

## Contexto

- Existem um conjunto de dados conhecidos
  - Conjunto de treino
- Queremos prever o que vai ocorrer noutros casos
- Exemplo
  - Empresa de seguros de saúde quer estimar custos com um novo cliente

Conjunto de treino (dados históricos)

Altura	Peso	Sexo	Idade	Ordenado	Usa ginásio	Encargos para seguradora
1.60	79	M	41	3000	S	N
1.72	82	M	32	4000	S	N
1.66	65	F	28	2500	N	N
1.82	87	M	35	2000	N	S
1.71	66	F	42	3500	N	S

E o Manel ?

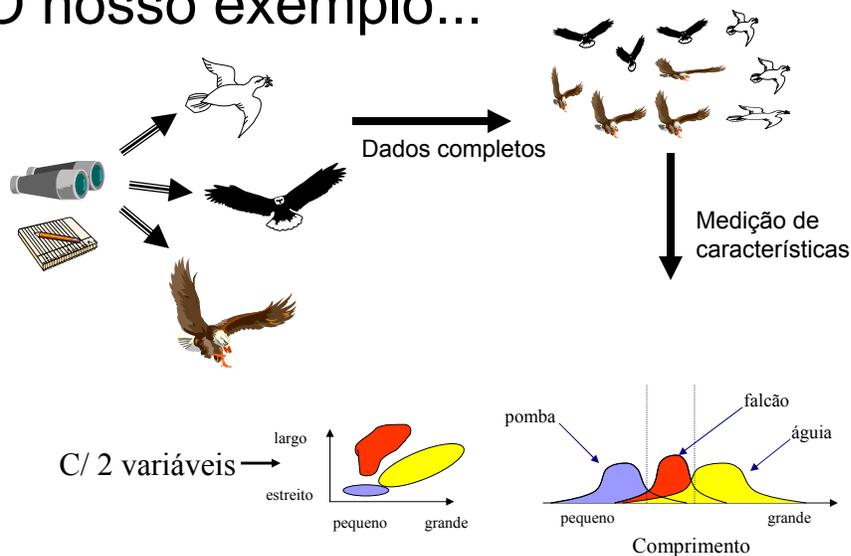
Altura=1.73  
Peso=85  
Idade=31  
Ordenado=2800  
Ginásio=N

Terá encargos para a seguradora ?

## Tema central:

- Existe alguma maneira ÓPTIMA de fazer a classificação de um padrão de dados ?
  - Sim: classificação Bayesiana (ótima segundo um dado critério...)
- Conseguimos usar sempre esse método ?
  - Não: geralmente é impossível obter o classificador de Bayes
- É útil conhecê-lo ?
  - Sim: Dá um limite e um termo de comparação

## O nosso exemplo...



## Noção de Classificação Bayesiana

- Escolhe a classe mais provável, dado um padrão de dados
  - $\max P(C_i|x)$
- É sempre a escolha óptima !
- Problema:
  - Estimar  $P(C_i|x)$
  - Solução: dado um dado, eu posso não saber à priori a classe, mas dado uma classe, eu talvez saiba à priori como são os dados dessa classe...

## Teorema de Bayes

- Formulação do teorema de Bayes
  - $P(C,x) = P(C|x)P(x) = P(x|C)P(C)$

logo..  $P(C|x) = P(x|C)P(C) / P(x)$

- Dado um  $x$ ,  $P(x)$  é constante, o classificador Bayesiano escolhe a classe que maximiza  $P(x|C)P(C)$
- Classificador que maximiza  $P(C|x)$  é conhecido como classificador MAP (*maximum a posteriori*)

## Custos variáveis

- A escolha óptima da classe tem que ter em conta os custos de cometer erros
  - Exemplos: detectar aviões num radar, detectar fraudes ou defeitos em peças
- Custo:  $ct(c_i, c_j)$  = custo de escolher  $c_j$  dado que a classe é de facto  $c_i$
- Matriz de custos
  - Matriz com todos os custos de classificação
- Determinação dos custos
  - ...

