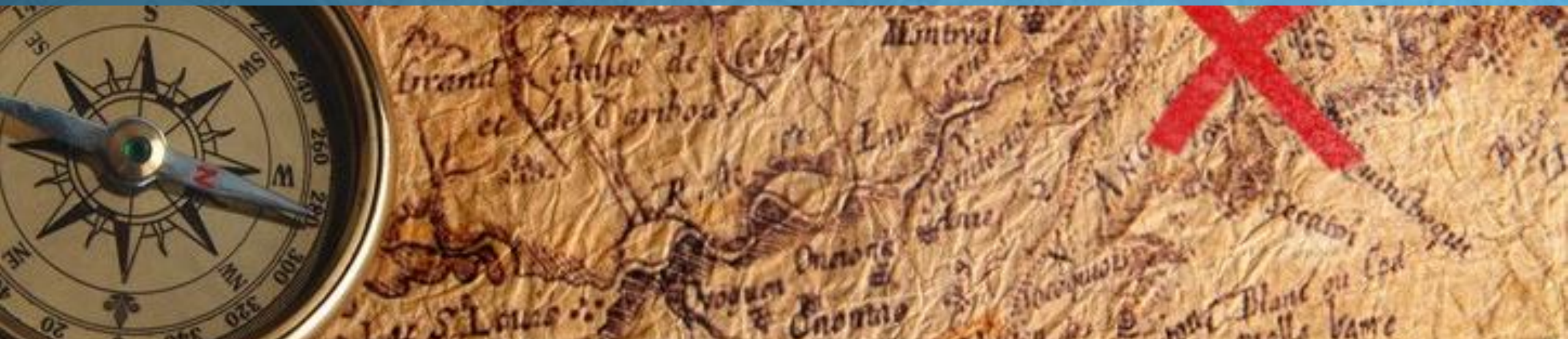


4. Algoritmos de aprendizaje automático en SBC



MD005 – Sistemas Basados en el Conocimiento

Manel Cerezo García– manel.cerezo@salle.url.edu

David Larrosa– david.larrosa@salle.url.edu

4. Algoritmos de aprendizaje automático en SBC

Organización

2025

OCTUBRE						
L	M	X	J	V	S	D
		1	2	3	4	5
6	7	8	9	10	11	12
13	14	15	16	17	18	19
✖	21	22	23	✖	25	26
✖	28	29		✖		

FEBRERO						
L	M	X	J	V	S	D
						1
2	3	4	5	6	7	8
9	10	11	12	13	14	15
16	17	18	19	20	21	22
23	24	25	26	27	28	

NOVIEMBRE						
L	M	X	J	V	S	D
					1	2
✖	4	5	✖	7	8	9
✖	11	12	✖	14	15	16
✖	18	19	✖	21	22	23
✖	25	26	✖	28	29	30

DICIEMBRE						
L	M	X	J	V	S	D
1	2	3	4	5	6	7
8	9	10	11	12	13	14
15	16	17	18	19	20	21
22	23	24	25	26	27	28
29	30	31				

2026

ENERO						
L	M	X	J	V	S	D
			1	2	3	4
5	6	7	8	9	10	11
12	13	14	15	16	17	18
19	20	21	22	23	24	25
26	27	28	29	30	31	

Organización

- **Aprendizaje no supervisado (Agrupamiento)**

- Qué es y en qué consiste.
- Algoritmos a tener en cuenta: K-means, jerárquico, densidades.
- Teoría de los algoritmos.
- Ejemplos prácticos: ejercicio de ejemplo y ejercicio guiado.

- **Aprendizaje supervisado (clasificación)**

- Qué es y en qué consiste.
- Algoritmos a tener en cuenta: Nearest neighbours (KNN), árboles de decisión.
- Teoría de funcionamiento.
- Ejemplos prácticos: ejercicio de ejemplo y ejercicio guiado.

Organización

- **Aprendizaje supervisado (regresión)**
 - Qué es y en qué consiste.
 - Algoritmos a tener en cuenta: regresiones polinomiales, árboles de regresión.
 - Teoría de funcionamiento.
 - Ejemplos prácticos: ejercicio de ejemplo y ejercicio guiado.
- **Parametrización de los algoritmos y su evaluación en profundidad**
 - Qué nos aporta parametrizar.
 - Métodos de parametrización: gridsearch, randomsearch, parametrización métodos estadísticos condicionados (Bayes).
 - Teoría de funcionamiento.
 - Ejemplos prácticos: ejercicios de ejemplo y ejercicios guiados para los diferentes algoritmos vistos.

Organización

- **Redes Neuronales**
 - Qué son y por qué funcionan. Conceptos básicos.
 - Arquitectura simple: perceptrón.
 - Ejercicios de ejemplo y guiado para 3 casos de uso:
 - Clasificación entre 2 clases (binaria)
 - Clasificación entre más clases (multiclase)
 - Regresiones
- **Redes Neuronales**
 - Evolución del perceptrón: perceptrón multicapa.
 - Ejercicios de ejemplo y guiado para 3 casos de uso:
 - Clasificación entre 2 clases (binaria)
 - Clasificación entre más clases (multiclase)
 - Regresiones
 - Comparativa entre perceptrón y perceptrón multicapa.

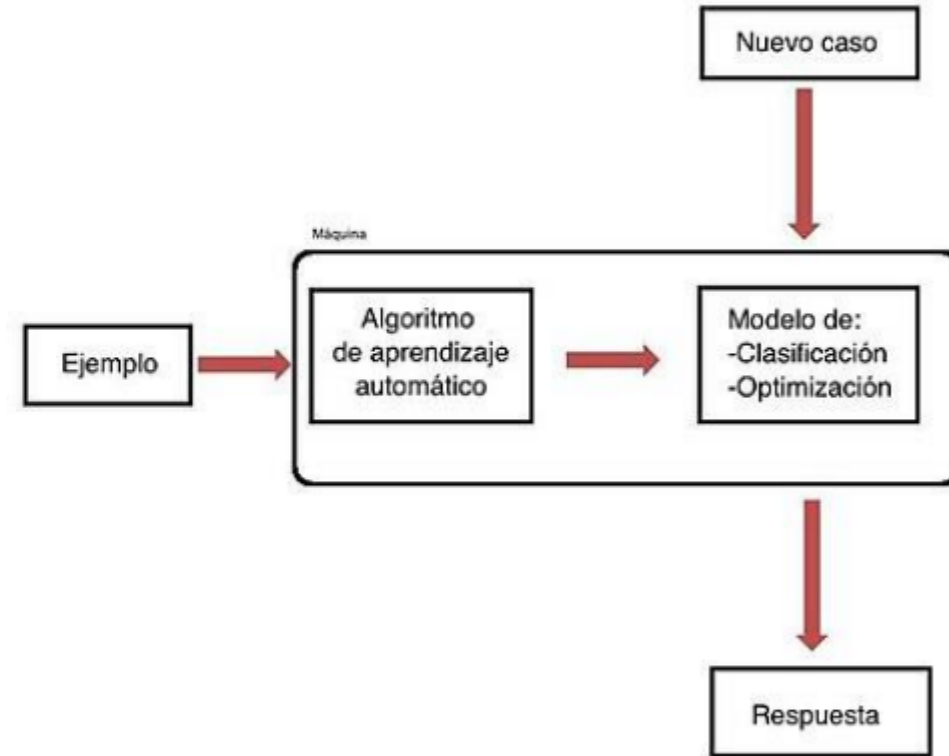
Hoy veremos...

- Objetivo del aprendizaje automático
- El ciclo de los datos
- Caso real de aplicación del ML
- Paradigmas (clasificaciones)
- Introducción a los algoritmos que veremos a lo largo de la asignatura
- Características deseables
- Posibles problemas en el entrenamiento
- ¿Como evaluamos un método que aprende?

Objetivo

¿Qué es el aprendizaje automático (ML)?

- **Objetivo:** Desarrollar sistemas que se adapten a nuevas situaciones y resolver problemas en ellas sin un entrenamiento previo. El entrenamiento se basará en situaciones ya conocidas, con las que se generará un conocimiento que se extrapolará a las nuevas situaciones.



