

Comparación de Técnicas de Aprendizaje Automático Supervisado Aplicadas a Datos Cardiólogos

Autor: Nicolás Seivane

Tutora: Andrea Rey

Universidad Nacional de Hurlingham (UNAHUR)



Índice general

| | |
|---|-----------|
| Índice de Figures | 3 |
| Índice de Tablas | 5 |
| Glosario | 9 |
| 1. Introducción | 13 |
| 1.1. Motivación | 13 |
| 1.2. Estado del Arte | 13 |
| 1.3. Conjuntos de Datos | 14 |
| 1.3.1. Dataset Binario: <i>Insuficiencia Cardíaca Predicción</i> | 15 |
| 1.3.2. Dataset Multiclasificación: <i>Cardiotocografía Predicción</i> | 17 |
| 2. Métodos de Clasificación | 21 |
| 2.1. Clasificador Naïve Bayes | 21 |
| 2.2. Regresión Logística | 23 |
| 2.3. Árboles de Decisión | 25 |
| 2.3.1. Bosques Aleatorios (Random Forest) | 26 |
| 2.4. Máquinas de Soporte Vectorial | 27 |
| 3. Métricas de Rendimiento | 31 |
| 3.1. Métricas para el Caso Binario | 31 |
| 3.2. Métricas para caso Multiclasificación | 33 |
| 4. Resultados | 37 |
| 4.1. Dataset Binario | 37 |
| 4.2. Dataset Multiclasificación | 43 |
| 5. Conclusiones | 51 |
| 5.1. Análisis General e Inferencias | 51 |
| 5.2. Mejoras Potenciales y Consideraciones | 51 |
| Bibliografía | 53 |

Índice de Figuras

| | | |
|------|--|----|
| 4.1. | Comparación del desempeño de los mejores modelos en el caso binario. | 40 |
| 4.2. | Valores de <i>Accuracy</i> según la cantidad de características en el caso binario. | 42 |
| 4.3. | Valores de <i>AUC</i> según la cantidad de características en el caso binario. | 42 |
| 4.4. | Valores de F1-Score según la cantidad de características en el caso binario. | 43 |
| 4.5. | Comparación del desempeño de los mejores modelos en el caso multiclase. | 46 |
| 4.6. | Valores de <i>Accuracy</i> según la cantidad de características en el caso multiclase. | 46 |
| 4.7. | Valores de <i>AUC</i> según la cantidad de características en el caso multiclase. | 47 |
| 4.8. | Valores de F1-Score según la cantidad de características en el caso multiclase. | 48 |

Índice de Tablas

| | | |
|-------|---|----|
| 1.1. | Cantidad de registros utilizados | 15 |
| 1.2. | Tipo de atributo del conjunto binario. | 16 |
| 1.3. | Cantidad de registros utilizados | 17 |
| 1.4. | Tipo de atributo del conjunto multiclase. | 17 |
| 3.1. | Matriz de confusión. | 32 |
| 3.2. | Matriz de confusión multiclase. | 34 |
| 4.1. | Grilla de hiperparámetros para NB Gaussiano en el caso binario. | 38 |
| 4.2. | Resultados finales de NB Gaussiano en el caso binario. | 38 |
| 4.3. | Grilla de hiperparámetros para RL en el caso binario. | 38 |
| 4.4. | Resultados finales del RL en el caso binario. | 38 |
| 4.5. | Grilla de hiperparámetros para RF en el caso binario. | 39 |
| 4.6. | Resultados finales de RF en el caso binario. | 39 |
| 4.7. | Grilla de hiperparámetros para SVM en el caso binario. | 39 |
| 4.8. | Resultados finales de SVM en el caso binario. | 39 |
| 4.9. | Importancia de las características para NB en el caso binario. | 40 |
| 4.10. | Importancia de las características para RL. | 41 |
| 4.11. | Importancia de las características para RF en el caso binario. | 41 |
| 4.12. | Importancia de las características para SVM en el caso binario. | 41 |
| 4.13. | Grilla de hiperparámetros para NB Gaussiano en el caso multiclase. | 43 |
| 4.14. | Resultados finales de NB Gaussiano en el caso multiclase. | 43 |
| 4.15. | Grilla de hiperparámetros para RL en el caso multiclase. | 44 |
| 4.16. | Resultados finales de RL en el caso multiclase. | 44 |
| 4.17. | Grilla de hiperparámetros para RF en el caso multiclase. | 44 |
| 4.18. | Resultados finales de RF en el caso multiclase. | 45 |
| 4.19. | Grilla de hiperparámetros para SVM en el caso multiclase. | 45 |
| 4.20. | Resultados finales de SVM en el caso multiclase. | 45 |
| 4.21. | Importancia de las características para NB Gaussiano en el caso multiclase. | 47 |
| 4.22. | Importancia de las características para RL en el caso multiclase. | 48 |
| 4.23. | Importancia de las características para RF en el caso multiclase. | 49 |
| 4.24. | Importancia de las características para SVM en el caso multiclase. | 50 |

Glosario

Notación general y datos

| | |
|----------------|---|
| n | Número total de registros o ejemplos en el <i>dataset</i> . |
| D | Cantidad de atributos de cada registro. |
| L | Número total de clases posibles en el problema de clasificación. |
| \mathbf{x}_i | Vector de características del registro i -ésimo, $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iD})$. |
| X_j | j -ésimo atributo de un registro. |
| x_{ij} | Valor del atributo X_j para el registro i -ésimo. |
| y_i | Clase real (etiqueta verdadera) del registro i -ésimo. |
| \hat{y}_i | Clase predicha para el registro i -ésimo. |
| C_l | l -ésima clase del conjunto de clases $\{C_1, C_2, \dots, C_L\}$. |
| $ C_l $ | Cardinalidad o número de registros pertenecientes a la clase l -ésima. |
| \hat{y} | Predicción final en un modelo de clasificación. |

Naïve Bayes (Gaussiano)

| | |
|----------------------|---|
| $\hat{\pi}_l$ | Estimación de la probabilidad <i>a priori</i> de que un registro pertenezca a la clase C_l . |
| $\hat{\theta}_{jvl}$ | Estimación de la probabilidad estimada de que el atributo X_j tome el valor x_{jv} dado que la clase es C_l . |
| μ_{jl} | Media del atributo X_j en la clase C_l . |
| σ_{jl}^2 | Varianza del atributo X_j en la clase C_l . |

Regresión logística

| | |
|---------------------------------|---|
| $\boldsymbol{\beta}$ | Vector de coeficientes en regresión logística, $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_D)$. |
| β_0 | Intercepto (sesgo) del modelo en regresión logística. |
| β | Término de sesgo o intercepto en regresión logística (cuando se usa sin subíndice). |
| $p(\mathbf{x}_i)$ | Estimación de la probabilidad de la clase positiva para la observación \mathbf{x}_i en regresión logística. |
| $\tilde{J}(\boldsymbol{\beta})$ | Función de costo regularizada en regresión logística. |
| α | Parámetro de regularización L1 (Lasso) o L2 (Ridge) en regresión. |
| \mathbf{H} | Matriz Hessiana de la función de costo en métodos Newton-CG. |
| \mathbf{B} | Aproximación de la matriz Hessiana en L-BFGS. |
| \mathcal{C} | Parámetro de regularización del modelo (controla el equilibrio entre ajuste y complejidad). |

SVM

| | |
|--------------|---|
| \mathbf{w} | Vector normal al hiperplano óptimo. |
| β | Término de sesgo o intercepto en SVM (cuando se usa sin subíndice). |

| | |
|-----------------------------|--|
| ξ_i | Variable de holgura (<i>slack</i>) para el registro i -ésimo en margen suave. |
| C | Parámetro de regularización en SVM que controla el equilibrio entre margen y errores. |
| $K(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ | Función kernel que calcula la similitud entre los vectores \mathbf{a} y \mathbf{b} . |
| γ | Parámetro de ancho en el kernel RBF (Radial Basis Function). |
| r | Coeficiente de desplazamiento en kernels polinómicos y sigmoides. |
| d | Grado del polinomio en el kernel polinómico. |

Árboles de decisión y Random Forest

| | |
|--------------------------------|--|
| t | Nodo de un árbol de decisión. |
| $N(t)$ | Número de registros en el nodo t . |
| $p(l t)$ | Proporción/probabilidad de la clase l en el nodo t . |
| $H(\mathcal{D})$ | Entropía de Shannon del conjunto de datos \mathcal{D} . |
| $\text{Gini}(t)$ | Índice de Gini del nodo t en un árbol de decisión. |
| $\hat{y}_a(\mathbf{x})$ | Predicción del árbol a en Random Forest para la observación \mathbf{x} . |
| A | Número total de árboles en un Random Forest. |
| <code>criterion</code> | Criterio de partición en árboles/RF (gini o entropy). |
| <code>max_depth</code> | Profundidad máxima del árbol. |
| <code>min_samples_split</code> | Mínimo de muestras para dividir un nodo. |
| <code>min_samples_leaf</code> | Mínimo de muestras en una hoja. |
| <code>max_features</code> | Número de atributos considerados por división. |

Métricas de evaluación

| | |
|---------------------------------|--|
| TP | Verdaderos positivos. |
| TN | Verdaderos negativos. |
| FP | Falsos positivos. |
| FN | Falsos negativos. |
| <i>Accuracy</i> | Proporción global de predicciones correctas. |
| <i>Precisión</i> | Proporción de positivos predichos correctos. |
| , <i>Recall</i> | Proporción de positivos reales detectados. |
| F1-Score | Media armónica entre <i>Precisión</i> y <i>Recall</i> . |
| F_{β_f} | F-measure ponderada que balancear <i>Recall</i> y <i>Precisión</i> . |
| <i>AUC</i> | Área bajo la curva ROC. |
| M_l | Valor de una métrica (<i>Accuracy</i> , F1-Score, etc.) para la clase C_l . |
| $\widehat{M}_{\text{weighted}}$ | Métrica ponderada por el tamaño de la clase en problemas multiclas. |

Validación cruzada

| | |
|-------|---|
| K | Número de pliegues en validación cruzada K -fold. |
| G_i | i -ésimo pliegue o grupo en validación cruzada. |

Resumen

En este trabajo se realiza un análisis comparativo de distintas técnicas de **Aprendizaje Automático Supervisado** aplicadas a datos cardiológicos, con el objetivo de evaluar su desempeño en la clasificación de pacientes según riesgo o presencia de enfermedad cardíaca.

En primer lugar, se lleva a cabo una **preparación del dataset**, que incluye limpieza, transformación de variables, selección de atributos y división en conjuntos de entrenamiento y prueba. Se definen las notaciones fundamentales utilizadas a lo largo del trabajo.

Luego, se describen los principales algoritmos estudiados:

- **Naïve Bayes**, se resalta su fundamento probabilístico y el supuesto de independencia condicional.
- **Regresión Logística**, incluyendo la función logística, el hiperplano de decisión y el proceso de optimización.
- **Árboles de Decisión y Random Forest**, destacando la construcción jerárquica de reglas, los criterios de impureza y la reducción de varianza aportada por los métodos de ensamble.
- **Máquinas de Vectores de Soporte (SVM)**, considerando márgenes duros y suaves, los hiperparámetros clave, el rol del vector normal w y el uso de *kernels*.

Para cada método, se explican los **hiperparámetros relevantes**, su interpretación y cómo afectan el ajuste del modelo. Se especifican los valores considerados o el procedimiento utilizado para seleccionarlos.

Posteriormente, se detalla la **metodología de evaluación**, incluyendo las métricas utilizadas derivadas de la matriz de confusión: *Accuracy*, precisión, *Recall*, y F1-Score, así como el área bajo la curva ROC y el tiempo de ejecución.

A continuación, se presentan y discuten los **resultados obtenidos** para cada modelo. Se comparan sus desempeños utilizando las métricas seleccionadas. El método con mejor desempeño en clasificación binaria y multiclase es **Random Forest**, el cual alcanza valores altos en las métricas utilizadas para evaluar, siendo claro el poder del clasificador al usar diferentes árboles de decisión para clasificar un mismo registro, considerando la clase más votada. Por el contrario, se nota cómo a mayor cantidad de datos y clases para clasificar, el método tarda más tiempo en tomar una decisión.

Finalmente, se exponen las **conclusiones generales** del estudio, señalando qué métodos mostraron mejor rendimiento en el *dataset* de cardiología, qué limitaciones presenta el estudio y cómo podrían extenderse o mejorarse los análisis en trabajos futuros mediante técnicas adicionales, mayor optimización o validación más exhaustiva.

Capítulo 1

Introducción

Las enfermedades cardiovasculares son la causa número uno de muerte globalmente, con un estimado de 17.9 millones de vidas cada año, aproximadamente el 31 % de todas las muertes globales. La idea central de este trabajo es encontrar una técnica de aprendizaje automático óptima para poder realizar predicciones de si un paciente tiene altas probabilidades de tener insuficiencia cardíaca.

Por otro lado, la cardiotocografía (CTG) es un registro continuo de la frecuencia cardíaca fetal que se obtiene mediante un transductor de ultrasonidos colocado en el abdomen materno. La CTG se utiliza ampliamente durante el embarazo como método para evaluar el bienestar fetal, sobre todo en embarazos con mayor riesgo de complicaciones.

El objetivo general de este trabajo es comparar el rendimiento de diversas técnicas de Aprendizaje Automático Supervisado con el fin de recomendar aquella que presente el mejor desempeño al aplicarse sobre un conjunto de datos cardiológicos. Se expondrán las técnicas empleadas y las métricas utilizadas para medidas de calidad de un clasificador y, en consecuencia, mostrar cual técnica resulta más adecuada para el problema del pre-diagnóstico de enfermedades cardíacas.

