Introdução ao Aprendizado de Máquina

Lucas Gonçalves de Moura Leite

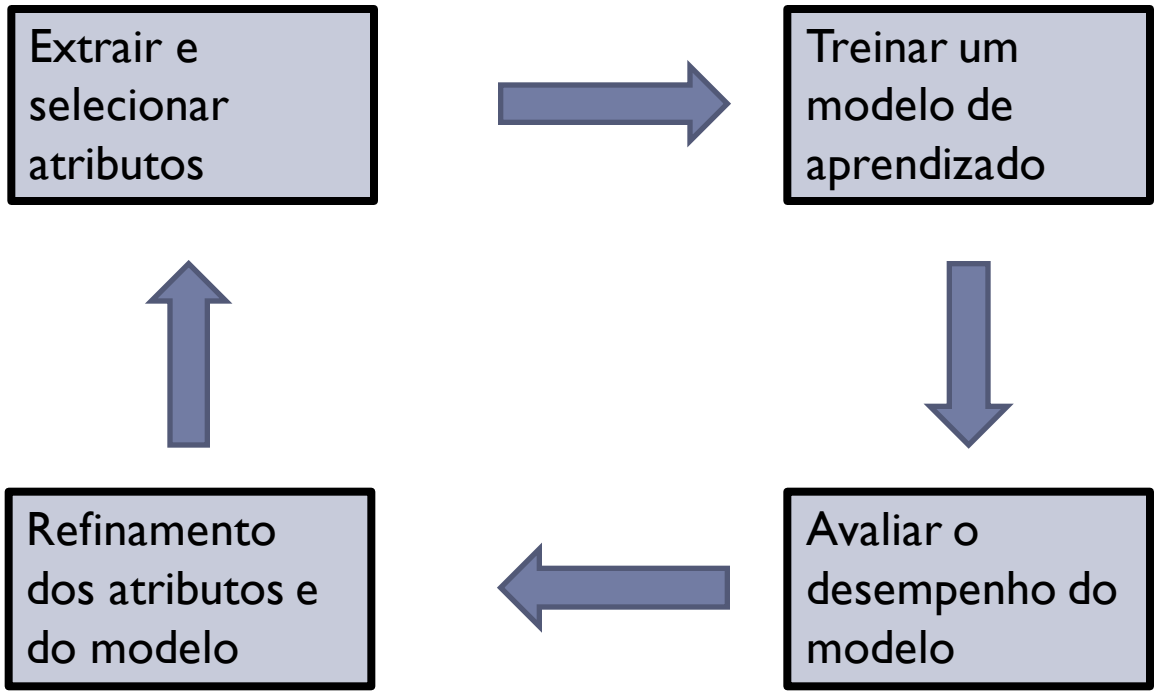
Métricas de Avaliação

Métricas de avaliação

- Classificação
  - Acurácia
- Regressão
  - R^2

- Desvantagens destas métricas e alternativas
- Como escolher a métrica mais adequada

Processo de AM



Avaliação

- Aplicações diferentes tem objetivos diferentes
- Acurácia é bastante usada mas outras métricas podem ser usadas
  - Busca na web (satisfação do usuário)
  - Retorno financeiro (Comércio)
  - Aumento na taxa de sobrevivência (aplicações médicas)

Avaliação para dados desbalanceados

- Suponha um problema com duas classes
  - Relevante (R) – Classe positiva
  - Irrelevante (I) – Classe negativa
- Exemplo
  - Sistemas de recomendação
  - Identificação de fraudes em cartões
- 1 em cada 1000 é relevante
- $Acc = \frac{predições\ corretas}{total\ de\ itens}$

Avaliação para dados desbalanceados

- Você projetou um classificador com 99.9% de acurácia.
- Quão bom é esse resultado?

Avaliação para dados desbalanceados

- Você projetou um classificador com 99.9% de acurácia.
- Quão bom é esse resultado?
- Comparar com um classificador muito simples. Ele sempre diz que um item é irrelevante.

Avaliação para dados desbalanceados

- Você projetou um classificador com 99.9% de acurácia.
- Quão bom é esse resultado?
- Comparar com um classificador muito simples. Ele sempre diz que um item é irrelevante.
  - Qual a sua taxa de acerto?

