Técnicas de Inteligencia Artificial Óscar García

Evaluación de la clasificación



Índice

- Matrices de confusión
- Evaluación de la matriz de confusión
- La curva ROC
- Estadístico de Kappa
- Evaluación de la regresión



Introducción

- Evaluación de modelos de aprendizaje supervisado
 - Regresión y clasificación
- Para ello separamos nuestro dataset en
 - Conjunto de entrenamiento
 - Conjunto de test



- Métricas para evaluación de clasificadores binarios
- En clasificación binaria hablamos de casos positivos y negativos
 - En nuestro modelos buscamos los casos positivos
- Las matrices de confusión es una manera de representar los resultados de un clasificador binario

		Predicción				
		Positivos	Negativos			
ación	Positivos	Verdaderos Positivos (VP)	Falsos Negativos (FN)			
0bserv	Negativos	Falsos Positivos (FP)	Verdaderos Negativos (VN)			

Matriz de confusión

Dadas n clases, la matriz de confusión tiene un tamaño $n \times n$ y sus elementos p_{ij} indican el número de instancias de la clase i que han sido clasificadas por el modelo como de la clase j.

- Filas → clase real de la instancia
- Columnas → clase estimada por el clasificador.

```
=== Confusion Matrix ===

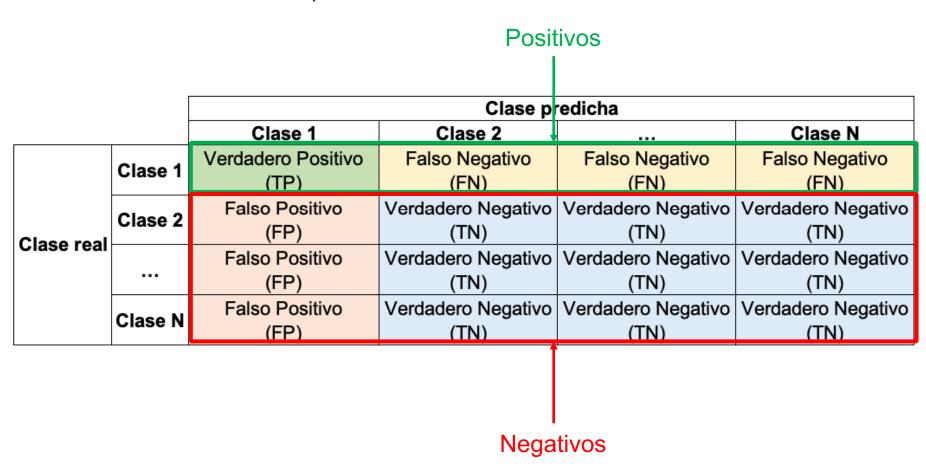
a b <-- classified as
8 1 | a = yes
1 4 | b = no
```

- Si tenemos más de una clase
- Reducimos a los casos positivos y negativos por cada clase
- Matriz de confusión para la Clase 1

		Clase predicha						
		Clase 1	Clase 2	•••	Clase N			
	Clase 1	Verdadero Positivo (TP)	Falso Negativo (FN)	Falso Negativo (FN)	Falso Negativo (FN)			
Clase real	Clase 2	Falso Positivo (FP)	Verdadero Negativo (TN)	Verdadero Negativo (TN)	Verdadero Negativo (TN)			
Clase real	•••	Falso Positivo (FP)	Verdadero Negativo (TN)	Verdadero Negativo (TN)	Verdadero Negativo (TN)			
	Clase N Falso Positivo (FP)		Verdadero Negativo (TN)	Verdadero Negativo (TN)	Verdadero Negativo (TN)			



Matriz de confusión para la Clase 1





Matriz de confusión para la Clase 2

		Clase predicha							
		Clase 1	Clase 2	•••	Clase N				
	Clase 1	Verdadero Negativo	Falso Positivo	Verdadero Negativo	Verdadero Negativo				
	Clase 1	(TN)	(FP)	(TN)	(TN)				
	Clase 2	Falso Negativo	Verdadero Positivo	Falso Negativo	Falso Negativo				
Clase real		(FN)	(TP)	(FN)	(FN)				
Clase real		Verdadero Negativo	Falso Positivo	Verdadero Negativo	Verdadero Negativo				
		(TN)	(FP)	(TN)	(TN)				
	Clase N	Verdadero Negativo	Falso Positivo	Verdadero Negativo	Verdadero Negativo				
	Clase N	(TN)	(FP)	(TN)	(TN)				