1.1 Motivación

El proceso de diagnóstico médico puede ser extenso, incluso contando con la mejor disposición del personal de salud, ya que con frecuencia requiere la recopilación y análisis de datos provenientes de distintos estudios. El propósito de este trabajo es contribuir a agilizar dicho proceso, identificando técnicas que puedan ser utilizadas por los profesionales médicos como herramientas complementarias para realizar diagnósticos. No solo resulta fundamental la posibilidad de obtener diagnósticos más ágiles, sino también la de reconocer qué atributos o características de los estudios resultan más significativos que otros para un diagnóstico determinado.

1.2 Estado del Arte

Las técnicas de Aprendizaje Automático se utilizan cada vez más en la investigación cardiovascular. El trabajo de Isaksen et al. [8] presenta recomendaciones y orientaciones para la evaluación adecuada de modelos de aprendizaje automático supervisado en cardiología, destacando los problemas específicos asociados con estas técnicas, como la fuga de datos (*data leakage*) y el desequilibrio de clases. Por su parte, el documento de Kumar y Kumar [9] revisa las metodologías de aprendizaje automático para el diagnóstico de cardiopatías utilizando métodos no invasivos, un área crucial dada la alta mortalidad

anual (17.9 millones de personas) asociada con los problemas cardíacos.

En los estudios cardiológicos, las variables utilizadas pueden agruparse en tres grandes categorías principales: parámetros clínicos estructurados, señales cardíacas y datos provenientes de imágenes médicas. Los parámetros clínicos incluyen variables demográficas, antecedentes, síntomas y mediciones de laboratorio, que suelen encontrarse en bases de datos estructuradas como el conjunto de Cleveland, utilizado comúnmente en estudios de clasificación de enfermedades cardíacas. Las señales cardíacas, como los electrocardiogramas (ECG) y fonocardiogramas (PCG), aportan información temporal y frecuencial altamente relevante para la detección de arritmias, soplos o patrones eléctricos anómalos. Finalmente, los datos de imagen —que abarcan ecocardiografías, resonancias magnéticas cardíacas (CMR), tomografías computarizadas (CCT) o estudios SPECT— permiten evaluar morfología, función cardíaca y perfusión.

En el ámbito de los métodos de aprendizaje automático aplicados a cardiología, varios trabajos han empleado los mismos algoritmos utilizados en este estudio. Por ejemplo, modelos basados en *Support Vector Machines* (SVM) han demostrado un rendimiento competitivo en la clasificación de ECG y en la detección de enfermedades a partir de parámetros clínicos, mostrando en muchos casos un desempeño superior a métodos más simples. Los clasificadores *k-Nearest Neighbors* (*kNN*) han sido utilizados para tareas como la detección de arritmias mediante características temporales del ECG o para la predicción de riesgo a partir de datos clínicos estructurados. Otros estudios han empleado Naïve Bayes o árboles de decisión para la clasificación de cardiopatías utilizando tanto datos tabulares como señales procesadas. Estas aplicaciones muestran que los modelos implementados en este trabajo están bien representados dentro de la literatura del área y cuentan con antecedentes sólidos en tareas diagnósticas dentro del dominio cardiológico.

Además de los enfoques basados en aprendizaje automático, los profesionales de la salud emplean tradicionalmente una variedad de herramientas diagnósticas para la evaluación cardiovascular, las cuales constituyen la base clínica sobre la que se interpretan los resultados computacionales. Entre ellas se destacan el electrocardiograma (ECG), utilizado para detectar alteraciones eléctricas como isquemia, arritmias o hipertrofias; las pruebas de esfuerzo, que permiten evaluar la respuesta cardíaca ante actividad física y cambios en el segmento ST; los ecocardiogramas, que brindan información estructural y funcional sobre cavidades, válvulas y fracción de eyección; y los análisis de laboratorio, que incluyen marcadores como troponinas, colesterol y glucosa, esenciales para caracterizar el riesgo cardiovascular. Estas herramientas continúan siendo el estándar clínico que pueden complementarse con modelos computacionales, proporcionando un marco interpretativo que guía la toma de decisiones médicas.

1.3 Conjuntos de Datos

Para la realización de este trabajo se exploraron diversas plataformas en busca de conjuntos de datos reales que resulten relevantes para el estudio mediante técnicas de aprendizaje automático. Durante esta búsqueda se identificaron múltiples *datasets* de distinta naturaleza: algunos correspondientes a problemas de **clasificación binaria**, donde las observaciones se asocian a dos posibles clases, y otro *dataset* de **clasificación multiclasa**, con más de dos categorías posibles.

Se observa, además, una marcada predominancia de conjuntos de datos provenientes del ámbito **médico**, dentro de los cuales se seleccionan aquellos considerados más adecuados para las pruebas de los métodos de aprendizaje automático, abarcando tanto casos binarios como multiclasa.

Todos estos *datasets* son procesados anteriormente a las pruebas realizadas, en donde se eliminan tanto registros duplicados como con datos faltantes, tampoco se tienen en cuenta aquellos registros con datos atípicos *a priori*, como un caso donde un paciente tiene colesterol 0.

Se realiza una pequeña descripción de cada atributo utilizado en cada *dataset*. Si el atributo es categórico, se informa la distribución de los valores que posee dicho atributo y en caso de resultar ser un atributo numérico, se informa la media de los valores de dicho atributo, junto con el valor máximo y mínimo que posee. Se realiza lo anterior para contextualizar los atributos y ver los rangos de valores con que se trabajará.

1.3.1 Dataset Binario: *Insuficiencia Cardíaca Predicción*

El *dataset HeartFailure* [6] fue creado mediante la combinación de cinco *datasets* independientes con 11 atributos comunes, logrando el *dataset* más grande de información de enfermedades cardiovasculares utilizado para investigación. Los cinco *datasets* utilizados son:

- Cleveland: 303 observaciones,
- Hungarian: 294 observaciones,
- Switzerland: 123 observaciones,
- Long Beach VA: 200 observaciones,
- Stalog (Heart) Data Set: 270 observaciones.

En la Tabla 1.2 se muestra qué tipo de datos son los atributos del *dataset* que son utilizados en este trabajo, considerando que estos mismos ya fueron previamente procesados para poder ser utilizados en las técnicas de aprendizaje automático. Luego, la Tabla 1.1 muestra la cantidad de registros y atributos que son utilizados, junto al tipo de dato que son.

Tabla 1.1: Cantidad de registros utilizados.

| | |
|------------------------------|------------|
| Cantidad de registros | 918 |
| Cantidad de atributos | 11 |
| Atributos Categóricos | 5 |
| Atributos Numéricos | 6 |

Descripción de los atributos

Age: Este atributo se refiere a la edad de los pacientes. Los pacientes tienen una media de edad de 53 años, con una edad máxima de 77 y de edad mínima de 28, con proporciones de edad bastante bien distribuidas, siendo la menor de 0.11% para algunas edades y la mayor de 4.14% para otras edades, teniendo otras distribuciones entre estos dos rangos.

Sex: Refiere al sexo de los pacientes; hay una distribución de sexo del 78.98% masculinos y el 21.02% femeninos.

ChestPainType: Tipo de dolor torácico causado por isquemia cardíaca. Tiene una distribución 18.85% de angina atípica, luego un 22.11% de dolor no anginoso, un 54.03% asintomático y un 5.01% de dolor

Tabla 1.2: Tipo de atributo del conjunto binario.

| Atributo | Tipo de dato | ¿Está codificado? | Unidad |
|----------------|------------------------------------|-------------------|-----------------|
| Age | Numérico (<code>int</code>) | No | Años |
| Sex | Categórico (<code>string</code>) | No | - |
| ChestPainType | Categórico (<code>string</code>) | No | - |
| RestingBP | Numérico (<code>int</code>) | No | mm Hg |
| Cholesterol | Numérico (<code>int</code>) | No | mm/dl |
| FastingBS | Numérico (<code>int</code>) | Sí | mg/dl |
| RestingECG | Categórico (<code>string</code>) | No | - |
| MaxHR | Numérico (<code>int</code>) | No | - |
| ExerciseAngina | Categórico (<code>string</code>) | No | - |
| Oldpeak | Numérico (<code>float</code>) | No | ST en depresión |
| ST_Slope | Categórico (<code>string</code>) | No | - |
| HeartDisease | Numérico (<code>int</code>) | Sí | - |

de pecho anginoso típico.

RestingBP: Describe la presión sanguínea en reposo, tiene un valor medio de 133.02, con un valor máximo de 200.00 y valor mínimo de 92.00.

Cholesterol: Este atributo es el colesterol sérico, es decir, la medida total de colesterol en sangre; tiene un valor medio en los pacientes de 199.02, con un valor máximo de 603.00 y un valor mínimo de 85.00. Se encuentra medido en miligramos por decilitro.

FastingBS: Es la Glucosa en sangre en ayuno; hay un 76.66 % de registros con valores de glucosa en sangre menores a 120 mg/dl, codificado en 0, y un 23.34 % con valores mayores a 120 mg/dl, codificado en 1.

RestingECG: Son los resultados de electrocardiogramas en reposo; hay un 60.09 % codificado en Normal, un 19.41 % codificado en ST (tiene una anormalidad en el estudio) y un 20.50 % codificado en LVH (probablemente una hipertrofia en el ventrículo izquierdo).

MaxHR: Este atributo es el máximo ritmo cardíaco registrado, tiene una media en los pacientes de 136.79, un valor máximo de 202.00 y un valor mínimo de 60.00.

ExerciseAngina: Es la angina (dolor en el pecho) producida por ejercicio, ; donde hay un 59.54 % de pacientes que no tenían dolor, codificado en N, y un 40.46 % que sí tenían dolor, codificado en Y.

Oldpeak: Valor máximo de depresión del segmento ST (en milímetros) registrado en todas las derivaciones contiguas durante una prueba de esfuerzo. Forma parte del cálculo del riesgo de que un paciente sufra de isquemia o infarto de miocardio; donde valores altos indican un mayor riesgo de enfermedad coronaria; tiene una media de 0.90, un valor máximo de 6.20 y un valor mínimo de -0.10.

ST_Slope: La pendiente del segmento ST durante el ejercicio máximo; hay un 43.08 % de casos *Up*, un 50.05 % de *Flat* y un 6.87 % de *Down* [*Up*: pendiente ascendente, *Flat*: pendiente plana, *Down*: pendiente descendente].

HeartDisease: Variable de salida que indica si la persona posee una enfermedad cardíaca; donde un 44.71 % no tiene enfermedad cardíaca, codificado en 0, y un 55.29 % sí tiene enfermedad cardíaca, codificado en 1. Siendo ésta la **variable objetivo**.

1.3.2 Dataset Multiclasificación: *Cardiotocografía Predicción*

En el *dataset* [3] utilizado, se procesaron automáticamente 2126 cardiotocogramas fetales y se midieron sus características diagnósticas. Tres obstetras expertos clasificaron los CTG, asignando una etiqueta de clasificación consensuada. La clasificación se realizó con respecto al estado fetal, el cual puede ser normal, sospechoso o patológico.

En la Tabla 1.4 se muestran los tipos de las variables utilizadas en este trabajo, junto con sus valores medio, máximo y mínimo. Luego, la Tabla 1.3 muestra la cantidad de registros y atributos que son utilizados, junto al tipo de dato que son.

Tabla 1.3: Cantidad de registros utilizados.

| | |
|-----------------------|-------------|
| Cantidad de registros | 2115 |
| Cantidad de atributos | 21 |
| Atributos Categóricos | 0 |
| Atributos Numéricos | 21 |

Tabla 1.4: Tipo de atributo del conjunto multiclasificación.

| Atributo | Tipo de dato | Media | Máximo | Mínimo |
|----------|---------------------|---------|---------|---------|
| LB | Numérico (int) | 133.301 | 160.000 | 106.000 |
| AC | Numérico (float) | 0.003 | 0.019 | 0.000 |
| FM | Numérico (float) | 0.009 | 0.481 | 0.000 |
| UC | Numérico (float) | 0.004 | 0.015 | 0.000 |
| DL | Numérico (float) | 0.001 | 0.015 | 0.000 |
| DS | Numérico (float) | - | - | - |
| DP | Numérico (float) | - | - | - |
| ASTV | Numérico (int) | 46.977 | 87.000 | 12.000 |
| MSTV | Numérico (float) | 1.335 | 7.000 | 0.200 |
| ALTV | Numérico (int) | 9.759 | 91.000 | 0.000 |
| MLTV | Numérico (float) | 8.170 | 50.700 | 0.000 |
| Width | Numérico (int) | 70.511 | 180.000 | 3.000 |
| Min | Numérico (int) | 93.574 | 159.000 | 50.000 |
| Max | Numérico (int) | 164.085 | 238.000 | 122.000 |
| Nmax | Numérico (int) | 4.075 | 18.000 | 0.000 |
| Nzeros | Numérico (int) | - | - | - |
| Mode | Numérico (int) | 137.448 | 187.000 | 60.000 |
| Mean | Numérico (int) | 134.596 | 182.000 | 73.000 |
| Median | Numérico (int) | 138.084 | 186.000 | 77.000 |
| Variance | Numérico (int) | 18.891 | 269.000 | 0.000 |
| Tendency | Numérico (int) | - | - | - |
| NSP | Categórico (string) | - | - | - |

Descripción de los atributos

LB: Frecuencia cardíaca fetal basal (latidos por minuto).

AC: Número de aceleraciones por segundo.

FM: Número de movimientos fetales por segundo.

UC: Número de contracciones uterinas por segundo.

DL: Número de desaceleraciones leves por segundo.

DS: Número de desaceleraciones severas por segundo.

