



# HIBEAM-NNBAR Machine learning Trabalho em andamento

Jorge Amaral

Universidade do Estado do Rio de Janeiro



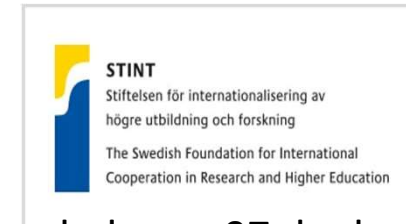
# Sumário



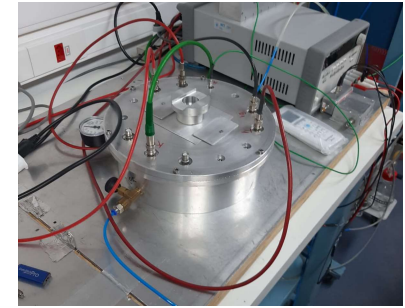
- Apresentação do LARISA
- Distinção entre Inteligência Artificial e Aprendizado de Máquinas
- Etapas da construção de um sistema de aprendizado de Máquinas
  - Exemplo : indígenas PIMA
- Uso modelos de aprendizado de máquina para separar o sinal do background com 100% de rejeição do background
  - Treinar um modelo
  - Explicar o que o modelo está fazendo
    - Possível implementação em Cut-based
  - Resultados
- Conclusões



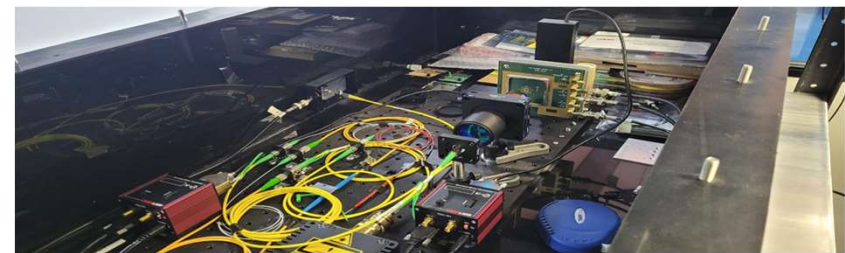
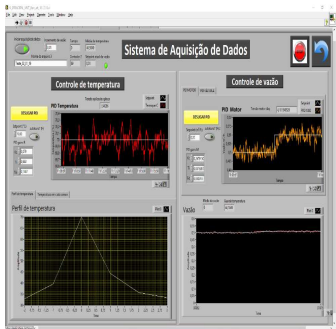
# LARISA



- LARISA (Laboratório de Redes Industriais e Sistemas de Automação) foi fundado em 07 de dezembro de 2012
- Credenciado na ANP no: 670/2015
- Membro do Centro de Inteligência Artificial do Rio de Janeiro (CIA-Rio)
  - Rede de pesquisadores em IA aplicado a petróleo e gás
- Nosso principal objetivo é contribuir com governos, empresas privadas e indústrias na oferta e aplicação de tecnologias com uso intensivo de inteligência artificial (IA), IoT e processamento digital de sinais em instrumentação.



– <http://www.eng.uerj.br/larisa/>





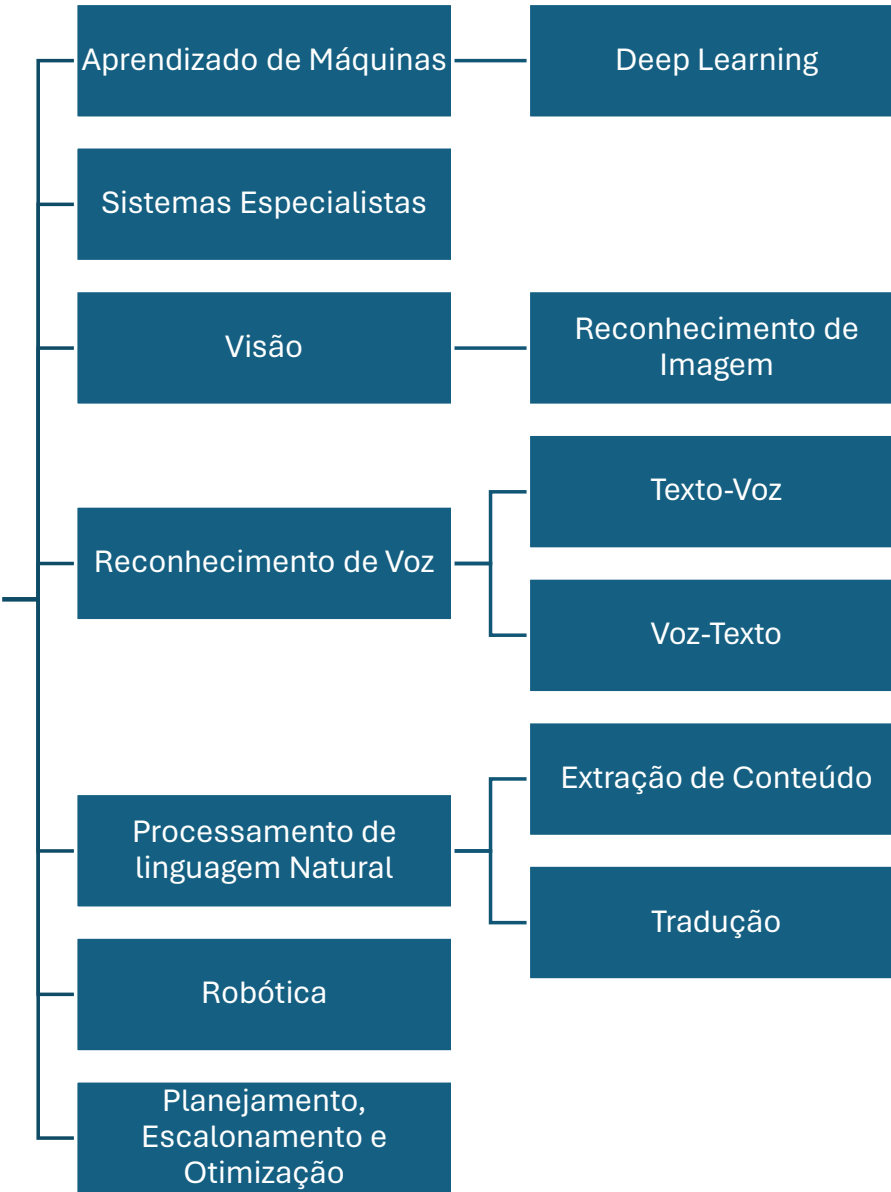
# Inteligência Artificial: Definição



- **Estudo de agentes inteligentes**: qualquer dispositivo que é capaz de perceber seu ambiente e realizar ações que maximizem sua chance atingir seus objetivos com sucesso!” (Russel & Norvig 2003, p.55).
- **O termo “inteligência artificial” é frequentemente usado para descrever máquinas (ou computadores ) que imitam as funções cognitivas que os seres humano associam com a mente humana, tais como o “aprendizado” e a “resolução de problemas” . ( Russel & Norvig, p.2)**



