



UNIVERSIDAD DE CHILE

Minería de Datos

Welcome to the Machine Learning class

Valentin Barriere

Universidad de Chile – DCC

CC5205, Otoño 2024

Aprendizaje supervisado – Intro

Esquema: Aprendizaje supervisado

Marco global

Generalidades

Contexto teórico

Marco matemático

Ejemplos

Aprendizaje

Función de costo

Errores, complejidad y
sobre-aprendizaje

Regularización

Optimización

Evaluación de la predicción

Métricas de clasificación

Métricas de regresión

Muestro para validación

Marco global

Outline : Marco global

Marco global

Generalidades

Contexto teórico

Aprendizaje

Evaluación de la predicción

Outline : Generalidades

Marco global

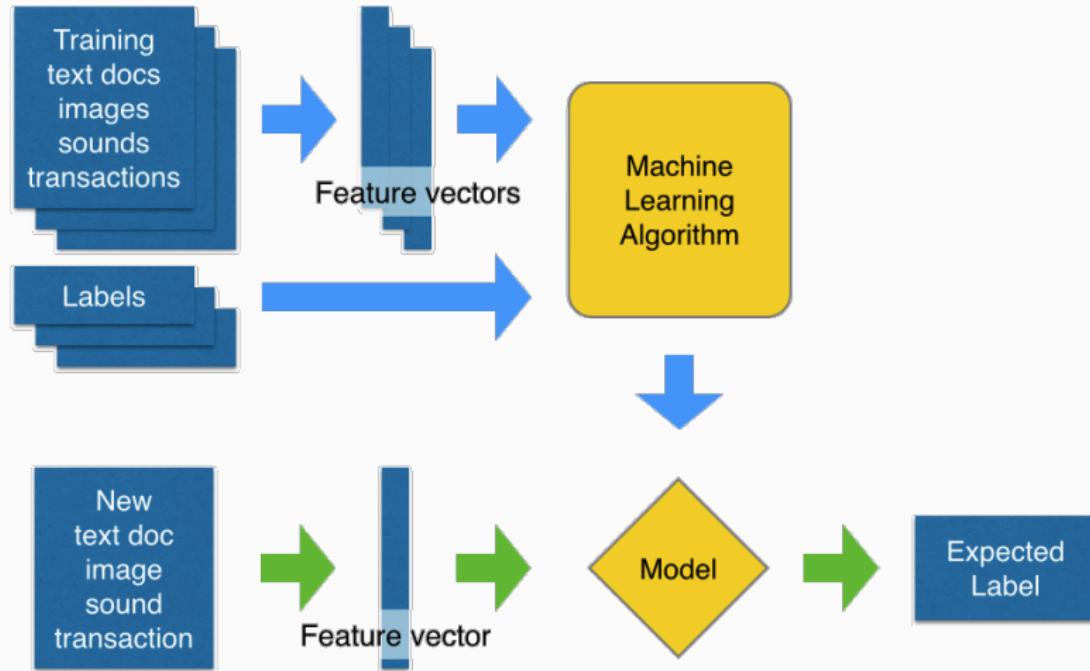
Generalidades

Contexto teórico

Aprendizaje

Evaluación de la predicción

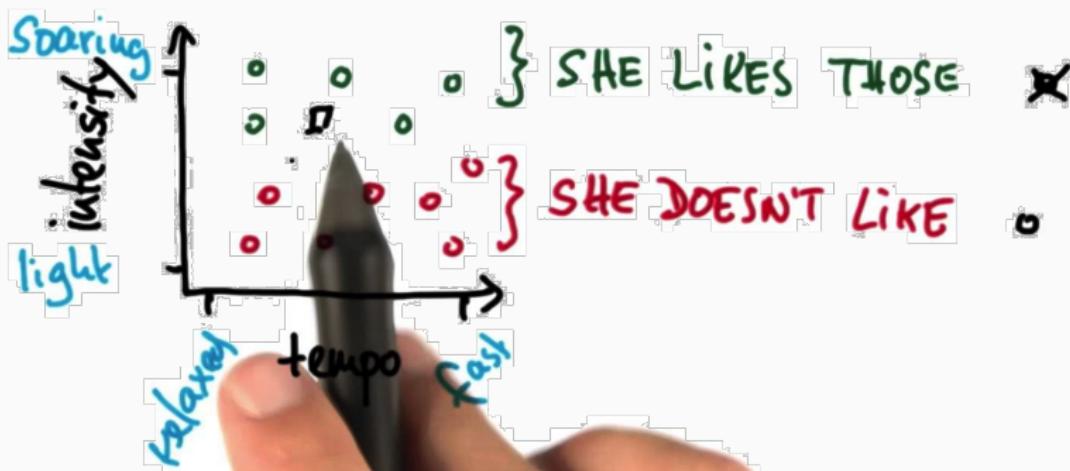
Aprendizaje supervisado



Predictive Modeling Data Flow

Descriptores y etiquetas

FEATURES AND LABELS



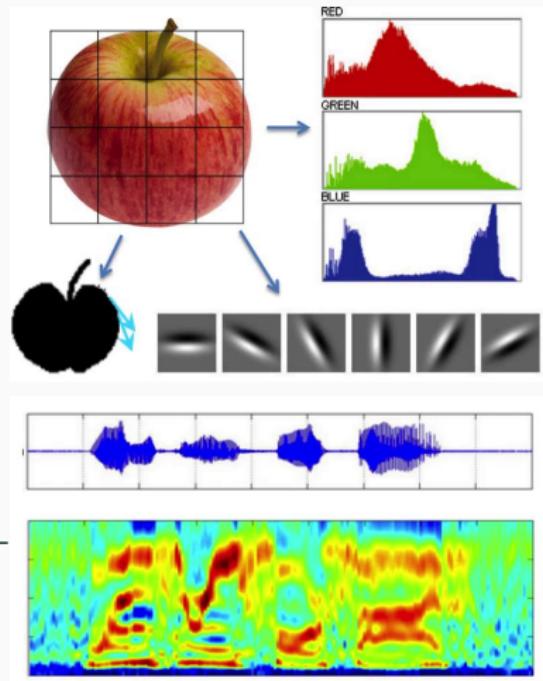
Atributos

PassengerId	Survived	Pclass	Name	Sex	Age	SibSp	Parch	Ticket	Fare	Cabin	Embarked
0	1	0	Braund, Mr. Owen Harris	male	22.0	1	0	A/5 21171	7.2500	NaN	S
1	2	1	Cumings, Mrs. John Bradley (Florence Briggs Th...)	female	38.0	1	0	PC 17599	71.2833	C85	C
2	3	1	Heikkinen, Miss. Laina	female	26.0	0	0	STON/O2. 3101282	7.9250	NaN	S
3	4	1	Futrelle, Mrs. Jacques Heath (Lily May Peel)	female	35.0	1	0	113803	53.1000	C123	S
4	5	0	Allen, Mr. William Henry	male	35.0	0	0	373450	8.0500	NaN	S

Figure 1: Un base de datos estructurados

Atributos

- Imágenes: Histograma de colores



- Sonidos: Representación tiempo-frecuencia

En resumen

- I Tener datos etiquetados
- II Extraer los descriptores = transformar documentos en vectores
- III Crear un modelo matemático f_θ
- IV Implementar una función de costo (error) ℓ a minimizar
- V Encontrar los parámetros θ^* de manera que $\ell(f_{\theta^*}(\mathbf{X}_i), Y_i)$ sea pequeño
- VI Probar f_{θ^*} en nuevos datos con una métrica de evaluación adecuada

En resumen

I Tener datos etiquetados

- Conjunto de datos de tamaño n , $\mathcal{D}_n = \{(Doc_i, Y_i), i = 1..n\}$
- Doc es una muestra (por ejemplo: una persona)
- Y son las etiquetas (por ejemplo: monto del préstamo concedido)

II Extraer los descriptores = transformar documentos en vectores

III Crear un modelo matemático f_θ

IV Implementar una función de costo (error) ℓ a minimizar

V Encontrar los parámetros θ^* de manera que $\ell(f_{\theta^*}(\mathbf{X}_i), Y_i)$ sea pequeño

VI Probar f_{θ^*} en nuevos datos con una métrica de evaluación adecuada

En resumen

I Tener datos etiquetados

- Conjunto de datos de tamaño n , $\mathcal{D}_n = \{(Doc_i, Y_i), i = 1..n\}$
- Doc es una muestra (por ejemplo: una persona)
- Y son las etiquetas (por ejemplo: monto del préstamo concedido)

II Extraer los descriptores = transformar documentos en vectores

- X es un vector de observaciones (por ejemplo: edad, sexo, salario)
- Y son las etiquetas (por ejemplo: monto del préstamo concedido)

III Crear un modelo matemático f_θ

IV Implementar una función de costo (error) ℓ a minimizar

V Encontrar los parámetros θ^* de manera que $\ell(f_{\theta^*}(X_i), Y_i)$ sea pequeño

VI Probar f_{θ^*} en nuevos datos con una métrica de evaluación adecuada

En resumen

I Tener datos etiquetados

- Conjunto de datos de tamaño n , $\mathcal{D}_n = \{(Doc_i, Y_i), i = 1..n\}$
- Doc es una muestra (por ejemplo: una persona)
- Y son las etiquetas (por ejemplo: monto del préstamo concedido)

II Extraer los descriptores = transformar documentos en vectores

- X es un vector de observaciones (por ejemplo: edad, sexo, salario)
- Y son las etiquetas (por ejemplo: monto del préstamo concedido)

III Crear un modelo matemático f_θ

- Modelo f_θ tal que $f_\theta(X)$ esté cerca de Y (para regresión)
- θ es el conjunto de parámetros del modelo matemático

IV Implementar una función de costo (error) ℓ a minimizar

V Encontrar los parámetros θ^* de manera que $\ell(f_{\theta^*}(X_i), Y_i)$ sea pequeño

VI Probar f_{θ^*} en nuevos datos con una métrica de evaluación adecuada

En resumen

I Tener datos etiquetados

- Conjunto de datos de tamaño n , $\mathcal{D}_n = \{(Doc_i, Y_i), i = 1..n\}$
- Doc es una muestra (por ejemplo: una persona)
- Y son las etiquetas (por ejemplo: monto del préstamo concedido)

II Extraer los descriptores = transformar documentos en vectores

- X es un vector de observaciones (por ejemplo: edad, sexo, salario)
- Y son las etiquetas (por ejemplo: monto del préstamo concedido)

