UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

DEPARTAMENTO DE COMPUTAÇÃO

LogIA

Aprendizagem de Máquina

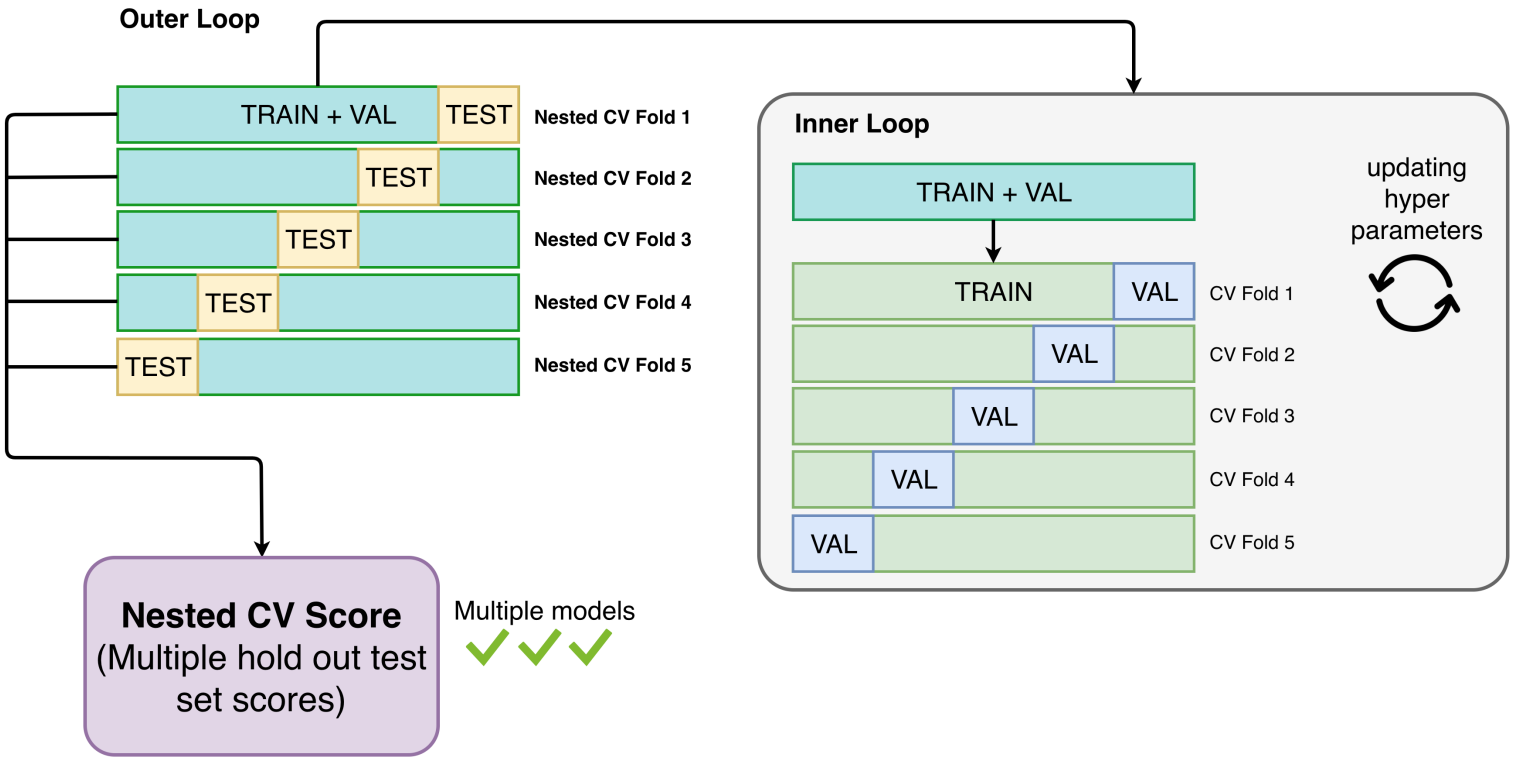
César Lincoln Cavalcante Mattos

2025

Agenda

Ajuste e avaliação de modelos

- O ajuste de hiperparâmetros deve ser considerado na avaliação.
- Uma abordagem possível é a **validação cruzada aninhada** (*nested cross-validation*).



- A escolha final do loop externo deve ser reajustada no loop interno usando todos os dados, resultando na solução final.

Avaliação de modelos de regressão

- Sendo $\hat{y}_i = f(\boldsymbol{x}_i)$ a i-ésima predição referente à entrada $\boldsymbol{x}_i$ e y_i a saída real, temos:
  - → **RMSE (root mean squared error)**: $\sqrt{\frac{1}{N}\sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2}$;
  - → **MAE (mean absolute error)**: $\frac{1}{N}\sum_i |y_i - \hat{y}_i|$;
  - → **MRE (mean relative error)**: $\frac{1}{N}\sum_i \left|\frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i}\right|$.

Avaliação de modelos de regressão

- Sendo $\hat{y}_i = f(\boldsymbol{x}_i)$ a i-ésima predição referente à entrada $\boldsymbol{x}_i$ e y_i a saída real, temos:
  - → **RMSE (root mean squared error)**: $\sqrt{\frac{1}{N}\sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2}$;
  - → **MAE (mean absolute error)**: $\frac{1}{N}\sum_i |y_i - \hat{y}_i|$;
  - → **MRE (mean relative error)**: $\frac{1}{N}\sum_i \left|\frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i}\right|$.

Observações

- O RMSE é proporcional ao quadrado dos erros, sendo mais afetado por dados discrepantes.
- O MAE é diretamente proporcional aos erros absolutos, sendo mais fácil de compreender.
- O MRE é invariante à magnitude dos dados, o que pode facilitar a interpretação.

Avaliação de modelos de regressão

- Considere uma perda L_i calculada para o i-ésimo exemplo.
- O **erro padrão** (*standard error*) da média é computado por:

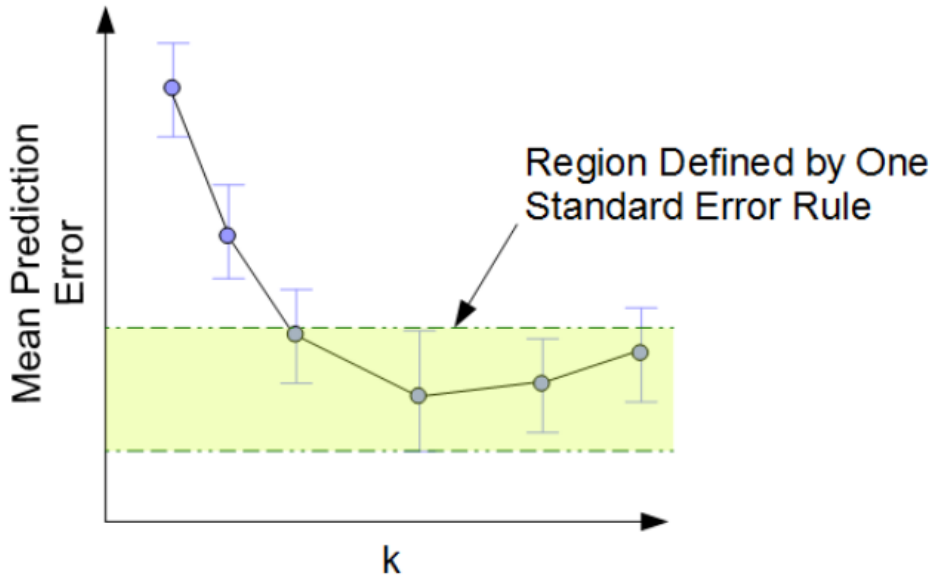
$$SE = \frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{N}}, \quad \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{N-1}\sum_i^N (L_i - \bar{L})^2, \quad \bar{L} = \frac{1}{N}\sum_i^N L_i.$$

Avaliação de modelos de regressão

- Considere uma perda L_i calculada para o i-ésimo exemplo.
- O **erro padrão** (*standard error*) da média é computado por:

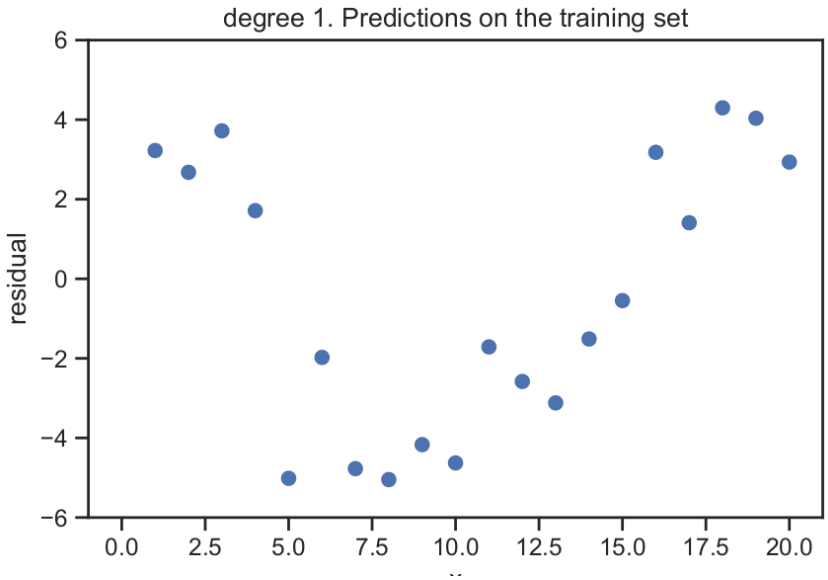
$$SE = \frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{N}}, \quad \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{N-1}\sum_i^N (L_i - \bar{L})^2, \quad \bar{L} = \frac{1}{N}\sum_i^N L_i.$$

