

Análise Forense de Documentos Digitais

Prof. Dr. Anderson Rocha

anderson.rocha@ic.unicamp.br

<http://www.ic.unicamp.br/~rocha>

Reasoning for Complex Data (RECOD) Lab.
Institute of Computing, Unicamp

Av. Albert Einstein, 1251 – Cidade Universitária
CEP 13083-970 • Campinas/SP – Brasil

Organização

Organização

- ▶ Validação e Métricas de Qualidade em Classificação de Padrões
- ▶ Classificadores de Padrões
 - KNN
 - LDA
 - Árvores
 - SVM
 - Coletâneas (*Bagging*)

Formas de Validação

Formas de Validação

- ▶ Ao utilizarmos aprendizado supervisionado para resolvemos um problema, temos três opções para validarmos nossos resultados [Friedman et al. 2001] [Bishop 2006]:
 - *Holdout validation*
 - *K-Fold Cross validation*
 - *Leave-one-Out validation*

Métricas de Qualidade

Métricas de Qualidade

- ▶ Problema de duas classes
- ▶ *False Negative Rate (FNR)*
- ▶ *True Positive Rate (TPR)*
- ▶ *False Positive Rate (FPR)*
- ▶ *True Negative Rate (TNR)*

Métricas de Qualidade

- ▶ Um bom classificador procura minimizar FNR e FPR e maximizar TNR e TPR
- ▶ Sabemos que $FNR = 1 - TPR$ e $FPR = 1 - TNR$
- ▶ Acurácia pode ser definida como $(TP + TN)/N$

Classificadores de Padrões

(Algumas Abordagens)

Classificadores de Padrões

► Em Matemática e Estatística

- Um **classificador** é um mapeamento a partir de um espaço de características X para um conjunto discreto de rótulos (*labels*) Y
[Friedman et al. 2001] [Bishop 2006]

Classificadores de Padrões

- ▶ Em Inteligência Artificial
 - Um **classificador** é um tipo de motor de inferência que implementa estratégias eficientes para
 - ▶ computar relações de classificação entre pares de conceitos ou
 - ▶ para computar relações entre um conceito e um conjunto de instâncias [Duda et al. 2001]

Classificadores de Padrões

- ▶ K-Vizinhos mais Próximos (KNN)
- ▶ Discriminante de Fisher (LDA)
- ▶ Árvores de Classificação
- ▶ Máquinas de Vetores de Suporte (SVMs)
- ▶ Coletâneas

K-Vizinhos Mais Próximos (KNN)

KNN

- ▶ *K-Nearest Neighbors (KNN)*
- ▶ A estratégia do algoritmo K-Vizinhos é classificar um elemento de acordo com os seus vizinhos
- ▶ **Noção de distância ou similaridade entre vizinhos**
- ▶ Não exige treinamento explícito mas exige um conjunto de elementos marcados

KNN

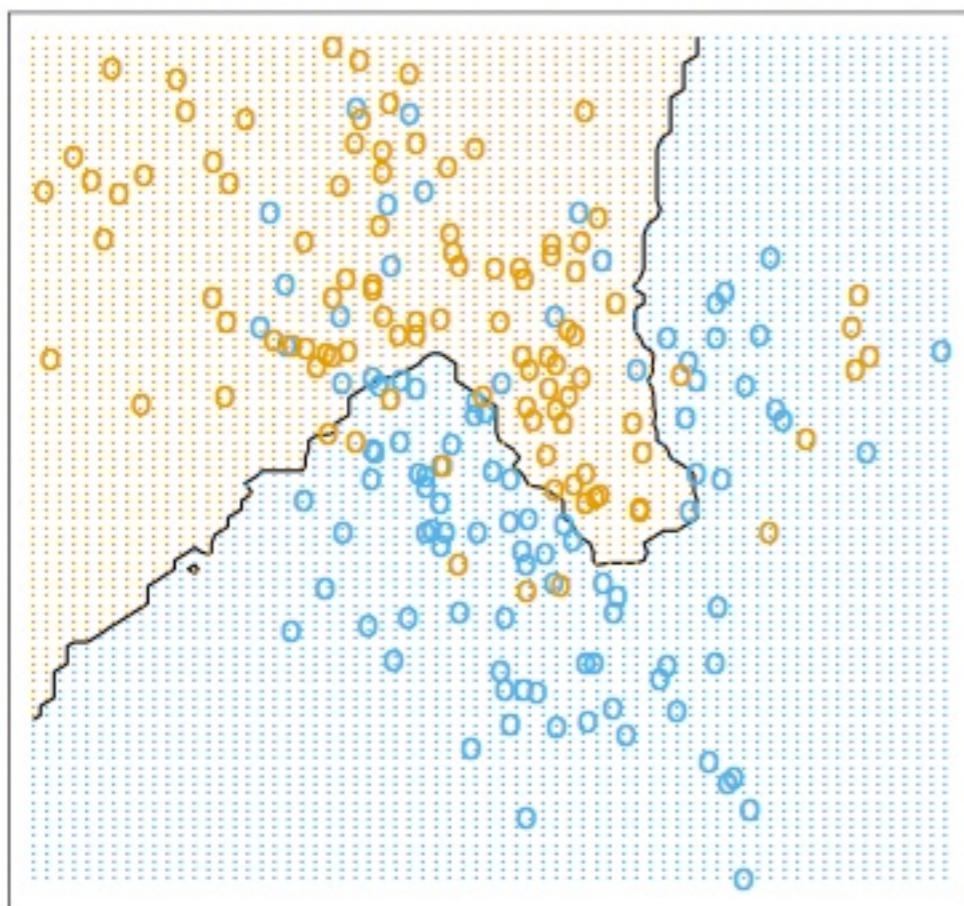
- ▶ Para classificar um elemento novo x , métodos baseados em K-Vizinhos usam observações em um conjunto de treinamento X_T próximos de x no espaço de características para formar a predição $f(x)$

