



CLASIFICACIÓN

APRENDIZAJE DE MAQUINA I - CEIA - FIUBA

Dr. Ing. Facundo Adrián Lucianna

REPASO CLASE ANTERIOR

- Tipos de variables y variables dummy
- Análisis de regresión
 - Regresión lineal simple y multiple
 - Regresión polinómica
 - Métricas de evaluación
- Construcción de un modelo

REPASO CLASE ANTERIOR

- Tipos de variables y variables dummy
- Análisis de regresión
 - Regresión lineal simple y multiple
 - Regresión polinómica
 - Métricas de evaluación
- Construcción de un modelo

TIPOS DE VARIABLES

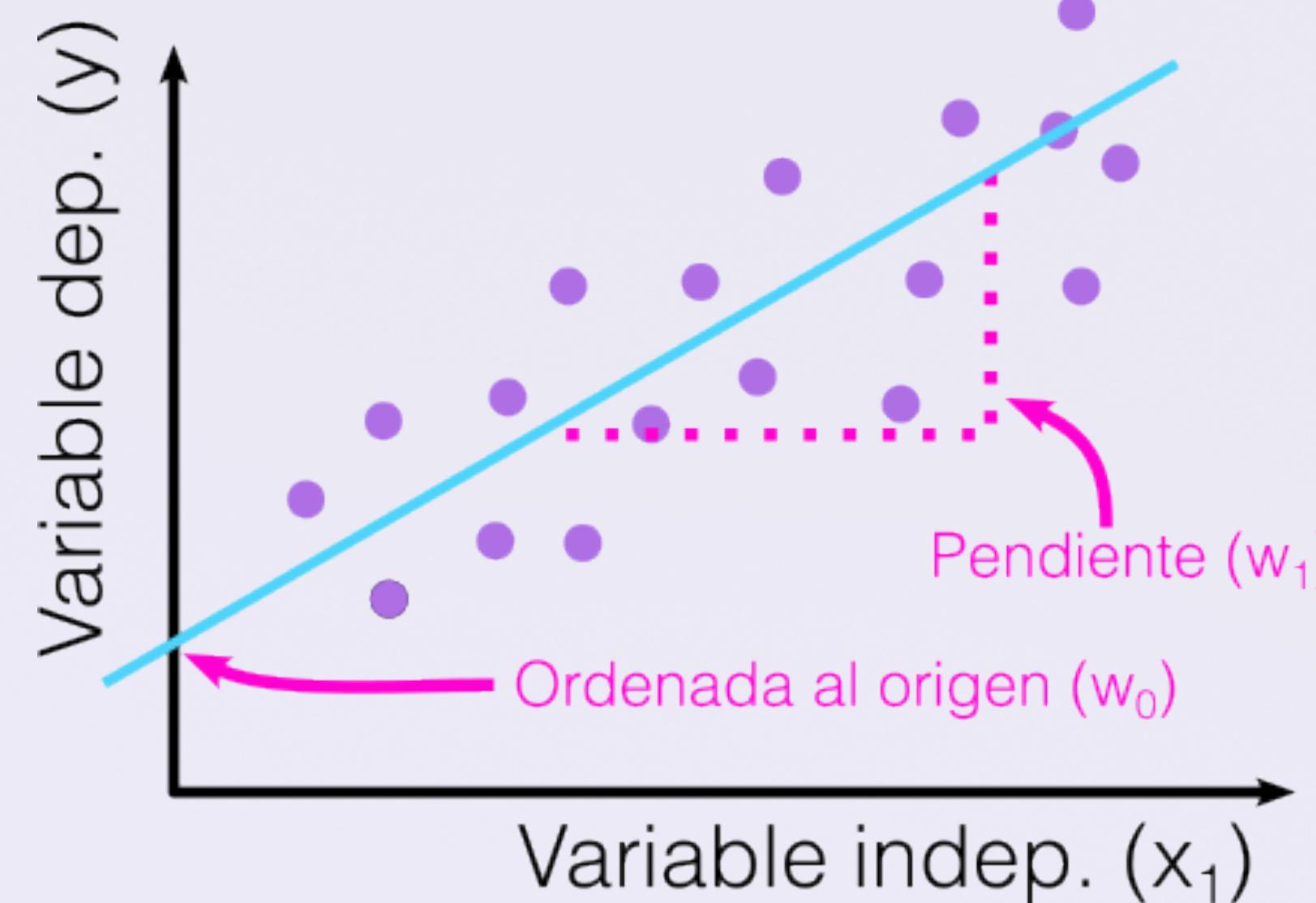
Una parte importante, es identificar el tipo de variable



REGRESIÓN

Se centra en estudiar las relaciones entre una variable dependiente de una o más variables independientes.

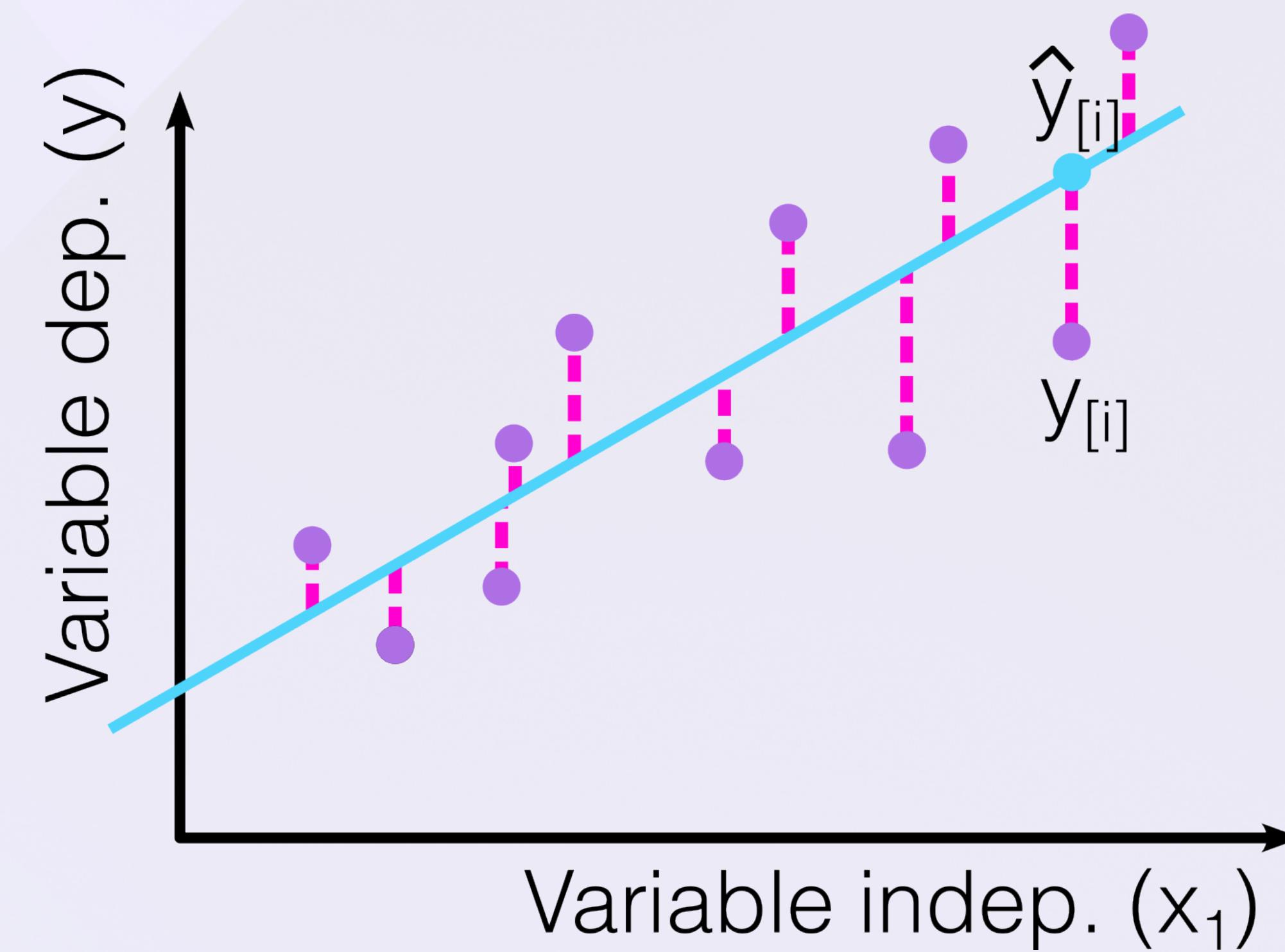
$$y(x_1) = w_0 + w_1 x_1$$



$$y(\hat{x}) = w_0 + w_1 x_1 + \dots + w_d x_d$$

REGRESIÓN LINEAL

Buscamos minimizar el valor de los **residuos**. Para lograr esto, lo hacemos minimizando la suma de los cuadrados de los residuos



MÉTRICAS DE EVALUACIÓN

- El coeficiente de Pearson (R^2)

- Error absoluto medio $MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} |y_{[i]} - \hat{y}_{[i]}|$

- Error cuadrático medio $MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} (y_{[i]} - \hat{y}_{[i]})^2$

- Error absoluto porcentual medio $MAPE = \frac{100\%}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \left| \frac{y_{[i]} - \hat{y}_{[i]}}{y_{[i]}} \right|$

- Error porcentual medio $MPE = \frac{100\%}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{y_{[i]} - \hat{y}_{[i]}}{y_{[i]}} \right)$

CLASIFICACIÓN

CLASIFICACIÓN

Es mas común encontrarnos con problema de clasificación que de regresión:

- Una persona llega a una guardia con un set de síntomas atribuidos a una de tres condiciones medicas.
- Un servicio de banca online debe determinar si una transacción en el sitio es fraudulenta o no, usando como base la dirección IP, historia de transacciones, etc.
- En base a la secuencia de ADN de un numero de pacientes con y sin una enfermedad dada, un genetista debe determinar que mutaciones de ADN genera un efecto nocivo relacionado a la enfermedad o no.

CLASIFICACIÓN

Regresión y clasificación son problemas muy similares entre sí. En ambos buscamos predecir una variable, la diferencia radica en que **regresión** predice una variable **numérica** y **clasificación** una **categórica**.

Por qué no usar regresión para predecir respuesta cualitativas?

Si usamos el ejemplo de los pacientes que llegan a la guardia, supongamos que hay tres diagnosticos:

- ACV
- Sobredosis
- Ataques epilépticos

CLASIFICACIÓN

Realizamos la siguiente codificación

- ACV: 1
- Sobredosis: 2
- Ataques epilépticos: 3

Aplicamos un modelo de regresión lineal para predecir en base a los predicadores del paciente.

El problema con esto es que la codificación implica un orden en los resultados, poniendo a **sobredosis** entre **ACV** y **ataques epilépticos**, y ademas que la distancia entre **ACV** y **sobredosis** es la misma que **sobredosis** y **ataques epilépticos**.

CLASIFICACIÓN

Pero tranquilamente podríamos haber elegido:

- Ataques epilépticos: 1
- ACV: 2
- Sobredosis: 3

Esto nos da una relación totalmente diferente.

Cada una de estas codificaciones produciría modelos lineales diferentes que, en última instancia, conducirían a diferentes conjuntos de predicciones sobre observaciones de prueba.

CLASIFICACIÓN

Si el target es una variable categórica ordinal, hay el orden tiene sentido y está en un gris la elección de valores posibles modelos de clasificación y regresión.

Es más, un caso de respuesta booleanas, por ejemplo, si una persona tiene ACV (igual a 1) o no (igual a 0), podemos lograr mostrar que un modelo de regresión lineal es de hecho una estimación de la probabilidad de tener ACV dado un conjunto de entradas

$$p(\text{ACV} = 1|X) = w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + \dots + w_nx_n$$



REGRESIÓN LOGÍSTICA

REGRESIÓN LOGÍSTICA

Lo que buscamos modelar en regresión logística no es el label **Y**, sino la probabilidad de que **Y** pertenezca a una clase en particular.

$$P(Y = k \mid \hat{X})$$

En un clasificación multiclase k puede ser $0, 1, 2, \dots$ (También podría ser cualquier cosa “perro”, “gato”, “zebra”).

