Práctica 3

Competición en DrivenData

Miguel Ángel Fernández Gutiérrez

Inteligencia de Negocio

5º Doble Grado en Ingeniería Informática y Matemáticas Universidad de Granada

mianfg.me



Subidas a DrivenData

BEST	CURRENT RANK	# COMPETITORS

0.8626 121 3434

SUBMISSIONS

Score \$	Submitted by \$	Timestamp 6	\$
0.8512	MiguelAngel_Fernandez_UGR_IN &	2021-12-29 23:39:17 UTC	■ Test
0.7778	MiguelAngel_Fernandez_UGR_IN &	2021-12-30 17:55:52 UTC	# 01
0.7656	MiguelAngel_Fernandez_UGR_IN &	2021-12-30 18:01:55 UTC	∄ #02
0.7659	MiguelAngel_Fernandez_UGR_IN &	2021-12-30 18:34:27 UTC	∄ #03
0.8589	MiguelAngel_Fernandez_UGR_IN &	2021-12-31 02:08:12 UTC	■ #01 (fix)
0.8405	MiguelAngel_Fernandez_UGR_IN &	2021-12-31 02:08:46 UTC	■ #02 (fix)
0.8412	MiguelAngel_Fernandez_UGR_IN &	2021-12-31 02:09:09 UTC	■ #03 (fix)
0.8592	MiguelAngel_Fernandez_UGR_IN &	2022-01-01 22:16:21 UTC	∄ #04
0.8592	MiguelAngel_Fernandez_UGR_IN &	2022-01-01 22:16:44 UTC	∄ #05
0.8622	MiguelAngel_Fernandez_UGR_IN &	2022-01-02 00:33:48 UTC	∄ #06
0.8608	MiguelAngel_Fernandez_UGR_IN &	2022-01-03 11:56:43 UTC	∄ #07
0.8626	MiguelAngel_Fernandez_UGR_IN ♣	2022-01-03 12:16:33 UTC	#08

Nota. Las subidas #01, #02 y #03 tenían un error en el código (las probabilidades del atributo objetivo seasonal_vaccine eran las mismas de h1n1_vaccine al crear el pandas.DataFrame del envío por un error en los índices), y es por ello por lo que las puntuaciones son menores. Ignoraremos tales subidas y tendremos en cuenta las subidas acabadas en (fix). El código proporcionado en los notebooks n.ipynb y n_holdout.ipynb (con n \in {01, 02, 03}) es funcional y tiene arreglado tal fallo.

Índice

1.	Introducción	3
	1.1. Estructura del código	3
	1.2. Estrategia seguida	3
	1.3. Primera aproximación a los datos	3
2.	Resumen de pruebas realizadas	5
3.	Descripción de pruebas realizadas	7
	3.1. Código proporcionado por el profesor	7
	3.2. LightGBM con estrategia de preprocesado básica	7
	3.3. LightGBM con cambios en preprocesado	8
	3.4. LightGBM con cambio de parámetros	9
	3.5. LightGBM con preprocesado básico	9
	3.6. LightGBM con StratifiedKFold	10
	3.7. Hyperparameter tuning en LightGBM	10
	3.8. Hyperparameter tuning en XGBoost	10
	3.9. Cambios en preprocesado con LightGBM óptimo	11
	3.10. Cambios en preprocesado: añadir clase unknown	11
	3.11. Cambios en preprocesado: eliminar hhs_geo_region	12
	3.12. Hyperparameter tuning en RandomForest	12
	3.13. Hyperparameter tuning en CatBoost	12
	3.14. LightGBM con SMOTE	13
	3.15. LightGBM con SMOTENC	13
4.	. Bibliografía	14

1. Introducción

En esta práctica abordamos una competición en DrivenData, en concreto, Flu Shot Learning: Predict H1N1 and Seasonal Flu Vaccines.

1.1. Estructura del código

El código proporcionado se estructura en las carpetas:

- common, que contiene el código de uso común, en concreto, de preprocesado y visualización, así como la semilla aleatoria.
- submissions contiene los csv de los envíos a DrivenData.
- data contiene los datos a usar.
- Cada envío se encuentra en un Jupyter Notebook de la forma ID.ipynb, en el directorio raíz.

