Reporte de Proyecto Profesionalizante

Maestría en Ciencia de Datos

Emmanuel Alcalá

DMAF

ITESO

Definición del problema

> "Si me dieran una hora para salvar el planeta, gastaría 59 minutos definiendo el problema y un minuto resolviéndolo"
>
> -- *Albert Einstein*

El propósito de esta sesión es:

- No saltarse a analizar los datos sin *antes* haber identificado el problema. No es correcto tener una respuesta y luego buscar la pregunta.
  - fishing expedition: proyecto que nunca se enmarcó correctamente y luego se tortura a los datos para encontrar relaciones *inesperadas*
- No tomar proyectos que excedan las capacidades (por ejemplo, que no puedan terminarse en un tiempo razonable).
- Asegurarse de que los datos (la evidencia) que tenemos permitan responder o resolver el problema.

Cómo definir un problema

> La ciencia de datos es tan científica como otras ciencias.

- Planteamiento: descripción concisa de un tema o condición para mejorar.
  - Identifica una brecha entre **estado actual** y **estado deseado**.
- Describir el contexto actual, en dónde ocurre el problema, qué impacto tiene, y cuál podría ser una mejora.
  - Este último punto es importante: ¿mejora con respecto a qué para quién(es)?
  - Mejorar solo con respecto a un algoritmo no necesariamente es una mejora en *utilidad*.

Ejemplo

Supongamos que queremos predecir si alguien tiene cáncer a partir de imágenes de resonancia magnética[1].

- ¿Cuál es el problema?
  - No es que los médicos entrenados en imagenología no sepan cómo se ve un cáncer con RM.
  - Tampoco queremos mejorar el proceso de toma de imágenes -aunque puede ser un problema.
  - El problema: ¿puede mejorarse la tasa de predicciones correctas que hace un médico usando algoritmos de clasificación?
  - Dado un conjunto de pacientes tienen cáncer, ¿qué proporción de casos identifican correctamente? ¿Podemos mejorar esa tasa?

[1] Bishop, C. (2006). *Pattern Recognition and Machine Learning*. Ch. 1

Ya identificamos algunas cosas:

- El estado de cosas actual es $\hat{\pi}_{\text{médico}}$: proporción de casos correctamente identificados.
- Un estado deseado es $\hat{\pi}_{\text{algoritmo}} \geq \hat{\pi}_{\text{médico}}$: minimizar la probabilidad de asignar un paciente a la clase equivocada (minimizar la probabilidad de cometer un error).
- El siguiente paso es hacer una descripción *concisa y clara* del problema. Preferiblemente, una definición **formal**.
- Pensar en cómo evaluaremos y formulamos nuestra solución en términos que sean comparables a la solución estándar?
- ¿Cómo saber cuándo detenernos, cuándo es suficientemente buena una solución?
- En este ejemplo, tenemos que plantear el problema en términos de teoría de la decisión: usar los datos disponibles para tomar una decisión *óptima*.

Descripción del problema

Sean $\mathbf{x}$ un vector de intensidad de pixeles de una imagen de RM, y C_k tal que:

$$\text{Presencia de cáncer es la clase } \mathcal{C}_1$$
$$\text{Ausencia de cáncer es la clase } \mathcal{C}_2$$

Notar que:

- $\mathbf{x}$ variará de paciente en paciente, por lo que se trata de una variable aleatoria.
- C_k es la variable que queremos predecir a partir de $\mathbf{x}$.

El problema consiste en dos pasos:

- Inferencia: determinar la distribución conjunta $p(\mathbf{x}, \mathcal{C}_k)$ a partir de datos de entrenamiento.
- Decisión: una vez estimamos $p(\mathbf{x}, \mathcal{C}_k)$ debemos *decidir* algo. Dado que tenemos datos $\mathbf{x}$ queremos saber la probabilidad de $\mathcal{C}_k$ condicional a los datos obtenidos.

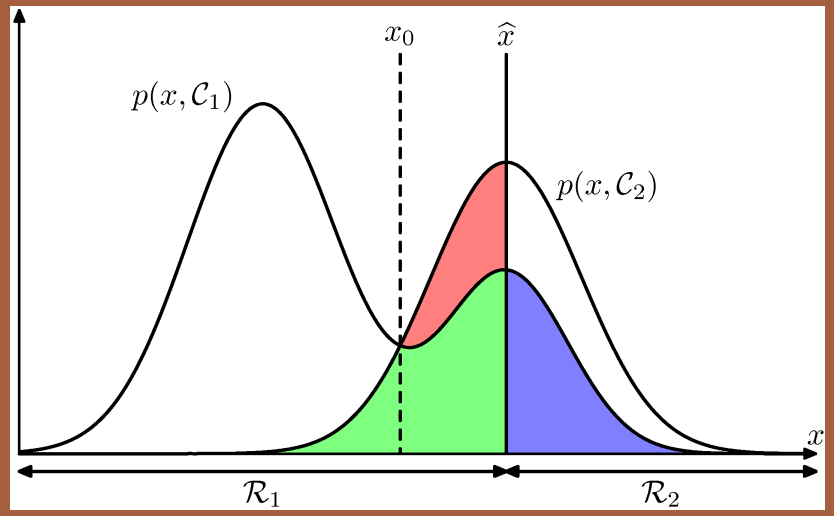
$$p(\mathcal{C}_k|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_k)p(\mathcal{C}_k)}{p(\mathbf{x})}$$