III Crear un modelo matemático f_θ

- Modelo f_θ tal que $f_\theta(X)$ esté cerca de Y (para regresión)
- θ es el conjunto de parámetros del modelo matemático

IV Implementar una función de costo (error) ℓ a minimizar

- Cuanto más se equivoque el modelo, mayor será el costo
- En general, se desea tener un costo pequeño

V Encontrar los parámetros θ^* de manera que $\ell(f_{\theta^*}(X_i), Y_i)$ sea pequeño

VI Probar f_{θ^*} en nuevos datos con una métrica de evaluación adecuada

En resumen

I Tener datos etiquetados

- Conjunto de datos de tamaño n , $\mathcal{D}_n = \{(Doc_i, Y_i), i = 1..n\}$
- Doc es una muestra (por ejemplo: una persona)
- Y son las etiquetas (por ejemplo: monto del préstamo concedido)

II Extraer los descriptores = transformar documentos en vectores

- X es un vector de observaciones (por ejemplo: edad, sexo, salario)
- Y son las etiquetas (por ejemplo: monto del préstamo concedido)

III Crear un modelo matemático f_θ

- Modelo f_θ tal que $f_\theta(X)$ esté cerca de Y (para regresión)
- θ es el conjunto de parámetros del modelo matemático

IV Implementar una función de costo (error) ℓ a minimizar

- Cuanto más se equivoque el modelo, mayor será el costo
- En general, se desea tener un costo pequeño

V Encontrar los parámetros θ^* de manera que $\ell(f_{\theta^*}(X_i), Y_i)$ sea pequeño

- $\theta^* = \arg \min_{\theta} \sum_i \ell(f_{\theta}(X_i), Y_i)$

VI Probar f_{θ^*} en nuevos datos con una métrica de evaluación adecuada

En resumen

I Tener datos etiquetados

- Conjunto de datos de tamaño n , $\mathcal{D}_n = \{(Doc_i, Y_i), i = 1..n\}$
- Doc es una muestra (por ejemplo: una persona)
- Y son las etiquetas (por ejemplo: monto del préstamo concedido)

II Extraer los descriptores = transformar documentos en vectores

- X es un vector de observaciones (por ejemplo: edad, sexo, salario)
- Y son las etiquetas (por ejemplo: monto del préstamo concedido)

III Crear un modelo matemático f_θ

- Modelo f_θ tal que $f_\theta(X)$ esté cerca de Y (para regresión)
- θ es el conjunto de parámetros del modelo matemático

IV Implementar una función de costo (error) ℓ a minimizar

- Cuanto más se equivoque el modelo, mayor será el costo
- En general, se desea tener un costo pequeño

V Encontrar los parámetros θ^* de manera que $\ell(f_{\theta^*}(X_i), Y_i)$ sea pequeño

- $\theta^* = \arg \min_{\theta} \sum_i \ell(f_{\theta}(X_i), Y_i)$

VI Probar f_{θ^*} en nuevos datos con una métrica de evaluación adecuada

Outline : Contexto teórico

Marco global

Generalidades

Contexto teórico

Marco matemático

Ejemplos

Aprendizaje

Evaluación de la predicción

Aprendizaje supervisado I

Marco matemático

- Medida de entrada: $\mathbf{X} = (X^{(1)}, X^{(2)}, \dots, X^{(d)}) \in \mathcal{X}$
- Medida de salida: $Y \in \mathcal{Y}$
- $(X, Y) \sim \mathbf{P}$ donde \mathbf{P} es desconocido
- Conjunto de entrenamiento: $\mathcal{D}_n = (\mathbf{X}_1, Y_1), \dots, (\mathbf{X}_n, Y_n)$
- A menudo:
 - $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^d$ y $Y \in [1, \dots, C]$ para una tarea de clasificación
 - $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^d$ y $Y \in \mathbb{R}$ para una tarea de regresión

Un clasificador es una función en $\mathcal{F} = \{f : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}\}$ (medible).

Objetivo

Construir un clasificador \hat{f} **satisfactorio** utilizando los datos de entrenamiento. **Atención:** \hat{f} depende de \mathcal{D}_n .

Aprendizaje, tarea, medida de rendimiento

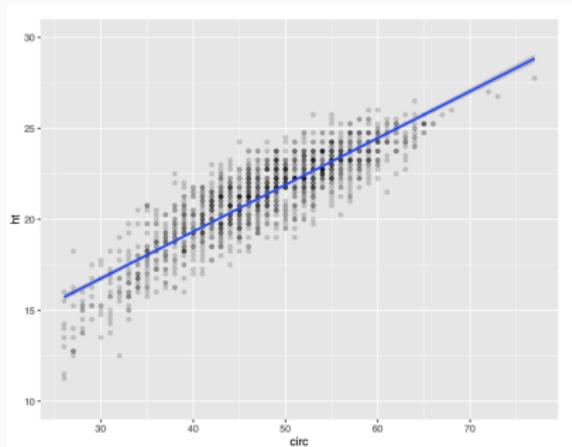
- Conjunto de entrenamiento: $\mathcal{D}_n = (\mathbf{X}_1, Y_1), \dots, (\mathbf{X}_n, Y_n)$
- Clasificador: $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ (medible).
- Función de costo/pérdida: $\ell(Y, f(\mathbf{X}))$ mide la calidad de la *predicción* de f en relación con Y
- Riesgo:

$$\mathcal{R}(f) = \mathbb{E}[\ell(Y, f(\mathbf{X}))]$$

Objetivo

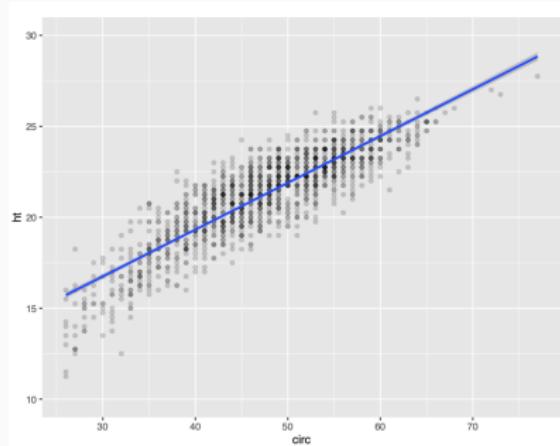
Aprender a construir un clasificador $f \in \mathcal{F}$ desde los datos de entrenamiento \mathcal{D}_n de manera que el riesgo $\mathcal{R}(f)$ sea pequeño en promedio en relación con \mathcal{D}_n .

Ejemplo: Eucalipto



- BDD simple y clásica
- Predecir el tamaño en función de la circunferencia
- $X = \text{circ}$
- $Y = ht$

Ejemplo: Eucalipto



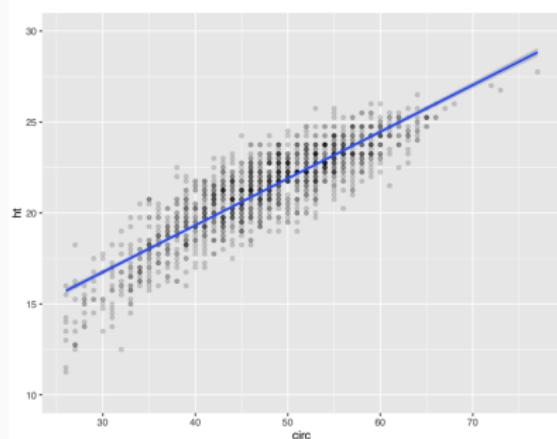
Modelo Lineal

- Modelo paramétrico:

$$f_{\beta}(\text{circ}) = \beta_1 + \beta_2 \text{circ} = \hat{ht}$$

- ¿Cómo elegir $\beta = (\beta_1, \beta_2)$?

Ejemplo: Mínimos cuadrados



Metodología

- Naturalmente:

$$\sum_{i=1}^n |Y_i - f_\beta(\mathbf{X}_i)|^2 = \sum_{i=1}^n |ht_i - f_\beta(\mathbf{circ}_i)|^2 = \sum_{i=1}^n |ht_i - (\beta_1 + \beta_2 \mathbf{circ}_i)|^2$$

- Elección de β que minimiza este criterio:

$$\hat{\beta} = \arg \min_{\beta \in \mathbb{R}^2} \sum_{i=1}^n |ht_i - (\beta_1 + \beta_2 \mathbf{circ}_i)|^2$$

Regresión Lineal

- **Modelo estadístico:** (circ_i, ht_i) i.i.d. con la misma ley que un (circ, ht) genérico
- **Criterio de rendimiento:** Buscar un f con un error promedio bajo

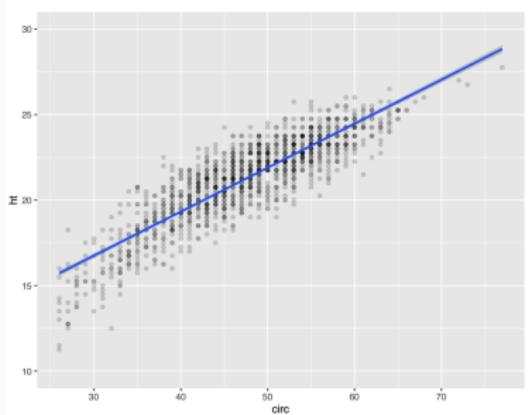
$$\mathbb{E}[|ht - f(\text{circ})|^2]$$

- **Criterio empírico:** Reemplazar la ley desconocida por su contraparte empírica

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |ht_i - f(\text{circ}_i)|^2$$

- **Elegir un clasificador:** no tomar un modelo demasiado complejo, restringirse al modelo más simple que dé buenos resultados (Ej: gran red neuronal/demasiadas características para muy pocos ejemplos)
- **Aprender el modelo:** Optimizar sobre los datos

Ejemplo: ¿Qué grado elegir ?



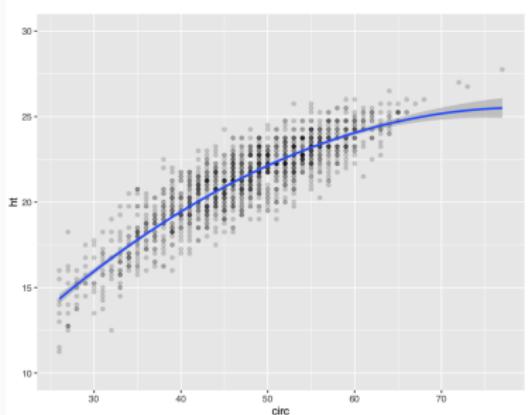
Modelos

- Un grado polinomial d que aumenta equivale a una **complejidad de modelo que aumenta** :

$$\beta \in \mathbb{R}^d = \text{plus de paramètres}$$

- Este modelo ya no se adapta a los datos que se le muestran.
- **Sobreajuste** : se adapta demasiado a \mathcal{D}_n y ya no generaliza

Ejemplo: ¿Qué grado elegir ?



