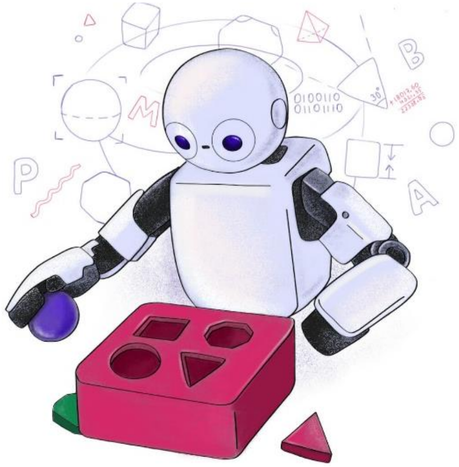
TP557 - Tópicos avançados em IoT e Machine Learning:

Medindo a precisão de um modelo de ML



Inatel

Felipe Augusto Pereira de Figueiredo
felipe.figueiredo@inatel.br

O que vamos ver?

- Neste tópico vamos ver como ***medir o desempenho*** de um ***modelo de aprendizado de máquina*** ao longo do seu processo de aprendizagem.
- Para isso, como já discutido brevemente antes, usaremos uma função chamada de ***função de erro*** ou de ***perda***.
- Idealmente, o ***processo de treinamento*** tem como ***objetivo minimizar o erro*** e, consequentemente, ***aumentar a precisão do modelo***.
- Além disso, veremos em breve ***diferentes estratégias para minimizar o erro***.
- Porém, primeiro, vamos aprender como calcular o erro.

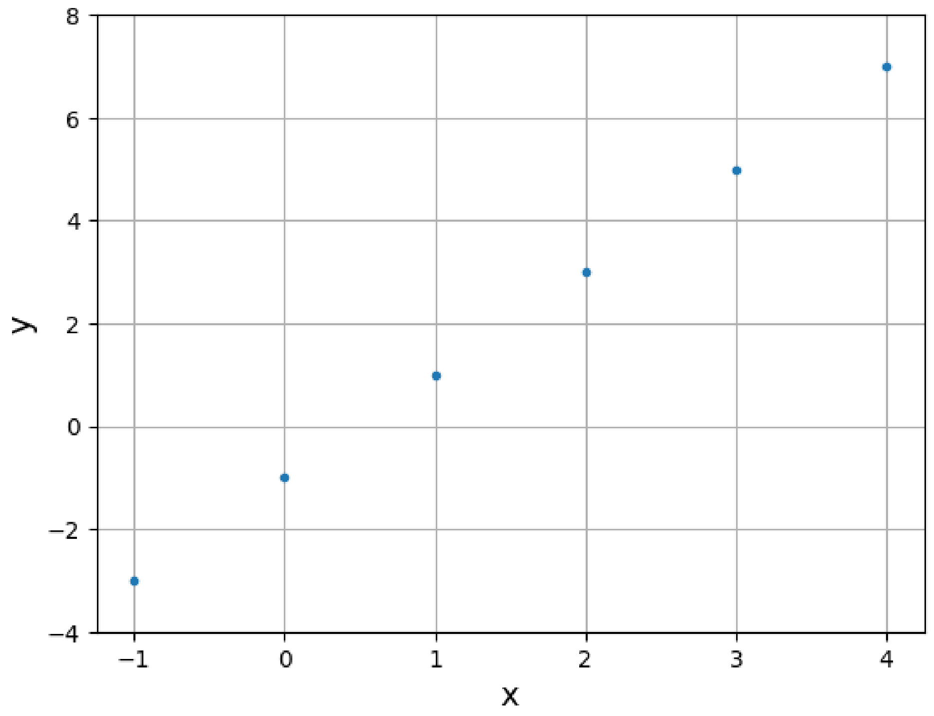
Mapeando $\boldsymbol{x}$ em $\boldsymbol{y}$

$$\boldsymbol{x} = \{-1, 0, 1, 2, 3, 4\}$$
$$\boldsymbol{y} = \{-3, -1, 1, 3, 5, 7\}$$

- Considerem esses dois conjuntos de números.
- Qual a relação entre os dois conjuntos?
  - Ou seja, qual é a ***função que mapeia*** os valores de $\boldsymbol{x}$ em $\boldsymbol{y}$?
- Nós sabemos que $\boldsymbol{y}$ é uma função de $\boldsymbol{x}$, nós só não sabemos que função é essa.
- Que tal plotarmos esses pontos?

Mapeando $\boldsymbol{x}$ em $\boldsymbol{y}$: Função hipótese

$$\boldsymbol{x} = \{-1, 0, 1, 2, 3, 4\}$$
$$\boldsymbol{y} = \{-3, -1, 1, 3, 5, 7\}$$



- Ao plotarmos os pontos, percebemos que existe uma ***relação linear*** entre eles.
- Podemos criar a ***hipótese*** de que uma ***reta*** explica esse mapeamento.
- Portanto, usamos a função de uma reta para definir o mapeamento:
$$y = a_0 + a_1 x.$$
- Agora precisamos encontrar os valores dos parâmetros (ou pesos) a_0 e a_1.

Suposição e Predição

$$\hat{y}[n] = h(x[n]) = -1 + 3x[n]$$

$$\boldsymbol{x} = \{-1, 0, 1, 2, 3, 4\}$$

Predições feitas pela função hipótese atual:

$$\hat{\boldsymbol{y}} = \{-4, -1, 2, 5, 8, 11\}$$

- Vamos começar ***atribuindo*** alguns ***valores aleatórios para os pesos*** ($a_0 = -1$ e $a_1 = 3$), ou seja, vamos fazer uma ***suposição*** (dar um ***palpite***) sobre os valores.
- Como medimos se essa função hipótese é boa ou ruim?
  - Usamos os valores de $x[n], \forall n$ para obter o mapeamento (i.e., predição) feito pela função e comparamos com os valores de saída esperados, $\boldsymbol{y}$.

