Sistemas de Información y Telemedicina. *

Marta Girones Sanguesa

Silvia Marset Gomis

Ignacio Amat Hernández

Sofía Gutiérrez Santamaría

January 17, 2020

Contents

Se	ecciói	n		Página
1	Res	umen		5
2	Intr	oducc	ión	5
3	Mat	teriale	s y Métodos	6
4	Res	ultado	os	8
	4.1	Anális	sis exploratorio	8
		4.1.1	Preparación	8
		4.1.2	Histogramas	10
		4.1.3	Kernel Density	13
		4.1.4	Boxplot	16
		4.1.5	QQplot	19
		4.1.6	Corrplot	22
	4.2	Extra	cción de características	27
		4.2.1	Filter Methods	27
		4.2.2	Wrapper Methods	29
		4.2.3	PCA	31
		4.2.4	Pareto	32
		4.2.5	Biplot	34
5	Mod	delos d	de Clasificación	37
	5.1	Clasifi	icación Lineal	37

^{*}Grado en Ingeniería Biomédica, Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales, Valencia, España.

	5.2	Clasificación Cuadrática	40
	5.3	Clasificación KNN	42
6	Pos	támbulo	44
	6.1	Comparación $LDA,\ QDA,\ KNN$ R	44
	6.2	Puntuación knn vs. número de vecinos	45
	6.3	Benchmarking	46
	6.4	Curva ROC	49
\mathbf{L}	ist	of Figures	
	1	Histogramas Python para datos con y sin anomalias	10
	2	Histogramas R para datos con anomalias	11
	3	Histogramas Matlab	12
	4	Kernel Density para datos con y sin anomalias	13
	5	Gráficos de densidad R	14
	6	Gráficos de densidad Matlab	15
	7	Boxplots Python para datos con y sin anomalias	16
	8	Boxplots R para datos con anomalias	17
	9	Boxplots Matlab para datos con anomalias	18
	10	QQplots Python para datos con y sin anomalias	19
	11	QQplots R	20
	12	QQplots Matlab Clase 1	21
	13	QQplots Matlab Clase 2	21
	14	Corrplot Python para datos con anomalias	22
	15	Corrplot Python para datos sin anomalias	23
	16	Corrplot R para datos con anomalias	24
	17	Matriz de correlaciones en R	25
	18	Matriz de correlaciones en Matlab	26
	19	Diagrama de Pareto en Python y R	33
	20	Diagrama de Pareto en Matlab	33
	21	Biplot Python	34
	22	Biplot R	35
	23	Biplot Matlab.	36
	24	Comparación de mil evaluaciones de cada uno de los métodos de clasificación en R	44
	25	Rendimineto decreciente según aumenta el número de vecinos	45
	26	ROC R	49

Listings

1	importaciones iniciales y preparación de datos en Python	Č
2	Importaciones iniciales y preparacion de datos en R	8
3	Importaciones iniciales y preparacion de datos en Matlab	9
4	Código Python generador de los histogramas con datos anómalos	10
5	Código R generador de los histrogramas con datos anómalos	11
6	Código Matlab generador de los histogramas	12
7	Código Python generador de los kernel density plots con datos anómalos	13
8	Código R generador de los density plots	14
9	Código Matlab generador de los kdensity	15
10	Código Python generador de los boxplots con datos anómalos	16
11	Código R generador de los boxplots	17
12	Código Matlab generador de los boxplots	18
13	Código Python generador de los Q Q plots con datos anómalos	19
14	Código R generador de los Q Q plots	20
15	Código Matlab generador de los QQplots	21
16	Código Python generador de los corrplots con datos anómalos	22
17	Código R generador de los corrplots	24
18	Código Matlab generador de los corrplots	26
19	Métodos filter Python	27
20	Ranking de variables según los métodos filter Python	27
21	Ranking de variables Matlab	27
22	Ranking de variables según distintos métodos en R	28
23	Aplicación métodos $wrapper$ de selección características	29
24	Resultados Python del filtrado mediante wrappers	29
25	Resultados R del filtrado mediante wrappers	30
26	Resultados Matlab del filtrado mediante wrappers	30
27	Principal Component Analysis Python	31
28	Varianza explicada por componente y suma acumulada Python	31
29	Principal Component Analysis R	31
30	Varianza explicada por componente y suma acumulada R	31
31	Principal Component Analysis Matlab y pareto	31
32	Código generador del diagrama de Pareto en Python	32
33	Código generador del diagrama de Pareto en R	32
34	Código generador del Biplot en Python	34
35	Código generador del Biplot en R	35

36	Código generador del Biplot en Matlab	36
37	Python validación del modelo lineal	37
38	Python validación según distintos métodos de partición	37
39	R análisis lineal discriminante	38
40	R puntuación de mil evaluaciones	38
41	Matlab análisis lineal discriminante	39
42	Python validación del modelo cuadrático	40
43	Python validación según distintos métodos de partición	40
44	R análisis cuadrático discriminante	41
45	R puntuación de mil evaluaciones	41
46	Python validación del modelo KNN	42
47	Python validación según distintos métodos de partición	42
48	R K nearest neighbours.	43
49	R puntuación de mil evaluaciones	43
50	Evolución de puntuación según número de vecinos	45
51	Código R para evaluar el tiempo de ejecucción	46
52	Código Python para evaluar el tiempo de ejecucción	47
53	Tiempo de ejecución en R	48
54	Tiempo de ejecución en Python.	48
55	Características de la máquina usada	48
56	Código R para generar la curva ROC y la AUC.	49

1 Resumen

El principal objetivo de este trabajo es adentrarnos en otros lenguajes de programación como son Python y

R, al mismo tiempo que profundizamos en las herramientas para el soporte a la decisión médica. Otro objetivo

del trabajo es poder ayudar a otras personas que vayan a realizar un trabajo similar a elegir el lenguaje de

programación, mediante una comparación de los tres mencionados anteriormente, que más se ajusta a sus

necesidades.

Para lograr una buena comparación de lenguajes nos basaremos en ciertos aspectos como son la facilidad

de aprendizaje del lenguaje, la facilidad de comprensión de la asignatura con cada lenguaje, las funciones

integradas, incluso los distintos tipos de gráficos que nos ofrece cada uno.

Palabras Clave: Matlab, Python, R, machine learning.

 $\mathbf{2}$ Introducción

Debido al aumento de información que se genera y almacena hoy en día es necesario, más que nunca, una

clasificación de datos. Los CDSSs basados en datos utilizan técnicas de aprendizaje automático que permiten

al sistema aprender de las experiencias pasadas y/o encontrar patrones en los datos clínicos. Estos permiten

minimizar el riesgo de fuga de datos, además de ser útil en la ayuda al diagnóstico médico.

Por ello, en el presente trabajo se lleva a cabo un análisis exploratorio de un conjunto de datos de cáncer de

mama de Coimbra que incluye las características clínicas de sujetos sanos y enfermos, una selección y extracción

de características del conjunto de datos, distintos modelos de clasificación y, por último, diferentes estrategias

y métricas de evaluación.

En el análisis exploratorio se realiza un preprocesado de los datos donde se verifica la integridad de la base de

datos, se eliminan las filas corruptas y se estudian los datos anómalos. Posteriormente se analiza la correlación

entre variables y entre datos, la normalidad de estos datos y su distribución mediante métricas básicas como

histograma, kernel density, qqplot y boxplot.

En el proceso de selección y extracción de características investigamos cuáles de las variables son estadísticamente

relevantes. Ello se consigue gracias a métodos de selección –aquellos basados en Filters o Wrappers– y de

extracción de características –como son Análisis de Componentes Principales y Análisis Discriminante Lineal.

Estos métodos tienen como objetivo final la reducción de dimensionalidad.

En cuanto a los modelos de clasificación podemos distinguir los de aprendizaje supervisado, aplicados en este

trabajo, y los basados en el aprendizaje no supervisado. Los modelos de clasificación supervisados están basados

en el aprendizaje mediante pares dato-solución, como KNN, LDA y QDA. Los métodos no supervisados, en

5

cambio, son aquellos en los que los sistemas se adaptan mediante las características intrínsecas de los datos.

Por último, para estudiar las estrategias y métricas de evaluación emplearemos la matriz de confusión de datos, la curva ROC y el error cuadrático medio. Estas cuatro fases se realizan en tres lenguajes de programación distintos: Matlab, Python y R.

3 Materiales y Métodos

La base de datos utilizada en este trabajo es un conjunto de datos de cáncer de mama de Coimbra que incluye las características clínicas de 64 pacientes con cáncer de mama y 52 controles sanos. Está formada por 9 predictores –datos antropométricos y parámetros recopilados de análisis de sangre rutinarios– y 1 variable dependiente binaria que indica la presencia o no de cáncer de mama (1: controles saludables y 2: pacientes). Los 9 predictores son: Edad (años), IMC (kg / m2), Glucosa (mg / dL), Insulina (μ U / mL), HOMA, Leptina (ng / mL), Adiponectina (μ g / mL), Resistencia (ng / mL) y MCP-1 (pg / dL).

Los lenguajes de programación utilizados son Matlab, Python y R. Matlab es un lenguaje interpretado propiedad de MathWorks; requiere de licencia comercial, es ampliamente usado en contextos ingenieriles. Python es un proyecto de código abierto de Guido van Rossum, es un lenguaje de scripting de uso general, no especializado. R es el único lenguaje especializado en ciencia de datos, es el antecesor a S; también de código abierto. Una vez definidos los materiales, procedemos a describir la metodología a seguir; será desarrollada en Python y R. Haremos una comparación con el desarrollo de Matlab realizado a lo largo de la asignatura.

