

# Selección y Evaluación de Modelos de AA

## Aprendizaje Automático

BORJA GONZÁLEZ SEOANE

`borja.gonzalez1@uie.edu`



S07, 16 de octubre de 2024



# Agenda

## ① Correlación entre variables

En Python

Acciones a tomar con variables correlacionadas

## ② Métricas en aprendizaje automático

Métricas de clasificación

Métricas de regresión

Métricas de aprendizaje no supervisado

Métricas como funciones de pérdida

En Python

## ③ Sobreajuste y subajuste

Particiones de validación y test

Validación cruzada

Validación cruzada en Python

## ④ Optimización de hiperparámetros

En Python

## ⑤ Persistencia de modelos

## ⑥ Gestión de proyectos de AA

# Agenda

## ① Correlación entre variables

En Python

Acciones a tomar con variables correlacionadas

## ② Métricas en aprendizaje automático

Métricas de clasificación

Métricas de regresión

Métricas de aprendizaje no supervisado

Métricas como funciones de pérdida

En Python

## ③ Sobreajuste y subajuste

Particiones de validación y test

Validación cruzada

Validación cruzada en Python

## ④ Optimización de hiperparámetros

En Python

## ⑤ Persistencia de modelos

## ⑥ Gestión de proyectos de AA

## Correlación

- Se dice que dos variables están correlacionadas si su valor cambia de forma conjunta
- La correlación no implica causalidad

## Ejemplo de correlación sin causalidad

- La cantidad de helados vendidos en un chiringuito de playa está correlacionada con el número de ataques de tiburones en la costa
- Aunque ambas variables están correlacionadas, no hay una relación de causalidad entre ellas

## Correlación de Pearson

- La correlación entre dos variables se puede medir con el coeficiente de correlación de Pearson, que toma valores entre -1 y 1, y que se calcula como:

$$\rho_{X_1, X_2} = \frac{\text{cov}(X_1, X_2)}{\sigma_{X_1} \sigma_{X_2}} \quad (1)$$

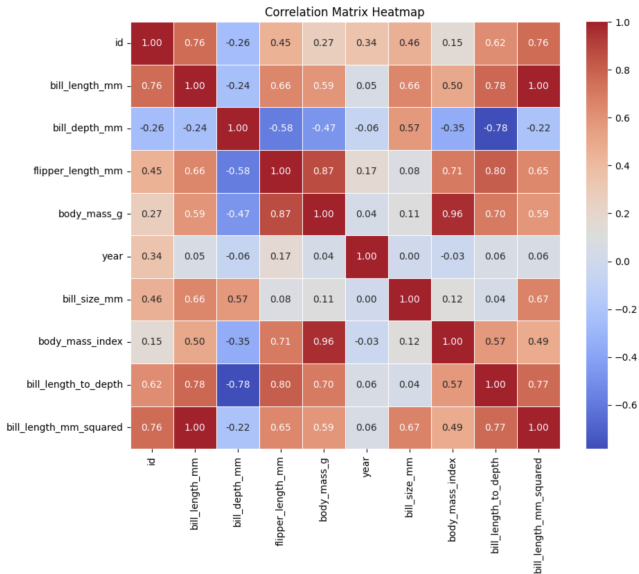
- Donde  $\text{cov}(X_1, X_2)$  es la covarianza entre  $X_1$  y  $X_2$ , y  $\sigma_{X_1}$  y  $\sigma_{X_2}$  son las desviaciones típicas de  $X_1$  y  $X_2$  respectivamente
- Si  $\rho_{X_1, X_2} = 1$ , las variables están perfectamente correlacionadas de forma positiva
- Si  $\rho_{X_1, X_2} = -1$ , las variables están perfectamente correlacionadas de forma negativa
- Si  $\rho_{X_1, X_2} = 0$ , las variables no están correlacionadas en absoluto

- El signo de la correlación de Pearson indica la dirección de la relación entre las variables
- Una correlación positiva indica que a medida que una variable aumenta, la otra también lo hace
- Una correlación negativa indica que a medida que una variable aumenta, la otra disminuye

# Matriz de correlaciones

- La matriz de correlación es una forma útil de visualizar las correlaciones entre variables
- En la matriz de correlación, cada celda muestra el coeficiente de correlación entre dos variables
- La diagonal de la matriz de correlación siempre es 1, ya que una variable está perfectamente correlacionada consigo misma, trivialmente
- La matriz de correlación es simétrica, ya que la correlación entre dos variables es la misma que la correlación entre las mismas variables en sentido inverso
- La matriz de correlación es una herramienta útil para identificar variables que están altamente correlacionadas, lo que puede ser un problema para algunos modelos de AA

# Matriz de correlaciones [cont.]





# Agenda

## ① Correlación entre variables

En Python

Acciones a tomar con variables correlacionadas

## ② Métricas en aprendizaje automático

Métricas de clasificación

Métricas de regresión

Métricas de aprendizaje no supervisado

Métricas como funciones de pérdida

En Python

## ③ Sobreajuste y subajuste

Particiones de validación y test

Validación cruzada

Validación cruzada en Python

## ④ Optimización de hiperparámetros

En Python

## ⑤ Persistencia de modelos

## ⑥ Gestión de proyectos de AA

- En Python, la matriz de correlación se puede calcular con el método `.corr()` de un *dataframe* de Pandas
- Por defecto, el método `.corr()` calcula la correlación de Pearson
- El método `.corr()` devuelve un *dataframe* de Pandas con la matriz de correlación
- La matriz de correlación se puede visualizar con la función `heatmap()` de Seaborn

