TICS-411 Minería de Datos

Clase 8: Evaluación de Modelos

Alfonso Tobar-Arancibia

alfonso.tobar.a@edu.uai.cl



Evaluación de Modelos Supervisados





Supongamos que tengo que estudiar para la prueba de Minería de Datos y tengo que aprender a calcular el Coeficiente de Silueta.

• Qué pasa si sólo les entrego una pregunta para estudiar y no tiene respuesta.



- Qué pasa si sólo les entrego una pregunta para estudiar y no tiene respuesta.
- ¿Qué pasa si ahora les doy la respuesta?



- Qué pasa si sólo les entrego una pregunta para estudiar y no tiene respuesta.
- ¿Qué pasa si ahora les doy la respuesta?
- ¿Qué pasa si te doy más ejercicios?



- Qué pasa si sólo les entrego una pregunta para estudiar y no tiene respuesta.
- ¿Qué pasa si ahora les doy la respuesta?
- ¿Qué pasa si te doy más ejercicios?
- ¿Qué pasa luego de que haces muchos ejercicios?



Supongamos que tengo que estudiar para la prueba de Minería de Datos y tengo que aprender a calcular el Coeficiente de Silueta.

- Qué pasa si sólo les entrego una pregunta para estudiar y no tiene respuesta.
- ¿Qué pasa si ahora les doy la respuesta?
- ¿Qué pasa si te doy más ejercicios?
- ¿Qué pasa luego de que haces muchos ejercicios?



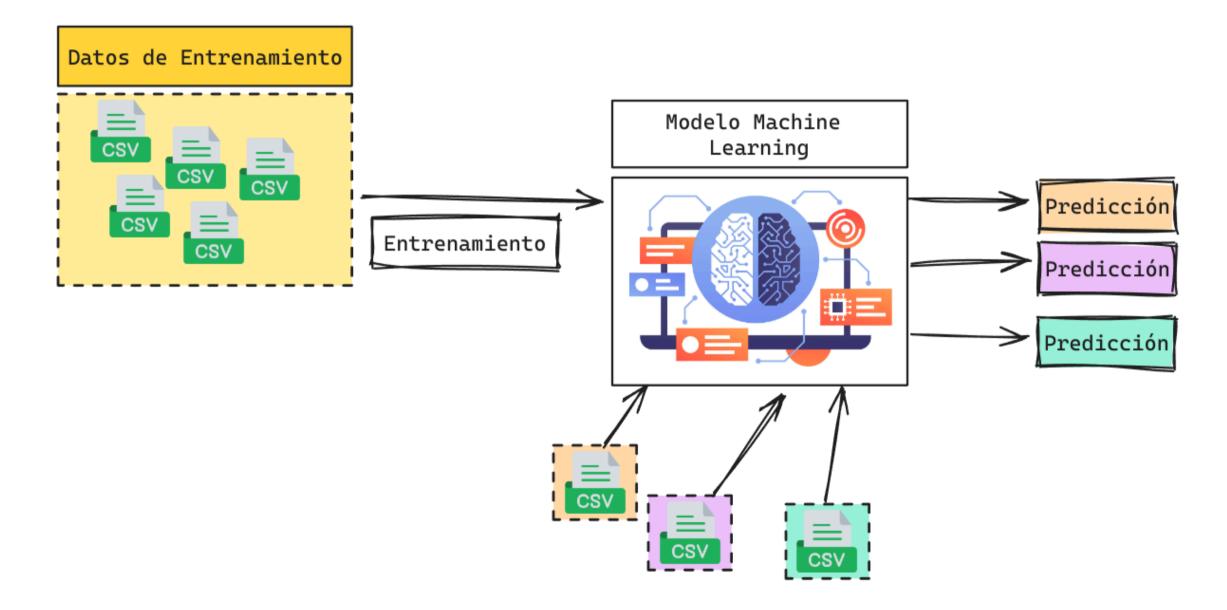
Voy aprendiendo mejor la tarea de calcular el coeficiente de Silueta. Lo mismo pasa con los modelos.



- Qué pasa si sólo les entrego una pregunta para estudiar y no tiene respuesta.
- ¿Qué pasa si ahora les doy la respuesta?
- ¿Qué pasa si te doy más ejercicios?
- ¿Qué pasa luego de que haces muchos ejercicios?
- Voy aprendiendo mejor la tarea de calcular el coeficiente de Silueta. Lo mismo pasa con los modelos.
- Pero no puedo medir qué tan bien aprendiste en los ejercicios que yo ya entregué para practicar. Tengo que hacer una prueba que tú no hayas visto, para ver si realmente aprendiste.

