TRABAJO FIN DE GRADO

DOBLE GRADO EN INGENIERÍA INFORMÁTICA Y MATEMÁTICAS

Análisis de los algoritmos de Boosting en entornos con ruido de clase.

Rafael Nogales Vaquero

Autor
Rafael Nogales Vaquero

Directores
Francisco Herrera Triguero
Julián Luengo Martín

Escuela Técnica Superior de Ingenierías Informática y de Telecomunicación

—

Granada, 7 Agosto de 2018

Análisis de los algoritmos de Boosting en entornos con ruido de clase.

Autor
Rafael Nogales Vaquero)

Directores
Francisco Herrera Triguero
Julian Luengo Martín

Análisis de los algoritmos de Boosting en entornos con ruido de clase.

Rafael Nogales Vaquero

Palabras clave: Machine Learning, Boosting, Ruido de clase, Función de pérdida, Problemas de Clasificación

Resumen

En este TFG se propone cambiar la función de pérdida de los algoritmos de tipo boosting con el objetivo de hacerlos más robustos a conjuntos de datos de entrenamiento parcialmente mal clasificados.

Analysis of Boosting algorithms in environments with class noise.

Rafael Nogales Vaquero

Keywords: Machine Learning, Boosting, Class noise, Loss function, Classification problems

Abstract

In this TFG it is proposed to change the loss function of the boosting algorithms in order to make them more robust to partially misclassified training data sets.

Yo, **Rafael Nogales Vaquero**, alumno de la titulación DOBLE GRADO EN INGENIERÍA INFORMÁTICA Y MATEMÁTICAS de la **Escuela Técnica Superior de Ingenierías Informática y de Telecomunicación de la Universidad de Granada**, con DNI 76669550Q, autorizo la ubicación de la siguiente copia de mi Trabajo Fin de Grado en la biblioteca del centro para que pueda ser consultada por las personas que lo deseen.

Fdo: Rafael Nogales Vaquero

Granada a 7 de Agosto de 2018

D. **Francisco Herrera Triguero** , Profesor del Departamento de Ciencias de la Computación e Inteligencia Artificial de la Universidad de Granada.

D. **Julian Luengo Martín**, Profesor del Departamento de Ciencias de la Computación e Inteligencia Artificial de la Universidad de Granada.

Informan:

Que el presente trabajo, titulado ***Título del proyecto, Subtítulo del proyecto***, ha sido realizado bajo su supervisión por **Rafael Nogales Vaquero** , y autorizamos la defensa de dicho trabajo ante el tribunal que corresponda.

Y para que conste, expiden y firman el presente informe en Granada a X de mes de 201 .

Los directores:

Francisco Herrera Triguero **Julian Luengo Martín**

Agradecimientos

A mi familia, amigos y profesores

Capítulo 1

Introducción

1.1. Contexto

A día de hoy hay un gran interés en la inteligencia artificial en general y particularmente existe una gran demanda de modelos predictivos de todo tipo en la mayoría de empresas de mediano y gran tamaño, incluso en algunas startups de base tecnológica.

En este trabajo vamos a interesarnos por las diferentes formas en las que podemos evitar una de las mayores dificultades a las que las organizaciones se encuentran a la hora de de construir sus modelos predictivos: los datos de mala calidad (en particular los datos con ruido).

Por otro lado en plataformas de Data Science se ha visto que el algoritmo XGBoost ha sido el más elegido para ganar numerosas competiciones de construcción de modelos predictivos. Por ello vamos a analizar cómo utilizar éste algoritmo de la forma más robusta posible, es decir evitando que sus predicciones se vean afectadas por datos de entrenamiento de baja calidad.

Este algoritmo es utilizado en problemas de ámbitos muy diferentes siempre que haya que trabajar con datos tabulados suele dar un gran resultado. Por desgracia hay muchos problemas con datos tabulados que son susceptibles de tener datos mal clasificados y esto es un gran problema para los algoritmos de boosting clásicos como Adaboost.

El problema principal radica en que para ajustarse rápidamente a los datos los algoritmos de boosting suelen utilizar funciones de pérdida exponenciales o cuadráticas que dan una importancia enorme a los datos ruidosos.

Lo cual nos deja un amplio terreno sobre el que trabajar.

1.2. Solución

Debido a que nuestro mayor problema es el sobreajuste causado al aprender de los datos ruidosos vamos a utilizar técnicas que den la menor importancia posible a aquellos datos que considere ruidosos. Es por esto que la estrategia a seguir para mitigar este problema va a consistir en utilizar otras funciones de pérdida más robustas al ruido en combinación con técnicas de regularización. Previamente repasaremos todos los conceptos matemáticos relacionados con el boosting, las funciones de pérdida y el aprendizaje automático en general.

1.3. Herramientas

Clasificaremos nuestras herramientas en dos tipos: Herramientas matemáticas y herramientas software.

Para la parte matemática nuestras herramientas serán el cálculo diferencial, la estadística y el álgebra lineal.

En la parte informática utilizaremos principalmente R, Python y algunas de sus librerías: pandas, scikit-learn, xgboost, matplotlib...

Capítulo 2

Objetivos

2.1. Estudio general de los algoritmos de boosting

En este trabajo se realiza un estudio de la complejidad del problema de clasificación en el ámbito del aprendizaje automático. En particular, se analiza la dificultad de clasificación en los problemas donde aplicamos algoritmos de boosting en presencia de ruido de clase.

2.2. Analizar cómo el ruido les afecta

Se explican así mismo cuales son los principales defectos de los algoritmos de boosting cuando tratamos con datos ruidosos: El modelo cae en *over-fitting* o bien si aplicamos las técnicas de *regularización* de forma demasiado estricta caemos en *under-fitting*

2.3. Proponer una mejora para hacerlos más robustos al ruido

En el trabajo se explican tres formas de conseguir que un modelo sea más robusto al ruido:

- Incorporación de filtros de ruido
- Función de pérdida robusta
- Aplicar técnicas de regularización

Capítulo 3

Aspecto Matemático

El Machine Learning tiene una gran base matemática puesto que su fundamento se basa en comprender una distribución de probabilidad desconocida que genera lo que observamos en la realidad. Nuestro trabajo consistirá en construir una función que se aproxime a la real y de la que podamos inferir resultados aplicables en la realidad.

