Import En primer lugar, se importan todas las librerías que se utilizarán. import numpy as np import pandas as pd import matplotlib.pyplot as plt %matplotlib inline from numpy.random import shuffle from sklearn.svm import SVC import seaborn as sns import math Carga de datos Los datos son cargados utilizando al librería "Pandas", de los archivos train.csv y test.csv. Luego se transforman en objetos "numpy" para facilitar su operación. Se juntan las columnas de los arrays X_train y y_train en samples_array, para poder mezclar los datos sin perder la relación entre train df = pd.read csv("./data/train.csv", sep=',', usecols=range(1,4)) test_df = pd.read_csv("./data/test.csv", sep=',', usecols=range(1,4)) print('Cantidad de datos de entrenamiento = ' + str(len(train df.index))) print('Cantidad de datos de prueba = ' + str(len(test df.index))) train df.head() Cantidad de datos de entrenamiento = 320 Cantidad de datos de prueba = 80 V2 label **0** -0.939381 -0.395176 -1.0 **1** -2.999302 -1.082222 **2** 2.154991 -2.355406 1.0 **3** 1.434488 1.755529 1.0 **4** -0.974204 -0.878194 -1.0 train = train df.to numpy() # Train set test = test df.to numpy() # Test set X train = train[:,0:2] y_train = train[:,2].astype(int) X test = test[:,0:2]y test = test[:,2].astype(int) samples array = np.zeros((X train.shape[0], X train.shape[1]+1)) samples array[:,0:2] = X train samples array[:,2] = y train from matplotlib.cm import ScalarMappable In [4]: fig class, ax = plt.subplots() sc = ax.scatter(X_train[:,0], X_train[:,1], alpha=0.5,c=y_train,cmap='jet') ax.set xlabel('V1') ax.set_ylabel('V2'); # fig class.colorbar(sc) 4 2 -20 V1 **Funciones** Se definen funciones necesarias para la el cálculo del gradiente descendiente. La función loss calcula la función costo J, que debe minimizarse. Ermse La función get_grad devuelve las tres componentes del gradiente de la función costo (w1,w2,b). Las derivadas son calculadas de la siguiente forma: **I**rmse La función get_line devuelve una recta para w y b. plot train_test plotea los puntos de train y test, divididos por la recta correspondiente a w y b. **def** loss (W, xy, C=1): (X,Y) = xyX = np.array(X)Y = np.array(Y)w = np.array(W[0])b = np.array(W[1])acum = 0for x, y in zip(X, Y): acum $+= \max(0, 1-y*(w.T@x+b))$ return .5 * (np.linalg.norm(w)**2.) + C * acum def get grad(W, xy, C=1): (X,Y) = xyX = np.array(X)Y = np.array(Y)w = np.array(W[0])b = np.array(W[1])grad = np.zeros(3)der b = 0.der w1 = 0.der w2 = 0.for x,y in zip(X,Y): **if** (y*(w.T@x + b) < 1): der w1 += y*x[0] der w2 += y*x[1] der b += y grad[0] = w[0] - C * der w1grad[1] = w[1] - C * der w2grad[2] = - C * der breturn grad **def** get line (x, w, b): # Ax + By + C = 0 => y = - C/B - A/C x# A=w0, B=w1, C=b => y = -b/w1 - w0/w1 x**return** -b/w[1] - (w[0]/w[1])*x def plot train test(w,b): x axis = np.linspace(-5, 5, 100) line = get line(x axis,w,b) fig, (ax1, ax2) = plt.subplots(1, 2, figsize=[20,10])# fig.suptitle(' ') ax1.scatter(X train[:,0], X train[:,1], alpha=0.5, c=y train,cmap='jet') ax1.plot(x axis, line, linewidth=2) ax1.set xlabel('V1', size=2) ax1.set ylabel('V2', size=2) ax2.scatter(X test[:,0], X test[:,1], alpha=0.5, c=y test,cmap='jet') ax2.plot(x axis, line, linewidth=2) ax2.set xlabel('V1', size=2) ax2.set ylabel('V2', size=2) def plot train test compare(w1,b1,label1,w2,b2,label2): x axis = np.linspace(-5, 5, 100) line1 = get line(x axis,w1,b1) line2= get line(x axis, w2, b2) fig, (ax1, ax2) = plt.subplots(1, 2, figsize=[20,10])# fig.suptitle(' ') ax1.scatter(X train[:,0], X train[:,1], alpha=0.5, c=y train,cmap='jet') ax2.scatter(X_test[:,0], X_test[:,1], alpha=0.5, c=y_test,cmap='jet') ax1.plot(x axis, line1, label=label1, linewidth=2) ax2.plot(x