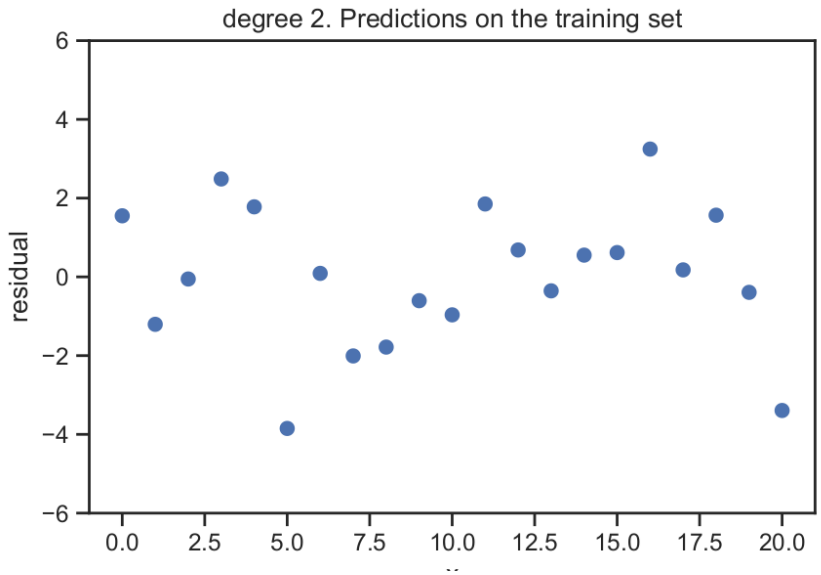
- **One standard error rule**: Na avaliação de múltiplos modelos, escolha o mais simples (e.g. menos parâmetros) que esteja no máximo a um erro padrão de diferença do melhor modelo.



Análise de resíduos

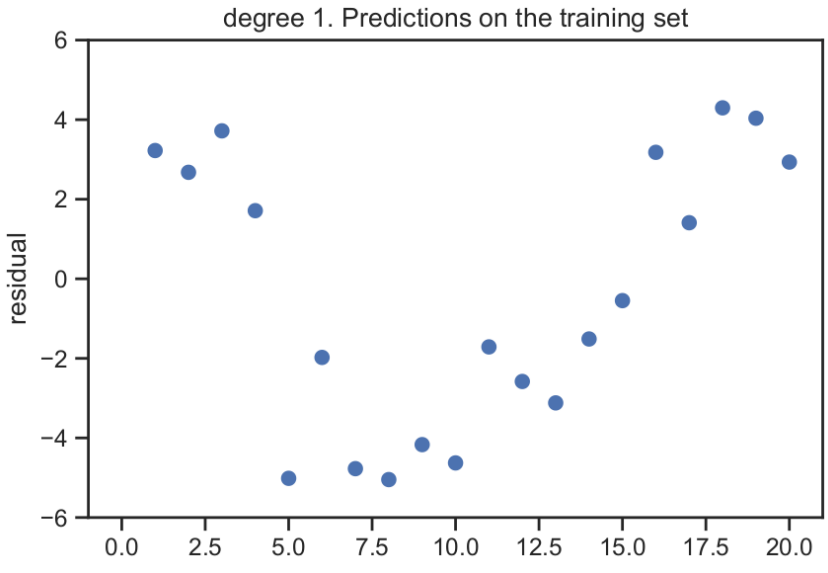
- Resíduos são os erros obtidos no conjunto de treinamento.
- A análise gráfica dos resíduos pode ajudar a avaliar o modelo.

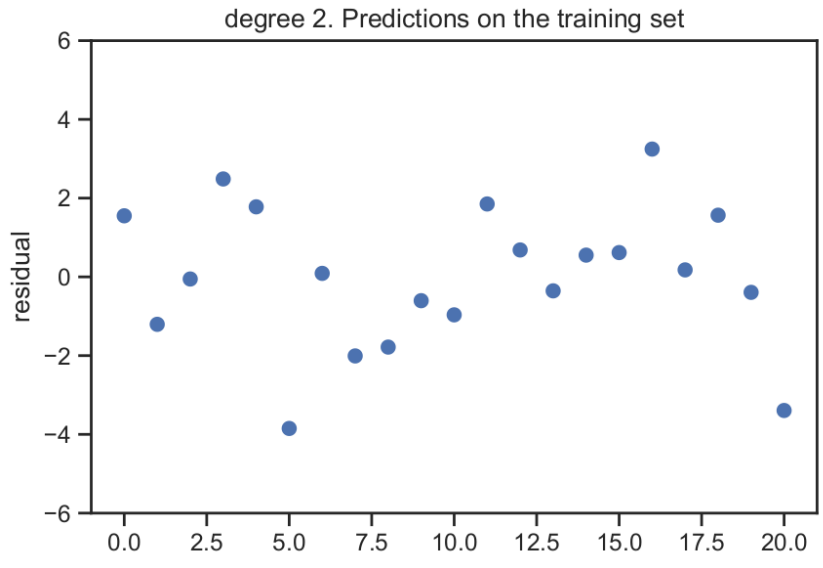


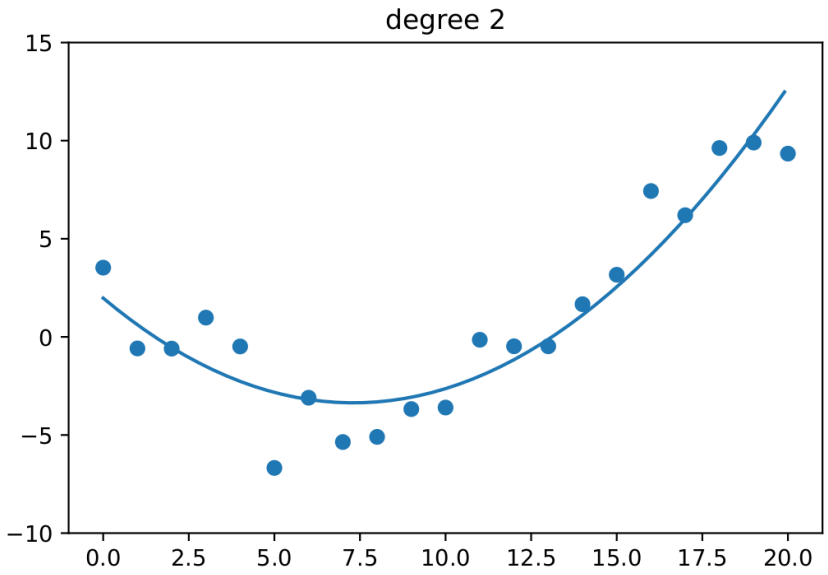


Análise de resíduos

- Resíduos são os erros obtidos no conjunto de treinamento.
- A análise gráfica dos resíduos pode ajudar a avaliar o modelo.

