

# Inteligencia de Negocio: Práctica 1

## Resolución de problemas de clasificación y análisis experimental

David Cabezas Berrido

Grupo 2: Viernes

[dxabezas@correo.ugr.es](mailto:dxabezas@correo.ugr.es)

27 de octubre de 2020

# Índice

|  |          |
|--|----------|
| <b>1. Introducción</b>   | <b>3</b> |
| <b>2. Procesado de datos</b>   | <b>4</b> |
| 2.1. Preprocesado básico: Eliminación de valores perdidos . . . . .        | 4        |
| 2.2. Preprocesado 1: Imputación de valores perdidos . . . . .              | 4        |
| 2.3. Preprocesado 2: Eliminación de características innecesarias . . . . . | 5        |
| 2.4. Preprocesado 4: Binarización de características nominales . . . . .   | 6        |
| <b>3. Configuración de algoritmos</b>                                      | <b>7</b> |
| <b>4. Resultados obtenidos</b>   | <b>7</b> |
| <b>5. Análisis de resultados</b>   | <b>7</b> |
| 5.1. Sobre preprocesado básico . . . . .                                   | 7        |
| 5.2. Sobre preprocesado 1 (Imputación de valores perdidos) . . . . .       | 7        |
| <b>6. Interpretación de resultados</b>                                     | <b>7</b> |
| <b>7. Contenido adicional</b>  | <b>7</b> |
| <b>8. Bibliografía</b>   | <b>7</b> |

# 1. Introducción

En esta primera práctica abordaremos el problema de decidir si un tumor en una mamografía es benigno o maligno, por lo que deducimos que se trata de un problema de clasificación binaria (dos clases: benigno y maligno). Disponemos para ello de datos de 961 pacientes, para cada uno de ellos se han medido 6 atributos entre cualitativos y cuantitativos.

Sobre este problema real, pondremos a prueba los distintos algoritmos estudiados en teoría y las herramientas de prácticas. Trataremos de mejorar los resultados mediante el procesamiento de los datos y probando distintos hiperparámetros en los algoritmos. Finalmente, compararemos los algoritmos entre sí y discutiremos cuál es el más adecuado para el problema.

Para la experimentación usaremos validación cruzada de 5 particiones. La matriz de confusión se calculará como la suma de las matrices de confusión de cada partición, de esta forma la matriz resultante tendrá en cuenta cada instancia una sola vez. Como usamos validación cruzada, nos ahorramos tener que separar un conjunto de test para pruebas y aprovechamos cada instancia tanto para entrenamiento como para evaluación.

Para esta tarea, utilizaremos las herramientas *pandas*, para tratamiento y visualización de datos; y *sklearn* para el preprocesado y la creación de los modelos.

Empezamos analizando el dataset. Como ya hemos comentado, consta de 961 instancias y cuenta con 6 atributos:

1. Código **BI-RADS**: se trata de un número entero entre 0 y 6 (ambos incluidos) asignado por un radiólogo tras interpretar la mamografía. Un mayor valor significa una mayor probabilidad de malignidad, a excepción del valor 0, que indica que la información de la radiografía es insuficiente. Tendremos que tener esto en cuenta, ya que puede “confundir” a algunos algoritmos como el KNN, que interpretaría que un código 0 está más próximo a un código 1 que a un código 4, lo cual no tiene sentido a priori (sin atender a más características).
2. Edad del paciente: entero positivo.
3. Forma del tumor: nominal, 4 posibles formas distintas (R, O, L, I) y N para indicar que la forma no está definida.
4. Margen de la masa: nominal, 5 posibles valores (del 1 al 5).
5. Densidad de la masa: entero entre 1 y 4 (ambos inclusive), un menor valor indica mayor densidad.
6. Severidad: variable objetivo a predecir, benigno o maligno.

Hay algunos datos perdidos en el dataset:

|          |    |
|----------|----|
| BI-RADS  | 2  |
| Age      | 5  |
| Shape    | 0  |
| Margin   | 48 |
| Density  | 76 |
| Severity | 0  |

En principio, no hay los suficientes datos perdidos como para dejar de considerar alguna variable, pero durante el procesamiento de datos discutiremos si eliminar alguna o cómo imputar los datos perdidos.