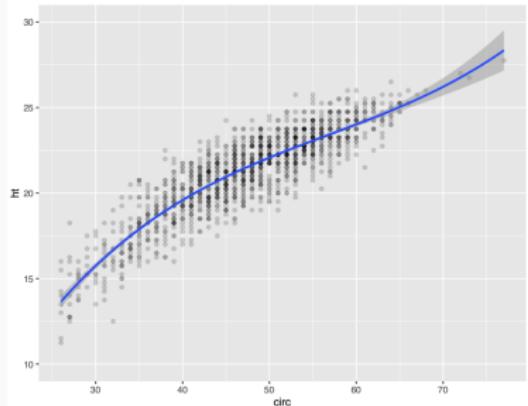
Modelos

- Un grado polinomial d que aumenta equivale a una **complejidad de modelo que aumenta** :

$$\beta \in \mathbb{R}^d = \text{plus de paramètres}$$

- Este modelo ya no se adapta a los datos que se le muestran.
- **Sobreajuste** : se adapta demasiado a \mathcal{D}_n y ya no generaliza

Ejemplo: ¿Qué grado elegir ?



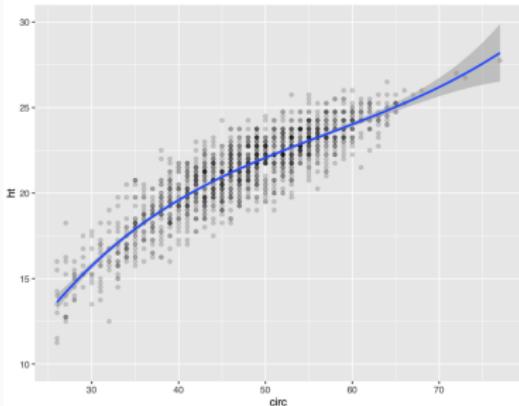
Modelos

- Un grado polinomial d que aumenta equivale a una **complejidad de modelo que aumenta** :

$$\beta \in \mathbb{R}^d = \text{plus de paramètres}$$

- Este modelo ya no se adapta a los datos que se le muestran.
- **Sobreajuste** : se adapta demasiado a \mathcal{D}_n y ya no generaliza

Ejemplo: ¿Qué grado elegir ?



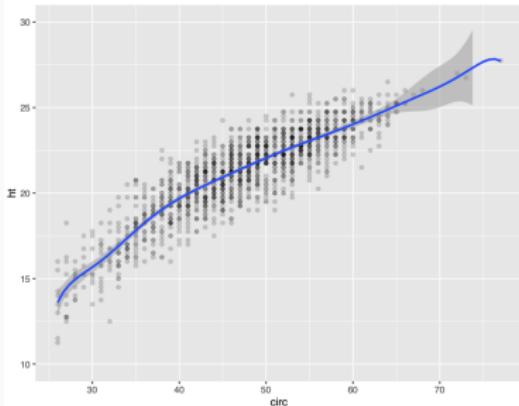
Modelos

- Un grado polinomial d que aumenta equivale a una **complejidad de modelo que aumenta** :

$$\beta \in \mathbb{R}^d = \text{plus de paramètres}$$

- Este modelo ya no se adapta a los datos que se le muestran.
- **Sobreajuste** : se adapta demasiado a \mathcal{D}_n y ya no generaliza

Ejemplo: ¿Qué grado elegir ?



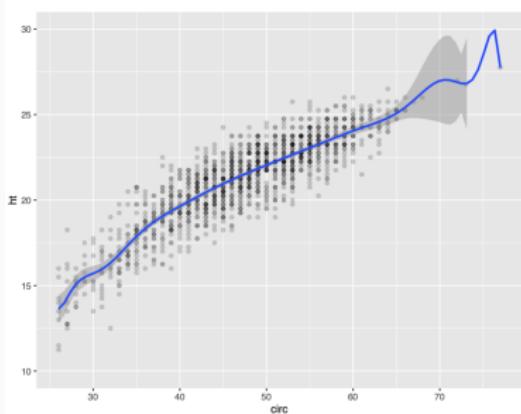
Modelos

- Un grado polinomial d que aumenta equivale a una **complejidad de modelo que aumenta** :

$$\beta \in \mathbb{R}^d = \text{plus de paramètres}$$

- Este modelo ya no se adapta a los datos que se le muestran.
- **Sobreajuste** : se adapta demasiado a \mathcal{D}_n y ya no generaliza

Ejemplo: ¿Qué grado elegir ?



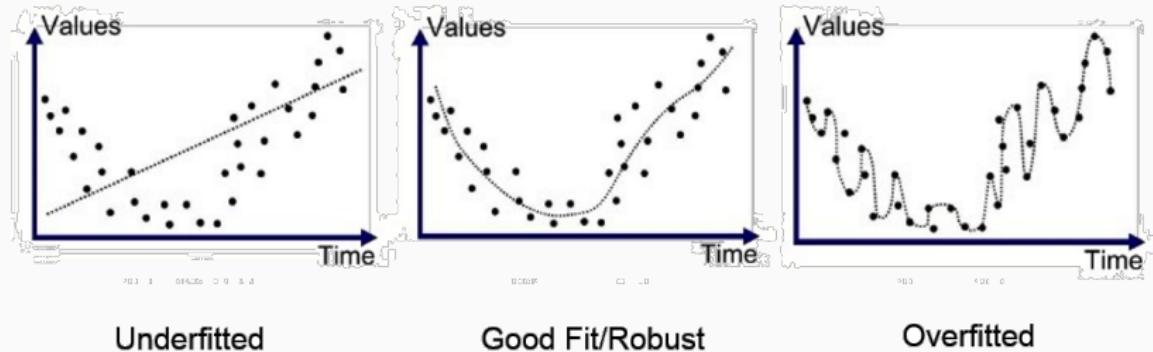
Modelos

- Un grado polinomial d que aumenta equivale a una **complejidad de modelo que aumenta** :

$$\beta \in \mathbb{R}^d = \text{plus de paramètres}$$

- Este modelo ya no se adapta a los datos que se le muestran.
- **Sobreajuste** : se adapta demasiado a \mathcal{D}_n y ya no generaliza

Ejemplo: ¿Qué grado elegir ?



Underfitted

Good Fit/R robust

Overfitted

Complejidad

- Si el modelo es demasiado simple, entonces ya no sigue los datos
- Si el modelo es demasiado complejo, el modelo aprende todas las irregularidades del dataset \mathcal{D}_n
- Ejemplo: si el modelo es el de la curva del medio más una componente de ruido no tenida en cuenta en las variables, el modelo de la derecha aprende ese ruido

Outline : Aprendizaje

Marco global

Generalidades

Contexto teórico

Aprendizaje

Función de costo

Errores, complejidad y
sobre-aprendizaje

Regularización

Optimización

Evaluación de la predicción

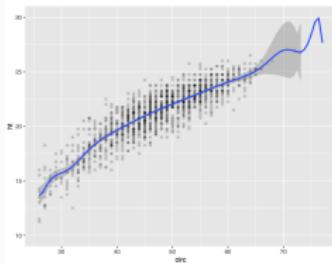
Aprendizaje supervisado

Diferentes conceptos

- **Datos etiquetados:** Regresión o Clasificación
- **Extracción de características:** Tono, Intensidad, Tempo o Edad, Salario, Género, etc.
- **Modelo f_θ :** SVM, Regresión Logística, Bosque Aleatorio, CNN
- **Función de costo a optimizar:** Pérdida de Bisagra, Pérdida de Entropía Cruzada, Pérdida Logística, Pérdida Cuadrada, etc.
- **Algoritmo de optimización:** Adam, SGD, BFGS, etc.
- **Métrica de evaluación:** Recall, Precisión, Mínimos Cuadrados, etc.

En el caso anterior:

- Descriptores y etiquetas:
- Modelo:
- Función de costo:
- Optim:
- Métrica de evaluación:



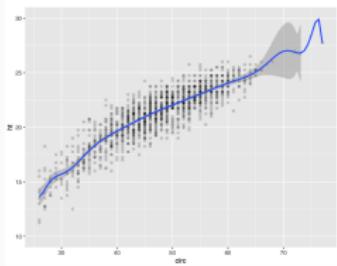
Aprendizaje supervisado

Diferentes conceptos

- **Datos etiquetados:** Regresión o Clasificación
- **Extracción de características:** Tono, Intensidad, Tempo o Edad, Salario, Género, etc.
- **Modelo f_θ :** SVM, Regresión Logística, Bosque Aleatorio, CNN
- **Función de costo a optimizar:** Pérdida de Bisagra, Pérdida de Entropía Cruzada, Pérdida Logística, Pérdida Cuadrada, etc.
- **Algoritmo de optimización:** Adam, SGD, BFGS, etc.
- **Métrica de evaluación:** Recall, Precisión, Mínimos Cuadrados, etc.

En el caso anterior:

- Descriptores y etiquetas: Circunferencia y longitud
- Modelo: Polinomio de grado 6
- Función de costo: Pérdida Cuadrada
- Optim: Descenso de Gradiente Estocástico (SGD)
- Métrica de evaluación: Mínimos Cuadrados



Entrenamiento: función de costo ℓ

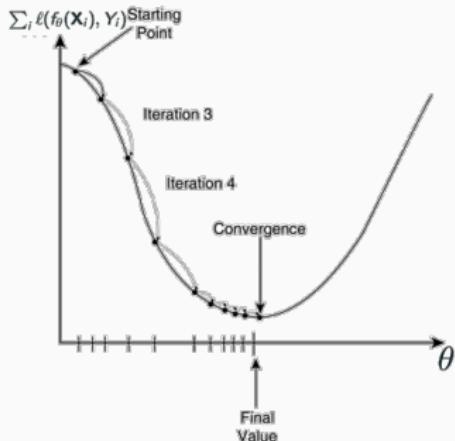
Principio

- Función que **penaliza** cuando el modelo comete errores
- Minimizar esta función sobre el conjunto de entrenamiento (riesgo empírico) para encontrar parámetros del modelo satisfactorios:

$$f_{\hat{\theta}} = \arg \min_{f_{\theta}, \theta \in \Theta} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ell(Y_i, f_{\theta}(\mathbf{X}_i))$$

- Convexidad: generalmente se reemplaza la función de costo $\ell^{0/1}$ por una función convexa ℓ' más fácil de optimizar
- Expresa el error desde una perspectiva **numérica**
- Transmite al algoritmo de aprendizaje lo que es importante y tiene sentido para la tarea
- Debe ser una función que se pueda optimizar eficientemente (convexa). **La función $\ell^{0/1} = \mathbb{1}_{f(\mathbf{x})=Y}$ no es utilizable** (ni siquiera continua).

