UNIVERSIDAD DE GRANADA

PRÁCTICA 3 INTELIGENCIA DE NEGOCIO

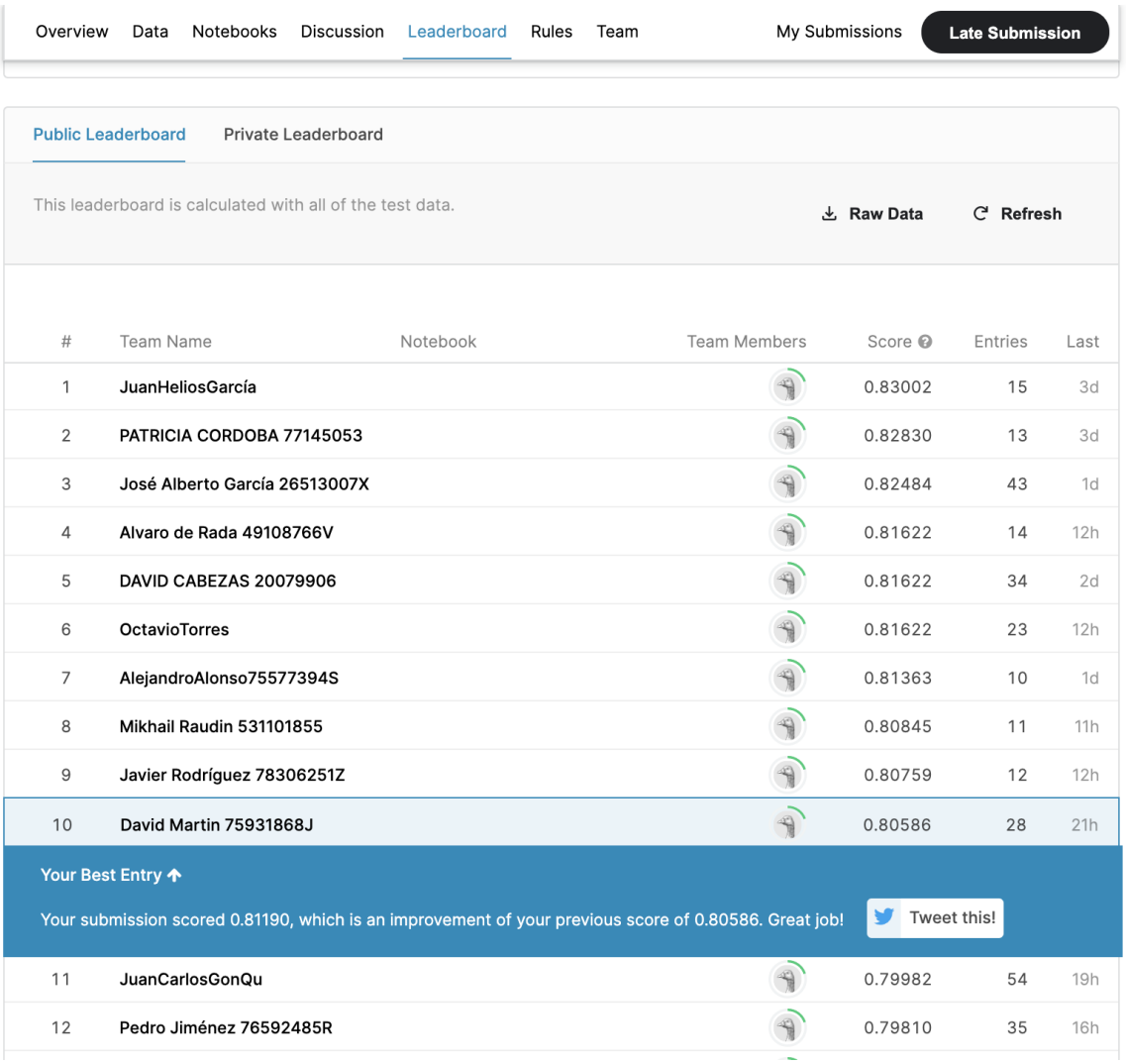
Competición en Kaggle

David Alberto Martín Vela

Grupo 2 de prácticas
davidmv1996@correo.ugr.es
Doble Grado Ingeniería Informática y Matemáticas

Curso 2020-2021

Leaderboard final de la competición, **posición 10** con una score de **0.80586**.



Overview Data Notebooks Discussion Leaderboard Rules Team My Submissions **Late Submission**

Public Leaderboard Private Leaderboard

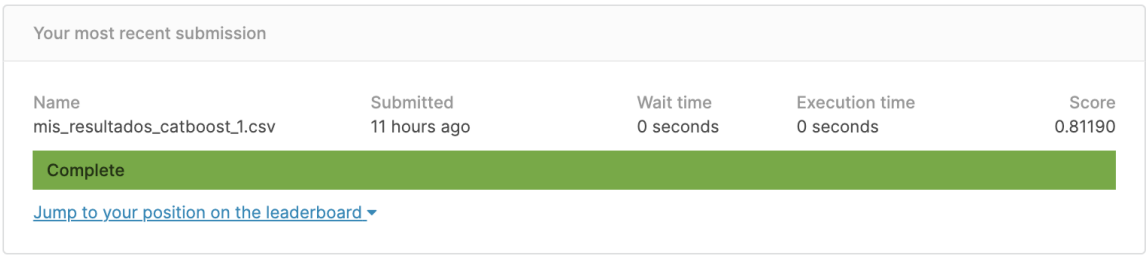
This leaderboard is calculated with all of the test data. **Raw Data** **Refresh**

#	Team Name	Notebook	Team Members	Score	Entries	Last
1	JuanHeliosGarcía			0.83002	15	3d
2	PATRICIA CORDOBA 77145053			0.82830	13	3d
3	José Alberto García 26513007X			0.82484	43	1d
4	Alvaro de Rada 49108766V			0.81622	14	12h
5	DAVID CABEZAS 20079906			0.81622	34	2d
6	OctavioTorres			0.81622	23	12h
7	AlejandroAlonso75577394S			0.81363	10	1d
8	Mikhail Raudin 531101855			0.80845	11	11h
9	Javier Rodríguez 78306251Z			0.80759	12	12h
10	David Martin 75931868J			0.80586	28	21h
11	JuanCarlosGonQu			0.79982	54	19h
12	Pedro Jiménez 76592485R			0.79810	35	16h

Your Best Entry

Your submission scored 0.81190, which is an improvement of your previous score of 0.80586. Great job! Tweet this!

Podríamos haber conseguido más si hubieramos hecho subidas de ficheros con más cabeza ya que después redactar las documentación probando alguna cosa más (late submissions) conseguimos scores de hasta **0.81190**.



Your most recent submission

Name	Submitted	Wait time	Execution time	Score
mis_resultados_catboost_1.csv	11 hours ago	0 seconds	0 seconds	0.81190

Complete

Jump to your position on the leaderboard

Contents

List of Figures

List of Tables

Introducción

En esta tercera y última práctica de la asignatura Inteligencia de Negocio veremos el uso de métodos avanzados para aprendizaje supervisado en clasificación sobre una competición disponible en *Kaggle*, creada ex-proceso para esta práctica. Se buscará adquirir destrezas para mejorar la capacidad predictiva del modelo mientras nos familiarizamos con una de las plataformas más populares de competición en ciencias de datos.

Descripción del problema

En este problema existen datos de una serie de coches vendidos, y se han clasificado los coches en 5 categorías de precio. Se desea predecir la categoría del precio del coche, por lo que es un problema de clasificación multiclase.
El conjunto de entrenamiento consta de alrededor de 6000 instancias, y 14 atributos (de los cuales, id toma valores únicos y solo sirve para identificar cada ejemplo) con datos categóricos y enteros. Se trata de predecir la variable ordinal **Precio_cat**, que representa el grado de coste que supone. Hay cinco valores: **1**, representa a los más baratos; **2**, representa aquellos baratos pero menos; **3**, representa a los que están en precio promedio; **4**, representa a los que son más caros que el promedio, y **5**, que representa a los coches más caros. Para medir el rendimiento de nuestros algoritmos, la competición usará la medida de precisión (accuracy), aunque se podrá utilizar otras medidas o criterios para identificar los algoritmos más promedores en la memoria.

Descripción de los atributos

A continuación se detalla el significado de los distintos atributos:

- Nombre del tipo de coche
- Año del coche
- Kilómetros recorridos
- Combustible del coche (Petrol, Diesel, Electric, LPG y CNG)
- Tipo de marcha del coche (Manual y Automatic).

- Mano si es primera mano (First), Segunda (Second), Tercera (Third) y cuarta o más (Fourth & Above).
- Consumo en kilómetros por litro (kmpl).
- MotorCC medido en centrómetros cúbicos (CC).
- Potencia del motor medido (bhc).
- Asientos
- Descuento realizado por oferta especial (en porcentaje).

Ficheros

Para trabajar se dispone de varios ficheros descargables en la página web de la competición:

- train.csv: Fichero con todos los atributos, incluyendo el objetivo a predecir. Es el conjunto de datos que se puede usar para realizar el aprendizaje automático. Además, se deberá de evaluar usando validación cruzada para identificar los algoritmos más prometedores, y realizar el proceso de tuning que se considere. Se deberá de aplicar las técnicas de pre-procesamiento que se consideren interesantes.
- test.csv: Fichero con las instancias a predecir. Posee el mismo formato que train.csv, a excepción del atributo Precio cat, que evidentemente no aparece.
- sample.csv: Fichero con el formato del fichero a someter, que contiene únicamente el id y los valores de Precio cat.

También se ofrece un fichero para cada atributo de cara a facilitar una correcta etiquetación y normalización (que debería de aplicarse por igual a los datos de ambos ficheros)

Competición

En esta parte de la documentación se explicarán las estrategias seguidas y el progreso que se ha ido desarrollando durante la competición. Para comenzar, haremos un poco de **EDA** para ver nuestros atributos (*Exploratory data analysis*), veremos distintos tipos de **preprocesamiento** que se plantean y describiremos los principales **algoritmos** para la predicción multiclase utilizados, haciendo mención especial en un apartado a una **red neuronal** creada para este problema.
Finalmente mostraremos una **tabla** [1] con el conjunto de planteamientos que han sido más existosos (ya que la mayoría de subidas de ficheros han sido probando el mismo preprocesamiento pero usando distintos algoritmos), incluyendo la fecha de subida de Kaggle, la posición en el leader en ese momento, el preprocesamiento utilizando, la puntuación de validación cruzada de 5 particiones respecto al conjunto de train.csv [1] y la puntuación obtenida en Kaggle resultante al subir el fichero con la predicción realizada sobre el conjunto test.csv.
Por simplicidad y para hacer la tabla más cómoda visualmente, mostraremos únicamente los planteamientos más interesantes, ya que personalmente opino que no tiene mucho sentido añadir todas las subidas donde algunas son distintas combinaciones para distintos preprocesamientos, si tenemos una subida que considera un conjunto de preprocesamientos y consigue una puntuación mejor que otros aplicados individualmente (por ejemplo, si en un intento hemos tratado con valores perdidos, y en otro intento hemos tratado de la misma manera valores perdidos y además hemos utilizado técnicas para el balanceo, únicamente pondremos el segundo intento ya que el primero es redundante).

