Índice general

1.	Mod	delización	3
	1.1.	Regresión logística con penalización	4
	1.2.	Regresión logística con penalización y PCA	5
	1.3.	Árboles de decisión	5
	1.4.	Bosques aleatorios	6
	1.5.	KNN	6
	1.6.	SVM lineal	7
	1.7.	SVM radial	7
	1.8.	Comparación	8
	1.9.	Test	9

Capítulo 1

Modelización

A continuación se va a utilizar el conjunto de datos construido en el capítulo [Construcción del conjunto de datos] para entrenar los modelos de clasificación binaria explicados en la sección [Modelos]. Es evidente que el rendimiento de los modelos debe evaluarse en observaciones futuras, por lo que las técnicas habituales de validación cruzada o partición aleatoria en entrenamiento/test no son adecuadas para este problema, ya que sufrirían el llamado efecto look-ahead. Por tanto, el enfoque que se seguirá en este trabajo será trabajar con una partición en entrenamiento/validación/test construida a partir de la ordenación temporal de las observaciones.

Se compararán los resultados obtenidos en 7 modelos diferentes: Regresión logística con penalización, Regresión logística con penalización + PCA, Árboles de decisión, Bosques aleatorios, KNN, SVM lineal y SVM radial.

Se ha seguido el flujo de trabajo habitual del paquete tidymodels:

- 1° . Crear una partición temporal en entrenamiento (60%), validación (20%) y test (20%), que será utilizada en todos los modelos.
- 2° . Definir cada uno de los modelos, indicando los parámetros del modelo deberán ajustarse.
- 3º. Crear la receta (recipe) con el preprocesamiento que se usará en cada modelo. Como se observó en la sección [Análisis exploratorio de datos], se incluirán en todos los modelos variables categóricas que indiquen el día de la semana y el mes de cada observación, haciendo uso de la función step_date. Igualmente, como también se indicó en el EDA, se modificará la variable uso_suelo para unificar todos los niveles que no sean agrícolas o forestales en un solo nivel que se llamará Otro. Esto último se hará fuera del workflow, antes de realizar la partición del conjunto de datos, haciendo uso de la función fct_lump del paquete forcats. Los detalles del preprocesamiento que se ha llevado a cabo en cada modelo pueden consultarse en el código, que se adjunta en el [Apéndice: Código], donde aparecen debidamente comentados.
 - 4º. Crear el workflow con el modelo y la receta.
 - 5° . Crear la rejilla (qrid) con los posibles valores de los parámetros que se deben ajustar.
- 6°. Entrenar el modelo para cada combinación de los valores de los parámetros a ajustar sobre los datos de entrenamiento.

7º. Evaluar el rendimiento de cada modelo sobre los datos de validación y seleccionar el mejor en base a las medidas de rendimiento ya mencionadas. El objetivo con estos modelos es predecir incendios forestales, por lo que es de vital importancia que los modelos funcionen especialmente bien en la clase positiva, es decir, que si un incendio se va a producir, que el modelo lo detecte. Sin embargo, es fundamental que el modelo tenga un buen desempeño general (un modelo que todo lo clasifique como incendio no serviría de nada, poniendo un ejemplo extremo). Por tanto, cada modelo se valorará de forma individual, considerando todas las métricas de rendimiento mencionadas y priorizando la sensitividad (o recall). Sin embargo, en la mayoría de los casos maximizar la tasa de acierto maximiza también la sensitividad, garantizando además un buen desempeño general. Por ello, en la mayoría de modelos se maximizará la tasa de acierto, pero porque analizando las salidas individualmente se ha considerado que es la mejor opción ya que produce la mayor sensitividad sin bajar demasiado las otras medias.

1.1. Regresión logística con penalización

Antes de aplicar este modelo, se han transformado las variables categóricas a variables dummy y se han tipificado todas las variables (media 0 y varianza 1). Los parámetros a ajustar son λ (parámetro de penalización o penalty) y α (parámetro de mixtura o mixture). Se consideran 10 valores equiespaciados para cada parámetro (en el caso de λ entre 10^{-4} y 10^{-1} y el caso de α entre 0 y 1) y se construye el grid tomando todas las combinaciones de estos valores.

Las métricas obtenidas por cada combinación de parámetro sobre los datos de validación se representan en la Figura 1.1.

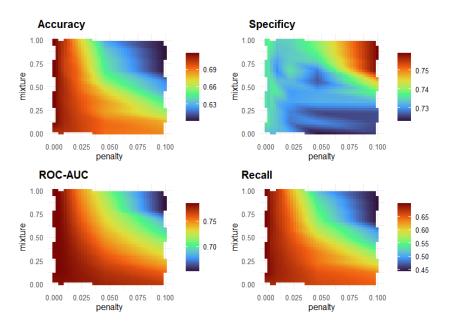


Figura 1.1: Métricas de rendimiento de los modelos de regresión logística con penalización. Fuente: Elaboración propia.

