

UNIVERSIDAD DE GRANADA

Introducción a la Ciencia de Datos máster ciencia de datos e ingeniería de computadores

Trabajo teórico/práctico

Análisis de datos, Regresión y Clasificación

Autor

Ignacio Vellido Expósito ignaciove@correo.ugr.es





ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍAS INFORMÁTICA Y DE ${\bf Telecomunicación}$

Curso 2020-2021

$\mathbf{\acute{I}ndice}$

1.			ón: Análisis Estadístico de Datos	2
	1.1.	Introd	ucción	2
	1.2.	Anális	is Estadístico de Datos	3
		1.2.1.	Análisis univariable	3
		1.2.2.	Missing values	Ć
		1.2.3.	Análisis sobre las distribuciones	10
		1.2.4.	Transformaciones	13
		1.2.5.	Anomalías	14
		1.2.6.	Análisis de correlación	14
		1.2.7.	Tratamiento de variables y ordenaciones	18
		1.2.8.	Resolución de hipótesis	18
	1.3.	Conclu	siones	21
2.	Téc	nicas d	le Clasificación	22
Re	efere	ncias		23

1. Clasificación: Análisis Estadístico de Datos

1.1. Introducción

Para el problema de clasificación hacemos uso del dataset **haberman** [1], que codifica el ratio de supervivencia de pacientes operados de cáncer de pecho en el Hospital Universitario de Chicago, en base a las siguientes características:

- 1. Age: Indica la edad del paciente en el momento de la operación.
- 2. Year: Los dos últimas cifras del año en el que se operó el paciente.
- 3. **Positive**: Número de nodos auxiliares positivos detectados. Esta variable hace referencia a los ganglios linfáticos que dan positivos como presentes de cáncer. A mayor número de nodos detectados, mayor es la gravedad del cáncer.

Aunque normalmente la primera zona de propagación del cáncer son estos nodos, no es la única medida de la seriedad, pues este puede propagarse a otras zonas del cuerpo. En principio no deberíamos descartar la posibilidad de que puede haber casos de no supervivencia con bajo número de positivos.

Viendo que solo tenemos esta medida del cáncer en el dataset es posible que la operación que recibieron los pacientes sea algún tipo de cirugía de ganglios linfáticos, donde el cirujano intenta extraer los nodos afectados por el tumor. Por consiguiente, cuanto mayor es la cantidad de nodos detectados, más complicaciones pueden acarrearse de la operación [2, 3].

El objetivo es poder clasificar, en base a los tres atributos, si los pacientes pueden sobrevivir 5 años o más:

4. Survival: Sí/No indicando la supervivencia del paciente tras 5 años.

Contamos por tanto con un problema de clasificación binario en base a tres características, y con un número total de 306 instancias.

La descripción del problema nos da alguna información adicional sobre las variables:

- 1. Age: Variable numérica discreta, contamos con valores enteros en el rango [30,83].
- 2. Year: Variable numérica discreta, contamos con valores enteros en el rango [58,69].
- 3. Positive: Variable numérica discreta, contamos con valores enteros en el rango [0,52].
- 4. Survival: Variable binaria.

Hipótesis de partida

- H.1: Habrá menor ratio de supervivencia cuanto mayor sea el número de nodos positivos encontrados.
- H.2: Habrá mayor ratio de supervivencia cuanto más joven sea el paciente.
- H.3: El rango de Year es pequeño. La influencia de esta variable creemos que podría darse solo si durante ese período se hubieran descubierto técnicas mejores de cirugía. Este razonamiento va orientado de cara a la población y no a la muestra. Puesto que contamos con datos de un solo hospital durante pocos años, es posible que el equipo de cirugía hubiera sido el mismo para la mayoría de pacientes.

- **H.4**: Podría haber relación entre la edad y el número de positivos, posiblemente indicando lo tardío que se descubre el cáncer.
- H.5: La bibliografía nos dice que el cáncer puede aparecer a diferentes edades con diferentes factores de riesgo (alcoholismo, herencia genética...). Podría ser que el número de variables con las que contamos sea insuficiente para la clasificación. (Hipótesis no demostrable en el EDA).

