

# Curso DM Clasificación

(Introducción, Framework, Evaluación)

Primavera 2023

Basado en las slides de Bárbara Poblete

# Sobre la Clasificación

- Técnica utilizada en minería de datos.
- Viene del área de Machine Learning.
- Método de "aprendizaje supervisado".

Aprendizaje Supervisado

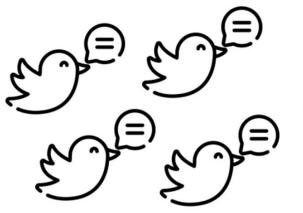


Debemos mostrar ejemplos a la máquina para que aprenda de ellos

# ¿Qué es la Clasificación?

- Técnica que "aprende" automáticamente cómo clasificar objetos en dos o más clases determinadas.
- Este aprendizaje se basa en datos previamente etiquetados (clasificados).
- Se aplica en caso en que "etiquetar" tiene un alto costo (por ejemplo: trabajo humano experto).

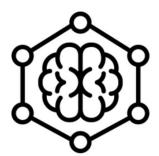
# Ejemplo de aplicación



| 2,50 | ) <u> </u>                    |
|------|-------------------------------|
|      | ¿Relevante<br>para la crisis? |

Aprendizaje

| Mensajes   | ¿Relevante<br>para la crisis? |
|--|-------------------------------|
| Ascienden 52 los muertos y 1,2 millones de afectados por terremoto en Guatemala: La cifra de muertos por el http://t.co/YyCHBArU | Sí                            |
| No sé si preocuparme porque no sentí el temblor de ahorita o qué.  | No                            |
|  |                               |





| Nuevos mensajes  | ¿Relevante<br>para la crisis? |
|--|-------------------------------|
| Fuerte terremoto de 6,5 magnitud en #Ecuador.<br>https://t.co/vU4N7babRb | ?                             |

# ¿Qué es la Clasificación?

**Objetivo:** Asignar objetos no vistos anteriormente a una clase dentro de un conjunto determinado de clases con la mayor precisión posible.

La clase usualmente es denotada por los valores 0,1 para el caso binario o bien  $\{1,2,3,...K\}$  para cuando se tienen K categorías.

#### **Enfoque:**

- Dada una colección de registros (conjunto de entrenamiento)
  - cada registro contiene un conjunto de atributos
  - uno de los atributos es la clase (etiqueta) que debe predecirse
- Aprender un modelo para el atributo de clase como función de los otros atributos.

### Tarea de mapear set X a una clase y



# ¿Qué es la Clasificación?

#### Variantes:

- Clasificación **binaria** (fraude/no fraude o verdadero/falso)
- Clasificación **multi-clase** (bajo, medio, alto)
- Clasificación **multi-etiqueta** (más de una clase por registro, por ejemplo, intereses del usuario)

# Machine learning vs Data Mining

- Cuando hacemos clasificación queremos automatizar una rostros en imágenes).
   Muchas veces usamos los mismos tipos de modelos pero con objetivos distintos.
- Cuando hacemos clasificación en Data Mining queremos encontrar un patrón en los datos (i.e., queremos entender cómo se relaciona x con y por medio de un modelo predictivo).

# Componentes principales

- Conjunto de entrenamiento
- Algoritmo de clasificación
- Conjunto de validación
- Producen un "Modelo de Clasificación"

# Ejemplos de clasificación

#### Evaluación del riesgo crediticio

- Atributos: su edad, ingresos, deudas, ...
- Clase: ¿recibes crédito de tu banco?

#### Marketing

- Atributos: productos comprados anteriormente, comportamiento de navegación
- Clase: ¿es usted un cliente objetivo para un nuevo producto?

#### Detección de SPAM

- Atributos: palabras y campos de la cabecera de un correo electrónico
- Clase: ¿correo electrónico normal o correo basura?

#### Detección de sentimiento

- Atributos: palabras del mensaje.
- Clase: ¿el texto transmite un sentimiento negativo?

