APRENDIZAGEM DE MÁQUINA

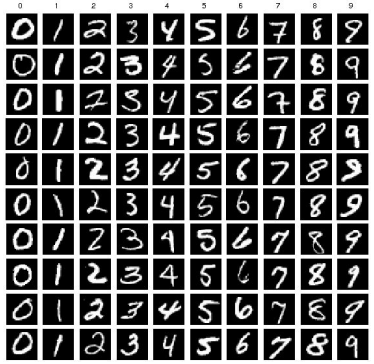
PROF. JOSENALDE OLIVEIRA

josenalde.oliveira@ufrn.br
https://github.com/josenalde/machinelearning

ANÁLISE E DESENVOLVIMENTO DE SISTEMAS - UFRN

AVALIANDO MODELOS DE CLASSIFICAÇÃO

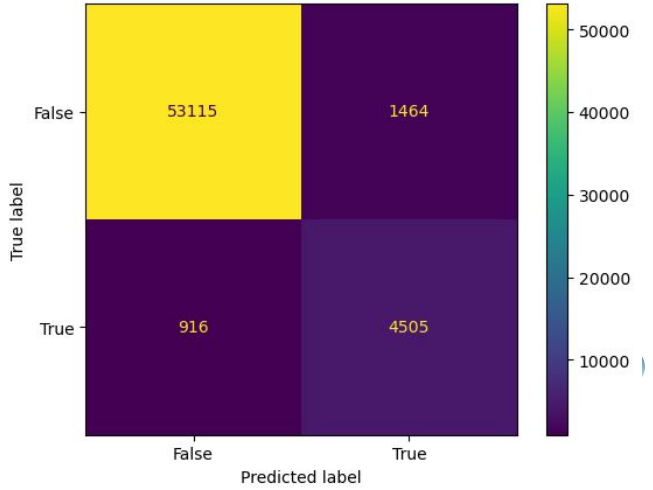
MATRIZ DE CONFUSÃO



[1] Ferramenta comum para avaliar desempenho de classificador
[2] Ideia geral: contar quantas vezes as instâncias de classe A são classificadas como classe B. Por exemplo, um classificador multiclasse (ou multinomial) como SGD, randomForest ou naiveBayes (que tratam multiclasse nativamente) teríamos uma matriz 10 x 10 para o dataset MNIST (0-9) e para saber quantas vezes imagens de 3s foram confundidas com imagens de 5s olharíamos na quarta linha e na sexta coluna
[3] Quando se tem a coluna target disponível no conjunto de teste final, pode-se predizer as saídas com o modelo final escolhido e sintonizado e gerar as métricas a partir da matriz de confusão. Contudo, para comparar modelos, pode-se usar cross_val_predict para gerar predições nos conjuntos de validação em cada fold
[4] Linhas: classes reais, Colunas: classes previstas (preditas)

- 53115 imagens não-5 (classe negativa) foram classificadas corretamente como não-5 (verdadeiro negativo: TN/VN) enquanto as 1464 restantes classificadas erroneamente como 5s (classe positiva) (falso positivo: FP)
- 916 imagens de 5s classificadas erroneamente como não-5 (falso negativo: FN) e as 4505 restantes corretamente classificadas como 5s (verdadeiro positivo).

Exemplo: SGD@MNIST para dígito 5

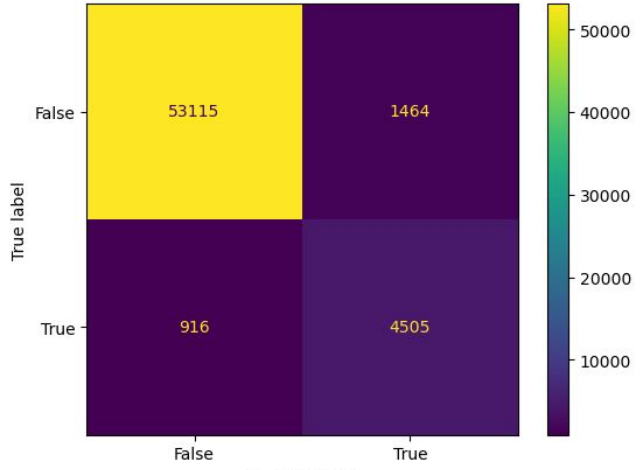


AVALIANDO MODELOS DE CLASSIFICACÃO

MATRIZ DE CONFUSÃO – métricas para além da acurácia

A escolha da(s) métrica(s) mais significativa(s) depende do problema, do balanceamento do conjunto em avaliação, do custo das avaliações incorretas

[1] **Acurácia**: o quanto o classificador acertou, seja da classe positiva, seja da classe negativa.
No caso do SPAM, quantos e-mails foram classificados corretamente
Um modelo perfeito teria 0FN e 0FP com acurácia 100%
É contudo métrica bem geral, com suposição de balanceamento
Quando o dataset é desbalanceado ou um dos erros de FN/FP são mais graves (doenças por exemplo), melhor outras métricas



