

AA: Práctica 3

David Cabezas Berrido

Índice

1. Clasificación de dígitos manuscritos	2
1.1. Problema	2
1.2. Conjuntos de training y test	3
1.3. Clases de funciones a usar y Preprocesamiento	3
1.4. Métricas	4
1.5. Técnica de ajuste del modelo	5
1.6. Regularización	5
1.7. Modelos	5
1.8. Estimación de hiperparámetros y selección del modelo	6
1.9. Estimación de E_{out} por validación cruzada y comparación con E_{test}	7
1.10. Conclusiones	8
2. Predicción de crímenes violentos per cápita	9
2.1. Problema	9
2.2. Conjuntos de training y test	10
2.3. Clases de funciones a usar y Preprocesamiento	10
2.4. Métrica	11
2.5. Técnica de ajuste del modelo	11
2.6. Regularización	11
2.7. Modelos	12
2.8. Estimación de hiperparámetros y selección del modelo	12
2.9. Estimación de E_{out} por validación cruzada y comparación con E_{test}	12
2.10. Conclusiones	13

Nota:

Intento responder a cada cuestión en una subsección, pero esto a veces es complicado y es posible que la respuesta a algunas cuestiones se encuentre parcialmente en una sección diferente.

Durante la resolución de los problemas, hay momentos en los que he tenido que volver atrás y rectificar decisiones. Intento plasmar los motivos que llevan a cada decisión, pero no he reflejado todo en el código, sólo la versión definitiva.

Sí que hay secciones de código (selección de parámetros, por ejemplo) que he considerado interesante mantenerlas aunque no se ejecuten. Se puede variar esto en las constantes del principio de los scripts, pero no es nada recomendable así que en la versión definitiva intento mantener el equilibrio entre representar una gran proporción del trabajo que he realizado y que la ejecución sea rápida y cómoda para ir siguiéndola.

1. Clasificación de dígitos manuscritos

1.1. Problema

Se nos pide clasificar imágenes de dígitos escritos a mano para reconocer el dígito que representan (del 0 al 9). Disponemos de ejemplos clasificados para aprender, por lo que podemos enfocarlo como un problema de aprendizaje supervisado. Concretamente se trata de un problema de clasificación en el que tenemos 10 clases, los dígitos del 0 al 9.

En el archivo `opdigits.names` encontramos información sobre los datos que nos proporcionan. Constan de un conjunto con 3823 instancias para training y 1791 para test, cada instancia tiene 64 atributos que representan el número de bits coloreados (entre 0 y 16) en cada una de las 64 casillas que forman una cuadrícula de 8×8 .

Podemos visualizar las instancias como matrices en lugar de vectores para comprender mejor el formato de los datos.

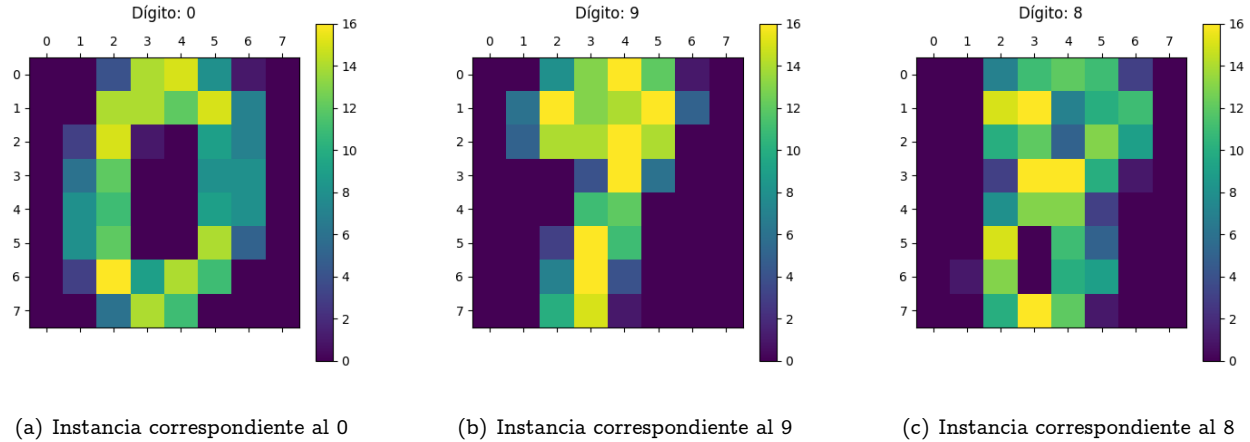


Figura 1: Algunas instancias de los datos

La población X constituye el conjunto de vectores de 64 enteros entre 0 y 16 que representan la cuadrícula resultante de aplicar la transformación antes comentada; el conjunto de clases Y constituye los posibles dígitos: 0,1,2,3,4,5,6,7,8,9; y la función objetivo f es la que asigna a cada vector de X la clase del dígito que representa.

Cabe preguntarnos si con los datos que tenemos podemos entrenar un buen modelo, pues se ha perdido parte de la información al agrupar los bits por cuadrículas. Para ello, podemos usar la función PCA (Principal Component Analysis) para proyectar las dos características que más me ayudan a distinguir los datos. Luego partimos de esa proyección y aplicamos algoritmo TSNE (T-distributed Stochastic Neighbor Embedding) para proyectar los datos en dos dimensiones de forma que para cada dato sus vecinos más cercanos queden proyectados cerca. Ambos algoritmos se encuentran programados en *sklearn*.

