



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Desarrollo de un paquete en SCALA y R para preprocesamiento y clasificación de datos ordinales

M^a CRISTINA HEREDIA GÓMEZ

Trabajo Fin de Máster
Máster en Ciencia de Datos e Ingeniería de Computadores

TUTOR
SALVADOR GARCÍA LÓPEZ

CO-TUTOR
PEDRO A. GUTIÉRREZ

ESCUELA INTERNACIONAL DE POSGRADO
E.T.S. INGENIERÍAS INFORMÁTICA Y DE TELECOMUNICACIÓN

GRANADA, A 12 DE SEPTIEMBRE DE 2018

©2014 – M^a CRISTINA HEREDIA GÓMEZ
ALL RIGHTS RESERVED.

Development of a package in SCALA and R for ordinal data preprocessing and classification

ABSTRACT

The present master's final project develop a software package with multiple algorithms for efficiently preprocessing and classifying data with specific intrinsic restrictions due to its nature, as ordinal and monotonic data.

In the first chapter is introduced the problem of dealing with ordinal and monotonic data, their nature and applications. The second chapter offers a theoretical explanation of the four supervised algorithms developed for classification (SVMOP, KDLOR, POM and WKNN) and the two for preprocessing (one instance selector and one feature selector). The third chapter introduces the Scala programming language, used in the development of that package. Chapter four includes a description of development and installation of the developed package for R, named OCAPIS. Chapter five contains the user guide of the package that will be published along with the package in CRAN. Finally, chapter six includes the results, conclusions and future work for OCAPIS.

KEYWORDS: Machine learning, Ordinal classification, Monotonic classification, Ordinal preprocessing, Monotonic preprocessing.

Desarrollo de un paquete en SCALA y R para preprocesamiento y clasificación de datos ordinales

RESUMEN

El presente trabajo de fin de máster desarrolla un paquete software de múltiples algoritmos para la eficiente clasificación y preprocesamiento de datos con restricciones intrínsecas específicas debido a su propia naturaleza, como son los datos ordinales y monotónicos.

En el primer capítulo se introduce el problema de trabajar con datos ordinales y monotónicos, su naturaleza y aplicaciones. El segundo capítulo ofrece una explicación teórica de los cuatro algoritmos supervisados de clasificación desarrollados (SVMOP, KDLOR, POM and WKNN) y los dos de preprocesamiento (un selector de instancias y un selector de características). El tercer capítulo introduce el lenguaje de programación Scala empleado en el desarrollo de este paquete. El capítulo cuarto, incluye una descripción del desarrollo e instalación del paquete desarrollado para R, de nombre OCAPIS. El capítulo quinto contiene el manual de usuario que será distribuido junto con el paquete en CRAN. Finalmente, en el capítulo sexto se recogen resultados, conclusiones y futuras ideas sobre OCAPIS.

KEYWORDS: Aprendizaje automático, Clasificación ordinal, Clasificación monotónica, Preprocesamiento ordinal, Preprocesamiento Monotónico.

Contenidos

1	INTRODUCCIÓN	2
1.1	El problema de la clasificación ordinal	2
1.2	El problema de la clasificación monotonica	5
1.3	Aplicaciones	6
2	ALGORITMOS IMPLEMENTADOS	7
2.1	Preprocesamiento	7
2.2	Clasificación	11
3	INTRODUCCIÓN A SCALA	19
3.1	Más ejemplos de Scala	21
3.2	Scala y la concurrencia	23
3.3	Scala y Big data	25
4	DESCRIPCIÓN DEL SOFTWARE DESARROLLADO	29
4.1	Instalación	29
4.2	Uso	31
5	MANUAL DE USUARIO DE OCAPIS 1.0	32
5.1	Fselector	32
5.2	Iselector	33
5.3	kdlorpredict	35
5.4	kdlortrain	36
5.5	pomfit	38
5.6	pompredict	39
5.7	svmofit	40
5.8	svmopredict	41
5.9	wknnor	42
6	CONCLUSION	44
6.1	Dataset balance-scale	44
	APPENDIX A SOME EXTRA STUFF	45
	REFERENCES	50

THIS IS THE DEDICATION.

Acknowledgments

LOREM IPSUM DOLOR SIT AMET, consectetur adipiscing elit. Morbi commodo, ipsum sed pharetra gravida, orci magna rhoncus neque, id pulvinar odio lorem non turpis. Nullam sit amet enim. Suspendisse id velit vitae ligula volutpat condimentum. Aliquam erat volutpat. Sed quis velit. Nulla facilisi. Nulla libero. Vivamus pharetra posuere sapien. Nam consectetur. Sed aliquam, nunc eget euismod ullamcorper, lectus nunc ullamcorper orci, fermentum bibendum enim nibh eget ipsum. Donec porttitor ligula eu dolor. Maecenas vitae nulla consequat libero cursus venenatis. Nam magna enim, accumsan eu, blandit sed, blandit a, eros.

Parte 1

Desarrollo teórico

Introducción al problema y descripción teórica de los algoritmos implementados.

1

Introducción

La predicción y clasificación supervisada de datos numéricos siempre ha sido un tema central de interés científico en el área de ciencia de datos y aprendizaje automático. También hay numerosas investigaciones publicadas en torno a el preprocesamiento de datos. Sin embargo, hasta hace unos años apenas se había prestado interés a la clasificación de datos ordinales, también conocida como regresión ordinal.

1.1 EL PROBLEMA DE LA CLASIFICACIÓN ORDINAL

Los datos de naturaleza ordinal no son más que datos cuyas clases muestran un claro orden. Es decir, para cada instancia $x \in X \subseteq \mathbb{R}^K$, con clase $y \in Y = C_1, C_2, \dots, C_n$, se tiene una relación de orden sobre las clases tal que $C_1 \prec C_2 \prec \dots \prec C_n$. Por ejemplo, datos recogidos de encuestas con diferentes grados de valoración, datos de resultados médicos considerando diferentes enfermedades, datos de psicología o, en general, datos obtenidos en cualquier área

científica donde los humanos intervengan para la generación de datos.

Por tanto, el problema de la clasificación de datos ordinales, o regresión ordinal, trata de clasificar datos ordinales considerando en los algoritmos el orden que presentan entre sí las clases de los datos, para obtener una clasificación más fiel a la naturaleza intrínseca de estos datos, y por tanto, construir un modelo más preciso. Pongamos como ejemplo datos obtenidos de una encuesta de valoración de un servicio que realizan un número de clientes, donde las posibles etiquetas son: [*malo, normal, bueno, muy bueno, excelente*]. En este caso, las clases contienen información de orden, pues pertenecer a la clase *malo* implica una peor valoración que pertenecer a la clase *excelente*, y por tanto un algoritmo de clasificación diseñado para tratar con datos ordinales debería considerar diferentes costes según el tipo de errores de clasificación que se produjesen. Por ejemplo, debería de penalizar más el clasificar como *malo* un servicio *excelente* que clasificarlo como *muy bueno*. Otro ejemplo similar de regresión ordinal sería la clasificación del riesgo de varias enfermedades en [*bajo, moderado, severo*] en base a los síntomas presentados por los pacientes. En este caso, la relación de orden presente sería los niveles de gravedad de una enfermedad.

Los problemas de clasificación de datos ordinales han estado presentes desde hace mucho, sin embargo se han abordado mayoritariamente como problemas nominales estándar, sin tener en cuenta el orden presente entre clases que las hace comparables, y por tanto llegando a soluciones no óptimas, aunque en trabajos como ¹⁵ se demostró que el uso de técnicas específicamente diseñadas para este tipo de problemas da mejores resultados que simplemente aplicar las técnicas estándar para datos nominales.

1.1.1 RANKING, ORDENACIÓN Y RANKING MULTIPARTITO

A pesar de su parecido, existen diferencias entre las técnicas de regresión ordinal y las de *ranking*, ordenación o *ranking* multipartito. En concreto, dado un conjunto de datos con etiquetas ordenadas, el objetivo del *ranking* será aprender un orden parcial subyacente en los datos, mientras que el de un problema de ordenación será de nuevo aprender un orden, en este caso

total, usando los datos de train (sin etiqueta) para ordenar los de test. El objetivo final de un problema de ranking multipartito es aprender un orden total de los datos usando para ello las etiquetas de los datos de entrenamiento, mientras que en regresión ordinal el enfoque no es encontrar un orden que describa los patrones, sino usar el orden presente en las etiquetas para tratar de asignar a las muestras las etiquetas más cercanas a las etiquetas reales de los datos.

1.1.2 TÉCNICAS DE REGRESIÓN ORDINAL

Las técnicas de regresión ordinal propuestas en la literatura se agrupan principalmente en tres: *enfoques naïve*, *enfoques de descomposición binaria* y *enfoques basados en límites*.

ENFOQUES NAÏVE

En ellos el modelo se obtiene usando otros algoritmos estándares de predicción, simplificando previamente el problema ordinal a un problema estándar. Se traducen sobre todo a problemas de regresión como NN,SVR,..., para lo que se transforman las etiquetas a valores reales²⁸ o se reconstruye la variable clase a partir de las distancias entre clases²⁶, de clasificación nominal, por ejemplo SVM³⁰, donde simplemente se ignora el orden de las etiquetas o de clasificación sensitiva al coste, para diferentes errores de clasificación²⁹.

