Universidade Federal do Paraná (UFPR)
Especialização em Engenharia Industrial 4.0

Boas Maneiras
Aprendizado Não Supervisionado
Regressão

David Menotti
www.inf.ufpr.br/menotti/am-17

Hoje

- Boas Maneiras
  - Métricas de Avaliação & Téc. de Validação
  - Avaliação & Comparação de Classificação
- Aprendizado não supervisionado (*Clustering*)
  - k-Means
  - DBScan
- Regressão
  - Linear (e Múltipla)
  - Não-Linear (Exponencial / Logística)

Boas Maneiras

Agenda

- Introdução
- Métricas de Avaliação
- Técnicas de Validação
- Avaliação de Classificadores
- Comparando Classificadores

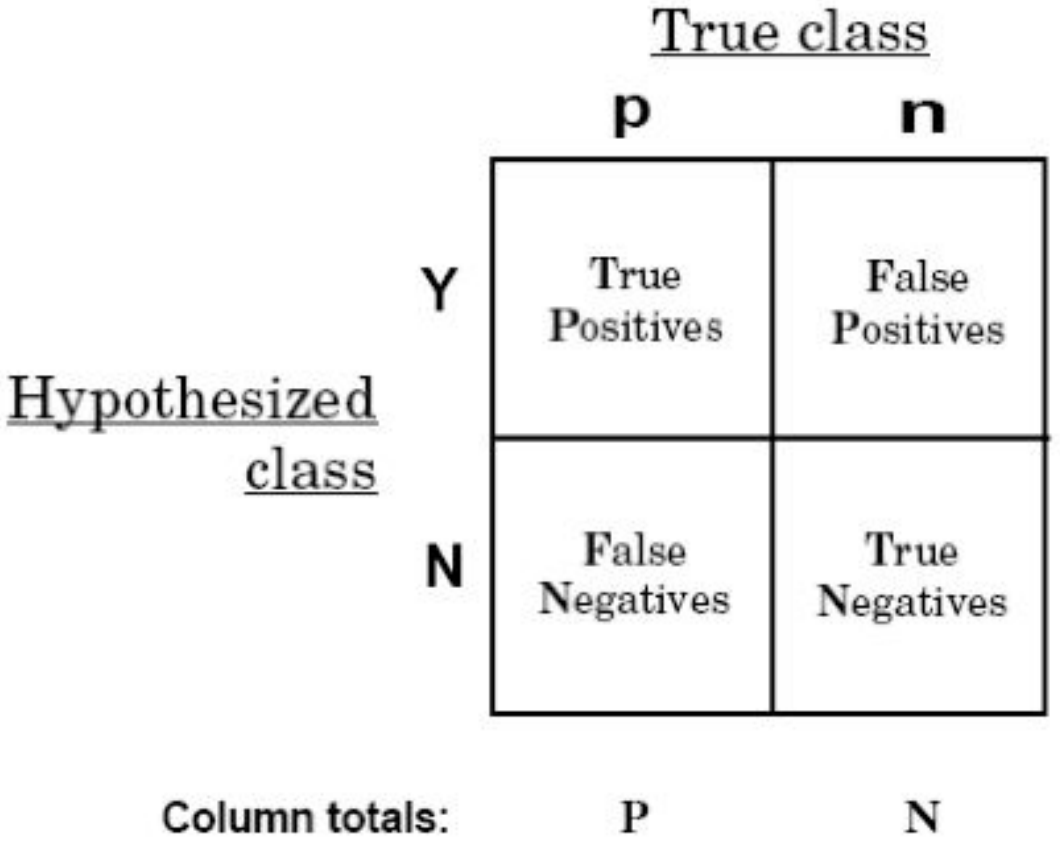
Introdução

- Considere por exemplo, um problema de classificação binário com 99 exemplos na classe positiva e 1 exemplo na classe negativa.
- Considere que o classificador *classificou* corretamente todos os exemplos da classe positiva e errou somente o exemplo da classe negativa.
- Nesse caso temos uma acurácia de 99%.

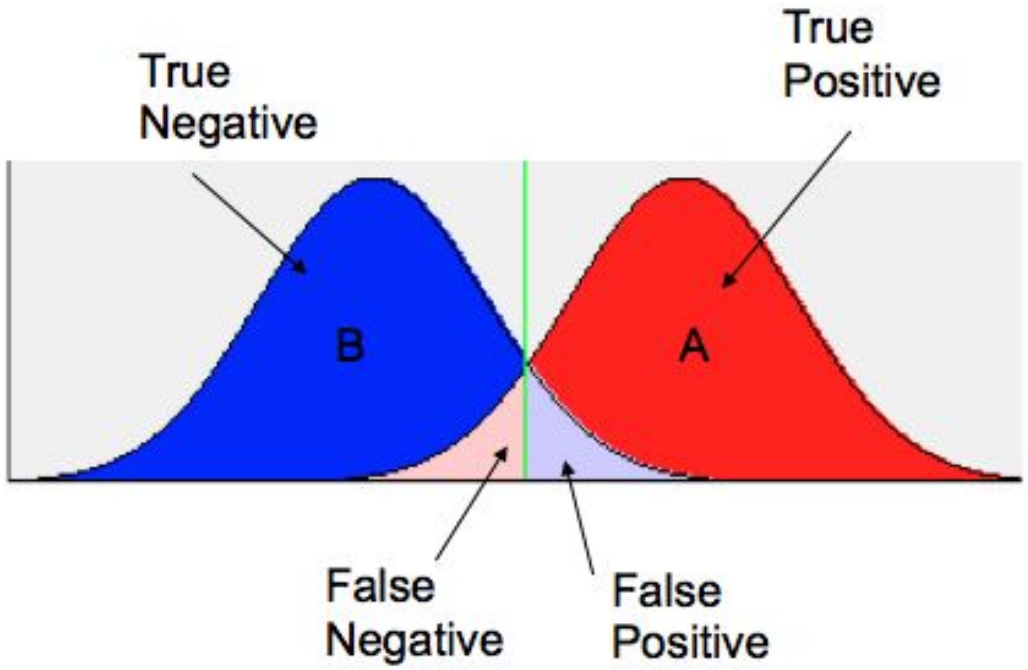
- **Atenção**: Acurácia de um classificador nem sempre é a melhor medida para se avaliar um classificador, principalmente em problemas **desbalanceados**.

Avaliação

- Dado um classificador binário, as saídas possíveis são as seguintes:



Avaliação

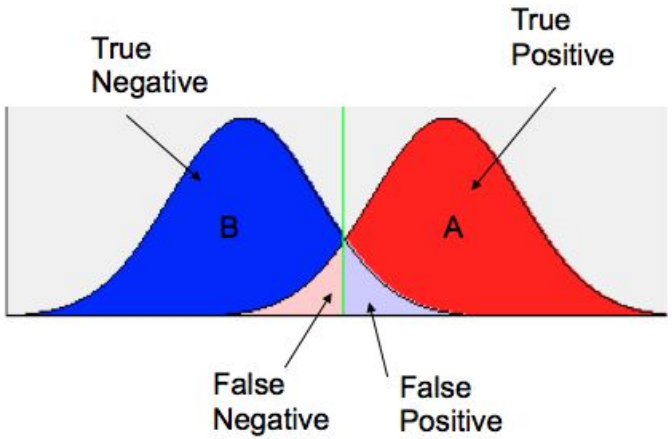


TPF	FPF
0.920	0.088
FNF	TNF
0.079	0.911

TP – Classe é A e classificamos como A
TN – Classe é B e classificamos como B
FP – Classe é B e classificamos como A
FN – Classe é A e classificamos como B

Tipos de Erro

- **Erro Tipo I** (α-erro, falso positivo):
  - Aceita-se como genuíno algo que é falso - **FP**
- **Erro Tipo II** (β-erro, falso negativo):
  - Rejeita-se algo que deveria ter sido aceito - **FN**



TPF	FPF
0.920	0.088
FNF	TNF
0.079	0.911

TP – Classe é A e classificamos como A
TN – Classe é B e classificamos como B
FP – Classe é B e classificamos como A
FN – Classe é A e classificamos como B

Métricas

- FP Rate
  - FP / N
- TP Rate ou hit rate
  - TP / P
- Accuracy
  - (TP + TN) / (P + N)
- P = TP + FN
- N = TN + FP

- *Precision* (Pr)
  - TP / (TP + FP)

Tende a 1 se FP tende a 0

- *Recall* (R) (revogação)
  - TPR = TP / (TP + FN)

Tende a 1 se FN tende a 0

- F-Measure
  - 2 / (1 / Pr + 1 / R)
  - 2 Pr. R / (Pr + R)

Média harmônica de Pr e R, tendo em vista que são grandezas inversamente proporcionais

Métricas

No scikit-learn, essas métricas estão implementadas no método `classification_report` (classe `metrics`)

```
>>> from sklearn.metrics import classification_report
>>> y_true = [0, 1, 2, 2, 0]
>>> y_pred = [0, 0, 2, 2, 0]
>>> target_names = ['class 0', 'class 1', 'class 2']
>>> print(classification_report(y_true, y_pred, target_names=target_names))
             precision    recall  f1-score   support

    class 0       0.67      1.00      0.80         2
    class 1       0.00      0.00      0.00         1
    class 2       1.00      1.00      1.00         2

avg / total       0.67      0.80      0.72         5
```

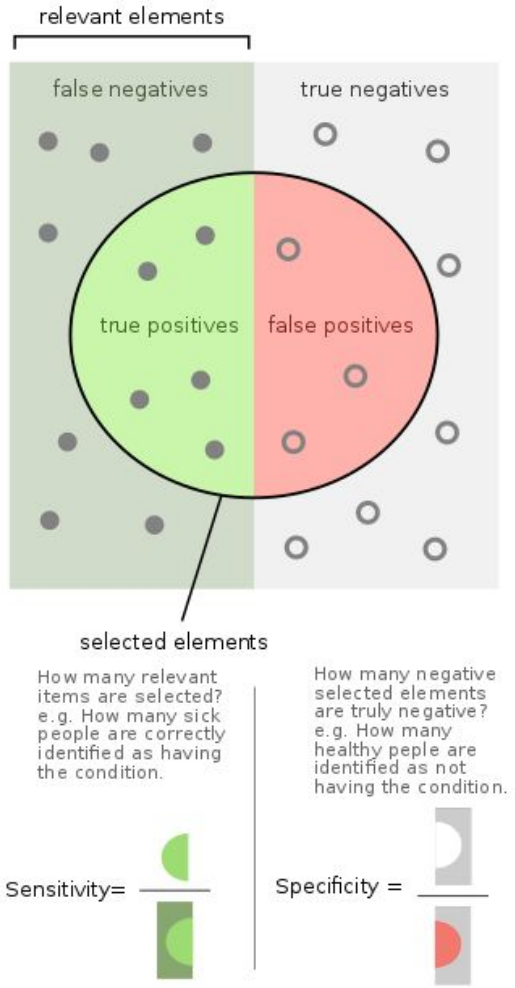
Métricas

- Especificidade / *Specificity*
  - TN / N

- Sensitividade / *Sensitivity*
  - TP / P

    * *Recall*

- P = TP + FN
- N = TN + FP



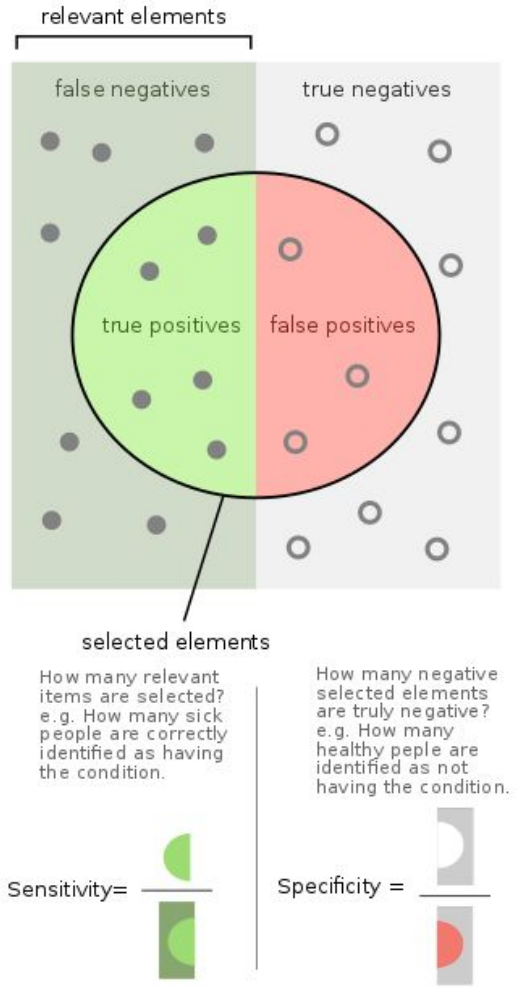
Métricas

- Especificidade / *Specificity*
  - TN / N

- Sensibilidade / *Sensibility*
  - TP / P

    * *Recall*

- P = TP + FN
- N = TN + FP



Técnicas de Validação

- Resubstitution
- Hold-out
- K-fold cross-validation
- LOOCV
- Random subsampling
- Bootstrapping

Resubstitution

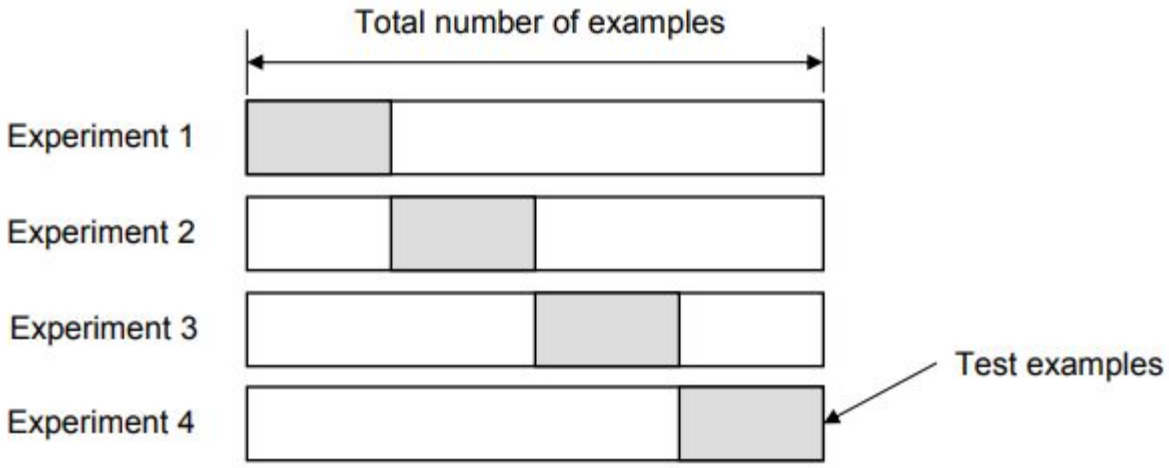
- Se todos os dados forem usados para treinar o modelo e a taxa de erro for avaliada com base no resultado versus valor real do mesmo conjunto de dados de treinamento, esse erro será chamado de **erro de resubstituição** (resubstitution error validation).
- Por exemplo:
  - Análise de *Malware*
  - Aplicações onde necessitam de:
    - *Black list*
    - *White list*

Hold-out

- Para evitar o erro de resubstituição, os dados são divididos em dois conjuntos de dados diferentes rotulados como um conjunto de treinamento e de teste.
- A divisão pode ser: 60% / 40% ou 70% / 30% ou 80% / 20%, etc.
  - Avaliar classificador em diferentes cenários:
    - 5% de train? ou 90% de train?
- Muito provavelmente haverá distribuição desigual das classes (alvos/metas) nos conjunto de dados de treinamento e teste.
  - os conjuntos de dados de treinamento e teste são criados com distribuição igual de diferentes classes de dados.
    - Esse processo é chamado de **estratificação**.

K-fold cross-validation

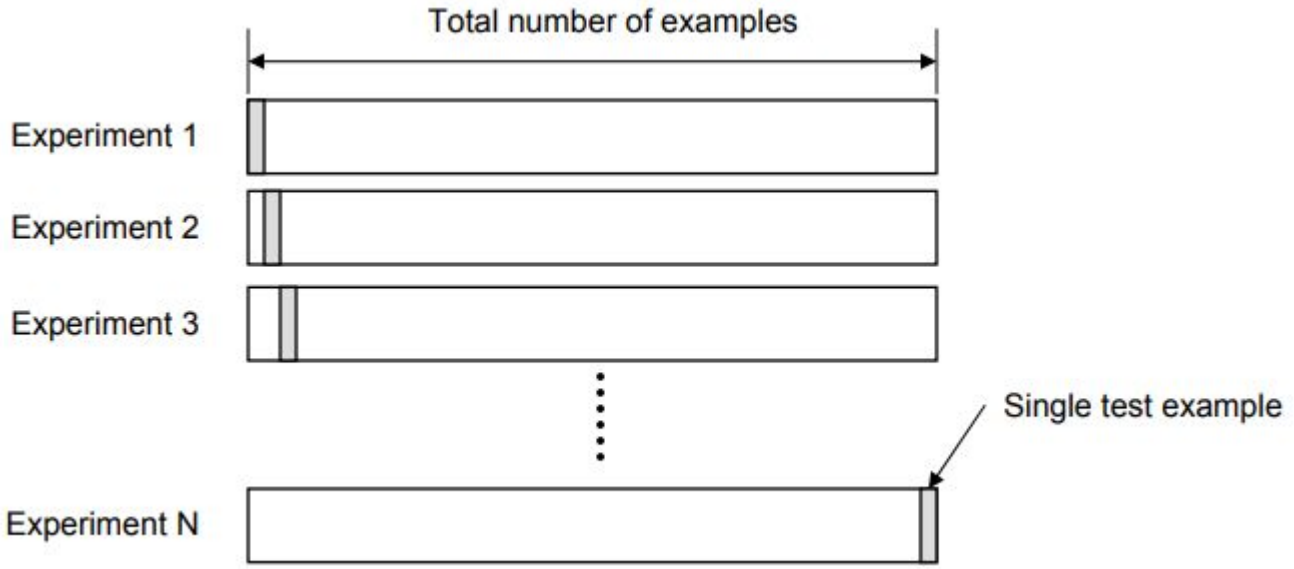
- Nesta técnica, k-1 *folds* são usadas para **treinamento** e o restante (1 *fold*) é usado para **teste**.



