Tutorial Python: ¿Cómo combatir el Overfitting en el Machine Learning?

En este tutorial veremos tres de las técnicas más usadas para combatir el Overfitting en el Machine Learning: (1) usar modelos más simples, (2) el Dropout y (3) el early stopping.

En un *post* anterior hablamos del overfitting y el underfitting, dos conceptos que están asociados al desempeño de un modelo de Machine o de Deep Learning.

En este tutorial nos enfocaremos en el *Overfitting*, que recordemos se produce cuando el modelo funciona bastante bien con el set de entrenamiento pero tiene un desempeño pobre con el set de validación.

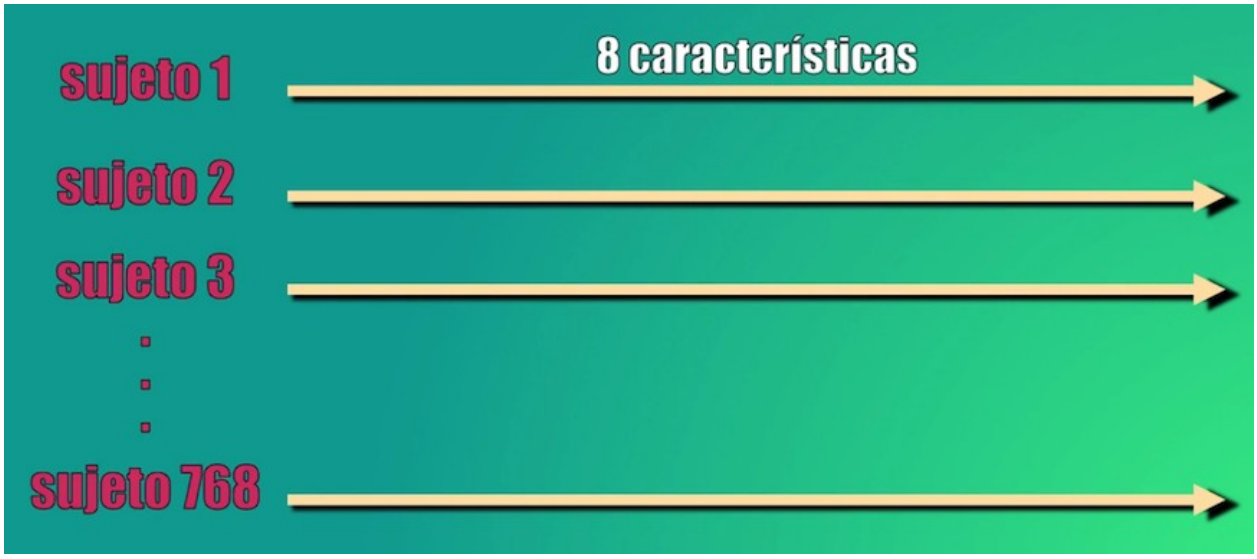
A través de un ejemplo práctico en Keras, veremos tres de las técnicas más usadas para combatir este problema

Al final del artículo se encuentra el enlace para descargar el set de datos y el código fuente.

Lectura y pre-procesamiento del set de datos

Hablemos primero del set de datos que usaremos en este tutorial.

Este contiene variables fisiológicas con las que se intenta predecir si una persona puede desarrollar diabetes en un futuro. Por cada sujeto se tienen, entre otras, variables como el número de embarazos que ha tenido, la concentración de glucosa en la sangre o el índice de masa corporal. En total son 8 características y 768 sujetos:



Adicionalmente, por cada sujeto se define la categoría a la que pertenece: 1: positivo o 0 negativo para diabetes.

Para leer este set usamos inicialmente Numpy, y creamos los arreglos y que contendrán respectivamente las características y la categoría a la que pertenece cada sujeto:

```
import numpy as np

dataset = np.loadtxt("dataset.csv", delimiter=",")
X = dataset[:, 0:8]
Y = dataset[:, 8]
```

En primer lugar debemos normalizar los datos (

), para garantizar que todas las características estén en la misma escala. Para ello usamos el módulo `StandardScaler` de la librería Scikit-Learn:

```
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
scaler = StandardScaler()
scaler.fit(X)
X = scaler.transform(X)
```