# Agenda

## ① Correlación entre variables

En Python

Acciones a tomar con variables correlacionadas

## ② Métricas en aprendizaje automático

Métricas de clasificación

Métricas de regresión

Métricas de aprendizaje no supervisado

Métricas como funciones de pérdida

En Python

## ③ Sobreajuste y subajuste

Particiones de validación y test

Validación cruzada

Validación cruzada en Python

## ④ Optimización de hiperparámetros

En Python

## ⑤ Persistencia de modelos

## ⑥ Gestión de proyectos de AA

- Si dos variables están altamente correlacionadas, es posible que una de ellas no aporte información adicional al modelo
- En estos casos, tal vez sea posible eliminar una de las dos variables correlacionadas
- Otra alternativa es combinar las dos variables correlacionadas en una sola variable que represente la información de ambas

## Ejemplo de cómo combinar variables correlacionadas

- Sea un conjunto de datos con información antropométrica de personas y un caso de uso que consiste en predecir el porcentaje de grasa corporal de una persona
- Probablemente haya una alta correlación entre algunas variables:
  - Peso y altura  
→ **Índice de masa corporal**
  - Circunferencia del pecho y circunferencia de la cintura, en hombres  
→ **Ratio cintura/pecho**
  - Circunferencia de la cadera y circunferencia de la cintura, en mujeres  
→ **Ratio cintura/cadera**

En algunos casos, como el del ejemplo, la combinación de variables, además de emanar numéricamente del cálculo de la correlación, tiene un sentido contextual: mejor interpretabilidad de los resultados

# Agenda

## ① Correlación entre variables

En Python

Acciones a tomar con variables correlacionadas

## ② Métricas en aprendizaje automático

Métricas de clasificación

Métricas de regresión

Métricas de aprendizaje no supervisado

Métricas como funciones de pérdida

En Python

## ③ Sobreajuste y subajuste

Particiones de validación y test

Validación cruzada

Validación cruzada en Python

## ④ Optimización de hiperparámetros

En Python

## ⑤ Persistencia de modelos

## ⑥ Gestión de proyectos de AA

# Agenda

## ① Correlación entre variables

En Python

Acciones a tomar con variables correlacionadas

## ② Métricas en aprendizaje automático

Métricas de clasificación

Métricas de regresión

Métricas de aprendizaje no supervisado

Métricas como funciones de pérdida

En Python

## ③ Sobreajuste y subajuste

Particiones de validación y test

Validación cruzada

Validación cruzada en Python

## ④ Optimización de hiperparámetros

En Python

## ⑤ Persistencia de modelos

## ⑥ Gestión de proyectos de AA

# Matriz de confusión

Real \ Predicción	Positivo	Negativo
	Positivo	Negativo
Positivo	TP	FN
Negativo	FP	TN



- **TP** (*true positives*): los casos positivos que el modelo ha clasificado correctamente
- **TN** (*true negatives*): los casos negativos que el modelo ha clasificado correctamente
- **FP** (*false positives*): los casos negativos que el modelo ha clasificado incorrectamente como positivos
- **FN** (*false negatives*): los casos positivos que el modelo ha clasificado incorrectamente como negativos

Existen escenarios en los que un FN es más grave que un FP, y viceversa

## Ejemplos de escenarios con diferente relevancia de FN y FP

- Un modelo de detección de spam que clasifica un correo electrónico importante como spam (FP) es peor que clasificar un correo basura como no spam (FN)
- Un modelo de detección de cáncer que clasifica a un paciente con cáncer como sano (FN) es peor que clasificar a un paciente sano como enfermo (FP)

- Exactitud (*accuracy*), predicciones correctas sobre el total de predicciones

$$\text{accuracy} = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN} \quad (2)$$

¿En qué escenarios no parece una buena métrica la exactitud?

# Conjuntos de datos desbalanceados

Se dice que un conjunto de datos está desbalanceado cuando una de las clases es mucho más frecuente que la otra

## Ejemplo de conjunto de datos desbalanceado

Sea un conjunto con 1000 de transacciones bancarias, en el que el 99 % de las transacciones son legítimas (etiqueta 1) y el 1 % restante son fraudulentas (etiqueta 0)

## ModeloDummy

```
1 class ModeloDummy:  
2     def predict(self, X):  
3         return np.ones(X.shape[0])
```

¿Qué métrica de exactitud obtendría el ModeloDummy sobre el conjunto de datos desbalanceado del ejemplo anterior? El objetivo del modelo sería identificar las transacciones legítimas

- En problemas de clasificación con datos desbalanceados, la exactitud no es una buena métrica
- Porque el modelo puede tener una alta exactitud simplemente prediciendo la clase mayoritaria

# Métricas de clasificación [cont.]

- Precisión (*precision*)

$$\text{precision} = \frac{TP}{TP + FP} \quad (3)$$

- Sensibilidad (*recall*)

$$\text{recall} = \frac{TP}{TP + FN} \quad (4)$$

- Especificidad (*specificity*)

$$\text{specificity} = \frac{TN}{TN + FP} \quad (5)$$

- F1, media armónica de precisión y sensibilidad

$$F1 = 2 \cdot \frac{\text{precision} \cdot \text{recall}}{\text{precision} + \text{recall}} \quad (6)$$

¿Qué métricas de precisión y sensibilidad tendría el ModeloDummy sobre los datos desbalanceados del ejemplo anterior?



