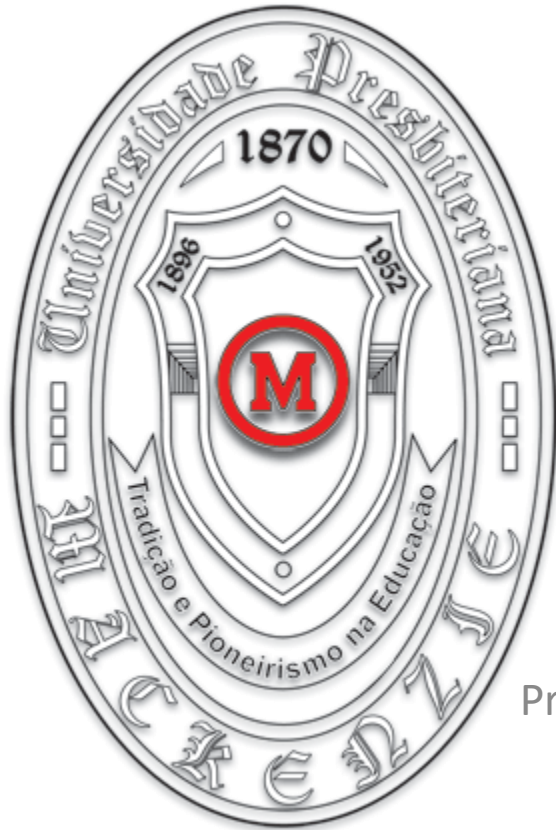




Universidade Presbiteriana Mackenzie



Metodologias para validar modelos preditivos

Prof. Dr. Leandro Augusto da Silva

leandroaugusto.silva@mackenzie.br

Laboratório de Big Data e Métodos Analíticos Aplicados

Faculdade de Computação e Informática

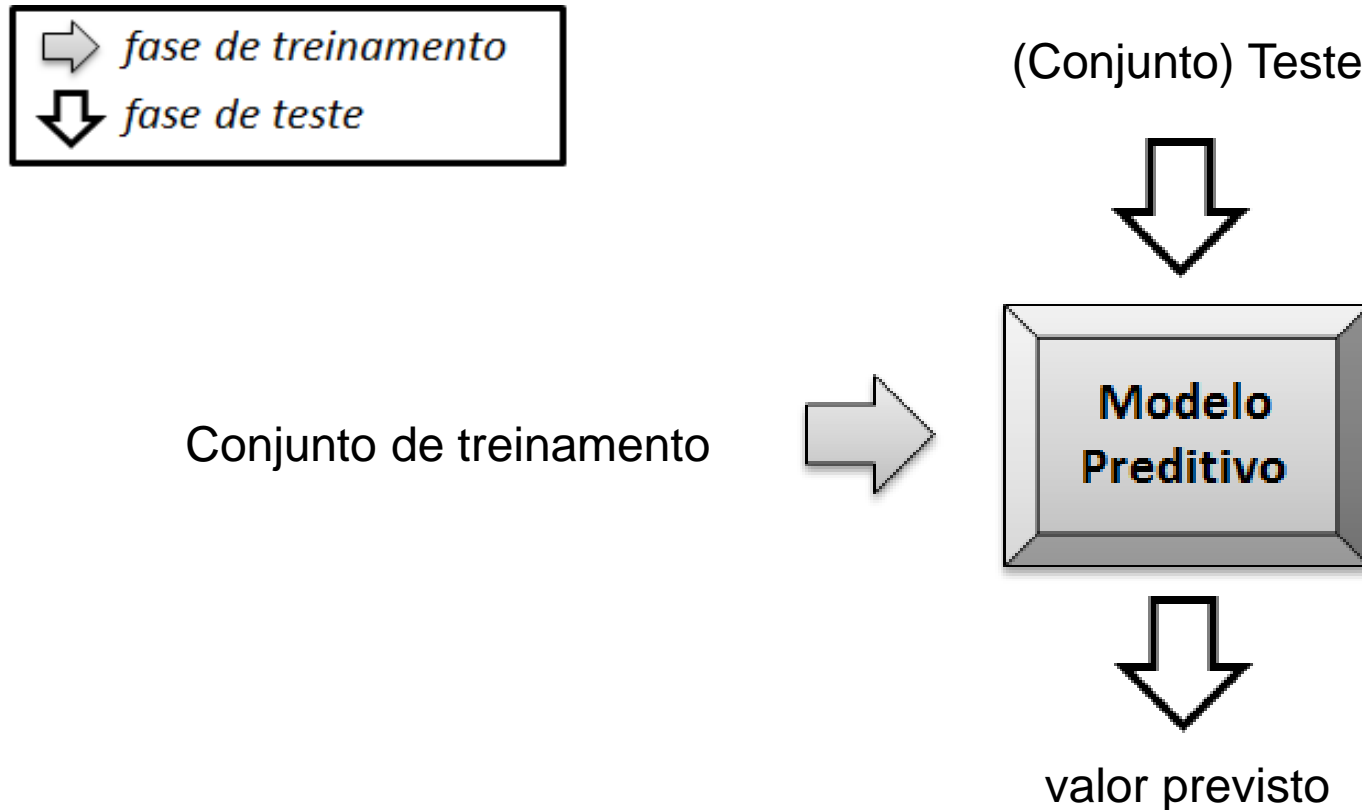
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e Computação

