Machine Learning Algorithms applied to CO2 Emissions in Canada

Emanuel Novelo Hernández

July 8, 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 clasificar 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.

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.

Los datos han sido tomados y compilados del siguiente enlace oficial del Gobierno de Canadá: https://open.canada.ca/data/en/dataset/98f1a129-f628-4ce4-b24d-6f16bf24dd64wb-auto-6

Se hace la lectura de los datos

[1]:
```
import pandas as pd
```

[19]:
```
# lectura de datos
df = pd.read_csv('C:/Users/emanuel.novelo/Desktop/MCD - 2024-2026/ML - 2do Tetra/
 ↪MCD----ML----2024/data/CO2 Emissions_Canada.csv')
df.head()
```

[19]:

	Make	Model	Vehicle Class	Engine Size(L)	Cylinders	Transmission	Fuel Type	Fuel Consumption City (L/100 km)	Fuel Consumption Hwy (L/100 km)	Fuel Consumption Comb (L/100 km)	Fuel Consumption Comb (mpg)	CO2 Emissions(g/km)
0	ACURA	ILX	COMPACT	2.0	4	AS5	Z	9.9	6.7	8.5	33	196
1	ACURA	ILX	COMPACT	2.4	4	M6	Z	11.2	7.7	9.6	29	221
2	ACURA	ILX HYBRID	COMPACT	1.5	4	AV7	Z	6.0	5.8	5.9	48	136
3	ACURA	MDX 4WD	SUV - SMALL	3.5	6	AS6	Z	12.7	9.1	11.1	25	255
4	ACURA	RDX AWD	SUV - SMALL	3.5	6	AS6	Z	12.1	8.7	10.6	27	244

Descripción básica de la data

[7]:
```
df.info()
```

```
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 7385 entries, 0 to 7384
Data columns (total 12 columns):
 #   Column                            Non-Null Count  Dtype
---  ------                            --------------  -----
 0   Make                              7385 non-null   object
 1   Model                             7385 non-null   object
 2   Vehicle Class                     7385 non-null   object
 3   Engine Size(L)                    7385 non-null   float64
```

```
 4   Cylinders                         7385 non-null   int64
 5   Transmission                      7385 non-null   object
 6   Fuel Type                         7385 non-null   object
 7   Fuel Consumption City (L/100 km)  7385 non-null   float64
 8   Fuel Consumption Hwy (L/100 km)   7385 non-null   float64
 9   Fuel Consumption Comb (L/100 km)  7385 non-null   float64
 10  Fuel Consumption Comb (mpg)       7385 non-null   int64
 11  CO2 Emissions(g/km)               7385 non-null   int64
dtypes: float64(4), int64(3), object(5)
memory usage: 692.5+ KB
```

2 Unsupervised Learning - DBSCAN & TSNE for Clustering CO2 Emissions

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 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 t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding (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 Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise (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.

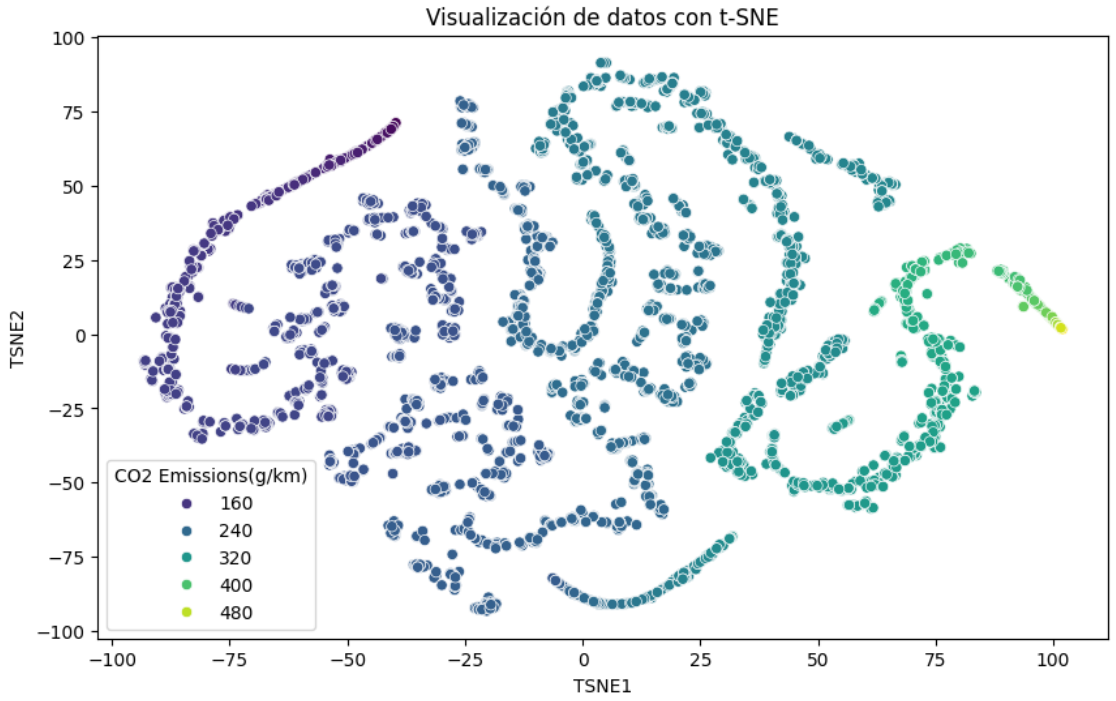
2.2 Resultados & Conclusiones

Selección de features numéricas para T-SNE y DBSCAN

[20]:
```
# Numeric Features for clustering
# Seleccionar las columnas numéricas para clustering
features = df[['Engine Size(L)', 'Cylinders', 'Fuel Consumption City (L/100 km)',
               'Fuel Consumption Hwy (L/100 km)', 'Fuel Consumption Comb (L/
↪100 km)',
               'Fuel Consumption Comb (mpg)', 'CO2 Emissions(g/km)']]
```