Exploratory data analysis

Todo lo relevante para recrear esta parte visual se encuentra al inicio del notebook **vanilla.ipynb**. Obteniendo información sobre nuestras variables

train.csv

```
RangeIndex: 4819 entries, 0 to 4818
Data columns (total 14 columns):
 #   Column       Non-Null Count Dtype
---  ------       -------------- -----
```

```
0   id           4747 non-null
    float64
1   Nombre       4747 non-null
    object
2   Ciudad       4747 non-null
```

[1] el fichero **train.csv**, a su vez dividido en conjuntos de train y test y realizando validación cruzada de 5 particiones **únicamente** sobre el conjunto de train resultante de dividir el conjunto de train, puede ser un poco confuso, básicamente es que no combinamos train_test

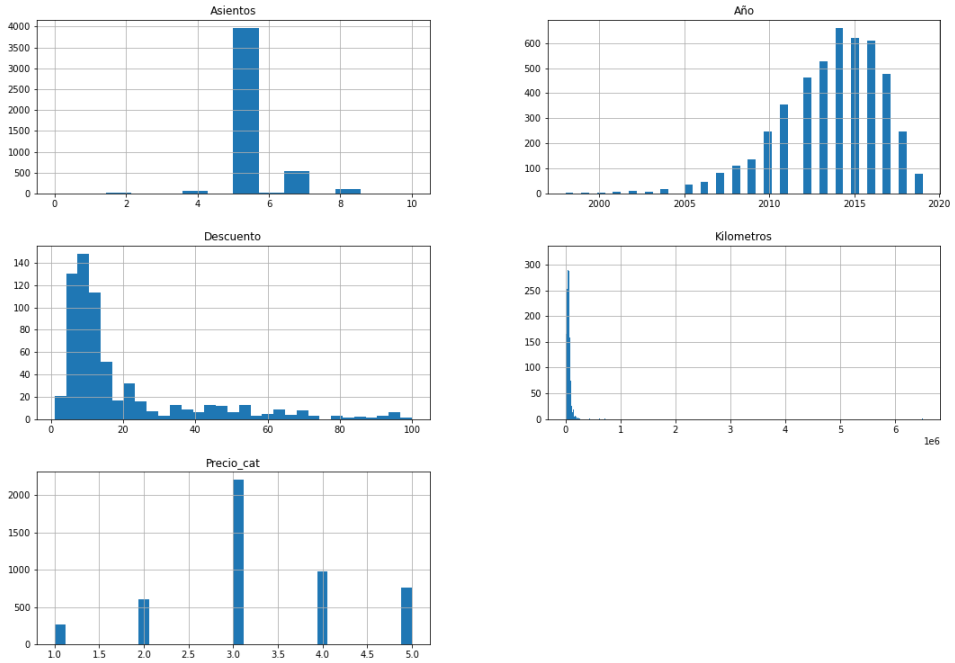
```
    object
 3  Anio          4747 non-null
    float64
 4  Kilometros    4747 non-null
    float64
 5  Combustible   4747 non-null
    object
 6  Tipo_marchas  4747 non-null
    object
 7  Mano          4747 non-null
    object
 8  Consumo       4746 non-null
    object
 9  Motor_CC      4718 non-null
    object
 10 Potencia      4644 non-null
    object
 11 Asientos      4713 non-null
    float64
 12 Descuento     659 non-null
    float64
 13 Precio_cat    4819 non-null  int64
dtypes: float64(5), int64(1),
   object(8)
```

test.csv

```
RangeIndex: 1159 entries, 0 to 1158
Data columns (total 13 columns):
 #   Column       Non-Null Count Dtype
---  ------       -------------- -----
 0   id           1159 non-null  int64
 1   Nombre       1159 non-null
     object
 2   Ciudad       1159 non-null
     object
 3   Anio          1159 non-null
     int64
 4   Kilometros   1159 non-null  int64
 5   Combustible  1159 non-null
     object
 6   Tipo_marchas 1159 non-null
     object
 7   Mano         1159 non-null
     object
 8   Consumo      1159 non-null
     object
 9   Motor_CC     1159 non-null
     object
 10  Potencia     1159 non-null
     object
 11  Asientos     1159 non-null
     float64
 12  Descuento    155 non-null
     float64
dtypes: float64(2), int64(3),
   object(8)
```

Hacemos una primera vista a las variables numéricas de nuestro dataset en modo de histograma [1], donde se aprecia la presencia de outliers, por ejemplo en el caso de nuestro atributo **kilómetros** y asimetría en las distribuciones (*skewed data*).

Figure 1: Histograma general



Vamos a mostrar visualizaciones de algunas variables discretas individualmente y respecto a nuestra variable a predecir **Precio_cat** en la figura [4], también en la figura [5] vemos algo esperado y es la influencia del atributo Año en la variable a predecir, ya que con el tiempo los coches valen menos.

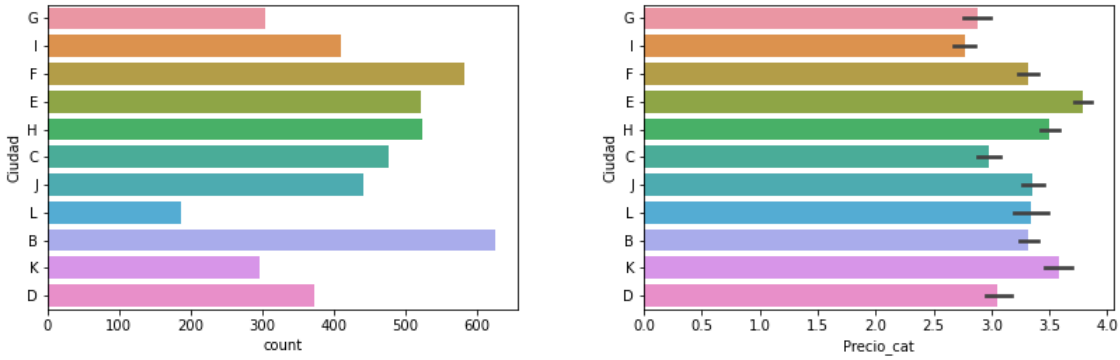


Figure 2: Ciudad vs Precio_cat

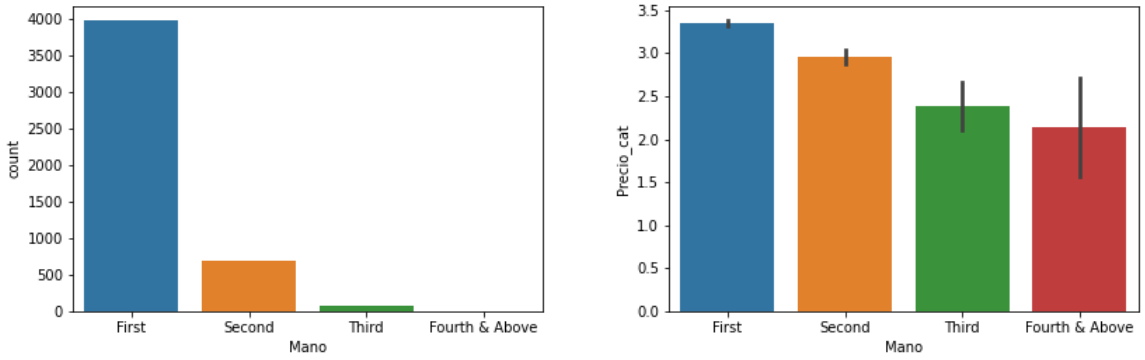


Figure 3: Mano vs Precio_cat

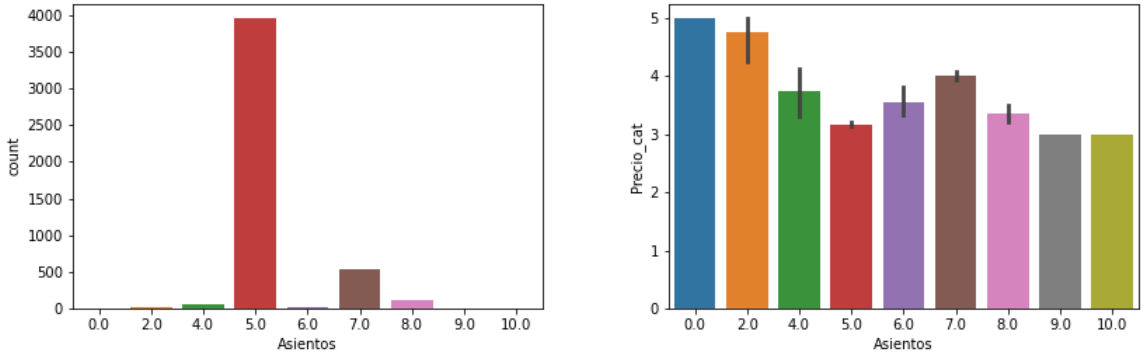


Figure 4: Asientos vs Precio_cat

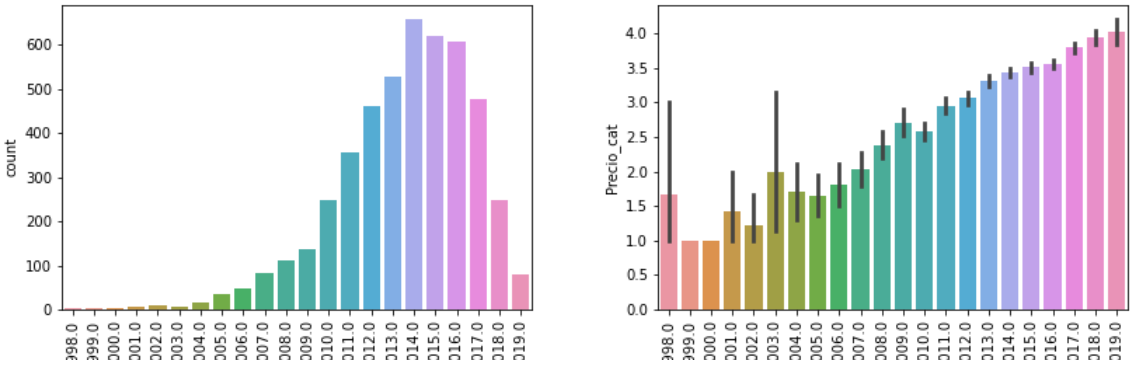


Figure 5: Año vs Precio_cat

Destacamos el caso de Asientos, donde hay una gran cantidad de coches con 5 asientos pero a su vez son de los que menos precio valen, esto puede deberse debido a la oferta y demanda.

A su vez, para visualizar también las variables de objetos como Combustible, Consumo etc que tienen un parámetro numérico junto a la medida, preprocesamos estos atributos dejandolo solo el valor numérico para poder visualizarlo, vemos en la figura [8] visualizaciones de estas variables preprocesadas de la manera comentada junto a un boxplot.

