APRENDIZADO DE MÁQUINA

DICAS PRÁTICAS

PROF. RONALDO CRISTIANO PRATI

ronaldo.prati@ufabc.edu.br

Bloco A, sala 513-2

DICAS DE SKLEARN

- SKlearn é um pacote python muito que implementa vários algoritmos de aprendizado de máquina
- Ele também oforece um conjunto de funções que implementam diversas funcionalidades para utilizar esses algoritmos

DICAS DE SKLEARN

- Vamos ver como criar a curva de aprendizado

(incrementando o conjunto de dados) e a curva de validação (alteranando os valores do parâmetro livre)

- Pode ser usado para analisar o trade-off bias-variância.

PACOTES

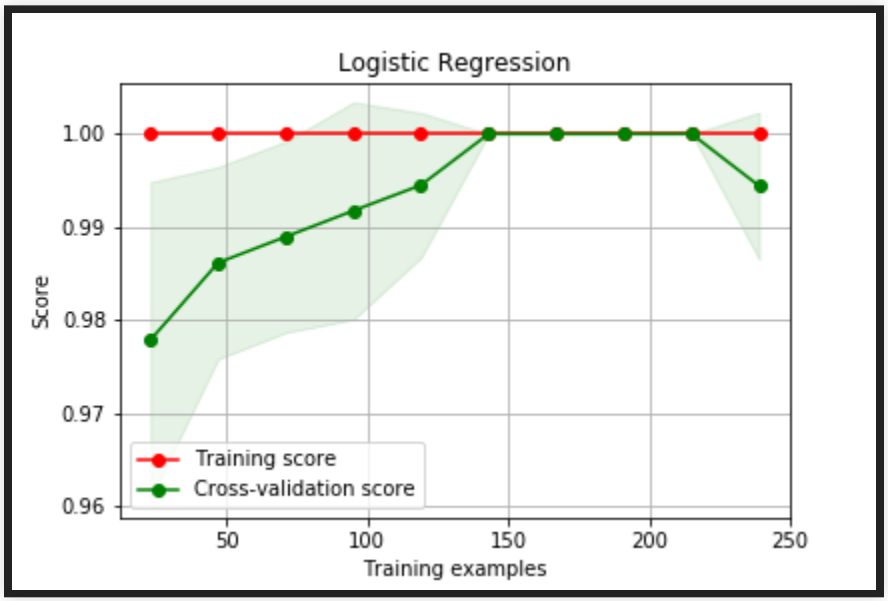
```
import matplotlib.pyplot as plt
# data sets
from sklearn.datasets import load_digits, load_iris
# Algoritmos
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
from sklearn.svm import SVC
```

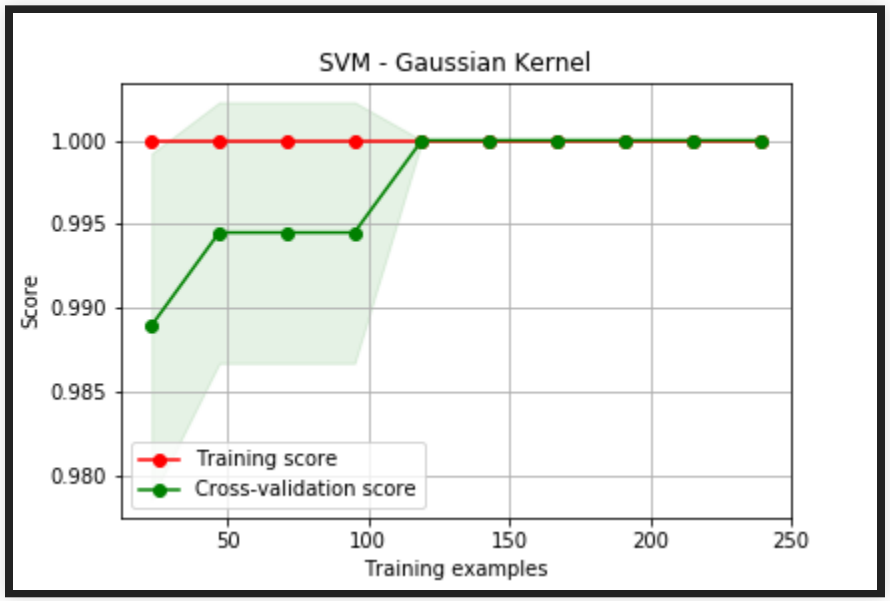
```
from sklearn.model_selection import learning_curve, validation_c
import numpy as np
```

CURVA DE APRENDIZADO

```
# Seleciona 2 classes do dataset digits
X,y = load_digits(n_class=2,return_X_y=True)

# cria uma lista de 0.1 a 1, contendo 10 pontos igualmente espaç
sizes = np.linspace(0.1,1,10)

algs = {'Logistic Regression' : LogisticRegression(solver='lbfgs
        'SVM - Gaussian' : SVC()}

for name, alg in algs.items():
    train_sizes, train_scores, test_scores = learning_curve(
        alg, X, y, cv=3, train_sizes=sizes)
    plot_learning_curve(train_sizes, train_scores, test_scores,n
```

