Introdução a Ciências de Dados

Seleção e ajuste de modelos preditivos

Francisco A. Rodrigues
ICMC/USP
francisco@icmc.usp.br

Seleção e ajuste de modelos preditivos

- Overfitting
- Bias-variance tradeoff
- Escolhendo modelos

Aprendizado supervisionado

- No aprendizado supervisionado, o objetivo é ajustar um modelo preditivo a partir de um conjunto de exemplos de modo que o modelo seja capaz de prever dados não observados.
- Matematicamente, modelos preditivos são função que, dado um conjunto de exemplos rotulados, constrói um estimador.

$$y = f(X, \theta) + \epsilon$$

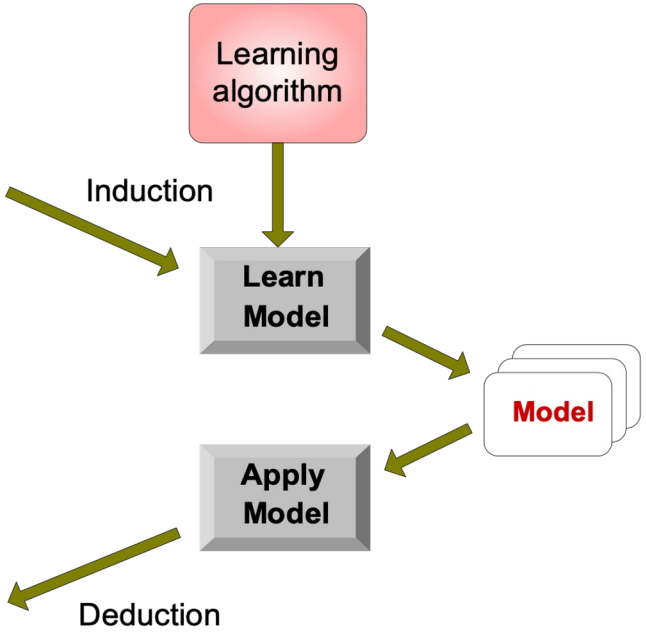
Erro ou ruído representa a informação que não está presente no modelo.

Estimadores podem ser vistos como funções.

Etapas

Tid	Attrib1	Attrib2	Attrib3	Class
1	Yes	Large	125K	No
2	No	Medium	100K	No
3	No	Small	70K	No
4	Yes	Medium	120K	No
5	No	Large	95K	Yes
6	No	Medium	60K	No
7	Yes	Large	220K	No
8	No	Small	85K	Yes
9	No	Medium	75K	No
10	No	Small	90K	Yes

Training Set



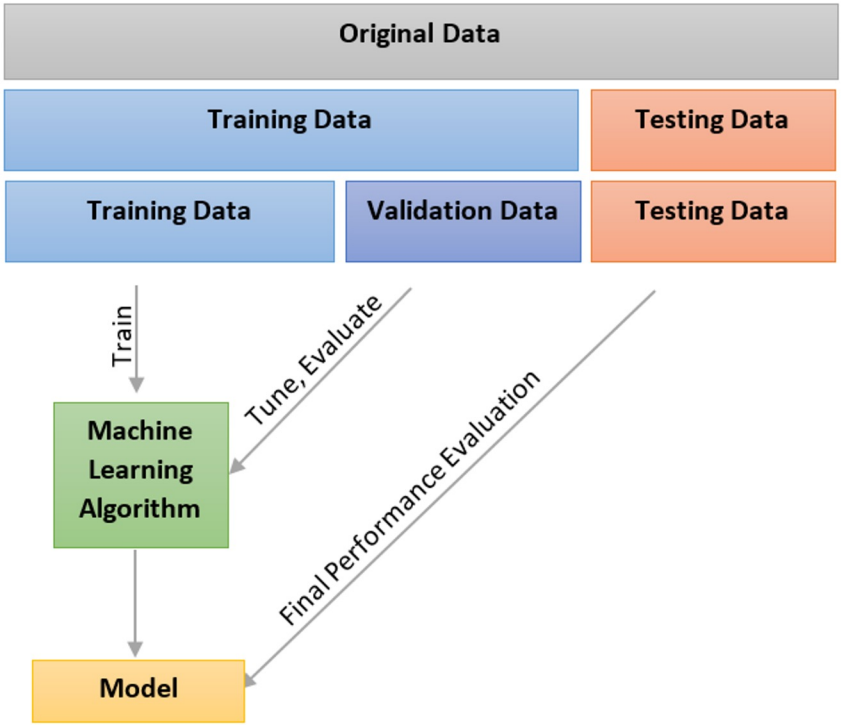
Tid	Attrib1	Attrib2	Attrib3	Class
11	No	Small	55K	?
12	Yes	Medium	80K	?
13	Yes	Large	110K	?
14	No	Small	95K	?
15	No	Large	67K	?