[2] **Acurácia das predições POSITIVAS (precisão/precision)**: proporção de classificações positivas que são realmente positivas. No exemplo, proporção de imagens classificadas como 5 que realmente são imagens de 5s

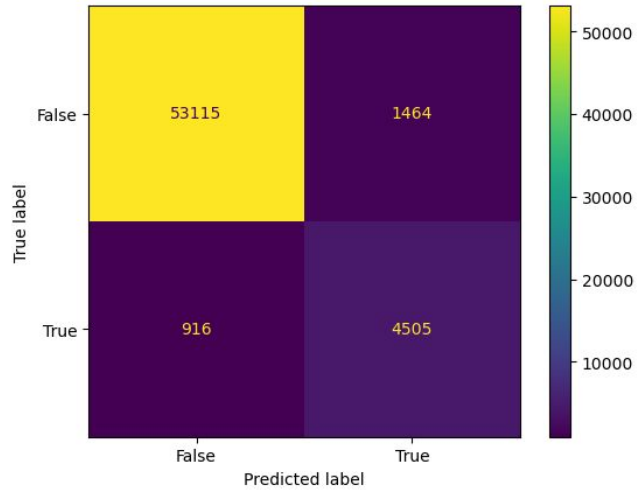
Fração de e-mails classificados como spam que eram realmente spam

"Quando um classificador é altamente preciso, ele tem maior confiabilidade ao rotular como positiva uma amostra. Quando ele diz que é de uma classe, é porque é!"
github@am@Profa.Laura

AVALIANDO MODELOS DE CLASSIFICAÇÃO

MATRIZ DE CONFUSÃO – métricas para além da acurácia

[3] **Revocação (recall, sensibilidade, taxa de verdadeiros positivos (TPR)**: Em geral usada junto com a precisão, pois é a proporção de instâncias positivas detectadas corretamente pelo classificador, pois



FN são positivos reais classificados incorretamente
Mede a fração de spams que foram corretamente classificados como spam
Também chamada **probabilidade de detecção**

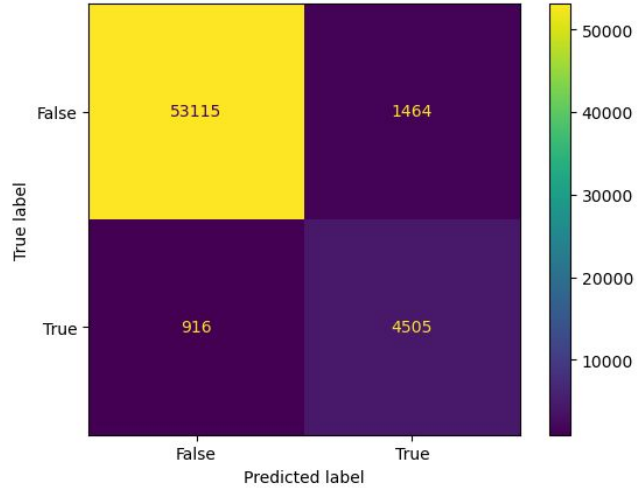
[4] **Taxa de falso positivo (TFP)**: proporção de todos negativos reais que foram classificados incorretamente como positivos, conhecida como **probabilidade de alarme falso**

Por quê?

AVALIANDO MODELOS DE CLASSIFICAÇÃO

MATRIZ DE CONFUSÃO – métricas para além da acurácia

[5] **Especificidade ou Taxa de Verdadeiros Negativos**:
Avalia a capacidade do modelo detectar resultados negativos, de modo oposto à sensibilidade



[6] **F1-score**: média harmônica entre precisão e revocação, dá mais importância a valores mais baixos e só será alta se a revocação e precisão forem altas. Bom para comparar classificadores. Para pr e rec semelhante, f1 semelhante. Senão f1 se aproxima da pior métrica.

AVALIANDO MODELOS DE CLASSIFICAÇÃO

E como escolher?

Ocorre que há um trade-off entre precisão e revocação/sensibilidade. Aumentar um reduz o outro!

Exemplo 1: classificador para detectar vídeos seguros (classe positiva) para crianças
Objetivo: rejeitar muitos vídeos bons (baixa sensibilidade) e mantenha apenas os seguros (alta precisão) OU uma revocação muito alta, mas permita que alguns vídeos ruins sejam exibidos em seu produto?