- A vantagem é que todos os dados são usados para treinamento.
  - Cada amostra é usada apenas uma vez para **teste**.
- A taxa de erro do modelo é a média
- Pode-se ver esta técnica como um *hold-out* repetido

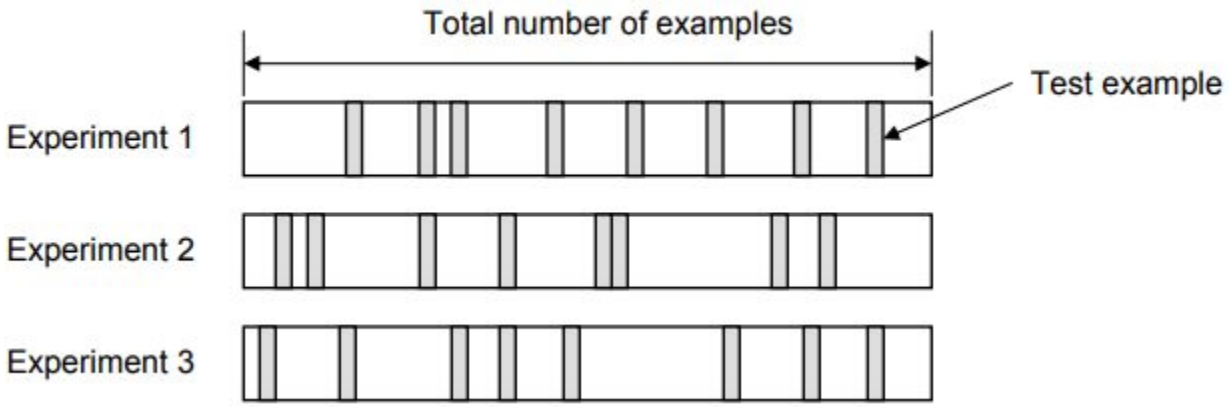
Leave-One-Out Cross-Validation (LOOCV)

- Todos os dados, exceto um registro, são usados para treinamento
  - Um registro é usado para teste.
- Processo é repetido por N vezes se houver registros N.
  - A vantagem é que (N-1)/ são usados para treinamento
- Desvantagem: custo computacional: N **rodadas**



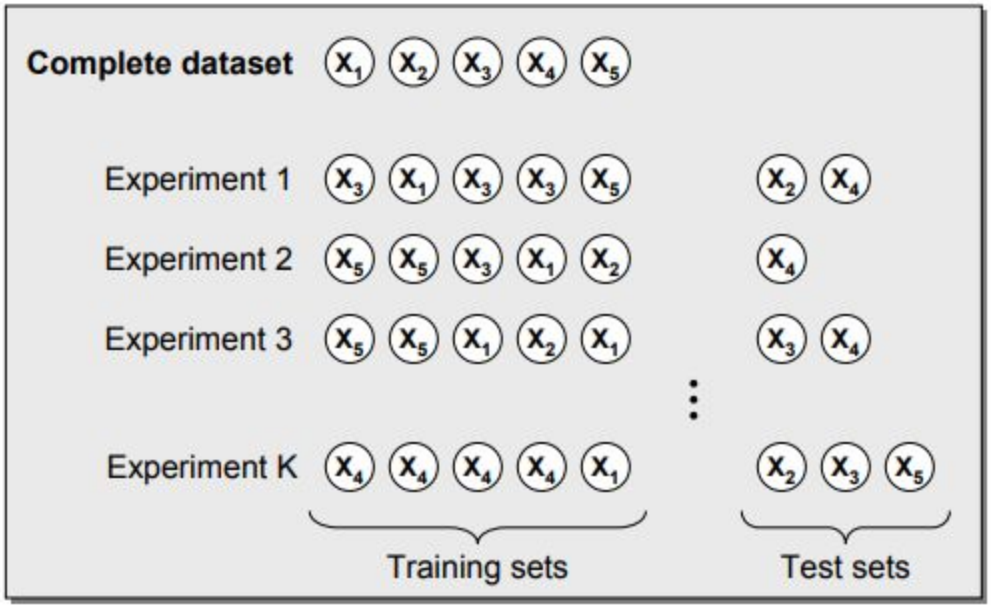
Random subsampling

- Amostras são escolhidos aleatoriamente para formar o ***test set***.
- Os dados restantes formam o ***train set***
- Bem utilizada na prática: pelo menos 30 execuções/rodadas



Bootstrapping

- Train set é selecionado aleatoriamente com **substituição / repetição**.
- Os exemplos restantes que não foram selecionados para treinamento são usados para teste.
- Diferente da validação cruzada de K-fold,
  - é provável que o valor mude de fold para fold.



Avaliação de Classificadores

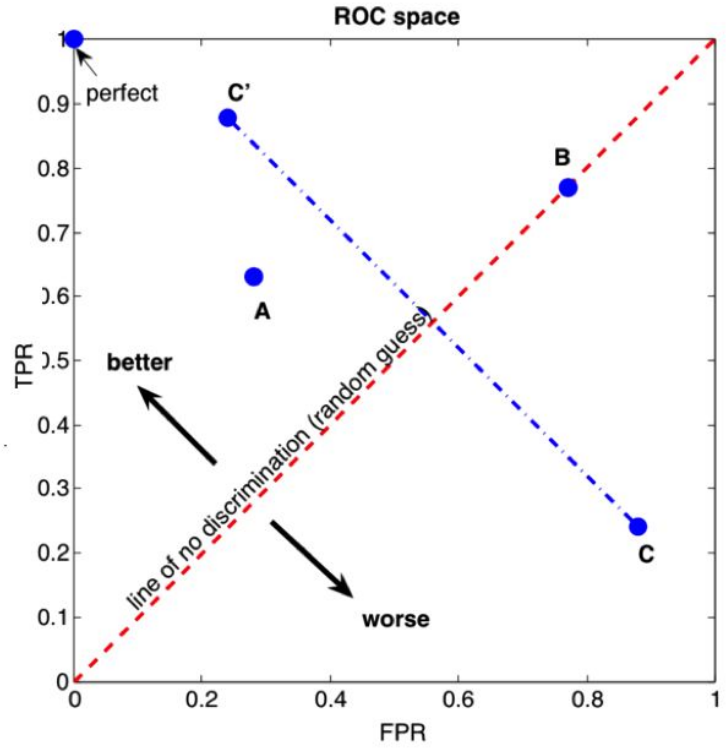
Exemplos de Classificadores

A	B	C	C′
TP=63 FN=37 100 FP=28 TN=72 100 91 109 200	TP=77 FN=23 100 FP=77 TN=23 100 154 46 200	TP=24 FN=76 100 FP=88 TN=12 100 112 88 200	TP=76 FN=24 100 FP=12 TN=88 100 88 112 200
TPR = 0.63	TPR = 0.77	TPR = 0.24	TPR = 0.76
FPR = 0.28	FPR = 0.77	FPR = 0.88	FPR = 0.12
F1 = 0.66	F1 = 0.61	F1 = 0.22	F1 = 0.81
ACC = 0.68	ACC = 0.50	ACC = 0.18	ACC = 0.82

Espaço ROC

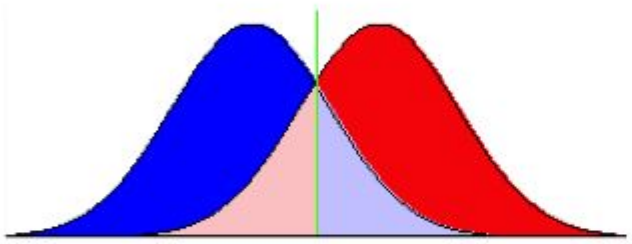
ROC (*Receiver Operating Characteristic*) é uma representação gráfica que ilustra o desempenho de um classificador binário em um determinado ponto de operação.

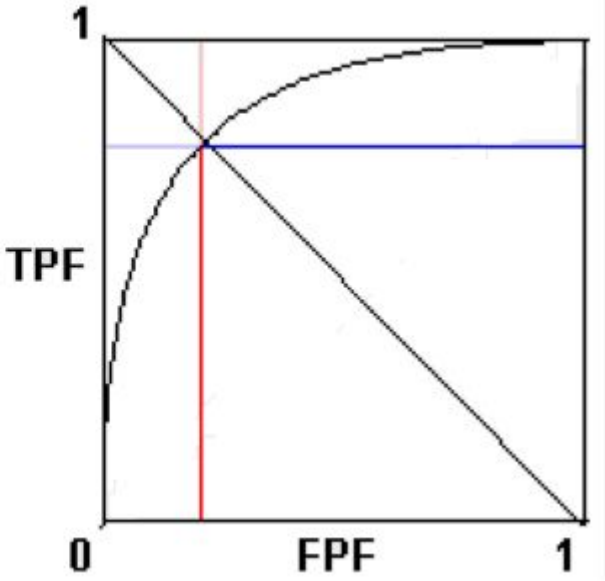
- Classificadores do exemplo anterior no espaço **ROC**.



Curva ROC

- A curva ROC mostra todos os pontos de operação do classificador (relação entre TP e FP)
- Para cada ponto, existe um limiar associado.
- EER (*Equal Error Rate*):
  - Ponto no gráfico no qual FPR é igual a 1-TPR
- Quando não existe um ponto operacional específico, usamos EER.





Curva ROC

- Considere 20 amostras, 10 classificadas corretamente (+) e 10 classificadas incorretamente (-) com suas respectivas probabilidades.

#	Classe	Score	#	Classe	Score
1	+	0.90	11	-	0.70
2	+	0.80	12	-	0.53
3	+	0.60	13	-	0.52
4	+	0.55	14	-	0.505
5	+	0.54	15	-	0.39
6	+	0.51	16	-	0.37
7	+	0.40	17	-	0.36
8	+	0.38	18	-	0.35
9	+	0.34	19	-	0.33
10	+	0.30	20	-	0.10

Curva ROC

Exemplo

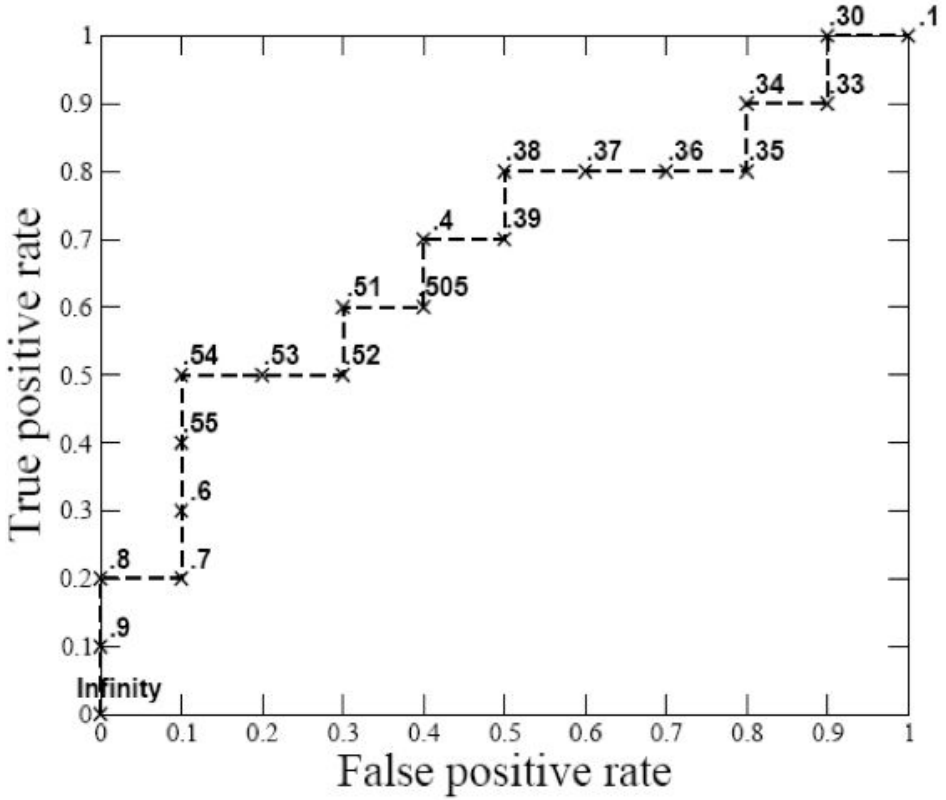
- Considere 20 amostras, 10 classificadas corretamente (+) e 10 classificadas incorretamente (-) com suas respectivas probabilidades.

#	Classe	Score	#	Classe	Score
1	+	0.90	11	-	0.70
2	+	0.80	12	-	0.53
3	+	0.60	13	-	0.52
4	+	0.55	14	-	0.505
5	+	0.54	15	-	0.39
6	+	0.51	16	-	0.37
7	+	0.40	17	-	0.36
8	+	0.38	18	-	0.35
9	+	0.34	19	-	0.33
10	+	0.30	20	-	0.10

Curva ROC

Exemplo

- Após ordenar os dados usando as probabilidades, temos a seguinte curva ROC



Curva ROC

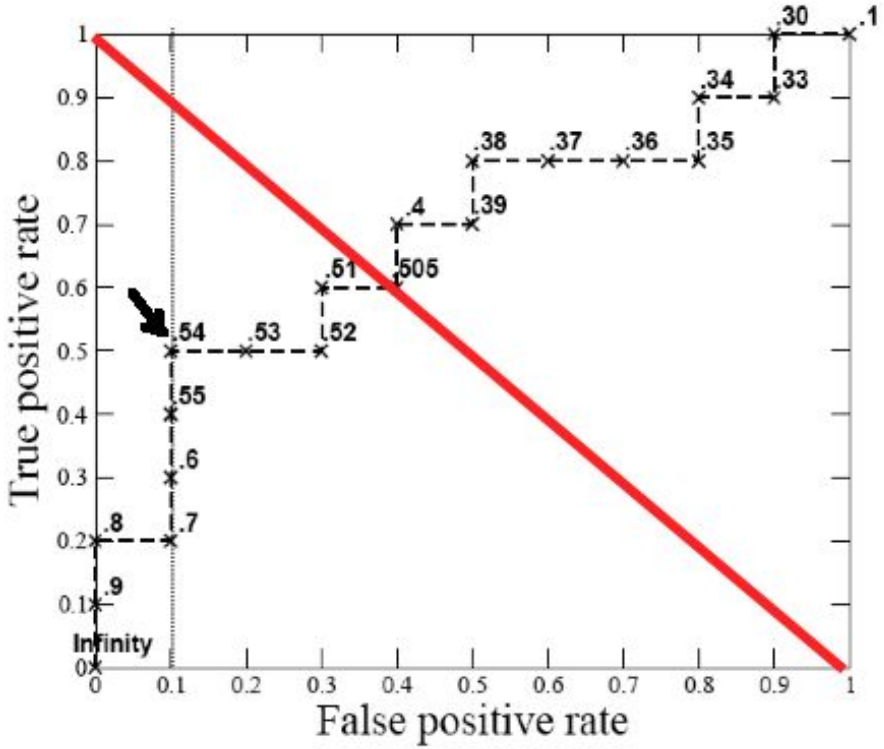
Exemplo

- Suponha que a especificação do seu sistema diga que o máximo **FPR** permitido é de 10%
- Qual seria o ponto de operação do sistema (limiar) ? **[0,7 ; 0,54]**

- Para esse limiar, qual seria a taxa de acerto do sistema?

$$\frac{(Pos \times TPR) + (Neg - (FPR \times Neg)}{N}$$

- 70% para um limiar de 0,54



Curva ROC

Classes desbalanceadas

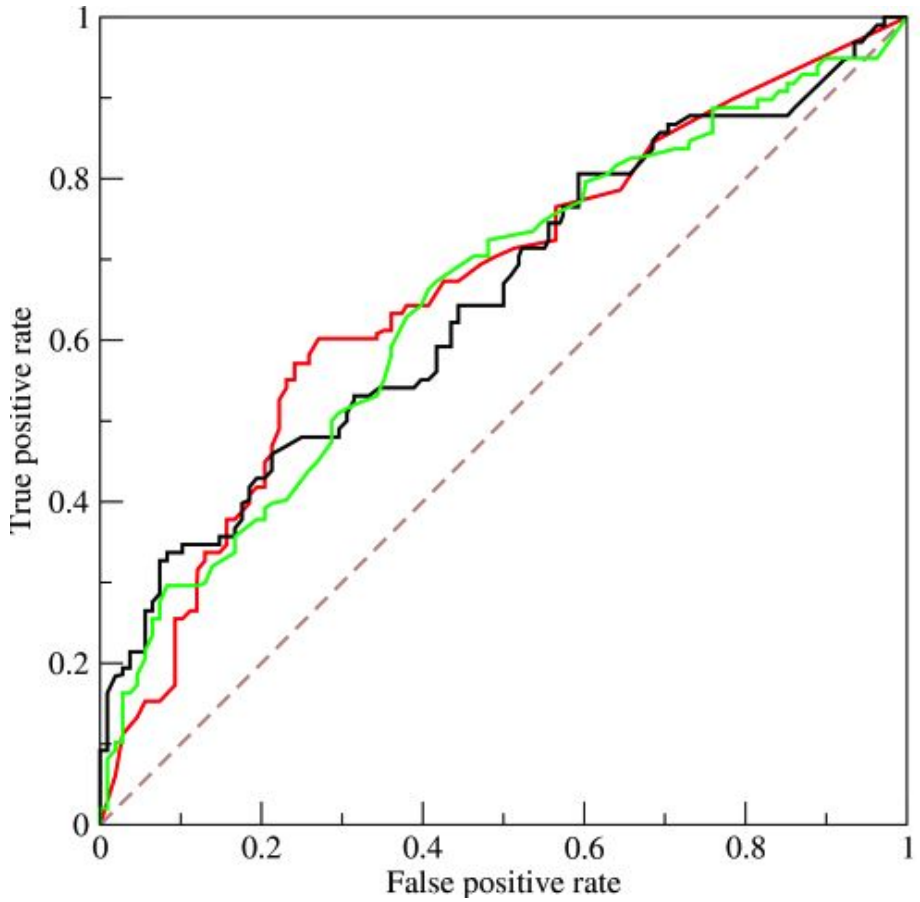
- Curvas ROC têm uma propriedade interessante:
  - não são sensíveis a mudanças de distribuição das classes

- Se a proporção de instâncias negativas e positivas na base de teste muda, a curva continua a mesma.
  - A curva é baseada em TP e FP.