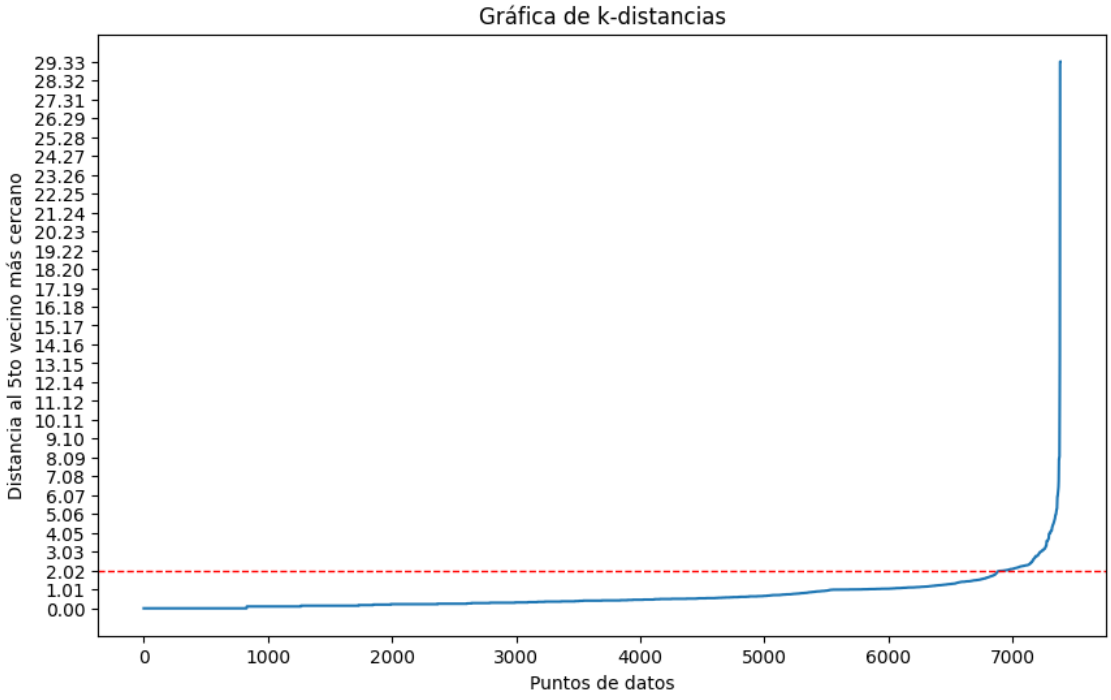
Dimensionality Reduction (T-SNE). Se realiza una reducción de dimensionalidad a 2 componentes para visualizar las features en un espacio 2D. El algoritmo DBSCAN funciona particularmente bien para identificar densidad en los datos, por lo que la visualización 2D resulta apropiada. El T-SNE es una ténica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

[21]:
```
from sklearn.manifold import TSNE
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns

# Reducir las dimensiones a 2D
tsne = TSNE(n_components=2, random_state=42)
tsne_results = tsne.fit_transform(features)

# Crear un DataFrame con los resultados de t-SNE
tsne_df = pd.DataFrame(tsne_results, columns=['TSNE1', 'TSNE2'])
tsne_df['CO2 Emissions(g/km)'] = df['CO2 Emissions(g/km)']

# Visualizar los datos
plt.figure(figsize=(10, 6))
sns.scatterplot(x='TSNE1', y='TSNE2', hue='CO2 Emissions(g/km)',␣
↪palette='viridis', data=tsne_df)
plt.title('Visualización de datos con t-SNE')
plt.show()
```



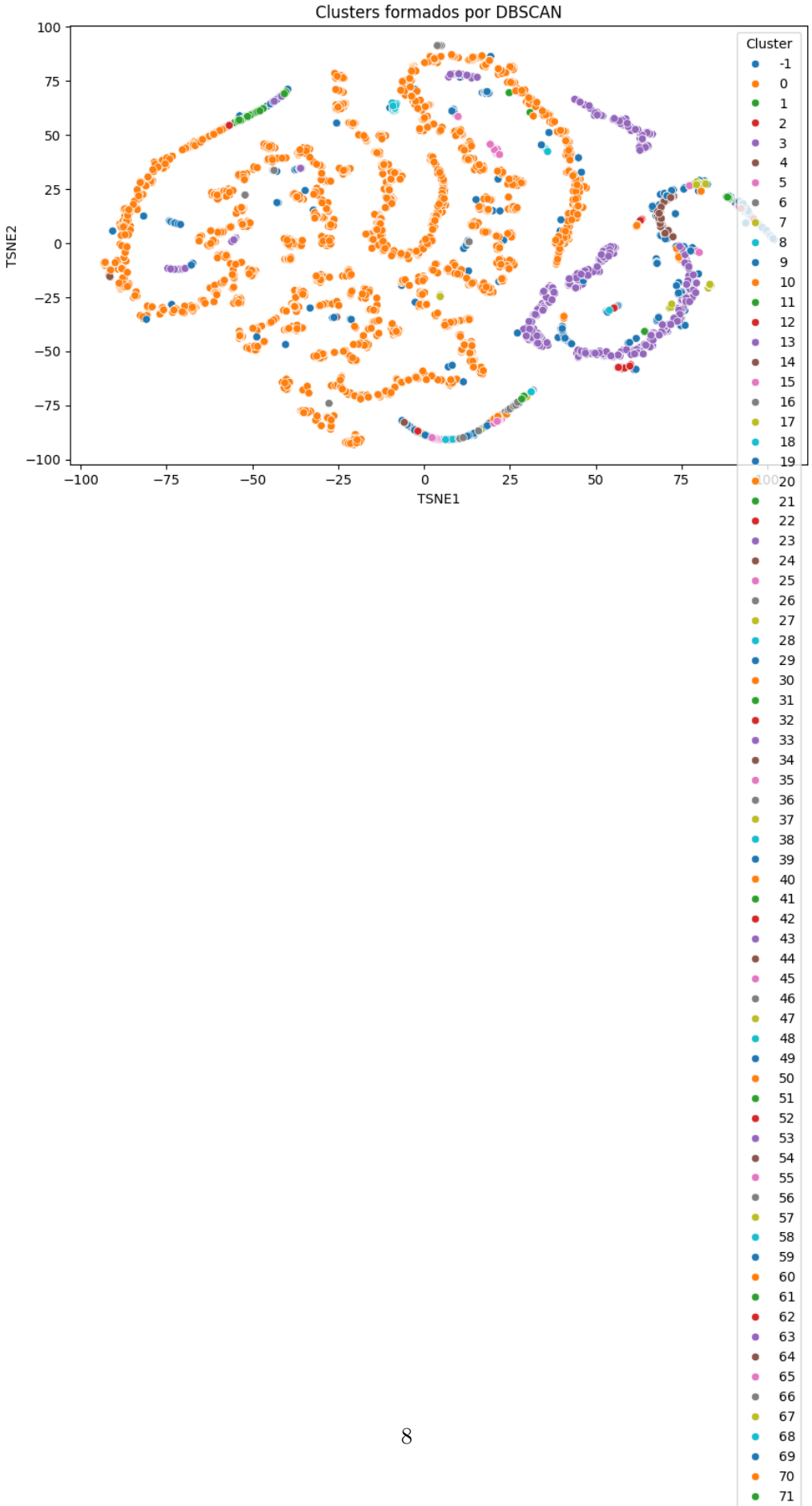
Se emplea el DBSCAN para crear clusters sobre las features, posteriormente se asigna el cluster al df original y al df con dimensionalidades reducidas. Se gráfica la distribución de clusters (colores) respecto al scatterplot de los componentes tsne1 y tsne2. La primera gráfica que se ve es una medida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

[61]:
```
from sklearn.neighbors import NearestNeighbors
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

neighbors = NearestNeighbors(n_neighbors=5)
neighbors_fit = neighbors.fit(features)
distances, indices = neighbors_fit.kneighbors(features)

distances = np.sort(distances[:, 4], axis=0)
plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.plot(distances)
plt.title('Gráfica de k-distancias')
plt.xlabel('Puntos de datos')
plt.ylabel('Distancia al 5to vecino más cercano')

yticks = np.linspace(0, max(distances), num=30)  # 20 marcas en el eje y
plt.yticks(yticks)
plt.axhline(y=2, color='r', linestyle='--', linewidth=1)

plt.show()
```



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.

