

Fundamentos de Machine Learning



## Índice

- 1. Introducción
- 2. Tipos de machine learning
- 3. Vecinos más próximos
  - a. Evaluación y selección del modelo
- 4. ¿Cómo elegir el algoritmo adecuado?
- 5. Principios del aprendizaje
- 6. Ciclo de vida de un proyecto en ML
- 7. ML en la vida real



#### La ciencia de

- "Proporcionar a los ordenadores la capacidad de aprender a tomar decisiones a partir de los datos, sin ser programados explícitamente para ello" Arthur Samuel, 1959
- Útil cuando no se puede utilizar una fórmula que describa la realidad, pero sí dispones de datos para construir una solución empírica

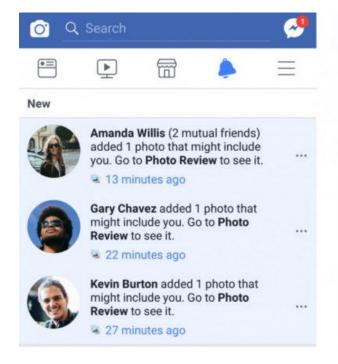


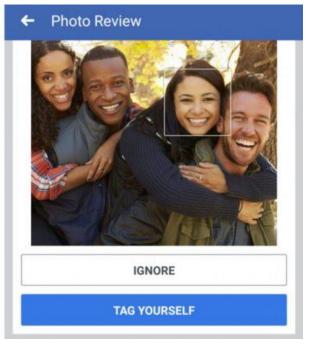








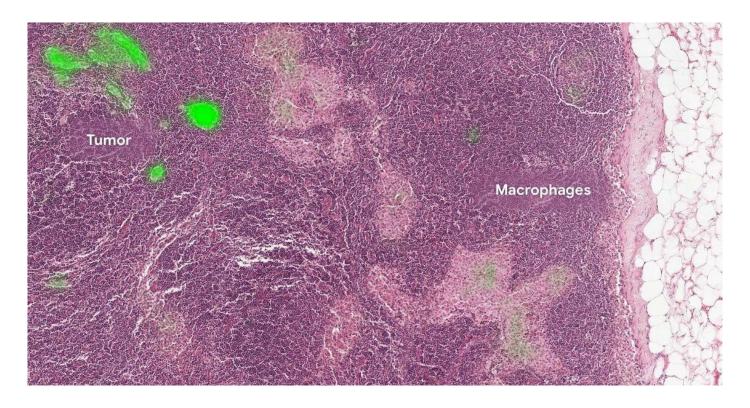














https://ai.google/research/teams/brain/healthcare-biosciences

### ■ ¿Y qué NO es? Diferencias con la IA

- La inteligencia artificial es la "ciencia e ingenio de hacer máquinas inteligentes, especialmente programas de cómputo inteligentes" – McCarthy, 1956
- La definición es difusa: inteligencia llevada a cabo por máquinas.
  - Técnicamente, la percepción del entorno y consecución de objetivos se considera inteligencia.
  - La definición más aceptada socialmente incluye funciones cognitivas: percepción, razonamiento, resolución.



#### Y qué NO es? Diferencias con la IA

- IA estrecha o *narrow*: Resuelve una tarea de forma igual o superior a un humano. DeepBlue (sin ML!), AlphaGo (RL). No va más allá de esa tarea; cualquier otra actividad escapa a su comprensión. AlphaGo es capaz de vencer a los grandes maestros del Go, pero no puede pedir una pizza. De hecho, ni siquiera sabe que está jugando al Go.
- IA general o *AGI*: Inteligencia a nivel humano. Según dicen, estamos cerca de alcanzarla; aunque hace dos décadas también decían que lo estábamos (spoiler: no lo estábamos)
- Super inteligencia o *ASI*: Superior a los humanos en cualquier ámbito, incluyendo creatividad artística y habilidades sociales.