## Classificador de Bayes

- Custo de uma decisão:
  - $ct_j(\mathbf{x}) = \sum ct(c_i, c_j) P(c_i, \mathbf{x})$
- Classificador de Bayes
  - Escolhe a classe que minimiza o custo de classificação
  - $c=c_k : k= \arg \min ct_j(\mathbf{x})$

## Classificador de máxima verosimilhança

### ■ Maximum Likelihood (ML)

- Muitas vezes podemos admitir que, à partida, todas as classes são equiprováveis
- Nesse caso, o classificador MAP simplifica para:

$$P(C|x) = P(x|C)P(C) / P(x) = P(x|C)$$

- Ou seja a classe mais provável é a que com maior probabilidade gera esse dado!
- Na prática, um bom critério !

## Problemas em estimar $P(x,C)$

- Desconhece-se geralmente a forma analítica de  $P(x,C)$
- Estimação de  $P(x,C)$  a partir dos dados
  - **Problema central em classificação !!!**
  - Estimação paramétrica
    - Assumir que  $P(x,C)$  tem uma distribuição “conhecida” (gausseana, uniforme, etc), e estimar os parâmetros dessa distribuição
  - Estimação não paramétrica
    - Calcular  $P(x,C)$  directamente a partir dos dados

## Exemplo de classificação Bayesiana : Jogar ténis

Outlook	Temperature	Humidity	Windy	Play
Sunny	Hot	High	False	No
Sunny	Hot	High	True	No
Overcast	Hot	High	False	Yes
Rainy	Mild	High	False	Yes
Rainy	Cool	Normal	False	Yes
Rainy	Cool	Normal	True	No
Overcast	Cool	Normal	True	Yes
Sunny	Mild	High	False	No
Sunny	Cool	Normal	False	Yes
Overcast	Mild	Normal	False	Yes
Sunny	Mild	Normal	True	Yes
Overcast	Mild	High	True	Yes
Overcast	Hot	Normal	False	Yes
Rainy	Mild	High	True	No

## Caso 1: sabendo só o “outlook”

- Queremos saber  $P(\text{jogo}|\text{outlook})$ , em concreto, se outlook = “overcast”

- Classificador MAP:

$$P(\text{jogo}|\text{outlook})=P(\text{outlook}|\text{jogo})P(\text{jogo})$$

- $P(\text{jogo}=\text{sim})=9/14=0.64$     $P(\text{jogo}=\text{não})=5/14=0.36$
- $P(\text{outlook}=\text{“overcast”}|\text{jogo}=\text{sim})=5/9=0.56$
- $P(\text{jogo}=\text{sim}|\text{outlook}=\text{“overcast”})=0.56 \times 0.64 = 0.36$

## Problema quando $x$ tem dimensão grande

- Se a dimensão de  $x$  é muito grande, devido à praga da dimensionalidade, é difícil calcular  $P(x,C)$
- Solução:
  - Assumir independência entre atributos
  - Exemplo:
    - Classificação de texto

## Classificador naive de Bayes

- Assume independência dos atributos:

$$P(x,C) = \prod P(x^m, C)$$

- Na prática tem bons resultados

- Evitar que  $P(x^m, C)$  seja 0:

- Estimativa m:

- $P = (n_c + m \times p) / (n + m)$

$n_c$  = exemplos de  $c$

$n$  = total de exemplos

$m$  = ponderação (+/--priori)

