Trabajo Final Introducción a la Ciencia de Datos

Juanjo Sierra

27 de diciembre de 2018

Planteamiento

El trabajo final de la asignatura *Introducción a la Ciencia de Datos* se divide en dos secciones. Consiste en realizar un estudio sobre un conjunto de datos de regresión y otro sobre un conjunto de datos de clasificación. Se aplicarán distintas técnicas aprendidas durante la asignatura para conseguir los resultados adecuados.

Librerías y paquetes a cargar

```
library(ggplot2)
library(dplyr)
```

```
##
## Attaching package: 'dplyr'
```

```
## The following objects are masked from 'package:stats':
##
##     filter, lag
```

```
## The following objects are masked from 'package:base':
##
##     intersect, setdiff, setequal, union
```

```
library(tidyr)
```

Trabajo Final Regresión

En primer lugar se realizará el estudio de la base de datos de regresión. En este caso el conjunto de datos a analizar es **Friedman**, que se ha descargado desde el repositorio de datasets de la asignatura. Se puede leer utilizando la siguiente orden:

```
friedman = read.csv("Datos/friedman/friedman.dat", header = FALSE, comment.char = "@")
head(friedman)
```

```
##          V1        V2        V3         V4         V5       V6
## 1 0.6964817 0.3584375 0.4258343 0.33031373 0.22249090 11.09496
## 2 0.5903899 0.4306749 0.8690418 0.07091161 0.63430253 13.22921
## 3 0.8276557 0.6178330 0.9494409 0.67013843 0.64080838 25.33973
## 4 0.8107169 0.2621162 0.4541944 0.85470608 0.27976951 15.18159
## 5 0.4068430 0.8161745 0.8611055 0.12890196 0.15747881 14.43310
## 6 0.6299940 0.3821170 0.9819543 0.98471273 0.07506318 20.97857
```

Dado que los nombres asignados a las variables no aportan ninguna información, y en el resumen del dataset en formato KEEL podemos comprobar que sus nombres tampoco son representativos, se procede a asignarles una notación genérica.

```
n = length(names(friedman))-1
names(friedman)[1:n] = paste ("X", 1:n, sep="")
names(friedman)[n+1] = "Y"
head(friedman)
```

```
##          X1        X2        X3         X4         X5        Y
## 1 0.6964817 0.3584375 0.4258343 0.33031373 0.22249090 11.09496
## 2 0.5903899 0.4306749 0.8690418 0.07091161 0.63430253 13.22921
## 3 0.8276557 0.6178330 0.9494409 0.67013843 0.64080838 25.33973
## 4 0.8107169 0.2621162 0.4541944 0.85470608 0.27976951 15.18159
## 5 0.4068430 0.8161745 0.8611055 0.12890196 0.15747881 14.43310
## 6 0.6299940 0.3821170 0.9819543 0.98471273 0.07506318 20.97857
```

Ahora podemos comprobar de forma más directa que existen 5 variables de entrada (X1-5) que determinan una única variable de salida (Y). Es interesante comprobar las dimensiones del dataset para poder asegurar que se está asumiendo lo correcto.

```
dim(friedman)
```

```
## [1] 1200    6
```

Con esto se puede confirmar que existen un total de 1200 ejemplos en el conjunto de datos, cada uno con 6 variables (5 de entrada y 1 de salida).

Utilizando la función `summary` se puede obtener una visión más completa del dataset, arrojando nuevos valores interesantes para su estudio como los rangos de las variables, sus cuartiles o su media y mediana.

```
summary(friedman)
```

```
##        X1                  X2                  X3
##  Min.   :0.001212   Min.   :0.0001603   Min.   :0.0006546
##  1st Qu.:0.249184   1st Qu.:0.2423287   1st Qu.:0.2485096
##  Median :0.519293   Median :0.4932687   Median :0.4993111
##  Mean   :0.506193   Mean   :0.4999592   Mean   :0.4995141
##  3rd Qu.:0.751131   3rd Qu.:0.7655960   3rd Qu.:0.7441912
##  Max.   :0.999719   Max.   :0.9996775   Max.   :0.9990619
##        X4                  X5                  Y
##  Min.   :0.0002123   Min.   :0.0004299   Min.   : 0.664
##  1st Qu.:0.2703118   1st Qu.:0.2578755   1st Qu.:10.859
##  Median :0.5328840   Median :0.4753492   Median :14.654
##  Mean   :0.5122272   Mean   :0.4928214   Mean   :14.567
##  3rd Qu.:0.7566648   3rd Qu.:0.7385440   3rd Qu.:18.494
##  Max.   :0.9994802   Max.   :0.9995394   Max.   :28.590
```

Se puede comprobar también si existen valores perdidos en el dataset. Para esto se puede utilizar la función `anyNA`:

```
anyNA(friedman)
```

```
## [1] FALSE
```

Este resultado indica que no hay valores perdidos y que por lo tanto no es necesario imputar ni tomar ninguna decisión para restablecer dichos valores.

