Tipologia i cicle de vida de les dades, PRAC 2 Joan Borràs 15/5/2022 1. Descripció del dataset. Perquè és important i quina pregunta/problema pretén respondre El dataset seleccionat es diu 'Red Wine Quality' i recull un conjunt de característiques associades al vi negre que pretenen descriure o determinar si es tracta d'un vi bo o contràriament un vi dolent. Aquestes característiques o variables són les següents: • fixed acidity : acidesa del vi que no s'evapora fàcilment. • volatile acidity: quantitat d'àcid acètic del vi- citric acid: quantitat d'àcid cítric • residual sugar: quantitat de sucre remenen després de la fermentació- chlorides: quantitat de sal en el vi • free sulfur dioxide: quantitat de diòxid de sulfur lliure resultant de l'equilibi amb el bisulfit. • total sulfur dioxide: quantitat total de diòxid de sulfur • density: quantitat i densitat de l'aigua depenent del percentatge d'alcohol i sucre • PH: ph del vi- sulphates: quantitat de sulfats. • Alcohol: quantitat d'alchol del vi • quality: variable target que determina la qualitat en una escala del 1 al 10 # Carraguem el dataframe i mostrem les variables wine_df <- read.csv("winequality-red.csv", header=T, sep=",", stringsAsFactors = FALSE)</pre> str(wine_df) ## 'data.frame': 1599 obs. of 12 variables: ## \$ fixed.acidity : num 7.4 7.8 7.8 11.2 7.4 7.4 7.9 7.3 7.8 7.5 ... ## \$ volatile.acidity : num 0.7 0.88 0.76 0.28 0.7 0.66 0.6 0.65 0.58 0.5 ... ## \$ citric.acid : num 0 0 0.04 0.56 0 0 0.06 0 0.02 0.36 ... ## \$ residual.sugar : num 1.9 2.6 2.3 1.9 1.8 1.6 1.2 2 6.1 ... ## \$ chlorides : num 0.076 0.098 0.092 0.075 0.076 0.075 0.069 0.065 0.073 0.071 ... ## \$ free.sulfur.dioxide : num 11 25 15 17 11 13 15 15 9 17 ... ## \$ total.sulfur.dioxide: num 34 67 54 60 34 40 59 21 18 102 ... ## \$ density : num 0.998 0.997 0.997 0.998 0.998 ... ## \$ pH : num 3.51 3.2 3.26 3.16 3.51 3.51 3.3 3 ## \$ pH : num 3.51 3.2 3.26 3.16 3.51 3.51 3.3 3.39 3.36 3.35 ... ## \$ sulphates : num 0.56 0.68 0.65 0.58 0.56 0.46 0.47 0.57 0.8 ... ## \$ alcohol : num 9.4 9.8 9.8 9.8 9.4 9.4 10 9.5 10.5 ... ## \$ quality : int 5 5 5 6 5 5 7 7 5 ... 2. Integració i selecció de les dades d'interès a analitzar. Pot ser el resultat d'addicionar diferents datasets o una subselecció útil de les dades originals, en base a l'objectiu que es vulgui aconseguir. El dataframe seleccionat es pot considerar prou complet i no seria necessàri ampliar. Tampoc resulta òptim simplificar ni reealitzar una subselecció de variables ja que el model predictiu perdria validesa al no disposar de totes les característiques o variables al