Machine learning para predições em saúde

Prof. Dr. Alexandre Chiavegatto Filho







19. Machine Learning para Predições em Saúde – MLS (PRESENCIAL)

Descrição: Introduzir as aplicações práticas de machine learning para realizar predições na área da saúde. O objetivo do curso é introduzir as aplicações práticas de machine learning para realizar predições na área da saúde. Programa: 1 – Perspectivas do uso de inteligência artificial em saúde. 2 – Préprocessamento dos dados (padronização, one-hot encoding, imputação, outliers, rebalanceamento, vazamento de informação). 3 - Sobreajuste e divisão da amostra em treino, validação e teste. 4 - Mensuração da performance de algoritmos preditivos (área abaixo da curva ROC, precisão, recall, especificidade, valor predito negativo e raiz guadrada do erro guadrático médio). 5 – Algoritmos para a predição de dados estruturados (regressões penalizadas com lasso e ridge, redes neurais, random forests, XGBoost, lightGBM, catboost e TabPFN). 6 Técnicas de otimização de hiperparêmetros. 7 – Estratégias para a seleção de variáveis preditoras (Boruta). 8 - Aprendizado federado, aprendizado de transferência e aprendizado online (contínuo). 9 - Estratégias para a identificação da importância de variáveis preditoras (Shapley values). 10 -Desafios éticos do uso de machine learning em saúde.

Requisito: Graduandos e Graduados.

Público: É importante um conhecimento pelo menos introdutório de estatística e programação. É necessário que o aluno traga notebook.

Carga horária: 20h



Repositório de Arquivos Machine Learning para Predições em Saúde



THE DECLINE OF INTERNATIONAL S

FOREIGN **AFFÀIRS**

Hi, Robot

Work and Life in the **Age of Automation**



Science Sanzass

INTELLIGENCE

INSIDE: A 14-PAGE SPECIAL REPORT ON FINANCIAL TECHNOLOGY How to fix America's inner cities

The self-service economy

Time to open up Indonesia

Inside the anti-bribery business

Why humans cause heatwaves



The

Economist

The promise and the peril





É CONSEQUÊNCIA DOS AVANÇOS CIENTÍFICOS DOS ÚLTIMOS ANOS

Por que têm ocorrido avanços exponenciais nos últimos 5 anos?



Aumento da quantidade de dados (importante para melhorar performance)

Por que têm ocorrido avanços exponenciais nos últimos 5 anos?



Aumento da quantidade de dados (importante para melhorar performance)

Por que têm ocorrido avanços exponenciais nos últimos 5 anos?



Avanços em capacidade computacional (modelos de *machine learning* exigem muita memória).



Aumento da quantidade de dados (importante para melhorar performance)

Por que têm ocorrido avanços exponenciais nos últimos 5 anos?



Avanços em capacidade computacional (modelos de *machine learning* exigem muita memória).



Novos algoritmos para problemas mais complexos (*transformers*).

A demanda por profissionais capazes de extrair informação relevante dos dados é muito grande no Brasil e no mundo



The most in-demand skills of 2020

Top 10 Hard Skills

- Blockchain
- 2 Cloud computing
- 3 Analytical reasoning
- 4 Artificial intelligence



INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL

Capacidade de máquinas tomarem decisões inteligentes.

Várias definições para inteligência.

Possibilidade: "capacidade de tomar a melhor decisão possível dada a informação disponível. Com a capacidade de se adaptar a novas situações."

Segundo essa definição, inteligência é um problema de análise de dados.

MACHINE LEARNING

Inteligência artificial clássica

Regras para a tomada de decisão ensinada por humanos

- Identificar spam via palavras-chave.
- Traduzir uma frase através de dicionário e regras de gramática.
- Identificar caras humanas por meio da forma de nariz, olho, boca etc.

Inteligência artificial com *machine learning*

Máquinas aprendendo as regras para a tomada de decisão sozinhas!

Tomada de decisão via identificação de padrões complexos nos dados.

É como uma criança aprende!



