

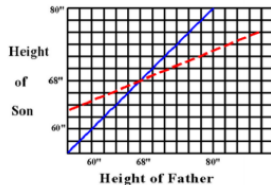
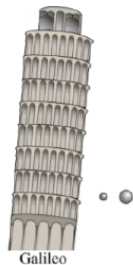
Knn, K **VECINOS MÁS CERCANOS**

ALAN REYES-FIGUEROA

INTRODUCCIÓN A LA CIENCIA DE DATOS

(AULA 24) 05.ABRIL.2021

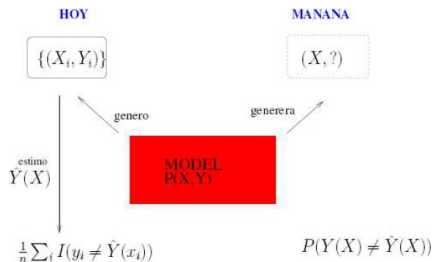
Modelación Predictiva



Pensamiento ha cambiado con el paso del tiempo

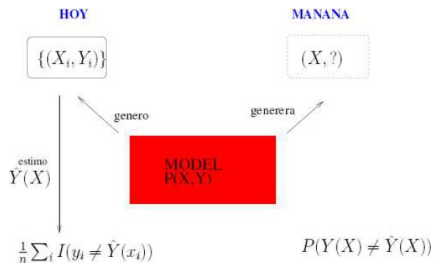
- en la antigüedad: Dioses y seres causantes del mundo
- Galileo: modelo descriptivo (separar causalidad de comportamiento)
- Hoy en día: regresión

Modelación Predictiva



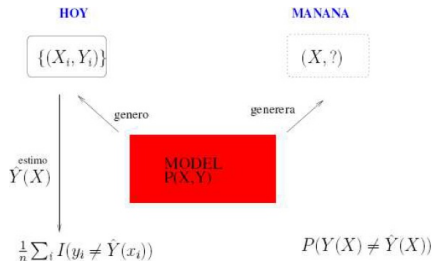
- Datos tienen dos componentes: (\mathbf{x}_i, y_i) , \mathbf{x}_i son las variables “explicativas”, y_i variable de respuesta.
- Distinguimos dos casos: $y_i \in \mathbb{R} \Rightarrow$ regresión, y_i discreto \Rightarrow clasificación.
- Conectar presente con futuro: datos (\mathbf{x}_i, y_i) deben ser representativos.

Modelación Predictiva



- Pragmático. Enfoque geométrico vs. enfoque probabilístico.
- Diferentes tipos de **error**: error empírico (error de entrenamiento), error de generalización (error de validación), error de prueba.
- Cada modelo tiene asociada una **complejidad**.

Modelación Predictiva

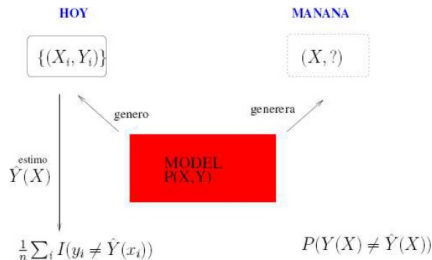


- ¿Es cierto que $\frac{1}{n} \sum_i \mathbf{1}(y_i \neq \hat{y}_i)$ converge a $\mathbb{P}(Y(X) \neq \hat{Y}(X))$?

La ley (débil) de grandes números dice que

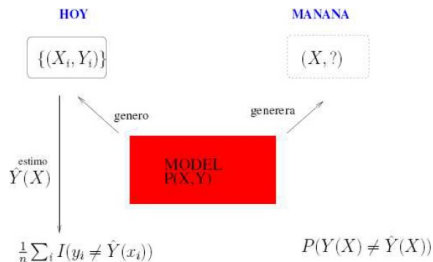
$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_i Z_i = \mathbb{E}(Z_i) = \mathbb{P}(Z_i = 1).$$

Modelación Predictiva



- Veremos que en general, no.
- Otro problema con esta función de costo empírica es que no es continua, menos diferenciable.
- Si usas tu método de derivación favorito, no funciona.
Pregunta: ¿cómo optimizar?

Modelación Predictiva



- Aprendizaje automático: imitar el aprendizaje humano.
- Historicamente: aprender o estimar con pocos datos.
- Varios tipos de aprendizaje: supervised, *unsupervised*, *semi-supervised*, *self-learning*, *reinforced learning*, ...