Test Set

Método hold-out

No método hold-out, os dados rotulados são divididos em dois grupos:

- p% são usados no treinamento
- (1-p)% para teste.



Aprendizado de máquina

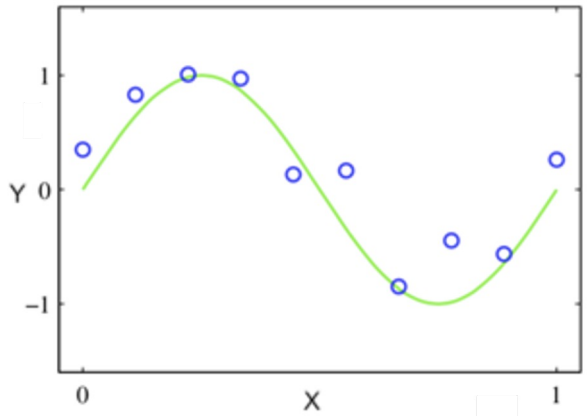
- Muitos problemas em aprendizado de máquina consideram os mesmos ingredientes:

  1. O primeiro ingrediente é um conjunto de dados $D=(\mathbf{X}, \mathbf{y})$, onde **X** é uma matriz de variáveis independentes e **y** é o vetor de variáveis dependentes.
  2. O segundo ingrediente é modelo $f(x,\theta)$, onde f é uma função dos parâmetros θ.
  3. O terceiro ingrediente é a função custo $C(y, f(x,\theta))$ que permite determinar o quanto o modelo *f* é adequado para predizer **y**.

Aprendizado de máquina

Exemplo:

1. $D(\mathbf{X},y)$



2. Modelo

$$f(\mathbf{x},\theta) = \sum_{j=0}^{M} \theta_j x^j$$

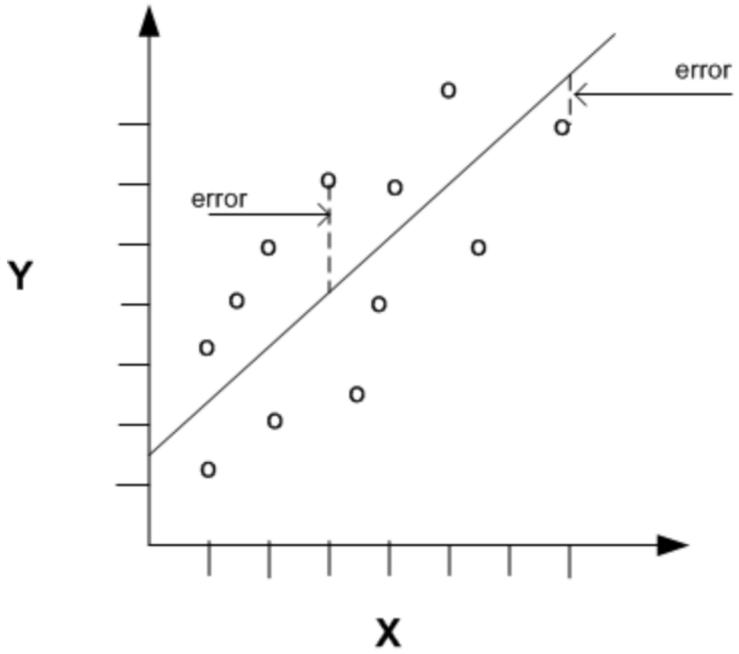
3 Função Custo

$$E(\theta) = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\{f(x_n,\theta) - y_n\}^2}$$

Aprendizado de máquina

Erro quadrático médio:

$$E(\theta) = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\{f(x_n,\theta) - y_n\}^2}$$