DP: Número de desaceleraciones prolongadas por segundo. Hay un 91.58 % con valor de 0, un 3.40 % con valor 0.002, un 1.13 % con valor 0.003, un 3.31 % con valor 0.001, un 0.43 % con valor 0.004 y un 0.14 % con valor 0.005.

ASTV: Porcentaje de tiempo con variabilidad anormal a corto plazo.

MSTV: Valor medio de la variabilidad a corto plazo.

ALTV: Porcentaje de tiempo con variabilidad anormal a largo plazo.

MLTV: Valor medio de la variabilidad a largo plazo.

Width: Ancho del histograma de CTG.

Min: Mínimo del histograma de CTG.

Max: Máximo del histograma de CTG.

Nmax: Número de picos del histograma de CTG.

Nzeros: Número de ceros del histograma de CTG. Hay un 76.26 % con valor 0, un 17.30 % con valor 1, un 0.99 % con valor 3, un 5.11 % con valor 2, un 0.09 % con valor 4, un 0.05 % con valor 10, un 0.09 % con valor 5, un 0.05 % con valor 8 y un 0.05 % con valor 7.

Mode: Moda del histograma de CTG.

Mean: Promedio del histograma de CTG.

Median: Mediana del histograma de CTG.

Variance: Varianza del histograma de CTG.

Tendency: Tendencia del histograma de CTG. Hay un 39.67 % con valor 1, un 52.53 % con valor 0 y un 8.27 % con valor -1.

CLASS: Código de clasificación del estado fetal (N = normal, S = sospechoso y P = patológico). Hay un 13.81 % de casos sospechosos, un 77.92 % de normales y un 8.27 % de patológicos. Siendo ésta la **variable objetivo**.

Capítulo 2

Métodos de Clasificación

En este capítulo se presentan los métodos de aprendizaje automático supervisado que se emplearon en este trabajo, se describen sus fundamentos teóricos, las fórmulas y notaciones utilizadas, así como los hiperparámetros y criterios de optimización más relevantes. El objetivo es describir y explicar cómo funciona cada uno de los algoritmos, sus supuestos y la forma en que se aplican a los datos cardiológicos analizados.

Los métodos requieren de **hiperparámetros**, que son un parámetro cuyo valor se fija antes del proceso de entrenamiento de un modelo y que controla aspectos del aprendizaje, como la complejidad del modelo, la velocidad de convergencia o la regularización. A diferencia de los parámetros internos del modelo (por ejemplo, los coeficientes en una regresión logística o en un hiperplano de separación), los hiperparámetros no se aprenden automáticamente a partir de los datos, sino que deben ser seleccionados mediante experimentación, validación cruzada u optimización de hiperparámetros, siendo un análisis en sí mismos.

Los **hiperparámetros** utilizados en este trabajo corresponden a aquellos definidos por la librería `scikit-learn` [?] del lenguaje de programación *Python*, la cual ofrece implementaciones estandarizadas y bien documentadas de modelos clásicos de aprendizaje automático. En particular, la búsqueda en grilla se realiza con los valores posibles que determina la librería, junto con la combinación de valores posibles.

En particular, se emplearon los valores por defecto sugeridos por la librería y, cuando fue necesario, se ajustaron manualmente algunos hiperparámetros relevantes con el fin de evaluar su influencia en el desempeño del modelo. Este procedimiento permite garantizar consistencia en las comparaciones, reproducibilidad de los experimentos y una interpretación clara acerca del efecto de cada hiperparámetro sobre los resultados.

En lo que sigue, los datos poseen D atributos denotados por X_1, X_2, \dots, X_D y cada registro es representado como $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iD}, y_i)$, para $i = 1, 2, \dots, n$, donde y_i indica la etiqueta. Además, C_1, C_2, \dots, C_L denotarán las clases de interés, siendo $L = 2$ para el caso binario.

2.1 Clasificador Naïve Bayes

El **clasificador Naïve Bayes** [7] (NB) es un método supervisado probabilístico basado en el *Teorema de Bayes*, que asume independencia condicional entre los atributos dado la clase de pertenencia. Si bien esta suposición rara vez se cumple estrictamente en la práctica —debido a que las variables suelen estar correlacionadas entre sí— el método continúa funcionando de manera efectiva en numerosos problemas

reales. La regla de clasificación, o la probabilidad de pertenencia de un registro a la clase C_l , para $l \in \{1, 2, \dots, L\}$ está dada por:

$$P(Y = C_l | X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_D = x_D) = \frac{P(X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_D = x_D | Y = C_l) P(Y = C_l)}{P(X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_D = x_D)}, \quad (2.1)$$

donde $P(Y = C_l)$ es la **probabilidad a priori** de la clase C_l , es decir, qué tan frecuente es esta clase en el conjunto de datos. Mientras que, $P(X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_D = x_D | Y = C_l)$ es la **verosimilitud**, es decir, cuán probable es observar las características de un registro si supiéramos que pertenece a la clase C_l .

Probabilidad Condicional: Bajo el supuesto de independencia, la probabilidad condicional puede expresarse como:

$$P(X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_D = x_D | Y = C_l) = \prod_{j=1}^d P(X_j = x_j | Y = C_l). \quad (2.2)$$

Por lo tanto, basta estimar individualmente, para cada atributo X_j con $j \in \{1, 2, \dots, D\}$ y para cada clase C_l con $l \in \{1, 2, \dots, L\}$, la probabilidad:

$$\hat{\theta}_{jvl} = P(X_j = x_{jv} | Y = C_l) = \frac{|\{X_j = x_{jv} \wedge Y = C_l\}|}{|C_l|}, \quad (2.3)$$

donde $v \in \{1, 2, \dots, V_j\}$ indexa los valores posibles del atributo X_j . Aquí, cada parámetro cumple una función específica:

- $\hat{\theta}_{jvl}$: estimación de la probabilidad de que el atributo X_j tome el valor x_{jv} para registros de la clase C_l . Representa qué tan típico es ese valor dentro de una clase.
- $|\{X_j = x_{jv} \wedge Y = C_l\}|$: cantidad de registros en la clase C_l para los cuales el atributo X_j toma el valor x_{jv} .
- $|C_l|$: número total de registros pertenecientes a la clase C_l .

Podemos pensar a θ_{jmk} como una especie de “*frecuencia interna de la clase*”, una medida que indica qué características son más comunes dentro de cada grupo.

Probabilidad a priori: Otra estimación fundamental a calcular es la de que un registro pertenezca a la clase C_l , dada por:

$$\hat{\pi}_l = P(Y = C_l) = \frac{|C_l|}{n}, \quad (2.4)$$

donde n es el tamaño muestral.

La intuición es sencilla: antes de mirar ningún atributo, ¿qué tan probable es cada clase?

Caso Continuo (Naïve Bayes Gaussiano)

Cuando los atributos son continuos y se asume distribución Normal, las verosimilitudes se estiman con la función de densidad Gaussiana, dada por:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right], \quad (2.5)$$

donde $x, \mu \in \mathbb{R}$ y $\sigma > 0$. Por lo cual la decisión final se obtiene como:

$$\hat{Y} = \operatorname{argmax}_{C_l} \left[\log P(Y = C_l) + \sum_{j=1}^D \log f(x_j | \mu_{jl}, \sigma_{jl}^2) \right], \quad (2.6)$$

donde los parámetros de la distribución normal para cada atributo X_j y para cada clase C_l se estiman como:

$$\hat{\mu}_{jl} = \frac{1}{|C_l|} \sum_{i:Y_i=C_l} x_{ij}, \quad (2.7)$$

$$\hat{\sigma}_{jl}^2 = \frac{1}{|C_l|} \sum_{i:Y_i=C_l} (x_{ij} - \hat{\mu}_{jl})^2. \quad (2.8)$$

2.2 Regresión Logística

El modelo de **Regresión Logística** [5] (LR, por su equivalente en inglés *Logistic Regression*) es una técnica de análisis de datos utilizada para establecer relaciones entre las variables predictoras y la clase a la cual pertenece cada registro. El modelo permite predecir la probabilidad de que un nuevo registro pertenezca a una clase determinada. Este tipo de modelo de regresión es justamente utilizado para los problemas no linealmente separables.

A diferencia de la regresión lineal múltiple, la regresión logística predice una probabilidad (valor entre 0 y 1). Ambos modelos son lineales en sus parámetros, pero difieren en la naturaleza de la variable dependiente. El objetivo es estimar los coeficientes de regresión que maximizan la verosimilitud de los datos observados, o encontrar los coeficientes que mejor funcionan para los datos de entrenamiento.

El modelo busca estimar la probabilidad condicional de que una observación pertenezca a la clase positiva (o clase objetivo). Para cada registro i (con $i = 1, 2, \dots, n$), su etiqueta verdadera se denota por y_i , donde se define:

$$y_i = \begin{cases} 1, & \text{si la observación pertenece a la clase positiva } C_1, \\ 0, & \text{si la observación pertenece a la clase negativa } C_2. \end{cases}$$

La función logística define la **función de probabilidad** de pertenencia del registro \mathbf{x}_i a la clase C_1 como:

$$p(\mathbf{x}_i) = P(y_i = 1 | \mathbf{x}_i) = \frac{\exp(\beta_0 + \sum_{j=1}^D \beta_j x_{ij})}{1 + \exp(\beta_0 + \sum_{j=1}^D \beta_j x_{ij})}, \quad (2.9)$$

donde β_0 es el intercepto y β_j son los coeficientes asociados a cada predictor, para $j = 1, 2, \dots, D$.

La función inversa de la función logística, denominada **función logit**, relaciona el logaritmo de los *odds* con un modelo lineal, siendo *odds* lo que se utiliza para analizar si la probabilidad de ocurrencia de un evento -caso/no caso- difiere o no en distintos grupos. En este caso,

$$\text{logit}(p(\mathbf{x}_i)) = \ln \left(\frac{p(\mathbf{x}_i)}{1 - p(\mathbf{x}_i)} \right) = \beta_0 + \sum_{j=1}^D \beta_j x_{ij}. \quad (2.10)$$

Esta transformación asegura que los valores obtenidos estén acotados entre 0 y 1, mientras que la combinación lineal de predictores puede tomar cualquier valor real, siendo este último punto un factor que realiza el cálculo de coeficientes muy difícil. Para solucionar este obstáculo, el cálculo de los coeficientes de regresión se estiman mediante el método de **Máxima Verosimilitud** (MLE), donde la función de log-verosimilitud a maximizar es

$$\ell(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k) = \sum_{i=1}^n [y_i \ln(p(\mathbf{x}_i)) + (1 - y_i) \ln(1 - p(\mathbf{x}_i))], \quad (2.11)$$

en donde la solución analítica no existe, por lo que se utilizan métodos numéricos iterativos para obtener los parámetros óptimos.

Hiperparámetros

- **Parámetro de Regularización (\mathcal{C}):** Controla la complejidad del modelo. Valores pequeños de \mathcal{C} implican mayor regularización (menor sobreajuste), mientras que valores grandes permiten mayor flexibilidad del modelo.
- **Penalización (penalty):** Es un término regulador que se suma a la función de coste original J , para formar una función ajustada \tilde{J} . Controla la capacidad del modelo y reduce el error de generalización.

- Regularización L1 (Lasso):

$$\tilde{J}_{L1}(\boldsymbol{\beta}) = J(\boldsymbol{\beta}) + \alpha \sum_{j=1}^D |\beta_j|, \quad (2.12)$$

donde

- β_j son los coeficientes del modelo, que representan la influencia de cada variable x_j en la predicción, para $j = 1, 2, \dots, D$;
- $\alpha \geq 0$ es el parámetro de regularización que controla la intensidad de la penalización: valores más altos implican mayor castigo a los coeficientes.

- Regularización L2 (Ridge):

$$\tilde{J}_{L2}(\boldsymbol{\beta}) = J(\boldsymbol{\beta}) + \frac{1}{2} \alpha \sum_{j=1}^D \beta_j^2, \quad (2.13)$$

donde

- β_j controla cuánto influye cada característica sobre la salida;
- $\alpha \geq 0$ determina cuánto se penaliza el tamaño de los coeficientes, evitando que crezcan demasiado.

- Regularización Elastic Net:

$$\tilde{J}_{EN}(\boldsymbol{\beta}) = J(\boldsymbol{\beta}) + \alpha \left[\rho \sum_{j=1}^D |\beta_j| + \frac{1-\rho}{2} \sum_{j=1}^D \beta_j^2 \right], \quad (2.14)$$

donde

- β_j son los coeficientes asociados a cada atributo;
- $\alpha \geq 0$ controla el grado total de regularización;
- $\rho \geq 0$ balancea la combinación entre L1 y L2. En particular, si $\rho = 0$ entonces se tiene L2 y si $\rho = 1$ se tiene L1.

- **Algoritmo de Optimización (solver):** El *solver* es el algoritmo numérico encargado de minimizar la función de coste regularizada $\tilde{J}(\boldsymbol{\beta})$.

- Método Newton-CG (basado en segunda derivada):

$$\boldsymbol{\beta}^{(t+1)} = \boldsymbol{\beta}^{(t)} - \mathbf{H}^{-1} \nabla_{\boldsymbol{\beta}} \tilde{J}(\boldsymbol{\beta}^{(t)}), \quad (2.15)$$

donde β es el vector de parámetros del modelo que se actualiza en cada iteración. El método utiliza el gradiente ∇_β y la inversa de la matriz Hessiana \mathbf{H} (o una aproximación de la misma mediante *Conjugate Gradient*) para determinar la dirección de actualización del vector de parámetros.

- Método L-BFGS (quasi-Newton):

$$\beta^{(t+1)} = \beta^{(t)} - \mathbf{B}^{-1} \nabla_\beta \tilde{J}(\beta^{(t)}). \quad (2.16)$$

En este método, β también es el vector de parámetros a optimizar. La matriz \mathbf{B} aproxima al Hessiano, permitiendo actualizaciones sin calcular derivadas segundas reales. Soporta la penalidad L2.

