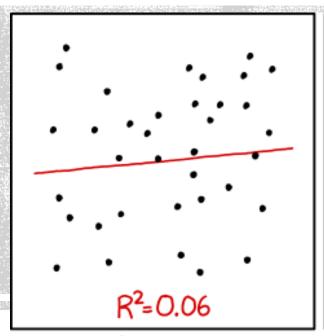
REGRESION

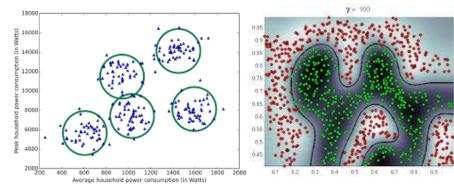




I DON'T TRUST LINEAR REGRESSIONS WHEN IT'S HARDER TO GUESS THE DIRECTION OF THE CORRELATION FROM THE SCATTER PLOT THAN TO FIND NEW CONSTELLATIONS ON IT.

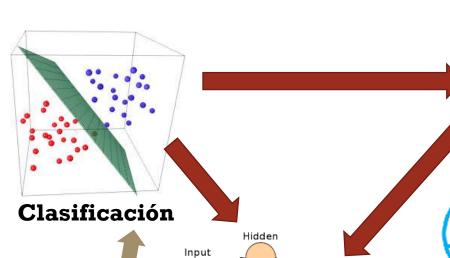
AGENDA

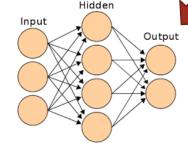




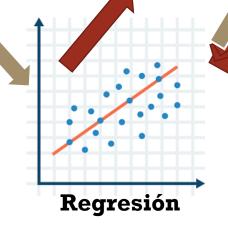
Aprendizaje no supervisado

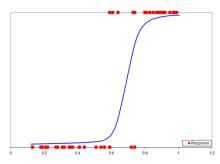
Aprendizaje supervisado





Redes neuronales artificiales

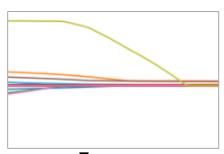




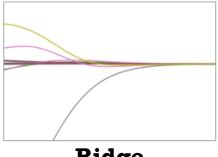
Regresión logística



Métricas de Evaluación de la regresión



Lasso



Ridge



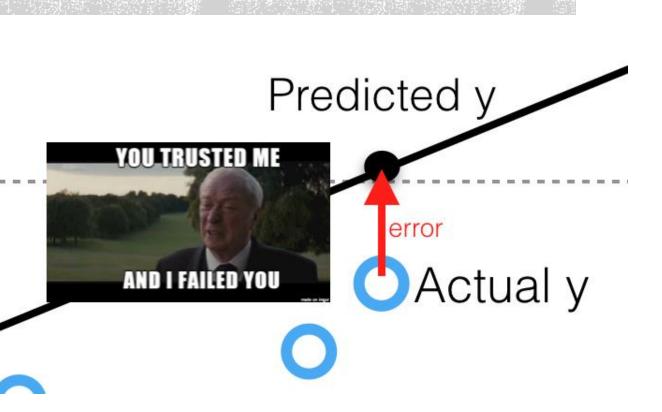
Data curve fit

ordinarios



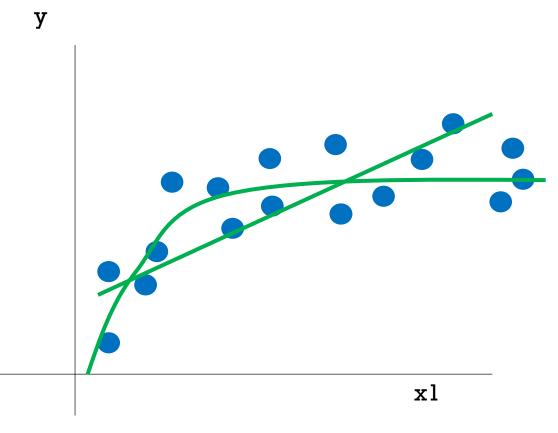
DECRESIÓN LINEAL

(Mínimos Cuadros Ordinarios)



REGRESIÓN

- Encontrar modelos que permitan predecir valores continuos:
 - KNN
 - Regresión lineal
 - Regresión polinómica
 - Árboles de regresión
 - . . .
- Valores continuos de la variable objetivo
- Baseline: medida de evaluación dada por un modelo que predice una medida de tendencia central (e.g. el promedio)





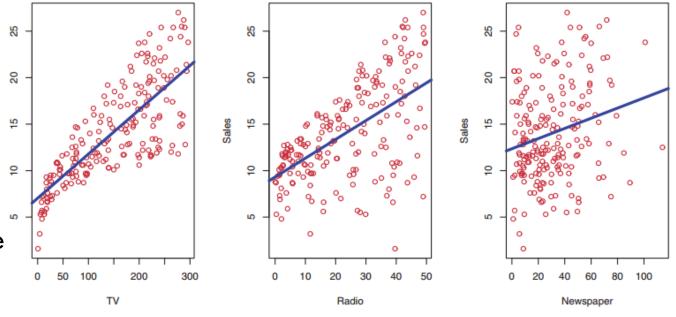
REGRESIÓN

Predicción:

- Procesos de caja negra
- Estimar el valor objetivo Y dado los valores de los predictores X

Inferencia:

- ¿Cuáles son los predictores asociados con la respuesta?
- ¿Cuál es la relación entre la variable respuesta y cada uno de los predictores?
- ¿Se puede resumir esa relación linealmente o se trata de una relación mas compleja?



Ventas = f(TV, Radio, Peri'odicos)

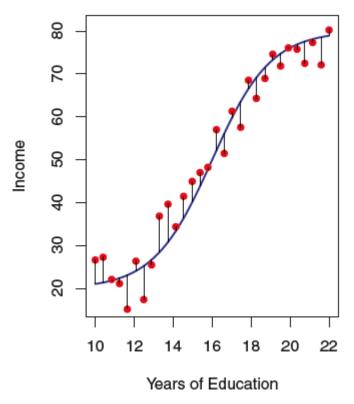
ISLR, 2013

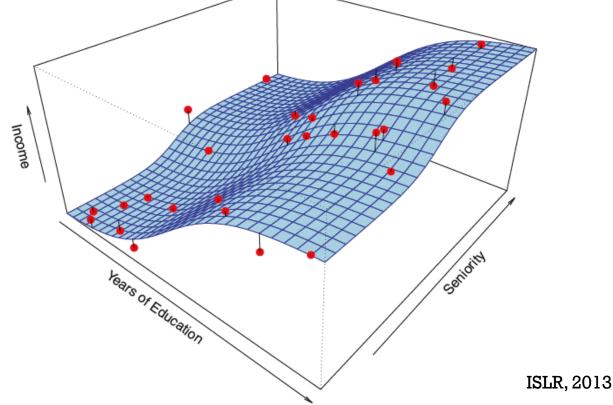


RESIDUOS

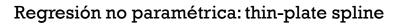
Residuos: diferencia entre los valores reales y los valores predichos

RSS (Residual sum of squares): suma de los residuos al cuadrado





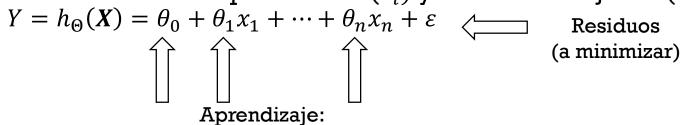






REGRESIÓN LINEAL — WINTIMOS **CUADRADOS**

• Se busca una relación lineal entre los atributos predictores (x_i) y el atributo objetivo (Y)



Como aprendemos los parámetros?

