

Sistemas de Información y Telemedicina. *

Marta Girones Sanguesa

Silvia Marset Gomis

Ignacio Amat Hernández

Sofía Gutiérrez Santamaría

December 31, 2019

Contents

Sección	Página
1 Preámbulo	4
2 Histogramas	5
3 Kernel Density	7
4 Boxplot	9
5 QQplot	11
6 Corrplot	13
7 Filter Methods	17
8 Wrapper Methods	19
9 PCA	20
9.1 Pareto	20
9.2 Biplot	21
10 Modelos de Clasificación	22
10.1 Clasificación Lineal	22
10.2 Clasificación Cuadrática	23
10.3 Clasificación KNN	24

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

List of Figures

1	Histogramas Python para datos con y sin anomalías.	5
2	Histogramas R para datos con anomalías.	6
3	Kernel Density para datos con y sin anomalías.	7
4	Gráficos de densidad R.	8
5	Boxplots Python para datos con y sin anomalías.	9
6	Boxplots R para datos con anomalías.	10
7	QQplots para datos con y sin anomalías.	11
8	Gráficos cuantil - cuantil R.	12
9	Corrplot Python para datos con anomalías.	13
10	Corrplot para datos sin anomalías.	14
11	Corrplot R para datos con anomalías.	15
12	Matriz de correlaciones en R.	16
13	Diagrama de Pareto.	20
14	Biplot.	21
15	Rendimineto decreciente según aumenta el número de vecinos.	25

Listings

1	Importaciones iniciales y preparacion de datos.	4
2	Código Python generador de los histogramas con datos anómalos.	5
3	Código R generador de los histogramas con datos anómalos.	6
4	Código Python generador de los kernel density plots con datos anómalos.	7
5	Código R generador de los density plots.	8
6	Código Python generador de los boxplots con datos anómalos.	9
7	Código R generador de los boxplots con datos anómalos.	10
8	Código generador de los QQplots con datos anómalos.	11
9	Código R generador de los QQplots.	12
10	Código generador de los corrplots con datos anómalos.	13
11	Código R generador de los corrplots.	15
12	Aplicación métodos <i>filter</i> de selección características.	17
13	Ranking de variables según los métodos filter.	17
14	Ranking de variables según distintos métodos en R.	18
15	Aplicación métodos <i>wrapper</i> de selección características.	19
16	Resultados del filtrado mediante wrappers.	19
17	<i>Principal Component Analysis</i>	20
18	Varianza explicada por componente y suma acumulada.	20
19	Código generador del diagrama de Pareto	20
20	Código generador del Biplot.	21
21	Validación del modelo lineal.	22
22	Validación según distintos métodos.	22
23	Validación del modelo cuadrático.	23
24	Validación según distintos métodos.	23
25	Validación del modelo KNN.	24
26	Validación según distintos métodos.	24
27	Evolución de puntuación según número de vecinos.	25

1 Preámbulo

```
1 import numpy as np
2 from scipy import stats
3
4 # names of variables
5 labels = ['age', 'leptin', 'bmi', 'adiponectin', 'glucose',
6           'resistin', 'insulin', 'MCP1', 'HOMA']
7
8 # loads data
9 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
12 data = data [~np.isnan (data).any (axis=1)]
13
14 # separates parameters into matrix x
15 x = np.array ([list (data [x][: -1]) for x in range (len (data))])
16
17 # and class (1, 2) into vector y
18 y = np.array ([int (data [x][ -1]) for x in range (len (data))])
19
20 # removes outliers
21 data_no = data [(np.abs (stats.zscore (data)) < 3).all (axis = 1)]
22 # ↑ = No Outliers
23
24 x_no = np.array ([list (data_no [x][: -1]) for x in range (len (data_no))])
25 y_no = np.array ([int (data_no [x][ -1]) for x in range (len (data_no))])
```

Listing 1: Importaciones iniciales y preparacion de datos.

2 Histogramas

En este apartado dibujamos los histogramas comparativos.

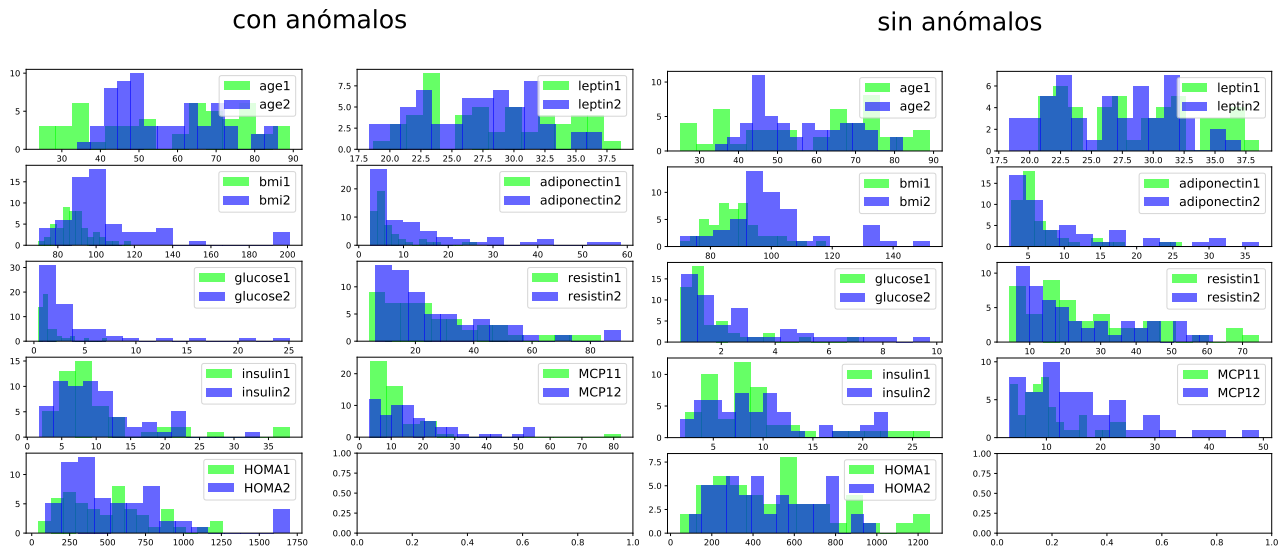


Fig. 1: Histogramas Python para datos con y sin anomalías.

```

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

```

Listing 2: Código Python generador de los histogramas con datos anómalos.