ENFOQUES DE DESCOMPOSICIÓN ORDINAL

Estas técnicas se basan en descomponer las etiquetas ordinales en varias variables binarias, estimadas a partir de uno o varios modelos. Algunos de los algoritmos entrenan un modelo por cada subproblema (*multiple model*) como el enfoque seguido en¹³, que considera varios problemas de clasificación binaria independientemente, que luego combina en una única etiqueta, mientras que otros aprenden un único modelo para todos (*multiple-output single model*). Por ejemplo el perceptrón ordinal en redes neuronales⁸, que codifica las clases de la misma forma que Frank & Hall¹³ inicialmente.

ENFOQUES BASADOS EN LÍMITES

Asumen que en una variable continua no observada, llamada variable latente, reside la clase ordinal. Por tanto su objetivo es estimar una función f que prediga los valores de esa variable latente y un conjunto de límites o umbrales $b = (b_1, b_2, \dots, b_n) \in \mathbb{R}^n$ que representan intervalos en el rango de f y que cumplan que $b_1 \leq b_2 \leq \dots \leq b_n$. Dentro de estos enfoques se incluyen los *Cumulative Link Models* como POM²³ que trata de extender la regresión logística binaria a regresión ordinal. También presentan este enfoque las variantes de SVM: SVOREX (Support Vector Ordinal Regression with Explicit Constraints) y SVORIM (con restricciones implícitas)¹⁰, métodos de aprendizaje discriminativo como KDOR (Kernel Discriminant Learning for Ordinal Regression)²⁵, clasificación binaria aumentada, ensembles (ORBoost)²¹ y procesos gaussianos (GPOR)⁹.

1.2 EL PROBLEMA DE LA CLASIFICACIÓN MONOTÓNICA

La clasificación monotónica es un caso especial de clasificación ordinal, donde las clases son ordinales y discretas, y existen ciertas restricciones de monotonicidad entre las características y sus clases, tal que para cualesquiera instancias x, x' donde $x \leq x' \Rightarrow f(x) \leq f(x')$. Es decir, una instancia (x') que sea mayor que otra (x) no puede tener una clase menor. Se dice que las instancias x, x' son comparables si y sólo si $x \leq x'$ o $x' \leq x$, y se dicen idénticas si $x = x'$. Por tanto, un par de instancias cualesquiera x, x' serán monótonas si se cumple que:

$$x \preceq x' \wedge x \neq x' \wedge Y(x) \leq Y(x')$$

o si

$$x = x' \wedge Y(x) = Y(x')$$

donde $Y = y_1, y_2, \dots, y_c$ es la variable de clase.

Siguiendo con la definición, un conjunto de datos se dirá que es monotónico si para todos los

posibles pares de instancias se cumple que son monótonas o incomparables.

Las restricciones monotónicas están presentes en muchos datos reales, como por ejemplo en precios de viviendas, dado que los precios se incrementan a medida que lo hace el tamaño de la casa y la distancia al centro de ciudad. También están presentes en medicina, leyes y fianzas, por ejemplo para predicción de bancarota en las empresas, donde se comparan compañías donde unas dominan a otras en todos los indicadores financieros.

1.2.1 CLASIFICADORES MONOTÓNICOS

La mayoría de los clasificadores monotónicos requieren que los datos que reciben cumplan las restricciones de monotonía. En la literatura se han propuesto varios clasificadores que tienen en cuenta estas restricciones en los datos, como OLM (Ordinal Learning Model)³ que fue el primero en hacerlo y se basa en el uso de la función:

$$f_{OLM}(x) = \max \{y_i : x_i \in D', x_i \preceq x\}$$

donde $D' \subseteq D$ y D denota el conjunto de instancias. También OSDL (Ordinal Stochastic Dominance Learner) que emplea un enfoque estocástico consistentes en dos funciones²⁰, MID que se basa en el uso de entropía e ID3² y KNN Monotónico que fija unos rangos que definen los valores de clase que puede tomar cada instancia en base a su condición¹², entre otros.

1.3 APLICACIONES

Dado que existen multitud de datos de naturaleza ordinal y monotónica, técnicas de esta índole se han aplicado en problemas médicos⁴ como la extracción de reglas para la detección temprana de demencia²⁴, estimación de edad⁷, interfaz cerebro-máquina³⁴, credit rating¹⁹, econometría²², reconocimiento facial¹⁸, clasificación de imágenes²⁷ y de texto¹ y asesoramiento de belleza facial³³ son algunos ejemplos de las aplicaciones actuales de este campo.

2

Algoritmos implementados

En este capítulo se revisan los seis algoritmos de preprocesamiento y clasificación de datos ordinales y monotónicos implementados en el paquete software desarrollado, ofreciendo una descripción teórica de los mismos. Para ello se divide el capítulo en dos secciones: algoritmos de preprocesamiento y algoritmos de clasificación.

2.1 PREPROCESAMIENTO

2.1.1 SELECTOR DE CARACTERÍSTICAS PARA CLASIFICACIÓN MONOTÓNICA

Se implementa en el paquete el algoritmo para selección de características¹⁷ basado en Rank Mutual Information. El funcionamiento del algoritmo propuesto por Qinghua Hu et Al. es el siguiente:

Consideremos un conjunto de datos $\langle U, A, D \rangle$ donde U denota las instancias, A denota los

atributos y D las clases, tal que $D = d_1 < d_2 < \dots < d_k$. Entonces, para cada atributo $a \in A$ se calculan las relaciones entre las instancias usando la siguiente función *logsig*:

$$r_{ij}^{<} = \frac{1}{1 + e^{k(v(x_i, a) - v(x_j, a))}}$$

Donde $v(x_i, a)$ es el valor de la instancia x_i para el atributo a , y k es una constante positiva. El resultado de aplicar esta función es:

$$\left\{ \begin{array}{ll} 0.5, & \text{si } r_{ii}^{>} = r_{ii}^{<} \\ \approx 1, & \text{si } v(x_j, a) \gg v(x_i, a) \\ \approx 0, & \text{si } v(x_j, a) \ll v(x_i, a) \end{array} \right\}$$

Es decir, en el primer caso no habría diferencia entre x_i y x_j , en el segundo caso x_i sería significativamente inferior a x_j , y en el tercer caso x_i sería significativamente mayor.

Con esto se calculan los conjuntos ordinales difusos mayores que x_i en términos de a de la siguiente forma:

$$[x_i]_a^{\leq} = r_{i1}/x_1 + r_{i2}/x_2 + \dots + r_{in}/x_n$$

que serán posteriormente usados para calcular la *mutual rank information* entre dos atributos cualesquiera sobre un conjunto de instancias de la siguiente forma:

$$RMI_{a_1, a_2}(U) = - \sum_{i=1}^n \frac{1}{n} \log \frac{|[x_i]_{a_1}^{\leq}| \times |[x_i]_{a_2}^{\leq}|}{n \times |[x_i]_{a_1}^{\leq} \cap [x_i]_{a_2}^{\leq}|}$$

Esta ganancia de información se combina junto con la ganancia de información de cada característica con respecto a la clase, obteniendo el criterio mRMR (minimum redundancy maximum relevance), que trata de encontrar las características más significativas y menos relevantes:

$$\Phi = \frac{1}{|B|} \sum_{a_i \in B} RMI_{a_i, D} - \frac{\beta}{|B|^2} \sum_{a_i, a_j \in B} RMI_{a_i, a_j}$$

donde β es un parámetro regulativo. Finalmente se seleccionan las k características con mayor mRMR.

2.1.2 SELECTOR DE INSTANCIAS PARA CLASIFICACIÓN MONOTÓNICA

EL selector de instancias para datos monotónicos implementado en el paquete es el algoritmo propuesto por J.-R. Cano, S. García, de nombre MonTSS⁵.

MonTSS tiene como objetivo eliminar las instancias que no son interesantes para el problema monotónico, lo que reduce la dimensión del problema y, como efecto colateral, los costes de computación. El algoritmo se compone de tres fases, como ilustra la siguiente figura:

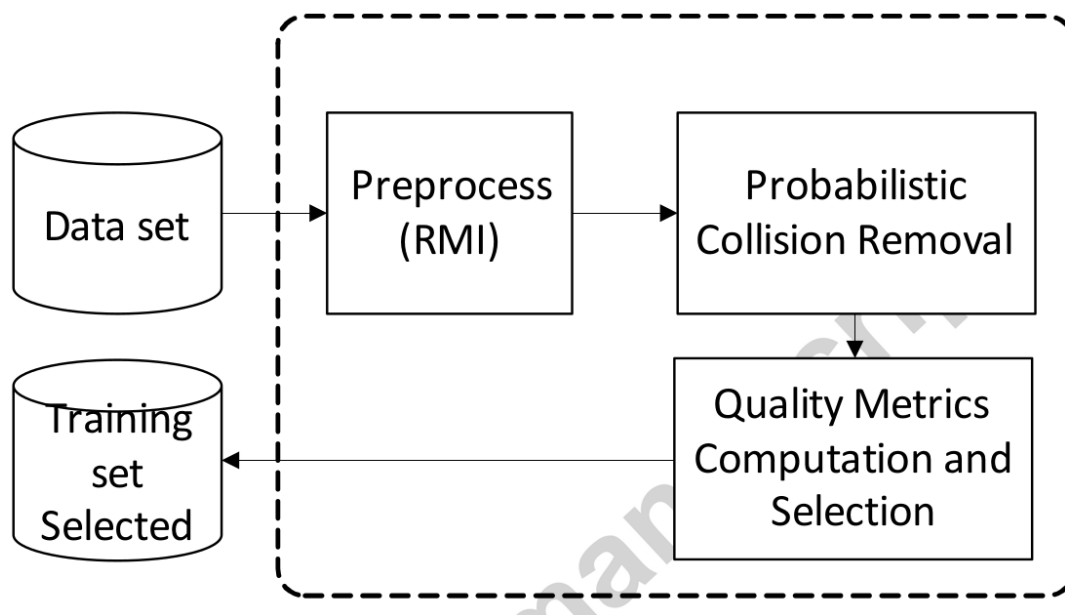


Figure 2.1: Fases del proceso de MonTSS.

