EPI5717: Machine learning para predições em saúde

Aula 5

Prof. Dr. Alexandre Chiavegatto Filho

Otimização de Hiperparâmetros

Otimização de Hiperparâmetros

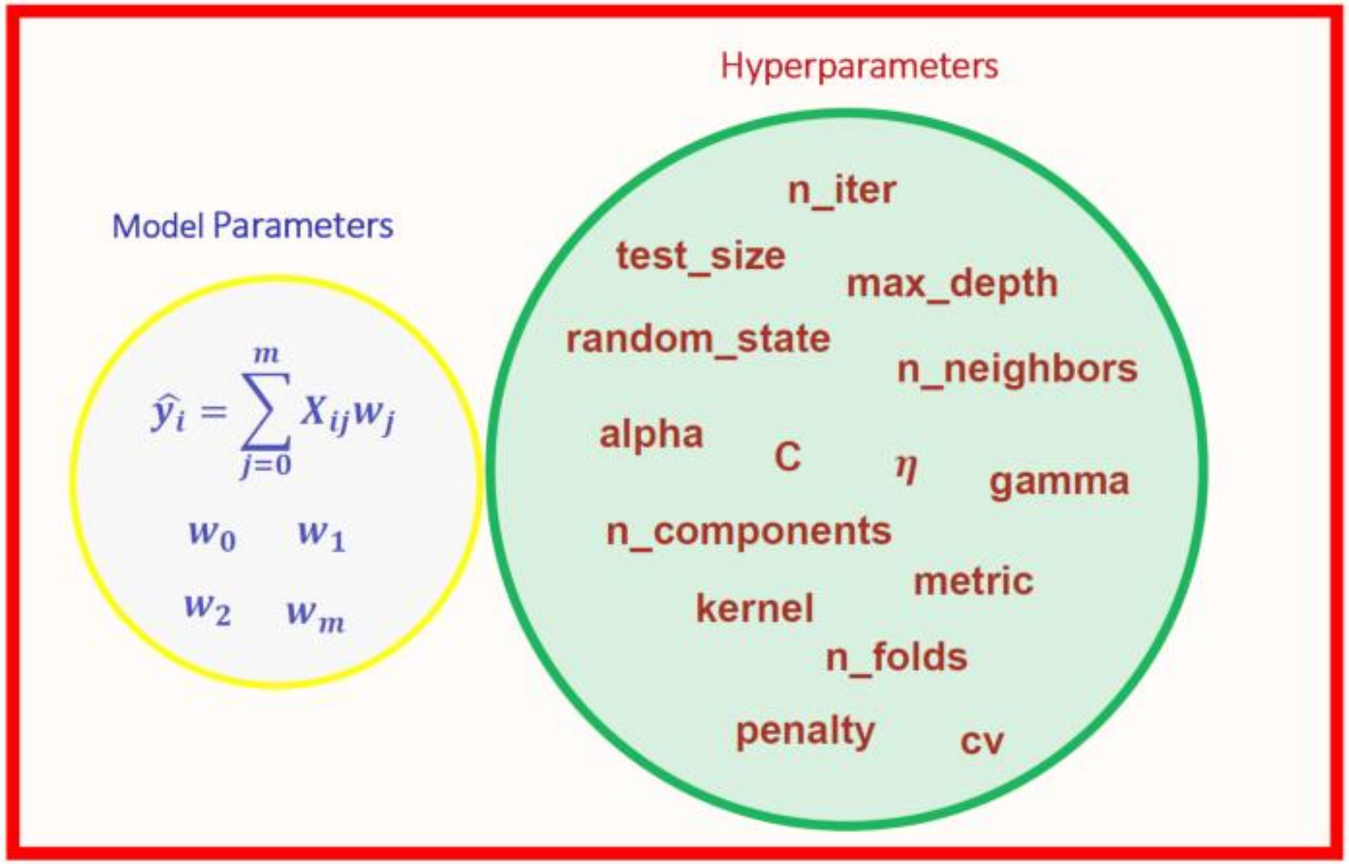
Relembrando...

Hiperparâmetros = configurações iniciais que utilizamos para regularizar um modelo e estimar seus parâmetros.

- Selecionamos manualmente antes de iniciarmos o treinamento

Parâmetros = valores estimados pelo modelo a partir do conjunto de dados e dos hiperparâmetros selecionados.

- Tem seus valores calculados durante a etapa de treinamento



Fonte: Tayo, 2019, Towards Data Science

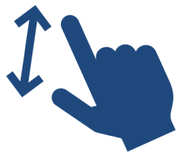
Otimização de Hiperparâmetros

Por que alteramos os hiperparâmetros?

Alteramos as configurações dos hiperparâmetros para obtermos melhores desempenhos na etapa de treinamento do algoritmo, e **possivelmente** no teste/validação.

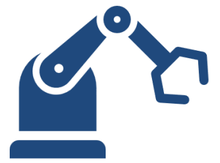
Buscamos uma combinação ótima que maximize a performance do modelo.

Otimização pode ser feita



Manualmente, testando diferentes combinações e avaliando o resultado de cada uma delas

De maneira automatizada, por meio de métodos como random search, grid search e otimização bayesiana

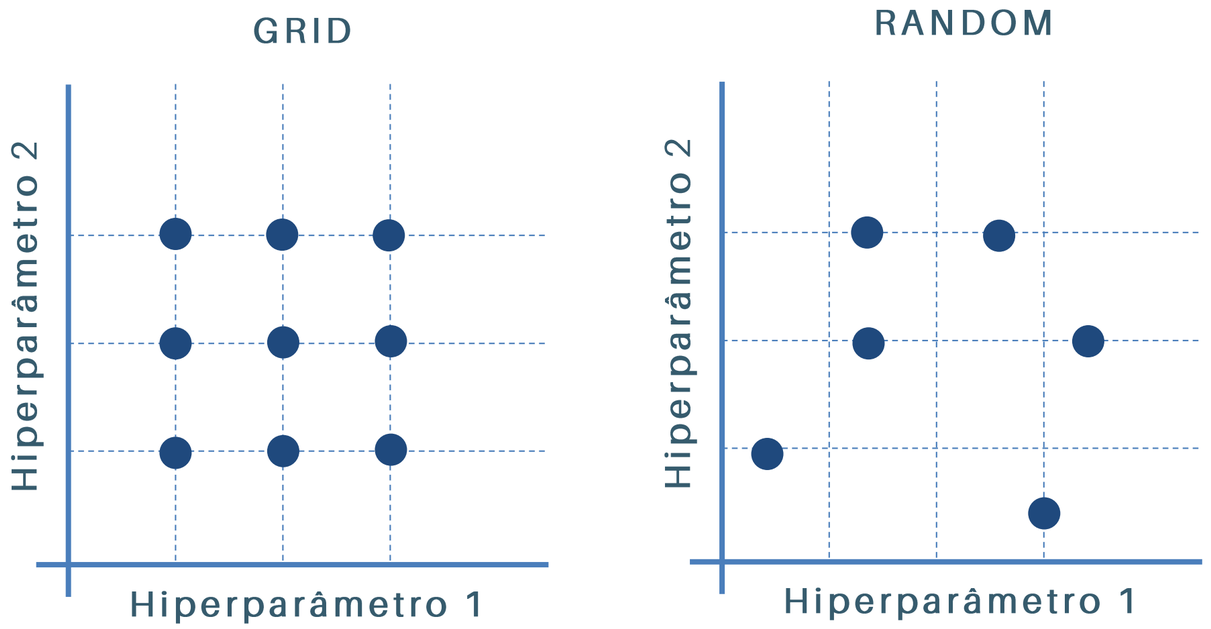


Otimização de Hiperparâmetros

Grid Search

Grid Search: método iterativo e automatizado de otimização que testa que testa todas as combinações dos hiperparâmetros a partir de uma grade de valores.

Passo 1 – Definição dos valores dos hiperparâmetros a serem utilizados no processo de otimização.
Passo 2 – Algoritmo (GridSearch) combina todos os valores de hiperparâmetros em uma grade de possibilidades e realiza os treinamentos com base nestas combinações
Passo 3 – Retorno da combinação de hiperparâmetros de melhor desempenho na etapa de treinamento



Otimização de Hiperparâmetros

Random Search

Random Search: método iterativo e automatizado de otimização que testa aleatoriamente as combinações entre os valores dos hiperparâmetros, de modo a se obter uma combinação ótima para determinado número de iterações.

