

Práctica 1: Clasificación de células

Lluís Camino Pérez

28 de diciembre de 2021

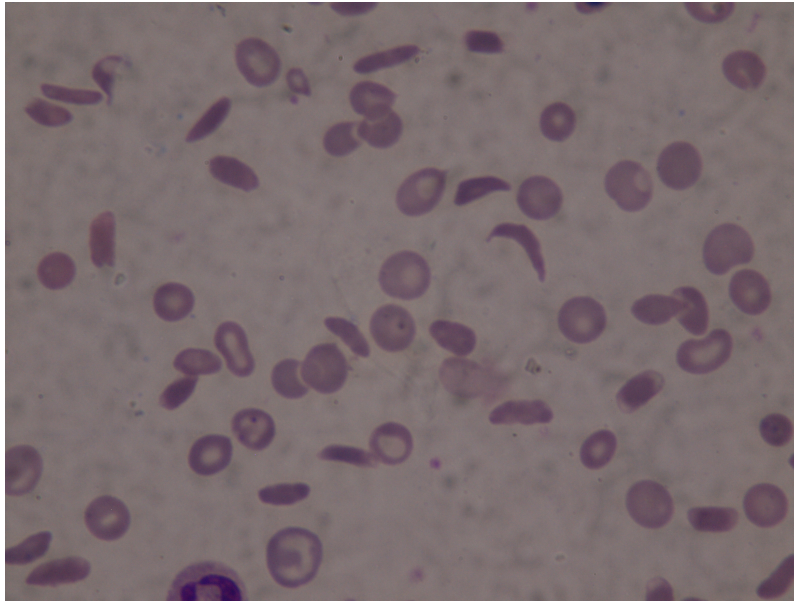
Índice

1. Enunciado del problema	2
2. Descripción del dataset	2
3. Importación del dataset	2
4. Análisis exploratorio de datos	3
5. Modelos de aprendizaje automático	4
5.1. División del conjunto de datos en train y test	4
5.2. Escalado de datos	4
5.3. Perceptrón, regresión logística, Random Forest y SVM básicos	4
5.4. Eliminación de características colineales	6
5.5. Ajuste de hiperparámetros en SVM	10
5.6. Modelo resultante	14

1. Enunciado del problema

La anemia de células falciformes es una alteración de la sangre que hace que los glóbulos rojos se deformen hasta adquirir una forma elongada, en vez de circular.

Esta práctica consiste en clasificar un conjunto de células en tres clases diferentes (circulares - c, elongadas - e u otras - o) usando el **mínimo de características posibles**.



2. Descripción del dataset

El dataset está formado por cuatro archivos CSV que contienen diferentes atributos sobre cada célula. Cada célula está identificada por un ID único, para poder ser reconocida en los diferentes archivos.

Los cuatro archivos de datos son los siguientes:

- `info.csv`: Contiene el path a la imagen de la célula en cuestión y su clase.
- `color.csv`: Contiene todas las características referentes al color extraídas de cada célula.
- `shape.csv`: Contiene todas las características referentes a la forma extraídas de cada célula.
- `texture.csv`: Contiene todas las características referentes a la textura extraídas de cada célula.

Estas características han sido extraídas mediante técnicas de visión por computador. El dataset está formado completamente por datos numéricos y no contiene datos inválidos o vacíos.

3. Importación del dataset

Para poder tratar este dataset de manera eficiente, se ha generado un nuevo fichero CSV que une los datos de los tres cuatro archivos de datos.

Para agregar los datos en un solo fichero, se ha desarrollado un script, que es capaz de unir en un archivo los datos de entrenamiento así como los datos de test.