complet. No obstant, amb objecte d'estudiar i visualitzar millor les dades, podem crear una columna que categoritzi la qualitat entre molt bo, bo, normal, dolent o molt dolent. Tenint en compte que la variable quality es distribueix en un rang del 0 al 10, categoritzarem de la següent manera: de [0 a 3) molt dolent, de [3 a 5) dolent, de [5 a 6) normal, de [6 a 8) bo, i de [8 a 10] molt bo. # Categoritzem la variable quality wine_df $quality_cat <- cut(wine_df<math>quality, breaks = c(0, 3, 5, 6, 8, 10),$ labels = c("molt dolent", "dolent", "normal", "bo", "molt bo")) Comprovem que s'ha categoritzat correctament # Mostrem el resultat str(wine_df) ## 'data.frame': 1599 obs. of 13 variables: ## \$ fixed.acidity : num 7.4 7.8 7.8 11.2 7.4 7.4 7.9 7.3 7.8 7.5 ... ## \$ volatile.acidity : num 0.7 0.88 0.76 0.28 0.7 0.66 0.6 0.65 0.58 0.5 ... ## \$ citric.acid : num 0 0 0.04 0.56 0 0 0.06 0 0.02 0.36 ... ## \$ residual.sugar : num 1.9 2.6 2.3 1.9 1.8 1.6 1.2 2 6.1 ... ## \$ chlorides : num 0.076 0.098 0.092 0.075 0.076 0.075 0.069 0.065 0.073 0.071 ... ## \$ free.sulfur.dioxide : num 11 25 15 17 11 13 15 15 9 17 ... ## \$ total.sulfur.dioxide: num 34 67 54 60 34 40 59 21 18 102 ... ## \$ density : num 0.998 0.997 0.998 0.998 ... : num 3.51 3.2 3.26 3.16 3.51 3.51 3.3 3.39 3.36 3.35 ... ## \$ pH ## \$ sulphates : num 0.56 0.68 0.65 0.58 0.56 0.56 0.46 0.47 0.57 0.8 ... ## \$ alcohol : num 9.4 9.8 9.8 9.4 9.4 9.4 10 9.5 10.5 ... ## \$ quality : int 5 5 5 6 5 5 7 7 5 ... ## \$ quality_cat : Factor w/ 5 levels "molt dolent",..: 2 2 2 3 2 2 2 4 4 2 ... Un cop categoritzades les dades, podem observar com es distribueixen # Importem llibreria library("ggplot2") # Mostrem la distribució de la variable quality_cat ggplot(wine_df, aes(x=quality_cat)) + geom_bar() 600 -200 molt dolent dolent bo normal quality_cat Podem observar que el major nombre de registres corresponen a l'etiqueta dolent, mentre que per l'etiqueta molt dolent existeixen molt pocs registres. Com que ja no farem ús d'aquesta columna, guardem el csv modificat. write.csv(wine_df, "wines_df_mod.csv", row.names = FALSE) Seguidament, un cop realitzada la distribució de la variable quality_cat, proseguim a eliminar-la per tal de seguir estudiant el dataset amb solsament variables numèriques. # Eliminem la variable quality_cat wine_df\$quality_cat <- NULL</pre> 3. Neteja de les dades. 3.1. Les dades contenen zeros o elements buits? Gestiona cadascun d'aquests casos. # Comprovem si existeixen elements nulls en el dataset is.null(wine_df) ## [1] FALSE # Comprovem si existeixen 0 en el dataset colSums(wine_df==0)

