Desempeño de Modelos

Jorge Gallego

Facultad de Economía, Universidad del Rosario

Junio 27 de 2017

Introducción

- Hemos visto algunas técnicas para evaluar el desempeño de un modelo
- Naturalmente, nos interesa que los algoritmos pronostiquen "bien" en datos futuros
- Pero existen diferentes concepciones, o métricas, para evaluar buenos pronósticos
- Veremos algunas de estas medidas de desempeño de los algoritmos

Precisión Total del Modelo

- Quizás la manera más obvia de medir el desempeño de un algoritmo es a través de su precisón total
- Representa la proporción total de casos clasificados correctamente, sobre la proporción total de casos a clasificar
- Sin embargo, hay que tener precaución con esta medida
- Consideremos el siguiente caso: queremos predecir un defecto genético en bebes
- Supongamos que 1 de cada 1000 bebés vienen con el defecto genético

Precisión Total del Modelo

- Consideremos el siguiente algoritmo: clasificar cada nuevo bebé como sano
- ¿Cuál sería la precisión de este algoritmo?
- Se equivocaría una en 1000 veces. Una precisión del 99.9%
- Lo evaluaríamos con un excelente algoritmo. ¿Lo es?
- Naturalmente no lo es. En este ejemplo, nos interesa predecir correctamente a los bebés que nacen con el defecto

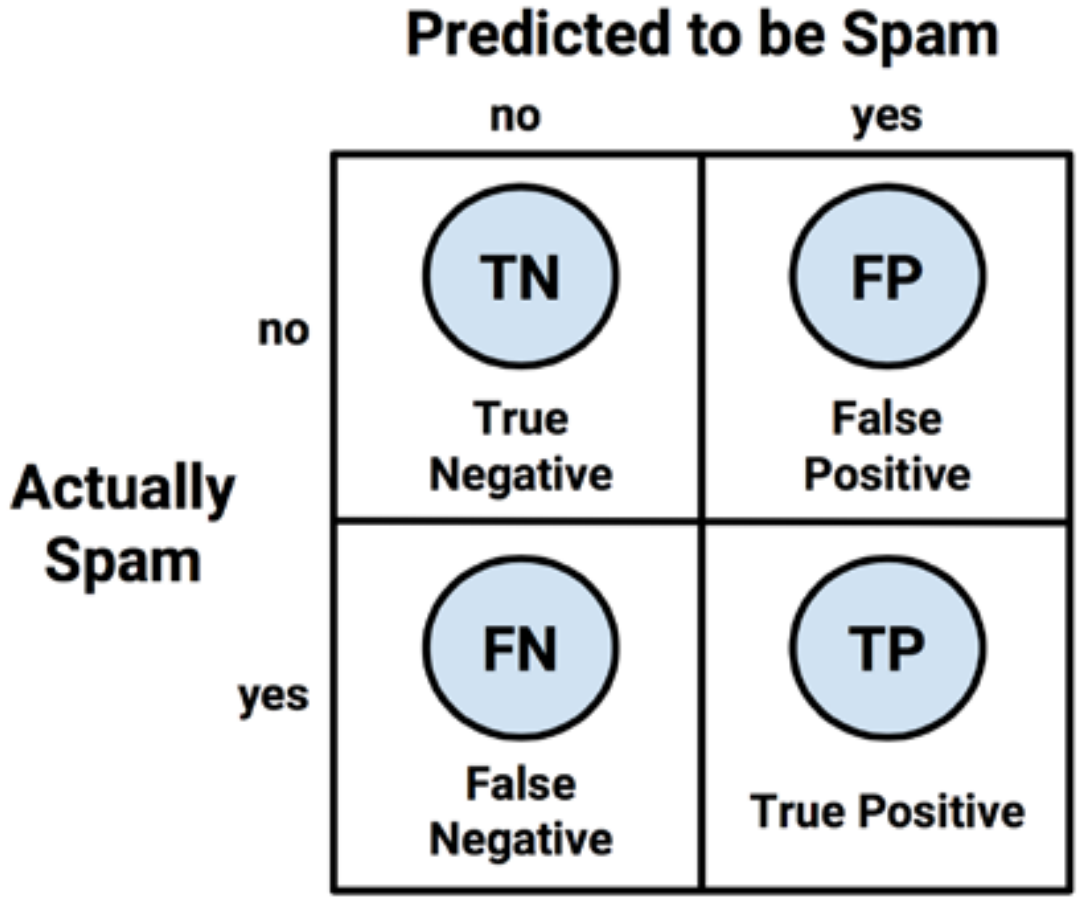
Precisión Total del Modelo

- Es decir, queremos minimizar la tasa de "falsos negativos"
- ¡Pero en este caso nos equivocamos en el 100% de bebés que nacen con el defecto!
- El algoritmo no es muy útil en este caso
- Necesitamos otras métrica para evaluar el desempeño del modelo
- Cuál sea más útil depende del problema que se esté buscando resolver