O quão boa é a função hipótese?

$$\hat{y}[n] = h(x[n]) = -1 + 3x[n]$$

$$\boldsymbol{x} = \{-1, 0, 1, 2, 3, 4\}$$

Predições feita pela função hipótese atual:

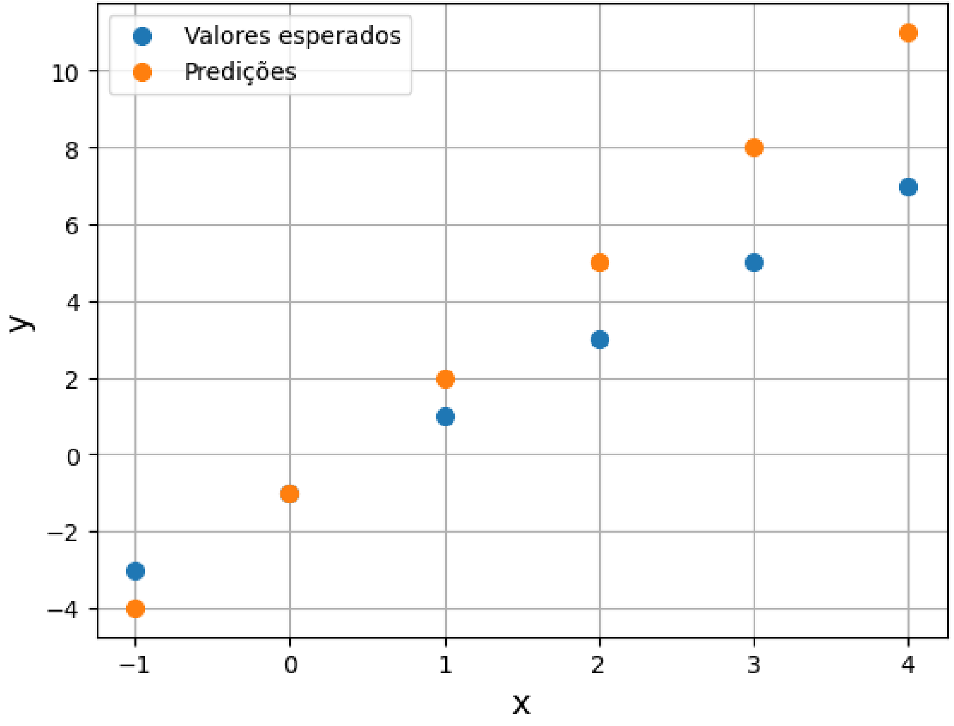
$$\hat{\boldsymbol{y}} = \{-4, -1, 2, 5, 8, 11\}$$

Valores de saída esperados:

$$\boldsymbol{y} = \{-3, -1, 1, 3, 5, 7\}$$

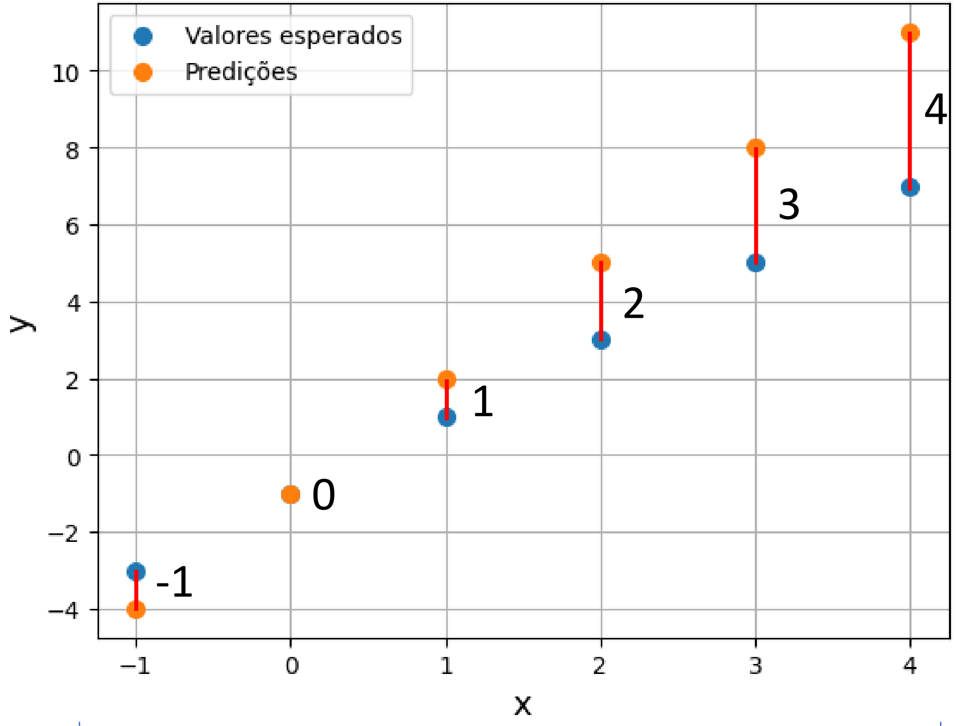
- Vemos que os ***valores*** preditos e esperados ***não são os mesmos***.
- Os três primeiros valores até são próximos, mas os últimos três já estão mais distantes.
- Existe uma maneira de ***formalizarmos*** um ***cálculo do quão bom ou ruim*** essa função hipótese e suas predições são?

Vamos medir as distâncias!



- Talvez nós possamos definir uma métrica de desempenho plotando os valores esperados e preditos.
- Na figura ao lado, temos os pontos preditos e esperados para cada valor de $\boldsymbol{x}$.

