

Qual o tamanho da sua incerteza?

Autores: Carolina Musso, Ricardo Torres, Guilherme Souza Rodrigues

Palavras chave: recalibratiNN , Computação bayesiana Aproximada, Recalibração, Cobertura

Abstract

Redes Neurais Artificiais (ANNs) são conhecidas por seu alto desempenho preditivo, mas frequentemente suas previsões não são calibradas, resultando em estimativas de incerteza imprecisas. Este trabalho apresenta um pacote em R para recalibrar modelos Gaussianos, como redes neurais treinadas com a função de perda MSE, utilizando uma técnica quantílica de pós-processamento. O pacote `recalibratiNN` utiliza probabilidades acumuladas para gerar amostras de Monte Carlo de distribuições recalibradas e inclui funções de diagnóstico para visualizar a falta de calibração. Ao oferecer uma ferramenta amigável e eficiente, o pacote promove práticas de calibração que melhoram a precisão das medições de incerteza.

Introdução

Nos últimos anos, os modelos de aprendizado de máquina têm melhorado significativamente o desempenho de previsões em diversas áreas. No entanto, a estimativa de incertezas nessas previsões ainda representa um grande desafio, especialmente em Redes Neurais Artificiais (RNAs). Neste caso, as previsões muitas vezes não são bem calibradas, o que pode impactar negativamente sua confiabilidade. Embora existam métodos disponíveis para a recalibração, a escolha e implementação do método mais adequado podem ser complexas e desafiadoras. O objetivo deste trabalho é apresentar aplicações do pacote [recalibratiNN](#) para a recalibração de modelos gaussianos, como regressões lineares ou redes neurais otimizadas pelo *Mean Squared Error* (MSE).

Observando a calibração de um modelo

A calibração de modelos refere-se à adequação entre as distribuições empíricas e preditivas, garantindo que os intervalos de confiança capturem adequadamente o percentual esperado de resultados reais. Intuitivamente, para um nível de confiança, esperamos que um intervalo de confiança de 95% cubra 95% dos resultados reais. Essa calibração pode ser observada por meio da distribuição dos PIT-values, que deve ter ser uniforme se o modelo estiver bem calibrado. Desvios da distribuição uniforme indicam superestimação ou subestimação da variância do modelo. Ademais, a calibração pode

QUAL O TAMANHO DA SUA INCERTEZA?

variar quando observada globalmente ou localmente, podendo superestimar a variância em alguns locais e subestimar em outros, o que, globalmente, pode acabar compensando a calibração. Dessa forma, é interessante recalibrar um modelo localmente, de modo a garantir que a incerteza seja mais homogênea para todas as combinações de variáveis, evitando erros (ou acertos!) excessivos em algumas regiões dos preditores. Para mais detalhes, leia [Torres et al. \(2024\)](#).

Recalibração e o pacote recalibratiNN

O pacote recalibratiNN está atualmente na versão 0.3.0 e está disponível tanto no [GitHub](#) quanto no [CRAN](#). Este pacote oferece uma variedade de funções, incluindo sete funções principais: duas para o cálculo de PIT-values, quatro para visualização e uma para recalibração. As funções de visualização funcionam como um método diagnóstico para ajudar a visualizar problemas de recalibração. O pacote atual implementa uma técnica de pós-processamento para recalibrar modelos Gaussianos, sendo particularmente útil para Redes Neurais Artificiais treinadas com a função de perda Mean Squared Error (MSE). Esta técnica pode ser aplicada em qualquer camada de representação da rede neural, oferecendo ganhos computacionais significativos quando usada em camadas de menor dimensionalidade em comparação com o espaço das covariáveis.

Baseado no estudo "[Model-Free Recalibration of Neural Networks](#)", o método se destaca por permitir tanto a recalibração local quanto global. Ele utiliza informações de probabilidades acumuladas para gerar amostras de Monte Carlo da distribuição preditiva recalibrada. O processo envolve a utilização de K-means para particionar o espaço e a busca por vizinhos próximos (KNN), com um algoritmo inspirado em Computação Bayesiana Aproximada. As amostras são ajustadas com base na transformada inversa, o que melhora a calibração dos modelos, ou seja, melhora a medição da incerteza das previsões. Para exemplos e mais detalhes, consulte as vignettes disponíveis no pacote e o trabalho de [Musso et al \(2023\)](#).

Conclusão

O pacote recalibratiNN fornece uma técnica de pós-processamento quantílica para recalibrar modelos Gaussianos, sendo particularmente útil para redes neurais treinadas com a função de perda MSE. Ele contribui para a comunidade estatística ao oferecer uma ferramenta intuitiva para identificar e corrigir problemas de recalibração, melhorando a confiabilidade das estimativas de incerteza e promovendo práticas de calibração. Futuras melhorias podem incluir melhor integração com outros pacotes, suporte para métodos de validação cruzada, ajuste de hiperparâmetros e a capacidade de lidar com diferentes tipos de distribuições preditivas além dos modelos Gaussianos.