

Universidad de La Habana
Facultad de Matemática y Computación



Mitigación de sesgos con ensembles y optimización multiobjetivo

Autor:

Jorge Mederos Alvarado

Tutores:

Juan Pablo Consuegra Ayala

Alejandro Piad Morfis

Trabajo de Diploma
presentado en opción al título de
Licenciado en (Matemática o Ciencia de la Computación)

Fecha

github.com/jmederosalvarado/thesis

Dedicación

Agradecimientos

Agradecimientos

Opinión del tutor

Opiniones de los tutores

Resumen

Resumen en español

Abstract

Resumen en inglés

Índice general

Introducción	1
1. Estado del Arte	3
1.1. Equidad	3
1.2. Mitigacion de sesgos	4
1.3. Metodos de ensamblado	5
1.4. Metodos de Aprendizaje de Maquina Automatico	6
1.5. Optimizacion Multiobjetivo	9
1.5.1. NSGA-II	10
1.6. Discusion	11
2. Propuesta	12
2.1. Descripcion general	12
2.2. Generacion de modelos base	12
2.3. Metricas de diversidad	14
2.4. Ensamblado inteligente de modelos justos	15
3. Detalles de Implementación y Experimentos	17
Conclusiones	18
Recomendaciones	19
Bibliografía	20

Índice de figuras

Ejemplos de código

Introducción

En la actualidad los algoritmos de aprendizaje automático están siendo aplicados en disímiles áreas de la vida humana. Es común encontrarlos aplicados en sistemas de recomendación de compras, aplicaciones de citas, solicitudes de préstamos, contratación personal y muchas otras áreas. A raíz de ello, ha surgido un creciente interés en estudiar las potencialidades y limitaciones de los modelos de aprendizaje automático, así como las posibles implicaciones de confiar ciegamente en sus predicciones.

En particular, su incorporación a tareas de toma de decisiones de alto riesgo ha dirigido la atención de muchos investigadores hacia una nueva interrogante: ¿están siendo "justos" los algoritmos de aprendizaje automático al tomar sus decisiones?

En este escenario, ha ganado popularidad el desarrollo de técnicas para detectar y mitigar los sesgos en colecciones de datos y algoritmos de aprendizaje automático. Tales herramientas son cruciales para desarrollar sistemas de toma de decisiones más justos. Los estudios orientados hacia la equidad en algoritmos de aprendizaje automático se enfocan principalmente en desarrollar técnicas que consideren tanto la precisión como la equidad de los modelos.

Motivación

Un modelo de aprendizaje de máquina se entrena con el objetivo de optimizar una única métrica, en la mayoría de los casos la precisión. Esto significa que los modelos aprenden muy bien los patrones que se presentan en los datos de entrenamiento, incluyendo aquellos patrones que representan sesgos y prejuicios que están desafortunadamente presentes en la sociedad y por ende en los datos recopilados, en algunos casos incluso amplifican estos patrones negativos. Son varias las técnicas que se han explorado para resolver este problema, algunas se enfocan en un preprocesamiento de los datos para eliminar aquellos elementos que puedan inducir un sesgo en el modelo, otras realizan variaciones en el método de entrenamiento con el mismo objetivo. Sin embargo permanece relativamente poco explorado el uso de técnicas de optimización multiobjetivo que permitan al modelo optimizar hasta encontrar un buen balance entre cuán justo es y cuán preciso.

Otra tecnica que ha demostrado ser de gran utilidad en la prevencion de los sesgos en los modelos de aprendizaje de maquina es la construccion de ensamblados de multiples modelos que maximizan la varianza entre si, por lo que se minimiza el sesgo del ensamblado final.

Problematica

A pesar de que existe AutoGOAL, una biblioteca de AutoML, que permite obtener modelos para resolver problemas arbitrarios utilizando entre otras tecnicas aprendizaje de maquina. No existe una biblioteca o herramienta que permita resolver de principio a fin un problema de clasificacion utilizando aprendizaje de maquina y donde exista alguna garantia de que el modelo aprendido sea justo.

Objetivo general

Proponer una herramienta que permita resolver problemas de clasificacion utilizando aprendizaje de maquina y que permita garantizar que el modelo aprendido sea justo.

Objetivos especifico

- Encontrar modelos que maximicen la varianza para minimizar el sesgo.
- Metodos basados en metaheurísticas para optimizar los modelos utilizando simultaneamente metricas de equidad y precision.
- Explorar adición de optimización multiobjetivo a AutoGOAL para que el modelo aprendido sea justo.
- Metodos basados en la combinacion de diferentes metricas en una sola, para poder aprovechar los multiples metodos de optimización que existen.

Capítulo 1

Estado del Arte

1.1. Equidad

No existe en estos momentos una única definición ampliamente aceptada de lo que es *equidad*, sino que diferentes definiciones codifican diferentes características que se muestran útiles en diferentes contextos. Incluso, algunas de las definiciones más comunes presentan conflictos entre sí.

A continuación se presentan algunas de las definiciones más utilizadas. Sea Y la clasificación (binaria) correcta, S el atributo protegido, y Y^p la clasificación obtenida del modelo. Las definiciones más comunes pueden ser agrupadas en tres categorías: (i) considerando el resultado obtenido dada la clasificación correcta; (ii) considerando la clasificación correcta dada la clasificación obtenida; (iii) considerando solamente el resultado obtenido. Los siguientes son ejemplos de estos tipos de métricas.

- Equal Opportunity (EO) requiere que la proporción de verdaderos positivos sea la misma en todos los subgrupos: $P(Y^p = 1|Y = 1, S = 0) = P(Y^p = 1|Y = 1, S = 1)$
- Equalized Odds (EOdd) requiere igual proporción de falsos positivos, además de EO
- Statistical Parity (SP) requiere que las predicciones positivas no se vean afectadas por el valor del atributo protegido, sin tomar en cuenta la clasificación correcta: $P(Y^p = 1|S = 0) = P(Y^p = 1|S = 1)$

Los tradeoffs inherentes a cada noción de fairness han sido estudiados extensamente (Dwork y col. 2012; Friedler y col. 2016; Kleinberg 2018). Escoger la definición correcta para un problema determinado es difícil, y en la práctica no puede ser delegado a un agente automático. En su lugar, una decisión humana es preferida para asegurar una decisión informada.