axis, line1, label=label1, linewidth=2) ax1.plot(x axis, line2, label=label2, linewidth=2) ax2.plot(x axis, line2, label=label2, linewidth=2) ax1.set xlabel('V1', size=2) ax1.set ylabel('V2', size=2) ax2.set xlabel('V1', size=2) ax2.set ylabel('V2', size=2) ax1.legend(loc="upper right", fontsize=14) ax2.legend(loc="upper right", fontsize=14) Implementación de Stochastic Gradient Descent (SGD) En la siguiente sección se implementa el gradiente descendiente estocástico para encontrar los valores óptimos de w y b que minimizan la función costo J. La función SGD_update realiza la actualización de las variables w1, w2 y b, en fución del gradiente calculado. run_SGD realiza un loop de la cantidad de épocas pasadas como parámetro. En cada ciclo se toma una muestra aleatorea del conjunto de datos, de tamaño batch_size. Se cálcula el gradiente con ese batch y se actualizan los valores de w y b. Finalmente, se verifica si hubo mejora en la función costo (J). Si J se mantiene sin mejorar por 'patient' épocas, se corta la ejecución. def SGD_update(w, b, grad, alpha): w[0] = w[0] - alpha*grad[0]w[1] = w[1] - alpha*grad[1]- alpha*grad[2] b = b return w,b def run SGD(w ini=[1.,1.],b ini=0.,C=1.,learning rate=0.001, batch size=100,epoch=100,patient=-1): w = np.array(w ini)b = np.array(b ini) $j_{train} = []$ best j = -1count error = 0 first time = True num samples = samples array.shape[0] for ep in range(epoch): # Mezclo los datos y tomo muestra de tamaño batch size shuffle(samples array) batch_samples = samples_array[0:min(batch size, num samples)] x_batch = np.array(batch_samples[:,0:2]) y_batch = np.array(batch_samples[:,2]) # Obtengo el gradiente y actualizo los párametros grad = get_grad([w,b], xy=(x_batch,y_batch), C=C) w,b = SGD update(w, b, grad, alpha = learning rate) # Acumulo los errores # j_train.append(loss([w,b], xy=(x_batch,y_batch), C=C)) j train.append(loss([w,b], xy=(X train,y train), C=C)) # Corte anticipado if (patient>=0): if(not(first time)): if j_train[-1] < best_j:</pre> best_j = j_train[-1] count error = 0 else: count error += 1 if(count error >= patient): print("Función J no mejoró por "+str(count error)+" épocas => STOP") else: first time = False best_j = j_train[-1] return w, b, j train A continuación, se usa el descenso del gradiente para encontrar los valores óptimos de w y b. En primer lugar, se definen los valores iniciales de w y b y los parámetros: • learning_rate: tasa de aprendizaje • batch_size: tamaño del lote • epoch: cantidad de épocas patient: si la función costo (J) no mejora por 'patient' épocas, se corta la ejecución Luego, se computa el gradiente y se grafica el error de train. En este ejemplo, la cantidad de epócas se configura en un número extremadamente alto, para que se realice el corte automático de la ejecución, basado en patient. # Configuración de valores iniciales e hiperparametros w ini = np.random.uniform([-10,10],2)b ini = 10.C = .1learning rate = 0.01 batch size = 60 epoch = 10000patient = 80 w, b, j train = run SGD(w ini, b ini, C, learning rate, batch size, epoch, patient) j_test = loss([w,b], xy=(X_test,y_test), C=C) print("w = " + str(w) + ", b = " + str(b)) $print("J_train = " + str(j_train[-1]) + ", J_test = " + str(j_test))$ fig, ax = plt.subplots(figsize=[20,10]) ax.set xlabel('Epoch', size=20) ax.set ylabel('Loss', size=20) fig.suptitle('Train Error', fontsize=24) ax.plot(np.linspace(0,len(j_train)-1,len(j_train)),j_train) plot train test(w,b) Función J no mejoró por 80 épocas => STOP $w = [0.64479568 \ 0.57518654], b = 0.3350000000000095$ J train = 10.136646606394219, J test = 2.123205296619837Train Error 300 200 50 400 500 600 Epoch Modificación de parámetros de entremamiento A continuación se