

Avaliação de Modelos

Prof. Jefferson T. Oliva

Aprendizado de Máquina e Reconhecimento de Padrões (AM28CP)
Engenharia de Computação
Departamento Acadêmico de Informática (Dainf)
Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR)
Campus Pato Branco

- Erro (Perda) em Problemas de Classificação e Regressão
- Decomposição de Viés-Variância do Erro Quadrático
- Classificação x Regressão
- Decomposição de Viés-Variância para a Perda 0-1
- Viés Estatístico x Viés Indutivo

- A análise de desempenho de modelos depende do problema
 - Classificação: taxa de exemplos corretamente classificados
 - Acurácia, sensibilidade, especificidade, f1-score, ...
 - Regressão: diferença entre os valor predito e o valor correto
 - Coeficiente de determinação (R^2), erro médio absoluto, erro médio quadrático, ...
- Média dos erros obtidos em diferentes execuções de um experimento
- O objetivo é errar o menos possível
 - Minimização da taxa de erro
 - Geralmente, não é possível medir a taxa de erro, ou seja, ela deve ser estimada

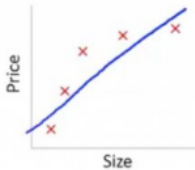
Erro (Perda) em Problemas de Classificação e Regressão

Erro (Perda) em Problemas de Classificação e Regressão

- É desejável que o modelo preditivo generalize "bem"
 - Alta acurácia de generalização
 - Baixo erro de generalização
- Suposição: os exemplos de treinamento e teste são independentes e distribuídos de forma idêntica (extraídos da mesma distribuição de probabilidade conjunta, $P(X, y)$)
- Para um qualquer modelo aleatório que não tenha sido ajustado ao conjunto de treinamento, esperamos que o erro de treinamento seja aproximadamente semelhante ao erro de teste
- O erro ou a acurácia do treinamento fornece uma estimativa com viés otimista do desempenho da generalização do modelo

Erro (Perda) em Problemas de Classificação e Regressão

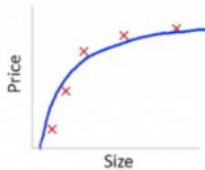
- Subajuste (*underfitting*): tanto o erro de treinamento quanto o de teste são altos
- Sobreajuste (*overfitting*): há diferença significativa entre o erro de treinamento e o de teste (onde o erro de teste é maior)



$$\theta_0 + \theta_1 x$$

High bias
(underfit)

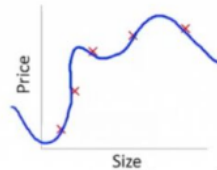
$$d=1$$



$$\theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2$$

"Just right"

$$d=2$$

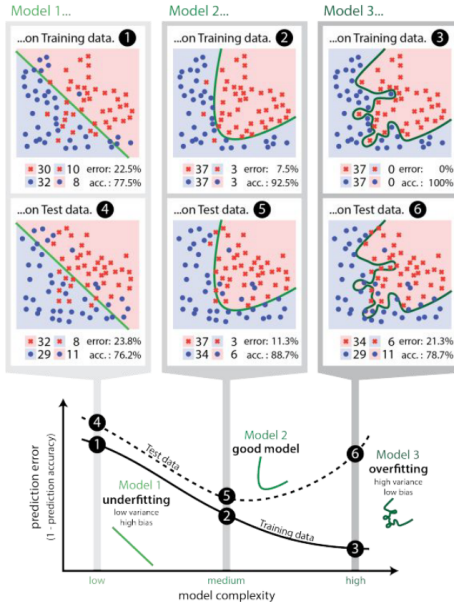


$$\theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2 + \theta_3 x^3 + \theta_4 x^4$$

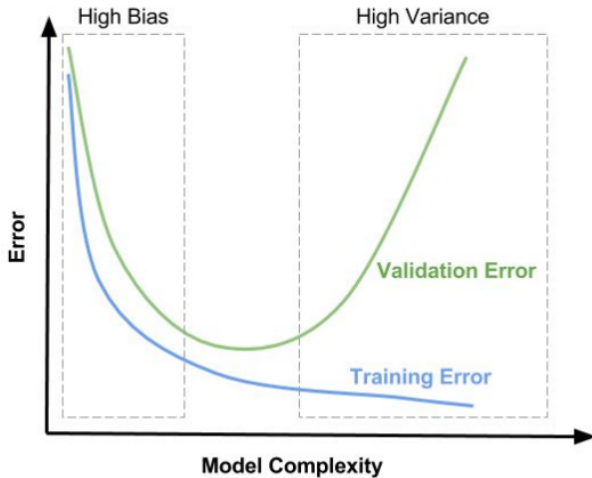
High variance
(overfit)

$$d=4$$

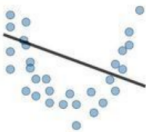


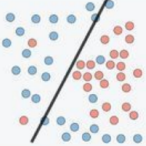
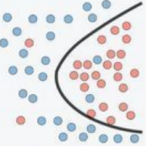
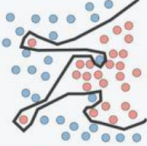