Passo 1 – Definição dos valores dos hiperparâmetros a serem utilizados no processo de otimização

Passo 2 – Definição do número de iterações a serem feitas

Passo 3 – Algoritmo (RandomSearch) realiza sorteios nos valores de cada hiperparâmetros e cria combinações para treinamento dos dados para cada iteração

Passo 4 – Retorno da combinação de hiperparâmetros de melhor desempenho na etapa de treinamento

Otimização de Hiperparâmetros

Otimização Bayesiana

HYPEROPT

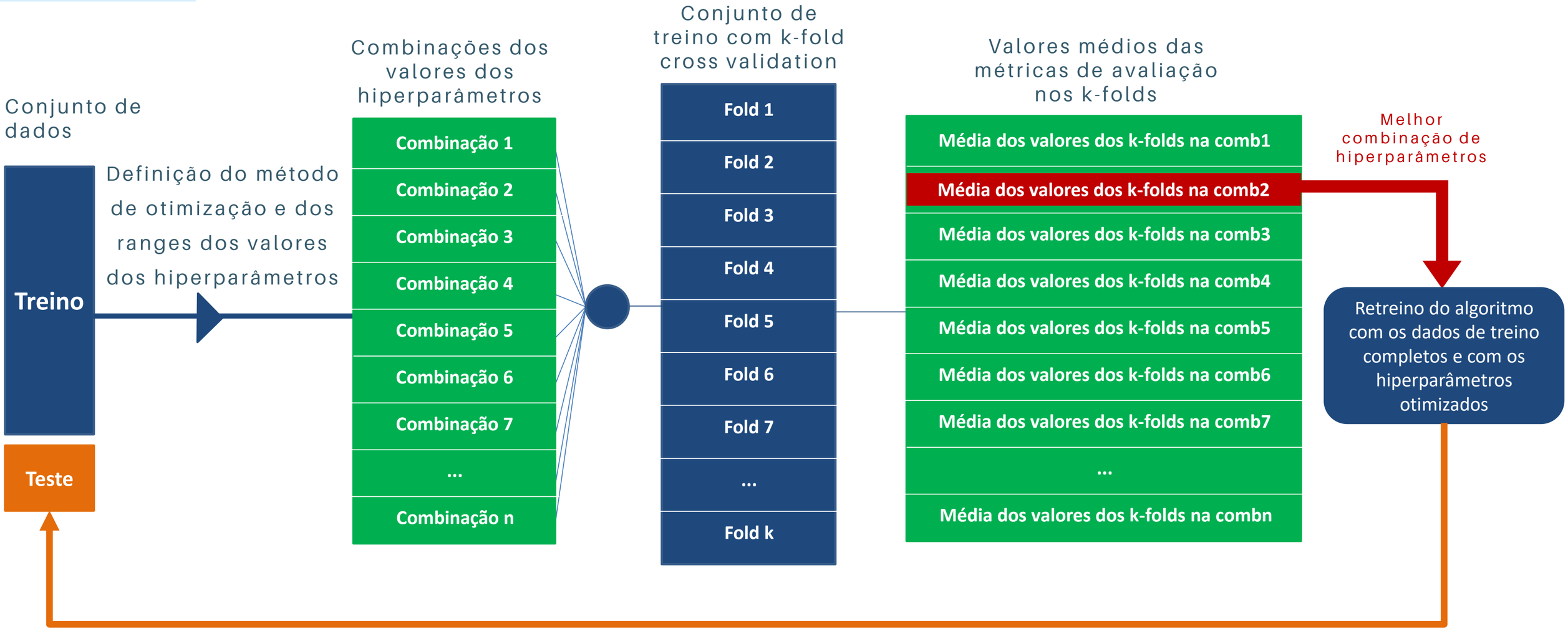
Otimização Bayesiana: considerando que a escolha pela melhor combinação de hiperparâmetros é um problema de otimização, a aplicação de métodos bayesianos busca encontrar a combinação de hiperparâmetros no ponto mínimo ou máximo da função objetivo.

Em geral, para aplicação da otimização de hiperparâmetros por métodos bayesianos, utilizamos o **Hyperopt**, uma biblioteca do python que trabalha com algoritmos como Tree of Parzen Estimators (TPE), Adaptive Tree of Parzen Estimators (ATPE) e Gaussian Processes (GP).

O **HyperOpt** requer 4 componentes essenciais para a otimização de hiperparmetros: o search space (valores possíveis que os hiperparâmetros podem assumir), a função de perda (função objetivo a ser minimizada), o algoritmo de otimização e um banco de dados.

Otimização de Hiperparâmetros

Funcionamento Geral



TIPOS DE MODELOS PREDITIVOS

Dois grandes grupos

1 Regressão

- Quando a variável a ser predita é quantitativa:
  - Ex: quantos meses de vida a pessoa tem pela frente, qual será o seu IMC no próximo ano, etc.

- A maioria dos algoritmos pode ser utilizada para os dois problemas.

TIPOS DE MODELOS PREDITIVOS

Dois grandes grupos

2 Classificação

- Quando a variável a ser predita é categórica:
  - Ex: óbito em 5 anos, incidência de doença em 10 anos, diagnóstico de doenças etc.

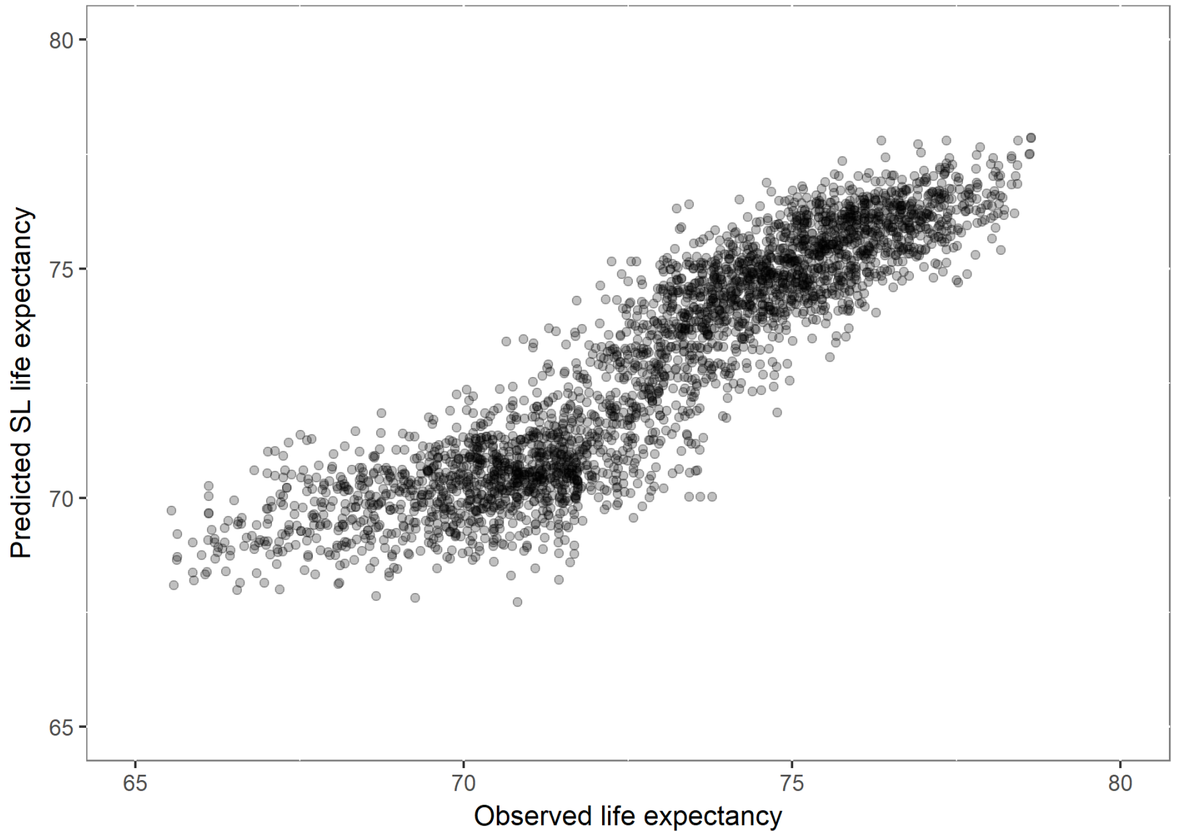
MEDIÇÃO DE PERFORMANCE EM PROBLEMAS DE REGRESSÃO

O mais comum é o uso da raiz quadrado do erro quadrático médio (RMSE, em inglês)

$$\mathrm{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(y_j - \hat{y}_j)^2}$$

- Subtrair cada valor real do seu valor predito e elevá-lo ao quadrado. Somar todos e dividir pelo número de observações. Tirar a raiz quadrada para retomar o valor à sua escala original.

Forma mais intuitiva de apresentar resultados de regressão: gráfico de dispersão da predição vs. realidade



MEDIÇÃO DE PERFORMANCE EM PROBLEMAS DE CLASSIFICAÇÃO


KEEP
CALM

MEDIÇÃO DE PERFORMANCE EM PROBLEMAS DE CLASSIFICAÇÃO

Modelos de classificação produzem dois resultados:

- Probabilidade individual.
- Categoria predita.

Primeira possibilidade

Acurácia

proporção de acertos

Problema: algoritmos são malandros.

- Se uma categoria ocorrer em 99% dos casos, o algoritmo vai predizer que todos os casos estão nessa categoria. Acurácia: 99%.

Porém: isso não nos traz nenhuma informação.

MEDIÇÃO DE PERFORMANCE EM PROBLEMAS DE CLASSIFICAÇÃO

Modelos de classificação produzem dois resultados:

- Probabilidade individual.
- Categoria predita.

Primeira possibilidade

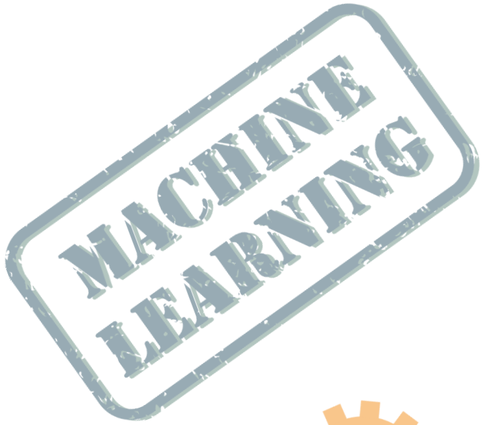
Acurácia

proporção de acertos

Ex: Identificar pacientes que possivelmente estão com câncer em amostra que só 1% tem câncer.