$$f(x) = \frac{1}{k} \sum_{x_i \in N_k(x)} y_i$$

KNN

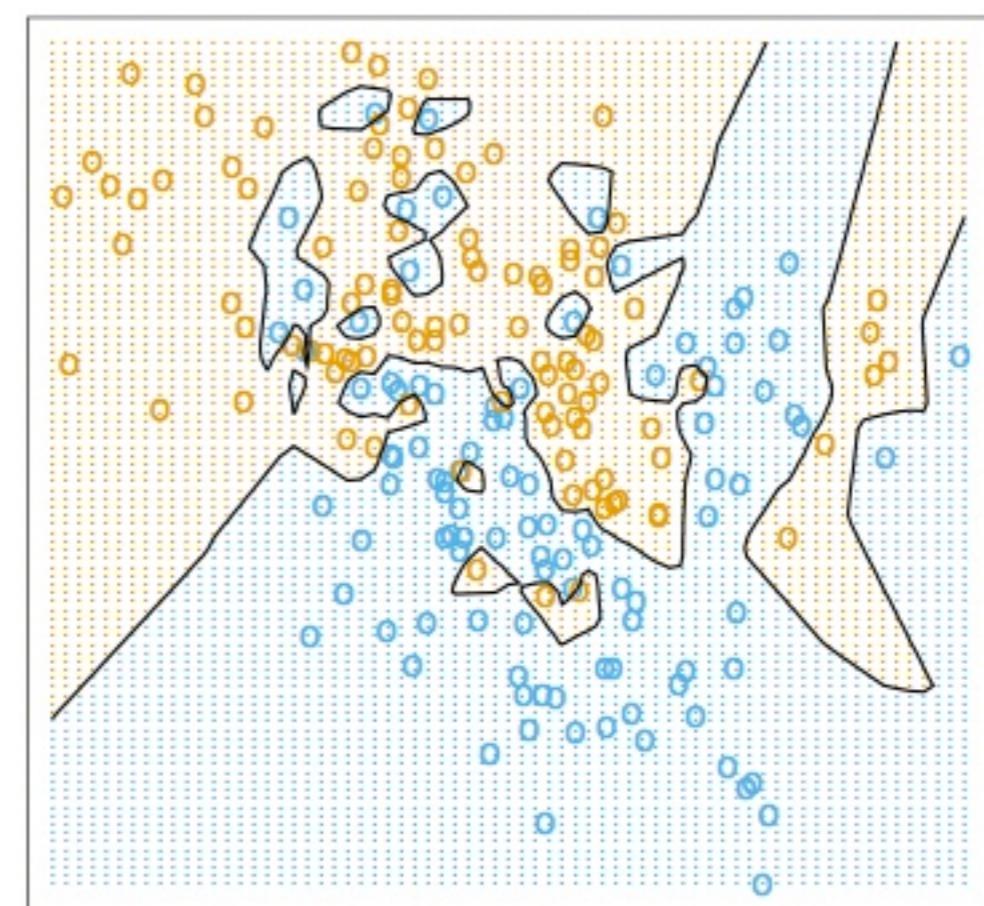
$K = 15$

© Friedman et al.



$K = 1$

© Friedman et al.



Comportamento no Treinamento!

Discriminante de Fisher (LDA)

LDA

- ▶ Linear Discriminant Analysis (LDA)
- ▶ Discriminante de Fisher
- ▶ Consiste em selecionar os componentes que maximizam a diferença **entre as classes** enquanto minimizam a variabilidade **intra-classe** [Friedman et al. 2001] [Bishop 2006]
- ▶ Por simplicidade, considere um problema de duas classes $Y(-1 = a \mid +1 = b)$

LDA

- ▶ Seja X_a uma família de exemplares pertencentes à classe a e X_b uma família de exemplares pertencentes à classe b no conjunto de treinamento
- ▶ Considere $|X_a| = N_a$ e $|X_b| = N_b$
- ▶ Adicionalmente, supomos que ambas as classes seguem uma **distribuição Gaussiana**

LDA

► Médias intra-classe

$$\mu_a = \frac{1}{N_a} \sum_{x_i \in X_a} x_i \quad \mu_b = \frac{1}{N_b} \sum_{x_j \in X_b} x_j.$$

► Média entre as classes (a,b)

$$\mu = \frac{1}{N_a + N_b} \left(\sum_{x \in X_a \cup X_b} x \right).$$

LDA

- ▶ Definimos uma matriz de **dispersão intra-classe** para medir o quanto cada classe varia

$$S_w = M_a M_a^T + M_b M_b^T$$

onde a i -ésima linha da matriz M_a contém a diferença $(x_i^a - \mu_a)$

- ▶ O mesmo procedimento se aplica a M_b

LDA

- ▶ Definimos agora a **dispersão entre as classes**

$$S_{bet} = N_a(\mu_a - \mu)(\mu_a - \mu)^T + N_b(\mu_b - \mu)(\mu_b - \mu)^T$$

- ▶ Para maximizarmos a diferença entre as classes e minimizarmos a variabilidade intra-classe em uma simples dimensão, é suficiente calcularmos o autovalor-autovetor generalizado \vec{e} maximal de S_{bet} e S_w