1.2. Mitigacion de sesgos

Las tecnicas de mitigacion de sesges pueden ser divididas fundamentalmente en pre-procesamiento, in-procesamiento, post-procesamiento.

Los metodos del primer grupo logran equidad modificando la representacion de los datos, i.e., pre-procesando los datos, y luego adoptan una solucion de machine learning estandard (Calmon y col. 2017; Kamiran y Calders 2011; Zemel y col. 2013). Por ejemplo aprender una representacion a partir de resolver un problema de optimizacion con dos objetivos, codificar la informacion preservando la mayor cantidad de informacion posible y ofuscar al mismo tiempo la pertenencia al conjunto de atributos protegidos (Zemel y col. 2013). Los metodos de pre-procesamiento son agnosticos al modelo, pero sus hiperparametros, asi como los del modelos de aprendizaje de maquina seleccionado todavia necesitan ser ajustados para mejor rendimiento.

El segundo grupo de la familia consiste de en metodos de in-procesamiento que se aseguran que se cumplan ciertas restricciones de equidad durante el entrenamiento (e.g. (Donini y col. 2018; Zafar, Valera, Gomez-Rodriguez y col. 2019; Zafar, Valera, Rogriguez y col. 2017)), sin embargo solo es aplicable a una cierta clase de modelos. Por ejemplo el algoritmo aplicado en (Donini y col. 2018) solo puede ser aplicado a *kernel machines* (tales como *maquinas de soporte vectorial*), y solo a una unica definicion de equidad (i.e., EO). Aunque metodos de in-procesamiento pueden brindar muy buenos resultados para la clase del modelo que estan diseñados, frecuentemente son dificiles, o a veces imposible de extender para nuevas clases de modelos. Estos metodos tambien pueden introducir nuevos hiper-parametros que podrian requerir conocimiento especificos del dominio y experimentacion.

Las tecnicas de post-procesamiento operan ajustando el umbral de decision de modelos pre-entrenados para eventualmente lograr resultados mas justos respecto a una metrica de equidad dada. El principal problema es que post-procesar el umbral de decision es inherentemente suboptimo y puede llevar a peores tradeoffs de eficacia y equidad. Lo que es mas, estas tecnicas no son utilizables si la informacion sensible no esta disponible en el momento de realizar las predicciones, lo cual a su vez puede llevar a problemas legales por la utilizacion de informacion sensible para realizar predicciones (MacCarthy 2018).

Una clase de metodos recientemente propuesta para tareas de clasificacion justa, conocida como meta-algoritmos, reduce la tarea de clasificacion justa a una secuencia de problemas de clasificación con costo asociado a sus errores de predicción (Agarwal, Beygelzimer y col. 2018; Agarwal, Dudík y col. 2019; Kearns y col. 2018). Las soluciones a estos problemas producen un clasificador *randomizado*. Contrario a los metodos de *in-procesamiento*, los meta-algoritmos no dependen de la tipo del modelo que se utiliza en el clasificador, sino en la capacidad de los mismos para ser re-entrenados repetidamente. En el contexto de algoritmos de minimizacion del riesgo empirico, es-

tos metodos son agnosticos al modelo de aprendizaje de maquina, pero aun necesitan implementaciones especificas basadas en la definicion de equidad seleccionada y necesitan producir un ensamblado de modelos. Limitaciones similares caracterizan un numero de enfoques que utilizan optimizacion (Chiappa y Isaac 2018; Dimitrakakis y col. 2019) o inferencia bayesiana (Kearns y col. 2018; Thomas y col. 2019), sus implementaciones tienen que estar diseñadas especificamente para ciertas definiciones de equidad.

1.3. Metodos de ensamblado

Los metodos de ensamblado estan diseñados para intentar resolver el problema de *low bias/high variance* que muestran la mayoría de los modelos de aprendizaje de maquina, haciendolos apropiados para modelos de clasificacion mas robustos (Polikar 2006). Un modelo de ensamblado esta diseñado de muchos modelos con *low bias* cuyas predicciones son combinadas para producir una prediccion final. Se asume fundamentalmente que la combinacion de varias predicciones de bajo nivel producira una salida con baja varianza mientras mantiene un low bias. Tener un conjunto diverso de modelos de bajo nivel es una caracteristica fundamental para lograr esto (Polikar 2006). Sin embargo, esto requiere, que clasificadores individuales cometan errores en diferentes instancias. La intuicion es que si cada clasificador comete diferentes errores, entonces una combinacion estrategica de estos clasificadores puede reducir el error total. Luego, es necesario lograr que cada clasificador sea lo mas unico posible, particularmente con respecto a ejemplos erroneamente clasificados.

La naturaleza de multiples hipotesis de estos modelos asegura que, si son ajustados lo suficiente, tendran resultados mejores que cualquiera de los modelos individuales en el caso general. Esto les permite tambien estimar el grado de confianza o calidad de las predicciones que producen. Las tecnicas classicas de ensamblado incluyen *voting* and *weighted voting* (Dietterich 2000), *boosting* (Schapire 1990), y *bagging* (Breiman 1996).

En un problema de clasificacion, *voting* produce como salida la etiqueta que tiene la mayoría de los votos, tratando cada prediccion de los modelos ensamblados como un voto. *Weighted-voting* funciona de forma similar a *voting*, pero cada modelo del ensamblado es asignado un *peso* que indica la importancia de su voto. *Boosting* ejecuta un proceso iterativo donde los modelos son entrenados secuencialmente, cada uno tratando de mejorar su rendimiento en los ejemplos entrenantes donde los modelos anteriores tuvieron peor rendimiento. Durante este proceso, cada sub-modelo es tambien asignado un peso que marca la importancia de su prediccion. *Bagging* entrena cada sub-modelo en una seleccion diferente (con reemplazo) de los ejemplos entrenantes originales. De esta forma, el modelo con una alta varianza deberia producir modelos entrenados con alta diversidad. Alternativamente, *feature bagging* funciona de forma

similar, seleccionando un subconjunto de los features en lugar de los ejemplos entrenantes, causando que features correlacionados sean analizados de forma separada en algunos sub-modelos.

