- Idea: estimar el rendimiento real de un modelo
  - Real: con patrones nuevos
    - Distintos a los usados para entrenar
    - Conjunto de test
      - · ¿Cómo escogemos el conjunto de test?
        - Varias estrategias posibles
- Útil para comparar dos (o más) algoritmos distintos
  - O el mismo algoritmo con distintas configuraciones
  - Decidir cuál se pone en producción
  - Si uno devuelve un rendimiento mejor que el resto, se escoge ese
  - Si hay un empate entre los que exhiben el mejor rendimiento, se escoge el más sencillo
    - Se espera que tenga mayor capacidad de generalización

- Comparar los resultados de varios algoritmos
  - De dos algoritmos distintos
    - Para evaluar cuál se comporta mejor en un determinado problema
  - Del mismo algoritmo con distintos parámetros
    - Para evaluar qué configuración de parámetros es la más indicada
- Si los algoritmos son determinísticos se puede comparar el nivel de error / precisión / etc.

- Si no son determinísticos, no se puede tomar el resultado de una única ejecución
  - Existirán variaciones en el resultado debido precisamente a esta componente aleatoria
  - Para minimizar la componente aleatoria, es necesario repetir el experimento un número alto de veces (50-100 veces) y quedarse con la media de los resultados
    - Esa media se usará como base para comparar los resultados

- Incluso si son determinísticos, no se puede tomar el resultado de una única ejecución...
  - Resultado en el conjunto de test
- ...si el conjunto de test ha sido escogido de forma aleatoria
  - Si el conjunto de test es siempre es mismo y los algoritmos son determinísticos, el resultado en test será siempre el mismo
    - Ejecutarlo una única vez

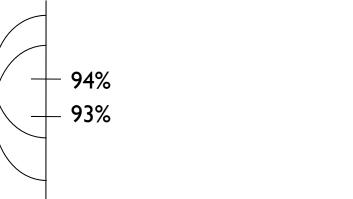
- Incluso si son determinísticos, no se puede tomar el resultado de una única ejecución...
  - Resultado en el conjunto de test
- ...si el conjunto de test ha sido escogido de forma aleatoria
  - Se introduce una componente aleatoria que hace que el proceso global no sea determinístico
  - Al igual que antes, para minimizar la componente aleatoria, es necesario repetir el experimento un número alto de veces (50-100 veces) y quedarse con la media de los resultados
    - Esa media se usará como base para comparar los resultados

- Por tanto, se tienen 2 fuentes de variabilidad:
  - Elección del conjunto de entrenamiento y test
  - Variabilidad propia del algoritmo
    - · Por ejemplo, inicialización aleatoria de pesos en una RNA
    - Hay algoritmos que la tienen, y algoritmos que no
- Necesario minimizar ambas fuentes de variabilidad
  - Repetir el experimento para minimizar la componente aleatoria
  - Quedarse con la media de los resultados
    - · Esa media se usará como base para comparar los resultados

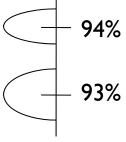
- Cómo minimizar ambas fuentes de variabilidad (1/2)
  - Si los conjuntos de entrenamiento/test son fijos
    - Se especifican de forma separada los conjuntos de entrenamiento y test
    - · Si el sistema es determinístico, ejecutarlo una vez
    - Si el sistema no es determinístico, ejecutarlo varias veces
      - Promediar los resultados
    - Como resultado, se tendrá un valor para estos conjuntos de entrenamiento/test fijos

- Cómo minimizar ambas fuentes de variabilidad (2/2)
  - Si los conjuntos de entrenamiento/test se escogen de forma aleatoria
    - Se parte de un conjunto de patrones sin especificar cuáles estarán en entrenamiento y cuáles estarán en test
    - Dividir este conjunto en entrenamiento/test varias veces
      - Para cada división
        - Si el sistema es determinístico, ejecutarlo una vez
        - Si el sistema no es determinístico, ejecutarlo un número alto de veces
          - Promediar los resultados de estas ejecuciones para este conjunto de entrenamiento
        - Como resultado, se tendrá un único valor para esta división entrenamiento/test
    - Promediar los resultados de todas las divisiones

- Sin embargo, no sólo basta con la media
  - Es posible que dos algoritmos den una precisión de medias 93% y 94%
    - Supondríamos que el segundo funciona mejor
    - Pero es posible que la desviación típica sea...



