Tema 04. Diseño de sistemas de Aprendizaje Automático

Autor: Ismael Sagredo Olivenza

4.1 Proceso de desarrollo del ML

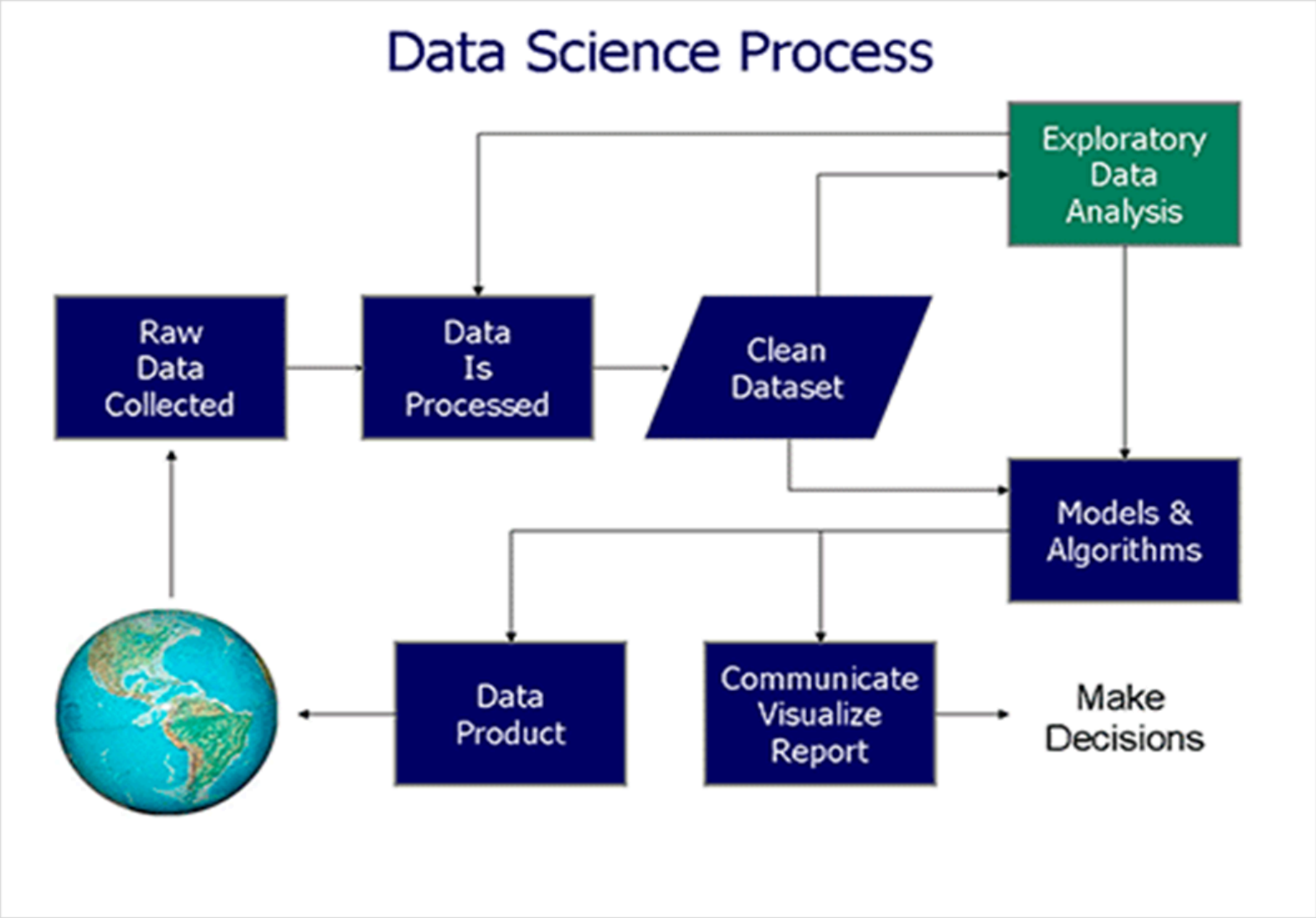
En proyectos reales:

Gran parte del tiempo de desarrollo se dedica a obtener, pulir y limpiar datos.

Los algoritmos de ML suelen tener que volver a entrenarse para mantener su relevancia, ya que el entorno cambia a menudo. Y durante el entrenamiento hay que hacer muchos ajustes finos.

Así, tenemos un proceso iterativo de desarrollo de proyectos basados en aprendizaje automático.