Aprendizado de máquina

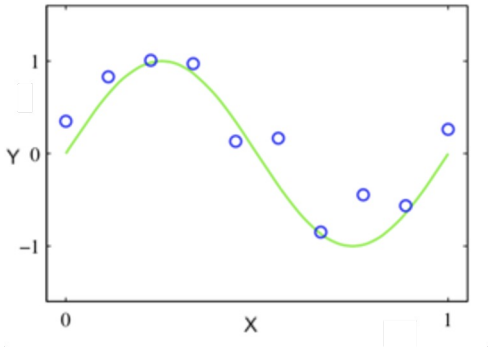
- O modelo é ajustado encontrando-se os valores de θ que minimizem a função custo.
- Uma pergunta básica se refere ao ajuste dos parâmetros do modelo:

Quais são os melhores valores dos parâmetros do modelo que permitam generalizar e prever dados desconhecidos com precisão?

Regressão Polinomial

- **Exemplo:**
- Os dados foram gerados a partir da função:

$$y = \sin(2\pi x) + \epsilon$$



- Onde ϵ tem distribuição uniforme com média zero e desvio padrão σ.
- Vamos supor que temos acesso apenas aos pontos em azul e não conhecemos a curva original

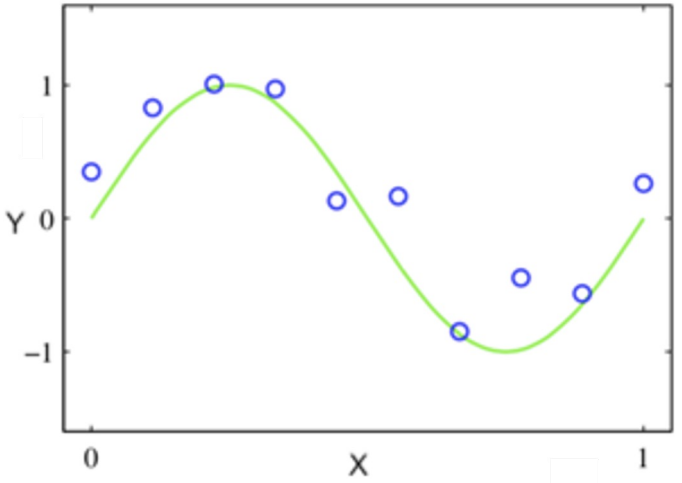
Regressão Polinomial

- Vamos considerar algumas possíveis curvas para modelar os dados:

Polinômio de grau M:

$$f(\mathbf{x}, \theta) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \ldots + \theta_M x_M = \sum_{j=0}^{M} \theta_j x^j$$

$$E(\theta) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \{f(x_n, \theta) - y_n\}^2}$$

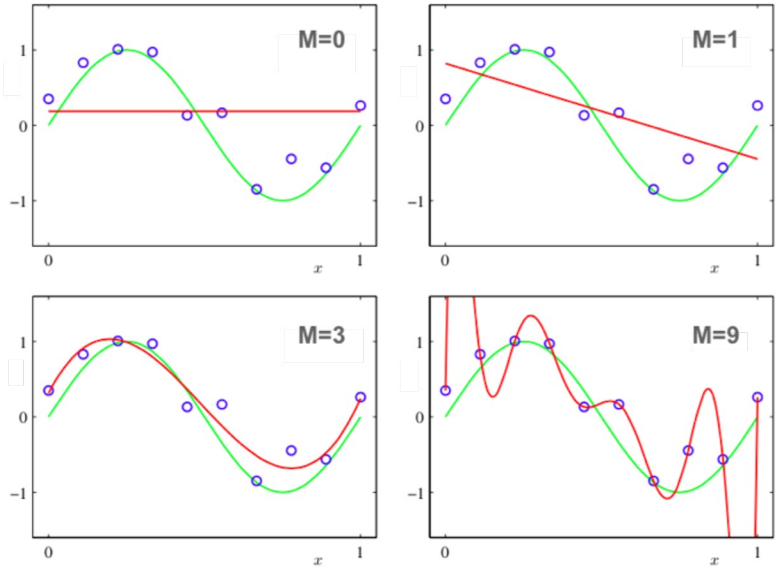


Qual o melhor valor de M?