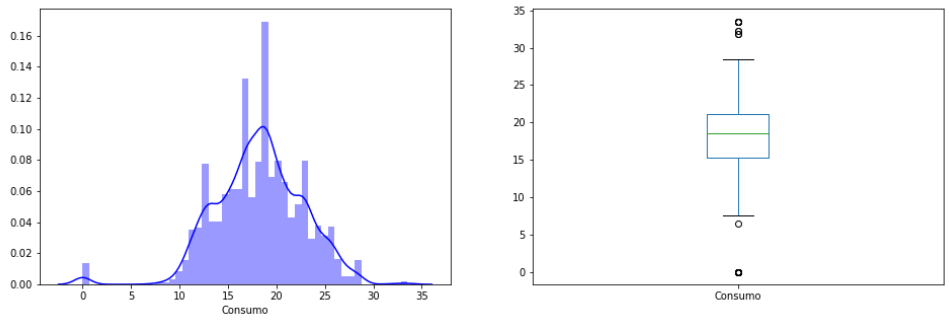


Figure 6: Distribución Consumo

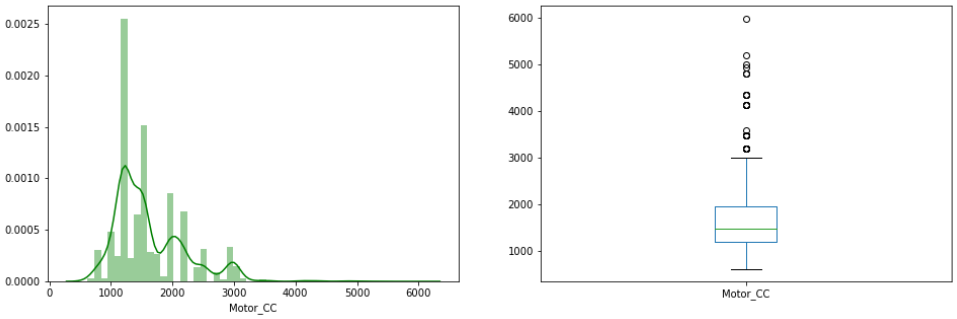


Figure 7: Distribución Motor CC

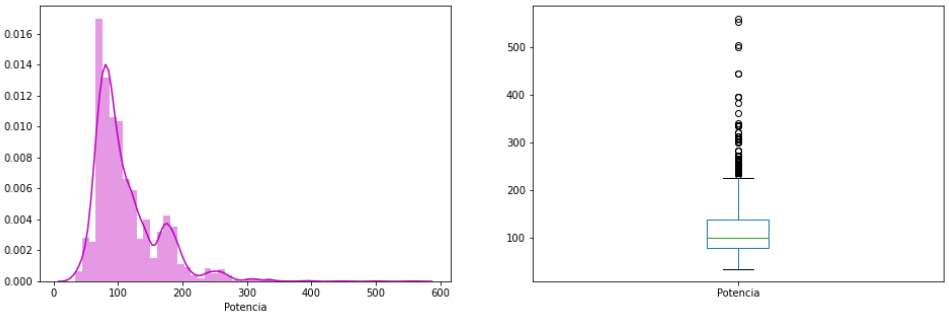


Figure 8: Distribución Potencia

Como en nuestro histograma inicial, se aprecia la presencia de outliers, por ejemplo en el caso de nuestro atributo **kilómetros** y asimetría en las distribuciones (*skewed data*), también en nuestro atributo consumo, hay valores de 0, lo cuál creemos que no es posible que haya coches que consuman 0 litros por kilómetro.

Vamos a crear otro atributo llamado **Company** donde de nuestro atributo **Nombre** extraeremos la marca del coche (nos quedamos con la primera palabra del nombre que corresponde a la marca del coche), visualizamos la relación entre la marca y el precio en la figura [10] y la distribución de valores de marcas en la figura [9].

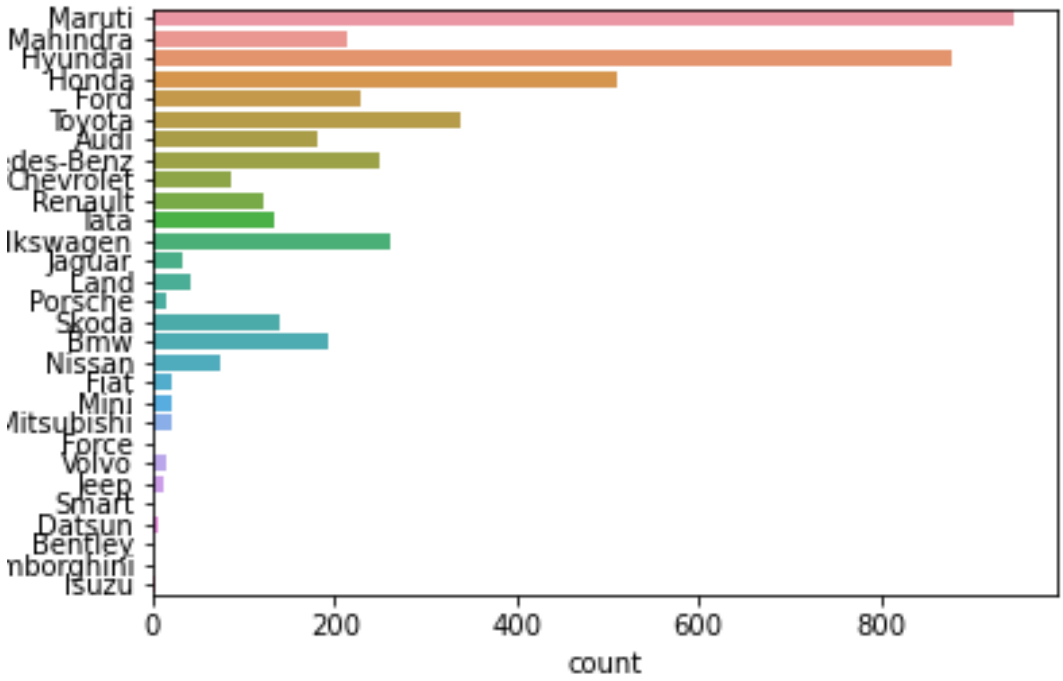


Figure 9: Marca

En la creación de la nueva columna Company, cuando separabamos los nombres nos hemos encontrado con algunas irregularidades, por ejemplo la marca Isuzu, estaba tanto en mayúscula como en minúscula, esto lo hemos solucionado con el método title() de python, donde hemos unificado estos valores pasándolos a la forma de un String con la primera letra mayúscula, después de esta aclaración, en la figura [10] vemos que la influencia de la marca en el precio tiene sentido, ya que marcas de gama baja suelen valer menos por ejemplo, fiat, comparado con marcas de coches de lujo como por ejemplo, Lamborghini.

```
part = car_train['Nombre'].astype(str).str.partition()
car_train['Company'] = part[0].str.title()
#car_train['Car_name'] = part[2]
```

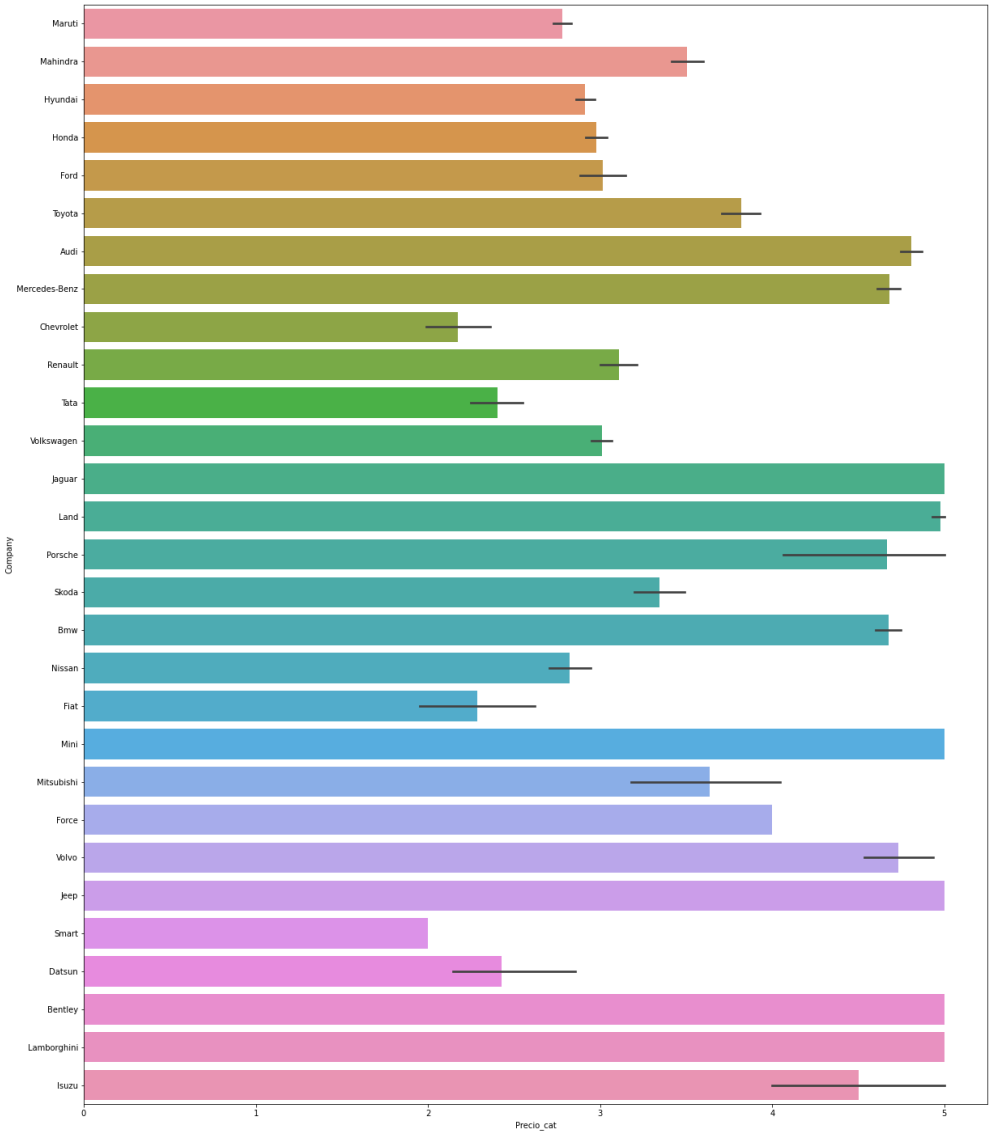


Figure 10: Marca vs Precio_cat

Comparamos también entre atributos, por ejemplo entre tipo de marchas y kilómetros en la figura [11] y entre ciudades y kilometros en la figura [12]