Matrices de Confusión

- En tareas de clasificación, son varias las cantidades de interés
- **Verdaderos Positivos**: casos correctamente clasificados en la categoría de interés
- **Verdaderos Negativos**: casos correctamente clasificados fuera de la categoría de interés
- **Falsos Positivos**: casos incorrectamente clasificados en la categoría de interés
- **Falsos Negativos**: casos incorrectamente clasificados fuera de la categoría de interés

Ejemplo: Predicción de SMS Spam



Fuente: Lantz (2015)

Medidas Básicas de Desempeño

De la matriz de confusión podemos definir dos medidas básicas de desempeño:

$$Accuracy = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$$

$$Error\ Rate = 1 - Accuracy = 1 - \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$$

En principio, buscamos maximizar la precisión y minimizar el error

Otras Medidas de Desempeño

- Pero como lo refleja el ejemplo introductorio, la precisión no siempre es la mejor medida
- Estudiaremos otras métricas para medir desempeño:
- El estadístico Kappa, la sensibilidad y la especificidad
- Así como algunas medidas gráficas:
- La curva ROC y el área AUC

Estadístico Kappa

- El estadístico kappa es un ajuste de la precisión total
- Ajusta por la probabilidad de acertar simplemente por cuestiones del azar
- Es particularmente útil con bases de datos con imbalance de clase grande
- En los que es fácil tener una precisión alta simplemente asignando todos los casos a la clase más popular

Estadístico Kappa

- Se define como:

$$\kappa = \frac{Pr(a) - Pr(e)}{1 - Pr(e)}$$

- donde $P(a)$ es la proporción de concordancia actual
- $P(e)$ es la concordancia esperada entre el clasificador y los valores verdaderos, asumiendo que se escogen al azar

Estadístico Kappa

- El estadístico kappa es un número entre 0 y 1
- Cuánto más grande sea, mayor es la precisión
- Suele usarse la siguiente convención:
  - $\kappa \leq 0.2 \rightarrow$ concordancia muy baja
  - $0.2 < \kappa \leq 0.4 \rightarrow$ concordancia baja
  - $0.4 < \kappa \leq 0.6 \rightarrow$ concordancia moderada
  - $0.6 < \kappa \leq 0.8 \rightarrow$ concordancia alta
  - $0.8 < \kappa \leq 1 \rightarrow$ concordancia muy alta

Ejemplo: Predicción de SMS Spam

	sms_results$predict_type		
sms_results$actual_type	ham	spam	Row Total
ham	1203	4	1207
	16.128	127.580	
	0.997	0.003	0.868
	0.975	0.026	
	0.865	0.003	
spam	31	152	183
	106.377	841.470	
	0.169	0.831	0.132
	0.025	0.974	
	0.022	0.109	
Column Total	1234	156	1390
	0.888	0.112	

Fuente: Lantz (2015)

Ejemplo: Predicción de SMS Spam

En este ejemplo:

$$P(a) = \frac{1203 + 152}{1390} = 0.974$$

$$\begin{aligned} P(e) &= Pr(tipo\ real\ ham) * Pr(pred\ ham) \\ &\quad + Pr(tipo\ real\ spam) * Pr(pred\ spam) \\ &= \left(\frac{1207}{1390}\right) * \left(\frac{1234}{1390}\right) + \left(\frac{183}{1390}\right) * \left(\frac{156}{1390}\right) \\ &= 0.868 * 0.888 + 0.132 * 0.112 \\ &= 0.786 \end{aligned}$$

Ejemplo: Predicción de SMS Spam

De esta forma, el estimador kappa en este ejemplo es:

$$\kappa = \frac{0.974 - 0.786}{1 - 0.786} = 0.879$$

Que representa una concordancia muy alta. Los pronósticos son más que simple azar

Sensibilidad y Especificidad

- Dos medidas adicionales capturan un trade-off inherente a estos problemas
- Algoritmos muy conservadores o muy agresivos
- Un filtro de spam muy agresivo clasificaría como spam casi todo, incluyendo correos buenos. Muchos falsos positivos
- Un filtro muy conservador clasificaría poco como spam, protegiendo los buenos. Muchos falsos negativos
- Las medidas de sensibilidad y especificidad capturan este trade-off

