Algoritmos de Aprendizaje Máquina aplicados a Emisiones de CO2 en Canadá

Emanuel Novelo Hernández

July 22, 2024

Abstract En el presente artículo se exploran diferentes modelos de Aprendizaje Automático Supervisado y No Supervisado, sobre un conjunto de datos de emisiones de carbono en vehículos en Canadá. Se probó el modelo de Aprendizaje No Supervisado DBSCAN para agrupar los datos en características similares e identificar los grupos y su relación con las emisiones de carbono. En este modelo de clusterización se explora el algoritmo de T-SNE para reducir la dimensionalidad de los datos y poder graficarlos como densidad. En cuanto a los resultados de la clusterización, el algoritmo DBSCAN devolvió 71 clusters distintos en los que se agruparon los más de 7 mil datos. La representación gráfica en dos dimensiones de los clusters presentó una dominancia muy marcada de volumen en los primeros clusters (del 0 al 3), mientras que los clusters del 4 al 71 engloban niveles muy similares de datos. No se halló relación visual y directa entre los clusters y las emisiones de carbono; sin embargo, se abre la posibilidad de llevar a cabo un análisis más profundo con diseño de experimentos del modelo DBSCAN, donde pudiera encontrarse una mayor relación en la asignación de clusters con los niveles de emisiones de carbono. En el campo del aprendizaje Supervisado, se exploró el uso del algoritmo Proceso de Regresión Gaussiano y se comparó con un modelo estadístico predictivo tradicional, que fue la Regresión Lineal Múltiple. Se buscó predecir los niveles de emisión de CO2 en los vehículos, basándose en sus características. Los resultados observados a través de las métricas de MAE, MSE, RMSE y MAPE arrojaron un mejor nivel de predicción en el modelo tradicional, teniendo un promedio de errores 35 por ciento menor que el modelo más complejo, incluso después de utilizar técnicas de diseño de experimentos, el performance del modelo de Regresión Lineal Múltiple fue mejor.

Índice

1 Descripción de los Datos

Este conjunto de datos captura los detalles de cómo las emisiones de CO2 de un vehículo pueden variar con las diferentes características. El conjunto de datos ha sido tomado del sitio web oficial de datos abiertos del Gobierno de Canadá. Esta es una versión compilada que contiene datos de un período de 7 años.

Hay un total de 7385 filas y 12 columnas. Se han utilizado algunas abreviaturas para describir las características. Las estoy enumerando aquí. Las mismas se pueden encontrar en la hoja de Descripción de Datos. Cabe destacar que el conjunto de datos no tiene valores faltantes o nulos.

Los datos han sido tomados y compilados de la base de datos oficial del Gobierno de Canadá[1].

Una muestra de los datos se puede ver en el siguiente esquema:

	Make	Model	Vehicle Class	Engine Size(L)	Cylinders	Transmission
0	ACURA	ILX	COMPACT	2.0	4	AS5
1	ACURA	ILX	COMPACT	2.4	4	M6
2	ACURA	ILX HYBRID	COMPACT	1.5	4	AV7
3	ACURA	MDX 4WD	SUV - SMALL	3.5	6	AS6
4	ACURA	RDX AWD	SUV - SMALL	3.5	6	AS6

	Fuel Type	Fuel Consumption City (L/100 km)
0	Z	9.9
1	Z	11.2
2	Z	6.0
3	Z	12.7
4	Z	12.1

	Fuel Consumption Hwy (L/100 km)	Fuel Consumption Comb (L/100 km)
0	6.7	8.5
1	7.7	9.6
2	5.8	5.9
3	9.1	11.1
4	8.7	10.6

	Fuel Consumption Comb (mpg)	CO2 Emissions(g/km)
0	33	196
1	29	221
2	48	136
3	25	255
4	27	244

[1] Base de datos gobierno de Canadá

2 Aprendizaje No-Supervisado - DBSCAN y T-SNE para clusterización de Emisiones de CO2

Abstract de la sección Se tomó como inspiración el artículo *Exploring Spatiotemporal Pattern and Agglomeration of Road CO2 Emissions in Guangdong, China* para realizar un modelo de aprendizaje no supervisado (DBSCAN) sobre los datos de emisiones de CO2 en vehículos en Cánada. Se realiza primeramente una reducción de dimensionaldiad para tener una visualización 2D de los datos, usando el algoritmo de T-SNE, esto con el fin de ver la densidad de colores (clusters) asignados por la clusterización obtenida del DBSCAN. Para fines de este ejercicio, el DBSCAN se efectúa sobre las variables numéricas de los datos.

2.1 Metodología

2.1.1 Vecinos Cercanos (Nearest Neighbors)

El algoritmo de vecinos más cercanos (Nearest Neighbors) se utiliza para encontrar puntos en un conjunto de datos que están más cerca unos de otros. La distancia euclidiana es una métrica comúnmente utilizada para medir la proximidad entre dos puntos x_i y x_j:

$$d(x_i, x_j) = \sqrt{\sum_{k=1}^{n}(x_{ik} - x_{jk})^2} \tag{1}$$

donde x_{ik} y x_{jk} son las coordenadas de los puntos x_i y x_j en el espacio k-dimensional.

2.1.2 Distribución-t de Embedding de Vecinos Estocásticos (t-SNE)

t-SNE es una técnica de reducción de dimensionalidad que se utiliza para visualizar datos de alta dimensión. Primero, t-SNE calcula las probabilidades de similitud entre los puntos en el espacio de alta dimensión utilizando una distribución gaussiana:

$$p_{j|i} = \frac{\exp(-\|x_i - x_j\|^2/2\sigma_i^2)}{\sum_{k\neq i}\exp(-\|x_i - x_k\|^2/2\sigma_i^2)} \tag{2}$$

Estas probabilidades se simetrizan como:

$$p_{ij} = \frac{p_{j|i} + p_{i|j}}{2n} \tag{3}$$

En el espacio de baja dimensión, t-SNE utiliza una distribución t de Student para calcular las probabilidades q_{ij}:

$$q_{ij} = \frac{(1 + \|y_i - y_j\|^2)^{-1}}{\sum_{k\neq l}(1 + \|y_k - y_l\|^2)^{-1}} \tag{4}$$

El objetivo es minimizar la divergencia de Kullback-Leibler entre las distribuciones P y Q:

$$KL(P\|Q) = \sum_{i\neq j} p_{ij} \log \frac{p_{ij}}{q_{ij}} \tag{5}$$

2.1.3 Clustering Espacial Basado en Densidad de Aplicaciones con Ruido (DBSCAN)

DBSCAN es un algoritmo de clustering basado en densidad que agrupa puntos que están juntos y marca los puntos que están en áreas de baja densidad como ruido. DBSCAN utiliza dos parámetros principales: ϵ (el radio de un punto de consulta) y $minPts$ (el número mínimo de puntos requeridos para formar un cluster).