1.2. Estrategia seguida

Para cada modelo se pueden computar tres *scores*:

- Score en DrivenData. Score obtenido en la subida.
- Estimación Cross-Validation. Es la puntuación obtenida al entrenar el modelo sobre todo el conjunto de *test* usando Cross-Validation. Es un buen *proxy* de la puntuación de DrivenData.
- Estimación Holdout. Haciendo uso de *holdout*, obtenemos una estimación mucho más estable de la puntuación que se obtendrá en DrivenData (como puede verse en la Figura 2).

1.3. Primera aproximación a los datos

Realizando un análisis de los datos (ver notebook **00.ipynb**) y observando la descripción del benchmark de DrivenData¹ obtenemos información útil de cara a ir haciendo las pruebas:

- Hay muchos valores perdidos.
- Los atributos están incorrelados. Si hubiese atributos altamente correlacionados, deberíamos dejar uno dado que pueden introducir ruido en los modelos, pero en nuestro dataset no podemos eliminar ningún atributo (ver Figura 1).
- Los atributos objetivo tienen las clases muy desbalanceadas (ver Figura 2).

¹https://www.drivendata.co/blog/predict-flu-vaccine-data-benchmark/

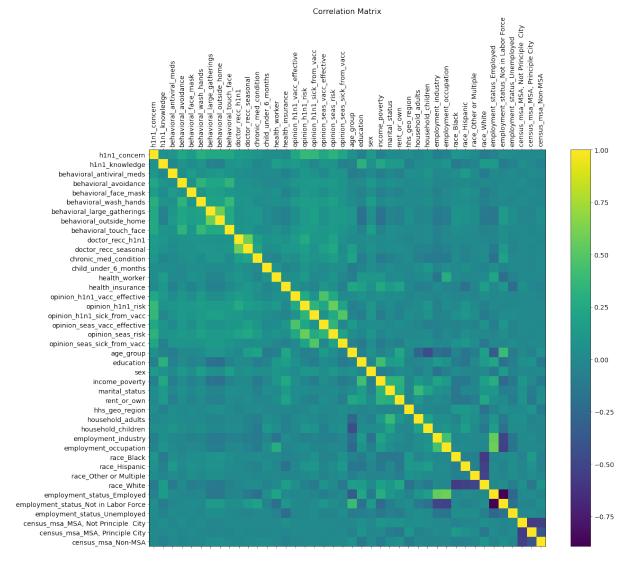


Figura 1: Matriz de correlación

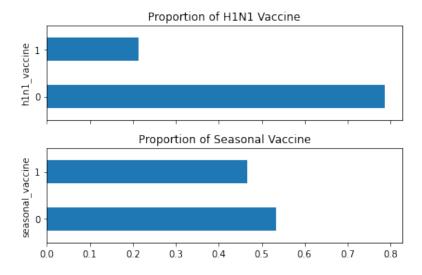


Figura 2: Proporción de clases en cada atributo objetivo

2. Resumen de pruebas realizadas

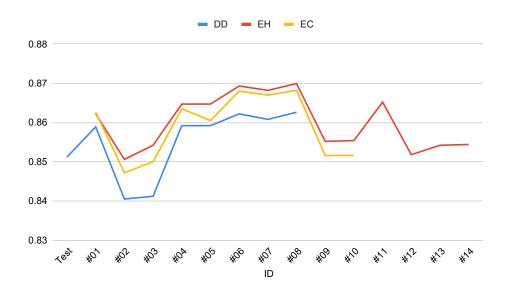


Figura 3: Evolución de scores ROC AUC para todas las pruebas

Ap. ¹	ID^2	Descripción	Parámetros	$Scores^3$
3.1	Test	Código proporcionado por el profesor		DD: 0.8512
3.2	#01 (fix)	LightGBM Estrategia de preprocesa- do básica	n_estimators: 200	DD: 0.8589 EH: 0.8622 EC: 0.8626
3.3	#02 (fix)	LightGBM Cambios en preprocesado	n_estimators: 200	DD: 0.8405 EH: 0.8506 EC: 0.8472
3.4	#03 (fix)	LightGBM Cambio de parámetros	n_estimators:50	DD: 0.8412 EH: 0.8542 EC: 0.8500
3.5	#04	LightGBM Estrategia de preprocesa- do básica (del profesor)	n_estimators: 200	DD: 0.8592 EH: 0.8647 EC: 0.8635

¹Apartado de esta memoria en la que se detalla la prueba

²Identificador de la subida. Coincide con la descripción de la subida a DrivenData, en caso de hacerla (ver *Subidas a DrivenData* tras la portada)

