UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑARÍA

Plataforma Web para la Validación de Experimentación en Aprendizaje Automático y Minería de Datos

TRABAJO DE FIN DE GRADO

Realizado por:
Adrián Canosa Mouzo

Dirigido por:
Ismael Rodríguez Fernández
Alberto J. Bugarín Díz
Manuel Mucientes Molina

Índice general

Índice de figuras

Capítulo 1

Introducción

En el contexto tecnológico actual, en donde el Big Data es un recurso cada vez más utilizado, el rol del analista de datos (data scientist) se está convirtiendo en una profesión emergente y de elevada demanda. Un analista de datos es aquel profesional que reúne, analiza e interpreta los datos obtenidos con el objetivo de sacar ciertas conclusiones de ellos y así tomar diferentes decisiones, con las que aumentar la productividad en una organización. Relacionado con el analista de datos, un nuevo rol emergente en muchas empresas / organizaciones es el de CDO (*"Chief Data Officer"*). Este rol es el responsable de la gestión y la utilización de la información como un activo para toda la empresa. El analista de datos combina diferentes habilidades, especialmente las técnicas de la minería de datos y del aprendizaje automático (DM&ML).

Según Mitchell [1], una definición de aprendizaje automático sería la siguiente: Un programa de ordenador aprende a partir de una experiencia E a realizar una tarea T (de acuerdo con una medida de rendimiento P), si su rendimiento al realizar T, medido con P, mejora gracias a la experiencia E. La minería de datos, por otra parte es un campo de las ciencias de la computación referido al proceso que trata de descubrir patrones en grandes volúmenes de conjuntos de datos [2]. Para ello utiliza, entre otros métodos, análisis matemático mediante la estadística para deducir estos patrones y tendencias que existen en los datos. Por lo general, estos patrones no pueden ser detectados mediante exploración tradicional debido a la complejidad o la gran cantidad de datos.

Una de las tareas más importantes que se deben llevar a cabo en el aprendizaje automático es la validación de resultados obtenidos por los algoritmos de aprendizaje. El método estándar más aceptado en la actualidad es el de la aplicación de test estadísticos sobre los experimentos, que, entre otras utilidades, apoyan la toma de decisiones (por ejemplo la elección del algoritmo más adecuado).

Este proyecto se centra en crear y desarrollar una plataforma para asistir al analista de datos en el proceso de validación de resultados. En este proyecto se extenderá una librería de tests estadísticos, se crearan servicios web para facilitar su consulta y se desarrollara una interfaz web que hará uso de estos servicios. El objetivo es que el analista pueda introducir en la web los datos obtenidos mediante experimentación y seleccionar el test estadístico que desee utilizar para que, de forma automática, el sistema muestre los resultados de la aplicación del test. Así, el sistema permitirá de un modo fácil y centralizado la validación de resultados mediante el uso de tests estadísticos.

La herramienta se incorporará en la lista de aplicaciones disponibles a través de la web del CiTIUS para su acceso. El impacto y difusión del resultado del proyecto tiene el potencial de ser amplio, ya que en la actualidad no existe ninguna herramienta que centralice la aplicación de los test estadísticos de mayor utilidad para la validación de aprendizaje automático y que resulte fácil de usar.

1.1. Objetivos del proyecto

El proyecto se centra en crear y desarrollar una plataforma web para asistir al analista de datos en el proceso de validación de resultados obtenidos de diferentes algoritmos de aprendizaje. Para ello, habrá que realizar las siguientes tareas:

1. Completar y extender una librería de test estadísticos, actualmente implementada en el lenguaje Python.
2. Estudiar y conocer las definiciones de los tests estadísticos de uso habitual en aprendizaje automático.
3. Crear los servicios web en Python, basados en REST, que hagan disponible el acceso a los tests estadísticos vía web.
4. Desarrollar una interfaz web (HTML + JavaScript) para facilitar el uso de los tests sobre los datos introducidos por el analista de datos.

1.2. Organización del documento

Sección que incluirá la descripción de los distintos apartados del documento.

Capítulo 2

Contraste de hipótesis

El contraste de hipótesis, o lo que se conoce como tests estadísticos, se engloba en el ámbito de la Inferencia Estadística, que es la parte de la estadística que estudia cómo sacar conclusiones generales (sujetas a un determinado grado de fiabilidad o significancia) para toda la población a partir del estudio de una muestra. En nuestro caso, se tratará de sacar conclusiones de los resultados obtenidos por diferentes algoritmos (muestra) para determinar, por ejemplo, si los algoritmos tienen un rendimiento significativamente diferente y por lo tanto no se pueden considerar iguales (población).

El **contraste de hipótesis** es uno de los problemas más comunes dentro de la inferencia estadística. En él se contrasta una hipótesis estadística. Por ejemplo:

Un ingeniero de software afirma que la media de los resultados obtenidos por un algoritmo de aprendizaje automático es 10. ¿Se podría desmentir la afirmación del ingeniero?

El planteamiento del contraste sería el siguiente (μ indica media poblacional):

$$\mu = 10$$
$$\mu \neq 10$$

Para tomar una decisión (desmentir o no la afirmación), hay que basarse en los datos de una muestra, para comprobar si en efecto la media de los resultados es 10 (media muestral). Para ello, podría establecer una regla de decisión sobre la cual se basaría nuestra decisión final. Por ejemplo: si la media obtenida está próxima a la afirmada por el ingeniero (10), entonces se podría afirmar que dice la verdad. Si por el contrario la muestra nos proporciona una media muy distinta a 10, entonces se puede afirmar que la evidencia desmiente la afirmación del ingeniero sobre el algoritmo en cuestión. Esto supone un problema y es el hecho de cuándo considerar que la media es lo suficientemente distinta como para determinar que la afirmación del ingeniero es errónea. Por ejemplo si la media de la muestra es 8.5, ¿se podría desmentir la afirmación inicial? El contraste de hipótesis nos proporciona una forma de establecer este criterio y poder rechazar o aceptar la afirmación inicial.

2.1. Hipótesis nula y alternativa

En todo contraste de hipótesis siempre se dan dos posibilidades o hipótesis, las cuales se representan con los siguientes símbolos:

$$H_0 : \text{Hipótesis nula}$$
$$H_1 : \text{Hipótesis alternativa}$$

- H_0: Es la hipótesis que se supone cierta de partida, es decir, es la hipótesis que establece que lo que indica la muestra es solamente debido a la variación aleatoria entre la muestra y la población.

- H_1: Es la hipótesis alternativa y es la que reemplazará a la hipótesis nula si ésta es rechazada. H_1 establece que lo que indica la muestra es verdadero, ya que representa a toda la población.