Regressão Polinomial

N = 10 observações

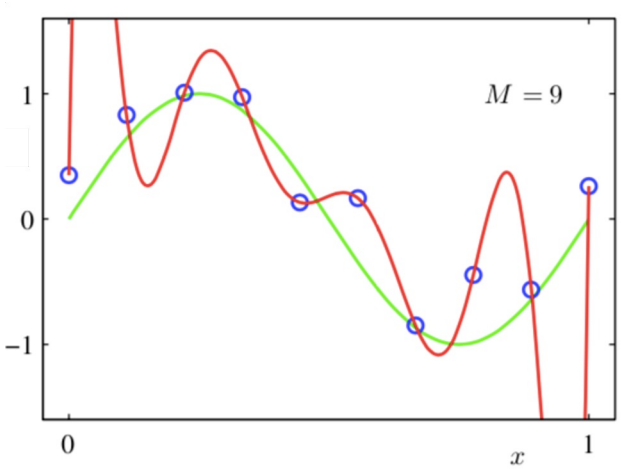
$$f(\mathbf{x}, \theta) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \ldots + \theta_M x_M = \sum_{j=0}^{M} \theta_j x^j$$



Overfitting

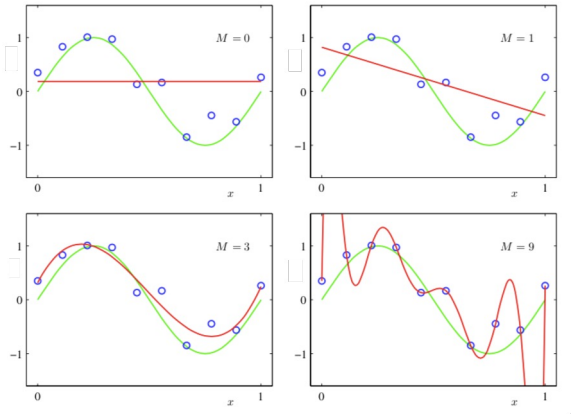
Overfitting: Ocorre quando um modelo se ajusta muito bem ao conjunto de dados anteriormente observado, mas se mostra ineficaz para prever novos resultados.

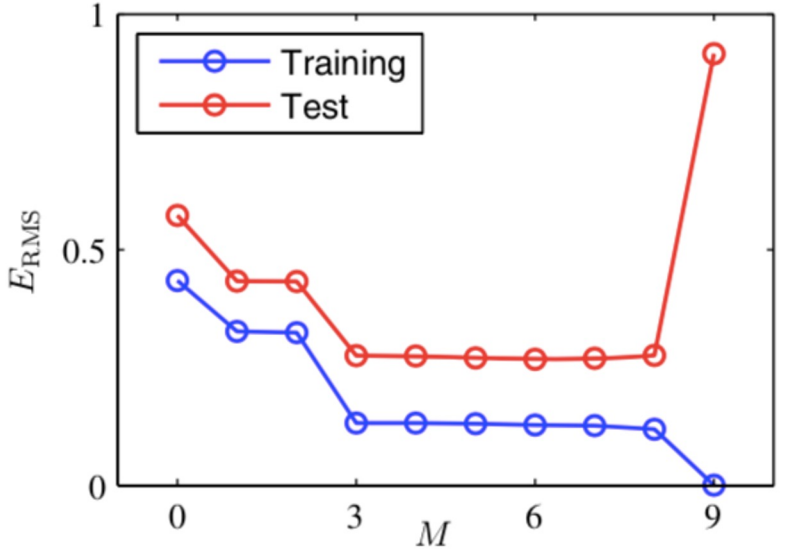
- Nesse exemplo, temos 10 pontos e um polinômios de grau 9.
- O modelo está super adaptado aos dados de treinamento.



