Universidade Federal do Paraná

Laboratório de Estatística e Geoinformação - LEG

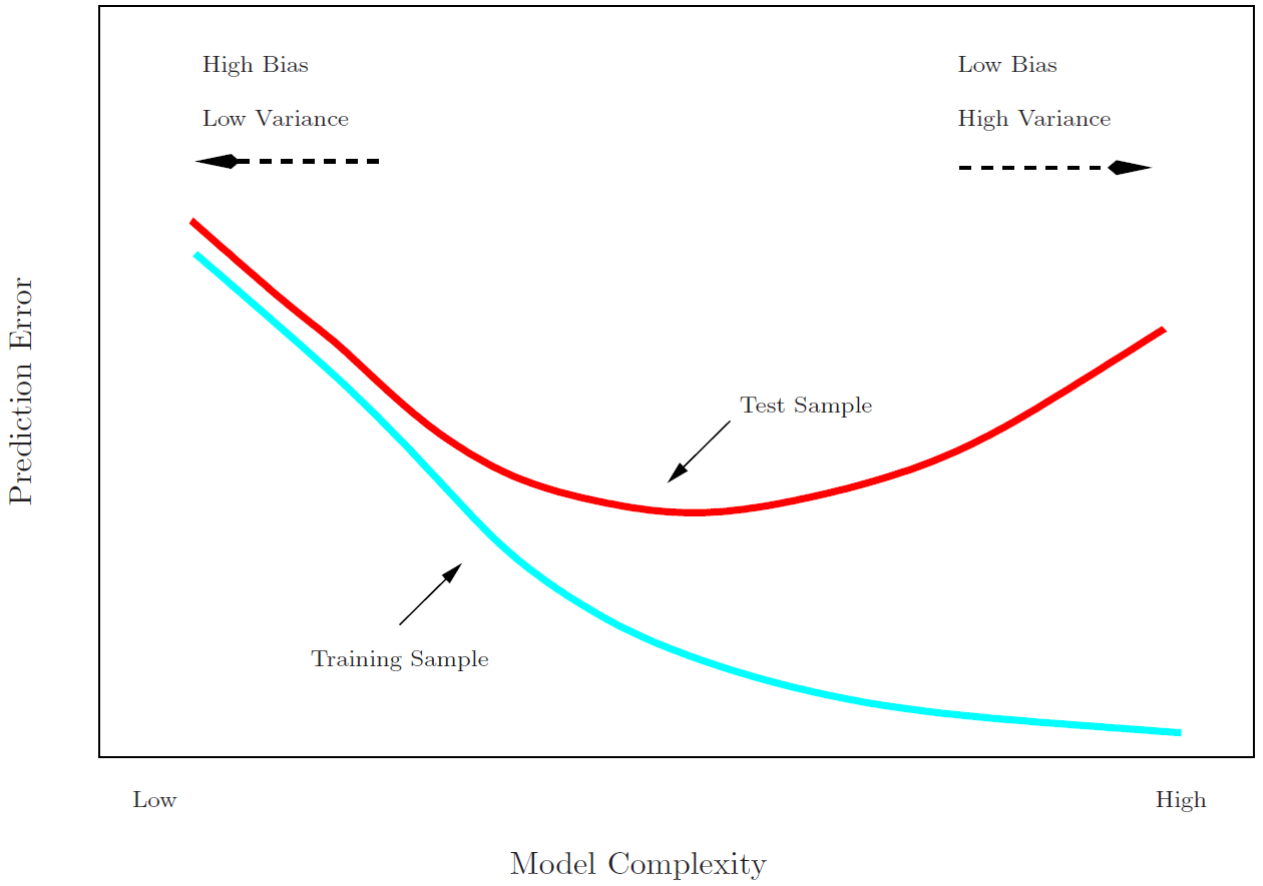
Métodos de reamostragem

Prof.: Eduardo Vargas Ferreira

Validação cruzada e bootstrap

- Nesta seção vamos discutir dois métodos de reamostragem: validação cruzada e bootstrap;
- Tais métodos reajustam o modelo de interesse a partir de amostras dos dados de treino, a fim de obter informações adicionais sobre o modelo;
- Por exemplo, fornecem estimativas do erro de predição da amostra de teste, e o vício e desvio padrão das estimativas dos parâmetros;
- Lembrando:
  - ⋆ **Erro do teste:** média do erro resultante da predição de uma nova observação (que não fazia parte dos dados de treino);
  - ⋆ **Erro do treino:** é calculado mediante aplicação do método estatístico nos dados de treino.

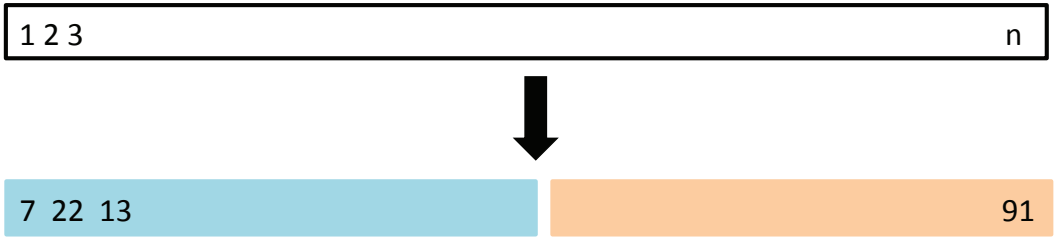
Dados de treino *x* Dados de teste



- Alguns métodos fornecem um **ajuste matemático** para a taxa de erro de treinamento, a fim de estimar a taxa de erro do teste (e.g. **C_p, AIC, BIC**);

Validação cruzada holdout

- Nesta abordagem dividimos os dados em duas partes: **treinamento** e **validação**;



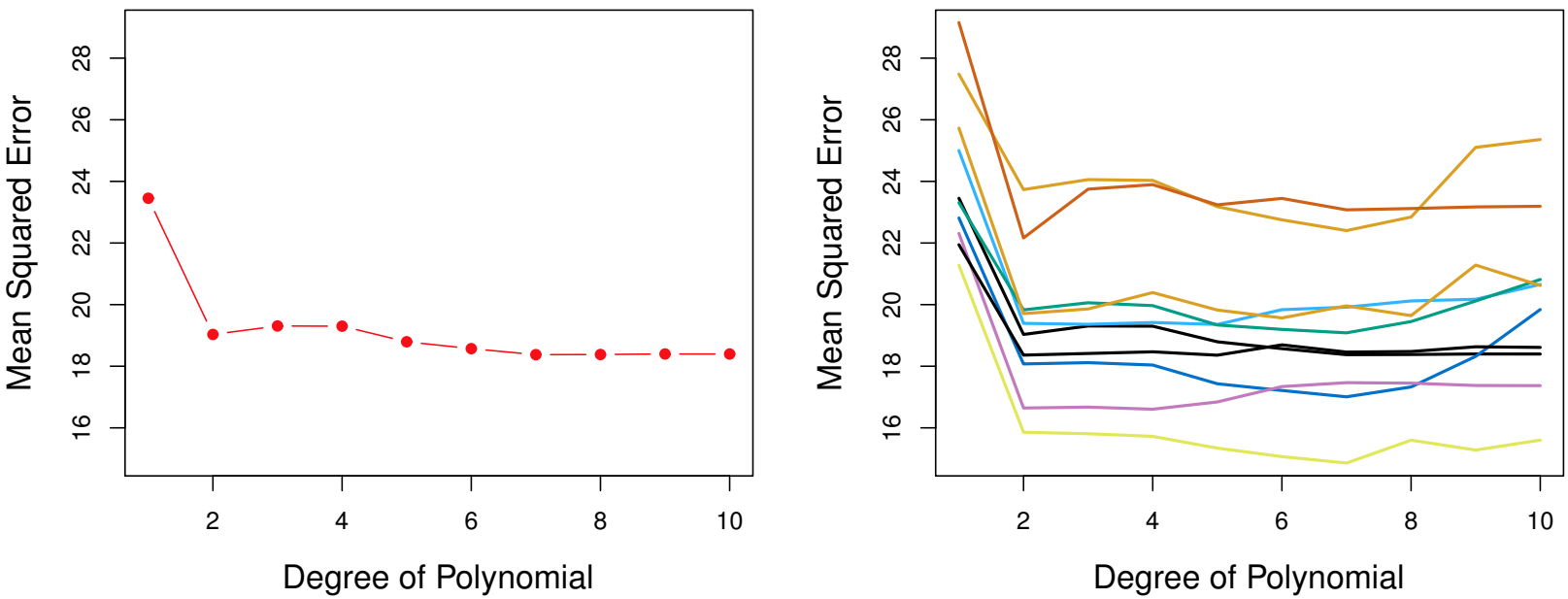
- O modelo é ajustado utilizando os dados de treinamento, e com o modelo ajustado fazemos predições nas observações dos dados de validação;