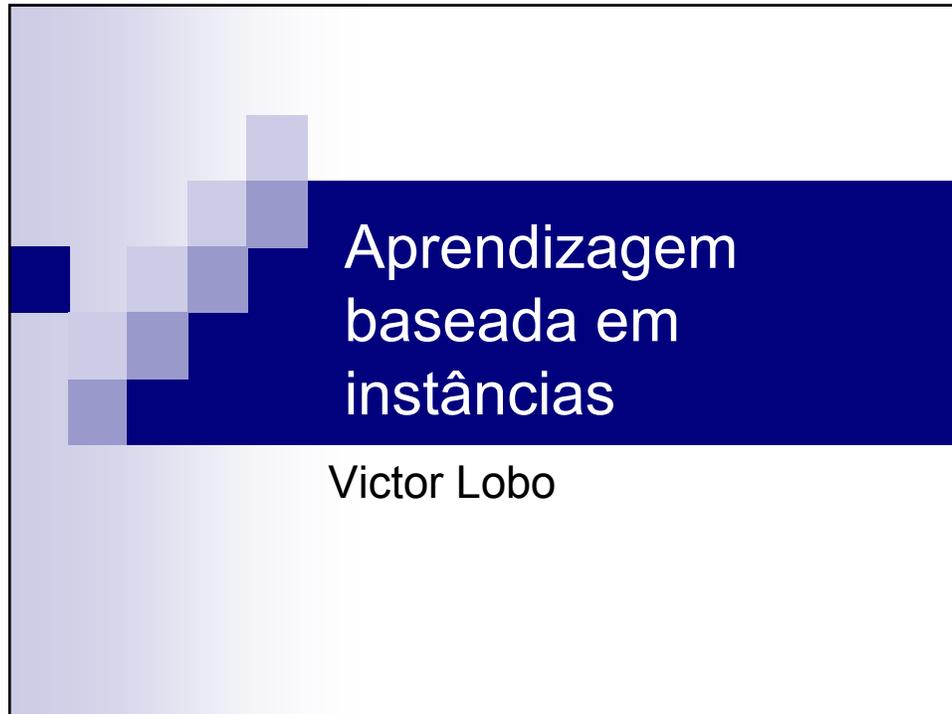
$p$  = estimativa à priori (equiprovável ?)

## Algumas considerações...

- Aprendizagem incremental
  - Um classificador Bayesiano por ir actualizando as suas estimativas
- Separabilidade
  - $P(x, c_i) > 0 \Rightarrow P(x, c_j) = 0 \quad \forall x$
  - Erro de Bayes = 0
- Não separabilidade
  - Inconsistência (com os atributos conhecidos):
    - Um mesmo  $x$ , tanto pode pertencer a  $c_i$  como  $c_j$
  - Erro de Bayes > 0

## Classificadores bayesianos:

- Classificador de Bayes
  - Entra em linha de conta com custos
- MAP
  - Assume custos iguais
- ML
  - Assume classes equiprováveis
- Naive de Bayes
  - Assume independência entre atributos
- Erro de Bayes
  - Erro do classificador bayesiano (geralmente MAP)



## Tema central

- Sistemas de aprendizagem que guardam “exemplos” dos dados
  - Ex: Guardar a “pomba típica” ou “som característico”
- A classificação (ou decisão) é feita comparando a nova instância com os exemplos guardados
  - Exemplos  $\approx$  **protótipos**  $\approx$  instâncias  $\approx$  neurónios

## Muitos nomes para a “mesma coisa”

### ■ Estatística

- Kernel-based density estimation (Duda & Hart 68)
- Locally-weighted regression (Hardle 90)

### ■ Machine Learning

- Memory-based classification (Stanfill & Waltz 86)
- Exemplar-based knowledge acquisition (Bareiss 89)
- Instance-based classification (Aha 91)
- Case-based reasoning (Shank 82)
- Lazy Learning (Alpaydin 97)

E muito, MUITO mais... (k-means, k-nn, etc, etc...)

### ■ Redes Neurais

- Prototype-based networks (Kohonen 95)
- RBF (Lowe 88), LVQ, etc, etc....