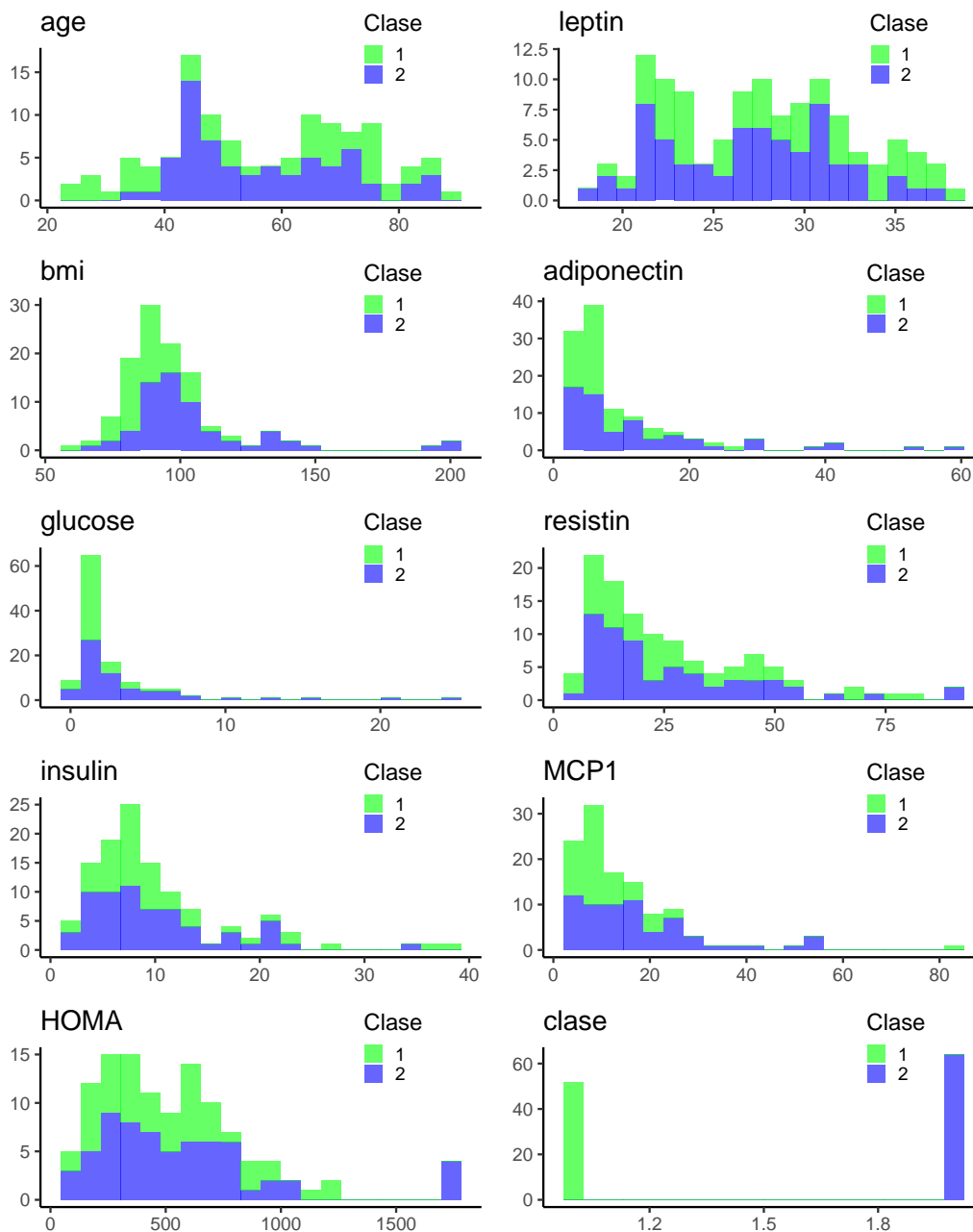


Fig. 2: Histogramas R para datos con anomalías.

```

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

```

Listing 3: Código R generador de los histogramas con datos anómalos.

3 Kernel Density

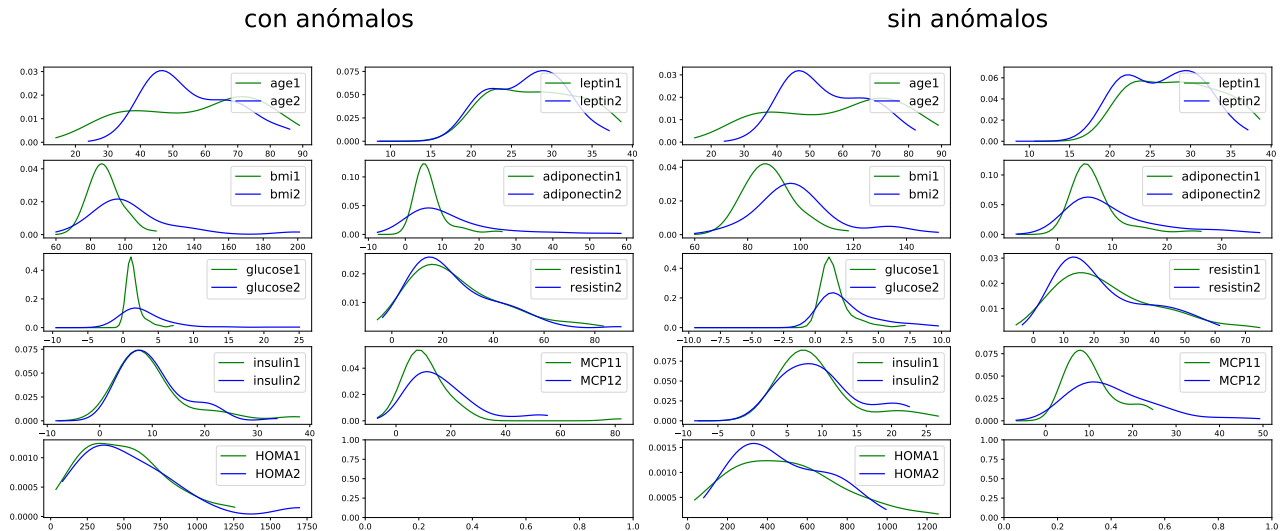


Fig. 3: Kernel Density para datos con y sin anomalías.

```

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

```

Listing 4: Código Python generador de los kernel density plots con datos anómalos.

