

Aprendizaje Automático, Level up!

Inteligencia Artificial e Ingeniería del Conocimiento

Constantino Antonio García Martínez

Universidad San Pablo Ceu

- Russell, Stuart J., and Peter Norvig. Artificial intelligence: a modern approach. Pearson, 2016.

El conjunto de datos de Titanic

En esta presentación, mejoraremos nuestras habilidades estudiando un nuevo problema.

Code Example: Titanic

Intentemos predecir si un pasajero sobrevivió al desastre del Titanic utilizando datos como la clase del billete, el sexo del pasajero, la edad, etc. **¿Es este un problema de regresión o clasificación?**

El conjunto de datos de Titanic

En esta presentación, mejoraremos nuestras habilidades estudiando un nuevo problema.

Code Example: Titanic

Intentemos predecir si un pasajero sobrevivió al desastre del Titanic utilizando datos como la clase del billete, el sexo del pasajero, la edad, etc. **¿Es este un problema de regresión o clasificación?**

Con algunos ajustes menores, podremos reutilizar la receta de aprendizaje automático de la presentación anterior. Solo necesitamos tener en cuenta:

Se llama
regresión
logística
pero no
es de
regresión

1. Necesitamos un modelo de **clasificación**. Utilizaremos un modelo de **regresión logística**. (¡Advertencia! A pesar del nombre, un regresor logístico es un clasificador!)
2. Necesitamos **una métrica** para medir el rendimiento en un problema de clasificación. Una métrica razonable es la **precisión**:



El conjunto de datos de Titanic

En esta presentación, mejoraremos nuestras habilidades estudiando un nuevo problema.

Code Example: Titanic

Intentemos predecir si un pasajero sobrevivió al desastre del Titanic utilizando datos como la clase del billete, el sexo del pasajero, la edad, etc. **¿Es este un problema de regresión o clasificación?**

Con algunos ajustes menores, podremos reutilizar la receta de aprendizaje automático de la presentación anterior. Solo necesitamos tener en cuenta:

1. Necesitamos un modelo de clasificación. Utilizaremos un modelo de regresión logística. **(¡Advertencia! A pesar del nombre, un regresor logístico es un clasificador!)**
2. Necesitamos una métrica para medir el rendimiento en un problema de clasificación. Una métrica razonable **es la precisión:**

Precisión: es la proporción de instancias predichas correctamente con respecto al total de instancias.

Code Example: El conjunto de datos de Titanic

Usemos el conjunto de datos de Titanic para intentar mejorar algunos puntos en nuestra Receta de ML:

Receta de ML (III)

1. **Ingeniería de características y Preprocesamiento.**
2. Elegir un modelo. (¡debería ser un modelo de clasificación!)
3. **Dividir los datos en conjuntos de entrenamiento y prueba.**
4. **Entrenar el modelo en el conjunto de entrenamiento para tratar de maximizar el rendimiento.**
5. **Medir el rendimiento real en el conjunto de prueba.**

Ingeniería y selección de características

Ingeniería y selección de características

- **Ingeniería de características:** El proceso de crear nuevas características o transformar las existentes para mejorar el poder predictivo.
 - Ejemplo: En la clasificación de imágenes, necesitaríamos extraer características estadísticas como la intensidad media de los píxeles para usarlas como entrada de los clasificadores.
 - Ejemplo: Combinar las columnas the number of siblings y parents para crear la variable FamilySize.

Optimizar las entradas

Si podemos reducir la dimensionalidad mejor. Demasiados datos/dimensiones puede causar overfitting