Matriz de confusión para la Clase 2 Negativos **Positivos** Clase predigna Clase 1 Clase 2 Clase N Verdadero Negativo Verdadero Negativo Verdadero Negativo Falso Positivo Clase 1 (TN) (FP) (TN) (TN) Falso Negativo Verdadero Positivo Falso Negativo Falso Negativo Clase 2 (FN) (TP) (FN) (FN) Clase real Verdadero Negativo Falso Positivo Verdadero Negativo Verdadero Negativo (TN) (FP) (TN) (TN) Verdadero Negativo Falso Positivo Verdadero Negativo Verdadero Negativo Clase N (TN) (FP) (TN) (TN) Negativos



Exactitud - Accuracy

Porcentaje de instancias del conjunto de prueba que se clasifican correctamente

$$Exactitud = Accuracy = \frac{TP + TN}{P + N}$$

=== Confusion Matrix ===

$$Exactitud = Accuracy = \frac{8+4}{9+5} = 0.857$$

Tasa de error – Error rate

Porcentaje de instancias del conjunto de prueba que se clasifican incorrectamente

Tasa de error = Error rate =
$$\frac{FP + FN}{P + N}$$

=== Confusion Matrix ===

Tasa de error = Error rate =
$$\frac{1+1}{9+5}$$
 = 0.142

Precisión - Precision

Porcentaje de instancias positivas respecto del total de predichas como positivas

$$Precisión = \frac{TP}{TP + FP}$$

$$Precisi\'on_{yes} = \frac{8}{8+1} = 0.89$$

$$Precisi\'on_{no} = \frac{4}{4+1} = 0.8$$

Tasa de verdaderos positivos – *TP Rate*Recall – Alcance - Sensibilidad

Proporción de instancias positivas correctamente clasificadas (detectar aciertos – enfermedad sobre enfermos).

$$TPrate = \frac{TP}{P}$$

=== Confusion Matrix ===

$$TPrate_{yes} = \frac{8}{8+1} = 0.89$$

$$TPrate_{no} = \frac{4}{4+1} = 0.8$$

Tasa de verdaderos negativos – TN Rate Especificidad - Specifity

Proporción de instancias negativas correctamente clasificadas (cuánto de bien se detecta una clase).

$$TNrate = \frac{TN}{N}$$

=== Confusion Matrix ===

$$TNrate_{yes} = \frac{4}{4+1} = 0.8$$

a b <-- classified as

$$TNrate_{no} = \frac{8}{8+1} = 0.89$$

TN Rate para la clase no = TP Rate para la clase yes

Tasa de falsos positivos – FP Rate

Proporción de instancias negativas incorrectamente clasificadas (falsa alarma).