La capacidad de los metodos de ensamblado para construir modelos mas robustos los ha hecho apropiados para multiples aplicaciones. El dominio de la salud es uno de los ejemplos donde estos metodos han sido aplicados con gran exito. Por ejemplo, una aplicacion hibrida de metodos de ensamblado con redes neuronales en un entorno de aprendizaje for reforzamiento es presentada para la prediccion de infeccion de COVID-19 con gran precision (W. Jin y col. 2022). De forma similar, un metodo de toma de decision multi-criterio basado en ensamblados es propuesto para la deteccion de COVID-19 a partir del sonido de la tos en pacientes (Chowdhury y col. 2022). Existen ejemplos tambien no relacionados a la medicina, por ejemplo, en (Livieris y col. 2020) se emplearon estrategias de ensamblado como *ensemble-averaging*, *bagging* y *stacking* con metodologias avanzadas de aprendizaje profundo para predecir los precios, a nivel de hora, de criptomonedas como *Ethereum*, *Bitcoin* y *Ripple*.

Una simple pero poderosa tecnica en el contexto de los metodos de ensamblado es la llamada *snapshot ensemble* (Huang y col. 2017). Esta tecnica genera multiples clasificadores base, entrenando una sola red neuronal mientras la hace converger de forma rapida y repetida a multiples optimos locales y salvando en cada uno de dichos puntos los parametros del modelo. Todas las redes neuronales son entonces ensambladas para producir el clasificador final. Estos *snapshot ensemble* son mas robustos y precisos que las redes individuales dada su naturaleza de ensamblado, a ningun costo adicional de entrenamiento.

1.4. Metodos de Aprendizaje de Maquina Automatico

Aprendizaje de Maquina Automatico (Auto-ML) es el proceso de automatizar la solucino de problemas del mundo real a traves de tecnicas de aprendizaje de maquina. El proceso involucra eliminar la necesidad de humanos expertos en aprendizaje de maquina para seleccionar apropiadamente las caracteristicas, flujos, paradigmas, algoritmos y sus hiperparametros para resolver un problema (Dimitrakakis y col. 2019). Las principales ventajas de las tecnologias de AutoML incluyen: (1) reducir el tiempo empleado en resolver problemas bien estudiados; y, (2) eliminar la necesidad de conocimiento experto. Adicionalmente, estas tecnologias tienden a generar soluciones mas simples que a menudo tienen mejor desempeño que soluciones diseñadas por humanos.

Multiples tecnologias han sido propuestas para resolver el problema de Auto-ML. Auto-Weka (Thornton y col. 2013) fue una de las primeras soluciones presentadas.

Esta está basada en el software Weka (Witten y col. 2009), un software construido a partir de varias herramientas de visualizacion y algoritmos para analisis de datos y modelacion predictiva. *Auto-Weka* resuelve el problema de *Auto-ML* como un problema CASH segun definido a continuacion.

Definición 1.1 Sea $A = \{A^{(1)}, \dots, A^{(R)}\}$ un conjunto de algoritmos, y sea $\Lambda^{(j)}$ el dominio de los hiperparametros del algoritmo $A^{(j)}$. Sea, $D = \{(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}$ el conjunto de entrenamiento, el cual es dividido en K cross-validation folds de la forma $\{D_{valid}^{(1)}, \dots, D_{valid}^{(K)}\}$ y $\{D_{train}^{(1)}, \dots, D_{train}^{(K)}\}$ tal que $D_{train}^{(i)} = D \setminus D_{valid}^{(i)}$ para todo $i = 1, \dots, K$. Finalmente, denotese $L(A_{\lambda}^{(j)}, D_{train}^{(i)}, D_{valid}^{(i)})$ la perdida del algoritmo $A^{(j)}$ en $D_{valid}^{(i)}$ con hiperparametros λ . Entonces, el problema de Seleccion de Algoritmo y Optimizacion de Hiperparametros Combinado (CASH) es encontrar la configuracion conjunta de algoritmo e hiperparametros que minimiza la perdida:

$$A^*, \lambda_{\star} \in \underset{A^{(j)}, \lambda \in \Lambda^{(j)}}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K L(A_{\lambda}^{(j)}, D_{train}^{(i)}, D_{valid}^{(i)}) \quad (1.1)$$

Otros sistemas populares de Auto-ML son Auto-Sklearn (Feurer y col. 2015) y Auto-Keras (H. Jin y col. 2018). Estos sistemas estan basados en las bibliotecas de aprendizaje de maquina, *Scikit-Learn* (Pedregosa y col. 2011) y *Keras* (*Keras* s.f.) respectivamente. Ambos sistemas proveen una interfaz para encontrar la mejor arquitectura de aprendizaje de maquina para resolver un problema. Una diferencia fundamental entre ellos es la forma en que sus espacios de busqueda son definidos. Mientras Auto-SkLearn explora espacio de busqueda condicional, i.e., un espacio con algunos hiperparametros condicionados a otros, Auto-Keras realiza una Busqueda de Arquitectura Neuronal (NAS (Elsken y col. 2018)), la cual implica explorar espacios jerarquicos de complejidad arbitraria.

AutoGOAL (Estévez Velarde y col. 2020; Estévez-Velarde y col. 2020) es una de las mas recientes contribuciones al campo del Auto-ML. AutoGOAL es un sistema que utiliza tecnicas heterogeneas para resolver el problema CASH. La esencia de AutoGOAL radica en su espacio personalizable de pipelines y su pool de algoritmos de busqueda, que son usados para encontrar la mejor configuracion para resolver un problema. Cada pipeline esta definido como un conjunto de algoritmos interconectados que traducen una entrada predefinida a su salida correspondiente. El espacio de pipelines comprende no solo el conjunto de algoritmos, sino tambien sus hiperparametros.

