

# Aprendizado de Máquina com o Pacote `tidymodels`

XVII Escola de Modelos de Regressão

---

Marcus Nunes

29 e 30 de Novembro de 2021

Departamento de Estatística - UFRN

# Roteiro

---

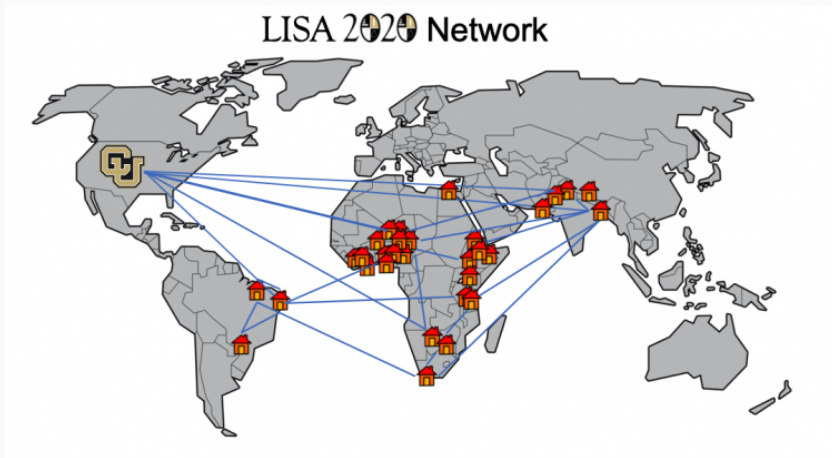
1. Apresentação
2. Motivação
3. Cuidados com a Coleta e Análise de Dados
4. Análise Exploratória, Inferência, Predição
5. Exemplos na UFRN
6. Conclusões

# Apresentação

---

# Apresentação

- Marcus Nunes, Professor Adjunto no Departamento de Estatística
- PhD em Estatística pela Pennsylvania State University (2013)
- Interessado em Educação Estatística, Aprendizado de Máquina e Projetos de Colaboração Estatística
- Site pessoal: `marcusnunes.me`
- Curso de big data: `introbigdata.org`
- Email: `marcus@marcusnunes.me`



link

## Pré-Requisitos

---

# Pré-Requisitos

- Familiaridade com a Linguagem R
- Análise de Componentes Principais
- `tidyverse` (pacotes como `ggplot2` e `dplyr` são suficientes)
- Modelos de regressão
- Material do curso disponível em <https://github.com/mnunes/emr-2021>



# Validação Cruzada

---

# Conjuntos de Treino e Teste

- Os métodos que veremos neste minicurso são computacionalmente complexos
- Eles envolvem passos extras que normalmente não são utilizados em métodos paramétricos de ajuste de modelos
- Os dois conceitos principais que nos permitirão avaliar se nossos modelos foram bem ajustados são
  - Divisão dos dados em conjuntos de treino e teste
  - Validação cruzada

# Conjuntos de Treino e Teste

- Utilizaremos este conceito em algoritmos para classificação e predição de dados
- Estes algoritmos são ferramentas importantes para descobrir padrões
- Eles permitem que generalizemos comportamentos presentes nos dados

# Conjuntos de Treino e Teste

- Classificação ou Regressão?
- A resposta é categórica ou numérica?
- Resposta categorizada: classificação
- Resposta numérica: regressão

# Conjuntos de Treino e Teste

- Aprendizagem Supervisionada: existe um conjunto de treino no qual o algoritmo se baseia para encontrar as relações entre os dados, com os valores da variável resposta bem definidos
- Aprendizagem Não-Supervisionada: não existe um conjunto de treino no qual o algoritmo se baseia para encontrar as relações entre os dados, sem os valores da variável resposta bem definidos

# Conjuntos de Treino e Teste

- Ao aplicarmos um algoritmo de aprendizagem supervisionada, precisamos ser capazes de avaliar o quão bom (ou ruim) é o nosso método
- A maneira mais comum de fazer isto é através de divisão dos dados originais em dois conjuntos:
  - Conjunto de treino
  - Conjunto de teste
- ## Conjuntos de Treino e Teste
- O **conjunto de treino** é aquele no qual aplicamos o algoritmo, informando a resposta correta para o algoritmo
- Em geral, utilizamos de 50% a 80% dos dados originais no conjunto de treino
- O algoritmo, então, se ajusta de modo a prever com a maior exatidão possível os outputs que nos interessam

# Conjuntos de Treino e Teste

- O **conjunto de teste** é aquele que utilizamos para prever resultados e verificar como o algoritmo se comportaria em dados reais
- Em geral, utilizamos de 50% a 20% dos dados originais no conjunto de teste (o percentual de dados deste conjunto depende do percentual utilizado no conjunto de treino, pois um é complementar do outro)
- Assim, podemos avaliar o quão bem o algoritmo está conseguindo prever novos resultados que não estavam no conjunto original
- É como se simulássemos a coleta de novos dados

# Métricas de Avaliação

- Para avaliar a eficiência do algoritmo de classificação, utilizamos medidas como sensibilidade e especificidade
- Sensibilidade é a razão entre o número de positivos encontrados pelo modelo pelo total de positivos nos dados
- Especificidade é a razão entre o número de negativos encontrados pelo modelo pelo total de negativos nos dados



# Métricas de Avaliação

		Referência	
		Positivo	Negativo
Predição	Positivo	$a$	$b$
	Negativo	$c$	$d$

- Acurácia:  $p_0 = \frac{a+d}{a+b+c+d}$
- Sensitividade:  $\frac{a}{a+c}$
- Especificidade:  $\frac{d}{b+d}$
- Curva ROC: Sensitividade (Verdadeiros Positivos) vs. 1-Especificidade (Falsos Positivos)

# Métricas de Avaliação

		Referência	
		Positivo	Negativo
Predição	Positivo	$a$	$b$
	Negativo	$c$	$d$

- Kappa:

$$p_{\text{Sim}} = \frac{a + b}{a + b + c + d} \times \frac{a + c}{a + b + c + d}$$

$$p_{\text{N\~ao}} = \frac{c + d}{a + b + c + d} \times \frac{b + d}{a + b + c + d}$$

$$p_e = p_{\text{Sim}} + p_{\text{N\~ao}}$$

$$\kappa = \frac{p_0 - p_e}{1 - p_e}$$

- Para avaliar a eficiência do algoritmo de regressão, utilizamos medidas como erro quadrático médio, erro absoluto médio e coeficiente de determinação
- Suponha que temos uma amostra de tamanho  $n$  e observações  $y_i, i = 1, \dots, n$
- Suponha que possuímos uma forma de estimar os valores de  $y_i$  e chamamos estas estimações de  $\hat{y}_i$