- Erro resultante dos dados de validação fornece uma estimativa do erro dos dados de **teste**;

- Tipicamente, utilizamos o **erro quadrado médio** (EQM) no caso de variáveis quantitativas e **taxa de classificação incorreta** nos de resposta qualitativa (discreta);

Exemplo: `Auto` data set

- Queremos comprar termos polinomiais de diferentes ordens em uma regressão linear;
- Separamos aleatoriamente as 392 observações em duas amostras: treinamento (com 196 dados) e validação (196 dados);



- O gráfico da esquerda com **divisão única** e da direita **divisão múltipla**.

Inconvenientes desta abordagem de validação

- A estimativa do erro de validação pode ser altamente variável, dependendo do conjunto de treinamento e validação;
- Nesta abordagem apenas uma parte da amostra treino (aquela não utilizada no treinamento) é utilizada para ajustar o modelo;
- Este fato sugere que a estimativa do erro do teste seja superestimada, porque o tamanho da amostra pode ser muito reduzido com relação aos dados totais

Menos dados $\Rightarrow$ geralmente menos informação $\Rightarrow$ maior variabilidade

- Para minimizar esses problemas, uma das abordagens de validação cruzada é por $k - fold$;

Validação cruzada por $k - fold$

- $k - fold$ é amplamente usado para estimar o erro do teste;
- As estimativas podem ser usadas para seleção do melhor modelo, e fornecer uma ideia do erro do teste para o modelo escolhido;
- O método consiste em dividir os dados em k partes iguais. Ajusta-se o modelo com $k - 1$ partes (combinadas), e uma é destinada para às predições;
- Isto é feito para cada parte $k = 1, \ldots, K$, e em seguida os resultados são combinados;

1	2	3	4	5
Validation	Train	Train	Train	Train

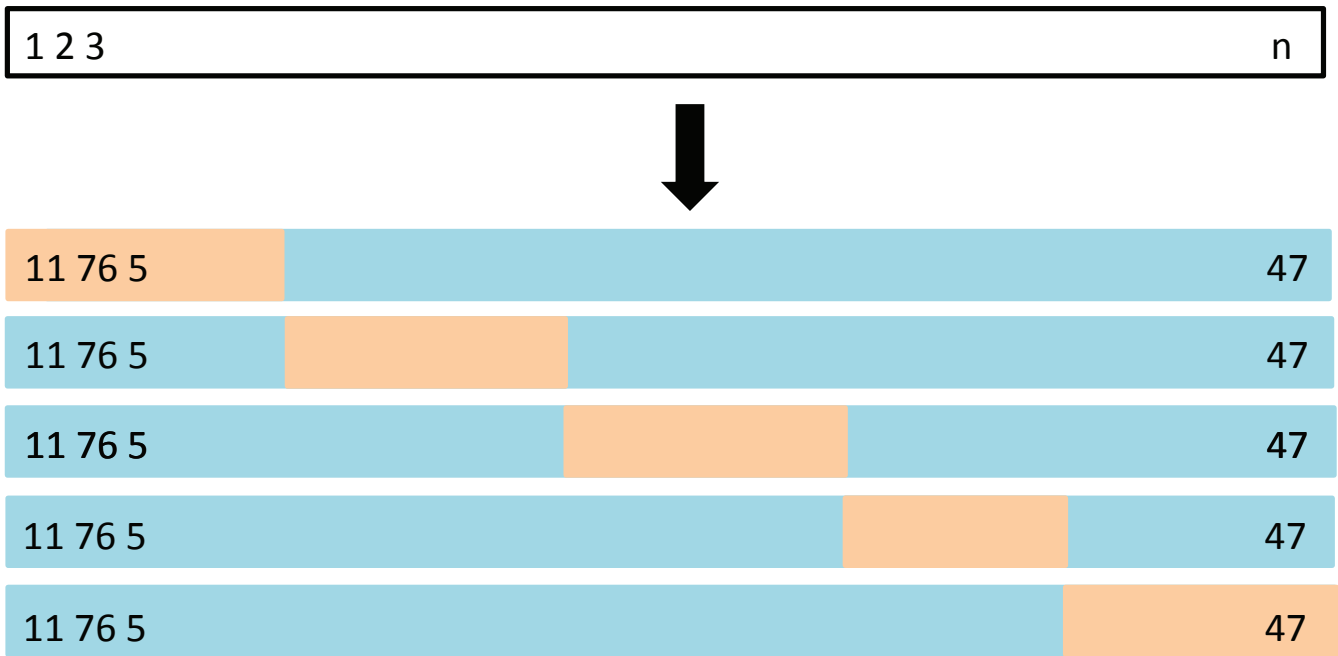
Validação cruzada por $k-$ *fold*

- Sejam as K partes denotadas por $C_1, C_2, \ldots, C_K$, em que C_k representa o índice da k-ésima parte;
- Considere que temos n_k observações na parte k: se n é múltiplo de K, então $n_k = n/K$;
- Calcule:

$$CV_{(K)} = \sum_{k=1}^{K} \frac{n_k}{n} EQM_k.$$

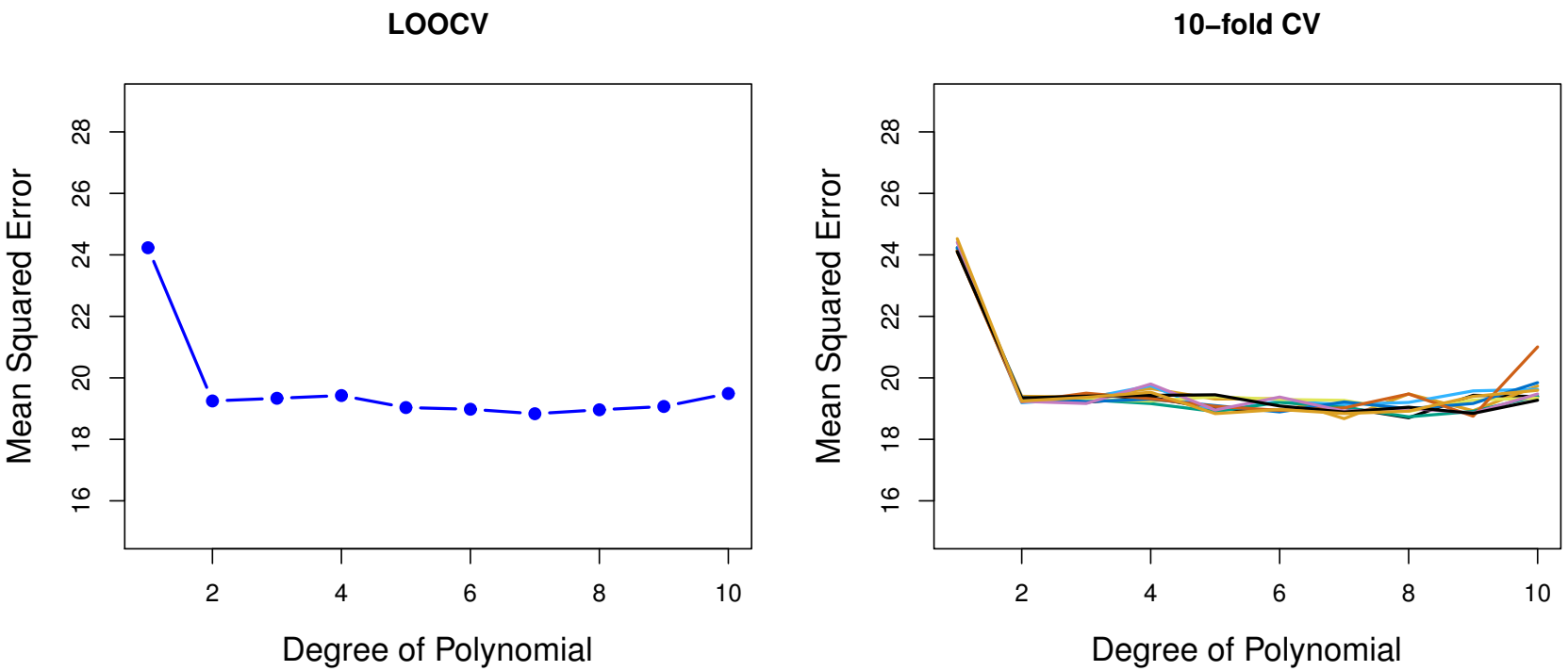
- O $EQM_k = \sum_{i \in C_k} (y_i - \hat{y}_i)^2 / n_k$, e $\hat{y}_i$ é o valor ajustado da observação i, obtido dos dados com a parte k removida;
- Um caso particular é quando $K = n$ gerando o método **leave-one out cross-validation** (LOOCV).

Validação cruzada 5 — *fold*



Exemplo: `Auto` data set

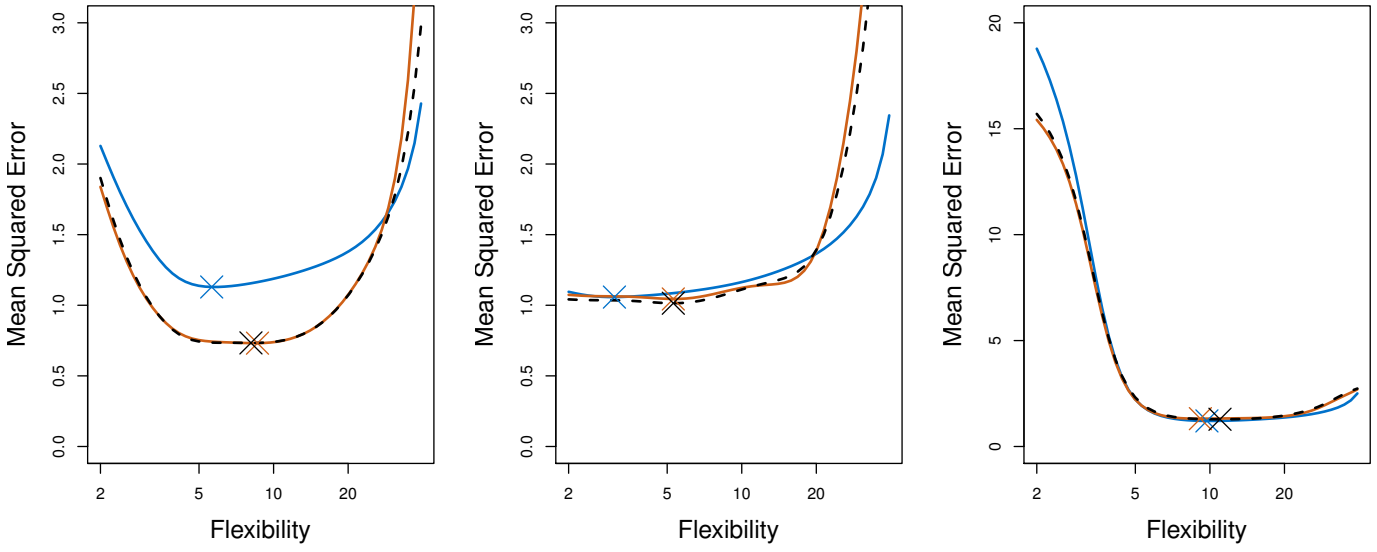
- O gráfico da direita apresenta 9 diferentes validações cruzadas 10 – *fold*. Em cada uma temos uma nova partição dos dados;



- Note que a variabilidade é menor quando comparado com a abordagem *holdout* (slide 5);

Exemplo simulado

- O gráfico abaixo apresenta a verdadeira curva do MSE em azul, a estimativa LOOCV pontilhada e 10 – *fold* em laranja;



- No primeiro gráfico as curvas estimadas têm o comportamento correto, todavia subestima o erro quadrado médio;

- Da mesma forma, no gráfico central, as estimativas estão muito próximas do valor real quando os graus de flexibilidade do modelo são baixos; e superestima quando aumentamos a flexibilidade do modelo;

Bias-Variance Trade-Off

- Um bom desempenho de um método em um conjunto de teste requer um baixo erro quadrático médio. Porém, note que

$$\mathrm{E}\left[y_0 - h(\mathbf{x}_0)\right]^2 = \mathrm{V}ar\left[h(\mathbf{x}_0)\right] + \left[\mathrm{Vício}(h(\mathbf{x}_0)\right]^2 + \mathrm{V}ar(\varepsilon). \qquad (1)$$

Variância

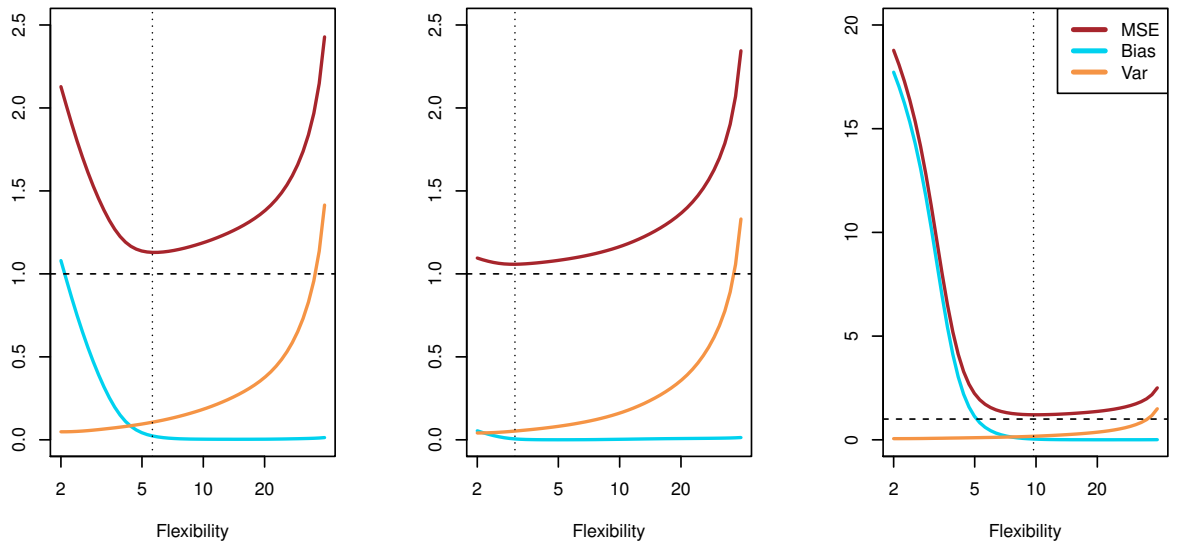
- ⋆ Refere-se ao quanto $h(\mathbf{x}_0)$ muda quando a estimamos utilizando diferentes dados de treino;
- ⋆ Idealmente as estimativas de $h(\mathbf{x}_0)$ não deveria mudar muito entre os conjuntos;
- ⋆ Em geral, quanto mais flexível o modelo, maior a variância.