Una vez normalizados los datos, creamos los sets de entrenamiento y de validación, que tendrán una proporción del 80 y 20% respectivamente. De nuevo usamos Scikit-Learn y el módulo `train_test_split`, en donde sólo basta con definir el tamaño del set de validación (20%, o 0.2):

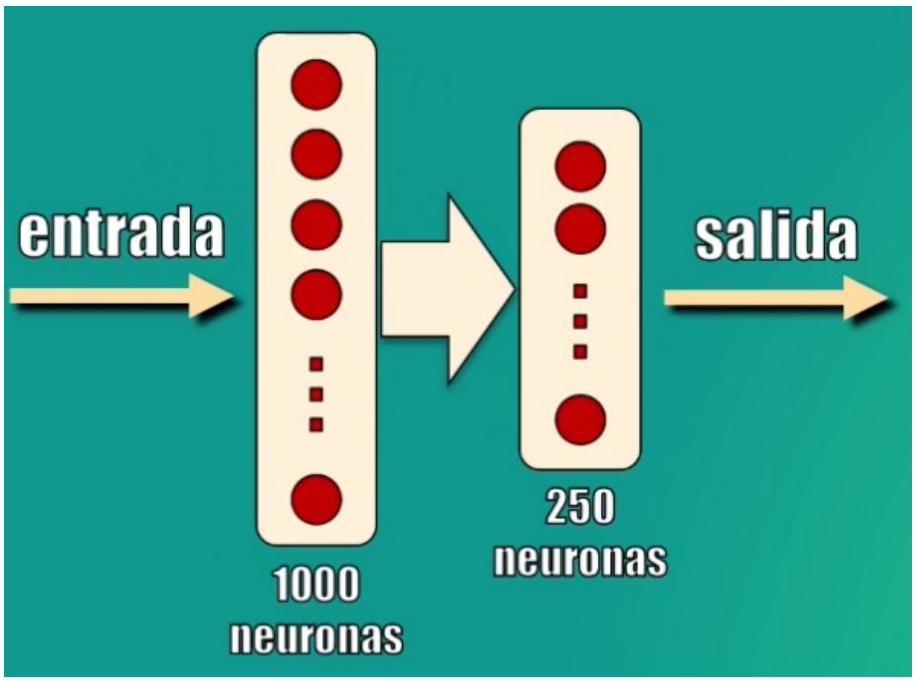
```
from sklearn.model_selection import train_test_split

x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(X, Y, test_size=0.2,
random_state=42)
```

y donde hemos usado `random_state=42` en la anterior línea de código para garantizar que la semilla del generador aleatorio siempre es la misma y por tanto la partición de los dos sets (entrenamiento y validación) siempre contendrá los mismos datos cada vez que ejecutemos el código.

Modelo base

Creemos un primer modelo base (o de referencia) para clasificar estos datos, donde intencionalmente usaremos más capas y neuronas de las necesarias para hacer que el modelo presente *Overfitting*. Este modelo será el referente para las próximas secciones, en donde implementaremos ligeros cambios para reducir este *Overfitting*.

El modelo será una simple Red Neuronal con dos capas ocultas: la primera contendrá 1000 neuronas y la segunda 250, ambas con función de activación *ReLU*, mientras que la capa de salida (que indicará la categoría a la que pertenece el dato), tendrá una sola neurona y función de activación sigmoidal:



Creación del modelo en Keras

Para crear este modelo usaremos los módulos `Sequential` y `Dense` de Keras:

```
np.random.seed(100)

model = Sequential()
model.add(Dense(1000, input_dim=8, activation='relu'))
model.add(Dense(250, activation='relu'))
model.add(Dense(1, activation='sigmoid'))
```

En este caso hemos usado `np.random.seed(100)` para fijar la semilla del generador aleatorio y garantizar así la reproducibilidad del entrenamiento cada vez que ejecutemos el código.