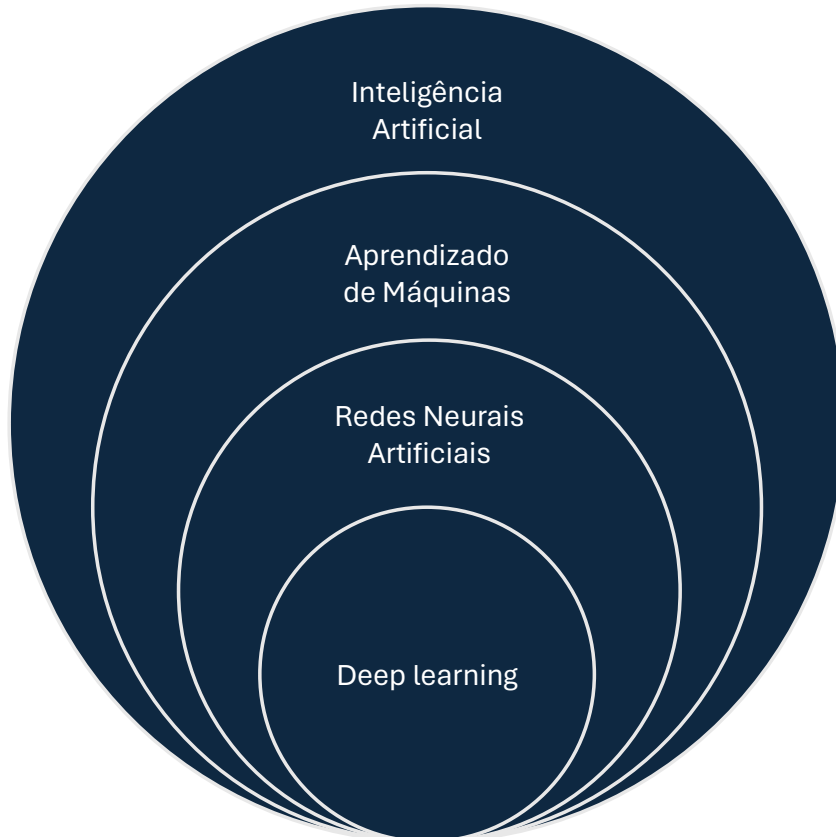
# Inteligência Artificial



## Inteligência Artificial: Áreas Relacionadas



# Aprendizado de Máquinas

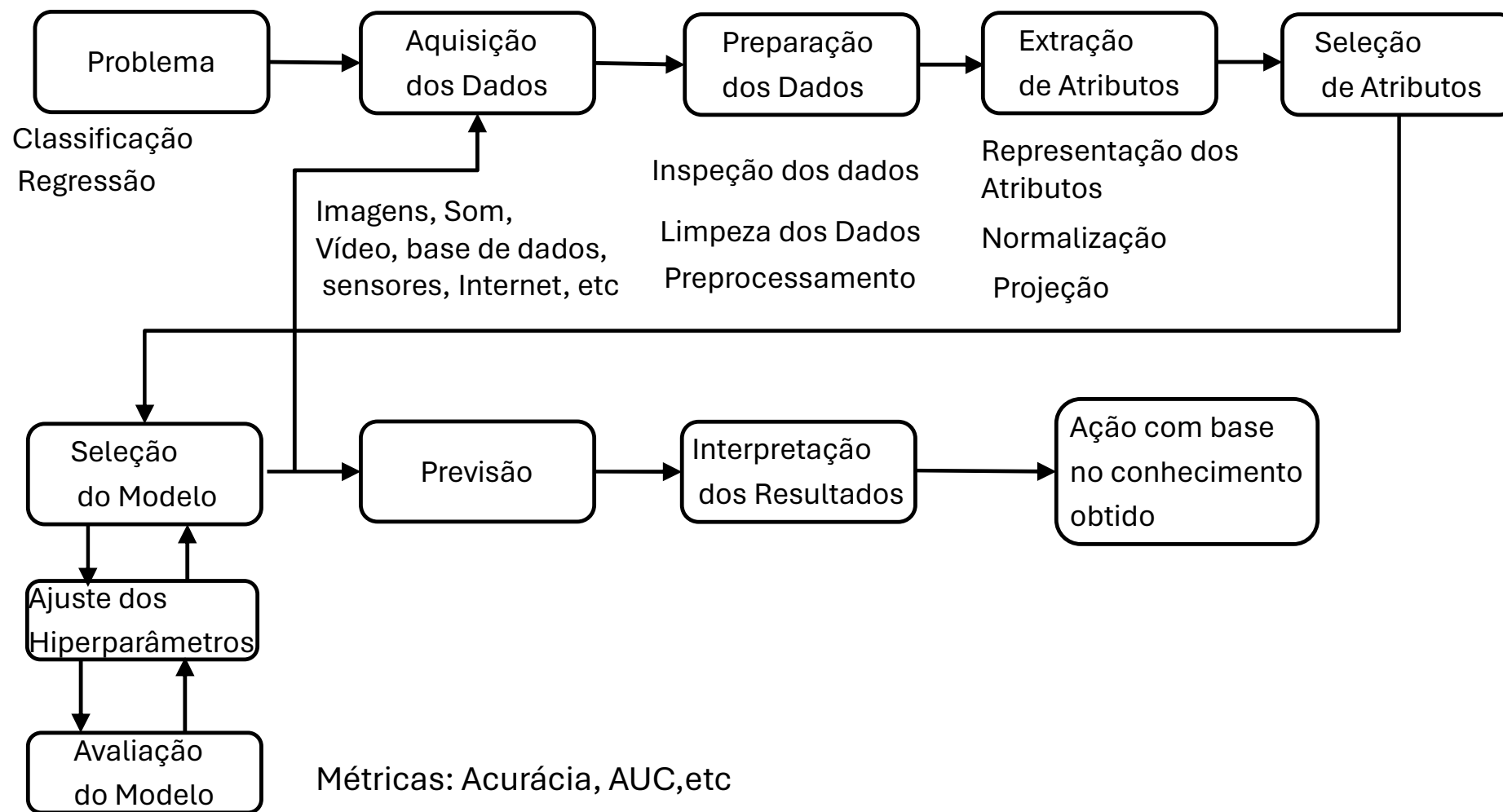


- Um ramo da Inteligência Artificial
- Surgiu graças as capacidades dos computadores atuais e da grande quantidade de dados disponíveis
- Estuda formas de proporcionar a habilidade de aprendizado aos computadores sem que estes sejam explicitamente programados
  - Reconhecimento de Escrita, Controle de Drones, Processamento de linguagem Natural entre outras .
- “Aprender a partir dos dados”
- Muitas vezes se usa o termo inteligência artificial quando estamos querendo dizer aprendizado de Máquinas



Arthur Samuel (1959).

# Sistema de Aprendizado de Máquinas





# Diabetes nos indígenas Pima (Arizona)

- A partir das informações coletadas em 768 mulheres:
- Indicar aquelas que são afetadas por diabetes
- Problema de Classificação

Smith, J.W., Everhart, J.E., Dickson, W.C., Knowler, W.C., & Johannes, R.S. (1988). [Using the ADAP learning algorithm to forecast the onset of diabetes mellitus](#). In *Proceedings of the Symposium on Computer Applications and Medical Care* (pp. 261--265). IEEE Computer Society Press.



# Coleta de dados

- Quantas vezes ficou grávida;
- Concentração de glicose após 2 horas
- Pressão diastólica
- Espessura da dobra do triceps
- Insulina (2horas)
- IMC
- Função de hereditariedade de diabetes
- Idade
- Tem Diabetes

Estes dados foram rotulados por médicos!



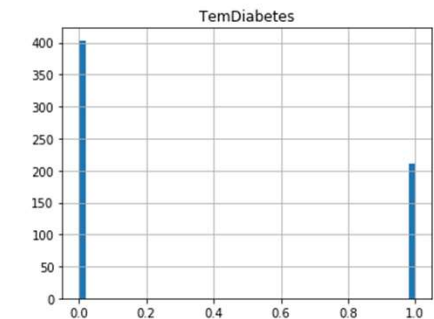
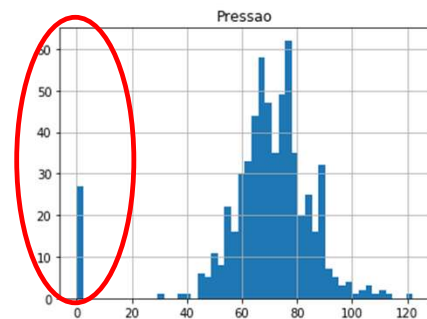
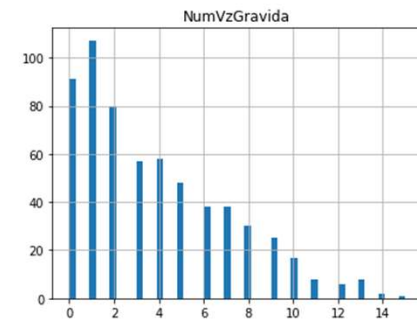
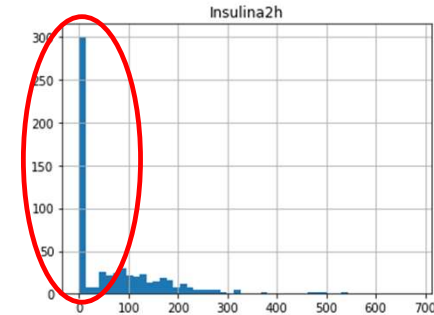
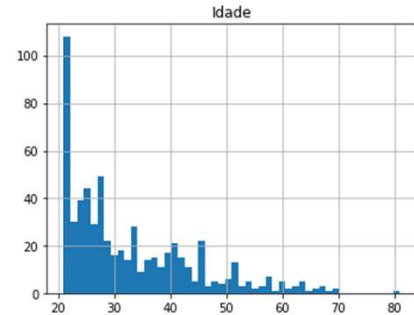
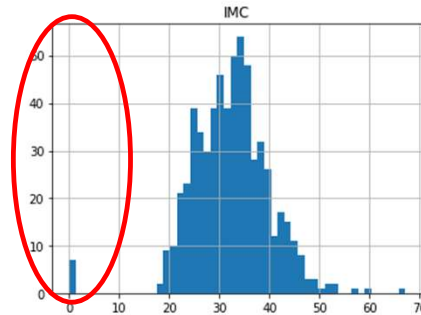
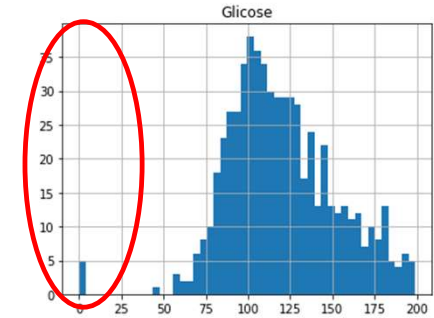
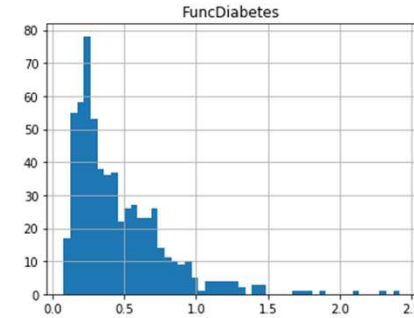
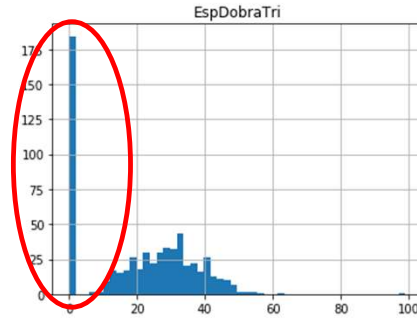
	NumVzGravida	Glicose	Pressao	EspDobraTri	Insulina2h	IMC	FuncDiabetes	Idade	TemDiabetes
0	6	148	72	35	0	33.6	0.63	50	1
1	1	85	66	29	0	26.6	0.35	31	0
2	8	183	64	0	0	23.3	0.67	32	1
3	1	89	66	23	94	28.1	0.17	21	0
4	0	137	40	35	168	43.1	2.29	33	1

# Preparação dos Dados

- Inspeccionar os dados
  - Valores incorretos
  - Dados ausentes
  - Valores inconsistentes
- Análise dos Dados
  - Estatística descritiva, Histogramas
- Normalização dos Dados



# Preparação dos dados



Olhando os histogramas, vemos algo estranho ...

- Métodos de Seleção

- Filtros
- Correlação
- Wrapper

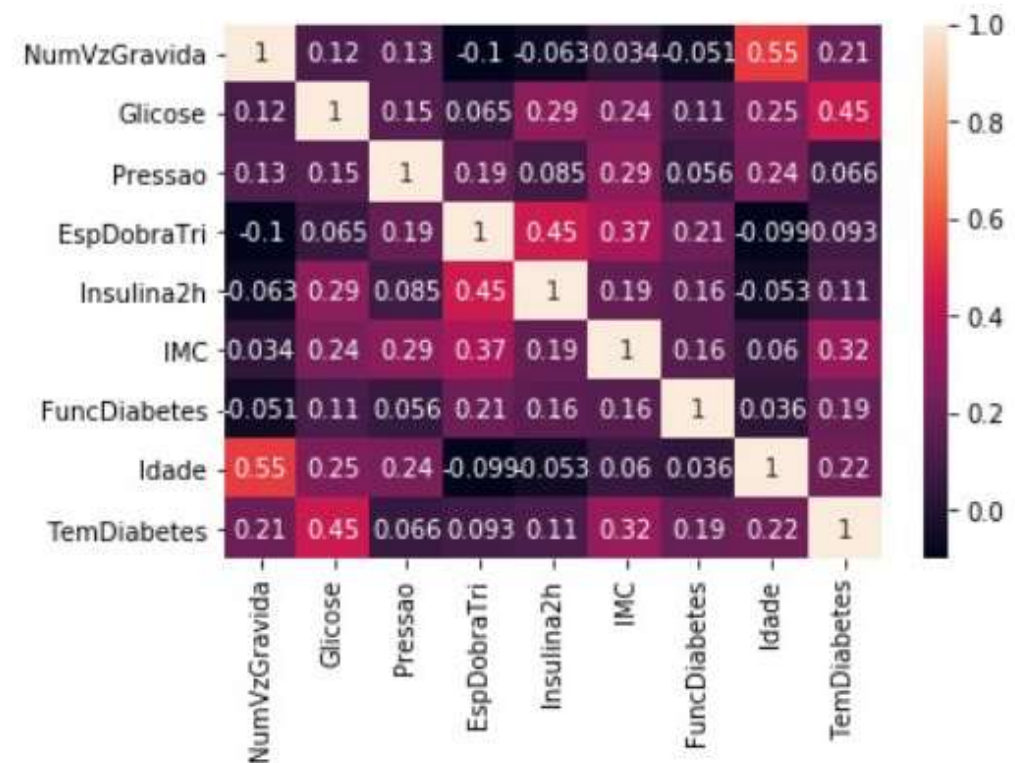
- Correlação

- Em probabilidade e estatística, correlação, dependência ou associação é qualquer relação estatística (causal ou não causal) entre duas variáveis <sup>1</sup>
- Informalmente, correlação é sinônimo de dependência

- Métodos de Seleção

- Filtros
- Correlação
- Wrapper

Valores de Correlação baixos: Vamos usar todos os atributos



<sup>1</sup> Bussab, Wilton de O.; Morettin, Pedro A. (2010). *Estatística Básica* 6ª ed. [S.l.]: Saraiva. p. 73.



