Práctica 3

Anabel Gómez Ríos

```
## Warning: package 'ISLR' was built under R version 3.2.5

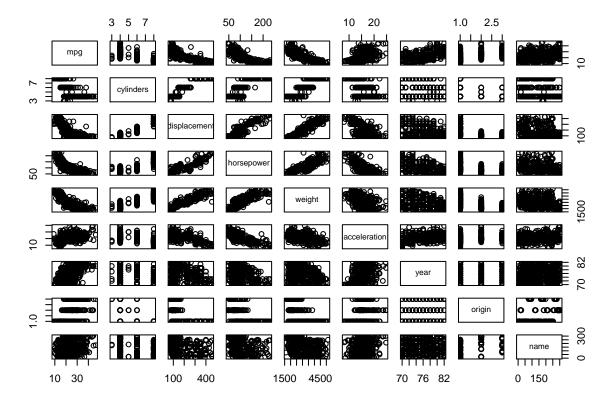
#library(MASS)
#library(class) # Para el KNN
# Para ahorrarnos el prefijo en Auto$mpg (cada vez que queramos acceder a algo de
# Auto:
attach(Auto)
```

Ejercicio 1

Usar el conjunto de datos Auto que es parte del paquete ISLR. En este ejercicio desarrollaremos un modelo para predecir si un coche tiene un consumo de carburante alto o bajo usando la base de datos Auto. Se considerará alto cuando sea superior a la media de la variable mpg y bajo en caso contrario.

a) Usar las funciones de R pairs() y boxplot() para investigar la dependencia entre mpg y las otras características. ¿Cuáles de las otras características parece más útil para predecir mpg? Justificar la respuesta.

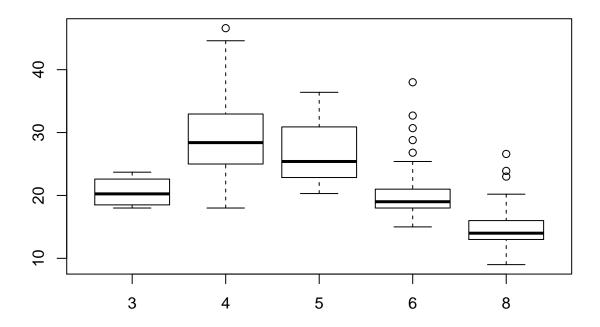
```
pairs(Auto)
```



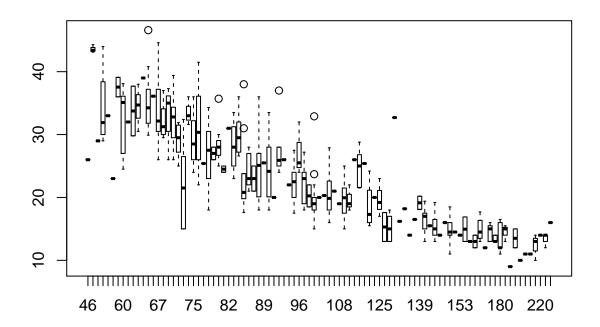
Como vemos con la función pairs, las características que parecen más útiles para predecir mpg (que son aquellas que tienen un patrón más o menos claro con respecto a mpg) son displacement, horsepower y weight.

Vamos a ver ahora las tres seleccionadas con boxplot:

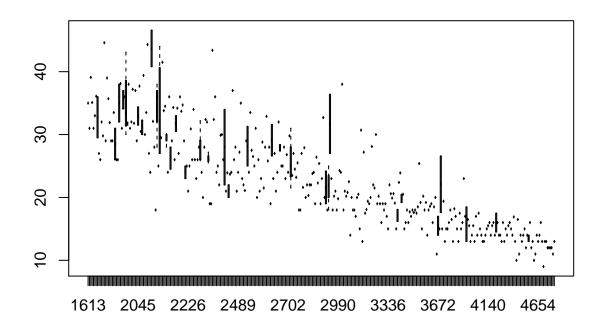
boxplot(Auto\$mpg~Auto\$cylinders)



boxplot(Auto\$mpg~Auto\$horsepower)