Finalmente, se elige el modelo maximiza la tasa de acierto, cuyos parámetros son: $\alpha = 1$ y $\lambda = 0.000464$. Es decir, un modelo de regresión logística *lasso* puro. Los coeficientes de este modelo se muestran en la Figura ??.

1.2. Regresión logística con penalización y PCA

A continuación se considera el mismo modelo de regresión logística con penalización que en la sección anterior pero en lugar de trabajar con los datos directamente, se aplica análisis de componentes principales sobre los datos normalizados en el preprocesamiento, ajustando el número de componentes principales utilizadas. Para construir el grid de parámetros se consideran los mismos valores que en el modelo sin PCA para los parámetros de penalización y mixtura pero ahora se consideran también 7 posibles valores para el número de componentes principales ($\{20, 25, 30, ..., 50\}$). Finalmente, el modelo que maximiza la tasa de acierto es el que tiene 40 componentes principales, $\alpha = 0.333$ y $\lambda = 0.00464$.

1.3. Árboles de decisión

Se construirán los árboles de decisión usando el índice de Gini como función de impureza y se elegirá el parámetro de coste-complejidad (α) que maximice la tasa de acierto. Se considera un grid con 10 valores del parámetro de coste-complejidad que oscilan entre 1.28e-10 y 3.02e-2. La mejor tasa de acierto en el conjunto de validación se obtiene con $\alpha=0.00182$. En la Figura 1.2 se muestran las distintas métricas de rendimiento sobre los datos de validación para cada uno de los valores del parámetro a ajustar.

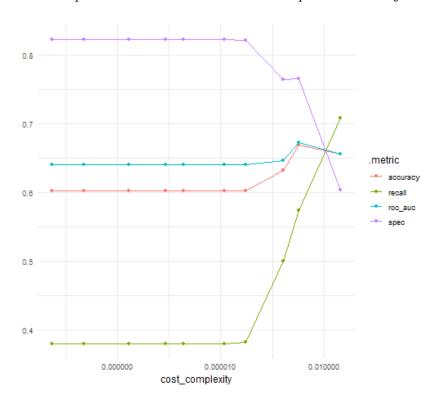


Figura 1.2: Métricas de rendimiento del árbol de decisión en función de el parámetro de coste-complejidad. Fuente: Elaboración propia.

1.4. Bosques aleatorios

En este modelo se ha fijado el número de árboles a 1000 y se han ajustado los parámetros mtry (el número de variables que se seleccionarán aleatoriamente en cada nodo) y min_n (el número de observaciones en un nodo a partir del cual no se sigue dividiendo y se convierte en nodo hoja). En este caso se ha optado por un enfoque diferente, motivado por el amplio rango de valores que puede tomar el parámetro min_n y por las limitaciones computacionales del equipo disponible.

De esta forma, la estimación de parámetros se ha hecho en dos etapas. En una primera etapa se ha fijado el parámetro mtry=4 y se ha estimado el parámetro min_n considerando para ello un grid equiespaciado de 1000 a 2500 tomando valores de 100 en 100 ({1000, 1100, ..., 2500}). Para elegir entre los distintos modelos esta vez se ha usado como criterio la sensitividad, obteniendo el valor más elevado para $min_n=2100$. En la segunda etapa, una vez min_n , este se ha considerado fijo y se ha estimado m_try , considerando una rejilla de 10 valores equiespaciados tomados del 1 al 10 ({1, 2, ..., 10}). De nuevo se ha utilizado la sensitividad para elegir el modelo final, eligiendo así $min_n=7$. En la Figura ?? se recogen los resultados de las dos estapas de tuning. El modelo final elegido tiene $min_n=2100$ y $min_n=7$.

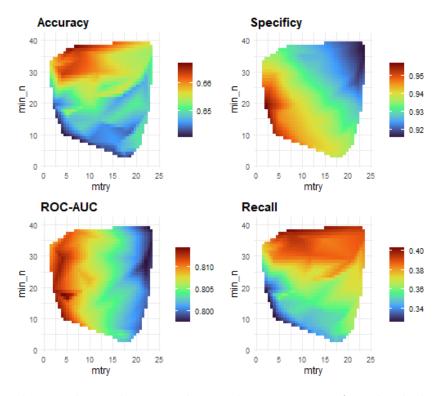


Figura 1.3: Métricas de rendimiento de Random Forest en función de los parámetros. Fuente: Elaboración propia.