4. Análisis exploratorio de datos

Una vez generado el fichero que une todos los datos de entrenamiento, se ha podido comprobar como este contiene 121 columnas (variables) y 445 filas (muestras).

```
[1]: from utils.utils import get_data
```

```
X, y = get_data()
```

```
X.shape
```

```
[1]: (445, 121)
```

A continuación podemos ver una muestra de las características del dataset.

```
[2]: X.head()
```

```
[2]:
```

	Blue mean	Green mean	Red mean	Blue std	Green std	Red std	Hue mean \
0	150.2912	118.8615	130.3895	5.2289	8.8786	8.4380	131.4628
1	158.2896	126.3923	144.6604	6.0253	10.1304	9.7674	136.0408
2	154.9417	127.0161	143.5692	5.2608	10.3249	9.3363	138.2455
3	151.9344	115.6617	132.1807	8.5218	13.4602	14.1391	132.4725
4	152.5914	123.9839	138.9914	4.7207	8.9208	8.7410	136.2724

	Saturation mean	Value mean	Hue std	...	Correlation3	Correlation4 \
0	53.4965	150.4433	10.9909	...	0.8115	0.8603
1	53.0517	159.4682	18.7224	...	0.7850	0.8285
2	46.8765	155.5516	15.9481	...	0.7870	0.8440
3	63.1637	153.4545	21.6648	...	0.7484	0.8133
4	48.6253	153.1451	14.3680	...	0.8152	0.8573

	Correlation5	Correlation6	Correlation7	Correlation8	Correlation9 \
0	0.8183	0.8570	0.8081	0.8603	0.7689
1	0.7694	0.8347	0.7821	0.8285	0.7014
2	0.8015	0.8651	0.7957	0.8440	0.7378
3	0.7608	0.8399	0.7608	0.8133	0.6838
4	0.8087	0.8626	0.8146	0.8573	0.7469

	Correlation10	Correlation11	Correlation12
0	0.7501	0.7577	0.7627
1	0.7150	0.7294	0.7250
2	0.7645	0.7440	0.7277
3	0.7264	0.6996	0.6775
4	0.7651	0.7627	0.7534

```
[5 rows x 121 columns]
```

5. Modelos de aprendizaje automático

Una vez explicado el enunciado del problema y visto cómo se han importado los datos, podemos pasar a explicar los diferentes pasos que se han seguido para obtener el modelo final.

5.1. División del conjunto de datos en train y test

En primer lugar, se ha hecho una división de los datos de entrenamiento en dos subconjuntos, para poder entrenar y posteriormente, evaluar el rendimiento del modelo.

Esta división se ha hecho con el método `train_test_split` de `scikit`, dándole al subconjunto de test un tamaño del 30 % del conjunto global.

```
[3]: from sklearn.model_selection import train_test_split

X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.3,
→random_state=57)
```

5.2. Escalado de datos

Adicionalmente, se han normalizado los datos mediante el escalado estándar usando la clase `StandardScaler`.

```
[4]: from utils.utils import scale_data

X_train, X_test = scale_data(X_train, X_test)
```

5.3. Perceptrón, regresión logística, Random Forest y SVM básicos

La primera estrategia para intentar construir un modelo de aprendizaje automático capaz de clasificar correctamente las células, ha sido entrenar cuatro clasificadores distintos utilizando todas las características del dataset.

Los clasificadores elegidos para esta primera fase son el perceptrón, regresión logística, Random forest y Support Vector Machine (SVM) linear.

5.3.1. Perceptrón

```
[5]: from utils.utils import print_model_performance_metrics
from sklearn.linear_model import SGDClassifier

clf = SGDClassifier(loss="perceptron", eta0=1, max_iter=1000, random_state=5)
clf.fit(X_train, y_train)
prediction = clf.predict(X_test)

print_model_performance_metrics(y_test, prediction)
```

```
[[49  0  1]
 [ 0 43  2]
 [ 1  2 36]]
```

Precision: 0.9552238805970149
Recall: 0.9552238805970149
F1 score: 0.9552238805970149