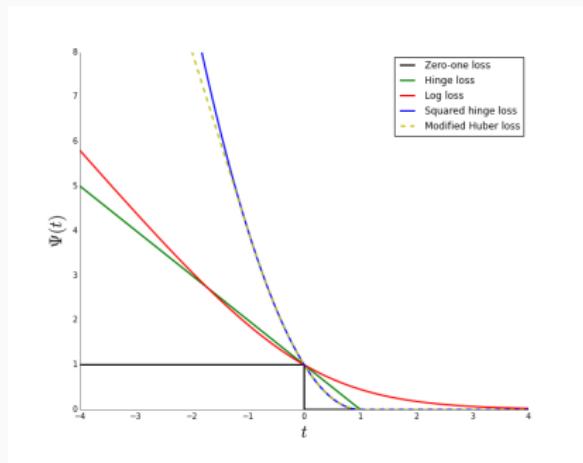
Función de costo y convexidad



Ejemplos de funciones de costo clásicas

- Logística (*Softmax*): $\ell'(Y, f(\mathbf{X})) = \log(1 + \exp^{-Yf(\mathbf{X})})$
- Bisagra: $\ell'(Y, f(\mathbf{X})) = (1 - Yf(\mathbf{X}))_+$
- Exponencial: $\ell'(Y, f(\mathbf{X})) = \exp^{-Yf(\mathbf{X})}$
- Cross-Entropy: $\ell'(Y, f(\mathbf{X})) = -(Y \ln(f(\mathbf{X})) + (1 - Y) \ln(1 - f(\mathbf{X})))$

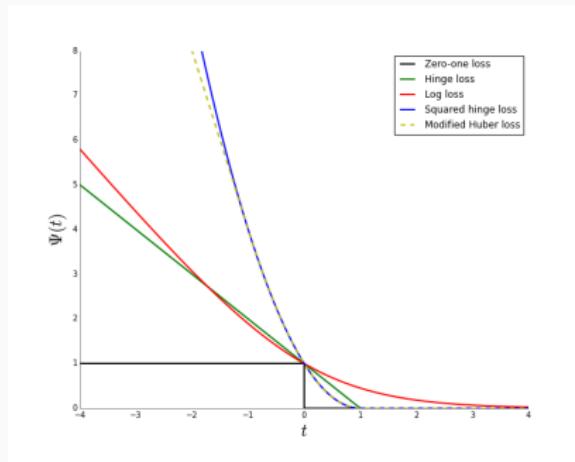
Función de costo y convexidad



Ejemplo de funciones de costo clásicas

- Logística (*Softmax*): $\ell'(Y, f(\mathbf{X})) = \log(1 + \exp^{-Yf(\mathbf{X})})$
- Exponencial: $\ell(Y, f(\mathbf{X})) = \exp^{-Yf(\mathbf{X})}$
- con $Y = \pm 1$, queremos que $f(\mathbf{X})$ sea muy **pos/neg** para $Y = +1/-1$
- Si $f(\mathbf{X}) = \text{signo}(Y)$, entonces $\exp^{-Yf(\mathbf{X})}$ es pequeño

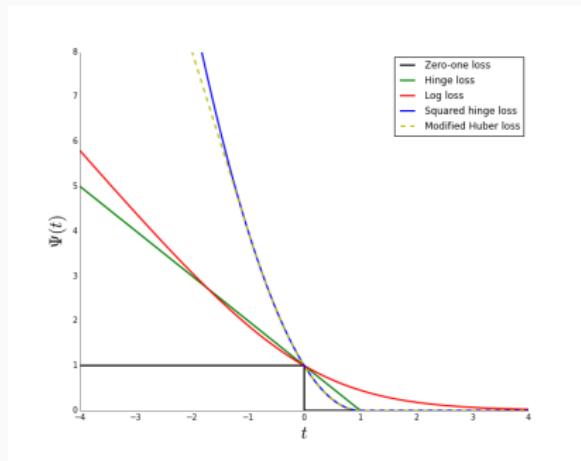
Función de costo y convexidad



Ejemplo de funciones de costo clásicas

- Cuadrada: $\ell'(Y, f(\mathbf{X})) = (1 - Yf(\mathbf{X}))^2$
- con $Y = \pm 1$, queremos exactamente $Y = f(\mathbf{X})$ (signo y amplitud)

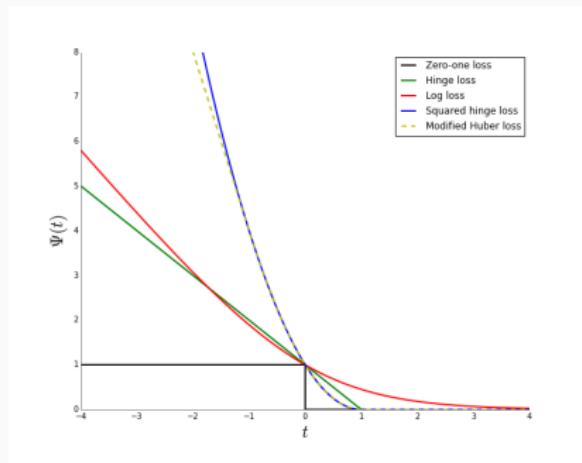
Función de costo y convexidad



Ejemplo de funciones de costo clásicas

- Bisagra: $\ell'(Y, f(\mathbf{X})) = (1 - Yf(\mathbf{X}))_+$
- con $Y = \pm 1$
- Si $f(\mathbf{X}) = signo(Y)$, y $|f(\mathbf{X})| > 1$ entonces $Yf(\mathbf{X}) > 1$

Función de costo y convexidad



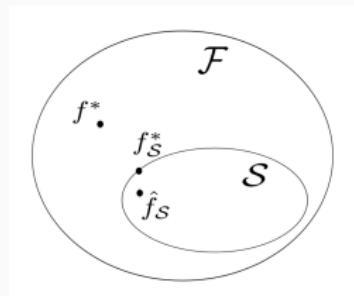
Ejemplo de funciones de costo clásicas

- Cross-Entropy: $\ell'(Y, f(\mathbf{X})) = -(Y \ln(f(\mathbf{X})) + (1 - Y) \ln(1 - f(\mathbf{X})))$
- con $Y \in [0, 1]$, queremos $f(\mathbf{X}) = Y$
-

$$\ell'(Y, f(\mathbf{X})) = \begin{cases} -\ln(1 - f(\mathbf{X})) & \text{si } Y = 0 \\ -\ln(f(\mathbf{X})) & \text{si } Y = 1 \end{cases}$$

Complejidad y modelos

- $\mathcal{F} = \{f : \text{funciones medibles } \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}\}$
- Mejor solución $f^* = \arg \min_{f \in \mathcal{F}} \mathcal{R}(f)$
- Clase de funciones $\mathcal{S} \subset \mathcal{F}$ utilizadas como modelos
- Objetivo ideal en \mathcal{S} : $f_S^* = \arg \min_{f \in \mathcal{S}} \mathcal{R}(f)$
- Estimación obtenida en \mathcal{S} : se obtiene \hat{f}_S tras un entrenamiento



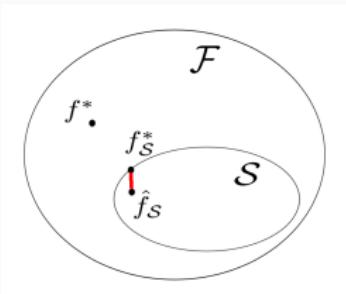
Error de aproximación y error general

$$\mathcal{R}(\hat{f}_S) - \mathcal{R}(f^*) = \underbrace{\mathcal{R}(f_S^*) - \mathcal{R}(f^*)}_{\text{error de aproximacion}} + \underbrace{\mathcal{R}(\hat{f}_S) - \mathcal{R}(f_S^*)}_{\text{error de estimacion}}$$

- El error de aproximación puede ser grande si el modelo \mathcal{S} no es adaptado
- El error de estimación puede ser grande si el modelo es complejo

Complejidad y modelos

- $\mathcal{F} = \{f : \text{funciones medibles } \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}\}$
- Mejor solución $f^* = \arg \min_{f \in \mathcal{F}} \mathcal{R}(f)$
- Clase de funciones $\mathcal{S} \subset \mathcal{F}$ utilizadas como modelos
- Objetivo ideal en \mathcal{S} : $f_S^* = \arg \min_{f \in \mathcal{S}} \mathcal{R}(f)$
- Estimación obtenida en \mathcal{S} : se obtiene \hat{f}_S tras un entrenamiento



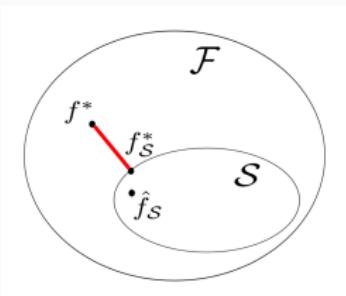
Error de aproximación y error general

$$\mathcal{R}(\hat{f}_S) - \mathcal{R}(f^*) = \underbrace{\mathcal{R}(f_S^*) - \mathcal{R}(f^*)}_{\text{error de aproximacion}} + \underbrace{\mathcal{R}(\hat{f}_S) - \mathcal{R}(f_S^*)}_{\text{error de estimacion}}$$

- El error de aproximación puede ser grande si el modelo \mathcal{S} no es adaptado
- El error de estimación puede ser grande si el modelo es complejo

Complejidad y modelos

- $\mathcal{F} = \{f : \text{funciones medibles } \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}\}$
- Mejor solución $f^* = \arg \min_{f \in \mathcal{F}} \mathcal{R}(f)$
- Clase de funciones $\mathcal{S} \subset \mathcal{F}$ utilizadas como modelos
- Objetivo ideal en \mathcal{S} : $f_S^* = \arg \min_{f \in \mathcal{S}} \mathcal{R}(f)$
- Estimación obtenida en \mathcal{S} : se obtiene \hat{f}_S tras un entrenamiento

