Avaliação de Modelos (parte 2)

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

DAINF
DEPARTAMENTO ACADÊMICO DE INFORMÁTICA
CÂMPUS PATO BRANCO

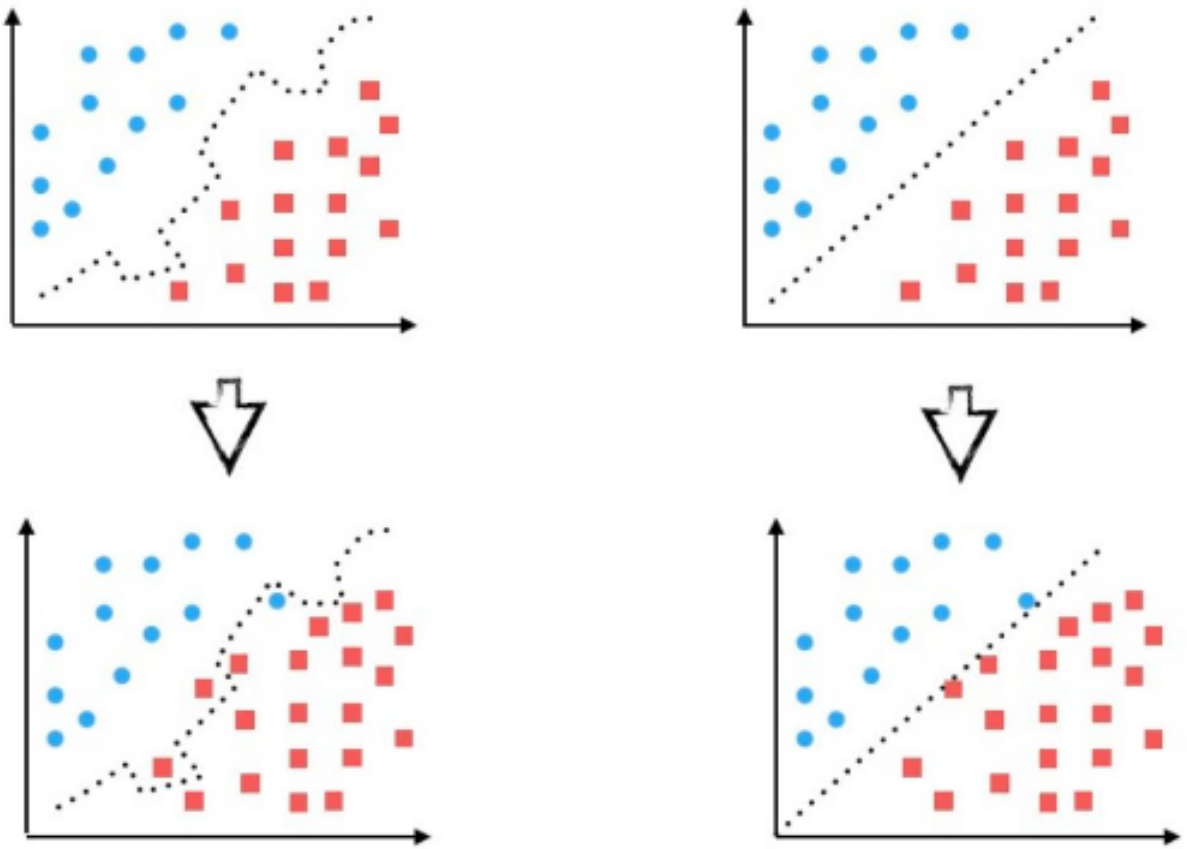
UTFPR
UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ