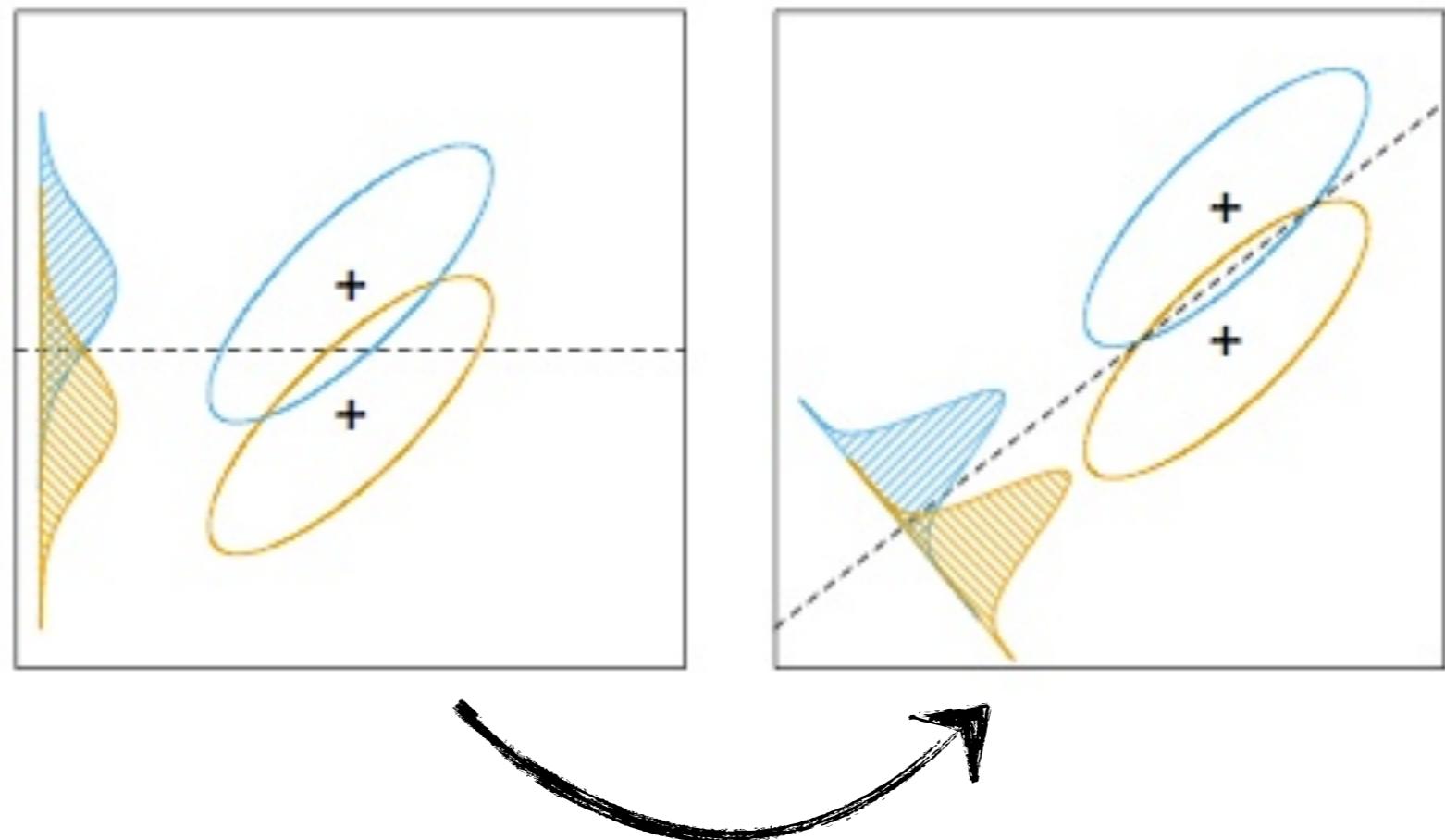
LDA

- ▶ Podemos calcular o **autovalor-autovetor generalizado** fazendo

$$S_{bet} \vec{e} = \lambda S_w \vec{e}$$

- ▶ Com o autovetor generalizado maximal, nós podemos projetar as amostras em um subespaço linear e aplicar um limiar para efetuarmos a classificação

LDA



© Friedman et al.



Árvores de Classificação (CTREES)

Árvores de Classificação

- ▶ *Classification Trees (CTREES)*
- ▶ Propriedades estatísticas da **teoria da informação** para proceder a classificação
- ▶ Alguns algoritmos conhecidos que aplicam esta abordagem são o ID3 e suas evoluções como as abordagens C4.5 e C5.0 [Mitchell 1997]

Árvores de Classificação

- ▶ Embora não descritas aqui, existem outras abordagens não baseadas na teoria da informação como a abordagem CART baseada em regressão univariada [Friedman et al. 2001]
- ▶ A maioria dos algoritmos baseados em árvores de classificação empregam **técnicas gulosas *top-down*** para analisar o espaço de possíveis soluções

Árvores de Classificação

- ▶ Em uma abordagem gulosa, em cada iteração, procuramos **selecionar os atributos que são mais propícios a serem nós da árvore**
- ▶ Para a seleção de atributos, aplicamos um teste estatístico para avaliarmos cada atributo (característica) de modo a analisarmos quão bem ele classifica, sozinho, os exemplos presentes no treinamento

Árvores de Classificação

- ▶ Considere um problema de duas classes

$$Y(-1 = a \mid +1 = b)$$

- ▶ Caso tenhamos N exemplos no treinamento e cada exemplo possua p características
 - no primeiro passo do algoritmo **selecionamos o atributo** que melhor classifica os N exemplos presentes no treinamento
 - para isso, usamos o critério estatístico adotado

Árvores de Classificação

- ▶ O processo é repetido para cada nó folha descendente produzido até que
 - o número total de atributos seja avaliado ou
 - todos os exemplos no treinamento associado a este determinado nó folha pertençam à mesma classe (e.g., todos os exemplos pertençam à classe $Y = +1$)

Árvores de Classificação

- Ao utilizarmos árvores de classificação, temos que considerar dois pontos importantes
 - **a seleção do atributo** a ser testado em cada nó
 - **discretização** – seleção de limiares para atributos não-discretos

Seleção do Atributo

- ▶ Definimos uma propriedade estatística chamada **ganho de informação (GI)**
- ▶ Mede quão bem um dado atributo separa os exemplos de treinamento de acordo com a classificação esperada
- ▶ Para definir GI, definimos, primeiramente, **Entropia**

Seleção do Atributo

- ▶ **Entropia** caracteriza o grau de organização em um conjunto arbitrário de exemplos
- ▶ Dada uma coleção de exemplos S contendo exemplos pertencentes tanto à classe a quanto à nossa classe b , a entropia de S é dada por

$$E(S) = -p_{\oplus} \log_2 p_{\oplus} - p_{\ominus} \log_2 p_{\ominus}$$

onde p_{\oplus} é a proporção de exemplos + em S

Seleção do Atributo

- ▶ Tendo $E(S)$ definida, buscamos maximizar o ganho de informação GI para um determinado atributo A como

$$GI(S, A) = E(S) - \sum_{v \in V(A)} \frac{|S_v|}{|S|} E(S_v)$$

- ▶ onde $V(A)$ é o conjunto de todos os valores possíveis para o atributo A e S_v é o subconjunto de S para o qual A tem o valor v

Seleção do Atributo

- ▶ GI mede a redução esperada na entropia para um determinado atributo A
- ▶ Quanto **maior o GI de um atributo, melhor** este atributo separa os dados [Mitchell 1997]

