

Aprendizaje Automático Profundo (Deep Learning)



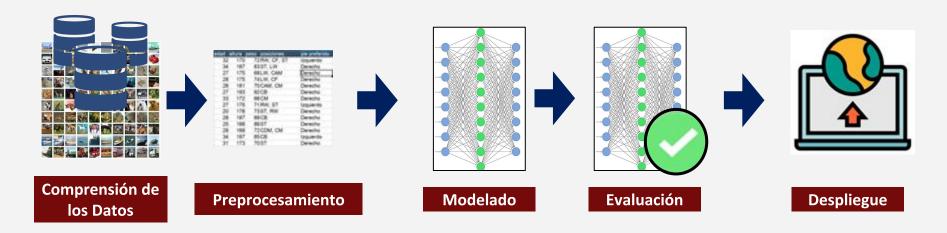


Dr. Facundo Quiroga - Dr. Franco Ronchetti

# Evaluación de modelos

#### **CRISP-DM**

Pipeline de procesamiento en Machine Learning



#### Evaluación

- Qué tan bueno es mi modelo?
- Con datos nuevos(Sin etiquetar, No "vistos")

#### **Hasta ahora:**

 Accuracy con datos de Entrenamiento



### Analogía:

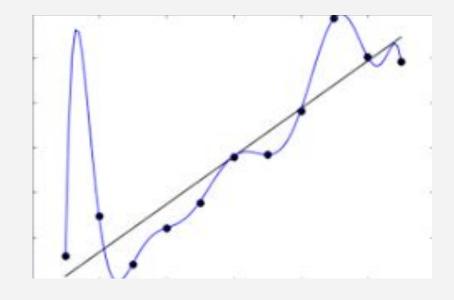
Enseñar a multiplicar

- Práctica: 10 ejercicios
- Examen: los mismos 10 ejercicios
  - ¿aprenden el dominio? o ¿memorizan los resultados?

| 321          | 491          | 556          | 883          | 142          |
|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| $\times$ 508 | $\times$ 622 | $\times$ 288 | $\times$ 470 | $\times$ 309 |
| 2,568        | 982          | 4,448        | 61,810       | 1,278        |
| 160,500      | 9,820        | 44,480       | 353,200      | 42,600       |
| 163,068      | 294,600      | 111,200      | 415,010      | 43,878       |
|              | 305,402      | 160,128      |              |              |
| 908          | 887          | 469          | 668          | 554          |
| $\times$ 219 | $\times$ 138 | $\times$ 909 | $\times$ 664 | × 628        |
| 8,172        | 7,096        | 4,221        | 2,672        | 4,432        |
| 9,080        | 26,610       | 422,100      | 40,080       | 11,080       |
| 181,600      | 88,700       | 426,321      | 400,800      | 332,400      |
| 198.852      | 122,406      |              | 443.552      | 347.912      |

# Qué sería aprender los datos "de memoria" en Redes neuronales?

- Podríamos tener un polinomio que pase exactamente por todos los patrones de entrenamiento.
- Spoiler: overfitting.



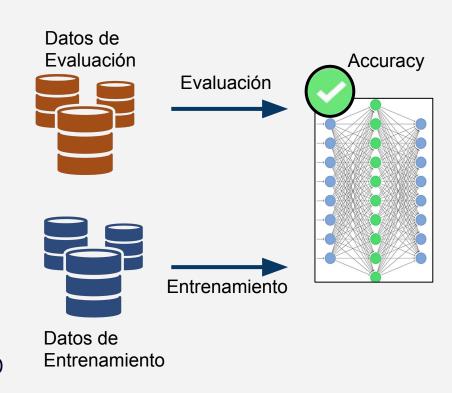
#### Lo que haremos:

 Accuracy con datos de Evaluación

#### **Analogía:**

Enseñar a multiplicar

- Práctica: 10 ejercicios
- Examen: otros 10 ejercicios
  - ¿aprenden el dominio? o ¿memorizan los resultados?