- Isso permite uma fácil visualização do desempenho dos classificadores independentemente da distribuição das classes.

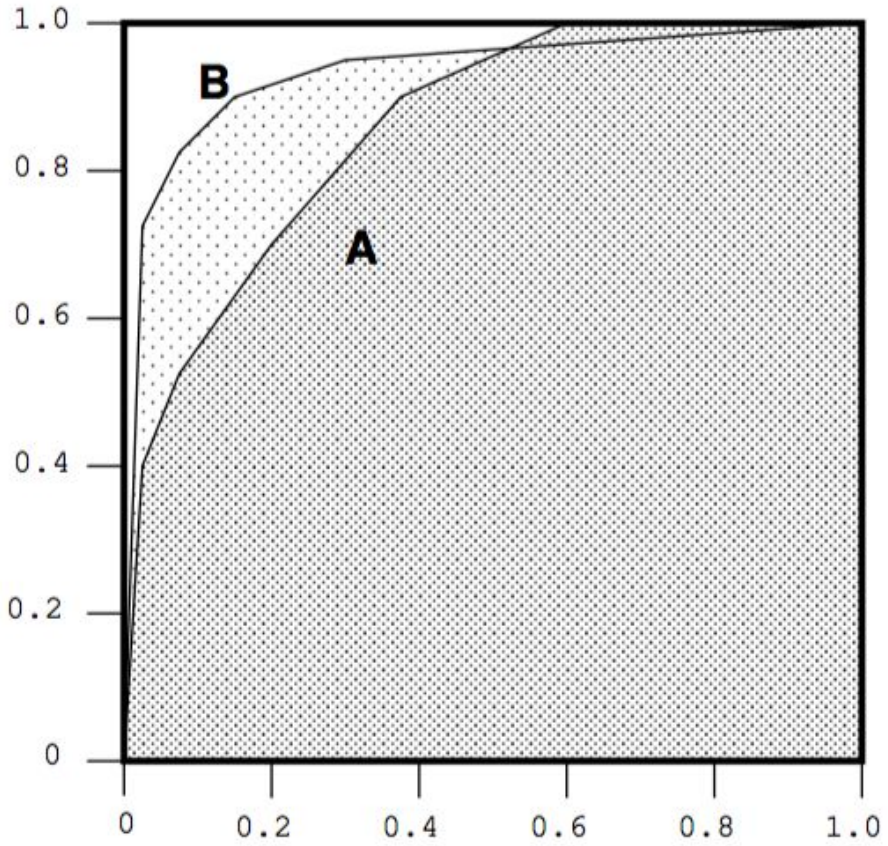
Comparando Classificadores

Qual seria o melhor classificador?



AUC

Area Under the Curve



Comparando Classificadores

Comparando Classificadores

- Suponha que você tenha dois classificadores que produziram as seguintes taxas de erro nos 10 folds de validação da sua base de dados.

$$C_1 = [10,15,7,6,13,11,12,9,17,14]$$

e

$$C_2 = [17,14,12,16,23,18,10,8,19,22]$$

- O erro médio de C_1 = 11,4% enquanto o erro médio de C_2 = 15,9%
- Podemos afirmar que C_1 é melhor do que o C_2?
- A média é bastante sensível a outliers.
  - O desempenho muito bom em um fold pode compensar o desempenho ruim em outro.

Comparando Classificadores

- Uma ferramenta bastante útil nesses casos é o teste de hipóteses.
  - t-Teste
    - Requer que as diferenças entre as duas variáveis comparadas sejam distribuídas normalmente.
    - Tamanho das amostras seja grande o suficiente (~30).

- A natureza do nosso problema não atende nenhum dos critério acima.

- Alternativa é o ***Wilcoxon signed-rank test***

Wilcoxon Signed-Rank test

- Teste não paramétrico que ordena as diferenças de desempenho de dois classificadores, ignorando os sinais, e compara a posição das diferenças (positivas e negativa).
- O teste consiste em:
  - Definir as hipóteses
    (H_0 - Não existe diferença e H_1 - Existe diferença)
  - Calcular as estatísticas do teste
  - Definir o nível de significância do teste (α)
  - Rejeitar ou aceitar H_0, comparando o valor da estatística calculada com o valor crítico tabelado.
- **Nível de significância**: Em aprendizagem de máquina, $\alpha = 0,05$ é um valor bastante utilizado. Isso quer dizer que existe 5 chances em 100 da hipótese ser rejeitada quando deveria ter sido aceita, ou seja, uma probabilidade de erro de 0,05 = 5%.

Wilcoxon Signed-Rank test

- Considere o exemplo anterior dos classificadores C_1 e C_2

C_1	C_2	Diff
10	17	7
15	14	1
7	12	5
6	16	10
13	23	10
11	18	7
12	10	2
9	8	1
17	19	2
14	22	8

Differenças	1	1	2	2	5	7	7	8	10	10
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Posição	1.5	1.5	3.5	3.5	5	6.5	6.5	8	9.5	9.5
Sinal	+	+	+	-	-	-	-	-	-	-

- Estatísticas: $N = 10$,
- $W^+ = 6{,}5$ (Soma das posições com sinal +)
- $W^+ = 48{,}5$ (Soma das posições com sinal -)
- Comparar os valores das estatísticas calculadas com os valores tabelados.

Wilcoxon Signed-Rank test

Valores críticos bi-caudais para o teste de Wilcoxon

Rejeição de H_0 para $\sum R-$ ou $\sum R+$ fora do intervalo dado pelos valores delimitados entre Inferior e Superior

	α							
	0,1		0,05		0,02		0,01	
número de pares com diferenças não-nulas	Inferior	Superior	Inferior	Superior	Inferior	Superior	Inferior	Superior
1								
2								
3								
4								
5	0	15						
6	2	19	0	21				
7	3	25	2	26	0	28		
8	5	31	3	33	1	35	0	36
9	8	37	5	40	3	42	1	44
10	10	45	8	47	5	50	3	52
11	13	53	10	56	7	59	5	61
12	17	61	13	65	9	69	7	71
13	21	70	17	74	12	79	9	82
14	25	80	21	84	15	90	12	93
15	30	90	25	95	19	101	15	105

- Comparar os valores das estatísticas calculadas (W^+ = 6,5 e W^- = 48,5) com os valores tabelados.
- Os valores críticos de W para N=10 e α = 0,05 são 8 e 47.
- Como os valores calculados estão fora do intervalo crítico, rejeita-se a hipótese que não há diferença (H_0), ou seja, aceita-se H_1 (existe diferença estatística entre os dois classificadores).

Wilcoxon Signed-Rank test

O teste de Wilcoxon pode ser encontrado em diversas ferramentas

- Matlab (`signedrank`)
- Python Scipy (`from scipy import stats`)

```
Python
>>> c1 =[10, 15, 7, 6, 13, 11, 12, 9, 17, 14]
>>> c2 =[17, 14, 12, 16, 23, 18, 10, 8, 19, 22]
>>> from scipy.stats import wilcoxon
>>> wilcoxon(a,b)
(6.5, 0.031865021445197136)

MATLAB
>> [p,h,stats] = signrank(c1,c2)
p = 0.0332
h = 1
stats = signedrank: 6.5000
```

Wilcoxon Signed-Rank test

- Um teste **não paramétrico** utilizado para comparar diversos classificadores é o teste de **Friedman**
  - Semelhante ao ANOVA

Aprendizado
Não Supervisionado

Agenda

- Aprendizado não supervisionado
  - Clustering
    - Particionamento: k-Means
    - Densidade: DBScan

Aprendizagem Não Supervisionada

- Em problemas de aprendizagem supervisionada, contamos como a tupla [X,y], em que o objetivo é classificar y usando o vetor de características X.
- Na aprendizagem não supervisionada, temos somente o vetor X.
- Nesse caso, o objetivo é descobrir alguma coisa a respeito dos dados
  - Por exemplo, como eles estão agrupados.
- Mais subjetiva que a aprendizagem supervisionada uma vez que não existe um objetivo simples como a classificação.

- **Dados não rotulados**:
  - Obtenção de dados não rotulados não é custosa!

Noção de Grupos pode ser Ambígua

•

Quantos clusters?

Seis Clusters

Dois Clusters

Quatro Clusters

Clustering

- Refere-se a um conjunto de técnicas utilizada para encontrar grupos (ou ***clusters***) em um conjunto de dados.

- ***Cluster***: Uma coleção de objetos similares entre si e diferentes dos objetos pertencentes a outros clusters.

- Métodos de *clustering* podem ser divididos em:
  - Particionamento
  - Hierárquico
  - Densidade

Particionamento

k-Means

- Separar os dados em um número pré-determinado de clusters
- k-Means Clustering

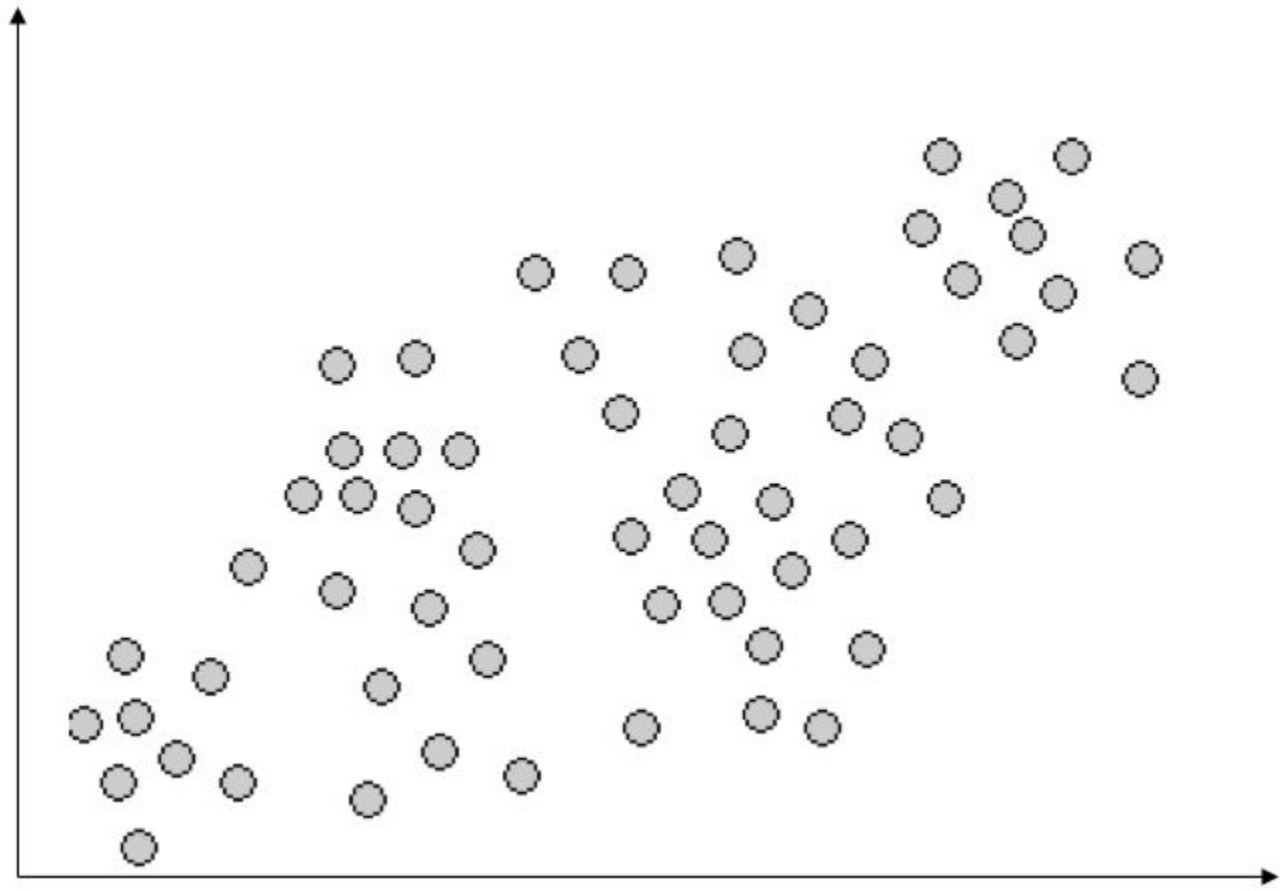
Algoritmo

Entrada: k, dados (**X**)

Saída: dados agrupados em k grupos

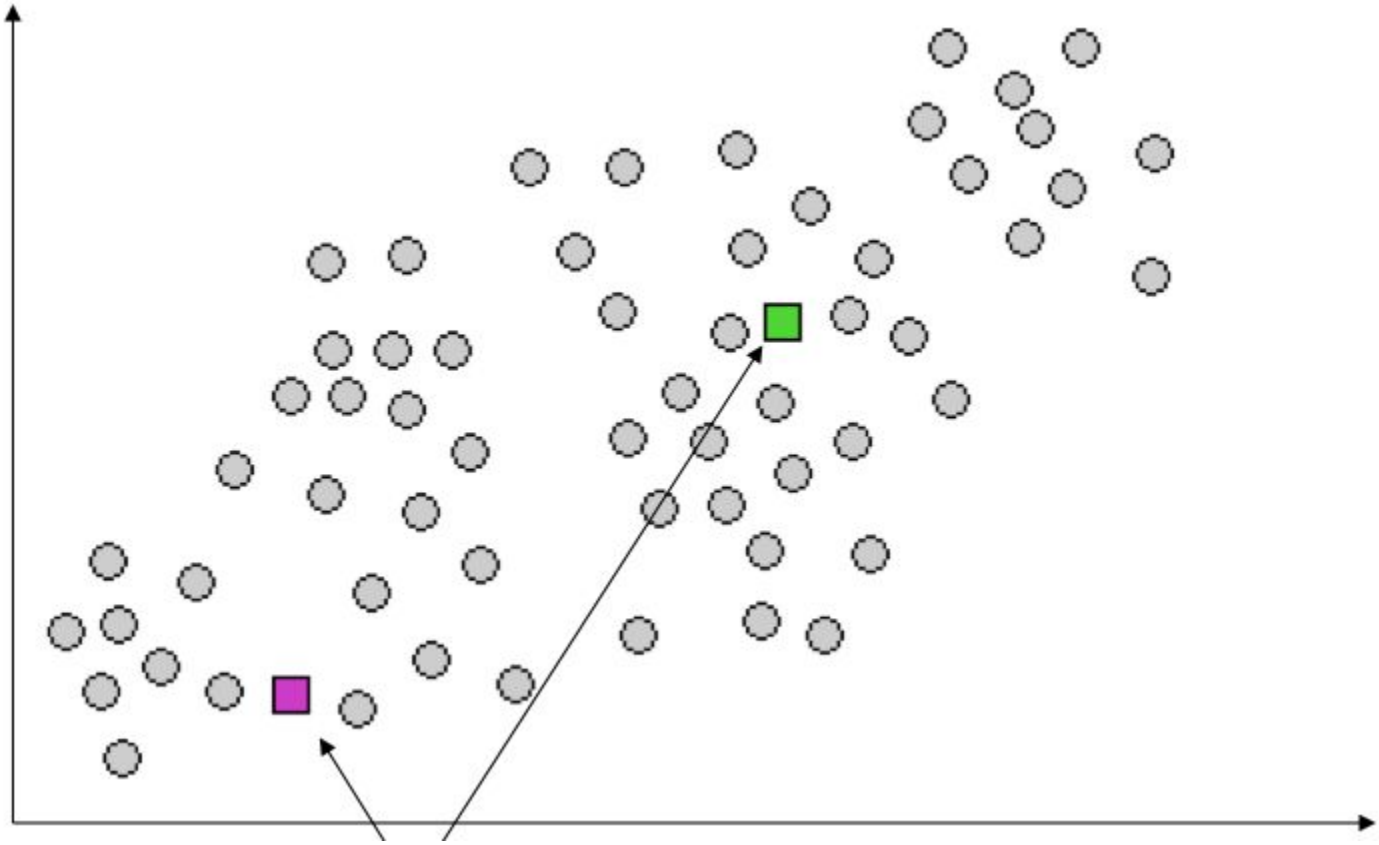
1. Determinar os k centróides
2. Atribuir a cada objeto do grupo o centróide mais próximo.
3. Após atribuir um centróide a cada objeto, recalcular os centróides
4. Repetir os passos 2 e 3 até que os centróides “não sejam“ modificados