Un punto p es un punto central si al menos $minPts$ puntos están dentro de una distancia ϵ de p:

$$N_\epsilon(p) = \{q \in D \mid d(p,q) \leq \epsilon\} \tag{6}$$

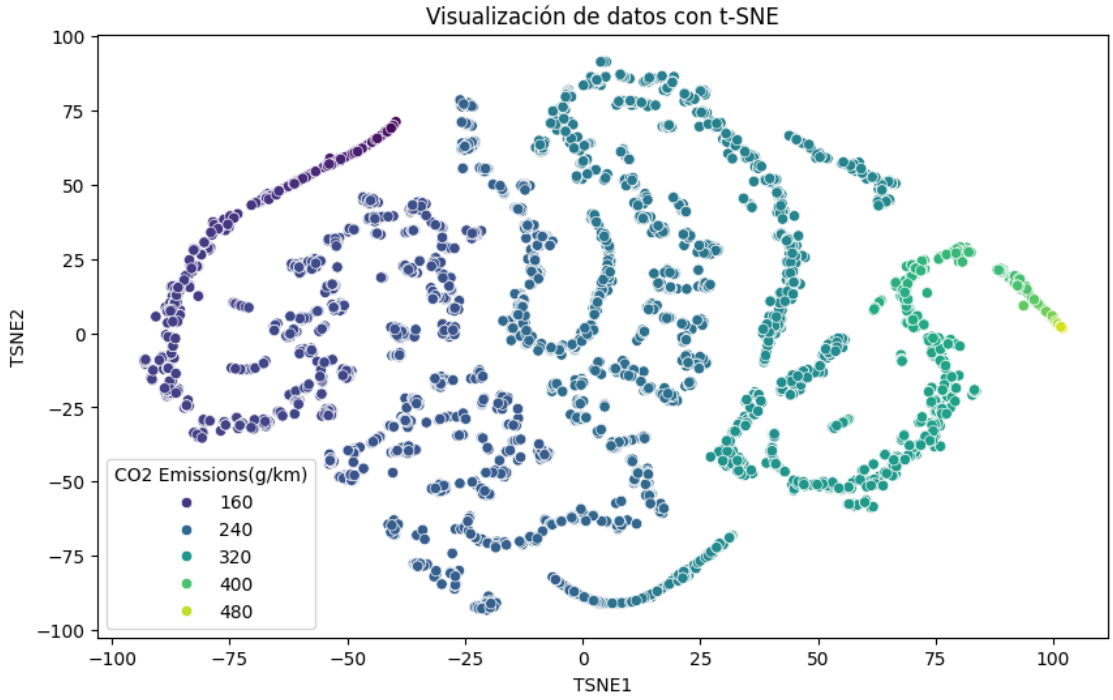
donde $N_\epsilon(p)$ es el conjunto de puntos dentro de la distancia ϵ de p.

El algoritmo clasifica los puntos en tres categorías: - Puntos centrales: tienen al menos $minPts$ puntos dentro de su radio ϵ. - Puntos borde: tienen menos de $minPts$ puntos dentro de su radio ϵ pero están dentro del radio ϵ de un punto central. - Puntos de ruido: no son puntos centrales ni puntos borde.

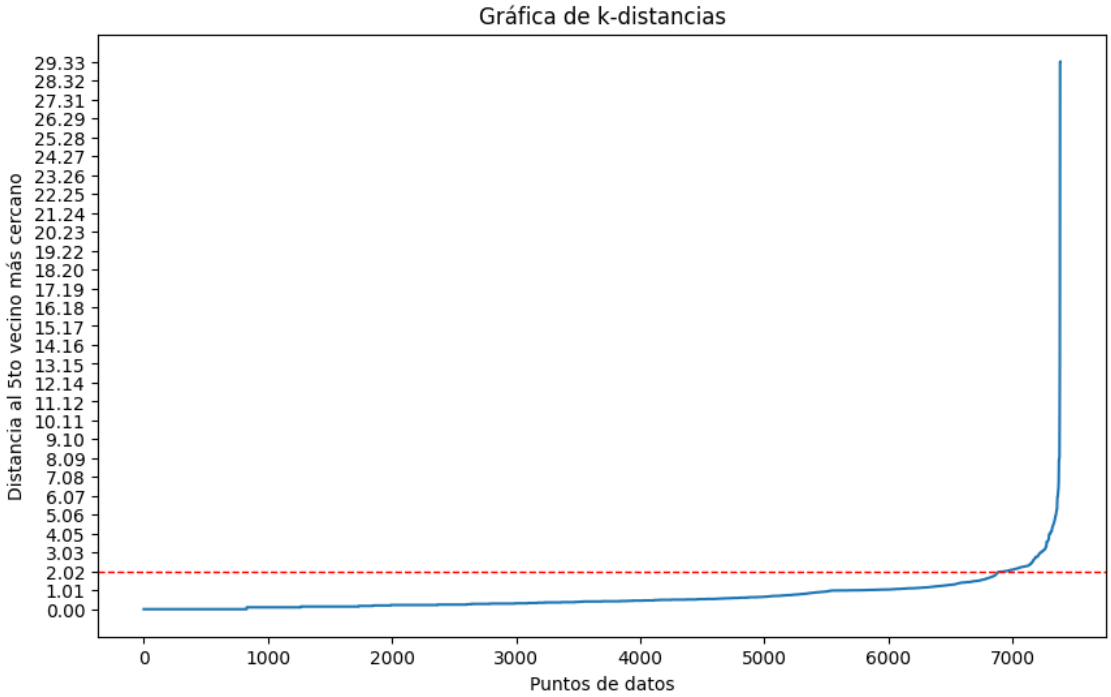
2.2 Resultados & Conclusiones

Para los análisis posteriores se seleccionan únicamente las variables numéricas.

