

Treina o classificador com conjunto de treinamento.

Executa a classificação com conjunto de validação.



Exemplo: bpsk_detection.ipynb

- Curva simulada se aproxima da teórica.

Classificador naïve Bayes Multinomial

- Com um classificador naïve Bayes multinomial, os ***atributos*** são ***discretos*** e representam as frequências com as quais determinados eventos são gerados por uma ***distribuição multinomial***, com probabilidades $(p_1, p_2, \dots, p_K)$, onde p_k é a probabilidade de que o evento k ocorra.
- Desta forma, o vetor de atributos $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \dots, x_K]^T$ é então, um ***histograma***, com x_k contando o número de vezes (i.e., frequência) que o evento k foi observado em uma instância específica.
- Este classificador é normalmente usado para classificação de documentos, com eventos representando a ocorrência de uma palavra no documento.
- A probabilidade condicional de se observar um histograma $\boldsymbol{x}$ dada a classe C_q é dada por

$$P(\boldsymbol{x}|C_q) = \frac{(\sum_k x_k)!}{\prod_k x_k!} \prod_k {p_{qk}}^{x_k} = \frac{(\sum_k x_k)!}{\prod_k x_k!} \prod_k P(x_k|C_q)^{x_k},$$

onde $\boldsymbol{x} = [x_1 \quad \dots \quad x_K]$ é um vetor que representa a frequência dos eventos e p_{qk} é a probabilidade da classe C_q gerar o atributo x_k.

Exemplo: classificador multinomial com Scikit-Learn

```
# Import all necessary libraries.
from sklearn.datasets import fetch_20newsgroups
from sklearn.naive_bayes import MultinomialNB
from sklearn.feature_extraction.text import CountVectorizer
from sklearn.pipeline import make_pipeline
from sklearn.metrics import confusion_matrix

# Use the "20 Newsgroups corpus" from scikit to show how we might classify these
short documents into categories.
data = fetch_20newsgroups()
data.target_names

# Select just a few of these categories, and download the training and testing set.
categories = ['talk.religion.misc', 'soc.religion.christian', 'sci.space', 'comp.graphics']
train = fetch_20newsgroups(subset='train', categories=categories)
test = fetch_20newsgroups(subset='test', categories=categories)

# Convert a collection of text documents to a matrix of token counts.
cv = CountVectorizer()
# Naive Bayes classifier for multinomial models.
mnb = MultinomialNB()
# Create a pipeline that attaches the vectorizer to a multinomial naive Bayes
classifier.
model = make_pipeline(cv, mnb)

# Train model. Apply the model to the training data.
model.fit(train.data, train.target)
# Run validation. Predict labels for the test data.
labels = model.predict(test.data)
```

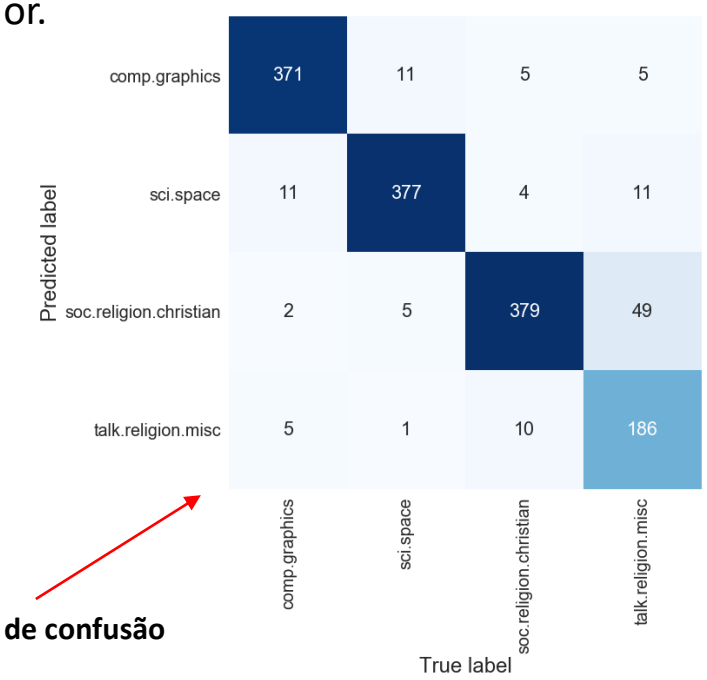
Base com 20 tópicos diferentes de discussão.

Treinamos e validamos com apenas 4 tópicos.

Converte o texto em um conjunto de valores numéricos representativos, ou seja, uma matriz com o número de ocorrências de cada palavra.

Treinamento e validação do classificador.

- Classificação de textos em categorias/classes.
- Esse exemplo usa uma base de dados de grupos de discussão disponibilizada pela biblioteca Scikit-learn.
- Ele classifica textos em 4 classes: ‘religião’, ‘cristianismo’, ‘espaço’ e ‘computadores’.
- O objeto da classe ***CountVectorizer*** cria uma matriz registrando o número de vezes que cada palavra aparece.
- A ***matriz de confusão*** é usada para verificar a performance do classificador.



Matriz de confusão

Exemplo: ClassifyingTextMultinomialNB.ipynb

Classificador naïve Bayes Bernoulli

- Esse classificador é baseado na ***distribuição de Bernoulli***, que é uma ***distribuição discreta binária***.
- Portanto, esse classificador considera que os ***atributos*** são ***variáveis binárias*** (i.e., booleanos) independentes, ou seja, o ***atributo*** pode estar presente (True) ou ausente (False).
- Assim como o classificador multinomial, esse classificador é utilizado para tarefas de classificação de documentos, onde atributos binários da ocorrência de termos são usados em vez da frequências de termos.
- Se x_k é um atributo booleano que expressa a ocorrência ou ausência do *i*-ésimo termo de um vocabulário de termos (i.e., palavras), então a probabilidade condicional de um documento pertencer à classe C_q é dado por

$$P(\boldsymbol{x}|C_q) = \prod_k p_{qk}^{x_k}\left(1 - p_{qk}\right)^{(1-x_k)} = \prod_k P(t_k|C_q)^{x_k}\left(1 - P(t_k|C_q)\right)^{(1-x_k)}$$

$$= \prod_k [P(t_k|C_q)x_k + \left(1 - P(t_k|C_q)\right)(1 - x_k)],$$

onde $\boldsymbol{x} = [x_1 \quad \dots \quad x_K]$ é um vetor binário que representa a ocorrência ou não do termo, t_k , e p_{qk} é a probabilidade da classe C_q gerar o termo t_k.

- **OBS**.: Analisando-se a equação acima e a anterior, percebemos que diferentemente do classificador multinomialNB, o classificador BernoulliNB penaliza explicitamente a não ocorrência de um termo, t_k, já o multinomialNB simplesmente ignoraria um termo que não ocorresse.
- Esse classificador é bastante utilizado para classificar textos curtos e tem o benefício de classificar explicitamente a ausência de termos.

Exemplo: Classificador Bernoulli com Scikit-Learn

```
# Import all necessary libraries.
import pandas as pd
from sklearn.naive_bayes import BernoulliNB
from sklearn.feature_extraction.text import CountVectorizer
from sklearn.model_selection import train_test_split

# Read SMS data base with pandas.
url = 'https://raw.githubusercontent.com/justmarkham/pycon-2016-tutorial/master/data/sms.tsv'
sms = pd.read_table(url, header=None, names=['label', 'message'])

# Convert label to a numerical variable
sms['label_num'] = sms.label.map({'ham':0, 'spam':1})

# Create feature and label vectors.
X = sms.message
y = sms.label_num

# Split array into random train and test subsets.
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, random_state=42)

# Convert a collection of text documents into a matrix of token counts.
vect = CountVectorizer(binary=True)
# Learn the vocabulary dictionary and return term-document matrix.
X_train_t = vect.fit_transform(X_train)

# Instantiate a Bernoulli Naive Bayes model.
nb = BernoulliNB(binarize=None)
# Train the MultinomialNB model.
nb.fit(X_train_t, y_train)

# Transform document into document-term matrix.
X_test_t = vect.transform(X_test)
# Perform classification on an array of test vectors X_test_t.
y_pred_class = nb.predict(X_test_t)
```

Download da base de dados.

Converte labels em valores discretos.

Divide a base de dados em 75% treinamento e 25% validação.

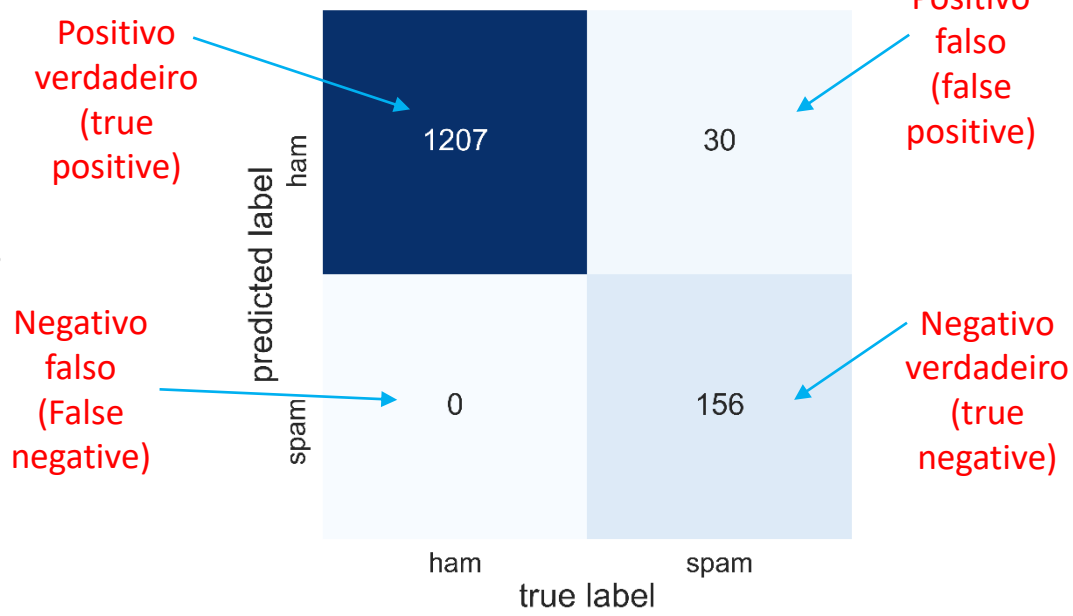
Cria matriz booleana indicando ou não a presença de uma palavra.

Treinamento do classificador.

Cria matriz boolena com a presença ou não de uma palavra para a base de validação

Validação do classificador.

- Classificação de mensagens entre SPAM e não-SPAM (HAM).
- Esse exemplo usa uma base de dados de mensagens SMS baixada do GitHub.
- Ele classifica as mensagens em 2 classes: ‘SPAM’ e ‘HAM’.
- O objeto da classe ***CountVectorizer*** cria uma matriz registrando se uma palavra aparece ou não (booleano) em cada mensagem.
- A ***matriz de confusão*** é usada para verificar a performance do classificador.



Exemplo: SPAMClassificationBernoulliNB.ipynb

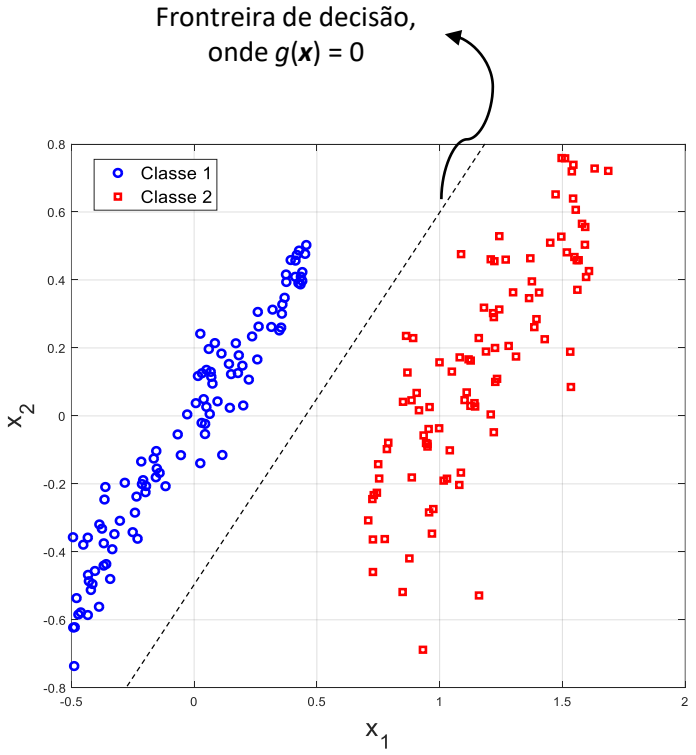
Classificadores lineares com limiar de decisão rígido

- Como vocês já devem ter percebido, funções lineares podem ser utilizadas em tarefas de ***regressão*** e ***classificação***.
- Dado um conjunto de treinamento, a tarefa do classificador é a de ***aprender*** uma ***função hipótese*** h que receberá um novo e desconhecido exemplo (e.g., x_1 e x_2) e retornará ***0*** caso sua classe seja C_1 (***classe negativa***) ou ***1*** caso ela seja C_2 (***classe positiva***).
- Uma ***fronteira de decisão*** é uma hiperplano (1 ponto em 1D, uma reta em 2D e um plano em 3D) que separa as classes.
- No exemplo da figura ao lado, a ***fronteira de decisão*** é definida por ***função discriminante*** que é uma reta.
- Uma ***fronteira de decisão linear*** é chamada de ***separador linear*** e dados que admitem tal separador são chamados de ***linearmente separáveis***.
- Portanto, para o exemplo ao lado, podemos definir a ***função hipótese de classificação*** como

$$h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}) = 1 \text{ se } g(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{a} \geq 0 \text{ e 0 caso contrário.}$$

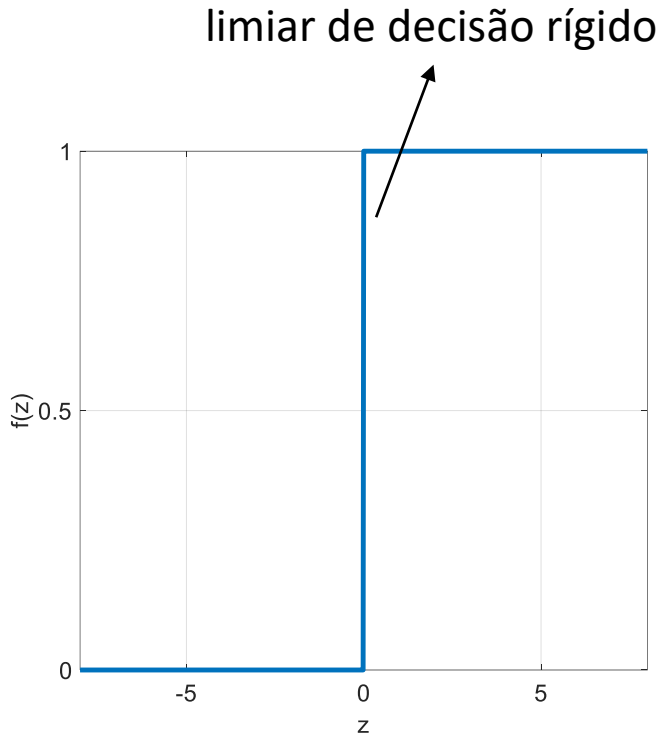
- Alternativamente, nós podemos expressar h como sendo o resultado de passar a função linear $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{a}$ (i.e, ***função discriminante***) através de uma ***função de limiar rígido*** $f(.)$

$$h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{a}), \text{ onde } f(z) = 1 \text{ se } z \geq 0 \text{ e 0 caso contrário.}$$



Classificadores lineares com limiar de decisão rígido

- A **função de limiar rígido** é mostrada na figura ao lado.
- Agora que a ***função hipótese*** $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})$ tem uma forma matemática bem definida, nós podemos pensar em como escolher os pesos $\boldsymbol{a}$ que minimizem o erro de classificação.
- No caso da ***regressão linear***, nós fizemos isso de duas maneiras: (i) de forma fechada (através da ***equação normal***) fazendo o gradiente igual a zero e resolvendo a equação para os pesos; (ii) e através do ***gradiente descendente***.
- Entretanto, com a ***função de limiar rígido*** que escolhemos e mostrada na figura, nenhuma das duas abordagens é possível devido ao fato do ***gradiente*** ser zero em todos os pontos do espaço de pesos exceto nos pontos onde $\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{a} = 0$, e mesmo assim, o ***gradiente*** é indeterminado nesses pontos.
- **Portanto, o que podemos fazer?**



Classificadores lineares com limiar de decisão rígido

- Uma possível abordagem para o problema quando utilizamos um limiar de decisão rígido é utilizar uma ***regra intuitiva*** de atualização dos pesos que converge para uma solução ***dado que os dados sejam linearmente separáveis***.
- A atualização dos pesos é dada pela seguinte equação

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

a qual é essencialmente idêntica à regra de atualização para a regressão linear.