Cómo planteamos un problema

Ciclo de desarrollo



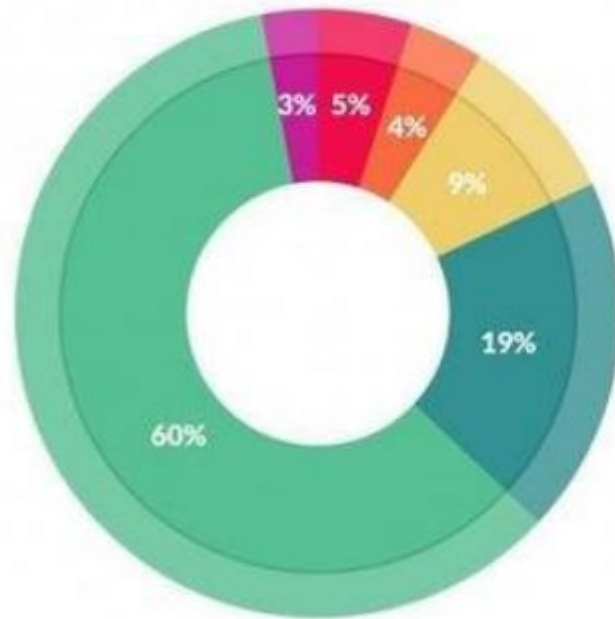
Ciclo de desarrollo



Ciclo de los datos

- Los datos se generan en los dispositivos (Cultivo).
- Recolección y almacenaje de éstos (Cosecha).
- Fases de filtrado (Post-Cosecha).
- Dataset 'limpio' (Post-Cosecha).
- Fase exploratoria (Tostar).
- Preparación para el uso de la información relevante (Preparación).
- Entreno del modelo (Preparación).
- Realización de predicciones (Consumo)

Ciclo de los datos: tiempo invertido



What data scientists spend the most time doing

- Building training sets: 3%
- Cleaning and organizing data: 60%
- Collecting data sets: 19%
- Mining data for patterns: 9%
- Refining algorithms: 4%
- Other: 5%

"Pasos" para construir un modelo de ML

1. Entendimiento del dominio y problema

- ¿Supervisado o no supervisado?

2. Análisis exploratorio de Datos (EDA)

- **Calidad** general de los datos y **estadística descriptiva**.
- Visualizaciones que ayuden a entender la **distribución** de las variables continuas y categóricas.
- Visualizaciones que ayuden a entender la **relación** entre los atributos y la variable objetivo (si la hay).
- **Estadísticos** que nos ayuden a entender mejor la **relación** (Correlación, PCA, ANOVA, ...).

3. Construcción del modelo

- **Elección** de los **modelos** que creemos que mejor funcionarán.
- **Elección** del método de **validación** (split train-test, k-fold cross validation, ...).
- **Preprocesado de datos** para que el modelo pueda ser entrenado (one-hot encoding, ...).
- **Hiperoptimización de parámetros** (grid search, random grid search, ...).
- **Entrenamiento** de los modelos.

4. Análisis e interpretación de los resultados

- **Análisis de rendimiento** de los modelos (accuracy, R^2 , matriz de confusión, ...).
- **Comparación** de resultados obtenidos con distintos modelos.
- **Interpretación** de los resultados del modelo candidato para poner en producción.

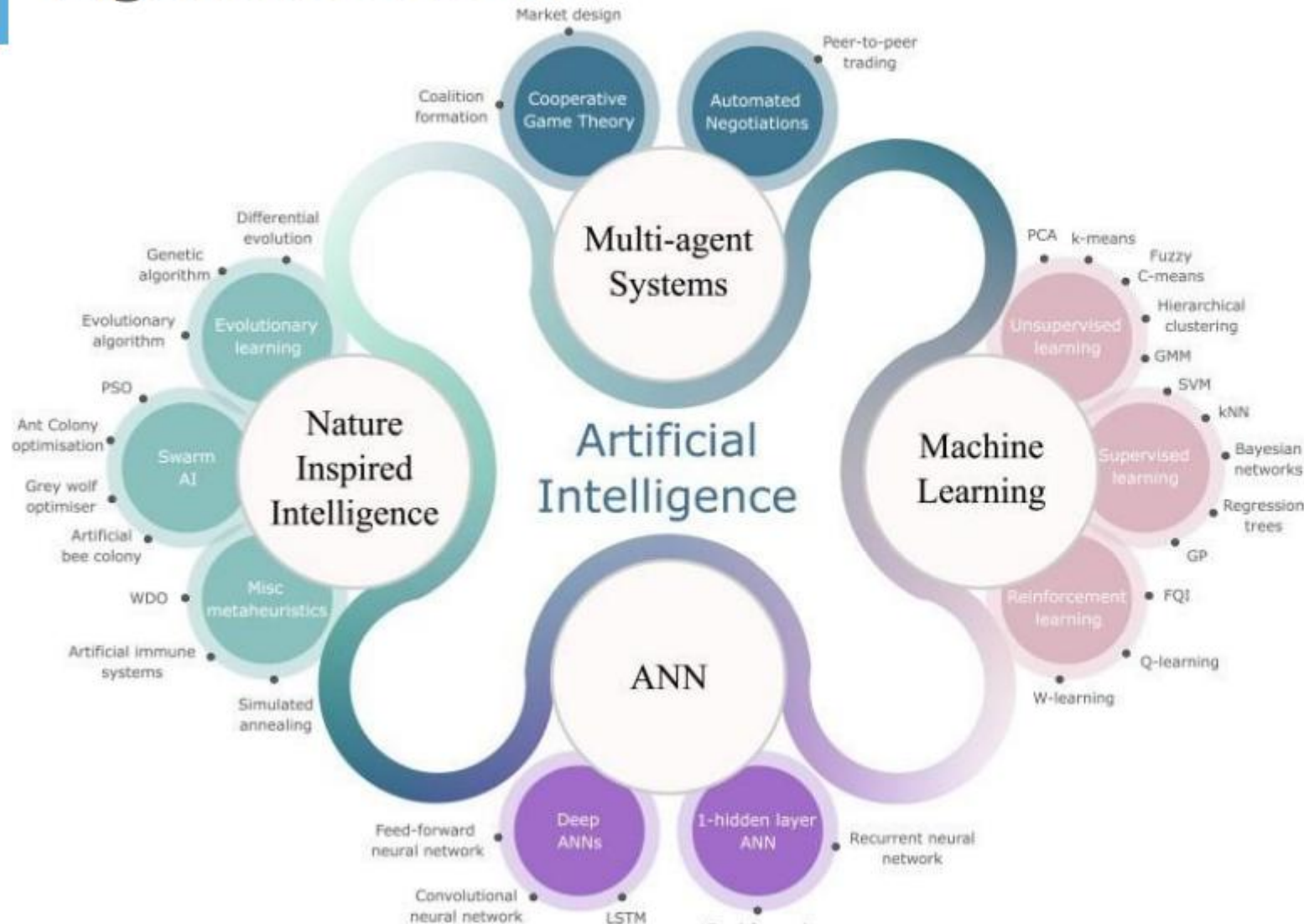


Paradigmas y Clasificación modelos ML

Paradigmas (clasificaciones) del ML

- **Tipos y clasificaciones:** En función del criterio a escoger, se pueden clasificar de 3 formas distintas:
 - **Según su selección y adaptación:** deductivo, inductivo, analogico, evolutivo, conexionista...
 - **Analógico:** inspirado en la memoria humana, resolvemos problemas a partir de la similitud con problemas ya vistos, adaptamos soluciones que funcionan para los similares al nuevo caso concreto.
 - **Conexionista:** Se inspira en la neurobiología, las neuronas se conectan entre ellas propagando valores que aprenden a partir de conocer ejemplos y bien hecho, generaliza el conocimiento.
 - **Según la estrategia:**
 - **Supervisado:** Los ejemplos se utilizan para extraer conocimiento, necesitamos todos los datos posibles para aplicarlos.
 - **No supervisado:** Extrae conocimiento a partir de descubrir patrones en los datos disponibles.
 - **Por refuerzo:** Entre las dos estrategias anteriores, se utiliza una función que evalúa qué tan bien se ajustas a modo de refuerzo para dirigir el aprendizaje del algoritmo.
 - **Según el problema que resuelve:** Asociación, clasificación, agrupación, regresión...