5.3.2. Regresión logística

```
[6]: clf = SGDClassifier(loss="log", eta0=1, max_iter=1000, random_state=5)
      clf.fit(X_train, y_train)
      prediction = clf.predict(X_test)

      print_model_performance_metrics(y_test, prediction)
```

```
[[48  0  2]
 [ 0 41  4]
 [ 1  0 38]]
Precision: 0.9526970896906932
Recall: 0.9477611940298507
F1 score: 0.9485273776308099
```

5.3.3. Random forest

```
[7]: from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier

      clf = RandomForestClassifier(max_depth=2, random_state=0)
      clf.fit(X_train, y_train)
      prediction = clf.predict(X_test)

      print_model_performance_metrics(y_test, prediction)
```

```
[[50  0  0]
 [ 0 41  4]
 [ 0  1 38]]
Precision: 0.9642857142857143
Recall: 0.9626865671641791
F1 score: 0.9627342216122453
```

5.3.4. Support Vector Machine (SVM)

```
[8]: from sklearn.svm import SVC

      svc = SVC(C=1.0, kernel="linear", probability=True, random_state=5)
      svc.fit(X_train, y_train)
      prediction = svc.predict(X_test)

      print_model_performance_metrics(y_test, prediction)
```

```
[[47  0  3]
 [ 0 42  3]]
```

```
[ 1  1 37]]
Precision: 0.9438056808978363
Recall:    0.9402985074626866
F1 score:  0.94111082894951
```

5.3.5. Comparación

Clasificador	F1 Score (test split)	F1 Score (test data)
Perceptrón	0.9552	0.4897
Regresión logística	0.9485	0.4955
Random forest	0.9627	0.2838
SVM	0.9402	0.1367

Podemos observar que, pese a que el rendimiento de todos los modelos parece ser bueno juzgando por el subconjunto de entrenamiento, una vez subido a la plataforma Kaggle para ser evaluado con el conjunto *test*, el rendimiento de ningún modelo es aceptable.

