

Aprendizaje Automático

Conceptos fundamentales

Enrique J. Carmona Suárez

Dpto. Inteligencia Artificial, ETS Ingeniería Informática, UNED

ecarmona@dia.uned.es

Second IPARCOS Workshop on Machine Learning and Applications to Physics - 18-20 diciembre 2023

Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Contenido

- Introducción
- El AA explicado en ocho pasos
- La importancia de los datos
- Métricas para caracterizar el desempeño de modelos
- Técnicas para predecir las prestaciones de un modelo

Contenido

- Introducción
 - Definición de AA
 - Breve revisión histórica
 - Taxonomía de AA
- El AA explicado en ocho pasos
- La importancia de los datos
- Métricas para caracterizar el desempeño de modelos
- Técnicas para predecir las prestaciones de un modelo

Qué es el Aprendizaje Automático

“El AA es el campo de estudio que le da a las computadoras la capacidad de aprender sin ser programadas explícitamente”

Arthur Samuel, 1959

Qué es el Aprendizaje Automático

“El AA es el campo de estudio que le da a las computadoras la capacidad de aprender sin ser programadas explícitamente”

Arthur Samuel, 1959

*“Se dice que un programa de computadora aprende de la experiencia **E** respecto a alguna tarea **T** y alguna medida de desempeño **P**, si su desempeño en **T**, medido por **P**, mejora con la experiencia **E**”*

Tom Mitchell, 1997

Breve revisión histórica del Aprendizaje Automático

- **1943.** *Neurona McCulloch-Pitts* (germen del perceptrón)
- **1950.** Test de Turing
- **1952.** Primer programa competitivo de juegos de mesa (juego de damas)
- **1956.** Se acuñan el término *Artificial Intelligence* (1956) (El término *Machine Learning* se acuña en 1959)
- **1958.** Rosenblatt describe los detalles del perceptrón
- **1966.** El primer chatbot Eliza
- **Década de los 70s: 1er invierno de la IA**
- **Década de los 80:** proliferación y éxito de los Sistemas Expertos  Modelos basados en conocimiento
- **1982.** Método *backpropagation* en su forma estándar (perceptrón multicapa)
- **1989.** Algoritmo Q-learning (Aprendizaje por Refuerzo)
- **Década de los 90s: 2do invierno de la IA (1997.** Deep Blue)
- **2006.** Se acuña el término *deep learning*: inicio de la explosión de las CNNs (imagen) y RNN-LSTM (lenguaje)
- **2015 y 2017** Deep Mind: algoritmo DQN alcanza nivel humano en juegos Atari -> AlphaZero: Ajedrez, Shogi, Go
- **2017 y 2018.** Google presenta la arquitectura *transformer* y la aplica a BERT (el primer LLM)
- **[2019-2023].** OpenAI lanza GPT-2, generador de imágenes Dall-E, chatGPT (GPT-3.5) y GPT-4



Modelos
basados en
Datos

Taxonomía

- Aprendizaje supervisado
- Aprendizaje no supervisado
- Aprendizaje por refuerzo
- Aprendizaje evolutivo

Taxonomía

- Aprendizaje supervisado
 - Clasificación
 - Regresión
- Aprendizaje no supervisado
 - Agrupación
 - Reducción de características
- Aprendizaje por refuerzo
- Aprendizaje evolutivo

x_1	x_2	x_3	...	x_n	Clase
*	*	*	...	*	#
*	*	*	...	*	#
*	*	*	...	*	#
*	*	*	...	*	#
*	*	*	...	*	#
*	*	*	...	*	#
*	*	*	...	*	#

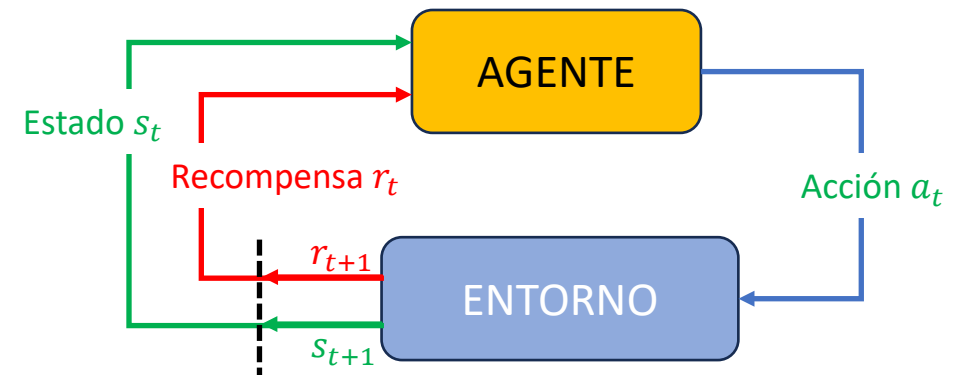
Taxonomía

- Aprendizaje supervisado
- Aprendizaje no supervisado
 - Agrupación
 - Reducción de características
- Aprendizaje por refuerzo
- Aprendizaje evolutivo

x_1	x_2	x_3	...	x_n	Clase
*	*	*	...	*	
*	*	*	...	*	
*	*	*	...	*	
*	*	*	...	*	
*	*	*	...	*	
*	*	*	...	*	
*	*	*	...	*	

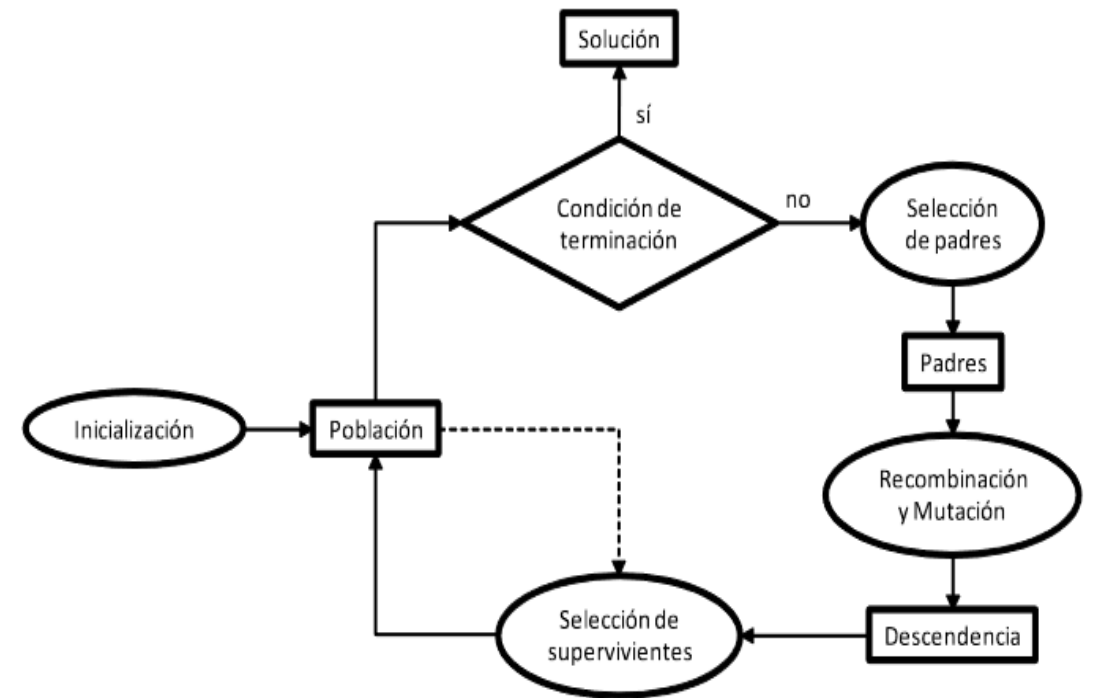
Taxonomía

- Aprendizaje supervisado
- Aprendizaje no supervisado
- **Aprendizaje por refuerzo**
 - Conducción autónoma
 - Robótica
 - Juegos: Ajedrez, Go, Atari
- Aprendizaje evolutivo



Taxonomía

- Aprendizaje supervisado
- Aprendizaje no supervisado
- Aprendizaje por refuerzo
- Aprendizaje evolutivo
 - Preprocesado
 - Sintonización de hiperparámetros de modelos de AA
 - Optimización de la arquitectura del modelo de AA
 - AutoML
 - Neuroevolución
 - [...]
 - Posprocesado



Contenido

- Introducción
- El AA explicado en ocho pasos
 - Definición del problema
 - Recolección de datos
 - Preparación de datos
 - Elección del modelo
 - Entrenamiento del modelo
 - Evaluación del modelo
 - Ajuste de hiperparámetros del modelo
 - Uso del modelo
- La importancia de los datos
- Métricas para caracterizar el desempeño de modelos
- Técnicas para predecir las prestaciones de un modelo

1er paso: Definición del problema

Predecir el éxito o fracaso de un alumno de la UCM durante su primer año de estudios **en función de** la nota de acceso y de la dedicación al estudio

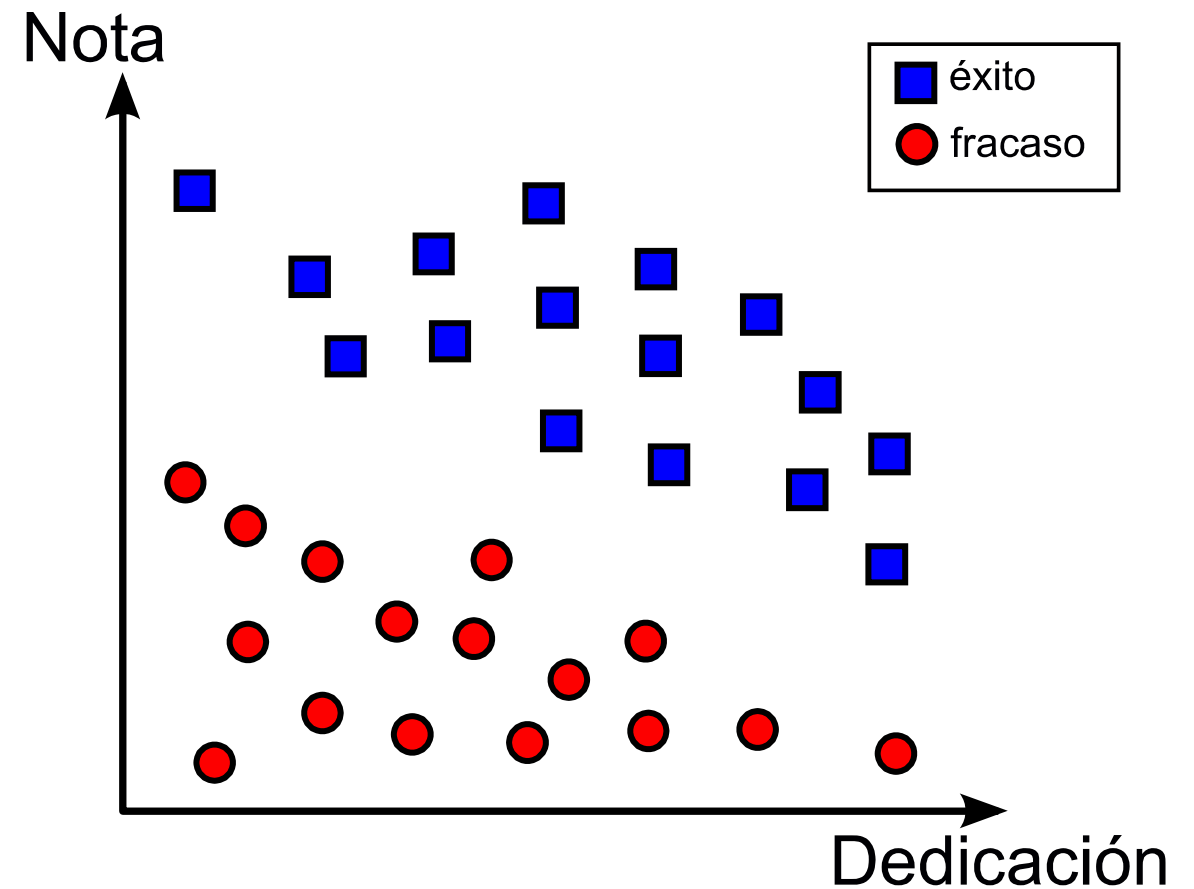


2do paso: Recolección de datos

Nota Acceso Universidad	Dedicación (horas/semana)	¿Éxito o fracaso?
5.1	5	<i>fracaso</i>
7.2	25	<i>éxito</i>
12.3	10	<i>éxito</i>
...	...	..

3er paso: Preparación de datos

- Visualización de los datos
- Preprocesado de datos



4º paso: Elección del modelo

- Tipo tarea implicada en el problema
 - Clasificación
 - Regresión
 - Agrupamiento
 - ...
- Tolerancia al ruido
- Tamaño conjunto datos (escalabilidad)
- Interpretabilidad
- ...