A modo de ejemplo, supongamos que unos programadores están trabajando en la optimización de un algoritmo de aprendizaje. El objetivo es mejorar el algoritmo de forma que los resultados que proporcione sean menores de 100. Se toma una muestra de los resultados obtenidos por el nuevo algoritmo optimizado y se observa que la media de la muestra es de 92. Si no hubiera incertidumbre en la media muestral, entonces se podría concluir que la modificación reduciría los resultados a 92. Sin embargo, siempre existe incertidumbre en la media muestral. La media poblacional en realidad será poco mayor o menor a 92.

Los programadores están preocupados de que el nuevo algoritmo en realidad no mejore al anterior, es decir, que la media poblacional pudiera ser mayor o igual a 100. Quieren saber si esta preocupación está justificada. Se ha observado una muestra con media de 92 y existen dos posibles interpretaciones o, como se ha mencionado más arriba dos tipos de hipótesis que serán contrastadas más adelante mediante un determinado test estadístico:

1. La media poblacional es mayor o igual a 100 (la media muestral es, por tanto, menor debido sólo a la variación aleatoria de la media poblacional). El nuevo algoritmo no mejorará al anterior.

2. La media poblacional es menor que 100, y la media muestral lo refleja. El nuevo algoritmo sí mejorará al anterior.

La primera interpretación sería la hipótesis nula o H_0. La segunda, la hipótesis alternativa o H_1, como bien se comentó más arriba.

En este caso, los programadores están preocupados de que la hipótesis nula sea cierta. Un test estadístico o prueba de hipótesis hallará una medida cuantitativa de la factibilidad de la hipótesis nula (denominado estadístico de contraste, que para este ejemplo viene dado por la media obtenida en la muestra) y se podrá decir a los programadores (después de que el test tome la decisión) si su preocupación está o no justificada. Por tanto, a modo de resumen este ejemplo nos proporciona dos hipótesis:

$$H_0 : \mu \geq 100 \text{ vs. } H_1 : \mu < 100$$

La realización de un contraste de hipótesis no consiste en decidir cuál de las dos hipótesis (H_0, H_1) es más creíble, sino en decidir si la muestra proporciona o no suficiente evidencia para descartar H_0. Para realizar la prueba de hipótesis o test estadístico se pone la hipótesis nula en juicio, es decir se empieza suponiendo que H_0 es verdadera. Se podría poner como analogía el supuesto de *"En un juicio, el acusado siempre es inocente hasta que se demuestre lo contrario."* Esto es:

$$H_0 : \text{El acusado es inocente}$$
$$H_1 : \text{El acusado es culpable}$$

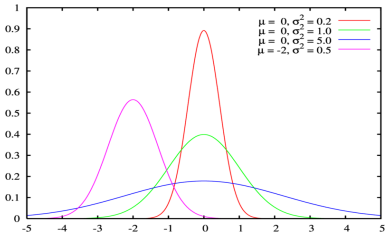
y, mientras no se tenga suficiente evidencia para aceptar H_1, hay que creer que lo que dice H_0 es cierto. La muestra aleatoria proporcionará la evidencia. Si el juicio (test o prueba de hipótesis) determina que el acusado es inocente, sólo se puede decir que no se tiene suficiente evidencia para asegurar que el acusado es culpable, mientras que si aceptamos la hipótesis alternativa, se estará bastante seguro de que el acusado sí es culpable.

2.2. Estadístico de contraste

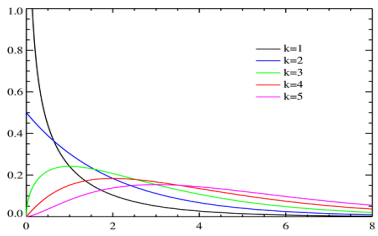
Los tests estadísticos o pruebas de hipótesis, calculan internamente una medida cuantitativa que proporciona la factibilidad de la hipótesis nula. Esta medición se extrae de la muestra proporcionada. Por ejemplo, si queremos contrastar la hipótesis de que la media poblacional es 5, un estadístico a calcular puede ser la media de una muestra. En este caso, la muestra viene determinada por los resultados obtenidos por los algoritmos y cada uno de los tests tiene una forma particular de hallar este estadístico mediante una fórmula que lo caracteriza. Estos estadísticos siguen una determinada distribución de probabilidad. Por ejemplo en este proyecto, los tests implementados harán uso de estadísticos que siguen distribuciones como:

- Distribución normal (p. ej. test de Wilcoxon).
- Distribución chi-cuadrado χ^2 (p. ej. test de Friedman).
- Distribución f de Fisher-Snedecor (p. ej. test de Iman-Davenport).
- Distribución t de Student (p. ej. t-test).

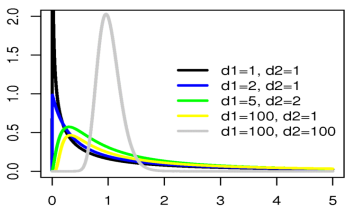
La figura 2.1, nos muestra el aspecto que presentan las distintas distribuciones de probabilidad. Las distribuciones dependen de ciertos parámetros para determinar su forma (μ, σ^2...):



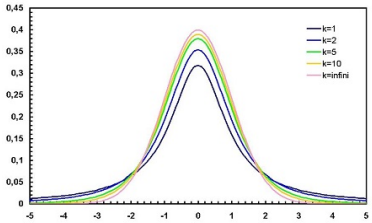
(a) Distribución normal con media μ y varianza σ^2.



(b) Distribución χ^2 con K grados de libertad.



(c) Distribución f con $d1$ y $d2$ grados de libertad.



(d) Distribución t con K grados de libertad.

Figura 2.1: Distribuciones de probabilidad.

Como podemos ver en la figura 2.1, la distribución normal presenta μ y σ^2 como parámetros. Éstos indican media y varianza respectivamente. La varianza, es una medida de dispersión que indica cómo se distribuye la población. Por ejemplo: en una distribución normal de media 0 y varianza 1, que es la línea roja en la figura 2.1(a), aproximadamente el 68 % de la población se encuentra en el intervalo $[-1, 1]$, ya que el área bajo la curva es de 0.68. Por tanto, la probabilidad de que un individuo de la población

se encuentre en ese intervalo es del 68 %. Si un estadístico sigue una distribución normal con media μ y varianza σ^2, se expresa como:

$$\text{Estadístico} \sim N(\mu, \sigma^2)$$

En las distribuciones χ^2 y t de Student se habla del parámetro K o grados de libertad ($d1$ y $d2$ en la distribución f de Fisher-Snedecor). La media y la varianza de estas tres distribuciones vendrán determinadas por el parámetro K. Cuando se habla de grados de libertad se está refiriendo al número de valores que se pueden elegir libremente en una muestra. Por ejemplo: una muestra con dos datos y media 5 si el primer dato toma el valor 4 entonces necesariamente el segundo dato debe de ser 6 (para lograr la media de 5). En este caso, se tienen:

$$N - 1 \text{ grados de libertad, donde } N \text{ es el tamaño de la muestra.}$$

Se hallan con la fórmula $N - R$, donde N es el número de individuos en la muestra cuyo valor puede ser elegido de forma libre y R es el número de sujetos cuyo valor dependerá del valor que tengan los individuos de la muestra que son libres. También se puede representar por $K - R$, donde K es el número de grupos (cuando intervienen grupos y no sujetos individuales).