- Esta regra é chamada de ***regra de aprendizagem do perceptron***, por razões que discutiremos em breve.
- Como estamos considerando classificações com valores de saída 0 ou 1, o comportamento da regra de atualização será diferente do comportamento para a regressão linear, como veremos a seguir.

Classificadores lineares com decisão rígida

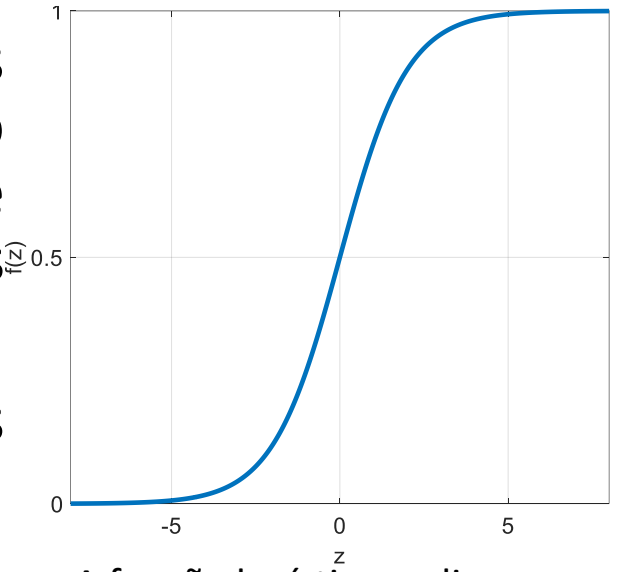
- Ambos, o valor desejado, y, e a saída da função hipótese, $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})$, assumem os valores 0 ou 1, portanto, existem 3 possibilidades:
  - Se a saída estiver correta, i.e., $y = h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})$, então os pesos não são atualizados.
  - Se $y = 1$, mas $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}) = 0$, então o peso a_k tem seu valor ***aumentado*** quando o valor de x_k é positivo e ***diminuído*** quando o valor de x_k é negativo.
    - Isso faz sentido pois nós queremos aumentar o valor do produto escalar $\boldsymbol{x^T a}$ de tal forma que $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})$ tenha como saída o valor 1.
  - Se $y = 0$, mas $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}) = 1$, então o peso a_k tem seu valor ***diminuido*** quando o valor de x_k é positivo e ***aumentado*** quando o valor de x_k é negativo.
    - Isso faz sentido pois nós queremos diminuir o valor do produto escalar $\boldsymbol{x^T a}$ de tal forma que $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})$ tenha como saída o valor 0.

Classificadores lineares com decisão rígida

- Normalmente, essa regra de aprendizagem é aplicada a um exemplo por vez, escolhendo exemplos aleatóriamente, assim como fizemos com o gradiente descendente estocástico.
- A ***regra de aprendizagem do perceptron*** converge para um separador linear perfeito quando os dados são linearmente separáveis, porém, na prática essa situação não é muito comum.
- Nesse caso, a ***regra de aprendizagem do perceptron*** falha em convergir para uma solução perfeita.
- Em geral, essa regra não converge para uma solução estável para valores fixos do ***passo de aprendizagem***, α, mas se α decresce de acordo com as iterações, então a regra tem uma chance de convergir para uma solução de erro mínimo quando os exemplos são apresentados de forma aleatória.

Classificação linear com regressão logística

- Outra possível abordagem é mostrada a seguir.
- Além do fato de que a **função hipótese**, $h_a(\boldsymbol{x})$, não ser ***diferenciável*** e ser de fato, uma função ***descontínua***, nós percebemos que com a ***função de limiar rígida*** o ***classificador*** sempre faz uma ***previsão*** completamente confiante da classe (i.e., 0 ou 1), mesmo para exemplos muito próximos da ***fronteira de decisão***.
- Em muitas situações, nós precisamos de previsões mais graduadas, que indiquem incertezas quanto à classificação.
- Todos esses problemas podem ser resolvidos em grande parte com a ***suavização*** da ***função de limiar rígida*** através de sua aproximação por uma função que seja contínua e diferenciável.



A função logística realiza um mapeamento $\mathbb{R} \rightarrow [0,1]$.

Classificação linear com regressão logística

- A ***função logística*** (ou ***função sigmóide***), mostrada na figura ao lado e definida como

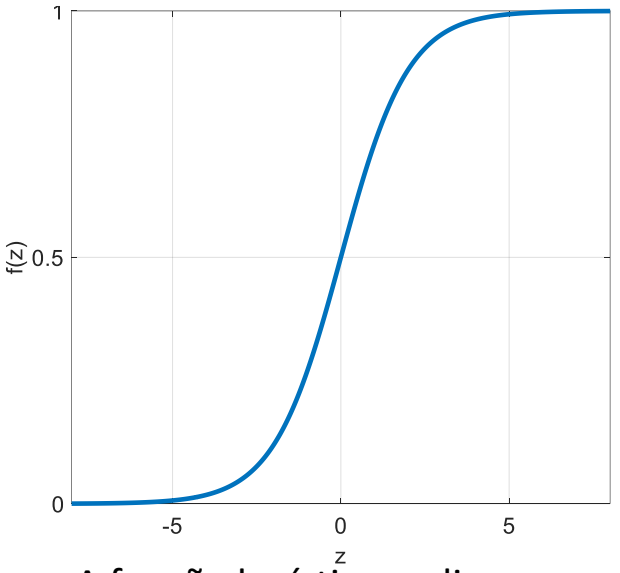
$$Logistic(z) = \frac{1}{1+e^{-z}},$$

apresenta tais propriedades matemáticas.

- Utilizando a ***função logística*** como ***função de limiar***, temos

$$h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}) = Logistic(\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{a}) = \frac{1}{1+e^{-x^T a}} \in [0,1].$$

- Perceba que a saída será um real entre 0 e 1, o qual pode ser interpretado como uma ***probabilidade*** de um dado exemplo pertencer à classe C_2 (ou seja, a ***classe positiva***).
- A ***função hipótese*** $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})$ forma uma ***fronteira de decisão*** suave, a qual confere a probabilidade de 0.5 para entradas no centro da região de decisão e se aproxima de 0 ou 1 conforme a posição do exemplo se distancia da fronteira.



A função logística realiza um mapeamento $\mathbb{R} \rightarrow [0,1]$.

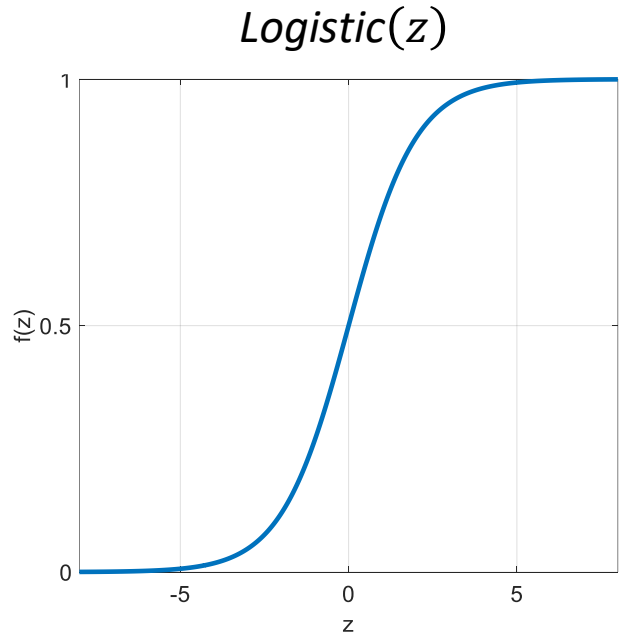
Regressão logística

- A ***regressão logística*** (é também chamada de ***regressão logit***) é um método para ***classificação binária***. Ela classifica os exemplos de um conjunto de dados em duas classes distintas, ou seja, é ótima para situações em que você precisa classificar entre duas classes, C_1 e C_2.
- A ***regressão logística*** estima a ***probabilidade*** de um exemplo pertencer a uma classe específica (por exemplo, qual é a probabilidade de uma dado email ser spam?).
- Se a ***probabilidade*** estimada para o exemplo for maior que ou igual a 50%, o classificador prediz que o exemplo pertence a essa classe (denominada ***classe positiva***, rotulada como 1), ou então prediz que não pertence (ou seja, pertence à ***classe negativa***, rotulada como 0). Ou seja

$$Classe = \hat{y} = \begin{cases} 0\ (\text{classe } C_1), \text{se } h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}) < 0.5 \\ 1\ (\text{classe } C_2), se\ h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}) \geq 0.5 \end{cases}$$

Regressão logística

- Note que $Logistic(z) < 0.5$ quando $z < 0$ e $Logistic(z) \geq 0.5$ quando $z \geq 0$, portanto, o modelo de ***regressão logística*** prediz a classe C_2 (i.e., $\hat{y} = 1$) se $\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{a}$ for positivo e C_1 (i.e., $\hat{y} = 0$) se for negativo.
- Como vimos, a ***regressão logística*** funciona usando uma ***combinação linear*** de ***atributos***, para que várias fontes de informação (i.e., atributos) possam governar/ditar a saída do modelo.
- Os ***parâmetros do modelo*** são os ***pesos*** dos vários ***atributos*** e representam sua importância relativa para o resultado.
- Mesmo sendo uma técnica bastante simples, a ***regressão logística*** é muito utilizada em várias aplicações do mundo real em áreas como medicina, marketing, análise de crédito, saúde pública entre outras.
- Além disto, toda a teroria por trás da regressão logística foi a base para a criação das primeiras redes neurais.



Propriedades da regressão logística

- Os valores de saída da ***função hipótese*** $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})$ ficam restritos entre o intervalo $0 \leq h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}) \leq 1$.
- A saída de $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})$ representa a ***probabilidade*** do vetor de atributos $\boldsymbol{x}$ pertencer à classe positiva, C_2, para qual a saída desejada é $y = 1$. Ou seja, $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})$ dá a probabilidade condicional da ***classe positiva***, C_2, i.e., $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}) = P(C_2 \mid \boldsymbol{x}; \boldsymbol{a})$.
- Assim, consequentemente, $(1 - h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}))$ = $P(C_1 \mid \boldsymbol{x}; \boldsymbol{a})$ é a probabilidade condicional da ***classe negativa***, C_1.
- A ***fronteira de decisão*** é determinada quando há uma ***indecisão*** entre as classes, ou seja, quando $P(C_1 \mid \boldsymbol{x}; \boldsymbol{a}) = P(C_2 \mid \boldsymbol{x}; \boldsymbol{a})$, que ocorre quando $P(C_2 \mid \boldsymbol{x}; \boldsymbol{a}) = h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}) = 0.5$.
- Observando a figura da ***função logística***, nós percebemos que *Logistic*$(z) = 0.5$ quando $z = 0$.
- Desta forma, a ***fronteira de decisão*** é caracterizada por

$$g(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{a} = a_0 + a_1 x_1 + \ \ldots + a_K x_K = 0,$$

  e corresponde a um ***hiperplano*** (um ponto, uma reta, uma superfície, etc.).
- A saída do classificador, $\hat{y}$, já discretizada, é dada por

$$\hat{y} = \begin{cases} 0 \text{ (classe } C_1), \text{se } h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}) < 0.5 \\ 1 \text{ (classe } C_2), se\ h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}) \geq 0.5 \end{cases}$$

Função de erro

- Para que possamos treinar um modelo de regressão logística e encontrar os seus pesos, nós precisamos, assim como fizemos com a regressão linear, definir uma ***função de erro***.
- Porém, adotar o ***erro quadrático médio*** como ***função de erro*** não é uma escolha muito acertada para a ***adaptação dos pesos*** no caso da ***regressão logística*** como veremos a seguir.
- A ***função de erro*** utilizando o ***erro quadrático médio*** é dada por

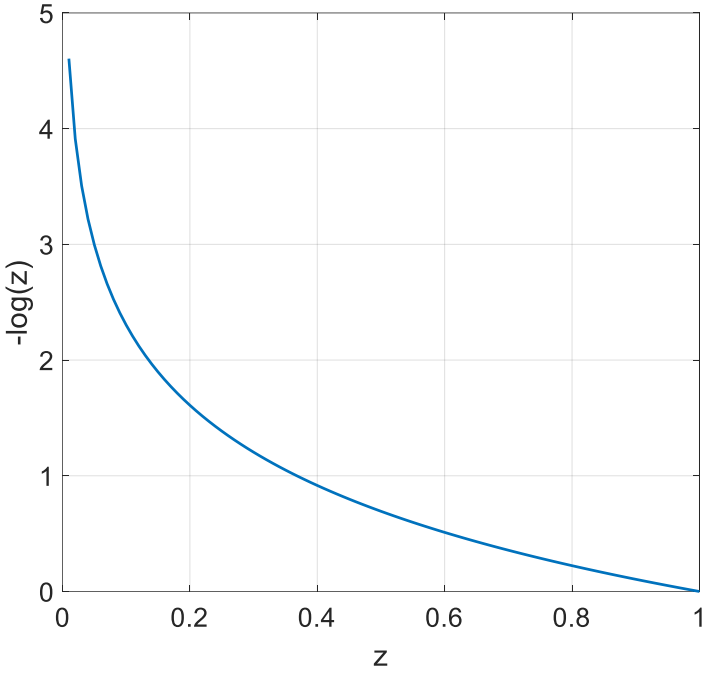
$$J_e(\boldsymbol{a}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\big(y(i) - h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})\big)^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\big(y(i) - Logistic(\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{a})\big)^2.$$

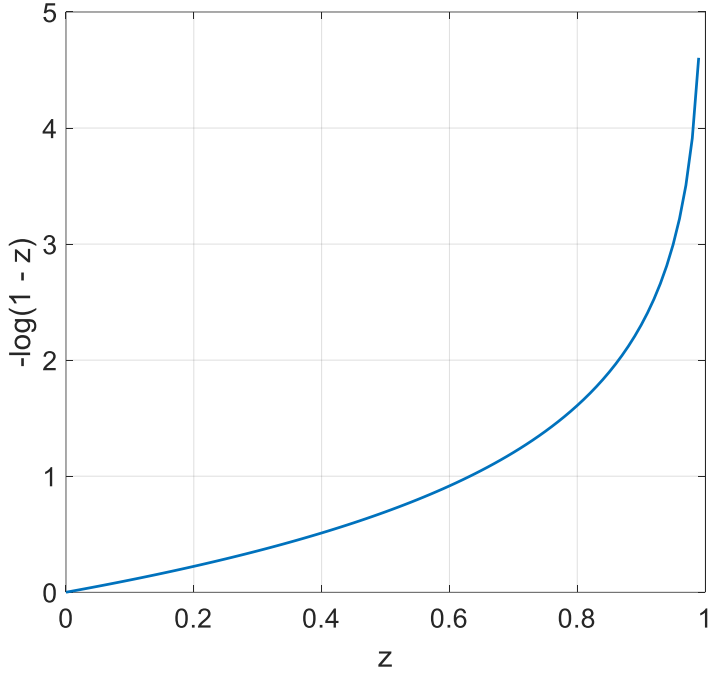
- Como *Logistic(.)* é uma função ***não-linear***, $J_e(\boldsymbol{a})$ não será consequentemente uma função ***convexa***, de forma que a ***superfície de erro*** poderá apresentar mínimos locais que vão dificultar o aprendizado (e.g., o algoritmo pode ficar preso em um mínimo local).
- **Ideia**: adotar uma função que melhor se adapte às características do problema de tal forma que a ***superfície de erro*** resultante seja ***convexa***.
- Uma proposta intuitiva para a ***função de erro*** para cada exemplo de entrada é dada por

$$Erro(h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}); y) = \begin{cases} -\log(h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})), & \text{se } y = 1 \\ -\log\big(1 - h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x})\big), & \text{se } y = 0 \end{cases}$$

- Veremos a seguir o motivo desta escolha.