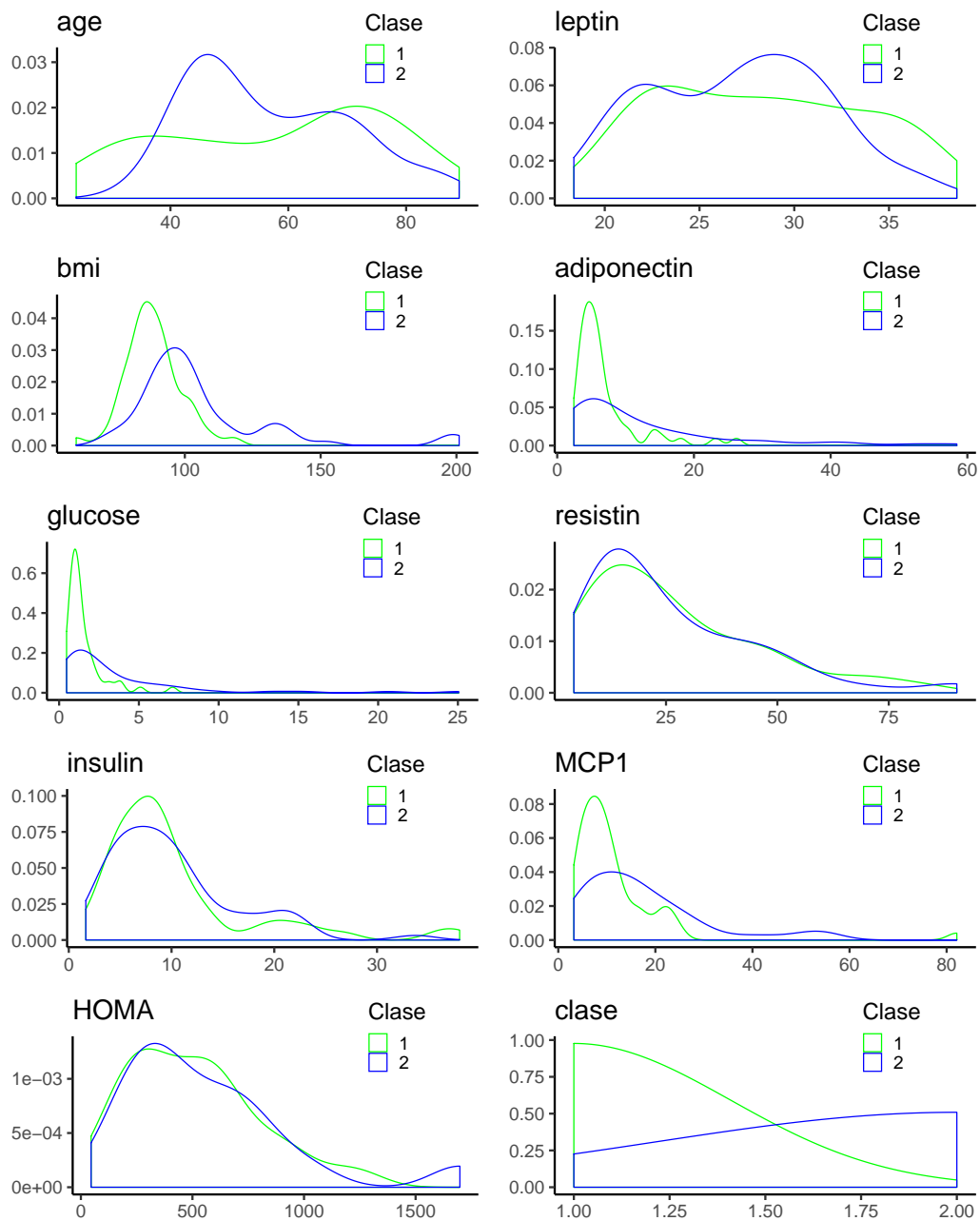


Fig. 4: Gráficos de densidad R.

```

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

```

Listing 5: Código R generador de los density plots.

4 Boxplot

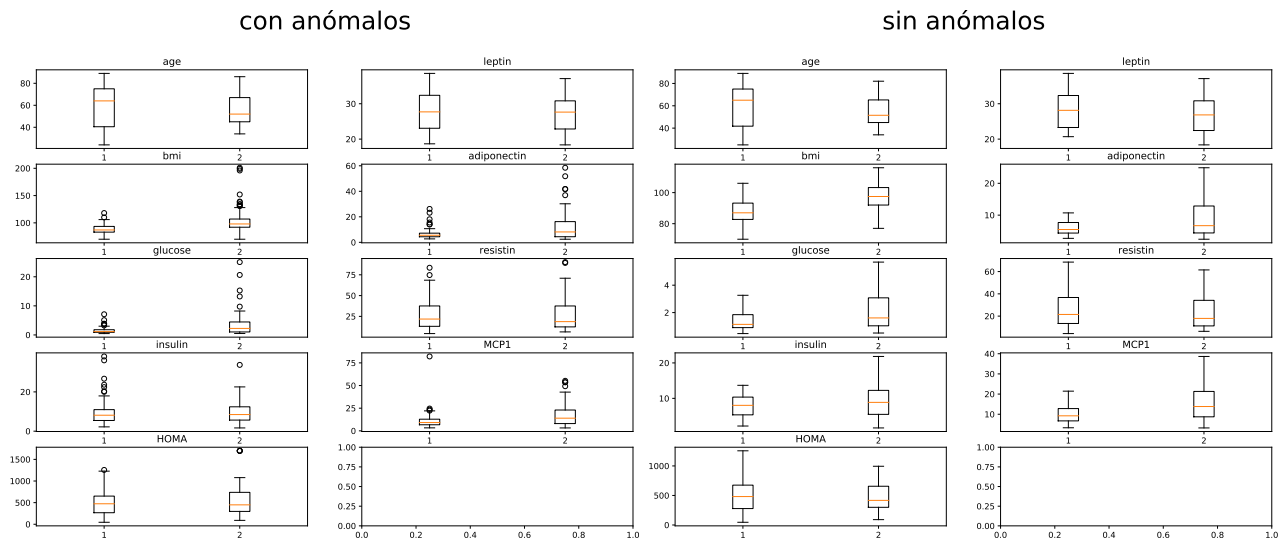


Fig. 5: Boxplots Python para datos con y sin anomalías.

```

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

```

Listing 6: Código Python generador de los boxplots con datos anómalos.

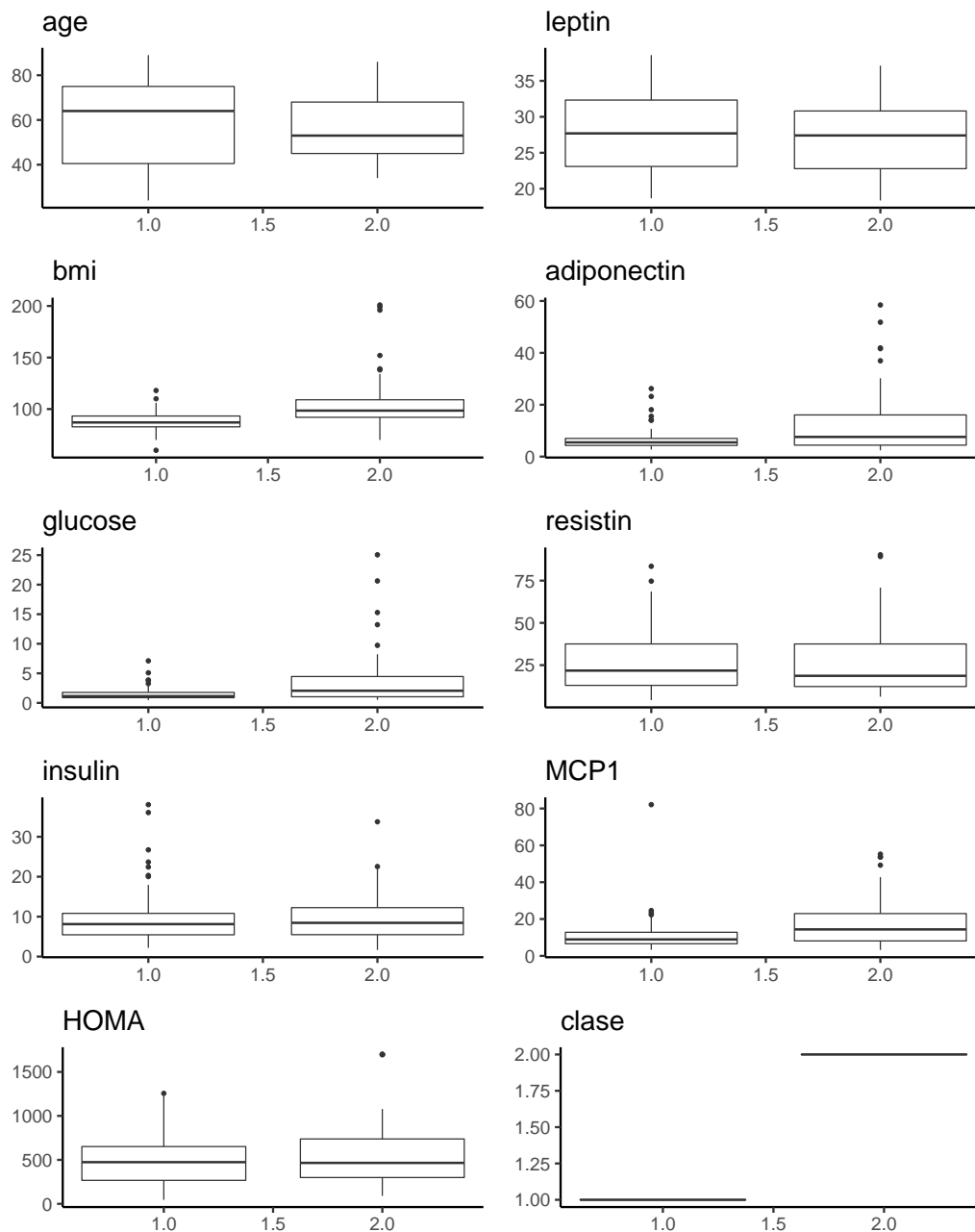


Fig. 6: Boxplots R para datos con anomalías.

```

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

```

Listing 7: Código R generador de los boxplots con datos anómalos.