Métrica	Orientação
Acurácia	Indicador bem geral sobre a performance do modelo em bases balanceadas
Precisão	Use quando é muito importante que predições POSITIVAS sejam acuradas
Revocação (Taxa de Verdadeiro Positivo)	Use quando o custo de FALSOS NEGATIVOS seja maior que de FALSOS POSITIVOS
Taxa de Falso Positivo	Use quando o custo de FALSOS POSITIVOS seja maior que de FALSOS NEGATIVOS

AVALIANDO MODELOS DE CLASSIFICAÇÃO

E como escolher?

Ocorre que há um trade-off entre precisão e revocação/sensibilidade. Aumentar um reduz o outro!

Exemplo 2: detectar ladrões de lojas em imagens de vigilância
Objetivo: pode ser bom que o classificador tenha somente 30% de precisão, desde que tenha 99% de recall (pode ter poucos alertas falsos)

Métrica	Orientação
Acurácia	Indicador bem geral sobre a performance do modelo em bases balanceadas
Precisão	Use quando é muito importante que predições POSITIVAS sejam acuradas
Revocação (Taxa de Verdadeiro Positivo)	Use quando o custo de FALSOS NEGATIVOS seja maior que de FALSOS POSITIVOS
Taxa de Falso Positivo	Use quando o custo de FALSOS POSITIVOS seja maior que de FALSOS NEGATIVOS

EXERCÍCIOS

A) Seja uma matriz de confusão com 5VP, 6VN, 3FP e 2FN. Calcule a sensibilidade (0.455, 0.714, 0.625)

B) Seja uma matriz de confusão com 3VP, 4VN, 2FP e 1FN. Calcule a precisão.

C) Você está desenvolvendo um classificador binário que verifica se determinado inseto nocivo está presente em fotos de armadilhas inteligentes (smart traps). Se o modelo detecta o inseto, o entomologista é notificado. A detecção antecipada deste inseto é crítica para prevenir uma infestação. Um alarme falso (falso positivo) é fácil de tratar: o entomologista vê a foto que foi classificada incorretamente e a marca como tal. Presumindo um nível aceitável de acurácia, para qual métrica este modelo deve ser otimizado?

1. Revocação
2. Precisão
3. Taxa de Falso Positivo

EXERCÍCIOS

1. Seja uma matriz de confusão com 5VP, 6VN, 3FP e 2FN. Calcule a sensibilidade (0.455, 0.714, 0.625)

6	3
2	5

2. Seja uma matriz de confusão com 3VP, 4VN, 2FP e 1FN. Calcule a precisão.

4	2
1	3

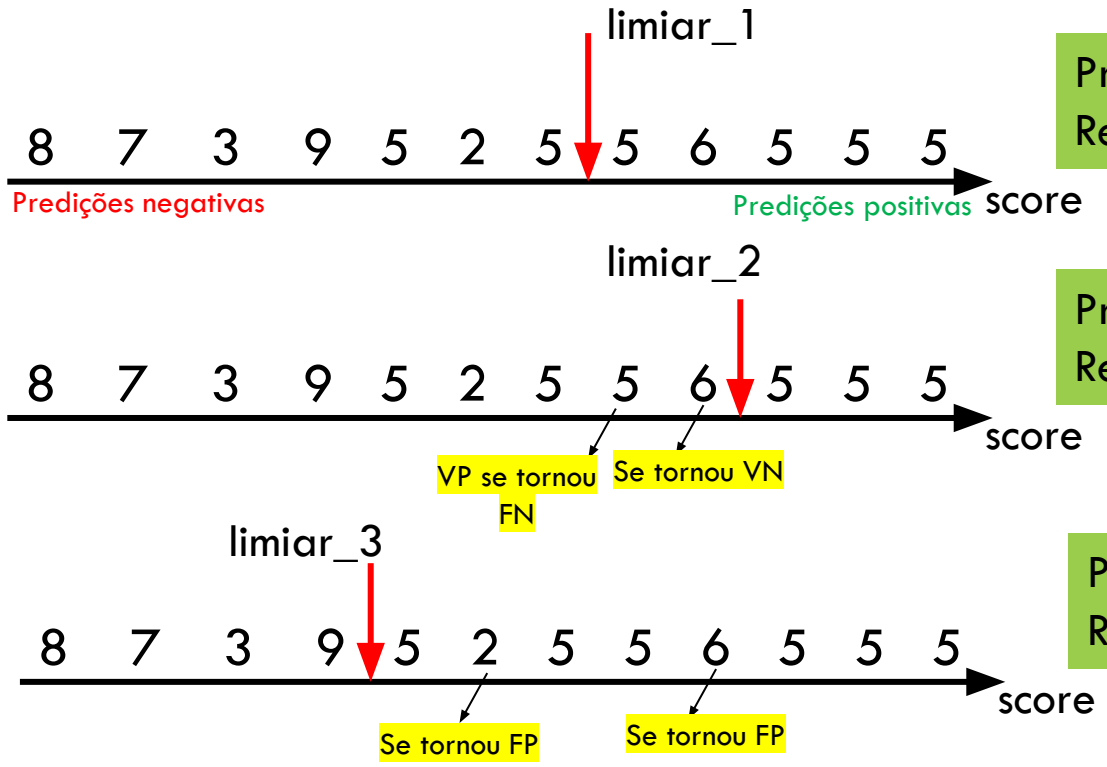
3. Você está desenvolvendo um classificador binário que verifica se determinado inseto nocivo está presente em fotos de armadilhas inteligentes (smart traps). Se o modelo detecta o inseto, o entomologista é notificado. A detecção antecipada deste inseto é crítica para prevenir uma infestação. Um alarme falso (falso positivo) é fácil de tratar: o entomologista vê a foto que foi classificada incorretamente e a marca como tal. Presumindo um nível aceitável de acurácia, para qual métrica este modelo deve ser otimizado?
    1. Revocação
    2. Precisão
    3. Taxa de Falso Positivo

