#### Métricas en Aprendizaje Automático

Prof. Wilmer Pereira

#### Necesidad de las métricas

Son parámetros que permiten evaluar la tasa de aprendizaje o rendimiento de la clasificación o regresión. Para ello se usa el conjunto de prueba y se verifica el ajuste de la predicción  $\hat{y}$  contra la clasificación real y

Las métricas son similares a las funciones de pérdidas ... pero ... las funciones de pérdida se aplican durante la fase entrenamiento. En cambio, las métricas son sobre el conjunto de prueba una vez entrenado el modelo. Las métricas para las clasificaciones y las regresiones son independientes ...



Es necesario, tener diferentes tipos de métricas y Keras ofrece una amplia variedad

### Falsos positivos y falsos negativos

En el caso de la clasificación, para poder discriminar bien el aprendizaje obtenido, conviene separar la cantidad de ejemplos acertados y no acertados por clase.

#### Clase real

Clase predicha

	Clase	No Clase
Clase	Verdadero Positivo	Falso Positivo
No Clase	Falso Negativo	Verdadero Negativo

Oun falso positivo se considera como una falsa alarma, es decir, se clasificó como perteneciente a la clase sin serlo. En contraposición el falso negativo es que clasificó como no perteneciente a la clase cuando en realidad si lo era. El vocabulario proviene de la medicina, donde falso positivo es una falsa detección de la enfermedad y un falso negativo es la no detección de la enfermedad

Para simplificar usemos las siglas en inglés:

P: positivos reales del conjunto de prueba

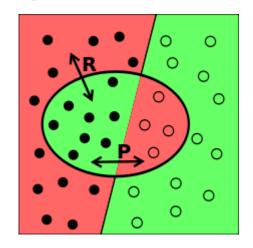
N: negativos reales del conjunto de prueba

TP: positivos bien clasificados

TN: negativos bien clasificados

FP: positivos mal clasificados

FN: negativos mal clasificados



A la matriz que cuenta todos los ejemplos y como fueron clasificados se le denomina **matriz de confusión** o tabla de contingencia. Por ejemplo

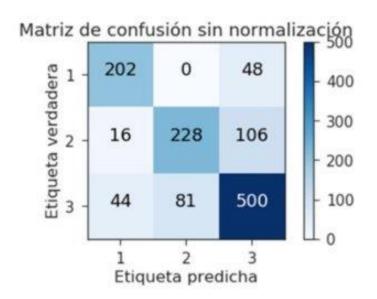
		Valor Predicho		
		Gato	Perro	Conejo
	Gato	5	3	0
Valor Real	Perro	2	3	1
	Conejo	0	2	11

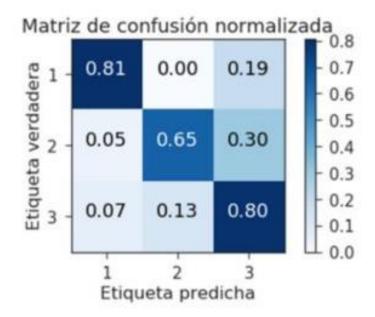
La técnica utilizada clasificó a los conejos de buena manera porque sólo se equivocó con dos ejemplos del conjunto de prueba

En cambio, perros y gatos no fueron tan bien clasificados y, un poco peor, perros

La diagonal son las clasificaciones correctas. El resto son las equivocaciones del clasificador sobre el conjunto de prueba.

### Ejemplos de matriz de confusión





P: positivos reales del conjunto de pruebaN: negativos reales del conjunto de prueba

TP: positivos bien clasificadosTN: negativos bien clasificadosFP: positivos mal clasificadosFN: negativos mal clasificados

La métrica para clasificadores más simple es el *accuracy* o exactitud que se obtiene como:

$$ACC = \frac{TP + TN}{P + N}$$

mide lo que se clasificó bien, conjuntamente con lo que pertenece o no a la clase ...

Es muy común usar sólo el *accuracy* (exactitud) pero tiene ciertos problemas con la clasificación. Por ejemplo, dada dos clases (A y B) y un conjunto de entrenamiento desbalanceado y compuesto por 98% de casos de la clase A y sólo 2% de casos de la clase B. Si forzamos a que siempre responda A, el *accuracy* es del 98%

... pero ...