En el caso de clasificación de dos clases:

$$P(Y = 0 \mid \hat{X})$$

$$P(Y = 1 \mid \hat{X})$$

REGRESIÓN LOGISTICA

Pero ademas, en el caso de dos clases:

$$P(Y = 1 | \hat{X}) = 1 - P(Y = 0 | \hat{X})$$

Por lo que podemos simplificar la notación:

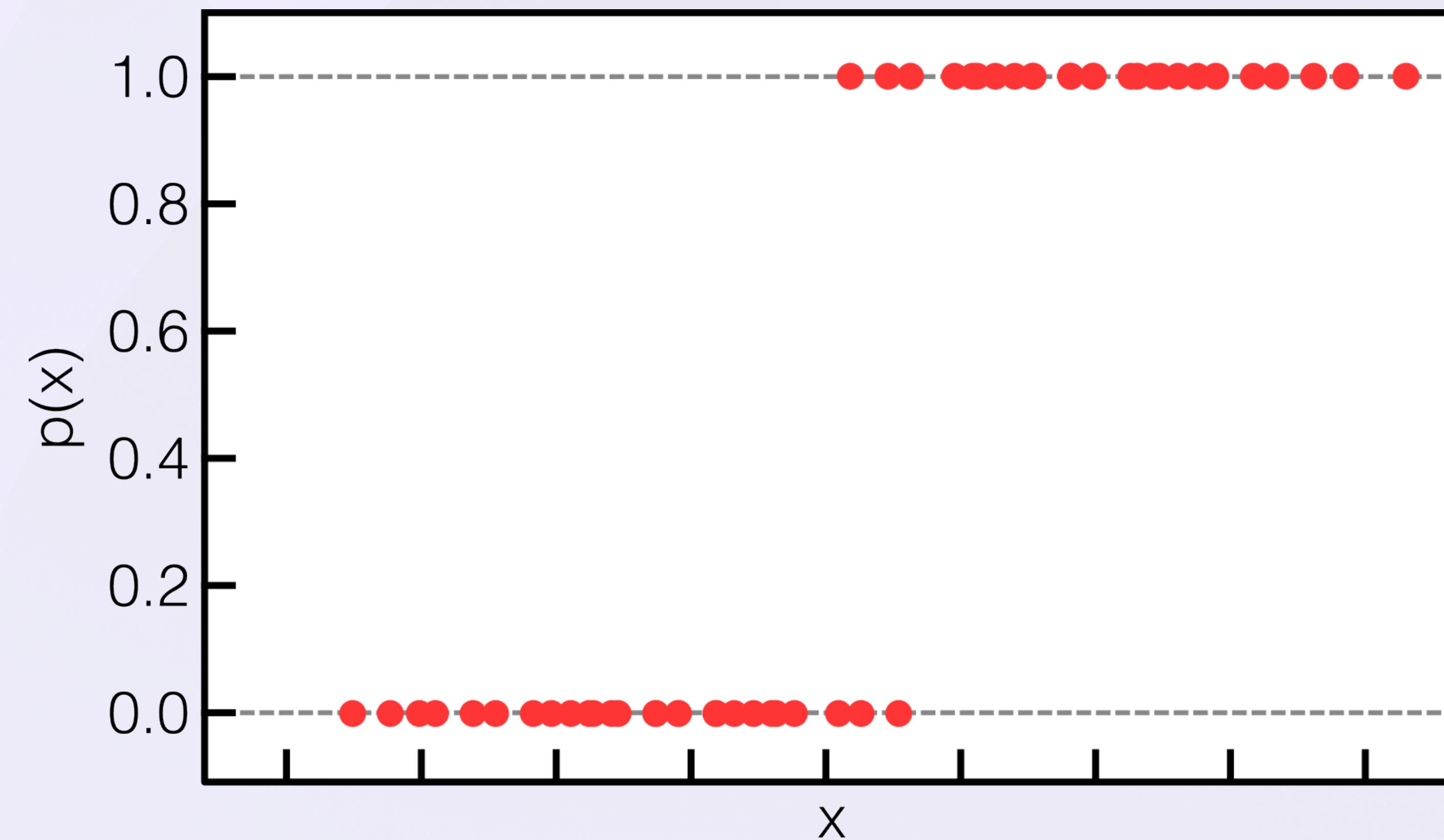
$$P(Y = 1 | \hat{X}) = p(\hat{X})$$

Las probabilidades son valores que van entre 1 y 0.

Además, la hagamos mas simple, el caso de una sola feature: $p(x)$

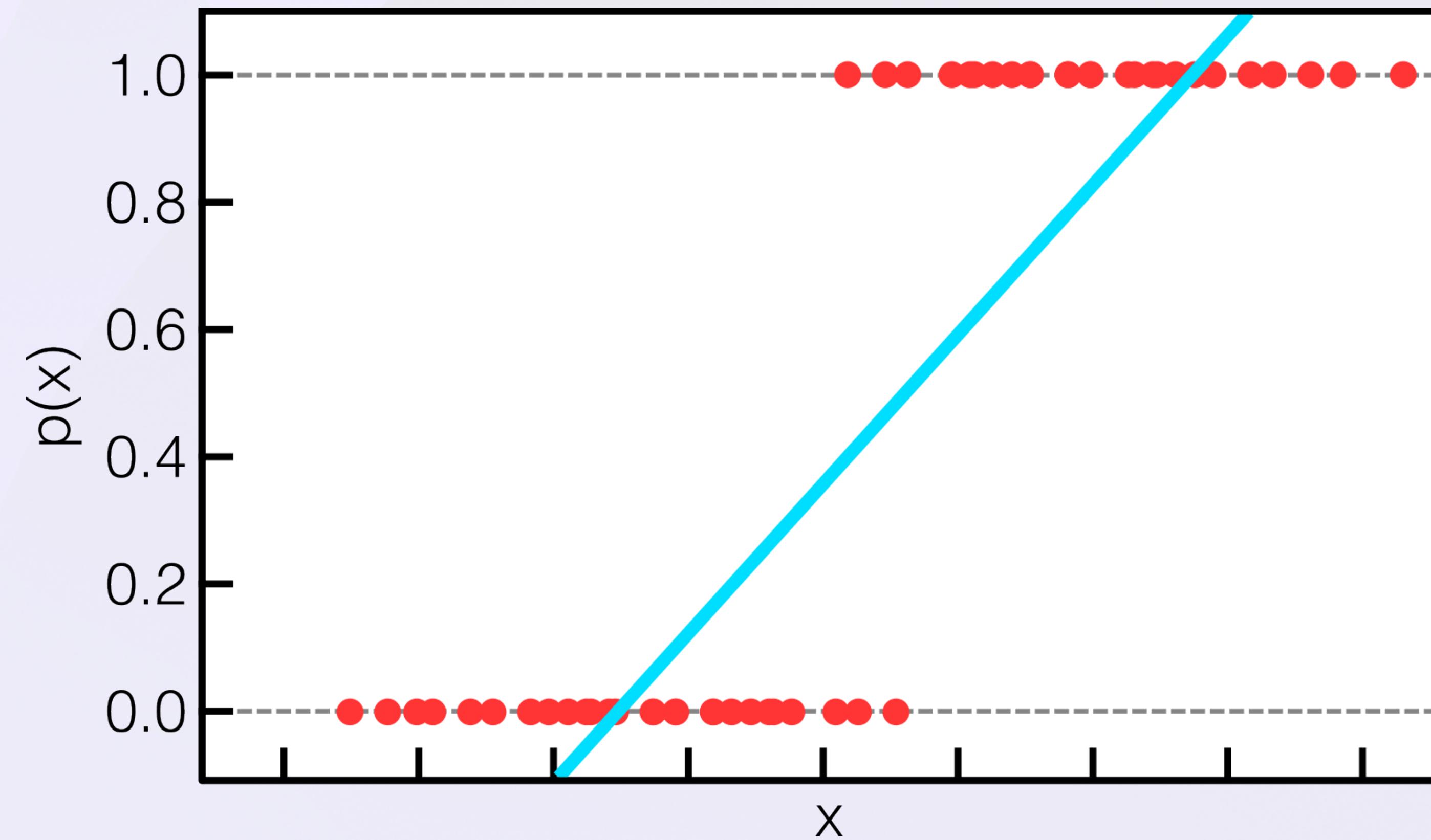
REGRESIÓN LOGISTICA

En un dataset, ya tenemos la probabilidad a la que pertenece. Es 1 en la clase que le pertenece.



REGRESIÓN LOGISTICA

Podemos usar una regresión lineal para estimar la probabilidad $p(x) = w_0 + w_1x$



REGRESIÓN LOGISTICA

En la gráfica se observa el problema de predecir usando regresión lineal. Dada la naturaleza de la función, hay valores en donde se obtienen $p(x) < 0$, o $p(x) > 1$. Esto va a ocurrir con cualquier regresión que de valores por fuera a 0 y 1.

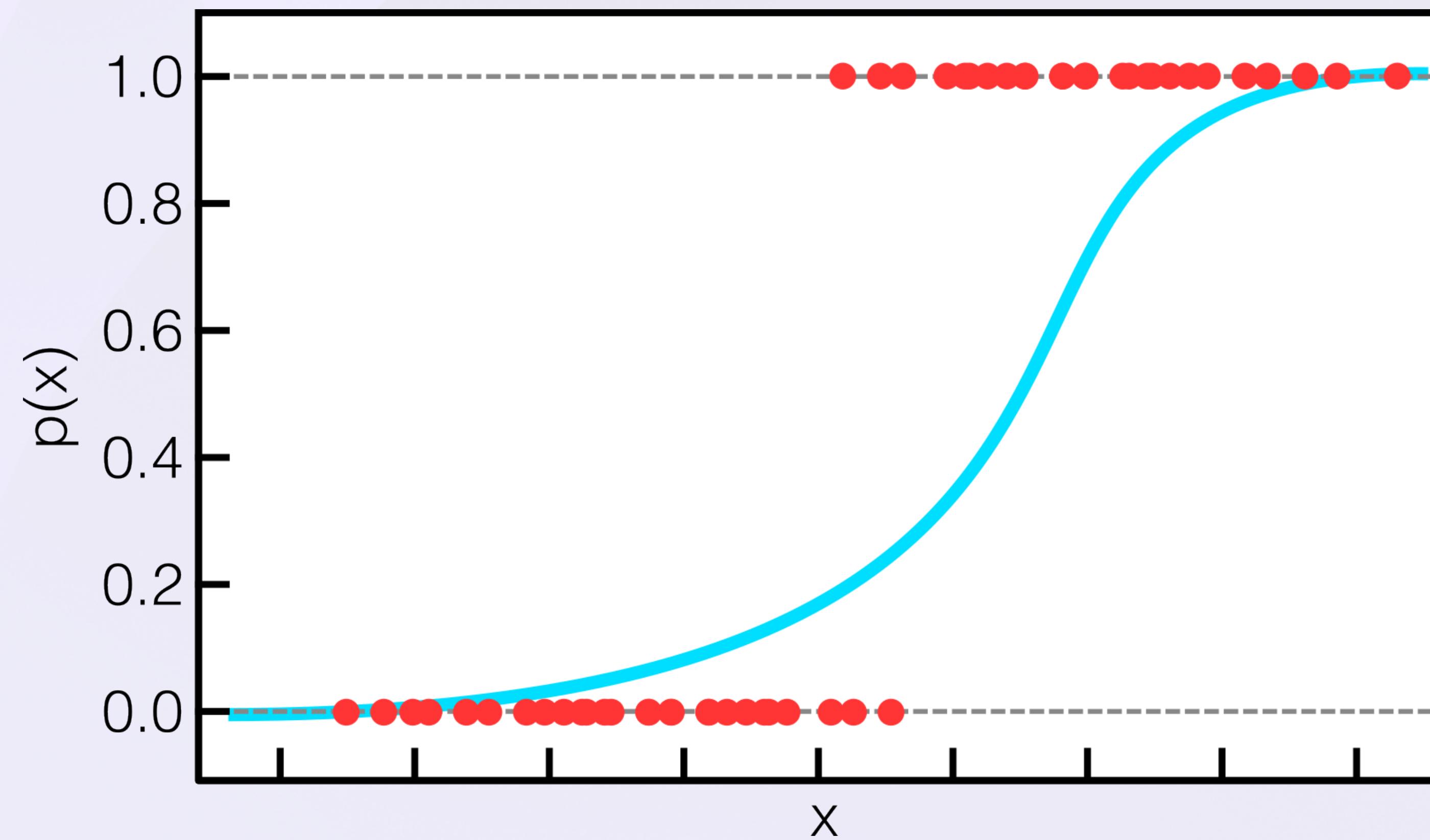
Para evitar este problema, se debe modelar a $p(x)$ usando una función que nos asegure que siempre tendremos valores entre 0 y 1.

