ACÁMICA

¡Bienvenidas/os a Data Science!

Agenda

¿Cómo anduvieron?

Actividad: Data Science en mi vida

Repaso: Aprendizaje no supervisado

Explicación: Evaluación de clusters

Break

Hands-On

Cierre

¿Dónde estamos?

¿Cómo anduvieron?

Actividad:
Data Science en mi vida

Data Science en mi vida

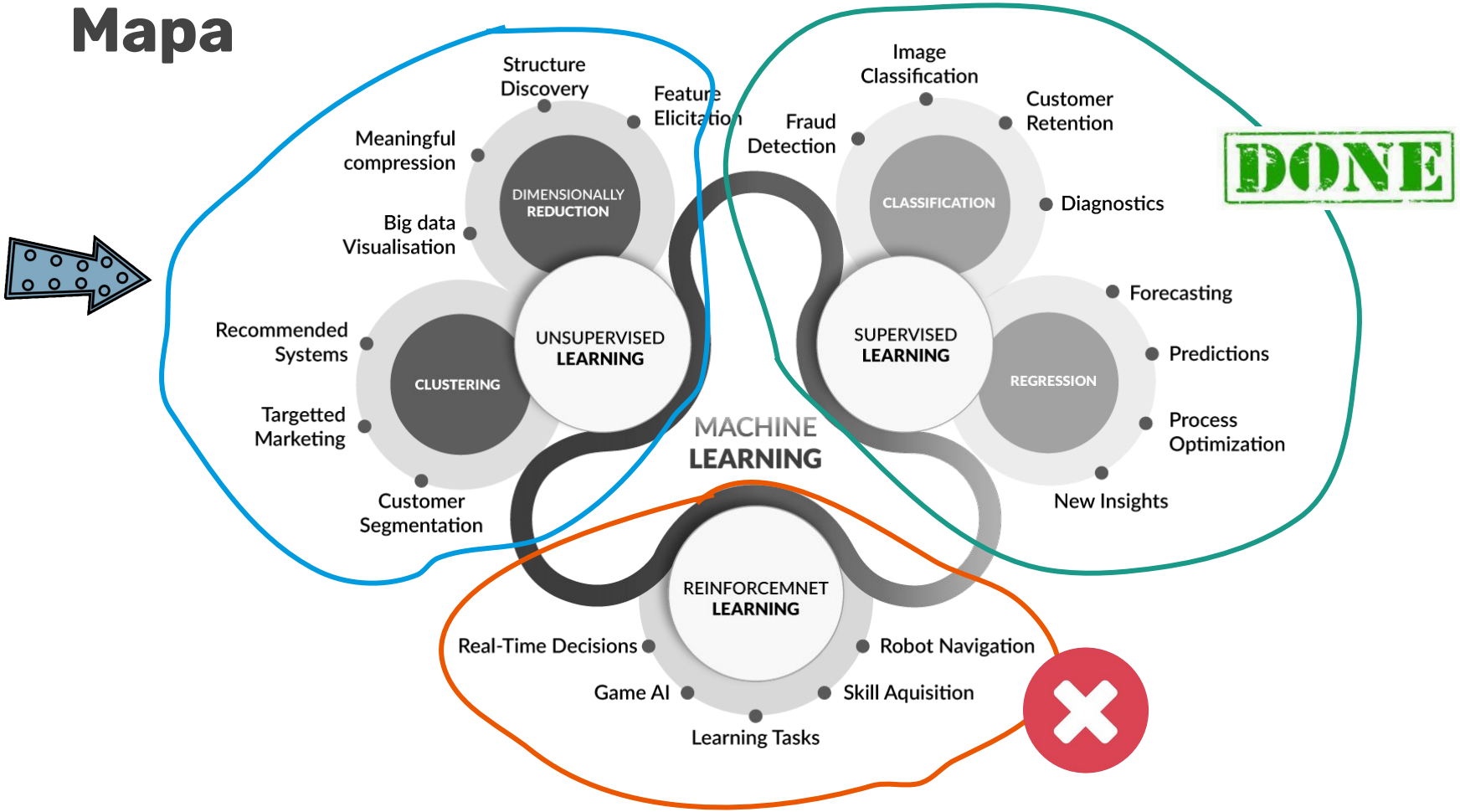
¡Preparen sus charlas relámpago!
En 7 minutos con 7 slides comparte con tus compañeros:

En qué problemas estás aplicando lo aprendido en Data Science y cómo lo estás haciendo.
O bien, en qué problemas te gustaría aplicar Data Science y cómo lo harías.