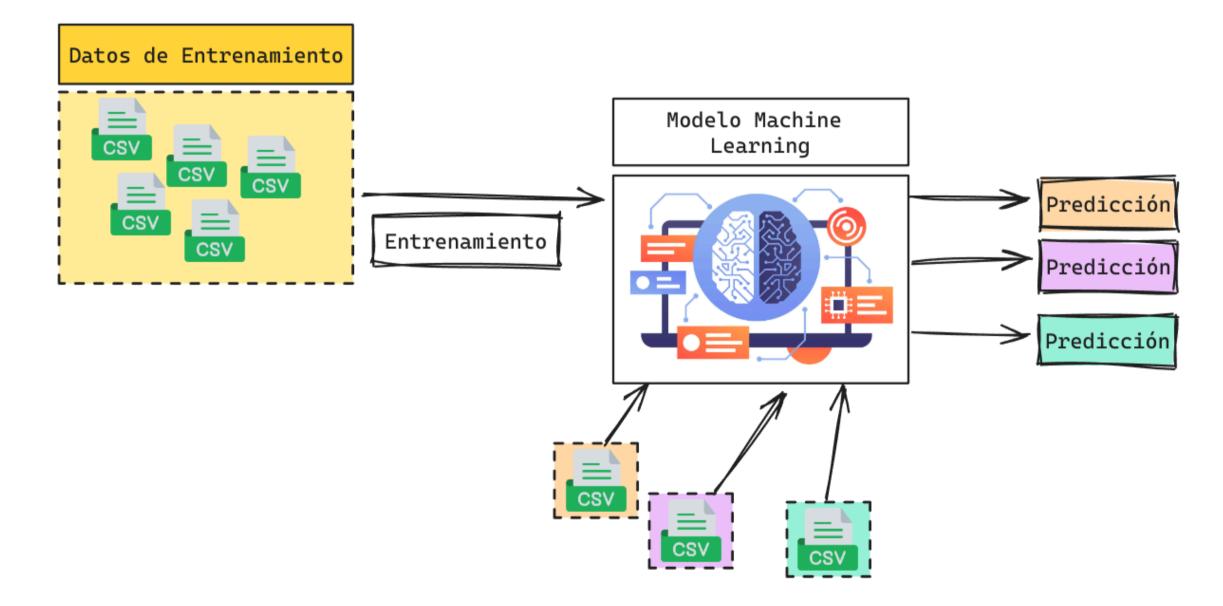


Uso de un Modelo





Uso de un Modelo







Evaluación de un Modelo



Métricas

El Rendimieto de un Modelo de Clasificación permite evaluar el error asociado al proceso de predicción.

Clase Positiva

Corresponde a la clase/evento de interés. Ej: Tiene cancer, va a pagar su deuda, es un gato. Normalmente se denota como la Clase 1.

Clase Negativa

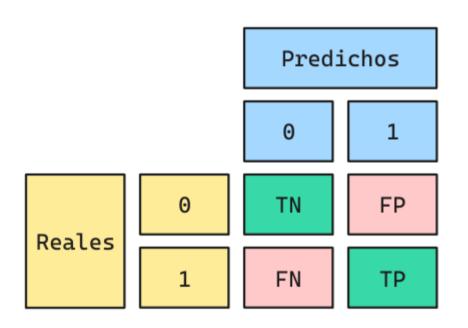
Corresponde a la clase/evento contrario al de interés. Ej: No tiene cancer, no va a pagar su deuda, no es un gato. Normalmente se denota como la Clase 0.

- Scikit-Learn usa la siguiente convención:
 - Si se llama *_score un mayor puntaje es mejor.
 - Si se llama *_error o *_loss un mejor puntaje es mejor.



Métricas: Matriz de Confusión

La Matriz de Confusión ordena los valores correctamente predichos y también los distintos errores que el modelo puede cometer.



TP (Verdaderos Positivos)

Corresponde a valores reales de la clase 1 que fueron correctamente predichos como clase 1.

TN (Verdaderos Negativos)

Corresponde a valores reales de la clase 0 que fueron correctamente predichos como clase 0.

FP (Falsos Positivos)

Corresponde a valores reales de la clase 0 que fueron incorrectamente predichos como clase 1.

FN (Falsos Negativos)

Corresponde a valores reales de la clase 1 que fueron incorrectamente predichos como clase 0.



Métricas: A partir de la Matriz de Confusión

Accuracy

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

Recall

$$rac{TP}{TP+FN}$$

Precision

$$rac{TP}{TP+FP}$$

F1-Score

$$\frac{2 \cdot Precision \cdot Recall}{Precision + Recall} = \frac{2 \cdot TP}{2 \cdot TP + FP + FN}$$



- Accuracy es probablemente la métrica más sencilla y más utilizada.
- Precision y Recall ponderarán distintos errores (FP y FN respectivamente) con mayor severidad. Ambas métricas son Antagonistas.
- F1-Score corresponde a la media armónica del Precision y Recall, y tiende a ponderar los errores de manera más balanceada.

¿Cuándo utilizar cada tipo de error?



Curva ROC

La curva ROC fue desarrollada en 1950 para analizar señales ruidosas. La curva ROC permite al operador contrapesar la tasa de verdaderos positivos (Eje y) versus los falsos positivos (Eje x).

El área bajo la curva representa la calidad del modelo. Una manera de interpretarla es como la probabilidad de que una predicción de la clase positiva tenga mayor probabilidad que una de clase negativa. En otras palabras, mide que las probabilidades se encuentren correctamente ordenadas. Por lo tanto varía entre 0.5 y 1.



```
from sklearn.metrics import accuracy_score, precision_score, recall_score, f1_score, roc_all
accuracy_score(y_true, y_pred)
precision_score(y_true, y_pred)
recall_score(y_true, y_pred)
f1_score(y_true, y_pred)
roc_auc_score(y_true, y_proba)
```

- y_true: Corresponde a las etiquetas reales del Dataset.
- y_pred: Corresponde a las predicciones realizadas por el modelo.
- y_proba: Corresponden a las probabilidades predichas por el modelo (si es que el modelo lo permite).



```
from sklearn.metrics import accuracy_score, precision_score, recall_score, f1_score, roc_all
accuracy_score(y_true, y_pred)
precision_score(y_true, y_pred)
recall_score(y_true, y_pred)
f1_score(y_true, y_pred)
roc_auc_score(y_true, y_proba)
```

- y_true: Corresponde a las etiquetas reales del Dataset.
- y_pred: Corresponde a las predicciones realizadas por el modelo.
- y_proba: Corresponden a las probabilidades predichas por el modelo (si es que el modelo lo permite).



```
from sklearn.metrics import accuracy_score, precision_score, recall_score, f1_score, roc_all
accuracy_score(y_true, y_pred)
precision_score(y_true, y_pred)
recall_score(y_true, y_pred)
f1_score(y_true, y_pred)
roc_auc_score(y_true, y_proba)
```

