Mineração de Dados
2018.2

Avaliação de Classificadores

Thiago Ferreira Covões

(slides baseados no material do Prof. Carlos Santos e Prof. Eduardo Hruschka [erh@icmc.usp.br])

Seleção de modelos

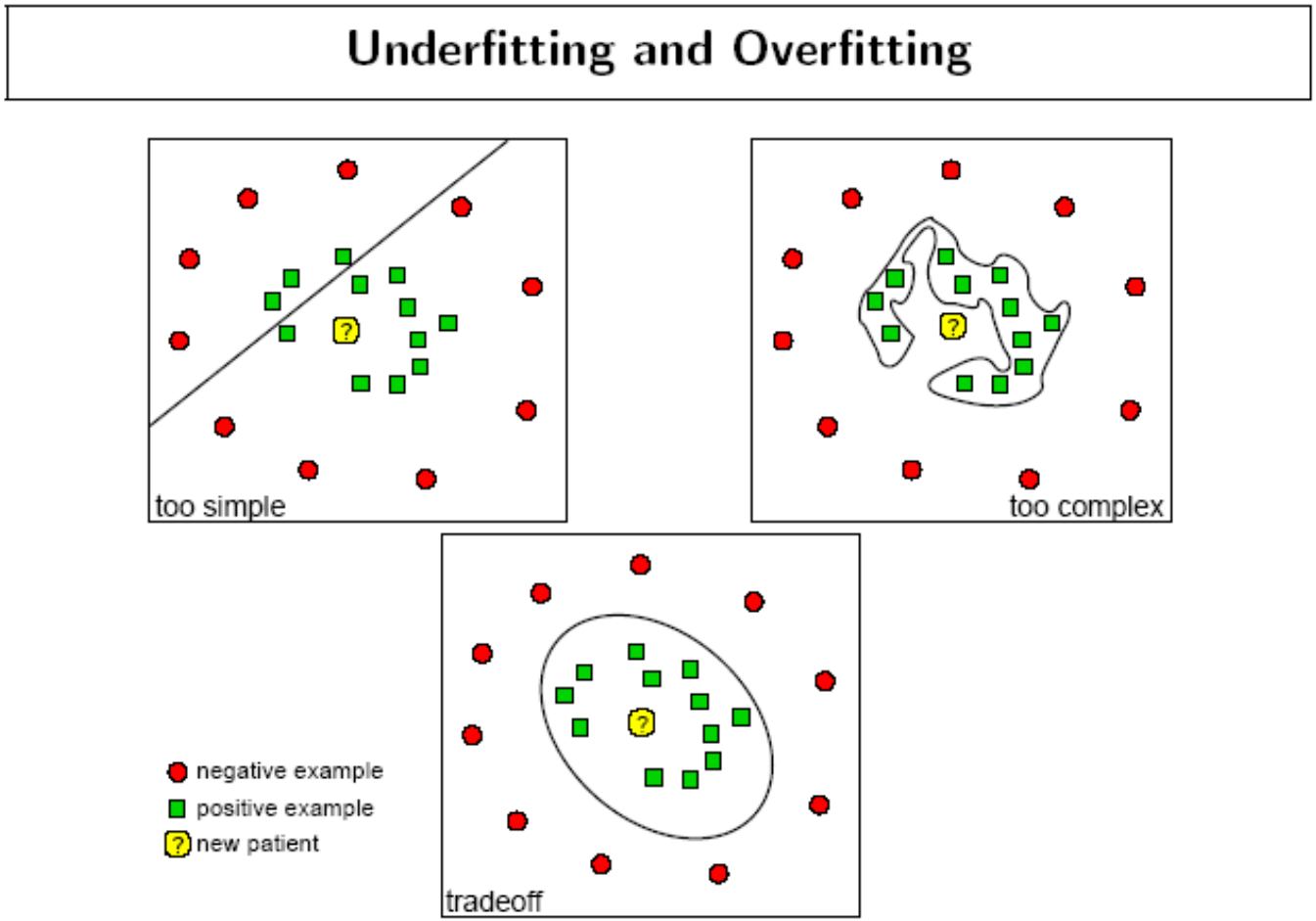
- Vimos como aprender diversos modelos a partir dos dados
  - Discriminantes Lineares e Quadráticos
  - Naïve Bayes
  - Árvores de Decisão
  - …

- Como escolher os parâmetros dos algoritmos?
- Como escolher entre os modelos obtidos?

