

# Aprendizaje Automático

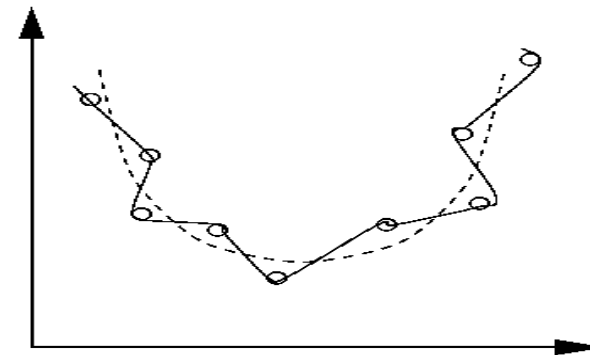
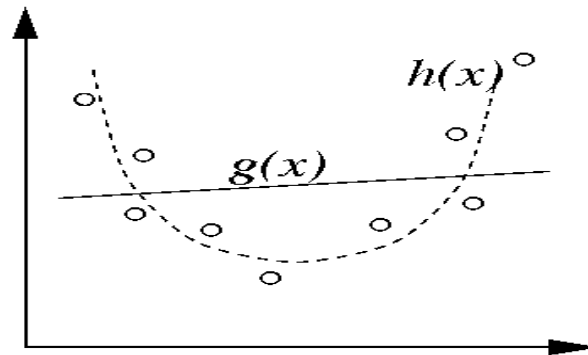
Departamento de Informática – UC3M

TUTORIAL 2 – Ajuste de Hiperparámetros

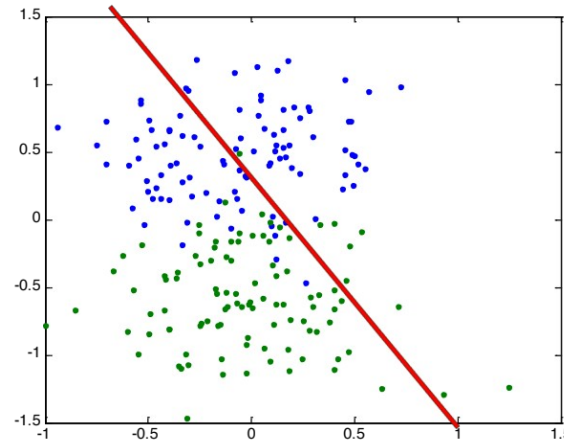
# Tutorial 2

## Objetivo

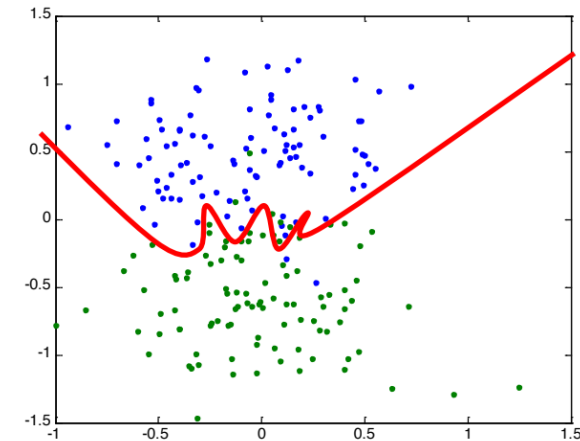
### REGRESIÓN



### CLASIFICACIÓN



Subadaptada (*underfitting*)