Sumário

- Método *Holdout*
- Validação Cruzada
- Medidas de Avaliação de Modelos

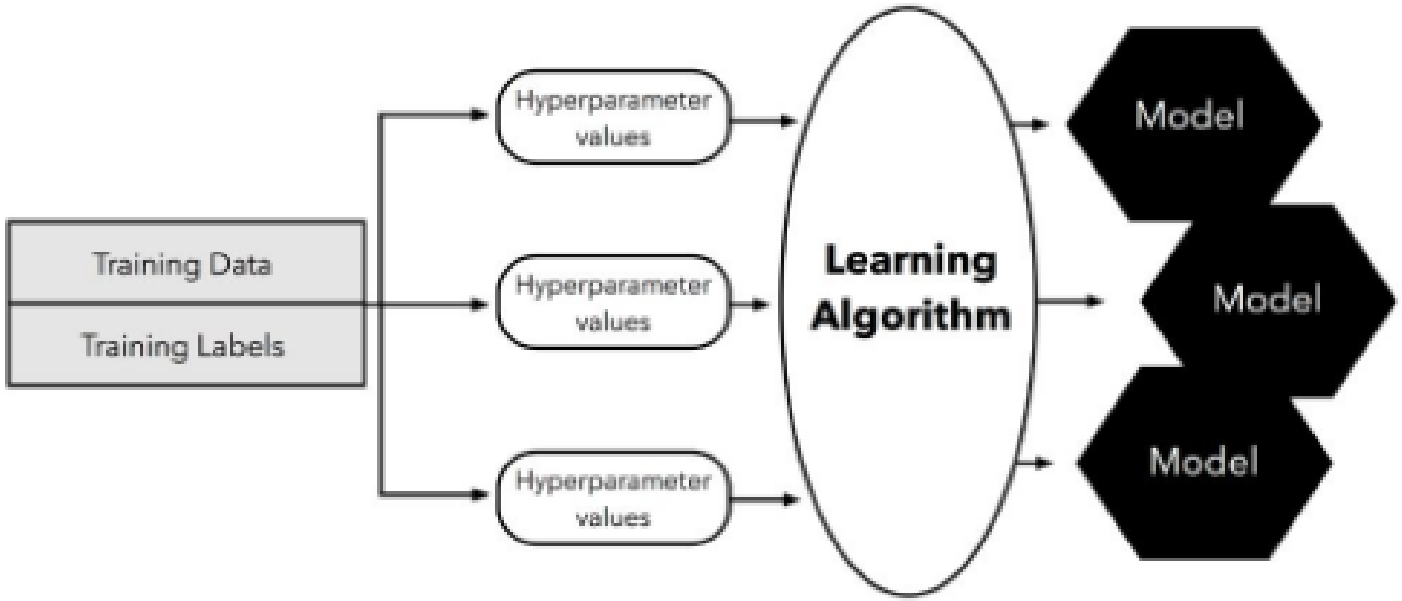
Introdução

- É desejável estimar o desempenho da generalização do modelo
  - Desempenho preditivo para dados não vistos



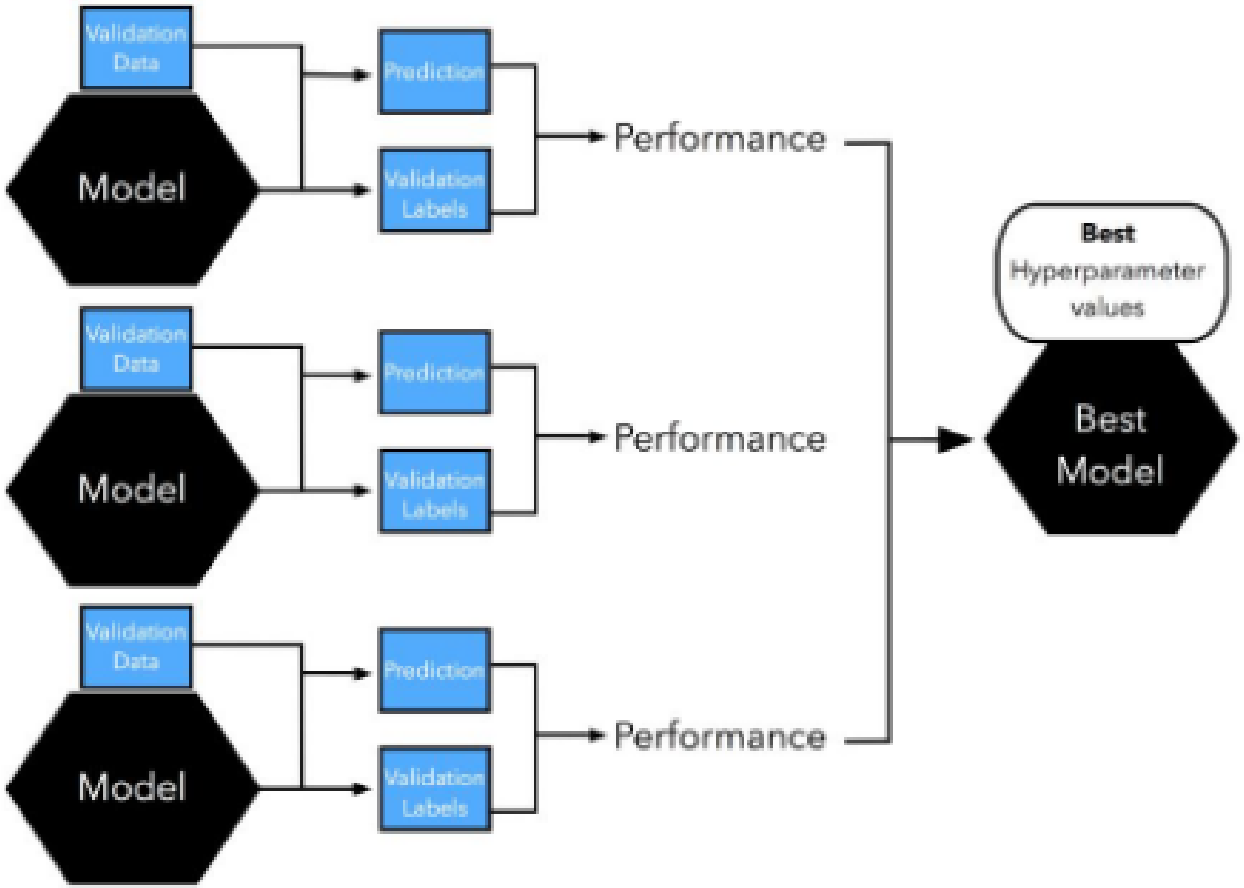
Introdução

- É desejável aumentar o desempenho preditivo ajustando o algoritmo de aprendizagem e selecionando o modelo de melhor desempenho de um determinado espaço de hipóteses