Un test estadístico podría decir que los resultados son estadísticamente similares

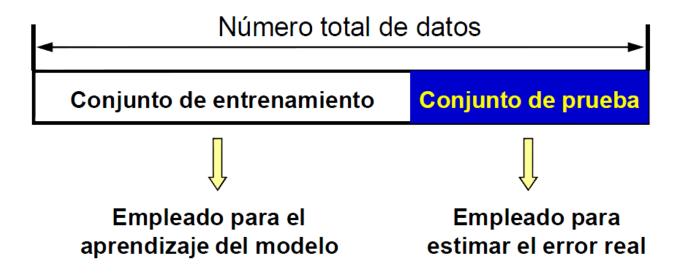


Un test estadístico diría que los resultados son estadísticamente distintos

- Es necesario usar la media y la desviación típica obtenida de las múltiples ejecuciones de cada algoritmo para realizar un contraste de hipótesis
  - Media y desviación típica del resultado obtenido en el conjunto de test!!!
    - Partición del conjunto de patrones en entrenamiento y test
      - Se introduce un componente aleatorio que hay que minimizar
        - Repetir el experimento

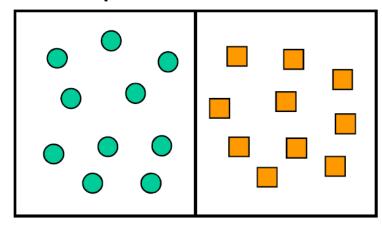
- ¿Cuántos datos escoger para el conjunto de test?
  - Importante que sea representativo
    - Si se tienen pocos patrones (~1000, 5000, etc), se puede tomar un 15%-20% para el conjunto de test (~200, 1000, etc.)
      - Entrenamiento/validación/test: 60/20/20%, 70/15/15% o similar
    - Si se tienen muchos patrones (100.000, IM, etc.) (Big Data, Deep Learning), se suele tomar un porcentaje mucho menor (1%, 0.5%)
      - Entrenamiento/validación/test: 98/1/1%, 99/0.6/0.4% o similar
      - El número de patrones resultante de test es parecido al anterior
        - Más importante que sean muchos es que sean representativos
- ¿¿¿Cómo escoger el conjunto de test???
  - Varias técnicas disponibles

- Técnicas:
  - Hold Out:
    - · Realiza un experimento realizando una única partición
      - Del conjunto de datos disponible se selecciona aleatoriamente dos conjuntos mutuamente excluyentes (entrenamiento y prueba)
      - Partición simple del conjunto de datos



- Técnicas:
  - Hold Out:
    - Es considerado como una evaluación pesimista
      - El número de datos reservados para entrenar es pequeño comparado con el total
    - Puesto que sólo se realiza un único experimento con un conjunto de entrenamiento, el resultado es engañoso si la partición no es adecuada

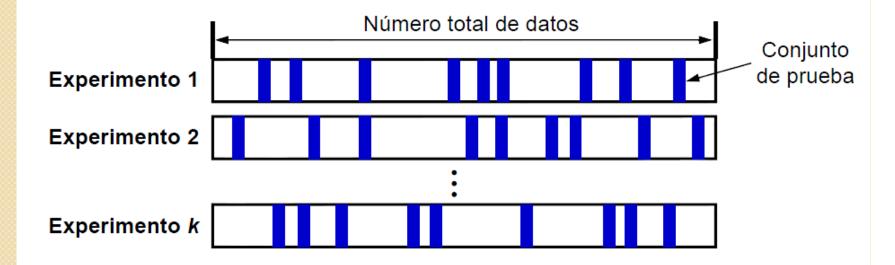
Conjunto de entrenamiento (no adecuado)



Conjunto de prueba (no adecuado)

- Técnicas:
  - Hold Out:
    - Es considerado como una evaluación pesimista
      - El número de datos reservados para entrenar es pequeño comparado con el total
    - Puesto que sólo se realiza un único experimento con un conjunto de entrenamiento, el resultado es engañoso si la partición no es adecuada
      - Los resultados son muy dependientes de la aleatoriedad de la partición en entrenamiento y test
        - Esta fuente de variabilidad no se ha minimizado
          - Repetir el experimento (submuestreo aleatorio).