³DD: Score en DrivenData, EH: Estimación Holdout, EC: Estimación Cross-Validation

Ap.	ID	Descripción	Parámetros	Scores
3.6	#05	LightGBM Uso de StratifiedKFold	n_estimators: 200	DD: 0.8592 EH: 0.8647 EC: 0.8605
3.7	#06	LightGBM Hyperparameter tuning	Mejor estimador: n_estimators: 200 colsample_bytree: 0.5 learning_rate: 0.05 num_leaves: 50	DD: 0.8622 EH: 0.8693 EC: 0.8680
3.8	#07	XGBoost Hyperparameter tuning	Mejor estimador: eta: 0.1 max_depth: 5 subsample: 0.75	DD: 0.8608 EH: 0.8682 EC: 0.8670
3.9	#08	LightGBM con pa- rámetros de #06 Cambios en preprocesado	n_estimators: 200 colsample_bytree: 0.5 learning_rate: 0.05 num_leaves: 50	DD: 0.8626 EH: 0.8699 EC: 0.8682
3.10	#09	LightGBM Cambios en preprocesado (añadir clase unknown)	n_estimators: 200 colsample_bytree: 0.5 learning_rate: 0.05 num_leaves: 50	EH: 0.8552 EC: 0.8516
3.11	#10	LightGBM Cambios en preprocesado (eliminar hhs_geo_region)	n_estimators: 200 colsample_bytree: 0.5 learning_rate: 0.05 num_leaves: 50	EH: 0.8554 EC: 0.8516
3.12	#11	RandomForest Hyperparameter tuning	Mejor estimador: bootstrap: True max_depth: 50 max_features: auto min_samples_leaf: 4 min_samples_split: 5 n_estimators: 1800	EH: 0.8652
3.13	#12	CatBoost Hyperparameter tuning	Mejor estimador: depth: 6 learning_rate: 0.04 iterations: 100	EH: 0.8518
3.14	#13	LightGBM Hyperparameter tuning + SMOTE	n_estimators: 200 colsample_bytree: 0.5 learning_rate: 0.05 num_leaves: 50	EH: 0.8542
3.15	#14	LightGBM Hyperparameter tuning + SMOTENC	n_estimators: 200 colsample_bytree: 0.5 learning_rate: 0.05 num_leaves: 50	EH: 0.8544

Descripción de pruebas realizadas 3.

3.1. Código proporcionado por el profesor

En primer lugar, realizamos una subida de prueba a DrivenData. Esta subida consiste en ejecutar el código proporcionado por el profesor en ejemplo_flu.py, en el que se aplica RandomForestClassifier con los parámetros por defecto. Obtenemos una puntuación relativamente buena, y claramente superior a la del benchmark proporcionado por DrivenData de 0.8185 (por regresión logística).

Scores obtenidos. DD: 0.8512

3.2. LightGBM con estrategia de preprocesado básica

Probamos a usar el algoritmo LightGBM, por sus buenos resultados en problemas de clasificación. Este algoritmo es más sofisticado que Random Forest, además de que es más rápido y eficiente. Además, es uno de los mejores algoritmos de boosting. Probaremos con n estimators=200.

Además, cambiaremos un poco la estrategia de preprocesado:

- Para los atributos categóricos, imputaremos con la moda.
- Para los atributos numéricos, imputaremos con la mediana.
- Usaremos la función preprocessing.trans_discretize para pasar los atributos categóricos a numéricos (tiene un efecto equivalente a LabelEncoder, se explica con más detalle en el apartado siguiente).

Estas imputaciones se realizan mediante la función preprocessing. impute en preprocessing. py, que dado un df (de tipo pandas. DataFrame) aplica una de las siguientes estrategias de imputación:

- strategy='mean' reemplaza los valores perdidos con la media.
- strategy='median' reemplaza los valores perdidos con la mediana.
- strategy='mode' reemplaza los valores perdidos con la moda.
- strategy='fill' reemplaza los valores perdidos con el valor proporcionado en el parámetro fill.

Obtenemos unos resultados notablemente mejores, posiblemente debido al uso de LightGBM. Intentaremos refinar los resultados mediante cambios en el preprocesado.