De los 961 instancias, 445 pertenecen a la clase maligno (46.3%) y 516 a benigno (53.7%). Las clases están bastante balanceadas, lo que en general convierte a la accuracy en una métrica bastante adecuada y fácil de interpretar (proporción de ejemplos bien clasificados) para la bondad de los algoritmos de clasificación. Sin embargo, en este problema concreto, parece mucho más grave un falso negativo (predecimos benigno y enviamos a un paciente a casa que debería empezar a tratarse) que un falso positivo (predecimos maligno y el paciente irá a análisis posteriores donde probablemente se percaten del error); por lo que puede ser interesante considerar otras métricas de evaluación.

En concreto, las métricas F1-score y G-measure, medias armónica y geométrica respectivamente de PPV (proporción de correctas entre las predicciones positivas) y TPR (proporción de correctas entre los ejemplos positivos), penalizan más los errores a la hora de clasificar instancias positivas (malignas). Esto las hace más adecuadas para el problema, por lo que les daremos mayor importancia a la hora de discutir cuando un algoritmo, configuración o procesamiento es mejor que otro.

## 2. Procesado de datos

Presentamos distintas técnicas de preprocesado de los datos. Discutiremos, para cada una de ellas, su efecto (bueno o malo) sobre los resultados de los algoritmos. Para comparar la bondad de los procesamientos, ejecutaremos todos los algoritmos a comparar con parámetros por defecto sobre esos datos y atenderemos a los score medio y máximo conseguidos entre los modelos (ignorando el `DummyClassifier`).

En todas ellas debemos usar `LabelEncoder` (de *sklearn*), porque los algoritmos de esta librería necesitan trabajar con datos numéricos.

### 2.1. Preprocesado básico: Eliminación de valores perdidos

La mayoría de los algoritmos no aceptan como entrada datos con valores perdidos, esto se podría solucionar asignando un valor fijo a estos valores que represente valor perdido, o simplemente podemos eliminar los valores perdidos con el método `dropna` del objeto `DataFrame` de *pandas*. Este es un preprocesado muy básico, prácticamente el justo para que funcionen los algoritmos, y debería ser superado a medida que experimentemos con procesamientos más avanzados.

Hay que tener en cuenta que el valor 0 en el código BI-RADS significa radiografía insuficiente, y el valor N en la forma significa que la forma no está definida. Así que consideraremos estos valores como perdidos.

Ejecutamos los algoritmos sobre estos datos y obtenemos los siguientes resultados:

|               | TP     | TN     | FP    | FN    | Acc    | TPR    | FPR    | PPV    | AUC    | F1-score | G-measure |
|---------------|--------|--------|-------|-------|--------|--------|--------|--------|--------|----------|-----------|
| Dummy         | 400    | 0      | 425   | 0     | 0.4848 | 1.0    | 1.0    | 0.4848 | 0.5    | 0.6531   | 0.6963    |
| DecisionTree  | 288    | 341    | 84    | 112   | 0.7624 | 0.72   | 0.1976 | 0.7742 | 0.7612 | 0.7461   | 0.7466    |
| GaussianNB    | 341    | 340    | 85    | 59    | 0.8255 | 0.8525 | 0.2    | 0.8005 | 0.8263 | 0.8257   | 0.8261    |
| MultinomialNB | 330    | 325    | 100   | 70    | 0.7939 | 0.825  | 0.2353 | 0.7674 | 0.7949 | 0.7952   | 0.7957    |
| RandomForest  | 312    | 345    | 80    | 88    | 0.7964 | 0.78   | 0.1882 | 0.7959 | 0.7959 | 0.7879   | 0.7879    |
| KNN           | 330    | 333    | 92    | 70    | 0.8036 | 0.825  | 0.2165 | 0.782  | 0.8043 | 0.8029   | 0.8032    |
| NeuralNetwork | 337    | 332    | 93    | 63    | 0.8109 | 0.8425 | 0.2188 | 0.7837 | 0.8118 | 0.812    | 0.8126    |
| Máximo        | 341    | 345    | 100   | 112   | 0.8255 | 0.8525 | 0.2353 | 0.8005 | 0.8263 | 0.8257   | 0.8261    |
| Media         | 323.00 | 336.00 | 89.00 | 77.00 | 0.7988 | 0.8075 | 0.2094 | 0.784  | 0.799  | 0.795    | 0.7953    |

