

# 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

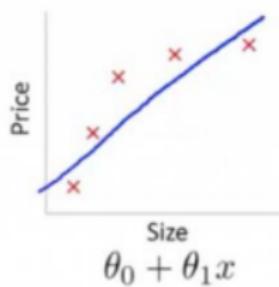
- A análise de desempenho de modelos depende do problema
  - Classificação: taxa de exemplos corretamente classificados
    - Acurácia, sensitividade, especificidade, f1-score, ...
  - Regressão: diferença entre os valor predito e o valor correto
    - Coeficiente de determinação ( $R^2$ ), erro médio 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

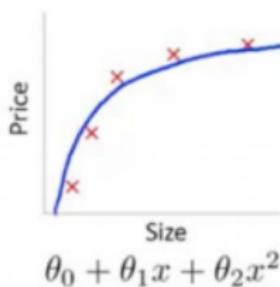
- É desejável que o modelo preditivo generalize "bem"
  - Alta acurácia de generalização
  - Baixo erro de generalização
- Suposição: os exemplos de treinamento e teste são independentes e distribuídos de forma idêntica (extraídos da mesma distribuição de probabilidade conjunta,  $P(X, y)$ )
- Para um 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

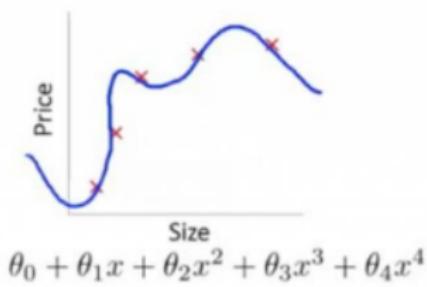
- Subajuste (*underfitting*): tanto o erro de treinamento quanto o de teste são altos
- Sobreajuste (*overfitting*): há diferença significativa entre o erro de treinamento e o de teste (onde o erro de teste é maior)



High bias  
(underfit)  
 $d=1$

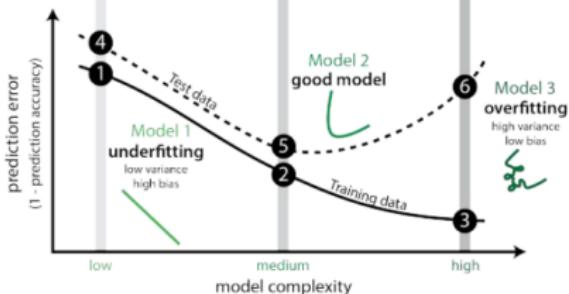
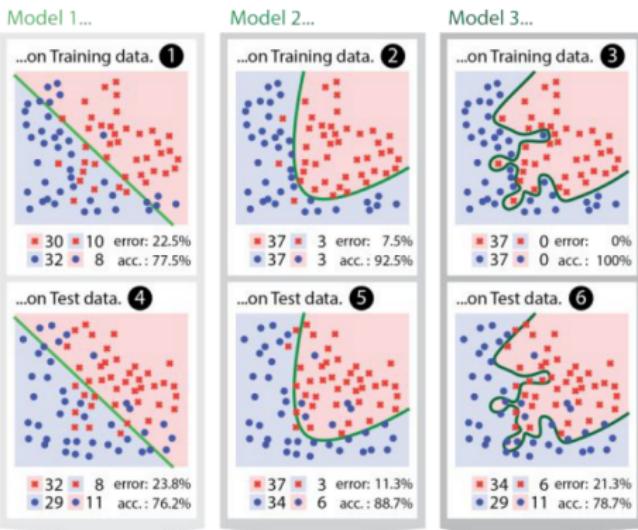