Raw data:
pixel grid



Better
features:
clock hands'
coordinates

{x1: 0.7,
y1: 0.7}
{x2: 0.5,
y2: 0.0}

{x1: 0.0,
y2: 1.0}
{x2: -0.38,
2: 0.32}

Even better
features:
angles of
clock hands

theta1: 45
theta2: 0

theta1: 90
theta2: 140

- **Ingeniería de características:** El proceso de crear nuevas características o transformar las existentes para mejorar el poder predictivo.
 - Ejemplo: En la clasificación de imágenes, necesitaríamos extraer características estadísticas como la intensidad media de los píxeles para usarlas como entrada de los clasificadores.
 - Ejemplo: Combinar las columnas `the number of siblings` y `parents` para crear la variable `FamilySize`.
- **Selección de características:** Reducir el número de características para evitar el sobreajuste, reducir la complejidad y mejorar la generalización.
 - **Maldición de la dimensionalidad (curse of dimensionality):** a medida que aumenta el número de características, el rendimiento del modelo puede deteriorarse a menos que se maneje adecuadamente.
 - **Métodos:**
 - **Conocimiento experto:** Usar un conocimiento previo para seleccionar manualmente las características relevantes.
 - **Métodos de filtro:** Utilizar pruebas estadísticas (p. ej., correlación) para seleccionar las características relevantes.
 - **Métodos de envoltura:** Seleccionar características en función del rendimiento del modelo (p. ej., Eliminación recursiva de características).
 - **Métodos integrados:** La selección de características está integrada en el modelo (p. ej., regularización Lasso).

Code Example: El conjunto de datos de Titanic: Ingeniería y selección de características

Preprocesamiento de características

Preprocesamiento de características

El preprocesamiento de características es esencial para preparar los datos para modelos de aprendizaje automático. Las técnicas clave incluyen:

- **Imputación:** Manejo de valores faltantes para evitar la pérdida de datos.
- **Codificación Categórica:** Convertir variables categóricas en formato numérico para la compatibilidad del modelo.
- **Estandarización:** Escalar características numéricas para tener una media de 0 y un ancho aproximado de 1, mejorando la convergencia del modelo.

Exercise: Características Categóricas vs. Numéricas

¿Qué es una característica categórica? ¿Qué es una característica numérica? Clasifica cada característica del conjunto de datos de Titanic en una de estas categorías.

Ej: Hombre/Mujer

Preprocesamiento de características



Imputación

Imputación

Tino 1 Male Nan ...

Problema, quitamos todo un reg con datos por un campo con un NaN
SOLUCION: IMPUTACION

La imputación es el proceso de reemplazar los valores faltantes en un conjunto de datos (NaNs en Python y NAs en R). Los métodos comunes incluyen:

- 
- **Imputación por media:** Reemplazar los valores faltantes con la media de los datos disponibles.
 - **Imputación por mediana:** Usar el valor de la mediana para el reemplazo, especialmente útil para distribuciones sesgadas.
 - **Imputación por moda:** Rellenar los valores faltantes con la categoría más frecuente en datos categóricos.
- 
- **K-Vecinos Más Cercanos (K-Nearest Neighbors, KNN):** Utilizar el promedio de los K datos más cercanos para imputar los valores faltantes.

Referencia al numero de vecinos usados

Cercano en referencia
a los valores de las
columnas

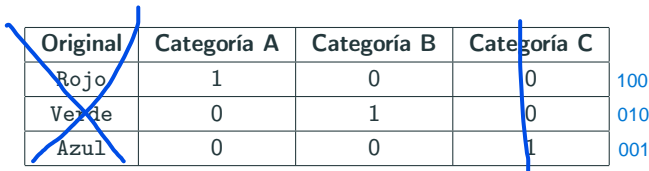
Preprocesamiento de características

Codificación Categórica

Codificación Categórica

- Algunas columnas son de texto -> Convertir texto en numeros

La **codificación categórica** transforma las variables categóricas en representaciones numéricas. Un método común es la **Codificación One-Hot**.



Original	Categoría A	Categoría B	Categoría C
Roj	1	0	0
Ver	0	1	0
Azul	0	0	1

100
010
001

Cuadro 1: Ejemplo de Codificación One-Hot para una variable de color

También se puede eliminar una de esas columnas porque con dos ya tenemos suficientes datos para representar 3 opciones (y 4 en verdad)

Para que no hayan numeros gordos

La estandarización es el proceso de escalar las características para tener una media de 0 y un ancho aproximado de 1 (esta es una definición no rigurosa).

Los métodos comunes incluyen:

- **Estandarización Z-Score o Escalado Estándar:** Reescalar los datos en función de la media y la desviación estándar.
- **Escalado Min-Max:** Escalar las características a un rango de $[0, 1]$.
- **Escalado Robusto:** Escalar las características según la mediana y el rango intercuartílico, haciéndolo resistente a los valores atípicos.

