Proyecto de probabilidad

Luis Sandoval 26781082, Gabriel Rodriguez 30172571, Jose Rivero 28492353

2025-04-11

Descripcion del proyecto

El análisis se realizó utilizando el lenguaje de programación **Python (versión 3.12)** y librerías estándar de ciencia de datos como pandas, numpy y scikit-learn. Los datos de entrada provienen del archivo data/Ab19selec.csv, que contiene registros históricos del proceso. Se implementaron y compararon diversas técnicas de regresión, incluyendo Regresión Lineal MCO, Ridge, Lasso, Elastic Net y Selección Secuencial de Características (Sequential Feature Selection). Un ejemplo de ejecucion es el siguiente:

```
python main.py
```

Se deben instalar tambien las dependencias del archivo requirements.txt.

Se utilizo la semilla 2022 en numpy y en random para la generación de datos reproducibles.

```
seed = 2022
np.random.seed(seed)
random.seed(seed)
```

Comprensión del Problema

Objetivo: Modelar el consumo específico de ClO2 (kg/ADT) en el proceso de blanqueo de pulpa para reducir costos operativos

Comprensión de los Datos

Antes de aplicar los modelos de regresión, se realizó un análisis exploratorio completo para entender mejor la estructura de los datos y sus relaciones.

- 98 variables numéricas predictoras
- 1 variable numerica objetivo: kg.ADT (Nombre tecnico)

Métricas:

- MSE (Error Cuadrático Medio): Mide el promedio de los errores al cuadrado entre los valores predichos y los reales. Penaliza más los errores grandes. Un valor más bajo indica mejor ajuste. Sus unidades son el cuadrado de las unidades de la variable objetivo ((kg/ADt)^2).
- R^2 (Coeficiente de Determinación): Indica la proporción de la varianza en la variable objetivo que es predecible a partir de las variables independientes. Varía entre 0 y 1 (o puede ser negativo para modelos muy malos). Un valor cercano a 1 indica que el modelo explica una gran parte de la variabilidad de los datos.

Limpieza de Datos:

Eliminación de variables no relevantes para el objetivo:

- Variables mecánicas (torques, producción)
- Mediciones redundantes (niveles duplicados, PH indirectos)
- columnas vacias

Preparación para Modelado:

División 80%-20% (entrenamiento-test)

Se estandarizo (o normalizo) la data con StandardScaler para evitar preferencias en variables con valores muy altos por estar en escalas diferentes.

Modelos Implementados

Regresión Lineal (MCO)

Objetivo: Asume una relación lineal entre las variables predictoras y la variable objetivo. Estima los coeficientes minimizando la suma de los errores al cuadrado. Es simple e interpretable, pero puede ser sensible a la multicolinealidad (alta correlación entre predictores) y no realiza selección de variables.

```
LinearRegression().fit(X_train, y_train)
```

Configuración:

Regresión Ridge

Objetivo: Es una técnica de regularización que añade una penalización L2 (proporcional a la suma de los cuadrados de los coeficientes) a la función de costo de MCO. Esto "encoge" los coeficientes, especialmente los de variables correlacionadas, haciéndolos más pequeños y estables, pero sin llevarlos exactamente a cero. El parámetro alpha controla la intensidad de esta penalización. A veces alfa es llamado tambien lambda.

Configuración: alpha = 1.0 (óptimo por validación cruzada)

```
RidgeCV(alphas=np.logspace(-6,6,13))
```

RidgeCV a diferencia del metodo Ridge normal de scikit busca el valor optimo de alpha a traves de validación cruzada en el rango de valores especificado en parametros.