5 QQplot

con anómalos

sin anómalos

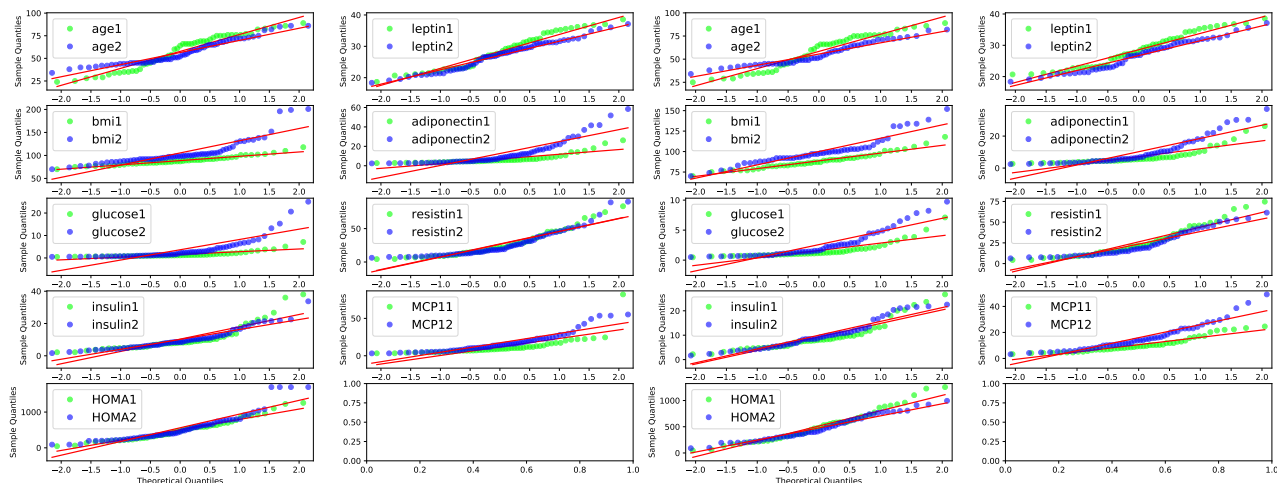


Fig. 7: QQplots para datos con y sin anomalías.

```

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

```

Listing 8: Código generador de los QQplots con datos anómalos.

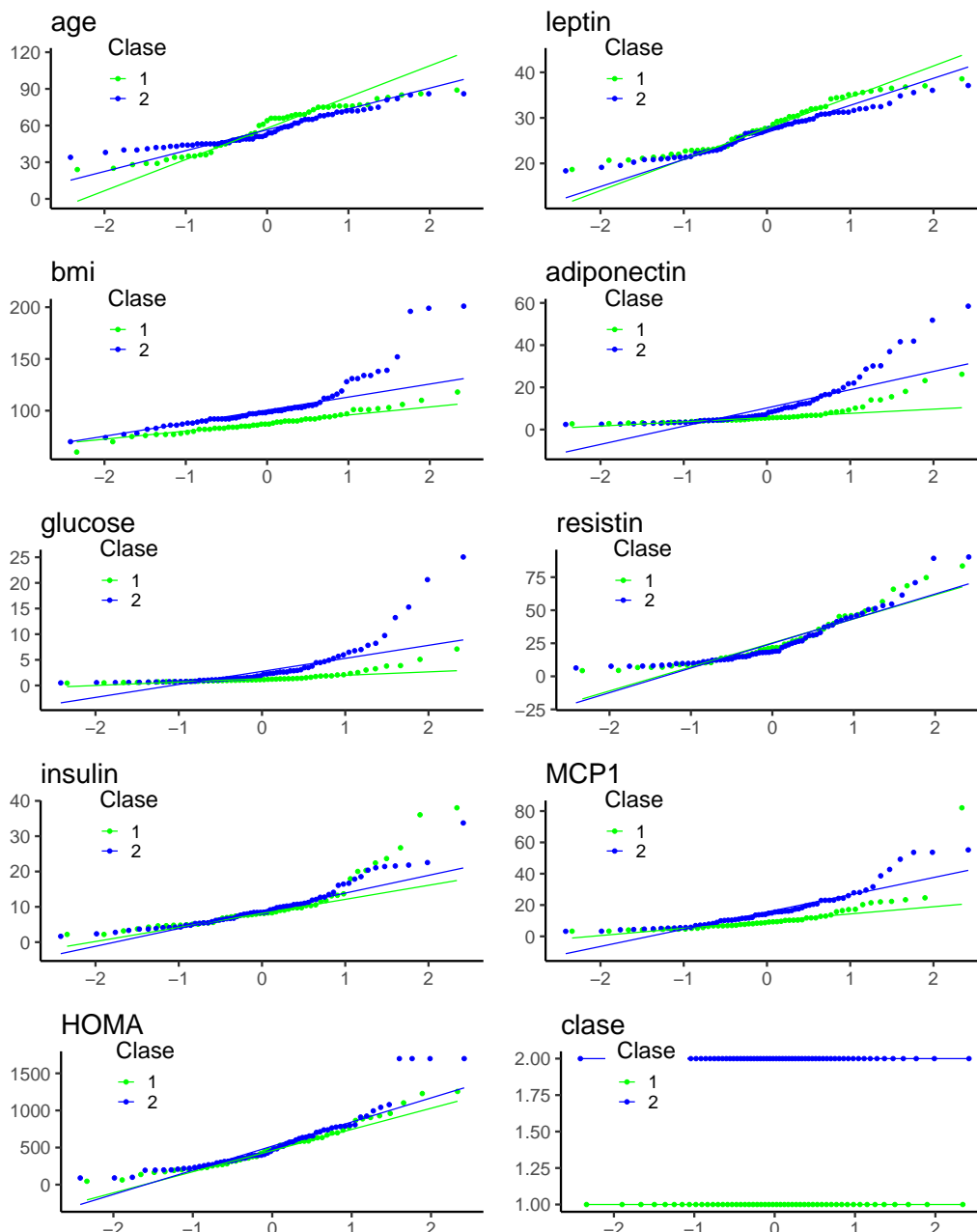


Fig. 8: Gráficos cuantil - cuantil R.

```

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

```

Listing 9: Código R generador de los QQplots.