Entrenamiento del modelo

Para el entrenamiento usaremos la entropía cruzada, que es la misma función usada en la Regresión Logística, para lo cual usaremos el optimizador `adam` que, de forma similar a como lo hace el algoritmo del Gradiente Descendente, permite de forma iterativa minimizar la función de error (es decir la entropía cruzada). Por su parte la métrica de desempeño (que evaluará qué tan bien realiza la clasificación el modelo) será la precisión (`accuracy`):

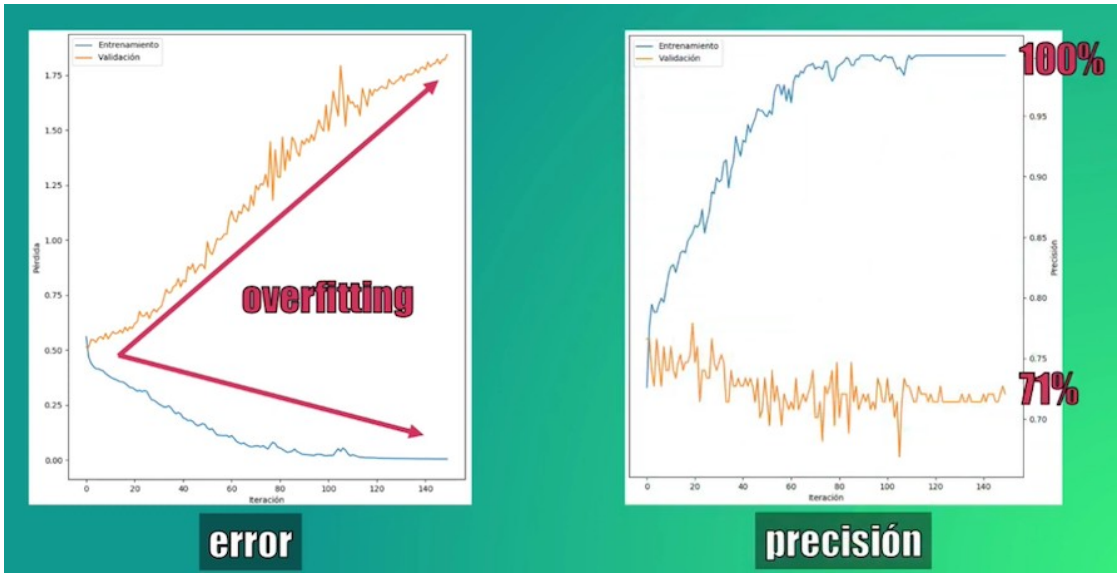
```
model.compile(loss='binary_crossentropy', optimizer='adam',
metrics=['accuracy'])
```

Entrenaremos el modelo con el método `fit`, presentaremos bloques de 64 ejemplos de entrenamiento (`batch_size=64`) por un total de 150 iteraciones (`epochs=150`). De manera simultánea realizaremos la validación (`validation_data=(x_test,y_test)`) para de esta forma ver cómo evolucionan tanto el error como la precisión con ambos sets durante el entrenamiento:

```
historia = model.fit(x_train, y_train, batch_size=64, epochs=150,
validation_data=(x_test,y_test), verbose=1)
```

Resultado del entrenamiento: overfitting

Una vez realizado el entrenamiento podemos observar el comportamiento del error y de la precisión:



En el caso del set de entrenamiento el error se reduce progresivamente. Sin embargo, con el set de validación el error se incrementa progresivamente! Esto es una señal clara de *Overfitting*, lo que se puede comprobar al verificar la precisión: 100% con el set de entrenamiento y tan sólo 71% con el de validación.

¿Y a qué se debe este overfitting? En este caso hay dos razones:

1. Tenemos realmente muy pocos datos (tan solo 768 en total) y cada uno de ellos tiene sólo 8 características,
2. Sin embargo, la Red Neuronal tiene demasiadas neuronas y capas ocultas, pues en total tiene casi 260 mil parámetros. Es un modelo que resulta excesivamente complejo para el set de datos que se quiere analizar.