- **Preprocesamiento:** se analiza inicialmente la relación de cada característica con la clase, usando RMI de forma similar a la descrita en el algoritmo anterior. Las características seleccionadas en este paso serán las empleadas en pasos posteriores del algoritmo.
- **Eliminación de colisiones:** se trata de un proceso iterativo en el que se eliminan la mayoría de las instancias que producen colisiones, es decir, las que no son monótonas.

Para ello se comienza calculando el número de colisiones que produce cada instancia, tras lo que se ordenan de forma decreciente. Luego se emplean la tasa de candidatos a seleccionar y el número de colisiones permitidas especificadas previamente al algoritmo como parámetro, para eliminar las instancias. Este último paso se hace de forma probabilística, pues para seleccionar la instancia a eliminar se genera un valor entre $[1, maxCandidates]$, Donde $maxCandidates$ se calcula a partir del tamaño de los datos y de la tasa de candidatos. El proceso se repite hasta que se alcanza el número permitido de colisiones.

- **Cálculo de métricas:** de entre las instancias seleccionadas en el paso anterior, se seleccionan finalmente las más importantes, que son las que se corresponden con fronteras de decisión. Para detectarlas, se emplean dos métricas, llamadas *Delimitación* e *Influencia*. Se calculan como sigue:

$$Del(x_i) = \frac{|Dom(x_i) - NoDom(x_i)|}{Dom(x_i) + NoDom(x_i)}$$

Donde

$$Dom(x_i) = x' \in X' \iff x_i \prec x' \wedge Y(x_i) = Y(x')$$

$$NoDom(x_i) = x' \in Z' \iff x_i \succeq x' \wedge Y(x_i) = Y(x')$$

Es decir, $Dom(x_i)$ son las instancias con igual clase que x_i que dominan a ésta, mientras que $NoDom(x_i)$ son las instancias con igual clase a x_i que son dominadas por ella.

Por otro lado, la influencia de una instancia x_i se calcula empleando los vecinos con diferente clase y su distancia a x_i , que se traduce en un peso asociado:

$$Infl(x_i) = \sum_{j=1}^k influenceWeight(x_j)$$

donde $influenceWeight$ se calcula como el peso normalizado de la instancia x_j y se cumple que $Y(x_i) \neq Y(x_j) \wedge x_j \in kNN_{x_i}$.

Ambas métricas toman valores en el rango $[0, 1]$, considerando 1 como muy relevante.

2.2 CLASIFICACIÓN

2.2.1 SVMOP

Se implementa el ensemble de WSVMs para clasificación ordinal³¹ usando descomposición binaria. Esta técnica se basa en descomponer el problema en varios subproblemas binarios, entrenando $r - 1$ SVM's, donde r denota el número de clases del problema. Sigue un enfoque muy similar al de ensembles probabilísticos que propuso Frank & Hall¹⁴:

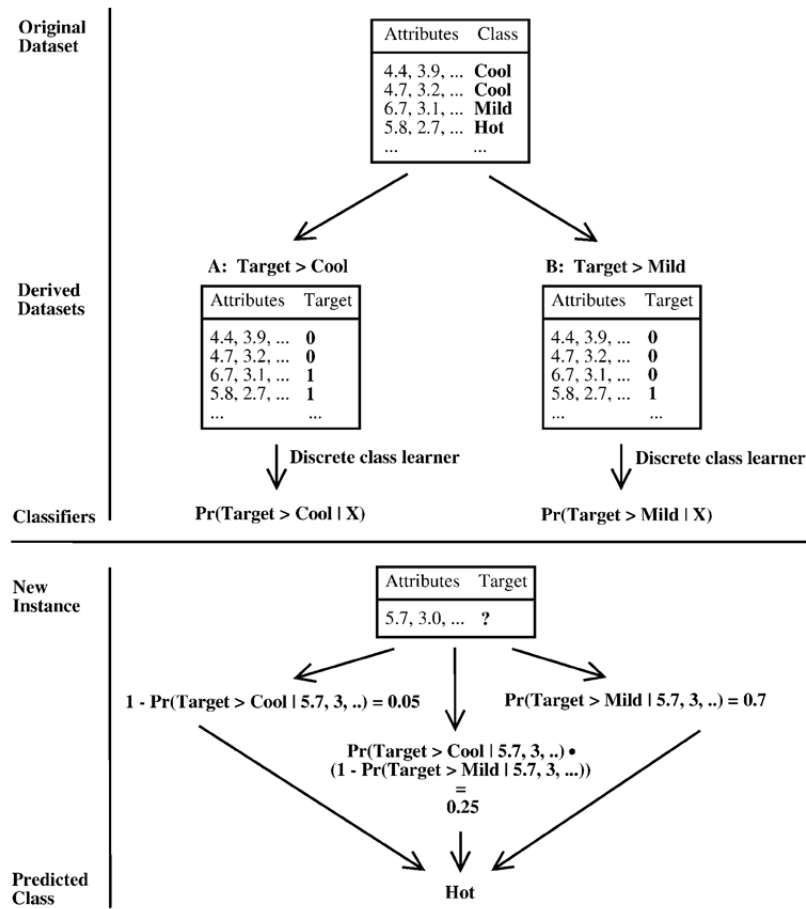


Figure 2.2: Aplicando algoritmos de clasificación estándar a predicción ordinal.

En concreto, para cada clasificador binario se transforman las instancias de entrenamiento

a la clase positiva o negativa, binarizándolas en función de si su etiqueta es mayor o no que p , donde $p = 1, \dots, r - 1$.

$$y_{pi} = \begin{cases} -1, & \text{si } y_i \leq p \\ 1, & \text{si } y_i > p \end{cases}$$

Siguiendo con el enfoque Frank & Hall, tras esto hay que asignarle un peso a cada una de las muestras, que será diferente para cada clasificador, lo que implica resolver los $r - 1$ problemas de optimización subyacentes.

Los pesos se asignan de forma que los errores de clasificación sean penalizados proporcionalmente a la diferencia absoluta de la clase de la instancia y p :

$$v_{pi} = \begin{cases} (p + 1 - y_i) \frac{|\{x_i | y_i \leq p\}|}{\sum_{i=1; y_i \leq p}^n (p + 1 - y_i)}, & \text{si } y_i \leq p \\ (y_i - p) \frac{|\{x_i | y_i > p\}|}{\sum_{i=1; y_i > p}^n (y_i - p)}, & \text{si } y_i > p \end{cases}$$

y se escalan para que mantenga igual la suma de errores de las clases positiva y negativa. Las clases de los datos de test se estiman combinando las \hat{y}_{pi} predicciones obtenidas por los $r - 1$ clasificadores, de tal forma que asignaremos la clase k a x_i si $\hat{y}_{pi} = 1$ para todo $p < (k - 1)$ y $\hat{y}_{pi} = -1$ para todo $p \geq k$. Sin embargo, para problemas multiclase a menudo ocurren ambigüedades con este proceso de asignación de clase, por lo que se asigna la clase con mayor probabilidad. En la implementación se usa *libsvm-weights*⁶ para el entrenamiento de las SVMs.

2.2.2 POM

Se implementa el modelo lineal de regresión *Proportional Odd Model for Ordinal Regression*²³ como un modelo de regresión logística, en base a lo siguiente:

Sean k las categorías ordenadas de la variable de clase, con probabilidades $\pi_1(x), \pi_2(x), \dots, \pi_k(x)$ donde las variables observadas toman valor x . En el caso de que hubiera dos grupos, x sería una variable factor que indicaría la pertenencia a cada grupo. Sea Y la variable de clase que toma valores en el intervalo $[1, \dots, k]$ con las probabilidades mencionadas arriba, y sea $k_j(x)$ la

cuota de que $Y \leq j$ dado x . Entonces el modelo POM especifica que:

$$k_j(x) = k_j \exp(-\beta^T x), (1 \leq j < k)$$

Donde β es un vector de parámetros desconocidos. El ratio de las cuotas correspondientes se calcula como:

$$k_j(x_1)/k_j(x_2) = \exp \{ \beta^T (x_2 - x_1) \}, (1 \leq j < k)$$

y es independiente de j , dependiendo únicamente de la diferencia de las covariables x_2, x_1 . Entonces, como la cuota de $Y \leq j$ es el ratio $\gamma_j(x)/\{1 - \gamma_j(x)\}$, donde $\gamma_j(x) = \pi_1(x) + \dots + \pi_j(x)$, el modelo POM resulta idéntico a el modelo de regresión logística lineal:

$$\log \left[\gamma_j(x)/\{1 - \gamma_j(x)\} \right] = \theta_j - \beta^T x, (1 \leq j < k)$$

donde $\theta_j = \log(k_j)$ por lo que la diferencia entre logits cumulativos es independiente de la categoría.