3.1. Empirical risk minimization

El principio ERM (Empirical Risk Minimization) es un principio en la teoría estadística del aprendizaje que se usa para acotar de forma teórica el rendimiento de una familia de algortimos de aprendizaje.

Consideremos la siguiente situación, que es muy general en la mayoría de problemas de aprendizaje supervisado. Tenemos dos espacios de objetos$X$ e Y y queremos aprender una función $h : X \mapsto Y$ (a menudo llamada *hipótesis*) cuya salida, dado un $x \in X$ es un objeto $y \in Y$. Para hacerlo disponemos de un *conjunto de entranamiento* de m muestras: $(x_1, y_1), ..., (x_m, y_m)$ dónde $x_i \in X$ es una entrada y $y_i \in Y$ es su correspondiente salida, la cual nosotros pensamos que viene dada por la función de hipótesis $h(x_i) = y_i$.

Para formalizar esta idea, supongamos que existe una función de distribución conjunta $P(x, y)$ sobre X e Y y que el conjunto de entremaniento consiste en m muestras $(x_1, y_1), ..., (x_m, y_m)$ independientes e identicamente distribuidas de $P(x, y)$. Es importante notar que esta suposición nos permite modelar la incertidumbre en las predicciones (por ejemplo, ruido en los datos) ya que y no es una función deterministica de x sino una variable aleatoria cuya función de distribución es $P(y|x)$ para un x fijo.

Supongamos además que tenemos una función real no negativa $L(\hat{y}, y)$ a la que llamaremos *Función de Pérdida* que mide cómo de diferente es la

predición $\hat{y}$ (una hipótesis) es de la realidad y. El *riesgo* asociado a una hipótesis $h(x)$ se define como la esperánza matemática de la función de pérdida:

$$R(h) = \mathbb{E}[L(h(x), y)] = \int L(h(x), y) dP(x, y)$$

Una función de pérdida muy utilizada a nivel teórico es la **0-1**:

$$L(\hat{y}, y) = I(\hat{y} \neq y)$$

Dónde $I(...)$ es la función indicadora.

El fin último de un algoritmo de aprendizaje es encontrar una función de hipótesis h^* en una famila de funciones $\mathcal{H}$ para la cual el operador riesgo es minimal:

$$h^* = arg \min_{h \in \mathcal{H}} R(h)$$

Todo lo hablado es muy bonito teóricamente, pero en general, el riesgo $R(h)$ no puede calcularse de ningún modo ya que la función de distribución $P(x, y)$ es desconocida para el algoritmo de aprendizaje. Sin embargo, podemos calcular una aproximación, llamada *riesgo empírico*, calculando la media de la función de pérdida en el conjunto de entrenamiento:

$$R_{\text{emp}}(h) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} L(h(x_i), y_i)$$

El principio de minimización del riesgo empírico establece que el algoritmo de aprendizaje debe escoger la función de hipótesis $\hat{h}$ que minimize el riesgo empírico:

$$\hat{h} = \arg \min_{h \in \mathcal{H}} R_{\text{emp}}(h).$$

Es decir el algoritmo de aprendizaje definido por el principio ERM consite en resolver el problema de optimización recién planteado. Para lo cual se van a utilizar las técnicas clásicas de resolución de problemas de optimización y se utilizarán propiedades matemáticas de las funciones de péridida tales como la convexidad y la diferenciabilidad cuando procedan.

3.2. Calculo Diferencial Multivariante

3.2.1. Optimización convexa

El algoritmo de gradiente descendente es un algoritmo para minimizar de forma aproximada funciones convexas. Sea $f : \Omega \subset \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ una función

convexa, diferenciable y que alcanza su mínimo en Ω. Sabemos que el gradiente de f (∇f) es un vector que indica la dirección de máximo crecimiento de f en cada punto.

Por tanto, dado $x \in \Omega$ tenemos que $-\nabla f(x)$ es el vector que indica la dirección en la que f se minimiza más rápidamente desde x.

Para ilustrarlo intuitívamente podemos pensar en $f(\Omega)$ como una superficie suave y en $(x, f(x))$ como un punto sobre ella. Entonces si dejásemos caer una gota de agua justo sobre este punto, la gota se deslizaría en la dirección de $\nabla f(x)$ y además lo haría a una velocidad proporcional a $|\nabla f(x)|$.

El algoritmo de gradiente descendente consiste en construir una sucesión de los puntos por los que esta gota pasaría si bajase en pequeños tramos rectos y no de forma continua.

Formalmente: Sea $f : \Omega \subset \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ una función convexa de clase $C^1(\Omega)$ con mínimo en p. Y sea $\{p_t\}$ una sucesión de puntos de Ω tal que $\{p_t\}$ converge a p. Para esto se elige un punto p_0 cualquiera en Ω y construímos desde él el resto de la sucesión recurrentemente:

$$p_{t+1} = p_t - \alpha_t \nabla f(p_t)$$

Dónde el parámetro α_t se selecciona de tal manera que $p_{t+1} \in \Omega$ y $f(p_t) \geq f(p_{t+1})$.

Nota: En el contexto del aprendizaje automático a este parámetro α se le suele denotar como η y se le denomina *tasa de aprendizaje*, además se le suele dar un valor constante y no se le exige ninguna restricción, lo que puede conllevar a que el gradiente descendente no descienda.

3.3. Algoritmos de aprendizaje y gradiente descendente

En nuestro caso particular nos interesa minimizar la función de pérdida de un algoritmo de aprendizaje. Recordamos que el objetivo de un algoritmo de aprendizaje según el principio ERM es minimizar el riesgo empírico:

$$R_{\text{emp}}(h) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} L(h(x_i), y_i)$$

Por lo tanto lo que buscamos es un clasificador $\hat{H}$ que minimize el riesgo empírico

$$\hat{H} = \arg\min_h \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} [L(h(x), y)]$$

El algoritmo de gradient boosting considera $y \in \mathbb{R}$ y busca una aproximación $\hat{H}(x)$ construida como suma de clasificadores débiles ponderados. Es decir como suma de funciones $h_i(x)$ pertenecientes a una famila de funciones $\mathcal{H}$.