4º paso: Elección del modelo

- Tipo tarea implicada en el problema

- Clasificación



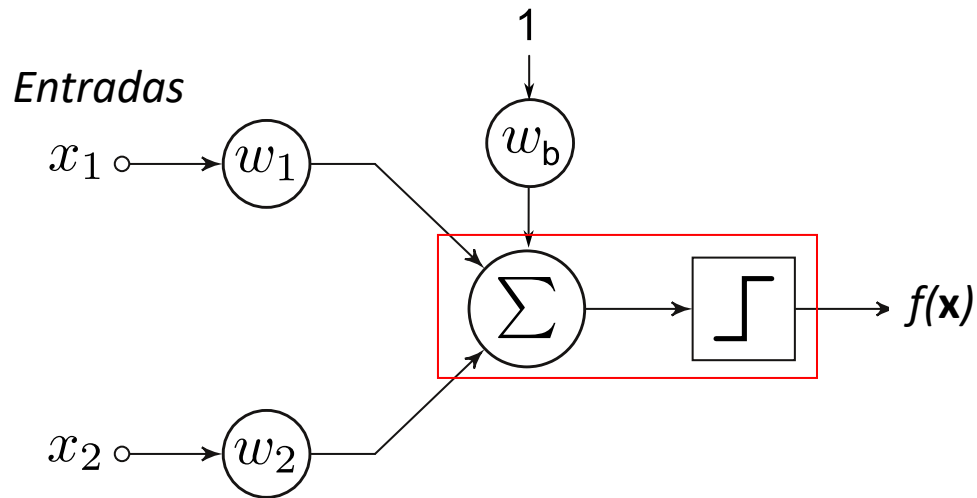
Perceptrón de 2 entradas

- Regresión
 - Agrupamiento
 - Ensayo y error...

- Tolerancia al ruido
- Escalabilidad (tamaño conjunto datos)
- Interpretabilidad
- ...

4º paso: Elección del modelo (perceptrón)

Perceptrón de 2 entradas



Función de decisión:

$$f(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } x_1 * w_1 + x_2 * w_2 + w_b > 0 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Hiperplano: $x_1 * w_1 + x_2 * w_2 + w_b = 0$

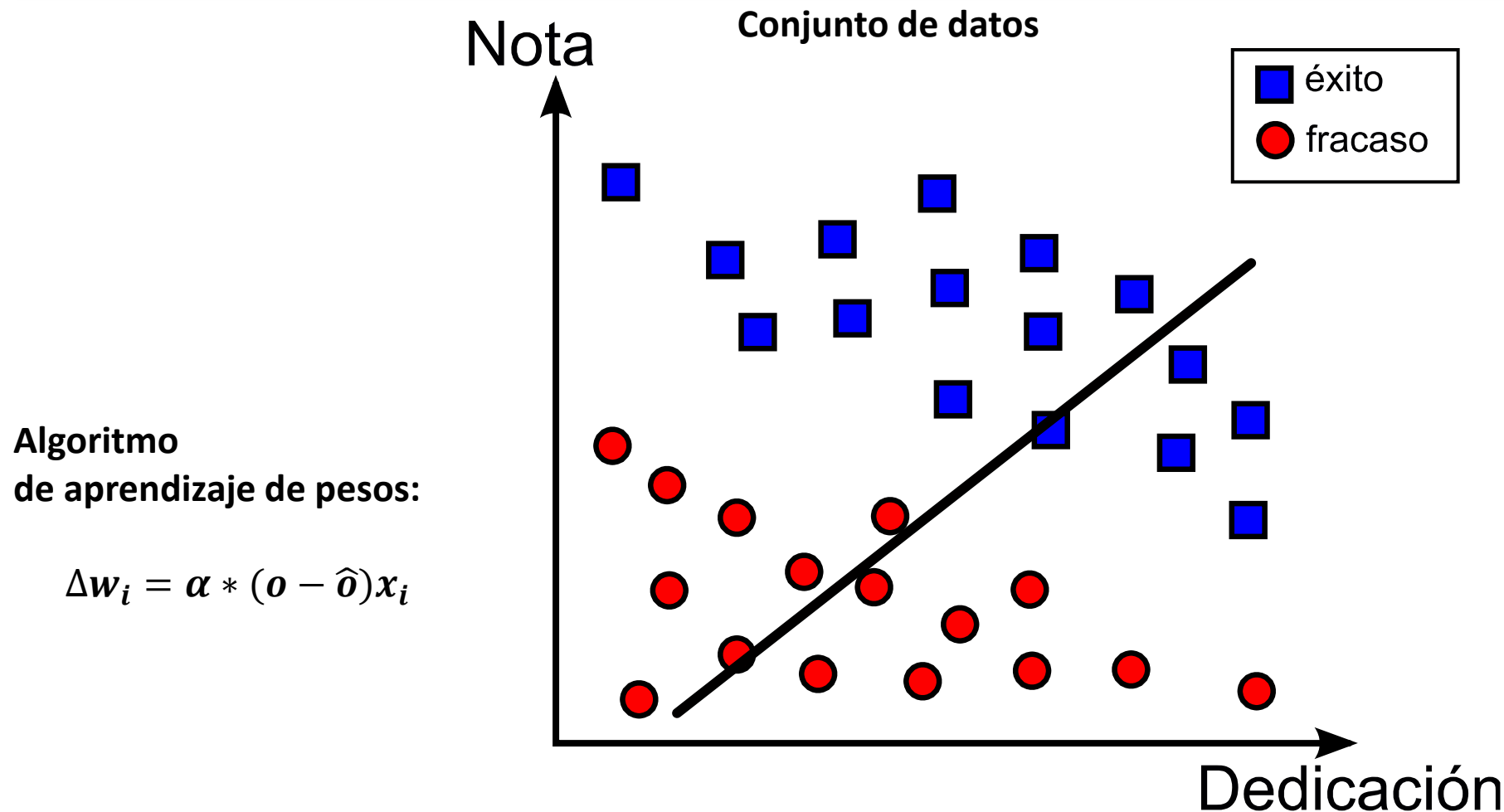
Modelo equivalente (Ec. de una recta):