En nuestro caso, N viene determinado por el número de resultados obtenidos por los algoritmos (número de filas de la matriz de la muestra de datos) y K por el número de algoritmos o variables relacionadas que tiene la muestra de datos con la que se están aplicando los tests (número de columnas de la matriz). Cada test que use el parámetro de grados de libertad lo calcula de acuerdo a su fórmula característica para el estadístico.

Todas las distribuciones de la figura 2.1 son continuas, pues se puede tomar cualquier valor dentro de un intervalo, a diferencia de las distribuciones discretas. Por otra parte, en la distribución t de Student a medida que aumentan los grados de libertad se tiende más a una distribución normal estandarizada (de $\mu = 0$ y $\sigma^2 = 1$).

Las distribuciones de probabilidad que puedan seguir un estadístico nos dan un valor diferente de probabilidad para cada valor diferente del estadístico. Este valor de probabilidad indica cómo de probable que es obtener ese valor del estadístico siendo la hipótesis nula cierta. Por ejemplo, si es cierta la hipótesis nula de que la media de una población es 5, es más probable que obtengamos una media de una muestra igual a 4.5 que a 3.

2.3. Decisiones y tipos de error

Cuando se lleva a cabo un contraste de hipótesis sólo se pueden tomar dos decisiones. Los datos de la muestra, que en este proyecto vendrá dada por los resultados obtenidos por los algoritmos, evidenciarán qué decisión se debe tomar:

1. Aceptar la hipótesis nula (H_0) (Rechazar la hipótesis alternativa H_1)
2. Rechazar H_0 (Aceptar la hipótesis alternativa)

Sin embargo, cuando se toma la decisión se pueden cometer dos tipos de error. La figura 2.2, nos muestra las decisiones y los dos tipos de errores que se pueden cometer:

		Decisión	
		No se rechaza Ho	Se rechaza Ho
Realidad	Ho es verdadera	Decisión correcta	Error de tipo I
	Ho es falsa	Error de tipo II	Decisión correcta

Figura 2.2: Decisiones y tipos de error.

La probabilidad de "Error tipo I"se denota por α y se denomina nivel de significación:

$$P(\text{"Error tipo I"}) = P(\text{Rechazar } H_0 | H_0 \text{ es cierta}) = \alpha$$

El nivel de significación consiste en la probabilidad de rechazar la hipótesis nula H_0 cuando verdaderamente es cierta. Este valor α es un parámetro que debe seleccionar la persona que quiere realizar un test estadístico en base a cómo de importante considere rechazar H_0 cuando es cierta. Normalmente es del 5 %, lo que implicará que 5 de cada 100 veces se acepta la hipótesis alternativa cuando la cierta es la hipótesis nula. Cuanto menor sea el nivel de significación, cada vez es más difícil rechazar la hipótesis nula. Es decir, si queremos equivocarnos menos veces, necesitamos mucha más evidencia para justificar el rechazo. Si es grande es más fácil aceptar la hipótesis alternativa cuando en realidad es falsa.
Por otra parte, la probabilidad de "Error tipo II"se denota por β:

$$P(\text{"Error tipo II"}) = P(\text{Aceptar } H_0 | H_0 \text{ es falsa}) = \beta$$

Este error β consiste en la probabilidad de aceptar la hipótesis nula H_0 cuando verdaderamente es falsa. Por último, cabe destacar el concepto de "Potencia".

$$P(\text{"Potencia"}) = P(\text{Rechazar } H_0 | H_0 \text{ es falsa}) = 1 - \beta.$$

La potencia es la probabilidad de detectar que una hipótesis es falsa. Los tests estadísticos o pruebas de hipótesis implementados en el presente proyecto se caracterizan por su potencia, siendo esta fija, y dejando como parámetro libre el nivel de significación. Así, cuanto mayor es el nivel de potencia, mejor será el test, ya que se rechazarán más hipótesis nulas cuando se deben rechazar (mayor habilidad en aceptar correctamente hipótesis alternativas).

En este proyecto se pondrá el énfasis en el nivel de significación, ya que es la hipótesis alternativa la que se quiere probar y no se quiere aceptar si en realidad no es cierta, es decir, si aceptamos la hipótesis alternativa queremos equivocarnos con un margen de error muy pequeño. Obviamente, lo ideal sería que tanto α como β fuesen nulos y que no se cometiese ningún error, o que ambos valores fuesen muy pequeños. Como no se pueden disminuir ambos errores a la vez, se controla el "Error tipo I".

2.4. Intervalos de confianza

El nivel de significación fijado divide en dos regiones el conjunto de posibles valores del estadístico de contraste: la región de aceptación y la región de rechazo o región crítica. Se denomina región de aceptación a la región que conduce a la aceptación de H_0 y región de rechazo a la región que conduce al rechazo de H_0 en favor de H_1. Aquí surge el concepto de "Cola", que indica la porción o porciones de una distribución de probabilidad en la cual se rechaza la hipótesis nula, es decir, la región de rechazo.

La determinación de las regiones de aceptación o de rechazo depende de cómo se establezca la hipótesis alternativa H_1. Por ejemplo, si hablamos de un contraste en el que se esté contrastando una determinada media (μ_0) se podría establecer como H_1 que la media en realidad sea menor, mayor o distinta a (μ_0):

- Media menor (test unilateral con cola a la izquierda):

$$H_0 : \mu = \mu_0$$
$$H_1 : \mu < \mu_0$$

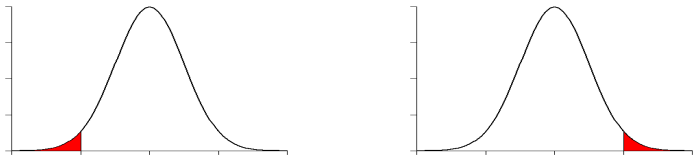
- Media mayor (test unilateral con cola a la derecha):

$$H_0 : \mu = \mu_0$$
$$H_1 : \mu > \mu_0$$

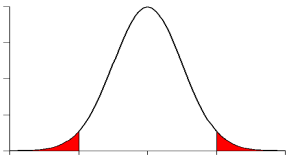
- Media distinta (test bilateral o de dos colas):

$$H_0 : \mu = \mu_0$$
$$H_1 : \mu \neq \mu_0$$

En la figura 2.3, podemos ver cómo quedarían establecidos los intervalos para el ejemplo. En rojo se muestra la región de rechazo:



(a) Test unilateral. Cola a la izquierda. (b) Test unilateral. Cola a la derecha.



