AVALIAÇÃO DE MODELOS PREDITIVOS

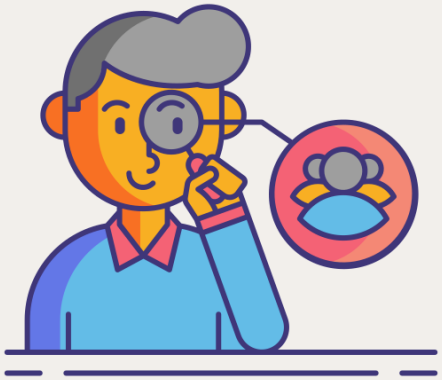
PROF. LETÍCIA RAPOSO
profleticiaraposo@gmail.com

TÓPICOS DA AULA

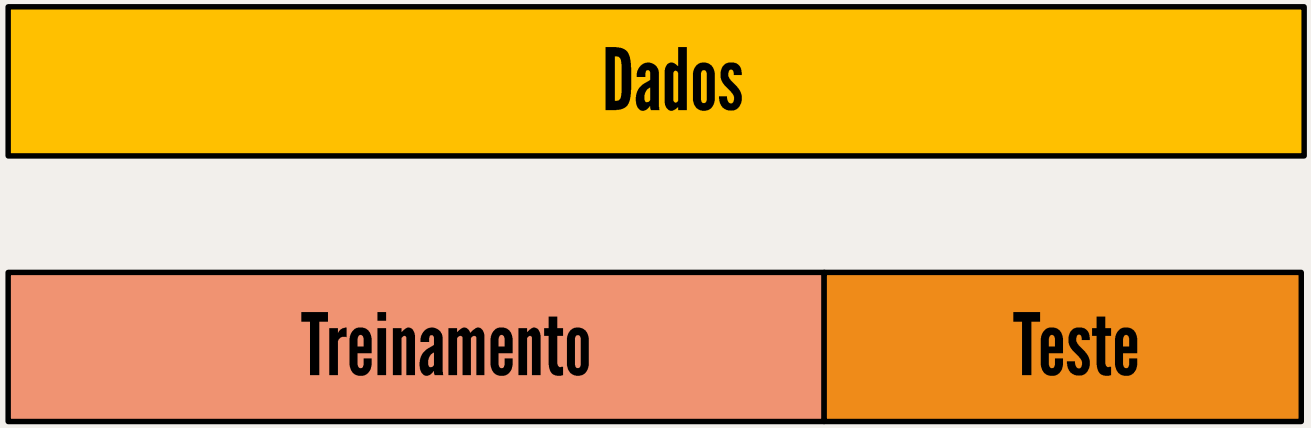
- Amostragem dos dados;
- Ajuste dos parâmetros;
- Medidas de desempenho:
  - Regressão;
  - Classificação;
- Comparação de modelos.

AMOSTRAGEM

- Importante a divisão entre conjunto de treinamento e teste.
- Uso do mesmo conjunto de treino na avaliação: estimativas otimistas.
- Treinamento: indução e ajuste do modelo.
- Teste: simulam a apresentação de objetos novos ao preditor que não foram vistos em sua indução.
- Treinamento e teste: conjuntos disjuntos.



MÉTODO HOLDOUT



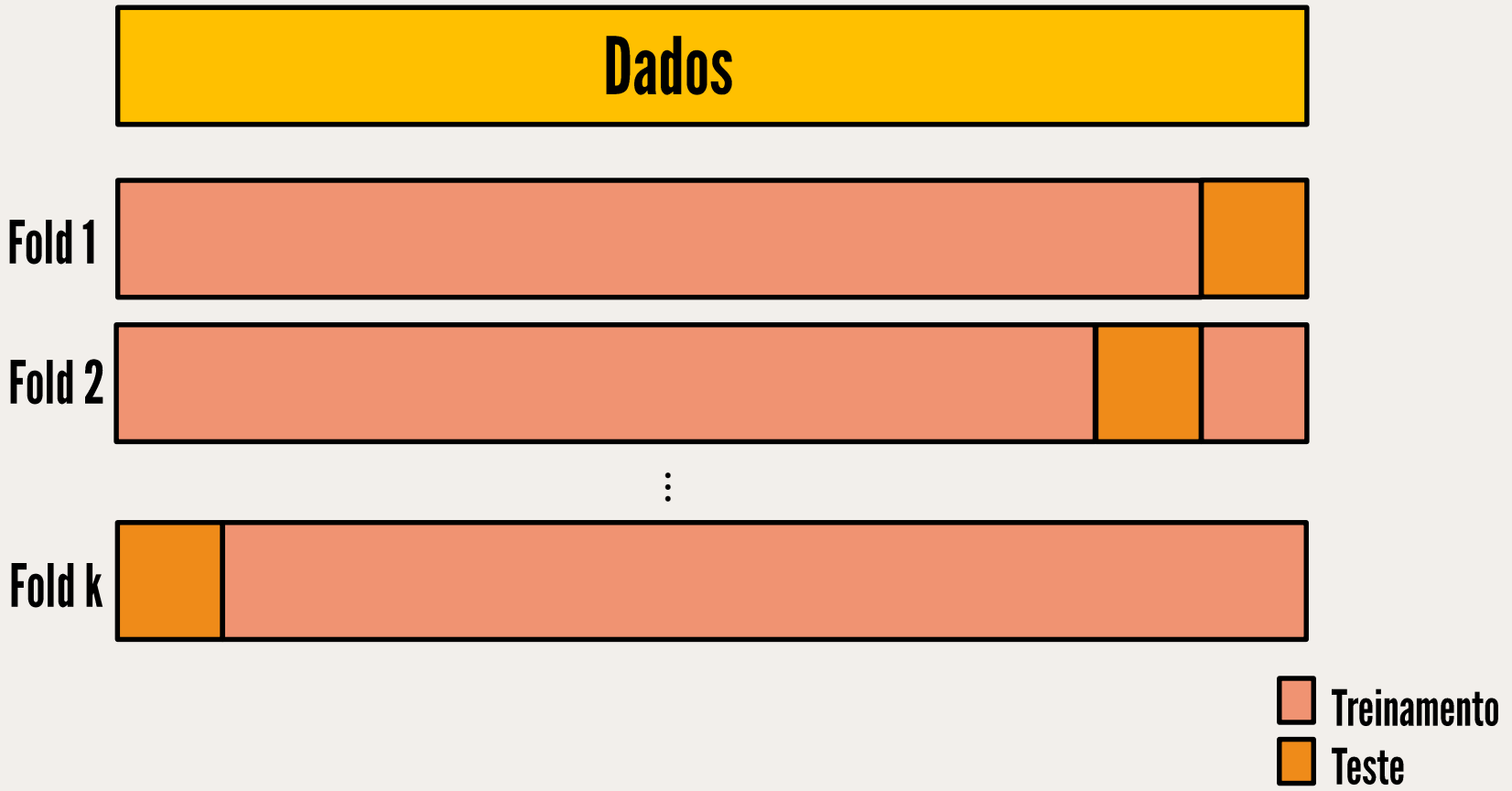
Dividimos, aleatoriamente, os dados em conjuntos de treinamento e teste (geralmente 2/3 para o treinamento e 1/3 para o teste)