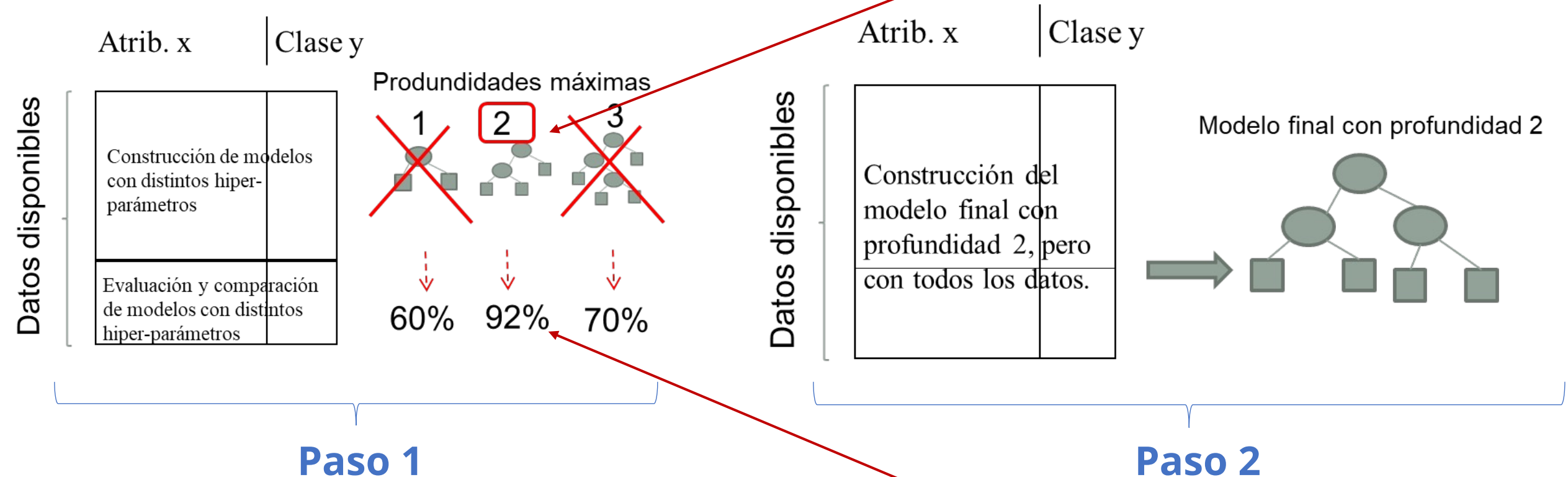


Sobreadaptada (*overfitting*)

# Tutorial 2

## Proceso

Inner. Evaluamos ajuste parámetros

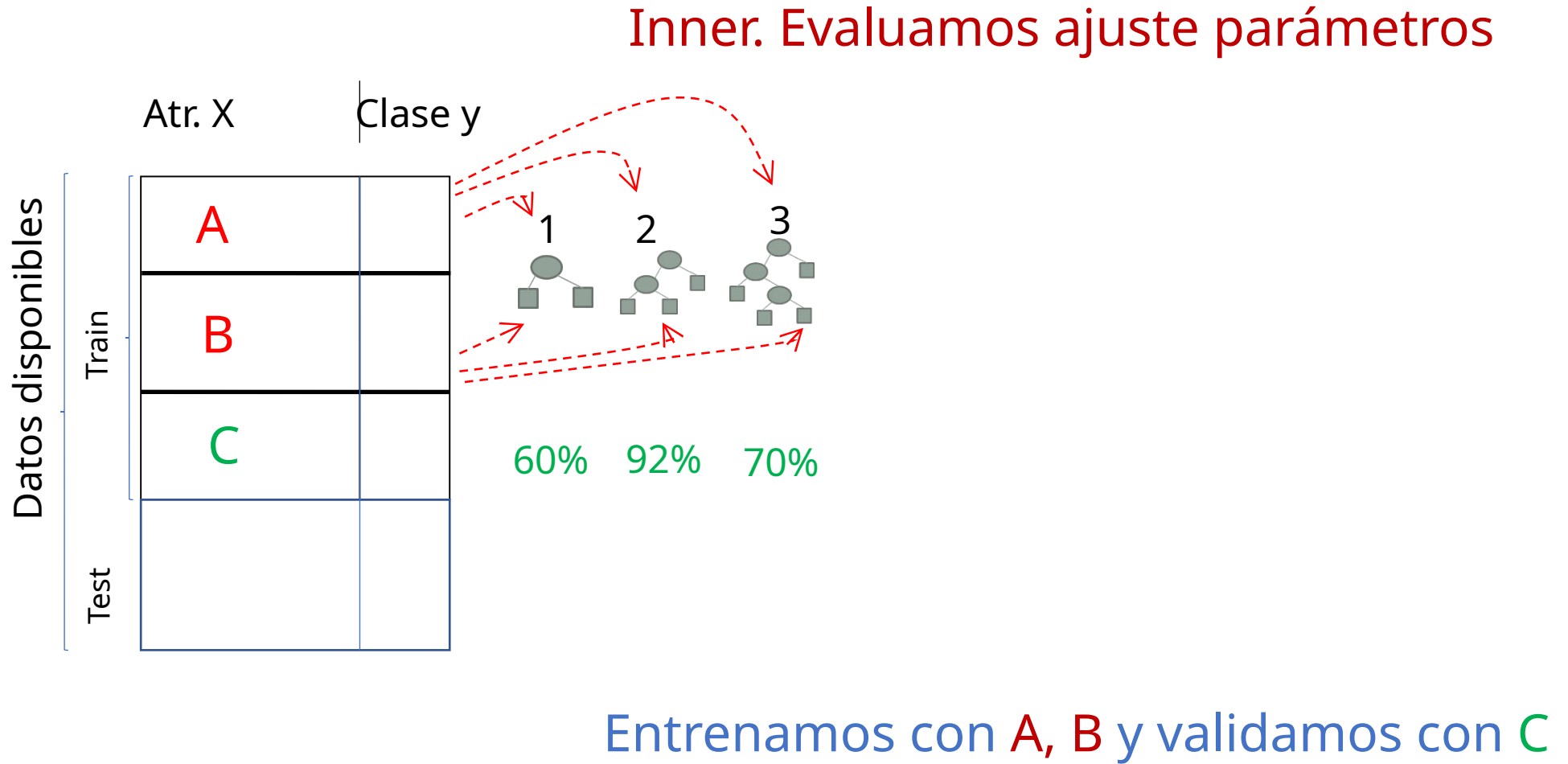


Outer. Evaluamos el modelo

(holdout o cross-validation)