k-Means



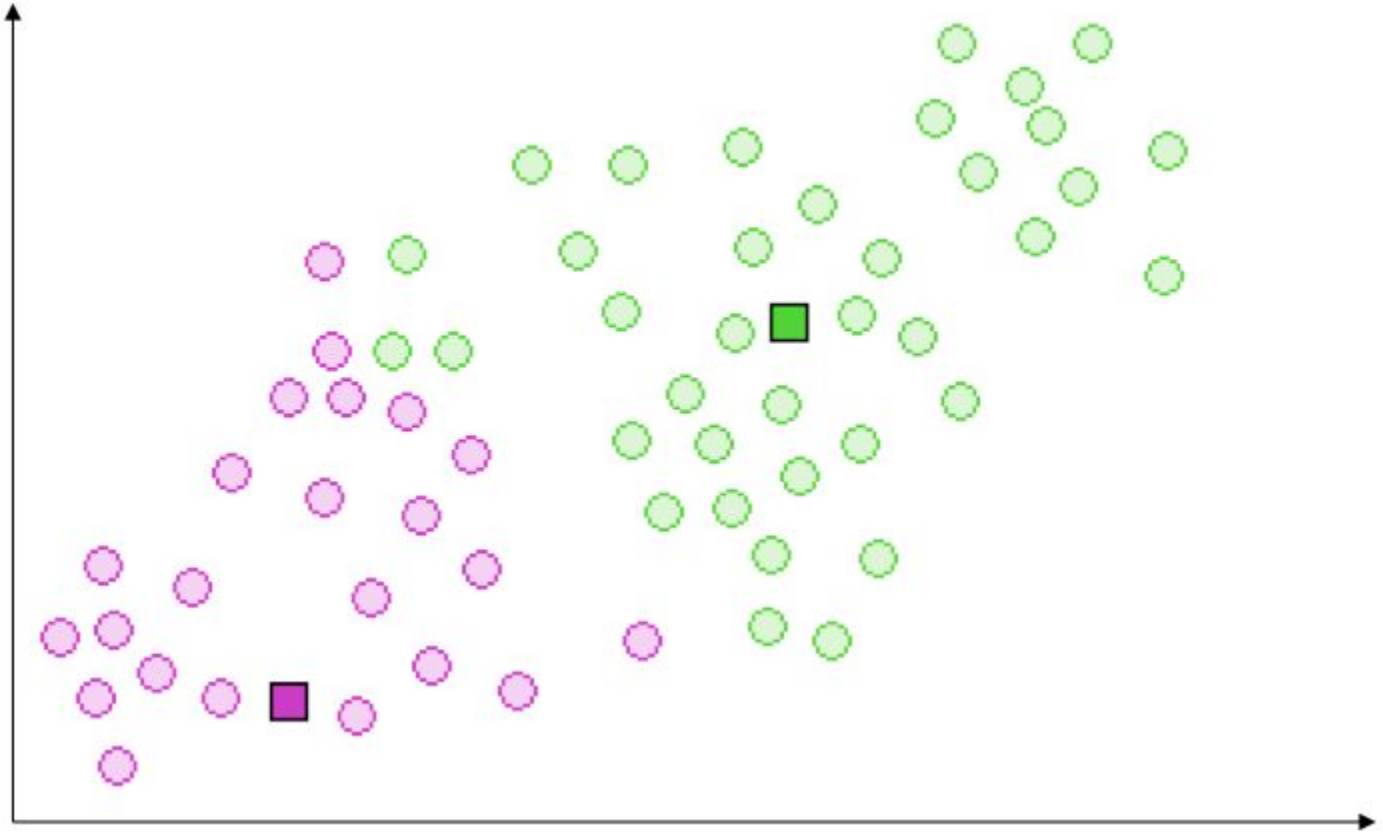
Dados em duas dimensões

k-Means



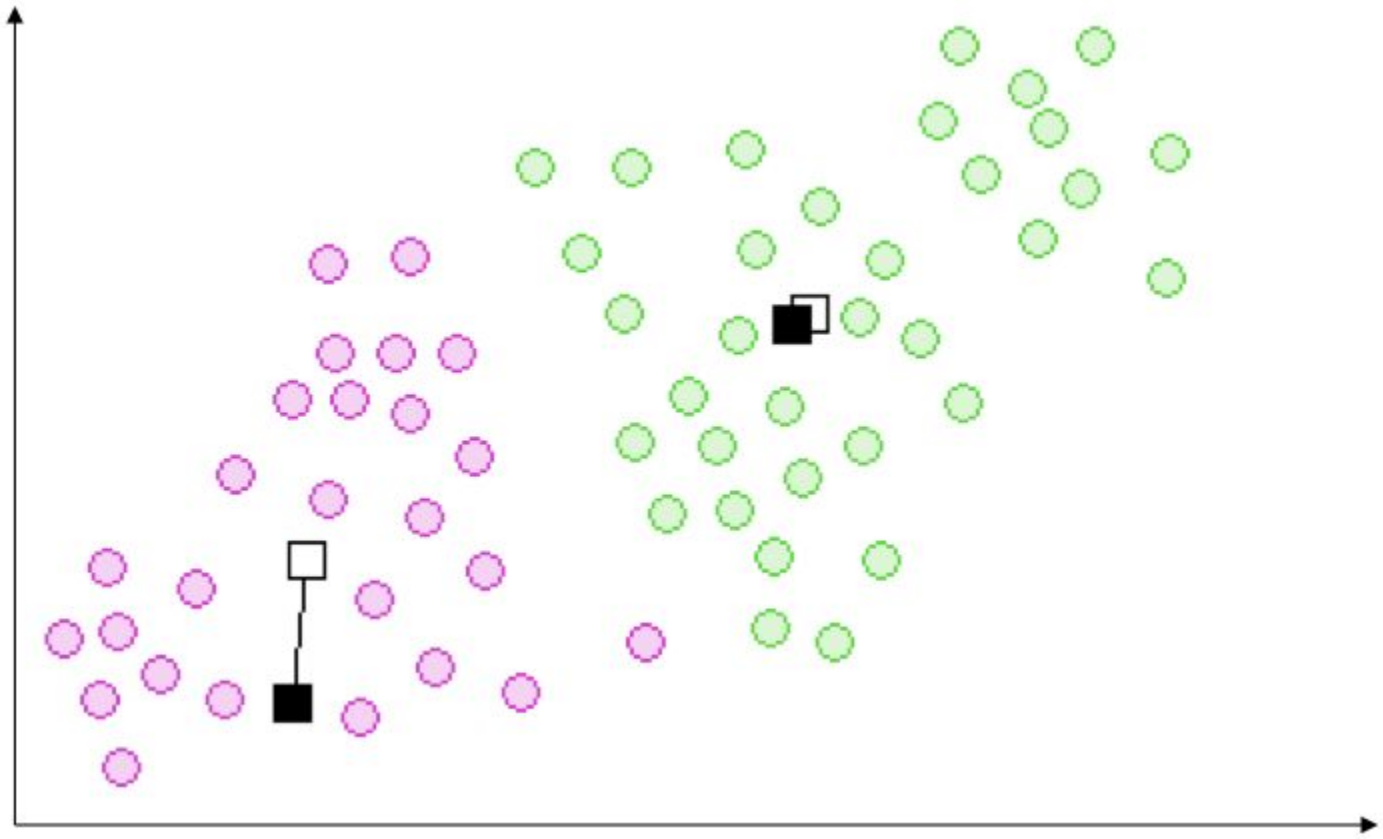
Passo 1: Centróides definidos aleatoriamente

k-Means



Passo 2: Atribuir a cada objeto o centróide mais próximo

k-Means



Passo 3: Recalcular os centróides

k-Means

Obsevações

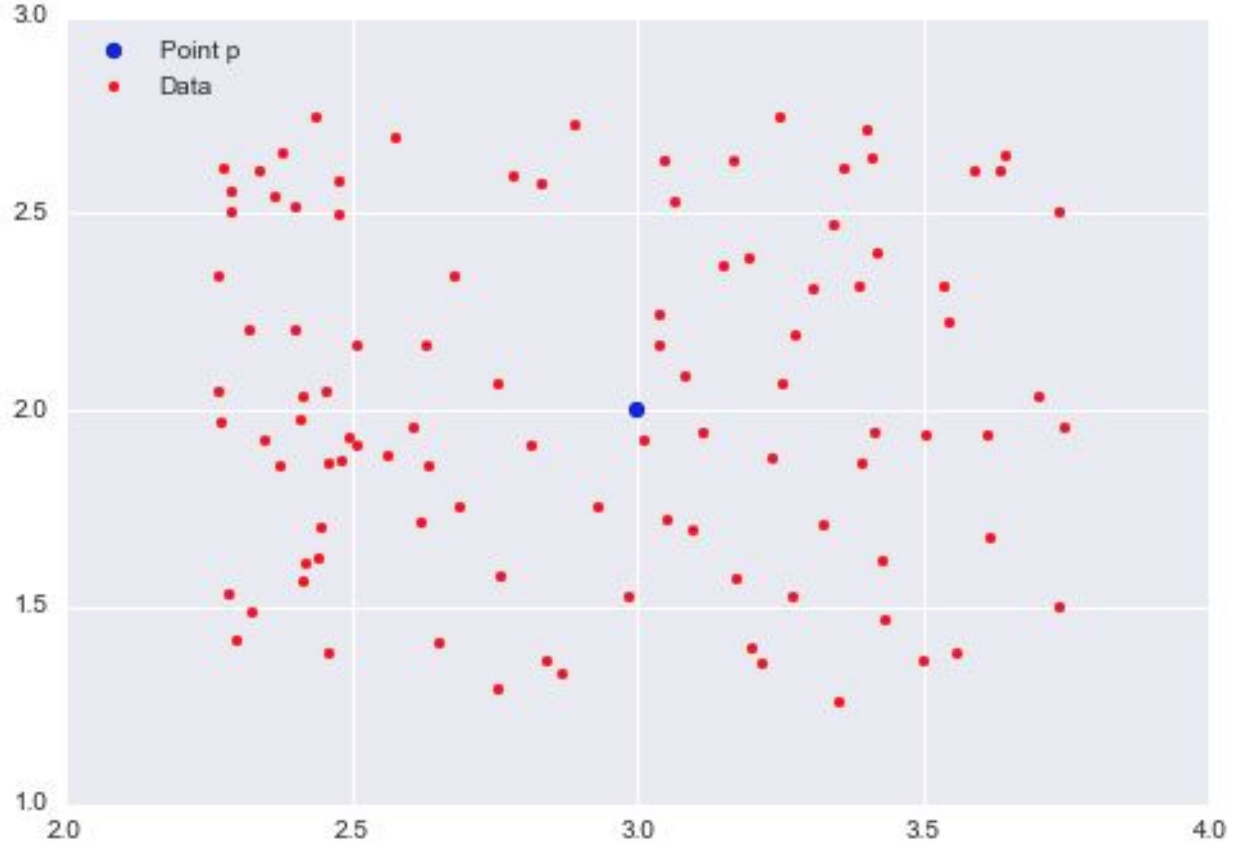
- Relativamente eficiente (escalável)
- Necessidade de definir o número de clusters *a priori*.
- Ineficiente para lidar com ruídos e/ou *outliers*.
  - Todo ponto será atribuído a um cluster mesmo que ele não pertença a nenhum.
  - Em alguns domínios de aplicação (detecção de anomalias) isso causa problemas.
- Inadequado para descobrir *clusters* com formato **não convexo**.

Métodos baseados em Densidade

- Diferentemente do k-Means, os métodos baseados em densidade identificam regiões densas, permitindo a formação de clusters com diferentes formatos.
- Resistentes a presença de ruídos.
- Baseado no conceito de ε-vizinhança.
- Em um espaço bi-dimensional, a ε-vizinhança de um ponto *p* is o conjunto de pontos contido num círculo de raio ε, centrado em *p*.

ε-vizinhança

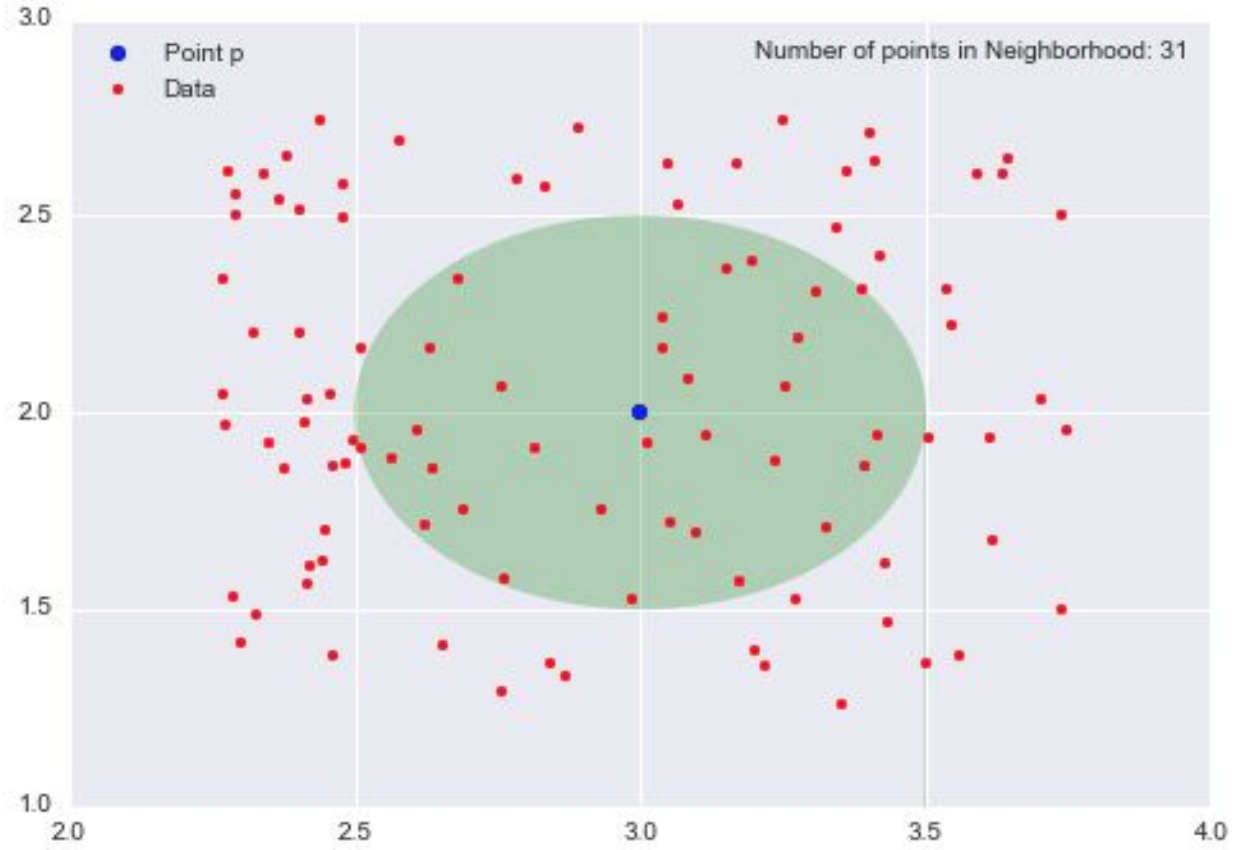
Exemplo



100 pontos no intervalo [1,3] x [2,4] e *p* = (3,2)