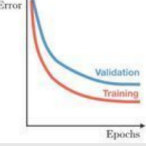

Erro (Perda) em Problemas de Classificação e Regressão



Erro (Perda) em Problemas de Classificação e Regressão



Erro (Perda) em Problemas de Classificação e Regressão

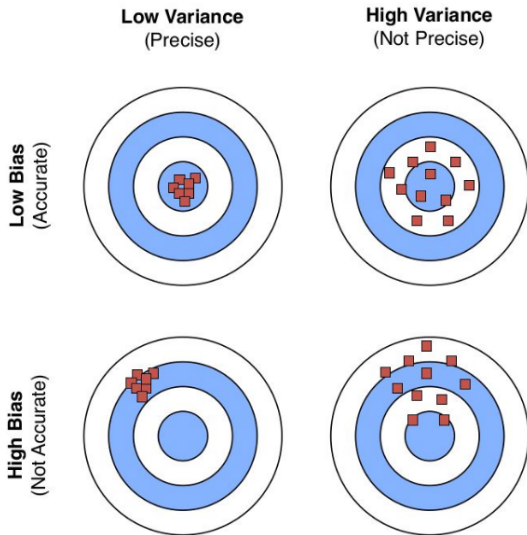
	Underfitting	Just right	Overfitting
Symptoms	<ul style="list-style-type: none">• High training error• Training error close to test error• High bias	<ul style="list-style-type: none">• Training error slightly lower than test error	<ul style="list-style-type: none">• Very low training error• Training error much lower than test error• High variance
Regression illustration			
Classification illustration			
Deep learning illustration			
Possible remedies	<ul style="list-style-type: none">• Complexify model• Add more features• Train longer		<ul style="list-style-type: none">• Perform regularization• Get more data

Decomposição de Viés-Variância do Erro Quadrático

Decomposição de Viés-Variância do Erro Quadrático

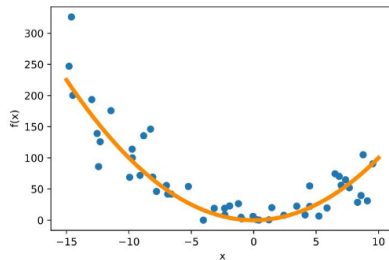
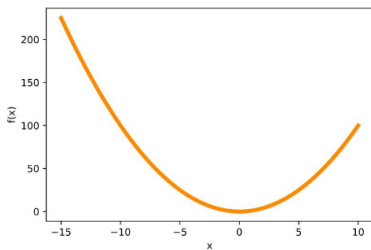
- A Decomposição da perda (*loss*) em relação ao viés e a variância é útil para a compreensão de algoritmos de aprendizado
 - Conceitos relacionados a subajuste e sobreajuste
- Ajuda a explicar por que métodos ensembles podem ter melhor desempenho do que modelos individuais
- $\text{Perda} = \text{Viés} + \text{Variância} + \text{Ruído}$

Decomposição de Viés-Variância do Erro Quadrático

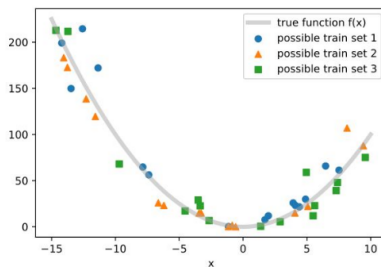
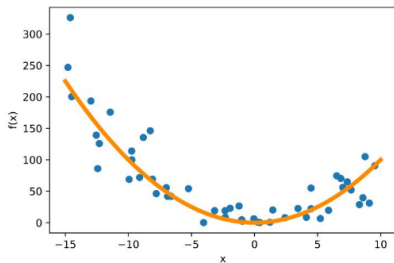


Decomposição de Viés-Variância do Erro Quadrático

- $f(x)$: alguma função verdadeira (alvo)
- Pontos azuis: conjunto de treinamento

