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)
library(kknn)
```

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
```

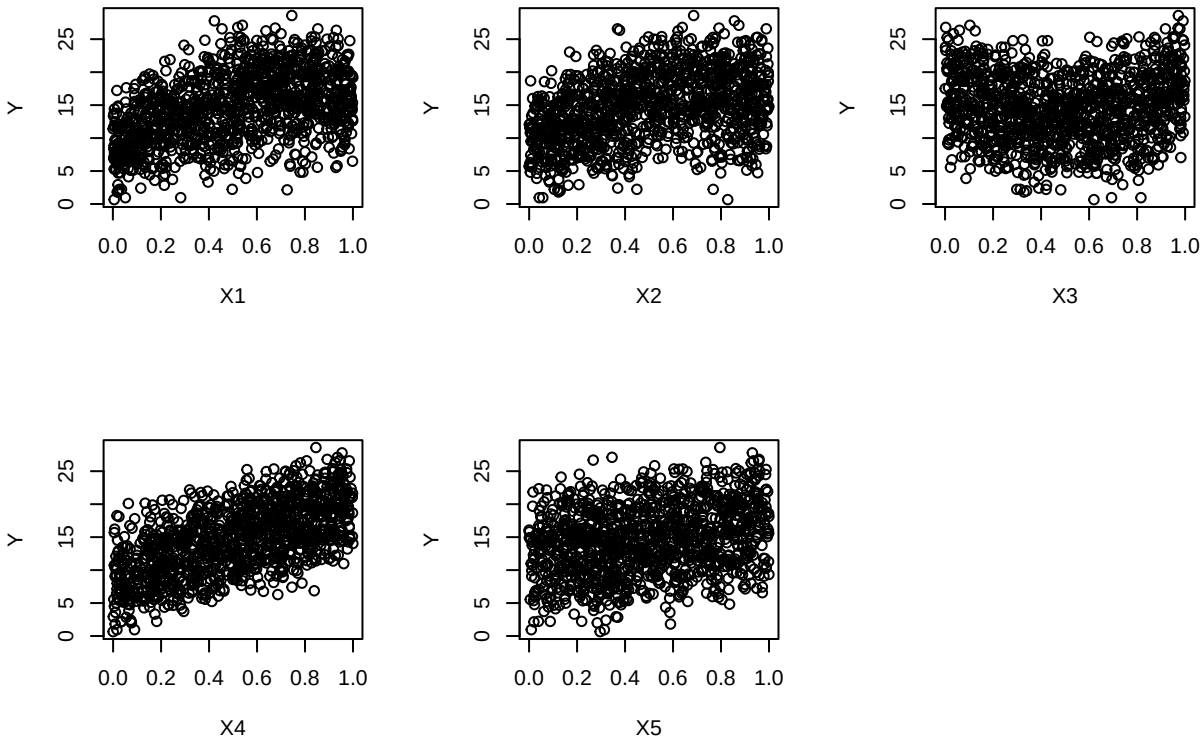
Como no hay duplicados se puede continuar con el estudio sin realizar ninguna alteración en el conjunto de datos.

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.

