Universidade Federal do Paraná

Laboratório de Estatística e Geoinformação - LEG

Métodos de reamostragem

Eduardo Vargas Ferreira

Função custo

Função custo

- **Matriz de confusão:** é um layout de tabela que permite a visualização do desempenho do algoritmo.

Paciente \ Diagnosticado	Doente	Saudável
Doente	1000	200
Saudável	800	8000

E-mail \ Avaliado	Spam	Não-Spam
Spam	100	170
Não-Spam	30	700

Função custo

- **Acurácia:** é a razão entre as predições corretas pelo total.

Paciente \ Diagnosticado	Doente	Saudável
Doente	1000	200
Saudável	800	8000

$$\text{Acurácia} = \frac{1000 + 8000}{10000} = 90\%$$

E-mail \ Avaliado	Spam	Não-Spam
Spam	100	170
Não-Spam	30	700

$$\text{Acurácia} = \frac{100 + 700}{1000} = 80\%$$

Função custo

- **Precisão:** é o número de verdadeiros positivos, dividido pelo número de positivos estimados pelo modelo.

Paciente \ Diagnosticado	Doente	Saudável
Doente	1000	200
Saudável	800	8000

$$\text{Precisão} = \frac{1000}{1000 + 800} = 55,6\%$$

E-mail \ Avaliado	Spam	Não-Spam
Spam	100	170
Não-Spam	30	700

$$\text{Precisão} = \frac{100}{100 + 30} = 76,9\%$$

Função custo

- **Recall:** dado que o estado verdadeiro é positivo, qual a proporção de verdadeiro positivo.

Paciente \ Diagnosticado	Doente	Saudável
Doente	1000	200
Saudável	800	8000

$$\text{Recall} = \frac{1000}{1000 + 200} = 83,3\%$$

E-mail \ Avaliado	Spam	Não-Spam
Spam	100	170
Não-Spam	30	700

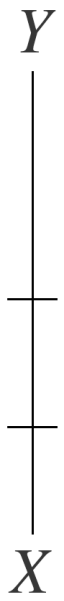
$$\text{Recall} = \frac{100}{100 + 170} = 37\%$$

Função custo

- F_1 **score:** é um compromisso entre a **Precisão** e o **Recall** através de uma média harmônica.

$$\text{Média aritmética} = \frac{x+y}{2}$$

$$\text{Média harmônica} = 2 \cdot \frac{x \cdot y}{x+y}$$



$$F_1 \text{ score} = 2 \times \frac{\text{Precisão} \cdot \text{Recall}}{\text{Precisão} + \text{Recall}}$$

- F_β **score:** é uma generalização do F_1 score, em que β representa a influência da **Precisão** no resultado final.

$$F_\beta \text{ score} = (1+\beta^2)\frac{\text{Precisão} \cdot \text{Recall}}{\beta^2 \cdot \text{Precisão} + \text{Recall}}$$

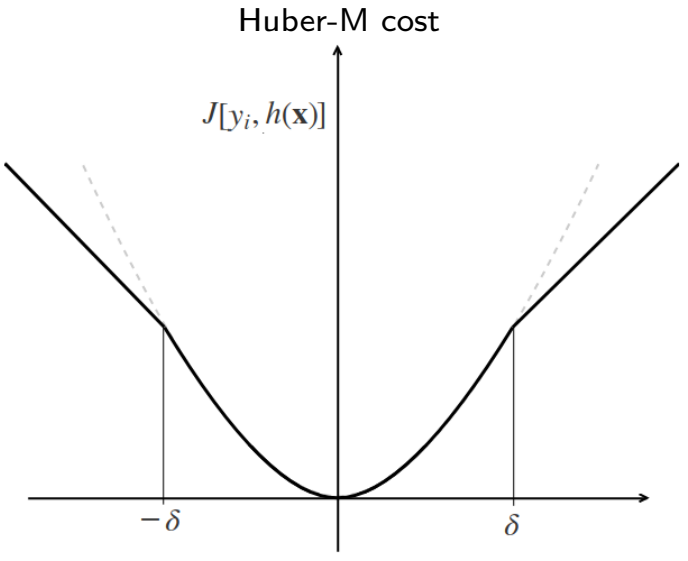
Função custo

- **Soma de quadrados dos desvios (SQD)**

$$J[y_i, h(\boldsymbol{x})] = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}[y_i - h(x_i)]^2$$

- **Soma dos desvios absolutos (SDA)**

$$J[y_i, h(\boldsymbol{x})] = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|y_i - h(x_i)|$$

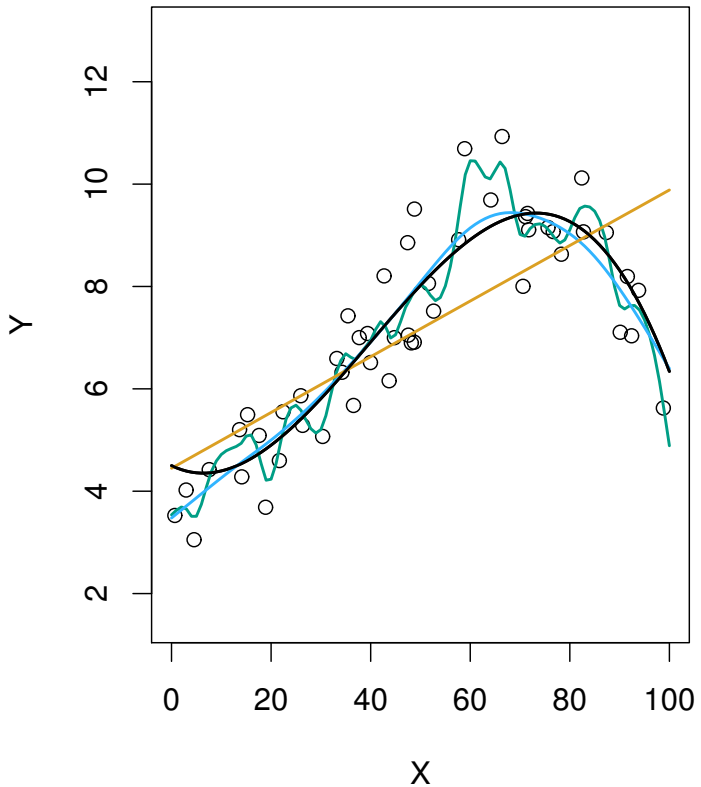


- **Huber-M cost**

$$J[y_i, h(\boldsymbol{x})] = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\begin{cases}\frac{1}{2}[y_i - h(x_i)]^2, & \text{para } |y - h(\boldsymbol{x}_i)| \leq \delta, \\ \delta\,|y_i - h(x_i)| - \frac{1}{2}\delta^2, & \text{caso contrário.}\end{cases}$$

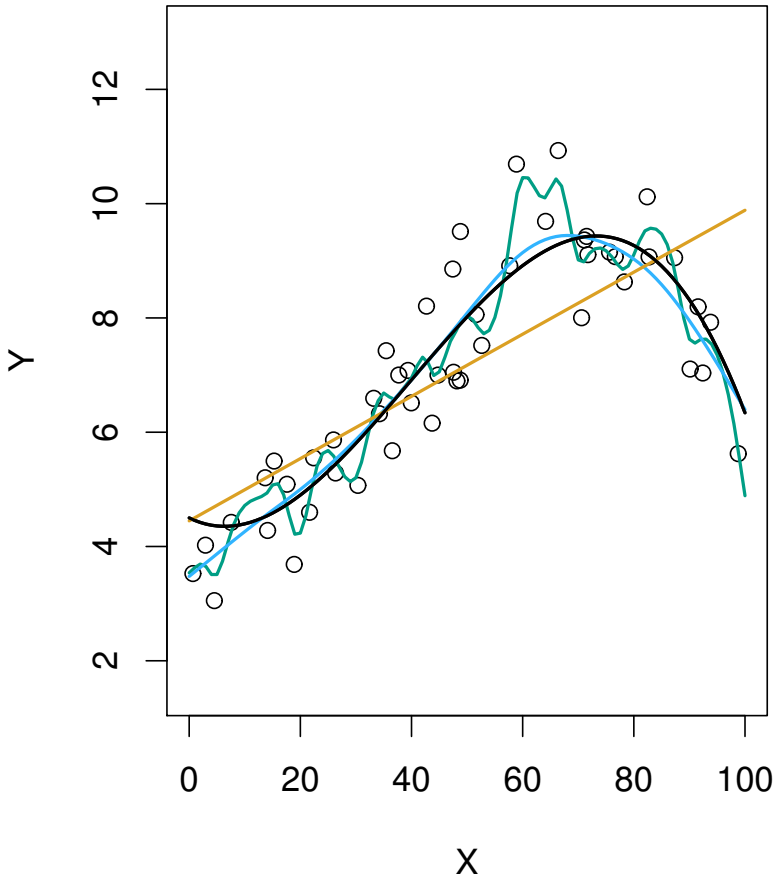
Exemplo simulado

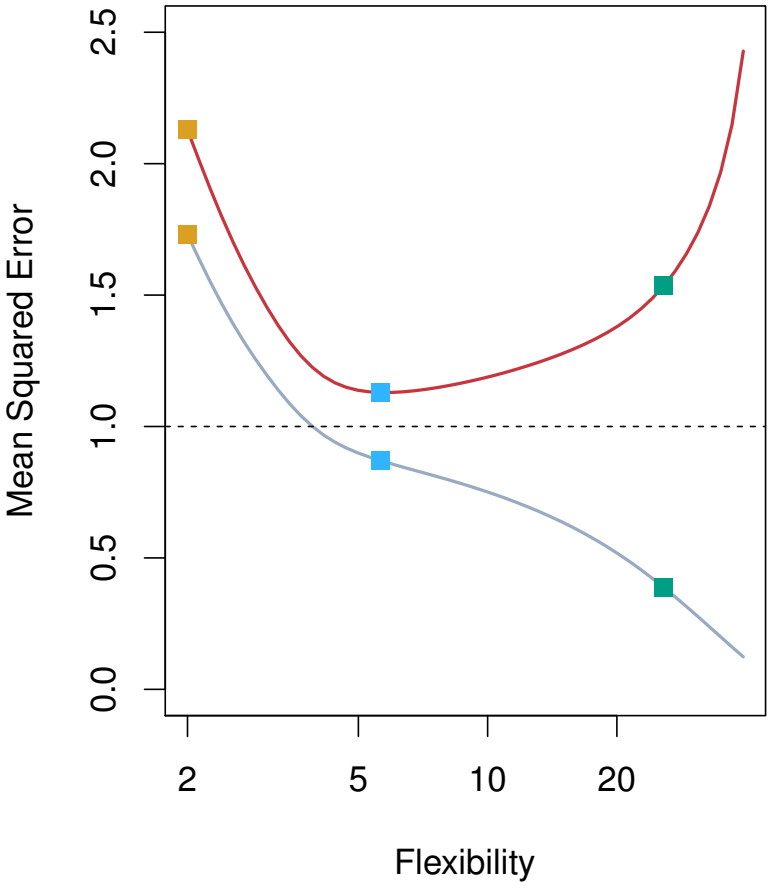
- Suponha que estamos interessados em estudar a relação entre X e Y;



- Podemos definir varias funções, $h(\boldsymbol{x})$. Mas, qual fornece a melhor predição? **Resposta:** a que apresentar menor custo (ou risco).

