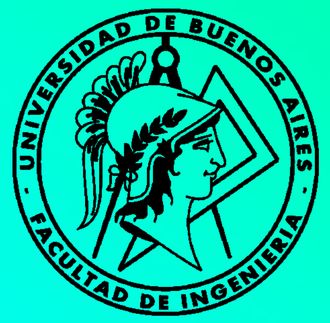
CLASIFICADOR KNN Y OPTIMIZACIÓN HIPERPARÁMETROS



APRENDIZAJE DE MAQUINA I - CEIA - FIUBA

Dr. Ing. Facundo Adrián Lucianna

Dr. Ing. Álvaro Gabriel Pizá

REPASO CLASE ANTERIOR

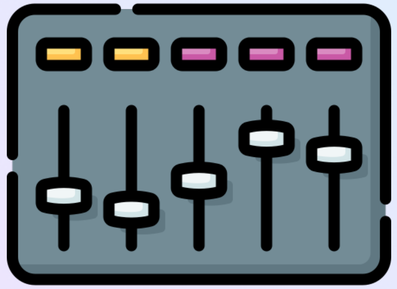
- Definición de Machine Learning y Big Data
- Tipos de aprendizaje:
  - Aprendizaje supervisado: Regresión y clasificación
  - Aprendizaje no supervisado: Agrupamiento y reducción dimensional
  - Aprendizaje profundo: Redes neuronales

REPASO CLASE ANTERIOR

	Features					*Label*
	Position	**Experience**	**Skill**	**Country**	**City**	**Salary ($)**
Observation →	Developer	0	1	USA	New York	103100
	Developer	1	1	USA	New York	104900
	Developer	2	1	USA	New York	106800
	Developer	3	1	USA	New York	108700
	Developer	4	1	USA	New York	110400
	Developer	5	1	USA	New York	112300
	Developer	6	1	USA	New York	116100
	Developer	7	1	USA	New York	117800

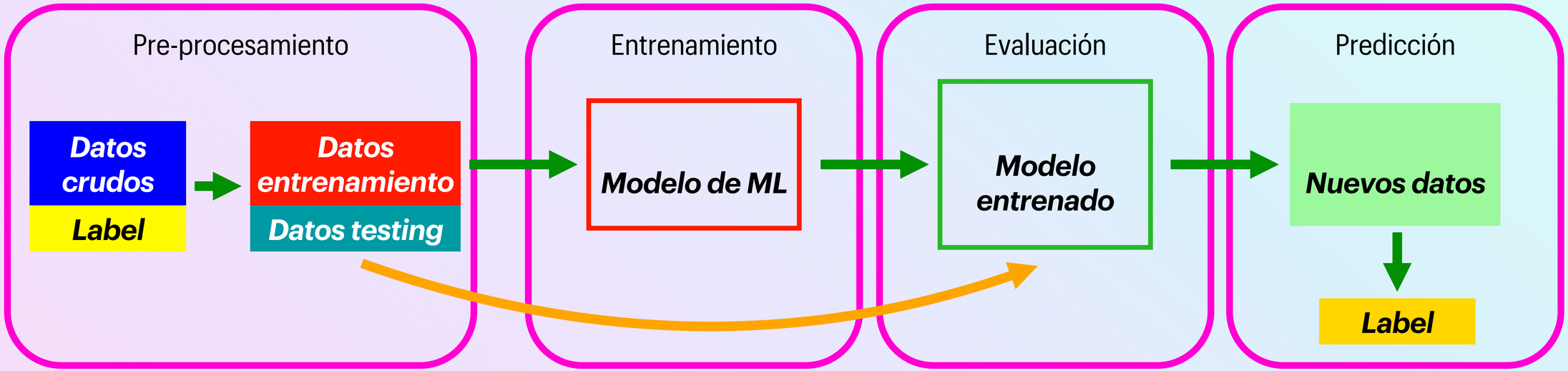
REPASO CLASE ANTERIOR

- Los algoritmos de Machine Learning tienen parámetros “internos” que no dependen de los datos. Estos parámetros se llaman **hiperparámetros**. Por ejemplo, una red neuronal tiene como hiperparametros la función de activación o la constante de entrenamiento.



- Llamamos **generalización** a la capacidad del modelo de hacer predicciones nuevas utilizando datos nuevos.