#### Datos de evaluación

- Sinónimos: Test Set, Testing set, datos de prueba.
- Deberían tener el mismo formato que los datos de entrenamiento.
- Generalmente se obtienen de la misma base de datos.
  - Dividir en dos conjuntos
  - Generalmente 80%- 20%



#### Accuracy en ambos conjuntos

- Acc en Train set: ¿Fue entrenado correctamente el modelo?
- Acc en Test set: ¿Cómo se comporta el modelo con datos nuevos?



### Cómo generar conjunto de evaluación

#### División fija

- 12 ejemplos
  - 3 Quemados 9 Ninguno
- Divido <sup>2</sup>/<sub>3</sub> y <sup>1</sup>/<sub>3</sub>
  - Train: <sup>2</sup>/<sub>3</sub> = 66% = 8 ej
  - $\circ$  Test:  $\frac{1}{3} = 33\% = 4 ej$
- Problemas?
  - Test sin clase Quemado
  - Ordenado por Pelo

| _ |                       |                       |   |
|---|-----------------------|-----------------------|---|
|   |                       |                       |   |
|   |                       |                       | н |
|   | $\boldsymbol{\omega}$ | C                     |   |
|   | $\overline{}$         | $\boldsymbol{\omega}$ |   |

| Nombre   | Pelo      | Estatura | Peso   | Protector | Resultado |
|----------|-----------|----------|--------|-----------|-----------|
| Juan     | Castaño   | Promedio | Pesado | No        | Ninguno   |
| Catalina | Castaño   | Baja     | Ligero | Si        | Ninguno   |
| Felipe   | Pelirrojo | Promedio | Pesado | No        | Ninguno   |
| Roberta  | Pelirrojo | Alta     | Ligero | Si        | Ninguno   |

| Nombre   | Pelo      | Estatura | Peso     | Protector | Resultado |
|----------|-----------|----------|----------|-----------|-----------|
| Sara     | Rubio     | Promedio | Ligero   | No        | Quemado   |
| Diana    | Rubio     | Alta     | Promedio | Si        | Quemado   |
| Alexis   | Rubio     | Baja     | Promedio | Si        | Ninguno   |
| Ana      | Rubio     | Baja     | Promedio | No        | Ninguno   |
| Emilia   | Rubio     | Promedio | Pesado   | No        | Quemado   |
| Pedro    | Rubio     | Alta     | Pesado   | No        | Ninguno   |
| Jacinta  | Castaño   | Alta     | Promedio | Si        | Ninguno   |
| María    | Castaño   | Baja     | Promedio | No        | Ninguno   |
| Juan     | Castaño   | Promedio | Pesado   | No        | Ninguno   |
| Catalina | Castaño   | Baja     | Ligero   | Si        | Ninguno   |
| Felipe   | Pelirrojo | Promedio | Pesado   | No        | Ninguno   |
| Roberta  | Pelirrojo | Alta     | Ligero   | Si        | Ninguno   |



| Nombre  | Pelo    | Estatura | Peso     | Protector | Resultado |
|---------|---------|----------|----------|-----------|-----------|
| Sara    | Rubio   | Promedio | Ligero   | No        | Quemado   |
| Diana   | Rubio   | Alta     | Promedio | Si        | Quemado   |
| Alexis  | Rubio   | Baja     | Promedio | Si        | Ninguno   |
| Ana     | Rubio   | Baja     | Promedio | No        | Ninguno   |
| Emilia  | Rubio   | Promedio | Pesado   | No        | Quemado   |
| Pedro   | Rubio   | Alta     | Pesado   | No        | Ninguno   |
| Jacinta | Castaño | Alta     | Promedio | Si        | Ninguno   |
| María   | Castaño | Baja     | Promedio | No        | Ninguno   |