$$y = \mathbf{m} * \mathbf{x} + \mathbf{b}, \text{ donde}$$

$$m = -(w_2/w_1)$$

$$b = -(w_b/w_1)$$

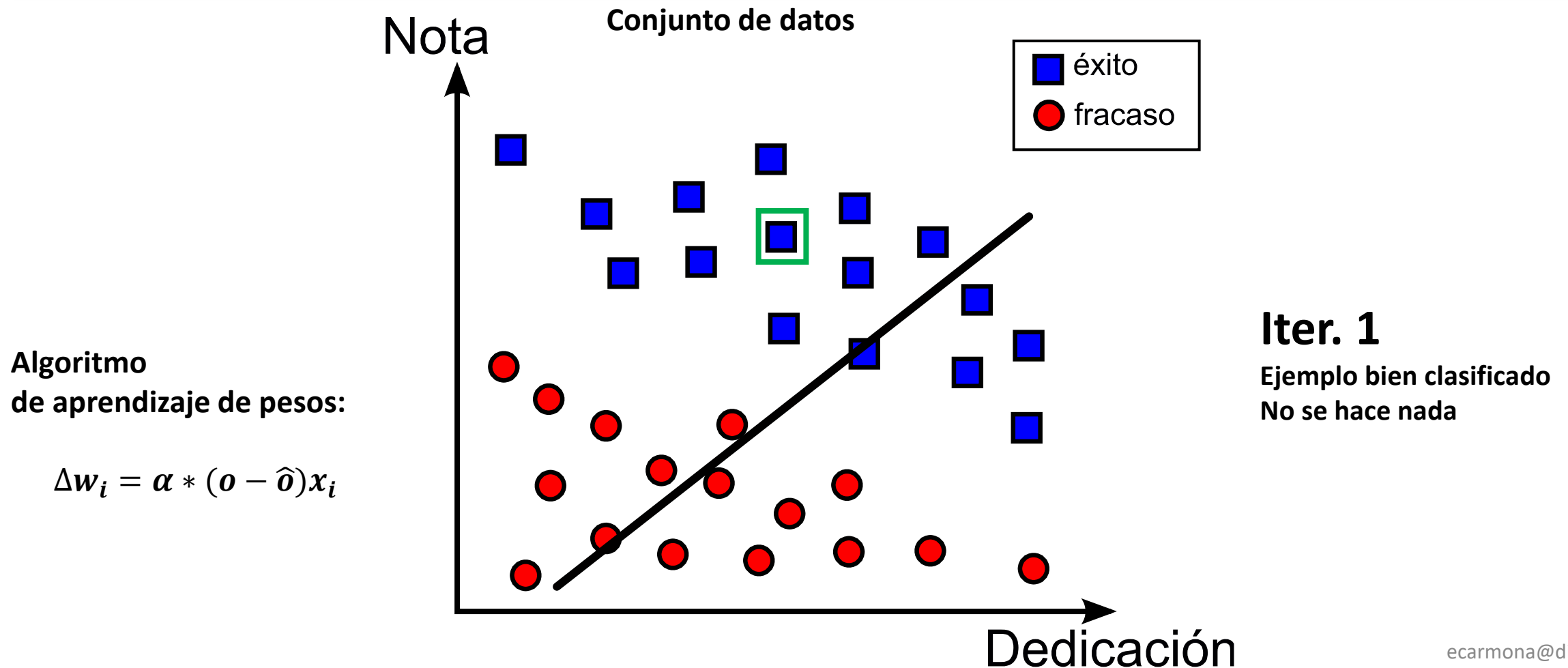
5º paso: Entrenamiento del modelo



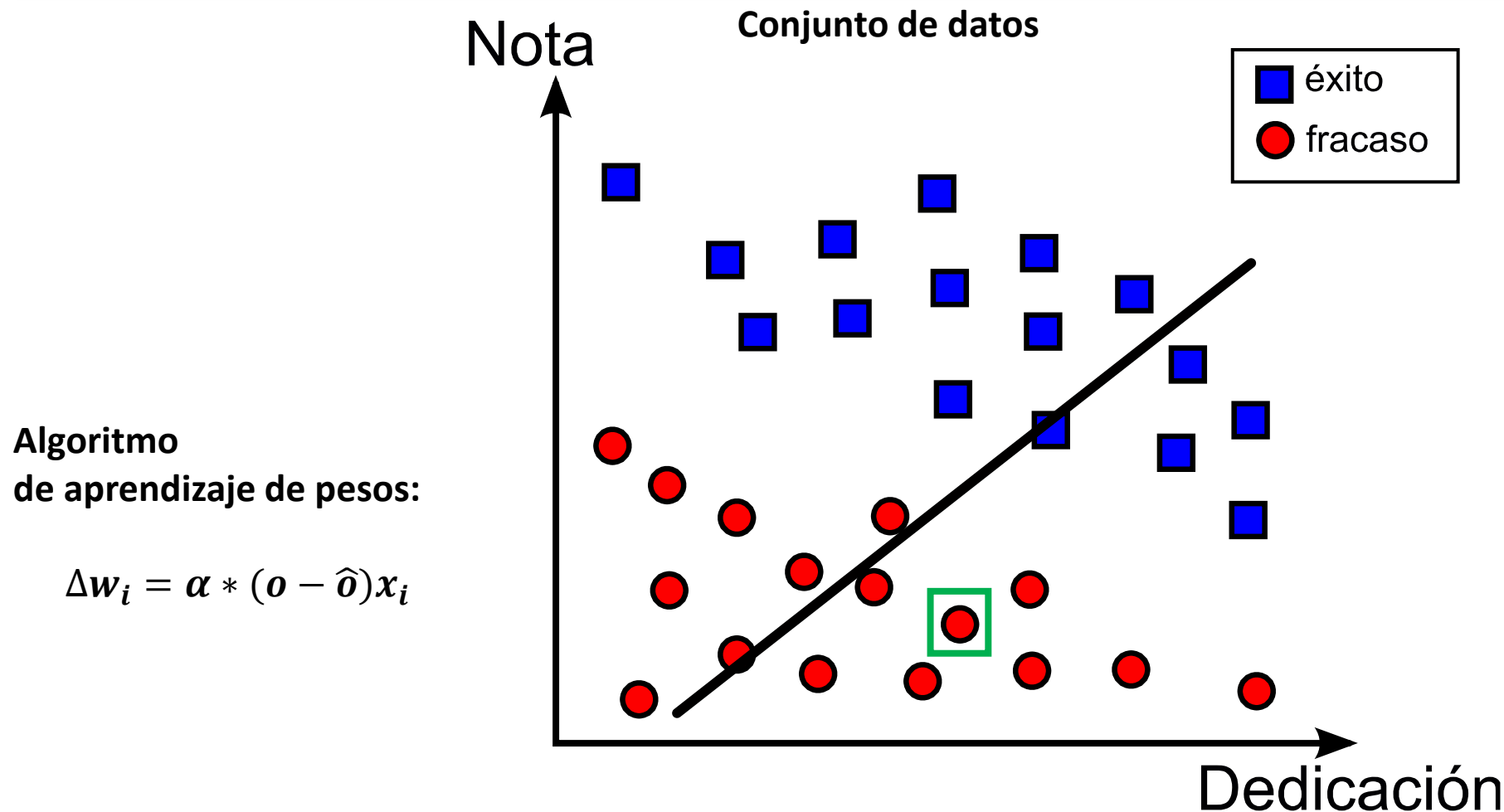
Iteración 0

- Inicialización aleatoria:
 $[w_1, w_2, w_b]$
- Iteraciones=40
- $\alpha = 1$

5º paso: Entrenamiento del modelo



5º paso: Entrenamiento del modelo



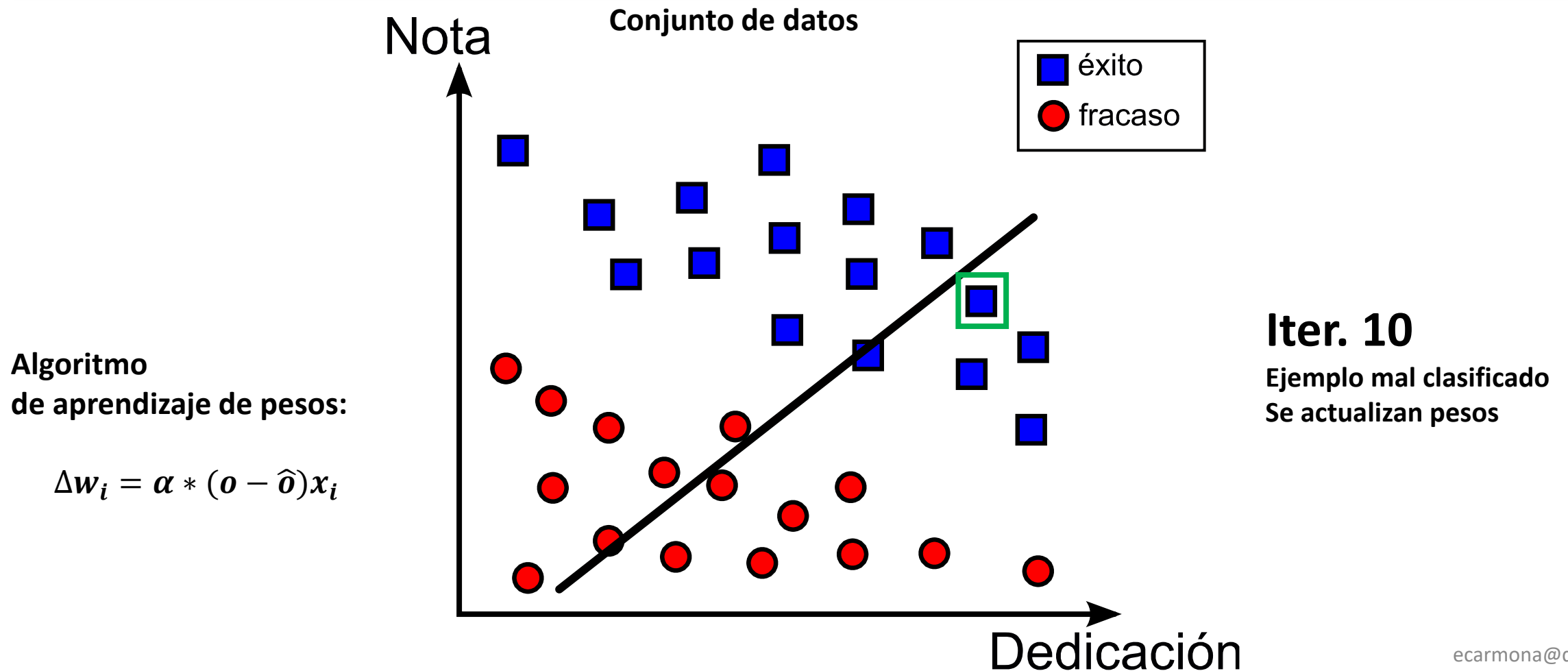
Iter. 2

Ejemplo bien clasificado
No se hace nada

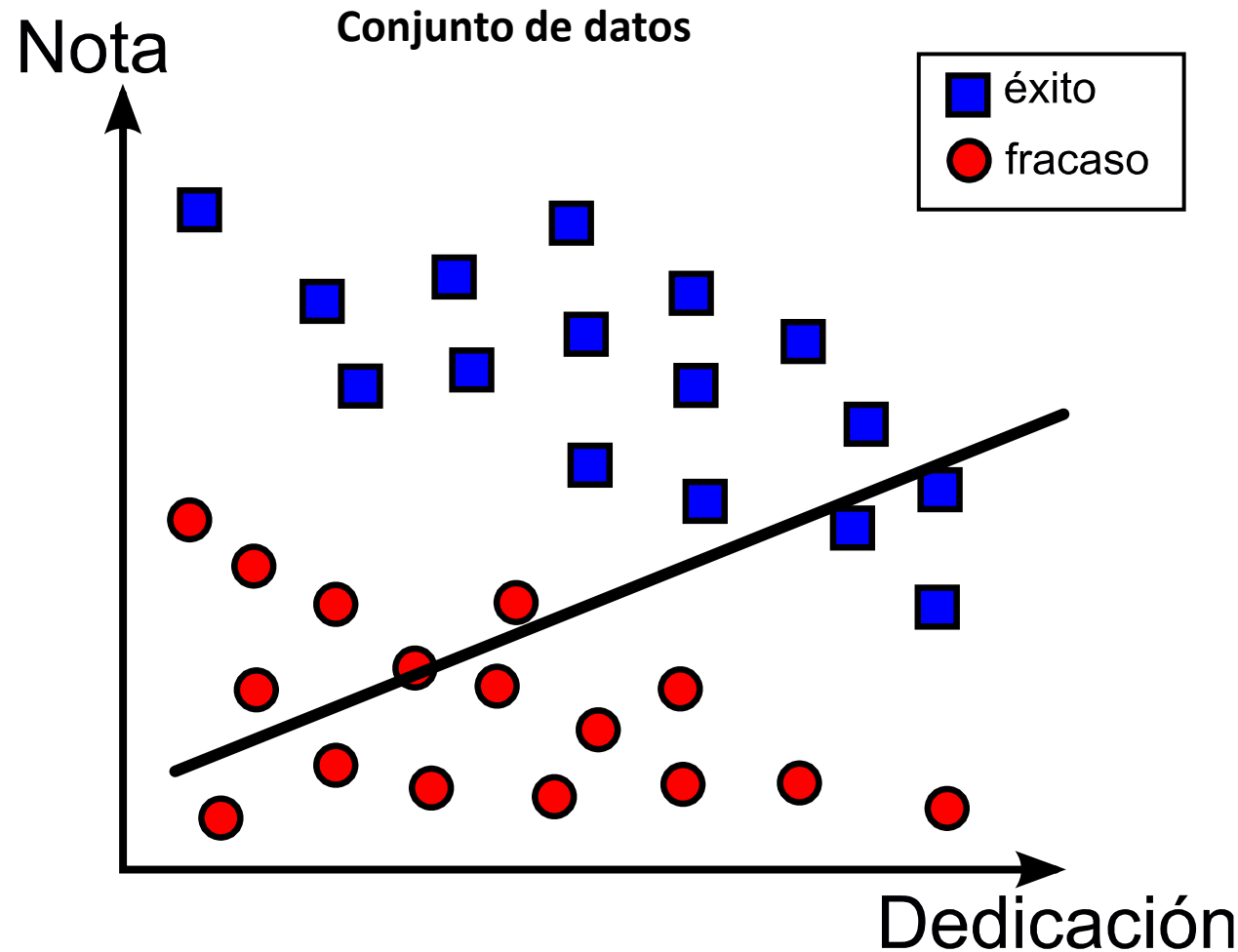


Iter. 3, 4,... 9 ocurre lo mismo

5º paso: Entrenamiento del modelo



5º paso: Entrenamiento del modelo

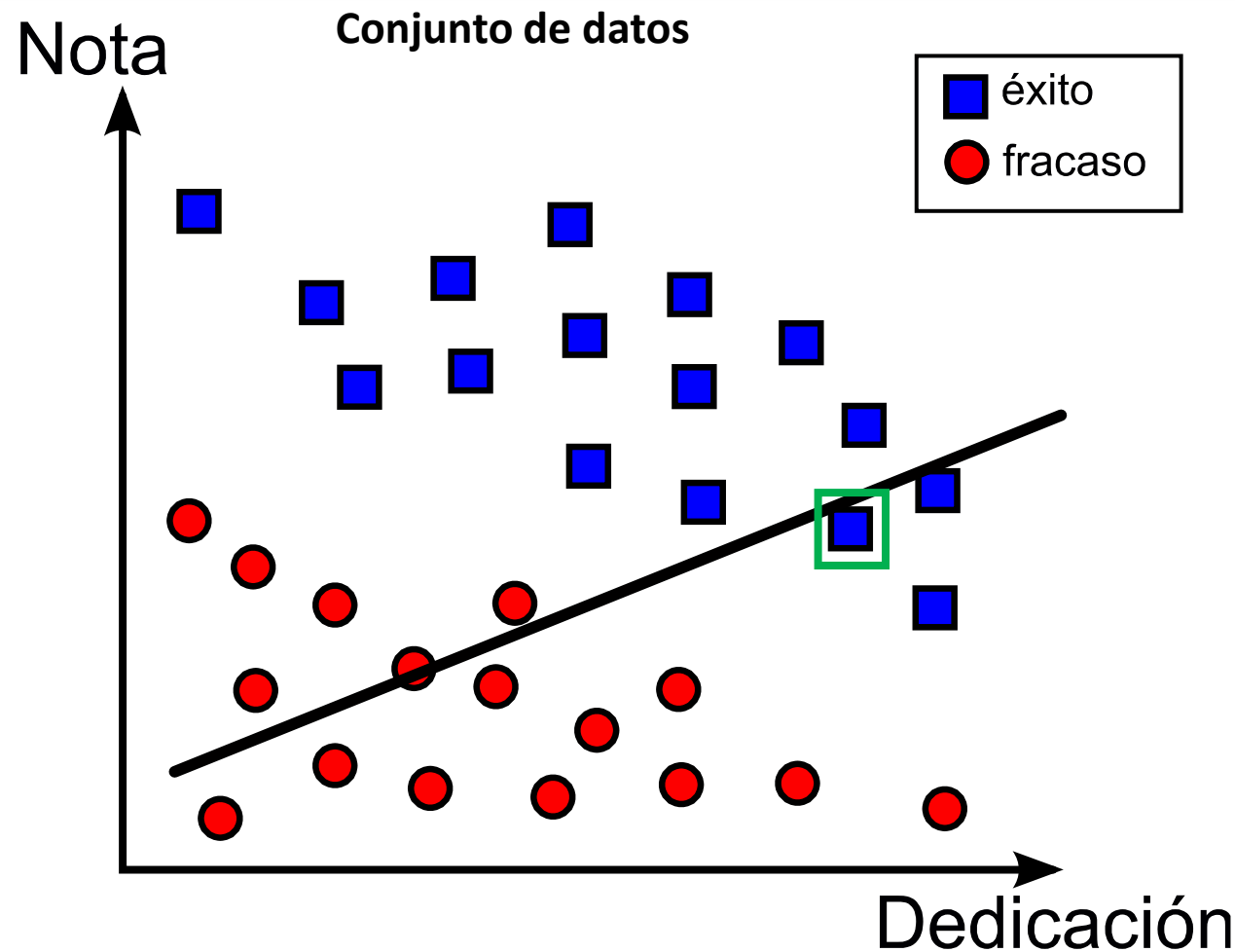


Iter. 10