En **regresión logística**, esto lo resolvemos usando una función sigmoide:

$$p(x) = \frac{e^{w_0 + w_1 x_1}}{1 + e^{w_0 + w_1 x_1}}$$

REGRESIÓN LOGISTICA

Lo que visualmente se observa:



REGRESIÓN LOGISTICA

Esta regresión siempre va a formar una curva con forma sigmoidea. E independientemente del valor de x, siempre estará contenido entre 0 y 1.

Si manipulamos a $p(x) = \frac{e^{w_0+w_1x_1}}{1 + e^{w_0+w_1x_1}}$, llegamos a:

$$\frac{p(x)}{1 - p(x)} = e^{w_0+w_1x_1}$$

El cual es la chance (o en inglés odds), es la proporción entre dos probabilidades complementarias. Estos valores pueden tomar desde 0 a infinito.

Para entender, en una semana la probabilidad de ser sábado es 1/7, pero la chance es 1/6, es decir **6 a 1** de que no sea sábado.

REGRESIÓN LOGISTICA

Si aplicamos el logaritmo de ambos lados:

$$\ln \left(\frac{p(x)}{1 - p(x)} \right) = w_0 + w_1 x_1$$

Que es la función **logit**. En la regresión logística, es una relación lineal.

Esto nos permite que ver que incremento de una unidad de x_1 , cambia el logit en w_1 unidades. Equivalentemente multiplica la chance en e^{w_1} .

Pero, la cantidad de $p(x)$ al aumentar x_1 en una unidad, al no ser lineal, depende del valor actual de x_1 .

REGRESIÓN LOGISTICA - AJUSTE

Para buscar los coeficientes (w_0 y w_1), es decir entrenar, lo hacemos con un método llamado estimación por **máxima verosimilitud**.

La básica intuición detrás de la máxima verosimilitud es que buscamos estimaciones para w_0 y w_1 tales que la probabilidad prevista $p(x_i)$ de cada caso, utilizando $p(x) = \frac{e^{w_0+w_1x_1}}{1 + e^{w_0+w_1x_1}}$, corresponda lo más cerca posible al estado observado.

En otras palabras, tratamos de encontrar w_0 y w_1 tales que al conectar estas estimaciones se obtenga un número cercano a uno para la clase positiva, y lo mas cercano a 0 para la clase negativa.

REGRESIÓN LOGISTICA - AJUSTE

Matemáticamente la **función de verosimilitud** es:

$$\ell(w_0, w_1) = \prod_{i:y_i=1} p(x_i) \prod_{j:y_j=0} (1 - p(x_j))$$

Y buscamos encontrar los valores de w_0 y w_1 que hacen el valor máximo de esta función.

REGRESIÓN LOGISTICA MULTIPLE

Igual que la regresión lineal, podemos tener más de una variable:

$$\ln \left(\frac{p(\hat{X})}{1 - p(\hat{X})} \right) = w_0 + w_1x_1 + \dots + w_nx_n$$

$$p(\hat{X}) = \frac{e^{w_0 + w_1x_1 + \dots + w_nx_n}}{1 + e^{w_0 + w_1x_1 + \dots + w_nx_n}}$$

Y el ajuste es exactamente igual, usando **máxima verosimilitud**.

The background features a minimalist design with abstract, wavy shapes in shades of purple and dark blue. These shapes are layered and overlap, creating a sense of depth and movement across the entire frame.

VAMOS A PRÁCTICAR UN POCO...



MÉTRICAS DE EVALUACIÓN

MÉTRICAS DE EVALUACIÓN

Ahora como clasificamos? Dado a que tenemos una probabilidad, por lo que por el momento elijamos el valor **naive**. Es decir, es 1 si $P(x) > 0.5$, 0 en caso contrario.

Y como medimos al clasificador?

Una forma es obteniendo el **porcentaje de clasificaciones correctas**. Aunque es buena información, deja afuera algunas consideraciones, tales como que clase se equivoco más.

Esto lo podemos ver con la **matriz de confusión**.

MATRIZ DE CONFUSIÓN

		Valores actuales	
		1	0
Predicción	1	Verdadero positivo (TP)	Falso positivo (FP)
	0	Falso negativo (FN)	Verdadero negativo (TN)

MATRIZ DE CONFUSIÓN

- **Verdadero positivo:** Es aquellas observaciones que clasificamos como 1 y que realmente eran 1.
- **Verdadero negativo:** Es aquellas observaciones que clasificamos como 0 y que realmente eran 0.
- **Falso positivo:** Es aquellas observaciones que clasificamos como 1 y que realmente eran 0. Este tipo de error se llaman de **tipo I**.
- **Falso negativo:** Es aquellas observaciones que clasificamos como 0 y que realmente eran 1. Este tipo de error se llaman de **tipo II**.

MATRIZ DE CONFUSIÓN

El desempeño específico de clase también es importante en medicina y biología, donde los términos **sensibilidad** y **especificidad** caracterizan el desempeño de un clasificador o prueba de detección.

- **Sensibilidad:** $TPR = \frac{TP}{P} = \frac{TP}{TP + FN} = 1 - FNR$
- **Especificidad:** $TNR = \frac{TN}{N} = \frac{TN}{TN + FP} = 1 - FPR$

La métrica del rendimiento general se llama **exactitud**:

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

MATRIZ DE CONFUSIÓN

Un problema de las metricas que principalmente la exactitud es sensible es el desbalance de clases:

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

Si tenemos mucho mas de una que la otra, una clase tendrá mas peso que la otra, dominando las métricas. Por lo que hay métricas que buscan compensar esto:

- **Exactitud balanceada:** $BA = \frac{TPR + TNR}{2}$

MATRIZ DE CONFUSIÓN

Otras dos métricas importantes son precisión y recuperación, y que tiene mas importancia cuando la clase positiva es la que nos importa (clasificación booleana)

- **Precisión:** Es la fracción de clases positivas correctamente predichas de las que el modelo dijo que eran positivas

$$\text{Precision} = \frac{TP}{TP + FP}$$

- **Recuperación:** Es la fracción de clases positivas que el modelo predijo que eran verdadero sobre el total de las verdaderas.

$$\text{Recall} = \frac{TP}{TP + FN}$$

Es decir, la recuperación nos dice cuanta clases positivas, el modelo pudo obtener. Y precisión es de los elementos traídos por el modelo son relevantes.

MATRIZ DE CONFUSIÓN

Que es mejor tener **precisión o recuperación?**

Podemos usar una sola métrica que pese uno u otro en función de que queremos. Si queremos medir un score que nos encuentre modelos que balanceen ambos tenemos el F₁-score:

$$F_1 = 2 \frac{\text{precision} \cdot \text{recall}}{\text{precision} + \text{recall}} = \frac{2TP}{2TP + FP + FN}$$

Pero podemos elegir un score que le de prioridad uno u otro:

$$F_\beta = (1 + \beta^2) \frac{\text{precision} \cdot \text{recall}}{(\beta^2 \cdot \text{precision}) + \text{recall}}$$

Si $0 < \beta < 1$, recuperación es mas prioritario, $\beta > 1$, precisión es más pesado.



CURVA ROC

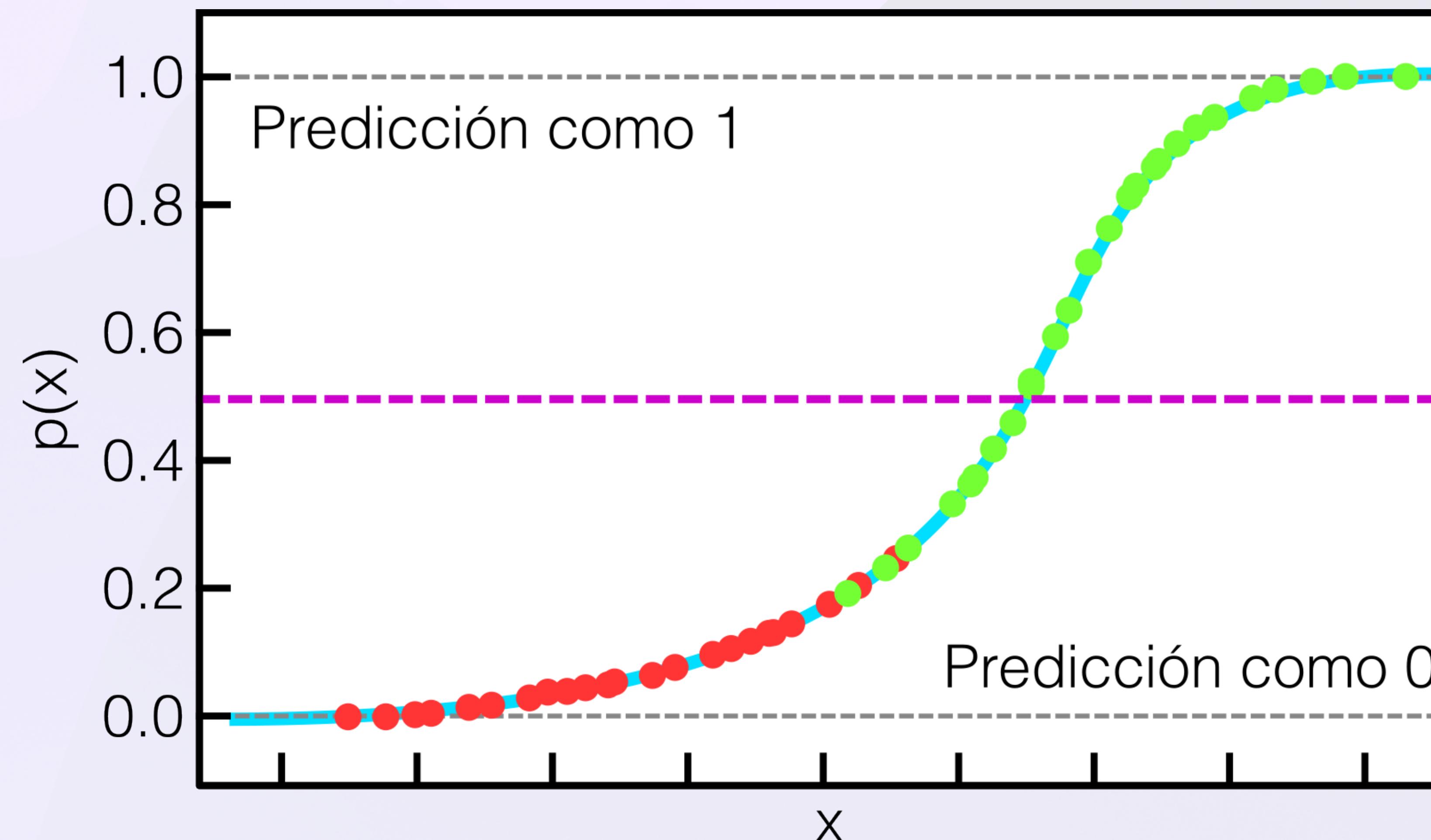
CURVA ROC

Todas estas métricas son decididas en función de la elección de umbral elegido en 0.5.