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{M} w_i h_i(x) + \text{const}$$

De acuerdo con el principio de ERM el algoritmo de boosting debe encontrar una aproximación $\hat{H}$ que minimiza el error medio de la función de pérdida en el conjunto de entrenamiento. El método elegido por el boosting consiste en establecer un modelo inicial constante H_0 y mejorarlo incrementalmente usando la metodología greedy:

$$H_0(x) = \arg\min_{w} \sum_{i=1}^{n} L(y_i, w)$$

$$H_m(x) = H_{m-1}(x) + \arg\min_{h_m \in \mathcal{H}} \sum_{i=1}^{n} L(y_i, H_{m-1}(x_i) + h_m(x_i))$$

dónde $h_m \in \mathcal{H}$ es un clasificador débil.

Desafortunadamente, elegir la mejor función h en cada paso para una función de pérdida L arbitraria no es computable en general. Sin embargo podemos restringirnos a una versión simplificada del problema. La idea es aplicar **gradiente descendente** para aproximar la solución del problema de minimización. Si consideramos el caso continuo, es decir, donde $\mathcal{H}$ es el conjunto de las funciones diferenciables sobre $\mathbb{R}$, las funciones $\mathcal{C}^{\infty}(\mathbb{R})$ podemos actualizar los pesos del modelo de acuerdo a las siguientes ecuaciones:

$$H_m(x) = H_{m-1}(x) - w_m \sum_{\text{i=1}}^{\text{n}} \nabla H_{m-1} L(y_i, H_{m-1}(x_i))$$

,

$$w_m = \arg\min_{w} \sum_{\text{i=1}}^{\text{n}} L(y_i, H_{m-1}(x_i) - w \nabla H_{m-1} L(y_i, H_{m-1}(x_i)))$$

dónde la derivada se toma respecto a las funciones H_i con $i \in \{1, .., m\}$.

En el caso discreto, es decir cuando $\mathcal{H}$ tiene un conjunto finito de funciones, elegimos h como la función más cercana al gradiente de L para el cual el peso w puede ser calculado minimizando las ecuaciones de arriba con algún algoritmo iterativo sencillo.

Algoritmo boosting:

Entrada$_1$: El conjunto de entrenamiento $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$
Entrada$_2$: Una función de pérdida diferenciable $L(y, H(x))$
Entrada$_3$: El número de iteraciones M.

Inicializar el modelo con un valor constante:
$H_0(x) = \arg\min_w \sum_{i=1}^n L(y_i, w)$.
for m en $\{1, .., M\}$ **do**
Calcular el error asociado a esa iteración:
$r_{i,m} = -\left[\frac{\partial L(y_i, H(x_i))}{\partial H(x_i)}\right]_{H(x)=H_{m-1}(x)}$ for $i = 1, \ldots, n$.
Entrenar un clasificador base (por ejemplo un arbol)
$h_m(x)$ usando el conjunto de aprendizaje $\{(x_i, r_{i,m})\}_{i=1}^n$.
Calcular el peso w_m solucionando el siguiente problema de optimización:
$w_m = \arg\min_w \sum_{i=1}^n L\left(y_i, H_{m-1}(x_i) + w h_m(x_i)\right)$.
Actualizar el modelo:
$H_m(x) = H_{m-1}(x) + w_m h_m(x)$
end for

Salida: $H_M(x)$

El parámetro M y el sobreajuste:

Ajustarnos mucho al conjunto de entrenamiento puede degradar el modelo como ya sabemos (caemos en sobreajuste). Además de utilizar funciones de pérdida que incluyan formas de regularización podemos minimizar el efecto del sobreajuste eligiendo un parámetro M adecuado.

Un M pequeño infrajustará el modelo y por el contrario uno demasiado grande caerá en sobreajuste.

Capítulo 4

Aspecto Informático

"Aim for simplicity in Data Science. Real creativity won't make things more complex. Instead, it will simplify them."

Damian Duffy Mingle

4.1. Introducción al Machine Learning

Hasta ahora muchas compañías de todos los tipos y tamaños se han dedicado a obtener un potente sistema de información que les permite almacenar de forma ordenada (o no tanto) todos los datos que se producen en el día a día de la empresa.

Sin embargo esta estrategia de por sí no sirve de nada, ya que si almacenas datos y no los utilizas nunca, estás desperdiciando tus recursos. La ciencia de datos es la disciplina que transforma la información en conocimiento. Este conocimiento puede ser utilizado para la toma de decisiones de forma manual o de forma automática. El machine learning es el subcampo de la ciencia de datos que se que se centra en hacer que las máquinas aprendan de los datos y puedan realizar tareas concretas sin haber sido programadas específicamente para ello.

Actualmente podemos encontrar aplicaciones del machine learning por todas partes:

- Buscadores web: (Clasificación de contenido)
- Redes sociales: (Segmentación de clientes en función de los gustos propios y de amigos)

- Comunicación: (Detección de spam y clasificación automática de la bandeja de entrada)
- Seguridad: (Detección de malware)
- Entretenimiento: (Shazam: Reconocimiento de canciones)
- Marketing: (Netflix: Sistemas de recomendación)
- Medicina: (Diagnostico de enfermedades)
- Arte: (Generar imágenes artificialmente)

El Machine Learning no es un concepto nuevo, sin embargo en los últimos años ha tenido un gran auge. Una de las razones principales de este auge es el aumento en la capacidad de procesamiento y la disminución de los costes del mismo, permitiendo así que pueda estar al alcance de todos.

Aquí podemos ver el interés en el machine learning a nivel global utilizando Google Trends:

Definición 4.1 Machine Learning
Campo de estudio que da a los ordenadores la habilidad de aprender sin la necesidad de ser explícitamente programados. Arthur Samuel, 1959

4.1.1. Tipos de problemas en Machine Learning

Hay tres tipos de problemas de machine learning: **Aprendizaje supervisado**, **Aprendizaje no supervisado** y **Aprendizaje por refuerzo**.

