

TAREA 1: Híper Parámetros y Validación de Modelos

I.- Preguntas Planteadas:

El presente trabajo tiene como objetivo responder dos preguntas principalmente:

- 1.- Cuál es el efecto de los hiperparámetros en los modelos de *machine learning*.
- 2.- Cómo se comparan y validan los modelos de *machine learning*.

II.- Desarrollo de las Respuestas:

1.- Efecto de los Hiperparámetros en los Modelos de Machine Learning

Independiente de la naturaleza del modelo de *machine learning*: Supervisado, No Supervisado o Deep Learning; sus resultados dependen de cuan afinados estén los parámetros e hiperparámetros sobre el cual se va desarrollando el modelo.

Los parámetros, son considerados los más importantes para el modelo como tal, ya que se obtienen del aprendizaje automático, durante el proceso de entrenamiento de datos. La estimación de estos, comúnmente se basa en algoritmos de optimización, como por ejemplo: el cálculo del mejor Beta para una Regresión Lineal.

Por otra parte, los Hiperparámetros, son valores que generalmente no los entrega la fase de entrenamiento de datos, y deben ser seteados a priori el usuario, quien debe encontrar la combinación óptima para maximizar el rendimiento del modelo. Dicha búsqueda pueda ser realizada de forma manual, basada en la experiencia con otros modelos, o bien por ensayo y error; así como también basándose en métodos más sofisticados mediante algoritmos de apoyo tales como Gridsearch, Random Search, Bayesian Search. Algunos ejemplos de hiperparámetros son: Learning rate, Número de Épocas, Hidden Layer.

Hyperparameter tuning vs. model training

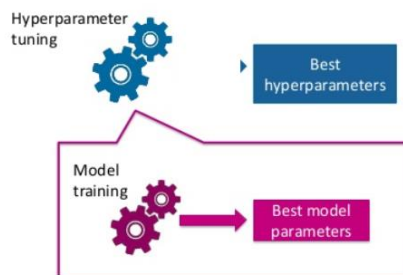


Figure 2: Hyperparameters vs model parameters → [Source](#)

La importancia de los hiperparámetros, es que regulan las condiciones dentro de las cuales se estimarán los parámetros en el proceso de entrenamiento, lo que finalmente impacta significativamente en la performance del modelo.

Una de las principales consecuencias de escoger una buena combinación óptima de hiperparámetros, es que permite regular o enfrentar los problemas de *underfitting*, así

como el de *overfitting*, de ahí que la obtención de los hiperparámetros óptimos conlleva a maximizar la performance del modelo.

2.- Cómo se comparan y validan modelos de Machine Learning

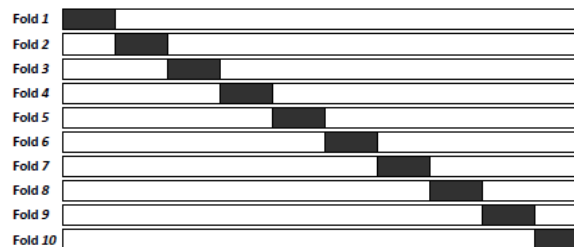
Para responder esta pregunta, comenzaremos respondiendo primero como se validan, ya que es que es la etapa que debe ocurrir primero, con el fin de obtener las métricas que nos permiten comparar modelos desde una mirada de la performance de las predicciones obtenidas.

2.1. Validación de Modelos

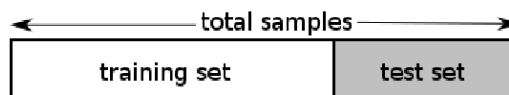
Se abordarán las dos formas más comunes:

2.1.1 Cross Validation (k-fold cross-validation):

- Se divide el conjunto de entrenamiento en k partes de igual tamaño, preferentemente estratificadas (valores usuales, $k=10$, $k=5$).
- Se hacen k aprendizajes con sus correspondientes evaluaciones (con una métrica dada)
- En cada aprendizaje, se usa como test una de las partes y como entrenamiento las k-1 restantes.
- Se devuelve la media de las evaluaciones realizadas.