- Método SAGA: Algoritmo de tipo *stochastic gradient descent* con soporte para regularización L1 y L2. Permite trabajar con grandes *datasets* y converge de manera estable incluso con penalización L1.

- **Estrategia Multiclasa:** La regresión logística está diseñada originalmente para clasificación binaria. Para extenderla a múltiples clases se emplean estrategias como:

- *one-vs-rest* (OvR): entrena un clasificador por clase;
- *multinomial*: optimiza una única función de verosimilitud multinomial conjunta.

2.3 Árboles de Decisión

El aprendizaje mediante **Árboles de Decisión** es un método no paramétrico que utiliza divisiones jerárquicas sobre los atributos de los datos, construyendo reglas de decisión del tipo *if-else* para predecir el valor de una variable objetivo.

El objetivo principal es encontrar las divisiones (particiones) de un nodo padre que maximicen la pureza de los nodos hijos, es decir, que minimicen la impureza de los nodos resultantes. Es un método mucho más sencillo de realizar, donde se crea un camino de decisión, por lo cual según los valores de los atributos de un registro podemos predecir a qué clase pertenecen, donde el cómputo pesado se encuentra en la creación del propio camino.

En consecuencia, la probabilidad de que un registro en el nodo t pertenezca a la clase C_l , para $l \in \{1, 2, \dots, L\}$, se define como:

$$p(l|t) = \frac{N_l(t)}{N(t)}, \quad (2.17)$$

donde $N(t)$ es la cantidad total de ejemplos en el nodo t y $N_l(t)$ la cantidad de ejemplos en la clase C_l . La impureza de un nodo t se mide mediante una función ϕ que depende de las probabilidades de las clases en dicho nodo y se calcula como:

$$\iota(t) = \phi(p(1|t), p(2|t), \dots, p(L|t)). \quad (2.18)$$

La función de impureza ι es un hiperparámetro en sí mismo y debe cumplir las siguientes condiciones, para una función de densidad de probabilidad $\mathbf{p} = \{p_1, p_2, \dots, p_L\}$:

- **No negatividad:**

$$\phi(\mathbf{p}) \geq 0.$$

- **Impureza mínima en nodos puros:**

$$\phi(\mathbf{p}) = 0 \quad \text{si existe } l \in \{1, 2, \dots, L\} \text{ tal que } p_l = 1.$$

- **Máxima impureza con distribución uniforme:**

$$\phi(\mathbf{p}) \text{ es máxima cuando } p_l = \frac{1}{L} \quad \forall l \in \{1, 2, \dots, L\}.$$

La impureza es máxima cuando las clases están perfectamente mezcladas (la probabilidad de cada clase es la misma) y es mínima (cero) cuando el nodo contiene solo una clase.

Dentro de las funciones de impureza más utilizadas, se encuentran la entropía de Shannon y el índice de Gini.

La **entropía de Shannon** mide el grado de desorden o incertidumbre en el conjunto de datos \mathcal{D} . Toma valores cercanos a cero cuando el nodo es puro y crece a medida que las clases se distribuyen de forma más uniforme, calculándose como:

$$H(\mathcal{D}) = - \sum_{l=1}^L \frac{N_l(t)}{N(t)} \log_2 \left(\frac{N_l(t)}{N(t)} \right). \quad (2.19)$$

El **índice de Gini** cuantifica la probabilidad de clasificar incorrectamente una instancia y se calcula como:

$$\text{Gini}(t) = 1 - \sum_{l=1}^L [p(l|t)]^2 = 1 - \sum_{l=1}^L \left(\frac{N_l(t)}{N(t)} \right)^2. \quad (2.20)$$

Al igual que la entropía, es mínimo cuando el nodo es puro y aumenta cuando las clases están mezcladas.

La **reducción de impureza** generada al dividir el nodo t en dos nodos hijos t_1 y t_2 mediante una partición s se calcula como

$$\Delta\iota(s, t) = \iota(t) - q_1\iota(t_1) - q_2\iota(t_2), \quad (2.21)$$

donde $q_j = \frac{N(t_j)}{N(t)}$ para $j = 1, 2$.

2.3.1 Bosques Aleatorios (Random Forest)

El algoritmo de **Random Forest** [1] (RF) combina múltiples árboles de decisión independientes construidos sobre subconjuntos aleatorios de los datos (muestreo con reemplazo o *bootstrap*). Cada árbol se entrena sobre un subconjunto de atributos aleatorios en cada división, lo que introduce diversidad y reduce la varianza.

La predicción final para la clasificación se obtiene mediante el voto mayoritario de los árboles está dada por:

$$\hat{y} = \underset{C_l}{\operatorname{argmax}} \sum_{a=1}^A \mathbb{I}(\hat{y}_a(\mathbf{x}) = C_l), \quad (2.22)$$

donde $\hat{y}_a(\mathbf{x})$ es la predicción del ejemplo \mathbf{x} dada por árbol a , A es la cantidad total de árboles en el bosque e \mathbb{I} es la **función indicadora**, definida como:

$$\mathbb{I}(\hat{y}_a(\mathbf{x}) = C_l) = \begin{cases} 1, & \text{si el árbol } a \text{ asigna la clase } C_l \text{ al ejemplo } \mathbf{x}, \\ 0, & \text{en caso contrario.} \end{cases}$$

Esta función contabiliza cuántos árboles votan por cada clase C_l , permitiendo que el modelo escoja aquella con mayor cantidad de votos.

Hiperparámetros

- **Criterio de Partición:** Función de impureza utilizada para evaluar la calidad de una división. En `scikit-learn`, las opciones disponibles son: `gini` (índice de Gini) y `entropy` (entropía de Shannon).
- **Algoritmo de Construcción:** *ID3* [2] emplea la ganancia de información (entropía), mientras que *CART* [10] utiliza el índice de Gini y construye árboles binarios. En `scikit-learn`, el árbol implementado corresponde a una versión optimizada de *CART*.
- **Número de Atributos Muestreados (`max_features`):** Cantidad de atributos candidatos por división. En Random Forest, las opciones típicas son:

$$\text{sqrt} = \sqrt{D}, \quad \text{log2} = \log_2(D),$$

o bien un número entero, un porcentaje o `None` (usar todos los atributos).

- **Número de Árboles (`n_estimators`):** Cantidad total de árboles que componen el bosque en Random Forest. Valores altos reducen la varianza pero aumentan el costo computacional.
- **Profundidad Máxima (`max_depth`):** Límite superior para la altura del árbol. Un valor `None` permite crecer hasta que las hojas sean puras o no haya más divisiones posibles.
- **Tamaño Mínimo de Muestra para Dividir (`min_samples_split`):** Número mínimo de muestras requerido para realizar una partición interna.
- **Tamaño Mínimo de Muestra en una Hoja (`min_samples_leaf`):** Cantidad mínima de muestras que debe contener una hoja para evitar sobreajuste.

2.4 Máquinas de Soporte Vectorial

Las **Máquinas de Soporte Vectorial** [4] (SVM, por sus siglas en inglés) constituyen una técnica de clasificación supervisada basada en la búsqueda de una **función de decisión** que permita predecir la clase de una observación a partir de sus atributos. Dado que este método opera sobre variables numéricas, los atributos categóricos deben codificarse previamente.

El objetivo fundamental de SVM es encontrar un **hiperplano de separación óptimo** que divida los datos en función de sus clases, **maximizando el margen**, es decir, la distancia mínima entre el hiperplano y los puntos más cercanos de cada clase (denominados **vectores de soporte**). Dichos vectores determinan la posición y orientación del hiperplano, por lo que son los únicos puntos relevantes en el entrenamiento del modelo.

Aunque existen infinitos hiperplanos que pueden separar los datos, el principio de SVM consiste en seleccionar aquel que logre la **máxima separación posible entre las clases**, minimizando simultáneamente el riesgo de sobreajuste y aumentando la capacidad de generalización.

El caso de **Margen Rígido (Hard Margin)** separa perfectamente las clases sin errores de clasificación. En este caso, el problema de optimización se formula como:

$$\text{Minimizar } \frac{1}{2} |\mathbf{w}|^2 \quad \text{sujeto a } y_i(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle + \beta) \geq 1, \quad (2.23)$$

donde \mathbf{w} es el vector normal al hiperplano, β es el término de sesgo, \mathbf{x}_i es el i -ésimo registro del conjunto de datos, $y_i \in \{-1, +1\}$ es la etiqueta asociada a dicho registro, y la restricción garantiza que todas las observaciones queden correctamente clasificadas y a una distancia mínima de $\frac{1}{\|\mathbf{w}\|}$ del hiperplano.

Pero hay un gran obstáculo, debido a que en la práctica los datos rara vez son perfectamente separables. Por ello, se introduce el concepto de **Margen Suave (Soft Margin)**, que permite violaciones controladas de las restricciones mediante variables de holgura $\xi_i \geq 0$. El problema se redefine como:

$$\text{Minimizar } \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^n \xi_i \quad \text{sujeto a } \begin{cases} y_i(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle + \beta) \geq 1 - \xi_i, \\ \xi_i \geq 0, \end{cases} \quad (2.24)$$

donde el parámetro $C > 0$ actúa como un **control de regularización**: valores grandes de C penalizan más fuertemente los errores, buscando una separación más estricta (a costa de menor margen), mientras que valores pequeños permiten más errores, favoreciendo márgenes amplios y mayor generalización.

La **Formulación Dual** del problema, en lo que respecta a los dos márgenes permite expresar la solución en términos de los productos internos entre las observaciones:

$$\text{Maximizar } -\frac{1}{2} \sum_{i,\ell=1}^n \alpha_i \alpha_\ell y_i y_\ell K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_\ell) + \sum_{i=1}^n \alpha_i, \quad (2.25)$$

$$\text{sujeto a } 0 \leq \alpha_i \leq C, \quad \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0. \quad (2.26)$$

Aquí, los α_i son los multiplicadores de Lagrange asociados a las restricciones, y $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_\ell)$ representa el producto interno entre las observaciones en un espacio transformado.

En muchos casos, las clases no son separables linealmente en el espacio original de los datos. El **Kernel Trick** permite proyectar los datos a un espacio de mayor dimensión (posiblemente infinito) donde sí exista un hiperplano separador, *sin necesidad de calcular explícitamente la transformación*.

Esto se logra sustituyendo los productos internos $\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_\ell \rangle$ por una función **kernel** $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_\ell)$, que computa directamente el producto interno en el espacio transformado. De esta forma, se mantiene la eficiencia computacional mientras se obtiene un modelo capaz de representar fronteras de decisión no lineales.

Funciones Kernel Comunes

En las siguientes definiciones, los vectores $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^D$ representan puntos en el espacio original de características o atributos.

Kernel Lineal:

$$K(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle. \quad (2.27)$$

Kernel Radial (RBF o Gaussiano):

$$K(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \exp(-\gamma \|\mathbf{a} - \mathbf{b}\|^2). \quad (2.28)$$

Kernel Polinómico:

$$K(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle + r)^d. \quad (2.29)$$

Kernel Sigmoide:

$$K(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \tanh(\gamma \langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle + r). \quad (2.30)$$

Cada kernel introduce parámetros que controlan la flexibilidad del modelo:

- $\gamma > 0$: controla la influencia local de los puntos (utilizado en el kernel RBF y el sigmoide).
- $r \in \mathbb{R}$: término independiente o sesgo (usado en los kernels polinómico y sigmoide).
- $d \in \mathbb{N}$: grado del polinomio en el kernel polinómico.

Hiperparámetros

- **Parámetro de Regularización (C):** Controla el equilibrio entre maximizar el margen y permitir errores de clasificación. Valores altos priorizan clasificar correctamente los datos de entrenamiento; valores bajos generan un margen más amplio y toleran mayor error, donde $C > 0$.
- **Tipo de Kernel (kernel):** Determina la forma de la frontera de decisión. Scikit-learn permite: `linear`, `poly`, `rbf` y `sigmoid`.
- **Parámetros del Kernel:** Dependiendo del tipo elegido, `scikit-learn` utiliza:
 - γ : controla la influencia de los puntos en kernels `rbf`, `poly` y `sigmoid`, $\gamma > 0$. Es equivalente a $\frac{1}{2\sigma^2}$ en formulaciones gaussianas, aunque `scikit-learn` nunca usa σ explícitamente. Se consideran las variantes `scaled` = $(D \cdot \text{varianza de los datos de entrada})^{-1}$ y `auto` = D^{-1} .
 - d (`degree`): grado del polinomio cuando el kernel es `poly`, $d \geq 1$.
 - r (`coef0`): coeficiente independiente usado por los kernels `poly` y `sigmoid`.

Capítulo 3

Métricas de Rendimiento

El objetivo de este trabajo es evaluar el desempeño del calificador de cada modelo de Aprendizaje Automático introducidos en el Capítulo 2. Para alcanzarlo, se utilizan **métricas de rendimiento** que permiten cuantificar la capacidad del algoritmo, ergo son herramienta que se utilizan para saber qué tan bien predice un modelo a una clase o qué tan bien puede clasificar entre varias clases.

La importancia de las métricas se ubica en que el objetivo central de estos algoritmos no es simplemente obtener un buen rendimiento en los datos utilizados para construir el modelo, sino en su **capacidad de generalización**, su habilidad para funcionar correctamente con entradas nuevas y previamente no observadas (no utilizadas en el entrenamiento). Esto se debe a que es perfectamente normal y sumamente esperable que el modelo funcione correctamente con el conjunto de datos que se utiliza para el entrenamiento del modelo, la idea fundamental es poder tener el mismo rendimiento o incluso uno mejor que con el conjunto de entrenamiento.