- A fórmula do erro quadrático médio é dada por

$$\text{EQM} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$

Normalmente, a estatística que se usa é a raiz do erro quadrático médio, dada por

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}$$

- O erro absoluto médio é dado por

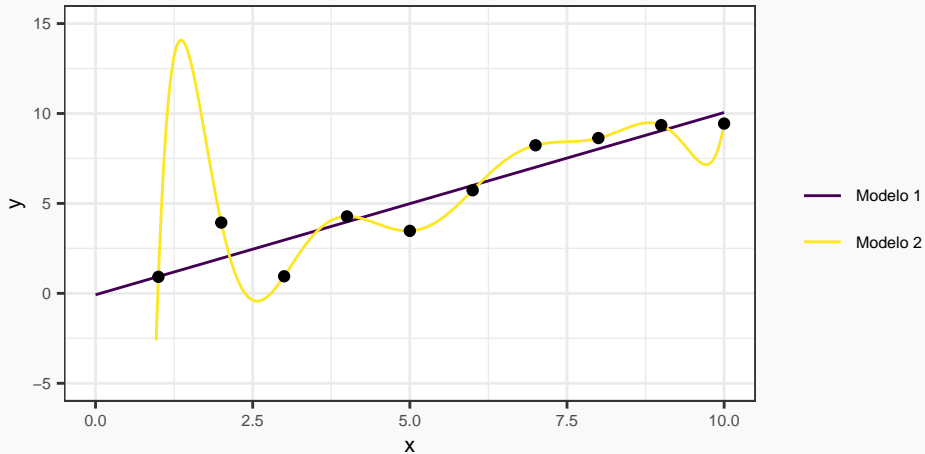
$$\text{EAM} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|$$

- Podemos calcular o coeficiente de determinação como

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}$$

- O ideal é que as medidas de ajuste do modelo sejam similares nos conjuntos de treino e teste
- Fazemos isso para verificar que não houve sobreajuste (*overfitting*) nos dados
- Se o modelo está sobreajustado, isto significa que ele se ajusta muito bem aos dados originais, mas não é um modelo que é generalizável

# Métricas de Avaliação



- Dividir os dados apenas uma vez em treino e teste pode, ainda assim, gerar vícios
- Então por que não realizar esta divisão mais de uma vez?
- Desta forma, a ocorrência de eventos anômalos fica diluída



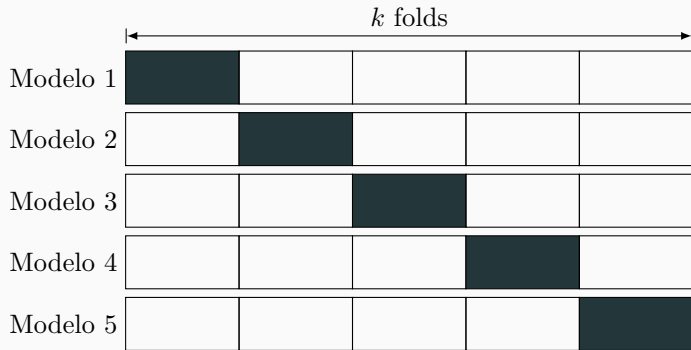
# Validação Cruzada

- Validação Cruzada é um método de reamostragem (*resampling*)
- Baseia-se na ideia de tomar diversas amostras aleatórias da mesma população
- Estas amostras aleatórias são todas tomadas a partir de uma amostra que já obtivemos

# Validação Cruzada

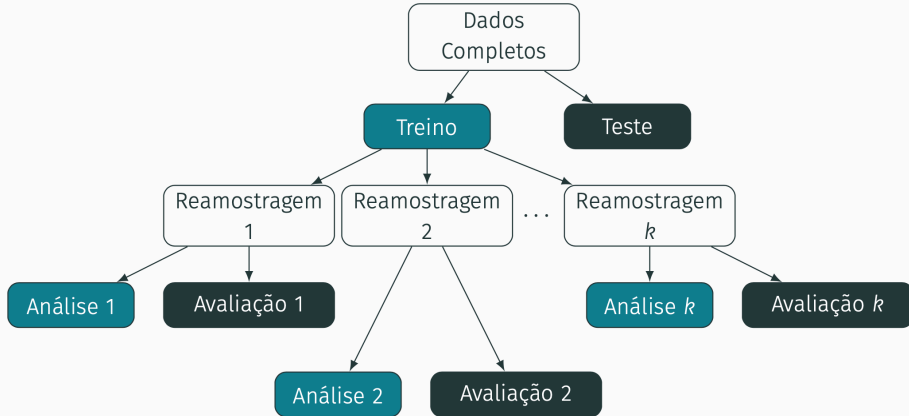
- O procedimento geral para realizar a validação cruzada é o seguinte:
- Crie  $k$  partições aleatórias do conjunto de dados com o mesmo tamanho aproximado
- Para  $j = 1, \dots, k$ , faça
  1. Treine o modelo em todos os blocos, exceto o bloco  $j$
  2. Teste o modelo no bloco  $j$
  3. Estime o erro em cada bloco  $j$
- Calcule a média dos erros

# Validação Cruzada



- A divisão dos dados em treino e teste ocorre em toda análise que formos realizar
- Encontramos o melhor modelo no conjunto de treino através da validação cruzada
- Verificamos o resultado obtido no conjunto de teste
- Ou seja, os dois métodos se complementam

# Processo Completo



tidymodels

---

# tidymodels

- O pacote **tidymodels** irá ajudar a organizar nosso fluxo de trabalho
  - De modo geral, cada ferramenta que veremos daqui em diante está implementada em um pacote diferente
  - Com o **tidymodels** podemos usar uma sintaxe similar para todas essas ferramentas, focando menos em aprender como cada uma é utilizada, e nos dedicando mais a interpretar os resultados obtidos
- ## ## tidyverse
- O **tidymodels** não é um pacote em si
  - Assim como o **tidyverse**, o **tidymodels** é uma coleção de pacotes com aplicações específicas
  - Os dois pacotes partem dos mesmos princípios básicos para criarem fluxos de trabalho consistentes