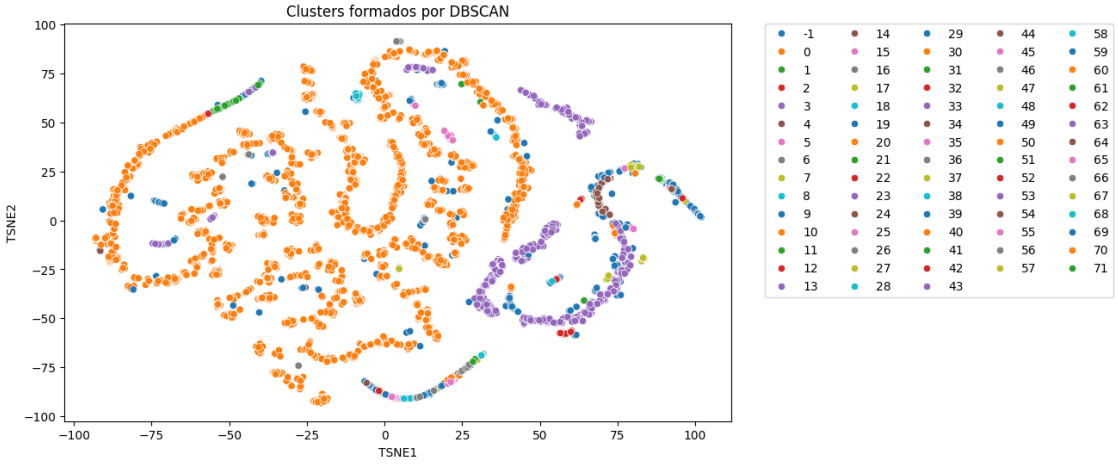
Para el análisis de reducción de dimensionalidad con T-SNE. Se realiza una reducción de dimensionalidad a 2 componentes para visualizar las features en un espacio 2D. El algoritmo DBSCAN funciona particularmente bien para identificar densidad en los datos, por lo que la visualización 2D resulta apropiada. El T-SNE es una ténica de Aprendizaje No Supervisado de reducción de dimensiones ampliamente utilizada para la exploración de datos y la visualización de datos de altas dimesiones.



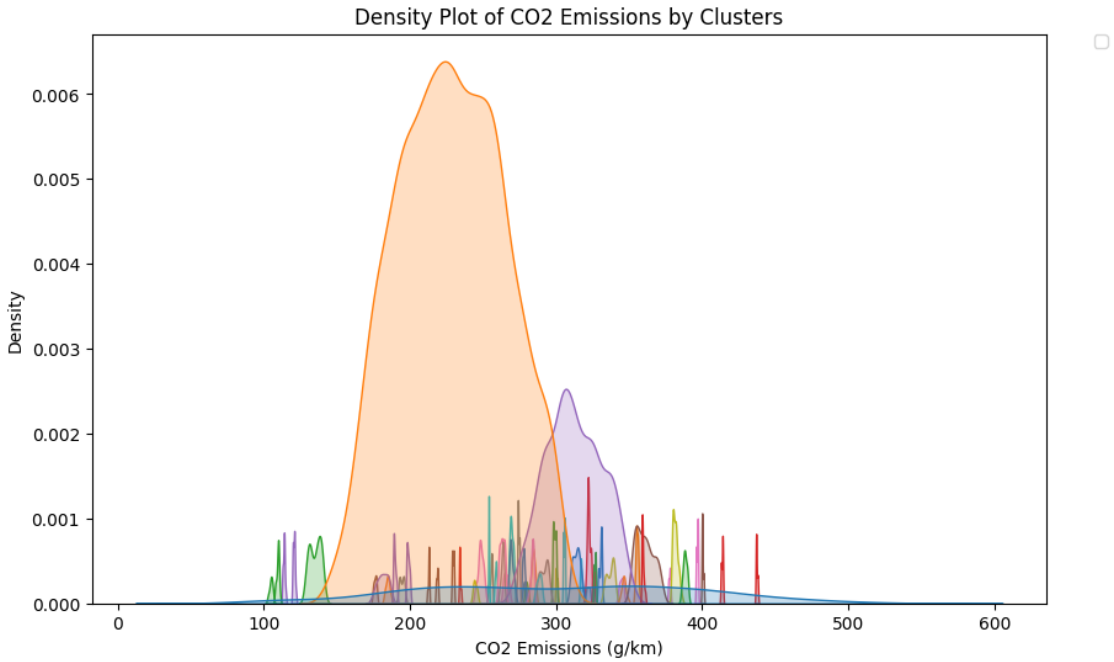
Se emplea el DBSCAN para crear clusters sobre las variables, posteriormente se asigna el cluster al conjunto de datos original y al conjunto de datos con dimensionalidades reducidas. Se gráfica la distribución de clusters (colores) respecto al scatterplot de los componentes tsne1 y tsne2. La primera gráfica que se ve es una medida conocida como *Optimal Eps Value* que sirve para determinar el hiperparámetro **eps** del algoritmo DBSCAN (es el parámetro más importante)



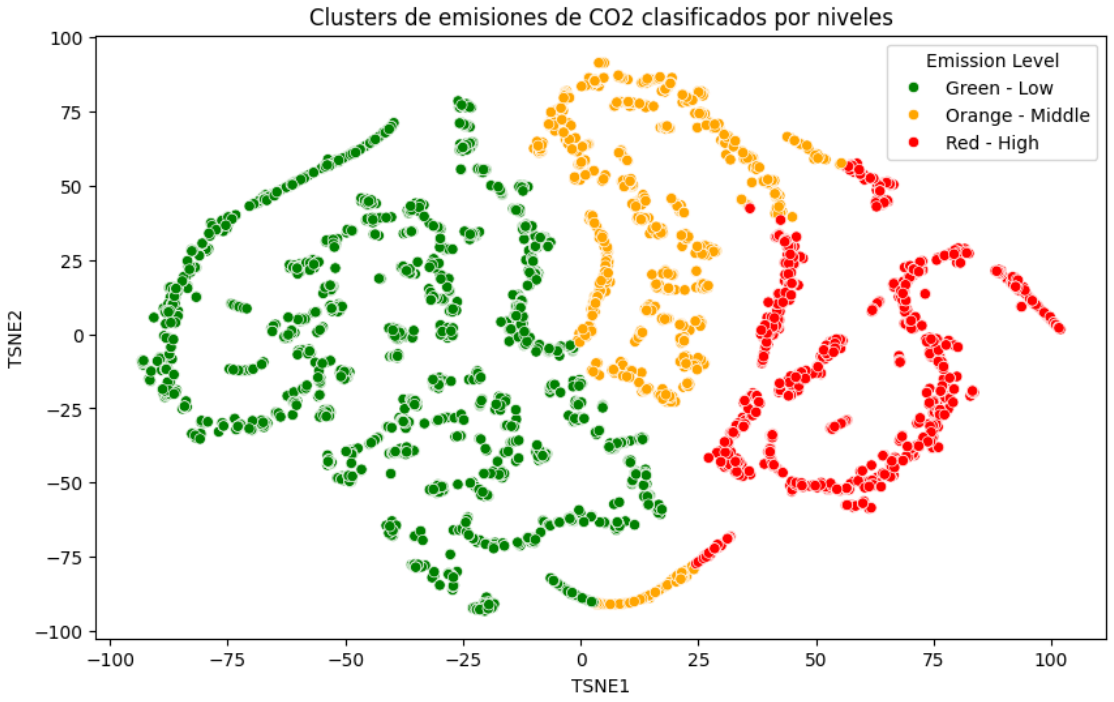
Como se puede observar en la gráfica, el punto de corte o cambio de dirección para un número de 5 vecinos cercanos distribidos en la data, es aproximadamente en el valor 2. Por lo que estas observaciones se pasan como parámetros para el modelo DBSCAN.