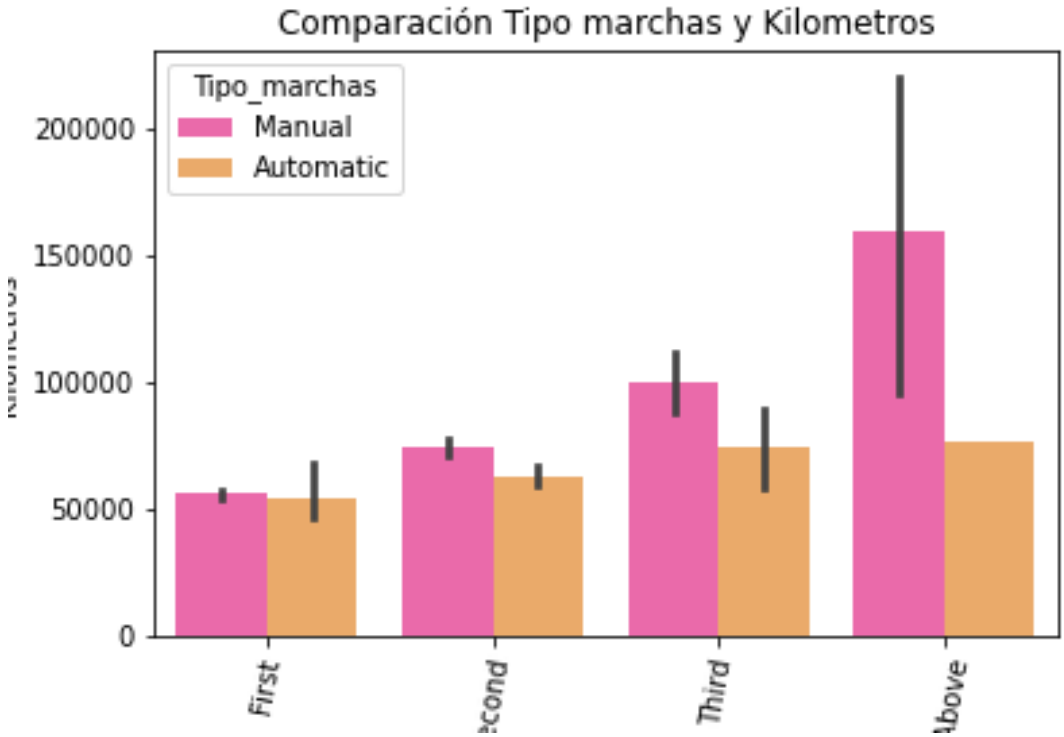


Figure 11: Comparación entre tipo marchas y kilómetros

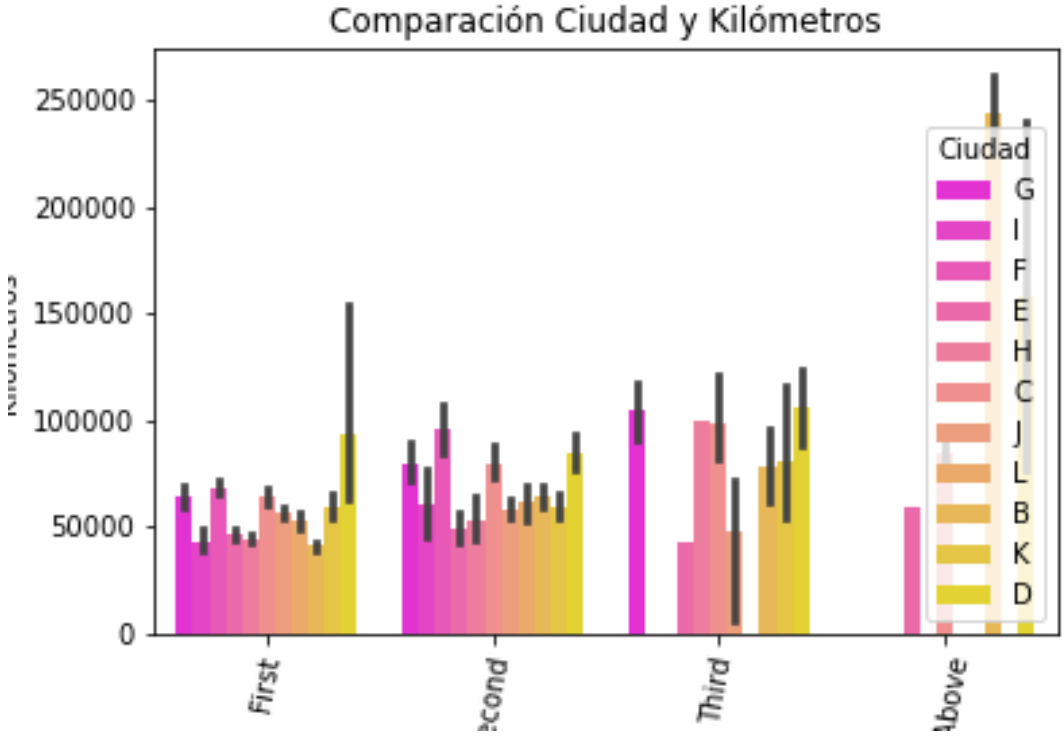


Figure 12: Comparación entre ciudad y kilómetros

Añadir heatmap correlación
Algunas conclusiones generales que sacamos de esta visualización es que los atributos característicos tienen un montón de valores únicos, esto puede hacer que realizar un tipo de etiquetado de one hot encoding no sea una buena idea, probaremos con ello igualmente. También hay valores perdidos, trabajaremos con esto probando distintos tipos de preprocesamiento. Finalmente nuestro conjunto esta desbalanceado, realizaremos técnicas de oversample/unversampling para paliar con ello.

Preprocesamientos

En esta sección vemos distintas maneras que hemos escogido para preprocesar nuestros datos, tratar con valores perdidos, etiquetación, skewed data, outliers y balanceo.

Missing values

No hay valores duplicados, veamos los valores perdidos de nuestros datasets

Train.csv

	percent	count
Descuento	86.324964	4160
Potencia	3.631459	175
Asientos	2.199626	106
Motor_CC	2.095871	101
Consumo	1.514837	73
Nombre	1.494086	72
Ciudad	1.494086	72
Año	1.494086	72
Kilometros	1.494086	72
Combustible	1.494086	72
Tipo_marchas	1.494086	72
Mano	1.494086	72

Test.csv

	percent	count
Descuento	86.626402	1004

Figure 13: Missing values

Debido al porcentaje de valores nulos en nuestro atributo de descuento, siempre vamos a proceder a eliminar esa columna directamente ya que personalmente opino que no sale a cuenta intentar rellenarla ya que no deja de ser una estimación que por tanto arrastra un error asi que al ser un número tan elevado la descartamos.
Respecto a lo restante, existen un gran número de procedimientos para el tratamiento de valores perdidos, nosotros siempre elegiremos entre eliminar muestras o variables que tienen datos faltantes. (Hay que tener cuidado y garantizar que las variables

descartadas no proporcionan información relevante) o sustituir los valores perdidos por estimaciones, por la media si las variables son numéricas (por ejemplo, Kilómetros) o por la moda si las variables son categóricas (Nombre, Mano etc...).
Antes de aplicar cualquier procedimiento sobre unos datos hay que analizar la naturaleza de los datos perdidos si los hubiere. Si su origen no fuera aleatorio, los valores perdidos no pueden ser ignorados. Una vez se sabe que son de origen aleatorio, se debe decidir si eliminarlos o sustituirlos por valores concretos según las técnicas anteriores. Si se tiene un tamaño suficientemente grande de muestras, siempre es preferible eliminarlos ya que sustituirlos no deja de ser una estimación que por tanto arrastra un error. Aparte de descartar siempre la columna **Descuento**, en nuestro caso probaremos siempre tres opciones.

- Eliminar directamente todos los valores nulos
- Rellenar los valores nulos con la moda si los atributos son categóricos o con la media sin son numéricos
- Crear un nuevo atributo llamado **Company** como hemos comentado en la parte de visualizacion, y sustituir el valor perdido por la moda de este mismo atributo pero de esa marca. El código sería el siguiente:

```
 #train.loc[train['brand_name'] == 'Maruti']['Asientos'].mode()[0]
def fill_na_with_mode(ds, brandname, column):
    if ds.loc[ds['Company'] == brandname][column].isnull().any() ==
        False:
        fill_value = ds.loc[ds['Company'] ==
            brandname][column].mode()[0]
        condit = ((ds['Company'] == brandname) & (ds[column].isnull()))
        ds.loc[condit, column] =
            ds.loc[condit,column].fillna(fill_value)
```

Por ejemplo, si estamos recorriendo los valores perdidos de nuestro atributo **Asientos**, sustituimos el valor perdido por la moda de Asientos de la marca que corresponda al valor perdido de Asientos. Si no hay siquiera nombre de compañia, no lo hacemos e igualmente luego eliminamos los valores perdidos restantes.

Etiquetado

Como hemos comentado en la parte de visualización, debido a la gran cantidad de valores únicos de nuestros atributos puede que realizar etiquetados one-hot empeore algunos de nuestros algoritmos, al realizar one hot encoding sobre una variable categórica, estamos induciendo escasez en el conjunto de datos, lo cual no es deseable. Desde el punto de vista del algoritmo de división, todas las variables ficticias son independientes. Si el árbol decide realizar una división en una de las variables ficticias, la ganancia por división es muy marginal. Como resultado, es

muy poco probable que el árbol seleccione una de las variables ficticias más cercanas a la raíz. Para verificar esto, en nuestros modelos que utilicen árboles de decisión veremos la importancia de las características para los modelos y veremos que características destacan. Para realizar un correcto etiquetado utilizando Labels utilizaremos el ejemplo enseñado en los seminarios con los ficheros originales de los datos para el conjunto de train y de test, para probar distintos etiquetamiento one-hot utilizaremos el método *get_dummies* de pandas. [Get], en la tabla final en la columna de preprocesado comentaremos que variables han sido etiquetadas y como pero nos moveremos entre estos dos tipos de etiquetado. Cabe comentar que cuando realizamos one-hot encoding sobre el conjunto de train y sobre el conjunto de test, puede darse la situacion de que algunas columnas no coincidan, por ejemplo si se diera el caso que como hemos comentado antes, crear una columna con marcas de vehículos y aplicar one-hot encoding sobre la misma, el conjunto de test no tiene porque tener las mismas columnas que el conjunto de train, luego esto daría un error de dimensión, para ello si se diera el caso rellenamos el conjunto de test con columnas faltantes vacías con 0s, adjuntamos una parte del script para ello.

```
# Get missing columns in the training test
missing_cols = set( train.columns ) - set( test.columns )
# Add a missing column in test set with default value equal to 0
for c in missing_cols:
    test[c] = 0
# Ensure the order of column in the test set is in the same order than in
    train set
test = test[train.columns]
```

Escalado

En la práctica, siempre viene bien escalar los datos (Estandarizar características eliminando la media y escalando a la varianza de la unidad), en nuestro caso después de varias pruebas, aunque hacemos uso de modelos basados en distancias, no son ni de lejos los que mejores resultados proporcionan, así que en nuestro caso tratar con el escalado de los datos no será importante ya que no influira en nuestros mejores resultados. Los modelos basados en distancias mejoran drásticamente mientras que para otros es irrelevante. Respecto a normalizar, probando un par de veces vemos que no beneficia nada a nuestro problema asi que no normalizaremos nuestros datos. En conclusión, aplicaremos escalado ya que nuestros modelos basados en distancia se benefician, y los que no (que también son los que mejores resultados nos aportan) son indiferentes ante este escalado asi que digamos que escalar no ”molesta”. No normalizaremos porque solo perjudica.

Skewed data y outliers

Como hemos visto en la parte de visualización, tenemos skewed data y outliers en nuestros atributos, vamos a tratar los outliers de algunos de nuestros atributos, vamos a documentar un ejemplo de lo que sería un preprocesamiento completo de

outliers y skewed data, aunque estos pueden realizarse individualmente y el resultado e imágenes en cuyo caso serán distintos, se dirá si se ha tenido en cuenta o no en la tabla final este tipo de preprocesamiento.
En la figura [18] mostramos 4 boxplots donde se aprecia claramente los outliers de nuestro conjunto, cabe comentar en el atributo consumo los valores 0.0, como ya hemos comentado en la parte de visualización, dudamos entre transformar estos atributos a valores nulos o eliminarlos directamente, en este caso vamos a proceder a eliminarlos. y a quedarnos con los datos más centrados.