REPASO CLASE ANTERIOR

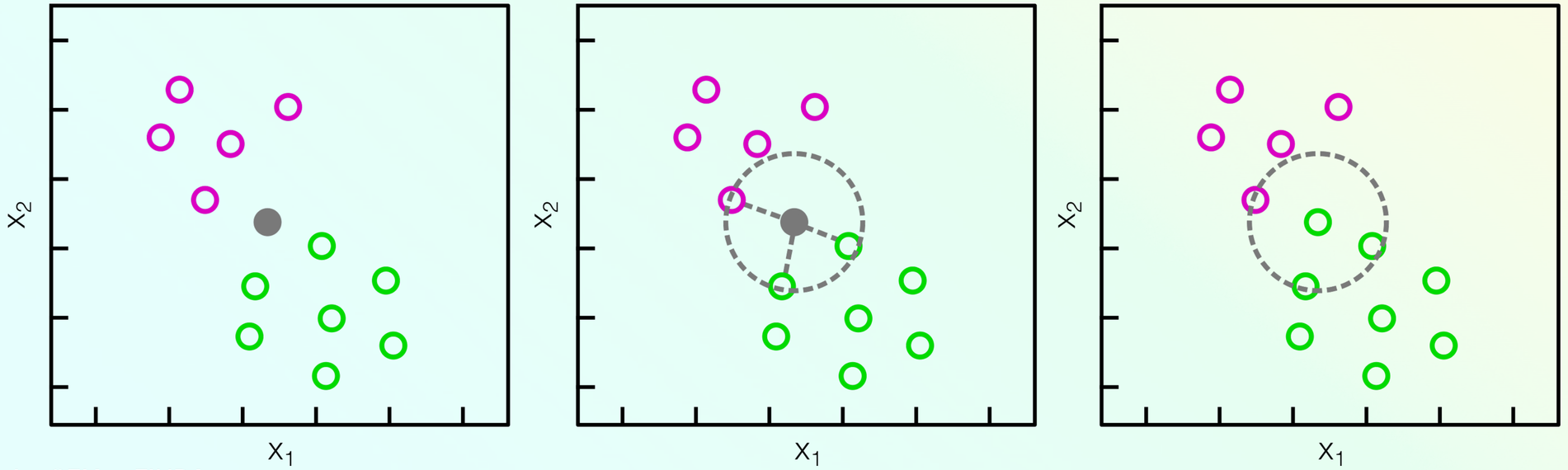


CLASIFICADOR KNN

KNN

El clasificador de k vecinos más cercanos (KNN o k-NN), es un algoritmo que utiliza la proximidad de sus vecinos para hacer clasificaciones sobre la agrupación de un punto.

La idea se basa de la **suposición** de que se pueden encontrar puntos similares cerca uno del otro en base a votación de pluralidad (se elige la clase en función de la moda de la clase de sus vecinos). Este modelo no obtiene una salida de probabilidad, solo nos dice de que clase es.



KNN

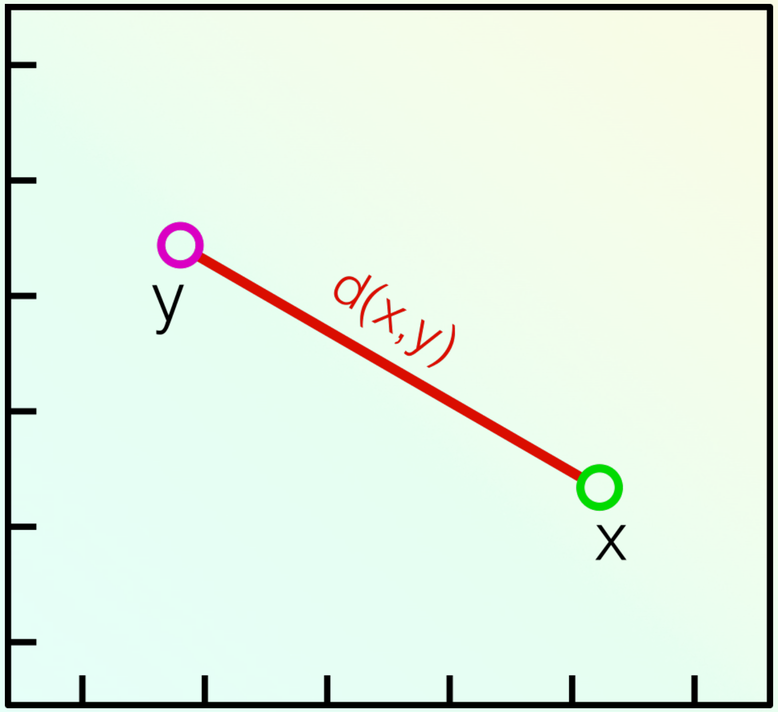
Como vimos, este algoritmo se fija en la distancia entre observaciones. ¿Ahora la pregunta es como medimos la distancia?

Hay múltiples maneras de medir distancia entre dos puntos geométricos. Vamos a definir algunas.

KNN

Distancia euclidiana (modulo 2): Es la más conocida, es la mínima distancia (una recta) entre dos puntos en un espacio euclidiano. Es adecuada para datos numéricos continuos.

