ACÁMICA

TEMA DEL DÍA

Evaluación de modelos

La evaluación de modelos es un aspecto **fundamental** en todo flujo de Data Science. Hoy aprenderemos algunos de los aspectos más importantes de este proceso.



Agenda

Daily

Explicación: métricas de evaluación

Break

Hands-on training

Para pensar.... Ejercicio en conjunto.

Cierre



Daily





Daily

Sincronizando...

Toolbox



¿Cómo te ha ido? ¿Obstáculos? ¿Cómo seguimos?

Challenge



¿Cómo te ha ido? ¿Obstáculos? ¿Cómo seguimos?



¿Cómo evaluar si mi modelo está aprendiendo?





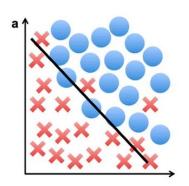
¿Cómo podemos evaluar si el modelo está aprendiendo o no de nuestros datos?¹

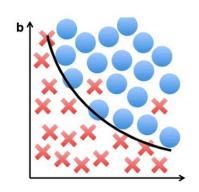
Una forma práctica de evaluar si nuestro modelo aprendió o no de nuestro datos es **observar su desempeño frente a nuevas instancias.**

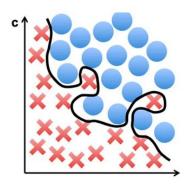
Pero, ¿por qué necesitamos nuevas instancias y no usamos, simplemente, las instancias que usamos para entrenar?



¹Podríamos preguntarnos también qué es aprender, pero por ahora vamos a ignorar esa pregunta.

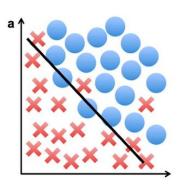


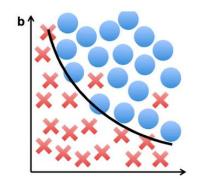


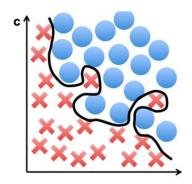


¿Qué modelo les parece mejor?

<u>Fuente de los gráficos</u>

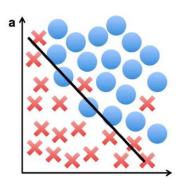




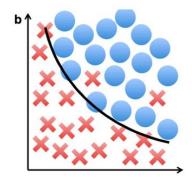


El **modelo a** es muy simple y no reproduce correctamente la frontera entre las clases. Llamaremos **underfitting** a esta situación.

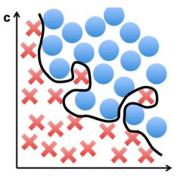
<u>Fuente de los gráficos</u>



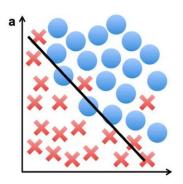
El **modelo a** es muy simple y no reproduce correctamente la frontera entre las clases. Llamaremos **underfitting** a esta situación.



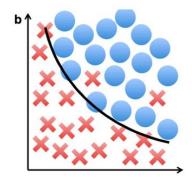
El modelo b tiene la complejidad suficiente para encontrar una frontera que parece apropiada para estos datos.



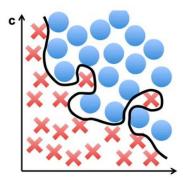
Fuente de los gráficos



El **modelo a** es muy simple y no reproduce correctamente la frontera entre las clases. Llamaremos **underfitting** a esta situación.



El modelo b tiene la complejidad suficiente para encontrar una frontera que parece apropiada para estos datos.



El modelo c parece muy flexible y se adaptó demasiado a los datos con los que fue entrenado. Llamaremos overfitting a esta situación.

Fuente de los gráficos



Entonces, podría ocurrir que el modelo se aprenda "de memoria" los datos con los que fue entrenado, por lo que es importante evaluarlo con datos que nunca vio.

Interviewer: What's your biggest strength?

Me: I'm an expert in machine learning.

Inteviewer: What's 6 + 10?

Me: Zero.

Interviewer: Nowhere near, it's 16.

Me: It's 16.

Interviewer: Ok... What's 10 + 20?

Me: It's 16.