### Cómo generar conjunto de evaluación

#### **División Estratificada**

- 12 ejemplos
  - 3 Quemados 9 Ninguno
- Divido <sup>2</sup>/<sub>3</sub> y <sup>1</sup>/<sub>3</sub>
  - Train: <sup>2</sup>/<sub>3</sub> = 66% = 8 ej
  - $\circ$  Test:  $\frac{1}{3} = 33\% = 4 ej$
- Estratificada
  - Misma proporción de clases
  - Sigue ordenado

| т |   | _ | 4 |
|---|---|---|---|
| ı | C | 2 | l |

| Nombre   | Pelo      | Estatura | Peso   | Protector | Resultado |
|----------|-----------|----------|--------|-----------|-----------|
| Emilia   | Rubio     | Promedio | Pesado | No        | Quemado   |
| Catalina | Castaño   | Baja     | Ligero | Si        | Ninguno   |
| Felipe   | Pelirrojo | Promedio | Pesado | No        | Ninguno   |
| Roberta  | Pelirrojo | Alta     | Ligero | Si        | Ninguno   |

| Nombre   | Pelo      | Estatura | Peso     | Protector | Resultado |
|----------|-----------|----------|----------|-----------|-----------|
| Sara     | Rubio     | Promedio | Ligero   | No        | Quemado   |
| Diana    | Rubio     | Alta     | Promedio | Si        | Quemado   |
| Alexis   | Rubio     | Baja     | Promedio | Si        | Ninguno   |
| Ana      | Rubio     | Baja     | Promedio | No        | Ninguno   |
| Emilia   | Rubio     | Promedio | Pesado   | No        | Quemado   |
| Pedro    | Rubio     | Alta     | Pesado   | No        | Ninguno   |
| Jacinta  | Castaño   | Alta     | Promedio | Si        | Ninguno   |
| María    | Castaño   | Baja     | Promedio | No        | Ninguno   |
| Juan     | Castaño   | Promedio | Pesado   | No        | Ninguno   |
| Catalina | Castaño   | Baja     | Ligero   | Si        | Ninguno   |
| Felipe   | Pelirrojo | Promedio | Pesado   | No        | Ninguno   |
| Roberta  | Pelirrojo | Alta     | Ligero   | Si        | Ninguno   |



| Nombre  | Pelo    | Estatura | Peso     | Protector | Resultado |
|---------|---------|----------|----------|-----------|-----------|
| Sara    | Rubio   | Promedio | Ligero   | No        | Quemado   |
| Diana   | Rubio   | Alta     | Promedio | Si        | Quemado   |
| Alexis  | Rubio   | Baja     | Promedio | Si        | Ninguno   |
| Ana     | Rubio   | Baja     | Promedio | No        | Ninguno   |
| Pedro   | Rubio   | Alta     | Pesado   | No        | Ninguno   |
| Jacinta | Castaño | Alta     | Promedio | Si        | Ninguno   |
| María   | Castaño | Baja     | Promedio | No        | Ninguno   |
| Juan    | Castaño | Promedio | Pesado   | No        | Ninguno   |

## Cómo generar conjunto de evaluación

#### **División Estratificada Aleatoria**

- 12 ejemplos
  - 3 Quemados 9 Ninguno
- Divido <sup>2</sup>/<sub>3</sub> y <sup>1</sup>/<sub>3</sub>
  - Train: <sup>2</sup>/<sub>3</sub> = 66% = 8 ej
  - <mark>Test</mark>: ⅓ = 33% = 4 ej
- Estratificada y aleatoria
  - Misma proporción de clases
  - Orden Aleatorio

| Nombre | Pelo      | Estatura | Peso     | Protector | Resultado |
|--------|-----------|----------|----------|-----------|-----------|
| Sara   | Rubio     | Promedio | Ligero   | No        | Quemado   |
| Ana    | Rubio     | Baja     | Promedio | No        | Ninguno   |
| Pedro  | Castaño   | Alta     | Pesado   | No        | Ninguno   |
| Felipe | Pelirrojo | Promedio | Pesado   | No        | Ninguno   |