ε-vizinhança

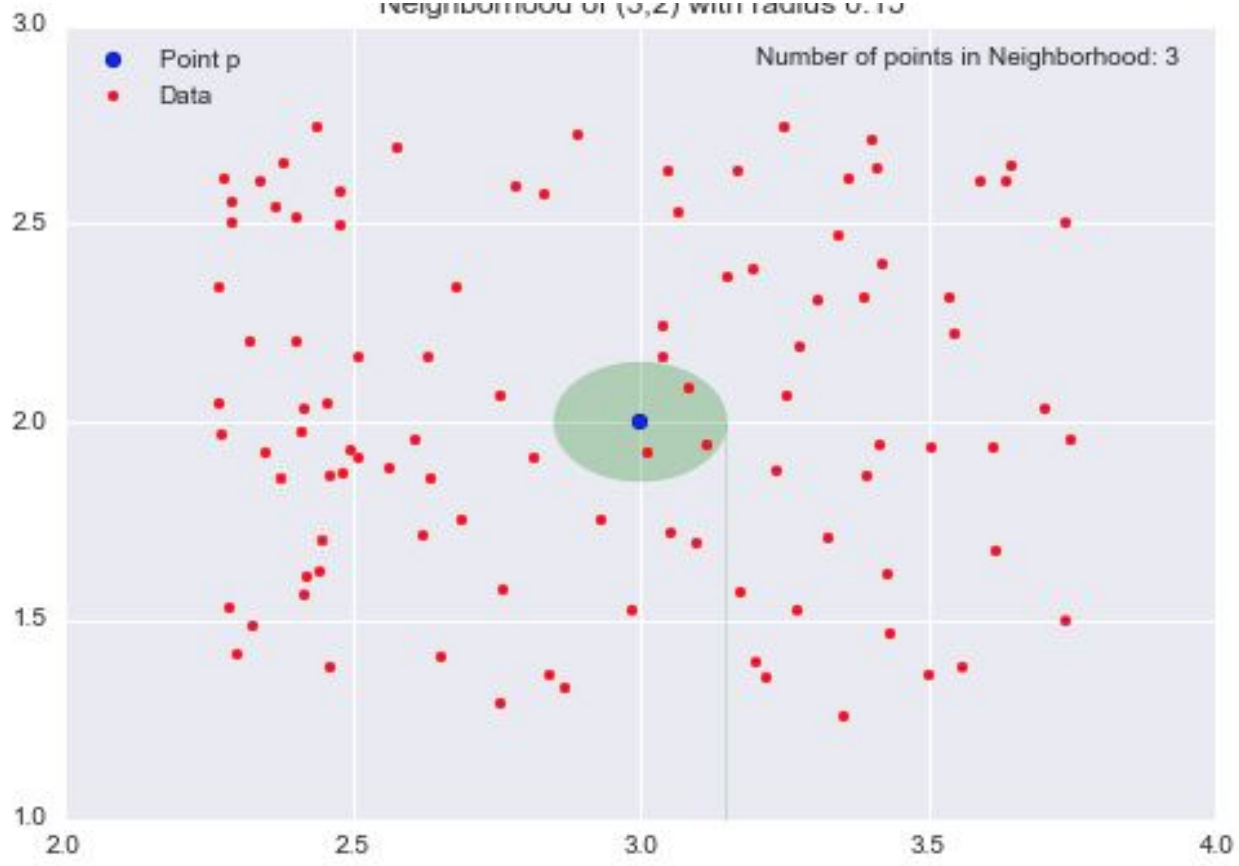
Exemplo



Vizinha de *p* com raio 0,5 (ε = 0,5) e 31 pontos de 100

ε-vizinhança

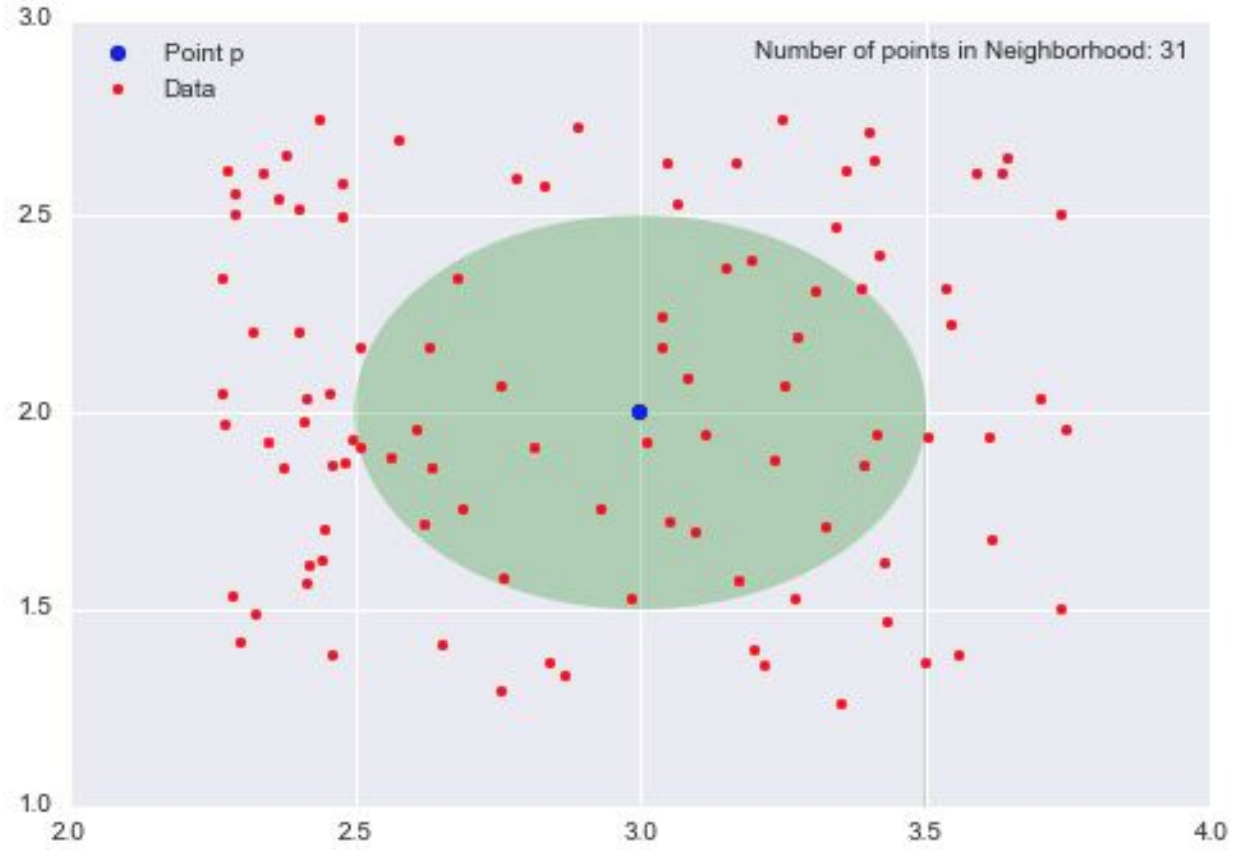
Exemplo



Vizinha de *p* com raio 0,15 (ε = 0,15) e apenas 3 vizinhos.

Densidade

Densidade = Massa / Volume

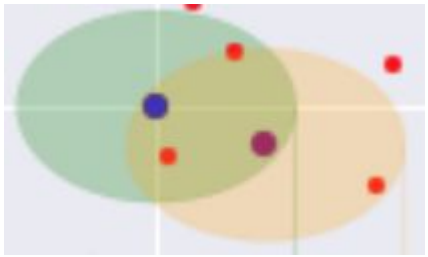


Para o caso de ε = 0,15, temos o volume como a área do círculo, logo $\pi(0,5)^2 = \pi/4$.
Desta forma, massa/volume = 31 pontos / (π/4) ≅ 39,5

Densidade

- A ideia é usar o valor de densidade para agrupar aqueles pontos que possuem valores similares
- Identificar **vizinhanças** densas nas quais a maioria dos pontos está contida.
- Essa é a ideia do algoritmo DBSCAN

DBSCAN



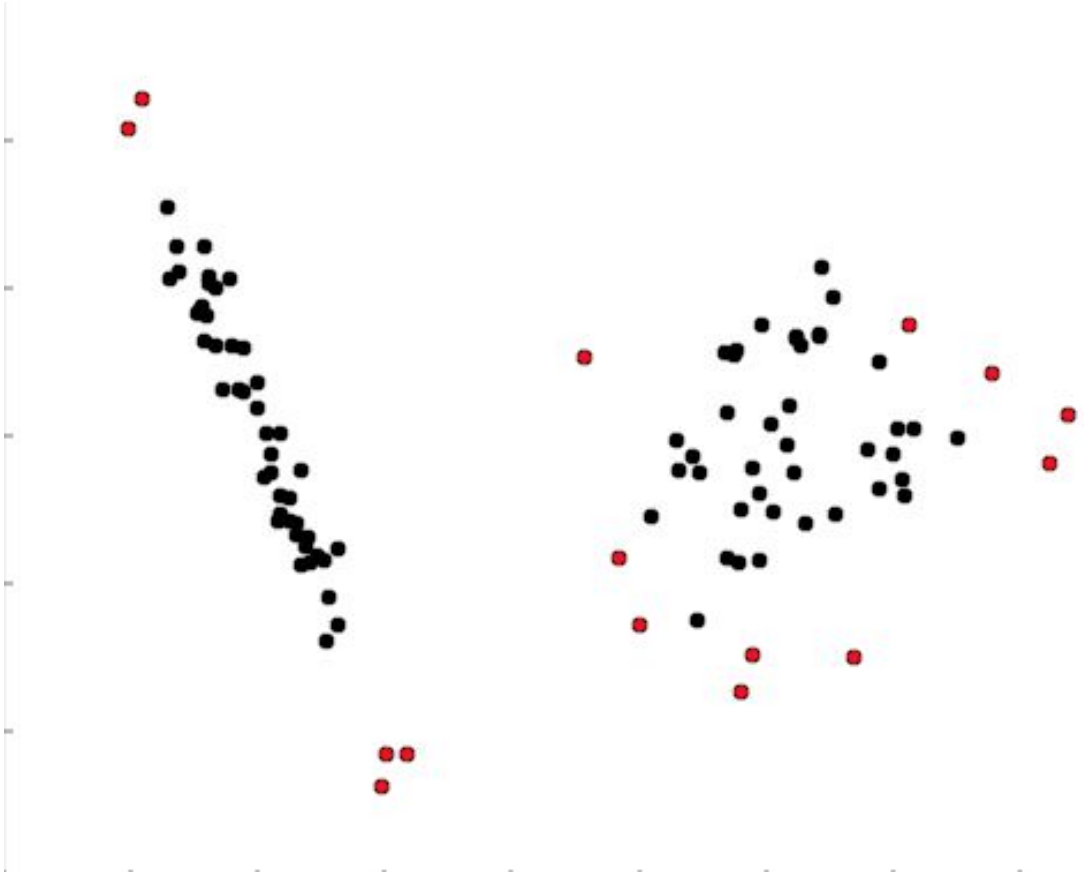
- Possui dois parâmetros:
  - ε: Raio da vizinhança
  - **MinPts**: Número mínimo de pontos na vizinhança para definir um *cluster*.
- Com bases nesses dois parâmetros, DBSCAN classifica os **pontos** em três categorias:
  - ***core point***: Se a vizinhança de p com raio ε contém pelo menos **MinPts**.
  - ***border point***: Se a vizinhança de q com raio ε contém menos de **MinPts**, mas pode ser alcançado por um *core point* p.
  - ***outlier***: Nenhum dos casos acima.

DBSCAN

1. Selecione um ponto aleatoriamente que não tenha sido atribuído a nenhum *cluster* e que não seja um ***outlier***. Calcule sua ε-vizinhança e determine se ele é um ***core point***.
   - Se sim, comece um cluster ao redor desse ponto.
   - Senão, rotule como ***outlier***.
2. Depois de ter encontrado ***core point***, expanda-o adicionando todos os pontos alcançáveis.
3. Repita os dois passos acima até que todos os pontos sejam atribuídos a um cluster ou sejam rotulados como ***outliers***.

DBSCAN

Exemplo



Outliers marcados em **vermelho**

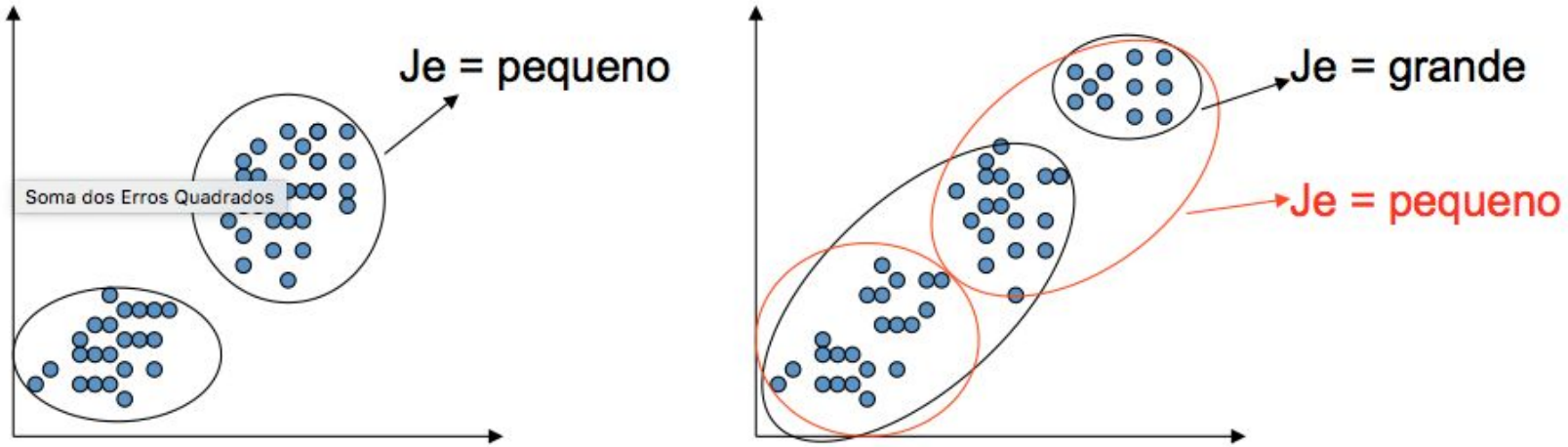
Avaliação em Aprendizagem Não Supervisionada

- Diferentemente da aprendizagem supervisionada, na qual podemos utilizar diferentes métricas de avaliação **objetivas**, a avaliação em aprendizagem não supervisionada é mais subjetiva.

- Porque é importante avaliar *clusters*?
  - Comparar algoritmos de *clustering*.
  - Comparar *clusters* gerados por mais de um algoritmo.

Avaliação em Aprendizagem Não Supervisionada

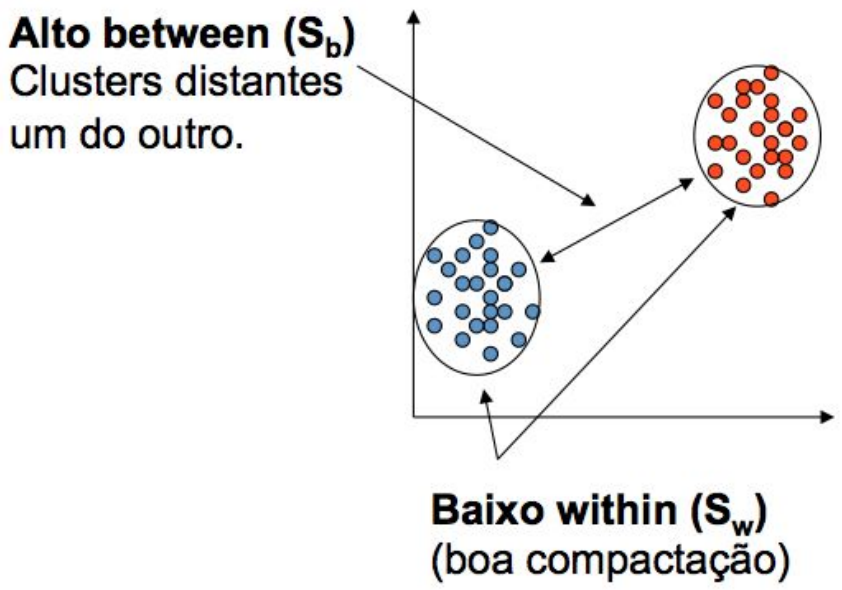
- O que é um bom cluster ? x Coesão e separação.
- A média (centróide) de cada cluster D_i
  - $m_i = \frac{1}{n_i} \sum_{x \in D_i} x$
- Erro^2 $J_e = \sum_{x=1}^{c} \sum_{x \in D_i} (x - m_i)^2$



- ***Outliers*** podem afetar bastante os vetores médios.

Avaliação em Aprendizagem Não Supervisionada

- A coesão (*within-cluster*) pode ser medida pela soma dos erros quadrados dentro de cada cluster
  - $S_w = \sum_{x \in D_i} (x - m_i)^2$
- A separação (between-cluster) é medida pela soma dos quadrados entre clusters
  - $S_b = \sum_{x=1}^{c} n_i (m_i - m)^2$
  - Em que m é o vetor médio total (centróide geral)



Avaliação em Aprendizagem Não Supervisionada

Coeficiente Silhouete

- O coeficiente Silhouette combina coesão e separação e pode ser calculado seguindo quatro passos:
  a. Para um dado objeto do cluster i, calcule a distância média (a_i) para todos os outros objetos de i.
  b. Seja b_i a menor distância média de i para todos os outros *clusters*, dos quais i não seja membro.
  c. $s_i = (b_i - a_i) / \max(a_i, b_i)$
  d. O coeficiente s_k para todos os objetos I numa partição de k *clusters* é dados por $s_k = \frac{1}{I} \sum_{i=1}^{I} s_i$

Avaliação em Aprendizagem Não Supervisionada

Coeficiente *Silhouete*

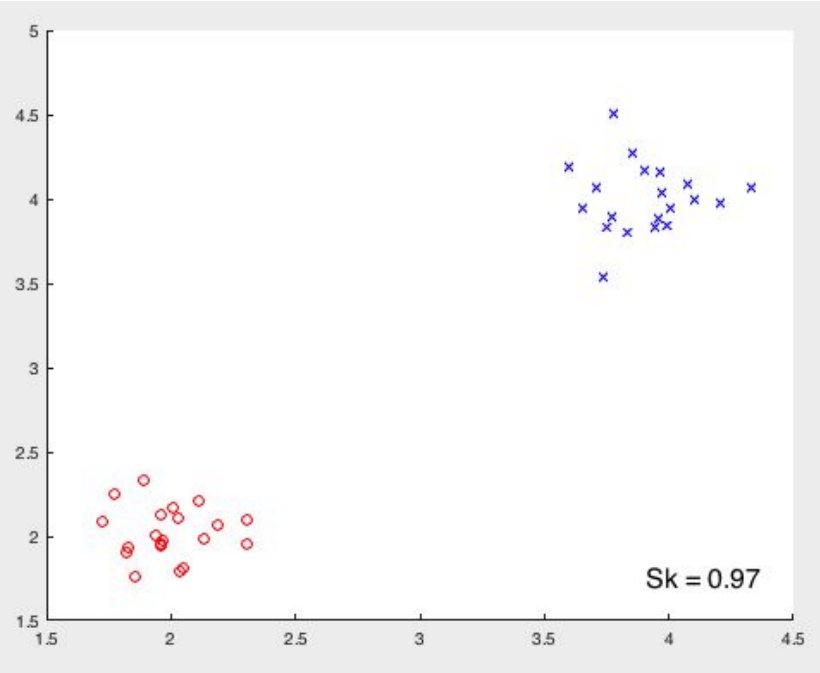
- Coesão e separação

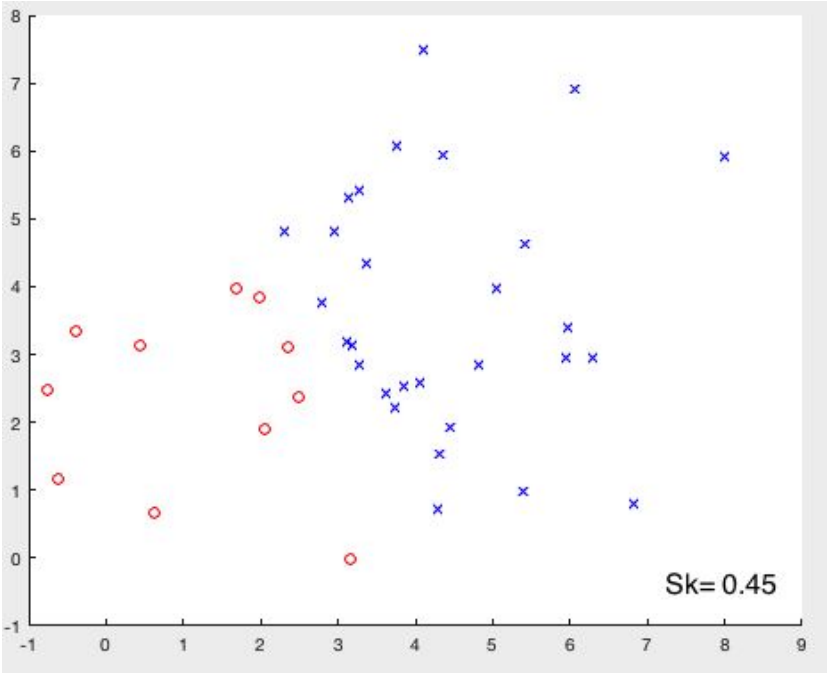
$$s_k = \frac{1}{I} \sum_{i=1}^{I} s_i \qquad\qquad s_i = (b_i - a_i) / \max(a_i, b_i)$$

- O valor do coeficiente pode variar entre -1 e 1.
- Um valor negativo não é desejável pois nesse caso o valor de a_i seria maior do que b_i
- É desejável que o coeficiente seja positivo ($a_i < b_i$) o que indica clusters compactos (a_i próximo de zero).