## Métricas de ModeloDummy

- Exactitud

$$\text{accuracy} = \frac{990}{1000} = 0,99 \quad (7)$$

- Precisión

$$\text{precision} = \frac{990}{990 + 10} = 0,99 \quad (8)$$

- Sensibilidad

$$\text{recall} = \frac{990}{990 + 0} = 1 \quad (9)$$

- Especificidad

$$\text{specificity} = \frac{0}{0 + 10} = 0 \quad (10)$$

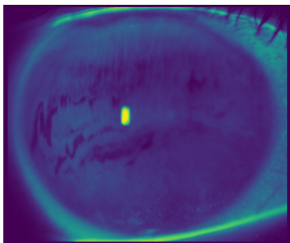
- F1

$$F1 = 2 \cdot \frac{0,99 \cdot 1}{0,99 + 1} = 0,995 \quad (11)$$

- La precisión mide la calidad de las predicciones positivas
- La sensibilidad mide la fracción de positivos que se han identificado correctamente
- La especificidad mide la fracción de negativos que se han identificado correctamente
- La F1 es útil cuando se desea encontrar un equilibrio entre precisión y sensibilidad

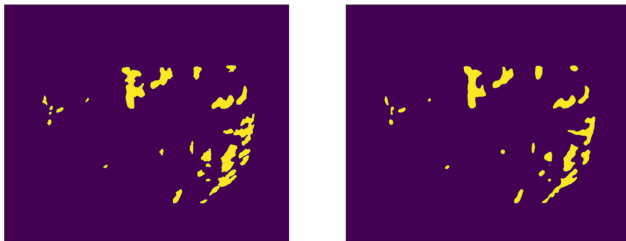
- La elección de las métricas de clasificación depende del problema y de la importancia relativa de los falsos positivos y los falsos negativos
- También depende de si el conjunto de datos está desbalanceado o no
- Obviamente, trabajar con conjuntos de datos bien balanceados es lo ideal, tanto para el aprendizaje de los modelos como para la evaluación de su rendimiento

# Métricas para casos particulares: visión por computador



De izquierda a derecha: imagen de un ojo con posible síndrome de ojo seco y máscara obtenida con un modelo de aprendizaje profundo de las zonas de ruptura de la película lagrimal

# Métricas para casos particulares: visión por computador [cont.]



De izquierda a derecha: máscara anotada manualmente por un experto médico y máscara obtenida con el mismo modelo de aprendizaje profundo de la transparencia anterior

# Métricas para casos particulares: visión por computador [cont.]

- En visión por computador, a la clasificación de píxeles en función de su contenido se le llama segmentación semántica
- Se obtienen máscaras como las anteriores, que codifican la pertenencia de cada píxel a una clase
- Por naturaleza, las máscaras están desbalanceadas, ya que la mayoría de los píxeles suelen pertenecer a la clase de fondo
- Además, como dificultad añadida, las máscaras anotadas manualmente normalmente no son perfectas, por lo que comparar la predicción con la anotación manual de forma directa tampoco es ideal

# Métricas para casos particulares: visión por computador [cont.]

- En estos casos, se utilizan métricas como la similitud de Jaccard, también conocida como índice de similitud de Jaccard (*Jaccard index*)

$$J(A, B) = \frac{|A \cap B|}{|A \cup B|} \quad (12)$$

- Donde  $A$  y  $B$  son dos conjuntos, en este caso, dos máscaras
- El índice de similitud de Jaccard mide la similitud entre dos conjuntos y toma valores entre 0 y 1
- Un valor de 1 indica que los conjuntos son idénticos
- Un valor de 0 indica que los conjuntos no tienen elementos en común

# Agenda

## ① Correlación entre variables

En Python

Acciones a tomar con variables correlacionadas

## ② Métricas en aprendizaje automático

Métricas de clasificación

**Métricas de regresión**

Métricas de aprendizaje no supervisado

Métricas como funciones de pérdida

En Python

## ③ Sobreajuste y subajuste

Particiones de validación y test

Validación cruzada

Validación cruzada en Python

## ④ Optimización de hiperparámetros

En Python

## ⑤ Persistencia de modelos

## ⑥ Gestión de proyectos de AA



- En el caso de las tareas de regresión, lo que se desea predecir es un valor numérico
- Por tanto, las métricas de regresión miden la diferencia entre los valores reales y los valores predichos: el error

- Error absoluto medio (*mean absolute error*, MAE)

