

Aprendizagem automática

Sessão 8 - T

Introdução à aprendizagem supervisionada

Ciência de Dados Aplicada

2023/2024

Aprendizagem não supervisionada vs. supervisionada

- **Não supervisionado:** envolve o trabalho com **dados não rotulados**, em que o algoritmo explora a **estrutura e os padrões** inerentes à entrada sem orientação explícita da saída.
- **Supervisionado:** o algoritmo é treinado num **conjunto de dados rotulados**, em que os dados de entrada são emparelhados com os rótulos de saída correspondentes. O objetivo é aprender um **mapeamento das entradas para as saídas**, permitindo que o algoritmo faça previsões sobre dados novos e não vistos.

Aprendizagem supervisionada

- Dado um conjunto **de dados**: $D = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$
 - em que x_i representa as características de entrada e y_i representa as características correspondentes etiquetas.
- O objetivo é aprender uma função $f(x)$ que **mapeia as entradas para as saídas**, ou seja, $y_i = f(x_i) + \epsilon_i$.
 - Em que ϵ_i representa um termo de erro.
- **Minimizando o erro** entre a saída prevista e os valores reais.

Conjuntos de dados para aprendizagem supervisionada

Entradas:

Saída:

Características

Exemplos

(...
)

<u>Quilómetros</u>	<u>Motor</u>	<u>Cavalos de potência</u>	<u>Tipo de transmissão</u>	<u>Tipo de carro</u>
25000	2.0	180	Manual	Sedan
30000	2.5	200	Automático	SUV
20000	1.8	160	Manual	Sedan
35000	3.0	250	Automático	SUV
28000	2.2	190	Automático	Sedan
32000	2.8	220	Manual	SUV
27000	2.0	170	Manual	Sedan
...