Scores obtenidos. DD: 0.8589, EH: 0.8622, EC: 0.8626

3.3. LightGBM con cambios en preprocesado

Vamos a probar a incorporar un preprocesado un tanto más complejo. Para ello, hemos implementado dos programas en preprocessing.py:

■ preprocessing.trans_onehot: dado un atributo attr con las categorías {c1, c2, ..., cn}, creamos *n* atributos attr_ci donde:

$$attr_ci = \begin{cases} 1 \text{ si attr} = ci \\ 0 \text{ si attr} \neq ci \end{cases}$$

 preprocessing.trans_discretize: dado un atributo attr y un diccionario dict, transforma el valor val de cada instancia de attr por dict[val].

Para este preprocesado, tenemos en cuenta algo relevante en la discretización de atributos categóricos: al discretizar, estamos imponiendo un orden (y, en principio, no estamos diciendo qué orden). Hay algunos atributos que tienen cierto orden implícito en las categorías, por ejemplo: age_group podría discretizarse en orden ascendente de edad, e incorporaríamos cierto sentido al orden de la discretización.

Vamos a realizar por tanto estas transformaciones:

Atributo	Descripción	Transformación aplicada
age_group	Grupo de edad	preprocessing.trans_discretize 1 = 18 - 34 Years 2 = 35 - 44 Years 3 = 45 - 54 Years 4 = 55 - 64 Years 5 = 65+ Years
education	Nivel educativo	<pre>preprocessing.trans_discretize 1 = <12 Years 2 = 12 Years 3 = Some College 4 = College Graduate</pre>
race	Raza	preprocessing.trans_onehot
sex	Sexo	<pre>preprocessing.trans_discretize (a binario) 0 = Male 1 = Female</pre>
income_poverty	Ingresos anuales respecto a umbrales de pobreza	<pre>preprocessing.trans_discretize 1 = Below Poverty 2 = <= \$75,000, Above Poverty 3 => \$75,000</pre>
marital_status	Estado marital	<pre>preprocessing.trans_discretize (a binario) 0 = Not married 1 = Married</pre>

Atributo	Descripción	Transformación aplicada
rent_or_own	Situación del hogar (alquiler o propiedad)	<pre>preprocessing.trans_discretize (a binario) 0 = Rent 1 = Own</pre>
employment_status	Estado de empleo	preprocessing.trans_onehot
hhs_geo_region	Residencia	*
census_msa	Residencia respecto a áreas metropolitanas	preprocessing.trans_onehot
employment_industry	Industria donde trabaja	*
employment_occupation	Tipo de ocupación	*

Con * se han destacado aquellas variables que corresponden a categorías más complejas, y en los que especificar una forma de discretización no tiene mucho sentido. En ellas, usamos preprocessing.trans_discretize sin especificar el diccionario. Nótese que si hiciésemos onehot insertaríamos demasiados atributos.

Ejecutamos el algoritmo y obtenemos unos resultados notablemente peores. Además, la diferencia entre los scores de *train* y *test* es notable, por lo que puede ser que nuestro modelo esté entrando en *overfitting*. Veremos cómo podemos suplir esto en pruebas posteriores.

Scores obtenidos. DD: 0.8405, EH: 0.8506, EC: 0.8472

3.4. LightGBM con cambio de parámetros

Vamos a ejecutar LightGBM cambiando el parámetro n_estimators a 50 con el objetivo de evitar el overfitting, y dejando el preprocesado anterior a pesar de haber empeorado los resultados para ver si mejora. Obtenemos unos resultados ligeramente mejores, pero aún inferiores a los del primer intento con LightGBM. Dudamos que pueda tratarse del preprocesado, así que lo modificaremos de nuevo en el siguiente apartado.

Scores obtenidos. DD: 0.8412, EH: 0.8542, EC: 0.8500

3.5. LightGBM con preprocesado básico

Volveremos a usar el preprocesado proporcionado por el profesor en ejemplo_flu.py y con los parámetros de LightGBM que mejor han funcionado hasta ahora: n_estimators=200. Obtenemos de este modo los mejores resultados hasta ahora.

Scores obtenidos. DD: 0.8592, EH: 0.8647, EC: 0.8635

3.6. LightGBM con StratifiedKFold

En un primer análisis del *dataset* pudimos ver cómo las clases estaban claramente desbalanceadas en ambos atributos objetivo. En *scikit-learn* disponemos de la clase StratifiedKFold a usar en lugar de KFold para balancear en Cross-Validation. Sin embargo, StratifiedKFold no funciona con multioutput. Para ello, realizaremos ciertas modificaciones en el código para tratar con ambos atributos objetivo independientemente. Tras ejecutar esta variación, no vemos ningún cambio en el score de DrivenData, lo cual nos indica que esta opción no es viable.

