UNIDAD 5. Problemas Multiclase: Knn; Redes Neuronales: Support Vector Machines

KNN (k-nearest neighbors)

KNN, k vecinos más próximos (Cover y Hart, 1967), es un método de clasificación supervisada basado en una idea muy simple e intuitiva: cada elemento es asignado a la misma clase que sus vecinos más cercanos. Se trata de un método no paramétrico, en el que no se hace ningún supuesto a priori sobre la distribución.

Los casos de entrenamiento son vectores en un espacio de dimensión m, descrito en términos de m atributos o variables explicativas, suponiendo conocida la clase a la que pertenece cada uno de los casos. Para la asignación de cada caso (punto o vector en ese espacio multidimensional) se consideran los k elementos de la muestra más próximos a ese punto -los k vecinos más cercanos- y se asigna el caso a la clase C más frecuente entre ellos. Generalmente se utiliza la distancia euclídea. Si el número de atributos es grande puede ocurrir que muchos de ellos sean irrelevantes, pero predominan en la asignación, ya que son mayoría, sobre los atributos importantes. Para corregir este efecto se pueden identificar y eliminar previamente las variables irrelevantes, o asignar un peso diferente a cada una en el cálculo de las distancias, reajustando los pesos durante el entrenamiento. Para ello se puede utilizar como ponderación la información mutua media $I(X_i,C)$ entre la variable i y la clase C, que mide la información que comparten X_i y C, e indica hasta que punto el conocimiento de una de ellas reduce nuestra incertidumbre sobre la otra. Si X_i y C son independientes, en cuyo caso X_i es irrelevante, la información mutua será cero; cuanto mayor sea la relación entre ambas, mayor será la información mutua.

Tambien es posible atribuir un mayor peso en el cálculo de las frecuencias a los casos más próximos, utilizando por ejemplo el inverso del cuadrado de la distancia como factor de ponderación.

La elección de k, el número de vecinos que deben ser considerados para encontrar la clase más probable, depende de la aplicación. Los valores grandes –muchos vecinos- reducen el efecto de ruido en la clasificación, pero tienden a separar clases relativamente próximas. Generalmente se consideran adecuados valores de k entre 3 y 7.

El algoritmo es el siguiente:

1) Para cada caso i que debe ser asignado se calcula su distancia a cada uno de los casos ya asignados
2) Se seleccionan los k casos más próximos a i
3) Se asigna i a la clase más frecuente dentro del conjunto de k casos más próximos.

Cuando existe empate en las frecuencias de dos o más clases se utiliza alguna regla heurística, como elegir entre ellas la clase del vecino más próximo (es decir k=1), o bien la clase cuya distancia media a ese punto dentro del conjunto es menor.

Para la aplicación con R utilizaremos la función knn del paquete class, que debe estar ya instalado con la instalación básica, y que emplea como criterio la distancia euclidea y decide la asignación por mayoría entre los k vecinos más próximos (al azar en caso de empate). Si hay varios vecinos a la misma distancia que el k-esimo se incluyen todos ellos. La sintaxis básica es:

```
knn(train,  test, cl,  k)
```

donde train es el conjunto de prueba, test el de validación, cl la variable que contiene la clase, y k el número de vecinos a considerar (1 por defecto).

Utilizaremos para el ejemplo el conjunto algas, ya conocido, con 31 casos de 6 tipos diferentes de algas, y 19 variables con la concentración relativa de diferentes pigmentos. El objetivo es identificar la clase de alga a partir de la composición relativa de pigmentos.

```
setwd("D:/CURSO DM")
load("algas.RData")     #  lee el conjunto "algas"
```

Dividimos el conjunto de datos en dos partes; el primero con 20 casos elegidos aleatoriamente, y el segundo con los 11 restantes, excluyendo en ambos la variable "clase", que obviamente no será utilizada como predictor. Para conseguir que el ejemplo sea reproducible fijamos la semilla o arranque aleatorio con la función set.seed, de modo que se obtendrá al aplicar la función sample a continuación exactamente la misma muestra aleatoria.

```
set.seed(123)
muestra <- sample(1:nrow(algas), 20)      #  muestra de 20 números de caso entre 1 y 31
entrenamiento <- subset(algas[muestra, ], select = -clase)   #  casos de entrenamiento
prueba <- subset(algas[-muestra, ], select = -clase)         #  casos de validación
```

