

Machine Learning

Borrador TFG

Santiago Domínguez

1. Introducción.

El estudio de optimización se lleva a cabo con el objetivo de maximizar o minimizar una función f . Por ejemplo, en nuestro caso, minimizar la función de error implica hallar los parámetros que la definen, cuando en los valores de estos la función alcanza su mínimo. Nos serviremos de la teoría de la optimización para alcanzar los valores en los que la función alcanza su mínimo absoluto. Estos valores son referidos como parámetros óptimos.

2. Teorema de Weierstrass.

El teorema de Weierstrass establece que en toda función continua f , alojada en un intervalo cerrado y acotado, dicha función alcanza sus valores máximos y mínimos en puntos del intervalo.

$$\text{Si } f \in C(A) \Rightarrow \exists x_1, x_2 \in A \mid f(x_0) \leq f(x) \leq f(x_1) \quad \forall x \in A$$

Definición 1.1. (Condición necesaria de extremo.)

$$\text{Sea } \vec{x} \in \mathring{A}, y \text{ } f \text{ derivable en } x \Rightarrow \nabla f(\vec{x}) = (0, \dots, 0)$$

Demostración:

$$f \text{ derivable en } x \Rightarrow f(\vec{x} + t\vec{e}_i) = g(t) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow g'(0) = 0 = \langle \vec{e}_i, \nabla f(\vec{x}) \rangle$$

$$\text{Siendo } \nabla f(\vec{x}) = \frac{\partial f}{\partial x_i} \vec{e}_i(\vec{x})$$

La condición anterior no es suficiente, puesto que:

- Puede ocurrir que $\nabla f(A) = 0$ y sea punto de silla.
- Puede ser el extremo relativo.

3. Búsqueda de mínimo absoluto.

Debemos buscar un máximo o mínimo en el conjunto interior \mathring{A} , empezando por los puntos en la frontera del conjunto, después los puntos sin derivada y por último los puntos con derivada nula. Existen condiciones para comprobar si cada punto con derivada nula es o no máximo o mínimo. Con matriz M y vector \vec{x} :

- M es definida positiva $\iff x^T M x \geq 0 \text{ y } x^T M x = 0 \iff x = 0$
- M es definida negativa $\iff x^T M x \leq 0 \text{ y } x^T M x = 0 \iff x = 0$
- M es semidefinida positiva $\iff x^T M x \geq 0 \text{ y } x^T M x \neq 0 \iff x = 0$
- M es semidefinida negativa $\iff x^T M x \leq 0 \text{ y } x^T M x \neq 0 \iff x = 0$

Definición 1.2. (Matriz Hessiana.) Sea f , se dice matriz hessiana a la matriz tal que, $D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$, A un punto perteneciente al conjunto D , tal que f es diferenciable dos veces en el punto A .

$$|H(A)| = \begin{vmatrix} f_{xx} & f_{xy} \\ f_{yx} & f_{yy} \end{vmatrix}$$

Teorema 1.1. (Clasificación de extremos mediante matriz hessiana.) Sea f , $D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$, D un conjunto abierto, con derivadas segundas continuas en un entorno de A punto críticos de f . Y considerando $|H(A)|$ como el determinante de la matriz hessiana en el punto A :

- Si $|H(A)| > 0$ y $f_{xx}(A) > 0$, entonces f tiene un mínimo relativo en A .
- Si $|H(A)| > 0$ y $f_{xx}(A) < 0$, entonces f tiene un máximo relativo en A .
- Si $|H(A)| < 0$, entonces f tiene un punto de silla en A .
- Si $|H(A)| = 0$, entonces no podemos sacar conclusiones.

4. Convexidad.

El estudio de la convexidad permite afirmar que un mínimos relativo es absoluto, por lo tanto, nos interesa demostrar la convexidad de la función de error para determinar nuestro parámetros óptimos.

- El dominio es cerrado y acotado: gradualmente expresado con restricciones de desigualdad. Algoritmo de Karush-Khun-Tucker.
- Hay restricciones de igualdad: Algoritmo de multiplicadores de Lagrange.
- En dominios convexos.

Definición 1.3.

$x_L \rightarrow$ mínimo local. Si $\exists x_1 | f(x_1) < f(x_L)$

$$f(x_L) \leq f(tx_L) + (1-t)x_1 \leq tf(x_L) + (1-t)f(x_1) < f(x_1)$$

Definición 1.4. $f: A \rightarrow (\mathbb{R})$, f es convexa en x_0 si lo es en un entorno de x_0 . En tal caso, $Hf(x_0)$ es definida positiva.

5. Regresión Lineal

Sea un conjunto de datos $(x_i, y_i)_{i=1}^n$, queremos obtener la recta que mejor se ajuste a la hipótesis $h\theta(x) = ax+b$ (puede tener más parámetros). Para ello, hallamos los parámetros de $h\theta$ minimizando la función del error cuadrático medio.

$$\text{i.e. escoger } (a,b) \in \mathbb{R}^2 | \text{ EMC} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - ax_i - b)^2 \text{ mínimo.}$$

5.1. Mínimos y máximos locales:

$$\begin{aligned}\frac{\partial H}{\partial b} &= -2 \sum_{i=1}^N y_i - ax_i - b = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^N ax_i + bN = \sum_{i=1}^N y_i \Rightarrow b = \bar{y} - a\bar{x} \\ \frac{\partial H}{\partial a} &= -2 \sum_{i=1}^N (y_i - ax_i - b)x_i = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^N x_i y_i = a \sum_{i=1}^N x_i^2 + b \sum_{i=1}^N x_i \Rightarrow a \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2 + (\bar{y} - a\bar{x})\bar{x} = \sum_{i=1}^N x_i y_i \Rightarrow \\ &\Rightarrow a \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2 - \bar{x}^2 \right] + \bar{y}\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i y_i \Rightarrow a \partial_x^2 = s_{xy} \Rightarrow \\ &\boxed{a = \frac{s_{xy}}{\partial_{x^2}}, b = \bar{y} - \frac{s_{xy}}{\partial_{x^2}} \bar{x}}\end{aligned}$$

\Rightarrow e.d. un único extremo local.

