Classificacao

November 8, 2016

Projeto da disciplina de Data Mining PESC - Programa de Engenharia de Sistemas e Computação COPPE / UFRJ

Autor: Rafael Lopes Conde dos Reis

E-mail: condereis@cos.ufrj.br

GitHub: https://github.com/condereis/data-mining

1 Resumo

O trabalho consiste em classificar os dados de uma base desconhecida. Nesta planilha existe uma coluna que indica a classe das amostras, algumas das quais são desconhecida, sendo indicadas com "?". A tarefa consiste em realizar a dessas classificação destas amostras, fornecendo como saída seu ID e a respectiva classe. Deverá ser usado o Naive Bayes como baseline e dois (ou mais) classificadores distintos para realizar a mesma tarefa. Por fim, deverá ser feia uma análise dos resultados obtidos.

2 Pacotes Utilizados

```
In [1]: import numpy as np
    import pandas as pd
    import seaborn as sns
    import matplotlib.pyplot as plt

from scipy.stats import lognorm
    from sklearn import svm
    from sklearn.decomposition import PCA
    from sklearn.linear_model import LogisticRegression
    from sklearn.metrics import confusion_matrix
    from sklearn.model_selection import cross_val_score, train_test_split
    from sklearn.model_selection import GridSearchCV
    from sklearn.model_selection import RandomizedSearchCV
    from sklearn.naive_bayes import GaussianNB
%matplotlib inline
```

3 Análise Exploratória

Primeiramente foi feita uma análise exploratória das variáveis, plotando suas distribuições e um resumo estatístico das mesmas. Pelo resumo estatístico podemos observar que não existe nenhum valor faltando no dataset (exceto os valores que devem ser classificados). É possível notar também que a média e desvio padrão das variáveis X2 a X11 são muito semelhantes entre si e que o a faixa de valores ocupada por essas variáveis é muito estreita, variando em torno de 0,015 do valor máximo ao mínimo. Isso pode dificultar a convergência de alguns algoritmos, sendo indicada uma normalização desses valores.