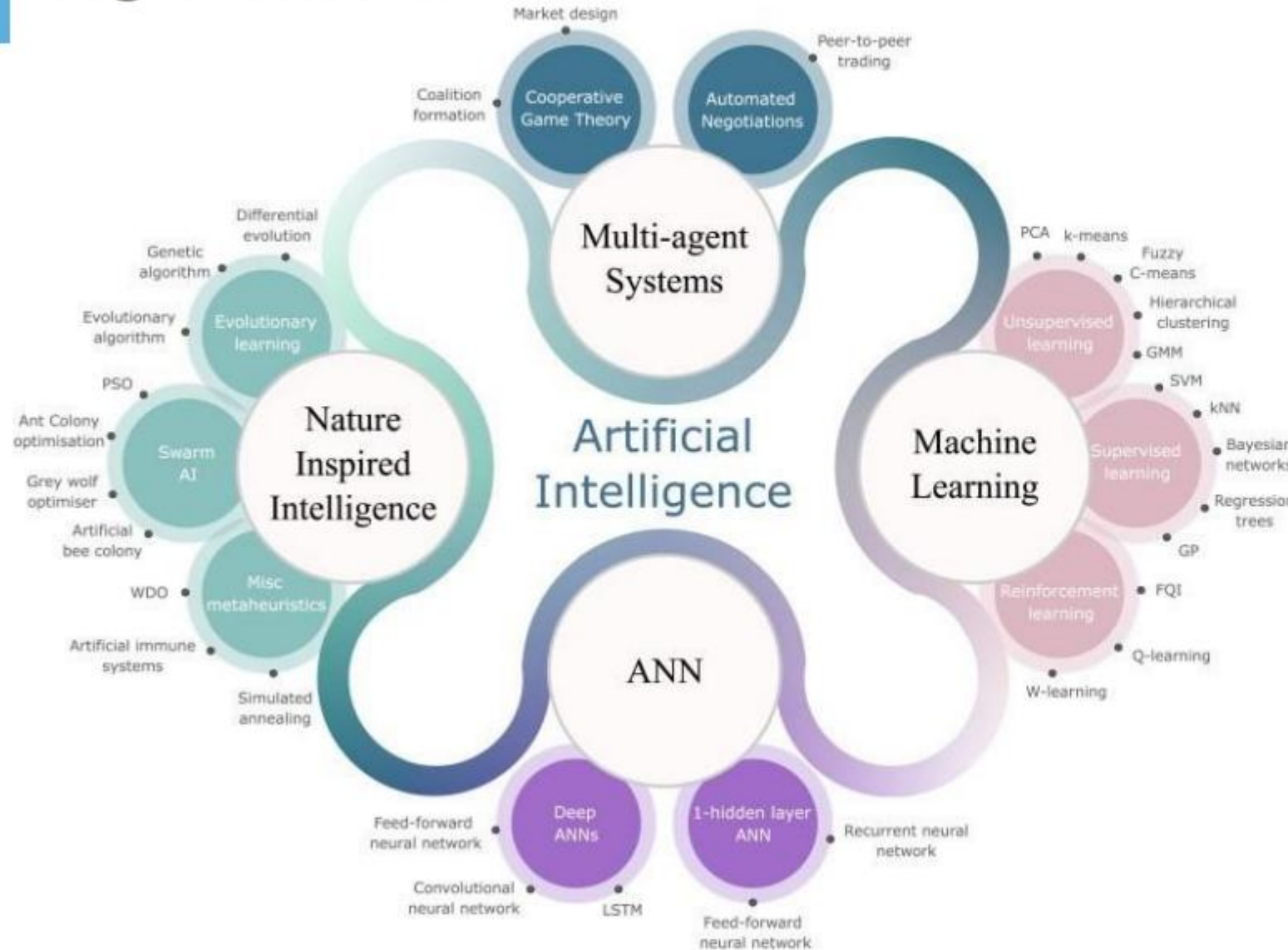
Algoritmos MD005



¿Qué podemos utilizar para cada problema?

- **¿Identificador Melanoma?**
- **¿Historial Crediticio?**
- **¿Ruta del comerciante?**

Algoritmos MD005



¿Qué podemos utilizar para cada problema?

- **¿Identificador Melanoma?**
Árboles de decisión, Random Forest, XGBoost, CatBoost ... incluso agrupación Redes Neuronales
- **¿Historial Crediticio?**
Clasificadores / Regresiones
Redes Neuronales
- **Ruta del comerciante?**
Ant colony optimization
Redes Neuronales



Características Generales

Características deseables

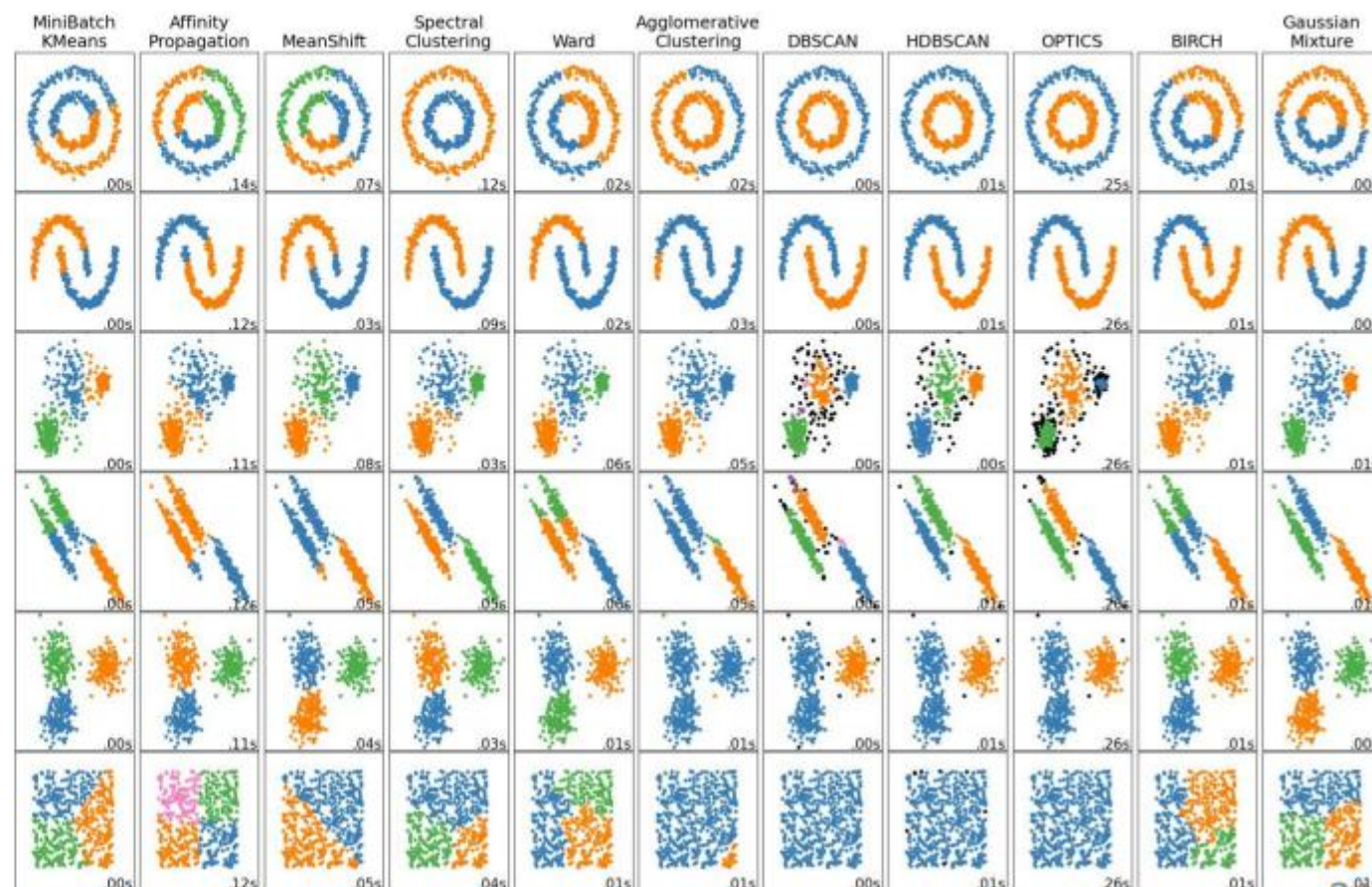
- **Generalidad/capacidad de abstracción:** Que sean capaces de extraer un conocimiento general y no solamente aprendan los ejemplos del entrenamiento.
- **Robustez:** Tanto el funcionamiento como el resultado ha de ser robusto y proporcionar resultados consistentes incluso si hay posibles ruidos.
- **Aprendizaje:** Ha de ser razonable a nivel de recursos (costes computacionales y de memoria) tanto a nivel de resultados. Utilizar algoritmos y métodos a fuerza bruta no es una solución viable si el coste es excesivamente elevado.
- **Explicabilidad:** Los modelos han de ser explicables o por lo menos, maximizar el entendimiento de éste. Utilizar un algoritmo sin saber cómo funciona ni porqué nos hará llegar a un callejón sin salida.
- **Determinista:** Para cualquier conjunto de datos, el resultado ha de ser siempre el mismo. En caso de no ser así, el algoritmo no es nada fiable.