Modelación Predictiva

Tratamos de responder la pregunta

$$\frac{1}{n} \sum_i \underbrace{\mathbf{1}(y_i \neq \hat{y}(\mathbf{x}_i))}_{Z_i} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}(Y(X) \neq \hat{Y}(X))?$$

Mencionamos que en el caso de v.a.s Bernoulli $Z_i \sim \text{Ber}(p)$, la ley de grandes números establece

$$\frac{1}{n} \sum_i Z_i \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}(Z) = \mathbb{P}(Z = 1).$$

¿Vale en este caso?

No.

La ley de grandes número requiere independencia de las Z_i .

Modelación Predictiva

En este caso, tenemos

$$\frac{1}{n} \sum_i \mathbf{1}(y_i \neq \hat{y}(\mathbf{x}_i)) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}(Y(X) \neq \hat{Y}(X)),$$

donde la función \hat{y} depende de todos los datos (\mathbf{x}_i, y_i) (de modo que no hay independencia de las Z_i). No aplica la ley de grandes números.

Solución *ad hoc*:

Separamos el conjunto (\mathbf{x}_i, y_i) en dos:

- Conjunto de entrenamiento: lo usamos para construir la función \hat{y} .
- Conjunto de validación: calculamos el error empírico $\frac{1}{n} \sum_i \mathbf{1}(y_i \neq \hat{y}(\mathbf{x}_i))$. Ahora sí hay independencia, y este error empírico de validación converge al error de generalización $\mathbb{P}(Y \neq \hat{Y})$.

Modelación Predictiva

Discutimos el concepto de **complejidad** de un modelo. Este se refiere al número de parámetros involucrados en el modelo.

- en regresión: está claro, relacionado al número de variables
- en clasificación: no es tan evidente.

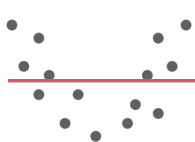
El concepto es importante por varias razones:

- Esto es lo que directamente va a afectar a los errores (empírico y de generalización).
- Nos va a permitir comparar diferentes modelos (en términos de simplicidad, no de exactitud).

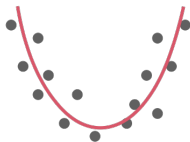
Veremos que existen diferentes métricas que miden la complejidad, y nos va a permitir una segunda opinión a la hora de elegir entre diferentes modelos con similar desempeño.

Modelación Predictiva

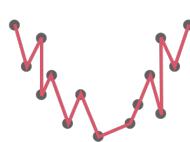
Regression



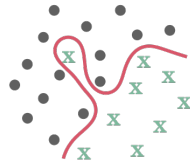
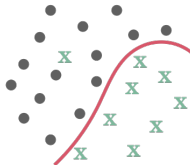
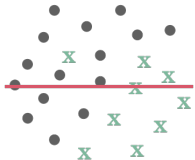
Underfitting



Desired



Overfitting



Classification

Knn, K vecinos más cercanos

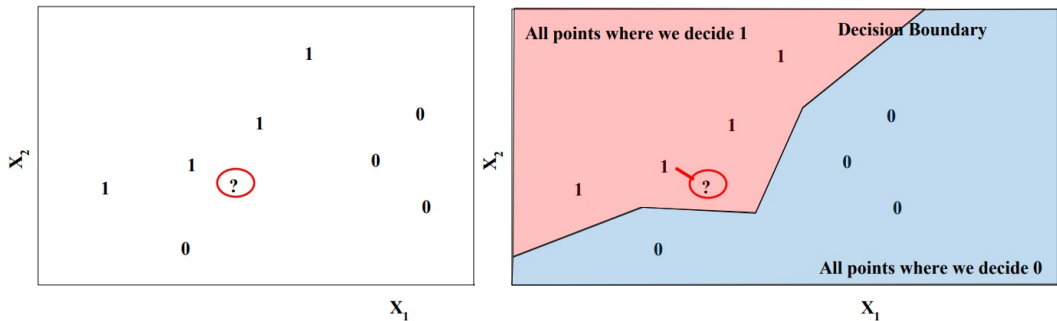
Consideramos el conjunto de datos $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}$, con $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ (en ocasiones denotamos $\mathbb{X} = (\mathbf{x}_i) \in \mathbb{R}^{n \times d}$, $\mathbb{Y} = (y_i) \in \mathbb{R}^n$).

