



#### TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Ingeniería Informática

Estudio comparativo de métodos de aprendizaje automático en la detección de malware

Autor: Manuel Jesús Mariscal Romero

Directores: D. David Guijo Rubio

D. Víctor Manuel Vargas Yun

septiembre, 2025









# Resumen

Este proyecto se centra en la aplicación de técnicas de aprendizaje automático para la detección de *malware*. El objetivo principal es comparar distintos algoritmos, tanto los estudiados en el plan de estudios de Ingeniería Informática como otros que no forman parte de la formación académica, con el fin de determinar cuáles se adaptan mejor a este problema.

Para ello, se utilizan bases de datos públicas de *malware*, adaptadas mediante técnicas de preprocesamiento, balanceo y reducción de la dimensionalidad. Posteriormente, se implementa un protocolo experimental que incluye la optimización de hiperparámetros, la validación cruzada estratificada y la repetición de experimentos con diferentes semillas para garantizar la reproducibilidad.

Finalmente, se analizan los resultados obtenidos en términos de precisión, eficiencia y viabilidad computacional, destacando las ventajas e inconvenientes de cada enfoque y aportando una visión comparativa que pueda servir de referencia para futuros estudios en la detección automática de malware.

Palabras clave: Aprendizaje automático, Detección de *malware*, Clasificación, Ciberseguridad



# Abstract

This project focuses on the application of machine learning techniques for malware detection. The main objective is to compare different algorithms, both those studied in the Computer Engineering curriculum and others not included in the formal academic training, to determine which are better suited to this problem.

For this purpose, public malware datasets are used, adapted through preprocessing, data balancing and dimensionality reduction techniques. Afterwards, an experimental protocol including hyperparameter optimization, stratified cross-validation and the repetition of experiments with different random seeds, is implemented to guarantee reproducibility.

Finally, the results are analyzed in terms of accuracy, efficiency and computational viability, with special focus on the advantages and disadvantages of each approach and providing a comparative perspective to serve as a reference for future research on automated malware detection.

**Keywords:** Machine Learnig, Malware detection, Clasification, Cibersecurity.



# Índice general

| Re                | esum     | en     |                                  |  | II   |  |  |  |  |  |  |
|-------------------|----------|--------|----------------------------------|--|------|--|--|--|--|--|--|
| Al                | Abstract |        |                                  |  |      |  |  |  |  |  |  |
| Índice de figuras |          |        |                                  |  |      |  |  |  |  |  |  |
| Índice de tablas  |          |        |                                  |  |      |  |  |  |  |  |  |
| 1.                | Intr     | oducci | ión                              |  | 1    |  |  |  |  |  |  |
| 2.                | Esta     | ado de | la técnica                       |  | 3    |  |  |  |  |  |  |
|                   | 2.1.     | Apren  | dizaje automático                |  | . 3  |  |  |  |  |  |  |
|                   |          | 2.1.1. | Balanceo de datos                |  | . 4  |  |  |  |  |  |  |
|                   |          | 2.1.2. | Reducción de la dimensionalidad  |  | . 6  |  |  |  |  |  |  |
|                   |          | 2.1.3. | Métricas de evaluación           |  |      |  |  |  |  |  |  |
|                   |          | 2.1.4. | Validación cruzada               |  |      |  |  |  |  |  |  |
|                   |          | 2.1.5. | Algoritmos de clasificación      |  |      |  |  |  |  |  |  |
|                   | 2.2.     | Cibers | seguridad                        |  |      |  |  |  |  |  |  |
|                   |          | 2.2.1. | Conceptos generales              |  |      |  |  |  |  |  |  |
|                   |          | 2.2.2. | Malware                          |  |      |  |  |  |  |  |  |
|                   |          | 2.2.3. | Técnicas de detección de Malware |  | . 14 |  |  |  |  |  |  |
| 3.                | For      | mulaci | ón del problema y objetivos      |  | 17   |  |  |  |  |  |  |
|                   | 3.1.     | Conte  | xto y motivación                 |  | . 17 |  |  |  |  |  |  |
|                   | 3.2.     | Defini | ción del problema                |  | . 18 |  |  |  |  |  |  |
|                   | 3.3.     | Objeti | vos                              |  | . 18 |  |  |  |  |  |  |
|                   |          | 3.3.1. | Objetivo general                 |  | . 18 |  |  |  |  |  |  |
|                   |          | 3.3.2. | Objetivos específicos            |  | . 19 |  |  |  |  |  |  |
| 4.                | Met      | odolog | gía de trabajo                   |  | 20   |  |  |  |  |  |  |
|                   |          |        | ue metodológico                  |  | . 20 |  |  |  |  |  |  |

|            | 4.2.                      | Técnic  | eas y herramientas empleadas                |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 21 |  |
|------------|---------------------------|---------|---------------------------------------------|--|--|--|--|--|--|--|--|--|----|--|
|            |                           | 4.2.1.  | Conjunto de datos                           |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 23 |  |
|            |                           | 4.2.2.  | Modelos                                     |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 23 |  |
| <b>5</b> . | Des                       | arrollo | y experimentación                           |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 26 |  |
|            | 5.1.                      | Model   | os utilizados                               |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 27 |  |
|            | 5.2.                      | Proces  | samiento del conjunto de datos              |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 27 |  |
|            |                           | 5.2.1.  | Clasificación multiclase                    |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 28 |  |
|            |                           | 5.2.2.  | Reducción del conjunto de datos             |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 29 |  |
|            | 5.3.                      | Prepar  | ración del entorno                          |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 34 |  |
|            |                           | 5.3.1.  | Herramientas y bibliotecas                  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 34 |  |
|            |                           | 5.3.2.  | Hardware                                    |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 35 |  |
|            |                           | 5.3.3.  | Protocolo de experimentación y validación . |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 35 |  |
|            | 5.4.                      | Impler  | nentación y pruebas                         |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 38 |  |
|            |                           | 5.4.1.  | Procedimiento de entrenamiento y evaluación |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 38 |  |
|            |                           | 5.4.2.  | Preparación y uso de los conjuntos de datos |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 39 |  |
|            |                           | 5.4.3.  | Métricas y análisis de resultados           |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 39 |  |
| 6.         | Resultados y discusión 40 |         |                                             |  |  |  |  |  |  |  |  |  |    |  |
|            | 6.1.                      | Clasifi | cación binaria                              |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 40 |  |
|            |                           | 6.1.1.  | Árboles de decisión                         |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 40 |  |
|            |                           | 6.1.2.  | Random forest                               |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 41 |  |
|            |                           | 6.1.3.  | <i>K-NN</i>                                 |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 41 |  |
|            |                           | 6.1.4.  | Máquinas de vectores de soporte             |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 41 |  |
|            |                           | 6.1.5.  | Ridge                                       |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 41 |  |
|            |                           | 6.1.6.  | Redes neuronales: Perceptrón multicapa      |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 41 |  |
|            |                           | 6.1.7.  | Light Gradient Boosting Machine             |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 41 |  |
|            | 6.2.                      | Clasifi | cación multiclase                           |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 41 |  |
|            |                           | 6.2.1.  | Árboles de decisión                         |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 41 |  |
|            |                           | 6.2.2.  | Random forest                               |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 41 |  |
|            |                           | 6.2.3.  | <i>K-NN</i>                                 |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 41 |  |
|            |                           | 6.2.4.  | Máquinas de vectores de soporte             |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 41 |  |
|            |                           | 6.2.5.  | Ridge                                       |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 42 |  |
|            |                           | 6.2.6.  | Redes neuronales: Perceptrón multicapa      |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 42 |  |
|            |                           | 6.2.7.  | Light Gradient Boosting Machine             |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 42 |  |
| 7.         | Con                       | clusio  | nes y recomendaciones                       |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 48 |  |
|            | 7.1.                      |         | usiones de investigación                    |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 48 |  |
|            |                           | 7.1.1.  | Clasificación binaria                       |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 48 |  |
|            |                           | 7.1.2.  | Clasificación multiclase                    |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 49 |  |
|            | 7.2.                      | Recom   | nendaciones                                 |  |  |  |  |  |  |  |  |  | 49 |  |

| - | _ |   |    |    |   |    |         |    |       |
|---|---|---|----|----|---|----|---------|----|-------|
| I | N | D | IC | F, | G | EN | $F_{i}$ | RA | $I_L$ |

# ÍNDICE GENERAL

| 50     |
|--------|
| 56     |
| <br>56 |
| <br>57 |
| <br>58 |
| <br>59 |
| <br>59 |
|        |



# Índice de figuras

| M 1  | 7 / ·  | 1    | · · /     |        | 1  | 1 'C '/       | 14.       |  |  |  |  |  | 0 | $\circ$ |
|------|--------|------|-----------|--------|----|---------------|-----------|--|--|--|--|--|---|---------|
| 5.I. | Matriz | ae c | confusior | ı para | Ia | clasificación | multicase |  |  |  |  |  | 3 | 2       |



# Índice de tablas

| 5.1.  | Codificación de las clases malware                    | 28 |
|-------|-------------------------------------------------------|----|
| 5.2.  | Clasificación binaria con PCA                         | 30 |
| 5.3.  | Clasificación binaria con PCA y Undersampling         | 30 |
| 5.4.  | Clasificación multiclase con <i>PCA</i>               | 31 |
| 5.5.  | Nueva codificación de las clases malware              | 34 |
| 5.6.  | Clasificación multiclase con la nueva codificación    | 34 |
| 6.1.  | Clasificación binaria con DecisionTreeClassifier      | 40 |
| 6.2.  | Clasificación binaria con RandomForestClassifier      | 41 |
| 6.3.  | Clasificación binara con KNeighborscClassifier        | 42 |
| 6.4.  | Clasificación binaria con $SVC$                       | 43 |
| 6.5.  | Clasificación binaria con Ridge Classifier            | 43 |
| 6.6.  | Clasificación binaria con <i>MLPClassifier</i>        | 44 |
| 6.7.  | Clasificación binaria con LGBMClassifier              | 44 |
| 6.8.  | Clasificación multiclase con Decision Tree Classifier | 45 |
| 6.9.  | Clasificación multiclase con RandomForestClassifier   | 45 |
| 6.10. | Clasificación multiclase con KNeighborsClasiffier     | 46 |
| 6.11. | Clasificación multiclase con RidgeClassifier          | 46 |
| 6.12. | Clasificación multiclase con <i>MLPClassifier</i>     | 47 |
| 6.13. | Clasificación multiclase con <i>LGBMClassifier</i>    | 47 |



# Capítulo 1

# Introducción

El surgimiento de nuevas herramientas y tecnologías ha hecho posible mejorar las técnicas de ciberseguridad, tanto las técnicas para proteger la información, como las que explotan las brechas de seguridad. Este mismo desarrollo tecnológico hace que se incrementen de forma exponencial los ataques de malware. La mejora de las técnicas de ciberseguridad ha provocado que los ciberdelincuentes se esfuercen aún más por conseguir su objetivo.

En 1971, Creeper [1], el primer malware de la historia, fue desarrollado por Bob Thomas Morris como un experimento y no causaba daño en los sistemas. Creeper era un gusano que se autorreplicaba y propagaba a través de ARPANET, y mostraba el mensaje «I'm the creeper, catch me if you can!». El primer malware con impacto mundial, afectando a un 10% de los 60000 servidores que había en ARPANET, fue el gusano Morris [2], desarrollado en 1988 por Robert Tappan Morris. Morris intentaba obtener la contraseña de los equipos en los que se ejecutaba mediante fuerza bruta, es decir, permutaba los nombres de usuarios conocidos y una lista de las contraseñas más comunes. Creeper y el gusano Morris provocaron la aparición de Reaper, el primer antivirus de la historia y la creación del Equipo de Respuesta ante Emergencias Informáticas (CERT, por sus siglas en inglés) [3].

Uno de los casos recientes más sonados fue WannaCry [4] en 2018, ramsomware [5] que bloquea el acceso a partes del sistema y pide un rescate. Este malware causó un gran impacto a nivel mundial, afectando en España a empresas como Telefónica o Iberdrola [6].

Este aumento en la complejidad de las tecnicas usadas tanto para dañar los sistemas como para evitar su detección, ha hecho que los métodos tradicionales basados en firmas [7] para detectar patrones únicos en el código queden obsoletos. A día de hoy se combina con la heurística y sigue siendo una de las técnicas más



usadas, pero son insuficientes para enfrentar vectores desconocidos.

En los últimos años, uno de los campos más estudiados en informática y con mayor avance y previsión de futuro es el aprendizaje automático [8]. Es un campo de estudio dentro de la inteligencia artificial que se centra en aprender patrones a partir de datos, en lugar de seguir reglas programadas explícitamente. El sistema entrena con ejemplos y luego generaliza para hacer predicciones o tomar decisiones. El aprendizaje automático podría ser una solución eficiente y escalable para la detección y clasificación de malware.

A lo largo de este proyecto se tratará de evaluar la efectividad de diferentes modelos de aprendizaje automático para identificar este tipo de programas. Para ello tendremos en cuenta precisión, velocidad y capacidad de adaptación ante nuevas variantes de amenazas tratando de identificar las ventajas y limitaciones de cada método.



# Capítulo 2

# Estado de la técnica

En este capítulo se presentan los fundamentos teóricos más relevantes que sirven como base para el desarrollo de este proyecto. Se revisan conceptos clave relacionados con el aprendizaje automático y su aplicación en la detección de *malware*, así como las nociones generales de ciberseguridad y los enfoques más utilizados en la identificación de software malicioso.

## 2.1. Aprendizaje automático

El aprendizaje automático se puede entender como «la creación de algoritmos y modelos que permiten a los ordenadores aprender y hacer predicciones sin ser específicamente programados» [9].

Inicialmente, los cálculos estadísticos se resolvían con máquinas electromecánicas, como la máquina tabuladora, desarrollada en 1890 por Herman Hollerith [10]. Años más tarde, se presentó la neurona de McCulloch-Pitts, el primer modelo matemático de una neurona biológica, considerado por muchos como el punto de partida para el aprendizaje automático y la base de importantes modelos de cálculo [11]. Hoy en día, el aprendizaje automático es esencial en diferentes ámbitos, como la investigación o los negocios, y emplea algoritmos avanzados capaces de hacer predicciones muy precisas sobre datos desconocidos.

Los algoritmos desarrollados se pueden dividir en aprendizaje supervisado, no supervisado, semisupervisado y por refuerzo, entre otros. A su vez, y de manera independiente a la clasificación anterior, se pueden dividir en técnicas de clasificación y regresión, siendo las primeros las que nos ocupan en este proyecto. Algunas de las principales técnicas de clasificación ordinal son: árboles de decisión, redes neuronales artificiales, máquinas de vectores de soporte (SVM, por sus siglas en inglés) y



algoritmos de agrupamiento.

Todas estas técnicas se pueden adaptar a las necesidades actuales de la ciberseguridad. Los tipos de ataques, *malware* o vulnerabilidades de los sistemas se están haciendo cada vez más frecuentes, no solo aumentando en cantidad, sino también en complejidad. Estos algoritmos pueden predecir si un *software* es malicioso, si tiene vulnerabilidades o si un correo electrónico puede considerarse un intento de *phishing*.