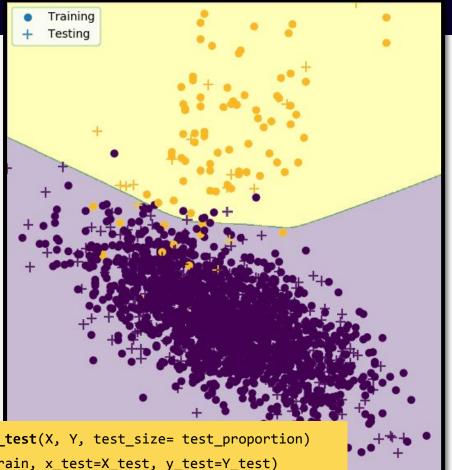
| Nombre   | Pelo      | Estatura | Peso     | Protector | Resultado |
|----------|-----------|----------|----------|-----------|-----------|
| Sara     | Rubio     | Promedio | Ligero   | No        | Quemado   |
| Diana    | Rubio     | Alta     | Promedio | Si        | Quemado   |
| Alexis   | Rubio     | Baja     | Promedio | Si        | Ninguno   |
| Ana      | Rubio     | Baja     | Promedio | No        | Ninguno   |
| Emilia   | Rubio     | Promedio | Pesado   | No        | Quemado   |
| Pedro    | Castaño   | Alta     | Pesado   | No        | Ninguno   |
| Jacinta  | Castaño   | Alta     | Promedio | Si        | Ninguno   |
| María    | Castaño   | Baja     | Promedio | No        | Ninguno   |
| Juan     | Castaño   | Promedio | Pesado   | No        | Ninguno   |
| Catalina | Castaño   | Baja     | Ligero   | Si        | Ninguno   |
| Felipe   | Pelirrojo | Promedio | Pesado   | No        | Ninguno   |
| Roberta  | Pelirrojo | Alta     | Ligero   | Si        | Ninguno   |

#### Train

| Nombre   | Pelo      | Estatura | Peso     | Protector | Resultado |
|----------|-----------|----------|----------|-----------|-----------|
| Diana    | Rubio     | Alta     | Promedio | Si        | Quemado   |
| Alexis   | Rubio     | Baja     | Promedio | Si        | Ninguno   |
| Emilia   | Rubio     | Promedio | Pesado   | No        | Quemado   |
| Jacinta  | Castaño   | Alta     | Promedio | Si        | Ninguno   |
| María    | Castaño   | Baja     | Promedio | No        | Ninguno   |
| Juan     | Castaño   | Promedio | Pesado   | No        | Ninguno   |
| Catalina | Castaño   | Baja     | Ligero   | Si        | Ninguno   |
| Roberta  | Pelirrojo | Alta     | Ligero   | Si        | Ninguno   |

## Training / Testing

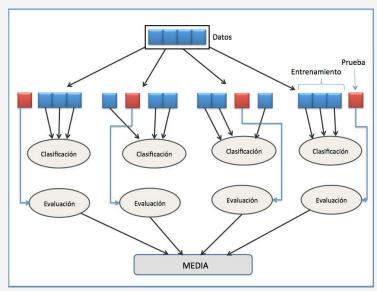
Ejemplo dataset 2D estratificado aleatoriamente



X\_train, X\_test, Y\_train, Y\_test = AAPutils.dividir\_train\_test(X, Y, test\_size= test\_proportion)
AAPutils.plot\_frontera\_de\_decision\_2D(model, X\_train, Y\_train, x\_test=X\_test, y\_test=Y\_test)

#### Validación cruzada

- Una sola evaluación no es suficiente para garantizar que mi modelo funciona correctamente
  - ¿Qué ocurre si los datos de "testing" son muy "fáciles" de clasificar/predecir?
- Una forma de solucionar esto es con la validación cruzada.
  - Hacer K ejecuciones de forma estratificada partiendo en k lugares distintos el conjunto de datos.
  - Muchas veces se reemplaza esto por K ejecuciones aleatorias independientes.