- $p(\mathcal{C}_1)$ es la probabilidad de que un paciente tenga cáncer antes de que tenga lugar la medición.
- $p(\mathcal{C}_1|\mathbf{x})$ es la probabilidad posterior *después* medición (se puede estimar directamente usando modelos discriminativos, como regresión logística).

Se pueden tener varios objetivos:

- Minimizar las asignaciones de $\mathbf{x}$ a la clase incorrecta.
  - Partir $\mathbf{x}$ en dos regiones de decisión $\mathcal{R}_k$, tal que los puntos en $\mathcal{R}_k$ son asignados a la clase $\mathcal{C}_k$.
  - Un error ocurre cuando un valor de x que pertenece a $\mathcal{C}_1$ es asignado a $\mathcal{C}_2$ o viceversa. La probabilidad de un error es:

$$p(\text{error}) = p(\mathbf{x} \in \mathcal{R}_1, \mathcal{C}_2) + p(\mathbf{x} \in \mathcal{R}_2, \mathcal{C}_1) = \underbrace{\int_{\mathcal{R}_1} p(\mathbf{x}, \mathcal{C}_2) \mathrm{d}\mathbf{x}}_{\text{Error en la región 1}} + \underbrace{\int_{\mathcal{R}_2} p(\mathbf{x}, \mathcal{C}_1) \mathrm{d}\mathbf{x}}_{\text{Error en la región 2}}$$



$\hat{x}$ es la regla de decisión. Conforme $\hat{x} \to x_0$, la zona roja desaparece, pero la azul crece.

La suma de las áreas verde y azul es constante.

Se pueden tener varios objetivos:

- Minimizar las asignaciones de $\mathbf{x}$ a la clase incorrecta.
- Optimizar otra variable. Hay dos tipos de asignaciones incorrectas:
  - Que tenga cáncer pero se clasifique como $\mathcal{C}_2$.
  - Que no tenga cáncer pero se clasifique como $\mathcal{C}_1$.
  - Cuando se minimiza la mala clasificación, se puede reducir solo el segundo error (área roja), pero no el primero (área azul).
  - Evidentemente, el primer error *es más costoso* que el segundo: las consecuencias de tener cáncer y no ser diagnosticado son peores que las de no tenerlo y ser diagnosticado.
  - Es mejor minimizar los errores del primer tipo.

- Función de costo:
  - Podemos asignar diferentes pesos a cada tipo de diagnóstico, de tal manera que refleje el hecho de que un tipo de error es más costoso.

$$\begin{array}{c} \\ \text{cancer} \\ \text{normal} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cc} \text{cancer} & \text{normal} \end{array} \\ \begin{bmatrix} 0 & 1000 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \end{array}$$

  - El costo de ser diagnosticado como normal, si se tiene cáncer, es de 1000.
  - El costo de ser diagnosticado con cáncer pero ser normal es de 1 (i.e., sí hay un costo en este tipo de error).
  - Ser diagnosticado correctamente tiene un costo de 0.

- Suponer que para un valor nuevo de $\mathbf{x}$, la clase verdadera es $\mathcal{C}_k$ y la asignamos a $\mathcal{C}_k$, en donde j puede o puede no ser igual a k.
- Incurrimos en costo L_{kj} tomado de la matriz de costos.
- El propósito ahora es reducir el costo esperado, que es una suma ponderada del costo L_{kj} con la probabilidad $p(\mathbf{x}, \mathcal{C}_k)$

$$\mathbf{E}[L] = \sum_j \sum_k \int_{\mathcal{R}_j} L_{kj} p(\mathbf{x}, \mathcal{C}_k) \, \mathrm{d}\mathbf{x}$$

- Si un $\mathbf{x}$ es asignado a $\mathcal{R}_i$, consideramos minimizar $\sum_k L_{kj} p(\mathbf{x}, \mathcal{C}_k)$, que es equivalente a minimizar $\sum_k L_{kj} p(\mathcal{C}_k | \mathbf{x})$.
- Por ejemplo, si un paciente con dx $\mathbf{x}$ tiene 0.1 de probabilidad de tener cáncer, $p(\mathcal{C}_{\text{cáncer}} | \mathbf{x}) = 0.1$ y $p(\mathcal{C}_{\text{normal}} | \mathbf{x}) = 0.9$, el costo esperado es