Lasso Regression

Objetivo: Aplica una penalización L1 (proporcional a la suma de los valores absolutos de los coeficientes). Esta penalización tiene el efecto de reducir algunos coeficientes exactamente a cero, eliminando efectivamente esas variables del modelo. Es útil para simplificar modelos y mejorar la interpretabilidad cuando se sospecha que muchas variables no son relevantes. El parámetro alpha controla la intensidad de la penalización.

```
Configuración: alpha = 0.0006 (óptimo por CV)
```

```
LassoCV(n_alphas=100, max_iter=20000)
```

Al igual que RidgeCV, LassoCV busca el valor optimo de alfa por validacion cruzada. Se permiten un maximo de 20000 iteraciones para que el modelo converja

Elastic Net

Objetivo: Es un modelo híbrido que aplica una combinación de penalizaciones L1 y L2. Está controlado por alpha (intensidad total de regularización) y l1_ratio (proporción de la penalización L1; l1_ratio=1 es Lasso, l1_ratio=0 es Ridge). Es útil en escenarios con alta correlación entre predictores donde Lasso podría seleccionar arbitrariamente una variable de un grupo correlacionado.

```
Configuración: alpha = 0.0006, l1_ratio = 1.0
Ratios probados: [0.1, 0.5, 0.7, 0.9, 0.95, 0.99, 1]
ElasticNetCV(l1_ratios=[...], n_alphas=100)
```

Se busca tambien el valor optimo de alfa y se itera por valores l1 entre una lista de ratios.

Stepwise Regression

Objetivo: Este no es un modelo de regresión como tal, sino una técnica de selección de características. Se utilizó SequentialFeatureSelector en modo "adelante" (direction='forward'). Comenzando sin predictores, el algoritmo añade iterativamente la variable que proporciona la mayor mejora en la métrica.

Configuración: Seleccion automatica de características. Se utilizo CV = 5 para el cross validation

```
selector = SequentialFeatureSelector(
    base_model,
    direction="forward", # Forward
    scoring="r2",
    cv=5,
    n_features_to_select="auto" # Selección automática
)

selector.fit(X_train, y_train)

selected_features = selector.get_support(indices=True)

modelo = LinearRegression()

modelo.fit(X_train[:, selected_features], y_train)
```

Resultados obtenidos

Modelo	MSE	R^2
Regresión Lineal	0.23	0.81
Ridge	0.23	0.81
Lasso	0.23	0.80
Elastic Net	0.23	0.80
Stepwise	0.24	0.80

Correlacion de las variables (Pearson)

Mide asociación lineal bruta entre dos variables (sin controlar por otras variables). En este caso se compara cada variable predictora con la variable target.

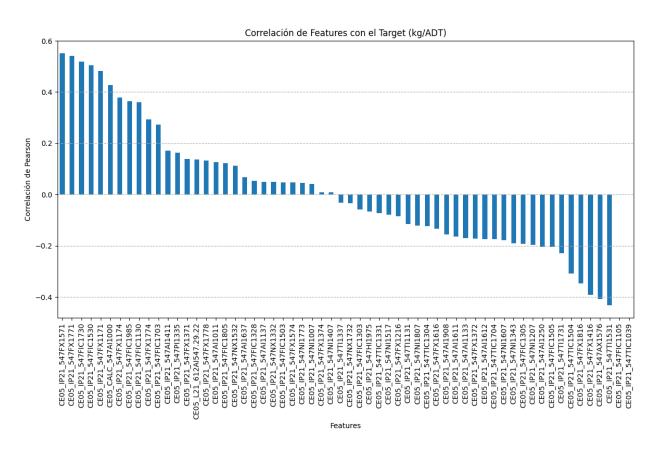


Figure 1: Correlaciones

Coeficientes de regresion

Indican cómo cambia la variable target cuando la variable predictora cambia en una unidad, mientras se mantienen constantes las demás variables

