Doble Grado en
Ingeniería Informática y Matemáticas

APRENDIZAJE AUTOMÁTICO
(E. Computación y Sistemas Inteligentes)

TRABAJO-3: Programación
AJUSTE DE MODELOS LINEALES

UNIVERSIDAD DE GRANADA

Carlos Santiago Sánchez Muñoz

Grupo de prácticas 3 - Lunes

Email: carlossamu7@correo.ugr.es

29 de mayo de 2020

Índice

1. Clasificación

El primer problema a abordar es un problema de clasificación. La base de datos es a usar es *Optical Recognition of Handwritten Digits* que contiene imágenes de dígitos del sistema de numeración arábigo. El objetivo consiste en aprender de esta base de datos para poder clasificar otras imágenes con dígitos manuscritos.

1.1. Comprensión del problema a resolver

El conjunto de datos lo obtenemos en dos ficheros sacados de la dirección proporcionada en el guión:

- `optdigits.tra` para el conjunto de entrenamiento.
- `optdigits.tes` para para el conjunto de test.

Ambos conjuntos de datos son una batería de imágenes de dígitos manuscritos con un preprocesamiento previo. Estos ficheros tienen un formato CSV (*Comma-Separated Values*) lo cual significa que las filas están separadas por saltos de línea y las columnas por el símbolo ',' (coma).

Vamos a explicar la técnica de reducción de la dimensionalidad que se ha aplicado a cada dígito para obtener su vector de características. Los dígitos son un *bitmap* de tamaño 32×32 en donde cada píxel es blanco o negro. Se han dividido en bloques de tamaño 4×4 no superpuestos. El vector de características son 64 valores del intervalo $[0, 16]$ que indican el número de píxeles negros de cada uno de los 8×8 bloques de tamaño 4×4. La etiqueta de cada dato es el dígito al que se corresponde, un entero en $[0, 9]$.

El problema a resolver es un problema de aprendizaje supervisado. La matriz $\mathcal{X}$ es la matriz de características que en cada fila tendrá los 64 valores ya explicados y tantas filas como instancias. El vector de etiquetas $\mathcal{Y}$ está compuesto por enteros en $[0, 9]$ y su dimensión es el número de instancias. La función de objetivo es $f : \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$ que para cada instancia $(x_n, y_n) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ verifica $f(x_n) = y_n$.

1.2. Selección de las clase/s de funciones a usar

En la búsqueda de la función objetivo f es necesario fijar la clase de funciones o conjunto de hipótesis $\mathcal{H}$. Más adelante elegiremos $g \in \mathcal{H}$ de modo que $g \approx f$.

La clase de funciones elegida es la de combinaciones lineales de los datos. Con las dimensiones que se manejan en este problema usar una clase no lineal puede ser problemático y dar lugar a *overfitting*. Además carecería de sentido pues qué significa elevar al cuadrado el número de unos que hay en un bloque 4×4. A priori no parece que eso funcionase así que nuestra clase elegida es:

$$\mathcal{H}_{clas} = \left\{ w_0 + \sum_{i=1}^{N} w_i x_i, \quad w \in \mathbb{R}^{N+1} \right\}.$$

