Entregable: Algoritmos básicos de aprendizaje

Laura Rodriguez Navas

Febrero 2020

Los Datos

El fichero glass.data incluye el estudio de la clasificación de los tipos de vidrio con 6 variables explicativas. El estudio fue motivado por una investigación criminológica. En la escena de un crimen, el vidrio que queda puede usarse como evidencia ... ¡si se identifica correctamente!

Las variables que se guardaron son:

1. Id number: 1 to 214
2. RI: refractive index
3. Na: Sodium (unit measurement: weight percent in corresponding oxide, as are attributes 4-10)
4. Mg: Magnesium
5. Al: Aluminum
6. Si: Silicon
7. K: Potassium
8. Ca: Calcium
9. Ba: Barium
10. Fe: Iron
11. Type of glass: (class attribute)

- 1 building_windows_float_processed
- 2 building_windows_non_float_processed
- 3 vehicle_windows_float_processed
- 4 vehicle_windows_non_float_processed (none in this database)
- 5 containers
- 6 tableware
- 7 headlamps

Primero debemos cargar los datos como data frame, y le damos nombres a las columnas.

```
glass <- read.table("glass.data", header = FALSE, sep = ",")
names(glass) <- c("Id number", "RI", "Na", "Mg", "Al", "Si", "K", "Ca", "Ba", "Fe",
                  "Type of glass")
colnames(glass) <- make.names(colnames(glass))
str(glass)
```

```
## 'data.frame':    214 obs. of  11 variables:
##  $ Id.number    : int  1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 ...
##  $ RI           : num  1.52 1.52 1.52 1.52 1.52 ...
##  $ Na           : num  13.6 13.9 13.5 13.2 13.3 ...
##  $ Mg           : num  4.49 3.6 3.55 3.69 3.62 3.61 3.6 3.61 3.58 3.6 ...
##  $ Al           : num  1.1 1.36 1.54 1.29 1.24 1.62 1.14 1.05 1.37 1.36 ...
##  $ Si           : num  71.8 72.7 73 72.6 73.1 ...
##  $ K            : num  0.06 0.48 0.39 0.57 0.55 0.64 0.58 0.57 0.56 0.57 ...
##  $ Ca           : num  8.75 7.83 7.78 8.22 8.07 8.07 8.17 8.24 8.3 8.4 ...
##  $ Ba           : num  0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 ...
##  $ Fe           : num  0 0 0 0 0 0.26 0 0 0 0.11 ...
##  $ Type.of.glass: int  1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 ...
```

Vemos como el conjunto de datos está formado por diez variables predictivas y la variable de clase Type.of.glass. Y todas estas variables son numéricas.

Además, podemos observar que la primera columna (cuyo nombre es "Id.number") es redundante (denota el identificador de cada instancia), por lo que borraremos esta columna. También le cambiaremos el nombre a la última columna (cuyo nombre es "Type.of.glass") para que se entienda mejor que representa la variable clase.

```
glass <- subset(glass, select = -Id.number)
colnames(glass)[10] <- "Class"
head(glass, 10)
```

```
##         RI    Na   Mg   Al    Si    K   Ca Ba   Fe Class
## 1  1.52101 13.64 4.49 1.10 71.78 0.06 8.75  0 0.00     1
## 2  1.51761 13.89 3.60 1.36 72.73 0.48 7.83  0 0.00     1
## 3  1.51618 13.53 3.55 1.54 72.99 0.39 7.78  0 0.00     1
## 4  1.51766 13.21 3.69 1.29 72.61 0.57 8.22  0 0.00     1
## 5  1.51742 13.27 3.62 1.24 73.08 0.55 8.07  0 0.00     1
## 6  1.51596 12.79 3.61 1.62 72.97 0.64 8.07  0 0.26     1
## 7  1.51743 13.30 3.60 1.14 73.09 0.58 8.17  0 0.00     1
## 8  1.51756 13.15 3.61 1.05 73.24 0.57 8.24  0 0.00     1
## 9  1.51918 14.04 3.58 1.37 72.08 0.56 8.30  0 0.00     1
## 10 1.51755 13.00 3.60 1.36 72.99 0.57 8.40  0 0.11     1
```

Aunque a primera vista los datos parecen que están ordenados por la variable clase Class, los ordenamos, y miramos que no existan valores codificados como NA.

```
glass <- glass[order(glass$Class), ]
any(is.na(glass))
```

```
## [1] FALSE
```

Como se ha comentado anteriormente, la columna Class representa la variable clase. Concretamente en este estudio contamos con seis variables explicativas.