6 Corrplot

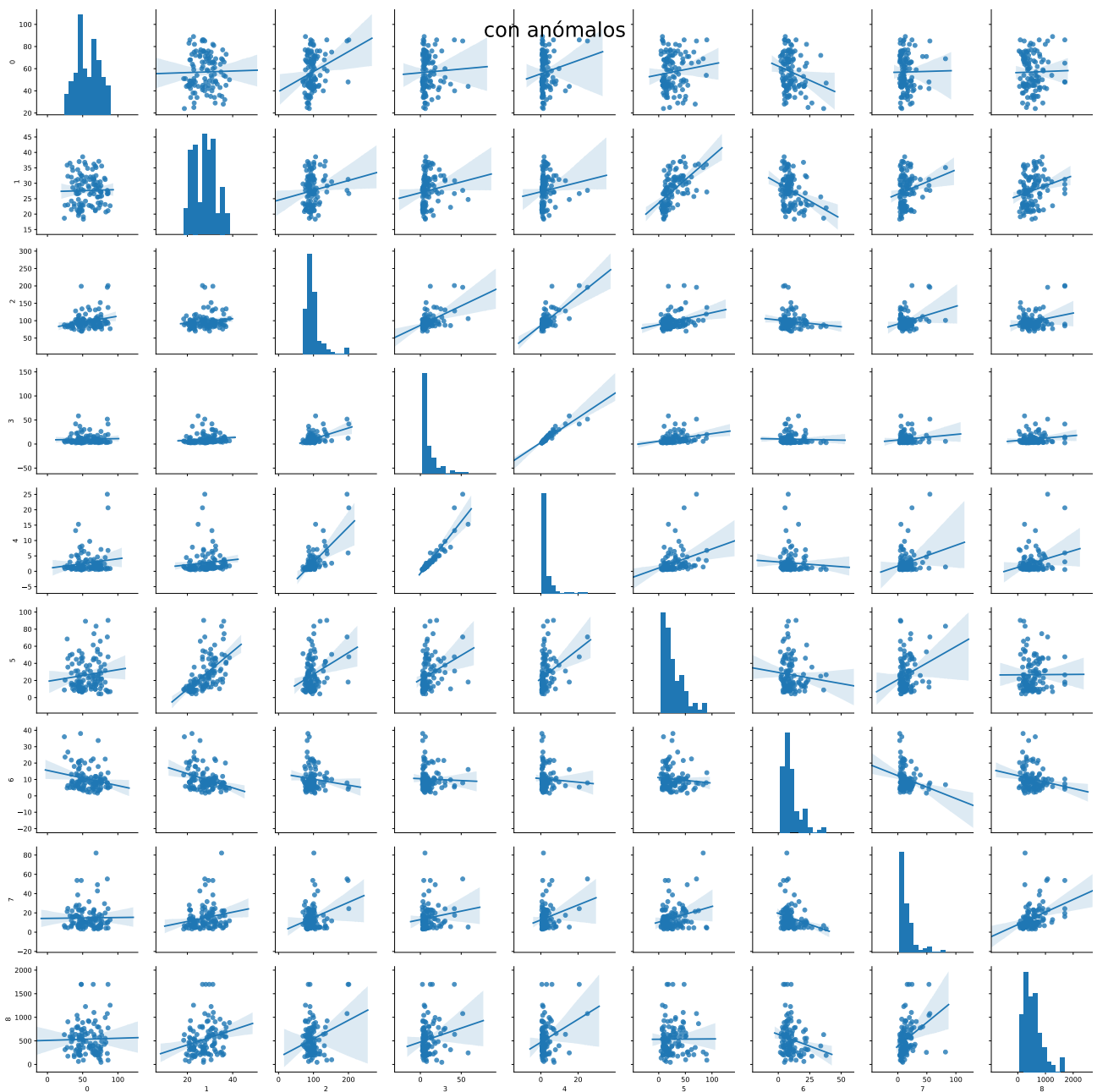


Fig. 9: Corrplot Python para datos con anomalías.

```

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

```

Listing 10: Código generador de los corrplots con datos anómalos.

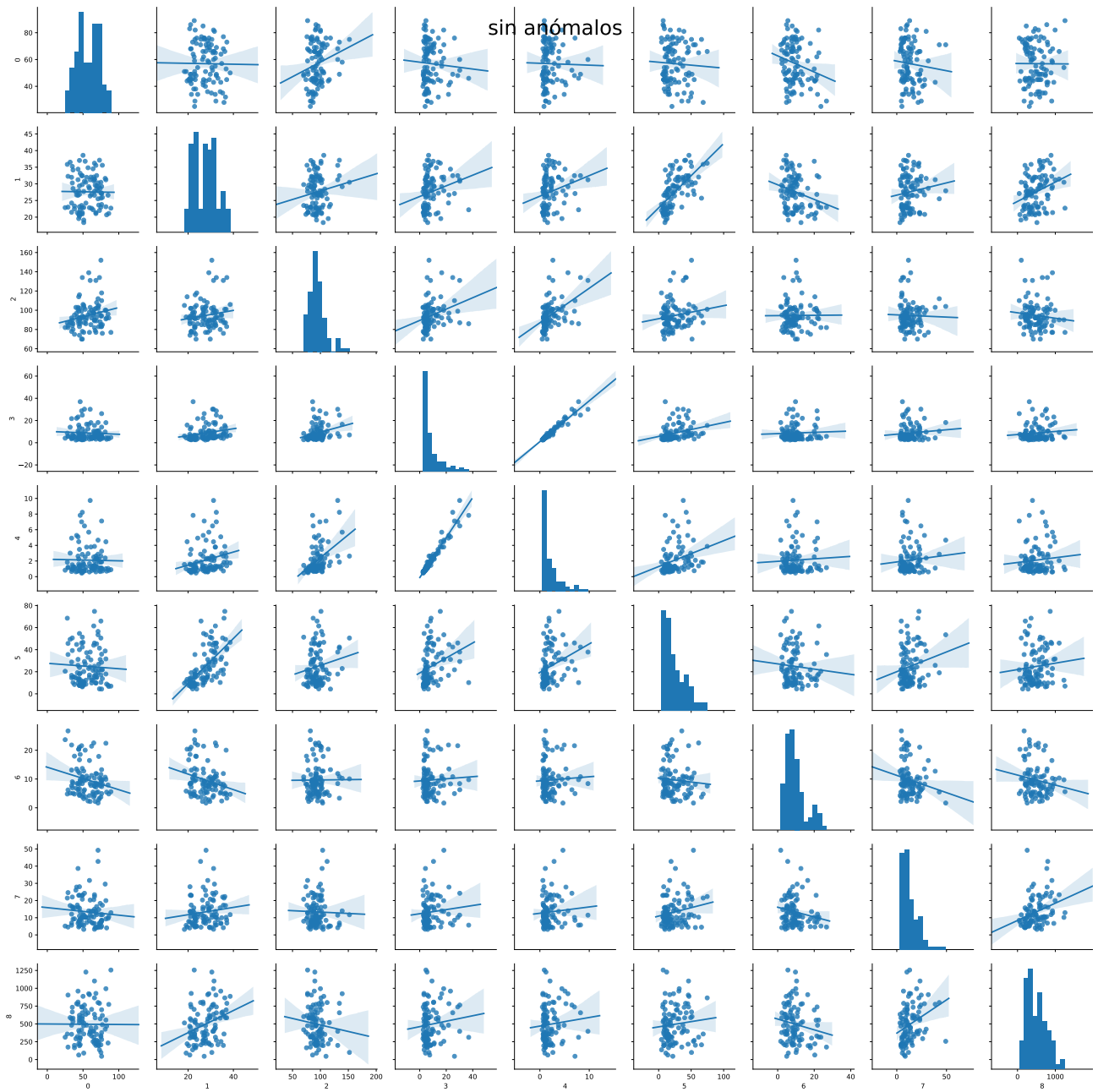


Fig. 10: Corrplot para datos sin anomalías.