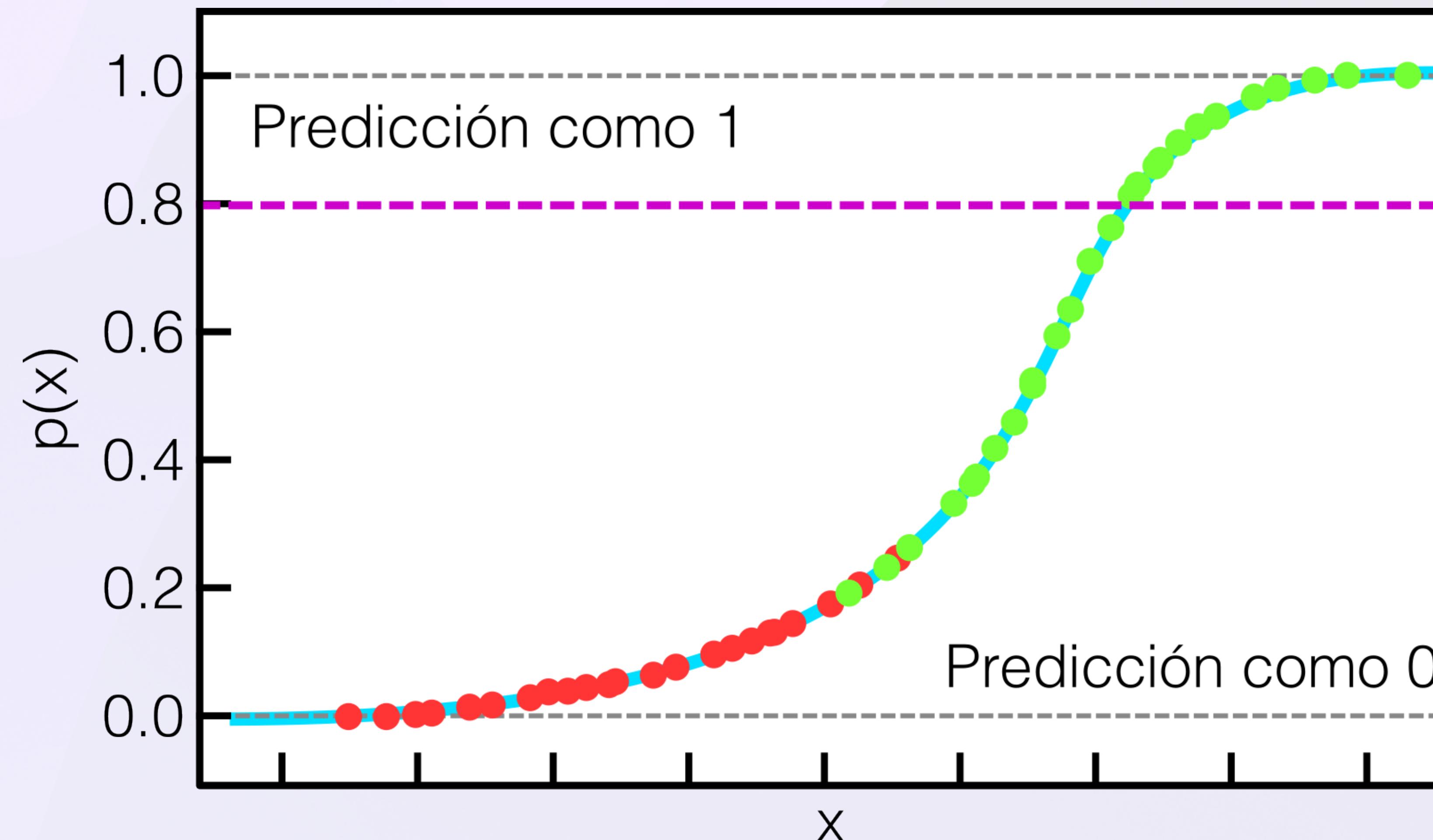
Pero una pregunta es, porque elegimos ese valor?

Nos basamos en la idea de que el modelo nos da un valor de probabilidad. Pero nada impide de que el umbral pueda ser definido en diferentes valores.