Iter. 11,..., 19
Ejemplos bien clasificados
No se hace nada

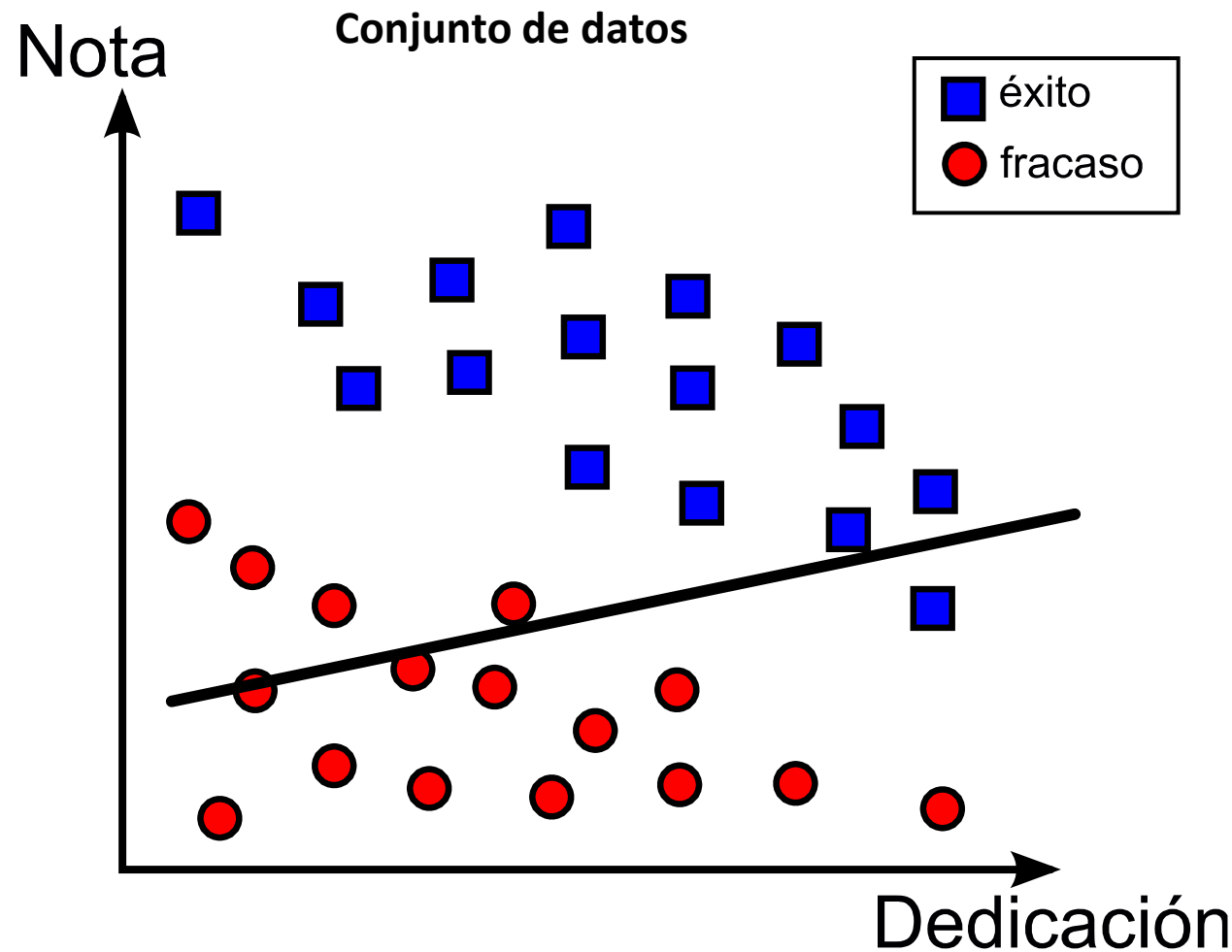
5º paso: Entrenamiento del modelo



Iter. 20

Ejemplo mal clasificado
Se actualizan pesos

5º paso: Entrenamiento del modelo

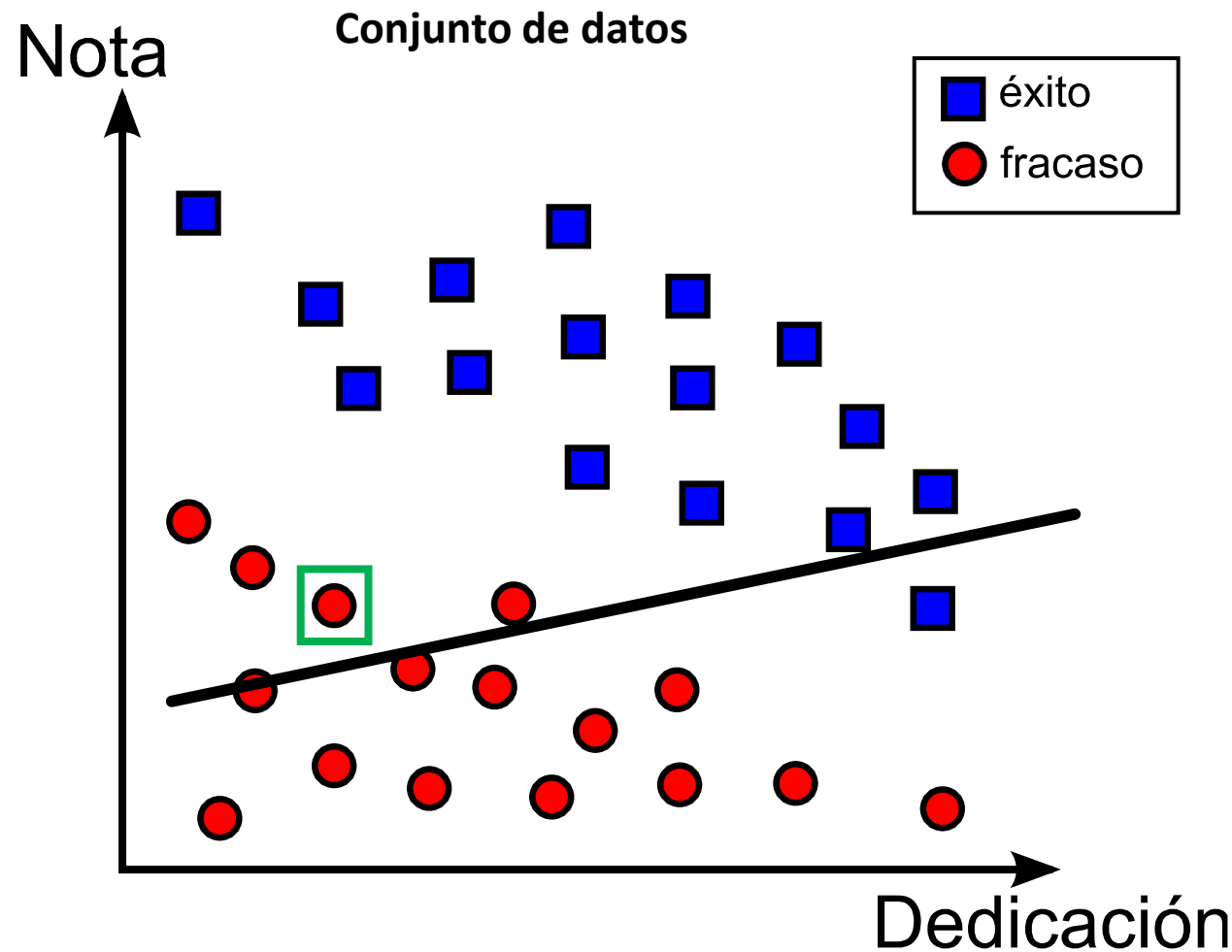


Iter. 20



Iter. 21,..., 29
Ejemplos bien clasificados
No se hace nada

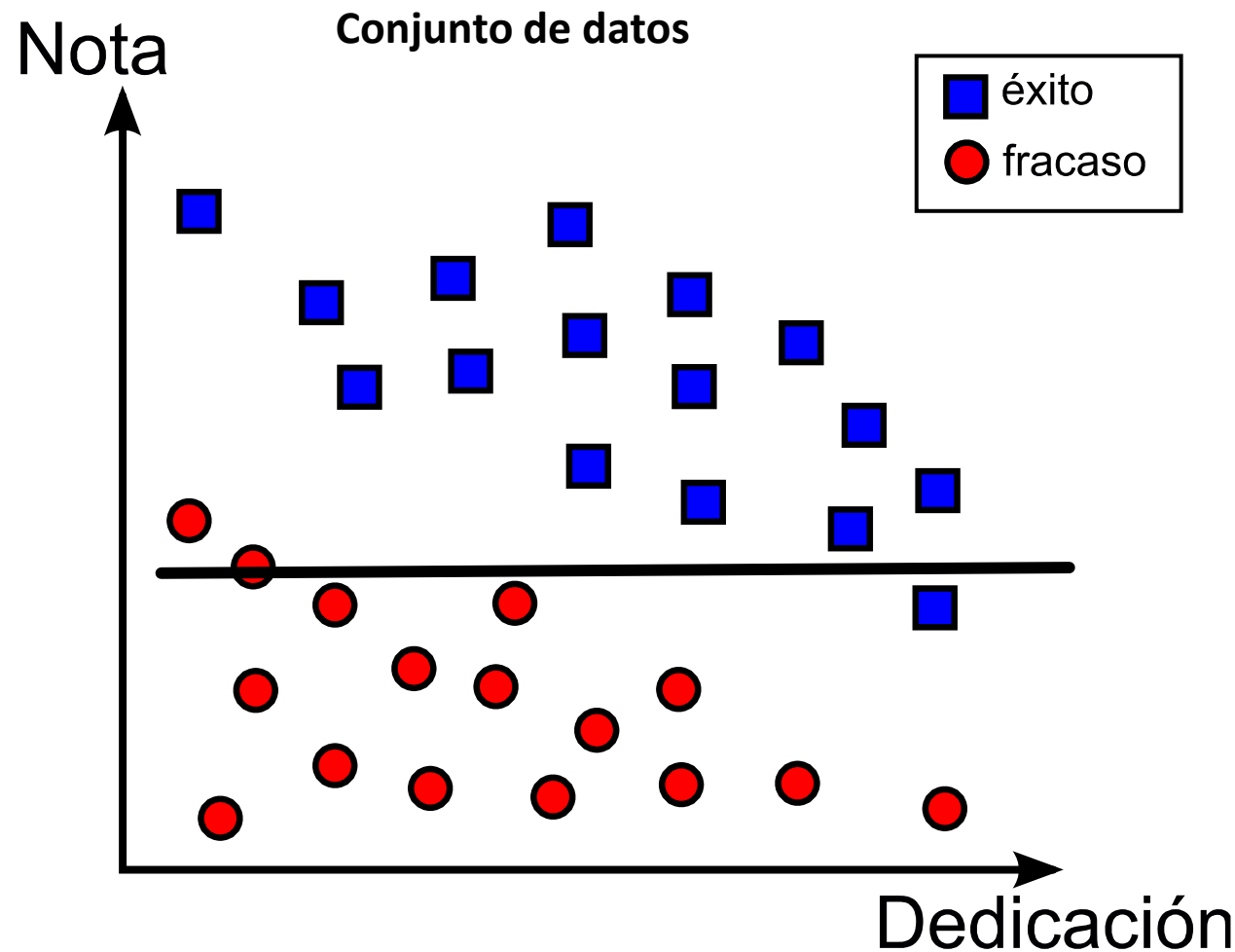
5º paso: Entrenamiento del modelo



Iter. 30

Ejemplo mal clasificado
Se actualizan pesos

5º paso: Entrenamiento del modelo

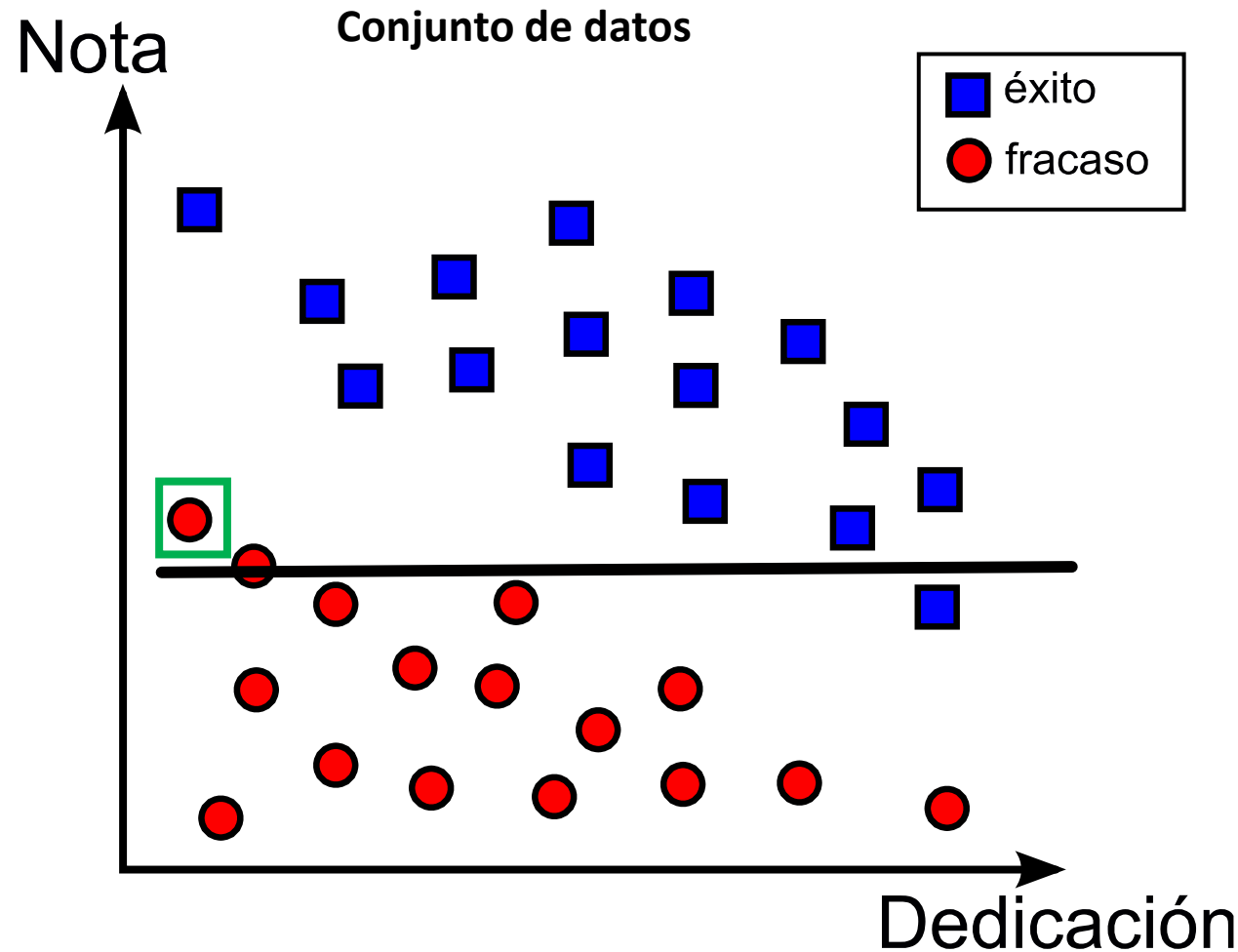


Iter. 30



Iter. 31,..., 39
Ejemplos bien clasificados
No se hace nada

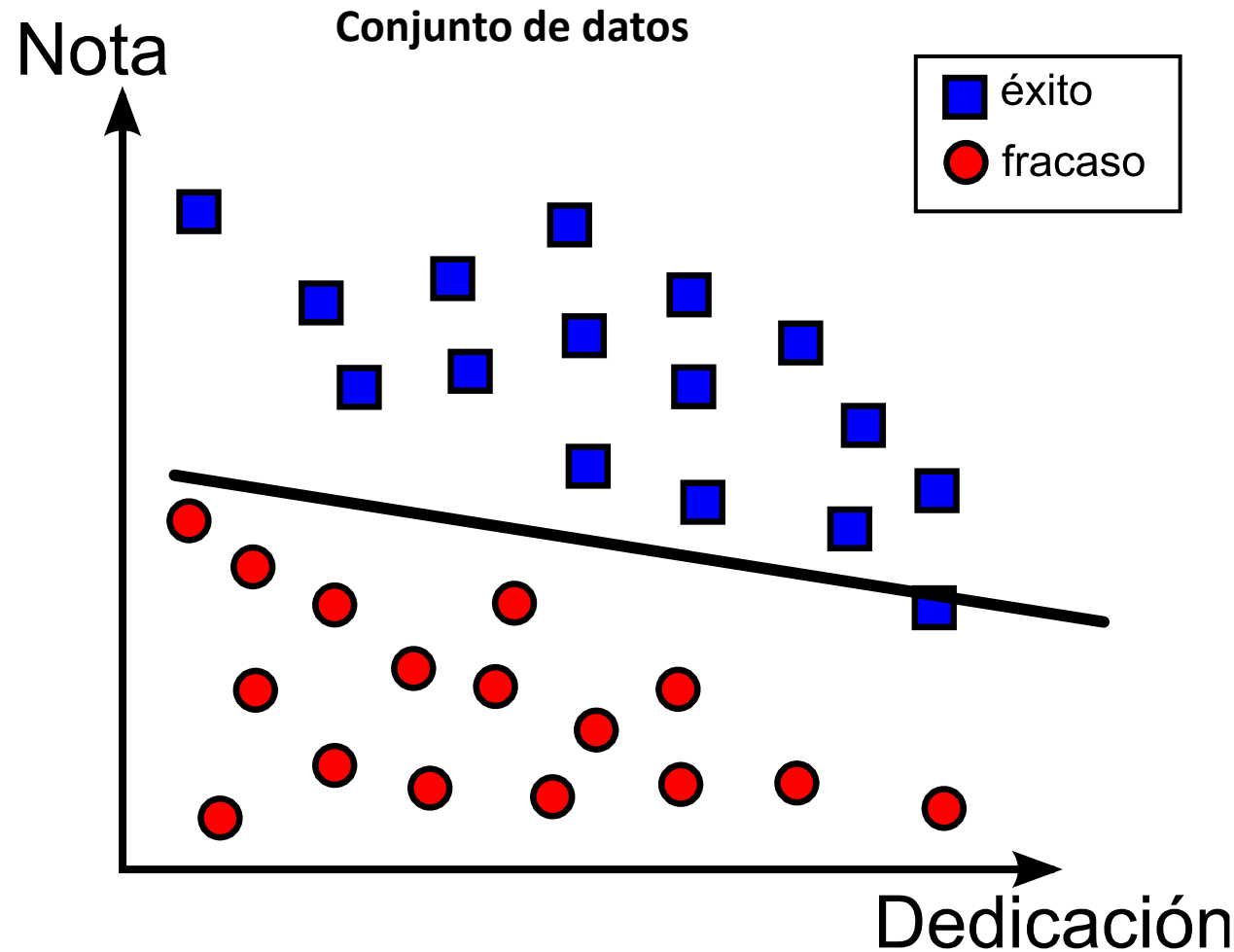
5º paso: Entrenamiento del modelo