Dado $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$, para decidir el valor de $\hat{y}(\mathbf{x})$, construimos $N_k(\mathbf{x})$ el conjunto de las k observaciones más cercanas a \mathbf{x} .

- Para clasificación: decidimos por votación, esto es, asignamos a \mathbf{x} la categoría más frecuente en $\{y_i : i \in N_k(\mathbf{x})\}$.
- Para regresión: decisión por promedio, *i.e.* asignamos a \mathbf{x} el promedio de $\{y_i : i \in N_k(\mathbf{x})\}$.

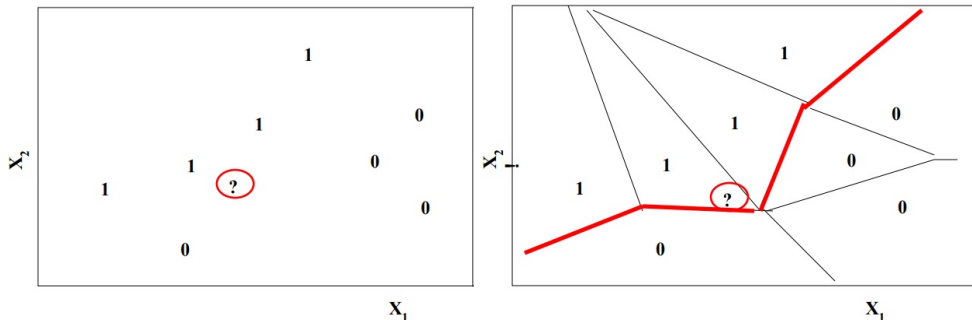
Obs! comentarios sobre cómo romper empates / métodos robustos.
El caso $k = 1$ se llama el clasificador de **vecino más cercano**.

Knn, K vecinos más cercanos



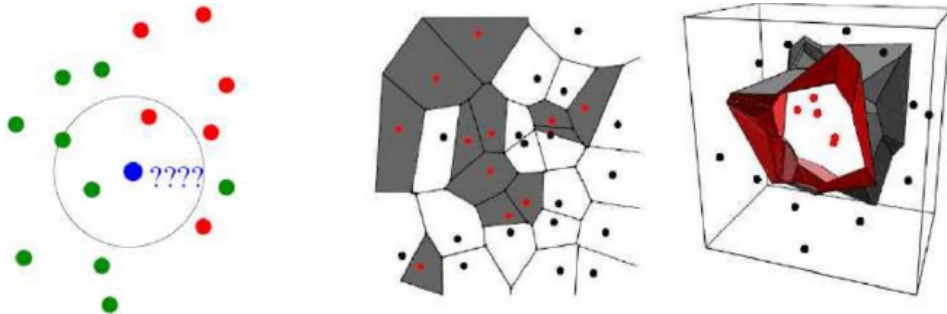
Ejemplo de *k-nn* en el caso de clasificación.

Knn, K vecinos más cercanos



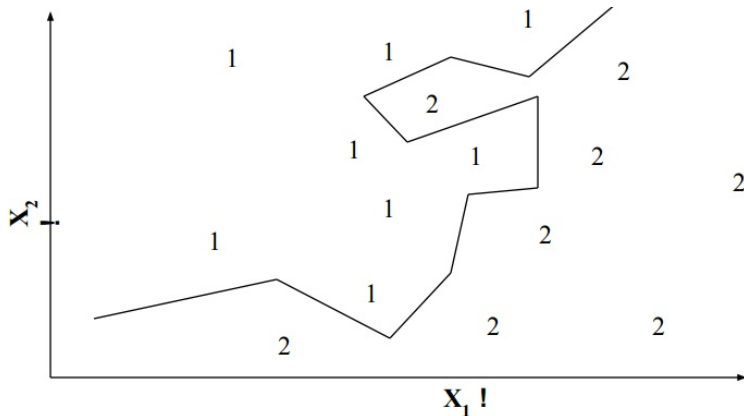
Ejemplo de k -nn en el caso de clasificación. Para $k = 1$, la frontera de clasificación coincide con un diagrama de Voronoi.