A continuación se comentarán algunas de las principales técnicas y modelos que podrían llegar a aplicarse en este estudio si fuera necesario.

#### 2.1.1. Balanceo de datos

Es muy habitual que los conjuntos de datos se encuentren desbalanceados. Esto significa que la cantidad de patrones pertenecientes a una o varias clases son significativamente menores a la clase mayoritaria. Por ejemplo, como veremos más adelante en la tabla 5.1, la clase de patrones no malicionsos representa aproximadamente la mitad del total de patrones, en torno a 150000 patrones, mientras que la clase exploit solo tiene 12 patrones [12]. Debido a este desbalanceo es probable que la capacidad de generalización del modelo se vea afectada.

Para mitigar estos problemas, las dos principales técnicas son el sobremuestreo y el submuestreo, oversampling y undersampling por sus términos en inglés.

#### 2.1.1.1. Sobremuestreo

Las técnicas de sobremuestreo, oversampling en inglés, buscan aumentar la representación de la clase minoritaria generando nuevas instancias a partir de los casos existentes. El problema que presenta esta técnica es el riesgo de introducir información no real [13]. Entre los métodos de oversampling más destacados se encuentran:

#### 1. Random oversampling.

Es la técnica más sencilla, ya que copia los patrones de la clase minoritaria hasta alcanzar la cantidad deseada. Es habitual que se haga hasta igualar a la clase mayoritaria [13].

#### 2. Synthetic Minority Oversampling Technique (SMOTE)...

Genera instancias sintéticas de la clase minoritaria en lugar de replicar ejemplos existentes. Para ello, selecciona un ejemplo de la clase minoritaria y crea nuevos puntos interpolando con sus vecinos más cercanos [14].



#### 3. Adaptative Synthetic Sampling (ADASYN).

Es una extensión de SMOTE que genera más instancias sintéticas en las zonas donde la clase minoritaria es más difícil de aprender, es decir, donde está menos representada respecto a la mayoritaria [15].

#### 2.1.1.2. Submuestreo

El undersampling engloba las técnicas que tratan de igualar las distribuciones de datos desbalanceados eliminando muestras de la clase mayoritaria respetando la distribución de la clase minoritaria. Las soluciones a este problema pueden cambiar en función del algoritmo que decide los patrones a eliminar [13]. Las principales técnicas de undersampling son:

#### 1. Random undersampling.

Es el método más sencillo, ya que solo se encarga de eliminar patrones de forma aleatoria de la clase mayoritaria. Lo habitual, y la técnica empleada en este estudio para la clasificación binaria, es igualar el número de patrones para cada clase. Su principal punto en contra es que puede eliminar datos útiles [16].

#### 2. Condensed nearest neighbours.

Es un algoritmo no paramétrico basado en instancias, donde la clasificación se determina a partir de los k casos más cercanos al punto. Es una técnica local que utiliza medidas de distancia para identificar la similitud entre observaciones [17].

#### 3. Tomek links.

Consiste en identificar pares de instancias pertenecientes a clases distintas que son mutuamente los vecinos más cercanos entre sí. Suelen encontrarse en las zonas de solapamiento entre clases y representan casos ruidosos. Se elimina del conjunto de datos la instancia perteneciente a la clase mayoritaria en cada par, reduciendo así el desbalanceo [18].

#### 4. Edited nearest neighbours.

Consiste en revisar cada instancia del conjunto de datos y clasificarla según la regla de los k vecinos más cercanos. Si la instancia no coincide con la clase mayoritaria de sus vecinos, se considera ruidosa o mal ubicada y se elimina del conjunto [19].



#### 2.1.2. Reducción de la dimensionalidad

En estadística, la reducción de la dimensionalidad es el proceso por el cual se reduce el número de variables aleatorias. Si aplicamos esto al aprendizaje automático, el objetivo a reducir es el número de características de cada patrón. Generalmente se aplica antes de la clasificación para evitar los efectos de la maldición de la dimensionalidad. Esta maldición implica que cuando aumenta la dimensionalidad, el volumen del espacio aumenta exponencialmente haciendo que los datos se vuelvan dispersos [20]. La principal ventaja que aportan estas técnicas es reducir el tiempo de entrenamiento y la memoria utilizada en el mismo [21]. A continuación, estudiaremos algunos de los principales métodos.

#### 1. Análisis de componentes principales

El análisis de componentes principales se usa para describir un conjunto de datos en términos de nuevas características no correlacionadas, buscando la proyección donde los datos queden mejor representados según el método de mínimos cuadrados [22].

#### 2. Análisis factorial

Tiene el objetivo es identificar un conjunto reducido de factores latentes que explican la mayor parte de la varianza observada en los datos para descubrir las estructuras que generan las correlaciones entre las variables [23].

#### 3. Descomposición en valores singulares

Es una técnica algebraica que descompone una matriz en tres componentes: U,  $\Sigma$  y  $V^T$  [24]. Esta descomposición permite representar los datos en un espacio reducido preservando la mayor parte de la información relevante.

#### 2.1.3. Métricas de evaluación

La elección de métricas de evaluación adecuadas es esencial para valorar de forma precisa el rendimiento de los modelos. No todas las métricas ofrecen la misma información. En esta sección se revisan las métricas más empleadas en la literatura especializada, destacando su utilidad, limitaciones y el tipo de información que aportan para la comparación de modelos.

#### 2.1.3.1. Exactitud

La exactitud o *Accuracy* se corresponde con el porcentaje de aciertos que se han producido, es decir, los patrones clasificados correctamente respecto al total. Se calcula como la suma de verdaderos positivos (TP) y verdaderos negativos (TN) respecto al número total de patrones de entrada (N) [25].



$$CCR = \frac{TP + TN}{N} \tag{2.1}$$

#### 2.1.3.2. Precisión

La precisión es una métrica que evalúa la proporción de patrones clasificados como positivas que realmente pertenecen a la clase positiva, es decir, mide como de confiable es el modelo cuando predice un positivo. Es muy relevante cuando el coste de clasificar erróneamente un negativo como positivo es alto.

$$Precisión = \frac{TP}{TP + FP}$$
 (2.2)

Donde TP representa el número de verdaderos positivos, y FP corresponde al número de falsos positivos.

#### 2.1.3.3. Sensibilidad

También conocida como exhaustividad o recall en inglés, mide la capacidad del modelo para detectar correctamente los positivos de un conjunto de datos. Como se muestra en la ecuación 2.3, se calcula como la proporción entre el número de verdaderos positivos (TP) y la suma de verdaderos positivos y falsos negativos (FN) [25]. Un valor alto de sensibilidad indica que se han obtenido pocos falsos negativos.

Sensibilidad = 
$$\frac{TP}{TP + FN}$$
 (2.3)

#### 2.1.3.4. Mínima sensibilidad

La mínima sensibilidad mide cómo de bien se clasifica la clase peor clasificada. Es útil en clasificación multiclase o con conjuntos de datos desbalanceados, ya que permite identificar si existe alguna clase que el modelo no está clasificando correctamente. Un valor alto indica que el modelo mantiene un buen rendimiento en todas las clases, mientras que un valor bajo revela que, al menos, una de ellas presenta un bajo grado de acierto. Si el modelo se deja una clase sin clasificar, el valor será 0.

Sea  $S_i$  la sensibilidad de la clase i, con n el número total de clases, la mínima sensibilidad se calcula como se muestra en la ecuación 2.4.

$$MS = \min_{i \in \{1, 2, \dots, n\}} S_i \tag{2.4}$$

Donde la sensibilidad de cada clase  $S_i$  se obtiene mediante la ecuación 2.3



#### 2.1.3.5. Valor-F

El valor-F o F1-score mide el equilibrio entre la precisión y la sensibilidad [25]. Se calcula como la media armónica entre ambas, lo que penaliza de forma más severa los valores extremos y proporciona una medida equilibrada del rendimiento del modelo. Es especialmente útil en problemas con clases desbalanceadas, ya que evita que un alto rendimiento en una sola métrica distorsione la evaluación global.

#### 2.1.3.6. Matriz de confusión

Una matriz de confusión permite visualizar el rendimiento de un algoritmo de clasificación, normalmente supervisado. Cada fila representa las instancias en una clase real, mientras que cada columna representa las instancias en una clase predicha (o viceversa). La diagonal de la matriz representa las instancias correctamente clasificadas [26]. Las matrices de confusión pueden utilizarse con cualquier algoritmo clasificador.

#### 2.1.4. Validación cruzada

La validación es esencial en la experimentación con modelos de aprendizaje automático, ya que permite evaluar de manera fiable la capacidad de generalización del modelo, reduciendo el sesgo que podría aparecer al hacer una única partición entrenamiento/prueba. A continuación, se estudian las dos principales estrategias para este propósito.

Se usa para para evaluar los resultados de un análisis estadístico y garantizar que son independientes de la partición entre datos de entrenamiento y prueba. Para ello hay que calcular la media aritmética obtenida de las medidas de evaluación sobre diferentes particiones. Este método es habitual cuando el objetivo es la predicción y se quiere estimar la precisión de los modelos que se van a utilizar [27]. A continuación, se estudian las principales estrategias de validación cruzada.

#### 1. Validación cruzada de K iteraciones

Los datos en k subconjuntos, usando en cada iteración uno como prueba y los restantes (k-1) como entrenamiento. El proceso se repite k veces y los resultados se promedian para obtener una única estimación del rendimiento. Ofrece mucha precisión, pero es muy costoso computacionalmente [28].

#### 2. Validación cruzada aleatoria

En este caso se eligen aleatoriamente los datos que pertenecen a cada partición de entrenamiento y prueba. El resultado es la media aritmética de los valores obtenidos para las métricas en cada iteración [29].



#### 3. Validación cruzada dejando uno fuera

En este tipo de validación se separan los datos de forma que tenemos una sola muestra para los datos de prueba, mientras que para los de entrenamiento tenemos el resto de patrones del conjunto de datos. Se realizan tantas iteraciones como muestras (N) tenga el conjunto de datos, calculando el error para cada una de ellas como evaluación y se obtiene la media aritmética de todas ellas [30].

$$E = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} E_i$$

#### 2.1.5. Algoritmos de clasificación

En esta sección se presentan algunos algoritmos de clasificación más comunes, entre ellos, los que se van a usar en el estudio. Los clasificadores son modelos de aprendizaje automático capaces de asignar una etiqueta a cada instancia de datos en función de sus características. Se describen tanto modelos simples y rápidos, que facilitan la interpretación de los resultados, como modelos más complejos, que ofrecen un mayor potencial de generalización y precisión.

#### 2.1.5.1. Árboles de decisión

Son modelos de aprendizaje supervisado que representan las decisiones mediante una estructura jerárquica de nodos y ramas. Cada nodo interno evalúa un atributo de los datos y realiza una bifurcación según el valor de dicho atributo, mientras que los nodos hoja asignan la clase final. Normalmente usando criterios como la ganancia de información o el índice Gini [31].

#### Ventajas.

- La estructura del árbol es visual y fácil de entender.
- Una vez construido, clasificar nuevas instancias es muy rápido.
- Puede manejar datos categóricos y continuos sin necesidad de gran preprocesamiento.
- No asume ninguna distribución particular de los datos, adaptándose a distintas formas de patrones.



#### Inconvenientes.

- Los árboles pueden crecer demasiado y memorizar el conjunto de entrenamiento, perdiendo capacidad de generalización.
- Cambios leves en los datos pueden alterar la estructura del árbol de manera significativa.
- Limitada capacidad predictiva para relaciones complejas.

[32]

#### 2.1.5.2. Random forest

Random forest es un método de ensamblado que construye múltiples árboles de decisión sobre distintas muestras del conjunto de datos y combinando aleatoriamente subconjuntos de características. Cada árbol individual realiza su predicción, y el bosque final decide por mayoría de votos (en clasificación) o promedio (en regresión). Esta estrategia reduce la varianza y mejora la capacidad de generalización respecto a un único árbol de decisión, manteniendo robustez frente al ruido y al sobreajuste [33].

#### Ventajas.

- Es uno de los clasificadores más certeros.
- Suele obtener mejores resultados que un árbol individual.
- Maneja variables categóricas y continuas y tolera datos faltantes.
- Permite identificar qué atributos contribuyen más a la predicción.

[34]

#### Inconvenientes.

- Al estar compuesto por muchos árboles, es difícil interpretar.
- Entrenar y almacenar múltiples árboles requiere más recursos que un árbol único.
- Puede sobreajustar en ciertas tareas de clasificación o regresión.

[35]



#### 2.1.5.3. K-NN

El método de los k vecinos más cercanos es un método de clasificación supervisada no paramétrico que estima la probabilidad de que un patrón pertenezca a una clase. Es un tipo de aprendizaje vago, donde la función se aproxima localmente y el cálculo se hace en la clasificación [36].

Funciona asignando a un archivo o programa nuevo la categoría de sus vecinos más cercanos en un conjunto de datos previamente etiquetado. Es decir, compara el nuevo caso con las muestras conocidas y lo clasifica según la mayoría de etiquetas entre los más similares. La cercanía se mide normalmente usando la distancia euclidiana [37].

- 2.1.5.4. Ridge
- 2.1.5.5. Perceptrón multicapa
- 2.1.5.6. Máquinas de vectores de soporte
- 2.1.5.7. Light Gradient-Boosting Machine

#### 2.2. Ciberseguridad

La ciberseguridad es la protección de la infraestructura informática y la información que hay en ella, abarcando software, hardware y redes. Para garantizar la seguridad, es esencial combinar estrategias de prevención con métodos de protección efectivos. Las estrategias de prevención, como el uso de firewalls, software antivirus actualizado y educación en ciberseguridad para los usuarios, se centra en identificar y mitigar posibles amenazas antes de que ocurran. Por otro lado, la protección se enfoca en responder a los incidentes y minimizar sus efectos, mediante herramientas como los sistemas de detección de intrusiones. Con esto, podemos llegar a la conclusión de que el objetivo de la seguridad es minimizar los riesgos de recibir un ataque y reducir el impacto en caso recibirlo [38]. En esta sección nos centraremos en la ciberseguridad software, concretamente en los aspectos relacionados con la detección y clasificación de malware.

#### 2.2.1. Conceptos generales

La ciberseguridad constituye un pilar esencial en la sociedad digital actual, donde cada vez más actividades cotidianas, económicas y sociales dependen de sistemas informáticos y redes de comunicación. Su importancia radica en garantizar que la

#### UNIVERSIDAD D CÓRDOBA

#### CAPÍTULO 2. ESTADO DE LA TÉCNICA

información y los servicios digitales sean fiables y estén protegidos frente a accesos indebidos o manipulaciones maliciosas.

Los principales objetivos de la ciberseguridad se articulan en torno a la denominada tríada CIA [39]:

- Confidencialidad: asegura que los datos solo sean accesibles por usuarios autorizados.
- Integridad: garantiza que la información no sea alterada de forma no autorizada.
- Disponibilidad: busca que los sistemas y servicios estén siempre accesibles.