Algoritmo: “ninguém tem câncer”! Acurácia = 99%

- Esse algoritmo não nos diz nada.
- Preferimos um algoritmo com **menor** acurácia.
- Mas que acerte alguns/muitos casos de câncer.

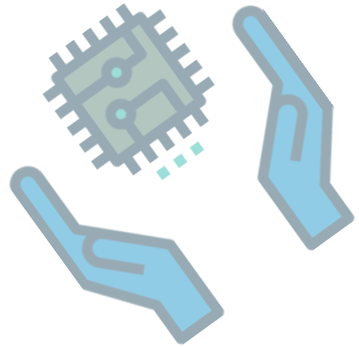


Machine Learning Mastery

Making Developers Awesome at Machine Learning

TOUR OF EVALUATION METRICS FOR IMBALANCED CLASSIFICATION

Author Jason Brownlee



Importante:

- Um classificador é tão bom quanto a métrica usada para avaliá-lo.
- Escolher a métrica adequada é um desafio para dados desbalanceados por duas razões:

1. A maioria das métricas assume uma distribuição balanceada;
2. Geralmente, nem todas as classes (e nem todos os erros de predição) têm a mesma importância quando os dados são desbalanceados.

Desafios das Métricas de Avaliação

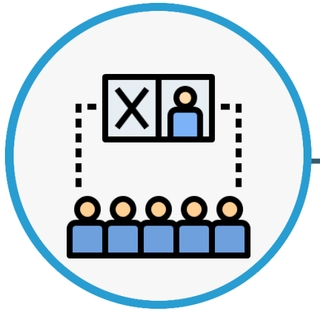
- Quantificam o desempenho de um modelo preditivo
- Orienta a modelagem
- Métricas iniciais: Acurácia e Erro
- Métricas fazem suposições sobre o desafio em questão
- Deve-se escolher a métrica que capture melhor o que é importante no problema de predição definido

CLASSIFICAÇÃO DESBALANCEADA

Classe majoritária
x
Classe minoritária

Métricas padrão podem não ser ideais (ex.: acurácia)

Erros da classe minoritária são mais importantes

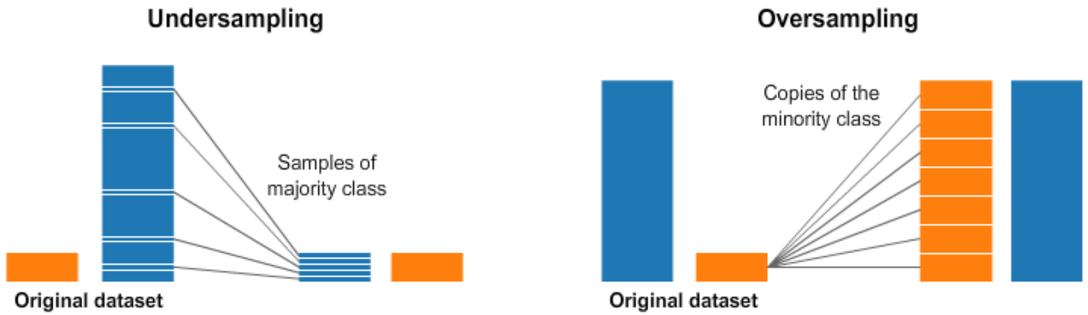


Conclusões enganosas

Classe Minoritária

Onde há menos dados

Técnicas de rebalanceamento



Alguns algoritmos na prática conseguem melhor performance com distribuição igual entre as categorias: desfecho binário com 50% cada.

Soluções:

- Down-sampling: selecionar amostra da classe mais frequente até se igualar à menos frequente.
- Up-sampling: amostragem com reposição da classe menos frequente até se igualar à mais frequente.
- Usar alguma combinação de de down e up-sampling.

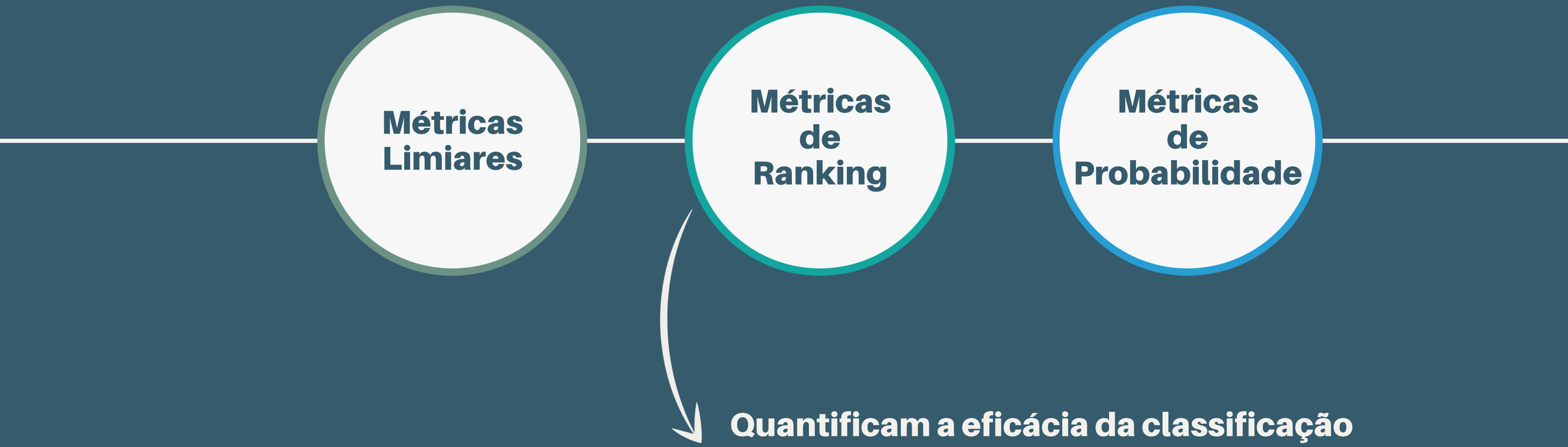
Importante: balanceamento não é feito no teste (= mundo real).

Taxonomia das métricas de avaliação

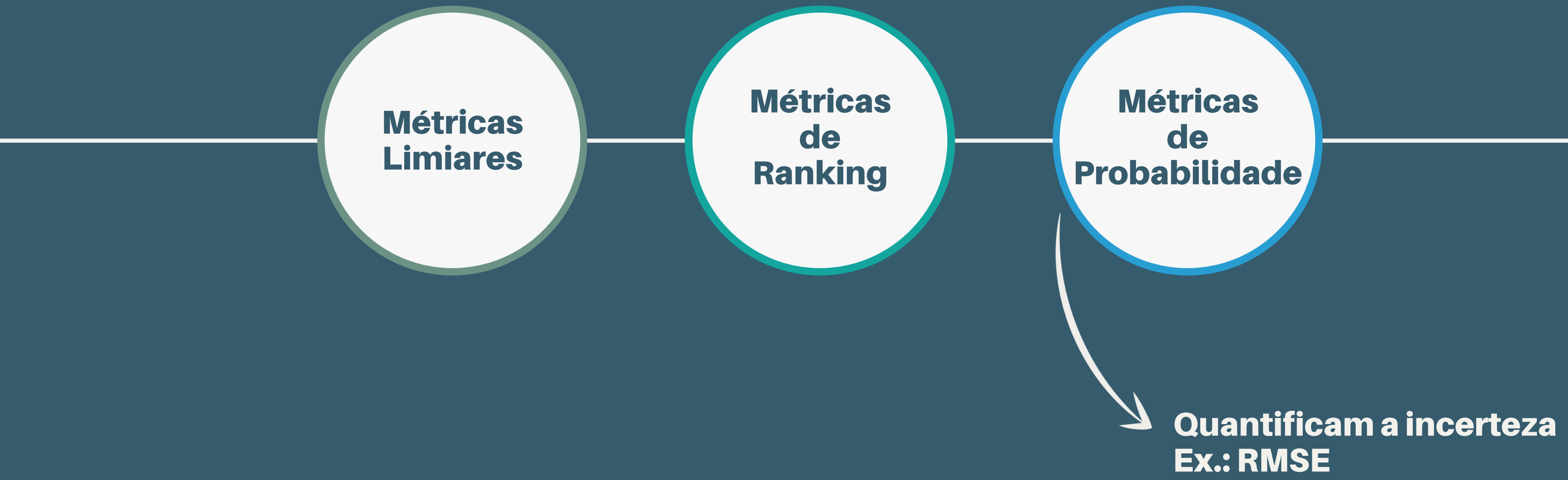
Proposta por Cesar Ferri, et al. (2008)

Taxonomia das métricas de avaliação

Taxonomia das métricas de avaliação



Taxonomia das métricas de avaliação



Métricas Limiares

Acurácia = $\frac{\text{Predições corretas}}{\text{Total de predições}}$

- Quase sempre inadequada em saúde.
- Aponta a performance na classe majoritária.

Erro = $\frac{\text{Predições incorretas}}{\text{Total de predições}}$

- Erro da acurácia da classificação.