Classificador Dummy

- Verificador de sanidade
- Baseline para classificação
- Tipos
  - Mais frequente (most_frequent)
  - Aleatório (uniform)
  - Aleatório com distribuição igual aos dados de treino (stratified)
  - Constante e configurado pelo usuário (constant)

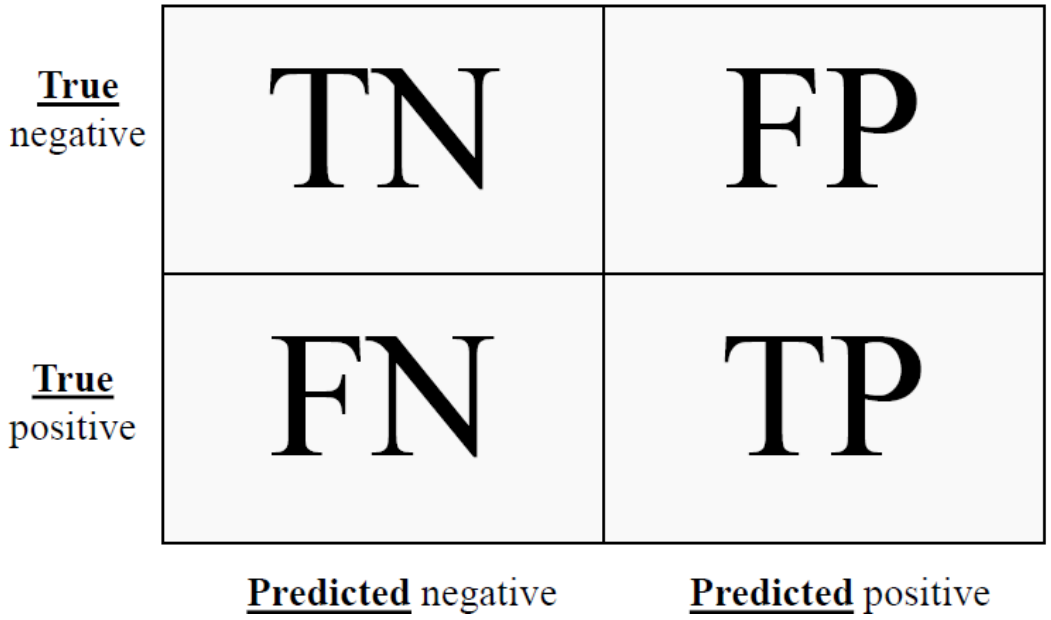
Classificador = Dummy

- Possíveis causas
  - Erros nos atributos (valores faltantes, errados ...)
  - Overfitting (má escolha dos hiperparâmetros)
  - Desbalanceamento

Regressores Dummy

- Tipos
  - Média das saidas do treinamento (mean)
  - Mediana das saídas do treinamento (median)
  - Quantil das saidas de treinamento. 0 para mínimo, 0.5 para média e 1 para máximo (quantile)
  - Constante e configurado pelo usuário (constant)

Matriz de Confusão



Label 1 = positive class
(class of interest)

Label 0 = negative class
(everything else)