Iter. 40

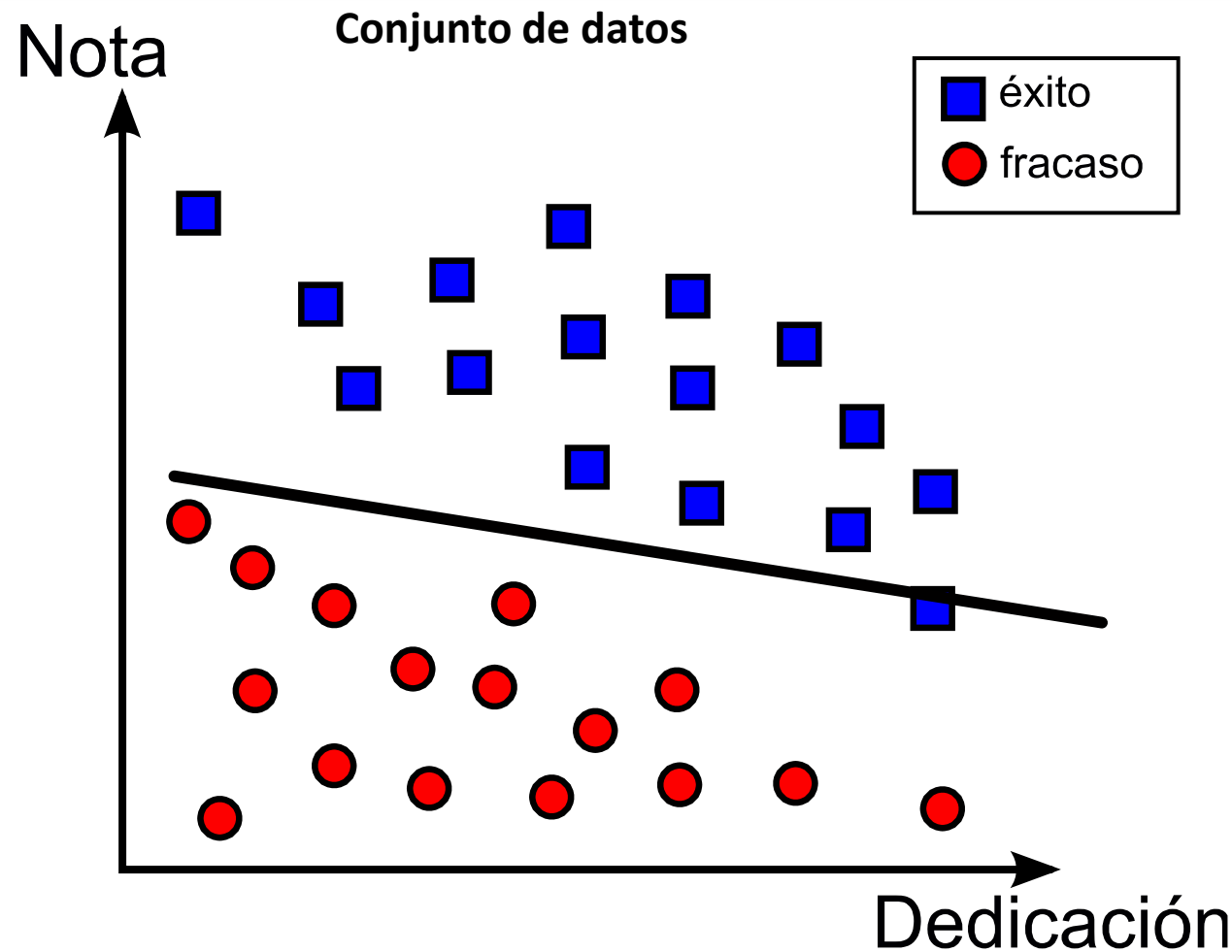
Ejemplo mal clasificado
Se actualizan pesos

5º paso: Entrenamiento del modelo



Iter. 40
Fin del entrenamiento

6º paso: Evaluación del modelo



Nº errores: 1
Accuracy: 96.9%

7º paso: Ajuste de hiperparámetros del modelo

Parámetros del modelo

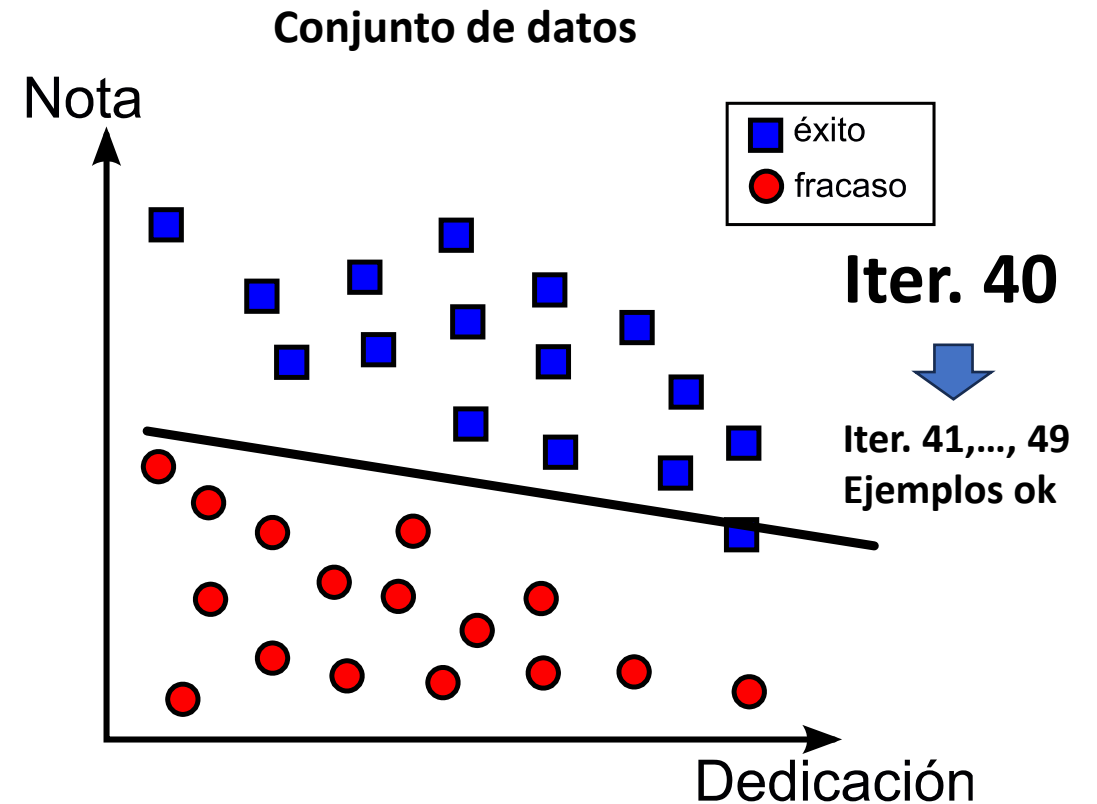
- Intrínsecos: $[w_1, w_2, w_b]$
- Extrínsecos (hiperparámetros) 
 - Nº de iteraciones
 - Tasa de aprendizaje
 - Configuración inicial de parámetros intrínsecos

Ajuste de hiperparámetros

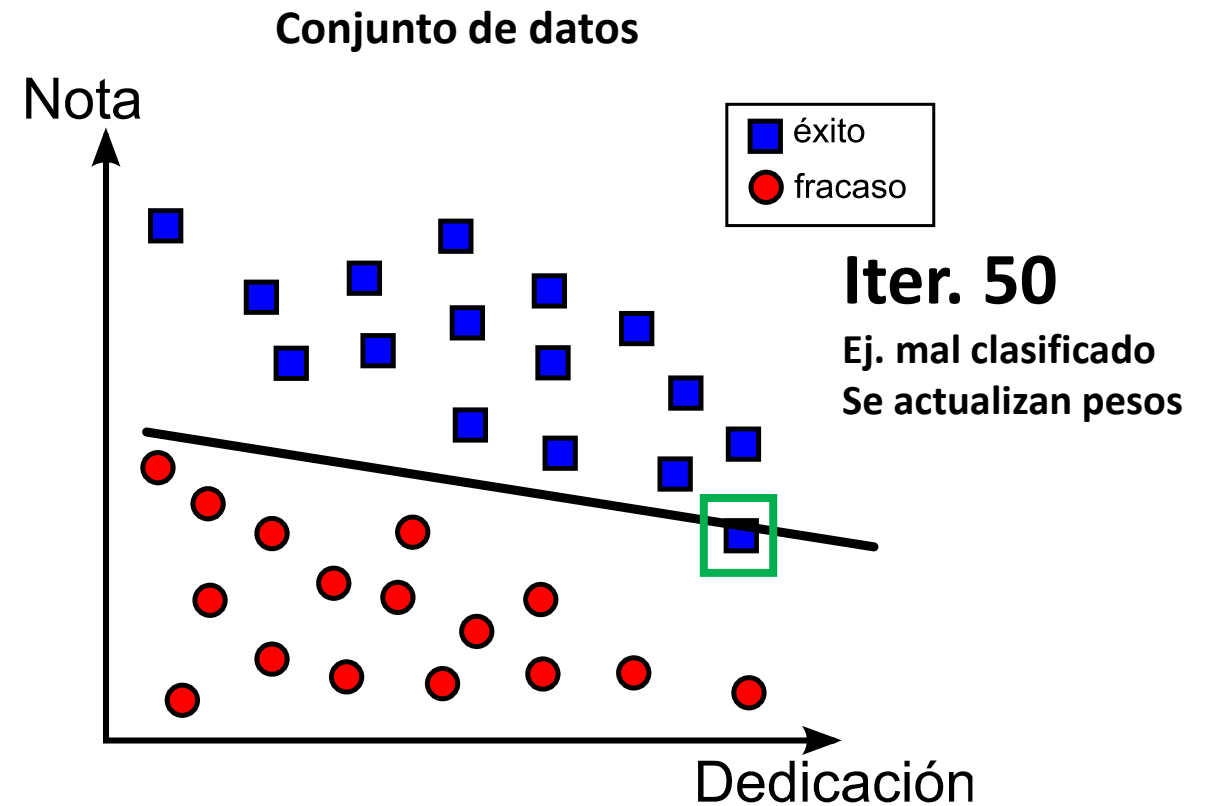
- Ensayo y error (es un arte)
- Depende de...
 - Conjunto de datos
 - Modelo
 - Proceso de entrenamiento