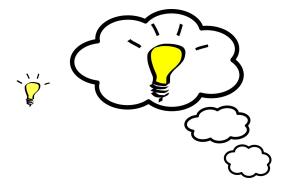
#### Identificación de células tumorales

- Atributos: características extraídas de radiografías o resonancias magnéticas
- Clase: células malignas o benignas

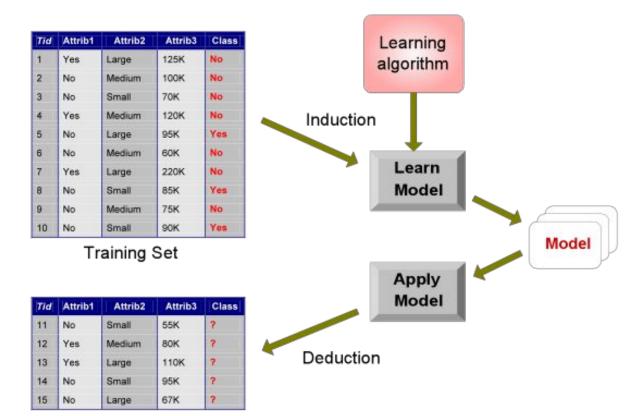
### **Actividad**

Mencionen 3 tareas de clasificación, ¿cuáles serían los atributos y cuál la clase objetivo para cada tarea?

Reunirse y discutir en grupo (5 minutos)



#### Proceso de Clasificación



**Test Set** 

#### Usos de los modelos

**Descriptivo:** el modelo se utiliza como una herramienta descriptiva.

Ayuda a describir las clases

¿Cuáles atributos influyen más?

Descubrir los patrones o
asociaciones interesantes que
relacionan los datos.

Predictivo: se utiliza para predecir la clase de objetos nuevos.

### Nota sobre la clasificación

- es mejor para datos binarios y nominales,
- no es tan bueno para ordinales, ya que no consideran relación de orden entre clases (ej. alto, mediano, bajo), también ignora información de subclases-superclases (mamíferos -> primates -> {humanos, monos}).
- Nos enfocamos en clases binarias y nominales.

# Técnicas de clasificación

- Basados en Árboles de Decisión
- Métodos basados en Reglas
- Razonamiento en base a memoria
- Redes Neuronales
- Naïve Bayes y Redes de Soporte Bayesianas
- Support Vector Machines

# La Clave del Éxito

• El modelo construido debe ser "generalizable", es decir, debe aprender bien con muchos tipos de datos nuevos.

# ¿Cómo saber si un modelo es bueno o no?

- Lo más importante es la capacidad predictiva del modelo.
- Hacer predicciones correctas sobre los datos de entrenamiento no es suficiente para determinar la capacidad predictiva.
- El modelo construido debe **generalizar**, es decir, debe ser capaz de realizar predicciones correctas en datos distintos a los datos de entrenamiento.
- Otros factores importantes: interpretabilidad, eficiencia, fairness.



# ¿Cómo saber si un modelo es bueno o no?

- 1. Resumimos la capacidad predictiva de un modelo mediante **métricas de desempeño** (performance metrics).
- 2. Las métricas se calculan **contrastando** los valores predichos versus los valores reales de la variable objetivo.
- 3. Este se hace con datos no usados durante entrenamiento.
- 4. Diseñamos experimentos en que comparamos las métricas de desempeño para varios modelos distintos y nos quedamos con el mejor.

# Performance Metrics (métricas de desempeño)

- Basadas en contar datos correcta e incorrectamente clasificados.
- Accuracy (Exactitud): métrica más usada, o
- Error rate (Tasa de error)

### Matriz de Confusión

Es una forma estándar de mostrar visualmente los resultados de la clasificación. Detalla el número de aciertos (TP, TN) y errores (FP, FN). Las métricas se pueden calcular directamente a partir de esta matriz de confusión.

|                 |   | Predicted Class         |                      |  |
|-----------------|---|-------------------------|----------------------|--|
|                 |   | 1                       | 0                    |  |
| Actual<br>Class | 1 | True Positives (TP)     | False Negatives (FN) |  |
| Class           | 0 | False Positives<br>(FP) | True Negatives (TN)  |  |