Neste cenário, alarmes falsos (falsos positivos) tem custo baixo e falsos negativos tem custo muito alto (infestação). Faz sentido maximizar Revocação ou a probabilidade de detecção

4. Leia a documentação do classification_report do sklearn.metrics

A RELAÇÃO PRECISÃO/REVOCAÇÃO

[1] Como um algoritmo de classificação "decide"? Intuitivamente nos parece que é gerada alguma medida interna da relação entre as features (score) e, com base em algum limiar (threshold) a classificação é atribuída à classe X, Y, Z etc.
[2] O SGDClassifier, por exemplo, para cada instância calcula um score baseado em uma função de decisão e, se esse score for maior que um limiar, ele atribui a instância à classe positiva, ou então a atribui à classe negativa.



Precisão: 4/5 (4VP e 1FP) = 80%
Revocação: 4/6 (pois existem 6 5s reais) = 67%

Precisão: 3/3 (3VP e 0FP) = 100%
Revocação: 3/6 = 50%

Precisão: 6/8 (6VP e 2FP) = 75%
Revocação: 6/6 = 100%

A RELAÇÃO PRECISÃO/REVOCAÇÃO

Uma forma de verificar é usar o método decision_function() do modelo ao invés do predict(), a qual retorna um score e pode-se fazer a predição com base neste score, definindo-se um limiar

```
y_scores = model_sgd.decision_function([some_digit])
print(y_scores)

# definindo um threshold = 0 (padrão do SGDClassifier com predict())
thresh = 0

y_some_digit_pred = (y_scores > thresh)
print(y_some_digit_pred) # TRUE

# aumentando o threshold para 8000 dará False, diminuindo a revocação (o classificador perde esta imagem
thresh = 3000
y_some_digit_pred = (y_scores > thresh)
print(y_some_digit_pred) # FALSE
```

✓ 0.0s

```
2164.22030239]
 True]
False]
```

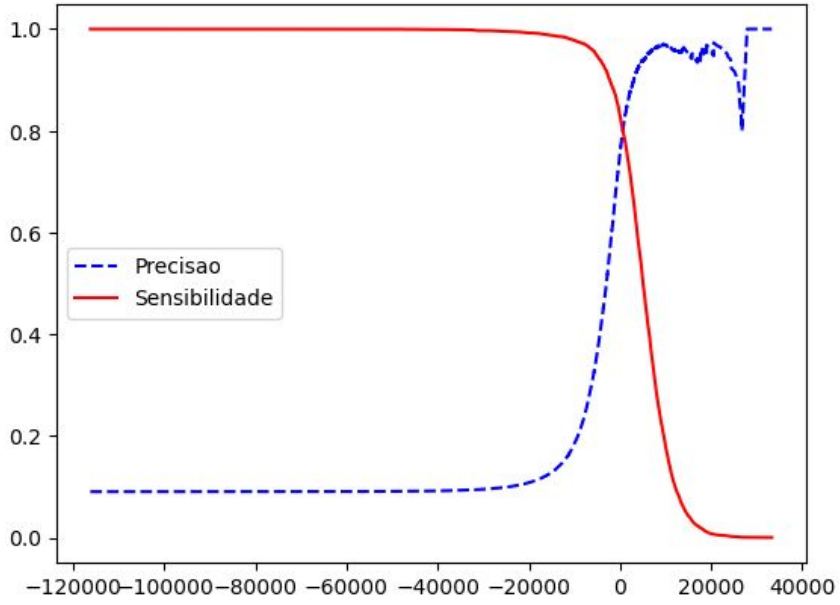
A RELAÇÃO PRECISÃO/REVOCAÇÃO

E qual limiar escolher? (para entendimento do pano de fundo...)