Tabla 1: Eliminación de instancias con valores perdidos

### 2.2. Preprocesado 1: Imputación de valores perdidos

Rellenamos los valores perdidos con algún valor para no tener que eliminar una instancia y poder aprovechar así el resto de datos de la instancia (los no perdidos). Para las variables numéricas, discutiremos 2 formas de hacer esto: la media y la mediana de la columna. En cambio las nominales las imputaremos usando la moda.

Para esta tarea utilizamos el objeto `SimpleImputer` de *sklearn*, debemos indicarle la estrategia que queremos que utilice. Como hemos comentado: probaremos `'mean'` y `'median'` para las variables numéricas y `'most_frequent'` para las nominales. Antes de continuar, nos quedaremos con la estrategia para las variables numéricas que consiga los mejores resultados.

|               | TP     | TN     | FP     | FN    | Acc    | TPR    | FPR    | PPV    | AUC    | F1-score | G-measure |
|---------------|--------|--------|--------|-------|--------|--------|--------|--------|--------|----------|-----------|
| Dummy         | 445    | 0      | 516    | 0     | 0.4631 | 1.0    | 1.0    | 0.4631 | 0.5    | 0.633    | 0.6805    |
| DecisionTree  | 316    | 420    | 96     | 129   | 0.7659 | 0.7101 | 0.186  | 0.767  | 0.762  | 0.7375   | 0.738     |
| GaussianNB    | 374    | 413    | 103    | 71    | 0.8189 | 0.8404 | 0.1996 | 0.7841 | 0.8204 | 0.8113   | 0.8118    |
| MultinomialNB | 363    | 390    | 126    | 82    | 0.7836 | 0.8157 | 0.2442 | 0.7423 | 0.7858 | 0.7773   | 0.7782    |
| RandomForest  | 338    | 422    | 94     | 107   | 0.7908 | 0.7596 | 0.1822 | 0.7824 | 0.7887 | 0.7708   | 0.7709    |
| KNN           | 341    | 411    | 105    | 104   | 0.7825 | 0.7663 | 0.2035 | 0.7646 | 0.7814 | 0.7654   | 0.7654    |
| NeuralNetwork | 365    | 410    | 106    | 80    | 0.8065 | 0.8202 | 0.2054 | 0.7749 | 0.8074 | 0.7969   | 0.7973    |
| Máximo        | 374    | 422    | 126    | 129   | 0.8189 | 0.8404 | 0.2442 | 0.7841 | 0.8204 | 0.8113   | 0.8118    |
| Media         | 349.50 | 411.00 | 105.00 | 95.50 | 0.7914 | 0.7854 | 0.2035 | 0.7692 | 0.791  | 0.7765   | 0.7769    |

Tabla 2: Imputando valores perdidos numéricos con la media

|               | TP     | TN     | FP     | FN    | Acc    | TPR    | FPR    | PPV    | AUC    | F1-score | G-measure |
|---------------|--------|--------|--------|-------|--------|--------|--------|--------|--------|----------|-----------|
| Dummy         | 445    | 0      | 516    | 0     | 0.4631 | 1.0    | 1.0    | 0.4631 | 0.5    | 0.633    | 0.6805    |
| DecisionTree  | 318    | 420    | 96     | 127   | 0.768  | 0.7146 | 0.186  | 0.7681 | 0.7643 | 0.7404   | 0.7409    |
| GaussianNB    | 374    | 413    | 103    | 71    | 0.8189 | 0.8404 | 0.1996 | 0.7841 | 0.8204 | 0.8113   | 0.8118    |
| MultinomialNB | 363    | 390    | 126    | 82    | 0.7836 | 0.8157 | 0.2442 | 0.7423 | 0.7858 | 0.7773   | 0.7782    |
| RandomForest  | 335    | 420    | 96     | 110   | 0.7856 | 0.7528 | 0.186  | 0.7773 | 0.7834 | 0.7648   | 0.7649    |
| KNN           | 346    | 414    | 102    | 99    | 0.7908 | 0.7775 | 0.1977 | 0.7723 | 0.7899 | 0.7749   | 0.7749    |
| NeuralNetwork | 366    | 410    | 106    | 79    | 0.8075 | 0.8225 | 0.2054 | 0.7754 | 0.8085 | 0.7983   | 0.7986    |
| Máximo        | 374    | 420    | 126    | 127   | 0.8189 | 0.8404 | 0.2442 | 0.7841 | 0.8204 | 0.8113   | 0.8118    |
| Media         | 350.33 | 411.17 | 104.83 | 94.67 | 0.7924 | 0.7873 | 0.2032 | 0.7699 | 0.7921 | 0.7778   | 0.7782    |