4.1.2. Aprendizaje Supervisado

El objetivo principal del aprendizaje supervisado es construir un modelo a partir de un conjunto etiquetado de *datos de entrenamiento* que nos permita hacer predicciones sobre los datos sin etiquetar que vengan en el futuro. Se llama aprendizaje supervisado porque la clave del paradigma radica en tener datos *etiquetados* a priori. Hay dos tipos de problemas que se resuelven mediante aprendizaje supervisado: **Clasificación** y **Regresión**.

4.1.3. Aprendizaje No Supervisado

En el aprendizaje supervisado conocemos la *respuesta correcta* de antemano cuando entrenamos nuestro modelo. En el aprendizaje no supervisado, por contra, estamos tratando con datos sin etiquetar o con datos con *estructura desconocida*. Usando aprendizaje no supervisado podemos explorar la estructura de nuestros datos y extraer información util observando únicamente similitudes y diferencias entre los datos para poder agruparlos de forma que salgan a relucir posibles patrones ocultos en los datos. La técnica más popular dentro del aprendizaje no supervisado es el *clustering*. Este método se utiliza cuando se necesita clasificar las instancias de datos pero no se conocen previamente las categorías. Esta agrupación permite construir grupos (*cluster*) de forma automática para clasificar de una forma lógica aun sin conocer las clases de antemano.

Un ejemplo clásico es examinar los datos de ventas de una compañía para obtener grupos de clientes similares.

4.1.4. Aprendizaje por refuerzo

En el aprendizaje por refuerzo, el objetivo consiste en desarrollar un sistema (*un agente*) que mejore su rendimiento basandose en interacciones con el entorno. Como la forma de aprender del entorno consite en la nueva incorporación de datos acompalañados de una medida de la *función de recompensa*. Podemos pensar en el aprendizaje por refuerzo como un tipo de aprendizaje supervisado. Sin embargo en el aprendizaje por refuerzo esta etiqueta que acompaña a los nuevos datos no es una clase, como ocurre en el aprendizaje supervisado, sino que es una medida de como de bien o mal se está comportando el agente (valor de la función de recompensa asociado

a los nuevos datos). A traves de la interacción con el entorno un agente puede utilizar aprendizaje por refuerzo para aprender una serie de acciones que maximizen su recompensa mediante ensayo-error o mediante un plan deliberado.

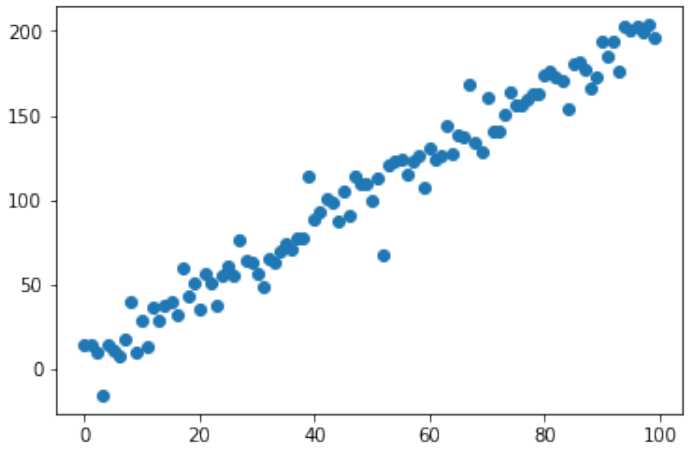
Un ejemplo clásico de aprendizaje por refuerzo es un programa que juegue a algún juego como el ajedrez. En este caso, el agente decide la jugada basandose en el estado actual del tablero (entorno) y la recompensa puede determinarse como una función que evalua cada situación y que lógicamente asigna la máxima puntuación a ganar y la mínima a perder.

4.2. Resolviendo problemas con Aprendizaje Supervisado

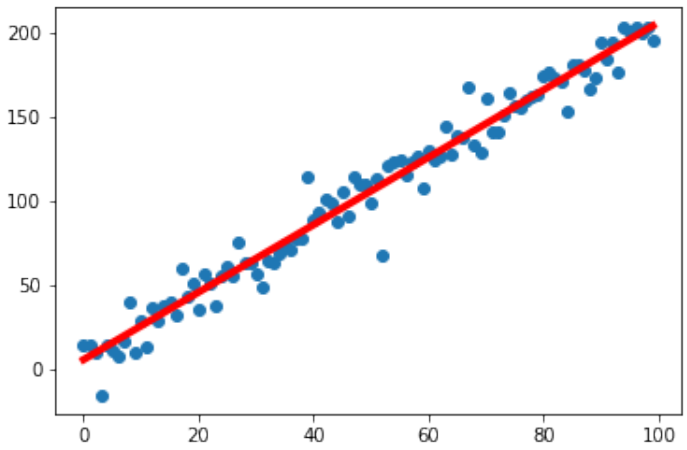
4.2.1. Método de Regresión

Este método se utiliza para predecir el valor de un atributo continuo. Consiste en encontrar la mejor ecuación que atraviese de forma óptima un conjunto de puntos (n-dimensiones). Esta mejor ecuación se va a buscar dentro de una familia de funciones, de esta forma hablaremos de *Regresión Lineal*, *Regresión Logistica* etc... En estos métodos lo único que cambiamos es la familia de funciones, aunque también se pueden añadir mecanismos de regularización.

Supongamos que tenemos dos variables aleatorias X e Y:



Queremos buscar la mejor función lineal que exprese Y como función de X: Aplicando regresión lineal obtenemos una función lineal $LM(x) = w_0 + w_1 x$ tal que $LM(x) \simeq Y(X)$

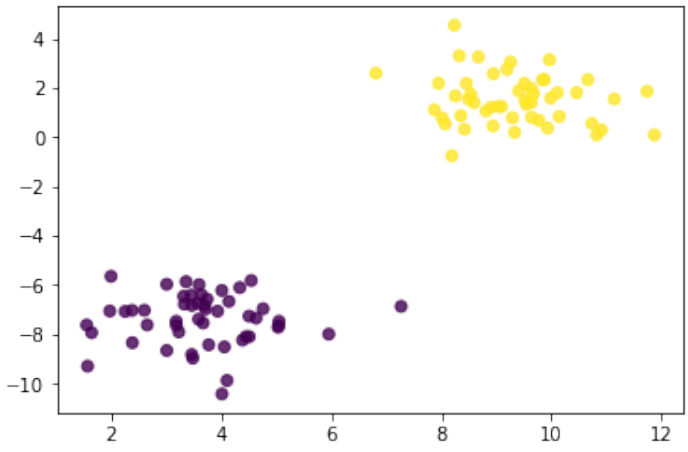


De esta forma ahora podríamos predecir el valor de nuevos datos colocandolos sobre la línea roja en la posición que les corresponda. Es decir: $y_{pred} = LM(X_{new})$