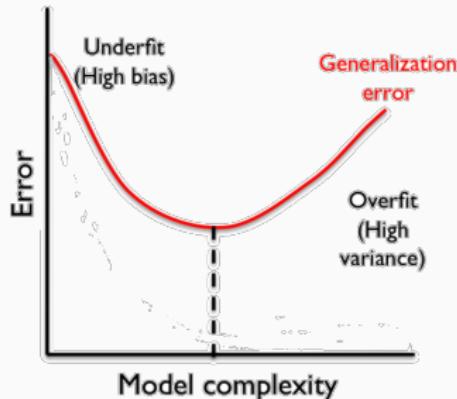


Error de aproximación y error general

$$\mathcal{R}(\hat{f}_S) - \mathcal{R}(f^*) = \underbrace{\mathcal{R}(f_S^*) - \mathcal{R}(f^*)}_{\text{error de aproximacion}} + \underbrace{\mathcal{R}(\hat{f}_S) - \mathcal{R}(f_S^*)}_{\text{error de estimacion}}$$

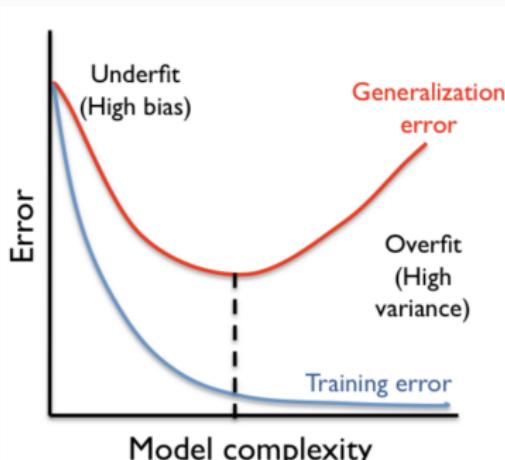
- El error de aproximación puede ser grande si el modelo \mathcal{S} no es adaptado
- El error de estimación puede ser grande si el modelo es complejo

Sobre-aprendizaje y sub-aprendizaje



- Según la complejidad del modelo (por ejemplo, tiempo de entrenamiento) se observa un comportamiento diferente
- Los modelos poco complejos son aprendidos fácilmente pero el error de aproximación puede ser grande (sub-aprendizaje)
- Los modelos muy complejos pueden tener el objetivo correcto pero un gran error de estimación (sobre-aprendizaje)

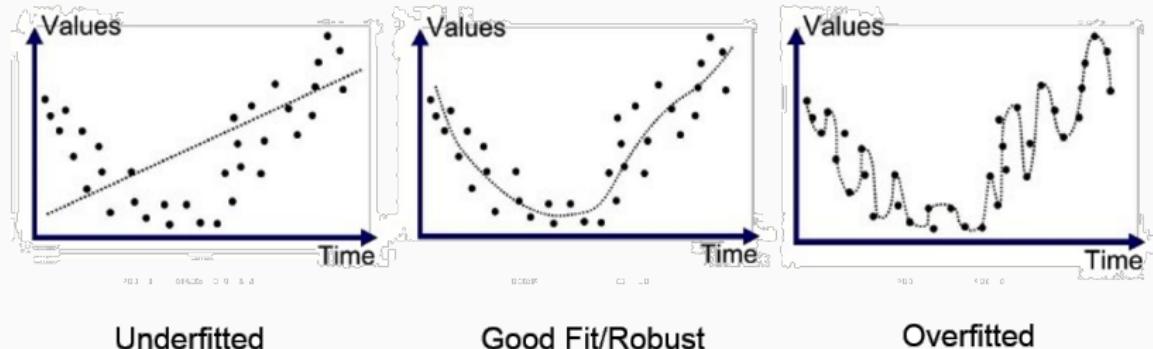
Sobre-aprendizaje: Problema



Error y riesgos

- El **riesgo empírico** (error en el conjunto de entrenamiento) disminuye con el aumento de la complejidad del modelo
- El **riesgo real** (error en observaciones de un nuevo conjunto) es muy diferente.
¡Tenemos un **problema de generalización!**
- Sobre-aprendizaje : los parámetros aprendidos son demasiado específicos para el conjunto de entrenamiento
- Se debe usar un criterio diferente al error en el conjunto de entrenamiento

Sobre-aprendizaje: Complejidad



Complejidad

- Si el modelo es demasiado simple, entonces ya no sigue los datos
- Si el modelo es demasiado complejo, el modelo aprende todas las irregularidades del conjunto de datos \mathcal{D}_n
- Ejemplo : si el modelo es el de la curva del medio más una componente de ruido no considerada en las variables, el modelo de la derecha aprende ese ruido

Sobre-aprendizaje: Regularización

Solución para combatir este problema de no generalización: **regularización**

Principio

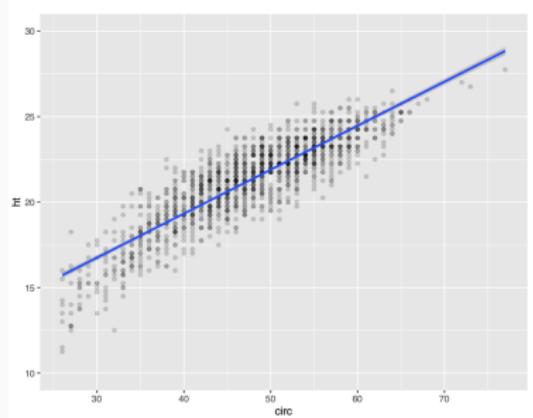
- El riesgo empírico de un estimador seleccionado de una familia de funciones dadas los datos está sesgado
- Al agregar una penalización en relación con la complejidad del modelo f_θ , podemos disminuirla y reducir el sobre-aprendizaje:

$$\mathcal{R}_n(f_\theta) \rightarrow \mathcal{R}_n(f_\theta) + pen(\theta)$$

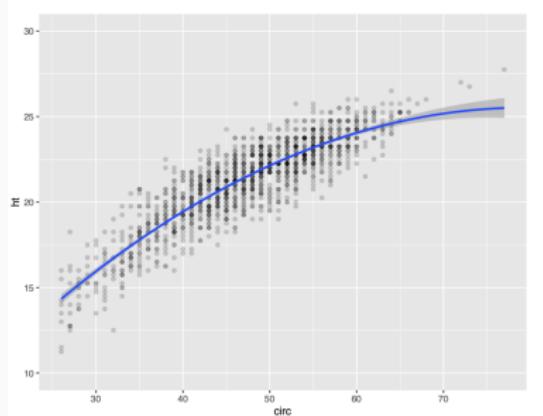
- Entonces, en el riesgo:

$$\arg \min_{f_\theta, \theta \in \Theta} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ell(Y_i, f_\theta(\mathbf{X}_i)) + pen(\theta)$$

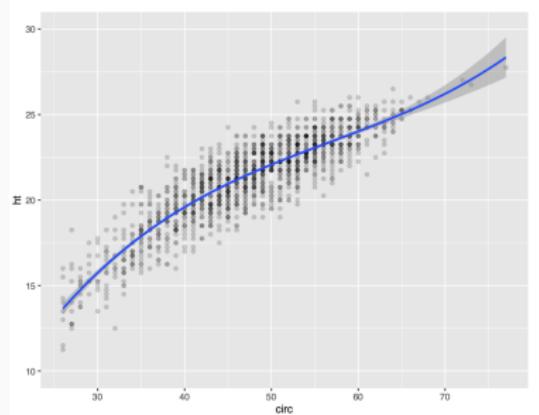
Sobre-aprendizaje: Regularización



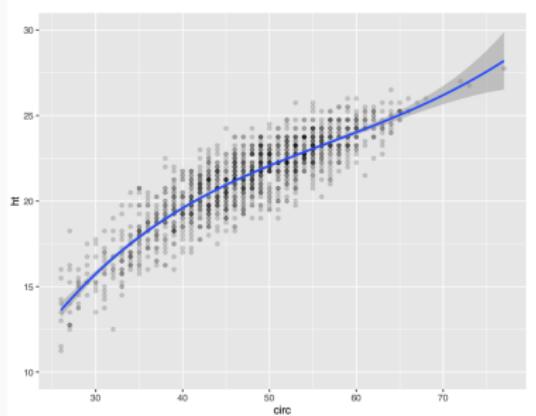
Sobre-aprendizaje: Regularización



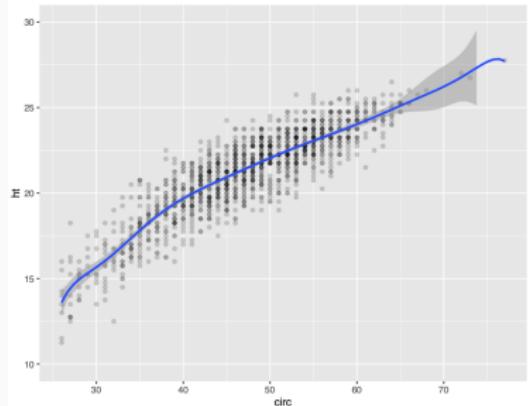
Sobre-aprendizaje: Regularización



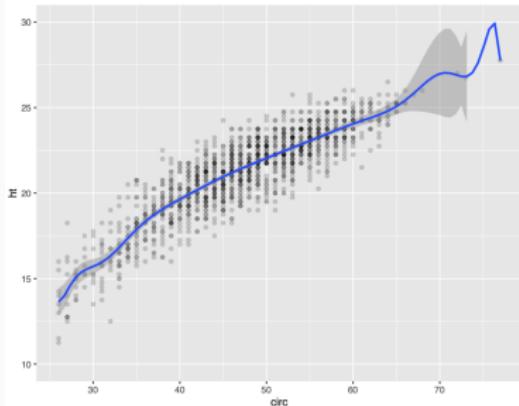
Sobre-aprendizaje: Regularización



Sobre-aprendizaje: Regularización



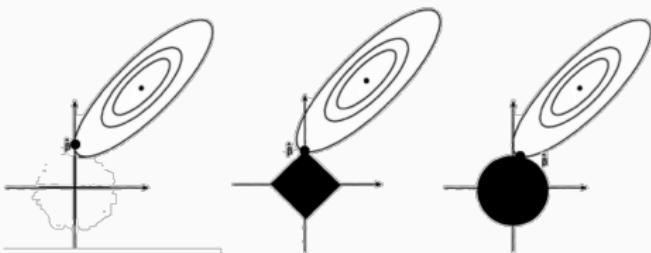
Sobre-aprendizaje: Regularización



Regularización

- Principio de parsimonia (navaja de Occam): cuanto más simple y funcione un modelo, mejor.
- Permite no tener en cuenta tantas particularidades de los datos.
- Intuición: disminuir la norma del modelo o su número de coeficientes, número de ramas del grafo (poda)