Conteúdo

- O objetivo desta aula é discutir metodologias de construção e avaliação de modelos preditivos.
- Veremos aqui sobre as metodologias para separação dos dados em conjuntos de treinamento e teste.
- E ainda, apresentaremos medidas de avaliação de desempenho para modelos que predizem valores de natureza categórica e contínua.



O conceito de Análise Preditiva



Resumindo sobre Análise Preditiva

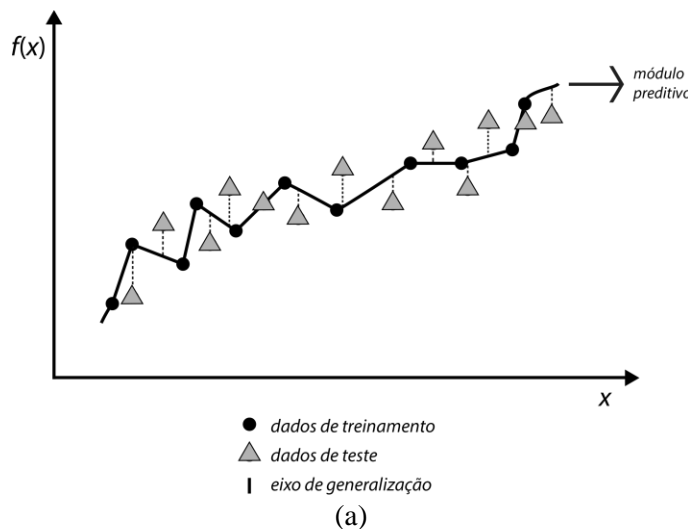
Processo de inferir um valor para um exemplar (situação) nunca antes visto. Exemplos:

- Classificar pacientes em sadio/doente/normal;
- Estimar a próxima jogada de um jogador;
- Classificar consumidores de algum recurso (jogo, aplicação e etc);
- Outros.

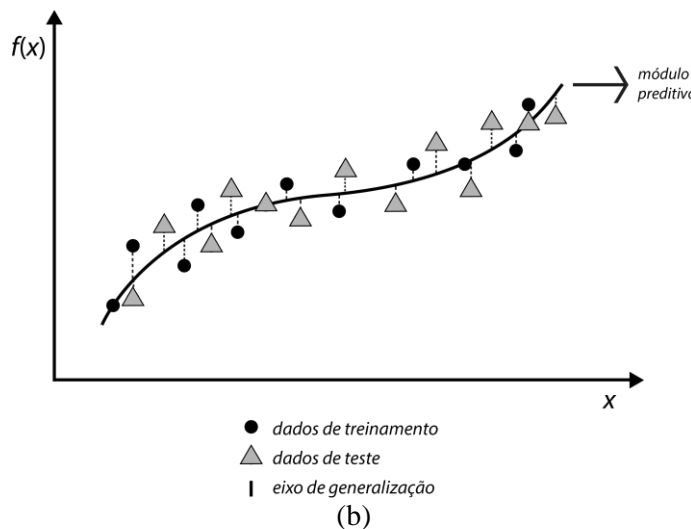


Estratégias para treinamento, validação e teste

- O principal motivo para essa ressalva é o **sobreajuste** (do inglês *overfitting*)



Com sobreajuste



Sem sobreajuste

Estratégias para treinamento, validação e teste

- Resubstituição
 - O modelo preditivo é avaliado com o mesmo conjunto usado no seu treinamento
- Holdout
 - Criação de dois conjuntos disjuntos, um para o treinamento (70%) e outro para o teste (30%)
- Validação cruzada
 - O conjunto de dados é dividido em K subconjuntos disjuntos, com alocação de exemplares aleatória.