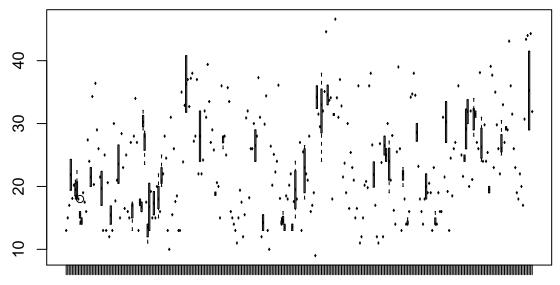


boxplot(Auto\$mpg~Auto\$weight)



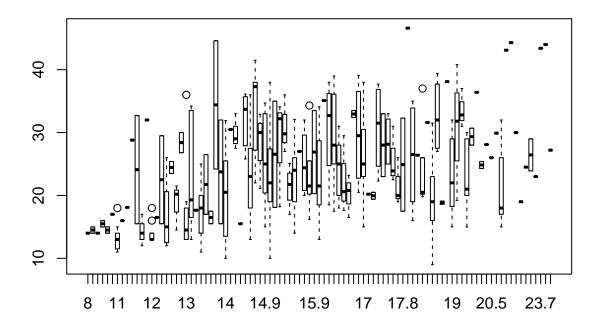
Como vemos las tres siguen más o menos una estructura clara. Veamos otra que no sea ninguna de estas tres:

boxplot(Auto\$mpg~Auto\$name)



amc ambassador brougham dodge colt ford torino plymouth valiant vw rabbit

boxplot(Auto\$mpg~Auto\$acceleration)



Estas por ejemplo, vemos que no tienen mucho que ver con mpg.

b) Seleccionar las variables predictorias que considere más relevantes.

Lo que vamos a hacer es crear otro data.frame en el que vamos a eliminar el resto de variables, y vamos a dejar sólo las que hemos citado previamente.

```
# Elegimos las cinco primeras columnas de Auto, que contienen mpg, cylinders,
# displacement, horsepower y weight
AutoMod <- Auto[ ,1:5]
# Nos sobra la columna de cylinders, así que la eliminamos
AutoMod <- AutoMod[ ,-2]</pre>
```

c) Particionar el conjunto de datos en un conjunto de entrenamiento (80%) y otro de test (20%). Justificar el procedimiento usado.

```
train = sample(1:nrow(AutoMod), round(nrow(AutoMod)*0.8))
test = AutoMod[-train, ]
train = AutoMod[train, ]
```

d) Crear una variable binaria, mpg01, que será igual a 1 si la variable mpg contiene un valor por encima de la mediana, y -1 si mpg contiene un valor por debajo de la mediana. La mediana se puede calcular usando la función median(). (Nota: puede resultar útil usar la función data.frames() para unir en un mismo conjunto de datos la nueva variable mpg01 y las otras variables de Auto).

```
posiciones <- c(1:length(train[,1]))
pos_positivos <- posiciones[train[,1] >= median(train[,1])]
pos_negativos <- posiciones[train[,1] < median(train[,1])]
train[,1][pos_positivos] = 1
train[,1][pos_negativos] = -1

posiciones <- c(1:length(test[,1]))
pos_positivos <- posiciones[test[,1] >= median(test[,1])]
pos_negativos <- posiciones[test[,1] < median(test[,1])]
test[,1][pos_positivos] = 1
test[,1][pos_negativos] = -1</pre>
```

1. Ajustar un modelo de regresión logística a los datos de entrenamiento y predecir mpg01 usando las variables seleccionadas en b). ¿Cuál es el error de test del modelo? Justificar la respuesta.

```
modlog1 <- glm(train$mpg~., data = train)
predicciones <- predict(modlog1, test)
comp <- sign(predicciones) == sign(test$mpg)
errores <- comp[comp == FALSE]
error.regresion <- 100*(length(errores)/nrow(test))
cat("El error con regresión ha sido:", error.regresion)</pre>
```