4.1.1 Data Science Process

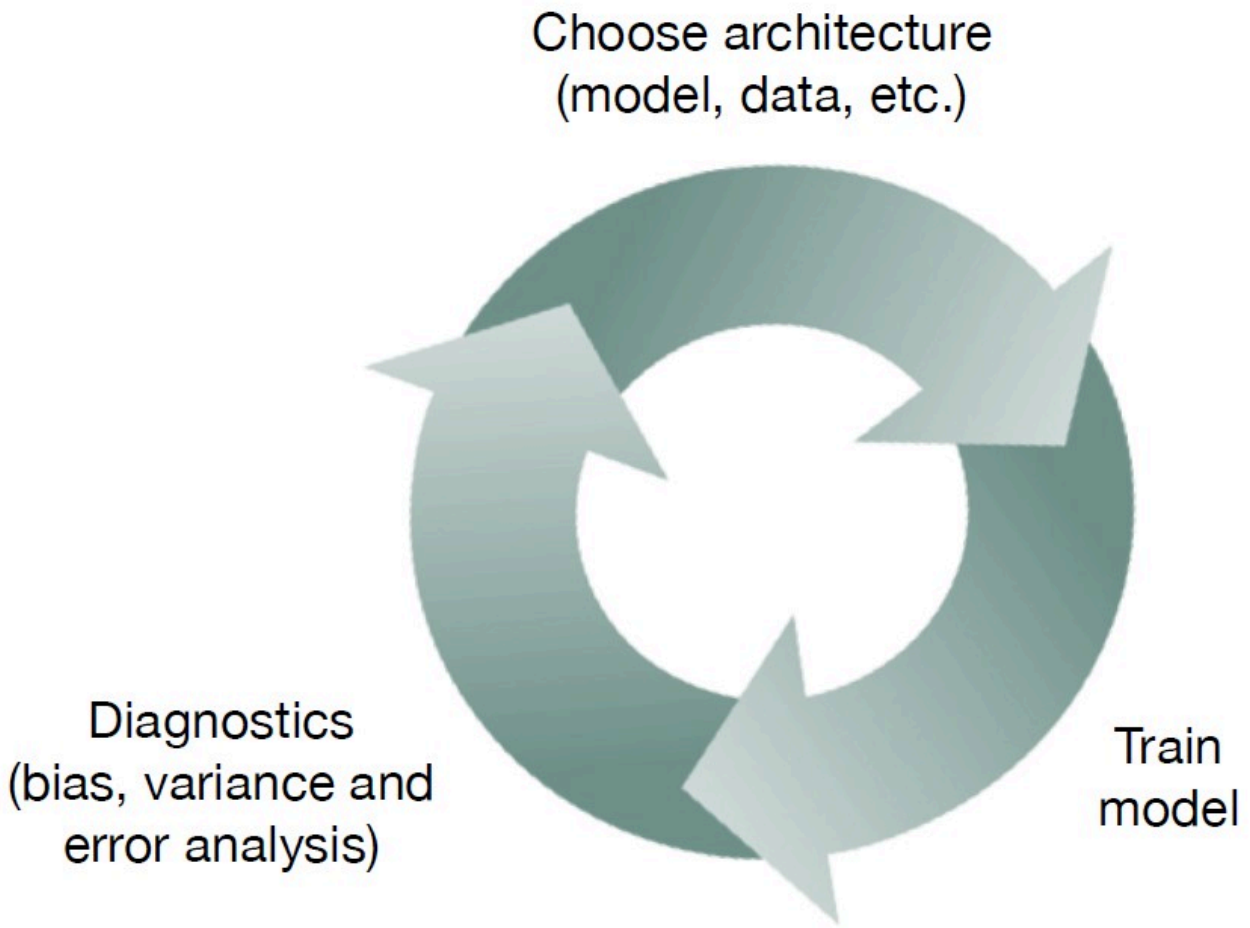


Este proceso iterativo se refleja en el **Proceso de Ciencia de Datos**. En muchas ocasiones, la modificación del mundo por parte de la propia IA hace que el entorno cambie, por lo que debemos repetir el proceso de nuevo.

Si nos centramos únicamente en el proceso iterativo desde el punto de vista del Machine Learning, podemos simplificar el proceso a tres fases:

- Elegir la arquitectura: incluyendo datos, modelos, etc.
- Entrenar el modelo: Entrenamiento del propio modelo, selección de hiperparámetros, etc.
- Diagnóstico: sesgo, varianza, error, etc.

4.1.2 Iterative loop of ML development



4.2 Limpiar y codificar los datos

Limpiar el conjunto de datos de errores y valores nulos. Estrategias:

- Eliminar observaciones: Si hay pocos datos no es recomendable.
- Imputar al campo o característica un valor que tenga sentido según los datos disponibles. Por ejemplo el valor medio / moda

```
from sklearn.impute import SimpleImputer
```

- Imputar el valor medio de las entradas más similares al dato que estamos inputando (KNNInputer)

```
from sklearn.impute import KNNImputer
```

4.2.1 One-hot encoding

Al trabajar con variables categóricas, una de las cuestiones más importantes es transformar nuestras variables categóricas en variables numéricas.