Se muestra la densidad (distribución) de los Clusters.



Como forma ilustrativa se observa la densidad (clasificada por nivel de emisiones de bajo a alto) respecto las componentes de la data (obtenidas del T-SNE). Finalmente se muestra una tabla de relación entre las features y las componetnes T-SNE 1 & 2, de esta forma podemos complementar la interpretación de la gráfica sabiendo que features influyen más o menos, positiva y negativamente, a cada componente.

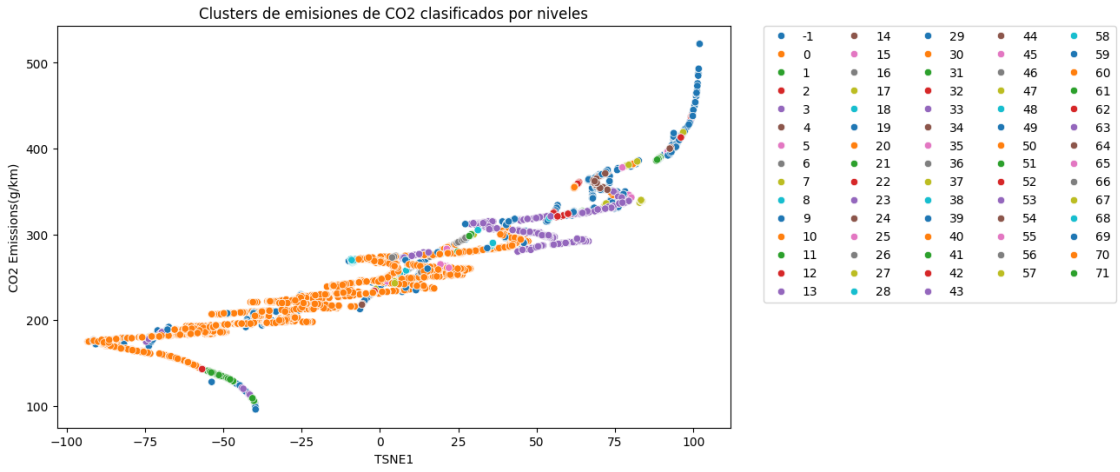


	Engine Size(L)	Cylinders	Fuel Consumption City (L/100 km)	\
TSNE1	0.834789	0.81222	0.861233	
TSNE2	-0.076133	-0.05065	-0.155395	

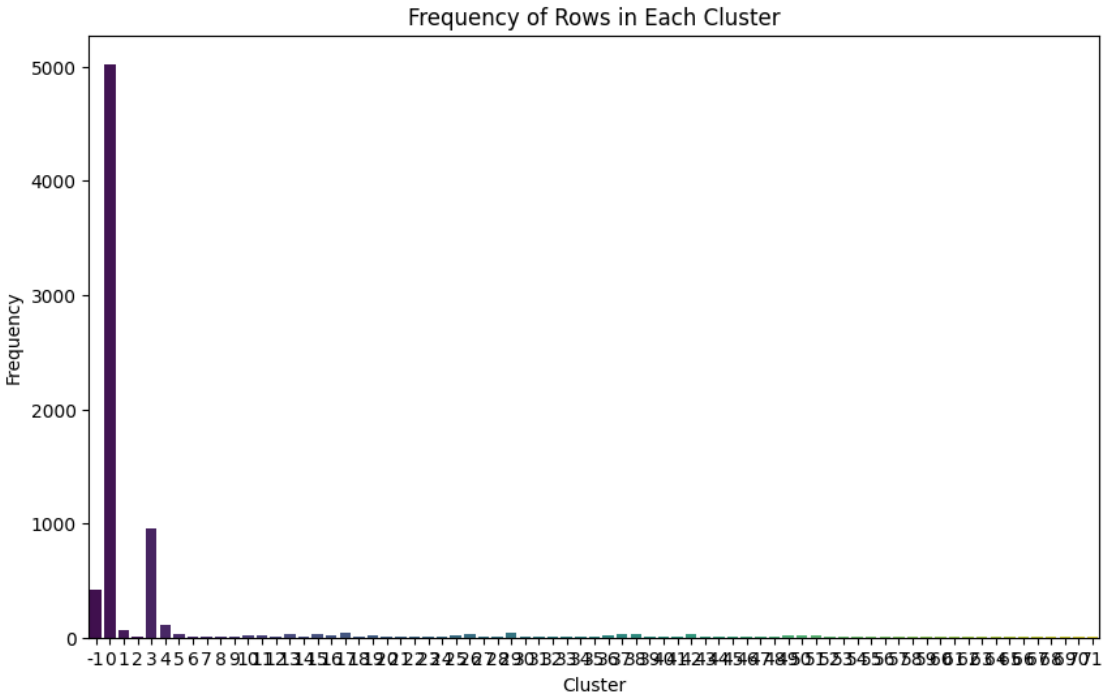
	Fuel Consumption Hwy (L/100 km)	Fuel Consumption Comb (L/100 km)	\
TSNE1	0.827188	0.859778	
TSNE2	-0.134140	-0.150245	

	Fuel Consumption Comb (mpg)	CO2 Emissions(g/km)
TSNE1	-0.854690	0.939401
TSNE2	0.163234	-0.023285

Se puede concluir de las correlaciones (disclaimer: no es una medida súper confiable para determinar "importancia" de las features en el cálculo de componentes de T-SNE) que para el componente 1, las variables están teniendo un mayor impacto. Por lo que se gráfica el T-SNE componente 1 vs las emisiones de CO2 para hallar relaciones.



Se crea un histograma de la frecuencia de cada cluster del DBSCAN en los datos. El cluster 0 es el más frecuente. Igualmente se identifican cerca de 500 observaciones consideradas como "ruido" por el algoritmo (cluster -1).



Se muestra un resumen de las características e insights de las variables categóricas y númericas de la data de emisiones de CO2, por cluster del DBSCAN.