¡Elige algún tema o proyecto que te interese y relaciónalo con lo aprendido!

Repaso: Aprendizaje no supervisado - Clustering

Mapa


Structure Discovery
Feature Elicitation
Meaningful compression
Big data Visualisation
DIMENSIONALLY REDUCTION
UNSUPERVISED LEARNING
Recommended Systems
Targetted Marketing
Customer Segmentation
CLUSTERING
Image Classification
Customer Retention
Fraud Detection
Diagnostics
CLASSIFICATION
SUPERVISED LEARNING
Forecasting
Predictions
Process Optimization
New Insights
REGRESSION
MACHINE LEARNING
REINFORCEMNET LEARNING
Real-Time Decisions
Robot Navigation
Game AI
Skill Aquisition
Learning Tasks
DONE

Solo datos

Llamamos Aprendizaje No Supervisado a los métodos para trabajar con datos (instancias) que no tienen asociados una etiqueta (una clase o un valor).

Los objetivos principales en Aprendizaje No Supervisado son:

- Clustering
- Reducción de dimensionalidad

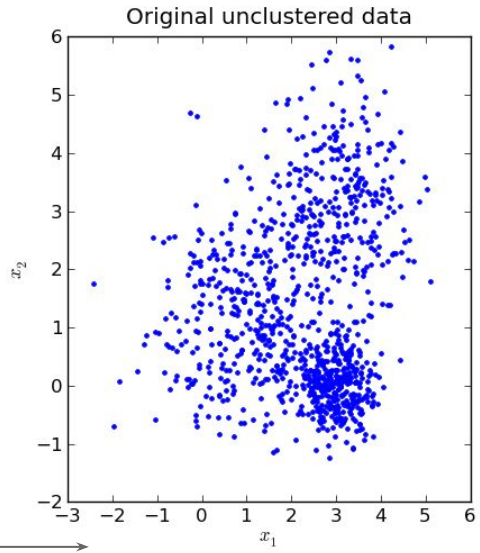
Aprendizaje No Supervisado • Clustering

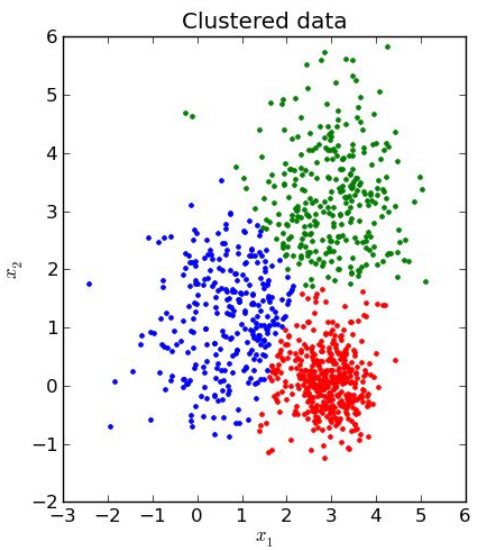
Dado un set de datos, nuestro objetivo será encontrar grupos (clusters) en los cuales las instancias pertenecientes sean parecidas (estén “cerca”).

Datos iniciales

Salida

Dos Features





Aprendizaje No Supervisado • Clustering

¿Para qué sirve?

Encontrar grupos en los datos puede ayudar en problemas de:

- Investigación de mercado
- Sistemas de recomendación
- Medicina
- Biología (genética y especies)
- Muchísimas mas cosas

¿Cómo se hace?