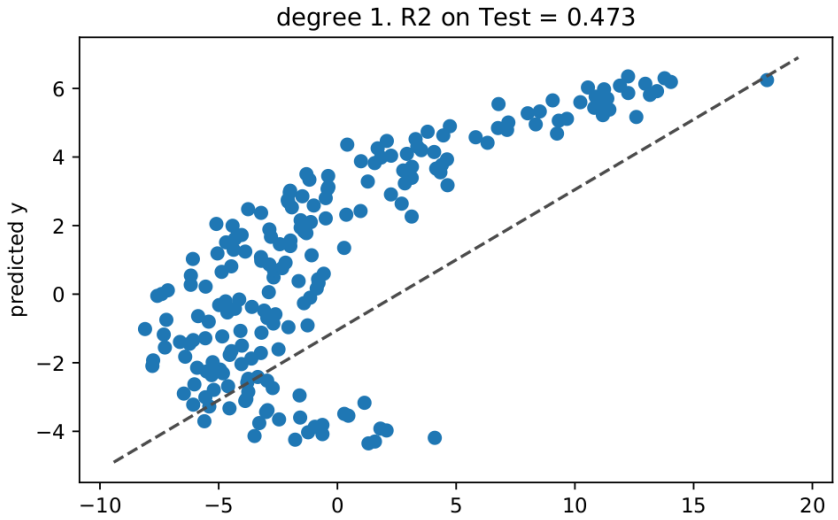


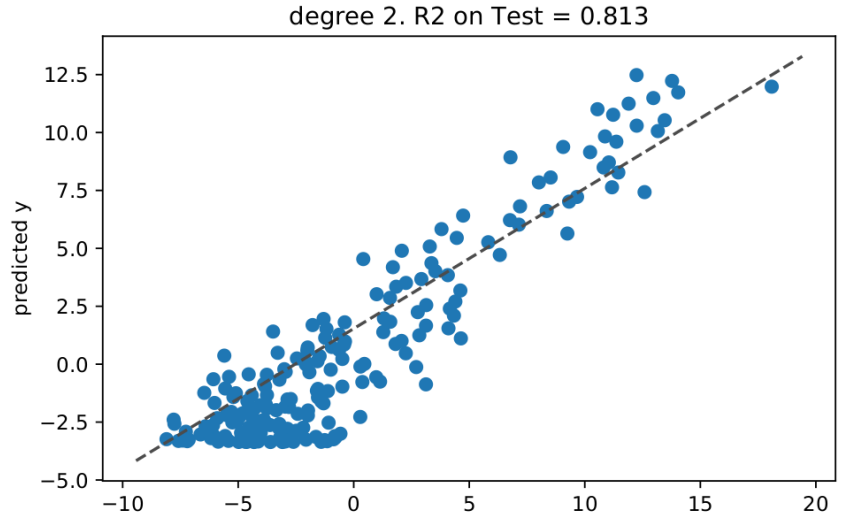


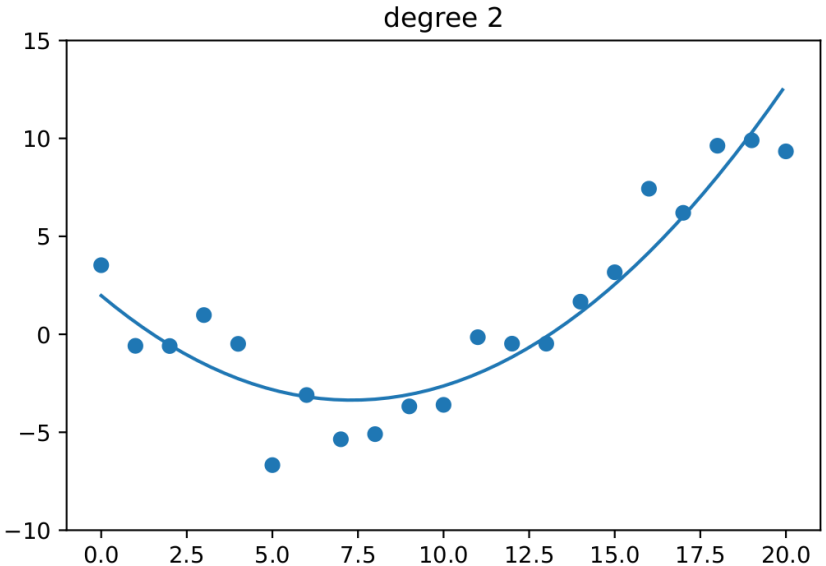


Análise de resíduos

- Podemos também analisar diretamente os valores esperados versus os preditos.







Análise de resíduos

- A qualidade do ajuste também pode ser medida pelo coeficiente de determinação R^2:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_i (y_i - \bar{y})^2}, \quad \bar{y} = \frac{1}{N} \sum_i y_i.$$

  - $\rightarrow$ O numerador é a soma residual dos quadrados (*residual sum of squares*).
  - $\rightarrow$ O denominador é a soma total dos quadrados (*total sum of squares*).
- Em geral, $0 \leq R^2 \leq 1$. Valores altos indicam maior redução na variância em relação a uma predição constante $\hat{y}_i = \bar{y}$.

Análise de resíduos

- A qualidade do ajuste também pode ser medida pelo coeficiente de determinação R^2:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_i (y_i - \bar{y})^2}, \quad \bar{y} = \frac{1}{N} \sum_i y_i.$$

  - $\rightarrow$ O numerador é a soma residual dos quadrados (*residual sum of squares*).
  - $\rightarrow$ O denominador é a soma total dos quadrados (*total sum of squares*).
- Em geral, $0 \leq R^2 \leq 1$. Valores altos indicam maior redução na variância em relação a uma predição constante $\hat{y}_i = \bar{y}$.
- **Importante**: O valor de R^2 não é indicado para avaliar modelos não-lineares nos parâmetros!

Avaliação de classificadores

- Considere uma classificação binária, com classes 0 e 1.
- Seja y_* a classe correta e $\hat{y}$ a classe predita.
- A função de perda zero-um é definida por:

$$l_{01} = \mathbb{I}(y_* \neq \hat{y}).$$

- A perda esperada *a posteriori* pode ser escrita por:

$$p(y_* \neq \hat{y}|\boldsymbol{x}) = 1 - p(y_* = \hat{y}|\boldsymbol{x}).$$

- A classificação que minimiza a perda esperada será:

$$\hat{y} = \arg\max_y p(y|\boldsymbol{x}),$$

que equivale à moda da distribuição, i.e., a solução MAP (*maximum a posteriori*).

Avaliação de classificadores

- **Problema**: Suponha que o custo de errar a classe 0 (c_{01}) seja diferente de errar a classe 1 (c_{10}).

Avaliação de classificadores

- **Problema**: Suponha que o custo de errar a classe 0 (c_{01}) seja diferente de errar a classe 1 (c_{10}).
- **Ideia**: Vamos considerar os custos na tomada de decisão.
- Escolhemos a classe 1 se:

$$
\begin{aligned}
p(y=1|\boldsymbol{x})c_{10} &> p(y=0|\boldsymbol{x})c_{01} \\
p(y=1|\boldsymbol{x})c_{10} &> [1-p(y=1|\boldsymbol{x})]c_{01} \\
p(y=1|\boldsymbol{x}) &> \frac{c_{01}}{c_{01}+c_{10}}.
\end{aligned}
$$

Avaliação de classificadores

- **Problema**: Suponha que o custo de errar a classe 0 (c_{01}) seja diferente de errar a classe 1 (c_{10}).
- **Ideia**: Vamos considerar os custos na tomada de decisão.
- Escolhemos a classe 1 se:

$$
\begin{aligned}
p(y=1|\boldsymbol{x})c_{10} &> p(y=0|\boldsymbol{x})c_{01} \\
p(y=1|\boldsymbol{x})c_{10} &> [1-p(y=1|\boldsymbol{x})]c_{01} \\
p(y=1|\boldsymbol{x}) &> \frac{c_{01}}{c_{01}+c_{10}}.
\end{aligned}
$$

- Caso $c_{10} = Rc_{01}$, temos:

$$
p(y=1|\boldsymbol{x}) > \frac{1}{R+1}.
$$

Avaliação de classificadores

- **Problema**: Seria possível o modelo não retornar nenhuma classe durante uma predição?

Avaliação de classificadores

- **Problema**: Seria possível o modelo não retornar nenhuma classe durante uma predição?
- **Ideia**: Podemos considerar uma "opção de rejeição":

$$y_* = \begin{cases} C_*, & \text{se } p(y_* = C_*|\boldsymbol{x}) > \tau_*, C_* = \arg\max_C p(y_* = C|\boldsymbol{x}) \\ \text{rejeita}, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

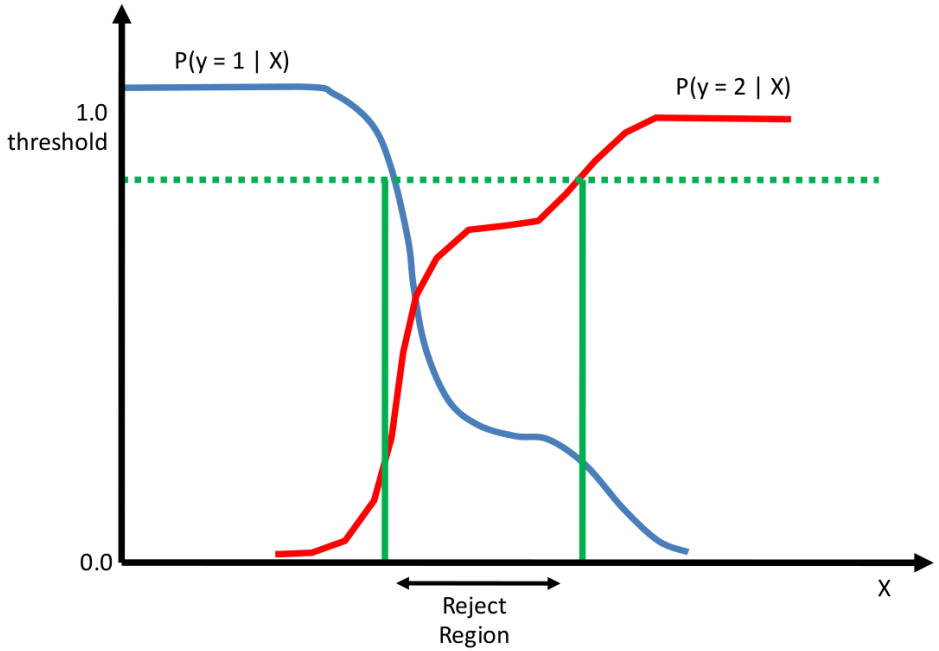
em que $\frac{1}{K} < \tau_* = 1 - \frac{\tau_r}{\tau_e} < 1$ é um limiar calculado a partir do custo da ação de rejeição τ_r e o custo do erro de classificação τ_e.

