

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-211

www.inf.ufpr.br/menotti/am-202

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

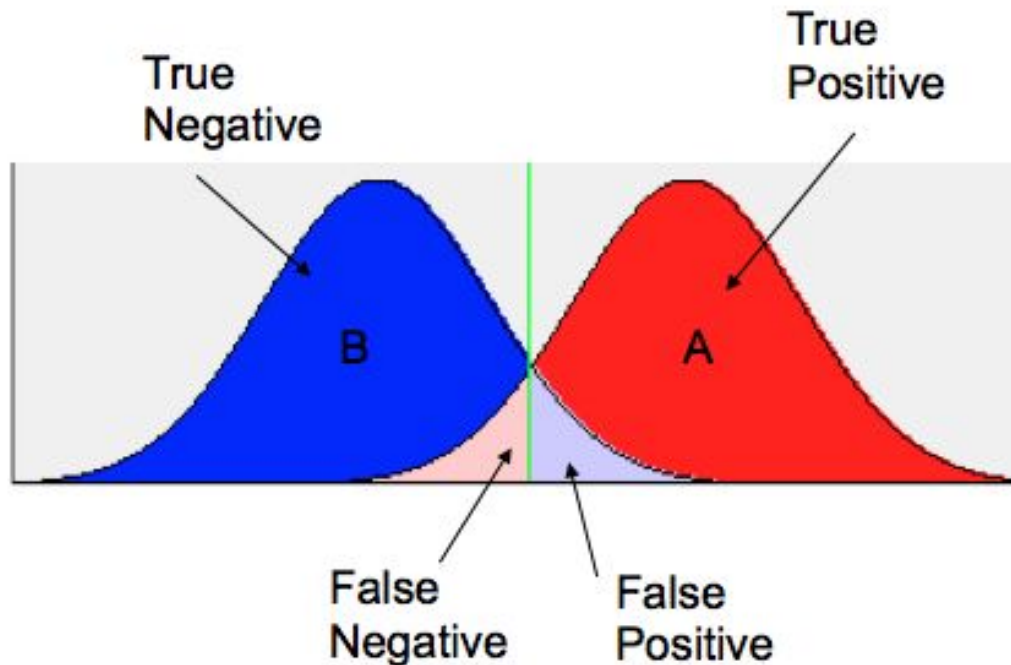
- Considere por exemplo, um problema de classificação binário com 99 exemplos na classe positiva e 1 exemplo na classe negativa.
- Considere que o classificador *classificou* corretamente todos os exemplos da classe positiva e errou somente o exemplo da classe negativa.
- Nesse caso temos uma acurácia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

		<u>True class</u>	
		p	n
<u>Hypothesized class</u>	Y	True Positives	False Positives
	N	False Negatives	True Negatives
Column totals:		P	N

Avaliação

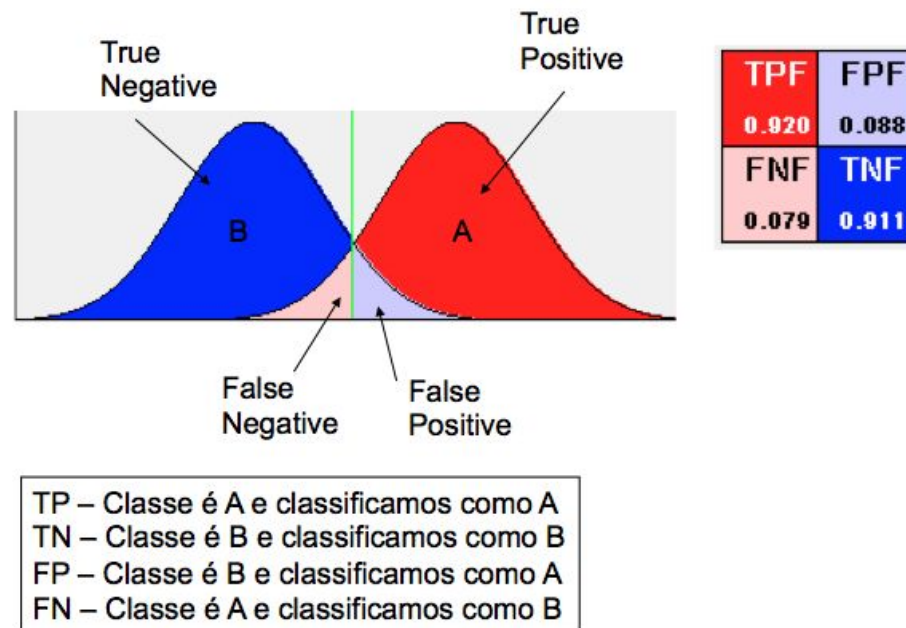


TPF	FPF
0.920	0.088
FNF	TNF
0.079	0.911

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**



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
 - $2 / (1 / Pr + 1 / R)$
 - $2 Pr \cdot R / (Pr + R)$

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

Métricas

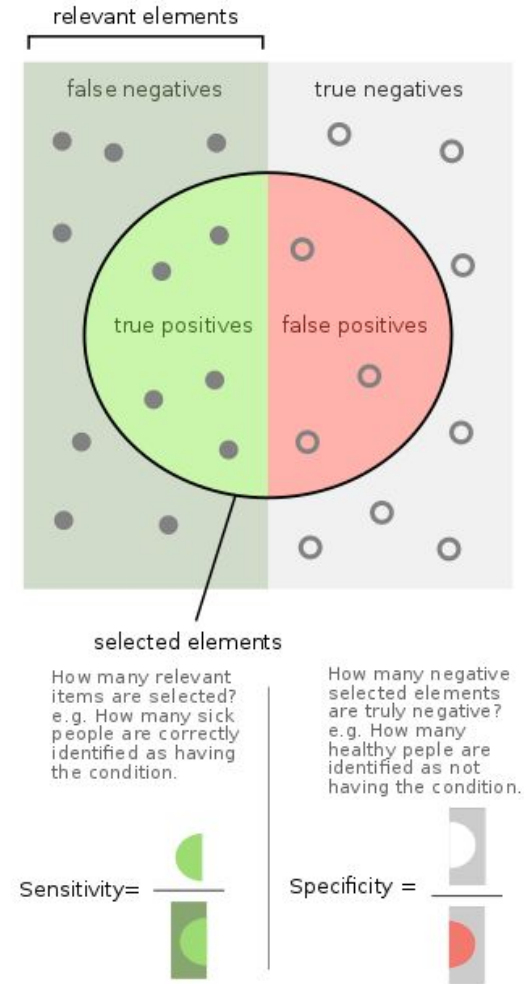
No scikit-learn, essas métricas estão implementadas no método `classification_report` (classe `metrics`)

```
>>> 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

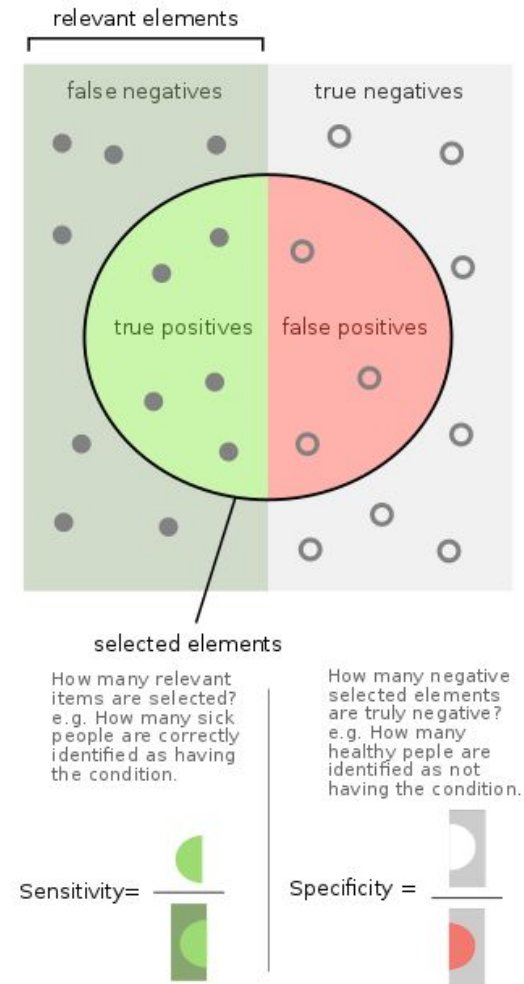
- Especificidade / *Specificity*
 - **TN** / N
- Sensitividade / *Sensitivity*
 - **TP** / P
 - * *Recall*



- $P = \text{TP} + \text{FN}$
- $N = \text{TN} + \text{FP}$

Métricas

- Especificidade / *Specificity*
 - **TN** / N
- Sensibilidade / *Sensitivity*
 - **TP** / P
 - * *Recall*



- $P = \text{TP} + \text{FN}$
- $N = \text{TN} + \text{FP}$

Técnicas de Validação

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

Resubstitution

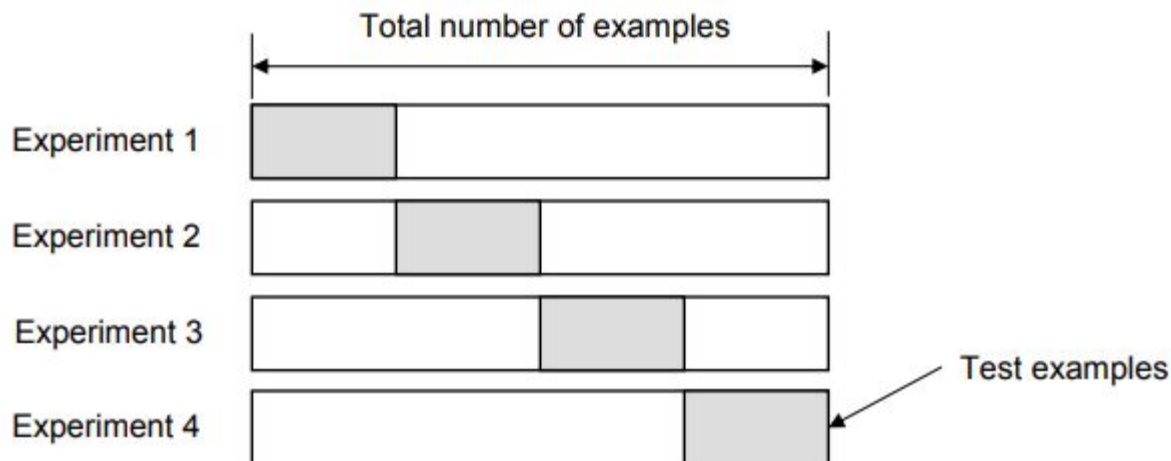
- Se todos os dados forem usados para treinar o modelo e a taxa de erro for avaliada com base no resultado versus valor real do mesmo conjunto de dados de treinamento, esse erro será chamado de **erro de resubstituição** (resubstitution error validation).
- Por exemplo:
 - Análise de *Malware*
 - Aplicações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

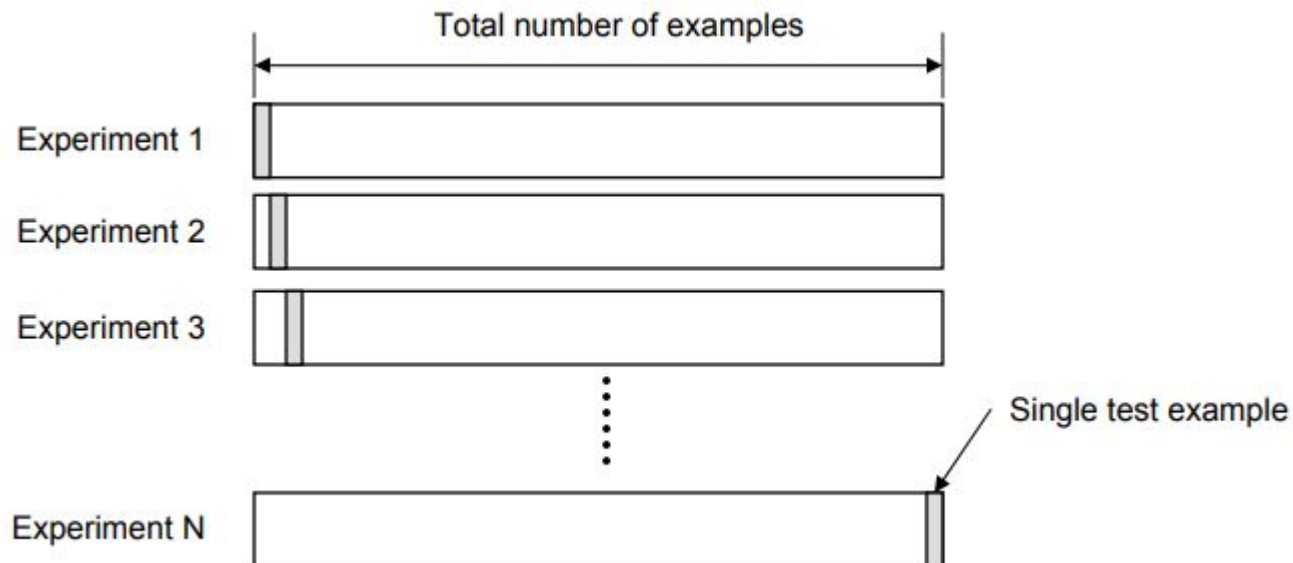
- Nesta técnica, $k-1$ *folds* são usadas para **treinamento** e o restante (1 *fold*) é usado para **teste**.