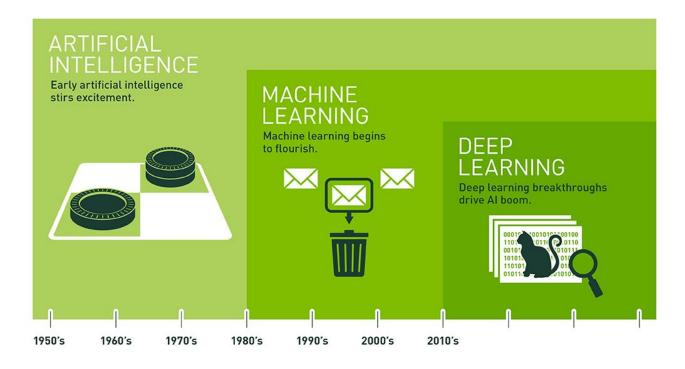
https://bdtechtalks.com/2017/05/12/what-is-narrow-general-and-super-artificial-intelligence/

#### Diferencias con *Deep Learning*

- Redes neuronales (algoritmo de machine learning)
- Arquitecturas complejas (profundas)
- Teorizadas en los años 50, recuperadas gracias a GPUs y datos masivos (digitalización)
- Grandes resultados (superior a humanos) en datos estructurados y algoritmos supervisados
  - Imagen médica
  - Gaming



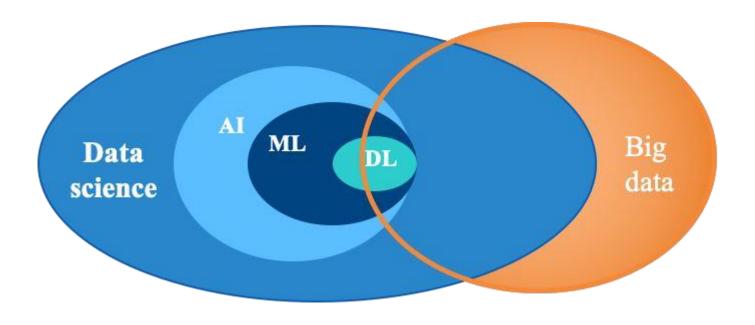
#### AI, ML y DL





Fuente: https://blogs.nvidia.com/blog/2016/07/29/whats-difference-artificial-intelligence-machine-learning-deep-learning-ai/

## Relación entre ML y ciencia de datos





#### Estado actual

Las empresas más grandes llevan algunos años con estas tecnologías implantadas; se van extendiendo paulatinamente.

El impacto es real, pero hay humo. Mucho humo. Por todas partes.

TECH ARTIFICIAL INTELLIGENCE

# Forty percent of 'Al startups' in Europe don't actually use Al, claims report

Companies want to take advantage of the AI hype

By James Vincent | Mar 5, 2019, 8:14am EST



Fuente: <a href="https://www.theverge.com/2019/3/5/18251326/ai-startups-europe-fake-40-percent-mmc-report">https://www.theverge.com/2019/3/5/18251326/ai-startups-europe-fake-40-percent-mmc-report</a>

## ■ ¿Y en lo laboral?

	Business-Oriented	Engineering-Oriented
Emerging	<ul> <li>Data Analyst</li> <li>Data Scientist</li> <li>Data/ML Product</li> <li>Manager</li> </ul>	<ul><li>Data Engineer</li><li>ML Researcher/Scientist</li><li>ML/DL/AI Engineer</li></ul>
Traditional	<ul><li>Business Analyst (Various Functions)</li><li>BI Analyst</li></ul>	BI Engineer/Developer      DATAKADEMY



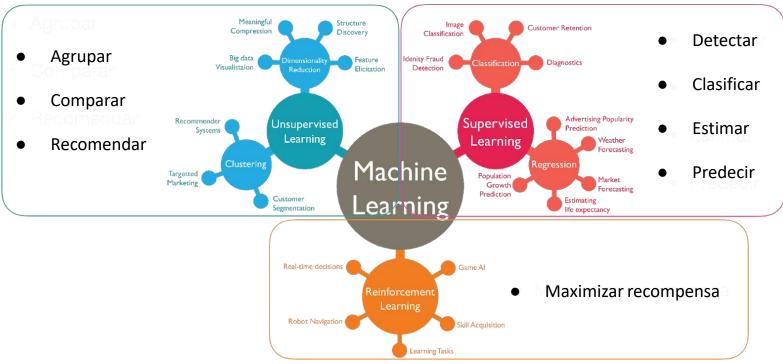
Fuente: <a href="https://hackernoon.com/navigating-the-data-science-career-landscape-db746a61ac62">https://hackernoon.com/navigating-the-data-science-career-landscape-db746a61ac62</a>

## Índice

- 1. Introducción
- 2. Tipos de machine learning
- 3. Vecinos más próximos
  - a. Evaluación y selección del modelo
- 4. ¿Cómo elegir el algoritmo adecuado?
- 5. Principios del aprendizaje
- 6. Ciclo de vida de un proyecto en ML
- 7. ML en la vida real



### Tipos de *machine learning*





https://medium.com/marketing-and-entrepreneurship/10-companies-using-machine-learning-in-cool-ways-887c25f913c3

