

Inteligencia artificial avanzada para la ciencia de datos

Reto

Etapa 4. Reporte de modelación

Diego Arturo Padilla Domínguez - A01552594

Keyuan Zhao - A01366831

Carolina Herrera Martínez - A01411547

Cutberto Arizabalo Nava - A01411431

Jose Pablo Cobos Austria - A01274631

Campus Querétaro

04 de noviembre de 2022

Etapa 4: "Modeling"

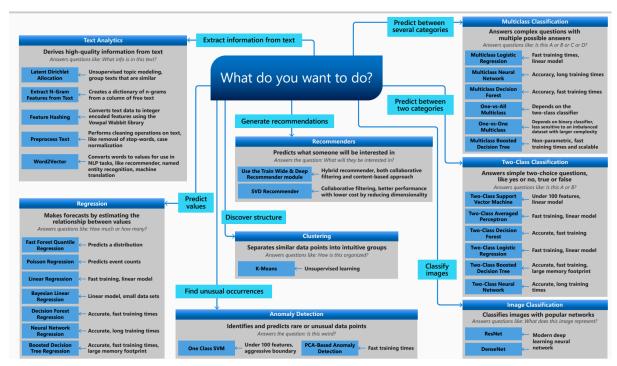
Para ejecutar esta etapa es esencial enfocarnos en el objetivo de la minería de datos, el cual es el siguiente:

"Obtener datos representativos sobre las rutas Origen-Destino mediante la limpieza, transformación y análisis del set de datos inicial. Utilizar dichos datos para entrenar un modelo que sea capaz de predecir la cantidad de viajes a una comuna en base a las características de dicha comuna."

Por ende, resulta natural que una vez obtenida la matriz de viajes procedamos a buscar cuál es el mejor modelo para dicha predicción.

En el área de ML existen 3 grandes ramas con un gran abanico de modelos que podemos utilizar. Por lo tanto, es importante saber distinguir qué es lo que queremos hacer, para poder elegir el modelo adecuado.

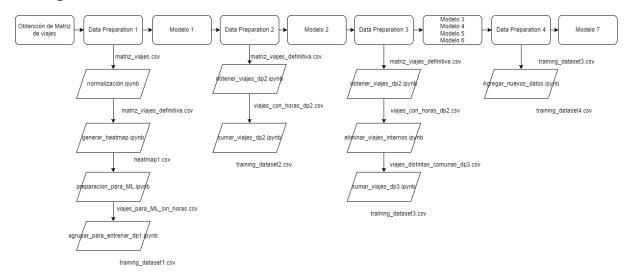
Como base para esta decisión, usaremos la guía de ML de Microsoft Azure, la cual se muestra a continuación:



En nuestro caso, queremos predecir valores (cantidad de visitas a una comuna) en base a los atributos de la comuna, por lo que necesitamos usar una Regresión.

Vemos que existen distintos tipos de regresión, cada tipo tiene distintas ventajas y requisitos para su uso.

Diagrama de modelación



Diseño de pruebas

Debido a la cantidad de registros se decidió hacer una distribución del dataset en:

Entrenamiento: 85%

Pruebas: 15%

Para verificar la calidad y validez de los datos se tomará como medida el porcentaje medio de error absoluto de cada dataset (MAPE).

$$\mathrm{M} = rac{1}{n} \sum_{t=1}^n \left| rac{A_t - F_t}{A_t}
ight|$$

Se decidió optar por el uso MAPE porque se utiliza a menudo en la práctica debido a su interpretación muy intuitiva en términos de error relativo, permitiendo mostrar resultados que todos los stakeholders puedan comprender sin necesidad de ver todo el análisis previo [3].

Una de sus características es que sus distribuciones de error subyacentes de estas medidas sólo tienen valores positivos y no tienen límite superior, los errores porcentuales son muy propensos a la asimetría a la derecha en la práctica real, pero esto no debe de ser algo de que preocuparnos, ya que por el contexto no es una desventaja [1].

Una de sus principales ventajas es que aunque haya un cambio en la escala de los datos, la escala de la metrica sigue siendo la misma, siendo esto muy útil al momento de hacer distintas iteraciones en los modelos.

El MAPE ofrece las mismas propiedades que el MSE y el RMSE, pero se expresa en porcentajes [2],

Otro factor para no elegir otra métrica es que se tiene planteado el uso de variables indicatriz (dummie), este tipo de variables provocan que el uso de otras métricas como R2 se vean afectadas, provocando que su valor no sea correcto.