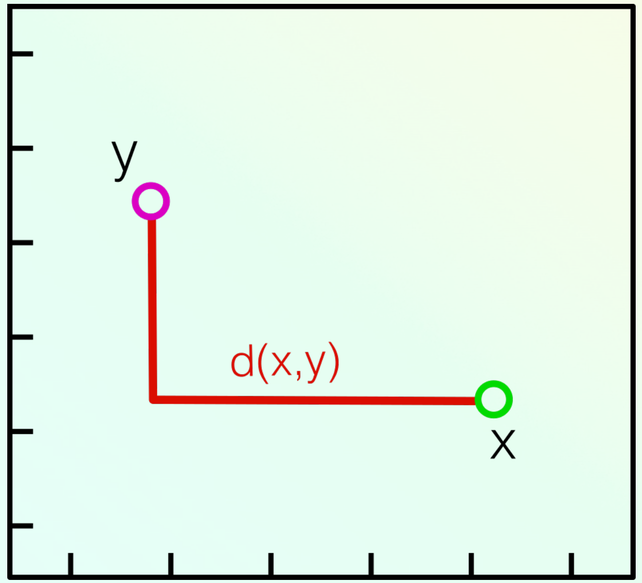
$$d(x, y) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2}$$



KNN

Distancia de Manhattan (modulo 1): Es la medida del valor absoluto entre dos puntos. Se conoce también como distancia taxi o de cuadra de ciudad, ya que mide distancias como en una ciudad. Es adecuada para datos que pueden tener correlaciones no lineales y no sigue la suposición de varianzas iguales en todas las dimensiones.

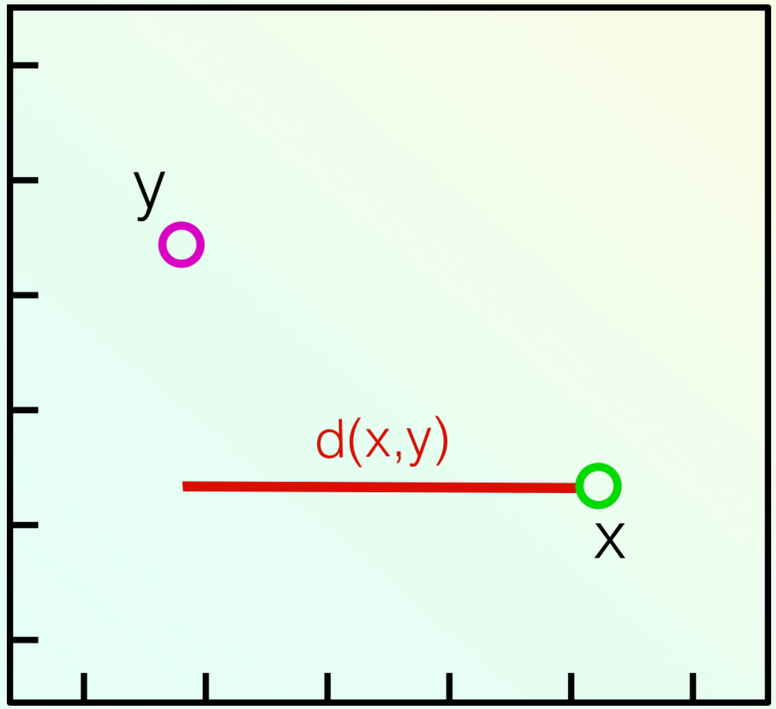
$$d(x, y) = \sum_{i=1}^{n} |x_i - y_i|$$



KNN

Distancia de Chebyshev (modulo infinito): Se calcula como la diferencia máxima entre las coordenadas de dos puntos. Es adecuada cuando las dimensiones son independientes y la distancia máxima es relevante.