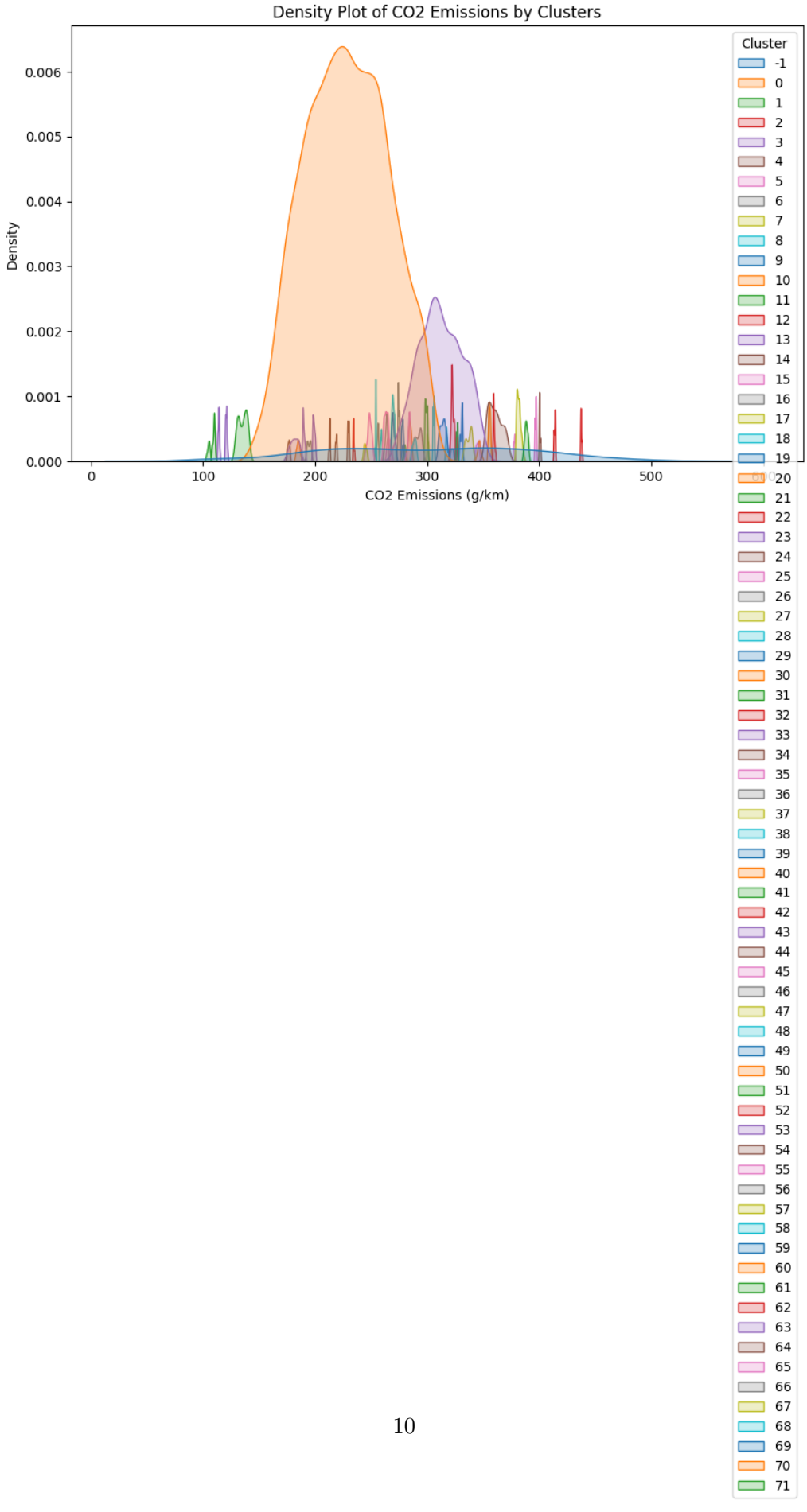
[62]:
```
from sklearn.cluster import DBSCAN

# Ajustar el modelo DBSCAN
dbscan = DBSCAN(eps=2, min_samples=5)
clusters = dbscan.fit_predict(features)

# Añadir los clusters al DataFrame original
df['Cluster'] = clusters

# Añadir los clusters al DataFrame de t-SNE
tsne_df['Cluster'] = clusters

# Visualizar los clusters en t-SNE
plt.figure(figsize=(10, 6))
sns.scatterplot(x='TSNE1', y='TSNE2', hue='Cluster', palette='tab10',␣
↪data=tsne_df)
plt.title('Clusters formados por DBSCAN')
plt.show()
```


Clusters formados por DBSCAN
TSNE1
TSNE2
Cluster
-1
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60
61
62
63
64
65
66
67
68
69
70
71

Density distribution CO2 emissions by cluster

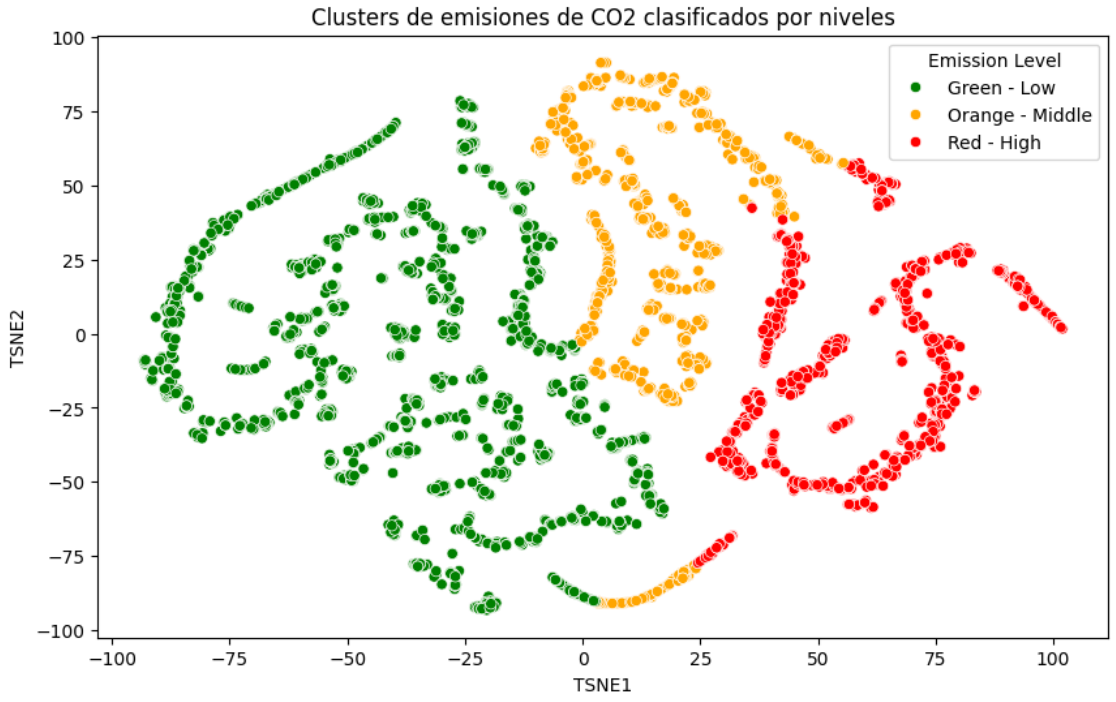
[63]:
```
plt.figure(figsize=(10, 6))
sns.kdeplot(data=df, x='CO2 Emissions(g/km)', hue='Cluster', palette='tab10',␣
 ↪fill=True)
plt.title('Density Plot of CO2 Emissions by Clusters')
plt.xlabel('CO2 Emissions (g/km)')
plt.ylabel('Density')
plt.show()
```

```
C:\Users\emanuel.novelo\AppData\Local\Temp\ipykernel_161472\2493083992.py:2:
UserWarning: Dataset has 0 variance; skipping density estimate. Pass
`warn_singular=False` to disable this warning.
  sns.kdeplot(data=df, x='CO2 Emissions(g/km)', hue='Cluster', palette='tab10',
fill=True)
```