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (13)$$

- Error cuadrático medio (*mean squared error*, MSE)

$$\text{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (14)$$

- Raíz del error cuadrático medio (*root mean squared error*, RMSE)

$$\text{RMSE} = \sqrt{\text{MSE}} \quad (15)$$

- Error absoluto relativo (*mean absolute percentage error*, MAPE)

$$\text{MAPE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \quad (16)$$

- Error porcentual cuadrático medio (*mean squared percentage error*, MSPE)

$$\text{MSPE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left( \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right)^2 \quad (17)$$

- Raíz del error porcentual cuadrático medio (*root mean squared percentage error*, RMSPE)

$$\text{RMSPE} = \sqrt{\text{MSPE}} \quad (18)$$

- La elección de las métricas de regresión depende del problema y de la importancia relativa de los errores
- Por ejemplo, el MAE es menos sensible a los valores atípicos que el RMSE
- Por tanto, si los valores atípicos son importantes en el problema, es mejor utilizar el MAE
- Se debe razonar numéricamente la elección de las métricas de regresión, en función de las características del problema

# Elección de las métricas de regresión absolutas o relativas

- Típicamente se utilizan métricas de regresión absolutas, como el MAE o el RMSE, para el entrenamiento de los modelos
- Ello es así porque estas métricas preservan la escala de la variable objetivo
- No obstante, las métricas de regresión relativas, como el MAPE o el RMSPE, son útiles para la interpretación de los resultados, sobre todo cuando no se tiene demasiado contexto del problema o cuando se quiere obtener una perspectiva más general

# Agenda

## ① Correlación entre variables

En Python

Acciones a tomar con variables correlacionadas

## ② Métricas en aprendizaje automático

Métricas de clasificación

Métricas de regresión

**Métricas de aprendizaje no supervisado**

Métricas como funciones de pérdida

En Python

## ③ Sobreajuste y subajuste

Particiones de validación y test

Validación cruzada

Validación cruzada en Python

## ④ Optimización de hiperparámetros

En Python

## ⑤ Persistencia de modelos

## ⑥ Gestión de proyectos de AA

- En el caso de las tareas de aprendizaje no supervisado, no se dispone de una variable objetivo
- Por tanto, no se pueden utilizar las métricas de clasificación o regresión
- En su lugar, se utilizan métricas específicas de cada tarea
- Por ejemplo, en el caso de la reducción de la dimensionalidad, se utilizan métricas como la varianza explicada o la capacidad de reconstrucción
- En modelos basados en distancias, también se pueden trabajar con la dispersión de los clústeres

# Agenda

## ① Correlación entre variables

En Python

Acciones a tomar con variables correlacionadas

## ② Métricas en aprendizaje automático

Métricas de clasificación

Métricas de regresión

Métricas de aprendizaje no supervisado

**Métricas como funciones de pérdida**

En Python

## ③ Sobreajuste y subajuste

Particiones de validación y test

Validación cruzada

Validación cruzada en Python

## ④ Optimización de hiperparámetros

En Python

## ⑤ Persistencia de modelos

## ⑥ Gestión de proyectos de AA



# Métricas como funciones de pérdida

- En muchos casos, se utiliza una de las métricas anteriores como función de pérdida
- Por ejemplo, en regresión lineal, la función de pérdida habitual es el error cuadrático medio

## Función de pérdida

Se llama función de pérdida a la función que mide el error entre las predicciones del modelo y los valores reales, y calcula una penalización por dicho error que se utiliza para ajustar los parámetros del modelo

- El resto de métricas que no se utilicen como funciones de pérdida se pueden emplear para evaluar el rendimiento del modelo

# Agenda

## ① Correlación entre variables

En Python

Acciones a tomar con variables correlacionadas

## ② Métricas en aprendizaje automático

Métricas de clasificación

Métricas de regresión

Métricas de aprendizaje no supervisado

Métricas como funciones de pérdida

En Python

## ③ Sobreajuste y subajuste

Particiones de validación y test

Validación cruzada

Validación cruzada en Python

## ④ Optimización de hiperparámetros

En Python

## ⑤ Persistencia de modelos

## ⑥ Gestión de proyectos de AA

- En Python, las métricas de aprendizaje automático se pueden calcular con las funciones de Scikit-Learn. Módulo `sklearn.metrics`
- Las métricas de clasificación se pueden calcular con las funciones `accuracy_score()`, `precision_score()`, `recall_score()`, `f1_score()`, `confusion_matrix()`, `classification_report()`, etc.
- Las métricas de regresión se pueden calcular con las funciones `mean_absolute_error()`, `mean_squared_error()`, `mean_squared_log_error()`, `r2_score()`, etc.
- También se podría optar por implementaciones *ad hoc* de las métricas, si se desea