- Regresión lineal simple (un predictor), y múltiple (varios predictores)
- Los parámetros θ_i son estimados teniendo como objetivo la minimización de los residuos o diferencias cuadradas entre las predicciones (\hat{Y}) y los valores reales (Y):

$$argmin_{\Theta} \sum_{1} (\theta_0 + \theta_1 x_1^{(m)} + \dots + \theta_n x_n^{(m)} - y^{(m)})^2$$

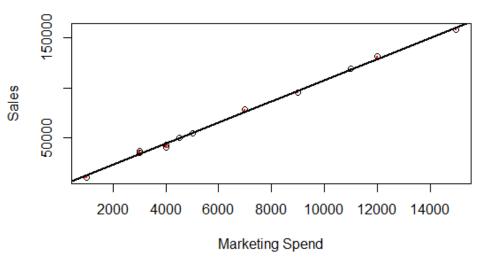
 $argmin_{\Theta} \sum_{1} (\theta_0 + \theta_1 x_1^{(m)} + \dots + \theta_n x_n^{(m)} - y^{(m)})^2 \,,$ donde $x_i^{(m)}$ se interpreta como el valor de la i-ésima variable independientes de la la m-ésima in stanció de data $x_i^{(m)}$ instancià de datos



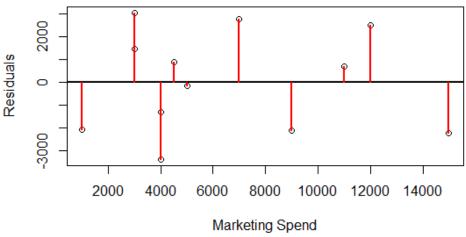
RESIDUOS

- Los residuos representan la variación que no se puede explicar por la regresión
 - Son estimadores de los errores
 - Pueden ser explicados en parte por la no consideración de otros predictores
 - $\sum e_i = 0$
- El análisis de los residuos proporciona una manera de evaluar la calidad de la regresión:
 - Errores deben ser independientes
 - Su varianza debe ser constante
 - Deben estar normalmente distribuidos
 - No deben presentar patrones (e.g sinusoide)

Sales x Mkt Spend



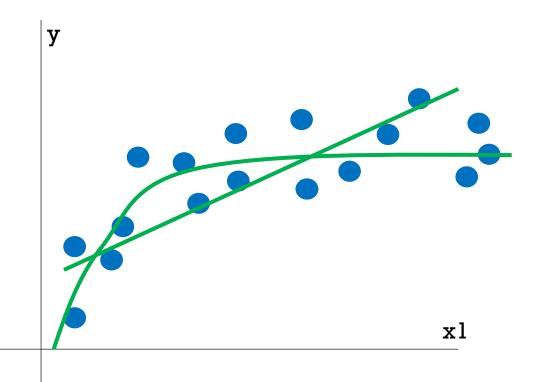
Residuals x Mkt Spend





REGRESIÓN LINEAL — MÍNIMOS CUADRADOS

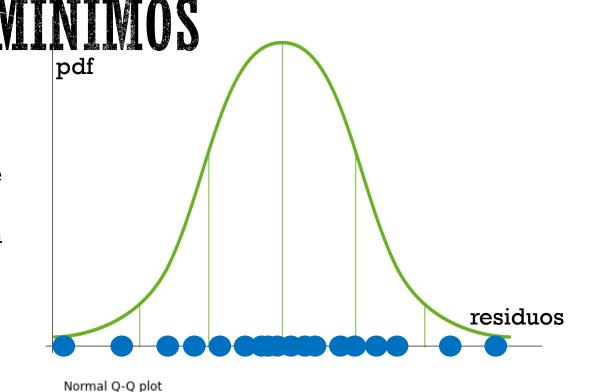
- Supuestos estadísticos para la utilización de la regresión lineal:
 - →Linealidad y aditividad en la relación entre variables independientes y variable dependiente
- Para validar:
 - Validación visual en plot de valores reales vs. valores ajustados (distribución simétrica con respecto a la diagonal)
 - Validación visual en plot de residuos vs.
 valores ajustados (distribución simétrica con respecto al eje de los valores ajustados)

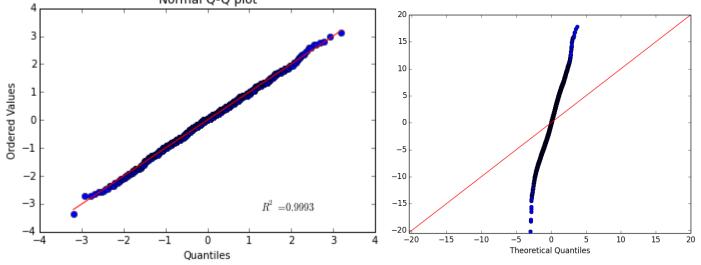




REGRESIÓN LINEAL — WÍNTIMOS CUADRADOS

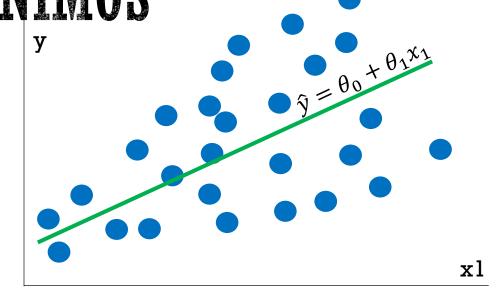
- Supuestos estadísticos para la utilización de la regresión lineal:
 - → Normalidad de la variable dependiente para valores fijos de las variables independientes
- Para validar:
 - Los residuos siguen una distribución normal
 - Utilizar un QQ-Plot
 - Prueba de Kolmogorov-Smirnov
 - Prueba de Shapiro-Wilk
 - Prueba de Jarque-Bera
 - Prueba de Anderson-Darling