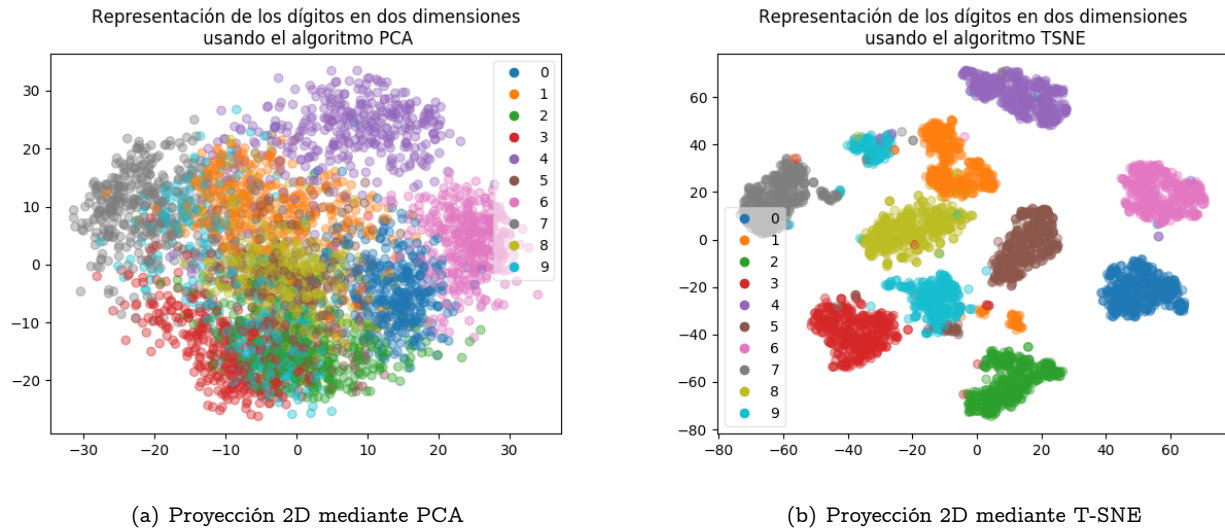


Figura 2: Visualización en 2D de los datos

Sólo con las características principales ya podemos discernir ligeramente entre los datos de diferentes clases. Y si tenemos en cuenta todas ellas, los dígitos correspondientes a la misma clase se encuentran bastante agrupados exceptuando algunas instancias sueltas.

1.2. Conjuntos de training y test

Los datos que nos proporcionan vienen ya separados en conjuntos de training y test, y es importante que mantengamos esta división.

El motivo es que los datos de training corresponden a dígitos hechos a mano por 30 personas diferentes y los datos de test a los de otras 13 personas.

Siempre es importante que en training y en test se utilicen conjuntos disjuntos de datos para que E_{test} sea un estimador de E_{out} lo más representativo posible. Pero además en este problema es importante que los dígitos usados en test estén hechos por personas diferentes a las que generaron los dígitos de train, ya que es presumible que el modelo reconozca mejor los dígitos trazados por las mismas personas que trazaron los dígitos de entrenamiento.

Este hecho provoca que la estimación de E_{out} realizada con Cross-Validation sea demasiado optimista, por ser los datos de validación correspondientes a las mismas personas que los de entrenamiento.

No separamos un conjunto de validación, ya que para decidir cuál es el mejor modelo usaremos validación cruzada.

1.3. Clases de funciones a usar y Preprocesamiento

La clase de funciones que usaremos son los polinomios de grado 2, ya que permiten obtener un modelo mucho más complejo y potente que utilizar simplemente características lineales. Para añadir características polinomiales usamos PolynomialFeatures.

El motivo por el que presento esta sección junto con procesamiento es que la introducción de características polinomiales eleva el número de variables de forma muy considerable (64^m atributos correspondientes a los monomios de grado m para cada m menor o igual que el grado), esto es computacionalmente costoso y provoca que acabemos con demasiadas características. De hecho, introducir características polinómicas de grado mayor que 2 es ya demasiado costoso, por lo que no usamos grados más altos. Por este motivo he decidido añadir la introducción de características polinomiales al preprocesamiento.

Para el preprocesamiento, creamos un Pipeline que primero elimina con Variance Threshold las características con varianza menor que un umbral, en este caso 0.005. Estas características apenas ayudan a distinguir las instancias

de la muestra. En segundo lugar añade características de grado 2, ahora el número de características es igual al cuadrado de las que quedaban tras la primera selección en lugar de 64^2 . A continuación, realiza una estandarización con `StandardScaler` y escala las variables para dejar todas con media 0 y varianza 1. Por último utiliza otra vez PCA, pero esta vez en lugar de proyectar un número fijo de variables, selecciona el menor número posible que expliquen cierto porcentaje de la variabilidad de la muestra, en este caso un 97.5%.

Ajustamos el Pipeline con los datos de train y aplicamos las transformaciones tanto a los de train como a los de test. Partíamos de 64 características y nos quedamos con 312. Teniendo en cuenta que $64^2 = 4096$, sacrificando un pequeño porcentaje de la información nos quedamos con un conjunto de variables bastante manejable.

Tanto el objeto Pipeline como los que realizan cada paso del preprocesado se encuentran en *sklearn*.

Para apreciar el resultado del preprocesado podemos visualizar la matriz de coeficientes de correlación de Pearson, que indica la medida en que unas características determinan linealmente a otras. Si una característica está determinada por el resto, se podría eliminar sin perder información. Por tanto interesa que esta matriz sea diagonal, que cada variable se determine (linealmente) únicamente a ella misma.