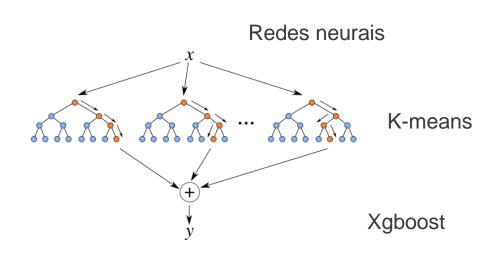


MACHINE LEARNING

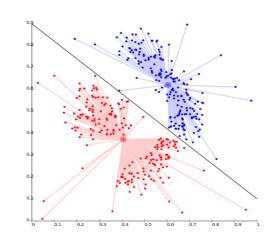
Problemas **práticos** de predição (para a tomada de decisão)

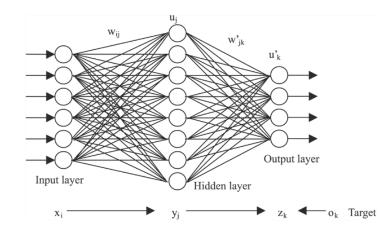
Pouco interesse em *interpretar* os modelos.

Liberdade para modelar a complexidade do mundo real









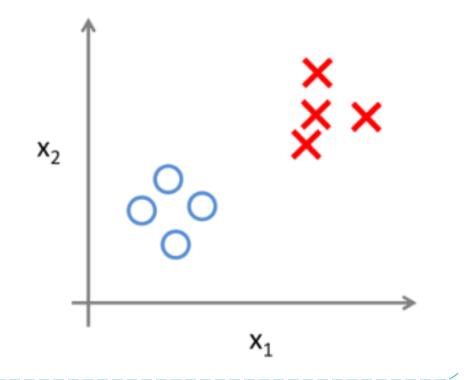
Regressões penalizadas

QUATRO CATEGORIAS DE MACHINE LEARNING

1. Aprendizado Supervisionado

Objetivo: Acertar um resultado que existe.

- Treinar um modelo para obter a melhor performance preditiva possível para um problema;
- Quando os dados incluídos para treinar o algoritmo incluem a solução desejada, ou rótulo ("label");





1. Aprendizado Supervisionado

QUATRO CATEGORIAS DE MACHINE LEARNING

Divididos em dois grandes grupos

1. Classificação

Quando a variável a ser predita é categórica.

Exemplo: Óbito em 5 anos, incidência de doença em 10 anos, etc.

2. Regressão

Quando a variável a ser predita é quantitativa

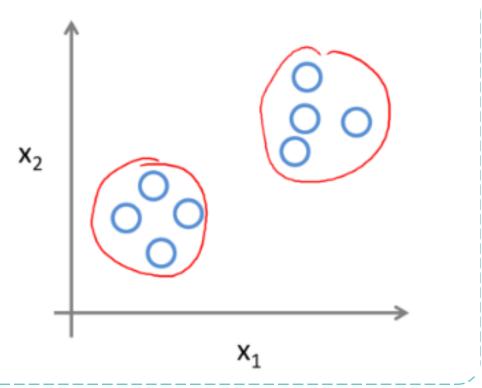
Exemplo: Quantos meses de vida a pessoa tem pela frente, qual será o seu IMC no próximo ano, etc.



2. Aprendizado não-supervisionado

- Não existe rótulo ("label");
- Algoritmo aprende sem uma resposta certa;
- O objetivo é encontrar padrões nos dados;
- Mais comuns: clustering (agrupamentos) e redução de dimensão (ACP).





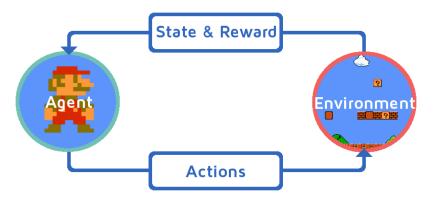


3. Aprendizado por reforço

Agente interage com um ambiente dinâmico;

- Feedbacks constantes em termos de premiações e punições;
- Jogos.









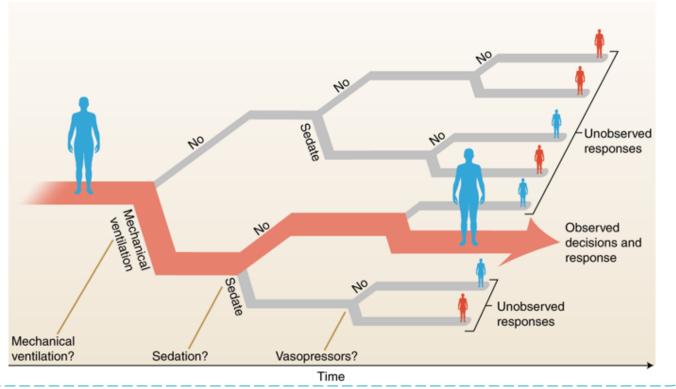
QUATRO CATEGORIAS DE MACHINE LEARNING

3. Aprendizado por reforço

Área promissora:

 Diferentes etapas do tratamento médico para identificar sequência ótima (ex: sepse).

