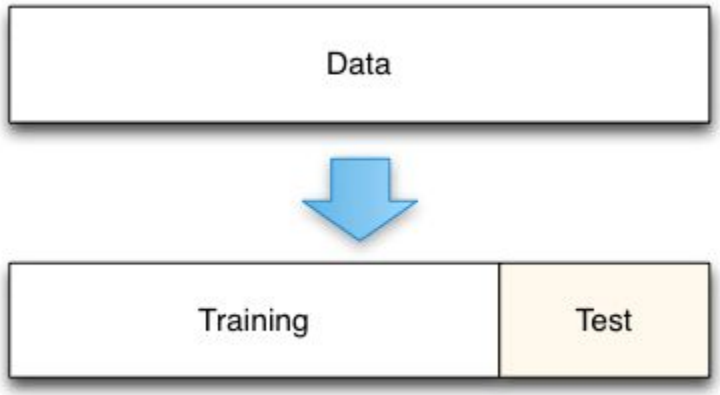
Machine Learning

Métricas de evaluación

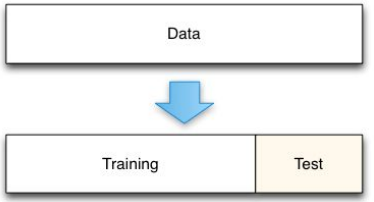
Christian Oliva Moya
Luis Fernando Lago Fernández

Evaluación de modelos

- Disponemos de un único dataset. El procedimiento natural es separarlo (split) en dos subconjuntos disjuntos para generar los datasets de entrenamiento y test



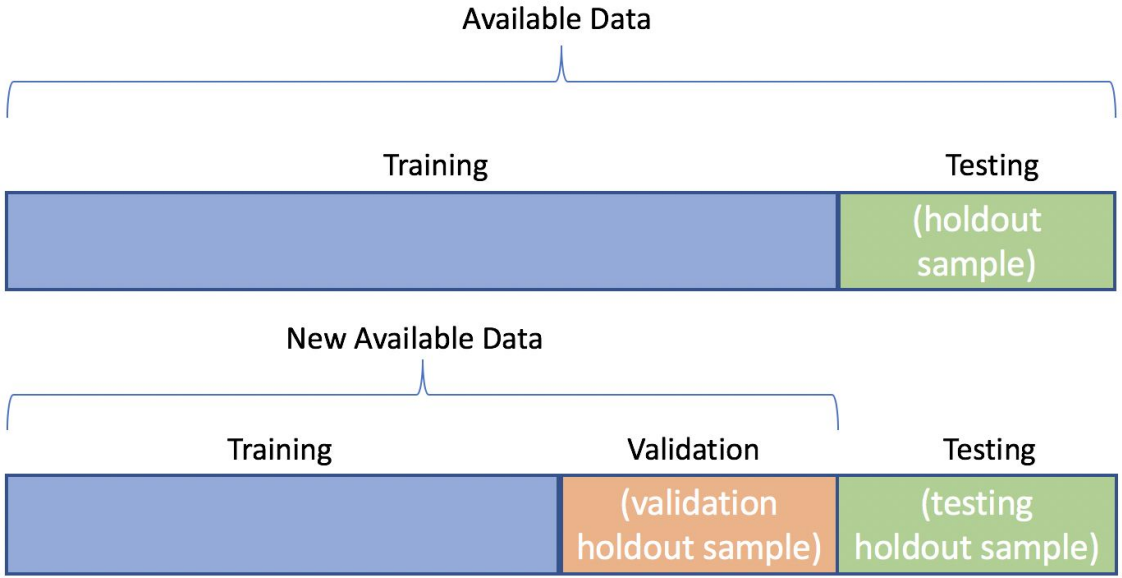
Evaluación de modelos



- Una vez tenemos el conjunto de entrenamiento y test por separado, solamente podemos trabajar con los datos de training:
  - Si normalizamos, usamos la media y la std de entrenamiento
  - Para seleccionar hiperparámetros, usamos los datos de entrenamiento
  - Para seleccionar el mejor modelo, usamos los datos de entrenamiento
  - NO podemos decidir qué modelo usamos utilizando test
- Test se utilizará para simular una prueba en un escenario desconocido
- ¿Entonces cómo evaluamos los modelos?