Tipos de

características

características

Contínuas

características

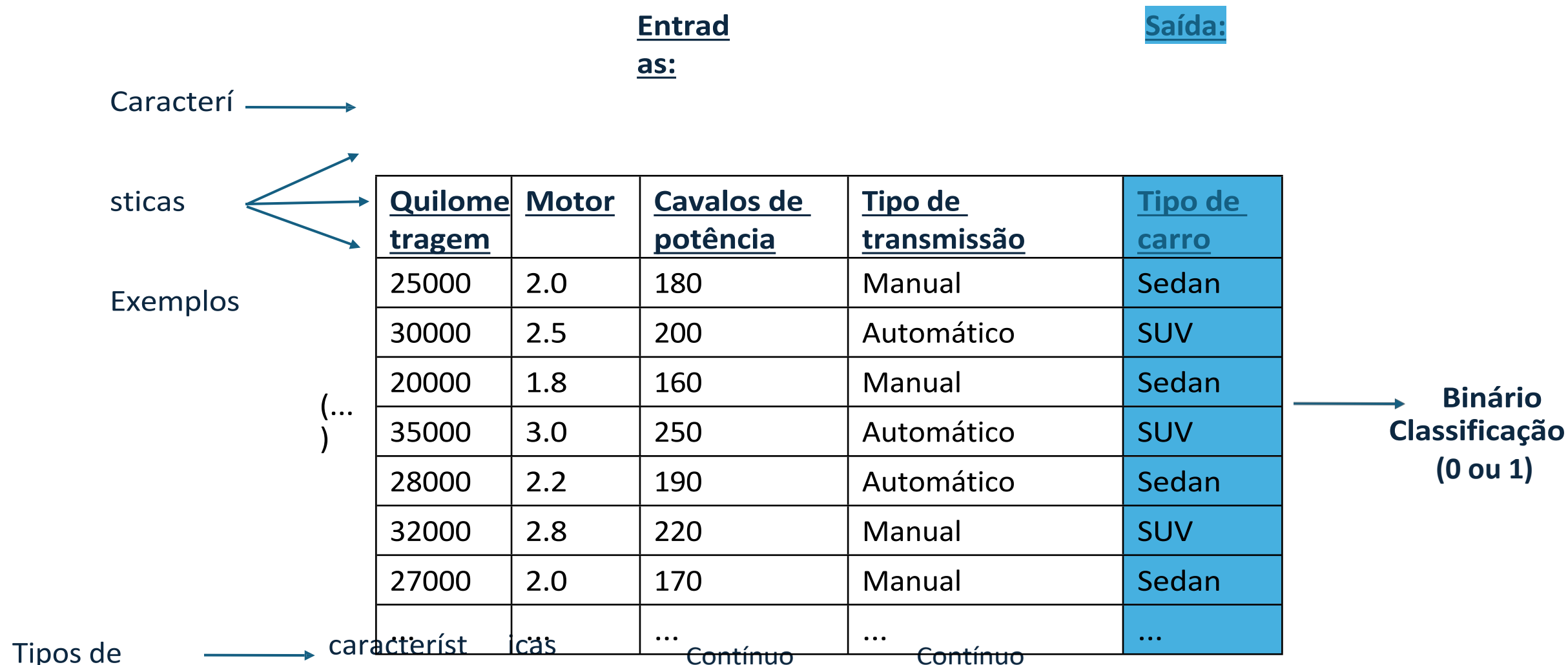
Contínuo

Contínuo

Discret
o

Discreto

Classificação binária

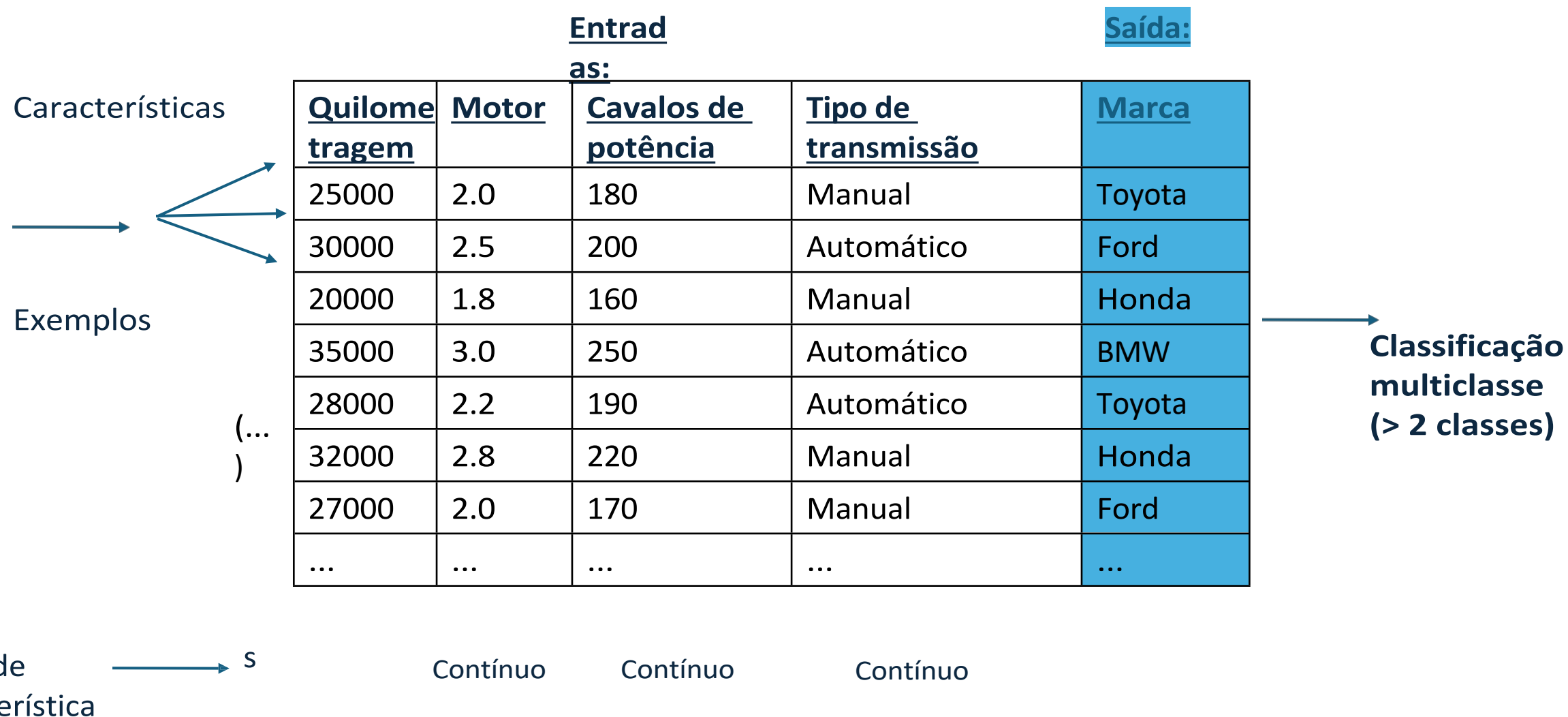


Contínuo

Discreto

Discreto

Classificação multiclasse



Discreto

Discreto

Regressão



			Entradas:		Saída:	
Características	→	<u>Quilometragem</u>	<u>Motor</u>	<u>Cavalos de potência</u>	<u>Tipo de transmissão</u>	<u>Preço</u>
		25000	2.0	180	Manual	20000
Exemplos	→	30000	2.5	200	Automático	25000
		20000	1.8	160	Manual	18000
		35000	3.0	250	Automático	30000
		28000	2.2	190	Automático	28000
		32000	2.8	220	Manual	15000
		27000	2.0	170	Manual	13000
(...)	
						→ Regressão