Para cada uno de los modelos se usarán las mismas pruebas.

Modelo 1. Regresión Lineal

Como el modelo más sencillo de regresión es el de regresión lineal, lo utilizaremos como modelo base/benchmark, y este será nuestro punto de comparación con el resto de modelos.

Además, el modelo de regresión lineal nos brinda la ventaja de que podemos analizar las propiedades estadísticas para obtener insights como la significancia de cada variable independiente.

Framework: Sci-Kit Learn

Código Fuente

Descripción de datos:

Este modelo recibe como variables independientes lo siguiente:

- Número de escuelas
- Número de hospitales
- Número de iglesias
- Número de zonas típicas

Y como variable dependiente:

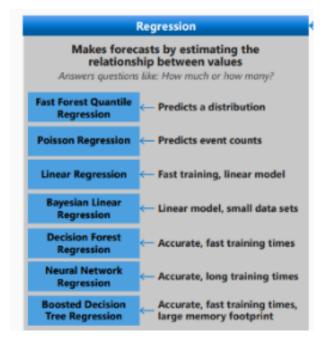
Número de viajes hacia la comuna

Parámetros:

Al ser un modelo de regresión lineal y se utilizará como modelo benchmark, este utiliza los parámetros por defecto de la librería.

Descripción del modelo:

Se esperan resultados no muy significativos, se estima una variación promedio mayor al 50%.



No se puede modelar relaciones complejas y no se pueden capturar relaciones no lineales sin transformar la entrada, por lo que se tiene que trabajar duro para que se ajuste a funciones no lineales. Puede sufrir con valores atípicos.

Interpretación del modelo:

	0	LS Regress:	ion Results			
Dep. Variable:	Num_viajes R-squared:			0.759		
Model:		OLS	Adj. R-square	d:	0.	733
Method:	Least	Squares	F-statistic:			.17
Date:			Prob (F-stati		5.45€	-11
Time:	:	20:12:52	Log-Likelihoo	d:	-480	.40
No. Observations:		42	AIC:		97	0.8
Df Residuals:		37	BIC:		97	9.5
Df Model:		. 4				
Covariance Type:						
			t			0.975
const	1.116e+04	6602.803	1.690	0.099	-2221.256	2.45e+6
Num_escuelas	2.1012	0.608	3.454	0.001	0.869	3.33
Num_hospitales						
Num_iglesias						
Num_zonas_tipicas	-448.5378	156.228	-2.871	0.007	-765.085	-131.99
 Omnibus:		5.674	Durbin-Watson	:	2.	126
Prob(Omnibus):		0.059	Jarque-Bera (JB): 4.374		374	
Skew:		0.650	Prob(JB): 0.112		112	
Kurtosis:		3.899	99 Cond. No. 2.79e+04			

Al analizar los resultados de la regresión lineal podemos ver que el impacto que hace el intercepto (la constante) no es estadísticamente significativo al tener un P value de 0.09, superando el margen de tolerancia de 0.05.

Asímismo vemos que el número de escuelas es la variable que tiene una mayor significancia estadística, ya que su t value es mayor al de las demás variables. Esta variable se relaciona de manera positiva con el número de viajes recibido. Es decir que a mayor escuelas, mayor cantidad de viajes recibidos en una comuna. Por cada escuela nueva que haya, se generarán 2 nuevos viajes.

Con respecto a los hospitales, vemos que es estadísticamente significativo (p value menor a 0.05). Esta variable se relaciona positivamente con la cantidad de viajes recibidos en una comuna, es decir que a mayor cantidad de hospitales, mayor cantidad de viajes recibidos. Por cada nuevo hospital que haya, se generarán 50 nuevos viajes.

Hablando de las iglesias, esta variable es estadísticamente significativa. Se relaciona positivamente con los viajes recibidos por comuna, por lo que a mayor

cantidad de iglesias, más viajes se reciben en una comuna. Por cada nueva iglesia que haya, se generarán 431 nuevos viajes.

En lo que respecta a las zonas típicas, la variable es estadísticamente significativa. Tiene una relación negativa con la cantidad de viajes, así que mientras más zonas típicas se tengan, menos viajes se recibe en la comuna. Por cada nueva zona típica, se reciben 448 viajes menos.