Exemplo simulado





Tipos de dados

Exercícios

Treinamento

Simulado

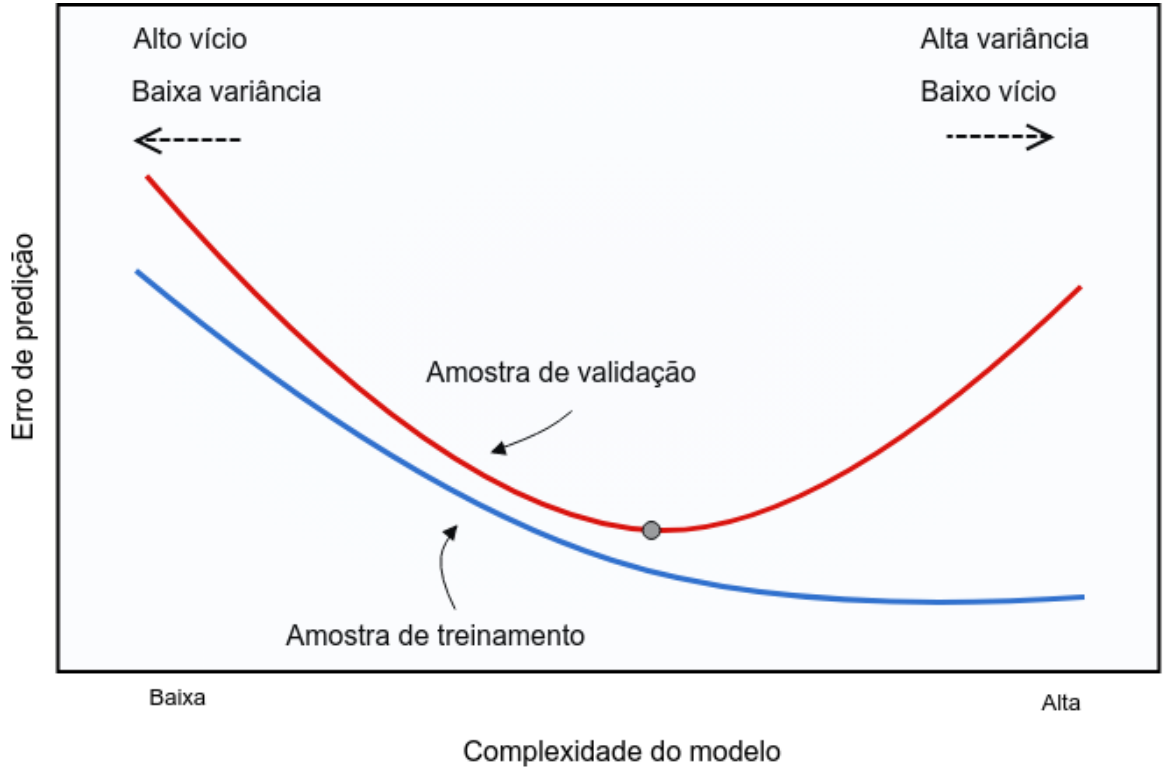
Validação

Vestibular

Teste

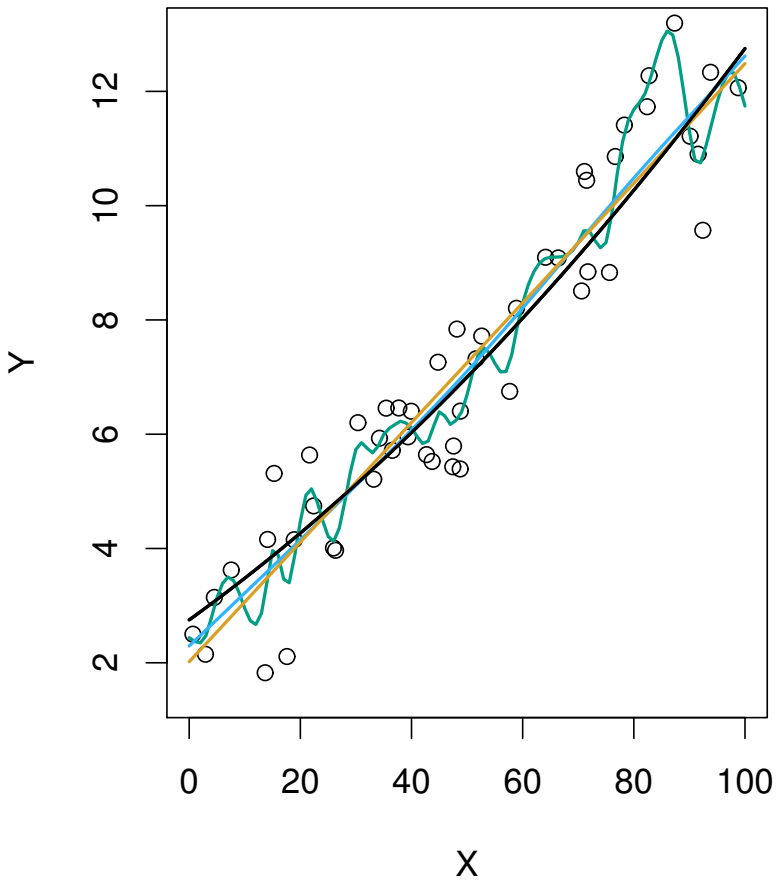
Dados de treino *x* dados de validação

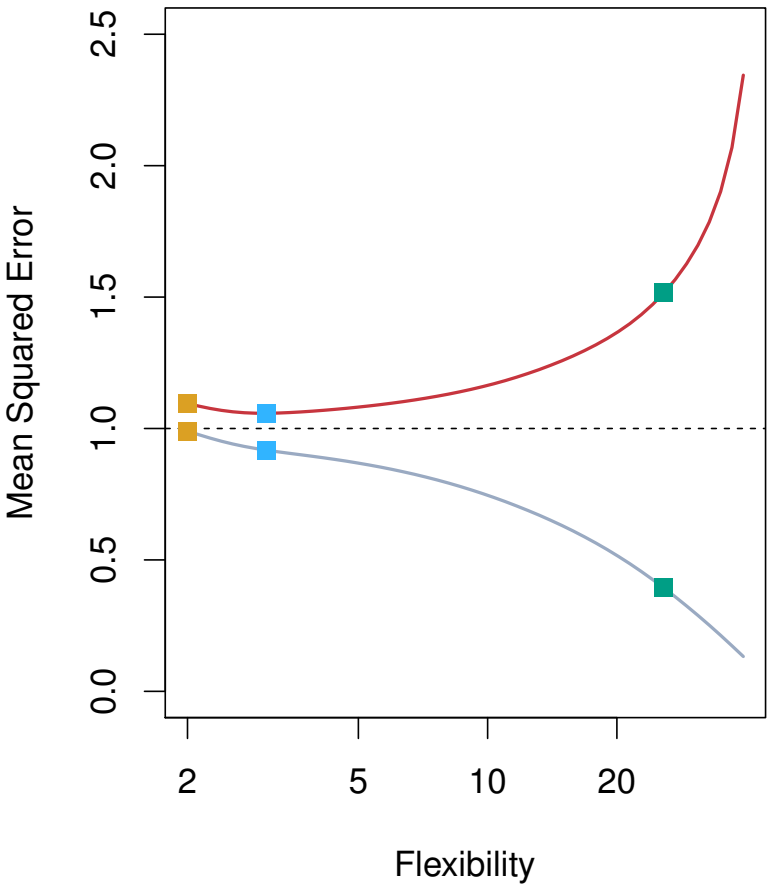
- **Erro do treino:** é calculado mediante aplicação do método estatístico nos dados de treino;



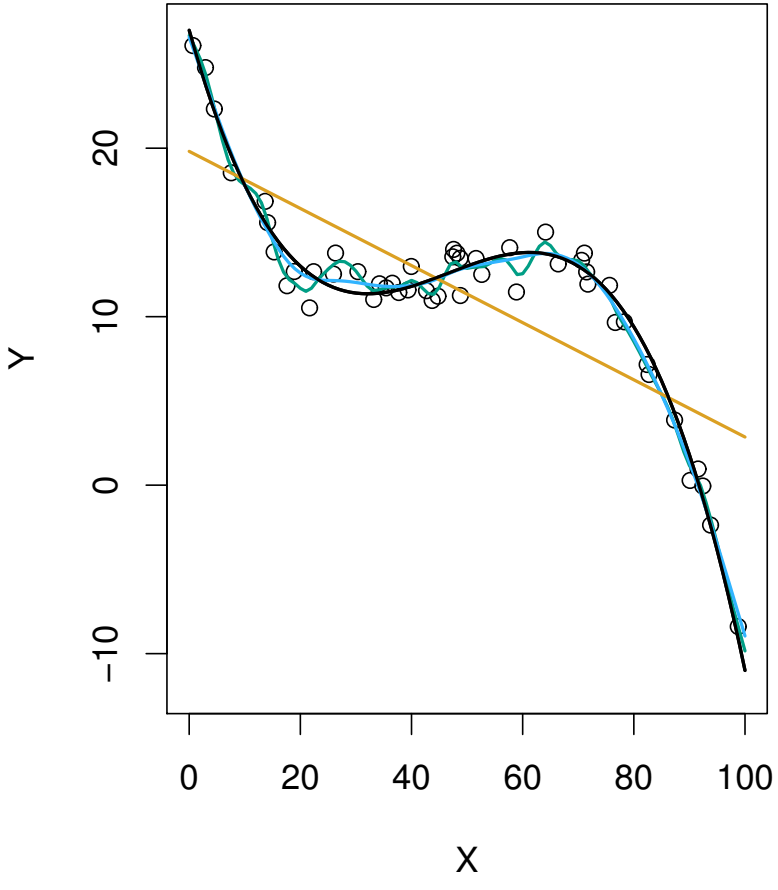
- **Erro de validação:** média do erro resultante da predição de uma nova observação (que não fazia parte dos dados de treino).