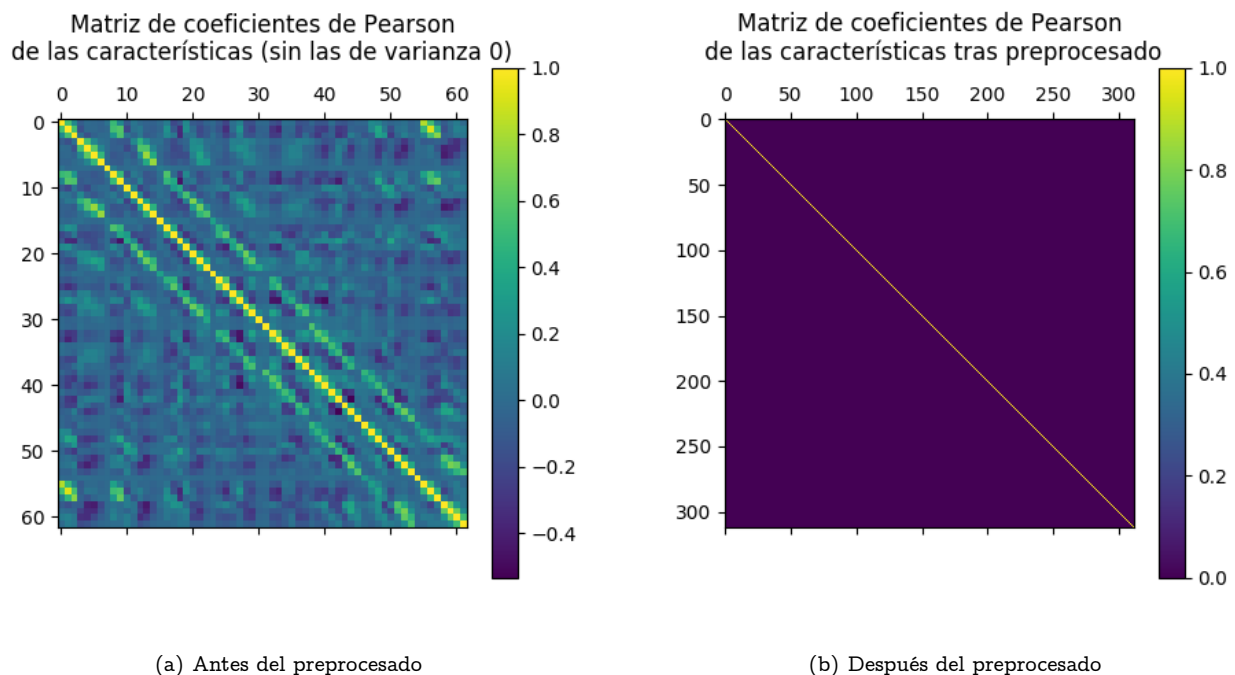


Figura 3: Matrices de coeficientes de correlación de Pearson

Como podemos ver, fuera de la diagonal todos los coeficientes son practicamente 0 como queríamos.

1.4. Métricas

Mirando el fichero `opdigits.names` percibimos que el número de ejemplos de cada clase está balanceado tanto en training (entre 376 y 389) como en test (entre 174 y 183). En esta situación, la precisión (*accuacy*, la proporción de elementos bien clasificados) es un métrica adecuada de la bondad del modelo, además de fácil de interpretar.

Ésta será la métrica que estimaremos con validación cruzada y compararemos con la que consiga en el conjunto de test.

También podemos visualizar la matriz de confusión (figuras 4 y 6). Es una matriz cuadrada de orden el número de clases con números naturales como entradas, en la que el valor de la posición (i, j) representa el número de ejemplos de la clase i -ésima que han sido clasificados por el modelo como elementos de la clase j -ésima. Claramente interesa que la matriz de confusión sea diagonal, ya que las entradas de la forma (i, i) representan éxitos a la hora

de clasificar y las entradas (i, j) con $j \neq i$ representan errores. De hecho, la accuracy se obtiene dividiendo la traza de la matriz de confusión (el número de ejemplos bien clasificados) entre el número total de ejemplos.

1.5. Técnica de ajuste del modelo

Aunque la métrica usada es la precisión, el modelo que usamos es el de Regresión Logística Multietiqueta para estimar la probabilidad de pertenencia a cada clase (la regla de clasificación será SoftMax), minimizamos la Pérdida Logarítmica.

$$E(\mathbf{w}) = E(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K) = -\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K y_{nk} \ln \sigma(\mathbf{w}_k^T \mathbf{x}_n)$$

Donde cada \mathbf{w}_k es la fila k -ésima de una matriz de pesos \mathbf{w} de dimensión $K \times d$, con K el número de clases (10) y d el número de características (312). Y las etiquetas y_n están codificadas como vectores one-hot ($y_{nk} = 1$ si y_n corresponde a la clase k y 0 en caso contrario).

Para minimizar esta función de pérdida utilizamos el algoritmo de Gradiente Descendente Estocástico, en otras ocasiones ya hemos comprobado su eficiencia a la hora de minimizar este tipo de funciones. De hecho el motivo de que usemos esta función de pérdida y no la proporción de fallos (1-accuracy) es la comodidad que tiene esta función para minimizarla con esta técnica. Puedo calcular fácilmente el gradiente respecto a cada una de las filas de la matriz \mathbf{w} .

$$\nabla_{\mathbf{w}_j} E(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (\sigma(\mathbf{w}_j^T \mathbf{x}_n) - y_{nj}) \mathbf{x}_n$$

Necesito elegir un learning rate η y un tamaño de minibatch adecuados, estos son hiperparámetros del modelo que discutiremos más adelante. El vector de pesos inicial es otro hiperparámetro que fijaremos como el vector nulo por simplicidad.

1.6. Regularización

Las funciones cuadráticas que hemos introducido añaden un número elevado de características y bastante complejidad al modelo, lo que lo hace propenso al sobreajuste. Para evitar esto, debemos introducir algún tipo de regularización.

En el preprocesado hemos eliminado bastantes atributos que no aportaban apenas información sobre la variabilidad de la muestra, luego cabe esperar que la mayoría de atributos que hemos seleccionado sean relevantes. Es por ello que utilizaremos la Regularización Ridge, reduciendo el cuadrado de la norma euclídea o norma de Frobenius de la matriz de pesos \mathbf{w} . La función de pérdida queda ahora

$$E_{aug}(\mathbf{w}) = E(\mathbf{w}) + \lambda \|\mathbf{w}\|_2^2$$

donde $\|\mathbf{w}\|_2^2 = \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^d \mathbf{w}_{kj}^2$ y λ es un hiperparámetro del modelo sobre el que hablaremos más adelante.