1. Análisis exploratorio:

- a) Cargar datos.
- b) Solucionar existencia de casos perdidos.
- c) Obtener de cada variable númerica y separado por clases el histograma, kernel density, qqplot y boxplot.
- d) Realizar plot matriz de gráficos de dispersión y detección de variables correlacionadas.
- e) Detección y solución de la presencia de outliers.

2. Extracción de características:

- a) Aplicar Filters (fscore y relieff) y Wrappers para seleccionar las variables más significativas.
- b) Normalizar los datos mediante zscore.
- c) Aplicar el Análisis de Componentes Principales para obtener un nuevo conjunto de características relevantes (PCA).
- d) Representar la variabilidad de los datos mediante pareto y la influencia de cada una de las componentes originales para la generación de cada componente principal con biplot.

- e) Transformar los datos usando la matriz de variables originales y la matriz de coeficientes que ofrece PCA.
- f) Representar las proyecciones de las primeras componentes principales mediante el gráfico de dispersión scatter
- g) Aplicar Análisis Lineal Discriminante (LDA) para obtener un nuevo conjunto de características relevantes.

3. Modelos de clasificación:

- a) Separar los datos en una muestra de entrenamiento y otra de validación del modelo a partir del método 'HoldOut'.
- b) Entrenar un modelo de clasificación lineal, cuadrático y basado en k-vecinos con distinto número de vecinos.

4. Estrategia y métricas de evaluación:

- a) Separar los datos en una muestra de entrenamiento y otra de validación del modelo a partir del método 'KFold'.
- b) Entrenar un modelo de clasificación basado en k-vecinos.
- c) Obtener el error cuadrático medio, la curva ROC y la matriz de confusión.

4 Resultados

4.1 Análisis exploratorio

4.1.1 Preparación

```
import numpy as np
2
          scipy import stats
3
   # names of variables
4
   labels = ['age', 'leptin', 'bmi', 'adiponectin', 'glucose',
5
           'resistin', 'insulin', 'MCP1', 'HOMA']
6
   # loads data
8
   data = np.loadtxt (open (r'../../data.csv', 'rb'), delimiter = ',', skiprows = 1)
10
11
     rewrites data as all the rows of data w/out nan cells
   data = data [~np.isnan (data).any (axis=1)]
12
13
     separates parameters into matrix x
14
15
        = np.array ([list (data [x][:-1]) for x in range (len (data))])
16
      and class (1, 2) into vector y
17
        = np.array ([int (data [x][ -1])
                                             for x in range (len (data))])
18
   У
19
20
   # removes outliers
   data_no = data [(np.abs (stats.zscore (data)) < 3).all (axis = 1)]
21
22
        \uparrow = No Outliers
23
   x_no = np.array ([list (data_no [x][:-1]) for x in range (len (data_no))])
24
   y_no = np.array ([int (data_no [x][ -1]) for x in range (len (data_no))])
```

Listing 1: Importaciones iniciales y preparacion de datos en Python.

```
# load data
datos <- read.table ('../../data.csv', sep = ',', header = T)

datos <- na.omit (datos)

# ignore rows w/ components above the 99<sup>th</sup> percentile
suppressPackageStartupMessages (library (dplyr))
datos <- datos %>% filter_all (all_vars (. <= quantile (., 0.99, na.rm = T)))</pre>
```

Listing 2: Importaciones iniciales y preparacion de datos en R.

```
1 load ('Data.mat')
2 % Eliminamos filas que contengan NaN:
3 dataR2mat = dataR2mat (~any (ismissing (dataR2), 2), :);
4 % Cuando queramos eliminar datos anomalos usaremos:
5 dataR2mat = dataR2mat (~any (isoutlier (dataR2mat (:,1:end-1)), 2), :);
```

Listing 3: Importaciones iniciales y preparacion de datos en Matlab.

4.1.2 Histogramas

En este apartado dibujamos los histogramas comparativos.

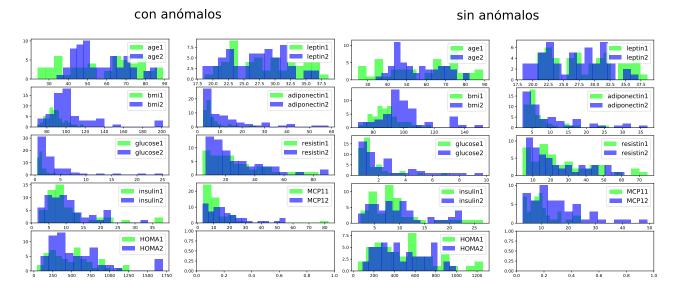


Fig. 1: Histogramas Python para datos con y sin anomalias.

```
import matplotlib as mpl
1
2
   import matplotlib.pyplot as plt
3
   \# load preprocessed data, x and y are raw, x_no and y_no contain no outliers
4
   from preprocessing import x, y, x_no, y_no, labels
5
6
   # colours for the histograms
7
8
   fc = [(), (0, 1, 0, 0.6), (0, 0, 1, 0.6)]
              (R, G, B, \alpha) \leftarrow transparency
9
10
   fig, ax = plt.subplots (nrows = 5, ncols = 2, figsize = (13, 10))
11
   ax = ax.flatten ()
12
13
   # draws each of the histograms, two for each variable
14
   for i in range (0, 9):
15
       for j in [1, 2]:
16
            ax[i].hist (x [y == j, i], bins = 15, fc = fc [j], label = labels [i] + str
17
               (j))
            ax[i].legend (loc = 1, prop={'size': 15})
18
19
   fig.suptitle ('con anómalos', fontsize = 30)
20
   fig.savefig ('../images/hist.pdf', bbox_inches = 'tight', pad_inches = 0)
21
```

Listing 4: Código Python generador de los histogramas con datos anómalos.

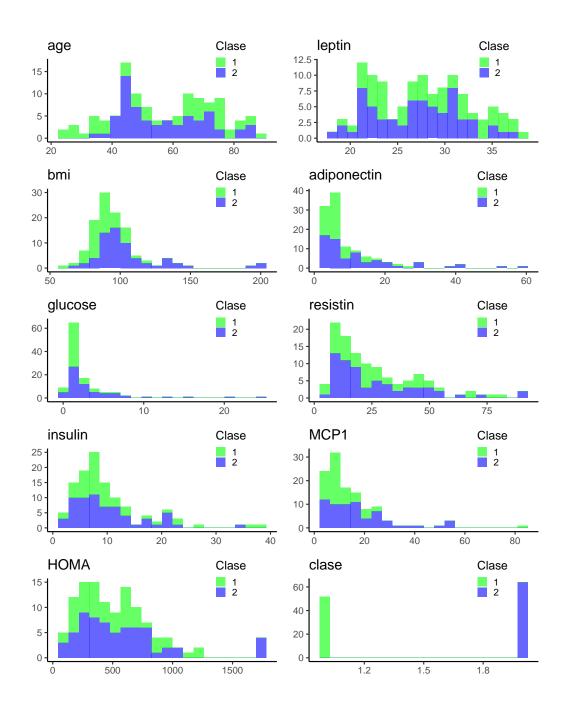


Fig. 2: Histogramas R para datos con anomalias.

```
for (i in 1:10){
1
   pdf (file = paste ('../images/hist', i, '.pdf', sep = ''), width = 6, height = 3)
2
   print (ggplot (datos, aes (x = datos[,i], fill = as.factor (clase))) +
3
                   labs (x = NULL, y = NULL, title = names (datos)[i], fill = 'Clase') +
4
                   geom_histogram (bins = 20, alpha = 0.6) +
5
6
                   theme_classic
                                   (base\_size = 20) +
                   scale_fill_manual(values = c ('green', 'blue')) +
7
8
                   theme
                           (legend.position = c (0.8, 1))
9
   dev.off ()
10
   }
```

Listing 5: Código R generador de los histrogramas con datos anómalos.

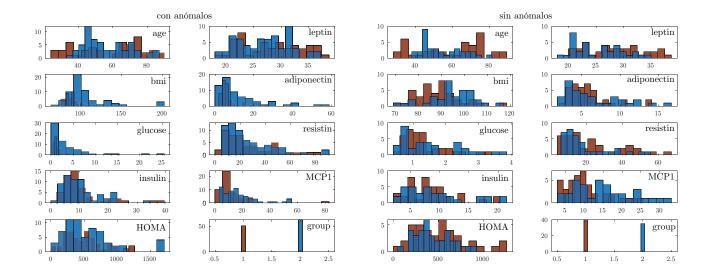


Fig. 3: Histogramas Matlab.

Listing 6: Código Matlab generador de los histogramas.

4.1.3 Kernel Density

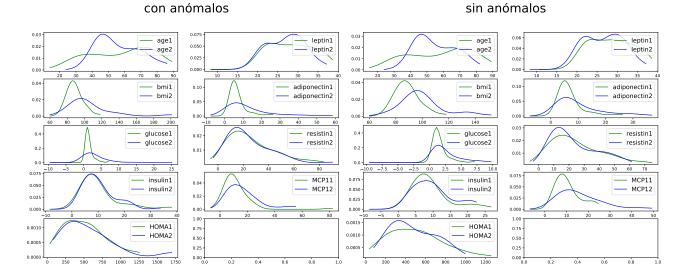


Fig. 4: Kernel Density para datos con y sin anomalias.

```
import matplotlib as mpl
   import matplotlib.pyplot as plt
   import numpy as np
3
4
   from scipy.stats import gaussian_kde
5
   \# load preprocessed data, x and y are raw, x_no and y_no contain no outliers
6
   from preprocessing import x, y, x_no, y_no, labels
7
8
9
   # colours
   fc = ['', 'green', 'blue']
10
11
   fig, ax = plt.subplots (nrows = 5, ncols = 2, figsize = (13, 10))
12
   ax = ax.flatten ()
13
14
   # same loop in principle as before
15
   for i in range (0, 9):
16
       for j in [1, 2]:
17
           kde = gaussian_kde (x_ := x [y == j, i])
18
           xs = np.linspace(np.min (x_) - 10, np.max (x_), num=len (x_))
19
           ax[i].plot (xs, kde(xs), c = fc[j], label = labels [i] + str (j))
20
           ax[i].legend (loc = 1, prop={'size': 15})
21
22
   fig.suptitle ('con anómalos', fontsize = 30)
23
   fig.savefig ('../images/kden.pdf', bbox_inches = 'tight', pad_inches = 0)
24
```

Listing 7: Código Python generador de los kernel density plots con datos anómalos.