# Seleção do Modelo

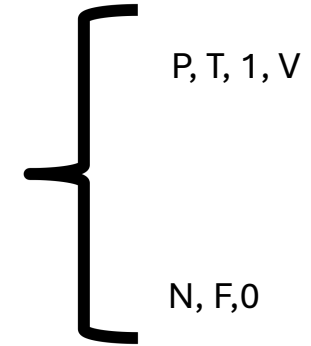
## Métricas de Avaliação

Classificação Binária

Matriz de Confusão

		Real	
		P	N
Previsto	P	TP	FP
	N	FN	TN

Dois valores de saída



$$\text{Acurácia} = \frac{TP + TN}{TP + FN + FP + TN}$$

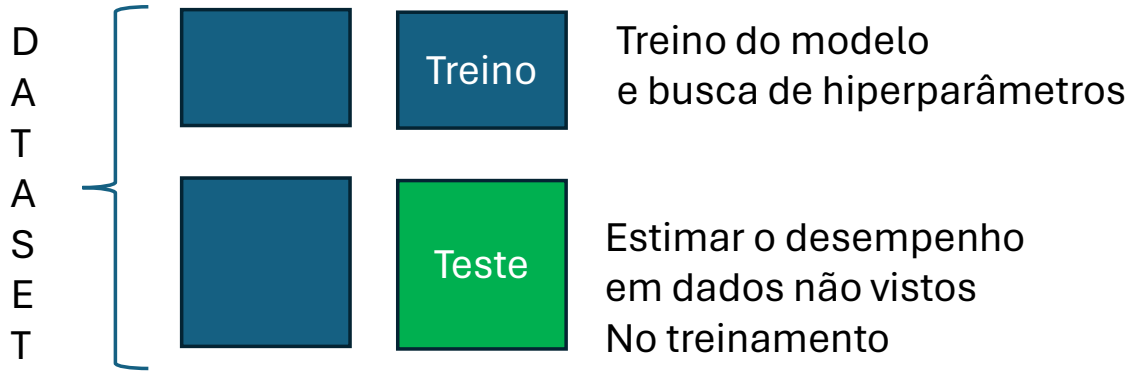
$$\text{Sensibilidade} = \text{Eficiência} = \text{TPR} = \frac{TP}{P} = \frac{TP}{TP + FN}$$

$$\text{Especificidade} = \text{Rejeição} = \text{TNR} = \frac{TN}{TN + FP}$$

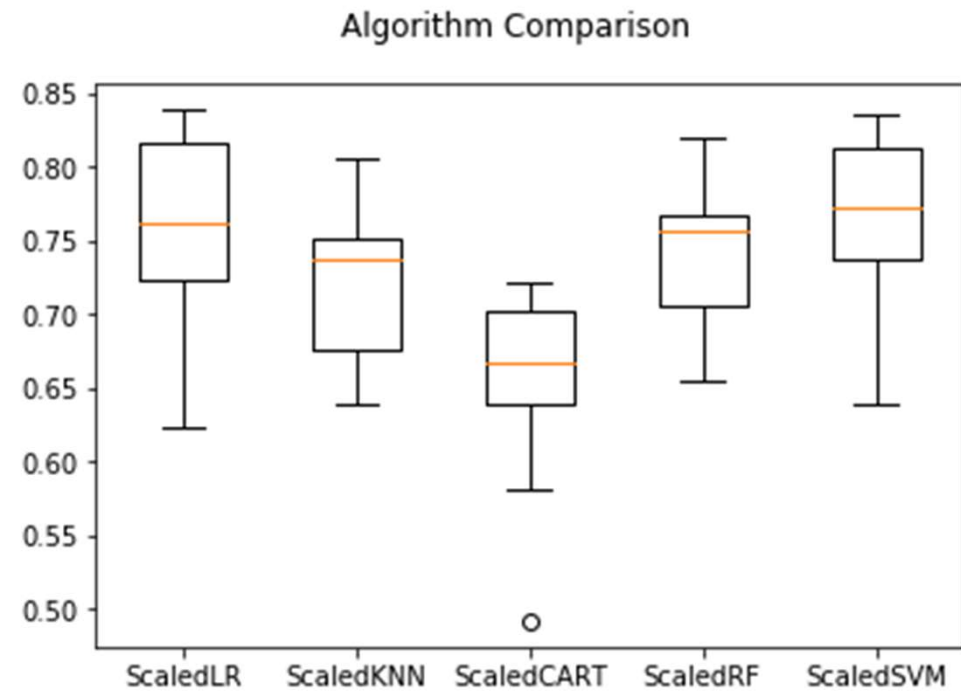




# Seleção do Modelo



Avaliando os modelos com os hiperparâmetros default



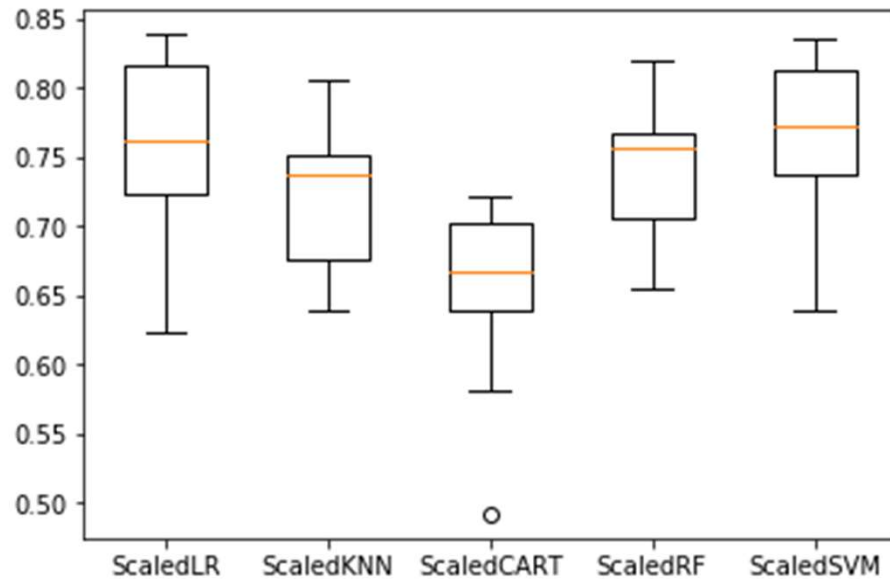
Melhor Modelo SVM : Acurácia = 76,5%



# Ajuste dos hiperparâmetros



Algorithm Comparison



SVM Original: Acurácia = 76,5%

SVM com ajuste : Acurácia = 77,2%

Matriz de Confusão

		P	N
Previsto	P	<b>TP</b> 33	<b>FP</b> 10
	N	<b>FN</b> 24	<b>TN</b> 87

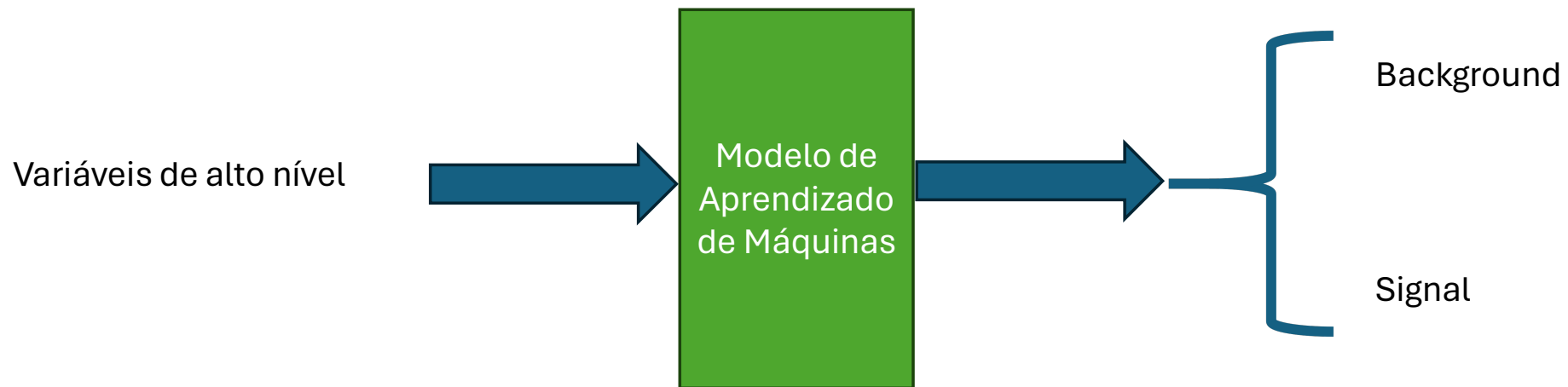
$$Acurácia = \frac{TP + TN}{TP + FN + FP + TN}$$

generalização

{ Acurácia (Treino) = 77,2 %  
Acurácia (Teste) = 77,9%

# Objetivo

- Usar modelos de aprendizado de máquina para separar o sinal do background com 100% de rejeição do background