Vício

- ⋆ Refere-se ao erro de aproximar um problema real (extremamente complicado) por uma função simples;
- ⋆ Em geral, quanto mais simples o modelo, maior o vício.

Bias-Variance Trade-Off

- Os três gráficos abaixo ilustram a Equação (1). Para todos os casos:



  - ⋆ A curva azul representa o $[\text{Vício}(h(\mathbf{x}_0)]^2$, para diferentes níveis de flexibilidade;
  - ⋆ A curva laranja a $\text{Var}\left[h(\mathbf{x}_0)\right]$;
  - ⋆ A linha pontilhada $\text{Var}(\varepsilon)$, o erro irredutível;
  - ⋆ Finalmente, a linha vermelha representa o EQM do teste.

CV em problemas de classificação

- Sejam as K partes denotadas por $C_1, C_2, \ldots, C_K$, em que C_k representa o índice da k-ésima parte;

- Considere que temos n_k observações na parte k: se n é múltiplo de K, então $n_k = n/K$;

- Calcule:

$$CV_{(K)} = \sum_{k=1}^{K} \frac{n_k}{n} Err_k, \quad \text{com} \quad Err_k = \sum_{i \in C_k} \mathbb{1}(y_i \neq \hat{y}_i)/n_k.$$

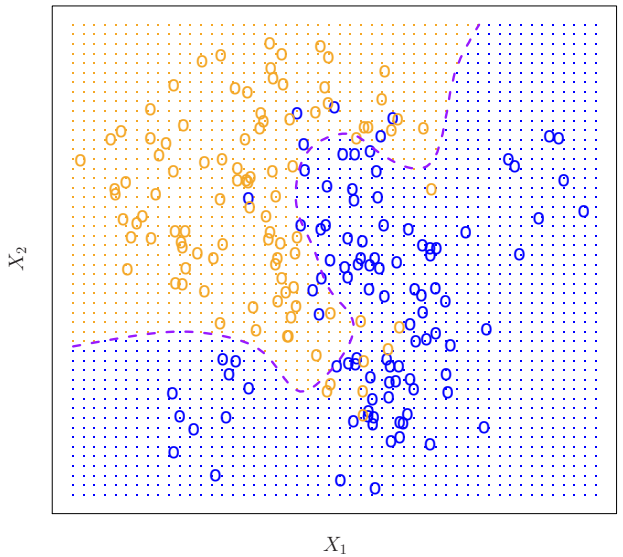
- O desvio padrão estimado do CV_k é

$$\widehat{DP}(CV_k) = \sqrt{\sum_{k=1}^{K} \left(Err_k - \overline{Err}_k\right)^2 /(K-1)}$$

- Que é uma estimativa útil, mas não muito válida (existe correlação entre os desvios, pois compartilham parte da amostra de treino).

Exemplo simulado

- Os dados consistem em 100 observações em cada um dos grupos (indicados em azul e laranja);
- A linha tracejada representa a fronteira de decisão de Bayes;
- Ajustamos quatro modelos de regressão logística aos dados;
- P. ex., um modelo quadrático fica:

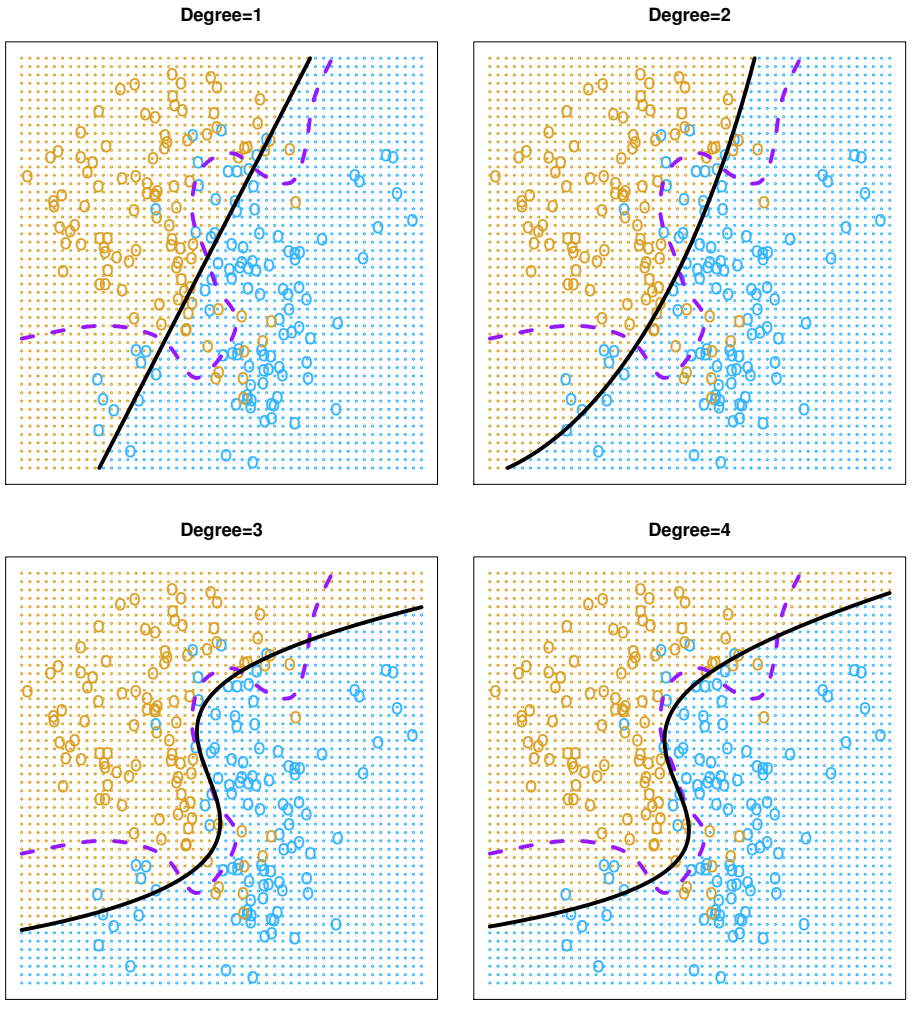


$$log\left(\frac{p}{1-p}\right) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_1^2 + \beta_3 X_2 + \beta_4 X_2^2$$

- A verdadeira taxa de erro do teste é 0.201 (são dados simulados!).