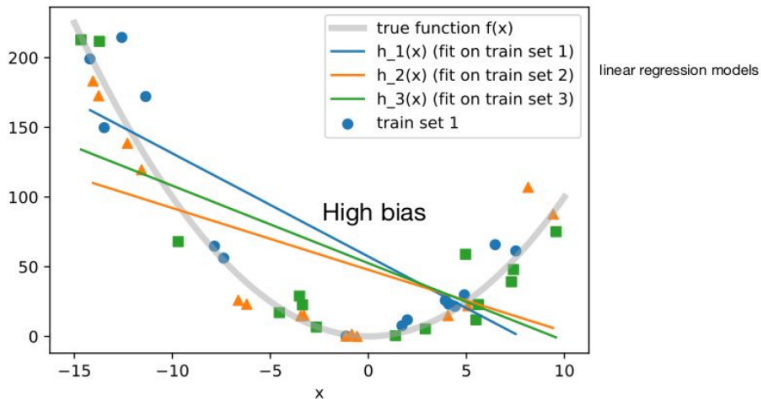


Decomposição de Viés-Variância do Erro Quadrático



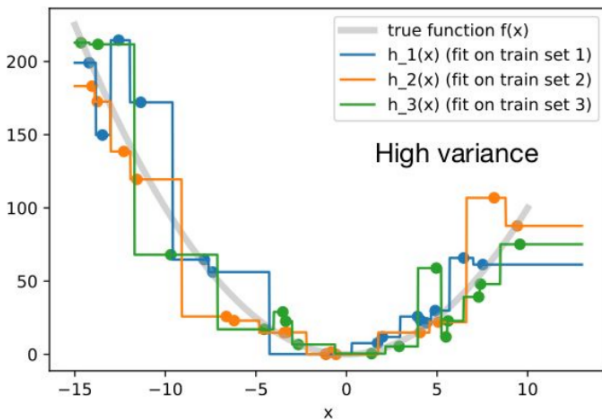
Decomposição de Viés-Variância do Erro Quadrático

- Suponha que temos vários conjuntos de treinamento



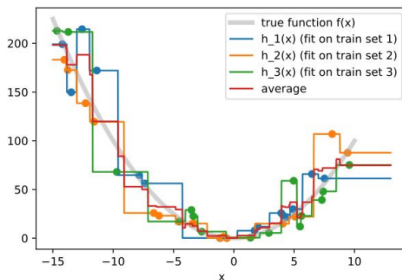
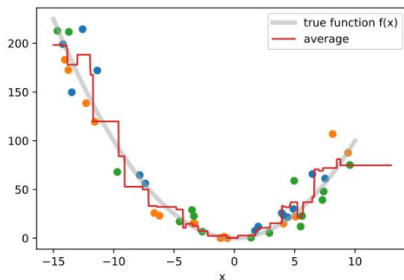
Decomposição de Viés-Variância do Erro Quadrático

- Suponha que temos vários conjuntos de treinamento



Decomposição de Viés-Variância do Erro Quadrático

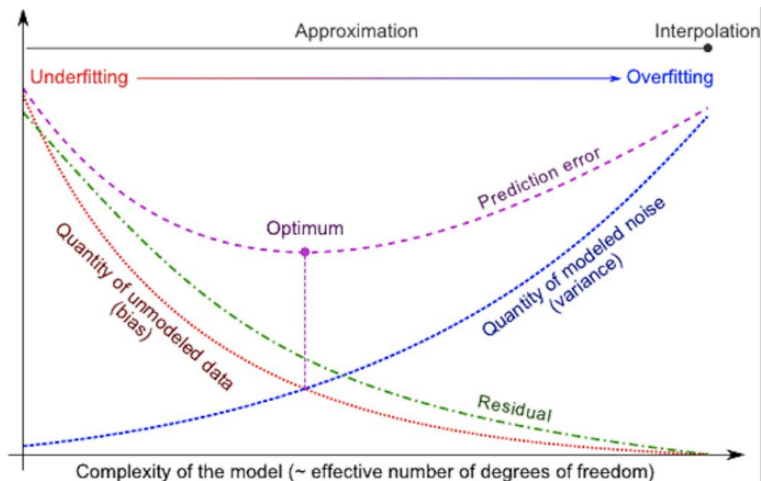
- E se for calculada a média entre as predições?