Sobre-aprendizaje: Regularización

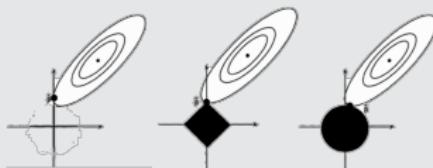


Regularizaciones clásicas

- AIC: $pen(\theta) = \lambda||\theta||_0$ (no convexa, parsimoniosa, poco utilizada)
 - Ridge: $pen(\theta) = \lambda||\theta||_2$ (convexa, no parsimoniosa)
 - Lasso: $pen(\theta) = \lambda||\theta||_1$ (convexa, parsimoniosa)
 - Elastic Net: $pen(\theta) = \lambda_1||\theta||_1 + \lambda_2||\theta||_2$ (convexa, parsimoniosa)
-
- Optimización simple si el costo (la regularización) es convexo
 - **Necesidad de especificar los λ** , que se convierten en nuevos hiperparámetros

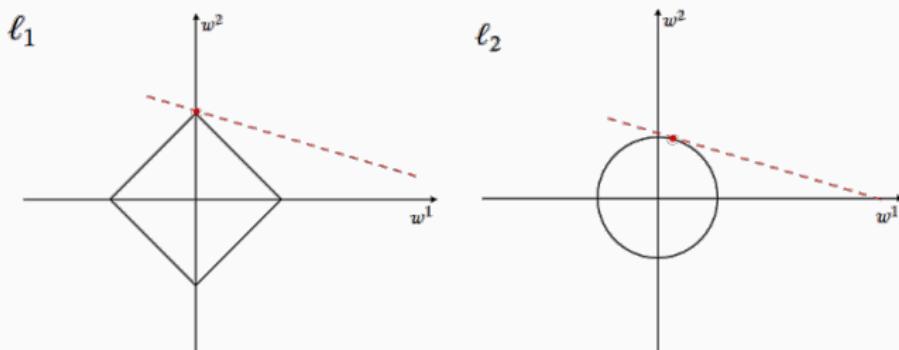
Intuición de la parsimonia

Lasso induce parsimonia

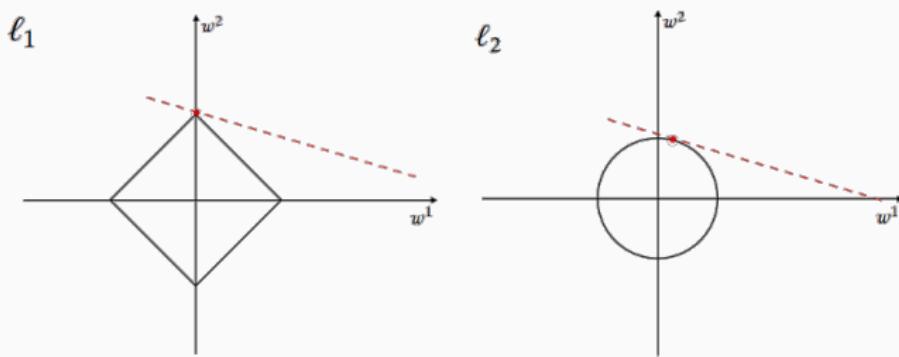


En negro $\mathcal{B}^n = \{x/x \in \mathbb{R}^d \text{ y } \|x\|_n < 1\}$ para $n = \{0, 1, 2\}$ en \mathbb{R}^2

- En dimensiones grandes, la mayoría de \mathcal{B}^1 se concentra en los ejes.
Esto equivale a tener valores nulos para otros ejes.

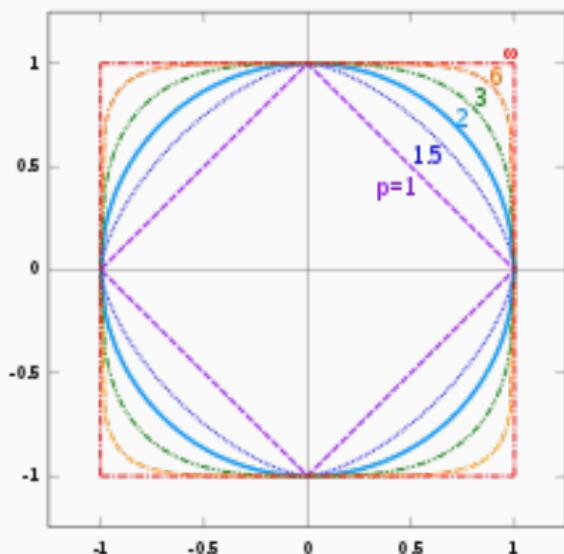


Intuición de la parsimonia : normas

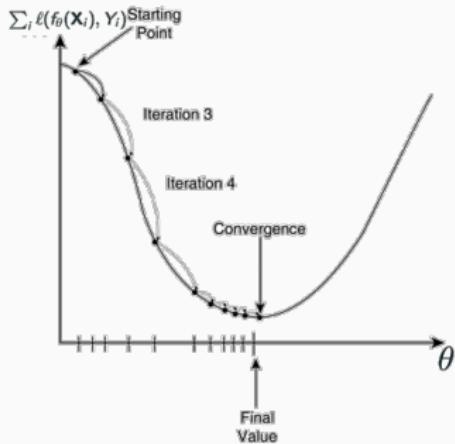


Ejercicio: Hemos visto la bola 1, y la bola 2. ¿Que forma tiene la bola infinita?

Intuición de la parsimonia : normas



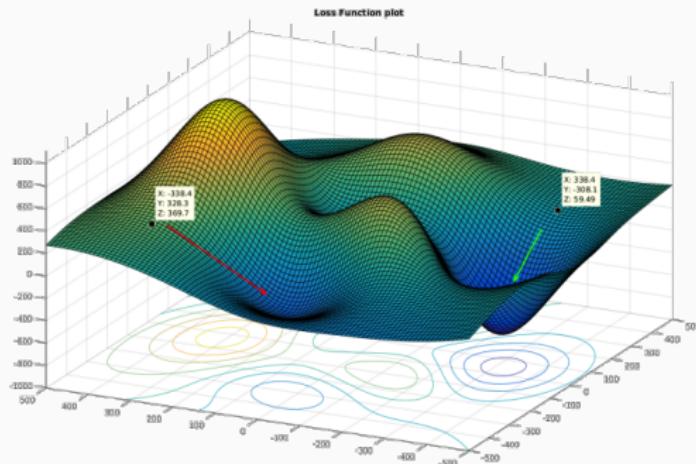
Optimización



Optimización de la función de costo

- Sirve para converger al valor mínimo de la función de costo en el conjunto de datos de entrenamiento
- Mejor caso: rápido y preciso
- A menudo se hacen aproximaciones para ser más rápidos

Visualización de la función de costo



Se puede visualizar el valor de la función de costo como una superficie:

- Los valores de los parámetros θ varían en el plano, y el valor de la función $\ell(\mathcal{D}_n; \theta)$ varía en altura.
- La convergencia se produce cuando se tienen parámetros que están en un hueco de esta superficie (mínimo local o global, dependiendo del modelo)

Optimización : visualización

Optimización : Descenso del Gradiente Estocástico

Descenso del gradiente

Después de cada cálculo de la función de costo $\ell(Y_i, f_\theta(\mathbf{X}_i); \theta)$, se calcula el gradiente de esta función para actualizar los parámetros θ :

$$\theta \leftarrow \theta - \alpha * \nabla_{\theta} \ell(Y_i, f_\theta(\mathbf{X}_i); \theta)$$

Ejemplo

- Sean $f_\theta(\mathbf{X}) = \theta^T \mathbf{X} = \sum_k^d \theta_k X^{(k)}$ y $\ell(Y, f_\theta(\mathbf{X})) = \frac{1}{2}(Y - f_\theta(\mathbf{X}))^2$

$$\nabla_{\theta} \ell(Y_i, f_\theta(\mathbf{X}_i); \theta) = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial \theta_d} \end{pmatrix} \cdot \ell(Y_i, f_\theta(\mathbf{X}_i); \theta) = \begin{pmatrix} X_i^{(1)}(Y - f_\theta(\mathbf{X}_i)) \\ \vdots \\ X_i^{(d)}(Y - f_\theta(\mathbf{X}_i)) \end{pmatrix}$$

Optimización : Descenso del Gradiente Estocástico

Descenso del gradiente

Después de cada cálculo de la función de costo $\ell(Y_i, f_\theta(\mathbf{X}_i); \theta)$, se calcula el gradiente de esta función para actualizar los parámetros θ :

$$\theta \leftarrow \theta - \alpha * \nabla_{\theta} \ell(Y_i, f_\theta(\mathbf{X}_i); \theta)$$

Ejemplo

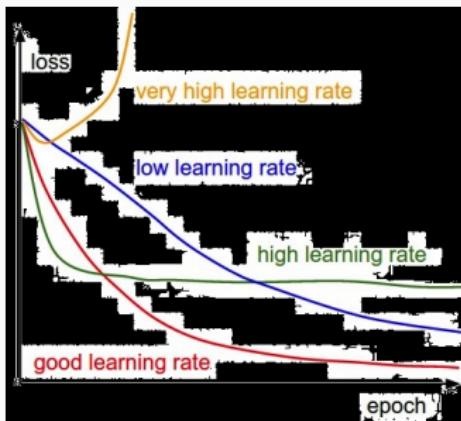
- Sean $f_\theta(\mathbf{X}) = \theta^T \mathbf{X} = \sum_k^d \theta_k X^{(k)}$ y $\ell(Y, f_\theta(\mathbf{X})) = \frac{1}{2}(Y - f_\theta(\mathbf{X}))^2$

$$\begin{pmatrix} \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_d \end{pmatrix} \leftarrow \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_d \end{pmatrix} - \alpha * \begin{pmatrix} X_i^{(1)}(Y - f_\theta(\mathbf{X}_i)) \\ \vdots \\ X_i^{(d)}(Y - f_\theta(\mathbf{X}_i)) \end{pmatrix}$$

Optimización : Importancia de la tasa de aprendizaje

Learning rate

- Un α demasiado pequeño no avanza en el aprendizaje
- Un α demasiado pequeño alarga el tiempo de entrenamiento
- Un α demasiado grande no permite alcanzar el mínimo (damos vueltas alrededor del agujero de la superficie)
- Un α demasiado grande no permite nada
- Una solución: disminuir α con el tiempo



Algoritmos de descenso del gradiente

Existen otros algoritmos existentes que se basan en un descenso del gradiente estocástico (SGD) con especificidades para mejorar su eficacia:

- Descenso del gradiente estocástico con momento
- Gradiente acelerado de Nestorov (NAG)
- Gradiente adaptativo (AdaGrad)
- Adam
- RMSprop

Finalmente, también existen otros métodos más clásicos de descenso: BFGS, L-BFGS, Quasi Newton, ...