A continuación se puede comprobar si existen ejemplos duplicados, y eliminarlos del dataset. Para ello se utiliza la función `duplicated` acompañado de la función `any`:

```
any(duplicated(friedman))
```

```
## [1] FALSE
```

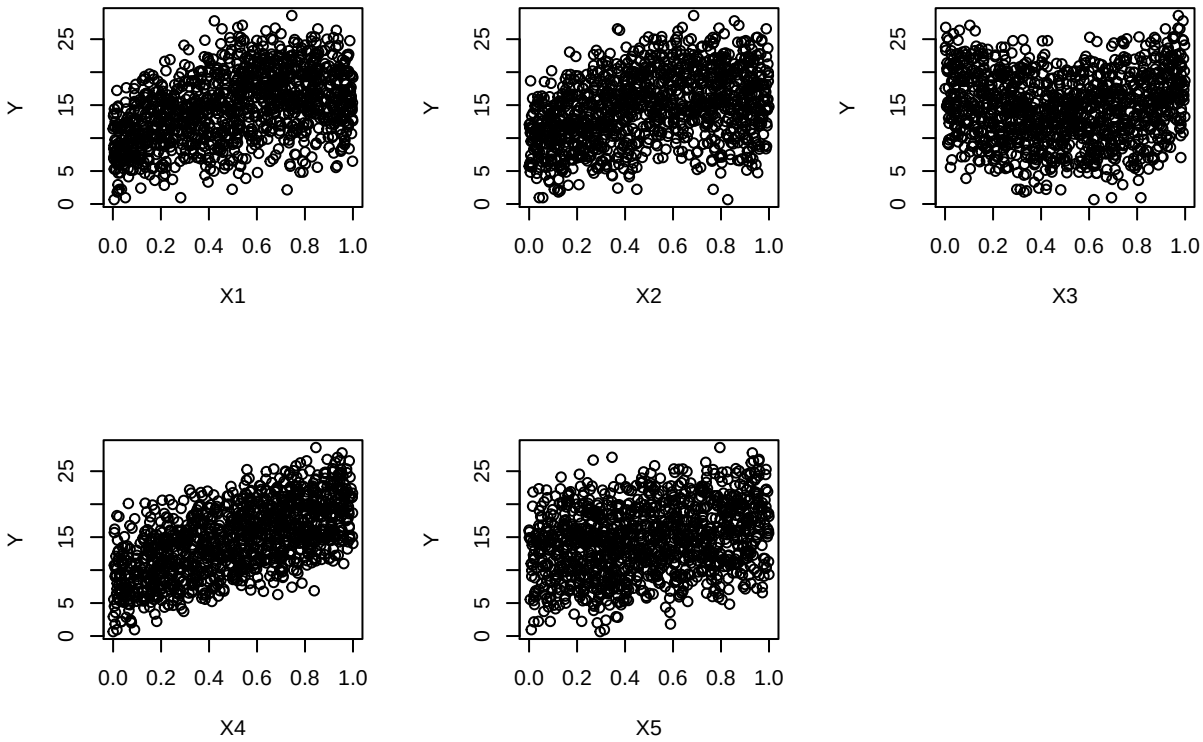
Como no hay duplicados se puede continuar con el estudio sin realizar ninguna alteración en el conjunto de datos.

Además, como el rango de las variables está entre 0 y 1 (como se pudo comprobar anteriormente con el `summary`), no es necesario realizar un escalado ni una transformación en los valores. En este punto se puede afirmar que los datos están listos para poder trabajar con ellos.

Como primer paso para el análisis del dataset se puede mostrar cada una de las variables de entrada con respecto a la variable de salida. Esto permitirá averiguar de un vistazo cuál tiene más potencial de determinar qué valor de salida obtendrá dicho ejemplo.