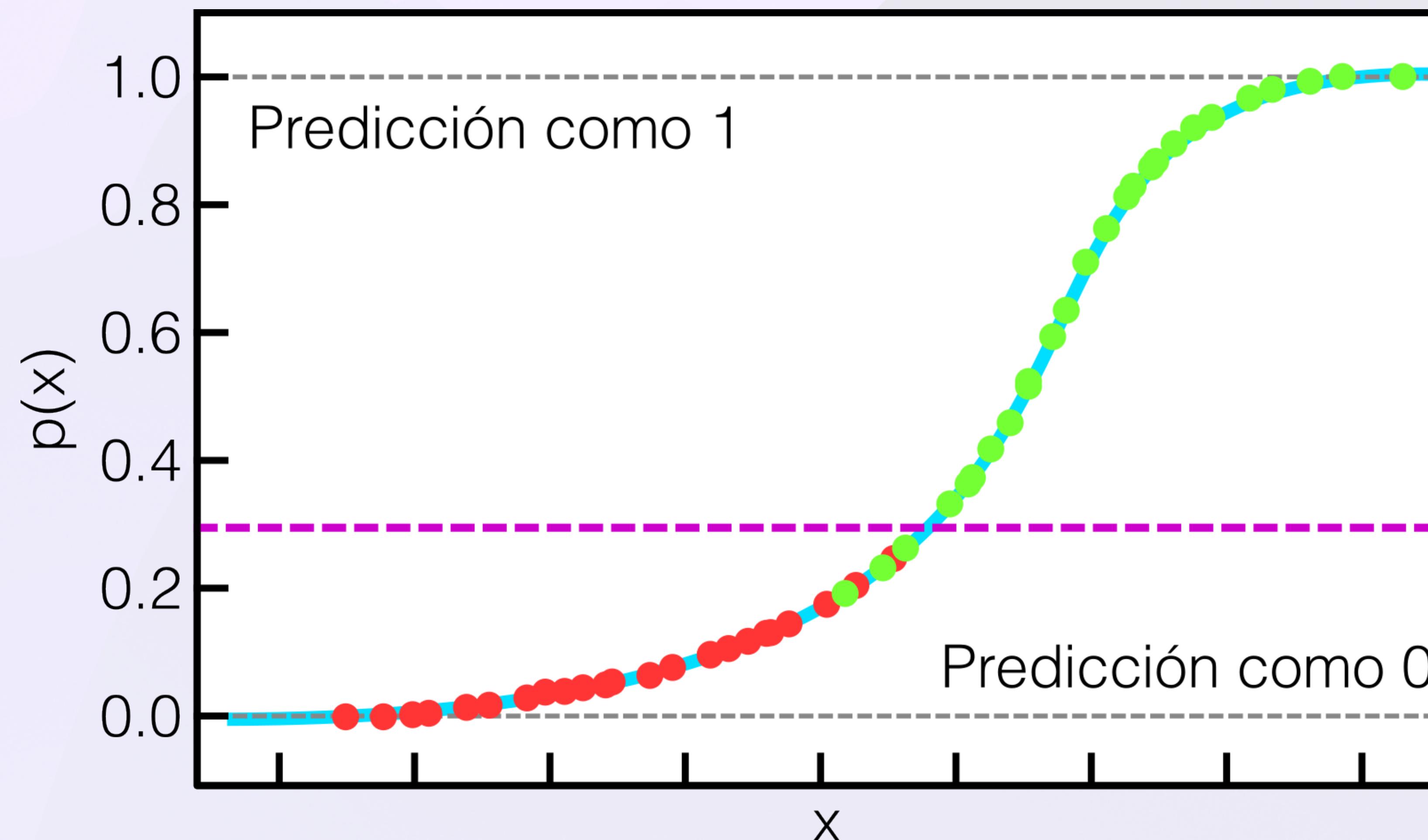
CURVA ROC



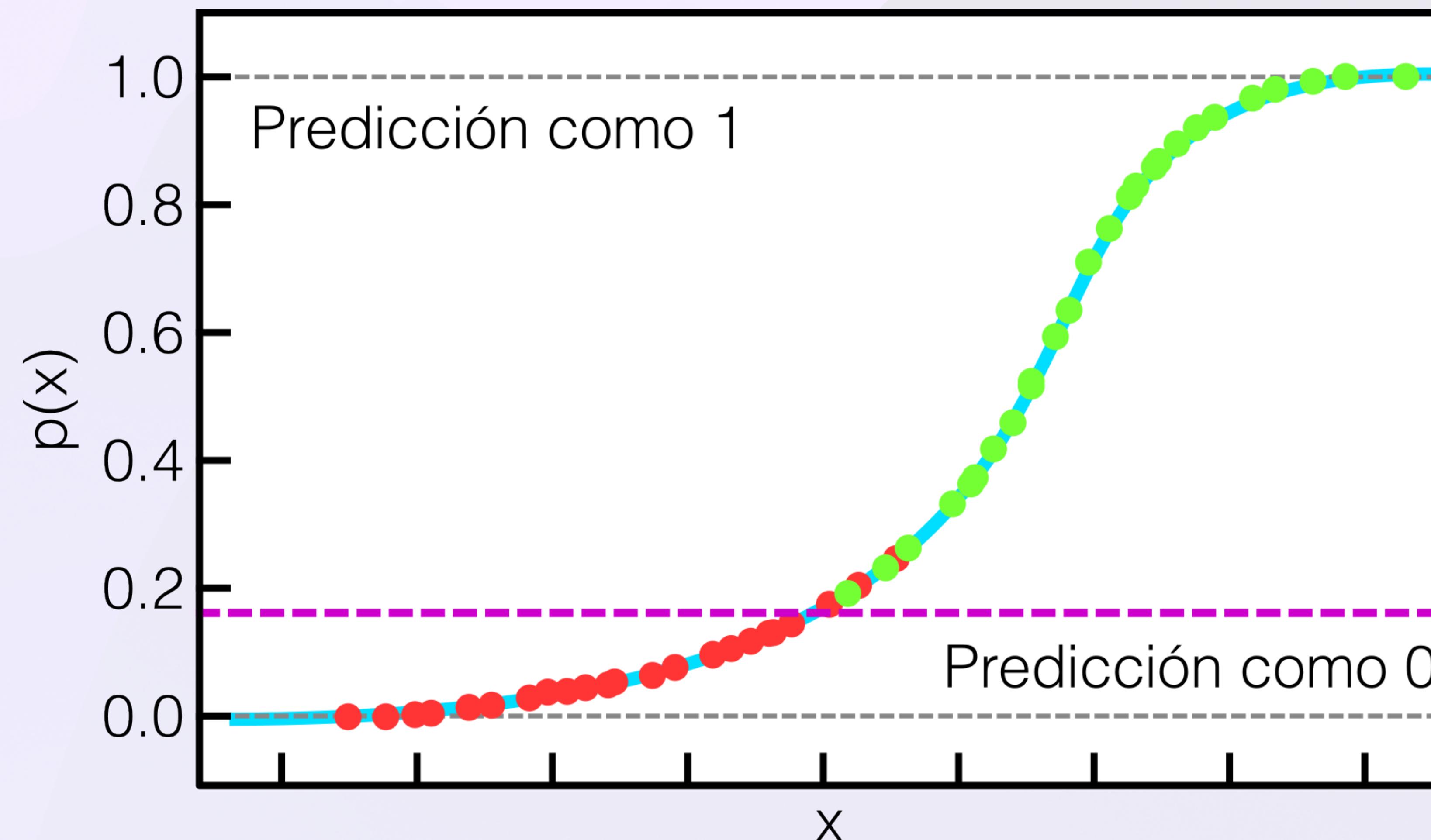
CURVA ROC



CURVA ROC



CURVA ROC

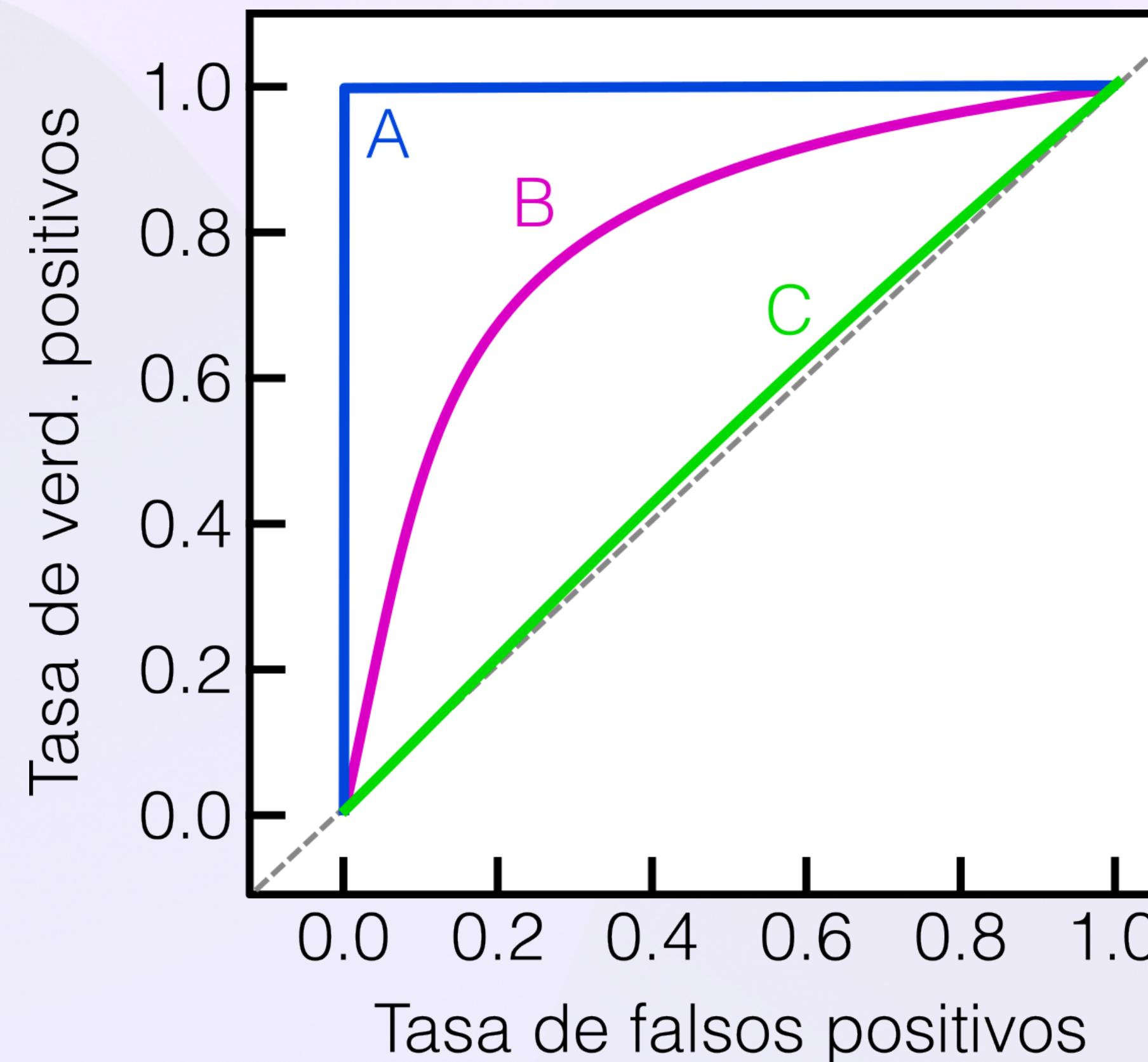


CURVA ROC

La curva ROC nos permite para todo valor de umbral, los dos tipos de errores. En el eje de las abscisas se utiliza la **tasa de falsos positivos** (o 1-especificidad) y en la ordenada la **tasa de verdadero positivos** (sensibilidad).

La curva se obtiene midiendo la sensibilidad y la especificad para todos los valores de umbrales de 0 a 1.

CURVA ROC



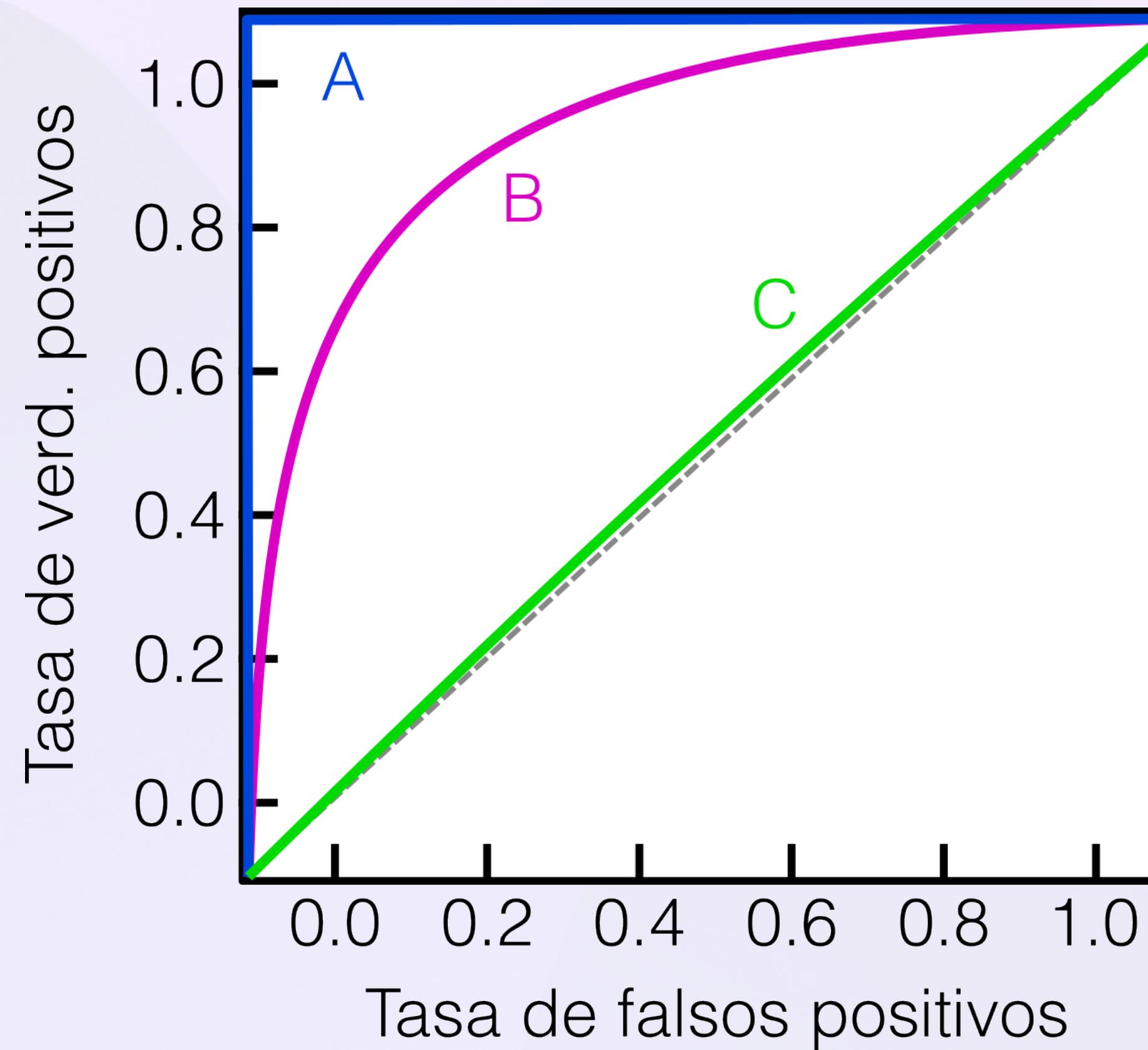
Siempre se arranca de umbral 1, donde la TPR es 0 y TFP es 0 y termina en 0 donde TVP es 1 y TFP es 1.

- **A** es la curva de un clasificador perfecto
- **B** es la curva de un clasificador estándar.
- **C** es la curva de un clasificador que adivina (el peor caso).

La curva ROC me permite encontrar el valor umbral que mejor resultado me dé.

Además me permite comparar clasificadores sin preocuparme del valor umbral elegido.

CURVA ROC

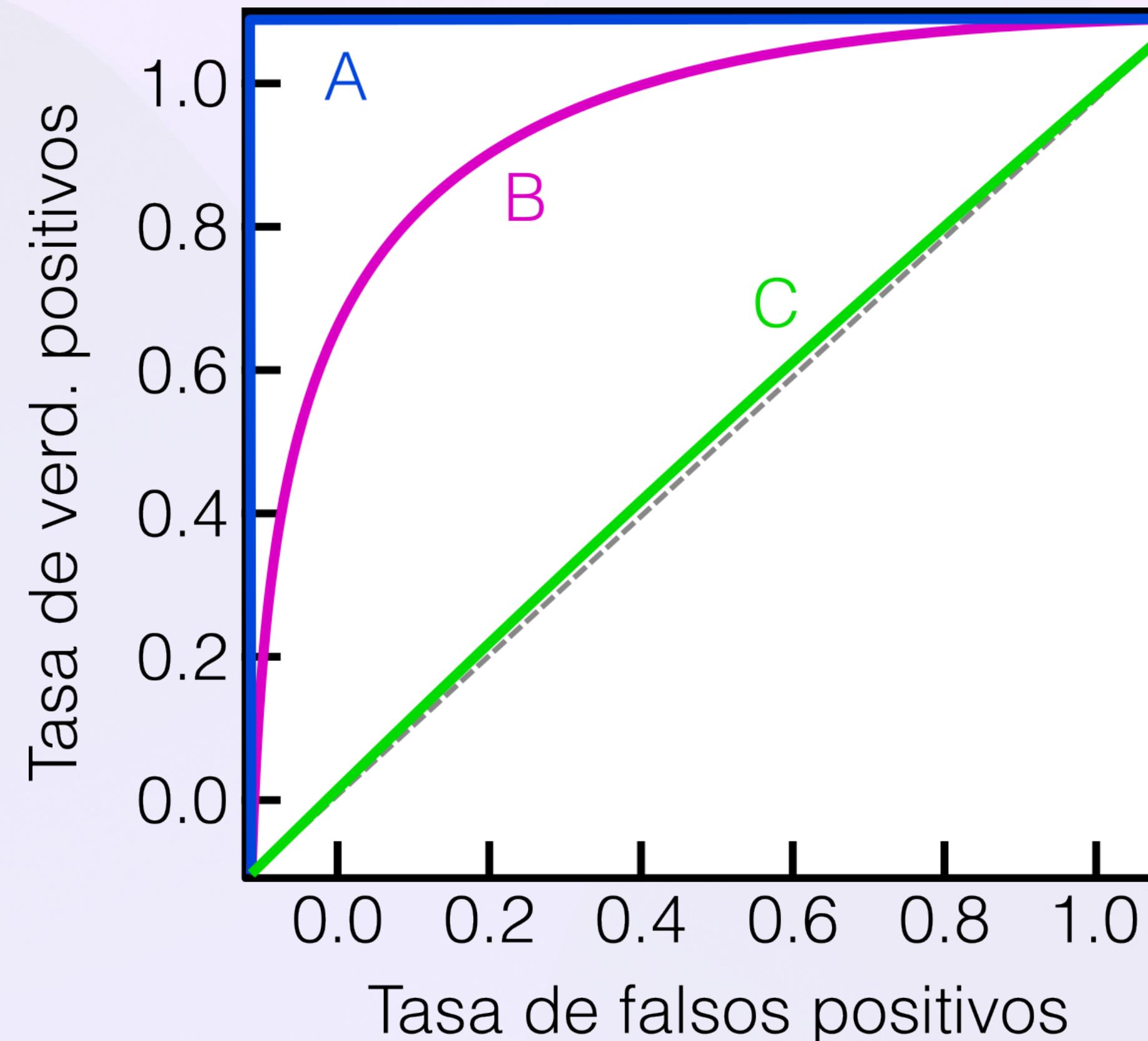


Si quiero bajar a una métrica a esta curva, podemos calcular el área bajo la curva (AUC).