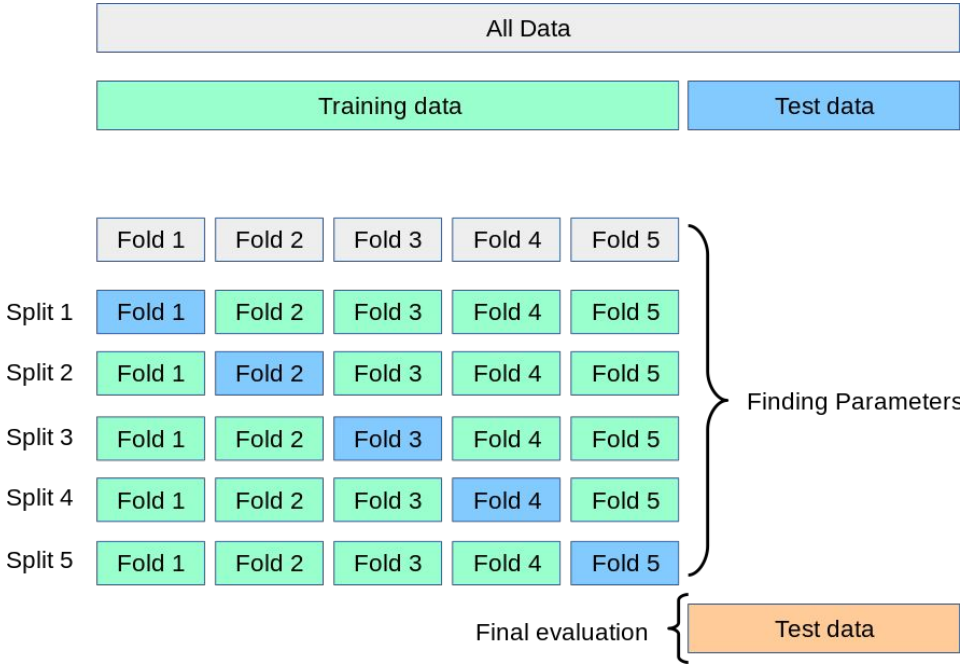
Evaluación de modelos

- Usamos técnicas de validación. El conjunto de entrenamiento lo volvemos a dividir.
  - **Validación simple**: Un nuevo split del conjunto de entrenamiento.



Evaluación de modelos

- Usamos técnicas de validación. El conjunto de entrenamiento lo volvemos a dividir.
  - **Validación Cruzada (KFold)**: K splits, usamos K-1 para entrenar y 1 para validar



Evaluación de clasificadores

- ¿Qué métricas utilizamos para validar/testear nuestros modelos?
  - ¿En regresión?
  - ¿En clasificación?

Evaluación de modelos

- En problemas de **regresión** utilizamos métricas de error:
  - **Error Absoluto Medio** (MAE - Mean Absolute Error)

$$MAE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|y_i - t_i|$$

  - **Error Cuadrático Medio** (MSE - Mean Squared Error)

$$MSE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - t_i)^2$$

  - **Coeficiente R2**

$$R2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - t_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \mu)^2}$$

Evaluación de modelos

- En problemas de **clasificación** utilizamos métricas relacionadas con la matriz de confusión:

		clase real	
		positiva	negativa
clase predicción	positiva	verdadero positivo (TP)	falso positivo (FP)
	negativa	falso negativo (FN)	verdadero negativo (TN)

Evaluación de modelos

		clase real	
		positiva	negativa
clase predicción	positiva	verdadero positivo (TP)	falso positivo (FP)
	negativa	falso negativo (FN)	verdadero negativo (TN)

- En problemas de **clasificación** utilizamos métricas relacionadas con la matriz de confusión:

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

$$precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

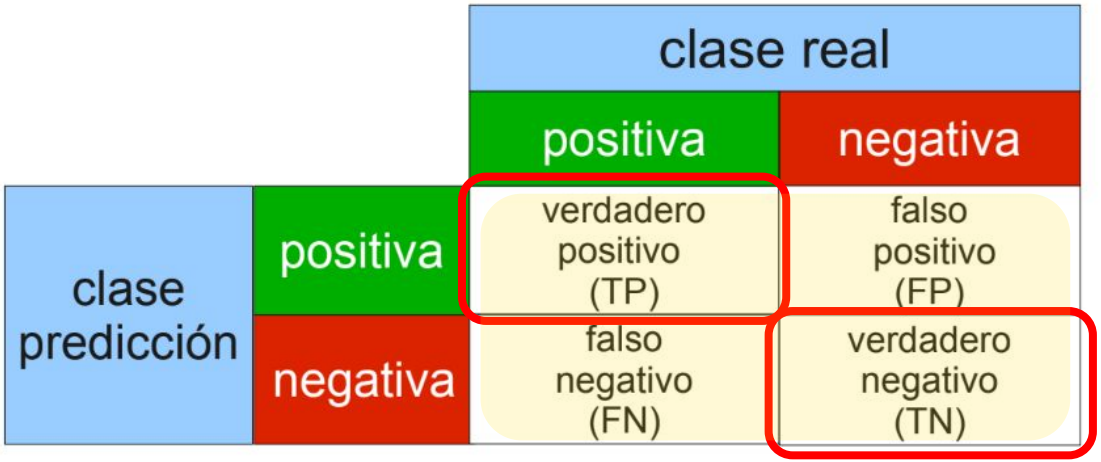
$$recall = \frac{TP}{TP + FN}$$

$$F1score = \frac{2 \times precision \times recall}{precision + recall}$$

Evaluación de modelos

- El accuracy representa el porcentaje de acierto. Cuantos son True frente al total

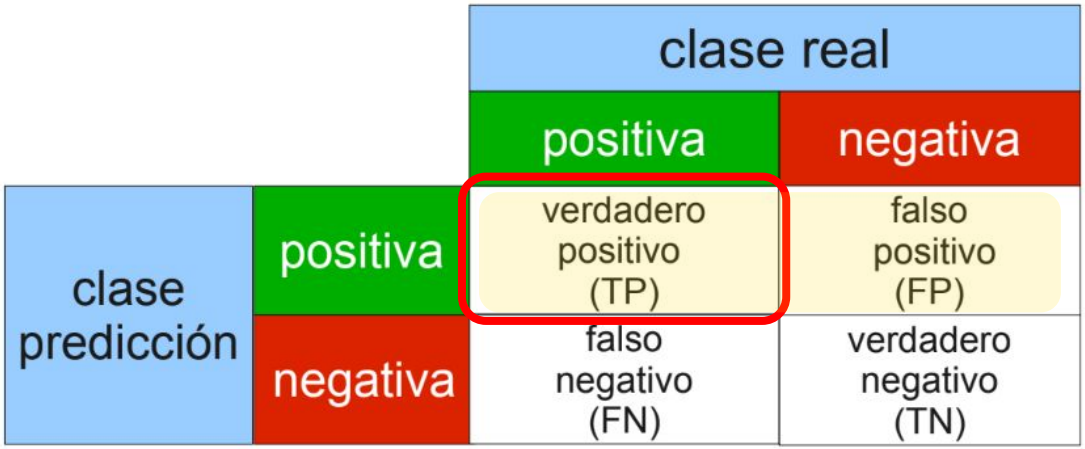
$$accuracy = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$$



Evaluación de modelos

- La precisión representa cuántos son realmente True frente a los que digo que son True

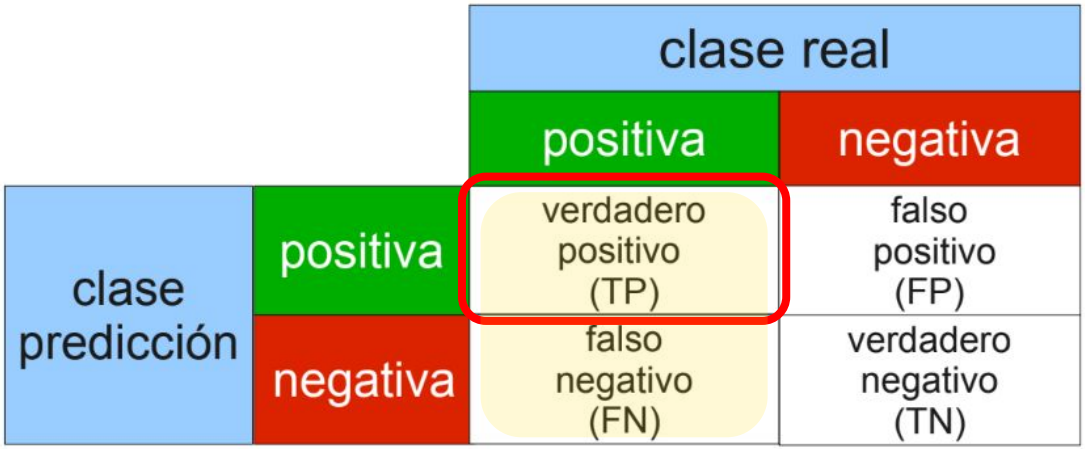
$$precision = \frac{TP}{TP + FP}$$



Evaluación de modelos

- El recall representa cuántos de los verdaderos True yo he clasificado como True