Density Plot of CO2 Emissions by Clusters
Density
CO2 Emissions (g/km)
0.000
0.001
0.002
0.003
0.004
0.005
0.006
0
100
200
300
400
500
Cluster
-1
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60
61
62
63
64
65
66
67
68
69
70
71

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.

[64]:
```
import numpy as np

# Clasificar las emisiones de CO2 en tres grupos usando cuantiles
quantiles = np.percentile(df['CO2 Emissions(g/km)'], [50, 75, 90])

df['Emission Level'] = pd.cut(df['CO2 Emissions(g/km)'],
                              bins=[-np.inf, quantiles[0], quantiles[1], np.
 ↪inf],
                              labels=['Green - Low', 'Orange - Middle', 'Red -␣
 ↪High'])

tsne_df['Emission Level'] = df['Emission Level']

# Visualizar los clusters en t-SNE
plt.figure(figsize=(10, 6))
sns.scatterplot(x='TSNE1', y='TSNE2', hue='Emission Level', palette=['green',␣
 ↪'orange', 'red'], data=tsne_df)
plt.title('Clusters de emisiones de CO2 clasificados por niveles')
plt.show()
```



[65]:
```
# Calcular la correlación entre las variables originales y las componentes t-SNE
correlations = pd.concat([features, tsne_df[['TSNE1', 'TSNE2']]], axis=1).corr()

# Mostrar las correlaciones de TSNE1 y TSNE2 con las variables originales
tsne_correlations = correlations.loc[['TSNE1', 'TSNE2'], features.columns]
tsne_correlations
```

[65]:

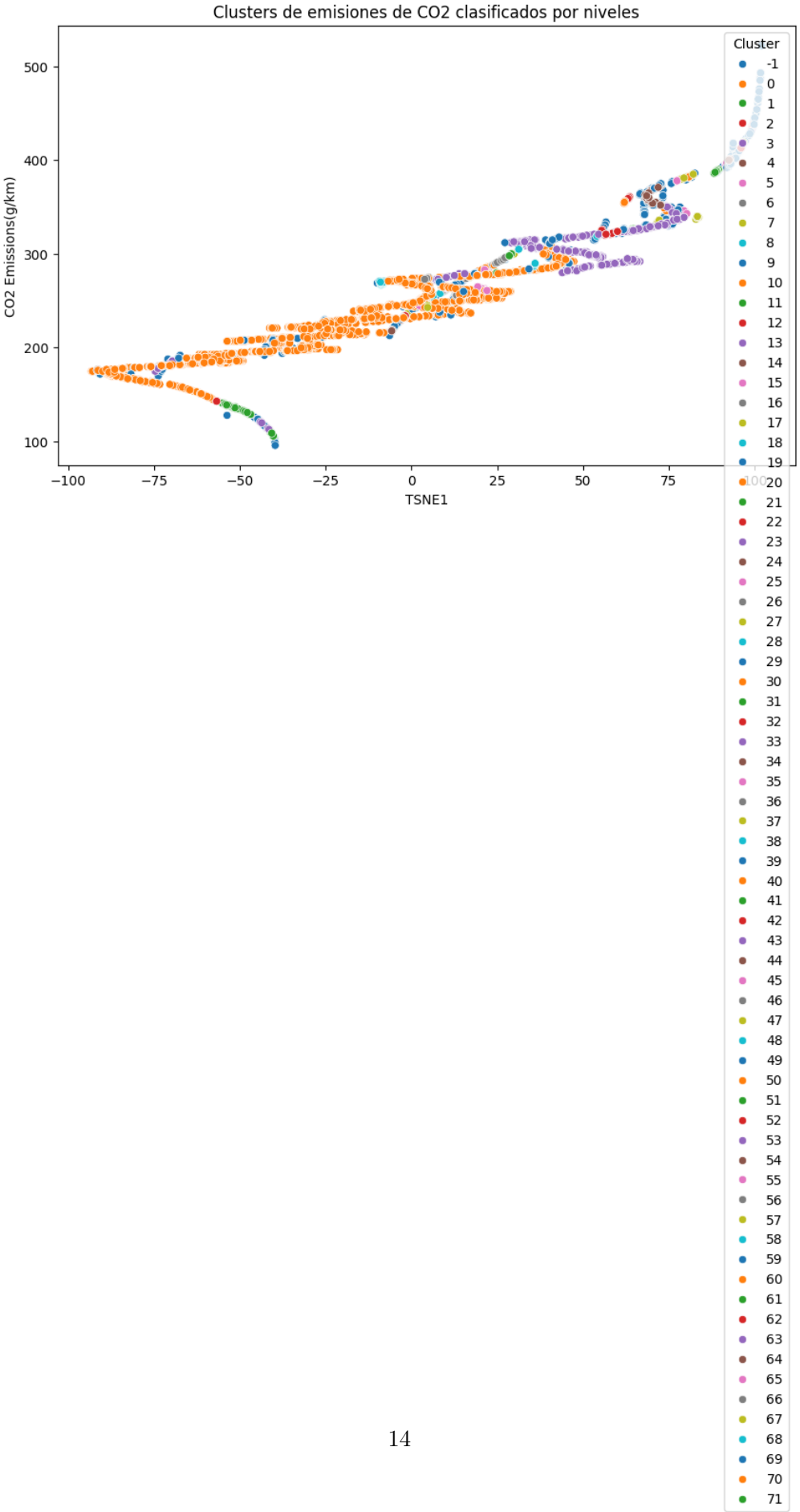
	Engine Size(L)	Cylinders	Fuel Consumption City (L/100 km)	\
TSNE1	0.834789	0.81222	0.861233	
TSNE2	-0.076133	-0.05065	-0.155395	

	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.