2.2.3 KDLOR

*Kernel Discriminant Learning for Ordinal Regression*²⁵ es una versión Kernel de LDA aplicable a datos no lineales de naturaleza ordinal.

Consideremos un problema de regresión ordinal con K clases ordenadas, tal que $Y = \{1, 2, \dots, K\}$.

El objetivo será encontrar una proyección de los datos donde:

- se minimize la distancia dentro de las clases y se maximize la distancia entre clases, como en un enfoque LDA.
- se respete la información de orden de las diferentes clases, por ejemplo, la proyección de las muestras con mayor rango deben ser mayores que las proyecciones de las clases con bajo rango.

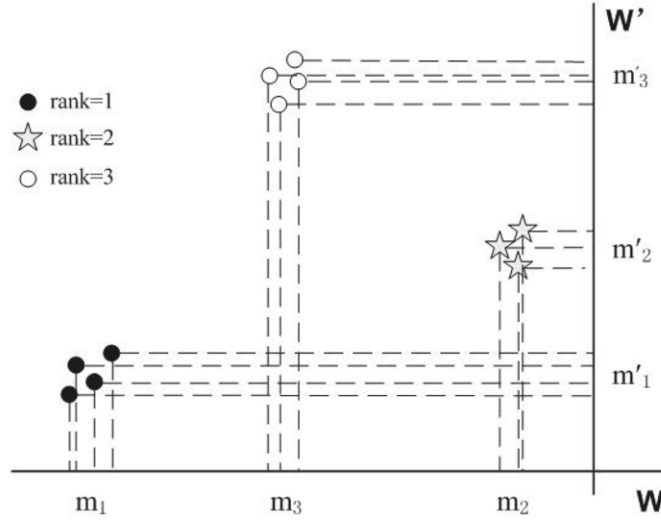


Figure 2.3: w es mejor para clasificación según el LMP, mientras que w' preserva el orden de las clases.

Aunque la proyección sobre w resulta mejor para la clasificación según el principio de máxima-marginalidad, la proyección sobre w' preserva el orden de las clases, a diferencia de w . Por tanto el problema es:

$$\min(\mathcal{J}, \rho) = w^T \cdot S_w \cdot w - C \cdot \rho$$

sujeto a:

$$w^T \cdot (m_{k+1} - m_k) \geq \rho, k = 1, 2, \dots, K - 1$$

donde

- S_w es la matriz dispersa de separación interclase:

$$S_w = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^K \sum_{x \in X_k} (x - m_k)(x - m_k)^T$$

- m_k es la media de las muestras de la clase k -ésima:

$$m_k = \frac{1}{N_k} \sum_{x \in X_k} x$$

- C es un coeficiente de penalización

Es decir, el modelo trata de minimizar las varianzas de los datos de las mismas clases mientras que al mismo tiempo trata de extender la diferencia entre las medias proyectadas entre dos clases vecinas, lo que hace que por un lado maximize la distancia entre dos vectores medios del par de clases más cercano, y por otro lado utilice la información de distribución de los datos en el algoritmo.

Para resolver el problema anterior, se resuelve una ecuación de Lagrange con multiplicadores $\alpha_k \geq 0$, quedando a resolver el siguiente problema de optimización de programación cuadrática convexa (QP) con restricciones lineales:

$$\min f(\alpha) = \sum_{k=1}^{K-1} \alpha_k (m_{k+1} - m_k)^T S_w^{-1} \sum_{k=1}^{K-1} \alpha_k (m_{k+1} - m_k)$$

sujeto a $\alpha_k \leq 0, k = 1, \dots, K-1$ y $\sum_{k=1}^{K-1} \alpha_k = C$. Tras obtener la dirección óptima de w usando α , la clase de una nueva muestra se clasifica usando la siguiente regla de decisión:

$$f(x) = \min_{k \in \{1, \dots, K\}} \{k : w \cdot x - b_k < 0\}$$

donde

$$b_k = w(m_{i+1} + m_i)/2$$

Para el caso no lineal, será necesario mapear los datos originales a un espacio de mayor dimensionalidad usando una función de mapeo $\varphi : x \rightarrow \varphi(x)$, por lo que w quedaría como:

$$w = \sum_{i=1}^N \beta_i \varphi(x_i), \beta_i \in \mathbb{R}$$

Quedando el problema de optimización como:

$$\min \mathcal{J}(\beta, \rho) = \beta^T \cdot H \cdot \beta - C \cdot \rho$$

sujeto a

$$\beta^T \cdot (M_{k+1} - M_k) \geq \rho, k = 1, \dots, K - 1$$

donde

- $(M_k)_j = \frac{1}{N_k} \sum_{x \in X_k} \varphi(x_j) \cdot \varphi(x)$
- $H = \sum_{k=1}^K P_k (I - 1_{N_k}) P_k^T$
- P_k es una matriz $N \times N_k$ con $(P_k)_{i,j} = \varphi(x_i) \cdot \varphi(x_j), x_j \in X_k$
- I es la matriz identidad
- 1_{N_k} es la matriz con entradas $1/N_k$

Por lo que usando núcleos de mercer con un conjunto de funciones de $s(x_i, x_j) = \varphi(x_i) \cdot \varphi(x_j)$ se resuelve el problema de forma similar al caso linear.

2.2.4 WKNN

Se implementa la extensión de KNN para datos ordinales *Weighted k-Nearest-Neighbors*¹⁶ que se basa en la idea de que las observaciones del conjunto de entrenamiento más próximas a la nueva observación a clasificar deben tener un mayor peso en su decisión. Además, para que el algoritmo sea también aplicable a datos monotónicos, se le incorporan restricciones de monotonicidad¹².

El procedimiento del algoritmo se puede describir como:

1. **Estandarización de variables:** previamente al cálculo de las distancias, para lo que se divide cada variable por su desviación estándar.
2. **Obtención de vecinos:** Sea $L = \{(y_i, x_i), i = 1, \dots, n_L\}$ un conjunto de entrenamiento donde x_i denota la instancia e y_i denota la clase. Dada una nueva instancia de test x a clasificar, se obtienen sus $k + 1$ vecinos más cercanos de acuerdo a la distancia de Minkowski, dado el parámetro q de la misma.

3. **Estandarización por el (k+1)ésimo vecino:** se estandarizan las k distancias obtenidas en el paso anterior usando el vecino $k + 1$ que no será considerado para la clasificación de x , tal que:

$$D_{(i)} = D(x, x_{(i)}) = \frac{d(x, x_{(i)})}{d(x, x_{k+1})}$$

4. **Asignación de pesos:** se transforman las distancias $D_{(i)}$ normalizadas a pesos, usando para ello alguna de las funciones Kernel implementadas, tal que $w_{(i)} = K(D_{(i)})$. Los Kernels que se implementan son:

- Rectangular: $\frac{1}{2} \cdot I(|d| \leq 1)$
- Triangular: $(1 - |d|) \cdot I(|d| \leq 1)$
- Epanechnikov: $\frac{3}{4}(1 - d^2) \cdot I(|d| \leq 1)$
- Biweight: $\frac{15}{16}(1 - d^2)^2 \cdot I(|d| \leq 1)$
- Triweight: $\frac{35}{32}(1 - d^2)^3 \cdot I(|d| \leq 1)$
- Coseno: $\frac{\pi}{4} \cos(\frac{\pi}{2}d) \cdot I(|d| \leq 1)$
- Gaussiano: $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{d^2}{2})$
- Inversión: $\frac{1}{|d|}$

5. **Asignación de clase:** por último, se etiqueta x con clase y donde y es la clase con mayor peso de entre sus vecinos.

Si se especifica el parámetro de monotonía, entonces se aplican restricciones monotónicas en la asignación de clases, de tal forma que se restringe la clase que puede tomar una instancia al intervalo $[y_{min}, y_{max}]$, donde:

$$y_{min} = \max \{y | (x', y) \in D \wedge x' \leq x\}$$

y

$$y_{max} = \min \{y | (x', y) \in D \wedge x \leq x'\}$$

Por tanto el procedimiento es el mismo que el anterior pero, en este caso, al obtener los k vecinos de la nueva instancia a clasificar, x , le asignamos la etiqueta de sus vecinos más frecuente que se encuentre en el intervalo $[y_{min}, y_{max}]$. Si ninguna etiqueta se encuentra en ese intervalo, se le asigna una clase aleatoria del intervalo.