Esta fórmula es fácil de derivar, obteniendo

$$\nabla_{\mathbf{w}_j} E_{aug}(\mathbf{w}) = \nabla_{\mathbf{w}_j} E(\mathbf{w}) + \lambda 2\mathbf{w}_j$$

1.7. Modelos

Como ya hemos comentado, usaremos un modelo de Regresión Logística multiclase, ya que es el más adecuado de los modelos lineales que conocemos para resolver un problema de clasificación no binario.

El modelo nos permite estimar para una instancia la probabilidad de pertenencia a cada clase $j = 1, \dots, K$ mediante la fórmula:

$$P(y = j | \mathbf{x}) = \frac{e^{\mathbf{w}_j^T \mathbf{x}}}{\sum_{k=1}^K e^{\mathbf{w}_k^T \mathbf{x}}}$$

A la hora de predecir utilizaremos la regla SoftMax, que para una instancia \mathbf{x} predice la clase con mayor probabilidad.

Para aprovechar varias funcionalidades de *sklearn*, implementamos nuestro propio objeto estimador (heredando de la clase BaseEstimator) que depende de los hiperparámetros que hemos comentado anteriormente. Debemos

implementar como mínimo los métodos `fit` y `predict`, `fit` recibe los datos de entrenamiento y ajusta la matriz de pesos w minimizando la Pérdida Logarítmica aumentada con SGD; `predict` recibe un conjunto de ejemplos y aplica la regla SoftMax para determinar la clase a la que pertenece cada uno.

Para evitar que el entrenamiento sea computacionalmente muy costoso, he limitado el número de evaluaciones totales a 50000 para el SDG, a la hora de aprender los datos se agrupan según el tamaño de minibatch. Esto quiere decir que si el tamaño de minibatch es el doble, se realizarán la mitad de iteraciones.

Esto no significa que no tengamos que discutir sobre el mejor modelo a usar, ya que el modelo depende de varios hiperparámetros que determinan su comportamiento y debemos estimar valores adecuados para ellos.

1.8. Estimación de hiperparámetros y selección del modelo

Para decidir el mejor modelo debemos estimar los hiperparámetros, para ello utilizamos `GridSearchCV`, que realiza una búsqueda exhaustiva en rejilla probando todas las combinaciones de hiperparámetros en un rango que determinamos. Para decidir qué combinación de parámetros es mejor implementamos el método `score` en nuestro estimador, que calcula el `accuracy` sobre un conjunto de datos. El algoritmo evalúa cada combinación usando Cross Validation con 5 subdivisiones, esto es tremendamente costoso (incluso paralelizando) por lo que lo omitimos en la versión final del código (se controla con la variable booleana `PARAMSELECT`).

Tras algunas horas de búsqueda, la combinación que mejor score ha presentado entre las que he probado es $\lambda = 0.007391304347826088$, $\eta = 0.001$, tamaño de minibatch = 1. Parece que lo más efectivo es hacer un gran número de iteraciones con un sólo dato y una tasa de aprendizaje baja. Con estos hiperparámetros, la precisión media de las 5 validaciones ha sido 0.9675642473394245, más que aceptable.

Por tanto, fijamos estos hiperparámetros y seleccionamos éste como el mejor modelo. Primero medimos su efectividad sobre el conjunto de training.

Pérdida logarítmica (aumentada) en la muestra: 0.04396861238743053

Precisión sobre train: 0.9895370128171593

Matriz de confusión en la prueba sobre el conjunto de entrenamiento:

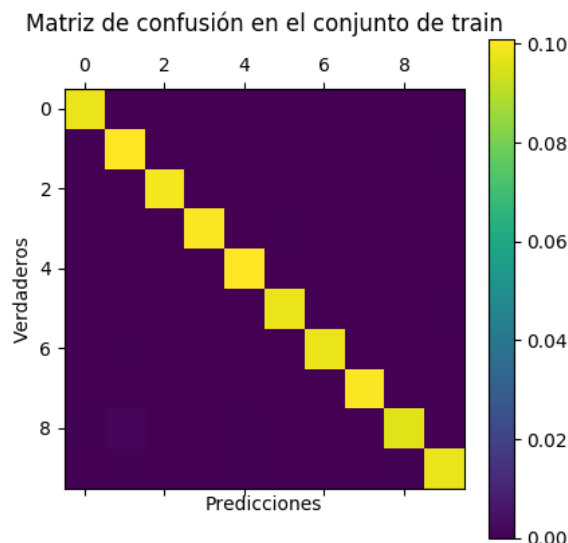


Figura 4: Matriz de confusión en la prueba con los datos de entrenamiento

Tiene una precisión muy cercana a 1, más que su score en la selección de modelos, ya que estos datos son los que he usado para entrenar el modelo. La matriz de confusión es prácticamente diagonal, falla sobre todo en algunas instancias de los dígitos 8 y 9 que ha clasificado como unos.

1.9. Estimación de E_{out} por validación cruzada y comparación con E_{test}

En lugar de error he considerado la precisión, que es una medida de bondad. Usando la función `cross_val_score` de *sklearn* obtenemos una estimación por validación cruzada de la precisión del modelo. Realiza 10 subdivisiones del conjunto de entrenamiento, por lo que necesita entrenar y validar 10 veces. Este proceso es algo lento, pero la función permite paralelizarlo. La precisión media que he obtenido en las 10 validaciones es $E_{cv} = 0.9764602955449538$ (este valor varía entre ejecuciones).