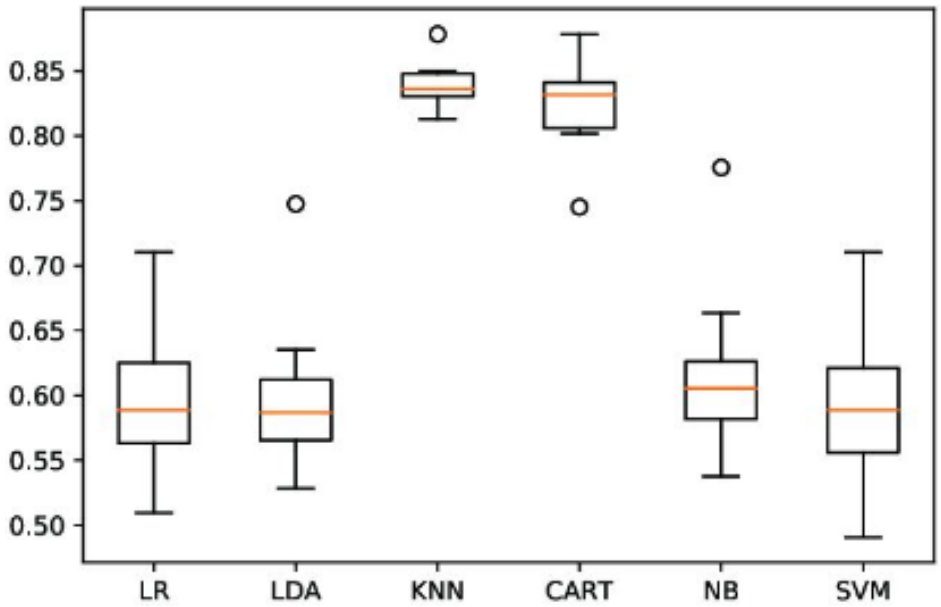
Introdução

- É desejável aumentar o desempenho preditivo ajustando o algoritmo de aprendizagem e selecionando o modelo de melhor desempenho de um determinado espaço de hipóteses



Introdução

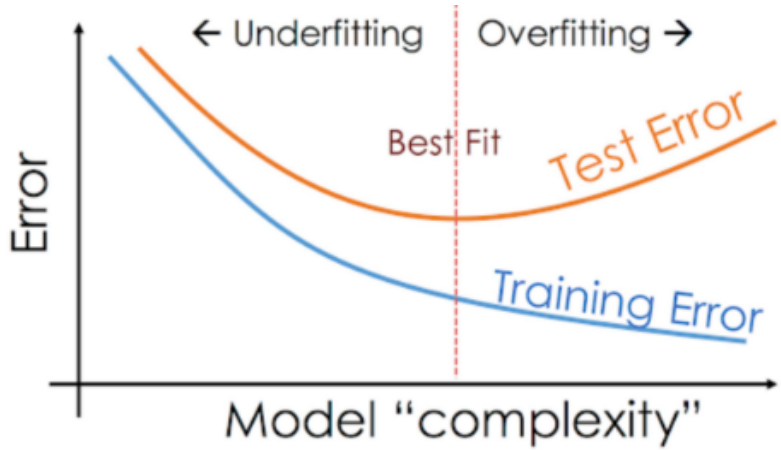
- O objetivo pode ser também identificar o algoritmo de ML mais adequado para o problema em questão
  - Nesse caso, vários algoritmo de aprendizado de máquina são comparados



Introdução

- O erro do conjunto de treinamento é um estimador com viés otimista do erro de generalização

- O erro do conjunto de teste é um estimador sem viés do erro de generalização



Método *Houldout*

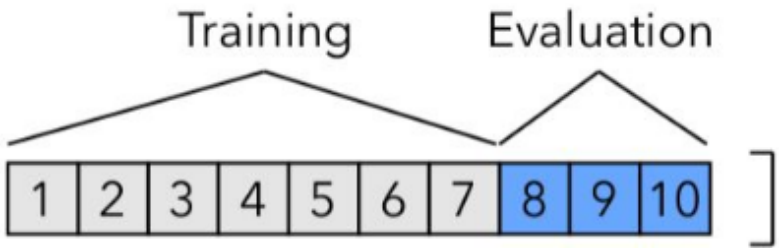
Método *Houldout*

- Esse método utiliza uma parte (*e.g.* 2/3) do conjunto de dados para o treinamento do modelo e o restante, para teste

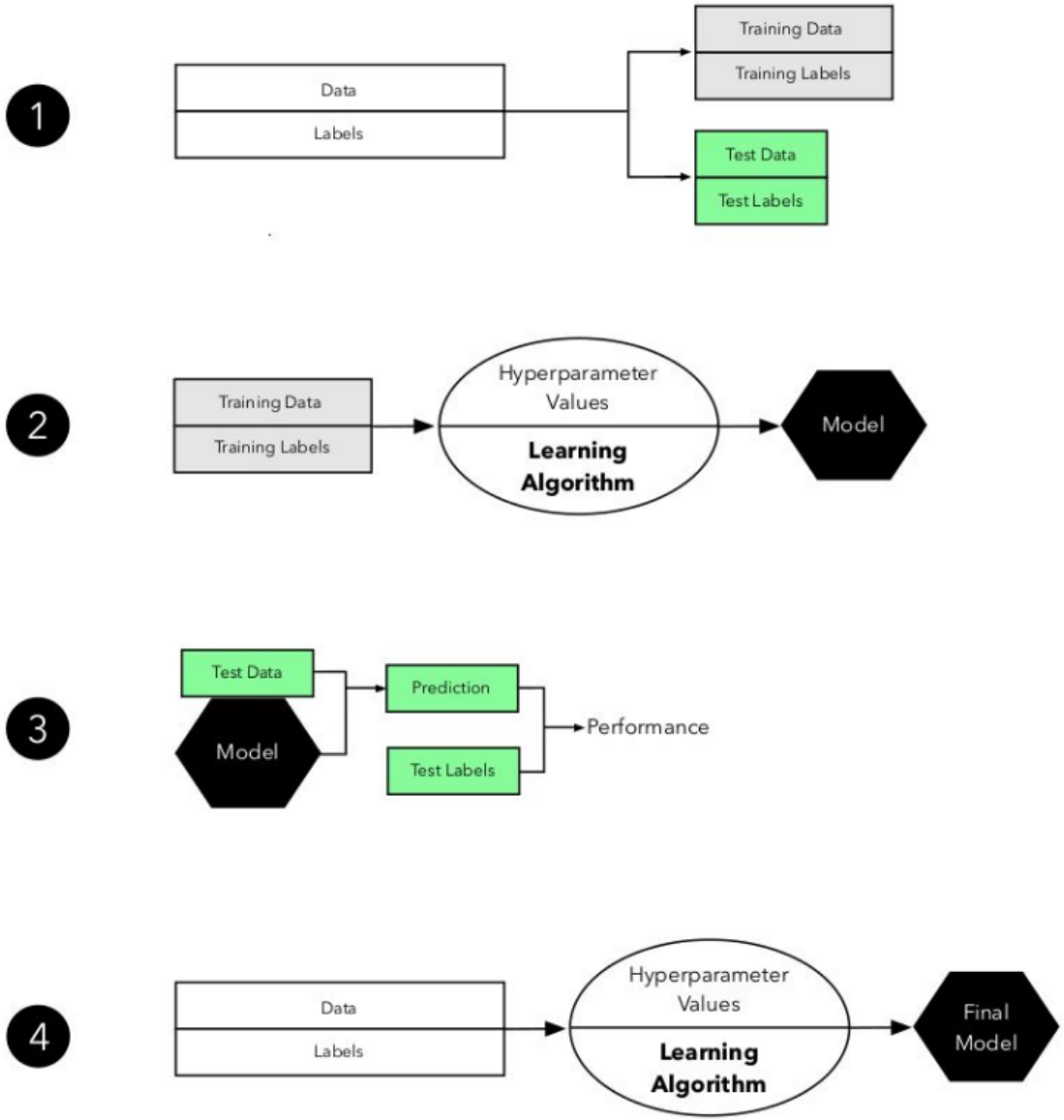
- Muitas vezes, usar o *houdout* não é uma boa ideia para a avaliação de modelos