En este contexto, las organizaciones y usuarios se enfrentan a amenazas comunes como que se comentarán superficialmente por su falta de relación con el proyecto. Algunas de las amenazas más frecuentes son:

- 1. **Phishing**: Correos electrónicos, mensajes o enlaces fraudulentos que buscan engañar al usuario para que revele información confidencial [40].
- 2. *Malware*: Software malicioso que diseñado para dañar sistemas, robar información o tomar control de dispositivos. Se explicará en profundidad en la sección 2.2.2.
- 3. **Denegación de servicio**: Inundación de sistemas con tráfico para interrumpir su funcionamiento y dejar servicios inaccesibles [41].
- 4. Robo de credenciales/fuerza bruta: Intentos de acceder a cuentas mediante contraseñas robadas, adivinación sistemática o explotación de vulnerabilidades de autenticación.



#### 2.2.2. Malware

El software malicioso o malware es cualquier tipo de software que se introduce sin el consentimiento del usuario con el objetivo de dañar o comprometer la confidencialidad, integridad o disponibilidad de la información o el sistema [42]. Su objetivo puede ir desde la interrupción del funcionamiento de sistemas hasta el robo de información sensible o la obtención de control remoto sobre dispositivos.

Los primeros ejemplos de *malware* surgieron en las décadas de 1970 y 1980 como experimentos de laboratorio o programas con fines demostrativos. Actualmente se ha convertido en una de las amenazas externas más relevantes debido al daño que puede llegar a causar y afectando tanto a usuarios individuales como a grandes corporaciones y entidades gubernamentales. Su relevancia se ha incrementado con la expansión de la digitalización y el uso masivo de Internet, donde ataques automatizados y campañas de *malware* buscan constantemente vulnerabilidades en sistemas y redes, además de posibles descuidos de los usuarios.

#### 2.2.2.1. Tipos de Malware

Podemos clasificar el malware en diferentes categorías [43] según su propósito:

- Virus. Tienen como objetivo infectar archivos y sistemas informáticos. Se propagan cuando los usuarios comparten archivos o ejecutan programas infectados.
- Gusanos. Se propagan a través de las redes sin que tenga que intervenir el usuario.
- Troyanos. Se presentan como un *software* legítimo. De esta forma intentan engañar al usuario para que lo descargue, instale y ejecute.
- Adware. Muestra anuncios de forma intrusiva. Puede ser incrustada en una página web mediante gráficos, carteles, ventanas flotantes, o durante la instalación de algún programa al usuario, con el fin de generar lucro a sus autores.
- Spyware. Trata de conseguir información de un equipo sin conocimiento ni consentimiento del usuario. Después transmite esta información a una entidad externa.
- Ransomware. Conocido como secuestro de datos en español. Está diseñado para restringir el acceso a archivos o partes de un sistema y pedir un rescate para quitar la restricción.



- Rootkit. Es un conjunto de software que permite al atacante un acceso de privilegio a un ordenador, manteniendo presencia inicialmente oculta al control de los administradores.
- Keylogger. Se encarga de registrar las pulsaciones que se realizan en el teclado, para memorizarlas en un fichero o enviarlas a través de Internet.
- Exploit. Aprovecha un error o una vulnerabilidad de una aplicación o sistema para provocar un comportamiento involuntario.
- Backdoor. Puerta trasera en español. Este tipo de software permite un acceso no autorizado al sistema, evitando pasar por los métodos de autenticación.

#### 2.2.3. Técnicas de detección de Malware

Ningún método de detección es infalible y los principales antivirus comerciales pueden combinar distintas técnicas en función de las necesidades. La detección basada en firmas siguen siendo el método más usado en términos absolutos porque son rápidas, eficientes y fáciles de implementar. Este método consiste en comparar archivos con una base de datos de patrones conocidos. Otros mecanismos son: la detección heurística, por comportamiento, sandbox e inteligencia artificial [44].

Existen varias limitaciones de los métodos tradicionales frente a nuevas amenazas. Por ejemplo, para evadir la detección basada en firmas se generaba una cadena de bits única cada vez que se codificaba. Esto se denomina polimorfismo. Gracias a la heurística no era necesaria una coincidencia exacta con las firmas almacenadas, pero debido a la gran cantidad de variaciones que surgen a diario, su efectividad y la de otros mecanismos se ve comprometida [45]. A continuación se estudiarán algunas de las técnicas más usadas.

#### 2.2.3.1. Detección basada en firmas

La detección de intrusiones basada en firmas compara la actividad del sistema con patrones conocidos de ataques para identificar comportamientos maliciosos. El código del *Malware* de compila como cualquier programa, y este código se puede cifrar para crear una firma única. Otras formas de crear una firma son sus acciones en memoria o los archivos específicos que generan en ubicaciones específicas. En los casos más modernos se comunican a través de Internet hacia direcciones IP o dominios, lo que permite a los sistemas de defensa y prevención detectarlas y alertar [46].



Las firmas habitualmente son generadas y almacenadas por los proveedores comerciales de estos servicios, como pueden ser *ESTET* [47] o *Bitdefender* [48], aunque algunas pueden ser abiertas o colaborativas, como es el caso de *VirusTotal* [49].

**Ventajas.** Las detección basada en firmas es un sistema muy preciso, ya que si el autor del *Malware* no realiza cambios en el código, la firma no cambia y la detección es casi inmediata. Esto implica que el sistema de detección proporcione muy pocos falsos positivos [46].

**Inconvenientes.** El principal inconveniente de la detección basada en firmas es que para poder actuar, la amenaza debe ser conocida. Esto significa que no tienen forma de detectar las amenazas de tipo *zero day*, es decir, que acaban de ser descubiertas y que aún no tienen una firma [50].

Como se ha comentado en las ventajas, es casi infalible si no se modifica el código del programa, pero la firma queda completamente inservible con un pequeño cambio que se introduzca [7].

#### 2.2.3.2. Detección heurística

En la detección de *Malware*, se conoce como heurística al conjunto de técnicas que se usan para identificar aplicaciones maliciosas que no se encuentran en la base de datos de firmas [51]. Surge de la necesidad de combatir las nuevas amenazas y es uno de los pocos métodos capaces de combatir los *Malware* polimórficos, que cambian su código constantemente [52]

**Ventajas.** La principal ventaja de la detección heurística es su capacidad para identificar nuevas amenazas desconocidas. Al no depender exclusivamente de firmas previas, resulta eficaz para reconocer modificaciones de *Malware* existente o ataques que todavía no han sido documentados. Esto amplía la cobertura de protección frente a amenazas emergentes [53].

Inconvenientes. Este tipo de análisis trata de detectar el comportamiento conocido, por lo que si un programa no realiza ninguna acción conocida, es probable que no sea detectado [53].



#### 2.2.3.3. Detección basada en comportamiento

Esta técnica es clave frente a amenazas que pueden evitar ser detectadas por los métodos tradicionales. Los atacantes, para evitar ser detectados, ofuscan el código, práctica que "consiste en transformar el código fuente de un programa en una forma más compleja y difícil de comprender, sin alterar su funcionalidad" [54].

La detección basada en comportamiento analiza las actividades y patrones de ejecución de programas para identificar posibles amenazas y descubrir comportamientos anómalos que puedan indicar una intrusión, incluso cuando se trata de ataques desconocidos o de tipo zero day. Es capaz de identificar amenazas desconocidas, ya que no depende de bases de datos de firmas previas pero suele generar un mayor número de falsos positivos.

#### 2.2.3.4. Detección mediante aprendizaje automático

Los modelos de aprendizaje automático tienen la capacidad de extraer conocimiento a partir de grandes cantidades de información y reconocer tanto patrones complejos como inusuales. Examina entradas como registros del sistema, tráfico de red, procesos en ejecución o secuencias de instrucciones para localizar conductas anómalas. Además, pueden ajustarse de forma continua incorporando nuevas muestras, lo que incrementa su efectividad frente a variantes no identificadas [55].

En este caso, si un atacante realiza cambios en el código, lo ofusca o es un programa no conocido, no tiene por qué engañar al modelo. Esto hace que sea uno de los métodos de detección de *malware* más potentes y con proyección de futuro [56].

# Capítulo 3

# Formulación del problema y objetivos

En este capítulo se describirá el contexto en de la investigación y los retos que plantea, así como los problemas que surgen de esta situación. Después, definiremos los objetivos específicos que orientan el estudio, estableciendo las metas a alcanzar y el alcance del proyecto. Al mismo tiempo, se abordarán con más detalle las situaciones que han provocado estos problemas y se expondrán distintos objetivos con la intención de mitigarlos.

## 3.1. Contexto y motivación

La detección de *malware* es uno de los grandes desafíos de la ciberseguridad por su rápida y constante evolución. Cada día aparecen nuevas amenazas capaces de evadir las técnicas tradicionales explicadas en la sección 2.2.3 y no es posible depender de reglas predefinidas. Esto ha puesto de manifiesto la necesidad de evolucionar al mismo ritmo las técnicas de detección y ha hecho que las técnicas tradicionales resulten insuficientes por si solas. Con el rápido crecimiento que está teniendo el aprendizaje automático, podría ser un gran aliado si se usa de la forma adecuada, ya que es una herramienta muy potente capaz de detectar amenazas aun no conocidas.

El uso de algoritmos de aprendizaje automático permite automatizar el análisis de grandes volúmenes de datos y adaptarse a la evolución de las amenazas. Además, existe una gran variedad de modelos, lo que posibilita evaluar diferentes estrategias e identificar los métodos más precisos, eficientes y escalables. Por otro lado, es posible volver a entrenar usando nuevos datos y adaptarse rápidamente a los cambios que surjan [57].

UNIVERSIDAD

## 3.2. Definición del problema

A continuación, se definen los principales problemas y preguntas que nos hemos encontrado:

- Detectar nuevas amenazas sin necesidad de conocerlas previamente.
- Dificultad de seleccionar el algoritmo más adecuado.
- Limitaciones de recursos computacionales.
- ¿Cómo afectan las características de cada conjunto al rendimiento de los modelos?
- ¿Qué variables son más influyentes en la clasificación?

#### 3.3. Objetivos

A partir de los problemas presentados en la sección 3.2, podemos establecer una serie de objetivos que definirán el desarrollo del estudio del que trata este proyecto. Los objetivos se pueden dividir en dos tipos: general y específicos. El primero es la columna vertebral del proyecto, el tema central sobre el que gira el estudio que se realizará. Los objetivos específicos dividen el objetivo principal en otros más concretos y deseables. A continuación, se expondrán ambos tipos.

#### 3.3.1. Objetivo general

El objetivo principal para este estudio es comparar distintos algoritmos de aprendizaje automático haciendo uso de conjuntos de datos de malware. Este objetivo se centra en los dos primeros problemas comentados en la sección 3.2, tratando de conseguir detectar nuevas amenazas y tener una idea general de qué algoritmos se adaptan mejor a este propósito. Para ello, evaluaremos su eficiencia, precisión y viabilidad computacional.

UNIVERSIDAD D Córdoba

#### 3.3.2. Objetivos específicos

A partir del objetivo principal y del resto de problemas planteados, podemos concretar una serie propósitos más concretos:

- Estudio teórico de distintos algoritmos en la detección de malware.
- Obtención y análisis de bases de datos públicas de malware.
- Implementación de metodologías de detección de malware y su adaptación para uso en las bases de datos anteriores.
- Evaluar el rendimiento, eficiencia, precisión y viabilidad computacional de estos algoritmos.
- Identificar y analizar los métodos que se adaptan mejor al problema, destacando las ventajas e inconvenientes de cada uno de los algoritmos.
- Identificación de las variables e información más influyentes en la detección de malware, particularmente para cada base de datos.



# Capítulo 4

# Metodología de trabajo

Este capítulo describe la metodología seguida para el desarrollo del proyecto. Se explican los enfoques, técnicas y herramientas utilizadas para alcanzar los objetivos. Además, se expone el tipo de estudio realizado y la selección del conjunto de datos y los modelos. El propósito es ofrecer una guía clara del proceso seguido.

# 4.1. Enfoque metodológico

Existen varios enfoques aplicables al tipo de proyecto que estamos tratando, pero dado el carácter planteado inicialmente en los objetivos, se centrará en un estudio comparativo y experimental de distintos algoritmos de aprendizaje automático en la detección de *malware*. Se combina la experimentación práctica sobre conjuntos de datos reales con análisis estadísticos sobre los resultado obtenidos en las distintas pruebas realizadas. Cada modelo se somete a unas pruebas controladas en escenarios de clasificación binaria y multiclase, utilizando conjuntos de datos públicos y representativos.

Esta metodología permite identificar los algoritmos que presentan mejor equilibrio y adaptación a nuevos patrones de datos. También se podrán detectar posibles limitaciones y áreas de mejora para futuras investigaciones. Este enfoque proporciona un marco sistemático para el análisis comparativo de modelos, facilitando la interpretación de resultados y la toma de decisiones fundamentadas sobre el rendimiento de cada algoritmo.



#### 4.2. Técnicas y herramientas empleadas

En esta sección se describe el software, bibliotecas y lenguajes de programación, así como su función específica dentro del desarrollo del proyecto.

#### 4.2.0.1. Python

Se ha elegido Python como lenguaje para este proyecto ya que ofrece una fácil implementación de modelos, manipulación de datos y visualización de resultados, además de una amplia variedad de modelos y bibliotecas orientadas al aprendizaje automático y el estudio estadístico de conjuntos de datos. Una de las principales ventajas de Python es que la mayor parte de sus modelos se aprendizaje automático están desarrolladas en lenguajes compilados y optimizadas para usar los recursos de la mejor forma posible. Por ejemplo, muchos de los modelos permiten la paralelización de sus tareas o incluso procesamiento en GPU, si el modelo disponible está soportado, para reducir el tiempo necesario de entrenamiento. Se ha elegido la versión 3.12, ya que garantiza la compatibilidad con las bibliotecas empleadas y un menor numero de errores, a diferencia de otras versiones que presentan fallos en la paralelización.

#### 4.2.0.2. Scikit-learn

Scikit-learn es un paquete de código abierto en Python que ofrece una gran variedad de métodos de aprendizaje automático rápidos y eficientes, gracias a que usan bibliotecas compiladas en lenguajes como C++, C o Fortran. Tiene detrás una comunidad activa que mantiene la documentación, corrige errores y asegura la calidad. Aunque no incluye todos los algoritmos usados en este proyecto, es una herramienta muy recomendable si necesitamos: transformación de datos, aprendizaje supervisado o evaluación de modelos [58].

#### 4.2.0.3. DLOrdinal

La biblioteca dlordinal incluye muchas de las metodologías más recientes de clasificación ordinal usando técnicas avanzadas de aprendizaje profundo. El enfoque ordinal de esta herramienta tiene el objetivo de aprovechar la información de orden presente en la variable objetivo usando funciones de pérdida, diversas capas de salida y otras estrategias [59]. El módulo de dlordinal que nos ha resultado de utilidad para este proyecto ha sido la el conjunto de métricas que incluye para evaluar los modelos utilizados, ya que cuenta con algunas de las métricas que finalmente hemos usado: mínima sensibilidad y valor-F.



#### 4.2.0.4. Matplotlib

Para una mejor visualización de los datos obtenidos en los modelos utilizados, se ha usado la biblioteca Matplotlib, ya que incluye una gran cantidad de recursos para la representación gráfica de la información [60]. Se ha usado, en combinación con *Seaborn*, descrita en la sección 4.2.0.8.