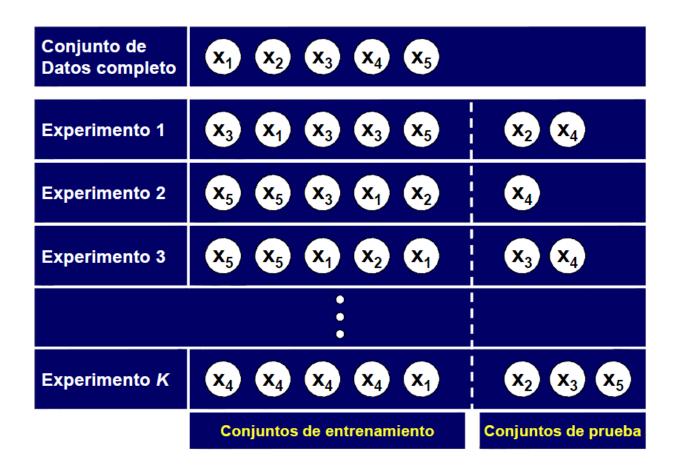
- Técnicas:
  - Random Subsampling (submuestreo aleatorio):
    - Se repite k veces el procedimiento anterior (hold out) y se hace la media de los errores obtenidos
      - k experimentos tomando como conjunto de prueba diferentes subconjuntos del conjunto de datos



#### Técnicas:

- Bootstrapping
  - Muestreo uniforme con reemplazo de los ejemplos disponibles para entrenamiento
    - Una vez que se escoge un ejemplo, se vuelve a dejar en el conjunto y puede que se vuelva a escoger
    - El conjunto de test serán las muestras no escogidas para entrenamiento
  - 0.632 bootstrap:
    - Dado un conjunto de d datos, se toman d muestras.
    - Los datos que no se escojan formarán parte del conjunto de prueba.
    - En torno al 63.2% de las muestras estarán en el "bootstrap" (el conjunto de entrenamiento) y el 36.8% caerá en el conjunto de prueba ya que  $(I-I/d)^d \approx e^{-I} = 0.368$

- Técnicas:
  - Bootstrapping

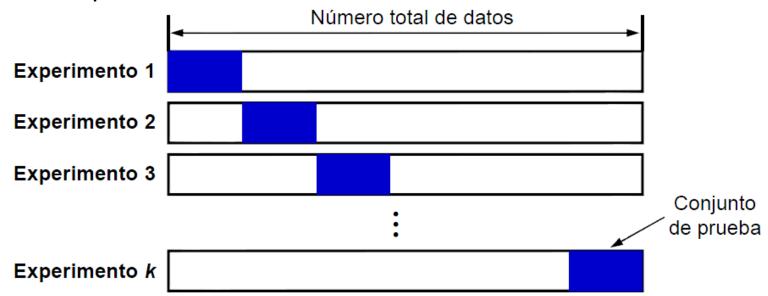


- Técnicas:
  - Leave k-Out
    - Separar k datos, entrenar con los demás, y evaluar con los k datos separados
      - Repetir lo anterior apartando otros k datos diferentes
        - Cada vez se entrena y hace test con datos distintos
      - Obtener una media de los resultados
    - Relacionada con esta, la técnica de validación cruzada

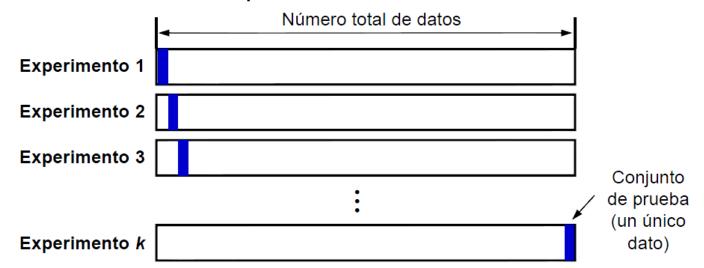
#### Técnicas:

- Validación cruzada
  - k-fold Cross-Validation
  - Se divide aleatoriamente el conjunto de datos en k subconjuntos disjuntos {D<sub>1</sub>, ..., D<sub>k</sub>} del mismo tamaño
    - Típicamente, k = 10
  - El algoritmo es entrenado y probado k veces:
    - En la iteración i, se usa el subconjunto D<sub>i</sub> como conjunto de prueba (test) y los k-l restantes como conjunto de entrenamiento
    - El resultado será la media de los resultados de test
      - Garantiza haber probado todos los datos
      - Es ligeramente pesimista
  - Validación cruzada estratificada:
    - Conseguir que en cada subconjunto D<sub>i</sub> haya igual número de ejemplares de cada clase representada

- Técnicas:
  - Validación cruzada
    - Método similar al submuestreo aleatorio
      - Ventaja de k-fold: todas las muestras del conjunto de datos se usan alguna vez para entrenar o como parte del conjunto de prueba



- Técnicas:
  - Validación cruzada y leave one-out
    - Es el caso extremo de la validación cruzada k-fold tomando k como el número de muestras N
      - Para un conjunto de N muestras se realizan N experimentos
      - En cada experimento se emplean N-1 datos para entrenar y el dato restante de prueba



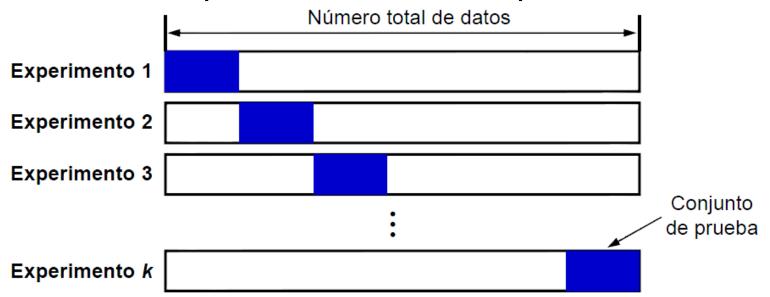
- Técnicas:
  - Validación cruzada:
    - ¿Cuántos subconjuntos y experimentos realizar?
      - Si se elige un gran número de subconjuntos
        - El error estimado será muy preciso (sesgo pequeño respecto al error real)
        - Pero...
          - · La varianza del error real será elevado
          - Tiempo computacional elevado (muchos experimentos)
      - Si se eligen pocos subconjuntos
        - Tiempo computacional reducido (pocos experimentos)
        - La varianza del estimador será pequeña
        - Pero...
          - El error estimado será menos preciso (sesgo mayor respecto al error real)

- Técnicas:
  - Validación cruzada:
    - En la práctica, la elección del número de subconjuntos depende del tamaño del conjunto de datos
      - Para conjuntos de datos de gran tamaño incluso una validación cruzada 3-fold será bastante precisa
      - Para conjuntos de datos pequeños, se puede emplear la leave one-out para emplear como entrenamiento tantos datos como sea posible
    - Una elección habitual de la k-fold es k=10

- Los métodos validación cruzada, leave-one-out, etc. permiten estimar el rendimiento de una configuración ante datos nuevos
- Si partimos de un conjunto de datos, cuantos más se separe para hacer test, más pesimista será esta estimación
  - Es decir, el error de test que devuelve será más bajo con respecto al rendimiento real del modelo ante datos nuevos
  - Porque se habrán utilizado menos datos para entrenar
    - · Para el modelo final de producción se usaría todos los datos