Função de erro





As figuras ao lado mostram as duas situações possíveis para a ***função de erro***. Como podemos observar, a penalização aplicada a cada saída reflete o ***erro de classificação***.

- O uso dessa ***função de erro*** faz sentido pois:
  - O valor de $-\log(z)$ se torna muito grande quando z se aproxima de 0, então o erro será grande se o classificador estimar uma probabilidade próxima a 0 para um exemplo positivo (i.e., pertencente à classe C_2)
  - O valor de $-\log(1-z)$ será muito grande se o classificador estimar uma probabilidade próxima de 1 para um exemplo negativo (i.e., pertencente à classe C_1) .
  - Por outro lado, $-\log(z)$ se torna próximo de 0 quando z se aproxima de 1, portanto, o erro será próximo de 0 se a probabilidade estimada for próxima de 1 para um exemplo positivo.
  - O valor $-\log(1-z)$ se torna próximo de 0 quando z se aproxima de 0, portanto, o erro será próximo de 0 para um exemplo negativo.

Função de erro

- Nós podemos reduzir a definição da ***função de erro*** a uma expressão única, dada por

$$Erro(h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}); y) = \underbrace{-y \log(h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}))}_{\text{Só exerce influência no erro se } y=1} \underbrace{-(1-y)\log(1-h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}))}_{\text{Só exerce influência no erro se } y=0} .$$

- Com isto, podemos definir a seguinte ***função de erro médio***:

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

$$= -\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1} y(i)\log(P(C_2 \mid \boldsymbol{x}(i); \boldsymbol{a})) + \left(1-y(i)\right)\log(P(C_1 \mid \boldsymbol{x}(i); \boldsymbol{a}))$$

$$= -\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1}\sum_{q=1}^{Q} 1\{y(i)+1 == q\}\log\left(P\left(C_q \mid \boldsymbol{x}(i); \boldsymbol{a}\right)\right),$$

$y(i) \in \{0,1\} \forall i$

onde 1{·} é a ***função indicadora***, de modo que 1{uma afirmação verdadeira} = 1 e 1{uma afirmação falsa} = 0.

- A má notícia aqui é que não existe uma ***equação de forma fechada*** conhecida para calcular o valor dos pesos $\boldsymbol{a}$ que minimize essa ***função de erro*** (ou seja, não há um equivalente da ***Equação Normal***).
- A boa notícia é que essa ***função de erro*** é ***convexa*** e portanto, é garantido que o algoritmo do ***gradiente descendente*** encontre o mínimo global (dado que a ***taxa de aprendizagem*** não seja muito grande e você espere tempo suficiente).

Processo de treinamento

- Semelhante ao que fizemos com a ***regressão linear***, vamos apresentar em seguida o algoritmo do ***gradiente descendente*** para a ***minimização*** da ***função de erro médio*** apresentada anteriormente.
- Antes de encontrarmos o ***vetor gradiente*** de $J_e(\boldsymbol{a})$, vamos reescrever a ***função de erro*** utilizando as seguintes equivalências

$$\log(h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}(i))) = \log\left(\frac{1}{1+e^{-x(i)^T\boldsymbol{a}}}\right) = -\log\left(1+e^{-\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a}}\right),$$

$$\log(1-h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}(i))) = \log\left(1-\frac{1}{1+e^{-x(i)^T\boldsymbol{a}}}\right) = -\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a} - \log\left(1+e^{-\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a}}\right).$$

- Assim, a nova expressão para a ***função de erro médio*** é dada por

$$J_e(\boldsymbol{a}) = -\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1} -y(i)\log\left(1+e^{-\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a}}\right) + (1-y(i))\left[-\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a} - \log\left(1+e^{-\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a}}\right)\right]$$

Processo de treinamento

- O termo $-y(i)\log\left(1+e^{-\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a}}\right)$ é cancelado com um dos elementos gerados a partir do produto envolvido no segundo termo, de forma que

$$J_e(\boldsymbol{a}) = -\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1} -\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a} + y(i)\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a} - \log\left(1+e^{-\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a}}\right).$$

- Se $-\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a} = -\log\left(e^{\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a}}\right)$, então

$$-\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a} - \log\left(1+e^{-\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a}}\right) = -\log\left(1+e^{\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a}}\right).$$

- Desta forma, a ***função de erro médio*** se torna

$$J_e(\boldsymbol{a}) = -\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1} y(i)\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a} - \log\left(1+e^{\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a}}\right).$$

- Em seguida, encontramos o ***vetor gradiente*** de cada termo da equação acima.

Processo de treinamento

- Assim, o ***vetor gradiente*** do primeiro termo da equação anterior é dado por

$$\frac{\partial[y(i)\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a}]}{\partial\boldsymbol{a}} = y(i)\boldsymbol{x}(i)^T$$

- O ***vetor gradiente*** do segundo termo é dado por

Usamos a regra da cadeia.

$$\frac{\partial\left[\log\left(1+e^{\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a}}\right)\right]}{\partial\boldsymbol{a}} = \frac{1}{1+e^{\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a}}}e^{\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a}}\boldsymbol{x}(i)^T = \frac{1}{1+e^{-\boldsymbol{x}(i)^T\boldsymbol{a}}}\boldsymbol{x}(i)^T = h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}(i))\boldsymbol{x}(i)^T.$$

- Portanto, combinando os 2 resultados acima, temos que o ***vetor gradiente*** da ***função de erro médio*** é dado por

$$\frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial\boldsymbol{a}} = -\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1} y(i)\boldsymbol{x}(i)^T - h_{\boldsymbol{a}}\big(\boldsymbol{x}(i)\big)\boldsymbol{x}(i)^T = -\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1}\big[y(i) - h_{\boldsymbol{a}}\big(\boldsymbol{x}(i)\big)\big]\boldsymbol{x}(i)^T$$

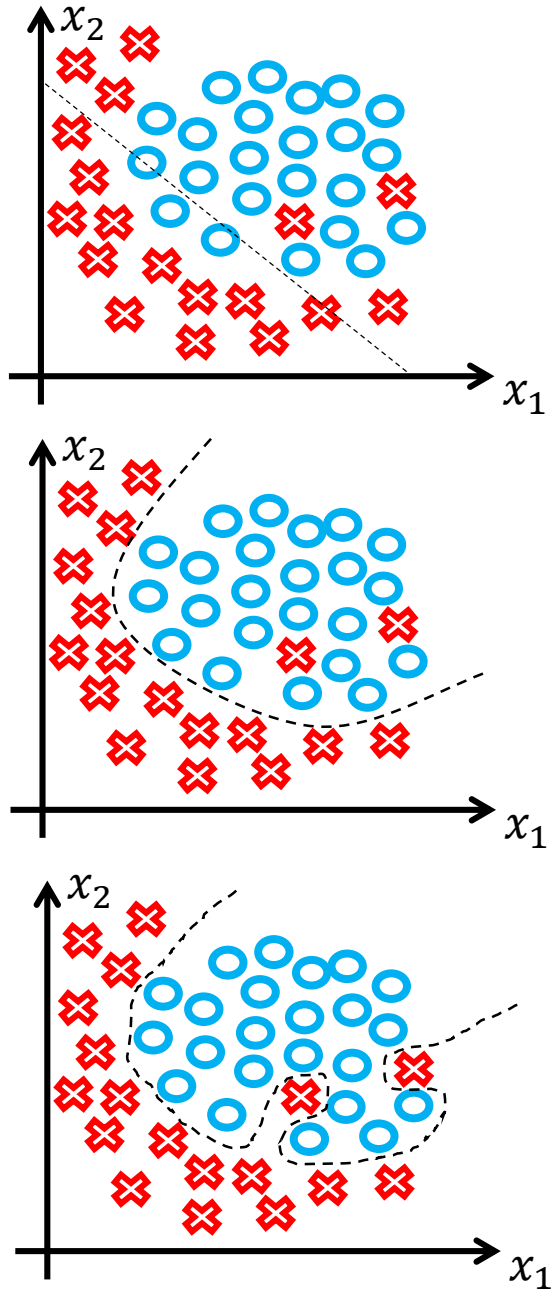
- Depois de obter o ***vetor gradiente***, podemos usá-lo no algoritmo do ***gradiente descendente*** (nas versões em batelada, estocástico ou mini-batch).
- Finalmente, a atualização dos pesos é dada por

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a} - \alpha\frac{\partial J_e(\boldsymbol{a})}{\partial\boldsymbol{a}}.$$

Exemplo: SPAMClassificationLogisticRegressionGD.ipynb

Observações

- A expressão do ***vetor gradiente*** da ***função de erro médio*** para a ***regressão logística*** é similar àquela obtida para a ***regressão linear*** com o critério dos ***quadrados mínimos***.
- A ***regressão logística*** também pode ser facilmente estendida para incorporar termos ***polinomiais*** envolvendo os atributos de entrada (e.g., x_1^2, x_2^2). Desta forma, pode-se produzir ***fronteiras de decisão não-lineares***.
- Assim como nós discutimos no caso da ***regressão linear***, modelos de ***regressão logística*** também estão sujeitos à ocorrência de ***sobreajuste*** e ***subajuste***.
  - Na primeira figura, a falta de flexibilidade da reta usada faz com que o erro de classificação seja alto.
  - Na última figura, a flexibilidade excessiva do modelo (explorando um polinômio de ordem elevada) dá origem a contorções na ***fronteira de decisão*** na tentativa de minimizar o erro de classificação junto aos dados de treinamento. Porém, o modelo ficou mais susceptível a erros de classificação para novos dados, ou seja, não irá generalizar bem.
  - Já a figura do meio mostra o que seria uma boa ***hipótese de classificação***.
- Por isso, ***técnicas de regularização*** podem ser empregadas em seu treinamento, assim como ***validação cruzada*** e ***early stopping***.



Exemplo: Regressão Logistica com SciKit-Learn

```
# Import all necessary libraries.
import pandas as pd
from sklearn.linear_model.logistic import LogisticRegression
from sklearn.feature_extraction.text import CountVectorizer
from sklearn.model_selection import train_test_split

# Read SMS data base with pandas.
url = 'https://raw.githubusercontent.com/justmarkham/pycon-2016-tutorial/master/data/sms.tsv'
sms = pd.read_table(url, header=None, names=['label', 'message'])

# Split array into random train and test subsets.
x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(x, y, random_state=42)

# Convert a collection of text documents into a matrix of token counts.
vect = CountVectorizer()
# Learn the vocabulary dictionary and return term-document matrix for the training set.
x_train_dtm = vect.fit_transform(x_train)
# Transform validation set into document-term matrix.
x_test_dtm = vect.transform(x_test)

# Instantiate Logistic classifier.
classifier = LogisticRegression()
# Train the model.
classifier.fit(x_train_dtm, y_train.ravel())

y_pred_class = classifier.predict(x_test_dtm)
```

Importa classe de regressão Logística.

Download da base de dados.

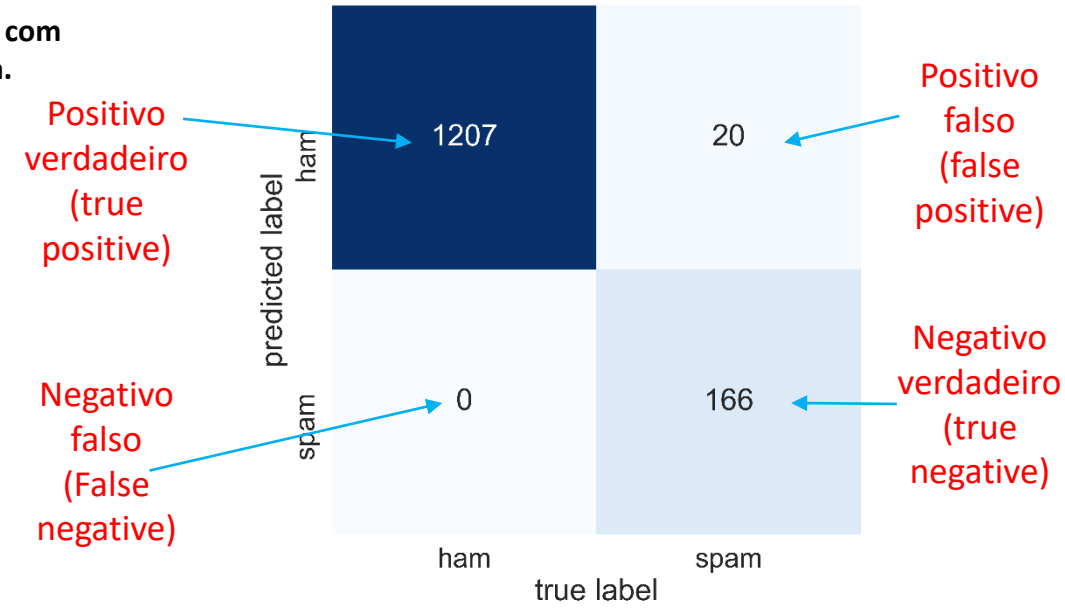
Divide a base de dados em 75% treinamento e 25% validação.

Converte as mensagens de treinamento em uma matriz com a frequência de cada palavra.

Converte as mensagens de validação em uma matriz com a frequência de cada palavra, baseado no vocabulário criado com o conjunto de treinamento.

Treinamento e validação do classificador.

- Classificação de mensagens entre SPAM e não-SPAM.
- Exemplo usa uma base de dados baixada do GitHub.
- Classifica as mensagens em 2 classes: 'SPAM' e 'HAM'.
- O objeto da classe ***CountVectorizer*** cria uma matriz registrando o número de vezes (frequência) com que cada palavra aparece na mensagem.
- A ***matriz de confusão*** mostra a performance do classificador.



Exemplo: SPAMClassificationLogisticRegressionSciKit.ipynb

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., $Q > 2$)?
- Existem algumas abordagens para classificação multi-classe:
  - Um-contra-o-Resto
  - Um-contra-Um
  - Regressão softmax
- Essas abordagens podem ser aplicadas a qualquer tipo de classificador binário e não apenas com o regressor logístico.