"If I were to pick a language to use today other than Java, it would be Scala."

James Gosling

3

Introducción a Scala

SCALA, (Scalable language) es un lenguaje de programación de propósito general cuya primera versión fue lanzada en 2004, y desde entonces ha ido creciendo enormemente en usuarios. Estas son algunas razones por las que se decide usar Scala en este proyecto (Wampler & Payne³²):

ES ESCALABLE

Tal y como su nombre indica, este lenguaje ha sido diseñado para crecer con las demandas de sus usuarios, por lo que es una buena opción para escribir desde scripts pequeños a grandes sistemas, abordar desafíos actuales como el Big data o proporcionar servicios con gran disponibilidad y robustez. Esta es la principal razón por la que se escoge este lenguaje para este proyecto, dado que la intención es ir ampliándolo.

SOPORTA UN PARADIGMA MIXTO

Por una parte Scala soporta programación orientada a objetos (POO), mejorando los objects de Java incluyendo los traits, una forma clara de implementar los tipos usando composiciones mixtas. En Scala todo son objetos realmente, incluso los tipos numéricos. Por otro lado, también soporta totalmente programación funcional (FP), herramienta que se ha convertido en la mejor forma de pensar en concurrencia, Big data y corrección del código en general (empleo de inmutabilidad, funciones de primera clase, funciones de alto orden...).

TIENE UN SOFISTICADO SISTEMA DE TIPOS

Extiende el sistema de tipos de Java con otros tipos genéricos más flexibles y otras mejoras para mejorar la corrección del código. Además Scala incorpora un mecanismo de inferencia de tipos.

ES ESTATICAMENTE TIPADO

Scala incorpora el tipado estático como herramienta para crear aplicaciones más robustas, pero añade algunas modificaciones para hacerlo más llevadero, como incorporar la inferencia de tipos y hacerlo más flexible, permitiendo identificación de patrones y nuevas formas de escribir y componer tipos.

UN LENGUAJE JVM Y JAVASCRIPT

Explota las funcionalidades y optimizaciones de JVM, así como la gran cantidad de librerías y herramientas disponibles para Java. Además tiene un puerto para JavaScript (Scala.js).

SINTAXIS CONCISA, ELEGANTE Y FLEXIBLE

Si de algo hablan los programadores de Scala es de su sintaxis y de las reducciones de código que experimentan con respecto a Java. Por ejemplo:

```
// código en Java
class Persona {
    private int edad;
    private String nombre;

    public Persona(int edad, String nombre) {
        this.edad = edad;
        this.nombre = nombre;
    }
}

// código en Scala
class Persona(edad: Int, nombre: String)
```

Sí, dado este código en Scala el compilador creará dos atributos privados `edad`(entero) y `nombre`(cadena de caracteres) y un constructor que tomará los valores que se le pasen inicialmente para inicializar esas variables. Más rápido de escribir, de leer, y menos errores.

3.1 MÁS EJEMPLOS DE SCALA

A continuación se muestran algunos ejemplos simples de Scala obtenidos de ?

3.1.1 ENCONTRAR CARACTER EN MAYÚSCULA

Éste es un ejemplo en Java y Scala del problema de encontrar un caracter en mayúscula en una cadena de texto:

```
// código en Java
boolean hasUpperCase = false;
for(int i = 0; i < name.length(); i++) {
    if(Character.isUpperCase(name.charAt(i))) {
        hasUpperCase = true;
        break;
    }
}

// código en Scala
val hasUpperCase = name.exists(_.isUpper)
```

Mientras que el código en Java itera sobre cada caracter del string, comprobando uno a uno hasta que encuentra una mayúscula, modifica el flag booleano y se sale del bucle, en Scala basta con llamar a la función exist sobre el string name, devolviendo un booleano. La `_` representa cada caracter de la cadena. De nuevo Scala seduce con su sintaxis.

3.1.2 CONTAR LAS LÍNEAS DE UN FICHERO

```
# código en Ruby
count = 0
File.open "someFile.txt" do |file|
  file.each { |line| count += 1 }
end
```

```
// código en Scala
val count = scala.io.Source.fromFile("someFile.txt").getLines().map(x => 1).sum
```

En Ruby también se realiza de forma breve, pero no tan elegante, ya que necesita una variable contador que va incrementando en cada vez que cuenta una línea. En Scala, una posible forma

de hacerlo es usando `map`, una función que a cada línea del fichero le hace corresponder un 1. Finalmente los suma todos llamando a `sum`.

Además, Scala soporta composición mixta a través de los `traits`. Los `traits` son parecidos a las clases abstractas con implementación parcial. Por ejemplo, podríamos crear un nuevo tipo de colección que permitiera acceder al contenido del fichero como un `iterable`, mezclando el `trait Iterable` de Scala:

```
class FileAsIterable {  
  def iterator = scala.io.Source.fromFile("someFile.txt").getLines()  
}
```

Ahora si lo mezclamos con el `trait Iterable` de Scala, al crear un objeto de esa clase, éste será un `Iterable`, teniendo acceso a los métodos de `Iterable`:

```
val newIterator = new FileAsIterable with Iterable[String]  
newIterator.foreach { line => println(line) }
```

donde el método `foreach` al que llama, es de `Iterable`.

3.2 SCALA Y LA CONCURRENCIA

Uno de los grandes problemas de la concurrencia es que si no se coordina bien el acceso a los recursos puede haber cambios inesperados e indeseados en los mismos, por acción de alguna de las hebras. Scala ayuda en esto con la inmutabilidad, de hecho, por defecto lo hace todo inmutable. Aunque en Scala se puede usar cualquier mecanismo de Java, Scala incorpora también sus propias herramientas específicas para concurrencia. Algunas de ellas son: Wampler & Payne³²

3.2.1 FUTURES

La API `scala.concurrent.Future` simplifica la concurrencia en código. Los Futures empiezan a correr concurrentemente cuando son creados, aunque lo hacen de forma asíncrona. Se puede hacer que las tareas sean independientes y sin bloqueo o por el contrario, bloquear, y además la API ofrece muchas funcionalidades para manejar los resultados (que pueden ser un Future), como callbacks que pueden ser invocados cuando el resultado esté listo. Veamos un ejemplo simple en el que se lanzan concurrentemente 5 tareas:

```
import scala.concurrent.Future
import scala.concurrent.ExecutionContext.Implicits.global

def sleep(millis: Long) = {
  Thread.sleep(millis)
}

// Busy work ;)

def doWork(index: Int) = {
  sleep((math.random * 1000).toLong)
  index
}

(1 to 5) foreach { index =>
  val future = Future {
    doWork(index)
  }
  future onSuccess {
    case answer: Int => println(s"Success! returned: $answer")
  }
  future onFailure {
    case th: Throwable => println(s"FAILURE! returned: $th")
  }
}
```

```
sleep(1000) // Wait long enough for the "work" to finish.  
println("Finito!")
```

Se usa un método `SLEEP` para simular la ocupación por un tiempo. El método `doWork` llama a `sleep` con un número aleatorio de milisegundos. Se itera con `foreach` en un rango de enteros (1 a 5 inclusive) y se llama a `scala.concurrent.Future.apply`. En este caso, `Future.apply` recibe una función de trabajo a realizar (`doWork`), y devuelve un nuevo objeto `Future`, el cual ejecuta el cuerpo de `doWork` (`index`) en otra hebra, devolviendo el control inmediatamente al bucle. Finalmente se usan `onSuccess` (si la tarea se completa correctamente) y `onFailure` (si falla) para registrar los callbacks.

3.2.2 MODELO DE ACTORES

Una regla de la concurrencia es: si puedes, no compartas. Los actores son entidades software independientes que no comparten unos con otros información mutable que se pueda alterar. En su lugar se comunican mediante mensajes, eliminando la necesidad de sincronizar el acceso a datos, estados e información mutable. De esta forma es más fácil crear aplicaciones concurrentes robustas. Cada actor cambia su estado según lo necesite, pero sólo si tiene acceso exclusivo a ese estado y sus invocaciones se garantizan seguras.

3.3 SCALA Y BIG DATA

Las funciones `map`, `flatMap`, `filter`, `fold`, `reduce`...etc siempre han sido funciones para trabajar con datos, independientemente de que estos fueran grandes o pequeños. Es por esto que una vez que se entiende Scala y sus colecciones, resulta fácil enganchar una API de Big data basada en Scala, sin embargo, sabiendo Java, enganchar con MapReduce Java API resulta más complicado por ser más difícil de usar y estar a más bajo nivel.

Pero la principal ventaja de Scala en Big data frente a otros lenguajes no es la curva de aprendizaje, sino la programación funcional. Scala permite escribir lo mismo (o más), con menos

código que otros lenguajes. El ejemplo simple de contar el número de palabras, sacado de Wampler & Payne³² bastará para evidenciar a simple vista la ventaja de las APIs Big data basadas en Scala frente a las basadas en Java.