Ahora aplicamos el método, indicando el conjunto de entrenamiento y el de validación, así como la variable que contiene la clase de alga. No configuramos el valor de k, el número de vecinos, por lo que será el valor por defecto k=1 (adecuado para conjuntos pequeños de datos como el nuestro):

```
library(class)
resultados <- knn(entrenamiento, prueba, cl = algas[muestra,"clase"])
```

table(resultados, algas[-muestra,"clase"])

	cianofíc.	clorofíc.	criptofíc.	diatomeas	dinofíc.	eustigmat
cianofíceas	0	0	0	0	0	0
clorofíceas	0	2	0	0	0	0
criptofíceas	0	0	2	0	0	0
diatomeas	0	0	0	2	0	0
dinofíceas	0	0	0	0	4	0
eustigmatoficeas	0	0	0	0	0	1

Todos los casos del conjunto de validación han sido identificados correctamente. Podemos aplicar el método al conjunto completo (que utilizamos como muestra de entrenamiento y de validación):

predictores <- subset(algas, select = -clase) # toda la muestra, excluyendo la variable clase
resultados <- knn(predictores,predictores, cl = algas$clase)
table(resultados, algas$clase)

	cianofíc.	clorofíc.	criptofíc.	diatomeas	dinofíc.	eustigmat.
cianofíceas	4	0	0	0	0	0
clorofíceas	0	8	0	0	0	0
criptofíceas	0	0	4	0	0	0
diatomeas	0	0	0	6	0	0
dinofíceas	0	0	0	0	5	0
eustigmatoficeas	0	0	0	0	0	4

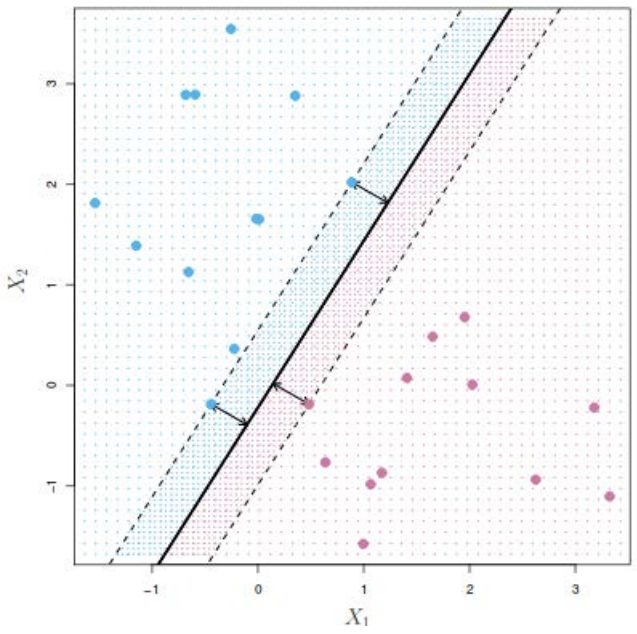
De nuevo comprobamos que todos los casos son asignados correctamente.

SVM (Support Vector Machines, Máquinas de Vector Soporte)

(Vladimir Vapnik, 1963)

Cuando se dispone de un conjunto de n observaciones con k predictores y se desea predecir o identificar una variable binaria, con dos niveles, se pueden utilizar hiperplanos para predecir el grupo de pertenencia. Un hiperplano separa el espacio de los predictores en dos partes; en el caso más simple, con solamente dos predictores, el espacio completo es un plano y el hiperplano buscado es una recta: asignaremos el caso a una de las dos clases dependiendo del lado en que se encuentre el punto. La distancia de cada caso al hiperplano es un indicador de fiabilidad, cuanto más alejado más fiable es la asignación (si está muy cerca o sobre la recta podría pertenecer a cualquiera de las dos clases).