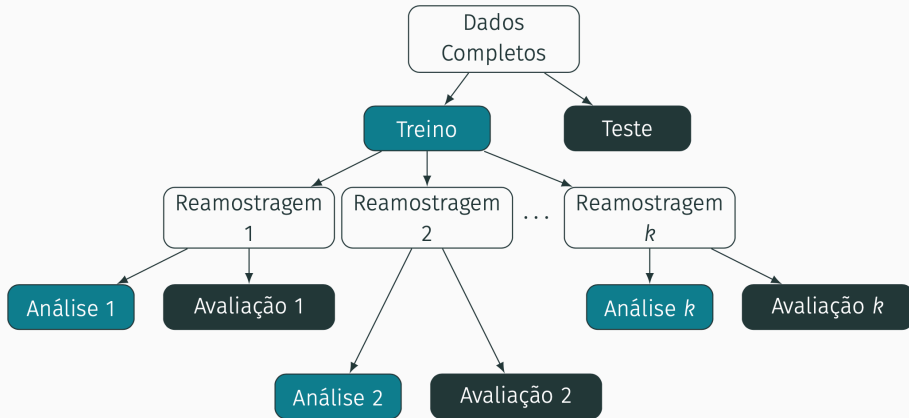
Os princípios *tidy* são os seguintes:

1. Reutilizar estruturas de dados existentes
2. Criar funções simples que utilizam *pipe* (`%>%`)
3. Adotar programação funcional
4. Feito para humanos



Os principais pacotes disponíveis dentro do `tidymodels` são:

- `rsample`: tipos diferentes de reamostragem
- `recipes`: transformações para pré-processamento de dados
- `parsnip`: uma interface comum para modelagem
- `yardstick`: medidas de desempenho do modelo



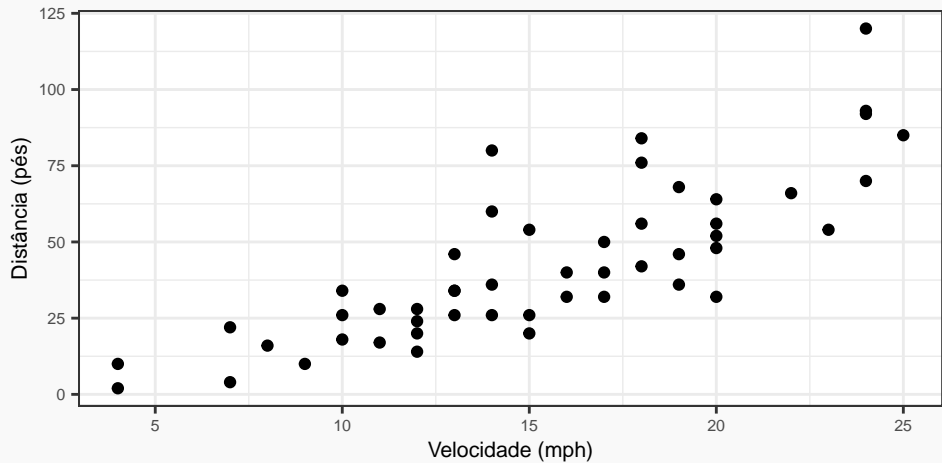
# Aplicação Tradicional

- A seguir veremos como ajustar um modelo de regressão linear simples a um conjunto de dados
- É importante entendermos os passos do ajuste de um modelo que já conhecemos para depois expandirmos o método para outros tipos de modelagem
- Nossa regressão será feita no conjunto de dados `cars`
- Ele possui apenas duas colunas
  - `speed`: velocidade do carro (milhas por hora)
  - `dist`: distância que o carro levou para parar completamente (pés)

```
library(tidymodels)
theme_set(theme_bw())

ggplot(cars, aes(x = speed, y = dist)) +
  geom_point() +
  labs(x = "Velocidade (mph)", y = "Distância (pés)")
```

# Aplicação Tradicional



```
# determinacao do software
```

```
cars_lm <-  
  linear_reg() %>%  
  set_engine("lm")
```

```
# ajuste do modelo
```

```
cars_lm_fit <-  
  cars_lm %>%  
  fit(dist ~ speed,  
      data = cars)
```

## Aplicação Tradicional

```
# resultados
```

```
cars_lm_fit
```

```
## parsnip model object
```

```
##
```

```
## Fit time: 1ms
```

```
##
```

```
## Call:
```

```
## stats::lm(formula = dist ~ speed, data = data)
```

```
##
```

```
## Coefficients:
```

```
## (Intercept)          speed
```

```
# resultados
```

```
tidy(cars_lm_fit)
```

```
## # A tibble: 2 x 5
```

##	term	estimate	std.error	statistic	p.value
##	<chr>	<dbl>	<dbl>	<dbl>	<dbl>
## 1	(Intercept)	-17.6	6.76	-2.60	1.23e- 2
## 2	speed	3.93	0.416	9.46	1.49e-12



## Aplicação Treino/Teste

```
# semente aleatoria
```

```
set.seed(555)
```

```
# 75% dos dados como treino
```

```
cars_split <- initial_split(cars, prop = .75)
```

```
cars_split
```

```
## <Analysis/Assess/Total>
```

```
## <37/13/50>
```

## Aplicação Treino/Teste

```
# criar os conjuntos de dados de treino e teste
```

```
cars_treino <- training(cars_split)  
nrow(cars_treino)/nrow(cars)
```

```
## [1] 0.74
```

```
cars_teste <- testing(cars_split)  
nrow(cars_teste)/nrow(cars)
```

```
## [1] 0.26
```

## Aplicação Treino/Teste

```
# receita
```

```
cars_rec <-  
  recipe(dist ~ speed,  
          data = cars_treino)
```

```
cars_rec
```

```
## Recipe
```

```
##
```

```
## Inputs:
```

```
##
```

```
##          role #variables
```

## Aplicação Treino/Teste

```
# modelo
```

```
cars_lm <-  
  linear_reg() %>%  
  set_engine("lm")
```

```
cars_lm
```

```
## Linear Regression Model Specification (regression)
```

```
##
```

```
## Computational engine: lm
```

## Aplicação Treino/Teste

```
# criar workflow
```

```
cars_wflow <-  
  workflow() %>%  
  add_recipe(cars_rec) %>%  
  add_model(cars_lm)
```

```
# ajuste do modelo
```

```
cars_lm_fit_treino <- fit(cars_wflow, cars_treino)
```

## Aplicação Treino/Teste

```
tidy(cars_lm_fit_treino)
```

```
## # A tibble: 2 x 5
```

##	term	estimate	std.error	statistic	p.value
##	<chr>	<dbl>	<dbl>	<dbl>	<dbl>
## 1	(Intercept)	-17.6	7.70	-2.28	2.86e- 2
## 2	speed	3.99	0.465	8.58	3.96e-10

```
tidy(cars_lm_fit)
```

```
## # A tibble: 2 x 5
```