El error con regresión ha sido: 14.10256

2. Ajustar un modelo K-NN a los datos de entrenamiento y predecir mpg01 usando solamente las variables seleccionadas en b). ¿Cuál es el error de test en el modelo? ¿Cuál es el valor de K que mejor ajusta los datos? Justificar la respuesta. (Usar el paquete class de R).

```
escalado <- scale(train[,2:4])
train[,2:4] <- escalado
centro <- attr(escalado, "scaled:center")
escala <- attr(escalado, "scaled:scale")
test[,2:4] <- scale(test[,2:4], center=centro, scale=escala)</pre>
```

```
library(class)
library(e1071)
```

Warning: package 'e1071' was built under R version 3.2.5

```
# Pasamos los datos con los que vamos a predecir a una matriz
x <- as.matrix(train[,-1])</pre>
# Fijamos la semilla
set.seed(237)
tune.knn(x,as.factor(train[,1]), k=1:10, tunecontrol=tune.control(sampling = "cross"))
##
## Parameter tuning of 'knn.wrapper':
##
## - sampling method: 10-fold cross validation
##
## - best parameters:
## k
## 5
##
## - best performance: 0.0922379
# Utilizamos knn con el mejor k que nos ha dicho tune.knn
pred.knn \leftarrow knn(train[,-1], test[,-1], train[,1], k=5)
Vamos a ver ahora el error de test
confM <- table(pred.knn, test[,1])</pre>
error \leftarrow (confM[1,2] + confM[2,1])/(confM[1,1] + confM[1,2] + confM[2,1] + confM[2,2])
```

3. Pintar las curvas ROC (instalar paquete ROCR de R) y comparar y valorar los resultados obtenidos para ambos modelos.

```
library(ROCR)

## Warning: package 'ROCR' was built under R version 3.2.5

## Loading required package: gplots

## Warning: package 'gplots' was built under R version 3.2.5

## ## Attaching package: 'gplots'

## The following object is masked from 'package:stats':

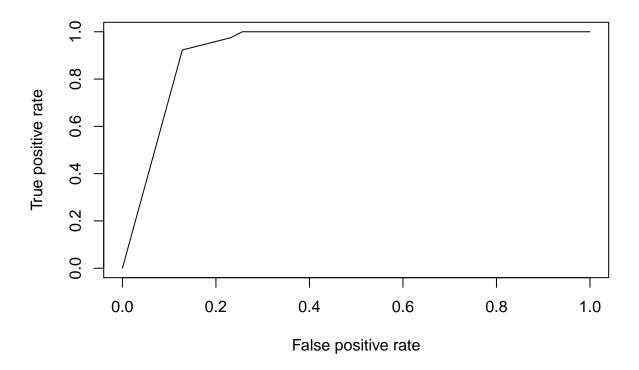
## lowess

knn.res <- knn(train[,-1], test[,-1], train[,1], k=5, prob=T)

prob <- attr(knn.res,"prob")

prob <- sapply(1:length(prob), function(i) {
   if(as.numeric(knn.res[i]) == 1) {
    1-prob[i]</pre>
```

```
}
else {
   prob[i]
}
pred <- prediction(prob, test$mpg)
perf <- performance(pred, "tpr", "fpr")
plot(perf)</pre>
```



- e) Bonus-1: Estimar el error de test de ambos modelos (RL, k-NN) pero usando Validación Cruzada de 5-particiones. Comparar con los resultados obtenidos en el punto anterior.
- f) Bonus-2: Ajustar el mejor modelo de regresión posible considerando la variable mpg como salida y el resto como predictorias. Justificar el modelo ajustado en base al patrón de los residuos. Estimar su error de entrenamiento y test.

```
# Borramos lo que no necesitamos
rm(AutoMod, escalado, test, train, x)
rm(centro, comp, confM, error, error.regresion, errores)
rm(escala, knn.res, modlog1, perf, pos_negativos, pos_positivos)
rm(posiciones, pred, pred.knn, predicciones, prob)
```

Ejercicio 2.