1. Usar cross_val_predict() para obter os scores de todas as instâncias de treinamento, com o método “decision_function”
2. Usar precision_recall_curve() para calcular precisão e revocação em todos os limiares possíveis
3. Plotar o gráfico PR/RC

A RELAÇÃO PRECISÃO/REVOCAÇÃO

```python
y_scores = cross_val_predict(model_sgd, X_train, y_train_5, cv=5, method='decision_function')

from sklearn.metrics import precision_recall_curve
precisions, recalls, thresholds = precision_recall_curve(y_train_5, y_scores)

def plot_precision_recall_vs_threshold(precisions, recalls, thresholds):
    plt.plot(thresholds, precisions[:-1], 'b--', label='Precisao')
    plt.plot(thresholds, recalls[:-1], 'r-', label='Sensibilidade')
    plt.legend()

plot_precision_recall_vs_threshold(precisions, recalls, thresholds)
plt.show()
```



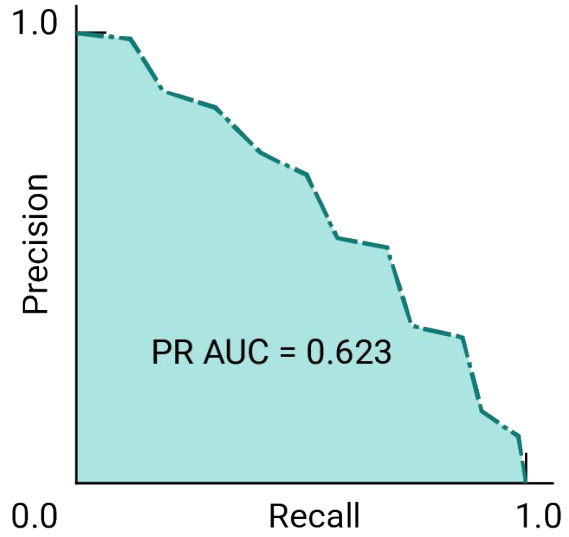
Para o limiar que dê uma precisão de 90%, qual a revocação associada?

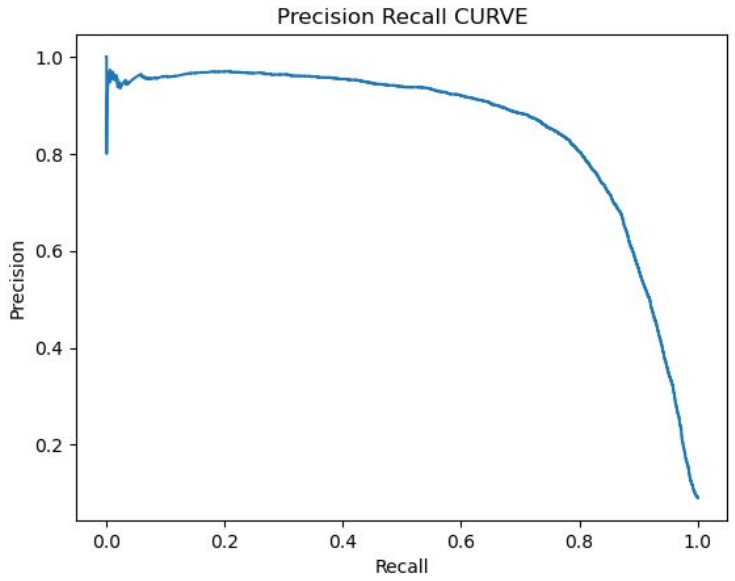
```python
threshold_90_precision = thresholds[np.argmax(precisions >= 0.90)]
print(threshold_90_precision) #3045

y_train_pred_90 = (y_scores >= threshold_90_precision)
from sklearn.metrics import precision_score, recall_score
print(precision_score(y_train_5, y_train_pred_90)) #90%
print(recall_score(y_train_5, y_train_pred_90)) #65%
```

✓ 0.0s

```
3045.9258227053647
0.9002016129032258
0.6589190186312488
```

A RELAÇÃO PRECISÃO/REVOCAÇÃO (CURVA PR)