Tipos de características

Contínuo

Contínuo

Contínuo

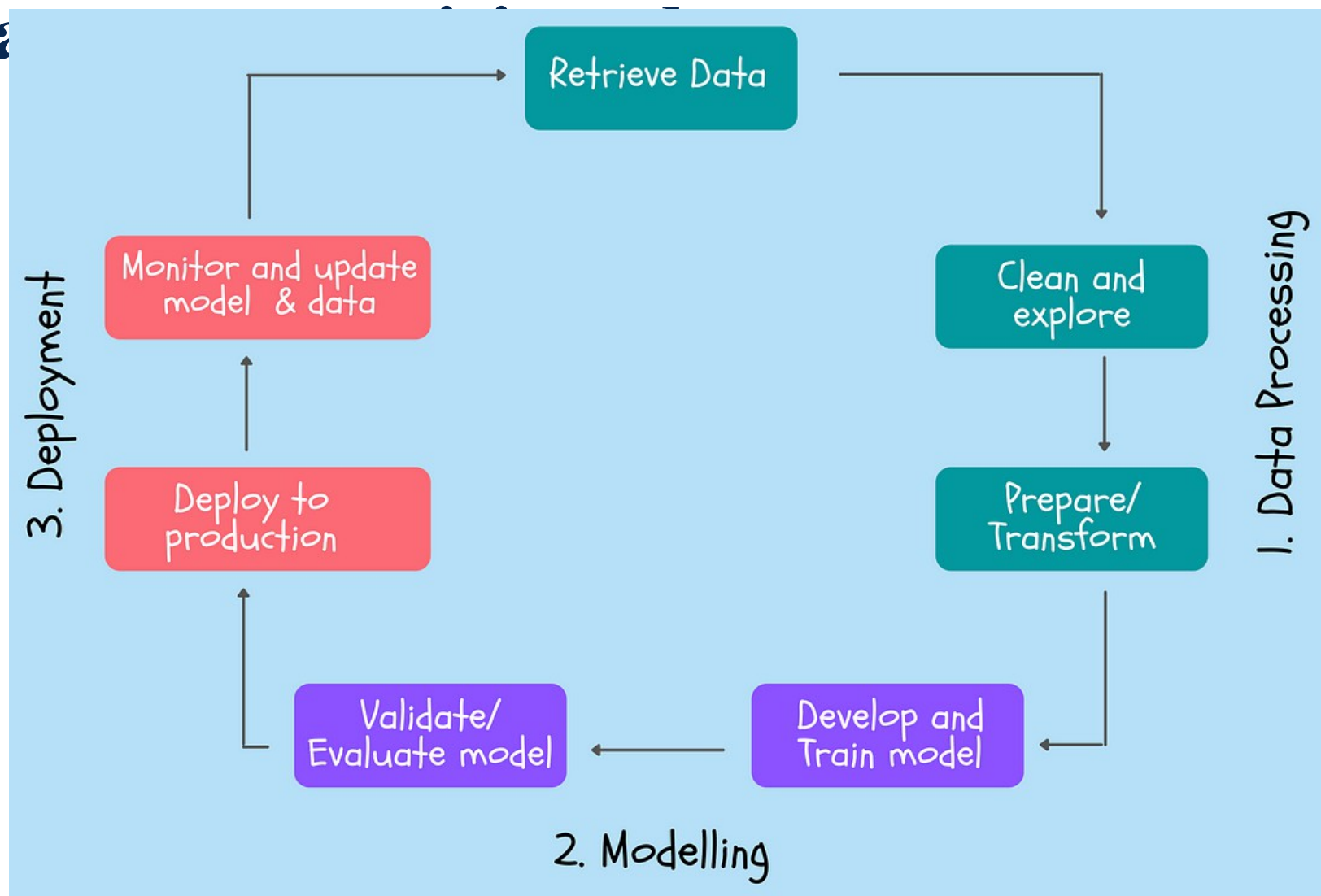
Discreto

Contínua

Aprendizagem supervisionada ou não?