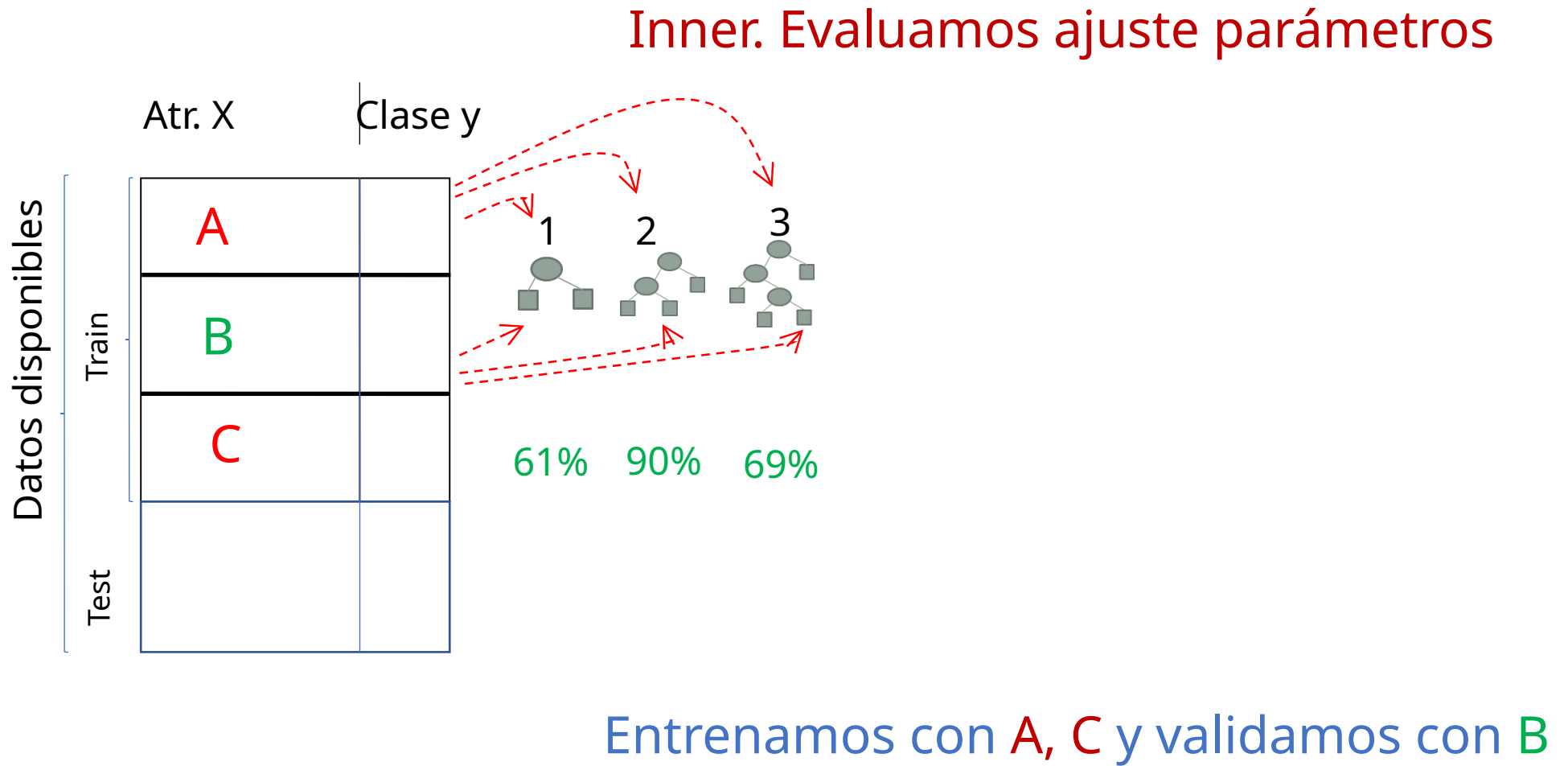
# Tutorial 2

## Proceso



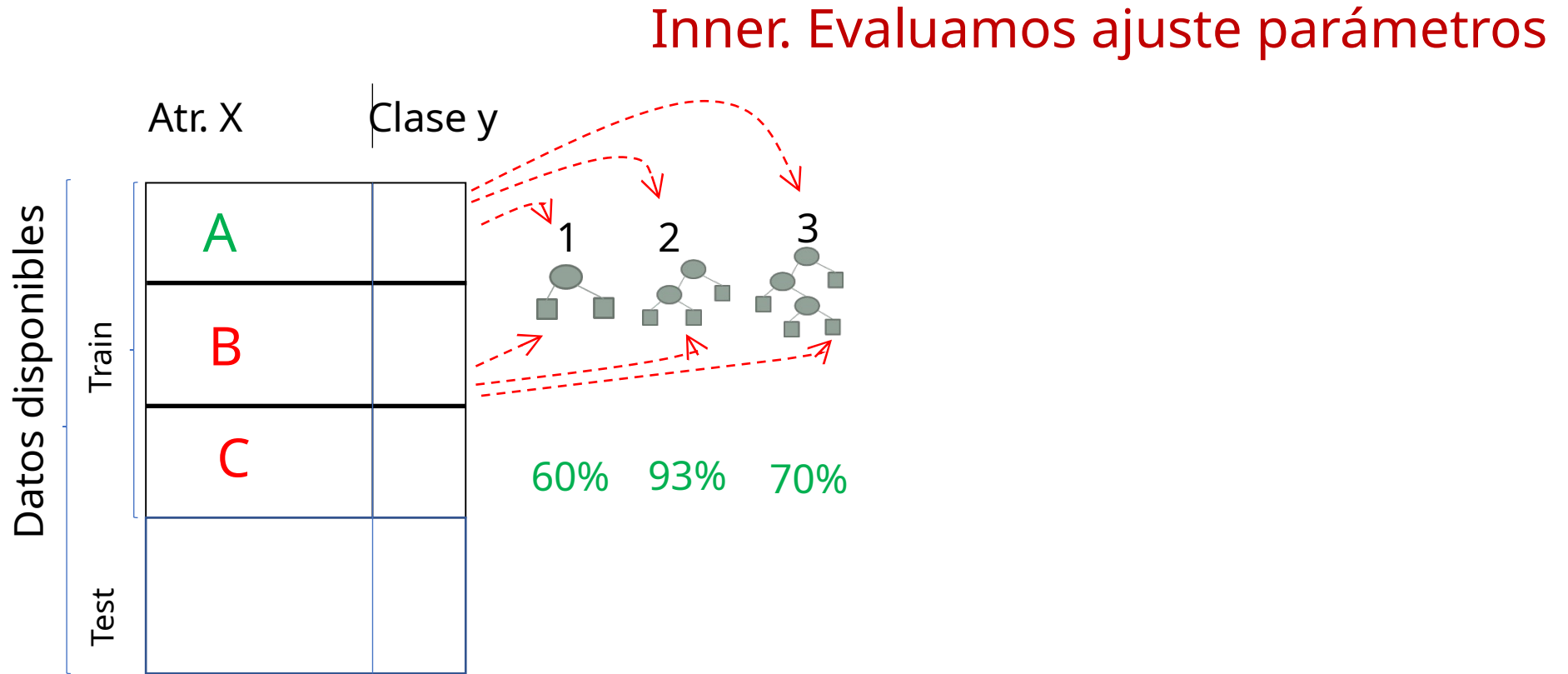
# Tutorial 2

## Proceso



# Tutorial 2

## Proceso



Entrenamos con B, C y validamos con A

# Tutorial 2

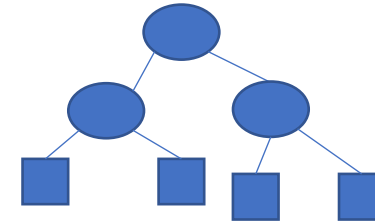
## Proceso

Inner. Evaluamos ajuste parámetros

| 1      | 2       | 3   |
|--------|---------|-----|
| 60%    | 93%     | 71% |
| 61%    | 90%     | 69% |
| 60%    | 92%     | 70% |
| 60.33% | 91.66 % | 70% |

|       | Atr. x | Clase y |
|-------|--------|---------|
| Train |        |         |
|       |        |         |
|       |        |         |
| Test  |        |         |
|       |        |         |