Decomposição de Viés-Variância do Erro Quadrático

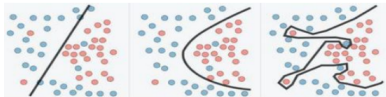
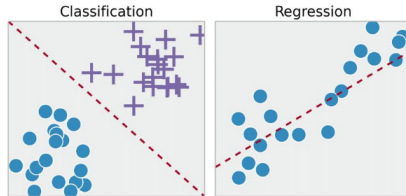
- Dado um preditor $\hat{\theta}$ de um parâmetro θ
 - Poderia também ser uma função
 - Por exemplo, a hipótese é um preditor de uma função alvo
- Viés: diferença entre a média preditiva do modelo (treinado a partir de exemplos de treinamento) e os valores verdadeiros
 - O valor esperado está sobre o conjunto de treinamento
 - $\text{Viés} = E[\hat{\theta}] - \theta$
- Variância: fornece uma estimativa de quanto a predição varia à medida que variamos os dados de treinamento (e.g, reamostragem)
 - $\text{Var}[\hat{\theta}] = E[\hat{\theta}^2] - (\hat{\theta})^2 = E[(E[\hat{\theta}] - \hat{\theta})^2]$

Decomposição de Viés-Variância do Erro Quadrático



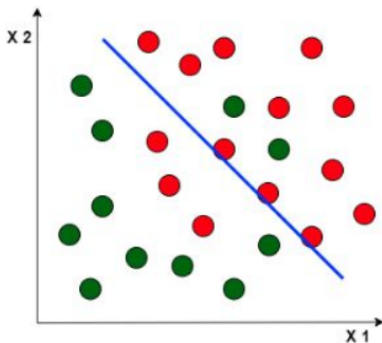
Classificação x Regressão

Classificação x Regressão



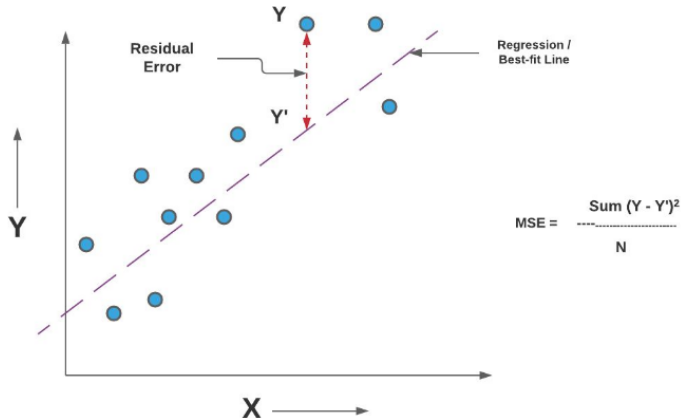
Classificação x Regressão

- Perda 0-1 (L_{0-1}) na classificação
 - Acurácia = 1 - taxa de erro
 - $1 - 0,2 = 0,8$
 - $L_{0-1}(y_i, \hat{y}_i) = 1(y_i \neq \hat{y}_i)$
 - $L_{0-1} = 5$



Classificação x Regressão

- Perda por erro médio quadrático (*mean squared error* – MSE) na regressão



- Viés do erro quadrático
 - $\text{Viés} = E[\hat{\theta}] - \theta$
 - $\text{Var}[\hat{\theta}] = E[\hat{\theta}^2] - (\hat{\theta})^2 = E[(E[\hat{\theta}] - \hat{\theta})^2]$
 - Alvo: $y = f(x)$ (por simplicidade, ignoramos o termo ruído)
 - Predição: $\hat{y} = \hat{f}(x) = h(x)$
 - Erro quadrático: $S = (y - \hat{y})^2$

- Notação para a perda por erro quadrático

- $(a - b)^2 = a^2 + b^2 - 2ab$

- $S = (y - \hat{y})^2$

- $S = (y - E[\hat{y}] + E[\hat{y}] - \hat{y})^2$

- $S = (y - E[\hat{y}])^2 + (E[\hat{y}] - \hat{y})^2 + 2(y - E[\hat{y}])(E[\hat{y}] - \hat{y})$

- $E[S] = E[(y - \hat{y})^2]$

- $E[(y - \hat{y})^2] = (y - E[\hat{y}])^2 + E[E[\hat{y}] - \hat{y}]^2$

- $= \text{Viés}^2 + \text{Var}$

- $E[2(y - E[\hat{y}])(E[\hat{y}] - \hat{y})] = 2E[(y - E[\hat{y}])(E[\hat{y}] - \hat{y})]$

- $= 2(y - E[\hat{y}])E[E[\hat{y}] - \hat{y}]$

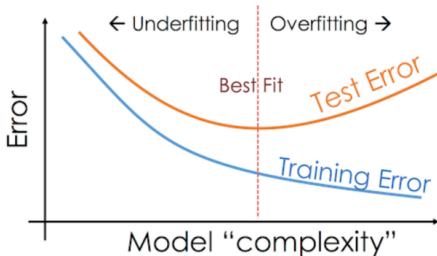
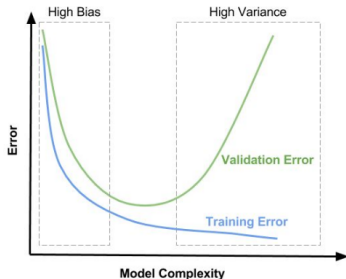
- $= 2(y - E[\hat{y}])(E[E[\hat{y}]] - E[\hat{y}])$