"Just right"  
 $d=2$

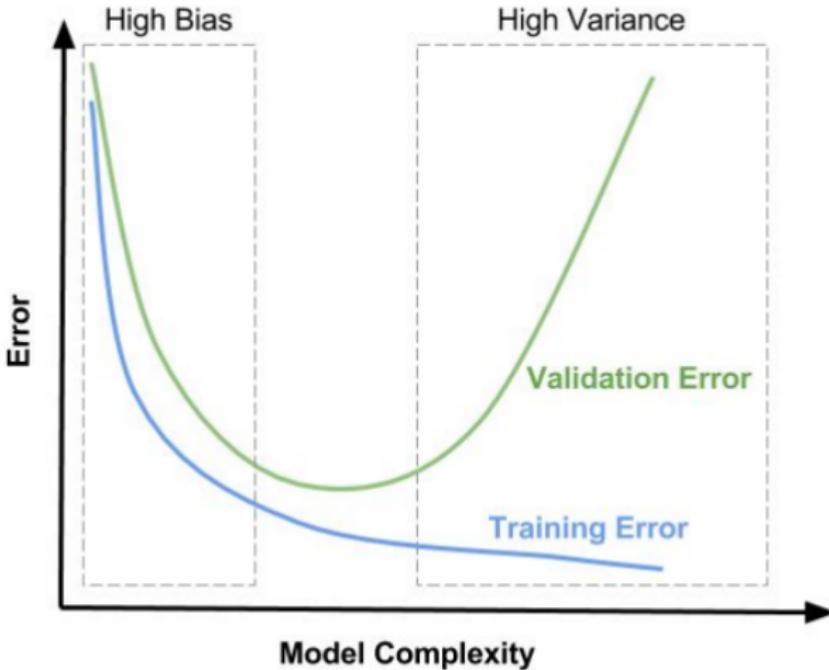


High variance  
(overfit)  
 $d=4$

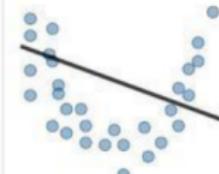
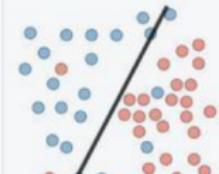
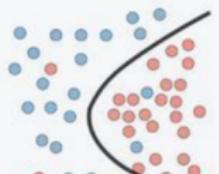
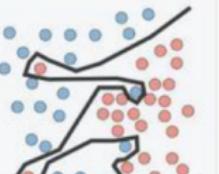
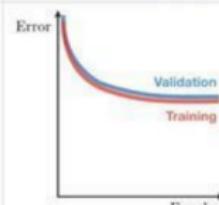
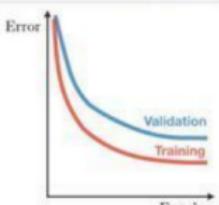
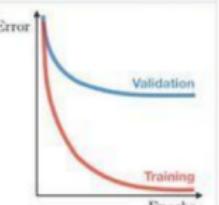
# Erro (Perda) em Problemas de Classificação e Regressão



# Erro (Perda) em Problemas de Classificação e Regressão



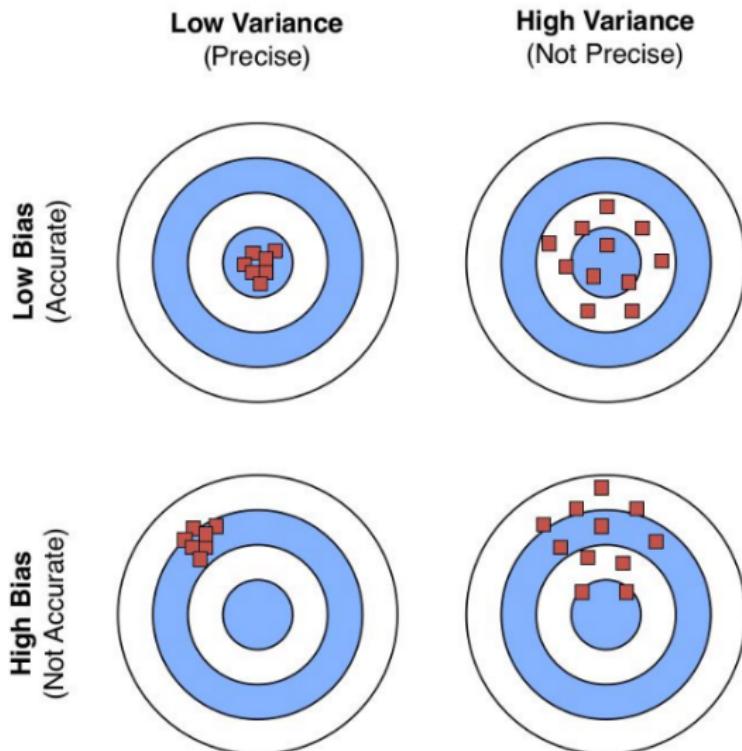
# Erro (Perda) em Problemas de Classificação e Regressão