MÉTODO HOLDOUT

Vantagens: dados totalmente independentes; só precisa ser executado uma vez, portanto, tem custos computacionais mais baixos.

Desvantagens: a avaliação de desempenho está sujeita a maior variância, dado o tamanho menor dos dados; difícil calcular qualquer informação de variação ou intervalos de confiança em um único conjunto de dados.

VALIDAÇÃO CRUZADA K-FOLD



VALIDAÇÃO CRUZADA K-FOLD

- Os dados são normalmente estratificados antes de serem divididos em subconjuntos:
  - A estratificação é o processo de reorganização dos dados para garantir que cada subconjunto seja um bom representante do todo.
  - P. ex., em um problema de classificação binária em que cada classe compreende 50% dos dados, o ideal é organizar os dados de modo que em cada subconjunto, cada classe inclui cerca de metade das instâncias.
- A estimativa do erro é obtida pela média dos erros de cada rodada.

VALIDAÇÃO CRUZADA K-FOLD

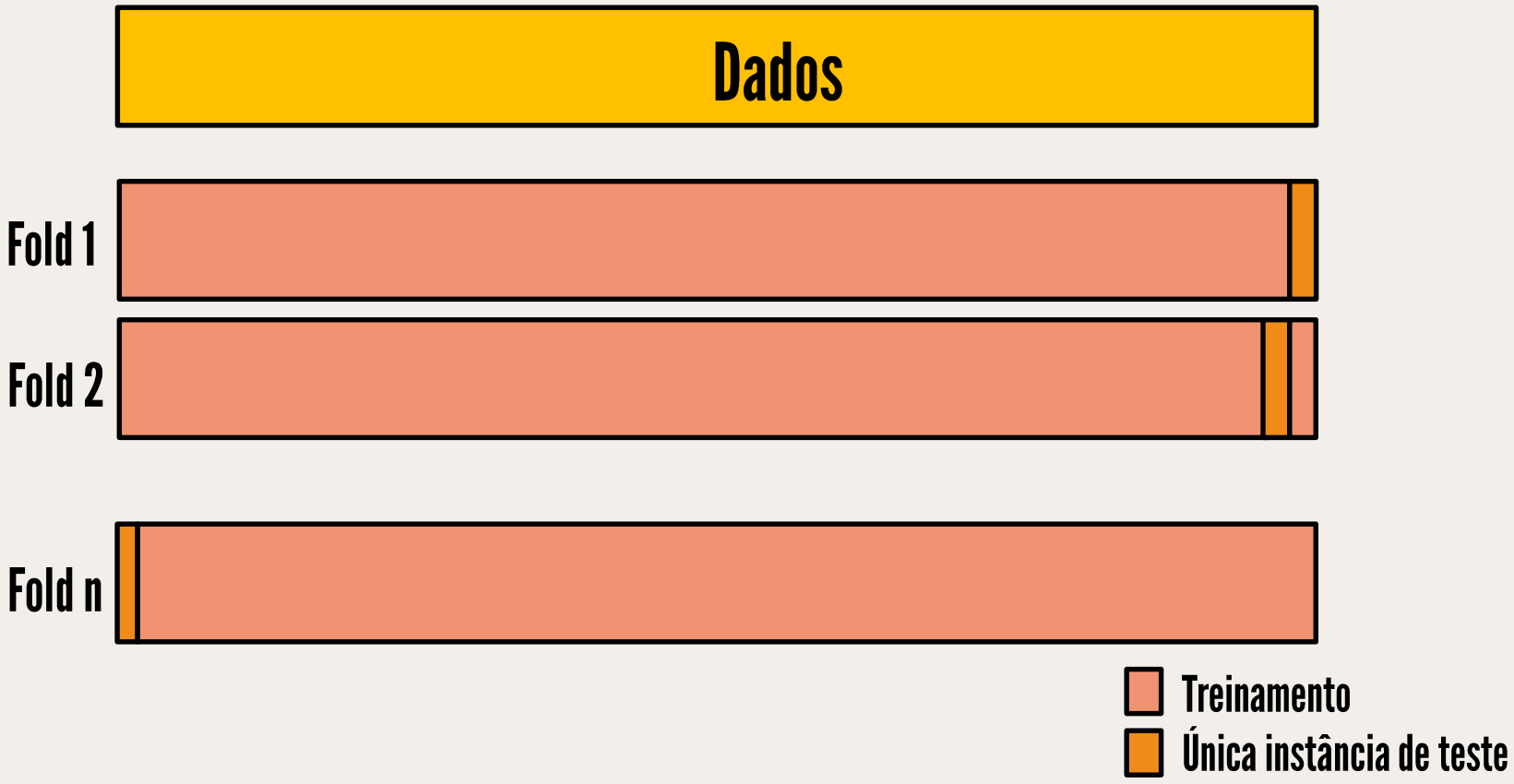
Vantagens: propenso a menor variação porque usa todo o conjunto de treinamento.

Desvantagens: maiores custos computacionais - o modelo precisa ser treinado K vezes na etapa de avaliação e mais uma para gerar o modelo final.

VALIDAÇÃO CRUZADA LEAVE-ONE-OUT

- Caso especial da *k-fold*, com k igual ao número de instâncias nos dados.
- Em cada iteração, quase todos os dados, exceto uma única observação, são usados para treinamento e o modelo é testado nessa única observação.
- Amplamente utilizada quando os dados disponíveis são muito raros.
- O desempenho é dado pela soma dos desempenhos verificados para cada exemplo de teste individual.