Primero sacamos tres muestras aleatorias del conjunto de test, en las tres el modelo ha dado con la clase correcta.

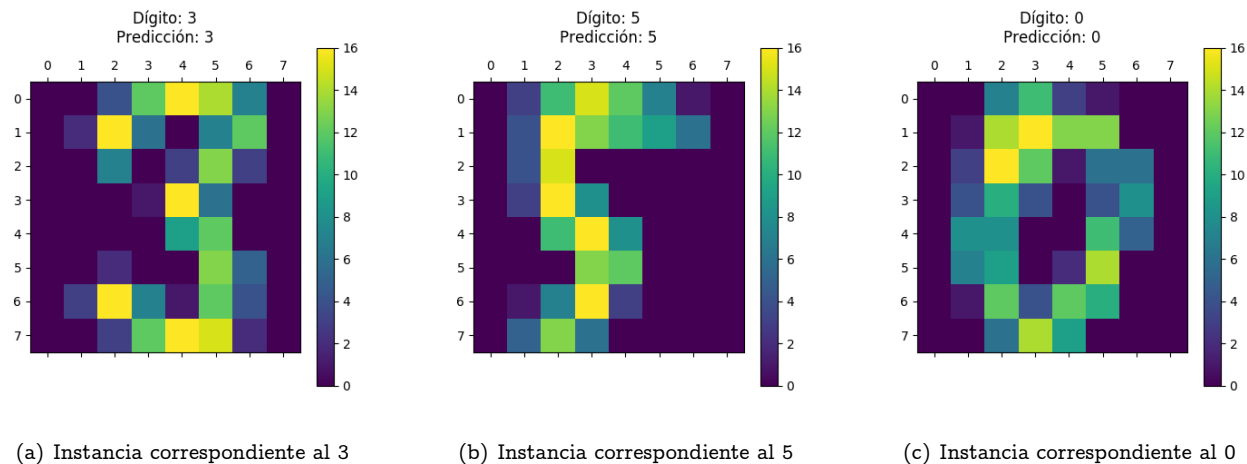


Figura 5: Algunas instancias de los datos

Evaluamos ya el modelo sobre el conjunto de test.

Pérdida logarítmica (aumentada) en test: 0.08595584205059877

Precisión sobre test: 0.9671675013912076

Matriz de confusión en la prueba sobre el conjunto de test:

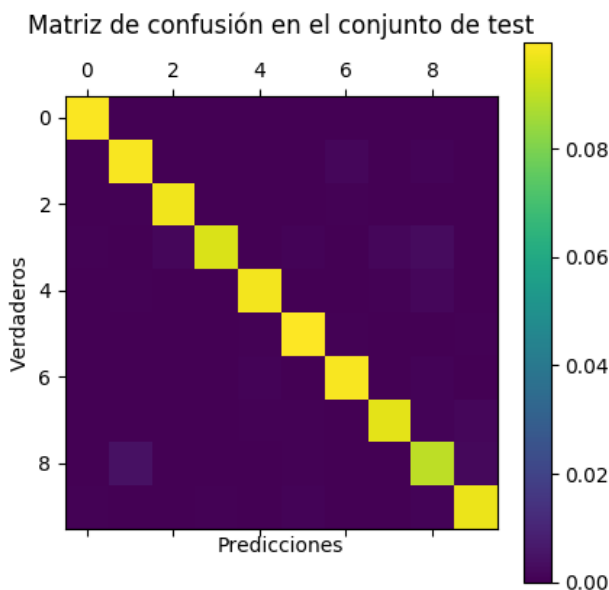


Figura 6: Matriz de confusión en la prueba con los datos de test

La precisión obtenida sobre el conjunto de test es ligeramente menor que la estimación realizada por validación cruzada. Esto se debe a la razón que comenté en la sección 1.2 de que la validación y el entrenamiento se realizan sobre datos correspondientes a dígitos trazados por las mismas 30 personas y los dígitos tienden a ser más parecidos entre ellos que los de test, que están trazados por otras 13 personas diferentes.

No obstante, la precisión obtenida es aceptable. Tampoco podemos optar a mucha más precisión puesto que hemos renunciado a algo más del 2.5 % de información sobre la variabilidad de la muestra para simplificar los datos durante el preprocesamiento.

El modelo falla sobre todo al clasificar algunos ochos como unos, lo que también ocurría en la prueba con los datos de entrenamiento.

1.10. Conclusiones

Para comparar utilizamos el clasificador por KNN de *sklearn*, que predice la clase de un elemento según la clase que más abunde entre sus 5 vecinos más cercanos del conjunto de entrenamiento.

En el fichero `opdigits.names` asegura que este algoritmo consigue una precisión mayor que la de nuestro modelo, lo comprobaremos.

Sobre los datos procesados de test el algoritmo ha obtenido una precisión de 0.9577072899276572, algo más baja que la de mi modelo. Esto nos indica que sobre los datos procesados nuestro modelo es más que decente.

Sin embargo, sobre los datos de test sin procesar el algoritmo KNN ha obtenido una precisión de 0.9788536449638287 (corresponde a lo indicado en `opdigits.names`), más alta que nuestro clasificador por regresión logística. Esto podría significar que hemos cometido un error al preprocesar los datos, pero tras probar nuestro modelo de regresión logística con los datos sin preprocesar concluimos que el preprocesado supone una importante mejora (accuracy Cross Validation: 0.9495174497286509, accuracy test: 0.9454646633277685), luego el preprocesar los datos ha sido una decisión acertada de cara a la eficacia del modelo lineal usado.

Concluimos que el modelo elegido no es el mejor, pero tiene buena calidad. Sí que ha proporcionado la mejor precisión entre las distintas posibilidades exploradas (variando los hiperparámetros).