Avaliação de modelos

- Queremos o modelo que forneça predições corretas para novos dados
  - Temos apenas uma amostra dos dados
  - Após aprender o modelo, podemos verificar o quanto ele está “errando” nos dados usados para o treinamento
    - Erro de resubstituição

Avaliação de modelos



Avaliação de modelos

- Erro de resubstituição não é uma boa opção
- Precisamos simular a situação de dados novos
  - Estratégias de amostragem
  - Não utilizar um subconjunto dos dados no treinamento e usá-lo para teste
    - Quanto maior a base de treinamento → Melhor generalização
    - Quanto maior a base de teste → Melhor estimativa do erro

Estratégia de amostragem

- Hold-out
  - Separa aleatoriamente os dados em dois subconjuntos
    - Por exemplo, 75% para treinamento e 25% para teste
- Random subsampling
  - Múltiplos hold-outs
  - Estimativa final igual a média
  - Sobreposição entre bases de testes

Estratégia de amostragem

- Validação cruzada de *k*-pastas
  - Separa os dados em *k*-subconjuntos e treina *k* modelos, em cada um utiliza um dos subconjuntos como base de teste
  - Estimativas baseadas na média dos erros obtidos

Estratégia de amostragem

- Validação cruzada estratificada de 10-pastas
  - Padrão atual
  - A distribuição de classes (proporção de exemplos em cada uma das classes) é mantida durante a amostragem
  - Ex: se o conjunto original de exemplos possui duas classes com distribuição de 20% e 80%, então cada *fold* também terá esta proporção de classes

Estratégia de amostragem

- Leave-One-Out (LOOCV)
  - Caso especial de validação cruzada ($k=N$)
  - Para uma amostra de tamanho N, é obtido um modelo utilizando N-1 objetos; o objeto remanescente é utilizado para teste
  - Este processo é repetido N vezes
  - O erro é a soma dos erros em cada teste dividido por N

Aplicações reais

- Separar um subconjunto dos dados para avaliar o erro do processo completo
  - Não utilizá-lo para definir parâmetros etc
  - Pode ser necessário ter validações cruzadas aninhadas (*nested cross-validation*)

Mensurando acerto/erro

- É intuitivo considerar a taxa de acerto de classificação (ou erro correspondente)

$$\frac{TN + TP}{N}$$

- Matriz de confusão (2 classes)

Classe	Predita positiva	Predita negativa
Real Positiva	Verdadeiro Positivo (TP)	Falso Negativo (FN)
Real Negativa	Falso Positivo (FP)	Verdadeiro Negativo (TN)

Mensurando o acerto/erro

- Taxa de acerto pode não ser o ideal

- Os dois classificadores abaixo têm a mesma taxa de acerto. No entanto, um deles parece melhor, qual?

Classe	PPos	PNeg
Pos	0	10
Neg	0	9.990

Classe	PPos	PPeg
Pos	10	0
Neg	10	9.980

Classe menos frequente

- A classe menos frequente (normalmente chamada de positiva) é geralmente a de maior interesse:
  - Doença rara
  - Transação fraudulenta
- Um classificador que erra muito a classe positiva é de pouca utilidade

Custos

- Uma outra maneira é atribuir um custo diferente para cada tipo de erro
- Para calcular o custo total, os erros são multiplicados pelo seu custo
- Em vez de minimizar o erro, o objetivo do classificador é minimizar o custo total.

Custos

- Nem todo classificador consegue incorporar custos na indução de modelos
- É muito difícil fazer uma atribuição de custos
- Custos podem variar com o tempo
- Existe uma relação direta entre custos e alterar artificialmente a proporção de exemplos entre as classes

Custos

- É possível incorporar custos:
  - Pesos diferentes para instâncias
  - Reamostragem do conjunto de treinamento, proporção de exemplos positivos/negativos de acordo com custo.