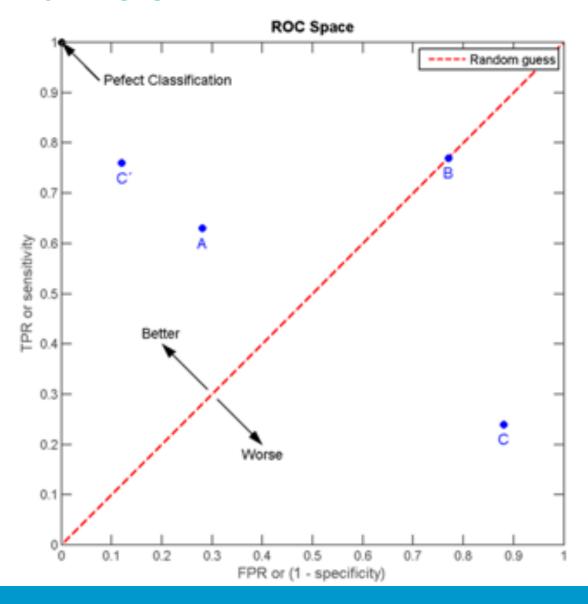
$$FPrate = \frac{FP}{N}$$

$$FPrate_{yes} = \frac{1}{4+1} = 0.2$$

$$FPrate_{no} = \frac{1}{8+1} = 0.11$$

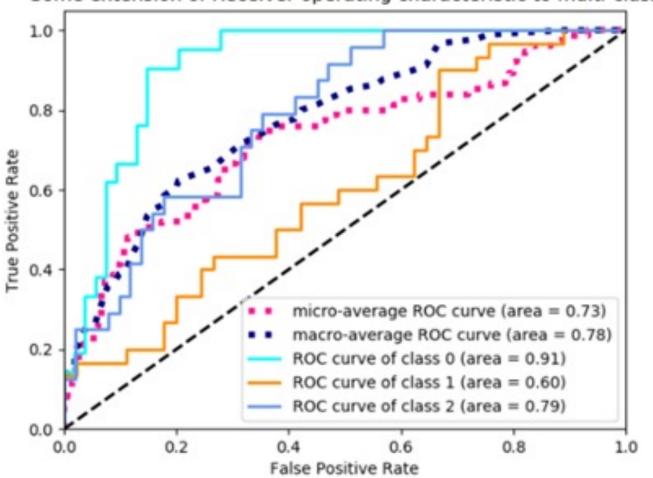
- Una curva ROC es una representación gráfica de la sensibilidad frente a la especificidad para un sistema clasificador binario.
- Otra interpretación de este gráfico es la representación de la ratio de verdaderos positivos frente a la ratio de falsos positivos también según se varía el umbral de discriminación (valor a partir del cual decidimos que un caso es un positivo).
- Ratio de falsos positivos (FPRate) = FP / (FP + TN)
- Ratio de verdaderos positivos (TPRate) = Recall = (TP)
 / (TP + FN)

• El principal objetivo de la curva ROC es determinar qué modelo es mejor dado un conjunto de modelos que sirven para una clasificación.





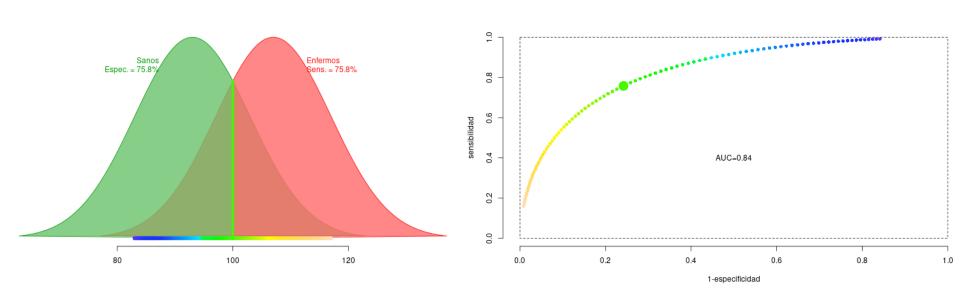
Some extension of Receiver operating characteristic to multi-class



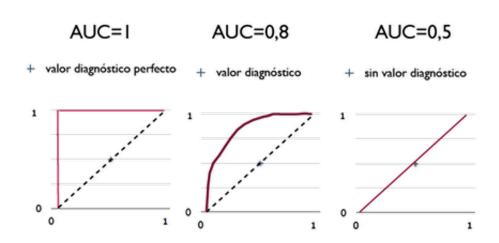


Elección de puntos de corte y área bajo la curva

https://www.bioestadistica.uma.es/app/roc1/



- El área bajo la curva ROC, conocido como AUC (Area Under Curve) toma un valor entre 0.5 y 1
 - AUC = 0.5 es como tirar una moneda al aire
 - AUC = 1 es un clasificador perfecto
 - AUC > 0.9 es un clasificador muy bueno



Fuente: https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/b/b9/Curvas.png/440px-Curvas.png

- ¿Cómo podemos saber que nuestro clasificador es mejor que el azar?
 - Estadístico de Kappa de Cohen (1960) se basa en comparar la concordancia observada en un conjunto de datos respecto a lo que podría ocurrir por azar
 - Elementos cualitativos (variables categóricas)