modifican los parámetros de entrenamiento, y se observa como varían los resultados. Los paráemtros a modificar son: Batch Size Learning Rate Regularización (C) La cantidad de épocas en cada prueba se mantiene constante en 500, (sin corte anticipado) para tener una mejor comparación de los resultados. **Batch Size** Se realiza el entrenamiento con distintos tamaños de batch. Se puede observar que a medida que el tamaño de batch aumenta, el error converge más rapido y con menos ruido al valor final. Particularmente, cuando el tamaño del batch es muy chico, el gradiente tiene más probabilidades de dar como resultado una dirección erronea, debido a que se están utilizando pocos datos para su cálculo. Es por esto que el valor de loss (J) puede aumentar entre una época y otra, y converge con más ruido hacia el valor final. Hay que tener en cuenta que al aumentar el tamaño del batch, se están procesando mayor cantidad de datos en cada época, por lo que esta velocidad de convergencia se paga con mayores requerimientos de cómputo. # Configuración de valores iniciales e hiperparametros $w_{ini} = np.random.uniform([-10,10],2)$ b ini = 10.C = .1learning rate = 0.01 batch size vector = [10, 50, 100, 150, 320]fig, ax = plt.subplots(figsize=[20,10])fig.suptitle('Train Error - Distintos Batch Sizes', fontsize=24) ax.set xlabel('Epoch', size=20) ax.set ylabel('Loss', size=20) for batch size in batch size vector: w, b, j train = run SGD(w ini, b ini, C, learning rate, batch size, epoch) j_test = loss([w,b], xy=(X_test,y_test), C=C) print(" ") print("batch size: "+str(batch size)) print("w = " + str(w) + ", b = " + str(b))print("J train = " + str(j train[-1]) + ", J test = "+ str(j test)) ax.plot(np.linspace(0,epoch-1,epoch),j train,label='batch size='+str(batch size)) ax.legend(loc="upper right", fontsize=14) batch size: 10 J train = 113.15143160948763, J test = 25.614214994238683batch_size: 50 $w = [0.97648154 \ 0.84598292], b = 1.3260000000000212$ J train = 12.669803738656976, J test = 3.115861346368344batch size: 100 $w = [0.66608322 \ 0.73050627], b = 0.310000000000046$ J train = 9.758732430581553, J test = 2.0864935437916468batch size: 150 $w = [0.71540503 \ 0.78108023], b = 0.31100000000000005$ J train = 9.625486584108396, J test = 2.086893025147005batch size: 320 $w = [0.8758654 \quad 0.89799986], b = 0.412000000000018$ J train = 9.511271789251996, J test = 2.208272501149537Out[16]: <matplotlib.legend.Legend at 0x23c0f571fd0> Train Error - Distintos Batch Sizes 160 batch_size=10 batch_size=50 batch_size=100 batch_size=150 140 batch_size=320 120 100 40 20 Epoch Learning Rate (alpha) En las gráficas siguientes se puede ver que a medida que el learning rate aumenta, la convergencia hacia el valor final se hace cada vez más rápida. Sin embargo, si el valor es demasiado gránde, el resultado final podría oscilar y no converger, o más aún, podría diverger. Esto se debe a que este valor controla el "paso" de actualización del gradiente en cada época. Observando las ecuaciones: - w = w - alpha * grad(w)-b = b - alpha * grad(b)se ve fácilmente que el learning rate (alpha) pondera el cambio en el gradiente en cada iteración. Es por esto que si el valor es muy pequeño, las variaciones de los valores de w y b entre cada iteración serán pequeñas y se tardará más tiempo en llegar al valor final. Por el contrario, se alpha es grande los cambios en las variables serán más bruscos, y los saltos de valores entre una iteración y otra serán mayores. En este último caso, es fácil ver que en las zonas proximas al gradiente, un gran cambio en las variables (w y b) podría derivar en "modificar de más" dicha variable y "pasarnos" del valor óptimo. # Configuración de valores iniciales e