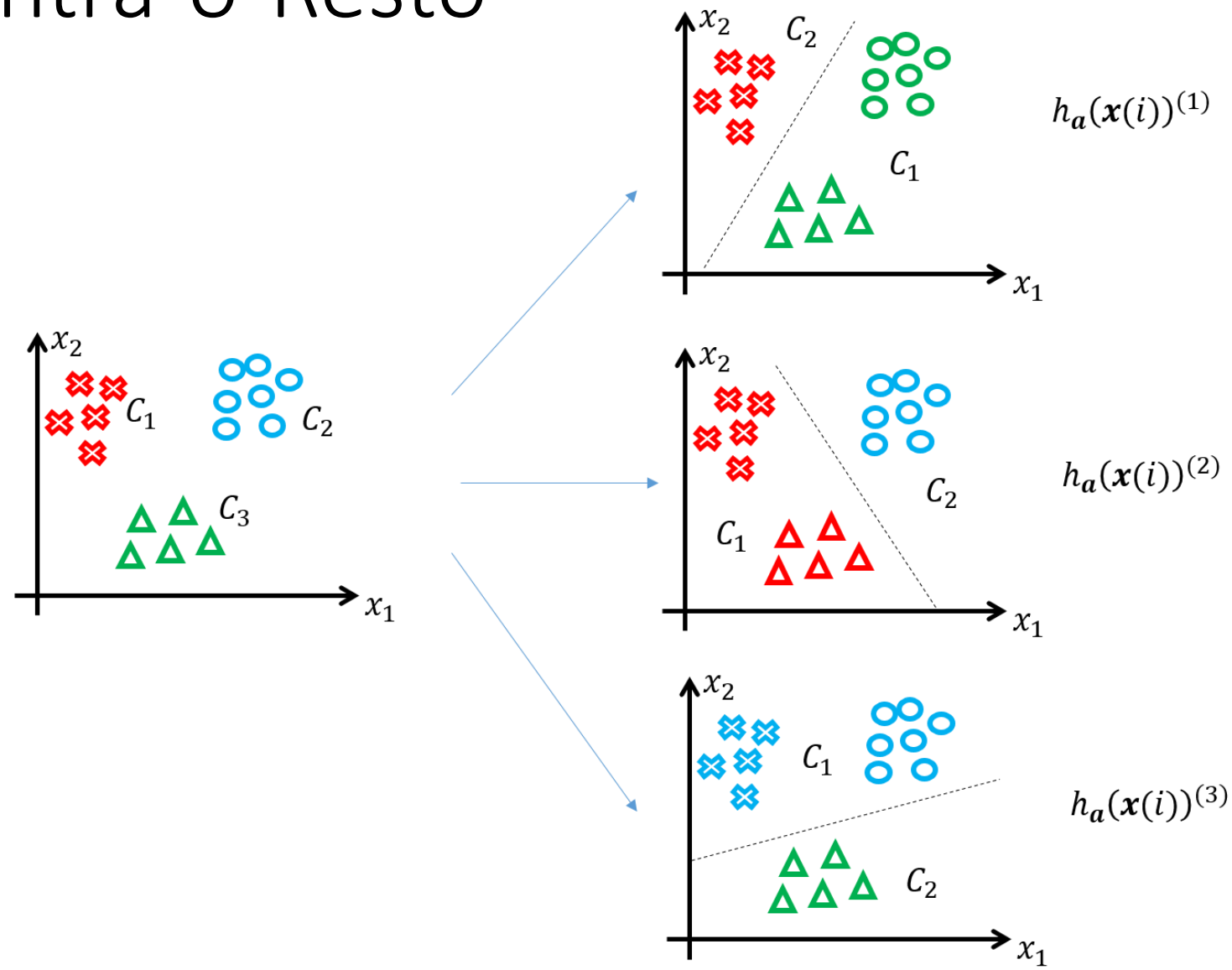
Um-Contra-o-Resto

- Nesta abordagem, nós treinamos um ***classificador binário*** (e.g., ***regressor logístico***) $h_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{x}(i))^{(q)}$ 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 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

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

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

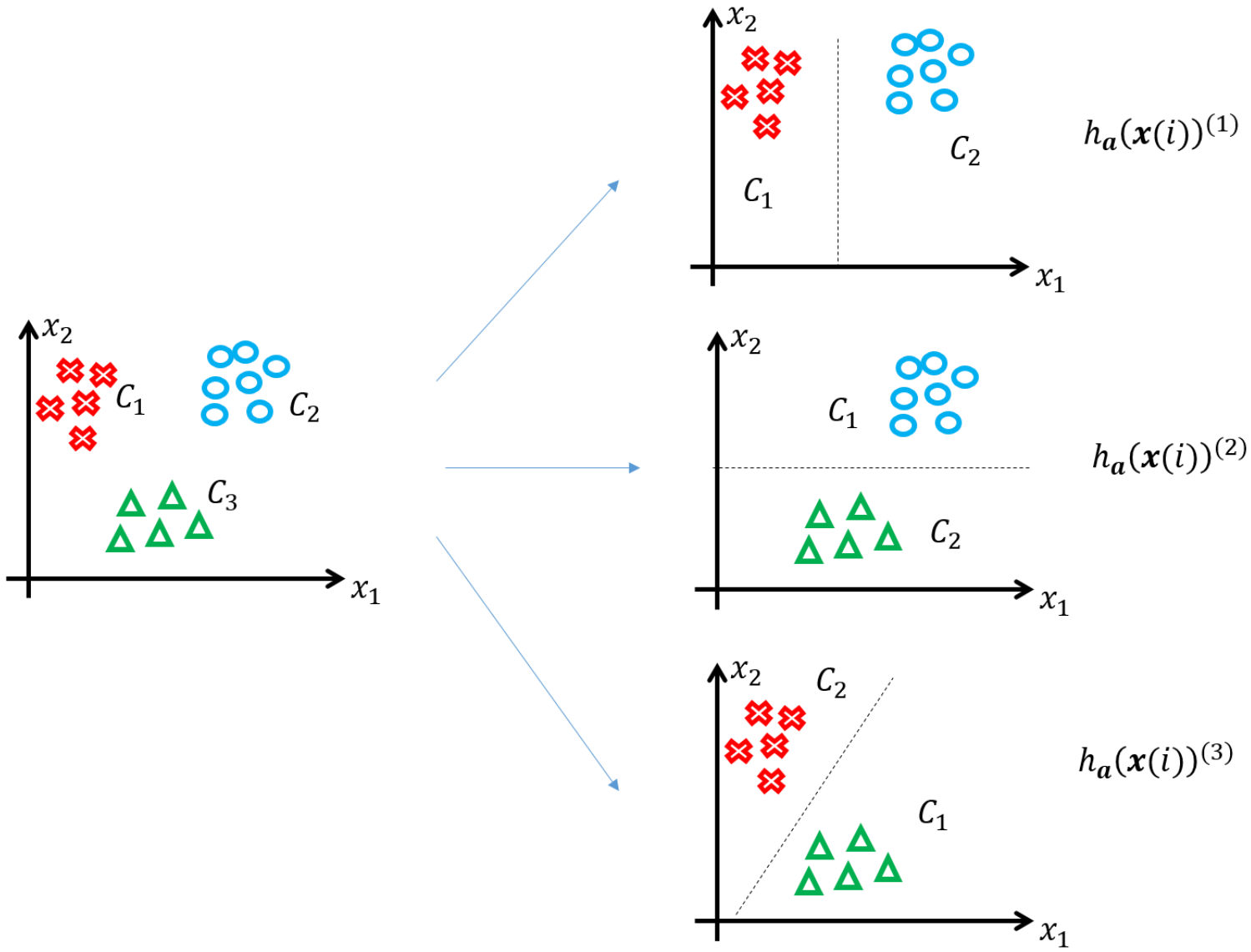


Um-Contra-Um

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

Regressão Softmax

- Também conhecida como ***regressão logística multinomial***.
- A ideia é ter um ***único*** classificador que classifique mais de 2 classes.
- É importante salientar que ele prediz ***apenas uma classe de cada vez***, ou seja, ele é multi-classe e não multi-saída, 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***, explorando a ***função softmax***, que é definida por

$$P\left(C_q \,|\boldsymbol{x}(i)\right) = h_{\boldsymbol{a}}^{q}\left(\boldsymbol{x}(i)\right) = \frac{e^{\boldsymbol{x}(i)^T \boldsymbol{a}_q}}{\sum_{j=1}^{Q} e^{\boldsymbol{x}(i)^T \boldsymbol{a}_j}},$$

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

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

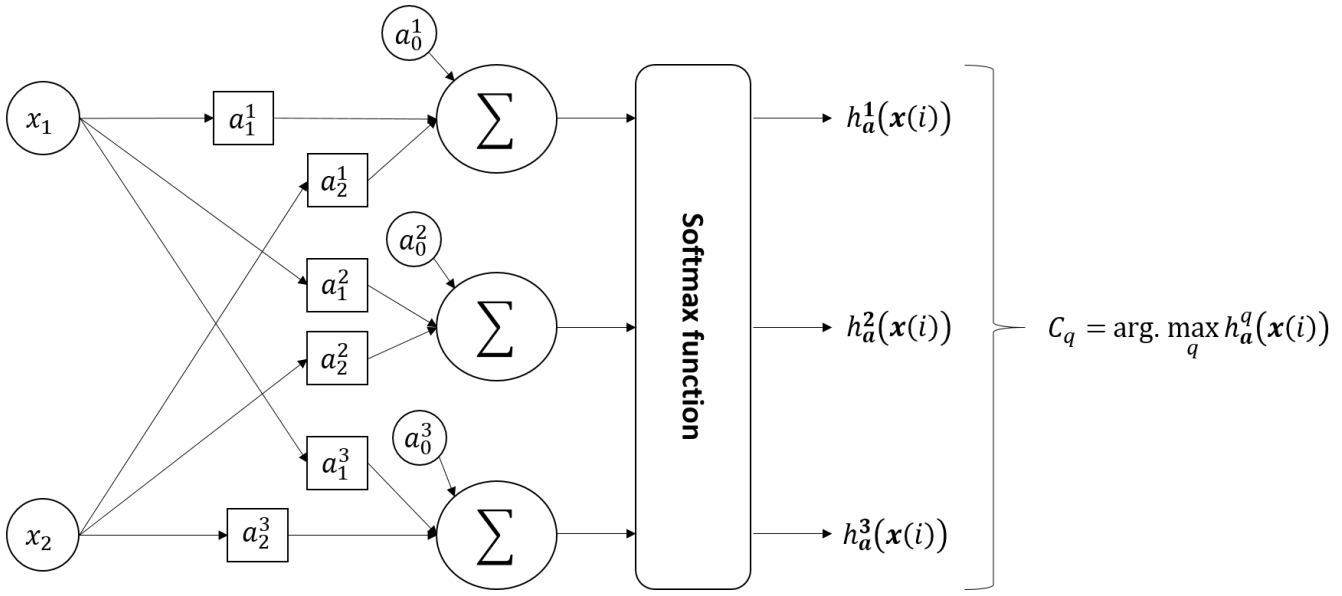
é a ***função discriminante*** para a classe q.

Regressão Softmax

- Para cada novo exemplo de entrada, $\boldsymbol{x}$, realiza-se as predições e escolhe-se a classe que maximize

$$C_q = \arg.\max_q h_{\boldsymbol{a}}^q\big(\boldsymbol{x}(i)\big) = \arg.\max_q \boldsymbol{x}(i)^T \boldsymbol{a}_q\,.$$

- 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 $\boldsymbol{x}(i)^T \boldsymbol{a}_q$).



Regressão Softmax

- A ***função de erro*** é dada por

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

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 Q classes.

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

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

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

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

- Observem que, quando existem apenas duas classes (Q = 2), a função de erro acima é equivalente à função de erro da regressão logística.

Propriedades da regressão Softmax

- $\sum_{q=1}^{Q} h_{\boldsymbol{a}}^{q}\big(\boldsymbol{x}(i)\big) = \sum_{q=1}^{Q} P\big(C_q \,\big|\boldsymbol{x}; \boldsymbol{a}_q\big) = 1$, 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

$$\boldsymbol{h_a}\big(\boldsymbol{x}(i)\big) = \big[h_{\boldsymbol{a}}^{1}\big(\boldsymbol{x}(i)\big) \quad \cdots \quad h_{\boldsymbol{a}}^{Q}\big(\boldsymbol{x}(i)\big)\big] \in \mathbb{R}^{Q\times 1}$$

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

- A derivada de $J_e(\boldsymbol{A})$ com respeito a cada vetor de pesos $\boldsymbol{a}_q$ segue uma expressão semelhante àquela obtida para a ***regressão logística***:

$$\frac{\partial J_e(\boldsymbol{A})}{\partial \boldsymbol{a}_q} = -\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1}\big[y^q(i) - h_{\boldsymbol{a}}^{q}\big(\boldsymbol{x}(i)\big)\big]\boldsymbol{x}(i)^T.$$

Exemplo: Regressão softmax com SciKit-Learn

```
# Import all necessary libraries.
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.datasets import load_digits
from sklearn.linear_model.logistic import LogisticRegression
from sklearn.model_selection import train_test_split

# Load digit data set.
digits = load_digits()
x = digits.data
y = digits.target

# Split the data set.
x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(x, y, test_size=0.3, random_state=42)

# Instantiate LogisticRegression object.
model = LogisticRegression(max_iter=10000, multi_class='multinomial')

# Train model.
model.fit(x_train, y_train)

# Predict.
y_pred = model.predict(x_test)
```

Importa classe de regressão Logística.

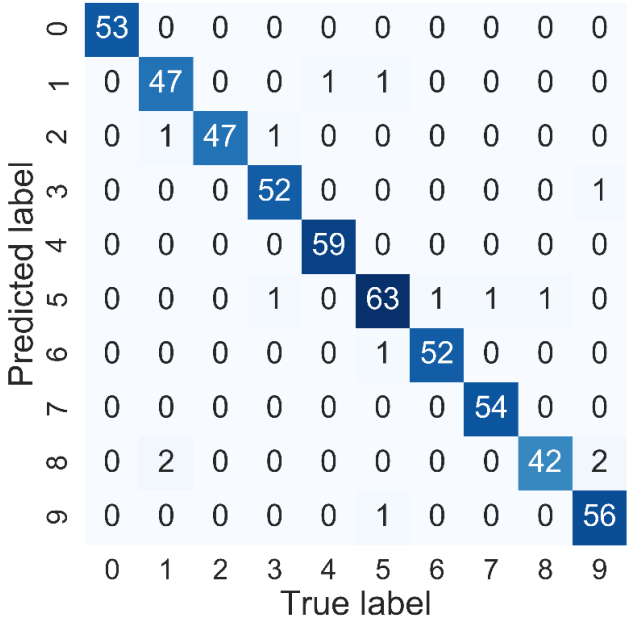
Carrega base de dados da biblioteca SciKit-Learn.

Divide a base de dados em 70% treinamento e 30% validação.

Instancia objeto da classe LogisticRegression para realizar regressão logistica Multinomial.

Treinamento e validação do classificador.

- Classificação de dígitos escritos à mão.
- Exemplo usa uma base de dados baixada do SciKit-Learn.
- Classifica os dígitos em 10 classes: 0 à 9.
- A ***matriz de confusão*** mostra a performance do classificador.



- A classe ***LogisticRegression*** usa a abordagem ***um-contra-todos*** por padrão quando se treina com conjuntos com mais de duas classes, mas pode-se definir o hiperparâmetro ***multi_class*** como "***multinomial***" para alternar para Regressão Softmax.
- Deve-se também especificar um solver que suporte a Regressão Softmax, como por exemplo o solver "lbfgs" (consulte a documentação do Scikit-Learn). A classe ***LogisticRegression*** também aplica a regularização L2 por padrão, que pode ser controlada usando o hiperparâmetro ***C***.