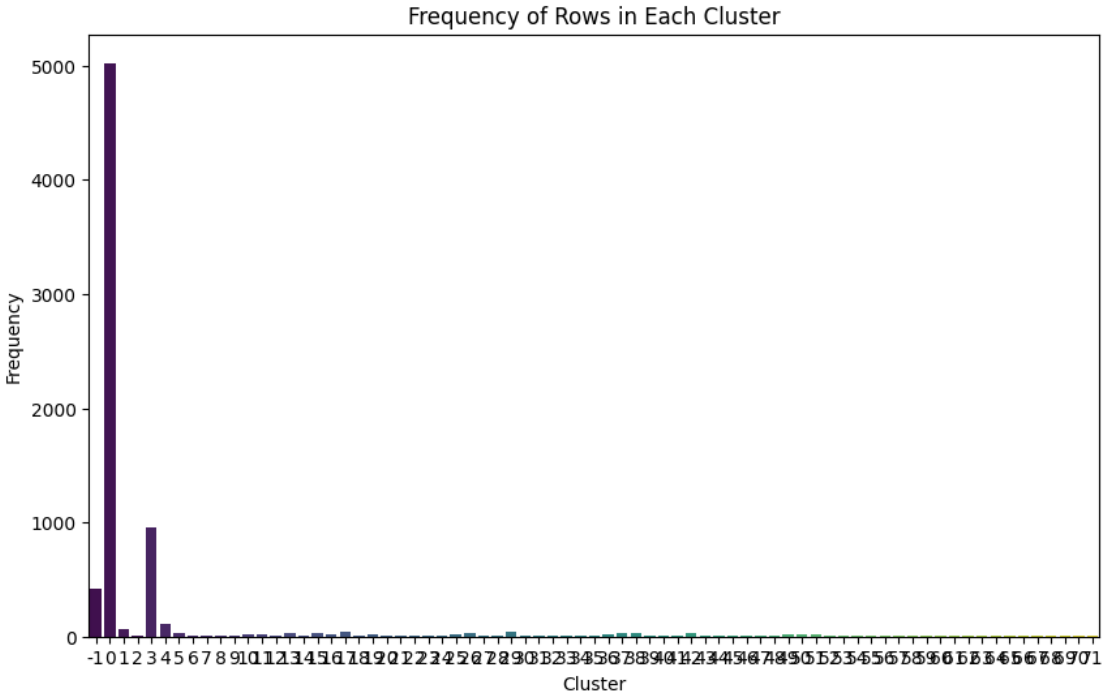
[66]:
```
# Visualizar los clusters en t-SNE
plt.figure(figsize=(10, 6))
sns.scatterplot(x='TSNE1', y='CO2 Emissions(g/km)', hue='Cluster',␣
 ↪palette='tab10', data=tsne_df)
plt.title('Clusters de emisiones de CO2 clasificados por niveles')
plt.show()
```


Clusters de emisiones de CO2 clasificados por niveles
CO2 Emissions(g/km)
TSNE1
Cluster

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).

[67]:
```
cluster_counts = df['Cluster'].value_counts().sort_index()

# Plot the frequency of rows in each cluster
plt.figure(figsize=(10, 6))
sns.barplot(x=cluster_counts.index, y=cluster_counts.values, palette='viridis')
plt.title('Frequency of Rows in Each Cluster')
plt.xlabel('Cluster')
plt.ylabel('Frequency')
plt.show()
```

```
C:\Users\emanuel.novelo\AppData\Local\Temp\ipykernel_161472\3883861907.py:5:
FutureWarning:

Passing `palette` without assigning `hue` is deprecated and will be removed in
v0.14.0. Assign the `x` variable to `hue` and set `legend=False` for the same
effect.

  sns.barplot(x=cluster_counts.index, y=cluster_counts.values,
palette='viridis')
```



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.

[68]:
```
summary = df.groupby('Cluster').agg({
    'CO2 Emissions(g/km)': ['mean', 'std'],
    'Make': lambda x: x.value_counts().idxmax(),
    'Model': lambda x: x.value_counts().idxmax(),
    'Vehicle Class': lambda x: x.value_counts().idxmax(),
    'Engine Size(L)': ['mean', 'std'],
    'Cylinders': ['mean', 'std'],
    'Transmission': lambda x: x.value_counts().idxmax(),
    'Fuel Type': lambda x: x.value_counts().idxmax(),
    'Fuel Consumption City (L/100 km)': ['mean', 'std'],
    'Fuel Consumption Hwy (L/100 km)': ['mean', 'std'],
    'Fuel Consumption Comb (L/100 km)': ['mean', 'std'],
    'Fuel Consumption Comb (mpg)': ['mean', 'std']
}).reset_index()

summary.columns = ['Cluster',
                   'CO2 Emissions Mean', 'CO2 Emissions Std',
                   'Most Common Make', 'Most Common Model', 'Most Common Vehicle␣
 ↪Class',
                   'Engine Size Mean', 'Engine Size Std',
                   'Cylinders Mean', 'Cylinders Std',
                   'Most Common Transmission', 'Most Common Fuel Type',
                   'Fuel Consumption City Mean', 'Fuel Consumption City Std',
                   'Fuel Consumption Hwy Mean', 'Fuel Consumption Hwy Std',
                   'Fuel Consumption Comb Mean', 'Fuel Consumption Comb Std',
                   'Fuel Consumption Comb MPG Mean', 'Fuel Consumption Comb MPG␣
 ↪Std']

summary
```

[68]:

	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]
```

2.3 Bibliografía de la sección

- 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%

3 Supervised Learning - Gaussian Process Regression for CO2 predictions

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.

[ ]:
```
# lectura de datos
import pandas as pd
df = pd.read_csv('C:/Users/emanuel.novelo/Desktop/MCD - 2024-2026/ML - 2do Tetra/
 ↪MCD----ML----2024/data/CO2 Emissions_Canada.csv')
# filtrando columnas numéricas
```

[1]:
```
features = df[['Engine Size(L)', 'Cylinders', 'Fuel Consumption City (L/100 km)',
                'Fuel Consumption Hwy (L/100 km)', 'Fuel Consumption Comb (L/
 ↪100 km)',
                'Fuel Consumption Comb (mpg)']]
```

[2]:
```
X = features
y = df[['CO2 Emissions(g/km)']]
```

[5]:
```
from sklearn.model_selection import train_test_split
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.2)
```

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:

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

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

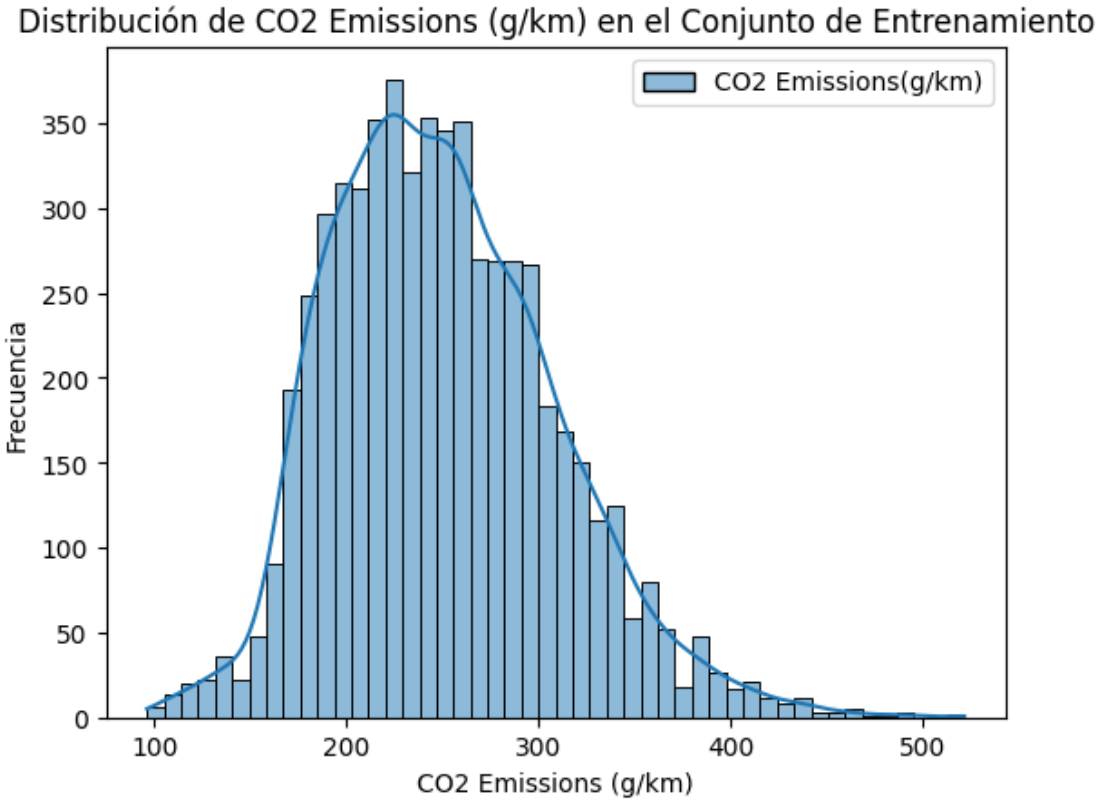
Donde:

- 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

[13]:
```
import seaborn as sns
import matplotlib.pyplot as plt

