# ¿Qué es Machine Learning?

## Sesgo, varianza, overfitting y underfitting

German Rosati
german.rosati@gmail.com

UNSAM - CONICET

30 de septiembre de 2024

# Hoja de ruta

## Temas a tocar

**¿Qué es un modelo? ¿Cómo evaluar un modelo?**

- Métricas de error - Loss Functions
- Train y Test Data
- Overfitting - Underfitting
- Balance Sesgo-Varianza
- Estimando el error de generalización

# ¿Qué es un modelo?

- Básicamente: una manera de proponer hipótesis sobre la forma en que se combinan variables
- En general, vamos a estar tratando de generar modelos de esta forma

$$Y = f(X) + \epsilon \tag{1}$$

- Todo el problema es estimar $f(X)$, es decir, de qué forma(s) se combinan las $X$ para generar un output
- Una posibilidad es suponer que $Y$ es una combinación lineal de las $X$

# ¿Qué es un modelo?

## Las dos culturas (Breiman, 2001) [1]

*"Todos los modelos son equivocados. Algunos son útiles."*
*George Box*


- El mundo como productor de outputs -$y$- en base a features -$X$-
- Problemas: ¿cuál es la manera en que el mundo produce resultados?
- Una forma común es asumir que los datos son generados por extracciones independientes de
  $output = f(predictores, ruido, parametros)$

# ¿Qué es un modelo?

## Las dos culturas (Breiman, 2001)[1]

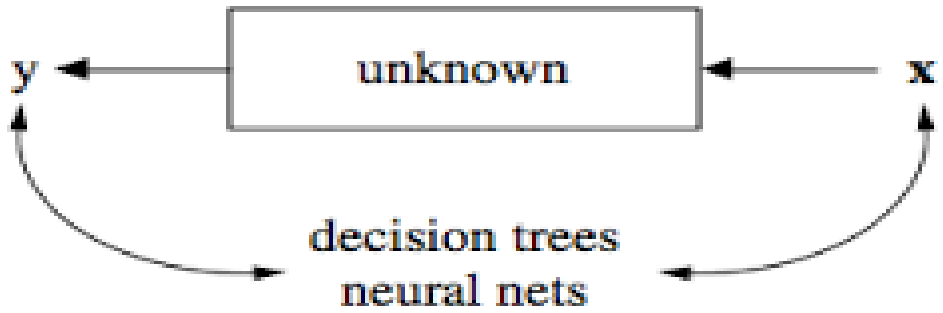
### Modelado estadístico


- Énfasis en $f(x)$. El modelo se postula en base a supuestos sobre $f(x)$
- Conocimiento acumulado, teoría, diseño de experimentos
- Los parámetros son estimados con los datos y luego se realizan las predicciones.
- Evaluación del modelo: estimadores insesgados, robustos, mínima varianza

# ¿Qué es un modelo?

## Las dos culturas (Breiman, 2001)[1]

**Modelado algorítmico (o *Machine Learning*, *Data Mining*, etc.)**




- Énfasis en $\hat{y}$
- El enfoque es encontrar una función $f(x)$ -un algoritmo- que opera sobre las $x$ para predecir las $y$.
- El modelo se "aprende"de los datos
- Evaluación del modelo: performance predictiva

# Ahora sí... ¿Como evaluar un modelo?

## Criterios I

- Ahora bien, ¿qué es un buen modelo?
- Desde la cultura del **modelado estadístico** (Breiman, 2001 [1]) un buen modelo es un modelo que ajusta bien a los datos y cuyos parámetros cumplen algunas propiedades "deseables"
  1. Ser insesgado
  2. Ser robusto
  3. Tener varianza mínima...
  4. Etc...