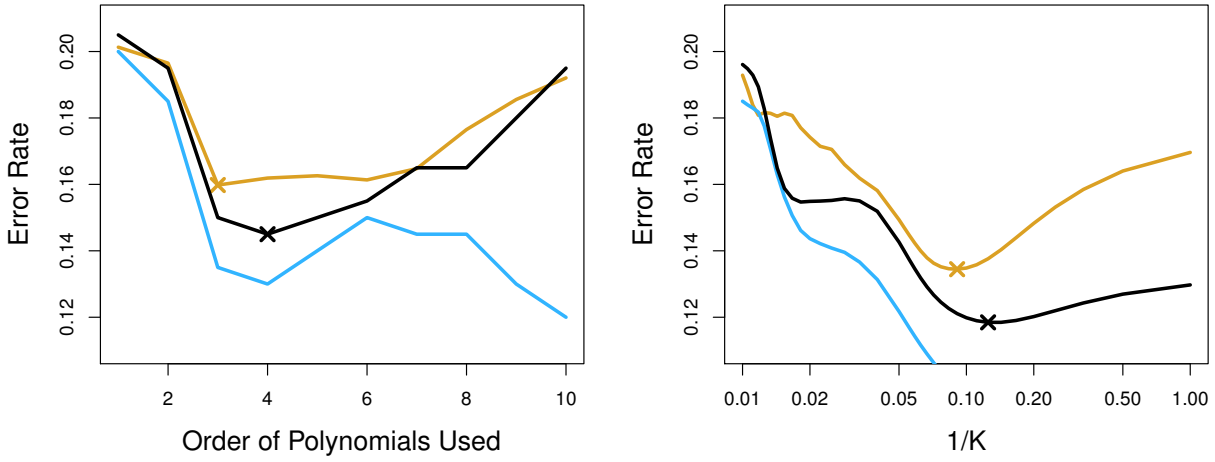
Exemplo simulado

- A taxa de erro do teste para os quatro ajustes são, respectivamente, 0.201, 0.197, 0.160, e 0.162. Enquanto, o erro de Bayes é 0.133;

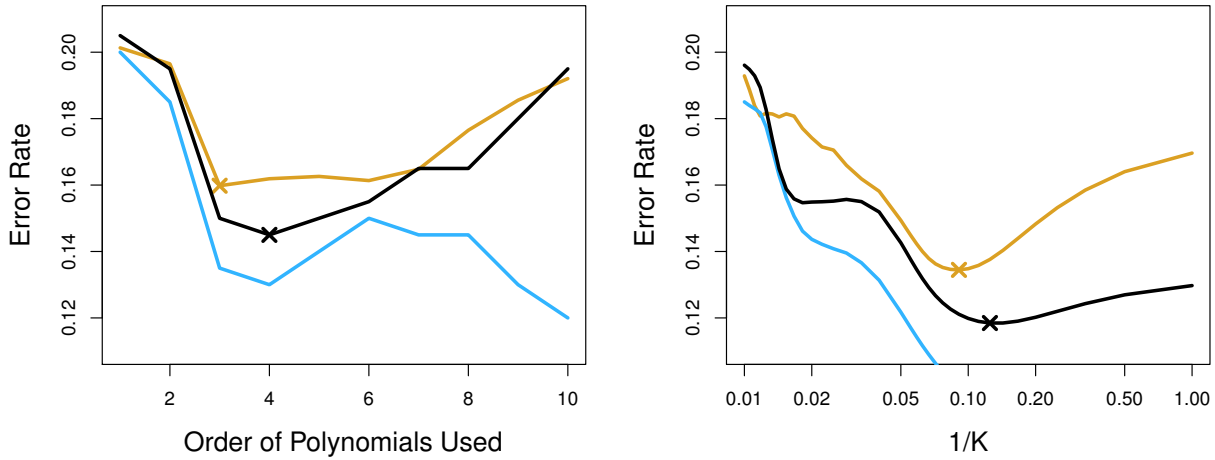


Exemplo simulado

- Na prática, em dados reais, a fronteira de decisão de Bayes e a verdadeira taxa de erro do teste são desconhecidas;
- Então, como decidir entre os modelos propostos? **Validação cruzada**;
- Abaixo temos a taxa de erro por validação cruzada 10 – *fold* em preto, o verdadeiro erro do teste em marrom e o erro do treinamento em azul;
- Na esquerda temos o classificador por regressão logística. E na direita, utilizamos *KNN*, em que o inverso do número de vizinhos, K, representa o eixo das abscissas.



Exemplo simulado



- Analisando os gráficos percebemos que a taxa de erro do treinamento decresce com o aumento da flexibilidade do modelo;
- Na esquerda, a taxa de erro do teste apresenta uma forma de U. Semelhante à validação cruzada $10 - fold$ (com uma boa aproximação);
- Na direita, a taxa do erro por validação cruzada também apresenta o mínimo muito próximo do obtido com os dados de teste.

CV: certo e errado

- Considere um classificador aplicado aos dados de duas classes:

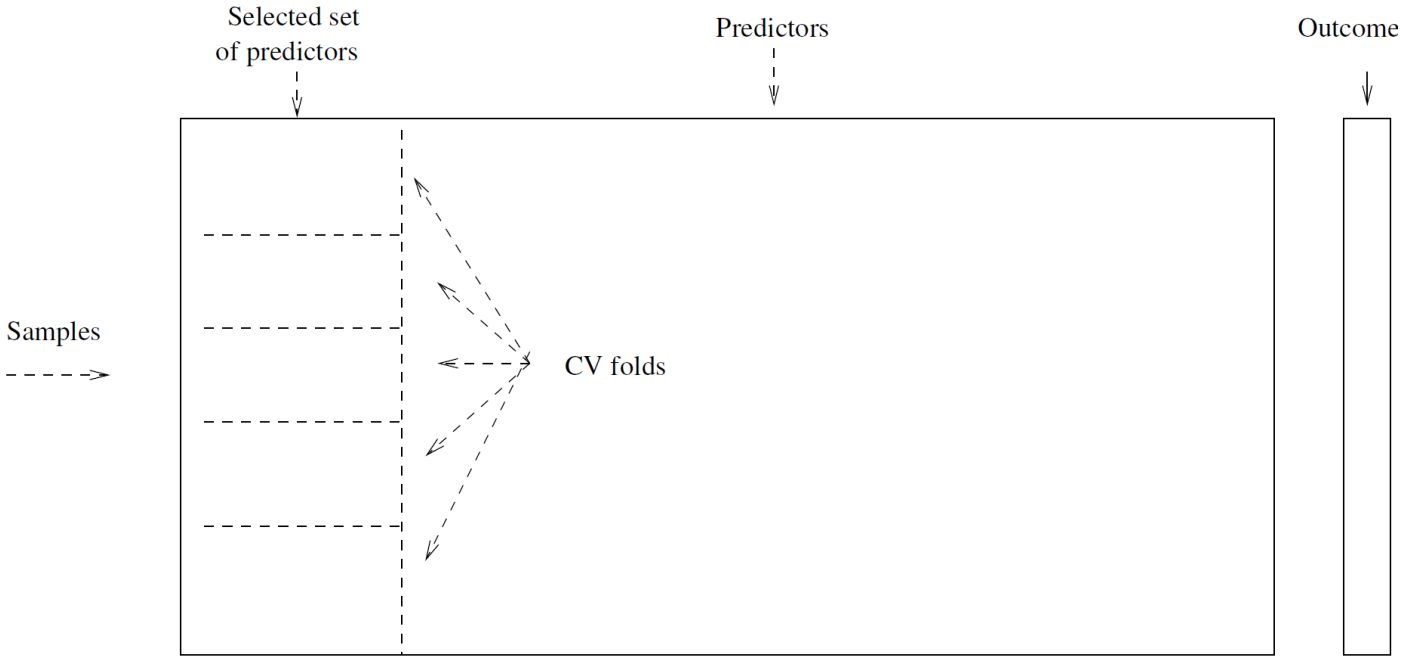
  1. Começando com 500000 preditoras e amostra de tamanho 50, filtramos as 100 preditoras que têm maior correlação nas classes;
  2. Aplicamos um classificador (e.g. regressão logística) utilizando somente as 100 preditoras.