One-Hot Encoding transforma una característica categórica en tantas variables como valores posibles tenga la categoría y asigna a cada una de ellas 0 ó 1 en función del valor.

```
from sklearn.preprocessing import OneHotEncoder
oneHotEncoder = OneHotEncoder(drop='first')
oneHotEncoderFit = oneHotEncoder.fit(provincias.reshape(-1,1))
oneHotEncoderFit.transform(provincias.reshape(-1,1)).toarray()
```

4.3 Evaluación del modelo

- **Mean Square Error** entre el pronostico y el real.

$$MSE(Y, Y') = \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^{N} (y_i - y'_i)^2$$

- **Confussion Matrix** (Ejemplo para clase binaria)

	C observed T	**C observed F**
C Predicted T	True Positive (TP)	False Positive (FP)
C Predicted F	False Negative (FN)	True Negative (TN)

- **Accuracity** o tasa de exactitud: Aciertos entre el total.

$$Accuracity = \frac{TP + TN}{TP + N + FP + FN} = \frac{V}{N}$$

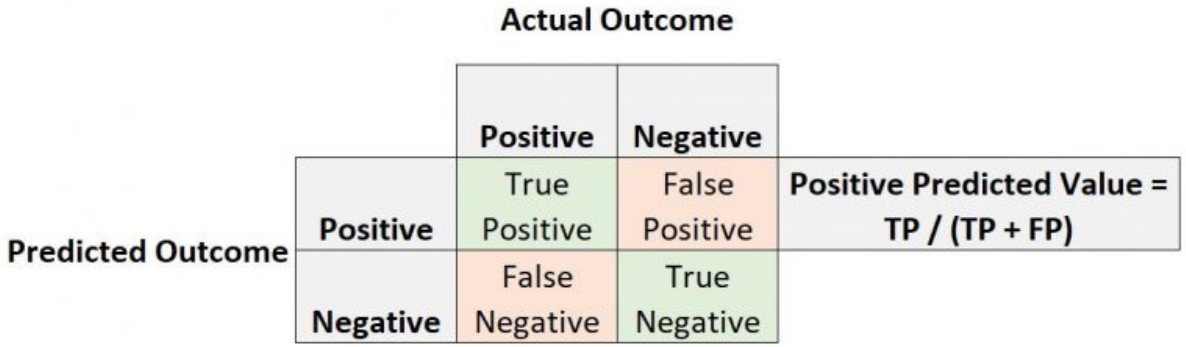
La exactitud puede presentar problemas en los casos en que las clases estén desequilibradas.

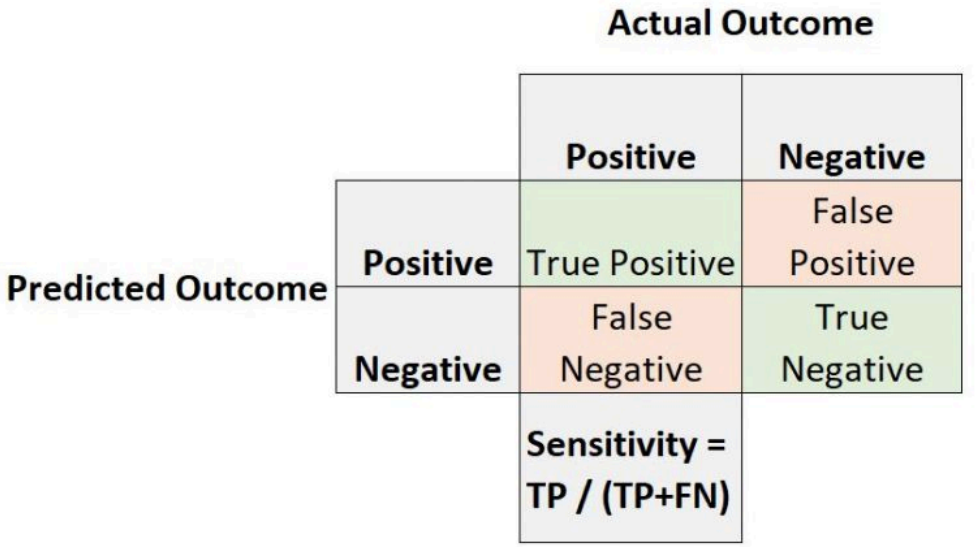
- True Positive Rate / **Sensibility** (**Recall**). Verdaderos positivos entre todos los positivos observados (de todos los positivos reales (TP + FN), cual es el ratio de positivos detectados.)

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

- Positive Predictive Value (**Precision**). Verdaderos positivos entre todos los positivos predecidos. (De todo lo que nuestro clasificador clasifica como positivo (TP + FP), cual es el ratio de clasificaciones correctas)

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





Equilibrio entre Precision y Recall

Las métricas de precision y recall están relacionadas de manera que si entrenas tu clasificador para aumentar la precisión, disminuirá el recall y viceversa.

Una métrica que mide el equilibrio de ambas es la siguiente:

- **F1 Score**: entre 0 y 1. 1 sería un clasificador perfecto.

$$F1Score = 2 \cdot \frac{Precision \cdot Recall}{Precision + Recall} = \frac{2TP}{2TP + FP + FN}$$