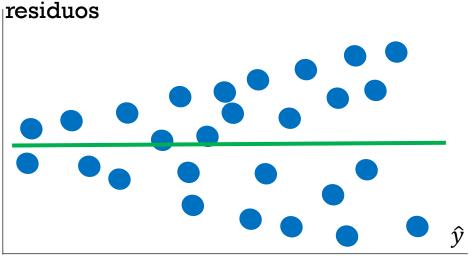




REGRESIÓN LINEAL — MÍNIMOS CUADRADOS

- Supuestos estadísticos para la utilización de la regresión lineal:
 - → Homocedasticidad de la variable dependiente no varia para diferentes valores de las variables independientes
- Para validar:
 - La dispersión de los residuos permanece constante con respecto a la variable ajustada
 - No hay aumento ni reducción de la varianza en los extremos del eje de los valores ajustados

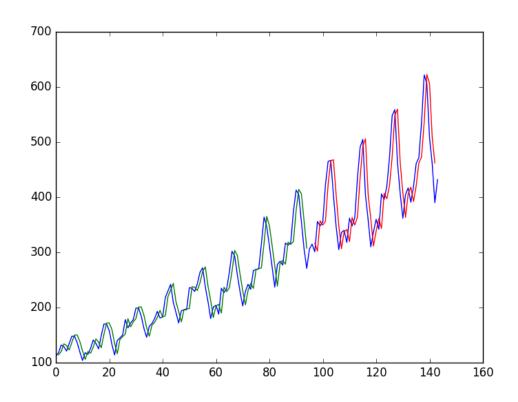






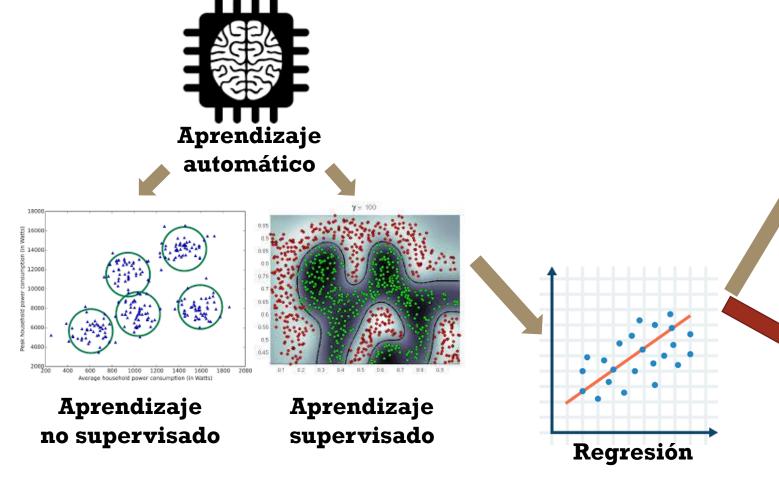
REGRESIÓN LINEAL — MÍNIMOS CUADRADOS

- Supuestos estadísticos para la utilización de la regresión lineal:
 - →Independencia de los valores de la variable dependiente (y de los residuos)
- Para validar:
 - Sentido común:
 - Analizar si hay alguna razón por la que un valor de la variables dependiente de una instancia influencie el de otra instancia.
 - Analizar la variable dependiente con respecto a una variable independiente temporal
 - Prueba Durbin-Watson de auto correlación en los residuos consecutivos (series de tiempo)



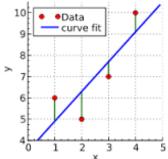


AGENDA





Métricas de Evaluación de la regresión



Mínimos cuadrados ordinarios



MÉTRICAS DE REGRESIÓN

Coeficiente de correlación (Pearson $\rho \in [-1;1]$): indica la fuerza de la relación linear entre los predictores y la variables objetivo, que puede ser positive o negativa

- $|\rho| = 0$ no hay correlación
- $|\rho| = 0.10$ correlación muy débil
- | ρ | = 0.25 correlación débil
- $| \rho | = 0.50$ correlación media
- $| \rho | = 0.75$ correlación fuerte
- $|\rho| = 0.90$ correlación muy fuerte
- $|\rho| = 1$ correlación perfecta

$$\rho_{x,y} = \frac{Cov(x,y)}{\sigma_x \sigma_y}$$

Coeficiente de determinación ($R^2 = \rho^2$): indica el porcentaje de la varianza que pudo ser explicada por los predictores a partir de la relación linear



METRICAS DE REGRESIÓN

• MAE (mean absolute error):

- MSE (mean square error):
- RMSE (root mean square error):

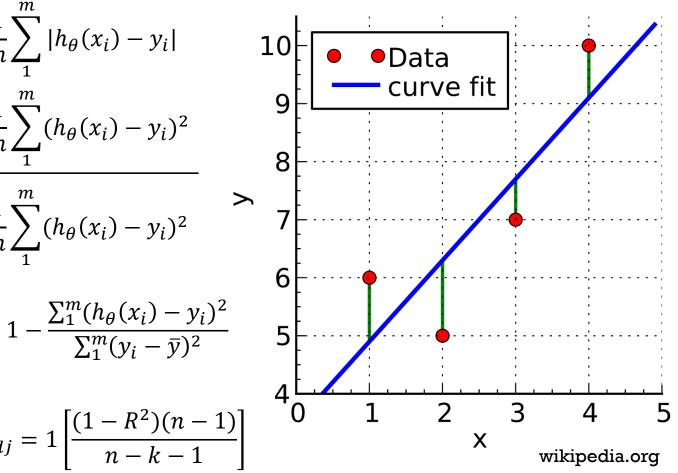
$$\sqrt{\frac{1}{m}\sum_{1}^{m}(h_{\theta}(x_{i})-y_{i})^{2}}$$

- R² (coeficiente de determinación):
- R^2 ajustado (penaliza el número kde variables independientes)

$$R_{adj}^2 = 1 \left[\frac{(1 - R^2)(n - 1)}{n - k - 1} \right]$$

 $\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}|h_{\theta}(x_{i})-y_{i}|$

 $\frac{1}{m}\sum_{i}^{m}(h_{\theta}(x_i)-y_i)^2$





VARIABLES CATEGÓRICAS

- Las variables predictivas deben ser numéricas.
- Las variables categóricas debes ser convertidas en numéricas:
 - One hot encoding: se crea una variable para cada valor posible de cada variable categórica
 - Variables de contraste o "dummy": variables numéricas adicionales para cada valor posible. Se acostumbra a crear una menos que el total de categorías para evitar problemas de multicolinealidad en modelos estadísticos.