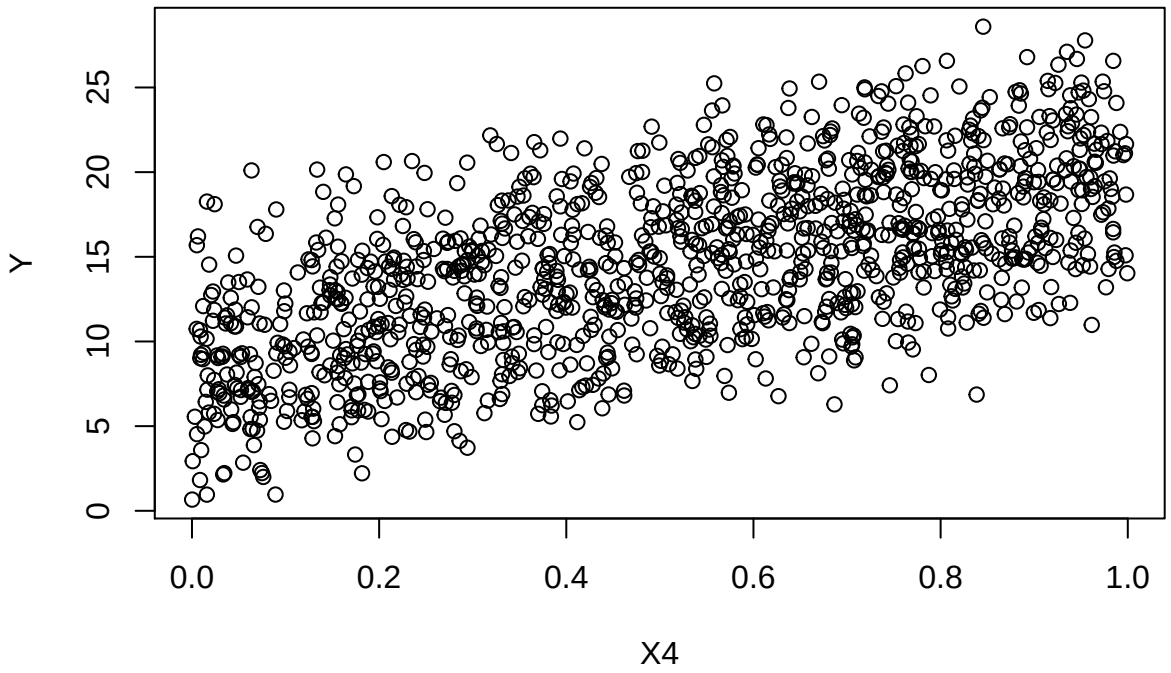
```
plotY = function (x,y) {
  plot(friedman[,y]~friedman[,x], xlab=names(friedman)[x], ylab=names(friedman)[y])
}

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).

No linealidad

El siguiente paso es tratar de encontrar si alguna de las combinaciones que se han probado tienen un componente no lineal que pueda ayudar a ajustar mejor. En primer lugar se probará con X4, la mejor variable encontrada mediante modelos de regresión lineal simples, dado que ninguna variable aparenta seguir una distribución cuadrática con respecto a la variable de salida.

```
lmnolinealidad1 = lm(Y~X4+I(X4^2), data=friedman)
summary(lmnolinealidad1)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = Y ~ X4 + I(X4^2), data = friedman)
##
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -11.2754  -3.0983  -0.0216   2.9983  10.8607
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)   8.3691     0.3642  22.979   <2e-16 ***
## X4           13.8767     1.6635   8.342   <2e-16 ***
## I(X4^2)      -2.6524     1.6143  -1.643    0.101
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 4.084 on 1197 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.3806, Adjusted R-squared:  0.3795
## F-statistic: 367.7 on 2 and 1197 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

El modelo es ligeramente mejor al lineal simple, pero como se puede observar en el resumen, el p-valor de la variable al cuadrado es sustancialmente mayor al de la varaible simple. Por tanto no merece la pena investigar esa vertiente. Se puede probar con otra variable distinta, como X1.

```
lmnolinealidad2 = lm(Y~X1+I(X1^2), data=friedman)
summary(lmnolinealidad2)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = Y ~ X1 + I(X1^2), data = friedman)
##
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -14.5809  -3.0448   0.0221   3.3661  12.7482
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)    8.352      0.386   21.64  < 2e-16 ***
## X1            21.734      1.772   12.27  < 2e-16 ***
## I(X1^2)      -14.044      1.717   -8.18 7.19e-16 ***
```

```
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 4.55 on 1197 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.2309, Adjusted R-squared:  0.2296
## F-statistic: 179.7 on 2 and 1197 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Dado que el p-valor de la variable cuadrática es pequeño, puede afirmarse con una alta confianza que X1^2 tiene dependencia lineal con Y, y por tanto puede ser útil en modelos más complejos. Se puede probar a añadirla al mejor modelo hasta ahora, el que utilizaba todas las variables menos X3.