Modelo con max depth = 2

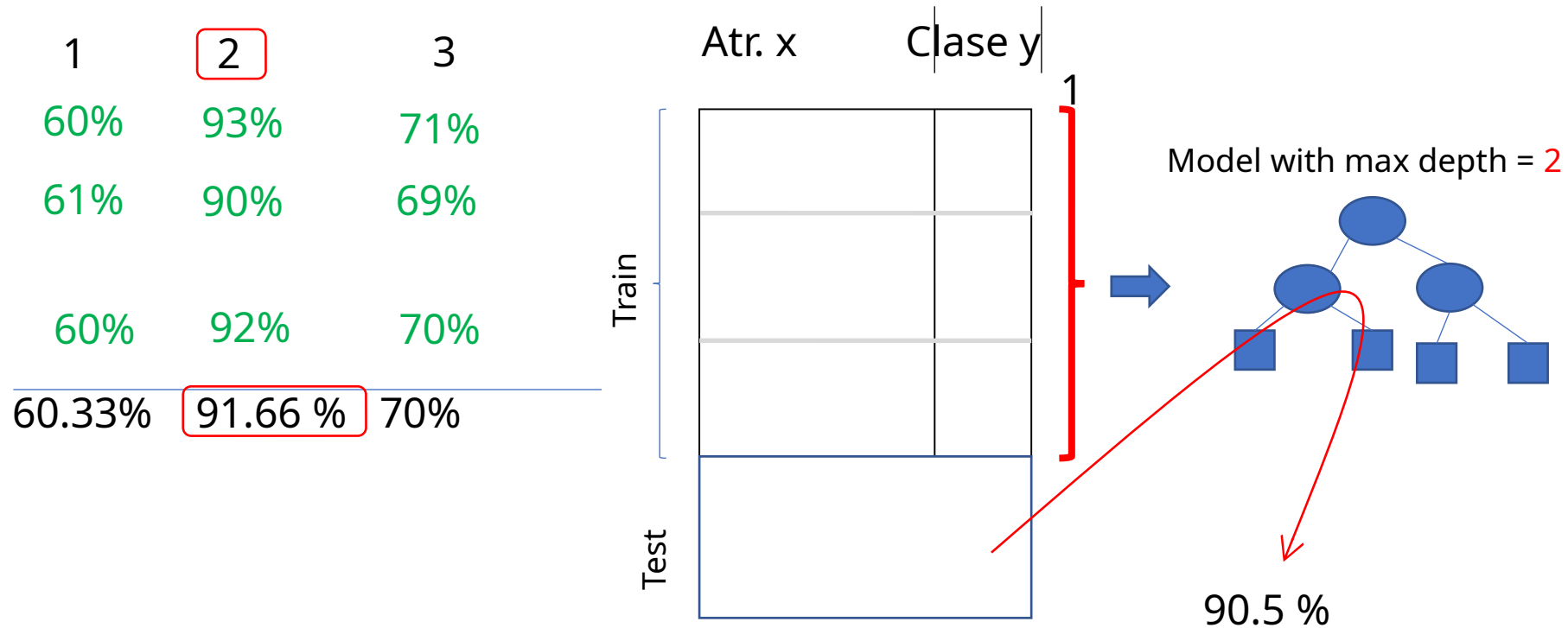


- Conocida la mejor max\_depth, se entrena un modelo con los 3 folds de Train.

# Tutorial 2

## Proceso

Outer. Evaluamos el modelo

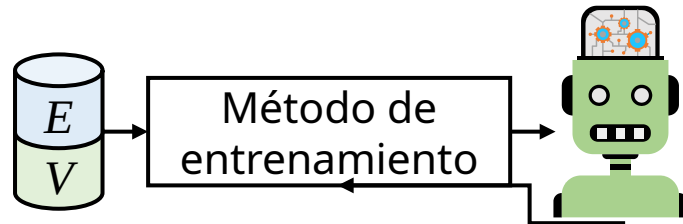
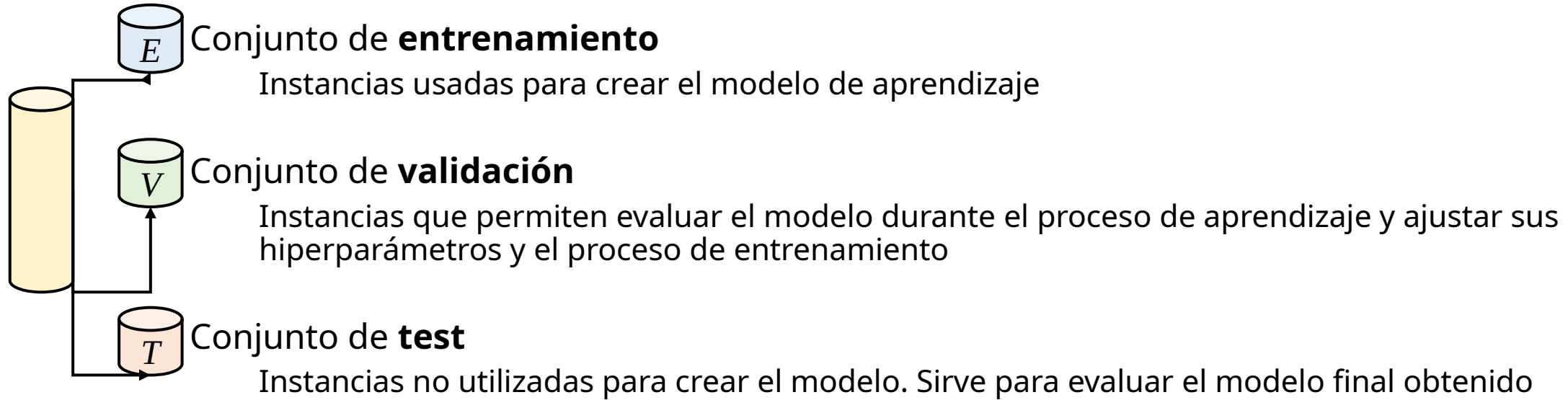


- Por último, ese modelo se evalúa con la partición de test.