Hessian de H: $\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial a^2} & \frac{\partial^2 H}{\partial a \partial b} \\ \frac{\partial^2 H}{\partial a \partial b} & \frac{\partial^2 H}{\partial b^2} \end{bmatrix} \Rightarrow 4(N \sum_{i=1}^N x_i^2 - (\sum_{i=1}^N x_i)^2) \geq 0 \Leftrightarrow \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2 - \bar{x}^2 \geq 0 \Rightarrow f$ es convexa
y el mínimo local es global.

6. Regresión lineal multivariable.

El estudio regresión lineal multivariable se utiliza para hallar la relación entre múltiples variables con su salida, con el objetivo de formular una hipótesis que será útil para predecir futuros resultados con nuevas entradas. Supongamos que tenemos las siguientes entradas y salidas:

features			trajet
tamaño	grosor	densidad	peso
x_1^1	x_1^2	x_1^3	y_1
x_2^1	x_2^2	x_2^3	y_2
x_3^1	x_3^2	x_3^3	y_3
...
x_n^1	x_n^2	x_n^3	y_n

Hiperespacio $H(a_1, a_2, a_3, a_4) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (a_1 x_i^1 + a_2 x_i^2 + a_3 x_i^3 + a_4 - y_i)^2$; Es \vec{a} minimizante?

$$H : R^4 \rightarrow R \quad \begin{bmatrix} x_1^1 & x_1^2 & x_1^3 & x_1^4 1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ x_N^1 & x_N^2 & x_N^3 & x_N^4 1 \end{bmatrix} \in M_{M*n}. \quad y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ y_N \end{bmatrix}$$

$$H(\vec{a}, b) = \|X\vec{a} - y\|^2 = \langle x\vec{a} - \vec{y}, x\vec{a} - \vec{y} \rangle = \langle x\vec{a}, x\vec{a} \rangle - 2\langle X\vec{a}, y \rangle + \langle y, y \rangle$$

$$\nabla H(a) = \nabla \langle x\vec{a}, x\vec{a} \rangle - 2\nabla \langle x\vec{a}, \vec{y} \rangle = 0 \Leftrightarrow \boxed{\vec{a} = (X^T X)^{-1} X^T y}$$

7. Método directo.

El anterior método explicado en el apartado de regresión lineal multivariable muestra cómo obtener la hipótesis de forma directa, analítica, no obstante en la realidad, el cálculo de la inversa de una matriz se evita en la mayoría de las ocasiones debido a la complejidad que esta requiere $O(n^3)$.

En su lugar, métodos iterativos como steepest descent, el cual “desciende” por la función de error gracias al cálculo constante de los parámetros en cada iteración, muestran una complejidad inferior $O(n^2)$, la cual es viable computacionalmente para trabajar.

8. Regresión polinomial.

Cuando nuestro modelo no se ajusta a una línea recta, la Regresión Lineal no nos sirve para definir una hipótesis que se ajuste a nuestro modelo de datos. IMAGEN DE GRÁFICA 1 La solución más tentativa que se plantea para abordar este dataset es añadir un nuevo parámetro a nuestra hipótesis que multiplique a la variable ya presente, pero esta vez, elevada a un factor mayor.

$$y = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2$$

$$\min \sum_{i=1}^N (y - \theta_0 - \theta_1 x - \theta_2 x^2)^2 \longrightarrow \hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2 \Rightarrow \text{esto ha funcionado. GRÁFICA 1 CON UNA CURVA DECENTE}$$

Si consideráramos una hipótesis más ambiciosa como $y = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2 \dots \theta_n x^n$ pero esto nos llevaría a un ajuste de nuestro modelo demasiado preciso como para funcionar correctamente con datos de testeo. Esto se conoce como *Overfitting* o *Variance problem*.

Eso nos lleva al problema de determinar el número de parámetros del modelo. Es decir, necesitamos saber cómo aplicar regresión polinomial.

9. Aplicación de regresión polinomial.

En la práctica, la decisión de aplicar regresión lineal o polinomial puede no ser algo trivial, por ello, antes de reflexionar sobre el número de parámetros que queremos aplicar a nuestro modelo, debemos primero, determinar si la naturaleza del problema corresponde a un problema polinomial, o si por el contrario, la regresión lineal es suficiente para abordarlo.

9.1. Coeficiente de Pearson.

El coeficiente de correlación lineal de Pearson (r_{xy}) nos sirve para determinar la naturaleza de la relación que guardan los datos entre sí, si el coeficiente es cercano a 1 ó -1, esto indica que no es necesario aplicar regresión polinomial.

$$r_{xy} = \frac{s_{xy}}{s_x s_y}$$

El coeficiente de Pearson es válido solo cuando se cumplan las siguientes condiciones:

- Los datos sean muestras independientes, es decir, no haya auto-correlación entre ellos.
- Los datos presenten una distribución normal.
- Homocedasticidad (pone en internet que esto es en los modelos, preguntar a Iván)

9.2. Coeficiente de Spearman.

El coeficiente de Spearman (ρ) es una medida de correlación utilizada en lugar del coeficiente de Pearson, cuando no se cumple algunas de las condiciones mencionadas en el apartado anterior. El resultado de este se interpreta al igual que en el coeficiente de Pearson, si el resultado es cercano a 1 ó -1, no es necesario aplicar regresión polinomial.

$$\rho = 1 - \frac{6 \sum D^2}{N(N^2 - 1)}$$

Siendo D la diferencia entre los correspondientes estadísticos de orden de x - y, y siendo N el número de datos.

9.3. Determinación del número de parámetros.

Partiendo del supuesto de que los datos de nuestro problema presenten una clara necesidad de ser abordados por regresión polinomial, El siguiente paso para definir el modelo será encontrar un número de parámetros que se ajuste bien a los datos sin presentar overfitting, o por el contrario underfitting, el cual se dice cuando nuestra curva presenta un vago ajuste los datos.

$$Error(x) = (E[\hat{f}(x)] - f(x))^2 + E[(\hat{f}(x) - E[\hat{f}(x)])^2] + \sigma_i^2 rr(\text{error irreducible})$$

9.4. ¿Es realmente esto polinomial?

$$y = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2$$

Realmente la distinción entre regresión multivariable y polinomial puede verse reducida a un mero formalismo cuando consideramos que la nueva parte de la hipótesis no es más que una nueva variable de entrada en nuestro problema, variable la cual es completamente dependiente de al menos una de las variables anteriores.