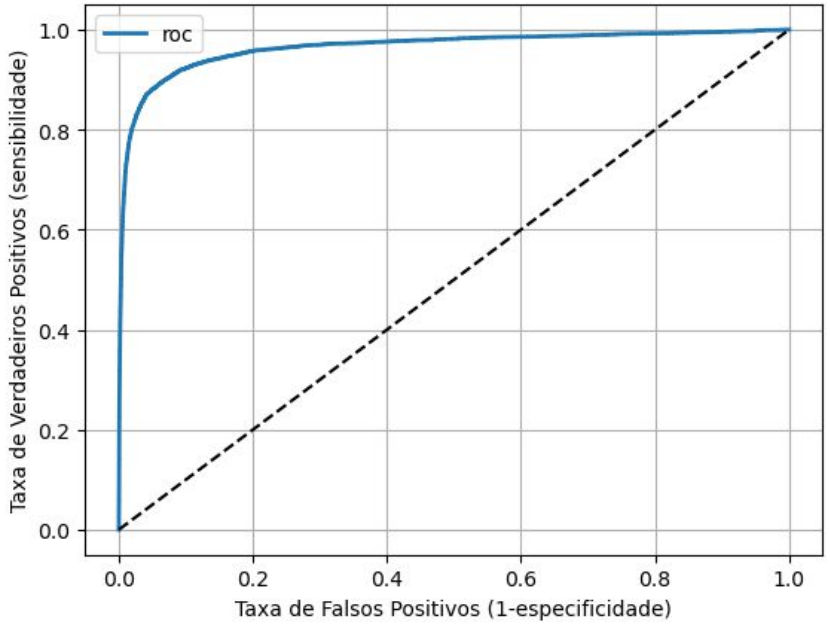




A curva PR e a respectiva área sobre esta curva é mais indicada para bases desbalanceadas

A CURVA ROC (CARACTERÍSTICA DE OPERAÇÃO)

- Muito usada para avaliar classificadores binários
- É a curva entre a Taxa de Verdadeiros Positivos (TVP = Revocação = Sensibilidade) X Taxa de Falsos Positivos (TFP, taxa de instâncias negativas classificadas como positivas)



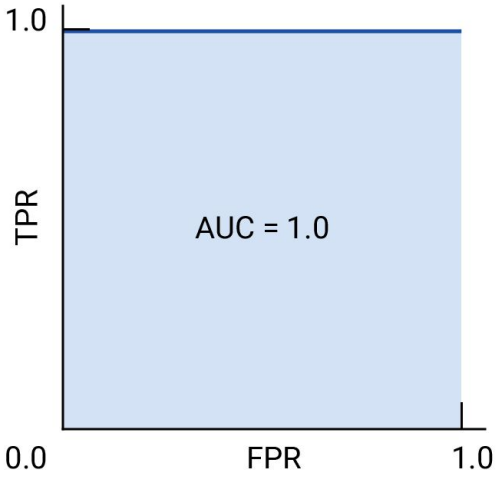

```
from sklearn.metrics import roc_curve
tfp, tvp, thresholds = roc_curve(y_train_5, y_scores)

def plot_roc_curve(tfp, tvp, label='roc'):
    plt.plot(tfp,tvp,linewidth=2,label=label)
    plt.plot([0,1],[0,1],'k--')
    plt.legend()
    plt.grid()
    plt.xlabel('Taxa de Falsos Positivos (1-especificidade)')
    plt.ylabel('Taxa de Verdadeiros Positivos (sensibilidade)')

plot_roc_curve(tfp, tvp)
plt.show()
```

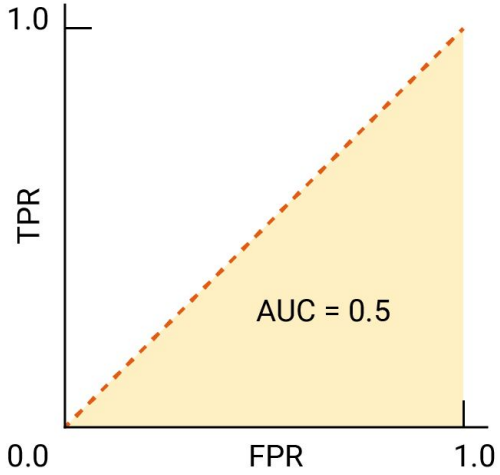
A área sob a curva (AUC) é uma forma de comparar classificadores (datasets balanceados): (quanto mais próximo de 1, melhor)

```
from sklearn.metrics import roc_auc_score
roc_auc_score(y_train_5, y_scores)
✓ 0.0s
0.9648211175804801
```

A CURVA ROC (CARACTERÍSTICA DE OPERAÇÃO)

- Em (0,1) temos FPR (TFP=0, ou seja, 1-especificidade=0 implica especificidade=1). Mas lembre que especificidade é a taxa de verdadeiros negativos. Se ela é igual a 1, significa que não há falsos positivos.
- Em (TPR, TVP=1=sensibilidade) não há falsos negativos.
- **Logo é o melhor cenário pontos próximos a (0,1) pois estão os limiares que geram os melhores desempenhos**