7º paso: Ajuste de hiperparámetros del modelo

Volvamos donde lo dejamos y apliquemos 10 iteraciones más



7º paso: Ajuste de hiperparámetros del modelo



7º paso: Ajuste de hiperparámetros del modelo

Iter. 40

Nº errores: 1

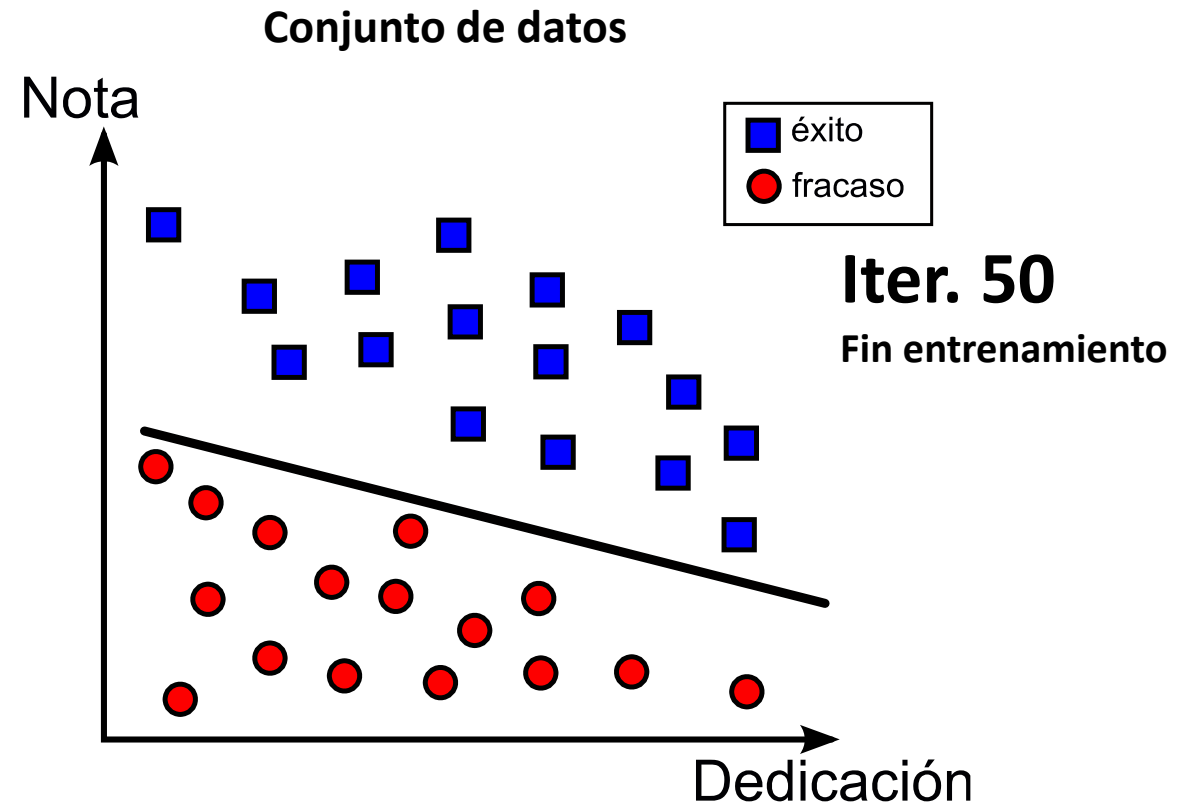
Accuracy: 96.9%



Iter. 50

Nº errores: 0

Accuracy: 100%



8º paso: Uso del modelo

Dado el modelo aprendido, *Perceptrón*, o su modelo equivalente: $y = -0.2x + 6.9$

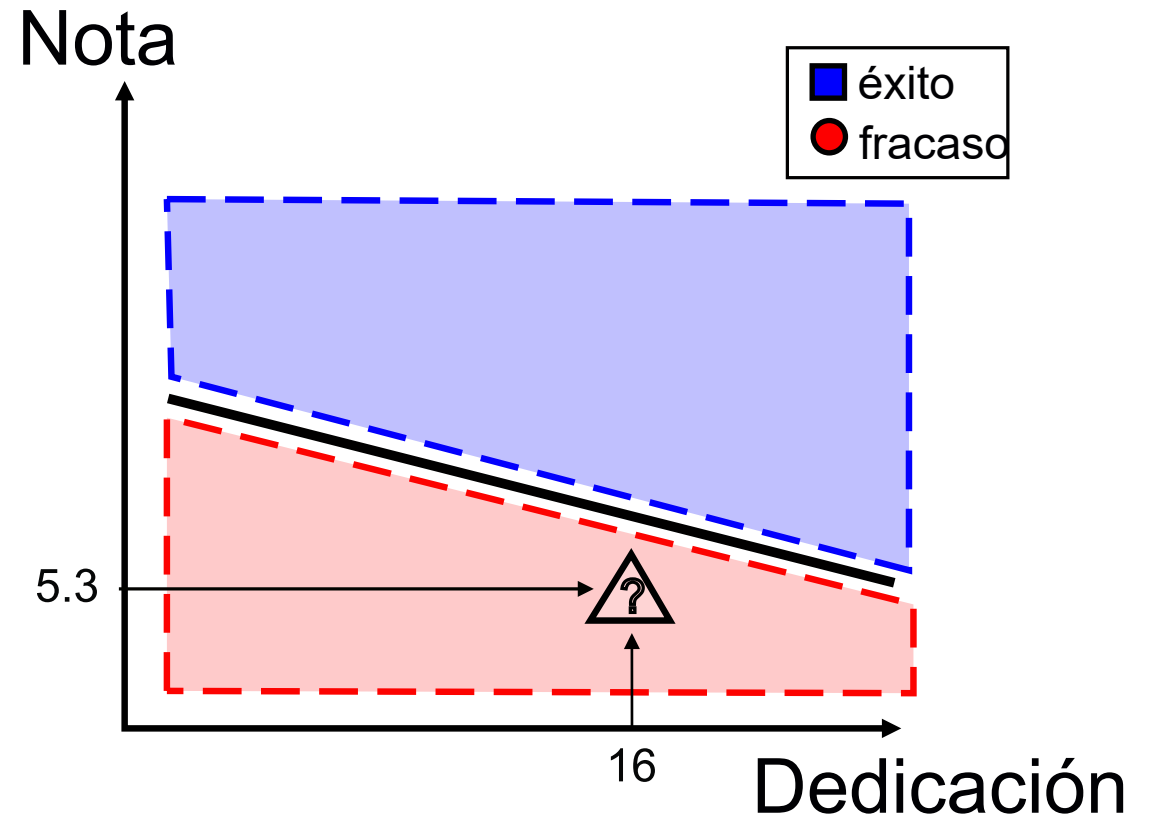
Usarlo en una aplicación, con el interfaz adecuado, para predecir el éxito/fracaso académico de los alumnos:

Alumno-1= (5.3, 16 h/sem)

Alumno-2= (7.2, 20 h/sem)

Alumno-3= (9.4, 23 h/sem)

[...]



Contenido

- Introducción
- El AA explicado en ocho pasos
- **La importancia de los datos**
- Métricas para caracterizar el desempeño de modelos
- Técnicas para predecir las prestaciones de un modelo

Características ideales de los datos a aprender

- Los datos usados para aprender deberán:
 - Ser representativos de los datos que se aplicarán al modelo aprendido en producción
 - Tamaño de datos demasiado pequeño → error de muestreo
 - Aun con tamaño de datos grande → sesgo de muestreo
 - Evitar desequilibrios en los datos (clases desbalanceadas)
 - Ser de buena calidad
 - Errores en los datos (ruido)
 - Valores atípicos
 - Datos faltantes o duplicados
 - Ser preparados adecuadamente
 - Aleatorización del orden
 - Normalización
 - Generación de nuevos datos
 - Estar basados en características discriminantes
 - Técnicas para reducción de la dimensionalidad
 - Técnicas para creación de nuevas características

Características ideales de los datos a aprender

- Los datos usados para aprender deberán:
 - Ser representativos de los datos que se aplicarán al modelo aprendido en producción
 - Tamaño de datos demasiado pequeño → error de muestreo
 - Aun con tamaño de datos grande → sesgo de muestreo
 - Evitar desequilibrios en los datos (clases desbalanceadas)
 - Ser de buena calidad
 - Errores en los datos (ruido)
 - Valores atípicos
 - Datos faltantes o duplicados
 - Ser preparados adecuadamente
 - Aleatorización del orden
 - Normalización
 - Generación de nuevos datos
 - Estar basados en características discriminantes
 - Técnicas para reducción de la dimensionalidad
 - Técnicas para creación de nuevas características

Técnicas de preprocesado de datos

Contenido

- Introducción
- El AA explicado en ocho pasos
- La importancia de los datos
- Métricas para caracterizar el desempeño de modelos
 - Regresión
 - Clasificadores binarios
 - Clasificadores multiclase
- Técnicas para predecir las prestaciones de un modelo

Métricas en regresión

- RMSE: distancia euclídea (norma ℓ_2)
- MAE: distancia Manhattan (norma ℓ_1)
- Norma $\ell_k(\mathbf{v}) \leftarrow \|\mathbf{v}\|_k = (|v_1|^k + \dots + |v_n|^k)^{1/k}$
 - Norma $\ell_0 \leftarrow$ N° de elementos distintos de cero en $\mathbf{v}$
 - Norma $\ell_\infty \leftarrow$ Valor absoluto del máximo en $\mathbf{v}$
- El RMSE es más sensible a los valores atípicos que el MAE

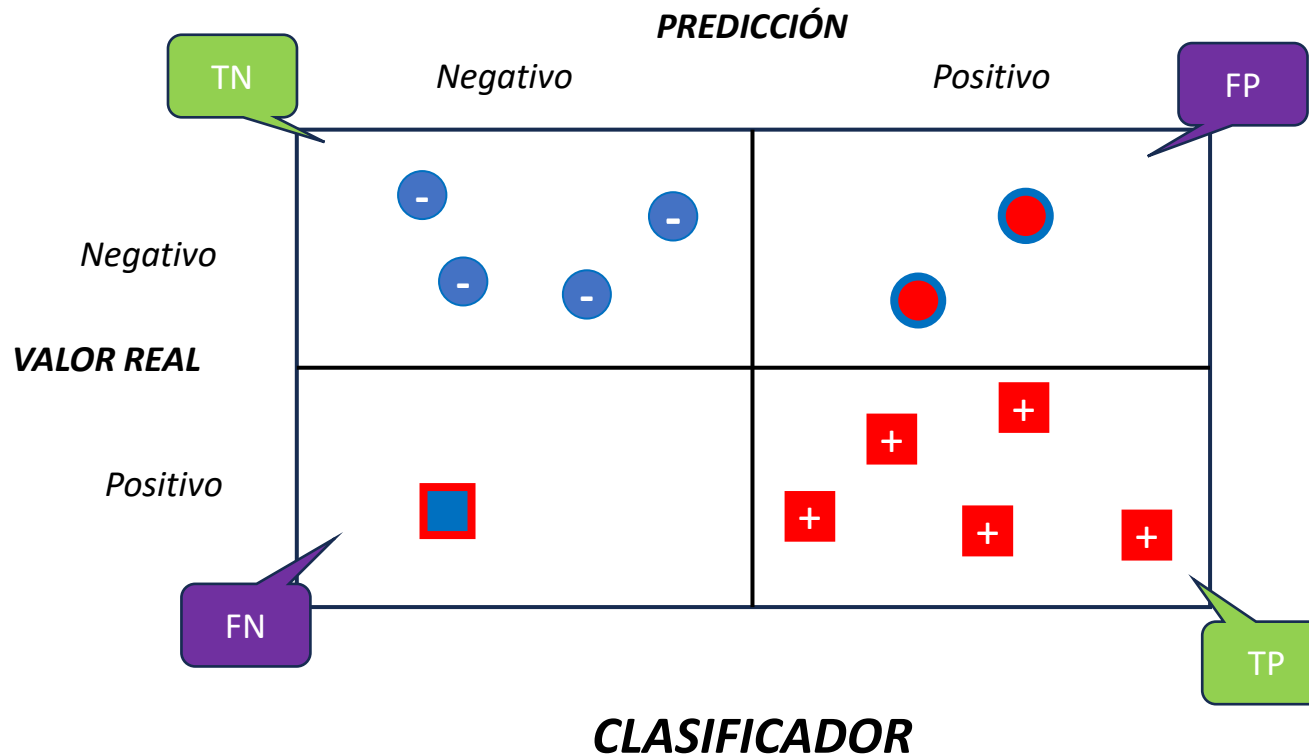
Clasificadores binarios

Matriz de confusión: FP, TP, FN y TN

CONJUNTO DE DATOS

 6 Ejemplos

 6 Ejemplos



Clasificadores binarios

Matriz de confusión: FP, TP, FN y TN

CONJUNTO DE DATOS

 6 Ejemplos

 6 Ejemplos

MATRIZ DE CONFUSIÓN



		PREDICCIÓN	
		Negativo	Positivo
VALOR REAL	Negativo	4	2
	Positivo	1	5

TN (True Negative) points to the cell with value 4.
FP (False Positive) points to the cell with value 2.
FN (False Negative) points to the cell with value 1.
TP (True Positive) points to the cell with value 5.