Gottesman O, Johansson F, Komorowski M, Faisal A, Sontag D, Doshi-Velez F, Celi LA. Guidelines for reinforcement learning in healthcare. Nat Med 2019. 25(1)16-18.



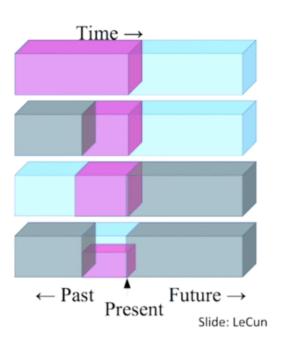


QUATRO CATEGORIAS DE MACHINE LEARNING

4. Autossupervisionado

- Um problema não supervisionado é transformado em um problema supervisionado pela geração automática dos rótulos;
- O processo de aprendizado autossupervisionado consiste em identificar partes ocultas dos dados.

- Predict any part of the input from any other part.
- ► Predict the future from the past.
- Predict the future from the recent past.
- Predict the past from the present.
- Predict the top from the bottom.
- Predict the occluded from the visible
- Pretend there is a part of the input you don't know and predict that.



Pre-training

Next token prediction

Not expert at following instructions

write a bedtime _

store

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed do eiusmod tempor incididunt ut labore et dolore magna

Supervised fine-tuning

fine-tune

Instructions
Dataset

instruction,
response)

Follow instructions

Reinforcement Learning

Reinforcement Learning from Human Feedback (RLHF)

Reinforcement Learning from AI Feedback (RLAIF)

PREDIÇÃO COM MACHINE LEARNING

- Trade-off entre predição e interpretação.
- Em predição estamos interessados em performance preditiva.
- Em inferência o interesse é entender a relação entre variáveis, normalmente como Y muda com uma alterações entre seus determinantes.
- Problema: modelos facilmente interpretáveis (regressões linear e logística, árvores de decisão) normalmente têm pior performance preditiva.
- Pensar bem sobre o objetivo da análise: é inferência ou predição?

PREDIÇÃO COM MACHINE LEARNING

Dados

Preferencialmente muitos e com boa qualidade (preenchidos corretamente e preditores fortes). Realizar o pré-processamento das variáveis.

Algoritmos

Inserir os dados no algoritmo de machine learning para aprender os parâmetros (regressão logística/linear) ou estruturas (árvores) que mapeiam os preditores aos resultados.

Testar no futuro

Inserir no algoritmo novos dados para testar a qualidade desse algoritmo para predizer dados futuros.



Artigo: How to avoid machine learning pitfalls: a guide for academic researchers

Autor: Michael A. Lones*

*School of Mathematical and Computer Sciences, Heriot-Watt University, Edinburgh, Scotland, UK

Objetivo





- Elencar erros comuns ao aplicar técnicas de machine learning;
- Como evitar esses erros;
- Destina-se como um guia para estudantes;
- Foco em questões de pesquisa acadêmica;

Discussão



- 1. O que fazer antes de construir um modelo
- 2. Como construir modelos
- 3. Como avaliar modelos
- 4. Como comparar modelos
- 5. Como relatar resultados





Entenda os dados



Não olhe para todos os seus



Certifique-se de que há dados suficientes



Converse com especialistas no assunto



Faça um levantamento de literatura



Pense em como o modelo será utilizado







Entenda os dados

É importante saber:

- Forma de coleta
- Se há artigos que descreveram o banco de dados
- Se os dados fazem sentido para predição
- Comece sempre por uma análise exploratória





Entenda os dados



Não olhe para todos os seus dados



Certifique-se de que há dados suficientes



Converse com especialistas no assunto



Faça um levantamento de literatura



Pense em como o modelo será utilizado





Não olhe para todos os seus dados

- Evite analisar os dados de **teste** durante a análise exploratória inicial (suposições consciência ou inconscientes)
- Cuidado com vazamentos (acesso aos dados de teste)