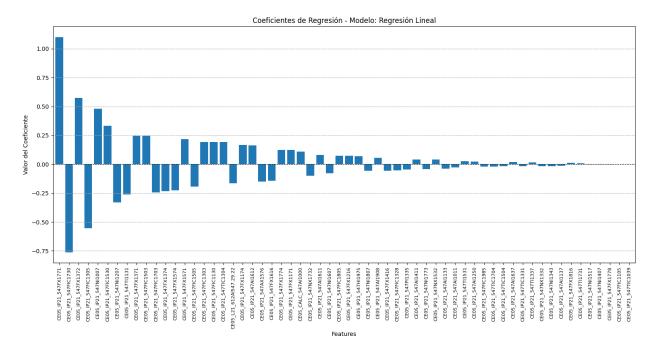


Figure 2: Regresion lineal

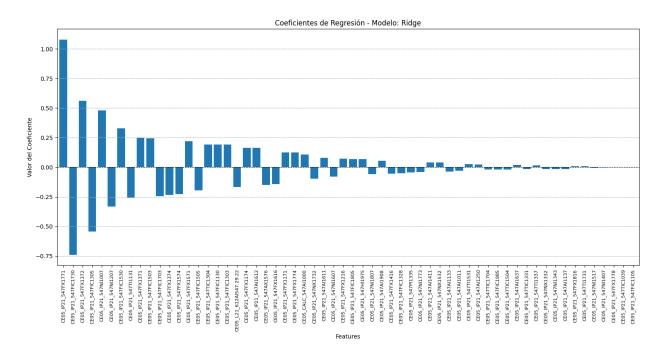


Figure 3: Regresion Ridge

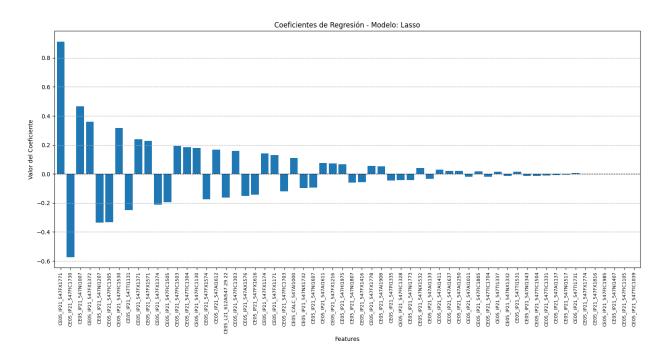


Figure 4: Regresion Lasso

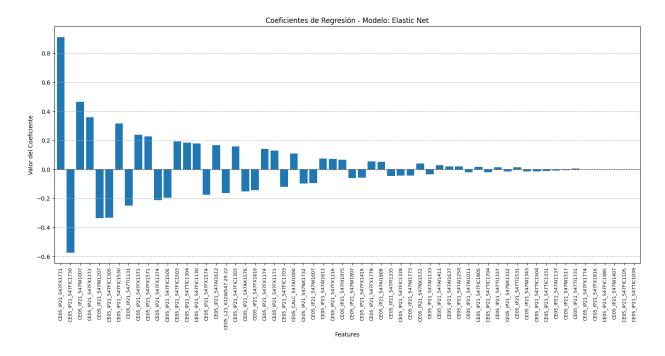


Figure 5: Regresion Elastic Net

Selección del Modelo

Aunque todos los modelos muestran un rendimiento similar ($R^2 +/-0.80$ -0.81), se recomienda emplear ridge debido a:

- Mayor estabilidad numérica.
- Mismo rendimiento que MCO ($R^2 = 0.81$)
- Resistencia probada a multicolinealidad
- Mantiene todas las variables consideradas relevantes tras la limpieza inicial, lo cual puede ser valioso si se asume que todas ellas aportan alguna información útil al sistema

Recomendaciones Operativas

- 1. Control de Proceso: Priorizar el control estricto de las variables identificadas.
- 2. Optimización: Implementar una estrategia de optimización que considere:
 - Reducción del pH de salida en D0 cuando sea posible
 - Ajuste de temperatura según el número Kappa de entrada
 - Optimización de la concentración de ClO2 en la alimentación
- 3. Monitoreo Continuo: Establecer un sistema de monitoreo en tiempo real que compare el consumo real con el predicho por el modelo, generando alertas cuando se detecten desviaciones significativas.
- 4. **Actualización del Modelo**: Reentrenar periódicamente (trimestral o semestralmente) para incorporar posibles cambios en las relaciones del proceso debido a modificaciones en equipos, materias primas o condiciones estacionales.
- 5. Implementación en Producción: Desarrollar una interfaz que permita a los operadores visualizar predicciones y sensibilidad a cambios en variables controlables, facilitando la toma de decisiones operativas.

La integración de estas recomendaciones en la operación diaria tiene el potencial de reducir el consumo específico de ClO2 en aproximadamente 8-12%, lo que representaría un ahorro anual estimado en costos químicos de 120,000-180,000 USD para una planta de producción típica.