MEDIÇÃO DE PERFORMANCE EM PROBLEMAS DE CLASSIFICAÇÃO

Matriz de confusão:

- Análise de concordância visual entre predição e realidade.

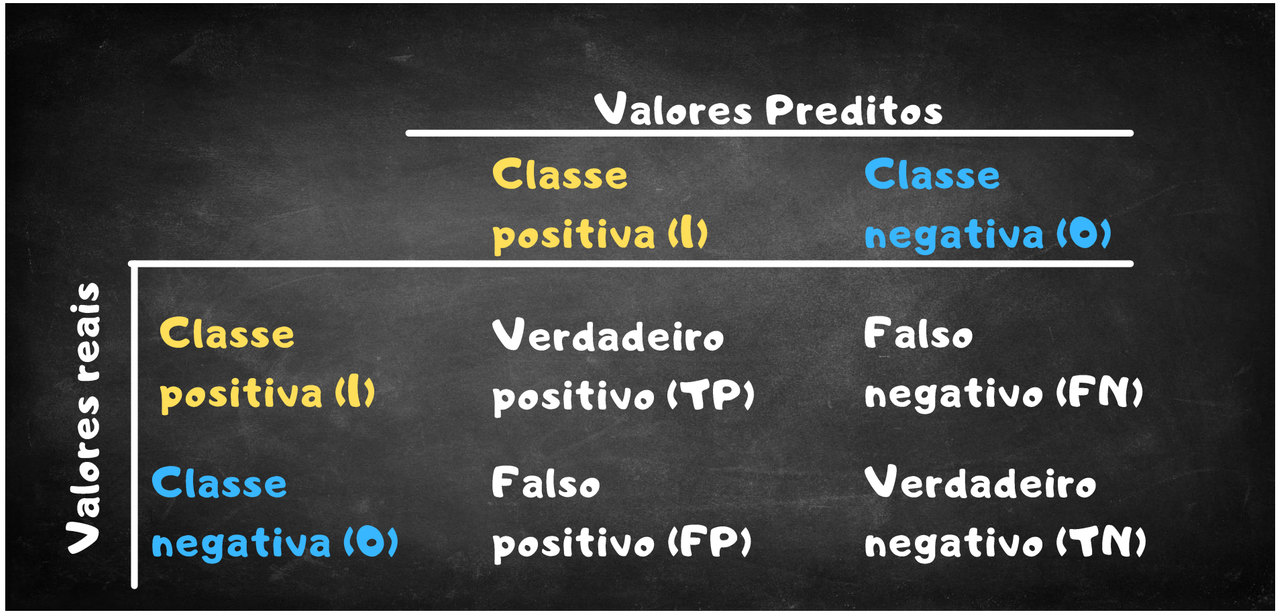
Realidade	Predição	
	Câncer	Sem câncer
Câncer	24	36
Sem câncer	10	130

Métricas Limiares

- Com dados desbalanceados tipicamente temos:

Classe majoritária = Resultado negativo = Classe 0
Classe minoritária = Resultado positivo = Classe 1

- Melhor compreensão por meio da matriz de confusão:

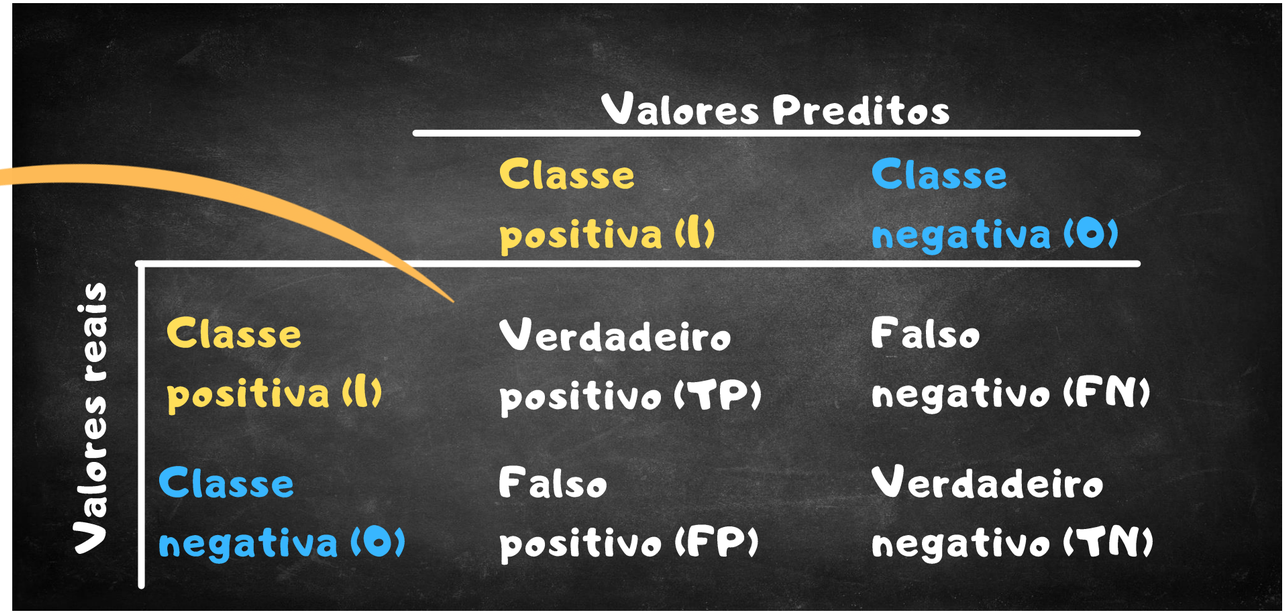


Métricas Limiares

- Com dados desbalanceados tipicamente temos:

Classe majoritária = Resultado negativo = Classe 0
Classe minoritária = Resultado positivo = Classe 1

- Melhor compreensão por meio da matriz de confusão:



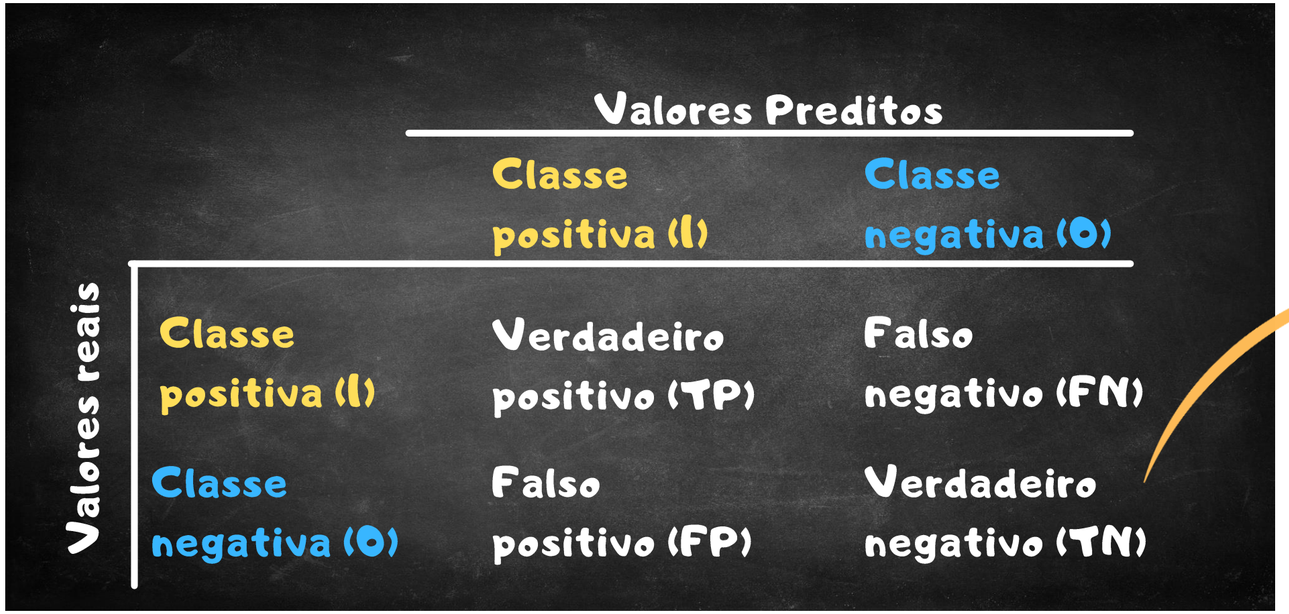
Sensibilidade = $\frac{TP}{TP+FN}$

Métricas Limiares

- Com dados desbalanceados tipicamente temos:

Classe majoritária = Resultado negativo = Classe 0
Classe minoritária = Resultado positivo = Classe 1