1.3. Fijando los conjuntos de training y test

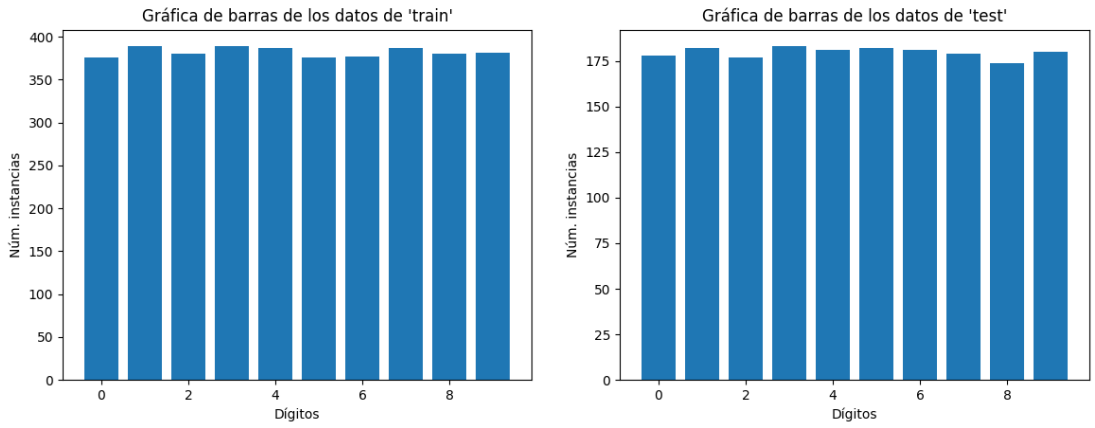
En este caso el conjunto de datos proporcionado venía separado distinguiendo el conjunto de entrenamiento del conjunto de test. Vamos a limitarnos a estudiar y averiguar algunos datos de este reparto para decir si es lo que deseamos.

El número de instancias del conjunto de entrenamiento es 3823 y el de test es 1797. Están repartidos por tanto con un porcentaje 68,025 % y 31,975 % respectivamente. Estos datos son muy razonables, falta saber si el porcentaje de aparición de cada dígito está bien repartido en cada conjunto de entrenamiento. En la Tabla 1.

Tabla 1: Reparto de los dígitos en 'train' y 'test'

Díg.	**Instancias 'train'**	**Porcentaje 'train' (%)**	**Instancias 'test'**	**Porcentaje 'test' (%)**
0	376	9.84	178	9.91
1	389	10.18	182	10.13
2	380	9.94	177	9.85
3	389	10.18	183	10.18
4	387	10.12	181	10.07
5	376	9.84	182	10.13
6	377	9.86	181	10.07
7	387	10.12	179	9.96
8	380	9.94	174	9.68
9	382	9.99	180	10.02

En unas gráficas de barras lo podemos apreciar mejor:



(a) Train (b) Test

Imagen 1: Gráficas de barras de los datos

En efecto, las apariciones está bien estratificadas y dicha uniformidad es necesaria para el buen aprendizaje del algoritmo que vamos a construir.

1.4. Preprocesado de los datos

Antes de hacer el preprocesado vamos a verificar algunas cosas que debe de cumplir la base de datos después de la comprensión y estudio realizado. En primer lugar se ha comprobado la no existencia de valores perdidos u *outliers*. En un base de datos tan conocida era obvio que esto no iba a pasar. A continuación se ha comprobado que todos los valores sean enteros. Por último, todos los valores de las características deben de estar en el rango $[0, 16]$ y los de las etiquetas en $[0, 9]$. Veamos estas comprobaciones:

```
Outliers en 'train': 0
Outliers en 'test': 0
Todos los valores son enteros en 'train': True
Todos los valores son enteros en 'test': True
Intervalo en el que están las características de 'train': [0,16]
Intervalo en el que están las etiquetas de 'train': [0,9]
Intervalo en el que están las características de 'test': [0,16]
Intervalo en el que están las etiquetas de 'test': [0,9]
```

Imagen 2: Comprobaciones sobre los datos

El preprocesamiento de los datos es muy importante para el buen ajuste del modelo. Es sin duda un paso fundamental ya que previere del sobreajuste a los datos y de la redundancia a la vez que reduce la dimensionalidad del problema haciéndolo menos complejo y más eficiente en tiempo. Para ello después de diferentes pruebas se ha procedido a tres pasos:

- Eliminar aquellas características cuyo valor sea constante. Para ello simplemente se eliminan aquellas que tienen varianza cero lo cual es equivalente. En este paso se usa `VarianceThreshold` de `sklearn.feature_selection`.
- Análisis de Componentes Principales PCA (Principal Component Analysis). Esta técnica reduce la dimensionalidad del problema sin perder mucha capacidad para explicar la varianza de los datos. El espacio de trabajo se transforma mediante esta técnica a uno más pequeño conservando un porcentaje de varianza explicada elegido, en nuestro caso un 95 %. Es probable que algunas zonas de la imagen no sean tan importantes y con esta técnica las podamos descartar. Para este paso usamos `StandardScaler` de `sklearn.preprocessing`.
- Para poder aplicar PCA los datos deben de tener una distribución gaussiana. Por consiguiente se van a normalizar para que la media sea 0 y la varianza 1. Para este paso se importa `PCA` de `sklearn.decomposition`.