CLASIFICADOR

Accuracy, prediction y recall

Accuracy: ratio de las predicciones correctas:

$$Accuracy = \frac{\text{correct_predictions}}{\text{all_predictions}} = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$$

		PREDICCIÓN	
		Negativo	Positivo
VALOR REAL	Negativo	1	9
	Positivo	1	89

Datos {
+ 90 Ejemplos
- 10 Ejemplos

$$Acc = 89 + 1 / 100 = 90\%$$

Conclusión: Usar la accuracy sólo si los datos están balanceadas

Accuracy, prediction y recall

Accuracy: ratio de las predicciones correctas:

$$Accuracy = \frac{\text{correct_predictions}}{\text{all_predictions}} = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$$

Precision: es la *ratio* de predicciones positivas correctas:

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

Recall (sensitivity o TPR): es la proporción de instancias positivas que el clasificador predice correctamente:

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

		PREDICCIÓN	
		Negativo	Positivo
VALOR REAL	Negativo	50	0
	Positivo	49	1

Datos {
+ 50 Ejemplos
- 50 Ejemplos

$$Prec = 1 / (1 + 0) = 100\%$$

$$Rec = 1 / (1 + 49) = 2\%$$

F1-score

- **F1-score**: es la *media armónica* de la *precision* and *recall*.

$$F_1 = \frac{2}{\frac{1}{\text{precision}} + \frac{1}{\text{recall}}} = 2 \times \frac{\text{precision} \times \text{recall}}{\text{precision} + \text{recall}} = \frac{TP}{TP + \frac{FN+FP}{2}}$$

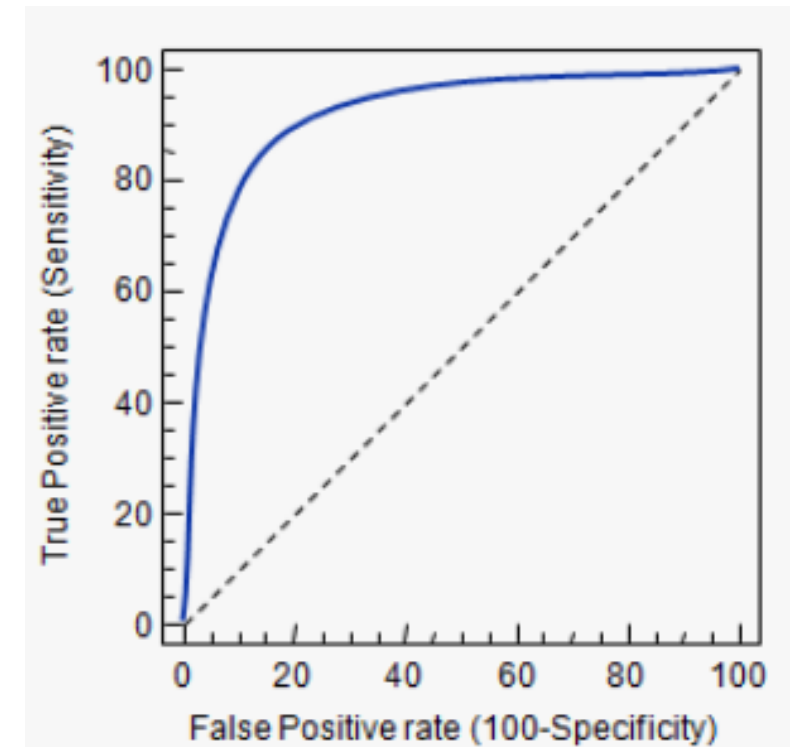
- Si *precision*↓ o *recall*↓, entonces *F1-score*↓
- Ejemplos de buenos o malos clasificadores:
 - Clasificador: 30% de *precision* ($TP/(TP+FP)$) y 99% de *recall* ($TP/(TP+FN)$) → *F1-Score*: 23%
 - Clasificador: 99% de *precision* ($TP/(TP+FP)$) y 40% de *recall* ($TP/(TP+FN)$) → *F1-Score*: 28.5%

Curva ROC (*Receiver Operating Characteristic*)

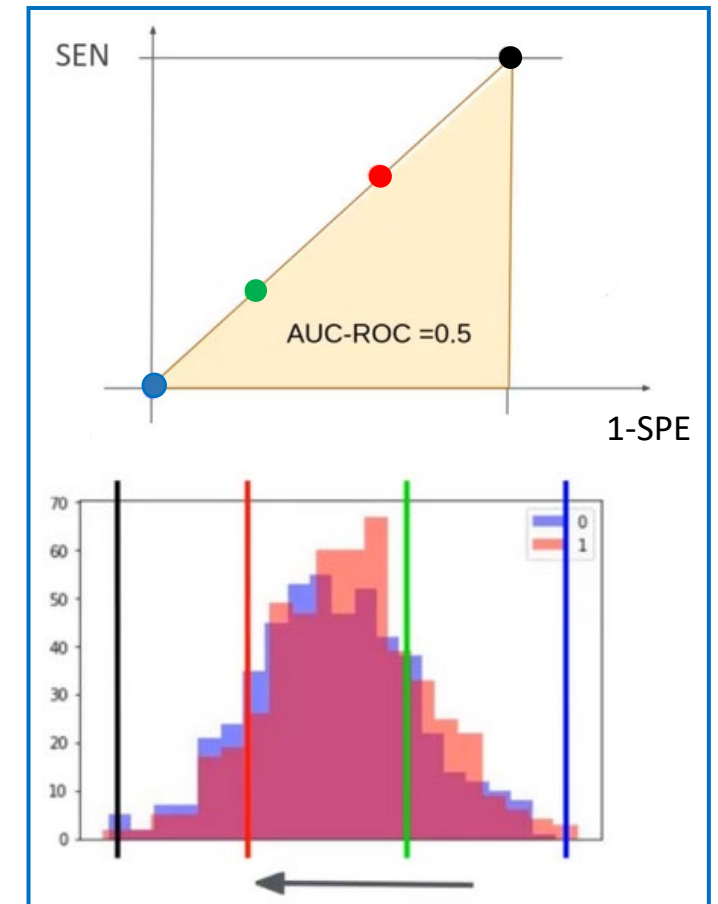
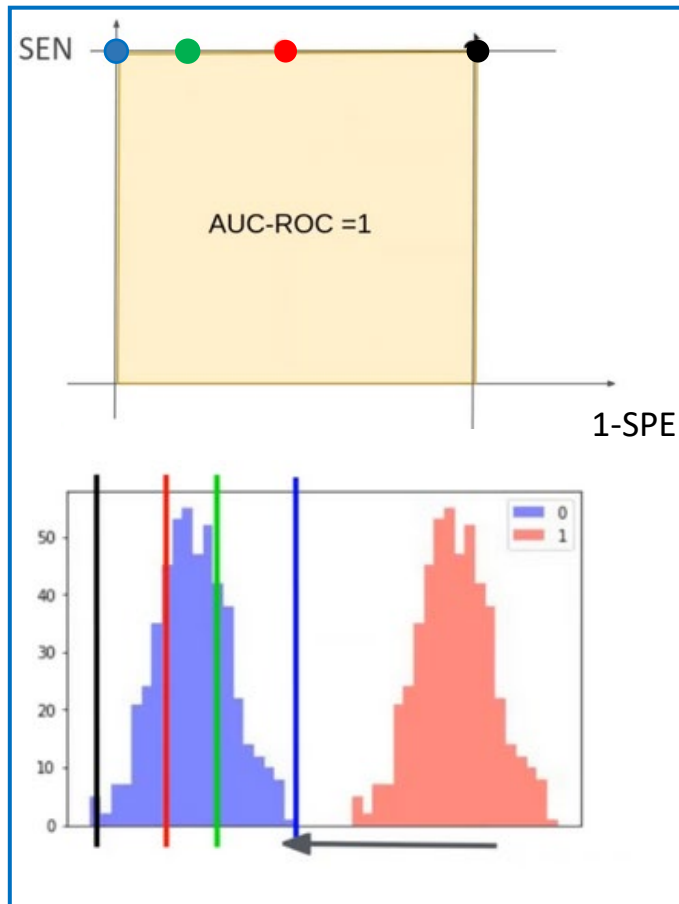
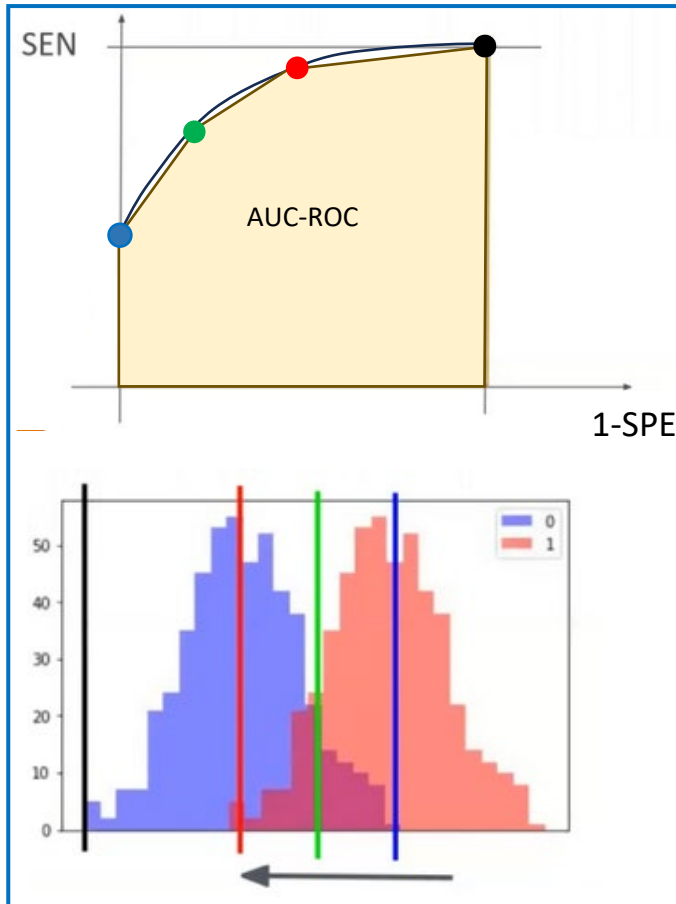
- La curva ROC representa la tasa de instancias positivas clasificadas correctamente (recall o *sensitivity*) vs. (1-*specificity*)
- La *specificity* es la proporción de instancias negativas que se clasifican correctamente:

$$specificity = \frac{TN}{TN + FP}$$

- Una forma de comparar clasificadores es medir el área bajo la curva (AUC)
 - AUC=1 → Clasificador perfecto
 - AUC=0.5 → Clasificador puramente aleatorio



Cómo se construye la curva ROC



Clasificadores multiclase

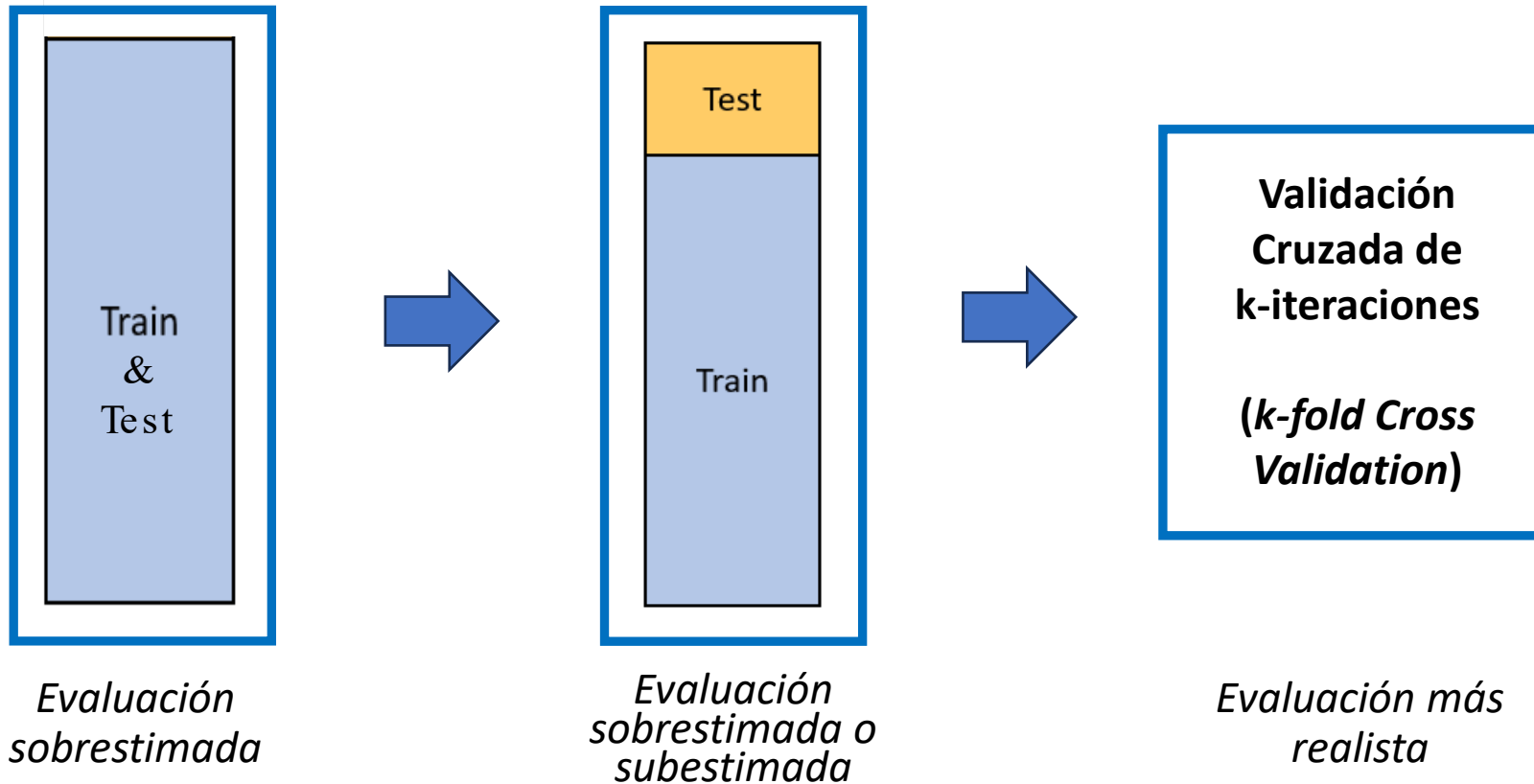
- Matriz de confusión multiclase
- *Recall* y *precision* por cada categoría

											Recall		
True Class	airplane	923	4	21	8	4	1	5	5	23	6	92.3%	7.7%
	automobile	5	972	2					1	5	15	97.2%	2.8%
	bird	26	2	892	30	13	8	17	5	4	3	89.2%	10.8%
	cat	12	4	32	826	24	48	30	12	5	7	82.6%	17.4%
	deer	5	1	28	24	898	13	14	14	2	1	89.8%	10.2%
	dog	7	2	28	111	18	801	13	17		3	80.1%	19.9%
	frog	5		16	27	3	4	943	1	1		94.3%	5.7%
	horse	9	1	14	13	22	17	3	915	2	4	91.5%	8.5%
	ship	37	10	4	4		1	2	1	931	10	93.1%	6.9%
	truck	20	39	3	3			2	1	9	923	92.3%	7.7%