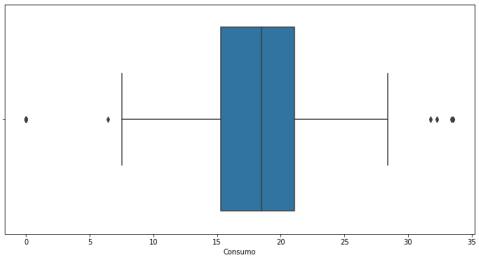


Figure 14: Outliers consumo

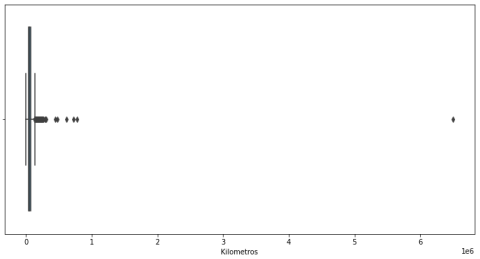


Figure 15: Outliers Kilometros

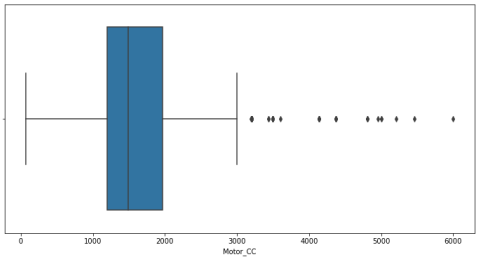


Figure 16: Outliers Motor_CC

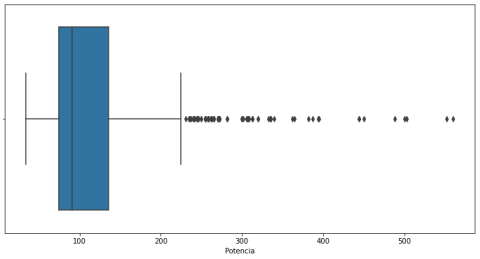


Figure 17: Outliers Potencia

Figure 18: Outliers

Podemos usar la funcion *quantile* de python para ver los quantiles de los extremos, en nuestro caso son:

```
Kilometros
max threshold : 451370.00000002445
min threshold : 1000.0
Potencia
max threshold : 456.93420000002664
min threshold : 34.2
Consumo
max threshold : 33.44
min threshold : 0.0
Motor_CC
max threshold : 4959.918000000034
min threshold : 624.0
```

Vamos a reducir estos outliers, por ejemplo acotandolo por estos valores:

```
train=train[train['Kilometros'] < 262000]
train=train[train['Consumo'] > 0.0]
train=train[train['Potencia'] <= 530]
train=train[train['Motor_CC'] <= 5900 ]
```

Después de nuestra transformación los datos quedarían como en la figura [23]

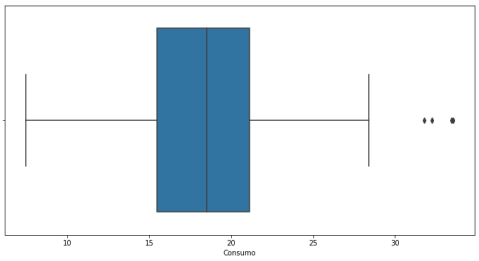


Figure 19: No outliers consumo

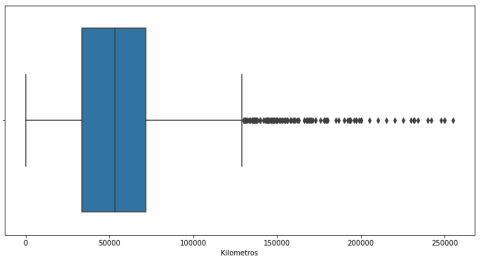


Figure 20: No outliers Kilometros

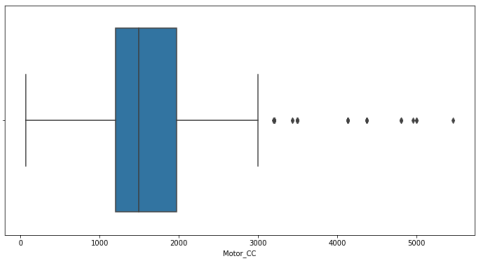


Figure 21: No outliers Motor_CC

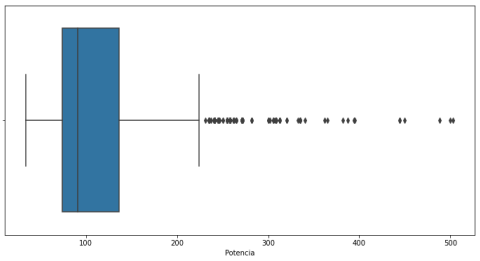


Figure 22: No outliers Potencia

Figure 23: No outliers

Por lo tanto, en los datos asimétricos,los outliers del skewed data pueden actuar como un valor atípico para el modelo estadístico y sabemos que los valores atípicos afectan negativamente el rendimiento del modelo, (especialmente los modelos basados en regresión). Hay modelos estadísticos que son robustos a valores atípicos como los modelos basados en árboles, pero limitarán la posibilidad de probar otros modelos. Por lo tanto, es necesario transformar los datos asimétricos para que se acerquen lo suficiente a una distribución gaussiana o distribución normal.
Por otro lado, en nuestros atributos, un dato se denomina skewed (*sesgado*) cuando la curva aparece distorsionada o sesgada hacia la izquierda o hacia la derecha, en una distribución estadística. En nuestro caso profundizemos en nuestros atributos Kilometros, Potencia, Consumo y Motor_CC. Usamos la función skew [Ske] de la librería pandas para comprobar la asimetría de nuestros datos, un valor de asimetría de 0 en la salida denota una distribución simétrica de valores en la fila 1, un valor de asimetría negativo en la salida indica una asimetría en la distribución correspondiente a la izquierda y la cola es más grande hacia el lado izquierdo de la distribución

mientras que un valor de asimetría positivo en la salida indica una asimetría en la distribución correspondiente a derecha y la cola es más grande hacia el lado derecho de la distribución. Adjuntamos una tabla con lo comentado:

	skewness
Potencia	1.851863
Motor_CC	1.397533
Kilometros	1.369657
Consumo	0.177833

En una distribución normal, el gráfico tiene simetría, lo que significa que hay tantos valores de datos en el lado izquierdo de la mediana como en el lado derecho. En la figura [24] vemos la distribución de nuestros datos.

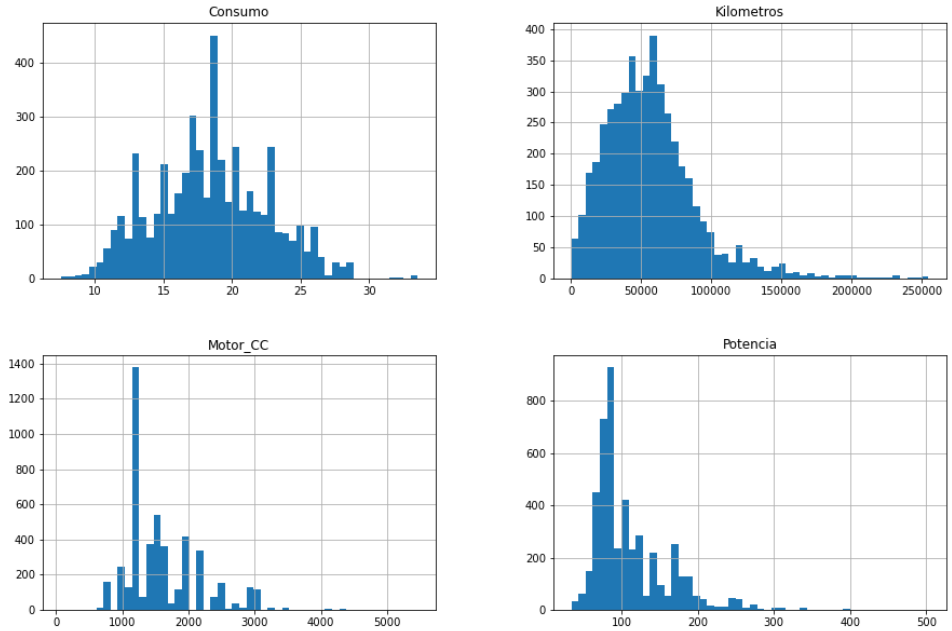


Figure 24: Skewed data

Aplicamos logarítmos para tratar con estos datos sesgados en la figura [25] vemos el resultado de nuestros datos después de haber aplicado técnicas logarítmicas

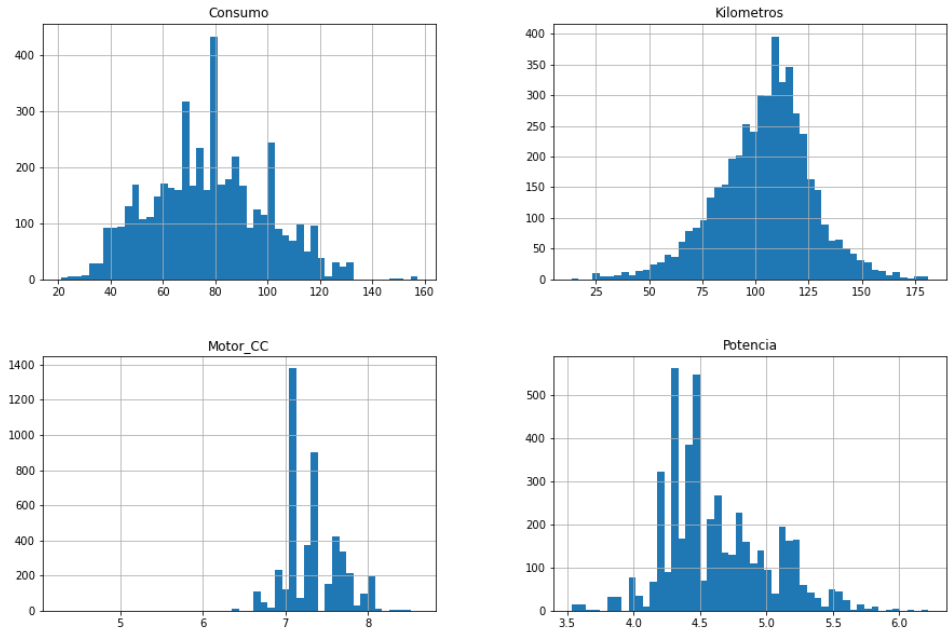


Figure 25: Skewed data

Mostramos una tabla con los datos transformados para medir el nivel de skew.

	skewness
Potencia	0.540517
Motor_CC	0.303247
Consumo	0.186635
Kilometros	-0.275876

Balanceado

Cuando procedemos a dividir nuestro conjunto de entrenamiento entre la variable a predecir y el resto de atributos, nos encontramos con que nuestra variable a predecir, **Precio_cat** esta muy desbalanceada, hay siempre un valor entre los 5 a predecir que en mucha más cantidad que el resto, si una clase está sobrerepresentada frente al resto, el modelo tendrá mucha tendencia a elegirlo. Esto puede ser problemático o no, si los datos finales a predecir mantienen el mismo no-balanceamiento, pero si no fuese el caso sí podría dar problemas, mientras que si una clase aparece poco en las muestras respecto al resto el modelo puede tener tendencia a despreciar dicha clase ya que le afecta poco a sus medidas, llegando incluso a ignorarla en casos extremos. Esto se produce independientemente de si dicho no-balanceamiento aparece también en los datos finales sobre los que se vaya a predecir. La gravedad depende del nivel de desbalanceamiento y de si el conjunto de datos a predecir mantiene el

balanceamiento o no, pero en cualquier caso puede ser problemático, y es recomendable tratarlo.
Dependendiendo de las características puede ser más conveniente uno que otro: undersampling, y oversampling. En nuestro caso probar con ambas técnicas llegados a la conclusión de que undersampling no es adecuado para nuestro caso, ya que elimina ejemplos de la clase mayoritaria y puede resultar en la pérdida de información invaluable para los modelos. Asi que nos centramos principalmente en oversampling, de todos los distintos preprocesamientos el que más ganancia nos ha aportado en una mejor puntuación del modelo es este tipo de preprocesamiento en la variable a predecir, al principio comenzamos con el que se ha dado en clase de prácticas, Synthetic Minority Oversampling Technique (**SMOTE**, sintetiza nuevos ejemplos para la clase minoritaria), pero luego empezamos a utilizar **RandomOverSampling** (duplica ejemplos de la clase minoritaria en el conjunto de datos de entrenamiento, tarde nos dimos cuenta que esto puede resultar en un "overfitting" para algunos modelos) ya que nos proporcionaba mejores resultados. Se describirá en la tabla que tipo de balanceo se ha aplicado.