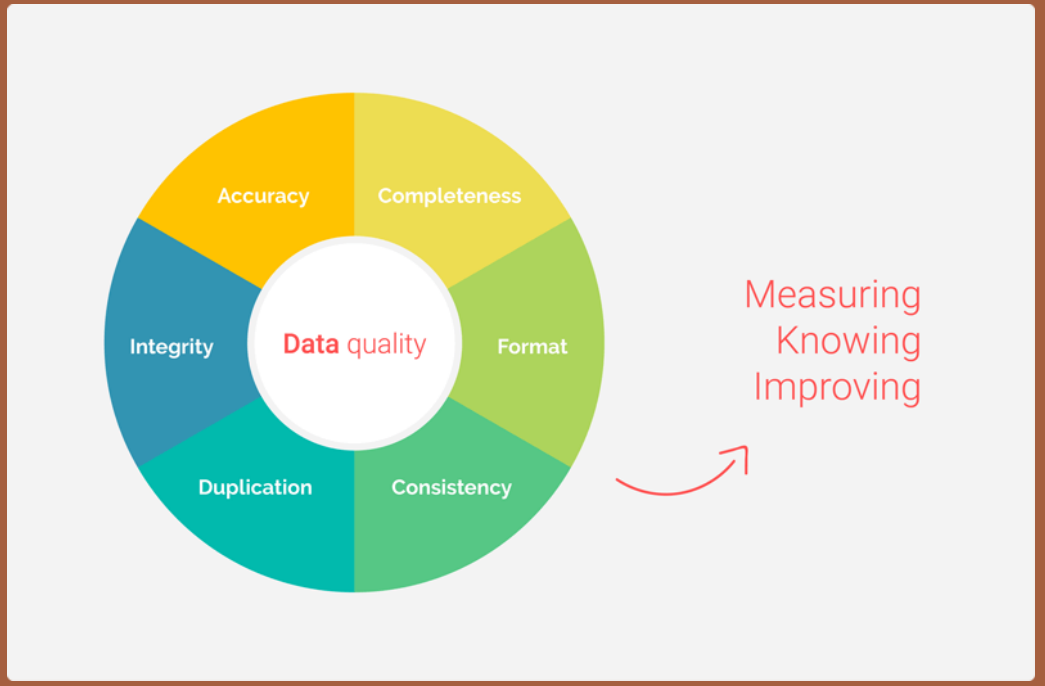
$$0 \times 0.1 + 1 \times 0.9 = 0.9, \text{ si se clasifica como cáncer}$$
$$1000 \times 0.1 + 0 \times 0.9 = 100, \text{ si se clasifica como normal}$$

Datos

¿Qué características deben tener los datos?

Naturalmente, deben contener la información necesaria para responder la pregunta. Luego:

- ¿Es representativo?
- ¿Está completo? (tiene todos los datos que se supone que debe tener)
- ¿Es posible tener fuentes extraordinarias de ruido? (e.g., industriales).
- ¿Podría ver datos artificiales insertados?
- ¿Los identificadores únicos son realmente únicos?
- ¿Los datos se conforman de acuerdo a estándares? (e.g., fechas, cuentas de banco, etc).



Fuente

Otros aspectos a cuidar de los datos

- ¿Qué tan agregada/desagregada está una unidad observacional?
  - Si vamos a incluir más de una fuente, esto es crucial.
- ¿Qué tan procesado o crudo está el dataset?
- ¿Qué criterios seguir para decidir incluir o excluir observaciones?
- Al excluir valores inválidos, ¿de qué tamaño queda? ¿Es suficiente?
- Contenido: ¿miden las variables lo que suponemos?
- Comparabilidad de las variables: el grado en que fueron medidas las variables de la misma manera en diferentes observaciones.
- ¿Tengo permiso de usarlos/publicarlos?

GIGO:

Los resultados de un análisis no pueden ser mejores que los datos usados.

Repositorios

- FacSet para datos financieros (acceso institucional de ITESO).
- WorldBank datos abiertos de varias categorías (desarrollo, financieros, consumo, etc).
- DataHub tiene varias colecciones de datos en varias categorías, como cambio climático, fútbol, películas, salud, etc.

Take-home message

- Resolver un problema implica proponer una mejora, pero debemos definir en qué consiste una mejora (e.g., minimizar un error por sí mismo no es una mejora, debemos tener el cuenta el costo de minimizar ciertos errores).
- La ciencia de datos debe ser tan científica como otras ciencias.
- Si la CD tiene el propósito de adquirir valor de los datos, ¿qué valor tiene información que no se puede reproducir?
- La calidad y adecuación de los datos es el segundo paso luego de definir el problema.
- No es muy productivo conseguir primero una base de datos y buscar después qué hacer con ella. Esto no es como la ciencia opera, y puede producir problemas graves (fishing expedition).
- Datos de mala calidad resultan en soluciones de mala calidad.
- Por último:

Si el procedimiento que seguimos resuelve en negativo una pregunta, no debemos desalentarnos, ni cambiar constantemente la pregunta hasta obtener un resultado que nos satisfaga (**sesgo de confirmación**).