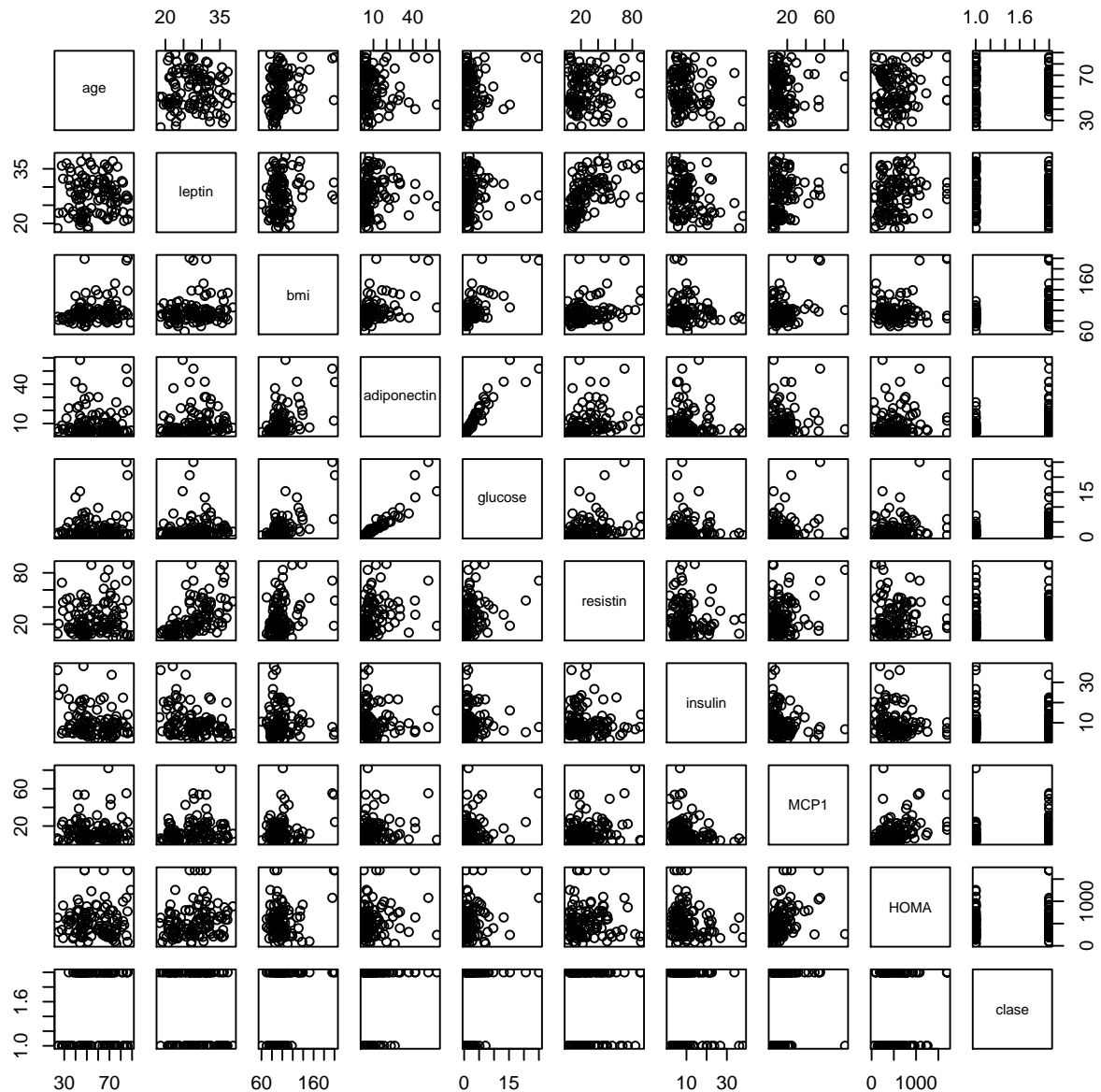


Fig. 11: Corrplot R para datos con anomalías.

```

1 pdf ("../images/corrplot.pdf")
2 plot (datos)
3 dev.off ()
4
5 library (corrplot)
6 pdf ("../images/corrplot1.pdf")
7 M <- cor (na.omit (datos))
8 corrplot (M, method = 'number')
9 dev.off ()

```

Listing 11: Código R generador de los corrplots.