A continuación, vamos a generar una representación binaria. Primero, nos quedaremos solo con los valores de la variable clase $\{1, 2\}$, los renombraremos como $\{1 =$ "positive", $2 =$ "negative"$\}$ y factorizaremos la variable clase.

```r
glass <- subset(glass , glass$Class < 3)
for (i in 1:146) {
  if (glass$Class[i] == 1){
    glass$Class[i] <- 'positive'
  }
  else {
    glass$Class[i] <- 'negative'
  }
}
glass[,10] <- as.factor(glass[,10])
str(glass)
```

```
## 'data.frame':    146 obs. of  10 variables:
##  $ RI   : num  1.52 1.52 1.52 1.52 1.52 ...
##  $ Na   : num  13.6 13.9 13.5 13.2 13.3 ...
##  $ Mg   : num  4.49 3.6 3.55 3.69 3.62 3.61 3.6 3.61 3.58 3.6 ...
##  $ Al   : num  1.1 1.36 1.54 1.29 1.24 1.62 1.14 1.05 1.37 1.36 ...
##  $ Si   : num  71.8 72.7 73 72.6 73.1 ...
##  $ K    : num  0.06 0.48 0.39 0.57 0.55 0.64 0.58 0.57 0.56 0.57 ...
##  $ Ca   : num  8.75 7.83 7.78 8.22 8.07 8.07 8.17 8.24 8.3 8.4 ...
##  $ Ba   : num  0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 ...
##  $ Fe   : num  0 0 0 0 0 0.26 0 0 0 0.11 ...
##  $ Class: Factor w/ 2 levels "negative","positive": 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 ...
```

La decisión de quedarnos con los tipos de vidrio {1, 2} es porqué del tipo de vidrio {4} no tenemos valores en este conjunto de datos para clasificar, juntamente con el tipo de vidrio {3}; y los tipos de vidrio {5, 6, 7} no pueden generar una representación binaria con los otros tipos.

División de los datos en muestra de entrenamiento y de test

Tomaremos una muestra del 70% del conjunto de datos como entrenamiento y el 30% del mismo como un conjunto de datos de prueba.

La validación cruzada usada cinco veces con muestreo estratificado se utilizará para dividir el conjunto de datos.

```r
set.seed(123)
inTraining <- createDataPartition(glass$Class, p = .7, list = FALSE)
training <- glass[ inTraining,]
testing  <- glass[-inTraining,]
fitControl <- trainControl(method = "cv",
                           number = 5,
                           classProbs = FALSE)
str(training)
```

```
## 'data.frame':    103 obs. of  10 variables:
##  $ RI   : num  1.52 1.52 1.52 1.52 1.52 ...
##  $ Na   : num  13.9 13.5 13.2 13.3 12.8 ...
##  $ Mg   : num  3.6 3.55 3.69 3.62 3.61 3.6 3.61 3.6 3.66 3.43 ...
##  $ Al   : num  1.36 1.54 1.29 1.24 1.62 1.14 1.05 1.36 1.27 1.4 ...
##  $ Si   : num  72.7 73 72.6 73.1 73 ...
##  $ K    : num  0.48 0.39 0.57 0.55 0.64 0.58 0.57 0.57 0.6 0.69 ...
##  $ Ca   : num  7.83 7.78 8.22 8.07 8.07 8.17 8.24 8.4 8.56 8.05 ...
##  $ Ba   : num  0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 ...
##  $ Fe   : num  0 0 0 0 0.26 0 0 0.11 0 0.24 ...
##  $ Class: Factor w/ 2 levels "negative","positive": 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 ...
```

```
str(testing)
```

```
## 'data.frame':    43 obs. of  10 variables:
##  $ RI   : num  1.52 1.52 1.52 1.52 1.52 ...
##  $ Na   : num  13.6 14 12.7 13.9 13 ...
##  $ Mg   : num  4.49 3.58 3.46 3.73 3.54 3.48 3.48 3.45 3.53 3.48 ...
##  $ Al   : num  1.1 1.37 1.56 1.18 1.21 1.41 1.33 1.21 1.32 1.35 ...
##  $ Si   : num  71.8 72.1 73.2 72.1 73 ...
##  $ K    : num  0.06 0.56 0.67 0.06 0.65 0.59 0.56 0.56 0.51 0.64 ...
##  $ Ca   : num  8.75 8.3 8.09 8.89 8.53 8.43 8.43 8.57 8.78 8.68 ...
##  $ Ba   : num  0 0 0 0 0 0 0 0 0.11 0 ...
##  $ Fe   : num  0 0 0.24 0 0 0 0 0 0 0 ...
##  $ Class: Factor w/ 2 levels "negative","positive": 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 ...
```

Entrenamiento de los modelos y evaluación

Se utilizarán tres algoritmos de clasificación diferentes para entrenar, OneR, kNN y Multilayer Perceptrón.