- 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

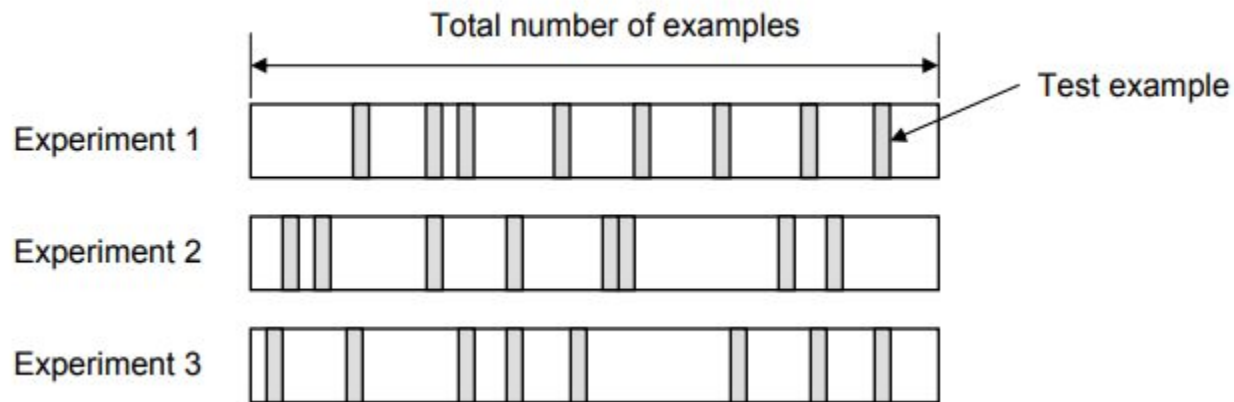
Leave-One-Out Cross-Validation (LOOCV)

- 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

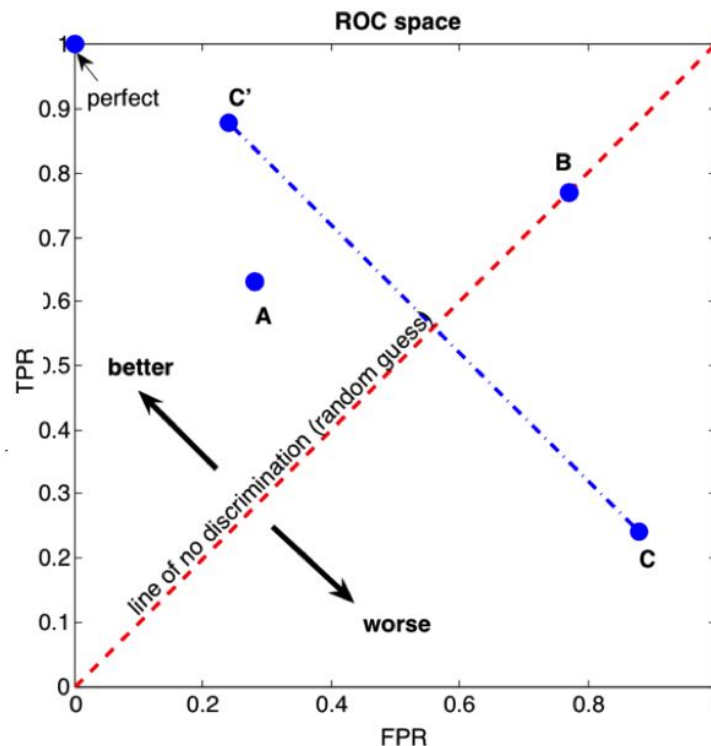
Exemplos de Classificadores

A			B			C			C'		
TP=63	FN=37	100	TP=77	FN=23	100	TP=24	FN=76	100	TP=76	FN=24	100
FP=28	TN=72	100	FP=77	TN=23	100	FP=88	TN=12	100	FP=12	TN=88	100
91	109	200	154	46	200	112	88	200	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

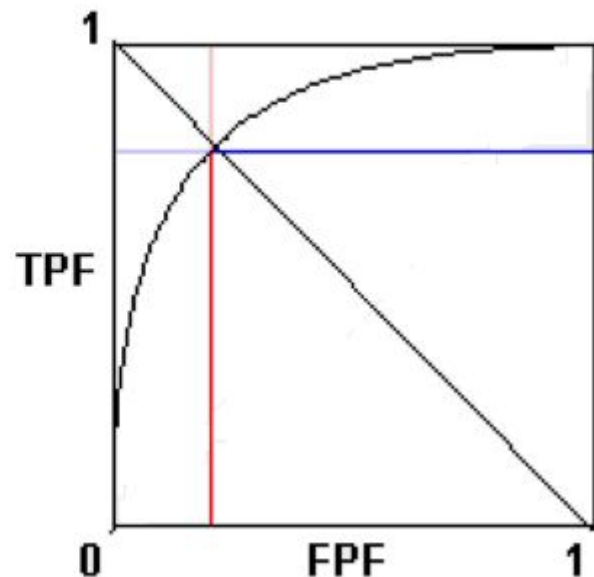
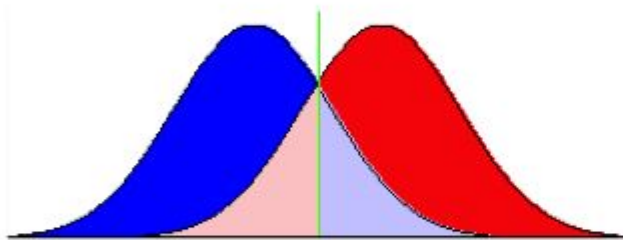
ROC (*Receiver Operating Characteristic*) é uma representação gráfica que ilustra o desempenho de um classificador binário em um determinado ponto de operação.

- 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

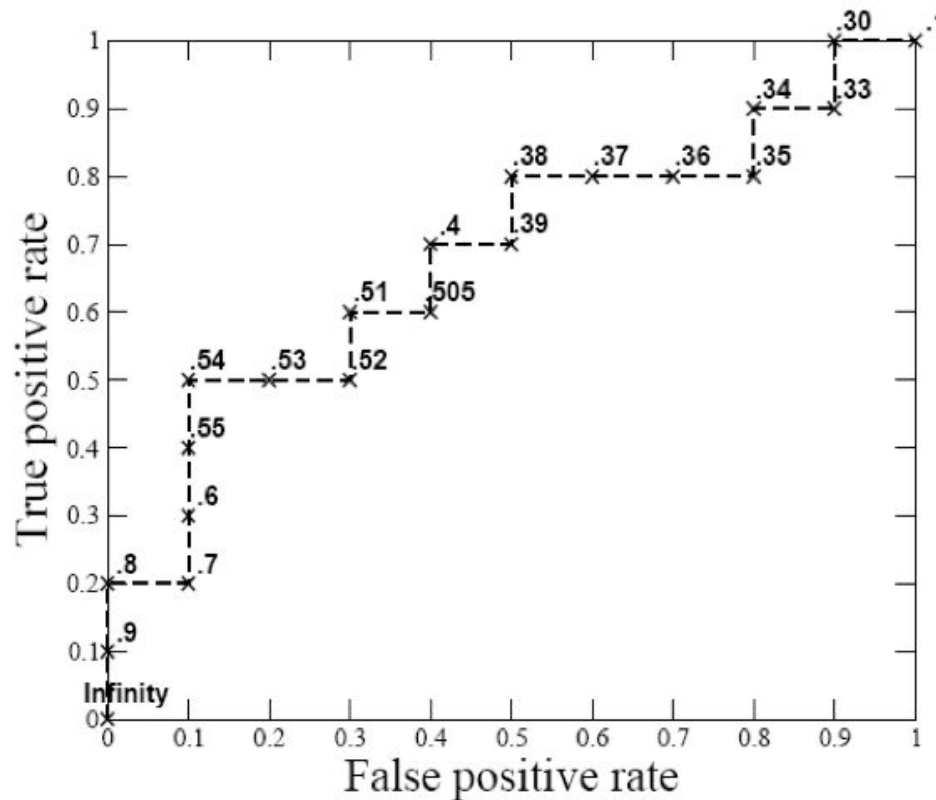
- Considere 20 amostras, 10 classificadas corretamente (+) e 10 classificadas incorretamente (-) com suas respectivas probabilidades.

#	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



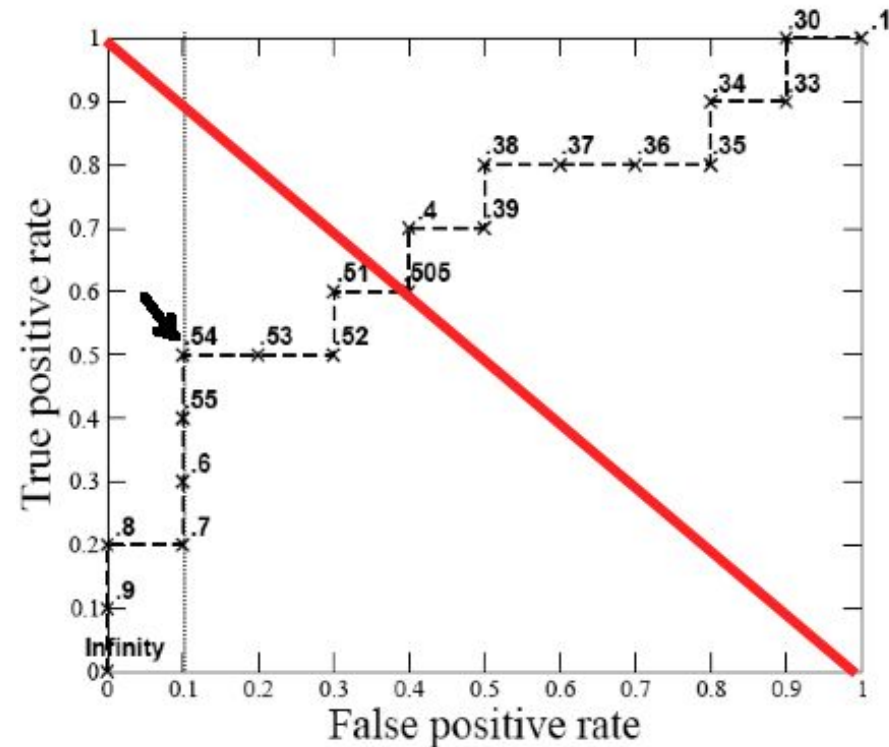
Curva ROC

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?

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

- 70% para um limiar de 0,54



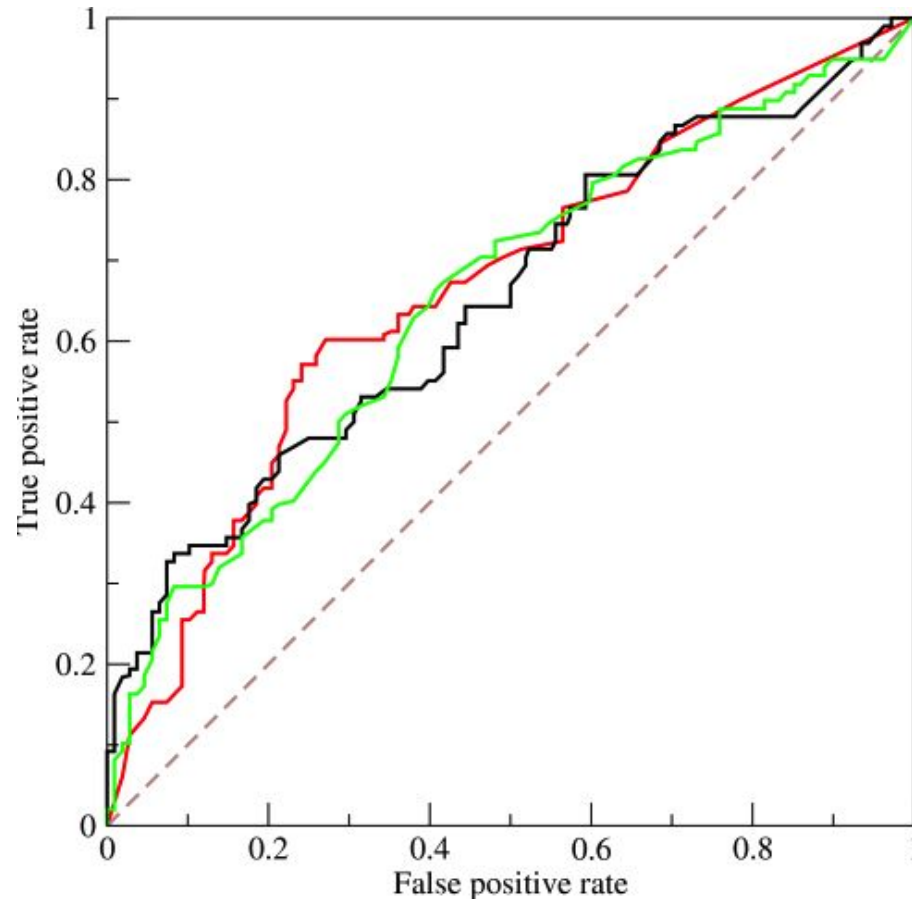
Curva ROC

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.