10. Regularización.

Durante el desarrollo de nuestro modelo, aplicando la teoría explicada hasta ahora, nos surge la duda de cuál es el grado que mejor resultado nos dará, o dicho de otra forma; ¿Qué grado en nuestro modelo es el que mejor se ajusta a nuestras necesidades y evita los problemas de bias y variance?

La regularización es la respuesta, se define regularización como la técnica que penaliza los términos de mayor grado de nuestro modelo, permitiéndonos así utilizar hipótesis de un grado considerable, por lo que no hay lugar a que aparezca el problema de bias, mientras que eludimos el problema de variance. Por ejemplo, en una hipótesis que con grado 4 nos daría variance:

$$y = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2 + 1000\theta_3 x^3 + 1000\theta_4 x^4 = h_\theta(x)$$

10.1. Planteamiento general.

El anterior ejemplo nos sirve para el caso en el que sabemos qué es lo que hay que penalizar, pero para poder usarlo en un caso general, en el que no conozcamos a priori los elementos a penalizar en nuestra hipótesis, la función de costes utilizada hasta ahora será modificada:

$$J(\vec{\theta}) = \frac{1}{2m} \left[\sum_{i=1}^m \left(h_{\theta}(x^{(i)}) - y^{(i)} \right)^2 - \lambda \sum_{j=1}^n \theta_j^2 \right]$$

Como vemos, aparece la variable lambda, la cual será definida de forma empírica, una lambda muy superior a 1, provocaría variance, y si es muy cercana a 0, provocaría bias. Los valores típicos suele rondar el 0,95. Además de ser una manera eficaz para mejorar nuestro modelo, previniendo dos de los problemas más comunes en el desarrollo del aprendizaje automático, la implementación será tan sencilla como modificar nuestro algoritmo de aprendizaje, modificando todos los términos a partir de θ_0

$$\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left(h_{\theta}(x^{(i)}) - y^{(i)} \right) x_j^{(i)} - \frac{\lambda}{m} \theta_j$$

11. Escalamiento de variables (feature scaling).

Durante el planteamiento del problema a resolver mediante el aprendizaje automático es frecuente encontrarse con diversas variables no relacionadas, con distinto rango y dominios. Esto puede causar un aprendizaje más lento, lo que supone más tiempo de entrenamiento para peores resultados.

Esto ocasiona, por ejemplo, en un problema en el que consideramos las variables de temperatura y velocidad del viento para predecir futuras precipitaciones, la θ correspondiente a velocidad del viento, al tener valores muy superiores respecto a la temperatura, adquirirá más relevancia para determinar el resultado, aunque en la realidad esto no ocurra. En las redes neuronales, que veremos más adelante, esto se traduce en pesos con una relevancia desorbitada respecto a los demás.

Esto se evita escalando las variables para que todas queden con el mismo rango, y a priori, con la misma relevancia:

$$x_i \longleftarrow \frac{x_i - \bar{x}}{s_i} \epsilon [-1, 1]$$

$$s_i = \max x_i^j - \min x_i^j$$

12. Redes neuronales.

Se define red neuronal (en adelante NN) como un modelo o estructura algorítmica que imita el comportamiento del cerebro humano con el objetivo de resolver, clasificar o predecir partiendo de unos datos de entrada.

Su elemento más básico es la neurona artificial, en las NN se implementan diversas neuronas en múltiples capas de acuerdo a las necesidades del problema con el objetivo de mejorar sus resultados. Las NN envuelven múltiples algoritmos y características que normalmente varían de forma poco rigurosa en función del rendimiento que estas muestran. Dichos aspectos irán siendo explicados en los siguientes apartados.

13. Neurona Artificial.

La neurona artificial es la unidad mínima de la que se componen las NN, dichas neuronas están basadas en la célula cerebral simplificada, denominada neurona de **McCulloch-Pitts (MCP)**, las neuronas son células nerviosas interconectadas del cerebro que participan en el proceso y transmisión de señales eléctricas y químicas, como se muestra en la siguiente figura:

FIGURA DE NEURONA CON DENTRITAS Y TAL

McCulloch y Pitts describieron una neurona como una simple puerta binaria que arroja una salida a partir de sus entradas o dentritas, transmitiendo dicha salida mediante el axón a sus terminaciones nerviosas, las cuales están conectadas a las dentritas de otras neuronas.

De un modo más formal, podemos definir las neuronas artificiales como una estructura simple, que suma y multiplica las entradas con sus pesos, que tras sesgar dicho resultado, genera un resultado dependiendo de su función de activación. Todos estos términos se definen bajo la siguiente imagen:

FOTO NEURONA NORMAL

- Entradas (X): las entradas son el equivalente a las dentritas de la célula cerebral, son los datos del problema que estamos tratando de resolver o la salida de otra neurona.
- Pesos (W): los pesos son un valor numérico que representan la importancia o relevancia de la entrada correspondiente, al principio del ejercicio suelen ser definidos de forma aleatoria. Son la parte más importante del modelo, pues como veremos en adelante, a través del entrenamiento son lo que vamos a modificar con el objetivo de que la NN alogre los mejores resultados posibles.
- Bias (b): El bias comparte similitudes con los pesos, puede ser establecido de forma aleatoria, aunque algunas veces se le da el valor 0 ó 1 de manera arbitraria, también es modificado durante el aprendizaje del modelo, se diferencia en que es un solo valor por neurona. El bias es el elemento que actúa como sesgo, para evitar que un peso crezca o decrezca más de la cuenta y perjudique el rendimiento del modelo.
- N: $N = (X * W) + b$
- Función de activación (f(N)): normalmente, la variable N se introduce en una función, tres de las funciones más comunes son:
 - Lineal: $f(x) = x$
FOTO
 - ReLu: $f(x) = \max(0, x)$
FOTO
 - Sigmoid: $f(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$
FOTO
- Resultado (a): es el resultado de aplicar la variable N a la función de activación.