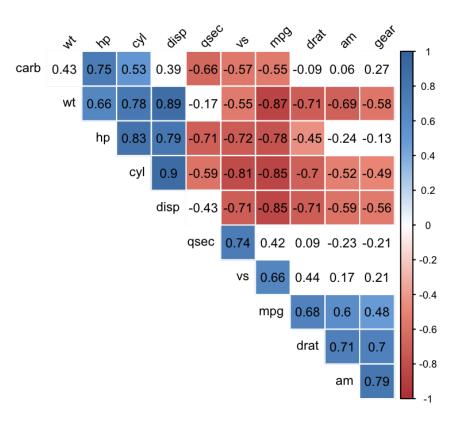
Ejemplo: variable estrato con 3 valores posibles (bajo, medio y alto)

	Estrato_bajo	Estrato_medio
Valor = bajo	1	0
Valor = medio	0	1
Valor = alto	0	0



REGRESIÓN LINEAL MÚLTIPLE — MÍNIMOS CUADRADOS

- Supuestos estadísticos para la utilización de la regresión lineal: múltiple
 - → Variables predictoras linealmente independientes entre ellas
 - →Evitar problema de la multicolinealidad
- Para validar:
 - Correlograma, filtrar variables con correlaciones altas (e.g. > |0.85|)





REGRESIÓN LINEAL MÚLTIPLE

Si se dispone de varias variables independientes, hay varias maneras de establecer el modelo de regresión múltiple a utilizar, dada una medida de bondad de ajuste:

- Completo: se evalúan todas las posibles combinaciones de variables independientes, y se escoge la mejor
- Tamaño fijo: se evalúan todas las posibles combinaciones de K variables independientes y se escoge la mejor
- Stepwise
 - Forward: se prueba una a una con las variables independientes aún no escogidas y se evalúa el modelo conjuntamente con las variables previamente escogidas, escogiendo la mejor. Se para cuando la medida de bondad de ajuste no mejore.
 - Backward: sigue un proceso contrario al forward, empezando con todas las variables y eliminando la variable que al no considerarla optimice la medida de bondad de ajuste.
- PCA: se transforman los datos en nuevas dimensiones no correlacionadas ordenadas con respecto a la cantidad de varianza que describen.



REGRESIÓN LINEAL — WÍNIMOS CUADRADOS

Los coeficientes que se obtienen para cada variable independiente deben ser analizados uno a uno, pues puede que no sean realmente significativos en la relación con la variable dependientes, dados las demás variables independientes.

Las herramientas de regresión lineal incluyen pruebas de hipótesis que comparan cada coeficiente contra el valor 0, y proveen el valor-p correspondiente. Si el valor-p es inferior a un alpha dado, se concluye entonces que el coeficiente es diferente de 0 y la relación entre variable independiente y dependiente es significativa.

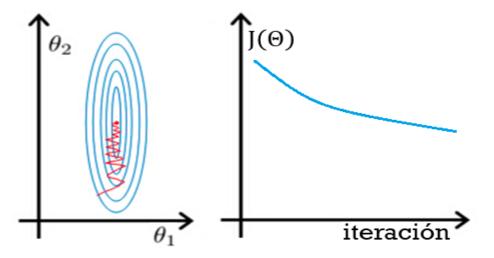


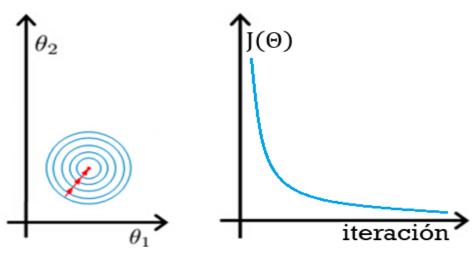
REGRESIÓN LINEAL — MÍNIMOS CUADRADOS

Feature Scaling: Si no hay términos de interacción, la regresión lineal y la regresión logística **no requieren** normalización de las variables (a menos que utilicen Lasso o Ridge).

Sin embargo, re escalar permite una mejor **interpretación** de la importancia de las variables en el modelo, además de reducir el **tiempo de ajuste** de los coeficientes de las variables con gradient descent:

 Si escalas muy diferentes: demorado llegar a convergencia, sobre influencia de las derivadas parciales de las variables de mayor escala iteración Si misma escala: influencia igual de las derivadas parciales de todos los parámetros

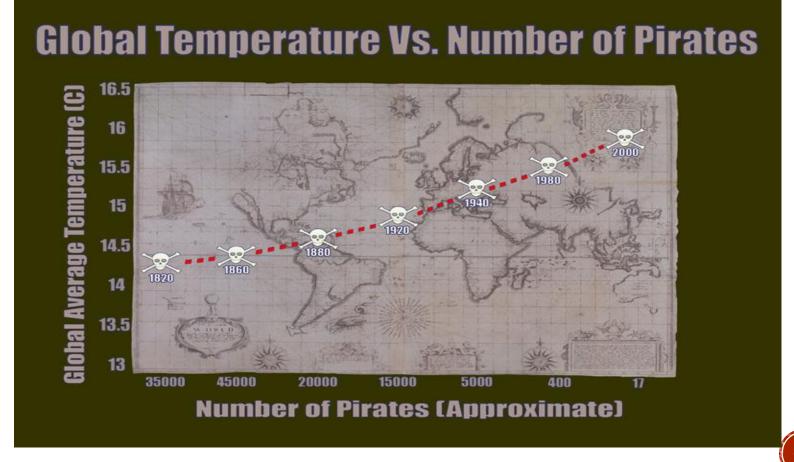




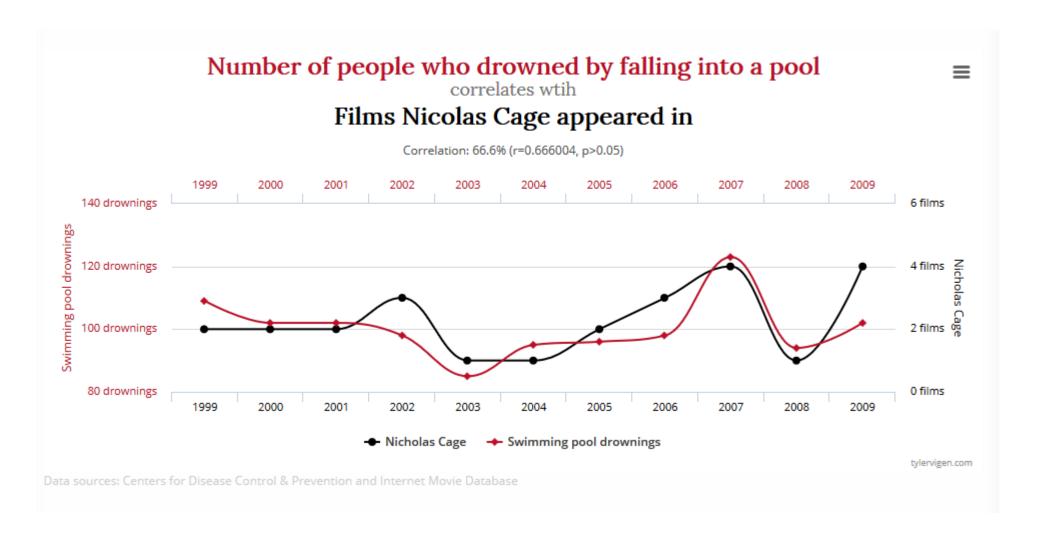


REGRESIÓN — CUIDADO!