- Os exemplos podem não ser representativos
  - Por exemplo, pode faltar exemplos de uma classe ou haver desbalanceamento

  - Para esse caso, uma solução seria a estratificação das partições

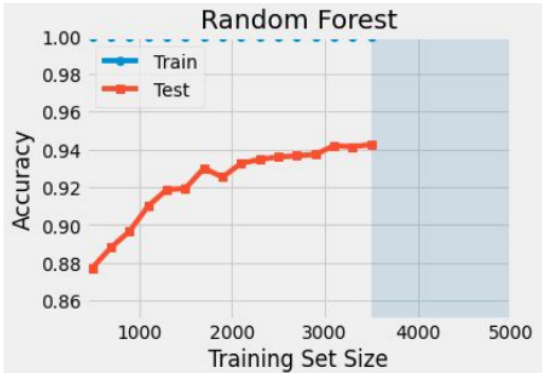


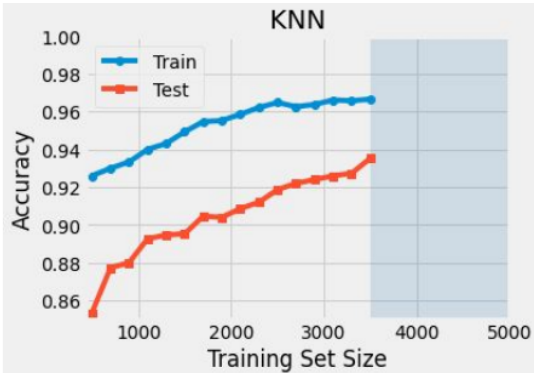
Método *Houldout*



Método *Houldout*

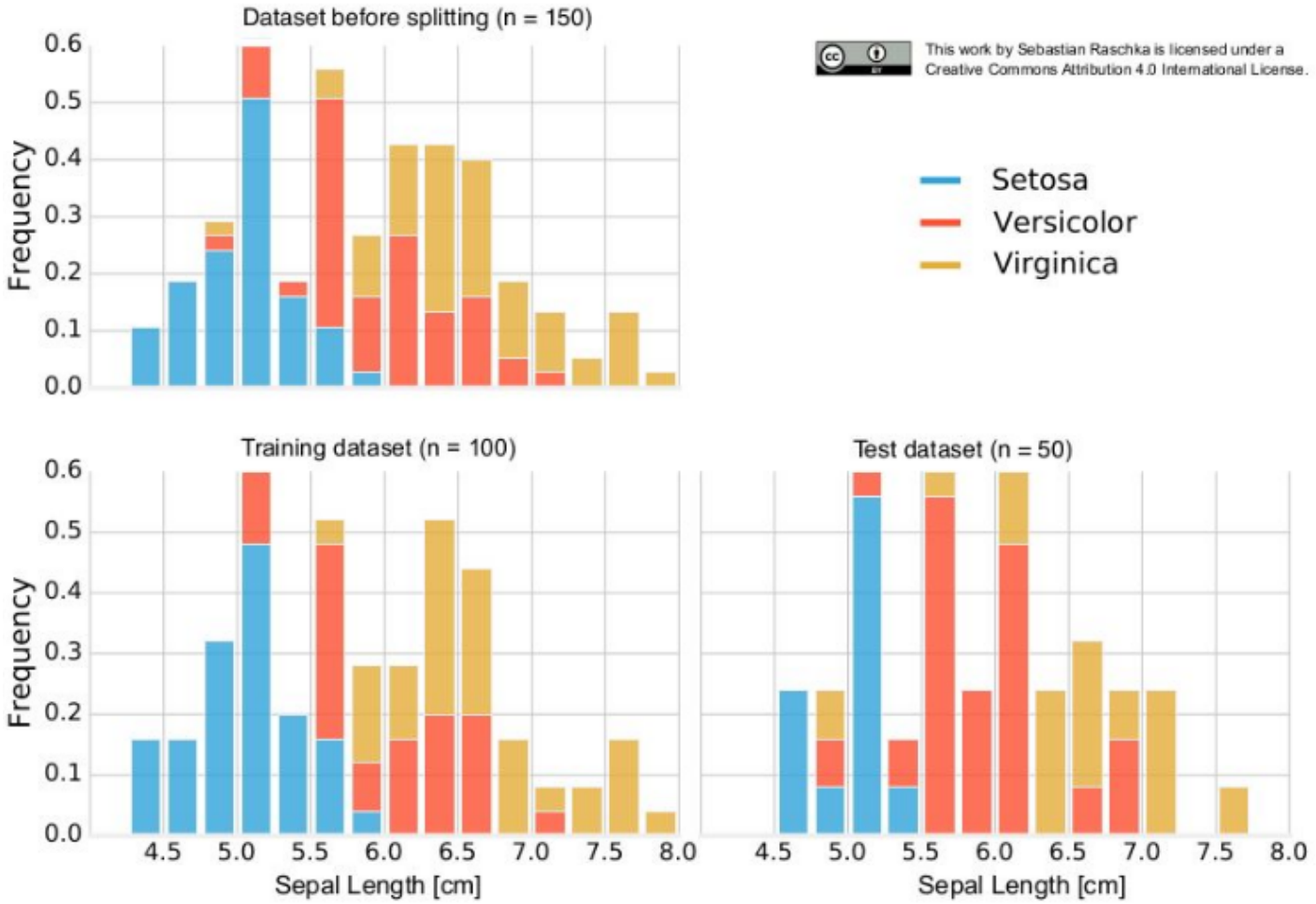
- O erro obtido utilizando o conjunto de teste no modelo preditivo é pessimista
- Mas a variação nos dados de treinamento não é levada em conta