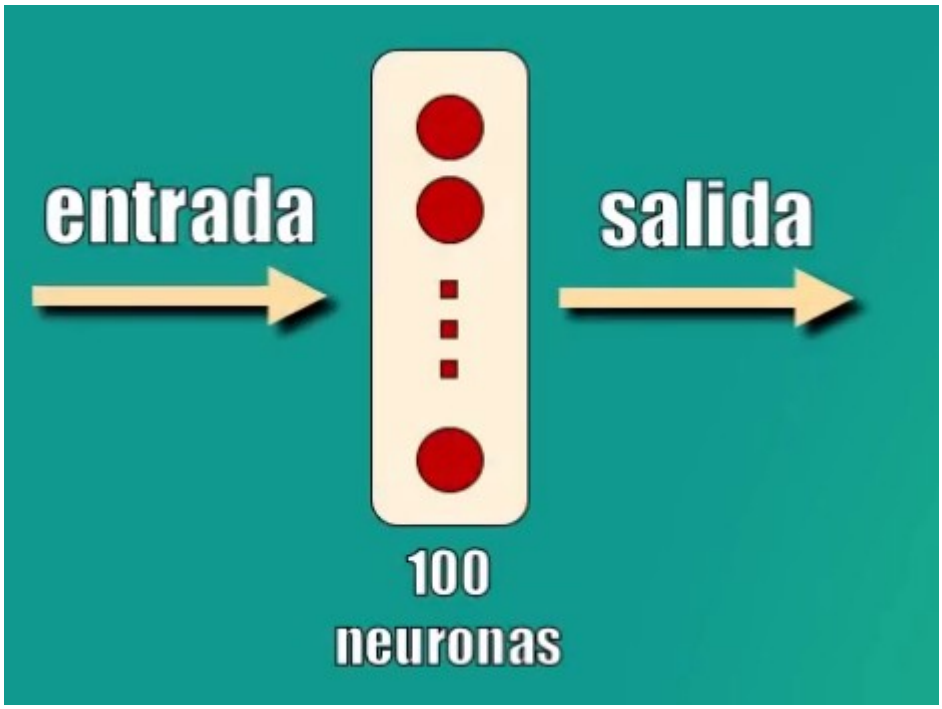
Veamos entonces tres técnicas para reducir este *Overfitting*.

Tres técnicas para reducir el *overfitting*

Simplificar el modelo

La primer técnica para combatir el *overfitting* es la más intuitiva: si el modelo es demasiado complejo, la solución consiste simplemente en reducir el número de capas y/o el número de neuronas en cada capa.

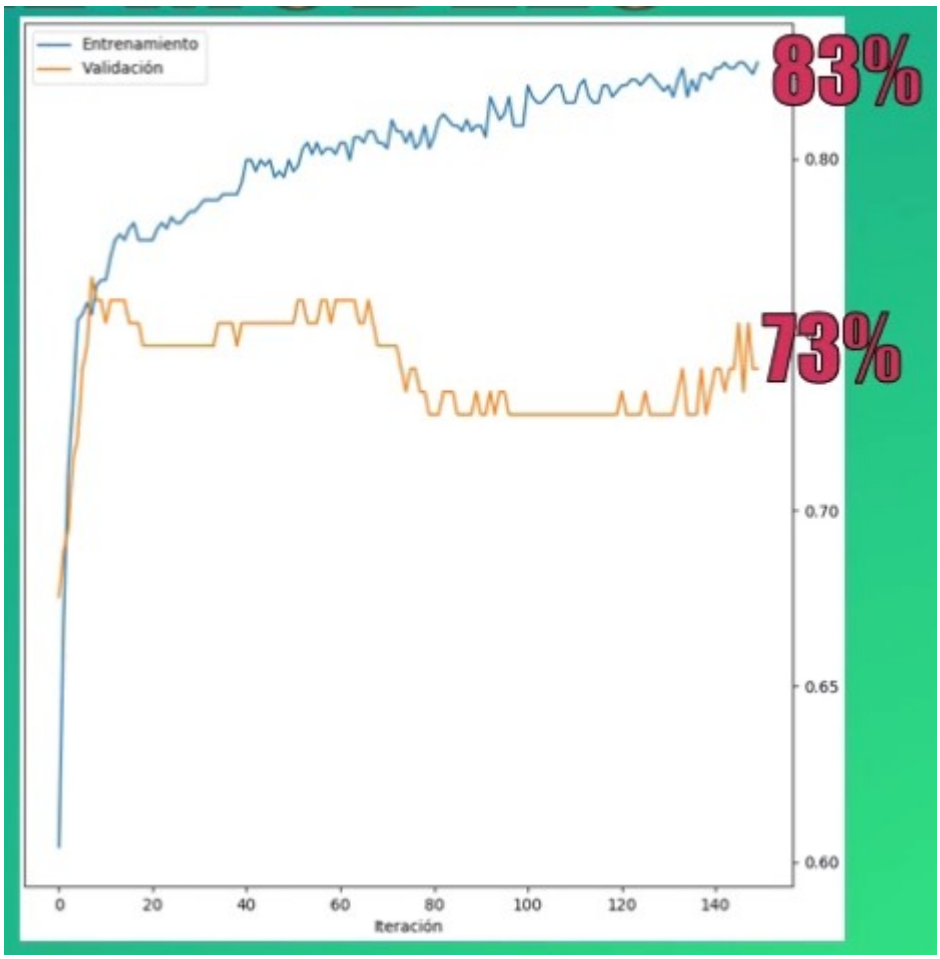
Así que diseñaremos un segundo modelo que será una Red Neuronal con tan sólo una capa oculta con 100 neuronas, adicional a las capas de entrada y de salida originales del modelo base:



Este modelo lo creamos y entrenamos de manera similar a como lo hicimos con el modelo de referencia, usando los módulos `Sequential` y `Dense` de Keras:

```
model = Sequential()
model.add(Dense(100, input_dim=8, activation='relu'))
model.add(Dense(1, activation='sigmoid'))
model.compile(loss='binary_crossentropy', optimizer='adam',
metrics=['accuracy'])
historia = model.fit(x_train, y_train, batch_size=64, epochs=150,
validation_data=(x_test,y_test), verbose=1)
```

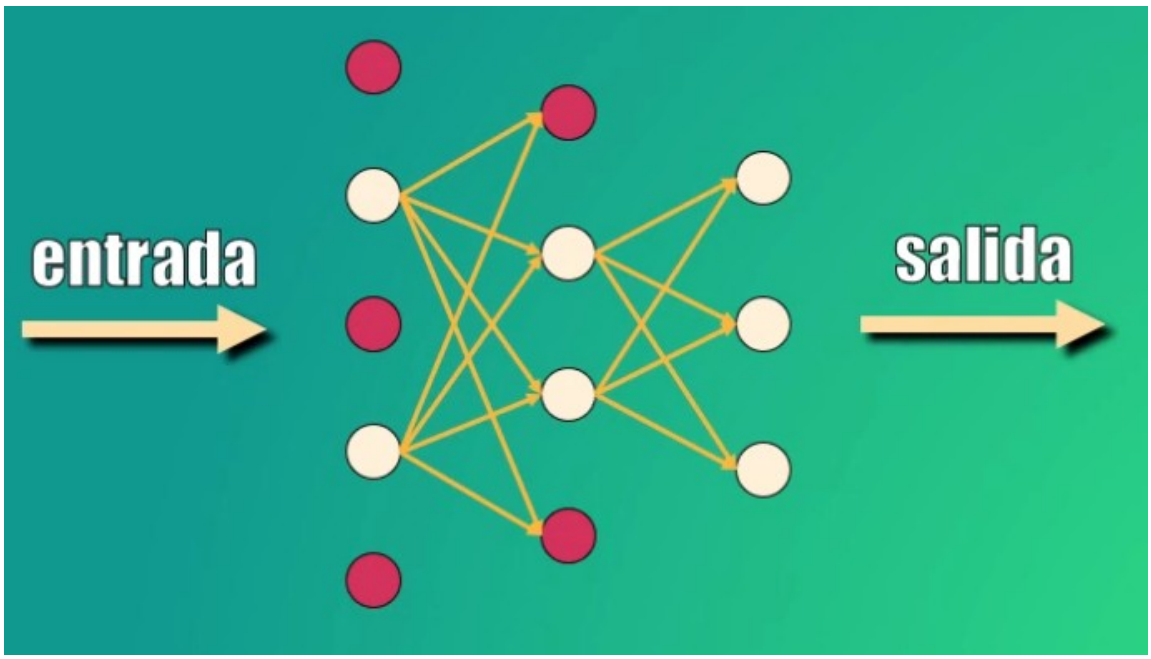
Al entrenar el modelo y validarlo, vemos que se ha sacrificado la precisión del set de entrenamiento (pues ahora bajó a aproximadamente el 83%), pero se ha incrementado la del set de validación (pasando de 71 a 73%), reduciendo así el *overfitting*:



El *Dropout*

Veamos la segunda técnica, el *Dropout*, que en la actualidad es una de las más usadas para reducir el *overfitting*.