Usar la base de datos Boston (en el paquete MASS de R) para ajustar un modelo que prediga si dado un suburbio este tiene una tasa de criminalidad (crim) por encima o por debajo de la mediana. Para ello considere la variable crim como la variable salida y el resto como variables predictoras.

```
library(MASS)
# Dividimos el conjunto en train (80%) y test(20%)
train = sample(1:nrow(Boston), round(nrow(Boston)*0.8))
test = Boston[-train, ]
train = Boston[train, ]
```

a) Encontrar el subconjunto óptimo de variables predictoras a partir de un modelo de regresión-LASSO (usar paquete glmnet de R) donde seleccionamos sólo aquellas variables con coeficiente mayor de un umbral prefijado.

Utilizando glmnet, le tenemos que dar un 1 al parámetro alpha para que sea un modelo LASSO.

```
library(glmnet)

## Warning: package 'glmnet' was built under R version 3.2.5

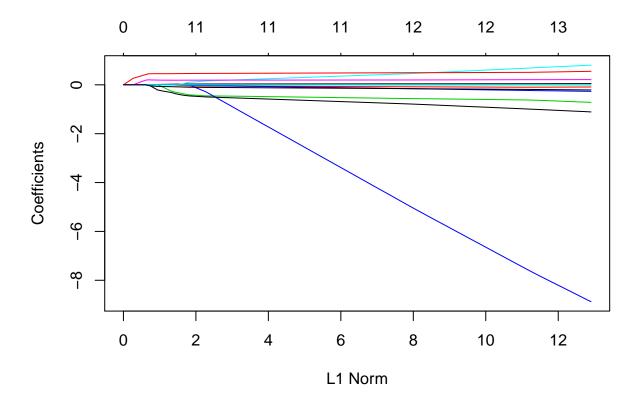
## Loading required package: Matrix

## Loading required package: foreach

## Warning: package 'foreach' was built under R version 3.2.5

## Loaded glmnet 2.0-5

## Volvemos a fijar la semilla
set.seed(237)
modelo.lasso <- glmnet(as.matrix(train[,-1]), as.matrix(train[,1]), alpha=1)
plot(modelo.lasso)</pre>
```



Como vemos, muchos de los coeficientes están cerca de cero, o son exactamente cero, lo que quiere decir que las variables correspondientes no influirán en la variable \mathtt{crim} . Vamos a elegir un λ apropiado usando cross-validation.

```
crossv <- cv.glmnet(as.matrix(train[,-1]), as.matrix(train[,1]), alpha=1)
lambda <- crossv$lambda.min
coeficientes <- predict(modelo.lasso, type="coefficients", s=lambda)[1:14,]
print(coeficientes)</pre>
```

```
##
    (Intercept)
                                      indus
                                                     chas
                                                                   nox
    6.663693369
                  0.040417814 -0.076929392 -0.551013275 -4.465790375
##
##
                                        dis
             rm
                          age
                                                      rad
                                                                   tax
##
    0.426488379
                 0.00000000 -0.752173795
                                             0.491769131
                                                           0.00000000
##
        ptratio
                        black
                                      lstat
                                                    medv
   -0.144639653 -0.003021976
                              0.198034616 -0.150936268
```

Como vemos hay muchos de estos coeficientes muy cercanos a 0. Nos vamos a quedar con aquellos que estén (en valor absoluto) por encima de un umbral 0.5, que significará que tienen cierta correlación con la variable crim, aunque podríamos elegir uno un poco más bajo si quisiéramos considerar más variables (aunque serían menos relevantes)

```
coeficientes <- coeficientes[abs(coeficientes)>0.5]
print(coeficientes)
```

```
## (Intercept) chas nox dis
## 6.6636934 -0.5510133 -4.4657904 -0.7521738
```

Nos quedamos sólo entonces con las variables chas, nox, dis y rad.

b) Ajustar un modelo de regresión regularizada con "weight-decay" (ridgeregression) y las variables seleccionadas. Estimar el error residual del modelo y discutir si el comportamiento de los residuos muestran algún indicio de "underfitting".