# ¿Como evaluar un modelo?

## Criterios II

- El **modelado algorítimo** (Breiman, 2001 [1]) piensa sobre todo en la capacidad predictiva
- Pero... ¿sobre cuáles datos?
- Queremos modelos que funcionen bien -tengan bajo error- en datos que NO vimos, es decir, en datos "futuros", datos de test, *out of sample*
- Pero muchas veces esos datos no existen o tardan en aparecer
- $\Longrightarrow$ Separación en *Training Data* y *Test Data*
- Entreno-estimo-construyo el modelo sobre *Training Data* y evalúo sobre *Test Data*

# ¿Como evaluar un modelo?

## Métricas de error - Loss Functions - Funciones de pérdida

**Requisito:** alguna medida que permita evaluar cómo funciona mi modelo

- Grande cuándo el modelo funciona "mal pequeña cuando funciona "bien"
- Sirve para "tunear", calibrar los parámetros del modelo
- Muchas métricas: por ahora nombramos dos
  - Mean Squared Error para variables cuantitativas

$$err = MSE = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i - \hat{y}_i)^2 \tag{2}$$

  - Error de clasificación para variables categóricas

$$err = Class = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} I(y_i \neq \hat{y}_i) \tag{3}$$

# ¿Como evaluar un modelo?

## Train y Test Data

- Que un modelo funcione bien en datos de entrenamiento no quiere decir que funcione bien en datos nuevos...
- En general, el error en datos de entrenamiento es más bajo que el error en datos de test

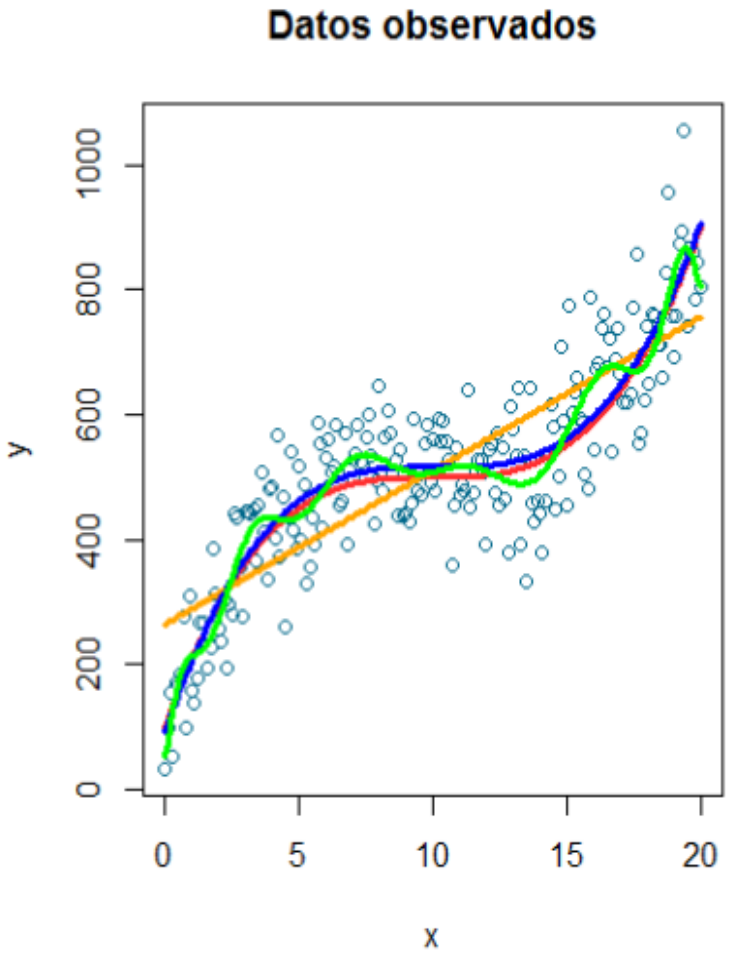
# ¿Como evaluar un modelo?