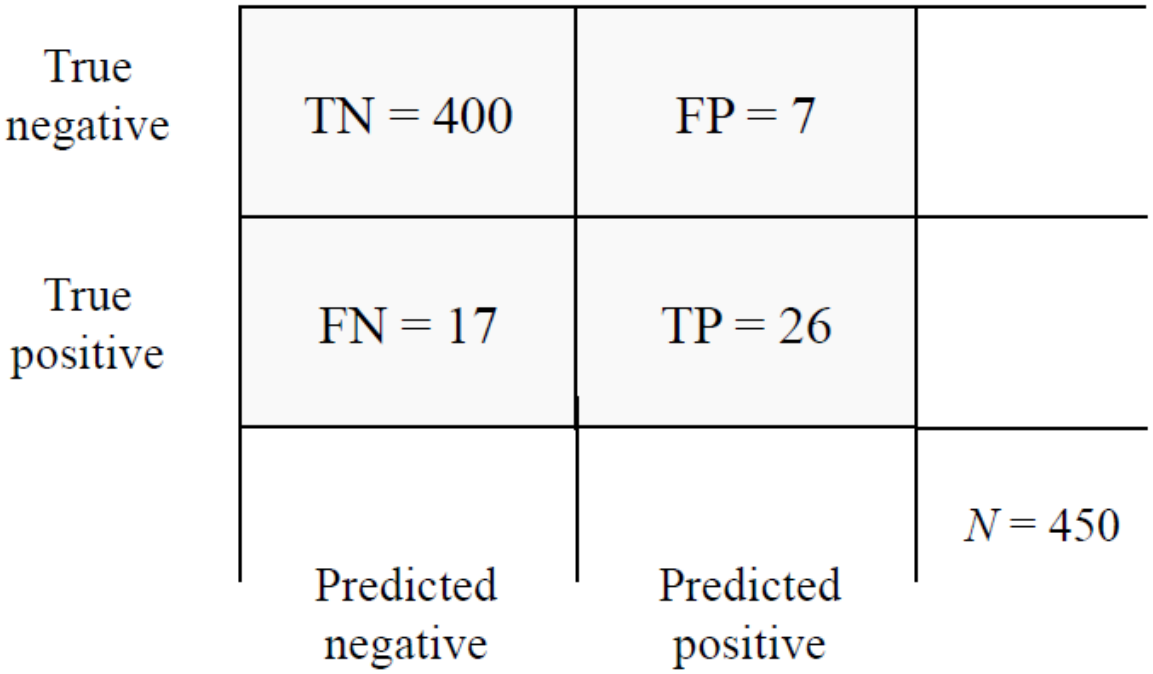
TP = true positive
FP = false positive (Type I error)
TN = true negative
FN = false negative (Type II error)

Métricas

True negative	TN = 400	FP = 7	
True positive	FN = 17	TP = 26	
	Predicted negative	Predicted positive	$N = 450$

- $Acc = \frac{TP+TN}{TP+TN+FP+FN}$
- $Acc = 0.95$

Erro de Classificação



- $Err = \frac{FP+FN}{TP+TN+FP+FN}$
- $Err = 0.05$

Recall

True negative	TN = 400	FP = 7	
True positive	FN = 17	TP = 26	
	Predicted negative	Predicted positive	$N = 450$

- $Rec = \frac{TP}{TP+FN}$
- $Rec = 0.6$

- Conhecido como:
  - Sensitividade
  - True Positive Rate (Taxa de verdadeiros positivos)
- Exemplo
  - Detecção de Cancer

Precision

True negative	TN = 400	FP = 7	
True positive	FN = 17	TP = 26	
	Predicted negative	Predicted positive	$N = 450$

- $Pre = \frac{TP}{TP+FP}$
- $Pre = 0.79$

- Exemplo
  - Sistemas de recomendação

False Positive Rate

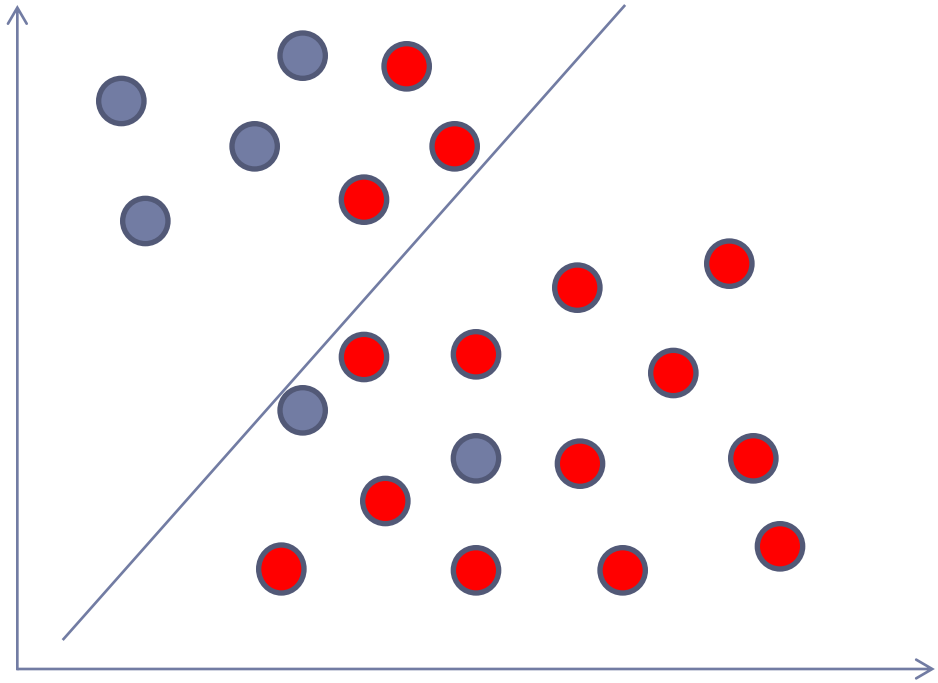
True negative	TN = 400	FP = 7	
True positive	FN = 17	TP = 26	
	Predicted negative	Predicted positive	$N = 450$