# Agenda

## ① Correlación entre variables

En Python

Acciones a tomar con variables correlacionadas

## ② Métricas en aprendizaje automático

Métricas de clasificación

Métricas de regresión

Métricas de aprendizaje no supervisado

Métricas como funciones de pérdida

En Python

## ③ Sobreajuste y subajuste

Particiones de validación y test

Validación cruzada

Validación cruzada en Python

## ④ Optimización de hiperparámetros

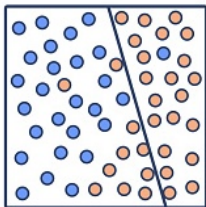
En Python

## ⑤ Persistencia de modelos

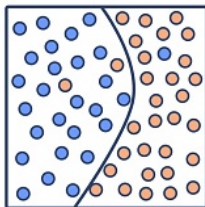
## ⑥ Gestión de proyectos de AA

## Sobreajuste o sobreentrenamiento (*overfitting*)

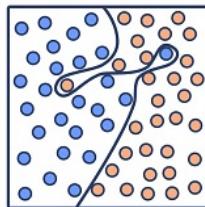
- Se dice que un modelo está sobreajustado cuando se ajusta demasiado bien a los datos de entrenamiento
- Un modelo sobreajustado es capaz de predecir muy bien los datos de entrenamiento, pero no generaliza bien a datos nuevos



Underfitting



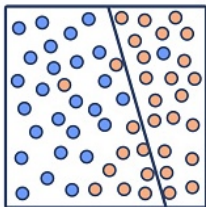
Optimal



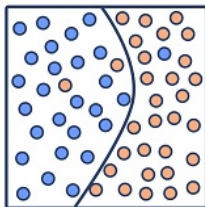
Overfitting

## Subajuste o infraentrenamiento (*underfitting*)

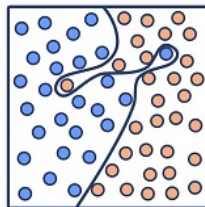
- Se dice que un modelo está subajustado cuando no es capaz de capturar la estructura subyacente de los datos
- Un modelo subajustado no es capaz de predecir bien ni los datos de entrenamiento ni los datos nuevos
- Normalmente, un modelo subajustado es demasiado simple para el problema que se quiere resolver



Underfitting



Optimal



Overfitting

- La detección de sobreajuste se puede hacer de forma visual, comparando las curvas de aprendizaje del modelo, o también numéricamente, comparando las métricas de rendimiento del modelo en los datos de entrenamiento y en los datos de validación o test
- Un modelo sobreajustado tendrá un rendimiento muy bueno en los datos de entrenamiento, pero un rendimiento **mucho** peor en los datos de validación o test

- La detección del subajuste resulta más sencilla, ya que el rendimiento del modelo en los datos de entrenamiento y en los datos de validación o test será malo
- Difícilmente se obtendrán buenas métricas que puedan conducir a engaño



# Agenda

## ① Correlación entre variables

En Python

Acciones a tomar con variables correlacionadas

## ② Métricas en aprendizaje automático

Métricas de clasificación

Métricas de regresión

Métricas de aprendizaje no supervisado

Métricas como funciones de pérdida

En Python

## ③ Sobreajuste y subajuste

Particiones de validación y test

Validación cruzada

Validación cruzada en Python

## ④ Optimización de hiperparámetros

En Python

## ⑤ Persistencia de modelos

## ⑥ Gestión de proyectos de AA

- La aproximación más simple de repartir los datos en un proyecto de AA es en dos particiones: entrenamiento y test
- Sin embargo, es habitual trabajar con una tercera partición, la de **validación**

# Particiones de validación y test [cont.]

## Partición de entrenamiento

- Se utiliza para ajustar los parámetros (pesos) del modelo
- Es la partición más grande y de la que emerge el aprendizaje

## Partición de validación

Se utiliza para ajustar los hiperparámetros del modelo y comprobar el proceso de entrenamiento

## Partición de test

Se utiliza para evaluar el rendimiento del modelo al final del proceso de entrenamiento

# Particiones de validación y test [cont.]



## En Python

- En Python, las particiones de validación y test se pueden hacer con la función `train_test_split()` de Scikit-Learn
- La función `train_test_split()` divide los datos en dos particiones: entrenamiento y test
- Para dividir los datos en tres particiones, simplemente se puede utilizar la función `train_test_split()` dos veces

# Estratificación de las particiones

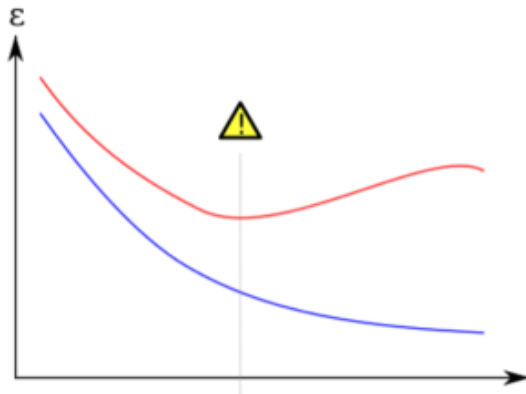
- En problemas de clasificación, es importante que las particiones de entrenamiento, validación y test mantengan la misma proporción de clases que el conjunto de datos original
- Para ello, se utiliza la estratificación
- Se dice que una partición está estratificada con respecto a una variable si mantiene la proporción de clases de esa variable entre las distintas subparticiones

## En Python

- En Python, la estratificación de las particiones se puede hacer con el argumento `stratify` de la función `train_test_split()` de Scikit-Learn
- El argumento `stratify` recibe la variable objetivo y mantiene la proporción de clases en las particiones