Estos tres pasos los unimos con `Pipeline` disponible en `sklearn.pipeline`. Básicamente dados unos datos en cada paso se hace el `fit_transform` a ellos y se pasa al siguiente elemento del `Pipeline`.

```
Número de características de 'train' antes del preprocesado: 64
Número de características de 'train' después del preprocesado: 41
```

Imagen 3: Número de características antes y después del preprocesamiento

Tal y como vemos los resultados del preprocesamiento son un decremento considerable en el número de características. Además, voy a pintar las matrices de correlación antes y después del preprocesamiento.

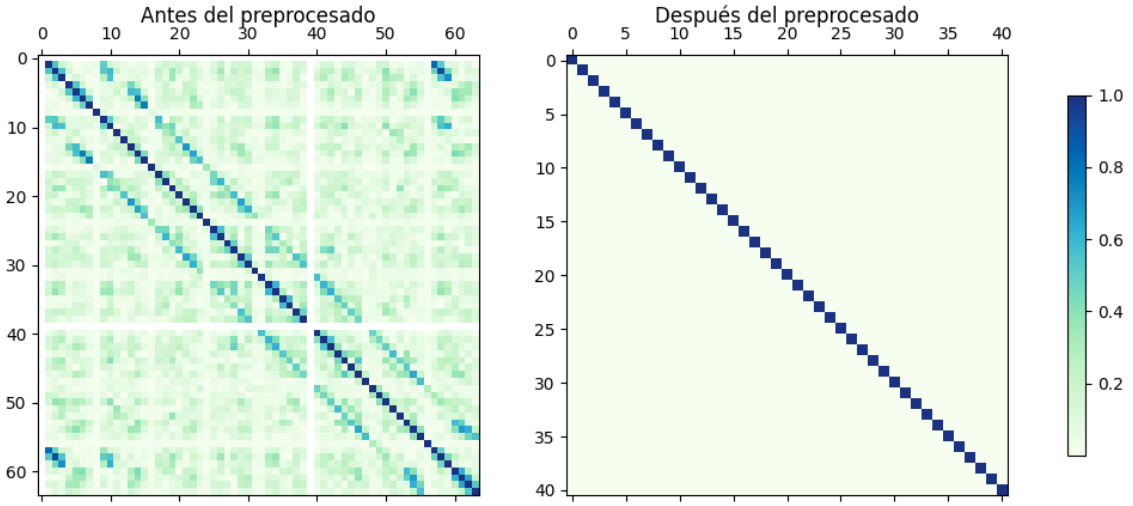


Imagen 4: Matriz de correlación antes y después del preprocesado

La columna y fila de píxeles en blanco en la matriz de correlación antes del preprocesamiento indica que esos valores son constantes (los elimina `VarianceThreshold`).

1.5. Fijando la métrica de error a usar

El error que voy a usar es el porcentaje de acierto en la clasificación de los elementos. Este error se denomina *accuracy* y así lo indicaremos a los modelos de `sklearn`.

Es necesario justificar esta elección porque no siempre sería acertada. Si mi base de datos estuviese desbalanceada y hubiese un alto porcentaje de instancias de una misma clase es probable que el error *accuracy* fuese en general bueno aunque el modelo no fuese el idóneo. Sin embargo, aquí los datos están repartidos para cada dígito de manera equitativa.