- Melhor compreensão por meio da matriz de confusão:



$$\text{Especificidade} = \frac{TN}{FP+TN}$$

Métricas Limiares

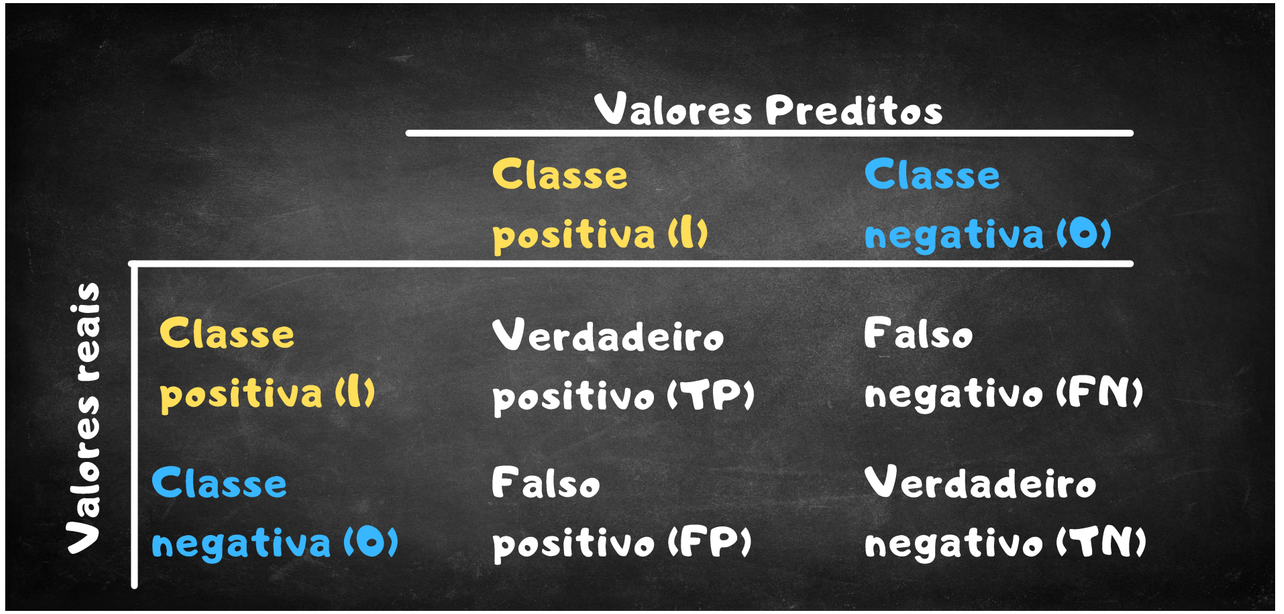
- Com dados desbalanceados tipicamente temos:

Classe majoritária = Resultado negativo = Classe 0
Classe minoritária = Resultado positivo = Classe 1

Sensibilidade e Especificidade podem ser combinadas em uma pontuação de equilíbrio (média geométrica):

G-mean = $\sqrt{}$ (sensibilidade x Especificidade)

- Melhor compreensão por meio da matriz de confusão:

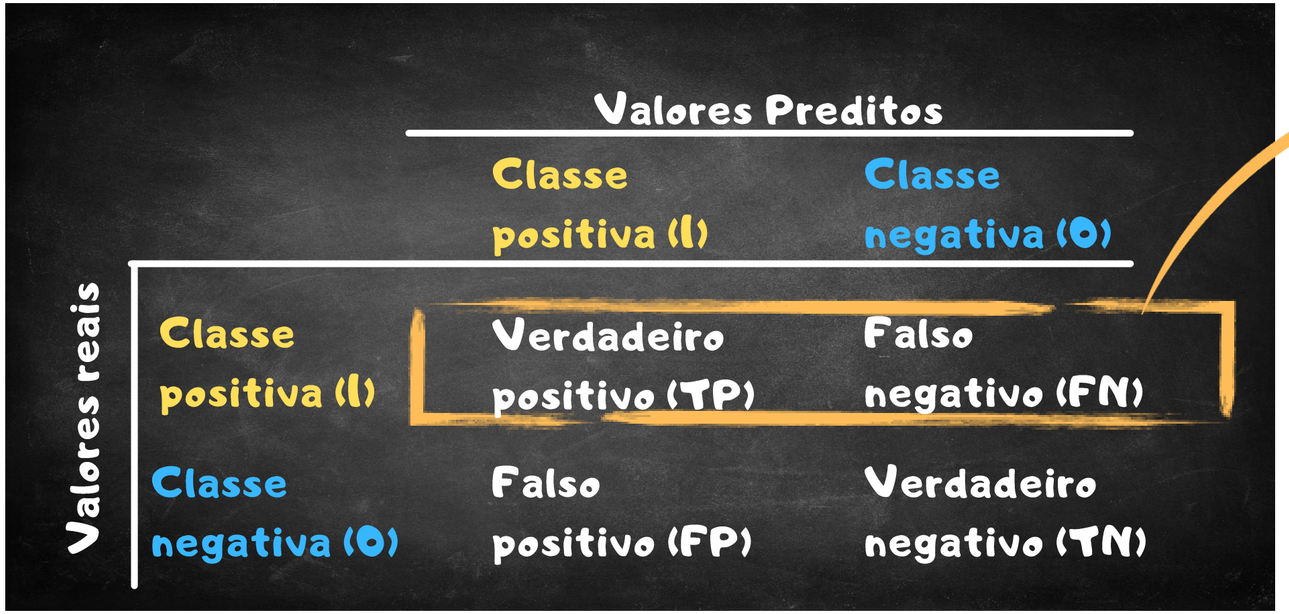


Métricas Limiares

- Com dados desbalanceados tipicamente temos:

Classe majoritária = Resultado negativo = Classe 0
Classe minoritária = Resultado positivo = Classe 1

- Melhor compreensão por meio da matriz de confusão:



= sensibilidade

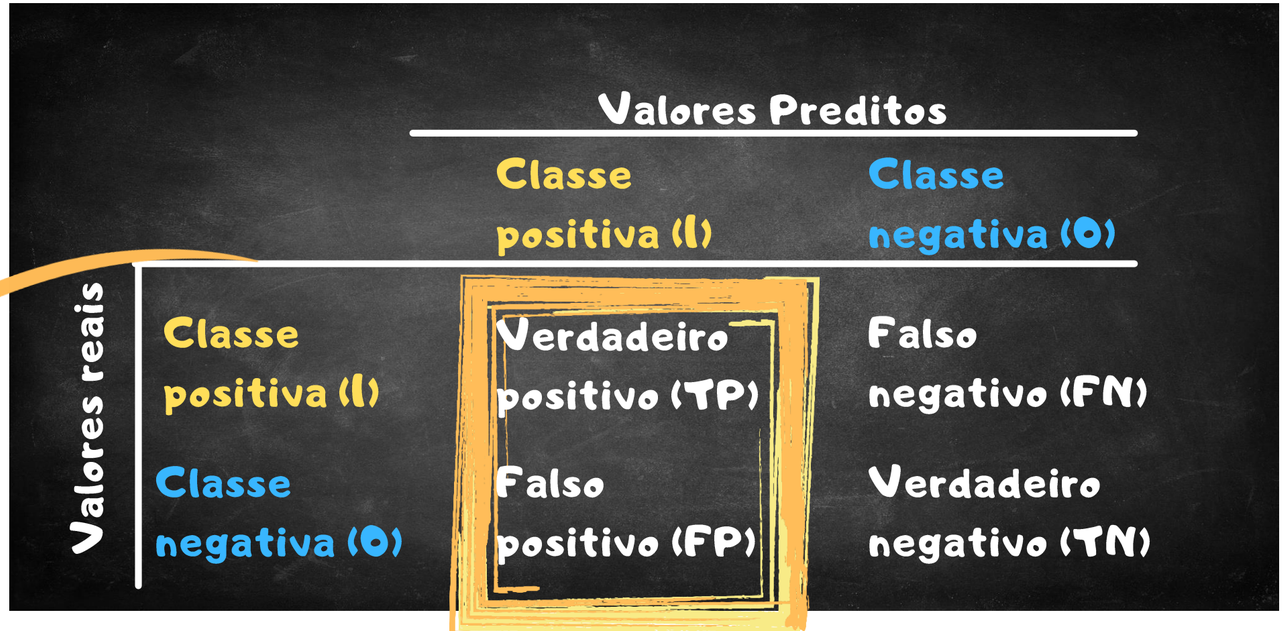
Recall = $\frac{TP}{TP+FN}$

Métricas Limiares

- Com dados desbalanceados tipicamente temos:

Classe majoritária = Resultado negativo = Classe 0
Classe minoritária = Resultado positivo = Classe 1

- Melhor compreensão por meio da matriz de confusão:



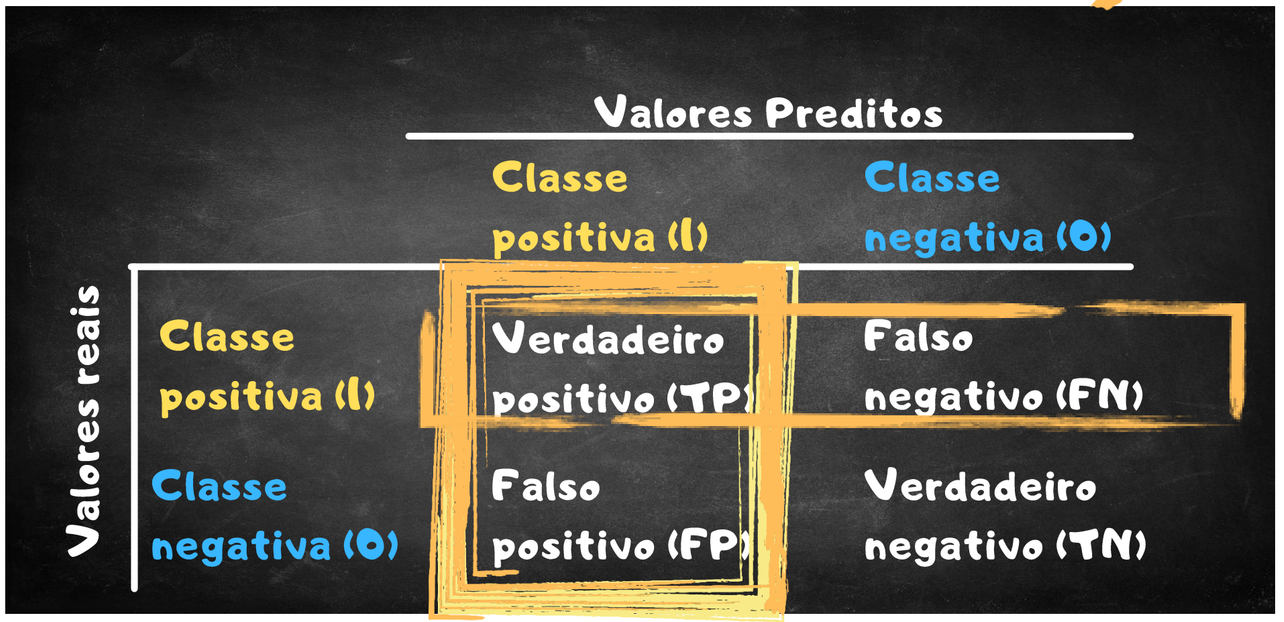
Precisão = $\frac{TP}{TP+FP}$

Métricas Limiares

- Com dados desbalanceados tipicamente temos:

Classe majoritária = Resultado negativo = Classe 0
Classe minoritária = Resultado positivo = Classe 1

- Melhor compreensão por meio da matriz de confusão:



Precisão e Recall podem ser combinadas em um único escore:

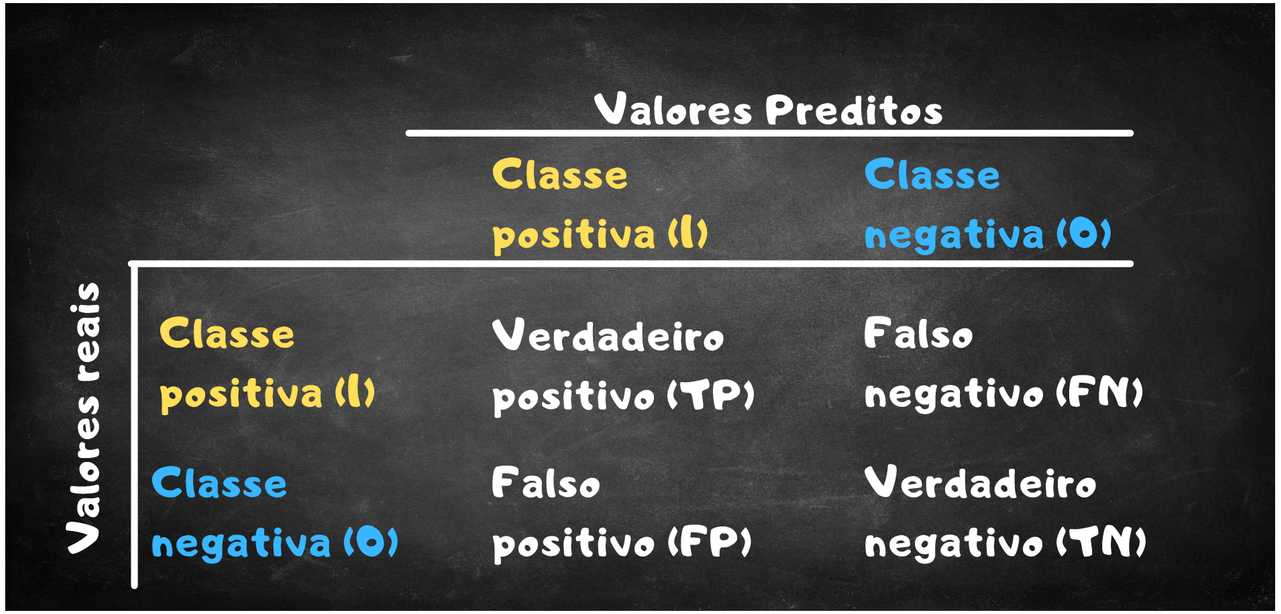
$$\text{F-score} = \frac{(2 * \text{Precisão} * \text{Recall})}{(\text{Precisão} + \text{Recall})}$$

Métricas Limiares

- Com dados desbalanceados tipicamente temos:

Classe majoritária = Resultado negativo = Classe 0
Classe minoritária = Resultado positivo = Classe 1

- Melhor compreensão por meio da matriz de confusão:



= precisão

Valor Predito Positivo = $\frac{TP}{TP+FP}$

Valor Predito Negativo = $\frac{TN}{TN+FN}$

Métricas Limiares

- O F-score é uma métrica popular para conjuntos de dados desbalanceados.
- Média hamônica entre precisão e recall.

$$F1 = \frac{2 \times precision \times recall}{precision + recall}$$

Métricas Limiares adicionais

- Kappa, Macro-Average Accuracy, Mean-Class-Weighted Accuracy, Optimized Precision, Adjusted Geometric Mean, Balanced Accuracy, entre outras.

MEDIÇÃO DE PERFORMANCE EM PROBLEMAS DE CLASSIFICAÇÃO

Para alguns desfechos de saúde é fundamental pensar nas diferentes métricas

Por exemplo

- Teste de HIV/AIDS é importante diminuir falsos negativos (falsos positivos são um problema menor porque o teste será refeito).

- Indicação de cuidados paliativos: importante diminuir falsos positivos (não indicar seu início quando o tratamento aumentará a sobrevida).

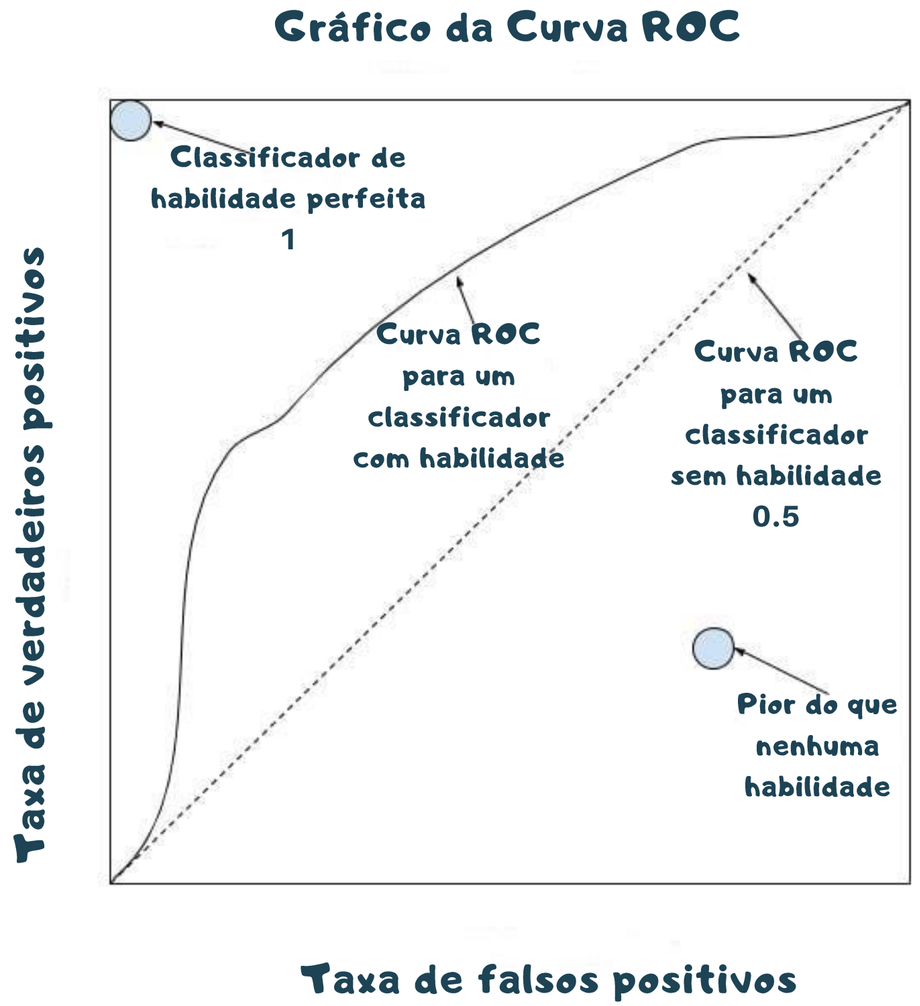
Métricas Limiares

Limitação

Assumem que a distribuição das classes no treino
será a observada na predição real