Discretização de Valores Contínuos

- ▶ Quando trabalhamos com um conjunto S cujos atributos podem ter valores contínuos, temos outro problema a tratar:
 - selecionarmos um limiar que transforme cada variável contínua em uma variável discreta – **discretização**
- ▶ Para cada atributo, temos que selecionar o limiar que produza o maior ganho de informação

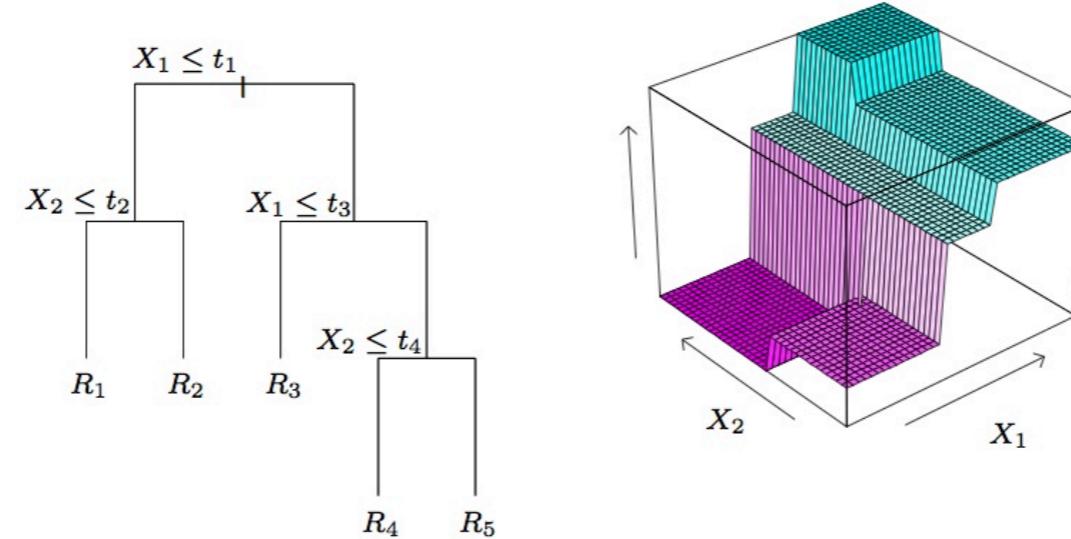
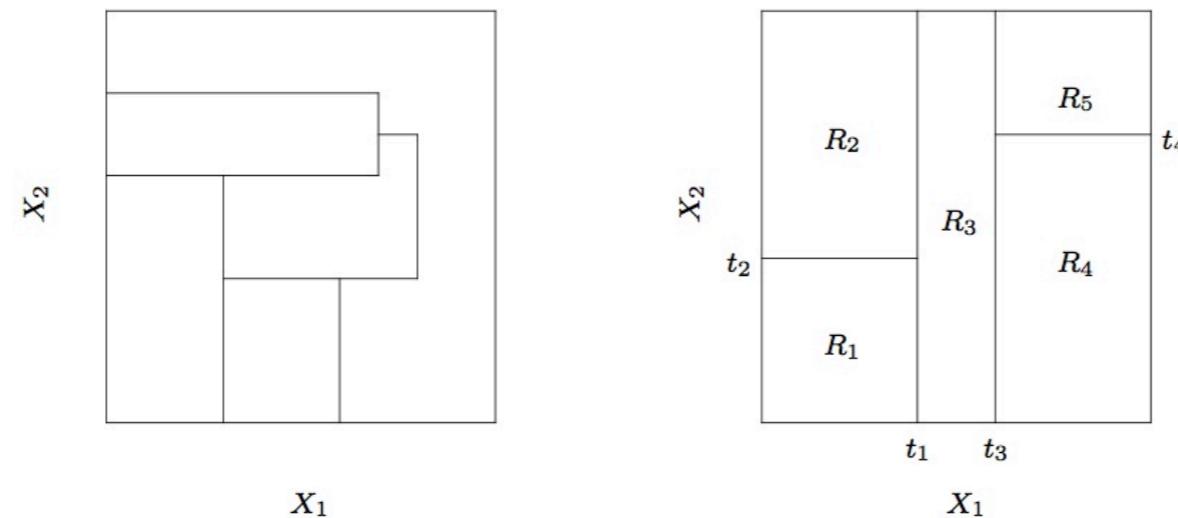
Discretização de Valores Contínuos

- ▶ Para isso, **ordenamos** nossos exemplos segundo o valor da variável contínua sendo analisada
- ▶ Geramos um conjunto de limiares candidatos selecionando exemplos adjacentes que tenham classificação diferente
- ▶ Para cada limiar candidato, dividimos o conjunto de treinamento segundo este limiar e calculamos o GI associado

Discretização de Valores Contínuos

- ▶ Selecionamos o limiar que produz o maior GI
- ▶ Aplicamos o procedimento **recursivamente** até atingirmos o critério de parada

Árvores de Classificação



© Friedman et al.

Máquinas de Vetores de Suporte (SVM)