- y_true: Corresponde a las etiquetas reales del Dataset.
- y_pred: Corresponde a las predicciones realizadas por el modelo.
- y_proba: Corresponden a las probabilidades predichas por el modelo (si es que el modelo lo permite).



```
from sklearn.metrics import accuracy_score, precision_score, recall_score, f1_score, roc_all
accuracy_score(y_true, y_pred)
precision_score(y_true, y_pred)
recall_score(y_true, y_pred)
f1_score(y_true, y_pred)
roc_auc_score(y_true, y_proba)
```

- y_true: Corresponde a las etiquetas reales del Dataset.
- y_pred: Corresponde a las predicciones realizadas por el modelo.
- y_proba: Corresponden a las probabilidades predichas por el modelo (si es que el modelo lo permite).



```
from sklearn.metrics import accuracy_score, precision_score, recall_score, f1_score, roc_al

accuracy_score(y_true, y_pred)
precision_score(y_true, y_pred)
recall_score(y_true, y_pred)
f1_score(y_true, y_pred)
roc_auc_score(y_true, y_proba)
```

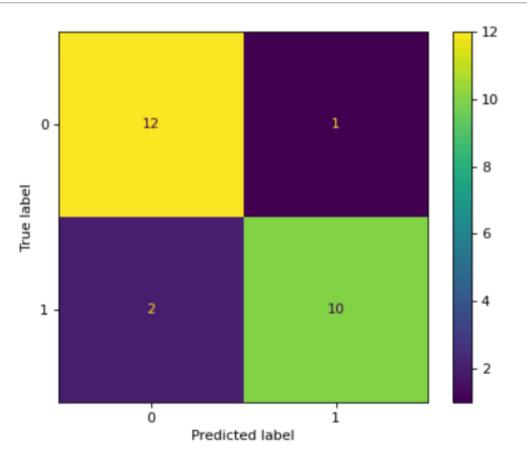
- y_true: Corresponde a las etiquetas reales del Dataset.
- y_pred: Corresponde a las predicciones realizadas por el modelo.
- y_proba: Corresponden a las probabilidades predichas por el modelo (si es que el modelo lo permite).



```
1 from sklearn.metrics import ConfusionMatrixDisplay
```

2

3 ConfusionMatrixDisplay.from_predictions(y_true, y_pred)

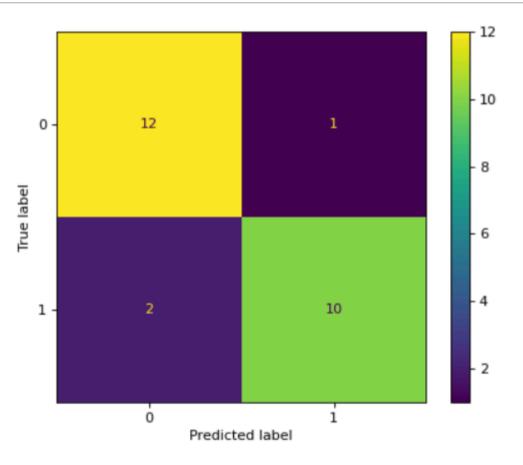




```
1 from sklearn.metrics import ConfusionMatrixDisplay
```

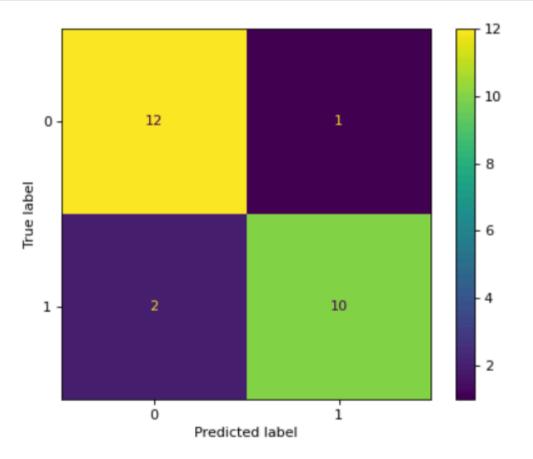
2

3 ConfusionMatrixDisplay.from_predictions(y_true, y_pred)





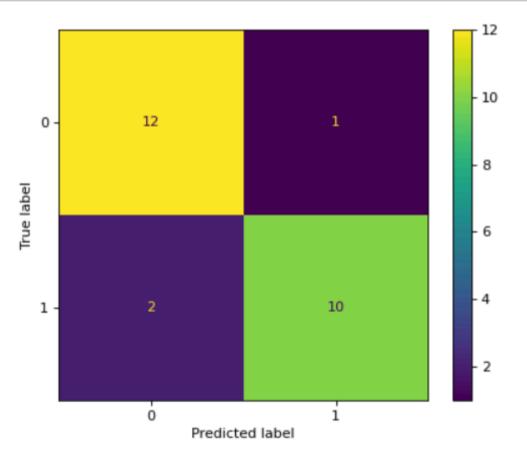
```
1 from sklearn.metrics import ConfusionMatrixDisplay
2
3 ConfusionMatrixDisplay.from_predictions(y_true, y_pred)
```





```
1 from sklearn.metrics import ConfusionMatrixDisplay
2
```

3 ConfusionMatrixDisplay.from_predictions(y_true, y_pred)





```
1 from sklearn.metrics import RocCurveDisplay
2
3 RocCurveDisplay.from_predictions(y_true, y_proba)
```



```
1 from sklearn.metrics import RocCurveDisplay
2
3 RocCurveDisplay.from_predictions(y_true, y_proba)
```



```
1 from sklearn.metrics import RocCurveDisplay
2
3 RocCurveDisplay.from_predictions(y_true, y_proba)
```