	Cluster	CO2 Emissions Mean	CO2 Emissions Std	Most Common Make
0	-1	299.502358	93.648783	FORD
1	0	228.267370	36.345936	FORD
2	1	135.045455	3.812658	TOYOTA
3	2	359.363636	0.674200	ASTON MARTIN
4	3	311.963312	18.889742	CHEVROLET
..	...	...	...	...
68	67	419.000000	0.000000	MERCEDES-BENZ
69	68	322.000000	1.000000	CHEVROLET
70	69	370.000000	0.000000	LAMBORGHINI
71	70	382.000000	0.000000	ROLLS-ROYCE
72	71	279.800000	0.836660	TOYOTA

	Most Common Model	Most Common Vehicle Class	Engine Size Mean
0	FOCUS FFV	TWO-SEATER	4.162264
1	SONIC	SUV - SMALL	2.522616
2	ES 300h	MID-SIZE	2.004545
3	DB9	MINICOMPACT	6.072727
4	SILVERADO 4WD	SUV - STANDARD	5.122642
..	...	...	...
68	G 550	SUV - STANDARD	5.220000

```
69   SUBURBAN 4WD FFV   PICKUP TRUCK - STANDARD          5.240000
70  Huracan Coupe AWD                TWO-SEATER          5.200000
71            Phantom                 FULL-SIZE          6.700000
72         TACOMA 4WD      PICKUP TRUCK - SMALL          2.660000

    Engine Size Std  Cylinders Mean  Cylinders Std Most Common Transmission  \
0          1.728769        7.198113       2.968455                         A6
1          0.749912        4.785188       1.000718                        AS6
2          0.370211        3.924242       0.266638                         AV
3          0.264919       12.000000       0.000000                         A6
4          0.698200        8.000000       0.000000                        AS8
..              ...             ...            ...                        ...
68         0.383406        8.000000       0.000000                         A6
69         0.134164        8.000000       0.000000                         A6
70         0.000000       10.000000       0.000000                        AM7
71         0.000000       12.000000       0.000000                        AS8
72         0.089443        4.000000       0.000000                         M5

   Most Common Fuel Type  Fuel Consumption City Mean  \
0                      Z                   16.271226
1                      X                   11.138244
2                      X                    5.710606
3                      Z                   18.372727
4                      Z                   15.624214
..                   ...                         ...
68                     Z                   20.480000
69                     E                   21.980000
70                     Z                   17.950000
71                     Z                   20.000000
72                     X                   12.800000

    Fuel Consumption City Std  Fuel Consumption Hwy Mean  \
0                    5.724219                  11.387736
1                    1.874373                   8.155883
2                    0.304898                   5.842424
3                    0.374409                  11.900000
4                    0.972837                  10.622222
..                        ...                        ...
68                   0.749667                  15.220000
69                   0.408656                  16.160000
70                   0.053452                  12.950000
71                   0.000000                  11.800000
72                   0.578792                  11.000000

    Fuel Consumption Hwy Std  Fuel Consumption Comb Mean  \
0                   3.704874                   14.071462
1                   1.244043                    9.795899
```

```
2                   0.382727                    5.778788
3                   0.618061                   15.472727
4                   0.886833                   13.376834
..                       ...                         ...
68                  0.867179                   18.140000
69                  0.614817                   19.360000
70                  0.053452                   15.700000
71                  0.000000                   16.300000
72                  0.489898                   12.000000

    Fuel Consumption Comb Std  Fuel Consumption Comb MPG Mean  \
0                    4.756994                       23.257075
1                    1.556013                       29.579932
2                    0.182727                       48.909091
3                    0.190215                       18.090909
4                    0.821228                       21.146751
..                        ...                             ...
68                   0.134164                       16.000000
69                   0.089443                       14.800000
70                   0.000000                       18.000000
71                   0.000000                       17.000000
72                   0.122474                       23.800000

    Fuel Consumption Comb MPG Std
0                       10.746045
1                        4.910056
2                        1.475203
3                        0.301511
4                        1.380214
..                            ...
68                       0.000000
69                       0.447214
70                       0.000000
71                       0.000000
72                       0.447214

[73 rows x 20 columns]
```

3 Aprendizaje Supervisado - Regresión de Proceso Gaussiano para predicciones de CO2

Abstract de la sección En esta sección de Aprendizaje Supervisado, se explora la aplicación del Gaussian Processes Regression, para la predicción de emisiones de CO2. Se tomó como inspiración el artículo *Can Machine Learning be Applied to Carbon Emissions Analysis: An Application to the CO2 Emissions Analysis Using Gaussian Process Regression* de Ning Ma, Wai Yan Shum y Tingting Han. Los resultados arrojan un R2 de 73% aprox, sin embargo destaca una serie de valores cuya predicción se opta por la media de la distribución (250), lo cual resulta particular. Se comparan distintas métricas como *MAE, MSE, RMSE y MAPE* contra las predicciones de una regresión lineal múltiple. La RLM resulta con mejor performance en general. Finalmente se realiza una búsqueda de hiperparámetros a través del diseño de experimentos con el fin de mejorar el performance del modelo. A priori se logró dsiminuir el error y mejor el ajuste significativamente, sin embargo el modelo de Regresión Lineal Múltiple permaneció como el mejor modelo.

3.1 Metodología

3.1.1 Regresión Lineal Múltiple

La regresión lineal múltiple es una técnica estadística que modela la relación entre una variable dependiente y y múltiples variables independientes $X_1, X_2, \ldots, X_p$. El modelo de regresión lineal múltiple puede ser representado por la siguiente fórmula:

$$y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \ldots + \beta_p X_p + \epsilon$$

Donde:

- y es la variable dependiente.
- $X_1, X_2, \ldots, X_p$ son las variables independientes.
- β_0 es el intercepto del modelo.
- $\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_p$ son los coeficientes de regresión.
- ϵ es el término de error.

Para ajustar el modelo, se utilizan los datos de entrenamiento para estimar los coeficientes β que minimizan el error cuadrático medio (MSE) entre las predicciones y los valores reales. La métrica MSE se define como:

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

Donde y_i son los valores reales y $\hat{y}_i$ son las predicciones del modelo.

3.1.2 Regresión de Procesos Gaussianos

La regresión de procesos gaussianos (GPR) es un método bayesiano no paramétrico utilizado para la regresión. GPR asume que los datos se distribuyen según un proceso gaussiano, lo que significa

que cualquier conjunto finito de datos sigue una distribución normal multivariada. El modelo de GPR está definido por una función de media $m(x)$ y una función de covarianza (o kernel) $k(x, x')$.

El proceso gaussiano se puede expresar como:

$$f(x) \sim \mathcal{GP}(m(x), k(x, x'))$$

Donde:

- $m(x)$ es la función de media, que generalmente se asume como cero.
- $k(x, x')$ es la función de covarianza o kernel, que define la relación entre los puntos de datos.