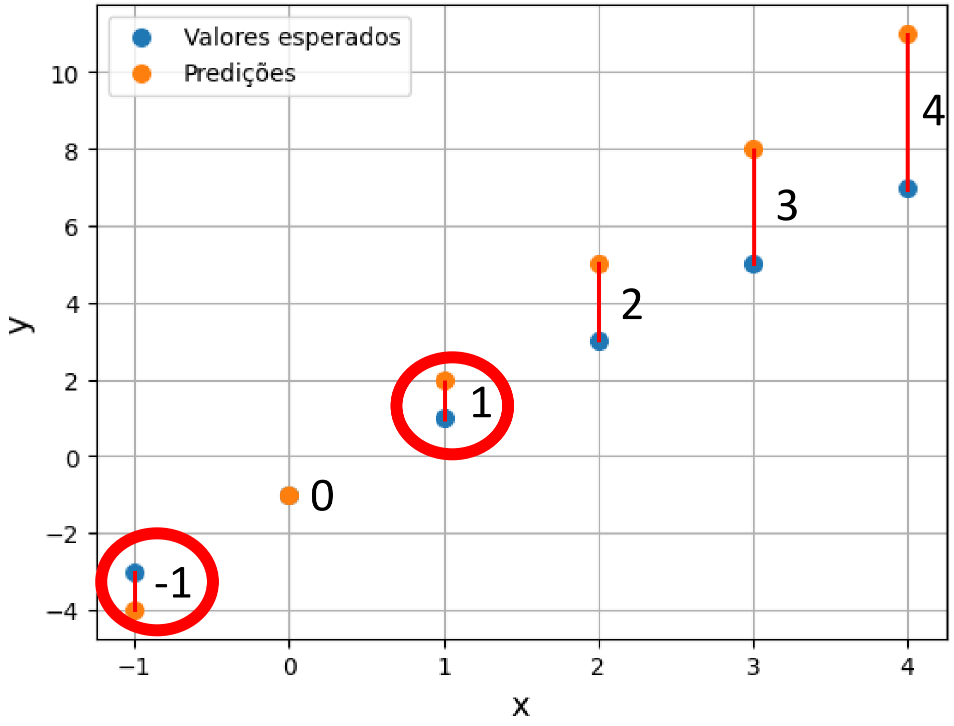
Vamos medir as distâncias!



$$\text{diff}[n] = \hat{y}[n] - y[n]$$

- Podemos traçar uma reta entre cada ponto e, pelo comprimento dessas retas (ou ***diferença entre os pontos***), ***descobrir se a função hipótese é boa ou não***.
- O comprimento de cada reta é mostrado ao lado delas.
- Talvez nós possamos ***calcular a média dos comprimentos*** para obter o ***erro médio*** causado pela função hipótese atual.

Temos um problema!

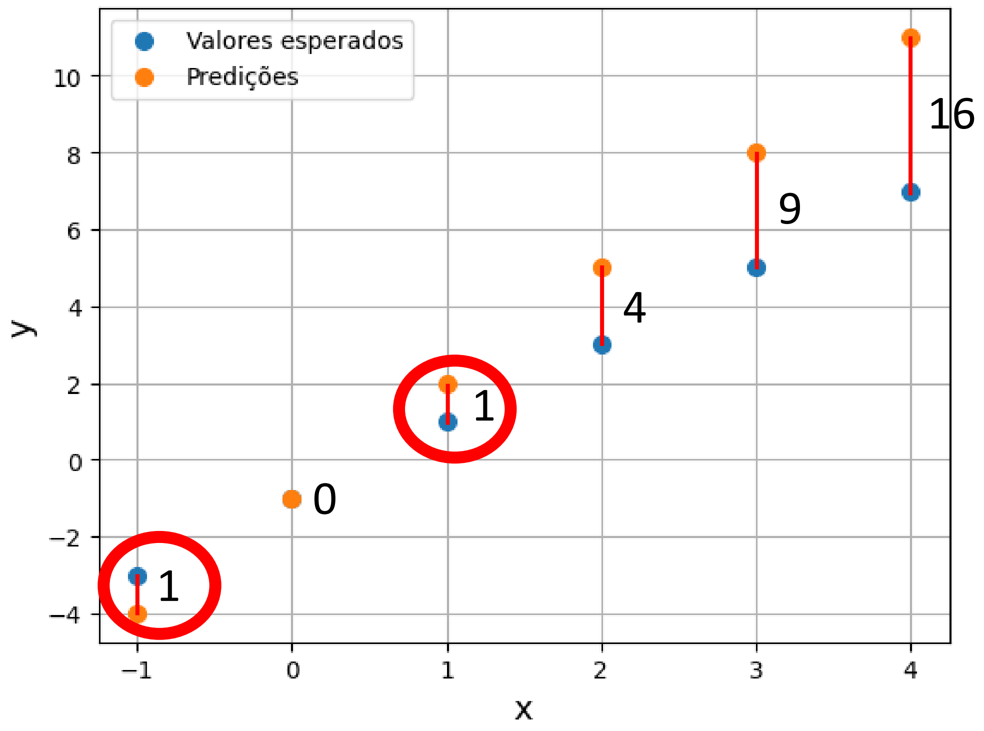


$$\text{erro médio} = \frac{1}{6}\sum_{0}^{5} \text{diff}[n]$$

$$\text{erro médio} = \frac{-1 + 0 + 1 + 2 + 3 + 4}{6} = 1.5$$

- Ao somarmos as diferenças, ***valores negativos podem reduzir ou até mesmo anular valores positivos***.
- Mesmo as predições para os dois pontos, $x = -1$ e 1, estando erradas, seus ***erros se cancelariam***, afetando a medida de desempenho.
- Isso poderia sugerir que 3 de 6 predições estão corretas, o que sabemos não ser verdade.
- O que podemos fazer para resolver esse problema?

Quadrado dos comprimentos



$$\text{erro quadrático médio (EQM)} = \frac{1}{6}\sum_{n=0}^{5} \text{diff}[n]^2$$

$$\text{EQM} = \frac{1 + 0 + 1 + 4 + 9 + 16}{6} = 5.17$$

- Podemos ***elevar ao quadrado todos os comprimentos***, fazendo com que todos eles sejam positivos e não se cancelem mais.
- Isso não afeta nossa métrica, pois aplicamos a todos os comprimentos.
- Usando essa métrica de ***erro médio***, vemos que ***nossa função hipótese não é boa***, pois o ***valor ainda está longe de zero***, que é o menor valor possível e nosso objetivo final.
- O que devemos fazer?