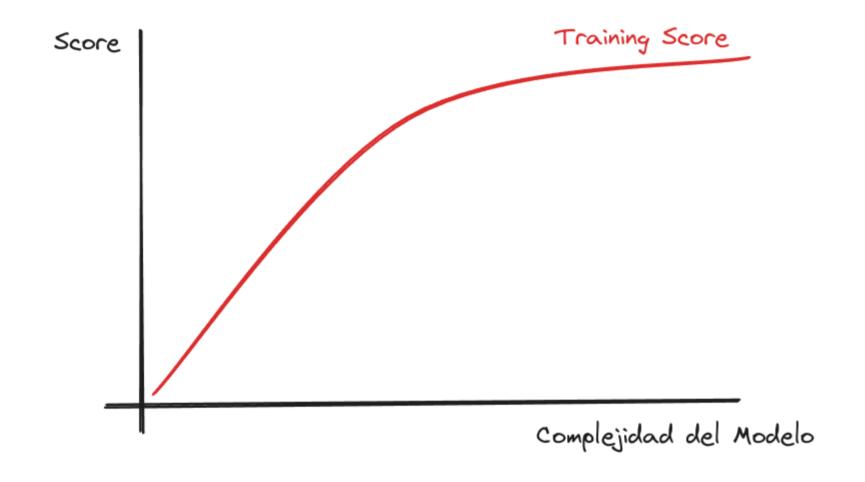
```
1 from sklearn.metrics import RocCurveDisplay
2
3 RocCurveDisplay.from_predictions(y_true, y_proba)
```



Sobre el aprendizaje de un Modelo



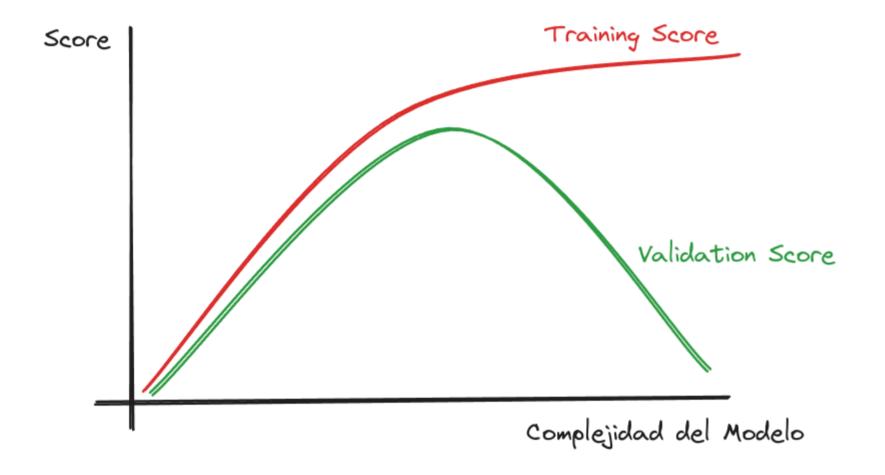
Curva de Aprendizaje: Training



¿Qué sería la Complejidad del Modelo?



Curva de Aprendizaje: Validación

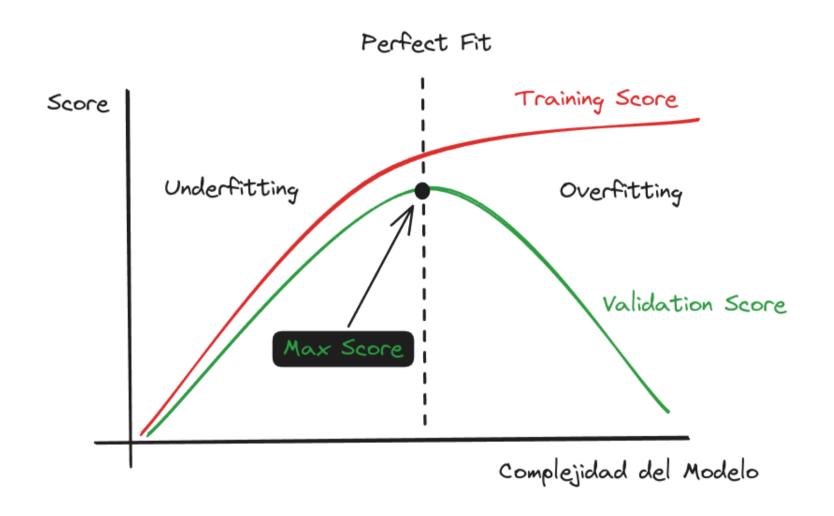




¿Por qué el modelo pierde rendimiento cuando aumenta su Complejidad?



Curva de Aprendizaje: Mejor Ajuste





Overfitting:

Gran diferencia entre Training y Validation Score.



Underfitting:

Poca diferencia entre Training y Validation Score, pero con ambos puntajes "relativamente bajos".



Proper fitting:

Corresponde al mejor puntaje en el set de Validación. Donde también la distancia entre Train y Test es *poca*.



Evaluación

La evaluación de modelos supervisados es fundamental. De no hacerlo de forma correcta podemos quedarnos con una idea muy equivocada del rendimiento del modelo.



Un modelo con un rendimiento incorrecto puede entregar predicciones completamente inútiles.

Cross Validation (Validación Cruzada)

Se debe evaluar el rendimiento de un modelo en un dataset diferente al que fue entrenado. Esta es la única manera en la que se puede medir el poder de generalización.

Generalización

Corresponde a la habilidad de un modelo de adaptarse apropiadamente a datos no vistos previamente.

Para esto se asume que todos los datos son i.i.d (independent and identically distributed). De no lograr esto, lograr buenos rendimientos es más difícil.