1.6. Discusión de la técnica de ajuste elegida

Para poder establecer una comparación y elegir un modelo de cara a proponer a la empresa es conveniente usar varios. En este caso se va a usar regresión logística y SVM (*Support-Vector Machine*).

En este apartado vamos a establecer las técnicas de ajuste usadas en cada modelo.

- Para regresión logística la optimización que voy a usar es `lbfgs` que además es la que viene por defecto. Es un método `bfgs` con memoria limitada. Calcula el mínimo usando el gradiente pero no la matriz Hessiana, sólo usa una estimación. Esto es una ventaja con respecto al método de Newton.
- La técnica de ajuste que usa SVM es mediante una función de pérdida `hinge` o `squared_hinge`. He elegido la primera, la cual es:

$$V(f(x), y) = \max\{0, 1 - yf(x)\} = \max\{0, 1 - yw^T x\}.$$

Fíjese que esta función de pérdida es un indicador 0-1 cuando $\text{sign}(f(x)) = y$ y $|yf(x)| \geq 1$. Además de clasificar correctamente maximiza la distancia a los puntos soporte proporcionando la colución buscada.

1.7. Discusión de la necesidad de regularización

Considero que en la mayoría de problemas de Aprendizaje Automático la regularización es fundamental ya que controla que el *overfitting* a los datos y ayuda por tanto al correcto aprendizaje de los mismos. Si el error es que comete el modelo es J la regularización controla la complejidad del modelo limitando el *overfitting* en función añadiendo un término αC.

El problema de clasificación que estamos trabajando tiene una gran dimensionalidad lo cual favorece el *overfitting*. Por este motivo creo correcto usar la regularización y los resultados que más adelante veremos confirman esta decisión.

En función del valor de C los dos tipos de regularización más conocidos son ℓ_1 o *Regularización Lasso* y ℓ_2 o *Regularización Ridge*. He escogido la regularización de tipo ℓ_2 que añade como término a la función de error un sumando de la forma $\alpha\|w\|_2^2$. En concreto:

$$C = \frac{1}{2(N+1)} \sum_{j=0}^{N} w_j^2$$

De esta manera penalizamos con más fuerza los valores muy grandes (cosa que no ocurre en ℓ_1). El parámetro α regula el efecto de la regularización.

1.8. Identificación de los modelos a usar

Ya hemos adelantado que se van a usar dos modelos (Regresión Logística y SMV) de cara a poder realizar una comparación y escoger el mejor de ellos.

- El primero es Regresión Logística. Hay dos estrategias especialmente conocidas para realizar la separación multiclase. La primera es *One vs Rest* que realiza tantos problemas de clasificación binaria (con regresión logística) como clases haya. La otra es *Multinomial* que realiza la clasificación de manera simultánea entre todas las clases. He elegido la segunda porque minimiza el error de toda la distribución de probabilidad y me parece más eficiente.

- El segundo modelo es Support-Vector Machines (SVM). Encontramos dos estrategias para la separación multiclase. La primera al igual que antes es *One vs Rest* que realiza tantos problemas de clasificación binaria (con SVM) como clases haya. La segunda es *Crammer-Singer* que optimiza un objetivo conjunto sobre todas las clases. En la documentación indica que *Crammer-Singer* es teóricamente consistente pero es algo menos eficiente que *One vs Rest* y los resultados rara vez son mejores. He probado ambos y los resultados sobre este problema son totalmente equivalentes. Finalmente me he decantado por *Crammer-Singer*.

1.9. Estimación de hiperparámetros y selección del mejor modelo

He usado la función `LogisticRegression` de `sklearn.linear_model`. La mayoría de los parámetros los he dejado por defecto como `max_iter=1000` y `tol=`10^{-4} (tolerancia del

criterio de parada). Aquellos que he cambiado son:

- `C`: He usado 4 valores [0,01, 0,1, 1,0, 10,0] para escoger el mejor.
- `multi_class`: como ya se anunció se va a usar `multinomial`.