Regressão Polinomial

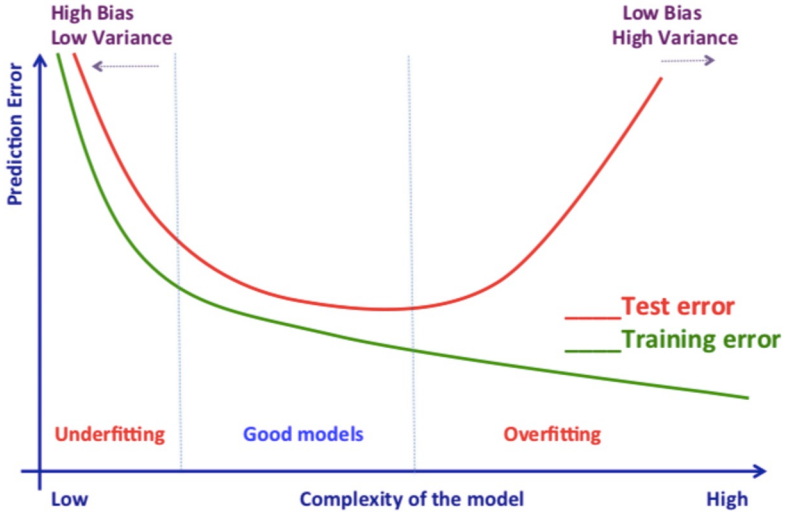
N = 10
observações

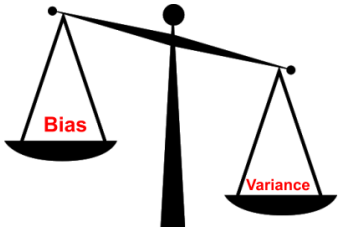




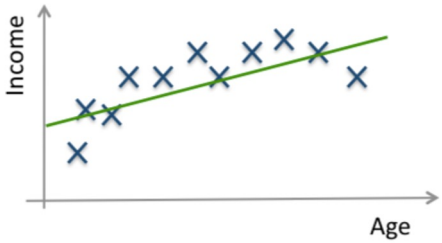
- Quando aumentamos a complexidade do modelo, ocorre um super ajuste.

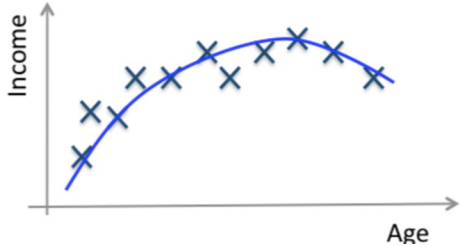
Viés-variância (bias-variance tradeoff)



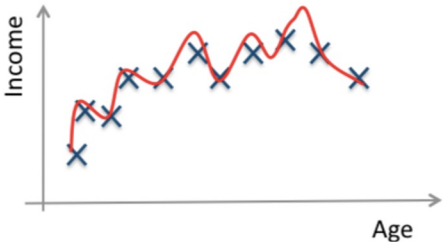


Alto viés
Baixa variância
Underfitting





Baixo viés
Alta variância
Overfitting

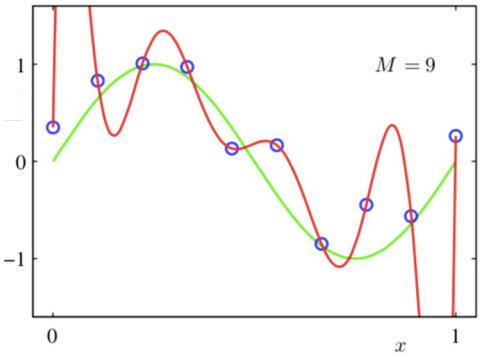


Escolha dos Modelos

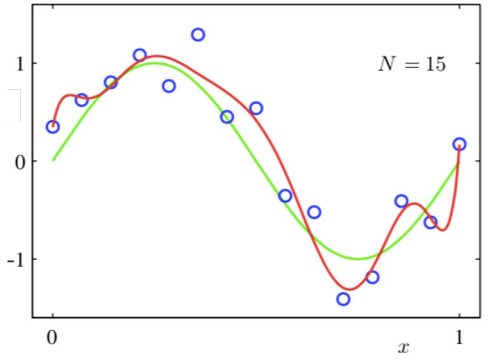
Há uma relação entre a quantidade de dados e a complexidade do modelo.

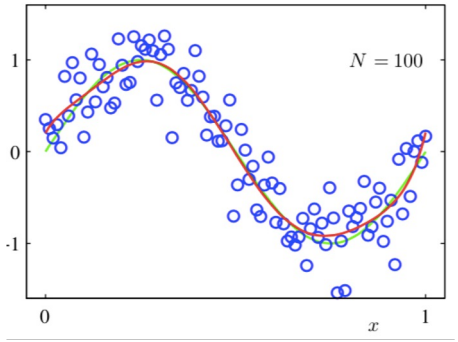
Regressão polinomial

N = 10 observações



N = 15 observações





N = 100 observações

Escolha do Modelo

Há relação entre o viés e variância e isso influencia na escolha do modelo.