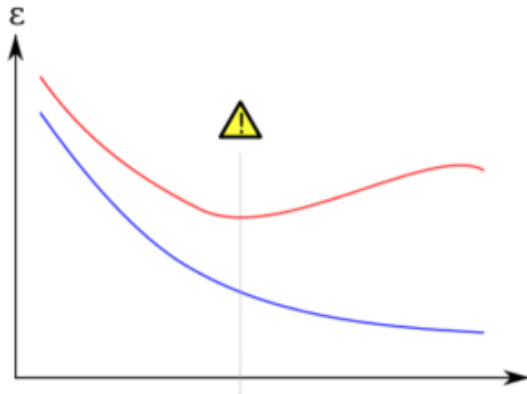
- El entrenamiento de un modelo de AA es un proceso iterativo en el que se van ajustando los parámetros del modelo para capturar la estructura subyacente de los datos
- Cuando se trabaja con una partición de datos de validación, se utilizará esta partición para ajustar los hiperparámetros del modelo al final de cada iteración del bucle
- Además, se puede utilizar la partición de validación para comprobar el proceso de entrenamiento y ajustar la tasa de aprendizaje
- Existen diferentes estrategias. . .

# Curvas de aprendizaje



- Si en cada iteración vamos guardando el error ( $\epsilon$ ) de entrenamiento y el error de validación, al final podremos pintar las curvas de aprendizaje, como el ejemplo de la figura

## Curvas de aprendizaje [cont.]



- ¿Cuál es la curva de entrenamiento y cuál es la curva de validación?
- ¿Qué está ocurriendo en el modelo de la figura?



- La curva de entrenamiento (azul) desciende progresivamente, ya que el modelo va aprendiendo de los datos de entrenamiento
- Sin embargo, se aprecia que la curva de validación (roja) se estanca y no mejora, lo que indica que el modelo no generaliza bien a datos nuevos
- Esto es un claro indicio de **sobreajuste**

- Basándose también en las curvas de aprendizaje, se puede implementar la técnica de *early stopping* de forma muy intuitiva
- La técnica de *early stopping* consiste en detener el entrenamiento del modelo cuando el error de validación deja de disminuir
- Se puede considerar una tolerancia de un número de iteraciones sin mejora, para evitar detener el entrenamiento en un punto de estancamiento local
- En la práctica, se pueden hacer dos cosas:
  - Detener realmente el bucle
  - Ir guardando el modelo que mejor rendimiento tenga en la partición de validación y sólo sobrescribirlo si se obtiene un modelo mejor en la iteración en curso

# Agenda

## ① Correlación entre variables

En Python

Acciones a tomar con variables correlacionadas

## ② Métricas en aprendizaje automático

Métricas de clasificación

Métricas de regresión

Métricas de aprendizaje no supervisado

Métricas como funciones de pérdida

En Python

## ③ Sobreajuste y subajuste

Particiones de validación y test

**Validación cruzada**

Validación cruzada en Python

## ④ Optimización de hiperparámetros

En Python

## ⑤ Persistencia de modelos

## ⑥ Gestión de proyectos de AA

- La partición de los datos en entrenamiento, validación y test es un proceso aleatorio
- Por tanto, el rendimiento del modelo puede depender de la selección de las particiones
- Este problema se agrava en conjuntos de datos pequeños

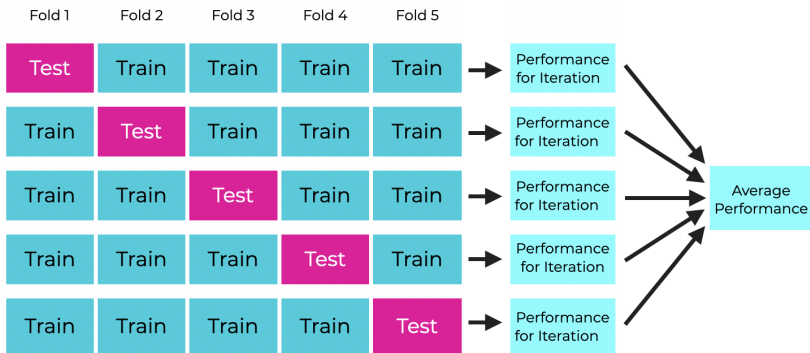
# Validación cruzada (*cross-validation*)

- La validación cruzada es una técnica que se utiliza para evaluar el rendimiento de un modelo
- La validación cruzada consiste en dividir los datos en  $k$  particiones, y entrenar y evaluar el modelo  $k$  veces, utilizando una partición distinta como conjunto de validación en cada iteración
- De esa forma, se minimiza el riesgo de que el rendimiento del modelo dependa de la selección de las particiones de entrenamiento y validación <sup>1</sup>
- Al final del proceso, se calcula la media de las métricas de rendimiento del modelo en las  $k$  iteraciones y se selecciona el modelo con mejor rendimiento

---

<sup>1</sup>Es decir, se reduce el peso de la aleatoriedad en la evaluación del modelo

# Validación cruzada [cont.]



- La validación cruzada es una técnica muy potente, pero también computacionalmente costosa
- En escenarios con conjuntos de datos pesados, la validación cruzada puede ser inviable
- Pesados no implica necesariamente grandes, por ejemplo: conjuntos de datos de vídeo, audio, imágenes de alta resolución, etc.