En realidad, no hay ningún aprendizaje Es por ello que son importantes otras medidas

P: positivos reales del conjunto de prueba

N: negativos reales del conjunto de prueba

TP: positivos bien clasificados
 TN: negativos bien clasificados
 FP: positivos mal clasificados
 FN: negativos mal clasificados

$$Precision/Recall (PPV/TPR)$$
  $\rightarrow PPV = \frac{TP}{TP+FP}$  ,  $TPR = \frac{TP}{TP+FN}$ 

Sensivity/Especificity (TPR/TNR) 
$$\rightarrow$$
  $TPR = \frac{TP}{TP+FN}$ ,  $TNR = \frac{TN}{TN+FP}$ 

- O Precision o PPV (Positive Predictive Value) se puede parafrasear como: "la fracción de los ejemplos positivos que clasificó contra todos los que clasificó como positivos".
- O Recall, TPR (True Positive Rate) es: "la fracción de los ejemplos positivos que clasificó contra los reales positivos". Se traduce como **exhaustividad**

... por otro lado ...

- O Sensivity es también TPR y se puede parafrasear igual que la precisión lo importante es su relación con la especificidad ...
- O Especificity o TNR (*True Negative Rate*) es: "la proporción de negativos identificados correctamente contra el total de los negativos bien o mal".

Explicación de métricas

P: positivos reales del conjunto de prueba N: negativos reales del conjunto de prueba

TP: positivos bien clasificadosTN: negativos bien clasificadosFP: positivos mal clasificadosFN: negativos mal clasificados

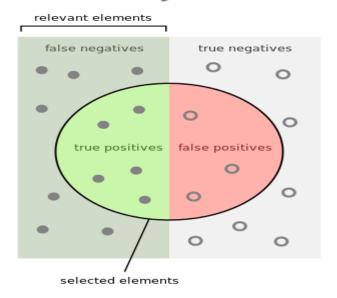
F1 es una métrica que combina, mediante la media armónica, la precisión (PPV) y la exhaustividad (TPR) para comparar el rendimiento

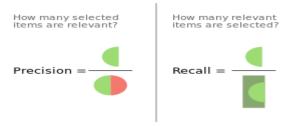
$$F1 = \frac{PPV \times TPR}{PPV + TPR}$$

El valor F1 asume que nos importa igual tanto la precisión como la exhaustividad ... sin embargo ... no siempre es el caso. Por ejemplo, cuando se necesita predecir si hay riesgo de que un trozo de basura espacial choque con un satélite, podemos valorar más la exhaustividad a riesgo de tener una peor precisión.

$$F2 = (1 + \beta^2) \frac{PPV \times TPR}{(\beta^2 \times PPV) + TPR}$$

Ejemplo de exactitud, precisión, exhaustividad y F1 con un ejemplo de marketing

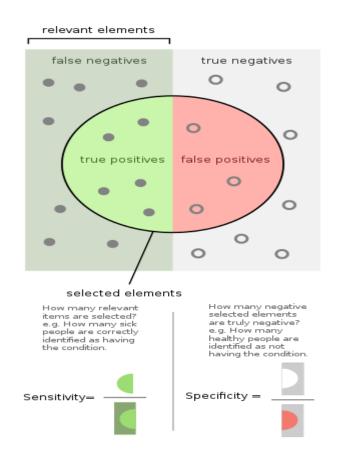




$$Precision = \frac{TP}{TP+FP}$$
 ,  $Recall = \frac{TP}{TP+FN}$ 

P: positivos reales del conjunto de pruebaN: negativos reales del conjunto de prueba

TP: positivos bien clasificadosTN: negativos bien clasificadosFP: positivos mal clasificadosFN: negativos mal clasificados



$$Sensivity = \frac{TP}{TP+FN}$$
,  $Especificity = \frac{TN}{TN+FP}$ 

P: positivos reales del conjunto de pruebaN: negativos reales del conjunto de prueba