Otimizando a suposição

$$\hat{y}[n] = h(x[n]) = -2 + 2x[n]$$

$$\boldsymbol{x} = \{-1, 0, 1, 2, 3, 4\}$$

Predições feitas pela função hipótese atual:

$$\hat{\boldsymbol{y}} = \{-4, -2, 0, 2, 4, 6\}$$

Valores de saída esperados:

$$\boldsymbol{y} = \{-3, -1, 1, 3, 5, 7\}$$

Diferença entre predições e valores esperados:

$$\mathbf{diff}^2 = \{1, 1, 1, 1, 1, 1\}$$

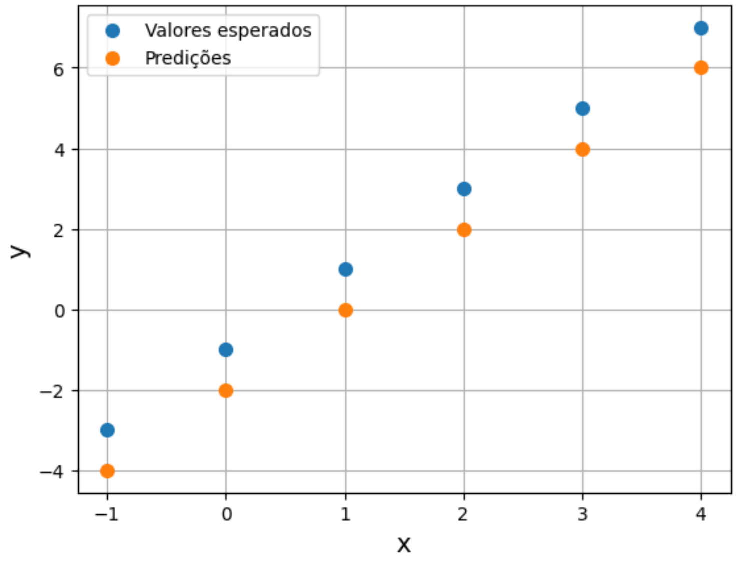
- Vamos supor outros valores para a_0 e a_1 e fazer predições com esta nova função hipótese.
- O novo palpite para os valores dos pesos será $a_0 = -2$ e $a_1 = 2$.

O quão boa é a nova função hipótese?

$$\hat{y}[n] = h(x[n]) = -2 + 2x[n]$$

$$\boldsymbol{x} = \{-1, 0, 1, 2, 3, 4\}$$

$$\text{EQM} = \frac{1+1+1+1+1+1}{6} = 1.0$$



- Já temos uma ***função melhor***, pois o erro caiu de 5.17 para 1.0.
- Estamos indo na direção correta!
- Comparando as predições com os valores esperados, notamos que as ***retas são paralelas***, sendo a única diferença um ***deslocamento***.
- O descolamento pode ser alterado através de a_0 (coeficiente linear).

Nova suposição

$$\hat{y}[n] = h(x[n]) = -1 + 2x[n]$$

$$\boldsymbol{x} = \{-1, 0, 1, 2, 3, 4\}$$

Predições feitas pela função hipótese atual:

$$\hat{\boldsymbol{y}} = \{-3, -1, 1, 3, 5, 7\}$$

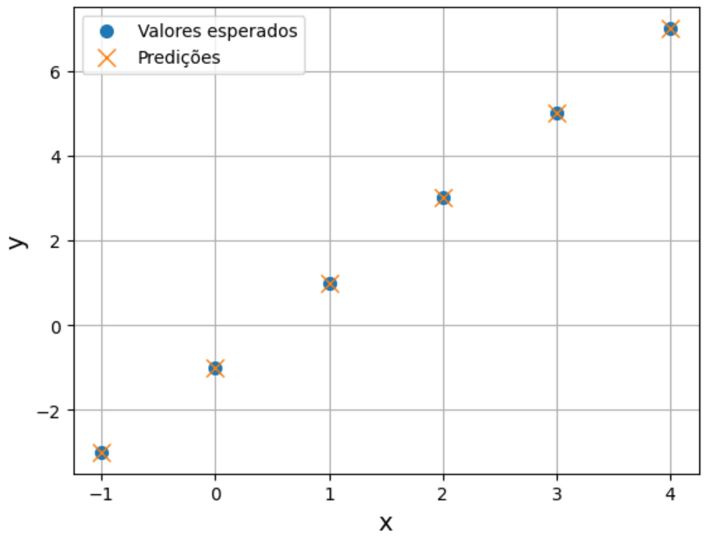
Valores de saída esperados:

$$\boldsymbol{y} = \{-3, -1, 1, 3, 5, 7\}$$

Diferença entre predições e valores esperados:

$$\mathbf{diff}^2 = \{0, 0, 0, 0, 0, 0\}$$

$$\text{EQM} = \frac{0+0+0+0+0+0}{6} = 0.0$$



- Vamos ***aumentar o valor de*** a_0 para -1, fazer novas predições e calcular o erro.
- Bingo! Nossa nova suposição mapeia perfeitamente x em y, resultando em um EQM igual a 0.

O processo

- O ***processo iterativo de otimização*** (ou atualização) dos pesos será sempre esse:
  - ***Palpite*** (i.e., pesos),
  - ***Medida da qualidade*** do palpite,
  - ***Otimização do palpite*** (i.e., atualização dos peso) baseada na informação do erro.
- As ***iterações se repetem*** até que algum ***critério de parada*** seja atingido: ***número máximo de iterações***, ***erro cair abaixo de um limiar***, etc.
- Esse é o processo por trás do algoritmo de otimização que veremos adiante.