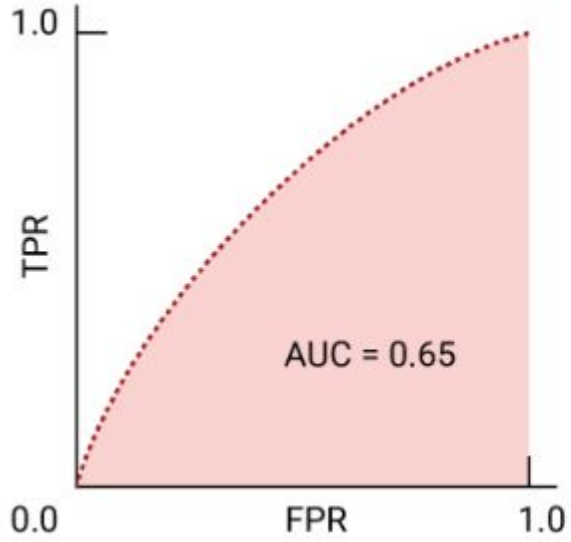


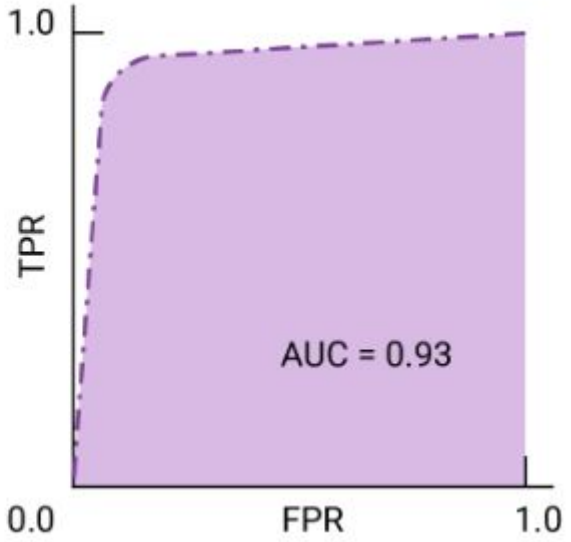
Já neste caso, um AUC de 0.5 equivale a predições aleatórias (como cara-coroa etc.), ou seja, 50% de probabilidade de ser positivo e 50% de ser negativo (1 pra 1)

https://developers.google.com/machine-learning/crash-course/classification/roc-and-auc

A CURVA ROC (CARACTERÍSTICA DE OPERAÇÃO)

- 0.93>0.65, logo modelo à direita tem melhor desempenho, maior probabilidade de classificar uma amostra aleatória como classe positiva

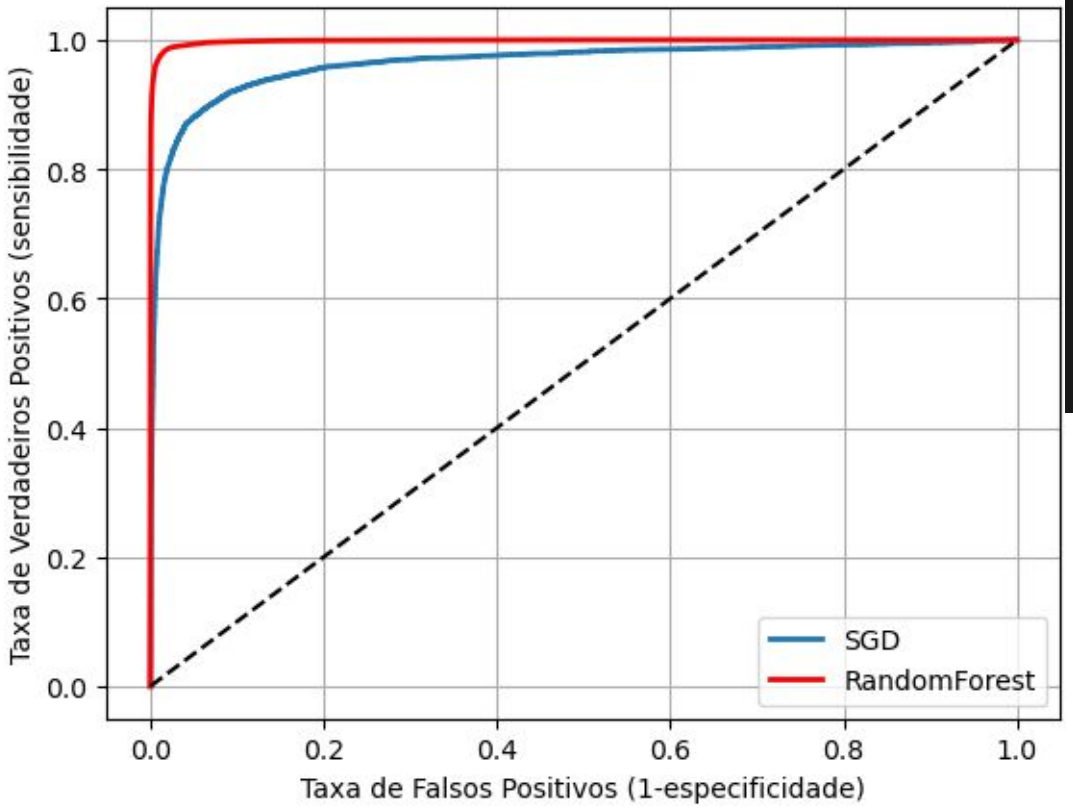




A CURVA ROC (CARACTERÍSTICA DE OPERAÇÃO)