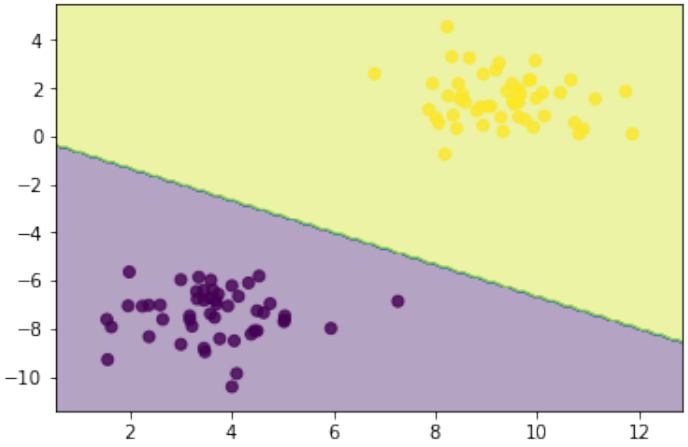
4.2.2. Método de Clasificación

Este método se utiliza para predecir a que clase pertenece una determinada instancia a partir de unas caraterísticas determinadas. El tipo más simple de clasificación es la clasificación binaria mediante un clasificador lineal:

Ejemplo: Supongamos que tenemos datos pertenecientes a dos clases (la clase violeta y la clase amarilla):



Queremos buscar la mejor función lineal que separe ambas clases:

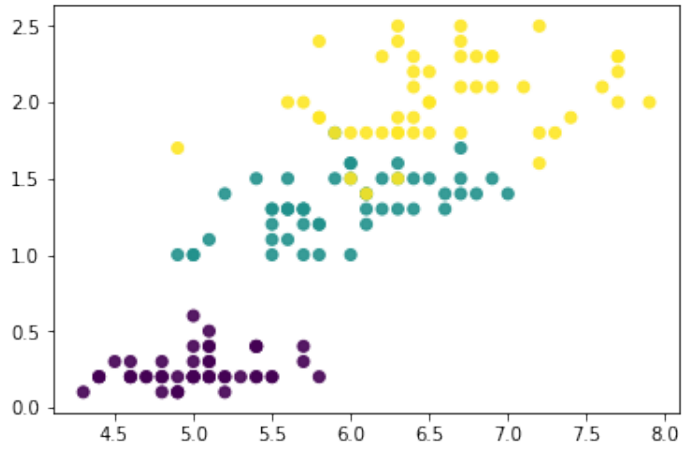

4
2
0
−2
−4
−6
−8
−10
2
4
6
8
10
12

4.2.3. Iris: El problema de clasificación más clásico

En 1936 Ronlad Fisher anotó la colección de datos *Iris*, en el que cuantificó varias mediciones taxonómicas de las flores de tres especies de Iris:

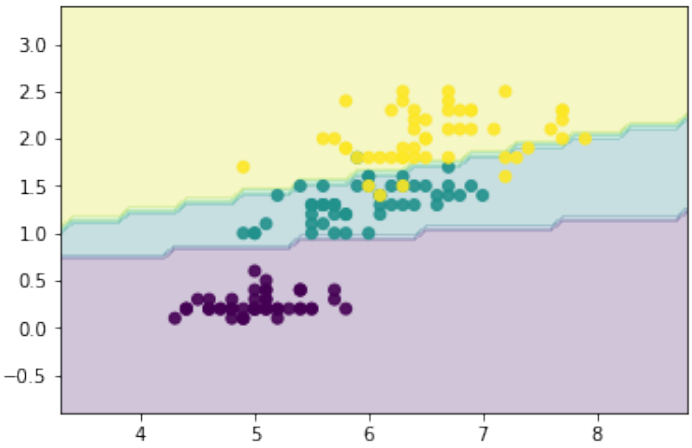
Figura 4.1: Especies de Iris.

Podemos establecer como variables la longitud del sépalo y la longitud del pétalo y obtenemos una representación en 2D del conjunto de Fisher:

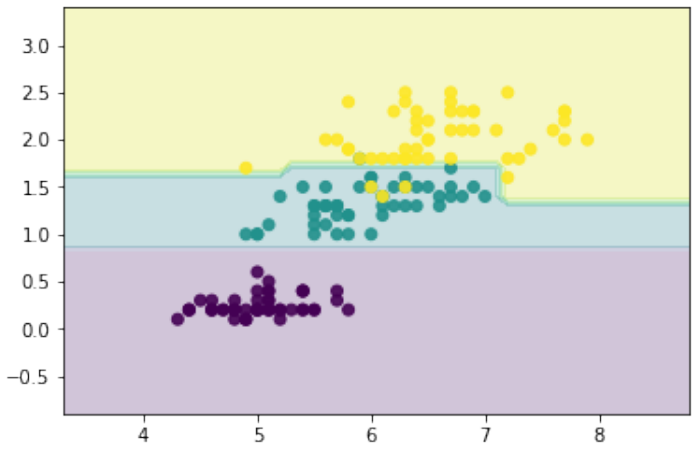


Y podemos establecer muchos tipos de clasificadores:

El clasificador lineal que utilizamos antes se vería de este modo:



Pero podemos utilizar tambien clasificadores de tipo Boosting, concretamente el Gradient Boosting Machine, del que hablaremos más adelante y que ocupará la mayor parte del trabajo:



