

# Introducción a Machine Learning

## Validación de modelos

Ronald Cárdenas Acosta

Agosto, 2016

# Outline

- 1 Validación de un modelo
  - Motivación
  - Procedimiento general
  
- 2 Tipos de validación
  - Validación cruzada
  - Validación Anidada
  - Análisis de cantidad óptima de data de entrenamiento

# Outline

## 1 Validación de un modelo

- Motivación
- Procedimiento general

## 2 Tipos de validación

- Validación cruzada
- Validación Anidada
- Análisis de cantidad óptima de data de entrenamiento

# ¿Porqué validar un modelo de Machine Learning?

- La elección de hiper-parámetros influye grandemente en la inferencia de parámetros ( $w$ )
- Permite aproximar el error de generalización y su varianza
  - Esto permite comparar un algoritmo con otros (ej. Percetron vs LogReg) y escoger los mejores hiper-parámetros
- El performance del modelo puede variar grandemente dependiendo en que sub-grupo se entrene (ej. si la data tiene out-liers)
- Si se tiene poca data, es fácil subestimar el error de generalización

# Outline

## 1 Validación de un modelo

- Motivación
- Procedimiento general

## 2 Tipos de validación

- Validación cruzada
- Validación Anidada
- Análisis de cantidad óptima de data de entrenamiento

# Procedimiento general

- Escoger una métrica con la cual evaluar el performance del modelo
- Dividir el dataset en 3 grupos: entrenamiento (training), validación (validation) y testeo (test)
- Pasos
  - Para cada conjunto de valores de hiper-parametros
    - Entrenar el modelo en el dataset de entrenamiento con los hiper-parámetros definidos
    - Evaluar en dataset de validación con la metrica escogida
  - Escoger hiper-parámetros que maximicen la métrica evaluada
  - Entrenar modelo en dataset [training+validation]
  - Reportar performance de modelo como la métrica evaluada en el dataset de testeo

# Tipos de validación

- Selección de modelo: Validación cruzada
- Comparación de algoritmos: Validación anidada
- Cantidad óptima de data de entrenamiento: Curva de Aprendizaje

# Outline

## 1 Validación de un modelo

- Motivación
- Procedimiento general

## 2 Tipos de validación

- Validación cruzada
- Validación Anidada
- Análisis de cantidad óptima de data de entrenamiento



# Validación cruzada

- Usada para selección de hiper-parámetros que optimicen la métrica
- Data se divide en entrenamiento y testeo
- Para cada set de valores de hiper-parámetros
  - Para cada división *entrenamiento* –  $\rightarrow$  *training, validation*
    - entrenar en training, evaluar en validation
  - valor de métrica = promedio de valores de cada iteración
- Se escoge hiper-parámetros que maximicen valor **promedio** de métrica

# Validación cruzada

- Diferentes estrategias de validación difieren en la forma de dividir el dataset en training y validation
  - K-Fold / Stratified K-Fold
  - Label K-Fold
  - Leave-One-Out / Leave-P-Out
  - Leave-One-Label-Out / Leave-P-Labels-Out
  - Shuffle & Split

# Outline

## 1 Validación de un modelo

- Motivación
- Procedimiento general

## 2 Tipos de validación

- Validación cruzada
- **Validación Anidada**
- Análisis de cantidad óptima de data de entrenamiento

# Validación Anidada

- Añade una capa más de iteración a la validación cruzada
  - Se itera entre varias divisiones de data de testeo
  - Reporte final es el promedio de métrica
- Se utiliza para estimación de varianza de error de generalización (entre todos los casos de testeo)
- No se usa para buscar hiper-parámetros óptimos
  - Validación se hace para hiper-parámetros fijos

# Outline

## 1 Validación de un modelo

- Motivación
- Procedimiento general

## 2 Tipos de validación

- Validación cruzada
- Validación Anidada
- Análisis de cantidad óptima de data de entrenamiento

# Curva de Aprendizaje (Learning Curve)

- Cuantifica cuanto se beneficia el modelo al aumentar la data de entrenamiento
- Su uso es separado del procedimiento de validación
  - La validación utiliza **toda** la data para las sub-divisiones
- Data se divide solo en entrenamiento y validación

# Curva de Aprendizaje (Learning Curve)

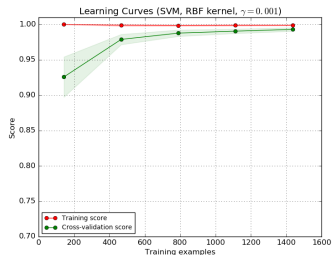
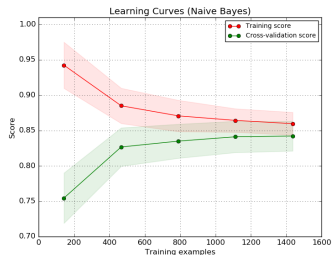


Figure: Ejemplos de curvas de aprendizaje