Algunos de los algoritmos para hacer clustering son:

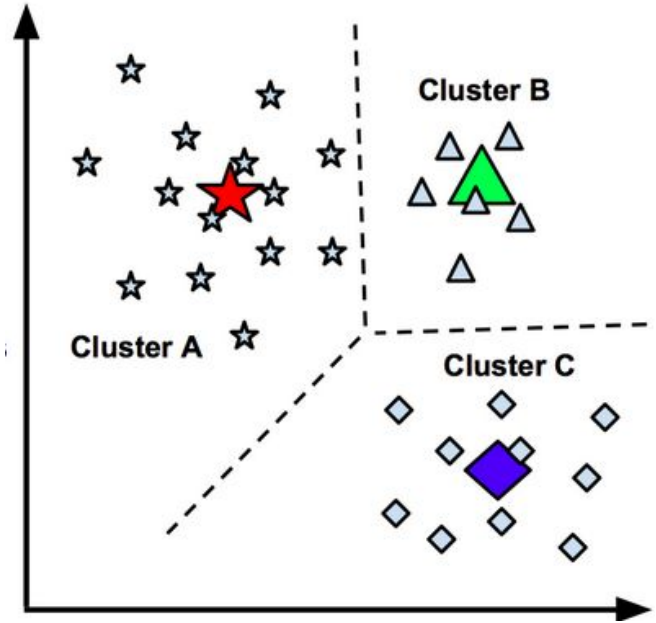
- K-means
- DBSCAN
- Hierarchical Clustering (aglomerativo)
- Fuzzy C-Means (como K-means pero permite overlap)
- GMM: Gaussian Mixture Models (supone distribucion gaussiana)

Aprendizaje No Supervisado

Clustering: K-Means

Clustering • K-Means

Objetivo: Separar los datos en k clusters (número dado) ubicando a las instancias que estén dentro de una región cercana dentro de un mismo cluster.



Idea: encontrar un número **k** de centros (centroids), uno por cada cluster, de manera tal que la distancia entre los centros y los datos más cercanos sea la mínima posible.

Luego cada instancia se identifica en el grupo del centroide más cercano.

Clustering • K-Means

¿Cómo se hace? Se utiliza un algoritmo iterativo hasta llegar al resultado.

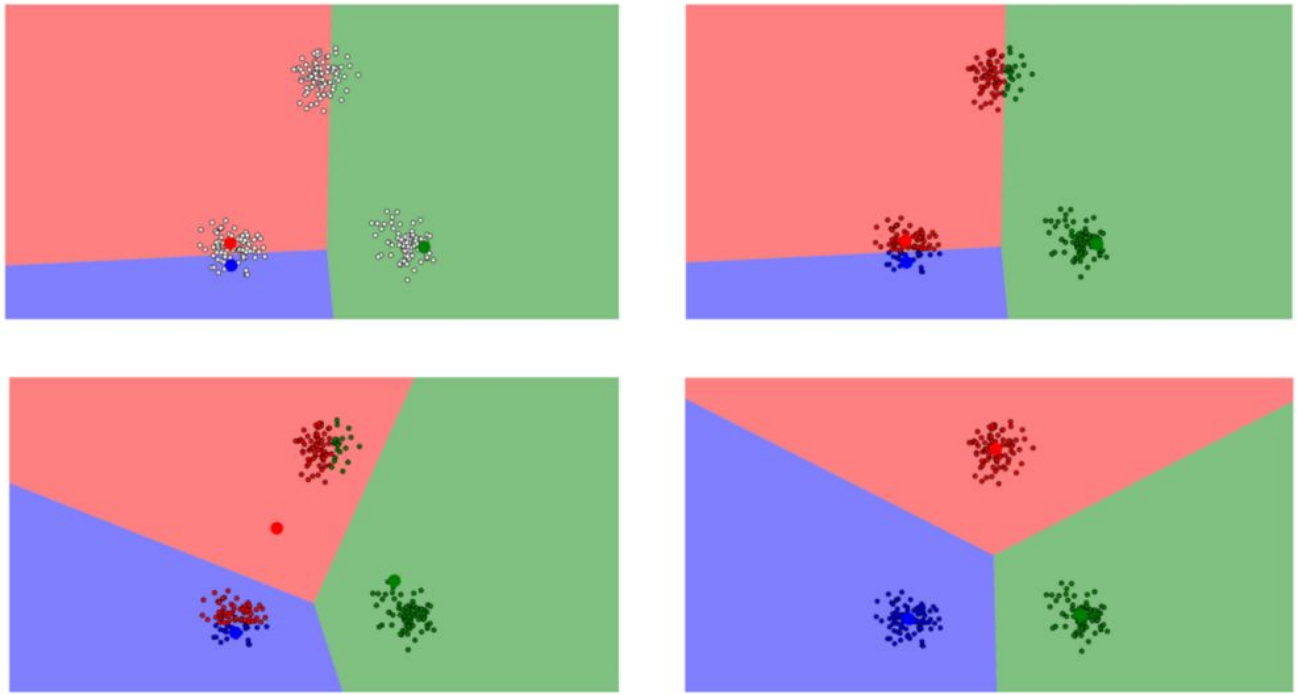
1) Se inicializan los k Centroides.
La ubicación inicial puede ser aleatoria o con algún criterio.