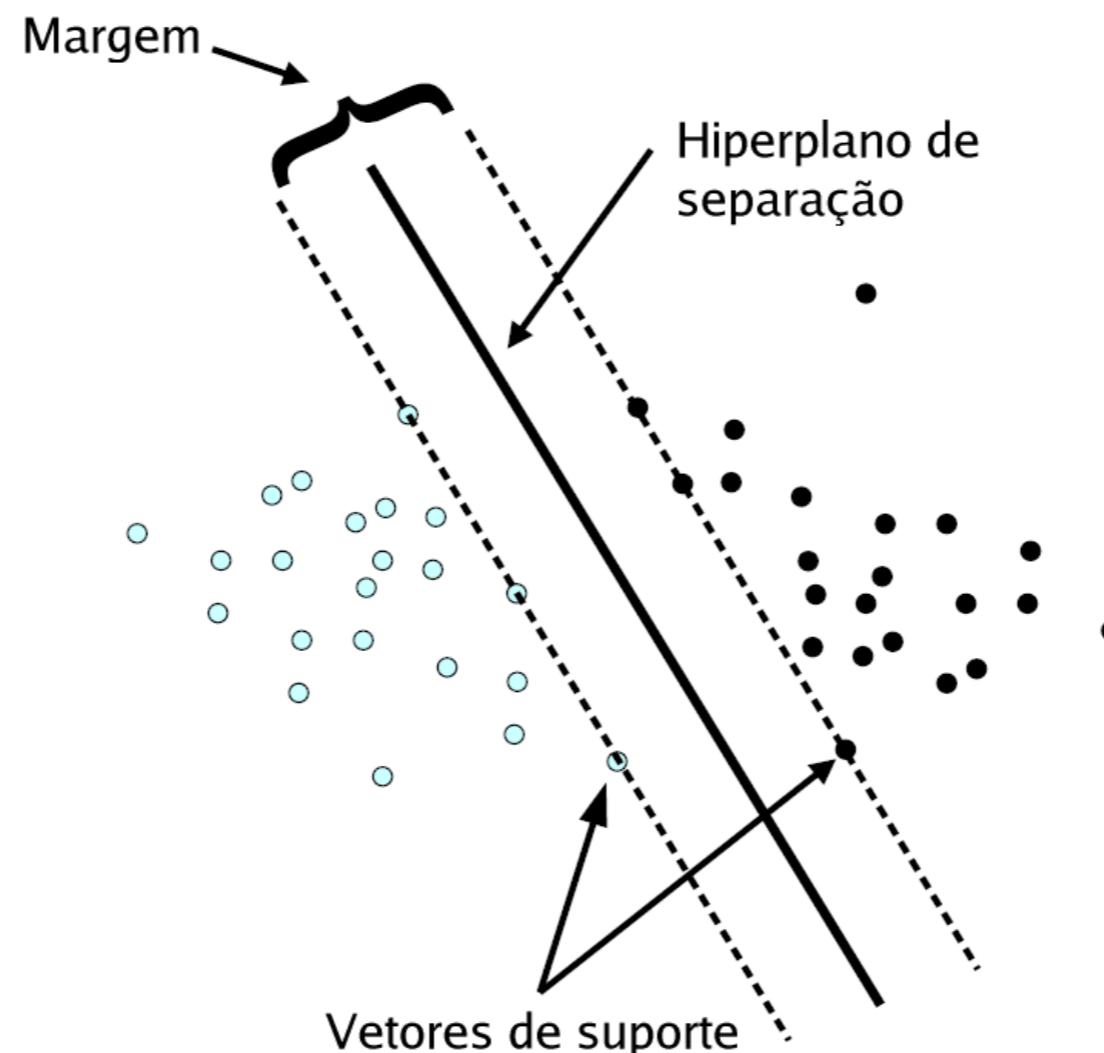
SVMs

- ▶ *Support Vector Machines (SVMs)*
- ▶ Tema de grande interesse na comunidade de aprendizado de máquina criando um entusiasmo similar ao que as redes neurais artificiais despertou anos atrás
- ▶ A teoria geral dos SVMs foi apresentada por [Cortes & Vapnik 1995] para **classificação binária** (duas classes)

SVMs

- ▶ Nessa abordagem, basicamente estamos procurando por um **hiperplano de separação ótima** entre duas classes [Schlkopf & Smola 2001] [Friedman et al. 2001] [Bishop 2006]
- ▶ Isto é feito através da maximização da margem
- ▶ Margem é a menor distância entre um ponto pertencente à classe *a* e um ponto pertencente à classe *b*

SVMs



© A. Rocha

SVMs

- ▶ Os pontos sobre as fronteiras são chamados **vetores de suporte** (*support vectors*)
- ▶ O meio da margem é o nosso hiperplano de separação ótima
- ▶ Para os pontos que estão do lado “errado” da margem discriminante, nós recalculamos os coeficientes de forma a reduzir sua influência (*soft margin methods*)

SVMs

- ▶ Quando não é possível achar um separador linear, os dados “são projetados” em um espaço de maior dimensão onde tornam-se linearmente separáveis
- ▶ Obviamente, a projeção não é feita de forma explícita
- ▶ A projeção é feita a partir de técnicas baseadas em *kernels* [Schlkopf & Smola 2001]

SVMs

- ▶ SVMs podem ser divididos em três categorias
 - linearmente separável
 - linearmente não-separável
 - não-linear

SVMs Linearmente Separáveis

- ▶ Suponha um problema de classificação de duas classes $Y(-1 = a \mid +1 = b)$
- ▶ Denote a tupla (x_i, y_i) com $i = 1, \dots, N$ como sendo o nosso conjunto de treinamento
- ▶ O vetor coluna x_i contém as características que nós achamos suficientes para distinguir os dois possíveis grupos e $y_i = f(x_i)$

SVMs Linearmente Separáveis

- ▶ Com um **SVM linearmente separável**, queremos achar o hiperplano linear que separa as duas classes de nosso problema
- ▶ Vamos expressar a maximização da *margem* como uma função do vetor de pesos w e o viés (*bias*) b do hiperplano de separação

SVMs Linearmente Separáveis

- ▶ Assim, a distância entre um ponto x e um plano (w, b) é

$$\frac{w^T x + b}{\|w\|},$$

onde $\|\cdot\|$ é a norma Euclidiana.

- ▶ Hiperplano ótimo pode ter infinitas soluções devido às infinitas possibilidades de escalas de w e b