Evaluación del modelo:

El modelo obtuvo un MAPE del 67.03% al evaluar los datos de pruebas, este resultado está altamente alejado de nuestro objetivo de minería de datos, pero dando los resultados esperados previos al entrenamiento del modelo.

Modelo 2. Regresión Lineal

Debido a que se realizó una añadidura en la cantidad de variables, se utilizará nuevamente el modelo inicial de regresión lineal con el fin de saber si las variables añadidas son útiles para la mejora del modelo.

Framework: Sci-kit Learn

Este modelo recibe como variables independientes lo siguiente:

- Número de escuelas
- Número de hospitales
- Número de iglesias
- Número de zonas típicas
- 23 variables dummies para las horas del día

Y como variable dependiente:

Número de viajes hacia la comuna

Código Fuente

Parámetros:

Al ser un modelo de regresión lineal y solo se busca ver si las variables agregadas mejoran el modelo, éste utiliza los parámetros por defecto de la librería.

Descripción del modelo:

Se espera una mejora de al menos un 10% con respecto al modelo anterior.

Al igual que en el modelo anterior, no se pueden modelar relaciones complejas. No se pueden capturar relaciones no lineales sin transformar la entrada, por lo que se tiene que trabajar duro para que se ajuste a funciones no lineales. Puede sufrir con valores atípicos.

Interpretación del modelo

Dep. Variable: Model: Method: Date: Time: No. Observations: Df Residuals: Df Model: Covariance Type:	Least Mon, 28 M	OLS Squares lov 2022 19:04:12 1020 992 27	R-squared: Adj. R-square F-statistic: Prob (F-stati Log-Likelihoo AIC: BIC:	stic):	0. 12 3.45e	17.5 ≘+04
==========	coef	std err	t	P> t	[0.025	0.975]
const	-1837.0358	169.705	-10.825	0.000	-2170.058	-1504.013
Num escuelas	3.9580	0.232		0.000	3.503	4.413
Num_hospitales	102.5404	5.543		0.000	91.663	113.418
Num iglesias	832.9501	61.073		0.000	713.103	952.797
Num zonas tipicas	-877.6988	58.570		0.000	-992.633	-762.764
Hora_llegada_1	1549.4546	226.744	6.834	0.000	1104.502	1994.407
Hora_llegada_2	1813.1202	229.522	7.900	0.000	1362.717	2263.524
Hora_llegada_3	1146.8853	225.522	5.085	0.000	704.331	1589.440
Hora_llegada_4	818.8051	230.987	3.545	0.000	365.527	1272.083
Hora_llegada_5	526.5857	228.115	2.308	0.021	78.943	974.228
Hora_llegada_6	573.7907	234.032	2.452	0.014	114.537	1033.045
Hora_llegada_7	416.2766	229.509	1.814	0.070	-34.102	866.656
Hora_llegada_8	629.2827	225.469	2.791	0.005	186.831	1071.734
Hora_llegada_9	802.0096	226.748	3.537	0.000	357.049	1246.970
Hora_llegada_10	1272.2533	234.092	5.435	0.000	812.881	1731.626
Hora_llegada_11	1489.8534	226.737	6.571	0.000	1044.915	1934.792
Hora_llegada_12	2010.5730	223.057	9.014	0.000	1572.855	2448.291
Hora_llegada_13	2391.1551	224.257	10.663	0.000	1951.083	2831.227
Hora_llegada_14	2498.9646	226.737	11.021	0.000	2054.026	2943.903
Hora_llegada_15	2364.3889	234.053	10.102	0.000	1905.092	2823.686
Hora_llegada_16	2357.5997	226.737	10.398	0.000	1912.660	2802.539
Hora_llegada_17	2315.7669	232.417		0.000	1859.682	2771.852
Hora_llegada_18	2546.6235	226.749	11.231	0.000	2101.662	2991.585
Hora_llegada_19	2824.0621	232.476	12.148	0.000	2367.860	3280.264
Hora_llegada_20	3249.4284	235.626		0.000	2787.045	3711.812
Hora_llegada_21	3810.2181	232.399		0.000	3354.169	4266.267
Hora_llegada_22	2993.9341	234.112		0.000	2534.523	3453.346
Hora_llegada_23	2120.6275	224.272	9.456	0.000	1680.525	2560.730

Al analizar los resultados de la regresión lineal podemos ver que el impacto que hace el intercepto (la constante) ahora sí es estadísticamente significativo y tiene una alta magnitud.