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

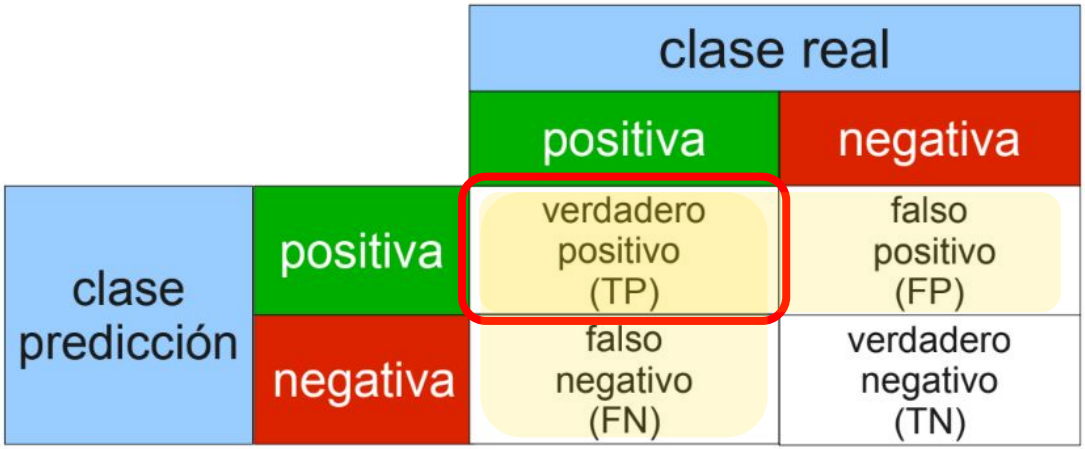


Evaluación de modelos

- El F1 score representa una media armónica entre precisión y recall

  Es alta cuando tanto la precisión como el recall son altos

$$F1score = \frac{2 \times precision \times recall}{precision + recall}$$



Evaluación de modelos

Clasificamos según un umbral de confianza. Lo normal es 0.5

Pred	Class	MC
0.95	1	TP
0.85	1	TP
0.75	0	FP
0.65	1	TP
0.55	0	FP
0.45	1	FN
0.35	0	TN
0.25	1	FN
0.15	0	TN
0.05	0	TN

umbral = 0.5

accuracy = 6 / 10 = 0.6

precision = 3 / 5 = 0.6

recall = 3 / 5 = 0.6

F1 score = 0.6

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

$$precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

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

$$F1score = \frac{2 \times precision \times recall}{precision + recall}$$

Evaluación de modelos

Si buscamos un clasificador más preciso aumentamos el umbral

Pred	Class	MC
0.95	1	TP
0.85	1	TP
0.75	0	FP
0.65	1	FN
0.55	0	TN
0.45	1	FN
0.35	0	TN
0.25	1	FN
0.15	0	TN
0.05	0	TN

umbral = 0.7

accuracy = 6 / 10 = 0.6

precision = 2 / 3 = 0.67

recall = 2 / 5 = 0.4

F1 score = 0.5

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

$$precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

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

$$F1score = \frac{2 \times precision \times recall}{precision + recall}$$

Evaluación de modelos

Si buscamos un clasificador más preciso aumentamos el umbral

Pred	Class	MC
0.95	1	TP
0.85	1	FN
0.75	0	TN
0.65	1	FN
0.55	0	TN
0.45	1	FN
0.35	0	TN
0.25	1	FN
0.15	0	TN
0.05	0	TN

umbral = 0.9

accuracy = 6 / 10 = 0.6

precision = 1 / 1 = 1.0

recall = 1 / 5 = 0.2

F1 score = 0.33

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

$$precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

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

$$F1score = \frac{2 \times precision \times recall}{precision + recall}$$

Evaluación de modelos

Si buscamos un clasificador más sensible disminuimos el umbral

Pred	Class	MC
0.95	1	TP
0.85	1	TP
0.75	0	FP
0.65	1	TP
0.55	0	FP
0.45	1	TP
0.35	0	FP
0.25	1	FN
0.15	0	TN
0.05	0	TN

umbral = 0.3

accuracy = 6 / 10 = 0.6

precision = 4 / 7 = 0.57

recall = 4 / 5 = 0.8

F1 score = 0.66

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

$$precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

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

$$F1score = \frac{2 \times precision \times recall}{precision + recall}$$

Evaluación de modelos

Si buscamos un clasificador más sensible disminuimos el umbral

Pred	Class	MC
0.95	1	TP
0.85	1	TP
0.75	0	FP
0.65	1	TP
0.55	0	FP
0.45	1	TP
0.35	0	FP
0.25	1	TP
0.15	0	TN
0.05	0	TN