La predicción de GPR en un nuevo punto x_* se obtiene mediante la siguiente fórmula:

$$\mu_* = K(X_*, X)[K(X, X) + \sigma_n^2 I]^{-1} y$$

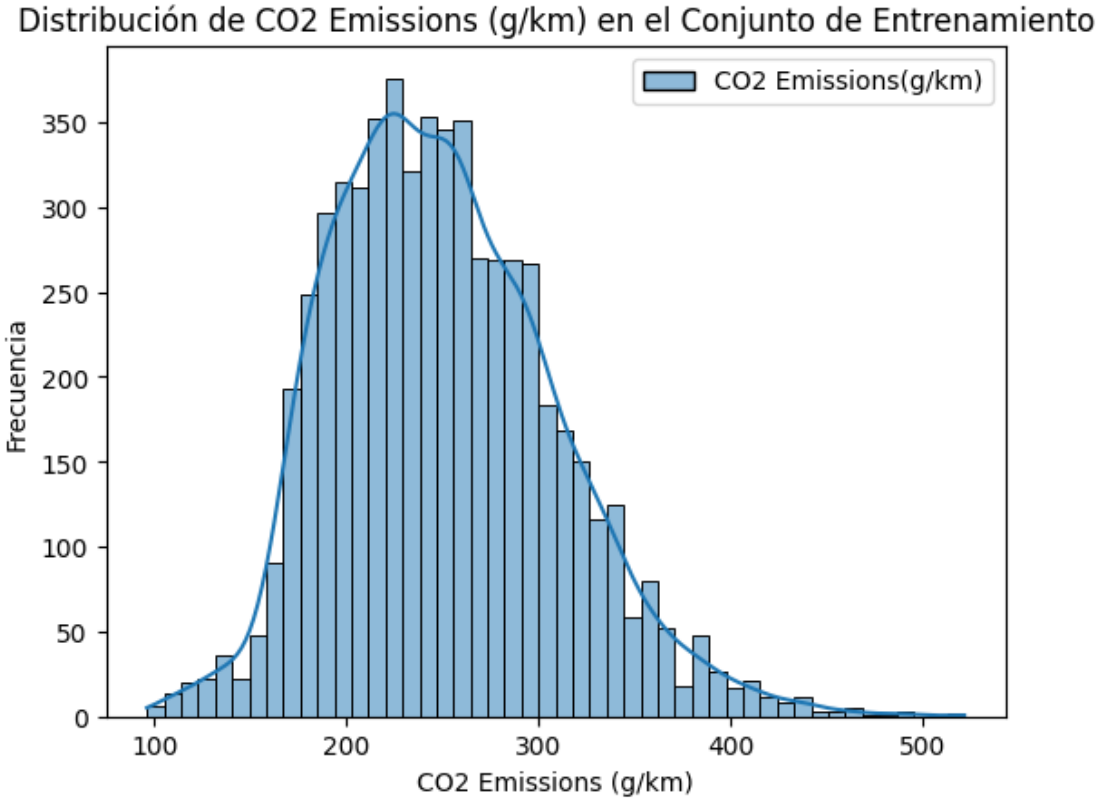
$$\Sigma_* = K(X_*, X_*) - K(X_*, X)[K(X, X) + \sigma_n^2 I]^{-1} K(X, X_*)$$

Donde:

- μ_* es la media predictiva en el punto x_*.
- Σ_* es la varianza predictiva en el punto x_*.
- K es la matriz de covarianza calculada mediante el kernel.
- σ_n^2 es la varianza del ruido en los datos.

3.2 Exploración previa

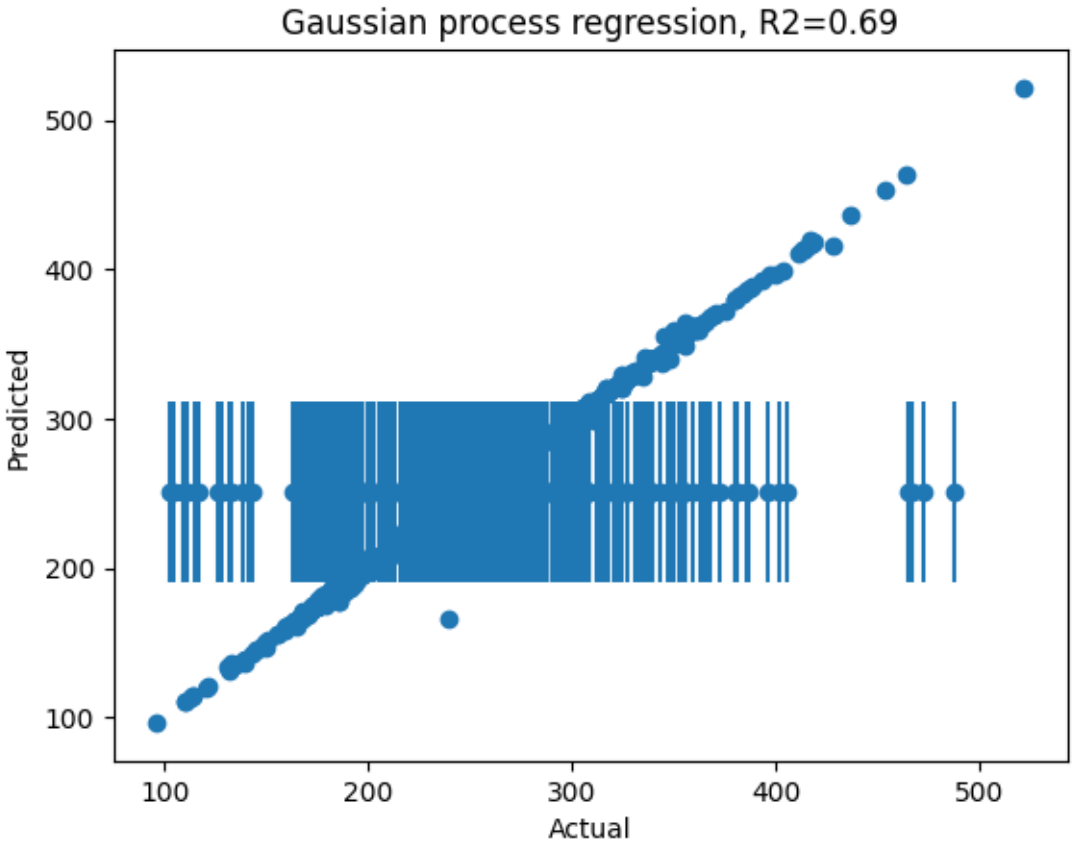
Se muestra la distribución de las Emisiones de CO2 en el conjunto de entrenamiento.



De la gráfica anterior de emisiones, se observa como la media de los datos se acerca al valor 250, esto tomará peso en los siguientes resultados.