Esto es sólo parte de la versión Hadoop. El original se compone de unas 60 líneas de código, sin imports ni comentarios.

```
// src/main/java/progscala2/bigdata/HadoopWordCount.javaX
...
class WordCountMapper extends MapReduceBase
implements Mapper<IntWritable, Text, Text, IntWritable> {
    static final IntWritable one = new IntWritable(1);
    static final Text word = new Text();

    @Override public void map(IntWritable key, Text valueDocContents,
        OutputCollector<Text, IntWritable> output, Reporter reporter) {
        String[] tokens = valueDocContents.toString().split("\\s+");
        for (String wordString: tokens) {
            if (wordString.length > 0) {
                word.set(wordString.toLowerCase());
                output.collect(word, one);
            }
        }
    }
}

class WordCountReduce extends MapReduceBase
implements Reducer<Text, IntWritable, Text, IntWritable> {
    public void reduce(Text keyWord, java.util.Iterator<IntWritable> counts,
        OutputCollector<Text, IntWritable> output, Reporter reporter) {
        int totalCount = 0;
        while (counts.hasNext()) {
```

```
        totalCount += counts.next.get;
    }
}
```

Ahora una versión Scalding, basado en Scala. El código original tiene 12 líneas de código, contando el import:

```
// src/main/scala/progscala2/bigdata/WordCountScalding.scalaX
import com.twitter.scalding._

class WordCount(args : Args) extends Job(args) {
    TextLine(args("input"))
    .read.flatMap('line -> 'word) {
        line: String => line.trim.toLowerCase.split("\\s+")
    }.groupBy('word){ group => group.size('count) }
    .write(Tsv(args("output")))
}
```

Parte 2

Desarrollo práctico

Descripción y documentación del software que implementa las técnicas mencionadas anteriormente.

4

Descripción del Software desarrollado

Ésta es la primera versión de OCAPIS, una librería software para preprocesamiento y clasificación de datos ordinales y monotónicos desarrollada para R pero implementada en Scala mayoritariamente, para potenciar su rendimiento. Para comunicar R con Scala se hace uso del paquete `rScala` ^{Dahl}.

4.1 INSTALACIÓN

Como dependencias a nivel de sistema, el paquete requiere que el usuario tenga instaladas alguna versión de Python y alguna versión de Scala en su sistema. Si este requisito no se cumple, el paquete no funcionará. El requerimiento de *Scala* es debido a que el serializer necesitará que esté instalado en el sistema para poder hacer las comunicaciones entre Scala y R.

4.1.1 INSTALACIÓN DE SCALA

Scala puede instalarse desde los repositorios, en caso de usar linux:

```
$ sudo apt-get install scala
```

En caso de Ubuntu, sustituyendo el comando por *emerge* si la distribución usada es gentoo o el correspondiente comando de instalación. Scala también puede instalarse desde su página web: <https://www.scala-lang.org/download/install.html>.

4.1.2 INSTALACIÓN DE PYTHON

Python se instala de forma similar, vía el repositorio o la página oficial : <https://www.python.org/downloads/>. Python es requerido porque la SVM ordinal implementada usa una librería C con wrapper para python para aplicar pesos por instancias, de nombre **libsvm-weights**.

4.1.3 INSTALACIÓN DE LIBSVM-WEIGHTS

Esta librería es muy potente, pero no la podemos encontrar en ningún repositorio. Es por tanto que debemos descargarla desde github: <https://github.com/claesenm/EnsembleSVM/tree/master/libsvm-weights-3.17> y compilarla para windows o linux, según nuestro sistema, usando el makefile correspondiente (seguir las instrucciones del README de la libería). Por último debemos colocar la librería compilada en el directorio de librerías de usuario: [/usr/local/lib](#) o [/usr/lib](#) en Linux, o su homólogo en windows.

4.1.4 INSTALACIÓN DE OCAPIS

Actualmente OCAPIS puede descargarse desde Github, usando el paquete *devtools* desde R:

```
$ devtools::install_github("CristinaHG/OCAPIS")
```

Aunque pronto podrá descargarse desde CRAN. El resto de dependencias R del paquete se instalarán automáticamente.

4.2 Uso

Todos los algoritmos de clasificación de OCAPIS tienen un método asociado para entrenar con los datos de entrenamiento y otro para clasificar las instancias de test con el modelo aprendido, siguiendo un enfoque típico en los paquetes de R. Por ejemplo, KDLOR incluye un método *kdlortrain* y otro *kdlorpredict*, SVMOP incluye otros dos métodos *svmofit* y *svmopredict*, etc, cuyo uso se detalla en el manual de usuario.

Por ejemplo, así sería el uso de SVMOP con el dataset ordinal **balance**:

```
library("OCAPIS")
# lectura de datos de train
dattrain<-read.table("train_balance-scale.0", sep=" ")
# entrenamiento del modelo
modelstrain<-svmofit(dattrain[, -ncol(dattrain)], dattrain[, ncol(dattrain)], TRUE, 1, 1)
# lectura de datos de test
dattest<-read.table("test_balance-scale.0", sep=" ")
# cálculo de predicciones
predictions<-svmopredict(modelstrain, dattest[, -ncol(dattest)])
```

La documentación completa para estos métodos puede consultarse con

```
?OCAPIS::svmofit
```

```
?OCAPIS::svmopredict
```

5

Manual de usuario de OCAPIS 1.0

5.1 FSELECTOR

5.1.1 TITTLE

Feature Selection for Monotonic Classification.

5.1.2 USE

```
fselector(traindata, trainlabels, k, beta, nselected)
```

5.1.3 ARGUMENTS

-
- **traindata**: Training data of numeric type without labels.
 - **trainlabels**: A vector of numeric tags for each instance of training data.

- **k**: positive constant for logit function. If large, fuzzy ordinal set is understood as slightly larger. If small, is understood as significantly larger.
 - **beta**: Regulation param for relative importance of MI between features and decision.
 - **nselected**: Number of features to select.
-

5.1.4 RETURN

nselected most important features.

5.1.5 DESCRIPTION

Selects the N most relevant features from ordinal and monotonic data, based on mRMR criterion.

5.1.6 EXAMPLES

```
dattrain<-read.table("train_balance-scale.0", sep=" ")
trainlabels<-dattrain[,ncol(dattrain)]
traindata=dattrain[,-ncol(dattrain)]
selected<-fselector(traindata,trainlabels,2,2,2)
```

5.2 ISELECTOR

5.2.1 TITTLE

Instance Selection for Monotonic Classification

5.2.2 USE

```
iselector(traindata, trainlabels, candidates, collisions, kEdition)
```

5.2.3 ARGUMENTS

-
- **traindata**: Training data of numeric type without labels.
 - **trainlabels**: A vector of numeric tags for each instance of training data.
 - **candidates**: Rate of the best candidates to be selected.
 - **collisions**: Minimal rate of collisions permitted to stop the removal process.
 - **kEdition**: Maximum number of nearest neighbors to consider.
-

5.2.4 RETURN

A reduced dataset with the selected instances and its labels.

5.2.5 DESCRIPTION

Selects the N most relevant instances from ordinal and monotonic dataset, using a three-steps algorithm.

5.2.6 EXAMPLES

```
dattrain<-read.table("train_balance-scale.0", sep=" ")
trainlabels<-dattrain[,ncol(dattrain)]
traindata=dattrain[,-ncol(dattrain)]
selected<-iselector(traindata,trainlabels,0.01,0.01,5)
```

5.3 KDLORPREDICT

5.3.1 TITTLE

Predicts KDLOR model outputs for test data.

5.3.2 USE

```
kdlorpredict(fittedmodel, trainData, testData)
```

5.3.3 ARGUMENTS

-
- **fittedmodel**: fitted model of class `kdlorModel` obtained with `kdlortrain(...)`.
 - **trainData**: Data used to previously train the model. Tags should not be provided in `traindata`.
 - **testData**: Test data without labels.
-

5.3.4 RETURN

A list of two elements containing the predicted labels for each instances and the projected values.

5.3.5 DESCRIPTION

Predicts the test data labels using a Kernel Discriminant Learning for Ordinal Regression fitted model

5.3.6 EXAMPLES

```
testdata<-read.table("test_balance-scale.0", sep=" ")
testdata<-testdata[, -ncol(testdata)]
pred<-kdlorpredict(myfit, traindata, testdata)
```

5.4 KDLORTRAIN

5.4.1 TITTLE

Trains a KDLOR model.

5.4.2 USE

```
kdlortrain(traindata, trainlabels, kernel, d, u, k)
```

5.4.3 ARGUMENTS

-
- **traindata**: Data to train kdlor model. Tags should not be provided in traindata.
 - **trainlabels**: Class labels for training data. Must be numeric of type integer.
 - **kernel**: Type of kernel to compute the Gram matrix. One of *"rbf"*, *"gauss"*, *"gaussian"*, *"sigmoid"*, *"linear"*, *"poly"*, *"polynomial"*.
 - **u**: Numeric parameter for H matrix computation. Default is 0.01.
 - **k**: Array of kernel Params. If kernel type is sigmoid, Array of two values should be provided.
 - **c**: Numeric parameter for optimization method. Default is 10..
-

5.4.4 RETURN

An instance of `kdlorModel` class containing the fields: `projectedTrain`, `predictedTrain`, `kerneltype`, `kernelParam`, `projection` and `thresholds`, where:

- `projectedTrain` is the projected matrix for training data.
- `predictedTrain` are the predicted numeric labels for training data.
- `kerneltype` is the used kernel type for the fit. Should be used again for prediction.
- `kernelParam` is the numeric kernel param used for computing the kernel matrix.
- `projection` is the general projected matrix that should be used in predict.
- `thresholds` is an array of doubles representing the model thresholds to be used in prediction.