Code Example: Ejemplo de Titanic: preprocesamiento de características

Validación cruzada

Cross-Validation

Dividido en : Train | Test | (a veces) Validation

No optimo

Validación Cruzada (CV)

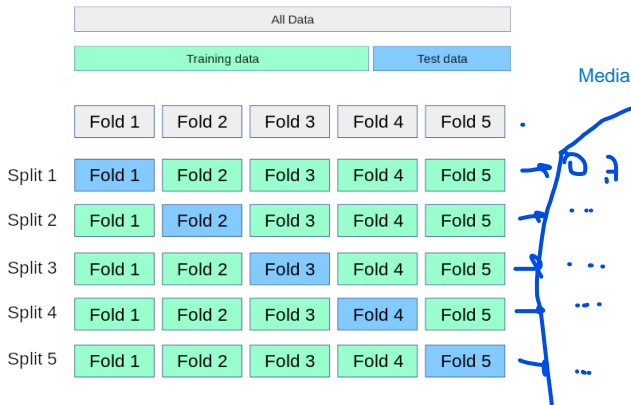
- **Objetivo:** Evaluar el rendimiento del modelo y asegurar que generaliza bien a datos no vistos.
- **Vs. División de train-test** CV proporciona una estimación más confiable del rendimiento del modelo al reducir el sesgo. Además, permite estimar la incertidumbre en el rendimiento del modelo.
- **Idea clave:** Dividir el conjunto de datos en varias partes (**pliegues o folds**) para entrenar y probar el modelo varias veces.

Hacerlo muchas veces sin reutilizar datos

5 veces

Verdes para entrenar

Azules para testear



f

Caso de mala suerte, vivos caen en lo verde y muertos en lo azul.



0% de precision



K-Fold
Estratificado

Tipos de Validación Cruzada:

K-Fold:

- Divide los datos en K partes iguales (pliegues).
- Entrenar en $K - 1$ pliegues, probar en el pliegue restante.
- Repetir K veces, cada vez usando un pliegue diferente para pruebas.

especialización

• **Leave-One-Out:** Caso especial donde $K = N$ (número de muestras). muy lento

• **K-Fold Estratificado:** Mantiene la proporción de clases en cada pliegue (usado principalmente para problemas de clasificación).

Ventajas:

- Evaluación más robusta al usar múltiples divisiones de train-test.
- Reduce el riesgo de sobreajuste o subajuste.

Desventajas:

- Puede ser computacionalmente costoso para conjuntos de datos grandes.

Code Example: El conjunto de datos de Titanic: Validación Cruzada

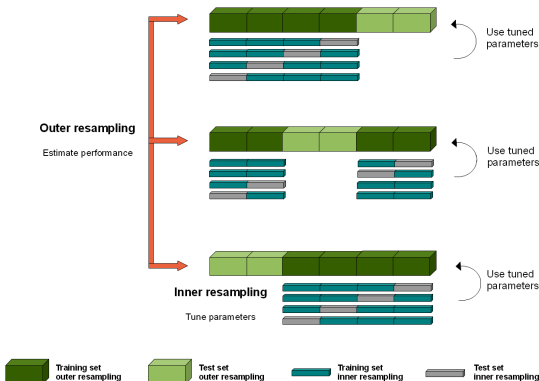
Code Exercise: `cross_val_score`

Validación cruzada

Validación Cruzada Anidada

Validación Cruzada Anidada para Selección de Modelos

- **Objetivo:** Proporciona una estimación insesgada del rendimiento del modelo mientras se selecciona el mejor modelo (p. ej., ajuste de hiperparámetros).
- **Idea clave:** Combina dos capas de validación cruzada:
 - **Bucle exterior:** Estima el rendimiento de generalización del modelo.
 - **Bucle interior:** Selecciona el mejor modelo o hiperparámetros.



Code Exercise: Model selection with nested CV

Code Exercise: Nested CV with Sklearn

Proyectos de Investigación

- **Estudiar PCA para selección y visualización de características.**

PCA es una herramienta poderosa para reducir la dimensionalidad y puede ayudar a descubrir patrones ocultos en los datos, lo que lo hace útil tanto para seleccionar características esenciales como para visualizar conjuntos de datos de alta dimensionalidad.

- **Estudiar la Eliminación Recursiva de Características (RFE) para la selección de características.**

RFE es un método iterativo que clasifica las características por su poder predictivo, ayudando a refinar los modelos al eliminar las características menos informativas y mejorar la interpretabilidad.