Para weight-decay tenemos que usar también glmnet pero con el parámetro $\alpha=0$. Nos quedamos primero con las variables seleccionadas por el método anterior, y vamos a utilizar el mejor λ que nos ha salido del apartado anterior por cross-validation:

Calculamos ahora el error residual, que será la raíz cuadrada positiva de los cuadrados de las diferencias entre nuestro valor y el predicho por el modelo.

```
error.res <- sum((BostonMod.test[,1] - predicciones)^2)
error.res <- sqrt(error.res/length(predicciones))</pre>
```

Para ver ahora si estamos o no ajustando poco el modelo (underfitting) vamos a probar distintos valores de λ , que es el parámetro que maneja la cantidad de regularización que le damos al modelo. Vamos a coger dos valores por debajo del λ que tenemos en este momento (0.0450578) y dos por encima y comprobar qué sucede:

El error para lambda = 0.08 ha sido 4.610146

El error para lambda = 1 ha sido 4.649119

El error para lambda = 0.02 ha sido 4.608881

El error para lambda = 0.002 ha sido 4.608556

Como vemos, cuanto mayor es el λ , menor es el error (mayor la cantidad de regularización), mientras que si lo bajamos, el error aumenta, por lo que sí que estamos ajustando poco el modelo aún, se podría mejorar aumentando λ .

c) Definir una nueva variable con valores -1 y 1 usando el valor de la mediana de la variable crim como umbral. Ajustar un modelo SVM que prediga la nueva variable definida. (Usar el paquete e1071 de R). Describir con detalle cada uno de los pasos dados en el aprendizaje del modelo SVM. Comience ajustando un modelo lineal y argumente si considera necesario usar algún núcleo. Valorar los resultados del uso de distintos núcleos.

```
posiciones <- c(1:length(train[,1]))
pos_positivos <- posiciones[train[,1] >= median(train[,1])]
pos_negativos <- posiciones[train[,1] < median(train[,1])]
train[,1][pos_positivos] = 1
train[,1][pos_negativos] = -1

posiciones <- c(1:length(test[,1]))
pos_positivos <- posiciones[test[,1] >= median(test[,1])]
pos_negativos <- posiciones[test[,1] < median(test[,1])]
test[,1][pos_positivos] = 1
test[,1][pos_negativos] = -1</pre>
```

Vamos a hacer ahora un SVM con núcleo lineal

```
# Volvemos a fijar la semilla
set.seed(237)
modelo.svm <- svm(train[,1]~., train[,-1], kernel="linear")
predicciones <- predict(modelo.svm, test[,-1])
comp <- sign(predicciones) == sign(test$crim)
errores <- comp[comp == FALSE]
error <- 100*(length(errores)/nrow(test))
cat("El error con SVM lineal ha sido:", error)</pre>
```

El error con SVM lineal ha sido: 22.77228

Vamos a probar con los otros tres tipos de núcleos a ver los resultados en errores que obtenemos

```
modelo.svm <- svm(train[,1]~., train[,-1], kernel="polynomial")
predicciones <- predict(modelo.svm, test[,-1])
comp <- sign(predicciones) == sign(test$crim)
errores <- comp[comp == FALSE]
error <- 100*(length(errores)/nrow(test))
cat("El error con SVM polinomial ha sido:", error)</pre>
```

El error con SVM polinomial ha sido: 18.81188

```
modelo.svm <- svm(train[,1]~., train[,-1], kernel="radial")
predicciones <- predict(modelo.svm, test[,-1])
comp <- sign(predicciones) == sign(test$crim)
errores <- comp[comp == FALSE]
error <- 100*(length(errores)/nrow(test))
cat("El error con SVM radial ha sido:", error)</pre>
```

El error con SVM radial ha sido: 12.87129

```
modelo.svm <- svm(train[,1]~., train[,-1], kernel="sigmoid")
predicciones <- predict(modelo.svm, test[,-1])
comp <- sign(predicciones) == sign(test$crim)
errores <- comp[comp == FALSE]
error <- 100*(length(errores)/nrow(test))
cat("El error con SVM sigmoidal ha sido:", error)</pre>
```

El error con SVM sigmoidal ha sido: 46.53465

Bonus-3: Estimar el error de entrenamiento y test por validación cruzada de 5 particiones.

```
# Borramos lo que no necesitamos
rm(BostonMod.test, BostonMod.train, test, train)
rm(coeficientes, comp, crossv, error, error.res, errores)
rm(lambda, modelo.lasso, modelo.ridge, predicciones, modelo.svm)
```

Ejercicio 3.