2) Encontrar el centroide más cercano.
Se asigna a cada instancia al centroide más cercano (el significado de "cercano" puede cambiar, es un hiperparámetro)

3) Actualizar los centroides.
La nueva posición del centroide es el promedio de las posiciones de las instancias en ese cluster (de acá viene el means).

4) Repetir pasos 2 y 3.
Se repiten los updates hasta que la posición del centroide ya no varíe

Clustering • K-Means



Aprendizaje No Supervisado

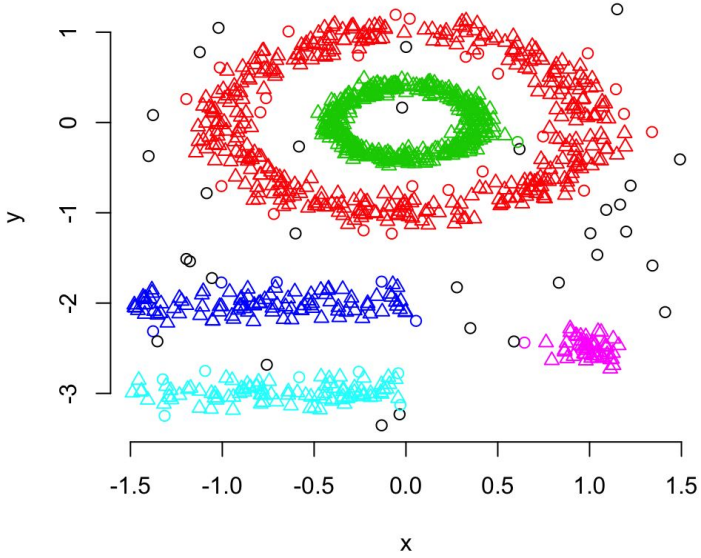
Clustering: DBSCAN

Clustering • DBSCAN

DBSCAN = **Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise**

Clustering • DBSCAN

Objetivo: Identificar un número arbitrario de clusters. Los clusters estarán definidos por densidad de puntos. Puede haber puntos que no pertenezcan a ningún cluster **(noise = OUTLIERS)**

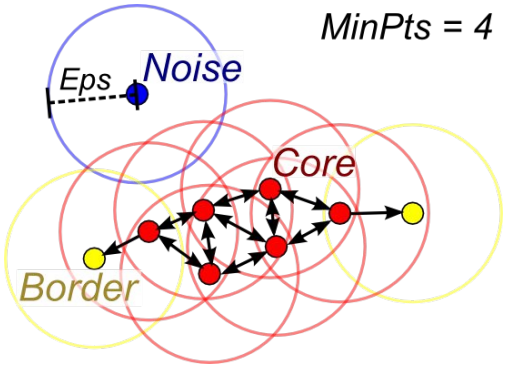


Idea: recorrer todo el dataset e ir identificando las zonas de puntos densamente pobladas como pertenecientes a un mismo cluster.

Los puntos aislados serán reconocidos como ruido.

Clustering • DBSCAN

¿Cómo se hace?



1) Se define una distancia epsilon (parámetro) como la vecindad de un punto. Se elige un número de puntos mínimos de para considerar un cluster minPoints (parámetro).