Como hay varios valores de `C` se ha construido un modelo (con el preprocesado indicado) para cada uno de ellos. Mostramos este fragmento de código:

```
""" Funcion para crear una lista de pipelines con el modelo RL para diferentes
valores de C sobre los datos preprocesados. Devuelve dicha lista.
- Cs: Lista de valores C.
"""
def RL_clasificators(Cs):
    # Inicializando lista de Pipeline
    pipes = []

    for c in Cs:     # Para cada C se inserta un modelo.
        pipes.append(Pipeline([("var", VarianceThreshold(threshold=0.0)),
                               ("scaled", StandardScaler()),
                               ("PCA", PCA(n_components=0.95)),
                               ("log",  LogisticRegression(C=c,
                                   multi_class='multinomial'))]))
    return pipes
```

He usado la función `LinearSVM` de `sklearn.svm`. La mayoría de los parámetros los he dejado por defecto como `max_iter=1000` y `tol=`10^{-4}. Aquellos que he cambiado son:

- `C`: He usado 4 valores [0,01, 0,1, 1,0, 10,0] para escoger el mejor.
- `random_state`: se ha establecido a `1` y controla la generación pseudo-aleatoria de números para barajar los datos en el descenso coordinado del problema dual.
- `loss`: como ya se ha explicado la función de pérdida va a ser `hinge`.
- `multi_class`: también se ha comentado la elección `crammer_singer`.

De manera análoga a como se hizo antes se muestra el pseudocódigo de los modelos:

```
""" Funcion para crear una lista de pipelines con el modelo SVM para diferentes
valores de C sobre los datos preprocesados. Devuelve dicha lista.
- Cs: Lista de valores C.
"""
def SVM_clasificators(Cs):
    # Inicializando lista de Pipeline
    pipes = []

    for c in Cs:     # Para cada C se inserta un modelo.
        pipes.append(Pipeline([("var", VarianceThreshold(threshold=0.0)),
                               ("scaled", StandardScaler()),
                               ("PCA", PCA(n_components=0.95)),
                               ("svm",  LinearSVC(C=c, random_state=1, loss='hinge',
                                   multi_class="crammer_singer"))]))
    return pipes
```

La ejecución de los dos modelos para cuatro valores de `C` distintos se realiza usando validación cruzada dividiendo en 5 conjuntos los datos de entrenamiento. Se han hallado las medias y desviaciones típicas de cara a elegir el mejor modelo. Los resultados son:

Modelo	C	Media	Desv. típica
LR	0.01	0.953704	0.00562458
LR	0.1	0.966783	0.00470287
LR	1	0.966261	0.00739849
LR	10	0.96469	0.00553305
SVM	0.01	0.962858	0.00456008
SVM	0.1	0.962075	0.00611391
SVM	1	0.955796	0.00517247
SVM	10	0.953441	0.00416937

Imagen 5: Resultados de los diferentes modelos

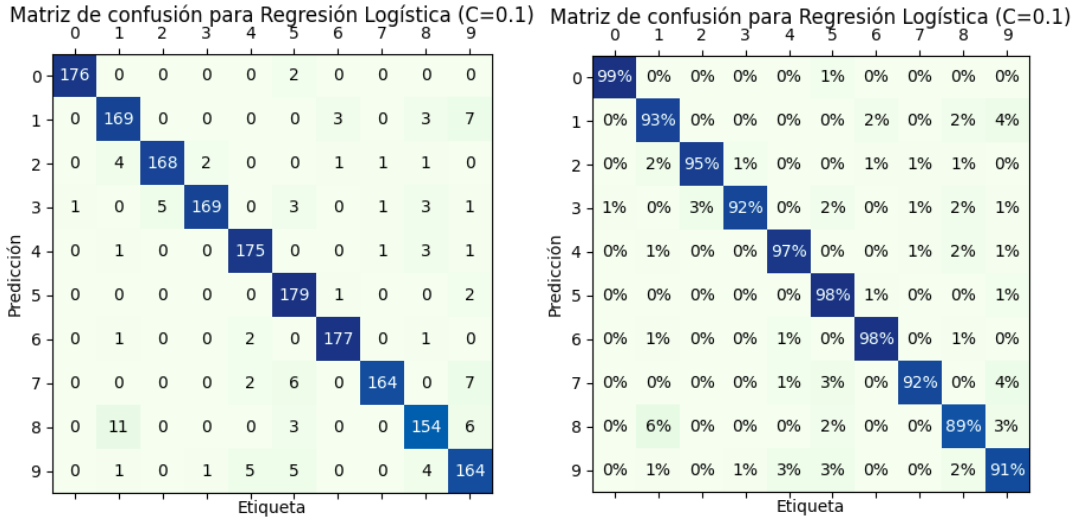
Las varianzas son pequeñas y muy similares entre ellas por lo que atendiendo a las medias se ha escogido regresión logística con `C=0.1` como el mejor modelo. A pesar de esta elección los resultados eran similares y escoger `SVM` también daría una buena clasificación.