14. Arquitectura.

Durante los primeros años de investigación en NN, se concluyó que una sola neurona no es capaz de resolver problemas complejos, es así como se introduce el concepto de arquitectura de las NN, las múltiples neuronas de nuestro modelo se organizan en niveles, conocidos como capas, con distinto número de neuronas. Existen tres tipos de capas:

- La primera capa se conoce como capa de entrada, y tiene tantas neuronas como entradas haya en nuestro problema.
- La última capa se conoce como capa de salida, y tiene tantas neuronas como posibles salidas tenga el problema, por ejemplo, si queremos determinar si un mail es spam o no, bastará una neurona en la capa de salida para representar esto, si el mensaje es spam, la salida deberá ser 1, y 0 si no lo es. Sin embargo, si queremos reconocer dígitos, seán necesarias tantas neuronas como dígitos, 10 si hablamos de número en base decimal.
- Por último, nos referiremos a las capas intermedias como capas ocultas, estas pueden ser más de una, de mayor, igual o menor número de neuronas que las capas de entrada y salida.

FOTO

15. Función de error.

La función de error es aquella definida por los valores de error que muestra el modelo durante la ejecución de su entrenamiento. Se obtiene a partir de la diferencia entre el resultado esperado y el resultado real. Existen numerosos algoritmos para calcular el error pero el más común es el error cuadrático medio o MSE. El cual se obtiene a partir de la diferencia entre valor real y estimado en m casos:

$$MSE = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2$$

15.1. Función de error Cross Entropy

Esta es la función de error más utilizada en problemas de clasificación y es la que implementamos en los modelos sobre los que hablaremos más adelante:

$$CE = - \sum_{i=1}^m y_i \log \hat{y}_i$$

16. Gradient Descent.

Es el algoritmo de aprendizaje más utilizado. Su objetivo es minimizar la función de error, busca el mínimo absoluto avanzando en cada iteración del entrenamiento, para ello actualiza constantemente los pesos y bias de la red. Consta de dos fases o subalgoritmos para ello:

- Forward propagation: la información se expande por la red, cada neurona calcula su salida y transmite la información resultante por la red hasta llegar al final de la red, donde se genera un resultado (Y_h). Durante el entrenamiento dicho resultado es comparado con el resultado real (Y) y se calcula su error para propagarlo.

- Back Propagation: es el responsable del aprendizaje del modelo, una vez calculado el error el algoritmo de backpropagation distribuye dicho error por todas las capas de la red con el objetivo de que los pesos y bias se reajusten de cara a errar en menor medida en la próxima iteración (k+1). Los pesos y bias se actualizan siguiendo las siguientes fórmulas:

$$W^i(k+1) = W^i(k) - \alpha s^i (a^{i-1})^T$$

$$b^i(k+1) = W^i(k) - \alpha s^i$$

$$s^i = -2\dot{F}^i(N^i)(Y - Yh)$$

17. Código de NeuralNetwork.py.

En este apartado explicaremos el código base desarrollado en el fichero NeuralNetwork.py para las redes neuronales utilizadas en los ejercicios de clasificación de tumores y detección de spam. Dicha red no se nutre de librerías de Machine Learning, solo de librerías para manejo de los datos.

17.1. Clase NeuralNetwork.

La red se instancia como objeto de la clase NeuralNetwork, se pasan por parámetro sus datos de entrada (x) y de salida (y), el learning rate que vamos a utilizar en el gradient descent, las dimensiones de la red (dims), las cuales solo pueden tener 3 capas: una de entrada, una oculta y una de salida. Y por último el parámetro lambda para la regularización. Además de estos parámetros, la clase cuenta con algunos más por defecto:

- Yh: vector de salidas de la red, inicialmente está a 0, y mide lo mismo que el vector de entrada Y.
- Param: es un diccionario (en python, digamos que un diccionario es una especie de lista con mucha más flexibilidad a la que se accede por palabras, no índices) donde vamos a guardar los pesos de la red, los bias, las salidas de la neurona antes (N) y después de pasar por la función de activación (A).
- Threshold: el threshold o umbral es una variable opcional en nuestro diseño de la red, la cual sirve para establecer un límite para filtrar las salidas de la red, para que de esta forma, no estemos obligados a que toda salida mayor que 0.5 sea igual a 1 y viceversa.
- Error: es una lista donde iremos guardando la evolución del error de la red durante la ejecución.
- m: es el número de samples o casos que tenemos en nuestro set de datos, es decir, el número de filas de X o Y.

```
class NeuralNetwork:
    def __init__(self, x, y, lr, dims, lambd):
        self.X=x
        self.Y=y
        self.Yh=np.zeros((1, self.Y.shape[1]))
        self.dims=dims
        self.param={}
        self.lr=lr
        self.lambd=lambd
        self.threshold=0.9
        self.error=[]
        self.m = self.Y.shape[1]
```

17.2. Inicialización de pesos y bias.

La función nInit se encarga de generar aleatoriamente tanto los pesos como los bias de las capas de la red.

```
def nInit(self):
    np.random.seed(1)
    self.param['W1'] = np.random.randn(self.dims[1], self.dims[0])/
                                np.sqrt(self.dims[0])
    self.param['b1'] = np.zeros((self.dims[1], 1))
    self.param['a1'] = np.zeros((self.dims[1], 1))
```

```

self.param['N1'] = np.zeros((self.dims[1], 1))

self.param['W2'] = np.random.randn(self.dims[2], self.dims[1])/
                        np.sqrt(self.dims[1])
self.param['b2'] = np.zeros((self.dims[2], 1))
self.param['a2'] = np.zeros((self.dims[2], 1))

```

17.3. Gradient descent.

La siguiente función corresponde al algoritmo de gradient descent, en ella inicializamos los pesos y bias llamando a `nInit()`, se avanza y retrocede por la red tantas veces como épocas hayamos introducido por parámetro. También imprimimos y cada 100 iteraciones el valor del error en ese momento, y al final de la ejecución, se imprime una gráfica de la evolución de la función de error a través de las épocas.

```

def gradient_descent(self, epochs):
    np.random.seed(1)
    self.nInit()#init weights and bias
    for i in range(0, epochs):#run
        Yh, error = self.forward()# we store the error and the predicted Y
        self.backward()
        if i % 100 == 0:
            print ("Cost after iteration %d: %f" % (i, error))
            self.error.append(error)

    plt.plot(np.squeeze(self.error))
    plt.ylabel('Loss')
    plt.xlabel('Iter')
    plt.title('Lr =' + str(self.lr))
    plt.show()