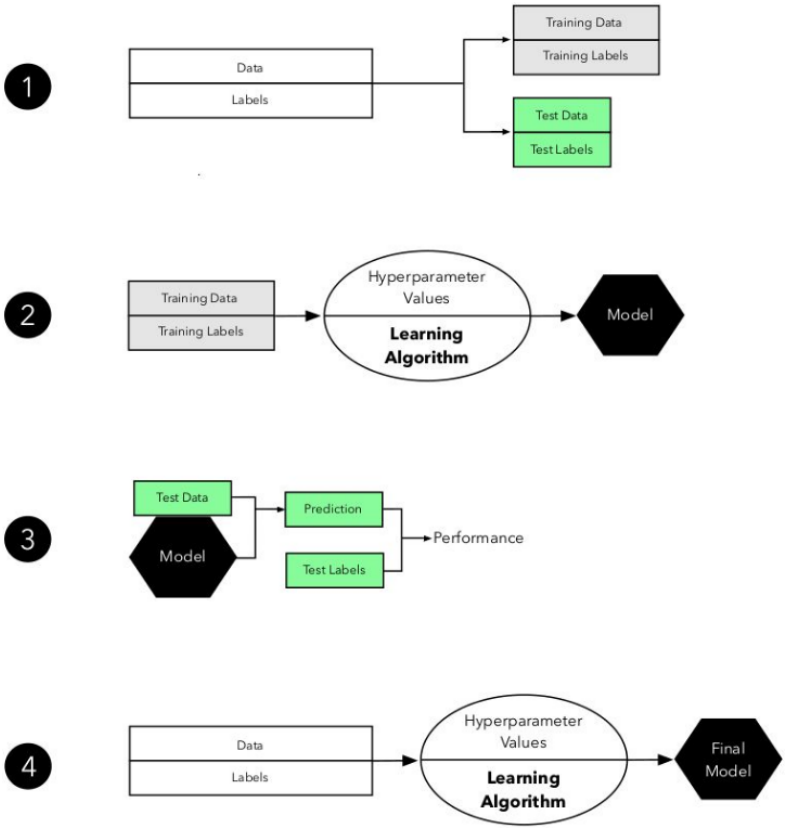
Método *Houldout*

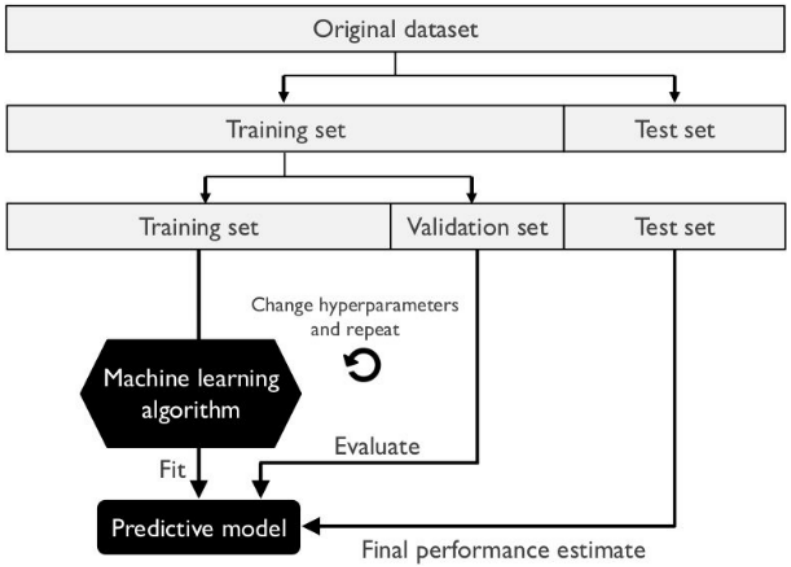
- Problemas com subamostragem (violação de independência)