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

## Decomposição de Viés-Variância do Erro Quadrático

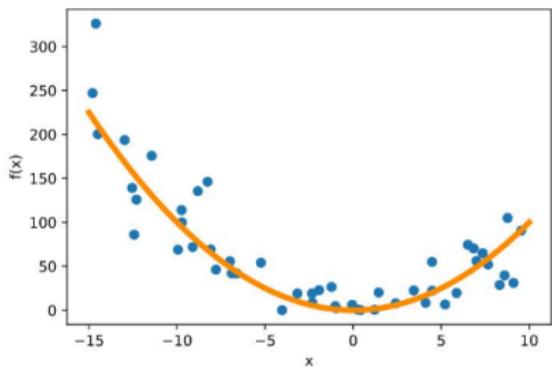
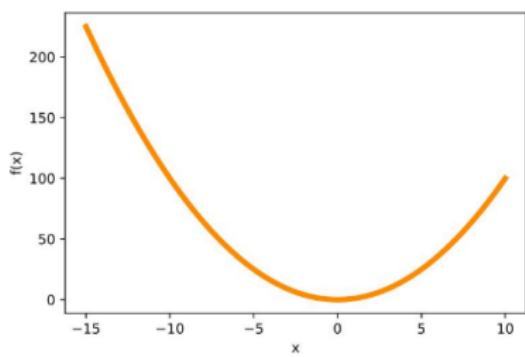
- A Decomposição da perda (*loss*) em relação ao viés e a variância é útil para a compreensão de algoritmos de aprendizado
  - Conceitos relacionados a subajuste e sobreajuste
- Ajuda a explicar por que métodos ensembles podem ter melhor desempenho do que modelos individuais
- Perda = Viés + Variância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

# Decomposição de Viés-Variância do Erro Quadrático

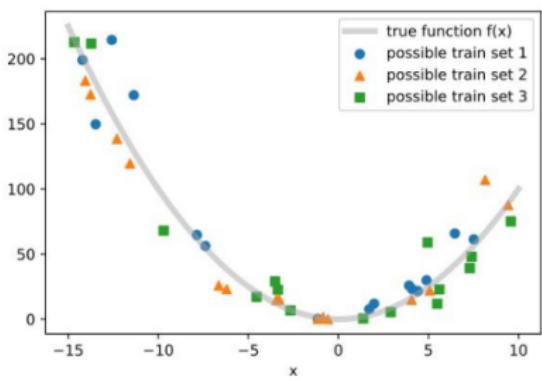
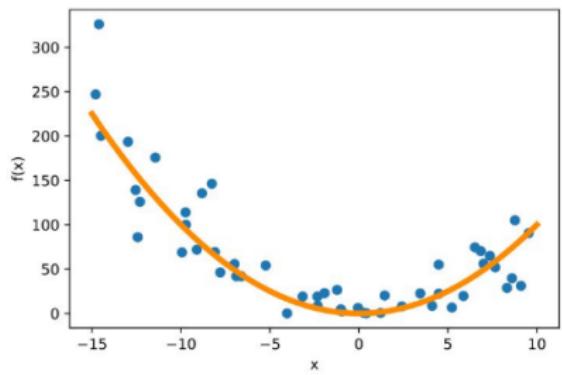