```

17.4. Forward Propagation.

En la función `forward()` aplicamos el algoritmo de forward propagation, hay que remarcar que en esta función los pesos y bias no se modifican. Calculamos las salidas de las neuronas antes y después de la función de activación acorde a la teoría y las guardamos en el diccionario `param`. Posteriormente calculamos el error. En la función devolvemos la salida de la red y el error.

```

def forward(self):
    N1 = self.param['W1'].dot(self.X) + self.param['b1']
    A1 = purelim(N1)
    N2 = self.param['W2'].dot(A1) + self.param['b2']
    A2 = sigmoid(N2)
    self.Yh, self.param['N1'], self.param['a1'], self.param['N2'] = A2, N1, A1, N2
    error = (1./self.m) * (-np.dot(self.Y, np.log(Yh).T) - np.dot(1-self.Y,
                                                                np.log(1-Yh).T))

    return A2, error

```

17.5. Backpropagation.

En la función backward() aplicamos el algoritmo de back propagation, ejecutamos esta función después de llamar a la función forward(). En esta función actualizamos los pesos y bias de la red, transmitiendo el error calculado en la iteración, para ello derivamos la función de error y las funciones de activación de toda la red neuronal. A su vez, calculamos el factor de regularización para aplicárselo a los pesos y bias en el momento en los que los actualizamos.

```
def backward(self):
    derror = - (np.divide(self.Y, self.Yh) - np.divide(1 - self.Y, 1 - self.Yh))
    #derivate of error function, Cross-Entropy, not MSE
    s2 = derror * dSigmoid(self.param['N2'])
    #s2 = derivate of error function * derivate of sigmoid function
    regu = (self.lambd * self.param['W2']) / self.param['a1'].shape[1]
    variaton_W2 = 1./self.param['a1'].shape[1] * np.dot(s2, self.param['a1'].T)
    - regu #s2 * a1
    regu = (self.lambd * self.param['b2']) / self.param['a1'].shape[1]
    variaton_b2 = 1./self.param['a1'].shape[1] * np.dot(s2, np.ones([s2.shape[1],1]))
    - regu #s2 * array of ones

    ws = np.dot(self.param["W2"].T,s2) #W2 * s2
    s1 = ws * self.param['N1'] #s1 = W2 * s2 * derivate of the function
    regu = (self.lambd * self.param['W1']) / self.X.shape[1]
    variaton_W1 = 1./self.X.shape[1] * np.dot(s1, self.X.T) - regu
    #s1 * x
    regu = (self.lambd * self.param['b1']) / self.X.shape[1]
    variaton_b1 = 1./self.X.shape[1] * np.dot(s1, np.ones([s1.shape[1],1])) - regu
    #s1 * array of ones

    self.param["W1"] = self.param["W1"] - self.lr * variaton_W1 #W1 upgrade
    self.param["b1"] = self.param["b1"] - self.lr * variaton_b1 #b1 upgrade
    self.param["W2"] = self.param["W2"] - self.lr * variaton_W2 #W2 upgrade
    self.param["b2"] = self.param["b2"] - self.lr * variaton_b2 #b2 upgrade
```

17.6. Predict.

La función predict es la que utilizamos para predecir o clasificar datos que no hemos utilizado en el entrenamiento. Su funcionamiento radica en llamar a la función forward() y guardar los resultados, al no llamar a la función backward(), la red no aprende de sus errores. Como nuestra función de activación en la ultima capa es una sigmoide, los resultados estarán entre 0 y 1, y con la variable threshold filtramos las salidas para que sean estrictamente 0 ó 1.

```
def predict(self, x, y):#predict when the model has trained
    self.X=x
    self.Y=y
    comp = np.zeros((1,x.shape[1]))
    pred, error = self.forward()

    for i in range(0, pred.shape[1]):
        if pred[0,i] > self.threshold: comp[0,i] = 1
```

```
    else: comp[0,i] = 0

print("Acc: " + str(np.sum((comp == y)/x.shape[1])))
return comp
```

18. Ejercicio de clasificación de tumores.

En este apartado vamos a explicar de forma detallada el proceso de desarrollo de una red neuronal capaz de clasificar tumores como benignos o malignos. Posteriormente, se comparará dicho modelo con otras arquitecturas, se mostrará el resultado al aplicar regularización y se mostrará dicho modelo con regresión logística en lugar de una red neuronal. Todo el código está adjuntado en el anexo del trabajo.

18.1. Carga y transformación de los datos.

Los datos utilizados corresponden a un fichero csv proporcionado por el hospital de Wisconsin. Dicho dataset incluye 11 columnas de datos, las cuales son: Person ID, Clump Thickness, Uniformity of Cell Size, Uniformity of Cell Shape, Marginal Adhesion, Single Epithelial Cell Size, Bare Nuclei, Bland Chromatin, Normal Nucleoli, Mitoses, Output.

Tras cargar el csv eliminamos las filas con los posibles valores nulos que pueda haber en el archivo.

```
df = pd.read_csv('wisconsin-cancer-dataset.csv', header=None)
df = df[~df[6].isin(['?'])]
```

La última columna esta compuesta por los valores 2 y 4, para hacer el desarrollo más fácil procedemos a cambiarla a por 0 y 1.

```
df.iloc[:,10].replace(2, 0,inplace=True)
df.iloc[:,10].replace(4, 1,inplace=True)
```

Ahora el set de datos luce así:

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0	1000025.0	5.0	1.0	1.0	1.0	2.0	1.0	3.0	1.0	1.0	0.0
1	1002945.0	5.0	4.0	4.0	5.0	7.0	10.0	3.0	2.0	1.0	0.0
2	1015425.0	3.0	1.0	1.0	1.0	2.0	2.0	3.0	1.0	1.0	0.0
3	1016277.0	6.0	8.0	8.0	1.0	3.0	4.0	3.0	7.0	1.0	0.0
4	1017023.0	4.0	1.0	1.0	3.0	2.0	1.0	3.0	1.0	1.0	0.0

18.1.1. Normalización.

Aplicamos normnmalización maxmin para mejorar el rendimiento y evistar que la columna con valores más altos monopolize el modelo.

```
names = df.columns[0:10]
scaler = MinMaxScaler()
scaled_df = scaler.fit_transform(df.iloc[:,0:10])
scaled_df = pd.DataFrame(scaled_df, columns=names)
scaled_df[10]= df[10]
```