VALIDAÇÃO CRUZADA LEAVE-ONE-OUT



VALIDAÇÃO CRUZADA LEAVE-ONE-OUT

Vantagens: propenso a menos variação porque usa todo o conjunto de treinamento.

Desvantagens: a estratificação não é possível.

OBSERVAÇÕES

- Na prática, a escolha do número de subconjuntos depende do tamanho do conjunto de dados.
- Para conjuntos grandes, k igual a 3 já fornecerá bons resultados.
- Para conjuntos mais esparsos, talvez a melhor opção seja o *leave-one-out* para treinar com um maior número possível.
- Uma escolha comum para k é 10.

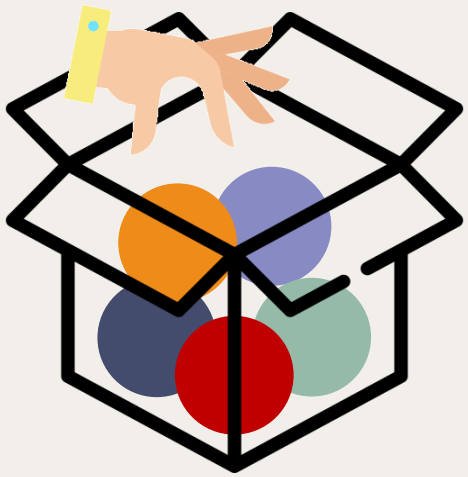
OBSERVAÇÕES

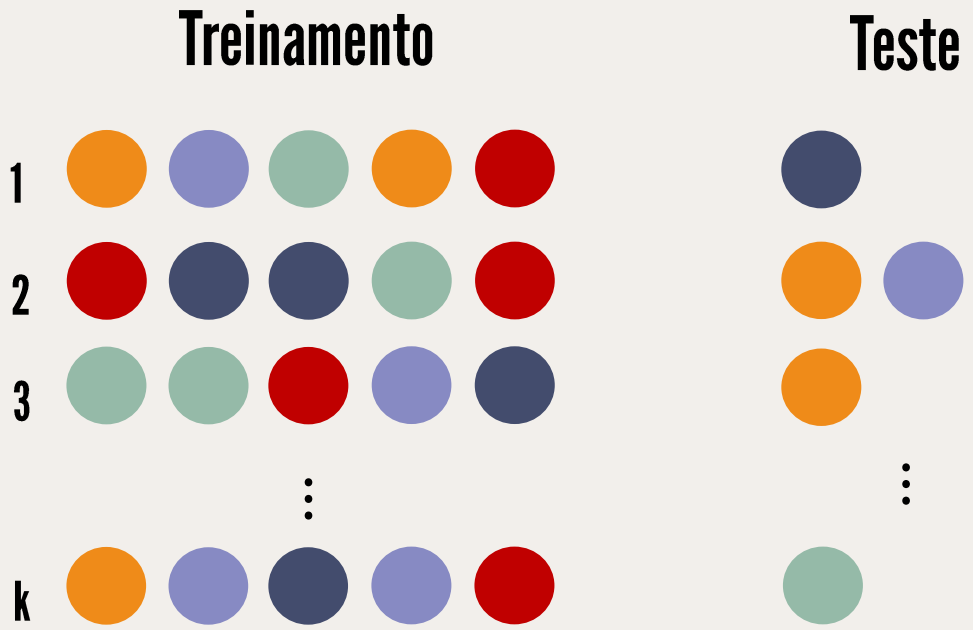
- O propósito da validação cruzada não é chegar ao modelo final, mas sim avaliar o(s) modelo(s).
- Para construir o modelo final, devemos usar todos os dados que temos para chegar ao melhor modelo possível.
- P. ex., digamos que temos dois modelos, um modelo de regressão linear e uma rede neural. Como podemos dizer qual modelo é melhor?
  - Podemos fazer validação cruzada *k-fold* e ver qual deles se mostra melhor na previsão dos exemplos de teste. Uma vez que usamos a validação cruzada para selecionar o modelo com melhor desempenho, treinamos esse modelo (quer seja a regressão linear ou a rede neural) com todos os dados.

BOOTSTRAP

- Método de reamostragem proposto por Bradley Efron em 1979.
- Técnica de reamostragem com reposição (≠ validação cruzada).
- A partir de um conjunto de dados com N exemplos, selecionamos, com reposição, N exemplos e utilizamos esse subconjunto para treino.
- Os exemplos restantes que não foram selecionados serão usados no teste.
- Repetimos esse processo k vezes (normalmente $\mathbf{k \geq 100}$).
- O erro estimado também será dado pela média dos erros de cada experimento.

BOOTSTRAP





BOOTSTRAP 0.632

- Um exemplo tem uma probabilidade de $1-\frac{1}{N}$ de não ser escolhido.
- Assim, sua probabilidade de terminar nos dados do teste é: $\left(1-\frac{1}{N}\right)^{N}$. Para N grande, essa probabilidade é aproximadamente $\frac{1}{e} \approx 0{,}368$.
- O conjunto de treinamento vai conter aproximadamente 63,2% dos exemplos.
- A taxa de erro é um estimador muito pessimista (usa 36,8% dos exemplos).
- Solução: usar também a taxa de erro obtida no conjunto de treinamento.

BOOTSTRAP 0.632

	≈ 63% dos exemplos de D	≈ 37% de D	Estimativas da Taxa de Erro
Experiência nº 1	Conjunto de Treino: D_1	Conjunto de Teste: $D \setminus D_1$	$E_1 = 0.632\ E_{teste} + 0.368\ E_{treino}$
Experiência nº 2	Conjunto de Treino: D_2	Conjunto de Teste: $D \setminus D_2$	$E_2 = 0.632\ E_{teste} + 0.368\ E_{treino}$
...			
Experiência nº k	Conjunto de Treino: D_B	Conjunto de Teste: $D \setminus D_k$	$E_k = 0.632\ E_{teste} + 0.368\ E_{treino}$

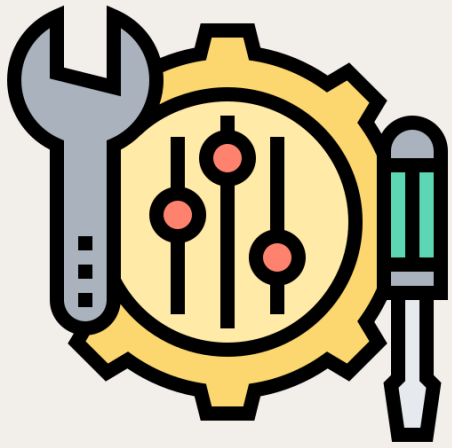
A estimativa do erro verdadeiro é obtida como a média dos erros de cada experiência.