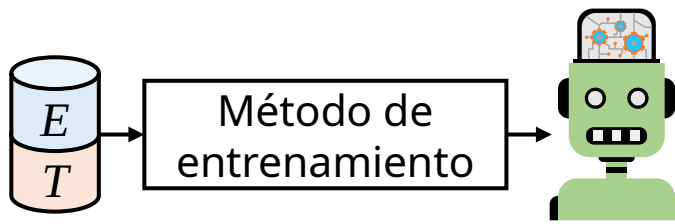


# Tutorial 2

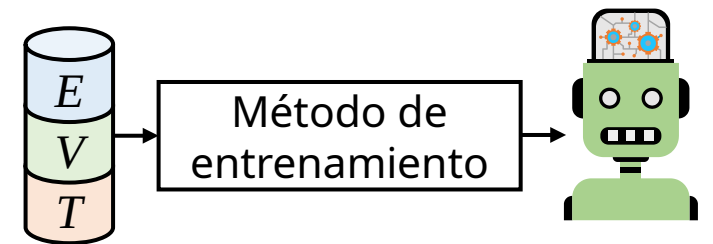
## Ajuste de Hiperparámetros



**Ajuste de Hiperparámetros**



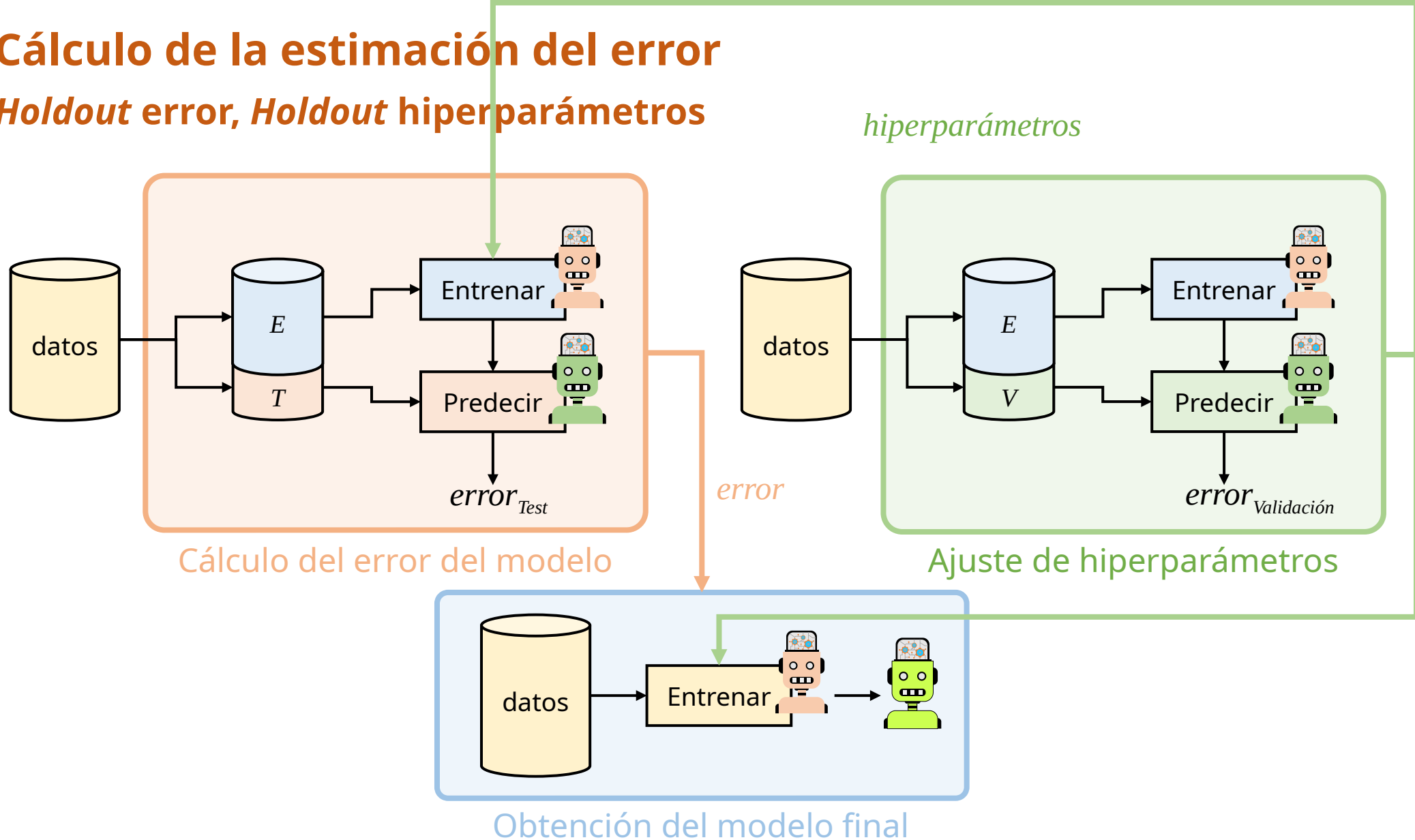
**Cálculo Estimación del Error**



**Creación del Modelo Final**

# Tutorial 2

## Cálculo de la estimación del error *Holdout error, Holdout hiperparámetros*



# Tutorial 2

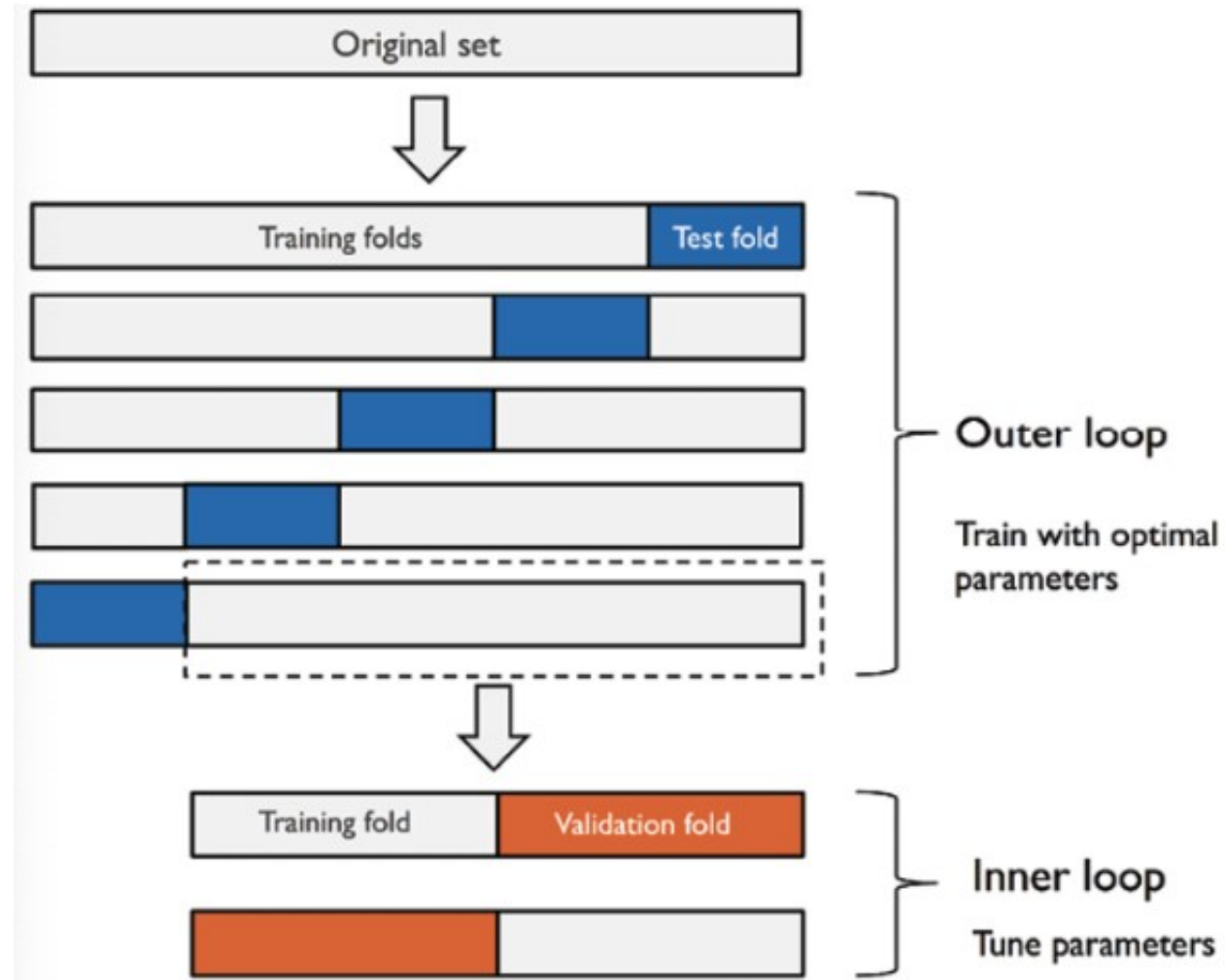
## Dos bucles

- Hay que diferenciar entre la "**evaluación del modelo**" (evaluación externa o "**outer**") y la "**evaluación para el ajuste de hiper-parámetros**" (evaluación interna o "**inner**")
- Pregunta:
  - Evaluación del modelo (outer, externa): 5 folds
  - Ajuste de hiper-parámetros (inner, interna): 2 folds. Queremos elegir entre profundidad máxima de 1, 2, 3, o 6.
  - ¿Cuántos modelos se construirán en total?: 3, 4, 15, 45 60, 63

$$5 \times (2 \times 4 + 1) = 45$$

# Tutorial 2

## Dos bucles



## Tutorial 2

### Métodos de búsqueda. Grid Search

```
for(maxdepth in c(2,4,6,8)){  
  for(minsplit in c(2,4,6)){  
    model = train(train_set, maxdepth, minsplit)  
    evaluation = "evaluate model with validation set"  
  }  
}
```

“Devolver (maxdepth, minsplit) del modelo con la mejor evaluación”

## Tutorial 2

### Métodos de búsqueda. Random Search

```
budget = 100 # El budget es la cantidad máxima de
combinaciones de hiperparámetros que queremos probar
while(budget>0){
    budget = budget - 1 # Ahora tenemos menos budget
    (maxdepth, minsplitt) = "get a random combination of
    hiper-parameter values"
    model = train(train_set, maxdepth, minsplitt)
    evaluation <- "evaluate model with validation set"
}
"Devolver (maxdepth, minsplitt) del modelo con la mejor evaluación"
```

# Tutorial 2

## Métodos de búsqueda. Especificación de espacios

- **Grid-search:** Especificar la lista de valores concretos a probar:

```
param_grid = {'max_depth' : [2, 4, 6, 8, 10, 14, 16],  
              'min_samples_split': [2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16] }
```

De la misma forma:

```
param_grid = {'max_depth' : list(range(2, 16, 2)),  
              'min_samples_split': list(range(2, 16, 2)) }
```