• El Coeficiente kappa de Cohen mide la concordancia entre dos examinadores en sus correspondientes clasificaciones de N elementos en C categorías mutuamente excluyentes.

$$Kappa \,\,(k) = rac{P_{observada} - P_{estimada}}{1 - P_{-}estimada}$$

- P_{observada} es el acuerdo observado relativo entre los observadores, y P_{estimada} es la probabilidad hipotética de acuerdo por azar.
- Si los evaluadores están completamente de acuerdo, entonces κ = 1
- Si no hay acuerdo entre los calificadores distinto al que cabría esperar por azar, $\kappa = 0$.

$$Kappa \,\, (k) = rac{P_{observada} - P_{estimada}}{1 - P_{-}estimada}$$

		В		
		Sí	No	
۸	Sí	20	5	
A	No	10	15	

La diagonal principal (20+15) nos indica la concordancia entre observadores,

$$P_{\text{observada}} = (20 + 15) / 50 = 0.70$$

$$Kappa \; (k) = rac{P_{observada} - P_{estimada}}{1 - P_{_estimada}}$$

		В		
		Sí	No	
٨	Sí	20	5	
A	No	10	15	

Pestimada

P_A dice Sí 25, dice No 25, A dice Sí el 50%

P_B dice Sí 30, dice No 20, B dice Sí el 60%

La probabilidad de que digan Sí al azar es: $P_A(Si) * P_B(Si) = 0.30$ La probabilidad de que digan No al azar es: $P_A(No) * P_B(No) = 0.20$

La $P_{estimada}$ es la suma de ambas. $P_{estimada} = 0.50$

		В		
		Sí	No	
۸	Sí	20	5	
A	No	10	15	

$$Kappa~(k) = rac{P_{observada} - P_{estimada}}{1 - P_{_}estimada}$$

Kappa =
$$(0.7 - 0.5)/(1-0.5) = 0.4$$

La probabilidad de que digan Sí al azar es: $P_A(Si) * P_B(Si) = 0.30$ La probabilidad de que digan No al azar es: $P_A(No) * P_B(Mo) = 0.20$

La P_{estimada} es la suma de ambas. P_{estimada} = 0.50

Estudiar la relación estadística entre dos variables

Regresión

Ecuación lineal que describe mejor la asociación entre dos variables

- Error cuadrático medio (RMSE):
 Distancia cuadrada promedio entre valor real y pronosticado.
 Medida absoluta del ajuste.
- Error absoluto medio (MAE):
 Las diferencias individuales se ponderan por igual en el promedio.



 R² – Coeficiente de determinación: Indica la bondad del ajuste. Mejor ajuste a medida que se acerca a 1. o hay relación lineal





- Métricas utilizadas para evaluar la predicción de datos numéricos
 - Error absoluto medio (MAE), promedio de los errores de clasificación para cada una de las instancias. Ponderación para el error. Menos sensible que RMSE a los valores atípicos.

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^{n} |y_{pred,i} - y_i|}{n}$$

Raíz del error cuadrático medio (RMSE)

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} (y_j - \hat{y}_j)^2}$$

- Comparación de ambas métricas
 - Similitudes: las dos pueden ir de 0 a ∞
 - Las dos son mejores cuanto más pequeños son los valores
 - Diferencias:
 - RMSE al utilizar la raíz cuadrada da más peso a los errores más grandes. Útil cuando queremos evitar siempre que sea posible los errores grandes.
 - MAE es más fácil de interpretar

+ información

- Métricas derivadas a partir de TP, TN, FP y FN
 - https://en.wikipedia.org/wiki/Sensitivity_and_specificity
 - https://en.wikipedia.org/wiki/Precision_and_recall#Definition_(classification_context)
- ¿Cuándo usar cada una de las métricas de evaluación?
 - https://medium.com/@alon.lek/should-i-look-at-precision-recallor-specificity-sensitivity-3946158aace1
- Métricas para variables continuas
 - https://medium.com/human-in-a-machine-world/mae-and-rmsewhich-metric-is-better-e60ac3bde13d

Gracias por vuestra atención ¿Dudas?