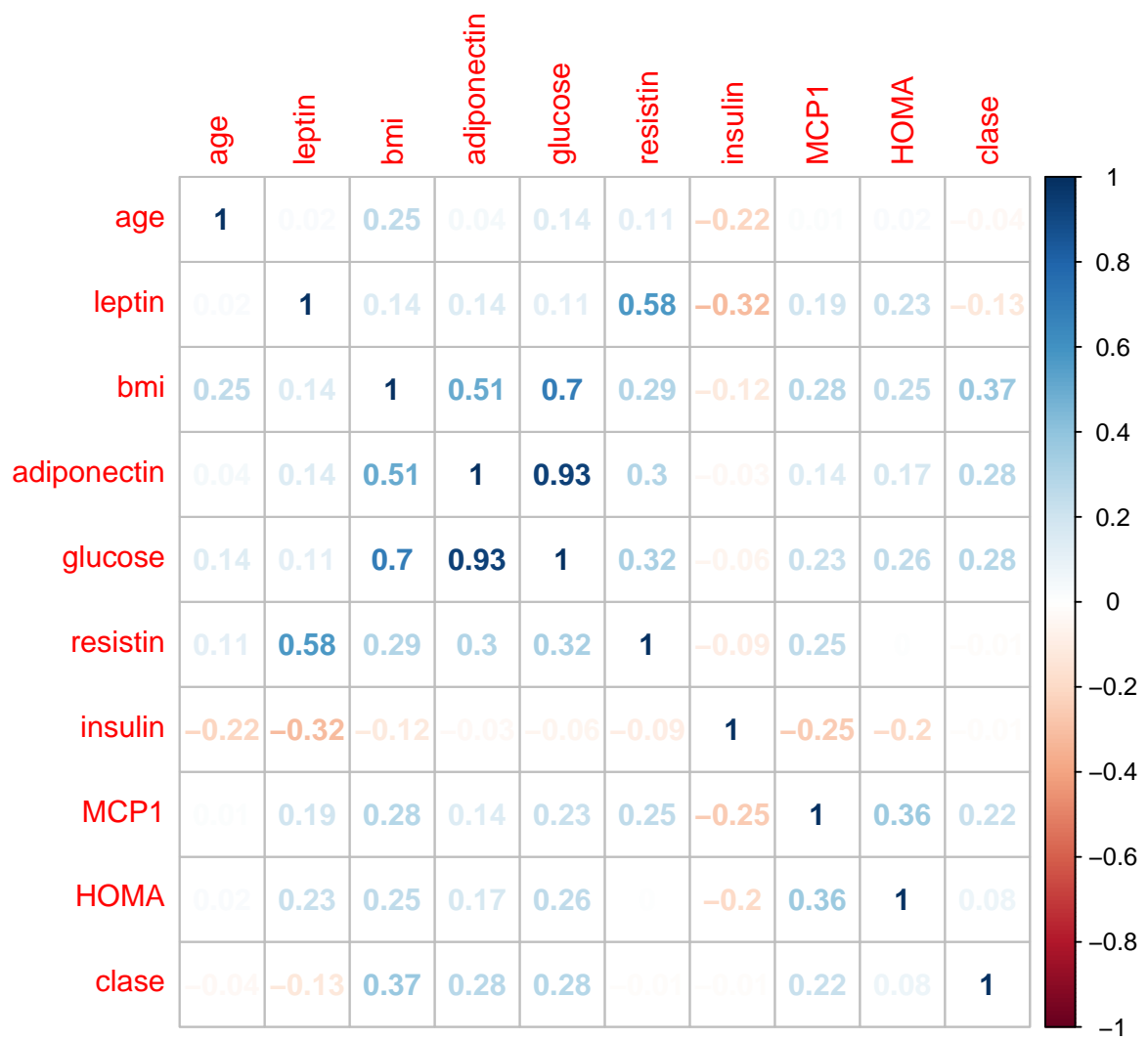


Fig. 12: Matriz de correlaciones en R.

7 Filter Methods

```
1 # Filter Methods
2 import sklearn.feature_selection as sk
3
4 Fscore, pval = sk.f_classif (x_no, y_no)
5 r1 = Fscore.argsort().argsort() # fscore rank
6 print (r1+1)
7
8 import ReliefF as rl
9
10 r2 = rl.ReliefF (n_neighbors = 1) # relieff rank
11 r2.fit(x_no, y_no)
12 r2 = r2.top_features
13 print (r2+1)
14
15 diferencias = abs (r1-r2)
16 media = np.mean (diferencias)
```

Listing 12: Aplicación métodos *filter* de selección características.

```
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 2.4444444444444446 -> media
```

Listing 13: Ranking de variables según los métodos filter.

```

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

```

Listing 14: Ranking de variables según distintos métodos en R.

8 Wrapper Methods

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

Listing 15: Aplicación métodos *wrapper* de selección características.

```
1 0.7054545454545454
2 Sequential Forward Selection ('leptin', 'bmi', 'glucose', 'MCP1')
3
4 0.7094949494949495
5 Sequential Backward Selection ('leptin', 'bmi', 'glucose', 'insulin')
```

Listing 16: Resultados del filtrado mediante wrappers.

9 PCA

```
1 from sklearn.preprocessing import StandardScaler
2 x_no = StandardScaler().fit_transform(x_no) # typify
3 from sklearn.decomposition import PCA
4 pca = PCA(n_components = 9)
5 principalComponents = pca.fit_transform(x_no)
6 evr = pca.explained_variance_ratio_
```

Listing 17: *Principal Component Analysis*

```
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 18: Varianza explicada por componente y suma acumulada.

9.1 Pareto

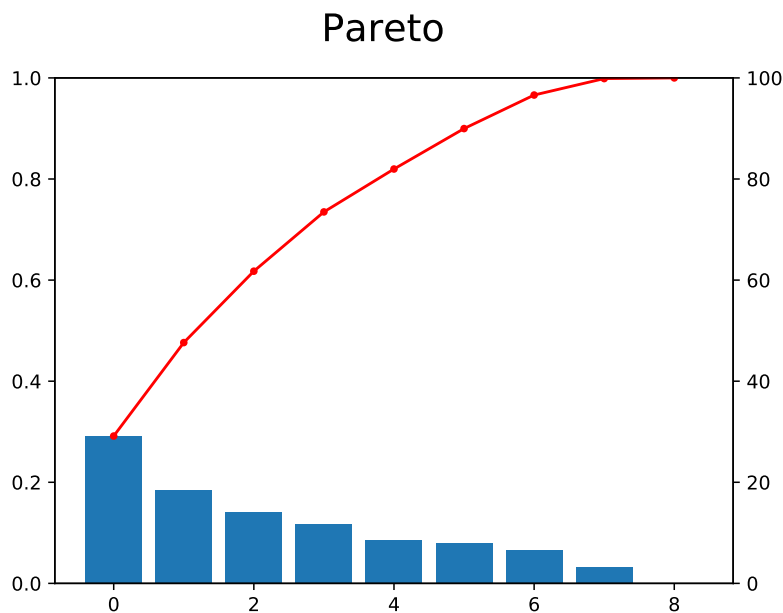


Fig. 13: Diagrama de Pareto.

```
1 ax.bar(range(len(evr)), evr)
2 ax.set_ylim(top=1)
3 ax1 = ax.twinx()
4 ax1.set_ylim(top=100)
5 ax1.plot(range(len(evr)), np.cumsum(evr)*100, marker = '.', color = 'red')
6 fig.suptitle('Pareto', fontsize = 20)
7 fig.savefig('../images/pareto.pdf', bbox_inches = 'tight', pad_inches = 0)
```

Listing 19: Código generador del diagrama de Pareto

9.2 Biplot

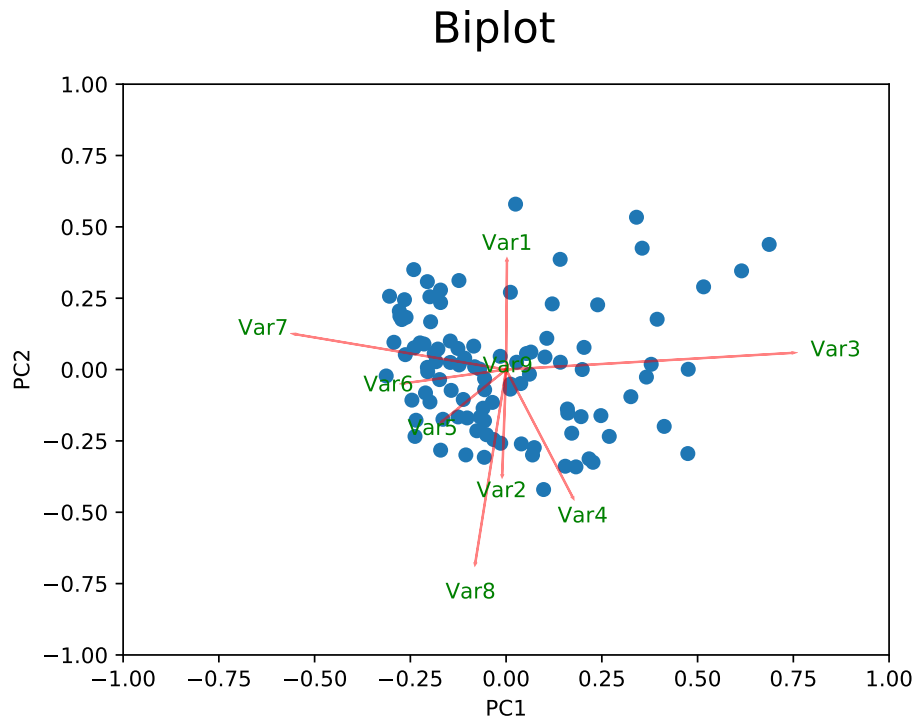


Fig. 14: Biplot.