In [2]: raw = pd.read_excel('../data/classificacao/classificacao-entrada.xls',

```
decimal=',', index col=0)
         del raw.index.name
         raw.head()
Out [2]:
                        X2
                                   Х3
                                              X4
                                                          X5
                                                                     Х6
                                                                                Х7
             Х1
        10
              9
                 1.001079
                             1.000849
                                        1.000867
                                                   1.000638
                                                              1.000560
                                                                         1.000331
                                                                                    1.00163
                 1.001850
                                        1.001014
                                                              1.001014
        11
              9
                            1.001681
                                                   1.000846
                                                                         1.000846
                                                                                    1.00270
        12
                 1.002005
                             1.001798
                                        1.001753
                                                   1.001547
                                                              1.001753
                                                                         1.001547
                                                                                    1.00236
              9
        13
              9
                 1.001509
                            1.001248
                                        1.001367
                                                   1.001107
                                                              1.001367
                                                                         1.001107
                                                                                    1.00167
                                        1.001135
                 1.001623
                             1.001264
         14
                                                   1.000776
                                                              1.000982
                                                                         1.000622
                                                                                    1.00205
                                                    X12 Classe
                    X9
                             X10
                                         X11
             1.001407
         10
                        1.001329
                                   1.001099
                                              0.851736
                                                              C
         11
             1.002537
                        1.002244
                                   1.002076
                                              3.252083
                                                              С
                                                              С
        12
             1.002161
                        1.001753
                                   1.001547
                                              0.653960
        13
                                                              С
             1.001414
                        1.001367
                                   1.001107 -0.277188
         14
             1.001697
                        1.001596
                                   1.001236
                                              0.859107
                                                              С
In [3]: raw.describe()
Out [3]:
                           X1
                                           X2
                                                           X3
                                                                          X4
                                                                                          X.
                10793.000000
                                10793.000000
                                               10793.000000
                                                               10793.000000
                                                                               10793.000000
         count
                    13.004262
                                    1.000001
                                                    1.000001
                                                                    0.999999
                                                                                   0.999999
        mean
                                    0.000739
                                                    0.000653
                     2.581256
                                                                    0.000663
                                                                                   0.000568
         std
                     9.000000
                                    0.993092
                                                    0.993643
                                                                    0.993583
                                                                                   0.993711
        min
         25%
                    11.000000
                                    0.999619
                                                    0.999661
                                                                    0.999677
                                                                                   0.999721
         50%
                    13.000000
                                    1.000002
                                                    0.999999
                                                                    1.000001
                                                                                   0.999998
         75%
                                                                                   1.000283
                    15.000000
                                    1.000395
                                                    1.000342
                                                                    1.000338
                    18.000000
                                    1.007497
                                                    1.007155
                                                                    1.006971
                                                                                   1.006783
        max
                           Х6
                                           Х7
                                                           X8
                                                                          Х9
                                                                                         X1(
                10793.000000
                                10793.000000
                                               10793.000000
                                                               10793.000000
                                                                               10793.000000
         count
                     0.999690
                                    0.999689
                                                    1.000314
                                                                                   0.999999
        mean
                                                                    1.000314
         std
                     0.000740
                                    0.000654
                                                    0.000735
                                                                    0.000650
                                                                                   0.000787
                                                    0.994045
                     0.992300
                                    0.992941
                                                                    0.994172
                                                                                   0.992452
        min
         25%
                     0.999347
                                    0.999392
                                                    0.999911
                                                                    0.999948
                                                                                   0.999608
         50%
                     0.999752
                                    0.999750
                                                    1.000248
                                                                    1.000242
                                                                                   0.999999
                                    1.000051
         75%
                     1.000097
                                                    1.000661
                                                                    1.000616
                                                                                   1.000394
```

```
1.006844
                                   1.006781
                                                  1.008614
                                                                 1.008299
        max
                                        X12
                         X11
                10793.000000
                              10793.000000
        count
                                  -0.000342
        mean
                    0.999999
                    0.000708
                                   1.000223
        std
        min
                    0.993354
                                  -1.062153
        25%
                    0.999649
                                  -0.673970
        50%
                    1.000000
                                  -0.295615
        75%
                    1.000356
                                   0.351766
                    1.007692
                                  14.230537
        max
In [4]: raw_train = raw[raw.Classe != '?']
        raw_test = raw[raw.Classe == '?'].drop(['Classe'], axis=1)
```