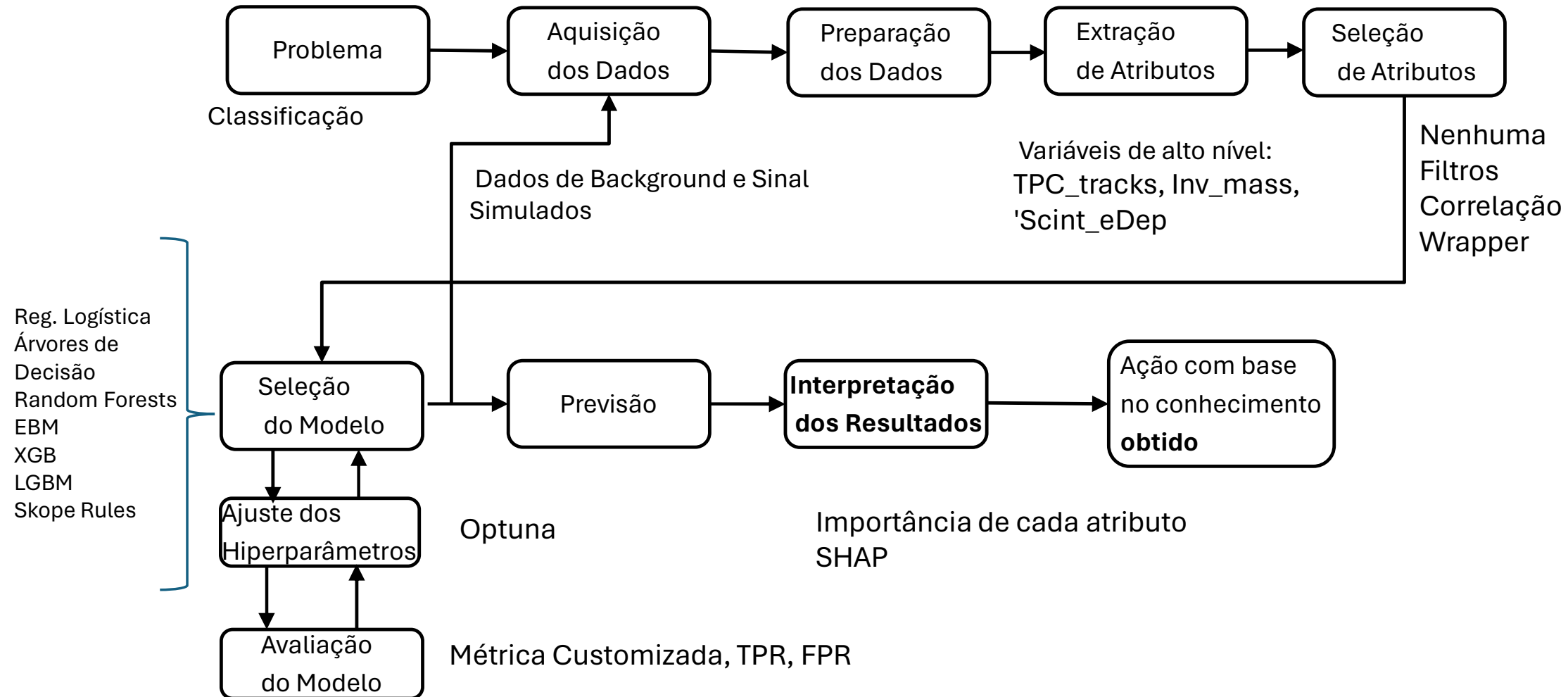
Problema de Classificação Binário

Sinal : Nêutrons que foram convertidos em antinêutrons e depois aniquilados com um nêutron dentro de um núcleo de carbono dentro do alvo

Background: Raios Cósmicos



# Sistema de Aprendizado de Máquinas





# Algumas das variáveis de alto nível

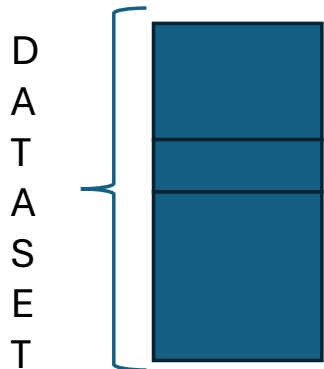


- 'TPC\_tracks': number of tracks recorded in the TPC
- 'Scint\_eDep': Total energy deposited in the scintillator
- 'Scint\_E\_L': Longitudinal energy from the scintillator
- 'pi0\_loose\_num': number of events that passes the pi0 selection
- 'pi0\_tight\_num': number of events that passes the pi0 selection and falls into a narrower invariant mass range.
- 'Scint\_up\_frac\_down': For pi0 like objects only fraction of energy from scintillator
- 'LeadGlass\_up\_frac\_down': For pi0 like objects only. Fraction of energy from lead glass
- 'TPC\_track\_vertex\_count', number of tracks that can be projected back to the foil in an event
- 'Inv\_mass'
- 'pi\_num': Number of pions in an event
- 'sphericity'



# Experimento 1

- Todas as 49 variáveis
- Modelos
  - Regressão Logística, Árvores de Decisão, Random Forests, XGB, LGBM, EBM
- Normalização de variáveis ( média = 0, variância = 1)
- Otimização de Hiperparâmetros : Optuna
  - Validação cruzada com 3 partes
- Métricas
  - AUC



Treino do modelo e busca de hiperparâmetros

Encontrar o limiar para rejeitar 100% do background

Estimar o desempenho em dados não vistos no treinamento



Predict

	N	P
Real N	TN	FP
Real P	FN	TP

$$\text{Rejeição} = TNR = \frac{TN}{TN+FP}$$

$$\text{Eficiência} = TPR = \frac{TP}{P} = \frac{TP}{TP+FN}$$



# Experimento 1



- Resultado
  - O custo para rejeitar 100% de background sacrifica a eficiência do sinal
  - XGB a rejeição original é de 99,9% e a eficiência do sinal é de 98,9%
  - Após aplicação do limite, rejeição = 100% e eficiência é 0%.
  - **Todos os verdadeiros positivos tornaram-se falsos negativos!!!**
    - **Todo mundo que era sinal foi classificado como background**
- Alternativa
  - Usar uma métrica customizada (MC) para aumentar o custo de um FP
  - $MC = 0*TP + 0*TN + 1*FN + (\text{beta}-1)*FP)/\text{beta}$ 
    - Beta = 10, 100, 1000



# Experimento 1



- Foi atingida 100% de rejeição do background no conjunto de validação, mantendo uma eficiência alta
- Random Forest, LGBM, XGB

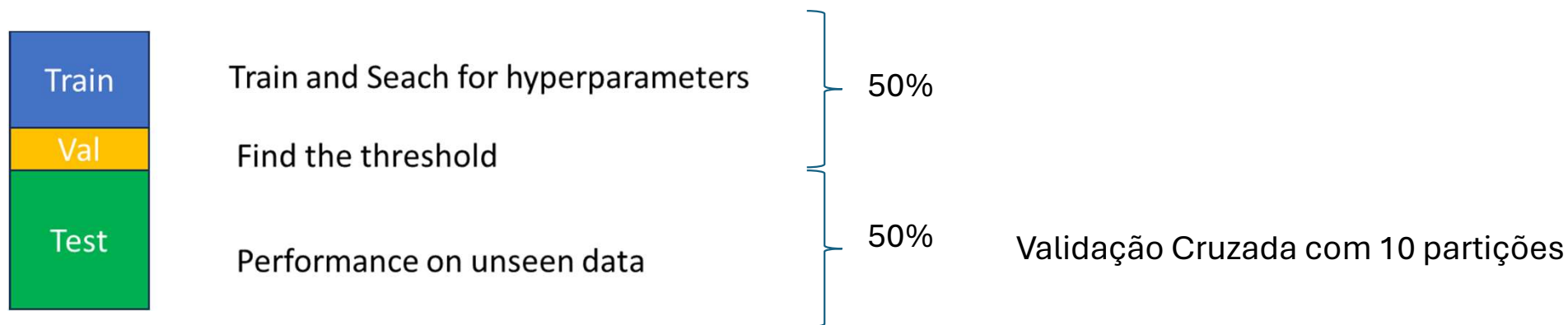
Modelo	Métrica	Rejeição antes	Eficiência antes	Limiar	Rejeição depois	Eficiência depois
Random Forest (WL)	Acurácia	99.91	99.45	0.973	100	92.92
Random Forest (optuna)	Customizada	99.88	99.44	0.933	100	95.81
XGB (optuna)	Customizada	99.86	99.71	0.999	100	98.71
LGBM (optuna)	Customizada	99.88	99.70	0.999	100	98.69



# Experimento 1



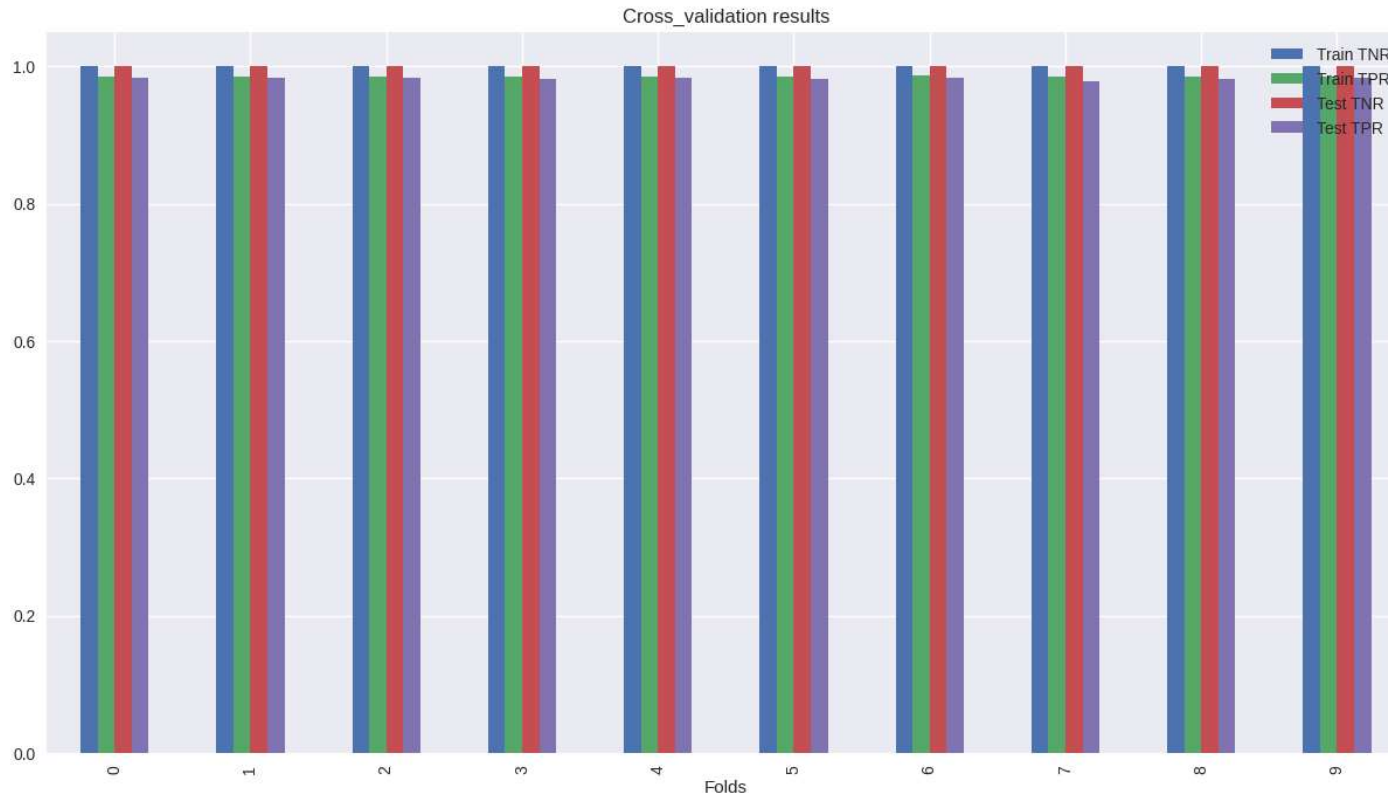
Os resultados do Experimento 1 generalizam ?