Exemplo: MultiClassDigitClassification. ipynb

Métricas de avaliação da classificação

A seguir, nós vamos estudar algumas métricas de classificação:

- Taxa de erro e acurácia
- Matrix de confusão
- Pontuação-F (F-score)
- Curva Característica Operacional do Receptor (ROC)

Métricas de avaliação da classificação

Taxa de erro e acurácia

- A ***taxa de erro***, é intuitivamente, a métrica mais direta para se avaliar o desempenho de um classificador.
- Ela corresponde à porcentagem de exemplos classificados incorretamente considerando o conjunto de dados disponíveis para validação.
- A ***taxa de erro*** é dada por

$$p_e(\hat{y}(\boldsymbol{x})) = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1}\big(1 - \delta(y(i), \hat{y}(\boldsymbol{x}(i)))\big),$$

onde $\delta(i,j) = \begin{cases} 0, \text{se } i \neq j \\ 1, \text{se } i = j \end{cases}$ é o delta de Kronecker. Observe que $p_e(\hat{y}(\boldsymbol{x})) \in [0,1]$.

- O complemento da ***taxa de erro*** é conhecido como ***acurácia***, e é definida por

$$\text{acc}\big(\hat{y}(\boldsymbol{x})\big) = 1 - p_e(\hat{y}(\boldsymbol{x})).$$

Métricas de avaliação da classificação

Matriz de Confusão

- O nome, ***matriz de confusão***, deriva do fato de que ela torna fácil verificar se o classificador está confundindo classes (ou seja, geralmente rotulando incorretamente uma como a outra).
- A ***matriz de confusão*** $\boldsymbol{C} \in \mathbb{R}^{Q \times Q}$ contabiliza o número de classificações corretas e incorretas para cada uma das Q classes existentes.
- A ***matriz de confusão*** $\boldsymbol{C}$ é definida como

$$\boldsymbol{C} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \cdots & C_{1Q} \\ C_{21} & C_{22} & & C_{2Q} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ C_{Q1} & C_{Q2} & \cdots & C_{QQ} \end{bmatrix},$$

Exemplos classificados como pertencentes à classe 1.

Exemplos pertencentes à classe 1.

onde o elemento C_{12} indica quantos padrões da classe 1 foram atribuídos à classe 2. Portanto, a diagonal de $\boldsymbol{C}$, nos fornece o número de classificações corretas.

- Cada ***linha*** da matriz representa os exemplos que foram classificados como pertencentes a uma dada classe, enquanto cada ***coluna*** representa os exemplos realmente pertencentes a uma dada classe.
- A informação apresentada nesta matriz permite verificar quais classes o ***classificador*** tem maior dificuldade em classificar.

Métricas de avaliação da classificação

Matriz de Confusão

Exemplo para $Q = 2$.

Classes Estimadas	**+** C_2	**Verdadeiro Positivo (TP)**	**Falso Positivo (FP)**
	- C_1	**Falso Negativo (FN)**	**Verdadeiro Negativo (TN)**
		+ C_2	**-** C_1
		Classes Verdadeiras	

- ***Verdadeiro Positivo*** (TP): número de exemplos da classe positiva (+), C_2, classificados corretamente.
- ***Verdadeiro Negativo*** (TN): número de exemplos da classe negativa (-), C_1, classificados corretamente.
- ***Falso Positivo*** (FP): número de exemplos classificados como positivos (+), mas que, na verdade, pertencem à classe negativa (−).
- ***Falso Negativo*** (FN): número de exemplos atribuídos à classe negativa (−), mas que, na verdade, pertencem à classe positiva (+).

➢ Algumas definições que vamos precisar a seguir:

- N_+ define o número de exemplos pertencentes à classe positiva = TP + FN (coluna de C_2).
- N_- define o número de exemplos pertencentes à classe negativa = FP + TN (coluna de C_1).
- N define o número total de exemplos = TP + FN + FP + TN.

Métricas de avaliação da classificação

Matriz de Confusão

Nós podemos calcular diversas métricas de desempenho a partir das informações contidas na ***matriz de confusão***

- ***Taxa de falso negativo***: é a proporção de exemplos da classe positiva (+) classificados incorretamente.

$$\text{Taxa de falso negativo} = p_e^+\big(\hat{y}(\boldsymbol{x})\big) = \frac{\text{FN}}{\text{TP+FN}} = \frac{\text{FN}}{\text{N}_+}.$$

- ***Taxa de falso positivo***: é a proporção de exemplos da classe negativa (-) classificados incorretamente.

$$\text{Taxa de falso positivo} = p_e^-\big(\hat{y}(\boldsymbol{x})\big) = \frac{\text{FP}}{\text{TF+FP}} = \frac{\text{FP}}{\text{N}_-}.$$

- ***Taxa de erro***:

$$p_e(\hat{y}(\boldsymbol{x})) = \frac{\text{FP+FN}}{\text{N}}.$$

- ***Acurácia***:

$$\text{acc}\big(\hat{y}(\boldsymbol{x})\big) = \frac{\text{TP+TN}}{\text{N}}.$$

Métricas de avaliação da classificação

Precisão

- Corresponde à proporção de exemplos da classe positiva (+) corretamente classificados em relação a todos os exemplos atribuídos à classe positiva (+).

$$\text{precisão}\big(\hat{y}(\boldsymbol{x})\big) = \frac{\text{TP}}{\text{TP+FP}}.$$

Sensibilidade (ou recall)

- Também conhecida como ***taxa de verdadeiros positivos***. Corresponde à proporção de exemplos da classe positiva (+) corretamente classificados.

$$\text{recall}\big(\hat{y}(\boldsymbol{x})\big) = \frac{\text{TP}}{\text{TP+FN}} = 1 - p_e^+\big(\hat{y}(\boldsymbol{x})\big).$$

Especificidade

- Também conhecida como ***taxa de verdadeiros negativos***. Corresponde à proporção de exemplos da classe negativa (-) corretamente classificados.

$$\text{especificidade}\big(\hat{y}(\boldsymbol{x})\big) = \frac{\text{TN}}{\text{TN+FP}} = 1 - p_e^-\big(\hat{y}(\boldsymbol{x})\big).$$

Métricas de avaliação da classificação

Observações importantes quanto a matriz de confusão

- É possível estender as métricas obtidas com a ***matriz de confusão*** para o cenário multi-classes (i.e., $Q > 2$):
  - basta selecionar, uma vez, cada classe $C_q, q = 1, \ldots, Q$ como sendo a classe positiva, enquanto todas as demais classes formam a classe negativa. Assim, obtem-se os valores das métricas para cada classe.
- Veja o exemplo abaixo para $Q = 3$.

Classes Estimadas				
	+	Verdadeiro Positivo (TP)	Falso Positivo (FP)	Falso Positivo (FP)
	-	Falso Negativo (FN)	Verdadeiro Negativo (TN)	Verdadeiro Negativo (TN)
	-	Falso Negativo (FN)	Verdadeiro Negativo (TN)	Verdadeiro Negativo (TN)
		+	-	-
		Classes Verdadeiras		

Classes Estimadas				
	-	Verdadeiro Negativo (TN)	Falso Negativo (FN)	Verdadeiro Negativo (TN)
	+	Falso Positivo (FP)	Verdadeiro Positivo (TP)	Falso Positivo (FP)
	-	Verdadeiro Negativo (TN)	Falso Negativo (FN)	Verdadeiro Negativo (TN)
		-	+	-
		Classes Verdadeiras		

Classes Estimadas				
	-	Verdadeiro Negativo (TN)	Verdadeiro Negativo (TN)	Falso Negativo (FN)
	-	Verdadeiro Negativo (TN)	Verdadeiro Negativo (TN)	Falso Negativo (FN)
	+	Falso Positivo (FP)	Falso Positivo (FP)	Verdadeiro Positivo (TP)
		-	-	+
		Classes Verdadeiras		

Métricas de avaliação da classificação

Observações importantes quanto a matriz de confusão (continuação)

- A ***precisão*** pode ser entendida como uma medida da qualidade de um ***classificador***, enquanto a ***sensibilidade*** (ou ***recall***) dá uma noção de sua completude (perfeição).
  - Um valor de ***precisão*** = 1 significa que, para uma determinada classe, cada exemplo classificado como sendo pertencente a esta classe realmente pertence a ela, ou seja, o número de ***falsos positivos*** é igual a 0. Entretanto, essa métrica não dá informações a respeito de quantos exemplos desta classe foram classificados de forma incorreta (ou seja, quantidade de ***falsos negativos***).

$$\frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP}+\mathrm{FP}}$$

  - Por outro lado, um valor de ***recall*** = 1 indica que todos os exemplos da classe C_q foram classificados como sendo pertencentes a C_q, ou seja, o número de ***falsos negativos*** é igual a 0. Porém, essa métrica não traz informações a respeito de quantos exemplos associados a outras classes foram classificados como sendo pertencentes a C_q (ou seja, quantidade de ***falsos positivos***).

$$\frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP}+\mathrm{FN}}$$

  - Portanto, elas precisam ser analisadas em conjunto como veremos a seguir.

Métricas de avaliação da classificação

Pontuação-F

- As medidas de ***precisão*** e ***recall*** costumam ser analisadas conjuntamente através de uma métrica que combina ambas medidas, chamada de ***pontuação-F*** (ou ***F-score***), denotada por F_m, que combina as duas medidas através de uma ***média harmônica ponderada*** dada pela equaçao abaixo:

$$F_m = \frac{(m+1)\times \text{recall}(\hat{y}(\boldsymbol{x}))\times \text{precisão}\left(\hat{y}(\boldsymbol{x})\right)}{\text{recall}\left(\hat{y}(\boldsymbol{x})\right)+m\times \text{precisão}\left(\hat{y}(\boldsymbol{x})\right)},$$

onde m é o ***fator de ponderação***.

- Quando m = 1, a mesma importância é dada para a ***precisão*** e para o ***recall***:

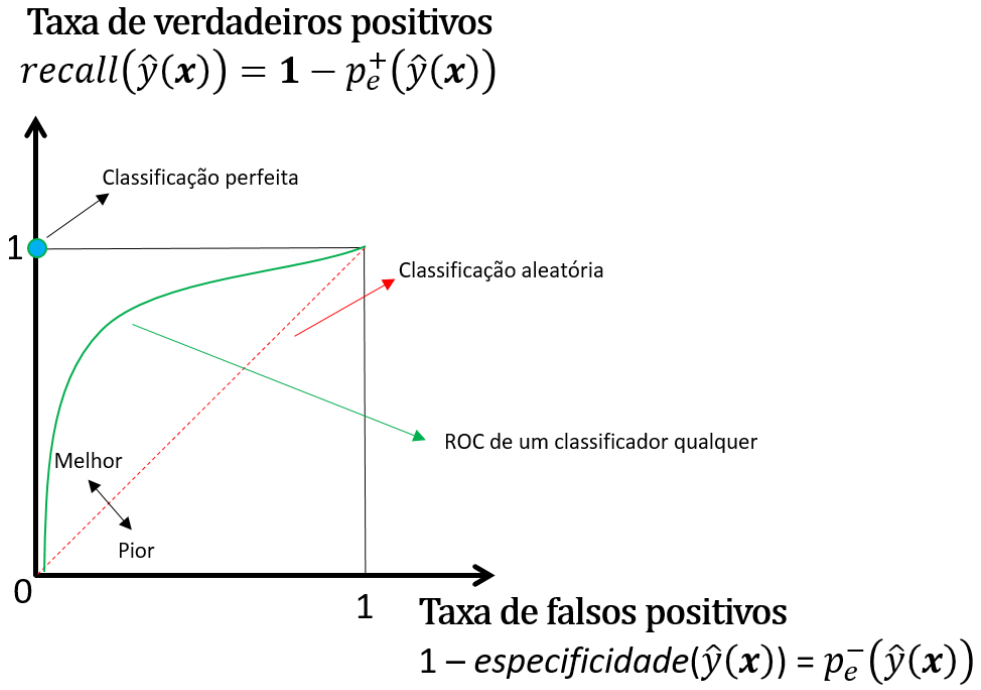
$$F_1 = 2\frac{\text{recall}(\hat{y}(\boldsymbol{x}))\times \text{precisão}\left(\hat{y}(\boldsymbol{x})\right)}{\text{recall}\left(\hat{y}(\boldsymbol{x})\right)+\text{precisão}\left(\hat{y}(\boldsymbol{x})\right)} = \frac{\text{TP}}{\text{TP}+\frac{\text{FN}+\text{FP}}{2}}.$$

- Valores de F_1 próximos de 1 indicam que o ***classificador*** obteve bons resultados tanto de ***precisão*** quanto de ***recall***.

Métricas de avaliação da classificação

Curva Característica Operacional do Receptor (ROC)

- É um gráfico, conforme mostrado na figura ao lado, que ilustra a performance de um classificador binário conforme seu limiar de discriminação é variado.
- A curva é criada plotando a ***taxa de verdadeiros positivos*** (i.e., ***recall***), em função da ***taxa de falsos positivos*** (i.e., 1 - Especificidade) para várias configurações de limiar de discriminação.
- Quanto mais à esquerda e para cima estiver a ***curva ROC*** de um ***classificador***, melhor será o seu desempenho.
- A linha diagonal, em vermelho, está associada a um ***classificador puramente aleatório***. Um bom ***classificador*** fica o mais longe possível dessa linha (em direção ao canto superior esquerdo).
- Um classificador perfeito produziria um ponto no canto superior esquerdo ou coordenada (0,1) da curva ROC, representando 100% de sensibilidade (ou seja, sem falsos negativos) e 100% de especificidade (ou seja, sem falsos positivos).



Métricas de avaliação da classificação

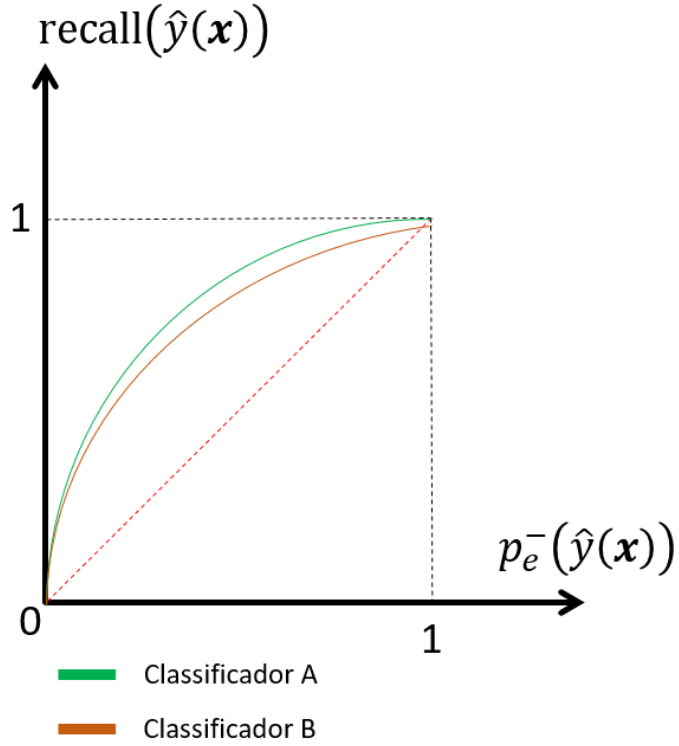
Curva Característica Operacional do Receptor (ROC)

- A forma usual de se comparar ***classificadores*** consiste em criar uma ***curva ROC*** para cada um.
- Em geral, ***classificadores*** produzem uma saída real (i.e, uma probabilidade) para cada exemplo de entrada. Normalmente, estas saídas são, então, discretizadas para que se tenha a decisão final: por exemplo, se $h_{\boldsymbol{a}}\big(\boldsymbol{x}(i)\big)$ ultrapassa um determinado ***limiar***, ***T***, ela é mapeada no valor 1 (classe positiva, C_2); caso contrário, ela é mapeada no valor 0 (classe negativa, C_1).
- Sendo assim, ao plotar a ***taxa de verdadeiro positivo*** (ou ***recall***) versus a ***taxa de falso positivo*** para diferentes valores de ***limiar***, ***T***, obtemos a ***curva ROC*** associada a um ***classificador***.