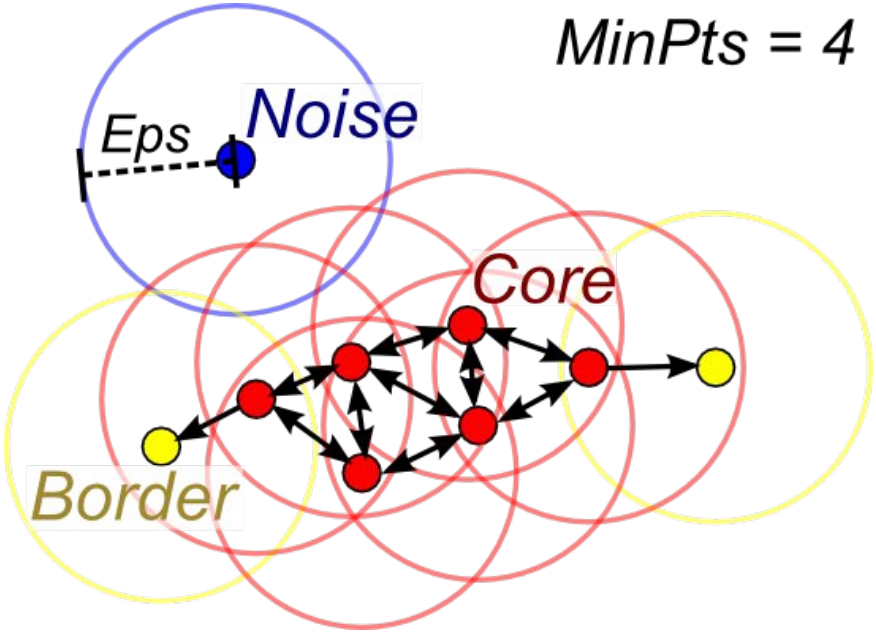
2) Luego se realiza el siguiente proceso sobre todos los puntos del dataset:

1) Se toma un punto no visitado random. Se identifica si el punto es un 'core', es decir, si tiene minPoints en su vecindario. Si no tiene, se lo llama 'noise'. Este punto se marca como visitado.

2) Si es un core, se le asigna un nuevo cluster y todos los puntos de su vecindario se consideran dentro de su cluster. Si alguno de estos puntos también son cores, este proceso se repite. A los puntos asignados a un cluster que no son core, se los llama 'border'. Todos se marcan como visitados.

3) Este proceso se repite hasta que todos los puntos hayan sido visitados.

Clustering • DBSCAN



¿Cómo se comparan K-Means y DBSCAN?

K-Means

- Rápido, muy mucho. O(n).
- No tiene parámetros
- Fácil asignar nuevas instancias

- Hay que definir el número de clusters
- Solo funciona bien con clusters tipo esferas
- Sensible a outliers (afectan el promedio)

DBSCAN

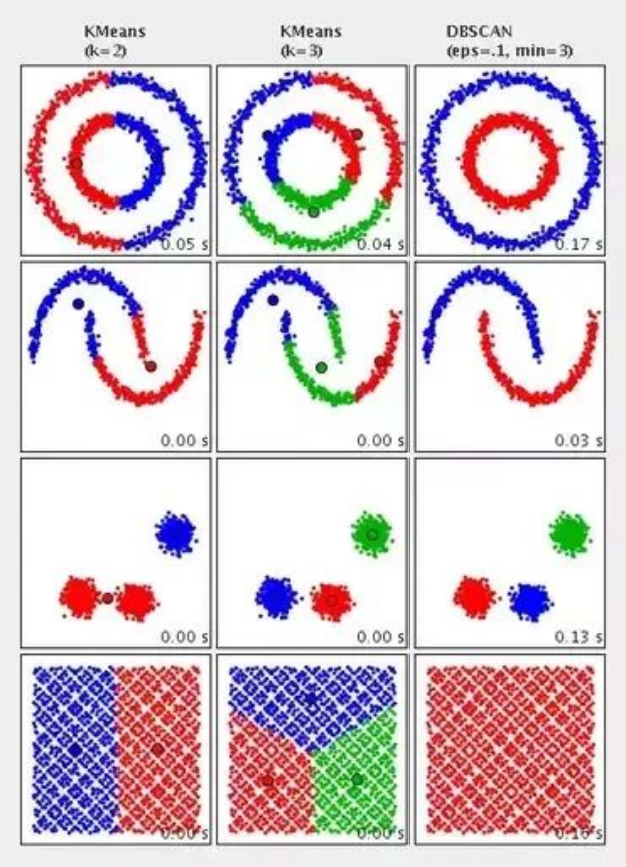
- No hay que elegir el número de clusters
- Detecta cualquier forma de clusters
- Determina automaticamente datos outliers

- Hay que elegir bien los parámetros
- No anda bien si hay clusters de diferentes densidades
- Es computacionalmente más costoso (tarda más)