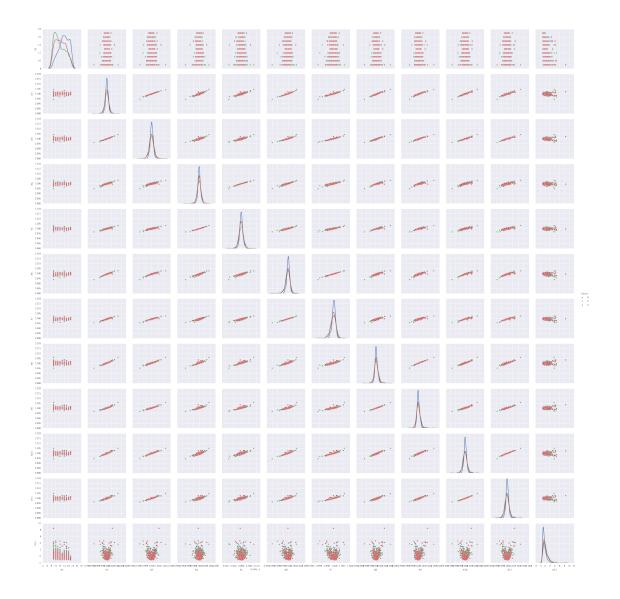
1.007755

3.1 Distribuições das Variáveis

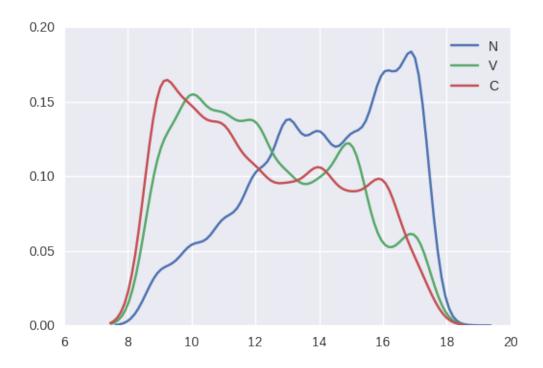
O plot abaixo, mostra a relação de cada par de variáveis, assim como um histograma de cada uma, separando cada classe com uma cor. Observando as distribuição das variáveis é possível notar claramente que a variável X1 é categórica e aprezenda distribuições consideravelmente distintas para cada classe. As demais variáveis, exceto X12, apresentam forte correlação linear entre sí, além de possuírem uma distribuição que se assemelha a uma gaussiana. A variável X12, já não apresenta uma correlação linear forte com as demais e sua distribuição se assemelha mais a uma distribuição exponencial ou lognormal.

Não é possível ver nenhuma forma de agrupamento das diferentes classe a olho nú por meio do plot abaixo (exceto em X1). É possível que aplicar uma redução de dimensão, uma vez que há uma forte correlação entre muitas das dimensões possa vir a permitir uma melhor visualização de agrupamentos por classe.

```
In [5]: sns.pairplot(raw_train.sample(frac=0.1), diag_kind=b"kde", hue='Classe');
```

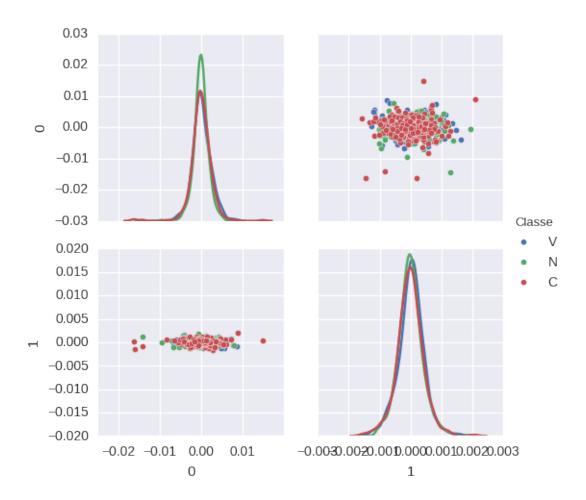


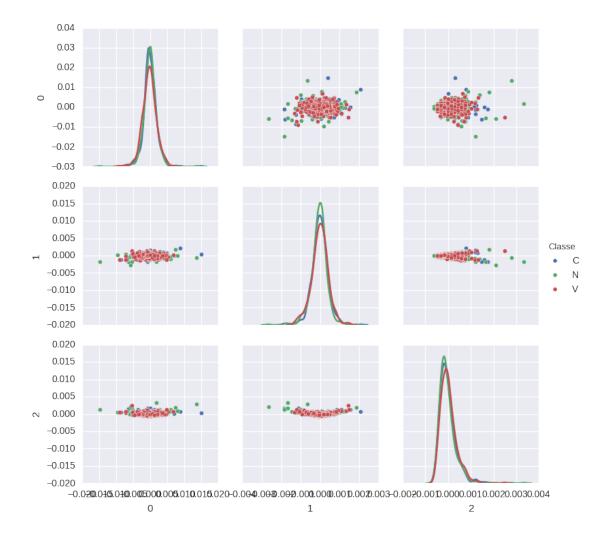
Exibindo em detalhe a distribuição de probabilidade da variável X1 para cada classe pode-se observar que a classe N está bastante separada das demais.



3.1.1 Redução de Dimensionalidade

Ao testar a aplicação de PCA, reduzindo para 2 e 3 componentes principais, nas variáveis fortemente correlacionadas podemos observar que continua não havendo grupos bem separados dos dados.