Avaliação de classificadores

- **Problema**: Seria possível o modelo não retornar nenhuma classe durante uma predição?
- **Ideia**: Podemos considerar uma "opção de rejeição":

$$y_* = \begin{cases} C_*, & \text{se } p(y_* = C_*|\boldsymbol{x}) > \tau_*, C_* = \arg\max_C p(y_* = C|\boldsymbol{x}) \\ \text{rejeita}, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

em que $\frac{1}{K} < \tau_* = 1 - \frac{\tau_r}{\tau_e} < 1$ é um limiar calculado a partir do custo da ação de rejeição τ_r e o custo do erro de classificação τ_e.

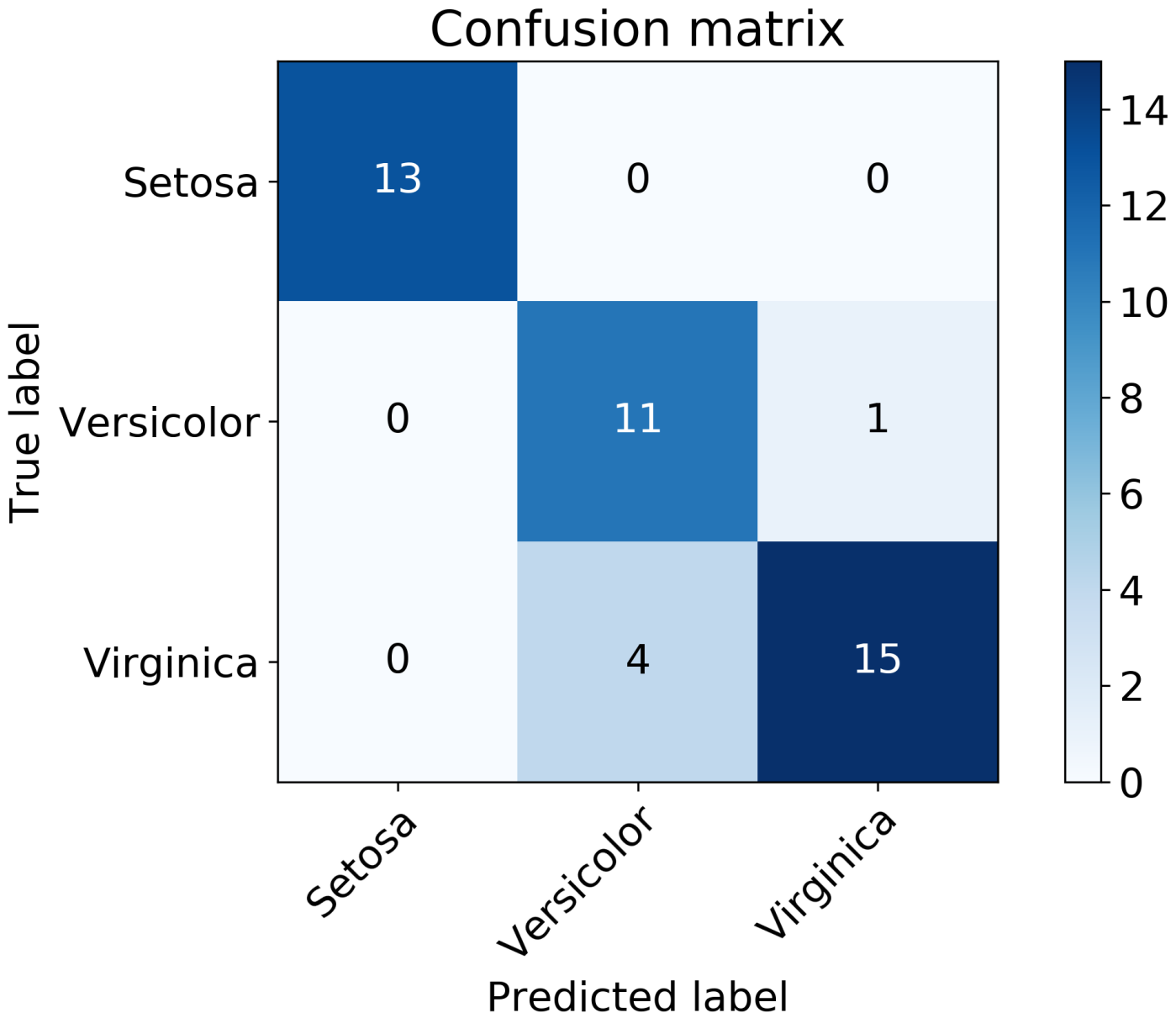


Avaliação de classificadores

Matriz de confusão

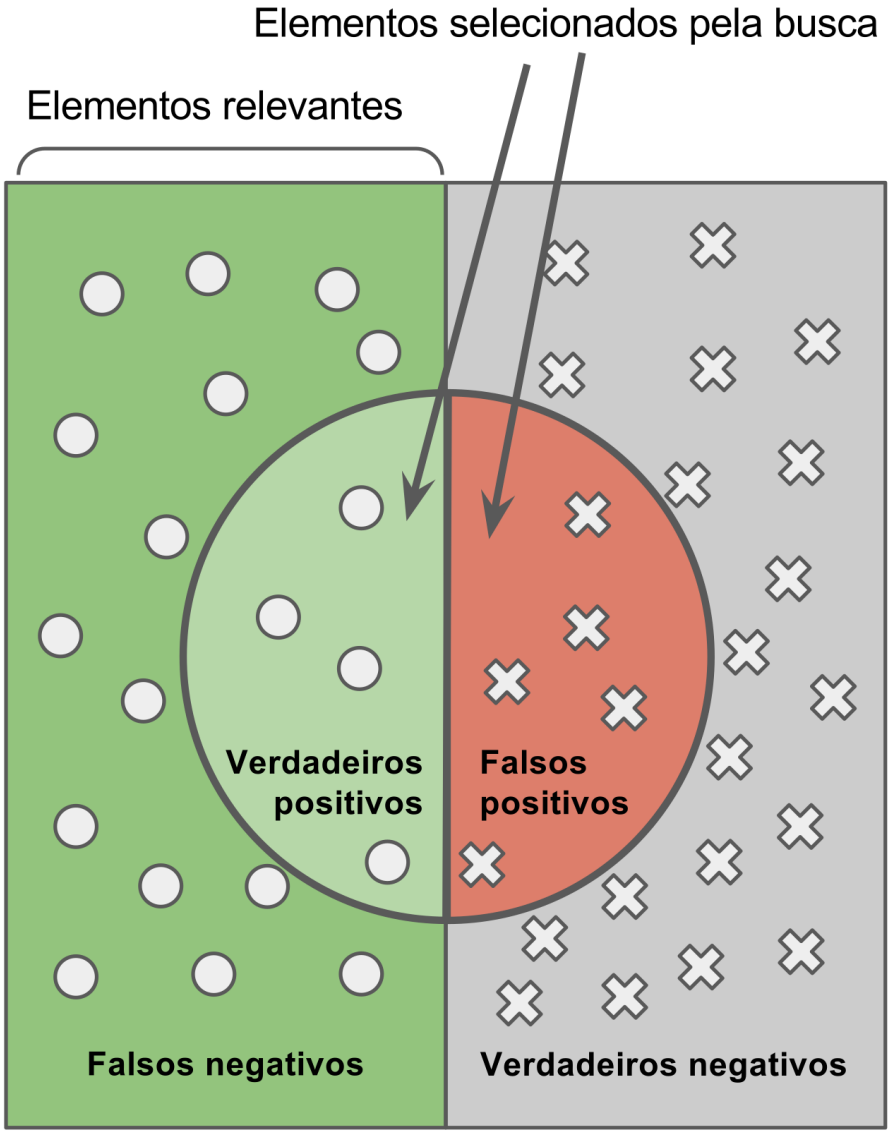
- Matriz que **sumariza os acertos e erros** de um classificador.
- Normalmente as classes (rótulos) verdadeiras são colocadas no eixo vertical, enquanto as classes preditas ficam no eixo horizontal.
- Os elementos na diagonal principal da matriz correspondem aos acertos do classificador.
- Os demais elementos correspondem aos erros do classificador.
- Classificadores obtidos por **algoritmos diferentes podem obter erros diferentes**, mesmo que a taxa de erro total seja semelhante.

Matriz de confusão - Arvore de decisão - Flores íris



Classificação binária ("positivo" ou "negativo")

Precisão e Revocação



Precisão = 

"Quantos elementos selecionados são relevantes?"

Revocação = 

"Quantos elementos relevantes foram selecionados?"