- $= 2(y - E[\hat{y}])(E[\hat{y}] - E[\hat{y}])$

- $= 0$

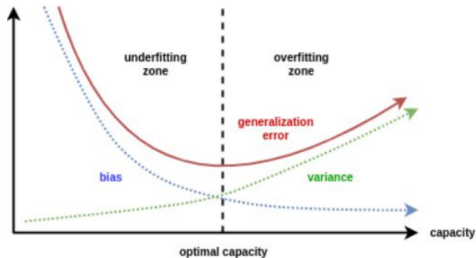
Classificação x Regressão

- Como $\text{Viés}^2 + \text{Var}$ está relacionado com subajuste e sobreajuste?



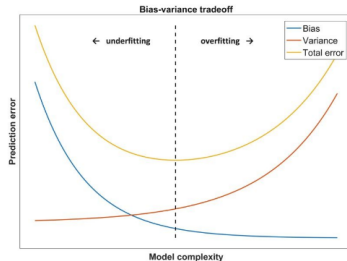
Classificação x Regressão

- Como $\text{Viés}^2 + \text{Var}$ está relacionado com subajuste e sobreajuste?



Minimize 2 error sources!

bias-variance tradeoff...



Decomposição de Viés-Variância para a Perda 0-1

Decomposição de Viés-Variância para a Perda 0-1

- Diversas decomposições viés-variância relacionadas à Perda 0-1 foram propostas, mas todas apresentam deficiências consideráveis
- Perda quadrática:
 - $(y - \hat{y})^2$
 - Valor esperado sobre conjuntos de treinamentos para uma amostra específica
$$E[(y - \hat{y})^2] = \underbrace{(y - E[\hat{y}])^2}_{\text{Viés}^2} + \underbrace{E[(E[\hat{y}] - \hat{y})^2]}_{\text{Variância}}$$
- Predição principal \rightarrow média ($E[\hat{y}]$)

Decomposição de Viés-Variância para a Perda 0-1

- Perda 0-1
 - $L(y, \hat{y})$
 - $E[L(y, \hat{y})]$
- Predição principal \rightarrow moda ($E[\hat{y}]$)
- Perda = $P(\hat{y} \neq y)$

$$\text{Viés} = \begin{cases} 1, & \text{se } y \neq \hat{y} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

Viés Estatístico x Viés Indutivo

- Viés estatístico: diferença sistemática entre o valor esperado de um modelo e o valor verdadeiro (alvo)

$$\text{Viés} = E[\hat{\theta}] - \theta$$

- Viés indutivo: também denominado de viés de aprendizado de máquina, é a simplificação ou suposição incorreta sobre os dados
 - Determina o limite da capacidade do modelo em capturar a verdadeira relação entre as variáveis
 - O viés é o erro cometido por um modelo devido à sua flexibilidade insuficiente para representar a complexidade da função alvo

- A causa do viés estatístico pode ser dada por: escolha de métodos de predição inadequados, conjunto de dados não representativos, hiperparâmetros "incorretos" ...
- A causa do viés de aprendizado de máquina pode ser dada por: subajuste do modelo (*underfitting*), suposições inadequadas (e.g. usar regressão linear em dados não lineares), características insuficientes ...

- Exemplos de problemas reais relacionados ao viés
 - Na Amazon, o modelo de aprendizado de máquina para revisar currículos estava apresentando preferências em candidatos masculinos em relação ao feminino



- Exemplos de problemas reais relacionados ao viés
 - Em 2018, a polícia chinesa admitiu que difamou, por engano, uma mulher de negócios bilionária após o sistema de reconhecimento facial projetado para flagrar pedestres indisciplinados ter "capturado" ela em um anúncio de um ônibus



- Outros exemplos de problemas reais relacionados ao viés
 - Amazon's Rekognition
 - Predição de gênero
 - Base de dados de mamografia



CASANOVA, D.

Model evaluation. Aprendizado de Máquina.

Slides. Engenharia de Computação. Dainf/UTFPR, 2020.



DOMINGOS, Pedro. A unified bias-variance decomposition.

In: Proceedings of 17th international conference on machine learning.

Morgan Kaufmann Stanford, 2000. p. 231-238.



RASCHKA, S.; MIRJALILI, V.

Python Machine Learning.

Packt, 2017.