Algoritmos

Aunque hemos usado gran cantidad de algorítmos de clasificación (SVM, KNeighbors, Extra Tree etc...), al final nos centramos solo en 3 de ellos ya que son los que mejores resultados nos proporcionan en nuestro conjunto train, vamos a comentarlos. Respecto a los preprocesamientos realizados para cada algoritmo, se escribirá explícitamente en la tabla, aunque el que más mejora ha resultado ser el trato con el balanceo, respecto a por ejemplo valores perdidos, escalado y demás, la mejora de esto es mínima, menos de 3% en todos los casos. Como hemos comentado en la parte de escalado, al ser algoritmos que no funcionan por distancia es normal que no influya la escala de los datos, además de ser métodos que funcionan bien aunque nuestro dataset no tengan muchos valores.

Random Forest

Random Forest Classifier[Rfc] es un metaestimador que se ajusta a una serie de clasificadores de árboles de decisión en varias submuestras del conjunto de datos y utiliza promedios para mejorar la precisión predictiva y controlar el sobreajuste. Funciona bien en la mayoría de problemas, y en este no es una excepción, En nuestro caso aunque proporciona buenos resultados el problema es su overfitting muy rápido, por ello en algunas de nuestras subidas de ficheros a Kaggle se ha obtenido puntuaciones pésimas (alrededor de 0.2).
Para evitar un sobre ajuste excesivo lo que hemos intentado hacer es reducir el parámetro *max_depth* y optimizar parámetros de ajuste que controlen la cantidad de características que se eligen al azar para hacer crecer cada árbol a partir de los datos de arranque. La función que hemos utilizado para hacer tuning de nuestro algoritmo es la siguiente:

```
def best_tree(X_train, y_train):
    #Randomized Search CV

    # Number of trees in random forest
    n_estimators = [int(x) for x in np.linspace(start = 100, stop = 1200,
        num = 12)]
    # Number of features to consider at every split
    max_features = ['auto', 'sqrt']
    # Maximum number of levels in tree 3-10 to deal with overfitting
    max_depth = [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9]
    # Minimum number of samples required to split a node
    min_samples_split = [2, 5, 10, 15, 100]
    # Minimum number of samples required at each leaf node
    min_samples_leaf = [1, 2, 5, 10]

    # Create the random grid
    random_grid = {'n_estimators': n_estimators,
                   'max_features': max_features,
                   'max_depth': max_depth,
                   'min_samples_split': min_samples_split,
                   'min_samples_leaf': min_samples_leaf}

    # search across different combinations
    rf_random = RandomizedSearchCV(estimator = RandomForestClassifier(),
                                   param_distributions = random_grid,
                                   scoring=scoring,
                                   n_iter = 15, cv = 5, verbose=2,
                                       random_state=42, n_jobs = 1)

    rf_random.fit(X_train,y_train)

    return rf_random
```

Hemos elegido randomized search en vez de grid search ya que exploran exactamente el mismo espacio de parámetros y el resultado en la configuración de los parámetros es bastante similar, mientras que el tiempo de ejecución para la búsqueda aleatoria es drásticamente menor. [Ran]

Después de controlar el overfitting haciendo tuning de los parámetros mostrados anteriormente, se consiguen peores puntuaciones respecto a nuestro conjunto de train (lo cuál es normal, pero antes obteniamos puntuaciones perfectas lo que nos indicaba un claro overfitting) pero obtenemos mejores puntuaciones en nuestro conjunto de test. Se escribirá en la tabla cuales han sido los parámetros elegidos. Otra cosa buena del random forest es que podemos ver que características han tenido más importancia, por ejemplo en la figura [26] vemos un ejemplo de esto. Respecto a los preprocesamientos, como hemos comentado al inicio de esta sección, no se ha notado mucha mejoría excepto cuando tratamos con el desbalanceo.

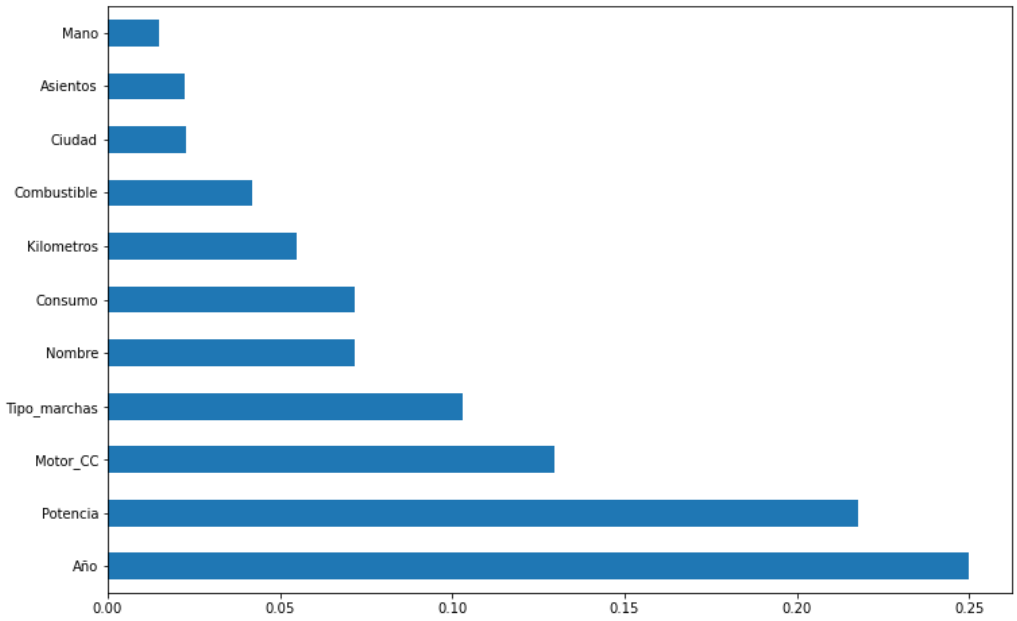


Figure 26: Features importance

También cabe decir que aunque no es el modelo que nos proporciona mejores resultados, sin duda es el que más rápido funciona.

XGBoost

El algoritmo **XGBoost**[Xgba] es eficaz para una amplia gama de problemas de modelos predictivos de clasificación.
Es una implementación eficiente del algoritmo de stochastic gradient boosting y ofrece una gama de hiperparámetros que brindan un control detallado sobre el procedimiento de entrenamiento del modelo. Aunque el algoritmo funciona bien en general, incluso en conjuntos de datos de clasificación desequilibrados, ofrece una forma de ajustar el algoritmo de entrenamiento para prestar más atención a la clasificación errónea de la clase minoritaria para conjuntos de datos con una distribución de clases sesgada. Está basado en un Random Forest ponderando a los individuos que se clasificaron mal en árboles anteriores. Al igual que en el caso de random forest classifier, XGBoost (y otros algoritmos de gradient boosting) tiene una serie de parámetros que se pueden ajustar para evitar un sobreajuste. La documentación está bastante bien respecto a estos parámetros [Xgbb], nuestra función de tuning es la siguiente:

```
def best_xgboost(X_train, X_test, y_train, y_test):
```

```
    param_dist = {'n_estimators': [int(x) for x in np.linspace(start = 100,
        stop = 1000, num = 12)],
# the learning rate of our GBM (i.e. how much we update our prediction with
    each successive tree); eta.
# Lower values avoid over-fitting.
             'learning_rate': [0.01, 0.05, 0.1, 0.15, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5],
             'subsample': [0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.],
# the maximum depth of a tree; max_depth. Lower values avoid over-fitting
             'max_depth': [3, 4, 5, 6, 7, 8],
# the ratio of features used (i.e. columns used); colsample_bytree. Lower
    ratios avoid over-fitting.
             'colsample_bytree': [0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.],
# the minimum sum of instance weight needed in a leaf, in certain
    applications this relates directly to
# the minimum number of instances needed in a node; min_child_weight.
    Larger values avoid over-fitting.
             'min_child_weight': [1, 5, 15, 20, 50]
            }

    print(param_dist)

    xgboost_random = RandomizedSearchCV(estimator = XGBClassifier(),
                            param_distributions = param_dist,
                            scoring=scoring,
                            n_iter = 15, cv = 5, verbose=2,
                                random_state=42, n_jobs = 1)

    xgboost_random.fit(X_train, y_train, eval_metric = "mlogloss", eval_set
        = [(X_test, y_test)])

    return xgboost_random
```

Destacamos también el parámetro *subsample* Proporción de submuestras de las instancias de formación. Establecerlo en 0.5 significa que XGBoost muestreará al azar la mitad de los datos de entrenamiento antes de cultivar árboles. y esto evitará el sobreajuste. Se escribirá en la tabla el conjunto de parámetros utilizados en el algoritmo para la predicción.

El modelo XGBoost puede evaluar e informar sobre el rendimiento en un conjunto de prueba para el modelo durante el entrenamiento.

Admite esta capacidad especificando tanto un conjunto de datos de prueba como una métrica de evaluación en la llamada a model.fit () al entrenar el modelo y especificar una salida detallada.

En nuestro caso hemos elegido informar sobre la tasa de error de clasificación multiclase *mlogloss* en un conjunto de prueba independiente (eval_set) mientras entrenamos el modelo XGBoost. Produce mejores resultados que el random forest aunque en comparación al tiempo es muchísimo más lento.

Catboost

CatBoost [Cata] es una biblioteca de software open-source desarrollada por Yandex. Proporciona un framework gradient boosting que intenta resolver las características categóricas utilizando una alternativa impulsada por permutación en comparación con un algoritmo clásico. Mientras que XGBoost fue el algoritmo más competitivo y preciso en Kaggle la mayor parte del tiempo, ahora está de moda un nuevo líder llamado **CatBoost**. En su documentación, incluyen referencias y ejemplos de GitHub, noticias, evaluaciones comparativas, comentarios, contactos, tutorial e instalación. Si está utilizando XGBoost, LightGBM o H2O, la documentación de CatBoost ha realizado una evaluación comparativa y ha demostrado que son los mejores con resultados ajustados y predeterminados. Por supuesto, si tiene variables más categóricas, CatBoost es el camino a seguir. Esta biblioteca permite algunas visualizaciones impresionantes, incluido el proceso de prueba y entrenamiento del modelo y una impresión de la importancia de las características, por nombrar algunas. Al contrario que en la mayoría de los algoritmos, en el caso de catboost **no hay que realizar one-hot encoding sobre los datos durante el preprocesamiento** [Catb], ya que esto afecta tanto a la velocidad del entrenamiento como a la calidad resultante. Por el contrario, hay un parámetro *one_hot_max_size* que podemos usar para cambiar el número máximo de valores únicos de características categóricas para aplicar la codificación one-hot. Lo que significa que CatBoost no requiere la conversión del conjunto de datos a ningún formato específico como XGBoost y LightGBM. También cabe decir que **Catboost** soporta la opción de entrenar el modelo utilizando la GPU, en nuestro caso esto no será posible ya que no contamos con un ordenador que tenga una GPU.
De igual manera a nuestros algoritmos anteriores, mostramos la función que hemos elegido para hacer tuning de nuestro algoritmo, al contrario que en los casos anteriores, aquí usamos funciones exclusivas de la librería de catboost:

```
def best_catboost(X_train, y_train):

    grid = {
        'iterations': [800, 1000, 1200],
        'learning_rate': [0.03, 0.06, 0.1],
        'random_strength': [0.03, 0.06, 0.1],
        'depth': [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10],
        'one_hot_max_size': [2,3,4,5,6,7,8],
        'od_type': ['IncToDec', 'Iter']}

    model = CatBoostClassifier(loss_function='MultiClass',
        eval_metric='Accuracy', leaf_estimation_method='Newton')

    randomized_search_result = model.randomized_search(grid,
                                                       X=X_train,
                                                       y=y_train,
                                                       cv=5, n_iter=15,plot=True)
    return randomized_search_result
```

Catboost cuenta con detectores de sobreajuste, [Catc], si se produce un sobreajuste, CatBoost puede detener el entrenamiento antes de lo que dicten los parámetros de entrenamiento. Por ejemplo, se puede detener antes de que se construya el número especificado de árboles. El método de detección de sobreajuste se establece en el parámetro *od_type*. Mantenemos siempre los parámetros de *loss_function* y *eval_metric* a esos valores ya que son los que se aplican a nuestro problema.
Como hemos comentado antes, también podemos ver en una gráfica dinámica como se entrena nuestro modelo en tiempo real según los dos parámetros de evaluación y pérdida, vemos un ejemplo en la figura [27].