- Como podemos estimar o desempenho do teste para este classificador? **Validação cruzada**

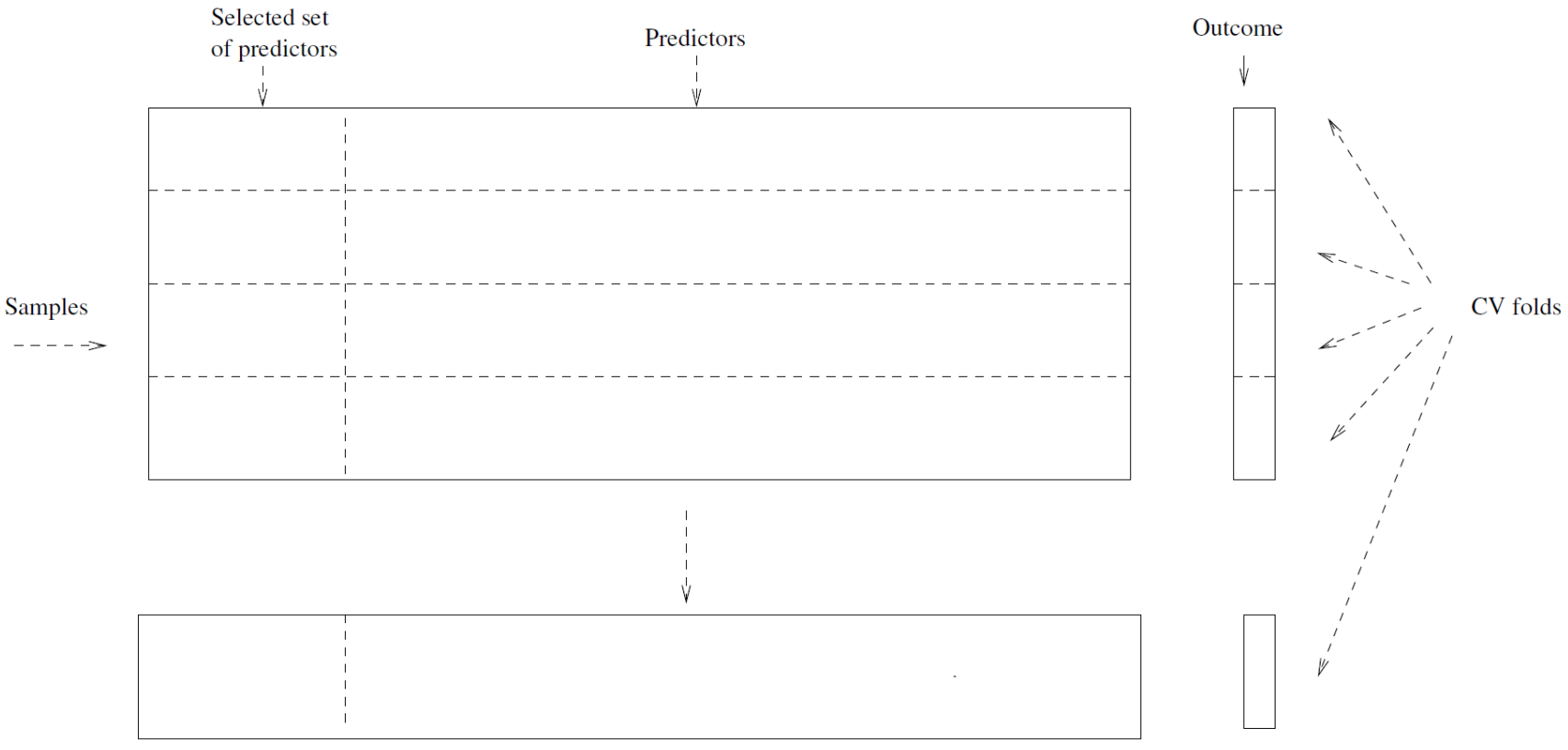
- Podemos aplicar validação cruzada no Passo 2, esquecendo o Passo 1 (não incorporando o fato de termos eliminado 4900 preditoras)? **Não!**

  - ⋆ Isso seria ignorar o fato de que no Passo 1 o procedimento já viu os rótulos de treinamento, e aprendeu com isso.
  - ⋆ É possível simular dados em que a resposta independe das preditoras (erro do teste = 50%), mas a validação cruzada ignorando o Passo 1 é zero!

Errado!


Selected set
of predictors
Predictors
Outcome
Samples
CV folds

Certo!



- Dessa forma, não estaremos "ensinando" o modelo com os dados de validação.

Bootstrap

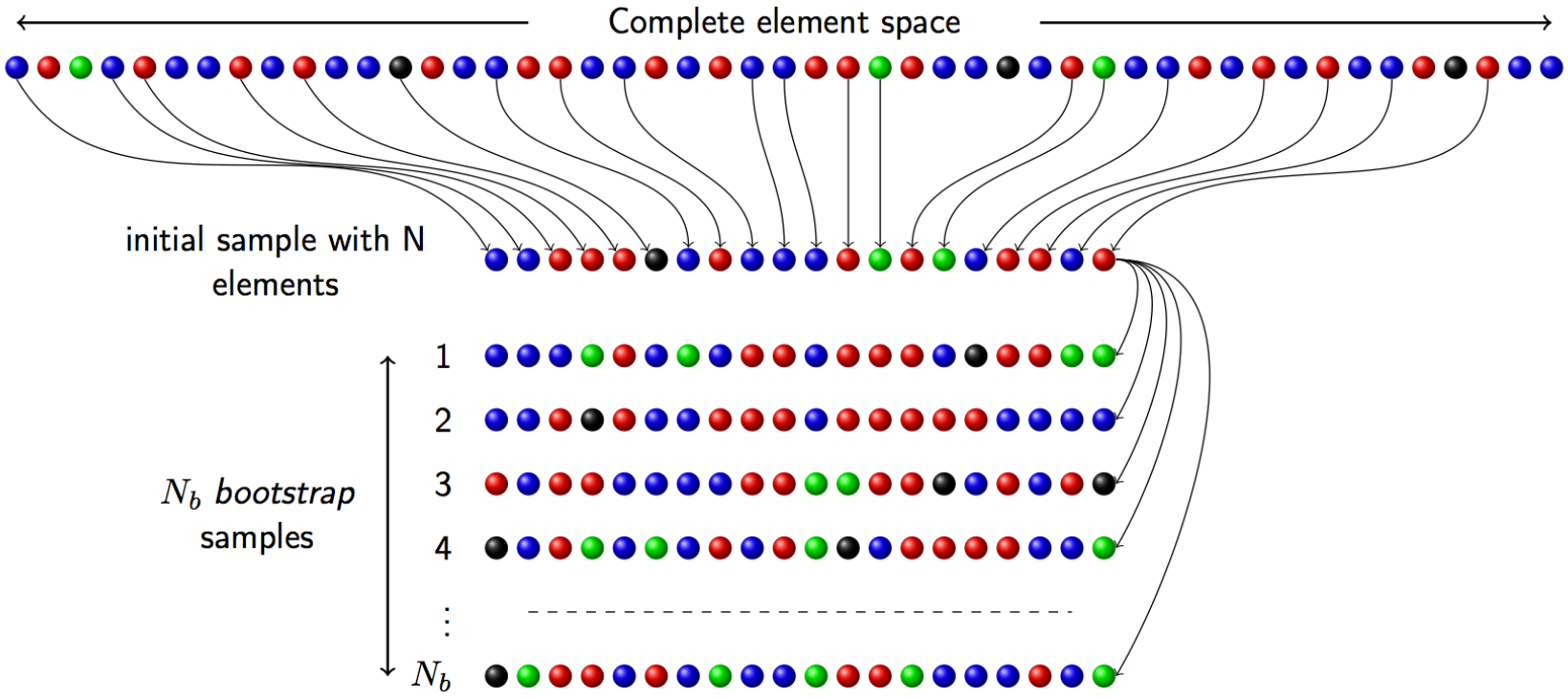
- **Bootstrap** é uma ferramenta estatística usada para quantificar a incerteza associada a determinado estimador ou método de aprendizagem estatística;