1.10. Estimación por validación cruzada de E_{out} y comparación con E_{test}

En esta sección vamos a entrenar el mejor modelo con todos los datos de entrenamiento y posteriormente se realizarán pruebas con el conjunto de test de cara a estimar E_{out}. Los resultados son

$$E_{in} \approx 0{,}02328, \quad E_{out} \approx 0{,}05676.$$

La matriz de confusión nos proporciona información acerca de qué clases clasifica mejor nuestro modelo cuáles peor. Veamos:



(a) Sin normalizar (b) Normalizada

Imagen 6: Matriz de confusión

El error E_{out} es bastante bueno. Observando la matriz de confusión normalizada la clase que mejor clasifica es la del dígito `0` y la que peor es la del `8`. Una posible explicación de por qué es el peor puede ser por el parecido que tiene el dígito `8` a otros dígitos como `0`, `6` y `9`.

1.11. Modelo a proponer a la empresa

Después del estudio llevado a cabo recomendaría a la empresa la elección del modelo de Regresión Logística con el parámetro de regularización `C=0.1`. Les diría que el porcentaje de acierto fuera de la muestra es por lo general mayor al 90 %. Con esta elección tendrían un error satisfactorio a la vez que un modelo con poca complejidad.

Si la empresa necesitase un error más pequeño en la clasificación intentaría optimizar más parámetros o en la validación cruzada dividir en más campos que aunque aumente el tiempo de cómputo es posible que los pesos obtenidos sean mejores. Esto no mejoraría demasiado el modelo así que otra opción es probar con otros modelos y otras clases de hipótesis diferentes.

2. Regresión

2.1. Comprensión del problema a resolver

Texto.

```
INFORMACIÓN DE LOS DATOS:
Número de atributos: 128 (uno es el goal)
Número de datos perdidos: 39202
Número de atributos que contienen datos perdidos: 25
Intervalo en el que están las características: [0,Zanesvillecity]
Intervalo en el que están las etiquetas: [0.0,1.0]
Tipos y cantidad de ellos en los atributos:
```

Nominal	Numeric	String	Decimal	Semiboolean
1	3	1	122	1

Imagen 7: Información general de los datos

Texto.

Intervalo	Núm. instancias
[0.0, 0.1)	679 (34.05%)
[0.1, 0.2)	470 (23.57%)
[0.2, 0.3)	285 (14.29%)
[0.3, 0.4)	174 (8.73%)
[0.4, 0.5)	97 (4.86%)
[0.5, 0.6)	98 (4.91%)
[0.6, 0.7)	69 (3.46%)
[0.7, 0.8)	32 (1.6%)
[0.8, 0.9)	33 (1.65%)
[0.9, 1.0]	57 (2.86%)

Imagen 8: Cantidad de instancias en intervalos de etiquetas

Texto.

2.2. Selección de las clase/s de funciones a usar

Texto.

2.3. Fijando los conjuntos de training y test

Texto.
Texto.