Avaliação de classificadores binários

- **Revocação (sensibilidade, recall ou taxa de verdadeiros positivos)**:

$$\text{revocação} = \frac{\text{verdadeiros positivos}}{\text{verdadeiros positivos} + \text{falsos negativos}}$$

Avaliação de classificadores binários

- **Revocação (sensibilidade, recall ou taxa de verdadeiros positivos)**:

$$\text{revocação} = \frac{\text{verdadeiros positivos}}{\text{verdadeiros positivos} + \text{falsos negativos}}$$

- **Precisão (precision ou valor preditivo positivo)**:

$$\text{precisão} = \frac{\text{verdadeiros positivos}}{\text{verdadeiros positivos} + \text{falsos positivos}}$$

Avaliação de classificadores binários

- **Revocação (sensibilidade, recall ou taxa de verdadeiros positivos)**:

$$\text{revocação} = \frac{\text{verdadeiros positivos}}{\text{verdadeiros positivos} + \text{falsos negativos}}$$

- **Precisão (precision ou valor preditivo positivo)**:

$$\text{precisão} = \frac{\text{verdadeiros positivos}}{\text{verdadeiros positivos} + \text{falsos positivos}}$$

- F_1 **score (F-score ou F-measure)**:

$$F_1 = \left(\frac{\text{revocação}^{-1} + \text{precisão}^{-1}}{2} \right)^{-1} = 2 \frac{\text{revocação} \times \text{precisão}}{\text{revocação} + \text{precisão}} \in [0, 1]$$

Avaliação de classificadores binários

- **Revocação (sensibilidade, recall ou taxa de verdadeiros positivos)**:

$$\text{revocação} = \frac{\text{verdadeiros positivos}}{\text{verdadeiros positivos} + \text{falsos negativos}}$$

- **Precisão (precision ou valor preditivo positivo)**:

$$\text{precisão} = \frac{\text{verdadeiros positivos}}{\text{verdadeiros positivos} + \text{falsos positivos}}$$

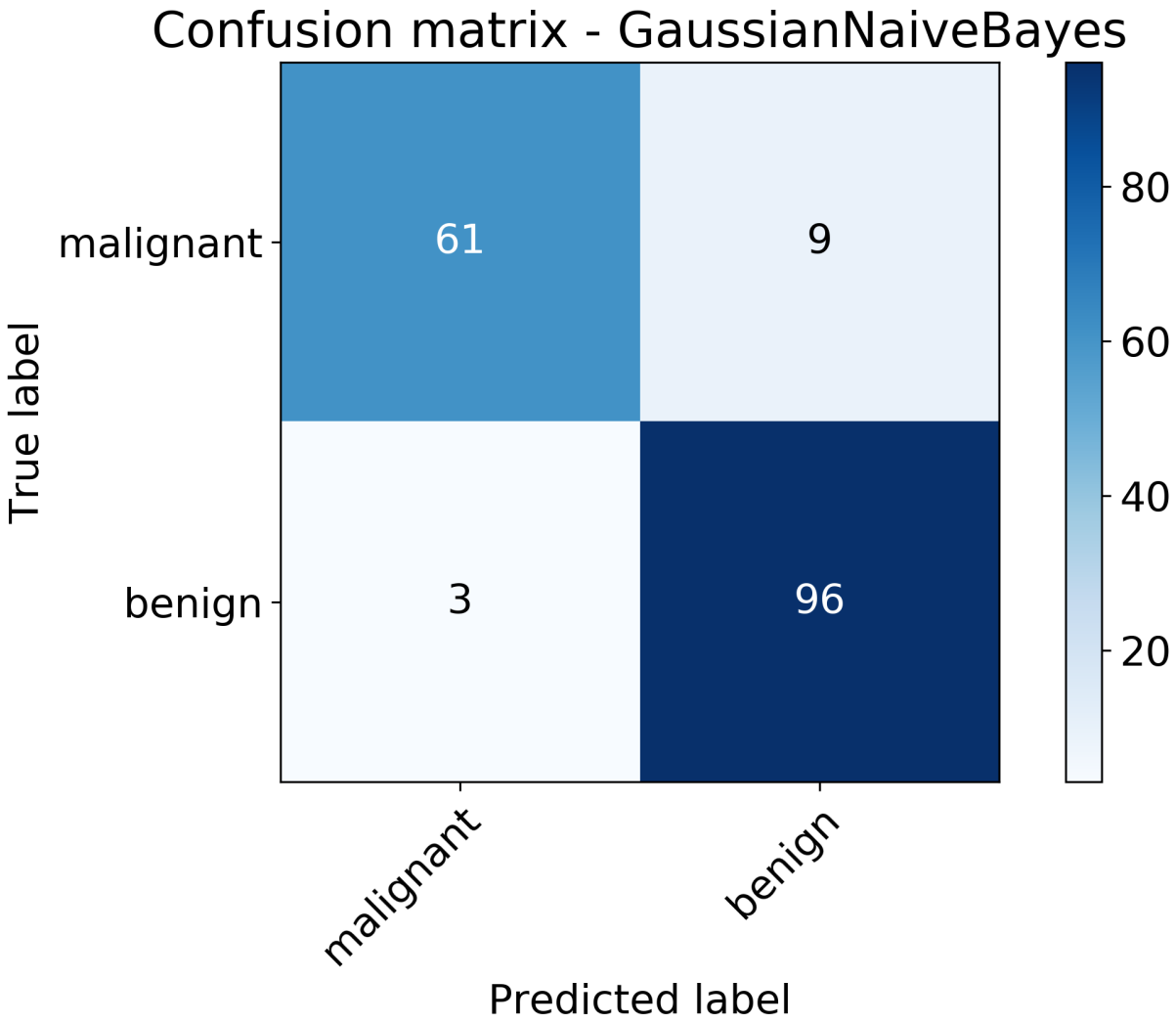
- F_1 **score (F-score ou F-measure)**:

$$F_1 = \left(\frac{\text{revocação}^{-1} + \text{precisão}^{-1}}{2} \right)^{-1} = 2 \frac{\text{revocação} \times \text{precisão}}{\text{revocação} + \text{precisão}} \in [0, 1]$$

- F_β **score (revocação** β **vezes mais importante que a precisão)**:

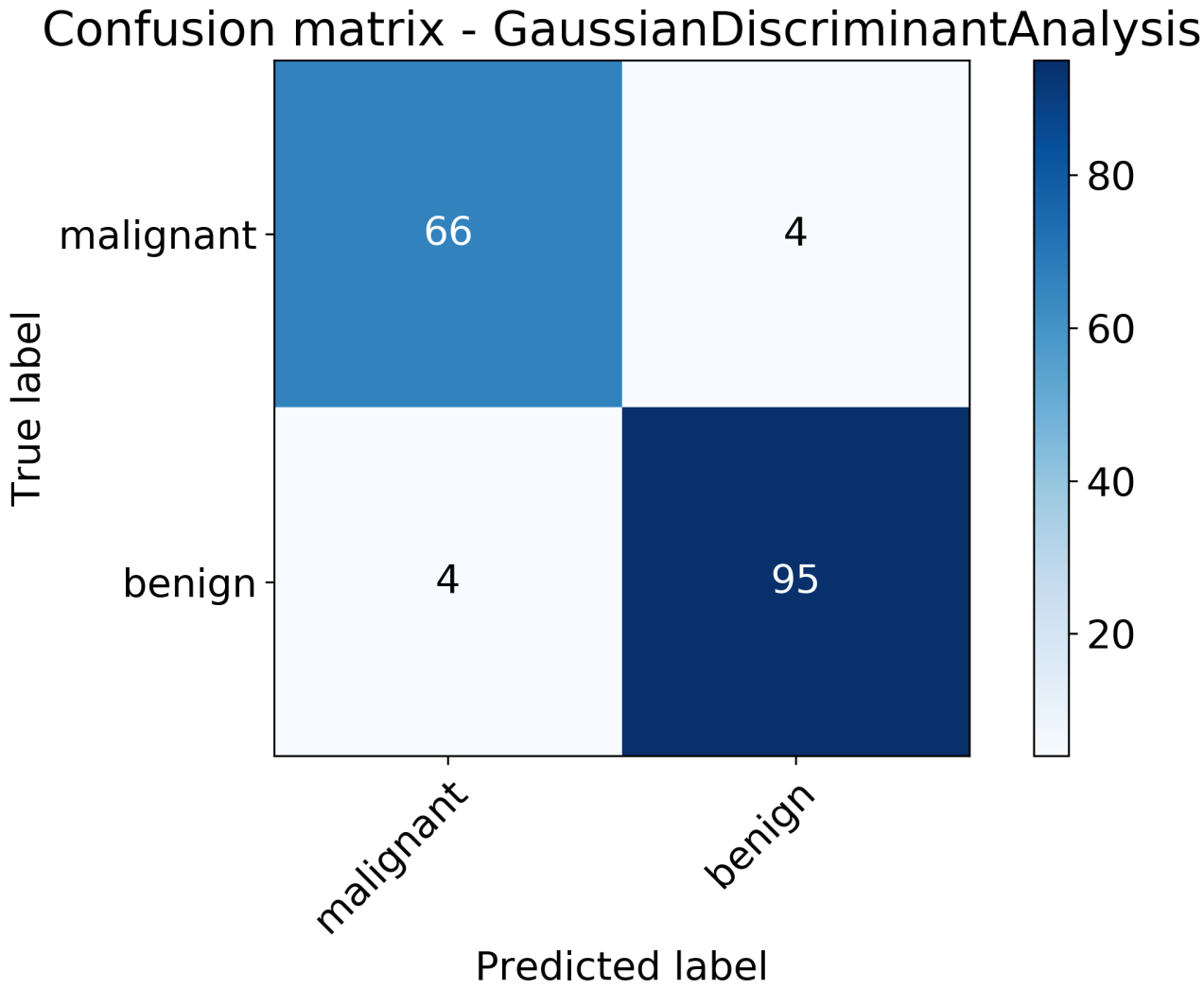
$$F_\beta = (1 + \beta^2) \frac{\text{revocação} \times \text{precisão}}{\text{revocação} + \beta^2 \text{precisão}} \in [0, 1]$$