Validação cruzada

Iteração		
1	Conjunto de treinamento →	X ₄ X ₅ X ₆ X ₇ X ₈ X ₉ X ₁₀ X ₁₁ X ₁₂
	Conjunto de teste →	X ₁ X ₂ X ₃
2	Conjunto de treinamento →	X ₁ X ₂ X ₃ X ₅ X ₈ X ₉ X ₁₀ X ₁₁ X ₁₂
	Conjunto de teste →	X ₄ X ₆ X ₇
3	Conjunto de treinamento →	X ₁ X ₂ X ₃ X ₄ X ₅ X ₆ X ₇ X ₁₁ X ₁₂
	Conjunto de teste →	X ₈ X ₉ X ₁₀
4	Conjunto de treinamento →	X ₁ X ₂ X ₃ X ₄ X ₆ X ₇ X ₈ X ₉ X ₁₀
	Conjunto de teste →	X ₅ X ₁₁ X ₁₂



Medidas de avaliação

- Para predição categórica

		<i>Classe Predita ($f(x)$)</i>	
		<i>positivo</i>	<i>negativo</i>
<i>Classe Esperada (y)</i>	<i>positivo</i>	<i>Verdadeiros positivos (VP)</i>	<i>Falsos negativos (FN)</i>
	<i>negativo</i>	<i>Falsos Positivos (FP)</i>	<i>Verdadeiros negativos (VN)</i>

- Acurácia (do inglês *accuracy*): $(VP + VN / (VP + VN + FP + FN))$.

Medidas de avaliação

- Sensibilidade ou **revocação** (do inglês *recall*) ou taxa de verdadeiros positivos: $(VP / (VP + FN))$.
- Especificidade ou taxa de verdadeiros negativos: $(VN / (FP + VN))$.
- Taxa de falsos positivos: porcentagem de falsos positivos dentre todos os exemplos que cuja classe esperada é a classe negativa $(FP / (VN + FP))$.
- Taxa de falsas descobertas: porcentagem de falsos positivos dentre os exemplos cuja classe esperada é a classe positiva $(FP / (VP + FP))$.