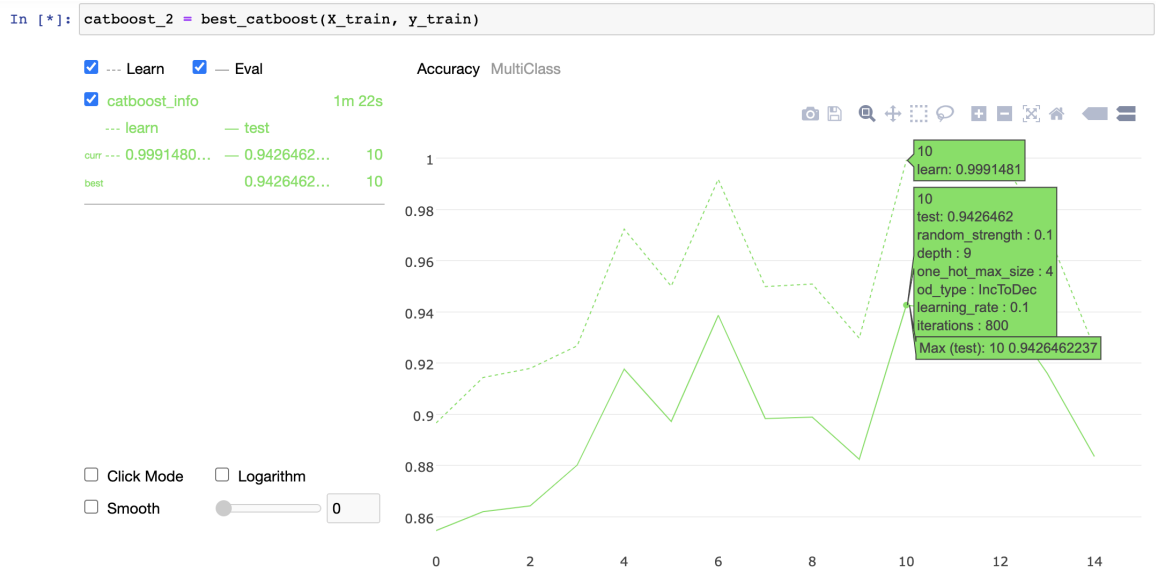


Figure 27: Catboost plot train

Este algoritmo ha sido el que mejores resultados nos ha proporcionado, y el que nos ha dado nuestra mejor puntuación, respecto al tiempo he de decir que tarda bastante si se hace tuning, (y más con la gráfica) aunque más o menos tarda lo mismo que xgboost

Red Neuronal

Dedicamos una sección especial a la propuesta de una red neuronal con Keras [2].
Para la creación de la red neuronal, creamos un modelo secuencia [Kerb], a los que se les ha ido añadiendo varias capas densas [Kera], a partir de estos modelos mostramos en varias gráficas la ganancia y perdida para cada uno de los modelos y nos quedamos con el que más nos convenga.
Resumimos nuestro modelo en lo siguiente:

- Input Layer: Layer de entrada, creamos una capa densa con el número de inputs, esto depende del número de atributos que tengamos en ese momento

[2]La red neuronal puede encontrarse en un notebook aparte llamado neural_network.ipynb

y depende del tipo de preprocesado, por ejemplo si simplemente aplicamos etiquetación a todos nuestros atributos tendremos una dimensión de 11 (11 atributos), mientras que si realizamos one hot encoding este número aumentara al tener más columnas.

- Hidden Layers: Layers de nodos entre el layer de input y de output, son capas densas que añadimos en el número que queramos, como máximo probaremos 5.
- Output Layer: El layer que produce el output, tendra el número de nodos de nuestra variable a predecir, en formato one-hot, en nuestro caso es un valor entre 1-5 que aplicado con one-hot encoding es 5.

Para nuestras capas densas, vamos a usar siempre funciones de activación *relu*, excepto en nuestro último layer de output, que usaremos *softmax*, debido a que funciona bien para problemas multiclase como output [Sof]. Softmax asigna probabilidades decimales a cada clase en un problema de varias clases. Esas probabilidades decimales deben sumar 1.0. Esta restricción adicional ayuda a que el entrenamiento converja más rápidamente de lo que lo haría de otra manera. El código de creación de nuestro modelo es el siguiente:

```
def create_custom_model(input_dim, output_dim, nodes, n=1, name='model'):
    def create_model():
        # Create model
        model = Sequential(name=name)
        for i in range(n):
            model.add(Dense(nodes, input_dim=input_dim, activation='relu'))
        model.add(Dense(output_dim, activation='softmax'))

        # Compile model
        model.compile(loss='categorical_crossentropy',
                      optimizer='adam',
                      metrics=['accuracy'])
        return model
    return create_model
```

Respecto a optimizador hemos escogido *Adam* ya que combina las buenas propiedades de Adadelta y RMSprop y, por lo tanto, tiende a funcionar mejor para la mayoría de los problemas y *loss* categorical_crossentropy ya que es un problema de clasificación multiclase.
Para la creación de nuestro modelo muchos de los valores de parámetros se han elegido empíricamente, por ejemplo para la elección de nodos de cada uno de nuestros hidden layers, haciendo un poco de investigación vemos que no hay una fórmula objetiva para escogerlos. [Nod]. En nuestro caso hemos elegido la fórmula

$$N_h = \frac{N_s}{(\alpha * (N_i + N_o))}$$

donde

- N_i número de neuronas de entrada
- N_o número de neuronas de output
- N_s número de ejemplos del conjunto de entrenamiento
- α un factor arbitrario entre 5 y 10 (en nuestro caso hemos escogido 5)

Haremos un ejemplo de ejecución donde como preprocesado escogemos llenar los valores perdidos numéricos con la media y categóricos con la moda, utilizaremos label encoding para nuestros atributos y para el balanceo utilizamos RandomOverSampling.

```
alpha = 5
nodes = n_samples // (alpha * (n_features + n_classes))
print("Number of nodes:", nodes)
models = [create_custom_model(n_features, n_classes, nodes, i,
    'model_{}'.format(i))
         for i in range(1, 6)]

for create_model in models:
    create_model().summary()
```

```
Number of nodes: 69
_________________________________________________________________
Layer (type)                 Output Shape              Param #
=================================================================
dense_1 (Dense)              (None, 69)                828
_________________________________________________________________
dense_2 (Dense)              (None, 5)                 350
=================================================================
Total params: 1,178
Trainable params: 1,178
Non-trainable params: 0
_________________________________________________________________
_________________________________________________________________
Layer (type)                 Output Shape              Param #
=================================================================
dense_3 (Dense)              (None, 69)                828
_________________________________________________________________
dense_4 (Dense)              (None, 69)                4830
_________________________________________________________________
dense_5 (Dense)              (None, 5)                 350
=================================================================
Total params: 6,008
Trainable params: 6,008
Non-trainable params: 0
_________________________________________________________________
_________________________________________________________________
```

```
Layer (type)                 Output Shape              Param #
=================================================================
dense_6 (Dense)              (None, 69)                828
_________________________________________________________________
dense_7 (Dense)              (None, 69)                4830
_________________________________________________________________
dense_8 (Dense)              (None, 69)                4830
_________________________________________________________________
dense_9 (Dense)              (None, 5)                 350
=================================================================
Total params: 10,838
Trainable params: 10,838
Non-trainable params: 0
_________________________________________________________________
_________________________________________________________________
Layer (type)                 Output Shape              Param #
=================================================================
dense_10 (Dense)             (None, 69)                828
_________________________________________________________________
dense_11 (Dense)             (None, 69)                4830
_________________________________________________________________
dense_12 (Dense)             (None, 69)                4830
_________________________________________________________________
dense_13 (Dense)             (None, 69)                4830
_________________________________________________________________
dense_14 (Dense)             (None, 5)                 350
=================================================================
Total params: 15,668
Trainable params: 15,668
Non-trainable params: 0
_________________________________________________________________
_________________________________________________________________
Layer (type)                 Output Shape              Param #
=================================================================
dense_15 (Dense)             (None, 69)                828
_________________________________________________________________
dense_16 (Dense)             (None, 69)                4830
_________________________________________________________________
dense_17 (Dense)             (None, 69)                4830
_________________________________________________________________
dense_18 (Dense)             (None, 69)                4830
_________________________________________________________________
dense_19 (Dense)             (None, 69)                4830
_________________________________________________________________
dense_20 (Dense)             (None, 5)                 350
=================================================================
Total params: 20,498
Trainable params: 20,498
```

```
Non-trainable params: 0
```

Para entrenar los modelos debemos de establecer algunos parámetros como el *batch_size*, una cantidad de muestras procesadas antes de que se actualice el modelo, y los *epochs*, número de pases completos a través del conjunto de datos de entrenamiento.
El *batch_size* debe ser mayor o igual a uno y menor o igual al número de muestras en el conjunto de datos de entrenamiento.
El número de *epochs* se puede establecer en un valor entero entre uno e infinito.
Para el *batch_size* no hará una gran diferencia para nuestro problema a menos que estemos entrenando cientos de miles o millones de observaciones.
En general: los *batch_size* más grandes dan como resultado un progreso más rápido en el entrenamiento, pero no siempre convergen tan rápido. Los *batch_size* más pequeños se entrenan más lentamente, pero pueden converger más rápido. Definitivamente depende del problema, en nuestro caso escogeremos **5**.
En general, los modelos mejoran con más *epochs* de entrenamiento, hasta cierto punto. Comenzarán a estabilizarse en precisión a medida que convergen. Intentaremos algo con **50**. Llamaremos a los modelos mostraros anteriormente del 1 al 5 correspondiendo al número de capas densas que contenga, vemos el resultado de nuesta ejecución en la figura [28] .