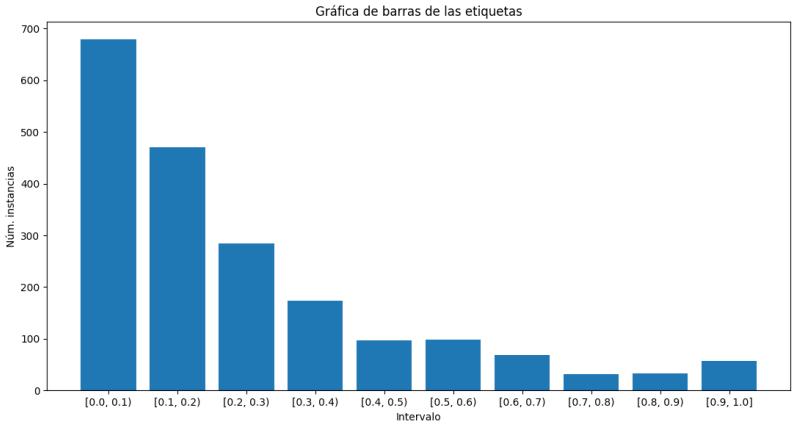
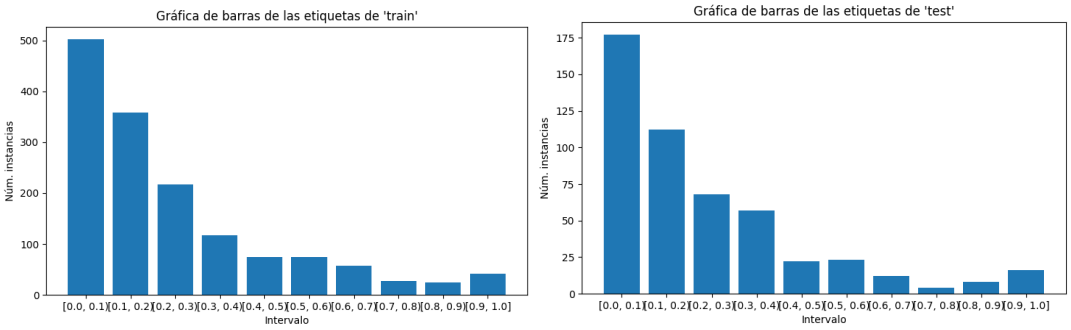


Imagen 9: Gráfica de barras de las etiquetas

Intervalo	Núm. instancias 'train'	Núm. instancias 'test'
[0.0, 0.1)	502 (33.58%)	177 (35.47%)
[0.1, 0.2)	358 (23.95%)	112 (22.44%)
[0.2, 0.3)	217 (14.52%)	68 (13.63%)
[0.3, 0.4)	117 (7.83%)	57 (11.42%)
[0.4, 0.5)	75 (5.02%)	22 (4.41%)
[0.5, 0.6)	75 (5.02%)	23 (4.61%)
[0.6, 0.7)	57 (3.81%)	12 (2.4%)
[0.7, 0.8)	28 (1.87%)	4 (0.8%)
[0.8, 0.9)	25 (1.67%)	8 (1.6%)
[0.9, 1.0]	41 (2.74%)	16 (3.21%)

Imagen 10: Reparto de las instancias después de la partición



(a) Train (b) Test

Imagen 11: Gráfica de barras de los datos

2.4. Preprocesado de los datos

Codificación, normalización, proyección, etc. Es decir, todas las manipulaciones sobre los datos iniciales hasta fijar el conjunto de vectores de características que se usarán en el entrenamiento.