##	term	estimate	std.error	statistic	p.value
##	<chr>	<dbl>	<dbl>	<dbl>	<dbl>
## 1	(Intercept)	17.6	6.76	2.60	1.83e- 2

## Aplicação Validação Cruzada

```
# semente aleatoria
```

```
set.seed(321)
```

```
# divisao dos dados
```

```
cars_treino_cv <- vfold_cv(cars_treino, v = 5)
```

## Aplicação Validação Cruzada

```
cars_treino_cv
```

```
## # 5-fold cross-validation
```

```
## # A tibble: 5 x 2
```

```
##   splits      id
```

```
##   <list>      <chr>
```

```
## 1 <split [29/8]> Fold1
```

```
## 2 <split [29/8]> Fold2
```

```
## 3 <split [30/7]> Fold3
```

```
## 4 <split [30/7]> Fold4
```

```
## 5 <split [30/7]> Fold5
```



```
# modelo ajustado com validacao cruzada
```

```
cars_lm_fit_cv <- fit_resamples(cars_wflow, cars_treino_cv)
```

## Aplicação Validação Cruzada

```
cars_lm_fit_cv
```

```
## # Resampling results
```

```
## # 5-fold cross-validation
```

```
## # A tibble: 5 x 4
```

##	splits	id	.metrics	.notes
##	<list>	<chr>	<list>	<list>
## 1	<split [29/8]>	Fold1	<tibble [2 x 4]>	<tibble [0 x 1]>
## 2	<split [29/8]>	Fold2	<tibble [2 x 4]>	<tibble [0 x 1]>
## 3	<split [30/7]>	Fold3	<tibble [2 x 4]>	<tibble [0 x 1]>
## 4	<split [30/7]>	Fold4	<tibble [2 x 4]>	<tibble [0 x 1]>
## 5	<split [30/7]>	Fold5	<tibble [2 x 4]>	<tibble [0 x 1]>

## Aplicação Validação Cruzada

```
# resultados
```

```
collect_metrics(cars_lm_fit_cv)
```

```
## # A tibble: 2 x 6
```

```
##   .metric .estimator   mean     n std_err .config
```

```
##   <chr>   <chr>       <dbl> <int>   <dbl> <chr>
```

```
## 1 rmse    standard   15.0      5    2.13 Preprocessor1_Model1
```

```
## 2 rsq     standard    0.644     5    0.129 Preprocessor1_Model1
```

```
sqrt(mean((predict(cars_lm_fit$fit) - cars$dist)^2))
```

```
## [1] 15.06886
```

```
# resultados no conjunto de teste
```

```
resultado <-  
  cars_teste %>%  
  bind_cols(predict(cars_lm_fit_treino, cars_teste) %>%  
             rename(predicao_lm = .pred))
```

## Aplicação Validação Cruzada

```
# resultado final
```

```
metrics(resultado,  
  truth = dist,  
  estimate = predicao_lm)
```

```
## # A tibble: 3 x 3
```

```
##   .metric .estimator .estimate
```

```
##   <chr>    <chr>         <dbl>
```

```
## 1 rmse     standard      15.3
```

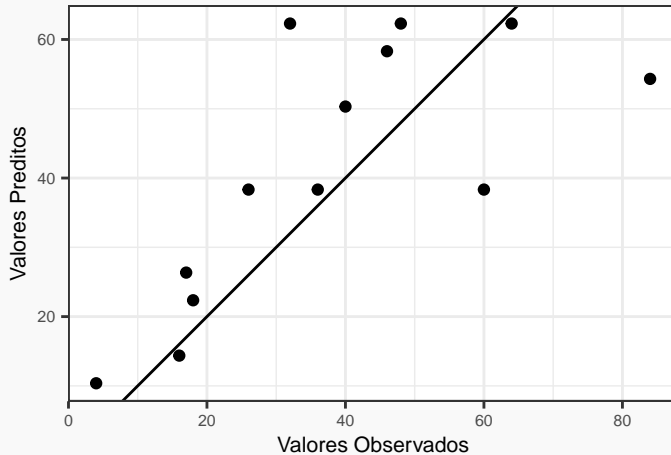
```
## 2 rsq      standard       0.538
```

```
## 3 mae      standard      12.1
```

```
# grafico final
```

```
ggplot(resultado, aes(x = dist, y = predicao_lm)) +  
  geom_point() +  
  labs(x = "Valores Observados", y = "Valores Preditos") +  
  geom_abline(intercept = 0, slope = 1) +  
  coord_fixed()
```

# Aplicação Validação Cruzada



# Exercícios

---



# Exercícios

O conjunto de dados `mpg` faz parte do pacote `ggplot2`. Ele possui informações a respeito de carros vendidos no mercado norte-americano. As variáveis são:

- `manufacturer`: fabricante
- `model`: modelo do carro
- `displ`: tamanho do motor em litros
- `year`: ano de fabricação
- `cyl`: número de cilindros
- `trans`: tipo de transmissão
- `drv`: tipo de tração
- `cty`: consumo na cidade em milhas por galão
- `hwy`: consumo na estrada em milhas por galão
- `fl`: tipo de combustível
- `class`: tipo de automóvel

# Exercícios

1. Crie um novo objeto chamado `mpg2` com apenas as variáveis numéricas presentes no conjunto de dados
2. Encontre a variável com a maior correlação negativa com a variável `hwy`. Visualize essa relação em um gráfico de dispersão. Intuitivamente, a correlação entre estas variáveis faz sentido? Explique.
3. Crie conjuntos de treinamento e teste com o objeto `mpg2`. Reserve 80% das observações para o conjunto de treinamento.
4. Utilize a validação cruzada com 5 grupos para ajustar um modelo de regressão linear simples. Utilize `hwy` como variável resposta e a variável encontrada na pergunta 2 como preditora.

5. Verifique se o resultado do ajuste ficou aceitável, comparando os RMSE do modelo nos conjuntos de treinamento e teste.
6. Ajuste uma regressão linear múltipla neste conjunto de dados. Mantenha `hwy` como variável resposta e adicione as outras variáveis numéricas como variáveis preditoras. Padronize as variáveis preditoras no conjunto de teste com as funções `step_center`, `step_scale`, `prep` e `juice` do pacote `tidymodels`.
7. Como ficou o novo ajuste? Decida baseando-se em medidas relevantes nos conjuntos de treinamento e teste (transforme os dados do conjunto teste com a função `bake`) e em gráficos de diagnóstico.