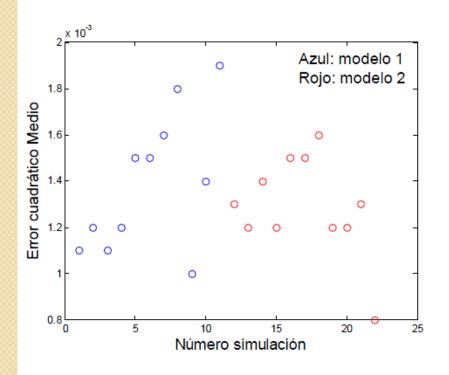
- Por lo tanto, el escenario ideal consiste en separar el menor número de datos posibles para test
  - leave-one-out
- Sin embargo, esto conlleva realizar un gran número de experimentos
  - Elevado tiempo computacional
  - 10-fold crossvalidation como compromiso entre precisión en la estimación del rendimiento real y tiempo de cómputo

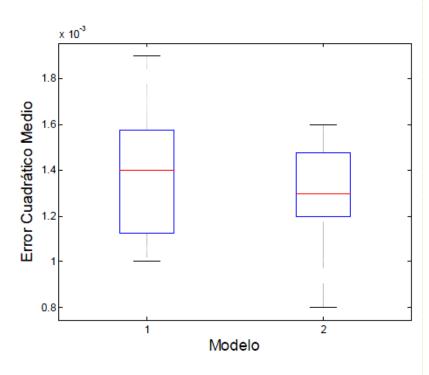
- Con estas técnicas se minimiza el impacto de dividir los patrones de forma aleatoria
  - Si el algoritmo es determinístico, no hay más fuentes de variabilidad
  - En cambio, si es estocástico el resultado de cada uno de estos experimentos no será representativo:



- Con estas técnicas se minimiza el impacto de dividir los patrones de forma aleatoria
  - Si el algoritmo es determinístico, no hay más fuentes de variabilidad
  - En cambio, si es estocástico el resultado de cada uno de estos experimentos no será representativo:
    - Cada vez que se entrene cada experimento dará un resultado distinto
      - El resultado de un único entrenamiento no es significativo
    - Necesario repetir cada experimento (validación cruzada, bootstrapping, leave-one-out, etc.)
      - Con las mismas particiones de datos de cada vez
        - Se "elimina temporalmente" la variabilidad debida a la partición de los datos para intentar minimizar la variabilidad debida al algoritmo

- Para comparar dos modelos:
  - ¿Cuál es mejor en términos de error?





- Para comparar dos modelos:
  - Dos modelos a comparar sobre un conjunto de datos
  - Experimentos realizados siguiendo una estrategia
    - Por ejemplo: k-fold cross-validation
    - Conjunto de k errores cometidos por el modelo I (media)
    - Conjunto de k errores cometidos por el modelo 2 (media)
  - ¿El rendimiento de ambos modelos es igual? ¿Hay diferencias significativas entre ambos?
  - Comparar la media de los errores cometidos

- Para comparar dos modelos:
  - No basta con comparar las medias
    - Es posible que, con la desviación típica, sea



Un test estadístico podría decir que los resultados son estadísticamente similares

Un test estadístico diría que los resultados son estadísticamente distintos

- Para comparar correctamente estas medias:
  - Contraste de hipótesis
  - Método estadístico para comprobar la validez o no de una hipótesis (hipótesis nula)

- Comparación de dos modelos:
  - Etapas del contraste de hipótesis (opción 1):
    - I. Definir la hipótesis nula  $(H_0)$
    - 2. Seleccionar la medida de discrepancia (estadístico del contraste o función de decisión)
    - 3. Elegir el nivel de significación (α) del test
      - Probabilidad de rechazar H<sub>0</sub> siendo cierta
    - 4. Determinación de la región crítica (C) o de rechazo
    - 5. Cálculo de la medida de discrepancia (d) para la muestra particular
    - 6. Resultado del test:
      - Si d está en C  $\rightarrow$  Rechazar  $H_0$
      - Si d no está en  $C \rightarrow Aceptar H_0$