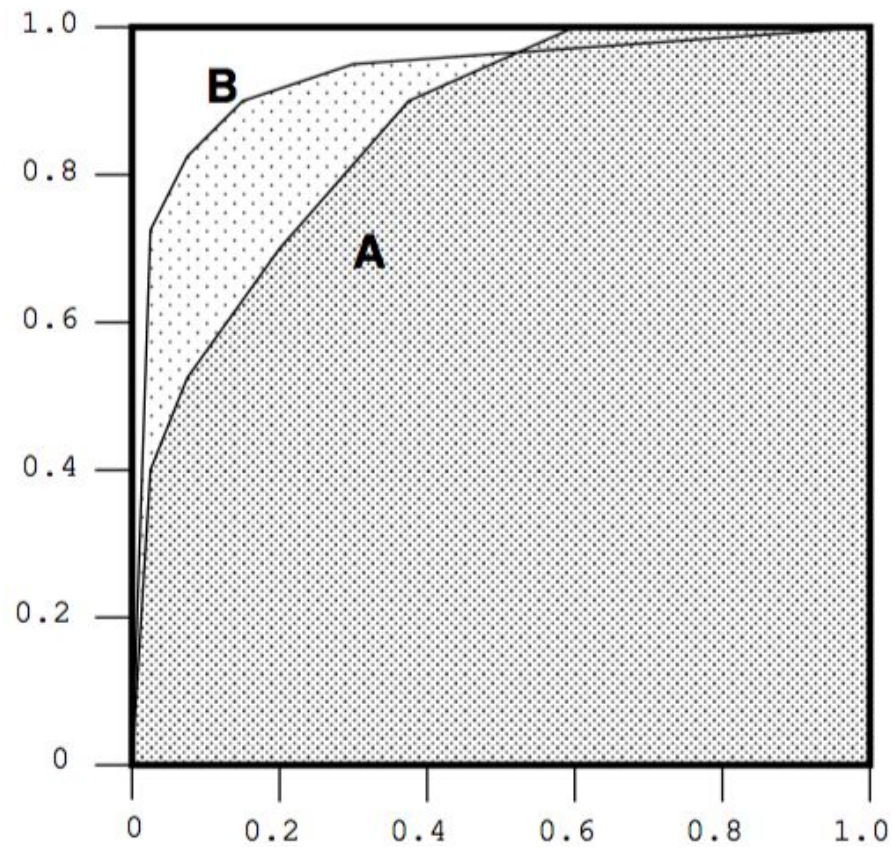
Comparando Classificadores

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

Diferenças	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

número de pares com diferenças não-nulas		α							
		0,1		0,05		0,02		0,01	
		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 $\alpha = 0,05$ 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

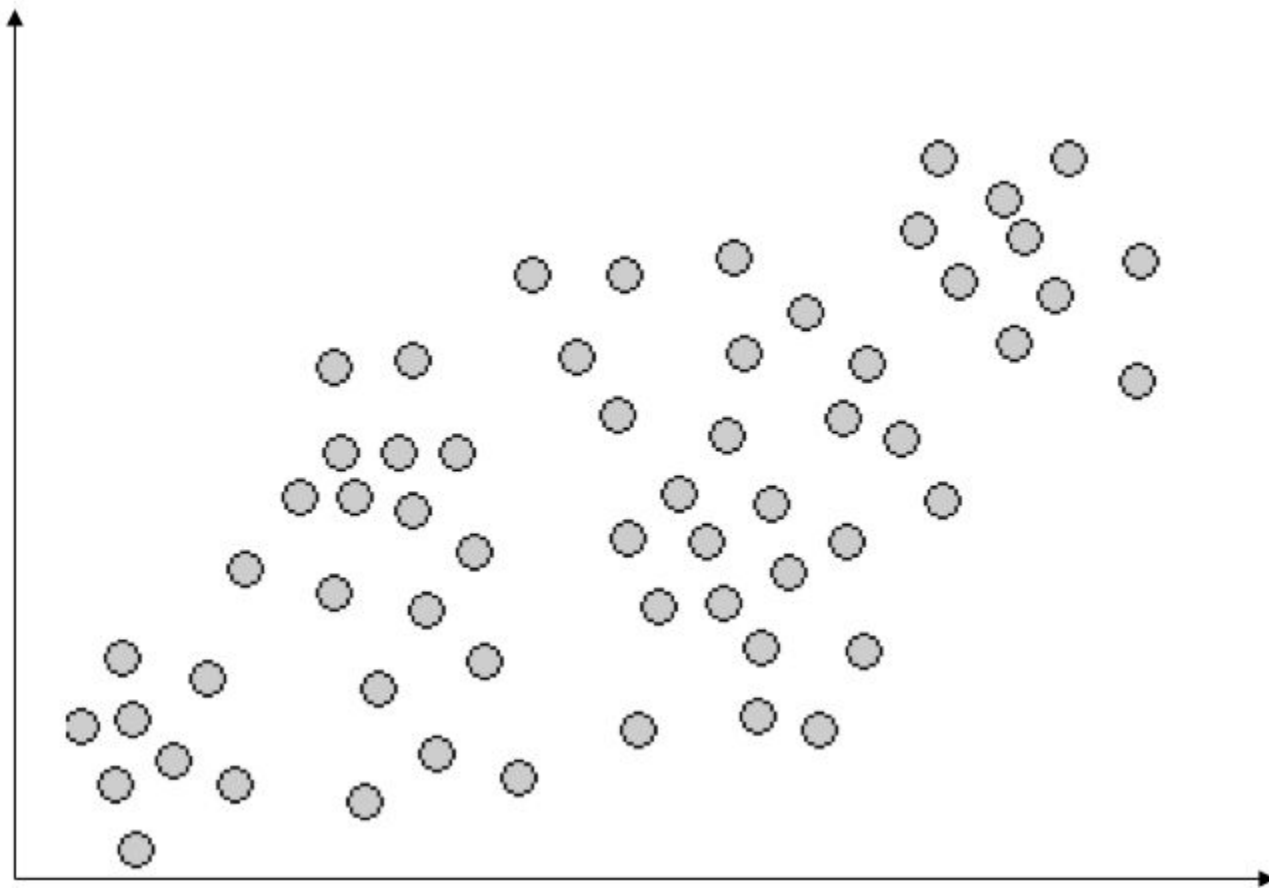
Algoritmo

Entrada: k, dados (X)

Saída: dados agrupados em k grupos

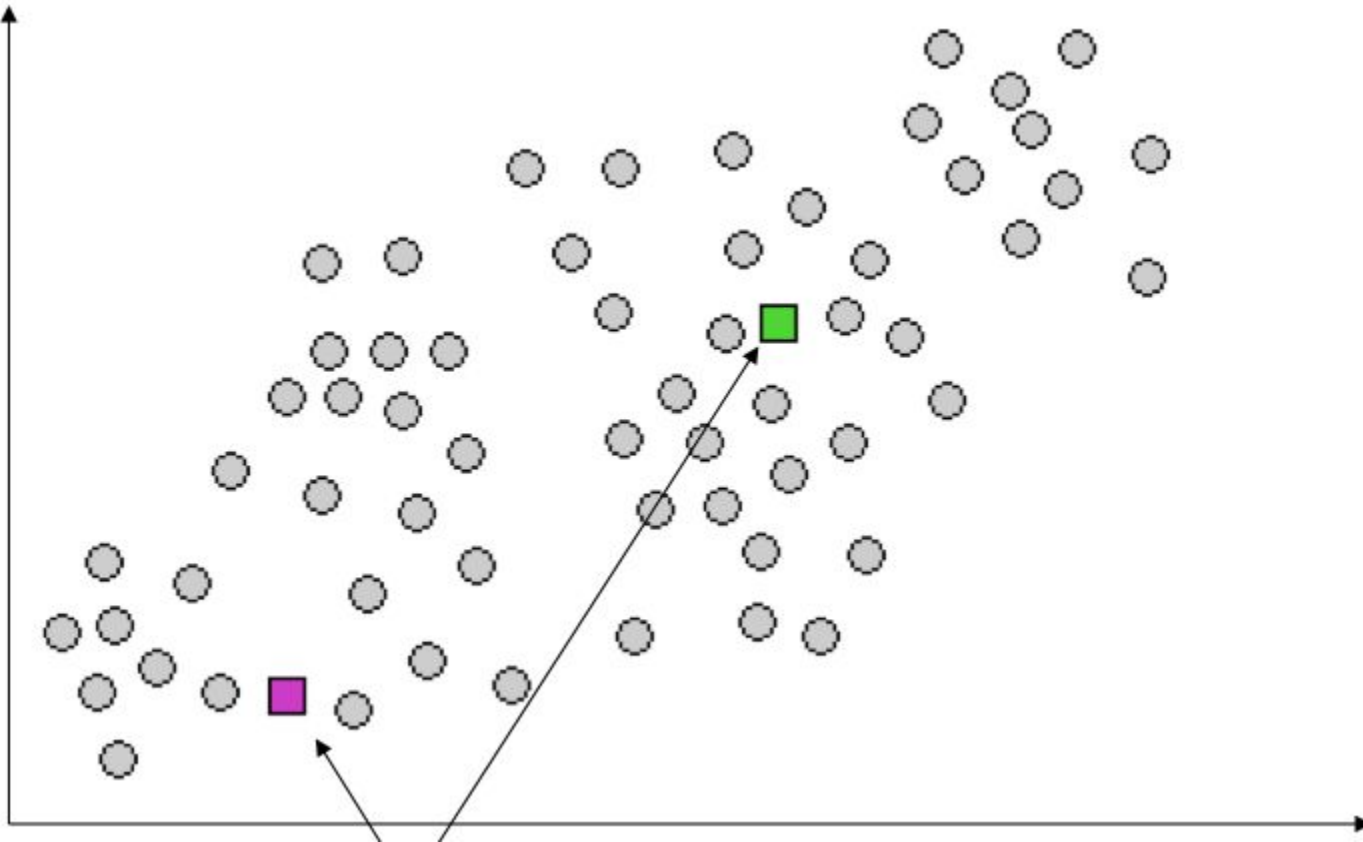
1. Determinar os k centróides
2. Atribuir a cada objeto do grupo o centróide mais próximo.
3. Após atribuir um centróide a cada objeto, recalcular os centróides
4. Repetir os passos 2 e 3 até que os centróides “não sejam” modificados

k-Means



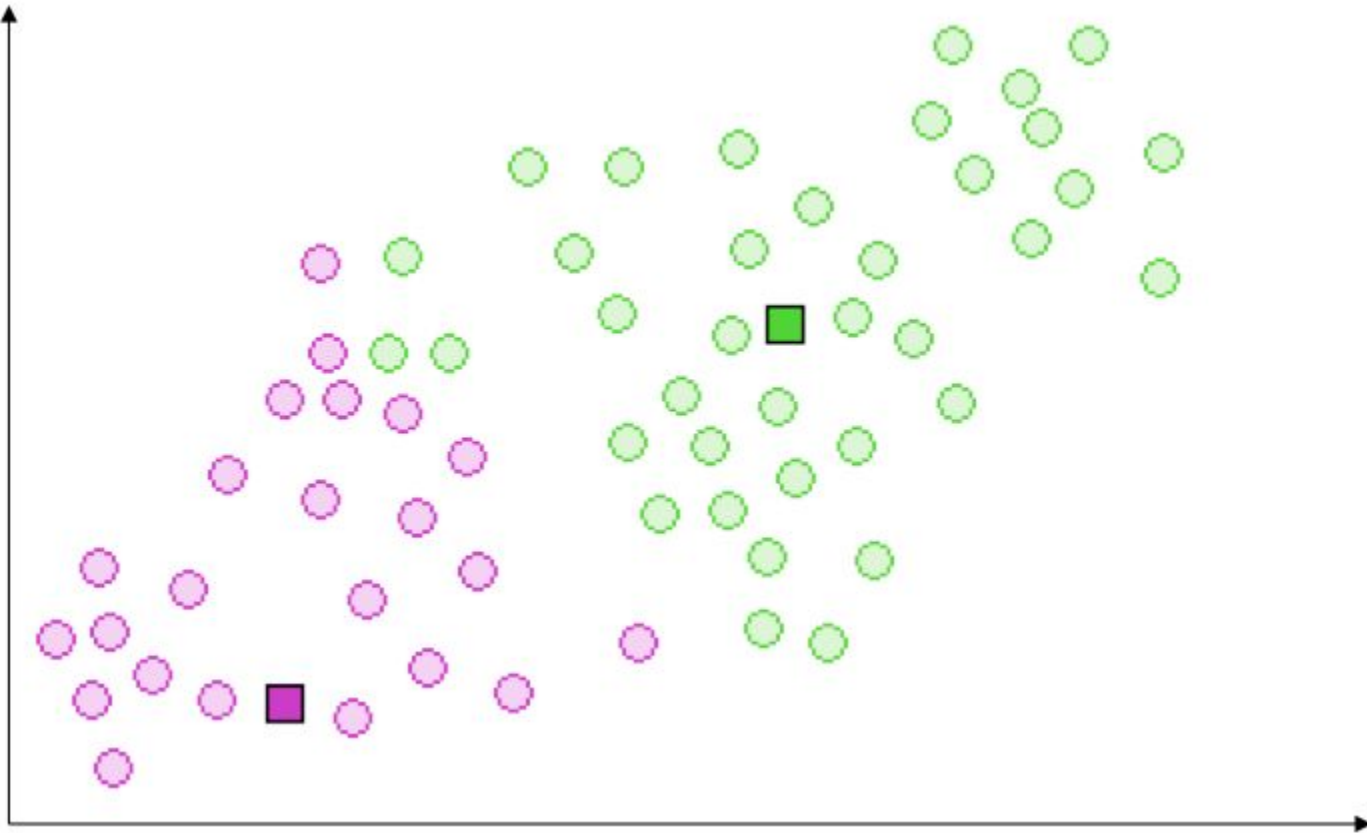
Dados em duas dimensões

k-Means



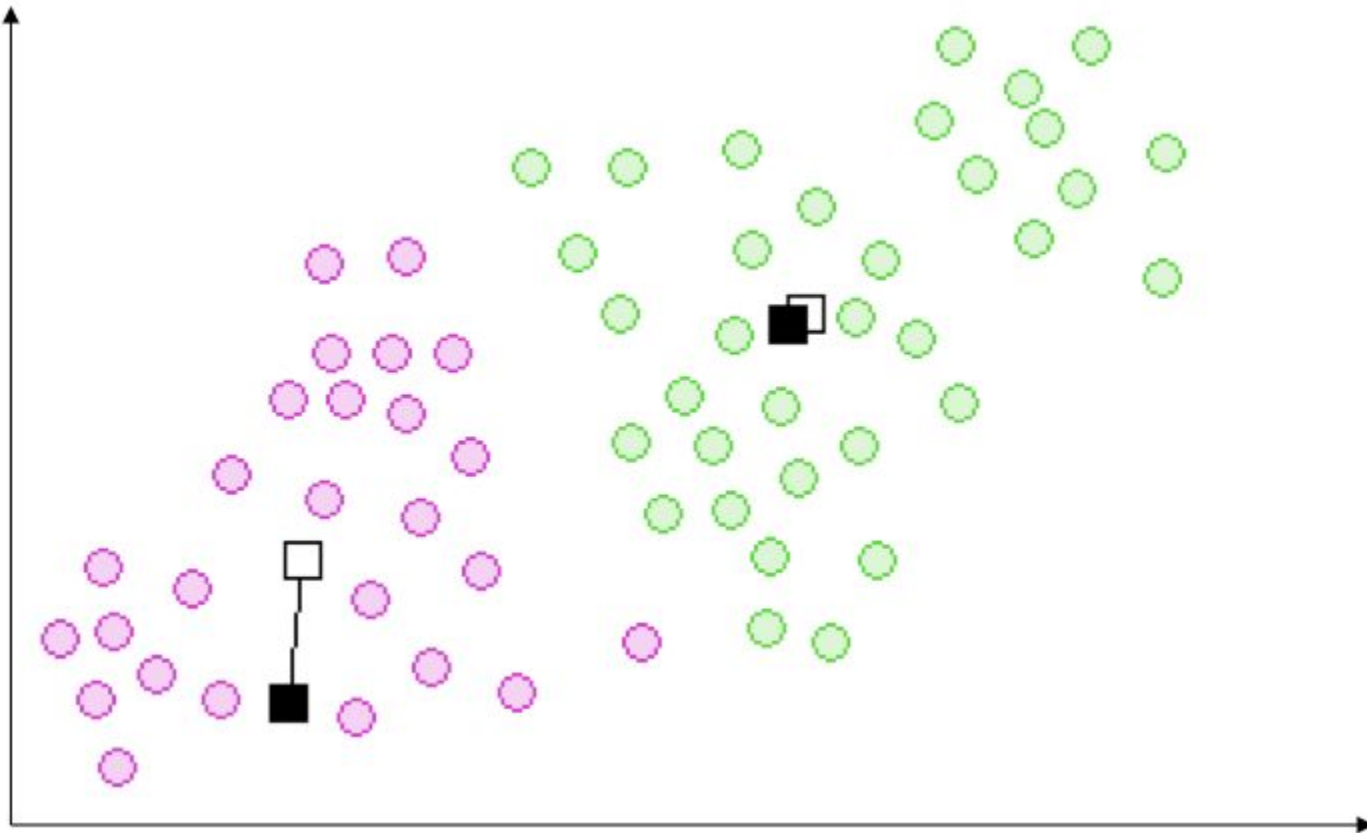
Passo 1: Centróides definidos aleatoriamente