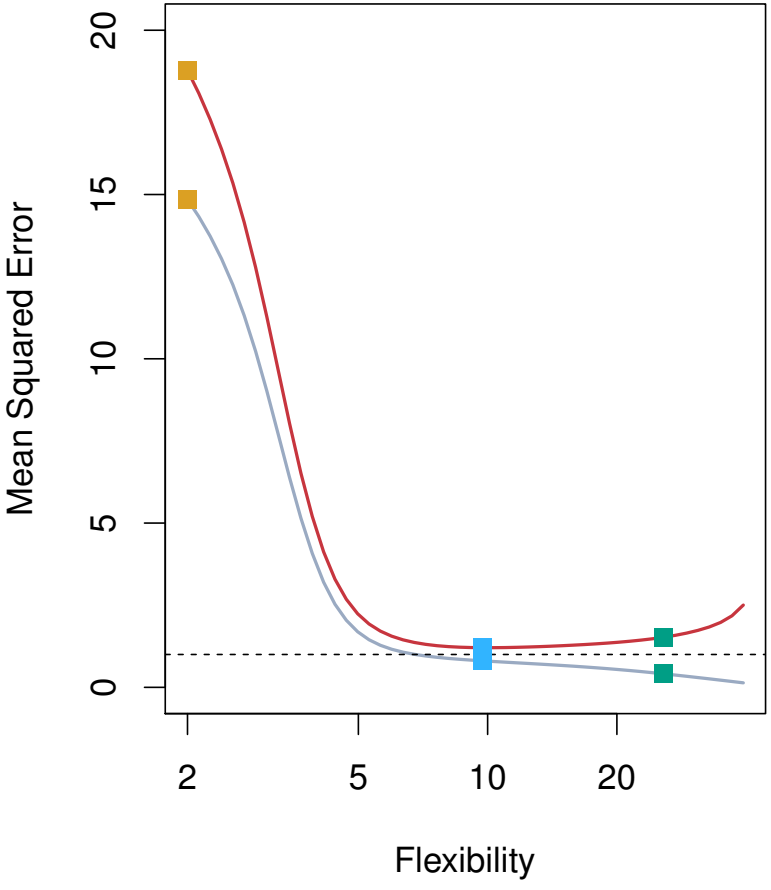
Exemplo simulado





Exemplo simulado

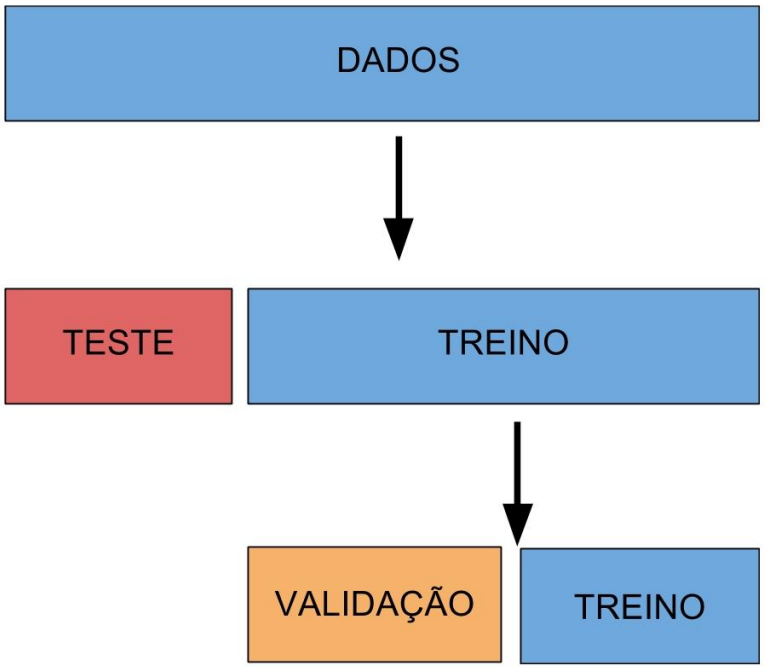




Validação holdout

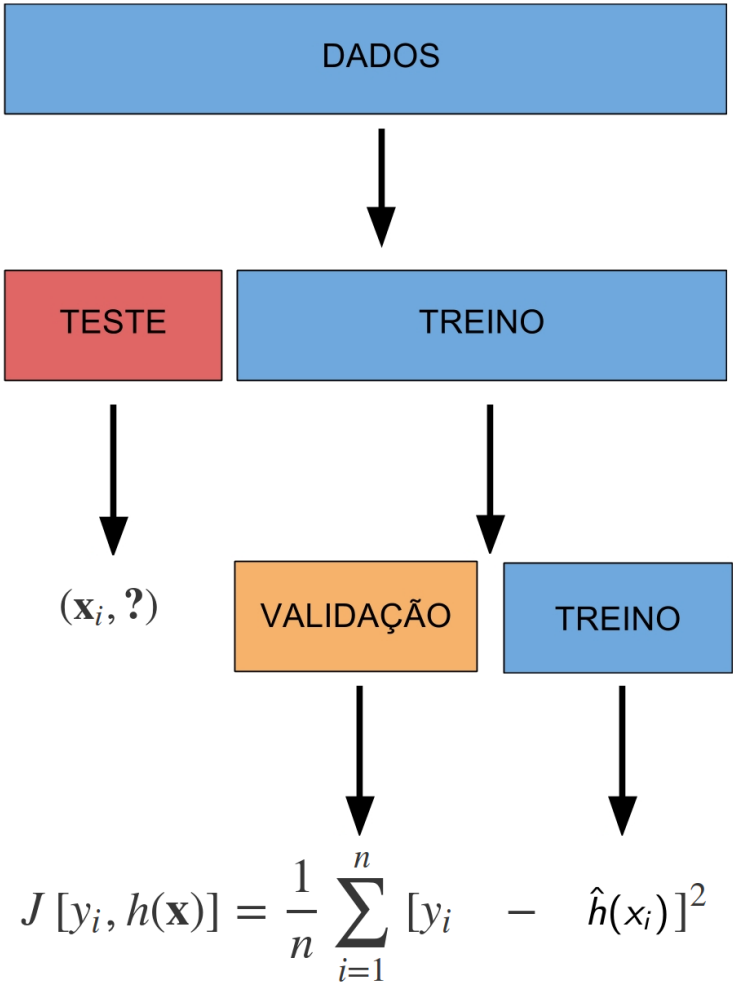
Validação holdout

- Nesta abordagem, dividimos os dados em apenas duas partes: **treinamento** e **validação**;



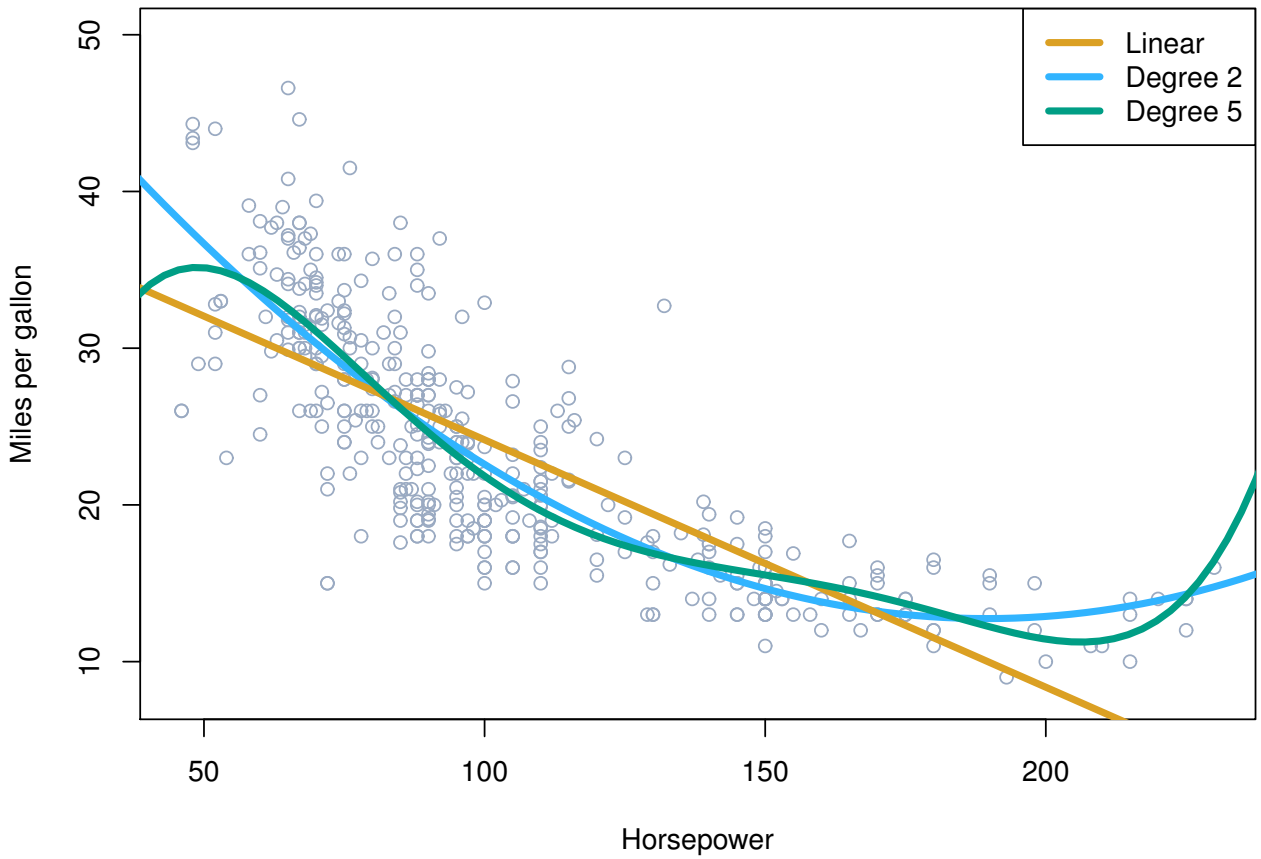
- O erro resultante dos dados de validação fornece uma estimativa do **erro do teste**, baseando-se em determinado indicador.

Validação holdout



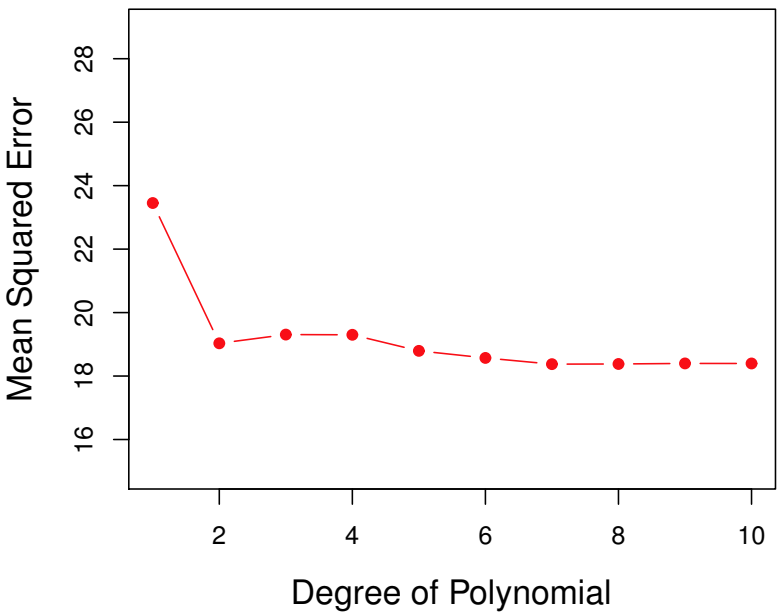
Exemplo: `Auto` data set

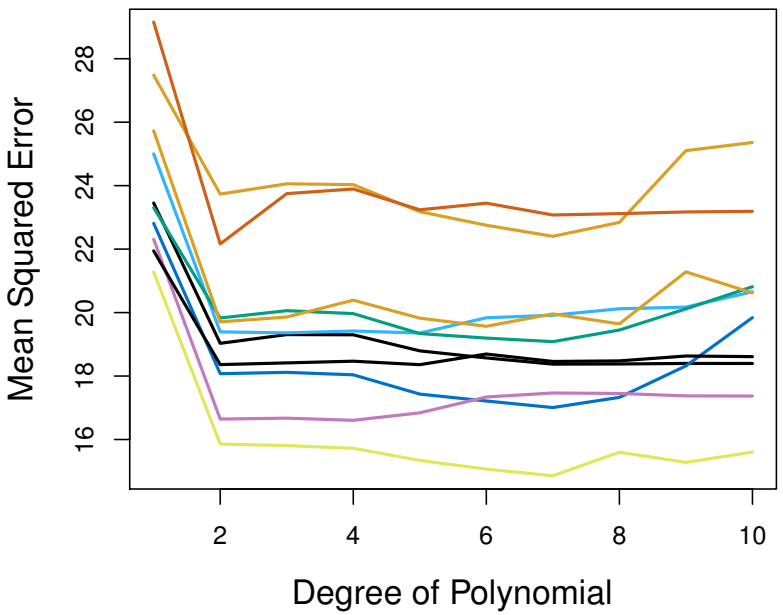
- Neste exemplo, estamos avaliando a relação entre consumo de combustível e potência do automóvel.