alcohol ## sulphates ## Podem observar que a la columna citric.acid hi ha una gran quantitat de 0. Al tractar-se d'una variable que raonablement pot contenir 0, és a dir,

per algun estadístic com per exemple, la mitjana d'aquest valor.

altra banda, els valors fora de aquesta normalitat (fora de la caixa).

3.2. Identifica i gestiona els valors extrems.

volatile.acidity

density

residual.sugar total.sulfur.dioxide

fixed.acidity

residual.sugar

total.sulfur.dioxide

fixed.acidity

Mostrem aquests valors outliers

##

##

##

Mostrem la gràfica dels valors outliers win_out <-boxplot(wine_df, col="skyblue", frame.plot=F)</pre>

pot ser que en un vi no hi hagi l'existència de àcid cítric, en el tractament de aquestes dades no cadrà eliminar aquests registres o substituir-los

Tractarem de detectar els valors outliers mitjaçant un un gràfic de caixes, que mostra per una banda els valors dintre de la normalitat(caixa) i, per

citric.acid

рН

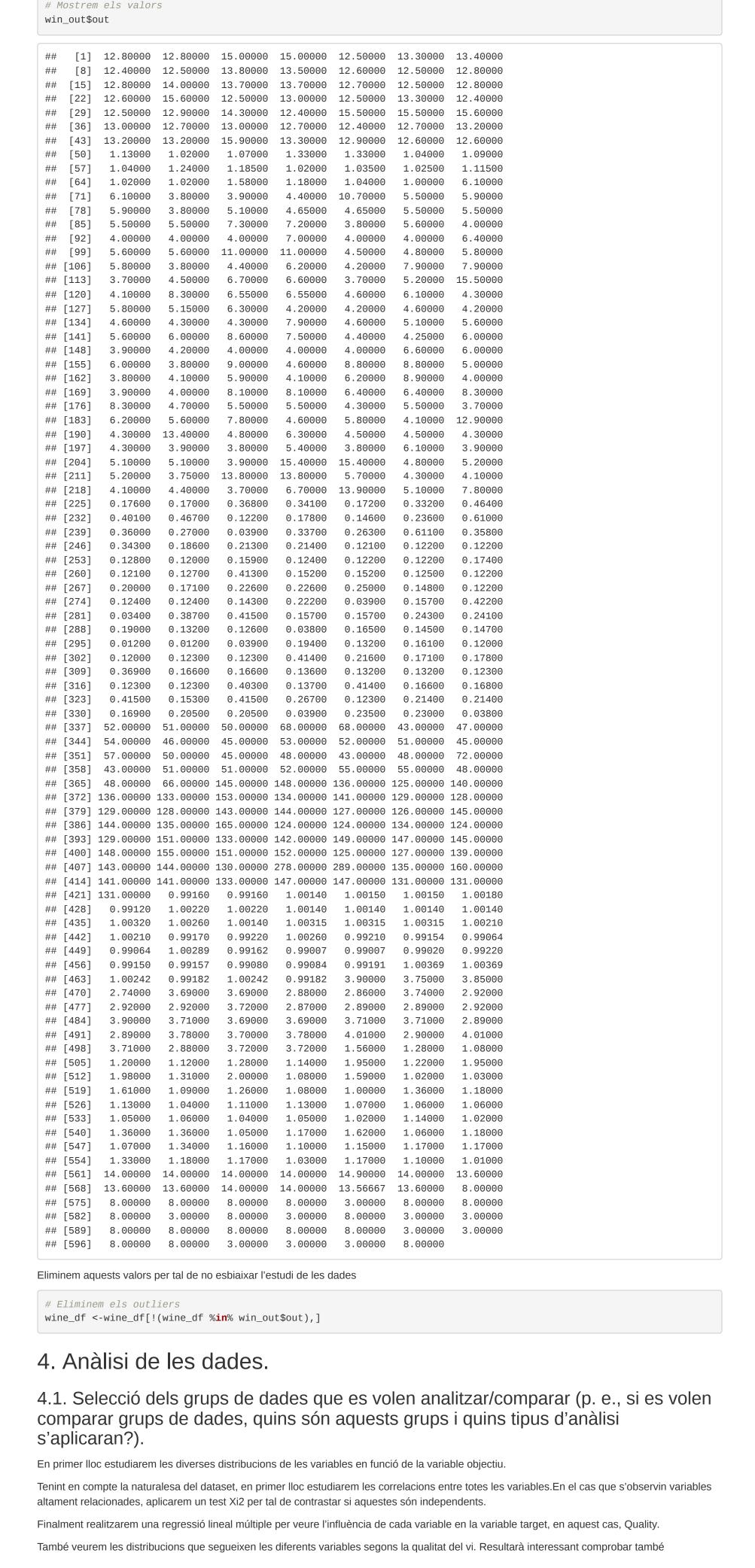
quality

chlorides free.sulfur.dioxide

```
150
100
50
```

sulphates

quality



fixed.acidity distribution

-2

qqline(wine_df\$fixed.acidity, col = 2)

Creem les gràfiques de distribució qq (quantil quantil)

qqnorm(wine_df\$fixed.acidity, main="fixed.acidity distribution")

dels valors de cada variable.