sns.histplot(y_train, kde=True)
plt.title('Distribución de CO2 Emissions (g/km) en el Conjunto de Entrenamiento')
plt.xlabel('CO2 Emissions (g/km)')
plt.ylabel('Frecuencia')
plt.show()
```



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

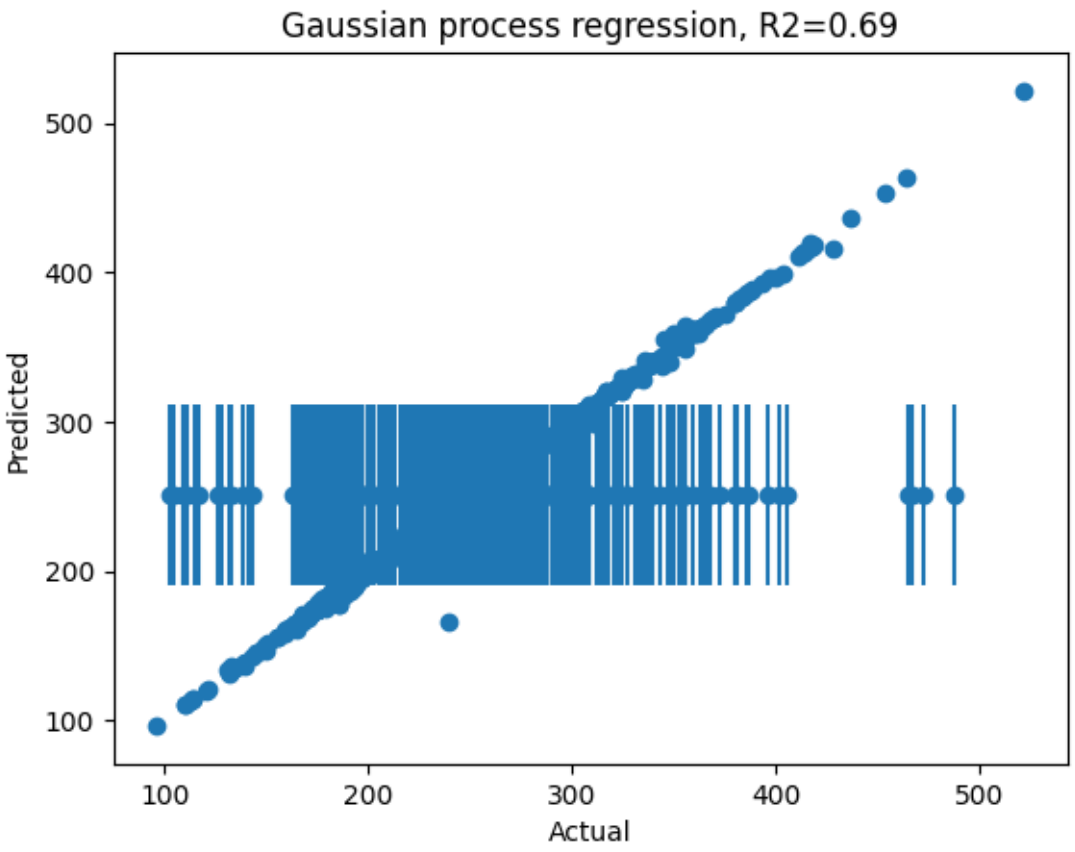
Se entrena un modelo de un Proceso de Regresión Gaussiano, el cuál ha sido probado previamente en la literatura como un buen predictor de emisiones de CO2.

[6]:
```
from sklearn.metrics import r2_score
from sklearn.gaussian_process import GaussianProcessRegressor
from sklearn.gaussian_process.kernels import RBF, ConstantKernel, WhiteKernel

kernel = ConstantKernel(1.0) + ConstantKernel(1.0) * RBF(10)  + WhiteKernel(5)
model = GaussianProcessRegressor(kernel=kernel)
model.fit(X_train, y_train)
y_pred_tr, y_pred_tr_std = model.predict(X_train, return_std=True)
y_pred_te, y_pred_te_std = model.predict(X_test, return_std=True)
```

```
C:\Users\emanuel.novelo\AppData\Local\Packages\PythonSoftwareFoundation.Python.3
.11_qbz5n2kfra8p0\LocalCache\local-packages\Python311\site-
packages\sklearn\gaussian_process\kernels.py:419: ConvergenceWarning: The
optimal value found for dimension 0 of parameter k1__k2__k2__length_scale is
close to the specified lower bound 1e-05. Decreasing the bound and calling fit
again may find a better value.
  warnings.warn(
```

[7]:
```
import matplotlib.pyplot as plt
plt.figure()
plt.errorbar(y_test, y_pred_te, yerr=y_pred_te_std, fmt='o')
plt.title('Gaussian process regression, R2=%.2f' % r2_score(y_test, y_pred_te))
plt.xlabel('Actual')
plt.ylabel('Predicted')
```

[7]:
```
Text(0, 0.5, 'Predicted')
```



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.

[10]:
```
from sklearn.metrics import r2_score, mean_absolute_error, mean_squared_error
import numpy as np
y_test_np = y_test.to_numpy().flatten()
y_pred_te_np = y_pred_te.flatten()

# Calcular las métricas
mae = mean_absolute_error(y_test_np, y_pred_te_np)
mse = mean_squared_error(y_test_np, y_pred_te_np)
rmse = np.sqrt(mse)
mape = np.mean(np.abs((y_test_np - y_pred_te_np) / y_test_np)) * 100