Naive Bayes Gaussiano - Breast Cancer



$$\text{revocação} = \frac{61}{61+9} \approx 0.8714, \quad \text{precisão} = \frac{61}{61+3} \approx 0.9531, \quad F_1 \approx 0.9104$$

Discriminante Gaussiano - Breast Cancer



$$\text{revocação} = \frac{66}{66+4} \approx 0.9429, \quad \text{precisão} = \frac{66}{66+4} \approx 0.9429, \quad F_1 \approx 0.9429$$

Avaliação de classificadores multiclasse

- Apesar de ser menos comum, há diferentes maneiras de calcular as métricas Revocação, Precisão e F_1 score para tarefas com múltiplas classes:
  - → **micro**: A métrica é calculada globalmente, considerando taxas de acerto/erro gerais.
  - → **macro**: Média simples das métricas calculadas separadamente por classe.
  - → **weighted**: Média ponderada das métricas calculadas separadamente por classe. A ponderação é pela proporção de exemplos das classes.
- Medidas **macro** enfatizam os acertos nas classes minoritárias, enquanto as **weighted** focam nos acertos em geral, independente da classe.

Curva ROC (receiver operating characteristic)

- Em classificadores binários, temos $\hat{y}_* = \begin{cases} 1, & \text{se } p(\hat{y}_*|\boldsymbol{x}_*) \geq \tau, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$

Curva ROC (receiver operating characteristic)

- Em classificadores binários, temos $\hat{y}_* = \begin{cases} 1, & \text{se } p(\hat{y}_*|\boldsymbol{x}_*) \geq \tau, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$
- Apesar do valor $\tau = 0.5$ ser usual, podemos usar $\tau \in [0, 1]$.
- A **curva ROC** é obtida para diversos valores de $\tau \in [0, 1]$.

$$\text{taxa de falsos positivos (FPR)} = \frac{\text{falsos positivos}}{\text{falsos positivos} + \text{verdadeiros negativos}} \text{ e}$$

$$\text{taxa de verdadeiros positivos (TPR)} = \frac{\text{verdadeiros positivos}}{\text{verdadeiros positivos} + \text{falsos negativos}}$$

Curva ROC (receiver operating characteristic)

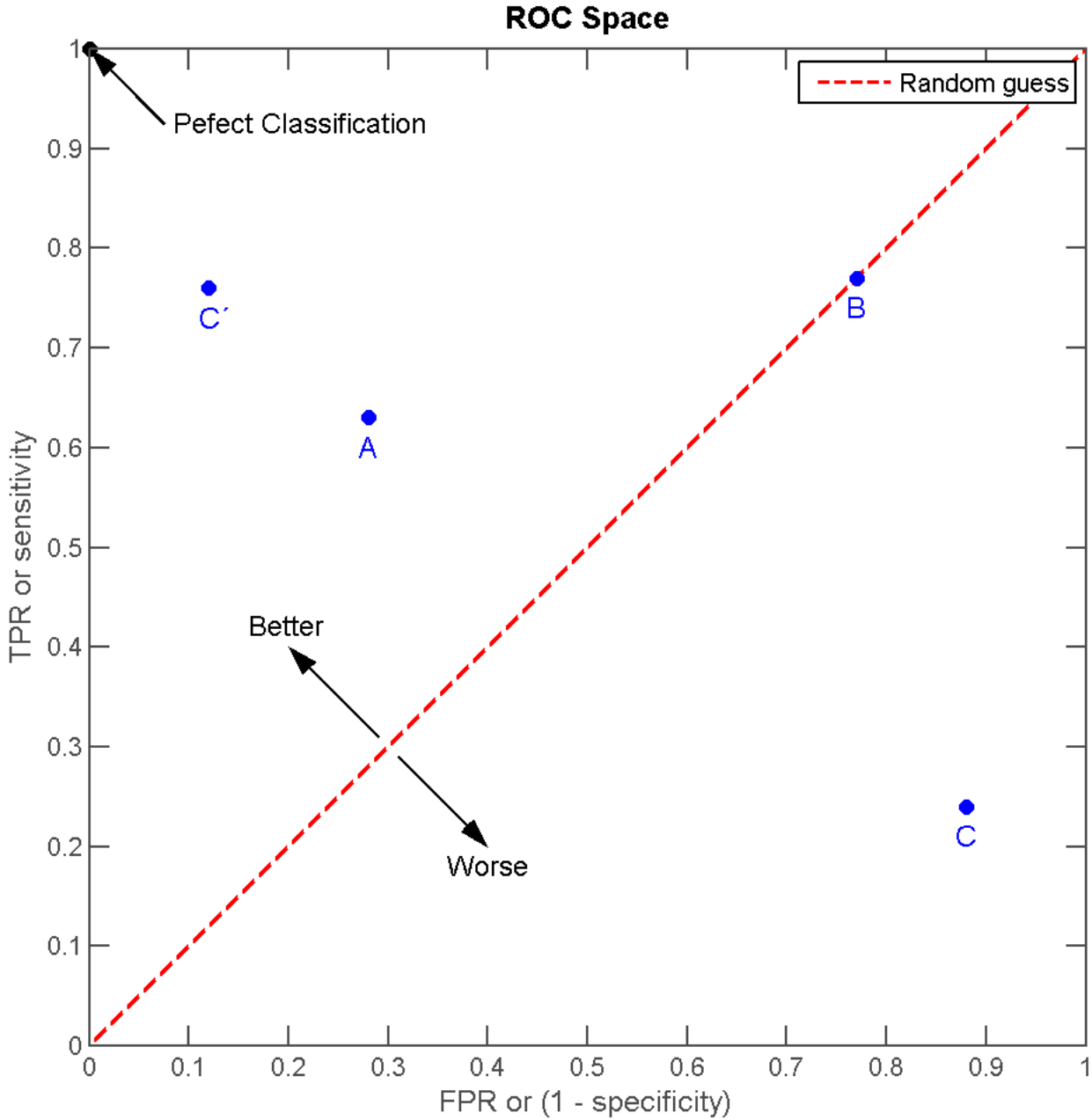
- Em classificadores binários, temos $\hat{y}_* = \begin{cases} 1, & \text{se } p(\hat{y}_*|\boldsymbol{x}_*) \geq \tau, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$
- Apesar do valor $\tau = 0.5$ ser usual, podemos usar $\tau \in [0, 1]$.
- A **curva ROC** é obtida para diversos valores de $\tau \in [0, 1]$.

$$\text{taxa de falsos positivos (FPR)} = \frac{\text{falsos positivos}}{\text{falsos positivos} + \text{verdadeiros negativos}} \text{ e}$$