k-Means



Passo 2: Atribuir a cada objeto o centróide mais próximo

k-Means



Passo 3: Recalcular os centróides

k-Means

Obsevações

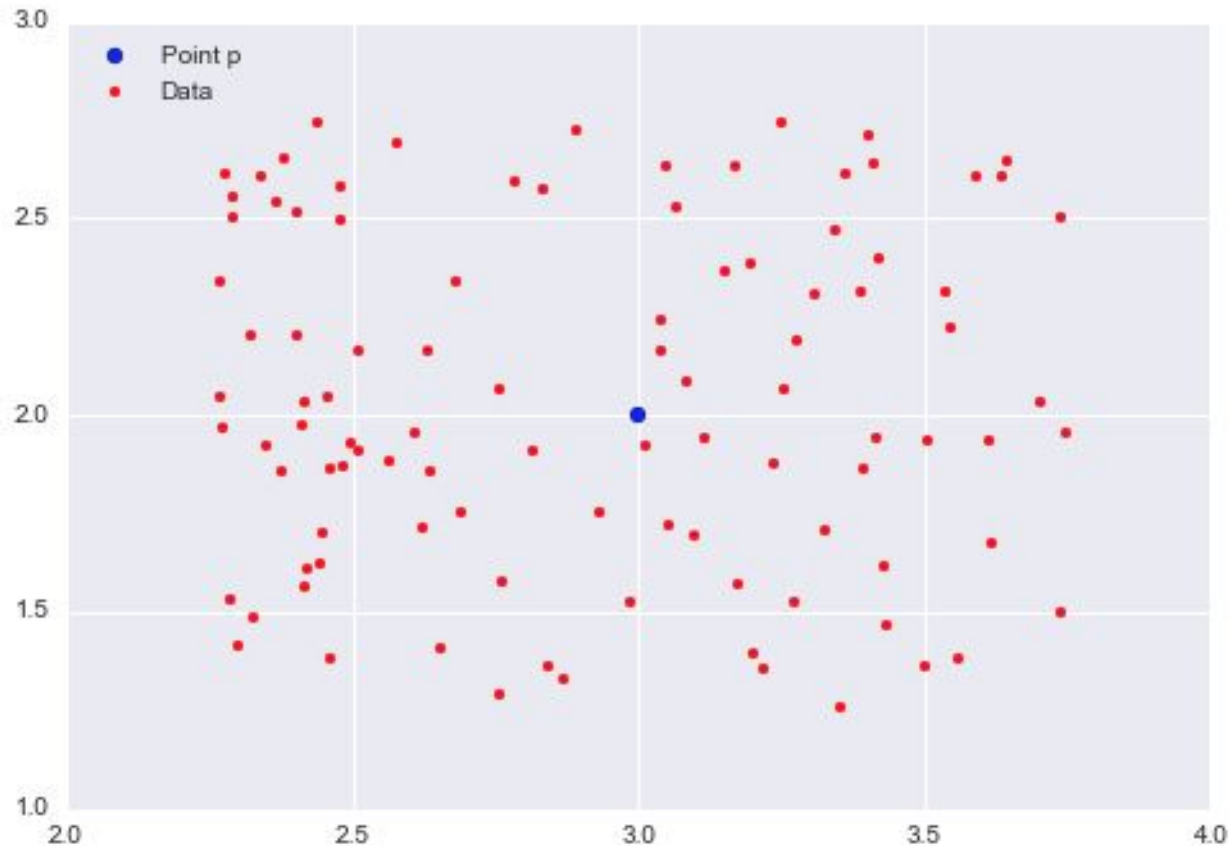
- Relativamente eficiente (escalável)
- Necessidade de definir o número de clusters *a priori*.
- Ineficiente para lidar com ruídos e/ou *outliers*.
 - Todo ponto será atribuído a um cluster mesmo que ele não pertença a nenhum.
 - Em alguns domínios de aplicação (detecção de anomalias) isso causa problemas.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

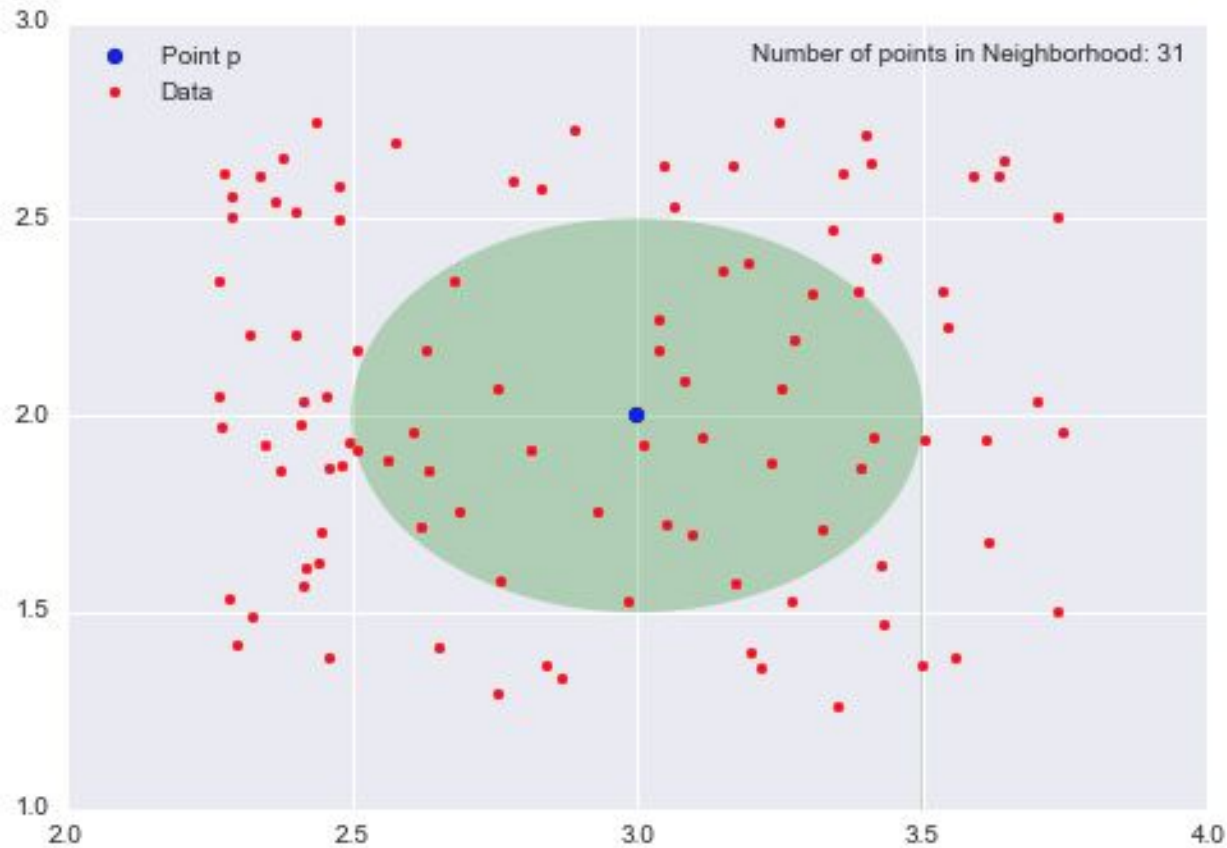
Exemplo



100 pontos no intervalo $[1,3] \times [2,4]$ e $p = (3,2)$

ϵ -vizinhança

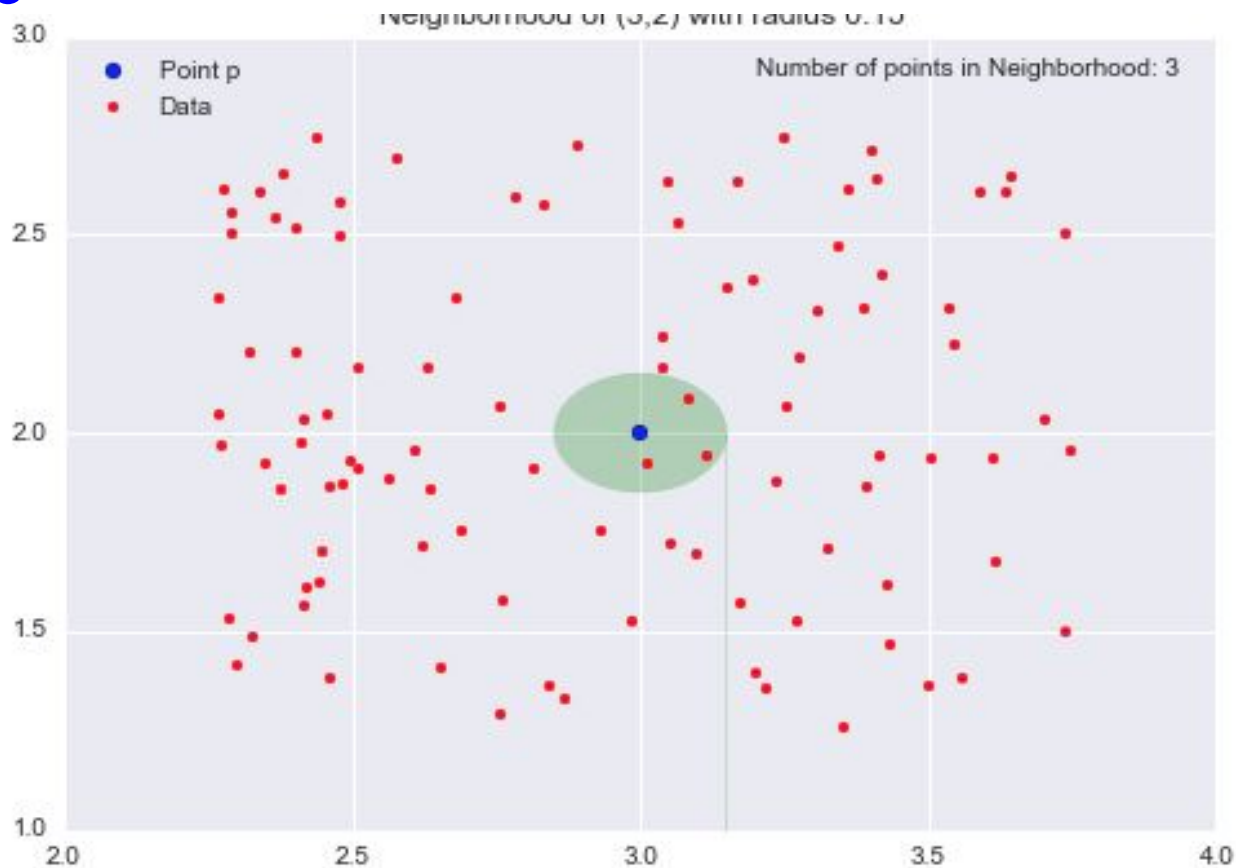
Exemplo



Vizinha de p com raio 0,5 ($\epsilon = 0,5$) e 31 pontos de 100

ϵ -vizinhança

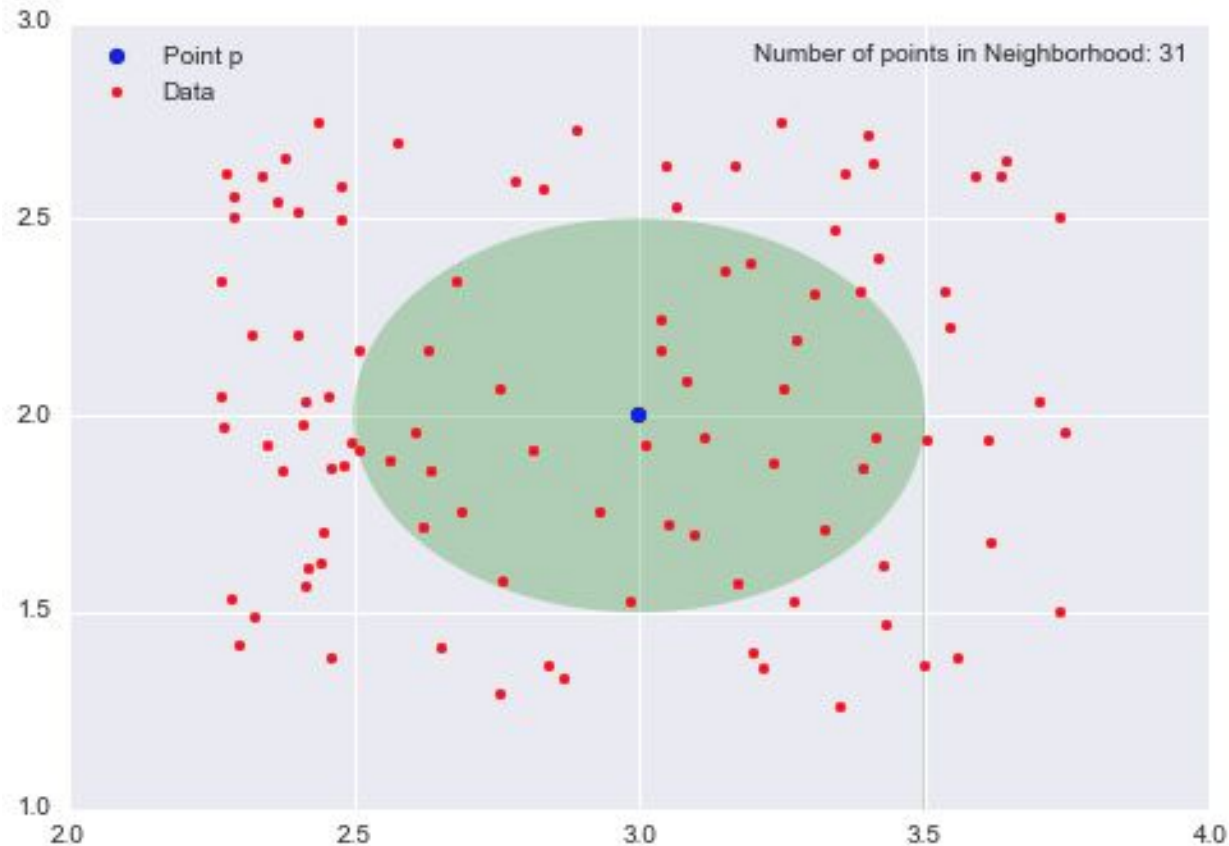
Exemplo



Vizinha de p com raio 0,15 ($\epsilon = 0,15$) e apenas 3 vizinhos.