# Crear DataFrame con las métricas
metrics_df = pd.DataFrame({
    'Metric': ['MAE', 'MSE', 'RMSE', 'MAPE'],
    'Value': [mae, mse, rmse, mape]
```

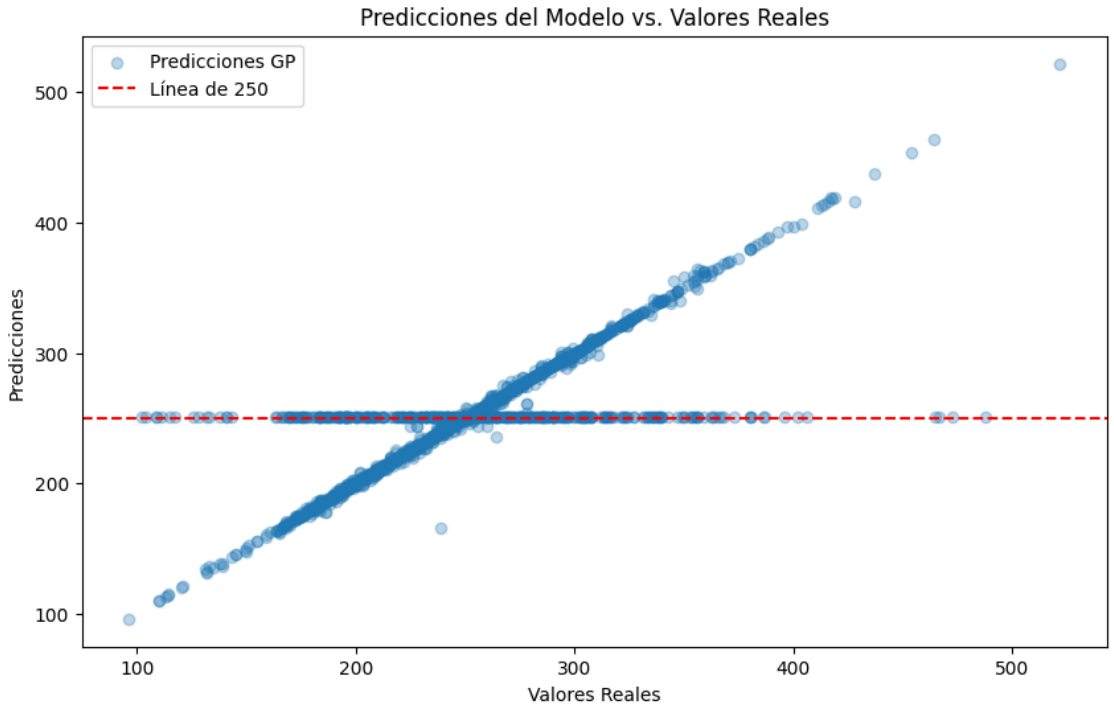
```
})
metrics_df
```

[10]:

	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.

[14]:
```
plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.scatter(y_test, y_pred_te, alpha=0.3, label='Predicciones GP')
plt.axhline(y=250, color='r', linestyle='--', label='Línea de 250')
plt.xlabel('Valores Reales')
plt.ylabel('Predicciones')
plt.title('Predicciones del Modelo vs. Valores Reales')
plt.legend()
plt.show()
```



[15]:
```
correlations = features.corrwith(df['CO2 Emissions(g/km)'])
print(correlations)
```

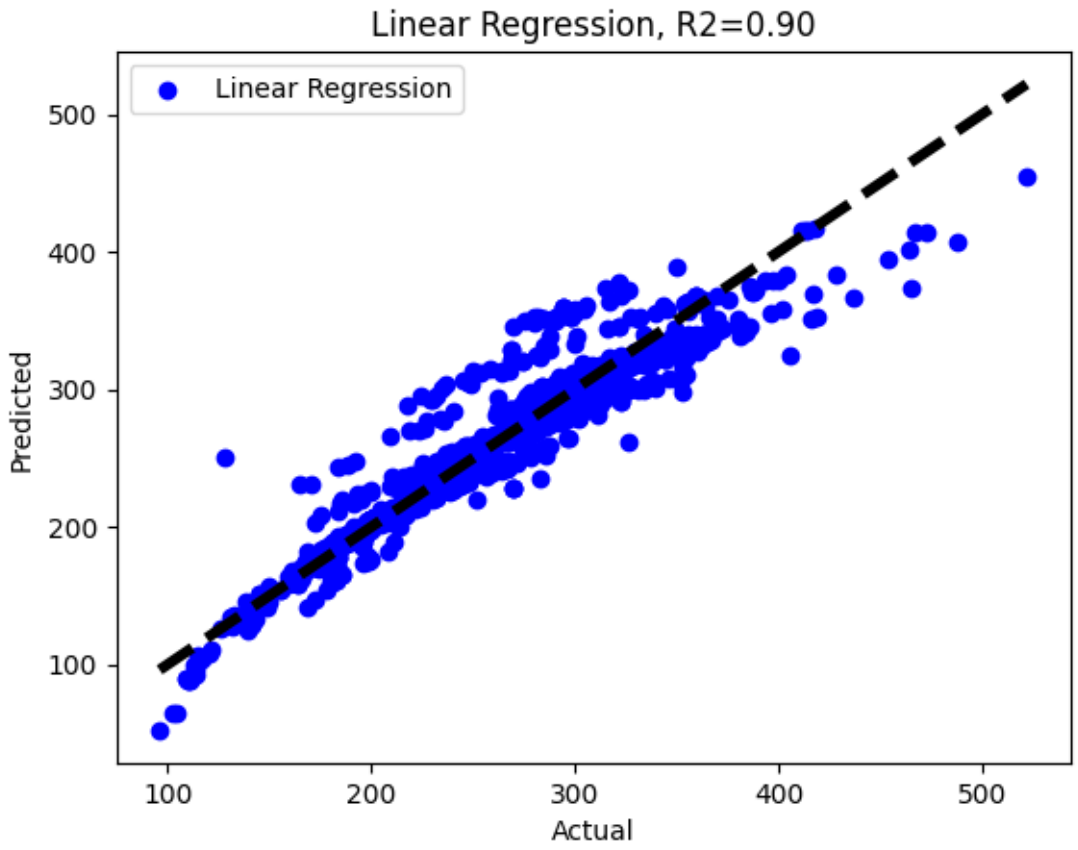
```
Engine Size(L)                      0.851145
Cylinders                           0.832644
Fuel Consumption City (L/100 km)    0.919592
Fuel Consumption Hwy (L/100 km)     0.883536
Fuel Consumption Comb (L/100 km)    0.918052
Fuel Consumption Comb (mpg)        -0.907426
dtype: float64
```

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

[11]:
```python
from sklearn.linear_model import LinearRegression

linear_model = LinearRegression()
linear_model.fit(X_train, y_train)

# predecir
y_pred_linear = linear_model.predict(X_test)

# calcular métricas para regresión lineal
mae_linear = mean_absolute_error(y_test, y_pred_linear)
mse_linear = mean_squared_error(y_test, y_pred_linear)
rmse_linear = np.sqrt(mse_linear)
mape_linear = np.mean(np.abs((y_test.to_numpy().flatten() - y_pred_linear.
 ↪flatten()) / y_test.to_numpy().flatten())) * 100
r2_linear = r2_score(y_test, y_pred_linear)