Métricas de avaliação da classificação

Curva Característica Operacional do Receptor (ROC)

- Por exemplo, considere as ***curvas ROC*** exibidas na figura ao lado. Para decidir qual o melhor ***classificador***, podemos tomar como base a ***área sob a curva (ASC) ROC***.
- A ASC é outra métrica da qualidade de um classificador e é um número entre 0 e 1. Quanto maior a ASC, melhor será o modelo.
- Neste exemplo, o classificador A seria o de melhor desempenho, pois tem maior ***área sob a curva ROC***.
- **Vantagens da curva ROC**
  - Possibilita a análise de diferentes métricas de desempenho independente do ***limiar*** escolhido.
  - Auxilia o estudo de diferentes ***limiares*** para lidar com problemas de desbalanceamento nos dados (i.e., nos quais as classes possuem tamanhos discrepantes).
- **Desvantagens**
  - Apropriada para problemas de ***classificação binária***.
  - No caso multi-classes, devemos utilizar as estratégias ***um-contra-todos*** ou ***um-contra-um*** e plotar várias ***curvas ROC***.



Exemplo: Métricas com SciKit-Learn

```
import numpy as np
from sklearn.datasets import make_blobs
from sklearn.linear_model.logistic import LogisticRegression
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.preprocessing import label_binarize
from sklearn.metrics import confusion_matrix, accuracy_score, auc, f1_score, roc_auc_score
from sklearn.metrics import classification_report, precision_score, recall_score
# make 3-class dataset for classification
centers = [[-5, 0], [0, 1.5], [5, -1]]
x, y = make_blobs(n_samples=1000, centers=centers, random_state=42)
# Split array into random train and test subsets.
x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(x, y, random_state=23)
# Add column with ones regarding x0.
x_train = np.c_[np.ones((len(y_train), 1)), x_train]
x_test = np.c_[np.ones((len(y_test), 1)), x_test]
# Instantiate LogisticRegression object for multi-class case.
model = LogisticRegression(max_iter=10000, multi_class='multinomial')
# Train model.
model.fit(x_train, y_train)
# Predict.
y_pred = model.predict(x_test)
# Plot the confusion matrix.
confusion_matrix(y_test, y_pred)
# Getting the probabilities for each class.
y_prob = model.predict_proba(x_test)
# Binarize the test targets.
y_test_bin = label_binarize(y_test, classes=[0, 1, 2])
# Calculating ROC curve and ROC AUC only for class 0.
fpr, tpr, _ = roc_curve(y_test_bin[:, 0], y_prob[:, 0])
roc_auc = auc(fpr[0], tpr[0])
# Claculate metrics.
classification_report(y_test, y_pred)
accuracy_score(y_test, y_pred)*100
precision_score(y_test, y_pred, average=None)
recall_score(y_test, y_pred, average=None)
f1_score(y_test, y_pred, average=None)
```

Cria 3 classes distintas.

Divide base de dados em treinamento e teste.

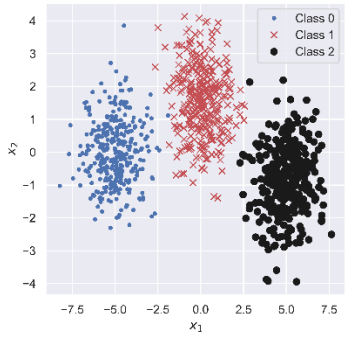
Cria objeto da classe LogisticRegression para múltiplas classes.

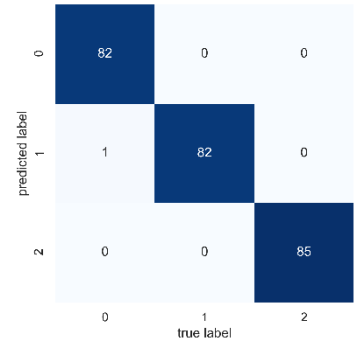
Treinamento e predição do classificador.

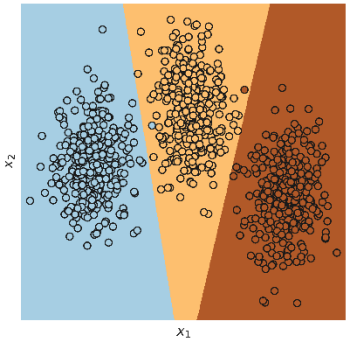
Cria matriz de confusão.

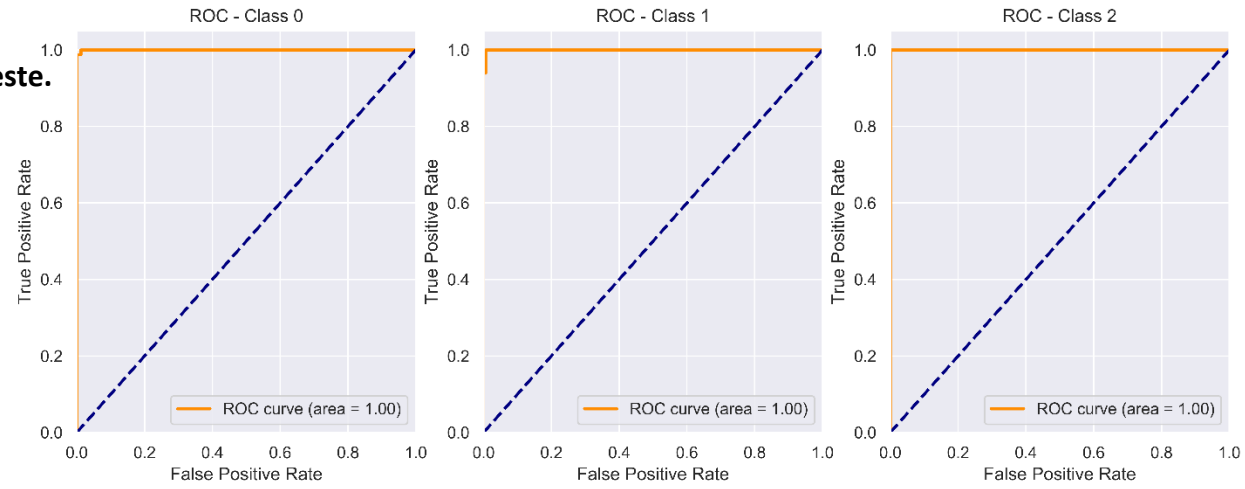
Curva ROC.

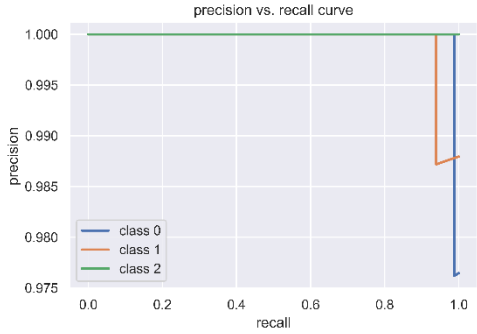
Calcula várias métricas.











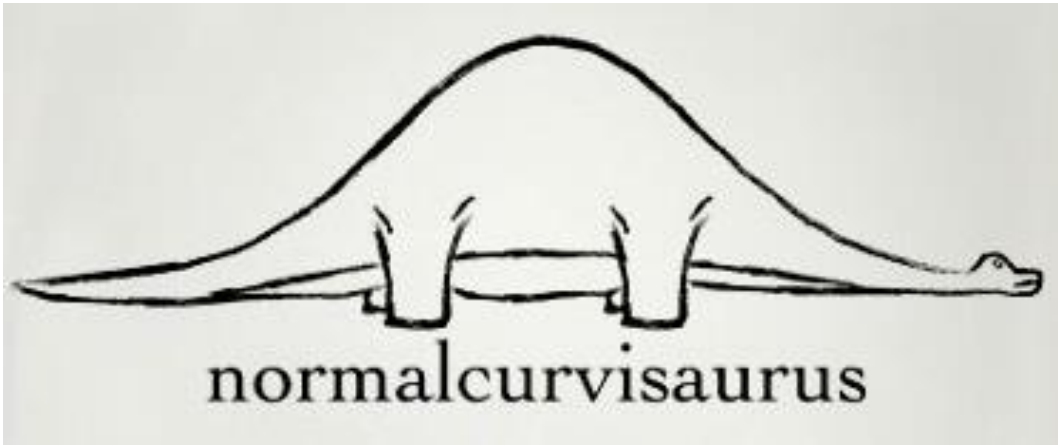
Exemplo: ClassificationMetrics.ipynb

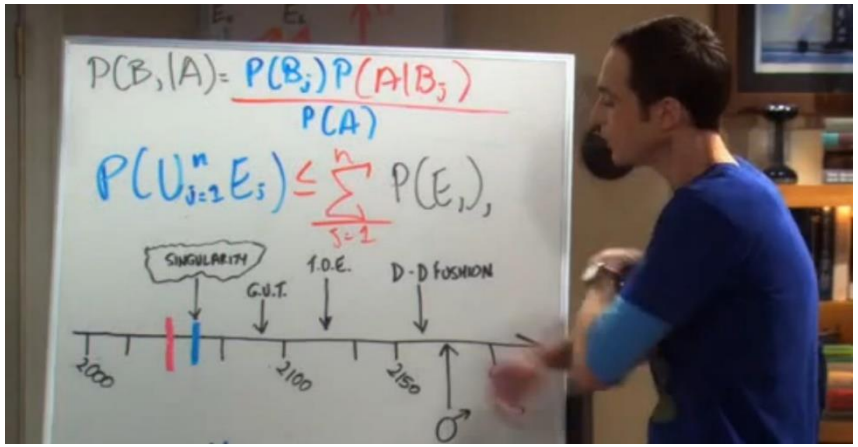
Tarefas e Avisos

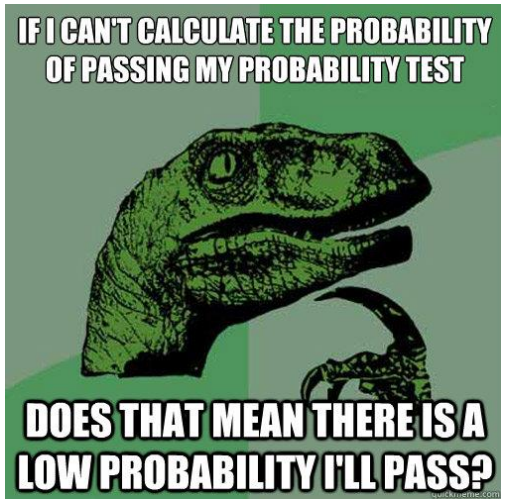
- Exemplos e lista #5 já estão disponíveis.
- Façam os exercícios:
  - Lista #4 - Exercício 10 (Naive Bayes)
  - Lista #5 - Exercício 2 (Classificador linear)
  - Lista #5 - Exercício 8 (Softmax)

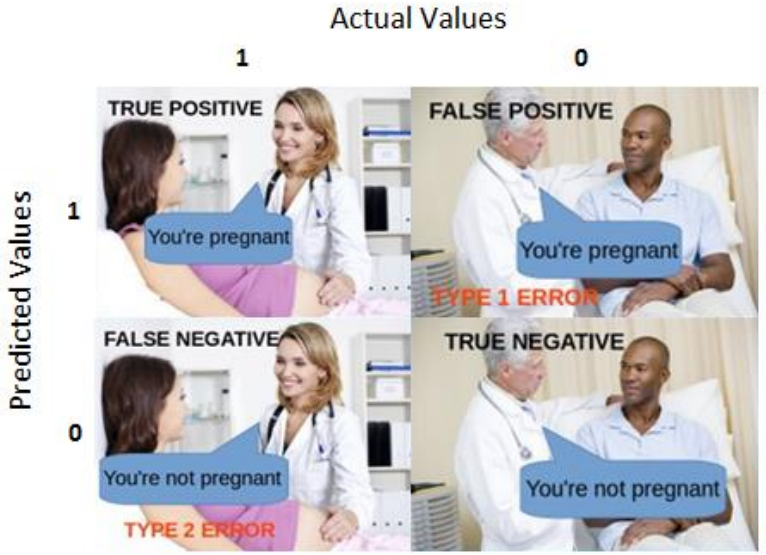
Obrigado!

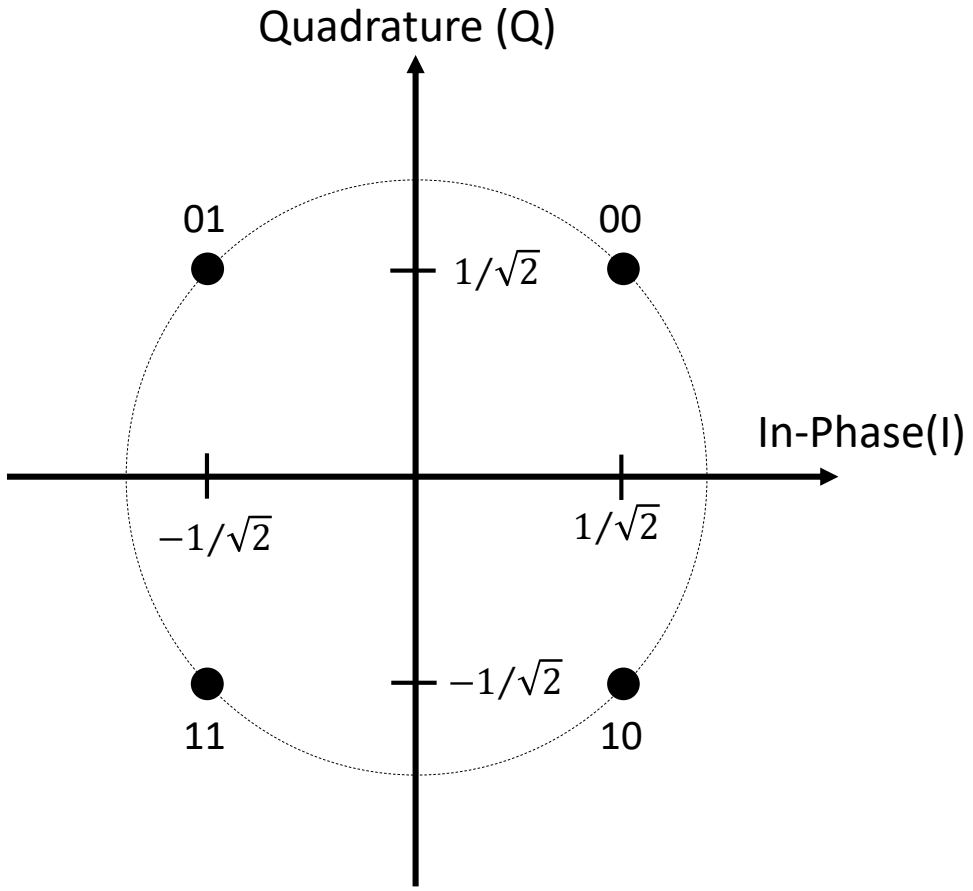

THIS IS YOUR MACHINE LEARNING SYSTEM?
YUP! YOU POUR THE DATA INTO THIS BIG PILE OF LINEAR ALGEBRA, THEN COLLECT THE ANSWERS ON THE OTHER SIDE.
WHAT IF THE ANSWERS ARE WRONG?
JUST STIR THE PILE UNTIL THEY START LOOKING RIGHT.
DATA
ANSWERS

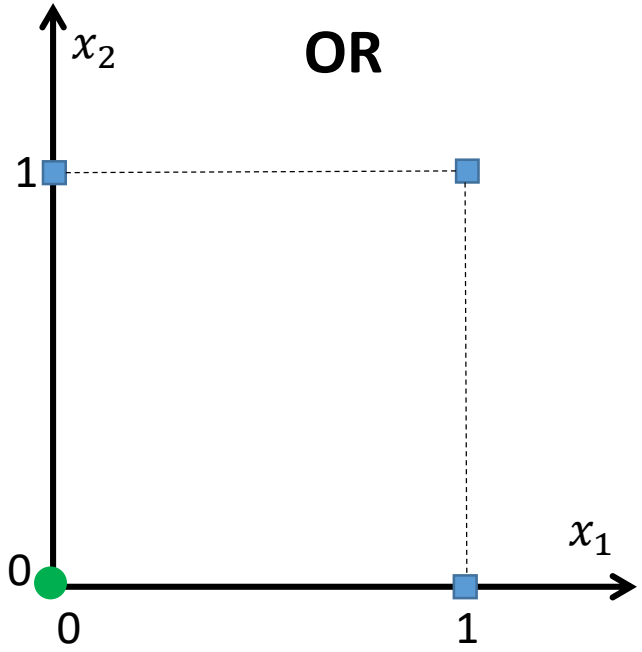

normalcurvisaurus


SINGULARITY
G.U.T.
T.O.E.
D-D FOSHION
2000
2100
2150


IF I CAN'T CALCULATE THE PROBABILITY OF PASSING MY PROBABILITY TEST
DOES THAT MEAN THERE IS A LOW PROBABILITY I'LL PASS?