Exemplo: `Auto` data set

- Separamos aleatoriamente as 392 observações em duas amostras: treinamento (com 196 dados) e validação (196 dados);





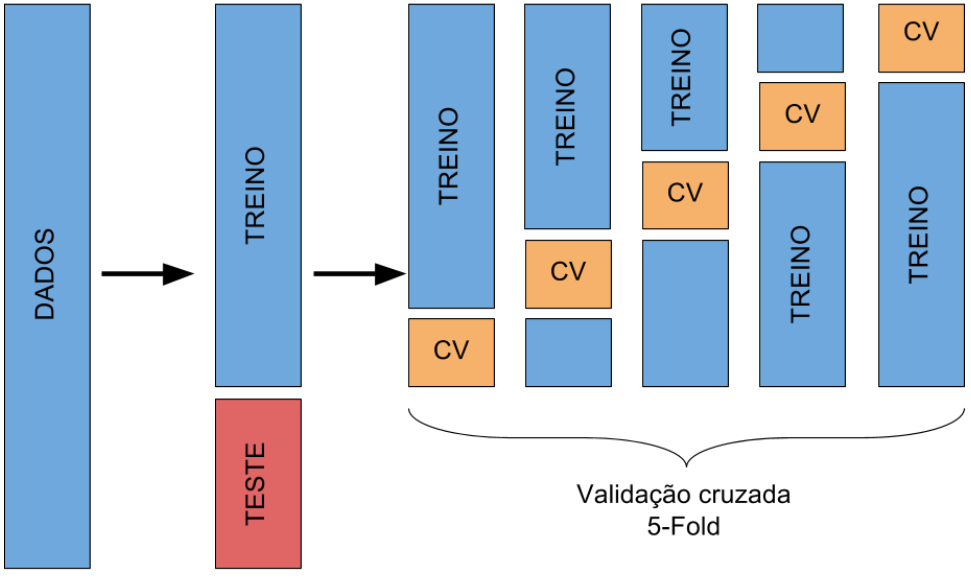
- O gráfico da esquerda temos **divisão única** e da direita **divisão múltipla**.

Validação cruzada por $k - fold$

Validação cruzada por $k - fold$

- O método consiste em dividir os dados em K partes iguais. Ajusta-se o modelo com $K - 1$ partes, e uma é destinada para às predições;

- Isto é feito para $k = 1 : K$, em seguida os resultados são combinados;



Validação cruzada por k – *fold*

- Sejam as K partes denotadas por $C_1, C_2, \ldots, C_K$, em que C_k representa o índice da k-ésima parte;

- Considere que temos n_k observações na parte k: se n é múltiplo de K, então $n_k = n/K$. Calcule:

$$
\begin{aligned}
CV_{(K)} &= \sum_{k=1}^{K} \frac{n_k}{n} EQM_k \\
&= \frac{n_1}{n} EQM_1 + \frac{n_2}{n} EQM_2 + \frac{n_3}{n} EQM_3 + \ldots + \frac{n_K}{n} EQM_K
\end{aligned}
$$

- Em que $EQM_k = \sum_{i \in C_k} \left[y_i - \hat{h}(x_i) \right]^2 / n_k$.

Validação cruzada por k – *fold*

- Sejam as K partes denotadas por $C_1, C_2, \ldots, C_K$, em que C_k representa o índice da k-ésima parte;

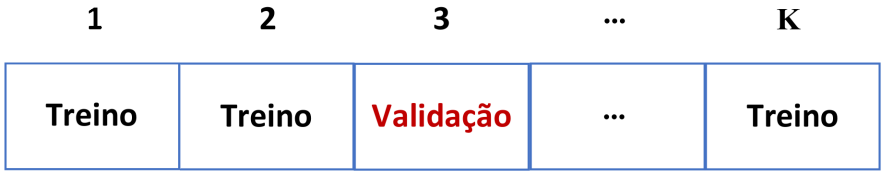
- Considere que temos n_k observações na parte k: se n é múltiplo de K, então $n_k = n/K$. Calcule:

$$
\begin{aligned}
CV_{(K)} &= \sum_{k=1}^{K} \frac{n_k}{n} EQM_k \\
&= \frac{n_1}{n} EQM_1 + \frac{n_2}{n} EQM_2 + \frac{n_3}{n} EQM_3 + \ldots + \frac{n_K}{n} EQM_K
\end{aligned}
$$

- Em que $EQM_k = \sum_{i \in C_k} \left[y_i - \hat{h}(x_i) \right]^2 / n_k$.

Validação cruzada por k – *fold*

- Sejam as K partes denotadas por $C_1, C_2, \ldots, C_K$, em que C_k representa o índice da k-ésima parte;



- Considere que temos n_k observações na parte k: se n é múltiplo de K, então $n_k = n/K$. Calcule:

$$
\begin{aligned}
CV_{(K)} &= \sum_{k=1}^{K} \frac{n_k}{n} EQM_k \\
&= \frac{n_1}{n} EQM_1 + \frac{n_2}{n} EQM_2 + \frac{n_3}{n} EQM_3 + \ldots + \frac{n_K}{n} EQM_K
\end{aligned}
$$

- Em que $EQM_k = \sum_{i \in C_k} \left[y_i - \hat{h}(x_i) \right]^2 / n_k$.

Validação cruzada por k – *fold*

- Sejam as K partes denotadas por $C_1, C_2, \ldots, C_K$, em que C_k representa o índice da k-ésima parte;

- Considere que temos n_k observações na parte k: se n é múltiplo de K, então $n_k = n/K$. Calcule:

$$
\begin{aligned}
CV_{(K)} &= \sum_{k=1}^{K} \frac{n_k}{n} EQM_k \\
&= \frac{n_1}{n} EQM_1 + \frac{n_2}{n} EQM_2 + \frac{n_3}{n} EQM_3 + \ldots + \frac{n_K}{n} EQM_K
\end{aligned}
$$

- Em que $EQM_k = \sum_{i \in C_k} \left[y_i - \hat{h}(x_i) \right]^2 / n_k$.

CV em problemas de classificação

- Sejam as K partes denotadas por $C_1, C_2, \ldots, C_K$, em que C_k representa o índice da k-ésima parte;

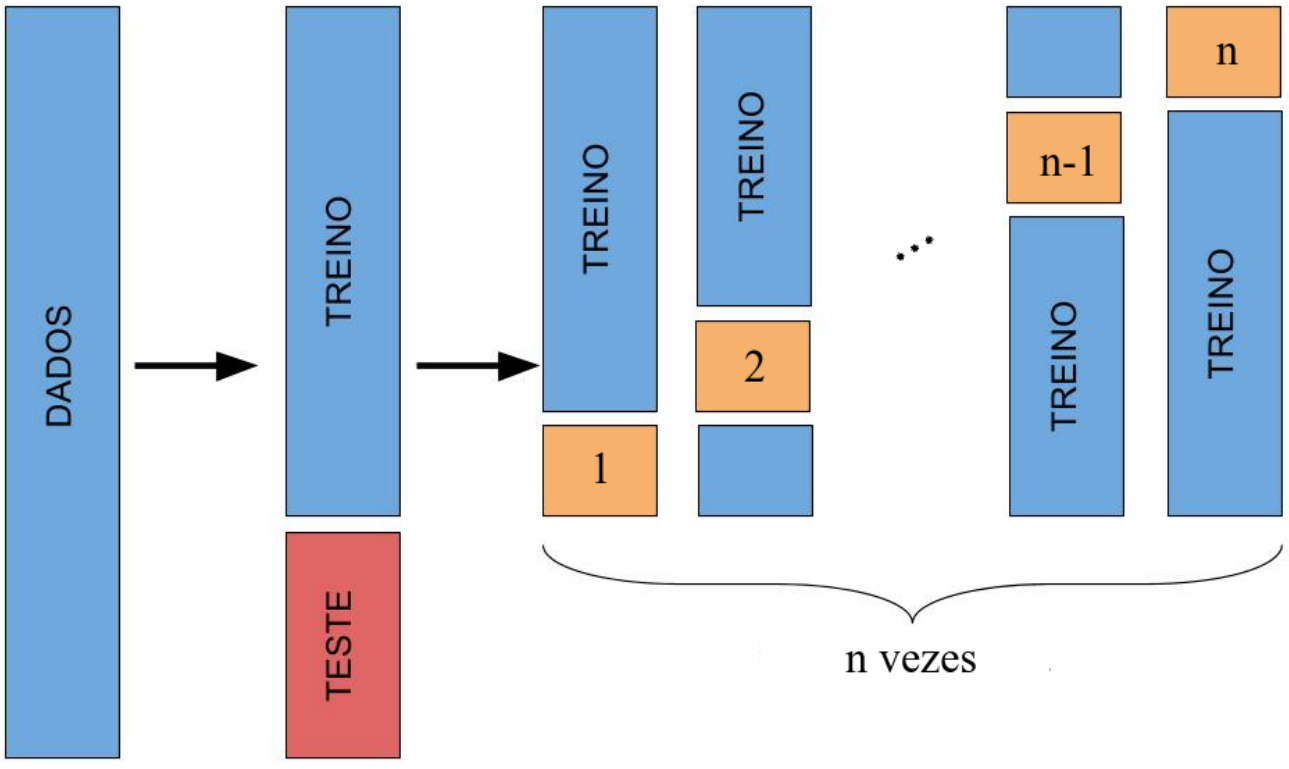
- Considere que temos n_k observações na parte k: se n é múltiplo de K, então $n_k = n/K$. Calcule:

$$
\begin{aligned}
CV_{(K)} &= \sum_{k=1}^{K} \frac{n_k}{n} Err_k \\
&= \frac{n_1}{n} Err_1 + \frac{n_2}{n} Err_2 + \frac{n_3}{n} Err_3 + \ldots + \frac{n_K}{n} Err_K
\end{aligned}
$$

- Em que $Err_k = \sum_{i \in C_k} \mathbb{1}(y_i \neq \hat{y}_i)/n_k$, e $\hat{y}_i$ é a classificação da i-ésima observação.