Ejemplo

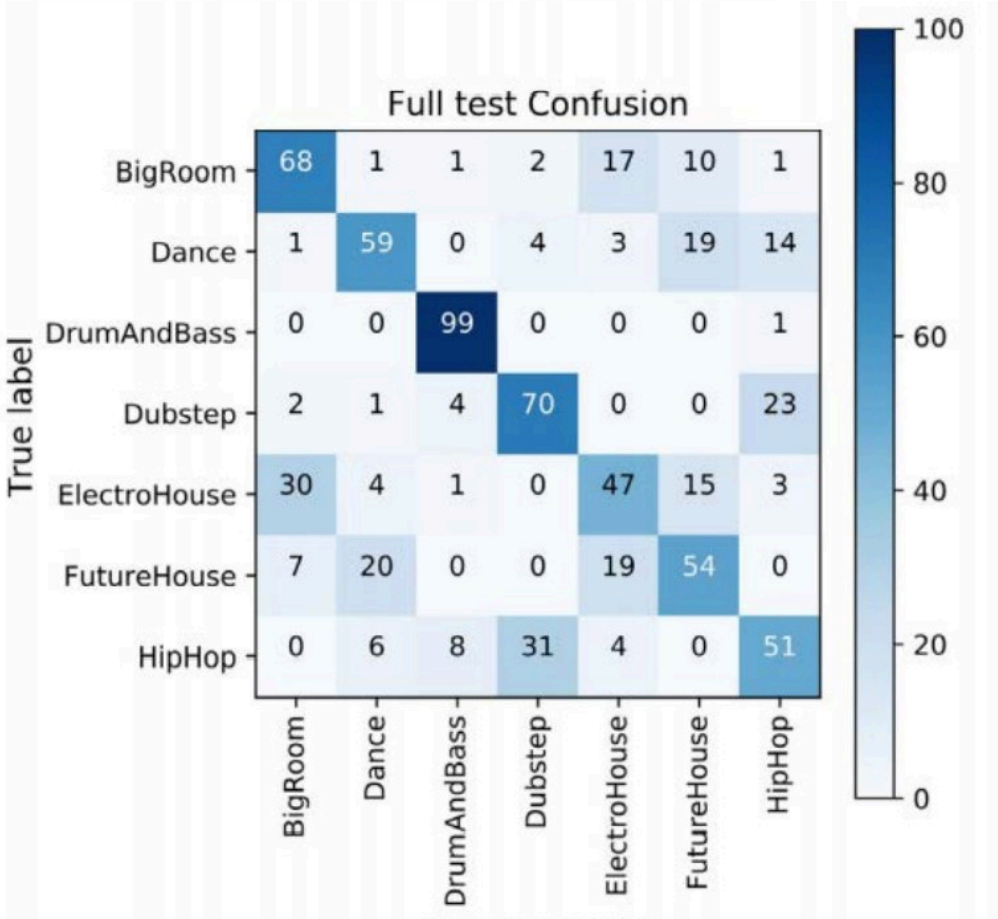
Confussion Matrix: Calcula precission, recall, F1Score.

	C observed T	C observed F
C Predicted T	176 (TP)	107 (FP)
C Predicted F	316 (FN)	993 (TN)

- Precission: $precission = \frac{TP}{TP+FP} = \frac{176}{176+107} = 0,6219 = 62,19\%$
- Recall: $recall = \frac{TP}{TP+FN} = \frac{176}{176+316} = 0,3577 = 35,77\%$
- F1Score: $F1 = 2 \cdot \frac{Precision \cdot Recall}{Precision+Recall} = 2 \cdot \frac{0.62 \cdot 0.35}{0.62+0.35} = 0,4488$

Ejercicio

Interpreta la siguiente matriz de confusión. Clasificar canciones según el subgénero de música electrónica al que pertenecen



4.3.1 Testing

Dividir el conjunto de datos en datos de entrenamiento y datos de prueba.

La distribución de los datos entre prueba y entrenamiento debe ser correcta y proporcional al número de clases. Una distribución sesgada (Biases) puede causar problemas.

SKLearn nos puede ayudar en esta tarea:

```
from sklearn.model_selection import train_test_split
x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(data, y, train_size = 0.8, random_state = 1234)
```

Durante la fase de entrenamiento, no sólo debemos fijarnos en el error de entrenamiento, sino también en el **error de validación**. El error de validación sería similar al **error de prueba**, pero se ejecuta durante el entrenamiento para ver si el modelo está perdiendo capacidad de generalización.

A priori podría parecer que la validación y la prueba son lo mismo, pero estos dos conjuntos se suelen diferenciar porque cuando se prueban diferentes ajustes del modelo (hiperparámetros) existe **aún un riesgo de sobreajuste** en el **conjunto de prueba** porque los parámetros se pueden **ajustar hasta que el estimador funcione de forma óptima**. De este modo, el conocimiento sobre el conjunto de pruebas puede "filtrarse" en el modelo y las métricas de evaluación ya no informan sobre el rendimiento de la capacidad de generalización.