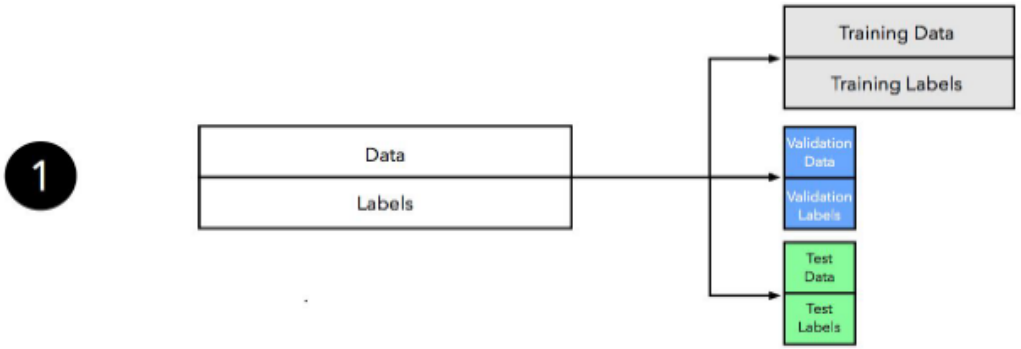
Método *Houldout*

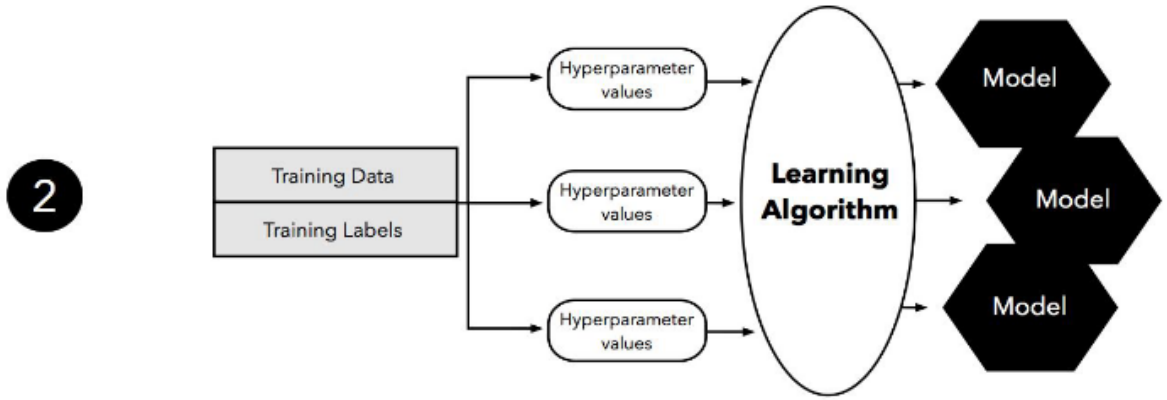
- Método *holdout*: seleção de modelos vs. avaliação de modelos





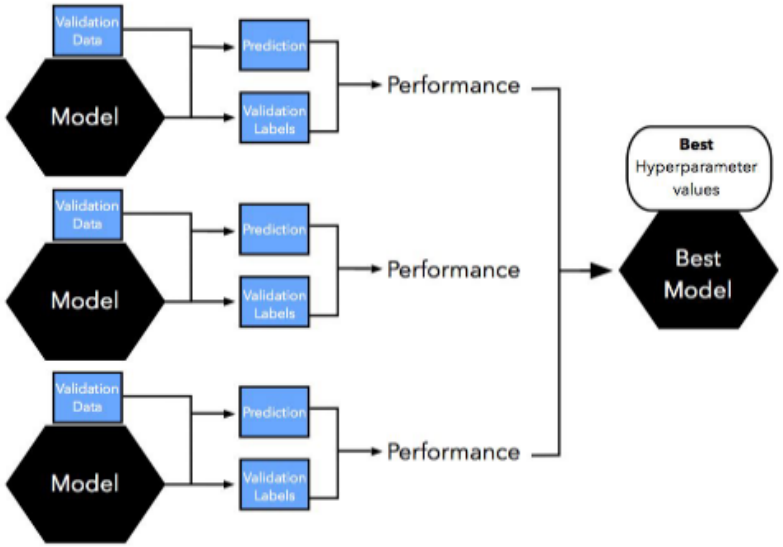
Método *Houldout*



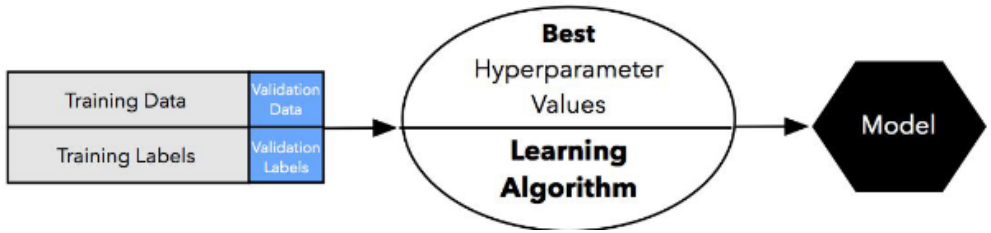


Método *Houldout*

3

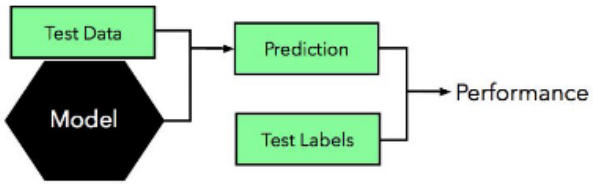


4

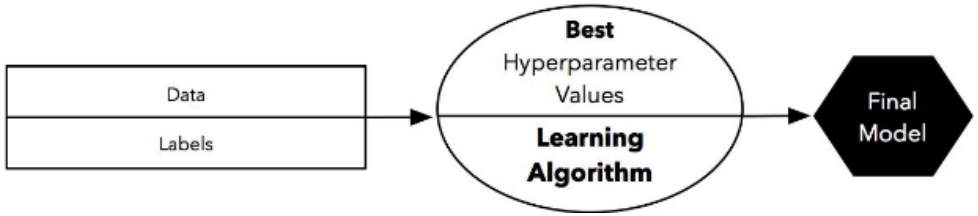


Método *Houldout*

5



6



Validação Cruzada

Validação Cruzada

- A divisão dos dados entre conjuntos de treino e teste uma única vez pode acarretar em vícios