Complejidad de un Modelo

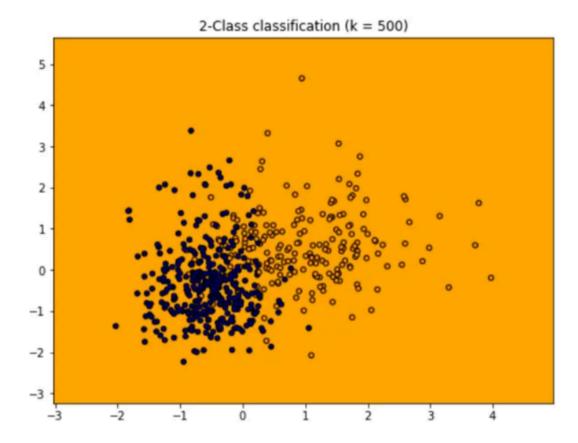
¿Qué modelo es un mejor clasificador?





Complejidad de un Modelo Overfitting

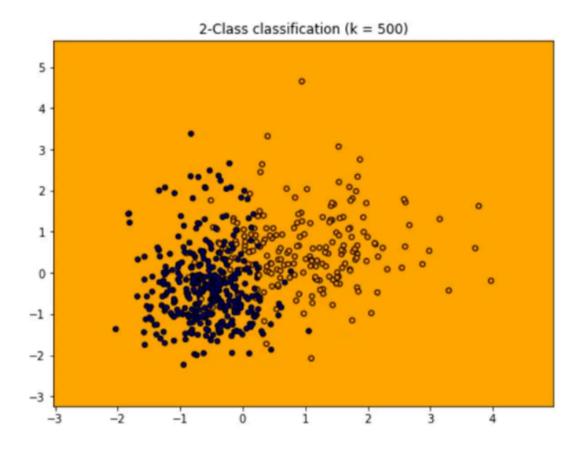
Underfitting





Complejidad de un Modelo Overfitting

Underfitting





Regularización: Se refiere a una penalización que damos al modelo para que disminuya su complejidad de modo tal que evite el **Overfitting**. En el caso de KNN, *K* es un parámetro de regularización.



Esquemas de Validación

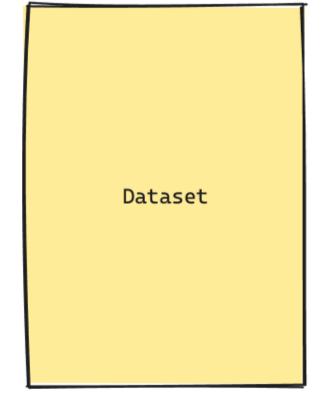


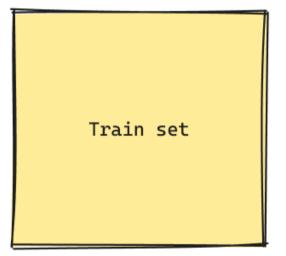
También es conocido como Train Test Split o simplemente Split. Corresponde a la separacion de nuestra data cuando con el proposito de aislar observaciones que el modelo no vea para una correcta evaluación.

Dataset



También es conocido como Train Test Split o simplemente Split. Corresponde a la separacion de nuestra data cuando con el proposito de aislar observaciones que el modelo no vea para una correcta evaluación.



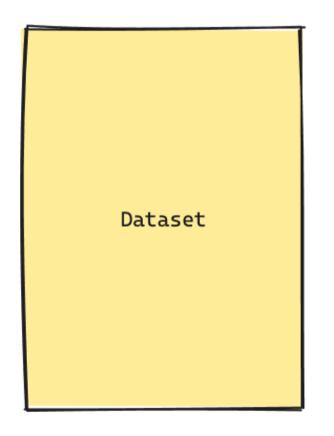


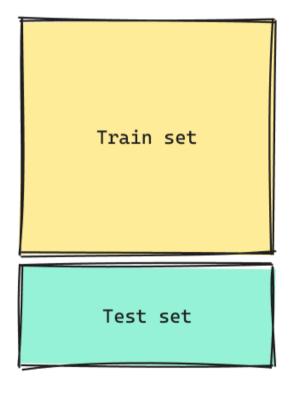


 El train set es la porción de los datos que se utilizará exclusivamente para entrenar los datos.



También es conocido como Train Test Split o simplemente Split. Corresponde a la separacion de nuestra data cuando con el proposito de aislar observaciones que el modelo no vea para una correcta evaluación.







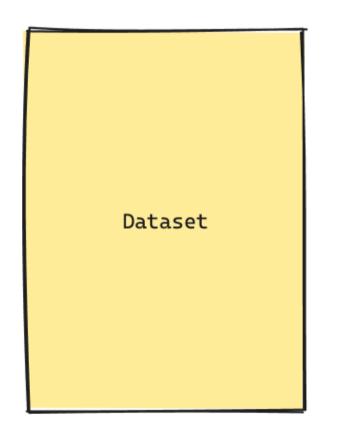
• El train set es la porción de los datos que se utilizará exclusivamente para entrenar los datos.

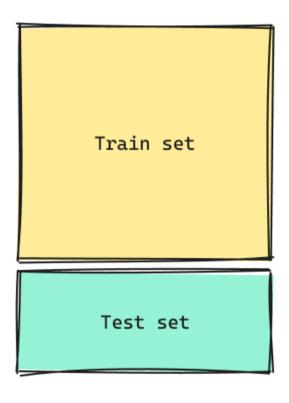


- El test set es la porción de los datos que se utilizará exclusivamente para validar los datos.
- El test set simula los datos que eventualmente entrarán el modelo para obtener una predicción.



También es conocido como Train Test Split o simplemente Split. Corresponde a la separacion de nuestra data cuando con el proposito de aislar observaciones que el modelo no vea para una correcta evaluación.