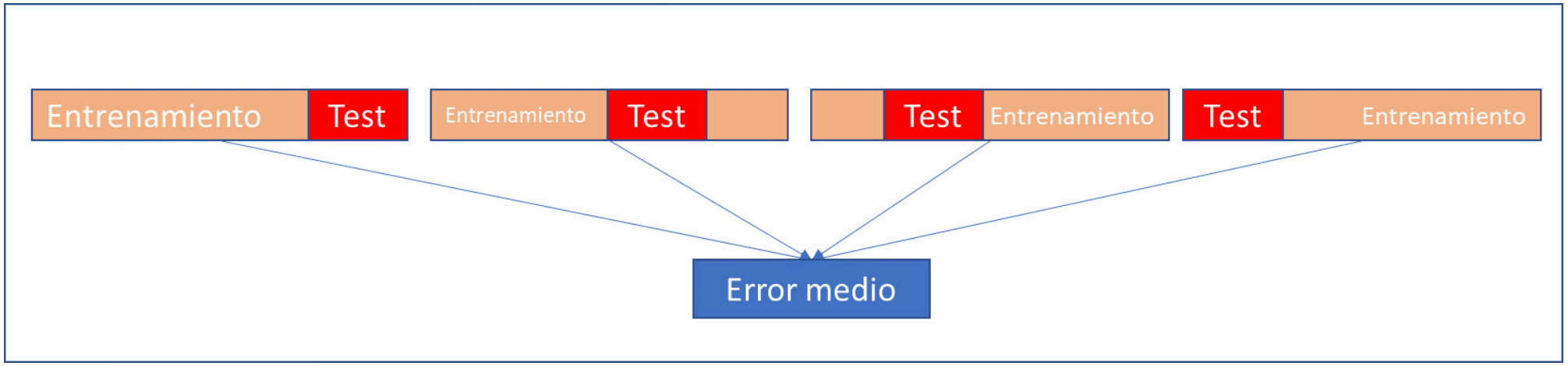
Por lo tanto, tendremos los siguientes conjuntos:

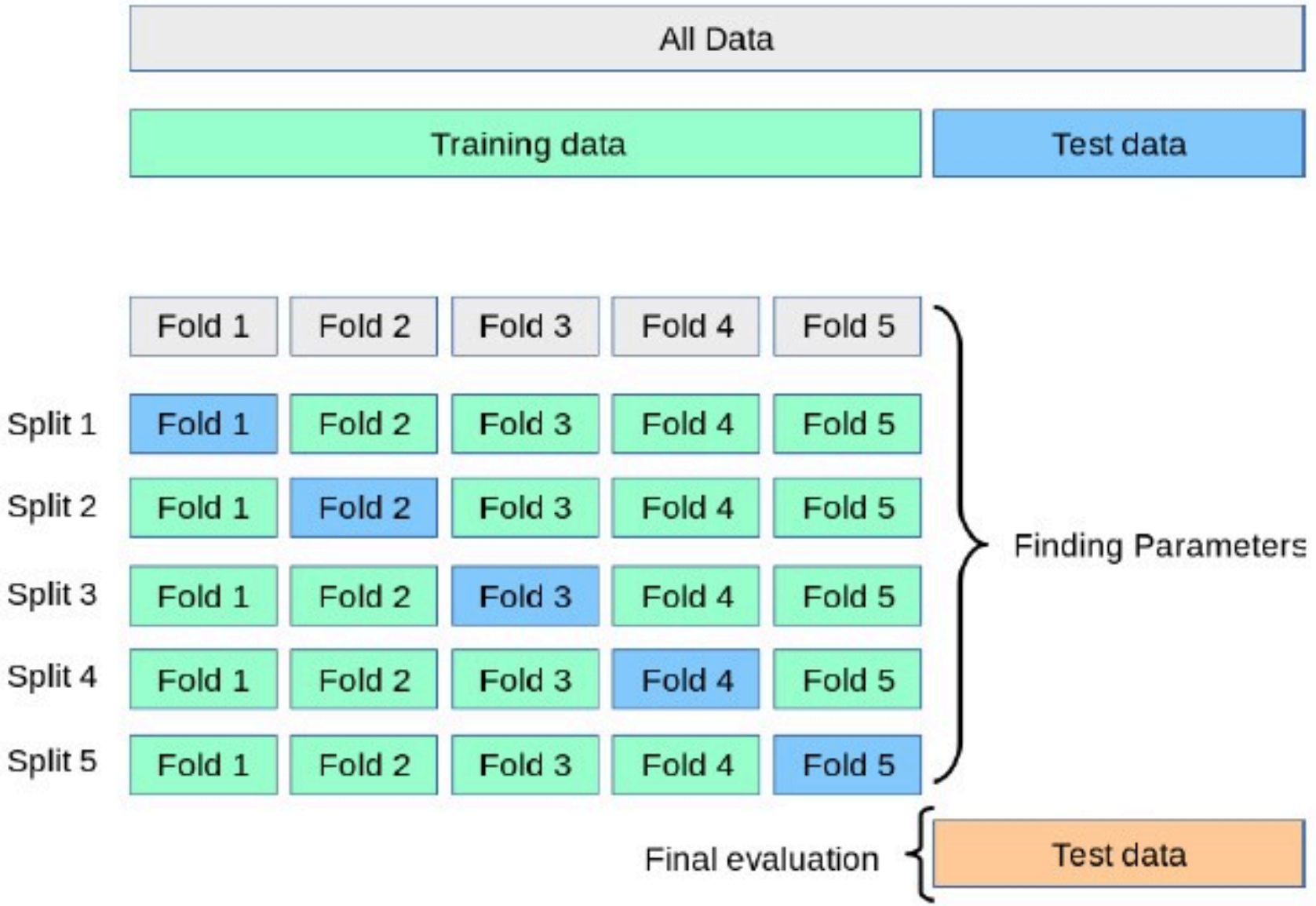
- **Error de entrenamiento**: Error de datos de entrenamiento.
- **Error de validación** (validation): Error de validación durante el entrenamiento para mantener la capacidad de generalización.
- **Error de pruebas** (test): Error con datos completamente excluidos del entrenamiento que tiene lugar después del entrenamiento.