Tabla 3: Imputando valores perdidos numéricos con la mediana

Atendiendo al máximo y a la media de los scores de los algoritmos, observamos que con este preprocesado no mejoran las métricas Accuracy y AUC (Area Under Curve), que miden la eficiencia general de los modelos. Además, las métricas F1-score y G-measure decrecen levemente, que son las que se ajustan más a la naturaleza del problema, ya que penalizan más los falsos positivos. Esto ocurre en para las dos estrategias, aunque la imputación de valores numéricos por la mediana ha resultado ligeramente mejor que usando la media, ambas han empeorado el desempeño de los algoritmos. Por esto decidimos abandonar la idea de imputar valores y mantenemos las instancias con valores perdidos eliminadas.

### 2.3. Preprocesado 2: Eliminación de características innecesarias

Estudiaremos si todas las características son útiles a la hora de predecir. En primer lugar, obtenemos la desviación típica de cada una:

| BI-RADS  | Age       | Margin   | Density  |
|----------|-----------|----------|----------|
| 0.635706 | 14.480131 | 1.566546 | 0.380444 |

Observamos una baja varianza en BI-RADS y en Density, usamos **Counter** para ver su distribución y observamos que de las 825 instancias sin valores perdidos, hay 468 con el valor 4 para el código BI-RADS y 317 con el valor 5. Decidimos mantenerla, ya que puede seguir teniendo interés, aun así, optamos por colapsar el resto de valores en 4 (los valores 2 y 3) y 5 (valor 6), ya que hay muy pocas instancias con estos valores (40 en total).

En el caso de Density, 750 instancias tienen el valor 3, por lo que su distribución es prácticamente degenerada en 3. Así que decidimos eliminar esta variable.

Estas dos acciones suponen obviamente una pérdida de información, pero ayuda a reducir la complejidad de los modelos y los hace más fácilmente interpretables (la característica se convierte en binaria), de modo que mantendremos esta decisión siempre que no suponga un descenso notable en el desempeño de los algoritmos.

No nos muestra la desviación de Shape al no ser numérica, pero obtenemos igualmente su distribución con **Counter** y observamos que está lejos de ser degenerada, así que la mantenemos.

Con el método **corr** de **pandas.DataFrame**, obtenemos la matriz de correlación entre las características. Si encontramos dos atributos altamente correlados, nos plantearíamos si quedarnos con sólo uno de ellos.

|          | BiRads    | Age       | Shape     | Margin    | Severity  |
|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| BiRads   | 1.000000  | 0.400823  | -0.552308 | 0.574538  | 0.669436  |
| Age      | 0.400823  | 1.000000  | -0.377555 | 0.420682  | 0.453140  |
| Shape    | -0.552308 | -0.377555 | 1.000000  | -0.738531 | -0.564691 |
| Margin   | 0.574538  | 0.420682  | -0.738531 | 1.000000  | 0.576492  |
| Severity | 0.669436  | 0.453140  | -0.564691 | 0.576492  | 1.000000  |

Figura 1: Matriz de correlación entre los atributos

No encontramos ningún par de variables con una correlación alta entre ellas, el máximo es -0.7385 entre Shape y Margin. De modo que mantenemos el resto de características.