Modelos: Agrupación

Partiendo del conjunto de datos, contiene los que son similares dentro de un mismo grupo autoidentificado maximizando la compacidad del grupo y la diferenciación respecto a otros grupos.

Técnica / Algoritmo	Tipo
K-Means	Distancias
DBSCAN	Densidad
OPTICS	Densidad
Jerárquico	Distancias



Algoritmos de agrupación

- **Segmentación de clientes**
 - Input: Datos de comportamiento de compra, demografía, interacciones
 - Output: Grupos de clientes con características similares
- **Agrupación de artículos**
 - Input: Textos de artículos
 - Output: Clusters temáticos automáticos
- **Identificación de patrones**
 - Input: Datos de consumo horario de diferentes hogares
 - Output: Perfiles típicos de consumo

Imágenes de Wikipedia



Modelos: Clasificación

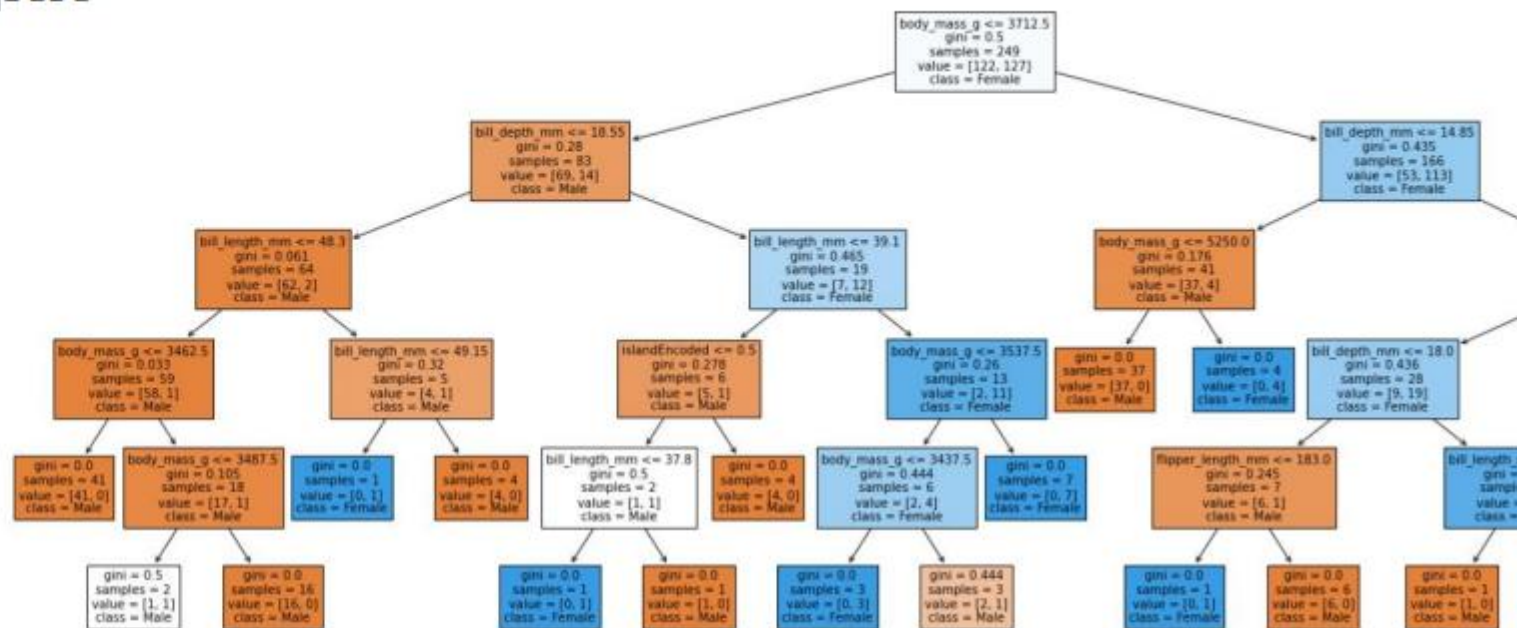
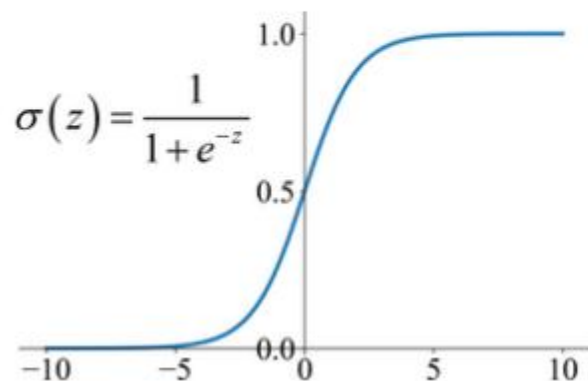
Algoritmos de clasificación

Problemas típicamente de identificación. A partir de un conjunto de inputs (entradas de datos) asignar una clase u otra al elemento que estemos evaluando, siendo:

- **Binaria:** Casos en los que solamente hay 2 opciones posibles.
- **Multiclase:** Más de 2 opciones disponibles.

Técnica / Algoritmo	Problema
Regresión Logística	Binario
KNN (k-nearest neighbors)	Binario/Multiclase
Árbol de decisión	Binario/Multiclase
Random Forest	Binario/Multiclase
SVC (Support Vector Classifier)	Binario/Multiclase

Algoritmos de clasificación



Múltiples árboles de decisión y la salida es la combinada entre ellos por lo que cada árbol puede ser especialista en una sección concreta de los datos y por lo tanto, dar mejor resultado que uno solo.

Algoritmos de clasificación

- **Detección de correo**

- Input: Características del email (palabras clave, remitente, enlaces)
- Output: Clasificación binaria (spam/no spam)

- **Diagnóstico médico**

- Input: Síntomas, resultados de análisis, historial médico
- Output: Probabilidad de diferentes enfermedades

- **Predicción de abandono de clientes (Customer Churn)**

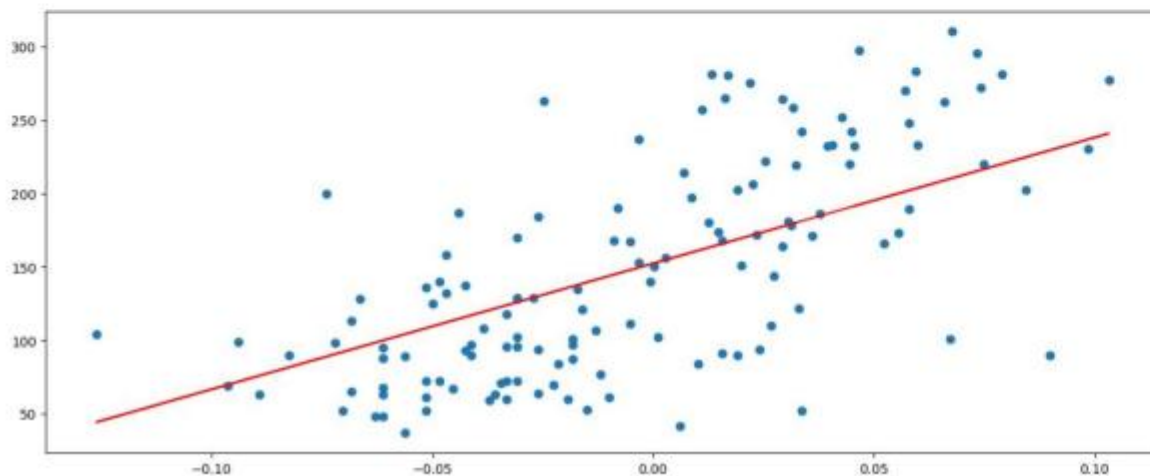
- Input: Historial de uso del servicio, quejas, pagos, tiempo como cliente
- Output: Probabilidad de que el cliente abandone el servicio



Modelos: Regresión

Algoritmos de regresión

Partiendo del conjunto de datos, encontrar y recrear la función que modela a la variable dependiente en función del resto en todo el espacio latente.