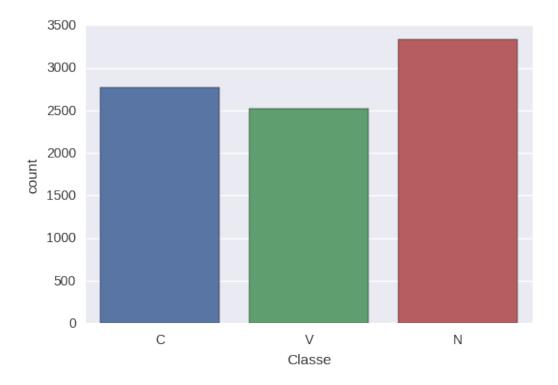


Por último é possível observar que as classes são bem balanceadas, o que é positivo uma vez que muitos modelos não funcionam bem com problemas onde existe uma variância muito grande entre as classes. Esse fato faz com que não seja necessário o uso de uma medida de eficiência mais sofisticada, como a área sob a curva ROC, e portando foi analisada a acurácia na classificação como medida de eficiência.

Também é possível setar um primeiro baseline de acurácia. A acurácia ao chutar a classe mais frequente é de 0.386981.

```
In [8]: sns.countplot(x="Classe", data=raw_train);
    print 'Acurácia ao chutar a classe mais frequente: %f' % (
         len(raw_train[raw_train.Classe == 'N'])/float(len(raw_train))
)
```

Acurácia ao chutar a classe mais frequente: 0.386981

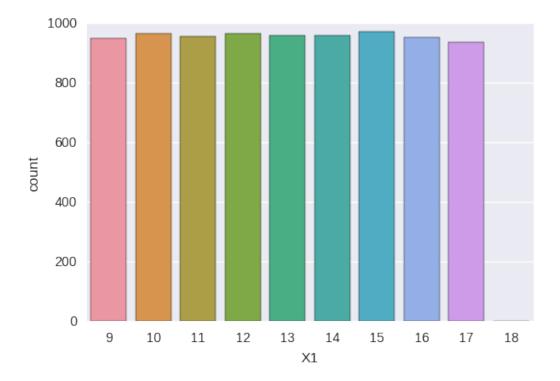


4 Pré-processamento

4.1 Variável X1

Como é possível observar na figura abaixo a variável X1 é categórica. Suas classes tem distribuição praticamente homogênea, com exceção da classe 18 que praticamente não tem representatividade quando comparada com as demais.

```
In [9]: sns.countplot(x="X1", data=raw_train);
```



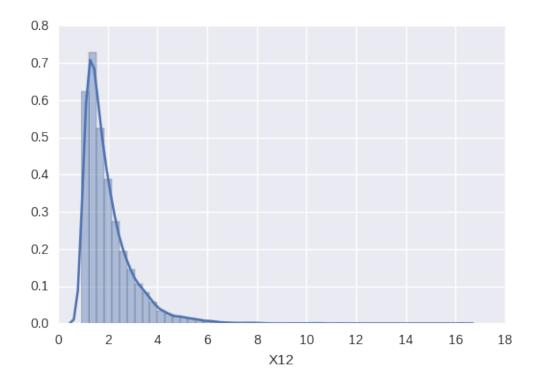
Como a variável X1 é categórica ela sera codificada por *one hot encoding*, ou seja, cada valor se transforma num array onde apenas o elemento com o índice igual a classe é 1 e os demais são 0. Como a classe 18 tem baixa representatividade ela será removida do vetor, de forma que a informação de pertencer a classe 18 será codificada por um vetor de zeros.