Asimismo vemos que el número de escuelas se relaciona de manera positiva con el número de viajes recibido. Es decir que a mayor escuelas, mayor cantidad de viajes recibidos en una comuna. Por cada nueva escuela, se reciben 3 viajes más.

Con respecto a los hospitales, vemos que es estadísticamente significativo (p value menor a 0.05), y es la variable más significativa de todas al tener el t value más alto. Esta variable se relaciona positivamente con la cantidad de viajes recibidos en una comuna, es decir que a mayor cantidad de hospitales, mayor cantidad de viajes recibidos. Por cada hospital nuevo, se reciben 102 viajes más.

Hablando de las iglesias, esta variable es estadísticamente significativa. Se relaciona positivamente con los viajes recibidos por comuna, por lo que a mayor cantidad de iglesias, más viajes se reciben en una comuna. Por cada nueva iglesia, se reciben 832 viajes más.

En lo que respecta a las zonas típicas, esta variable es estadísticamente significativa. Tiene una relación negativa con la cantidad de viajes, así que mientras más zonas típicas se tengan, menos viajes se recibe en la comuna. Por cada zona típica, se reciben 877 viajes menos.

Con respecto a las variables dummies, vemos que todas ellas son estadísticamente significativas para nuestro modelo, además de que tienen magnitudes mucho más altas que el resto de variables, por lo que sabemos que el cambio en la hora tiene un impacto más grande en la cantidad de viajes recibidos que las demás variables.

Evaluación del modelo:

El modelo obtuvo un MAPE del 54.92% al evaluar los datos de pruebas, por lo cual no cumple con nuestro objetivo de minería de datos. A comparación del modelo anterior se obtuvo una mejora del 12%.

Comparación modelos

Modelo	Hiperparámetros / Configuración	Score Train (%MAPE)	Score Test (%MAPE)
Regresión Lineal (1)	4 Variables	31.47%	67.03%
Regresión Lineal (2)	27 Variables (23 dummies)	44.04%	54.92%

Modelo 3. Regresión lineal

Debido al cambio de objetivo de negocio y de minería de datos se tiene que realizar un nuevo modelo benchmark, escogiendo nuevamente el modelo de regresión lineal por su simpleza para la interpretación.

Framework: Sci-kit Learn

Código fuente

Este modelo recibe como variables independientes lo siguiente:

- Número de escuelas
- Número de hospitales
- Número de iglesias
- Número de zonas típicas
- 23 variables dummies para las horas del día

Y como variable dependiente:

Número de viajes hacia la comuna

Parámetros:

Como modelo benchmark se utilizan los parámetros por defecto de la librería.

Descripción del modelo:

Para este modelo se tiene esperado una variabilidad mayor a un 50%.

Recordando nuevamente las limitaciones como lo es no poder modelar relaciones complejas. No se pueden capturar relaciones no lineales sin transformar la entrada, por lo que se tiene que trabajar duro para que se ajuste a funciones no lineales. Puede sufrir con valores atípicos.

Prueba de multicolinearidad:

Al encontrarnos en un contexto de regresión lineal nos interesa averiguar si existen problemas de multicolinearidad en nuestras variables. Para averiguar esto, se ejecutará una prueba en la que se calculará el VIF de las variables. Aquellas con un VIF superior a 10 serán descartadas para este modelo en particular.

Resultado de la prueba:

	Variable	VIF
1	Num_escuelas	2.179267
2	Num_hospitales	4.861675
3	Num_iglesias	20.398728
4	Num_zonas_tipicas	28.342396
5	Hora_llegada_1	1.892614
6	Hora_llegada_2	1.854917
7	Hora_llegada_3	1.912862
8	Hora_llegada_4	1.835817
9	Hora_llegada_5	1.873951
10	Hora_llegada_6	1.796272
11	Hora_llegada_7	1.854715
12	Hora_llegada_8	1.911969
13	Hora_llegada_9	1.892683
14	Hora_llegada_10	1.797202
15	Hora_llegada_11	1.892496
16	Hora_llegada_12	1.950441
17	Hora_llegada_13	1.931511
18	Hora_llegada_14	1.892500
19	Hora_llegada_15	1.796607
20	Hora_llegada_16	1.892508
21	Hora_llegada_17	1.815142
22	Hora_llegada_18	1.892697
23	Hora_llegada_19	1.816073
24	Hora_llegada_20	1.775957
25	Hora_llegada_21	1.814857
26	Hora_llegada_22	1.797506
27	Hora_llegada_23	1.931779

Vemos como resultado de la prueba que las variables dummies no presentan el problema de multicolinealidad. Sin embargo, las variables de número de iglesias y zonas típicas tienen un VIF bastante superior a 10. Eliminaremos la variable de zonas típicas, ya que es la que tiene un mayor VIF, y repetiremos la prueba.