4

12

9

-3

Sample Quantiles 10 ∞

2

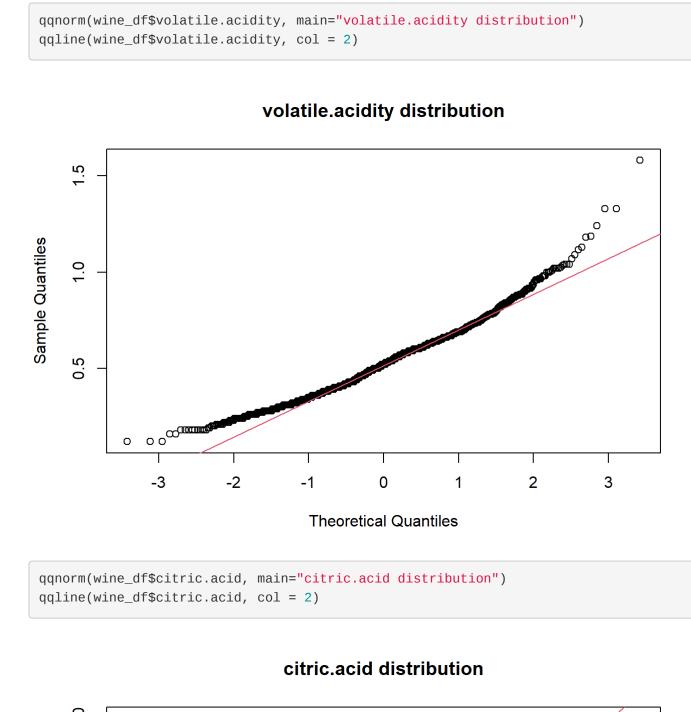
3

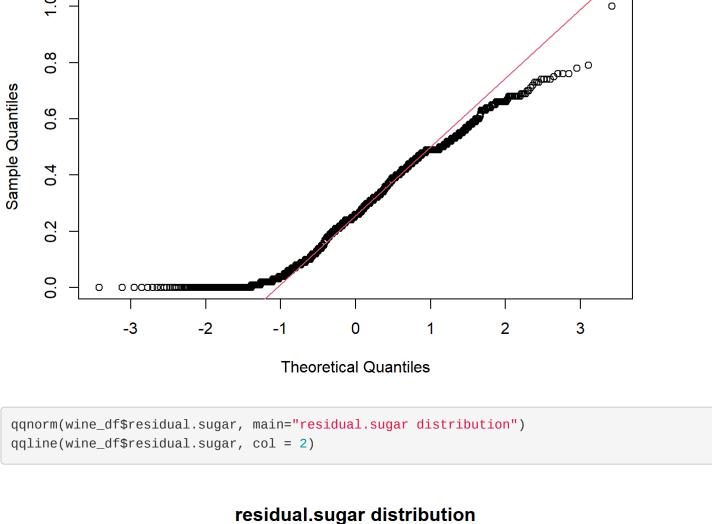
0

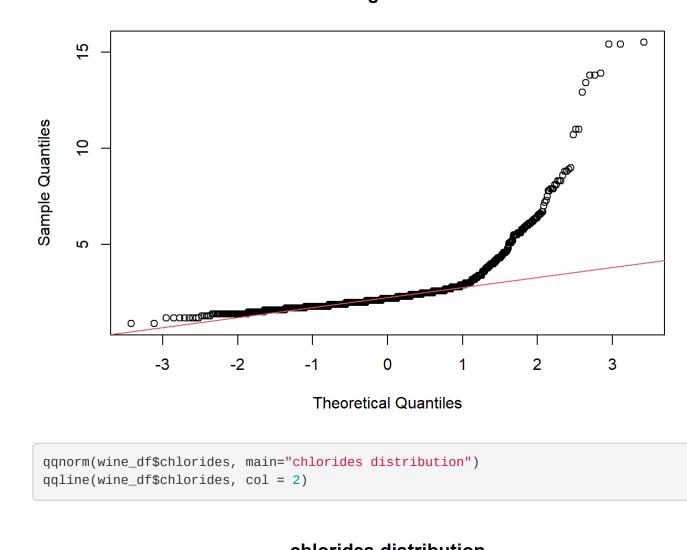
Theoretical Quantiles

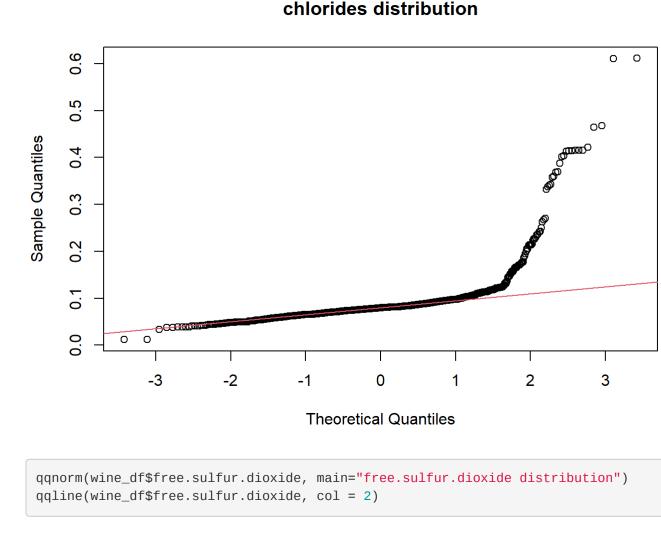
En primer lloc, per tal d'estudiar la normalitat de les variables farem servir un gràfic quantil-quantil que ens dona informació sobre la distribució

4.2. Comprovació de la normalitat i homogeneïtat de la variància.









free.sulfur.dioxide distribution 000 9 Sample Quantiles 40 30 20 10 0 0000 0

-2

-3

0

Theoretical Quantiles

1

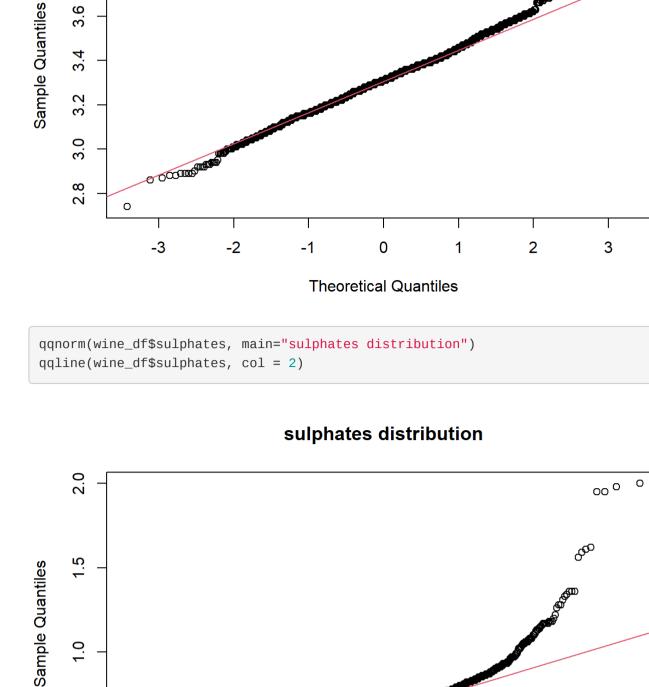
2

3

```
qqnorm(wine_df$total.sulfur.dioxide, main="total.sulfur.dioxide distribution")
qqline(wine_df$total.sulfur.dioxide, col = 2)
                            total.sulfur.dioxide distribution
     250
     200
Sample Quantiles
     150
     100
     50
                -3
                          -2
                                               0
                                                                    2
                                                                              3
                                     Theoretical Quantiles
qqnorm(wine_df$density, main="density distribution")
qqline(wine_df$density, col = 2)
```

density distribution

```
1.002
Sample Quantiles
     0.994
           0.990
                                                0
                                                                     2
                                                                                3
                           -2
                -3
                                     -1
                                      Theoretical Quantiles
qqnorm(wine_df$pH, main="pH distribution")
qqline(wine_df\$pH, col = 2)
                                       pH distribution
     4.0
```