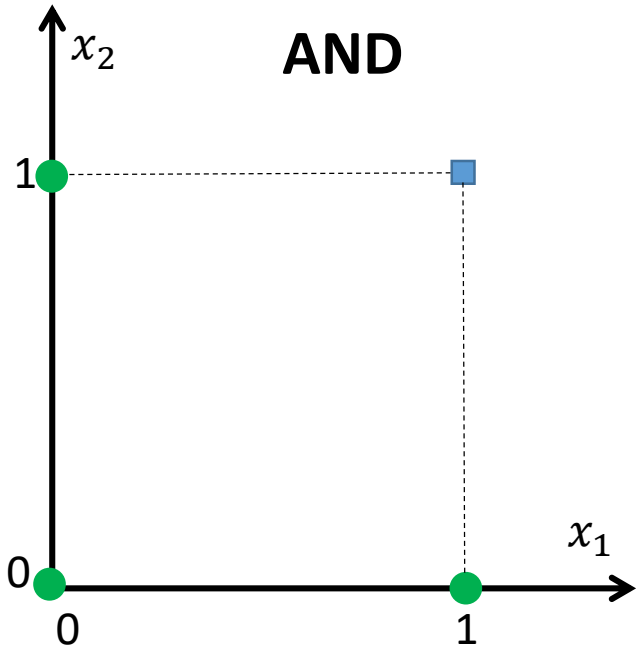

Actual Values
1
0
Predicted Values
1
0
TRUE POSITIVE
You're pregnant
FALSE POSITIVE
You're pregnant
TYPE 1 ERROR
FALSE NEGATIVE
You're not pregnant
TYPE 2 ERROR
TRUE NEGATIVE
You're not pregnant


Quadrature (Q)
01
00
$1/\sqrt{2}$
In-Phase(I)
$-1/\sqrt{2}$
$1/\sqrt{2}$
$-1/\sqrt{2}$
11
10



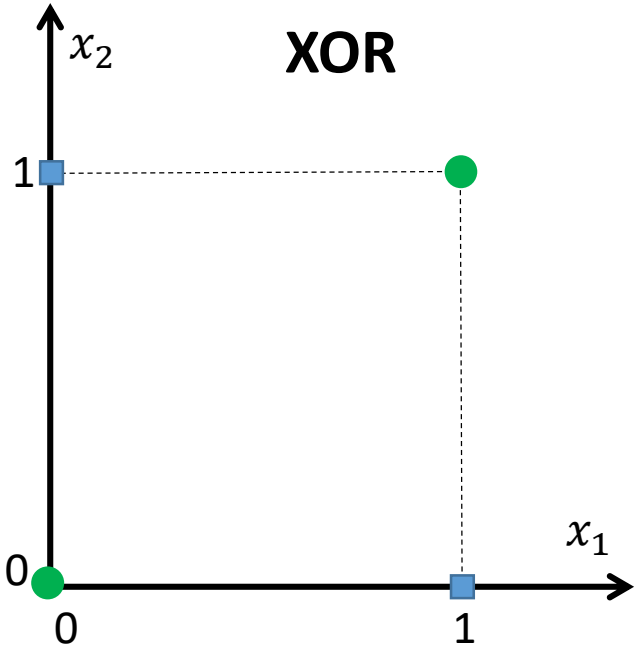
Classe 0 (nível lógico 0)

Classe 1 (nível lógico 1)



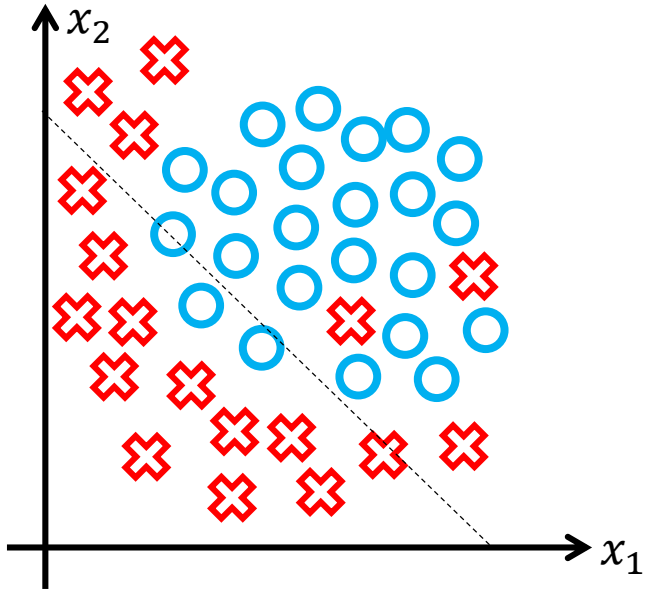
Classe 0 (nível lógico 0)

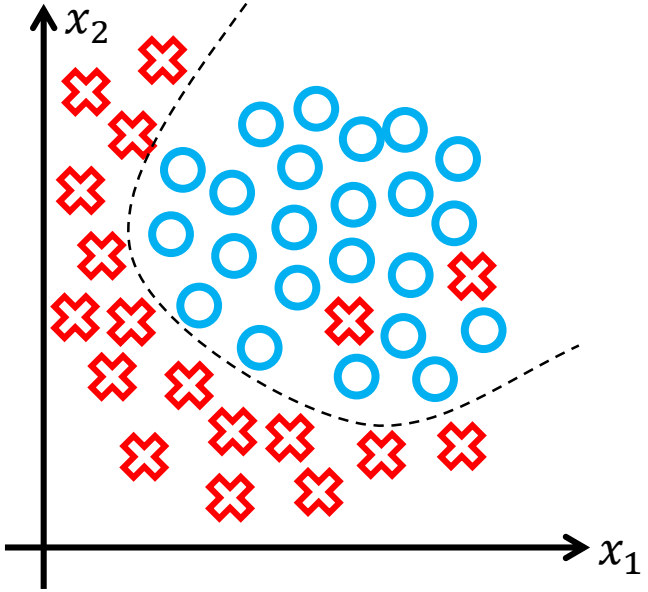
Classe 1 (nível lógico 1)

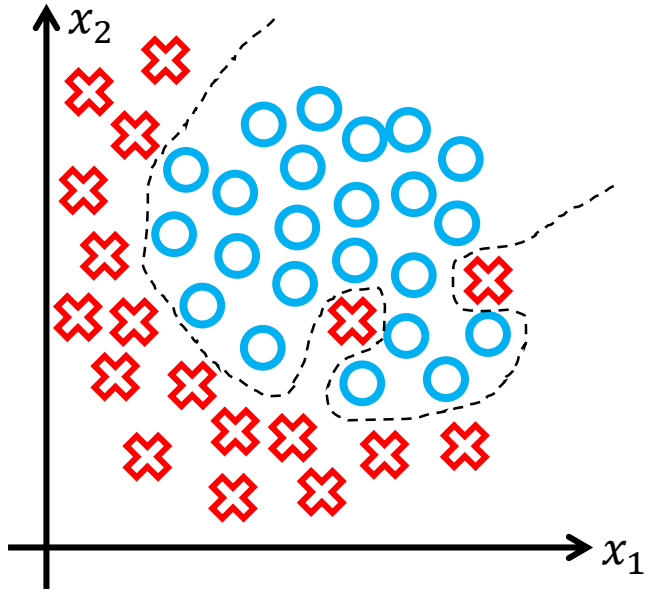


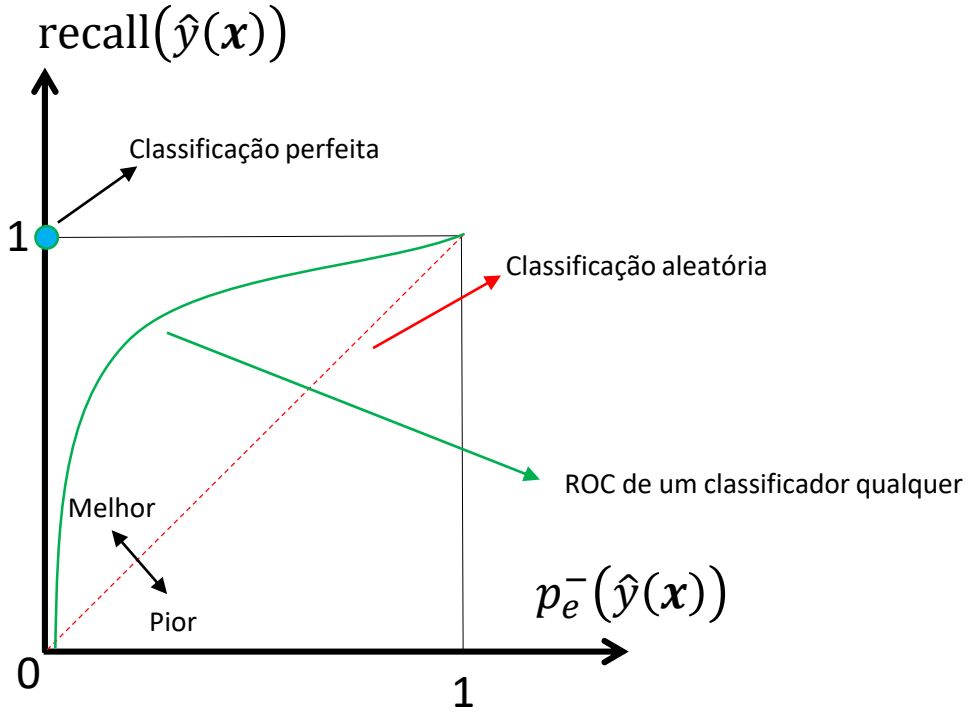
Classe 0 (nível lógico 0)

Classe 1 (nível lógico 1)


x_2
x_1

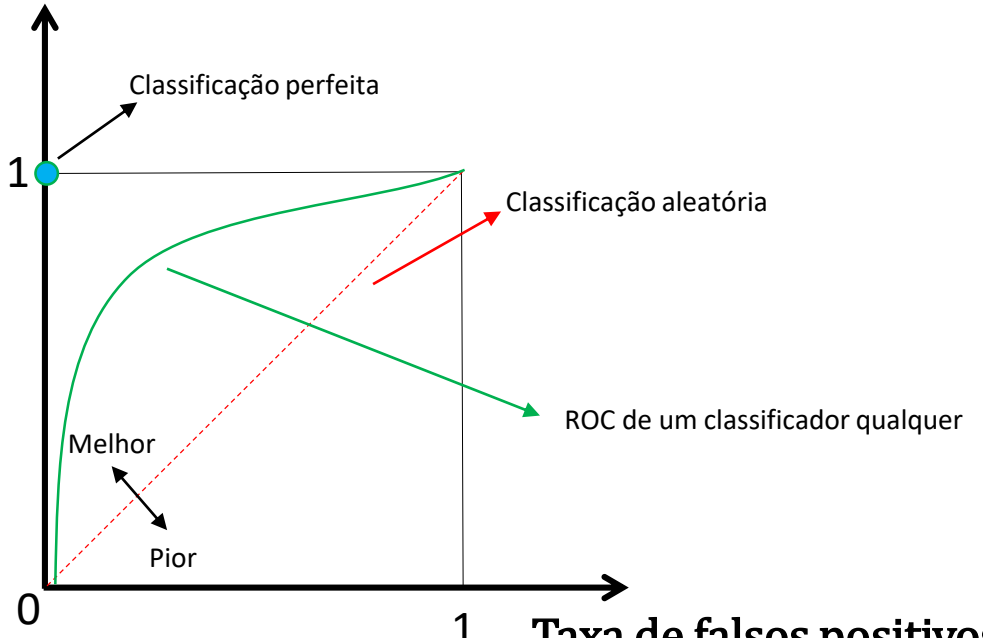

x_2
x_1


x_2
x_1


recall$(\hat{y}(\boldsymbol{x}))$
Classificação perfeita
1
Classificação aleatória
ROC de um classificador qualquer
Melhor
Pior
$p_e^-(\hat{y}(\boldsymbol{x}))$
0
1

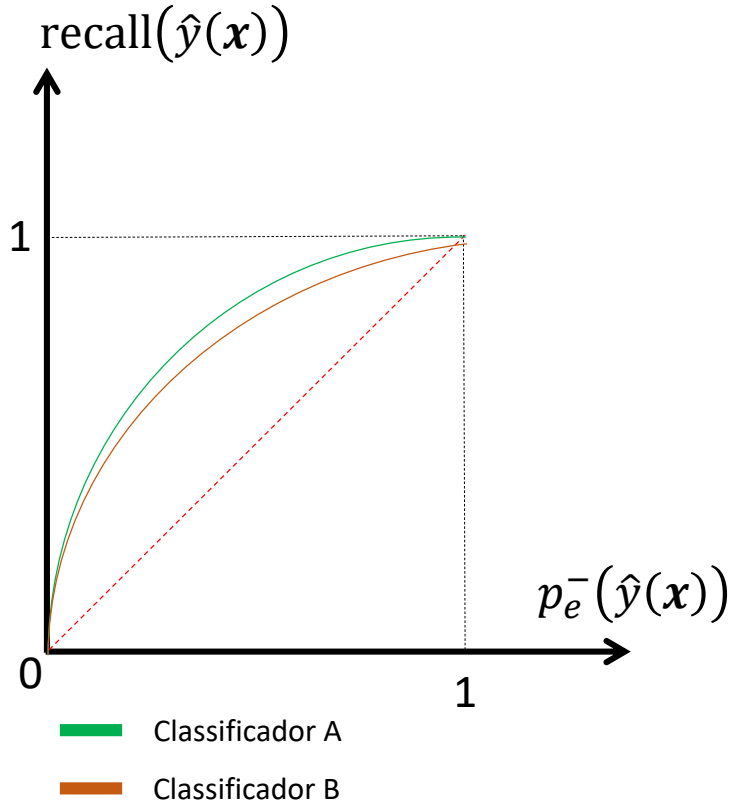
Taxa de verdadeiros positivos

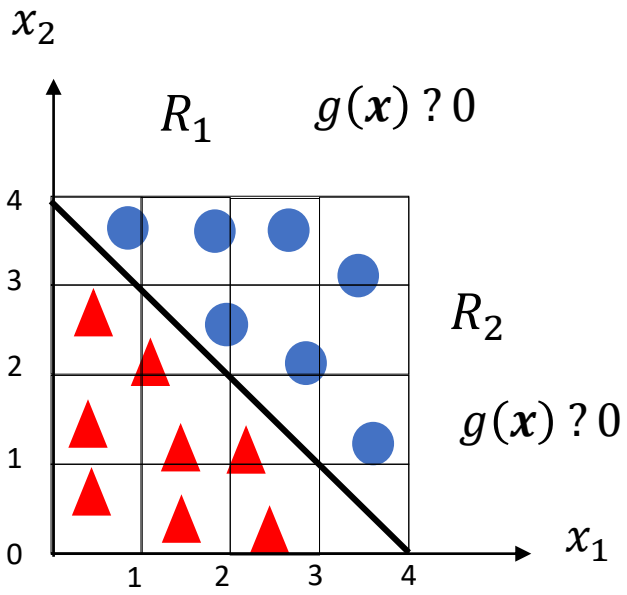
$recall(\hat{y}(\boldsymbol{x})) = \mathbf{1} - p_e^+(\hat{y}(\boldsymbol{x}))$