• El train set es la porción de los datos que se utilizará exclusivamente para entrenar los datos.



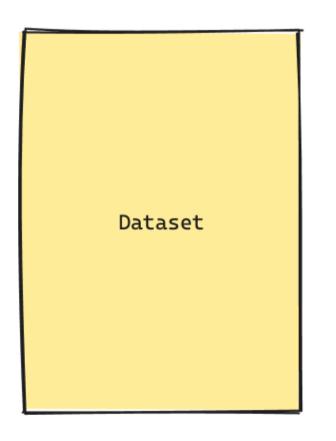
- El test set es la porción de los datos que se utilizará exclusivamente para validar los datos.
- El test set simula los datos que eventualmente entrarán el modelo para obtener una predicción.

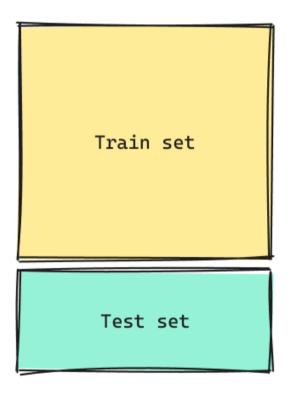


 Normalmente se utilizan splits del tipo 70/30, 80/20 o 90/10.



También es conocido como Train Test Split o simplemente Split. Corresponde a la separacion de nuestra data cuando con el proposito de aislar observaciones que el modelo no vea para una correcta evaluación.







• El train set es la porción de los datos que se utilizará exclusivamente para entrenar los datos.



- El test set es la porción de los datos que se utilizará exclusivamente para validar los datos.
- El test set simula los datos que eventualmente entrarán el modelo para obtener una predicción.



Normalmente se utilizan splits del tipo 70/30, 80/20 o 90/10.



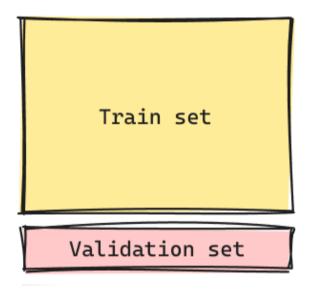
¿Cuál es el problema con este tipo de validación?





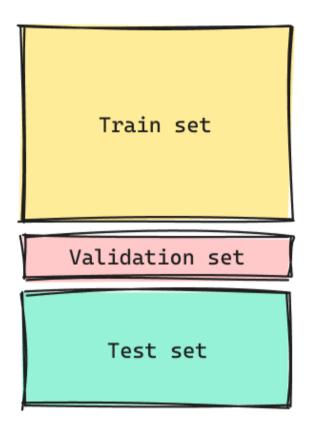
Train set





 Se agrega un validation set el cuál se utilizará para escoger los hiperparámetros que muestren un mejor poder de generalización.

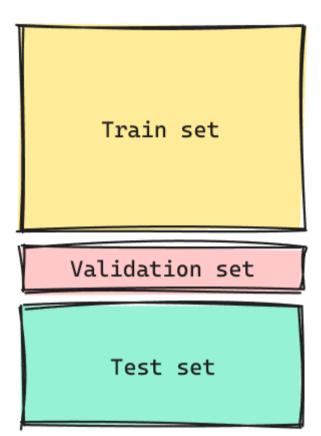




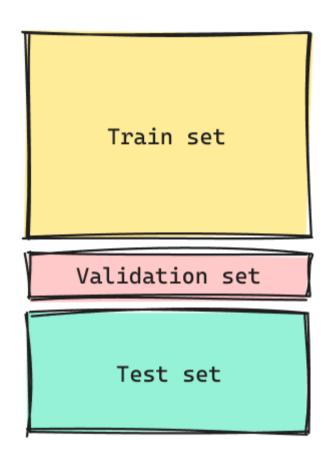
 Se agrega un validation set el cuál se utilizará para escoger los hiperparámetros que muestren un mejor poder de generalización.

• El train set y el test set cumplen la misma función que tenían antes.









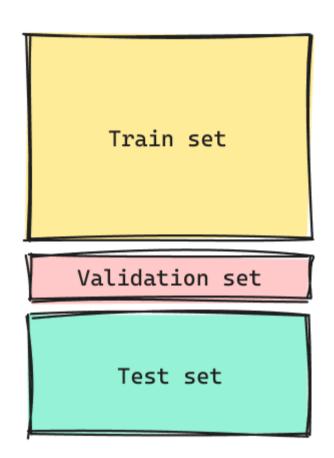
Procedimiento

• Repetir para cada Mode lo a probar.



• Vamos a entender un modelo como la combinación de un Algoritmo de Aprendizaje + Hiperparámetros + Preprocesamiento.



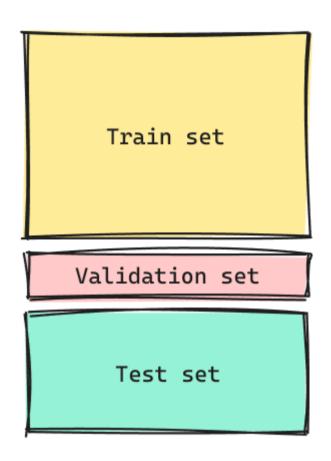


Procedimiento

• Repetir para cada Modelo a probar.

- Vamos a entender un modelo como la combinación de un Algoritmo de Aprendizaje + Hiperparámetros + Preprocesamiento.
- 1. Se entrena cada Modelo en el train set. Se mide una métrica de Evaluación apropiada utilizando el Validation Set. La llamaremos métrica de Validación.