# Random Forest

---

# Random Forest

- É um algoritmo derivado das árvores de classificação e regressão
- Foi criado por Tin Kam Ho em 1995 e aperfeiçoado por Leo Breiman em 2001
- Surgiu em um artigo discutindo duas culturas para análise de dados: uma derivada da estatística, outra derivada da computação
- Se tornou muito popular popular nos últimos anos, servindo como base para algoritmos mais avançados

# Random Forest

- É muito utilizado tanto em aplicações de classificação quanto regressão
- Pode lidar com problemas do tipo “small  $n$  large  $p$ ” - problemas em que temos um tamanho amostral  $n$  muito pequeno se comparado ao número de parâmetros  $p$  do modelo
- Não é utilizada apenas para predição, podendo ser aplicada em problemas de seleção de variáveis

# Random Forest

- É uma combinação de várias árvores de regressão e classificação
- Parte do princípio que previsões feitas a partir da combinação de modelos são melhores do que de um modelo apenas
- Os erros dos estimadores são combinados e diminuídos, gerando assim um resultado com menor variância
- Além disso, por ser baseado em árvores, transformações monótonas nas variáveis preditoras não influenciam no desempenho dos algoritmos

- É uma sigla para **B**ootstrap **agg**regating
- Combina o resultados das classificações de conjuntos de treinamento gerados aleatoriamente
- Melhora a estabilidade e a acurácia dos algoritmos, além de reduzir a variância e evitar o sobreajuste



- Bootstrap é uma técnica de reamostragem com reposição utilizada para estimar algum parâmetro de uma população
- Assuma que dispomos de uma amostra  $X_1, X_2, \dots, X_n$  e queremos alguma informação sobre o parâmetro  $\theta$  da variável aleatória  $X$
- São tomadas  $B$  reamostras  $X_1^*, X_2^*, \dots, X_n^*$ , com reposição, de tamanho  $n$
- Calculamos a estatística de interesse  $\hat{\theta}^*$  para cada reamostra
- Assim, conseguimos construir a distribuição empírica do estimador  $\hat{\theta}$

# Bagging

- Gere  $B$  subamostras com reposição a partir do conjunto de treinamento
- Treine um modelo CART em cada nova amostra
- Classificação: a classe é definida pela maioria dos votos
- Regressão: média dos valores preditos
- A estabilidade e a acurácia são melhoradas, além de reduzir a variância e evitar o sobreajuste

# Algoritmo

- Random forest é uma coleção de várias árvores de decisão decorrelacionadas
- Algoritmos de decorrelação são técnicas usadas para reduzir autocorrelação
- Random forest (floresta aleatória) possui este nome porque é definido através do uso de várias árvores de classificação e regressão## Algoritmo
- Suponha que temos uma matriz  $S$  composta de  $n$  amostras de treinamento, com 3 variáveis preditoras ( $X$ ,  $Y$  e  $Z$ )

$$S = \begin{bmatrix} X_1 & Y_1 & Z_1 & C_1 \\ X_2 & Y_2 & Z_2 & C_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ X_n & Y_n & Z_n & C_n \end{bmatrix}$$

# Algoritmo

- A ideia é criar  $B$  subamostras aleatórias  $S_1, S_2, S_3, \dots, S_B$  da matriz  $S$ , todas de tamanho  $n$ , com reposição

$$S_1 = \begin{bmatrix} X_5 & Y_5 & Z_5 & C_5 \\ X_8 & Y_8 & Z_8 & C_8 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ X_{33} & Y_{33} & Z_{33} & C_{33} \end{bmatrix}$$

$$S_2 = \begin{bmatrix} X_3 & Y_3 & Z_3 & C_3 \\ X_{20} & Y_{20} & Z_{20} & C_{20} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ X_6 & Y_6 & Z_6 & C_6 \end{bmatrix}$$

$$S_3 = \begin{bmatrix} X_9 & C_9 \\ X_{38} & C_8 \\ \vdots & \vdots \\ X_{45} & C_{45} \end{bmatrix}$$

$$\vdots$$

$$S_B = \begin{bmatrix} Y_1 & Z_1 & C_1 \\ Y_{12} & Z_{12} & C_{12} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ Y_{97} & Z_{97} & C_{97} \end{bmatrix}$$

- Ajustamos, a partir de cada uma das subamostras criadas, um modelo CART diferente
- Cada um desses modelos terá um número aleatório de variáveis preditoras
- Ou seja,  $S_1$  terá um modelo próprio com  $k_1$  variáveis preditoras,  $S_2$  terá outro modelo próprio com  $k_2$  variáveis preditoras e assim por diante
- Os  $k_i, i = 1, \dots, B$  não serão necessariamente iguais

- Ao fim, teremos  $B$  CARTs diferentes
- Portanto, teremos uma **floresta** com  $B$  árvores
- A partir destes resultados, calculamos a média das árvores estimadas no caso de regressão ou contamos a maioria de votos, no caso de classificação

- De maneira mais formal, temos o seguinte algoritmo:
  1. Tome  $B$  subconjuntos de seu conjunto de dados originais, com reposição
  2. Ajuste uma CART  $\hat{f}_i$  a cada um destes subconjuntos, com um número aleatório de variáveis preditoras
  3. Encontre uma estimativa para a random forest fazendo

$$\hat{f} = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^B \hat{f}_i$$



- É possível encontrar a importância de cada variável ao rodarmos uma random forest
- Durante o processo de ajuste do modelo, o erro de ajuste para cada nó é medido e registrado
- Para medir a importância da  $j$ -ésima variável, basta permutar os seus valores dentro de cada iteração
- Assim, temos os valores dos erros de ajuste dos conjuntos de dados normais e perturbados
- Desta forma medimos a importância de cada variável

- Cada vez uma divisão ocorre para a variável  $j$ , o nível de impureza para os dois nós descendentes é menor do que o do nó original
- Somando os índices de Gini para cada variável sobre todas as árvores, obtemos uma medida da importância da variável que é consistente com o do teste de permutação descrito anteriormente, só que mais rápido

# Importância de Gini

- O índice de pureza Gini é definido como

$$G = \sum_{i=1}^{n_c} p_i(1 - p_i)$$

em que  $n_c$  é o número de classes na variável  $j$  e  $p_i$  é a proporção desta classe (note que este  $G$  é calculado para cada árvore na floresta)