Usar el conjunto de datos Boston y las librerías randomForest y gbm de R.

- a) Dividir la base de datos en dos conjuntos de entrenamiento (80%) y test (20%).
- b) Usando la variable medy como salida y el resto como predictoras, ajustar un modelo de regresión usando bagging. Explicar cada uno de los parámetros usados. Calcular el error del test.
- c) Ajustar un modelo de regresión usando Random Forest. Obtener una estimación del número de árboles necesario. Justificar el resto de parámetros usados en el ajuste. Calcular el error de test y compararlo con el obtenido con bagging.
- d) Ajustar un modelo de regresión usando Boosting (usar gbm con distribution = 'gaussian'). Calcular el error de test y compararlo con el obtenido con bagging y Random Forest.

Ejercicio 4.

Usar el conjunto de datos OJ que es parte del paquete ISLR.

a) Crear un conjunto de entrenamiento conteniendo una muestra aleatoria de 800 observaciones, y un conjunto de test conteniendo el resto de las observaciones. Ajustar un árbol a los datos de entrenamiento, con Purchase como la variable respuesta y las otras variables como predictoras (paquete tree de R).

```
# Fijamos de nuevo la semilla
set.seed(237)

library(ISLR)
train.idx = sample(1:nrow(0J), 800)
test = OJ[-train.idx, ]
train = OJ[train.idx, ]

# Usamos la librería tree
library(tree)
```

Warning: package 'tree' was built under R version 3.2.5

Para saber si usar clasificación o regresión vamos a ver de qué tipo es la variable Purchase con la función summary()