18.1.2. Separar los datos.

En este ejercicio separamos los datos en 2 sets, el de entrenamiento y el de test. Aprovechamos la versatilidad de la librería pandas para quitar la primera columna, pues el ID del paciente no influye en nada. Trasponemos los datos para que el finchero NeuralNetwork.py pueda trabajar con ellos.

```
x=scaled_df.iloc[0:500,1:10].values.transpose()#500 casos para el entrenamiento
y=df.iloc[0:500,10:].values.transpose()
xval=scaled_df.iloc[501:683,1:10].values.transpose()
yval=df.iloc[501:683,10:].values.transpose()#168 para el tets
```

18.2. Implementación de la red.

En este apartado hacemos uso de las funciones del NeuralNetwork.py, la razón de desarrollar dicho fichero fue poder implementar redes neuronales de forma sencilla y poder aplicarla en distintos problemas sin tener que programar lo mismo otra vez. Ahora lo vemos en práctica.

Declaramos la red neuronal con los valores de entrenamiento y un learning rate de 0.01. La red funciona con una arquitectura [9 - 15 - 1], la cual utiliza funciones de salida lineales en la capa intermedia y una sigmoideal en la de salida. Utiliza como función de error, en lugar del clásico MSE, el Cross-Entropy. El algoritmo de aprendizaje utilizado es el descenso por gradiente, el cual implementa el algoritmo de backpropagation. Tanto la arquitectura como el learning rate son valores que hemos definido basandonos en la experiencia, en el anexo se muestran diversas implementaciones que nos han llevado a elegir la mejor.

```
nn = NeuralNetwork(x,y,0.01,0)
nn.gradient_descent(50000)
\begin{figure}[H]
\centering
\includegraphics{Annotation_2020-03-23_190119.png}
\end{figure}
```

Imprimimos los resultados, nótese que este modelo no usa regularización.

```
pred_train = nn.predict(x, y)
pred_test = nn.predict(xval, yval)
Acc: 0.92400000000000003
Acc: 0.9835164835164836
```

18.2.1. Con regularización.

Tras diversas pruebas, el valor 0.7 el que mejor rendimiento aporta. Elevando el acierto en el test al máximo.

```
pred_train = nn.predict(x, y)
pred_test = nn.predict(xval, yval)
Acc: 0.93600000000000003
Acc: 1.0
```

18.3. Visualización.

Para visualizar los datos de forma más explicativa se ha recurrido a una matriz de confusión que muestra el número de positivos clasificados correctamente, falsos positivos, falsos negativos, y negativos clasificados correctamente. La función es la siguiente:

```
def plotCf(a,b,t):
    cf =confusion_matrix(a,b)
    plt.imshow(cf,cmap=plt.cm.Blues,interpolation='nearest')
    plt.colorbar()
```

```

plt.title(t)
plt.xlabel('0          Predicted          1')
plt.ylabel('1          Actual          0')
tick_marks = np.arange(len(set(a))) # length of classes
class_labels = ['0','1']
plt.xticks(np.ndarray([0,1]))
plt.yticks(np.ndarray([0,1]))
for i,j in itertools.product(range(cf.shape[0]),range(cf.shape[1])):
    plt.text(j,i,format(cf[i,j],'d'),horizontalalignment='center',color='white' if cf
plt.show();

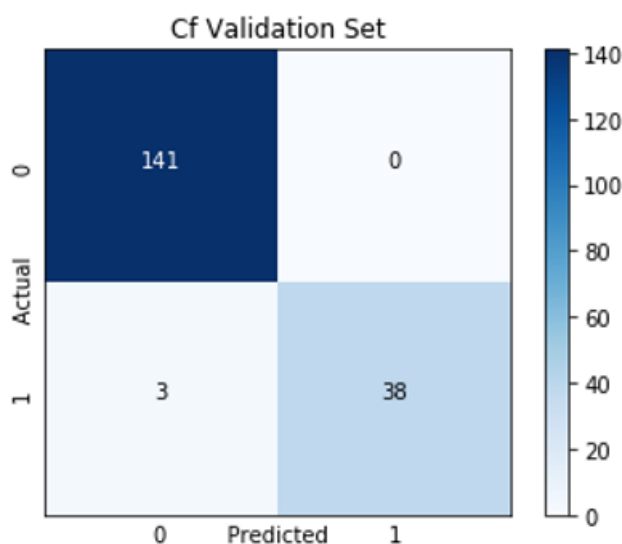
```

La llamamos, aquí podemos aplicar el threshold que deseamos, como estamos hablando de un tema tan sensible como el ca

```

nn.X,nn.Y=xval , yval
target=np.around(np.squeeze(yval), decimals=0).astype(np.int)
predicted=np.around(np.squeeze(nn.predict(xval,yval)), decimals=0).astype(np.int)
plotCf(target,predicted,'Cf Validation Set')

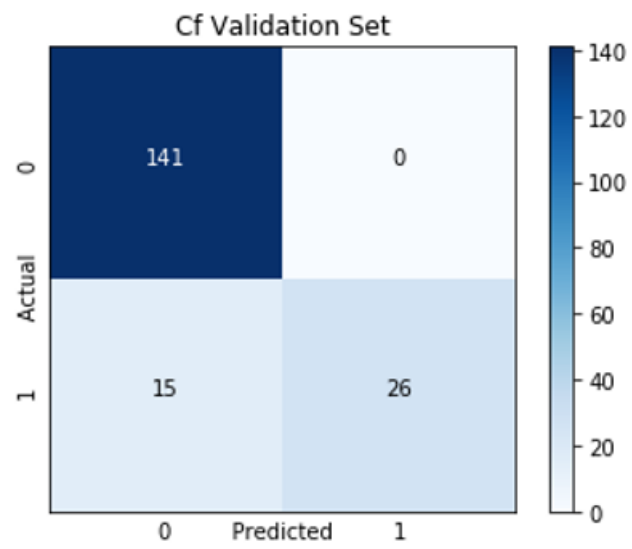
```



El modelo, incluso sin regularización, muestra un resultado excelente. Solo hemos clasificado 3 correos mal, todos eran spam y los hemos clasificado como correos ordinarios.