Sensibilidad y Especificidad

- Los definimos de la siguiente forma:

$$sensitivity = \frac{TP}{TP + FN}$$

$$specificity = \frac{TN}{TN + FP}$$

- La sensibilidad mide la fracción positivos correctamente clasificados. Qué tanto acertamos con los positivos
- La especificidad mide la fraccón de negativos correctamente clasificados. Qué tanto acertamos con los negativos

Sensibilidad y Especificidad

- En el ejemplo de los SMS:

$$sensitivity = \frac{152}{183} = 0.831$$

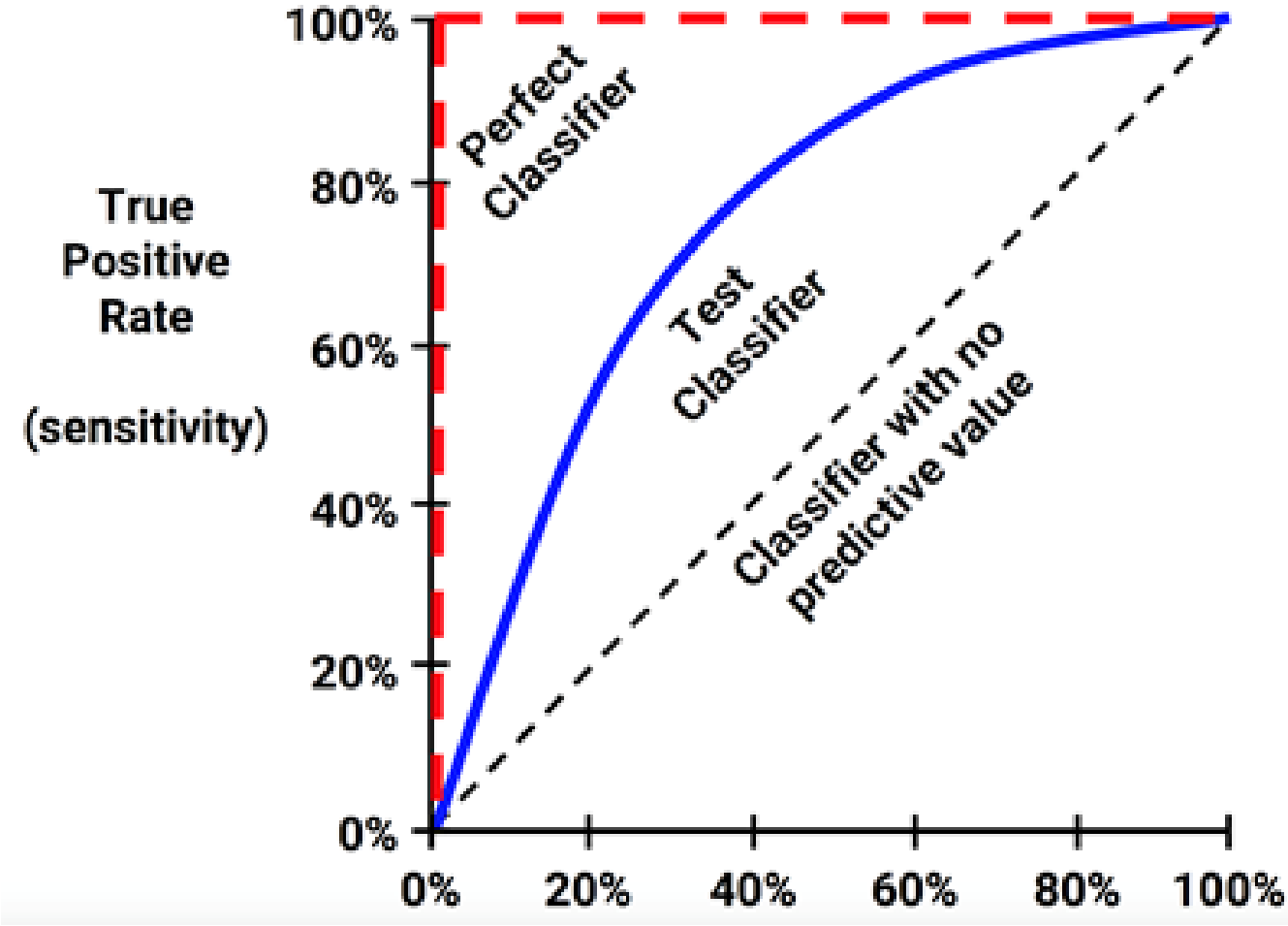
$$specificity = \frac{1203}{1207} = 0.997$$