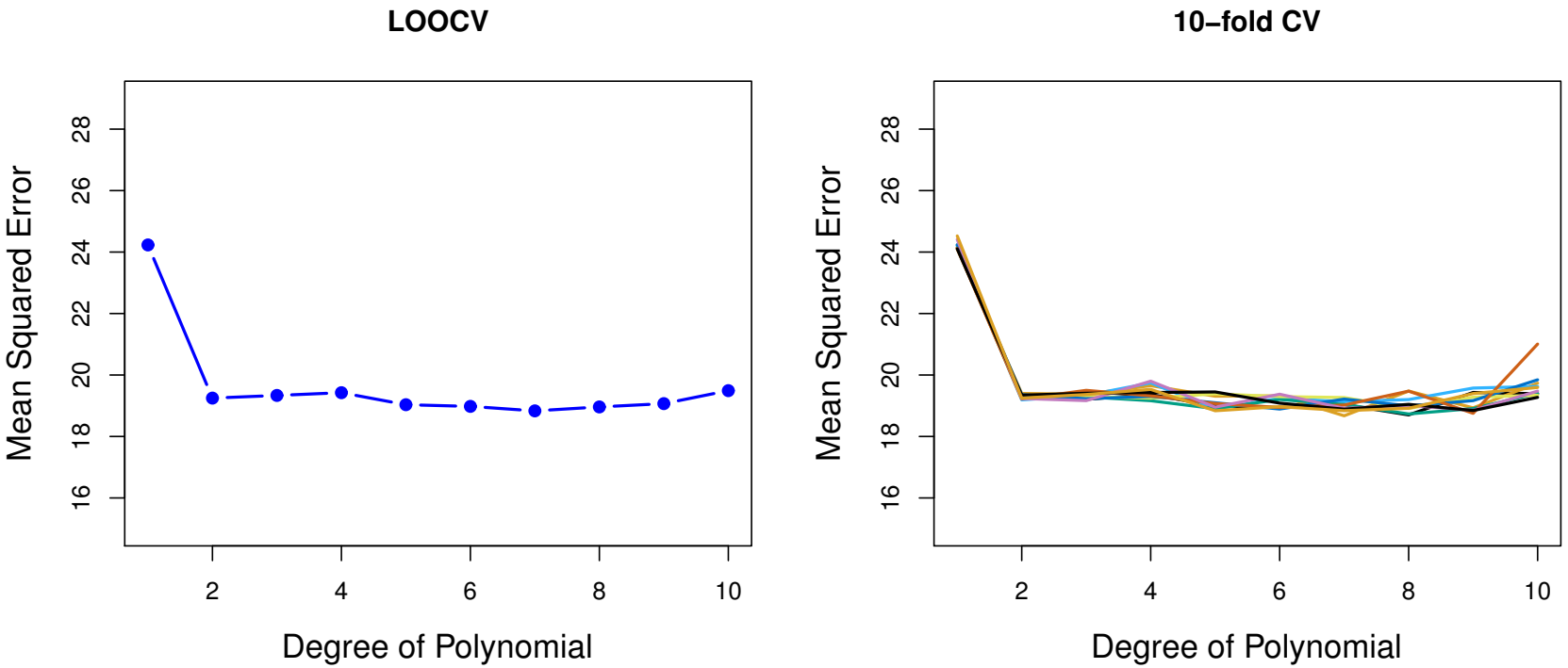
Validação cruzada leave-one-out

Validação cruzada leave-one-out (LOOCV)



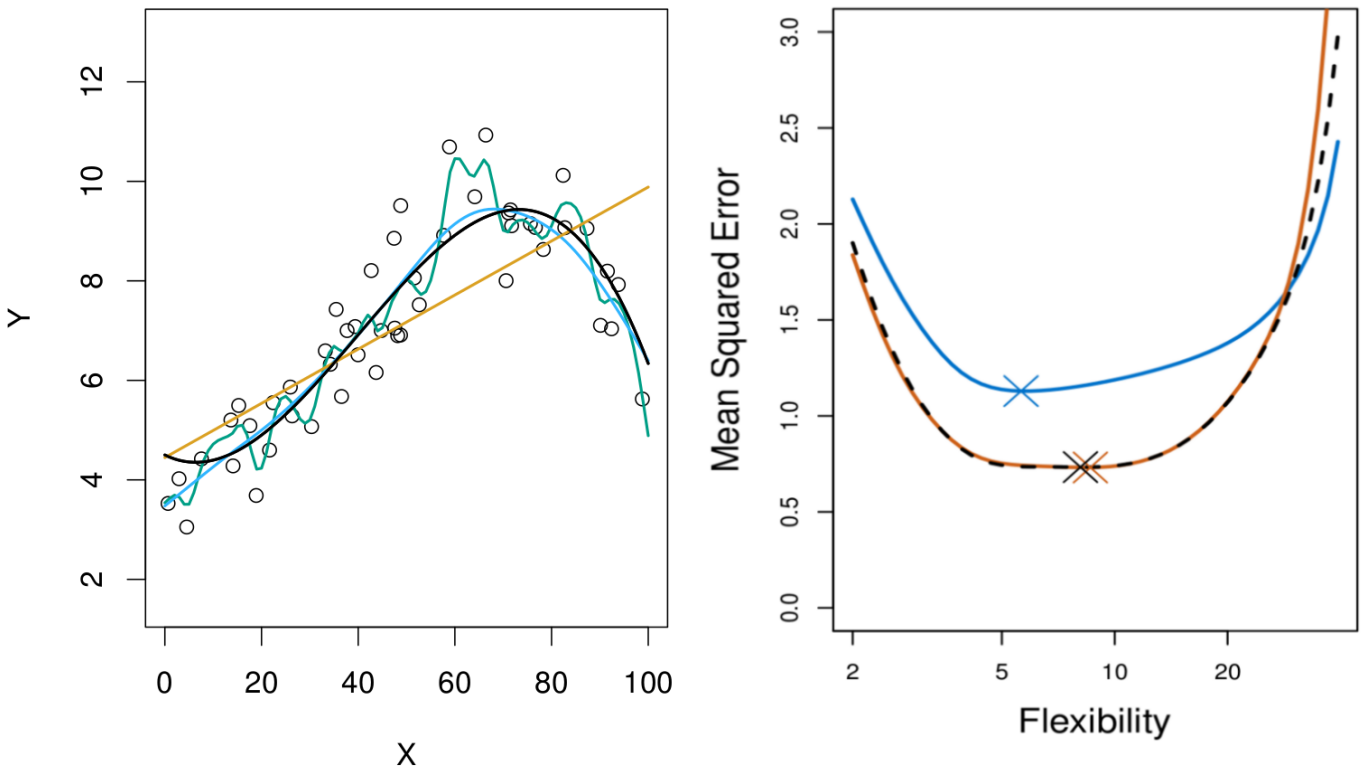
Exemplo: `Auto` data set

- O gráfico da direita apresenta 9 diferentes validações cruzadas 10 – *fold*. Em cada uma, temos uma nova partição dos dados.



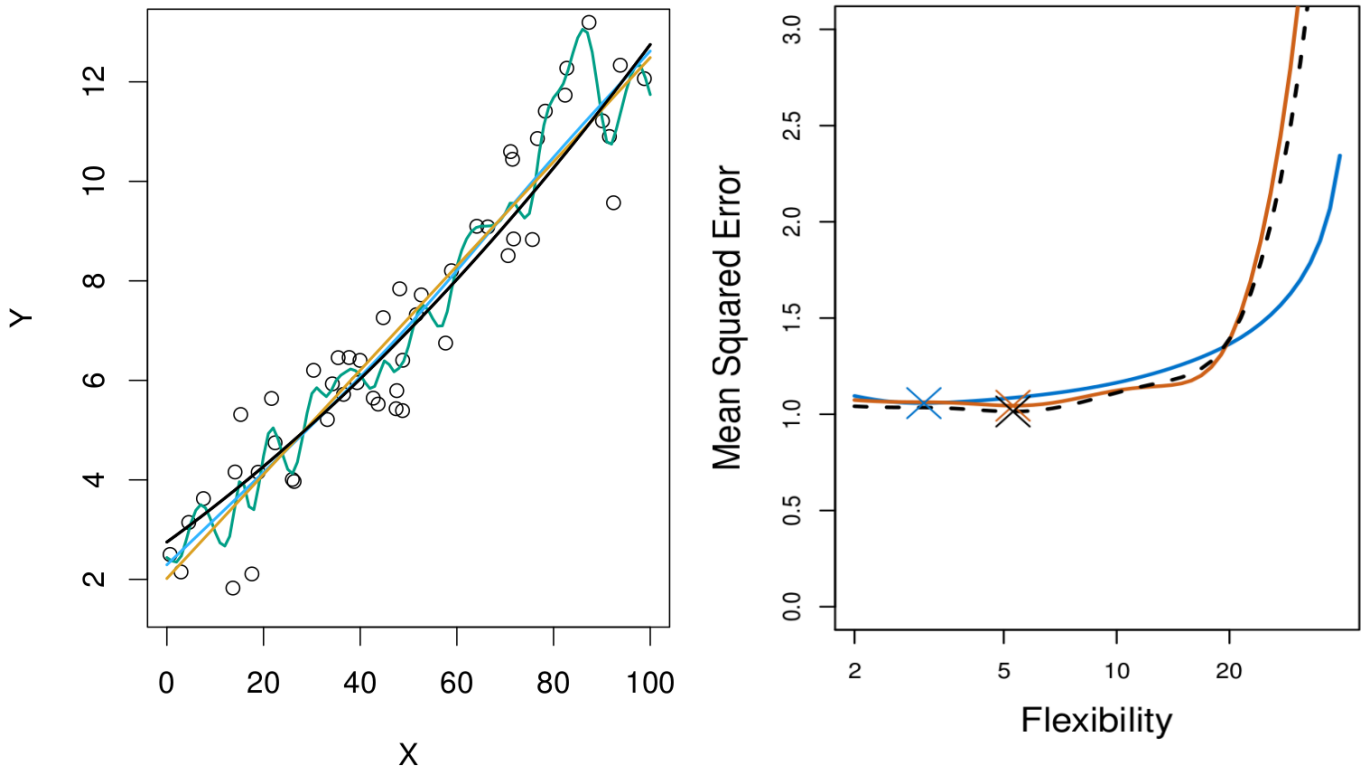
Exemplo simulado

- O gráfico abaixo apresenta a verdadeira curva do EQM em azul, a estimativa LOOCV pontilhada e 10 – *fold* em laranja;



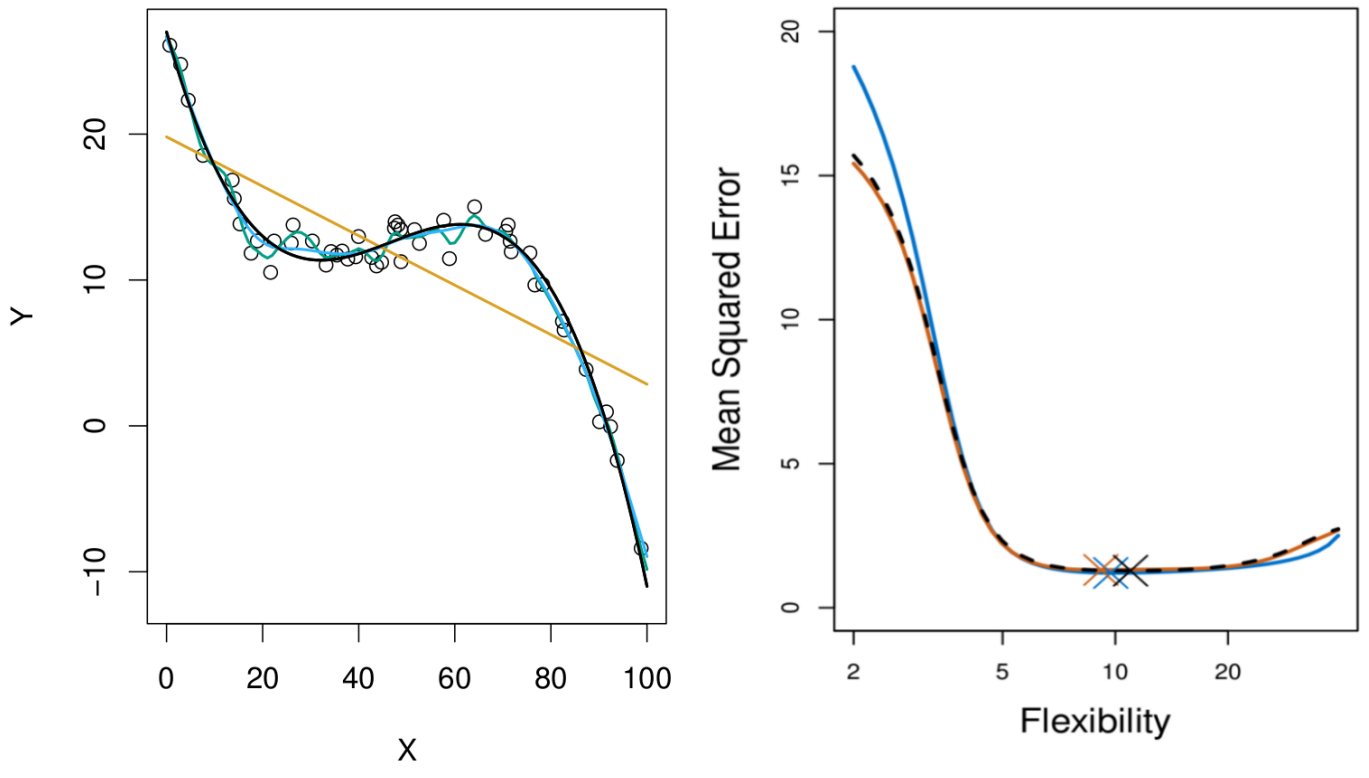
Exemplo simulado

- O gráfico abaixo apresenta a verdadeira curva do EQM em azul, a estimativa LOOCV pontilhada e 10 – *fold* em laranja;