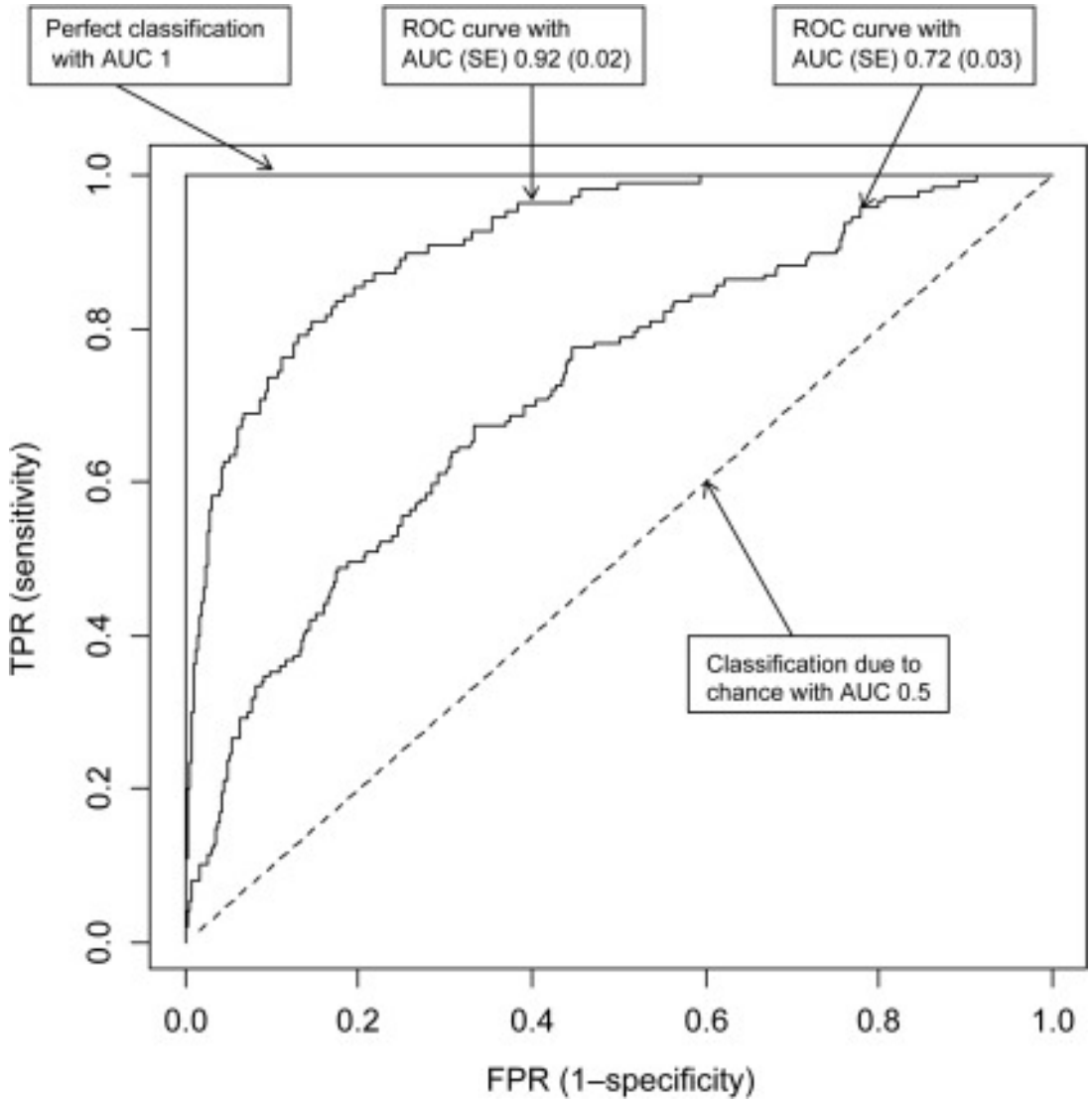
$$\text{taxa de verdadeiros positivos (TPR)} = \frac{\text{verdadeiros positivos}}{\text{verdadeiros positivos} + \text{falsos negativos}}$$

- **AUROC (area under the ROC curve)**: Área abaixo da curva ROC de um classificador. Seu pior valor é 0 e o melhor é 1.
  - $\rightarrow$ Probabilidade do classificador atribuir um valor maior a um padrão positivo qualquer comparado a um negativo qualquer.
- **EER (equal error rate) ou cross-over rate**: Valor em que FPR = 1 - TPR. Seu melhor valor é 0.

Curva ROC - Ilustração



Curva ROC - Ilustração



- **Observação**: Um classificador aleatório possui uma curva ROC em que TPR = FPR.

Curva Precision-Recall (PRC)

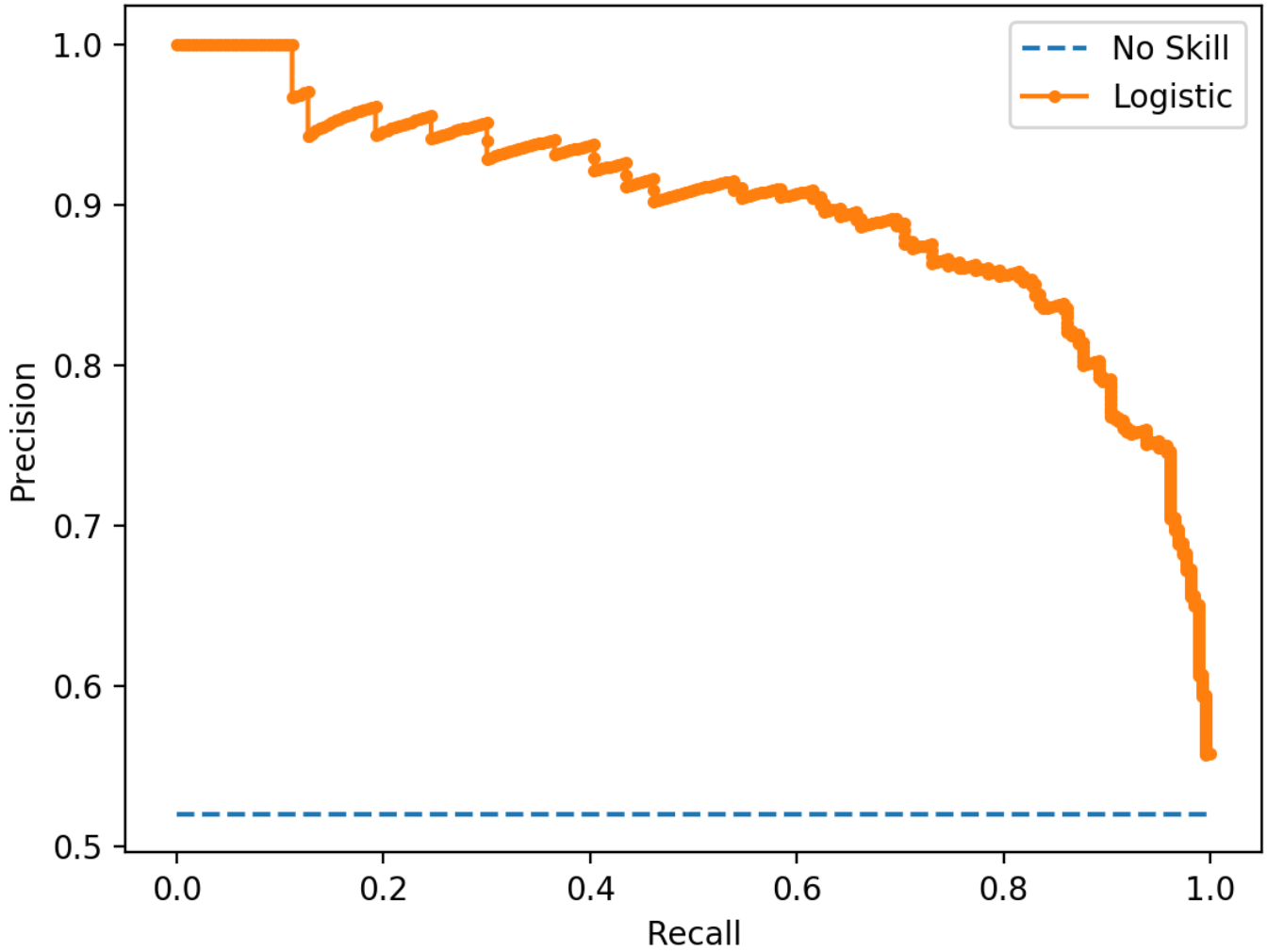
- Em classificadores binários, temos $\hat{y}_* = \begin{cases} 1, & \text{se } p(\hat{y}_*|\boldsymbol{x}_*) \geq \tau, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$
- A **curva PR** é obtida quando computamos

$$\text{revocação} = \frac{\text{verdadeiros positivos}}{\text{verdadeiros positivos} + \text{falsos negativos}} \text{ e}$$

$$\text{precisão} = \frac{\text{verdadeiros positivos}}{\text{verdadeiros positivos} + \text{falsos positivos}}$$

  para diversos valores de $\tau \in [0, 1]$.
- **AUPRC (area under the PR curve)**: Área abaixo da curva PR de um classificador. Corresponde à **precisão média**.