SVMs Linearmente Separáveis

- ▶ Assim, escolhemos a solução em que a função discriminante se torna 1 para os exemplos de treinamento próximos da fronteira
- ▶ Conhecido como **hiperplano canônico**

$$|w^T x_i + b| = 1.$$

SVMs Linearmente Separáveis

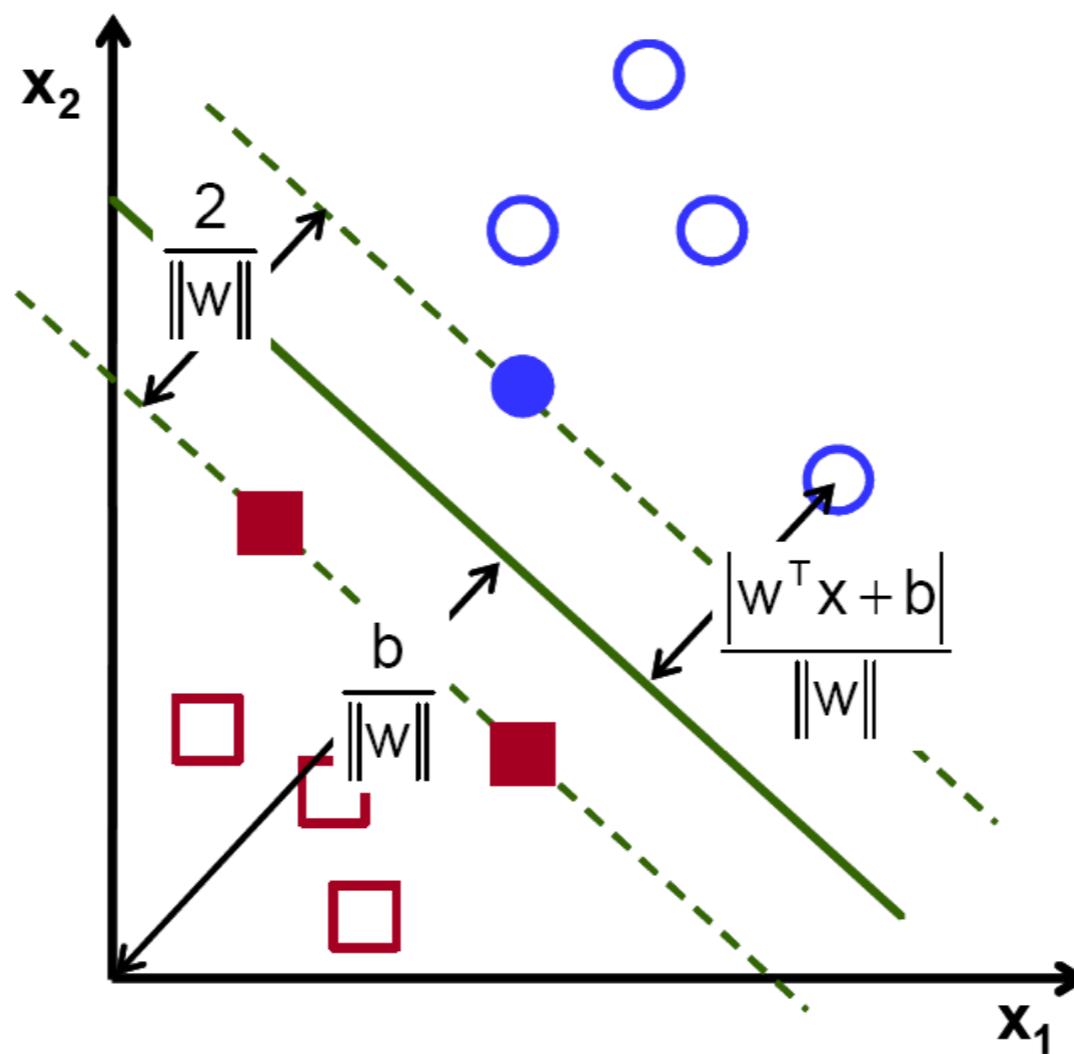
- ▶ Desta forma, a distância dos exemplos mais próximos à fronteira é

$$\frac{|w^T x + b|}{\|w\|} = \frac{1}{\|w\|}$$

- ▶ E a margem se torna

$$m = \frac{2}{\|w\|}.$$

SVMs Linearmente Separáveis



SVMs Linearmente Separáveis

- ▶ O problema de maximizar a margem é equivalente a

$$\min J(w) = \frac{1}{2} ||w||^2 \text{ sujeito a } y_i(w^T x_i + b) \geq 1 \ \forall i.$$

- ▶ Por definição, $J(w)$ tem um mínimo global
- ▶ Para resolver esta função, podemos empregar técnicas de **Otimização Lagrangiana**

SVMs Linearmente Separáveis

- ▶ A introdução de multiplicadores de Lagrange para resolver este problema resulta em

$$L_P(w, b, \alpha_1, \dots, \alpha_N) = \frac{1}{2} ||w||^2 - \sum_{i=1}^N \alpha_i (w^t x_i + b) y_i + \sum_{i=1}^N \alpha_i,$$

- ▶ Esta função de erro precisa ser minimizada com relação a w e b

SVMs Linearmente Separáveis

- ▶ Problema de **otimização quadrática**
- ▶ Definimos a *margem* para qualquer hiperplano dado como a soma das distâncias do hiperplano aos exemplares mais próximos das duas classes.
- ▶ O hiperplano é escolhido de forma a maximizar a margem

SVMs Linearmente Separáveis

- ▶ A partir do hiperplano de separação (w, b) , um novo exemplar z pode ser classificado simplesmente a partir do cálculo sobre qual lado do hiperplano ele se encontra
- ▶ Se o valor $w^t z + b \geq 0$ então o exemplar é classificado como +1, caso contrário como -1

SVMs Linearmente Não-Separáveis

- ▶ Quando os dados não estão uniformemente dispostos em algum dos lados de um hiperplano, um SVM linearmente separável não resultará em uma solução razoável
- ▶ Podemos tratar tal situação relaxando as restrições iniciais através da introdução de **variáveis de folga** (*slack variables*)

SVMs Linearmente Não-Separáveis

- ▶ **Variáveis de folga** relaxam as restrições do hiperplano canônico

$$y_i |w^T x_i + b| \geq 1 - \xi_i \quad \forall i = 1 \dots N$$

- ▶ Com a introdução de variáveis de folga, o objetivo agora é achar o **hiperplano de separação que produza a menor taxa de erros no treinamento**, $\sum_i \xi_i$ enquanto maximiza a margem