Resultados de la segunda prueba de multicolinealidad:

	Variable	VIF		
1	Num_escuelas	1.402239		
2	Num_hospitales	1.817808		
3	Num_iglesias	1.375255		
4	Hora_llegada_1	1.892592		
5	Hora_llegada_2	1.854861		
6	Hora_llegada_3	1.912784		
7	Hora_llegada_4	1.835817		
8	Hora_llegada_5	1.873409		
9	Hora_llegada_6	1.796266		
10	Hora_llegada_7	1.854700		
11	Hora_llegada_8	1.911903		
12	Hora_llegada_9	1.892553		
13	Hora_llegada_10	1.795764		
14	Hora_llegada_11	1.892490		
15	Hora_llegada_12	1.950340		
16	Hora_llegada_13	1.931195		
17	Hora_llegada_14	1.892497		
18	Hora_llegada_15	1.795724		
19	Hora_llegada_16	1.892478		
20	Hora_llegada_17	1.815138		
21	Hora_llegada_18	1.892582		
22	Hora_llegada_19	1.815823		
23	Hora_llegada_20	1.775924		
24	Hora_llegada_21	1.814856		
25	Hora_llegada_22	1.797368		
26	Hora_llegada_23	1.931663		

Podemos ver que al remover la variable de zonas típicas resolveremos el problema de multicolinealidad en nuestras variables. Una vez resulto, podemos proceder a la interpretación del modelo con dichas variables.

Interpretación del modelo:

		OLS Regres	sion Results			
Dep. Variable: Model: Method: Date: Time: No. Observations Df Residuals: Df Model: Covariance Type:	Lea Wed, 3	Num_viajes OLS st Squares 0 Nov 2022 11:36:43 1020 993 26 nonrobust	Log-Likelihood: - AIC: 1.4		0.733 0.726 104.7 e-263 440.8 4e+04 7e+04	
	coef	std err	t	P> t	[0.025	0.975]
const Num_escuelas Num_hospitales Num_iglesias Hora_llegada_2 Hora_llegada_3 Hora_llegada_4 Hora_llegada_5 Hora_llegada_6 Hora_llegada_7 Hora_llegada_7 Hora_llegada_9 Hora_llegada_9 Hora_llegada_10 Hora_llegada_11 Hora_llegada_11 Hora_llegada_12 Hora_llegada_13 Hora_llegada_15 Hora_llegada_15 Hora_llegada_15 Hora_llegada_16 Hora_llegada_17 Hora_llegada_17 Hora_llegada_17 Hora_llegada_20 Hora_llegada_20 Hora_llegada_21 Hora_llegada_21 Hora_llegada_22 Hora_llegada_22 Hora_llegada_23	-467.0549 1.2123 11.5869 36.2051 447.6827 576.2097 324.4209 231.7929 164.5148 221.8801 244.0965 292.8020 329.5438 420.7604 528.0987 720.9997 851.1458 864.7224 769.4613 789.8580 855.5233 965.4090 1166.0707 1433.6723 1798.9554 1275.6299 830.6350	56.761 0.063 1.145 5.356 76.578 77.515 76.164 78.011 77.030 79.040 77.512 76.147 76.577 79.029 76.576 75.331 75.732 76.576 79.028 76.578 79.578	-8.229 19.299 10.122 6.760 5.846 7.433 4.259 2.971 2.136 2.807 3.149 3.845 4.303 5.324 6.896 9.571 11.239 11.292 9.737 10.315 10.899 12.607 14.853 18.016 22.920 16.134 10.967	0.000 0.000	-578.439 1.089 9.341 25.695 297.409 424.097 174.960 78.707 13.354 66.776 91.990 143.375 179.272 265.678 377.829 573.173 702.532 714.453 614.381 639.589 701.489 815.136 1012.008 1277.513 1644.934 1120.478 682.003	-355.671 1.336 13.833 46.715 597.956 728.323 473.882 384.879 315.676 376.984 396.203 442.229 479.816 575.843 678.368 868.827 999.760 1014.992 924.542 940.127 1009.557 1115.682 1320.134 1589.832 1952.977 1430.781 979.267
Omnibus: Prob(Omnibus): Skew: Kurtosis:	0350.0350 	75.742 ======== 155.202 0.000 0.509 7.766	10.96/ Durbin-Wats Jarque-Bera Prob(JB): Cond. No.	====== on:	100 5.93	9/9.26/ ===== 2.027 9.578 e-220 3e+03