Sin embargo, la estrategia de separar los modelos para cada atributo objetivo la usaremos más adelante, dado que la mayoría de utilidades de *scikit-learn*, así como de *imbalanced-learn* y de los distintos algoritmos no funcionan bien con MultiOutputClassifier.

Scores obtenidos. DD: 0.8592, EH: 0.8647, EC: 0.8605

3.7. Hyperparameter tuning en LightGBM

Procederemos mejorando LightGBM, el modelo que mejor resultado ha dado hasta ahora. Para ello, usaremos *hyperparameter tuning*: dado que las medidas de Cross-Validation son un buen *proxy* de las medidas con datos desconocidos, obtendremos el modelo con mejor score en CV. Usaremos el siguiente espacio de búsqueda:

```
search_space = {
  'n_estimators': [50, 200],
  'colsample_bytree': [i/10.0 for i in range(3, 6)],
  'learning_rate': [0.05, 0.1],
  'num_leaves': [30, 50]
}
```

El mejor modelo obtenido tiene los parámetros siguientes:

```
{'params': {'n_estimators': 200,
   'colsample_bytree': 0.5,
   'learning_rate': 0.05,
   'num_leaves': 50},
   'roc_auc': 0.8693384996292246}
```

Obtenemos la mejor puntuación hasta ahora. Esto nos indica que LightGBM es un buen algoritmo para nuestro problema.

Scores obtenidos. DD: 0.8622, EH: 0.8693, EC: 0.8680

3.8. Hyperparameter tuning en XGBoost

Dado que hemos obtenido muy buenos resultados al tunear los hiperparámetros en LightGBM, intentaremos hacer lo mismo con otros algoritmos. Probaremos con XGBoost y con el siguiente espacio de búsqueda:

```
search_space = {
  'eta': [0.05, 0.1, 0.2],
  'max_depth': [3, 5, 8, 10],
  'subsample': [0.5, 0.75, 1]
}
```

El mejor modelo obtenido tiene los parámetros siguientes:

```
{'params': {'eta': 0.1, 'max_depth': 5, 'subsample': 0.75}, 'roc_auc': 0.8682050936387379}
```

Sin embargo, no logramos mejorar los resultados de LightGBM.

Scores obtenidos. DD: 0.8608, EH: 0.8682, EC: 0.8670

3.9. Cambios en preprocesado con LightGBM óptimo

Vamos a intentar mejorar el resultado de LightGBM aplicando un preprocesado más complejo. Retomaremos el preprocesado del apartado 3.3, y la misma estrategia de valores perdidos que el apartado 3.2. Ejecutamos el algoritmo y obtenemos el mejor resultado hasta ahora. Este resultado mejora considerablemente con respecto al resultado #06. Esto nos indica que el preprocesado es muy relevante.

Scores obtenidos. DD: 0.8626, EH: 0.8699, EC: 0.8682

Nota. De aquí en adelante, dado que disponemos de pocos intentos en DrivenData, sólo subiremos aquellos que mejoren los scores que usamos como *proxy*, principalmente el que mejore EH.

3.10. Cambios en preprocesado: añadir clase unknown

En el foro de la competición² se sugiere una estrategia de preprocesado que se basa en la observación de que en las clases employment_occupation y employment_industry hay muchos valores nulos debidos a principios de protección de datos.

Impugnar la clase mayoritaria en estos casos puede introducir información en nuestro *dataset* que no es correcta. Por ello, introduciremos una categoría unknown para los datos perdidos mediante la función preprocessing.impute con strategy='fill'.

Los resultados que obtenemos, sin embargo, son notablemente peores.

Scores obtenidos. EH: 0.8552, EC: 0.8516

 $^{{}^2}https://community.driven data.org/t/nul-values-in-columns-containing-personal-data-of-the-volunteers/5997\\$

3.11. Cambios en preprocesado: eliminar hhs_geo_region

Observando los datos también vemos cómo el atributo hhs_geo_region tiene cierta variabilidad, por lo que nos preguntamos si es posible que esté introduciendo ruido en el *dataset*. Intentamos ignorar este atributo, y obtenemos unos resultados ligeramente peores que en la alternativa anterior de preprocesado; esto nos indica que hhs_geo_region tiene información relevante para nuestra clasificación.