## Fundamentos:

### ■ Classificador óptimo escolhe classe mais provável:

- $P(C|x) = P(x|C)P(C) / P(x)$
- No caso de um classificador MAP, basta saber  $P(x|C)$

### ■ Estimação de $P(x|C)$ quando os atributos de $x$ têm valores contínuos:

- $P(x|C) \neq 0$ , mas podemos calcular  $p(x|C)$
- No limite temos

$$p(x|C) = \frac{k/n}{\Delta V}$$

## Fundamentos

■ Para que  $p(x|C) = \frac{k/n}{\Delta V}$

$\Delta V$  = um dado volume em torno da nova instância  
 $n$  = nº total de exemplos nesse volume  
 $k$  = nº de exemplos que pertencem à classe C

É necessário que  $n \rightarrow \infty$ , e

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \Delta V = 0$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} k = \infty$$

- Duas grandes famílias
  - $n=c^{te}$  k-vizinhos, vizinho mais próximo, etc
  - $V=c^{te}$  Janelas de Parzen



K-vizinhos

## k-vizinhos e vizinho mais próximo (k=1)

- **Todos** os exemplos são memorizados e usados na fase de aprendizagem.
- A classificação de um exemplo  $X$  consiste em encontrar os  $k$  elementos do conjunto de treino mais próximos e decidir por um critério de maioria.



## Algoritmo k - vizinhos mais próximos

- Algoritmo de treino
  - Para cada** exemplo de treino  $(x, c(x))$  adicionar à lista de exemplos de treino.
  - Retorna** lista de exemplos de treino.



## Classificação por k-vizinhos

### ■ k-NearestNeighbor(x, Exemplos de treino)

Sejam  $y_1, \dots, y_k$ , pertencentes à lista de exemplos de treino, os  $k$  vizinhos mais próximos de  $x$ .

**Retorna**  $\hat{c}(x) \leftarrow \arg \max_{v \in V} \sum_{i=1}^k \delta(v, c(y_i))$

em que  $V$  é o conjunto de classes e

$$\delta(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \neq y \\ 1 & \text{se } x = y \end{cases}$$

## Regressão por k-vizinhos

### ■ Algoritmo de regressão

k-NearestNeighbor(x, exemplos de treino)

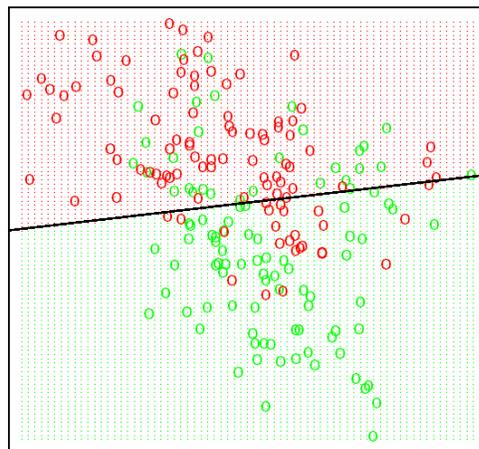
Sejam  $y_1, \dots, y_k$ , pertencentes à lista de exemplos de treino, os  $k$  vizinhos mais próximos de  $x$ .

**Retorna**  $\hat{c}(x) \leftarrow \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k c(y_i)$

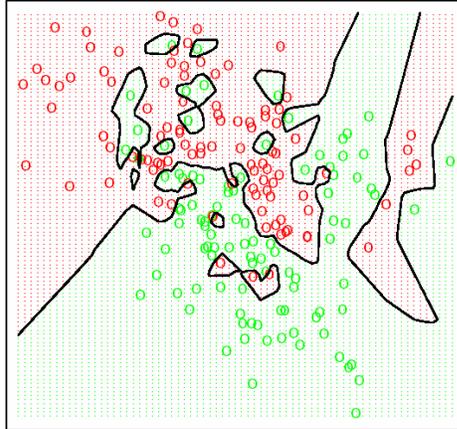
## Fronteiras definidas pelo k-nn

- k grande
  - Fronteiras suaves, “ponderadas”
  - Estimador razoável da densidade de probabilidade
- k pequeno
  - Fronteiras mais rugosas, sensíveis a outliers
  - Mau estimador de densidade de probabilidade
- Margens de segurança
  - Pode-se exigir uma diferença mínima para tomar uma decisão