- $Pre = \frac{FP}{TN+FP}$
- $Pre = 0.02$

- Conhecido como:
  - Especificidade

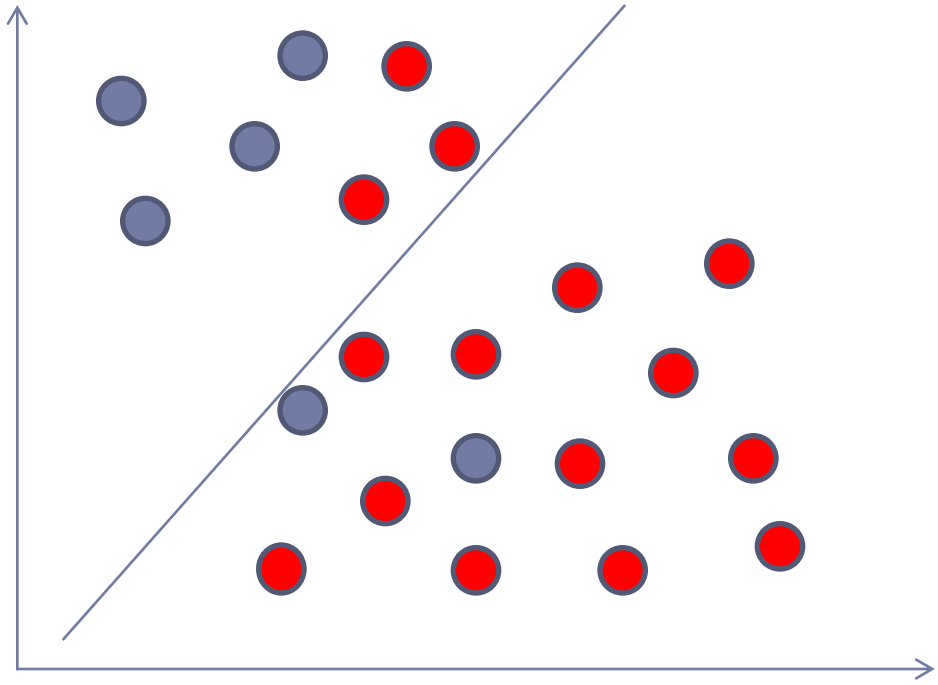
Precision x Recall

TN	FP
FN	TP



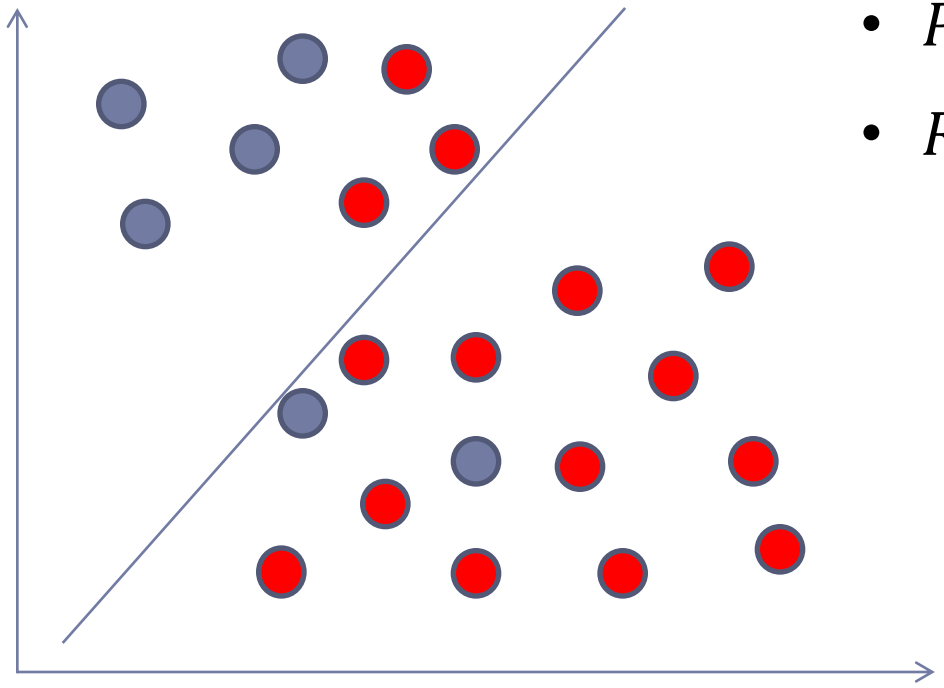
Precision x Recall