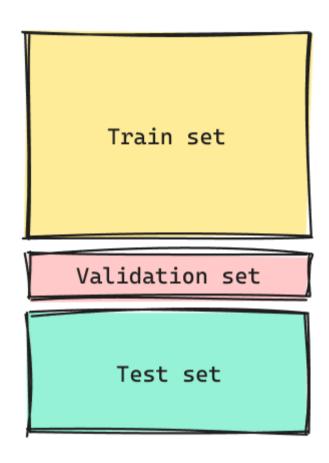


Procedimiento

Repetir para cada Mode lo a probar.

- Vamos a entender un modelo como la combinación de un Algoritmo de Aprendizaje + Hiperparámetros + Preprocesamiento.
- 1. Se entrena cada Modelo en el train set. Se mide una métrica de Evaluación apropiada utilizando el Validation Set. La llamaremos métrica de Validación.
- 2. Se escoge el mejor Mode Lo como el que tenga la mejor *métrica de* Validación.



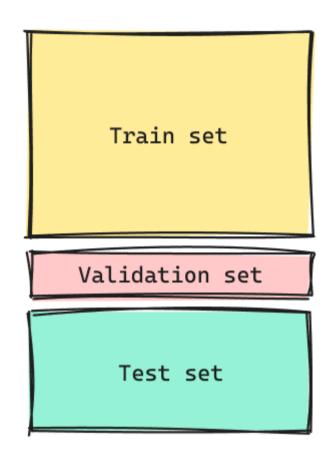


Procedimiento

Repetir para cada Mode lo a probar.

- <u>(!)</u>
- Vamos a entender un modelo como la combinación de un Algoritmo de Aprendizaje + Hiperparámetros + Preprocesamiento.
- 1. Se entrena cada Modelo en el train set. Se mide una métrica de Evaluación apropiada utilizando el Validation Set. La llamaremos métrica de Validación.
- 2. Se escoge el mejor Mode Lo como el que tenga la mejor *métrica de Validación*.
- 3. Se reentrena el *modelo escogido* pero ahora en un "*nuevo set*" compuesto por el Train set + el Validation set.





Procedimiento

Repetir para cada Mode lo a probar.

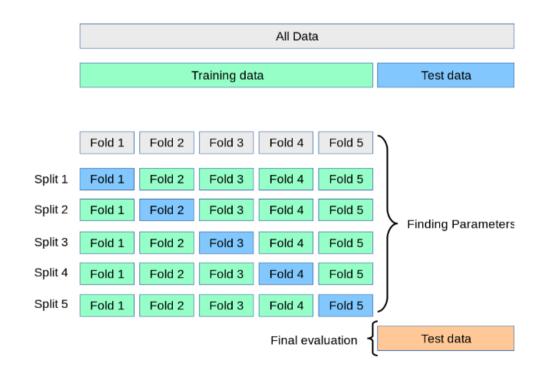
- Vamos a entender un modelo como la combinación de un Algoritmo de Aprendizaje + Hiperparámetros + Preprocesamiento.
- 1. Se entrena cada Modelo en el train set. Se mide una métrica de Evaluación apropiada utilizando el Validation Set. La llamaremos métrica de Validación.
- 2. Se escoge el mejor Mode Lo como el que tenga la mejor *métrica de* Validación.
- 3. Se reentrena el *modelo escogido* pero ahora en un "nuevo set" compuesto por elTrain set + el Validation set.
- 4. Se reporta el rendimiento final del *mejor modelo* (al momento del diseño) utilizando métricas medidas en el Test Set.



K-Fold CV



- El proceso de Holdout podría llevar a un proceso de overfitting del Test Set si el modelo no es lo suficientemente robusto.
- Definiremos la robustez más adelante.
- *i* El K-Fold CV se aplica sólo al Train Set y la métrica final que se reporta utilizando el Test Set.



Fold

Entenderemos Folds como divisiones que haremos a nuestro dataset. (En el ejemplo se divide el dataset en 5 Folds).

Split

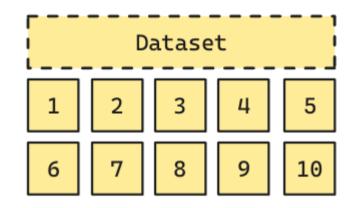
Entenderemos Splits, como iteraciones. En cada iteración utilizaremos un Fold como Validation Set y todos los Folds restantes como Train Set.

- (!)
- La métrica final se calculará como el promedio de las Métricas de Validación para cada Split.
 - A veces la variabilidad (medido a través de la Desviación Estándar) también es usado como criterio para elegir el mejor modelo.

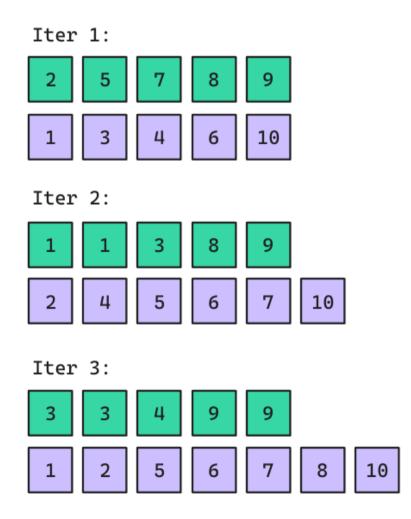


Bootstrap

Consiste en generar subgrupos aleatorios con repetición. Normalmente requiere específicar el tamaño de la muestra de entrenamiento. Y la cantidad de repeticiones que del proceso. Los sets de validación (en morado) acá se denominan *out-of-bag* samples.



• La métrica final a reportar se mide como el promedio de los *out-of-bag* samples.





Variantes y Consejos

Stratified K-Fold

Es la variante más utilizada de K-Fold el cual genera los folds considerando que se mantenga la proporción de etiquetas en cada Fold.

Leave One Out

Sería una variante con K=n. Por lo tanto, el Validation Set tiene sólo una observación.