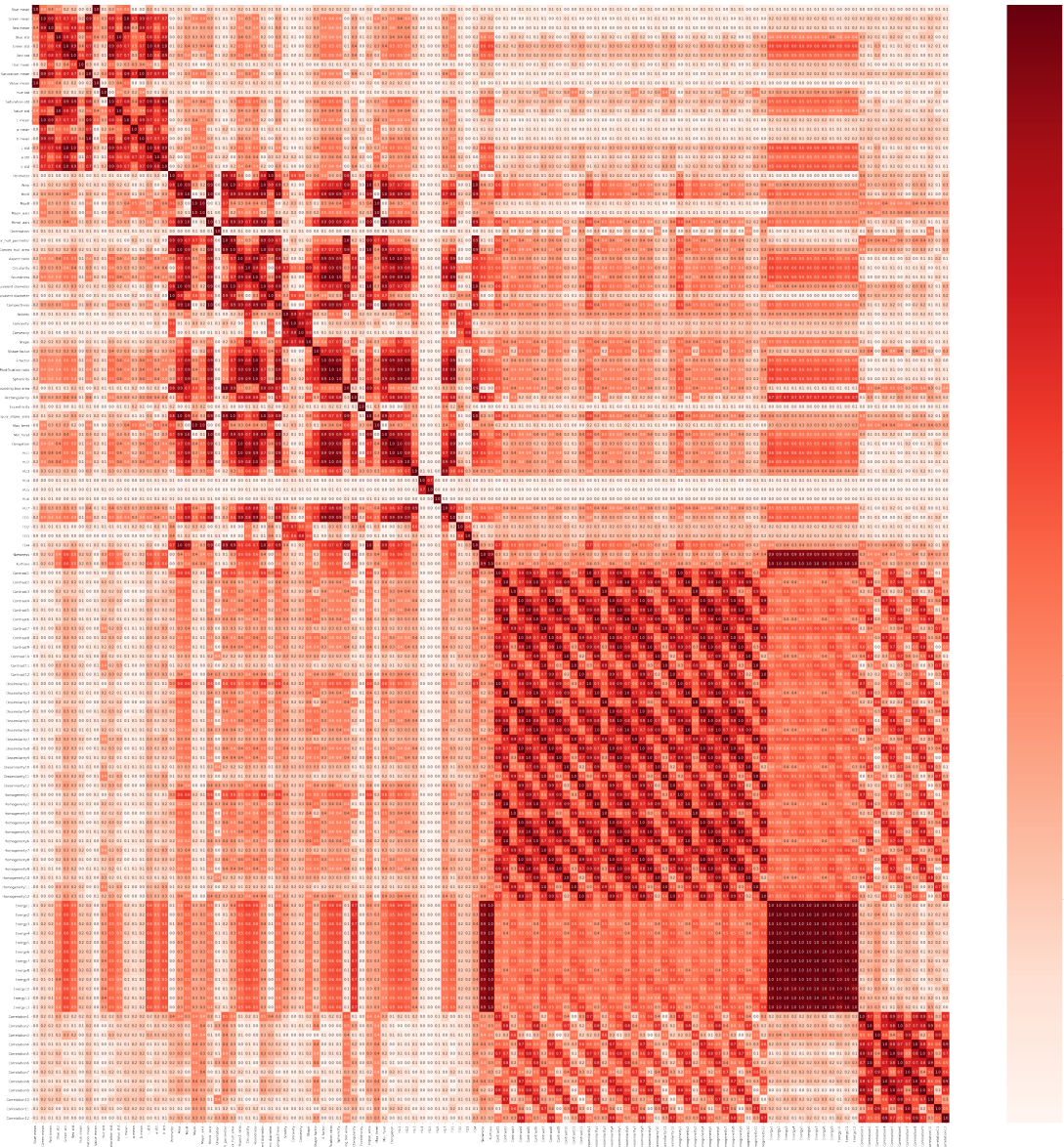
5.4. Eliminación de características colineales

Uno de los motivos que puede llevar a un rendimiento bajo de los modelos lineales, es la existencia de características colineales en el dataset.

Con el objetivo de estudiar la correlación entre las características del dataset, se ha dibujado un *heatmap* en forma de matriz, que indica la correlación entre las diferentes variables.

```
[9]: import seaborn as sns
      from matplotlib import pyplot as plt

      corr = X.corr().abs()
      plt.figure(figsize=(60, 60))
      sns.heatmap(corr, annot=True, cmap=plt.cm.Reds, fmt=".1f")
      plt.show()
```