Densidade

Densidade = Massa / Volume

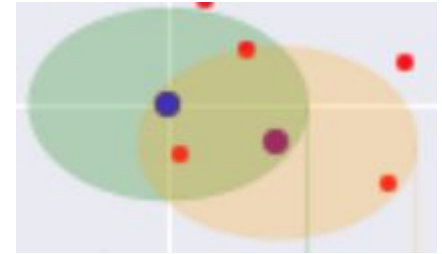


Para o caso de $\epsilon = 0,15$, temos o volume como a área do círculo, logo $\pi(0,5)^2 = \pi/4$.
Desta forma, massa/volume = 31 pontos / $(\pi/4) \approx 39,5$

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



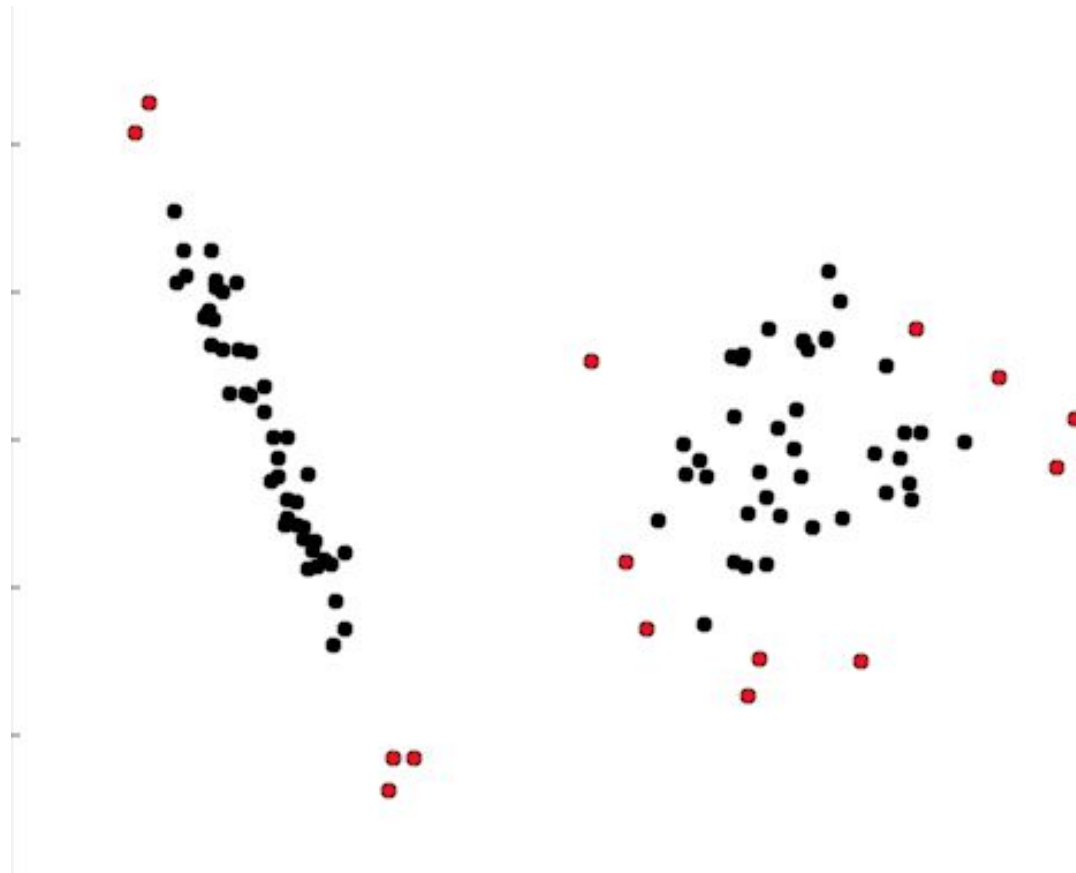
- Possui dois parâmetros:
 - ϵ : Raio da vizinhança
 - **MinPts**: Número mínimo de pontos na vizinhança para definir um *cluster*.
- Com bases nesses dois parâmetros, DBSCAN classifica os **pontos** em três categorias:
 - **core point**: Se a vizinhança de **p** com raio ϵ contém pelo menos **MinPts**.
 - **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

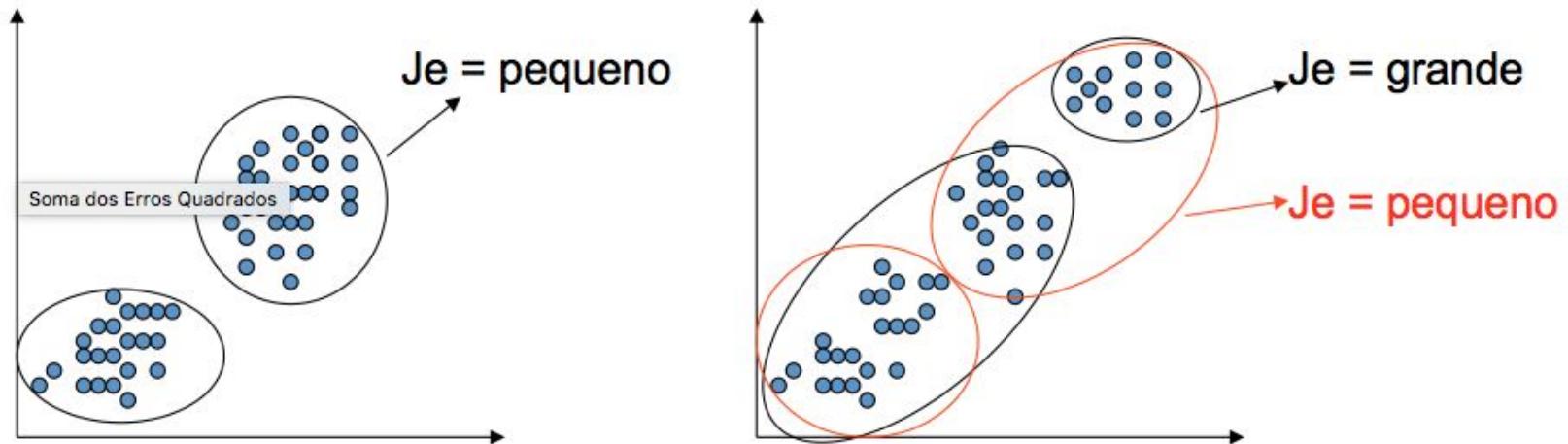
- Diferentemente da aprendizagem supervisionada, na qual podemos utilizar diferentes métricas de avaliação **objetivas**, a avaliação em aprendizagem não supervisionada é mais subjetiva.
- Porque é importante avaliar *clusters*?
 - Comparar algoritmos de *clustering*.
 - Comparar *clusters* gerados por 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

$$- m_i = \frac{1}{n_i} \sum_{x \in D_i} x$$

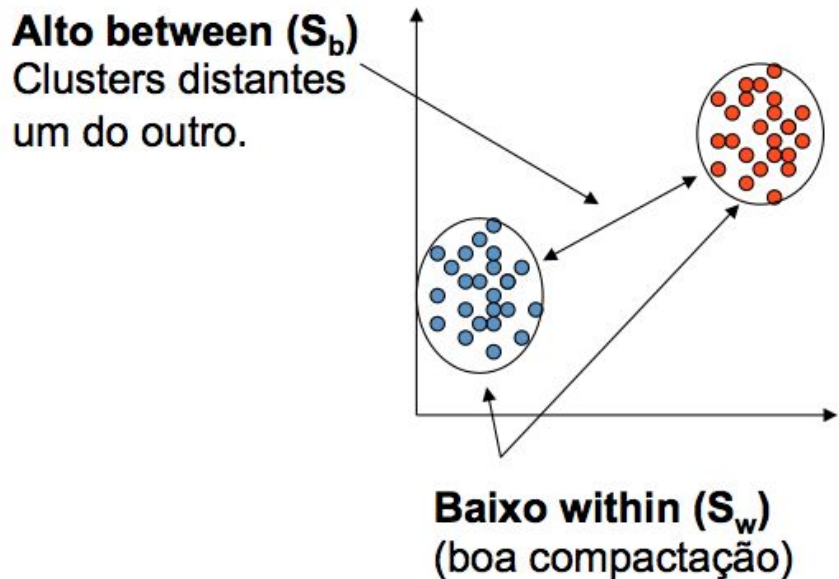
- Erro² $J_e = \sum_{x=1}^c \sum_{x \in D_i} (x - m_i)^2$



- **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
 - $S_b = \sum_{i=1}^c n_i (m_i - m)^2$
 - Em que m é o vetor médio total (centróide geral)