```
lmnolinealidad3 = lm(Y~.-X3+I(X1^2), data=friedman)
summary(lmnolinealidad3)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = Y ~ . - X3 + I(X1^2), data = friedman)
##
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -10.6302  -1.6178  -0.1023   1.5998   8.2333
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  -1.9294     0.3007  -6.417    2e-10 ***
## X1           19.2436     0.9885  19.468   <2e-16 ***
## X2            6.4223     0.2489  25.805   <2e-16 ***
## X4           10.2530     0.2585  39.659   <2e-16 ***
## X5            5.0524     0.2612  19.343   <2e-16 ***
## I(X1^2)     -12.3129     0.9560 -12.879   <2e-16 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 2.526 on 1194 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.7636, Adjusted R-squared:  0.7626
## F-statistic: 771.2 on 5 and 1194 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Se ha encontrado un modelo en el que una transformación no lineal ha aportado una solución considerablemente mejor a la anterior. El R-cuadrado ajustado ha pasado de 0.72 a 0.76, y el p-valor de todas las variables que componen el modelo asegura con confianza su correlación lineal con la variable Y. Por tanto este modelo supera a `lmmultiple2` como mejor modelo encontrado.

Algoritmo k-NN para regresión no paramétrica

Para el siguiente apartado del trabajo final de regresión se va a realizar un estudio del dataset con el algoritmo k-NN. Se probarán distintas configuraciones para encontrar la mejor combinación de variables en el caso de dicho algoritmo.

Cabe destacar que los datos utilizados por k-NN deben estar normalizados, para que las variables con valores de mayor orden no tengan más influencia en el cálculo de la distancia que aquellas con valores de menor orden. En el caso de este dataset, las variables de entrada tienen los valores entre 0 y 1 por lo que no es necesario realizar el escalado. Aunque, por defecto, la normalización se hace gracias al parámetro `scale = TRUE` de la función `kknn`. Para utilizar dicha función es necesario cargar el paquete homónimo, como ya se hizo al comienzo del trabajo.

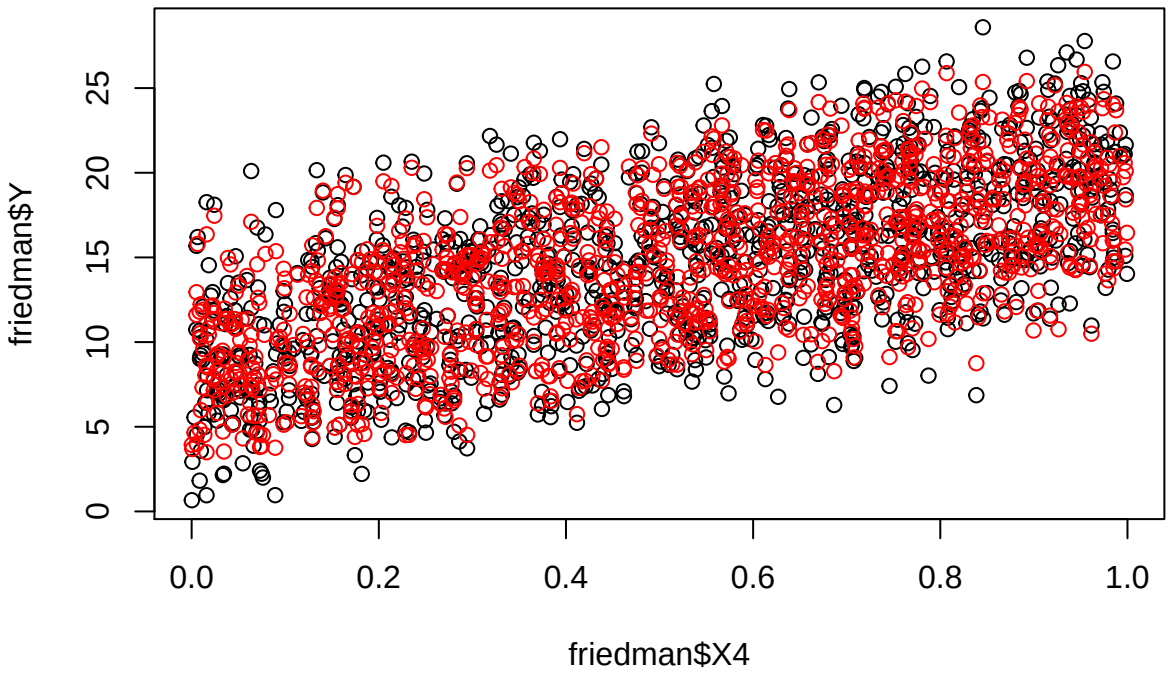
En primer lugar se va a partir del modelo que contiene todas las variables. Los valores por defecto que se

utilizan son k=7, y el kernel óptimo. Se utiliza el mismo conjunto de datos (el dataset entero) tanto para train como para test en este caso, para obtener un único valor que ejemplifique cómo se comporta el modelo para train.

```
fitknn1 = kknn(Y~., friedman, friedman)
```