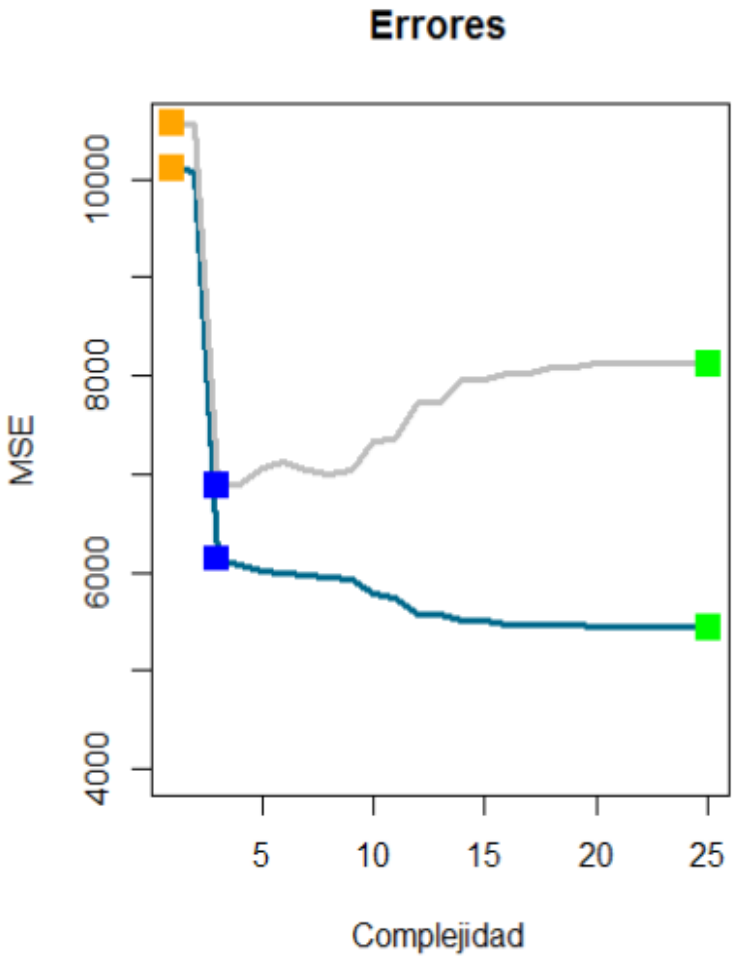
## Ejemplo teórico

- Función original: $f(x_i) = 500 + 0{,}4X_i^3 + \epsilon_i$
- Modelo Lineal: $\hat{f}(x_i) = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_i$
- Modelo Cuadrático: $\hat{f}(x_i) = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_i + \hat{\beta}_2 X_i^2$
- Modelo Polinómico de orden 25:
  $\hat{f}(x_i) = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_i + \hat{\beta}_2 X_i^2 + ... + +\hat{\beta_{25}} X_i^{25}$

# ¿Como evaluar un modelo?

## Ejemplo teórico



# ¿Como evaluar un modelo?

## Overfitting - Underfitting

- TrS-error decrece constantemente: siempre es posible generar un modelo muy "complejo" como para que ajuste bien a los datos (¿cuáles?)
- TeS-error decrece hasta un punto y luego comienza a crecer nuevamente. Se produce "overfitting" (sobreajuste).
- El modelo "trabaja" demasiado para encontrar patrones en el TrS y tiende a confundir el verdadero patrón ($f(x)$ - el "proceso generador de los datos") con ruido ($\epsilon$) que no existe en el TeS.

# ¿Como evaluar un modelo?

## Balance Sesgo-Varianza

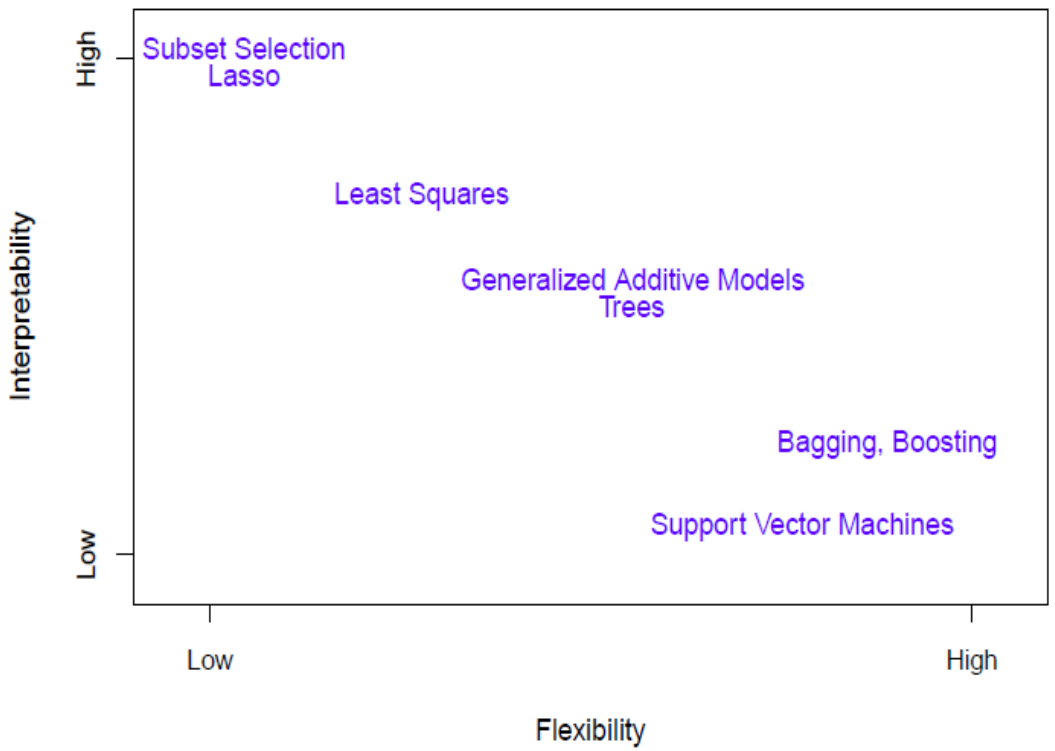
- El ECM puede descomponerse en tres partes