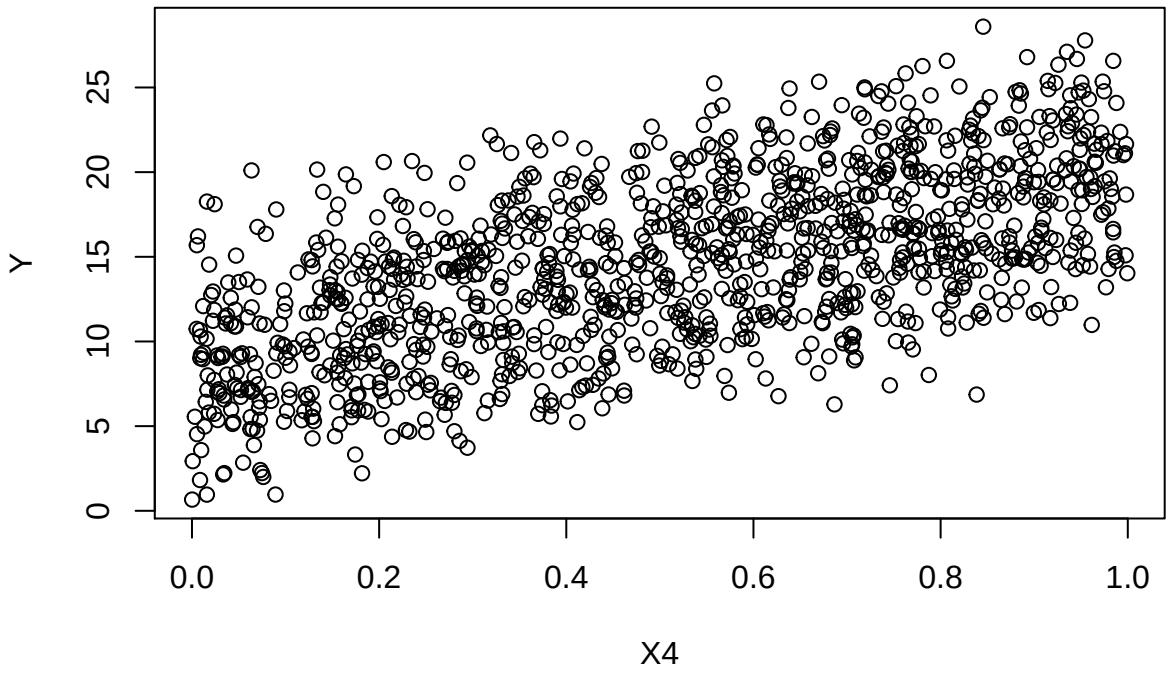
```
plotY = function (x,y) {
  plot(friedman[,y]~friedman[,x], xlab=names(friedman)[x], ylab=names(friedman)[y])
}

par(mfrow=c(2,3))
x = sapply(1:(dim(friedman)[2]-1), plotY, dim(friedman)[2])
par(mfrow=c(1,1))
```



Basándose en un modelo de regresión lineal, se puede especular que la variable X4 parece tener una correlación más alta con la variable de salida Y, y por tanto podría resultar en un mejor modelo. A continuación se muestra la gráfica de X4 frente a Y más grande para poder apreciar mejor la posible correlación.

```
plotY(4,dim(friedman)[2])
```



La correlación de las variables entre sí y con la variable de salida puede obtenerse de forma directa gracias a la función `cor`:

```
cor(friedman)
```

```
##              X1          X2          X3          X4          X5         Y
## X1  1.000000000 -0.03227730 0.009162253  0.09172183  0.01124122 0.4334883
## X2 -0.032277302  1.00000000 0.010233226  0.03639529  0.02452585 0.3713814
## X3  0.009162253  0.01023323 1.000000000  0.03883400  0.02110537 0.0356199
## X4  0.091721829  0.03639529 0.038834002  1.00000000 -0.02445055 0.6157779
## X5  0.011241216  0.02452585 0.021105366 -0.02445055  1.00000000 0.2757470
## Y   0.433488308  0.37138140 0.035619901  0.61577794  0.27574703 1.0000000
```

Como se había supuesto anteriormente en función de las gráficas obtenidas, es la variable X4 la que más correlación tiene con la variable de salida Y (~0.616).