El mejor clasificador, el hiperplano más adecuado o hiperplano óptimo de separación (MMH, maximal margin hyperplane) es aquel que se encuentra más alejado de todas las observaciones de entrenamiento. Para ello se determina la distancia perpendicular de cada observación a un determinado hiperplano, y la menor de todas ellas es el "margen"; el mmh es el hiperplano que consigue un mayor margen. En la imagen que sigue (tomada del libro Support Vector Machines Succinctly, de Alexandre Kowalczyk), se muestra el hiperplano óptimo (la línea contínua) para un ejemplo con dos clases identificadas con distinto color, y el margen o distancia mínima de los puntos de cada clase al hiperplano indicado con líneas discontínuas.



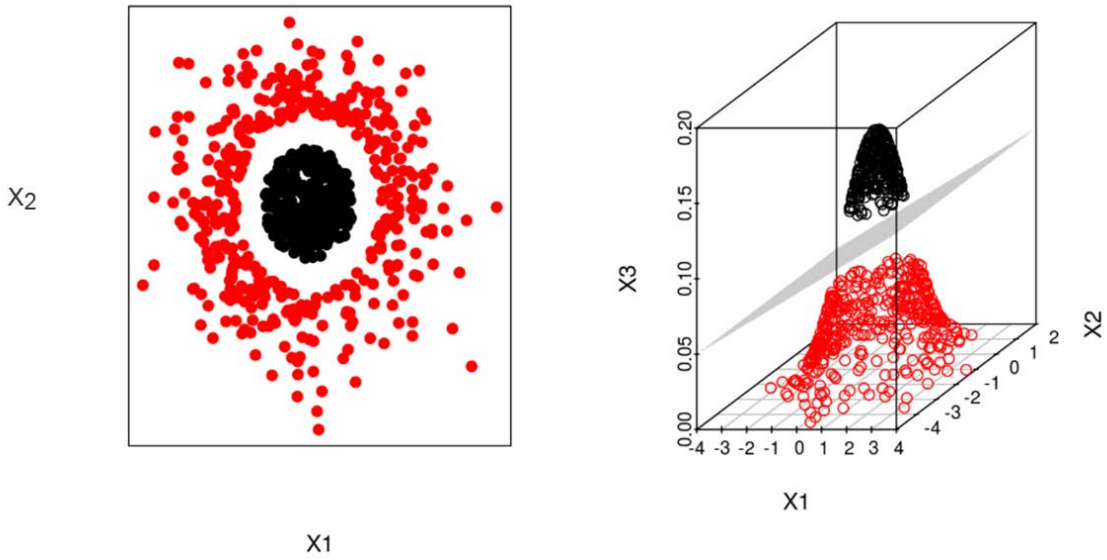
Cada observación es un vector de dimensión k (en el ejemplo dimensión 2). Las observaciones situadas a la distancia mínima (es decir el margen) se denominan "vectores soporte", ya que permiten definir por completo el hiperplano óptimo; las restantes observaciones no tienen influencia alguna.

En la mayoría de las aplicaciones las observaciones están mezcladas y no permiten una separación completa, y por lo tanto no existe un hiperplano de separación MMH. Sin embargo se puede extender el concepto de margen (margen adaptado o soft margin) para obtener un hiperplano que casi separe las clases, permitiendo algunos errores de clasificación. Los vectores soporte son ahora los que se encuentran justo en el margen o los que lo incumplen (los que están más cerca del hiperplano).

Para ello se introduce un parámetro de ajuste adicional que supone una penalización de los casos de entrenamiento mal clasificados. El valor de ese parámetro se obtiene mediante validación cruzada, de tal modo que se consigue finalmente el clasificador que logra la mayor proporción de elementos correctamente clasificados cuando cada elemento de la muestra ha sido asignado sin emplear los datos de ese propio caso en la definición del criterio de asignación, es decir en la determinación del MMH.

De este modo se consiguen además dos ventajas adicionales: el método es más robusto (ya que no depende excesivamente de un número muy escaso de vectores soporte), y la validación cruzada reduce el problema de sobreajuste, común a muchas técnicas de minería de datos, según el cual el método funciona muy bien con los casos de la muestra, pero predice mal los casos nuevos no utilizados en el análisis.