Entenda os dados



Não olhe para todos os seus dados



Certifique-se de que há dados suficientes



Converse com especialistas no assunto



Faça um levantamento de literatura



Pense em como o modelo será utilizado







Certifique-se de que há dados suficientes

- Sem dados suficientes é impossível treinar um modelo que generalize
- Descobrir isso pode não ser tão simples (sinal vs ruído)
- Sinal forte = pode usar menos dados
- Sinal fraco = precisa de mais dados ou usar validação cruzada

Primeira parte

Segunda parte

Terceira parte

Décima parte

- Data Augmentation = aumento no número de observações



Em classificação: importante em dados desbalanceados



Não usar acurácia como medida de desempenho





Entenda os dados



Não olhe para todos os seus dados



Certifique-se de que há dados suficientes



Converse com especialistas no assunto



Faça um levantamento de literatura



Pense em como o modelo será utilizado







Converse com especialistas no assunto

- Ajuda para entender o problema (ex.: variáveis uteis)
- Modelo útil na prática real
- Checar de importância de variáveis fazem sentido e identificar vazamentos





Entenda os dados



Não olhe para todos os seus dados



Certifique-se de que há dados suficientes



Converse com especialistas no assunto



Faça um levantamento de literatura



Pense em como o modelo será utilizado







Faça um levantamento de literatura

- Entender o que foi feito anteriormente
- Progresso acadêmico = Processo iterativo
- Aproveitar o conhecimento existente





Entenda os dados



Não olhe para todos os seus dados



Certifique-se de que há dados suficientes



Converse com especialistas no assunto



Faça um levantamento de literatura



Pense em como o modelo será utilizado



Antes de começar a construir modelos





Pense em como o modelo será utilizado

- "Por que você quer construir esse modelo?"
- Implementação em ambiente real
- Vinculação do modelo a um Sistema (prontuário eletrônico, aplicativo)





Impeça vazamento de dados pro teste



Teste vários modelos



Não use modelos inapropriados



Otimize os hiperparâmetros



Cuidado com a otimização de hiperparâmetros e seleção de variáveis







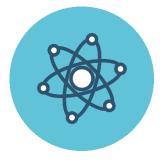
Impeça vazamento de dados pro teste

- Separe o conjunto de teste e não mexa nele!
- Vazamento torna modelos inúteis
- Falta de confiabilidade
- Exemplos:
 - Pré-processamento só no treino
- Seleção de variáveis e otimização de hiperparâmetros só no treino





Impeça vazamento de dados pro teste



Teste vários modelos



Não use modelos inapropriados



Otimize os hiperparâmetros



Cuidado com a otimização de hiperparâmetros e seleção de variáveis







Teste vários modelos

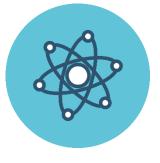
- Não existe um único algoritmo melhor
- Teorema do almoço grátis
- Encontrar algoritmo que gere a melhor predição
- Python: Scikit Learn







Impeça vazamento de dados pro teste



Teste vários modelos



Não use modelos inapropriados



Otimize os hiperparâmetros



Cuidado com a otimização de hiperparâmetros e seleção de variáveis







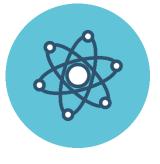
Não use modelos inapropriados

- Modelos inadequados aos dados: variáveis categóricas quando o modelo só aceita numéricas
- Modelos <u>desnecessariamente</u> complexos (deep learning para dados estruturados)
- Modelos mais recentes nem sempre são melhores (cuidado com artigos de benchmark em que autores querem que seu algoritmo vença)





Impeça vazamento de dados pro teste



Teste vários modelos



Não use modelos inapropriados



Otimize os hiperparâmetros



Cuidado com a otimização de hiperparâmetros e seleção de variáveis







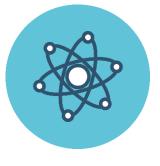
Otimize os hiperparâmetros

- Hiperparâmetros: parâmetros externos ao treinamento que afetam a configuração do modelo
- Hiperparâmetros afetam o desempenho
- Estratégias de otimização (random search, grid search, hyperopt etc)





Impeça vazamento de dados pro teste



Teste vários modelos



Não use modelos inapropriados



Otimize os hiperparâmetros



Cuidado com a otimização de hiperparâmetros e seleção de variáveis







Cuidado com a otimização de hiperparâmetros e seleção de variáveis

- Erro comum: seleção de variáveis antes da divisão dos dados
- Seleção estatística de variáveis e otimização de hiperparâmetros devem ser feitas com dados de treino
- Técnica: Validação cruzada aninhada (definição de hiperparâmetros e parâmetros dentro da mesma validação cruzada)