Para obtener las métricas y entrenar el algoritmo se utiliza la estrategia de **Validación Cruzada K -fold**. En este método, el conjunto de datos se divide en K grupos $\{G_1, G_2, \dots, G_K\}$ (o *pliegues*) de igual tamaño. En cada iteración, un grupo G_i ($1 \leq i \leq K$) se utiliza como conjunto de prueba, mientras que los $K - 1$ restantes se emplean para el entrenamiento. Cada grupo actúa como conjunto de prueba exactamente una vez. El valor final estimado de la métrica M , denotado por \widehat{M} , es el promedio de los valores obtenidos en cada iteración, es decir,

$$\widehat{M} = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K M_i, \quad (3.1)$$

donde M_i representa el valor de la métrica de evaluación cuando G_i se utiliza como conjunto de prueba, para $i = 1, 2, \dots, K$.

Dentro de este trabajo no solo se evalúan distintos modelos, sino que se utilizan distintos *datasets* para lograrlos. A continuación se señalan las métricas que se utilizan en cada caso y se pueden apreciar algunas diferencias, leves, pero diferencias en sí.

3.1 Métricas para el Caso Binario

Una matriz de confusión, que se puede observar en la Tabla 3.1, es una forma simple de saber de qué forma está clasificando el algoritmo, donde una clase es considerada **positiva** P y la otra **negativa** N . La matriz de confusión divide las predicciones en:

- **Verdaderos Positivos (TP):** Casos positivos clasificados correctamente.

- **Verdaderos Negativos (TN):** Casos negativos clasificados correctamente.
- **Falsos Positivos (FP):** Casos negativos clasificados incorrectamente como positivos.
- **Falsos Negativos (FN):** Casos positivos clasificados incorrectamente como positivos.

Tabla 3.1: Matriz de confusión.

| | | Predicción | |
|--------|----------|-------------------------|-------------------------|
| | | Positivo | Negativo |
| Verdad | Positivo | Verdadero Positivo (TP) | Falso Negativo (FN) |
| | Negativo | Falso Positivo (FP) | Verdadero Negativo (TN) |

A partir de la matriz de confusión se calculan varias métricas, algunas de las cuales se presentan a continuación.

Accuracy

El *Accuracy* es la proporción de instancias clasificadas correctamente, es una medida “ingenua” que puede ser engañosa si existe un gran desbalance entre clases, ergo se puede obtener un *Accuracy* alto si se predice una clase muy bien, que tiene una distribución mucho mayor que la otra, mientras que la de menor aparición casi no la predice. En términos de la matriz de confusión,

$$\text{Accuracy} = \frac{TP + TN}{TP + FP + TN + FN} = \frac{TP + TN}{\text{Total}}. \quad (3.2)$$

En términos del conjunto de predicciones y valores verdaderos, se tiene que n representa la cantidad total de ejemplos en el *dataset*, mientras que \hat{y}_i es el valor predicho del i -ésimo ejemplo e y_i es el valor verdadero correspondiente. Se obtiene el número total de aciertos del modelo como:

$$\text{Accuracy}(y, \hat{y}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{I}(\hat{y}_i = y_i), \quad (3.3)$$

donde la **función indicadora** se define como:

$$\mathbb{I}(\hat{y}_i = y_i) = \begin{cases} 1, & \text{si } \hat{y}_i = y_i, \\ 0, & \text{en caso contrario.} \end{cases}$$

Por lo tanto, se puede simplificar como la siguiente fórmula:

$$\text{Accuracy} = \frac{\text{Número de predicciones correctas}}{\text{Número total de muestras}}. \quad (3.4)$$

Precisión

La *Precisión* mide la probabilidad de que la predicción positiva del clasificador sea correcta, en otras palabras, mide qué tan bien predice las clases positivas el modelo. En términos de la matriz de confusión, se puede expresar lo anterior de la siguiente manera:

$$\text{Precisión} = \frac{TP}{TP + FP}. \quad (3.5)$$

Recall

El *Recall* o también conocido como Sensibilidad o Tasa de Verdaderos Positivos (TPR), mide la probabilidad de que el clasificador detecte un caso positivo cuando en verdad lo es. En términos de la matriz de confusión se puede entender al *Recall* de la siguiente manera:

$$\text{Recall} = \text{TPR} = \frac{TP}{TP + FN} = \frac{TP}{P}. \quad (3.6)$$

F-measure

El *F-measure* es la media armónica ponderada de *Precisión* y *Recall*, cuya fórmula general es:

$$F_\beta = \frac{(1 + \beta_f^2) \text{ Precisión} \times \text{Recall}}{\beta_f^2 \text{ Precisión} + \text{Recall}}, \quad (3.7)$$

donde $\beta_f > 0$ controla la importancia relativa entre la *Precisión* y el *Recall*. En particular, la fórmula del F1-Score ($\beta_f = 1$) en términos de *Precisión* y *Recall* se puede notar de la siguiente manera:

$$F1 = 2 \cdot \frac{\text{Precisin} \cdot \text{Recall}}{\text{Precisin} + \text{Recall}}, \quad (3.8)$$

o en términos de la matriz de confusión, de forma más simplificada:

$$F1 = \frac{2 \cdot TP}{2 \cdot TP + FP + FN}. \quad (3.9)$$

Un clasificador perfecto tiene un valor de F1-Score igual a 1.

Área Bajo la Curva ROC (AUC)

La métrica *AUC* es un valor que resume la capacidad de un clasificador para distinguir entre clases, siendo una métrica muy útil para comparar el desempeño entre modelos distintos o entre un mismo modelo con hiperparámetros distintos.

La **Curva ROC** es un gráfico que ilustra el rendimiento de un clasificador binario a medida que se varía su umbral de discriminación. Se crea graficando la **Tasa de Verdaderos Positivos (TPR)** versus la **Tasa de Falsos Positivos (FPR)** en varios umbrales. El *AUC* mide justamente el área debajo de la Curva ROC.

Ejes utilizados para el gráfico:

Eje Y: TPR,

Eje X: FPR.

Un clasificador **ideal** se ubica en el punto (0, 1), donde TPR=1 y FPR=0, lo que resulta en un *AUC* = 1. Un clasificador **aleatorio** se sitúa sobre la línea TPR = FPR, lo que resulta en un *AUC* = 0.5. Un clasificador se considera **razonable** si $0.5 < AUC \leq 1$.

3.2 Métricas para caso Multiclasificación

En este caso se utiliza el método “*weighted*”, el cual tiene en cuenta el desequilibrio de clases calculando el promedio de las métricas binarias por clase, ponderadas según su frecuencia en el conjunto de datos reales.

Para cada clase C_l , con $l \in \{1, 2, \dots, L\}$, se define $|C_l|$ como la cantidad de muestras reales pertenecientes a dicha clase. Asimismo, M_l es el valor de la métrica binaria correspondiente a la clase l .

La métrica ponderada, $\widehat{M}_{\text{weighted}}$, se define como:

$$\widehat{M}_{\text{weighted}} = \frac{1}{\sum_{l=1}^L |C_l|} \sum_{l=1}^L |C_l| \cdot M_l. \quad (3.10)$$

De esta forma, las clases con mayor cantidad de muestras tienen una contribución proporcionalmente mayor en el valor final de la métrica evaluada.

Matriz de Confusión Multiclasé

La matriz de confusión multiclasé, que se puede ver en la Tabla 3.2, es una matriz cuadrada de tamaño $L \times L$, donde L es el número de clases. Cada celda C_{ij} representa la cantidad de muestras pertenecientes a la clase C_i que fueron clasificadas como clase C_j para $i, j \in \{1, 2, \dots, L\}$.

Para cada clase C_l se definen los valores que antes habíamos utilizados para la matriz de confusión del caso binario:

- $TP_l = C_{ll}$;
- $FP_l = \sum_{i=1, i \neq l}^L C_{il}$;
- $FN_l = \sum_{j=1, j \neq l}^L C_{lj}$
- $TN_l = n - TP_l - FP_l - FN_l$.

Tabla 3.2: Matriz de confusión multiclasé.

| | | Predicción | | | | | |
|--------|-------------|-----------------|-----------------|-----|-----------------|-----|-----------------|
| | | Clase C_1 | Clase C_2 | ... | Clase C_l | ... | Clase C_L |
| Verdad | Clase C_1 | TN _l | TN _l | ... | FP _l | ... | TN _l |
| | Clase C_2 | TN _l | TN _l | ... | FP _l | ... | TN _l |
| | ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ |
| | Clase C_l | FN _l | FN _l | ... | TP _l | ... | FN _l |
| | ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ |
| | Clase C_L | TN _l | TN _l | ... | FP _l | ... | TN _l |

Precisión

La *Precisión* para clase C_l mide la proporción de muestras clasificadas como positivas que realmente pertenecen a la clase C_l , donde $l \in \{1, 2, \dots, L\}$. En términos más simples, utilizando la matriz de confusión:

$$\text{Precisión}_l = \frac{TP_l}{TP_l + FP_l}. \quad (3.11)$$

Recall

El *Recall* para clase C_l , donde $l \in \{1, 2, \dots, L\}$, mide la proporción de muestras verdaderamente positivas de la clase C_l que fueron correctamente identificadas. En términos más simples, utilizando la matriz de confusión:

$$\text{Recall}_l = \frac{TP_l}{TP_l + FN_l}. \quad (3.12)$$

F1-measure

El valor global ponderado se obtiene aplicando la fórmula de M_{weighted} sobre los F_l , para $\beta = 1$:

$$F_{\text{weighted}} = \sum_{l=1}^L w_l F_l, \quad \text{con } w_l = \frac{|C_l|}{\sum_{l=1}^L |C_l|}. \quad (3.13)$$

Área Bajo la Curva ROC (AUC)

Para extender la métrica *AUC* a clasificación multiclas se emplea el enfoque **One-vs-Rest (OVR)**. Para cada clase C_l ($l \in \{1, 2, \dots, L\}$), se considera la clase C_l como positiva y el resto como negativas; luego, se calcula el valor correspondiente AUC_l a partir de la curva ROC del problema binario generado para esa clase. Finalmente, el *AUC* multiclas se obtiene como un promedio ponderado por el soporte de cada clase.

$$AUC_{\text{weighted}} = \sum_{l=1}^L w_l AUC_l \quad \text{con } w_l = \frac{|C_l|}{\sum_{l=1}^L |C_l|}. \quad (3.14)$$

Importancia de la característica

Sea un modelo predictivo \mathcal{M} entrenado sobre un conjunto de datos \mathcal{D} , y sea M la métrica de referencia del modelo sobre los datos originales. El procedimiento se detalla a continuación:

1. Para cada atributo j del conjunto de datos:

- a) Repetir el siguiente proceso K veces (para reducir la varianza de la estimación):
 - 1) Generar una versión alterada del conjunto de datos, $\mathcal{D}^{(k,j)}$, en la que se permuta aleatoriamente, se intercambian de orden los datos de la columna correspondiente al atributo X_j , manteniendo las demás columnas sin cambios, para ver si el modelo empeora o no en su rendimiento.
 - 2) Calcular la métrica M del modelo sobre los datos permutados:

$$M_{k,j} = \text{valor de la métrica } M \text{ del modelo } \mathcal{M} \text{ con } \mathcal{D}^{(k,j)}. \quad (3.15)$$

- b) Calcular la importancia del atributo X_j como la disminución promedio en el puntaje del modelo respecto del puntaje de referencia:

$$I_j = M - \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K M_{k,j}. \quad (3.16)$$

De esta manera, I_j mide la pérdida de desempeño al romper la relación entre el atributo X_j y la variable objetivo. Valores más altos de I_j indican características más relevantes para el modelo.

Capítulo 4

Resultados

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos mediante la aplicación de los modelos de aprendizaje supervisado sobre los distintos conjuntos de datos. Se analizan las métricas de evaluación alcanzadas, las configuraciones óptimas halladas mediante búsqueda en malla (*Grid Search*) y la importancia relativa de las características más influyentes en las predicciones. Se busca evaluar el rendimiento de cada modelo bajo diferentes configuraciones de hiperparámetros, a través de métricas como la precisión (*Accuracy*), el F1-Score y el área bajo la curva ROC (*AUC*), entre otras.

Durante la fase experimental se exploraron distintas estrategias de balanceo de clases, dado que varios de los conjuntos presentan desbalances significativos entre las clases. En particular, se probó la técnica de ***undersampling***, reduciendo la cantidad de ejemplos de la clase mayoritaria para equilibrar el *dataset*. Sin embargo, esta estrategia no arrojó resultados satisfactorios: los modelos tienden a perder capacidad de generalización, mostrando un descenso notable en las métricas de validación, aunque se sostiene la mejor configuración con mejor valor de métricas. Por este motivo, se opta finalmente por mantener la distribución original y aplicar técnicas de regularización y ajuste de hiperparámetros para mitigar el sesgo hacia la clase dominante.

4.1 *Dataset Binario*

En esta sección se presentan los resultados obtenidos al aplicar los distintos modelos de aprendizaje automático al ***dataset binario***. En este caso, la tarea de clasificación consiste en distinguir entre dos clases posibles, lo que típicamente permite a los algoritmos aprender fronteras de decisión más simples en comparación con escenarios multiclas.