# Decomposição de Viés-Variância do Erro Quadrático

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

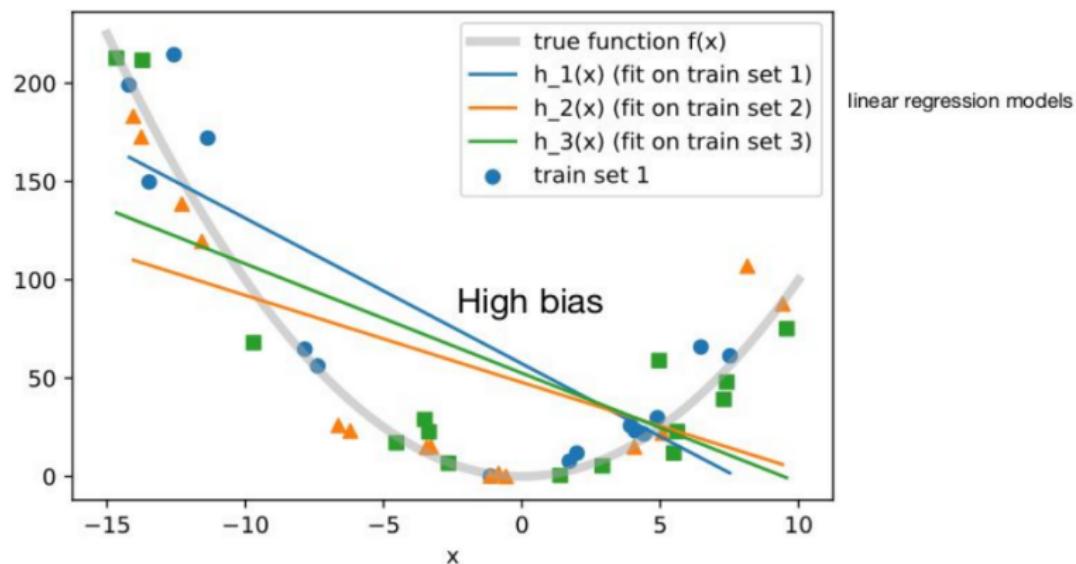


# Decomposição de Viés-Variância do Erro Quadrático



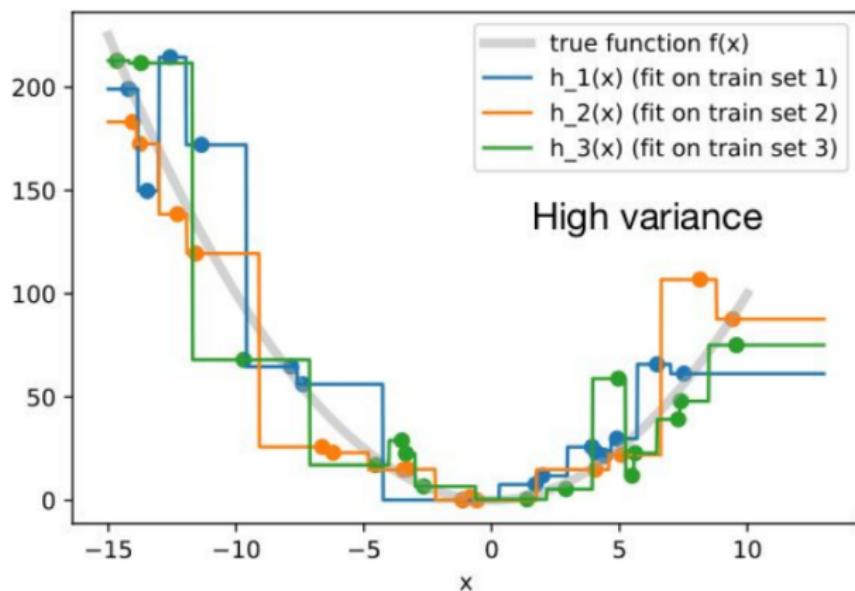
# Decomposição de Viés-Variância do Erro Quadrático

- Suponha que temos vários conjuntos de treinamento



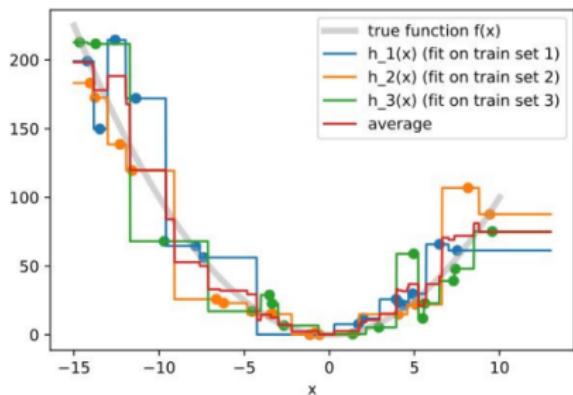
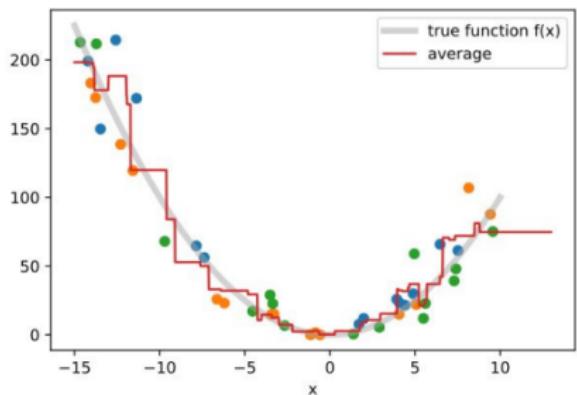
# Decomposição de Viés-Variância do Erro Quadrático