Each of these fields can be accessed with `@` (see section examples) below.

5.4.5 DESCRIPTION

Trains the Kernel Discriminant Learning for Ordinal Regression model with training data

5.4.6 EXAMPLES

```
# read train data
dattrain<-read.table("train_balance-scale.0", sep=" ")
traindata=dattrain[,-ncol(dattrain)]
trainlabels=dattrain[,ncol(dattrain)]
# fit the kdlor model
myfit<-kdlortrain(traindata,trainlabels,"rbf",10,0.001,1)
# access kdlor model fields
myfit@predictedTrain
```

5.5 POMFIT

5.5.1 TITTLE

Train a proportional odd model for ordinal regression.

5.5.2 USE

```
pomfit(train, trainLabels, linkfunction = "logistic")
```

5.5.3 ARGUMENTS

-
- **linkfunction:** link function to be used in the ordinal logistic regression fit. Possible functions are: 'logistic', 'probit', 'loglog', 'cloglog' or 'cauchit'.
 - **train:** Training data of numeric type without labels.
 - **trainLabels:** Tags for each instance of training data. Must be factors.
-

5.5.4 RETURN

the fitted model.

5.5.5 DESCRIPTION

train data must be the training data without labels. Labels should be provided in trainLabels.

5.5.6 EXAMPLES

```
dattrain<-read.table("train_balance-scale.0", sep=" ")  
fit<-pomfit(dattrain[, -ncol(dattrain)], as.factor(dattrain[, ncol(dattrain)]), "logistic")
```

5.6 POMPREDICT

5.6.1 TITTLE

Predict over the new data instances using the trained model.

5.6.2 USE

```
pompredict(model, test)
```

5.6.3 ARGUMENTS

-
- **model**: A trained POM model.
 - **test**: Numeric test data without labels.
-

5.6.4 RETURN

A list containing at the first position the projected values per instance per class and at the second position the predicted label for the values.

5.6.5 DESCRIPTION

Predict over the new data instances using the trained model.

5.6.6 EXAMPLES

```
dattrain<-read.table("train_balance-scale.0", sep=" ")
fit<-pomfit(dattrain[, -ncol(dattrain)], as.factor(dattrain[, ncol(dattrain)]), "logistic")
dattest<-read.table("test_balance-scale.0", sep=" ")
```

```
predictions<-pompredict(fit,dattest[, -ncol(dattest)])  
projections<-predictions[[1]]  
predictedLabels<-predictions[[2]]
```

5.7 SVMOFIT

5.7.1 TITTLE

Train n-1 SVM models for ordinal data with given parameters.

5.7.2 USE

```
svmofit(train, trainLabels, weights = TRUE, cost, gamma)
```

5.7.3 ARGUMENTS

-
- **weights:** A boolean indicating whether weights per instance are used.
 - **cost:** numeric value indicating the cost parameter to train the SVM.
 - **gamma:**numeric value indicating the gamma parameter to train the SVM.
 - **train:** Training data of numeric type without labels.
 - **trainLabels:** A vector of numeric tags for each instance of training data.
-

5.7.4 RETURN

A matrix of 1xn svm trained with weights models.

5.7.5 DESCRIPTION

Train data must be the data without labels. Labels should be provided in trainLabels

5.7.6 EXAMPLES

```
dattrain<-read.table("train_balance-scale.0", sep=" ")
modelstrain<-svmofit(dattrain[, -ncol(dattrain)], dattrain[, ncol(dattrain)], TRUE, 1, 1)
```

5.8 SVMOPREDICT

5.8.1 TITTLE

Predict over the new data instances using the trained models.

5.8.2 USE

```
svmpredict(models, test)
```

5.8.3 ARGUMENTS

-
- **models:** A matrix of 1xN trained SVM models. Where N denotes the number of classes of the problem minus one.
 - **test:** Numeric test data without labels.
-

5.8.4 RETURN

A list containing the projected values per instance per class and the predicted values (the maximum probability for each data instance).

5.8.5 DESCRIPTION

Predict over the new data instances using the trained models.

5.8.6 EXAMPLES

```
dattrain<-read.table("train_balance-scale.0", sep=" ")
modelstrain<-svmofit(dattrain[, -ncol(dattrain)], dattrain[, ncol(dattrain)], TRUE, 1, 1)
datatest<-read.table("test_balance-scale.0", sep=" ")
predictions<-svmpredict(modelstrain, datatest[, -ncol(datatest)])
```

5.9 WKNNOR

5.9.1 TITTLE

K-nearest neighbors for ordinal and monotonic data

5.9.2 USE

```
wknnor(traindata, trainlabels, testdata, k, q, kerneltype, monotonicity)
```

5.9.3 ARGUMENTS

-
- **traindata**: Training data of numeric type without labels.
 - **trainlabels**: A vector of numeric tags for each instance of training data.
 - **testdata**: Test data of numeric type.
 - **q**: Minkowski distance param. Use q=1 for Manhattan distance and q=2 for Euclidean distance.
 - **kerneltype**: Kernel used to compute neighbors weights. Available kernels are: rectangular, triangular, epanechnikov, biweight, triweight, cosine, gauss and inversion.
 - **monotonicity**: Boolean param specifying whether data is monotone or not.
-

5.9.4 RETURN

Predicted labels for test data.

5.9.5 DESCRIPTION

Predicts labels for test data with ordinal nature or monotonic constraints using an adaptation of wknn.

5.9.6 EXAMPLES

```
dattrain<-read.table("train_balance-scale.0", sep=" ")
traindata=dattrain[, -ncol(dattrain)]
trainlabels=dattrain[, ncol(dattrain)]
testdata<-read.table("test_balance-scale.0", sep=" ")
testdata<-testdata[, -ncol(testdata)]
testlabels<-wknnor(traindata, trainlabels, testdata, 5, 2, "rectangular", FALSE)
```

6

Resultados y conclusiones

6.1 DATASET BALANCE-SCALE

	SVMOP	POM	KDLOR	WKNNOR + rectangular
ACC	0.2420382	0.910828	0.8343949	0.7515924
MAE	1.433121	0.1019108	0.1656051	0.4076433
MZE	0.7579618	0.089172	0.1656051	0.2484076



Some extra stuff

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Morbi commodo, ipsum sed pharetra gravida, orci magna rhoncus neque, id pulvinar odio lorem non turpis. Nullam sit amet enim. Suspendisse id velit vitae ligula volutpat condimentum. Aliquam erat volutpat. Sed quis velit. Nulla facilisi. Nulla libero. Vivamus pharetra posuere sapien. Nam consectetur. Sed aliquam, nunc eget euismod ullamcorper, lectus nunc ullamcorper orci, fermentum bibendum enim nibh eget ipsum. Donec porttitor ligula eu dolor. Maecenas vitae nulla consequat libero cursus venenatis. Nam magna enim, accumsan eu, blandit sed, blandit a, eros.

Quisque facilisis erat a dui. Nam malesuada ornare dolor. Cras gravida, diam sit amet rhoncus ornare, erat elit consectetur erat, id egestas pede nibh eget odio. Proin tincidunt, velit vel porta elementum, magna diam molestie sapien, non aliquet massa pede eu diam. Aliquam iaculis. Fusce et ipsum et nulla tristique facilisis. Donec eget sem sit amet ligula viverra gravida. Etiam vehicula urna vel turpis. Suspendisse sagittis ante a urna. Morbi a est quis

orci consequat rutrum. Nullam egestas feugiat felis. Integer adipiscing semper ligula. Nunc molestie, nisl sit amet cursus convallis, sapien lectus pretium metus, vitae pretium enim wisi id lectus. Donec vestibulum. Etiam vel nibh. Nulla facilisi. Mauris pharetra. Donec augue. Fusce ultrices, neque id dignissim ultrices, tellus mauris dictum elit, vel lacinia enim metus eu nunc.

Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Vestibulum tortor quam, feugiat vitae, ultricies eget, tempor sit amet, ante. Donec eu libero sit amet quam egestas semper. Aenean ultricies mi vitae est. Mauris placerat eleifend leo. Quisque sit amet est et sapien ullamcorper pharetra. Vestibulum erat wisi, condimentum sed, commodo vitae, ornare sit amet, wisi. Aenean fermentum, elit eget tincidunt condimentum, eros ipsum rutrum orci, sagittis tempus lacus enim ac dui. Donec non enim in turpis pulvinar facilisis. Ut felis.

Cras sed ante. Phasellus in massa. Curabitur dolor eros, gravida et, hendrerit ac, cursus non, massa. Aliquam lorem. In hac habitasse platea dictumst. Cras eu mauris. Quisque lacus. Donec ipsum. Nullam vitae sem at nunc pharetra ultricies. Vivamus elit eros, ullamcorper a, adipiscing sit amet, porttitor ut, nibh. Maecenas adipiscing mollis massa. Nunc ut dui eget nulla venenatis aliquet. Sed luctus posuere justo. Cras vehicula varius turpis. Vivamus eros metus, tristique sit amet, molestie dignissim, malesuada et, urna.