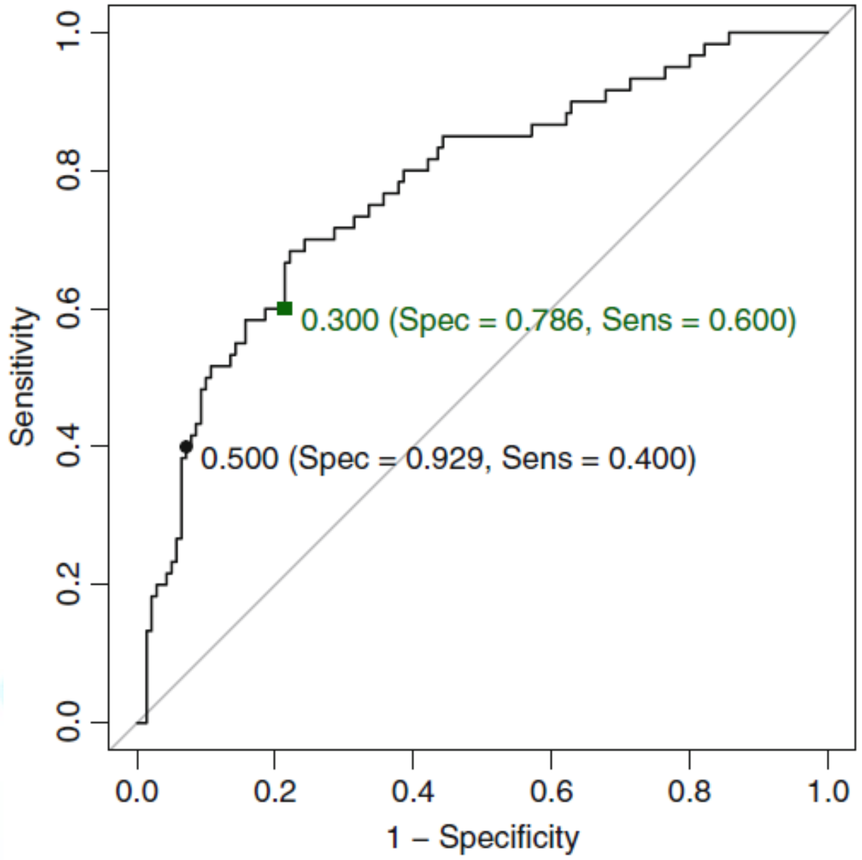
Métricas de Ranking

- Quão bem o modelo discrimina os exemplos
- Predição de uma pontuação ou probabilidade em relação à classe
- Métricas mais utilizadas: Curva ROC (Receptor Operating Characteristic) ou AUC (área sob a curva ROC)
- A curva ROC é um gráfico que resume o comportamento do modelo



Área abaixo da curva ROC

- Matriz de confusão é baseada em o algoritmo dar > 50% de probabilidade.
- É possível melhorar a sensibilidade diminuindo o threshold?
  - Perfeito: 1,0
  - Ineficiente: 0,5
- Intuição: entre duas pessoas escolhidas aleatoriamente (em que uma tem o desfecho e a outra não), a AUC é a proporção de vezes que a predição será maior para a pessoa que de fato tem o desfecho.

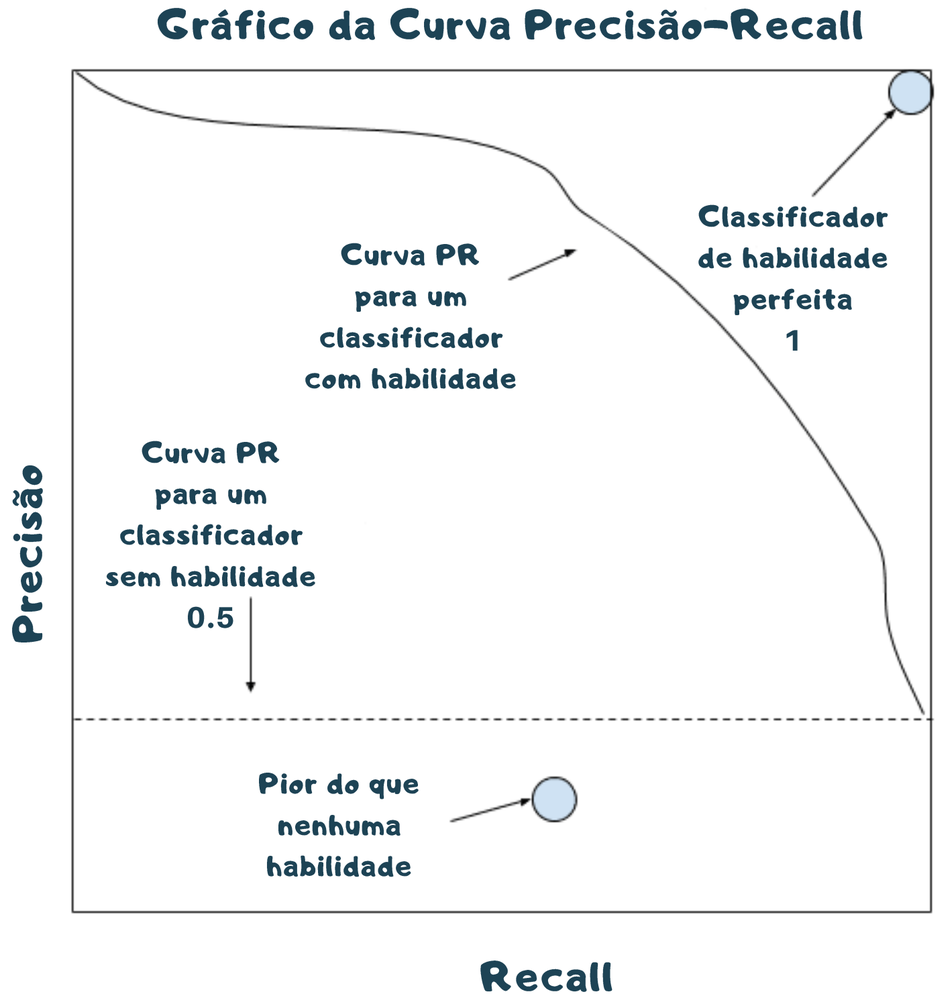


Métricas de Ranking

- ROC e AUC podem ser otimistas quando o número de exemplos da classe minoritária é pequeno

- Uma alternativa é o uso da Curva de Precisão-Recall (concentra o desempenho na classe minoritária)

- PR AUC = área sob a curva de precisão-recall



Métricas de Probabilidade

- Medem o desvio da probabilidade real
- São utilizadas quando o interesse está na incerteza que o modelo tem nas predições
- Avaliar um modelo com base nas probabilidades preditas requer que as probabilidades sejam calibradas
- Alguns classificadores são treinados usando uma estrutura probabilística, tendo a probabilidade já calibrada
- Exemplos de classificadores que precisam ser calibrados: SVM e KNN

Métricas de Probabilidade

Classificação Binária, onde **y** são os valores esperados e **yhat** os valores preditos.

LogLoss = -((1 – y) * log(1 – yhat) + y * log(yhat))

Generalizando para várias classes temos:

LogLoss = -(**sum c in C y_c * log(yhat_c)**)

- Resume a diferença média entre duas distribuições de probabilidade
- LogLoss = 0.0 (classificador perfeito)
- Quanto mais positivos os resultados do LogLoss, pior é o classificador

Métricas de Probabilidade

$$BrierScore = \frac{1}{\mathrm{N}} * \sum_{i=1}^{N} (yhat_i - y_i)^2$$

- Erro quadrático médio entre as prob. reais e as prob. preditas para a classe positiva
- Está focado na classe positiva (minoritária), sendo preferível ao LogLoss que foca em toda a distribuição de probabilidade
- Classificador perfeito ⇨ Brier Score = 0.0
- As diferenças de Brier Score para diferentes classificadores podem ser pequenas

$$BrierSkillScore = 1 - \frac{BrierScore}{BrierScoreRef}$$

- Usa um score de referência
- Melhor classificador BSS = 1.0
- Pior classificador BSS = 0.0

MEDIÇÃO DE PERFORMANCE EM PROBLEMAS DE CLASSIFICAÇÃO

Solução para identificar onde a predição está errando.

Gráfico de calibração:

- Separar observações segundo grupos de probabilidade predita.

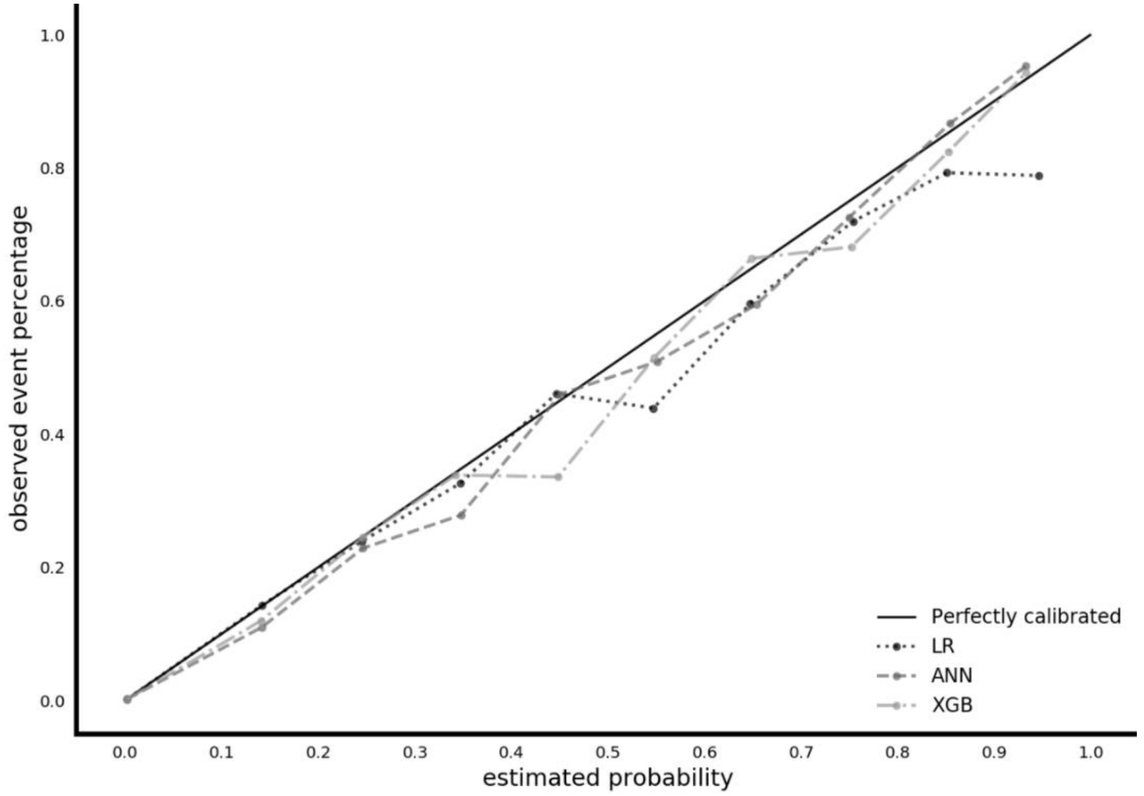
- Ex: [0 – 10%], ...]90 – 100%]

- Em cada grupo identificar quantos de fato apresentaram o evento.