(c) Test bilateral o de dos colas.

Figura 2.3: Regiones de aceptación y rechazo.

Como se puede observar en el caso del test bilateral o de dos colas, el α se divide en dos porciones iguales: $\alpha/2$, que constituye la región de rechazo. La región de aceptación tendrá en todos los casos probabilidad $1 - \alpha$.

2.5. Decisión final y Concepto de $p - valor$

Si el valor del estadístico cae en la región de aceptación, se acepta la hipótesis nula, ya que no existen razones suficientes para rechazar H_0 con el nivel de significación dado. Por tanto, en este caso se diría que el contraste es estadísticamente no significativo, es decir, no existe evidencia estadísticamente significativa

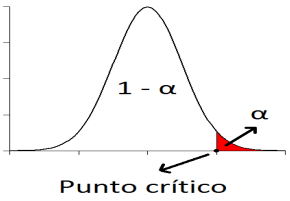


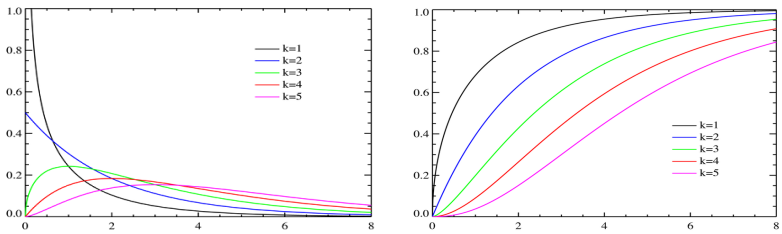
Figura 2.4: Punto crítico.

en favor de H_1. La figura 2.4 nos muestra el punto crítico: si el estadístico obtenido por el test o prueba de hipótesis es 5 y el punto crítico es 4.5, se rechaza H_0 ya que el estadístico pertenece a la región de rechazo.

La decisión de rechazar o aceptar la hipótesis nula, se puede determinar también mediante el $p-valor$, que es el parámetro utilizado para realizar los tests estadísticos en este proyecto. El $p-valor$ proporciona un forma más eficiente de determinar si el contraste es o no estadísticamente significativo, ya que no sería necesario recalcular regiones de aceptación y rechazo cada vez que el usuario de los tests cambia de nivel de significación.

"El $p-valor$, es la probabilidad que hay de obtener un valor al menos tan extremo como el estadístico en cuestión que se ha obtenido."

Para entender mejor el concepto de $p-valor$, conviene hablar de las distribuciones de probabilidad vistas en la figura 2.1 de la sección 2.2 donde se hablaba del estadístico de contraste. Estas distribuciones son funciones que se denominan "Funciones de densidad de probabilidad"(FDP). Como bien se expuso, estas funciones proporcionan la probabilidad que existe para cada valor diferente del estadístico (cómo de probable es obtener ese valor del estadístico). Si en vez de trabajar con las funciones de densidad de probabilidad, se trabaja con las funciones de distribución acumuladas (FDA), para cada valor del estadístico éstas devolverían la probabilidad de obtener un valor igual o menor que ese estadístico siendo la hipótesis nula cierta. En la figura 2.5 podemos ver una comparación entre los dos tipos de funciones para el caso de la distribución χ^2:



(a) Función de densidad de probabilidad.

(b) Función de distribución acumulada.

Figura 2.5: Comparativa FDP y FDA.

Visto de otro modo, con la distribución acumulada, dado un estadístico, nos devuelve la probabilidad que hay de obtener un valor al menos tan extremo como el estadístico en cuestión. Esto es el $p-valor$. Por ejemplo si el valor del estadístico es 3 y el test da como resultado un $p-valor$ igual a 0.1, esto quiere decir que un 10 % de las veces vamos a obtener un valor similar. Si el $p-valor$ es muy bajo, es decir, la probabilidad de obtener un valor al menos tan extremo como ese estadístico es muy baja, se puede

concluir que la hipótesis nula no es cierta, ya que sería poco probable que siendo cierta se obtuviese ese estadístico.

El criterio para saber si el $p - valor$ es lo suficientemente bajo como para rechazar que la hipótesis nula sea cierta es tomado de acuerdo al nivel de significancia establecido. Como se ha mencionado en la sección 2.3, el nivel de significancia o α indica la probabilidad de rechazar la hipótesis nula siendo ésta cierta. Si el $p - valor$ es menor que el nivel de significancia se rechaza la hipótesis nula.

Según se disminuye α, cada vez es más difícil de rechazar la hipótesis nula, ya que se necesita mucha más evidencia para justificar el rechazo. Por ejemplo si α es 0.05 y la probabilidad de obtener un estadístico igual a 1 es 0.03, se rechaza la hipótesis nula. Sin embargo, si el α fuese 0.01, no se podría rechazar: no hay suficiente evidencia de que la hipótesis nula sea falsa.

2.6. Etapas en la resolución de un contraste de hipótesis

En un contraste de hipótesis siempre se siguen una serie de pasos definidos. Como se ha ido viendo a lo largo del capítulo, los pasos para la realización de una prueba de hipótesis o test estadístico son las siguientes [4]:

1. Especificación de la hipótesis nula H_0 y de la hipótesis alternativa H_1.
2. Suponer que H_0 es verdadera (el test sirve para que a partir de la muestra de datos podamos rechazar H_0 en beneficio de H_1).
3. Calcular un estadístico de prueba o estadístico de contraste. Este estadístico se usa para evaluar la fuerza de la evidencia en contra de H_0 (medir la discrepancia entre la hipótesis y la muestra).
4. Establecer un nivel de significación α en base a cómo de importante se considere rechazar H_0 cuando realmente es verdadera.
5. El nivel de significación fijado divide en dos regiones el conjunto de posibles valores del estadístico de contraste: la región de aceptación y la región de rechazo o región crítica.
6. Si el valor del estadístico cae en la región de rechazo, se rechaza la hipótesis nula, ya que esto evidencia que los datos obtenidos de la muestra no son compatibles con H_0. Por tanto, en este caso se diría que el contraste es estadísticamente significativo, es decir, existe evidencia estadísticamente significativa en favor de H_1.
7. Si el valor del estadístico cae en la región de aceptación, se acepta la hipótesis nula, ya que no existen razones suficientes para rechazar H_0 con el nivel de significación dado. Por tanto, en este caso se diría que el contraste es estadísticamente no significativo, es decir, no existe evidencia estadísticamente significativa en favor de H_1.
8. La decisión de rechazar o aceptar la hipótesis nula, se puede determinar también mediante el $p - valor$, que es el parámetro utilizado para realizar los tests estadísticos en este proyecto. El $p - valor$ proporciona un forma más eficiente de determinar si el contraste es o no estadísticamente significativo, ya que no sería necesario recalcular regiones de aceptación y rechazo cada vez que el usuario de los tests cambia de nivel de significación.