Al analizar los resultados de la regresión lineal podemos ver que el impacto que hace el intercepto (la constante) ahora sí es estadísticamente significativo y tiene una alta magnitud.

Asímismo vemos que el número de escuela se relaciona de manera positiva con el número de viajes recibido. Es decir que a mayor escuelas, mayor cantidad de viajes recibidos en una comuna. Por cada nueva escuela, se recibe un viaje más.

Con respecto a los hospitales, vemos que es estadísticamente significativo (p value menor a 0.05), y es la variable más significativa de todas al tener el t value más alto. Esta variable se relaciona positivamente con la cantidad de viajes recibidos en una comuna, es decir que a mayor cantidad de hospitales, mayor cantidad de viajes recibidos. Por cada hospital nuevo, se reciben 15 viajes más.

Hablando de las iglesias, esta variable es estadísticamente significativa. Se relaciona positivamente con los viajes recibidos por comuna, por lo que a mayor cantidad de iglesias, más viajes se reciben en una comuna. Por cada nueva iglesia que haya, se generarán 36 nuevos viajes.

Con respecto a las variables dummies, vemos que todas ellas son estadísticamente significativas para nuestro modelo, además de que tienen magnitudes mucho más altas que el resto de variables, por lo que sabemos que el cambio en la hora tiene un impacto más grande en la cantidad de viajes recibidos que las demás variables. También vemos que las horas de más impacto son aquellas en el rango de las 19hrs a las 22 hrs.

Evaluación del modelo:

El modelo obtuvo un MAPE del 87.8% al evaluar los datos de pruebas, este resultado está altamente alejado de nuestro objetivo de minería de datos. Este modelo brinda los resultados esperados al momento de su elección como modelo benchmark.

Modelo 4. Random forest

Los modelos de decisión basados en bosques (conjuntos de árboles) se caracterizan por ser más precisos que los modelos sencillos generados a base de regresiones lineales. Además, estos modelos nos permiten conocer la significancia de cada variable que integra al modelo, por lo que nos resultará de gran utilidad para cumplir con el objetivo de negocio de conocer cuales son los principales atractores de viajes.

Framework: Sci-kit Learn

Código Fuente

Este modelo recibe como variables independientes lo siguiente:

- Número de escuelas
- Número de hospitales
- Número de iglesias
- Número de zonas típicas
- 23 variables dummies para las horas del día

Y como variable dependiente:

Número de viajes hacia la comuna

Parámetros:

Debido a que este modelo se utilizará únicamente como un paso intermedio en la mejora del rendimiento, se utilizarán los valores por default del regresor de random forest de sklearn, es decir:

n_estimators: 100max_depth : Nonemin_samples: None

Descripción del modelo:

Para este modelo se tiene esperado una variabilidad alrededor de un 30%.

Las desventajas de este modelo es que se pierde la facilidad de interpretación del modelo, además de que no puede predecir más allá del rango de valores del conjunto de entrenamiento.

Evaluación del modelo:

El modelo obtuvo una variación del 15.05% al evaluar los datos de pruebas.

Los resultados obtenidos son muy superiores a los esperados, el modelo superó al anterior en un 74% siendo una mejora bastante significativa.

Modelo 5. XGBoost

El modelo XGBoost nos ofrece un rendimiento superior a los modelos de árboles tradicionales gracias a que implementa una optimización avanzada utilizando Gradient Boosting.

Framework: Sci-kit Learn

Código Fuente

Este modelo recibe como variables independientes lo siguiente:

- Número de escuelas
- Número de hospitales
- Número de iglesias
- Número de zonas típicas
- 23 variables dummies para las horas del día

Y como variable dependiente:

• Número de viajes hacia la comuna

Parámetros:

Para afinar los hiperparámetros de este modelo, recurrimos a utilizar una búsqueda en cuadrícula CV. Este enfoque nos permite probar diferentes valores de los hiperparámetros para encontrar los que ofrecen el mejor rendimiento.