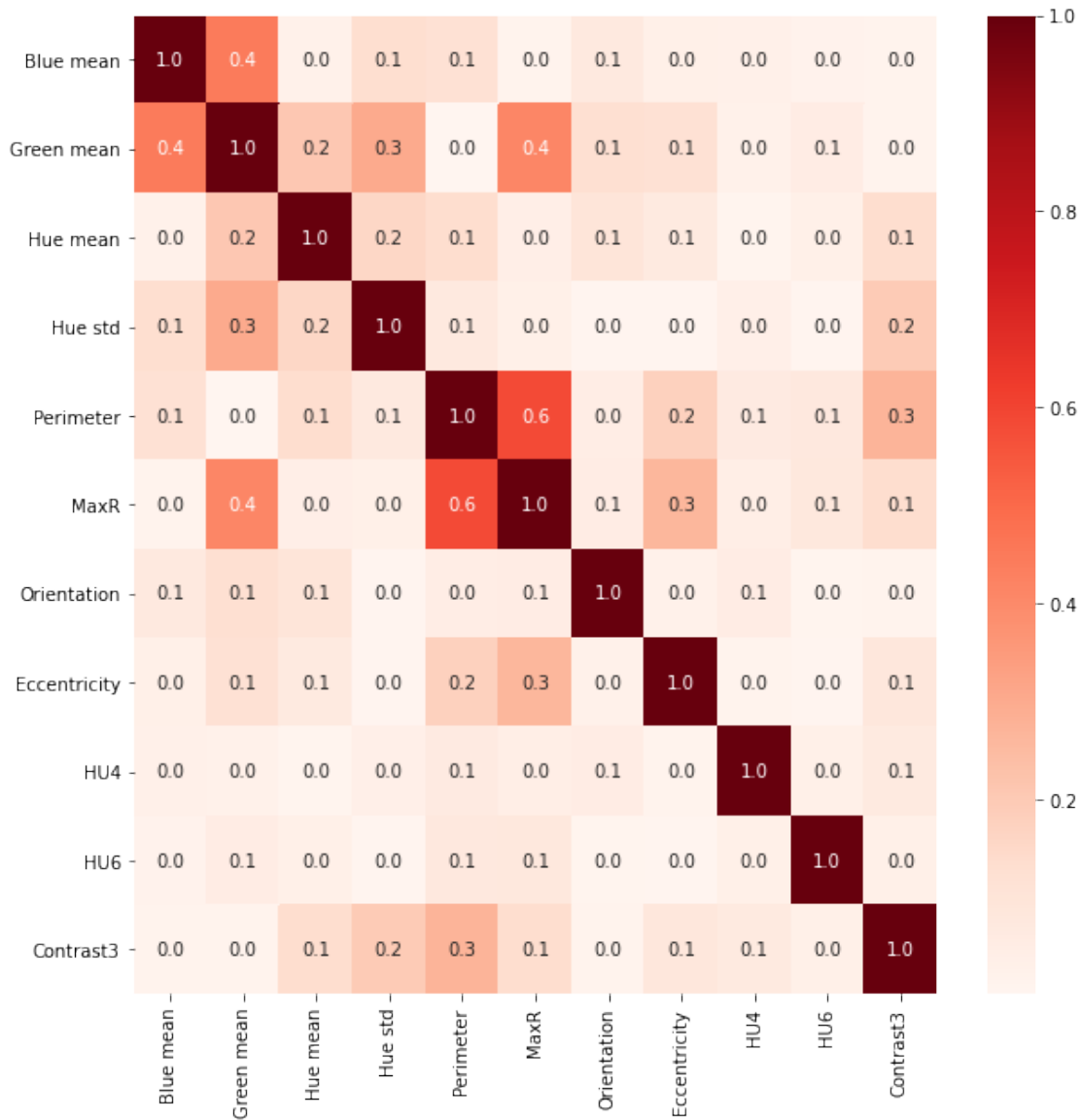
Se puede observar como existe colinealidad entre varias características diferentes. Esta podría ser una explicación de los bajos resultados de los modelos del punto anterior.

Para solucionar este problema, se ha optado por eliminar todas aquellas características colineales que superen un cierto umbral de correlación. Para este fin, se ha usado una adaptación de la función `remove_collinear_features` (Synergix).

El umbral a partir del cual se eliminarán las características colineales es 0.6. Una vez eliminadas las características colineales que superen este umbral, podemos volver a calcular la matriz de correlación, que ahora mostrará una baja correlación entre características diferentes.

```
[10]: from feature_selection.filter_method import remove_collinear_features

remove_collinear_features(X, 0.6)
plt.figure(figsize=(10, 10))
sns.heatmap(X.corr().abs(), annot=True, cmap=plt.cm.Reds, fmt=".1f")
plt.show()
```



Una vez realizado este proceso, podemos volver a entrenar los modelos del apartado anterior y comparar los nuevos resultados de rendimiento.