# Accuracy (Exactitud)

|                 |   | Predicted Class         |                      |  |
|-----------------|---|-------------------------|----------------------|--|
|                 |   | 1                       | 0                    |  |
| Actual<br>Class | 1 | True Positives (TP)     | False Negatives (FN) |  |
| Class           | 0 | False Positives<br>(FP) | True Negatives (TN)  |  |

$$Accuracy = rac{TP + TN}{TP + FP + TN + FN}$$

 $Accuracy = \frac{TP + TN}{TP + FP + TN + FN} \qquad \text{N\'umero de casos clasificados correctamente dividido por el n\'umero total de casos evaluados.}$ 

# Limitaciones del Accuracy

#### Consideren un problema de 2-clases

- Num. de ejemplos de la Clase 0 = 9990
- Num. de ejemplos de la Clase 1 = 10

#### ¿Cuál es el problema?

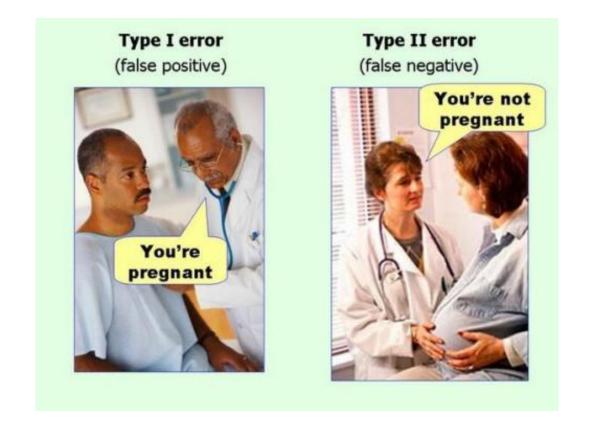
- Modelo que clasifica todo como Clase 0, accuracy es 9990/10000 = 99.9%
- Pero el modelo no detecta nada de la Clase 1 podría ser una f(x)=0.
- No es una buena métrica cuando tenemos clases desbalanceadas.

# Precisión y Recall

En un problema de clasificación binaria tenemos que escoger cual es la clase positiva. Podemos pensar que clasificar algo como "positivo" es equivalente a "seleccionarlo".

- Precision: % de los casos "seleccionados" que son correctos.
- Recall: % de los casos "positivos" que son "seleccionados".
- Existe un trade-off entre Precision y Recall.

# Falsos Positivos y Falsos Negativos



### Precisión

|                 |   | Predicted Class         |                        |  |  |
|-----------------|---|-------------------------|------------------------|--|--|
|                 |   | 1 0                     |                        |  |  |
| Actual<br>Class | 1 | True Positives (TP)     | False Negatives (FN)   |  |  |
| Class           | 0 | False Positives<br>(FP) | True Negatives<br>(TN) |  |  |

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

Proporción de <u>verdaderos positivos</u> sobre el número de casos <u>predichos</u> <u>como positivos</u>.

Determina lo bueno que es un clasificador para evitar los falsos positivos.

### Recall

|                 |   | Predicted Class      |                      |  |  |
|-----------------|---|----------------------|----------------------|--|--|
|                 |   | 1 0                  |                      |  |  |
| Actual<br>Class | 1 | True Positives (TP)  | False Negatives (FN) |  |  |
| Class           | 0 | False Positives (FP) | True Negatives (TN)  |  |  |

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

Proporción de <u>verdaderos positivos</u> sobre el número de <u>positivos reales</u>. Determina lo bueno que es un clasificador para evitar los falsos negativos.

### F1-score

|                 |   | Predicted Class      |                        |  |  |
|-----------------|---|----------------------|------------------------|--|--|
|                 |   | 1 0                  |                        |  |  |
| Actual<br>Class | 1 | True Positives (TP)  | False Negatives (FN)   |  |  |
| Class           | 0 | False Positives (FP) | True Negatives<br>(TN) |  |  |

$$F1 = 2 \cdot \frac{P \cdot R}{P + R}$$

Media armónica de la precisión y recall. Es conservadora y tiende a estar más cerca del mínimo. Generalmente usamos la F1 measure.