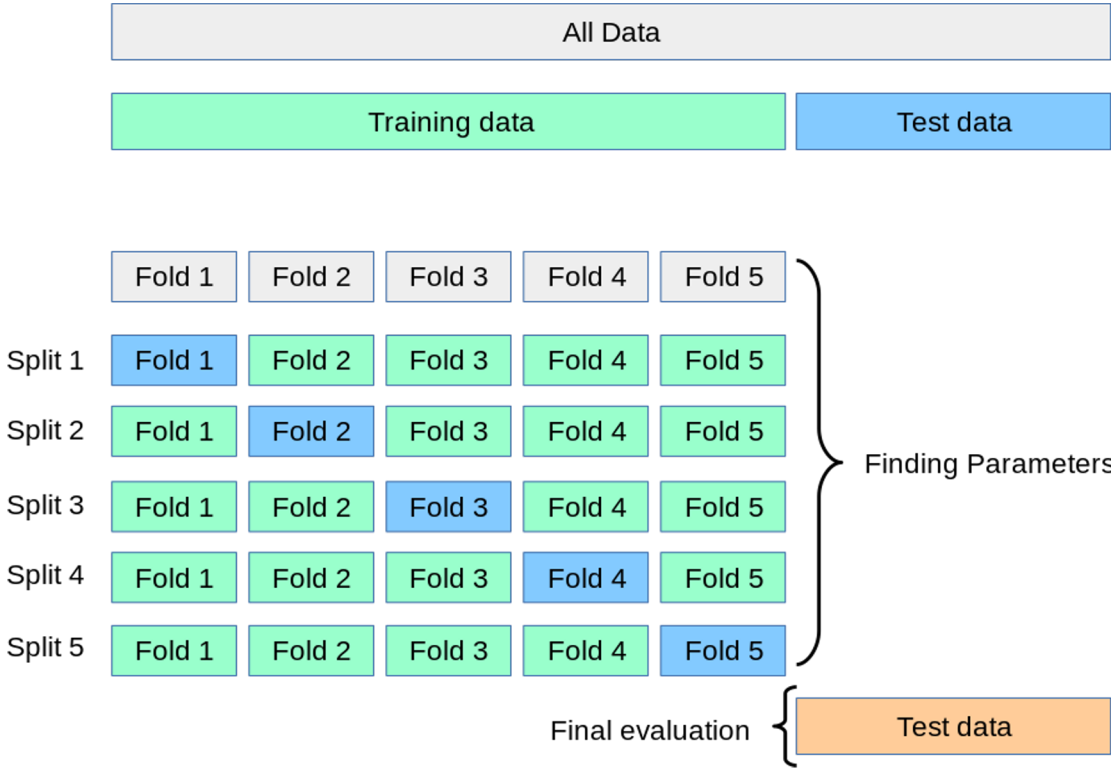
Assim, questões fundamentais são:

- Como escolher um modelo?
- Quais parâmetros usar?
- Como validar os modelos?

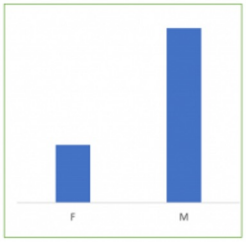
Escolha do Modelo

- Escolhendo o melhor modelo envolve a redução da variância e viés.
- Infelizmente: não há nenhum método científico padrão para isso.
- Como escolher complexidade ótima e conseguir erro mínimo no conjunto de teste?
- Erro no treinamento não é uma boa estimativa do erro no conjunto de teste.
- Podemos usar validação cruzada.