- Comparación de dos modelos:
  - Etapas del contraste de hipótesis (opción 2):
    - I. Definir la hipótesis nula  $(H_0)$
    - 2. Seleccionar un test estadístico (estadístico del contraste) que pueda emplearse para evaluar la validez de H<sub>0</sub>
    - 3. Elegir el nivel de significación ( $\alpha$ ) del test
      - Probabilidad de rechazar H<sub>0</sub> siendo cierta
    - 4. Calcular el p-valor
      - Probabilidad de obtener una discrepancia mayor de la observada siendo H<sub>0</sub> cierta
    - 5. Comparar el p-valor obtenido con nivel de significación:
      - Si  $p \le \alpha \rightarrow Rechazar H_0$
      - Si p >  $\alpha \rightarrow \text{Aceptar H}_0$
      - Por tanto, el p-valor informa sobre cuál sería el nivel de significación más pequeño que nos permitiría rechazar la hipótesis nula

- Tipos de test estadísticos empleados en selección de modelos:
  - t-test
  - Test de Wilcoxon

- Tipos de test estadísticos empleados en selección de modelos:
  - t-test
    - Test paramétrico
    - Evalúa las diferencias entre las medias (errores medios) de dos modelos.
    - Hipótesis nula:  $\mu_1 \mu_2 = 0$
    - Suposiciones de este estadístico:
      - Ambas distribuciones siguen una distribución normal con idénticas varianzas
        - Comprobación:
          - Normalidad:Test de Shapiro-Wilk
          - Varianza: Test de Levene

- Tipos de test estadísticos empleados en selección de modelos:
  - t-test
    - El intervalo de confianza para la diferencia de medias poblacionales está centrado en la diferencia de las medias muestrales, siendo sus límites superior e inferior:

$$(\overline{X_1} - \overline{X_2}) \pm t_{\alpha/2} S \sqrt{\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}}$$

• donde  $t_{\alpha/2}$  es el valor crítico correspondiente al grado de confianza  $1-\alpha$  de la distribución t de Student con  $n_1+n_2-2$  grados de libertad y S

 $S = \sqrt{\frac{(n_1 - 1)S_1^2 + (n_2 - 1)S_2^2}{n_1 + n_2 - 2}}$ 

• es una estimación de la desviación típica común a ambas poblaciones obtenida a partir de las varianzas de las dos muestras

- Tipos de test estadísticos empleados en selección de modelos:
  - t-test
    - S<sub>1</sub><sup>2</sup> y S<sub>2</sub><sup>2</sup> son las cuasivarianzas muestrales de ambas muestras:

$$S_1^2 = \frac{1}{n_1 - 1} \sum_{i=1}^{n_1} (X_{1i} - \overline{X_1})^2$$

$$S_2^2 = \frac{1}{n_2 - 1} \sum_{i=1}^{n_2} (X_{2i} - \overline{X_2})^2$$

Por lo tanto, el t-test se basa en el estadístico

$$t = \frac{\overline{X_1} - \overline{X_2}}{\sqrt{\frac{(n_1 - 1)S_1^2 + (n_2 - 1)S_2^2}{n_1 + n_2 - 2}} \sqrt{\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}}}$$

- Tipos de test estadísticos empleados en selección de modelos:
  - Test de Wilcoxon
    - Wilcoxon Signed Rank Test
    - Test no paramétrico
    - Evalúa las diferencias entre las medianas de dos modelos
    - Hipótesis nula:  $m_1 m_2 = 0$
    - Suposiciones de este test estadístico:
      - Ninguna