## Interpretación Accuracy en Train/Test set

#### Situaciones con Accuracy:

- Train alto Test alto
  - Buen modelo
  - sirve para nuevos datos
- Train alto Test bajo
  - Modelo "bien" entrenado
  - No sirve para nuevos datos.
- Train bajo Test no importa
  - Modelo mal entrenado

Situación ideal. El modelo Generaliza

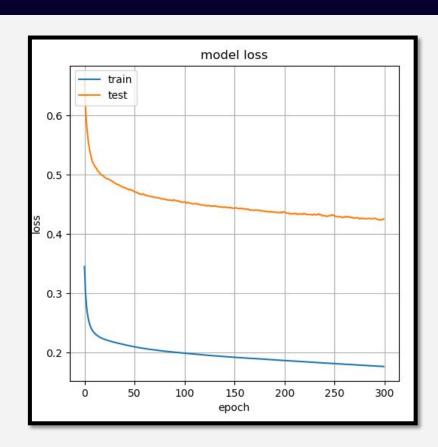


Síntomas de sobreajuste

Síntomas de sub-ajuste

#### Curvas de entrenamiento

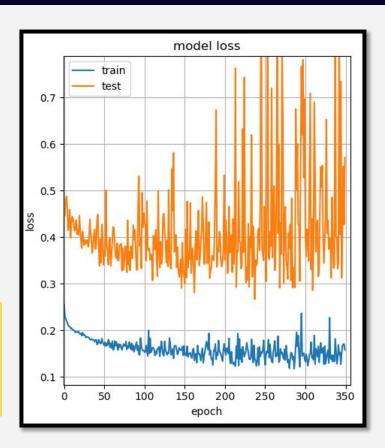
- Las curvas de entrenamiento nos permiten ver cómo se comporta el modelo (error) en cada iteración.
- No siempre la última iteración será el mejor modelo.
- La diferencia entre la curva de training y de testing nos permite visualizar el comportamiento del modelo con nuevos datos.



#### Curvas de entrenamiento

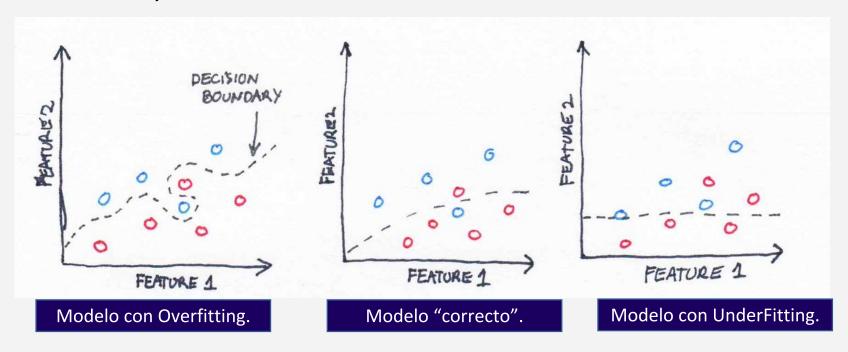
También nos permiten visualizar errores en la configuración de los hiperparámetros. Por ejemplo ¿Qué ocurre aquí?

Alfa demasiado grande!



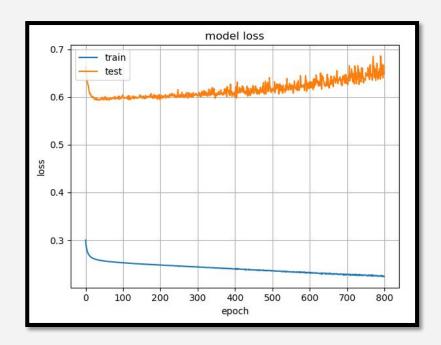
# Sobreajuste (overfitting)

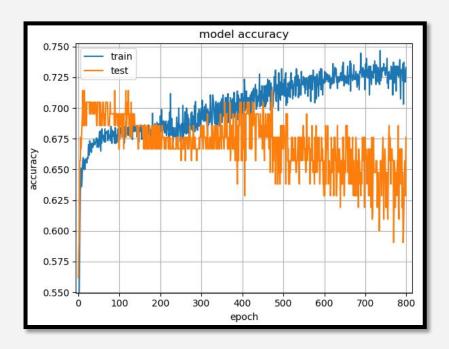
El Overfitting ocurre cuando el modelo es muy complejo e intenta adecuarse perfectamente a los datos de entrenamiento.