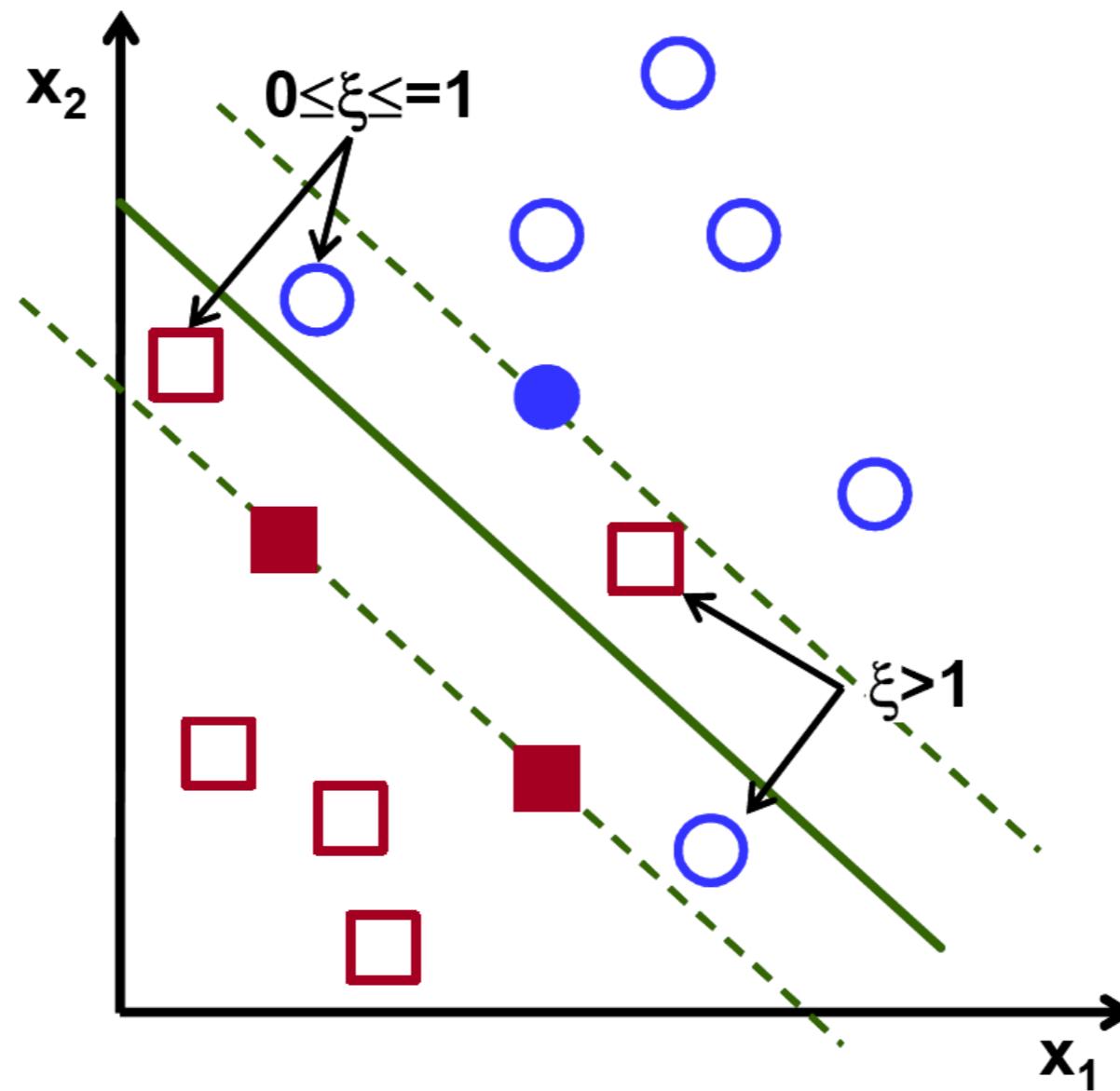
SVMs Linearmente Não-Separáveis

- ▶ Função de erro a ser minimizada

$$\frac{\|w\|^2}{2} + C \sum_{i=1}^N \xi_i$$

- ▶ Valores altos de C implicam poucos erros de classificação e maior complexidade no classificador
- ▶ Valores baixos para C implicam preferência por soluções de baixa complexidade e com maior quantidade de erros na classificação

SVMs Linearmente Não-Separáveis



SVMs Não Lineares

- ▶ Uma característica dos SVMs vistos até o momento é que eles estão restritos a hiperplano linear
- ▶ Há casos em que um hiperplano linear não é capaz de garantir a classificação
- ▶ Para isso, usamos **SVMs não lineares**

SVMs Não Lineares

- ▶ Para atingir nosso objetivo, mapeamos os exemplos de treinamento num espaço Euclidiano de mais dimensões
- ▶ **Mapeamento é implícito** e não explícito

$$\phi : \mathcal{L} \rightarrow \mathcal{H}$$

- ▶ O erro a ser minimizado depende apenas de produtos internos sobre exemplares do conjunto de treinamento $x_i^t x_j$

SVMs Não Lineares

- ▶ Definimos uma função *kernel K* capaz de fazer este mapeamento sob demanda (*on-the-fly*)

$$K(x_i, x_j) = \phi(x_i)^t \phi(x_j)$$

- ▶ Há várias escolhas possíveis para *K* dentre elas
 - funções radiais base (*Radial Basis Functions – RBF*)
 - polinomiais etc.

SVMs Não Lineares

- ▶ Um novo **exemplar z**, é classificado pela determinação sobre qual lado do hiperplano de separação (w, b) ele se encontra
- ▶ Se o valor $w^t \phi(z) + b \geq 0$ ele é classificado como da classe +1
- ▶ Caso contrário, ele é classificado como -1

SVMs Não Lineares

- ▶ Teste precisa ser feito no espaço de maior dimensão usando a mesma função *kernel*

$$w^t \phi(z) + b = \sum_{i=1}^N \alpha_i K(x_i, z) y_i + b$$

- ▶ **Como o SVM funciona no cenário de mais de duas classes?**

Coletâneas

Coletâneas – *Bagging*

- ▶ *Bagging* ou *Bootstrap Aggregation*
- ▶ Avaliamos as previsões sobre uma coleção de amostras (*bootstrap samples*)
- ▶ *Bootstrap samples* são amostras com reposição e mesmo tamanho feitas a partir de um conjunto de dados

Coletâneas – *Bagging*

- ▶ A amostragem serve para reduzir sua variância e consequentemente o erro na predição
- ▶ Criamos uma **coletânea** (*ensemble*) a partir do treinamento individual de classificadores nas amostras feitas do conjunto de dados