Los resultados obtenidos son:

|               | TP     | TN     | FP    | FN    | Acc    | TPR    | FPR    | PPV    | AUC    | F1-score | G-measure |
|---------------|--------|--------|-------|-------|--------|--------|--------|--------|--------|----------|-----------|
| Dummy         | 400    | 0      | 425   | 0     | 0.4848 | 1.0    | 1.0    | 0.4848 | 0.5    | 0.6531   | 0.6963    |
| DecisionTree  | 293    | 349    | 76    | 107   | 0.7782 | 0.7325 | 0.1788 | 0.794  | 0.7768 | 0.762    | 0.7626    |
| GaussianNB    | 346    | 347    | 78    | 54    | 0.84   | 0.865  | 0.1835 | 0.816  | 0.8407 | 0.8398   | 0.8402    |
| MultinomialNB | 329    | 324    | 101   | 71    | 0.7915 | 0.8225 | 0.2376 | 0.7651 | 0.7924 | 0.7928   | 0.7933    |
| RandomForest  | 313    | 345    | 80    | 87    | 0.7976 | 0.7825 | 0.1882 | 0.7964 | 0.7971 | 0.7894   | 0.7894    |
| KNN           | 328    | 335    | 90    | 72    | 0.8036 | 0.82   | 0.2118 | 0.7847 | 0.8041 | 0.802    | 0.8022    |
| NeuralNetwork | 323    | 338    | 87    | 77    | 0.8012 | 0.8075 | 0.2047 | 0.7878 | 0.8014 | 0.7975   | 0.7976    |
| Máximo        | 346    | 349    | 101   | 107   | 0.84   | 0.865  | 0.2376 | 0.816  | 0.8407 | 0.8398   | 0.8402    |
| Media         | 322.00 | 339.67 | 85.33 | 78.00 | 0.802  | 0.805  | 0.2008 | 0.7907 | 0.8021 | 0.7972   | 0.7975    |

Tabla 4: Simplificando el conjunto de atributos

Al comparar los resultados de los algoritmos sobre este procesamiento con los mejores resultados obtenidos hasta el momento (eliminación de valores perdidos, tabla 1), apreciamos una leve mejora en las métricas Accuracy y AUC, por lo que no ha decaído su capacidad de predicción. También mejoran levemente los scores F1-score y G-measure, por lo que los modelos siguen siendo apropiados para el problema. Esto se debe sobre todo al aumento del desempeño de Gaussian Naive-Bayes, que supone que los atributos son independientes. Al simplificar el conjunto de atributos es lógico que disminuya el grado de dependencia entre los mismos y el algoritmo funcione mejor.

No sólo no hemos observado un descenso en el desempeño de los modelos, sino una pequeña mejora. Así que mantenemos este preprocesamiento.

## 2.4. Preprocesado 4: Binarización de características nominales

Nuestro dataset tiene dos características nominales: Shape y Margin, que toman 4 y 5 posibles valores respectivamente. Codificar estas variables utilizando números naturales puede confundir a algunos algoritmos. Este es el caso de KNN, que podría interpretar que una instancia con valor 2 en cualquiera de estas características está más cerca de una con valor 1 ó 3 que de una con valor 4, cuando no es lógico pensar esto, ya que estos números simplemente codifican cualidades. Es por ello que binarizamos estas dos variables introduciendo 9 nuevos atributos binarios (valdrán 0 ó 1), 4 de ellos indicarán el valor de Shape (1 en la posición correspondiente al valor y 0 en las demás) y 5 para el valor de Margin. De esa forma, dos individuos con distintos valores de la característica Shape estarán a distancia 0 (por lo que a la variable Shape respecta) si tienen el mismo valor en esta característica y a una distancia constante positiva (por lo que a la variable Shape respecta) si tienen valor de Shape diferente; y análogo para Margin. Esto puede mejorar la eficiencia de algunos algoritmos, especialmente de KNN.

En este caso, el número de características nominales y de valores que pueden tomar es bajo, así que esta operación es factible. De haber existido un número más elevado de características nominales o un número más elevado de posibles

valores para las mismas, binarizar estas características conllevaría un aumento notable del número de variables, lo que puede provocar dificultades en el aprendizaje de los modelos si el número de datos no es lo suficientemente grande.