- Por exemplo, pode ser usado para estimar o erro padrão dos coeficientes do ajuste de uma regressão linear (ou seus intervalos de confiança);

- Na verdade, o poder do bootstrap reside no fato de ser aplicável em uma vasta gama de métodos estatísticos;

- Incluindo alguns para os quais uma medida de variação é difícil de obter (e não é fornecido automaticamente fornecido pelo software);

Ideia básica do bootstrap



Exemplo simulado

- Suponha que queremos investir uma quantidade fixa de dinheiro em dois ativos financeiros com retornos de X e Y (ambos aleatórios);
- Vamos investir a fração α do dinheiro em X e o restante $1-\alpha$ em Y;
- Queremos escolher α tal que minimize o risco total (ou a variância) do nosso investimento, isto é

$$min \ \{Var[\alpha X + (1-\alpha)Y]\}.$$

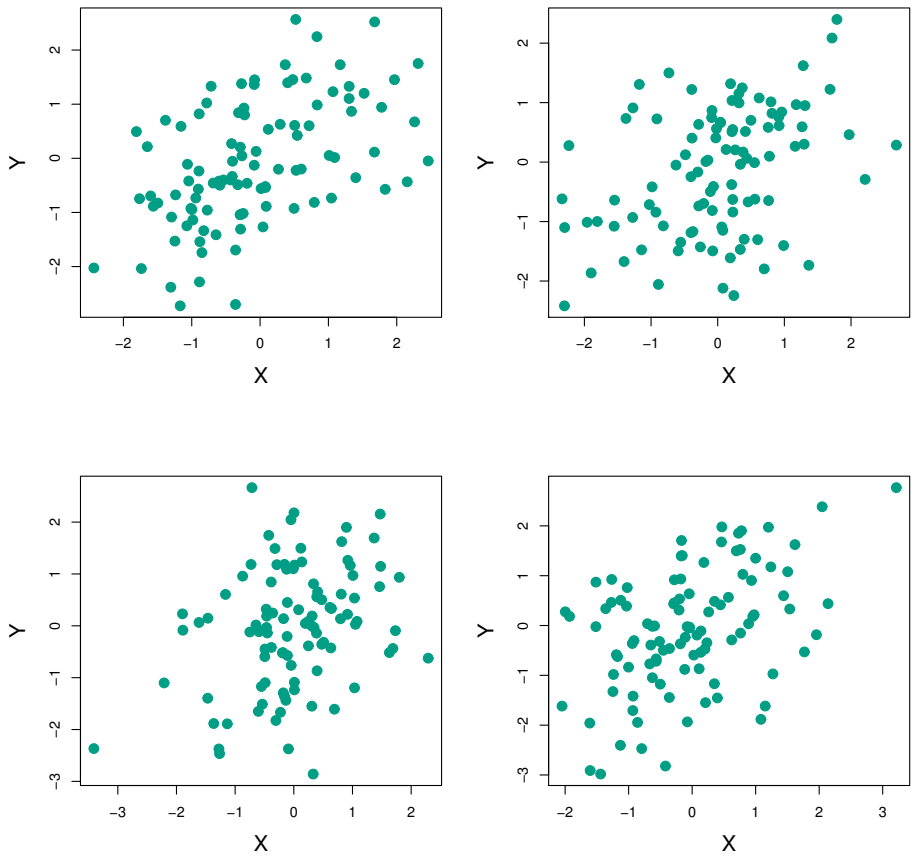
- Pode-se provar que o valor que minimiza o risco é dado por

$$\alpha = \frac{Var(Y) - Cov(X,Y)}{Var(X) + Var(Y) - 2Cov(X,Y)}. \tag{2}$$

- Note que $Var(Y)$, $Var(X)$ e $Cov(X,Y)$ são desconhecidos.
- Mas, podemos calcular estimativas para estas quantidades utilizando os dados que contém medidas passadas de X e Y.

Exemplo simulado

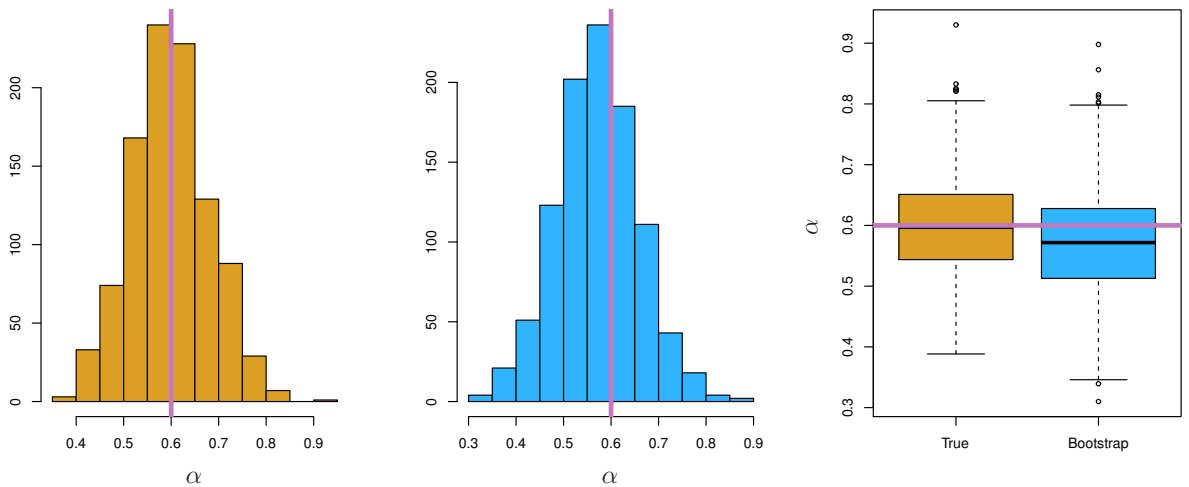
- Os paineis exibem 100 retornos simulados para os investimentos X e Y;
- Estimamos os valores de $Var(Y)$, $Var(X)$ e $Cov(X, Y)$;
- Em seguida, $\hat{\alpha}$, pela Equação (2).



Exemplo simulado

- Para estimar o desvio padrão de $\hat{\alpha}$, repetimos o processo: simular 100 observações de (X, Y) e estimar α por 1000 vezes $(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \ldots, \hat{\alpha}_{1000})$;

- Abaixo o histograma obtido a partir da população verdadeira (em laranja) e a partir da amostra bootstrap (em azul);



- Para esta simulação os parâmetros considerados foram $Var(X) = 1$, $Var(Y) = 1.25$ e $Cov(X, Y) = 0.5$. Assim, $\alpha = 0.6$ (linha rosa).