1.2. Análisis Estadístico de Datos

R por defecto nos carga las variables Age, Year y Positive como numéricas y Survival como carácter. Transformamos Survival a factor categórico, el resto de variables las mantenemos en su formato.

1.2.1. Análisis univariable

La cabecera de los datos nos quedan por tanto de la siguiente manera:

Age	Year	Positive	Survival
38	59	2	No
39	63	4	No
49	62	1	No
53	60	2	No
47	68	4	No
56	67	0	No

Con las siguientes medidas estadísticas principales:

Age	Year	Positive	Survival
Min. :30.00	Min. :58.00	Min. : 0.000	No :225
1st Qu.:44.00	1st Qu.:60.00	1st Qu.: 0.000	Yes: 81
Median :52.00	Median :63.00	Median : 1.000	
Mean :52.46	Mean :62.85	Mean : 4.026	
3rd Qu.:60.75	3rd Qu.:65.75	3rd Qu.: 4.000	
Max. :83.00	Max. :69.00	Max. :52.000	

En las distribuciones de los clasificadores nos fijaremos más adelante. Aquí hacemos notar que los valores de salida en nuestros datos están bastante desbalanceados, solo un $26.5\,\%$ de los paciente sobrevivieron a los 5 años.

Age Year Positive Survival Age Year Positive Survival No Yes No Yes No No No No No Yes No No Yes No No No No No No No No No

El dataset cuenta con valores 17 repetidos, concretamente las siguientes ocurrencias:

Existen dos posibilidades para el origen de estos datos:

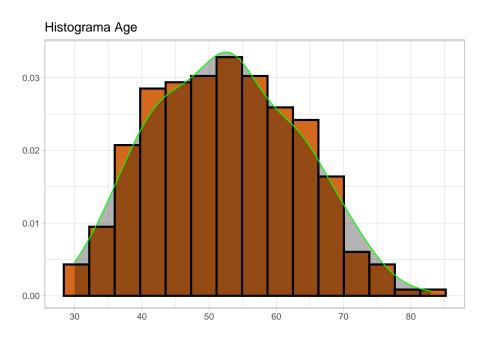
- 1. Errores en la introducción de los datos. Entradas repetidas por error.
- 2. Son entradas de pacientes distintos casualmente con las mismas características.

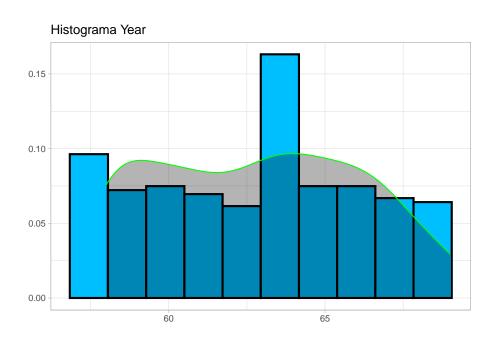
Apreciamos que en la mayoría de instancias el número de Positive es cero. En el apartado 3.3 se explica como este es un valor bastante frecuente en los datos pero que posiblemente se deba a que es una medida de los nodos **auxiliares** y no un error de codificación.

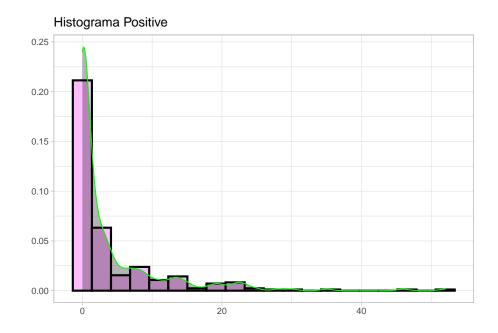
Como en este caso tenemos muy pocas variables (y un número moderado de entradas, 306), es probable que los pacientes coincidan en las características. Además, podemos ver que las entradas en la mayoría de los casos solo están duplicadas (solo hay una entrada triplicada).

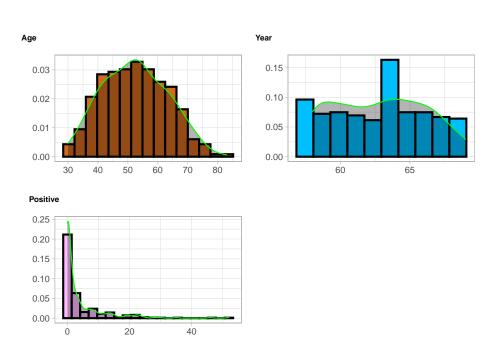
Por tanto proseguimos sin eliminar estas instancias duplicadas.