- Comparando SGD X RandomForest para o classificador binário de 5s no MNIST

```python
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
model_rf = RandomForestClassifier(random_state=42)

y_probas_rf = cross_val_predict(model_rf, X_train, y_train_5, cv=5, method='predict_proba')

y_scores_rf = y_probas_rf[:,1] # ou seja as probabilidades da classe positiva (5)
tfp_rf, tvp_rf, thresholds_rf = roc_curve(y_train_5, y_scores_rf)

def plot_roc_curve(tfp_1, tvp_1, tfp_2, tvp_2, label_1, label_2):
    plt.plot(tfp_1,tvp_1, linewidth=2, label=label_1)
    plt.plot(tfp_2,tvp_2, 'r', linewidth=2, label=label_2)
    plt.plot([0,1],[0,1],'k--')
    plt.legend()
    plt.grid()
    plt.xlabel('Taxa de Falsos Positivos (1-especificidade)')
    plt.ylabel('Taxa de Verdadeiros Positivos (sensibilidade)')

plot_roc_curve(tfp, tvp, tfp_rf, tvp_rf, 'SGD', 'RandomForest')
plt.show()
```



ROC AUC_RF = 0.9984

APERFEIÇOANDO O MODELO

- A escolha manual de hiperparâmetros é tediosa (encontrar uma combinação)
- No Scikit-learn pode-se usar o GridSearchCV ou o RandomizedSearchCV
- No GridSearch ele avalia TODAS as combinações por meio de validação cruzada
- Exemplo para o RandomForest

```
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
hyperparam_grid = [{'n_estimators':[3,10,30],
                    'max_features':[2,4,6,8]},
                   {'bootstrap':[False], 'n_estimators':[3,10], 'max_features':[2,3,4]},]
model_rf = RandomForestRegressor()
model_rf_gs = GridSearchCV(model_rf, hyperparam_grid, cv=5,scoring='f1',return_train_score=True)
model_rf_gs.fit(X,y)
```

Testa no primeiro dict 3x4=12 combinações com o parâmetro bootstrap:True (default)
Depois testa no segundo dict 2x3=6 combinações com bootstrap:False
Testa portanto 12+6 combinações e cada rodada de 5 treinos com validação cruzada, ou seja, 18 x 5 = 90 rodadas de treinamento. Ao fim, os melhores parâmetros estão aqui:

```
model_rf_gs.best_params_ # se os melhores resultados forem com os limites superiores, pense em aumenta-los
model_rf_gs.best_estimator_ (melhor estimador)
cvres = model_rf_gs.cv_results_
for mean_f1, params in zip(cvres['f1'], cvres['params']):
    print(mean_f1, params)
```

APERFEIÇOANDO O MODELO

- Outro exemplo com KNN

```
from sklearn.model_selection import GridSearchCV

param_grid = {'n_neighbors': range(1,40,2), 'weights': ['uniform', 'distance'], 'p': [1, 2, 3]}
grid = GridSearchCV(KNeighborsClassifier(),param_grid, verbose = 3)#verbose indica a quantidade de detalhame
grid.fit(X_train,y_train)
```

Então você pode executar previsões neste objeto da grade com o conjunto de teste

```
grid_predictions = grid.predict(X_test)
```

```
dfGridSearch = pd.DataFrame(grid.cv_results_)
```

```
dfGridSearch.loc[dfGridSearch['rank_test_score'] == 1, :]
```

APERFEIÇOANDO O MODELO

- Se o espaço de pesquisa for grande é melhor usar busca randomizada
- Avalia determinado número de combinações aleatórias, selecionando um valor aleatório para cada hiperparâmetro por iteração (1000 iterações no Randomized explorar mais do que no GridSearch) e pode-se definir o número de iterações desejado para controlar melhor o custo computacional

```
from sklearn.model_selection import RandomizedSearchCV
hyperparam_grid = [{'n_estimators':[3,10,30],
                    'max_features':[2,4,6,8]},
                   {'bootstrap':[False], 'n_estimators':[3,10], 'max_features':[2,3,4]},]
model_rf = RandomForestRegressor()
model_rf_gs = RandomizedSearchCV(model_rf, hyperparam_grid, n_iter=10, scoring='f1', cv=5, return_train_score=True)
model_rf_gs.fit(X,y)
```

https://optuna.org/ e muitos outros sintonizadores
Hyperopt, Hyperas, Talos, Kopt, Keras Tuner,
Scikit-Optimize (skopt), Spearmint, Hyperband,
Sklearn-Deap, Arimo, SigOpt, Oscar etc.