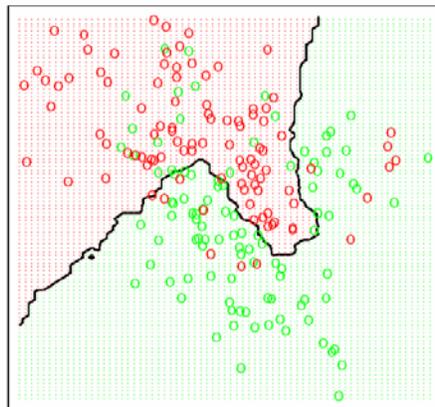
## Regressão linear



## 1- Vizinho mais próximo



## 15 – Vizinhos mais próximos



## Exemplos de medidas de semelhança

### ■ Distâncias

- Euclidiana
- Hamming
- Minkowski

$$D_M(X, Y, \lambda) = \left( \sum_{i=1}^K |x_i - y_i|^\lambda \right)^{1/\lambda}$$

- Mahalanobis

$$D_{Ma}(X, Y, \varphi) = \left( (X - Y)^T \Psi_{[KK]} (X - Y) \right)^{1/2}$$

### ■ Correlação

- Não normalizada

$$C(X, Y) = X \cdot Y = \sum_{i=1}^K x_i y_i$$

- Máxima correlação

$$C_m(X, Y) = \max_j \sum_{i=1}^K x_i y_{i-j}$$

## Classificação por k-vizinhos pesados

### ■ Algoritmo de classificação

k-NearestNeighbor(x, Exemplos de treino)

Sejam  $y_1, \dots, y_k$ , pertencentes à lista de exemplos de treino, os k vizinhos mais próximos de x.

**Retorna**

$$\hat{c}(x) \leftarrow \arg \max_{v \in \mathcal{V}} \sum_{i=1}^k \varpi_i \delta(v, c(y_i))$$

em que

$$\varpi_i = \frac{1}{D(x, y)}$$

## Regressão pelos k-vizinhos pesados

- Algoritmo de classificação

k-NearestNeighbor(x, Exemplos de treino)

Sejam  $y_1, \dots, y_k$ , pertencentes à lista de exemplos de treino, os k vizinhos mais próximos de x.

**Retorna**

$$\hat{c}(x) \leftarrow \frac{\sum_{i=1}^k w_i c(y_i)}{\sum_{i=1}^k w_i}$$

## Vizinho mais próximo (k=1)

- É simples e eficaz
- Está muito bem estudado
- Erro assintótico (quando  $n \rightarrow \infty$ )
  - Zero, se as classes forem separáveis
  - 2x erro de Bayes, se não o forem
    - (Cover 67; Ripley 96; Krishna 00)

## Erro do vizinho mais próximo

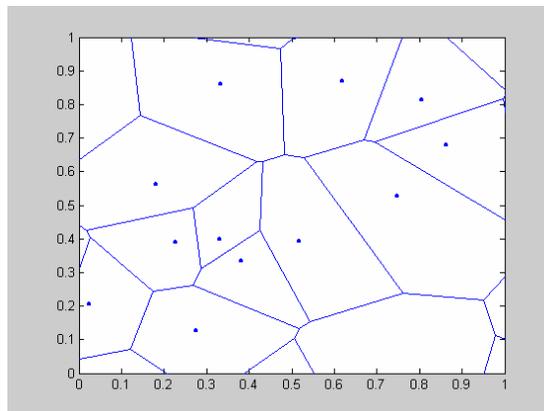
- Com  $n$  finito, e  $c$  classes

$$E_{bayes} \leq E_{neighbour} \leq 2E_{bayes} - \frac{c}{c-1} E_{bayes}^2 + \sup_{x \in X} \delta_{mx}(x) \left(1 - \frac{cE_{bayes}}{c-1}\right)$$

- $\delta(x)$  é a função de semelhança (Drakopoulos 95), que pode ser estimada, e tem geralmente um valor baixo

## Fronteiras do vizinho mais próximo

- Partição de Voronoi do conjunto de treino



## Problemas com k-nn

- Exigem MUITA memória para guardar o conjunto de treino
- Exigem MUITO tempo na fase de classificação
- São muito sensíveis a outliers
- São muito sensíveis à função de distância escolhida
  - Só se pode resolver com conhecimento à priori...