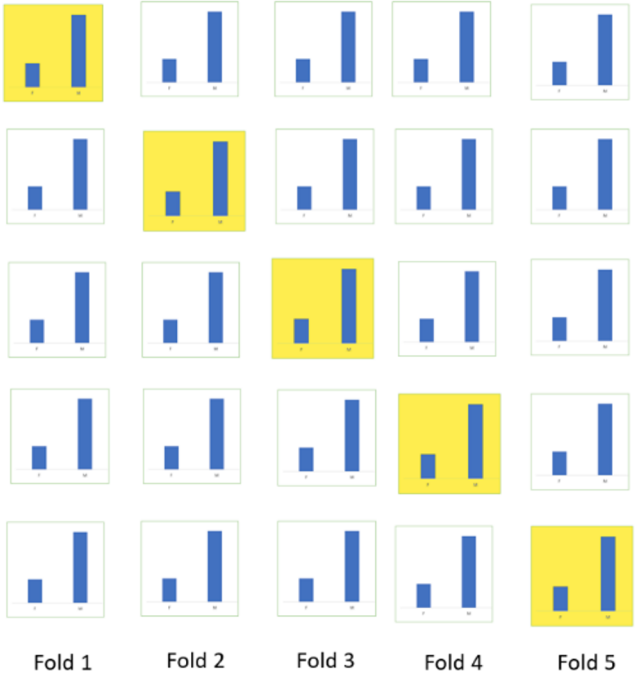
Validação cruzada



Casos estratificados



Class Distributions



Manter a distribuição das classes em cada fold.

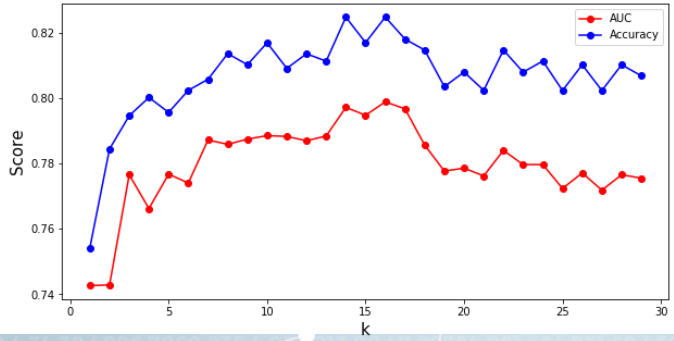
Validação cruzada

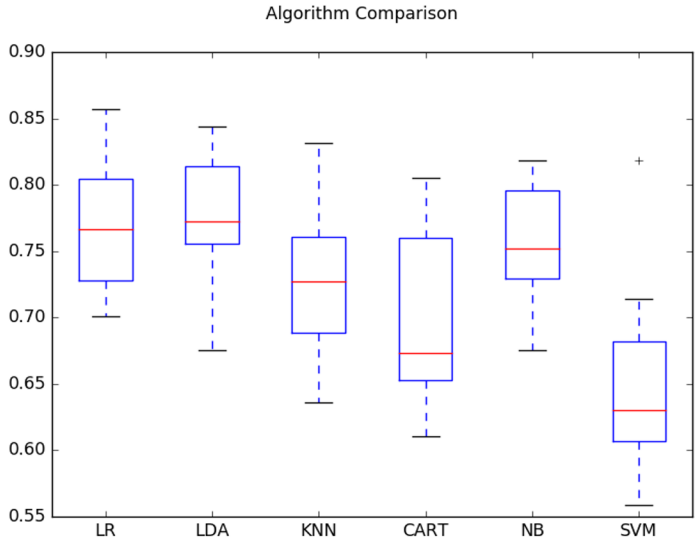
- Na validação cruzada, **todos os dados rotulados são usados**.
- A média de todas as classificações **reduz a variância** de todo o processo.
- **Validação não serve para determinar a precisão do modelo**, mas para escolher os atributos e modelos.
- Após a validação, usamos **todo o conjunto de dados** para ajustar o método de classificação ou regressão, para aplicar no conjunto de teste.

Validação cruzada

Usamos validação para as seguintes tarefas:

- Comparar modelos.
- Escolha dos hiperparâmetros do modelo (ex. grau do polinômio).





Sumário

Selecionando Métodos e Ajustando Modelos

- Modelos preditivos
- Overfitting
- Bias-variance tradeoff
- Escolhendo modelos

Leitura Complementar

- Bishop, **Pattern Recognition and Machine Learning**, Springer (capítulo 1).
- Online: https://www.microsoft.com/en-us/research/uploads/prod/2006/01/Bishop-Pattern-Recognition-and-Machine-Learning-2006.pdf

- Lindholm et al., **Supervised Machine Learning**, 2019. http://www.it.uu.se/edu/course/homepage/sml/literature/lecture_notes.pdf