Exemplo simulado

- O gráfico abaixo apresenta a verdadeira curva do EQM em azul, a estimativa LOOCV pontilhada e 10 – *fold* em laranja;

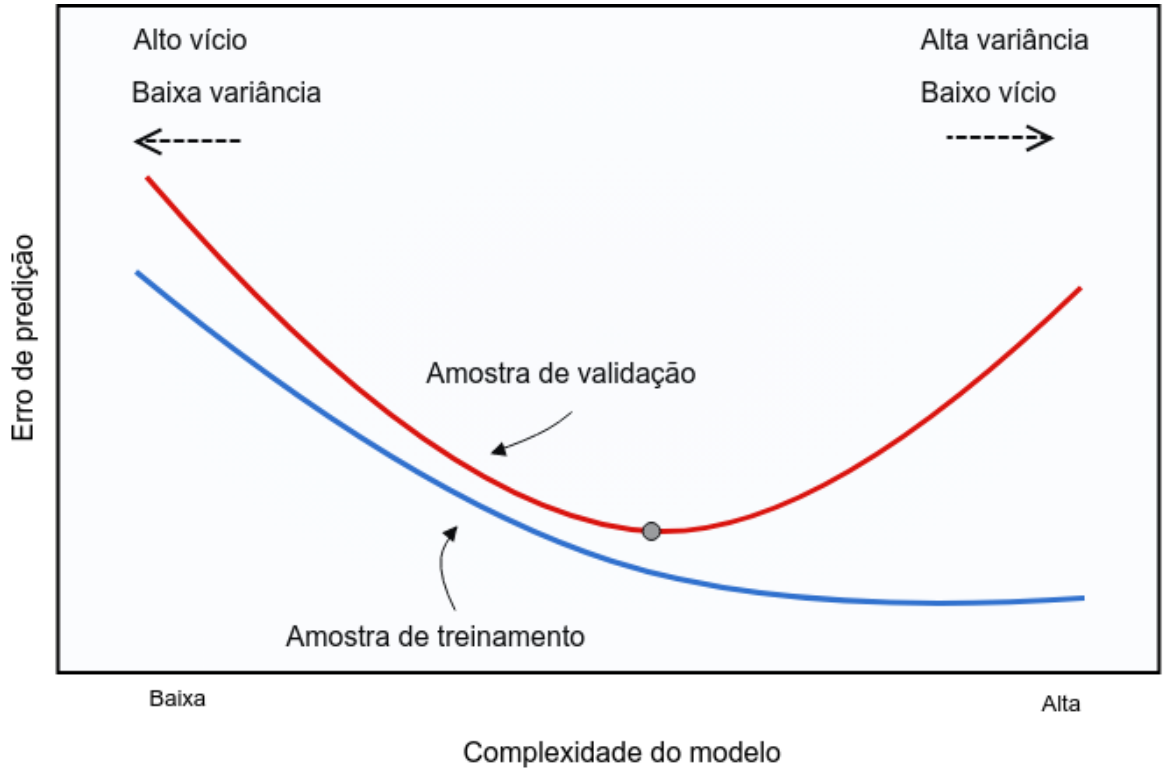


Bias-Variance Trade-Off

Bias-Variance Trade-Off

- Um bom desempenho no conjunto de teste requer um baixo erro quadrático médio. Porém, note que

$$\mathrm{E}\left[y_0 - h(\boldsymbol{x}_0)\right]^2 = \mathrm{V}ar\left[h(\boldsymbol{x}_0)\right] + \mathrm{Vício}\left[h(\boldsymbol{x}_0)\right]^2 + \mathrm{V}ar(\varepsilon).$$



Bias-Variance Trade-Off

- Um bom desempenho no conjunto de teste requer um baixo erro quadrático médio. Porém, note que

$$\mathrm{E}\left[y_0 - h(\boldsymbol{x}_0)\right]^2 = \mathrm{V}ar\left[h(\boldsymbol{x}_0)\right] + \mathrm{Vício}\left[h(\boldsymbol{x}_0)\right]^2 + \mathrm{V}ar(\varepsilon).$$

Variância

  - ⋆ Refere-se ao quanto $h(\boldsymbol{x}_0)$ muda quando a estimamos utilizando diferentes dados de treino;
  - ⋆ Em geral, quanto mais flexível o modelo, maior a variância.

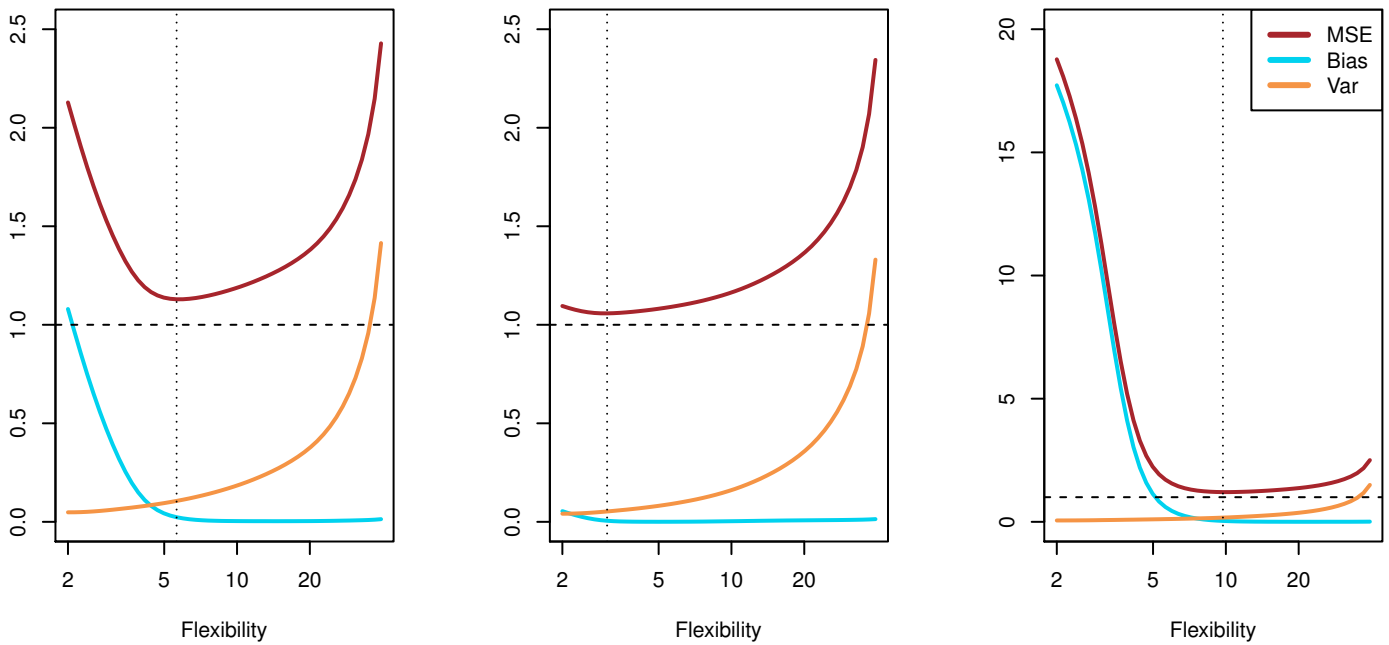
Vício

  - ⋆ Refere-se ao erro de aproximar um problema real (extremamente complicado) por uma função simples;
  - ⋆ Em geral, quanto mais simples o modelo, maior o vício.

Bias-Variance Trade-Off

- Um bom desempenho no conjunto de teste requer um baixo erro quadrático médio. Porém, note que

$$\mathrm{E}\left[y_0 - h(\boldsymbol{x}_0)\right]^2 = \mathrm{Var}\left[h(\boldsymbol{x}_0)\right] + \mathrm{Vício}\left[h(\boldsymbol{x}_0)\right]^2 + \mathrm{Var}(\varepsilon).$$



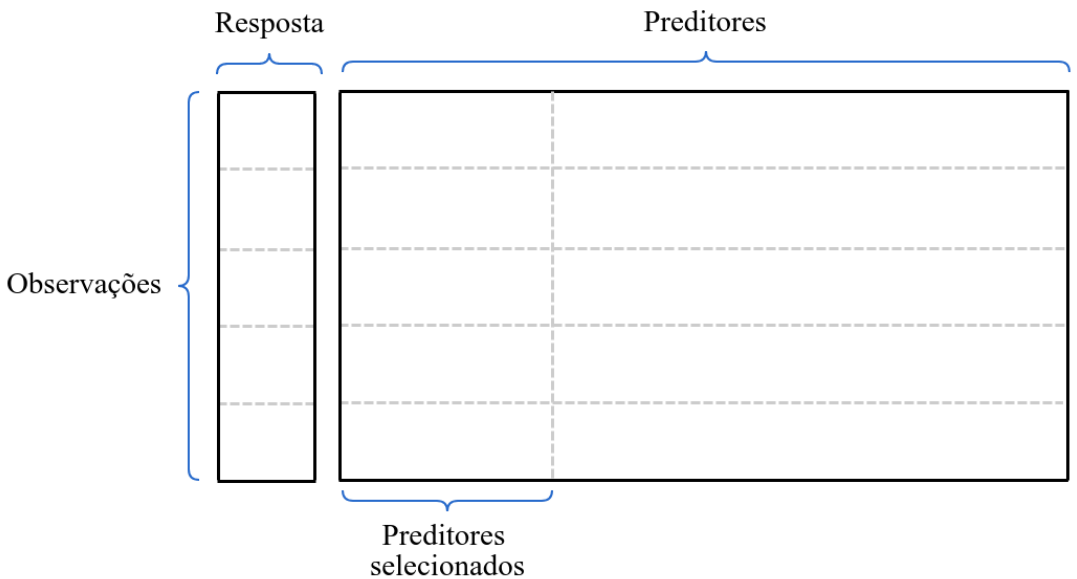
Validação cruzada: certo e errado

Validação cruzada: certo e errado

- Considere um classificador aplicado aos dados de duas classes:

  1. Começando com 5000 preditores e amostra de tamanho 50, filtramos os 100 preditores com maior correlação entre as classes;