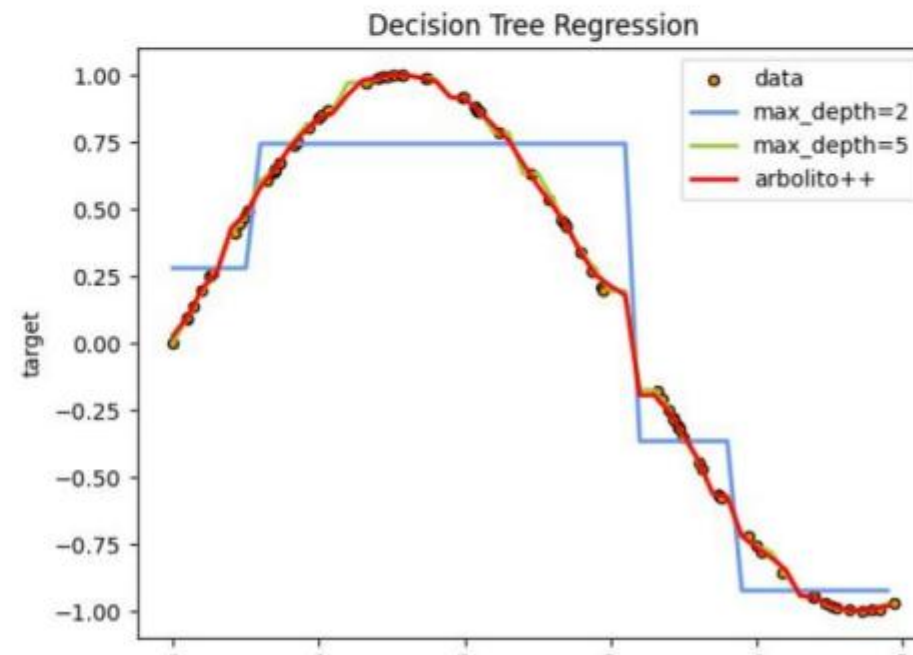


Técnica / Algoritmo

Regresión lineal

Regresión no lineal

Árboles de regresión



Algoritmos de regresión

- **Predicción de precios de viviendas**
 - Input: Características (m^2 , ubicación, antigüedad, etc.)
 - Output: Precio estimado
- **Pronóstico de ventas mensuales**
 - Input: Histórico de ventas, temporada, eventos especiales
 - Output: Predicción de ventas futuras
- **Estimación de fallo del motor**
 - Input: Características del vehículo (peso, potencia, aerodinámica)
 - Output: Tiempo hasta necesitar nuevo motor

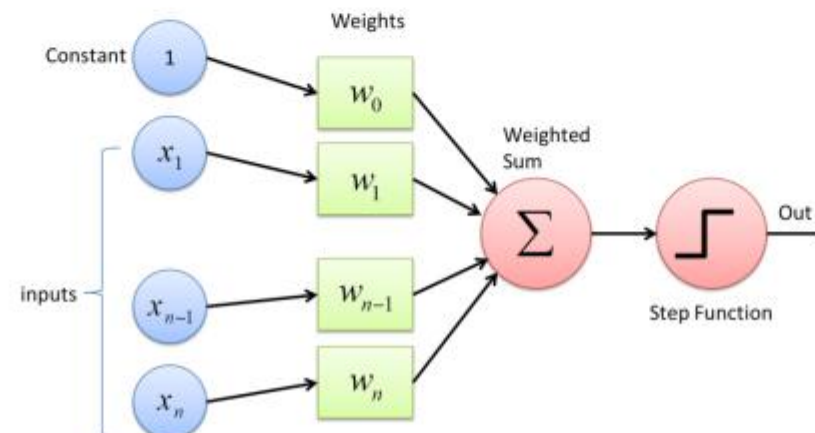
The background of the entire image is a dense, overlapping arrangement of numerous open books. The pages are filled with text, and the books are oriented in various directions, creating a complex, textured pattern of white and cream-colored pages against a darker background. The lighting is soft, highlighting the edges of the pages and the texture of the paper.

Redes Neuronales

Redes neuronales

En términos generales sirven para 'todo', solo necesitamos tener claro cómo adaptamos el problema y la arquitectura.

Técnica / Algoritmo	Uso
Perceptrón	Classificación/regresión
Perceptrón multicapa	Clasificación/regresión



Redes neuronales

Todo lo anterior!

+

- Imágenes:
 - Clasificación
 - Generación
 - Detección
- Sonido
- Series temporales
- ...



Ejercicios

Ejercicio 1

1. Vamos a elegir un modelo al azar para cada alumno.
2. Con el modelo que os haya tocado, tenéis que decirnos :
 - Un problema a resolver en vuestra Empresa con dicho modelo
 - Un problema real que se haya resuelto con ese modelo
3. Defender porqué, para ese problema, dicho modelo es mejor opción que el resto:
 - Características de ese modelo diferente a los de su misma especie uqe lo hace buena elección
 - Porque la elección de esta tipología de modelo (clasificación, regresión,...)

Ejercicio 2

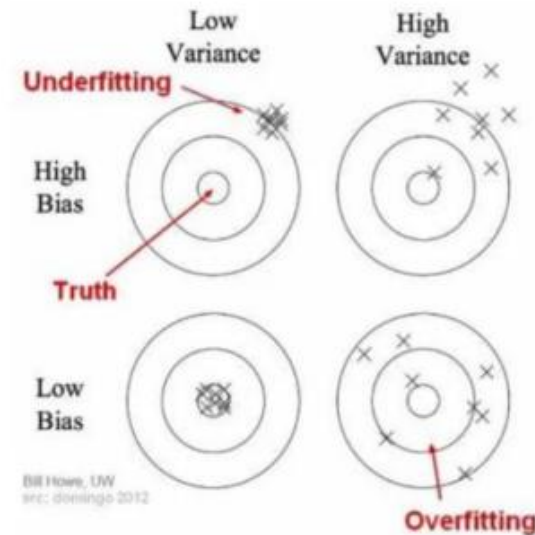
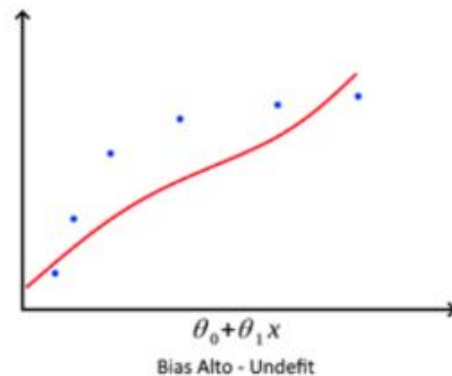
1. Os vamos a dar unos casos a resolver
2. Con el problema que os haya tocado, tenéis que decirnos qué modelo es la mejor opción y porqué



Posibles problemas al entrenar un modelo

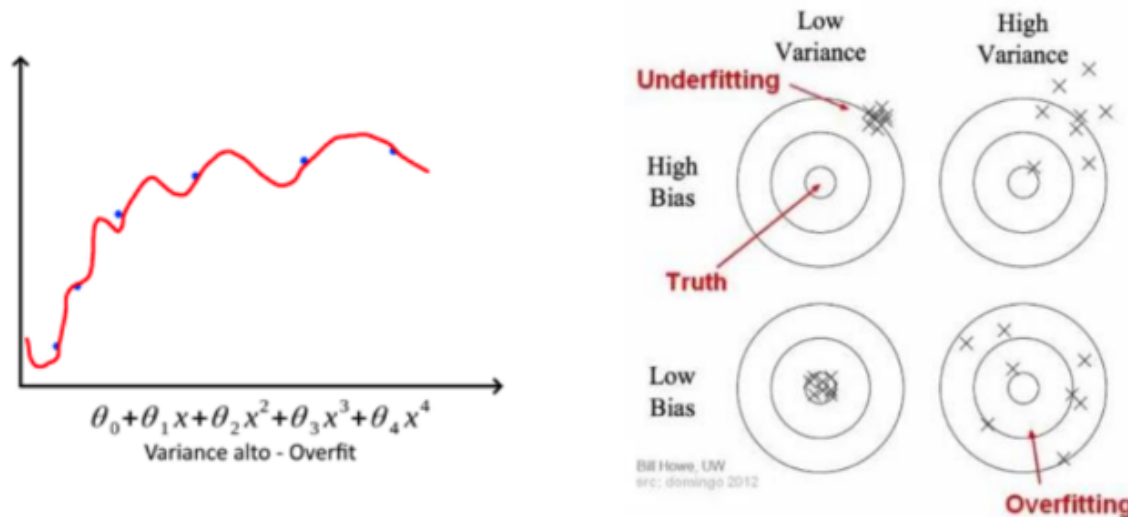
Underfitting

- ¿De donde surge el **error** de nuestros modelos de ML?
- Principalmente: $\text{error} = \text{sesgo}^2 + \text{varianza} + \epsilon$
- **Sesgo o bias (underfitting):**
 - Es la diferencia entre la predicción promedio de nuestro modelo y el valor correcto que estamos tratando de predecir.
 - Proviene de la rigidez del propio modelo para aprender las señales complejas del dataset (el modelo es demasiado simplista).
 - Los modelos con pocos grados de libertad son proclives a un alto bias (ej.: regresión lineal).
 - Si alto sesgo \rightarrow error alto en los datasets de training y de test.