## Aprendizaje supervisado

$$\{\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)}\} \propto p(x, y) \text{ i.i.d.},$$

$$\mathbf{x}^{(i)} \in \mathbb{R}^d,$$
 $y^{(i)} \in \mathbb{R},$ 
 $i = 1, \dots, N,$ 
 $f_{\omega}(\mathbf{x}^{(i)}) \approx y^{(i)}$ 

	sepal length (cm)	sepal width (cm)	petal length (cm)	petal width (cm)
0	5.8	2.8	5.1	2.4
1	6.0	2.2	4.0	1.0
2	5.5	4.2	1.4	0.2
3	7.3	2.9	6.3	1.8
4	5.0	3.4	1.5	0.2

	Species
0	virginica
1	versicolor
2	setosa
3	virginica
4	setosa

Iris data set: <a href="https://es.wikipedia.org/wiki/Iris\_flor\_conjunto\_de\_datos">https://es.wikipedia.org/wiki/Iris\_flor\_conjunto\_de\_datos</a>



## Clasificación y regresión (supervisado)

#### Clasificación

- La variable objetivo y es discreta
- Ej: Apto / No apto
- Regresión logística

#### Regresión

- La variable objetivo y es continua
- Ej: Nota del examen
- Regresión lineal

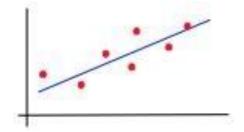


## Clasificación y regresión (supervisado)

#### Clasificación



Regresión

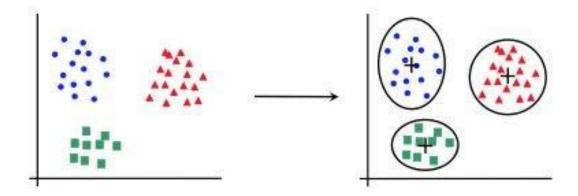




## Aprendizaje no supervisado (ya estudiado)

$$\{\mathbf{x}^{(i)}\} \propto p(x)$$

aprender sobre p





#### Generalización

No solo buscamos que el entrenamiento tenga buen resultado:

$$f_{\omega}(x^{(i)}) \approx y^{(i)}$$

También que lo tenga el subconjunto de test:

$$f_{\omega}(x^{(new)}) \approx y^{(new)}$$



## Paramétricos vs no paramétricos

<u>Paramétricos</u>: el modelo tiene un conjunto limitado de parámetros

- Regresión lineal
- Regresión logística
- Naïve Bayes
- Redes neuronales
- Eficientes: sencillos de entrenar
- Menos complejos

No paramétricos: la complejidad aumenta con el número de muestras

- Vecinos más próximos K-NN
- Kernel SVM
- Árboles de decisión

- Más flexibles
- Computacionalmente costosos



# Índice

- 1. Introducción
- 2. Tipos de machine learning
- 3. Vecinos más próximos
  - a. Evaluación y selección del modelo
- 4. ¿Cómo elegir el algoritmo adecuado?
- 5. Principios del aprendizaje
- 6. Ciclo de vida de un proyecto en ML
- 7. ML en la vida real

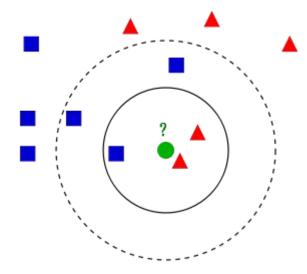


## ■ Vecinos más próximos (K-NN)

- Del inglés, K-Nearest Neighbors
- Puede utilizarse en **clasificación** y en regresión (más adelante)

☐ Si k=3: Rojo

☐ Si k=5: Azul



Matemáticamente:

$$f(\mathbf{x}_0) = y_i$$
  
 $i = \arg\min_{j} (||\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_0||_2)$ 