CURVA DE APRENDIZADO

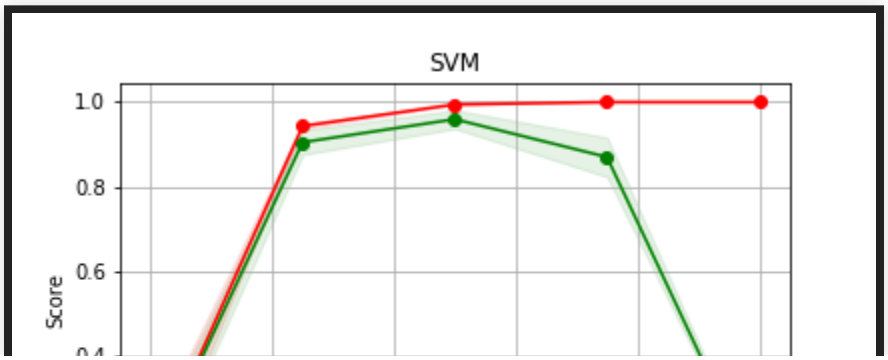


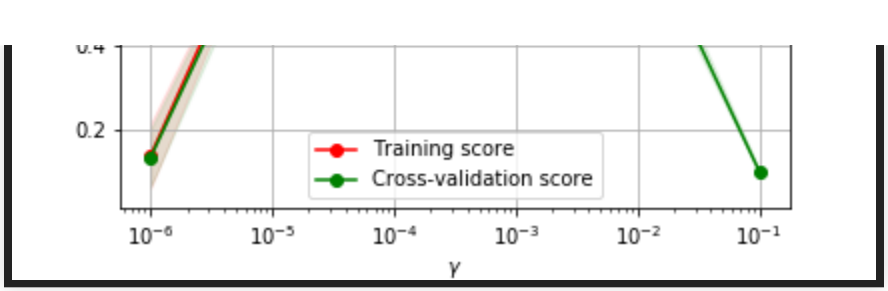


CURVA DE VALIDAÇÃO

```
X,y = load_digits(return_X_y=True)

# cria pontos exponencialmente expaçados 10^-6 até 10^-1
param_range = np.logspace(-6, -1, 5)

train_scores, test_scores = validation_curve(
    SVC(), X, y, param_name="gamma", param_range=param_range,
    cv=5, scoring="accuracy", n_jobs=1)
```

CURVA DE VALIDAÇÃO




0.4
0.2
Training score
Cross-validation score
10^{-6}
10^{-5}
10^{-4}
10^{-3}
10^{-2}
10^{-1}
γ