1. Prever a pontuação IMDB de um filme com base nas suas características.
2. Identificar a doença de um paciente com base nos seus sintomas.
3. Agrupar os doentes com base nos valores dos indicadores das suas análises bioquímicas.
4. Prever o tempo para outubro de 2023 com base no tempo dos meses anteriores.
5. Calcule a idade média dos alunos deste curso.
6. Escrever um programa para melhorar o seu desempenho ao jogar xadrez contra humanos.

Fluxo de trabalho de aprendizagem



<https://towardsdatascience.com/the-machine-learning-workflow-explained-557abf882079>

Fluxo de trabalho de aprendizagem supervisionada

• Preparar os dados:

- Recolha de dados;
 - Limpeza de dados;
 - Pré-processamento de dados.

• Construção de modelos:

- Seleção do modelo;
- Arquitetura do modelo;
- Selecionar os hiperparâmetros.

• Treinar e avaliar o modelo:

- Treinar o modelo com os dados de treino para minimizar uma função de perda;
- Avaliar o desempenho do modelo num conjunto de validação separado para ajustar os hiperparâmetros e evitar o sobreajuste.
- Avaliar o desempenho do modelo no teste.

• Obter previsões do modelo:

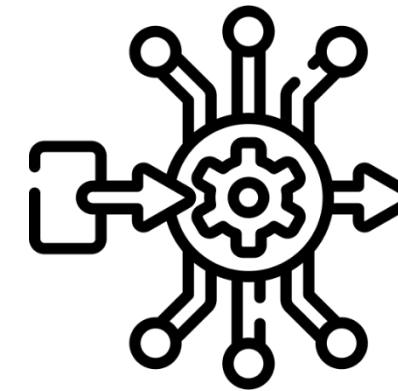
- Utilizar o modelo treinado para fazer previsões sobre dados novos e não vistos.

Fluxo de trabalho de aprendizagem supervisionada

Conjunto de dados

<u>Quilometragem</u>	<u>Motor</u>	<u>Cavalos de potência</u>	<u>Tipo de transmissão</u>	<u>Tipo de carro</u>
25000	2.0	180	Manual	Sedan
30000	2.5	200	Automático	SUV
20000	1.8	160	Manual	Sedan
35000	3.0	250	Automático	SUV
28000	2.2	190	Automático	Sedan
32000	2.8	220	Manual	SUV
27000	2.0	170	Manual	Sedan
...

Algoritmo de otimização



Modelo

Modelos lineares
Modelos baseados em
árvores Modelos
baseados em
instâncias Modelos
probabilísticos Modelos
de conjuntos Redes
neurais

...

<u>Quilometragem</u>	<u>Motor</u>	<u>Cavalos de potência</u>	<u>Tipo de transmissão</u>	<u>Tipo de carro</u>
25000	2.0	180	Manual	?
30000	2.5	200	Automático	?
20000	1.8	160	Manual	?
...

Previsões

<u>Tipo de carro</u>
SUV
SUV
Sedan
...

Avaliação de modelos: Métricas de erro



- A avaliação da qualidade de um modelo para uma tarefa específica envolve o cálculo de **métricas de erro**.
- Estas métricas fornecem informações sobre **o desempenho do modelo** num conjunto de exemplos (não utilizados durante a formação do modelo).
- A métrica a utilizar depende do **tipo de problema**: regressão ou classificação.

Métricas de classificação

- Matriz de

confusão: 2 classes

		Predicted Class	
		Positive	Negative
Actual Class	Positive	True Positive (TP)	False Negative (FN) Type II Error
	Negative	False Positive (FP) Type I Error	True Negative (TN)

Métricas de classificação

- Matriz de confusão:

Mais de 2 aulas

Confusion Matrix						
Output Class	BRCA	KIRC	LUAD	LUSC	UCEC	
	342 41.0%	2 0.2%	3 0.4%	4 0.5%	1 0.1%	97.2% 2.8%
	3 0.4%	211 25.3%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	98.6% 1.4%
	4 0.5%	1 0.1%	54 6.5%	13 1.6%	3 0.4%	72.0% 28.0%
	2 0.2%	1 0.1%	8 1.0%	79 9.5%	0 0.0%	87.8% 12.2%
	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	104 12.5%	100% 0.0%