TN = 12	FP = 3
FN = 2	TP = 4



Precision x Recall

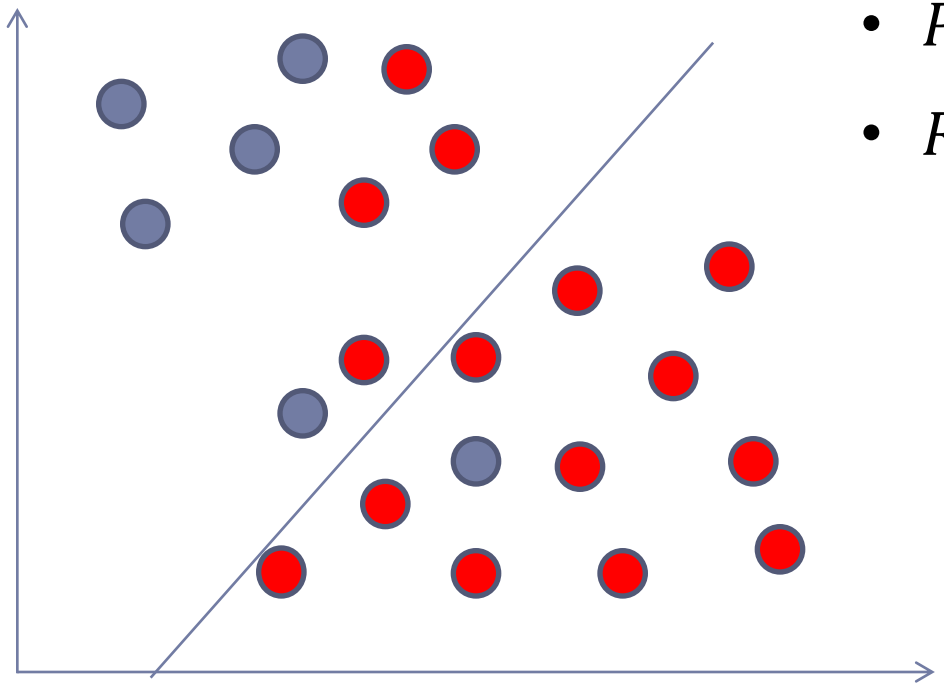
TN = 12	FP = 3
FN = 2	TP = 4



- $Pre = \frac{TP}{TP+FP} = \frac{4}{4+3} = 0.57$
- $Rec = \frac{TP}{TP+FN} = \frac{4}{4+2} = 0.66$