### Overfitting

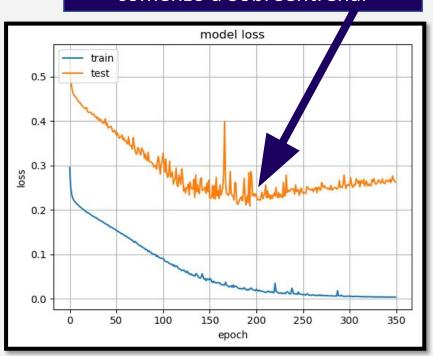
Podemos verificar el Overfitting si el error en Training es bajo y el de testing es alto. Si observamos las curvas de aprendizaje podemos detectar el momento en que comienza el sobreajuste del modelo.



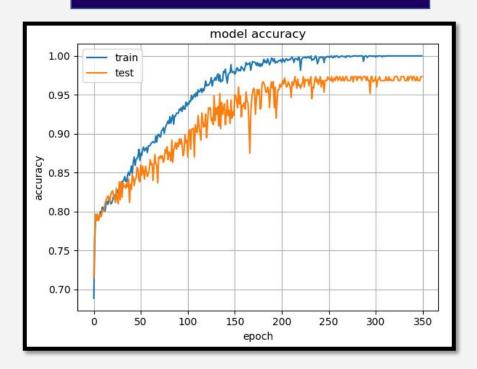


### Overfitting

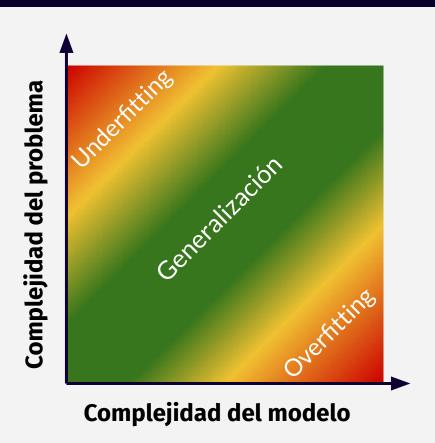
# Momento en que el modelo comenzó a Sobreentrenar



# En este caso, el accuracy no se vio demasiado afectado.

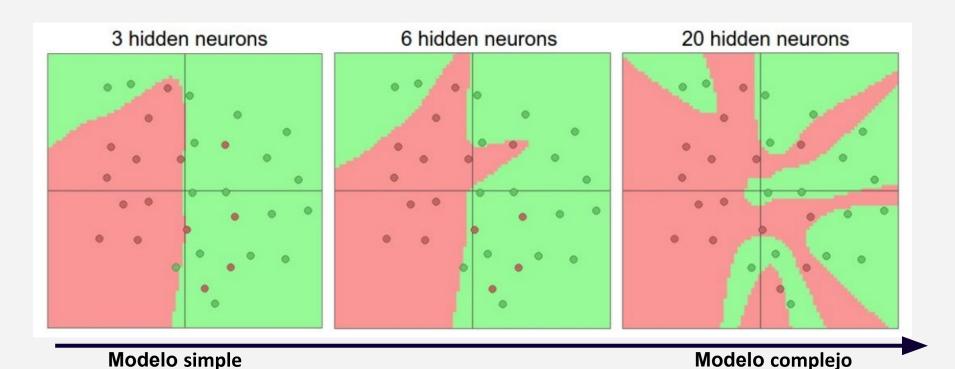


### Complejidad del modelo vs problema



- Generalización
  - Capacidad de un modelo para predecir datos no vistos (sin etiquetar).
  - Se mide con Testing set
- Overfitting
  - Predice bien train
  - No generaliza en test
- Underfitting
  - Predice mal train

## Complejidad del modelo vs problema



## Hiperparámetros

Los hiperparámetros son los que guían el algoritmo de optimización de nuestro modelo.

No existe una configuración ideal, sino que depende del modelo y del dataset específico.

Cantidad de capas y cant. de neuronas por capa.