Naïve Bayes obtuvo un desempeño sólido en la tarea de clasificación binaria, especialmente considerando su supuesto fuerte de independencia condicional entre atributos. Si bien este supuesto rara vez se cumple estrictamente en datos reales, el modelo suele mantener un rendimiento competitivo. En este trabajo, evaluamos su desempeño utilizando la métricas distitas métricas, y consideramos que un valor superior a 0.80 constituye un nivel de desempeño adecuado para el tipo de problema abordado. La mejor configuración se alcanzó con cualquier suavizado, no hubo diferencias. Los resultados cuantitativos finales se resumen en la Tabla 4.2. El modelo logra un *Accuracy* y un F1-Score de 0.8420, junto con un *AUC* de 0.9138, lo que refleja una muy buena capacidad clasificadora siendo un método tan eficaz, además de ser bastante similar con los resultados de los modelos a los cuales se compara. El tiempo de entrenamiento fue de apenas 0.10 segundos, siendo que la mayor fortaleza es la rapidez de su entrenamiento.

Tabla 4.1: Grilla de hiperparámetros para NB Gaussiano en el caso binario.

| Hiperparámetro | Valores evaluados |
|----------------|---|
| Suavizado | $10^{-9}, 10^{-8}, 10^{-7}, 10^{-6}, 10^{-5}$ |

Tabla 4.2: Resultados finales de NB Gaussiano en el caso binario.

| Configuración | Accuracy | Recall | F1-Score | AUC | Tiempo (s) | Precisión |
|------------------------|----------|--------|----------|--------|------------|-----------|
| Todas las consideradas | 0.8420 | 0.8420 | 0.8420 | 0.9138 | 0.10 | 0.8433 |

Regresión Logística obtuvo un correcto desempeño en la clasificación binaria, siempre tomando un buen resultado cuando cualquier métrica por lo menos supere el valor de 0.80. Los resultados cuantitativos se resumen en la Tabla 4.4, en la cual se muestra la mejor configuración obtenida de los hiperparámetros de la Tabla 4.3. El modelo logra un *Accuracy* y un F1-Score de 0.8445, junto con un *AUC* de 0.9050, lo que refleja una buena capacidad discriminatoria, pero siendo datos médicos se requieren incluso mejores valores. El tiempo de entrenamiento fue de apenas 0.13 segundos, lo que lo convierte en una opción eficiente para este tipo de problema, teniendo en cuenta el tamaño pequeño del *dataset*.

Tabla 4.3: Grilla de hiperparámetros para RL en el caso binario.

| Hiperparámetro | Valores evaluados |
|----------------|------------------------------------|
| C | 0, 0.1, 0.01 |
| Penalidad | Ninguna, Lasso, Ridge, Elastic Net |
| <i>Solver</i> | L-BFGS, SAGA, Newton-CG |
| Multiclas | OvR, <i>multinomial</i> |

Tabla 4.4: Resultados finales del RL en el caso binario.

| Configuración | Accuracy | Recall | F1-Score | AUC | Tiempo (s) | Precisión |
|----------------------|----------|--------|----------|--------|------------|-----------|
| $C = 1$ | | | | | | |
| Penalidad = Lasso | 0.8485 | 0.8485 | 0.8481 | 0.9050 | 0.13 | 0.8495 |
| <i>Solver</i> = SAGA | | | | | | |
| Multiclas = OvR | | | | | | |

Random Forest demostró un desempeño bastante sólido en la clasificación binaria, mostrando alta capacidad de generalización para registros no vistos durante el entrenamiento. Los resultados cuantitativos finales se resumen en la Tabla 4.6, donde el modelo logra un *Accuracy* y un F1-Score de 0.8780, junto con un *AUC* de 0.9315, lo que refleja una excelente capacidad de clasificación, pero evidentemente la tarea de creación de los árboles y del voto mayoritario lo vuelven un método bastante costoso aunque efectivo. El tiempo de entrenamiento fue de 1.38 segundos, siendo considerablemente el modelo en el cual más se tarda en obtener los resultados.

Máquinas de Soporte Vectorial obtuvo un desempeño sólido en la clasificación binaria, mostrando un equilibrio adecuado entre precisión y generalización. Demostrando la solidez habitual con que es descripto este método. Los resultados cuantitativos finales se resumen en la Tabla 4.8. El modelo logra un *Accuracy* y un F1-Score de 0.8616, junto con un *AUC* de 0.9232, lo que refleja la mejor capacidad de clasificación

Tabla 4.5: Grilla de hiperparámetros para RF en el caso binario.

| Hiperparámetro | Valores evaluados |
|--------------------------------|---|
| Criterio | <code>gini</code> , <code>entropy</code> |
| <code>max_depth</code> | Ninguna, 3, 5, 7, 9 |
| <code>min_samples_split</code> | 2, 5, 10 |
| <code>min_samples_leaf</code> | 1, 2, 4 |
| <code>max_features</code> | <code>None</code> , <code>sqrt</code> , <code>log2</code> |

Tabla 4.6: Resultados finales de RF en el caso binario.

| Configuración | Accuracy | Recall | F1-Score | AUC | Tiempo (s) | Precisión |
|------------------------------------|----------|--------|----------|--------|------------|-----------|
| <code>Criterio = entropy</code> | | | | | | |
| <code>max_depth = 7</code> | | | | | | |
| <code>min_samples_split = 5</code> | 0.8780 | 0.8780 | 0.8775 | 0.9315 | 1.38 | 0.8731 |
| <code>min_samples_leaf = 1</code> | | | | | | |
| <code>max_features = sqrt</code> | | | | | | |

hasta ahora. El tiempo de entrenamiento fue de apenas 0.60 segundos, siendo un tiempo acotado, pero costoso si vemos que el tamaño del *dataset* es bastante pequeño, refleja un costo de evaluación más grande que con RL.

Tabla 4.7: Grilla de hiperparámetros para SVM en el caso binario.

| Hiperparámetro | Valores evaluados |
|---------------------|---|
| C | 0.001, 0.01, 0.1, 1, 10, 15, 20, 25 |
| <code>kernel</code> | <code>linear</code> , <code>poly</code> , <code>rbf</code> , <code>sigmoid</code> |
| γ | <code>scale</code> , <code>auto</code> , 0.001, 0.01, 0.1, 1 |
| <code>degree</code> | 2, 3, ..., 10 |

Tabla 4.8: Resultados finales de SVM en el caso binario.

| Configuración | Accuracy | Recall | F1-Score | AUC | Tiempo (s) | Precisión |
|---------------------------|----------|--------|----------|--------|------------|-----------|
| $C = 1$ | | | | | | |
| <code>kernel = rbf</code> | 0.8616 | 0.8616 | 0.8609 | 0.9232 | 0.60 | 0.8628 |
| $\gamma = 0.1$ | | | | | | |

En la Figura 4.1 se observa que Random Forest obtiene la mayor puntuación en todas las métricas, seguido por la Regresión Logística y SVM. Esto indica que, para nuestro *dataset*, el modelo RF presenta mejor capacidad de generalización, mientras que los demás modelos muestran un desempeño bastante competitivo. Esto no quiere decir que sea el mejor modelo, sino que es el que mejor clasifica este *dataset*, pero si se quieren resultados sólidos con menor tiempo de cálculo, entonces el NB es una buena solución. Podemos afirmar que todos los modelos tuvieron desempeños correctos.

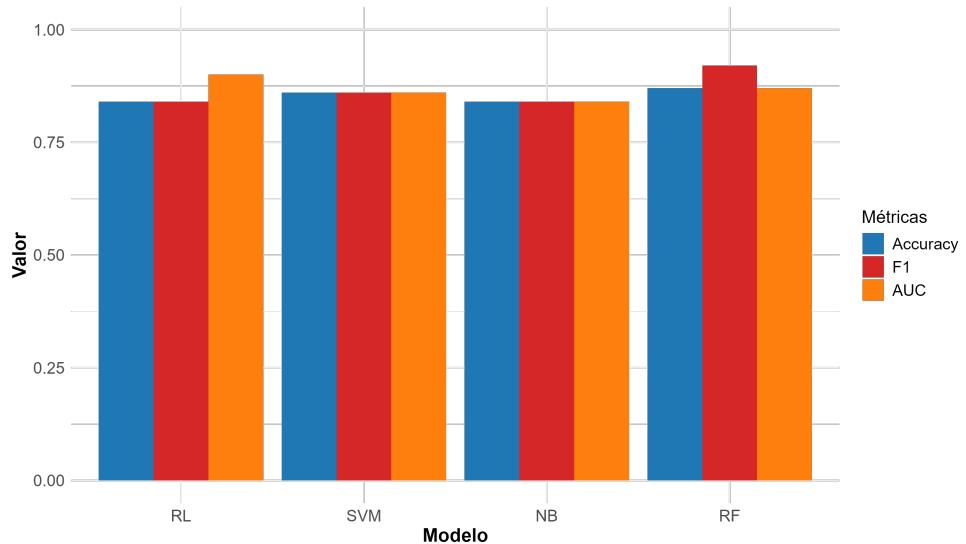


Figura 4.1: Comparación del desempeño de los mejores modelos en el caso binario.

Importancia de las Características

La importancia de las características se calculó mediante el método de *Permutation Feature Importance*. Este método evalúa cuánto se degrada el desempeño del modelo cuando se altera aleatoriamente una característica, manteniendo fijas las demás. Cuanto mayor sea la disminución en la métrica de desempeño, mayor será la importancia atribuida a dicha característica.

Los resultados obtenidos se presentan en las Tablas 4.9, 4.10, 4.11 y 4.12, correspondientes a los modelos NB, RL, RF y SVM, respectivamente.

Tabla 4.9: Importancia de las características para NB en el caso binario.

| Característica | Importancia (Permutación) |
|----------------|---------------------------|
| ST_Slope | 0.027015 |
| ExerciseAngina | 0.023747 |
| Oldpeak | 0.018736 |
| ChestPainType | 0.018519 |
| Cholesterol | 0.014815 |
| Sex | 0.014270 |
| FastingBS | 0.004575 |
| RestingBP | 0.001852 |
| MaxHR | -0.000218 |
| RestingECG | -0.001198 |
| Age | -0.003595 |

Tabla 4.10: Importancia de las características para RL.

| Característica | Importancia (Permutación) |
|----------------|---------------------------|
| ST_Slope | 0.072440 |
| ExerciseAngina | 0.026797 |
| ChestPainType | 0.020806 |
| Sex | 0.011329 |
| FastingBS | 0.010240 |
| Cholesterol | 0.009150 |
| Oldpeak | 0.006100 |
| Age | 0.003922 |
| MaxHR | 0.003268 |
| RestingBP | 0.000545 |
| RestingECG | 0.000218 |

Tabla 4.11: Importancia de las características para RF en el caso binario.

| Característica | Importancia (Permutación) |
|----------------|---------------------------|
| ST_Slope | 0.254265 |
| ChestPainType | 0.127319 |
| Oldpeak | 0.113156 |
| ExerciseAngina | 0.105952 |
| Cholesterol | 0.099872 |
| MaxHR | 0.088635 |
| Age | 0.065807 |
| RestingBP | 0.055053 |
| Sex | 0.040916 |
| FastingBS | 0.030069 |
| RestingECG | 0.018956 |

Tabla 4.12: Importancia de las características para SVM en el caso binario.

| Característica | Importancia (Permutación) |
|----------------|---------------------------|
| ST_Slope | 0.106209 |
| Cholesterol | 0.031808 |
| Oldpeak | 0.024510 |
| ChestPainType | 0.023312 |
| Sex | 0.011438 |
| MaxHR | 0.008715 |
| ExerciseAngina | 0.008388 |
| Age | 0.007952 |
| RestingBP | 0.005773 |
| RestingECG | 0.004902 |
| FastingBS | 0.004575 |

Las Figuras 4.2, 4.3 y 4.4 muestran cómo las métricas del modelo mejoran al incorporar las características más relevantes según su importancia. Se observa que inicialmente, con pocas características, el

desempeño es limitado, siendo prudente incrementar la cantidad de características. En algunos casos es muy sorprendentemente, ya que se obtiene un buen resultado, y a medida que se agregan las variables de mayor relevancia, las métricas tienden a incrementarse hasta estabilizarse. Este comportamiento permite identificar el conjunto de características que maximiza el rendimiento sin necesidad de incluir todas las variables disponibles, optimizando tanto la complejidad del modelo como el tiempo de entrenamiento.

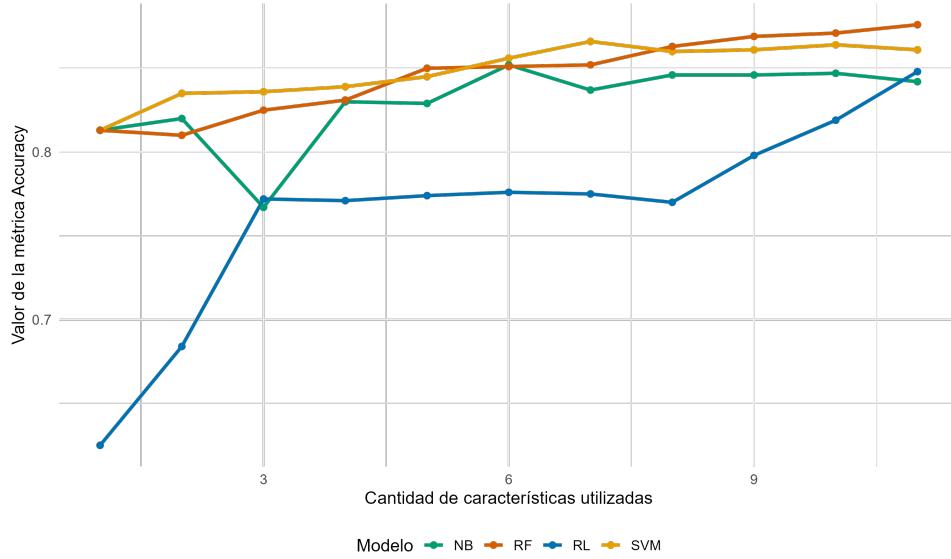


Figura 4.2: Valores de *Accuracy* según la cantidad de características en el caso binario.