#### 4.2.0.5. NumPy

La biblioteca *NumPy* tiene como objetivo principal dar soporte a la creación de vectores y matrices de grandes dimensiones, junto con una colección de funciones matemáticas con las que operar [61]. Ha sido de gran utilidad en el desarrollo del proyecto, ya que el conjunto de datos con el que se ha trabajado es de un tamaño considerable, aunque no ha sido necesario hacer uso de las funciones que proporciona porque la mayor parte de los cálculos necesarios se hacen de manera interna en los modelos utilizados.

#### 4.2.0.6. Pandas

Pandas es una herramienta muy potente para el manejo, análisis y manipulación de datos. Incluye una amplia variedad de herramientas para: leer y escribir datos, reestructuración y segmentación, inserción y eliminación de columnas, mezcla y unión de datos y muchas funcionalidades más [62]. Varias de ellas se han utilizado durante el desarrollo y la preparación del conjunto de datos.

#### 4.2.0.7. Light GBM

La biblioteca Light Gradient-Boosting Machine por su nombre en inglés, es una infraestructura de aprendizaje automático basada en modelos de árboles de decisión [63]. Se puede usar en diferentes tareas, pero la importante para el análisis realizado el la de clasificación. Los principales algoritmos soportados son: Gradient Boosting Decision Trees (GBDT), el cual utiliza LGBMClassifier, clasificador usado durante la experimentación, Dropouts meet Multiple Additive Regression Trees (Dart) y Gradient-based One-Side Sampling (Goss) [64].



#### 4.2.0.8. Seaborn

Basada en *Matplotlib*, *Seaborn* proporciona una interfaz de alto nivel para generar gráficos estadísticos [65]. Es posible usar ambas bibliotecas de forma combinada para una mayor capacidad de visualización. Mientras que *Matplotlib* ofrece un control detallado sobre cada elemento de la figura, *Seaborn* simplifica la creación de visualizaciones complejas, incorporando estilos predefinidos y funciones específicas para el análisis de datos.

#### 4.2.1. Conjunto de datos

En lo que a malware se refiere, BODMAS [66] es uno de los conjuntos de datos más completos en la actualidad, con la ventaja para este proyecto de ya estar procesado y tener una amplia bibliografía. Otra opción interesante puede ser VirusShare [67], ya que cuenta con más de 99 millones de muestras de malware actualizadas pero tiene varios inconvenientes para este proyecto. El primero, es que no incluye muestras de software no malicioso y el segundo, que necesita un procesamiento previo para extraer las características. Todo esto conlleva un aumento de tiempo considerable para la realización del proyecto. Otra de las opciones estudiadas ha sido theZoo [68]. En cuanto a este repositorio hemos podido observar que tiene los mismos inconvenientes que VirusShare y no tiene sus ventajas. Por último tenemos Microsoft Malware Classification [69]. En este caso tenemos un conjunto de datos muy amplio con casi medio terabyte, pero además de los inconvenientes ya comentados en los anteriores conjuntos, solo incluye malware que afecta a equipos Windows, lo que limitaría considerablemente el alcance del estudio.

Teniendo en cuenta todo lo comentado hasta ahora sobre los distintos conjuntos de datos considerados, hemos decidido usar *BODMAS*, ya que es el que mejor se adapta a las necesidades del estudio

#### 4.2.2. Modelos

Existe una gran variedad de modelos de aprendizaje automático implementados en las diferentes bibliotecas de *Python*. Aunque habría sido interesante hacer una comparación con el mayor número posible de ellos, por limitaciones de equipo y tiempo se ha hecho una pequeña selección siguiendo los siguientes criterios:

Diversidad en los enfoques de aprendizaje: Modelos rápidos como los árboles, otros más robustos, modelos lineales como referencia, métodos basados en distancia, redes neuronales y máquinas de vectores soporte por su capacidad de trabajar la optimización de márgenes.



- Equilibrio entre interpretabilidad y complejidad, usando modelos simples y algunos complejos pero que suelen ofrecer mejores resultados.
- Se han incluido tanto modelos que toleran bien el desbalanceo y otros más sensibles.
- Escalabilidad y coste computacional, usando desde algunos modelos ligeros a otros más costosos. Esto permite evaluar la viabilidad práctica de cada modelo en escenarios reales

#### $4.2.2.1. \quad Decision Tree Classifier$

DecisionTreeClassifier es un clasificador basado en árboles de decisión. Se incluido en este estudio por ser sencillo, interpretable y rápido a la hora de entrenar. Este modelo es una buena referencia inicial a pesar de que los tienden a sobreajustar los datos si no se aplican mecanismos de regularización adecuados. Su bajo coste computacional y capacidad para manejar tanto variables categóricas como continuas lo convierten en una herramienta útil para contrastar con modelos más complejos y ofrece un punto de partida sencillo para identificar patrones relevantes.

#### $4.2.2.2. \ Random Forest Classifier$

Este clasificador se destaca por su robustez y capacidad de generalización frente al sobreajuste. RandomForestClassifier es un conjunto de árboles de decisión entrenados sobre subconjuntos aleatorios de datos y características. Esto aprovecha la diversidad entre los distintos árboles para reducir la varianza del modelo y mejorar su rendimiento en comparación con un único árbol de decisión. Tiene la ventaja de ser uno de los algoritmos de aprendizaje más certeros para un conjunto de datos lo suficientemente grande, pero puede sobreajustar para tareas ruidosas [70]. Para problemas de clasificación de alta dimensionalidad ofrece un equilibrio entre precisión, estabilidad y coste computacional moderado.

#### 4.2.2.3. KNeighbors Classifier

El clasificador *KNeighborsClassifier* tiene un enfoque diferente al de los modelos anteriores. Su funcionamiento se basa en la proximidad entre muestras en el espacio de características, asignando la clase mayoritaria de los vecinos más cercanos. Aunque no realiza un proceso de entrenamiento tradicional, requiere el uso del conjunto de entrenamiento para almacenar las instancias y calcular las distancias durante la predicción.



#### $4.2.2.4. \ Ridge Classifier$

El clasificador *RidgeClassifier* es un modelo lineal, aportando un enfoque interpretable y computacionalmente eficiente. A diferencia de otros algoritmos más complejos, este clasificador aplica una regularización de tipo L2 que penaliza los coeficientes de gran magnitud, lo cual ayuda a mitigar el sobreajuste.

#### 4.2.2.5. MLPC lassifier

Este clasificador se basa en el perceptrón multicapa y funciona como red neuronal. Es capaz de capturar relaciones no lineales y complejas en los datos, lo que lo hace interesante en problemas donde los patrones pueden ser heterogéneos. Requiere un mayor coste computacional y un ajuste más cuidadoso de hiperparámetros pero es flexible y puede aproximar funciones no lineales que permiten explorar enfoques más avanzados frente a métodos tradicionales. Además, facilita analizar la diferencia de rendimiento entre modelos simples y redes neuronales.

#### 4.2.2.6. SVC

SVC (Support Vector Classifier) permite optimizar los márgenes de separación entre clases y funciona muy bien en problemas de clasificación complejos. Su fortaleza reside en el uso de funciones kernel, que permiten transformar los datos en espacios de mayor dimensión y separar clases que no son linealmente separables. En la detección de malware, donde las fronteras entre software benigno y malicioso pueden ser difusas, esto resulta especialmente útil. El principal inconveniente es que su coste computacional puede ser elevado en conjuntos de datos grandes.

#### $4.2.2.7. \ LGBMC lassifier$

El clasificador *LGBMClassifier*, perteneciente a la biblioteca *LightGBM*, es muy eficiente en problemas de clasificación con grandes volúmenes de datos y un número elevado de características. Se basa en el método de *gradient boosting*, pero introduce optimizaciones como el uso de histogramas y técnicas de reducción de memoria que lo hacen más rápido y escalable que otros métodos similares. *LightGBM* ha mostrado resultados competitivos estudios recientes [71].



# Capítulo 5

# Desarrollo y experimentación

En esta fase se lleva a cabo la implementación práctica del estudio, haciendo uso de los modelos de aprendizaje automático implementados principalmente en la biblioteca *Scikit-Learn* de *python*. Para ello se realiza un procesamiento de los datos, necesario para obtener un conjunto reducido y otro apto para la clasificación multiclase. Además, se configuran los entornos necesarios para su entrenamiento y evaluación, se establecen las métricas de rendimiento, los procedimientos de prueba y los escenarios de experimentación que permitirán obtener resultados consistentes y comparables. El objetivo es verificar, mediante pruebas controladas, la efectividad de cada método en la detección de *malware*.

La parte experimental se aborda desde dos perspectivas complementarias. En primer lugar, se evalúa la capacidad de los modelos para la detección de *malware* mediante pruebas de clasificación binaria, determinando si un patrón corresponde a software malicioso o legítimo. En segundo lugar, se analiza la viabilidad de realizar una clasificación multinivel sobre esos mismos patrones, identificando el tipo específico de *malware* al que pertenecen, lo que permite un análisis más detallado y aplicable a entornos de ciberseguridad avanzada.



## 5.1. Modelos utilizados

En este proyecto se han empleado diversos algoritmos de aprendizaje automático, seleccionados en función de los criterios mencionados en el capitulo 4 y con el objetivo de representar diferentes enfoques.

Se han utilizado los siguientes modelos implementados en scikit-learn y LightGBM:

- ullet Decision Tree Classifier
- $\blacksquare$  RandomForestClassifier
- $\blacksquare$  KNeighborsClassifier
- $\blacksquare$  RidgeClassifier
- MLPClassifier
- *SVC*
- LGBMClassifier (de LightGBM)

Todos los modelos se han ajustado y evaluado utilizando *GridSearchCV*, lo que permite explorar sistemáticamente distintas combinaciones de hiperparámetros y asegurar comparaciones consistentes entre los distintos métodos de clasificación. La descripción teórica de estos modelos se presenta en el capítulo 2.

# 5.2. Procesamiento del conjunto de datos

Dadas las limitaciones hardware y la cantidad de datos, aproximadamente 135000 patrones y 2400 atributos por cada patrón, es necesario hacer un procesamiento previo del conjunto de datos. Para ello hemos tenido en cuenta varios enfoques. Por un lado, BODMAS nos permite hacer una distinción entre clasificación binaria y clasificación multiclase, pero para ello es necesario reordenar los datos, ya que se encuentran distribuidos en varios archivos. Por otro lado, es necesario reducir la cantidad de datos. A continuación veremos los distintos enfoques.



### 5.2.1. Clasificación multiclase

El conjunto de datos seleccionado se divide en varios archivos:

- bodmas.npz: incluye la matriz de patrones de entrada en formato de matriz de python y la matriz de salidas deseadas.
- bodmas\_metadata.csv: la información relevante para nuestro problema es la columna sha que contiene la función hash de todo el conjunto de datos.
- bodmas\_malware\_category.csv: contiene la función hash del malware y la categoría a la que pertenece.

Dado que las distintas categorías se encuentran en formato texto, es necesario codificarlas para poder trabajar con ellas. La codificación elegida ha sido la representada en la tabla 5.1.

| Categoría           | Codificación | $N^{\underline{o}}$ de patrones |
|---------------------|--------------|---------------------------------|
| benign              | 0            | 77142                           |
| trojan              | 1            | 29972                           |
| worm                | 2            | 16697                           |
| backdoor            | 3            | 7331                            |
| downloader          | 4            | 1031                            |
| information stealer | 5            | 448                             |
| dropper             | 6            | 715                             |
| ransomware          | 7            | 821                             |
| rootkit             | 8            | 3                               |
| cryptominer         | 9            | 20                              |
| pua                 | 10           | 29                              |
| exploit             | 11           | 12                              |
| virus               | 12           | 192                             |
| p2p-worm            | 13           | 16                              |
| trojan-gamethief    | 14           | 6                               |

Tabla 5.1: Codificación de las clases malware.

Para obtener una nueva matriz de salidas deseadas que incluya los tipos de malware, una vez cargados los datos en sus correspondiente variables de python, usamos la función merge [72] perteneciente a la clase pandas. DataFrame para incluir en metadata los datos de mw\_category['category'] en las entradas donde coincide la columna sha.

## CAPÍTULO 5. DESARROLLO Y EXPERIMENTACIÓN

Antes de codificar necesitamos darle una etiqueta a los datos vacíos, los cuales significan que esa muestra es benigna. Para ello usamos la función pandas. Data Frame. fillna [73], que nos permite completar datos vacíos de distintas formas. Para nuestro caso usamos la etiqueta benign. También eliminamos las columnas que no vamos a necesitar, dejando solo la categoría a la que pertenece cada muestra.

Ahora podemos codificar los datos usando la función pandas. Data Frame. map [74]. Este método aplica una función que acepta y devuelve un valor escalar a cada elemento del Data Frame, lo que permite asignar un valor numérico a cada clase.

El código utilizado para esta tarea se encuentra en el Anexo A.1.

## 5.2.2. Reducción del conjunto de datos

Reducir el número de datos con el que vamos a trabajar tiene el objetivo de principal de disminuir el tiempo que los algoritmos van a necesitar para procesar la información sin perjudicar la integridad de los datos, ya que los resultados del estudio podrían verse afectados y llevar a unas conclusiones erróneas. Esta tarea se puede enfrentar desde dos planteamientos distintos: condensar el número de patrones o el número de características. Ambos planteamientos se han estudiado de forma teórica en esta memoria en las secciones 2.1.1 y 2.1.2 respectivamente. Las técnicas elegidas son undersampling por simplicidad y PCA porque según el estudio A Low Complexity ML-Based Methods for Malware Classification [75] se obtienen unos resultados algo más precisos que con otros métodos.

El código utilizado se encuentra en el anexo A.2. A continuación se explicarán los pasos seguidos.

#### 5.2.2.1. Número de patrones

Como ya hemos estudiado en la sección 2.1.1.2, el submuestreo o undersampling en inglés, es una técnica para abordar el desbalance de clases en un conjunto de datos, especialmente cuando una de las clases tiene muchos más patrones que la otra. En nuestro caso, el desbalance no es demasiado grande ya que BODMAS contiene 57293 muestras malware y 77142 muestras benignas.

El método RandomUnderSampler [76] de la biblioteca Imbalanced learn nos permite varias formas de actuar, siendo la que nos interesa para este estudio la que nos permite elegir manualmente el número de patrones de cada clase. Hemos elegido una cantidad de 15000 patrones en por clase.



#### 5.2.2.2. Número de características

Este método, también conocido como reducción de la dimensionalidad, consiste en reducir el número de variables de las que consta el problema. Para aplicar el método matemático-estadístico de análisis de componentes principales, PCA por sus siglas en inglés, usamos la clase PCA [77] perteneciente a sklearn. decomposition. Esta clase nos permite entrenar el modelo y transformar el conjunto de datos tanto para el conjunto de entrenamiento como para el de test. Para ello será necesario separar previamente los datos, ya que BODMAS no cuenta con esta división.

### 5.2.2.3. Elección final del nuevo conjunto de datos

Para poder decidir como será el conjunto de entrenamiento final se han hecho distintos conjuntos de datos sobre los que se probarán algunos algoritmos. Los conjuntos son los siguientes:

- Clasificación binaria con *PCA*.
- Clasificación binaria con PCA y Undersampling con 15000 patrones por clase.
- Clasificación multiclase con PCA.