Multiples fuentes de algoritmos estan incluidos en el espacio de AutoGOAL, tales como *Scikit-Learn* (Pedregosa y col. 2011), *NLTK* (Loper y Bird 2002), *Keras* (*Keras* s.f.), y *Pytorch* (Paszke y col. 2019). Sin embargo, AutoGOAL carece de la habilidad

de combinar multiples end-to-end pipelines para generar una solucion. Esta limitacion puede ser superada con la utilizacion de ensamblados.

El proceso fundamental de optimizacion utilizado en AutoGOAL en estos momentos esta baasado en una tecnica de continua optimizacion con Evolucion Gramatical para gramaticas probabilistas libres del contexto (Mégane y col. 2021). El proceso consiste de un cilo de generacion y evaluacion, utilizando una gramatica G apropiada para describir el problema de aprendizaje de maquina qe se intenta resolver. En cada iteracion un conjunto de N pipelines es generados a partir de samplear la gramatica G de acuerdo a las probabilidades θ asignadas a cada produccion. Estas probabilidades son inicializadas con una distribucion uniforme θ_0 para todas las producciones. Cada pipeline es evaluado (lo cual consiste simplemente en entrenamiento y ejecucion), y los de mejor desempeño son utilizados para modificar θ , con el objetivo de maximizar la probabilidad de que estos sean generados. Este proceso se ilustra en el algoritmo

Algoritmo 1.1: PGE

```

1  $N \leftarrow$  tamaño de la poblacion
2  $n \leftarrow$  numero de individuos seleccionados en cada iteracion
3  $\alpha \leftarrow$  factor de aprendizaje
4  $G \leftarrow$  gramatica que describe los pipelines de aprendizaje de maquina a
   explorar
5  $\theta_0 \leftarrow$  probabilidades iniciales (uniforme)
6  $f \leftarrow$  funcion de fitness (entrenamiento y evaluacion de pipelines)
7  $best \leftarrow none$ 
8 para cada iteracion  $i$  hacer
9    $P_i \leftarrow$  generar poblacion utilizando gramatica  $G$ , con probabilidades  $\theta_{i-1}$ 
10  para cada solucion  $S \in P_i$  hacer
11     $f(S) \leftarrow$  calcular fitness de  $S$  (evaluar el pipeline)
12  fin
13   $best \leftarrow \operatorname{argmax}_{S \in P \cup \{best\}} \{f(S)\}$ 
14   $P_i^* \leftarrow$  seleccionar los  $n$  mejores individuos de  $P_i$ 
15   $\theta_i^* \leftarrow$  calcular la distribucion marginal de  $P^*$ 
16   $\theta_i \leftarrow \alpha \theta_i^* + (1 - \alpha) \theta_{i-1}$ 
17 fin
18 devolver  $best$ 

```

1.5. Optimizacion Multiobjetivo

Los metodos de optimizacion multiobjetivo son aquellos que exploran el espacio de busqueda optimizando simultaneamente diferentes funciones.

Definición 1.2 (Optimizacion Multiobjetivo) *Dadas m funciones objetivo $f_1 : X \rightarrow \mathbf{R}, \dots, f_m : X \rightarrow \mathbf{R}$ las cuales traducen el espacio X en \mathbf{R} , un problema de optimizacion multiobjetivo esta dado es expresado de la siguiente forma:*

$$\text{minimizar } f_1(x), \dots, \text{minimizar } f_m(x), x \in X \quad (1.2)$$

Al trabajar con multiples funciones objetivos es necesario encontrar formas de comparar dos soluciones en el espacio de soluciones factibles. El concepto de *Pareto dominación* juega un papel fundamental en el ambito de la optimizacion multiobjetivo, dado que permite comparar objetivamente dos vectores de forma precisa, sin requerir informacion adicional de preferencia.

Definición 1.3 (Pareto Dominación) *Dados dos vectores en el espacio objetivo, digase $y^{(1)}, y^{(2)} \in \mathbf{R}^m$, entonces el punto $y^{(1)}$ se dice que pareto-domina a $y^{(2)}$ si y solo si:*

$$\forall_{i \in \{1, \dots, m\}} : y_i^{(1)} \leq y_i^{(2)} \text{ y } \exists_{j \in \{1, \dots, m\}} : y_j^{(1)} < y_j^{(2)} \quad (1.3)$$

Definición 1.4 (Frente pareto) *Todos aquellos vectores x del espacio objetivo tal que no exista otro vector y en el espacio objetivo que pareto-domine a x .*

Tradicionalmente los problemas de optimizacion multiobjetivo han sido atacados utilizando tecnicas de escalarizacion (e.g. (Miettinen 2012)), estas tecnicas consisten en de alguna forma combinar todas las funciones objetivos en una sola, o reescribirlas como restricciones. Varias tecnicas existen en este contexto. *Linear Weighting* es una de estas, en la cual se construye una nueva funcion objetivo a partir de la combinacion lineal de las funciones objetivo del problema original, i.e. $\min \sum w_i f_i(x), x \in X$. Este enfoque tiene un problema fundamental y es que si el frente pareto no es convexo, no es posible encontrar soluciones en esta zona, no importa los pesos w_i que se utilicen. Otra forma de escalarizacion es ϵ -constrain, esta tecnica selecciona una funcion como la *principal* y las demas se establecen como restricciones al conjunto de soluciones factibles, exigiendo que sean menores que un ϵ .

Existen metodos numericos que intentan resolver el problema haciendo cumplir las condiciones de Karush-Kuhn-Tucker (Kuhn y Tucker 2014). La idea va de encontrar al menos una solucion del sistema de ecuaciones que se produce al tratar el problema de *KKT*. Es posible utilizar metodos de continuacion y homotopia para obtener todas las soluciones (Hillermeier y col. 2001; Schütze y col. 2005). Estos metodos require que las soluciones satisfagan condiciones de convexidad local y diferenciabilidad.

1.5.1. NSGA-II

Los algoritmos genéticos utilizan paradigmas basados en procesos evolutivos naturales, como *selección natural*, *mutación* y *recombinación* para mover una población (conjunto de vectores de decisión) a soluciones óptimas o casi óptimas (Back 1996). Los algoritmos genéticos multiobjetivos generalizan esta idea y son diseñados para en cada iteración acercarse más al frente Pareto. En este contexto destaca *NSGA-II* (Deb y col. 2002), el cual se explica en mayor detalle a continuación.