Algoritmos de descenso del gradiente

Outline : Evaluación de la predicción

Marco global

Generalidades

Contexto teórico

Aprendizaje

Evaluación de la predicción

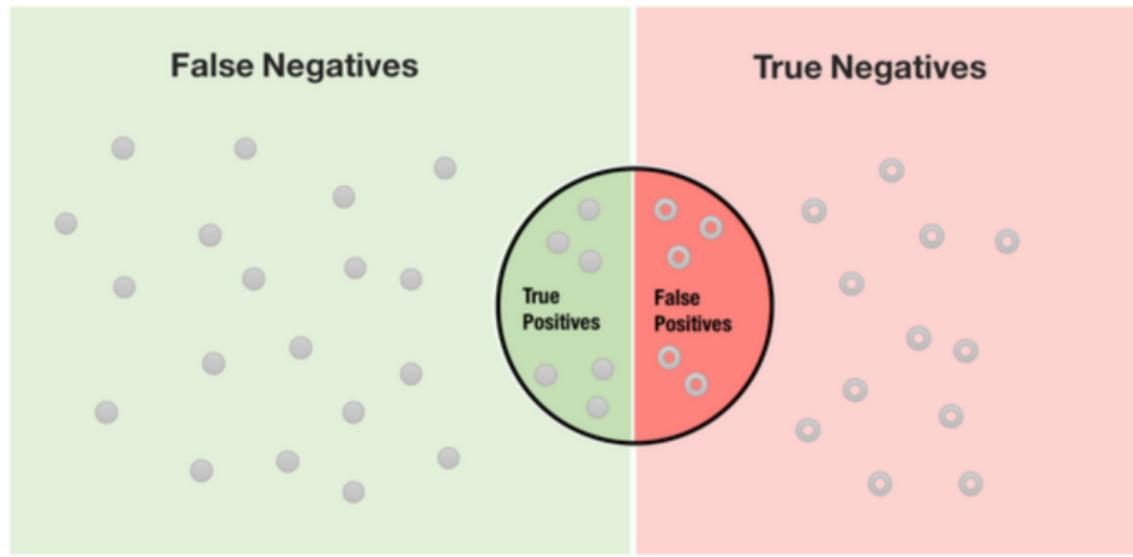
Métricas de clasificación

Métricas de regresión

Muestro para validación

Evaluación de la predicción: Verdaderos y falsos positivos

Relevant Information

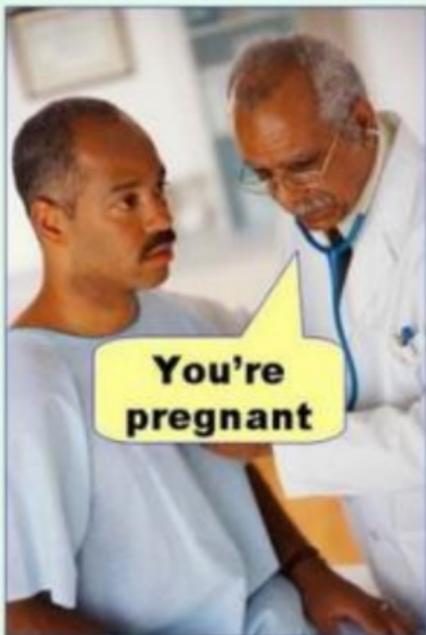


Preste atención

- Si el conjunto de datos no está equilibrado
- La importancia que se le da a los diferentes tipos de errores

Métricas : Tipos de errores

Type I error
(false positive)



Type II error
(false negative)



Métricas : Confusion Matrix

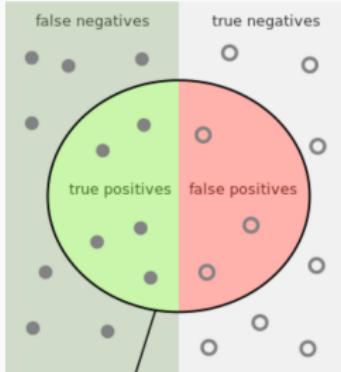
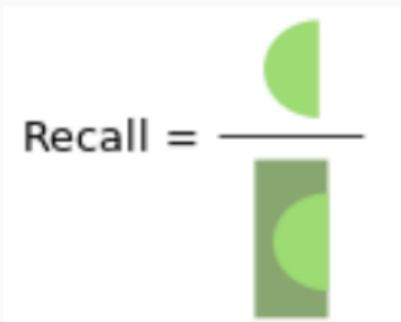
		Model prediction / Test result	
		Positive / Predicted positive	Negative / Predicted Negative
Actual / Ground truth / target / condition / Label	Positive (P)	True Positive (TP), hit	False Negative (FN), type II error, miss, Underestimation
	Negative (N)	False Positive (FP), type I error, false alarm, Overestimation	True negative (TN), correct rejection

Métricas : Recall

Recall: ¿Qué proporción de los positivos reales se clasificaron como positivos?

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

- ¿Se han clasificado a todos?
- ¿En qué caso esta métrica podría ser la más importante?

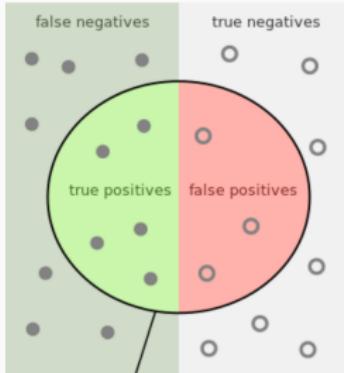


Métricas : Recall

Recall: ¿Qué proporción de los positivos reales se clasificaron como positivos?

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

- ¿Se han clasificado a todos?
- ¿En qué caso esta métrica podría ser la más importante?
- **Detección masiva de una enfermedad contagiosa:** no queremos perder a ningún contaminado

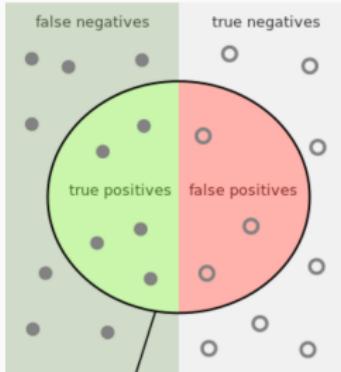


Métricas : Precisión

Precisión: ¿Qué proporción de las predicciones positivas son correctas?

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

- ¿Se han clasificado a todos?
- ¿En qué caso esta métrica podría ser la más importante?

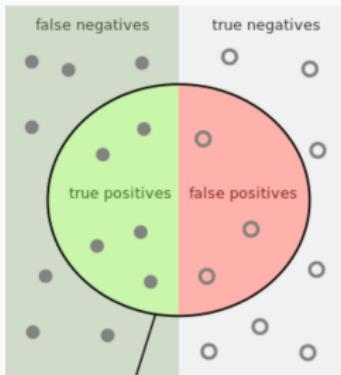


Métricas : Precisión

Precisión: ¿Qué proporción de las predicciones positivas son correctas?

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

- ¿Se han clasificado a todos?
- ¿En qué caso esta métrica podría ser la más importante?
- **Detección fina de una enfermedad mortal:** no queremos dar ningún tratamiento pesado sin necesidad

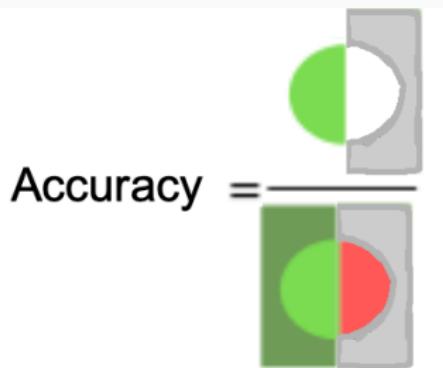


Métricas : Accuracy

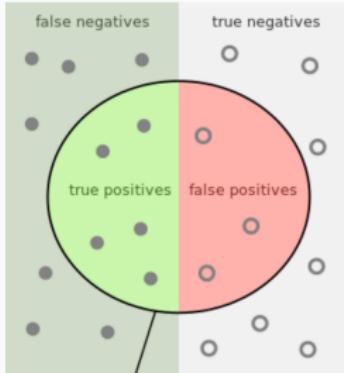
Precisión: ¿Qué proporción de las predicciones son correctas?

$$\text{Accuracy} = \frac{TP + TN}{TP + FP + TN + FN}$$

- ¿Qué tan bien funciona en el conjunto de datos global?
- ¿En qué caso esta métrica es completamente inútil?



$$\text{Accuracy} = \frac{\text{true positives} + \text{true negatives}}{\text{true positives} + \text{false positives} + \text{false negatives} + \text{true negatives}}$$

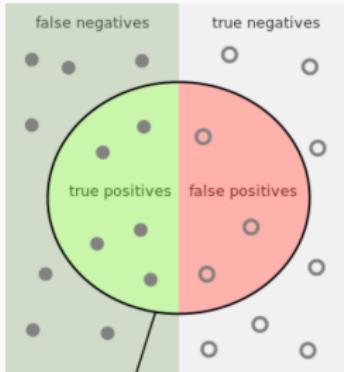
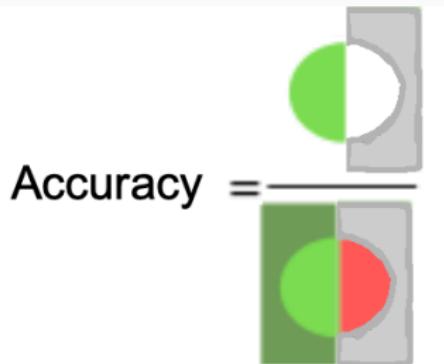


Métricas : Accuracy

Precisión: ¿Qué proporción de las predicciones son correctas?

$$\text{Accuracy} = \frac{TP + TN}{TP + FP + TN + FN}$$

- ¿Qué tan bien funciona en el conjunto de datos global?
- ¿En qué caso esta métrica es completamente inútil?
- **Detección de anomalías:** con 1% de casos positivos, un sistema que predice negativo todo el tiempo da un 99% de precisión...