Use um conjunto de teste adequado



Use um conjunto de validação



Avalie o modelo várias vezes



Salve dados para uma avaliação final



Não use a acurácia com dados desbalanceados

Como avaliar modelos





Use um conjunto de teste adequado

- Sempre use um conjunto de teste!
- Dados de teste apropriados (representativo)





Use um conjunto de teste adequado



Use um conjunto de validação



Avalie o modelo várias vezes



Salve dados para uma avaliação final



Não use a acurácia com dados desbalanceados

Como avaliar modelos





Use um conjunto de validação

- Conjunto de validação: conjunto de dados intermediário ao treino e teste, para medir desempenho
- Pode ser usado para orientar o treinamento





Use um conjunto de teste adequado



Use um conjunto de validação



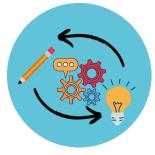
Avalie o modelo várias vezes



Salve dados para uma avaliação final



Não use a acurácia com dados desbalanceados





Avalie o modelo várias vezes

- Alguns modelos são instáveis
- Pequenas mudanças no treino podem mudar o desempenho significativamente
- Validação Cruzada (com estratificação em problemas de classificação)

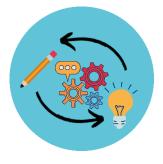




Use um conjunto de teste adequado



Use um conjunto de validação



Avalie o modelo várias vezes



Salve dados para uma avaliação final



Não use a acurácia com dados desbalanceados

Como avaliar modelos





Salve dados para uma avaliação final

- Validação cruzada possui um conjunto de teste pequeno usar média da performance dos folds
- Usar teste se possível (deixar validação cruzada para seleção de hiperparâmetros)

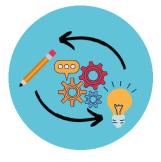




Use um conjunto de teste adequado



Use um conjunto de validação



Avalie o modelo várias vezes



Salve dados para uma avaliação final



Não use a acurácia com dados desbalanceados

Como avaliar modelos

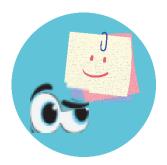




Não use a acurácia com dados desbalanceados

- Cuidado com as métricas de avaliação!
- Acurácia: Em classificação só funciona com amostras balanceadas (mesmo número de observações de ambas classes)
- Os dados de saúde costumam ser desbalanceados





Não presuma que valores maiores signifiquem modelos melhores



Use testes estatísticos para comparar modelos



Faça correções para múltiplas comparações

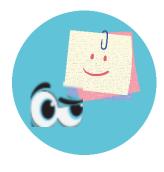


Nem sempre acredite nos resultados já encontrados em outros trabalhos



Considere combinações de modelos



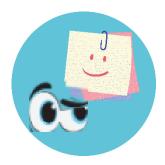




Não presuma que valores maiores signifiquem modelos melhores

- Cuidado ao comparar seus resultados com o de outras pesquisas (diferentes bancos de dados)
- Comparações devem ser justas
- Desempenho depende de como o modelo foi desenvolvido (tipo de dados de treino, formas de avaliação, otimização dos hiperparâmetros, etc)





Não presuma que números maiores signifiquem modelos melhores



Use testes estatísticos para comparar modelos



Faça correções para múltiplas comparações



Nem sempre acredite nos resultados já encontrados em outros trabalhos



Considere combinações de modelos

Como comparar modelos

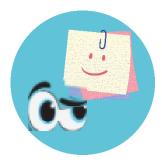




Use testes estatísticos para comparar modelos

- Use testes estatísticos para comparações entre algoritmos e com outros trabalhos (debatível)





Não presuma que valores maiores signifiquem modelos melhores



Use testes estatísticos para comparar modelos



Faça correções para múltiplas comparações



Nem sempre acredite nos resultados já encontrados en outros trabalhos



Considere combinações de modelos



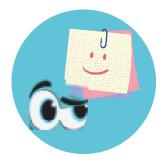




Faça correções para múltiplas comparações

- Necessidade de testes estatísticos para comparar mais de dois modelos
- Correção para múltiplos testes: Correção de Bonferroni