- **A** tendrá un $AUC = 1$
- **B** tendrá un $0.5 < AUC < 1$
- **C** tendrá un $AUC = 0.5$

Si un clasificador tiene AUC menor a 0.5, qué significa?

CURVA ROC



Si quiero bajar a una métrica a esta curva, podemos calcular el área bajo la curva (AUC).

- **A** tendrá un $AUC = 1$
- **B** tendrá un $0.5 < AUC < 1$
- **C** tendrá un $AUC = 0.5$

Si un clasificador tiene AUC menor a 0.5, qué significa?

Significa que las clases están **invertidas**. Con solo cambiar las positivas por negativas, se soluciona.

The background features a minimalist design with abstract, wavy shapes in shades of purple and dark blue. These shapes are layered and overlap, creating a sense of depth and movement across the entire frame.

VAMOS A PRÁCTICAR UN POCO...



REGRESIÓN LOGÍSTICA MULTI-CLASE

REGRESIÓN LOGÍSTICA MULTI-CLASE

Hasta ahora hemos visto clasificadores binarios, es decir, pueden predecir dos clases. Pero es posible extender a la **regresión logística** para que pueda predecir 3 o más clases que llamamos K.

Para hacer esto, se elige una de las clases como base y sobre esta se construye la probabilidad de las demás clases:

$$P(Y = k \mid X = x) = \frac{e^{w_{k0} + w_{k1}x_1 + \dots + w_{kn}x_n}}{1 + \sum_{l=1}^{K-1} e^{w_{l0} + w_{l1}x_1 + \dots + w_{ln}x_n}}$$

$$P(Y = K \mid X = x) = \frac{1}{1 + \sum_{l=1}^{K-1} e^{w_{l0} + w_{l1}x_1 + \dots + w_{ln}x_n}}$$

Y las chances son: $\ln \left(\frac{P(Y = k \mid X = x)}{P(Y = K \mid X = x)} \right) = w_{k0} + w_{k1}x_1 + \dots + w_{kn}x_n$

REGRESIÓN LOGÍSTICA MULTI-CLASE

Que clase K se elige como base no importa. Los coeficientes van a cambiar con dos modelos entrenados con el mismo dataset, pero diferente elección de clase para la base.

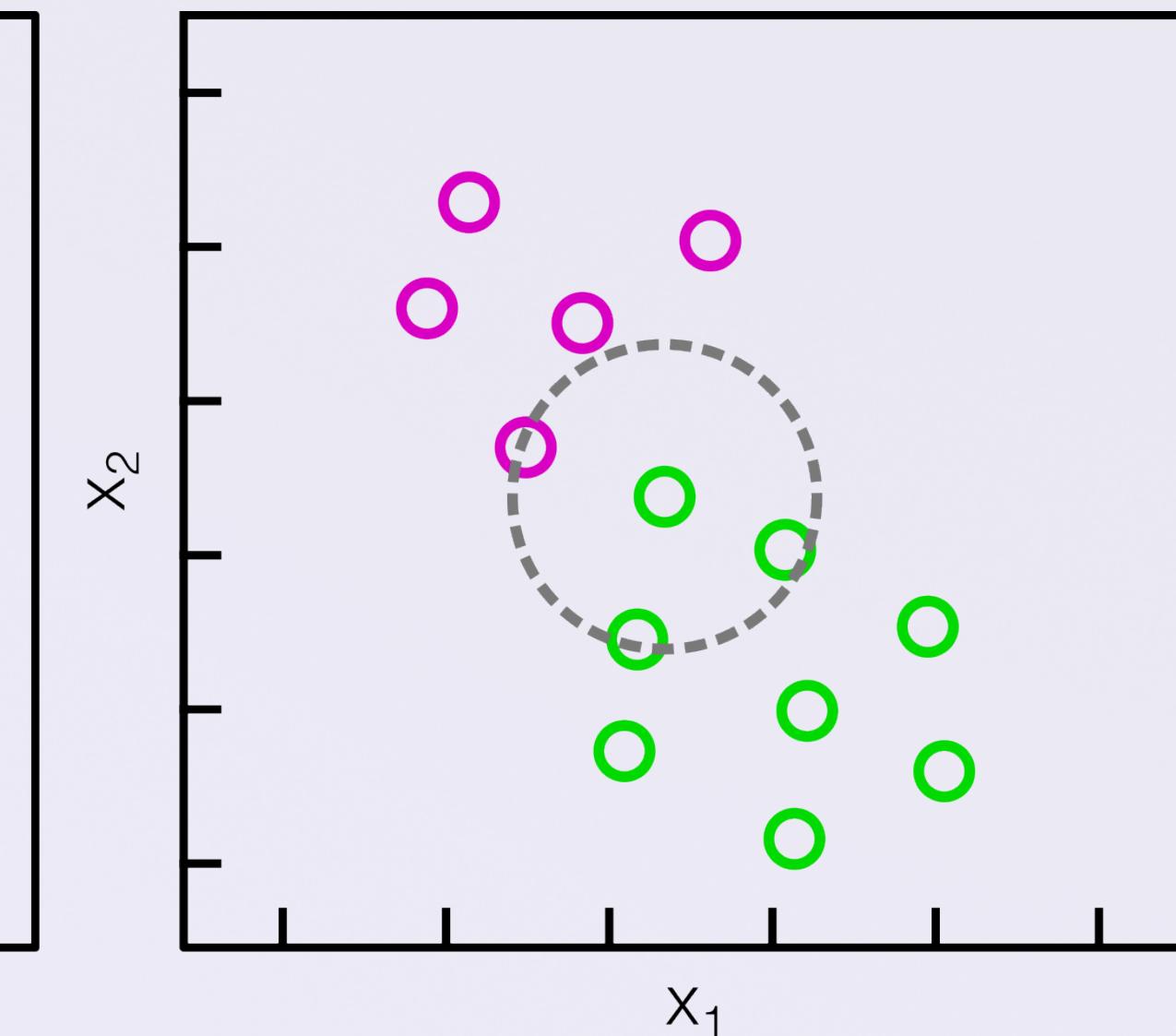
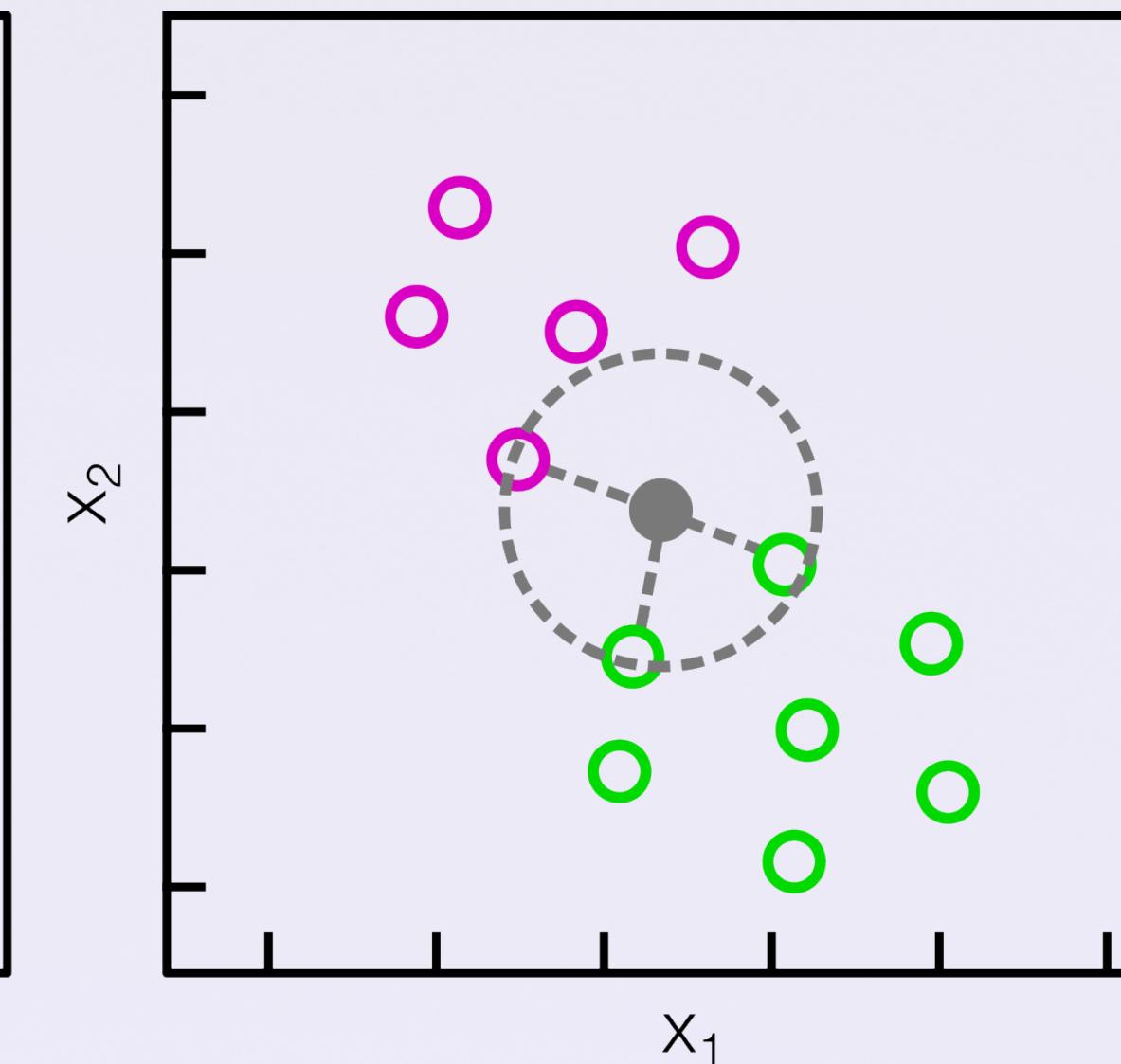
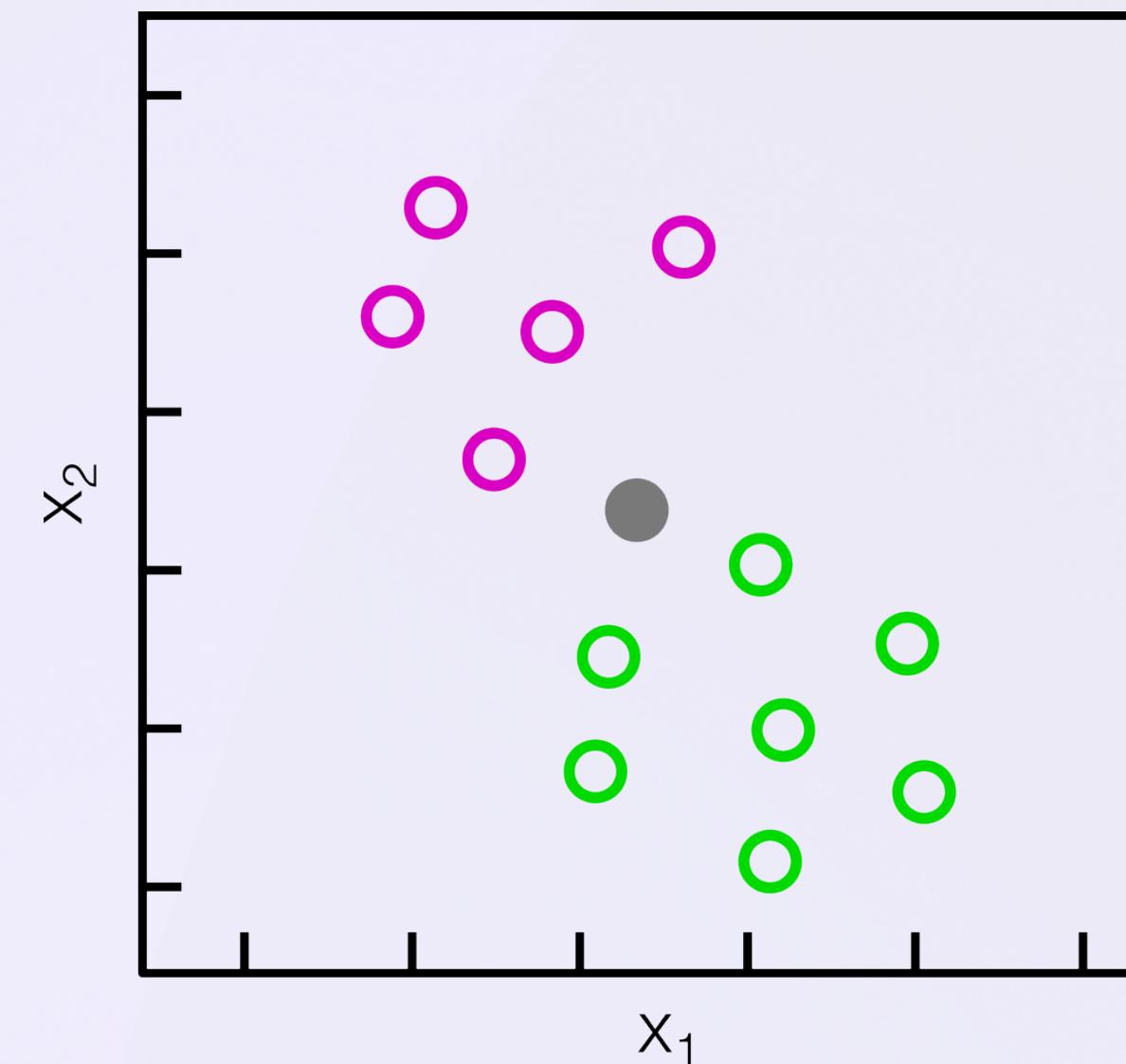
Lo importante es que los valores predichos de probabilidad se van a mantener igual.