Modelo	Rejeição no Treino	Eficiência no Treino	Rejeição no Teste	Eficiência no Teste
Random Forest	100%	98%	100%	96%
XGB	100%	98%	100%	96%
LGBM	100%	100%	100%	96%



# Experimento 1

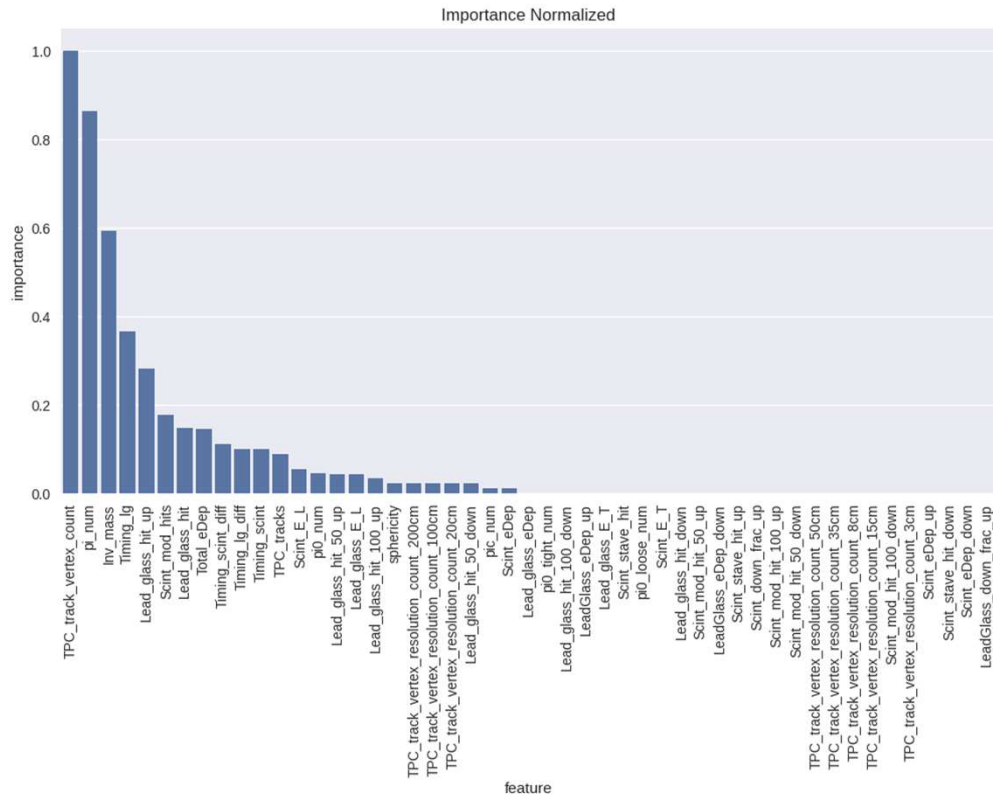


Resultados do XGB na validação cruzada com 10 partições  
Resultados consistentes em todas as partições

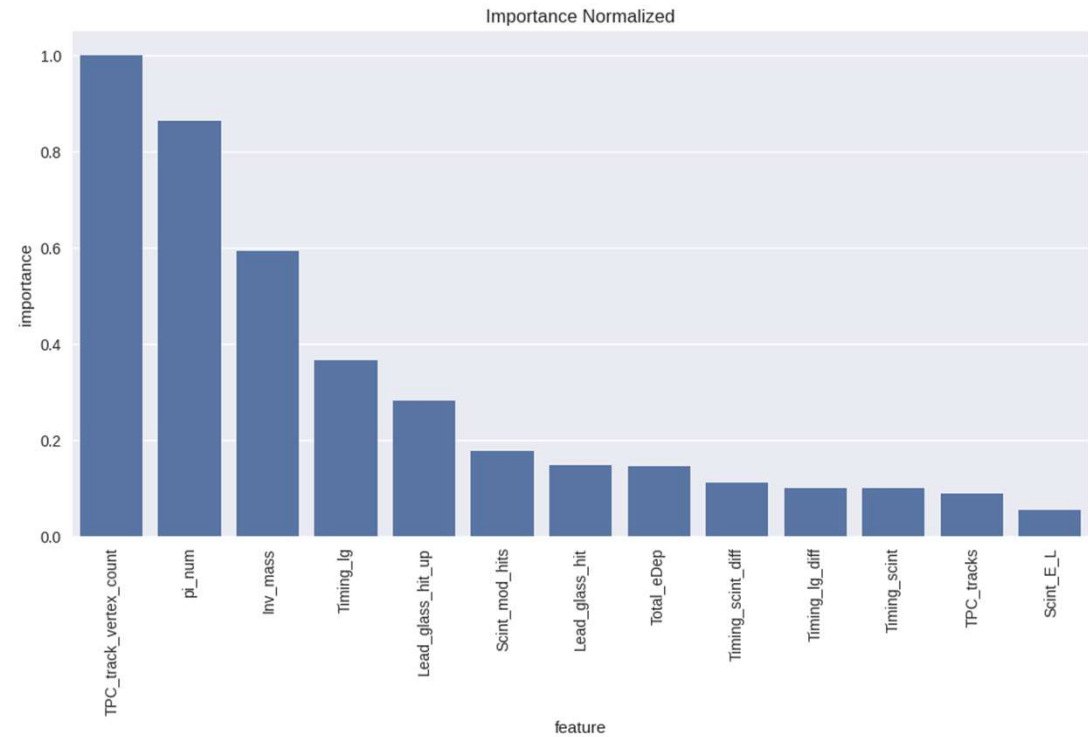
# Experimento 2

Objetivo: Estudar a importância de cada atributo e o seu impacto no resultado do modelo

Random Forest



Random Forest com Importância normalizada > 0.05



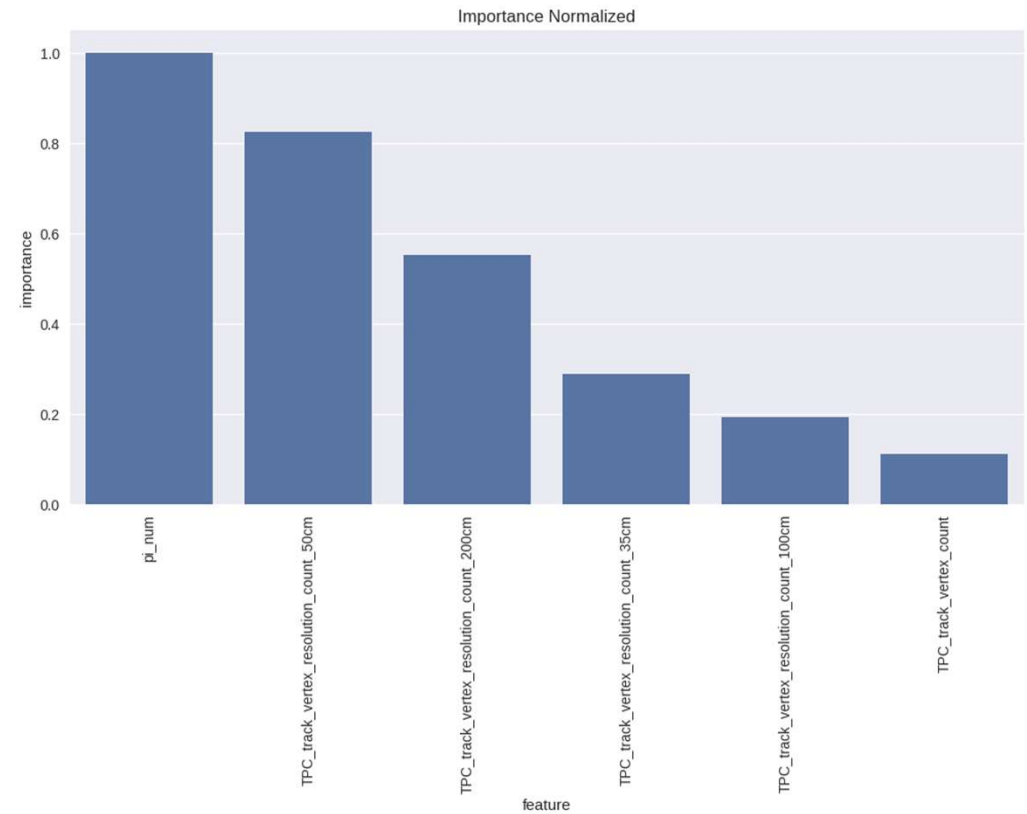
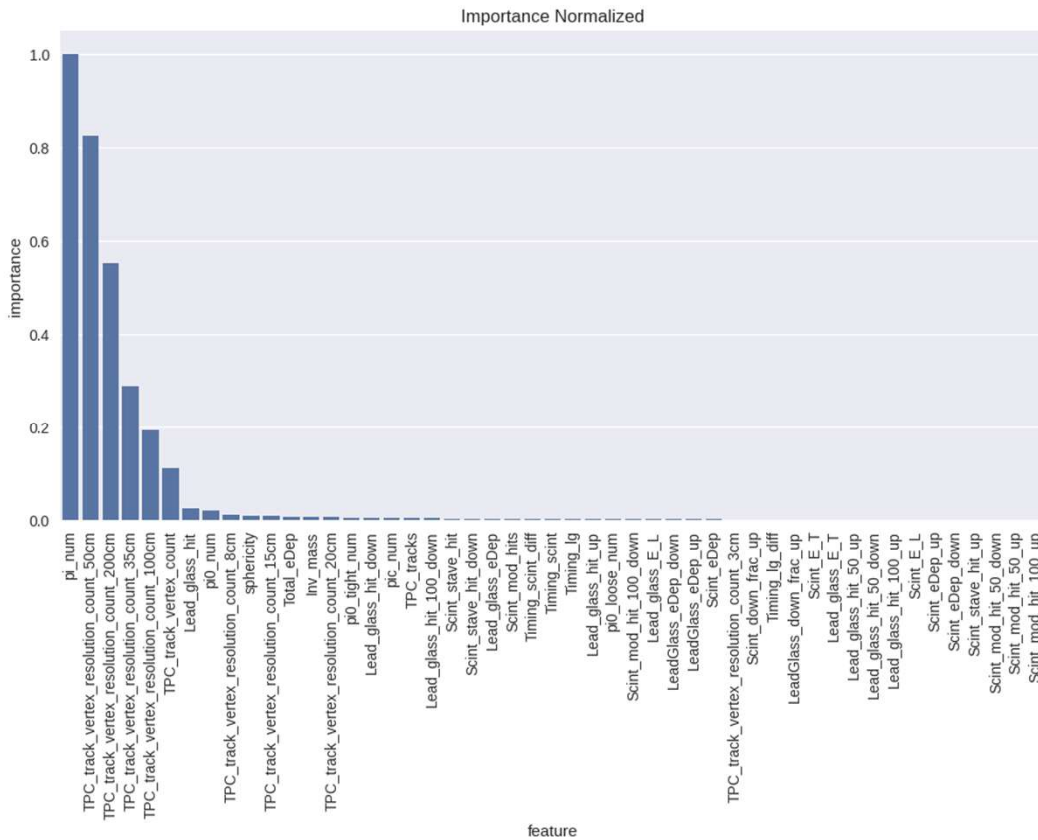