1.5. KNN

6

Para aplicar el modelo, primero se han transformado las variables categóricas en variables dummy y, porsteriormente, se han tipificado las todas las variables. Se ha usado

la distancia euclídea entre los vectores transformados. Para ajustar el parámetro k del modelo se han tomado valores entre 1 y 400. La mayor tasa de acierto sobre los datos de validación se ha obtenido con k = 275. Los resultados del tuning se muestran en la Figura 1.4.

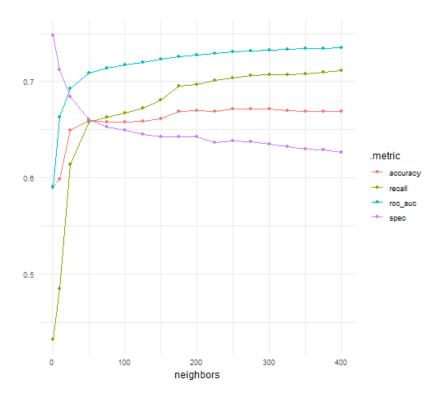


Figura 1.4: Métricas de rendimiento de KNN en función del número de vecinos. Fuente: Elaboración propia.

1.6. SVM lineal

Antes de construir el modelo, se han transformado las variables categóricas usando variables dummy y se han tipificado todas las variables. Se ha probado con 15 valores del parámetro coste entre 0.001949 y 24.666648. La mayor tasa de acierto y el mayor recall se han obtenido para C=0.0437. Los resultados del tuning se muestran en la Figura 1.5

1.7. SVM radial

Por último, se ha construido el modelo de SVM usando un kernel gaussiano. El preprocesamiento ha sido el mismo que en el caso del kernel lineal. Dado el elevado tiempo de entrenamiento de este modelo solo se ha probado con 8 combinaciones de valores para los parámetros C y γ , que oscilan entre 0.005 y 31.7 y entre 0 y 0.05. La mayor tasa de acierto sobre los datos de validación se ha conseguido para C=31.7 y $\gamma=0.0000496$.

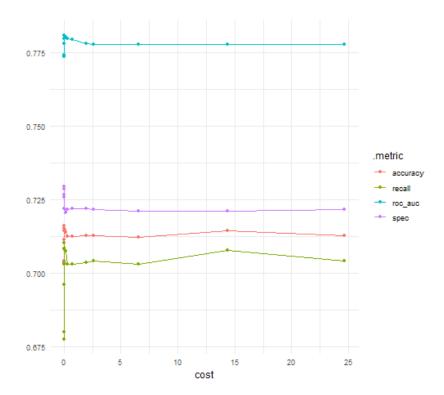


Figura 1.5: Métricas de rendimiento de SVM en función del parámetro C. Fuente: Elaboración propia.

model_name	roc_auc	accuracy	recall	specificity	precision
lr	0.785	0.719	0.700	0.738	0.727
lr_pca	0.727	0.659	0.624	0.694	0.670
dt	0.656	0.656	0.709	0.604	0.641
rf	0.781	0.725	0.758	0.693	0.711
svm_linear	0.781	0.716	0.710	0.722	0.718
svm_rbf	0.777	0.710	0.692	0.728	0.717
knn	0.732	0.672	0.706	0.637	0.660

Tabla 1.1: Métricas de los modelos seleccionados sobre el conjunto de validación. Fuente: Elaboración propia.

1.8. Comparación

A continuación se muestran las métricas de cada uno de los modelos seleccionados en los datos de validación en la Tabla 1.1 y en la Figura 1.6. Las curvas ROC de todos los modelos se muestran en la Figura 1.7.

Puede observarse que los resultados obtenidos por todos los modelos son bastante similares. Destacan el modelo de bosque aleatorio y el de regresión logística con penalización, el primero por ser el que tiene la tasa de acierto y la sensitividad más elevadas, y el segundo por dar los mejores resultado en cuanto a precisión y especificidad. Las curvas ROC de los modelos de bosque aleatorio, regresión logística con penalización, SVM lineal y SVM radial son prácticamente iguales. Los modelos más pobres son la regresión logística aplicando PCA, KNN y el árbol de decisión.