Avaliação em Aprendizagem Não Supervisionada

Coeficiente *Silhouete*





Avaliação em Aprendizagem Não Supervisionada

Coeficiente Silhouete

- Prática comum: Utilize mais de um índice de clustering
- Voto entre os índices pode ser um bom indicativo de qual número de clusters você deve escolher.

```
**********************************************************************
* Among all indices:
* 3 proposed 2 as the best number of clusters
* 4 proposed 3 as the best number of clusters
* 19 proposed 4 as the best number of clusters
* 1 proposed 5 as the best number of clusters

                 ***** Conclusion *****

* According to the majority rule, the best number of clusters is  4
```

Regressão

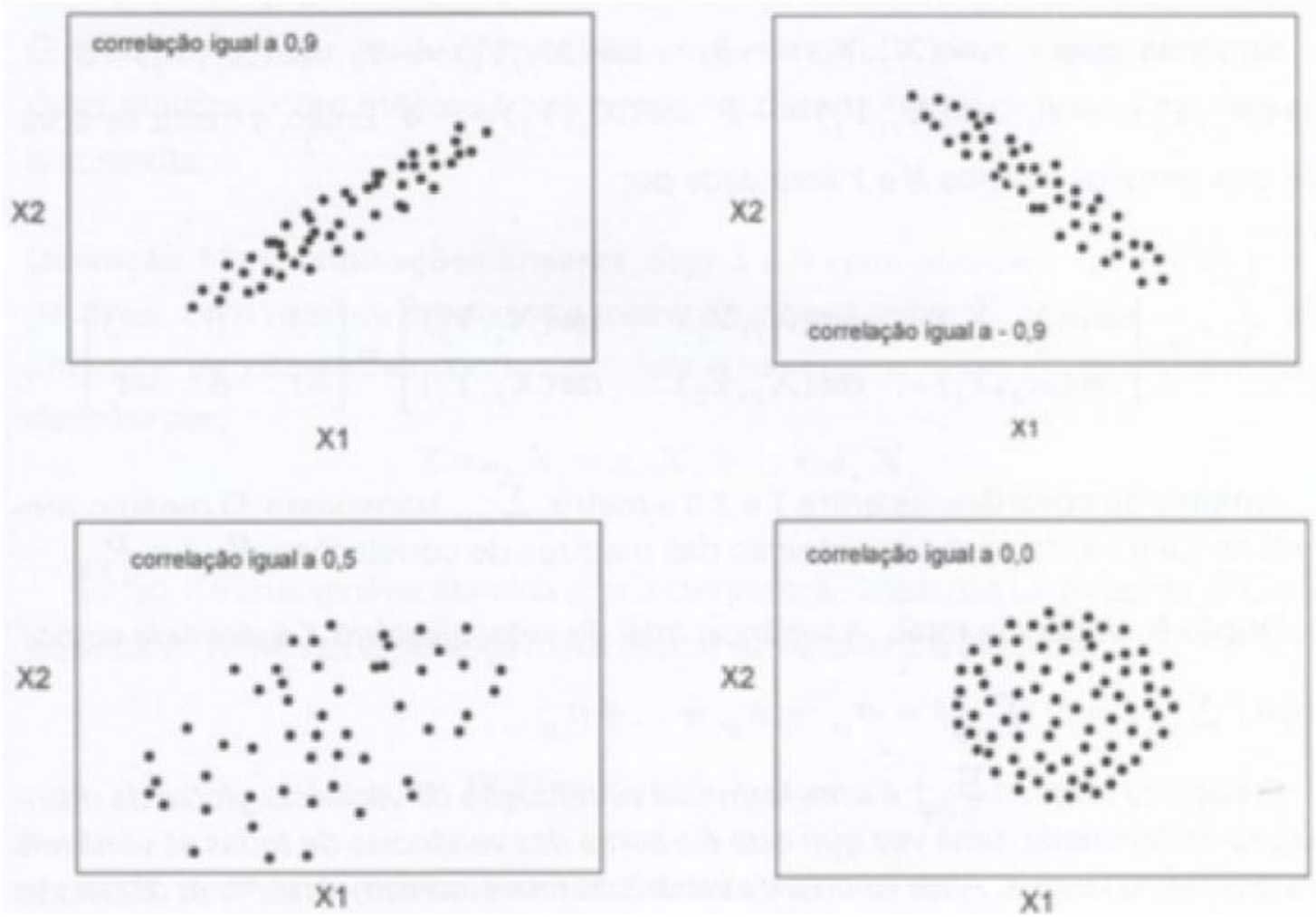
Agenda

- Regressão
  - Correlação
  - Análise de Regressão
    - Linear
    - Não-linear

Correlação

- Indica a força e a direção do relacionamento linear entre dois atributos.
- Trata-se de uma medida de **relação** entre dois atributos, embora correlação não implique **causalidade**
  - Duas variáveis podem estar altamente correlacionadas e não existir relação de causa e efeito entre elas.
- Em muitas aplicações duas ou mais variáveis estão relacionadas, sendo necessário explorar a natureza desta relação
  - Correlação muito próxima de 1 ou de -1 indica relação linear entre dois atributos.
  - Nesse caso é possível ajustar um modelo que expresse tal relação
  - Esse é o objetivo da análise de regressão.

Correlação


correlação igual a 0,9
X2
X1
correlação igual a - 0,9
X2
X1
correlação igual a 0,5
X2
X1
correlação igual a 0,0
X2
X1

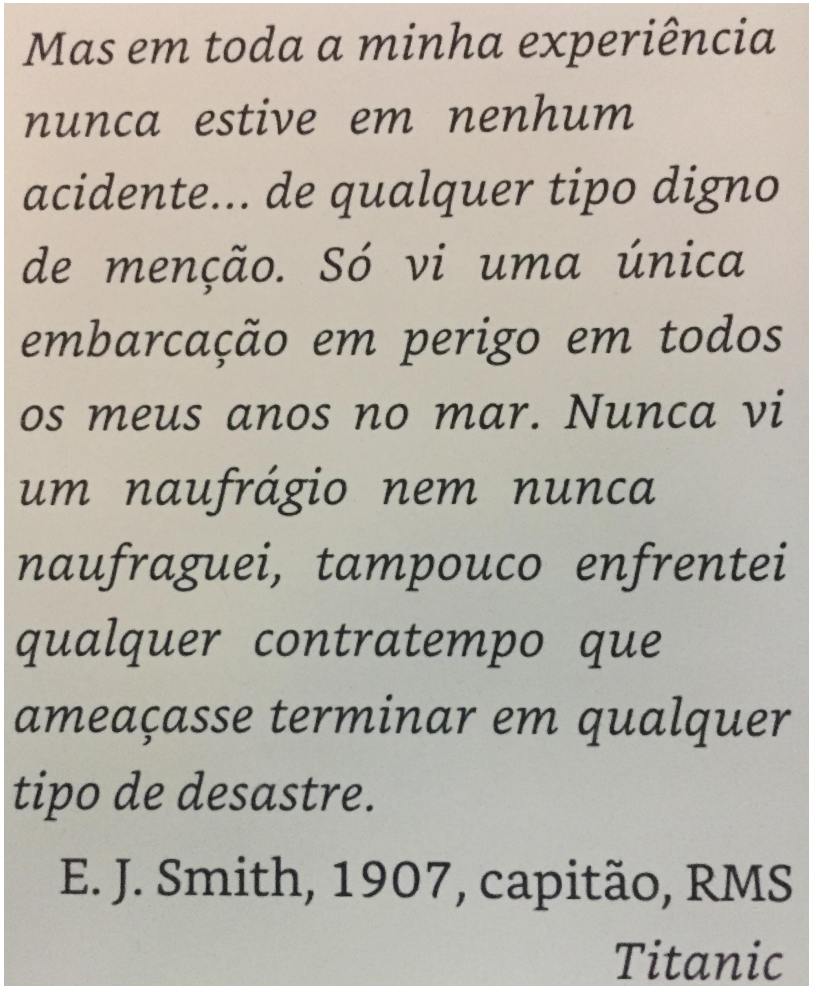
Análise da Regressão

Objetivo: Determinar o modelo que expressa esta relação (modelo de regressão) a qual é ajustada aos dados

- Permite construir um modelo matemático que representa dois atributos (x e y)
- y = f(x), em que f(.) é a função que relaciona x e y
- x é a variável independente da equação
- y é a variável dependente das variações de x

Análise da Regressão

- Esse modelo pode ser usado para predizer o valor de y para um dado valor de x
  - Realizar previsões sobre um comportamento futuro de algum fenômeno da realidade.
  - Extrapolar para o futuro relações de causa-efeito entre as variáveis, já observadas no passado.
  - Cuidado com a extrapolação

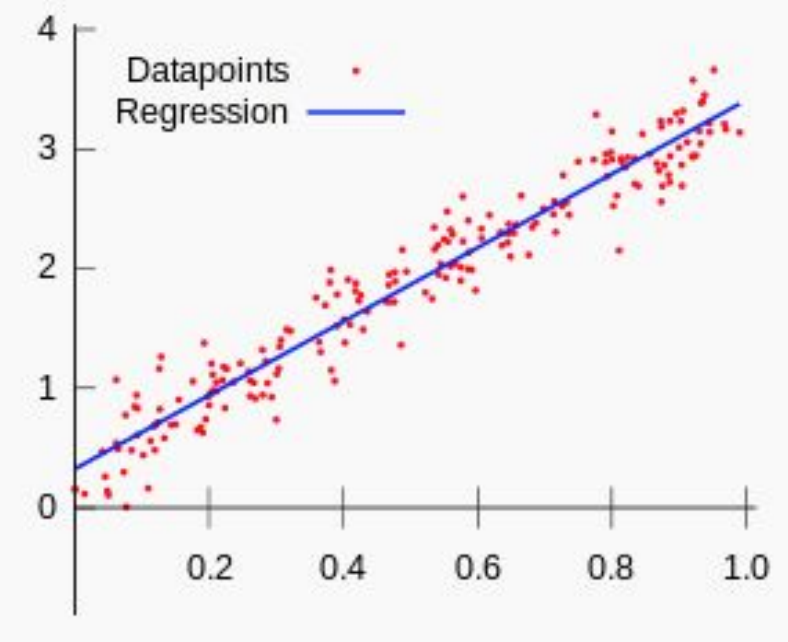


Análise da Regressão

- A análise de regressão compreende dois tipos básicos:
  - Linear
  - Linear Múltipla
  - Não Linear
    - Modelos exponenciais
    - Modelos logísticos

Regressão Linear

- Considera que a relação da resposta às variáveis é uma função linear de alguns parâmetros



- Modelos de regressão linear são frequentemente ajustados usando a abordagem dos mínimos quadrados.

Método dos Mínimos Quadrados

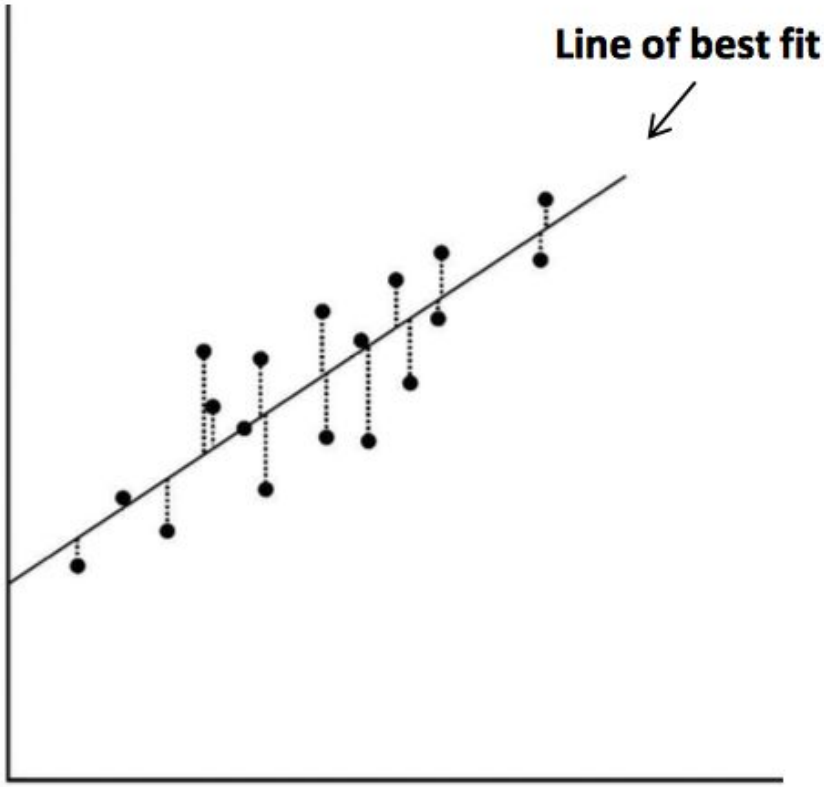
- Seja a equação da reta y = ax + b (ou y = α + β x) que modela a relação entre uma variável independente e uma variável dependente.
- Seja um conjunto de n pontos de dados conhecidos:

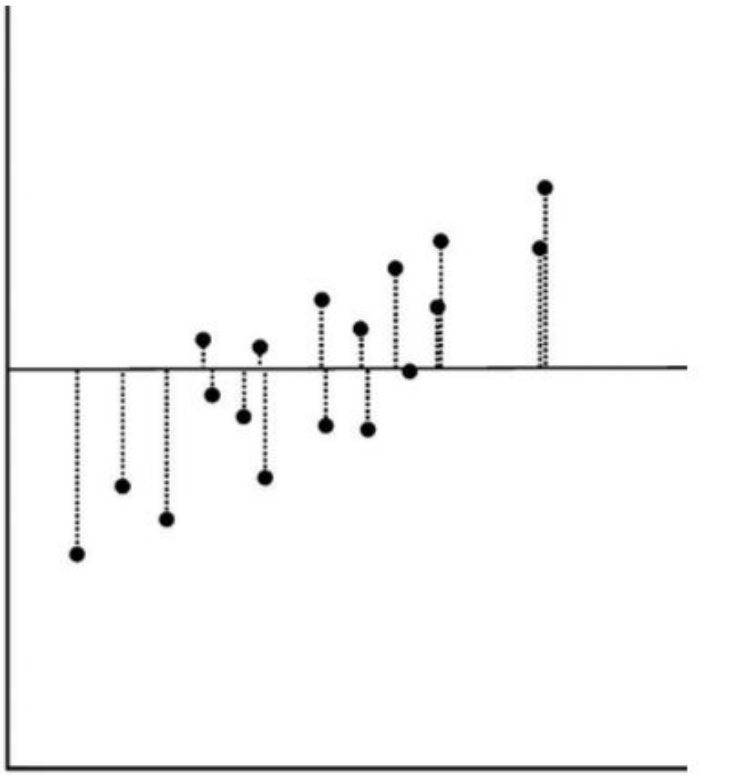
$$D = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (n_x, y_n)\}$$

- O objetivo é encontrar os coeficientes a e b para o modelo que minimizem a medida de erro quadrático
  RSS (Residual Sum of Squares)

$$RSS = \sum_{i=1}^{n} (y - y_i)^2$$

Regressão Linear





Método dos Mínimos Quadrados

- Os parâmetros da reta podem ser estimados através do conjunto de dados D usando as seguintes equações:

$$a = \frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}$$

$$b = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \sum_{i=1}^{n} y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \sum_{i=1}^{n} x_i}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}$$

Método dos Mínimos Quadrados

Exemplo

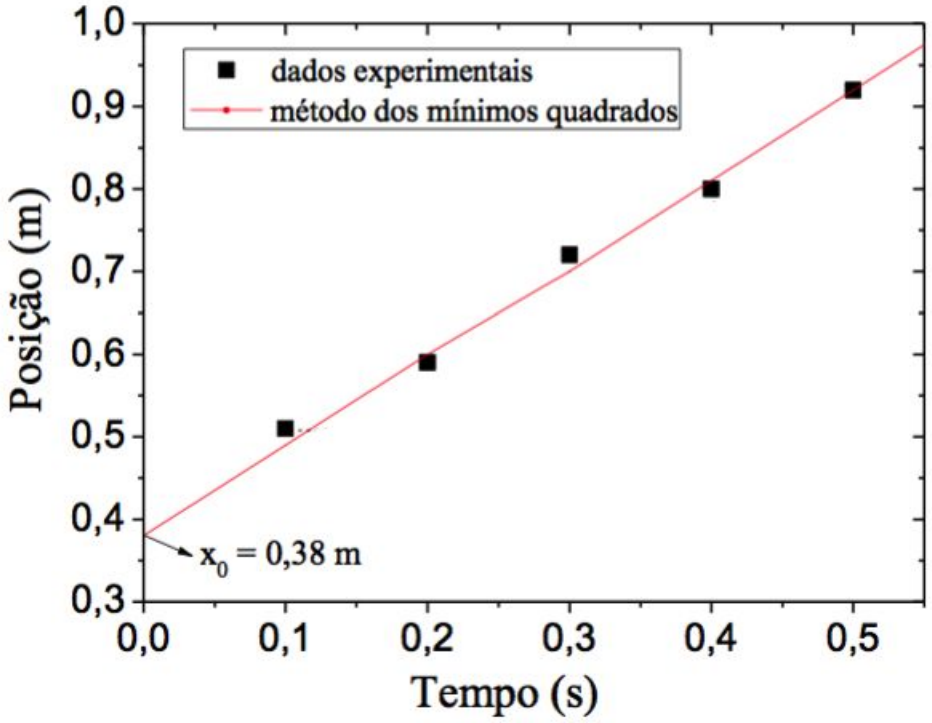
- Considere os dados da tabela abaixo. Encontre os coeficientes *a* e *b* e calcule a posição (y) no tempo x = 0,6

X - tempo (s)	Y - posição (m)
0,100	0,51
0,200	0,59
0,300	0,72
0,400	0,80
0,500	0,92

- Da tabela acima temos, $\sum x = 1.5$ $\sum xy = 1.17$ $\sum y = 3.54$ $\sum x^2 = 0.55$
- Usando as equações anteriores, temos a = 1,08 e b = 0,38
- Desta forma, temos o modelo de regressão y = 1,08x + 0,38

Método dos Mínimos Quadrados

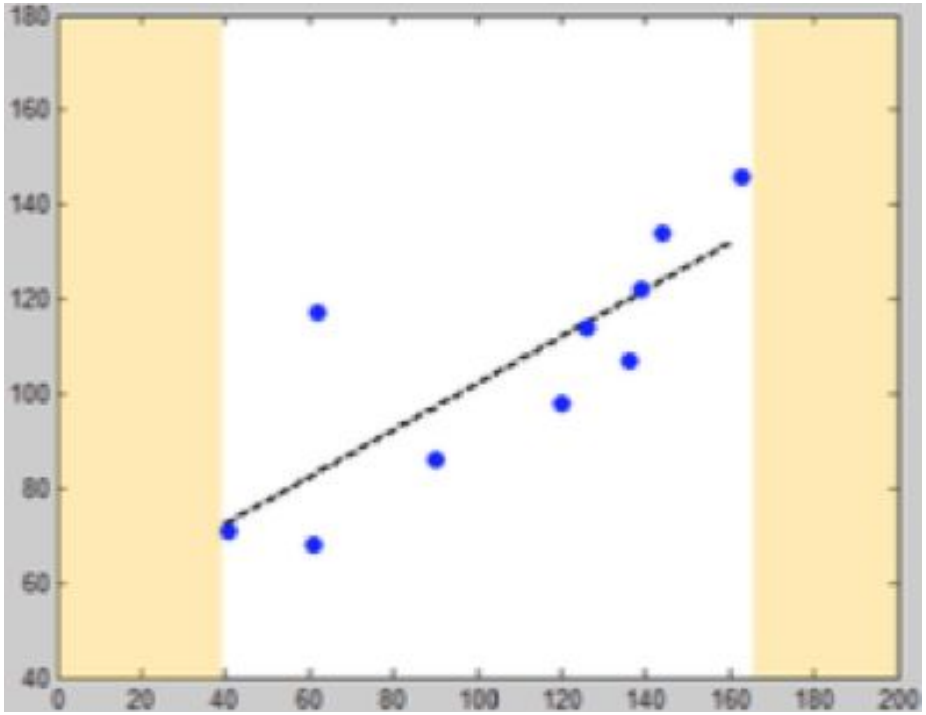
Exemplo



- Respondendo a questão anterior, para x = 0,6, y = 1,02

Método dos Mínimos Quadrados

- Modelos de regressão linear não costumam ser válidos para fins de **extrapolação**, ou seja, predizer um valor fora do domínio dos dados



Análise de resíduos

- Como avaliar a qualidade do modelo?
  - Os erros têm distribuição normal?
  - Existem "outliers'" no conjunto de dados?
  - O modelo gerado é adequado?