Knn, K vecinos más cercanos



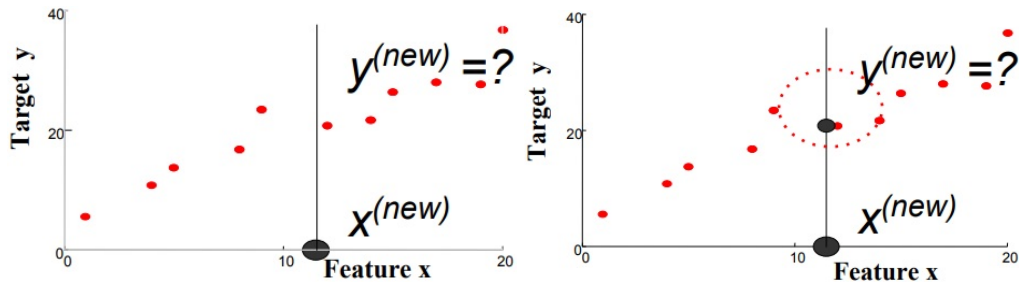
Ejemplo de k -nn en el caso de clasificación. Para $k = 1$, la frontera de clasificación coincide con un diagrama de Voronoi.

Knn, *K* vecinos más cercanos



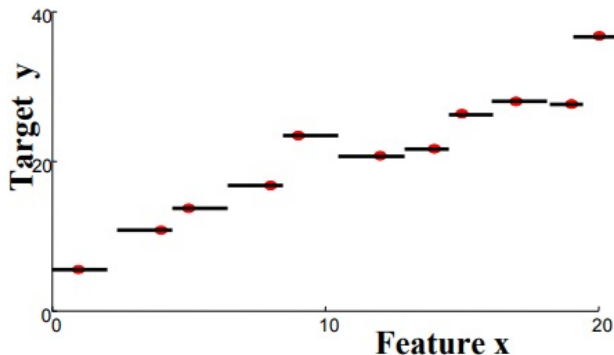
Ejemplo de k -nn en el caso de clasificación. En el caso general $k > 1$, la frontera sigue siendo formada por piezas poligonales (o poliedrales).

Knn, K vecinos más cercanos



Ejemplo de k -nn en el caso de regresión.

Knn , K vecinos más cercanos

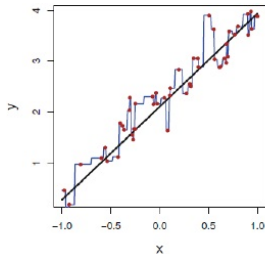


Ejemplo de k -nn en el caso de regresión en el caso $k = 1$. Las discontinuidades ocurren en los puntos medios entre dos observaciones consecutivas.

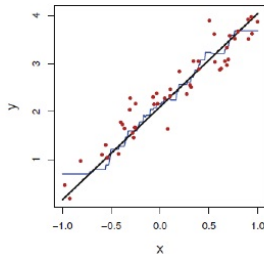
Knn, K vecinos más cercanos

Comportamiento al variar el valor de k :

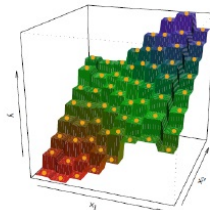
$k = 1$



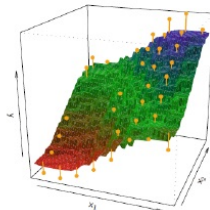
$k = 7$



$k = 1$



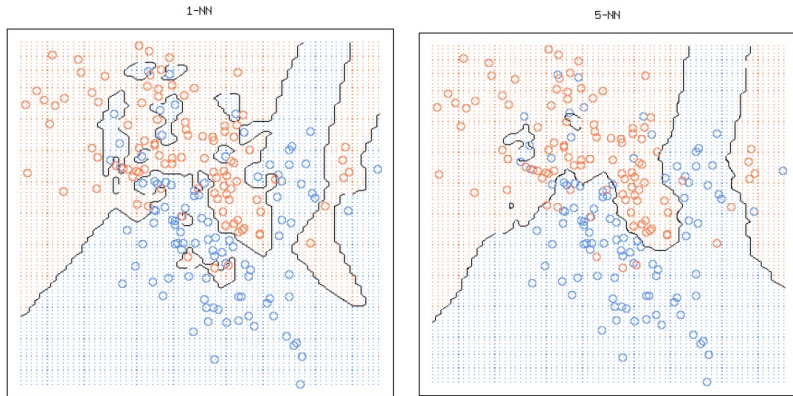
$k = 7$



Ejemplo de k -nn en el caso de regresión.