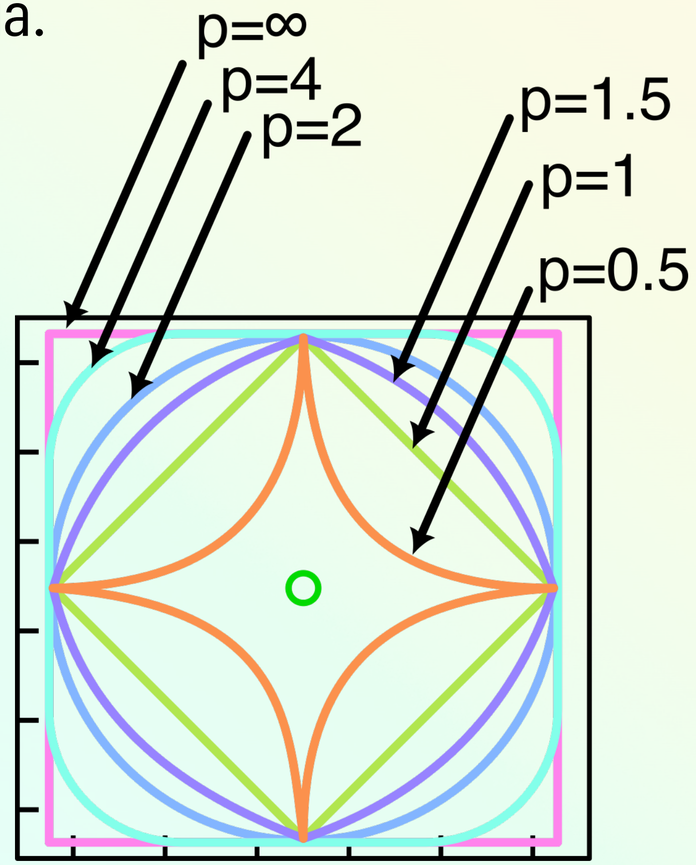
$$d(x, y) = max(|x_i - y_i|)$$



KNN

Distancia de Minkowski: Es una medida generalizada que incluye las anteriores. Posee un parámetro, p, es la que permite variar el tipo de distancia.

$$d_p(x, y) = \left(\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^p \right)^{1/p}$$

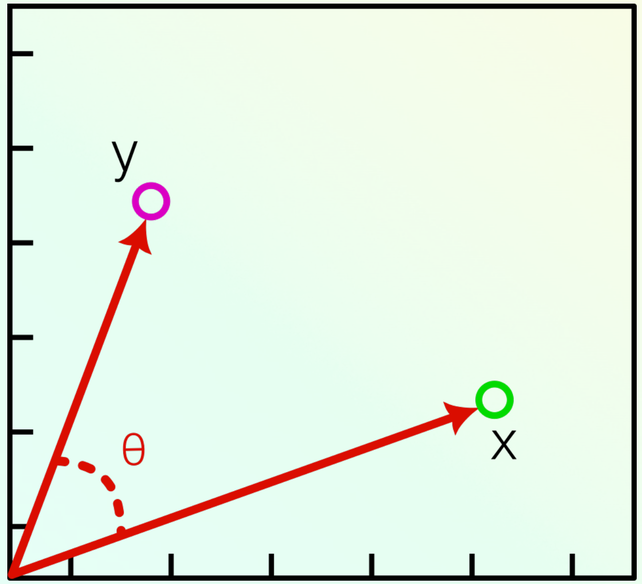


KNN

Distancia Coseno: La similitud coseno mide la similitud entre dos vectores como el coseno del ángulo entre ellos, y la distancia es 1 menos la similitud coseno. Es adecuada para datos donde la magnitud de los vectores es irrelevante, pero si su orientación.

$$d_c(x, y) = 1 - S_c(x, y)$$

$$S_c(x, y) = cos(\theta) = \frac{x \cdot y}{\|x\|\|y\|}$$



KNN

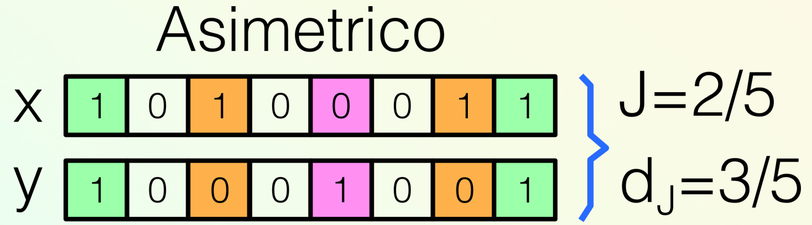
Distancia de Canberra: Es una métrica de distancia ponderada que se utiliza comúnmente para datos numéricos y pondera más las diferencias en las dimensiones donde los valores son pequeños. Es la distancia de Manhattan ponderada.

$$d(x, y) = \sum_{i=1}^{n} \frac{|x_i - y_i|}{|x_i| + |y_i|}$$

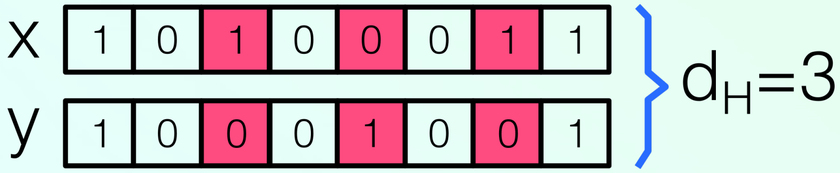
KNN

Distancia de Jaccard: Se utiliza comúnmente en conjuntos o datos binarios. Mide la similitud entre dos conjuntos como el tamaño de su intersección dividido por el tamaño de su unión.

$$J(x,y) = \frac{|x \cap y|}{|x \cup y|} \qquad d_J(x,y) = 1 - J(x,y)$$



Distancia de Hamming: Se usa típicamente con vectores booleanos, en donde se mide la cantidad de elementos del vector que son diferentes entre sí.



KNN

Distancia de Gower: Es una métrica de distancia que puede manejar datos mixtos (numéricos y categóricos) y tiene en cuenta la escala de las variables y la similitud entre las categorías. Esta entre 0 y 1.