1. OneR.

```
oner <- train(Class ~ ., data = training, method = "OneR", trControl = fitControl)
oner
```

```
## Single Rule Classification
##
## 103 samples
##   9 predictor
##   2 classes: 'negative', 'positive'
##
## No pre-processing
## Resampling: Cross-Validated (5 fold)
## Summary of sample sizes: 83, 82, 82, 82, 83
## Resampling results:
##
##   Accuracy   Kappa
##   0.8452381  0.688327
```

```
onerPredict <- predict(oner, newdata = testing)
cm_oner <- confusionMatrix(onerPredict, testing$Class)
cm_oner
```

```
## Confusion Matrix and Statistics
##
##           Reference
## Prediction negative positive
##   negative       18        7
##   positive        4       14
##
##                Accuracy : 0.7442
##                  95% CI : (0.5883, 0.8648)
##     No Information Rate : 0.5116
##     P-Value [Acc > NIR] : 0.001574
##
##                   Kappa : 0.4864
##
##  Mcnemar's Test P-Value : 0.546494
##
##             Sensitivity : 0.8182
##             Specificity : 0.6667
##          Pos Pred Value : 0.7200
##          Neg Pred Value : 0.7778
##              Prevalence : 0.5116
##          Detection Rate : 0.4186
##    Detection Prevalence : 0.5814
##       Balanced Accuracy : 0.7424
##
##        'Positive' Class : negative
##
```

2. kNN con k=1, k=3 y con peso por distancia (tres configuraciones en total).

```
grid_knn <- expand.grid(k = seq(1, 3))
knn <- train(Class ~ ., data = training, method = "knn", trControl = fitControl, tuneGrid = grid_knn)
knn
```

```
## k-Nearest Neighbors
##
## 103 samples
##   9 predictor
##   2 classes: 'negative', 'positive'
##
## No pre-processing
## Resampling: Cross-Validated (5 fold)
## Summary of sample sizes: 83, 82, 82, 82, 83
## Resampling results across tuning parameters:
##
##   k  Accuracy   Kappa
##   1  0.7852381  0.5701258
##   2  0.7657143  0.5325650
##   3  0.7361905  0.4718654
##
## Accuracy was used to select the optimal model using the largest value.
## The final value used for the model was k = 1.
```

```
knnPredict <- predict(knn, newdata = testing)
cm_knn <- confusionMatrix(knnPredict, testing$Class)
cm_knn
```

```
## Confusion Matrix and Statistics
##
##           Reference
## Prediction negative positive
##   negative       16        2
##   positive        6       19
##
##                Accuracy : 0.814
##                  95% CI : (0.666, 0.9161)
##     No Information Rate : 0.5116
##     P-Value [Acc > NIR] : 3.932e-05
##
##                   Kappa : 0.6293
##
##  Mcnemar's Test P-Value : 0.2888
##
##             Sensitivity : 0.7273
##             Specificity : 0.9048
##          Pos Pred Value : 0.8889
##          Neg Pred Value : 0.7600
##              Prevalence : 0.5116
##          Detection Rate : 0.3721
##    Detection Prevalence : 0.4186
##       Balanced Accuracy : 0.8160
##
##        'Positive' Class : negative
##
```

3. Multilayer Perceptrón con una sola capa oculta y 3, 5, y 7 unidades ocultas en la misma (tres configuraciones en total).

```
grid_mlp = expand.grid(layer1 = 3, layer2 = 5, layer3 = 7)
mlp <- train(Class ~., data = training,
             method = "mlpML",
             trControl = fitControl,
             tuneGrid = grid_mlp)
mlp
```

```
## Multi-Layer Perceptron, with multiple layers
##
## 103 samples
##   9 predictor
##   2 classes: 'negative', 'positive'
##
## No pre-processing
## Resampling: Cross-Validated (5 fold)
## Summary of sample sizes: 82, 83, 82, 82, 83
## Resampling results:
##
##   Accuracy   Kappa
##   0.5242857  0
##
## Tuning parameter 'layer1' was held constant at a value of 3
## Tuning
##  parameter 'layer2' was held constant at a value of 5
## Tuning parameter
##  'layer3' was held constant at a value of 7
```

```
mlpPredict <- predict(mlp, newdata = testing)
cm_mlp <- confusionMatrix(mlpPredict,testing$Class)
cm_mlp
```

```
## Confusion Matrix and Statistics
##
##           Reference
## Prediction negative positive
##   negative       22       21
##   positive        0        0
##
##                Accuracy : 0.5116
##                  95% CI : (0.3546, 0.6669)
##     No Information Rate : 0.5116
##     P-Value [Acc > NIR] : 0.561
##
##                   Kappa : 0
##
##  Mcnemar's Test P-Value : 1.275e-05
##
##             Sensitivity : 1.0000
##             Specificity : 0.0000
##          Pos Pred Value : 0.5116
##          Neg Pred Value :    NaN
##              Prevalence : 0.5116
##          Detection Rate : 0.5116
##    Detection Prevalence : 1.0000
##       Balanced Accuracy : 0.5000
##
##        'Positive' Class : negative
##
```