Outras medidas de erro

$$\text{MSE} = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}(\hat{y}[n] - y[n])^2$$

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}(\hat{y}[n] - y[n])^2}$$

$$\text{MAE} = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}|\hat{y}[n] - y[n]|$$

Usadas em problemas de aproximação de curvas

$$\text{CE} = -\frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}\sum_{i=0}^{Q-1} y_i[n]\log_e(\hat{y}_i[n])$$

Usada em problemas de classificação

- Além do EQM (*Mean Squared Error* – MSE), existem diversas outras métricas de erro que podemos usar, como por exemplo:
  - Raíz do Erro Quadrático Médio (*Root Mean Squared Error* – RMSE)
  - Erro Absoluto Médio (*Mean Absolute Error* – MAE);
  - Entropia Cruzada (*Cross-Entropy*);
  - Etc.

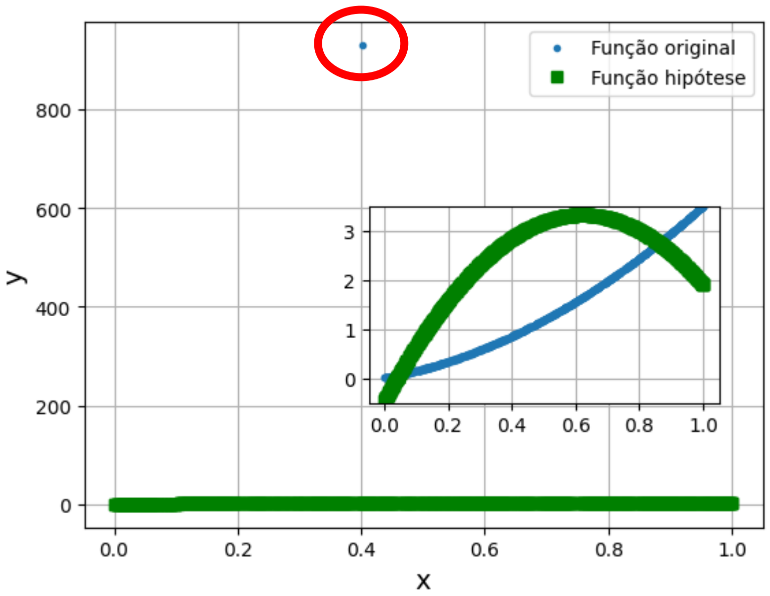
Mean Squared Error – MSE

$$\text{MSE} = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}(\hat{y}[n] - y[n])^2$$

- É a função de erro ***mais usada em problemas de regressão***.
- Calcula a média do ***quadrado da diferença*** entre os valores preditos e esperados.
- Assim, ele ***penaliza mais (i.e., amplifica) erros maiores*** (devido ao quadrado), o que pode ser útil se desejarmos que o modelo seja ***mais sensível a esses erros***.

Mean Squared Error – MSE

$$\text{MSE} = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}(\hat{y}[n] - y[n])^2$$



Função original: $y = 1 + x + 2x^2$

- Porém, como a diferença é elevada ao quadrado, ele ***pode amplificar a influência de outliers***.
  - Outliers podem ***distorcer ou deslocar a função hipótese***, fazendo com que ela se distancie de um mapeamento que represente o comportamento dos dados "*normais*".
- Por usar o quadrado da diferença, ***a métrica não fica na mesma escala dos dados originais***.
  - Por exemplo, se estivermos predizendo o preço de casas em dólares, os erros estarão em dólares^2.

Root Mean Squared Error – RMSE

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}(\hat{y}[n] - y[n])^2}$$

- Calcula a raiz quadrada do MSE, ***retornando a métrica à mesma escala dos dados originais***.
- Isso é útil para interpretar o erro na mesma unidade do rótulo, o que pode facilitar a compreensão do impacto do erro.
- Assim como o MSE, ***também amplifica erros maiores***.

Mean Absolute Error – MAE

$$\text{MAE} = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}|\hat{y}[n] - y[n]|$$

- Calcula a ***média das diferenças absolutas*** entre as predições do modelo e os valores esperados.
  - Ou seja, ***penaliza os erros de maneira uniforme***.
- Ao contrário do MSE e RMSE, não eleva os erros ao quadrado, o que o torna ***menos sensível a outliers***.

Mean Absolute Error – MAE

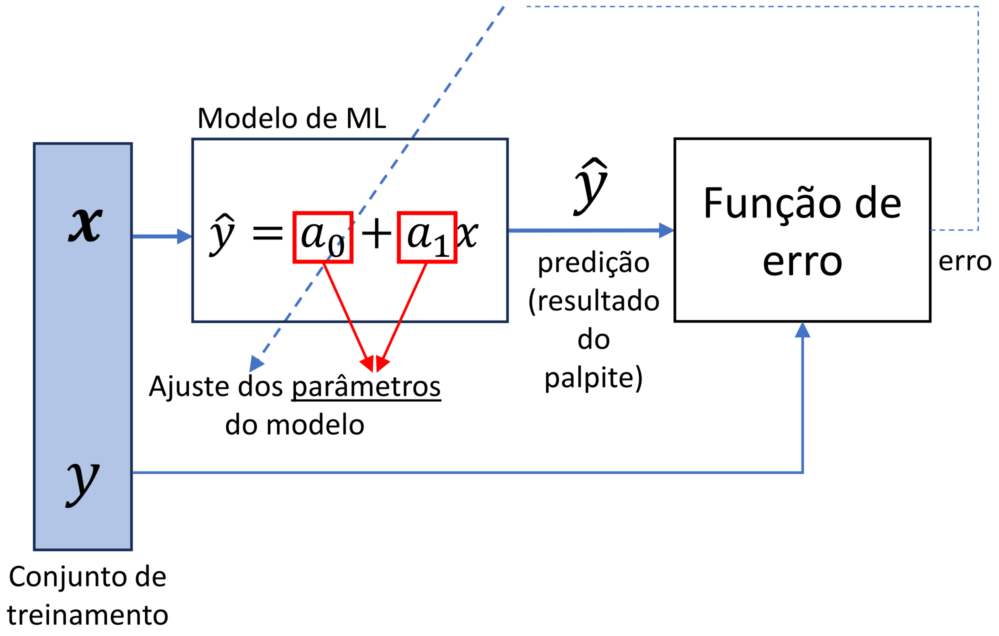
$$\text{MAE} = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} |\hat{y}[n] - y[n]|$$

- ***Representa os erros na mesma escala dos dados originais***, facilitando a interpretação.
- Boa opção quando desejamos um ***erro mais uniforme em todas as predições*** e desejamos ***minimizar a influência de outliers***.