Cabecera	Val. perdidos	Porcentaje (%)
OtherPerCap	1	0.05
LemasSwornFT	1675	84
LemasSwFTPerPop	1675	84
LemasSwFTFieldOps	1675	84
LemasSwFTFieldPerPop	1675	84
LemasTotalReq	1675	84
LemasTotReqPerPop	1675	84
PolicReqPerOffic	1675	84
PolicPerPop	1675	84
RacialMatchCommPol	1675	84
PctPolicWhite	1675	84
PctPolicBlack	1675	84
PctPolicHisp	1675	84
PctPolicAsian	1675	84
PctPolicMinor	1675	84
OfficAssgnDrugUnits	1675	84
NumKindsDrugsSeiz	1675	84
PolicAveOTWorked	1675	84
PolicCars	1675	84
PolicOperBudg	1675	84
LemasPctPolicOnPatr	1675	84
LemasGangUnitDeploy	1675	84
PolicBudgPerPop	1675	84

Imagen 12: Valores perdidos de los atributos

Texto.

```
PREPROCESANDO LOS DATOS
Número de características con varianza cero: 0
```

Imagen 13: Características con varianza cero

Texto.
Texto.

2.5. Fijando la métrica de error a usar

Texto.

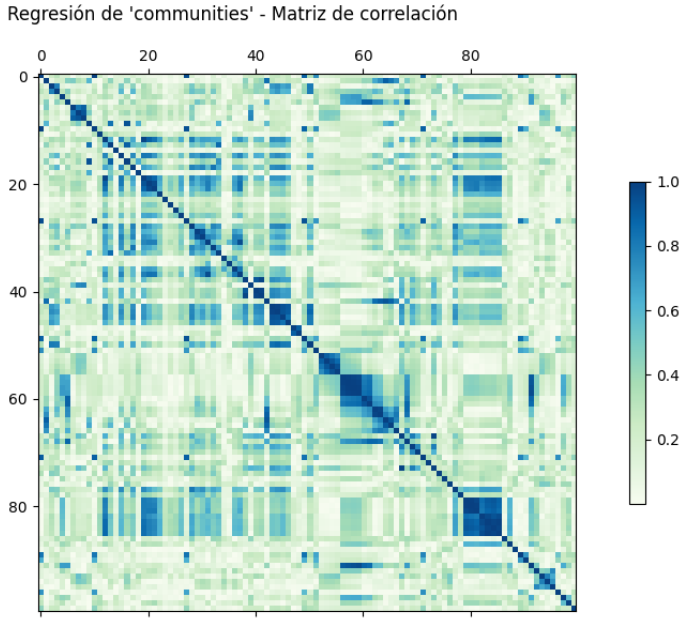


Imagen 14: Matriz de correlación

```
INFORMACIÓN DE LOS DATOS:
Número de atributos: 101 (uno es el goal)
Número de datos perdidos: 0
Número de atributos que contienen datos perdidos: 0
Intervalo en el que están las características: [0.0,1.0]
Intervalo en el que están las etiquetas: [0.0,1.0]
```

Imagen 15: Información de los datos después del preprocesado.

2.6. Discusión de la técnica de ajuste elegida

Texto.

2.7. Discusión de la necesidad de regularización

En su caso la justificar la función usada para ello.

2.8. Identificación de los modelos a usar

Texto.

2.9. Estimación de hiperparámetros y selección del mejor modelo

Texto.

Modelo	Alpha	Tol.	R^2 'train'	R^2 'test'
SGDR	1e-05	1e-09	0.677579	0.623585
SGDR	1e-05	1e-08	0.674869	0.622873
SGDR	1e-05	1e-07	0.676164	0.623709
SGDR	0.0001	1e-09	0.672437	0.618146
SGDR	0.0001	1e-08	0.674197	0.622222
SGDR	0.0001	1e-07	0.670412	0.621365
SGDR	0.001	1e-09	0.677248	0.622565
SGDR	0.001	1e-08	0.670999	0.621536
SGDR	0.001	1e-07	0.671176	0.621778

Imagen 16: Resultados de los diferentes modelos

2.10. Estimación por validación cruzada de E_{out} y comparación con E_{test}

Texto.

2.11. Modelo a proponer a la empresa

Suponga que Ud ha sido encargado de realizar este ajuste para una empresa. ¿Qué modelo les propondría y que error Eout les diría que tiene?. Justifique las decisiones.