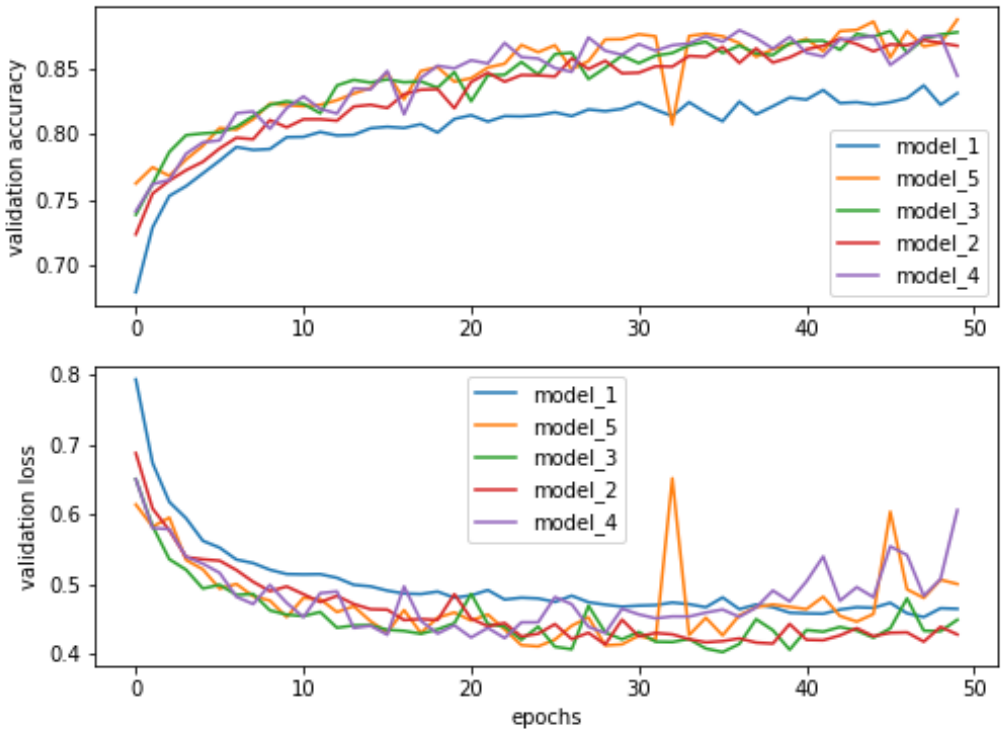


Figure 28: Convergencia modelos red neuronal

Vemos que con ese número de *epochs* nuestros modelos convergen sin problema,

nuestro Test loss ronda 0.4773907017086763 y test accuracy 0.8876628076115841, veamos ahora ahora el AUC de nuestros modelos en al figura [29], escogemos el segundo modelo ya que parece más estable, y hacemos la validación cruzada con 5 particiones de el mismo donde obtenemos un resultado de **0.857 (+/- 0.012)**.

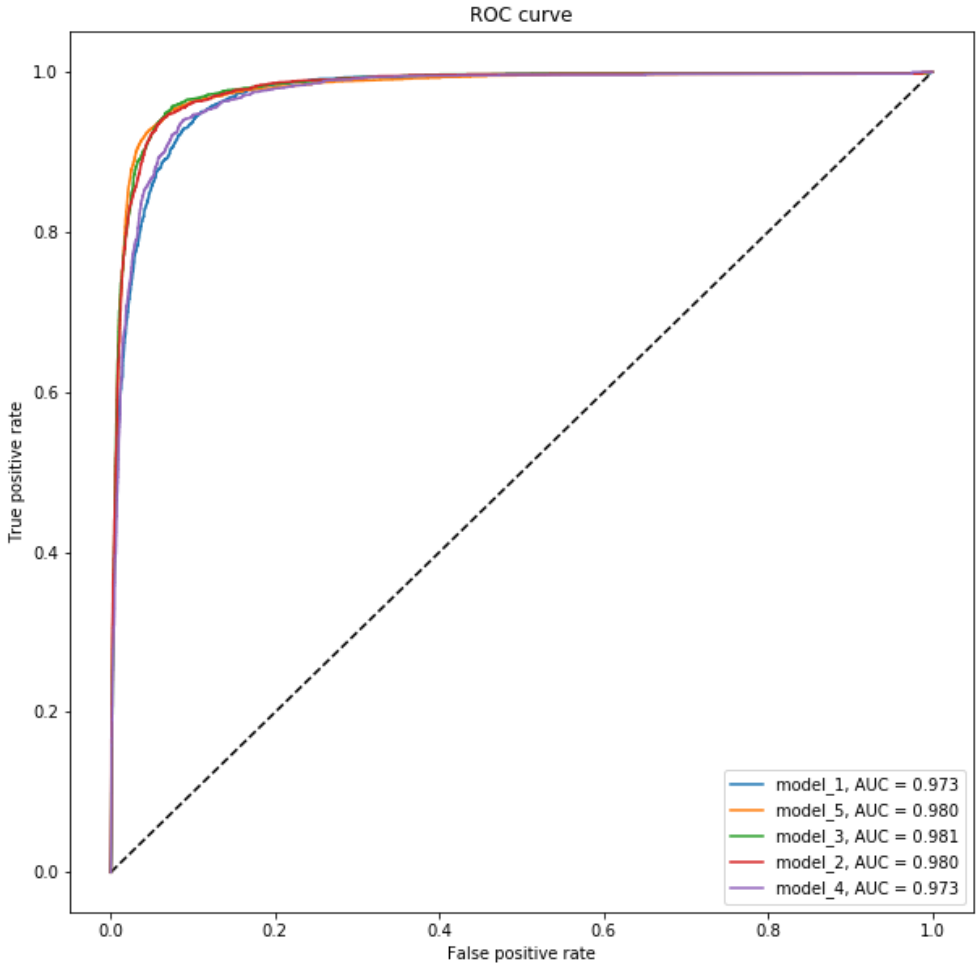


Figure 29: AUC ROC red neuronal

Con esto concluye esta sección respecto a la red neuronal, comprobandola contra nuestro conjunto de test, conseguimos una score de **0.75**, comparando lo que tarda cada ejecución de la red neuronal, tanto en entrenar, como en encontrar valores óptimos llegamos a la conclusión de que no es rentable para este problema (o tal vez nuestro conjunto de valores elegidos no ha sido el adecuado). Tambien probamos a utilizar BatchNormalization y con otros datos pero no conseguimos mejores resultados y como hemos comentado, el tiempo de ejecución es muy elevado comparado con otros algoritmos (puede llegar a tardar **horas**), un simple Random Forest Clas-

sifier proporciona mejores resultados tardando muchísimo menos.

Tabla

Adjuntamos una foto de nuestras mejores 20 subidas en la figura [30].

Submission and Description	Private Score	Public Score	Use for Final Score
mis_resultados_catboost_1.csv 17 hours ago by David Martin Vela add submission details	0.81190	0.81190	☐
mis_resultados_catboost_2.csv 4 days ago by David Martin Vela add submission details	0.80586	0.80586	☐
mis_resultados_catboost_2.csv 2 days ago by David Martin Vela add submission details	0.79723	0.79723	☐
mis_resultados_xgboost_1.csv a day ago by David Martin Vela add submission details	0.79292	0.79292	☐
mis_resultados_xgboost_1.csv 17 hours ago by David Martin Vela add submission details	0.79292	0.79292	☐
mis_resultados_xgboost_2.csv 4 days ago by David Martin Vela add submission details	0.79119	0.79119	☐
mis_resultados_xgboost_2.csv 3 days ago by David Martin Vela add submission details	0.79033	0.79033	☐
mis_resultados_xgboost_1.csv 2 days ago by David Martin Vela add submission details	0.78861	0.78861	☐
mis_resultados_1.csv 5 days ago by David Martin Vela add submission details	0.78774	0.78774	☐
mis_resultados_catboost_1.csv 4 days ago by David Martin Vela add submission details	0.78429	0.78429	☐
mis_resultados_xgboost_2.csv a day ago by David Martin Vela add submission details	0.78343	0.78343	☐
mis_resultados_catboost_1.csv 2 days ago by David Martin Vela add submission details	0.77911	0.77911	☐
mis_resultados_1.csv 5 days ago by David Martin Vela add submission details	0.76531	0.76531	☐
mis_resultados_1.csv 6 days ago by David Martin Vela add submission details	0.76445	0.76445	☐
mis_resultados_3.csv 13 days ago by David Martin Vela add submission details	0.75409	0.75409	☐
mis_resultados_2.csv 12 days ago by David Martin Vela add submission details	0.74460	0.74460	☐
mis_resultados_svc_1.csv a day ago by David Martin Vela add submission details	0.74115	0.74115	☐
mis_resultados_1.csv 12 days ago by David Martin Vela add submission details	0.73943	0.73943	☐
mis_resultados_1.csv 11 days ago by David Martin Vela add submission details	0.73252	0.73252	☐
mis_resultados_nn.csv 3 days ago by David Martin Vela add submission details	0.72648	0.72648	☐

Figure 30: Subidas a la plataforma Kaggle

Todo lo relevante para recrear las subidas se encuentran en el notebook **vanilla.ipynb**, donde tenemos principalmente dos versiones, una primera versión **vanilla** (una versión básica donde tratamos los valores perdidos, etiquetamos y pasamos directamente a los modelos) y una segunda versión donde realizamos algo más de preprocesados, la diferencia entre ambas es el tipo de etiquetado (en el primero únicamente usamos label encoding mientras que en el segundo hacemos one hot de otros atributos) y que en la segunda versión podemos tratar con los outliers y skewed data, en ambas versiones tenemos disposibles los preprocesamientos de valores perdidos, podemos ejecutarlos selectivamente en nuestro código dependiendo de la opción que queramos, igual con el tipo de balanceo (SMOTE o RandomOverSampling). La mayoria de métodos relacionados con algoritmo ejecutan un conjunto de todo ellos, y luego se profundizan sobre los que hemos comentado en la sección de algoritmos realizando tuning. De estos que se profundizan se genera un archivo con el nombre de **mis_resultados_{algoritmo-utilizado}_{versión}**

Preprocesamiento	Fecha Subida	Posición	Algoritmo	Score Train	Score Test
Valores perdidos por media y moda	-	-	Catboost		
Etiquetado con LabelEncoding					
Balanceo con RandomOverSampling y Skewed y outliers					

Table 1: Tabla de puntuaciones

Referencias

[Cata] *Catboost*. URL: https://catboost.ai/.

[Catb] *Catboost One Hot*. URL: https://catboost.ai/docs/features/categorical-features.html.

[Catc] *Catboost Overfit*. URL: https://catboost.ai/docs/concepts/overfitting-detector.html.

[Get] *Get Dummies*. URL: https://pandas.pydata.org/pandas-docs/stable/reference/api/pandas.get_dummies.html.

[Kera] *Keras dense*. URL: https://keras.io/api/layers/core_layers/dense/.

[Kerb] *Keras Sequential*. URL: https://keras.io/guides/sequential_model/.

[Nod] *Nodes hidden layers*. URL: https://stats.stackexchange.com/questions/181/how-to-choose-the-number-of-hidden-layers-and-nodes-in-a-feedforward-neural-netw.

[Rfc] *Random Forest Classifier*. URL: https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.ensemble.RandomForestClassifier.html.

[Ran] *Randomized Grid Search*. URL: https://scikit-learn.org/stable/auto_examples/model_selection/plot_randomized_search.html.

[Ske] *Skewed data*. URL: https://pandas.pydata.org/pandas-docs/stable/reference/api/pandas.DataFrame.skew.html.

[Sof] *Softmax*. URL: https://developers.google.com/machine-learning/crash-course/multi-class-neural-networks/softmax.

[Xgba] *XGBoost*. URL: https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.ensemble.RandomForestClassifier.html.

[Xgbb] *XGBoost tuning*. URL: https://xgboost.readthedocs.io/en/latest/parameter.html.