2.7. Tests paramétricos

Uno de los tipos más comunes de tests son los tests paramétricos. En general, estos tests son más robustos y tienen mayor potencia que los tests no paramétricos, que se verán más adelante en 2.8. Sin

embargo, las pruebas paramétricas se basan en supuestos que muy probablemente se violan cuando se analiza el rendimiento de algoritmos de inteligencia computacional y minería de datos [6]. Estas suposiciones o condiciones paramétricas que deben cumplir los resultados de los algoritmos son explicadas a continuación.

2.7.1. Condiciones Paramétricas

Independencia

En estadística, dos eventos son independientes si cuando uno de ellos se da no modifica la probabilidad de la ocurrencia del otro. Dicho de otra forma: cuando las muestras o datos obtenidos por los algoritmos, es decir, los resultados de éstos no dependen unos de otros. Cuando se comparan dos algoritmos de optimización normalmente suelen ser independientes. Cuando se comparan dos métodos de aprendizaje automático, depende de cómo sea la partición. La independencia es una característica que en este proyecto debe asumir el usuario de los tests, y, por tanto, podrá actuar de una forma u otra bajo su responsabilidad.

Normalidad

Una muestra u observación es normal cuando su comportamiento sigue una distribución normal (o distribución de Gauss) con una cierta media μ y varianza σ^2. En la figura 2.6 podemos ver que a la izquierda se cumple el supuesto de normalidad, mientras que a la derecha los datos de la muestra no están distribuidos de forma normal:

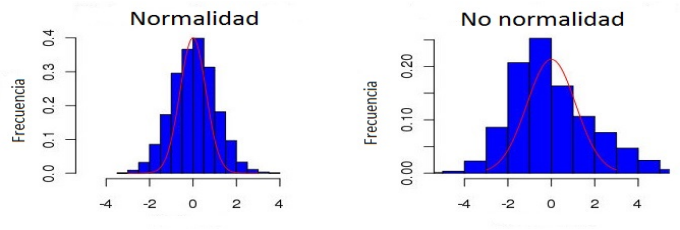


Figura 2.6: Normalidad VS No normalidad.

En este proyecto se pueden realizar los siguientes tests no paramétricos para comprobar el supuesto de normalidad:

- **Shapiro–Wilk:** Contrasta la hipótesis nula de que las muestras o poblaciones provienen de una población normalmente distribuida. Analiza la muestra para hallar el nivel de simetría y Kurtosis (forma de la curva) para calcular la diferencia con respecto a una distribución normal, obteniendo el p-valor de la suma de los cuadrados de estas discrepancias. Se considera de los más potentes, sobre todo para muestras de menos de 30 elementos. Sin embargo, el rendimiento de esta prueba se ve afectado de forma negativa cuando no existe independencia en los datos.

- **D'Agostino–Pearson:** Contrasta la hipótesis nula de que las muestras o poblaciones provienen de una población normalmente distribuida. Primero calcula el coeficiente de asimetría (en qué medida la normal es simétrica ó coeficiente 0) y el coeficiente de Kurtosis (grado de amplitud, donde lo normal es coeficiente 0) para cuantificar qué tan lejos se está de la distribución normal. Luego, calcula cómo de lejos cada uno de estos valores difiere de los valores esperados en una distribución normal, para obtener el $p - valor$ de la suma de estas discrepancias. Es menos potente que el test de Shapiro-Wilk, pero no se ve afectado cuando los datos no son independientes.

- **Kolmogorov–Smirnov:** Realiza una prueba de bondad de ajuste, para determinar si los datos observados de la muestra se ajustan a la distribución normal. Tiene como H_0 que la distribución obtenida de los datos observados es idéntica a la distribución normal. Es la prueba que menos potencia presenta de los tres y, por tanto es la que peor funciona.

Homocedasticidad

La homocedasticidad es la condición que dice que las poblaciones de entrada o datos obtenidos por los algoritmos proceden de poblaciones con varianzas iguales. Es decir, esta propiedad indica la hipótesis de igualdad de varianzas. El caso contrario sería heterocedasticidad. En la figura 2.7 se puede apreciar la diferencia existente entre unos datos que proceden de poblaciones con varianzas similares y aquellos que no:

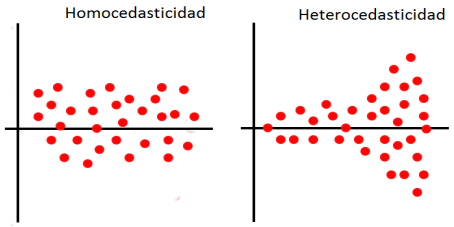


Figura 2.7: Homocedasticidad VS Heterocedasticidad.

En este proyecto se puede realizar el siguiente test no paramétrico para comprobar el supuesto de homocedasticidad:

- **Test de Levene:** Contrasta la hipótesis nula de que todas las poblaciones de entrada proceden de poblaciones con varianzas iguales. Se utiliza para comprobar si K muestras pertenecientes a datos obtenidos por K algoritmos presentan o no homogeneidad de varianzas.

2.7.2. Test Anova

El análisis de la varianza (ANOVA) es uno de los tests estadísticos más ampliamente utilizados para probar la igualdad de más de dos medias de la población. Se trata de una versión más general del T-test, ya que permite comparar más de 2 poblaciones (en este proyecto resultados de más de dos algoritmos). Dado que es un test paramétrico, se asume que se dan las condiciones de independencia, normalidad y homocedasticidad en su aplicación. De no ser el caso, los resultados de esta prueba no son fiables.

Hipótesis

- Hipótesis nula H_0: $\mu_1 = \mu_2 = \mu_3 ... = \mu_K$.
- Hipótesis alternativa H_1: $\exists \quad \mu_j \neq \mu \quad j = 1, 2, ..., K$.