En un caso real de que nos hubiesen encargado un modelo que resolviese este problema hubiesemos proporcionado este modelo con la precisión obtenida por validación cruzada. Tendríamos que advertir de que esa precisión se ha estimado usando un conjunto de validación disjunto del de entrenamiento, pero con datos correspondientes a números trazados con las mismas personas, y que esto podría provocar que la precisión del modelo sea menor en datos correspondientes a dígitos trazados por personas distintas. De no haber hecho esta advertencia y limitarnos a devolver el modelo y la estimación de la precisión por validación cruzada, habríamos cometido el error de ofrecer una estimación de la bondad del modelo demasiado optimista.

Para poder probar la bondad real del modelo hemos necesitado el conjunto de test, que es probable que en un problema real no tuviésemos. Se podría paliar este problema si en los datos proporcionados nos proporcionasen los datos separados por la persona que trazó el dígito, pero no era el caso.

2. Predicción de crímenes violentos per cápita

2.1. Problema

Queremos predecir el número de crímenes violentos por cada 100.000 habitantes en distantes comunidades. Disponemos de un conjunto de datos que incluye variables como porcentajes de población en un rango de edad, con un determinado nivel de estudios, perteneciente a cierta raza, que ha emigrado... También sobre las rentas, el desempleo, el número de policías por cada x habitantes...

Claramente podemos plantear este problema como un problema de Regresión Lineal y entrenar un modelo para predecir la variable objetivo con datos de los que disponemos.

Todas las variables (numéricas) han sido normalizadas entre 0 y 1, manteniendo su distribución y simetría/asimetría. La normalización colapsa los outliers a 0 o 1 (según si están muy por debajo o por encima del resto), por lo que no tenemos que preocuparnos por la existencia de outliers. Sí debemos tener en cuenta que esta normalización preserva los ratios entre valores del mismo atributo, pero no entre atributos, no tiene sentido comparar dos atributos diferentes.

Podemos encontrar toda la información sobre los datos en el fichero `communities.names`, esto lo tendremos en cuenta para gestionar el problema de la existencia de valores perdidos. En total hay 127 variables + la variable objetivo, de estas 127 sólo hay 122 predictivas, así que desechamos el resto.

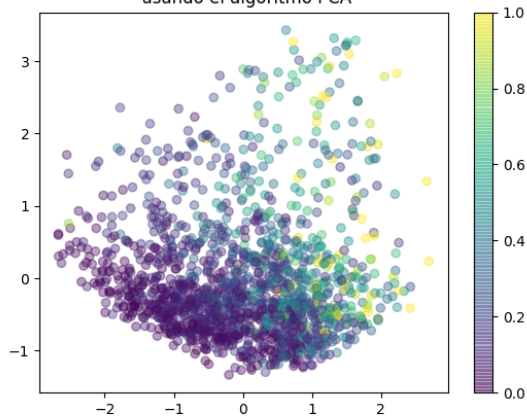
Entre las variables restantes, 22 de ellas presentan un gran porcentaje (84 %) de valores perdidos, tendremos que decidir qué hacemos con ellas.

La población X constituye el conjunto de valores normalizados entre 0 y 1 de las variables correspondientes a una comunidad; Y es el conjunto de posibles números de crímenes violentos normalizados (esto no quiere decir que estén entre 0 y 1, como explicamos en el siguiente párrafo); y la función objetivo f es la que asigna a cada vector de X el número de crímenes violentos en la comunidad que representa normalizado entre 0 y 1.

Con esta normalización sobre la variable objetivo debemos tener cuidado, ya que ante la aparición de un nuevo dato para el cual el modelo predice un índice de criminalidad superior al mayor de entre las comunidades de los datos que tenemos (predeciría $y > 1$) puede no ser adecuado interpretar el valor como 1. Ya que esto desecha información sobre comunidades con mayor tasa de crímenes violentos que las de los datos. Es por ello que permitiremos que nuestro modelo prediga valores de y superiores a 1.

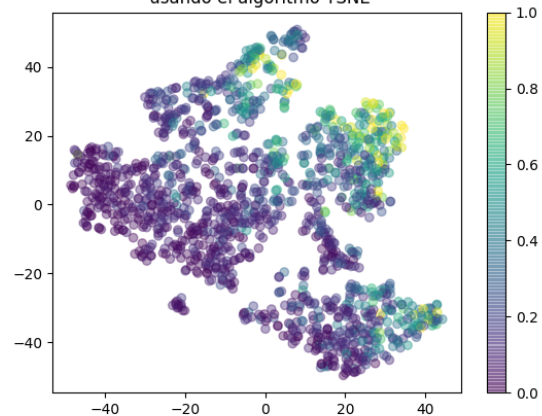
Tras gestionar los valores perdidos en el preprocesamiento, podemos visualizar los datos. He usado la misma técnica que antes: PCA + TSNE

Representación de los datos en 2D y su índice de criminalidad usando el algoritmo PCA



(a) Proyección 2D mediante PCA

Representación de los datos en 2D y su índice de criminalidad usando el algoritmo TSNE



(b) Proyección 2D mediante T-SNE

Figura 7: Visualización en 2D de los datos

Se aprecia que los datos correspondientes a comunidades con diferente índice de criminalidad no están demasiado entremezclados. Al ser la variable a predecir de carácter continuo, no podíamos esperar que los datos estuviesen tan separados como en el problema anterior. Pero tenemos una transición gradual entre los datos correspondientes a instancias con distinto índice de criminalidad (variable objetivo).

2.2. Conjuntos de training y test

A diferencia del otro problema, en este caso no se nos proporciona un conjunto de test separado, por lo que debemos extraerlo del conjunto de train. Lo hacemos con la función `train_test_split` de *sklearn*, y elegimos 75 % de datos para train y 25 % para test de forma aleatoria.

2.3. Clases de funciones a usar y Preprocesamiento

Por la misma razón que antes usamos polinomios de grado 2 y los introducimos en medio del preprocesamiento.