5.4.1. Perceptrón

```
[11]: from utils.utils import print_model_performance_metrics
      from sklearn.linear_model import SGDClassifier

      X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.3,
      →random_state=57)
      X_train, X_test = scale_data(X_train, X_test)
      clf = SGDClassifier(loss="perceptron", eta0=1, max_iter=1000, random_state=5)
      clf.fit(X_train, y_train)
      prediction = clf.predict(X_test)

      print_model_performance_metrics(y_test, prediction)

[[38  0 12]
 [ 1 38  6]
 [ 2  2 35]]
Precision: 0.8570610477295987
Recall:    0.8283582089552238
F1 score:  0.8333391710400528
```

5.4.2. Regresión logística

```
[12]: clf = SGDClassifier(loss="log", eta0=1, max_iter=1000, random_state=5)
      clf.fit(X_train, y_train)
      prediction = clf.predict(X_test)

      print_model_performance_metrics(y_test, prediction)

[[40  0 10]
 [ 2 42  1]
 [ 2  4 33]]
Precision: 0.8641156863901834
Recall:    0.8582089552238806
F1 score:  0.8589828449298084
```

5.4.3. Random forest

```
[13]: from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier

      clf = RandomForestClassifier(max_depth=2, random_state=0)
      clf.fit(X_train, y_train)
      prediction = clf.predict(X_test)

      print_model_performance_metrics(y_test, prediction)

[[50  0  0]
 [ 0 39  6]
 [ 1  6 32]]
```

Precision: 0.9019530828827995
Recall: 0.9029850746268657
F1 score: 0.902392051571895

5.4.4. Support Vector Machine (SVM)

```
[14]: from sklearn.svm import SVC

svc = SVC(C=1.0, kernel="linear", probability=True, random_state=5)
svc.fit(X_train, y_train)
prediction = svc.predict(X_test)

print_model_performance_metrics(y_test, prediction)
```

```
[[40  0 10]
 [ 0 43  2]
 [ 2  5 32]]
Precision: 0.8678745073334625
Recall: 0.8582089552238806
F1 score: 0.8594287556119268
```

5.4.5. Comparación

Clasificador	F1 Score (test split)	F1 Score (test data)
Perceptrón	0.8283	0.6854
Regresión logística	0.8582	0.6793
Random forest	0.9029	0.2674
SVM	0.8582	0.1367

Podemos observar como los modelos más afectados por la multicolinealidad son el perceptrón y la regresión logística, cuyo *F1 score* sobre el dataset de test ha mejorado hasta un 0.6854 y un 0.6793, respectivamente.

También cabe destacar la diferencia de la medida de rendimiento en el split de datos y en Kaggle. En concreto, esta diferencia se aprecia significativamente en los modelos Random forest y SVM. Esta diferencia indica un claro caso de *overfitting* en los modelos mencionados. Es decir, los modelos están “memorizando” los datos de entrenamiento pero no son capaces de generalizar sus predicciones.

5.5. Ajuste de hiperparámetros en SVM

5.5.1. Elección de kernel

Hasta el momento, el modelo Support Vector Machine ha tenido el peor rendimiento de los cuatro tipos de modelos que se han entrenado.

Una de las maneras de resolver este problema, puede ser entrenar un modelo de tipo SVM con un kernel no lineal. Los kernels disponibles son el lineal (*linear*), polinómico (*poly*), función de base

radial (rbf) y sigmoide (sigmoid).

Entrenaremos un modelo para cada kernel distinto y compararemos los resultados de rendimiento.

```
[15]: kernels = ["linear", "poly", "rbf", "sigmoid"]

for kernel in kernels:
    print("\nSVC kernel=", kernel)
    svc = SVC(C=1.0, kernel=kernel, probability=True, random_state=5)
    svc.fit(X_train, y_train)
    prediction = svc.predict(X_test)
    print_model_performance_metrics(y_test, prediction)
```

```
SVC kernel= linear
[[40  0 10]
 [ 0 43  2]
 [ 2  5 32]]
Precision: 0.8678745073334625
Recall:    0.8582089552238806
F1 score:  0.8594287556119268
```

```
SVC kernel= poly
[[33  2 15]
 [ 0 39  6]
 [ 0  6 33]]
Precision: 0.8296549169048375
Recall:    0.7835820895522388
F1 score:  0.7879748463616456
```

```
SVC kernel= rbf
[[39  0 11]
 [ 0 40  5]
 [ 2  3 34]]
Precision: 0.8652346322838447
Recall:    0.8432835820895522
F1 score:  0.8474924371285263
```

```
SVC kernel= sigmoid
[[41  0  9]
 [ 0 42  3]
 [ 4  5 30]]
Precision: 0.8479512266428748
Recall:    0.8432835820895522
F1 score:  0.844281642891568
```