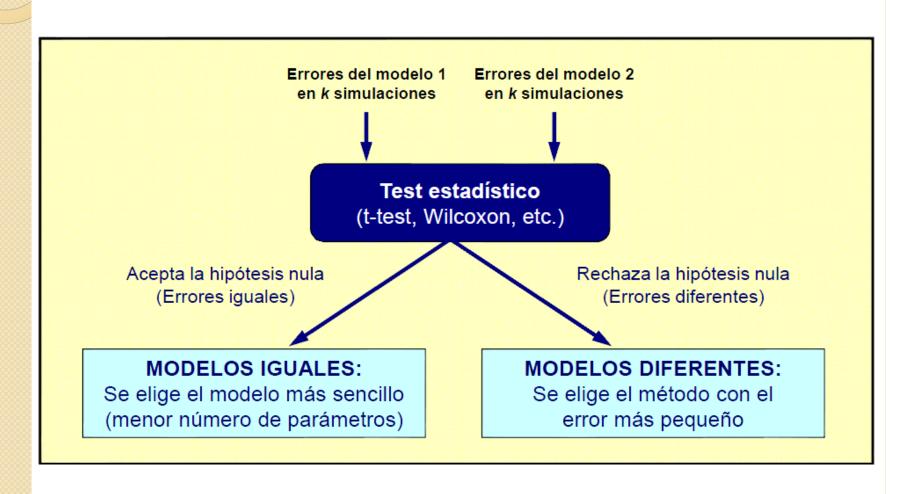
- Tipos de test estadísticos empleados en selección de modelos:
  - Test de Wilcoxon
    - Procedimiento:
      - Se tiene n pares de observaciones  $(x_i, y_i)$  ordenadas
      - Se calculan las diferencias z<sub>i</sub> = y<sub>i</sub> x<sub>i</sub>
      - Se excluyen aquellos pares con  $|y_i x_i| = 0$ 
        - N<sub>r</sub> es el tamaño muestral reducido
      - Se ordenan los valores absolutos  $|z_1|, ..., |z_n|$  y se les asigna su rango  $R_i$
      - El estadístico de la prueba es

$$W = \left| \sum_{i=1}^{N_r} \left[ sign(y_i - x_i) \cdot R_i \right] \right|$$

 se consulta en tablas para determinar si se acepta o no la hipótesis nula

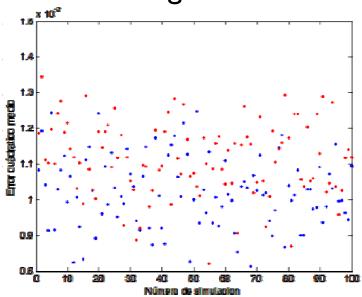
- ¿Cuál de los dos métodos de contraste de hipótesis es el más adecuado?
  - Si se cumplen las suposiciones del t-test, este método es más potente
    - Mayor probabilidad de rechazar H<sub>0</sub> cuando es falsa
  - Cuando no se cumplen las suposiciones del t-test, el de Wilcoxon es más potente y más fiable
    - No asume ninguna distribución
  - El test de Wilcoxon es más robusto frente a casos atípicos
  - En general, si no se conoce la distribución de los errores de cada método, emplear test de Wilcoxon

Metodología de comparación:



#### Ejemplo:

 Dados dos modelos diferentes con los siguientes errores en el conjunto de prueba de 100 simulaciones (ambas muestras de errores siguen una distribución normal)



¿Hay diferencias estadísticamente significativas entre ambos modelos?

- Ejemplo:
  - Se realiza un t-test para comprobarlo:
    - Hipótesis nula  $(H_0)$ :  $\mu_1$   $\mu_2$  = 0
      - Ambas medias son iguales
    - Nivel de significación: 0.0 l
      - · Probabilidad de rechazar la hipótesis nula siendo cierta
    - Resultado obtenido:
      - p-valor del test: 1.1934e<sup>-9</sup>
      - Puesto que  $p \le \alpha$ 
        - Rechazamos H<sub>0</sub> con un nivel de confianza del 99%

- Para comparar 3 o más modelos:
  - No es apropiado simplemente comparar cada par de modelos empleando por ejemplo un t-test:
    - La posibilidad de detectar incorrectamente una diferencia significativa aumenta con el número de comparaciones
  - En este caso:
    - Emplear un análisis de varianza ANOVA o un test de Kruskal-Wallis para identificar si hay una diferencia significativa entre todas las medias
    - Si el test de varianza concluye que sí hay diferencias
      - Hay que investigar cuáles son diferentes empleando un método de comparación múltiple
    - Si el test de varianza concluye que no hay diferencias
      - Todas las medias iguales -> todos los modelos iguales
        - Se elige el más sencillo