Mostramos scatterplots univariables:

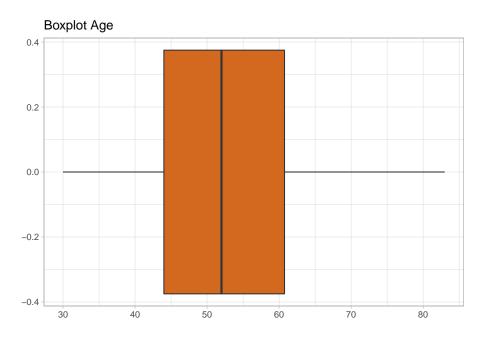


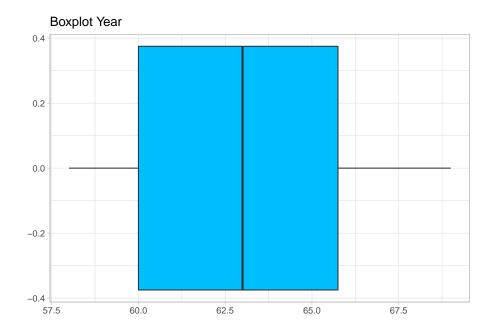


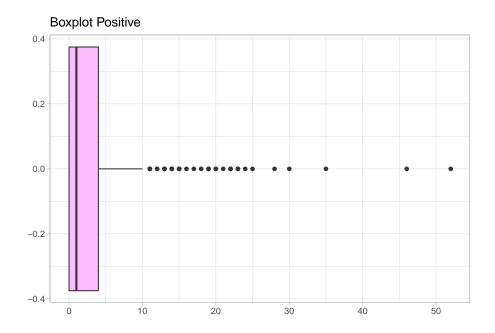


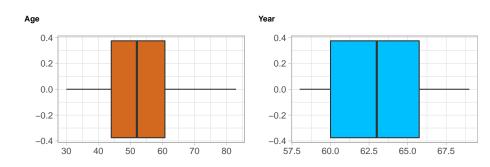


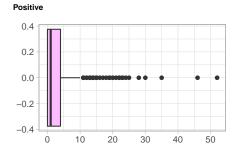
Y boxplots sobre las distribuciones de los datos:

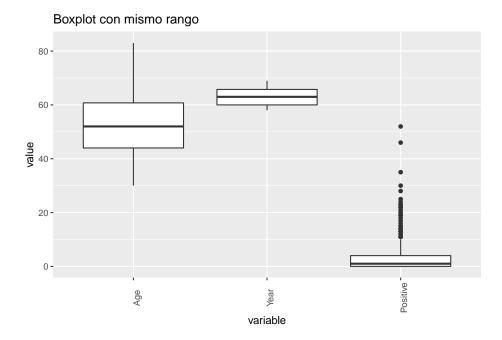












Podemos comparar los rangos intercuartiles si estandarizamos antes el dataset

Age Year Positive 1.550430 1.769555 0.556355

También podemos ver la distancia entre mínimos y máximos

Age Year Positive 4.905839 3.385235 7.232616

Ya la descripción del problema nos lo decía, los rangos en los que se distribuyen los datos son muy diferentes entre sí. Es necesario aplicar un proceso de estandarización antes de clasificar.

1.2.2. Missing values

Nos cuestionamos la ocurrencia de instancias con cero en el número de positivos. Podríamos pensar que se trata de una codificación de missing values si nos aseguramos que la operación consistía en eliminar estos nodos positivos.

Si revisamos la información que tenemos, estos nodos positivos se denominan auxiliares, y una mayor investigación del problema por internet nos asegura de que estos valores de cero no se corresponden a missing values.

Pese a ello, lo apropiado habría sido ponerse en contacto con los creadores del dataset y preguntar por la forma de codificar los datos que habían usado.

Si hubiéramos descubierto que sí lo son, y tras ver que una gran parte de las instancias contienen este valor, habríamos tenido que buscar algún tipo de imputación para rellenar estos valores. Puesto que tendríamos un número pequeño de valores reales, probablemente habríamos optado por KNN o interpolación lineal.