## Variantes sobre k-vizinhos

## Edited Nearest Neighbors

- Remover os outliers, e os exemplos demasiado próximos da fronteira
- Usar a regra de classificação (k-nn) sobre o próprio conjunto de treino, e eliminar os exemplos mal classificados
  - K=3 já produz bons resultados

## Minimização do nº de protótipos

- Reduzir o nº de protótipos resolve os 2 primeiros problemas !
- Deixa de ser possível estimar  $p(x)$
- Enquadramento formal
  - Q-Sets
- Heurísticas
  - Condensed Nearest Neighbors ( = IB2, RIBL, etc)

## Condensed Nearest Neighbors

[Hart 68]

```
1  Let
2
3      Train   Training Set
4      #train  Number of patterns in the training set
5      CNN    Condensed Nearest Neighbor set
6
7  Do
8
9      CNN = { Train1 }
10     Repeat
11         Additions =FALSE
12         For i =2 to #train
13             Classify Traini with CNN
14             If Traini is incorrectly classified
15                 CNN = CNN ∪ {Traini}
16                 Additions =TRUE
17             End_if
18         End_for
19     Until Additions = FALSE
```

## Reduced Nearest Neighbors

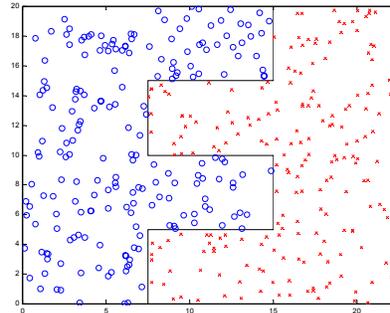
[Gates 72]

```
1  Let
2
3      Train   Training Set
4      #train  Number of patterns in the training set
5      #cnn    Number of patterns in the CNN set
6      CNN    Condensed Nearest Neighbor set
7      RNN    Reduced Nearest Neighbor Set
8
9  Do
10
11     RNN = CNN
12     For i =1 to #cnn
13         Let Candidate_RNN = RNN - { RNNi }
14         Classify all Train with Candidate_RNN
15         If all patterns in Train are correctly classified
16             RNN = Candidate_RNN
17         End_if
18     End_for
```

## *Toy problem para testes*

### ■ Double F ou Harts' Problem

- Simples visualização, fronteira “complexa”
- Distribuição uniforme nas áreas indicadas
- Usada por muitos autores como ref.



Harts' problem com 400 padrões

## Avaliação experimental dos métodos

- 1 - Gerar  $N$  pontos para conjunto de treino
- 2 - Aplicar o método para obter um classificador
- 3 - Gerar  $M$  pontos para conjunto de validação
- 4 - Calcular o erro  $E$  no conjunto de validação
- 5 - Repetir os passos 1-4 várias vezes, e calcular os valores médios e desvios padrões para: Erro, N° de protótipos, Tempo de treino e classificação

## Cálculo do erro

- Qual o tamanho do conjunto de validação para estimar o erro ?

Para cada padrão de validação  $x = \begin{cases} 1(\text{erro}) & p \\ 0(\text{certo}) & 1-p \end{cases}$

$C/p \approx 1\%$  e  $N=10e6$   
 $\sigma = 0.01\% \approx 0$

Erro médio  $y = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$

$E(y) = E(x_i) = \hat{p}$   $\hat{\sigma}_y^2 = \frac{\hat{p}(1-\hat{p})}{N}$  ( $N \times p \times (1-p) > 5$ )

## Rotinas Matlab

- `Class_plot(x,y,class)`
- `[vx,vy]=Voronoi_boundary(x,y,class)`
- `[ c,cp ] = knn( t_data, t_label, x, k)`
- `[ c ] = knn_mat( t_data, t_label, x )`
- `[cnn,cnn_label]=Cnn(train, train_label )`
- `[rnn,rnn_label]=Rnn(train,train_label,cnn,cnn_label)`
- `outclass=SelfClassify( dataset,inclass )`
- `[data]=Remove_col(data,index)`

## Fronteiras típicas