Exemplo simulado

- A média das 1000 estimativas de α é

$$\bar{\alpha} = \frac{1}{1000} \sum_{r=1}^{1000} \hat{\alpha}_r = 0.5996$$

  muito próximo de $\alpha = 0.6$! E o desvio padrão estimado é

$$\sqrt{\frac{1}{1000-1} \sum_{r=1}^{1000} (\hat{\alpha}_r - \bar{\alpha})^2} = 0.083$$

- O que nos fornece uma boa ideia sobre a precisão de $\hat{\alpha}$: $DP(\hat{\alpha}) \approx 0.083$;

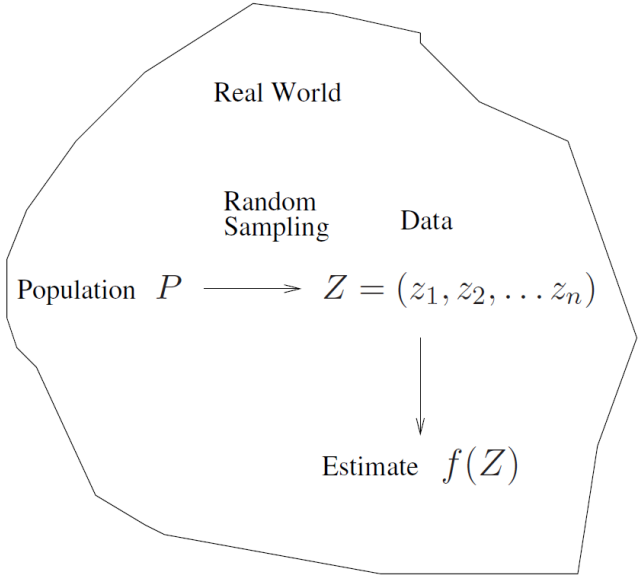
- Então, para uma amostra da população, esperamos que $\hat{\alpha}$ difira de α cerca de 0.08, em média.

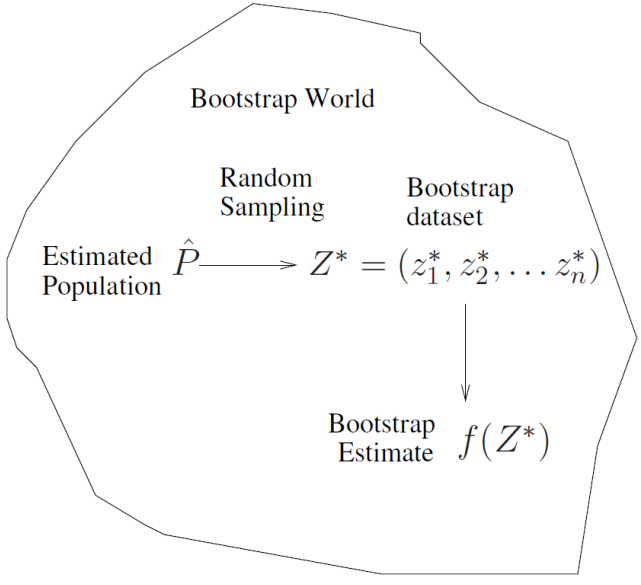
- Na prática (em dados reais), a fronteira de decisão de Bayes e a verdadeira taxa de erro do teste são desconhecidas;

Voltando ao mundo real

- O procedimento descrito anteriormente (histograma laranja) não pode ser aplicado, pois no mundo real não conseguimos gerar novas amostras da população original;

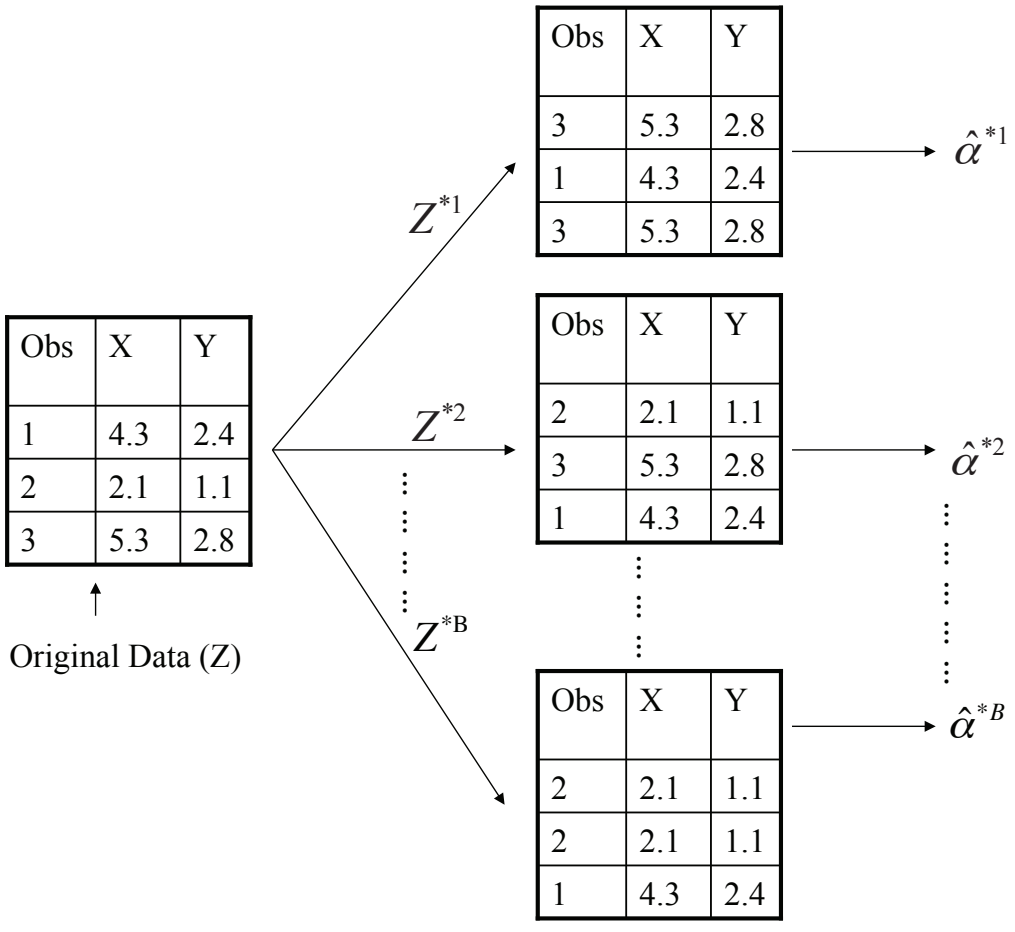
- Entretanto, bootstrap nos permite utilizar o computador para simular o processo de obtenção de novos conjuntos de dados (estimando a variabilidade da estimativa, sem amostras adicionais);





Exemplo com somente 3 observações

- Cada conjunto de dados bootstrap contém *n* observações amostradas **com reposição** dos dados originais.



Bootstrap estimando o erro de predição

- Na validação cruzada, o K- ésimo *fold* de validação é distinto dos demais $k-1$ *folds* usados no treinamento;

1	2	3	4	5
Validation	Train	Train	Train	Train

- Não há **overlap** entre os dados de treino e validação. O que é crucial para seu sucesso. Queremos uma ideia sobre os dados de teste (novos dados);
- Para estimar o erro de predição utilizando bootstrap, podemos pensar em separar cada amostra bootstrap para treinamento e a original como validação;
- Entretanto, tais amostras apresentam um significativo *overlap* com os dados originais (cerca de 2/3);
- Este fato causa sérios problemas de subestimação do verdadeiro erro de predição (podendo ser parcialmente solucionado - não veremos no curso);
- Então, validação cruzada apresenta uma abordagem mais simples e atrativa para estimar o erro de predição (Keep it simple!).