Muchos modelos que utilizaremos son muy flexibles y, de esas dos situaciones, en general tendremos que preocuparnos más por el **Sobreajuste (Overfitting).***

^{*}Más adelante, también veremos técnicas más complejas para evaluar correctamente nuestros modelos y prevenir el Overfitting y el Underfitting

Parámetros

Hacen referencia a las variables que se ajustan automáticamente durante el proceso de entrenamiento. Esta es la parte en el que el modelo "aprende solo".

Hiperparámetros

Son valores que ajustamos y decidimos los/as Data Scientists.



Para pensar, ¿cómo controlar el overfitting y el underfitting en los árboles de decisión?

El principal parámetros que controla si "overfiteamos" o "underfiteamos" es la profundidad del árbol. Para evitar el overfitting, existen algunos métodos:

- Criterio de parada: no construir más allá de cierta profundidad. Ésta es una de las reglas más usadas.
- Poda: construir el árbol entero. Podar las ramas cuando ello mejore la performance sobre datos separados
- Y más...

¿Cómo entreno un modelo?





¿Cómo entreno un modelo?

En nuestro flujo de trabajo, tendremos que emular una situación donde el modelo es entrenado con ciertos datos y luego es evaluado con datos nuevos.

¡Hacerlo es muy sencillo! Antes de entrenar un modelo...

- 1. Separo una porción de los datos
- 2. Evalúo el desempeño del modelo sobre esos datos.

En general, los datos se separan al azar para evitar cualquier orden o estructura subyacente en los datos¹.

¹En algunos problemas, por ejemplo cuando queremos entrenar un modelo que haga predicciones a futuro, esto no es válido.

En Scikit-Learn

¡Esta función es tan importante que viene en todos los entornos de desarrollo de Machine Learning!

En Scikit-Learn, la función se llama train_test_split.

```
sklearn.model_selection.train_test_split

sklearn.model_selection. train_test_split (*arrays, **options)
[source]
```



Métricas de evaluación para Clasificación





¿Cómo evaluamos los resultados de una clasificación?

¿Cómo evaluamos los resultados de una clasificación?

Exactitud

Matriz de Confusión

Precisión/Exhaustividad

F-Score

Problema general: separar los elementos de un conjunto en **dos grupos** bajo cierta/s regla/s de clasificación.

Problema general: separar los elementos de un conjunto en **dos grupos** bajo cierta/s regla/s de clasificación.

Ejemplos:



Examen médico

Enfermo / No enfermo
Test de embarazo



Educación

Aprobado / No aprobado



Bromatología

Apto / No apto para consumo



Control calidad

Seguro / No seguro

En general, nos interesa un grupo en particular.

¿Qué puede pasar con un test? (ejemplo: test de embarazo)

¿Qué puede pasar con un test? (ejemplo: test de embarazo)

Verdadero positivo (acierto)

test positivo, paciente embarazada

Verdadero negativo (acierto)

test negativo, paciente no embarazada

¿Qué puede pasar con un test? (ejemplo: test de embarazo)

Verdadero positivo (acierto) test positivo, paciente embarazada

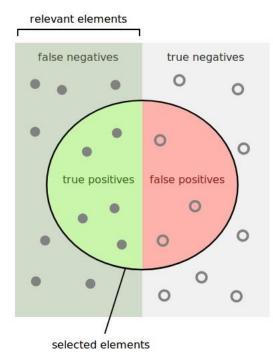
Verdadero negativo (acierto) test negativo, paciente no embarazada

Falso positivo (error tipo 1) test positivo, paciente no embarazada

Falso negativo (error tipo 2) test negativo, paciente embarazada

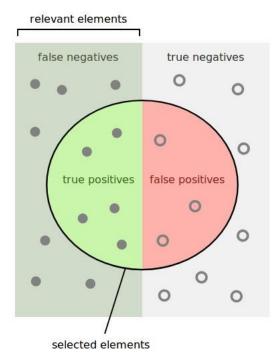


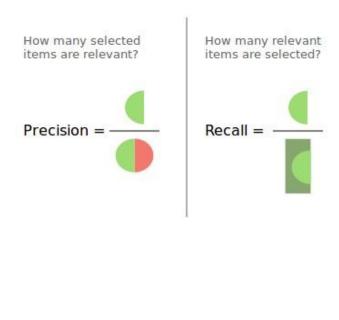
Cuando hacemos muchos tests...