18.4. Implementación con regresión logística.

Con el fin de comprobar si un modelo más rápido y sencillo podría superar al ya explicado, hemos implementado regresión logística. Como era de esperar, la regresión logística no es suficiente para tratar problemas de esta embergadura.



19. Ejercicio de clasificación de correo electrónico.

Al igual que en la sección anterior, éste ejercicio implementa las funciones definidas en el archivo NeuralNetwork.py.

En este caso el ejercicio exige un enfoque ligeramente diferente respecto al anterior a causa de los datos. Los datos utilizados son numerosos mensajes, los cuales algunos son spam y otros mensakes corrientes. De dichos mensajes solo se pueden extraer sus palabras, así que en este caso, no tenemos distintas características que evaluar.

19.1. Carga, comprensión y transformación de los datos.

Como ya hemos dicho, el dataset está compuesto por frases y su correspondiente etiqueta, hay tres columnas vacías que quitamos.

```
import pandas as pd
import numpy as np
import re
raw = pd.read_csv('spam.csv', delimiter = ',', encoding='latin-1')
raw.head()
```

```
      v1                                     v2 Unnamed: 2 \
0  ham  Go until jurong point, crazy.. Available only ...      NaN
1  ham                                Ok lar... Joking wif u oni...      NaN
2  spam  Free entry in 2 a wkly comp to win FA Cup fina...      NaN
3  ham  U dun say so early hor... U c already then say...      NaN
4  ham  Nah I don't think he goes to usf, he lives aro...      NaN

      Unnamed: 3 Unnamed: 4
0           NaN           NaN
1           NaN           NaN
```

```
raw.drop(['Unnamed: 2', 'Unnamed: 3', 'Unnamed: 4'], axis=1, inplace=True)
raw = raw.dropna(how='any', axis=0) # drop Nan rows
raw.head()
```

```
      v1                                     v2
0  ham  Go until jurong point, crazy.. Available only ...
1  ham                                Ok lar... Joking wif u oni...
2  spam  Free entry in 2 a wkly comp to win FA Cup fina...
3  ham  U dun say so early hor... U c already then say...
4  ham  Nah I don't think he goes to usf, he lives aro...
```

Como ya hemos comentado, la única información que podemos extraer de los datos son palabras, en total hay aproximadamente 1000. Como no es viable desarrollar en nuestro equipo una red neuronal con 10000 valores en la capa de entrada, debemos sesgar cuáles queremos.

En este caso hemos elegido 100, las 100 que más se repiten. Nótese que con intención de hacer un modelo

más eficiente, se podrían considerar otros criterios a parte de la frecuencia de aparición en el dataset. Contamos las palabras:

```
columns=[]
rows = []
y = list(raw.v1)#lo usaremos luego
for i in range (0,len(raw.v2)):
    try:
        rows.append(re.sub("[^\w]", " ", raw.v2[i]).lower().split())
        columns = columns + re.sub("[^\w]", " ", raw.v2[i]).lower().split()
    except:
        print('Error in:',raw.v2[i])
from collections import Counter
counts = Counter(columns)#dict to value which fields we want to keep (it isn't possible)
print(counts)
```

```
Counter({'i': 3001, 'to': 2242, 'you': 2240, 'a': 1433, 'the': 1328, 'u': 1192,
'and': 979, 'in': 898, 'is': 890, 'me': 802, 'my': 762, 'it': 744, 'for': 704,
'your': 681, 'of': 620, 'call': 591, 'that': 577, 'have': 575, 's': 568, 'on':
537, '2': 528, 'now': 499, 'are': 494, 'can': 469, 't': 467, 'so': 461, 'but':
441, 'not': 439, 'm': 429, 'or': 422, 'do': 409, 'we': 405, 'at': 404, 'get':
391, 'be': 387, 'if': 386, 'will': 385, 'ur': 385, 'with': 381, 'just': 371,
'no': 367, 'this': 341, '4': 321, 'gt': 318, 'lt': 316, 'how': 312, 'up': 306,
'a': 303, 'when': 299, 'ok': 292, 'what': 290, 'free': 284, 'from': 284, 'go':
280, 'all': 275, 'out': 274, 'll': 269, 'know': 261, 'like': 245, 'good': 245,
'then': 243, 'got': 239, 'there': 232, 'was': 231, 'he': 230, 'day': 229,
'come': 229, 'its': 227, 'am': 225, 'time': 220, 'only': 218, 'love': 209,
'send': 199, 'want': 194, 'text': 193, 'as': 181, 'txt': 177, 'one': 175, '1':
173, 'going': 173, 'by': 172, 'need': 168, 'home': 167, 'about': 166, 'she':
166, 'don': 162, 'r': 162, 'lor': 162, 'today': 160, 'sorry': 160, 'see': 158,
'stop': 158, 'still': 157, 'n': 153, 'back': 153, 'da': 150, 'our': 149,
```

Elegimos las palabras:

```
columns = list(dict.fromkeys(columns))#delete repeated values
counts_list = [key for key, _ in counts.most_common()]
df_columns = counts_list[0:100]
df_columns.append('y')
print(df_columns)
```

19.1.1. Transformar la información.

Ahora lo relevante es determinar cómo vamos a introducir la información en la red. Las redes neuronales no aceptan otra entrada que no sea de carácter numérico, eso nos lleva a transformar nuestro set de datos, utilizaremos un 1 cuando la palabra de la frase sea una de las palabras elegidas como entrada de la red y utilizaremos un 0.

```
binary_rows = np.zeros((len(rows),len(df_columns)),dtype=int)
```

```

for i in range(0, len(rows)):
    for k in range(0, len(rows[i])):
        if rows[i][k] in df_columns:
            binary_rows[i][df_columns.index(rows[i][k])]=1
            if k == (len(rows[i])-1) and y[i]!='spam':# si es spam=1
                binary_rows[i][100]=1
print(binary_rows[2])

```

```

[0 1 0 1 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 1 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
 1 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1]

```

Creamos un dataframe nuevo con las frases cargadas como secuencias binarias.

```

dataframe = pd.DataFrame(binary_rows, columns=df_columns)
dataframe.head(5)