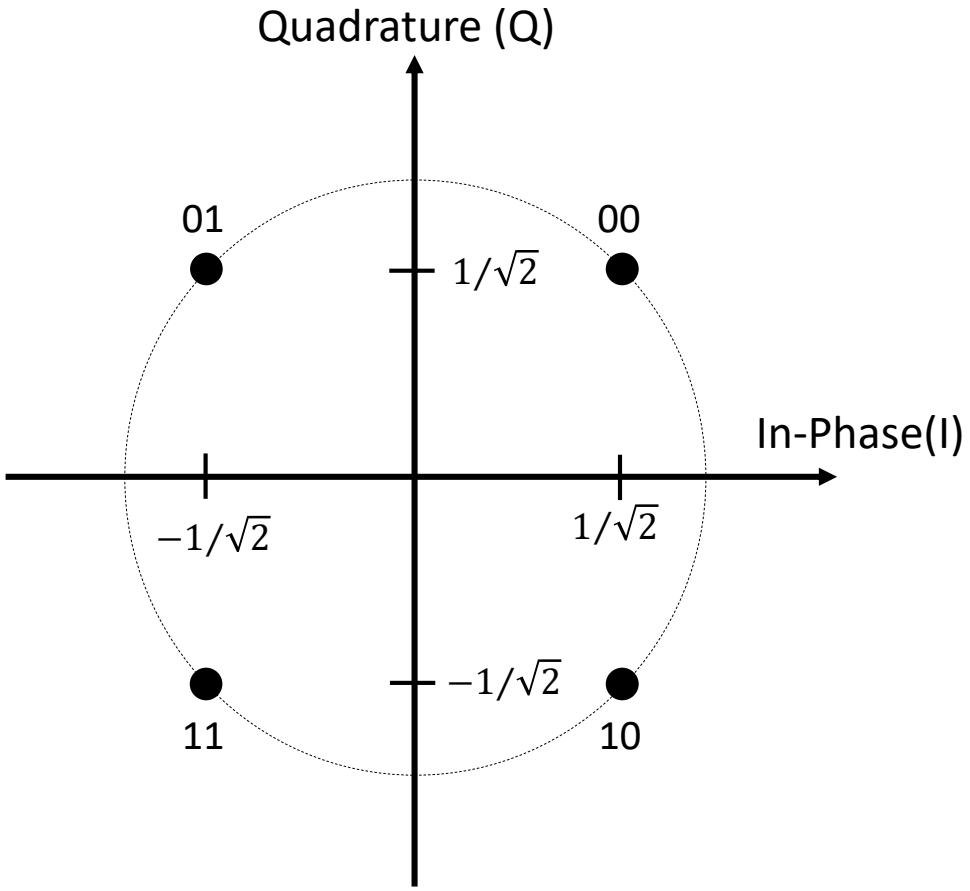


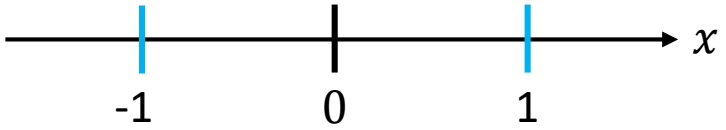
Taxa de falsos positivos

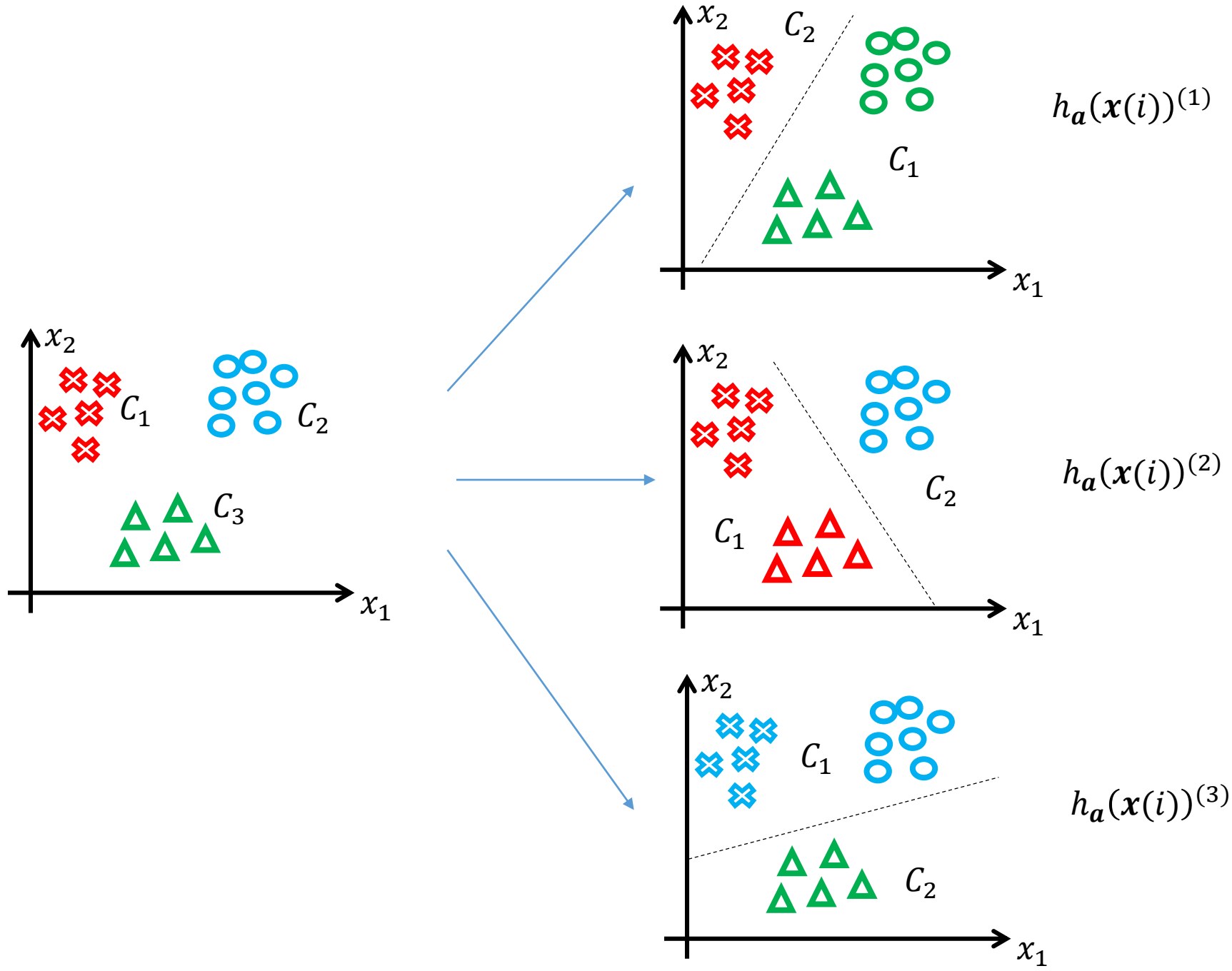
1 – *especificidade*$(\hat{y}(\boldsymbol{x}))$ = $p_e^-(\hat{y}(\boldsymbol{x}))$

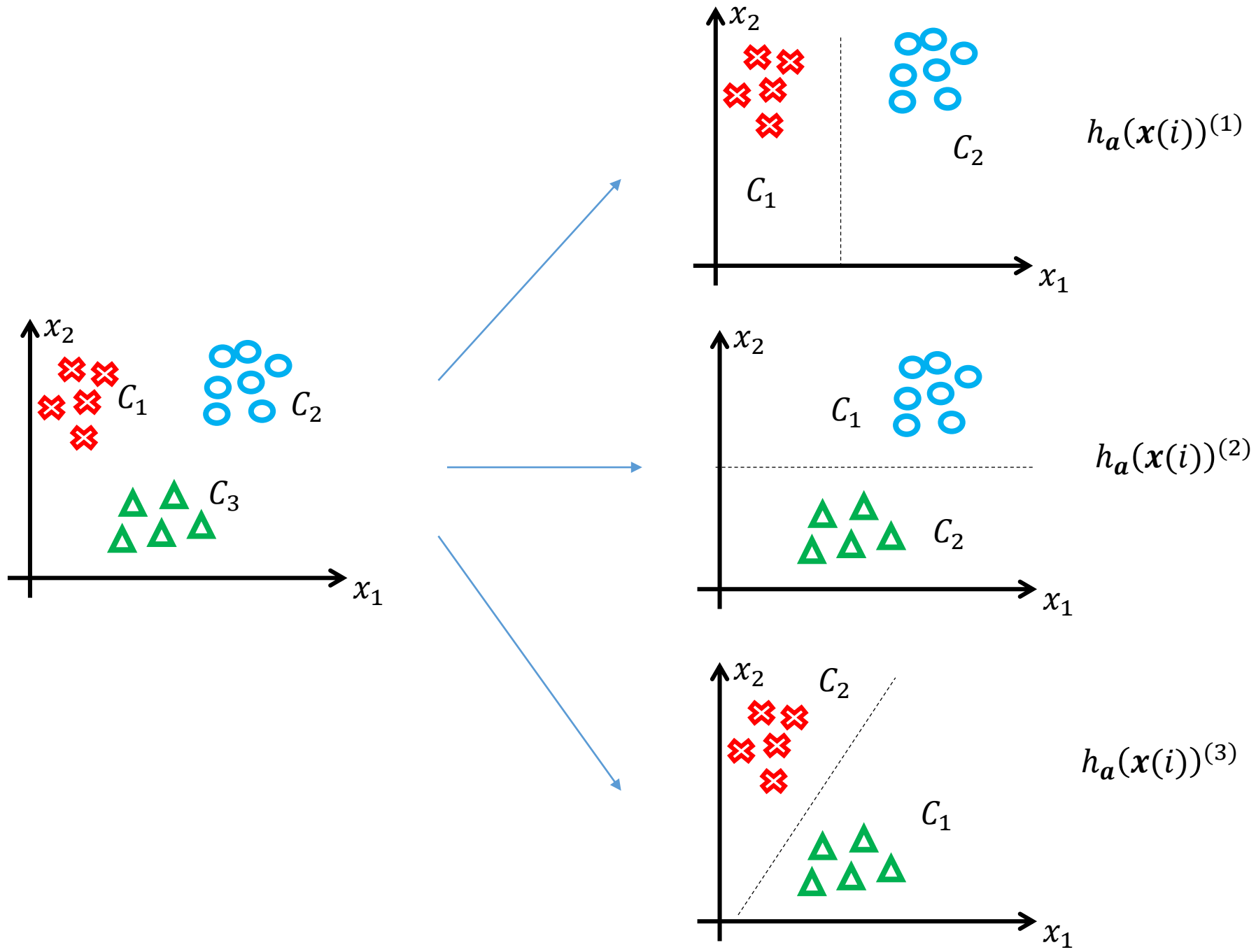

recall$\left(\hat{y}(\boldsymbol{x})\right)$
1
0
1
$p_e^-\left(\hat{y}(\boldsymbol{x})\right)$
Classificador A
Classificador B

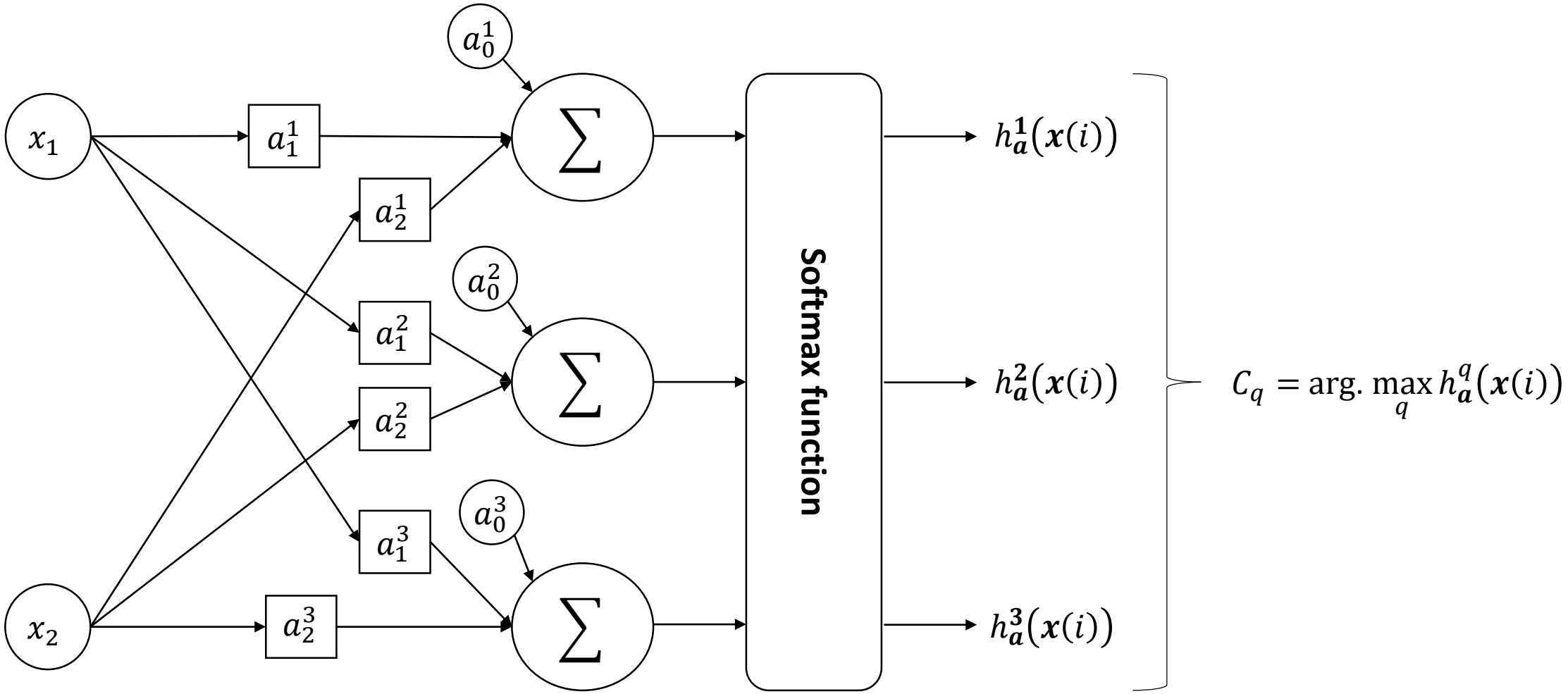

x_2
R_1
$g(\boldsymbol{x})$? 0
4
3
2
1
0
R_2
$g(\boldsymbol{x})$? 0
x_1
1
2
3
4


Quadrature (Q)
01
00
$1/\sqrt{2}$
In-Phase(I)
$-1/\sqrt{2}$
$1/\sqrt{2}$
$-1/\sqrt{2}$
11
10


x
-1
0
1


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


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


x_1
x_2
a_1^1
a_2^1
a_1^2
a_2^2
a_1^3
a_2^3
a_0^1
a_0^2
a_0^3
$\sum$
$\sum$
$\sum$
Softmax function
$h_a^1(x(i))$
$h_a^2(x(i))$
$h_a^3(x(i))$
$C_q = \arg.\max_q h_a^q(x(i))$