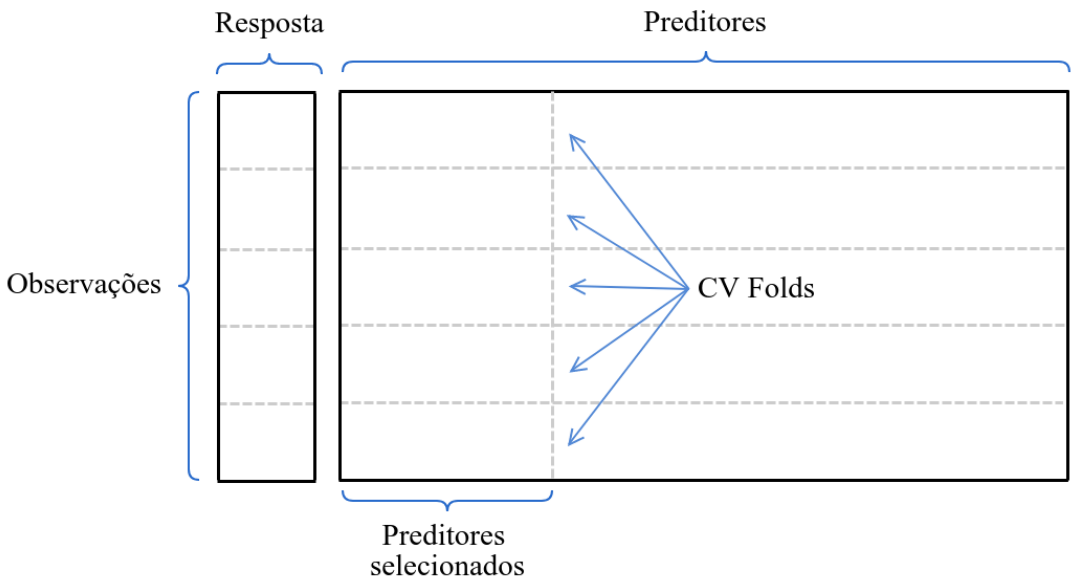
  2. Aplicamos um classificador utilizando somente os 100 preditores.



- Como podemos estimar o desempenho do teste para este classificador?
  Validação cruzada

Validação cruzada: abordagem errada!

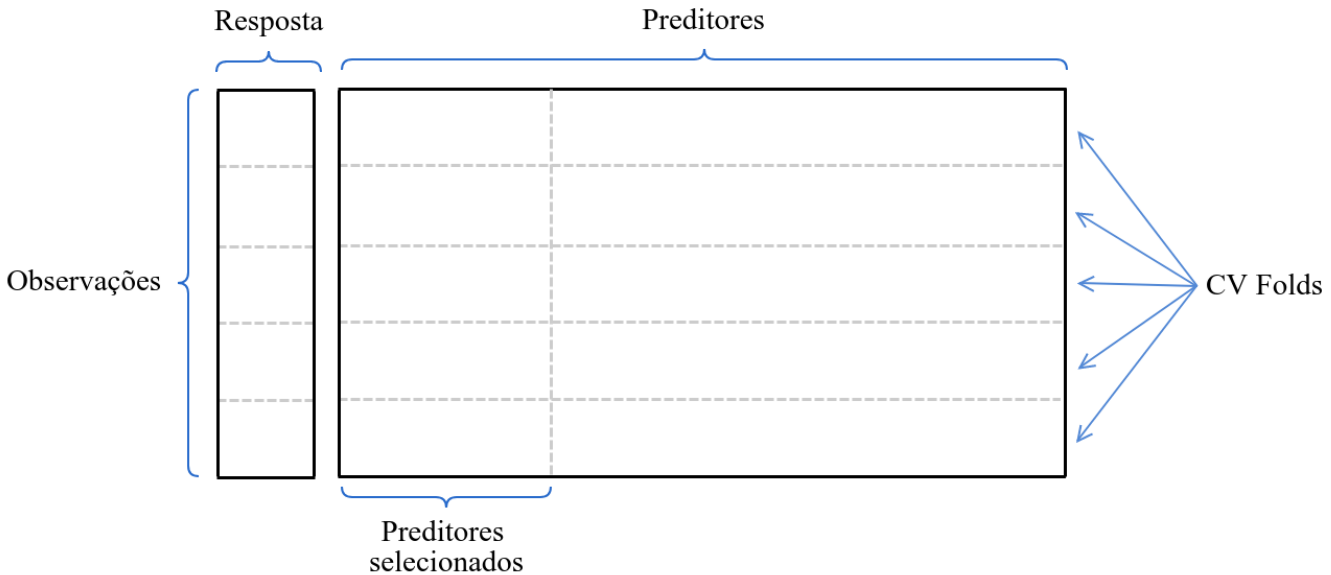
- Podemos aplicar validação cruzada no Passo 2, esquecendo o Passo 1 (não incorporando o fato de termos eliminado 4900 preditores)? **Não!**



- Isso seria ignorar o fato de que no Passo 1 o procedimento já viu os rótulos de treinamento, e aprendeu com isso.

Validação cruzada: abordagem certa!

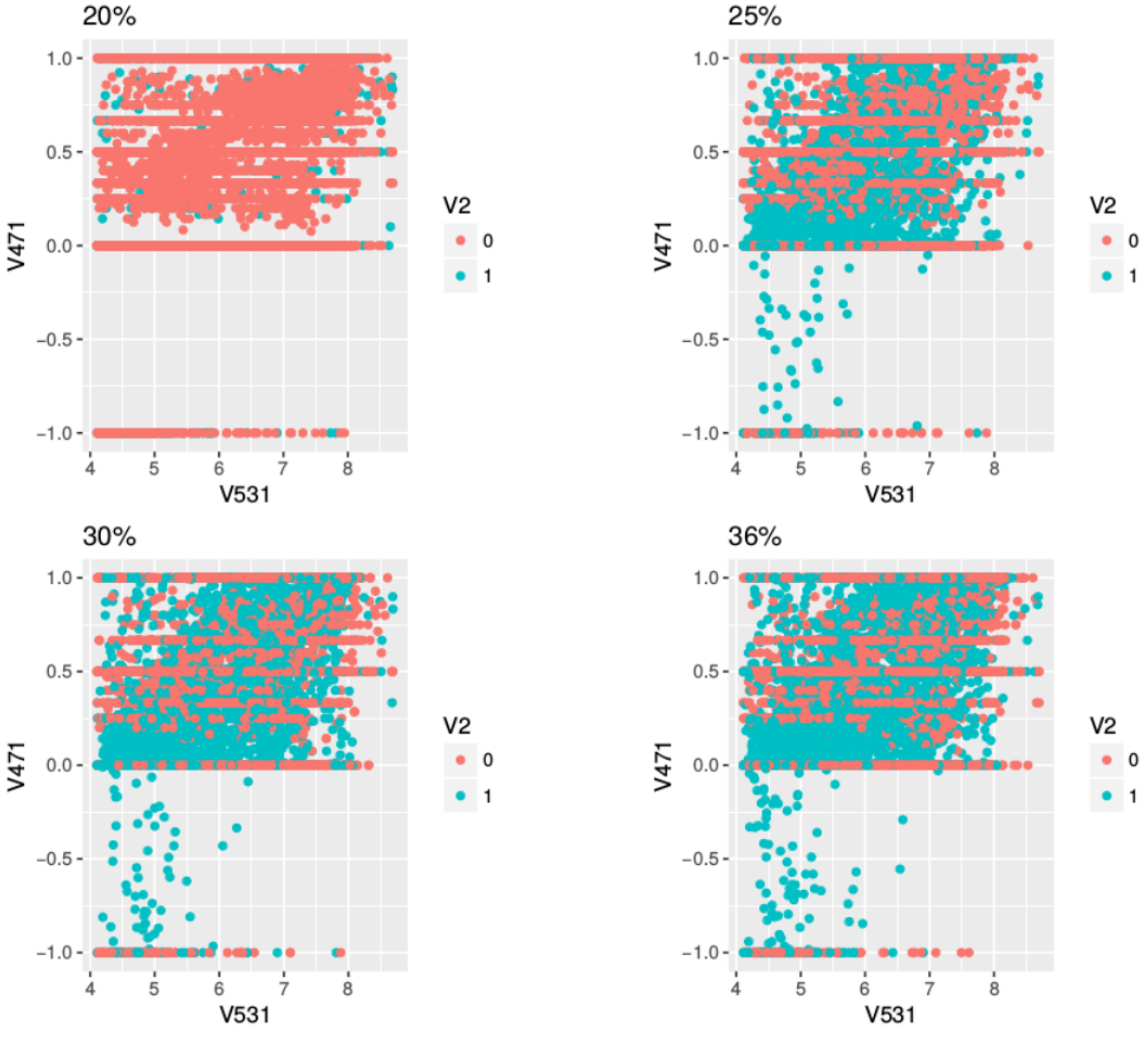
- Podemos aplicar validação cruzada no Passo 2, esquecendo o Passo 1 (não incorporando o fato de termos eliminado 4900 preditores)? **Não!**



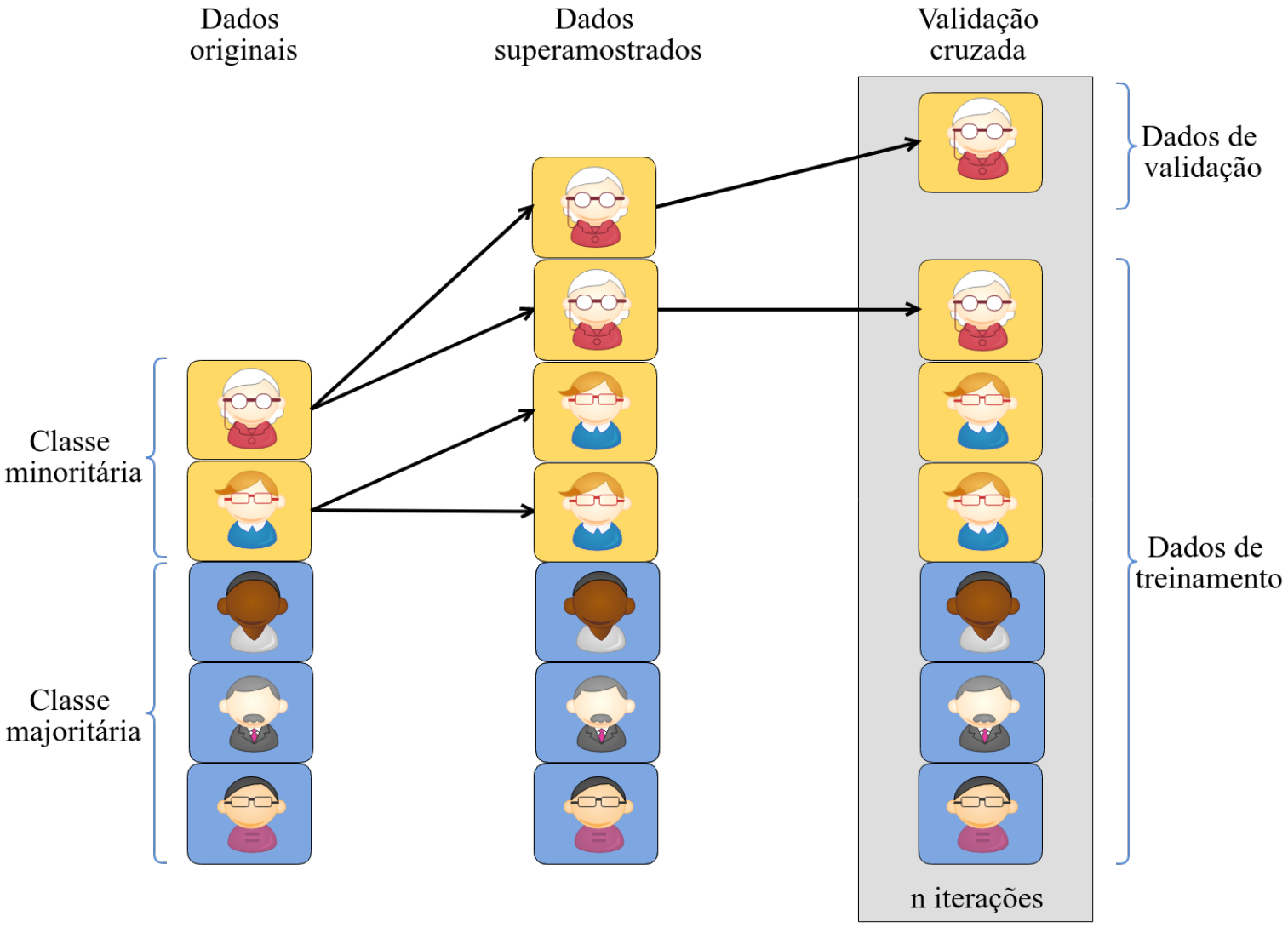
- Isso seria ignorar o fato de que no Passo 1 o procedimento já viu os rótulos de treinamento, e aprendeu com isso.