Imagen por Peggy und Marco Lachmann-Anke Licencia: Creative Commons Zero

UNIVERSIDAD INTERNACIONAL LITTERNACIONAL DE LA RIOJA

www.unir.net

Ejemplo TP-Rate

=== Detailed Accuracy By Class ===

	TP Rate	FP Rate	Precision	Recall	F-Measure	MCC	ROC Area	PRC Area	Class
	0,778	0,600	0,700	0,778	0,737	0,189	0,789	0,847	yes
	0,400	0,222	0,500	0,400	0,444	0,189	0,789	0,738	no
Weighted Avg.	0,643	0,465	0,629	0,643	0,632	0,189	0,789	0,808	

TP Rate para la clase yes

También llamado recall, alcance o sensibilidad

TP rate =
$$\frac{TP}{P} = \frac{7}{7+2} = 0,778$$

TP

Ejemplo TP-Rate

=== Detailed Accuracy By Class ===

	TP Rate	FP Rate	Precision	Recall	F-Measure	MCC	ROC Area	PRC Area	Class
	0,778	0,600	0,700	0,778	0,737	0,189	0,789	0,847	yes
	0,400	0,222	0,500	0,400	0,444	0,189	0,789	0,738	no
Weighted Avg.	0,643	0,465	0,629	0,643	0,632	0,189	0,789	0,808	

TP Rate para la clase no

=== Confusion Matrix ===

También llamado recall, alcance o sensibilidad

TP rate =
$$\frac{TP}{P} = \frac{2}{2+3} = 0,400$$

Ejemplo TP-Rate

=== Detailed Accuracy By Class ===

Recall TP Rate FP Rate Precision F-Measure MCC ROC Area PRC Area Class 0,778 0,600 0,700 0,778 0,737 0,189 0,789 0,847 yes 0,222 0,500 0,444 0,789 0,738 0,400 0,400 0,189 no 0,643 0.465 0.643 0,632 Weighted Avg. 0,629 0,189 0,789 0,808

Media ponderada del TP Rate

TP rate
$$=\frac{P}{P+N} \cdot \text{TP}$$
 rate clase $P + \frac{N}{P+N} \cdot \text{TP}$ rate clase N

TP rate
$$'yes' = 0,778$$

TP rate $'no' = 0,400$

TP rate =
$$\frac{P}{P+N}$$
 · TP rate 'yes' + $\frac{N}{P+N}$ · TP rate 'no' = $\frac{9}{9+5}$ · 0,778 + $\frac{5}{9+5}$ · 0,400 = 0,643

Ejemplo TN-Rate

=== Detailed Accuracy By Class ===

	TP Rate	FP Rate	Precision	Recall	F-Measure	MCC	ROC Area	PRC Area	Class
					0,737				-
	0,400	0,222	0,500	0,400	0,444	0,189	0,789	0,738	no
Weighted Avg.	0,643	0,465	0,629	0,643	0,632	0,189	0,789	0,808	

TN Rate para la clase yes

TN rate =
$$\frac{TN}{N} = \frac{2}{2+3} = 0,400$$

TN Rate para la clase yes = TP Rate para la clase no

Ejemplo TN-Rate

=== Detailed Accuracy By Class ===

	TP Rate	FP Rate	Precision	Recall	F-Measure	MCC	ROC Area	PRC Area	Class
	0,778	0,600	0,700	0,778	0,737	0,189	0,789	0,847	yes
	0,400	0,222	0,500	0,400	0,444	0,189	0,789	0,738	no
Weighted Avg.	0,643	0,465	0,629	0,643	0,632	0,189	0,789	0,808	

TN Rate para la clase no

a b <-- classified as
$$72 \mid a = yes \quad N$$

$$32 \mid b = no$$

También llamado especificidad

TN rate =
$$\frac{TN}{N} = \frac{7}{7+2} = 0,778$$

TN Rate para la clase no = TP Rate para la clase yes

Ejemplo FP-Rate

=== Detailed Accuracy By Class ===

	TP Rate	FP Rate	Precision	Recall	F-Measure	MCC	ROC Area	PRC Area	Class
	0,778	0,600	0,700	0,778	0,737	0,189	0,789	0,847	yes
	0,400	0,222	0,500	0,400	0,444	0,189	0,789	0,738	no
Weighted Avg.	0,643	0,465	0,629	0,643	0,632	0,189	0,789	0,808	