A continuación se muestran los valores reales de Y frente a los que k-NN ha predicho, para comprobar de forma visual cuánto se parece la predicción a la realidad.

```
plot(friedman$Y~friedman$X4)
points(friedman$X4, fitknn1$fitted.values, col="red")
```



De esta gráfica sólo se puede intuir que el modelo construido con k-NN calcula unos valores de Y que siguen una distribución similar a la de la variable real. Sin embargo, se necesita una medida objetiva que ayude a valorar estos modelos de forma más precisa. Para ello se utiliza la raíz del error cuadrático medio (Root-Mean-Square Error, o **RMSE**). Se puede calcular siguiendo la siguiente fórmula:

```
RMSE = function(fit, labels) {
  yprime = fit$fitted.values
  sqrt(sum((labels-yprime)^2)/length(yprime)) # RMSE
}

RMSE(fitknn1, friedman$Y)
```

```
## [1] 1.166675
```

Ahora que se ha implementado la función del cálculo del RMSE, se pueden generar nuevos modelos con el algoritmo k-NN y compararlos entre sí. Por ejemplo, el modelo que contiene todas las variables menos X3, que anteriormente se ha comprobado que no ha aportado nada.

```
fitknn2 = kknn(Y~.-X3, friedman, friedman)
RMSE(fitknn2, friedman$Y)
```

```
## [1] 1.507862
```

En este caso se puede comprobar que los mejores modelos para regresión lineal no tienen por qué ser los mejores para el algoritmo k-NN. Aun así, se puede probar la selección de características del mejor modelo de

regresión lineal múltiple para k-NN y de esta forma valorar cómo de bien aproxima la variable de salida con respecto a los otros modelos de este algoritmo.

```
fitknn3 = kknn(Y~.-X3+I(X1^2), friedman, friedman)
RMSE(fitknn3, friedman$Y)
```

```
## [1] 1.494644
```

La adición de la variable X1 cuadrática ha aportado al modelo, aunque sin embargo este sigue sin ser mejor que el que tiene todas las variables. Si la añadimos a dicho modelo se podrá comprobar si realmente es una buena característica a tener en cuenta.

```
fitknn4 = kknn(Y~.+I(X1^2), friedman, friedman)
RMSE(fitknn4, friedman$Y)
```

```
## [1] 1.162829
```

El modelo es mejor que el mejor obtenido previamente pero no es una mejora sustancial a cambio de aumentar la complejidad con una nueva variable. Se puede comprobar si eliminando alguna otra variable el RMSE disminuye (X1 no puede ser eliminada porque es necesaria para el cálculo de X1^2).

```
fitknn5 = kknn(Y~.-X2+I(X1^2), friedman, friedman)
fitknn6 = kknn(Y~.-X4+I(X1^2), friedman, friedman)
fitknn7 = kknn(Y~.-X5+I(X1^2), friedman, friedman)
RMSE(fitknn5, friedman$Y)
```

```
## [1] 2.111819
```

```
RMSE(fitknn6, friedman$Y)
```

```
## [1] 2.380083
```

```
RMSE(fitknn7, friedman$Y)
```

```
## [1] 1.447878
```

Los resultados reflejan que no merece la pena eliminar ninguna de las variables, y que el mejor modelo según el criterio seguido en el estudio sería el que contiene todas las variables, ya que añadir la variable X1 cuadrática no aporta una suficiente mejora, y sin embargo sí añade complejidad al modelo.

Comparativa de algoritmos

En este último apartado se van a comparar los resultados de los dos modelos de regresión múltiple estudiados (regresión lineal múltiple y k-NN) para comprobar si existen diferencias significativas entre ambos, mediante tests de Wilcoxon, Friedman y Holm. Para los tests que soportan más de dos algoritmos como entrada, se añadirán también los resultados del algoritmo M5 como parte de la comparativa.

En este caso se van a comparar únicamente los modelos que contienen todas las variables, cómo punto de partida igualitario para ambos regresores. Llegados a este punto sí tiene sentido contar con un error de train y test, por lo que se van a utilizar las particiones ubicadas dentro de la carpeta del dataset para realizar validación cruzada. La medida de error será el error cuadrático medio o MSE, que viene determinado por la distancia que existe entre las variables de salida predichas y las verdaderas.