# Agenda

## ① Correlación entre variables

En Python

Acciones a tomar con variables correlacionadas

## ② Métricas en aprendizaje automático

Métricas de clasificación

Métricas de regresión

Métricas de aprendizaje no supervisado

Métricas como funciones de pérdida

En Python

## ③ Sobreajuste y subajuste

Particiones de validación y test

Validación cruzada

Validación cruzada en Python

## ④ Optimización de hiperparámetros

En Python

## ⑤ Persistencia de modelos

## ⑥ Gestión de proyectos de AA



- En Python, la validación cruzada se puede hacer con la función `cross_val_score()` de Scikit-Learn
- La función `cross_val_score()` entrena y evalúa el modelo  $k$  veces, utilizando una partición distinta como conjunto de validación en cada iteración
- La función `cross_val_score()` devuelve una lista con las métricas de rendimiento del modelo en las  $k$  iteraciones
- La función `cross_val_score()` también permite paralelizar el proceso de validación cruzada, para reducir el tiempo de cómputo

# Agenda

## ① Correlación entre variables

En Python

Acciones a tomar con variables correlacionadas

## ② Métricas en aprendizaje automático

Métricas de clasificación

Métricas de regresión

Métricas de aprendizaje no supervisado

Métricas como funciones de pérdida

En Python

## ③ Sobreajuste y subajuste

Particiones de validación y test

Validación cruzada

Validación cruzada en Python

## ④ Optimización de hiperparámetros

En Python

## ⑤ Persistencia de modelos

## ⑥ Gestión de proyectos de AA

## Hiperparámetros

- Los hiperparámetros son parámetros que afectan al desempeño de un modelo de AA
- Pero que no se ajustan durante el proceso de entrenamiento del modelo: no emanan directamente del aprendizaje de los datos
- Para ajustar los hiperparámetros de un modelo, se suele partir de un enfoque de simple prueba y error
- Se seleccionarán los hiperparámetros que proporcionen el mejor rendimiento del modelo, sin mayor justificación
- Una de las primeras cosas que hacer cuando se considera un modelo para un proyecto es revisar su documentación y ver, entre otras cosas, qué hiperparámetros se podrían ajustar

# Exploración de hiperparámetros exhaustiva vs. aleatoria

- La posibilidad de probar todas las combinaciones posibles de hiperparámetros de un modelo es una opción viable en problemas pequeños
- Pero en problemas más grandes, la búsqueda exhaustiva es inviable, o cuanto menos, muy costosa
- En estos casos, se puede recurrir a la búsqueda de hiperparámetros aleatoria
- La búsqueda de hiperparámetros aleatoria seleccionará subconjuntos aleatorios de hiperparámetros y los evaluará
- El proceso se puede repetir un número determinado de veces, o hasta que se alcance un criterio de parada
- Obviamente, lo ideal es tener en cuenta el conocimiento del dominio del que se disponga y la experiencia con las arquitecturas de los modelos a considerar para restringir lo máximo posible el espacio de búsqueda de hiperparámetros

# Agenda

## ① Correlación entre variables

En Python

Acciones a tomar con variables correlacionadas

## ② Métricas en aprendizaje automático

Métricas de clasificación

Métricas de regresión

Métricas de aprendizaje no supervisado

Métricas como funciones de pérdida

En Python

## ③ Sobreajuste y subajuste

Particiones de validación y test

Validación cruzada

Validación cruzada en Python

## ④ Optimización de hiperparámetros

En Python

## ⑤ Persistencia de modelos

## ⑥ Gestión de proyectos de AA

## GridSearchCV

- La función GridSearchCV ajusta los hiperparámetros del modelo uno a uno, evaluando todas las combinaciones posibles
- La función GridSearchCV recibe como argumento un diccionario con los hiperparámetros a ajustar y sus valores
- La función GridSearchCV evalúa el rendimiento del modelo en todas las combinaciones posibles de hiperparámetros, utilizando **validación cruzada**
- La función GridSearchCV selecciona los hiperparámetros que proporcionen el mejor rendimiento del modelo

## RandomizedSearchCV

- La función `RandomizedSearchCV` ajusta los hiperparámetros del modelo de forma aleatoria
- La función `RandomizedSearchCV` recibe como argumento un diccionario con los hiperparámetros a ajustar y sus valores, y un número determinado de iteraciones
- La función `RandomizedSearchCV` selecciona subconjuntos aleatorios de hiperparámetros y evalúa el rendimiento del modelo en cada iteración, utilizando **validación cruzada**
- La función `RandomizedSearchCV` selecciona los hiperparámetros que proporcionen el mejor rendimiento del modelo