- A partir disto, a importância é calculada como

$$I = G_{\text{pai}} - G_{\text{filho 1}} - G_{\text{filho 2}}$$

- Por fim, é calculada a média de todos os nós para todas as árvores

- Será que todas as variáveis (*mtry*) são importantes para o ajuste do modelo?
- Qual a melhor profundidade (*levels*) para a árvore?
- Estas e outras perguntas podem ser respondidas através do tunning de hiperparâmetros

- Valores como *mtry*, *levels* e outros, que ajudam na procura do melhor modelo para os nossos dados, são chamados de hiperparâmetros
- Queremos encontrar a melhor combinação dos hiperparâmetros em cada análise realizada
- Ou seja, queremos maximizar o valor da acurácia (ou de alguma outra medida) considerando diferentes valores para estes hiperparâmetros

- Utilizaremos uma grade de procura para isso
- Iremos definir valores específicos para cada hiperparâmetro e ajustaremos modelos para todas as combinações possíveis
- Esse processo é computacionalmente intenso e seu tempo de execução dependerá diretamente de características como a quantidade de combinações de hiperparâmetros, o tamanho do conjunto de dados e a complexidade da validação cruzada, dentre outros

## Exemplo

---

## Exemplo

- O conjunto de dados **penguins** faz parte do pacote **palmerpenguins**
- Ele possui 344 observações para 8 variáveis
- Nosso objetivo é classificar as espécies de pinguins baseando-nos nas outras variáveis do conjunto de dados ## Exemplo

```
# pacotes carregados
```

```
library(tidymodels)
library(onehot)
library(palmerpenguins)
library(GGally)
library(ggfortify)
library(vip)
```



## Exemplo

```
# checagem dos dados
```

```
glimpse(penguins)
```

```
## Rows: 344
```

```
## Columns: 8
```

```
## $ species      <fct> Adelie, Adelie, Adelie, Adelie, Adelie,
```

```
## $ island       <fct> Torgersen, Torgersen, Torgersen, Torgersen,
```

```
## $ bill_length_mm <dbl> 39.1, 39.5, 40.3, NA, 36.7, 39.3, 38.9,
```

```
## $ bill_depth_mm  <dbl> 18.7, 17.4, 18.0, NA, 19.3, 20.6, 17.8,
```

```
## $ flipper_length_mm <int> 181, 186, 195, NA, 193, 190, 181, 195, 1
```

```
## $ body_mass_g    <int> 3750, 3800, 3250, NA, 3450, 3650, 3625,
```

```
## $ sex            <fct> male, female, female, NA, female, male,
```



## Exemplo

```
# criacao de variaveis dummy
```

```
pp <-
```

```
  penguins %>%
```

```
  select(!where(is.numeric)) %>%
```

```
  select(-species) %>%
```

```
  onehot() %>%
```

```
  predict(penguins) %>%
```

```
  as.data.frame() %>%
```

```
  select(i_Biscoe      = `island=Biscoe`,
```

```
         i_Dream       = `island=Dream`,
```

```
         i_Torgersen   = `island=Torgersen`,
```

```
         s_fem         = `sex=female`,
```

## Exemplo

```
pp <-  
  penguins %>%  
  select(where(is.numeric), species, -year) %>%  
  bind_cols(pp) %>%  
  relocate(species) %>%  
  na.omit()
```

## Exemplo

```
# treino/teste
```

```
penguins %>%  
  group_by(species) %>%  
  count()
```

```
## # A tibble: 3 x 2  
## # Groups:   species [3]  
##   species      n  
##   <fct>    <int>  
## 1 Adelie    152  
## 2 Chinstrap  68  
## 3 Gentoo    124
```

## Exemplo

```
# 75% dos dados como treino
```

```
set.seed(1232)
```

```
pp_split <- initial_split(pp, prop = .75, strata = species)
```

```
# criar os conjuntos de dados de treino e teste
```

```
pp_treino <- training(pp_split)
```

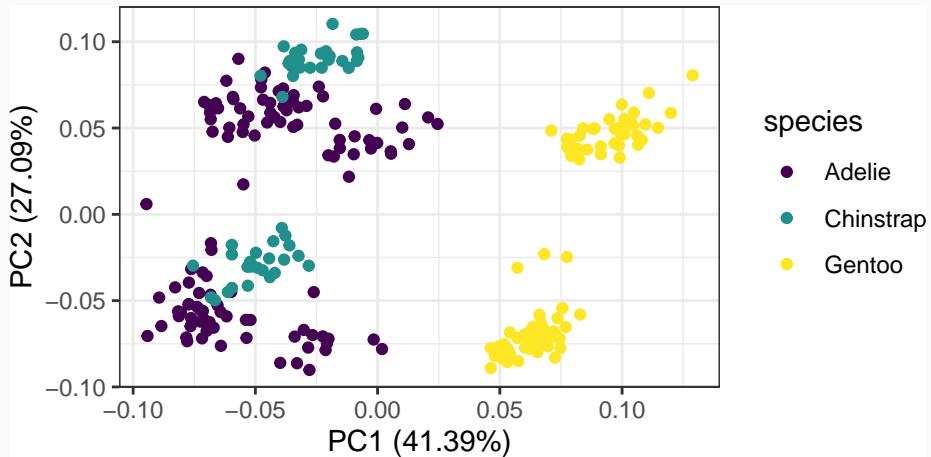
```
pp_teste <- testing(pp_split)
```

## Exemplo

*# eda*

```
autoplot(prcomp(pp_treino %>% select(-species),  
            center = TRUE, scale. = TRUE),  
         data = pp_treino,  
         colour = "species") +  
scale_colour_viridis_d()
```

## Exemplo

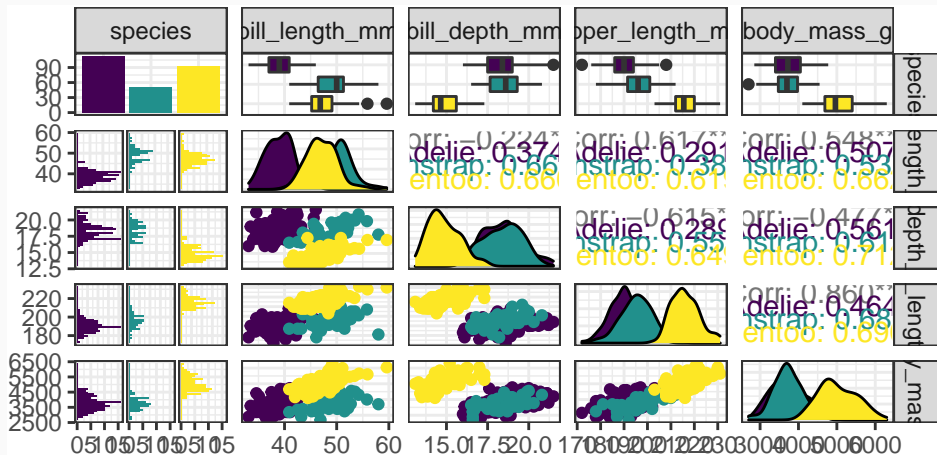




## Exemplo

```
ggpairs(pp_treino %>% select(species,  
                             bill_length_mm,  
                             bill_depth_mm,  
                             flipper_length_mm,  
                             body_mass_g),  
        aes(colour = species)) +  
scale_colour_viridis_d() +  
scale_fill_viridis_d()
```