Modelos de regresión lineal simple

El primer objetivo del trabajo final de regresión es generar un modelo lineal con cada una de las variables de entrada del dataset. De esta forma se puede obtener de una manera sencilla la información sobre qué variable es mejor para un modelo lineal, es decir, qué variable es más representativa de la de salida.

Para realizar los modelos de regresión lineal se va a utilizar la función `lm` que ya viene entre las funciones base de R. Es necesario indicar cuál es la variable de salida y cuál (o cuáles) son las que se van a utilizar para construir el modelo.

Se van a analizar todas las variables X con respecto a la variable de salida Y. Se construye un modelo con cada una de estas variables, y con la función `summary` se obtiene una información más detallada del modelo resultante.

```
lmsimple1 = lm(Y~X1, data=friedman)
lmsimple2 = lm(Y~X2, data=friedman)
lmsimple3 = lm(Y~X3, data=friedman)
lmsimple4 = lm(Y~X4, data=friedman)
```

```r
lmsimple5 = lm(Y~X5, data=friedman)

summary(lmsimple1)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = Y ~ X1, data = friedman)
##
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -14.1161  -3.3974   0.0156   3.3261  13.8565
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  10.6586     0.2708   39.37   <2e-16 ***
## X1            7.7211     0.4637   16.65   <2e-16 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 4.674 on 1198 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.1879, Adjusted R-squared:  0.1872
## F-statistic: 277.2 on 1 and 1198 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

```r
summary(lmsimple2)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = Y ~ X2, data = friedman)
##
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -16.0532  -3.3110  -0.1019   3.5042  12.8661
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  11.2915     0.2744   41.15   <2e-16 ***
## X2            6.5515     0.4732   13.84   <2e-16 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 4.816 on 1198 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.1379, Adjusted R-squared:  0.1372
## F-statistic: 191.7 on 1 and 1198 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

```r
summary(lmsimple3)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = Y ~ X3, data = friedman)
##
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -13.9798  -3.6750   0.1493   3.8077  13.7227
##
## Coefficients:
```

```
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  14.2490     0.2981  47.805   <2e-16 ***
## X3            0.6367     0.5161   1.234    0.218
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 5.183 on 1198 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.001269,   Adjusted R-squared:  0.0004351
## F-statistic: 1.522 on 1 and 1198 DF,  p-value: 0.2176
```

```
summary(lmsimple4)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = Y ~ X4, data = friedman)
##
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -11.3664  -3.1954  -0.0698   3.0166  10.5726
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)   8.8149     0.2432   36.25   <2e-16 ***
## X4           11.2296     0.4151   27.05   <2e-16 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 4.087 on 1198 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.3792, Adjusted R-squared:  0.3787
## F-statistic: 731.7 on 1 and 1198 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

```
summary(lmsimple5)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = Y ~ X5, data = friedman)
##
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -13.2433  -3.8083   0.1361   3.6498  13.2920
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  12.0471     0.2918  41.292   <2e-16 ***
## X5            5.1132     0.5150   9.929   <2e-16 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 4.986 on 1198 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.07604,    Adjusted R-squared:  0.07527
## F-statistic: 98.59 on 1 and 1198 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

De los resultados anteriores se pueden extraer varias afirmaciones. En primer lugar, el p-value de los modelos de X1, X2, X4 y X5 es muy pequeño ($< 2.2e\text{-}16$) por lo que se puede afirmar con una confianza casi cercana al 100% que existe algún tipo de dependencia lineal entre dichas variables y la variable de salida. En el caso de la variable X3, sin embargo, el p-value es muy alto (> 0.2) por lo que no se puede afirmar lo anterior con

suficiente confianza, es decir, es una variable que no se utilizará generalmente para construir un modelo de regresión lineal.

De entre los modelos aceptables, como era de esperar el mejor es el que utiliza X4, la variable que más correlación mantiene con la salida, a pesar de ser "tan sólo" un valor de R-cuadrado de 0.379. El R-squared o R-cuadrado indica cómo de bueno es el modelo de regresión lineal. Cuanto más próximo a 1 más acertado es, y cuanto más próximo a 0 al contrario. Es por esto que a pesar de que el valor de X4 no es muy óptimo, es el que más cerca se encuentra del 1, y por tanto el mejor de las variables estudiadas.