Métricas de classificação



		Predicted Class		
		Positive	Negative	
Actual Class	Positive	True Positive (TP)	False Negative (FN) Type II Error	Sensitivity $\frac{TP}{(TP + FN)}$
	Negative	False Positive (FP) Type I Error	True Negative (TN)	Specificity $\frac{TN}{(TN + FP)}$
		Precision $\frac{TP}{(TP + FP)}$	Negative Predictive Value $\frac{TN}{(TN + FN)}$	Accuracy $\frac{TP + TN}{(TP + TN + FP + FN)}$

também conhecido como **Recall**

Métricas de classificação



UNIVERSIDADE
CATOLICA
PORTUGUESA

BRAGA

Métricas de classificação

$$\begin{aligned}\text{F1 Score} &= \frac{2}{\frac{1}{\text{Precision}} + \frac{1}{\text{Recall}}} \\ &= \frac{2 \times \text{Precision} \times \text{Recall}}{\text{Precision} + \text{Recall}}\end{aligned}$$

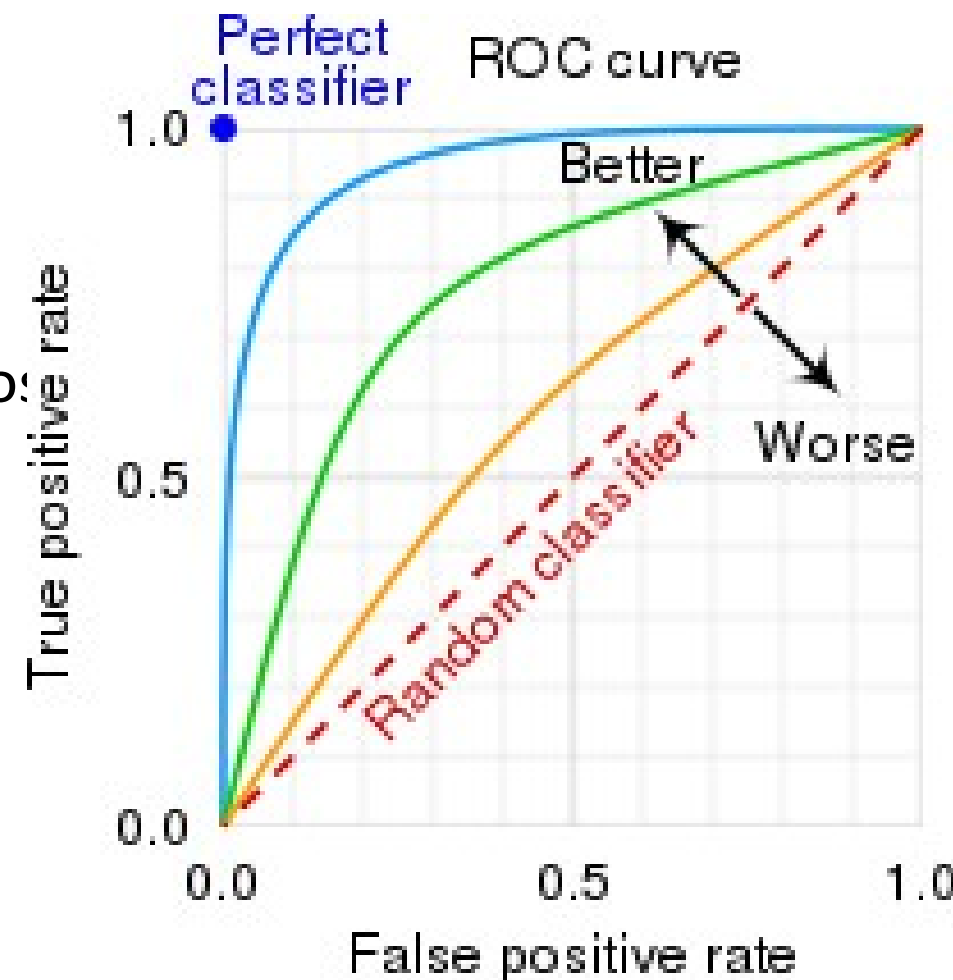
Coeficiente de correlação de Matthews

$$\text{MCC} = \frac{\text{TP} \times \text{TN} - \text{FP} \times \text{FN}}{\sqrt{(\text{TP} + \text{FP})(\text{TP} + \text{FN})(\text{TN} + \text{FP})(\text{TN} + \text{FN})}}$$

Métricas de classificação

- **Curvas de características de funcionamento do recetor (ROC)**

- Avalia graficamente a discriminação do modelo em **diferentes limiares**.
- Taxa de verdadeiros positivos vs. taxa de falsos positivos.
- Área sob a curva (**AUC**): Indicador de qualidade do classificador fiável (0,5 para aleatório, 1 para perfeito).
- **Curvas de precisão-recuperação**: Mais adequadas para **dados desequilibrados**, realçando os compromissos entre precisão e



Métricas de recuperação. classificação

Métricas de classificação: Qual escolher?