Esta técnica es muy sencilla, consiste simplemente en “apagar”, para cada una de las capas, un porcentaje de las neuronas para que no sean entrenadas, evitando así que sus coeficientes se modifiquen. En cada iteración las neuronas inactivas son seleccionadas de forma aleatoria durante el algoritmo, con lo que se logra mejorar la capacidad de generalización del modelo:

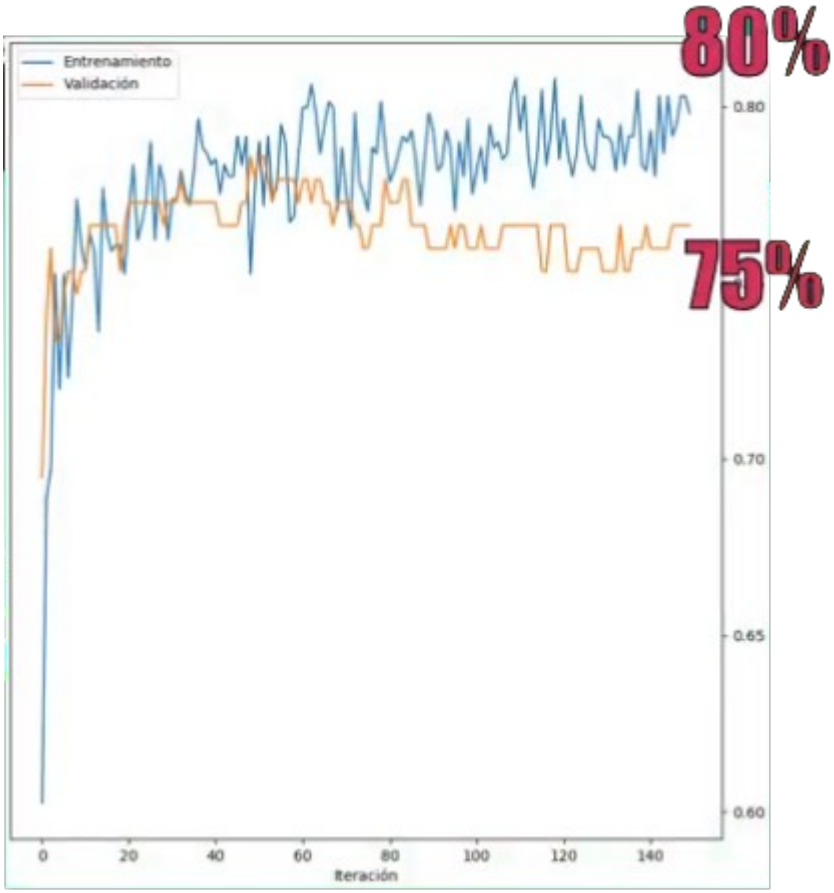


En Keras es muy sencillo implementar el *Dropout*. Basta con agregar esta función a la salida de cada capa del modelo original, especificando el porcentaje de neuronas que estarán inactivas:

```
model = Sequential()
model.add(Dense(1000, input_dim=8, activation='relu'))
model.add(Dropout(0.9))
model.add(Dense(250, activation='relu'))
model.add(Dropout(0.8))
model.add(Dense(1, activation='sigmoid'))
model.compile(loss='binary_crossentropy', optimizer='adam',
metrics=['accuracy'])
historia = model.fit(x_train, y_train, batch_size=64, epochs=150,
validation_data=(x_test,y_test), verbose=1)
```

En las líneas de código anteriores, se usaron valores de *Dropout* correspondientes al 90% (`model.add(Dropout(0.9))`) y al 80% (`model.add(Dropout(0.8))`) en cada una de las capas del modelo base inicial.