Correlación y causalidad son dos cosas muy diferentes



REGRESIÓN — CUIDADO!



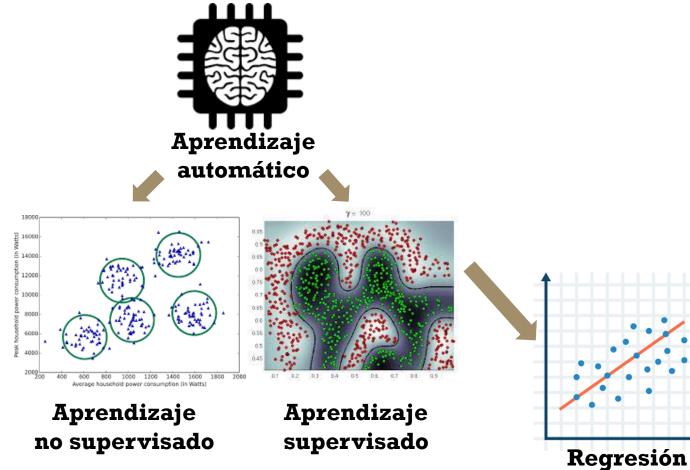


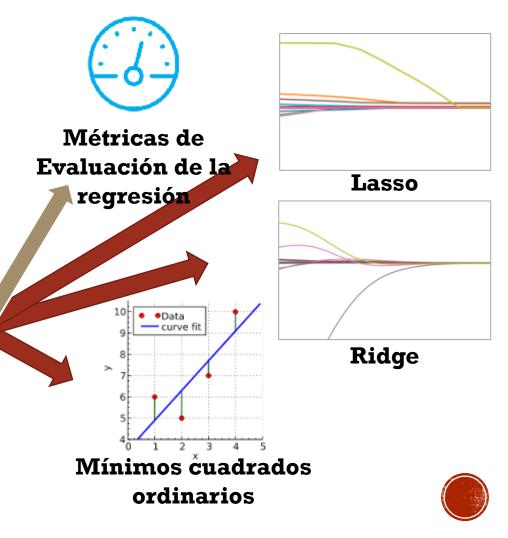
TALLER: REGRESIÓN MÍNIMOS CUADRADOS

Desarrollar el taller de regresión lineal sobre el dataset "MPG Auto".



AGENDA





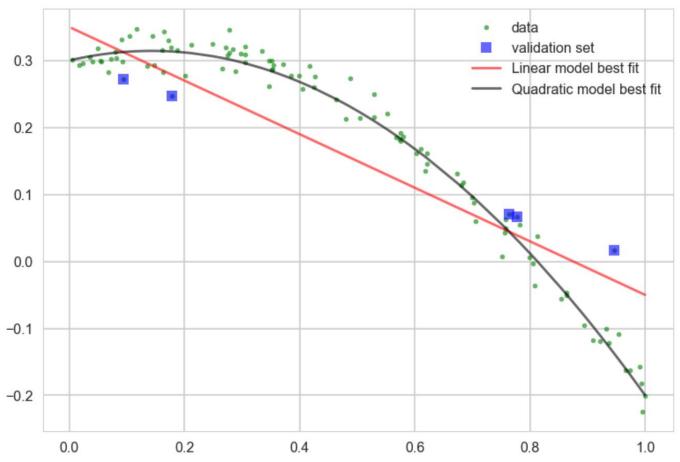
REGULARIZACIÓN (RIDGE & LASSO)



REGULARIZACIÓN

• R2 reg. lineal: 0,78

R2 reg polinómica grado 2:0,64





- **Técnicas de regularización**: penalizan la magnitud de sus coeficientes de las variables independientes al mismo tiempo que se trata de minimizar los errores de predicción.
- Se quiere minimizar la complejidad de los modelos
 - Disminuir la posibilidad de sobre-aprendizaje del modelo
 - Controlar los requerimientos computacionales de tener muchas variables independientes (big data)
- Se cambia la función de costo a minimizar:

• **Ridge**:
$$J(\Theta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \theta_0 + \theta_1 x_1 + \dots + \theta_m x_m)^2 + \frac{\lambda}{2} * \sum_{j=1}^{m} \theta_i^2$$

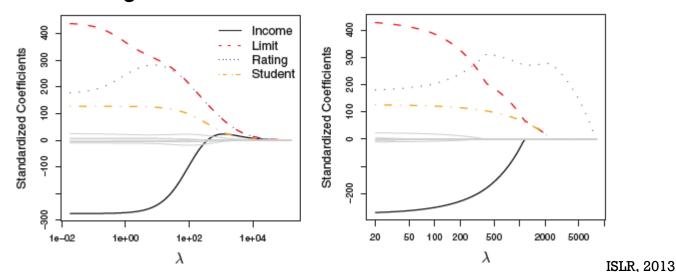
Lasso:
$$J(\Theta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \theta_0 + \theta_1 x_1 + \dots + \theta_m x_m)^2 + \lambda * \sum_{j=1}^{m} |\theta_i|$$
 No se penaliza θ_0



- El parámetro λ sirve para controlar el impacto relativo de los dos términos en la función de costo (el que minimiza el error, y el que limita la complejidad)
 - Cuando $\lambda = 0$, la penalidad no tiene efecto
 - Entre más grande λ , los coeficientes obtenidos van a ser más pequeños
 - Seleccionar un valor de λ es crítico; se usa Cross-Validation
- Se actualiza la actualización de los coeficientes en el algoritmo de descenso de gradiente.
 - Ridge: $\theta_i \coloneqq \theta_i \alpha \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \left(\theta_0 + \theta_1 x_1^{(j)} + \dots + \theta_n x_n^{(j)} y^{(j)} \right) * x_i + \frac{\lambda}{m} \theta_i$
 - Lasso: [muy complicado, incluye definición de subgradiente, dado que la función de valor absoluto no es derivable]
- ElasticNet: modelo de regresión con regularización que combina las penalizaciones de Ridge y Lasso



- Ridge lleva a coeficientes pequeños de los atributos
 - →Todos los atributos predictores están presentes en el modelo
 - →El modelo resultante es difícil de interpretar si hay muchas variables predictivas
- Lasso hace desaparecer los coeficientes menos importantes
 - \rightarrow Método de selección de atributos, forzando los coeficientes de los atributos eliminados a 0, si λ es suficientemente grande





Consideraciones:

- Ridge:
 - Correlación de las variables independientes: funciona bien, pues aunque incluya todas las variables sus coeficientes van a distribuirse considerando sus correlaciones
 - Usada para prevenir el overfitting
- Lasso:
 - Correlación de las variables independientes:
 - Escoge arbitrariamente cualquiera de las variables altamente correlacionadas, poniendo en 0 los coeficientes de las demás.
 - Puede haber problemas en caso de términos polinomiales que puedan desaparece al estar correlacionados entre ellos.
 - Produce modelos mas simples, robustos con respecto al overfitting, y fáciles de interpretar.
 - Usada como método de selección de atributos a considerar cuando hay miles de variables independientes → produce modelos "dispersos" (sparse)



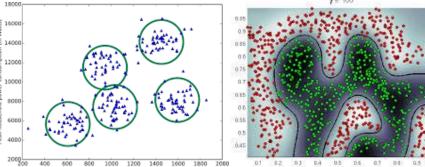
TALLER: REGRESIÓN RIDGE Y LASSO

 Continuar con las partes dedicadas a Ridge y Lasso del taller de regresión lineal sobre el dataset "MPG Auto".