# Ejercicio: reincidencia de cáncer

Considere 286 mujeres: 201 no tienen reincidencia de cáncer después de 5 años y 85 sí tienen. Compare los modelos:

M1: "todas reinciden"

|       | Clase predicha |    |   |  |
|-------|----------------|----|---|--|
|       | + -            |    |   |  |
| Clase | +              | 85 | 0 |  |

201

real

M2: "ninguna reincide"

|               | Clase predicha |   |     |
|---------------|----------------|---|-----|
|               |                | + | -   |
| Clase<br>real | +              | 0 | 85  |
|               | -              | 0 | 201 |

Calcular accuracy, precision, recall y F1. Reunirse y discutir en grupo (5 minutos)

# Ejercicio: reincidencia de cáncer

Considere 286 mujeres: 201 no tienen reincidencia de cáncer después de 5 años y 85 sí tienen. Compare los modelos:

#### M1: "todas reinciden"

|       | Clase predicha |     |   |
|-------|----------------|-----|---|
|       |                | +   | - |
| Clase | +              | 85  | 0 |
| real  | -              | 201 | 0 |

Accuracy: 85/286= 0.3 Precision: 85/286= 0.3

Recall: 1

F1: 2\*0.3/(0.3+1)=0.46

#### M2: "ninguna reincide"

|               | Clase predicha |   |     |
|---------------|----------------|---|-----|
| Clase<br>real |                | + | -   |
|               | +              | 0 | 85  |
|               | -              | 0 | 201 |

Accuracy: 201/286 = 0.7Precision: 0/0 =undef

Recall: 0/85=0

F1: undef

#### Matriz de Costo

A veces yo se cuales errores son más costosos y cuales aciertos son más valiosos. Puedo hacer una evaluación sensible al costo.

|            | Clase predicha |           |           |
|------------|----------------|-----------|-----------|
| Clase real | C(i j)         | clase = + | clase = - |
|            | clase = +      | C(+ +)    | C(- +)    |
|            | clase = -      | C(+ -)    | C(- -)    |

C(i|j): Costo de clasificar un objeto como clase j dado que es clase i

### Calculando el costo de la clasificación

A mayor costo peor el modelo.

| Matrix<br>Costo | Clase predicha |    |     |
|-----------------|----------------|----|-----|
|                 | C(i j)         | +  | -   |
| Clase<br>real   | +              | -1 | 100 |
|                 | -              | 1  | 0   |

| Modelo<br>M1 | Clase predicha |     |     |
|--------------|----------------|-----|-----|
|              |                | +   | -   |
| Clase real   | +              | 150 | 40  |
|              | -              | 60  | 250 |

**Accuracy(M1)** = 
$$400/500 = 0.8$$
 **C(M1)** =  $-1*150+100*40+1*60+0*250 = 3910$ 

| Modelo<br>M2  | Clase predicha |     |     |
|---------------|----------------|-----|-----|
|               |                | +   | -   |
| Clase<br>real | +              | 250 | 45  |
|               | -              | 5   | 200 |

**Accuracy(M2)** = 
$$450/500 = 0.9$$
  
**C(M2)** =  $-1*250+100*45+1*5+0*200 = 4255$ 

## Clasificación Multi-clase

Cuando tenemos k etiquetas, la matriz de confusión es una matriz de k X k.

| Docs in test set | Assigned<br>UK | Assigned poultry | Assigned<br>wheat | Assigned<br>coffee | Assigned interest | Assigned<br>trade |
|------------------|----------------|------------------|-------------------|--------------------|-------------------|-------------------|
| True UK          | 95             | 1                | 13                | 0                  | 1                 | 0                 |
| True poultry     | 0              | 1                | 0                 | 0                  | 0                 | 0                 |
| True wheat       | 10             | 90               | 0                 | 1                  | 0                 | 0                 |
| True coffee      | 0              | 0                | 0                 | 34                 | 3                 | 7                 |
| True interest    | -              | 1                | 2                 | 13                 | 26                | 5                 |
| True trade       | 0              | 0                | 2                 | 14                 | 5                 | 10                |

# Métricas de desempeño por clase

Es posible agregarlas para tener una sola

métrica que resuma el desempeño del

Clasificador binario: One-Vs-Rest

Recall: Fracción de ejemplos de la clase i correc

**Precision:** Fracción de ejemplos asignados a la clase i que realimente son de la clase i.

**Accuracy:** (1 - error rate). Fracción total de ejemplos correctamente clasificados.

# Micro- vs. Macro-Averaging

Si tenemos más de una clase, ¿cómo combinamos múltiples métricas de desempeño en un solo valor?