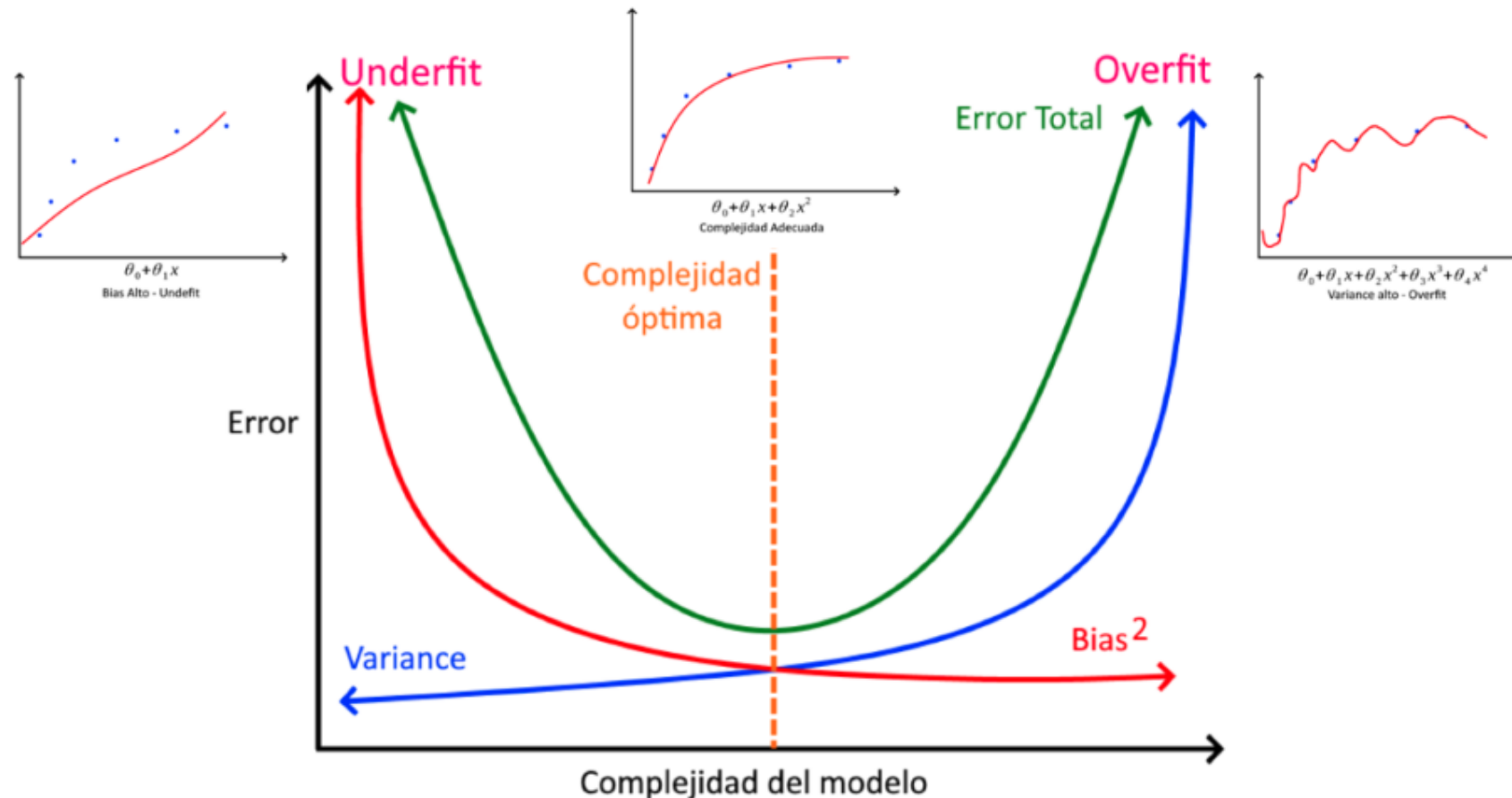
Overfitting

- ¿De donde surge el **error** de nuestros modelos de ML?
- Principalmente: $\text{error} = \text{sesgo}^2 + \text{varianza} + \epsilon$
- **Varianza (overfitting):**
 - Es la variabilidad de la predicción del modelo para los puntos de datos dados.
 - Proviene de la sensibilidad (flexibilidad) de un modelo a las variaciones en los datos de entrenamiento.
 - Un modelo con alta varianza presta mucha atención a los datos de entrenamiento y no generaliza bien en datos que no ha visto antes.
 - Los modelos con muchos grados de libertad son proclives a una alta varianza (ej.: árbol de decisión con muchos nodos).
 - Si alta varianza \rightarrow error bajo en los datos de training pero alto en test.



Bias-variance trade-off

- Normalmente, los **modelos no rinden** bien por sí solos debido a que tienen un **sesgo alto** para ser precisos o una **varianza alta** para ser robustos





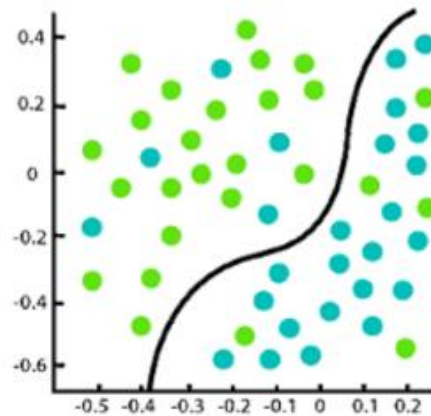
¿Cómo se evalúa un modelo?

¿Cómo los evaluamos?

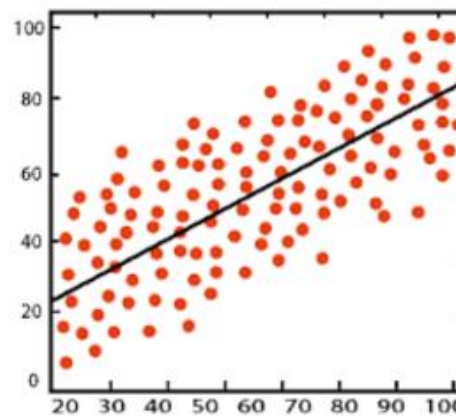
- **Evaluación de los resultados:** Hay infinidad de funciones que nos permiten evaluar qué tan bien se comportan los modelos, pero hay que hacer distinciones:

¿Qué tipo de problema estamos solucionando?

KNN
Árboles de decisión
Redes neuronales



Classification



Regression

Regresiones
Árboles de regresión
Redes neuronales

Evaluación de modelos de clasificación

- **Métricas de clasificación**
 - % aciertos / accuracy
 - Matrices de confusión: 2 clases
 - Matrices de confusión: múltiples clases
 - Métricas derivadas de la matriz de confusión
 - Curvas ROC
- **Métricas de regresión**
- **Validación del método de aprendizaje (del modelo)**
- **Comparación de distintos métodos de aprendizaje**

Evaluación de modelos de clasificación

Exactitud (accuracy) = % Aciertos

$$\text{Accuracy} = \frac{\text{Correct predictions}}{\text{All predictions}}$$

$$\text{Error} = 1 - \text{Accuracy}$$

- Es la más simple y fácil de interpretar
- No es representativa en conjuntos de datos desbalanceados

Evaluación de modelos de clasificación

Exactitud (accuracy) = % Aciertos

Ejemplo:

- Tienes 100 imágenes de lunares:
 - 95 son lunares (no perjudicial para la salud)
 - 5 son melanomas (cáncer de piel)
- Un modelo podría comportarse de esta forma:
 - El modelo siempre predice "lunar", sin importar la imagen
- Resultado:
 - Clasifica correctamente las 95 imágenes de lunares (no peligrosos)
 - Falla en las 5 imágenes de melanomas (las predice como "lunar").
- A pesar de tener un **95% de accuracy**, el modelo es inútil para detectar melanomas, porque nunca acierta en esa clase

La accuracy NO es válida para evaluar modelos entrenados con conjuntos de datos desbalanceados

Evaluación de modelos de clasificación

Matrices de confusión

Nos permiten evaluar qué clases se han identificado correctamente, cuáles no y qué instancias se han clasificado mal para poder estudiar a fondo qué ha pasado, dando lugar a una reformulación del procesamiento inicial, arquitectura etc.