Curva PR - Ilustração

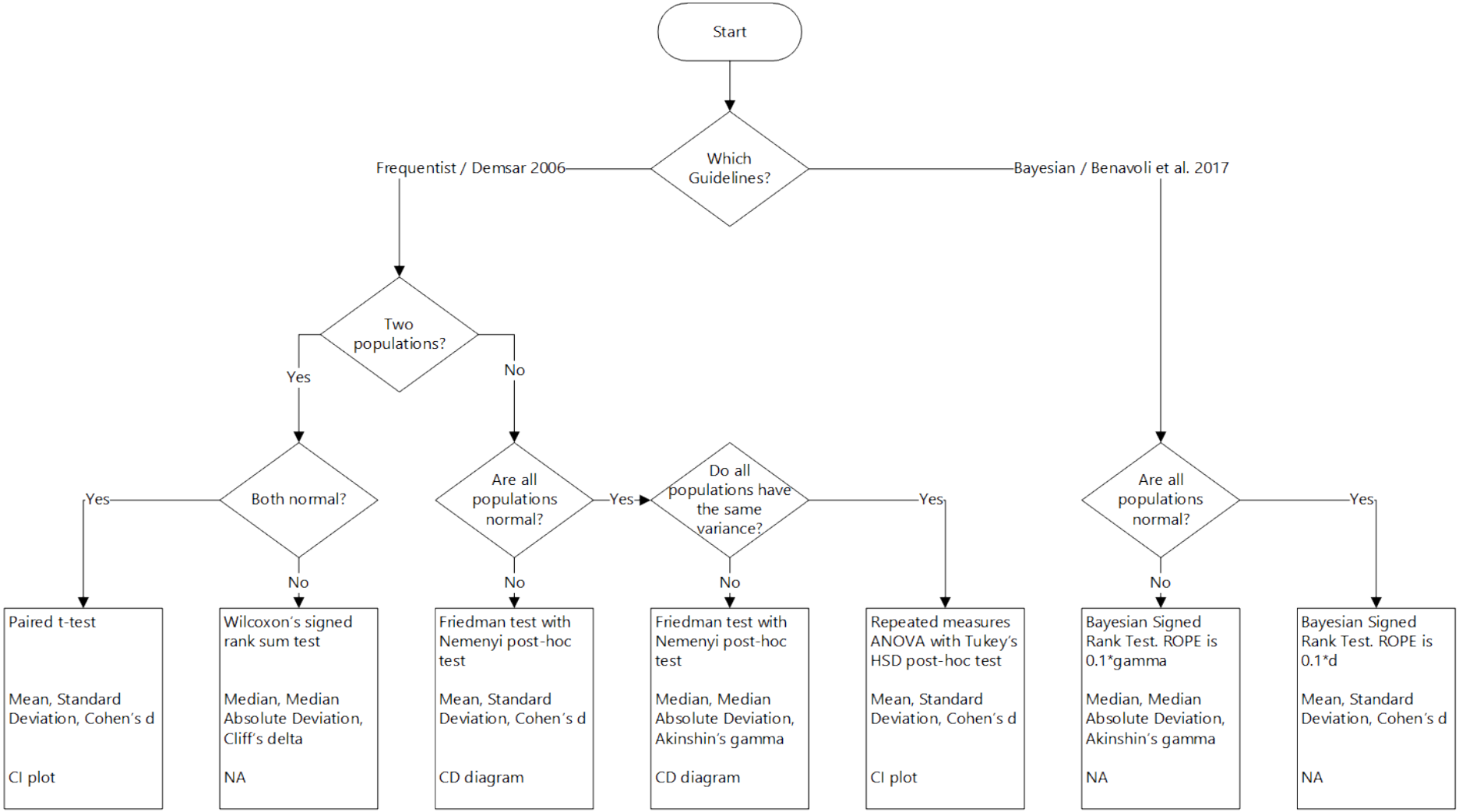


- **Observação**: Um classificador aleatório possui uma curva PR constante igual à proporção de exemplos positivos.

Tópicos adicionais sobre avaliação de modelos

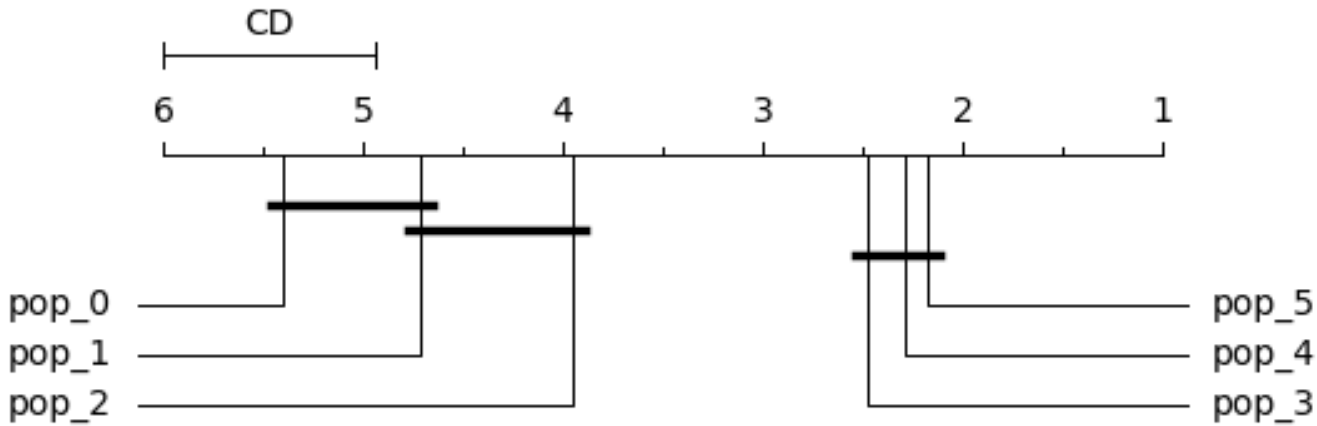
- DEMŠAR, Janez. Statistical comparisons of classifiers over multiple data sets. The Journal of Machine Learning Research, v. 7, p. 1-30, 2006.
- BENAVOLI, Alessio et al. Time for a change: a tutorial for comparing multiple classifiers through Bayesian analysis. Journal of Machine Learning Research, v. 18, n. 77, p. 1-36, 2017.
- Pacote Python para comparação estatística de múltiplos modelos: Autorank.
- Pacote Python para testes *post-hoc*: scikit-posthocs.
- O SciPy implementa vários testes estatísticos.

Tópicos adicionais sobre avaliação de modelos



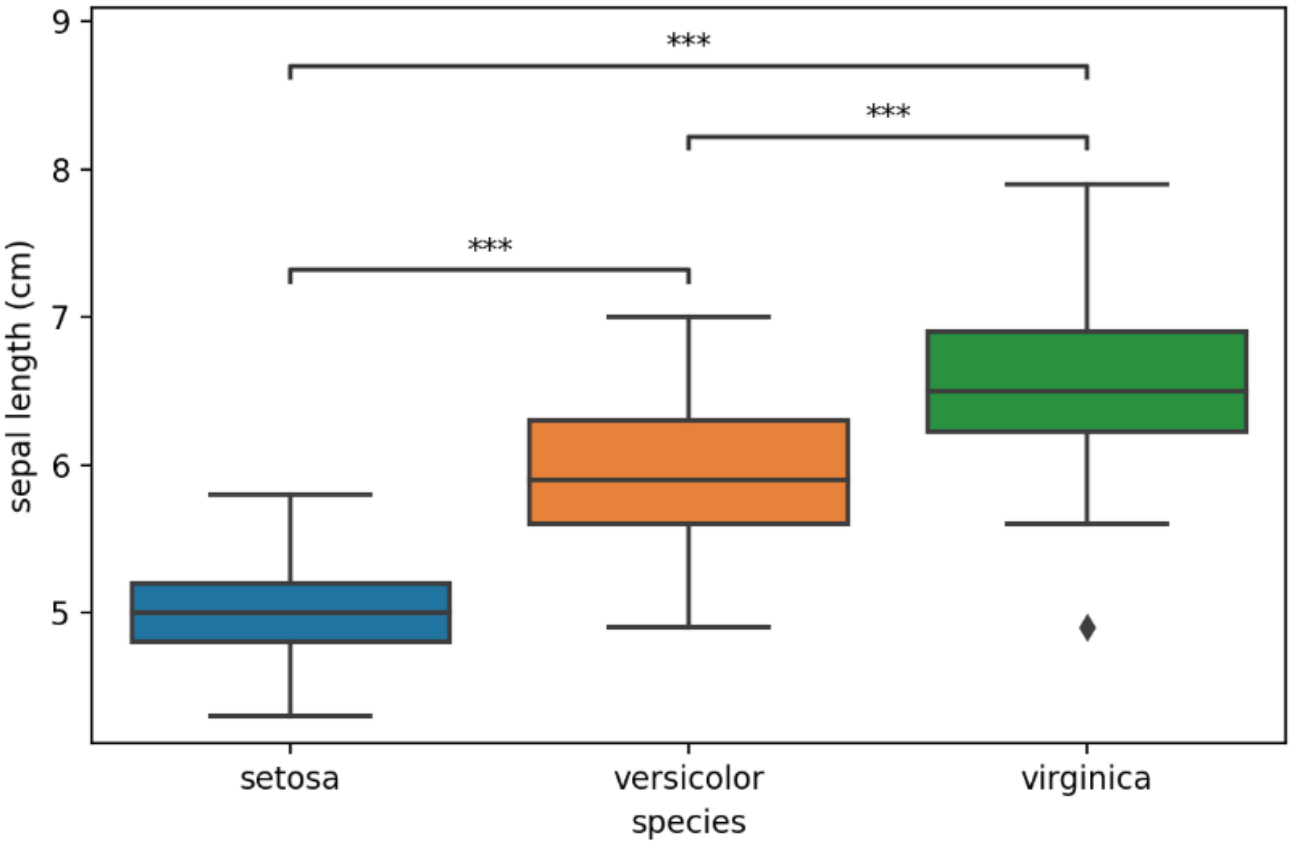
Tópicos adicionais sobre avaliação de modelos

- Comparação de múltiplos modelos em múltiplos datasets - Teste não paramétrico de Friedman seguido de teste *post-hoc* de Nemenyi (diagrama de distância crítica):



Tópicos adicionais sobre avaliação de modelos

- Comparação de múltiplos modelos em um dataset - Teste não paramétrico de Kruskal-Wallis seguido de teste *post-hoc* de Dunn:



Referências bibliográficas

- **Caps. 5 e 16** - MURPHY, Kevin P. **Machine learning: a probabilistic perspective**, 2012.
- **Cap. 18** - MURPHY, Kevin P. **Probabilistic Machine Learning: An Introduction**, 2021.
- **Cap. 14** - BISHOP, C. **Pattern recognition and machine learning**, 2006.