# Exemplo



## Exemplo

```
# pre-processamento
```

```
pp_rec <-
```

```
  recipe(species ~ .,  
          data = pp_treino) %>%
```

```
# remover observacoes de modo que todos os niveis de species
```

```
# fiquem com o mesmo numero de observacoes
```

```
themis::step_downsample(species) %>%
```

```
# center/scale
```

```
step_center(-species) %>%
```

```
step_scale(-species) %>%
```

```
# funcao para aplicar a transformacao aos dados
```

```
prep()
```

## Exemplo

```
# aplicar a transformacao aos dados
```

```
pp_treino_t <- juice(pp_rec)
```

```
# preparar o conjunto de teste
```

```
pp_teste_t <- bake(pp_rec,  
                   new_data = pp_teste)
```

## Exemplo

```
#####  
# definicao do tuning
```

```
pp_rf_tune <-  
  rand_forest(  
    mtry = tune(),  
    trees = 1000,  
    min_n = tune()  
  ) %>%  
  set_mode("classification") %>%  
  set_engine("ranger", importance = "impurity")
```

## Exemplo

```
# grid de procura
```

```
pp_rf_grid <- grid_regular(mtry(range(1, 9)),  
                           min_n(range(10, 50)),  
                           levels = c(9, 5))
```

## Exemplo

```
# workflow
```

```
pp_rf_tune_wflow <-  
  workflow() %>%  
  add_model(pp_rf_tune) %>%  
  add_formula(species ~ .)
```

## Exemplo

```
# definicao da validacao cruzada
```

```
set.seed(2389)
```

```
pp_treino_cv <- vfold_cv(pp_treino_t, v = 7)
```



## Exemplo

```
# avaliacao do modelo

pp_rf_fit_tune <-
  pp_rf_tune_wflow %>%
  tune_grid(
    resamples = pp_treino_cv,
    grid = pp_rf_grid
  )
```

## Exemplo

```
# resultados
```

```
collect_metrics(pp_rf_fit_tune)
```

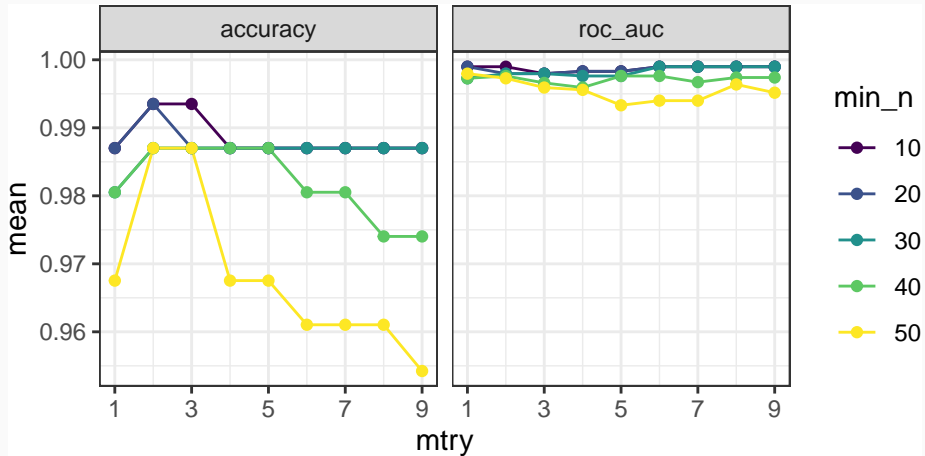
```
## # A tibble: 90 x 8
```

##	mtry	min_n	.metric	.estimator	mean	n	std_err	.config
##	<int>	<int>	<chr>	<chr>	<dbl>	<int>	<dbl>	<chr>
##	1	1	10	accuracy	multiclass	0.987	7 0.0130	Preprocesso
##	2	1	10	roc_auc	hand_till	0.999	7 0.00102	Preprocesso
##	3	2	10	accuracy	multiclass	0.994	7 0.00649	Preprocesso
##	4	2	10	roc_auc	hand_till	0.999	7 0.00102	Preprocesso
##	5	3	10	accuracy	multiclass	0.994	7 0.00649	Preprocesso
##	6	3	10	roc_auc	hand_till	0.998	7 0.00204	Preprocesso

## Exemplo

```
pp_rf_fit_tune %>%  
  collect_metrics() %>%  
  mutate(min_n = factor(min_n)) %>%  
  ggplot(., aes(x = mtry, y = mean, colour = min_n, group = min_n)) +  
  geom_line() +  
  geom_point() +  
  facet_grid(~ .metric) +  
  scale_x_continuous(breaks = seq(1, 9, 2)) +  
  scale_colour_viridis_d()
```

## Exemplo



## Exemplo

```
# melhores modelos
```

```
pp_rf_fit_tune %>%  
  show_best("roc_auc")
```

```
## # A tibble: 5 x 8
```

```
##   mtry min_n .metric .estimator  mean     n std_err .config  
##   <int> <int> <chr>    <chr>    <dbl> <int>   <dbl> <chr>  
## 1     1     10 roc_auc hand_till  0.999     7 0.00102 Preprocessor1  
## 2     2     10 roc_auc hand_till  0.999     7 0.00102 Preprocessor1  
## 3     6     10 roc_auc hand_till  0.999     7 0.00102 Preprocessor1  
## 4     7     10 roc_auc hand_till  0.999     7 0.00102 Preprocessor1  
## 5     8     10 roc_auc hand_till  0.999     7 0.00102 Preprocessor1
```