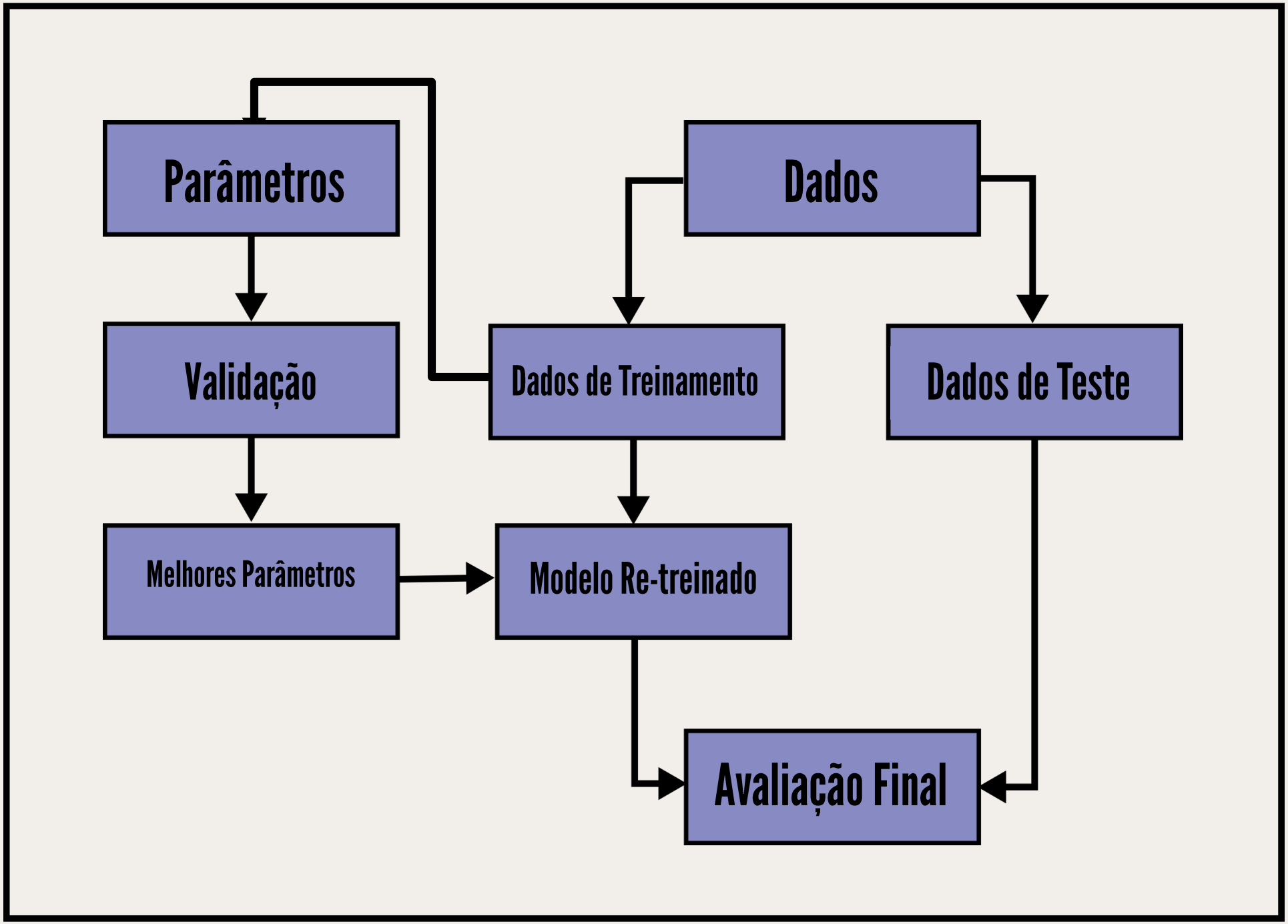
$$E = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} E_i$$

AJUSTE DE PARÂMETROS

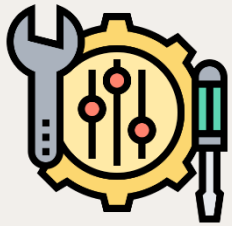
Na maioria dos modelos, torna-se necessário realizar um ajuste de parâmetros.