Mensurando erro

- Taxa de Falsos Positivos (Erro Tipo I):
  - De todos os exemplos negativos, quantos foram erroneamente preditos como positivos?
  - FP/(FP+TN)
- Taxa de Falsos Negativos (Erro Tipo II):
  - De todos os exemplos positivos, quantos foram erroneamente preditos como negativos?
  - FN/(FN+TP)

Mensurando o erro

- Taxa de Verdadeiros Positivos
  - De todos os objetos positivos, quantos eu acertei?
  - VP/(VP+FN)
  - Também conhecido como recall, revocação, sensibilidade

Mensurando o erro

- Precisão
  - Dos objetos preditos como positivos, quantos eram de fato positivos
  - TP/(TP+FP)

- F-Measure
  - Media harmônia entre Precisão e Revocação
  - $2 \cdot \frac{\text{precisão} \cdot \text{revocação}}{\text{precisão} + \text{revocação}}$

Mensurando o erro

- Estatística Kappa
  - Corrigi a taxa de acerto pelo número esperado de acertos do classificador

$$\kappa = \frac{\mathrm{TxAcerto} - P_e}{1 - P_e}$$

$$P_e = \frac{(FN + TP) \cdot (FP + TP)}{N} + \frac{(TN + FP) \cdot (TN + FN)}{N}$$

Exemplo

- Computar taxa de acerto, precisão, revocação, F-measure, taxa de falso positivo e taxa de falso negativo da matriz de confusão abaixo

Classe	Predita positiva	Predita negativa
Real Positiva	70	30
Real Negativa	40	60

Exemplo

- Taxa de acerto=(TP+TN)/N=
- Precisão=TP/(TP+FP)=
- Revocação=TP/(TP+FN)=
- TFP=FP/(FP+TN)=
- TFN=FN/(FN+TP)=

Classe	Predita positiva	Predita negativa
Real Positiva	70	30
Real Negativa	40	60

Exemplo

- Taxa de acerto=(TP+TN)/N=130/200=0,65
- Precisão=TP/(TP+FP)=70/110=0,63
- Revocação=TP/(TP+FN)=70/100=0,7
- TFP=FP/(FP+TN)=40/100=0,4
- TFN=FN/(FN+TP)=30/100=0,3

Classe	Predita positiva	Predita negativa
Real Positiva	70	30
Real Negativa	40	60

Classificação versus Ranking

- Alguns classificadores indicam apenas a classe predita
- Outros fornecem um indicativo de confiança (chamados de *score*)
  - Pode ser uma probabilidade
  - Normalmente obtidos/transformados entre [0,1] ou [0,100]

Classificação versus Ranking

- Como obter *score* para:
  - Discriminante Linear/Naïve Bayes
  - *K*NN
  - Árvore de Decisão