Qual devo usar?

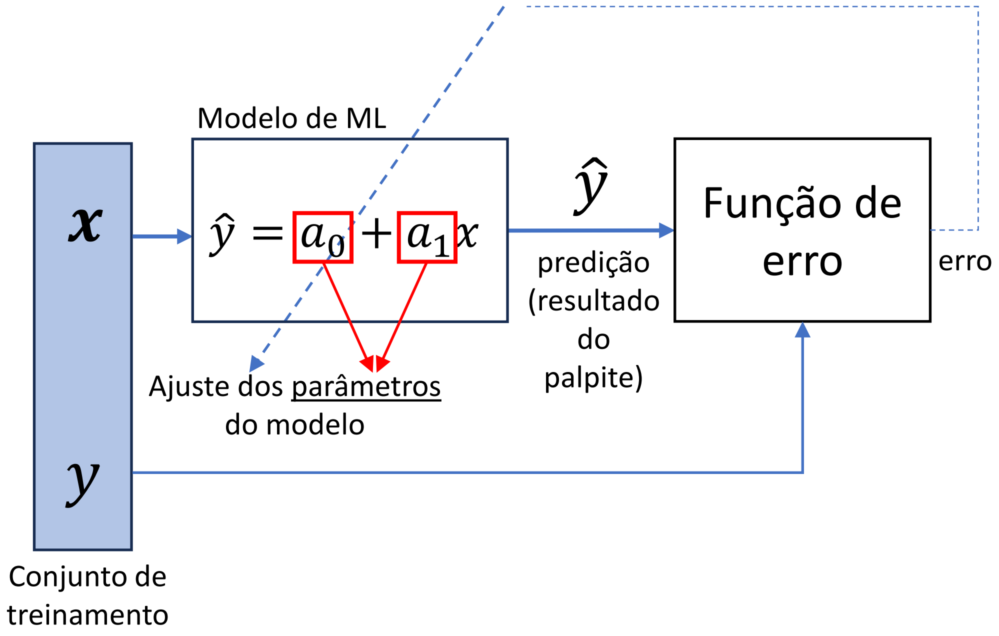
O recomendável é ***experimentar diferentes funções de erro*** durante a ***fase de desenvolvimento*** para determinar qual delas se ***alinha*** melhor com os ***objetivos e as características*** específicas do seu ***problema de regressão***.

Regressão ou aproximação de funções



- O problema que estamos vendo neste tópico é conhecido como ***regressão*** ou ***aproximação de funções***.
- Nele, a função com formato de reta, que definimos como ***função hipótese***, é o ***modelo de ML*** e o ***objetivo da regressão é encontrar os parâmetros (ou pesos) que minimizam a função de erro***.

Regressão ou aproximação de funções



- **OBS**.: No exemplo que vimos nesse tópico, conseguimos visualizar os dados e, facilmente, identificar a equação (ou formato) da função hipótese, mas em outros casos, além dos pesos, temos que descobrir o formato da função.
- Veremos adiante formas de definir o melhor modelo para uma aproximação.

Ponto de mínimo ou solução ótima

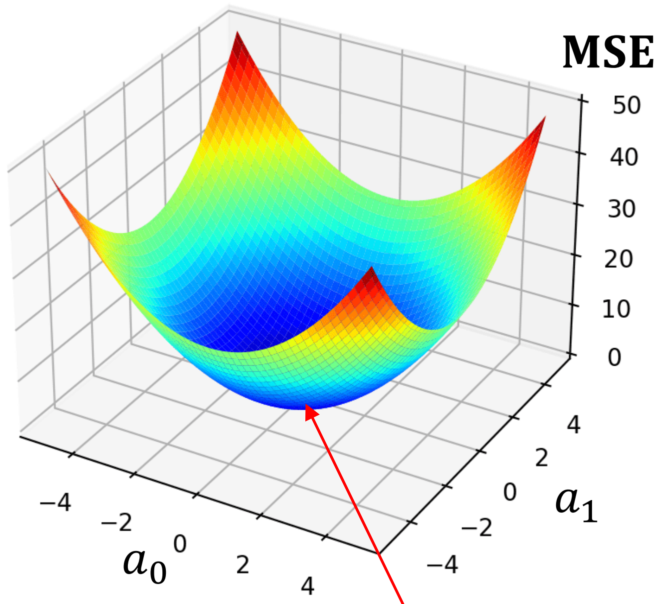
$$\text{MSE} = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}(\hat{y}[n] - y[n])^2$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}(\boxed{a_0} + \boxed{a_1}x[n] - y[n])^2$$

?

- Dado que o conjunto de treinamento é conhecido e fixo, notamos que a ***função de erro*** é ***função dos pesos*** do modelo.
- Assim, o ***objetivo da regressão*** é ***encontrar o conjunto de pesos que minimiza a função de erro***.
- Esse é um ***problema de minimização***.
  - ***Qual é o conjunto de pesos que resulta no menor erro possível?***