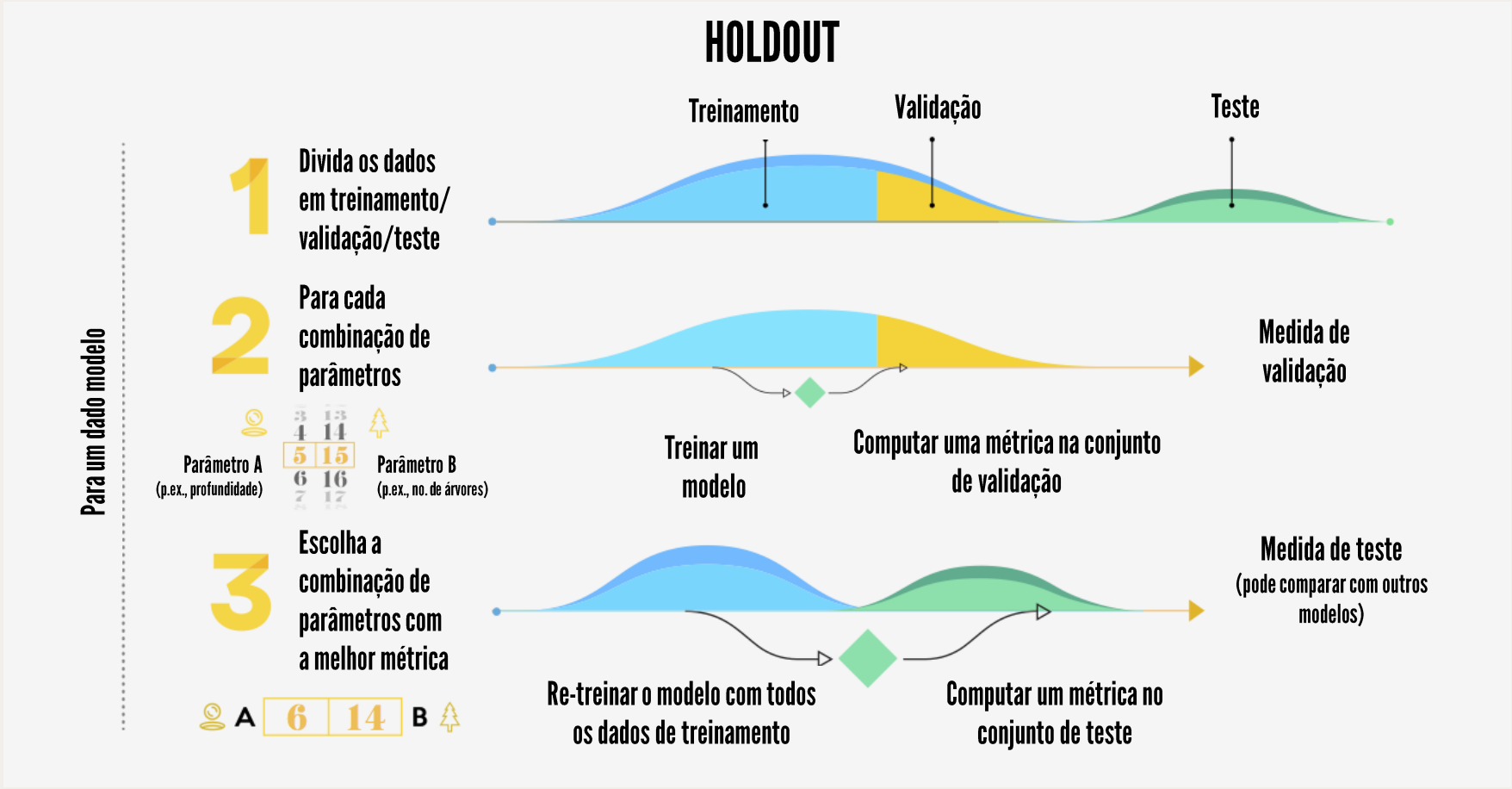
- Nesses casos, é necessário reservar uma parte dos exemplos para ajustar os parâmetros e outra parte para teste.



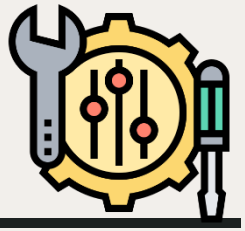

Parâmetros
Dados
Validação
Dados de Treinamento
Dados de Teste
Melhores Parâmetros
Modelo Re-treinado
Avaliação Final

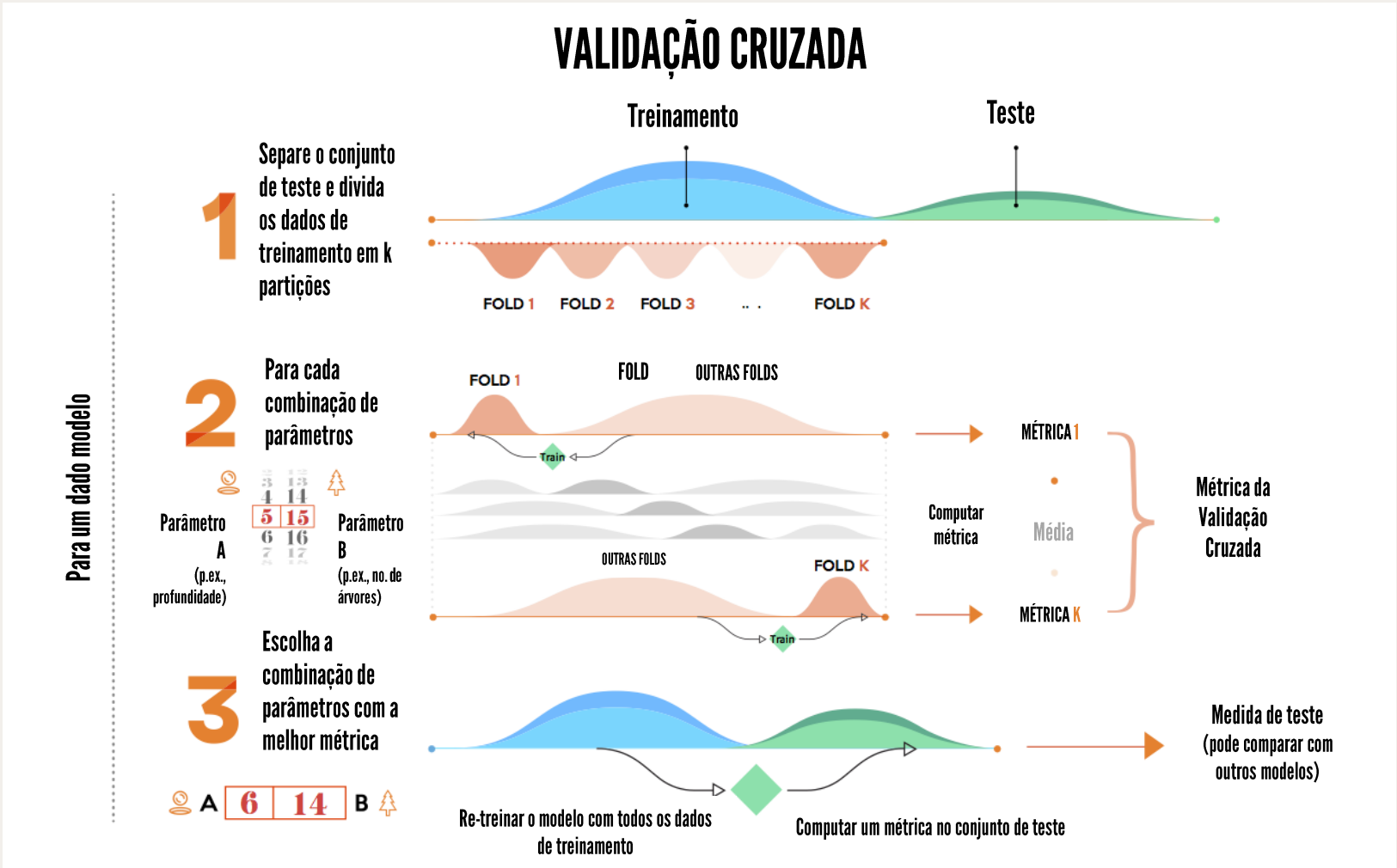
AJUSTE DE PARÂMETROS





AJUSTE DE PARÂMETROS





MÉTRICAS PARA REGRESSÃO

- Erro quadrático médio (MSE – *mean squared error*):

$$MSE(\hat{f}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \hat{f}(\boldsymbol{x}_i)\right)^2$$