```

	i	to	you	a	the	u	and	in	is	me	...	stop	still	n	back	da	our	\
0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	...	0	0	1	0	0	0	
1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	...	0	0	0	0	0	0	
2	0	1	0	1	0	0	0	1	0	0	...	0	0	0	0	0	0	
3	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	...	0	0	0	0	0	0	
4	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	...	0	0	0	0	0	0	

	reply	k	dont	y
0	0	0	0	0
1	0	0	0	0
2	0	0	0	1
3	0	0	0	0
4	0	0	0	0

Por último, creamos los datos en listas para imputarlos posteriormente en la red.

```

Y = (dataframe.y).to_numpy()
dataframe.drop(['y'], axis=1, inplace=True)
X = dataframe.to_numpy().T
size = int(X.shape[1] * 0.70)
x_train, x_test = X[:,0:size], X[:,size:]
y_train, y_test = Y[0:size], Y[size:]

```

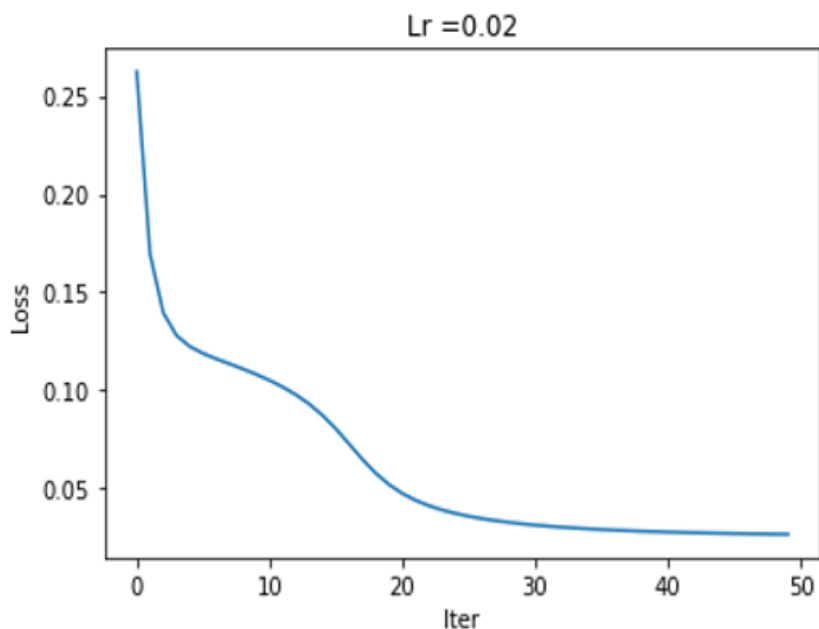
19.2. Implementación de la red.

De nuevo utilizamos el fichero NeuralNetwork.py, en este caso, la arquitectura que mejor rendimiento muestra es la 100-25-1, 25 neuronas en una única capa oculta y un ratio de aprendizaje (learning rate) de 0.2. Diversas arquitecturas puede contrastarse en el anexo de este trabajo.

```

from NeuralNetwork import *
nn = NeuralNetwork(x_train,y_train,0.02,[100,25,1],0)
nn.gradient_descent(5000)#gradient descent algorithm

```



19.3. Visualización.

Implementamos de nuevo la función de la matriz de confusión. La función es la siguiente:

```

def plotCf(a,b,t):
    cf =confusion_matrix(a,b)
    plt.imshow(cf,cmap=plt.cm.Blues,interpolation='nearest')
    plt.colorbar()
    plt.title(t)
    plt.xlabel('0          Predicted          1')
    plt.ylabel('1          Actual          0')
    tick_marks = np.arange(len(set(a))) # length of classes
    class_labels = ['0','1']
    plt.xticks(np.ndarray([0,1]))
    plt.yticks(np.ndarray([0,1]))
    for i,j in itertools.product(range(cf.shape[0]),range(cf.shape[1])):
        plt.text(j,i,format(cf[i,j],'d'),horizontalalignment='center',color='white' if cf
    plt.show();

```

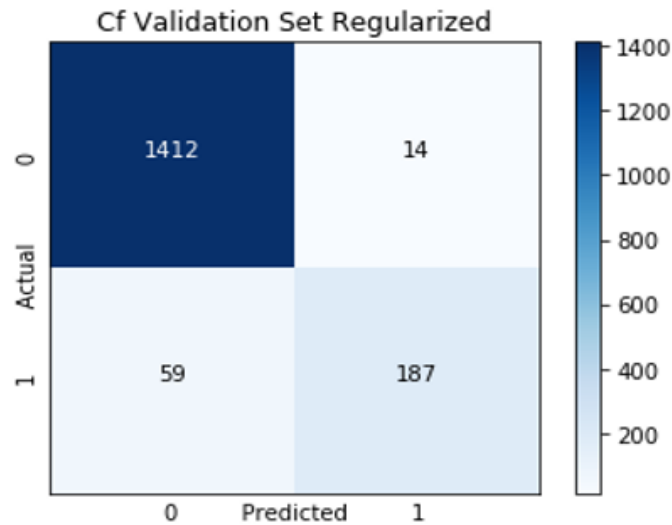
Llamamos de nuevo a la función. Observamos que esta vez el rendimiento está al rededor del 95 por ciento.

```

nn.X,nn.Y=x_test, y_test
target= nn.Y
predicted=nn.predict(x_test,y_test)
plotCf(target,predicted[0],'Cf Validation Set')

```

Acc: 0.95633971291866



Hemos fallado 63 mensajes, de los cuales, 14 han sido clasificado erroneamente como spam y 59 como no spam

19.3.1. Con regularización.

En este caso la regularización no aporta nada, este método ha sido evaluado con distintos valores pero ninguna prueba ha aportado ninguna mejora. Teniendo en cuenta esto, es posible que el anterior resultado sea el correspondiente al alcanzar el mínimo absoluto en la función de error.

19.4. Implementación con regresión logística.

Como podemos observar, en este caso la regresión logística es igual de efectiva que la red neuronal, esto es otra indicación que podemos haber hallado el mínimo absoluto de la función de error.

```
logistic_regression = LogisticRegression()
logistic_regression.fit(x_train.T, y_train)
threshold = 0.5
y_pred = np.where(logistic_regression.predict_proba(x_train.T)[:, 1] > threshold, 1, 0)
plotCf(target, y_pred, 'Cf Validation Set Logistic Regression')
```

Acc: 0.95633971291866