El clasificador descrito funcionará razonablemente bien cuando el límite de separación entre las clases es aproximadamente lineal. Cuando no lo es, y los grupos no son linealmente separables, se utiliza una estrategia que consiste en expandir las dimensiones del espacio original. En la figura siguiente se muestran dos clases no separables linealmente (figura de la izquierda), pero añadiendo una dimensión extra (x3 en la figura de la derecha) es posible esa separación.



El método de Máquinas de Vector Soporte (SVM) es una extensión del clasificador lineal descrito anteriormente aumentando la dimensión de los datos. Aplicando a los datos una transformación no lineal se construye un espacio de mayor dimensión provisto de un producto escalar (kernel o núcleo) en el cual aplicamos el mismo algoritmo obteniendo así una versión no lineal del clasificador. Existen diferentes posibilidades para ello, siendo los más habituales el kernel polinómico y el gaussiano (base radial).

Cuando el número de clases es mayor que dos se generaliza el procedimiento aplicando alguna de las siguientes estrategias: one-versus-one, one-versus-all y DAGSVM.

La primera, one-versus-one, consiste en aplicar el método a todos los posibles pares de las k clases, generando por lo tanto k(k-1)/2 predicciones, y asignando finalmente cada elemento a la clase que ha sido asignada con mayor frecuencia en el conjunto de predicciones. Esta es la opción por defecto de la función svm de R, aunque puede ser no adecuada –por el gran número de operaciones necesarias- cuando el número de clases es muy elevado.

La segunda, one-versus-all, compara cada clase con todas las restantes, obteniendo así k clasificadores, es decir un hiperplano para cada clase, que permite predecir la clase correspondiente a cada elemento. Sin embargo puede ocurrir que exista más de un clasificador positivo, en cuyo caso algunos elementos serán asignados a más de una clase.

La tercera, DAGSVM (Directed Acyclic Graph SVM) es una variante de la primera, one-versus-one, eliminando las comparaciones innecesarias: si en la comparación entre las clases i y j se obtiene que un elemento pertenece a la primera, podemos excluir la clase j de todas las comparaciones (combinaciones de pares de clases) subsiguientes. De este modo en la asignación de cada elemento se excluyen en general la mayoría de las combinaciones o pares de clases, mejorando así el rendimiento del algoritmo.

Para su aplicación con R utilizaremos la función svm del paquete e1071 que ya ha sido instalado en una unidad anterior.

La sintaxis básica de la función es:

```
svm(y ~ x, data)
```

Donde "y" es la variable de clasificación, o variable dependiente, y "x" el conjunto de predictores, que pueden ser cuantitativos o cualitativos. El argumento data, opcional, permite indicar el conjunto de datos al que pertenecen las variables de la fórmula.

Utilizaremos para el ejemplo el conjunto de datos "empresas", en el archivo "empresas.RData", con una muestra de 1194 empresas de las cuales 165 son empresas culturales, y 25 variables, relacionadas en la tabla siguiente, obtenidas del balance y cuenta de resultados de cada empresa. El objetivo es establecer si las variables contables están relacionadas con el carácter de empresa cultural, y en ese caso si es posible identificar si una empresa es cultural o no a partir de sus cuentas anuales (información libremente disponible en el Registro Mercantil).