El algoritmo consiste básicamente de un ciclo generacional que se divide en dos partes. En la primera parte, la población pasa por un proceso de variación. En la segunda parte, un proceso de selección toma lugar, el cual resulta en la población de la nueva generación. Este proceso se repite hasta que se cumple algún criterio de convergencia o se excede una cantidad de cómputo predefinida.

En la parte de la variación, λ nuevos individuos son generados. Para cada uno de ellos dos padres son seleccionados de la población actual P_t . Para escoger estos, se utiliza una selección de torneo binario, es decir se escogen aleatoriamente dos individuos de la población y se selecciona el mejor de acuerdo a su ranking en la población. Los padres son entonces recombinados utilizando un operador de combinación, el individuo resultante es luego mutado utilizando un operador de mutación. De esta forma es creado un nuevo conjunto Q_t de individuos, los cuales son añadidos junto a la población actual al conjunto de individuos a considerar para la siguiente generación.

La segunda fase, fase de selección, los μ mejores individuos son seleccionados del conjunto $P_t \cup Q_t$ utilizando un mecanismo de ranking multiobjetivo, de esta forma la población de la nueva generación P_{t+1} es formada. El mecanismo de selección de *NSGA-II* es el ingrediente fundamental que lo distingue del resto de los algoritmos genéticos que son utilizados para resolver problemas de optimización de un único objetivo. Este consiste de dos niveles. Primero se realiza un *non-dominated sorting*. Este depende únicamente del *pareto-orden* entre los individuos. Finalmente los individuos que comparten el mismo *pareto-orden* son ordenados de acuerdo al *crowding-distance*, la cual es una medida de la diversidad.

Non-dominated sorting

Sea $ND(P)$ el conjunto de soluciones no dominadas 1.3 en una población P . *Non-dominated sorting* particiona la población en subconjuntos, pasado en la *pareto dominación* 1.3 como especifica la siguiente recursión.

$$R_1 = ND(P) \tag{1.4}$$

$$R_{k+1} = ND(P \setminus \cup_{i=1}^k R_i) \quad k = 1, 2, \dots \tag{1.5}$$

Como en cada paso de la recursion al menos una solucion es eliminada de la poblacion, el numero maximo de *capas* es $|P|$. El orden de una solucion esta dada por el subindice k del R_k en el cual queda dicha solucion.

Crowding distance

Si mas de una solucion quedan en el mismo subconjunto de la poblacion R_k luego de realizar la ordenacion anterior, se procesa a ordenar las soluciones dentro de dichos subconjunto a partir de su *crowding distance*. Esta es calculada para una solucion x como la suma de las contribuciones c_i a la i -ésima funcion objetivo:

$$l_i(x) = \max\{f_i(y) | y \in R \setminus \{x\} \wedge_i (y) \leq f_i(x)\} \cup \{-\infty\} \quad (1.6)$$

$$u_i(x) = \min\{f_i(y) | y \in R \setminus \{x\} \wedge f_i(y) \geq f_i(x)\} \cup \{+\infty\} \quad (1.7)$$

$$c_i(x) = u_i - l_i, \quad i = 1, \dots, m \quad (1.8)$$

$$c(x) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m c_i(x), x \in R \quad (1.9)$$

Intuitivamente mientras mas *espacio* exista alrededor de una solucion, mayor sera el *crowding distance* de la misma. Por tanto, aquellas soluciones con elevado *crowding distance* son preferidas a aquellas con baja distancia, con el proposito de mantener la diversidad en la poblacion.

1.6. Discusion

Capítulo 2

Propuesta

2.1. Descripción general

El sistema toma como entrada un dataset $D = \{(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}$ y una función de pérdida \mathcal{L} y una o varias métricas de equidad F_1, F_2, \dots, F_n . El objetivo del sistema es producir un modelo de clasificación que es a la vez efectivo según L y justo según F_1, F_2, \dots, F_n . El sistema consiste en dos fases fundamentales. La primera es responsable de generar una colección de modelos, cada uno llamado modelo base. Esta colección es construida optimizando una función de pérdida \mathcal{L}_1 , mientras se asegura *diversidad* a lo largo de toda la población. La segunda fase es responsable de producir un modelo de clasificación. Este modelo es generado ensamblando la colección de modelos base de forma tal que optimice su efectividad según L_2 , a la vez que es lo más *justo* posible según F_1, F_2, \dots, F_n . En el contexto de esta tesis se asume $L = L_1 = L_2$. Las secciones 2.2 y 2.4 abordan con más detalles la primera y segunda fase, respectivamente.

2.2. Generación de modelos base

En esta fase al sistema se le da la tarea de generar N modelos para ajustar D de acuerdo a la pérdida \mathcal{L} .

La Definición 1.1 se modifica para buscar una colección de modelos en lugar de un solo modelo, sujeto a una métrica de diversidad \mathcal{D} . Esto es, se desea encontrar una colección de modelos base (modelos que optimicen la efectividad en el dataset D de acuerdo a la función de pérdida \mathcal{L}) mientras garantiza algunas diferencias entre sus hipótesis utilizando la métrica \mathcal{D} . Asegurar diversidad en la colección de modelos base es importante porque los métodos de ensemble no son capaces de mejorar su rendimiento si todos los modelos base tienen exactamente la misma hipótesis, i.e.,

todos realizan las mismas predicciones.

El procedimiento aplicado para generar la coleccion de modelos base esta resumido por la funcion *GenerateBaseModels* `GenerateBaseModels`. El espacio de algoritmos y hiperparametros es explorado utilizando una estrategia de busqueda pre-seleccionada. Todo esto es capturado por la funcion **explore**. Luego de evaluar las arquitecturas generadas y estimar la diversidad entre los modelos actualmente seleccionados y la nueva generacion de modelos, la coleccion de modelos base es actualizada para ajustarse a su capacidad N . Todo esto es capturado por la funcion **reselect**.