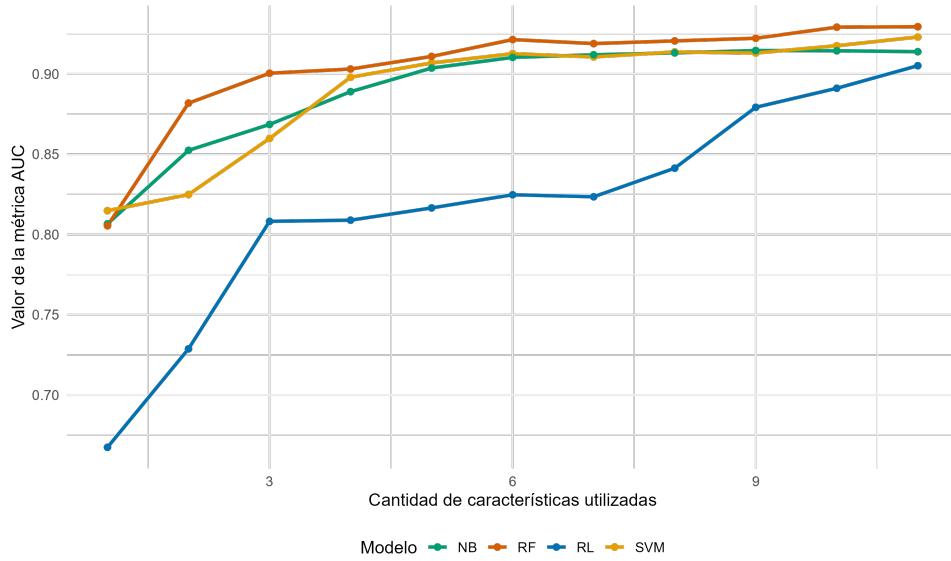


Figura 4.3: Valores de *AUC* según la cantidad de características en el caso binario.

Siendo los modelos **SVM** y **RF** los que mejor comportamiento tienen a lo largo del incremento de características, donde podemos ver en su gran mayoría un incremento del valor de las métricas a medida que se aumentan las caracterizadas. Además, como se puede observar, tienen valores aceptables para pocas características.

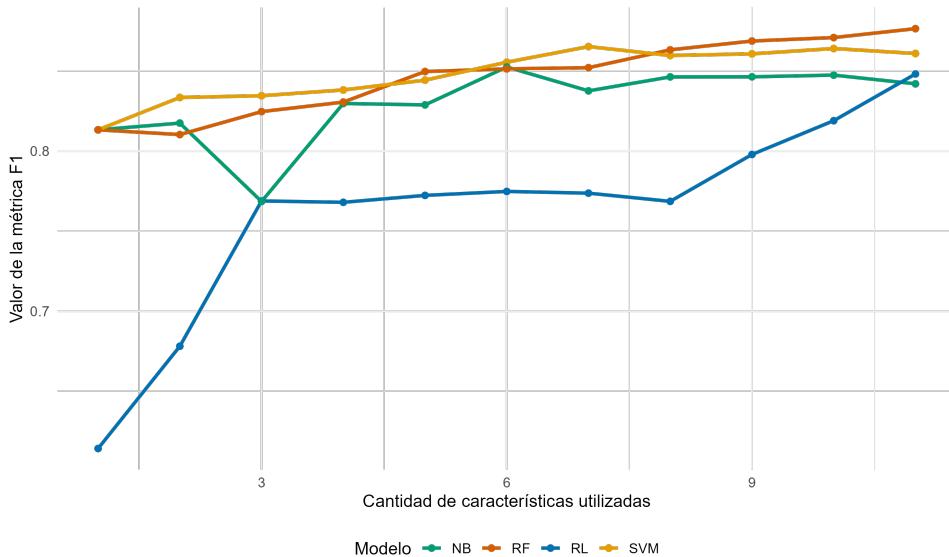


Figura 4.4: Valores de F1-Score según la cantidad de características en el caso binario.

4.2 Dataset Multiclasificación

En esta sección se presentan los resultados obtenidos al aplicar los distintos modelos de aprendizaje automático al **dataset multiclasificación**. A diferencia del problema binario, este conjunto de datos requiere que los algoritmos distingan entre varias categorías posibles, lo cual introduce desafíos adicionales como una separación más compleja entre clases, mayor variabilidad interna y posibles desbalances entre categorías.

Naïve Bayes obtuvo un buen desempeño en la clasificación multiclasificación, considerando su supuesto de independencia entre atributos. Los resultados cuantitativos finales se resumen en la Tabla 4.14. El modelo logra un *Accuracy* y un F1-Score de 0.8208, junto con un *AUC* de 0.91, lo que refleja una buena capacidad clasificadora, pero lo suficientemente menor a los modelos con los cuales se compara, para decidir que no es útil en cuanto a tener buenos valores de métricas a la hora de resolver este problema. Es evidente que se mantuvo en valores similares al caso binario, sin tener caídas aún cuando se incrementa el tamaño del *dataset* o se dificulta el mismo con un caso multiclasificación, pero tampoco muestra mejora como el resto de modelos. El tiempo de entrenamiento fue de apenas 0.11 segundos, siendo su mayor fortaleza, incluso con más datos el modelo se mantiene en valores parecidos de tiempo de ejecución.

Tabla 4.13: Grilla de hiperparámetros para NB Gaussiano en el caso multiclasificación.

| Hiperparámetro | Valores evaluados |
|----------------|---|
| Suavizado | $10^{-9}, 10^{-8}, 10^{-7}, 10^{-6}, 10^{-5}$ |

Tabla 4.14: Resultados finales de NB Gaussiano en el caso multiclasificación.

| Configuración | Accuracy | Recall | F1-Score | AUC | Tiempo (s) | Precisión |
|------------------------|----------|--------|----------|--------|------------|-----------|
| Todas las consideradas | 0.8208 | 0.8208 | 0.8366 | 0.9112 | 0.11 | 0.8747 |

Regresión Logística obtuvo un muy buen desempeño en la clasificación multiclasificación, mostrando un equilibrio adecuado entre precisión y generalización. Los resultados cuantitativos finales se resumen en

la Tabla 4.16, junto con la configuración de hiperparámetros que logró esos resultados. El modelo logra un *Accuracy* y un F1-Score de 0.8978 respectivamente, junto con un *AUC* de 0.9644, lo que refleja una buena capacidad discriminatoria, logrando un buen resultado al incremento de datos y de dificultad al existir más de dos clases. El tiempo de entrenamiento fue de apenas 0.30 segundos, lo que lo convierte en una opción eficiente para este tipo de problema, teniendo en cuenta que se mantiene en rangos acotados, incluso con más datos que en el caso binario.

Tabla 4.15: Grilla de hiperparámetros para RL en el caso multiclas.

| Hiperparámetro | Valores evaluados |
|----------------|-----------------------------|
| C | 0.01, 0.1, 1, 10 |
| Penalidad | Ninguna, Ridge, Elastic Net |
| <i>Solver</i> | L-BFGS, SAGA, Newton-CG |
| Multiclas | OvR |

Tabla 4.16: Resultados finales de RL en el caso multiclas.

| Configuración | Accuracy | Recall | F1-Score | AUC | Tiempo (s) | Precisión |
|---------------------------|----------|--------|----------|--------|------------|-----------|
| $C = 1$ | | | | | | |
| Penalidad = Ninguna | | | | | | |
| <i>Solver</i> = Newton-CG | 0.8978 | 0.8978 | 0.8953 | 0.9644 | 0.30 | 0.8945 |
| Multiclas = OvR | | | | | | |

Random Forest demostró un desempeño claramente superior en la clasificación multiclas, mostrando alta capacidad de generalización incluso para un *dataset* más grande y con caso multiclas. Los resultados cuantitativos finales se resumen en la Tabla 4.18, junto con la mejor configuración con la cual se obtuvieron estos resultados. El modelo logra un *Accuracy* y un F1-Score de 0.9432, junto con un *AUC* de 0.9868, lo que refleja una buena excelente capacidad clasificadora. Se entienden que los árboles de decisión no se ven afectados por casos multiclas y que la presencia de más cantidad de registros los enriquecen para realizar mejor clasificaciones. El tiempo de entrenamiento fue de 2.24 segundos, mostrando como estos modelos incrementan su tiempo de ejecución a mayores datos requieren procesar.

Tabla 4.17: Grilla de hiperparámetros para RF en el caso multiclas.

| Hiperparámetro | Valores evaluados |
|-------------------|---------------------|
| Criterion | gini, entropy |
| max_depth | Ninguna, 3, 5, 7, 9 |
| min_samples_split | 2, 5, 10 |
| min_samples_leaf | 1, 2, 4 |
| max_features | None, sqrt, log2 |

Tabla 4.18: Resultados finales de RF en el caso multiclas.

| Configuración | <i>Accuracy</i> | Recall | F1-Score | <i>AUC</i> | Tiempo (s) | Precisión |
|---|-----------------|--------|----------|------------|------------|-----------|
| Criterio = <code>gini</code> | | | | | | |
| <code>max_depth</code> = Ninguna | | | | | | |
| <code>min_samples_split</code> = 2 | 0.9432 | 0.9432 | 0.9412 | 0.9868 | 2.24 | 0.9417 |
| <code>min_samples_leaf</code> = 1 | | | | | | |
| <code>max_features</code> = <code>sprt</code> | | | | | | |

Máquinas de Soporte Vecorial obtuvo un desempeño bastante sólido en la clasificación multiclas, mostrando unos grandes valores en sus métricas. Los resultados cuantitativos finales se resumen en la Tabla 4.20, junto con la mejor configuración que logró las mejoras métricas. El modelo logra un *Accuracy* y un F1-Score de 0.9082, junto con un *AUC* de 0.9556, lo que refleja una muy buena capacidad de clasificación, logrando ser un método útil para *datasets* acotados y grandes, como a casos binarios y multiclas. El tiempo de entrenamiento fue de apenas 1.42 segundos, mostrando una clara demora a cuantos más datos deben de procesar, si comparamos como sube el tiempo de ejecución con el caso binario.

Tabla 4.19: Grilla de hiperparámetros para SVM en el caso multiclas.

| Hiperparámetro | Valores evaluados |
|---------------------|---|
| <i>C</i> | 0.001, 0.01, 0.1, 1, 10, 15, 20, 25 |
| <code>kernel</code> | <code>linear</code> , <code>poly</code> , <code>rbf</code> , <code>sigmoid</code> |
| γ | <code>scale</code> , <code>auto</code> , 0.001, 0.01, 0.1, 1 |
| <code>degree</code> | 2, 3, ..., 10 |

Tabla 4.20: Resultados finales de SVM en el caso multiclas.

| Configuración | <i>Accuracy</i> | Recall | F1-Score | <i>AUC</i> | Tiempo (s) | Precisión |
|---|-----------------|--------|----------|------------|------------|-----------|
| $C = 0,1$ | | | | | | |
| <code>kernel</code> = <code>poly</code> | 0.9082 | 0.9082 | 0.9064 | 0.9556 | 1.45 | 0.9057 |
| $\gamma = 1$ | | | | | | |
| <code>degree</code> = 2 | | | | | | |

En la Figura 4.5 se observa que Random Forest obtiene la mayor puntuación en todas las métricas, seguido por RL y SVM. Esto indica que, para nuestro *datasets*, el modelo RF presenta mejor capacidad de generalización, mientras que los demás modelos muestran un desempeño bastante competitivo.

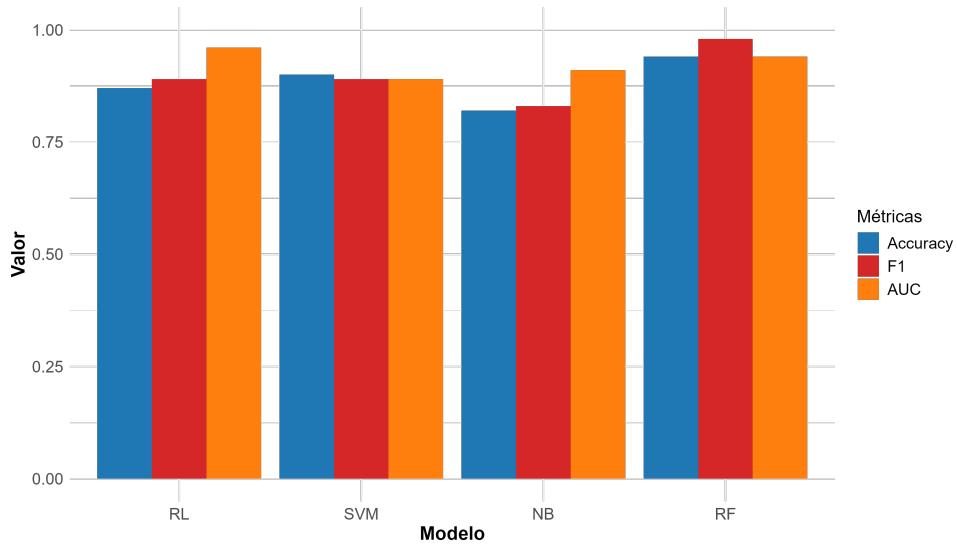


Figura 4.5: Comparación del desempeño de los mejores modelos en el caso multiclas.

Importancia de las Características

Los resultados obtenidos se presentan en las Tablas 4.21, 4.22 4.23 y 4.24 correspondientes a los modelos NB, RL, RF y SVM, respectivamente. Las Figuras 4.6, 4.8 y 4.7 muestran cómo las métricas del modelo mejoran al incorporar las características más relevantes según su importancia. Se observa que inicialmente, con pocas características, el desempeño es menor al obtenido anteriormente, pero mucho mejor del esperable. En algunos casos, de forma muy sorprendentemente, se obtiene un buen resultado ya a los pocos atributos utilizados, y a medida que se agregan las variables de mayor relevancia, las métrica tienden a incrementarse hasta estabilizarse.