- Distância absoluta média (MAD – *mean absolute distance*):

$$MAD(\hat{f}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|y_i - \hat{f}(\boldsymbol{x}_i)\right|$$

- Para ambas as medidas, valores mais baixos correspondem a melhores modelos.

MÉTRICAS PARA CLASSIFICAÇÃO

- Taxa de erro ou de classificações incorretas:

$$err(\hat{f}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} I\left(y_i \neq \hat{f}(\boldsymbol{x}_i)\right)$$

em que $I(a) = 1$ se a é verdadeiro e é 0 em caso contrário.

- A taxa de erro varia entre 0 e 1, e valores próximos ao extremo 0 são melhores.
- O complemento dessa taxa corresponde à taxa de acerto ou acurácia do classificador:

$$ac(\hat{f}) = 1 - err(\hat{f})$$

- Valores próximos de 1 são considerados melhores.

MÉTRICAS PARA CLASSIFICAÇÃO

Matriz de confusão:

		Verdadeira Classe	
		Positivo	Negativo
Classe Predita	Positivo	Verdadeiros Positivos (VP)	Falsos Positivos (FP)
	Negativo	Falsos Negativos (FN)	Verdadeiros Negativos (VN)

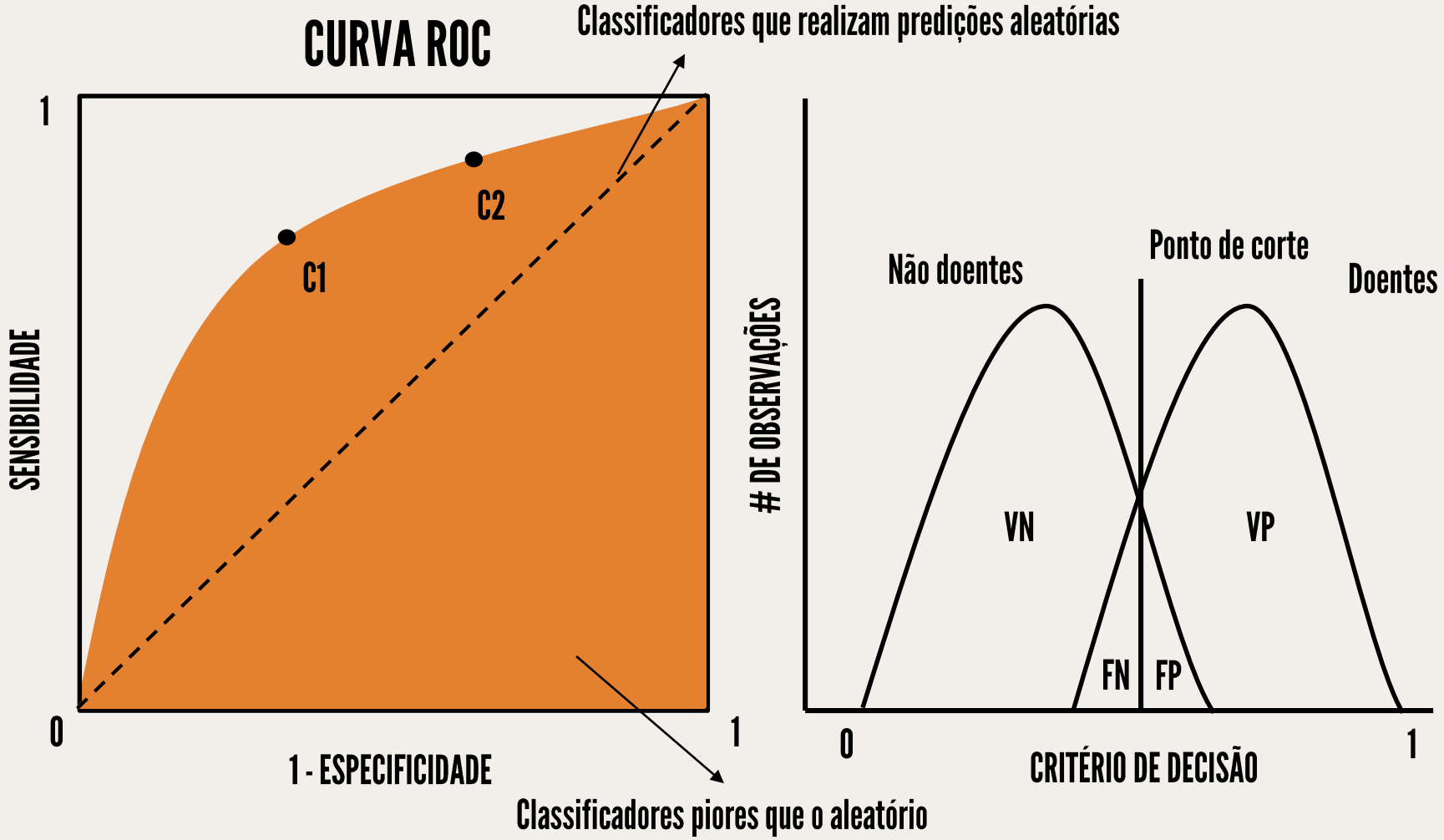
		Verdadeira Classe		
		A	B	C
Classe Predita	A	4	1	0
	B	0	5	0
	C	0	2	8