0

7

4

geom_point()

geom_point()

geom_point()

geom_point()

0 00000000

-2

-3

Sample Quantiles

-3

qqline(wine_df\$alcohol, col = 2)

-2

qqnorm(wine_df\$alcohol, main="alcohol distribution")

Sample 0.5 - 1.0

2

3

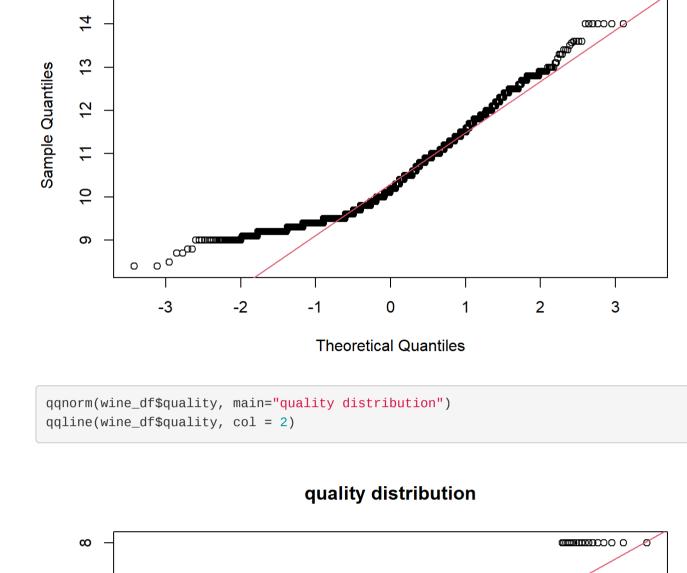
0

3

0

Theoretical Quantiles

alcohol distribution



ctrc_ac <- ggplot(aes(x=quality,y=citric.acid),data=wine_df)+
 geom_point()</pre>

Pel les variables independetns, tot i que les seves cues no segueixen exactament la linea transversal, la major part de les dades semblen estar

4.3. Aplicació de proves estadístiques per comparar els grups de dades. En funció de

0

Theoretical Quantiles

les dades i de l'objectiu de l'estudi, aplicar proves de contrast d'hipòtesis,

correlacions, regressions, etc. Aplicar almenys tres mètodes d'anàlisi diferents.

distribuïdes de forma normal. No obstant, la variable qualitat no sembla seguir aquesta distribució.

Mostrem les distribucions de les diferents variables en funció de la qualitat

fx_ac <- ggplot(aes(x=quality,y=fixed.acidity),data=wine_df)+</pre>

vlt_ac <- ggplot(aes(x=quality,y=volatile.acidity),data=wine_df)+</pre>

r_sugr <- ggplot(aes(x=quality,y=residual.sugar),data=wine_df)+</pre>

chlor <- ggplot(aes(x=quality,y=chlorides),data=wine_df)+</pre>

Proseguim estudiant les diverses correlacions entre variables.

1.00000000

-0.25613089

0.67170343

0.11477672

0.09370519

-0.15379419

-0.11318144

0.66804729

-0.68297819

0.18300566

-0.06166827

0.12405165

0.093705186

0.061297772

0.203822914

0.055609535

1.000000000

0.200632327

-0.265026131

0.371260481

-0.221140545

-0.128906560

density

Creem una matriu de correlacions

cor(wine_df)

fixed.acidity

residual.sugar

citric.acid

chlorides

density

sulphates

fixed.acidity

residual.sugar

citric.acid

chlorides

density

alcohol

quality

sulphates

fixed.acidity

volatile.acidity

pH

pH

##

##

Call:

Residuals:

Coefficients:

sulphates

alcohol

quality

volatile.acidity

free.sulfur.dioxide 0.005562147

total.sulfur.dioxide 0.047400468

alcohol

quality

pH

volatile.acidity

free.sulfur.dioxide

total.sulfur.dioxide

##

f_slr_dox <- ggplot(aes(x=quality,y=free.sulfur.dioxide),data=wine_df)+
 geom_point()

ttl_sl_dox <- ggplot(aes(x=quality,y=total.sulfur.dioxide),data=wine_df)+
 geom_point()</pre>

densty <- ggplot(aes(x=quality,y=density),data=wine_df)+</pre> geom_point() ph <- ggplot(aes(x=quality,y=pH),data=wine_df)+</pre> geom_point() suplh <- ggplot(aes(x=quality,y=sulphates),data=wine_df)+</pre> geom_point() alco <-ggplot(aes(x=quality,y=alcohol),data=wine_df)+</pre> geom_point() library(ggpubr) ## Warning: package 'ggpubr' was built under R version 4.0.5 ggarrange(fx_ac, vlt_ac, ctrc_ac, r_sugr, chlor, f_slr_dox, ttl_sl_dox, densty, ph, suplh, alco + rremove("x.tex labels = c("fixed.acidity", "volatile.acidity", "citric.acid", "residual.sugar", "chlorides", "free.sulf ur.dioxide", "total.sulfur.dioxide", "density", "pH", "sulphates", "alcohol"), ncol = 4, nrow = 3, heights = c(25, 25)) 16 fixed.acidity volatile.acid 1.0 citric.acid residual.suç residual.sugar 0.50 -0.00 -4 5 6 7 8 3 3 4 5 6 7 8 quality quality free.sulfur pixoip 200 free.sulfur.dioxide 0.6 chlorides total.sulfu density density 0.995 -0.990 quality quality quality p₩o 2.0 sulphates alcohol quality quality quality De les anteriors gràfiques en podem destacar que els vins de alta qualitat porten menys volatile-acid, residual.sugar, chlorides, són menys densos, tenen un ph equilibrat, i no tenen més de 1.3 de sulfats.