Age Para esta variable no contamos con valores de todos los años, y hemos visto que en general no están equitativamente distribuidos:

Años: 30 31 33 34 35 36 37 38 39 40 41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 Conteo: 3 2 2 7 2 2 6 10 6 3 10 9 11 7 9 7 11 7 10 12 6 14 Años: 53 54 55 56 57 58 59 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71 72 73 74 Conteo: 11 13 10 7 11 7 8 6 9 7 8 5 10 5 6 2 4 7 1 4 2 2 Años: 75 76 77 78 83

Años: 75 76 77 78 83 Conteo: 1 1 1 1 1

Year Aquí si contamos con valores en todos los años, aunque con más instancias en los iniciales:

Años: 58 59 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 Conteo: 36 27 28 26 23 30 31 28 28 25 13 11

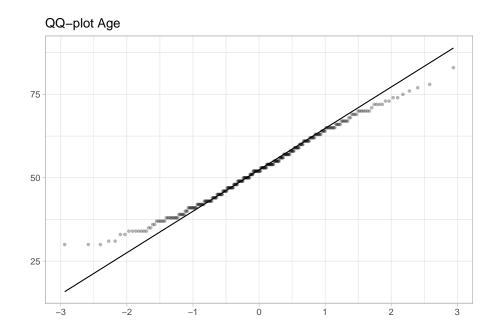
Positive Esta variable parece llevar una distribución exponencial y probablemente por ello aparezcan tantas posibles anomalías.

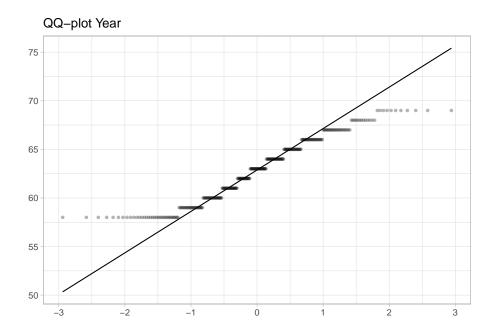
1.2.3. Análisis sobre las distribuciones

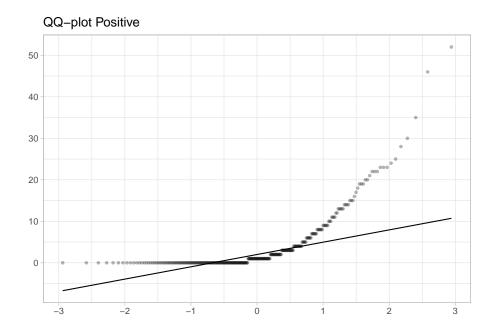
Ninguna variable parece seguir una distribución semejante a una distribución normal. Lo aseguramos con un test estadístico (Shapiro-Wilk test):

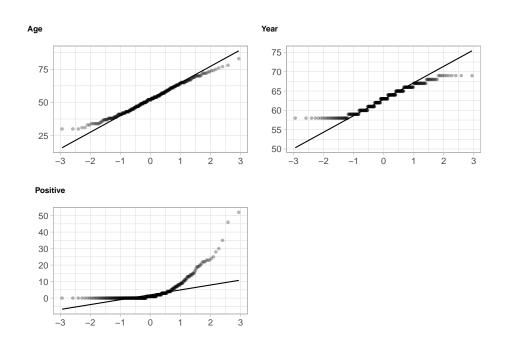
vars	statistic	p_value	sample
Age	0.9894580	0.0260466	306
Year	0.9467912	0.0000000	306
Positive	0.6153079	0.0000000	306

También lo mostramos gráficamente con plots Q-Q, donde se ve que las distribuciones no siguen los cuartiles normales, mayormente en las colas:

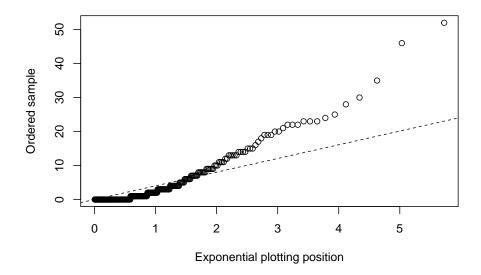








La variable Positive parece seguir una distribución exponencial. Podemos hacer un plot de los supuestos cuartiles para hacernos una idea de cómo se asemeja:



Ya el gráfico nos muestra que no se va a asemejar, pero podríamos verificarlo con más precisión haciendo uso de un test de Kolmogorov-Smirnov.