# Experimento 2

Objetivo: Estudar a importância de cada atributo e o seu impacto no resultado do modelo

XGB

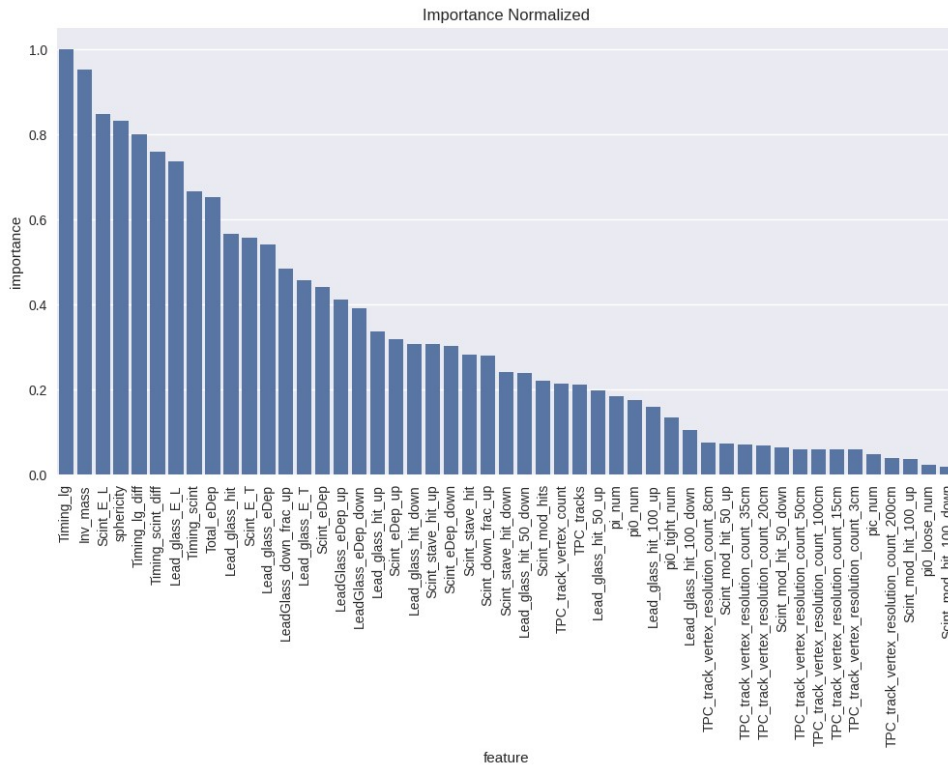
XGB com Importância normalizada > 0.05



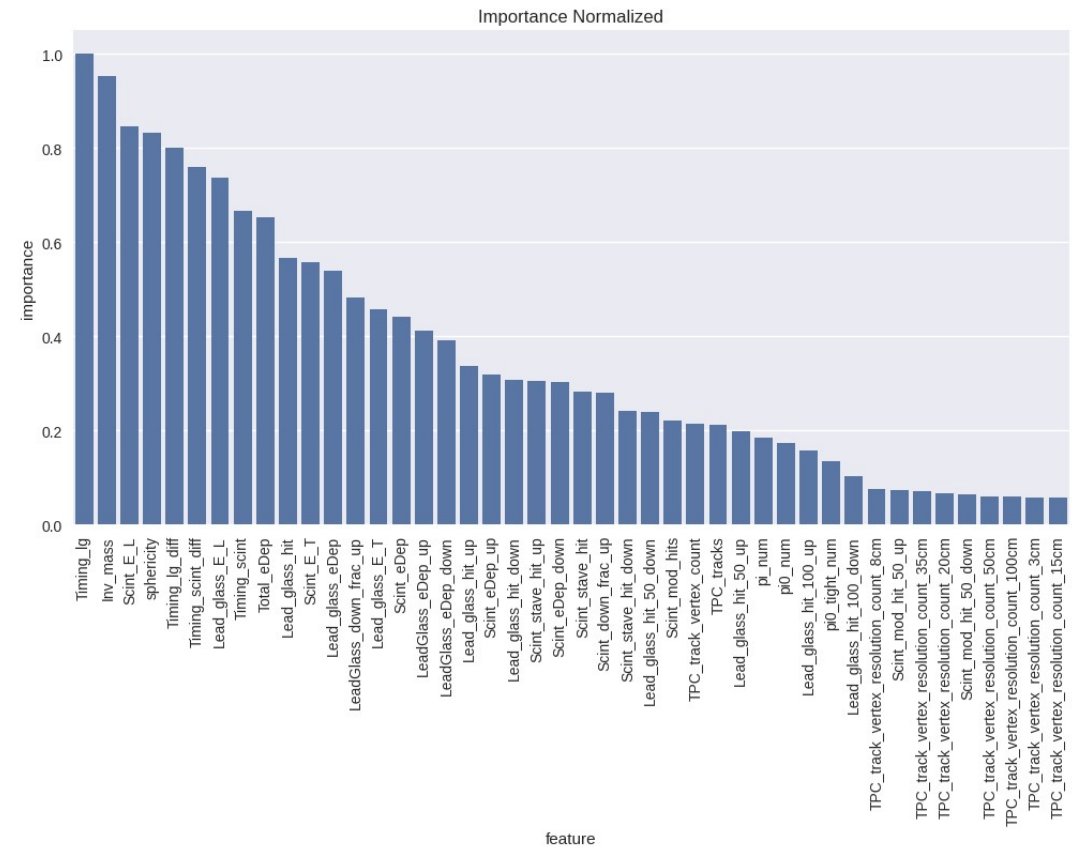
# Experimento 2

Objetivo: Estudar a importância de cada atributo e o seu impacto no resultado do modelo