Función `GenerateBaseModels($N, D, A, \Lambda, \mathcal{L}, \mathcal{D}$)`

```

1 set base_models  $\leftarrow \emptyset$ 
2 para generation  $\in \text{explore}(A, \Lambda)$  hacer
3   scores  $\leftarrow \emptyset$ 
4   para  $A_\lambda^{(j)} \in \text{generation}$  hacer
5     scores(j)  $\leftarrow \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K \mathcal{L}(A_\lambda^{(j)}, D_{train}^{(i)}, D_{valid}^{(i)})$ 
6   fin
7   diversity  $\leftarrow \mathcal{D}(\text{base\_models} \cup \text{generation}, D)$ 
8   base_models  $\leftarrow \text{reselect}(\text{base\_models} \cup \text{generation}, \text{scores}, \text{diversity}, N)$ 
9 fin
10 devolver base_models
```

Para explorar inteligentemente el espacio de algoritmos y hiperparametros, i.e., para resolver el problema *CASH* modificado, se utiliza la implementacion de *Probabilistic Grammatical Evolution Search* 1.1 presente en AutoGOAL. AutoGOAL se refiere a los modelos que construye como pipelines, dado que cada uno de ellos esta formado por algoritmos interconectados. La busqueda comienza con una estrategia de muestreo aleatorio, pero segun evalua mas pipelines, modifica el modelo de muestreo probabilista para que pipelines similares a los mejores encontrados hasta el momento, sean generados con mayor frecuencia. El espacio de algoritmos y hiperparametros utilizados es el utilizado por defecto en AutoGOAL, el cual incluye varios algoritmos clasicos de aprendizaje de maquina presentes en las diferentes bibliotecas utilizadas por AutoGOAL.

Para reseleccionar la coleccion de modelos base, i.e. la coleccion de pipelines de AutoGOAL, un enfoque greedy es utilizado y estudiado. La funcion **reselect** resume la estrategia propuesta. El algoritmo siempre incluye el modelo que mejor se desempeña de acuerdo a L en la seleccion. Cada iteracion siguiente añade el modelo no todavia seleccionado, que maximiza la diversidad respecto a todos los modelos anteriormente seleccionados. El enfoque greedy no garantiza que la coleccion final logre la mejor posible diversidad respecto a \mathcal{D} . La precision tampoco es tomada en

cuenta, excepto para seleccionar el modelo de mejor desempeño.

Función $\text{reselect}(M, \text{scores}, \text{diversity}, N)$	
<hr/>	
1	set $R \leftarrow \emptyset$
2	set $R^{(0)} \leftarrow \underset{m^{(j)} \in M}{\operatorname{argmin}} \text{scores}^{(j)}$
3	para $r \leftarrow 1$ a N hacer
4	$\left \begin{array}{l} R^{(r)} \leftarrow \underset{(m^{(j)} \in M \setminus R)}{\operatorname{argmax}} \sum_{(m^{(i)} \in R)} \text{diversity}^{(i,j)} \end{array} \right.$
5	fin
6	devolver $R^{(0)} \dots R^{(N)}$

Tres metodos *reselect* de referencia fueron implementaods para realizar comparaciones entre las metricas de diversidad *disagreement* y *double-fault*, las cuales son presentadas en la seccion 2.3.

- **Shuffle**: La coleccion de modelso base es construida barajando aleatoriamente la selecciona ctual de modelos base y los nuevos encontrados. Los primeros N modelos luego de barajear son seleccionados para la siguiente generacion.
- **Arbitrary**: La coleccion de modelos base es construida de la misma forma que con la estrategia *shuffle*, pero el modelo de mejor rendimiento siempre es incluido en la coleccion de modelos base seleccionados.
- **Best**: La coleccion de modelos base es construida a partir de seleccionar los modelos de mejor rendimiento entre los previamente seleccionados y los recién encontrados.

A continuacion, la seccion 2.3 provee algunos detalles acerca de las metricas de diversidad estudiadas en este trabajo.

2.3. Metricas de diversidad

Dos metricas fueron implementadas para estimar la diversidad de una coleccion dada de modelos base. Ambas de ellas precomputan una matriz de clasificaciones incorrectas, la cual es usada entonces para computar una metrica que aporta informacion sobre la diversidad entre los modelos base dos a dos. La matriz de clasificaciones incorrectas se construye de la siguiente manera.

$$M_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{si el modelo } j \text{ correctamente clasifica el ejemplo } i \text{ } (D_{valid}) \\ -1 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.1)$$

Las siguientes metricas son computadas entre pares de modelos base para estimar cuand diferentes son sus hipotesis, y por tanto la diversidad de la coleccion incluyendo a ambos a la vez.

Disagreement. Esta mide la frecuencia con la cual uno de los mdelos falla cuando el otro no lo hace, y viceversa. Mientras mas alto el valor de la metrica, mas diferentes son los modelos.

$$disagreement(m^{(a)}, m^{(b)}) = \frac{|\{M_{i,a} \neq M_{i,b} | s^{(i)} \in D_{valid}^{(*)}\}|}{|D_{valid}^{(*)}|} \quad (2.2)$$

Double Fault. Esta mide cuan a menudo ambos modelos fallan a la vez. Mientras mas alta esta medida mayor la diferencia entre ambos.

$$double - fault(m^{(a)}, m^{(b)}) = 1 - \frac{|\{M_{i,a} = M_{i,b} = -1 | s^{(i)} \in D_{valid}^{(*)}\}|}{|D_{valid}^{(*)}|} \quad (2.3)$$

2.4. Ensamblado inteligente de modelos justos

En esta fase el sistema tiene la tarea de combinar las predicciones de N modelos para ajustar D de acuerdo tanto a la perdida \mathcal{L} como a las metricas de equidad F_1, \dots, F_n .