Modelos de regresión lineal múltiple

A continuación se va a intentar llegar a un modelo de regresión linear múltiple que obtenga mejores resultados que el modelo anterior. Para ello se construirá un modelo con todas las variables de entrada posibles y se eliminarán las menos prometedoras para encontrar el mejor balance entre complejidad y acierto.

Lo primero es construir el modelo con todas las variables, como se ha indicado anteriormente.

```
lmmultiple1 = lm(Y~., data=friedman)
summary(lmmultiple1)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = Y ~ ., data = friedman)
##
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -12.4519  -1.5973   0.0415   1.7213   6.8138
##
## Coefficients:
##              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  0.024019   0.303396   0.079    0.937
## X1           6.932948   0.268826  25.790   <2e-16 ***
## X2           6.284951   0.265372  23.684   <2e-16 ***
## X3           0.005065   0.268706   0.019    0.985
## X4          10.465240   0.275546  37.980   <2e-16 ***
## X5           5.130121   0.278745  18.404   <2e-16 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 2.696 on 1194 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.7307, Adjusted R-squared:  0.7296
## F-statistic:   648 on 5 and 1194 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Se puede observar que este modelo, siendo más complejo, es también sustancialmente mejor que cualquier modelo de regresión lineal simple. Este modelo alcanza un valor de R-cuadrado ajustado de casi 0.73, mientras que el mejor de los anteriores tan sólo llegaba a 0.379. Sin embargo, comparando los p-values de los diferentes atributos se puede observar que el de X3 es muy elevado, al igual que evaluándolos individualmente. Es por ello que el siguiente paso es eliminarlo del modelo.

```
lmmultiple2 = lm(Y~.-X3, data=friedman)
summary(lmmultiple2)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = Y ~ . - X3, data = friedman)
```

```
##
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -12.4519  -1.5974   0.0413   1.7224   6.8164
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  0.02636    0.27682   0.095    0.924
## X1           6.93298    0.26871  25.801   <2e-16 ***
## X2           6.28499    0.26525  23.694   <2e-16 ***
## X4          10.46544    0.27523  38.025   <2e-16 ***
## X5           5.13024    0.27856  18.417   <2e-16 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 2.695 on 1195 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.7307, Adjusted R-squared:  0.7298
## F-statistic: 810.7 on 4 and 1195 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Este modelo incluso da un R-cuadrado ajustado mayor que el que contenía todas las variables, por lo que es intrínsecamente mejor tanto en complejidad como en acierto. Ahora todas las variables tienen un p-value ínfimo por lo que no se puede elegir una clara que eliminar para seguir probando a hacer un modelo más simple. Por ello, se va a eliminar la que menor R-cuadrado tuviese en los modelos lineales simples. En este caso, X5 (0.07).

```
lmmultiple3 = lm(Y~.-X3-X5, data=friedman)
summary(lmmultiple3)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = Y ~ . - X3 - X5, data = friedman)
##
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -13.1609  -1.9004  -0.0158   2.0840   7.7125
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)   2.5241     0.2733   9.235   <2e-16 ***
## X1            7.0046     0.3043  23.018   <2e-16 ***
## X2            6.4117     0.3003  21.350   <2e-16 ***
## X4           10.3306     0.3116  33.152   <2e-16 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 3.052 on 1196 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.6543, Adjusted R-squared:  0.6534
## F-statistic: 754.5 on 3 and 1196 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

El modelo resultante desciende su valor de R-cuadrado ajustado hasta 0.653, casi un 0.1 con respecto al modelo anterior. Teniendo esto en cuenta, se puede afirmar que la reducción de complejidad eliminando variables en este caso no compensa ya que se pierde demasiado acierto con respecto al modelo inmediatamente superior en complejidad. El mejor modelo lineal múltiple hasta el momento es `lmmultiple2`.

Una vez se ha llegado a esta conclusión, se pueden realizar transformaciones sobre las variables o interacciones entre ellas para tratar de obtener un modelo más preciso.

Interacciones

En primer lugar se realizarán algunos modelos basados en interacciones entre las variables más prometedoras del dataset, con el objetivo de buscar posibles combinaciones que arrojen un modelo más adecuado al problema.

Para empezar se pueden probar las dos variables que, individualmente, han resultado más adecuadas para realizar un modelo lineal.