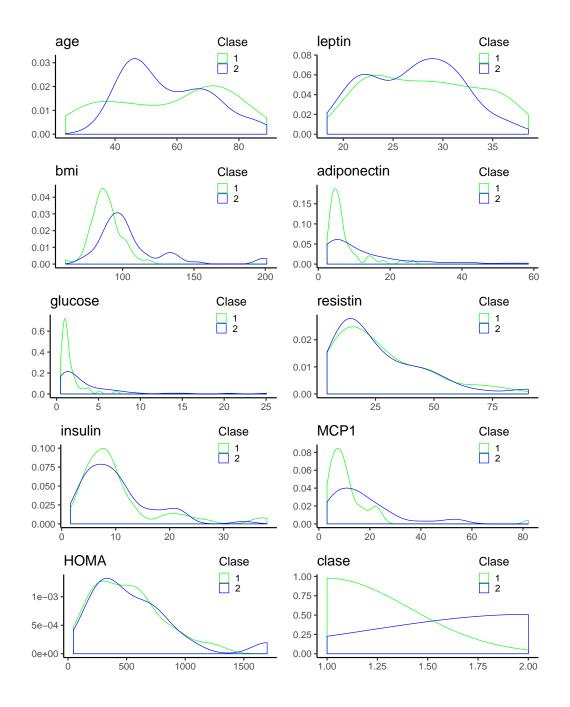


Fig. 5: Gráficos de densidad R.

```
for (i in 1:10){
1
   pdf (file = paste ('../images/dens', i, '.pdf', sep = ''), width = 6, height = 3)
2
   print (ggplot (datos, aes (x = datos[,i], colour = as.factor (clase))) +
3
                   labs (x = NULL, y = NULL,
4
                         title = names (datos)[i], colour = 'Clase') +
5
6
                   geom_density () + theme_classic (base_size = 20) +
                   scale_colour_manual (values = c ('green', 'blue')) +
7
                           (legend.position = c (0.8, 1))
8
                   theme
9
   dev.off ()
10
```

Listing 8: Código R generador de los density plots.

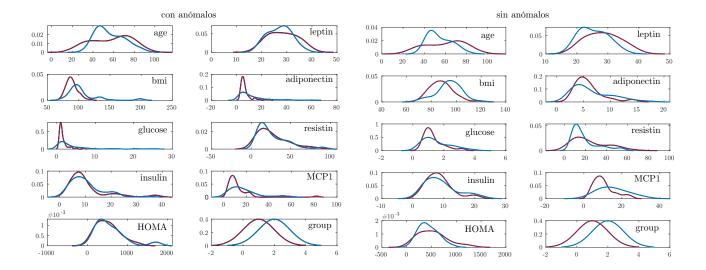


Fig. 6: Gráficos de densidad Matlab.

Listing 9: Código Matlab generador de los kdensity.

4.1.4 Boxplot

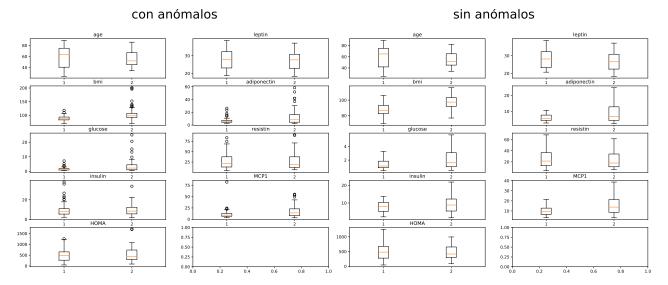


Fig. 7: Boxplots Python para datos con y sin anomalias.

```
import matplotlib as mpl
1
2
   import matplotlib.pyplot as plt
3
   \# load preprocessed data, x and y are raw, x<sub>n</sub>o and y<sub>n</sub>o contain no outliers
4
   from preprocessing import x, y, x_no, y_no, labels
5
6
7
   fig, ax = plt.subplots (nrows = 5, ncols = 2, figsize = (13, 10))
8
   ax = ax.flatten ()
9
   for i in range (0, 9):
10
11
       ax[i].boxplot ([x [y == 1, i], x [y == 2, i]])
       ax[i].title.set_text (labels [i])
12
13
14
   fig.suptitle ('con anómalos', fontsize = 30)
   fig.savefig ('../images/boxp.pdf', bbox_inches = 'tight', pad_inches = 0)
15
```

Listing 10: Código Python generador de los boxplots con datos anómalos.

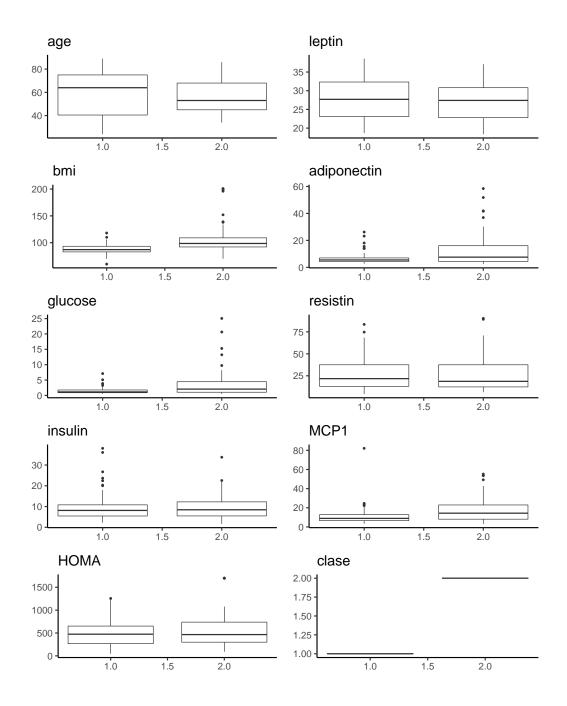


Fig. 8: Boxplots R para datos con anomalias.

```
for (i in 1:10){
1
   pdf (file = paste ('../images/box', i, '.pdf', sep = ''), width = 6, height = 3)
2
   print (ggplot (datos, aes (x = clase,
3
                               y = datos[,i],
4
                               group = clase)) +
5
6
                   labs (x = NULL, y = NULL, title = names (datos)[i]) +
7
                   geom_boxplot
                                 () +
                   theme_classic (base_size = 20))
8
9
   dev.off ()
10
   }
```

Listing 11: Código R generador de los boxplots.

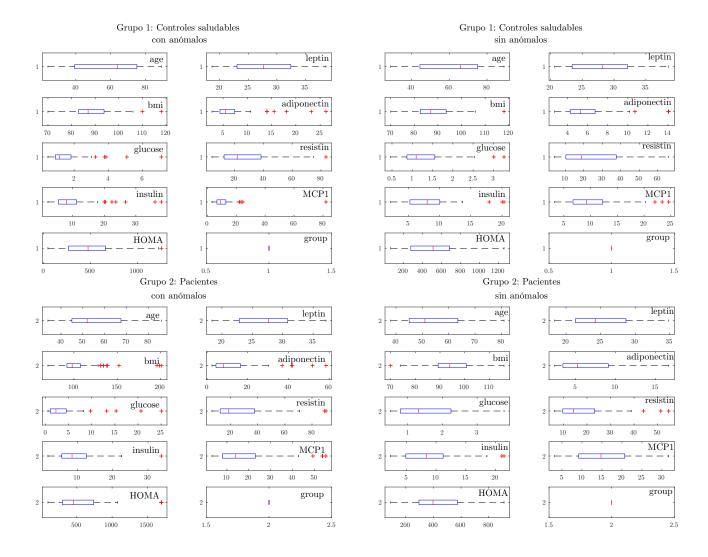


Fig. 9: Boxplots Matlab para datos con anomalias.

Listing 12: Código Matlab generador de los boxplots.

4.1.5 QQplot

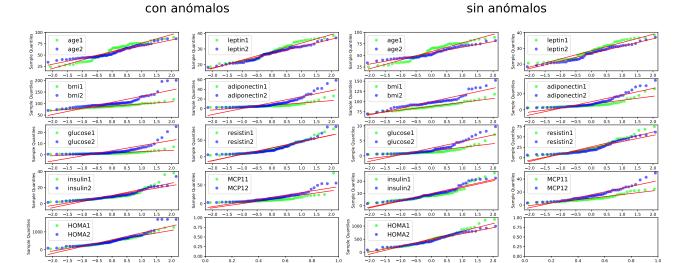


Fig. 10: QQplots Python para datos con y sin anomalias.

```
import matplotlib as mpl
1
2
   import matplotlib.pyplot as plt
3
4
   \# load preprocessed data, x and y are raw, x_no and y_no contain no outliers
   from preprocessing import x, y, x_no, y_no, labels
5
6
   import statsmodels.api as sm
7
   fc = [(), (0, 1, 0, 0.6), (0, 0, 1, 0.6)]
8
9
   fig, ax = plt.subplots (nrows = 5, ncols = 2, figsize = (13, 10))
10
   ax = ax.flatten ()
11
12
13
   for i in range (0, 9):
       for j in [1, 2]:
14
15
           sm.qqplot (x [y == j, i], ax = ax[i], c = fc[j],
                    line = 's', label = labels [i] + str (j))
16
17
           ax[i].legend (loc = 2, prop={'size': 15})
18
   fig.suptitle ('con anómalos', fontsize = 30)
19
   fig.savefig ('../images/qqp.pdf', bbox_inches = 'tight', pad_inches = 0)
20
```

Listing 13: Código Python generador de los QQplots con datos anómalos.