Los resultados obtenidos se reflejan en las tablas 5.2, 5.3 y 5.4 respectivamente.

Test Clasificador Tiempo (s) Entrenamiento  $\overline{F1}$ Acc MS F1Acc MS 0.8851.000 1.000 0.9720.971 1.000 Decission tree 1.000 Random forest 25.91 1.000 0.9761.000 1.000 1.000 0.984K-NN0.095 0.9730.9701.000 0.963 0.963 1.000

Tabla 5.2: Clasificación binaria con *PCA*.

Tabla 5.3: Clasificación binaria con PCA y Undersampling.

| Clasificador   | Tiempo (s) | Entrenamiento |       |       | Test  |       |       |
|----------------|------------|---------------|-------|-------|-------|-------|-------|
|                |            | Acc           | MS    | F1    | Acc   | MS    | F1    |
| Decission tree | 0.184      | 1.000         | 1.000 | 1.000 | 0.945 | 0.936 | 1.000 |
| Random forest  | 4.926      | 1.000         | 1.000 | 1.000 | 0.963 | 0.957 | 1.000 |
| K-NN           | 0.016      | 0.954         | 0.948 | 1.000 | 0.938 | 0.931 | 1.000 |

En cuanto a la clasificación binaria, hemos decidido usar el conjunto de datos en el que se ha aplicado tanto PCA como undersampling, ya que, aunque los resultados

### CAPÍTULO 5. DESARROLLO Y EXPERIMENTACIÓN

Tabla 5.4: Clasificación multiclase con *PCA* 

| Clasificador   | Tiempo (s) | Entrenamiento |       |       | Test  |       |       |
|----------------|------------|---------------|-------|-------|-------|-------|-------|
|                |            | Acc           | MS    | F1    | Acc   | MS    | F1    |
| Decission tree | 1.059      | 0.999         | 0.895 | 0.999 | 0.939 | 0.000 | 0.976 |
| Random forest  | 30.04      | 0.999         | 0.895 | 0.999 | 0.955 | 0.000 | 0.981 |
| K-NN           | 0.088      | 0.951         | 0.000 | 0.981 | 0.936 | 0.000 | 0.975 |

son similares en ambos conjuntos, el tiempo es considerablemente más bajo y dadas las limitaciones del equipo disponible puede ser beneficioso a la hora de probar algoritmos más complejos.

Para la clasificación multiclase hay varios métodos que podemos usar para reducir el tamaño del conjunto de datos, como el clustering o variantes del método de undersampling ya utilizado en clasificación binaria. A pesar de ello, estos métodos tienen una mayor complejidad de aplicación y la reducción de las dimensiones no es el objeto de este estudio. Por otro lado, esta decisión puede suponer algunos problemas al usar técnicas como GridSearchCV o la validación cruzada, ya que incrementan considerablemente el tiempo de entrenamiento.

También en referencia a la clasificación multiclase, podemos ver en la tabla 5.4 que la métrica de mínima sensibilidad es 0 para todos los casos de test. Como ya se ha explicado en esta memoria, mide cómo de bien se clasifica la clase peor clasificada y un valor de 0 indica que alguna de las clases no se ha clasificado bien. Como podemos ver en la matriz de confusión representada en la imagen 5.1, algunas de las clases con menos patrones tienen dificultades para obtener una buena clasificación debido a la falta de información en el entrenamiento. Algunos clasificadores tienen la opción de asignar un peso a los patrones de cada clase inversamente proporcional al número de patrones de la clase, de manera que todas las clases tengan el mismo peso en el entrenamiento, pero no se consiguen mejores resultados.



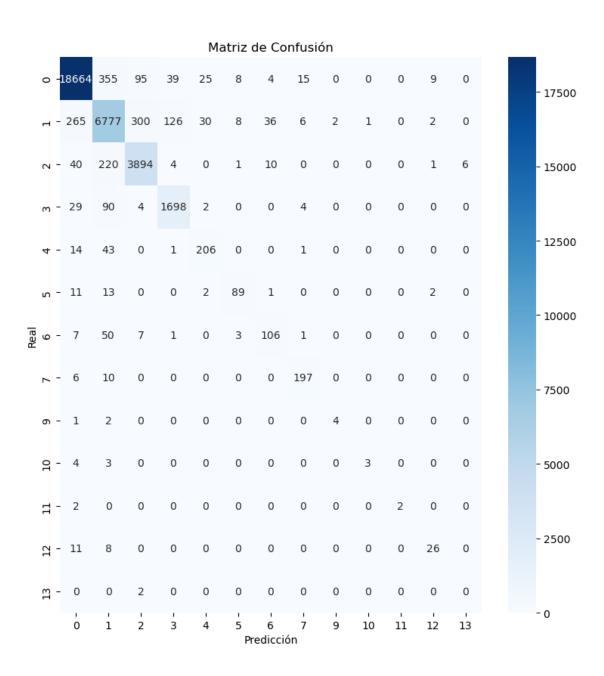


Figura 5.1: Matriz de confusión para la clasificación multicase

### UNIVERSIDAD D CÓRDOBA

## CAPÍTULO 5. DESARROLLO Y EXPERIMENTACIÓN

Según el estudio Malware Behavior Analysis: Learning and Understanding Current Malware Threats [78], algunos de los tipos de malware que tenemos con menos patrones, se pueden agrupar en algunas de las clases más representadas de nuestro conjunto de datos. En este estudio se comenta que p2p-worm añade un comportamiento específico al comportamiento de un gusano, generando problemas de red y de pérdida de datos. Algo similar pasa con Gamethief trojan. De esta forma podemos agrupar estos patrones a sus respectivas clases similares sin perder efectividad a la hora de clasificar y además eliminar así dos de las clases que nos pueden dar problemas por falta de información.

Por otro lado, se han planteado dos formas de solucionar este problema, aunque ambas presentan inconvenientes:

- Eliminar las clases menos representadas. Tiene el riesgo de no reconocer un nuevo patrón si es de un tipo distinto de *malware*.
- Agruparlas en una nueva clase que represente varios tipos de malware. En este caso estamos suponiendo que los patrones agrupados tienen unas características similares.

Finalmente hemos decidido agrupar las clases con menos de 30 patrones en una nueva categoría otros. Por número de patrones sería recomendable agrupar también la clase virus, pero podría tener demasiado peso en la categoría otros y hemos considerado que es lo suficientemente relevante como para estudiarla por separado. En la tabla 5.6 podemos ver que, aunque mejoramos la mínima sensibilidad, no se producen unas mejoras significativas en la precisión de clasificación pero dada la alta precisión presentada por los modelos y la mejora en la mínima sensibilidad puede considerarse una buena actualización. Podemos ver la nueva codificación en la tabla 5.5

Por último, se han considerado otras opciones para mejorar la clasificación de las clases minoritarias, pero podrían exceder la complejidad de este proyecto:

- Utilizar métodos de sobremuestreo, ya mencionados en la sección 2.1.1.1, que consisten en aumentar la cantidad de patrones de estas clases de forma sintética.
- Utilizar métodos jerárquicos que primero clasifiquen usando la categoría otros, para después dividirla en sus diferentes clases y entrenar un modelo específico.



Tabla 5.5: Nueva codificación de las clases malware.

| Categoría           | Codificación | $N^{\underline{o}}$ de patrones |
|---------------------|--------------|---------------------------------|
| benign              | 0            | 77142                           |
| trojan              | 1            | 29978                           |
| worm                | 2            | 16713                           |
| backdoor            | 3            | 7331                            |
| downloader          | 4            | 1031                            |
| information stealer | 5            | 448                             |
| dropper             | 6            | 715                             |
| ransomware          | 7            | 821                             |
| virus               | 8            | 192                             |
| otros               | 9            | 64                              |

Tabla 5.6: Clasificación multiclase con la nueva codificación.

| Clasificador   | Tiempo (s) | Entrenamiento |       |       | Test  |       |       |
|----------------|------------|---------------|-------|-------|-------|-------|-------|
|                |            | Acc           | MS    | F1    | Acc   | MS    | F1    |
| Decission tree | 1.220      | 0.998         | 0.992 | 0.998 | 0.938 | 0.670 | 0.975 |
| Random forest  | 31.201     | 0.998         | 0.993 | 0.998 | 0.953 | 0.670 | 0.980 |
| K-NN           | 0.083      | 0.951         | 0.431 | 0.980 | 0.936 | 0.333 | 0.974 |

#### Preparación del entorno 5.3.

En esta sección se describe el entorno de trabajo utilizado por el alumno para la implementación de los modelos y la realización de las pruebas. El entorno se debe preparar de forma correcta, ya que puede afectar a la ejecución de los algoritmos y a la reproducibilidad de los experimentos. A continuación, se explican elementos del entorno como el lenguaje de programación, las bibliotecas y las características del equipo.

#### 5.3.1. Herramientas y bibliotecas

El desarrollo y la experimentación de este proyecto se han llevado a cabo empleando un conjunto de herramientas y bibliotecas muy utilizadas en la ciencia de datos. Python ha sido el lenguaje de programación de este trabajo, ya que ofrece una fácil implementación de modelos, manipulación de datos y visualización de resultados. Su popularidad en se debe a su sintaxis sencilla, escalabilidad y amplia variedad de herramientas y bibliotecas [79].



En este proyecto se ha utilizado la versión 3.12 de *Python*, elegida principalmente por su compatibilidad con las bibliotecas empleadas, en particular, con *Grid-SearchCV*, que aprovechan la paralelización de procesos para mejorar el rendimiento. El problema encontrado es que los hilos no se cierran correctamente, es un comportamiento típico asociado a lo que en programación concurrente se denomina *thread leakage* o hilos huérfanos. provoca que la memoria *RAM* y la *CPU* sigan siendo consumidas incluso después de que la ejecución haya terminado. En teoría, este problema no afecta al rendimiento de los clasificadores, pero puede afectar al tiempo de ejecución.

Las bibliotecas utilizadas para construir un modelo y analizar los datos son *Scikit-learn*, *DLOrdinal*, *Matplotlib*, *NumPy*, *Pandas*, *LightGBM* y *Seaborn*. Se ha hablado de todas ellas con mayor profundidad en la sección 4.2

#### 5.3.2. Hardware

El entrenamiento y evaluación de los modelos se ha realizado en el equipo del estudiante con las siguientes características: procesador Intel Core i7-4712MQ, tarjeta gráfica NVIDIA GeForce 920M, 16 GB de RAM DDR3 y almacenamiento compuesto por un SSD Crucial MX500 de 250 GB y un HDD de 1 TB. Este hardware permite la paralelización de los algoritmos en múltiples núcleos del procesador, lo que reduce significativamente los tiempos de entrenamiento, pero se encuentra muy limitado respecto al conjunto utilizado para clasificación multiclase y modelos más costosos como puede ser SVM.

# 5.3.3. Protocolo de experimentación y validación

En esta sección se establecen las condiciones de evaluación del rendimiento de los modelos mencionados en la sección 5.1 y se explican los procedimientos seguidos, las técnicas de validación usadas y los criterios que permiten medir de forma objetiva la calidad de las predicciones. Todo esto tiene objetivo de minimizar posibles sesgos, evitar el sobreajuste y obtener conclusiones fiables.

#### 5.3.3.1. Diseño experimental

Inicialmente se han planteado tres formas de estructurar el diseño experimental y como se evaluarán posteriormente las pruebas. La primera ha sido comparar distintos modelos para cada tipo de clasificación. La segunda, comparar, clasificación binaria y multiclase para cada clasificador. Por último, se ha planteado la posibilidad de una combinación de ambas comparaciones. Este último caso se ha descarta porque, aunque puede ser interesante la comparación combinada por proporcionar

### CAPÍTULO 5. DESARROLLO Y EXPERIMENTACIÓN

una amplia visión del problema, duplica la carga de trabajo y puede exceder la complejidad del proyecto.

La segunda opción planteada puede servir para comparar el rendimiento de uno o varios modelos según la naturaleza del problema y realizar un análisis de coste computacional. Son aspectos interesantes a estudiar, pero no entran dentro de los objetivos de este estudio.

Finalmente se ha seleccionado la primera opción. Aunque el problema de la detección de malware puede enfocarse tanto para la simple detección de un programa malicioso como para identificar a que tipo pertenece, los problemas de clasificación binaria y multiclase tienen enfoques muy diferentes. Por otro lado, el conjunto de datos usado para clasificación multiclase contiene varias clases con muy pocos patrones y la comparación podría no ser justa.

#### 5.3.3.2. Validación de resultados

Para evitar sesgos y resultados poco concluyentes se han empleado varias técnicas.

- Validación cruzada: Se ha usado el parámetro cv de GridSearchCV. En general se han usado 5, aunque en algunos casos ha sido necesario ajustarlo por tiempo.
- Validación cruzada estratificada adaptativa: la función cv() que encontramos en el Anexo A.4 ajusta el numero de particiones en caso de que una clase tenga menos muestras que particiones indicadas.
- Particion entrenamiento/prueba: se ha dividido el conjunto de datos en un 75-25 para entrenamiento y pruebas respectivamente usando la variable random\_state con la semilla usada en las pruebas.
- Repetición con semillas aleatorias: para repetir los experimentos y tener una visión más amplia.
- Ajuste de pesos de clase: mediante class\_weight = "balanced" en los clasificadores en los que se encuentra disponible.

A pesar de todas estas técnicas, es bastante probable que las clases extremadamente minoritarias del conjunto de datos para la clasificación multiclase pueden tener una influencia muy limitada.



#### 5.3.3.3. Reproducibilidad

Durante el desarrollo del código y de las pruebas, se han adoptado diferentes medidas para garantizar que las comparaciones entre modelos sean justas.

#### 1. Fijación de semillas:

Se ha hecho uso de una semilla controlada dentro de un bucle para repetir el experimento. Con ella se controla:

- La partición aleatoria de test y entrenamiento.
- la inicialización interna de los clasificadores que aceptan randon\_state.

### 2. Número de repeticiones:

Si bien el número de repeticiones es ajustable dentro del código utilizado, para asegurar una justa comparación y por las limitaciones del equipo, se han usado 10 semillas en todos los experimentos. Esto permite obtener la media y la desviación típica de las métricas y reducir la variabilidad.

### 3. Control de parámetros:

Los hiperparámetros se optimizan con *GridSearchCV* usando la misma rejilla para todas las semillas para poder tener una comparación coherente.

Estas medidas permiten obtener los mismo resultados si se usan las mismas semillas, configuraciones y conjunto de datos.

### 5.3.3.4. Control de parámetros

Para la optimización de hiperparámetros hemos usado búsqueda en rejilla de GridSearchCV. Esta técnica hace pruebas con todas las combinaciones posibles de los parámetros proporcionados y usa validación cruzada para garantizar la robustez de los resultados. El problema con esta técnica es el elevado número de pruebas, ya que se prueban todas las combinaciones de parámetros posibles en cada uno de los conjuntos de la validación cruzada, lo que eleva el tiempo necesario de manera considerable.

Una opción considerada y probada para evitar esta limitación es la búsqueda aleatoria de *RandomizedSearchCV*, que permite establecer un número máximo de combinaciones a probar y puede reducir considerablemente el número de combinaciones evaluadas. El inconveniente que ha surgido con esta técnica es que al disponer de un *Hardware* muy limitado, la cantidad de combinaciones usadas es pequeña y limitar aun más con la búsqueda aleatoria puede suponer que los resultados sean menos representativos.