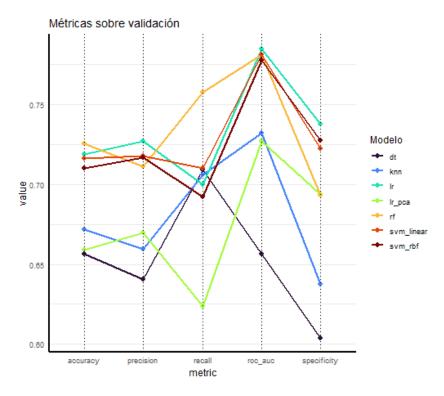


Figura 1.6: Gráfico de métricas obtenidas sobre el conjunto de validación por cada uno de los modelos seleccionados. Fuente: Elaboración propia.

1.9. Test

Por último, para conocer la capacidad de generalización de los modelos construidos, estos se evaluarán sobre nuevas observaciones, el conjunto de datos test. Recuérdese que el entrenamiento de los modelos se ha realizado con el conjunto de entrenamiento, formado por 12927 observaciones tomadas entre el 2002 y mediados de 2014 y para ajustar los parámetros de cada modelo, se han utilizado 4309 observaciones tomadas entre mediados de 2014 y mediados de 2019. Finalmente, se evaluará la capacidad de predicción de los modelos sobre 4310 nuevas observaciones tomadas entre mediados de 2019 y 2022. Para ello, primero se juntarán los conjuntos de entrenamiento y validación para reentrenar los modelos con la configuración de parámetros seleccionada en cada caso, y posterior mente se compararán los valores predichos por los modelos con los valores reales. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 1.2 y el la Figura 1.8. Las curvas ROC de los distintos modelos sobre el conjunto de datos test se muestra en la Figura 1.9.

En este caso, los mejores resultados en todas las medidas los da el modelo de regresión logística con penalización. Los modelos de SVM muestran resultados bastante similares entre ellos y prácticamente iguales al modelo de regresión logística. Sobre los datos test, el modelo de bosque aleatorio ha dado un rendimiento peor que el obtenido en validación, quedando por detrás de los tres modelos ya comentados, aunque la sensitividad de todos estos modelos es prácticamente igual. De nuevo, los peores resultados los dan los modelos de regresión logística aplicando PCA y el árbol de decisión, seguidos del KNN.

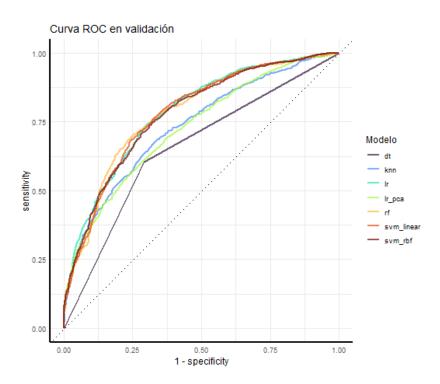


Figura 1.7: Curvas ROC sobre el conjunto de validación. Fuente: Elaboración propia.

$model_name$	roc_auc	accuracy	recall	specificity	precision
lr	0.795	0.710	0.726	0.693	0.718
lr_pca	0.715	0.645	0.631	0.661	0.667
dt	0.667	0.668	0.712	0.621	0.670
rf	0.762	0.699	0.727	0.669	0.703
svm_linear	0.790	0.705	0.729	0.680	0.710
$\operatorname{svm_rbf}$	0.789	0.706	0.727	0.683	0.712
knn	0.744	0.673	0.719	0.624	0.673

Tabla 1.2: Métricas sobre el conjunto test. Fuente: Elaboración propia.

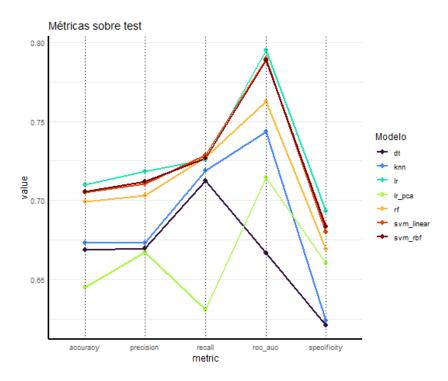


Figura 1.8: Métricas obtenidas sobre el conjunto test por cada uno de los modelos seleccionados. Fuente: Elaboración propia.

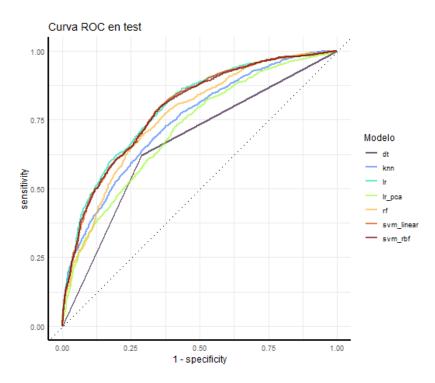


Figura 1.9: Curvas ROC sobre test. Fuente: Elaboración propia.