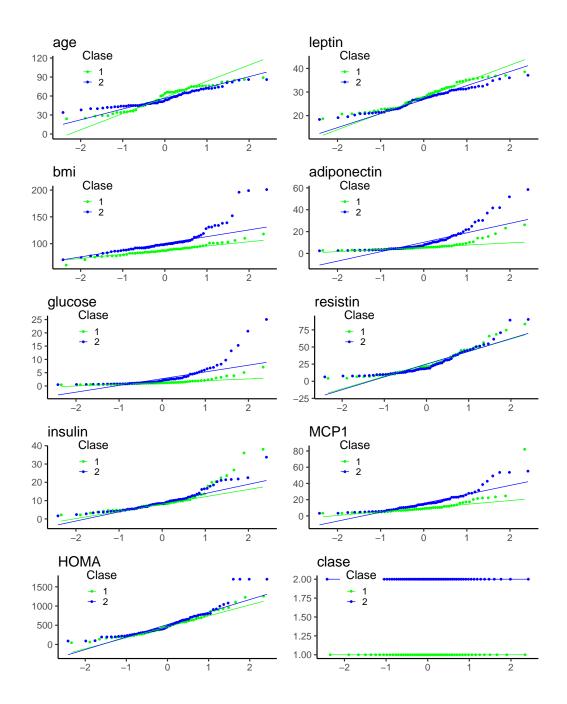


Fig. 11: QQplots R.

```
for (i in 1:10){
1
   pdf (file = paste ('../images/qq', i, '.pdf', sep = ''), width = 6, height = 3)
2
   print (ggplot (datos, aes (sample = datos[,i], colour = as.factor (clase))) +
3
                   labs (x = NULL, y = NULL,
4
                         title = names (datos)[i], colour = 'Clase') +
5
6
                   geom_qq () + geom_qq_line () + theme_classic (base_size = 20) +
                   scale_colour_manual (values = c ('green', 'blue')) +
7
8
                   theme
                           (legend.position = c (0.2, 0.85))
9
   dev.off ()
10
   }
```

Listing 14: Código R generador de los QQplots.

Listing 15: Código Matlab generador de los QQplots.

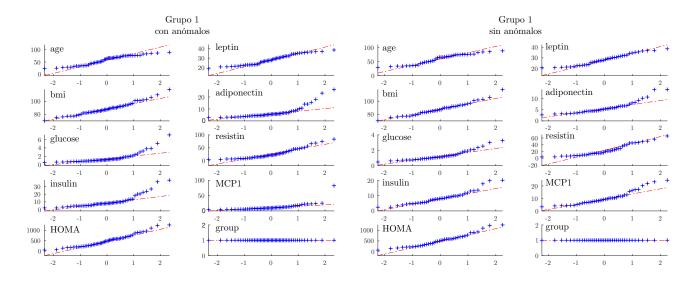


Fig. 12: QQplots Matlab Clase 1.

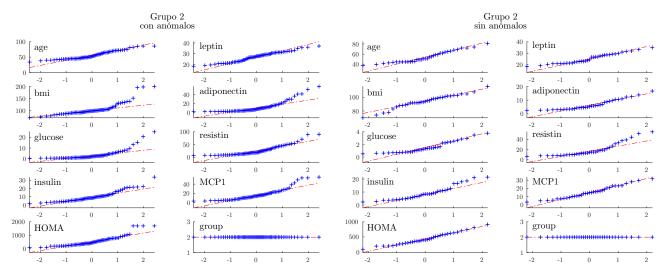


Fig. 13: QQplots Matlab Clase 2.

4.1.6 Corrplot

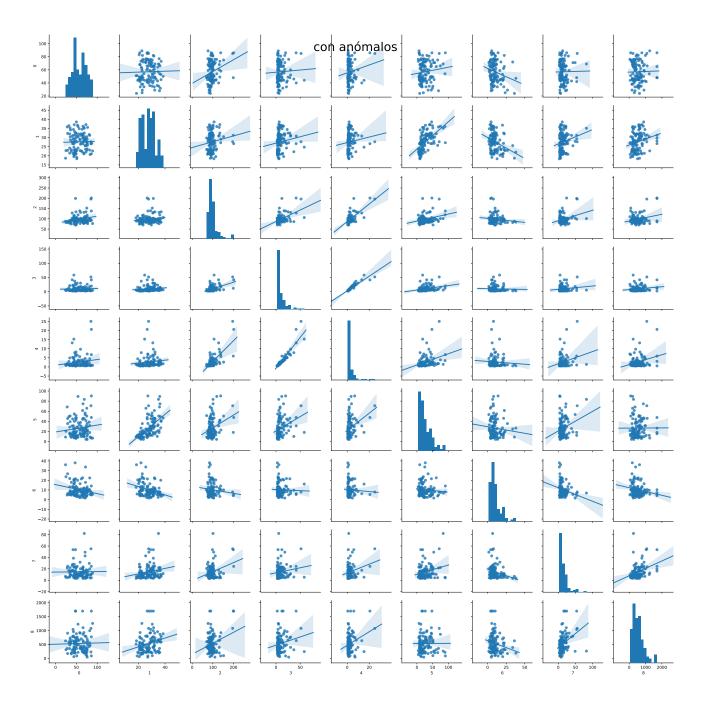


Fig. 14: Corrplot Python para datos con anomalias.

```
import pandas as pd
import seaborn as sns
dataframe = pd.DataFrame.from_records(x)
sns.pairplot (dataframe, kind = 'reg')
plt.suptitle ('con anómalos', fontsize = 30)
plt.savefig ('../images/corrp.pdf', bbox_inches = 'tight', pad_inches = 0)
```

Listing 16: Código Python generador de los corrplots con datos anómalos.

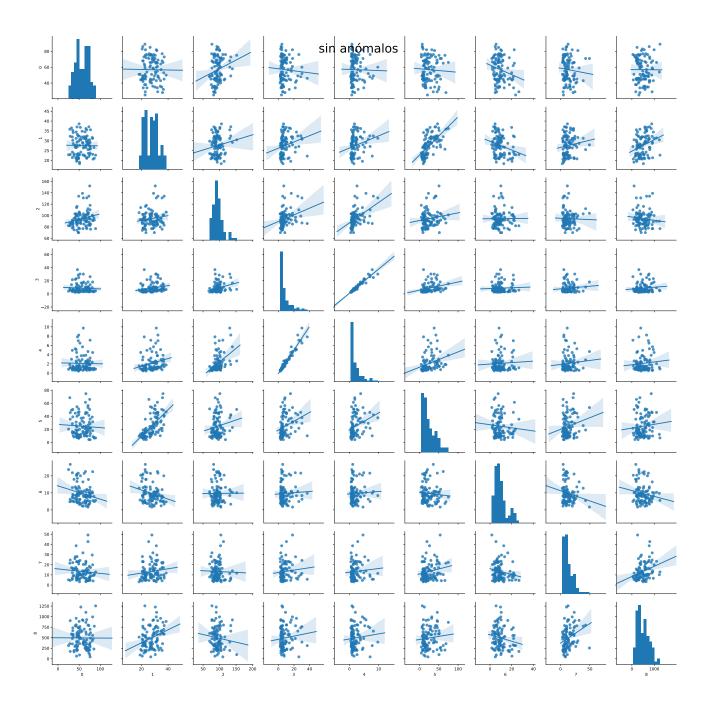


Fig. 15: Corrplot Python para datos sin anomalias.

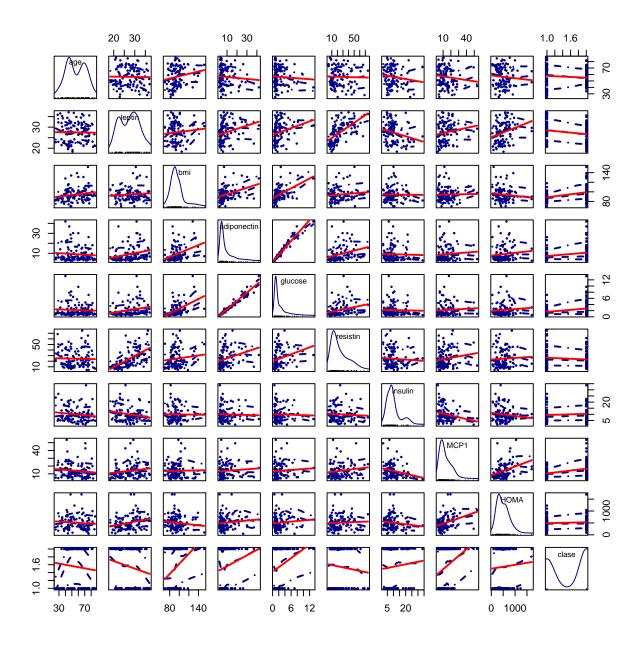


Fig. 16: Corrplot R para datos con anomalias.

```
library (car)
1
2
   pdf ("../images/corrplot.pdf")
   scatterplotMatrix (datos, regLine=list (col='red'), pch=20, cex=0.5, col='blue4')
3
   dev.off ()
4
5
   library (corrplot)
6
7
   pdf ("../images/corrplot1.pdf")
   M <- cor (na.omit (datos))
8
9
   corrplot (M, method = 'number')
10
   dev.off ()
```

Listing 17: Código R generador de los corrplots.