## LGBM



## LGBM com Importância normalizada > 0.05

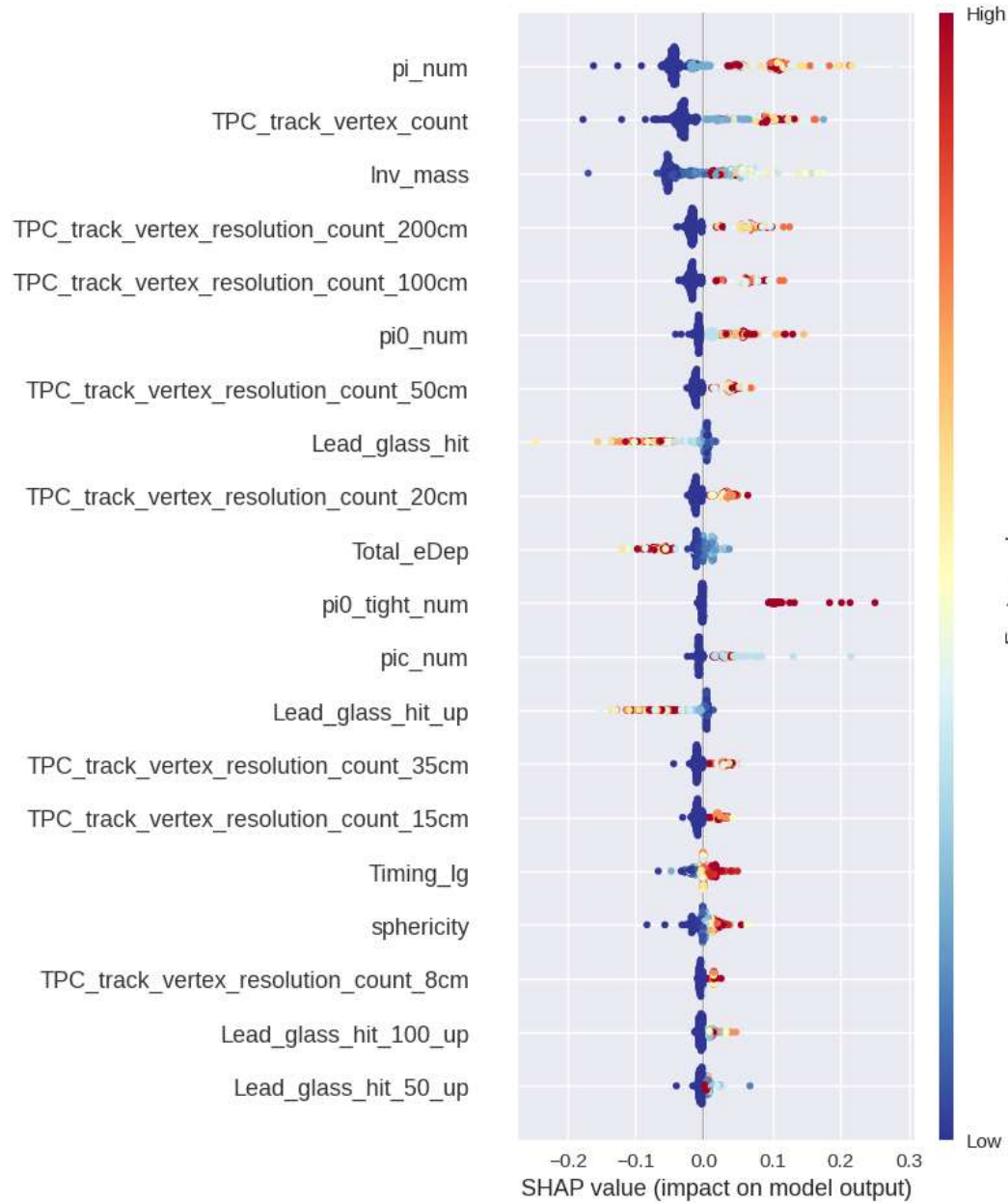




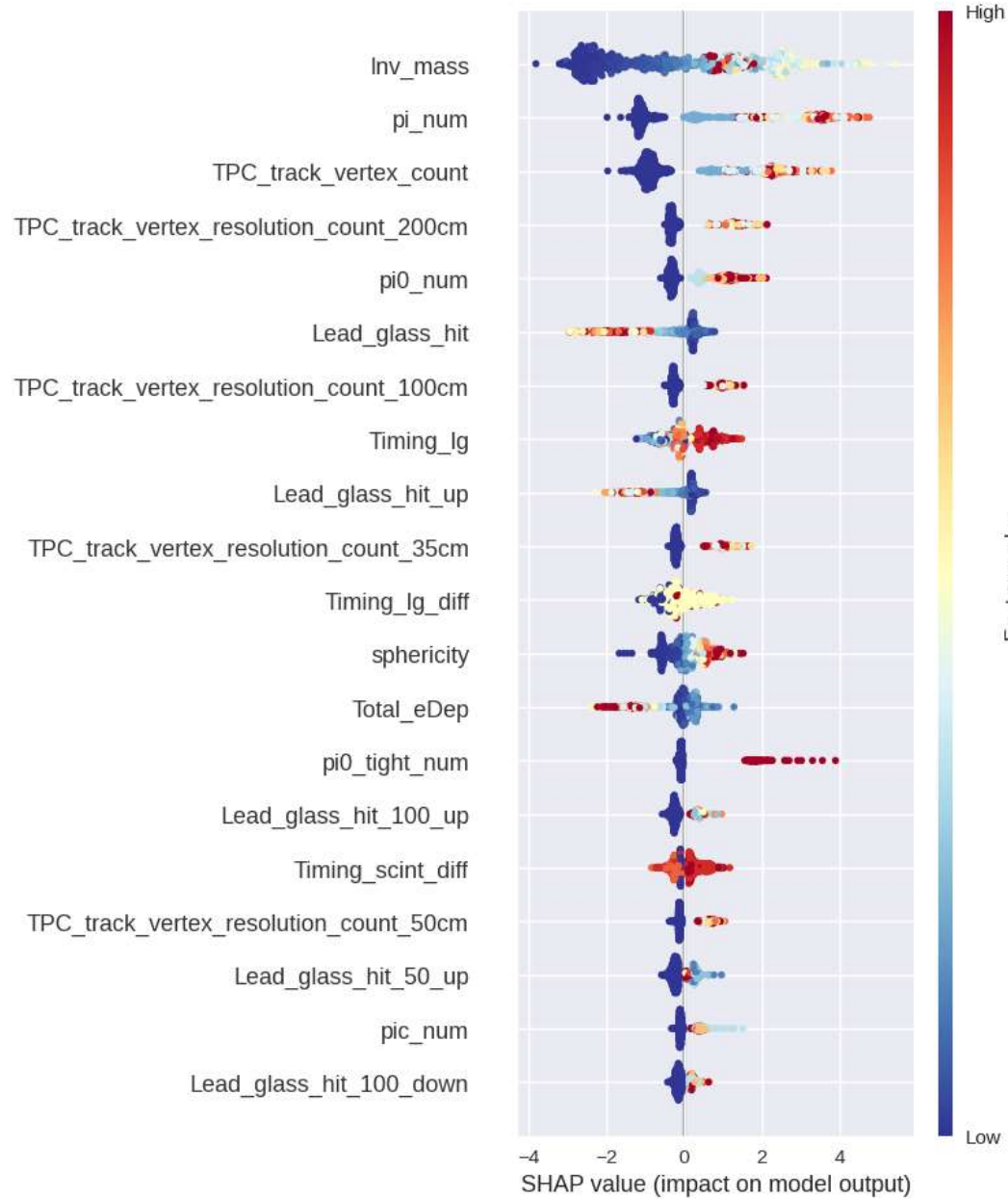
# SHAP



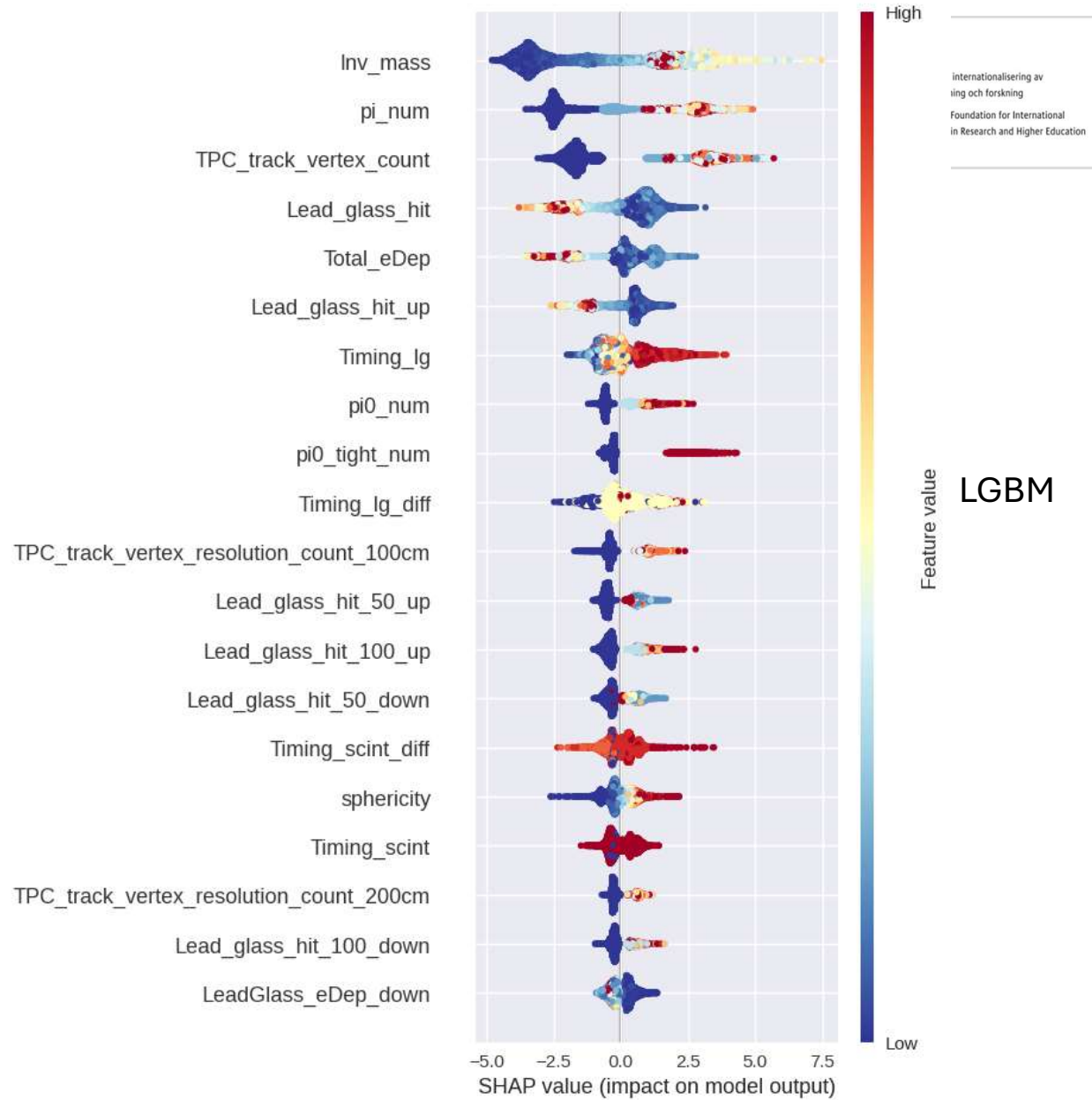
- SHAP (SHapley Additive exPlanations) de Lundberg e Lee (2017)<sup>6</sup> é um método para explicar previsões individuais.
  - O objetivo do SHAP é explicar a previsão de uma instância  $x$  calculando a contribuição de cada atributo para a previsão
- SHAP é baseado nos Shapley Values
  - Para um jogo cooperativo qualquer, os *Shapley Values* distribuem uma quantidade total de contribuição, para cada jogador da equipe de forma justa
- Usando o SHAP podemos ver contribuição de cada atributo no resultado do modelo de forma de forma justa!



Random Forest



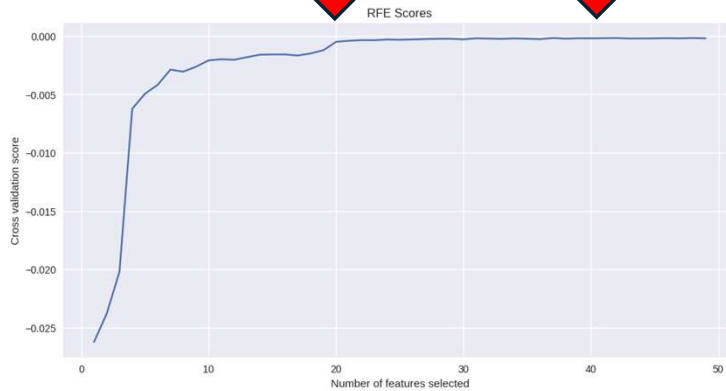
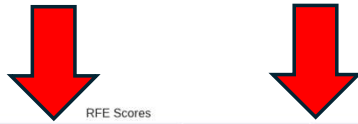
XGB