Métricas : Ejercicio I

Considere 286 mujeres: 201 no tienen reincidencia de cáncer después de 5 años y 85 sí tienen.

Compare los modelos:

- M1: "todas reincident"
- M2: "ninguna reincident"

TODO

Hacer matrices de confusión, calcular accuracy, precision, recall y F1.

Métricas : Ejercicio II

Considere 286 mujeres: 201 no tienen reincidencia de cáncer después de 5 años y 85 sí tienen. Compare los modelos:

M1: Todas reinciden

M1	+	-
+	85	0
-	201	0

M2: Ninguna reincide

M2	+	-
+	0	85
-	0	201

Accuracy: $85/286 = 0.3$

Precision: $85/286 = 0.3$

Recall: 1

F1: $2*0.3/(0.3+1)=0.46$

Accuracy: $201/286 = 0.7$

Precision: $0/0 = \text{undef}$

Recall: $0/85=0$

F1: undef

Métricas : Cost Matrix

La idea: Hay errores mas graves que otras

Poner un peso sobre el tipo de error

**A veces yo se cuales errores son más costosos y cuales aciertos
son más valiosos.**

		Clase predicha	
		C(i j)	clase = +
Clase real	clase = +	C(+ +)	C(- +)
	clase = -	C(+ -)	C(- -)
		C(i j)	clase = +

$C(i|j)$: Costo de clasificar un objeto como clase j dado que es clase i

Métricas : Cost Matrix

La idea: Hay errores mas graves que otras

Poner un peso sobre el tipo de error

A mayor costo
peor el modelo.

Matrix Costo		Clase predicha	
		C(i j)	+
Clase real	+	-1	100
	-	1	0

		Clase predicha	
		+	-
Clase real	+	150	40
	-	60	250

$$\text{Accuracy}(M1) = 0.8$$

$$C(M1) = -1*150 + 100*40 + 1*60 + 0*250 = \\ 3910$$

		Clase predicha	
		+	-
Clase real	+	250	45
	-	5	200

$$\text{Accuracy}(M2) = 0.9$$

$$C(M2) = -1*250 + 100*45 + 1*5 + 0*200 = \\ 4255$$

Métricas

Diferentes métricas según lo que se busca

-

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

-

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

-

$$\text{Accuracy} = \frac{TP + TN}{TP + FP + TN + FN}$$

-

$$F1 = \frac{2 * \text{Recall} * \text{Precision}}{\text{Recall} + \text{Precision}} = \frac{2TP}{2TP + FP + FN}$$

Más generalmente: $\frac{1}{F_\beta} = \frac{1}{1+\beta^2} \left(\beta^2 \frac{1}{\text{Recall}} + \frac{1}{\text{Precision}} \right)$

- Curva ROC, AUC,...
- top-k accuracy, balanced accuracy

More infos: https://scikit-learn.org/stable/modules/model_evaluation.html#classification-metrics

Agregación de Métricas I

Si hay mas de una clase, hay que agregar las métricas per clase:

- **Micro-averaging**: computar métrica para cada clase y luego promediar
- **Macro-averaging**: crear matriz de confusión binaria para cada clase, combinar las matrices y luego evaluar

Agregación de Métricas II

		gold labels		
		urgent	normal	spam
system output	urgent	8	10	1
	normal	5	60	50
	spam	3	30	200
		recall_u =	recall_n =	recalls =
		$\frac{8}{8+5+3}$	$\frac{60}{10+60+30}$	$\frac{200}{1+50+200}$

Figure 4.5 Confusion matrix for a three-class categorization task, showing for each pair of classes (c_1, c_2), how many documents from c_1 were (in)correctly assigned to c_2

Agregación de Métricas II

Class 1: Urgent		Class 2: Normal		Class 3: Spam		Pooled	
true	true	true	true	true	true	true	true
urgent	not	normal	not	spam	not	yes	no
system	urgent	8	11	system	normal	60	55
system	not	8	340	system	not	40	212
				system	spam	200	33
				system	not	51	83
				system	yes	268	99
				system	no	99	635

$\text{precision} = \frac{8}{8+11} = .42$ $\text{precision} = \frac{60}{60+55} = .52$ $\text{precision} = \frac{200}{200+33} = .86$ $\text{microaverage precision} = \frac{268}{268+99} = .73$

$\text{macroaverage precision} = \frac{.42+.52+.86}{3} = .60$

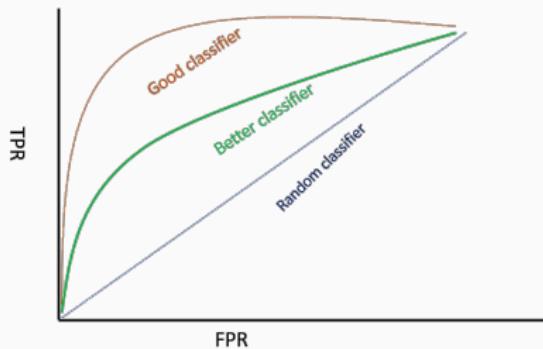
Figure 4.6 Separate contingency tables for the 3 classes from the previous figure, showing the pooled contingency table and the microaveraged and macroaveraged precision.

- Los micro-promedios son dominados por las clases más frecuentes.
- Los macro-promedios pueden sobre-representar a clases minoritarias.

Receiver operating characteristic (ROC)

Definicion

Ilustra el rendimiento de un sistema clasificador binario a medida que varía su **umbral de discriminación**. Se crea trazando la fracción de verdaderos positivos de los positivos (TPR = true positive rate) frente a la fracción de falsos positivos de los negativos (FPR = false positive rate), en varios ajustes de umbral.



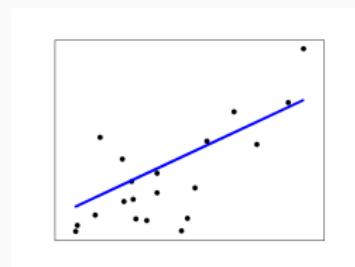
El AUC (area under curve) se utiliza porque mas grande significa mejor.

Evaluación de la predicción: distancia

Diferentes funciones para calcular el rendimiento de una regresión

- Error medio absoluto: $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |Y_i - f(\mathbf{X}_i)|$
- Error cuadrático medio: $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - f(\mathbf{X}_i))^2$
- Error medio mediano: $\text{mediana}(|Y_1 - f(\mathbf{X}_1)|, \dots, |Y_n - f(\mathbf{X}_n)|)$
- Coeficiente de determinación R^2 :

$$1 - \frac{\sum_{i=1}^n |Y_i - f(\mathbf{X}_i)|^2}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2} = \frac{\sum_{i=1}^n |f(\mathbf{X}_i) - \bar{Y}|^2}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}$$



R^2 representa la **proporción de la varianza explicada** por el modelo

Validación Cruzada (Cross-Validation)

Principio

- Separación del conjunto de datos \mathcal{D} en V conjuntos \mathcal{D}_v de tamaños similares
- Para cada $v \in \llbracket 1; V \rrbracket$:
 - Tomar $\mathcal{D}^{-v} = \mathcal{D} \setminus \mathcal{D}_v$
 - Entrenar \hat{f}^{-v} en \mathcal{D}^{-v}
 - Calcular $\mathcal{R}^{-v}(\hat{f}^{-v}) = \frac{1}{n_v} \sum (\mathbf{X}_i, Y_i) \in \mathcal{D}_v \ell(Y_i, \hat{f}^{-v}(\mathbf{X}_i))$
- Calcular el **riesgo general** : $\mathcal{R}^{CV}(\hat{f}) = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^V \mathcal{R}^{-v}(\hat{f}^{-v})$

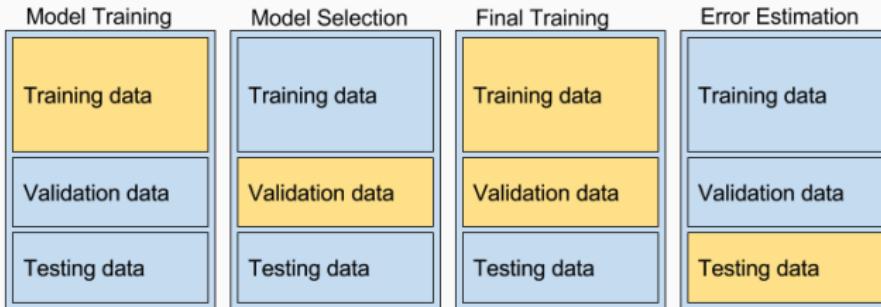


Conjuntos de validación y prueba (Holdout)

- La validación cruzada requiere V entrenamientos. ¿Existe un método menos costoso?

Separación del conjunto de datos \mathcal{D} en 3 conjuntos

- El **conjunto de entrenamiento** se utiliza para entrenar el clasificador
- El **conjunto de validación** proporciona una idea del poder de generalización del modelo entrenado. Puede usarse para detener el entrenamiento
- El **conjunto de prueba** es un conjunto independiente utilizado para probar el rendimiento del clasificador, no interactuará con el entrenamiento del clasificador



70/10/20 o 70/15/15 son buenas proporciones para train/val/test

Tamaño de la partición

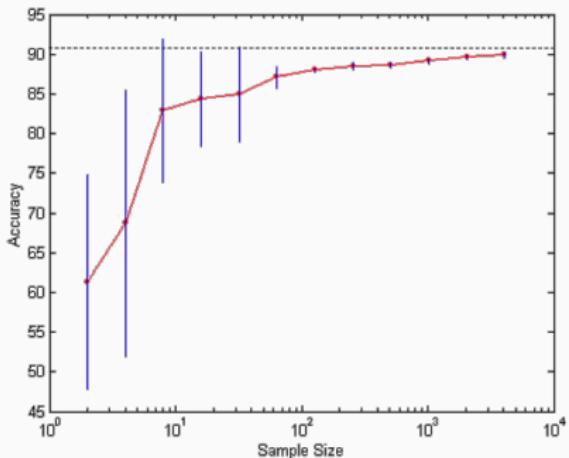


Figure 1: Performancias de un modelo segun la cantidad de datos bista

- La evaluación puede variar mucho según las particiones escogidas.
- Training muy pequeño \Rightarrow modelo sesgado.
- Testing muy pequeño \Rightarrow accuracy poco confiable.

Questions?

References i