En primer lugar se realizará la validación cruzada y el estudio de la regresión lineal múltiple.

```
path = "./Datos/friedman/friedman"

run_lm_fold = function(i, x, tt = "test") {
  file = paste(x, "-5-", i, "tra.dat", sep="")
  x_tra = read.csv(file, comment.char="@")
```

```
  file = paste(x, "-5-", i, "tst.dat", sep="")
  x_tst = read.csv(file, comment.char="@")
  In = length(names(x_tra)) - 1
  names(x_tra)[1:In] = paste ("X", 1:In, sep="")
  names(x_tra)[In+1] = "Y"
  names(x_tst)[1:In] = paste ("X", 1:In, sep="")
  names(x_tst)[In+1] = "Y"

  if (tt == "train") {
    test = x_tra
  }
  else {
    test = x_tst
  }

  fitMulti = lm(Y~., x_tra)
  yprime = predict(fitMulti, test)
  sum(abs(test$Y-yprime)^2)/length(yprime) # MSE
}

lmMSEtrain = mean(sapply(1:5, run_lm_fold, path, "train"))
lmMSEtest = mean(sapply(1:5, run_lm_fold, path, "test"))

lmMSEtrain
```

```
## [1] 7.229588
```

```
lmMSEtest
```

```
## [1] 7.298681
```

Como se puede observar en base a los resultados, el modelo de regresión lineal múltiple que contiene a todas las variables obtiene un error cuadrático medio rondando los 7.2, con una ligera mejora en train con respecto a test, como es lógico dado que son los datos en los que se ha basado para construir el modelo.

A continuación se prueba el mismo experimento con el algoritmo k-NN, para ver cómo se comparan sus errores cuadráticos medios con los de regresión lineal.

```
run_knn_fold = function(i, x, tt = "test") {
  file = paste(x, "-5-", i, "tra.dat", sep="")
  x_tra = read.csv(file, comment.char="@")
  file = paste(x, "-5-", i, "tst.dat", sep="")
  x_tst = read.csv(file, comment.char="@")
  In = length(names(x_tra)) - 1
  names(x_tra)[1:In] = paste ("X", 1:In, sep="")
  names(x_tra)[In+1] = "Y"
  names(x_tst)[1:In] = paste ("X", 1:In, sep="")
  names(x_tst)[In+1] = "Y"

  if (tt == "train") {
    test = x_tra
  }
  else {
    test = x_tst
  }
```

```
  fitMulti = kknn(Y~., x_tra, test)
  yprime = fitMulti$fitted.values
  sum(abs(test$Y-yprime)^2)/length(yprime) # MSE
}

knnMSEtrain = mean(sapply(1:5, run_knn_fold, path, "train"))
knnMSEtest = mean(sapply(1:5, run_knn_fold, path, "test"))

knnMSEtrain
```

```
## [1] 1.42313
```

```
knnMSEtest
```

```
## [1] 3.196096
```

Para el k-NN la diferencia entre los errores de train y test se hace más notable, aumentando desde un 1.423 hasta un 3.196. A pesar de la diferencia entre ambas pruebas, el MSE en test, que es el que realmente es significativo, sigue estando bastante por debajo con respecto a su análogo de regresión lineal. El modelo que contiene todas las variables se ajusta por tanto bastante mejor con el algoritmo k-NN que con regresión lineal.

Antes de comenzar con las comparativas entre los algoritmos, se han de leer las tablas con los errores medios tanto de train como de test para tener los datos disponibles para aplicar los tests estadísticos. Estas tablas deberán contener los nuevos valores obtenidos por regresión lineal y k-NN, sustituyendo a los que aparecían por defecto.

```
resultados = read.csv("Datos/regr_train_alumnos.csv")
tablatra = cbind(resultados[,2:dim(resultados)[2]])
colnames(tablatra) = names(resultados)[2:dim(resultados)[2]]
rownames(tablatra) = resultados[,1]

resultados = read.csv("Datos/regr_test_alumnos.csv")
tablatst = cbind(resultados[,2:dim(resultados)[2]])
colnames(tablatst) = names(resultados)[2:dim(resultados)[2]]
rownames(tablatst) = resultados[,1]
```