El sistema una vez mas resuelve un problema de *CASH* como se presenta en 1.1. En lugar de trabajar directamente en $D = \{(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}$, esta vez el sistema trabaja sobre $D^e = \{(y_1^{(*)}, y_1), \dots, (y_n^{(*)}, y_n)\}$, donde $y_i^{(*)} = [y_i^{(0)}, \dots, y_i^{(n)}]$ y cada $y_i^{(j)}$ es la salida de un modelo base j para el ejemplo i , $i \in [1 \dots n]$, $j \in [1 \dots N]$. En otras palabras, al sistema se le pide encontrar la mejor combinacion E^* de algoritmos y sus hiperparametros para ensamblar las salidas de los modelos base. Particularmente, un espacio de algoritmos especializados en estrategias de ensamblados y sus hiperparametros es utilizado en esta fase. Estas estrategias son presentadas a continuacion.

- *Voting Classifiers.* Asigna la etiqueta mas comun entre las predichas por los modelos base. En caso de empate, se selecciona la etiqueta producida por el modelo mas preciso entre los modelos base.
- *Overfitted Voting Classifiers.* Asigna a cada combinacion de salida de los modelos base la etiqueta que asegura el mejor desempeño en D_{train}^e . En el momento de prediccion, si una combinacion no antes vista es encontrada, este selecciona la etiqueta predicha por el modelo base mas preciso (ignorando si esta fue la etiqueta mas votada).

- *ML Voting Classifiers*. Ajusta un modelo de aprendizaje de maquina sobre D_{train}^e para optimizar \mathcal{L} . La arquitectura del modelo de aprendizaje de maquina es tomado del pool de algoritmos por defecto de AutoGOAL.

Para explorar el espacio de algoritmos e hiperparametros se realiza una modificacion a *Probabilistic Grammatical Evolution*(1.1), en la cual la fase de seleccionar los n individuos de la poblacion actual que pasan a la siguiente generacion, se realiza utilizando *Non-dominated sorting* 1.5.1 y *Crowding distance* 1.5.1, de la misma forma en que se utiliza en *NSGA-II*. De esta forma la funcion de seleccion, y por tanto la exploracion del espacio, optimizan simultaneamente las metricas de equidad y la funcion de perdida.

Capítulo 3

Detalles de Implementación y Experimentos

Conclusiones

Conclusiones

Recomendaciones

Recomendaciones

Bibliografía

- Agarwal, A., Beygelzimer, A., Dudík, M., Langford, J. & Wallach, H. (2018). A reductions approach to fair classification. *International Conference on Machine Learning*, 60-69 (vid. pág. 4).
- Agarwal, A., Dudík, M. & Wu, Z. S. (2019). Fair regression: Quantitative definitions and reduction-based algorithms. *International Conference on Machine Learning*, 120-129 (vid. pág. 4).
- Back, T. (1996). *Evolutionary algorithms in theory and practice: evolution strategies, evolutionary programming, genetic algorithms*. Oxford university press. (Vid. pág. 10).
- Breiman, L. (1996). Bagging predictors. *Machine learning*, 24(2), 123-140 (vid. pág. 5).
- Calmon, F., Wei, D., Vinzamuri, B., Natesan Ramamurthy, K. & Varshney, K. R. (2017). Optimized Pre-Processing for Discrimination Prevention. En I. Guyon, U. V. Luxburg, S. Bengio, H. Wallach, R. Fergus, S. Vishwanathan & R. Garnett (Eds.), *Advances in Neural Information Processing Systems*. Curran Associates, Inc. <https://proceedings.neurips.cc/paper/2017/file/9a49a25d845a483fae4be7e341368e36-Paper.pdf>. (Vid. pág. 4)
- Chiappa, S. & Isaac, W. S. (2018). A causal Bayesian networks viewpoint on fairness. *IFIP International Summer School on Privacy and Identity Management*, 3-20 (vid. pág. 5).
- Chowdhury, N. K., Kabir, M. A., Rahman, M. M. & Islam, S. M. S. (2022). Machine learning for detecting COVID-19 from cough sounds: An ensemble-based MCDM method. *Computers in Biology and Medicine*, 145, 105405. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.compbiomed.2022.105405> (vid. pág. 6)
- Deb, K., Pratap, A., Agarwal, S. & Meyarivan, T. (2002). A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 6(2), 182-197. <https://doi.org/10.1109/4235.996017> (vid. pág. 10)
- Dietterich, T. G. (2000). Ensemble Methods in Machine Learning. *Multiple Classifier Systems*, 1-15 (vid. pág. 5).

- Dimitrakakis, C., Liu, Y., Parkes, D. C. & Radanovic, G. (2019). Bayesian Fairness. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 33(01), 509-516. <https://doi.org/10.1609/aaai.v33i01.3301509> (vid. págs. 5, 6)
- Donini, M., Oneto, L., Ben-David, S., Shawe-Taylor, J. S. & Pontil, M. (2018). Empirical risk minimization under fairness constraints. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 31 (vid. pág. 4).
- Dwork, C., Hardt, M., Pitassi, T., Reingold, O. & Zemel, R. (2012). Fairness through awareness. *Proceedings of the 3rd innovations in theoretical computer science conference*, 214-226 (vid. pág. 3).
- Elsken, T., Metzen, J. H. & Hutter, F. (2018). Neural Architecture Search: A Survey. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1808.05377> (vid. pág. 7)
- Estévez Velarde, S., Gutiérrez, Y., Montoyo, A. & Almeida Cruz, Y. (2020). Automatic Discovery of Heterogeneous Machine Learning Pipelines: An Application to Natural Language Processing, 3558-3568. <https://doi.org/10.18653/v1/2020.coling-main.317> (vid. pág. 7)
- Estévez-Velarde, S., Gutiérrez, Y., Almeida-Cruz, Y. & Montoyo, A. (2020). General-purpose hierarchical optimisation of machine learning pipelines with grammatical evolution. *Information Sciences*. <https://doi.org/10.1016/j.ins.2020.07.035> (vid. pág. 7)
- Feurer, M., Klein, A., Eggenberger, K., Springenberg, J., Blum, M. & Hutter, F. (2015). Efficient and robust automated machine learning. *Advances in neural information processing systems*, 28 (vid. pág. 7).
- Friedler, S. A., Scheidegger, C. & Venkatasubramanian, S. (2016). On the (im) possibility of fairness. *arXiv preprint arXiv:1609.07236* (vid. pág. 3).
- Hillermeier, C. y col. (2001). *Nonlinear multiobjective optimization: a generalized homotopy approach* (Vol. 135). Springer Science & Business Media. (Vid. pág. 9).
- Huang, G., Li, Y., Pleiss, G., Liu, Z., Hopcroft, J. E. & Weinberger, K. Q. (2017). Snapshot Ensembles: Train 1, get M for free. *CoRR*, abs/1704.00109. <http://arxiv.org/abs/1704.00109> (vid. pág. 6)
- Jin, H., Song, Q. & Hu, X. (2018). Efficient Neural Architecture Search with Network Morphism. *CoRR*, abs/1806.10282. <http://arxiv.org/abs/1806.10282> (vid. pág. 7)
- Jin, W., Dong, S., Yu, C. & Luo, Q. (2022). A data-driven hybrid ensemble AI model for COVID-19 infection forecast using multiple neural networks and reinforced learning. *Computers in Biology and Medicine*, 146, 105560. <https://doi.org/10.1016/j.combiomed.2022.105560> (vid. pág. 6)
- Kamiran, F. & Calders, T. (2011). Data preprocessing techniques for classification without discrimination. *Knowledge and Information Systems*, 33, 1-33 (vid. pág. 4).