VARIABLE	SIGNIFICADO
CULTURAL	Empresa cultural (1) o no cultural (0)
npac	ACTIVO CORRIENTE
npacc	Acreedores comerciales
npactt	ACTIVO TOTAL
npbaim	RESULTADO ANTES DE IMPUESTOS
npcaps	Capital Suscrito
npcone	Aprovisionamientos
npdfcp	Deudas a cp
npextc	Existencias
npfpro	Fondos Propios
npgper	Gastos de Personal
npimps	Impuesto sobre beneficios
npincn	Importe neto de la cifra de negocios
npingf	Ingresos Financieros
npmarv	Margen
npogex	Otros gastos de explotación
npoinf	Otros ingresos
nppatn	PATRIMONIO NETO
nppc	PASIVO CORRIENTE
npreje	RESULTADO DEL EJERCICIO
nprene	Rentabilidad Económica
nprenf	Rentabilidad Financiera
nprevs	Reservas
nprexp	RESULTADO DE EXPLOTACIÓN
nptes	Efectivo y otros activos líquidos

```
setwd("C:/CURSO DM")
load("empresas.RData")
names(empresas)
summary(empresas)
```

```
> names(empresas)
 [1] "CULTURAL" "npac"     "npacc"    "npactt"   "npbaim"   "npcaps"
 [7] "npcone"   "npdfcp"   "npextc"   "npfpro"   "npgper"   "npimps"
[13] "npincn"   "npingf"   "npmarv"   "npogex"   "npoinf"   "nppatn"
[19] "nppc"     "npreje"   "nprene"   "nprenf"   "nprevs"   "nprexp"
[25] "nptes"

> summary(empresas)
CULTURAL      npac               npacc               npactt              npbaim
0:1029 Min.   :     16615  Min.   :       229  Min.   :     40879  Min.   :  -4132944
1: 165 1st Qu.:    255194  1st Qu.:     98685  1st Qu.:    432775  1st Qu.:     -8442
       Median :    658630  Median :    245198  Median :   1196432  Median :      7258
       Mean   :   5693995  Mean   :   2892705  Mean   :  13630905  Mean   :   1612010
       3rd Qu.:   1919394  3rd Qu.:    752458  3rd Qu.:   3135912  3rd Qu.:     55804
       Max.   :2421517000  Max.   :1467502000  Max.   :5501603000  Max.   :1485515000
     npcaps             npcone               npdfcp              npextc
 Min.   :    2971   Min.   :-3736509000   Min.   :        0   Min.   :    -8241
 1st Qu.:   12000   1st Qu.:   -1881934   1st Qu.:    21030   1st Qu.:    40000
 Median :   54090   Median :    -509448   Median :    89893   Median :   167886
 Mean   :  638138   Mean   :   -8317870   Mean   :   896782   Mean   :  1500006
 3rd Qu.:  162632   3rd Qu.:    -167099   3rd Qu.:   347338   3rd Qu.:   530968
 Max.   :93500000   Max.   :     780862   Max.   :116743000   Max.   :416970000
     npfpro              npgper              npimps              npincn
 Min.   :  -3180689   Min.   :-130811000   Min.   :-70053000   Min.   :        52
 1st Qu.:    132143   1st Qu.:   -594990   1st Qu.:   -13609   1st Qu.:    421716
 Median :    411654   Median :   -235288   Median :    -1870   Median :   1065598
```

```
Mean   :   7421842   Mean   :   -985653   Mean   :  -137112   Mean   :  12013710
3rd Qu.:   1232870   3rd Qu.:   -111509   3rd Qu.:     1714   3rd Qu.:   3265299
Max.   :3227989000   Max.   :     -3359   Max.   :  2848000   Max.   :5363837000
    npingf            npmarv             npogex              npoinf
Min.   :     -47   Min.   :-46.94530   Min.   :-634379000   Min.   :     -42
1st Qu.:      53   1st Qu.:  0.00035   1st Qu.:   -443658   1st Qu.:      50
Median :     652   Median :  0.02225   Median :   -148974   Median :     632
Mean   :   63971   Mean   :  0.84694   Mean   :  -1497239   Mean   :   63869
3rd Qu.:    6076   3rd Qu.:  0.06705   3rd Qu.:    -59719   3rd Qu.:    5732
Max.   :27458749   Max.   : 54.94870   Max.   :     -2463   Max.   :27458749
    nppatn               nppc               npreje               nprene
Min.   :      1521   Min.   :      7212   Min.   :  -5723801   Min.   :-44.97920
1st Qu.:    133538   1st Qu.:    159101   1st Qu.:     -6983   1st Qu.:  0.00032
Median :    425298   Median :    399854   Median :      5182   Median :  0.02655
Mean   :   7465947   Mean   :   4628631   Mean   :   1474897   Mean   :  0.96188
3rd Qu.:   1300917   3rd Qu.:   1211212   3rd Qu.:     43680   3rd Qu.:  0.06782
Max.   :3204901000   Max.   :2272580000   Max.   :1415462000   Max.   : 56.03620
    nprenf             nprevs              nprexp              nptes
Min.   :-78.50060   Min.   :         1   Min.   :  -2708285   Min.   :  -105060
1st Qu.: -0.01738   1st Qu.:     49475   1st Qu.:     -2676   1st Qu.:    13911
Median :  0.02530   Median :    240272   Median :     20260   Median :    45949
Mean   :  0.86629   Mean   :   4430496   Mean   :   1666783   Mean   :   741334
3rd Qu.:  0.10110   3rd Qu.:    825920   3rd Qu.:     90318   3rd Qu.:   155702
Max.   : 53.00130   Max.   :2288286000   Max.   :1496275000   Max.   :612926000
```