Skewness Claramente la única variable con skewness es Positive, con un grado positivo bastante alto:

Positive: 2.969176 Year: 0.07836828 Age: 0.1457859

1.2.4. Transformaciones

El paquete *caret* nos sugiere una estandarización a media cero y desviación típica 1. Para un problema de clasificación esto es totalmente necesario puesto que no queremos que los diferentes rangos de las variables hagan que haya información de más peso que otra.

A excepción de KNN, los métodos de clasificación que vamos a usar necesitan la normalidad en los datos. En un caso real, si quisiéramos aplicar sí o sí esos métodos deberíamos averiguar previamente la distribución exacta que siguen esos datos para transformarla apropiadamente.

Por otro lado, transformaciones de Yeo-Johnson o BoxCox para reducir la skewness en Positive carece de lógica puesto que no sigue una forma normal.

1.2.5. Anomalías

La única variable en la que podríamos considerar anomalías es Positive. Tanto para la edad como para los años no tiene sentido, además de que hemos visto en los boxplots que en ellas todos los valores caen en el $95\,\%$ de la distribución.

A la hora de considerar los outliers en Positive, tal y como habíamos mencionado en la descripción del problema, debemos recordar que un alto número de nodos detectados complica la operación y el pronóstico para el paciente.

Contrariamente a esta idea, podemos ver que para aquellas instancias con un gran número de positivos la cantidad de sobrevivientes en nuestro dataset está equilibrada:

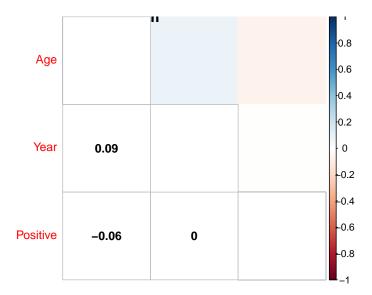
No Yes 17 23

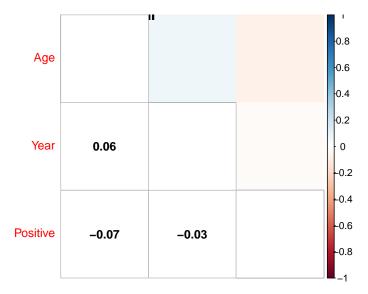
Viendo que la distribución está equilibrada en estos posibles valores anómalos y tampoco tenemos conocimiento suficiente sobre el problema para considerar cuándo un número de positivos es demasiado alto, proseguimos manteniéndolos en nuestro dataset.

1.2.6. Análisis de correlación

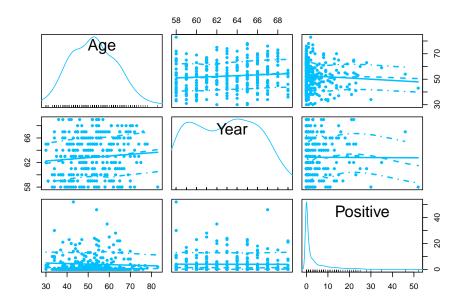
Como este es un problema de clasificación, necesitamos eliminar aquellas variables correladas para que la información se aporte de manera equitativa. Las gráficas no nos han dado ninguna señal de una posible correlación, pero debemos asegurarnos de forma estadística.

Tenemos que tener en cuenta que las variables no siguen distribuciones normales. Aunque el coeficiente de Pearson no asume normalidad (si asume varianza y covarianza finitas), podemos usar el coeficiente de Kendall para los cálculos. Independientemente del método usado vamos a obtener las mismas correlaciones en este dataset, solo varía la fuerza con la que se dan.