Precision x Recall

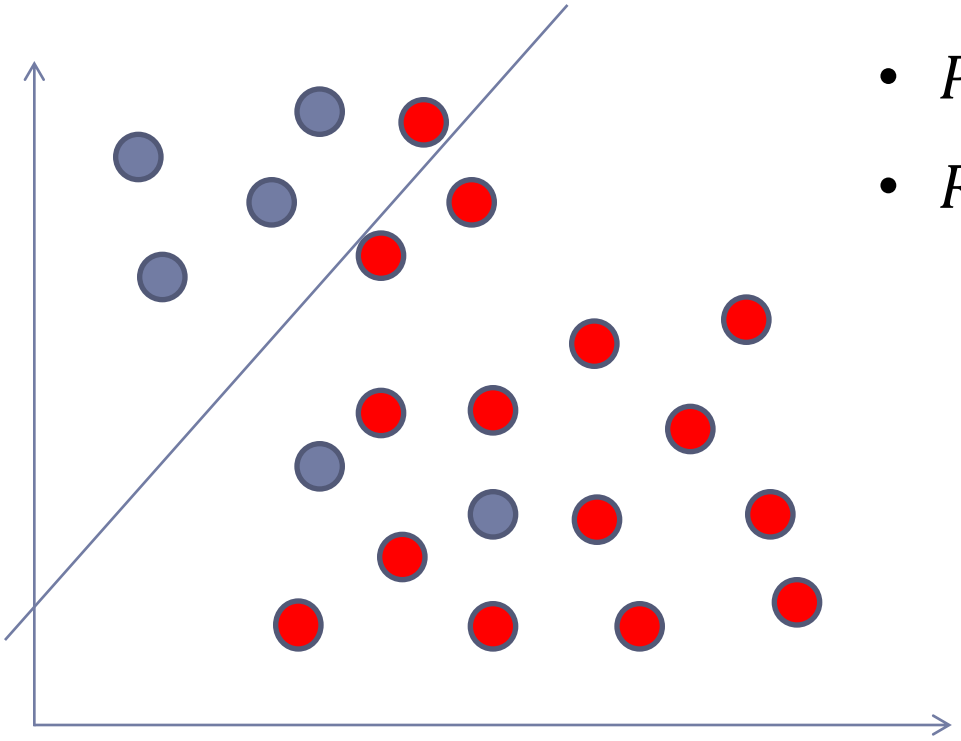
TN = 11	FP = 4
FN = 1	TP = 5



- $Pre = \frac{TP}{TP+FP} = \frac{5}{5+4} = 0.55$
- $Rec = \frac{TP}{TP+FN} = \frac{5}{5+1} = 0.83$

Precision x Recall

TN = 14	FP = 1
FN = 2	TP = 4



- $Pre = \frac{TP}{TP+FP} = \frac{4}{4+1} = 0.8$
- $Rec = \frac{TP}{TP+FN} = \frac{4}{4+2} = 0.66$

Aplicações (Precision e Recall)

- Recall
  - Aplicações médicas
  - Busca por informações
  - Apoio humano para filtrar falsos positivos
- Precision
  - Recomendação
  - Aplicações que lidam direto com um cliente humano

F-measure

- F1-score
- $F1 = 2\frac{Precision * Recall}{Precision+Recall} = \frac{2*TP}{2*TP+FN+FP}$