Categoricos:

```
param_grid = {'criterion' : ['gini', 'entropy']}
```

Reales:

```
param_grid = {'SVM__C': [0.1, 1, 10, 100, 1000, 10000]}
```

Booleanos:

```
param_grid = {'normalize': [True, False]}
```

# Tutorial 2

## Métodos de búsqueda. Especificación de espacios

- **Random Search:**

- Se puede especificar igualmente la lista de valores a probar
- Pero suele ser mejor especificar la distribución de probabilidad, de la cual se muestreen valores elegidos aleatoriamente:

```
from scipy.stats import uniform, expon
from scipy.stats import randint as sp_randint

# Search space with integer uniform distributions
param_grid = {'max_depth': sp_randint(2,16),
              'min_samples_split': sp_randint(2,16)}
```



## Tutorial 2

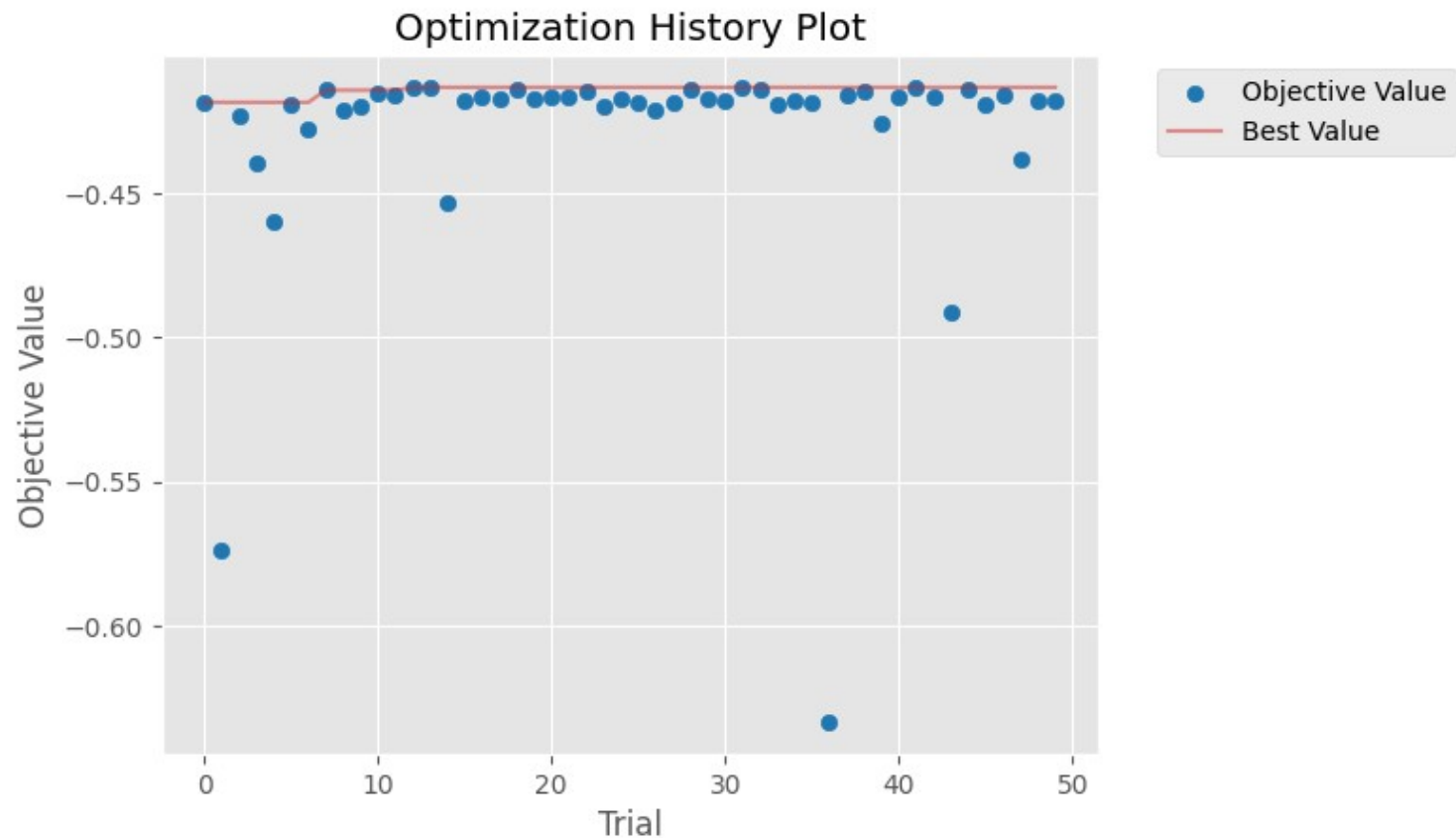
### Métodos de búsqueda. Análisis

- Si no encuentro resultados mejores que con los valores por omisión del hiper-parámetro, tal vez haya que **incrementar el budget** (seguir buscando).
- Si el valor encontrado para el hiper-parámetro está en el borde, tal vez haya que **incrementar el espacio de búsqueda**.

# Tutorial 2

## Métodos de búsqueda. Otros

- Evaluaciones en regiones prometedoras .



# Tutorial 2

## Métodos de búsqueda. Otros

- Una mejor solución: optimización bayesiana (OPTUNA), algoritmos genéticos...