Sin embargo, al dividir los datos disponibles en tres conjuntos, reducimos drásticamente el número de muestras que pueden utilizarse para el aprendizaje del modelo, y los resultados pueden depender de una elección aleatoria concreta para el par de conjuntos (entrenamiento, validación). Una solución es la **validación cruzada** o **cross-validation**

K-Fold Cross Validation

Cross-validation nos permite dividir los datos en k subgrupos y utilizar para el entrenamiento k-1 de ellos y para la validación durante el entrenamiento el restante. El error final es el error medio. Esto nos permite aprovechar los datos de entrenamiento y evitar posibles sesgos en la elección del conjunto de validación.




All Data
Training data
Test data
Fold 1
Fold 2
Fold 3
Fold 4
Fold 5
Split 1
Split 2
Split 3
Split 4
Split 5
Finding Parameters
Final evaluation
Test data

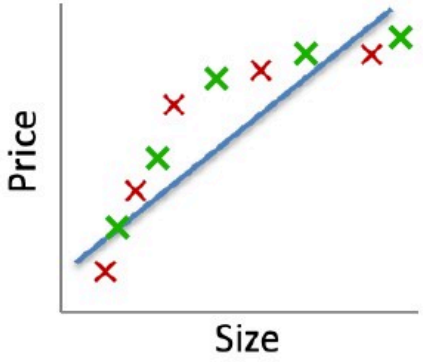
```
from sklearn.model_selection import cross_val_score
clf = Stimator(For example MLPClassifier)
scores = cross_val_score(clf, X, y, cv=5)
scores
print("%0.2f accuracy with a standard deviation of %0.2f" % (scores.mean(), scores.std()))
```

Por defecto, la puntuación calculada en cada iteración de CV es el método de puntuación del estimador. Es posible cambiar esto utilizando el parámetro de puntuación:

```
scores = cross_val_score(clf, X, y, cv=5, scoring='f1_macro')
```

- Leave One Out (LOO)
- Leave P Out (LPO), Leave P Out (LPO)
- ShuffleSplit...

4.4 Diagnostic Bias and Variance



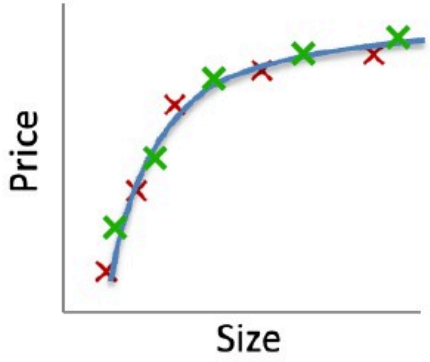
$f_{\vec{w},b}(\vec{x}) = w_1x_1 + b$

High bias
(underfit)

$d = 1$

J_{train} is high

J_{cv} is high



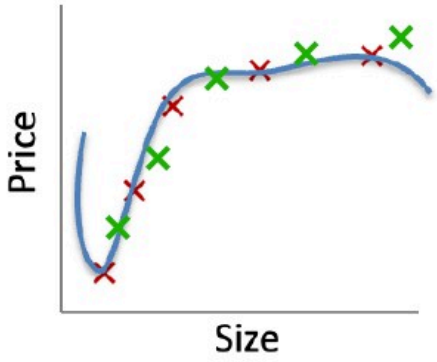
$f_{\vec{w},b}(\vec{x}) = w_1x_1 + w_2x^2 + b$

"Just right"

$d = 2$

J_{train} is low

J_{cv} is low



$f_{\vec{w},b}(\vec{x}) = w_1x_1 + w_2x^2 + w_3x^3 + w_4x^4 + b$

High variance
(overfit)