Confiança em classificadores

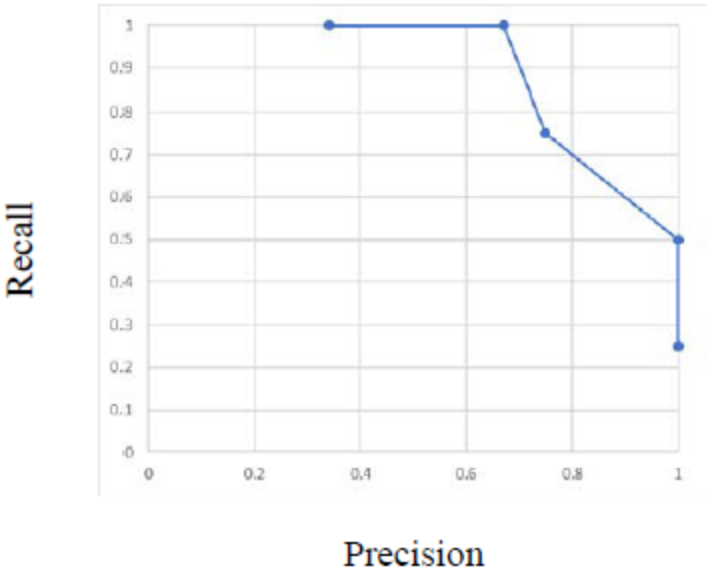
Confiança na classificação

- Muitos classificadores fornecem como saida uma medida que indica a certeza da classificação
- Usualmente a classificação é feita com um limiar
- A mudança desse limiar tem como resultado uma série de classificações que formam uma curva de desempenho

Variando o limiar

True Label	Classifier score
0	-27.6457
0	-25.8486
0	-25.1011
0	-24.1511
0	-23.1765
0	-22.575
0	-21.8271
0	-21.7226
0	-19.7361
0	-19.5768
0	-19.3071
0	-18.9077
0	-13.5411
0	-12.8594
1	-3.9128
0	-1.9798
1	1.824
0	4.74931
1	15.234624
1	21.20597

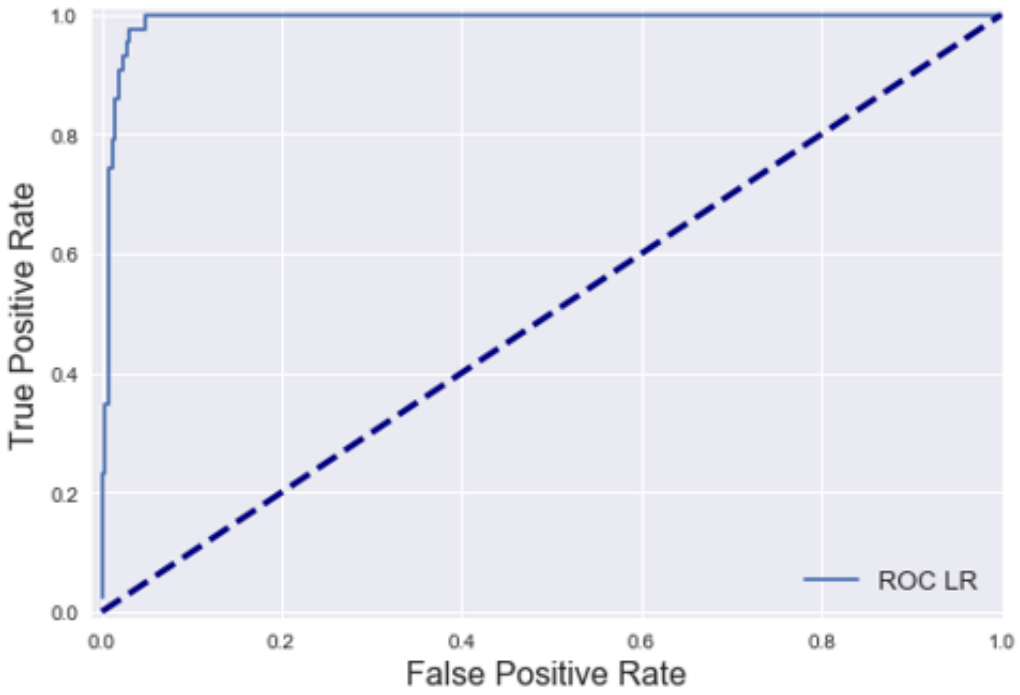
Classifier score threshold	Precision	Recall
-20	4/12=0.34	4/4=1.00
-10	4/6=0.67	4/4=1.00
0	3/4=0.75	3/4=0.75
10	2/2=1.0	2/4=0.50
20	1/1=1.0	1/4 = 0.25



Curva Precision x Recall

Curva ROC

- Eixo x – False Positive Rate
- Eixo y – True Positive Rate



Avaliação de classificadores com múltiplas classes

Métricas para Classificadores Multiclasse

- A extensão de algumas métricas é bastante simples
  - Matriz de confusão
- Outras tem como princípio o calculo de uma média da métrica para todas as classes
  - Diferentes formas de calcular médias ponderadas

Micro e Macro Average

- Formas de ponderar os resultados por classe
- Macro
  - Média dos resultados de cada classe
  - Cada classe tem o mesmo peso
- Micro
  - Computa a métrica com o resultado do classificador
  - Não separa por classe
  - Cada exemplo tem o mesmo peso

Macro Average

Class	Predicted Class	Correct?
orange	lemon	0
orange	lemon	0
orange	apple	0
orange	orange	1
orange	apple	0
lemon	lemon	1
lemon	apple	0
apple	apple	1
apple	apple	1

Macro-average:

- Each class has equal weight.