```
1 def biplot(score,coeff,pcax,pcay,labels=None):
2     pca1=pcax-1; pca2=pcay-1
3     xs = score[:,pca1]; ys = score[:,pca2]
4     n=score.shape[1]
5     scalex = 1.0/(xs.max()- xs.min()); scaley = 1.0/(ys.max()- ys.min())
6     plt.scatter(xs*scalex,ys*scaley)
7     for i in range(n):
8         plt.arrow(0, 0, coeff[i,pca1], coeff[i,pca2],color='r',alpha=0.5)
9         if labels is None:
10             plt.text(coeff[i,pca1]* 1.15, coeff[i,pca2] * 1.15, "Var"+str(i+1), \
11                     color='g', ha='center', va='center')
12         else:
13             plt.text(coeff[i,pca1]* 1.15, coeff[i,pca2] * 1.15, labels[i], color='g', \
14                     , ha='center', va='center')
15     plt.xlim(-1,1); plt.ylim(-1,1)
16     plt.xlabel("PC{}".format(pcax)); plt.ylabel("PC{}".format(pcay))
17     return plt
18 bp = biplot (pca.fit_transform (x_no), pca.components_,1,2)
19 bp.suptitle ('Biplot', fontsize = 20)
20 bp.savefig ('../images/biplotpca.pdf', bbox_inches = 'tight', pad_inches = 0)
```

Listing 20: Código generador del Biplot.

10 Modelos de Clasificación

10.1 Clasificación Lineal

```
1 from sklearn.discriminant_analysis import LinearDiscriminantAnalysis as LDA
2
3 lda = LDA ()
4 score = cross_val_score (lda, x, y, cv = 10)
5 print ('Linear puntuación CV media: %.2f std: %.2f'
6       %(np.mean (score), np.std (score)))
7
8 score = cross_val_score (lda, x, y, cv = KFold (n_splits = 10, shuffle = True))
9 print ('Linear puntuación KF media: %.2f std: %.2f'
10      %(np.mean (score), np.std (score)))
11
12 score = cross_val_score (lda, x, y, cv = ShuffleSplit (n_splits = 10))
13 print ('Linear puntuación SS media: %.2f std: %.2f'
14      %(np.mean (score), np.std (score)))
15
16 score = cross_val_score (lda, x, y, cv = LeaveOneOut ())
17 print ('Linear puntuación LO media: %.2f std: %.2f'
18      %(np.mean (score), np.std (score)))
```

Listing 21: Validación del modelo lineal.

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

Listing 22: Validación según distintos métodos.

10.2 Clasificación Cuadrática

```
1 from sklearn.discriminant_analysis import QuadraticDiscriminantAnalysis as QDA
2
3 qda = QDA ()
4 score = cross_val_score (qda, x, y, cv = 10)
5 print ('Quadratic puntuación CV media: %.2f std: %.2f'
6       %(np.mean (score), np.std (score)))
7
8 score = cross_val_score (qda, x, y, cv = KFold (n_splits = 10, shuffle = True))
9 print ('Quadratic puntuación KF media: %.2f std: %.2f'
10       %(np.mean (score), np.std (score)))
11
12 score = cross_val_score (qda, x, y, cv = ShuffleSplit (n_splits = 10))
13 print ('Quadratic puntuación SS media: %.2f std: %.2f'
14       %(np.mean (score), np.std (score)))
15
16 score = cross_val_score (qda, x, y, cv = LeaveOneOut ())
17 print ('Quadratic puntuación L0 media: %.2f std: %.2f'
18       %(np.mean (score), np.std (score)))
```

Listing 23: Validación del modelo cuadrático.

```
1 Quadratic puntuacion CV media: 0.66 std: 0.19
2 Quadratic puntuacion KF media: 0.76 std: 0.09
3 Quadratic puntuacion SS media: 0.76 std: 0.14
4 Quadratic puntuacion L0 media: 0.73 std: 0.44
```

Listing 24: Validación según distintos métodos.

10.3 Clasificación KNN

```
1 from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
2
3 knn = KNeighborsClassifier (n_neighbors = 9)
4 score = cross_val_score (knn, x, y, cv = 10)
5 print ('KNN puntuación CV media: %.2f std: %.2f'
6        %(np.mean (score), np.std (score)))
7
8 score = cross_val_score (knn, x, y, cv = KFold (n_splits = 10, shuffle = True))
9 print ('KNN puntuación KF media: %.2f std: %.2f'
10        %(np.mean (score), np.std (score)))
11
12 score = cross_val_score (knn, x, y, cv = ShuffleSplit (n_splits = 10))
13 print ('KNN puntuación SS media: %.2f std: %.2f'
14        %(np.mean (score), np.std (score)))
15
16 score = cross_val_score (knn, x, y, cv = LeaveOneOut ())
17 print ('KNN puntuación LO media: %.2f std: %.2f'
18        %(np.mean (score), np.std (score)))
```

Listing 25: Validación del modelo KNN.

```
1 KNN puntuacion CV media: 0.47 std: 0.12
2 KNN puntuacion KF media: 0.47 std: 0.15
3 KNN puntuacion SS media: 0.47 std: 0.13
4 KNN puntuacion LO media: 0.43 std: 0.50
```

Listing 26: Validación según distintos métodos.

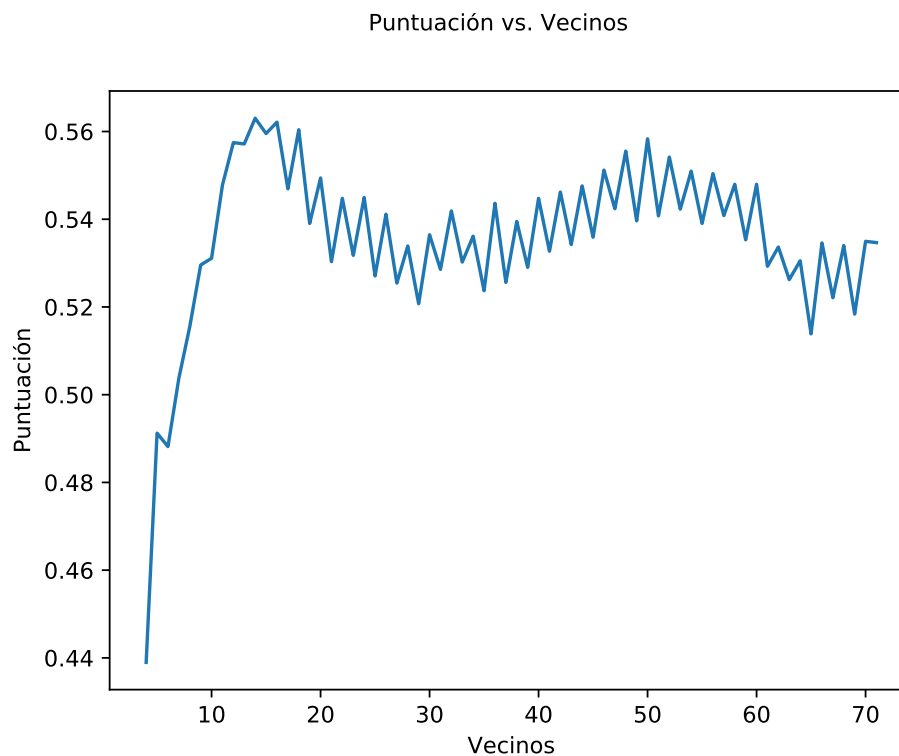


Fig. 15: Rendimiento decreciente según aumenta el número de vecinos.

```

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

```

Listing 27: Evolución de puntuación según número de vecinos.