<u>Fuente: Wikipedia</u>

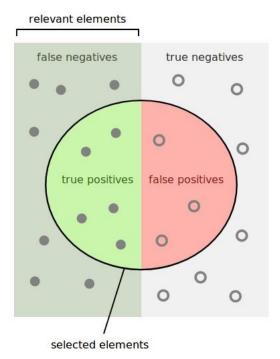
Cuando hacemos muchos tests...

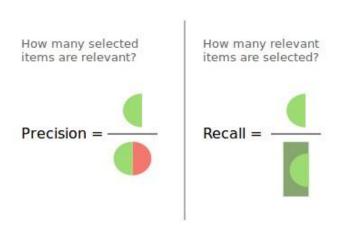




Fuente: Wikipedia

Cuando hacemos muchos tests...

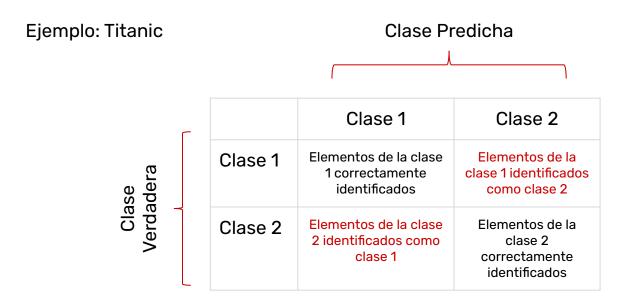


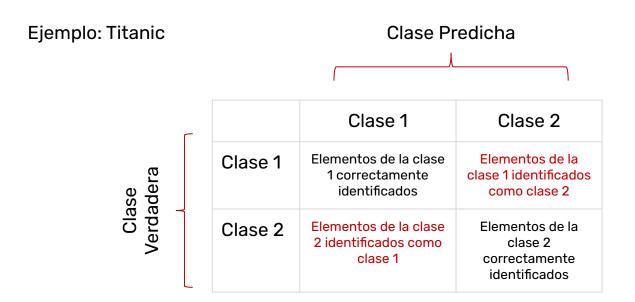


$$Precisi\'on = \frac{Aciertos}{Aciertos + Falsos Positivos}$$

$$Exhaustividad = \frac{Aciertos}{Aciertos + Falsos Negativos}$$

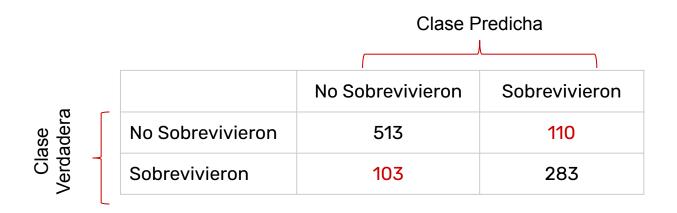
Fuente: Wikipedia





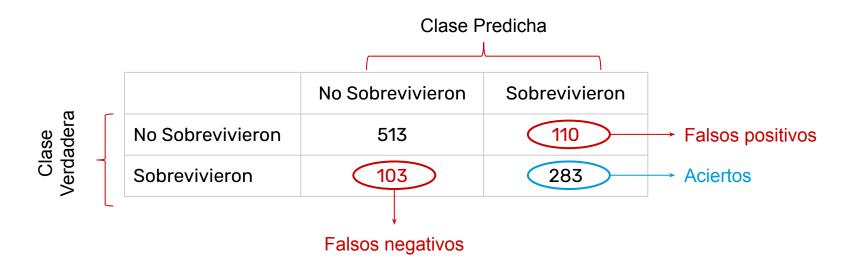
¡Tiene toda la información que necesitamos!

Ejemplo: Titanic



Ejercicio: para la clase "sobrevivieron", indicar Aciertos, Falsos Positivos, Falsos Negativos. Calcular Precisión y Exhaustividad.