# crear DataFrame con las métricas para regresión lineal
metrics_linear_df = pd.DataFrame({
    'Metric': ['MAE', 'MSE', 'RMSE', 'MAPE', 'R2'],
    'Linear Regression': [mae_linear, mse_linear, rmse_linear, mape_linear,␣
 ↪r2_linear]
})

# crear DataFrame con las métricas para regresión gaussiana
metrics_gp_df = pd.DataFrame({
    'Metric': ['MAE', 'MSE', 'RMSE', 'MAPE', 'R2'],
    'Gaussian Process': [mae, mse, rmse, mape, r2_score(y_test_np, y_pred_te_np)]
})

# combinar los DataFrames para comparación
comparison_df = pd.merge(metrics_linear_df, metrics_gp_df, on='Metric')
print(comparison_df)

# visualizar las predicciones de la regresión lineal múltiple
plt.figure()
plt.scatter(y_test, y_pred_linear, color='blue', label='Linear Regression')
plt.plot([y_test.min(), y_test.max()], [y_test.min(), y_test.max()], 'k--', lw=4)
```

```
plt.xlabel('Actual')
plt.ylabel('Predicted')
plt.title('Linear Regression, R2=%.2f' % r2_linear)
plt.legend()
plt.show()
```

	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.

[20]:
```
from sklearn.gaussian_process import GaussianProcessRegressor
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
from sklearn.gaussian_process.kernels import RBF, DotProduct
import numpy as np

X_tr = np.array(X_train)
y_tr = np.array(y_train)

param_grid = [{
    "alpha":  [1e-2, 1e-3],
    "kernel": [RBF(l) for l in np.logspace(-1, 1, 2)]
}, {
    "alpha":  [1e-2, 1e-3],
    "kernel": [DotProduct(sigma_0) for sigma_0 in np.logspace(-1, 1, 2)]
}]

# scores for regression
scores = ['explained_variance', 'r2']

gp = GaussianProcessRegressor()
for score in scores:
    print("# Tuning hyper-parameters for %s" % score)
    print()

    clf = GridSearchCV(estimator=gp, param_grid=param_grid, cv=4, scoring='%s' %␣
 ↪score)
    # Reshape X_tr only if it's 1-dimensional
    if X_tr.ndim == 1:
        X_tr = X_tr.reshape(-1, 1)
    clf.fit(X_tr, y_tr)
    print(clf.best_params_)
```

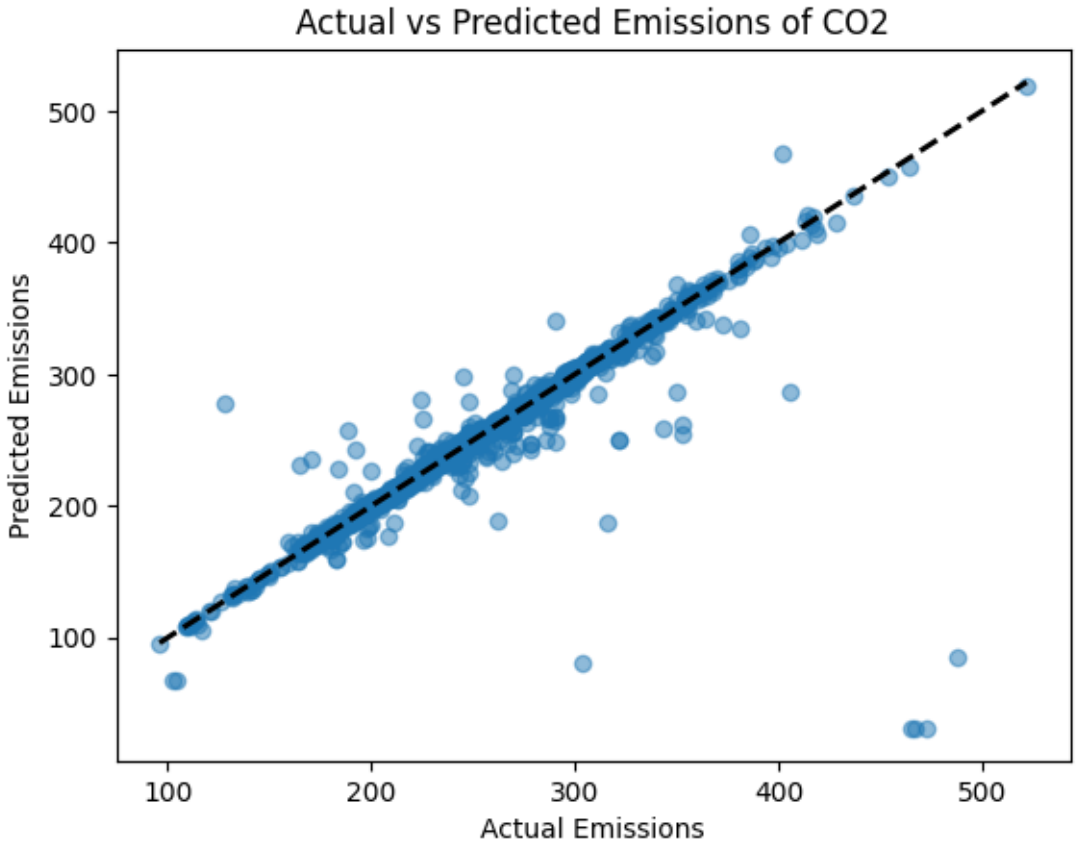
```
# Tuning hyper-parameters for explained_variance


{'alpha': 0.01, 'kernel': RBF(length_scale=10)}
# Tuning hyper-parameters for r2


{'alpha': 0.01, 'kernel': RBF(length_scale=10)}
```

[22]:
```
# Predict on the test data
X_te = np.array(X_test)
```

```
y_te = np.array(y_test)

y_pred = clf.predict(X_te)
```

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.

[23]:
```
# Plotting
plt.scatter(y_te, y_pred, alpha=0.5)
plt.xlabel("Actual Emissions")
plt.ylabel("Predicted Emissions")
plt.title("Actual vs Predicted Emissions of CO2")
plt.plot([y_te.min(), y_te.max()], [y_te.min(), y_te.max()], 'k--', lw=2)
plt.show()
```



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.

[24]:
```
# Calculate metrics
mae = mean_absolute_error(y_te, y_pred)
```

```python
mse = mean_squared_error(y_te, y_pred)
rmse = np.sqrt(mse)
mape = np.mean(np.abs((y_te - y_pred) / y_te)) * 100
r2 = r2_score(y_te, y_pred)

# Print metrics
print(f"MAE: {mae}")
print(f"MSE: {mse}")
print(f"RMSE: {rmse}")
print(f"MAPE: {mape}%")
print(f"R2: {r2}")
```

```
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).

3.4 Bibliografía de la sección

- https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fenrg.2021.756311/full
- https://towardsdatascience.com/getting-started-with-gaussian-process-regression-modeling-47e7982b534d