### CAPÍTULO 5. DESARROLLO Y EXPERIMENTACIÓN

La rejilla se ha establecido para cada modelo en función de las limitaciones del equipo, el tiempo necesario para el entrenamiento de cada modelo y cuanto influye ese parámetro en el tiempo de entrenamiento y el peso que tiene en los resultados.

#### 5.3.3.5. Criterios de evaluación

Para evaluar la efectividad de los modelos implementados, se han utilizado las siguientes métricas, cuya descripción teórica se encuentra en la sección 2.1.3:

- Accuracy: proporción de predicciones correctas sobre el total de patrones.
- Mínima Sensibilidad: sensibilidad de la clase peor clasificada.
- **F1-score**: media armónica entre precisión y sensibilidad. En este documento se ha hecho referencia a ella como valor-F.

# 5.4. Implementación y pruebas

En esta sección se describe, principalmente, la estructura del código empleado para realizar los experimentos y el procedimiento seguido dentro del mismo para entrenar y evaluar los modelos seleccionados. Además se va a tratar la preparación del conjunto de datos, es decir, cómo se cargan y cómo se divide la información para realizar el entrenamiento y las pruebas. Por último, se tratará la forma que hemos seguido para presentar los resultados y las métricas que se han mencionado en la sección 5.3.3.5.

# 5.4.1. Procedimiento de entrenamiento y evaluación

El planteamiento seguido para entrenar los diferentes modelos ha sido usar *Grid-SearchCV* para ajustar los modelos de clasificación con los mejores parámetros posibles. Para obtener una visión más amplia y más justa del problema, se ha repetido el entrenamiento, con las mismas 10 semillas para todos los modelos. Con esto conseguimos que el experimento sea controlado y reproducible, ya que para un mismo modelo, una misma semilla y la misma rejilla de parámetros, obtendremos siempre los mismos resultados. Una vez calculadas las métricas seleccionadas en la sección 5.3.3.5, se calcula la media y la desviación típica de todas ellas para usarlas como valor final de comparación entre modelos.



## 5.4.2. Preparación y uso de los conjuntos de datos

Además del tratamiento previo del conjunto de datos realizado en la sección 5.2, es necesario procesar la información antes de entrenar. Con la función load, cargamos el conjunto de datos en dos matrices de Numpy, la matriz de información y la matriz de clases. La matriz de patrones de entrada se normaliza haciendo uso de la clase MinMaxScaler del módulo preprocessing de Scikit-Learn. Por último, haciendo uso de la función train\_test\_split, dividimos el conjunto de datos en test y entrenamiento. Esto se hace dentro del bucle y para cada semilla con el objetivo de tener una evaluación más robusta, ya que permite tener una división distinta y controlada para cada semilla.

# 5.4.3. Métricas y análisis de resultados

Para calcular las métricas se han usado las funciones accuracy\_off1 y minimum\_sensitivity para las métricas valor-F y mínima sensibilidad respectivamente.
Estas se encuentran disponibles en el módulo metrics de la librería dlordinal. Para
calcular la exactitud o accuracy del entrenamiento, se ha usado la función accuracy\_score disponible en el módulo metrics de la librería Scikit-Learn. Finalmente,
una vez calculados los resultados para todas las semillas, se guardan en un objeto
DataFrame de Pandas con el formato que se muestra en el ejemplo del Anexo A.5.
Haciendo uso de los métodos mean y std de esta clase, se obtiene la media y la
desviación típica de todas las semillas.



# Capítulo 6

# Resultados y discusión

# 6.1. Clasificación binaria

# 6.1.1. Árboles de decisión

Tabla 6.1: Clasificación binaria con Decision Tree Classifier

|                  | Ent   | renamie | ento  | Test  |       |       |
|------------------|-------|---------|-------|-------|-------|-------|
| Estado aleatorio | Acc   | MS      | F1    | Acc   | MS    | F1    |
| 0                | 1.000 | 1.000   | 1.000 | 0.951 | 0.942 | 1.000 |
| 1                | 1.000 | 1.000   | 1.000 | 0.944 | 0.935 | 1.000 |
| 2                | 1.000 | 1.000   | 1.000 | 0.942 | 0.935 | 1.000 |
| 3                | 1.000 | 1.000   | 1.000 | 0.948 | 0.938 | 1.000 |
| 4                | 1.000 | 1.000   | 1.000 | 0.953 | 0.946 | 1.000 |
| 5                | 0.998 | 0.997   | 1.000 | 0.947 | 0.936 | 1.000 |
| 6                | 0.998 | 0.997   | 1.000 | 0.947 | 0.941 | 1.000 |
| 7                | 1.000 | 1.000   | 1.000 | 0.949 | 0.946 | 1.000 |
| 8                | 0.999 | 0.998   | 1.000 | 0.948 | 0.937 | 1.000 |
| 9                | 1.000 | 1.000   | 1.000 | 0.950 | 0.940 | 1.000 |
| Mean             | 0.999 | 0.999   | 1.000 | 0.948 | 0.940 | 1.000 |
| STD              | 0.001 | 0.001   | 0.000 | 0.003 | 0.004 | 0.000 |



Tabla 6.2: Clasificación binaria con RandomForestClassifier

|                  | Ent   | renamie | ento  | Test  |       |       |
|------------------|-------|---------|-------|-------|-------|-------|
| Estado aleatorio | Acc   | MS      | F1    | Acc   | MS    | F1    |
| 0                | 0.980 | 0.928   | 0.989 | 0.939 | 0.524 | 0.972 |
| 1                | 0.980 | 0.929   | 0.990 | 0.939 | 0.500 | 0.973 |
| 2                | 0.980 | 0.927   | 0.989 | 0.941 | 0.429 | 0.974 |
| 3                | 0.979 | 0.923   | 0.989 | 0.939 | 0.444 | 0.973 |
| 4                | 0.982 | 0.931   | 0.990 | 0.939 | 0.500 | 0.974 |
| 5                | 0.980 | 0.929   | 0.990 | 0.937 | 0.609 | 0.971 |
| 6                | 0.978 | 0.920   | 0.988 | 0.938 | 0.550 | 0.971 |
| 7                | 0.980 | 0.929   | 0.990 | 0.939 | 0.562 | 0.972 |
| 8                | 0.982 | 0.934   | 0.991 | 0.938 | 0.489 | 0.971 |
| 9                | 0.989 | 0.956   | 0.992 | 0.936 | 0.400 | 0.972 |
| Mean             | 0.981 | 0.931   | 0.990 | 0.939 | 0.501 | 0.972 |
| STD              | 0.003 | 0.010   | 0.001 | 0.001 | 0.064 | 0.001 |

- 6.1.2. Random forest
- 6.1.3. *K-NN*
- 6.1.4. Máquinas de vectores de soporte
- 6.1.5. Ridge
- 6.1.6. Redes neuronales: Perceptrón multicapa
- 6.1.7. Light Gradient Boosting Machine
- 6.2. Clasificación multiclase
- 6.2.1. Árboles de decisión
- 6.2.2. Random forest
- 6.2.3. K-NN
- 6.2.4. Máquinas de vectores de soporte

En este caso, el proceso de entrenamiento presentó una mayor complejidad y dificultad para obtener resultados comparables con los de otros modelos evaluados, principalmente debido a las limitaciones del equipo utilizado. El elevado tiempo



Tabla 6.3: Clasificación binara con KNeighborscClassifier

|                  | Ent   | renamie | ento  |       | Test  |       |
|------------------|-------|---------|-------|-------|-------|-------|
| Estado aleatorio | Acc   | MS      | F1    | Acc   | MS    | F1    |
| 0                | 1.000 | 1.000   | 1.000 | 0.947 | 0.935 | 1.000 |
| 1                | 1.000 | 1.000   | 1.000 | 0.949 | 0.938 | 1.000 |
| 2                | 1.000 | 1.000   | 1.000 | 0.939 | 0.926 | 1.000 |
| 3                | 1.000 | 1.000   | 1.000 | 0.949 | 0.937 | 1.000 |
| 4                | 1.000 | 1.000   | 1.000 | 0.949 | 0.936 | 1.000 |
| 5                | 1.000 | 1.000   | 1.000 | 0.946 | 0.932 | 1.000 |
| 6                | 1.000 | 1.000   | 1.000 | 0.946 | 0.931 | 1.000 |
| 7                | 1.000 | 1.000   | 1.000 | 0.944 | 0.934 | 1.000 |
| 8                | 1.000 | 1.000   | 1.000 | 0.947 | 0.935 | 1.000 |
| 9                | 1.000 | 1.000   | 1.000 | 0.949 | 0.940 | 1.000 |
| Mean             | 1.000 | 1.000   | 1.000 | 0.947 | 0.934 | 1.000 |
| STD              | 0.000 | 0.000   | 0.000 | 0.003 | 0.004 | 0.000 |

requerido para el entrenamiento sin ajuste de parámetros, junto con los resultados poco satisfactorios obtenidos para las dos semillas empleadas —con una precisión aproximada del 20 %—, motivaron la decisión de no continuar con las máquinas de vectores de soporte para la clasificación multiclase. No obstante, estos resultados no indican que el modelo sea inadecuado para el problema planteado, sino que tiene una mayor exigencia en cuanto a los recursos necesarios para su entrenamiento.

- 6.2.5. Ridge
- 6.2.6. Redes neuronales: Perceptrón multicapa
- 6.2.7. Light Gradient Boosting Machine



Tabla 6.4: Clasificación binaria con SVC

|                  | Ent   | renamie | ento  |       | Test  |       |
|------------------|-------|---------|-------|-------|-------|-------|
| Estado aleatorio | Acc   | MS      | F1    | Acc   | MS    | F1    |
| 0                | 0.757 | 0.656   | 1.000 | 0.764 | 0.672 | 1.000 |
| 1                | 0.761 | 0.671   | 1.000 | 0.769 | 0.681 | 1.000 |
| 2                | 0.766 | 0.702   | 1.000 | 0.757 | 0.699 | 1.000 |
| 3                | 0.762 | 0.700   | 1.000 | 0.766 | 0.704 | 1.000 |
| 4                | 0.760 | 0.684   | 1.000 | 0.768 | 0.696 | 1.000 |
| 5                | 0.761 | 0.663   | 1.000 | 0.753 | 0.655 | 1.000 |
| 6                | 0.762 | 0.702   | 1.000 | 0.762 | 0.683 | 1.000 |
| 7                | 0.763 | 0.699   | 1.000 | 0.759 | 0.697 | 1.000 |
| 8                | 0.766 | 0.704   | 1.000 | 0.758 | 0.693 | 1.000 |
| 9                | 0.760 | 0.662   | 1.000 | 0.758 | 0.666 | 1.000 |
| Mean             | 0.762 | 0.684   | 1.000 | 0.762 | 0.685 | 1.000 |
| STD              | 0.003 | 0.020   | 0.000 | 0.005 | 0.016 | 0.000 |

Tabla 6.5: Clasificación binaria con Ridge Classifier

|                  | Ent   | renamie | ento  |       | Test  |       |
|------------------|-------|---------|-------|-------|-------|-------|
| Estado aleatorio | Acc   | MS      | F1    | Acc   | MS    | F1    |
| 0                | 0.649 | 0.549   | 1.000 | 0.648 | 0.530 | 1.000 |
| 1                | 0.645 | 0.558   | 1.000 | 0.655 | 0.569 | 1.000 |
| 2                | 0.652 | 0.573   | 1.000 | 0.645 | 0.564 | 1.000 |
| 3                | 0.649 | 0.567   | 1.000 | 0.653 | 0.570 | 1.000 |
| 4                | 0.651 | 0.573   | 1.000 | 0.651 | 0.573 | 1.000 |
| 5                | 0.647 | 0.562   | 1.000 | 0.648 | 0.558 | 1.000 |
| 6                | 0.648 | 0.556   | 1.000 | 0.650 | 0.573 | 1.000 |
| 7                | 0.651 | 0.571   | 1.000 | 0.650 | 0.573 | 1.000 |
| 8                | 0.651 | 0.564   | 1.000 | 0.639 | 0.551 | 1.000 |
| 9                | 0.650 | 0.563   | 1.000 | 0.645 | 0.551 | 1.000 |
| Mean             | 0.649 | 0.564   | 1.000 | 0.648 | 0.561 | 1.000 |
| STD              | 0.002 | 0.008   | 0.000 | 0.005 | 0.014 | 0.000 |



Tabla 6.6: Clasificación binaria con MLPClassifier

|                  | Ent   | renamie | ento  |       | Test  |       |
|------------------|-------|---------|-------|-------|-------|-------|
| Estado aleatorio | Acc   | MS      | F1    | Acc   | MS    | F1    |
| 0                | 0.783 | 0.771   | 1.000 | 0.789 | 0.778 | 1.000 |
| 1                | 0.788 | 0.736   | 1.000 | 0.792 | 0.740 | 1.000 |
| 2                | 0.788 | 0.750   | 1.000 | 0.782 | 0.739 | 1.000 |
| 3                | 0.733 | 0.605   | 1.000 | 0.737 | 0.609 | 1.000 |
| 4                | 0.767 | 0.759   | 1.000 | 0.769 | 0.760 | 1.000 |
| 5                | 0.790 | 0.736   | 1.000 | 0.783 | 0.730 | 1.000 |
| 6                | 0.777 | 0.772   | 1.000 | 0.783 | 0.781 | 1.000 |
| 7                | 0.774 | 0.767   | 1.000 | 0.770 | 0.763 | 1.000 |
| 8                | 0.778 | 0.704   | 1.000 | 0.772 | 0.705 | 1.000 |
| 9                | 0.788 | 0.762   | 1.000 | 0.784 | 0.751 | 1.000 |
| Mean             | 0.776 | 0.736   | 1.000 | 0.776 | 0.736 | 1.000 |
| STD              | 0.017 | 0.051   | 0.000 | 0.016 | 0.050 | 0.000 |

Tabla 6.7: Clasificación binaria con LGBMClassifier

|                  | Ent   | renamie | ento  |       | Test  |       |
|------------------|-------|---------|-------|-------|-------|-------|
| Estado aleatorio | Acc   | MS      | F1    | Acc   | MS    | F1    |
| 0                | 0.984 | 0.981   | 1.000 | 0.953 | 0.952 | 1.000 |
| 1                | 0.984 | 0.980   | 1.000 | 0.951 | 0.947 | 1.000 |
| 2                | 0.985 | 0.983   | 1.000 | 0.949 | 0.946 | 1.000 |
| 3                | 0.985 | 0.982   | 1.000 | 0.952 | 0.951 | 1.000 |
| 4                | 0.984 | 0.981   | 1.000 | 0.950 | 0.945 | 1.000 |
| 5                | 0.985 | 0.981   | 1.000 | 0.949 | 0.948 | 1.000 |
| 6                | 0.985 | 0.982   | 1.000 | 0.952 | 0.949 | 1.000 |
| 7                | 0.986 | 0.984   | 1.000 | 0.948 | 0.947 | 1.000 |
| 8                | 0.984 | 0.979   | 1.000 | 0.953 | 0.952 | 1.000 |
| 9                | 0.989 | 0.989   | 1.000 | 0.953 | 0.950 | 1.000 |
| Mean             | 0.985 | 0.982   | 1.000 | 0.951 | 0.949 | 1.000 |
| STD              | 0.002 | 0.003   | 0.000 | 0.002 | 0.002 | 0.000 |