CLASIFICADOR KNN

KNN

El clasificador de k vecinos más cercanos (KNN o k-NN), es un algoritmo que utiliza la proximidad de sus vecinos para hacer clasificaciones sobre la agrupación de un punto.

La idea se basa de la **suposición** de que se pueden encontrar puntos similares cerca uno del otro en base a votación de pluralidad (se elige la clase en función de la moda de la clase de sus vecinos).



KNN

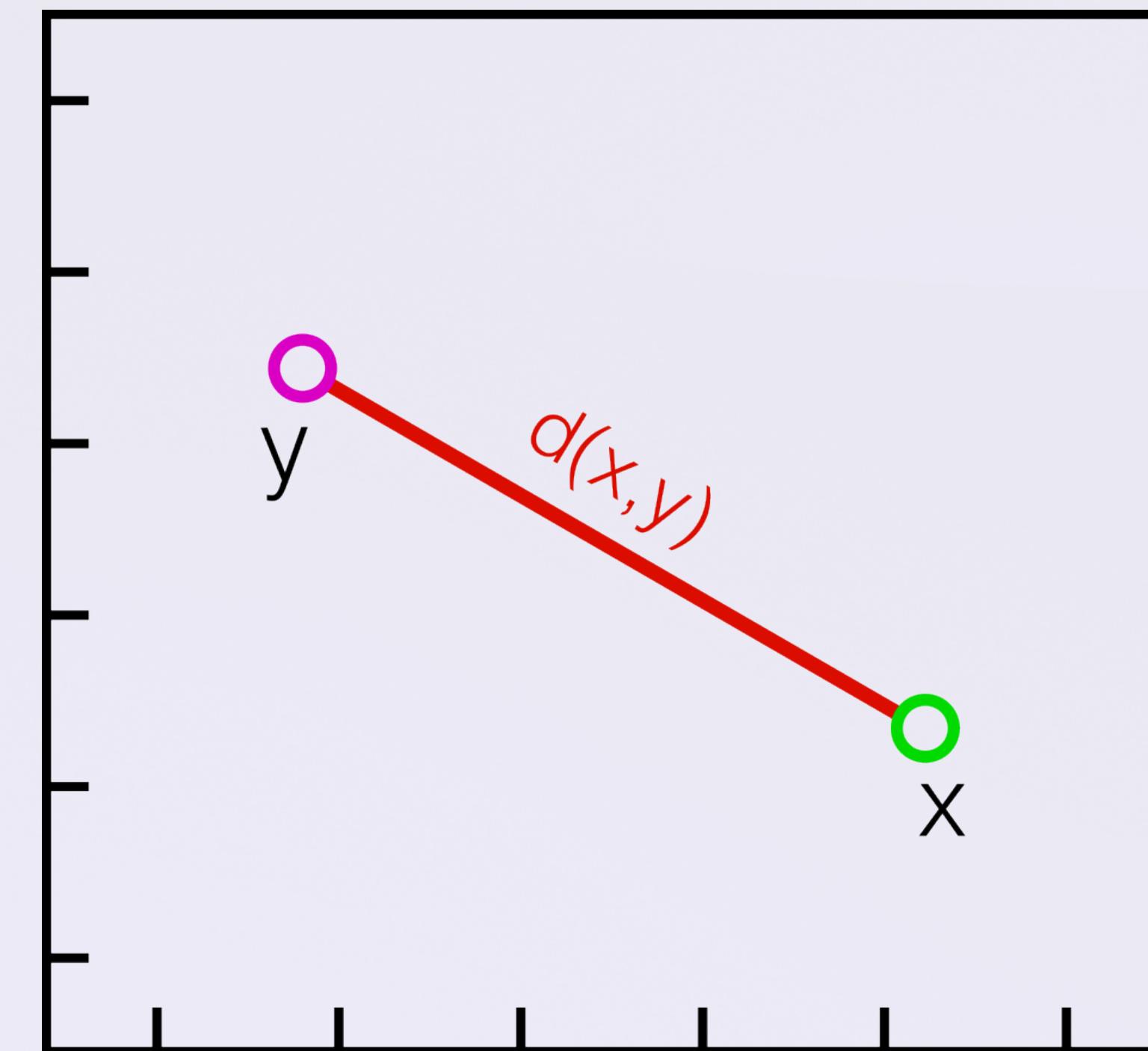
Como vimos, este algoritmo se fija en la distancia entre observaciones. Ahora la pregunta es como medimos la distancia?

Hay múltiples maneras de medir distancia entre dos puntos geométricos. Vamos a definir algunas.

KNN

Distancia euclíadiana (modulo 2): Es la más conocida, es la mínima distancia (una recta) entre dos puntos en un espacio euclidiano

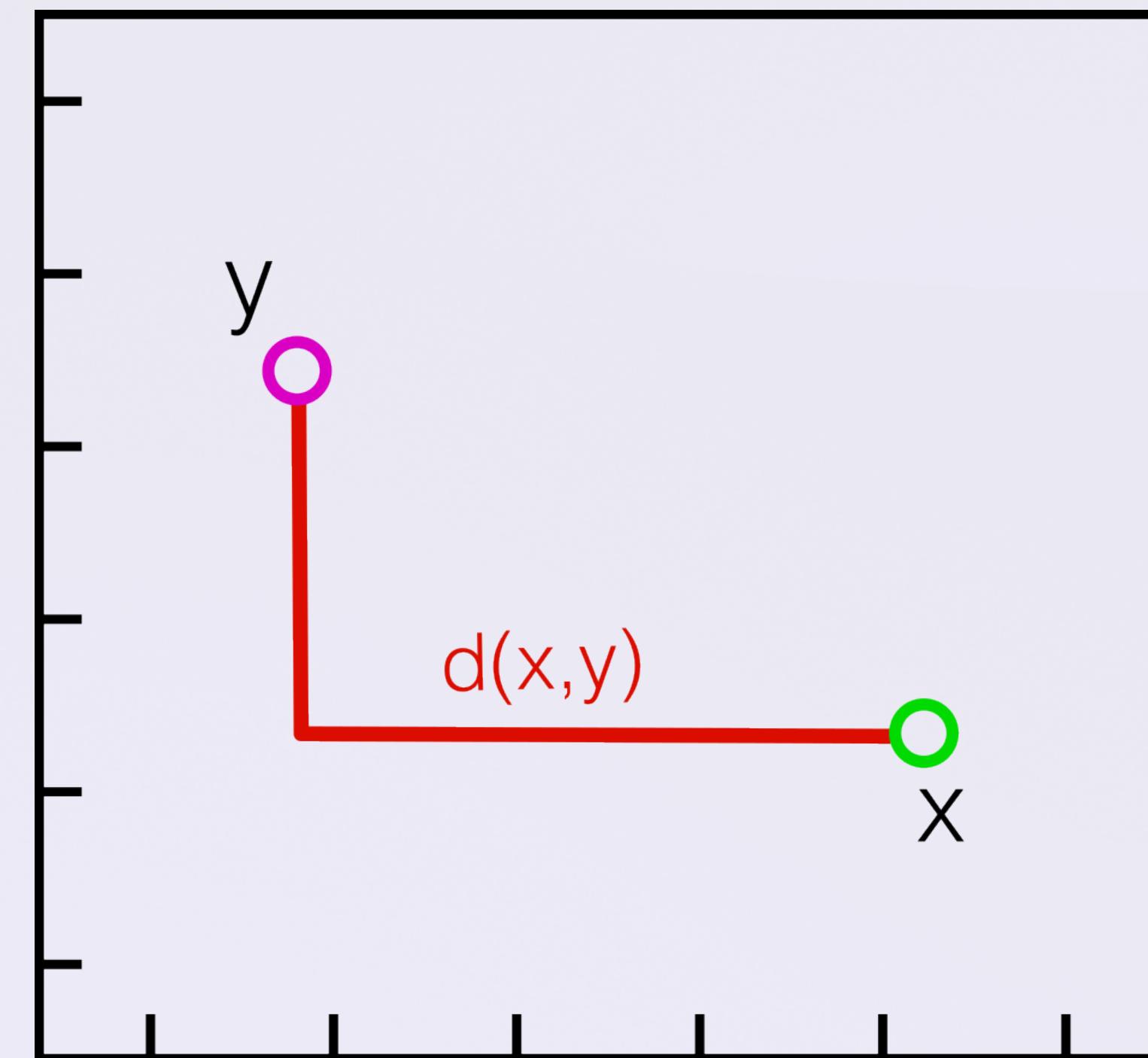
$$d(x, y) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}$$



KNN

Distancia de Manhattan (modulo 1): Es la medida del valor absoluto entre dos puntos. Se conoce también como distancia taxi o de cuadra de ciudad, ya que mide distancias como en una ciudad

$$d(x, y) = \sum_{i=1}^n |x_i - y_i|$$



KNN

Distancia de Minkowski: Es una medida generalizada que incluye las anteriores dos. Posee un parámetro, p , es la que permite variar el tipo de distancia

$$d_p(x, y) = \left(\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^p \right)^{1/p}$$

Distancia de Hamming: Se usa típicamente con vectores booleanos, en donde se mide la cantidad de elementos del vector que son diferentes entre si.

$$\left. \begin{array}{l} x \quad [1 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1 \ 1] \\ y \quad [1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1] \end{array} \right\} d_H=2$$

KNN

Dada la metrica de distancia, debemos definir el valor de k, que es quien define con cuantos vecinos se usará para determinar la clasificación de un punto.