Además se pueden derivar en muchas métricas en función de los resultados que estamos buscando o qué errores nos podemos llegar a permitir.

	Predicted Positive	Predicted Negative
Actual Positive	TP <i>True Positive</i>	FN <i>False Negative</i>
Actual Negative	FP <i>False Positive</i>	TN <i>True Negative</i>

Evaluación de modelos de clasificación

Matrices de confusión

- **Recall (sensibilidad):**
¿Qué porcentaje de los melanomas fueron detectados correctamente?
- **Specificity (especificidad):**
¿Qué porcentaje de los lunares corrientes fueron identificados correctamente como no melanomas?
- **Precision:**
Para las predicciones clasificadas como melanomas, ¿qué porcentaje realmente eran melanomas?
- **F1-Score:**
¿Cuál es el balance entre precisión (precision) y sensibilidad (recall) para la detección de melanomas?

Evaluación de modelos de clasificación

		Predicted Class		
		Positive	Negative	
Actual Class	Positive	True Positive (TP)	False Negative (FN) Type II Error	Sensitivity $\frac{TP}{(TP + FN)}$
	Negative	False Positive (FP) Type I Error	True Negative (TN)	Specificity $\frac{TN}{(TN + FP)}$
		Precision $\frac{TP}{(TP + FP)}$	Negative Predictive Value $\frac{TN}{(TN + FN)}$	Accuracy $\frac{TP + TN}{(TP + TN + FP + FN)}$

$$F1 = 2 * \frac{Precision * Recall}{Precision + Recall}$$

Evaluación de modelos de clasificación

		Predicted Class		
		Positive	Negative	
Actual Class	Positive	True Positive (TP)	False Negative (FN) Type II Error	Sensitivity $\frac{TP}{(TP + FN)}$
	Negative	False Positive (FP) Type I Error	True Negative (TN)	Specificity $\frac{TN}{(TN + FP)}$
		Precision $\frac{TP}{(TP + FP)}$	Negative Predictive Value $\frac{TN}{(TN + FN)}$	Accuracy $\frac{TP + TN}{(TP + TN + FP + FN)}$

$$F1 = 2 * \frac{Precision * Recall}{Precision + Recall}$$



- $Precision = \frac{23}{23+5} = 0,821$
- $NPV = \frac{31}{31+8} = 0,794$
- $Recall = \frac{23}{23+8} = 0,791$
- $Specificity = \frac{31}{31+5} = 0,861$

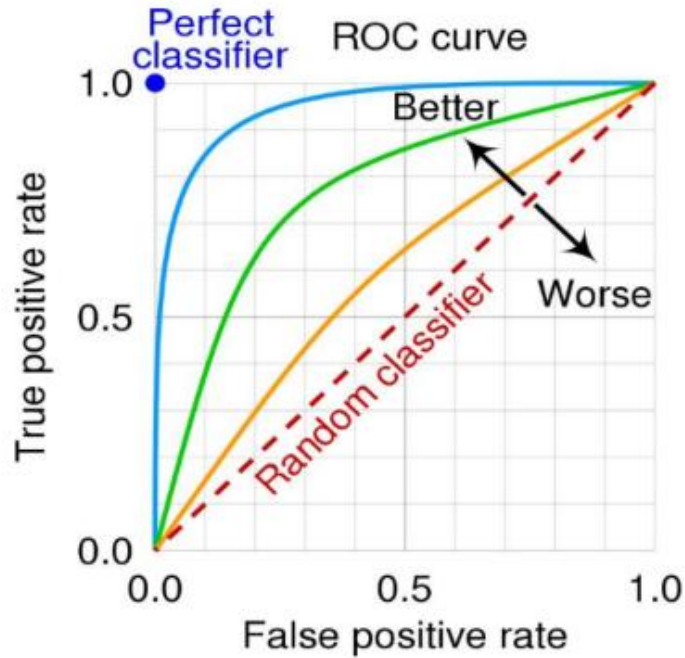
- $Accuracy = \frac{23+31}{23+31+5+8} = 0,805$

- $F1 = 2 \frac{\frac{23}{23+5} * \frac{23}{23+8}}{\frac{23}{23+5} + \frac{23}{23+8}} = 2 \frac{0,649}{1,612} = 0,805$

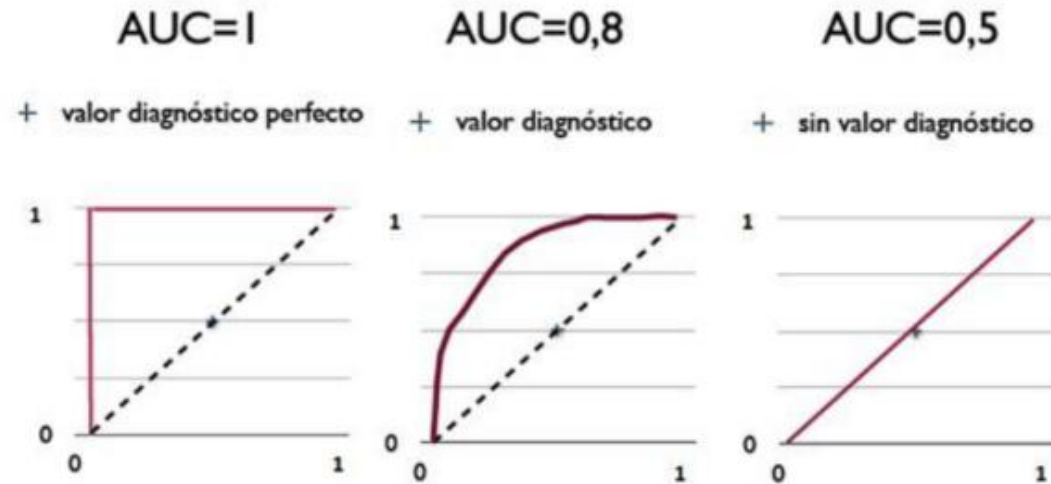
Evaluación de modelos de clasificación

		Predicted class			
Actual class		Class a	Class b	Class c	Total
	Class a	88 100%	10	2	100
	Class b	14	40 100%	6	60
	Class c	18	10	12 100%	40
	Total	120	60	20	

Evaluación de modelos de clasificación



- **Curva ROC (Receiver Operating Characteristic):** Representa la sensibilidad y la tasa de falsos positivos (1-especificidad), eje y/x respectivamente.
- **Area bajo la curva (AUC):** Se integra la curva ROC a modo de medida de bonanza.