- **Exatidão:** medida geral utilizada quando as **classes são equilibradas** e os erros de classificação dos casos positivos e negativos são igualmente importantes;
- **Sensibilidade/Recall:** quando a identificação correcta de **casos positivos** é crucial (por exemplo, diagnóstico médico ou deteção de fraude);
- **Especificidade:** quando é importante identificar corretamente **os casos negativos** (por exemplo, rastreio de segurança ou controlo de qualidade);
- **Precisão:** quando queremos **minimizar os falsos positivos** (por exemplo, deteção de spam de correio eletrónico);
- **Pontuação F1:** quando se pretende um **equilíbrio entre a precisão e a recuperação**, especialmente em situações em que existe um **desequilíbrio** entre o número de casos positivos e negativos.
- **MCC:** quando se pretende uma métrica única que considere o **desempenho global** do modelo, especialmente em tarefas **de**

classificação binária em que as classes são **desequilibradas**.

Métricas de regressão

- **Erro médio absoluto (MAE):**

- Simples e interpretável medida de média previsão erro de previsão.
Menos sensível a valores anómalos.

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |y_i - \hat{y}|$$

- **Erro médio quadrático (MSE):**

- Penaliza mais fortemente os erros maiores. Sensível a valores anómalos devido ao quadrado dos erros.

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y})^2$$

- **Raiz do erro quadrático médio (RMSE):**

- Métrica nas mesmas unidades que a variável-alvo. Fornece uma variável interpretável como o MAE, mas que tem em conta erros maiores como o MSE.

$$RMSE = \sqrt{MSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y})^2}$$

Métricas de regressão

- **Erro Percentual Absoluto Médio (MAPE):**
$$\text{MAPE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|y_i - \hat{y}|}{y_i} * 100\%$$
 - Útil quando a escala da variável-alvo varia muito.

- **Coeficiente de determinação (R-quadrado):**
$$R^2 = 1 - \frac{\sum (y_i - \hat{y})^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2}$$
 - Utilizado para avaliar em que medida as variáveis independentes explicam a variabilidade da variável dependente. Valores mais elevados indicam um melhor ajuste do modelo aos dados.

- **R-quadrado ajustado:**
$$R_{adj}^2 = 1 - \left[\frac{(1 - R^2)(n - 1)}{n - k - 1} \right]$$
 - Ajusta o R-quadrado para o número de variáveis independentes (k), que reflecte de forma mais precisa o ajuste do modelo.
 - n é o número de observações nos dados.

Métodos de estimativa de erros

- **Objetivo:** garantir **uma avaliação credível** do desempenho do algoritmo e da **capacidade de generalização**.
- As medidas de erro não devem ser aplicadas ao mesmo conjunto de dados que foi utilizado para a formação.
- **Os conjuntos de validação e de teste** são utilizados para avaliar o modelo treinado.
- Importância dos exemplos de testes:
 - Crucial para avaliar o grau de generalização do modelo para **dados não vistos**.

- Assegura uma **avaliação imparcial** do desempenho do modelo.

Retenção

0

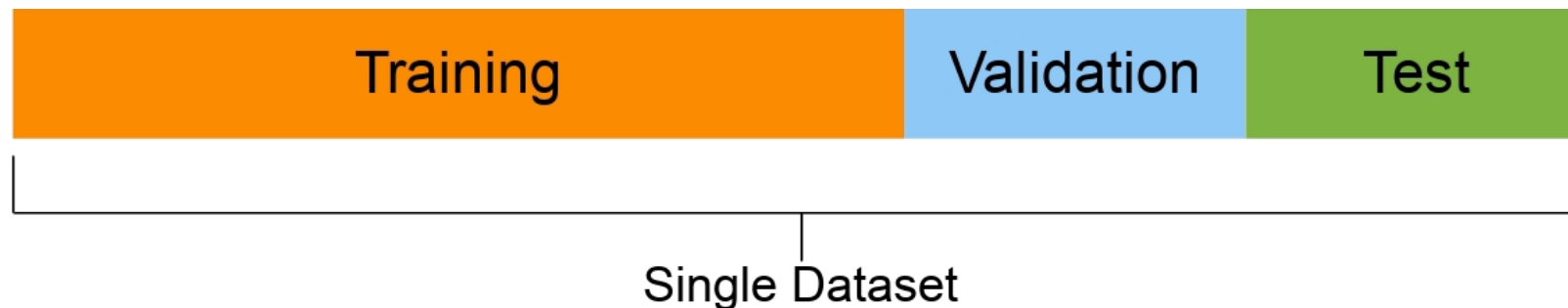
- Envolve a divisão do conjunto de dados em dois subconjuntos: o **conjunto de treino** e o **conjunto de teste**.
- O modelo é treinado no conjunto de treino e avaliado no conjunto de teste independente.