- Datos numéricos: Se calcula usando la distancia de Manhattan, pero para cada atributo se la divide por el rango de valores (poblacional o de muestra).
- Datos categóricos: Si el atributo es igual es 0, sino es 1.

KNN

Dada la métrica de distancia, debemos definir el valor de k, que es quien define con cuantos vecinos se usará para determinar la clasificación de un punto.

Por ejemplo, si k=1, la observación se asignará a la misma clase de su vecino más cercano.

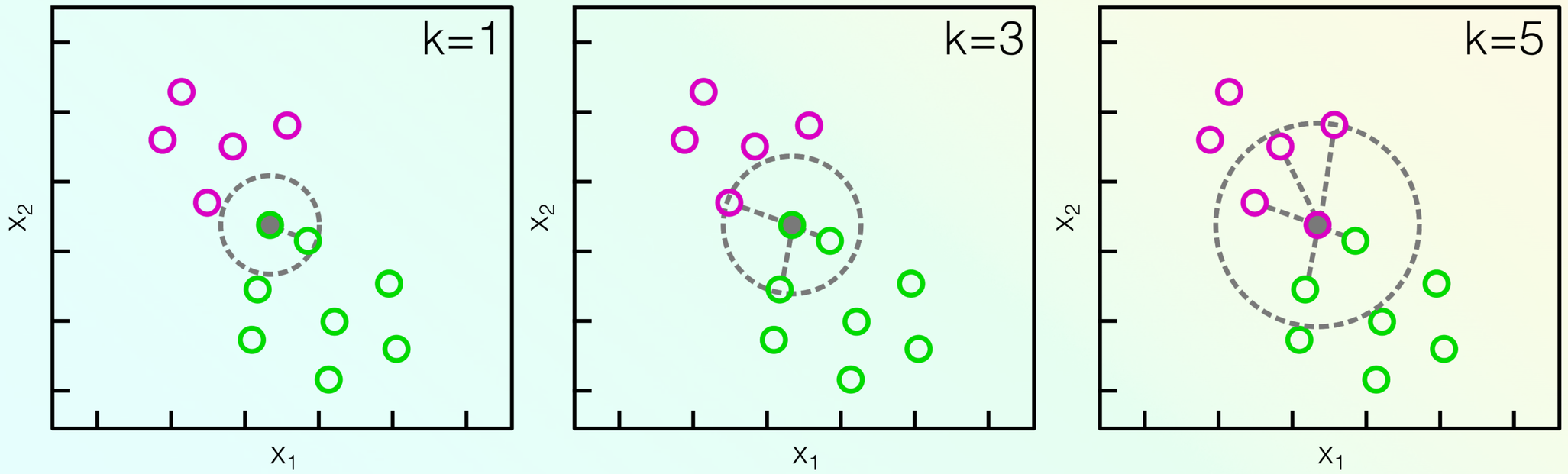
Definir k, el cual es un hiper-parámetro justo al tipo de distancia elegida, es un acto de equilibrio.

Valores bajos de k pueden tener una varianza alta, pero un sesgo bajo, y valores altos de k un sesgo alto y poca varianza.

En general, se recomienda tener un **número impar** para k para evitar empates en la clasificación.