## Exemplo

```
pp_rf_fit_tune %>%  
  show_best("accuracy")
```

```
## # A tibble: 5 x 8
```

##	mtry	min_n	.metric	.estimator	mean	n	std_err	.config
##	<int>	<int>	<chr>	<chr>	<dbl>	<int>	<dbl>	<chr>
## 1	2	10	accuracy	multiclass	0.994	7	0.00649	Preprocessor
## 2	3	10	accuracy	multiclass	0.994	7	0.00649	Preprocessor
## 3	2	20	accuracy	multiclass	0.994	7	0.00649	Preprocessor
## 4	1	10	accuracy	multiclass	0.987	7	0.0130	Preprocessor
## 5	4	10	accuracy	multiclass	0.987	7	0.00838	Preprocessor

## Exemplo

```
# melhor modelo
```

```
pp_rf_best <-  
  pp_rf_fit_tune %>%  
  select_best("accuracy")
```

```
pp_rf_final <-  
  pp_rf_tune_wflow %>%  
  finalize_workflow(pp_rf_best)
```

```
pp_rf_final <- fit(pp_rf_final,  
                  pp_treino_t)
```

## Exemplo

```
# resultados no conjunto de teste
```

```
resultado_rf <-  
  pp_teste_t %>%  
  bind_cols(predict(pp_rf_final, pp_teste_t) %>%  
    rename(predicao_rf = .pred_class))
```



## Exemplo

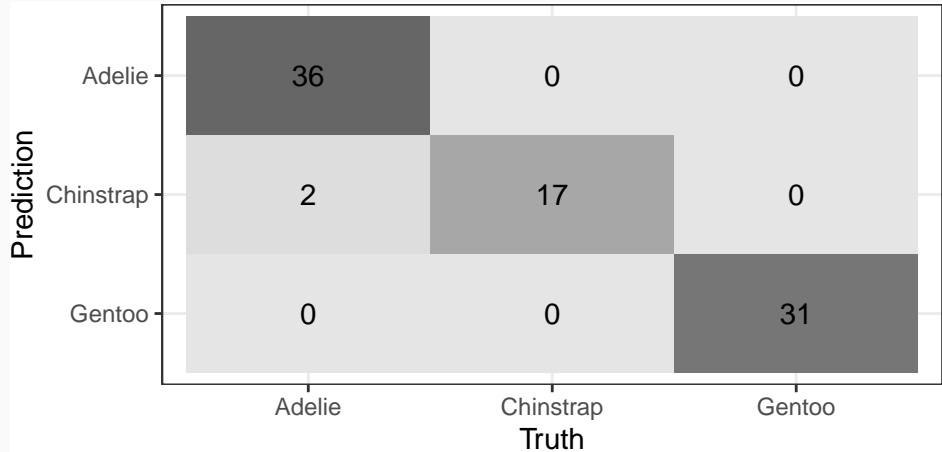
```
metrics(resultado_rf,  
        truth = species,  
        estimate = predicao_rf,  
        options = "roc")
```

```
## # A tibble: 2 x 3  
##   .metric .estimator .estimate  
##   <chr>   <chr>      <dbl>  
## 1 accuracy multiclass    0.977  
## 2 kap      multiclass    0.964
```

## Exemplo

```
conf_mat(resultado_rf,  
          truth = species,  
          estimate = predicao_rf) %>%  
  autoplot(type = "heatmap")
```

## Exemplo



## Exemplo

```
# sensibilidade
```

```
sens(resultado_rf,  
      truth = species,  
      estimate = predicacao_rf)
```

```
## # A tibble: 1 x 3
```

```
##   .metric .estimator .estimate
```

```
##   <chr>    <chr>         <dbl>
```

```
## 1 sens      macro          0.982
```

## Exemplo

```
# especificidade
```

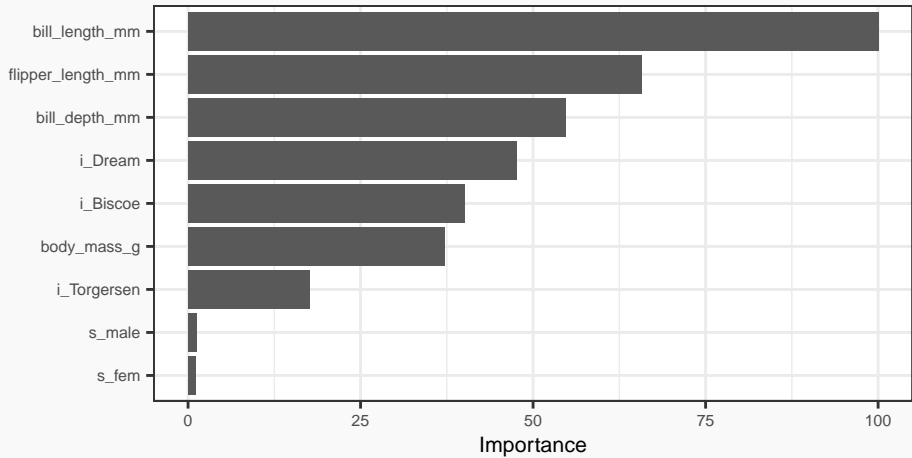
```
spec(resultado_rf,  
      truth = species,  
      estimate = predicao_rf)
```

```
## # A tibble: 1 x 3  
##   .metric .estimator .estimate  
##   <chr>    <chr>         <dbl>  
## 1 spec      macro          0.990
```

```
# importancia das variaveis
```

```
pp_rf_final %>%  
  extract_fit_parsnip() %>%  
  vip(scale = TRUE)
```

# Exemplo



# Exercícios

---



# Exercícios

O pacote **MASS** possui um conjunto de dados chamado **Pima.tr**. Este conjunto de dados possui informações a respeito de testes sobre diabetes realizados em mulheres da tribo Pima, dos Estados Unidos. Este conjunto de dados possui as seguintes variáveis:

- **npreg**: - número de gestações
- **glu**: - concentração de glicose
- **bp**: - pressão diastólica (mm Hg)
- **skin**: - medida da dobra do tríceps (mm)
- **bmi**: - índice de massa corporal
- **ped**: - diabetes pedigree function
- **age**: - idade (anos)
- **type**: - diabética ou não

Além disso, este mesmo pacote possui um outro conjunto de dados, com as mesmas colunas, chamado `Pima.te`.

1. Crie um novo conjunto chamado `Pima` unindo os dois conjuntos de dados originais. Utilize este novo conjunto de dados para criar os seus conjuntos de treinamento e teste.

2. Utilize o método random forest para criar um modelo para o diagnóstico de diabetes neste conjunto de dados.
3. Encontre as variáveis mais importantes do modelo ajustado.
4. Avalie se o modelo final é bom o suficiente na sua opinião. Justifique sua resposta.
5. Compare o resultado das classificações utilizando Random Forest e CART, feito na última aula. Qual é a sua conclusão?