Avaliação em Aprendizagem Não Supervisionada

Coeficiente Silhouette

- 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 *Silhouette*

- Coesão e separação

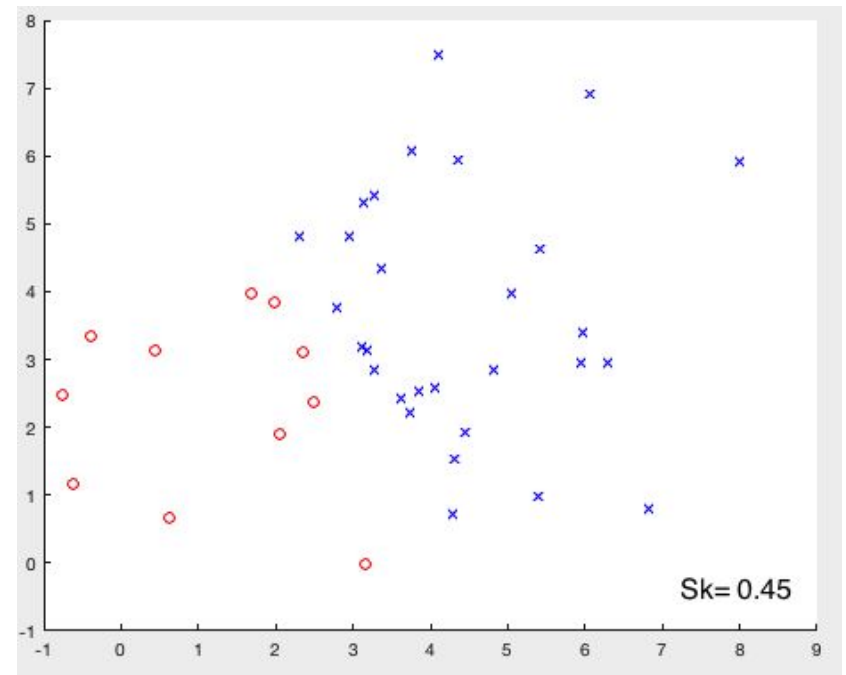
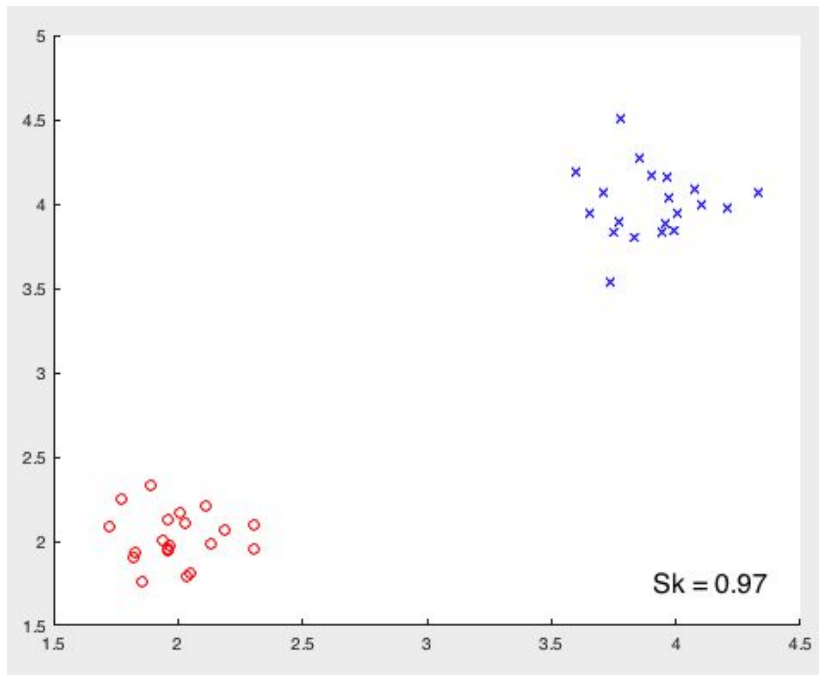
$$s_k = \frac{1}{I} \sum_{i=1}^I s_i$$

$$s_i = (b_i - a_i) / \max(a_i, b_i)$$

- 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 *Silhouette*



Avaliação em Aprendizagem Não Supervisionada

Coeficiente Silhouette

- 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

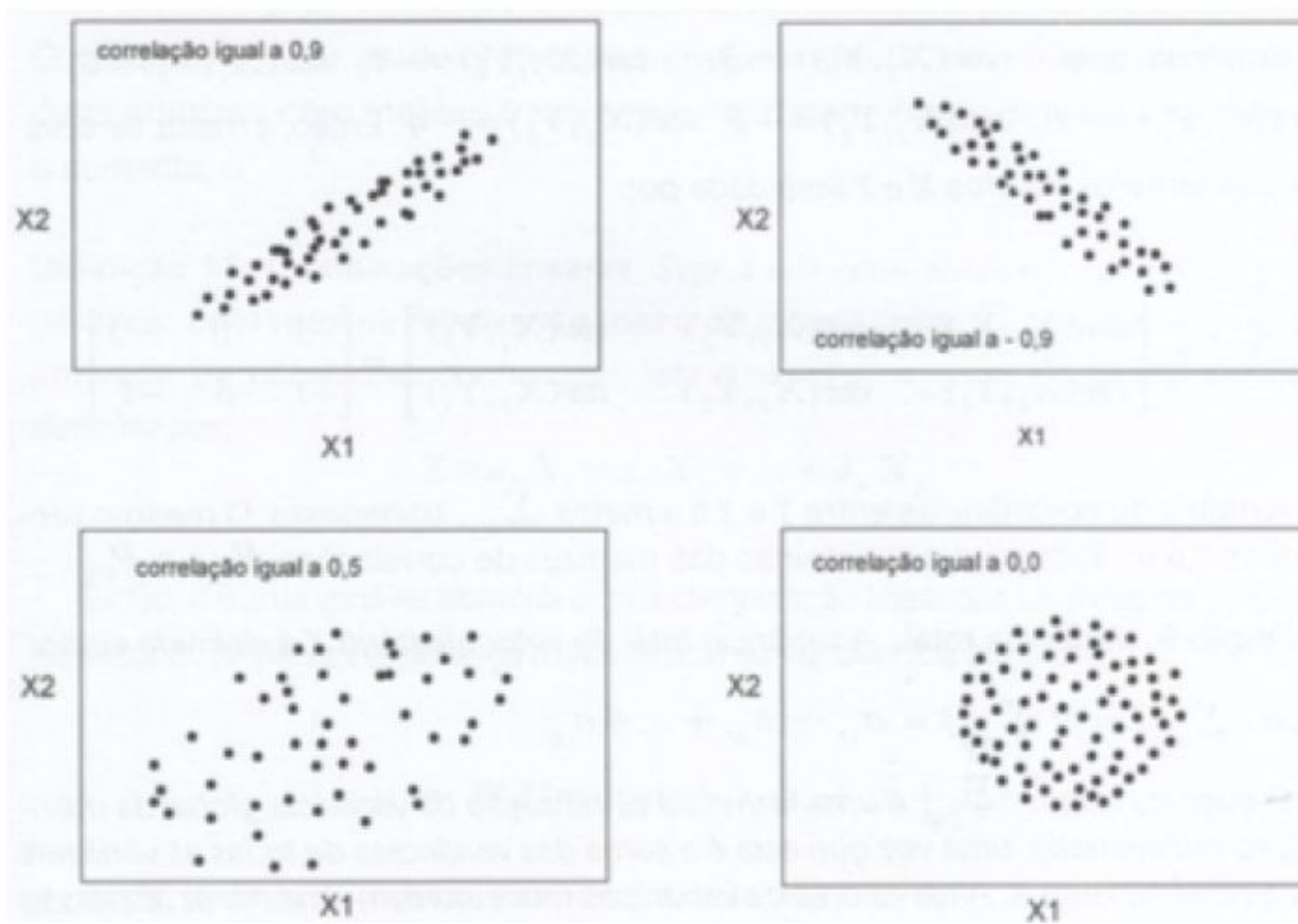
Agenda

- 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



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 prever 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

Mas em toda a minha experiência nunca estive em nenhum acidente... de qualquer tipo digno de menção. Só vi uma única embarcação em perigo em todos os meus anos no mar. Nunca vi um naufrágio nem nunca naufraguei, tampouco enfrentei qualquer contratempo que ameaçasse terminar em qualquer tipo de desastre.

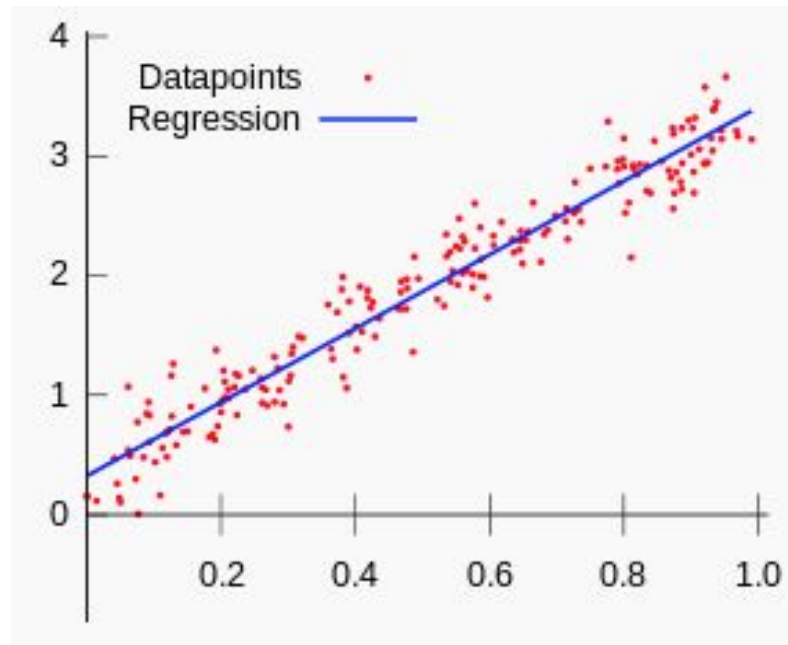
E. J. Smith, 1907, capitão, RMS
Titanic

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

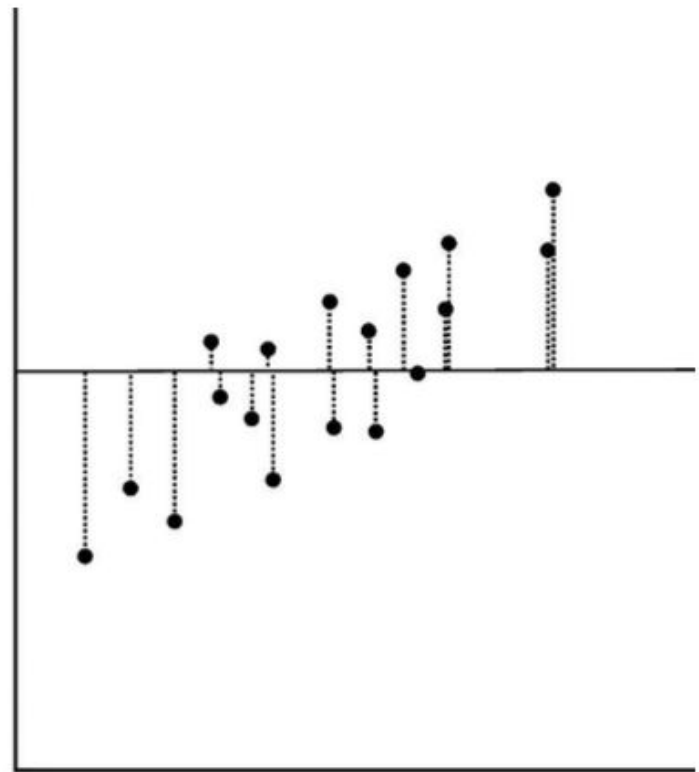
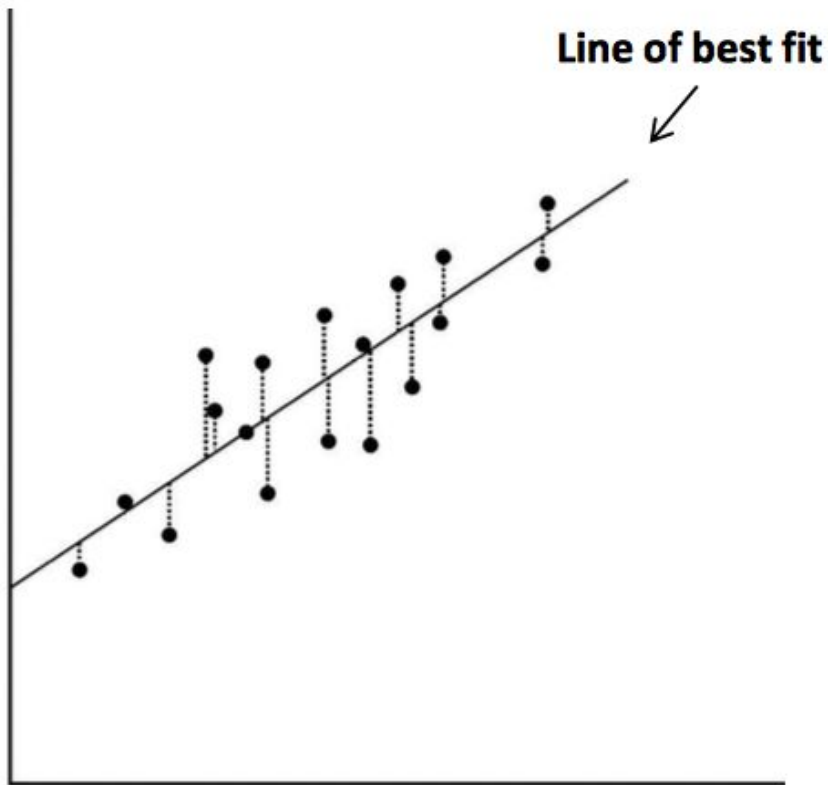
- Seja a equação da reta $y = ax + b$ (ou $y = \alpha + \beta x$) que modela a relação entre uma variável independente e uma variável dependente.