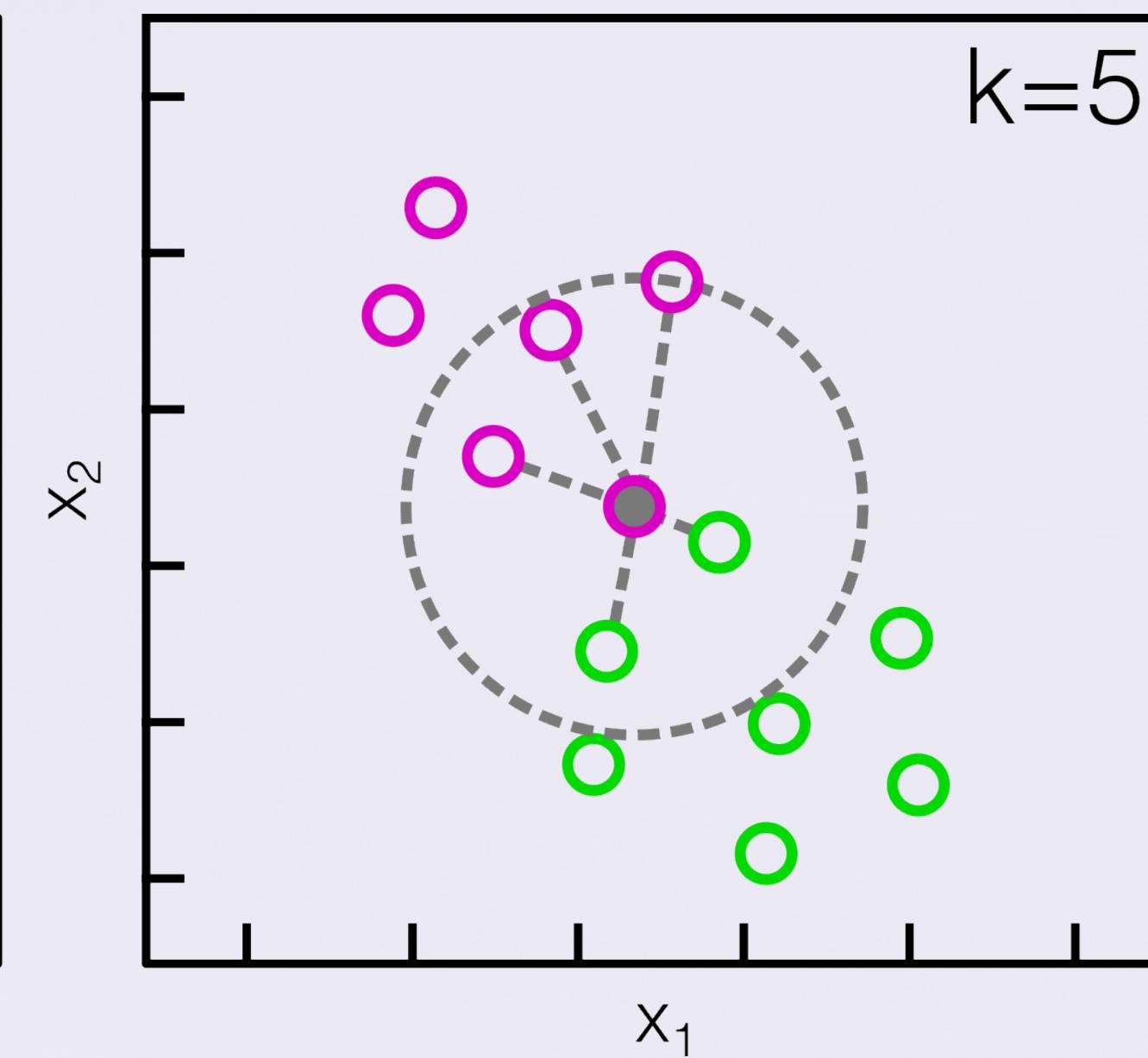
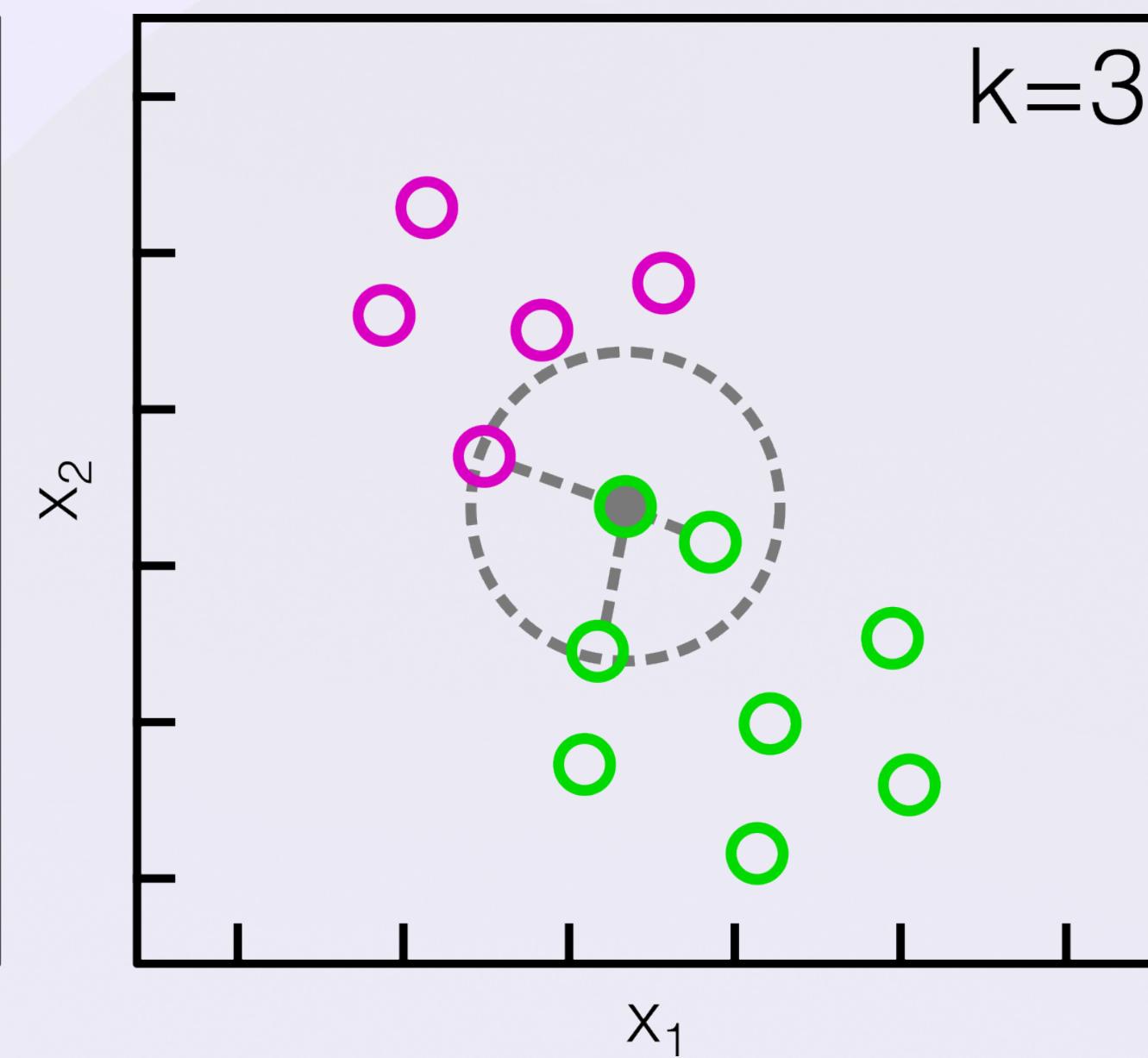
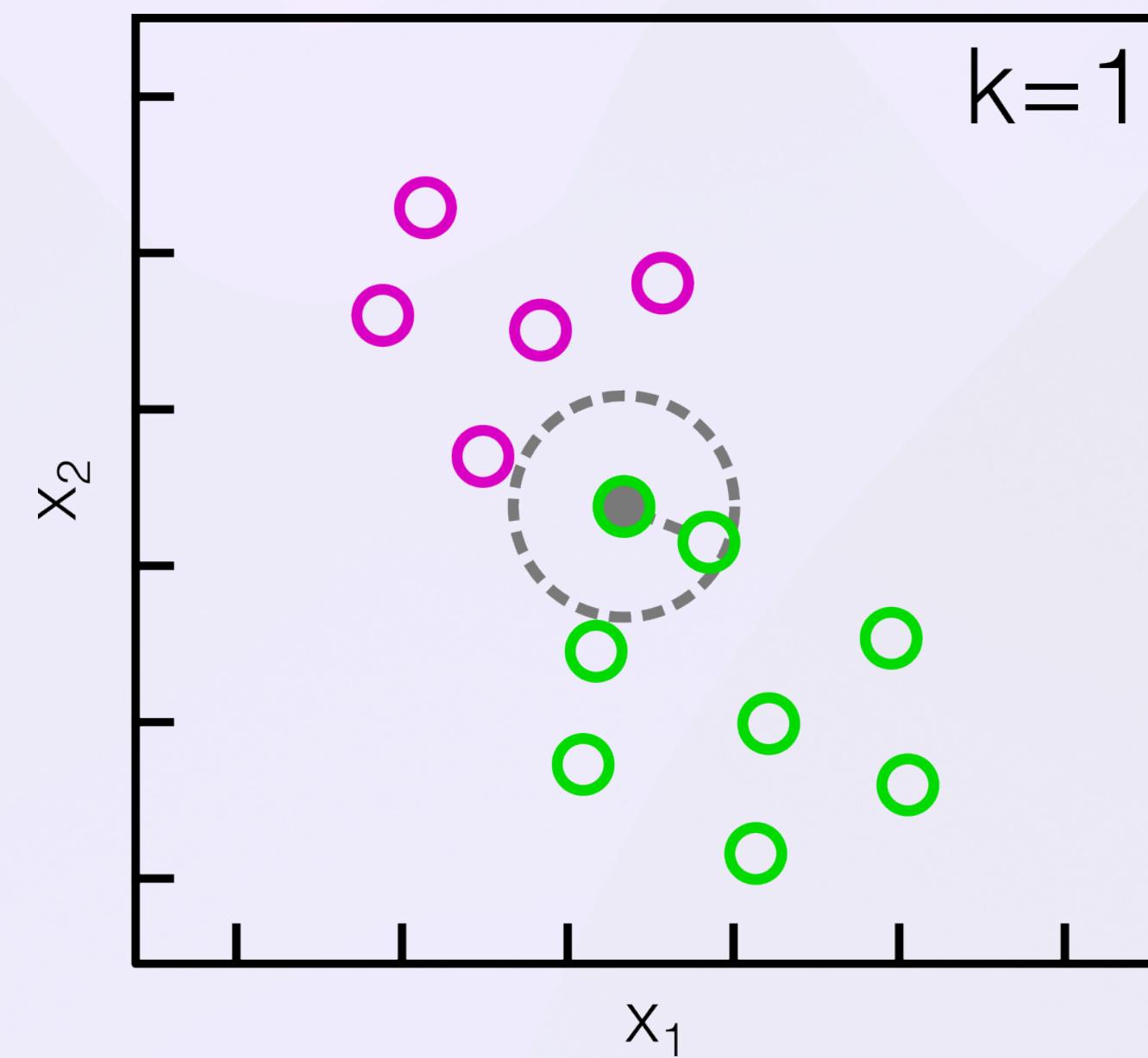
Por ejemplo, si $k=1$, la observación se asignará a la misma clase de su vecino mas cercano.

Definir k, el cual es un hiperparámetro justo al tipo de distancia elegida, es un acto de equilibrio.

Valores bajos de k pueden tener una varianza alta, pero un sesgo bajo, y valores altos de k un sesgo alto y poca varianza.

En general, se recomienda tener un **número impar** para k para evitar empates en la clasificación.

KNN



The background features a minimalist design with abstract, wavy shapes in shades of purple and dark blue. These shapes are layered and overlap, creating a sense of depth and movement across the entire frame.

VAMOS A PRÁCTICAR UN POCO...