Dándonos como resultado los siguientes hiperparametros:

colsample_bytree: 0.1learning rate: 0.1

max depth: 3

• n estimators: 20000

Descripción del modelo:

Para este modelo se tiene esperado una variabilidad menor al 20%

Las limitaciones de este modelo es que sus resultados pueden llegar a ser complejos de interpretar, puede llegar a ajustar ciertos grupos de datos en presencia de ruido y se tiene poco control sobre lo que hace el modelo.

Evaluación del modelo:

El modelo obtuvo un MAPE del 14.84 % al evaluar los datos de pruebas, el resultado cumple con el objetivo de la minería de datos.

Modelo 6. Red Neuronal MLP

El modelo Multi-layer Perceptron regressor nos permite hacer una regresión a través de una red neuronal usando optimizadores basados en gradient descent.

Framework: Sci-kit Learn

Código Fuente

Este modelo recibe como variables independientes lo siguiente:

- Número de escuelas
- Número de hospitales
- Número de iglesias
- Número de zonas típicas
- 23 variables dummies para las horas del día

Y como variable dependiente:

• Número de viajes hacia la comuna

Parámetros:

Para la selección de parámetros se realizaron múltples pruebas con los distintos tipos de activación para encontrar el modelo que ofrezca mejores resultados. Después de las pruebas, hallamos buenos resultados con los siguientes hiperparámetros.

- random state=1,
- max_iter=1000000,
- learning_rate="adaptive",
- activation = "logistic"

Descripción del modelo:

Para este modelo se espera obtener un resultado igual o mejor al de XGBoost, es decir, un 20% o menos de error.

Evaluación del modelo:

Este modelo presentó un MAPE de 67% al evaluar los datos de pruebas. Creemos que esto se debe a que el tamaño de nuestro dataset de entrenamiento no es lo suficientemente grande como para alimentar un modelo profundo.

Debido al resultado, se decidió no utilizar técnicas de Deep Learning para la creación del modelo. En su lugar, nos apegaremos al modelo XGBoost, ya que nos brindó los mejores resultados.

Comparación de modelos

Modelo	Hiperparámetros/ Configuración	Score Train (%MAPE)	Score Test (%MAPE)
Regresión Lineal	27 Variables (23 dummies)	63.55%	87.80%
Random Forest	 27 Variables (23 dummies) n_estimators: 100 max_depth: None min_samples: None 	14.98%	15.05%
XGBoost	 27 Variables (23 dummies) colsample_bytree: 0.1 learning_rate: 0.1 max_depth: 3 n_estimators: 20000 	10.72%	14.89%
Red neuronal MLP	 27 Variables (23 dummies) random_state=1, max_iter=1000000, learning_rate="adaptive", activation = "logistic" 	58.31%	67.23%

Modelo 7. XGBoost

Este modelo se basa en el modelo 5, con la diferencia de que se construyó un nuevo dataset de entrenamiento que incluye un mayor número de variables. Esto se hizo basado en la sugerencia de nuestro SF.

Framework: Sci-kit Learn

Código Fuente

Este modelo recibe como variables independientes lo siguiente:

- Número de escuelas
- Número de hospitales
- Número de iglesias
- Número de zonas típicas
- Superficie en Km^2
- Población
- Conexiones fijas de internet
- M^2 de areas verdes
- Número de micro empresas
- Número de empresas pequeñas
- Número de empresas medianas
- Número de empresas grandes
- 23 variables dummies para las horas del día

Y como variable dependiente:

Número de viajes hacia la comuna

Descripción del modelo:

Para este modelo se tiene esperado una variabilidad menor al 20%

Las limitaciones de este modelo es que sus resultados pueden llegar a ser complejos de interpretar, puede llegar a ajustar ciertos grupos de datos en presencia de ruido y se tiene poco control sobre lo que hace el modelo.

Parámetros:

Como parámetros iniciales para el modelo xgboost utilizaremos los valores por default del framework sklearn para xgboost. El único valor que modificaremos es el de objective. Indicamos al modelo que debe utilizar como objetivo una regresión de Poisson, ya que estas regresiones están orientadas a predecir el conteo de valores y únicamente generan resultados positivos, a diferencia de la regresión lineal clásica que puede generar valores negativos.