Tabla 6.8: Clasificación multiclase con Decision Tree Classifier

|                  | Entrenamiento |       |       | Test  |       |       |  |
|------------------|---------------|-------|-------|-------|-------|-------|--|
| Estado aleatorio | Acc           | MS    | F1    | Acc   | MS    | F1    |  |
| 0                | 0.980         | 0.928 | 0.989 | 0.939 | 0.524 | 0.972 |  |
| 1                | 0.980         | 0.929 | 0.990 | 0.939 | 0.500 | 0.973 |  |
| 2                | 0.980         | 0.927 | 0.989 | 0.941 | 0.429 | 0.974 |  |
| 3                | 0.979         | 0.923 | 0.989 | 0.939 | 0.444 | 0.973 |  |
| 4                | 0.982         | 0.931 | 0.990 | 0.939 | 0.500 | 0.974 |  |
| 5                | 0.980         | 0.929 | 0.990 | 0.937 | 0.609 | 0.971 |  |
| 6                | 0.978         | 0.920 | 0.988 | 0.938 | 0.550 | 0.971 |  |
| 7                | 0.980         | 0.929 | 0.990 | 0.939 | 0.562 | 0.972 |  |
| 8                | 0.982         | 0.934 | 0.991 | 0.938 | 0.489 | 0.971 |  |
| 9                | 0.989         | 0.956 | 0.992 | 0.936 | 0.400 | 0.972 |  |
| Mean             | 0.981         | 0.931 | 0.990 | 0.939 | 0.501 | 0.972 |  |
| STD              | 0.003         | 0.010 | 0.001 | 0.001 | 0.064 | 0.001 |  |

Tabla 6.9: Clasificación multiclase con RandomForestClassifier

|                  | Entrenamiento |       |       | Test  |       |       |  |
|------------------|---------------|-------|-------|-------|-------|-------|--|
| Estado aleatorio | Acc           | MS    | F1    | Acc   | MS    | F1    |  |
| 0                | 0.981         | 0.926 | 0.990 | 0.951 | 0.524 | 0.977 |  |
| 1                | 0.981         | 0.926 | 0.990 | 0.953 | 0.735 | 0.978 |  |
| 2                | 0.981         | 0.926 | 0.990 | 0.954 | 0.429 | 0.978 |  |
| 3                | 0.980         | 0.923 | 0.990 | 0.954 | 0.500 | 0.978 |  |
| 4                | 0.981         | 0.926 | 0.990 | 0.954 | 0.500 | 0.979 |  |
| 5                | 0.981         | 0.927 | 0.990 | 0.952 | 0.638 | 0.977 |  |
| 6                | 0.980         | 0.923 | 0.990 | 0.952 | 0.550 | 0.977 |  |
| 7                | 0.981         | 0.927 | 0.991 | 0.954 | 0.500 | 0.978 |  |
| 8                | 0.981         | 0.926 | 0.990 | 0.953 | 0.471 | 0.978 |  |
| 9                | 0.981         | 0.926 | 0.990 | 0.953 | 0.400 | 0.978 |  |
| Mean             | 0.981         | 0.926 | 0.990 | 0.953 | 0.525 | 0.978 |  |
| STD              | 0.000         | 0.002 | 0.000 | 0.001 | 0.098 | 0.001 |  |



Tabla 6.10: Clasificación multiclase con KNeighbors Clasiffier

|                  | Entrenamiento |       |       | Test  |       |       |  |
|------------------|---------------|-------|-------|-------|-------|-------|--|
| Estado aleatorio | Acc           | MS    | F1    | Acc   | MS    | F1    |  |
| 0                | 0.994         | 0.811 | 0.997 | 0.940 | 0.524 | 0.976 |  |
| 1                | 0.994         | 0.794 | 0.996 | 0.943 | 0.500 | 0.977 |  |
| 2                | 0.994         | 0.811 | 0.997 | 0.940 | 0.357 | 0.977 |  |
| 3                | 0.994         | 0.815 | 0.996 | 0.942 | 0.389 | 0.978 |  |
| 4                | 0.994         | 0.810 | 0.997 | 0.941 | 0.375 | 0.976 |  |
| 5                | 0.994         | 0.807 | 0.996 | 0.940 | 0.435 | 0.976 |  |
| 6                | 0.994         | 0.802 | 0.996 | 0.941 | 0.500 | 0.976 |  |
| 7                | 0.994         | 0.849 | 0.996 | 0.940 | 0.500 | 0.976 |  |
| 8                | 0.994         | 0.817 | 0.996 | 0.939 | 0.529 | 0.976 |  |
| 9                | 0.994         | 0.834 | 0.996 | 0.940 | 0.400 | 0.976 |  |
| Mean             | 0.994         | 0.815 | 0.996 | 0.941 | 0.451 | 0.976 |  |
| STD              | 0.000         | 0.016 | 0.000 | 0.001 | 0.067 | 0.001 |  |

Tabla 6.11: Clasificación multiclase con Ridge Classifier

|                  | Entrenamiento |       |       | Test  |       |       |
|------------------|---------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Estado aleatorio | Acc           | MS    | F1    | Acc   | MS    | F1    |
| 0                | 0.189         | 0.000 | 0.301 | 0.186 | 0.000 | 0.299 |
| 1                | 0.195         | 0.000 | 0.308 | 0.191 | 0.000 | 0.307 |
| 2                | 0.173         | 0.000 | 0.284 | 0.176 | 0.000 | 0.287 |
| 3                | 0.172         | 0.000 | 0.283 | 0.172 | 0.000 | 0.280 |
| 4                | 0.185         | 0.000 | 0.297 | 0.189 | 0.000 | 0.305 |
| 5                | 0.187         | 0.000 | 0.300 | 0.189 | 0.000 | 0.303 |
| 6                | 0.170         | 0.000 | 0.280 | 0.166 | 0.000 | 0.274 |
| 7                | 0.186         | 0.000 | 0.299 | 0.191 | 0.000 | 0.303 |
| 8                | 0.187         | 0.000 | 0.300 | 0.187 | 0.000 | 0.301 |
| 9                | 0.171         | 0.000 | 0.282 | 0.173 | 0.000 | 0.284 |
| Mean             | 0.182         | 0.000 | 0.293 | 0.182 | 0.000 | 0.294 |
| STD              | 0.009         | 0.000 | 0.010 | 0.009 | 0.000 | 0.012 |



Tabla 6.12: Clasificación multiclase con MLPClassifier

|                  | Entrenamiento |       |       | Test  |       |       |  |
|------------------|---------------|-------|-------|-------|-------|-------|--|
| Estado aleatorio | Acc           | MS    | F1    | Acc   | MS    | F1    |  |
| 0                | 0.725         | 0.000 | 0.885 | 0.722 | 0.000 | 0.883 |  |
| 1                | 0.724         | 0.000 | 0.901 | 0.724 | 0.000 | 0.900 |  |
| 2                | 0.724         | 0.000 | 0.885 | 0.723 | 0.000 | 0.885 |  |
| 3                | 0.679         | 0.000 | 0.885 | 0.681 | 0.000 | 0.888 |  |
| 4                | 0.730         | 0.000 | 0.904 | 0.735 | 0.000 | 0.902 |  |
| 5                | 0.721         | 0.000 | 0.888 | 0.717 | 0.000 | 0.884 |  |
| 6                | 0.724         | 0.000 | 0.889 | 0.723 | 0.000 | 0.888 |  |
| 7                | 0.711         | 0.000 | 0.885 | 0.711 | 0.000 | 0.884 |  |
| 8                | 0.719         | 0.000 | 0.910 | 0.720 | 0.000 | 0.910 |  |
| 9                | 0.716         | 0.000 | 0.886 | 0.718 | 0.000 | 0.885 |  |
| Mean             | 0.717         | 0.000 | 0.892 | 0.718 | 0.000 | 0.891 |  |
| STD              | 0.014         | 0.000 | 0.009 | 0.014 | 0.000 | 0.009 |  |

Tabla 6.13: Clasificación multiclase con LGBMClassifier

|                  | Entrenamiento |       |       | Test  |       |       |
|------------------|---------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Estado aleatorio | Acc           | MS    | F1    | Acc   | MS    | F1    |
| 0                | 0.938         | 0.821 | 0.965 | 0.916 | 0.600 | 0.953 |
| 1                | 0.936         | 0.820 | 0.964 | 0.916 | 0.735 | 0.953 |
| 2                | 0.890         | 0.749 | 0.941 | 0.884 | 0.357 | 0.936 |
| 3                | 0.323         | 0.000 | 0.460 | 0.327 | 0.000 | 0.460 |
| 4                | 0.888         | 0.747 | 0.940 | 0.880 | 0.500 | 0.936 |
| 5                | 0.938         | 0.828 | 0.967 | 0.917 | 0.565 | 0.955 |
| 6                | 0.893         | 0.758 | 0.943 | 0.881 | 0.550 | 0.935 |
| 7                | 0.936         | 0.821 | 0.964 | 0.917 | 0.562 | 0.952 |
| 8                | 0.891         | 0.750 | 0.941 | 0.880 | 0.588 | 0.933 |
| 9                | 0.893         | 0.760 | 0.942 | 0.883 | 0.467 | 0.936 |
| Mean             | 0.853         | 0.706 | 0.903 | 0.840 | 0.492 | 0.895 |
| STD              | 0.187         | 0.250 | 0.156 | 0.181 | 0.198 | 0.153 |



# Capítulo 7

# Conclusiones y recomendaciones

En este último capítulo del proyecto se expondrán las conclusiones, recomendaciones y mejoras de este proyecto.

# 7.1. Conclusiones de investigación

En cuanto a los resultados obtenidos en la investigación y dado el enfoque seleccionado en el capítulo 4, es necesario hacer una diferenciación entre clasificación binaria y clasificación multiclase

### 7.1.1. Clasificación binaria

Si bien es cierto que los resultados obtenidos por los clasificadores más sencillos son muy altos en cuanto a precisión, todos ellos presentan una caída apreciable en la métrica de sensibilidad mínima. Esto significa que es bastante probable un sobreajuste de los modelos y una mala generalización, lo que puede llevar a demasiados fallos en una situación real. Por otro lado, LGBMClassifier tiene una precisión ligeramente inferior pero mayor estabilidad entre las métricas de entrenamiento y clasificación. A pesar de ser más complejo a la hora de entrenar e interpretar esta consistencia hace que sea una muy buena opción a tener en cuenta.



### 7.1.2. Clasificación multiclase

Este tipo de clasificación ha presentado varios problemas además del aumento necesario de tiempo por la configuración del conjunto de datos con todos los patrones. Por un lado, la fuerte caída de la mínima sensibilidad indica que los clasificadores tienden a priorizar las clases mayoritarias, dejando sin apenas capacidad de detección a las minoritarias. Esto provoca que, aunque la precisión o el valor-F1 puedan mantenerse razonablemente altos, el rendimiento real frente a todas las clases no es confiable.

Por otro lado, algunos modelos como *LGBMClassifier* presentan una alta varianza entre semillas. Esto implica que el conjunto de datos está fuertemente afectado por el desbalanceo, y que los modelos probados no garantizan una generalización. Además, algunos modelos presentan una sensibilidad mínima de 0, es decir, hay clases que directamente no se predicen en absoluto.

## 7.2. Recomendaciones

Las principales recomendaciones referentes a este estudio tienen su origen en las limitaciones del equipo con el que se han realizado las pruebas. A pesar de que se han obtenido muy buenos resultados tanto en entrenamiento como en test con algoritmos ligeros, es recomendable hacer pruebas con un hardware capaz de entrenar modelos algo más lentos para hacer unas pruebas realmente concluyentes. Por ejemplo, para el modelo de máquinas de vectores de soporte, ha sido muy difícil realizar el entrenamiento ajustando una rejilla relativamente completa de parámetros, por lo que los resultados podrían llegar a mejorar. En cuanto al perceptrón multicapa sí se han podido realizar más pruebas, pero a cada ajuste de parámetros que se ha probado mejoraban considerablemente los resultados. Un equipo más potente permitiría ajustar correctamente el modelo y obtener los mejores resultados posibles.

En cuanto al conjunto de datos, si bien es cierto que es amplio y en clasificación binaria funciona muy bien, para clasificación multiclase es insuficiente. Su principal problema se encuentra en la cantidad de clases desbalanceadas. Como podemos ver en la tabla 5.5, la cuarta clase más poblada contiene más de diez veces menos patrones que la primera. Esto implica que a la hora de entrenar, la clase más poblada influye mucho en el entrenamiento incluso aplicando varias técnicas para evitarlo. Sería recomendable hacer pruebas con distintos conjuntos de datos que dispongan de una mayor cantidad de muestras en clases minoritarias para poder hacer un entrenamiento equilibrado.



# Bibliografía

- [1] Bob Thomas Morris. Creeper. URL https://es.wikipedia.org/wiki/Creeper\_(virus).
- [2] Gusano morris. URL https://es.wikipedia.org/wiki/Gusano\_Morris.
- [3] Cert. URL https://es.wikipedia.org/wiki/Equipo\_de\_Respuesta\_ante\_Emergencias\_Inform%C3%A1ticas.
- [4] Wannacry. URL https://es.wikipedia.org/wiki/WannaCry.
- [5] Ransomware, . URL https://es.wikipedia.org/wiki/Ransomware.
- [6] Wannacry: el ransomware que tiene «secuestrados» los sistemas de telefónica y de otras empresas. URL https://www.abc.es/tecnologia/redes/abci-wannacry-ransomware-tiene-secuestrados-sistemas-telefonica-y-otras-empresas-noticia.html?ref=https%3A%2F%2Fwww.google.com%2F.
- [7] Detección basada en firmas, . URL https://fastercapital.com/es/tema/%C2%BFqu%C3%A9-es-la-detecci%C3%B3n-basada-en-la-firma.html.
- [8] Machine learning. URL https://es.wikipedia.org/wiki/Aprendizaje\_autom%C3%A1tico#Tipos\_de\_algoritmos.
- [9] A low complexity ml-based methods for malware classification. URL https://www.researchgate.net/publication/383827671\_A\_Low\_Complexity\_ML-Based\_Methods\_for\_Malware\_Classification.
- [10] La máquina tabuladora. URL https://es.wikipedia.org/wiki/Herman\_Hollerith#La\_m%C3%A1quina\_tabuladora.
- [11] Rafael Prieto Meléndez, A Herrera, J Pérez, and Alejandro Padrón-Godínez. El modelo neuronal de mcculloch y pitts. interpretación comparativa del modelo. 10 2000. URL https://www.researchgate.net/publication/343141076\_EL\_MODELO\_NEURONAL\_DE\_McCULLOCH\_Y\_PITTS\_Interpretacion\_Comparativa\_del\_Modelo.