hiperparametros In [9]: $w_{ini} = np.random.uniform([-10,10],2)$ b ini = 10.C = .1learning_rate_vector = [.001,.01,.05,.1,.5] batch size = 100epoch = 500 fig, ax = plt.subplots(figsize=[20,10]) fig.suptitle('Train Error - Distintos Learning Rates', fontsize=24) ax.set_xlabel('Epoch', size=20) ax.set_ylabel('Loss', size=20) for learning_rate in learning_rate_vector: w, b, j_train = run_SGD(w_ini, b_ini, C, learning_rate, batch_size, epoch) j_test = loss([w,b], xy=(X_test,y_test), C=C) print(" ") print("learning_rate: "+str(learning_rate)) print("w = " + str(w) + ", b = " + str(b)) $print("J_train = " + str(j_train[-1]) + ", J_test = " + str(j_test))$ ax.plot(np.linspace(0,epoch-1,epoch),j_train,label='learning_rate='+str(learning_rate)) ax.legend(loc="upper right", fontsize=14) learning rate: 0.001 $w = [1.2069597 \quad 6.18697588], b = 8.752699999999987$ $J_{train} = 76.75167531909499, J_{test} = 29.42942051686289$ learning rate: 0.01 $w = [0.70540802 \ 0.75308076], b = 0.3320000000000102$ J train = 9.669365445253046, J test = 2.0948992488021982learning rate: 0.05 $w = [0.65700517 \ 0.67920024], b = 0.2800000000000125$ J train = 9.836628446072336, J test = 2.0768682699413246learning rate: 0.1 $w = [0.69948134 \ 0.67705728], b = 0.2800000000000002$ $J_{train} = 9.763820716213736$, $J_{test} = 2.0742620165940617$ learning rate: 0.5 $w = [0.83479305 \ 0.35956459], b = 0.3500000000000012$ $J_{train} = 10.949875221718525$, $J_{test} = 2.358319347035996$ Out[9]: <matplotlib.legend.Legend at 0x23c0e7b48e0> Train Error - Distintos Learning Rates — learning_rate=0.001 learning_rate=0.01 learning_rate=0.05 learning_rate=0.1 learning_rate=0.5 100 80 60 40 20 100 400 Epoch Regularización (C) En las gráficas siguientes podemos ver que el valor de C modifica en gran medida el valor final del error de train. En menor medida, se ve modificada la velocidad de convergencia. Para entender el cambio en el valor final, debemos observar las derivadas de la función loss, en la función get_grad . Tomando como ejemplo el gradiente de b: $- grad[b] = - C * der_b$ der_b se calcula como la sumatoria de los errores, por lo que sera un número entero. Si tomamos un C relativamente grande como C=1, cuando la cantidad de errores está cercana a 0 el gradiente tenderá a tomar valores '0', '±1' o a lo sumo '±2'. Es decir que no se le permite al gradiente tomar valores menores a 1 en valor absoluto. Esto produce que el error se estanque y oscile en valores relativamente grandes, ya que el gradiente no puede hacerse lo suficientemente pequeño para seguir convergiendo a un valor final óptimo. Algo similar ocurre con el termino de w, aunque no es tan directo de verlo por la forma en que se calcula el acumulado y el gradiente. # Configuración de valores iniciales e hiperparametros w ini = np.random.uniform([-10,10],2)b ini = 10.C vector = [.01, .1, .5, 1, 2]learning rate = .01 batch size = 100 epoch = 500 fig, ax = plt.subplots(figsize=[20,10]) fig.suptitle('Train Error - Distintos valores de regularización', fontsize=24) ax.set xlabel('Epoch', size=20) ax.set ylabel('Loss', size=20) for C in C vector: w, b, j train = run SGD(w ini, b ini, C, learning rate, batch size, epoch) j test = loss([w,b], xy=(X test,y test), C=C)print(" ") print("C: "+str(C)) print("w = " + str(w) + ", b = " + str(b))print("J train = " + str(j train[-1]) + ", J test = "+ str(j test)) ax.plot(np.linspace(0,epoch-1,epoch),j train,label='C='+str(C)) ax.legend(loc="upper right", fontsize=14) ax.set ylim([0, 300]) C: 0.01 $w = [0.51151736 \ 0.59652842], b = 7.67949999999982$ J train = 11.61524106601701, J test = 2.8443582055388177C: 0.1 $w = [0.67248926 \ 0.69071697], b = 0.2730000000000191$ J_train = 9.782081647647162, J_test = 2.070525194738045 C: 0.5 $w = [0.9572095 \ 1.01335169], b = 0.44500000000000095$ J train = 43.89933887332978, J test = 7.797965684182289 $w = [1.06832144 \ 0.95005625], b = 0.399999999999999$ J train = 86.97844897137219, J test = 14.452403611711057C: 2 $w = [1.18726686 \ 1.10914832], b = 0.62000000000001$ J train = 172.90325334007775, J test = 28.05371095584376Out[10]: (0.0, 300.0) Train Error - Distintos valores de regularización C=0.01 C = 0.1C = 0.5C=1250 C=2200 SS0150 100 50 100 200 Epoch Finalmente, se adopta una configuración para el entrenamiento, y se guardan los valores finales en w_best y b_best para utilizarlos más adelante. También se realizan las predicciones para los valores del conjunto de prueba. Esto se hace a través el cálculo np.sign(w@x + b), donde x es un punto del conjunto x_test. El resultado, se almacena en el vector y_pred que luego se compara con y_test haciendo el conteo de casos correctos y erroneos. Se calcula la precisión como "casos correctos / casos totales". Por último, se grafican los resultados. # Configuración de valores iniciales e hiperparametros w ini = np.random.uniform([-10,10],2)b ini = 10.C = .1learning rate = .01batch size = 100epoch = 10000patient = 80 # Entrenar algoritmo w, b, j train = run SGD(w ini, b ini, C, learning rate, batch size, epoch, patient) # Calcular performance e imprimir resultados j_test = loss([w,b], xy=(X_test,y test), C=C) y pred grad = [int(np.sign(w@x + b)) for x in X test] correct_grad = np.sum(y_pred_grad-y_test == 0) score grad = (correct_grad/len(y_test)) indx err grad = [i for i,e in enumerate((y pred grad-y test)!=0) if(e)] # Ídicdes de muestra mal estimadas print("w = " + str(w) + ", b = " + str(b))print("J train = " + str(j train[-1]) + ", J test = " + str(j test))print("Se predijeron correctamente "+str(correct grad)+" de "+str(len(y test))+" datos.") print("Precisión = "+str(score grad*100)+"%") print("Muestras mal estimadas con implementación gradiente desciendiente = "+str(indx err grad)) # Realizar gráficas fig, ax = plt.subplots(figsize=[20,10]) ax.set xlabel('Epoch', size=20) ax.set ylabel('Loss', size=20) fig.suptitle('Train Error', fontsize=24) ax.plot(np.linspace(0,len(j train)-1,len(j train)),j train) plot train test(w,b) # Guardar valores para usarlos en el futuro w best, b best = w, bFunción J no mejoró por 80 épocas => STOP $w = [0.71957864 \ 0.69033482], b = 0.318000000000167$ $J_{train} = 9.726334391299767, J_{test} = 2.0915699462252166$ Se predijeron correctamente 75 de 80 datos. Precisión = 93.75% Muestras mal estimadas con implementación gradiente desciendiente = [8, 55, 63, 67, 79] Train Error 250 200 Epoch Implementación de SVM de Scikit-Learn A continuación se realiza la implementación de SVM utilizando el modelo SVC lineal de la librería Scikit-Learn. El modelo es entrenado y testeado con los mismos datos que en el caso anterior. Podemos ver que los resultados obtenidos son muy similares. Ambos metodos alcanzan la misma precisión, calculada como la proporción de etiquetas predichas correctamente. Observando los índices de las etiquetas erroneas, vemos que la mayoría de estas coinciden entre ambas implementaciones (los errores se dan para las mismas etiquetas). Por otro lado, se ve también que los valores de w y b son cercanos, pero no iguales. Esto se debe a dos razones: • En primer lugar, hay una pequeña diferencia entre los dos planos obtenidos, que se ve gráficamente. Por lo tanto, es de esperar que los valores de w y b no coincidan. • Para el caso de w, hay que tener en cuenta que este vector marca la dirección del plano, por lo que existen infinitos valores de (w0,w1) que generan el mismo plano (para un valor fijo de b). Es por esto