Comparación Una vez calculado el *F1 score* sobre el split de datos de test, pasamos a subir los datos de Kaggle y a construir una tabla de resultados.

Clasificador	F1 Score (test split)	F1 Score (test data)
SVM kernel lineal	0.8594	0.1367
SVM kernel poly	0.7879	0.6656
SVM kernel rbf	0.8474	0.3000
SVM kernel sigmoid	0.8442	0.5808

Se puede observar como los modelos con un kernel polinómico y sigmoide tienen un rendimiento bastante mejor que el anterior modelo con un kernel lineal.

5.5.2. Parámetro de regularización C

Ahora que hemos comprobado que el kernel polinómico y sigmoide son los que tienen un mayor rendimiento para este conjunto de datos, podemos ajustar el hiperparámetro C. Entrenaremos varios modelos para los kernels polinómico y sigmoide con los siguientes valores para C: 1, 10, 100, 1000, y 10000.

```
[16]: kernels = ["poly", "sigmoid"]
      c_values = [1, 10, 100, 1000, 10000]

      for kernel in kernels:
          print("\nSVC kernel=", kernel)
          for c in c_values:
              print("C=", c)
              svc = SVC(C=c, kernel=kernel, probability=True)
              svc.fit(X_train, y_train)
              prediction = svc.predict(X_test)
              print_model_performance_metrics(y_test, prediction)
```

```
SVC kernel= poly
C= 1
[[33  2 15]
 [ 0 39  6]
 [ 0  6 33]]
Precision: 0.8296549169048375
Recall:    0.7835820895522388
F1 score:  0.7879748463616456
C= 10
[[35  3 12]
 [ 0 38  7]
 [ 2  5 32]]
Precision: 0.8129984968363408
Recall:    0.7835820895522388
F1 score:  0.7876539998001656
```

```

C= 100
[[36  4 10]
 [ 0 38  7]
 [ 4  7 28]]
Precision: 0.7773479541070158
Recall:    0.7611940298507462
F1 score:  0.7640520800254048
C= 1000
[[36  4 10]
 [ 0 38  7]
 [ 4  7 28]]
Precision: 0.7773479541070158
Recall:    0.7611940298507462
F1 score:  0.7640520800254048
C= 10000
[[36  4 10]
 [ 0 38  7]
 [ 4  7 28]]
Precision: 0.7773479541070158
Recall:    0.7611940298507462
F1 score:  0.7640520800254048

SVC kernel= sigmoid
C= 1
[[41  0  9]
 [ 0 42  3]
 [ 4  5 30]]
Precision: 0.8479512266428748
Recall:    0.8432835820895522
F1 score:  0.844281642891568
C= 10
[[35  1 14]
 [ 1 38  6]
 [ 5  6 28]]
Precision: 0.771887513651256
Recall:    0.753731343283582
F1 score:  0.7579476622194068
C= 100
[[35  1 14]
 [ 1 39  5]
 [ 2  4 33]]
Precision: 0.8260372777262015
Recall:    0.7985074626865671
F1 score:  0.8022137597435266
C= 1000
[[36  1 13]
 [ 1 39  5]
 [ 7  6 26]]

```

```

Precision: 0.7619904430417085
Recall:    0.753731343283582
F1 score:  0.7559928048627846
C= 10000
[[39  1 10]
 [ 0 39  6]
 [ 4  6 29]]
Precision: 0.8107040631020831
Recall:    0.7985074626865671
F1 score:  0.8017573423206547

```

Comparación Una vez calculado el rendimiento del modelo con el split sobre los datos de entrenamiento, podemos pasar a subir las predicciones a Kaggle y comparar el rendimiento de los modelos en función del parámetro C.