Retenção

0

- Por vezes, é necessário dividir os dados em três subconjuntos: o **conjunto de treino**, o **conjunto de validação** e o **conjunto de teste**.
- O modelo é treinado no conjunto de treino e avaliado no conjunto de validação para **ajustar os hiperparâmetros**.
- Por fim, o desempenho do modelo é avaliado no conjunto de teste para obter uma estimativa não enviesada da sua **capacidade de generalização**.



Retenção

0

- **Vantagens:**

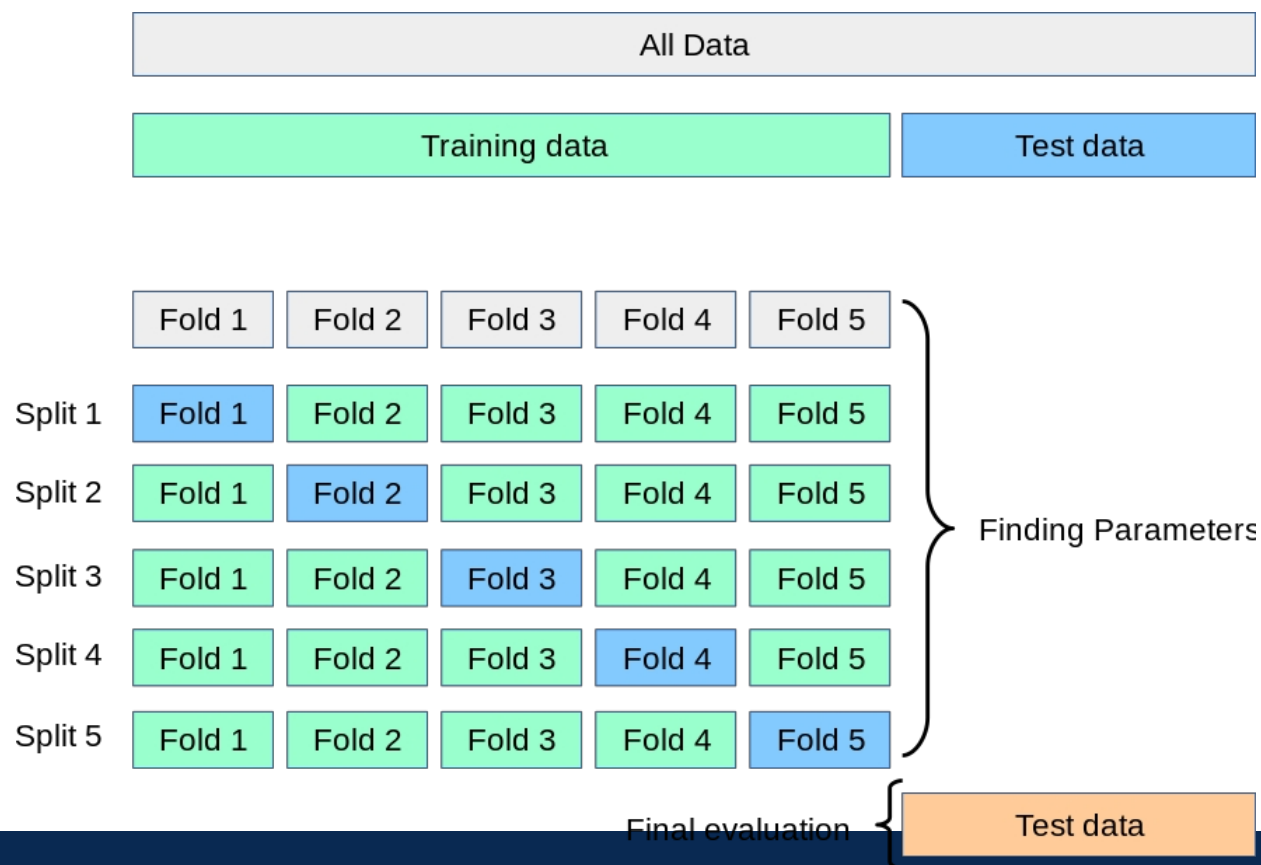
- Fácil de implementar.
- Fornece uma estimativa rápida do desempenho do modelo.
- Útil para grandes conjuntos de dados em que os recursos computacionais são limitados.