- Seja um conjunto de n pontos de dados conhecidos:

$$D = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$$

- 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:

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

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

Método dos Mínimos Quadrados

Exemplo

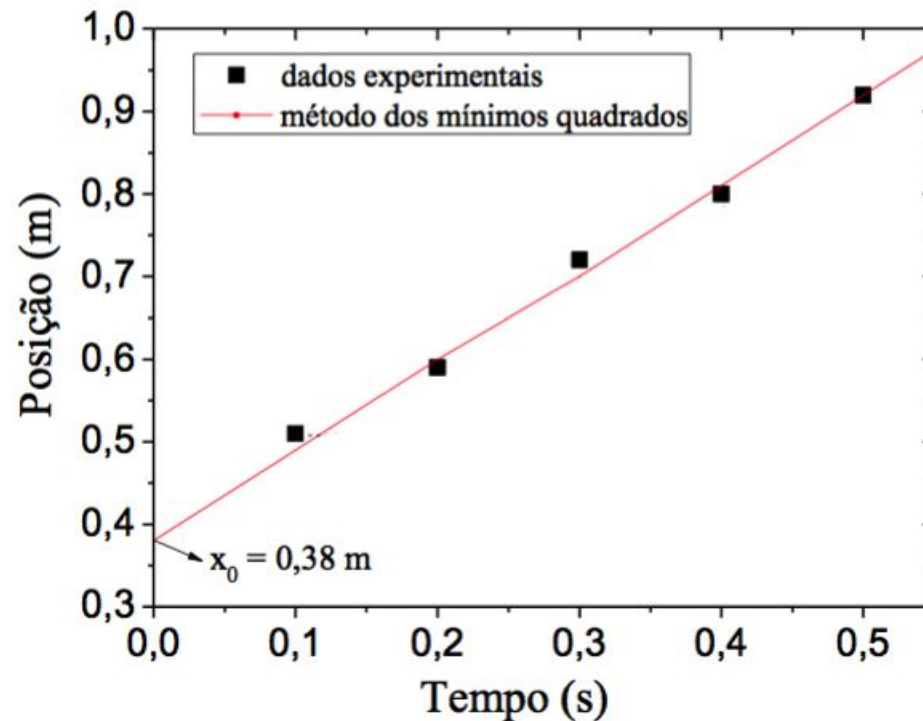
- Considere os dados da tabela abaixo. Encontre os coeficientes a e b e calcule a posição (y) no tempo $x = 0,6$

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

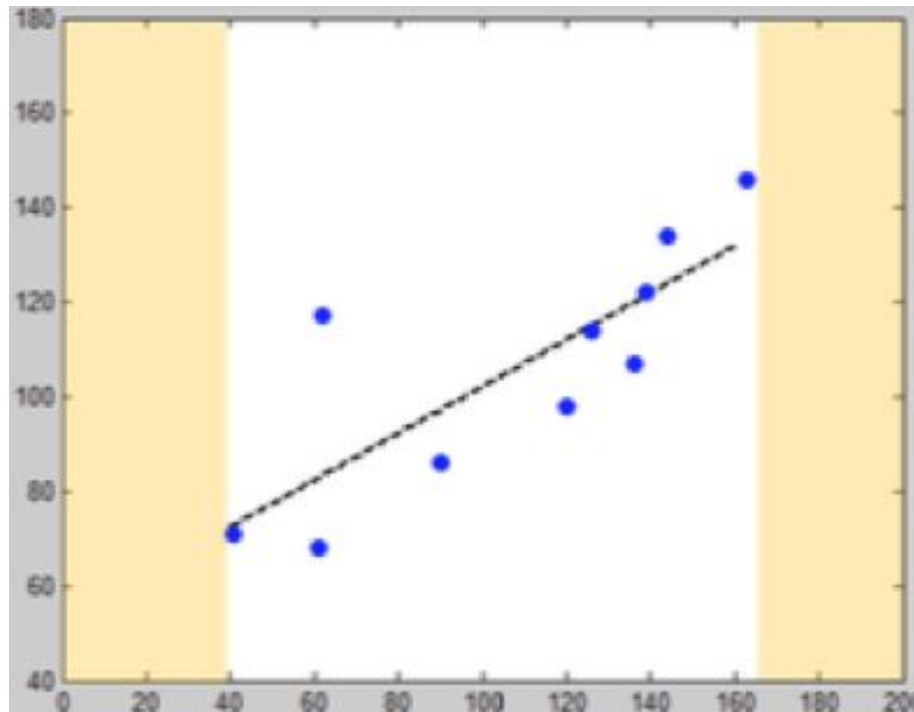
Exemplo



- 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 $\hat{y}_i$

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

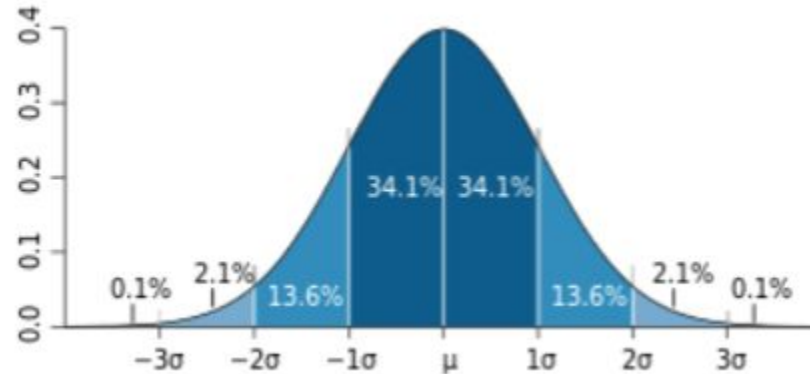
Análise de resíduos

Outliers

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

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

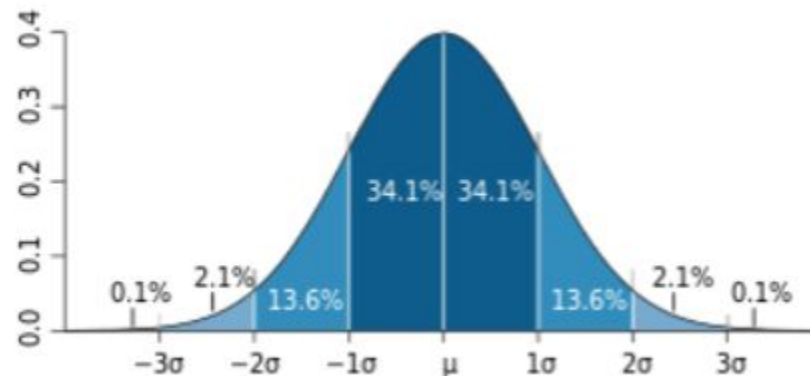
- O histograma de resíduos deve ser semelhante a uma normal.



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?

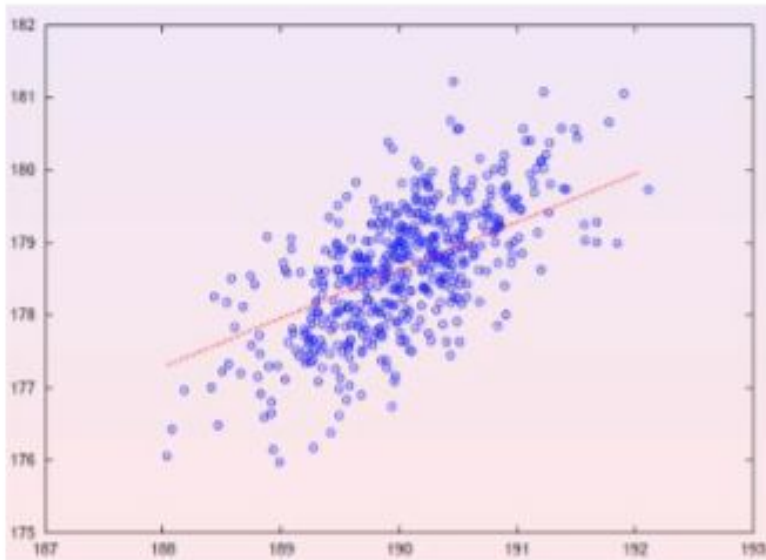


Coeficiente de Determinação (R^2)

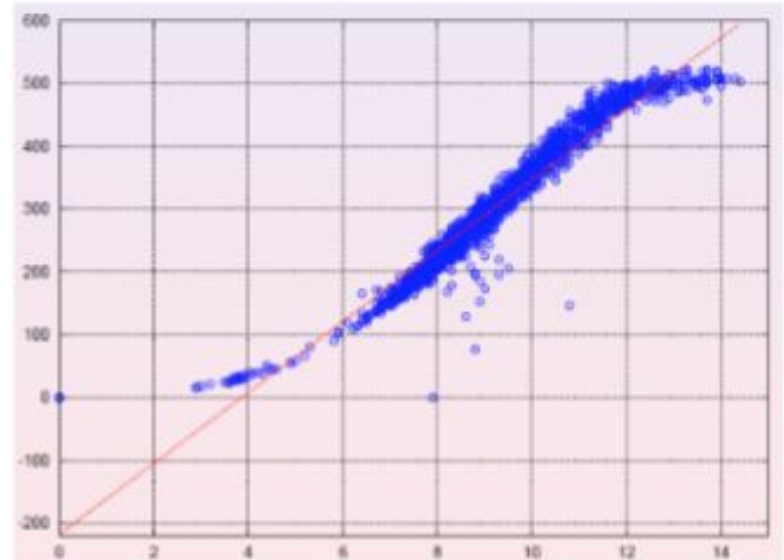
- Uma forma de avaliar a **qualidade** de ajuste do modelo.
- Indica a quantidade de **variabilidade** dos dados que o modelo de regressão é capaz de explicar.
- Varia entre 0 e 1, indicando quanto o modelo consegue explicar os valores observados.

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

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)

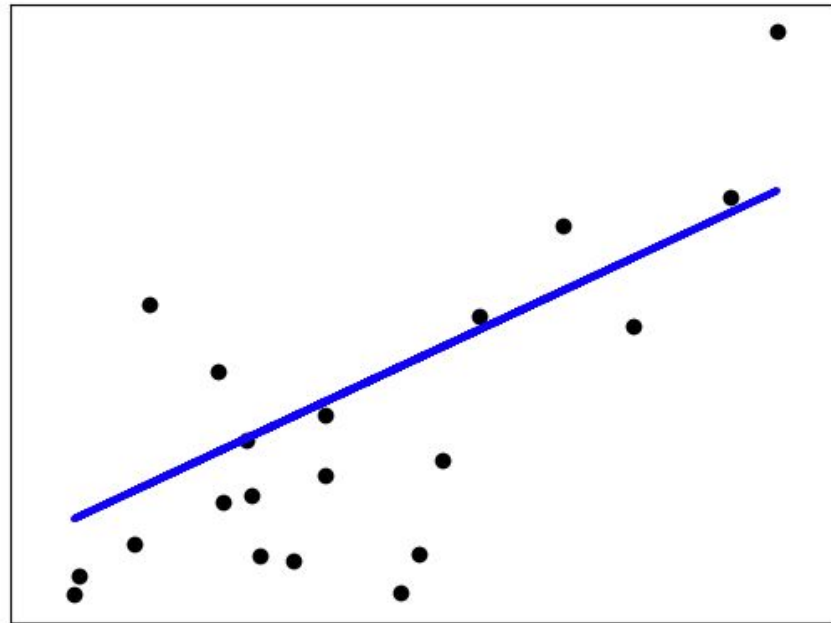
plt.xticks(())
plt.yticks(())

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

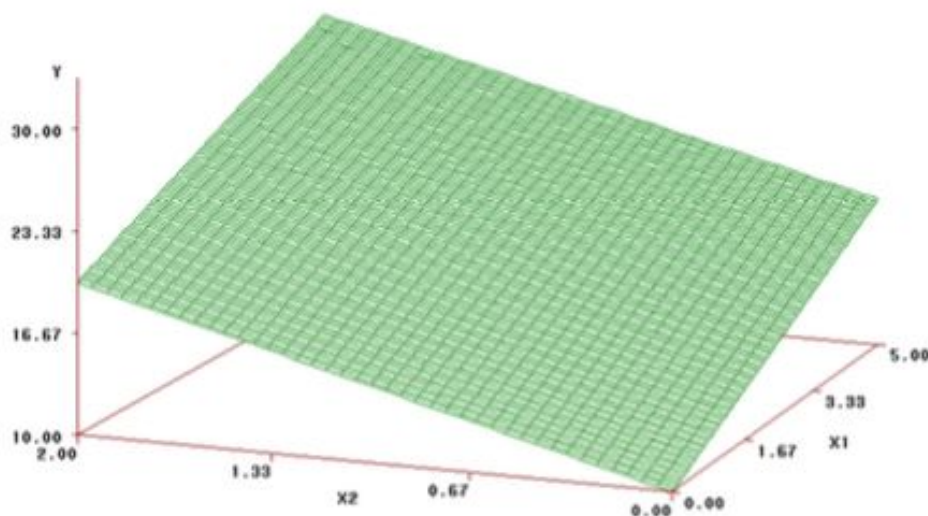
- A regressão múltipla funciona de forma parecida com a regressão simples
- Leva em consideração diversas variáveis de entrada x_i , $i = 1, \dots, p$, influenciando ao mesmo tempo uma única variável de saída, y

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

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 $\mathbf{x}$

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

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

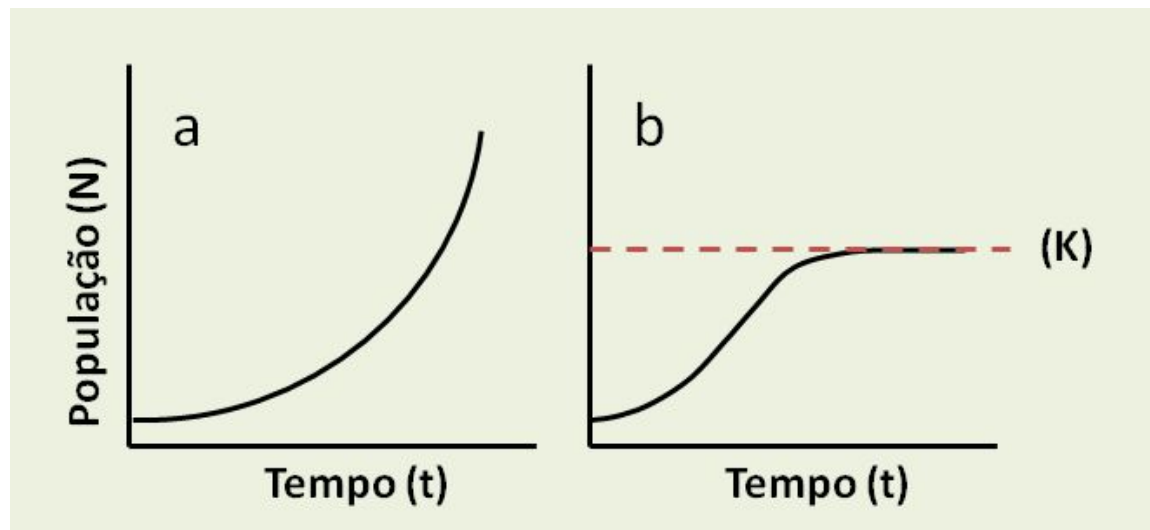
- **Solução:** Expressar as operações matemáticas utilizando notação matricial

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} \dots & x_{p1} \\ 1 & x_{12} \dots & x_{p2} \\ \dots & \dots \dots & \dots \\ 1 & x_{1p} \dots & x_{pn} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \dots \\ \beta_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \dots \\ \epsilon_n \end{pmatrix}$$

- $y = X\beta + \epsilon$

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 $y = be^{ax}$

$$a = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y'_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y'_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - (\sum_{i=1}^n x_i)^2}$$

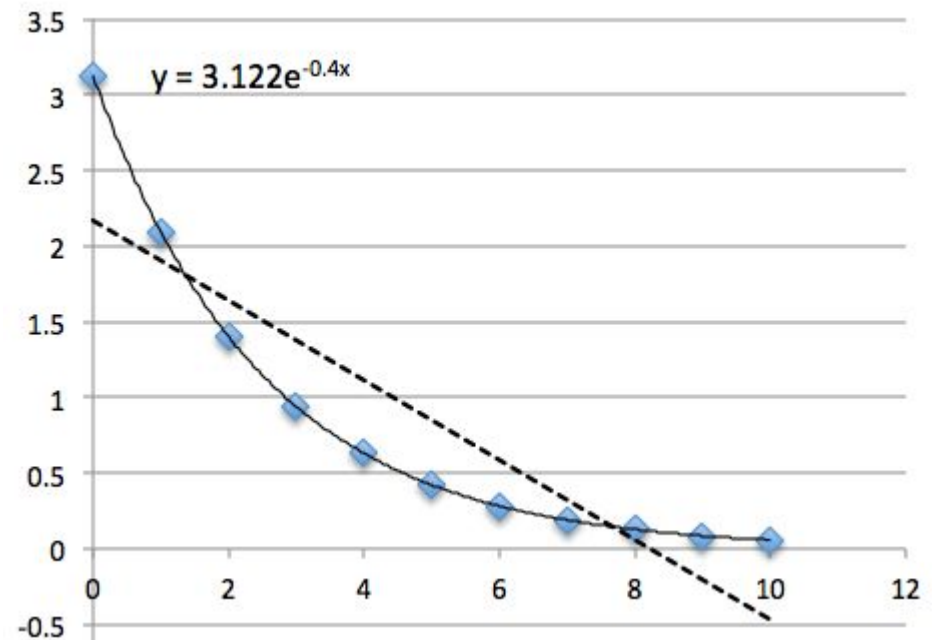
$$b = e^{\bar{y}' - a\bar{x}}$$

Método dos Mínimos Quadrados

Caso Exponencial

Exemplo

x	y	$\ln(y) = y'$	x^2	$x \cdot y'$	
	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

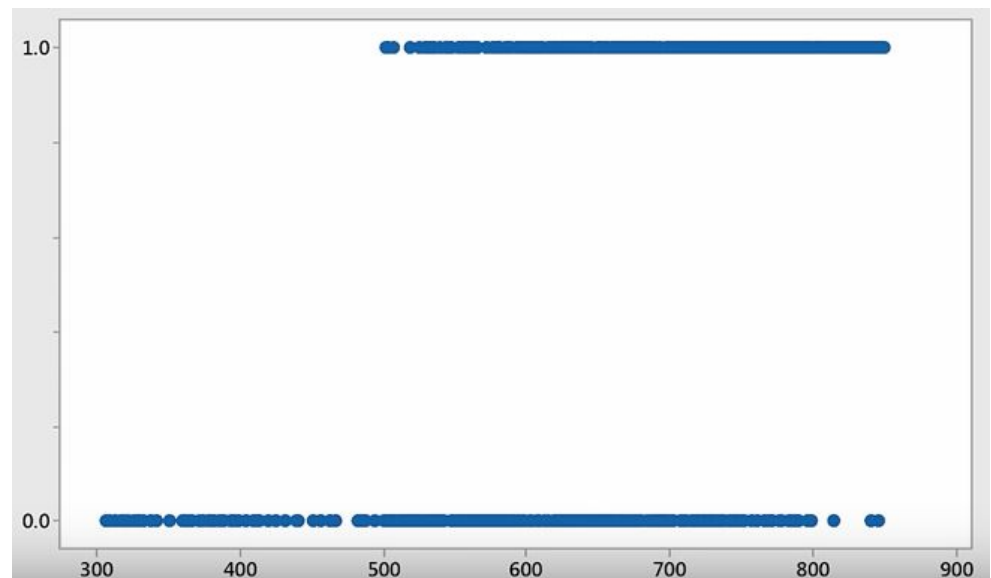
Exemplo

- Considere que alguém queira comprar uma casa e está na busca por um financiamento.