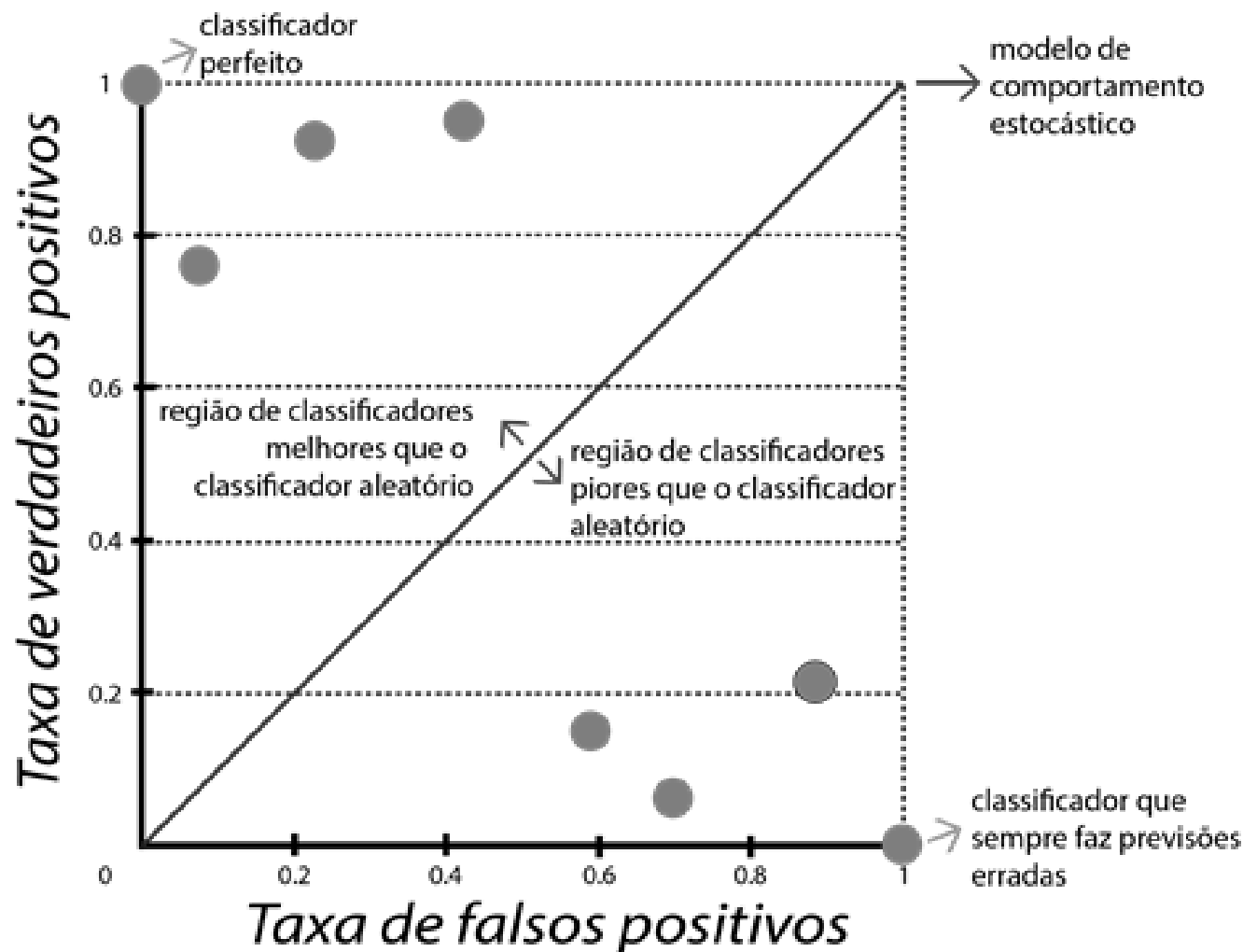


Medidas de avaliação

- Preditividade positiva ou **precisão** (do inglês *precision*): porcentagem de acertos, ou verdadeiros positivos, dentre todos os exemplos classificados como positivos ($VP / (VP + FP)$).
- Preditividade negativa: porcentagem de rejeições, ou de verdadeiros negativos, dentre todos os exemplos classificados como negativos ($VN / (VN + FN)$).
- *F-score*: faz uma relação entre a precisão e a revocação: $2 / ((1/\text{revocação}) + (1/\text{precisão}))$

Medidas de avaliação

Curva ROC



Medidas de avaliação

- Para predição numérica, alguns exemplos são:

$$\textit{Erro absoluto} = \sum_{\langle \vec{x}_i, y_i \rangle \in \kappa} |y_i - f(\vec{x}_i)|$$

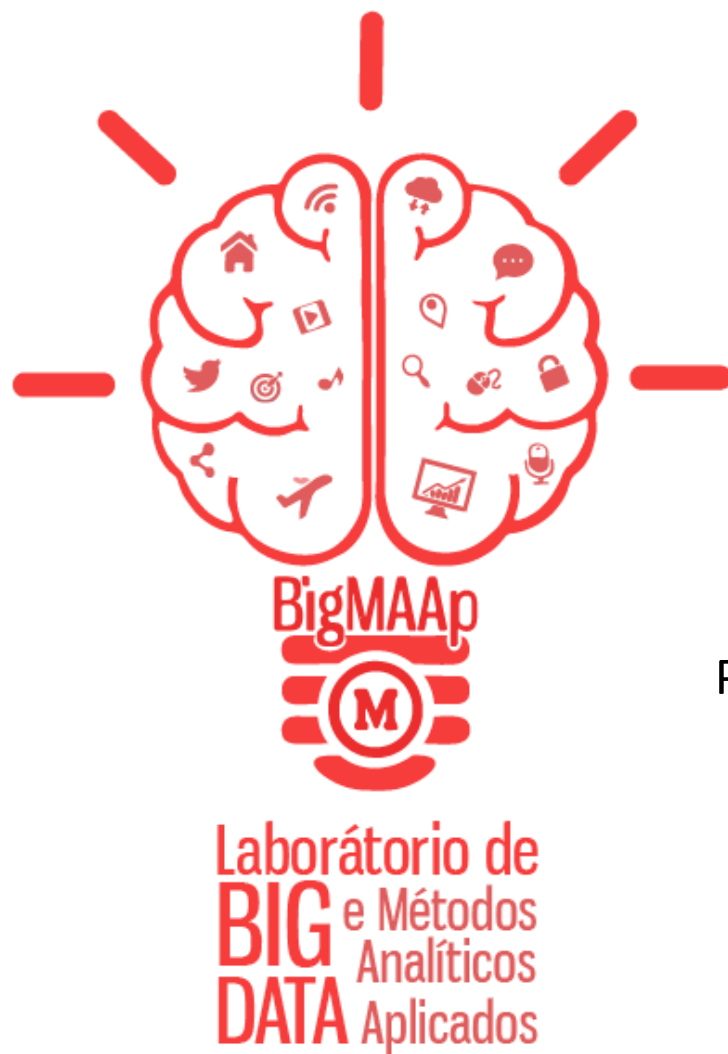
$$\textit{Erro quadrado médio} = \sum_{\langle \vec{x}_i, y_i \rangle \in \kappa} (y_i - f(\vec{x}_i))^2 / m$$

em que m é a quantidade de exemplares existentes em κ .

Prática

- Utilizando o estudo de caso da Aula 1 (Iris) e Aula 2 (reta) faça:
 - Definir a metodologia de separação de conjunto e de avaliação de resultado
 - Comparar os resultados de desempenho com as medidas de avaliação apresentadas na aula (Acurácia e Erro Médio Quadrático)





Prof. Dr. Leandro Augusto da Silva

leandroaugusto.silva@mackenzie.br

Faculdade de Computação e Informática

Programa de Pós-Graduação em Engenharia
Elétrica e Computação