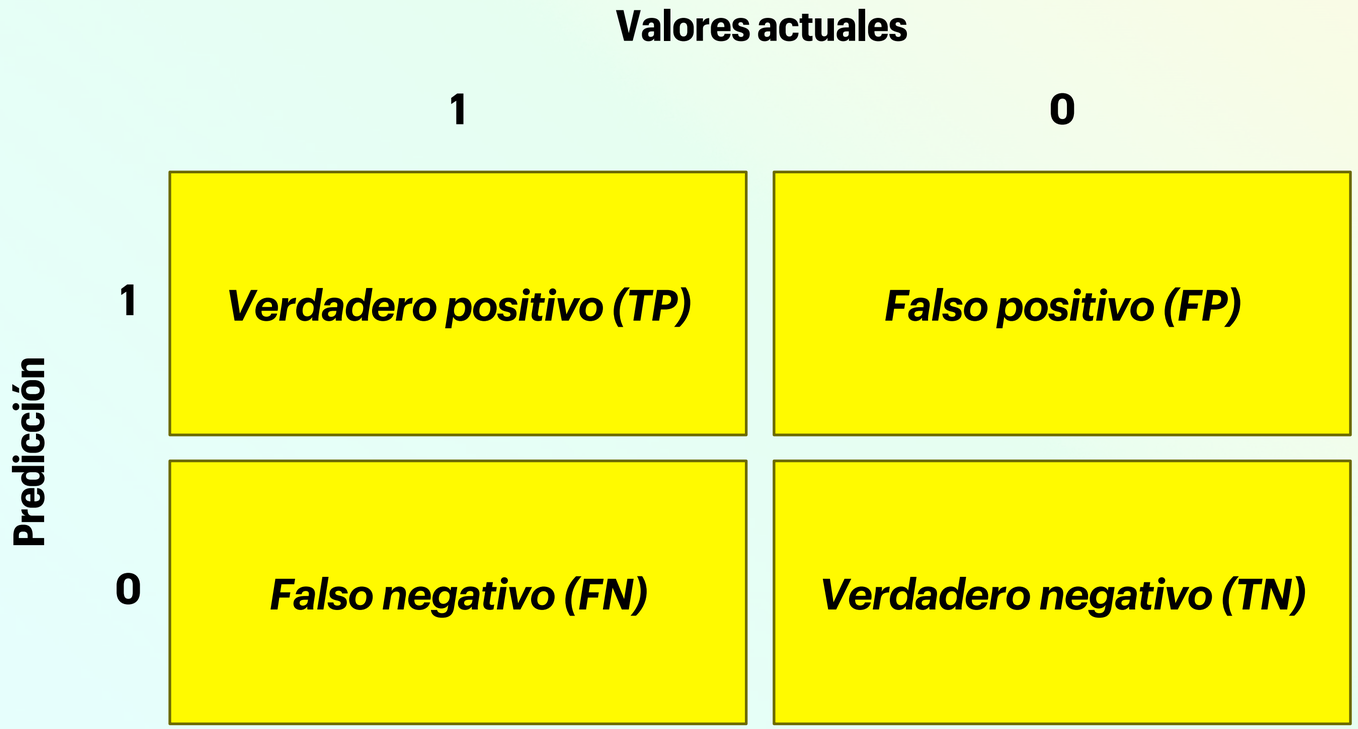
Este algoritmo no tiene “entrenamiento” ya que debe guardar todo el dataset para evaluar a nuevos valores a que clase pertenece. Si el dataset de entrenamiento es muy grande, puede tener dificultades para almacenarse o ejecutarse.

KNN



REPASO DE MÉTRICAS DE EVALUACIÓN

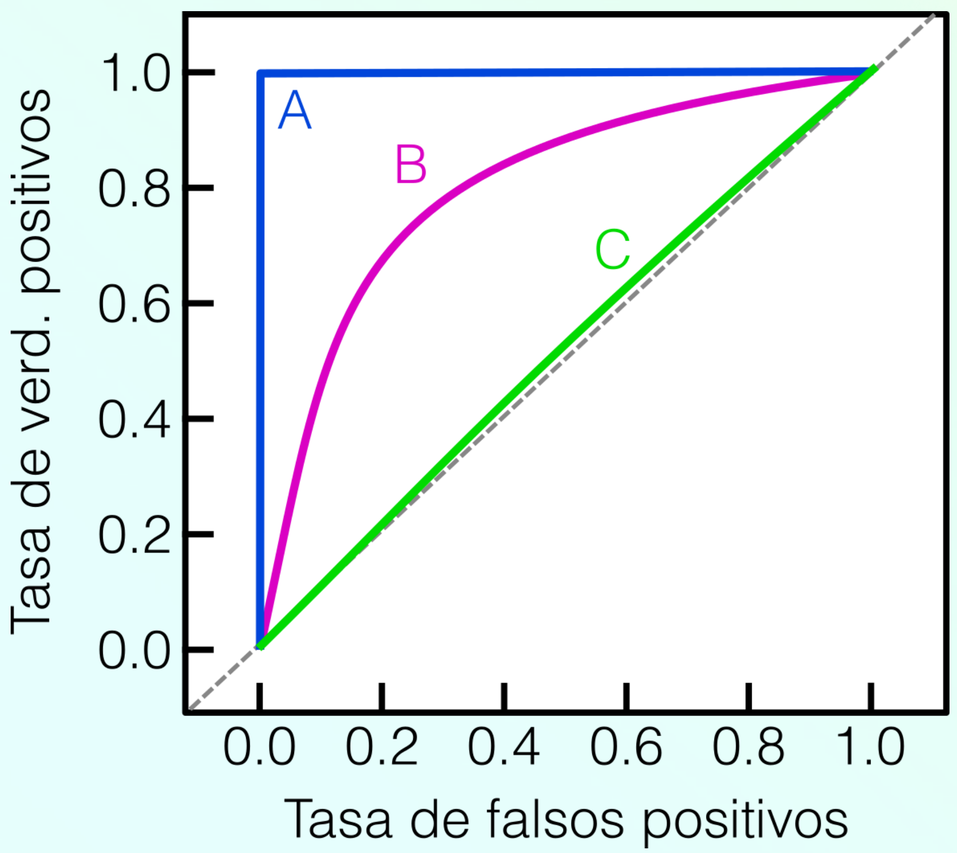
MÉTRICAS DE EVALUACIÓN
MATRIZ DE CONFUSIÓN