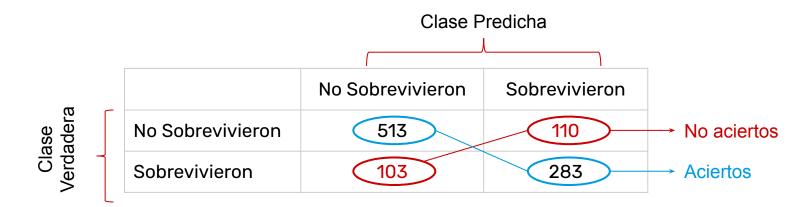
Ejemplo: Titanic



Precisión: TP/(TP + FP) = 283/(283+110) = 0.72

Exhaustividad: TP/(TP + FN) = 283/(283+103) = 0.73

Ejemplo: Titanic



Exactitud = Aciertos/Total = (513 + 283)/(513 + 283 + 110 + 103) = 0.789

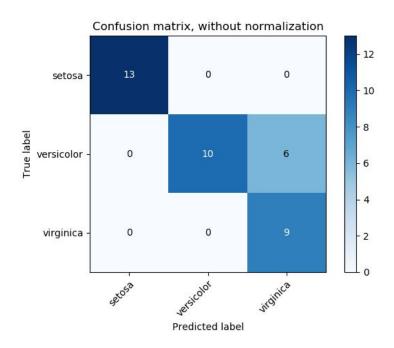
Clasificación Multiclase

¿Cómo se generalizan los conceptos?

Acierto, Verdaderos Negativo, Falsos Positivos y Negativos: tengo que elegir una clase de interés.

Precisión y Exhaustividad: ídem, por clase.

Exactitud: Sigue valiendo

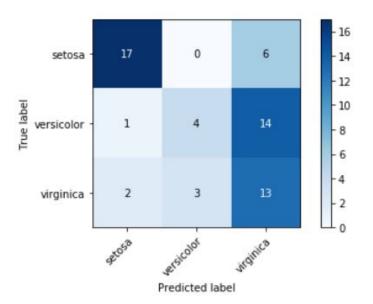


Clasificación Multiclase

Ejercicio

Dada la siguiente Matriz de Confusión:

- Elegir una clase e indicar Aciertos, Falsos
 Positivos, Falsos Negativos para esa clase.
- Calcular Precisión y Exhaustividad para la clase elegida.
- Calcular F-Score para la clase elegida
- Calcular la exactitud del modelo.



Clasificación Multiclase · Comentarios

Elegir la métrica correcta para nuestro problema es parte del trabajo que un Data Scientist tiene que hacer. A veces querremos favorecer precisión, otras veces exhaustividad.

¿En qué circunstancias les parece que preferimos una sobre otra?

Más adelante veremos:

- Curva ROC y área bajo la curva
- Funciones de costo

En scikit-learn:

https://scikit-learn.org/stable/modules/classes.html#sklearn-metrics-metrics



Hands-on training





Hands-on training

DS_Toolbox_13_Evaluación.ipynb





Para pensar... proponer un test 100% exhaustivo y otro 100% preciso. ¿Son útiles estos tests?

Para pensar...

...proponer un test 100% exhaustivo y otro 100% preciso. ¿Son útiles estos tests?

Problema: ninguna por sí sola alcanza para evaluar el desempeño del test, ya que precisión y exhaustividad compiten entre sí.

Objetivo: encontrar un compromiso entre ambas métricas.

Para pensar...

...proponer un test 100% exhaustivo y otro 100% preciso. ¿Son útiles estos tests?

Problema: ninguna por sí sola alcanza para evaluar el desempeño del test, ya que precisión y exhaustividad compiten entre sí.

Objetivo: encontrar un compromiso entre ambas métricas.

F-SCORE
$$\longrightarrow$$
 $F = 2 \times \frac{precisión \times exhaustividad}{precisión + exhaustividad}$

Recursos





Evaluación de modelos

- <u>Python Data Science Handbook</u> Capítulo 5, "Machine Learning", sección "<u>Hyperparameters and Model Validation"</u>. Adelanta algunos conceptos que veremos en el segundo Sprint, como Validación Cruzada, y utiliza una terminología levemente distinta, pero es una introducción muy comprendisble. La recomendamos mucho.
- The Data Science Design Manual, de Steven Skienna.

Estado de tu proyecto Primer Modelo de Machine Learning





Proyecto:

Primer Modelo de Machine Learning



Estado del proyecto

Identifica el estado de avance de tu proyecto. Te será muy útil saberlo para poder esquematizar tu trabajo en las próximas semanas y entregar a tiempo.

Puedes estimar tu grado de avance de la siguiente manera:

Grupo 25%: Recién estoy comenzando

Grupo 50%: He avanzado pero aún me falta

Grupo 75%: Estoy muy avanzado

Grupo 100%: He finalizado el proyecto

Para la próxima

- Termina el notebook de hoy.
- Lee la Toolbox 14 y carga las dudas que tengas al Trello.

ACAMICA