4.3. El flujo de trabajo para clasificación

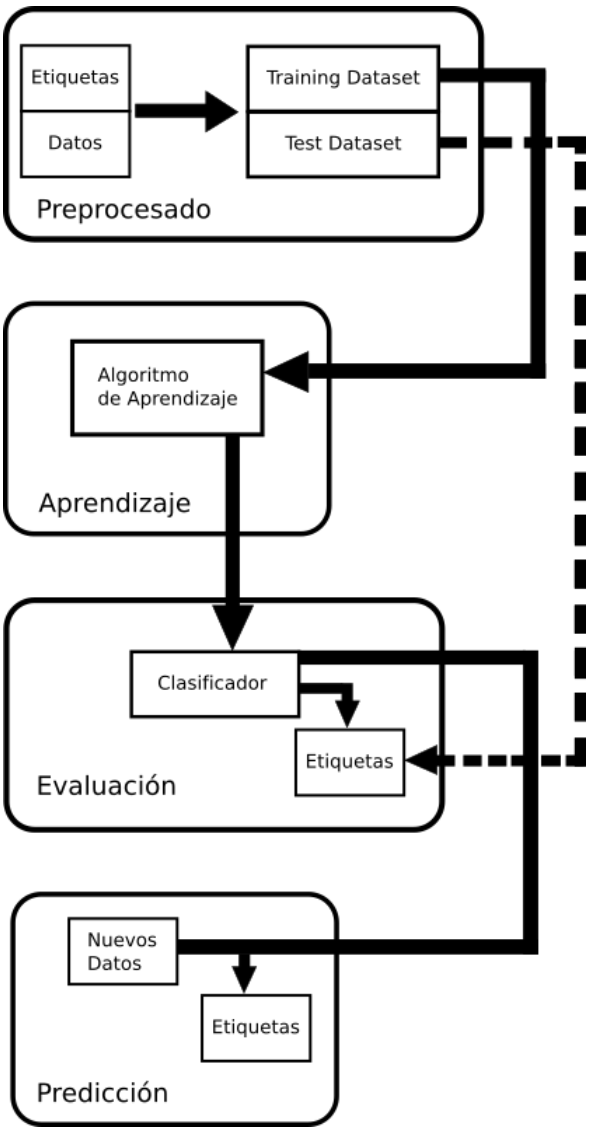
Todos los problemas de clasificación parten de un conjunto de datos etiquetados. Y el objetivo es construir una función que acepta nuevos datos con la misma estructura que en el conjunto inicial, pero sin etiqueta, y devuelve la etiqueta que considera que debe ser la correcta.

Lo primero, antes de nada es separar el dataset en datos de entrenamiento (training dataset) y en datos de test (test dataset). Los datos de test se guardarán hasta el final sin hacer nada sobre ellos y se trabajará únicamente con los datos de entrenamiento. Para construir un modelo de calidad, primero deben **preprocesarse** los datos de entrenamiento, es decir, normalizarlos, escalarlos, aplicar transformaciones, seleccionar qué variables son importantes y cuales no... Este es un subcampo bastante amplio llamado *Ingeniería de Características*. Normalmente el preprocesamiento es la parte que más tiempo requiere y a la que el cientifico de datos más esfuerzo debe dedicarle.

Una vez se han preprocesado los datos de entrenamiento se utilizarán para **ajustar un modelo**, es decir, se construirá un modelo mediante un algoritmo de aprendizaje.

Una vez el modelo se ha construido llega el turno de **evaluar la calidad del modelo**, lo mejor es utilizar cross validation con los datos de entrenamiento para evaluarlo y dejar los de test únicamente para evaluar los modelos que creemos que son buenos. Existen técnicas para ajustar los parámetros empíricamente como por ejemplo *gridsearch*.

Una vez tenemos un modelo de calidad podrá utilizarse para **predecir nuevos datos** y nuestro trabajo volverá a empezar para mejorar el modelo si así lo consideramos necesario.


Etiquetas
Datos
Training Dataset
Test Dataset
Preprocesado
Algoritmo
de Aprendizaje
Aprendizaje
Clasificador
Etiquetas
Evaluación
Nuevos
Datos
Etiquetas
Predicción

4.4. Uso de Python para Machine Learning

En este caso vamos a utilizar Python, debido a que actualmente se está convirtiendo en el lenguaje más utilizado para ciencia de datos, además de estar ganando terreno a muchos otros lenguajes clásicos debido a la enorme cantidad de librerías que existen para Python. La mayor alternativa a Python es el lenguaje estadístico R. No obstante un cientifico de datos debería conocer ambos lenguajes ya que R es muy potente a la hora de hacer un buen análisis exploratorio de forma rápida y eficaz. En Python también es posible trabajar como con R de forma rápida e interactiva utilizando Jupyter Notebook.

Para lo que nos ocupa nos centraremos en utilizar las principales liberías de Python para Machine Learning:

- *numpy*: Es una libería de cálculo numérico para Python, se encarga de que las opereciones computacionalmente intensivas con matrices se hagan con rutinas C muy eficientes en lugar de directamente interpretadas con Python
- *pandas*: Es una libería para importar y exportar datos en Python, además con pandas es muy facil manejar grandes tablas de forma cómoda ya que está construida sobre *numpy*
- *scipy*: Es otra colección de rutinas en Fortran y C para agilizar los cálculos científicos
- *scikit-learn*: Está contruida sobre *numpy* y *scipy* y tiene una gran cantidad de herramientas para poder completar el flujo de trabajo de un problema de machine learning sin necesidad de otras librerías en la mayoría de los casos sencillos
- *xgboost*: Es una librería que contiene la implementación del algoritmo XGBoost, el algoritmo de boosting más utilizado en la actualidad
- *matplotlib*: Es una librería para visualización de gráficos

4.4.1. Instalación de Python y de paquetes

Python está disponible para los tres grandes sistemas operativos (Linux, Microsoft Windows y Mac OS X). En la mayoría de distribuciones Linux modernas Python viene instalado por defecto en su versión moderna (Python3). En Mac no obstante aún viene por defecto la versión 2.7 (Python antiguo). Lo ideal en este caso es instalar Python3 con un alias (python3) y utilizarlo, pero sin desinstalar el Python del sistema, ya que el sistema operativo utiliza internamente la versión 2.7 para algunas tareas. En Windows

Python no viene instalado por defecto en ninguna versión por lo que hay que descargarlo de la web oficial: https://www.python.org

Todo el código que se ha utilizado en este proyecto está escrito para Python3 y debería funcionar en todas las versiones superiores a la 2.7.10

Para instalar paquetes en Python utilizaremos su gestor de paquetes *pip*.

pip install nombre_paquete

En nuestro caso vamos a instalar los paquetes básicos, que ya hemos comentado antes, para probar el flujo de trabajo en machine learning. Más adelante profundizaremos en la utilización de los algoritmos de boosting.