$d = 4$

J_{train} is low

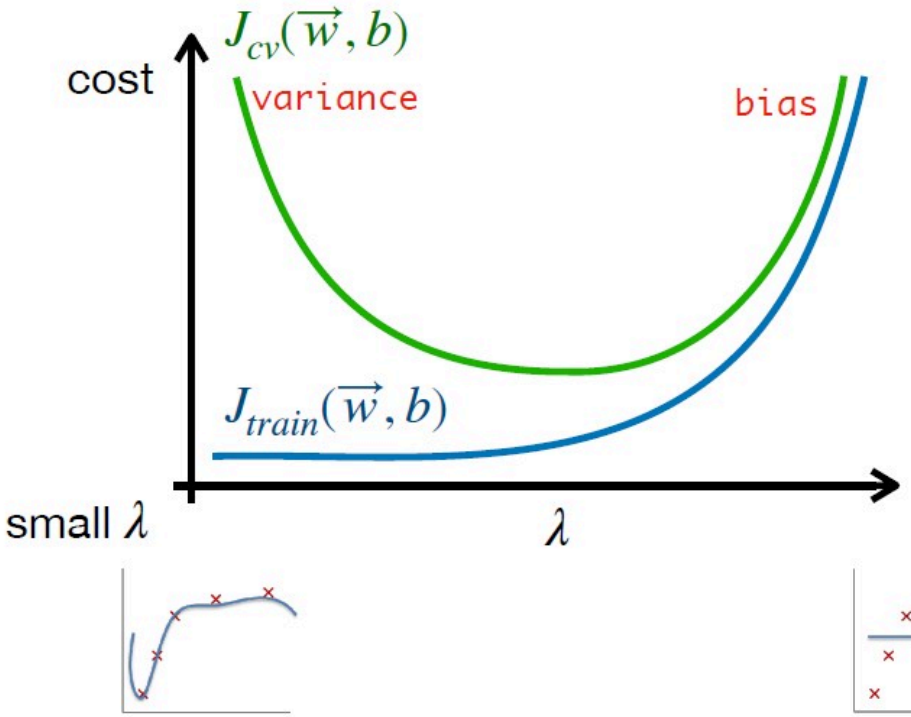
J_{cv} is high

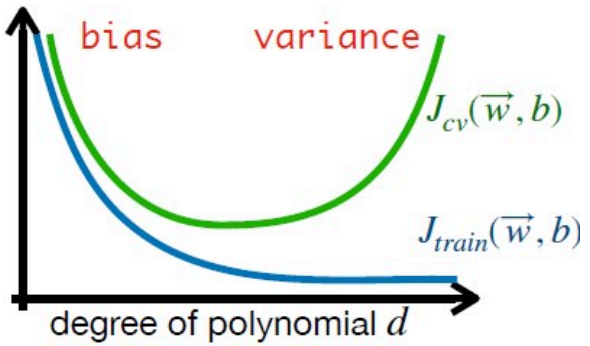
4.4.1 Bias / varianza en función del parámetro de regularización

Cuanto mayor sea el parámetro de regulzarización, la diferencia entre bias y varianza se reducirá. Lo importante es e ncontrar el punto correcto donde la varianza sea la mas baja posible, ya que no nos interesa que crezca. Ese es el punto correcto del parámetro λ

Bias/variance as a function of regularization parameter λ

$$J(\vec{w}, b) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} (f_{\vec{w},b}(\vec{x}^{(i)}) - y^{(i)})^2 + \frac{\lambda}{2m} \sum_{j=1}^{n} w_j^2$$



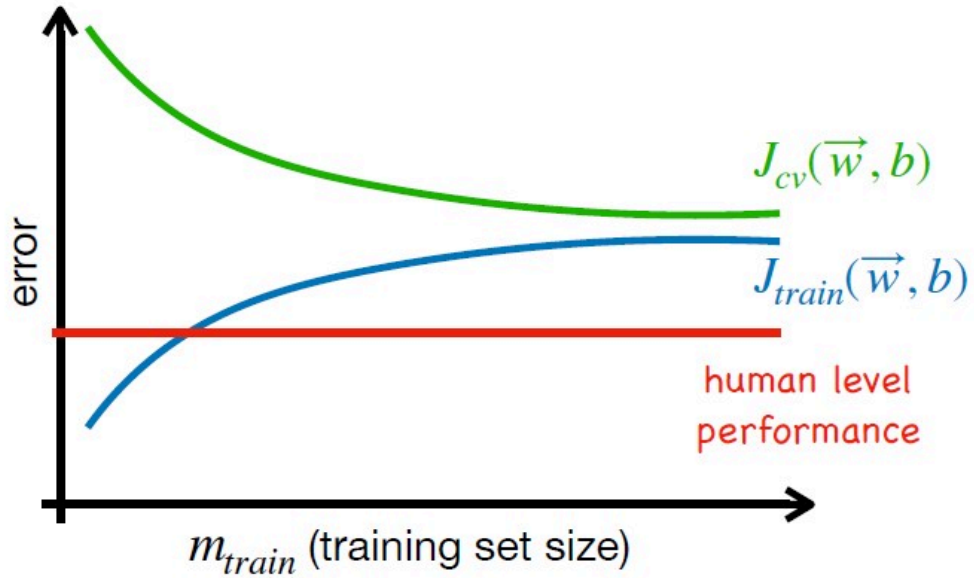


*One of the challenges with building machine learning systems is that there's so many things you could try, so many things you could change (**hyperparameters**)*