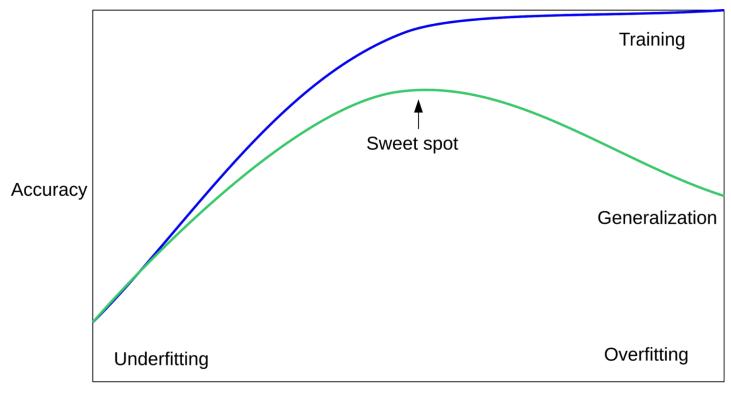


Fuente: https://en.wikipedia.org/wiki/K-nearest\_neighbors\_algorithm

# Let's code!



## ■ Train + test: sobreajuste





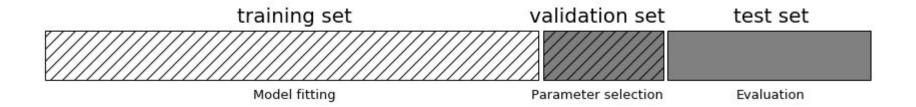
Model complexity

#### Limitaciones train + test

- Si las muestras de entrenamiento son escasas, el error en test puede ser muy variable, dependiendo de las muestras incluidas en el conjunto de entrenamiento y el conjunto de test.
- No permite seleccionar los parámetros del modelo



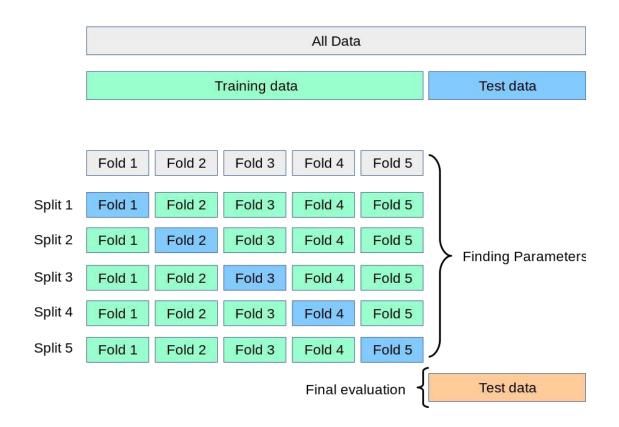
#### ■ Entrenamiento + validación + test



- Rápido y sencillo
- Mucha varianza (mismas limitaciones que caso anterior)



#### ■ Validación cruzada: k-fold *cross-validation*





© All rights reserved. www.keepcoding.i

#### ■ Validación cruzada: Paso 1





#### Validación cruzada: Paso 2

#### for n = 1:Nvecinos

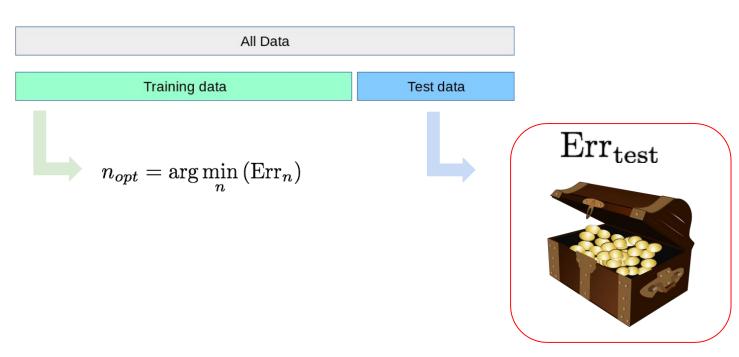
$$\begin{array}{c|c}
\rightarrow & \operatorname{Err}_{n,2} \\
\rightarrow & \operatorname{Err}_{n,3} \\
\rightarrow & \operatorname{Err}_{n,4}
\end{array}
\qquad \operatorname{Err}_{n} = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^{5} \operatorname{Err}_{n,i}$$

$$n_{opt} = \arg\min_{n} \left( \mathrm{Err}_{n} \right)$$



end

#### ■ Validación cruzada: Paso 3





#### Consideraciones sobre k-fold *CV*

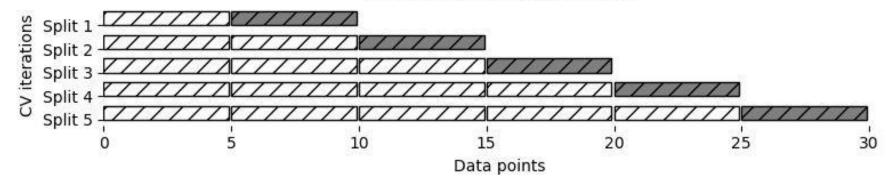
- Si K = N (número de muestras) se tiene leave-one out CV
  - N-1 muestras para entrenar, y 1 muestra para medir prestaciones
  - El conjunto de entrenamiento es muy parecido para cada fold ⇒ la estimación del error de tiene poco sesgo, pero mucha varianza.
  - Es computacionalmente costoso
- En la práctica K = 5, 10 proporciona buenos resultados, buen compromiso entre sesgo y varianza