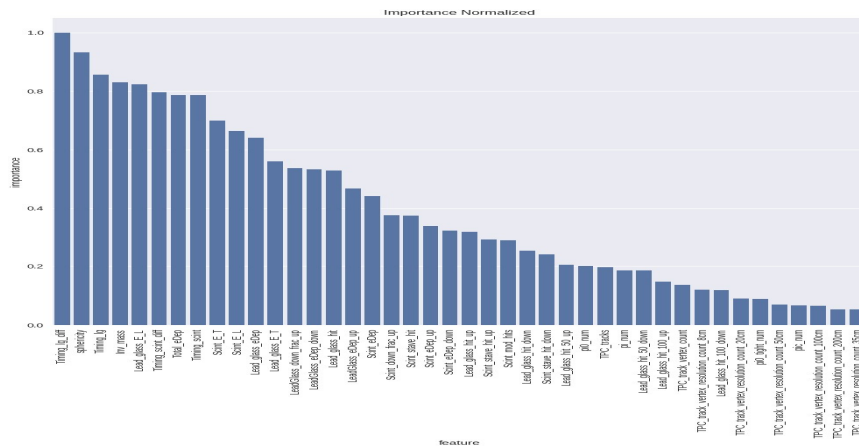


# Experimento 3

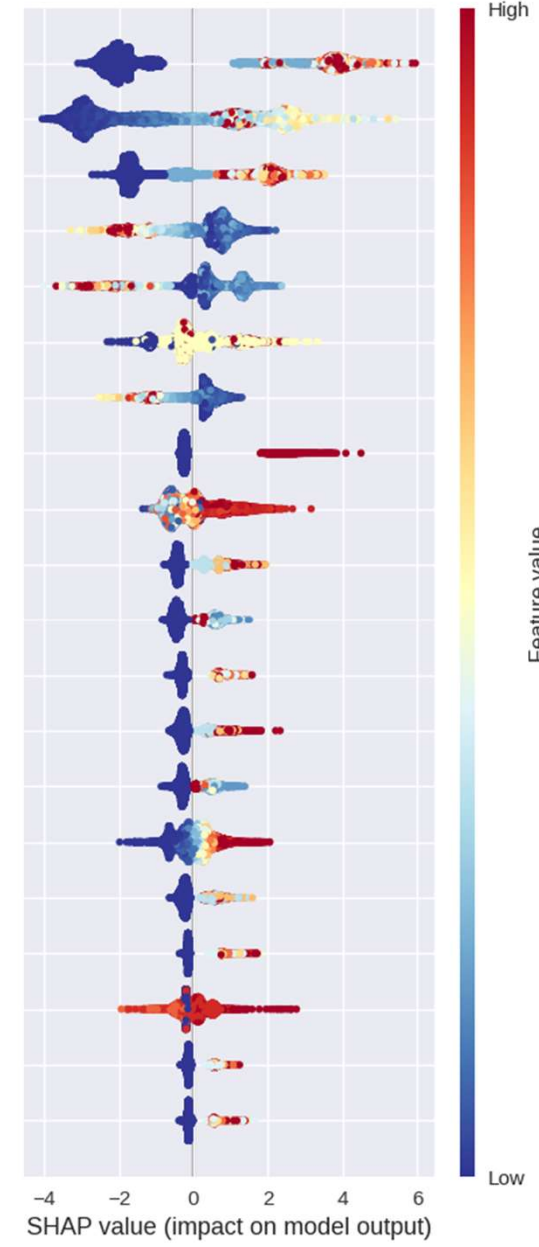
Objetivo: Estudar a seleção de variáveis via RFE



Número ótimo de atributos encontrados : 42



- TPC\_track\_vertex\_count
- Inv\_mass
- pi\_num
- Lead\_glass\_hit
- Total\_eDep
- Timing\_lg\_diff
- Lead\_glass\_hit\_up
- pi0\_tight\_num
- Timing\_lg
- pi0\_num
- Lead\_glass\_hit\_50\_up
- TPC\_track\_vertex\_resolution\_count\_100cm
- Lead\_glass\_hit\_100\_up
- Lead\_glass\_hit\_50\_down
- sphericity
- Lead\_glass\_hit\_100\_down
- TPC\_track\_vertex\_resolution\_count\_20cm
- Timing\_scint\_diff
- TPC\_track\_vertex\_resolution\_count\_50cm
- TPC\_track\_vertex\_resolution\_count\_200cm

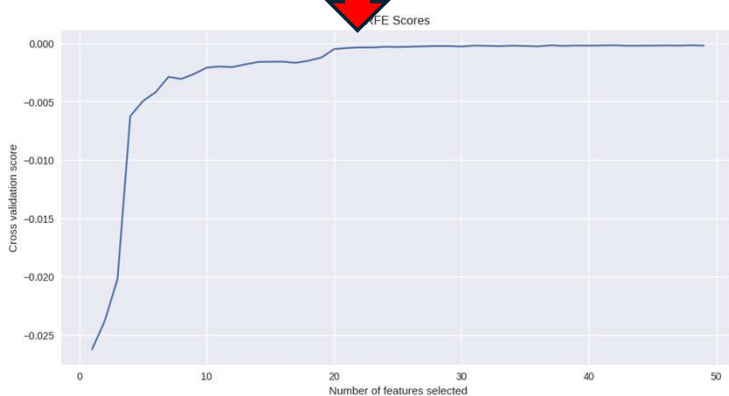




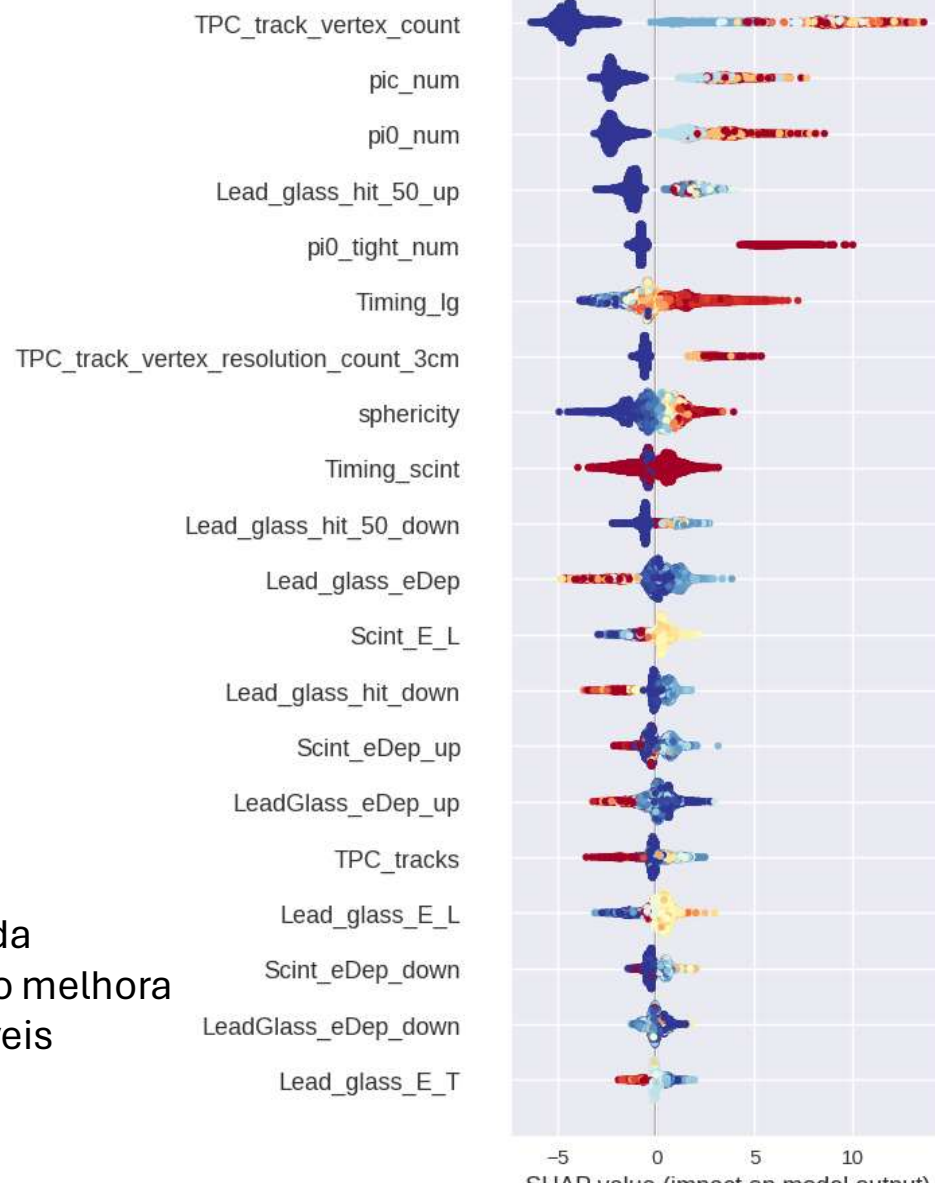
# Experimento 4

Objetivo: Estudar a seleção de variáveis via correlação

Correlação	Atributos corr	Num. tentativas OPTUNA	Rejeição no teste	Efficiência no teste
0.9	15	20	100%	98%
0.875	22	50	100%	98%
0.8625	24	50	100%	96%
0.85	25	60	100%	98%



Resultado que concorda com o RFE (o resultado melhora a partir de 24-25 variáveis)







# Testes Iniciais com Skope Rules



- SkopeRules encontra regras lógicas com o *precision* alto (poucos Falso positivos e as funde para formar um único classificador
  - Encontrar boas regras é feito ajustando árvores de classificação e regressão a subamostras.
  - Uma árvore ajustada define um conjunto de regras (cada nó da árvore define uma regra)
  - As regras são então testadas e aquelas com um *precision* alto são selecionadas e mescladas

$$Recall = TPR = \frac{TP}{P} = \frac{TP}{TP + FN}$$

$$Precision = \frac{TP}{TP + FP}$$



# Testes Iniciais com Skope Rules

Scint\_mod\_hits <= 20.5 and Lead\_glass\_hit\_up <= 32.0 and Total\_eDep <= 1974.9874877929688 and pi\_num > 0.5 and TPC\_track\_vertex\_resolution\_count\_50cm > 1.0

Lead\_glass\_hit <= 43.5 and Lead\_glass\_hit\_up <= 31.5 and Total\_eDep <= 1974.9874877929688 and pi\_num > 0.5 and TPC\_track\_vertex\_resolution\_count\_50cm > 1.0

TPC\_tracks <= 13.5 and Lead\_glass\_hit <= 43.5 and Total\_eDep <= 1981.13525390625 and pi\_num > 0.5 and TPC\_track\_vertex\_resolution\_count\_35cm > 1.0



$$Precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

Rule 1:		
	FPR	TPR
train_set	1.13e-03	0.89
test_set	1.22e-03	0.89

Rule 2:		
	FPR	TPR
train_set	1.20e-03	0.89
test_set	1.26e-03	0.89

Rule 3:		
	FPR	TPR
train_set	1.08e-03	0.88
test_set	1.19e-03	0.88

Resultados promissores : ainda sem ajuste de hiperparâmetros



# Conclusões



- Foi possível encontrar 3 modelos que atingiram 100% de rejeição de background e alta eficiência do Sinal
  - Métrica customizada que pune falso positivos e alteração de limiar na saída do classificador
- As técnicas de Seleção de Atributos foram eficientes para reduzir o número de atributos, mantendo 100% de rejeição de background e alta eficiência de sinal
- As técnicas de explicação como a importância de atributos e o SHAP permitem uma análise das previsões dos modelos desenvolvidos
- Skope rules forneceu resultados promissores que podem ser facilmente interpretados por qualquer pessoa



# Trabalhos Futuros



- Analisar os resultados fornecidos pelo SHAP e pela importância de atributos para obter um novo conjunto reduzido de variáveis
- Continuar o aperfeiçoamento de métricas customizadas
- Investir nos modelos baseados em regras ou nas explicações baseadas em regras
- Desenvolver o nosso próprio modelo baseado em regras



# Obrigado! Perguntas?



Agradecimentos: Fundação Sueca para Cooperação Internacional em Pesquisa e Ensino Superior (STINT).

Faculdade de Engenharia da Universidade do Estado do Rio de Janeiro

Laboratório de Redes Industriais e Sistemas e Automação (LARISA)

Gabriel Cesario(UERJ) e Willian Lejon (Universidade de Estocolmo)

**Jorge Amaral (UERJ)**

[jamaral@uerj.br](mailto:jamaral@uerj.br)

[jamaral@eng.uerj.br](mailto:jamaral@eng.uerj.br)