La hipótesis nula indica que las medias de distintas poblaciones o muestras coinciden ($K > 2$), frente a la hipótesis alternativa de que por lo menos una de las poblaciones tiene una media que difiere de las demás. Es, por tanto, un contraste o prueba unilateral con cola a la derecha. En este proyecto el parámetro K viene determinado por el número de algoritmos que existe en la muestra de datos.

Pasos a desarrollar

Los pasos a seguir para realizar el test de Anova son los siguientes:

- Se analiza la variación total (respecto a la media general o media de medias de los resultados de cada algoritmo):

$$variacion\_t = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{K}(X_{ij} - \bar{X})^2$$

, donde $\bar{X}$ es la media general, N es el número de conjuntos de datos o problemas sobre los que se aplican los algoritmos y X_{ij} es un resultado específico obtenido por un algoritmo.

- Se halla también la variación entre los diferentes tratamientos o algoritmos (efecto de la media de cada tratamiento respecto a la media general):

$$variacion\_tr = \sum_{i=1}^{K} N(\bar{X}_i - \bar{X})^2$$

, donde $\bar{X}_i$ representa la media del tratamiento o algoritmo.

- La variación dentro del tratamiento o variación del error (cada valor respecto a la media de su tratamiento):

$$variacion\_e = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{K}(X_{ij} - \bar{X}_j)^2$$

, donde $\bar{X}_j$ representa la media de un tratamiento o algoritmo.

- Se calculan los grados de libertad totales, del tratamiento y del error como:

$$GLT = (NK) - 1$$

$$GLTR = K - 1$$

$$GLE = GLT - GLTR$$

- Luego, se determinan los cuadrados medios totales (CMT), del tratamiento ($CMTR$) y del error (CME), que son las variaciones divididas entre los grados de libertad correspondientes.

- Se halla el estadístico, que se distribuye como una distribución f con $K-1$ y $(KN)-K$ grados de libertad:

$$anova = CMT/CME$$

- Por último se halla el $p - valor$ y se toma la decisión en función del nivel de significancia.

2.7.3. T-test

El caso más simple de Anova donde intervienen únicamente 2 muestras o algoritmos es realizado por este test. Dado que es un test paramétrico, se asume que se dan las condiciones de independencia, normalidad y homocedasticidad en su aplicación. De no ser el caso, los resultados de esta prueba no son fiables.

Hipótesis

- Hipótesis nula H_0: $\mu_1 = \mu_2$.
- Hipótesis alternativa H_1: $\mu_1 \neq \mu_2$.

La hipótesis nula indica que las medias de las 2 poblaciones o muestras coinciden, frente a la hipótesis alternativa de que son distintas. Se trata, por tanto, de un contraste o prueba bilateral.

El estadístico de este test, se distribuye como una distribución t de Student con $2N - 2$ grados de libertad.

2.8. Tests no paramétricos

Cuando los datos obtenidos de la aplicación de los algoritmos de aprendizaje automático no cumplen las características de independencia, normalidad u homocedasticidad total o parcialmente podemos hablar de tests no paramétricos. Recientemente, los tests estadísticos no paramétricos han emergido como una metodología eficaz, robusta y asequible para la evaluación de nuevas propuestas de metaheurísticas y algoritmos evolutivos, alcanzando gran popularidad. La validación de nuevos algoritmos requiere con frecuencia la definición de un marco experimental exhaustivo y la parte crítica de estas comparaciones recae en la validación estadística de los resultados, contrastando las diferencias encontradas entre métodos. Dentro de las técnicas disponibles, destacan los tests no paramétricos debido a su flexibilidad y a las pocas restricciones de uso que presentan (a diferencia de los tests paramétricos, los cuales sufren a menudo problemas derivados de la imposibilidad de cumplir las condiciones paramétricas para su uso). [5]

2.8.1. Test de Wilcoxon

La prueba de los rangos con signo de Wilcoxon también conocida como el test de Wilcoxon es una prueba no paramétrica que se utiliza como alternativa a la prueba t de Student cuando no se puede suponer la normalidad de las muestras. Es, por tanto, menos potente que que la prueba t de Student. El test de Wilcoxon fue creado por Frank Wilcoxon y publicado en 1945 [3].

Sirve para comparar dos métodos o tratamientos (en este proyecto interesa comparar dos algoritmos). Por tanto, los individuos (los problemas) donde se aplican los algoritmos tienen que ser los mismos. Es decir, a un mismo individuo se le efectúa la medición de dos variables: las muestras son apareadas. Para tomar la decisión, hay que basarse en las observaciones de N individuos independientes (sin relación existente entre ellos). Para tamaños muestrales pequeños, se puede determinar mediante la comparación del estadístico con el valor crítico de la tabla de Wilcoxon. Para tamaños muestrales grandes (> 25), el test se puede aproximar con la distribución normal.

Hipótesis

- Hipótesis nula H_0: $Mediana_{diferencias} = 0$.
- Hipótesis alternativa H_1: $Mediana_{diferencias} \neq 0$.

La mediana, es el valor que ocupa el lugar central de todos los datos cuando éstos están ordenados de menor a mayor. H_0 indica que la mediana de las diferencias de dos muestras (resultados de dos algoritmos) relacionadas son iguales, es decir, las dos medianas son iguales (los resultados de los algoritmos no dependen del algoritmo). H_1 indica, por otra parte, que las medianas son diferentes. Se trata, por tanto, de una prueba bilateral.

Pasos a desarrollar

Los pasos a seguir para realizar la prueba de los rangos signados de Wilcoxon son los siguientes:

- Se calculan las diferencias entre las muestras. Por ejemplo: diferencias entre los resultados del algoritmo A y B.
  - Se eliminan los elementos que tengan diferencias nulas (se excluye el 0).
- Se ordenan las diferencias en valor absoluto (independientemente del signo).
- Se asignan rangos de orden 1,2,...,N. Si hay empates se calcula la media del rango de cada uno de los elementos repetidos.
- Suma de los rangos según los signos que tengan las diferencias para obtener los estimadores:
  - $T(+)$ = Suma de los rangos correspondientes a diferencias positivas.
  - $T(-)$ = Suma de los rangos correspondientes a diferencias negativas.
- Definir el estadístico:
  - $T = \text{mín}[T(+), T(-)]$
- Si $N \leq 25$, se examina la tabla de Wilcoxon que nos da los valores críticos (el intervalo de aceptación) para cada valor de N y cada nivel de significancia. El contraste será estadísticamente significativo si: $T <=$ límite inferior correspondiente.
- Si $N > 25$, el estadístico se ajusta a la distribución normal. Por tanto, se calcula el estadístico Z y se toma la decisión en función del $p - valor$ y del nivel de significancia:

$$Z = \frac{T - \frac{N(N+1)}{4}}{\sqrt{\frac{N(N+1)(2N+1)}{24}}}$$

2.8.2. Test de Friedman

El test de Friedman es una prueba no paramétrica que puede realizar comparaciones entre dos o más algoritmos, es decir, se trata de una prueba de comparaciones múltiples. Fue desarrollada por el economista Milton Friedman y trabaja asignando rankings para establecer quién es el mejor algoritmo de la muestra de datos proporcionada.