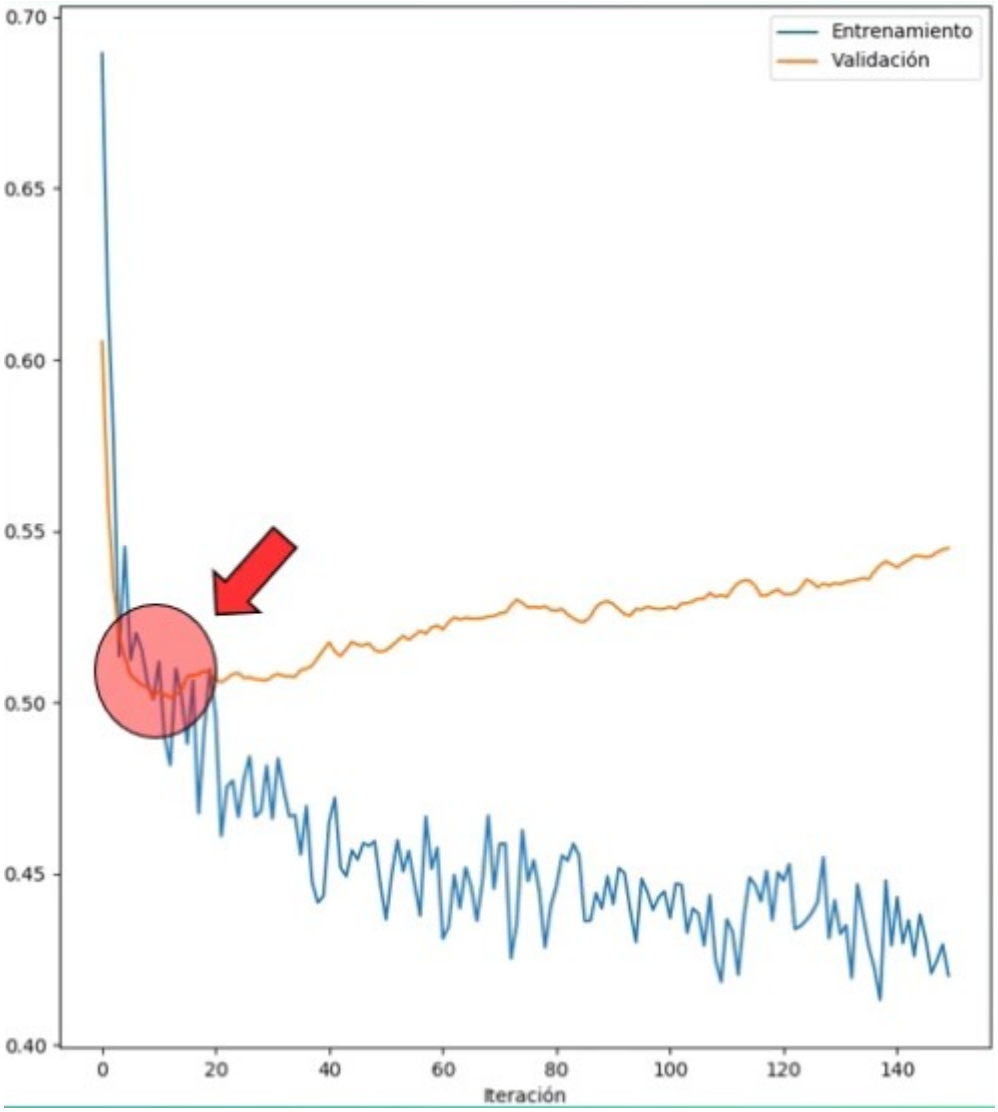
Al entrenar el modelo se observa un incremento en la precisión del set de validación, llegando al 75%:



Early stopping

Finalmente, la tercera técnica se conoce como *Early stopping*.

Si volvemos al modelo entrenado con *Dropout*, observamos que el error de validación comienza a incrementarse después la iteración 10, aproximadamente:



La idea del *Early stopping* es sencilla: detener el entrenamiento en el momento que se observe un incremento en el valor del error de validación. Al hacer esto se logra entrenar el modelo para que este error sea mínimo y, por tanto, su precisión sea máxima, reduciendo así el *overfitting*.