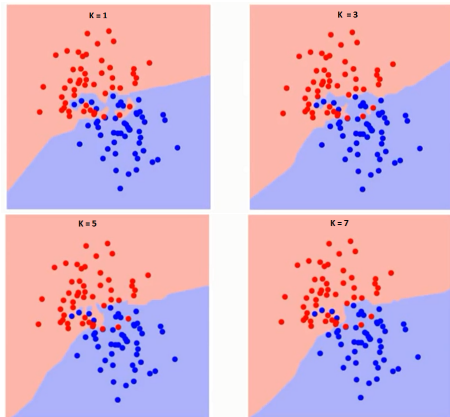
Knn, K vecinos más cercanos

Comportamiento al variar el valor de k :



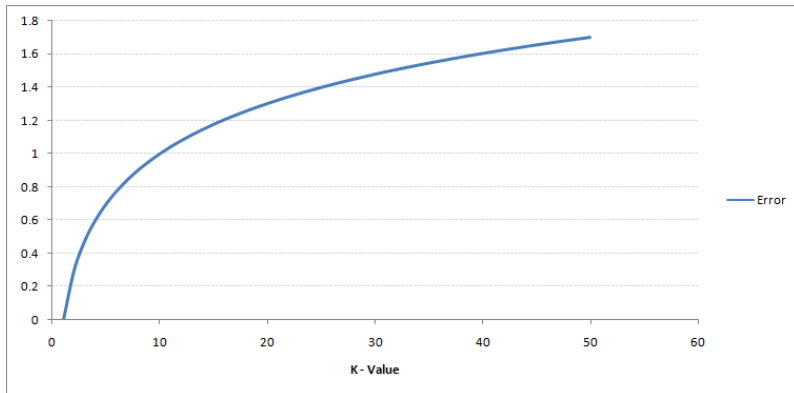
Knn, K vecinos más cercanos

Al aumentar k las fronteras de clasificación se suavizan.



Knn, K vecinos más cercanos

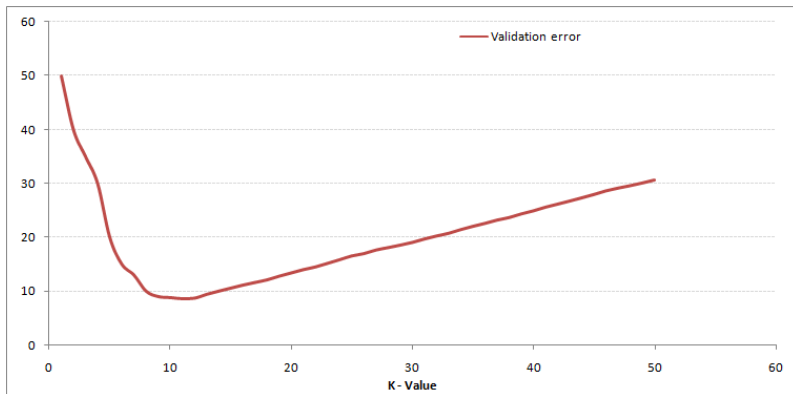
¿Cómo elegir k ?



Error de entrenamiento en k -nn.

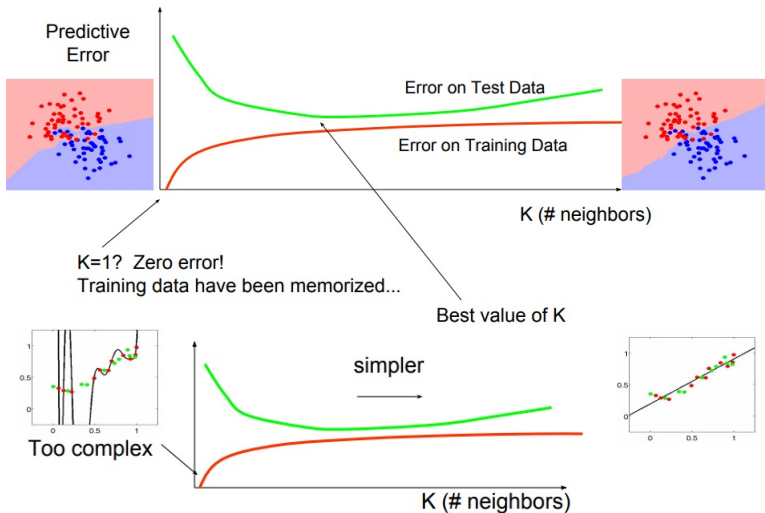
Knn , K vecinos más cercanos

¿Cómo elegir k ?



Error de validación en k -nn.

Knn, K vecinos más cercanos



Knn , K vecinos más cercanos

Pregunta: ¿Cómo medir la complejidad en k -nn?