- E se fazermos a divisão de dados mais de uma vez?
  - A ocorrência de anormalidade nos dados fica diluída

- A validação cruzada é um método de reamostragem para a geração de diversas amostras aleatória a partir da mesma população
  - Em outras palavras, diversos conjuntos de treino e de teste diferentes são gerados

- Exemplos de abordagens de validação cruzada:
  - *k-fold*
  - *leave-me-out*

Validação Cruzada

- O *k-fold*, por exemplo, divide o conjunto de dados em k conjuntos, sendo um para teste e os $k - 1$ restantes para treinamento do modelo em um processo que é repetido k vezes
  - Os valores de k mais comum são 5 e 10

Validação Cruzada

- *Leave-me-out* é um caso específico de k-fold, onde k é igual ao a quantidade total de exemplos
  - Por mais que apresente uma avaliação completa (obtenção do erro verdadeiro) sobre a variação do modelo, esta abordagem possui custo computacional elevado
  - Recomendo apenas em situações onde poucos dados estão disponíveis
  - Por outro lado, a validação cruzada *10-fold* é a mais recomendada, pois consiste em uma avaliação robusta
    - Além do equilíbrio entre viés e variância, resulta na aproximação do erro verdadeiro
    - Recomendado para pequenas e médias bases de dados
  - A validação cruzada 5-*fold* é usada caso a base de dados seja considerada grande

Validação Cruzada

- Problema: desbalanceamento por classe na amostragens
  - Solução: estratificação, onde os exemplos são mantidos proporcionalmente em relação às classes
  - No entanto, estratificação não é possível no *leave-me-out*

Medidas de Avaliação de Modelos

Medidas de Avaliação de Modelos

- Matriz de Confusão
  - Verdadeiro positivo (V_P): quantidade de exemplos normais (positivos) classificados como positivo ou normal
  - Verdadeiro negativo (V_N): quantidade de exemplos negativos (novidades) classificados como negativo ou novidade
  - Falso positivo (F_P): quantidade de exemplos negativos classificados como normal
  - Falso positivo (V_N): quantidade de exemplos normais classificados como novidade

	Positivo	*Negativo*	Total
Positivo	V_P	F_N	$V_P + F_N$
Negativo	F_P	V_N	$F_P + V_N$
Total	$V_P + F_P$	$F_N + V_N$	$V_P + F_N + F_P + V_N$

Medidas de Avaliação de Modelos

- Acurácia

$$Acc = \frac{VP + VN}{VP + FN + VN + FP}$$

- Sensibilidade (revocação – *recall*)

$$Sen = \frac{VP}{VP + FN}$$

- Especificidade

$$Esp = \frac{VN}{VN + FP}$$

Medidas de Avaliação de Modelos

- Valor preditivo positivo (precisão)

$$VPP = \frac{VP}{VP + FP}$$

- Valor preditivo negativo

$$VPN = \frac{VN}{VN + FN}$$

- f1-*score*

$$VPN = 2 * \frac{VPP * Sen}{VPP * Sen} \rightarrow VPN = 2 * \frac{\text{precisão} * \text{revocação}}{\text{precisão} + \text{revocação}}$$

Medidas de Avaliação de Modelos

- As medidas baseadas na matriz de confusão foram propostas para a avaliação de modelos de classificação

- Os exemplos de medidas apresentados, por mais que sejam no contexto de modelos binários, algumas delas podem ser adaptadas para a classificação multiclasse, tais como: acurácia, revocação, sensibilidade e f1-*score*
  - Especificidade é a "revocação" para a classe negativa
  - Valor preditivo negativo e à "precisão" para a classe negativa

- Na aplicação da validação cruzada, cada uma das medidas de avaliação pode ser calculada para cada *fold* de teste
  - Geralmente são obtidos os valores de média e de desvio-padrão para cada medida

Medidas de Avaliação de Modelos

- Para a regressão, as medidas são geralmente calculadas com base na diferença entre o valor real (alvo/*target*) e o predito

- Exemplos de medidas:
  - Erro quadrático médio (EQM)

    $$EQM = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(Y_i - \overline{\mathrm{Y}}_i)^2$$

  - Raiz quadrada do EQM (*root-mean-square error* – RMSE)

    $$RMSE = \sqrt{EQM}$$

  - Erro médio absoluto (EMA)

    $$EMA = \frac{1}{N}\sum_{i1}^{N}(Y_i - \overline{\mathrm{Y}}_i)$$

    onde Y_i é o valor real do i-ésimo exemplo, $\overline{\mathrm{Y}}_i$ é o i-ésimo resultado da predição e N é a quantidade de exemplos

Medidas de Avaliação de Modelos

- Exemplos de medidas (regressão):
  - Coeficiente de determinação (R^2)

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N}(Y_i - \overline{Y})^2}{\sum_{i=1}^{N}(Y_i - \hat{Y}_i)^2}$$

onde $\hat{Y}_i$ é o valor médio dos valores reais

  - Erro percentual absoluto médio (*mean absolute percentual error* – MAPE)

$$MAPE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{N}\frac{|Y_i - \overline{Y}_i|}{Y_i}$$

Medidas de Avaliação de Modelos

- Assim como na classificação, na regressão também pode ser aplicada a validação cruzada
  - Obtenção de valores médios de EQM, RMSE, EMA, R^2 ...
- As avaliações podem ser complementadas por
  -
  - Testes estatísticos de hipótese (comparação de modelos)