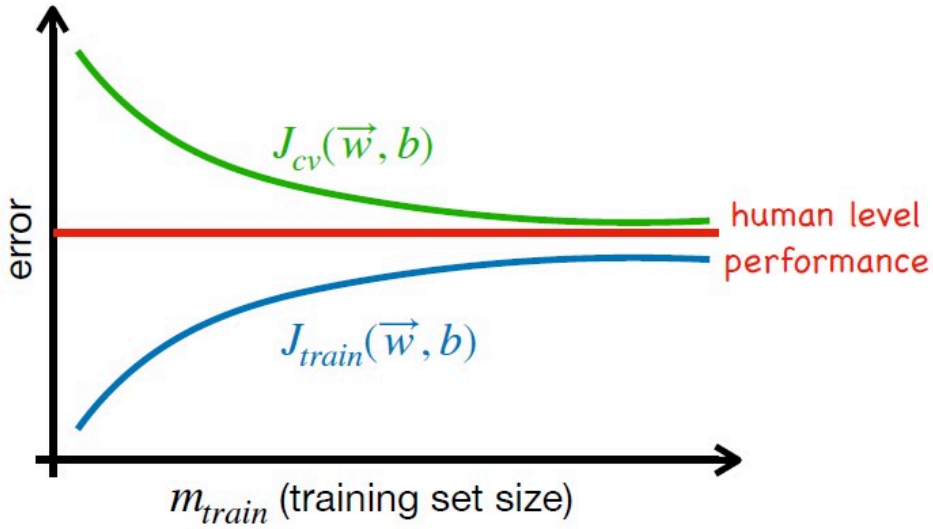
4.4.2 Podemos usar una baseline para medir el rendimiento.

Usando una baselie o medida de lo que consideramos suficientemente bueno o lo que pretendemos superar (por ejemplo el rendimiento humano en una tarea), podemos estimar si el modelo necesita más complejidad o mas ejemplos. Si tanto el error de entrenamiento como el de validación están por encima del error humano, necesitaremos un modelo más complejo. Si la varianza es alta, necesitamos más datos.

Usando **accuracy** sería similar pero a la inversa, si tengo mayor accuracy que el humano mejor.

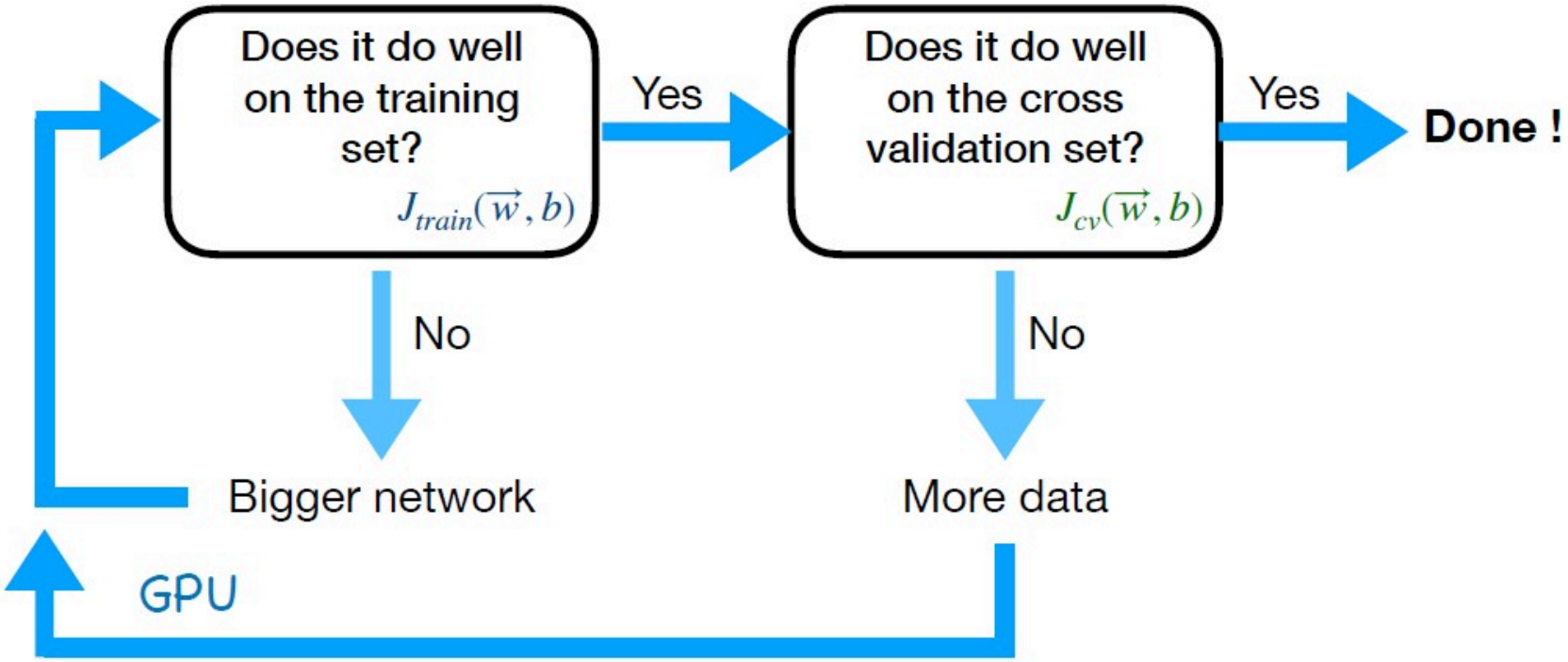


if a learning algorithm suffers from high bias, getting more training data will not (by itself) help much



if a learning algorithm suffers from high variance, getting more training data is likely to help

4.4.2 Controlar la relación bias/carianza



Las grandes redes neuronales son modelos de bajo sesgo. Es importante seleccionar el parámetro de regularización correcto.