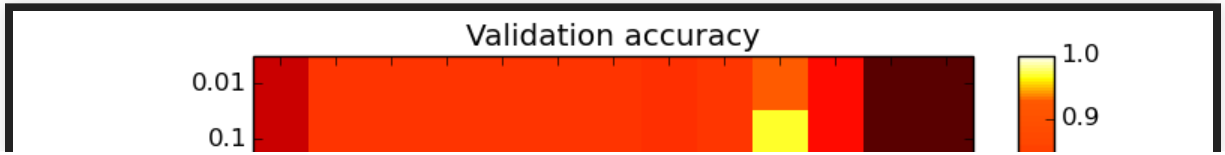
GRID SEARCH

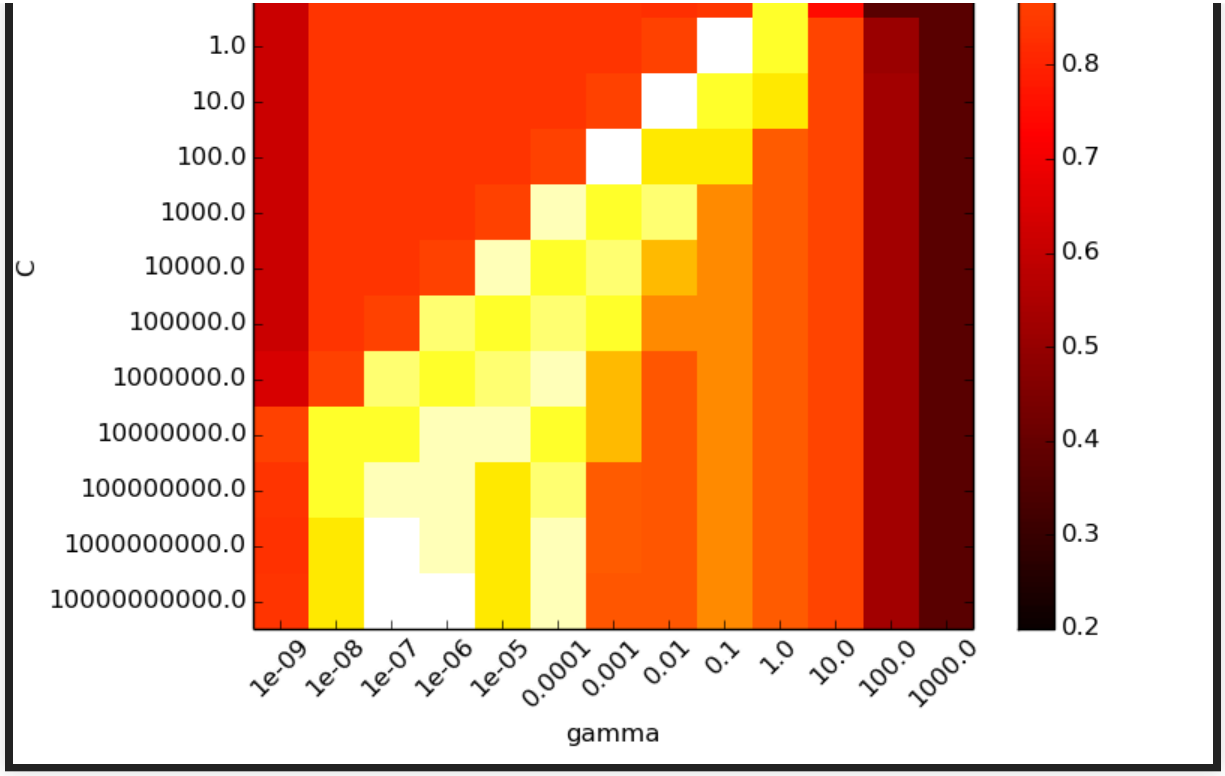
- Em algumas situações queremos variar mais de um parâmetro livre do algoritmo.
  - Em SVMs por exemplo, podemos querer ajustar o parâmetro de regularização C e o parâmetro do kernel σ
- GridSearch faz uma busca combinando todas as possibilidades para esses valores

GRID SEARCH

```
X, y = load_iris(return_X_y=True)
# faixa de valores de C
C_range = np.logspace(-2, 10, 13)
# faixa de valores de gamma
gamma_range = np.logspace(-9, 3, 13)
param_grid = dict(gamma=gamma_range, C=C_range)
cv = StratifiedShuffleSplit(y, n_iter=5, test_size=0.2, random_s
grid = GridSearchCV(SVC(), param_grid=param_grid, cv=cv)
grid.fit(X, y)
```