FP Rate para la clase yes

FP rate =
$$\frac{FP}{N} = \frac{3}{3+2} = 0,600$$

Ejemplo FP-Rate

=== Detailed Accuracy By Class ===

	TP Rate	FP Rate	Precision	Recall	F-Measure	MCC	ROC Area	PRC Area	Class
	0,778	0,600	0,700	0,778	0,737	0,189	0,789	0,847	yes
	0,400	0,222	0,500	0,400	0,444	0,189	0,789	0,738	no
Weighted Avg.	0,643	0,465	0,629	0,643	0,632	0,189	0,789	0,808	

FP Rate para la clase no

FP rate =
$$\frac{FP}{N} = \frac{2}{2+7} = 0,222$$

Ejemplo Precisión

=== Detailed Accuracy By Class ===

	TP Rate	FP Rate	Precision	Recall	F-Measure	MCC	ROC Area	PRC Area	Class
	0,778	0,600	0,700	0,778	0,737	0,189	0,789	0,847	yes
	0,400	0,222	0,500	0,400	0,444	0,189	0,789	0,738	no
Weighted Avg.	0,643	0,465	0,629	0,643	0,632	0,189	0,789	0,808	

Precisión para la clase yes

a b <-- classified as

$$TP = 72 \mid a = yes$$

 $FP = 32 \mid b = no$

Precision =
$$\frac{TP}{TP+FP} = \frac{7}{7+3} = 0,700$$

Ejemplo Precisión

=== Detailed Accuracy By Class ===

	TP Rate	FP Rate	Precision	Recall	F-Measure	MCC	ROC Area	PRC Area	Class
	0,778	0,600	0,700	0,778	0,737	0,189	0,789	0,847	yes
	0,400	0,222	0,500	0,400	0,444	0,189	0,789	0,738	no
Weighted Avg.		•							

Precisión para la clase no

Precision =
$$\frac{TP}{TP+FP} = \frac{2}{2+2} = 0,500$$

Ejemplo F-measure

=== Detailed Accuracy By Class ===

	TP Rate	FP Rate	Precision	Recall	F-Measure	MCC	ROC Area	PRC Area	Class
	0,778	0,600	0,700	0,778	0,737	0,189	0,789	0,847	yes
	0,400	0,222	0,500	0,400	0,444	0,189	0,789	0,738	no
Weighted Avg.	0,643	0,465	0,629	0,643	0,632	0,189	0,789	0,808	

F-measure para la clase yes

$$F measure = \frac{2 \cdot precision \cdot recall}{precision + recall}$$

$$F measure = \frac{2 \cdot 0,700 \cdot 0,778}{0,700 + 0,778} = 0,737$$

Ejemplo F-measure

=== Detailed Accuracy By Class ===

	TP Rate	FP Rate	Precision	Recall	F-Measure	MCC	ROC Area	PRC Area	Class
	0,778	0,600	0,700	0,778	0,737	0,189	0,789	0,847	yes
	0,400	0,222	0,500	0,400	0,444	0,189	0,789	0,738	no
Weighted Avg.	0,643	0,465	0,629	0,643	0,632	0,189	0,789	0,808	

F-measure para la clase no

$$F measure = \frac{2 \cdot precision \cdot recall}{precision + recall}$$

$$F measure = \frac{2 \cdot 0,500 \cdot 0,400}{0.500 + 0,400} = 0,444$$

Ejemplo Exactitud (accuracy)

```
=== Stratified cross-validation ===
=== Summarv ===
                                                        64.2857 %
Correctly Classified Instances
Incorrectly Classified Instances
                                                        35.7143 %
Kappa statistic
                                        0.186
Mean absolute error
                                        0.2857
                                       0.4818
Root mean squared error
Relative absolute error
Root relative squared error
                                 97.6586 %
Total Number of Instances
                                    14
```