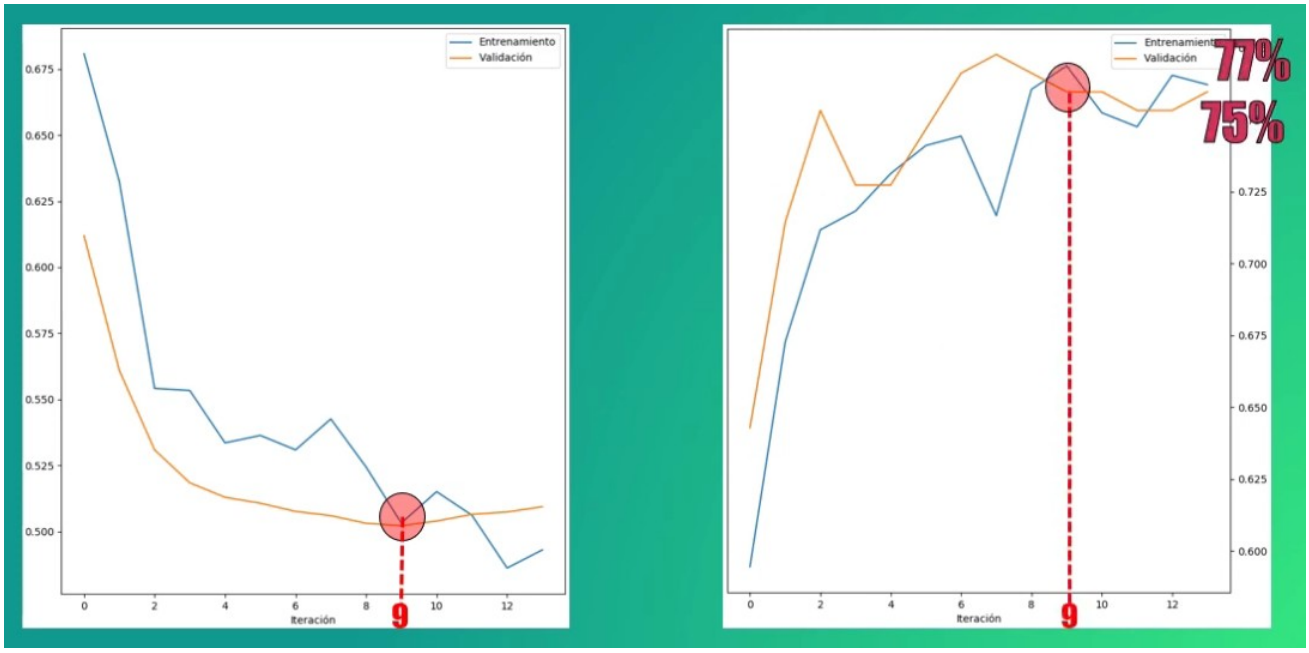
Así que tomaremos el modelo *Dropout* y agregaremos early stopping durante el entrenamiento.

Esto es sencillo en Keras: creamos un *callback* con la función `EarlyStopping`, especificando que vamos a seguir el comportamiento del error de validación, y que después de observar el valor mínimo esperaremos cuatro iteraciones, y si este valor no se reduce detendremos el entrenamiento:

```
early_stop = EarlyStopping(monitor='val_loss', patience=4,
restore_best_weights=True)
historia = model.fit(x_train, y_train, batch_size=64, epochs=150,
validation_data=(x_test,y_test), verbose=1, callbacks=[early_stop])
```

Con la palabra clave `restore_best_weights` le indicamos a Keras que use los coeficientes de entrenamiento obtenidos en el punto mínimo alcanzado por el error.

Al usar el *early stopping* vemos que el entrenamiento se detiene tras 13 iteraciones. Sin embargo es en la iteración 9 en donde el error es mínimo, y por tanto los coeficientes finales del modelo corresponderán a los calculados en esta iteración:



En este caso los valores obtenidos para la precisión con los sets de entrenamiento y validación son de aproximadamente 75 y 77%. Es decir, que con este cuarto modelo entrenado ¡prácticamente no existe *overfitting*!

Conclusión

Bien, en este video vimos un ejemplo práctico de un modelo con *overfitting* y de cómo atacar este problema usando tres estrategias diferentes.

La primera de ellas consistió en simplificar el modelo, usando menos capas y menos neuronas por capa. La segunda técnica, que es tal vez la más usada y efectiva, es el *Dropout*, que consiste en desactivar en cada iteración del entrenamiento, y de forma aleatoria, un cierto porcentaje de las neuronas de cada capa. Y la tercera es el *early stopping*, que consiste en detener el entrenamiento en el momento en que el error del set de validación se comienza a incrementar.

En estos tres casos vimos que se lograba mejorar la precisión con el set de validación, pasando de 60% a aproximadamente un 70%.

En todo caso vemos que esta precisión sigue siendo relativamente baja para lo que se espera de un clasificador, y esto nos indica que de todos modos el modelo presenta algo de *underfitting*. En el siguiente *post* veremos, también con un ejemplo práctico, cómo resolver este problema y mejorar así la precisión con el set de validación.

Datos y código fuente

En este enlace de Github podrás descargar el set de datos y el código fuente de este tutorial.