¿Cuando usar cada uno?

- Si se tiene una cantidad de datos suficiente (normalmente tamaños muy grandes se prefiere) el Holdout.
 - Entre más registros, menos % de Validation Set se deja.
- Si se requiere robustez, o hay Test sets que son muy variables se prefiere K-Fold.
 - Si es que hay desbalance de clases, se prefiere la versión Stratified.
- Si se tienen *muy pocos* datos, entonces utilizar **Leave-One-Out**.
- Bootstrap también es utilizado cuando se tengan pocos datos. Aunque suele ser un approach más estadístico.



Baseline

Un modelo Baseline es un modelo simple, normalmente sin aprendizaje asociado o con poder de aprendizaje más limitado, el cuál será utilizado como medida de referencia para ver si algoritmos más complejos efectivamente están aprendiendo.

(i) Si estamos probando un nuevo modelo y éste es capaz de **superar el rendimiento de un Baseline**, se considera como que estamos aprendiendo algo nuevo.



Modelos que no superaron el puntaje de un modelo Baseline normalmente son deshechados.



```
from sklearn.dummy import DummyClassifier

dc = DummyClassifier(strategy="prior", random_state = 42, constant=None)
dc.fit(X_train,y_train)
y_pred = dc.predict(X_test)
```

- strategy: Corresponde a estrategias "dummy" con las cuales generar predicciones.
 - "prior": predice siempre la clase más frecuente observada en el entrenamiento. Si se predice la probabilidad, se devuelve la probabilidad empírica.
 - "constant": Devuelve un valor constante provisto por el usuario.
 - "uniform": Predice probabilidades aleatorios obtenidas mediante una distribución uniforme.



```
from sklearn.dummy import DummyClassifier

dc = DummyClassifier(strategy="prior", random_state = 42, constant=None)
dc.fit(X_train,y_train)
y_pred = dc.predict(X_test)
```

- strategy: Corresponde a estrategias "dummy" con las cuales generar predicciones.
 - "prior": predice siempre la clase más frecuente observada en el entrenamiento. Si se predice la probabilidad, se devuelve la probabilidad empírica.
 - "constant": Devuelve un valor constante provisto por el usuario.
 - "uniform": Predice probabilidades aleatorios obtenidas mediante una distribución uniforme.



```
from sklearn.dummy import DummyClassifier

dc = DummyClassifier(strategy="prior", random_state = 42, constant=None)

dc.fit(X_train,y_train)

y_pred = dc.predict(X_test)
```

- strategy: Corresponde a estrategias "dummy" con las cuales generar predicciones.
 - "prior": predice siempre la clase más frecuente observada en el entrenamiento. Si se predice la probabilidad, se devuelve la probabilidad empírica.
 - "constant": Devuelve un valor constante provisto por el usuario.
 - "uniform": Predice probabilidades aleatorios obtenidas mediante una distribución uniforme.



```
from sklearn.dummy import DummyClassifier

dc = DummyClassifier(strategy="prior", random_state = 42, constant=None)
dc.fit(X_train,y_train)
y_pred = dc.predict(X_test)
```

- **strategy**: Corresponde a estrategias "dummy" con las cuales generar predicciones.
 - "prior": predice siempre la clase más frecuente observada en el entrenamiento. Si se predice la probabilidad, se devuelve la probabilidad empírica.
 - "constant": Devuelve un valor constante provisto por el usuario.
 - "uniform": Predice probabilidades aleatorios obtenidas mediante una distribución uniforme.



```
from sklearn.dummy import DummyClassifier

dc = DummyClassifier(strategy="prior", random_state = 42, constant=None)

dc.fit(X_train,y_train)

y_pred = dc.predict(X_test)
```

- strategy: Corresponde a estrategias "dummy" con las cuales generar predicciones.
 - "prior": predice siempre la clase más frecuente observada en el entrenamiento. Si se predice la probabilidad, se devuelve la probabilidad empírica.
 - "constant": Devuelve un valor constante provisto por el usuario.
 - "uniform": Predice probabilidades aleatorios obtenidas mediante una distribución uniforme.



```
from sklearn.dummy import DummyClassifier

dc = DummyClassifier(strategy="prior", random_state = 42, constant=None)
dc.fit(X_train,y_train)
y_pred = dc.predict(X_test)
```

- strategy: Corresponde a estrategias "dummy" con las cuales generar predicciones.
 - "prior": predice siempre la clase más frecuente observada en el entrenamiento. Si se predice la probabilidad, se devuelve la probabilidad empírica.
 - "constant": Devuelve un valor constante provisto por el usuario.
 - "uniform": Predice probabilidades aleatorios obtenidas mediante una distribución uniforme.



Data Leakage

Fuga de Datos

Se refiere al proceso donde el modelo por alguna razón conoce información que no debería conocer. Puede ser información del Test Set o variables que revelan información primordial sobre la etiqueta.

① Cuando existe Data Leakage es posible que los resultados del modelo no reflejen correctamente su rendimiento dando una falsa sensación de optimismo.

Ejemplos

- Estandarizar o aplicar preprocesamientos antes del Split de la Data.
- Utilizar variables que tienen directa relación con el Target.



Data Leakage

Fuga de Datos

Se refiere al proceso donde el modelo por alguna razón conoce información que no debería conocer. Puede ser información del Test Set o variables que revelan información primordial sobre la etiqueta.

① Cuando existe Data Leakage es posible que los resultados del modelo no reflejen correctamente su rendimiento dando una falsa sensación de optimismo.

Ejemplos

- Estandarizar o aplicar preprocesamientos antes del Split de la Data.
- Utilizar variables que tienen directa relación con el Target.



Se recomienda siempre que sea posible utilizar Pipelines para poder evitar el Data Leakage.



Arrivederci!