Construimos los conjuntos de datos de entrenamiento (1000 empresas elegidas al azar) y de validación (las 194 restantes):

```
set.seed(123)
muestra <- sample(1:nrow(empresas), 1000)
entrenamiento <- empresas[muestra, ]
prueba <- empresas[-muestra, ]
```

Ahora aplicamos el método SVM para construir el modelo, con la variable CULTURAL dependiente de todas las restantes:

```
library(e1071)
modelo <- svm(CULTURAL ~ ., data = entrenamiento)
summary(modelo)
```

La orden summary nos permite observar los resultados, el contenido del objeto "modelo":

```
Call:
svm(formula = CULTURAL ~ ., data = entrenamiento)

Parameters:
   SVM-Type:  C-classification
 SVM-Kernel:  radial
       cost:  1
      gamma:  0.04166667

Number of Support Vectors: 121
 (59 62)

Number of Classes: 2
Levels:
 0 1
```

El tipo de svm es "clasificación", opción por defecto cuando la variable dependiente es un factor; svm también se puede utilizar como método de regresión si la variable dependiente es contínua.

Por defecto el núcleo o kernel es radial, con la transformación *exp(-gamma*|u-v|^2)*, donde gamma es una constante. Podrían haberse utilizado otros: "linear ", "polynomial", "sigmoid", mediante el argumento kernel (kernel = "linear") dentro de la función svm. Generalmente los mejores resultados se consiguen con la opción por defecto.

Cost = 1 indica el parámetro de ajuste adicional citado anteriormente para definir el margen adaptado: todas las observaciones dentro del margen de ± Cost se consideran también vectores soporte, y no solamente las observaciones que están en el margen.

Gamma = 0.04166667 es el valor de la constante utilizada en la transformación núcleo; por defecto se utiliza el inverso del número de variables explicativas (1/24=0.0416667).

El número de vectores soporte encontrados es 121, divididos en dos partes con 59 y 61 puntos o vectores a cada lado del hiperplano. Si queremos saber (no es relevante) cuales son esos 121 casos del conjunto de datos podemos ejecutar modelo$index.

A continuación, una vez construido el modelo, lo utilizamos para predecir la clase (empresa cultural o no). Observamos los resultados, elaborando la matriz de confusión, o tabla de doble entrada con la predicción y la clase real:

```
resultados.entrenamiento <- predict(modelo, newdata = entrenamiento, type = "class")
table(resultados.entrenamiento, entrenamiento$CULTURAL)
```

```
> table(resultados.entrenamiento, entrenamiento$CULTURAL)

resultados.entrenamiento   0   1
                       0 861  19
                       1   0 120
```

Observamos que la mayoría de las empresas han sido identificadas correctamente: todas las no culturales, y 120 de las 139 culturales. ¿Será capaz nuestro clasificador svm de identificar también correctamente las empresas no utilizadas para su construcción? Aplicamos el modelo al conjunto de prueba:

```
resultados.prueba <- predict(modelo, newdata = prueba, type = "class")
t <- table(resultados.prueba, prueba$ CULTURAL)
t ;  100 * sum(diag(t)) / sum(t)
```

```
> t <- table(resultados.prueba, prueba$ CULTURAL)
> t  ;  100 * sum(diag(t)) / sum(t)

resultados.prueba   0   1
                0 166   4
                1   2  22
[1] 96.90722
```

El 96,9% de las empresas son identificadas correctamente.