citric.acid 0.36494718 -0.54190414 0.312770044 0.10990325

residual.sugar 0.35528337 -0.08565242 0.005527121 0.04207544

chlorides 0.20063233 -0.26502613 0.371260481 -0.22114054

free.sulfur.dioxide -0.02194583 0.07037750 0.051657572 -0.06940835

total.sulfur.dioxide 0.07126948 -0.06649456 0.042946836 -0.20565394

density 1.00000000 -0.34169933 0.148506412 -0.49617977

sulphates

fixed.acidity volatile.acidity citric.acid residual.sugar

-0.256130895 0.67170343

1.000000000 -0.55249568

-0.552495685 1.00000000

0.001917882 0.14357716

0.061297772 0.20382291

-0.010503827 -0.06097813

0.076470005 0.03553302

0.022026232 0.36494718

0.234937294 -0.54190414

-0.260986685 0.31277004

-0.202288027 0.10990325

-0.390557780 0.22637251

chlorides free.sulfur.dioxide total.sulfur.dioxide

-0.153794193

-0.010503827

-0.060978129

0.187048995

0.005562147

1.000000000

0.667666450

-0.021945831

0.070377499

0.051657572

-0.069408354

-0.050656057

0.66804729 -0.68297819 0.183005664 -0.06166827

-0.34169933 1.000000000 -0.196647602 0.20563251

 $0.14850641 - 0.19664760 \ 1.0000000000 \ 0.09359475$

рН

0.114776724

0.001917882

0.143577162

1.000000000

0.055609535

0.187048995

0.203027882

0.355283371

-0.085652422

0.005527121

0.042075437

0.013731637

-0.11318144

0.07647000

0.03553302

0.20302788

0.04740047

0.66766645

1.00000000

0.07126948

-0.06649456

0.04294684

-0.20565394

-0.18510029

quality 0.12405165 ## fixed.acidity ## volatile.acidity -0.39055778 0.22637251 ## citric.acid ## residual.sugar 0.01373164 ## chlorides -0.12890656 ## free.sulfur.dioxide -0.05065606 ## total.sulfur.dioxide -0.18510029 ## density -0.17491923 ## pH -0.05773139 ## sulphates 0.25139708 ## alcohol 0.47616632 ## quality 1.00000000 De la taula de correlacions anterior, podem veure que entre fixed acidity i ph hi ha una correlació inversament proporcional del 68.29%. Això ens pot fer pensar que existeix algún tipus de relació entre aquestes variables i que, per tant, no són independents. Per tal de verificar aquest supòsit, realitzarem un test xi2 on les hipòtesis seràn les següents: H0 : pH i fixed.acidity són independents H1 : pH i fixed.acidity no són independents En primer lloc, construim la taula de contingència # Creem la taula de contingència cont_table <- table(wine_df\$pH, wine_df\$fixed.acidity)</pre> # Executem el test xi2 chisq.test(cont_table) ## Warning in chisq.test(cont_table): Chi-squared approximation may be incorrect ## Pearson's Chi-squared test ## ## data: cont_table ## X-squared = 20246, df = 8360, p-value < 2.2e-16 Els resultats mostren com el p-value és menor a 0.05 i per tant, rebutgem la hipòtesis nul.la. Per tant, podem afirmar que les variables ph i fixed.acidity no són independents. Finalment, realitzarem una regressó lineal múltiple per tal d'observar com varia la qualitat del vi en funció de les variables independents. # Creem una regressió lienal múltiple mlr_wine <- lm(quality ~ fixed.acidity + volatile.acidity +citric.acid + residual.sugar + chlorides +free.sulfur. dioxide + total.sulfur.dioxide + density + pH + sulphates + alcohol, data = wine_df) summary(mlr_wine)

lm(formula = quality ~ fixed.acidity + volatile.acidity + citric.acid +

density + pH + sulphates + alcohol, data = wine_df)

Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 2.197e+01 2.119e+01 1.036 0.3002
fixed.acidity 2.499e-02 2.595e-02 0.963 0.3357

volatile.acidity -1.084e+00 1.211e-01 -8.948 < 2e-16 ***

citric.acid -1.826e-01 1.472e-01 -1.240 0.2150
residual.sugar 1.633e-02 1.500e-02 1.089 0.2765
chlorides -1.874e+00 4.193e-01 -4.470 8.37e-06 ***

free.sulfur.dioxide 4.361e-03 2.171e-03 2.009 0.0447 * ## total.sulfur.dioxide -3.265e-03 7.287e-04 -4.480 8.00e-06 ***

Min 1Q Median 3Q Max ## -2.68911 -0.36652 -0.04699 0.45202 2.02498

residual.sugar + chlorides + free.sulfur.dioxide + total.sulfur.dioxide +

density -1.788e+01 2.163e+01 -0.827 0.4086 ## pH -4.137e-01 1.916e-01 -2.159 0.0310 * ## sulphates 9.163e-01 1.143e-01 8.014 2.13e-15 * ## alcohol 2.762e-01 2.648e-02 10.429 < 2e-16 *** ## ---## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1 ## Residual standard error: 0.648 on 1587 degrees of freedom ## Multiple R-squared: 0.3606, Adjusted R-squared: 0.3561 ## F-statistic: 81.35 on 11 and 1587 DF, p-value: < 2.2e-16 Tot i que el model no sigui molt acurat, ja que la R2 ajusted és tan sols del 35.61% podem veure que el nivell de sulfats és una de les variables més rellevants a l'hora de determinar la qualitat del vi. També podem veure per altra banda, que el ph determina de forma inversa la qualitat del vi a continuació, podem predir quin resultat tindrà un vi segons les caracteristiques que li imputem # Creem el dataframe amb les noves dades predict_df = data.frame(fixed.acidity = 7.9, volatile.acidity = 0.67, citric.acid = 0.08, residual.sugar = 2.2, chlorides = 0.071, free.sulfur.dioxide =14, total.sulfur.dioxide = 67, density = 0.998, pH = 3.22,sulphates = 0.60, alcohol = 10.6) # Predim predict(mlr_wine, predict_df) 1 ## 5.467345

El vi eleborat, no serà apte pels paladars més fins ja que tindrà una qualitat de 5.46 segons el model.