Cras dictum. Maecenas ut turpis. In vitae erat ac orci dignissim eleifend. Nunc quis justo. Sed vel ipsum in purus tincidunt pharetra. Sed pulvinar, felis id consectetur malesuada, enim nisl mattis elit, a facilisis tortor nibh quis leo. Sed augue lacus, pretium vitae, molestie eget, rhoncus quis, elit. Donec in augue. Fusce orci wisi, ornare id, mollis vel, lacinia vel, massa.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Morbi commodo, ipsum sed pharetra gravida, orci magna rhoncus neque, id pulvinar odio lorem non turpis. Nullam sit amet enim. Suspendisse id velit vitae ligula volutpat condimentum. Aliquam erat volutpat. Sed quis velit. Nulla facilisi. Nulla libero. Vivamus pharetra posuere sapien. Nam consectetur. Sed aliquam, nunc eget euismod ullamcorper, lectus nunc ullamcorper orci, fermentum biben-

dum enim nibh eget ipsum. Donec porttitor ligula eu dolor. Maecenas vitae nulla consequat libero cursus venenatis. Nam magna enim, accumsan eu, blandit sed, blandit a, eros.

Quisque facilisis erat a dui. Nam malesuada ornare dolor. Cras gravida, diam sit amet rhoncus ornare, erat elit consectetur erat, id egestas pede nibh eget odio. Proin tincidunt, velit vel porta elementum, magna diam molestie sapien, non aliquet massa pede eu diam. Aliquam iaculis. Fusce et ipsum et nulla tristique facilisis. Donec eget sem sit amet ligula viverra gravida. Etiam vehicula urna vel turpis. Suspendisse sagittis ante a urna. Morbi a est quis orci consequat rutrum. Nullam egestas feugiat felis. Integer adipiscing semper ligula. Nunc molestie, nisl sit amet cursus convallis, sapien lectus pretium metus, vitae pretium enim wisi id lectus. Donec vestibulum. Etiam vel nibh. Nulla facilisi. Mauris pharetra. Donec augue. Fusce ultrices, neque id dignissim ultrices, tellus mauris dictum elit, vel lacinia enim metus eu nunc.

References

- [1] Baccianella, S., Esuli, A., & Sebastiani, F. (2014). Feature selection for ordinal text classification. *Neural computation*, 26(3), 557–591.
- [2] Ben-David, A. (1995). Monotonicity maintenance in information-theoretic machine learning algorithms. *Machine Learning*, 19(1), 29–43.
- [3] Ben-David, A., Sterling, L., & Pao, Y.-H. (1989). Learning and classification of monotonic ordinal concepts. *Computational Intelligence*, 5(1), 45–49.
- [4] Bender, R. & Grouven, U. (1997). Ordinal logistic regression in medical research. *Journal of the Royal College of physicians of London*, 31(5), 546–551.
- [5] Cano, J.-R. & García, S. (2017). Training set selection for monotonic ordinal classification. *Data & Knowledge Engineering*, 112, 94–105.
- [6] Chang, C.-C. & Lin, C.-J. (2011). Libsvm: a library for support vector machines. *ACM transactions on intelligent systems and technology (TIST)*, 2(3), 27.
- [7] Chang, K.-Y., Chen, C.-S., & Hung, Y.-P. (2011). Ordinal hyperplanes ranker with cost sensitivities for age estimation. In *Computer vision and pattern recognition (cvpr), 2011 ieee conference on* (pp. 585–592).: IEEE.
- [8] Cheng, J., Wang, Z., & Pollastri, G. (2008). A neural network approach to ordinal regression. In *Neural Networks, 2008. IJCNN 2008.(IEEE World Congress on Computational Intelligence). IEEE International Joint Conference on* (pp. 1279–1284).: IEEE.
- [9] Chu, W. & Ghahramani, Z. (2005). Gaussian processes for ordinal regression. *Journal of machine learning research*, 6(Jul), 1019–1041.
- [10] Chu, W. & Keerthi, S. S. (2007). Support vector ordinal regression. *Neural computation*, 19(3), 792–815.
- [Dahl] Dahl, D. B. Integration of r and scala using rscala.

- [12] Duivesteijn, W. & Feelders, A. (2008). Nearest neighbour classification with monotonicity constraints. In *Joint European Conference on Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases* (pp. 301–316): Springer.
- [13] Frank, E. & Hall, M. (2001a). A simple approach to ordinal classification.
- [14] Frank, E. & Hall, M. (2001b). A simple approach to ordinal classification. In *European Conference on Machine Learning* (pp. 145–156): Springer.
- [15] Gutiérrez, P. A., Pérez-Ortiz, M., Sánchez-Monedero, J., Fernández-Navarro, F., & Hervás-Martínez, C. (2016). Ordinal regression methods: Survey and experimental study. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 28(1), 127–146.
- [16] Hechenbichler, K. & Schliep, K. (2004). Weighted k-nearest-neighbor techniques and ordinal classification.
- [17] Hu, Q., Pan, W., Zhang, L., Zhang, D., Song, Y., Guo, M., & Yu, D. (2012). Feature selection for monotonic classification. *IEEE Transactions on Fuzzy Systems*, 20(1), 69–81.
- [18] Kim, M. & Pavlovic, V. (2010). Structured output ordinal regression for dynamic facial emotion intensity prediction. In *European conference on computer vision* (pp. 649–662): Springer.
- [19] Kwon, Y. S., Han, I., & Lee, K. C. (1997). Ordinal pairwise partitioning (opp) approach to neural networks training in bond rating. *Intelligent Systems in Accounting, Finance & Management*, 6(1), 23–40.
- [20] Lievens, S., De Baets, B., & Cao-Van, K. (2008). A probabilistic framework for the design of instance-based supervised ranking algorithms in an ordinal setting. *Annals of Operations Research*, 163(1), 115–142.
- [21] Lin, H.-T. & Li, L. (2006). Large-margin thresholded ensembles for ordinal regression: Theory and practice. In *International Conference on Algorithmic Learning Theory* (pp. 319–333): Springer.
- [22] Mathieson, M. J. (1996). Ordinal models for neural networks. In *Proc. 3rd Int. Conf. Neural Netw. Capital Markets* (pp. 523–536).
- [23] McCullagh, P. (1980). Regression models for ordinal data. *Journal of the royal statistical society. Series B (Methodological)*, (pp. 109–142).

- [24] Pazzani, M. J., Mani, S., & Shankle, W. R. (2001). Acceptance of rules generated by machine learning among medical experts. *Methods of information in medicine*, 40(05), 380–385.
- [25] Sun, B.-Y., Li, J., Wu, D. D., Zhang, X.-M., & Li, W.-B. (2010). Kernel discriminant learning for ordinal regression. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 22(6), 906–910.
- [26] Sánchez-Monedero, J., Gutiérrez, P. A., Tino, P., & Martínez, C. (2013). Exploitation of pairwise class distances for ordinal classification. 25.
- [27] Tian, Q., Chen, S., & Tan, X. (2014). Comparative study among three strategies of incorporating spatial structures to ordinal image regression. *Neurocomputing*, 136, 152–161.
- [28] Torra, V., Domingo-Ferrer, J., Maria Mateo-Sanz, J., & Ng, M. (2006). Regression for ordinal variables without underlying continuous variables. 176, 465–474.
- [29] tu, h.-h. & Lin, H.-T. (2010). One-sided support vector regression for multiclass cost-sensitive classification.
- [30] Vapnik, V. N. & Chervonenkis, A. Y. (2015). *On the Uniform Convergence of Relative Frequencies of Events to Their Probabilities*, (pp. 11–30). Springer International Publishing: Cham.
- [31] Waegeman, W. & Boullart, L. (2009). An ensemble of weighted support vector machines for ordinal regression. *International Journal of Computer Systems Science and Engineering*, 3(1), 47–51.
- [32] Wampler, D. & Payne, A. (2014). *Programming Scala: Scalability = Functional Programming + Objects*. O’Reilly Media.
- [33] Yan, H. (2014). Cost-sensitive ordinal regression for fully automatic facial beauty assessment. *Neurocomputing*, 129, 334–342.
- [34] Yoon, J. W., Roberts, S. J., Dyson, M., & Gan, J. Q. (2011). Bayesian inference for an adaptive ordered probit model: An application to brain computer interfacing. *Neural Networks*, 24(7), 726–734.



THIS THESIS WAS TYPESET using \LaTeX , originally developed by Leslie Lamport and based on Donald Knuth's \TeX . The body text is set in 11 point Egenolff-Berner Garamond, a revival of Claude Garamont's humanist typeface. The above illustration, *Science Experiment 02*, was created by Ben Schlitter and released under [CC BY-NC-ND 3.0](#). A template that can be used to format a PhD dissertation with this look & feel has been released under the permissive AGPL license, and can be found online at github.com/suchow/Dissertate or from its lead author, Jordan Suchow, at suchow@post.harvard.edu.