Las métricas más adecuadas para la clasificación son Accuracy (cantidad de predicciones positivas que fueron correctas) y F-measure, que combina Recall y Precision en una sola métrica. F-measure es de gran utilidad cuando la distribución de las clases es desigual.

Utilizando la información de estas métricas que nos dan las matrices de confusión para cada modelo, y los cálculos de F-measure,

Recall (OneR) = TP / (TP + FN) = 14 / (14 + 18) = 0.4375
Precision (OneR) = TP / (TP + FP) = 14 / (14 + 7) = 0.6666
F-measure = 2 x (Precision x Recall / Precision + Recall) = 2 (0.6666 x 0.4375 / 0.6666 + 0.4375) = 0.5282

Recall (kNN) = 19 / (19 + 16) = 0.5428
Precision (kNN) = 19 / (19 + 2) = 0.9048
F-measure = 2 (0.9048 x 0.5428 / 0.9048 + 0.5428) = 0.6785

Recall (MLP) = 0 / (0 + 22) = 0
Precision (MLP) = 0 / (0 + 21) = 0
F-measure = 0

construimos la siguiente tabla:

	Accuracy	Recall	Precision	F-measure
OneR	0.7442	0.4375	0.9048	0.5282
k-Nearest Neighbors (k=1)	0.814	0.5428	0.9048	0.6785
Multi-Layer Perceptron	0.5116	0	0	0

A mayor valor de Accuracy, menos errores de clasificación, mejor será el clasificador. Así que si solo nos fijamos en esta métrica el mejor clasificador es k-Nearest Neighbors para k=1.

El peor clasificador es indiscutiblemente el modelo Multi-Layer Perceptron. El valor de Accuracy es muy bajo y causa una alta tasa de errores, concretamente 1 - 0.5116 x 100 = 48.84 %, casi un 50 %.

Pero solo con la métrica Accuracy, no podemos tomar la decisión final y utilizaremos también la métrica F-measure. Conforme a estas métricas tenemos estos tres casos para cada modelo:

- Modelo OneR - Alta precisión y bajo recall: el modelo no detecta la clase muy bien, pero cuando lo hace es altamente confiable.
- Modelo k-Nearest Neighbors (k=1) - Alta precisión y bajo recall: el modelo no detecta la clase muy bien, pero cuando lo hace es altamente confiable.
- Modelo Multi-Layer Perceptron - Baja precisión y bajo recall: El modelo no logra clasificar la clase correctamente.

Finalmente, podemos confirmar que el mejor modelo de clasificación para este conjunto de datos es k-Nearest Neighbors para k=1, ya que el valor de F-measure e superior al resto.

Un dato interesante en el modelo de clasificación Multi-Layer Perceptron, es que F-measure nos dé 0. Eso quiere decir que no ha clasificado bien, lo poco que ha podido clasificar lo ha hecho con un alto porcentaje de errores. Lo podemos confirmar por la métrica Kappa que también nos da un valor de 0. No existe concordancia y podemos suponer que el conjunto de datos que hemos intentado de clasificar, no están bien balanceados.

Análisis ROC

Añadimos el análisis ROC que facilita la interpretación de los datos utilizando la normalización en términos de la matriz de confusión, y lo compararemos con el análisis anterior.

Para el análisis ROC volveremos a predecir, pero ahora con el conjunto de datos de prueba y construiremos el objecto de predicción para cada modelo de clasificación utilizando el vector de estimación de probabilidades para la variable clase positiva ("positive").

1. OneR.

```
onerPredictProb <- predict(oner, newdata = testing, type = "prob")
onerPred <- prediction(onerPredictProb$positive, testing$Class)
onerPerf <- performance(onerPred, "tpr", "fpr")
```

2. kNN con k=1, k=3 y con peso por distancia (tres configuraciones en total).