Coletâneas – *Bagging*

- ▶ Seja X o conjunto de dados de entrada e $Z^i, i = 1, 2, \dots, B$ uma amostra de X
- ▶ Para fazermos a classificação em cada Z^i selecionamos um classificador (LDA, CTREE, etc.)
- ▶ Em cada passo, nós construímos um conjunto de treinamento fazendo **amostragens com reposição** a partir do conjunto de dados original

Coletâneas – *Bagging*

- ▶ Cada classificador é treinado em média sobre 63.2% dos exemplos do conjunto de treinamento
- ▶ Para cada elemento x , armazenamos a predição $\vec{f}^i(x)$
- ▶ Definimos a **estimativa da coletânea** para x como

$$\vec{f}_{bag}(x) = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^B \vec{f}^i(x)$$

Coletâneas – *Bagging*

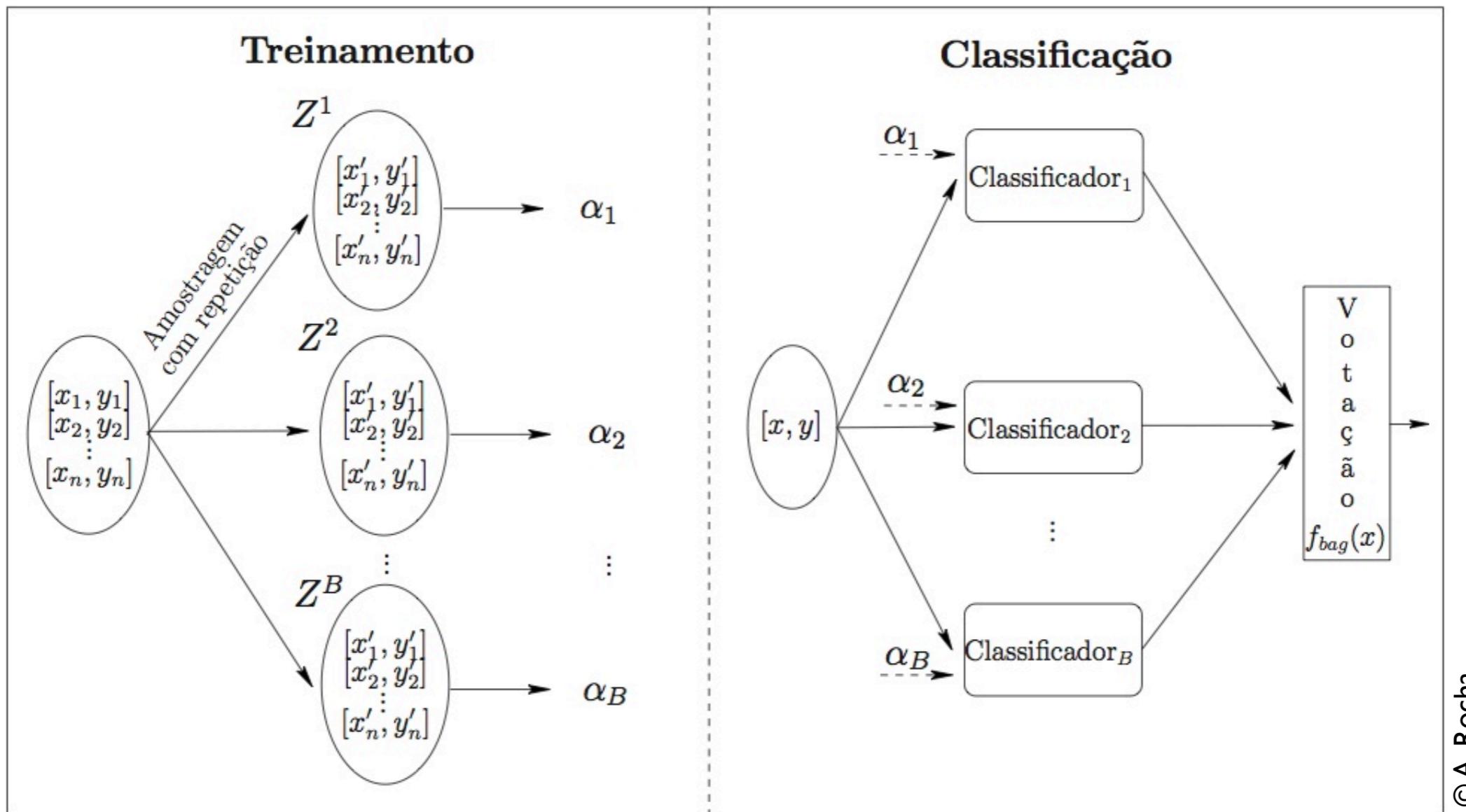
- ▶ A equação

$$\vec{f}_{bag}(x) = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^B \vec{f}^i(x)$$

funciona como uma **votação dentro da coletânea**

- ▶ Ao avaliarmos todas as classificações feitas para x , nós o classificamos como pertencente à classe para a qual ele foi classificado mais vezes

Coletâneas – Bagging



Coletâneas – *Bagging*

- ▶ Armazenamos os coeficientes relativos a cada classificador aplicado (α)
- ▶ Ao recebermos um **exemplar z a ser testado**, submetemos este exemplar aos B classificadores e procedemos a votação

Referências

Referências

1. [Bishop, 2006] **C. M. Bishop.** *Pattern Recognition and Machine Learning*. Springer, 1 edition, 2006.
2. [Cortes & Vapnik 1995] **C. Cortes and V. Vapnik** (1996). *Support-vector networks*. Machine Learning (ML), 20(3): 273–297, March 1995.
3. [Duda et al. 2001] **R. O. Duda, P. E. Hart and D. G. Stork.** *Pattern Classification*. Wiley-Interscience, 2, 2000.
4. [Friedman et al. 2001] **J. Friedman, T. Hastie, and R. Tibshirani.** *The Elements of Statistical Learning*. Springer, 1 edition, 2001.
5. [Mitchell 1997] **T. M. Mitchell.** *Machine Learning*. McGraw-Hill, 1 edition, 1997.
6. [Schlkopf & Smola 2001] **Bernhard Schlkopf and Alexander J. Smola.** *Learning with Kernels: Support Vector Machines, Regularization, Optimization, and Beyond*. The MIT Press, Boston, MA, USA, first edition, 2001.

Obrigado!