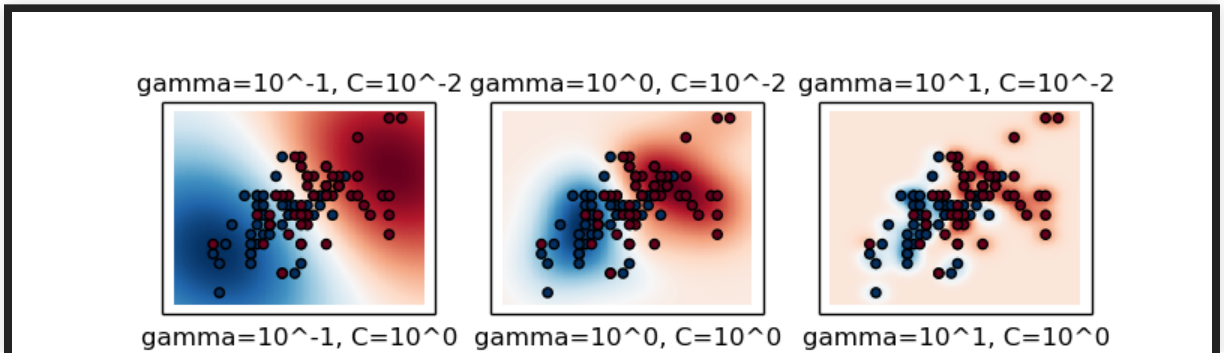
GRID SEARCH

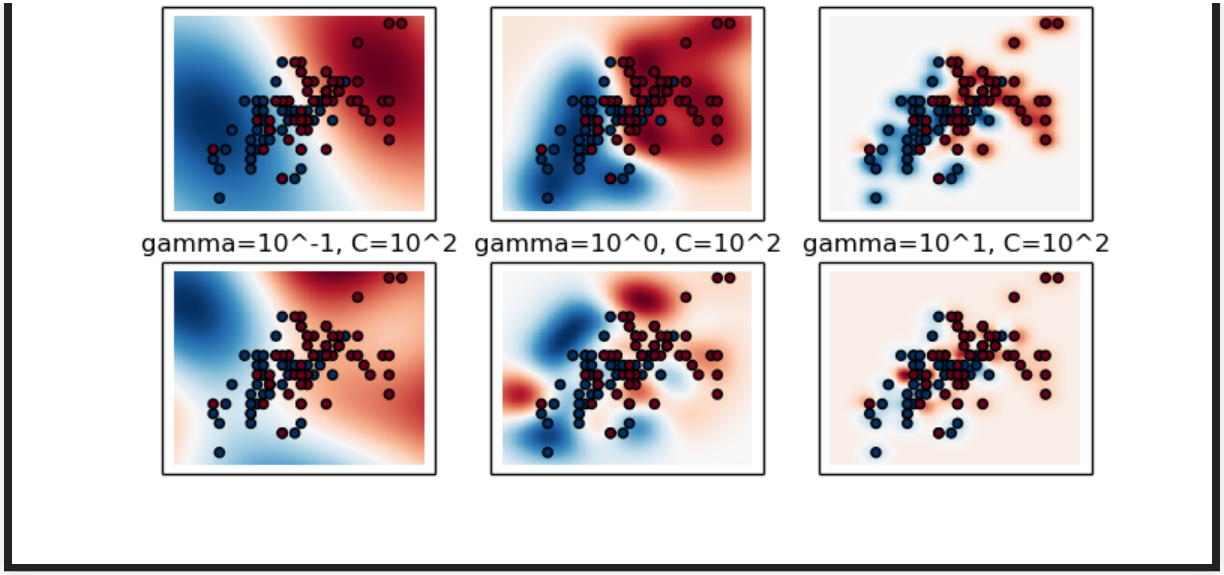




The best parameters are {'C': 1.0, 'gamma': 0.1}
with a score of 0.97

GRID SEARCH


gamma=10^-1, C=10^-2
gamma=10^0, C=10^-2
gamma=10^1, C=10^-2
gamma=10^-1, C=10^0
gamma=10^0, C=10^0
gamma=10^1, C=10^0


gamma=10^-1, C=10^2
gamma=10^0, C=10^2
gamma=10^1, C=10^2

VALIDAÇÃO CRUZADA

- Como visto anteriormente, em validação cruzada, dividimos o conjunto em diferentes partes de treino e teste
- Se a base estiver de alguma maneira ordenada, temos que tomar cuidado em como fazemos a divisão

VALIDAÇÃO CRUZADA

- O Sklearn tem vários metodos que auxiliam a fazer validação cruzada.
- O mais simples deles divide os as linhas da base em blocos igualmente espaçados.

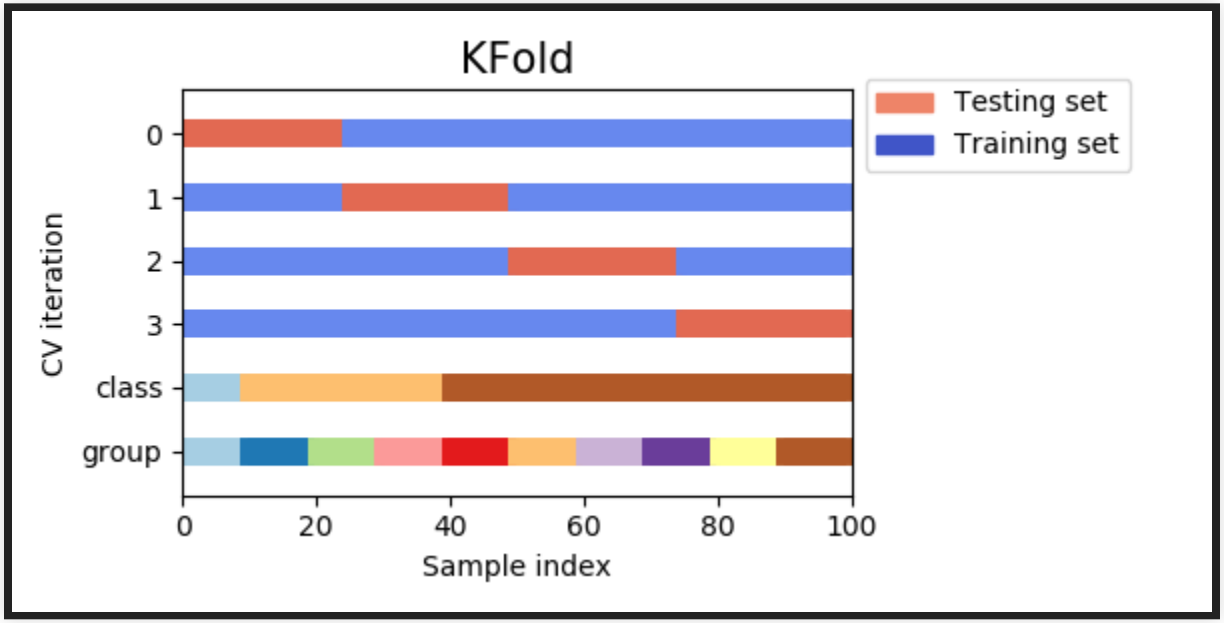
VALIDAÇÃO CRUZADA

```
from sklearn.model_selection import KFold
from sklearn.metrics import accuracy_score

X, y = load_iris(return_X_y=True)
alg =  LogisticRegression(solver='lbfgs',multi_class='ovr')
accuracies = []
kf = KFold(n_splits=5)
for train, test in kf.split(X):
    X_train = X[train]
    X_test  = X[test]
    y_train = y[train]
    y_test  = y[test]
    alg.fit(X_train,y_train)
    pred = alg.predict(X_test)
    accuracies.append(accuracy_score(y_test,pred))
```