4.2 Variável X12

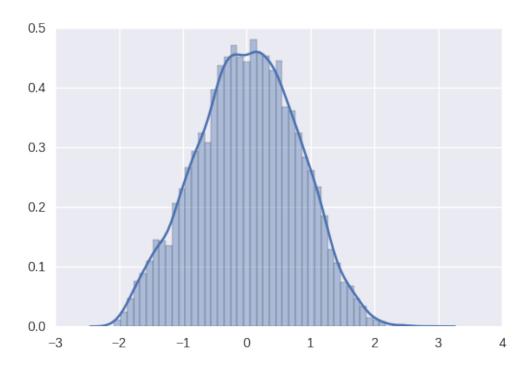
O plot abaixo mostra a distribuição da variável X12. Como foi falado, se aproxima muito de uma distribuição lognormal. O único problema é que ela parece estar deslocada para a esquerda e uma distribuição lognormal não pode conter valores negativos. A figura abaixo mostra a distribuição ao ser somado 2 como offset. Esse valor possui uma margem considerável do menor valor encontrado (-1.062153).

```
In [11]: sns.distplot(raw['X12']+2)
```

Out[11]: <matplotlib.axes._subplots.AxesSubplot at 0x7f766846c810>



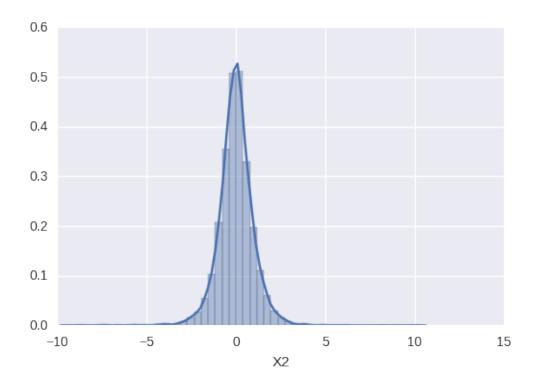
Foram então calculadas a média e a variância da suposta distribuição lognormal por meio da *maximum likelihood estimation*. Foi subtraída a média e dividida pela variância. Por fim calculouse o logaritmo neperiano da distribuição a fim de encontrar uma distribuição normal com média próxima a 0 e variância aproximadamente unitária. A figura abaixo mostra a nova distribuição. Esta parece ser uma boa maneira de pré-processar a variável X12.



4.3 Variáveis X2 a X11

Elas serão apenas processadas para terem média 0 e variância unitária.

```
In [13]: x2_x11 = raw[['X2', 'X3', 'X4', 'X5', 'X6', 'X7', 'X8', 'X9', 'X10',
                       'X11']]
        x2_x11_preproc = (x2_x11 - x2_x11.mean())/x2_x11.std()
        x2_x11_preproc.head()
Out[13]:
                  X2
                            Х3
                                      X4
                                                Х5
                                                          X6
                                                                    Х7
                                                                              Х8
        10 1.457189
                      1.299660
                               1.308473
                                          1.123997
                                                    1.175316
                                                              0.979785
                                                                        1.798238
        11
            2.499964 2.574294 1.529997
                                          1.490015 1.789300
                                                              1.767710
                                                                        3.252396
        12 2.709811 2.753005 2.644556 2.722678 2.788089
                                                              2.838679
                                                                        2.794082
        13
           2.038886
                     1.911088
                                2.061518
                                          1.948194
                                                    2.265612
                                                              2.165787
                                                                        1.849781
                     1.934487
        14
            2.193663
                                1.712309
                                          1.366518 1.745235 1.425817
                                                                        2.370006
                  Х9
                           X10
                                     X11
        10
            1.682393
                      1.689945
                                1.554725
            3.422107
                      2.853775
                                2.934645
        11
        12 2.844237
                      2.230230
                                2.187292
        13
            1.693174
                      1.738525
                                1.565085
        14
            2.129113
                      2.029687
                                1.748551
In [14]: sns.distplot(x2_x11_preproc['X2'])
Out[14]: <matplotlib.axes._subplots.AxesSubplot at 0x7f767014b410>
```