Neonatal mortality prediction with routinely collected data

Batista AFM, Diniz CSG, Bonilha EA, Kawachi I, Chiavegatto Filho ADP.

BMC Pediatrics 2021;21(32)



- Predizer risco de mortalidade neonatal (até 28 dias) utilizando dados de nascimentos (SINASC) e óbitos (SIM) do município de São Paulo.

    - 2012 a 2017 (1.202.843 nascimentos e 7.282 óbitos neonatais).

    - Preditores: dados rotineiramente coletados pelo SINASC.

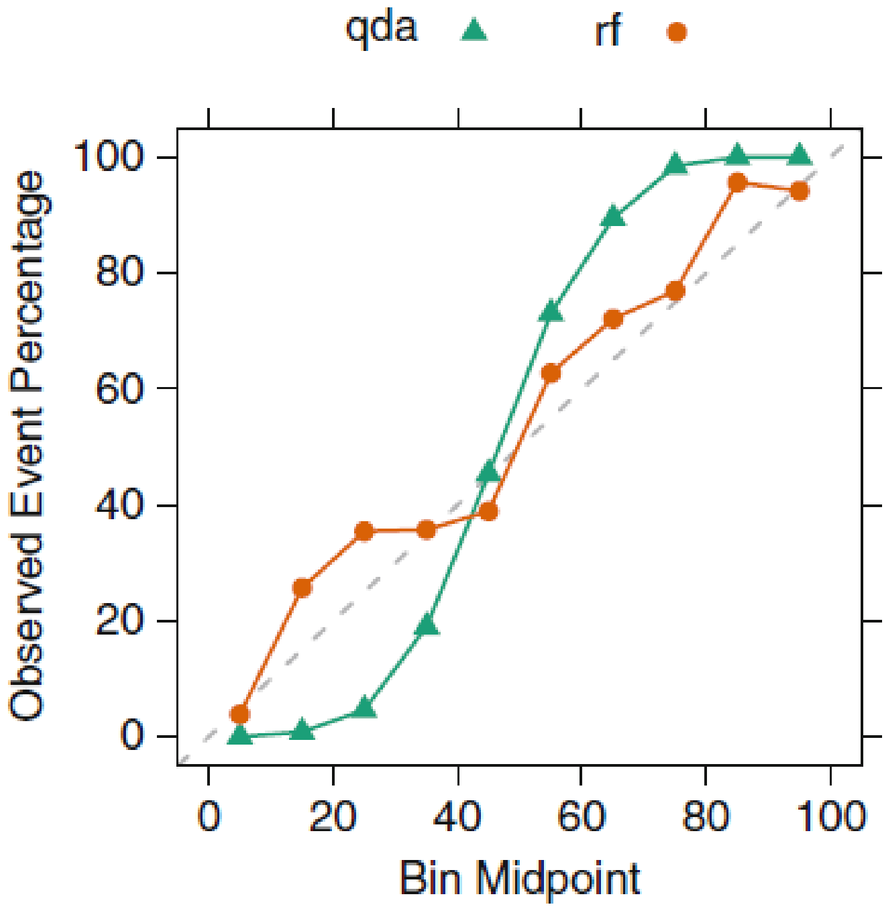
    - AUC: 0,97 (mesmo com as 5 variáveis mínimas da OMS: 0,91).

    - 5% maior risco: 90% de todos os casos.

MEDIÇÃO DE PERFORMANCE EM PROBLEMAS DE CLASSIFICAÇÃO

Gráfico de calibração (quadratic discriminant analysis e random forests).

Qual o melhor?



Como escolher as métricas de avaliação?

Importante!

Converse com os pesquisadores responsáveis para ter claro o que importa no modelo.

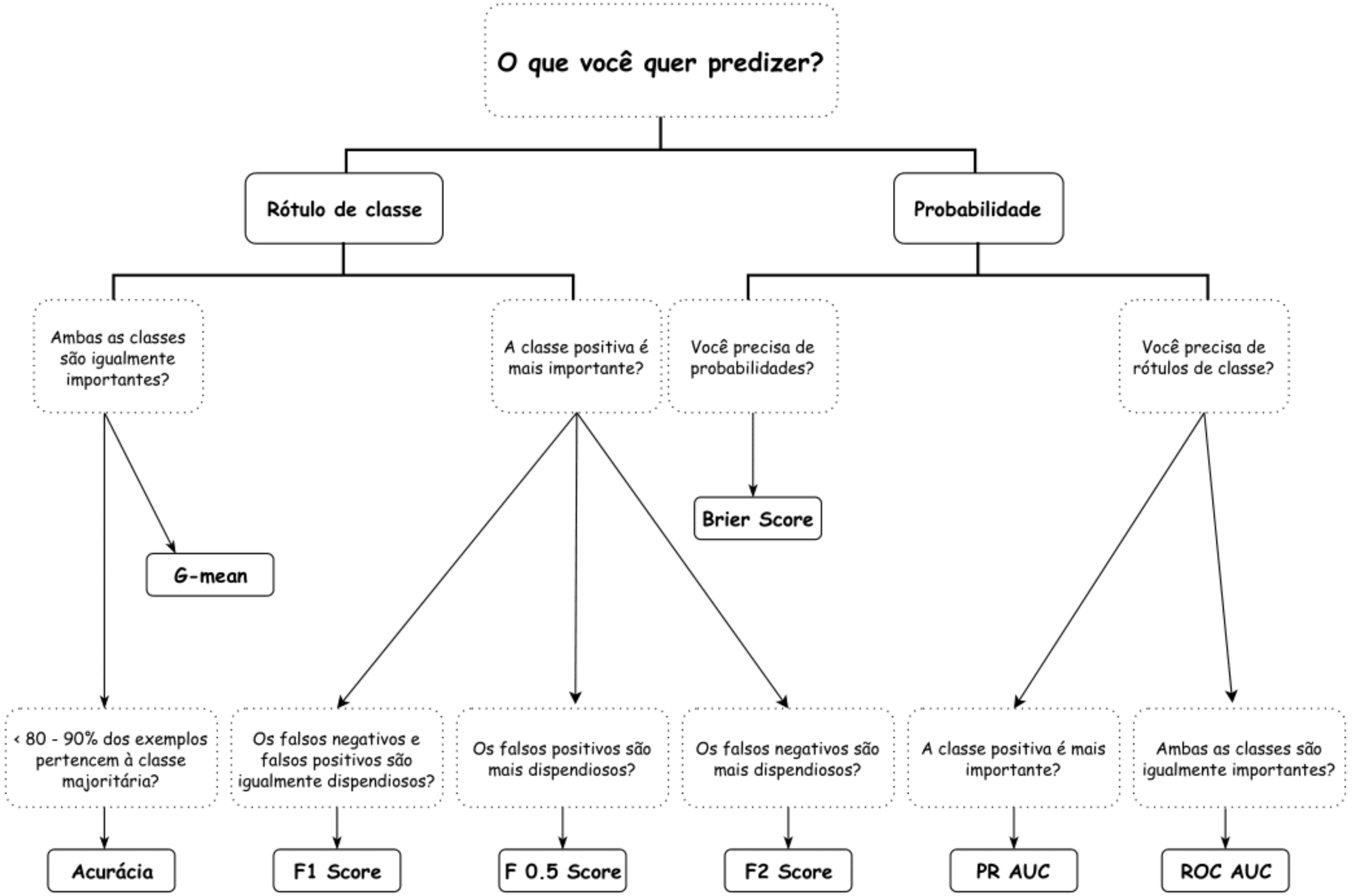
Teste

Selecione algumas métricas e teste em diferentes cenários.

A literatura pode ajudar

Uma opção é revisar o que a literatura diz à respeito sobre as métricas mais comumente usadas.

Como escolher as métricas de avaliação?



Artigos da próxima semana

Site:

machinelearningmastery.com/tour-of-evaluation-metrics-for-imbalanced-classification/

- Autor Jason Brownlee
- Atualizado em 01 de maio de 2021

LABDAPS

LABORATÓRIO DE BIG DATA E ANÁLISE PREDITIVA EM SAÚDE

Obrigado!

Alexandre Chiavegatto Filho

http://labdaps.fsp.usp.br

@SaudenoBR

@labdaps

alexdiasporto@usp.br