Fig. 17: Matriz de correlaciones en R.

corrplot (dataR2mat (:,1:end-1))

Listing 18: Código Matlab generador de los corrplots.

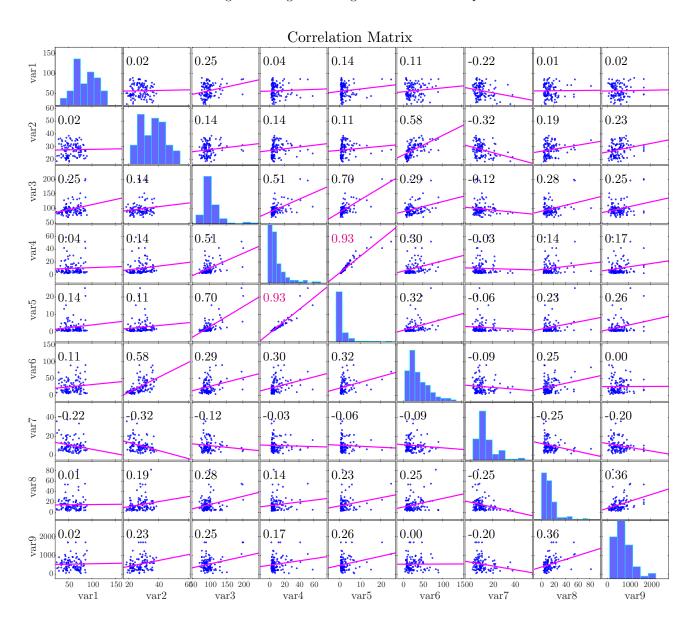


Fig. 18: Matriz de correlaciones en Matlab.

4.2 Extracción de características.

4.2.1 Filter Methods

```
Filter Methods
1
2
   import sklearn.feature_selection as sk
3
   Fscore, pval = sk.f_classif (x_no, y_no)
4
   r1 = Fscore.argsort().argsort() # fscore rank
5
   print (r1+1)
6
8
   import ReliefF as rl
9
   r2 = r1.ReliefF (n_neighbors = 1) # relieff rank
10
   r2.fit(x_no, y_no)
11
   r2 = r2.top_features
12
   print (r2+1)
13
14
   diferencias = abs (r1-r2)
15
16
   media = np.mean (diferencias)
```

Listing 19: Métodos filter Python.

```
1 [4 5 9 6 7 3 1 8 2] -> fscore
2 [1 9 8 7 6 5 4 2 3] -> relieff
3 [3 4 1 1 1 2 3 6 1] -> diferencias
4 2.4444444444446 -> media
```

Listing 20: Ranking de variables según los métodos filter Python.

```
= fscore (x, y);
   [out
          , rank]
   [RANKED, WEIGHT] = relieff (x, y, 1); % k = 1 neighbour
  diferencia = abs(rank-RANKED')
3
  media = mean (diferencia)
4
                                        var6
                                              var7
5
       var1
            var2
                    var3
                          var4
                                 var5
                                                     var8 var9
        3
                     4
                                  2
                                                             7
6
               5
                            8
                                         9
                                                1
                                                      6
                                                                  -> fscore
7
        1
               3
                     2
                            7
                                         5
                                                8
                                                      9
                                                             6
                                                                  -> relieff
8
   diferencias =
9
        2
               2
                     2
                            1
                                  2
                                                7
                                                      3
                                                             1
                                         4
  media =
        2.6667
```

Listing 21: Ranking de variables Matlab.

```
# Fscore
1
   library (PredPsych)
2
   rank (fscore (datos, 10, 1:9))
3
          leptin bmi adiponectin glucose resistin insulin MCP1 HOMA
4
                                 7
                                           8
5
6
   # Relieff
   brary (CORElearn)
8
9
   rank (attrEval (as.factor (clase)~., datos, 'Relief'))
10
          leptin bmi adiponectin glucose resistin insulin MCP1 HOMA
                7
                                  2
                                          4
                                                    5
                      8
                                                             1
                                                                     6
11
12
   # Algunos de los posibles metodos
13
   for (i in infoCore (what = "attrEval")){
14
       cat (i, '\r\t\', unname (rank (attrEval (as.factor (clase)~., datos, i))), '\n')
15
16
   # ReliefFequalK
                      9 3 8 4 6 5 2 7 1
17
   # ReliefFexpRank
18
                       8 5 9 3 6 4 1 7 2
   # ReliefFbestK
                       9 7 8 3 4 5 1 6 2
19
   # Relief
                       9 7 8 2 4 5 1 6 3
20
21
   # InfGain
                       7 4 9 5 8 2 1 6 3
   # GainRatio
                       9 2 8 7 6 4.5 1 3 4.5
22
23
   # MDL
                       7 4 9 5 8 3 1 6 2
   # Gini
                       7 4 9 5 8 3 1 6 2
24
                       6 4 9 5 7 3 1 8 2
25
   # MyopicReliefF
   # Accuracy
                       6 4 9 5 7 3 1.5 8 1.5
26
27
   # ReliefFmerit
                       8 3 9 5 6 4 1 7 2
   # ReliefFdistance
                      8 4 9 5 6 3 1 7 2
28
   # ReliefFsqrDistan 8 4 9 5 6 3 1 7 2
29
   # DKM
                       7 3 9 6 8 2 1 5 4
30
   # ReliefFexpC
                       8 5 9 3 6 4 1 7 2
31
   # ReliefFavgC
                       8 5 9 3 6 4 1 7 2
32
   # ReliefFpe
                      8 5 9 3 6 4 1 7 2
33
   # ReliefFpa
                       8 5 9 3 6 4 1 7 2
34
   # ReliefFsmp
                      8 5 9 3 6 4 1 7 2
35
   # GainRatioCost
                       9 2 8 7 6 4.5 1 3 4.5
36
   # DKMcost
                       7 4 9 5 8 3 2 6 1
37
38
```

Listing 22: Ranking de variables según distintos métodos en R.

4.2.2 Wrapper Methods

```
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
2
   from mlxtend.feature_selection import SequentialFeatureSelector
3
   knn = KNeighborsClassifier (n_neighbors = 50)
4
5
6
   sfs = SequentialFeatureSelector (knn,
                    k_features = 4,
8
                    forward = True,
                    scoring = 'accuracy',
9
                    cv = 10
10
11
12
   sfs.fit (x_no, y_no, custom_feature_names = labels)
   print (sfs.k_score_)
13
14
   print ('Sequential Forward Selection', sfs.k_feature_names_, end = '\n\n')
15
   sfs.forward = False
16
17
   sfs.fit (x_no, y_no, custom_feature_names = labels)
18
19
   print (sfs.k_score_)
20
   print ('Sequential Backward Selection', sfs.k_feature_names_, end = '\n\n')
```

Listing 23: Aplicación métodos wrapper de selección características.

```
0.70545454545454
2 Sequential Forward Selection ('leptin', 'bmi', 'glucose', 'MCP1')
3
4 0.70949494949495
5 Sequential Backward Selection ('leptin', 'bmi', 'glucose', 'insulin')
```

Listing 24: Resultados Python del filtrado mediante wrappers.

```
# Sequential Feature Selector
1
   library (mlr)
2
   # Forward
3
   sfs <- selectFeatures (
4
         learner
                                         ('classif.knn', k = 9, 1 = 3),
5
                     = makeLearner
         task
                     = makeClassifTask (data = datos, target = 'clase'),
6
         resampling = makeResampleDesc ("CV", iter = 50),
                     = makeFeatSelControlSequential (method = "sfs", maxit = 100L))
8
          control
   # FeatSel result:
9
   # Features (4): age, leptin, bmi, MCP1
10
   # mmce.test.mean=0.1833333
11
12
   # Backward
13
   sbs <- selectFeatures (</pre>
14
                                         ('classif.knn', k = 9, 1 = 3),
         learner
                     = makeLearner
15
16
          task
                     = makeClassifTask (data = datos, target = 'clase'),
         resampling = makeResampleDesc ("CV", iter = 50),
17
                     = makeFeatSelControlSequential (method = "sbs", maxit = 100L))
18
          control
   # FeatSel result:
19
   # Features (4): age, leptin, bmi, MCP1
20
21
   # mmce.test.mean = 0.1800000
```

Listing 25: Resultados R del filtrado mediante wrappers.

```
fun = @(XT, yT, Xt, yt) \dots
2
                  (sum ((yt - classify (Xt,XT,yT,'quadratic'))~=0));
  fsf = sequentialfs (fun, x, y, 'direction', 'forward', 'cv', 10);
3
  fsb = sequentialfs (fun, x, y, 'direction', 'backward', 'cv', 10);
4
  [fsf' fsb']'
5
6
  ans =
7
          0
               0
                            0
                                         0
                                              -> forward
      1
                        0
                                0
                                     0
8
      1
          1
               1
                        0
                            0
                                1
                                     1
                                         0
                                              -> backward
                   1
```

Listing 26: Resultados Matlab del filtrado mediante wrappers.