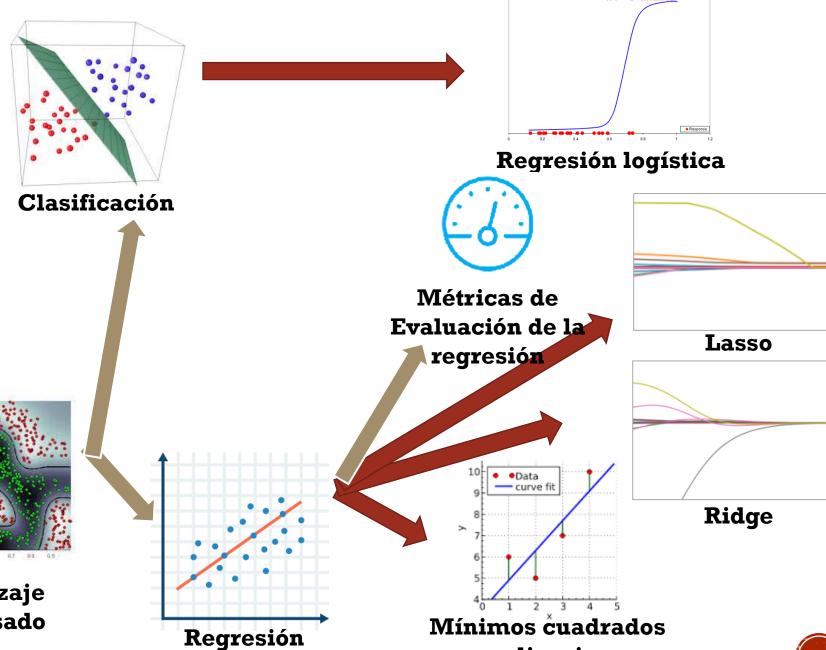
AGENDA





Aprendizaje no supervisado

Aprendizaje supervisado



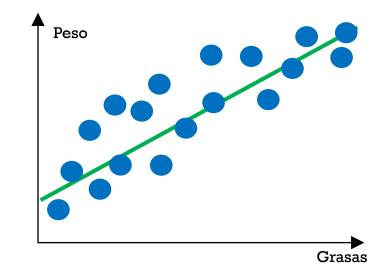
ordinarios

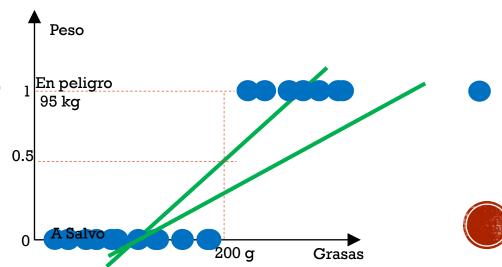
RECRESIÓN LOCÍSTICA



REGRESIÓN LINEAL PARA CLASIFICACIÓN?

- Si un doctor estima que mas de 95kg implica riesgo de diabetes, el problema se convierte en uno de clasificación: 0=a salvo, 1=en peligro
- Una regresión lineal podría ayudar a estimar el límite sobre el cual se estaría en peligro de diabetes
- Pero no se puede interpretar sus predicciones como probabilidades (valores no están en [0;1])
- Y no sería muy robusto...





REGRESIÓN LOCÍSTICA

- Algoritmo de clasificación, no de regresión
- Parte de la idea de la regresión lineal, cuyo resultado es modificado para poder obtener una salida **binaria**: sólo permite distinguir entre 2 clases.
 - Churn vs. Stay
 - Compra vs. No compra
 - Cliente valioso vs. Cliente no valioso
- Se agrega una transformación del resultado de la regresión lineal a partir de una función de distribución acumulativa logística, también conocida como función logit o sigmoide.

$$f(\mathbf{z}) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$



REGRESIÓN LOGÍSTICA

• El modelo pasa de:

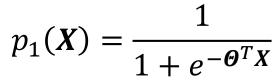
$$h_{\Theta}(X) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \dots + \theta_n x_n$$

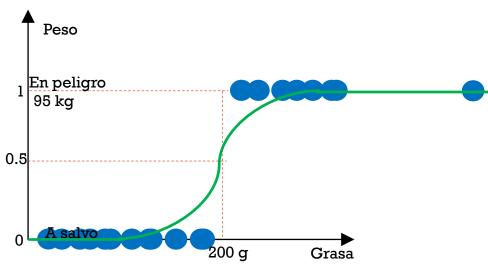
$$h_{\Theta}(X) = \mathbf{f}(\mathbf{z}) = \mathbf{\sigma}(\theta_0 + \theta_1 x_1 + \dots + \theta_n x_n),$$

$$\text{con } \max(f(\mathbf{z})) = 1 \text{ y } \min(f(\mathbf{z})) = 0$$

- $\sigma(z)$ es la función sigmoide o logística
- Se pueden interpretar los valores de $\sigma(z)$ como **probabilidades** de que una instancia con atributos X pertenezca a la clase Y=1:

$$p_1(X) = \sigma(\theta_0 + \theta_1 x_1 + \dots + \theta_n x_n) = P(Y = 1 | x_1, \dots, x_n)$$









- Coeficientes θ_1 :
 - $\bullet \log\left(\frac{p_1(X)}{1-p_1(X)}\right) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \dots + \theta_n x_n$
 - El signo indica la dirección de la influencia de la variable correspondiente en la probabilidad de la clase de interés.
 - Relación lineal entre los coeficientes y la razón de probabilidades: un crecimiento de una unidad de x_1 indica que el log de la razón de probabilidades va a crecer θ_1 unidades.
 - Como con la regresión lineal, cada coeficiente tiene asociado un estadístico. Una prueba de hipótesis permite obtener un valor-p que indique si existe una asociación entre la variable independiente correspondiente y la probabilidad.