VALIDAÇÃO CRUZADA

```
print(accuracies)
[1.0, 0.9, 0.5, 0.9333333333333333, 0.6333333333333333]
```

```
print (np.mean(accuracies),np.std(accuracies))
0.7933333333333332 0.1925270543759153 6
```



VALIDAÇÃO CRUZADA ESTRATIFICADA

- Esse grande variação vem do fato que, ao fazermos a validação cruzada, pegamos blocos contíguos
- Como a base está agrupada por classes, temos conjuntos com classes não representadas no

treino/teste
- Validação cruzada estratificada leva em consideração as classes para fazer a divisão

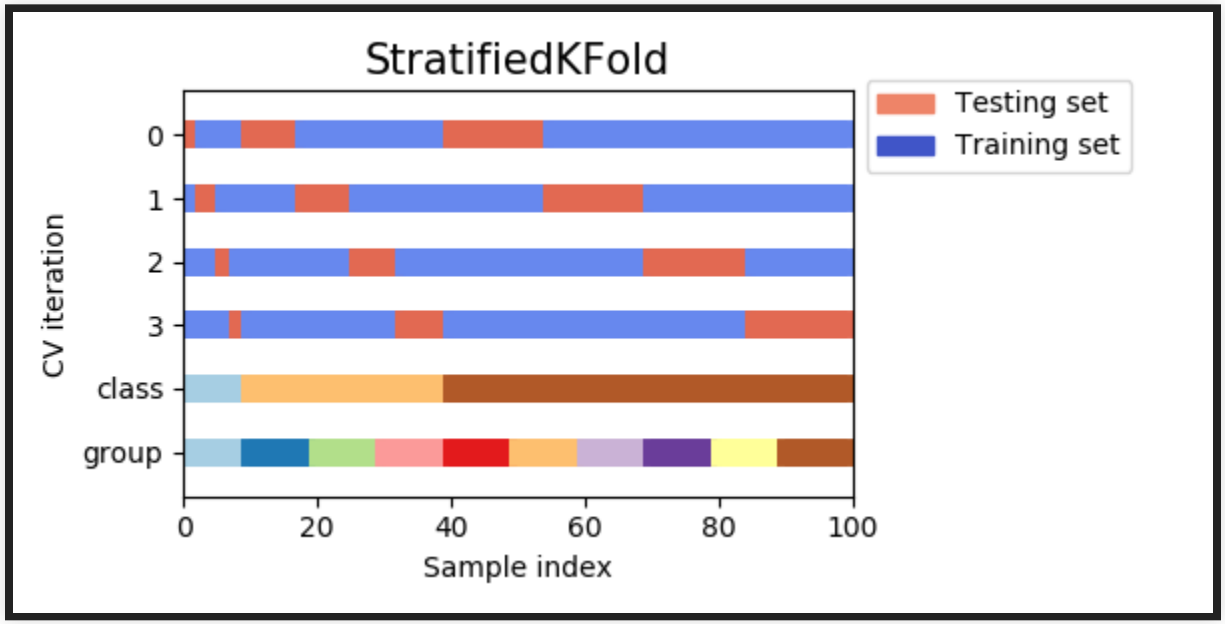
VALIDAÇÃO CRUZADA ESTRATIFICADA

```
from sklearn.model_selection import StratifiedKFold
from sklearn.metrics import accuracy_score

X, y = load_iris(return_X_y=True)
alg =  LogisticRegression(solver='lbfgs',multi_class='ovr')
accuracies = []
kf = StratifiedKFold(n_splits=5)
for train, test in kf.split(X,y):
    X_train = X[train]
    X_test  = X[test]
    y_train = y[train]
    y_test  = y[test]
    alg.fit(X_train,y_train)
```

```
    pred = alg.predict(X_test)
    accuracies.append(accuracy_score(y_test,pred))
```

VALIDAÇÃO CRUZADA ESTRATIFICADA

```
print(accuracies)
[0.8666666666666667, 0.9666666666666667, 0.9333333333333333,
 0.9333333333333333, 1.0]
print (np.mean(accuracies),np.std(accuracies))
0.9400000000000001 0.04422166387140532 4
```