- Indica, com um determinado nível de segurança (geralmente 95%), onde se espera que esteja o valor verdadeiro de uma medida de desempenho de um modelo

- O intervalo de confiança fornece uma faixa provável de valores
  - Expressa a incerteza da estimativa
  - Exemplo: a acurácia verdadeira está entre 85% e 91%, considerando 95% de confiança

- Mostra que a medida de avaliação pode variar de acordo com a amostra de dados utilizada

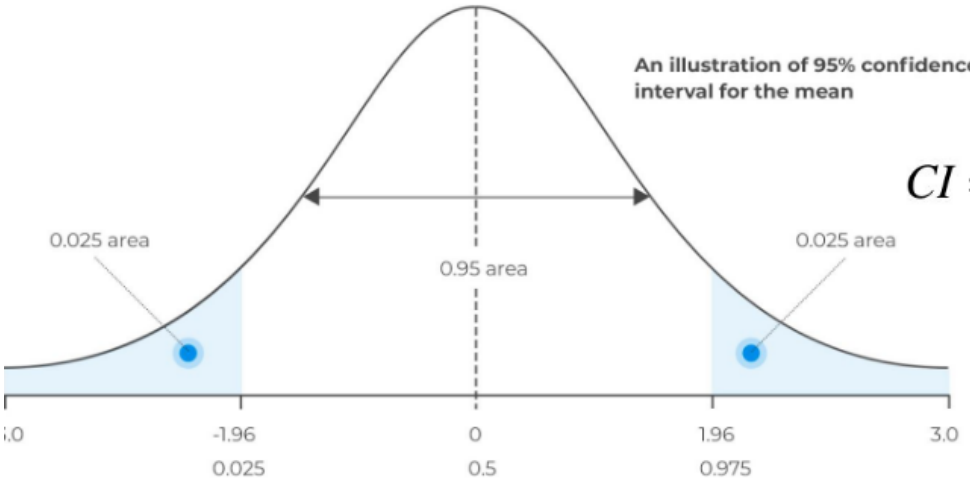
- Dado um valor de erro (ERR), o intervalo de confiança pode ser determinado pela seguinte equação

$$IC = ERR \pm z\sqrt{\frac{ERR(1 - ERR)}{n}}$$

- A constante z para os seguintes intervalos de confiança:
  - $99\% \rightarrow z = 2,58$
  - $95\% \rightarrow z = 1,96$
  - $90\% \rightarrow z = 1,94$

Medidas de Avaliação de Modelos

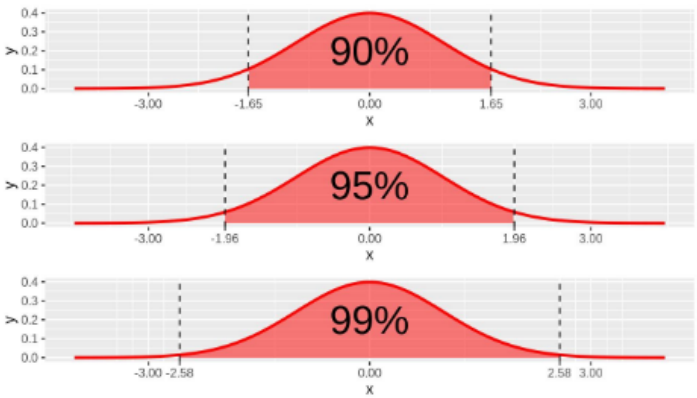
Intervalo de confiança



$$CI = ERR_S \pm z\sqrt{\frac{ERR_S(1 - ERR_S)}{n}}$$

The z constant for different confidence intervals

- 99%: z=2.58
- 95%: z=1.96
- 90%: z=1.64



- Podem ser utilizados para a comparação entre dois ou mais classificadores verificar se há diferença estatística entre eles
- O teste estatístico de hipótese determina a probabilidade que uma diferença observada de forma empírica seja de fato somente ao acaso
- Esse tipo de teste determina a probabilidade da hipótese nula, de que as duas amostras vieram da mesma distribuição
- Para isso, é considerado um nível de significância, comumente (5%)
  - Por convenção, hipótese nula é rejeitada e diz-se que a diferença é estatisticamente significativa se a probabilidade da hipótese nula for menor que 5%, ou seja, $p < 0,05$

- Para a escolha do teste apropriado, duas principais observações em relação às características dos dados devem ser realizadas:
  - Se os dados são pareados ou não-pareados
  - Se os dados estão dentro da distribuição normal, o que determina se o teste deve ser paramétrico ou não-paramétrico
- Exemplos de testes estatísticos de hipótese:
  - Paramétrico para dados pareados: t de Student e *two-way* ANOVA (*Analysis of Variance* ? análise de variância)
  - Não-paramétrico para dados pareados: Wilcoxon e Friedman
  - Paramétrico para dados não pareados: t de Student não pareado e *one-way* ANOVA
  - Não-paramétrico para dados não pareados: Mann-Whitney e Kruskal-Wallis

- Caso mais de dois classificadores sejam comparados e uma diferença estatística seja constatada, um pós teste (*post hoc*) deve ser aplicado
  - A escolha de um teste *post hoc* segue os mesmos critérios da definição do teste estatístico de hipótese adequado
    - Por exemplo: o pós-teste de Nemenyi pode ser executado após o teste de Friedman, caso neste último tenha sido observada uma diferença estatisticamente significante

Referências I

CASANOVA, D.
Model evaluation 2. 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.

ZADROZNY, B. Avaliação experimental. Aprendizado de Máquina.
Slides. *Ciência da Computação. UFF, 2010.*