Además de eliminar las variables no predictivas, realizamos las siguientes tareas:

Primero debemos decidir qué hacer con los valores perdidos, puesto que no son demasiadas variables las que presentan valores perdidos y en ellas la proporción de valores perdidos es relativamente alta (84 %), mi primera decisión fue eliminar dichas variables, quedandome con 100. Para ello he usado la función `dropna` de pandas, para desechar los atributos con más del 50 % de valores perdidos. El Error Cuadrático Medio obtenido con validación cruzada bajo esta decisión ha sido $E_{cv} = 0.02356922860102622$.

En el caso de no eliminarlas (o por si queda alguna con el 50 % o menos de valores perdidos), tenemos que estimarlas de alguna forma. Para ello usaremos `KNNImputer` de *sklearn*, que estima cada valor perdido promediando los de los 5 vecinos (que tienen el valor) más cercanos en la distancia euclídea (atendiendo a la características sin valores perdidos), da más peso a los vecinos más cercanos. Aplicamos esto tanto en train (fit y transform) como en test (sólo transform).

Si en lugar de eliminar las características con demasiados (>50 %) datos perdidos, las interpolamos con `KNNImputer`, el ECM que obtenemos en validación es $E_{cv} = 0.027620319480671656$, por lo que mantenemos la decisión de eliminarlas.

A continuación aplicamos (también en un Pipeline) las mismas transformaciones que el problema anterior: eliminamos variables con baja varianza (<0.005), añadimos características polinomiales de grado 2, escalamos a media 0 y varianza 1 y elegimos el menor número de variables que expliquen el 99 % de la variabilidad de la distribución. Nos quedamos con 260 atributos, perfectamente manejable.

Al igual que antes, visualizamos la matriz de coeficientes de correlación de Pearson antes (pero ya sin valores perdidos) y después del preprocesamiento. Comprobamos que queda diagonal.

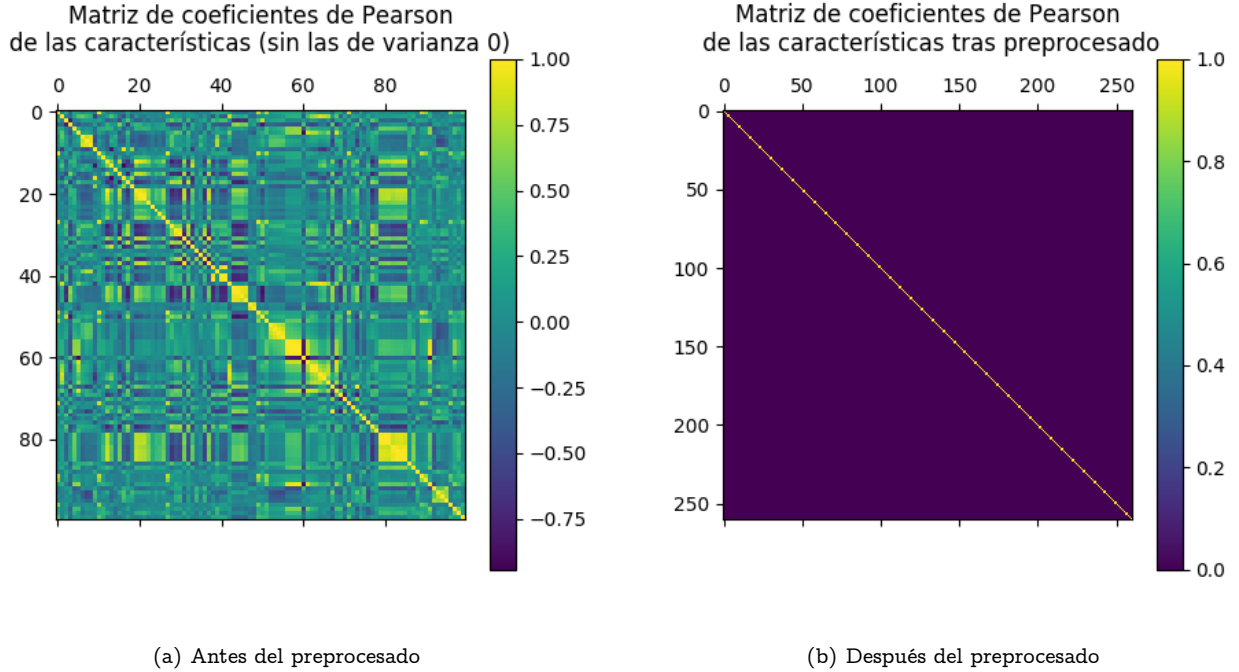


Figura 8: Matrices de coeficientes de correlación de Pearson

2.4. Métrica

La función que minimizaremos es el error cuadrático medio (MSE, mean squared error), también será la función en la que basaremos nuestra elección de cuál es el mejor modelo en la fase de validación.

Preferimos esta función al error absoluto medio (MAE, mean absolute error) porque, aunque es cierto que el MAE es más robusto ante los outliers, en este caso disminuye su influencia al haber sido normalizados. El MSE es más adecuado cuando queremos tener en cuenta cada uno de los datos de los que disponemos, no permite que algún dato tenga error demasiado alto a cambio de predecir otro con más exactitud.

No obstante, aunque basemos en el MSE la elección del modelo, estudiamos también el coeficiente de determinación R^2 y lo comparamos con el de otros modelos a la hora de sacar conclusiones respecto a la calidad del modelo elegido. Debido a su fácil interpretación: la proporción de la variabilidad de la distribución que puede explicarse por el modelo.