MÉTRICAS DE EVALUACIÓN

- **Sensibilidad:** $TPR = \frac{TP}{P} = \frac{TP}{TP + FN} = 1 - FNR$
- **Especificidad:** $TNR = \frac{TN}{N} = \frac{TN}{TN + FP} = 1 - FPR$
- **Exactitud:** $ACC = \frac{TP + TN}{P + N}$
- **Exactitud balanceada:** $BA = \frac{TPR + TNR}{2}$
- **Precisión:** $\text{Precision} = \frac{TP}{TP + FP}$
- **Recuperación:** $\text{Recall} = \frac{TP}{TP + FN}$
- **F1-score o Fβ-score:** $F_\beta = (1 + \beta^2) \frac{\text{precision} \cdot \text{recall}}{(\beta^2 \cdot \text{precision}) + \text{recall}}$

CURVA ROC



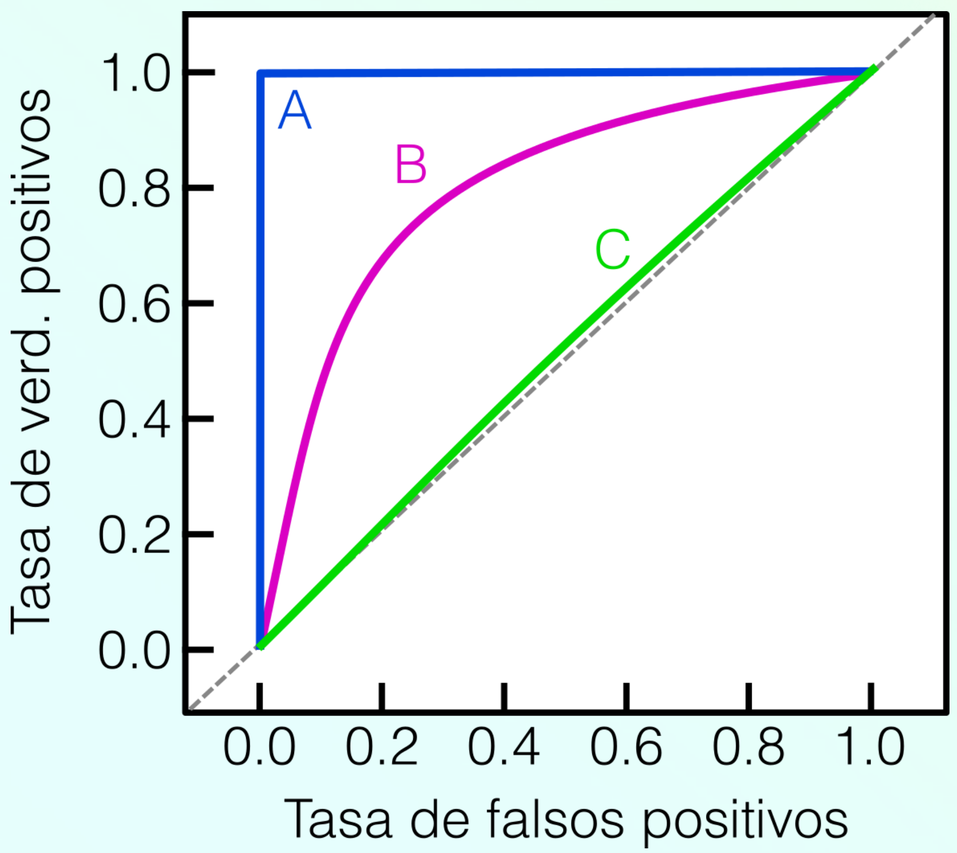
Siempre se arranca de umbral 1, donde la TPR es 0 y TFP es 0 y termina en 0 donde TVP es 1 y TFP es 1.

- **A** es la curva de un clasificador perfecto
- **B** es la curva de un clasificador estándar.
- **C** es la curva de un clasificador que adivina (el peor caso).

La curva ROC me permite encontrar el valor umbral que mejor resultado me dé.

Además, me permite comparar clasificadores sin preocuparme del valor umbral elegido.

CURVA ROC



Si quiero bajar a una métrica a esta curva, podemos calcular el área bajo la curva (AUC).

- **A** tendrá un AUC = 1
- **B** tendrá un 0.5 < AUC < 1
- **C** tendrá un AUC = 0.5

k-NN no tiene curva ROC, dado que no puede darnos salida probabilística, solo nos da un punto.

VAMOS A PRÁCTICAR UN POCO...

MÉTODOS DE AJUSTE DE LOS HIPER-PARÁMETROS

MÉTODOS DE AJUSTE DE LOS HIPER-PARÁMETROS

En Inteligencia Artificial se vió que validación cruzada nos sirve para buscar ayudarnos a buscar los hiper-parámetros que mejor se nos ajustan a nuestros modelos, permitiendo mantener la **generalidad**.