4.2.3 PCA

```
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
  x_no = StandardScaler ().fit_transform (x_no) # typify
from sklearn.decomposition import PCA

pca = PCA (n_components = 9)
principalComponents = pca.fit_transform(x_no)
evr = pca.explained_variance_ratio_
```

Listing 27: Principal Component Analysis Python.

```
1 [0.29146865 0.18490568 0.14125105 0.11727276 0.08486126 0.07999359
2 0.06636991 0.03254865 0.00132847]
3 [0.29146865 0.47637432 0.61762537 0.73489813 0.81975939 0.89975298
4 0.96612289 0.99867153 1. ]
```

Listing 28: Varianza explicada por componente y suma acumulada Python.

```
pca <- prcomp (datos[,1:9], center = T, scale. = T, rank. = 9)
summary (pca)</pre>
```

Listing 29: Principal Component Analysis R.

```
Importance of components:
                   PC1
                          PC2
                                  PC3
                                        PC4
                                              PC5
                                                     PC6
                                                             PC7
                                                                     PC8
                                                                             PC9
  Std deviation
                   1.7475 1.2393 1.082 1.048 0.8528 0.8144 0.66261 0.53101 0.17555
3
  Propor. of Var. 0.3393 0.1707 0.130 0.122 0.0808 0.0737 0.04878 0.03133 0.00342
4
                   0.3393 0.5100 0.640 0.762 0.8428 0.9165 0.96525 0.99658 1.00000
5
  Cum. Var.
```

Listing 30: Varianza explicada por componente y suma acumulada R.

```
1 x = zscore (x);
2 [coeff, score, latent] = pca (x);
3 pareto (latent)
```

Listing 31: Principal Component Analysis Matlab y pareto.

4.2.4 Pareto

```
ax.bar (range (len (evr)), evr)
ax.set_ylim (top=1)
ax1 = ax.twinx ()
ax1.set_ylim (top=100)
ax1.plot (range (len (evr)), np.cumsum (evr)*100, marker = '.', color = 'red')
fig.suptitle ('Pareto Python', fontsize = 16)
fig.savefig ('../images/pareto.pdf', bbox_inches = 'tight', pad_inches = 0)
```

Listing 32: Código generador del diagrama de Pareto en Python.

```
pdf ("../images/pareto.pdf", width = 7, height = 5.5)
1
   x <- pca[['sdev']]^2</pre>
2
   cx <- cumsum (x)
3
   par (mar = c(3,3,4,3))
4
   pc <- barplot (x, names.arg = dimnames (pca[['rotation']])[[2]],</pre>
5
                   border = NA, axes = F, main = 'Pareto R',
6
7
                   ylim = c(0, 1.05*max(cx, na.rm = T)), col = 'blue4'
8
   lines (pc, cx, type = 'b', pch = 19, col="red")
9
        (col
                 = 'black')
10
   box
   axis (side
                 = 2,
11
                 = c (0, round (x[c (1,2,4,6,8,9)], 1)),
12
          at
                 = 2, cex.axis = 0.8,
13
          las
14
   axis (side
                 = 4,
15
                 = c(0, cx[1:8]),
16
          labels = paste (c (0, round (cx[1:8]/max (cx) * 100)) ,"%",sep=""),
17
                 = 2, cex.axis = 0.8
18
19
   dev.off ()
20
```

Listing 33: Código generador del diagrama de Pareto en R.

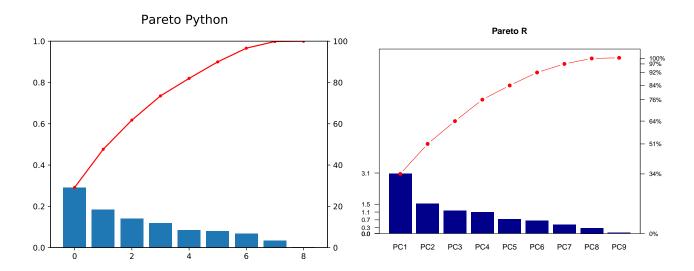


Fig. 19: Diagrama de Pareto en Python y R.

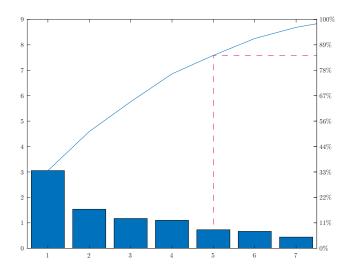


Fig. 20: Diagrama de Pareto en Matlab.

4.2.5 Biplot

Biplot Python

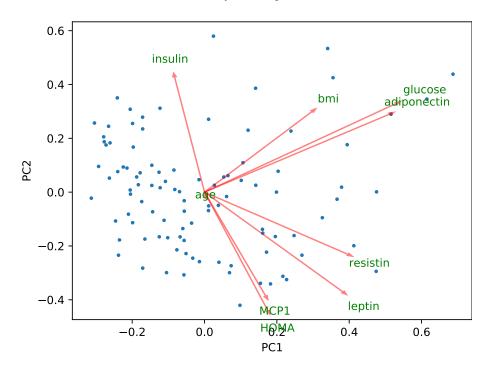


Fig. 21: Biplot Python.

```
def biplot (score,coeff,labels=None):
1
2
       """ from https://ostwalprasad.github.io/machine-learning/PCA-using-python.html"""
       xs = score[:,0]; ys = score[:,1]
3
4
       n = coeff.shape[0]
       scalex = 1.0/(xs.max() - xs.min())
5
6
       scaley = 1.0/(ys.max() - ys.min())
7
       plt.scatter(xs * scalex,ys * scaley,s=5)
       plt.suptitle ('Biplot Python', fontsize = 16)
8
9
       for i in range(n):
10
           plt.arrow(0, 0, coeff[i,0], coeff[i,1],color='r',alpha=0.5, head_width=0.01)
11
           if labels is None:
                plt.text(coeff[i,0]*~1.15,~coeff[i,1]~*~1.15,~"Var"+str(i+1),~color~=~^{\searrow}
12
                    green', ha = 'center', va = 'center')
           else:
13
14
                plt.text(coeff[i,0]* 1.15, coeff[i,1]* 1.15, labels[i], color = 'g', ha_{st}
                    = 'center', va = 'center')
       plt.xlabel("PC{}".format(1)), plt.ylabel("PC{}".format(2))
15
16
       plt.savefig ('../images/biplotpca.pdf', bbox_inches = 'tight', pad_inches = 0)
   biplot (principalComponents[:,0:2], np.transpose(pca.components_[0:2, :]), labels)
17
```

Listing 34: Código generador del Biplot en Python.

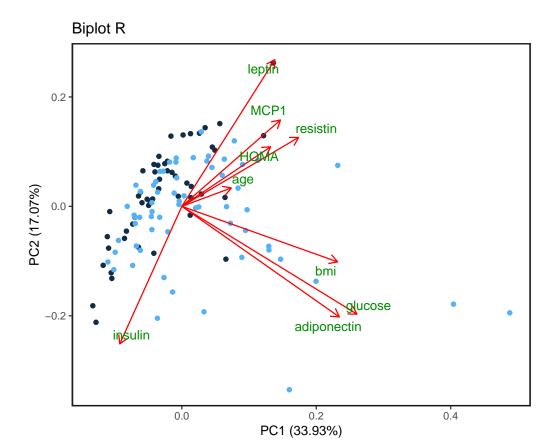


Fig. 22: Biplot R.

```
library (ggfortify)
   pdf ("../images/biplot.pdf", width = 6, height = 5)
2
   autoplot (pca, data = datos, colour = 'clase',
3
4
              loadings = T,
                        = 'Biplot R',
5
              main
              loadings.label
6
              loadings.label.repel = T,
7
              loadings.label.colour = 'green4',
8
9
10
   theme_bw () +
11
   theme (panel.grid.major = element_blank(),
          panel.grid.minor = element_blank(),
12
          panel.background = element_rect(colour = "black", size = 1),
13
          legend.position = 'none'
14
15
```

Listing 35: Código generador del Biplot en R.

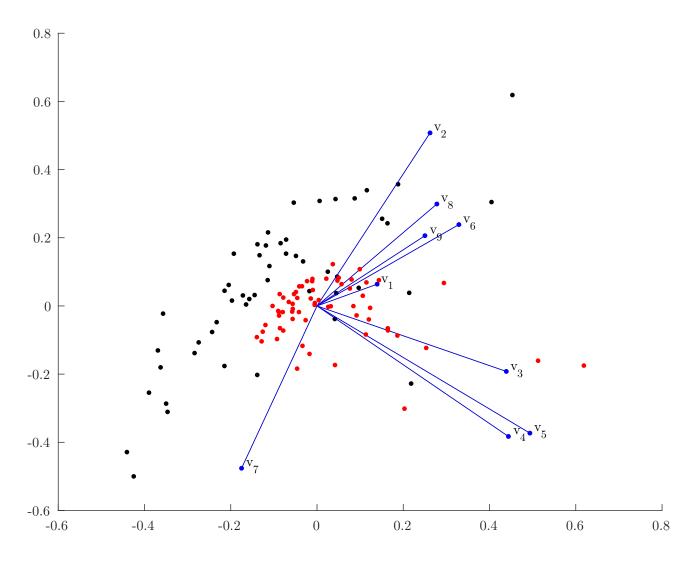


Fig. 23: Biplot Matlab.

```
hold on
biplot (coeff (:,1:2), 'score', score(1:51,1:2), ...

'Color', 'k', 'MarkerSize',10)
biplot (coeff (:,1:2), 'score', score(51:end,1:2), ...
'varlabels', varnames, 'MarkerSize',10)
hold off
```

Listing 36: Código generador del Biplot en Matlab.