- Suponha que temos vários conjuntos de treinamento



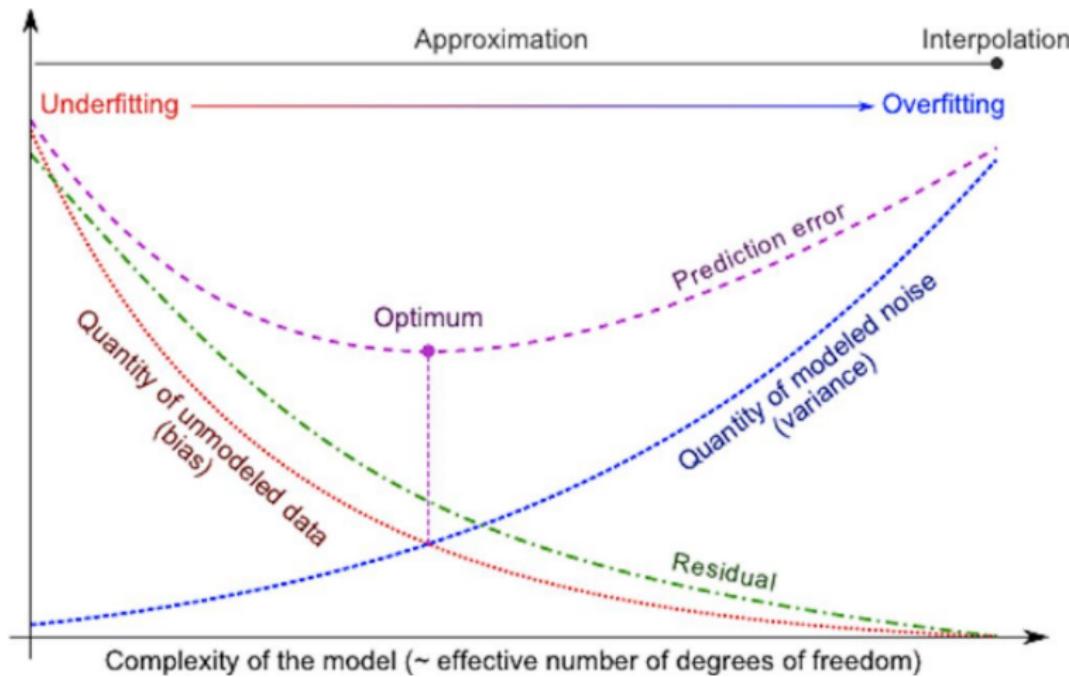
# Decomposição de Viés-Variância do Erro Quadrático

- E se for calculada a média entre as previsões?



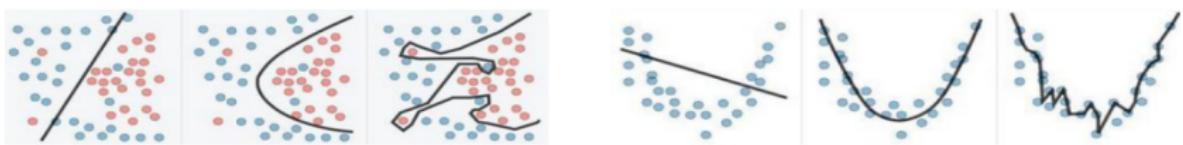
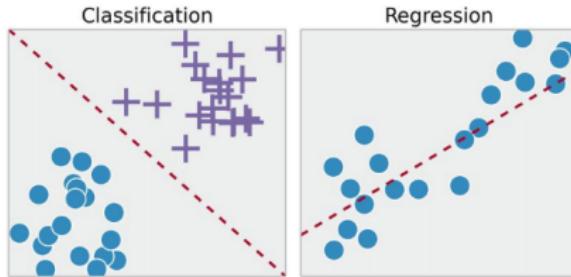
- Dado um preditor  $\hat{\theta}$  de um parâmetro  $\theta$ 
  - Poderia também ser uma função
    - Por exemplo, a hipótese é um preditor de uma função alvo
- Viés: diferença entre a média preditiva do modelo (treinado a partir de exemplos de treinamento) e os valores verdadeiros
  - O valor esperado 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