Pero por sí solo, no alcanza, necesitamos de alguna forma *movernos* por el espacio de búsqueda.

Una búsqueda consiste en:

- Un modelo (de regresión o clasificación)
- Un espacio de parámetros
- Un método de búsqueda o de muestreo de candidatos
- Un esquema de validación cruzada
- Una función de puntaje

MÉTODOS DE AJUSTE DE LOS HIPER-PARÁMETROS

En Inteligencia Artificial se vió que validación cruzada nos sirve para buscar ayudarnos a buscar los hiper-parámetros que mejor se nos ajustan a nuestros modelos, permitiendo mantener la **generalidad**.

Pero por sí solo, no alcanza, necesitamos de alguna forma *movernos* por el espacio de búsqueda.

Una búsqueda consiste en:

- Un modelo (de regresión o clasificación)
- Un espacio de parámetros
- **Un método de búsqueda o de muestreo de candidatos**
- Un esquema de validación cruzada
- Una función de puntaje

MÉTODOS DE AJUSTE DE LOS HIPER-PARÁMETROS

Dos métodos de búsqueda típicos:

Búsqueda de grilla: Busca exhaustiva de todas las combinaciones de los parámetros. Es el más completo pero el más ineficiente.

Búsqueda aleatoria: Busca aleatoriamente tomando datos del espacio de combinaciones de los parámetros, bajo una distribución aleatoria dada. Termina dado una cierta cantidad arbitraria de iteraciones.

MÉTODOS DE AJUSTE DE LOS HIPER-PARÁMETROS

Una mejora que se puede aplicar a ambos métodos, a expensa de una mayor duración, es incorporar la reducción a la mitad sucesiva (succesive halving).

La idea es tener una especie de torneo. En el cual, se arranca buscando los hiper-parámetros pero usando un subset de entrenamiento chico.

Una vez que termina la búsqueda, se elige la mitad de las combinaciones que mejores parámetros dieron. Con esa mitad, se aumenta el set de entrenamiento y este proceso se repite, hasta que quede uno.

MÉTODOS DE AJUSTE DE LOS HIPER-PARÁMETROS

Estos métodos de búsquedas se pueden atacar con estrategias de Inteligencia Artificial. Hay muchos estudios que aplican algoritmos que buscan encontrar selecciones de hiperparámetros eficientes, y cortar evaluaciones de combinaciones no tan atractivas.

Un framework que nos ofrece técnicas más avanzadas de búsqueda de hiperparametros es **Optuna**. Para buscar hiper-parámetros realiza dos acciones que ayudan a ser más eficiente en su búsqueda:

- Selección de hiper-parámetros que pueden dar buenos resultados.
- Podado de hiper-parámetros que es innecesario buscar por malos resultados.

MÉTODOS DE AJUSTE DE LOS HIPER-PARÁMETROS

Selección de hiper-parámetros

Hay muchos tipos de búsqueda para este problema. **Optuna** usa una combinación de TPE+ CMA-ES:

Tree-structured Parzen Estimator (TPE): Es una técnica de optimización bayesiana. Se basa en el teorema de Bayes para actualizar la probabilidad de que una configuración de hiper-parámetros sea la óptima, dadas las observaciones de su rendimiento en el proceso de optimización.

En lugar de asignar una probabilidad uniforme a todas las configuraciones posibles de hiper-parámetros, TPE utiliza dos modelos de densidad: uno para las configuraciones que han producido un mejor rendimiento y otro para las configuraciones que han producido un peor rendimiento. Se utiliza esta información para seleccionar de manera más inteligente las próximas configuraciones de hiper-parámetros a evaluar, priorizando aquellas que se espera que mejoren el rendimiento del modelo.

MÉTODOS DE AJUSTE DE LOS HIPER-PARÁMETROS

Selección de hiper-parámetros

Hay muchos tipos de búsqueda para este problema. **Optuna** usa una combinación de TPE+ CMA-ES:

Covariance Matrix Adaptation - Evolution Strategy (CMA-ES): Es un algoritmo de optimización basado en evolución que busca encontrar los óptimos en espacios de alta dimensionalidad.

Utiliza una estrategia de evolución para ajustar una distribución multivariada de probabilidad que representa la población de soluciones candidatas. La matriz de covarianza se adapta durante el proceso de optimización para guiar la búsqueda hacia las regiones más prometedoras del espacio de búsqueda.

MÉTODOS DE AJUSTE DE LOS HIPER-PARÁMETROS

Podado de hiper-parámetros

Por otro lado, el podado permite reducir el espacio de búsqueda, determinando anticipadamente que combinación de hiper-parámetros no va a dar buenos resultados. Optuna implementa esto usando una versión de reducción a la mitad sucesiva (halving).

VAMOS A PRÁCTICAR UN POCO...