- Podemos responder essas perguntas analisando os resíduos, o qual é dado pela diferença entre o y_i e sua estimativa $\hat{y}_i$

$$e_i = y_i - \hat{y}_i$$

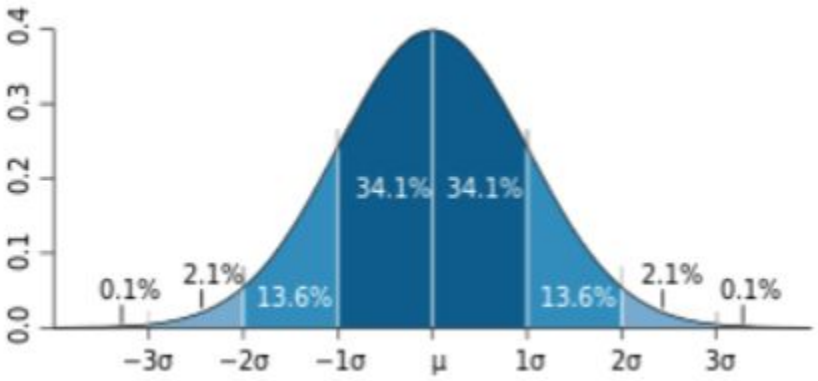
Análise de resíduos

Outliers

- Construir um histograma de frequência dos resíduos
- Normalizar de modo a ter média zero e desvio 1

$$Z = \frac{e-\mu}{\sigma}$$

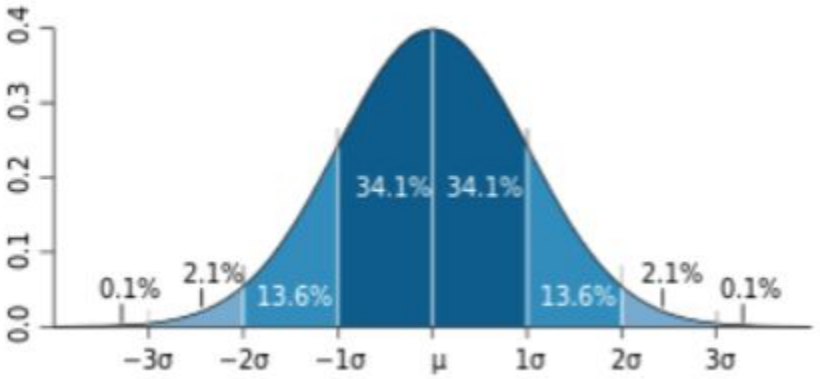
- O histograma de resíduos deve ser semelhante a uma normal.



Análise de resíduos

Outliers

- Se os erros tiverem uma distribuição normal,
  - Aproximadamente, 95% dos resíduos estarão no intervalo de um desvio padrão da média
- Caso contrário, deve existir a presença de "outlier",
  - ou seja, valores atípicos ao restante dos dados.
- O que fazer com os outliers?

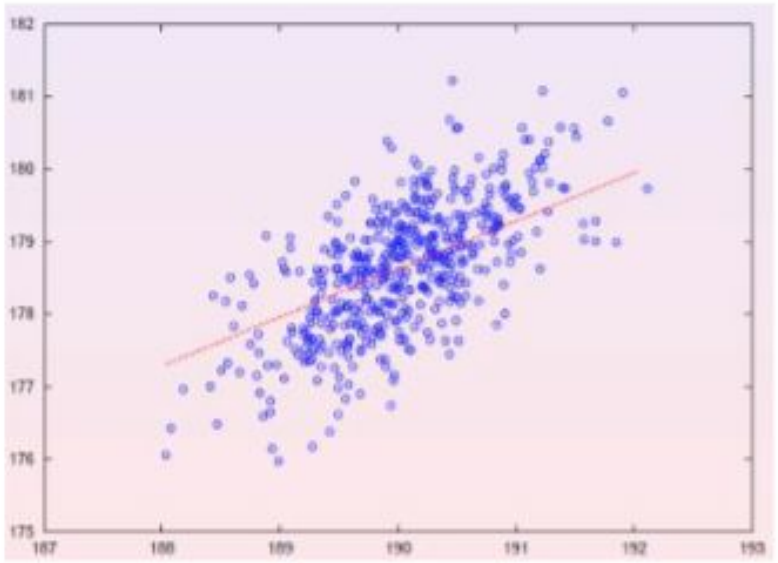


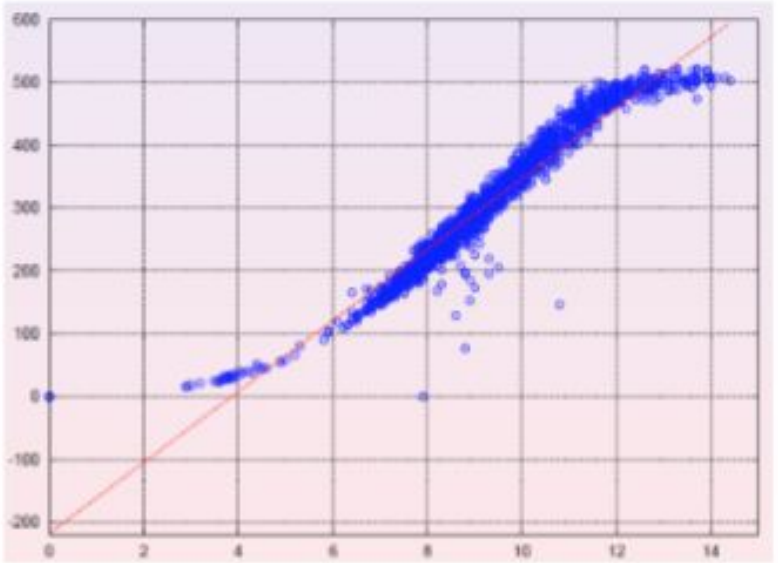
Coeficiente de Determinação (R^2)

- Uma forma de avaliar a qualidade de ajuste do modelo.
- Indica a quantidade de variabilidade dos dados que o modelo de regressão é capaz de explicar.
- Varia entre 0 e 1, indicando quanto o modelo consegue explicar os valores observados.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \overline{y}_i)^2}$$

Coeficiente de Determinação (R^2)





$$R^2 = 0.44$$

$$R^2 = 0.93$$

Regressão Linear

Exercício

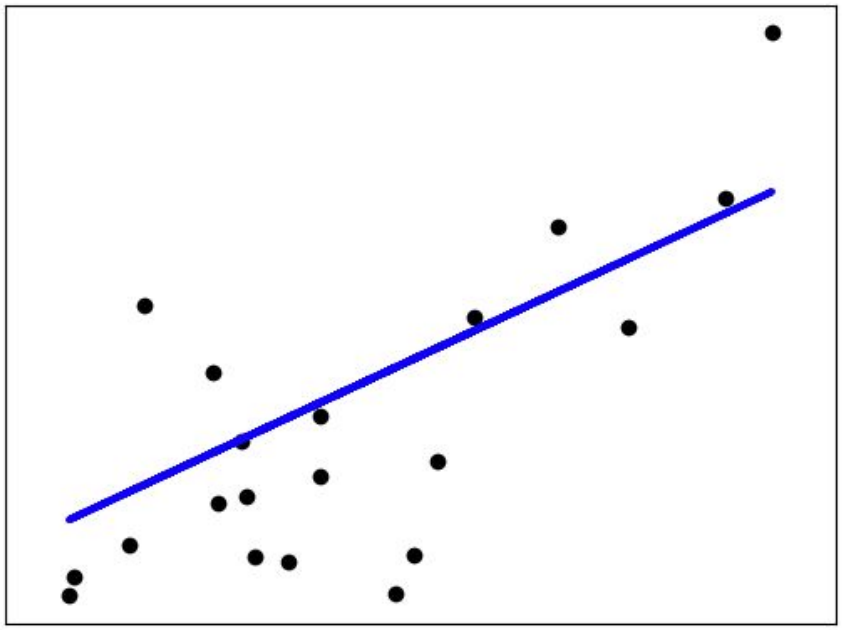
- Programa exemplo de regressão usando `scikit-learn`: **Linear Regression Example**¶

```
print(__doc__)


# Code source: Jaques Grobler
# License: BSD 3 clause


import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
from sklearn import datasets, linear_model
from sklearn.metrics import mean_squared_error, r2_score

# Load the diabetes dataset
diabetes = datasets.load_diabetes()


# Use only one feature
diabetes_X = diabetes.data[:, np.newaxis, 2]

# Split the data into training/testing sets
diabetes_X_train = diabetes_X[:-20]
diabetes_X_test = diabetes_X[-20:]

# Split the targets into training/testing sets
diabetes_y_train = diabetes.target[:-20]
diabetes_y_test = diabetes.target[-20:]

# Create linear regression object
regr = linear_model.LinearRegression()
```

```
# Train the model using the training sets
regr.fit(diabetes_X_train, diabetes_y_train)

# Make predictions using the testing set
diabetes_y_pred = regr.predict(diabetes_X_test)

# The coefficients
print('Coefficients: \n', regr.coef_)
# The mean squared error
print("Mean squared error: %.2f"
      % mean_squared_error(diabetes_y_test, diabetes_y_pred))
# Explained variance score: 1 is perfect prediction
print('Variance score: %.2f' % r2_score(diabetes_y_test, diabetes_y_pred))

# Plot outputs
plt.scatter(diabetes_X_test, diabetes_y_test,  color='black')
plt.plot(diabetes_X_test, diabetes_y_pred, color='blue', linewidth=3)

plt.xticks(())
plt.yticks(())

plt.show()
```

Regressão Linear

Exercício The coefficients, the residual sum of squares and the variance score are also calculated.



Out:

```
Coefficients:
 [938.23786125]
Mean squared error: 2548.07
Variance score: 0.47
```

Regressão Linear Múltipla

- A regressão múltipla funciona de forma parecida com a regressão simples

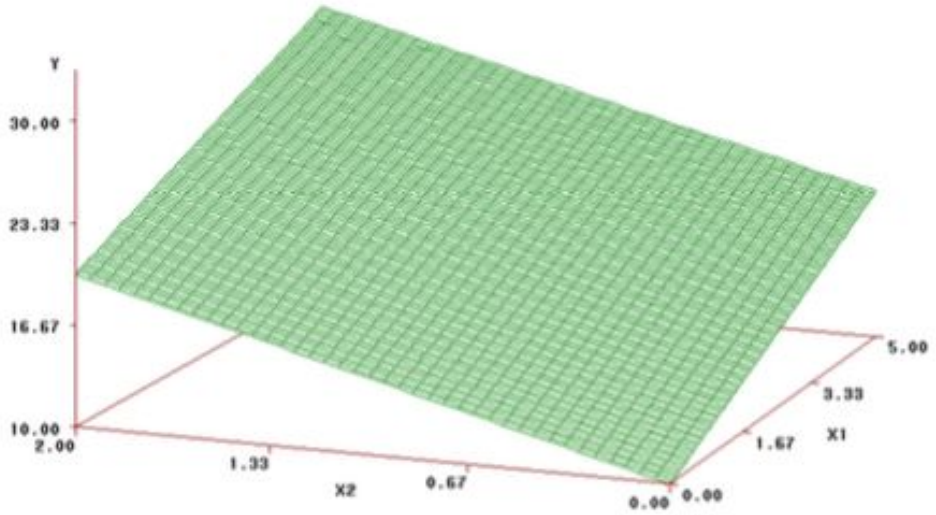
- Leva em consideração diversas variáveis de entrada x_i, $i = 1, ..., p$, influenciando ao mesmo tempo uma única variável de saída, y

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \ldots + \beta_p x_p + \epsilon$$

Regressão Linear Múltipla

Exemplo:

$$y = 10 + 2x_1 + 5x_2$$



- A função de regressão na regressão múltipla é chamada de superfície de resposta
- Descreve um hiperplano no espaço p-dimensional das variáveis de entrada x

Regressão Linear Múltipla

Como calcular a superfície de regressão?

- Usar o método dos mínimos quadrados como feito na regressão linear simples
- A diferença é que agora temos um elevado número de parâmetros na forma

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \ldots + \beta_p x_p + \epsilon$$

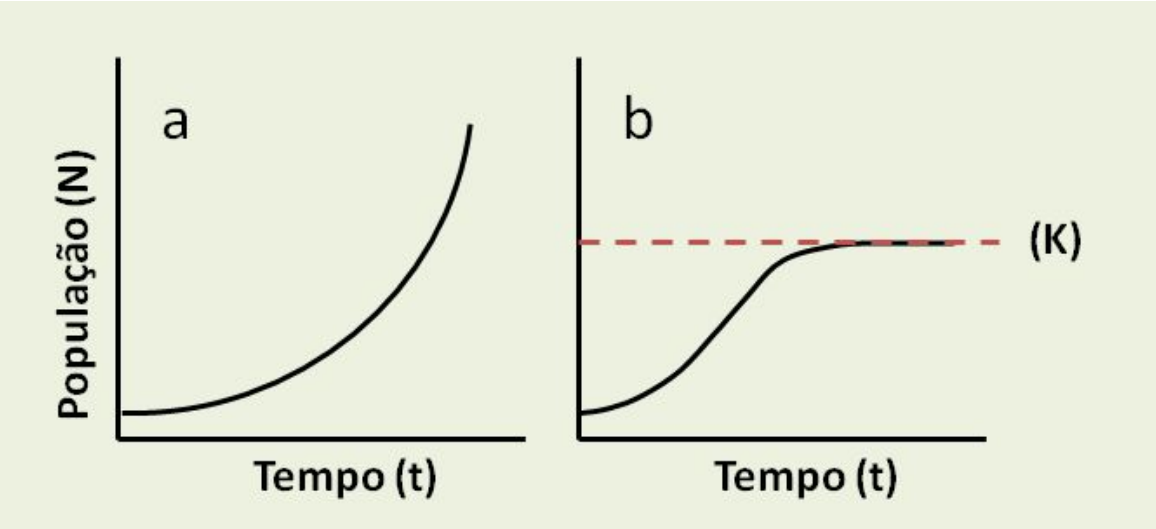
- **Solução**: Expressar as operações matemáticas utilizando notação matricial

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} \cdots & x_{p1} \\ 1 & x_{12} \cdots & x_{p2} \\ \cdots & \cdots \cdots & \cdots \\ 1 & x_{1p} \cdots & x_{pn} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \cdots \\ \beta_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \cdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

- $y = X\beta + \epsilon$

Regressão Não Linear

- Em alguns casos o modelo linear pode não ser o mais adequado.
- Muitas aplicações biológicas são modeladas por meio de relações não lineares.
- Por exemplo, padrões de crescimento podem seguir modelos:
  - Exponenciais: onde a população aumenta sem limites
  - Logísticos: onde a população cresce rapidamente no início, desacelera e se mantém estável.



Método dos Mínimos Quadrados
Caso Exponencial

- O método dos mínimos quadrados pode ser facilmente adaptado para o caso exponencial, usando logaritmos neperianos.