Finalmente, os dados são concatenados a coluna Classe e separados em treino e teste.

```
In [15]: preproc = pd.concat([x1_preproc, x2_x11_preproc, x12_preproc, raw['Classe'])
                               axis=1, join='inner')
         preproc.head()
Out [15]:
              X1_9
                    X1_10
                            X1_11
                                   X1_12
                                           X1_13
                                                  X1_14
                                                          X1_15
                                                                  X1_16
                                                                          X1_17
         10
                 1
                                0
                                        0
                         0
                                                0
                                                       0
                                                               0
                                                                      0
                                                                              0
                                                                                 1.457189
         11
                 1
                         0
                                0
                                        0
                                                0
                                                       0
                                                               0
                                                                      0
                                                                              0
                                                                                 2.499964
         12
                 1
                         0
                                0
                                        0
                                                0
                                                       0
                                                               0
                                                                      0
                                                                              0
                                                                                 2.709811
         13
                 1
                         0
                                0
                                        0
                                                0
                                                       0
                                                               0
                                                                      0
                                                                              0
                                                                                 2.038886
         14
                 1
                         0
                                0
                                        0
                                                       0
                                                                       0
                                                                                 2.193663
                                                0
                                                               0
                                        X5
                                                   Х6
                                                              Х7
                                                                         X8
                                                                                   Х9
                             X4
                      1.308473
                                 1.123997
                                            1.175316
                                                       0.979785
                                                                  1.798238
                                                                             1.682393
         10
         11
                      1.529997
                                 1.490015
                                            1.789300
                                                       1.767710
                                                                  3.252396
                                                                             3.422107
         12
                      2.644556
                                 2.722678
                                            2.788089
                                                       2.838679
                                                                  2.794082
                                                                             2.844237
         13
                      2.061518
                                 1.948194
                                            2.265612
                                                       2.165787
                                                                  1.849781
                                                                             1.693174
         14
                      1.712309
                                 1.366518
                                            1.745235
                                                       1.425817
                                                                  2.370006
                                                                             2.129113
                   X10
                              X11
                                         X12
                                              Classe
         10
              1.689945
                        1.554725
                                   0.859321
                                                    С
         11
              2.853775
                        2.934645
                                    1.642169
                                                    С
         12 2.230230 2.187292
                                   0.756335
                                                    С
```

0.041533

С

1.565085

13

1.738525

5 Naive Bayes

Primeiramente foi testado Naive Bayes com os dados antes e após o pré-processamento, concluindo que de fato o pré-processamento foi positivo para o modelo, aumentando a acurácia em mais de 10 pontos percentuais. Em seguida aplicado redução de dimensionalidade com PCA e avaliar o desempenho do modelo conforme o número de dimensões é reduzido.

A sequir é plotada a matriz de confusão do modelo. Por ela é possível observar que o modelo, para a classe N, possui uma taxa de acerto muito maior do que para as demais. Isso confirma o que foi visto na distribuição da variável X1.

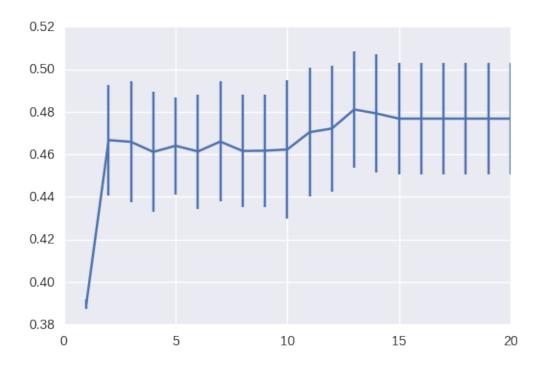


6 Logistic Regression

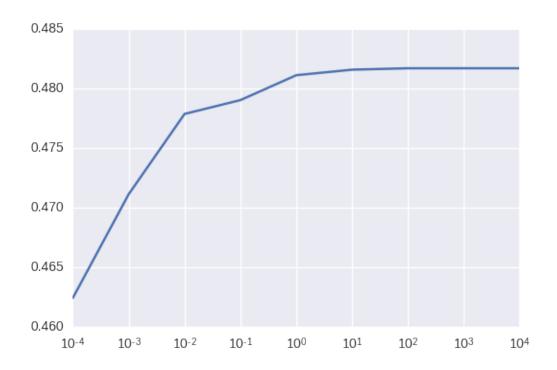
O segundo modelo aplicado foi Logistic Regression. Usando as configurações padrões o resultado foi inferior ao obtido com Naive Bayes. A seguir, porém, foi feito um ajuste fino no modelo.