Ponto de mínimo ou solução ótima



ponto de mínimo

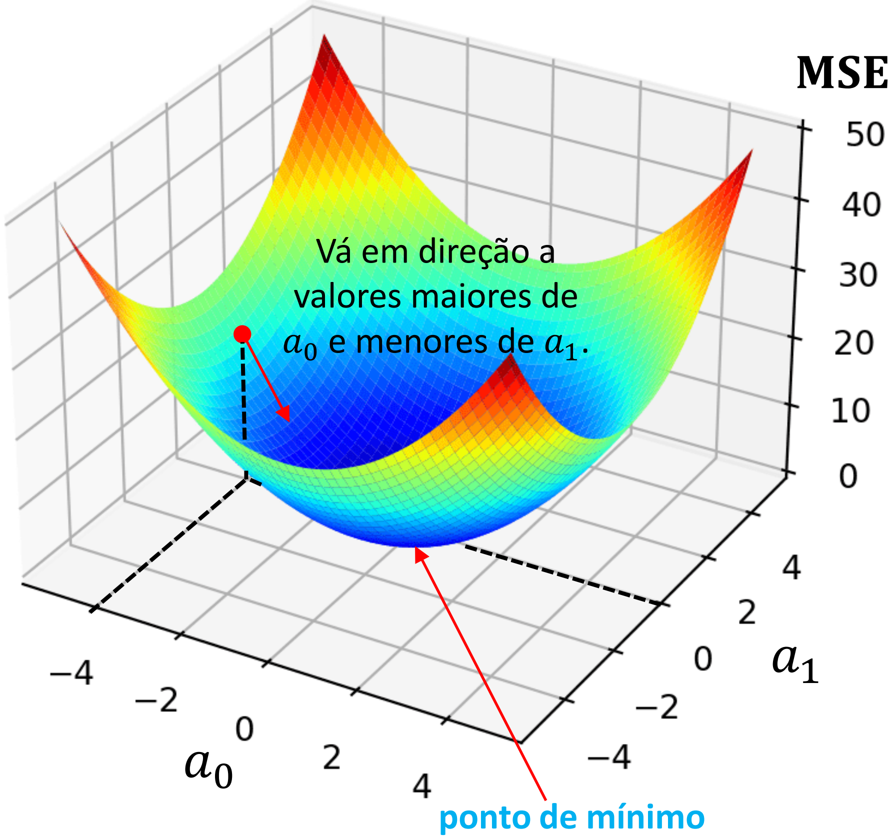
$$\mathrm{MSE} = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}(\hat{y}[n] - y[n])^2$$

?

$$= \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}(\boxed{a_0} + \boxed{a_1}x[n] - y[n])^2$$

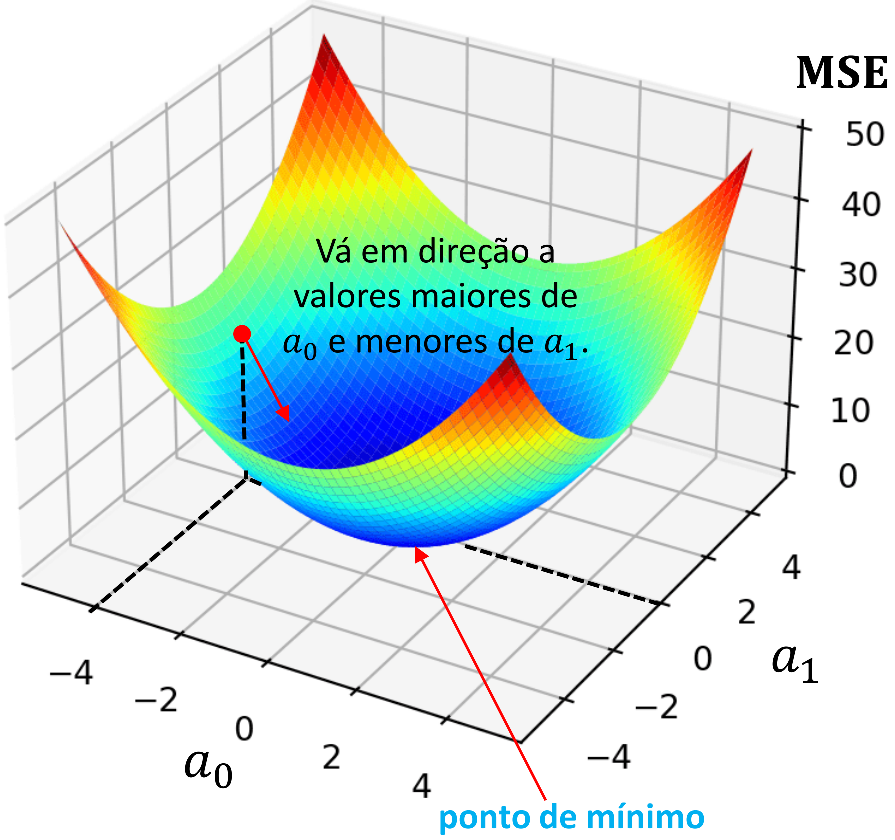
- Se ***plotarmos o erro em função da variação dos pesos***, nós plotamos o que é conhecido como ***superfície de erro***.
- Seu ***ponto mais baixo*** é chamado de ***ponto de mínimo*** e nos dá o ***conjunto de pesos ótimo***, ou seja, os pesos que minimizam a função de erro.
- O algoritmo de otimização, que veremos em breve, ***caminha*** através da superfície sempre ***indo em direção ao seu ponto mais baixo***.