3.3 Resultados & Conclusiones

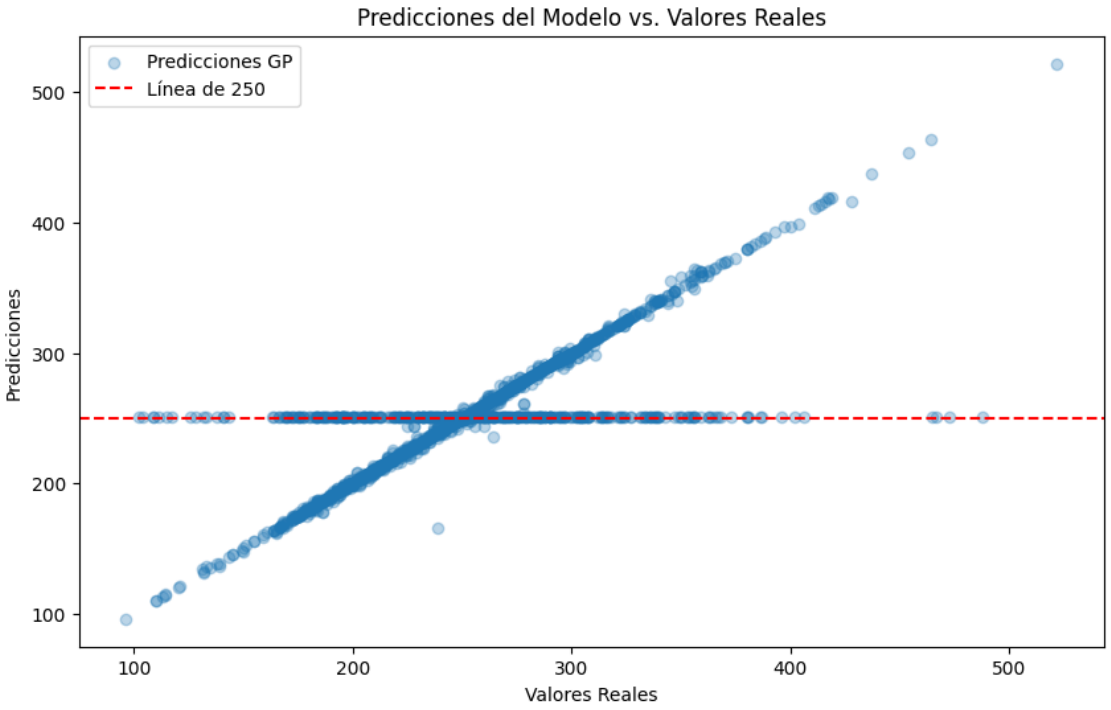
Se entrena un modelo de un Proceso de Regresión Gaussiano, el cuál ha sido probado previamente en la literatura como un buen predictor de emisiones de CO2.



Los resultados del modelo indican un ajuste de 73% sobre los datos predichos vs observados, sin embargo se destaca una serie de predicciones que resultaron en la media de la distribución, de alrededor de 250, comparado contra las observaciones reales se puede percibir una recta horizontal, se discutirá más adelante en este paper las posibles causas.

	Metric	Value
0	MAE	12.483388
1	MSE	858.493804
2	RMSE	29.300065
3	MAPE	5.491289

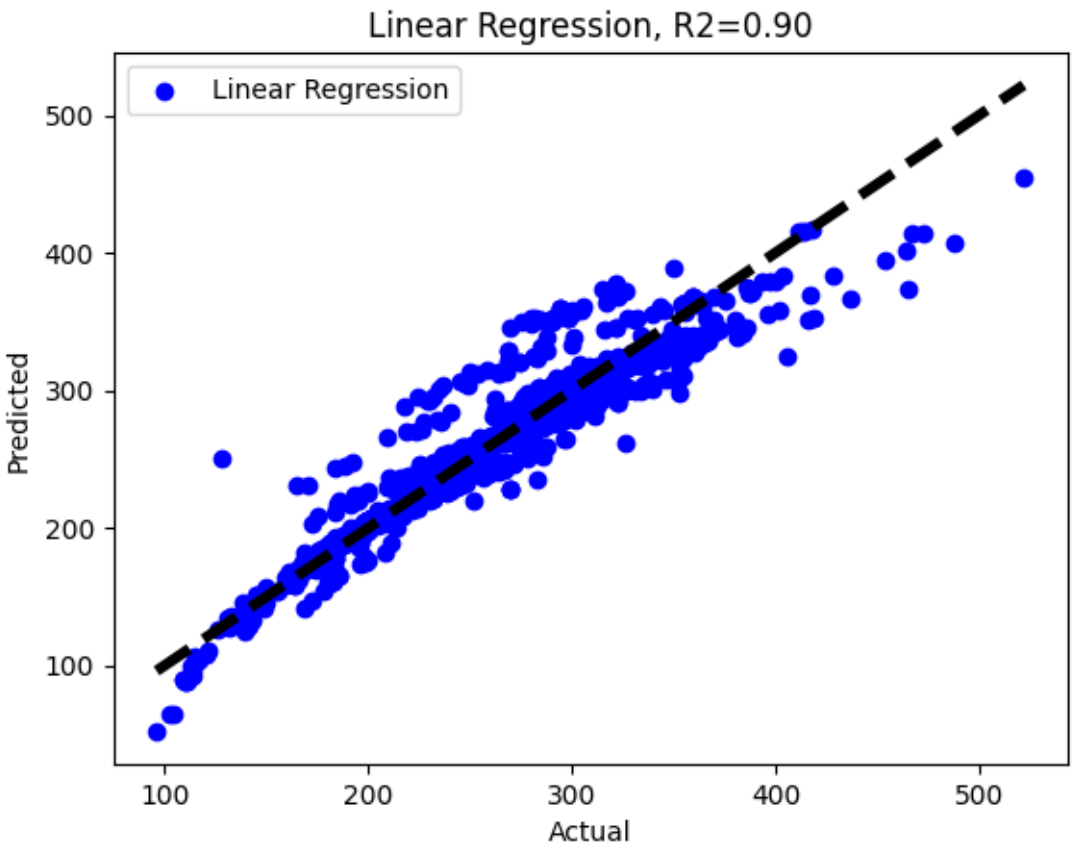
Se muestran las métricas de desempeño, los resultados per se podrían decirse no tan negativos, sin embargo es preferible que sean comparados con observaciones similares y resultados de métricas de la literatura.




```
Engine Size(L)                      0.851145
Cylinders                           0.832644
Fuel Consumption City (L/100 km)    0.919592
Fuel Consumption Hwy (L/100 km)     0.883536
Fuel Consumption Comb (L/100 km)    0.918052
Fuel Consumption Comb (mpg)        -0.907426
dtype: float64
```

Se muestran las correlaciones. las cuales muestran fuerte relación de las variables numéricas hacia el resultado a predecir, que es la emisión de CO2.