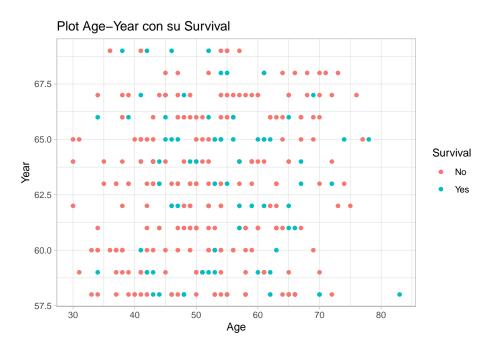


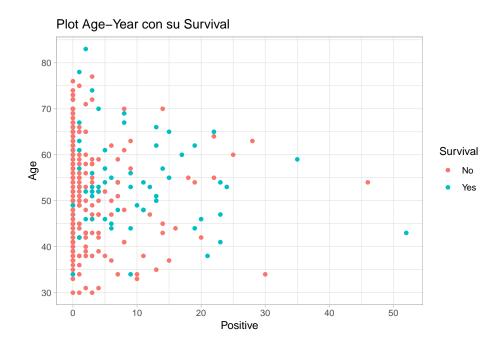


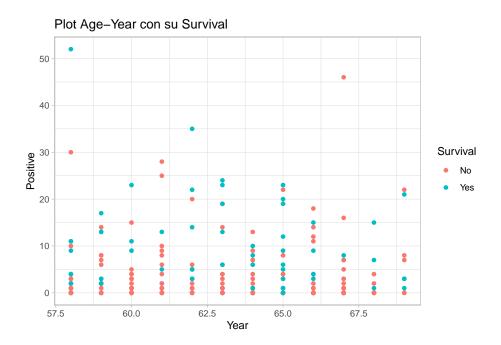
Las matrices de correlación nos muestran que no existe correlación alguna entre las variables, y un con un conjunto de scatterplot lo podemos ver gráficamente:



Adicionalmente, mostramos la distribución de las variables con su clasificación:







No se aprecia ninguna relación visual que nos ayude a clasificar el Survival.

1.2.7. Tratamiento de variables y ordenaciones

Volvemos a mostrar la cabecera de los datos:

Age	Year	Positive
38	59	2
39	63	4
49	62	1
53	60	2
47	68	4
56	67	0

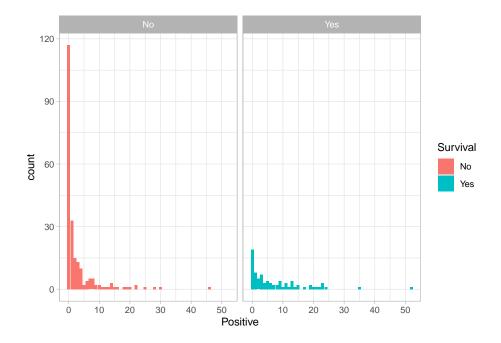
Para este dataset contamos con tres clasificadores con información de distinto tipo y bien organizada, por lo que no necesitamos hacer ningún tipo de ordenación/tratamiento. No existe ninguna relación entre variables sobre la información que codifican (en el sentido de que podrían agruparse).

La variable Year solo indica las dos últimas cifras del año de operación, pero como todas las instancias son del mismo siglo nos resulta más conveniente tenerla así

1.2.8. Resolución de hipótesis

Nos habíamos planteado las siguientes hipótesis

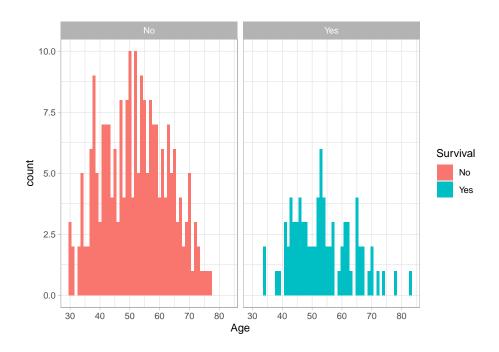
■ H.1: Habrá menor ratio de supervivencia cuanto mayor sea el número de nodos positivos encontrados.



No Yes

Vemos que la hipótesis no es cierta. Creemos que se debe a que el número de nodos no es el clasificador más importante.