Classificação versus Ranking

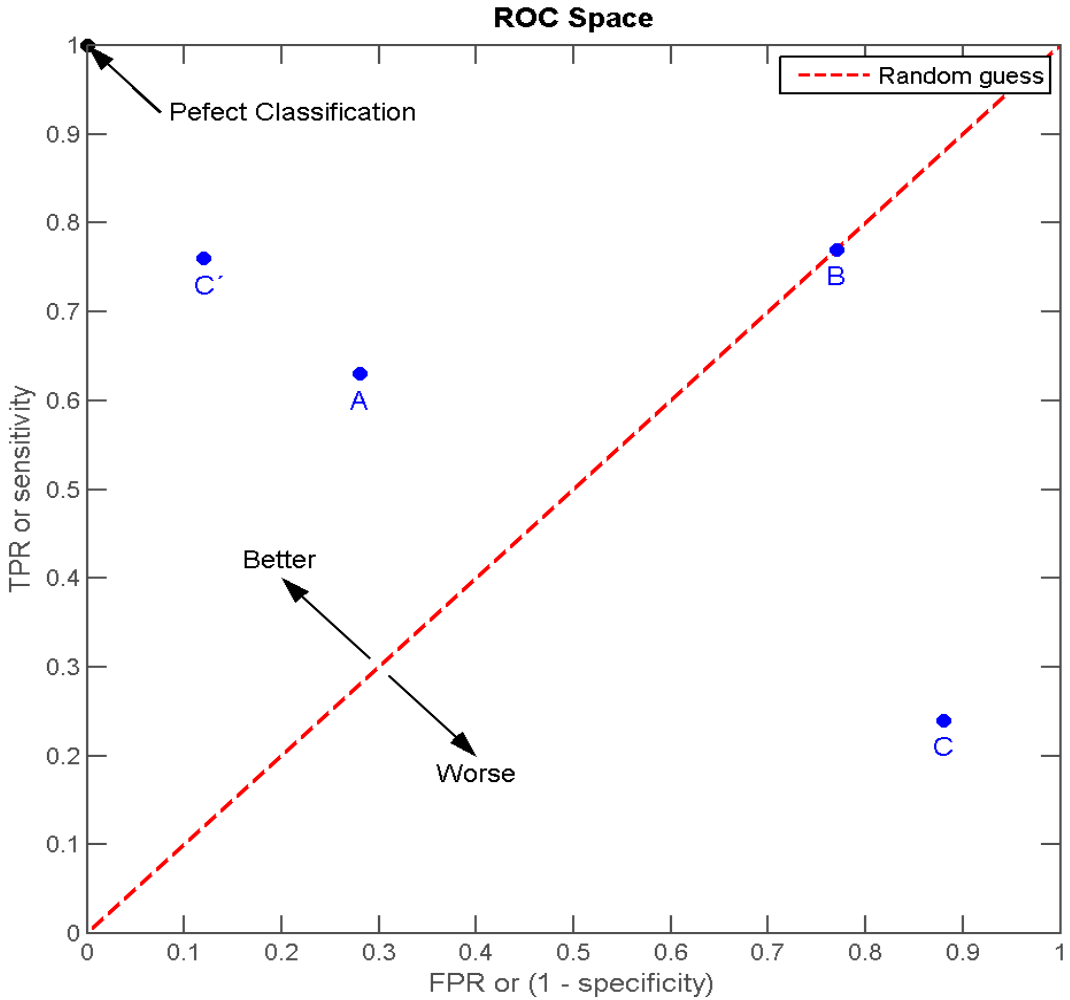
- A partir destes *scores* podemos obter diferentes classificadores considerando os valores possíveis para o limiar de decisão
  - Conservador → limiar alto
  - Liberal → limiar baixo

Curvas ROC

- Receiver Operating Characteristic curve
- Origem:
  - detecção de sinais
  - compromisso entre alarme falso/acerto

- TFP x TVP [FPR x TPR]
- TFP = FP/(FP+TN)
- TVP = VP/(VP+FN)

Curvas ROC



fonte: http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/3/36/ROC_space-2.png