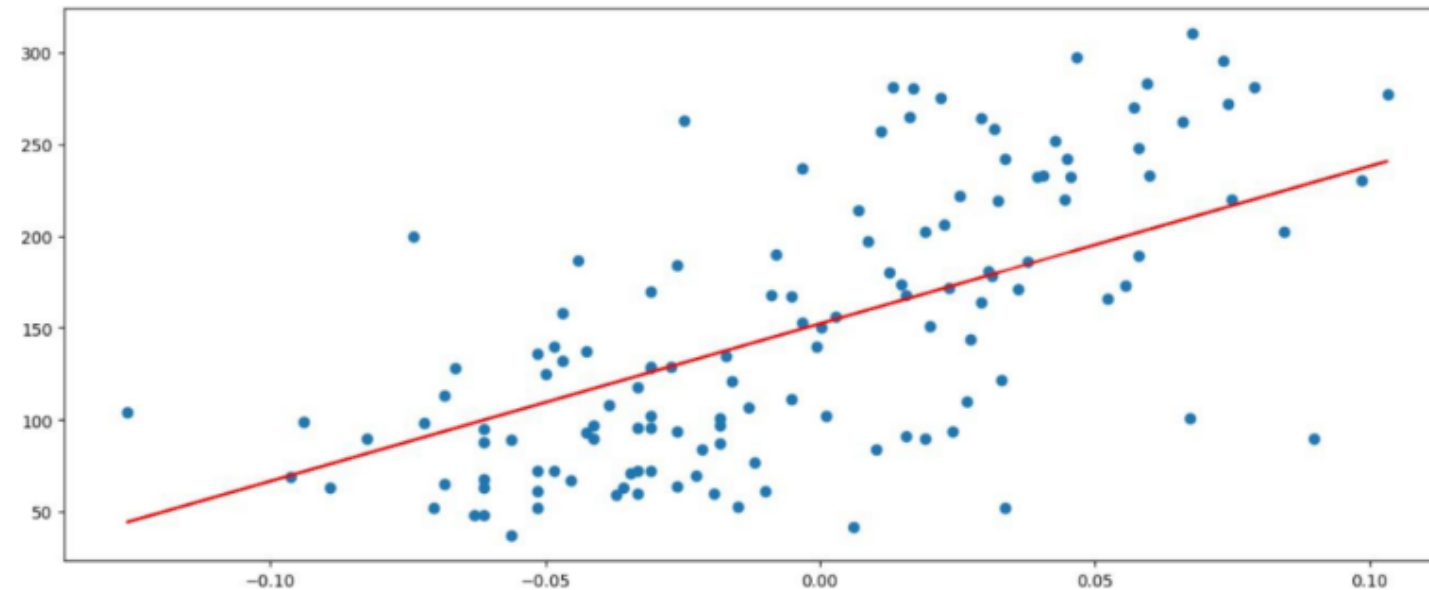


Métodos de validación

Métricas de regresión

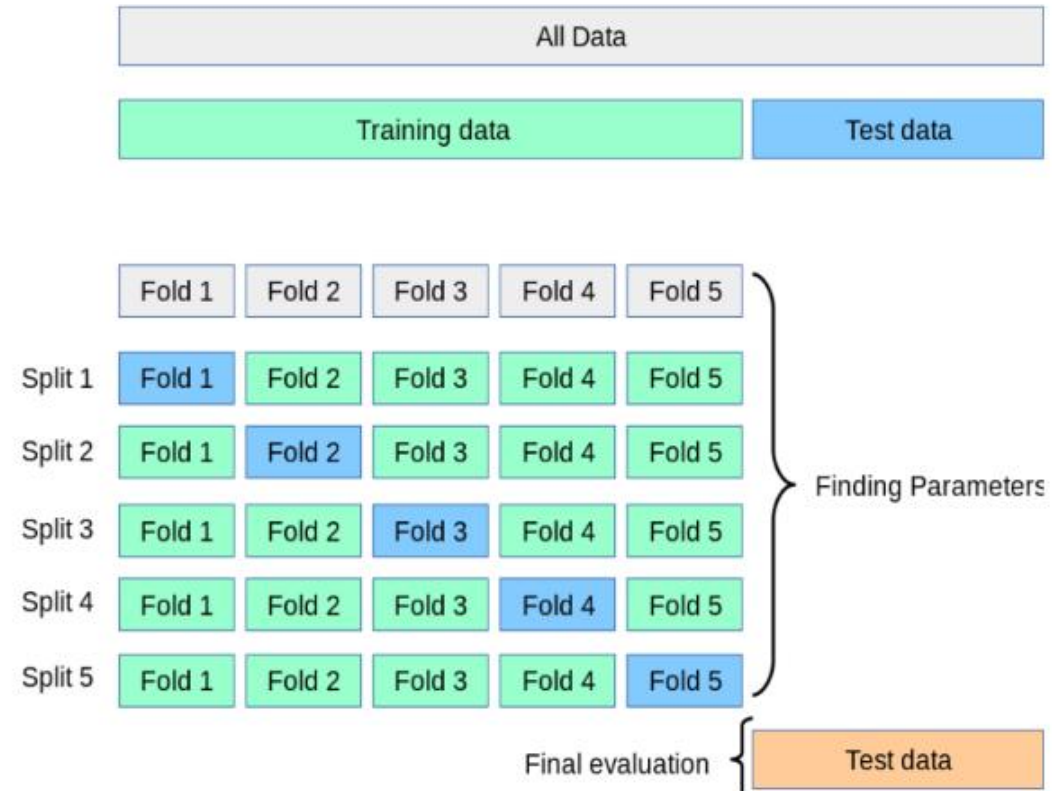
Funciones que nos permiten calcular de cuánto nos hemos equivocado en nuestra predicción y que la mayoría de ellas vienen derivadas de una misma función pero que nos permiten conocer ciertas características.

- Mean absolute error (MAE)
- Mean squared error (MSE)
- Root mean squared error (RMSE)
- ...



Evaluación de modelos de regresión

- **K-fold cross validation:** Separar en K grupos y entrenar/evaluar con los diferentes grupos para tener una medida estadística de los resultados y darle consistencia.



Comparando distintos métodos de aprendizaje

	Dataset 1	Dataset 2	Dataset K
Algorithm 1	%acc (std)	%acc (std)	%acc (std)
Algorithm 2	%acc (std)	%acc (std)	%acc (std)
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
Algorithm N	%acc (std)	%acc (std)	%acc (std)

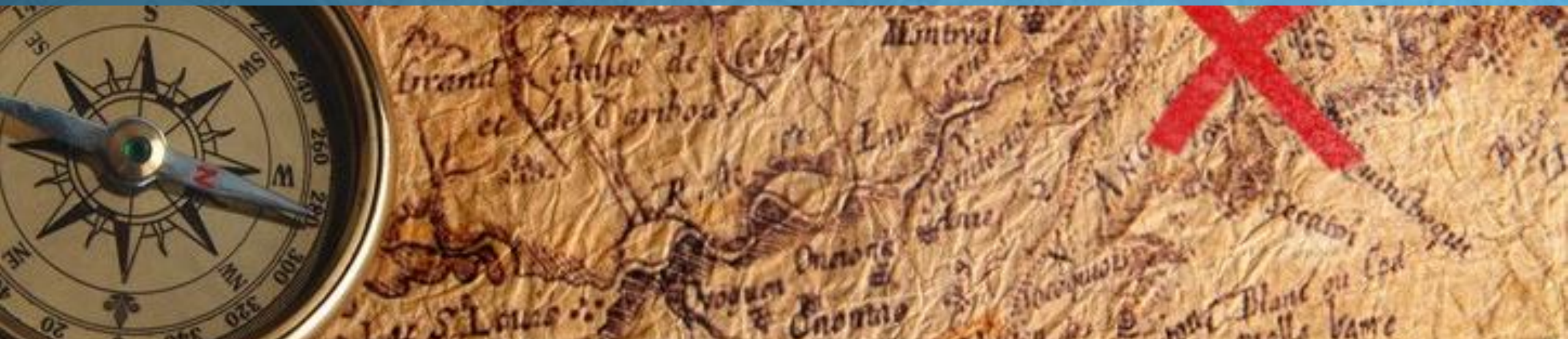
Which one is the best?

Comparando distintos métodos de aprendizaje

Modelo	MMLU (5-shot)	HellaSwag	HumanEval	MATH	TruthfulQA	Avg. Score
GPT-4	86.4%	95.3%	67.0%	42.5%	59.2%	70.1%
Claude 3.5 Sonnet	85.7%	94.8%	65.5%	41.0%	58.7%	69.1%
Llama 3.1 405B	84.5%	93.2%	63.0%	39.5%	57.3%	67.5%
Gemini 1.5 Pro	83.0%	92.5%	61.5%	38.0%	56.0%	66.2%
Mistral 7B	80.0%	90.0%	58.0%	35.0%	52.0%	63.0%

- **MMLU (Massive Multitask Language Understanding):** Evalúa la comprensión multitarea en 57 temas diferentes.
- **HellaSwag:** Mide la capacidad de razonamiento de sentido común.
- **HumanEval:** Prueba la capacidad de generar código funcional.
- **MATH:** Evalúa la habilidad para resolver problemas matemáticos.
- **TruthfulQA:** Mide la veracidad de las respuestas generadas.

4. Algoritmos de aprendizaje automático en SBC



MD005 – Sistemas Basados en el Conocimiento

Manel Cerezo García– manel.cerezo@salle.url.edu

David Larrosa– david.larrosa@salle.url.edu