Aplicando redução de dimensionalidade a acurácia obtida teve seu valor médio máximo com PCA reduzindo para 13 dimensões.

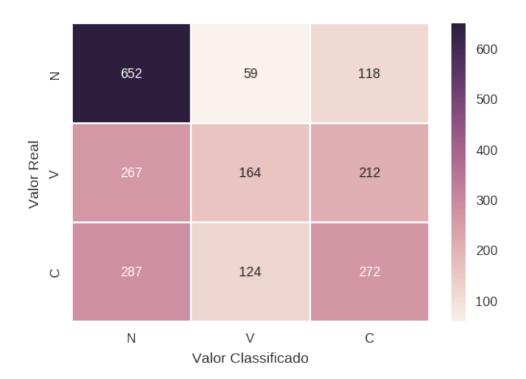
Out[20]: <Container object of 3 artists>



Por fim foi variado o parâmetro C, que corresponde a inversa da força de regularização. Foram testados valores variando entre 0.0001 a 10000. A melhor configuração foi a com C=10. O valor encontrado para a acurácia na melhor configuração foi de 0.481541 +- 0.027655.



Como esperado pela pequena variação na acurácia, não houve variação significativa na matriz de confusão.



7 Support Vector Machine

O primeiro passo para a aplicação de SVM foi definir qual o tipo de kernel que seria usado. Para isso foram testados 4 tipos: Linear, polinomial, sigmoidal e RBF. Para cada teste foi usada 5-fold cross-validation. Surpreendentemente o kernel liner foi superior ao polinomial, porem o RBF foi o que apresentou melhor desempenho entre os 4.

```
In [24]: model = svm.SVC(kernel='linear')
         scores = cross_val_score(model, train.drop('Classe', axis=1),
                                  train['Classe'], cv=5, n_jobs=-1)
         print 'SVM - Linear: %f +- %f' % (np.mean(scores), np.std(scores))
         model = svm.SVC(kernel='poly')
         scores = cross_val_score(model, train.drop('Classe', axis=1),
                                  train['Classe'], cv=5, n_jobs=-1)
         print 'SVM - Polinomial: %f +- %f' % (np.mean(scores), np.std(scores))
         model = svm.SVC(kernel='sigmoid')
         scores = cross_val_score(model, train.drop('Classe', axis=1),
                                  train['Classe'], cv=5, n_jobs=-1)
         print 'SVM - Sigmoidal: %f +- %f' % (np.mean(scores), np.std(scores))
         model = svm.SVC()
         scores = cross_val_score(model, train.drop('Classe', axis=1),
                                  train['Classe'], cv=5, n jobs=-1)
         print 'SVM - RBF: %f +- %f' % (np.mean(scores), np.std(scores))
```

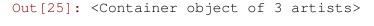
```
SVM - Linear: 0.455894 +- 0.029928

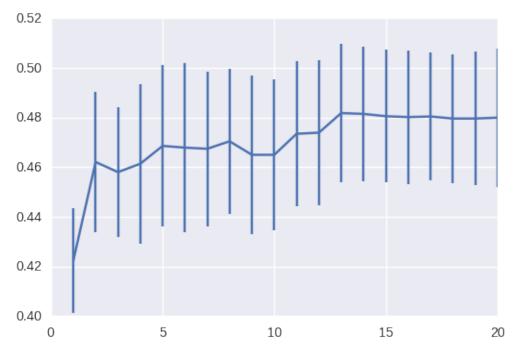
SVM - Polinomial: 0.437453 +- 0.020423

SVM - Sigmoidal: 0.372704 +- 0.018569

SVM - RBF: 0.479916 +- 0.027878
```

Aplicando redução de dimensionalidade a acurácia obtida teve seu valor médio máximo com PCA reduzindo para 13 dimensões.