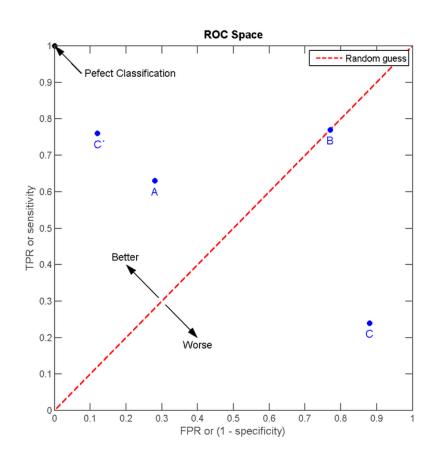
TP: positivos bien clasificadosTN: negativos bien clasificados

FP: positivos mal clasificados FN: negativos mal clasificados

		True condition				
	Total population	Condition positive	Condition negative	Prevalence = $\frac{\sum Condition positive}{\sum Total population}$	Accuracy (ACC) = $\frac{\Sigma \text{ True positive} + \Sigma \text{ True negative}}{\Sigma \text{ Total population}}$	
Predicted condition	Predicted condition positive	True positive	False positive, Type I error	Positive predictive value (PPV),  Precision = $\Sigma$ True positive $\Sigma$ Predicted condition positive	False discovery rate (FDR) = Σ False positive Σ Predicted condition positive	
	Predicted condition negative	False negative, Type II error	True negative	False omission rate (FOR) =  Σ False negative Σ Predicted condition negative	Negative predictive value (NPV) =  Σ True negative Σ Predicted condition negative	
		True positive rate (TPR), Recall, Sensitivity, probability of detection, Power $= \frac{\Sigma \text{ True positive}}{\Sigma \text{ Condition positive}}$	False positive rate (FPR), Fall-out, probability of false alarm $= \frac{\Sigma \text{ False positive}}{\Sigma \text{ Condition negative}}$	Positive likelihood ratio (LR+) = TPR	Diagnostic odds ratio (DOR) = LR+ LR-	F <sub>1</sub> score = 2 · Precision · Recall Precision + Recall
		False negative rate (FNR), Miss rate $= \frac{\Sigma \text{ False negative}}{\Sigma \text{ Condition positive}}$	$\begin{aligned} \text{Specificity (SPC), Selectivity, True negative} \\ \text{rate (TNR)} &= \frac{\sum \text{True negative}}{\sum \text{Condition negative}} \end{aligned}$	Negative likelihood ratio (LR-) = FNR TNR		

#### Tabla de ROC

Es una razón de la sensibilidad contra 1-especificidad para un clasificador, según se varía el umbral de discriminación



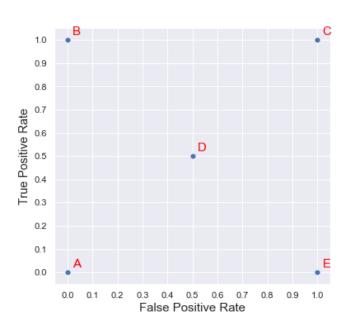
El mejor resultado sería en la esquina superior izquierda pues representaría 100% de sensibilidad (ningún falso negativo) y 100% de especificidad (ningún falso positivo)

La discriminación completamente aleatoria sería con un punto sobre la diagonal (por ejemplo, B)

En consecuencia, los puntos por debajo de la diagonal son pobre (peor que aleatorio) ...

Sin embargo, de un mal predictor se puede obtener uno bueno sólo invirtiéndolo ...

#### Tabla de ROC



Así como B sería el ideal, hay otras posibilidades como A (no detectaría positivo ningún negativo) pero no identificaría ninguna muestra positiva ...

El punto D significa que identificaría la mitad de las muestras positivas y negativas como erróneas y, sin duda, E es el peor caso ...

Cuando se desea ajustar un clasificador, se se obtienen varios puntos y por ello una curva del comportamiento del clasificador.

El área bajo la curva (AUC) se interpreta como la probabilidad de clasificar bien elementos que pertenecen a sus clases. Por ejemplo, la azul es mejor que la amarilla