- Razón de probabilidades
 - A probabilidades altas, razón alta y viceversa

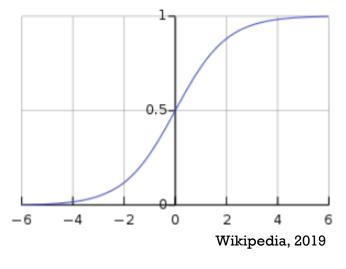
$p_1(X)$	odds
1,0	+Inf
0,99	99
0,75	3
0,5	1
0,25	0,33
0	0





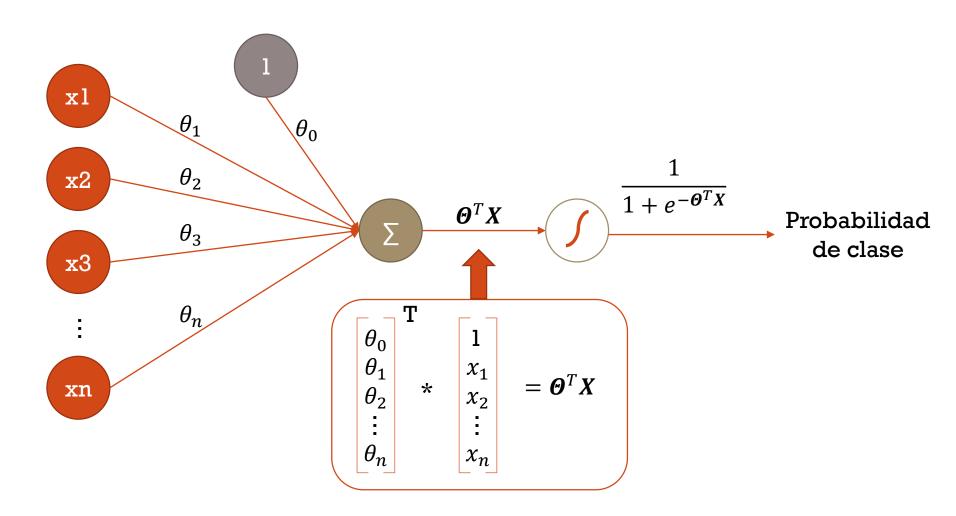
- Comportamiento:
 - Si y=1, queremos que $p_1(X) \approx 1$, que $\boldsymbol{\Theta}^T X \gg \mathbf{0}$
 - Si y=0, queremos que $p_1(X) \approx \mathbf{0}$, que $\boldsymbol{\Theta}^T X \ll \mathbf{0}$
- Predicción: se establece un valor de umbral, por ejemplo 0.5
 - Predecir clase 1 si $p_1(X) \ge 0.5$, cuando $\boldsymbol{\Theta}^T X \ge 0$
 - Predecir clase 0 de otra manera
- Se pueden establecer un umbral diferente si se quiere ser mas o menos robusto en la calificación, dado el contexto de la clasificación

$$p_1(X) = \frac{1}{1 + e^{-\boldsymbol{\Theta}^T X}}$$



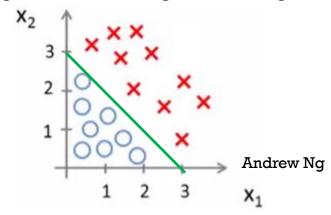








• El algoritmo de regresión logística determina una frontera de decisión lineal

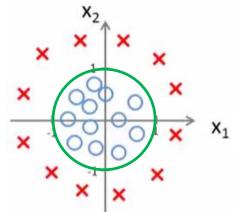


$$h_{\Theta}(X) = f(-3 + x_1 + x_2)$$

Predecir la clase roja de cruz cuando:

- $h_{\Theta}(X)$ ≥ 0.5
- $f(-3 + x_1 + x_2) \ge 0.5$

• Para fronteras de decisión no lineales: usar polinomios de un mayor orden



$$h_{\Theta}(X) = f(-1 + x_1^2 + x_2^2)$$

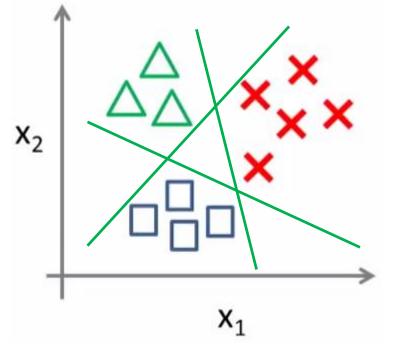
Predecir la clase roja de cruz cuando:

- $h_{\Theta}(X) \geq 0.5$
- $f(-1 + x_1^2 + x_2^2) \ge 0.5$



¿Qué se puede hacer si se tienen más de 2 clases?

- Para problemas de clasificación con más de 2 clases, es necesario utilizar una aproximación de 1 vs. todos
- Un clasificador por regresión logística es necesaria para cada clase
- Para una nueva instancia, la clase con la mayor probabilidad en su propio modelo es predicha



Andrew Ng



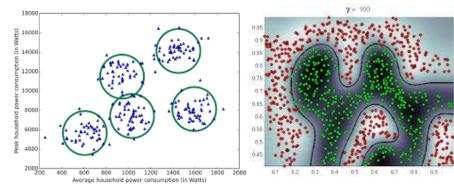
TALLER: REGRESIÓN LOGÍSTICA

 Desarrollar el taller de regresión logística para evaluar si un cliente de un crédito va a poder pagarlo.



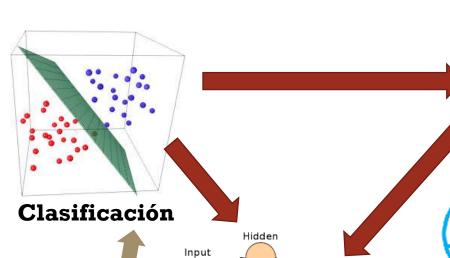
AGENDA

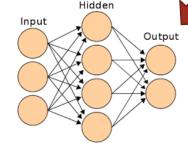




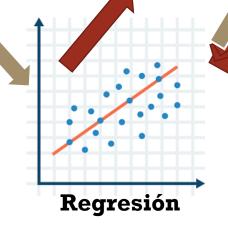
Aprendizaje no supervisado

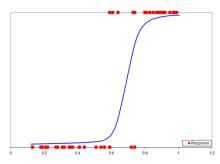
Aprendizaje supervisado





Redes neuronales artificiales

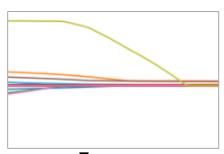




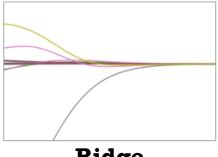
Regresión logística



Métricas de Evaluación de la regresión



Lasso



Ridge



Data curve fit

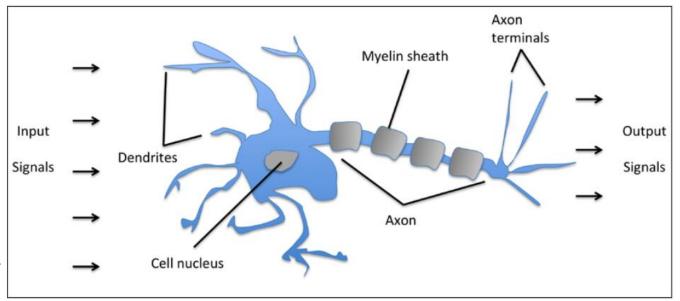
ordinarios



- Modela la relación entre un conjunto de señales de entrada y una señal de salida
- Son la base del Deep Learning, técnica muy actual que lleva el machine learning a solucionar problemas muy complejos, hasta hace 10 años imposibles para un computador: reconocimiento de imágenes, de audio, de escritura a mano, los carros o drones auto-pilotados, etc.
- Pueden ser utilizados para clasificación, regresión y últimamente aprendizaje no supervisado y por refuerzo
- Base del "Artificial Brain" de Google, y el "Watson" de IBM
- Son un modelo "caja negra", pues es imposible interpretarlo por su complejidad