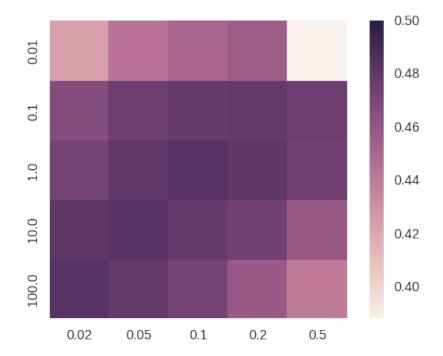


Por fim foram variados os parâmetros C (parâmetro de penalidade do erro) e *gamma* (o coeficiente do kernel) do modelo. Foram testados valores variando entre 0.01 a 100 para C e entre 0.02

e 0.5 para *gama*. A melhor configuração foi a com C=10 e *gamma*=0.05. O valor encontrado para a acurácia na melhor configuração foi de 0.484209 +- 0.028707.

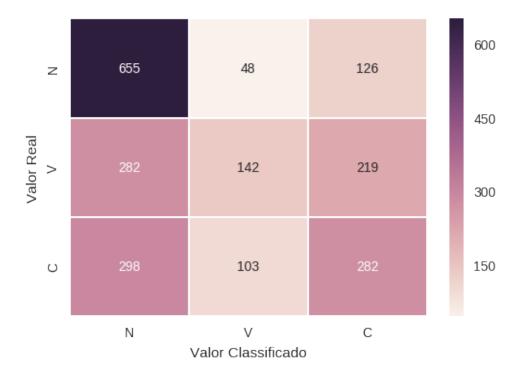
```
In [32]: reduced_data = PCA(n_components=13).fit_transform(
                 train.drop('Classe', axis=1)
             )
         clf = svm.SVC()
         c_list = [0.01, 0.1, 1, 10, 100]
         gamma_list = [0.02, 0.05, 0.1, 0.2, 0.5]
         param dist = {
             "C": c list,
             "gamma": gamma_list
         # run randomized search
         grid_search = GridSearchCV(clf, param_grid=param_dist, cv=5,
                                     n_{jobs}=-1)
         grid_search.fit(reduced_data, train['Classe'])
         mtx = grid_search.cv_results_['mean_test_score'].reshape(5,5)
         sns.heatmap(pd.DataFrame(mtx, columns=gamma_list, index=c_list),
                     vmax=.5,
                     square=True)
```

Out[32]: <matplotlib.axes._subplots.AxesSubplot at 0x7f767028d690>



Novamente, como esperado pela pequena variação na acurácia, não houve variação significativa na matriz de confusão.

Out[36]: <matplotlib.text.Text at 0x7f766fe21990>



8 Conclusão

Os modelos testados apresentaram resultados muito semelhantes para os dados utilizados, mesmo após terem seus parâmetros ajustados. O modelo SVM foi o que apresentou o maior resultado, porém a diferença é tão pequena comparada com a margem de erro que não justifica seu uso. O modelo Naive Bayes teve um resultado tão bom quanto e é um modelo de interpretação muito mais simples, portanto esta seria a escolha de modelo, dentre os testados.

9 Aplicação dos modelos nos dados não classificados

```
In [37]: reduced_data = PCA(n_components=13).fit_transform(test)

predict = best_nb.predict(test)
out_df = pd.DataFrame(predict, columns=['Classe'], index=test.index)
out_df.to_csv('../data/classificacao/out_naive_bayes.csv')

predict = best_lr.predict(reduced_data)
out_df = pd.DataFrame(predict, columns=['Classe'], index=test.index)
out_df.to_csv('../data/classificacao/out_logistic_regression.csv')

predict = best_svm.predict(reduced_data)
out_df = pd.DataFrame(predict, columns=['Classe'], index=test.index)
out_df.to_csv('../data/classificacao/out_svm.csv')
```