VALIDAÇÃO CRUZADA AGRUPADA

- Em algumas situações, a base de dados

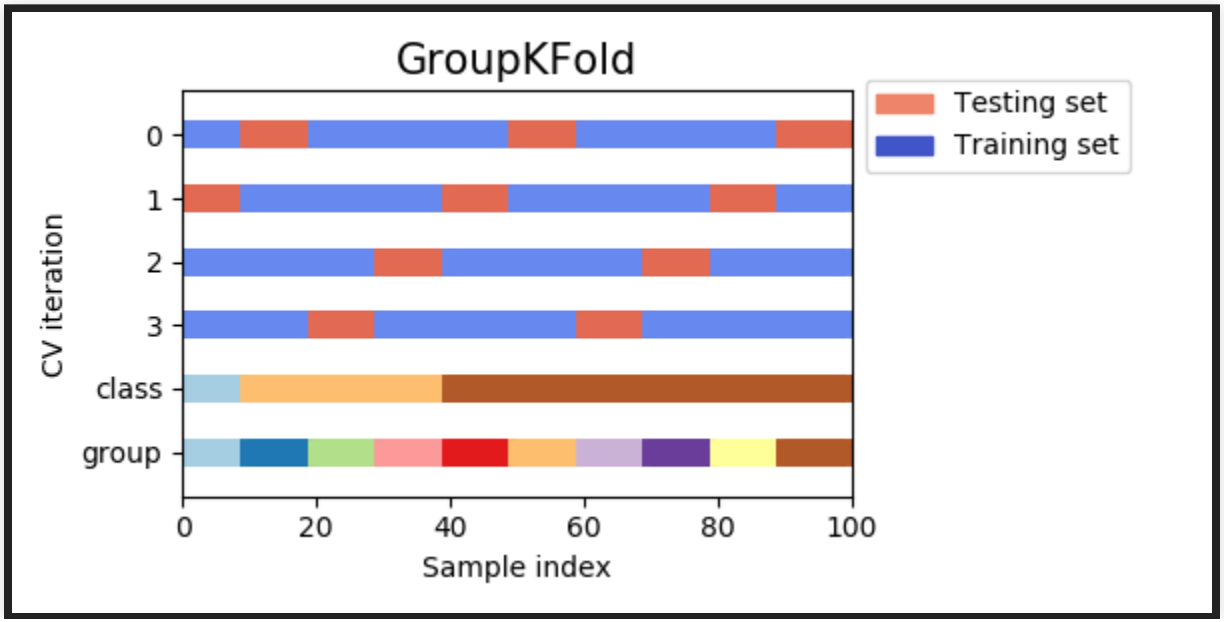
também pode estar organizada em grupos
  - Por exemplo, uma prática comum em classificação de imagens, por exemplo, é rotacionar a imagem em $90^o, 180^o, 270^o$ e 360^o
  - Nesse caso, para cada imagem inicial, temos outras 4
- Para esses casos, devemos usar validação cruzada agrupada

VALIDAÇÃO CRUZADA AGRUPADA

```
from sklearn.model_selection import GroupKFold

X = [0.1, 0.2, 2.2, 2.4, 2.3, 4.55, 5.8, 8.8, 9, 10]
y = ["a", "b", "b", "b", "c", "c", "c", "d", "d", "d"]
groups = [1, 1, 1, 2, 2, 2, 3, 3, 3, 3]
```

```
gkf = GroupKFold(n_splits=3)
for train, test in gkf.split(X, y, groups=groups):
    print("%s %s" % (train, test))
[0 1 2 3 4 5] [6 7 8 9]
[0 1 2 6 7 8 9] [3 4 5]
[3 4 5 6 7 8 9] [0 1 2]
```