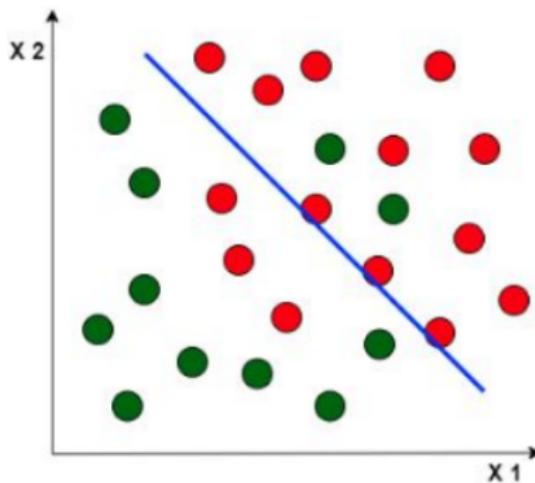
## Classificação x Regressão

# Classificação x Regressão



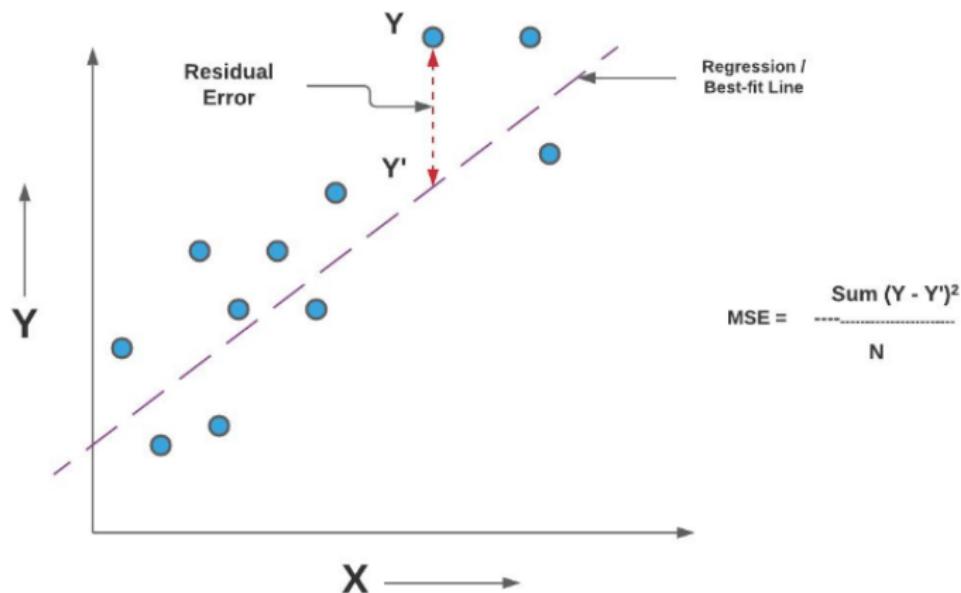
# Classificação x Regressão

- 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



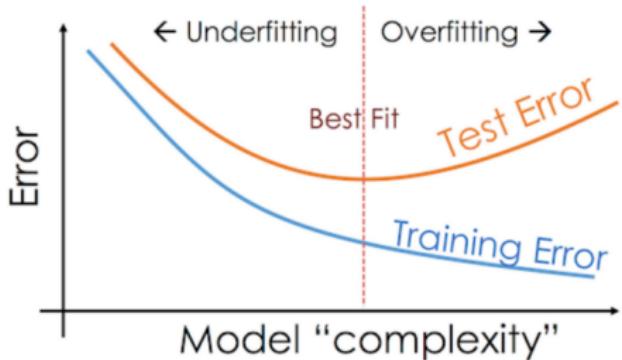
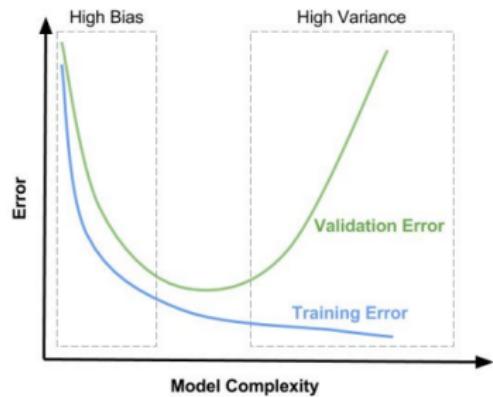
- Viés do erro quadrático
  - Viés =  $E[\hat{\theta}] - \theta$
  - $Var[\hat{\theta}] = E[\hat{\theta}^2] - (\hat{\theta})^2 = E[(E[\hat{\theta}] - \hat{\theta})^2]$
  - Alvo:  $y = f(x)$  (por simplicidade, ignoramos o termo ruído)
  - Predição:  $\hat{y} = \hat{f}(x) = h(x)$
  - Erro quadrático: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

- Notação para a perda por erro quadrático

- $(a - b)^2 = a^2 + b^2 - 2ab$
- $S = (y - \hat{y})^2$
- $S = (y - E[\hat{y}] + E[\hat{y}] - \hat{y})^2$
- $S = (y - E[\hat{y}])^2 + (E[\hat{y}] - \hat{y})^2 + 2(y - E[\hat{y}])(E[\hat{y}] - \hat{y})$
- $E[S] = E[(y - \hat{y})^2]$