# Agenda

## ① Correlación entre variables

En Python

Acciones a tomar con variables correlacionadas

## ② Métricas en aprendizaje automático

Métricas de clasificación

Métricas de regresión

Métricas de aprendizaje no supervisado

Métricas como funciones de pérdida

En Python

## ③ Sobreajuste y subajuste

Particiones de validación y test

Validación cruzada

Validación cruzada en Python

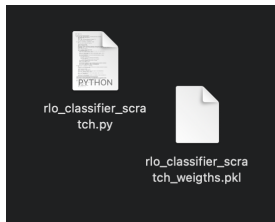
## ④ Optimización de hiperparámetros

En Python

## ⑤ Persistencia de modelos

## ⑥ Gestión de proyectos de AA





- A nivel programático, un modelo de AA estaría compuesto por la arquitectura del modelo —la clase, el código— y los pesos ajustados durante el proceso de entrenamiento
- La persistencia de modelos es el proceso de guardar un modelo de AA entrenado para poder utilizarlo en el futuro
- La persistencia de modelos es importante para no tener que volver a entrenar el modelo cada vez que se quiera utilizar
- Además, es necesaria para poder desplegar los modelos en un entorno productivo

# Persistencia de modelos [cont.]

- En verdad, la persistencia de los modelos consiste simplemente en serializar el modelo en un archivo salvable en disco
- Ergo cualquier protocolo de serialización con implementación en Python sería válido para persistir un modelo de AA
- Hay algunas opciones bastante populares: Pickle, Joblib, HDF5, etc.
- Su elección dependerá de las necesidades del proyecto, cuestiones de arquitectura del entorno u otras consideraciones de carácter puramente técnico

## Lectura recomendada y propuesta para el F1

- *Models Persistence*<sup>2</sup>, de la documentación de Scikit-Learn
- Lectura recomendada en general
- Propuesta también para resumir y comentar en el F1

---

<sup>2</sup>Scikit-Learn Developers. (s.f.). *Model Persistence - Scikit-Learn 1.5.2 documentation*. Consultado 14 de octubre de 2024, desde [https://scikit-learn.org/stable/model\\_persistence.html](https://scikit-learn.org/stable/model_persistence.html)

# Agenda

## ① Correlación entre variables

En Python

Acciones a tomar con variables correlacionadas

## ② Métricas en aprendizaje automático

Métricas de clasificación

Métricas de regresión

Métricas de aprendizaje no supervisado

Métricas como funciones de pérdida

En Python

## ③ Sobreajuste y subajuste

Particiones de validación y test

Validación cruzada

Validación cruzada en Python

## ④ Optimización de hiperparámetros

En Python

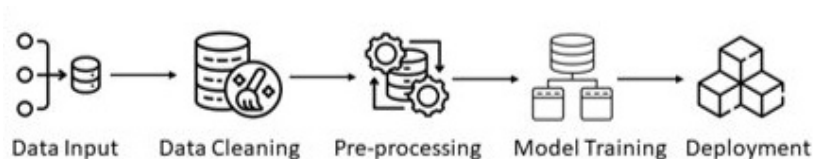
## ⑤ Persistencia de modelos

## ⑥ Gestión de proyectos de AA

- A día de hoy, los *notebooks* se han convertido en la herramienta de facto para el desarrollo de proyectos de AA, sobre todo en fases más iniciales
- Son la herramienta perfecta para la experimentación y la iteración a la que recurren los científicos e ingenieros de datos
- Los proyectos más sencillos se pueden desarrollar íntegramente en un único *notebook*
- Pero en escenarios más realistas, es conveniente pensar en los proyectos como canalizaciones o *pipelines* de datos

## Gestión de proyectos de AA [cont.]

- Así pues, se podrían ir separando los diferentes pasos de un proyecto de AA en diferentes *notebooks* o en diferentes scripts de Python
- El resultado de un paso se persiste de alguna forma y se recupera en el paso siguiente como entrada



# Gestión de proyectos de AA [cont.]

- Una buena recomendación sería utilizar nombres de archivo descriptivos y coherentes para los *notebooks* o los scripts de Python
- También es buena idea utilizar índices para numerar los *notebooks* o los scripts de Python, para indicar el orden en el que se deben ejecutar dentro del *pipeline*

## Ejemplo de nombrado en un proyecto tipo

- `n01_carga_datos.ipynb`
- `n02_limpieza_datos.ipynb`
- `n03_ingenieria_variables.ipynb`
- `n04_entrenamiento_modelo.ipynb`
- `n05_evaluacion_modelo.ipynb`

Si se trabaja con Python, se debería evitar nombrar archivos comenzando por un número, ya que Python no permite importar módulos con nombres que comiencen por un número

## Recomendación extracurricular: Git

- Cuando se trabaja en cualquier tipo de proyecto de código, es recomendable utilizar un sistema de control de versiones, como Git
- Git es un sistema de control de versiones distribuido, que permite llevar un registro de los cambios en el código
- Se puede saber en todo momento quién ha hecho qué, cuándo y por qué. Se puede volver a versiones anteriores del código, etc.
- Permite una mejor colaboración entre los miembros de un equipo
- **Git se quede completamente fuera del alcance de este curso**

*El aprendizaje automático no es magia, es sólo matemáticas aplicadas a los datos.*

— PETER NORVIG



# Selección y Evaluación de Modelos de AA

## Aprendizaje Automático

BORJA GONZÁLEZ SEOANE

`borja.gonzalez1@uie.edu`



S07, 16 de octubre de 2024

Versión del documento: 14 de octubre de 2024