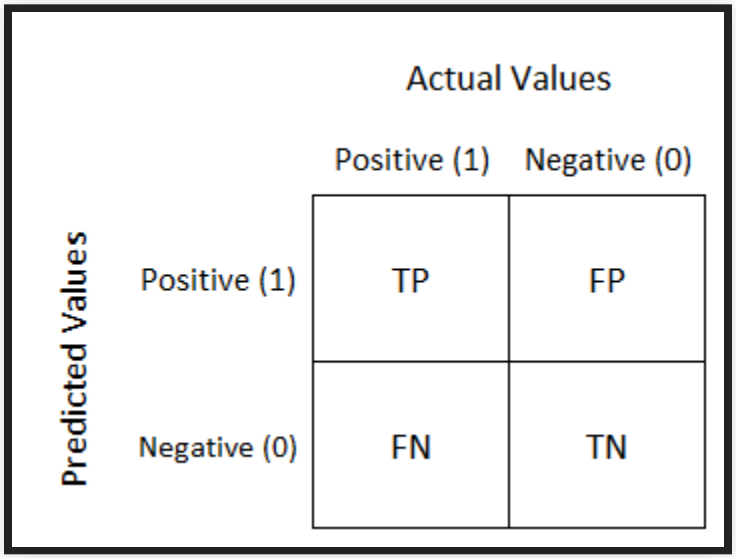
VALIDAÇÃO CRUZADA AGRUPADA

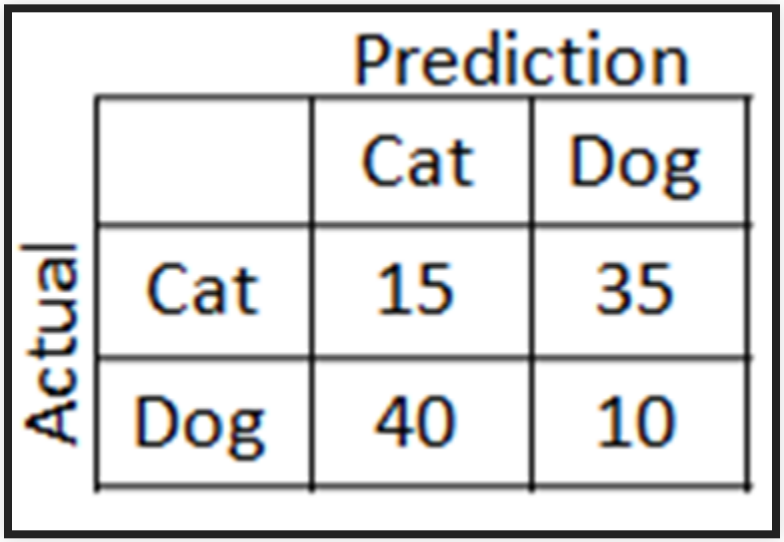


MÉTRICA DE AVALIAÇÃO

- Em diversas aplicações, a escolha da métrica de avaliação pode levar a resultados incosistentes
- Por exemplo, quando temos classes desbalanceadas, é fácil ter uma alta acurácia
  - Vamos assumir que fraude de cartão só ocorre 0.1% das transações
  - Classificador que **nunca** preve fraude acerta 99.9% das vezes!

MATRIZ DE CONFUSÃO





PRECISÃO (PRECISION)

- Avalia cada classe individualmente
- Vamos chamar a nossa classe de interesse

- Vamos chamar a nossa classe de interesse positiva
  - Quando o algoritmo prediz um exemplo como positivo, com que frequência ele acerta aquela predição?

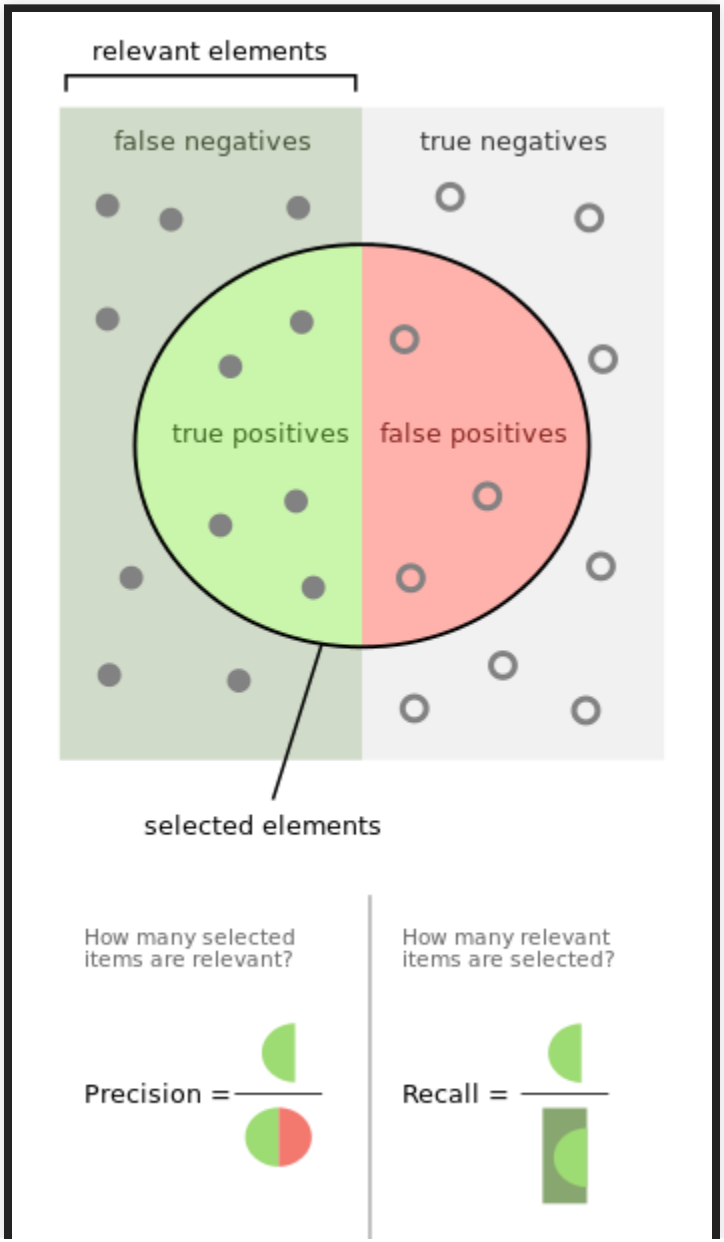
$$precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