	Metric	Linear Regression	Gaussian Process
0	MAE	10.967599	12.483388
1	MSE	312.066899	858.493804
2	RMSE	17.665415	29.300065
3	MAPE	4.199974	5.491289
4	R2	0.903524	0.734595

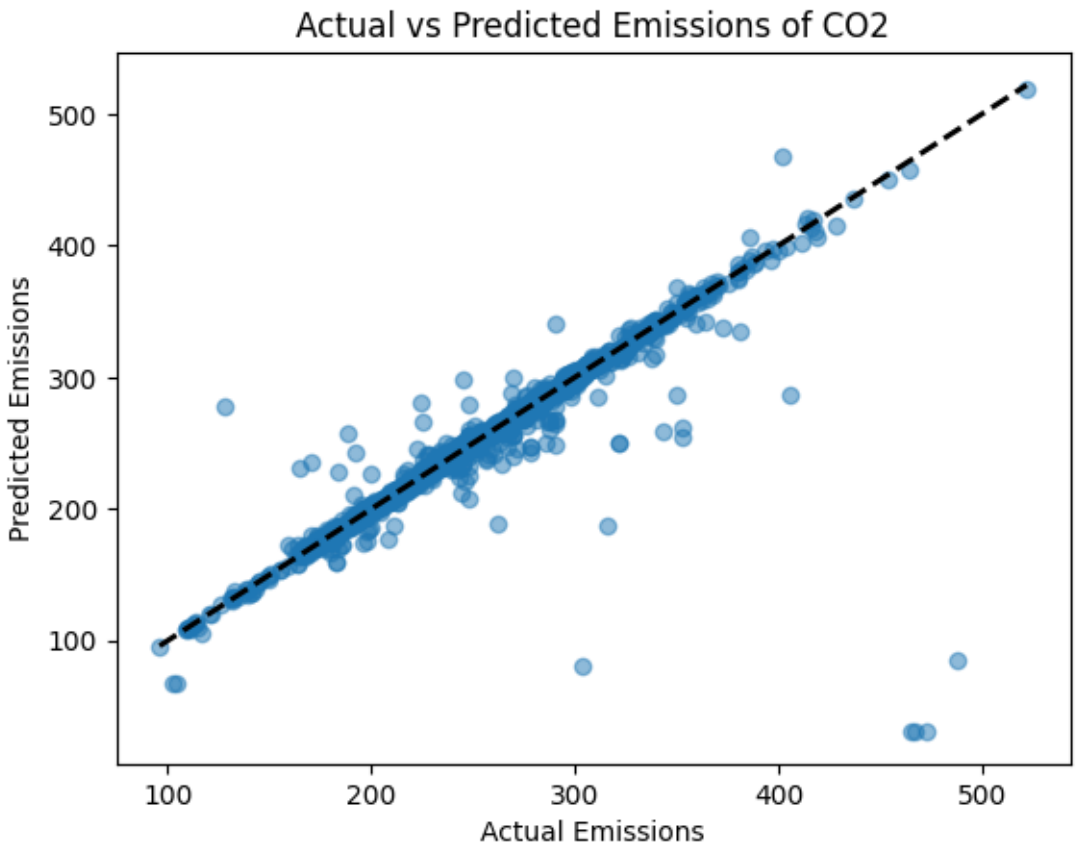


Se comparan los resultados de perfromance del GPR vs una Regresión Lineal Múltiple, para connotar que en este caso particular, un modelo más avanzado no resulta necesariamente mejor que la estadística tradicional, sin embargo, cabe destacar y dejar muy claro que no se realizaron esfuerzos de hyperparameter tunning, feature engineering, dimensionality reduction, ni parameter optimization, que pudieran resultar en un performance de índole superior a favor del modelo GPR.

3.3.1 Diseño de Experimentos

Se realiza una optimización de Hipermarametros para el modelo de regresión gaussiana con el fin de mejorar el rendimiento del modelo. Finalmente se vuelve a comparar con la Regresión Lineal Múltiple.

Se muestra a continuación los resultados de la predicción vs las observaciones actuales en un Scatterplot. Finalmente se muestran los resultados con las métricas de desempeño previamente empleadas.



Desde la misma gráfica ScatterPlot se observa como se tuvo un mejor ajuste en los datos de predicción vs los observados. Además ya no se percibe la predicción constatne en el valor 250.

```
MAE: 5.748593839203
MSE: 657.4599804086429
RMSE: 25.64098243844496
MAPE: 27.084351647188402%
R2: 0.8049810000564228
```

En los resultados de las métricas se puede observar una mejora significativa respecto al primer modelo base de GPR. Salvo por el MAE, en general el modelo de Regresión Lineal Múltiple conservó mejores resultados de error. A través del diseño de experimentos, el modelo tomó aproximadamente seis veces más de tiempo de entrenamiento que el modelo base (30 vs 5 mins).

4 Conclusiones Generales

Se realizaron dos análisis principales para investigar las emisiones de CO2 en vehículos: un análisis de clustering utilizando DBSCAN combinado con T-SNE para la reducción de dimensionalidad, y un modelo de regresión de procesos gaussianos (GPR) para la predicción de emisiones de CO2. Las conclusiones generales fueron las siguientes:

La combinación de T-SNE y DBSCAN permitió una visualización clara y una agrupación efectiva de los vehículos según sus emisiones de CO2. El DBSCAN identificó densidades en los datos y agrupó los vehículos en clusters. El cluster 0 resultó ser el más frecuente, y se detectaron cerca de 500 observaciones como "ruido" (cluster -1).

En general, las variables como el tamaño del motor y el consumo de combustible son determinantes importantes en las emisiones de CO2.

Respecto a la predicción de emisiones de CO2. Aunque el modelo GPR mostró potencial, la regresión lineal múltiple tuvo un mejor rendimiento inicial, destacando la necesidad de una optimización adecuada de los modelos avanzados. Como puntos de mejora o premisa para análisis posteriores, la optimización de hiperparámetros es crucial para mejorar el rendimiento de los modelos, aunque puede aumentar significativamente el tiempo de procesamiento.

5 Bibliografías

- https://github.com/d0r1h/CO2-Emission-by-Cars?tab=readme-ov-file
- https://www.kaggle.com/datasets/debajyotipodder/co2-emission-by-vehicles
- https://www.kdnuggets.com/2019/10/right-clustering-algorithm.html
- https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0048969723007507
- https://www.datacamp.com/es/tutorial/introduction-t-sne
- https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1755-1315/31/1/012012/pdf#:~:text=Sorting%20the%20results%
- https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fenrg.2021.756311/full
- https://towardsdatascience.com/getting-started-with-gaussian-process-regression-modeling-47e7982b534d