umbral = 0.2

accuracy = 7 / 10 = 0.7

precision = 5 / 8 = 0.625

recall = 5 / 5 = 1.0

F1 score = 0.77

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

$$precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

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

$$F1score = \frac{2 \times precision \times recall}{precision + recall}$$

Evaluación de modelos

- Notebook 6_1_cross_validation_and_threshold.ipynb

Clasificación multi-clase

- Un problema de ML es multi-clase cuando hay más de 2 posibles etiquetas
  - Problema del Iris: ¿setosa, versicolor o virginica?
  - Trading: ¿compra, venta o neutral?
- Algunos clasificadores responden de forma natural al problema multiclase:
  - KNN mira los más cercanos y selecciona la clase más probable
- Otros clasificadores son binarios por naturaleza:
  - SVM
  - Naive Bayes
  - Regresión logística

Clasificación multi-clase

- Enfoque One-vs-rest:
  - Se entrena un clasificador para cada clase
  - Cada clasificador predice si pertenece o no a la clase particular
  - Se combinan las salidas para dar la predicción multi-clase

$x_1 \ldots x_n$	**Clase**	EsA?	EsB?	EsM?	**Predicción**
$v_{11} \ldots v_{1m}$	A	Si	No	No	A
...	B	No	Si	No	B
...	M	Si	No	No	A
$v_{n1} \ldots v_{nn}$	A	Si	No	Si	¿?

Clasificación multi-clase

$x_1 \ldots x_n$	**Clase**	EsA?	EsB?	EsM?	**Predicción**
$v_{11} \ldots v_{1m}$	A	Si	No	No	A
...	B	No	Si	No	B
...	M	Si	No	No	A
$v_{n1} \ldots v_{nn}$	A	Si	No	Si	¿?

- Enfoque One-vs-rest:
  - Podemos predecir la clase de la fila ¿? con el clasificador binario que proporcione la mayor probabilidad
  - Para expresar esta probabilidad multi-clase, **normalizamos** las probabilidades de cada modelo individual usando la función **Softmax**

$$softmax(c_i|x_i) = \frac{e^{P(c_i|x_i)}}{\sum_{c_j \in C} e^{P(c_j|x_i)}}$$

Clasificación multi-etiqueta

- Un problema de ML es multi-etiqueta cuando puede haber varias clases objetivo a la vez
  - ¿Qué hay en la imagen? Un perro, dos personas y un coche al fondo
  - ¿Temática de un texto? Política, economía y salud mental
  - ¿Categorías de películas de interés? Acción, terror, ciencia ficción
- Algunos clasificadores permiten la estrategia multiclase:
  - Redes neuronales
- Otros no lo permiten:
  - KNN, ¿cómo podría elegir varias clases a la vez si solo mira el más cercano?
  - Los binarios, como SVM o Naive Bayes, ¿cómo eligen varios si solo son 2 posibles?

Clasificación multi-etiqueta

- Enfoque One-vs-all:
  - Se entrena un clasificador para cada clase
  - Todos los que predigan que pertenece se añade a la respuesta final

$x_1 \ldots x_n$	**Etiquetas**	EsA?	EsB?	EsC?	**Predicción**
$v_{11} \ldots v_{1m}$	A	Si	No	No	A
...	A, B	Si	Si	No	A,B
...	A, B	Si	No	Si	A,C
$v_{n1} \ldots v_{nn}$	A, B	No	No	Si	C

- En esta situación, pueden salir combinaciones que no existen o no son válidas
- Además, puede existir correlación entre clases

Clasificación multi-etiqueta

- Otras aproximaciones - combinación de clases:
  - Cuando el número de clases es pequeño, creamos una nueva clase que resulta de combinar las etiquetas originales
  - Entrenamos el clasificador como si tuviésemos un problema multi-clase
  - **Limitación**: Solamente puede predecir sobre combinaciones que se hayan visto
    - Si {B, C} no existe en entrenamiento, la clase {B, C} no existe
    - Todos los {B, C} de test están mal clasificados

Clasificación multi-etiqueta

- Otras aproximaciones - ranking de etiquetas:
    - Representamos el problema como una tarea de ranking
    - Elegimos las N primeras etiquetas como salida
- Es una estrategia muy utilizada en sistemas de recomendación

Clasificación multi-etiqueta

- Otras aproximaciones - ranking de etiquetas:
    - Representamos el problema como una tarea de ranking
    - Elegimos las N primeras etiquetas como salida
- Es una estrategia muy utilizada en sistemas de recomendación