4.4.2. Jupyter Notebook

Merece especialmente la pena utilizar Jupyter notebook, ya que podemos trabajar con Python de forma interactiva y generar informes de forma rápida y reproducible por otras personas. Jupyter Notebook levanta un servidor web en nuestra máquina y nos podemos conectar vía navegador web a localhost. En este punto Jupyter está sirviendo una aplicación web en la que podemos escribir bloques de código python y enviarlos a ejecutarse con una instancia de python (el kernel de jupyter).

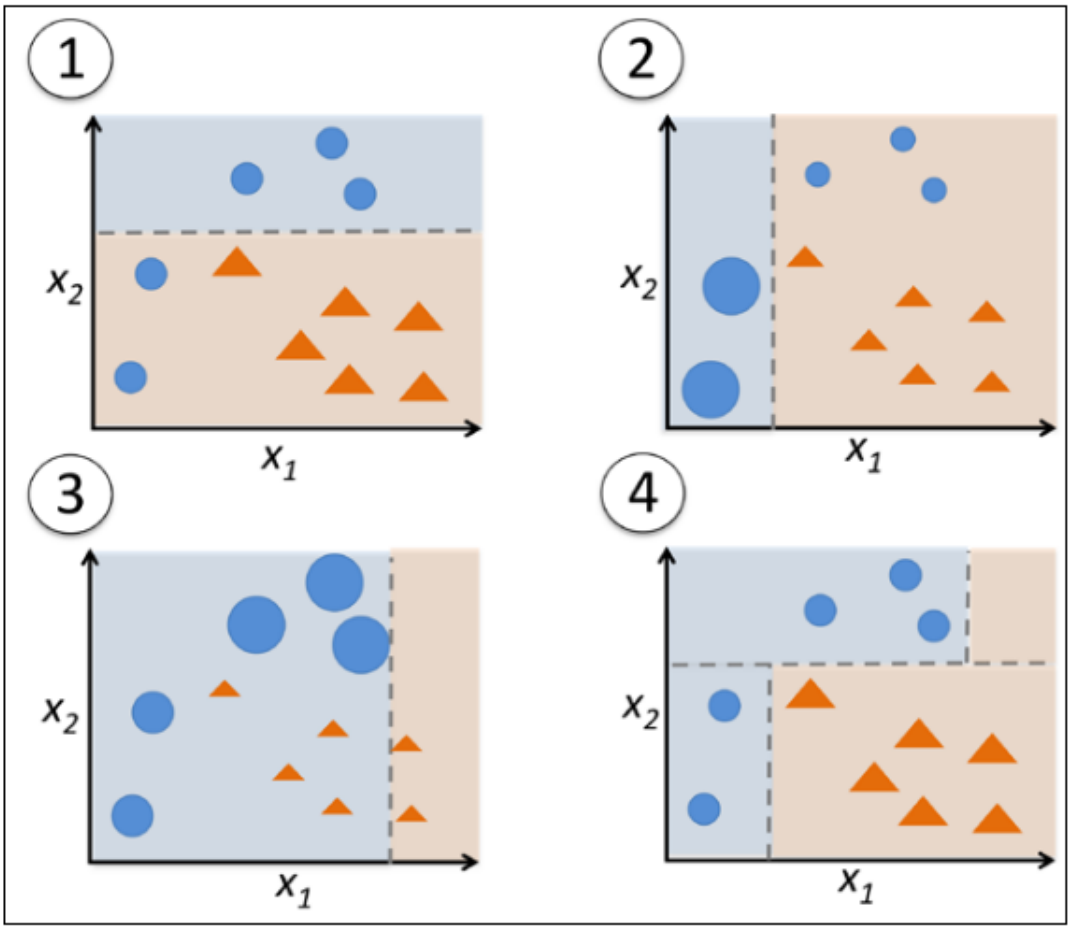
También tiene opciones para exponer el notebook a la red de forma segura, por lo que podríamos utilizar jupyter notebook en un servidor con gran potencia de procesamiento y trabajar de forma remota

Jupyter Notebook viene de serie si utilizamos **Anaconda** para instalar Python junto con todas las herramientas básicas de ciencia de datos.

4.5. Algoritmos de Boosting

El boosting es un tipo particular de método para generar un ensemble, este ensemble consiste en un conglomerado de clasificadores débiles (que son solo un poco mejor que la asignación aleatoria) que actúan de forma conjunta para construir un clasificador fuerte (de gran calidad). Un ejemplo típico de clasificado débil es un arbol de una sola hoja. En boosting se va construyendo el clasificador de forma iterativa, como ya mencionamos en la sección matemática. Las instancias que no han sido bien clasificadas en la iteración anterior adquieren una mayor importancia para la siguiente iteración. Podríamos decir que el algoritmo de boosting va concentrandose en acertar las instancias más dificiles conforme avanza en su proceso iterativo.

Este proceso iterativo se ve reflejado en la siguiente ilustración:



4.5.1. Adaboost

Adaboost es el algoritmo de boosting más simple. En Python puede implementarse definiendo un clasificador débil que actúe como base y construyendo el clasificador adaboost en base a él.

En el anexo podemos observar el mismo ejemplo del cáncer de mama aplicando Adaboost con árboles de una sola hoja como hemos explicado anteriormente.

4.5.2. Extreme Gradient Boosting - XGBoost

Adaboost es una forma de boosting simple pero poco eficaz en ejemplos reales. En la actualidad el algoritmo de boosting más famoso es XGBoost, una implementación muy eficiente del Gradient Boosting que aprovecha al máximo los recursos hardware disponibles mediante paralelización.

Podemos ver la utilización de XGBoost en el anexo.