- La idea es balancear estas dos medidas
- Cuál sea el punto ideal depende del problema en específico

Curvas ROC

- El trade-off entre sensibilidad y especificidad lo podemos expresar gráficamente
- Por medio de las curvas ROC (Receiver Operating Characteristic)
- Se busca aumentar la detección de verdaderos positivos, sin aumentar los falsos positivos
- Ubicamos los verdaderos positivos en el eje y y los falsos positivos en el x

Curvas ROC



Fuente: Lantz (2015)

Curvas ROC

- La recta de 45 grados representa el clasificador inútil:
- El que aumenta el número de verdaderos positivos aumentando los falsos positivos
- La línea punteada es el clasificador perfecto: alcanza el máximo de verdaderos positivos al mínimo de falsos positivos
- La curva se construye ordenando las predicciones del modelo de la clase positiva, empezando por los valores más altos
- Se seleccionan umbrales para clasificar como un positivo. Se calculan las tasas de verdaderos positivos y falsos positivos
- Y se grafican los diferentes umbrales

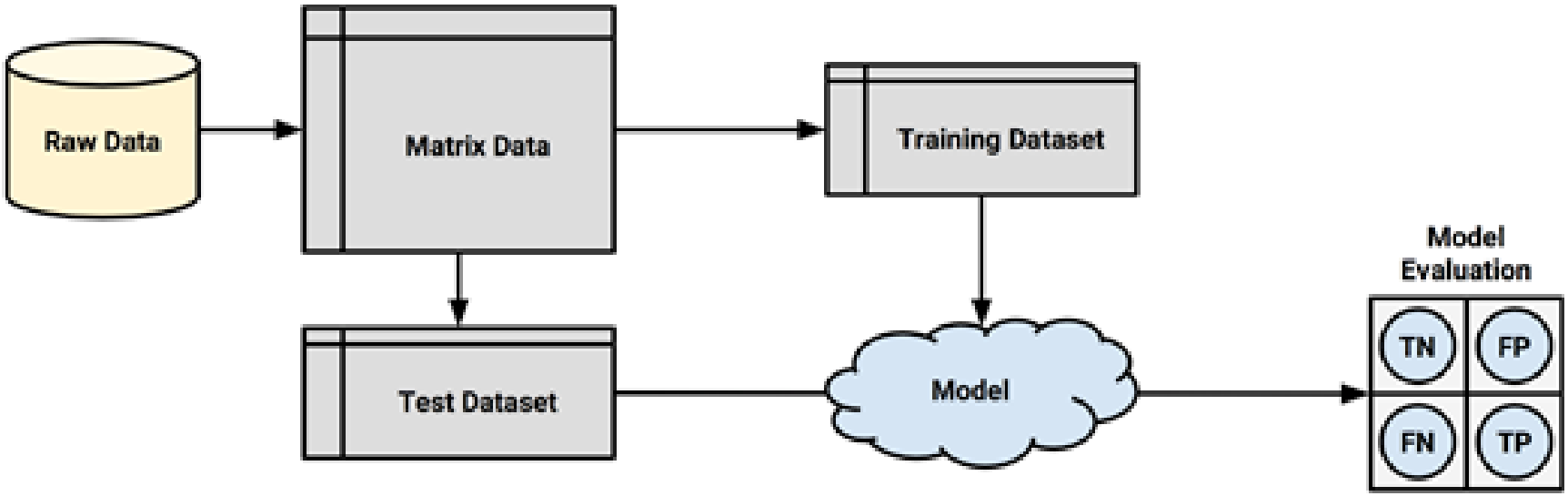
Area Bajo la Curva (AUC)

- El área bajo la curva mide el desempeño del clasificador bajo el criterio ROC
- El clasificador inútil tiene un AUC=0.5. Recoge el 50% del área total del cuadrado
- El clasificador perfecto tiene AUC=1. Recoge el 100% del área
- Los clasificadores reales tendrán un AUC entre 0.5 y 1. Cuánto más grande sea AUC, mejor será el clasificador

Desempeño Futuro

- Hemos visto un método simple para evaluar el desempeño futuro de un algoritmo
- Dividir aleatoriamente la base total en dos: entrenamiento y prueba
- Esta técnica se conoce como el *holdout method*
- Qué proporción se destine a cada grupo ha de depender de cuántos datos se tengan