- Nesse caso, $y' = ln(y)$

- A equação que modela a relação entre uma variável independente e uma variável dependente é dada por $y = be^{ax}$

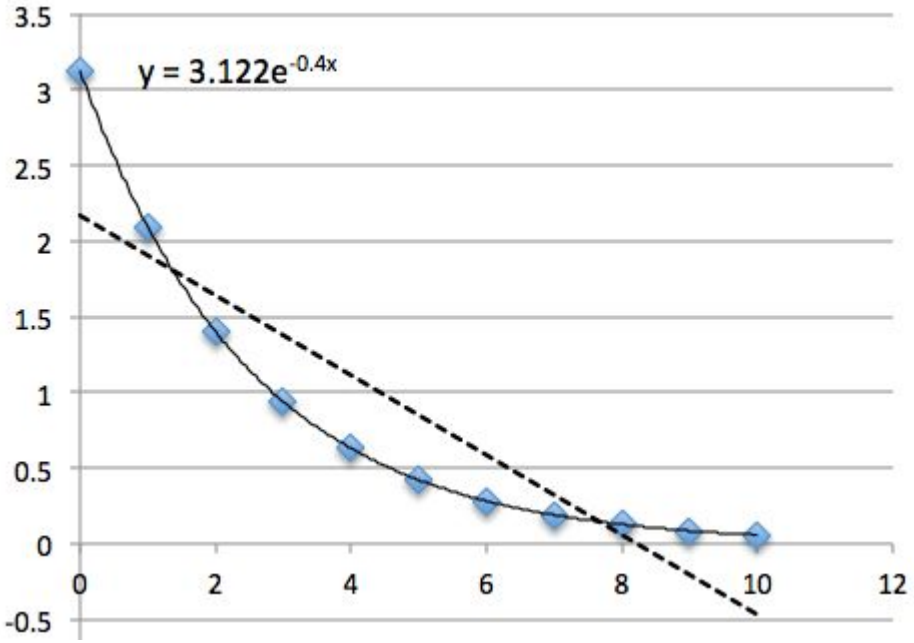
$$a = \frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i y_i' - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i'}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}$$

$$b = e^{\overline{y'} - a\overline{x}}$$

Método dos Mínimos Quadrados
Caso Exponencial

Exemplo

	x	y	ln(y) =y'	x2	x*y'
	0	3.12	1.1378	0	0
	1	2.091	0.7376	1	0.738
	2	1.402	0.3379	4	0.676
	3	0.94	-0.062	9	-0.186
	4	0.63	-0.462	16	-1.848
	5	0.422	-0.863	25	-4.314
	6	0.283	-1.262	36	-7.574
	7	0.19	-1.661	49	-11.63
	8	0.127	-2.064	64	-16.51
	9	0.085	-2.465	81	-22.19
	10	0.057	-2.865	100	-28.65
SUM	55	9.347	-9.49	385	-91.47
AVG	5		-0.863		-8.316



Regressão Logística

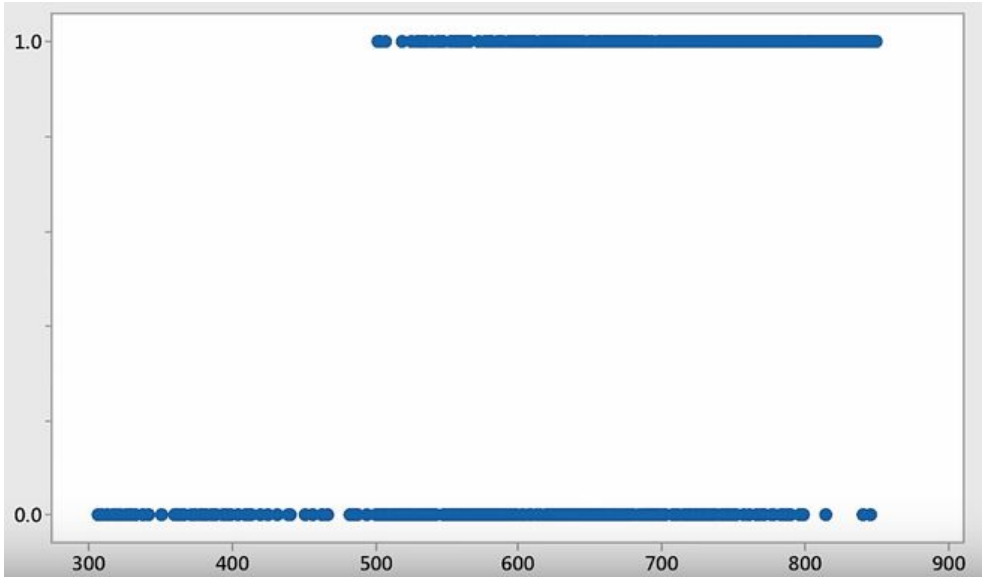
Exemplo

- Considere que alguém queira comprar uma casa e está na busca por um financiamento.
- Os bancos mantém para cada cliente um **score**, que varia de 300 a 850
- Suponha que um dado cliente tem um score de 720 e gostaria de saber qual é a probabilidade de ter seu crédito aprovado pela instituição financeira.
- Esse cliente encontrou ainda dados de 1000 clientes com seus respectivos escores, que tiveram seus pedidos aprovados ou não.
- Notem que nesse caso a variável y é dicotômica
  - Aprovado (1)
  - Negado (0)

Regressão Logística

Exemplo

creditScore	approved
655	0
692	0
681	0
663	1
688	1
693	1
699	0
699	1
683	1
698	0
655	1
703	0
704	1
745	1
702	1



- Note que a distribuição dos dados é diferente (binomial).
- O modelos de regressão vistos até então não funcionam nesse caso.
- Solução: Regressão Logística

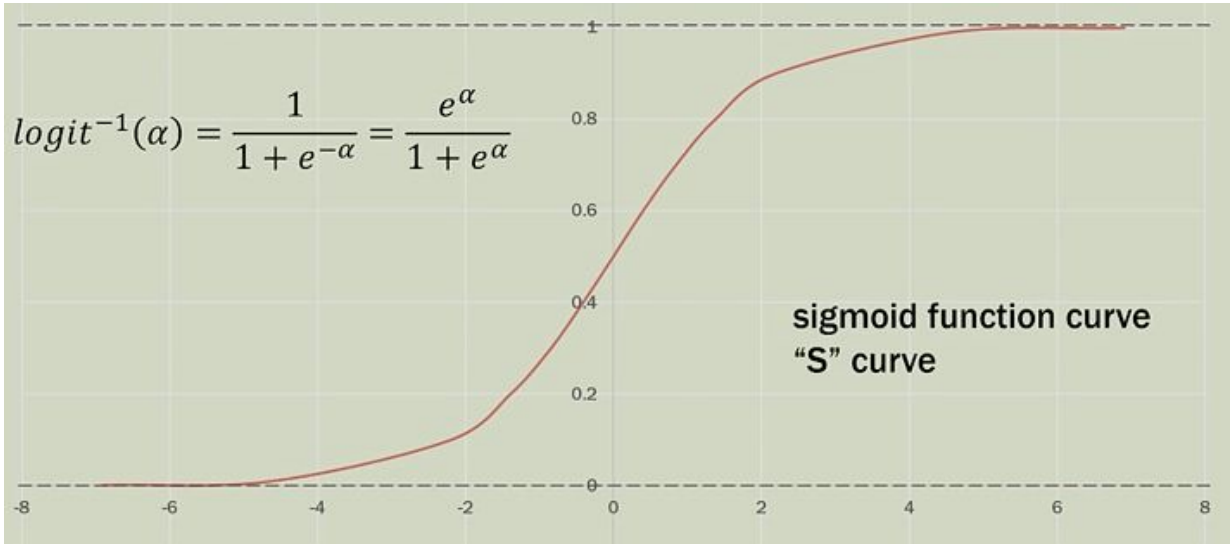
Regressão Logística

A regressão logística tem como objetivo:

- Modelar a probabilidade de um evento ocorrer dependendo dos valores das variáveis independentes.
- Estimar a probabilidade de um evento ocorrer (e também de não ocorrer) para uma dada observação.
- Pode ser usada como um classificador, atribuindo uma classe ao padrão de entrada.
  - No nosso exemplo, crédito aprovado ou reprovado.

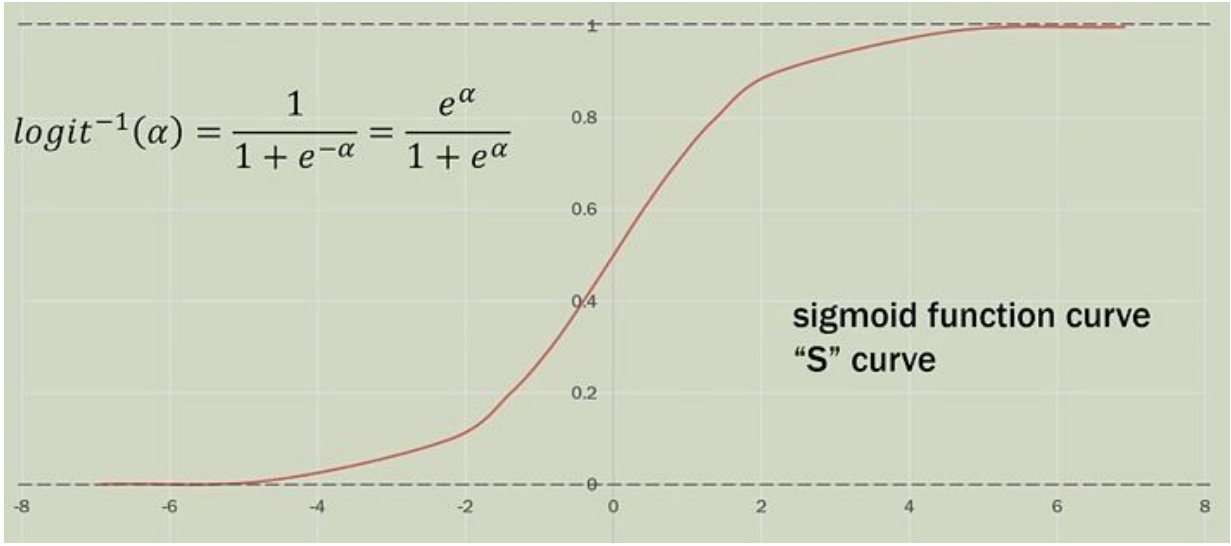
Regressão Logística

- A variável dependente na regressão logística segue a distribuição de Bernoulli.
- Distribuição discreta de espaço amostral {0,1} que tem probabilidade de sucesso p e falha q = 1 - p
- Na regressão logística estimamos p para qualquer combinação linear das variáveis independentes.

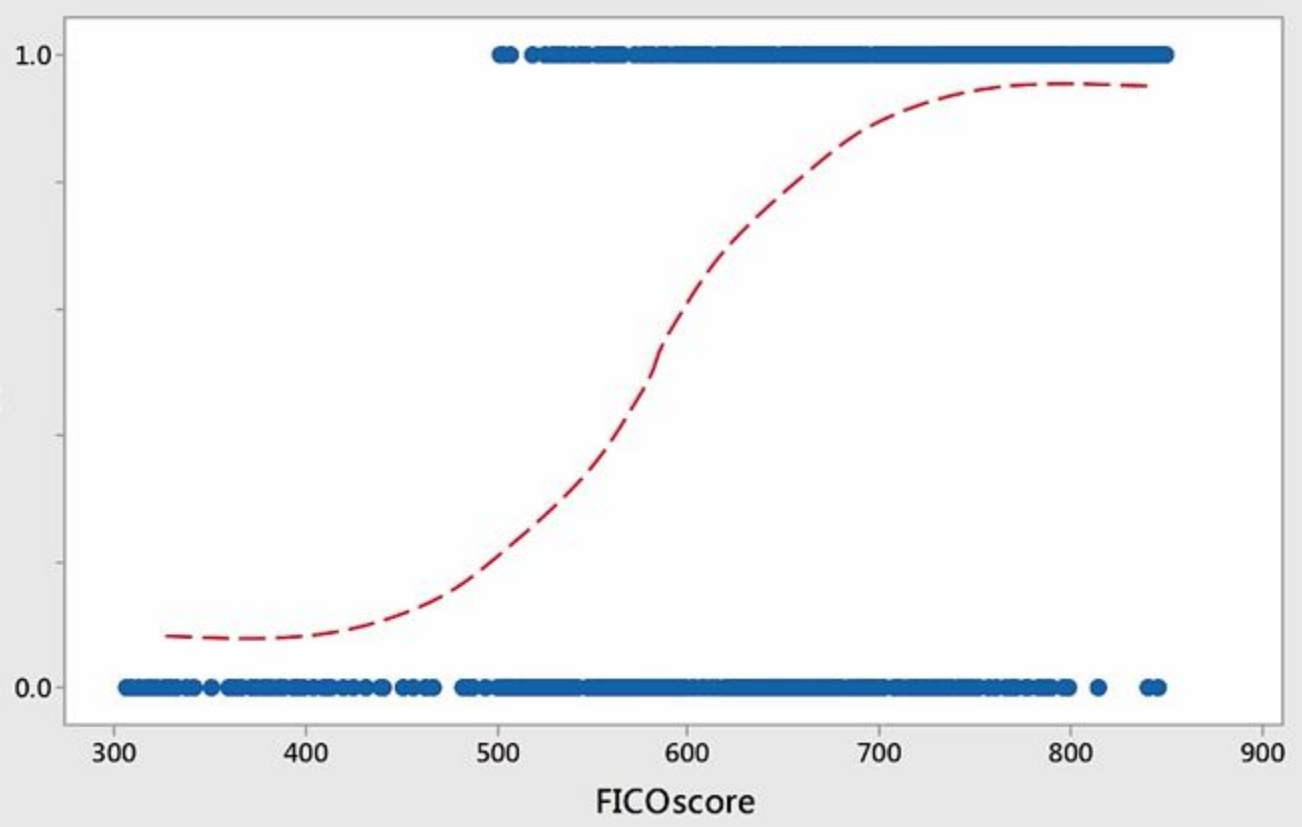


Regressão Logística

- Isso pode ser alcançado ajustando o seguinte modelo (função logística)
- MLE (*Maximum Likehood Estimation*) é usada para estimar os coeficiente do modelo.



Regressão Logística



- Esse modelo diz basicamente que a probabilidade de conseguir crédito sobre em função do *score*

Regressão Logística

Exercício

- Programa exemplo de regressão usando `scikit-learn`: **Logistic Function**

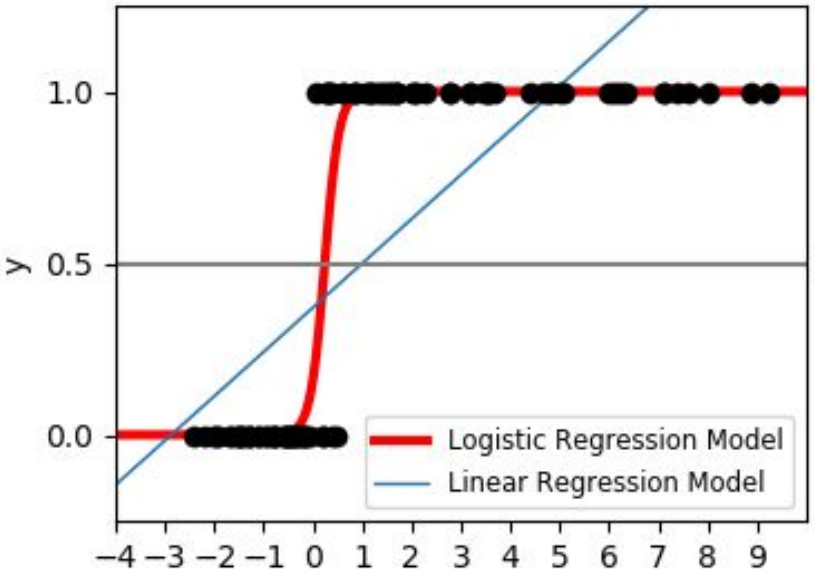
```
print(__doc__)


# Code source: Gael Varoquaux
# License: BSD 3 clause

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

from sklearn import linear_model

# this is our test set, it's just a straight line
# Gaussian noise
xmin, xmax = -5, 5
n_samples = 100
np.random.seed(0)
X = np.random.normal(size=n_samples)
y = (X > 0).astype(np.float)
X[X > 0] *= 4
X += .3 * np.random.normal(size=n_samples)

X = X[:, np.newaxis]
# run the classifier
clf = linear_model.LogisticRegression(C=1e5)
clf.fit(X, y)
```

```
# and plot the result
plt.figure(1, figsize=(4, 3))
plt.clf()
plt.scatter(X.ravel(), y, color='black', zorder=20)
X_test = np.linspace(-5, 10, 300)


def model(x):
    return 1 / (1 + np.exp(-x))
loss = model(X_test * clf.coef_ + clf.intercept_).ravel()
plt.plot(X_test, loss, color='red', linewidth=3)

ols = linear_model.LinearRegression()
ols.fit(X, y)
plt.plot(X_test, ols.coef_ * X_test + ols.intercept_, linewidth=1)
plt.axhline(.5, color='.5')

plt.ylabel('y')
plt.xlabel('X')
plt.xticks(range(-5, 10))
plt.yticks([0, 0.5, 1])
plt.ylim(-.25, 1.25)
plt.xlim(-4, 10)
plt.legend(('Logistic Regression Model', 'Linear Regression Model'),
           loc="lower right", fontsize='small')
plt.show()
```

Regressão Logística

Exercício

- Programa exemplo de regressão usando `scikit-learn`: **Logistic Function**



Referências

- J. Demsar,
  Statistical Comparisons of Classifiers over Multiple Data Sets,
  J. of M. Learning Research, 7:1-20, 2006.

- S. Salzberg,
  On Comparing Classifiers: Pitfalls to avoid and recommended approach,
  Data Mining and Knowledge Discovery, 1:317-327, 1997.

- Luiz E. S. Oliveira,
  Avaliando Classificadores,
  Notas de Aulas, DInf / UFPR, 2017.

Referências

- Charrad et al.,
  NbClust: An R Package for Determining the Relevant Number of Clusters in a Data Set,
  Journal of Statistical Software, 61, 2014.

- Luiz E. S. Oliviera,
  Aprendizado Não-supervisionado,
  Notas de Aulas, DInf / UFPR, 2017.

- Luiz E. S. Oliviera,
  Regressão,
  Notas de Aulas, DInf / UFPR, 2017.

Referências

- Wikipedia, **Sensitivity & Specificity**
  https://en.wikipedia.org/wiki/Sensitivity_and_specificity
- DZone - Ai Zone
  Machine Learning: Validation Techniques
  https://dzone.com/articles/machine-learning-validation-techniques