Otimização (treinamento) do modelo



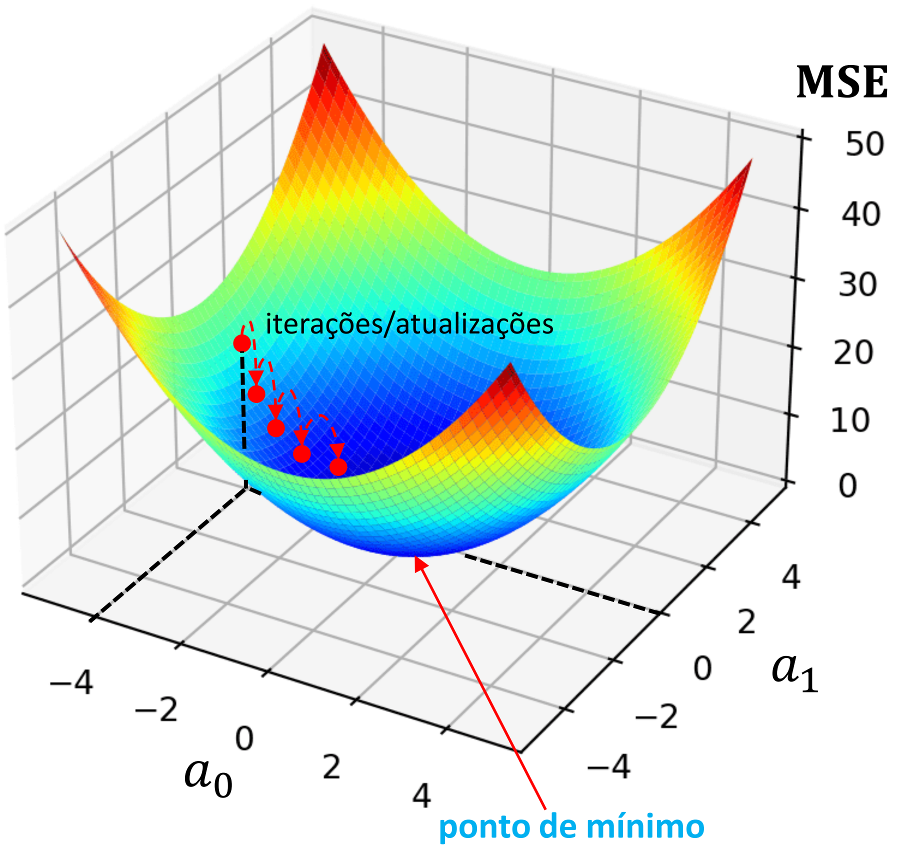
- Esse ***processo de busca*** que tem como ***objetivo*** encontrar o ***ponto*** que ***minimiza o erro*** é chamado de ***otimização*** e, no contexto de ML, é conhecido como ***treinamento do modelo***.
  - Treinamento é o processo de ***atualizar o modelo*** para obter predições melhores a cada ***iteração***.

Otimização (treinamento) do modelo



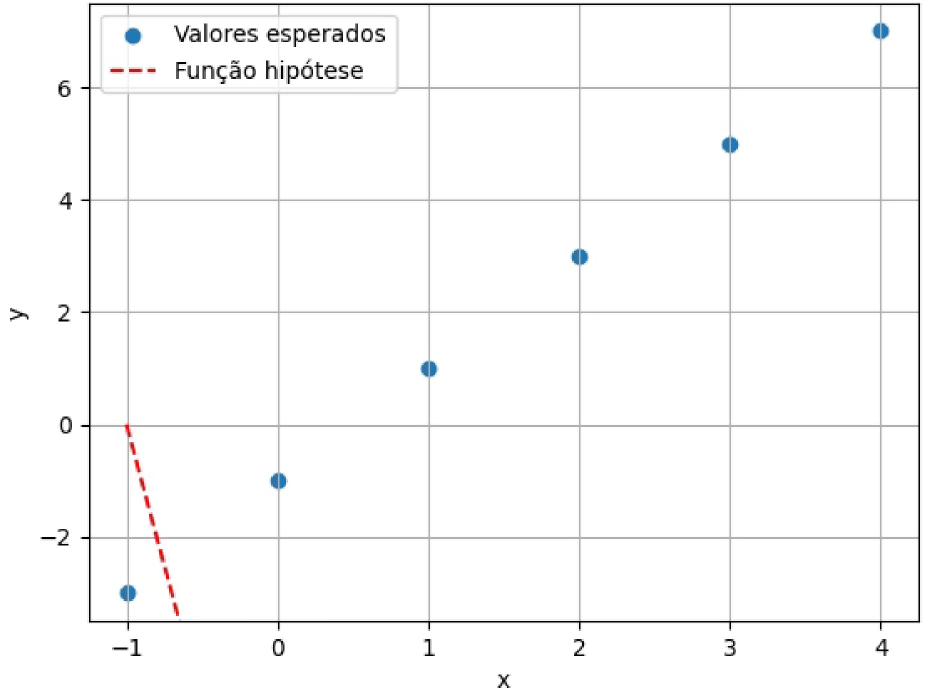
- O ***treinamento***/atualização do modelo se ***baseia*** na ***informação obtida a partir da função de erro***.
- Como veremos, essa informação ***aponta para a direção do ponto de mínimo*** ***(i.e., conjunto de pesos ótimo)***.

Gradiente descendente



- Como veremos em breve, de posse dessa informação trazida pelo erro, o algoritmo de otimização, conhecido como ***gradiente descendente (GD)***, consegue ***caminhar iterativamente*** através da ***superfície de erro*** até o ***ponto de mínimo*** (i.e., conjunto de pesos ótimo).

Gradiente descendente



- A figura ao lado ilustra o processo iterativo de otimização realizado pelo GD.
  - A partir de um ***ponto inicial*** (i.e., uma ***suposição aleatória*** de pesos), o algoritmo ***extrai a informação de direção do ponto de mínimo a partir da função de erro*** e a usa para ***atualizar o ponto atual*** (i.e., otimizar a suposição atual).
  - Em geral, o ***novo ponto*** (i.e., conjunto de pesos atualizado) resulta em um ***erro menor do que o anterior***.
  - Esse processo é repetido a partir do novo ponto até que algum critério de parada seja atingido.

Próximos passos

- Nesse tópico nós vimos o que é o ***erro*** (ou perda) e definimos uma forma de medi-lo.
- Agora, o próximo passo envolverá a ***definição de um processo que utilize a informação do erro para gerar o próximo palpite*** (ou suposição) de forma que ele ***seja melhor do que o atual***.
- Esse processo é chamado de ***otimização*** e será abordado em breve.
- Mas primeiro, vamos dar uma olhada em um ***exemplo*** que nos dará uma ideia ***sobre como funciona esse processo de otimização***.

Explorando a função de erro

Atividades

- Quiz: “***TP557 - Medindo a precisão de um modelo de ML***”.
- Exercício: Encontre os pesos da função hipótese.

Perguntas?

Obrigado!


Faça uma suposição
Meça o desempenho
Otimize sua suposição
repita


Faça uma suposição
Meça o desempenho
Otimize sua suposição
repita


Faça uma suposição
Meça o desempenho
Otimize sua suposição
repita