Hipótesis

- Hipótesis nula H_0: No existen diferencias entre los algoritmos.
- Hipótesis alternativa H_1: Existen diferencias entre los algoritmos.

La hipótesis nula quiere decir que todos los algoritmos se comportan de la misma forma, por lo que los rankings que poseen deben de ser similares. La hipótesis alternativa, por el contrario, afirma que existen diferencias, lo cual quiere decir al menos el rendimiento de un algoritmo es diferente al rendimiento que presentan los demás. Se trata, por tanto, de un contraste o prueba unilateral con cola a la derecha.

Pasos a desarrollar

Los pasos a seguir para realizar el test de Friedman son los siguientes:

- En primer lugar se asignan rankings r_{ij} a los resultados obtenidos por cada algoritmo j en cada problema i. Es decir, para cada problema o conjunto de datos se asigna un ranking cuyos valores están comprendidos entre 1 y K, donde K representa el número de algoritmos que se están comparando. Los rankings se asignan de forma ascendente (1 al mejor resultado, 2 al segundo mejor, etc.) y se tiene en cuenta la función objetivo de los algoritmos, es decir, si lo que se pretende es minimizar o maximizar resultados.

- En caso de que haya empates en la asignación de rankings anterior, se asignan rankings medios:

$$r_{ij} = \frac{rep + (2pos) + 1}{2}$$

  , donde *rep* representa el número de veces que se repite el dato y *pos* representa la posición que ocupa el dato repetido.

- Luego, se calculan los rankings medios de cada algoritmo en los N problemas:

$$R_j = \frac{\sum_{i=1}^{N} r_{ij}}{N}$$

- El estadístico de Friedman se distribuye de acuerdo a una distribución χ^2 con $K-1$ grados de libertad:

$$friedman = \frac{12N}{K(K+1)} \left[\sum R_j^2 - \frac{K(K+1)^2}{4} \right]$$

- Por último se halla el $p - valor$ y se toma la decisión en función del nivel de significancia.

2.8.3. Test de Iman-Davenport

El estadístico de Friedman fue mejorado por Iman y Davenport, que demostraron que tenía un comportamiento demasiado conservativo (se tiende a aceptar la hipótesis nula y, por tanto, la potencia del test es menor).

Hipótesis

- Similar al test de Friedman.

Pasos a desarrollar

- El test de Iman-Davenport hace las mismas operaciones que el test de Friedman pero en él se calcula un estadístico más ajustado (en el que también interviene el estadístico de Friedman). Este nuevo estadístico, se distribuye de acuerdo a una distribución f con $(K-1)$ y $(K-1)*(N-1)$ grados de libertad, donde N representa el número de problemas o conjuntos de datos y K el número de algoritmos:

$$iman_d = \frac{(N-1)friedman}{N(K-1) - friedman}$$

2.8.4. Test de los Rangos Alineados de Friedman

El test de los rangos alineados de Friedman realiza comparaciones y asigna rankings teniendo en cuenta a todos los conjuntos de datos, a diferencia del test de Friedman, que asigna rankings dentro de cada conjunto (es decir, dentro de los resultados obtenidos por los algoritmos para cada problema en particular). Por tanto, en este caso los valores de los rankings irán desde 1 hasta $K * N$. Suele emplearse cuando el número de algoritmos en la comparación es pequeño y cuando se quiera realizar una comparación entre conjuntos de datos.

Hipótesis

- Similar al test de Friedman.

Pasos a desarrollar

- Cálculo de las observaciones alineadas: primero se halla el valor de localización, que es el rendimiento medio alcanzado por los algoritmos en cada conjunto de datos y luego se calculan las diferencias entre el rendimiento obtenido por cada algoritmo con respecto al valor de localización dentro de un mismo conjunto de datos.

- Se repite el primer paso para los N conjuntos de datos.

- Se juntan todas las observaciones alineadas y se ordenan para asignar los rankings alineados desde 1 hasta $K * N$. En caso de empates se procede asignando valores medios igual que en el test de Friedman.

- Se calculan los rankings medios de cada algoritmo en los N problemas.

- El estadístico para esta prueba se distribuye de acuerdo a una distribución χ^2 con $K-1$ grados de libertad:

$$rangos\_al = \frac{(K-1)\left[\sum_{j=1}^{K}\hat{R}_j^2 - (\frac{KN^2}{4})(KN+1)^2\right]}{\left[\frac{KN(KN+1)(2KN+1)}{6}\right] - (\frac{1}{K})\sum_{i=1}^{N}\hat{R}_i^2}$$

  , donde $\hat{R}_i$ y $\hat{R}_j$ son la suma total de los rankings del problema i y del algoritmo j respectivamente.

- Por último se halla el $p - valor$ y se toma la decisión en función del nivel de significancia.

2.8.5. Test de Quade

El test de Quade considera, a diferencia del test de Friedman que considera que todos los problemas son iguales en importancia, que algunos problemas son más difíciles o que los resultados que obtienen los algoritmos sobre ellos son más distantes (se realiza una ponderación).

Hipótesis

- Similar al test de Friedman.

Pasos a desarrollar

- Se obtienen los rankings de cada conjunto de datos de la misma forma que en Friedman.
- Asignación de rankings a los problemas en función del tamaño del rango de la muestra en cada uno (diferencia entre el valor observado más alto y el más bajo). Este ranking de 1 a N usa también rankings medios en caso de empate.
- A partir de estos datos se pueden obtener los rankings medios finales para cada algoritmo y obtener el estadístico, que se distribuye como una distribución f con $(K-1)$ y $(K-1)*(N-1)$ grados de libertad.
- Por último se halla el $p-valor$ y se toma la decisión en función del nivel de significancia.

2.8.6. Tests POST-HOC

Los tests no paramétricos de ranking (test de Friedman, Iman-Davenport, Rangos Alineados de Friedman y Quade), dan como resultado la existencia o no de diferencias significativas entre los algoritmos sobre los que se han aplicado. Es decir, nos dice si el contraste de hipótesis es o no estadísticamente significativo. Si se rechaza la hipótesis nula de "todos los algoritmos son iguales", sabremos que entre los algoritmos existen diferencias. Sin embargo, puede ocurrir que un algoritmo presente un rendimiento similar a otro u otros y por tanto se pueda considerar igual.