2.5. Técnica de ajuste del modelo

Para minimizar el MSE, podemos usar el SGD o la pseudoinversa. Nos decantamos por esta última debido a que la matriz a invertir no tiene un orden excesivamente alto (tenemos 260 características + la columna de unos) y las operaciones matriciales en *numpy* están muy optimizadas. Además, este algoritmo permite calcular el vector de pesos \mathbf{w} que anula el gradiente de la función de error de forma casi exacta y no precisamos estimar hiperparámetros como son el learning rate, el tamaño de minibatch y los pesos iniciales. Obtenemos: $\mathbf{w} = \mathbf{X}^+ \mathbf{y} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$

2.6. Regularización

Al igual que en el problema anterior, gracias al preprocesamiento podemos esperar que la mayoría de atributos sean relevantes, por lo que utilizaremos Regularización Ridge. Esto modifica la fórmula de la pseudoinversa anterior, para tener en cuenta la penalización por regularización. Obteniendo $\mathbf{w}_{reg} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$ donde \mathbf{I} es la matriz identidad de orden $d + 1$ (d es el número de características) y λ un hiperparámetro del modelo que debemos discutir más adelante.

2.7. Modelos

El modelo que usaremos será el de Regresión Lineal para minimizar el Error Cuadrático Medio, el más adecuado entre los modelos lineales que conocemos para este problema (predecir una variable continua a partir de otro conjunto de variables). Como ya hemos comentado, lo ajustaremos con el algoritmo de la pseudoinversa añadiendo regularización.

Para este problema también he creado un objeto estimador de *sklearn* que ajusta el vector de pesos w mediante pseudoinversa (con regularización) para el método `fit` y realiza el producto escalar de un vector de atributos de entrada x por w para predecir la variable objetivo en el método `predict`.

En este caso sólo tenemos un hiperparámetro (λ , la penalización de la regularización) que estimaremos de la misma forma que en el problema anterior.

2.8. Estimación de hiperparámetros y selección del modelo

Para seleccionar el modelo definitivo nos falta elegir un valor de λ adecuado. Utilizamos la misma técnica que en el ejercicio anterior (GridSearch CV de *sklearn*), para ello implementamos un método `score` en el estimador que decrezca cuando aumenta el ECM (lo más sencillo: `score = -ECM`). Probamos varios valores de λ equiespaciados entre 10^{-4} y 500, y vamos estrechando el intervalo para obtener una estimación más precisa. La mejor puntuación la obtenemos para $\lambda = 78.78787878787878$, con un ECM de 0.02396088923493373 de media en las 5 validaciones. (Este proceso, aunque es más rápido que en el problema anterior por tener sólo un hiperparámetro, también lo hemos omitido por necesitar entre 15 y 20 minutos incluso paralelizando).

Ahora hemos seleccionado el modelo definitivo, lo probamos sobre la muestra.

ECM aumentado sobre la muestra: 4.323467888321191

ECM sobre la muestra: 0.013243601309686465

$R^2 = 0.7517257860345214$

Parece un ECM bastante bajo, y un buen ajuste: el modelo consigue explicar el 75.17% de la variabilidad de la variable objetivo. Pero lo que nos interesa es su eficacia fuera de la muestra.

2.9. Estimación de E_{out} por validación cruzada y comparación con E_{test}

De igual modo que en el problema anterior, estimamos E_{out} por validación cruzada (10 subdivisiones con `cross_val_score` de *sklearn*), obteniendo un error cuadrático medio $E_{cv} = 0.02356922860102622$. Es bastante mayor que el del conjunto de train, lo que podría significar que se está produciendo sobreajuste. Sin embargo, he comprobado que restringir más la clase de funciones incrementando el valor de λ no mejora esta estimación, de forma que pasamos a analizar la eficacia del modelo sobre el conjunto de test.

Primero seleccionamos 4 elementos aleatorios y calculamos la predicción de la variable objetivo que proporciona el modelo para cada uno.

Objetivo	0.32	0.29	0.09	0.2
Predicción	0.2428077121087347	0.37131158436817296	0.13948687744365962	0.3688994745851004
Diferencia	-0.07719228789126531	0.08131158436817298	0.04948687744365962	0.1688994745851004

Evaluamos ya el modelo sobre el conjunto de test.

ECM aumentado sobre el test: 4.329183968372332

ECM sobre el test: 0.018959681360827634

$R^2 = 0.6671865221163271$

Aunque sigue siendo más alto que el ECM en el conjunto de entrenamiento, presenta una notable mejoría respecto a la estimación obtenida con validación cruzada.

2.10. Conclusiones

Comparamos la eficacia de nuestro modelo con dos “regresores” de *sklearn*.

El primero es `KNighborsRegressor`, que predice para cada entrada la media de los atributos objetivo de los 5 vecinos más cercanos en distancia euclídea. Comprobamos su eficacia sobre el conjunto de test:

ECM sobre test: 0.02153277755511022

$R^2 = 0.622019038705042$

El segundo es `RandomForestRegressor`, que predice para cada entrada el promedio de varios árboles de decisión aleatorios con el fin de paliar el sobreajuste propio de los árboles de decisión. Su comportamiento sobre el conjunto de test ha sido:

ECM sobre test: 0.023047872064128255

$R^2 = 0.595423450769131$

Comprobamos que el error cuadrático medio de nuestro modelo en el conjunto de test es inferior a al de estos dos estimadores. Y por consiguiente, el coeficiente de determinación. Podemos aventurar que la calidad de nuestro modelo es bastante decente, al menos sobre los datos preprocesados.

Respecto a la estimación de E_{out} , esta vez el error de validación cruzada E_{cv} constituye una cota pesimista del verdadero ECM sobre el conjunto de test. Esto es esperable debido a que en las evaluaciones de la validación cruzada sólo se entrena al modelo con el 90 % de los datos, y a la ausencia de factores presentes en la naturaleza del problema que provoquen falta de fiabilidad en la validación, tal como ocurría en el problema anterior en que los datos de train y validación correspondían a dígitos trazados por las mismas personas.