1. Compute metric within each class
2. Average resulting metrics across classes

Class	Precision
orange	1/5 = 0.20
lemon	1/2 = 0.50
apple	2/2 = 1.00

Macro-average precision:
(0.20 + 0.50 + 1.00) / 3 = **0.57**

Micro Average

Class	Predicted Class	Correct?
orange	lemon	0
orange	lemon	0
orange	apple	0
orange	orange	1
orange	apple	0
lemon	lemon	1
lemon	apple	0
apple	apple	1
apple	apple	1

Micro-average:

- Each instance has equal weight.
- Largest classes have most influence

1. Aggregrate outcomes across all classes
2. Compute metric with aggregate outcomes

Micro-average precision:
4 / 9 = **0.44**

Micro x Macro

- Se os dados são balanceados, Micro e Macro são aproximadamente iguais
- Se dados são desbalanceados
  - Se quiser uma métrica enviesada para as classes majoritárias, use Micro.
  - Se quiser uma métrica enviesada para as classes minoritárias, use Macro.
  - Se Micro << Macro
  - Se Micro >> Macro

Micro x Macro

- Se os dados são balanceados, Micro e Macro são aproximadamente iguais
- Se dados são desbalanceados
  - Se quiser uma métrica enviesada para as classes majoritárias, use Micro.
  - Se quiser uma métrica enviesada para as classes minoritárias, use Macro.
  - Se Micro << Macro -> veja as classes majoritárias
  - Se Micro >> Macro

Micro x Macro

- Se os dados são balanceados, Micro e Macro são aproximadamente iguais
- Se dados são desbalanceados
  - Se quiser uma métrica enviesada para as classes majoritárias, use Micro.
  - Se quiser uma métrica enviesada para as classes minoritárias, use Macro.
  - Se Micro << Macro -> veja as classes majoritárias
  - Se Micro >> Macro -> veja as classes minoritárias

Exercício

- Carregar os dados do dataset iris
- Utilizar alguns métodos de classificação e obter as métricas apresentadas

Métricas para regressão

Métricas para Regressão

- Métricas bastante semelhantes
- R^2 é bastante utilizado
- Outras métricas
  - Erro absoluto médio
  - Erro quadrático médio
  - Mediana do erro absoluto

Regressões Dummy

- Teste de sanidade
  - Média (mean)
  - Mediana (median)
  - Constante (constant)
  - Quantil (quantile)

Exercício

- Carregar os dados do dataset diabetes
- Utilizar alguns métodos de regressão e compará-los com os métodos Dummy

Seleção de Modelos

Seleção de modelos

- Treinar e testar nos mesmo dados
  - Overfitting
- Divisão treino\teste
  - Simples
  - Sem informação de variância da métrica
- Validação cruzada
  - Mais confiável
  - Variância da métrica
  - Pode ser combinado com estratégia de grid-search

Seleção de modelos

- CV e grid search para seleção de modelos usando o conjunto de treinamento (não usar o teste)
- Na prática
  - Treinamento (ajuste dos parâmetros)
  - Validação (seleção do modelo)
  - Teste (avaliação do modelo)

Exercício

- Escolha um conjunto de dados de classificação
- Use o SVM com kernel RBF
- Faça 10 divisões de treino e teste
- Para cada divisão use o CV e o grid search para encontrar o melhor conjunto de hyperparâmetros (C e gamma)
- Teste o modelo encontrado no conjunto de teste
- Repita o processo para cada um das 10 divisões. Apresente o resultado em termos de todas as métricas de classificação vistas hoje