Exemplo: clientes em atraso

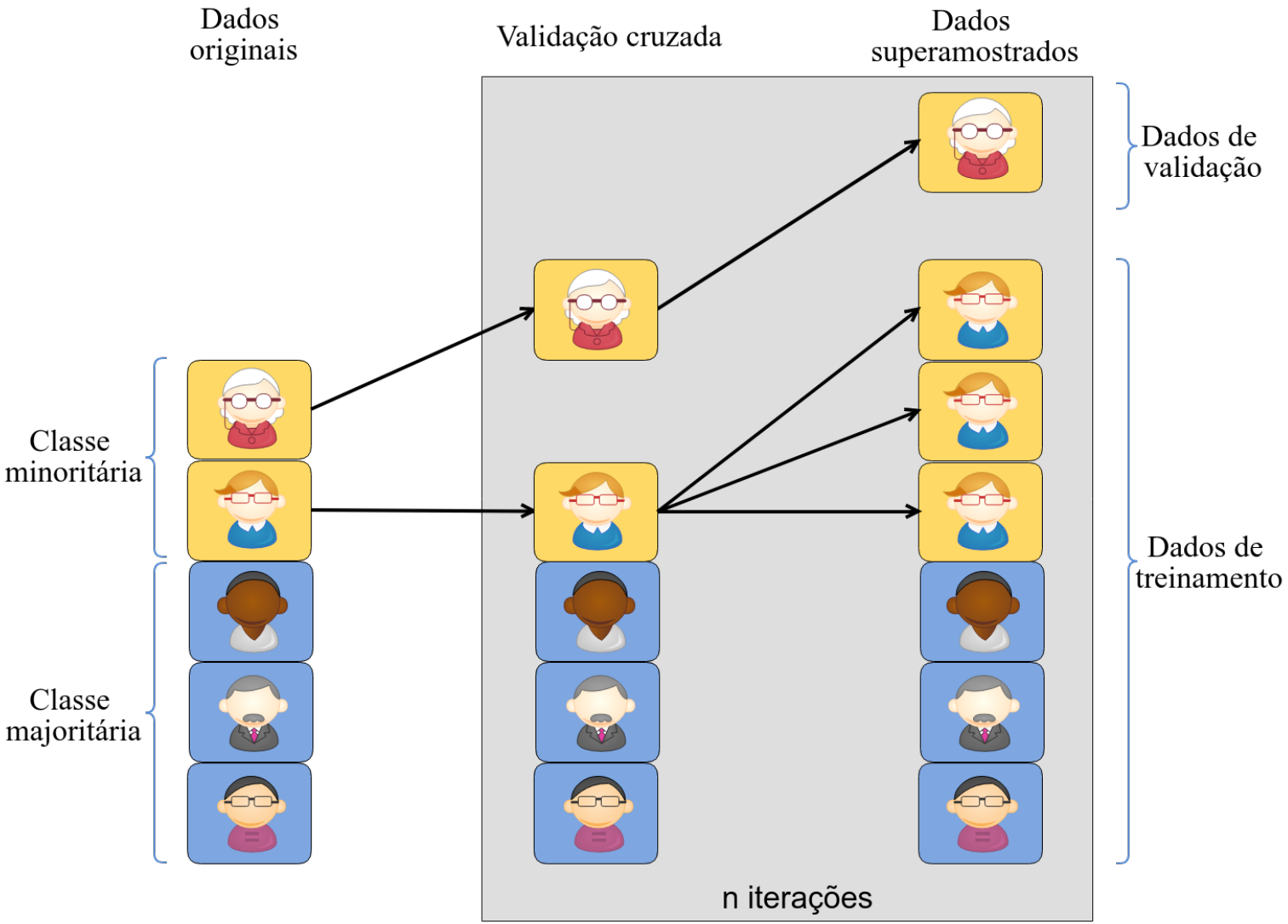
- Criamos exemplos "sintéticos", superamostrando a classe minoritária.



Exemplo: abordagem errada!

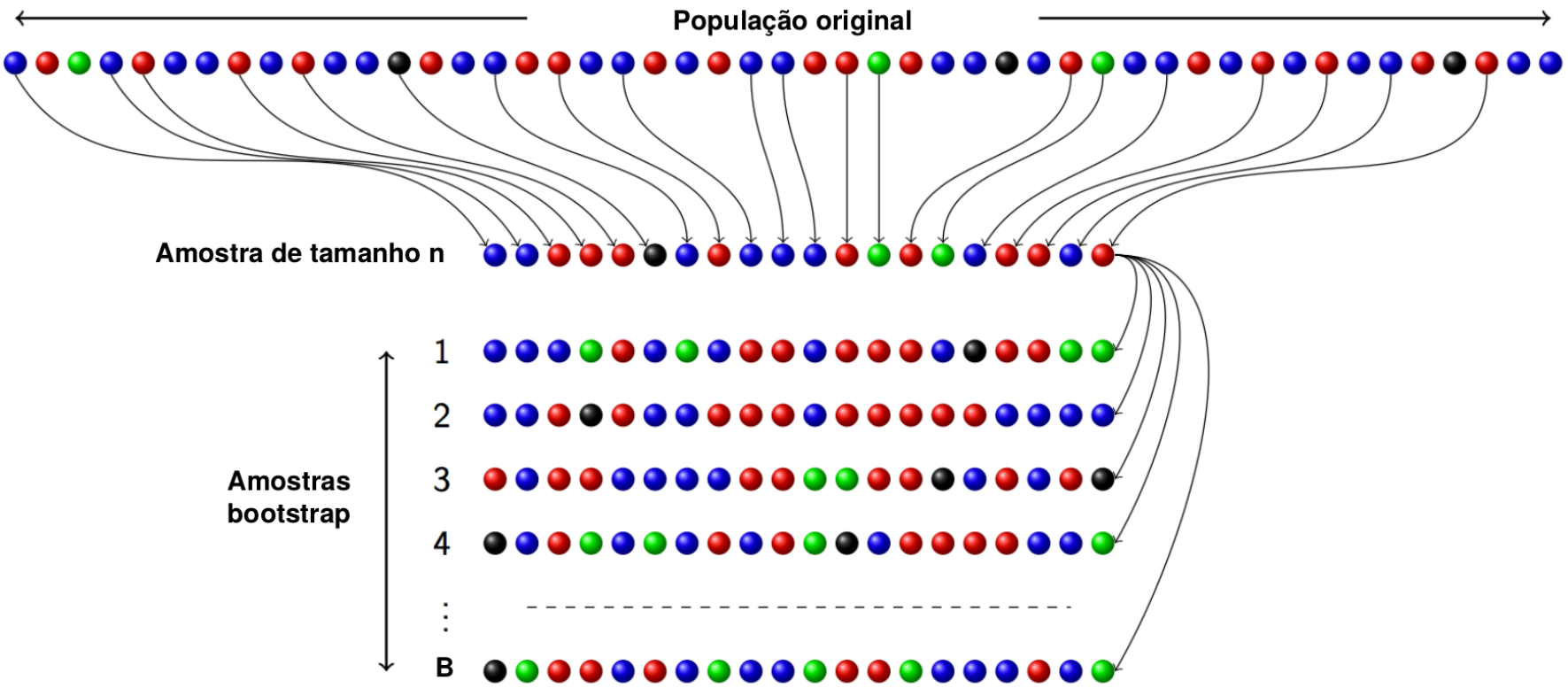


Exemplo: abordagem certa!



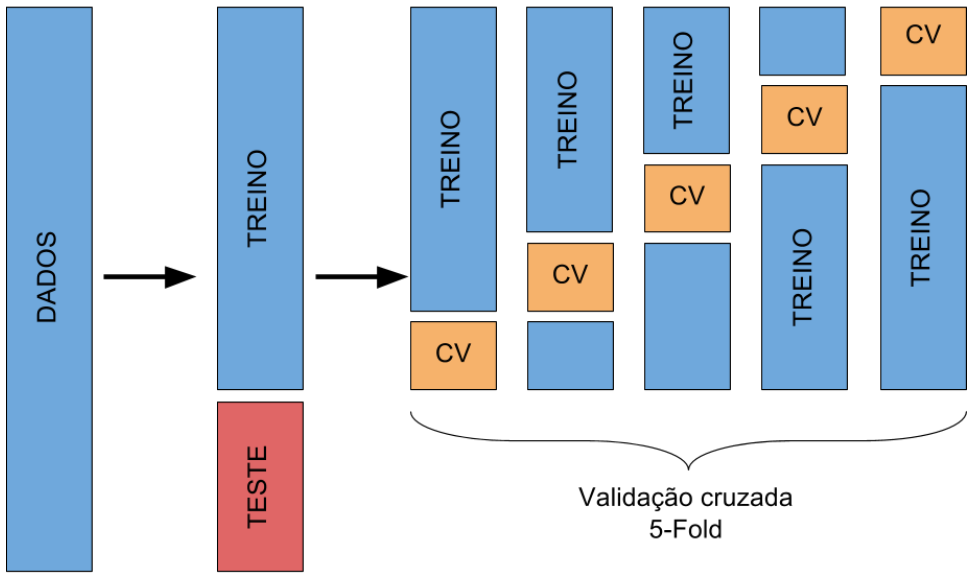
Bootstrap

Bootstrap estimando o erro de predição



Bootstrap estimando o erro de predição

- Na validação cruzada, o K- ésimo *fold* de validação é distinto dos demais $k-1$ *folds* usados no treinamento;



- Não há **overlap** entre os dados de treino e validação. O que é crucial para seu sucesso. Queremos uma ideia sobre os dados de teste (novos dados);

Referências

- James, G., Witten, D., Hastie, T. e Tibshirani, An Introduction to Statistical Learning, 2013;
- Hastie, T., Tibshirani, R. e Friedman, J., The Elements of Statistical Learning, 2009;
- Lantz, B., Machine Learning with R, Packt Publishing, 2013;
- Tan, Steinbach, and Kumar, Introduction to Data Mining, Addison-Wesley, 2005;
- Some of the figures in this presentation are taken from "An Introduction to Statistical Learning, with applications in R"(Springer, 2013) with permission from the authors: G. James, D. Witten, T. Hastie and R. Tibshirani