### CV en series temporales

No es un proceso i.i.d

#### Time series cross-validation





A

# Let's code!



# Índice

- 1. Introducción
- 2. Tipos de machine learning
- 3. Vecinos más próximos
  - a. Evaluación y selección del modelo
- 4. ¿Cómo elegir el algoritmo adecuado?
- 5. Principios del aprendizaje
- 6. Ciclo de vida de un proyecto en ML
- 7. ML en la vida real



#### ■ ¿Cómo elegir el algoritmo adecuado?

- No free lunch, no hay un algoritmo mejor que otro para todos los problemas
- "All models are wrong, but some are useful", George Box



#### Algunas consideraciones

- Compromiso sesgo-varianza
- Ruido y número de muestras de entrenamiento
- Complejidad de la solución
- Dimensionalidad del conjunto de entrada



#### Otros factores

- Heterogeneidad de los datos
  - Árboles vs algoritmos basados distancia
- Redundancia
  - Métodos lineales
- Interacciones y relaciones complejas



# Let's code!



# Índice

- 1. Introducción
- 2. Tipos de machine learning
- 3. Vecinos más próximos
  - a. Evaluación y selección del modelo
- 4. ¿Cómo elegir el algoritmo adecuado?
- 5. Principios del aprendizaje
- 6. Ciclo de vida de un proyecto en ML
- 7. ML en la vida real



### Principios del aprendizaje

- Navaja de Occam: el modelo más simple es el más plausible
- Sesgo en la población: el aprendizaje también estará sesgado
  - Manipulación en el conjunto de test
    - Normalización de variables
    - Selección de características





# Índice

- 1. Introducción
- 2. Tipos de machine learning
- 3. Vecinos más próximos
  - a. Evaluación y selección del modelo
- 4. ¿Cómo elegir el algoritmo adecuado?
- 5. Principios del aprendizaje
- 6. Ciclo de vida de un proyecto en ML
- 7. ML en la vida real



### ML pipeline: general



· Reducción de

dimensionalidad

 Combinación de variables



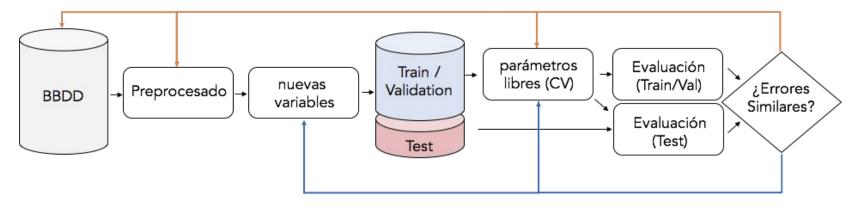
Estadística

Correlación

#### ■ ML pipeline: específico

#### Errores muy distintos (overfitting):

- 1. Conseguir más muestras de entrenamiento
- 2. Reducir el número de variables
- 3. Aumentar el valor del parámetro de regularización



#### Errores similares, pero de valor elevado:

- 1. Añadir nuevas variables
- 2. Añadir variables polinómicas y/ointeracciones
- 3. Disminuir el valor del parámetro de regularización



# Índice

- 1. Introducción
- 2. Tipos de machine learning
- 3. Vecinos más próximos
  - a. Evaluación y selección del modelo
- 4. ¿Cómo elegir el algoritmo adecuado?
- 5. Principios del aprendizaje
- 6. Ciclo de vida de un proyecto en ML
- 7. ML en la vida real



#### Principios básicos

- Definición del problema: elegir la tarea de ML adecuada
  - Probabilidad de que un cliente deje de usar la aplicación: ¿regresión, clasificación, clustering?
- Recopila datos, análisis exploratorio, y después (si es necesario), aplica ML (no comenzar con deep learning)
- Mide el impacto:
  - ¿De verdad necesitas un algoritmo de ML? ¿y qué beneficios vas a obtener? ¿y cómo mides esos beneficios?
- Explicar los resultados
  - Interpretabilidad y comunicación
  - Sistemas de recomendación mejoran si se dicen causas de recomendación



#### Referencias

- An Introduction to Statistical Learning.
  - Capítulos 2, 5.
- Machine Learning a Probabilistic Perspective.
  - Capítulo 1
- Hands On Machine Learning.
  - Capítulo 1