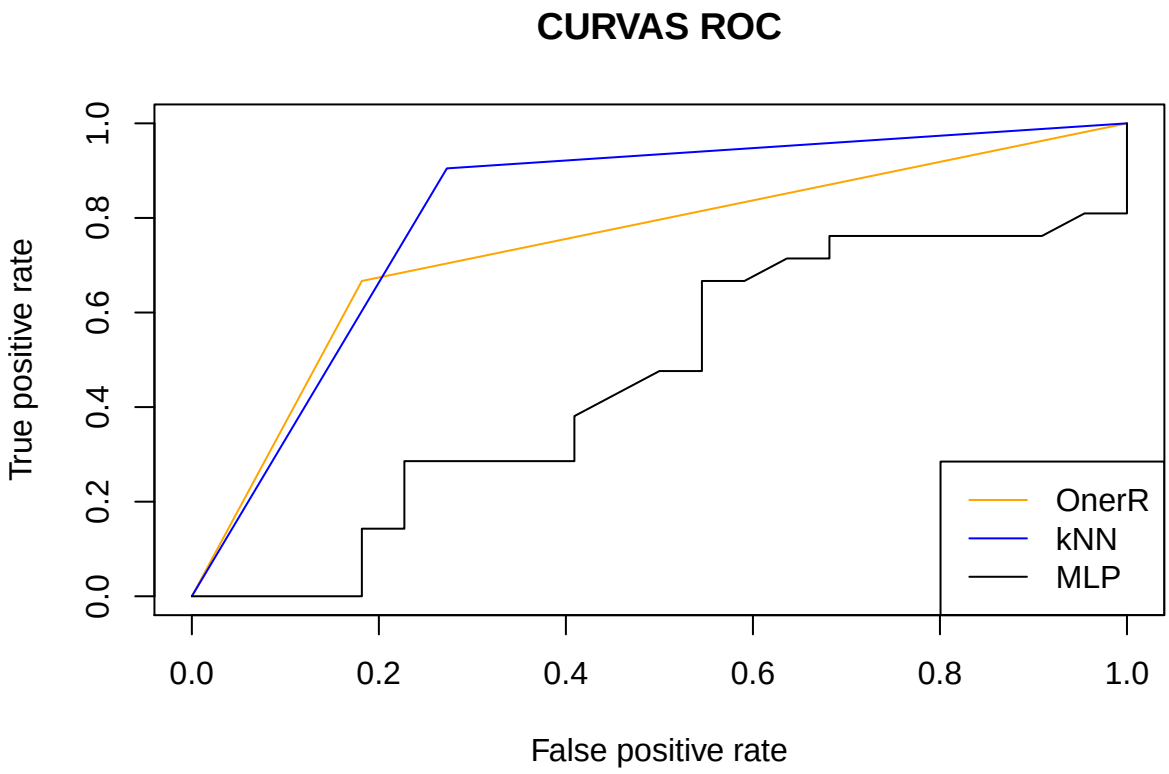
```
knnPredictProb <- predict(knn, newdata = testing, type = "prob")
knnPred <- prediction(knnPredictProb$positive, testing$Class)
knnPerf <- performance(knnPred, "tpr", "fpr")
```

3. Multilayer Perceptrón con una sola capa oculta y 3, 5, y 7 unidades ocultas en la misma (tres configuraciones en total).

```
mlpPredictProb <- predict(mlp, newdata = testing, type = "prob")
mlpPred <- prediction(mlpPredictProb$positive, testing$Class)
mlpPerf <- performance(mlpPred, "tpr", "fpr")
```

Y finalmente, dibujamos las curvas ROC de los modelos.

```
plot(onerPerf, col = "orange", add = FALSE)
plot(knnPerf, col = "blue", add = TRUE)
plot(mlpPerf, col = "black", add = TRUE)
title(main = "CURVAS ROC")
legend("bottomright", legend = c("OnerR", "kNN", "MLP"),
       col = c("orange", "blue", "black"),
       lty = 1, lwd = 1)
```



Si nos fijamos en el gráfico de las curvas ROC, que refleja el análisis ROC, podemos observar que el modelo de clasificación k-Nearest Neighbors para k=1 es el mejor para clasificar. Igual que hemos comentado anteriormente.

El modelo Multilayer Perceptrón sigue siendo el peor modelo. Realmente es un clasificador pésimo, se encuentra por debajo de la diagonal.