5 Modelos de Clasificación

5.1 Clasificación Lineal

```
{	t from sklearn.discriminant\_analysis import LinearDiscriminantAnalysis as LDA}
1
2
3
   lda = LDA ()
   score = cross_val_score (lda, x, y, cv = 10)
4
   print ('Linear puntuación CV media: %.2f std: %.2f'
           %(np.mean (score), np.std (score)))
6
7
   score = cross_val_score (lda, x, y, cv = KFold (n_splits = 10, shuffle = True))
8
   print ('Linear puntuación KF media: %.2f std: %.2f'
9
10
           %(np.mean (score), np.std (score)))
11
   score = cross_val_score (lda, x, y, cv = ShuffleSplit (n_splits = 10))
12
   print ('Linear puntuación SS media: %.2f std: %.2f'
13
           %(np.mean (score), np.std (score)))
14
15
16
   score = cross_val_score (lda, x, y, cv = LeaveOneOut ())
   print ('Linear puntuación LO media: %.2f std: %.2f'
17
           %(np.mean (score), np.std (score)))
18
```

Listing 37: Python validación del modelo lineal.

```
Linear puntuacion CV media: 0.75 std: 0.13
Linear puntuacion KF media: 0.75 std: 0.10
Linear puntuacion SS media: 0.71 std: 0.14
Linear puntuacion LO media: 0.76 std: 0.43
```

Listing 38: Python validación según distintos métodos de partición.

```
# Linear Discriminant Analysis
1
   it <- 1000
2
   ldascores <- rep (NA, times = it)</pre>
3
   p <- 0.7 \# partition
4
   cat ('LDA\n')
5
   pb <- txtProgressBar (min = 0, max = it, initial = 0, char = '|', style = 3)
6
   for (i in 1:it){
7
   train.samples <- createDataPartition (datos$clase, p = p, list = F)
8
                   <- datos[ train.samples,]</pre>
10
   train.data
11
   test.data
                   <- datos[-train.samples,]</pre>
12
   preproc.param <- preProcess (train.data, method = c ("center", "scale"))</pre>
13
14
                   <- predict (preproc.param, train.data)
15
   train.trans
                   <- predict (preproc.param, test.data)
16
   test.trans
17
18
   mdl <- lda (clase~., data = train.trans)</pre>
19
20
   prd <- predict (mdl, test.trans)</pre>
21
   ldascores[i] <- mean (prd$class == test.trans$clase)</pre>
22
23
   setTxtProgressBar (pb, i)
24
   }
```

Listing 39: R análisis lineal discriminante.

```
vars n mean sd median trimmed mad min max range skew
ldascores 1 1000 0.72 0.08 0.73 0.72 0.10 0.47 0.97 0.50 -0.09
```

Listing 40: R puntuación de mil evaluaciones.

```
= length (x);
 2
3
       = 0.3;
   cvp = cvpartition (n, 'HoldOut', p);
 4
   iteraciones = 10000;
 5
   resultados = zeros (iteraciones,1);
6
   for i = 1 : iteraciones
            cvp = cvpartition (n, 'HoldOut', p);
8
            Mdl = fitcdiscr (x (cvp.training), y (cvp.training), ...
9
                    'DiscrimType', 'linear');
            [label, score, cost] = predict (Mdl, x (cvp.test));
           dif = abs (label - y (cvp.test));
12
            errores = sum (dif == 1); aciertos = sum (dif == 0);
13
14
           resultados(i) = (aciertos/(aciertos+errores)) * 100;
16
   [muHat, sigmaHat, muCI, sigmaCI] = normfit (resultados, .01)
17
18
   % % Linear
   % muHat =
19
20
   %
             52.586
21
   % sigmaHat =
             7.5288
22
   %
   % muCI =
23
             52.392
24
   %
25
              52.78
26
   % sigmaCI =
             7.394
   %
27
28
   %
             7.6683
```

Listing 41: Matlab análisis lineal discriminante.

5.2 Clasificación Cuadrática

```
from sklearn.discriminant_analysis import QuadraticDiscriminantAnalysis as QDA
1
2
   qda = QDA ()
3
   score = cross_val_score (qda, x, y, cv = 10)
4
   print ('Quadratic puntuación CV media: %.2f std: %.2f'
5
           %(np.mean (score), np.std (score)))
6
   score = cross_val_score (qda, x, y, cv = KFold (n_splits = 10, shuffle = True))
8
   print ('Quadratic puntuación KF media: %.2f std: %.2f'
9
           %(np.mean (score), np.std (score)))
10
11
12
   score = cross_val_score (qda, x, y, cv = ShuffleSplit (n_splits = 10))
   print ('Quadratic puntuación SS media: %.2f std: %.2f'
13
           %(np.mean (score), np.std (score)))
14
15
   score = cross_val_score (qda, x, y, cv = LeaveOneOut ())
16
   print ('Quadratic puntuación LO media: %.2f std: %.2f'
17
18
           %(np.mean (score), np.std (score)))
```

Listing 42: Python validación del modelo cuadrático.

```
Quadratic puntuacion CV media: 0.66 std: 0.19
Quadratic puntuacion KF media: 0.76 std: 0.09
Quadratic puntuacion SS media: 0.76 std: 0.14
Quadratic puntuacion LO media: 0.73 std: 0.44
```

Listing 43: Python validación según distintos métodos de partición.

```
qdascores <- rep (NA, times = it)
1
   cat ('\nQDA\n')
2
   pb <- txtProgressBar (min = 0, max = it, initial = 0, char = '|', style = 3)
3
   for (i in 1:it){
4
   train.samples <- createDataPartition (datos$clase, p = p, list = F)</pre>
5
6
7
   train.data
                   <- datos[ train.samples,]</pre>
                   <- datos[-train.samples,]</pre>
8
    test.data
9
   preproc.param <- preProcess (train.data, method = c ("center", "scale"))</pre>
10
11
                   <- predict (preproc.param, train.data)
12
   train.trans
13
    test.trans
                   <- predict (preproc.param, test.data)
14
   mdl <- qda (clase~., data = train.trans)</pre>
15
16
   prd <- predict (mdl, test.trans)</pre>
17
18
19
   qdascores[i] <- mean (prd$class == test.trans$clase)</pre>
20
   setTxtProgressBar (pb, i)
21
   }
```

Listing 44: R análisis cuadrático discriminante.

```
    vars
    n mean
    sd median trimmed
    mad
    min
    max
    range
    skew

    qdascores
    2 1000
    0.69
    0.07
    0.70
    0.69
    0.10
    0.43
    0.87
    0.43
    -0.17
```

Listing 45: R puntuación de mil evaluaciones.

```
= length (x);
 2
   n
     = 0.3;
3
   cvp = cvpartition (n, 'HoldOut', p);
4
   iteraciones = 10000;
5
   resultados = zeros (iteraciones,1);
6
   for i = 1 : iteraciones
           cvp = cvpartition (n, 'HoldOut', p);
8
           Mdl = fitcdiscr (x (cvp.training), y (cvp.training), ...
9
                    'DiscrimType', 'quadratic');
            [label, score, cost] = predict (Mdl, x (cvp.test));
           dif = abs (label - y (cvp.test));
12
           errores = sum (dif == 1); aciertos = sum (dif == 0);
13
14
           resultados(i) = (aciertos/(aciertos+errores)) * 100;
16
   [muHat, sigmaHat, muCI, sigmaCI] = normfit (resultados, .01)
17
18
   % % Quadratic
   % muHat =
19
20
            62.252
21
   % sigmaHat =
            8.3548
22
   % muCI =
23
            62.037 62.468
24
25
   % sigmaCI =
            8.2051 8.5096
26
   %
```

Listing 46: Matlab análisis lineal discriminante.

5.3 Clasificación KNN

```
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
1
2
   knn = KNeighborsClassifier (n_neighbors = 9)
3
   score = cross_val_score (knn, x, y, cv = 10)
4
   print ('KNN puntuación CV media: %.2f std: %.2f'
5
6
           %(np.mean (score), np.std (score)))
   score = cross_val_score (knn, x, y, cv = KFold (n_splits = 10, shuffle = True))
8
   print ('KNN puntuación KF media: %.2f std: %.2f'
9
           %(np.mean (score), np.std (score)))
10
11
12
   score = cross_val_score (knn, x, y, cv = ShuffleSplit (n_splits = 10))
   print ('KNN puntuación SS media: %.2f std: %.2f'
13
           %(np.mean (score), np.std (score)))
14
15
   score = cross_val_score (knn, x, y, cv = LeaveOneOut ())
16
   print ('KNN puntuación LO media: %.2f std: %.2f'
17
18
           %(np.mean (score), np.std (score)))
```

Listing 47: Python validación del modelo KNN.

```
KNN puntuacion CV media: 0.47 std: 0.12

KNN puntuacion KF media: 0.47 std: 0.15

KNN puntuacion SS media: 0.47 std: 0.13

KNN puntuacion LO media: 0.43 std: 0.50
```

Listing 48: Python validación según distintos métodos de partición.

```
knnscores <- rep (NA, times = it)
1
2
   library (class)
   cat ('\nKNN\n')
3
   pb <- txtProgressBar (min = 0, max = it, initial = 0, char = '|', style = 3)
4
   for (i in 1:it){
5
   train.samples <- createDataPartition (datos$clase, p = p, list = F)</pre>
6
7
8
                   <- datos[ train.samples,]</pre>
   train.data
9
   test.data
                   <- datos[-train.samples,]</pre>
10
11
   preproc.param <- preProcess (train.data, method = c ("center", "scale"))</pre>
12
                   <- predict (preproc.param, train.data)
13
   train.trans
                   <- predict (preproc.param, test.data)
14
   test.trans
15
   prd <- knn (train = train.trans[1:9],</pre>
16
17
                       = train.trans$clase,
18
                 test
                       = test.trans[1:9],
                       = 1)
19
20
   knnscores[i] <- mean (prd == test.trans$clase)</pre>
21
22
23
   setTxtProgressBar (pb, i)
24
   }
```

Listing 49: R K nearest neighbours.

```
    vars
    n mean
    sd median trimmed
    mad
    min
    max range
    skew

    knnscores
    3 1000 0.66 0.07 0.67 0.66 0.05 0.43 0.90 0.47 -0.07
```

Listing 50: R puntuación de mil evaluaciones.