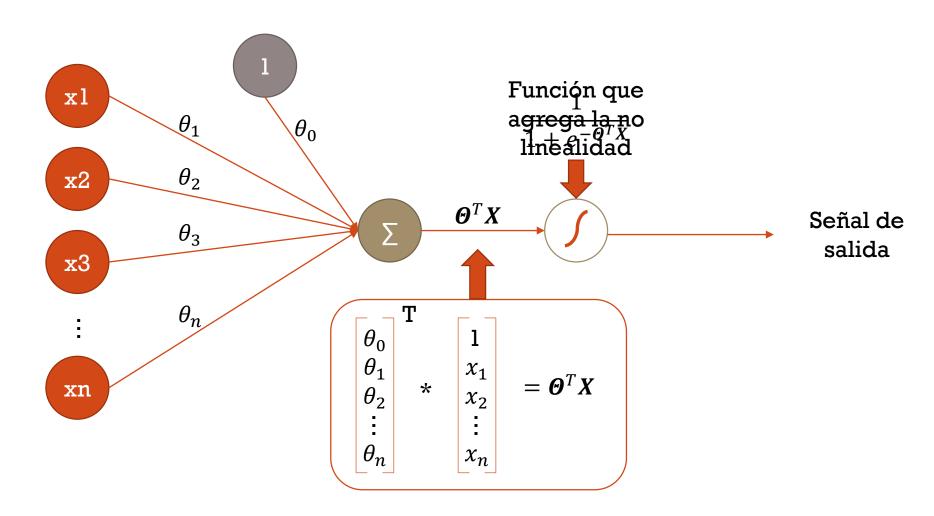
- Modelos de aprendizaje automático bio-inspirados: tratan de modelar cómo funciona el cerebro → 1943, transmisión de señales eléctricas y químicas
- Simplificación. Una neurona:
 - recibe múltiples señales de entrada,
 - que se acumulan en el cuerpo de la neurona
 - emiten una señal binaria que evalúa el sobrepaso de un umbral
 - Se conectan a otras neuronas a partir de sinapsis entre axones y dendritas



Python Machine Learning, 2015

¿cómo se parece esto a una regresión logística?







Una red neuronal se distingue por:

- La topología de arquitectura de red: describe el número de neuronas en cada una de las capas y la manera como se conectan entre ellas
- La función de activación: transforma la combinación de los inputs en una sola señal de salida a ser comunicada a las siguientes neuronas
- El **algoritmo de entrenamiento**: especifica como los pesos de las conexiones se establecen de tal manera que se cohíba o incite la activación de las neuronas en proporción de las señales de entrada.



Las más parecidas a la realidad biológica

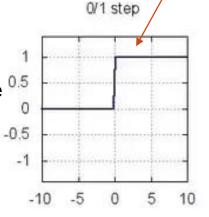
Muy usada en Deep Learning

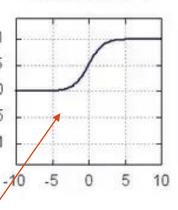
Funciones de activación:

mecanismo de procesamiento de la información entrante que permite la propagación de la señal en la red

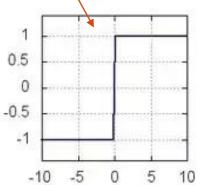
Se prefieren las que tengan buenas propiedades matemáticas (simples, derivables)

Para evitar problemas de 0.5 aprendizaje, se acostumbra 0 normalizar las entradas, para que 0.5 los valores se encuentren en los 1 rangos dinámicos de las funciones de activación.

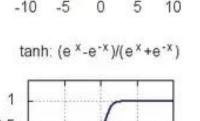


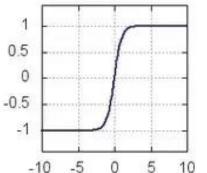


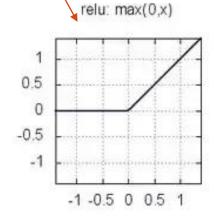
sigmoid: 1/(1+e-x)

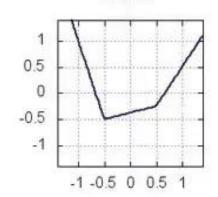


-1/+1 step









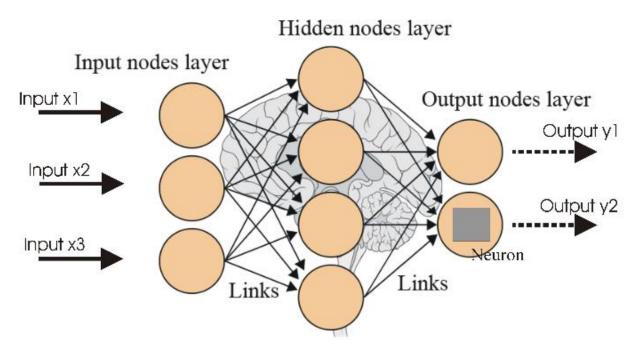
maxout





Topología: determina la complejidad de las tareas que se pueden aprender

- Número de capas y como se conectan entre ellas. Deep Learning se refiere a la profundidad de las capas.
- Número de neuronas en cada capa: salvo por la capa de entrada y salida, depende de la complejidad del problema y calidad de los datos. Cuidado con overfitting.
- Dirección del envío de la información
 - Feedforward: hacia adelante
 - Recurrent: se permite retorno (short term memory)



www. analytics vidhy a. com/wp-content/uploads/2016/08/Artificial-Intelligence-Neural-Network-Nodes. jpg



Back-propagation: el algoritmo más común para entrenar una red neuronal feedforward de múltiples capas (MLP – Multi Layer Perceptron, mediados de los 80's).

- 2 fases
 - Forward: para cada ejemplo propagar la información hasta llegar al final, calcular el error de predicción.
 - **Backward**: modificar los pesos de la capa inmediatamente anterior de tal manera que se reduzcan los errores. Continuar el proceso con las capas anteriores.
- Basado en el descenso de gradiente (derivadas parciales de las funciones de activación que van en la dirección de la reducción del error)
- Computacionalmente intensivo
- Influencia de la inicialización aleatoria de las neuronas
- Tasa de aprendizaje



TALLER: REDES NEURONALES

• Desarrollar el taller de redes neuronales para la detección del cancer