Exactitud

accuracy =
$$\frac{TP+TN}{P+N} = \frac{7+2}{(7+2)+(2+3)} = 0,643$$

Ejemplo Tasa de Error

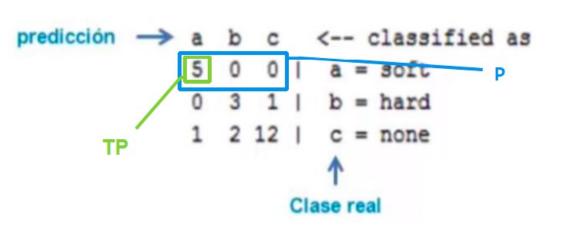
```
=== Stratified cross-validation ===
=== Summarv ===
Correctly Classified Instances
                                                          64.2857 %
Incorrectly Classified Instances
                                                         35.7143 %
Kappa statistic
                                         0.186
Mean absolute error
                                         0.2857
Root mean squared error
                                         0.4818
Relative absolute error
Root relative squared error
                                    97.6586 %
Total Number of Instances
                                        14
```

Tasa de error

Tasa error =
$$\frac{FP + FN}{P + N} = \frac{3 + 2}{(7 + 2) + (2 + 3)} = 0.357$$

Tasa error = 1 – accuracy

TP Rate



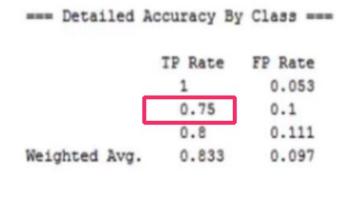
TP Rate FP Rate

1 0.053
0.75 0.1
0.8 0.111
Weighted Avg. 0.833 0.097

TP Rate para la clase soft

$$TP \ Rate = \frac{TP}{P} = \frac{5}{5} = 1$$

TP Rate



TP Rate para la clase hard

$$TP \ Rate = \frac{TP}{P} = \frac{3}{4} = 0.75$$

TP Rate

TP Rate FP Rate

1 0.053
0.75 0.1

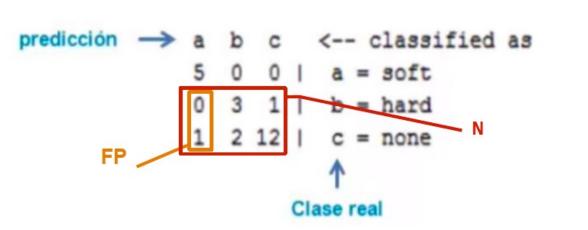
0.8 0.111

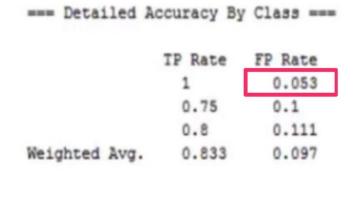
Weighted Avg. 0.833 0.097

TP Rate para la clase none

$$TP \ Rate = \frac{TP}{P} = \frac{12}{15} = 0.8$$

FP Rate





FP Rate para la clase soft

$$FP\ Rate = \frac{FP}{N} = \frac{0+1}{0+3+1+1+2+12} = \frac{1}{19} = 0.053$$

FP Rate

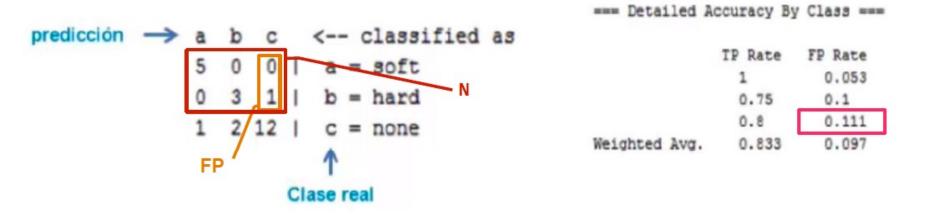
TP Rate FP Rate

1 0.053
0.75 0.1
0.8 0.111
Weighted Avg. 0.833 0.097

FP Rate para la clase hard

$$FP \ Rate = \frac{FP}{N} = \frac{0+2}{5+0+0+1+2+12} = \frac{2}{20} = 0.1$$

FP Rate



FP Rate para la clase none

$$FP \ Rate = \frac{FP}{N} = \frac{0+1}{5+0+0+0+3+1} = \frac{1}{9} = 0.111$$