6 Postámbulo

6.1 Comparación LDA, QDA, KNN R.

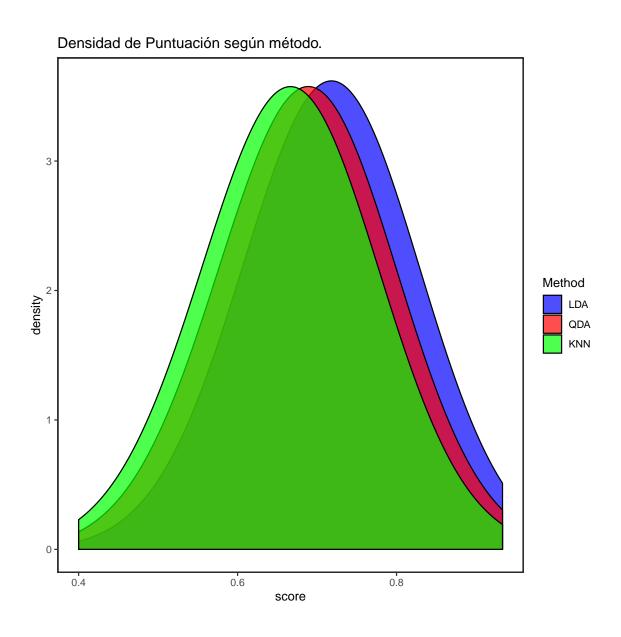


Fig. 24: Comparación de mil evaluaciones de cada uno de los métodos de clasificación en R.

6.2 Puntuación knn vs. número de vecinos.

Puntuación vs. Vecinos

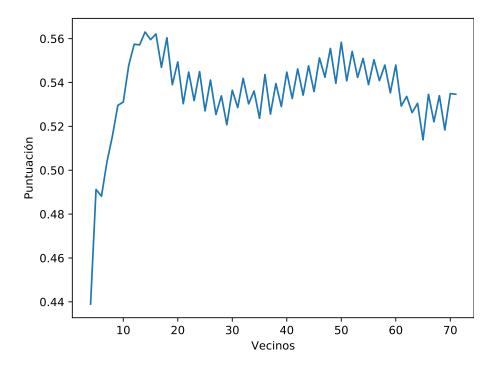


Fig. 25: Rendimineto decreciente según aumenta el número de vecinos.

```
score = [None]*(vecinos)
1
2
   for i in range (2, vecinos):
       print ('n_neighbors = \%i'\% (i), end = '\r')
3
4
       iteraciones = 1000
       error = [None]*iteraciones
5
       for j in range (0, iteraciones):
6
           X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split (x, y, test_size = 0.3)
7
           knn = KNeighborsClassifier (n_neighbors = i, n_jobs = -1)
8
9
           knn.fit (X_train, y_train)
           error[j] = np.sum (abs (knn.predict (X_test) - y_test))/ len (y_test)
10
11
       score[i] = np.mean (error)
12
   plt.plot (range (2, vecinos+2), score)
13
14
   plt.suptitle ('Puntuación vs. Vecinos', fontsize = 10)
15
   plt.suptitle ('puntuación vs. vecinos', fontsize = 10)
16
   plt.xlabel ('vecinos')
17
   plt.ylabel ('puntuación')
18
19
   plt.show ()
```

Listing 51: Evolución de puntuación según número de vecinos.

6.3 Benchmarking

```
benchmark (
    '1 load'= {
2
            datos <- read.table ('../../data.csv', sep = ',', header = T)</pre>
3
            datos <- na.omit (datos)
4
            datos <- filter_all (datos, all_vars (. <= quantile (., 0.99, na.rm = T)))</pre>
5
            p < -0.7
6
7
   },
8
    '2 part'= {
            train.samples \leftarrow createDataPartition (datos$clase, p = p, list = F)
9
            train.data
                            <- datos[ train.samples,]</pre>
10
                            <- datos[-train.samples,]</pre>
11
            test.data
            preproc.param <- preProcess (train.data, method = c ("center", "scale"))</pre>
12
                            <- predict (preproc.param, train.data)
            train.trans
13
14
            test.trans
                            <- predict (preproc.param, test.data)
15
   },
    '3 1da' = {
16
            mdl <- lda (clase~., data = train.trans)</pre>
17
18
            prd <- predict (mdl, test.trans)</pre>
19
            mean (prd$class == test.trans$clase)
20
   },
    '4 qda' = {
21
            mdl <- qda (clase~., data = train.trans)</pre>
22
            prd <- predict (mdl, test.trans)</pre>
            mean (prd$class == test.trans$clase)
24
25
    '5 knn' = {
26
27
            prd <- knn (train = train.trans[1:9],</pre>
28
                                 = train.trans$clase,
                                = test.trans[1:9],
29
                          test
30
                                 = 1
31
32
            mean (prd == test.trans$clase)
33
   },
   replications = 1000,
34
    columns = c ("test", "replications", "elapsed",
35
                 "relative", "user.self", "sys.self")
36
37
```

Listing 52: Código R para evaluar el tiempo de ejecucción.

```
import pytest
1
2
   # Absolute times
3
   @measure
4
   def loa ():
5
6
        global x_no, y_no
        from preprocessing import x_no, y_no
8
9
   @measure
10
   def par ():
        global X_train, X_test, y_train, y_test
11
12
        X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split (x_no, y_no)
13
   @measure
14
   def lda ():
15
        lda = LDA ()
16
       lda.fit (X_train, y_train)
17
18
        error = np.sum (abs (lda.predict (X_test) - y_test)) / len (y_test)
19
   @measure
20
21
   def qda ():
22
        qda = QDA ()
23
        qda.fit (X_train, y_train)
        error = np.sum (abs (qda.predict (X_test) - y_test)) / len (y_test)
24
25
   @measure
26
27
   def knn ():
       knn = KNeighborsClassifier (n_neighbors = 1)
28
29
        knn.fit (X_train, y_train)
        error = np.sum (abs (knn.predict (X_test) - y_test)) / len (y_test)
30
31
32
   loa (), par (), lda (), qda (), lda ()
   compare (lda, qda, 1000)
33
   compare (qda, knn, 1000)
34
   compare (lda, knn, 1000)
35
```

Listing 53: Código Python para evaluar el tiempo de ejecucción.

```
test replications elapsed relative user.self sys.self
1
2
      1 load
                     1000
                             4.803
                                       8.486
                                                   4.712
                                                             0.090
  1
                     1000
                            13.267
                                      23.440
                                                  13.201
                                                             0.061
3
  2
     2 part
  3
      3 lda
                     1000
                             3.359
                                       5.935
                                                   3.346
                                                             0.013
4
                             3.480
                                       6.148
                                                   3.455
                                                             0.025
5
  4
      4 qda
                     1000
6
                                                             0.004
  5
      5 knn
                      1000
                             0.566
                                       1.000
                                                   0.562
```

Listing 54: Tiempo de ejecución en R.

```
1 'loa' ((), {}) 0.00376701354980468750 sec
2 'par' ((), {}) 0.00057792663574218750 sec
3 'lda' ((), {}) 0.00213122367858886719 sec
4 'qda' ((), {}) 0.00131011009216308594 sec
5 'lda' ((), {}) 0.00145196914672851562 sec
6 Result: qda is 1.516303298299778 times faster than lda
7 Result: qda is 2.87883278273268 times faster than knn
8 Result: lda is 1.918905609112522 times faster than knn
```

Listing 55: Tiempo de ejecución en Python.

```
OS: macOS Sierra 10.12.6 16G1618 x86_64
1
   Host: iMac12,2
2
   Kernel: 16.7.0
3
   Uptime: 4d 23h
4
   Packages: 292 (port), 233 (brew)
5
   Shell: zsh 5.2
6
   Resolution: 2560x1440
7
   DE: Aqua
8
9
   WM: Kwm
   Terminal: kitty
10
11
   CPU: Intel i5-2500S (4) @ 2.70GHz
   GPU: AMD Radeon HD 6770M
12
   Memory: 7027MiB / 12288MiB
13
   Disk (/): 806G / 931G (87%)
14
```

Listing 56: Características de la máquina usada.

6.4 Curva ROC

Curva ROC R

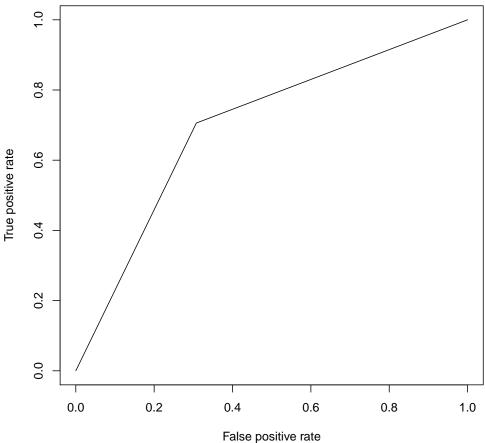


Fig. 26: ROC R.

```
1
   \verb"suppressPackageStartupMessages" (library (ROCR))
   pred <- prediction (as.numeric (prd$class), as.numeric (test.trans$clase))</pre>
2
3
   rocs <- performance (pred, "tpr", "fpr")</pre>
4
   pdf ("../images/roc.pdf")
5
   plot(rocs)
6
   title ('Curva ROC R')
7
   dev.off ()
8
9
   auc_ROCR <- performance(pred, measure = "auc")</pre>
10
   auc_ROCR@y.values[[1]]
11
```

Listing 57: Código R para generar la curva ROC y la AUC.