Wilcoxon

A continuación se va a ejecutar el test de Wilcoxon para comprobar si existen diferencias significativas entre ambos modelos. Dado que Wilcoxon trabaja con diferencias de error, en regresión hay que normalizarlo para que se obtengan valores útiles. Se toma como referencia el algoritmo que parece ser mejor (k-NN en este caso) y se compara con el otro (regresión lineal múltiple). Se suma 0.1 porque Wilcoxon no trabaja bien con valores iguales a 0.

```
difs = (tablatst[,1] - tablatst[,2]) / tablatst[,1]
wilc_1_2 = cbind(ifelse (difs<0, abs(difs)+0.1, 0+0.1),
                 ifelse (difs>0, abs(difs)+0.1, 0+0.1))
colnames(wilc_1_2) = c(colnames(tablatst)[1], colnames(tablatst)[2])
head(wilc_1_2)
```

```
##      out_test_lm out_test_kknn
## [1,]   0.1909091     0.1000000
## [2,]   0.1000000     1.0294118
## [3,]   0.1000000     0.4339071
## [4,]   0.1000000     0.3885965
## [5,]   0.1548506     0.1000000
```

```
## [6,]   0.1000000     0.3061057
```

Con esta tabla se puede entrar a evaluar ya el test de Wilcoxon como tal.

```
LMvsKNNtst = wilcox.test(wilc_1_2[,1], wilc_1_2[,2],
                         alternative = "two.sided", paired=TRUE)
Rmas = LMvsKNNtst$statistic
pvalue = LMvsKNNtst$p.value
LMvsKNNtst = wilcox.test(wilc_1_2[,2], wilc_1_2[,1],
                         alternative = "two.sided", paired=TRUE)
Rmenos = LMvsKNNtst$statistic
Rmas
```

```
##  V
## 78
```

```
Rmenos
```

```
##  V
## 93
```

```
pvalue
```

```
## [1] 0.7660294
```

Se puede considerar que no existen diferencias significativas entre ambos algoritmos. El grado de confianza que se tiene de que los algoritmos sean distintos es de apenas un 23.4%, por lo que no se puede validar dicha hipótesis.

Friedman

Para el test de Friedman se valora la posición (el ranking) de cada algoritmo en cada conjunto de datos, con lo que no es necesario normalizar nada. Como la tabla `tablatst` ya contiene los valores de los algoritmos anteriormente mencionados además del algoritmo M5, se puede utilizar directamente para evaluar el test. Eso sí, la función `friedman.test` recibe una matriz, por lo que sí que es necesario realizar el casting correspondiente de forma previa.

```
test_friedman = friedman.test(as.matrix(tablatst))
test_friedman
```

```
##
##  Friedman rank sum test
##
## data:  as.matrix(tablatst)
## Friedman chi-squared = 8.4444, df = 2, p-value = 0.01467
```

Dado el p-valor tan bajo que se obtiene como resultado del test de Friedman, se puede afirmar con casi un 99% de confianza que al menos un par de algoritmos son diferenciables entre sí significativamente.

Holm

Ahora que se tiene certeza de que existe algún par de algoritmos con diferencias significativas, para averiguar cuál o cuáles de estas combinaciones son las que cumplen esta hipótesis se realiza el test de Holm.

```
tam = dim(tablatst)
groups = rep(1:tam[2], each=tam[1])
pairwise.wilcox.test(as.matrix(tablatst),
                     groups, p.adjust = "holm", paired = TRUE)
```

```
##
##  Pairwise comparisons using Wilcoxon signed rank test
##
## data:  as.matrix(tablatst) and groups
##
##   1     2
## 2 0.580 -
## 3 0.081 0.108
##
## P value adjustment method: holm
```

En base a los resultados obtenidos, se puede deducir que existen dos pares de algoritmos diferentes significativamente (p-valor rondando el 0.1 o menor). Sabiendo que, según el orden en el que aparecen en la tabla, el 1 representa regresión lineal, el 2 k-NN y el 3 M5, se obtiene que el algoritmo M5 tiene diferencias significativas con respecto tanto a regresión lineal (~92% de confianza) como a k-NN (~90% de confianza). Los otros dos algoritmos, según la tabla, no pueden ser considerados diferentes, como se había comprobado antes en el test de Wilcoxon. Por tanto, se puede afirmar que todas las diferencias significativas entre estos algoritmos son a favor de M5.