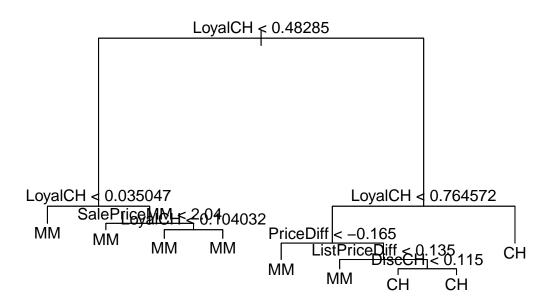
```
Purchase WeekofPurchase
                                 StoreID
                                                 PriceCH
                                                                  PriceMM
##
    CH:653
             Min.
                     :227.0
                              Min.
                                      :1.00
                                                      :1.690
                                                                       :1.690
                                              Min.
                                                               Min.
##
    MM:417
             1st Qu.:240.0
                              1st Qu.:2.00
                                              1st Qu.:1.790
                                                               1st Qu.:1.990
##
             Median :257.0
                              Median:3.00
                                              Median :1.860
                                                               Median :2.090
##
                     :254.4
                                      :3.96
                                              Mean
                                                      :1.867
             Mean
                              Mean
                                                               Mean
                                                                       :2.085
##
             3rd Qu.:268.0
                              3rd Qu.:7.00
                                              3rd Qu.:1.990
                                                               3rd Qu.:2.180
##
             Max.
                     :278.0
                              Max.
                                      :7.00
                                              Max.
                                                      :2.090
                                                               Max.
                                                                       :2.290
##
                           {\tt DiscMM}
        DiscCH
                                           SpecialCH
                                                             SpecialMM
           :0.00000
                              :0.0000
                                                :0.0000
                                                                  :0.0000
##
    Min.
                       Min.
                                         Min.
                                                           Min.
    1st Qu.:0.00000
                       1st Qu.:0.0000
                                         1st Qu.:0.0000
##
                                                           1st Qu.:0.0000
##
    Median :0.00000
                       Median :0.0000
                                         Median :0.0000
                                                           Median :0.0000
           :0.05186
                              :0.1234
                                                :0.1477
##
    Mean
                       Mean
                                         Mean
                                                           Mean
                                                                   :0.1617
##
    3rd Qu.:0.00000
                       3rd Qu.:0.2300
                                         3rd Qu.:0.0000
                                                           3rd Qu.:0.0000
##
    Max.
           :0.50000
                       Max.
                              :0.8000
                                         Max.
                                                :1.0000
                                                           Max.
                                                                  :1.0000
##
       LoyalCH
                         SalePriceMM
                                          SalePriceCH
                                                            PriceDiff
##
    Min.
           :0.000011
                        Min.
                               :1.190
                                         Min.
                                                :1.390
                                                          Min.
                                                                 :-0.6700
##
    1st Qu.:0.325257
                        1st Qu.:1.690
                                         1st Qu.:1.750
                                                          1st Qu.: 0.0000
##
    Median :0.600000
                        Median :2.090
                                         Median :1.860
                                                          Median : 0.2300
           :0.565782
##
    Mean
                        Mean
                               :1.962
                                                :1.816
                                                                 : 0.1465
                                         Mean
                                                          Mean
##
    3rd Qu.:0.850873
                        3rd Qu.:2.130
                                         3rd Qu.:1.890
                                                          3rd Qu.: 0.3200
           :0.999947
                               :2.290
##
    Max.
                        Max.
                                         Max.
                                                :2.090
                                                          Max.
                                                                 : 0.6400
##
    Store7
                PctDiscMM
                                  PctDiscCH
                                                   ListPriceDiff
                      :0.0000
                                        :0.00000
##
    No :714
                                                   Min.
                                                           :0.000
              Min.
                                Min.
    Yes:356
              1st Qu.:0.0000
                                1st Qu.:0.00000
                                                   1st Qu.:0.140
##
##
              Median :0.0000
                                Median :0.00000
                                                   Median :0.240
##
                      :0.0593
                                        :0.02731
              Mean
                                Mean
                                                   Mean
                                                           :0.218
##
              3rd Qu.:0.1127
                                3rd Qu.:0.00000
                                                   3rd Qu.:0.300
##
              Max.
                      :0.4020
                                Max.
                                        :0.25269
                                                   Max.
                                                           :0.440
##
        STORE
##
           :0.000
   Min.
    1st Qu.:0.000
##
##
   Median :2.000
##
   Mean
           :1.631
##
    3rd Qu.:3.000
##
    Max.
           :4.000
```

Como vemos, Purchase toma sólo dos valores: CH y MM, con lo que vamos a utilizar clasificación:

```
tree.oj <- tree(train$Purchase~., train)</pre>
```

Vamos a ver el resultado de este árbol:

```
plot(tree.oj)
text(tree.oj, pretty = 0)
```



Como este no queda muy bien, vamos a hacerlo también con el software RWeka, que también permite dibujar árboles, y se ven mejor:

```
library(RWeka)

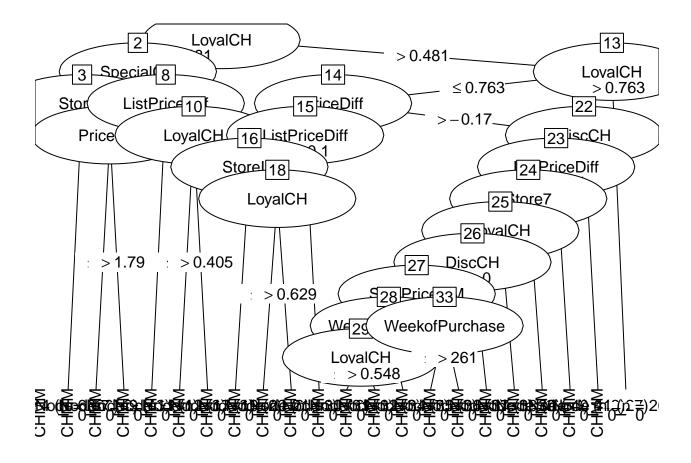
## Warning: package 'RWeka' was built under R version 3.2.5

library(partykit)

## Warning: package 'partykit' was built under R version 3.2.5

## Loading required package: grid

oj.rweka = J48(OJ$Purchase~., data = OJ, subset = train.idx)
plot(oj.rweka)
```