- **Limitações:**

- A estimativa do desempenho pode variar consoante a divisão aleatória dos dados.
- Pode não ser adequado para pequenos conjuntos de dados devido ao potencial desequilíbrio dos dados.

Validação cruzada

- A validação cruzada é uma técnica robusta para estimar o erro de previsão, dividindo iterativamente o conjunto de dados em vários subconjuntos.



Validação cruzada

- Tipos de validação cruzada:
 - **K-Fold Cross-Validation:** Divide os dados em k dobras, cada uma usada como uma conjunto de testes uma vez.
 - **Validação cruzada de saída única (LOOCV):** Cada observação é utilizada como um conjunto de teste uma vez, sendo o resto o conjunto de treino (k=número de amostras).
- **Vantagens:**
 - Fornece uma estimativa robusta do desempenho do modelo, calculando a média sobre múltiplas iterações.
- **Limitações:**

Validação cruzada

- Computacionalmente intensivo, especialmente para grandes conjuntos de dados ou modelos complexos.
- Pode resultar em estimativas de variância mais elevadas devido à aleatoriedade na divisão dos dados.

Viés de aprendizagem

- Representa o **erro sistemático** ou o **desvio** das previsões do modelo em relação aos valores reais.
- O viés de aprendizagem pode surgir devido à complexidade do modelo, à insuficiência de dados ou a limitações inerentes ao algoritmo.
- Tipos de preconceitos de aprendizagem:
 - **Subajuste (viés elevado)**
 - **Sobreajuste (viés baixo, variância elevada)**

Desvio e variância

- **Preconceito:**

- O viés refere-se ao erro introduzido pela aproximação de um problema do mundo real com um modelo simplificado.
- Os modelos de enviesamento elevado são demasiado simples e não conseguem captar os padrões subjacentes nos dados.

- **Desvio:**

- A variância mede a sensibilidade do modelo a pequenas flutuações nos dados de treino.
- Elevada e variância modelos são excessivamente complexos e captam ruído ou flutuações aleatórias nos dados.

- **Compensação de viés-variância:**

- Encontrar uma solução de compromisso entre o enviesamento e a variância: a redução de um aumenta normalmente o outro.
- O objetivo é encontrar o equilíbrio certo que minimize o enviesamento e a variância, resultando num desempenho ótimo do modelo.

Subadaptação

- O subajuste ocorre quando um modelo de aprendizagem automática **não consegue captar os padrões subjacentes nos dados**, resultando num fraco desempenho tanto nos dados de treino como nos dados de teste.
- **Causas:**
 - A complexidade do modelo é demasiado baixa em relação à complexidade dos dados subjacentes.
 - Características ou exemplos de formação insuficientes para captar a variabilidade dos dados.
- **Estratégias de atenuação:**
 - Aumentar a complexidade do modelo, acrescentando mais características ou utilizando um algoritmo mais complexo.
 - Afinar os hiperparâmetros para alcançar a melhor equilíbrio entre o enviesamento e variância.

- Recolher mais dados para proporcionar ao modelo um ambiente de aprendizagem mais rico.

- O sobreajuste ocorre quando um modelo de aprendizagem automática **capta ruído ou padrões irrelevantes dos dados de treino**, levando a uma fraca generalização em dados não vistos.
- **Causas:**
 - A complexidade do modelo é demasiado elevada em relação à quantidade de dados de treino disponíveis.
 - São consideradas demasiadas características ou interações, o que leva à captação de ruído em vez de sinal.
- **Estratégias de atenuação:**
 - Simplificar o modelo reduzindo a complexidade, por exemplo, diminuindo o número de características ou utilizando técnicas de regularização.
 - Aumentar os dados de formação para fornecer ao modelo exemplos mais diversificados.
 - Utilizar técnicas como a validação cruzada para avaliar o desempenho do modelo e seleccionar o modelo com melhor desempenho.

Recursos

- Kelleher, J. D., Namee, B. M., C D'Arcy, A. (2015). Fundamentos da aprendizagem automática para a análise preditiva de dados. Londres, Inglaterra: MIT Press.
- https://courses.washington.edu/me333afe/Bias_Variance_Tradeoff.pdf