Scores obtenidos. EH: 0.8554, EC: 0.8516

3.12. Hyperparameter tuning en RandomForest

Intentamos ahora probar otros algoritmos. Comenzaremos por Random Forest, que a pesar de ser un algoritmo más sencillo que los anteriores, puede ser que nos dé buenos resultados. Usaremos *hyperparameter tuning* usando el preprocesado de #08, el mejor candidato hasta el momento.

Dado que los tiempos de entrenamiento son mayores, usaremos una búsqueda aleatoria en el siguiente espacio de búsqueda:

```
search_space = {
  'bootstrap': [True, False],
  'max_depth': [10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100, None],
  'max_features': ['auto', 'sqrt'],
  'min_samples_leaf': [1, 2, 4],
  'min_samples_split': [2, 5, 10],
  'n_estimators': [200, 400, 600, 800, 1000, 1200, 1400, 1600, 1800, 2000]
}
```

El mejor modelo obtenido tiene los parámetros siguientes:

```
{'params': {'bootstrap': True,
    'max_depth': 50,
    'max_features': 'auto',
    'min_samples_leaf': 4,
    'min_samples_split': 5,
    'n_estimators': 1800},
    'roc_auc': 0.8651691969281137}
```

No obtenemos una buena puntuación en ningún momento, incluso tras varias ejecuciones, no llegando a 0.86 en ninguno de los *proxies*.

Scores obtenidos. EH: 0.8652

3.13. Hyperparameter tuning en CatBoost

Probaremos también el algoritmo CatBoost, pues es posible que de buenos resultados. Procedemos del mismo modo que con Random Forest, haciendo una búsqueda no exhaustiva en el siguiente espacio:

```
search_space = {
  'depth': [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10],
  'learning_rate': [0.01, 0.02, 0.03, 0.04],
  'iterations': [10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100]
}

El mejor modelo obtenido tiene los parámetros siguientes:

{'params': {'depth': 6, 'learning_rate': 0.04, 'iterations': 100},
  'roc_auc': 0.8518087063929591}
```

Scores obtenidos. EH: 0.8518

3.14. LightGBM con SMOTE

Al explorar el *dataset* observamos el desbalance de la distribución de las clases en los atributos objetivo. Probaremos insertar atributos sintéticos usando SMOTE. Para ello, usaremos *imbalanced-learn*.

Dado que el SMOTE de *imbalanced-learn* no funciona con MultiOutputClassifier, como en intentos anteriores entrenaremos individualmente dos modelos para clasificar cada atributo objetivo. Además, volveremos a hacer un *hyperparameter tuning* dado que es posible que al insertar más atributos los parámetros obtenidos no sean los óptimos. Finalmente, hacemos uso de GridSearchCV de *scikit-learn* y lo integramos en un Pipeline de *imbalanced-learn*, para agilizar la implementación.

Obtenemos unos resultados muy mediocres mediante esta técnica. Nos preguntamos si hay alguna otra forma de usar atributos sintéticos.

Scores obtenidos. EH: 0.8542

3.15. LightGBM con SMOTENC

Probamos a usar SMOTENC en lugar de SMOTE, pues es un algoritmo de generación de instancias sintéticas más orientado a atributos categóricos. Este algoritmo se implementa de forma idéntica a SMOTE, pero pasando los atributos categóricos.

Obtenemos una leve mejora respecto a SMOTE, pero aún quedamos lejos de la mejor puntuación obtenida.

Scores obtenidos. EH: 0.8544

4. Bibliografía

Towards Data Science, *The right way of using SMOTE with Cross-validation*.

https://towardsdatascience.com/the-right-way-of-using-smote-with-cross-validation-92a8d09d00c7

scikit-learn, Cross-validation: evaluating estimator performance.

https://scikit-learn.org/stable/modules/crossvalidation.html

imbalanced-learn, SMOTENC.

https://imbalanced-learn.org/dev/references/generated/imblearn.oversampling.SMOTENC.html

Towards Data Science, Essential guide to Multi-Class and Multi-Output Algorithms in Python. https://towardsdatascience.com/essential-guide-to-multi-class-and-multi-output-algorithms-in-python-3041fea55214

Machine Learning Mastery, *How to Develop a Light Gradient Boosted Machine (LightGBM) Ensemble* https://machinelearningmastery.com/light-gradient-boosted-machine-lightgbm-ensemble/

Eijaz Allibhai, Hold-out vs. Cross-validation in Machine Learning.

https://medium.com/@eijaz/holdout-vs-cross-validation-in-machine-learning-7637112d3f8f