- [12] Balanceo de datos. URL https://es.linkedin.com/pulse/balanceo-de-datos-ainad-empresarial#:~:text=%C2%BFQu%C3%A9%20es%20e1%20balanceo%20de,en%20nuestro%20conjunto%20de%20datos.
- [13] Joaquín García Abad. Comparativa de técnicas de balanceo de datos. aplicación a un caso real para la predicción de fuga de clientes. URL https://digibuo.uniovi.es/dspace/bitstream/handle/10651/60629/TFM\_Joaqu%C3%ADnGarc%C3%ADaAbad.pdf?sequence=4.
- [14] Dina Elreedy and Amir F. Atiya. A comprehensive analysis of synthetic minority oversampling technique (smote) for handling class imbalance. *Information Sciences*, 505:32–64, 2019. ISSN 0020-0255. doi: https://doi.org/10.1016/j.ins. 2019.07.070. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020025519306838.
- [15] Haibo He, Yang Bai, Edwardo Garcia, and Shutao Li. Adasyn: Adaptive synthetic sampling approach for imbalanced learning. *Proceedings of the International Joint Conference on Neural Networks*, pages 1322 1328, 07 2008. doi: 10.1109/IJCNN.2008.4633969.
- [16] Jason Brownlee. Random oversampling and undersampling for imbalanced classification. URL https://machinelearningmastery.com/random-oversampling-and-undersampling-for-imbalanced-classification/.
- [17] Cnn (condensed nearest neighbors). URL https://abhic159.medium.com/cnn-condensed-nearest-neighbors-3261bd0c39fb.
- [18] Tusneem Elhassan, Aljourf M, Al-Mohanna F, and Mohamed Shoukri. Classification of imbalance data using tomek link (t-link) combined with random under-sampling (rus) as a data reduction method. *Global Journal of Technology and Optimization*, 01, 01 2016. doi: 10.4172/2229-8711.S1111.
- [19] Roberto Alejo, José Sotoca, Rosa Valdovinos, and P. Toribio. Edited nearest neighbor rule for improving neural networks classifications. pages 303–310, 06 2010. doi: 10.1007/978-3-642-13278-0\_39.
- [20] Maldición de la dimensión, . URL https://es.wikipedia.org/wiki/Maldici%C3%B3n\_de\_la\_dimensi%C3%B3n.
- [21] Reducción de dimensionalidad, . URL https://es.wikipedia.org/wiki/Reducci%C3%B3n\_de\_dimensionalidad#Ventajas\_de\_la\_reducci%C3%B3n\_de\_dimensionalidad.



- [22] Análisis de componentes principales. URL https://es.wikipedia.org/wiki/An%C3%A1lisis\_de\_componentes\_principales.
- [23] Análisis factorial. URL https://es.wikipedia.org/wiki/An%C3%A1lisis\_factorial.
- [24] Descomposición en valores singulares. URL https://es.wikipedia.org/wiki/Descomposici%C3%B3n\_en\_valores\_singulares.
- [25] Joaquim Moré. Evaluación de la calidad de los sistemas de reconocimiento de sentimientos. URL https://openaccess.uoc.edu/server/api/core/bitstreams/6ff15a78-47c1-45ba-9475-442a6e8d19cc/content.
- [26] Matriz de confusión. URL https://es.wikipedia.org/wiki/Matriz\_de\_confusi%C3%B3n.
- [27] Validación cruzada, . URL https://es.wikipedia.org/wiki/Validaci%C3% B3n\_cruzada.
- [28] Validación cruzada de k iteraciones, . URL https://es.wikipedia.org/wiki/ Validaci%C3%B3n\_cruzada#Validaci%C3%B3n\_cruzada\_de\_K\_iteraciones.
- [29] Validación cruzada aleatoria, . URL https://es.wikipedia.org/wiki/Validaci%C3%B3n\_cruzada#Validaci%C3%B3n\_cruzada\_aleatoria.
- [30] Validación cruzada dejando uno fuera, . URL https://es.wikipedia.org/wiki/Validaci%C3%B3n\_cruzada#Validaci%C3%B3n\_cruzada\_dejando\_uno\_fuera.
- [31] ¿qué es un árbol de decisión?, . URL https://www.ibm.com/es-es/think/topics/decision-trees.
- [32] Decision trees, . URL https://scikit-learn.org/stable/modules/tree. html.
- [33] Ensembles: Gradient boosting, random forests, bagging, voting, stacking, . URL https://scikit-learn.org/stable/modules/ensemble.html.
- [34] Random forest, . URL https://es.wikipedia.org/wiki/Random\_forest# Caracter%C3%ADsticas\_(o\_rasgos)\_y\_Ventajas.
- [35] Random forest, . URL https://es.wikipedia.org/wiki/Random\_forestt# Desventajas.



- [36] k vecinos más próximos, . URL https://es.wikipedia.org/wiki/K\_vecinos\_ms\_prximos.
- [37] Nearest neighbors, . URL https://scikit-learn.org/stable/modules/neighbors.html.
- [38] Seguridad informática. URL https://es.wikipedia.org/wiki/Seguridad\_inform%C3%A1tica#Objetivos.
- [39] Los componentes de la tríada de la cia. URL https://www.checkpoint.com/es/cyber-hub/cyber-security/what-is-it-security/what-is-the-cia-triad/.
- [40] Phishing. URL https://es.wikipedia.org/wiki/Phishing.
- [41] Ataque de denegación de servicio. URL https://es.wikipedia.org/wiki/Ataque\_de\_denegaci%C3%B3n\_de\_servicio.
- [42] Joseph Nusbaum Peter Mell, Karen Kent. Guide to malware incident prevention and handling. URL https://profsite.um.ac.ir/kashmiri/nist/SP800-83.pdf.
- [43] Jorge Pablo Trías Posa. Aprendizaje automático aplicado a la detección de malware y de ciberataques. URL http://hdl.handle.net/10609/150576.
- [44] Antivirus. URL https://es.wikipedia.org/wiki/Antivirus.
- [45] Inteligencia artificial para la detección de binarios maliciosos. URL https://openaccess.uoc.edu/bitstream/10609/138409/6/jdiaznavTFM0122memoria.pdf.
- [46] ¿qué es la detección de intrusiones basada en firmas?,
  . URL https://www.purestorage.com/es/knowledge/
  signature-based-intrusion-detection.html.
- [47] Eset. URL https://www.eset.com.
- [48] Bitdefender. URL https://www.bitdefender.com.
- [49] Virustotal, . URL https://docs.virustotal.com/docs/how-it-works.
- [50] ¿qué es una vulnerabilidad zero day? URL https://www.incibe.es/ciudadania/blog/que-es-una-vulnerabilidad-zero-day.
- [51] Heurística en antivirus. URL https://es.wikipedia.org/wiki/Heur%C3% ADstica\_en\_antivirus.



- [52] ¿en qué consiste el análisis heurístico? URL https://www.kaspersky.es/resource-center/definitions/heuristic-analysis.
- [53] ¿qué es el análisis heurístico? URL https://www.fortinet.com/lat/resources/cyberglossary/heuristic-analysis.
- [54] La ofuscación de código: un arte que reina en la ciberseguridad. URL https://www.welivesecurity.com/es/recursos-herramientas/ofuscacion-de-codigo-arte-ciberseguridad/.
- [55] Detección de malware en 2025: técnicas, herramientas y desafíos reales. URL https://s2grupo.es/deteccion-de-malware-en-2025/.
- [56] Jorge Pablo Trías Posa. Aprendizaje automático aplicado a la detección de malware y de ciberataques, 2024. URL https://openaccess.uoc.edu/ server/api/core/bitstreams/c07e4b84-89d7-4489-8d58-dc676f411b45/ content.
- [57] Machine learning en detección de malware.

  URL https://www.campusciberseguridad.com/blog/
  machine-learning-en-deteccion-de-malware/.
- [58] J. Hao and T. K. Ho. Machine learning made easy: A review of scikit-learn package in python programming language. *Journal of Educational and Behavioral Statistics*, 44(3):348–361, 2019. doi: 10.3102/1076998619832248.
- [59] Francisco Bérchez-Moreno, Rafael Ayllón-Gavilán, Víctor M. Vargas, David Guijo-Rubio, César Hervás-Martínez, Juan C. Fernández, and Pedro A. Gutiérrez. dlordinal: A python package for deep ordinal classification. Neurocomputing, 622:129305, 2025. ISSN 0925-2312. doi: https://doi.org/10.1016/j.neucom. 2024.129305. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925231224020769.
- [60] Matplotlib. URL https://en.wikipedia.org/wiki/Matplotlib.
- [61] Numpy. URL https://es.wikipedia.org/wiki/NumPy.
- [62] Pandas. URL https://es.wikipedia.org/wiki/Pandas\_(software).
- [63] Lightgbm. URL https://en.wikipedia.org/wiki/LightGBM.
- [64] MJ Bahmani. Understanding lightgbm parameters (and how to tune them). URL https://dev.to/kamil\_k7k/understanding-lightgbm-parameters-and-how-to-tune-them-14n0.



- [65] Seaborn. URL https://seaborn.pydata.org/.
- [66] Bodmas. URL https://whyisyoung.github.io/BODMAS/.
- [67] Virusshare, . URL https://virusshare.com/.
- [68] thezoo. URL https://github.com/ytisf/theZoo.
- [69] Microsoft malware classification challenge, . URL https://www.kaggle.com/c/malware-classification/data.
- [70] Randomforesclassifier. URL https://es.wikipedia.org/wiki/Random\_forest.
- [71] Hani AlOmari, Qussai Yaseen, and Mohammed Al-Betar. A comparative analysis of machine learning algorithms for android malware detection. *Procedia Computer Science*, 220:763–768, 01 2023. doi: 10.1016/j.procs.2023.03.101.
- [72] pandas.dataframe.merge. URL https://pandas.pydata.org/docs/reference/api/pandas.DataFrame.merge.html.
- [73] pandas.dataframe.fillna. URL https://pandas.pydata.org/docs/reference/api/pandas.DataFrame.fillna.html.
- [74] pandas.dataframe.map. URL https://pandas.pydata.org/docs/reference/api/pandas.DataFrame.map.html.
- [75] A low complexity ml-based methods for malware classification, . URL https://www.researchgate.net/publication/383827671\_A\_Low\_Complexity\_ML-Based\_Methods\_for\_Malware\_Classification.
- [76] Randomundersampler, . URL https://imbalanced-learn.org/stable/references/generated/imblearn.under\_sampling.RandomUnderSampler. html.
- [77] sklearn.decomposition.pca. URL https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.decomposition.PCA.html.
- [78] Mohamad Zolkipli and Aman Jantan. Malware behavior analysis: Learning and understanding current malware threats. URL https://www.researchgate.net/publication/232657598\_Malware\_Behavior\_Analysis\_Learning\_and\_Understanding\_Current\_Malware\_Threats.
- [79] Reema Patel Akshit J. Dhruv and Nishant Doshi. Python: The most advanced programming language for computer science applications. URL https://www.scitepress.org/Papers/2020/103079/103079.pdf.



# Anexo A

# Código del programa

# A.1. Codificación de las categorías malware

```
= load('bodmas/bodmas.npz')
           = pd.read_csv('bodmas/bodmas_metadata.csv')
mw_category = pd.read_csv('bodmas/bodmas_malware_category.csv')
# Incluimos los valores de 'category' en metadata cuando coinciden
  los valoes de 'sha'
mw_category = metadata.merge(mw_category, on = 'sha', how = 'left')
# Rellenamos los huecos como software benigno
mw_category['category'] = mw_category['category'].fillna('benign')
# Eliminamos todas las columnas excepto 'category'
mw_category = mw_category['category']
# Codificamos las categorias de malware
category = {
  'benign': 0, 'trojan': 1, 'worm': 2, 'backdoor': 3,
  'downloader': 4, 'informationstealer': 5, 'dropper': 6,
  'ransomware': 7, 'rootkit': 8, 'cryptominer': 9, 'pua': 10,
  'exploit': 11, 'virus': 12, 'p2p-worm': 13, 'trojan-gamethief':
mw_category = mw_category.map(category)
y = mw_category.to_numpy()
save('bodmas/bodmas_multiclass.npz', X, y)
```



# A.2. Reducción de la dimensionalidad

```
def resampling(X, y, n_components = 5, size = 15000, u = False):
    if u:
        rus = RandomUnderSampler(sampling_strategy = {0: size, 1: size
        })
        # rus = RandomUnderSampler(sampling_strategy = 'majority')
        X, y = rus.fit_resample(X, y)

        X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(
            X, y, test_size = 0.25, random_state = 1
        )

        pca = PCA(n_components)
        X_train = pca.fit_transform(X_train)
        X_test = pca.transform(X_test)

        return X_train, X_test, y_train, y_test
```



# A.3. Pruebas para la elección del conjunto de datos

```
file = {'pca_binary', 'resampling_binary', 'pca_multiclass'}
clf = None
print('clasificador,dataset,n patrones,n caracteristicas,accuracy,
   tiempo')
for i in range(3):
 if i == 0: clf = DecisionTreeClassifier()
 elif i == 1: clf = RandomForestClassifier()
 else: clf = KNeighborsClassifier()
  for train_file in file:
   X_train, y_train = load('bodmas/' + train_file + '_train.npz')
   X_test, y_test = load('bodmas/' + train_file + '_test.npz')
    # Entrenar el modelo
    inicio = time.time()
    clf.fit(X_train, y_train)
    tiempo = time.time() - inicio
    # Predecir sobre el conjunto de prueba
    y_pred = clf.predict(X_test)
    # Evaluar
    accuracy = accuracy_score(y_test, y_pred)
    print(f'{i},{train_file},{X_train.shape},{accuracy:.3f},{tiempo
   :.3f}')
```



# A.4. Control de la validación cruzada

```
def cv(y, crossval):
    y_ = min(pd.DataFrame(y).value_counts())

if y_ < crossval:
    return y_

return crossval</pre>
```

# A.5. Ejemplo de salida de la información

|      | acc train | ms train | f1 train | acc test | ms test  | f1 test |
|------|-----------|----------|----------|----------|----------|---------|
| 0    | 0.648800  | 0.548712 | 1.0      | 0.648133 | 0.530019 | 1.0     |
| 1    | 0.645200  | 0.558267 | 1.0      | 0.655200 | 0.568564 | 1.0     |
| 2    | 0.652400  | 0.572655 | 1.0      | 0.644667 | 0.563784 | 1.0     |
| 3    | 0.648578  | 0.566829 | 1.0      | 0.653467 | 0.569664 | 1.0     |
| 4    | 0.650933  | 0.573087 | 1.0      | 0.650933 | 0.573003 | 1.0     |
| 5    | 0.647289  | 0.562228 | 1.0      | 0.647867 | 0.558393 | 1.0     |
| 6    | 0.647867  | 0.556000 | 1.0      | 0.650267 | 0.572533 | 1.0     |
| 7    | 0.650667  | 0.570983 | 1.0      | 0.649600 | 0.572906 | 1.0     |
| 8    | 0.650711  | 0.564155 | 1.0      | 0.638800 | 0.551123 | 1.0     |
| 9    | 0.649911  | 0.563205 | 1.0      | 0.645200 | 0.550628 | 1.0     |
| Mean | 0.649236  | 0.563612 | 1.0      | 0.648413 | 0.561062 | 1.0     |
| STD  | 0.002112  | 0.007797 | 0.0      | 0.004713 | 0.013867 | 0.0     |