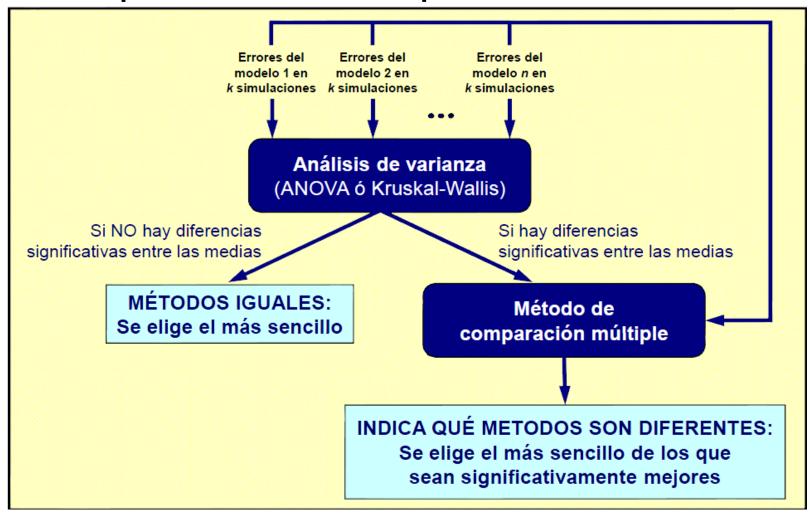
- Comparación de múltiples modelos:
  - ANOVA:
    - Test paramétrico que compara las medias de diversos modelos
    - Hipótesis nula: todas las medias son iguales
      - Provienen de la misma población o de diferentes poblaciones pero con la misma media
    - Suposiciones del test:
      - Todas las muestras de las diferentes poblaciones están normalmente distribuidas
      - 2. Todas las muestras de las diferentes poblaciones tienen la misma varianza
      - 3. Todas las observaciones son mutuamente independientes
    - El test sigue siendo robusto para observaciones que no cumplan "ligeramente" las dos primeras suposiciones

- Comparación de múltiples modelos:
  - Kruskal-Wallis:
    - Test no paramétrico que compara las medias de diversos modelos
    - Hipótesis nula:
      - Provienen de la misma población o de diferentes poblaciones pero con los mismos rangos medios
    - Suposiciones del test:
      - Todas las poblaciones provienen de una población continua
      - Todas las observaciones son mutuamente independientes

- Comparación de múltiples modelos:
  - Kruskal-Wallis:
    - Observación
      - El test sigue siendo válido para comprobar que los datos vienen de la misma distribución
        - Si no lo son, los rangos serán distintos
          - Se rechazará la hipótesis nula
      - Habitualmente, se suele decir que la hipótesis nula es que las medianas son iguales
        - Esto sólo es cierto si se asume que la forma de la distribución en cada grupo es la misma
        - Si las distribuciones son diferentes, la prueba de Kruskal-Wallis puede rechazar la hipótesis nula aunque las medianas sean las mismas
        - Sin embargo, es habitual usar Kruskal-Wallis para comparar medianas

- Comparación de múltiples modelos:
  - Comparación de las diferencias entre cada par de medias con ajustes apropiados a la comparación múltiple:
    - Método de Tukey
    - Método de Scheffé
    - Método de Bonferroni

Comparación de múltiples modelos:



- Una vez escogida una configuración
  - Esta habrá sido entrenada varias veces
    - Por ejemplo, 10 veces en un 10-fold crossvalidation
      - Una por fold
      - Si el modelo es determinístico
    - Por ejemplo, 50 veces en cada fold de un 10-fold crossvalidation
      - 500 entrenamientos en total
      - Si el modelo no es determinístico
  - ¿Cuál es la que se usa en producción?

- Respuesta: ninguna de ellas
  - El objetivo de estas técnicas es estimar el rendimiento de la configuración en datos nuevos
    - Datos de test
    - Útil para comparar rendimientos de distintas configuraciones para escoger la que creemos que dará mejores resultados ante datos nuevos
  - Una vez escogida una configuración, esta se reentrena con todos los datos sin separar ninguno para test
    - El rendimiento en test ya ha sido estimado en el paso anterior de experimentación
    - Entrenar con más datos → Se espera que la generalización sea mejor
      - Se espera que el rendimiento con datos nuevos sea un poco mejor que el calculado previamente
        - El calculado previamente será algo pesimista