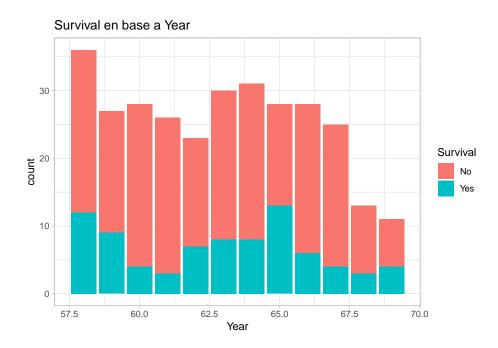
■ H.2: Habrá mayor ratio de supervivencia cuanto más joven sea el paciente.



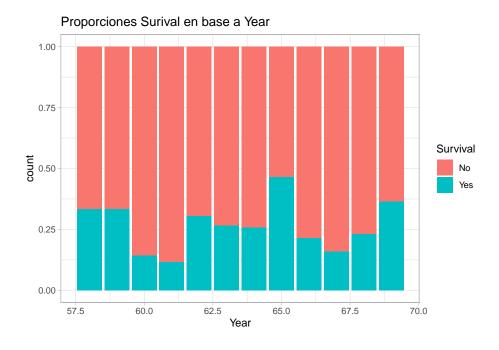
Si miramos los pacientes con edades ${<}40$ nos sale todo lo contrario:

No Yes

■ H.3: El rango de Year es pequeño. La influencia de esta variable creemos que podría darse solo si durante ese período se hubieran descubierto técnicas mejores de cirugía. Este razonamiento va orientado de cara a la población y no a la muestra. Puesto que contamos con datos de un solo hospital durante pocos años, es posible que el equipo de cirugía hubiera sido el mismo para la mayoría de pacientes.

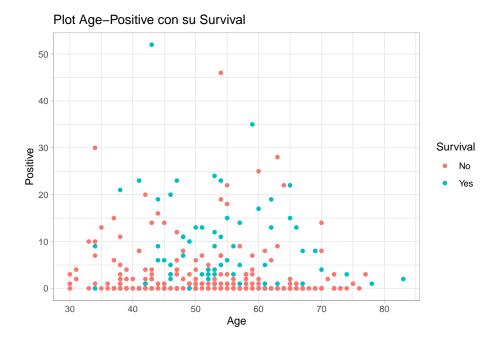


Decrementa el número de datos en años superiores, aunque la proporción es bastante similar con los datos que tenemos, por lo que no podemos confirmar la hipótesis:



■ **H.4**: Podría haber relación entre la edad y el número de positivos, posiblemente indicando lo tardío que se descubre el cáncer.

Un scatterplot no nos muestra visualmente ninguna aparente relación, y el análisis de correlación no nos había indicado nada:



1.3. Conclusiones

Para terminar, concluímos diciendo que tenemos un dataset con pocas variables, pero con ninguna correlación entre ellas, favoreciéndonos el problema de clasificación que nos atañe. También hemos visto ausencia de normalidad en los clasificadores que hará que no cumplamos con las asunciones de LDA.

Además, el dataset se encuentra desbalanceado, contando con más instancias de no supervivientes (en torno al $76\,\%$ de los datos). También se aprecian algunas instancias repetidas, sobre las que en principio creemos que se debe a una casualidad debido al bajo número de variables cuyos rangos de valores son pequeños en cada una, pero carecemos de información adicional que nos corrobore la hipótesis.

Adicionalmente, se hace notar una alta cantidad de instancias con valor de Positive cero. Por la descripción de la variable creemos que es un valor correcto y no una codificación de missing value.

El único tratamiento realizado ha sido un preprocesado aplicando una estandarización, preparando el dataset a los algoritmos que se van a utilizar. Por la forma no normal de la distribución en Positive, no deberíamos aplicar algoritmos que la requieran.

2. Técnicas de Clasificación

Referencias

- [1] http://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Haberman%27s+Survival.
- [2] https://www.cancer.org/cancer/breast-cancer/treatment/surgery-for-breast-cancer/lymph-node-surgery-for-breast-cancer.html.
- [3] https://en.wikipedia.org/wiki/Lymph_node#.
- [4] http://lib.stat.cmu.edu/datasets/cars.desc.
- [5] https://www.ajdesigner.com/phphorsepower/horsepower_equation_trap_speed_method_increase_horsepower.php.
- [6] https://statisticsbyjim.com/regression/multicollinearity-in-regression-analysis/ #.