Esta primera versión nos da un % de error (MAPE) de **27.4**% en train y **31.24**% en test. Debido a que estos valores están por detrás de lo visto en nuestros modelos anteriores, procedemos a realizar un refinamiento.

Primer refinamiento:

Para afinar los hiperparámetros de este modelo, recurrimos a utilizar una búsqueda en cuadrícula CV. Este algoritmo realiza una fuerza por medio de fuerza bruta, probando con un conjunto de hiper parámetros para evaluar cuáles otorgan mejores resultados.

Al aplicar este algoritmo, obtuvimos como resultado los siguientes hiperparametros:

colsample_bytree: 0.1learning_rate: 0.1max_depth: 3

n_estimators: 100000

Con la optimización de gridSearchCV logramos obtener un % de error (MAPE) de 1% en train y 14.1% en test. Si bien el error de test es bastante bueno, vemos que hay overfitting, por lo que no es un modelo muy estable. Debido a esto, decidimos hacer de forma manual un nuevo refinamiento del modelo.

Segundo refinamiento:

Para este segundo refinamiento ajustamos de manera manual los hiperparámetros. Se tomaron los valores del primer refinamiento pero se redujo la cantidad de estimadores. Esto nos permitirá reducir la posibilidad de que el modelo memorice los valores de entrenamiento, generando un modelo más estable.

colsample_bytree: 0.1learning rate: 0.1

max_depth: 3

• n estimators: 10000

Con el refinamiento manual al modelo, obtuvimos un % de error (MAPE) de **10.4**% en train y **16.9**% en test. De esta manera, logramos reducir en una gran medida el overfitting sin tener un impacto muy grande en la precisión del modelo.

Cross fold validation

Para este modelo se realizó una validación cruzada de K-folds con un valor de 10 folds. Se eligió esta cantidad de folds ya que, como se comenta en el artículo "Why use cross fold validation" de <u>KDNuggets</u>, al usar 10 folds se suele tener un bias bajo y una varianza moderada en los resultados, representando muchas veces un punto óptimo.

El resultado obtenido como precisión es de: 85.78%

```
from sklearn.model_selection import KFold
from sklearn.model_selection import cross_val_score

kfold = KFold(n_splits=10)
results = cross_val_score(xgb_model, X, y, cv=kfold)
print("Accuracy: %.2f%% " % (results.mean()*100))
```

Accuracy: 85.78%

Evaluación del modelo:

Modelo	Hiperparámetros / Configuración	Score Train (%MAPE)	Score Test (%MAPE)
Modelo Inicial	34 Variables (23 dummies) ■ default sklearn values	27.4%	31.2%
Primer Refinamiento	 34 Variables (23 dummies) colsample_bytree: 0.1 learning_rate: 0.1 max_depth: 3 n_estimators: 100000 	1%	14.1%
Segundo Refinamiento	 34 Variables (23 dummies) colsample_bytree: 0.1 learning_rate: 0.1 max_depth: 3 n_estimators: 10000 	10.4%	16.9%

El modelo en su segundo refinamiento obtuvo una variación del 16.98% al evaluar los datos de pruebas, el resultado cumple con el objetivo de la minería de datos. Es importante mencionar que, si bien este modelo obtuvo una precisión inferior al primer refinamiento, nos aporta un mayor valor tener un modelo más estable gracias a la reducción del overfitting.

Bibliografia

[1]Kim, S.; Kim, H.(2016) A new metric of absolute percentage error for intermittent demand forecasts. Recuperado de

https://reader.elsevier.com/reader/sd/pii/S0169207016000121?token=79EECEB30F7CC2154434EABF95C521C124BE6FA065E66ADC0D2DA62069333CAB8F055338228D91B26392CF3C0A3843AF&originRegion=us-east-1&originCreation=20221128202145

[2]Swanson, D.A.; Tayman, J.; Bryan, T.M.(2011) MAPE-R: A RESCALED MEASURE OF ACCURACY FOR CROSS-SECTIONAL, SUBNATIONAL FORECASTS. Recuperado de https://paa2011.populationassociation.org/papers/110062

[3]De Myttenaere, A.; Golden, B.; Le Grand, B.; Rossi, F.(2017, julio 10) Mean Absolute Percentage Error for regression models. Recuperado de https://arxiv.org/abs/1605.02541