Estos tests comparan los algoritmos y realizan contrastes de hipótesis entre ellos para determinar diferencias.

Hipótesis

- Hipótesis nula H_0: El algoritmo i y j son iguales.
- Hipótesis alternativa H_1: El algoritmo i y j son distintos.

Se trata, por tanto, de tests que realizan contrastes bilaterales, ya que están destinados a encontrar diferencias a posteriori en caso de que el test de ranking sea estadísticamente significativo. Se distinguen dos tipos de comparación:

- Método de control: Se compara el primer algoritmo del ranking devuelto por el test de ranking con el resto de algoritmos y por tanto habrá $K-1$ comparaciones o contrastes.
- Comparación múltiple: Compara todos los algoritmos entre sí. El número de comparaciones o contrastes por tanto es:

$$m = \frac{K(K-1)}{2}$$

Todos los tests POST-HOC aproximan los valores Z (estadísticos) de una distribución normal a partir de las diferencias entre dos rankings. La forma de aproximar estos valores Z varía en función del test de ranking de donde se provenga:

- Test de Friedman / Iman-Davenport:

$$Z = \frac{(R_i - R_j)}{\sqrt{\frac{K(K+1)}{6N}}}$$

, donde R_i y R_j son los rankings medios obtenidos por el algoritmo i y j respectivamente en el test de Friedman.

- Test de los Rangos Alineados de Friedman:

$$Z = \frac{\hat{R}_i - \hat{R}_j}{\sqrt{\frac{K(K+1)}{6N}}}$$

, donde $\hat{R}_i$ y $\hat{R}_j$ son los rankings medios obtenidos por el algoritmo i y j respectivamente en el test de los Rangos Alineados de Friedman.

- Test de Quade:

$$Z = \frac{T_i - T_j}{\sqrt{\frac{K(K+1)(2N+1)(K-1)}{18N(N+1)}}}$$

, donde T_i y T_j son los rankings medios obtenidos por el algoritmo i y j respectivamente en el test de Quade.

Luego, calculan los $p - valores$ y ordenan todos los datos en función de éstos de mayor a menor significancia (de menor a mayor). El contraste de las hipótesis (los resultados), así como el cálculo del valor α y los $p - valores$ ajustados varían en función del test aplicado. Los $p - valores$ ajustados son $p - valores$ que dependen de toda la familia de comparaciones y no sólo de una comparación, es decir, consideran la familia de hipótesis completa para cada pareja de algoritmos y se pueden comparar con el nivel de significancia proporcionado sin ajustar.

Tests

- **Test de Bonferroni-Dunn:** El contraste de las hipótesis se realiza comparando cada $p - valor$ con el nivel de significancia ajustado:

$$alpha\_ajustado = \frac{\alpha}{(K-1)}$$

- **Test de Holm:** Compara cada $p - valor$ (empezando por el más significativo) con:

$$alpha\_ajustado_i = \frac{\alpha}{(K-i)}$$

Si se rechaza una hipótesis continúa contrastando. En el caso de que una hipótesis se rechace se rechazan todas las demás.

- **Test de Finner:** Compara cada $p - valor$ (empezando por el más significativo) con:

$$alpha\_ajustado_i = 1 - (1-\alpha)^{\frac{(K-1)}{i}}$$

Al igual que el test de Holm, si se rechaza una hipótesis continúa contrastando. En el caso de que una hipótesis se rechace se rechazan todas las demás.

- **Test de Hochberg:** Compara en la dirección opuesta a Holm. En el momento que encuentra una hipótesis que pueda aceptar, acepta todas las demás.

- **Test de Li:** Rechaza todas las hipótesis si el $p - valor$ menos significativo es menor que α. En otro caso, acepta dicha hipótesis y rechaza cualquier hipótesis restante cuyo $p - valor$ sea menor que un valor específico:

$$valor = \frac{(1 - p\_valor_{k-1})}{(1-\alpha)\alpha}$$

Los tests anteriores son para el caso de comparaciones simples (utilizan un método de control), con lo que interviene el parámetro K para realizar las $K-1$ comparaciones. Para el caso de comparación múltiple, habría que cambiar esto por el parámetro m. Para los tests POST-HOC anteriores existe, por tanto, un test POST-HOC de comparación múltiple que se obtiene de forma análoga, excepto para el test de Li. En lugar del test de Li para comparaciones múltiples en este proyecto se implementa el test de Shaffer:

- **Test de Shaffer:** Rechaza cada H_i si:

$$p - valor_i \leq \frac{\alpha}{t_i}$$

, donde t_i puede ser obtenido mediante:

$$S(K) = \bigcup_{j=1}^{K} \{\binom{j}{2} + x : x \in S(K-j)\}$$

, que calcula la secuencia de número máximo de hipótesis que pueden ser ciertas en una comparación secuencial entre K distribuciones, donde $K \geq 2$ y $S(0) = S(1) = \{0\}$

Los tests POST-HOC de la lista anterior están ordenados de menor a mayor potencia, siendo, como se puede apreciar, el test de Bonferroni-Dunn el menos potente de todos y el test de Li el que mayor potencia presenta [7].

Capítulo 3

Análisis de requisitos

3.1. Epics

3.2. Historias de usuario

3.2.1. Historias de usuario desarrollador

3.2.2. Historias de usuario cliente

Bibliografía

[1] Tom M. Mitchell, *Machine Learning*, McGraw Hill, 1997.

[2] Oded Maimon and Lior Rokach, *Data Mining and Knowledge Discovery Handbook*, Springer, New York, 2010.

[3] Wilcoxon, F. *Individual Comparisons by Ranking Methods Biometrics*, Biometrics 1, 80-83, 1945.

[4] William Navidi *Estadística para ingenieros y científicos*, Colorado School of Mines, 370-372, 2006.

[5] J. Derrac, S. García, D. Molina, F. Herrera *A Practical Tutorial on the Use of Nonparametric Statistical Tests as a Methodology for Comparing Evolutionary and Swarm Intelligence Algorithms*, Swarm and Evolutionary Computation, 3-18, 2011.

[6] Zar, J.H. *Biostatistical Analysis*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1999

[7] S. García, A. Fernández, J. Luengo, F. Herrera, *Advanced nonparametric tests for multiple comparisons in the design of experiments in computational intelligence and data mining: Experimental Analysis of Power*, Information Sciences 180, 2044–2064, 2010