Não presuma que valores maiores signifiquem modelos melhores



Use testes estatísticos para comparar modelos



Faça correções para múltiplas comparações



Nem sempre acredite nos resultados já encontrados em outros trabalhos



Considere combinações de modelos



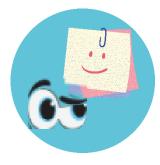




Nem sempre acredite nos resultados já encontrados em outros trabalhos

- Problema da utilização de dados de mesmos bancos
- Desconhecer se não olharam o teste antes
- Coletivamente o teste está sendo usado muitas vezes (overfitting nesse teste)





Não presuma que valores maiores signifiquem modelos melhores



Use testes estatísticos para comparar modelos



Faça correções para múltiplas comparações



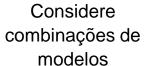
Nem sempre acredite nos resultados já encontrados em outros trabalhos



Considere combinações de modelos









- Compensar pontos fracos com pontos fortes
- Exemplo:
 - Bagging e Boosting
- Como combinar diferentes modelos de base?
 (votação ou usar um algoritmo final para agregação de resultados)

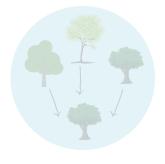




Seja transparente



Relate o desempenho de várias formas



Não generalize para além do seu conjunto de dados



Cuidado ao relatar significância estatística



Olhe seus modelos





Seja transparente

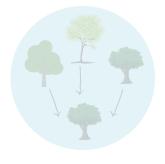
- Objetivo é contribuir com o conhecimento
- ML possui muitos trade-offs
- Compartilhe o modelo de forma acessível (ex.: github)
- Código limpo e organizado (documente as etapas)
- Facilitar a reprodutibilidade



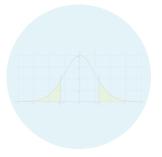
Seja transparente



Relate o desempenho de várias formas



Não generalize para além do seu conjunto de dados



Cuidado ao relatar significância estatística



Olhe seus modelos

5 Como relatar resultados





Relate o desempenho de várias formas - Múltiplos conjuntos de dados para teste

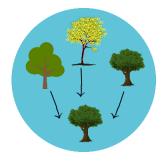
- Relate várias métricas



Seja transparente



Relate o desempenho de várias formas



Não generalize para além do seu conjunto de dados

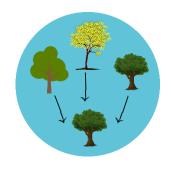


Cuidado ao relatar significância estatística



Olhe seus modelos

Como relatar resultados





Não generalize para além do seu conjunto de dados

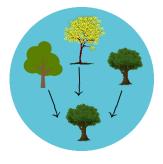
- Não faça afirmações exageradas
- Esteja ciente das limitações do estudo
- Variações com a qualidade dos dados e diferenças de distribuição



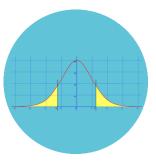
Seja transparente



Relate o desempenho de várias formas



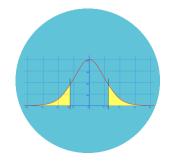
Não generalize para além do seu conjunto de dados



Cuidado ao relatar significância estatística



Olhe seus modelos





Cuidado ao relatar significância estatística

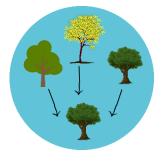
- Testes estatísticos não são perfeitos!
- Significância estatística: relate o valor p e deixe que o leitor os interprete



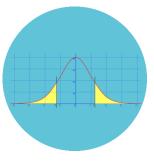
Seja transparente



Relate o desempenho de várias formas



Não generalize para além do seu conjunto de dados



Cuidado ao relatar significância estatística



Olhe seus modelos







- Mostre como o modelo aprendeu e tomou as decisões
- Objetivo: gerar conhecimento
- Forneça visualizações
- Use técnicas de explicabilidade (Shapley)

Em ML assim como em qualquer tipo de pesquisa:

- mantenha a mente aberta
- acompanhe o desenvolvimento da rea
- aceite que você não sabe tudo

Referência

LONES, Michael A. How to avoid machine learning pitfalls: a guide for academic researchers. arXiv preprint arXiv:2108.02497, 2021.





Obrigado!

Alexandre Chiavegatto Filho



Alexandre Chiavegatto Filho



@SaudenoBR



@labdaps



alexdiasporto@usp.br