que se calcula también el ángulo que forma w con el eje de las abscisas. Vemos que estos ángulos son muy similares entre sí, aunque existe una pequeña diferencia. svm=SVC(kernel='linear',C=.1) In [40]: svm.fit(X_train,y_train) # entrenar SVM suport_vector = svm.support_vectors_ # vector soporte suport_vector_vert = svm.support_ # indices del vector soporte $w_skl = svm.coef_[0]$ # vector w b skl = svm.intercept # valor de b score_skl = svm.score(X_test,y_test) # score # predicciones y pred skl = svm.predict(X test) indx_err_skl = [i for i,e in enumerate((y_pred_skl-y_test)!=0) if(e)] # Ídicdes de muestra mal estimadas # Resultados para Scikit-Learn print("SVM en Scikit-Learn: ") print("- Se predijeron correctamente "+str((y_test-y_pred_skl==0).sum())+ " de "+str(len(y_test))+" datos.") print("- Precisión = "+str(score skl*100)+"%") $print("-w = " + str(w_skl) + ", b = "+ str(b_skl))$ print("- Ángulo de w con eje x1 = "+ str(math.degrees(np.arctan2(w skl[1], w skl[0])))) print("- Índices de muestras mal estimadas: "+str(indx err skl)) # Resultados para gradiente descendente print(" ") print("SVM con gradiente descendente: ") print("- Se predijeron correctamente "+str(correct_grad)+" de "+str(len(y_test))+" datos.") print("- Precisión = "+str(score grad*100)+"%") print("-w = " + str(w) + ", b = "+ str(b))print("- Ángulo de w con eje x1 = "+ str(math.degrees(np.arctan2(w best[1], w best[0]))))print("- Índices de muestras mal estimadas: "+str(indx err grad)) # Graficar ambas rectas plot_train_test_compare(w_skl,b_skl,'Scikit-Learn',w_best,b_best,'Implementación SGD') SVM en Scikit-Learn: - Se predijeron correctamente 75 de 80 datos. - Precisión = 93.75% $- w = [0.87458469 \ 0.89832016], b = [0.4132359]$ - Ángulo de w con eje x1 = 45.76702423927827- Índices de muestras mal estimadas: [8, 55, 63, 67, 79] SVM con gradiente descendente: - Se predijeron correctamente 75 de 80 datos. - Precisión = 93.75% $- w = [0.71957864 \ 0.69033482], b = 0.3180000000000167$ - Ángulo de w con eje x1 = 43.81176574676312Índices de muestras mal estimadas: [8, 55. Scikit-Learn Scikit-Learn Implementación SGD Implementación SGD **Remover Vectores Soportes** En la siguiente sección se analiza cómo se ve afectada la performance del SVM al remover vectores soportes. Para esto se utiliza el arreglo svm.support_, que devuelve el modelo SVC, para remover estos índices del los datos originales en X_train. Luego, se evalúa el modelo en todo el conjunto de prueba x_test . Se repite el procedimiento removiendo diferentes cantidades de vectores soportes, y se grafican los resultados. Vemos que en todos lo casos, varían los valores obtenidos de w y b respecto a los originales. Además, podemos ver gráficamente que los planos obtenidos son diferentes. Sin embargo la cantidad de vectores removidos no afecta demasiado a la precisión del modelo. In [41]: remove vector = [1,5,10,20]for cant in remove vector: indx = np.random.choice(suport vector vert, size=cant, replace=False) indx = np.sort(indx)[::-1] # Remuevo del mayor al menor X train cut = X train y train cut = y train for i in indx: X train cut = np.delete(X train cut, i, 0) y train cut = np.delete(y train cut, i, 0) svm=SVC(kernel='linear',C=.1) svm.fit(X train cut, y train cut) # entrenar SVM w = svm.coef[0]# vector w b = svm.intercept # valor de b score = svm.score(X test, y test) # predicciones pred = svm.predict(X test) print("Removiendo "+str(cant)+" vectores soportes") print("Se predijeron correctamente "+str((y test-pred==0).sum())+" de "+str(len(y test))+" datos.") print("Precisión = "+str(score*100)+"%") print("w = " + str(w) + ", b = " + str(b))plot train test compare(w skl,b skl,"TrainSet completo",w,b,"Removiendo "+str(cant))