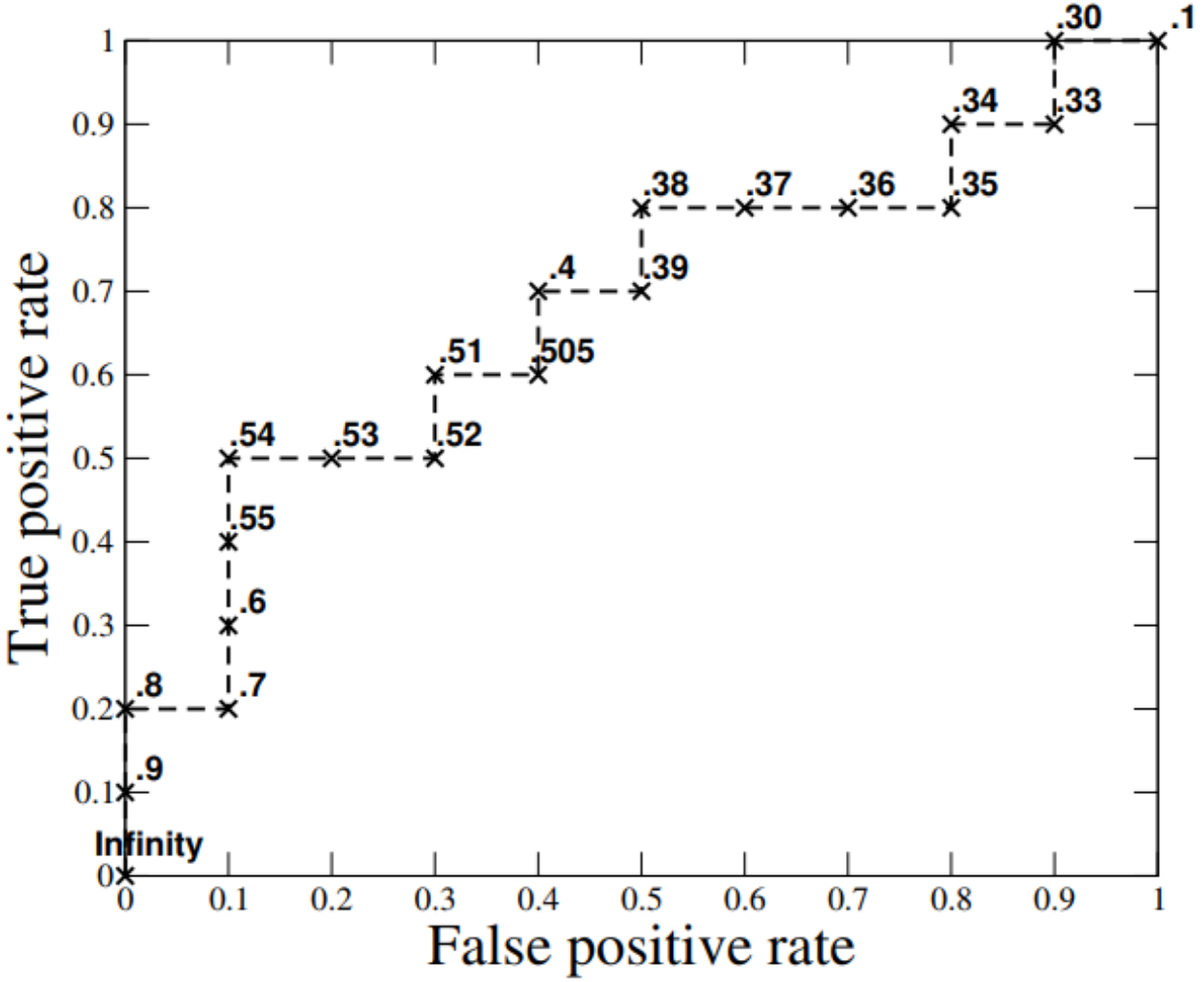
Gerando a curva ROC

(1) Ordene as tuplas da base de testes por ordem crescente de seus valores de output (prob. de estar na classe positiva)
(2) Selecione a primeira tupla X1 e
  (i) Classifique X1 como **POSITIVA**
  (ii) Classifique todas as tuplas com outputs maiores do X1 como **POSITIVAS**
    Neste caso, todas as tuplas foram classificadas como positivas.
    Logo: todas as positivas corretamente classificadas TPR = 1
      todas as negativas incorretamente classificadas FPR = 1
(3) Selecione a segunda tupla X2
  (i) Classifique X2 como **POSITIVA**
  (ii) Classifique todas as tuplas com outputs maiores do X2 como **POSITIVAS** e as com outputs menores como **NEGATIVAS**
  (iii) Calcule os novos valores de TP e FP
    (1) Se a classe de X1 é positiva então TP é decrementado de 1 e FP continua o mesmo
    (2) Se a classe de X1 é negativa então TP continua o mesmo e FP é decrementado.
(4) Repita o processo para a terceira tupla até varrer todo o banco de testes
(5) Faça o gráfico dos valores de TPR (eixo y) por FPR (eixo x)

Gerando a curva ROC

Inst#	Class	Score	Inst#	Class	Score
1	p	.9	11	p	.4
2	p	.8	12	n	.39
3	n	.7	13	p	.38
4	p	.6	14	n	.37
5	p	.55	15	n	.36
6	p	.54	16	n	.35
7	n	.53	17	p	.34
8	n	.52	18	n	.33
9	p	.51	19	p	.30
10	n	.505	20	n	.1