PROBLEMAS DE DUAS CLASSES

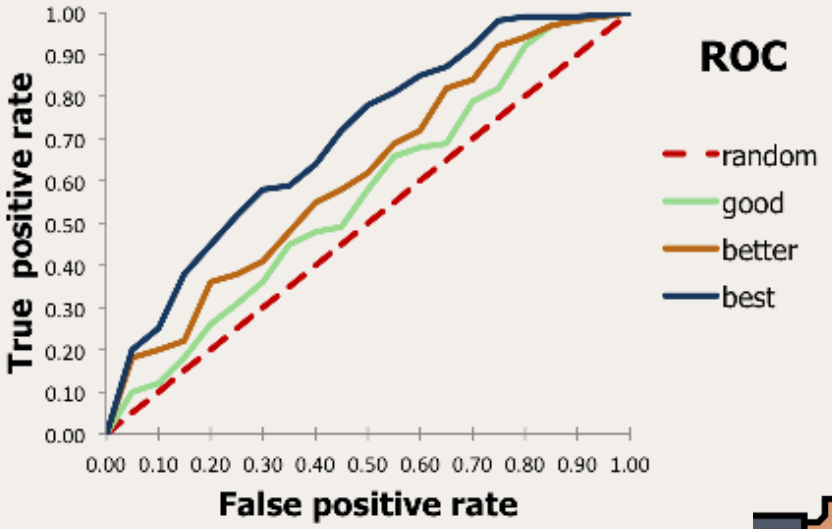
		Verdadeira Classe	
		Positivo	Negativo
Classe Predita	Positivo	Verdadeiros Positivos (VP)	Falsos Positivos (FP)
	Negativo	Falsos Negativos (FN)	Verdadeiros Negativos (VN)

- $Sensibilidade = \frac{VP}{VP+FN}$
- $Especificidade = \frac{VN}{VN+FP}$
- $Valor\ Preditivo\ Positivo = \frac{VP}{VP+FP}$
- $Valor\ Preditivo\ Negativo = \frac{VN}{VN+FN}$
- $Acurácia = \frac{VP+VN}{VP+VN+FP+FN}$
- $Medida - F = \frac{2\times(S \times VPP)}{S+VPP}$

ANÁLISE ROC


CURVA ROC
Classificadores que realizam predições aleatórias
1
C2
C1
SENSIBILIDADE
0
1
1 - ESPECIFICIDADE
Classificadores piores que o aleatório
DE OBSERVAÇÕES
Não doentes
Ponto de corte
Doentes
VN
VP
FN
FP
0
1
CRITÉRIO DE DECISÃO

ANÁLISE ROC



AUC: área sob a curva ROC

- Maior AUC, classificador superior aos demais.
- Entretanto, melhor comparar estatisticamente.

Vantagem: medida única, boa para dados desbalanceados.

Desvantagem: limitada a problemas binários.

ÍNDICE KAPPA

- Mede o grau de concordância entre duas diferentes técnicas além do que seria esperado pelo acaso.
- Calculado pela divisão da diferença entre a concordância esperada e a concordância observada e a diferença entre a concordância absoluta e a concordância esperada.

Kappa	Interpretação
<0	Discordantes
0 - 0,19	Concordância fraca
0,20 – 0,39	Concordância razoável
0,40 – 0,59	Concordância moderada
0,60 – 0,79	Concordância substancial
0,80 – 1,00	Concordância quase perfeita

ÍNDICE KAPPA

- Acurácia observada:

$$((22 + 13) / 51) = 0{,}69$$

- Acurácia esperada:

$$((29 * 31 / 51) + (22 * 20 / 51)) / 51 = 0{,}51$$

- Kappa:

$$(0{,}69 - 0{,}51) / (1 - 0{,}51) = 0{,}37$$

		Referência	
		Classe A	Classe B
Classificador	Classe A	22	9
	Classe B	7	13

TESTES ESTATÍSTICOS

- Comparar dois ou mais algoritmos na solução de um ou mais problemas práticos.
- Utilizar uma estratégia de amostragem, p. ex., validação cruzada *k-fold*.
- A cada iteração, todos os algoritmos usam a mesma partição de treinamento e de teste para obter seus resultados e, dessa forma, a média de desempenho obtida por todos é calculada sobre os mesmos objetos.
- Mais recomendado: teste de hipóteses para a comparação dos desempenhos dos modelos em investigação.

LEITURA RECOMENDADA: DEMŠAR, Janez. Statistical comparisons of classifiers over multiple data sets. Journal of Machine learning research, v. 7, n. Jan, p. 1-30, 2006.

TESTES ESTATÍSTICOS

Testes comumente utilizados:

- Wilcoxon signed-rank;
- Friedman.

Pareados e não paramétricos.

Baseados em ranqueamentos, permitem comparar outras medidas de desempenho além das tradicionais, estabelecidas em algum tipo de erro/acerto preditivo.

COMPARANDO DOIS MODELOS

Teste recomendado: *Wilcoxon signed-rank*

1. Calculam-se inicialmente as diferenças nas medidas de desempenho dos algoritmos.
2. Os valores absolutos dessas diferenças são ranqueados (menores diferenças assumem primeiras posições e assim sucessivamente).
   - No caso de empates, atribuem-se valores médios das posições de ordenação.
3. Pelo teste, comparam-se as posições das diferenças positivas e negativas entre os algoritmos.
   - A e B → B – A: maiores valores são melhores (taxa de acerto, AUC, precisão...), então +, melhor desempenho de B, -, melhor desempenho de A.

COMPARANDO DOIS MODELOS

MODELO A	MODELO B	DIF (B-A)	DIF_ABS	POSIÇÃO
77,98	77,91	-0,07	0,07	3
72,26	72,27	0,01	0,01	1
76,95	76,97	0,02	0,02	2
77,94	76,57	-1,37	1,37	5
72,23	71,63	-0,60	0,60	4
76,90	75,48	-1,42	1,42	6
77,93	75,75	-2,18	2,18	7

Seja R+ a soma das posições (*ranks*) de conjuntos de dados em que o algoritmo B é melhor que o algoritmo A e R- a soma de posições oposta. As posições das diferenças nulas são repartidas igualmente entre as duas somas. Se há um número ímpar de diferenças nulas, uma é ignorada.

$$z = \frac{S - \frac{1}{4}N(N-1)}{\sqrt{\frac{1}{24}N(N+1)(2N+1)}}$$

S: menor das somas.

$$R+ = \sum_{d_i>0} rank(d_i) + \frac{1}{2}\sum_{d_i=0} rank(d_i)$$

$$R- = \sum_{d_i<0} rank(d_i) + \frac{1}{2}\sum_{d_i=0} rank(d_i)$$

COMPARANDO MAIS MODELOS

Teste recomendado: teste de Friedman

- Também é baseado na comparação de ranqueamentos de desempenhos.
- O valor absoluto da medida de desempenho de cada algoritmo individualmente em cada conjunto de dados é considerado para realizar o ranqueamento.
- Para cada conjunto de dados, realiza-se o ranqueamento dos algoritmos de acordo com seu desempenho (dos melhores para os piores).
  - Em caso de empates, valores médios de posição são atribuídos.