- $E[(y - \hat{y})^2] = (y - E[\hat{y}])^2 + E[E[\hat{y}] - \hat{y}^2]$
- $= \text{Viés}^2 + \text{Var}$
- $E[2(y - E[\hat{y}])(E[\hat{y}] - \hat{y})] = 2E[(y - E[\hat{y}])(E[\hat{y}] - \hat{y})]$
- $= 2(y - E[\hat{y}])E[E[\hat{y}] - \hat{y}]$
- $= 2(y - E[\hat{y}])(E[E[\hat{y}]] - E[\hat{y}])$
- $= 2(y - E[\hat{y}])(E[\hat{y}] - E[\hat{y}])$
- $= 0$

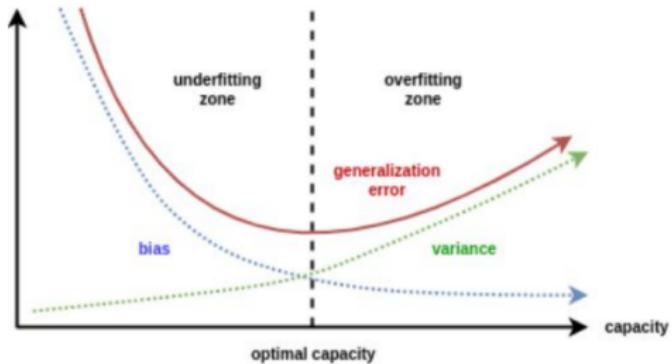
# Classificação x Regressão

- Como  $Vies^2 + Var$  está relacionado com subajuste e sobreajuste?



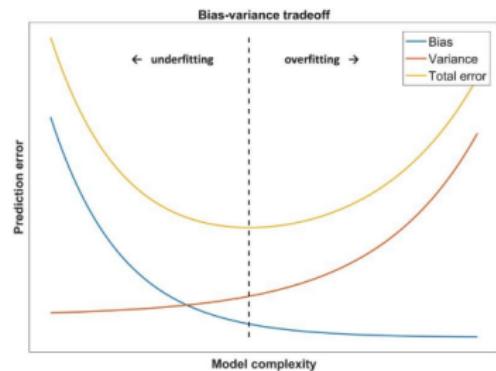
# Classificação x Regressão

- 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-variancia 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
$$E[(y - \hat{y})^2] = (y - E[\hat{y}])^2 + E[(E[\hat{y}] - \hat{y})^2]$$
$$\text{Viés}^2 \quad + \quad \text{Variância}$$
- Predição principal → 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 "incorrectos" ...
- 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.