Este comportamiento permite identificar el conjunto de características que maximiza el rendimiento sin necesidad de incluir todas las variables disponibles, optimizando tanto la complejidad del modelo como el tiempo de entrenamiento. Se ven como **RF** muestra resultados muy prometedores incluso con pocas métricas, siendo claramente superior en los valores de métricas incluso con pocos atributos.

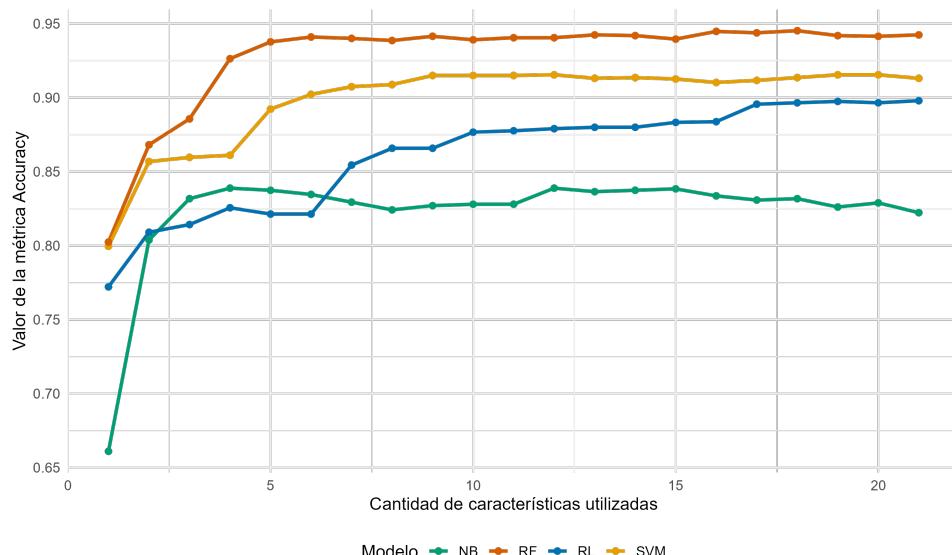
Figura 4.6: Valores de *Accuracy* según la cantidad de características en el caso multiclas.

Tabla 4.21: Importancia de las características para NB Gaussiano en el caso multiclase.

| Característica | Importancia (Permutación) |
|----------------|---------------------------|
| AC | 0.057163 |
| DP | 0.018676 |
| ALTV | 0.015461 |
| ASTV | 0.005106 |
| DS | 0.002695 |
| UC | 0.002364 |
| FM | 0.001371 |
| Variance | 0.001087 |
| Nzeros | 0.001040 |
| Nmax | -0.000993 |
| Tendency | -0.001040 |
| Mode | -0.001324 |
| Max | -0.001371 |
| Min | -0.001986 |
| LB | -0.001986 |
| MLTV | -0.002222 |
| Width | -0.002459 |
| Median | -0.003310 |
| MSTV | -0.004965 |
| Mean | -0.005768 |
| DL | -0.006809 |

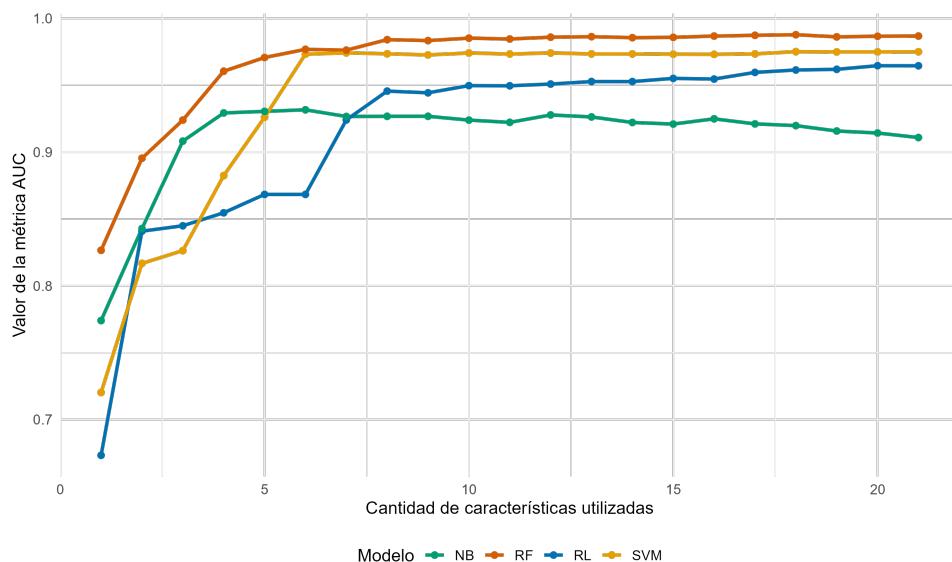
Figura 4.7: Valores de AUC según la cantidad de características en el caso multiclase.

Tabla 4.22: Importancia de las características para RL en el caso multiclas.

| Característica | Importancia (Permutación) |
|----------------|---------------------------|
| Mean | 0.098487 |
| AC | 0.084113 |
| ASTV | 0.057069 |
| Median | 0.031631 |
| DP | 0.029740 |
| LB | 0.023404 |
| Variance | 0.022270 |
| UC | 0.022080 |
| ALTV | 0.019243 |
| Max | 0.018109 |
| Nmax | 0.014374 |
| Mode | 0.011348 |
| Min | 0.005910 |
| MSTV | 0.004208 |
| FM | 0.003830 |
| Tendency | 0.003546 |
| MLTV | 0.002979 |
| Nzeros | 0.002837 |
| DL | 0.001655 |
| Width | 0.000189 |
| DS | 0.000000 |

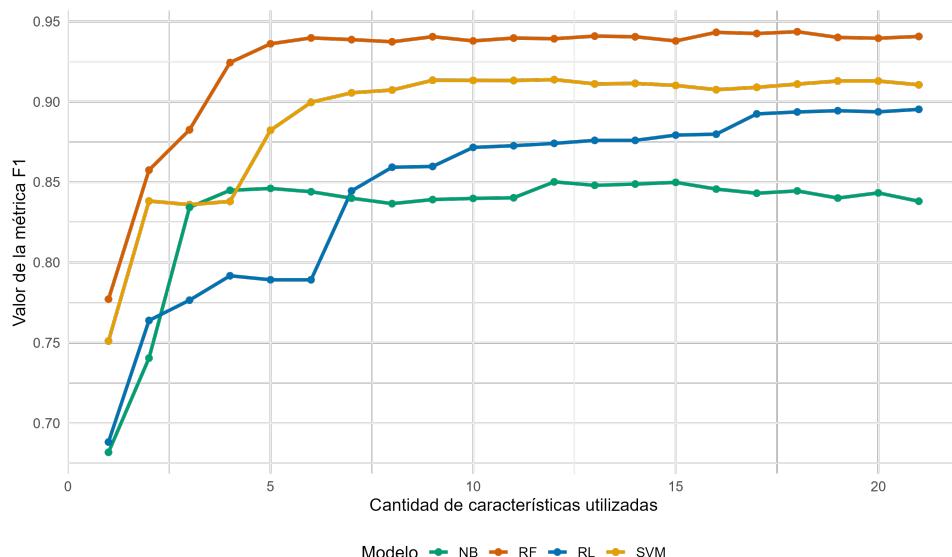


Figura 4.8: Valores de F1-Score según la cantidad de características en el caso multiclas..

Tabla 4.23: Importancia de las características para RF en el caso multiclase.

| Característica | Importancia (Permutación) |
|----------------|---------------------------|
| ASTV | 0.139807 |
| ALTV | 0.109941 |
| MSTV | 0.104823 |
| Mean | 0.091579 |
| AC | 0.063645 |
| Mode | 0.061986 |
| Median | 0.060633 |
| DP | 0.047945 |
| LB | 0.045324 |
| MLTV | 0.045132 |
| Variance | 0.040531 |
| UC | 0.039166 |
| Width | 0.030551 |
| Min | 0.030109 |
| Max | 0.027147 |
| FM | 0.020801 |
| Nmax | 0.018407 |
| DL | 0.011128 |
| Tendency | 0.007652 |
| Nzeros | 0.003405 |
| DS | 0.000287 |

Tabla 4.24: Importancia de las características para SVM en el caso multiclas.

| Característica | Importancia (Permutación) |
|----------------|---------------------------|
| ASTV | 0.050355 |
| ALTV | 0.037069 |
| UC | 0.030638 |
| AC | 0.026903 |
| DP | 0.018345 |
| Mean | 0.015887 |
| Mode | 0.014988 |
| Median | 0.014043 |
| Nmax | 0.011915 |
| MSTV | 0.009125 |
| DL | 0.005059 |
| Variance | 0.004775 |
| Nzeros | 0.004586 |
| Min | 0.004444 |
| Max | 0.004350 |
| MLTV | 0.003357 |
| Tendency | 0.003026 |
| FM | 0.002459 |
| Width | 0.001418 |
| DS | 0.000000 |
| LB | -0.000804 |

Capítulo 5

Conclusiones

5.1 Análisis General e Inferencias

Del análisis de los resultados obtenidos se puede observar que el modelo **Random Forest** alcanzó reiteradamente los mejores valores en todas las métricas, tanto en el problema binario como en el multiclase. Esto se debe a su capacidad de combinar múltiples árboles de decisión, lo que permite capturar relaciones no lineales y reducir el sobreajuste, sobretodo a la hora de hacer un voto mayoritario de estos mismos árboles que permiten una representación mejor.

El modelo de **Máquinas de Soporte Vectorial** mostró también un rendimiento muy bueno, especialmente con el kernel **RBF** en el caso binario y el **polinómico** en el caso multiclase, destacándose su capacidad para definir fronteras de decisión complejas en espacios transformados.

Regresión Logística presentó resultados positivos y de buena generalización, aunque con menor capacidad para capturar patrones que los otros modelos, no por ser malos resultados, sino que el resto tuvo mejores valores de métricas. Por su parte, el modelo **Naïve Bayes** ofreció un rendimiento aceptable, siendo el más liviano computacionalmente, aunque con limitaciones inherentes a su supuesto de independencia de las variables. Esto no quita que aunque posea este supuesto, es el más liviano y rápido de los modelos obteniendo resultados sumamente buenos.

En cuanto a la **importancia de las características**, se identificaron atributos dominantes en cada conjunto de datos:

En el caso binario, variables como *ST_Slope*: este segmento del ECG se analiza porque cambia cuando hay isquemia, es decir, cuando el corazón recibe menos sangre de la necesaria; *ChestPainType*: el tipo de dolor en el pecho, asociado a isquemia cardíaca; y *Oldpeak*: componente utilizado para estimar el riesgo de isquemia o infarto de miocardio, fueron recurrentemente relevantes.

En el caso multiclase destacaron *ASTV*: porcentaje de tiempo con variabilidad anormal a corto plazo; *ALTV*: porcentaje de tiempo con variabilidad anormal a largo plazo; y *MSTV*: valor medio de la variabilidad a largo plazo.

5.2 Mejoras Potenciales y Consideraciones

Para optimizar aún más las métricas, podrían explorarse las siguientes estrategias:

- **Ajuste más fino de hiperparámetros:** empleando *Randomized Search* o *Bayesian Optimization* para reducir tiempos de búsqueda, y luego utilizar un *Grid Search* en los hiperparámetros encontrados.
- **Manipulación de características:** Reducción de dimensionalidad (PCA) o creación de variables sintéticas, para observar mejor las importancias de cada característica.
- **Validación cruzada más robusta:** utilizando más particiones para estimar mejor la generalización.

En conjunto, los modelos demostraron un desempeño satisfactorio, con un claro potencial de mejora mediante el refinamiento de hiperparámetros y una mejor comprensión de la estructura de los datos.

Bibliografía

- [1] Leo Breiman. Random forests. *Machine Learning*, 45(1):5–32, 2001.
- [2] Leo Breiman, Jerome Friedman, Richard A Olshen, and Charles J Stone. *Classification and regression trees*. Chapman and Hall/CRC, 2017.
- [3] J Campos, D. y Bernardes. Cardiotocography. <https://doi.org/10.24432/C51S4N.>, 2000.
- [4] Corinna Cortes and Vladimir Vapnik. Support-vector networks. *Machine Learning*, 20(3):273–297, 1995.
- [5] Jan Salomon Cramer. The origins of logistic regression. Technical report, Tinbergen Institute discussion paper, 2002.
- [6] fedesoriano. Heart failure prediction dataset. <https://www.kaggle.com/fedesoriano/heart-failure-prediction><https://www.kaggle.com/fedesoriano/heart-failure-prediction>, September 2021.
- [7] David J Hand and Keming Yu. Idiot’s bayes—not so stupid after all? *International statistical review*, 69(3):385–398, 2001.
- [8] Jonas L Isaksen, Malene Nørregaard, Martin Manninger, Dobromir Dobrev, Thomas Jespersen, Ben Hermans, Jordi Heijman, Gernot Plank, Daniel Scherr, Thomas Pock, et al. Evaluating artificial intelligence-enabled medical tests in cardiology: Best practice. *IJC Heart & Vasculature*, 60:101783, 2025.
- [9] Narender Kumar and Dharmender Kumar. Machine learning based heart disease diagnosis using non-invasive methods: A review. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 1950, page 012081. IOP Publishing, 2021.
- [10] J. Ross Quinlan. Induction of decision trees. *Machine learning*, 1(1):81–106, 1986.