- Kearns, M., Neel, S., Roth, A. & Wu, Z. S. (2018). Preventing fairness gerrymandering: Auditing and learning for subgroup fairness. *International Conference on Machine Learning*, 2564-2572 (vid. págs. 4, 5).
- Keras. (s.f.). <https://github.com/fchollet/keras>. (Vid. pág. 7)
- Kleinberg, J. (2018). Inherent trade-offs in algorithmic fairness. *Abstracts of the 2018 ACM International Conference on Measurement and Modeling of Computer Systems*, 40-40 (vid. pág. 3).
- Kuhn, H. W. & Tucker, A. W. (2014). Nonlinear programming. *Traces and emergence of nonlinear programming* (pp. 247-258). Springer. (Vid. pág. 9).
- Livieris, I. E., Pintelas, E., Stavroyiannis, S. & Pintelas, P. (2020). Ensemble deep learning models for forecasting cryptocurrency time-series. *Algorithms*, 13(5), 121 (vid. pág. 6).
- Loper, E. & Bird, S. (2002). NLTK: The Natural Language Toolkit. *CoRR*, cs.CL/0205028. <https://arxiv.org/abs/cs/0205028> (vid. pág. 7)
- MacCarthy, M. (2018). Standards of Fairness for Disparate Impact Assessment of Big Data Algorithms. *Other Information Systems & eBusiness eJournal* (vid. pág. 4).
- Mégane, J., Lourenço, N. & Machado, P. (2021). Probabilistic grammatical evolution. *European Conference on Genetic Programming (Part of EvoStar)*, 198-213 (vid. pág. 8).
- Miettinen, K. (2012). *Nonlinear multiobjective optimization* (Vol. 12). Springer Science & Business Media. (Vid. pág. 9).
- Paszke, A., Gross, S., Massa, F., Lerer, A., Bradbury, J., Chanan, G., Killeen, T., Lin, Z., Gimelshein, N., Antiga, L. y col. (2019). Pytorch: An imperative style, high-performance deep learning library. *Advances in neural information processing systems*, 32 (vid. pág. 7).
- Pedregosa, F., Varoquaux, G., Gramfort, A., Michel, V., Thirion, B., Grisel, O., Blondel, M., Prettenhofer, P., Weiss, R., Dubourg, V. y col. (2011). Scikit-learn: Machine learning in Python. *the Journal of machine Learning research*, 12, 2825-2830 (vid. pág. 7).
- Polikar, R. (2006). Ensemble based systems in decision making. *IEEE Circuits and systems magazine*, 6(3), 21-45 (vid. pág. 5).
- Schapire, R. E. (1990). The strength of weak learnability. *Machine learning*, 5(2), 197-227 (vid. pág. 5).
- Schütze, O., Dell'Aere, A. & Dellnitz, M. (2005). On Continuation Methods for the Numerical Treatment of Multi-Objective Optimization Problems. En J. Branke, K. Deb, K. Miettinen & R. E. Steuer (Eds.), *Practical Approaches to Multi-Objective Optimization* (pp. 1-15). Schloss Dagstuhl – Leibniz-Zentrum für Informatik. <https://doi.org/10.4230/DagSemProc.04461.16>. (Vid. pág. 9)
- Keywords: multi-objective optimization, continuation, k-manifolds

- Thomas, P. S., Castro da Silva, B., Barto, A. G., Giguere, S., Brun, Y. & Brunskill, E. (2019). Preventing undesirable behavior of intelligent machines. *Science*, 366(6468), 999-1004 (vid. pág. 5).
- Thornton, C., Hutter, F., Hoos, H. H. & Leyton-Brown, K. (2013). Auto-WEKA: Combined Selection and Hyperparameter Optimization of Classification Algorithms. *Proceedings of the 19th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, 847-855. <https://doi.org/10.1145/2487575.2487629> (vid. pág. 6)
- Witten, I., Hall, M., Frank, E., Holmes, G., Pfahringer, B. & Reutemann, P. (2009). The WEKA data mining software: An update. *SIGKDD Explorations*, 11, 10-18. <https://doi.org/10.1145/1656274.1656278> (vid. pág. 7)
- Zafar, M. B., Valera, I., Gomez-Rodriguez, M. & Gummadi, K. P. (2019). Fairness Constraints: A Flexible Approach for Fair Classification. *Journal of Machine Learning Research*, 20(75), 1-42. <http://jmlr.org/papers/v20/18-262.html> (vid. pág. 4)
- Zafar, M. B., Valera, I., Rogriguez, M. G. & Gummadi, K. P. (2017). Fairness constraints: Mechanisms for fair classification. *Artificial intelligence and statistics*, 962-970 (vid. pág. 4).
- Zemel, R., Wu, Y., Swersky, K., Pitassi, T. & Dwork, C. (2013). Learning fair representations. *International conference on machine learning*, 325-333 (vid. pág. 4).