Clasificador	C	F1 Score (test split)	F1 Score (test data)
SVM kernel poly	1	0.7879	0.6656
SVM kernel poly	10	0.7876	0.6216
SVM kernel poly	100	0.7640	0.6231
SVM kernel poly	1000	0.7640	0.6231
SVM kernel poly	10000	0.7640	0.6231
SVM kernel sigmoid	1	0.8442	0.6003
SVM kernel sigmoid	10	0.7579	0.5137
SVM kernel sigmoid	100	0.8022	0.5152
SVM kernel sigmoid	1000	0.7559	0.5182
SVM kernel sigmoid	10000	0.8017	0.5182

5.6. Modelo resultante

De todos los modelos de aprendizaje automático probados, el que mejor rendimiento ha dado de todos los entrenados ha sido el perceptrón. Por este motivo, será el modelo que utilizemos en la solución final.

Para poder obtener el mayor rendimiento posible de este modelo, ajustaremos sus hiperparámetros mediante una búsqueda exhaustiva usando GridSearchCV.

Los hiperparámetros comprobados con sus posibles valores son los siguientes:

```

[17]: params = {
    'penalty': ['None', 'l2', 'l1', 'elasticnet'],
    'alpha': [0.0001, 0.0003, 0.001, 0.003, 0.01, 0.03, 0.1, 0.3],
    'shuffle': [False, True],
    'eta0': [0.01, 0.1, 0.5, 1, 1.5]
}

```

A partir de este objeto de hiperparámetros, podemos obtener la mejor combinación de estos para nuestro clasificador mediante la clase de scikit GridSearchCV.

```
[18]: from sklearn.model_selection import GridSearchCV

clf = SGDClassifier(loss="perceptron", max_iter=10000, random_state=5)
grid_search = GridSearchCV(clf, param_grid=params, scoring='f1_micro')

grid_search.fit(X_train, y_train)
print("Best params: {}".format(grid_search.best_params_))
print("Best f1 score: %.5f" % grid_search.best_score_)
```

Best params: {'alpha': 0.03, 'eta0': 0.01, 'penalty': 'l2', 'shuffle': True}
 Best f1 score: 0.87783

Los resultados de este modelo son los siguientes:

Clasificador	F1 Score (test split)	F1 Score (test data)
Perceptrón	0.8778	0.7158

Entrenando el modelo con el total del conjunto de entrenamiento, obtenemos un F1-score en Kaggle de 0.7204.

Referencias

- [1] Abhini Shetye. Feature Selection with sklearn and Pandas. <https://towardsdatascience.com/feature-selection-with-pandas-e3690ad8504b>.
- [2] Chris Albon. Drop Highly Correlated Features. https://chrisalbon.com/code/machine_learning/feature_selection/drop_highly_correlated_features/.
- [3] Synergix. How to calculate correlation between all columns and remove highly correlated ones using pandas? <https://stackoverflow.com/a/61938339/8554847>.
- [4] Gavin M. Jones. Why is a correlation coefficient threshold of $r = 0.6$ among predictors commonly used in ecology? <https://stats.stackexchange.com/q/175933>.
- [5] Wikipedia. Radial basis function kernel. https://en.wikipedia.org/wiki/Radial_basis_function_kernel.
- [6] Conor O'Sullivan. Visualising the Classification Power of Data using PCA. <https://towardsdatascience.com/visualising-the-classification-power-of-data-54f5273f640>.