COMPARANDO MAIS MODELOS

MODELO A	MODELO B	MODELO C
77,98	77,91	75,89
72,26	72,27	74,56
76,95	76,97	77,32
77,94	76,57	76,98
72,23	71,63	72,65
76,90	75,48	75,32
77,93	75,75	76,90

MODELO A	MODELO B	MODELO C
1	2	3
3	2	1
3	2	1
1	3	2
2	3	1
1	2	3
1	3	2
1,71	2,43	1,86

COMPARANDO MAIS MODELOS

- Seja r_j^i a posição do desempenho do algoritmo j (dentre A algoritmos) no conjunto de dados i (dentre N conjuntos de dados).
- O teste de Friedman irá comparar os ranqueamentos médios R_j dos diferentes algoritmos.
- A H0 afirma que todos os algoritmos são equivalentes e que suas posições de ranqueamento são iguais.

$$F_F = \frac{(N-1)\chi_F^2}{N(A-1)\chi_F^2}, \qquad \chi_F^2 = \frac{12N}{A(A+1)}\left[\sum_j R_j^2 - \frac{A(A+1)^2}{4}\right]$$

Se a estatística calculada for maior que $F_{A-1,(A-1)(N-1)}$, rejeita-se a H0 de que todos os algoritmos têm o mesmo desempenho.

COMPARANDO MAIS MODELOS

- Se H0 for rejeitada, precisamos descobrir quais algoritmos possuem diferença de desempenho → pós-teste.
- No pós-teste, o desempenho de dois algoritmos em particular é estatisticamente diferente caso a diferença entre os seus valores médios de posição no ranqueamento seja maior ou igual ao valor da diferença crítica CD (*Critical Difference*):

$$CD = q_\alpha \sqrt{\frac{A(A+1)}{6N}}$$

COMPARANDO MAIS MODELOS

- Se todos os algoritmos estão sendo comparados entre si em pares, os valores de q_α podem ser fornecidos pela estatística de Nemenyi.
  - Se a diferença entre os ranqueamentos médios de dois algoritmos é maior que CD, então a H0 de que os algoritmos têm o mesmo desempenho é rejeitada.
- Quando a comparação é de vários algoritmos em relação a um único algoritmo (p. ex., o desempenho de várias modificações de um algoritmo é comparado ao do algoritmo base), q_α pode ser menos restritivo, pois menos comparações são realizadas.
  - A estatística de Bonferroni-Dunn pode ser empregada.

COMPARANDO MAIS MODELOS

#classifiers	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$q_{0.05}$	1.960	2.343	2.569	2.728	2.850	2.949	3.031	3.102	3.164
$q_{0.10}$	1.645	2.052	2.291	2.459	2.589	2.693	2.780	2.855	2.920

(a) Critical values for the two-tailed Nemenyi test

#classifiers	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$q_{0.05}$	1.960	2.241	2.394	2.498	2.576	2.638	2.690	2.724	2.773
$q_{0.10}$	1.645	1.960	2.128	2.241	2.326	2.394	2.450	2.498	2.539

(b) Critical values for the two-tailed Bonferroni-Dunn test; the number of classifiers include the control classifier.

COMPARANDO MAIS MODELOS

Teste de Holm: o modelo com a melhor colocação é selecionado como modelo-controle e uma comparação dois a dois dos demais modelos com o controle é realizada. A hipótese nula afirma que o modelo-controle e o segundo utilizado na comparação pareada possuem a mesma colocação média.

1. Os valores p das comparações são ordenados de forma crescente com suas hipóteses associadas. Para um dado nível de significância α, tome k como índice mínimo tal que $p_{(k)} > \frac{\alpha}{m+1-k}$, sendo m o número de comparações.
2. Conforme tomamos um novo valor p, incrementamos o valor de k.
3. Se $\mathrm{p} < p_{(k)}$, então rejeitamos a hipótese. Quando alguma hipótese não é rejeitada, o método para e as demais hipóteses não são verificadas (já considera não rejeição).

COMPARANDO MAIS MODELOS

$H_1 \rightarrow p_1 = 0{,}01$
$H_2 \rightarrow p_2 = 0{,}04$
$H_3 \rightarrow p_3 = 0{,}03$
$H_4 \rightarrow p_4 = 0{,}005$

Valores p não ajustados
$\alpha = 0{,}05$

$$p_{(k)} > \frac{\alpha}{m+1-k}$$

Se $p < p_{(k)}$, então rejeitamos a hipótese.

$$H_4 = H_{(1)}$$
$$p_4 = p_{(1)} = 0{,}005$$
$$p_{(1)} = \frac{0{,}05}{4+1-1} = 0{,}0125 \rightarrow \text{Rejeitamos}$$

$$H_1 = H_{(2)}$$
$$p_1 = p_{(2)} = 0{,}01$$
$$p_{(2)} = \frac{0{,}05}{4+1-2} = 0{,}0167 \rightarrow \text{Rejeitamos}$$

$$H_3 = H_{(3)}$$
$$p_3 = p_{(3)} = 0{,}03$$
$$p_{(2)} = \frac{0{,}05}{4+1-3} = 0{,}025 \rightarrow \text{Não rejeitamos}$$

$H_2 \rightarrow Não\ rejeitamos$

REFERÊNCIAS

- Inteligência Artificial: Uma Abordagem de Aprendizado de Máquina, por Katti Faceli, Ana Carolina Lorena, João Gama, André C. P. L. F. de Carvalho;
- Notas de aula do curso Mineração de Dados em Biologia Molecular, ministrado por André C. P. L. F. de Carvalho;
- FRIEDMAN, Jerome; HASTIE, Trevor; TIBSHIRANI, Robert. The elements of statistical learning. New York: Springer series in statistics, 2001.