```
lminteraccion1 = lm(Y~X4*X1, data=friedman)
summary(lminteraccion1)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = Y ~ X4 * X1, data = friedman)
##
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -11.4758  -2.4193   0.0361   2.4213  10.3090
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)   5.4721     0.4032  13.572   <2e-16 ***
## X4           11.0946     0.7245  15.313   <2e-16 ***
## X1            7.2666     0.7133  10.187   <2e-16 ***
## X4:X1        -0.9980     1.2459  -0.801    0.423
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 3.586 on 1196 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.5228, Adjusted R-squared:  0.5216
## F-statistic: 436.7 on 3 and 1196 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

El modelo tan sólo llega a un R-cuadrado de 0.52, y el p-value del producto X4*X1 no garantiza una alta confianza de que dicho valor resulte significativo para la predicción de la variable de salida Y. El siguiente modelo será, por tanto, el que combine lo anterior con una nueva variable, la X2, que es la siguiente en la lista de prometedoras.

```
lminteraccion2 = lm(Y~X4*X1*X2, data=friedman)
summary(lminteraccion2)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = Y ~ X4 * X1 * X2, data = friedman)
##
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -13.4444  -1.8606  -0.0631   2.1395   7.8986
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)   3.5243     0.6886   5.118 3.60e-07 ***
## X4            9.4596     1.2620   7.496 1.28e-13 ***
## X1            4.3620     1.2182   3.581 0.000356 ***
## X2            3.8700     1.1550   3.351 0.000832 ***
## X4:X1         2.8933     2.1588   1.340 0.180409
```

```
## X4:X2         2.9348     2.1101   1.391 0.164535
## X1:X2         6.5580     2.0850   3.145 0.001700 **
## X4:X1:X2     -8.3626     3.6596  -2.285 0.022481 *
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 3.041 on 1192 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.658,  Adjusted R-squared:  0.656
## F-statistic: 327.6 on 7 and 1192 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Este modelo ya es sustancialmente mejor, llegando hasta un R-cuadrado ajustado de 0.656. La confianza de la combinación de X1, X2 y X4 es superior a un 97% por lo que no se puede rechazar la hipótesis de que tenga una correlación lineal con la variable de salida. A pesar de que haya valores más altos de p-value para interacciones que son un subconjunto de la interacción principal, es el p-value de la última el que indica si es confiable.

Dado que el modelo de regresión lineal múltiple que mejor resultado ha dado ha sido el que combinaba todas las variables menos X3, se puede añadir X5, la variable que falta, y comprobar cómo se integra en el modelo.

```
lminteraccion3 = lm(Y~X4*X1*X2*X5, data=friedman)
summary(lminteraccion3)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = Y ~ X4 * X1 * X2 * X5, data = friedman)
##
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -11.8663  -1.6229   0.0125   1.7488   6.8136
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  -0.2115     1.2777  -0.166  0.86853
## X4           10.6976     2.2618   4.730 2.52e-06 ***
## X1            6.9770     2.2622   3.084  0.00209 **
## X2            5.9794     2.1664   2.760  0.00587 **
## X5            7.6391     2.3618   3.234  0.00125 **
## X4:X1         1.0171     3.9296   0.259  0.79582
## X4:X2         0.7184     3.8699   0.186  0.85276
## X1:X2         2.5026     3.8327   0.653  0.51391
## X4:X5        -1.9897     4.3047  -0.462  0.64402
## X1:X5        -5.5109     4.0148  -1.373  0.17013
## X2:X5        -4.8001     3.9352  -1.220  0.22279
## X4:X1:X2     -6.3673     6.6718  -0.954  0.34010
## X4:X1:X5      3.5243     7.2060   0.489  0.62487
## X4:X2:X5      4.5470     7.2148   0.630  0.52866
## X1:X2:X5      8.9523     6.8265   1.311  0.18998
## X4:X1:X2:X5  -4.6139    12.2215  -0.378  0.70585
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 2.676 on 1184 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.7369, Adjusted R-squared:  0.7336
## F-statistic: 221.1 on 15 and 1184 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Este modelo supone un caso particular, y es que su acierto es superior a la de los modelos anteriores

(R-cuadrado superior a 0.73), pero a su vez no refleja una confianza que garantice que la interacción estudiada se ajuste de forma lineal a la variable de salida. Por dicha razón, mientras se esté buscando un modelo de regresión lineal no se va a utilizar este. De nuevo, la falta de confianza viene dada por un p-valor muy alto (~0.706).