Para esta tarea utilizamos `OneHotEncoder`, de *sklearn*. Los resultados obtenidos son:

|               | TP     | TN     | FP    | FN    | Acc    | TPR    | FPR    | PPV    | AUC    | F1-score | G-measure |
|---------------|--------|--------|-------|-------|--------|--------|--------|--------|--------|----------|-----------|
| Dummy         | 400    | 0      | 425   | 0     | 0.4848 | 1.0    | 1.0    | 0.4848 | 0.5    | 0.6531   | 0.6963    |
| DecisionTree  | 297    | 347    | 78    | 103   | 0.7806 | 0.7425 | 0.1835 | 0.792  | 0.7795 | 0.7665   | 0.7669    |
| GaussianNB    | 354    | 321    | 104   | 46    | 0.8182 | 0.885  | 0.2447 | 0.7729 | 0.8201 | 0.8252   | 0.8271    |
| MultinomialNB | 336    | 326    | 99    | 64    | 0.8024 | 0.84   | 0.2329 | 0.7724 | 0.8035 | 0.8048   | 0.8055    |
| RandomForest  | 319    | 344    | 81    | 81    | 0.8036 | 0.7975 | 0.1906 | 0.7975 | 0.8035 | 0.7975   | 0.7975    |
| KNN           | 332    | 332    | 93    | 68    | 0.8048 | 0.83   | 0.2188 | 0.7812 | 0.8056 | 0.8048   | 0.8052    |
| NeuralNetwork | 342    | 337    | 88    | 58    | 0.823  | 0.855  | 0.2071 | 0.7953 | 0.824  | 0.8241   | 0.8246    |
| Máximo        | 354    | 347    | 104   | 103   | 0.823  | 0.885  | 0.2447 | 0.7975 | 0.824  | 0.8252   | 0.8271    |
| Media         | 330.00 | 334.50 | 90.50 | 70.00 | 0.8055 | 0.825  | 0.2129 | 0.7852 | 0.806  | 0.8038   | 0.8045    |

Tabla 5: Binarización de atributos nominales

Comparamos los resultados con los de la tabla 4. Las métricas Acc. y AUC (que miden la eficacia general de los modelos) han mejorado en media, ya que ha habido una mejora leve en la mayoría de modelos, aunque ha decaído el máximo score, ya que el mejor modelo hasta el momento (Gaussian Naive-Bayes) ha visto empeorados sus resultados. No experimentamos una mejora sustancial en KNN como esperábamos, pero sí en la Red Neuronal, que también puede sufrir de la condición que hemos comentado antes, y se convierte en el nuevo máximo. Respecto a las métricas F1-score y G-measure, que reflejan mejor la naturaleza del problema, ha ocurrido exactamente lo mismo con la excepción de que la caída de Gaussian Naive-Bayes y el crecimiento de la Red Neuronal no han sido suficientes para que la red supere a Naive-Bayes. Esto ocurre porque la Red Neuronal a mejorado a Naive-Bayes gracias a una mejor clasificación en las instancias negativas, a las que las métricas F1-score y G-measure les dan una menor importancia.

Aquí se nos plantea una elección difícil sobre cual sería mejor procesamiento, podemos mantener el que teníamos y apostar por Naive-Bayes o adoptar el nuevo y disponer de una gama más amplia pero hasta ahora menos efectiva de algoritmos. Nos decantaremos por binarizar los atributos nominales, debido al poco interés que se le ha dado a Naive-Bayes en clase de teoría y la facilidad de interpretación que poseen los árboles.

### 3. Configuración de algoritmos

### 4. Resultados obtenidos

Presentamos los distintos modelos y los resultados obtenidos por cada uno.

### 5. Análisis de resultados

#### 5.1. Sobre preprocesado básico

#### 5.2. Sobre preprocesado 1 (Imputación de valores perdidos)

### 6. Interpretación de resultados

### 7. Contenido adicional

### 8. Bibliografía

<http://faculty.marshall.usc.edu/gareth-james/ISL>