- Fx activación
- Learning rate (alfa)
- Batch size
- # Epochs
- Regularización
- ..

## Regularización

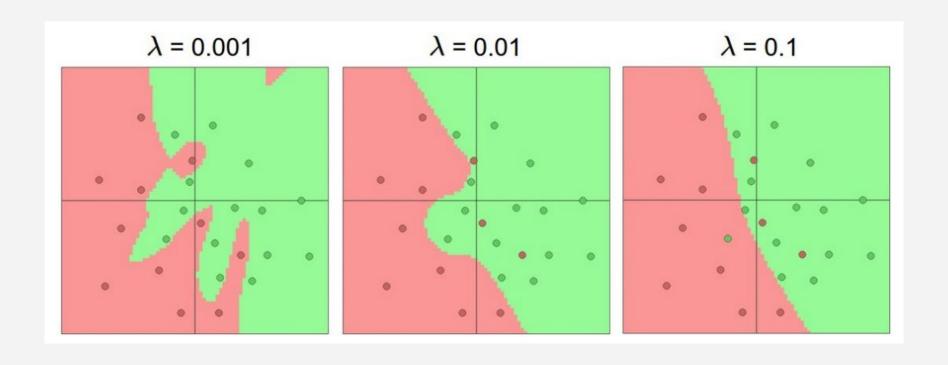
La regularización es un modo de restringir la complejidad de un modelo.

Es útil cuando hay mucha correlación entre features, para filtrar ruido en los datos y también para evitar el Overfitting.

#### **L2** Regularization:

$$Loss = \frac{1}{n} \sum_{i}^{n} E_{i} + \lambda \sum_{j}^{m} w_{j}^{2}$$
Error plano
Penalización

# Regularización



### Preprocesamiento

# ¿Cuándo preprocesar los datos?

Ej: TRAIN - petal size: min =0.1, max= 2 TEST - petal size: min =0.2, max= 1.5

- Solo preprocesar datos de entrenamiento
  - Distintos formatos y rangos
- Preprocesar Train y Test por separado
  - Problemas al tener nuevas distribuciones
- Preprocesar antes de dividir
  - Contamina train Set (hacemos trampa)

TRAIN - petal size: min =0, max= 1 TEST - petal size: min =0.2, max= 1.5

TRAIN - petal size: min =0, max= 1 TEST - petal size: min =0, max= 1 (en train 1= 2 y en test 1= 1.5)

TRAIN - petal size: min =0, max= 1
TEST - petal size: min =0, max= 1
Ok, pero se entrenó con info de Test set

## Preprocesamiento

## ¿Cuándo preprocesar los datos?

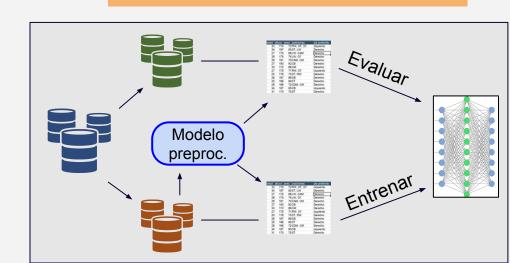
- Modelo de preprocesamiento
  - Se genera un modelo de datos con Train set
  - Se utiliza el mismo modelo con Test Set (Ej. media y desviación).
  - Otra opción: El modelo de clasificación también preprocesa (Ej. ConvNets)

Ej: TRAIN - petal size: min =0.1, max= 2 TEST - petal size: min =0.2, max= 1.5

TRAIN -

Modelo Preproc.= min=0.1, max=2 petal size: min =0, max= 1

Aplicar mismo modelo de preproc. TEST - petal size: min =0, max= 1



### Análisis y visualización del entrenamiento

Regresión con webcam
 https://editor.p5js.org/AndreasRef/sketches/B1g7ds0wm

• Clasificación o Regresión simple en datasets 2D:

https://playground.tensorflow.org/

https://cs.stanford.edu/people/karpathy/convnetjs/demo/classify2d.html

• Red entrenada para clasificar imágenes de números:

http://scs.ryerson.ca/~aharley/vis/fc/