c) Usar la función summary() para generar un resumen estadístico acerca del árbol y describir los resultados obtenidos: tasa de error de training, número de nodos del árbol, etc.

```
summary(tree.oj)
```

```
##
## Classification tree:
## tree(formula = train$Purchase ~ ., data = train)
## Variables actually used in tree construction:
## [1] "LoyalCH" "SalePriceMM" "PriceDiff" "ListPriceDiff"
## [5] "DiscCH"
## Number of terminal nodes: 9
## Residual mean deviance: 0.7303 = 577.6 / 791
## Misclassification error rate: 0.1638 = 131 / 800
```

Como vemos, el número de nodos hoja son 9. El número total de nodos lo podemos ver en el árbol anterior y es 17. Las variables que se han utilizado en los nodos internos (aquellos que no son hoja) nos lo dice también la función summary() y son LoyalCH, SalePriceMM, PriceDiff, ListPriceDiff y DiscCH.

También nos dice el error en training: 0.1638 (16%) y la desviación residual hasta la media, que en este caso es la desviación normal a la media entre 800 (total de instancias en train) - 6 (número de nodos hoja) = 794, lo que da 0.7303. Como es lógico, a menor desviación, mejor ajusta el árbol a los datos de train.

d) Predecir la respuesta de los datos de test, y generar e interpretar la matriz de confusión de los datos de test. ¿Cuál es la tasa de error del test? ¿Cuál es la precisión del test?

Para esto podemos usar de nuevo la función predict() pasándole el árbol que hemos entrenado con train y los datos de test. Le ponemos el argumento type=class porque estamos con un árbol de clasificación y así obligamos a utilizar la predicción con la variable Purchase. Para calcular el error de test y su precisión vamos a utilizar la función table(), que nos devuelve la matriz de confusión.

```
tree.predict <- predict(tree.oj, test[,-1], type="class")
table(tree.predict, test[,1])

##
## tree.predict CH MM
## CH 125 11
## MM 39 95

El error en test es (11+39)/(125+11+39+95) = 0.1851852
La precisión es (125+95)/(125+11+39+95) = 0.8148148
Es decir, hay un error en test del 18.5% y una precisión del 81.4%.</pre>
```

e) Aplicar la función cv.tree() al conjunto de training y determinar el tamaño óptimo del árbol. ¿Qué hace cv.tree?

La misión de cv.tree() es utilizar cross-validation para obtener el mejor nivel de complejidad para el árbol que se obtiene. Este "mejor nivel" se puede obtener en base a diferentes criterior. Por ejemplo, si usamos cv.tree() con los parámetros por defecto, nos devolverá aquel que tenga menor desvianza. Si queremos que nos devuelva aquel que tenga menor error en la validación cruzada tenemos que usar el parámetro FUN = prune.misclass.

```
set.seed(237)
cv.oj <- cv.tree(tree.oj, FUN = prune.misclass)
print(cv.oj)</pre>
```

```
## $size
## [1] 9 5 4 2 1
## $dev
## [1] 144 144 145 151 311
##
## $k
                     2.0
                            7.5 163.0
## [1] -Inf
               0.0
##
## $method
## [1] "misclass"
## attr(,"class")
## [1] "prune"
                        "tree.sequence"
```

Como podemos ver, los árboles con 9 y 5 nodos terminales son los que tienen el menor error, 144. El árbol que habíamos ajustado en el apartado c) tenía justo 9 nodos terminales, por lo que ya habíamos obtenido aquel con menor error y mejor precisión.

Bonus-4. Generar un gráfico con el tamaño del árbol en el eje x (número de nodos) y la tasa de error de validación cruzada en el eje y. ¿Qué tamaño de árbol corresponde a la tasa más pequeña de error de clasificación por validación cruzada?