Contenido

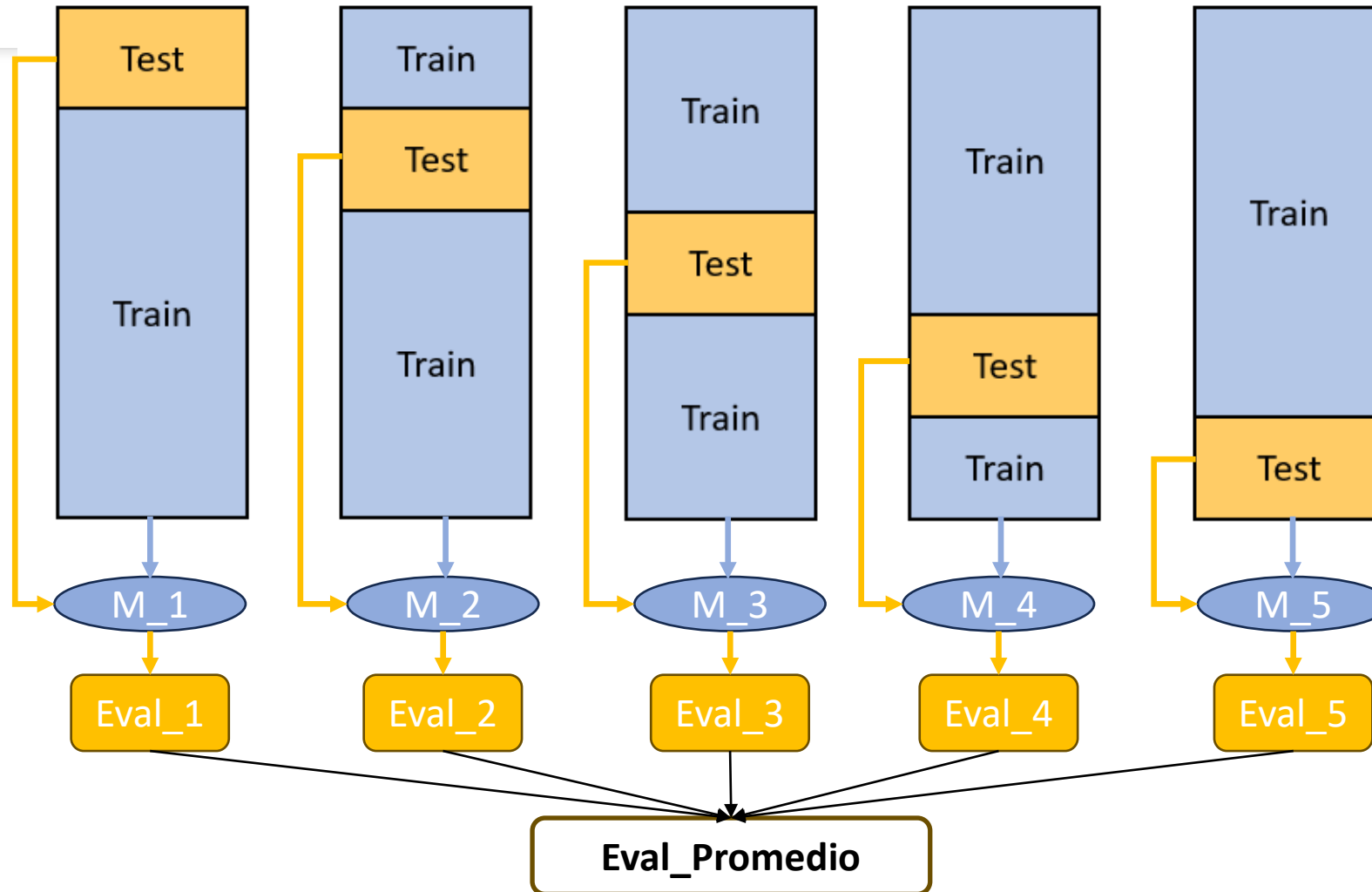
- Introducción
- El AA explicado en ocho pasos
- La importancia de los datos
- Métricas para caracterizar el desempeño de modelos
- Técnicas para predecir las prestaciones de un modelo
 - Training&test
 - Validación cruzada de n -iteraciones
 - Considerando los hiperparámetros en la evaluación
 - Validación cruzada anidada de k - p -iteraciones
 - Evaluando con bases de datos de gran tamaño

Training & Test

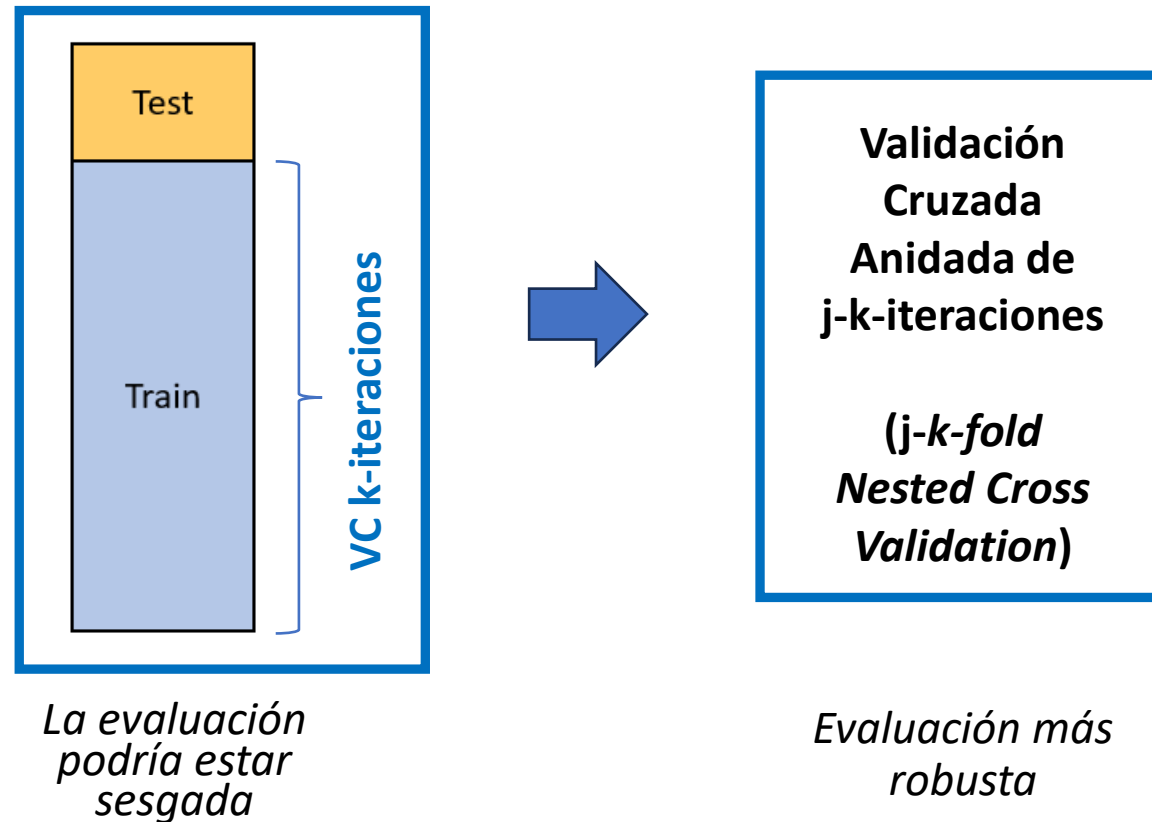


Validación cruzada de k-iteraciones

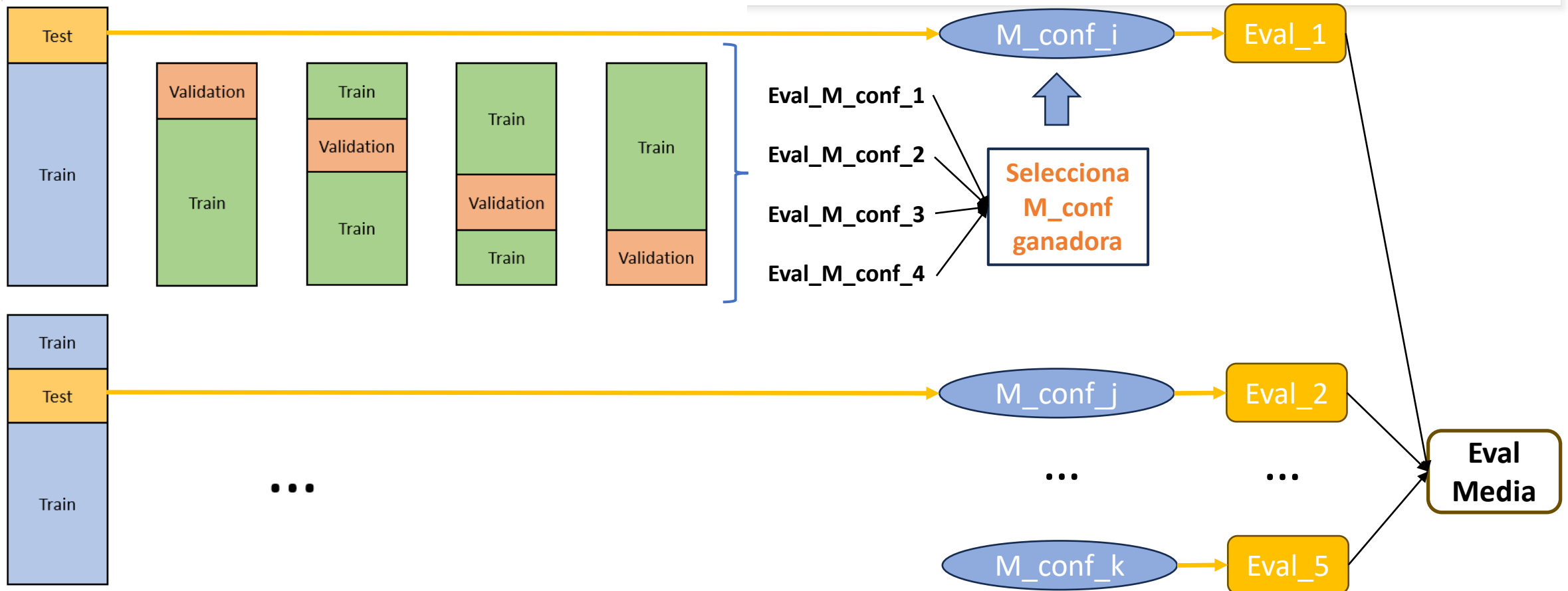
*Ejemplo con
k=5 iteraciones*



Considerando los hiperparámetros en la evaluación

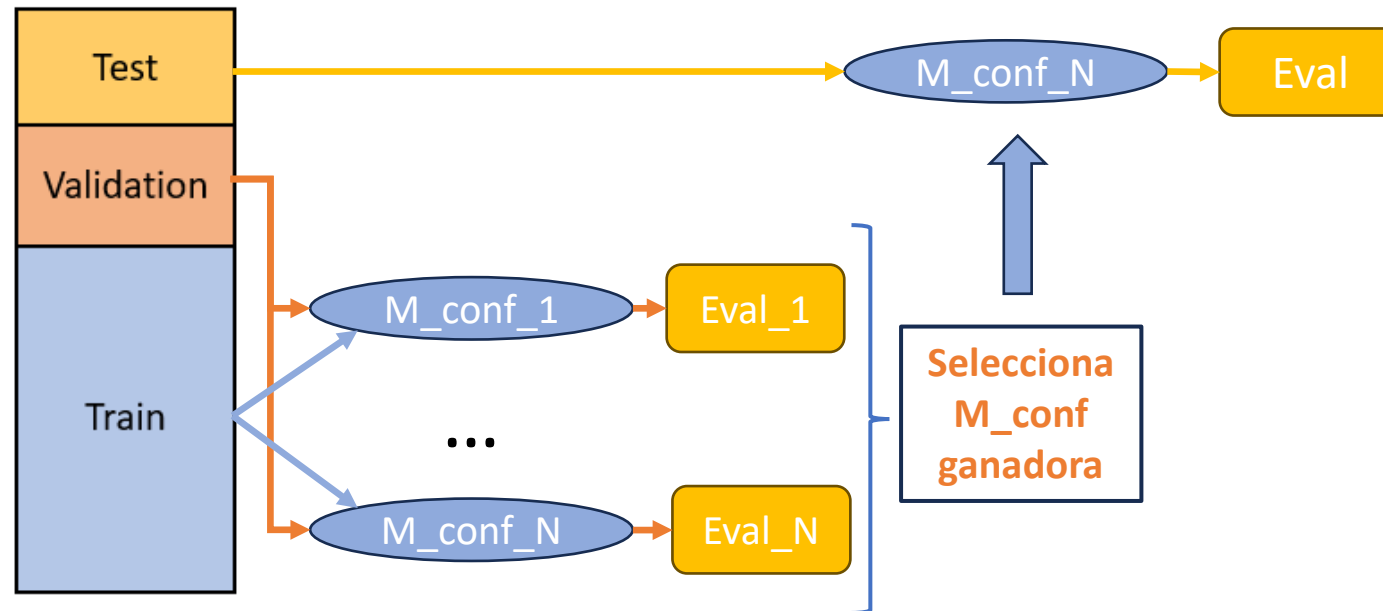


Validación cruzada anidada de k - p -iteraciones



Ejemplo de VC anidada de 4-5-iteraciones

Evaluando con bases de datos de gran tamaño



Evaluación de la mejor configuración de un modelo