$$E[(y - \hat{f}(x))^2] = V(\hat{f}(x)) + bias^2 + \sigma^2 \tag{4}$$

- **Error debido al sesgo:** diferencia entre el valor esperado de nuestra predicción y el verdadero valor poblacional
- **Error debido a la varianza:** producido por la variabilidad de las predicciones del modelo en un punto determinado.
- El $\sigma^2$ es la parte "irreductible"del error en el modelo

# ¿Como evaluar un modelo?

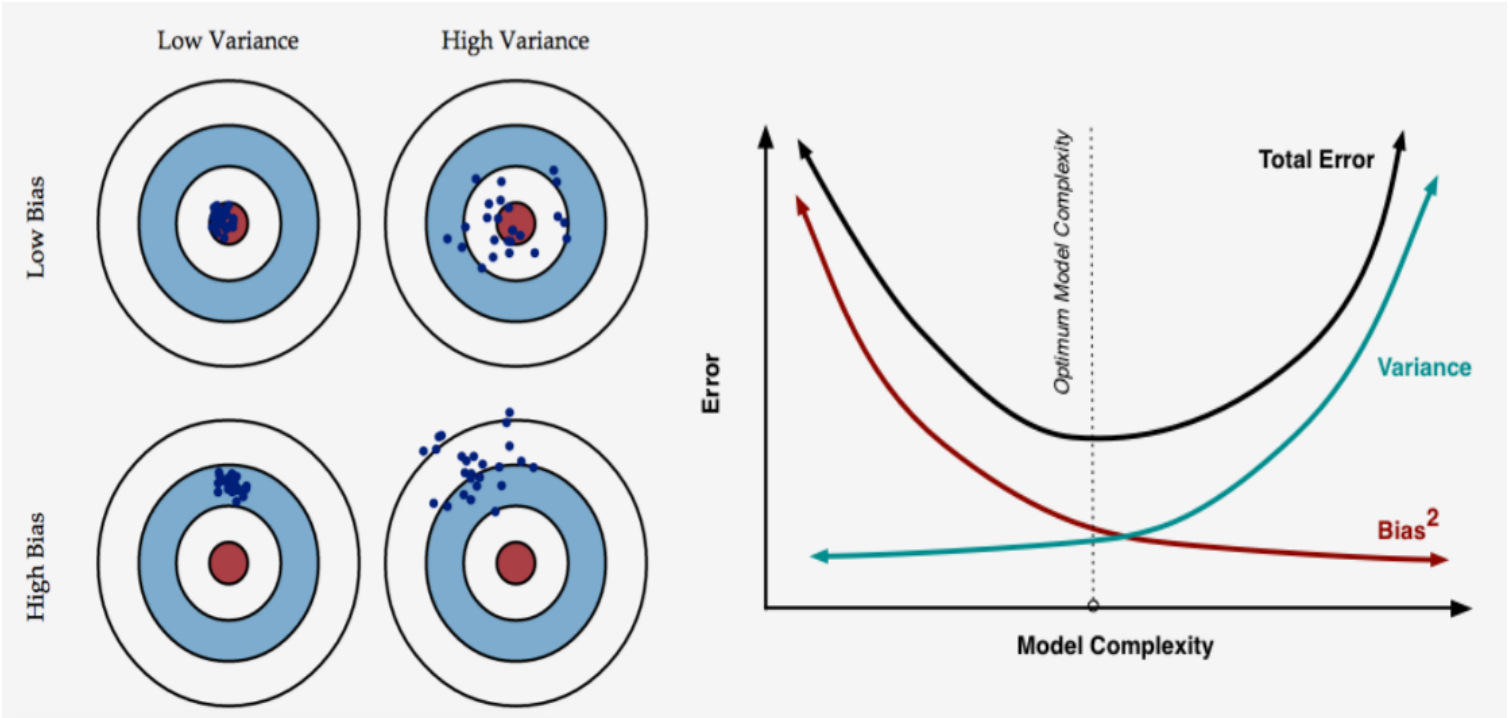
## Algunos trade-offs




**Fuente:** (James, Witten, Hastie y Tibshirani, 2013 [2]) : 25

# ¿Como evaluar un modelo?

## ¿Cómo evaluar un modelo? - Balance Sesgo-Varianza




**Fuente:** Scott Fortman's Blog

# ¿Como evaluar un modelo?

## Estimando el error de generalización

- Herramientas para estimar el error de generalización de un modelo -qué tan bien va a funcionar sobre datos "no vistos"
  1. *Validation Set Approach*
  2. *Cross Validation*
  3. *Bootsrap*
  4. *Etc.*

# ¿Como evaluar un modelo?

## Validation Set Approach

- Dividimos el **aleatoriamente** *dataset* en *Training Set - TrS* y *Test Set - TeS*
- El modelo se ajusta en el TrS y el modelo ajustado se usa para predecir las observaciones correspondientes al TeS

# ¿Como evaluar un modelo?

## Cross Validation

1. Dividimos el **aleatoriamente** *dataset* en $K$ porciones de igual tamaño
2. Fiteamos el modelo dejando como TeS una de las $K$ partes
3. Computamos el error en la parte dejada afuera previamente
4. Repetimos para $k = 1, 2, 3, ..., K$

La estimación del error será el promedio de las $K$ estimaciones de error