- Os bancos mantêm 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

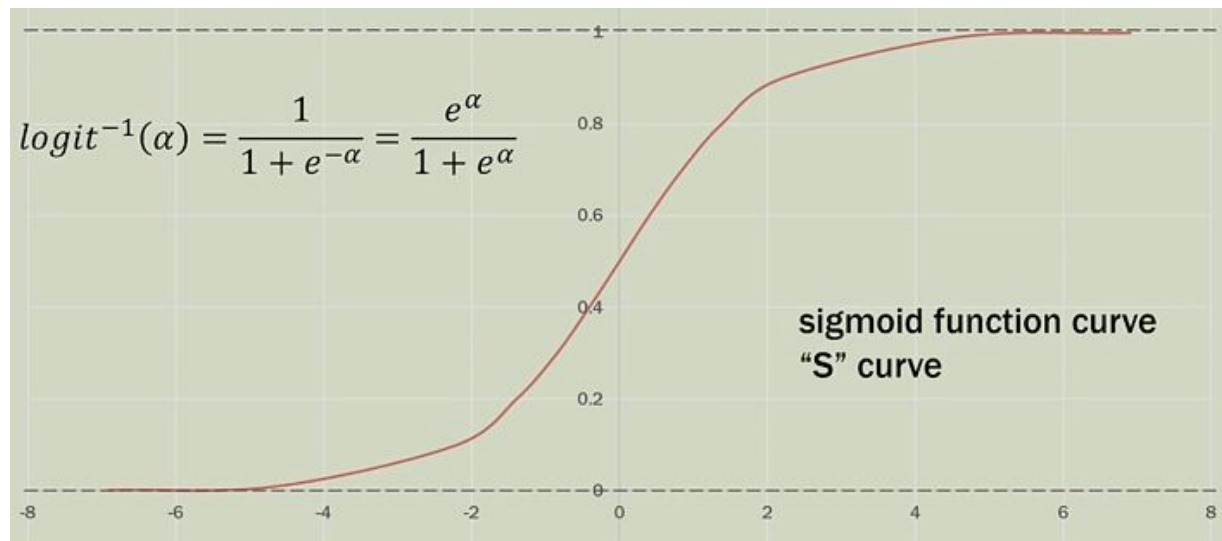
Regressão Logística

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.

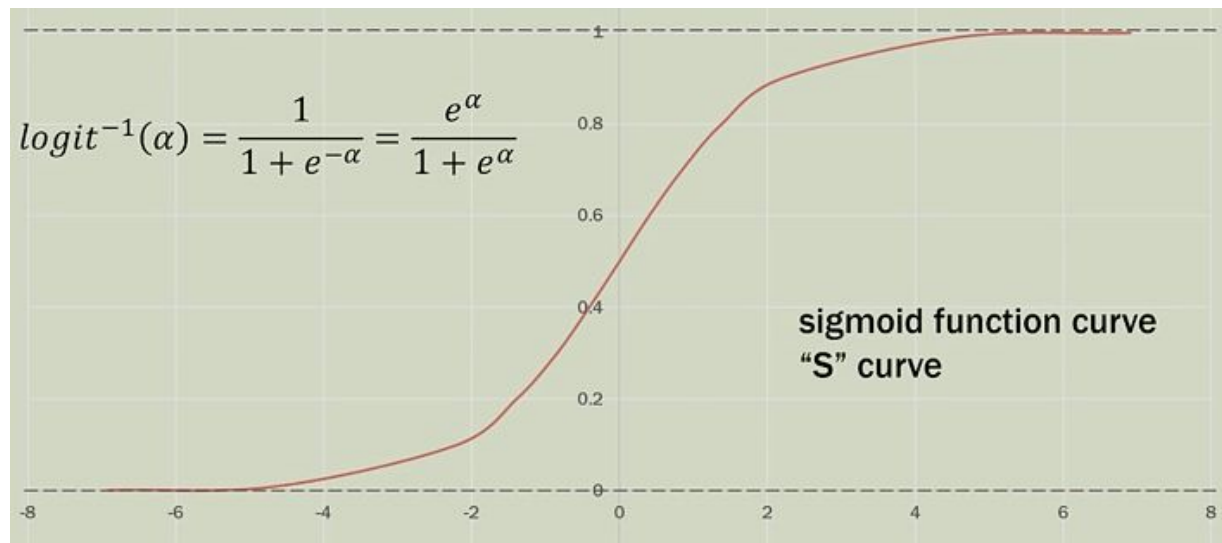
Regressão Logística

- 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.

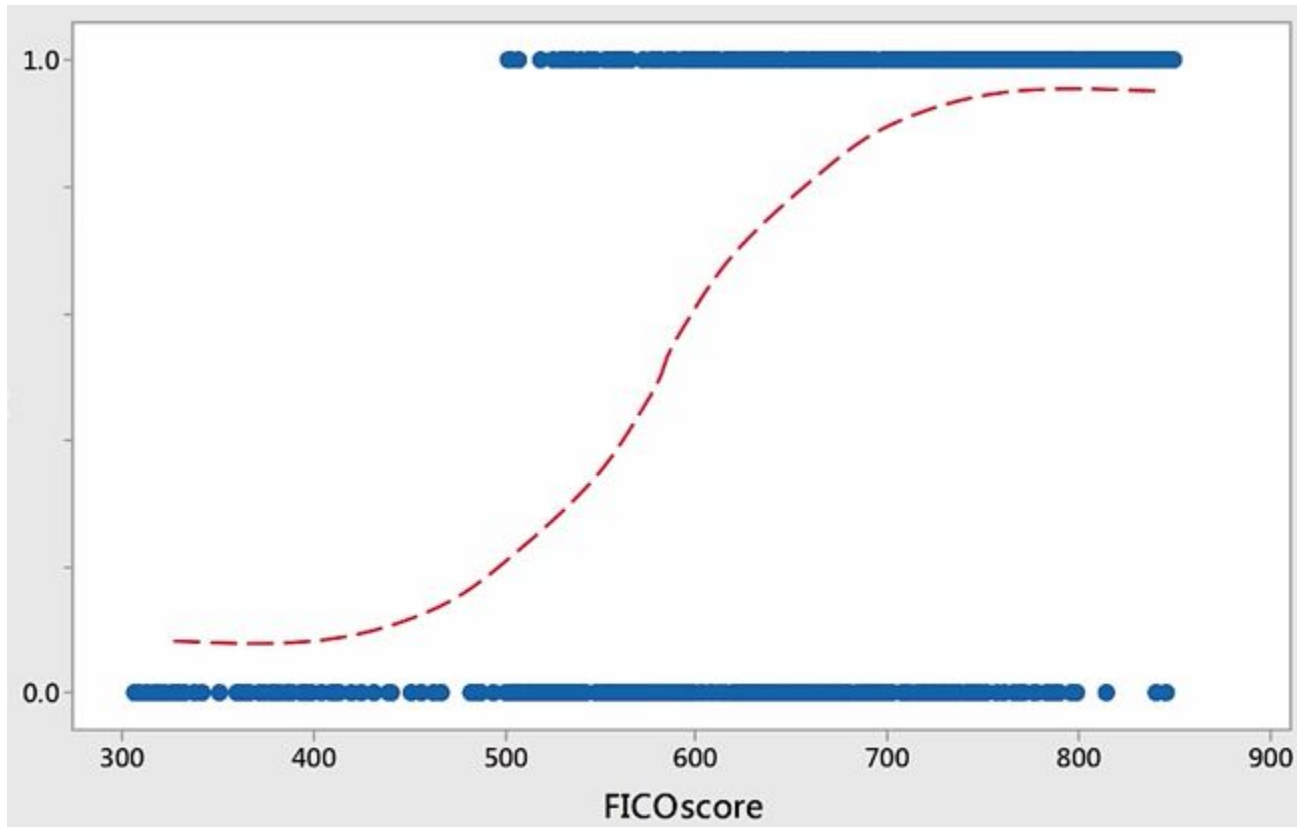


Regressão Logística

- Isso pode ser alcançado ajustando o seguinte modelo (função logística)
- MLE (*Maximum Likelihood 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)

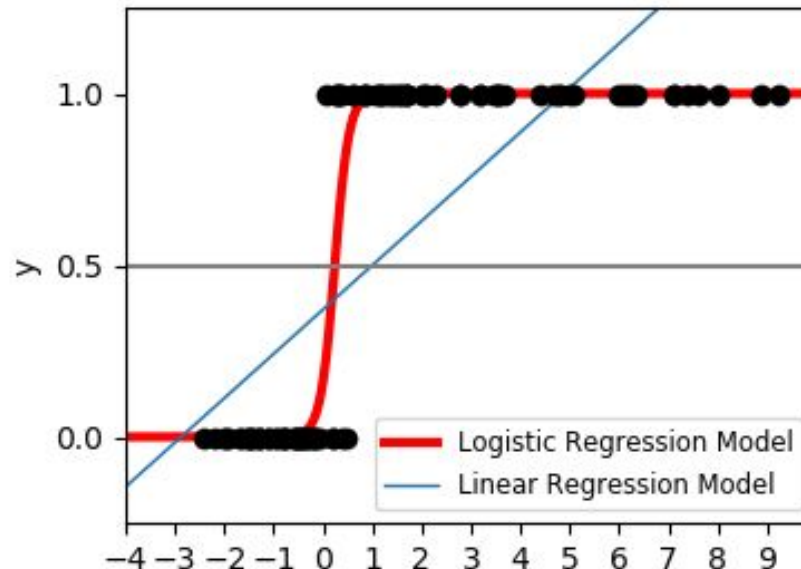
ols = linear_model.LinearRegression()
ols.fit(X, y)
plt.plot(X_test, ols.coef_ * X_test + ols.intercept_, linewidth=1)
plt.axhline(.5, color='.5')

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>