4.6. Ruido de clase, Regularización, Underfing y over-fitting

Se denomina ruido de clase a las instancias mal clasificadas en el conjunto de entrenamiento. Estas instancias deben ser eliminadas a toda costa de nuestro conjunto de entrenamiento, pero el problema es que no sabemos cuales son ruidosas y cuales no. Lo que si está en nuestra mano es desconfiar de instancias cuya clase no concuerde con la que según el clasificado debería tener. Esta aproximación consistiría en aplicar un filtro de ruido, normalmente basado en KNN para eliminar del dataset aquellas instancias cuyos k vecinos más cercanos tengan una clase diferente.

La regularización es una técnica que consiste en conseguir que un clasificador sea capaz de funcionar adecuadamente en datos que nunca ha visto, es decir que no solo se ciña al conjunto de aprendizaje sino que sea capaz de generalizarlo. Para ello lo que la regularización hace es limitar la complejidad del modelo, por ejemplo penalizando a los clasificadores que utilizan más parámetros en su ajuste. Por ejemplo, en un árbol de decisión, la regularización puede consistir en penalizar a los árboles que tienen más nodos hoja.

Underfiting / over-fitting

Los conceptos de under-fitting y over-fitting son conceptos contrapuestos y hacen referencia a los casos en los que estamos tratando el problema como algo demasiado general (under-fitting) o por el contrario estamos cayendo en over-fitting, ciñéndonos demasiado a los datos de entrenamiento y aprendiendo comportamientos aleatorios en un modelo muy complejo que no se ajusta a la realidad (la cual es más simple muchas veces).

La siguiente imagen es muy esclarecedora de qué es el over-fitting y el under-fitting

En los casos en los que nuestros datos son ruidosos debemos tener especial cuidado con no caer en el over-fitting, ya que aprenderíamos el ruido y nos sería muy difícil acertar en las predicciones con nuestro modelo una vez lo llevemos a predecir la realidad en un entorno productivo.

Es por esto que vamos a prestar especial atención a cómo aplicar factores de regularización al algoritmo XGBoost.

4.7. Regularización en XGBoost

En XGBoost los principales parámetros para regularización son:

min_child_weight Define la suma mínima de los pesos de todas las observaciones que se requiere para crear un nuevo nodo en el árbol. Si establecemos un valor alto estaremos evitando crear nodos que se ajusten a conductas demasiado específicas de un pequeño grupo de observaciones en nuestro conjunto de datos de entrenamiento. Sin embargo si establecemos un valor demasiado amplio vamos a descartar prácticamente todo nuestro dataset, salvo las conductas generales, cayendo por tanto en under-fitting.

max_depth La profundidad máxima de una rama de un árbol. Si no permitimos ramas muy profundas estamos evitando el over-fitting , ya que el árbol será incapaz de aprender las conductas que sean demasiado específicas.

gamma Es el multiplicador de Lagrange que acompaña a la función de pérdida: Un nodo se divide solamente cuando el resultado de la división conduce a una reducción de la función de pérdida. Gamma es proporcional a la magnitud de la reducción de la función de pérdida necesaria para que se produzca la división. Por tanto debe elegirse un gamma u otro dependiendo de cuál sea nuestra función de pérdida.

lambda Es el factor de regularización L2 (análogo a la regresión Ridge)

alfa Es el factor de regularización L1 (análogo a la regresión Lasso)

[11pt]article

[T1]fontenc mathpazo

graphicx caption nolabel labelformat=nolabel

adjustbox xcolor enumerate geometry amsmath amssymb textcomp upquote eurosym [mathletters]ucs [utf8x]inputenc fancyvrb grffile hyperref longtable booktabs [inline]enumitem [normalem]ulem

HighlightingVerbatimcommandchars=
{}

verbose,tmargin=1in,bmargin=1in,lmargin=1in,rmargin=1in

wisconsin pipeline

7 de septiembre de 2018

4.7.1. Modelo de predición de cancer de mama (Wisconsin uci)

[commandchars=
{}] In [7]: **import pandas as pd from sklearn.cross˙validation import** train˙test˙split **from sklearn.preprocessing import** StandardScaler **from sklearn.decomposition import** PCA **from sklearn.linear˙model import** LogisticRegression **from sklearn.pipeline import** Pipeline

[commandchars=
{}] In [2]: *# Importamos los datos desde el repositorio oficial* df = pd.read˙csv('https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/breast-cancer-wisconsin/wdbc.data', header=**None**)

[commandchars=
{}] In [3]: *# Vemos la estructura del dataframe # Columna 0 --¿ ID # Columna 1 --¿ Clase # Columnas 2.. -¿ Datos* df[:2]

[commandchars=
{}] Out[3]: 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 \ 0 842302 M 17.99 10.38 122.8 1001.0 0.11840 0.27760 0.3001 0.14710 1 842517 M 20.57 17.77 132.9 1326.0 0.08474 0.07864 0.0869 0.07017

... 22 23 24 25 26 27 28 29 \ 0 ... 25.38 17.33 184.6 2019.0 0.1622 0.6656 0.7119 0.2654 1 ... 24.99 23.41 158.8 1956.0 0.1238 0.1866 0.2416 0.1860

30 31 0 0.4601 0.11890 1 0.2750 0.08902

[2 rows x 32 columns]

[commandchars=
{}] In [4]: *# Separamos el dataset en (Conjunto de datos, Etiquetas)* X = df.loc[:, 2:].values y = df.loc[:, 1].values

[commandchars=
{}] In [5]: *# Separamos el conjunto total en dos subconjuntos (Train 80% / Test 20%)* X˙train, X˙test, y˙train, y˙test = train˙test˙split(X, y, test˙size=0.20)

[commandchars=
{}] In [6]: *# Creamos un flujo de trabajo (pipeline): # Paso 1 -¿ Escalar los datos # Paso 2 -¿ Analisis de componentes principales (Reduce la dimensionalidad) # Paso 3 -¿ Construimos un modelo utilizando Regresión Logística*

pipe˙lr = Pipeline([('scl', StandardScaler()), ('pca', PCA(n˙components=2)), ('clf', LogisticRegression(random˙state=1))])

 # Ajustamos el modelo a los datos de entrenamiento pipe˙lr.fit(X˙train, y˙train)

```
    #Calculamos la precisión del modelo utilizando los datos de test
print('Test Accuracy: %.3f' % pipe˙lr.score(X˙test, y˙test))
```

```
    [commandchars=
{}] Test Accuracy: 0.947
```