Desempeño Futuro

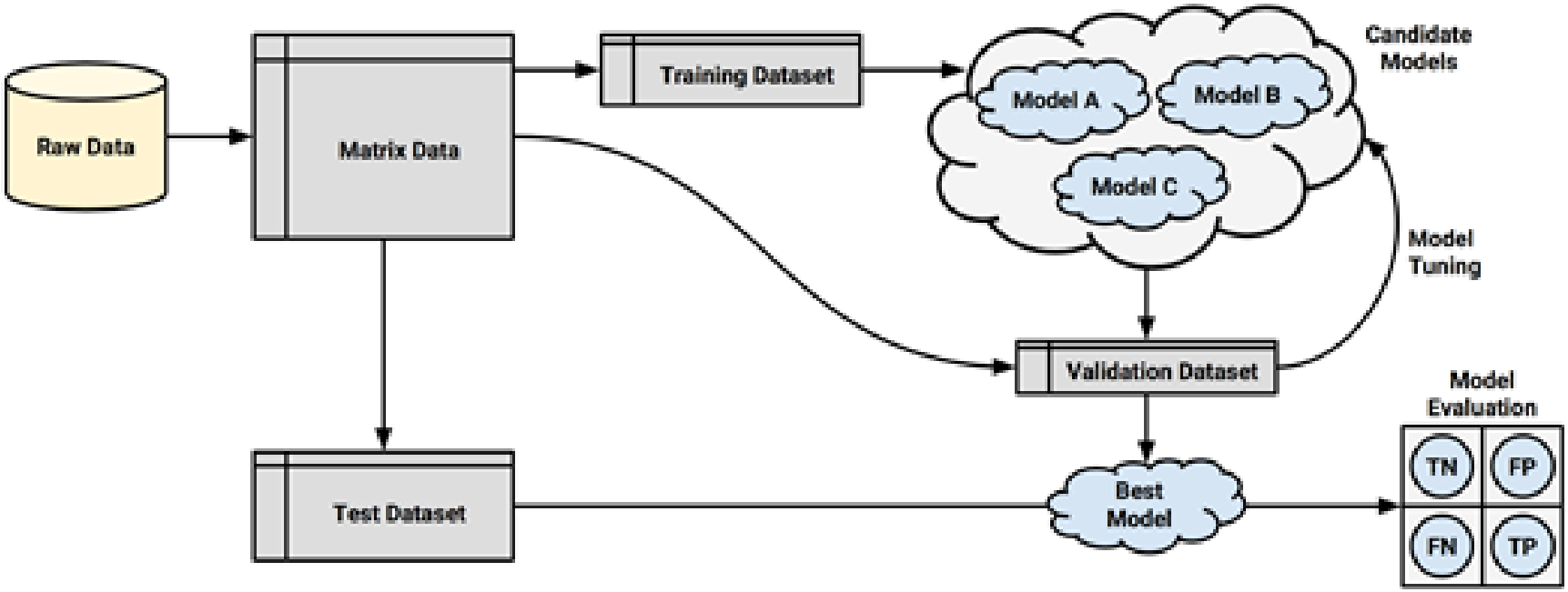


Fuente: Lantz (2015)

Desempeño Futuro

- En la práctica, el resultado del modelo en la base de prueba no debería afectar el tipo de modelo utilizado
- Hemos violado este principio en algunos ejemplos. Cuando cambiamos el modelo luego de ver su desempeño en la prueba
- ¿Cómo evitar el sesgo que implica esta práctica?
- Dividir los datos en tres: entrenamiento, validación y prueba
- El modelo se afina con los datos de validación. Luego se pone a prueba con los de prueba

Desempeño Futuro



Fuente: Lantz (2015)

Holdout Repetido

- Pero el método de *holdout* puede tener problemas
- Por ejemplo, las muestras de entrenamiento, validación y prueba pueden quedar desbalanceadas
- En especial en el outcome a predecir. Esto es particularmente probable con muestras pequeñas
- Todo lo cual puede conducir a sesgos en las predicciones
- Las técnicas de holdouts repetidos permiten apaciguar algunos de estos problemas

Cross-Validation

- El caso más utilizado de holdout repetido es la validación cruzada (*cross validation*)
- La técnica más popular es la de *k-fold cross validation*, y en particular, la de 10-fold
- Se dividen los datos en 10 partes iguales
- Cada parte es usada una vez como base de prueba, luego de entrenar el modelo con las 9 partes restantes
- Al final, se promedian las medidas de desempeño que se tienen para los 10 ejercicios realizados