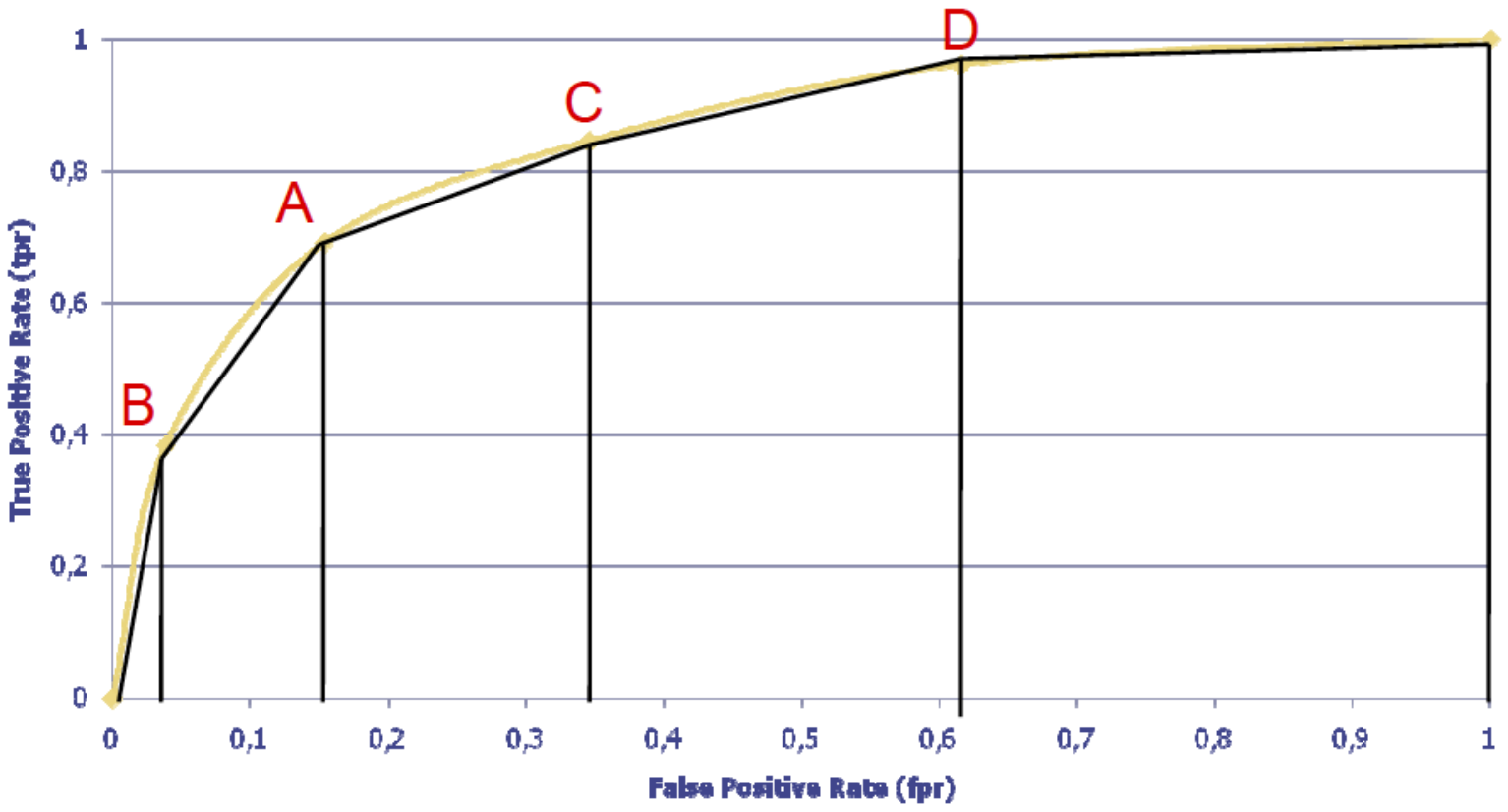
Gerando a curva ROC



AUC

- Probabilidade que um exemplo positivo vai estar ranqueado acima de um exemplo negativo.
- Pode ser calculado pela regra do trapézio.
- Quanto maior a área, melhor é o desempenho médio do classificador.

AUC


D
C
A
B
1
0,8
0,6
0,4
0,2
0
True Positive Rate (tpr)
0
0,1
0,2
0,3
0,4
0,5
0,6
0,7
0,8
0,9
1
False Positive Rate (fpr)

Outras formas de avaliação

- Curvas precisão x revocação
- Curvas de custo
- Curvas lift
- ...