Macroaveraging: computar métrica para cada clase y luego promediar.

Microaveraging: crear matriz de confusión binaria para cada clase, combinar las matrices y luego evaluar.

Promedio ponderado por soporte (cantidad de ejemplos) por clase

|              | precision | recall | f1-score |  |
|--------------|-----------|--------|----------|--|
| 1            | 1.00      | 0.67   | 0.80     |  |
| 2            | 0.00      | 0.00   | 0.00     |  |
| 3            | 0.00      | 0.00   | 0.00     |  |
| micro avg    | 1.00      | 0.67   | 0.80     |  |
| macro avg    | 0.33      | 0.22   | 0.27     |  |
| weighted avg | 1.00      | 0.67   | 0.80     |  |



sklearn.metrics.classification\_report

# Micro- vs. Macro-Averaging: Ejemplo clasificación de Spam

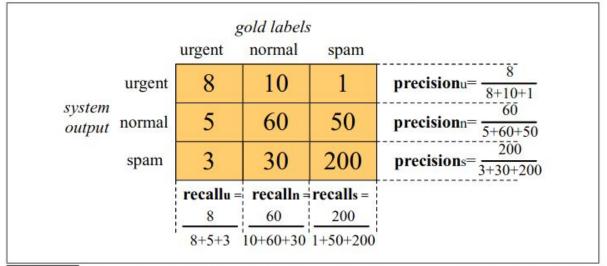


Figure 4.5 Confusion matrix for a three-class categorization task, showing for each pair of classes  $(c_1, c_2)$ , how many documents from  $c_1$  were (in)correctly assigned to  $c_2$ 

Fuente: <a href="https://web.stanford.edu/~jurafsky/slp3/4.pdf">https://web.stanford.edu/~jurafsky/slp3/4.pdf</a>

#### Micro- vs. Macro-Averaging: Ejemplo clasificación de Spam

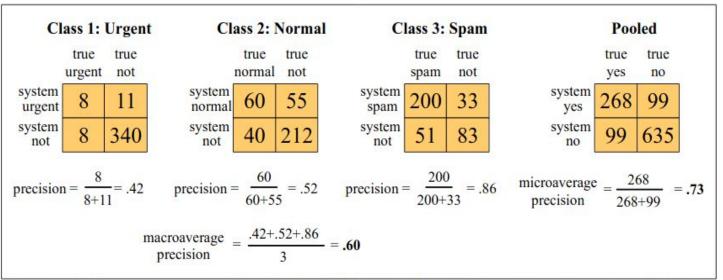


Figure 4.6 Separate contingency tables for the 3 classes from the previous figure, showing the pooled contingency table and the microaveraged and macroaveraged precision.

- Los micro-promedios son dominados por las clases más frecuentes.
- Los macro-promedios pueden sobre-representar a clases minoritarias.

Fuente: <a href="https://web.stanford.edu/~iurafskv/slp3/4.pdf">https://web.stanford.edu/~iurafskv/slp3/4.pdf</a>

### En resumen

#### Clasificación

Dada una colección de objetos (set de entrenamiento)

 Cada record contiene un set de atributos, uno de los cuales es su clase.

Encontrar un modelo para el atributo clase, en base a los otros atributos.

Meta: records nuevos deben ser asignados correctamente su clase

 Un set de evaluación se utiliza para medir el desempeño del modelo.
 ¡La evaluación es

una parte integral del proceso!

# Próxima clase

- Continuación de evaluación del desempeño del modelo.
- Problemas prácticos en la clasificación (Overfitting, Underfitting).
- Algoritmos de clasificación.



# **Ejemplo: Rumores en Twitter**

(presentación externa

https://prezi.com/r6xefyatyuwg/information-credibility-on-twitter/)



www.dcc.uchile.cl