REVOCAÇÃO (RECALL)

- Avalia cada classe individualmente
- Vamos chamar a nossa classe de interesse positiva
  - Com relação a todos os exemplos positivos do

conjunto de teste, quantos o algoritmo acertou?

$$recall = \frac{TP}{TP + FN}$$


relevant elements
false negatives
true negatives
true positives
false positives
selected elements
How many selected items are relevant?
Precision =
How many relevant items are selected?
Recall =

MÉTRICA DE AVALIAÇÃO

- Geralmente escolhemos a classe minoritária como a de interesse
  - Doença rara, fraude, etc.
- Calcular precisão e revocação para essa classe nos dá uma ideia melhor do desempenho do algoritmo para aquela classe
- Eventualmente podemos computar para outra(s) classe(s) também

F1-MEASURE

- A medida $F1$ é muito usada em algumas áreas como um compromisso entre precisão e revocação.
- Média harmônica entre precisão e revocação

$$F1 = 2 \cdot \frac{precision * recall}{precision + recall}$$

TRADE-OFF ENTRE PRECISÃO E REVOCAÇÃO

- Para muitas aplicações, queremos controlar o *trade-off* entre precisão e revocação
- É fácil otimizar um ou outro:
  - precisão: só predizar o mais seguro (e.g., o de maior probabilidade)

maior probabilidade)
    - revocação: predizer todos os exemplos como positivos
- Entretanto, otimizar os dois pode ser difícil

TRADE-OFF ENTRE PRECISÃO E REVOCAÇÃO

- Uma maneira de controlar o trade-off entre essas duas medidas é variar o limiar da fronteira de decisão
- Por exemplo, na regressão logística, o algoritmo dá como saída a probabilidade da classe
  - Normalmente assumimos que a fronteira está em predizer classe positiva se $h_\theta(x) > 0.5$.
  - Por exemplo, podemos aumentar precisão predizendo positivo se $h_\theta(x) > 0.8$, e aumentar

a revocação predizendo positivo se $h_\theta(x) > 0.2$

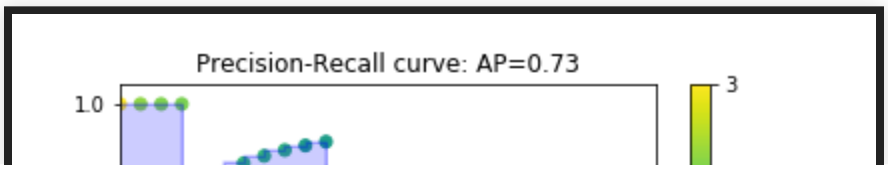
TRADE-OFF ENTRE PRECISÃO E REVOCAÇÃO

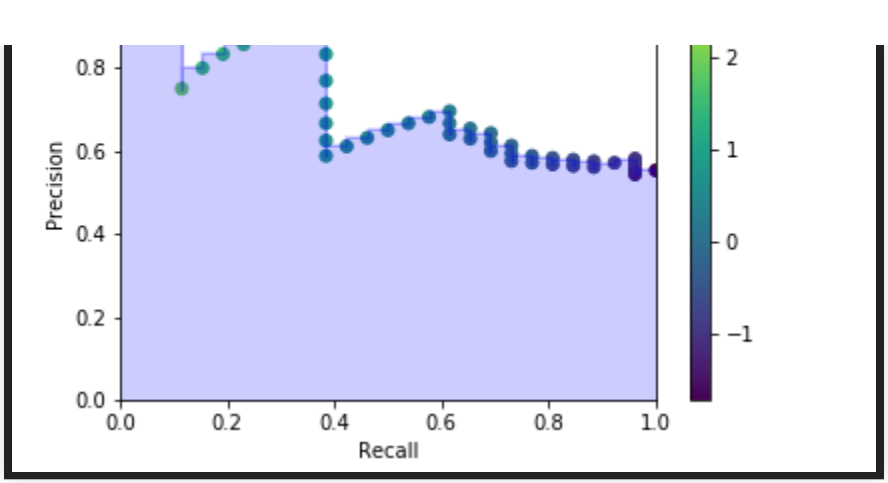
- A escolha do limiar é dependente do problema
- Podemos analisar o desempenho de um modelo considerando todos os possíves limiares
  - Curva precisão-revocação (precision-recall)
  - Precision (eixo y)
  - Recall (eixo x)
  - Para cada possível limiar, calcula-se um valor de precision e recall

PRECISON-RECALL CURVE

```
from sklearn.metrics import precision_recall_curve
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.datasets import make_classification
from sklearn import svm

X,y = make_classification(class_sep=0.5)

X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y,
                                                    test_size=.5

alg = svm.LinearSVC()
alg.fit(X_train, y_train)
y_score = alg.decision_function(X_test)
precision, recall, t = precision_recall_curve(y_test, y_score)
```

PRECISION RECALL CURVE




Precision
Recall
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
2
1
0
−1