$$CV(\hat{f}) = \sum_{k=1}^{K} \frac{n_k}{N} err_k \tag{5}$$

# ¿Como evaluar un modelo?

## Cross Validation

| | Dataset Original | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| Iteración 1 | C1 (VaSet) | C2 (TrSet) | C3 (TrSet) | C4 (TrSet) | C5 (TrSet) |
| Iteración 2 | C1 (TrSet) | C2 (VaSet) | C3 (TrSet) | C4 (TrSet) | C5 (TrSet) |
| Iteración 3 | C1 (TrSet) | C2 (TrSet) | C3 (VaSet) | C4 (TrSet) | C5 (TrSet) |
| Iteración 4 | C1 (TrSet) | C2 (TrSet) | C3 (TrSet) | C4 (VaSet) | C5 (TrSet) |
| Iteración 5 | C1 (TrSet) | C2 (TrSet) | C3 (TrSet) | C4 (TrSet) | C5 (VaSet) |

# ¿Como evaluar un modelo?

## Cross Validation

¿Cómo elegimos $K$?

- $K$ pequeño maximiza datos para estimar, sensible a valores extremos
- $K$ grande maximza datos para evaluar, modelo estimado con menor precisión
- Regla del dígito pulgar oscilante: 5 o 10 (James, Witten, Hastie y Tibshirani, 2013 [2])

# Comentarios finales

- La máxima de Box...
- Dado que todos los modelos son simplificaciones de la realidad, no podemos llegar a la "verdad" por complejidad creciente.
- Principio de Occam, caso contrario, *overfitting*
- ¿Modelado estadístico o algorítmico? Dependerá del problema en cuestión

# Referencias bibliográficas I


Breiman, L.
Statistical modeling: The two cultures (with comments and a rejoinder by the author).
*Statistical Science 16*, 3 (08 2001), 199–231.

James, G., Witten, D., Hastie, T., and Tibshirani, R.
*An Introduction to Statistical Learning – with Applications in R*, vol. 103 of *Springer Texts in Statistics*.
Springer, New York, 2013.