- 2.2.2 **Holdout:** consiste en separar de manera aleatoria, una parte de los datos de los que se dispone, obteniendo: un conjunto de entrenamiento y un conjunto de prueba. Se aprende con el conjunto de entrenamiento y se evalúa el rendimiento sobre el conjunto de prueba.



2.2 Comparación de Modelos

Cabe mencionar que los modelos se pueden comparar desde varios puntos de vista: desde su complejidad (modelos de cajas negras), por su uso de recursos computacionales o tiempo, así como por la performance en su grado de predicción, siendo esta última la que nos permite saber cuán óptima son las predicciones obtenidas. Como regla general, el mejor modelo frente una misma performance va a ser el más simple, pero ¿qué métricas usar?

Esto va a depender del tipo de modelo que se trate, de acuerdo a si es de regresión o si es de clasificación.

Para los modelos de Regresión, las métricas más usadas son:

- Error cuadrático medio (MSE): mide el error cuadrado promedio de nuestras predicciones. Para cada punto, calcula la diferencia cuadrada entre las predicciones y el objetivo y luego promedia esos valores.
- Error cuadrático medio (RMSE): corresponde a la raíz cuadrada del MSE
- Error absoluto medio (MAE): el error se calcula como un promedio de diferencias absolutas entre los valores objetivo y las predicciones. El MAE es una puntuación lineal, lo que significa que todas las diferencias individuales se ponderan por igual en el promedio.

Para los modelos de Clasificación, las métricas más usadas son:

- Precision: ¿qué proporción de los clasificados como positivos lo son realmente?

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

- Accuracy: proporción de predichos correctos, sobre el total de casos evaluados

$$\frac{TP+TN}{TP+TN+FP+FN}$$

- Recall: ¿Qué proporción de todos los positivos se clasifican como tal?

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

- F1-Score: relaciona Precision y recall en un solo dato, y se prefiere por sobre la media aritmética, ya mitiga el impacto de las tasas altas y acentúa el de las tasas bajas.

$$F_1 = 2 \times \frac{P \times R}{P + R}$$

La clasificación de los predichos, se puede representar sobre la Confussion Matrix:

- Confussion Matrix: tabla que cruza las predicciones con la clasificación real (ground truth)

		Prediction	
		Positive	Negative
Actual	Positive	TP	FN
	Negative	FP	TN

Tipos de predicciones representadas en la Confussion Matrix:

- Verdadero Positivo (TP): ejemplo positivo, predicho positivo
- Falso Positivo (FP): ejemplo negativo, predicho positivo
- Verdadero Negativo (TN): ejemplo negativo, predicho negativo
- Falso Negativo (FN): ejemplo positivo, predicho negativo

Bibliografía:

- <https://towardsdatascience.com/understanding-hyperparameters-and-its-optimisation-techniques-f0debba07568>
- <https://www.analyticslane.com/2019/12/16/cual-es-la-diferencia-entre-parametro-e-hiperparametro/>
- <https://jakevdp.github.io/PythonDataScienceHandbook/05.03-hyperparameters-and-model-validation.html>
- <https://www.aprendemachinelearning.com/que-es-overfitting-y-underfitting-y-como-solucionarlo/>
- <https://towardsdatascience.com/how-to-train-and-compare-machine-learning-models-with-few-lines-of-code-b1d5e1e266dd>
- <https://topbigdata.es/metricas-de-regresion-para-el-aprendizaje-automatico/>
- <https://sitiobigdata.com/2018/08/27/machine-learning-metricas-regresion-mse/#:~:text=RMSE%20es%20solo%20la%20ra%C3%ADz%20cuadrada%20de%20MSE.&text=Por%20ejemplo%2C%20si%20tenemos%20dos,funciona%20en%20la%20direcci%C3%B3n%20puesta%20.>