Clustering • K-Means vs. DBSCAN

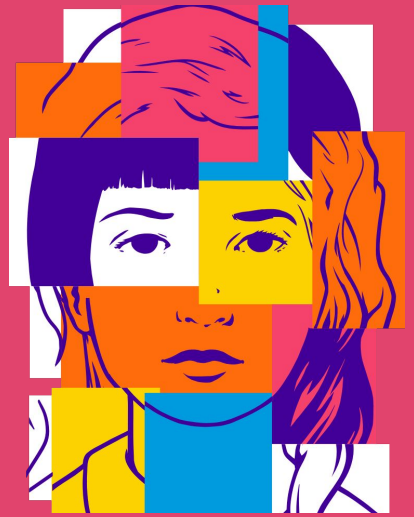
¿Cómo funcionan?

Es muy común ver este tipo de representaciones de los métodos, donde muestra cómo categorizan distintos datasets y cuanto tardan en hacerlo.



Aprendizaje No Supervisado

Evaluación de clusters



Evaluación: Distancia al centroide

Buscamos una medida para la validación e interpretación de clusters en un dataset.

Idea: medimos cuál es la distancia media de cada dato al centroide más cercano.

Evaluación: Distancia al centroide

Buscamos una medida para la validación e interpretación de clusters en un dataset.

$$d(i) = \|\mathbf{X_i} - \mathbf{Cj}\|^2$$

Distancia de cada dato

Posción del dato i

Posción del centoride mas cercano

Idea: medimos cuál es la distancia media de cada dato al centroide más cercano.

Evaluación: Distancia al centroide (K-Means)

Buscamos una medida para evaluar qué tan bien resulta el clustereo en K-Means.

Idea: medimos cuál es la distancia media de cada dato al centroide más cercano.

Evaluación: Distancia al centroide (K-Means)

Buscamos una medida para evaluar qué tan bien resulta el clustereo en K-Means.

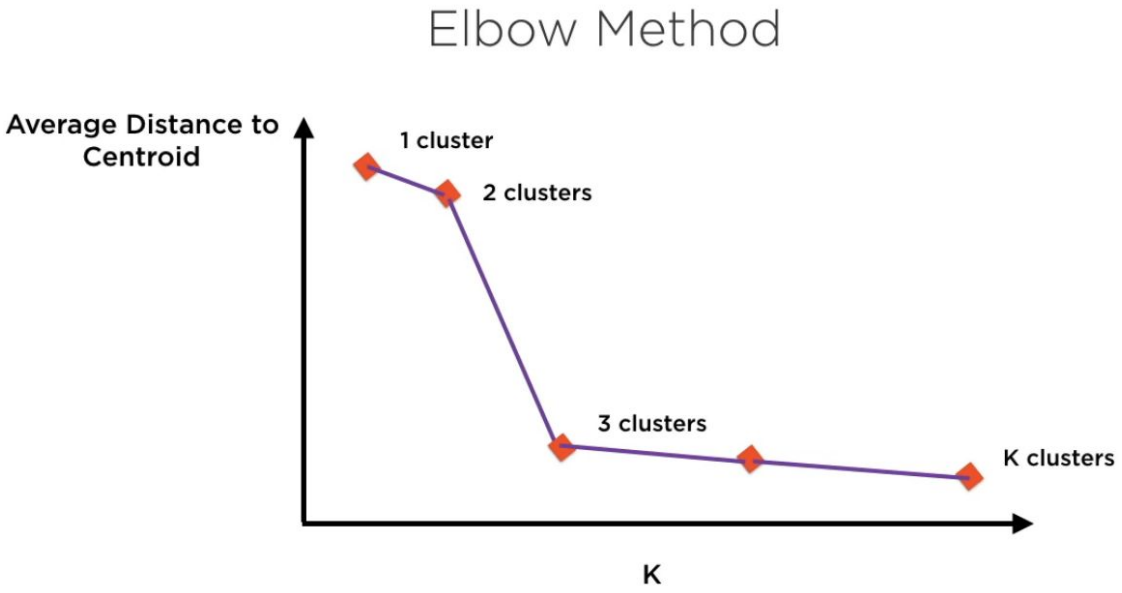
$$D = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} d(i)$$

Distancia media total

Idea: medimos cuál es la distancia media de cada dato al centroide más cercano.

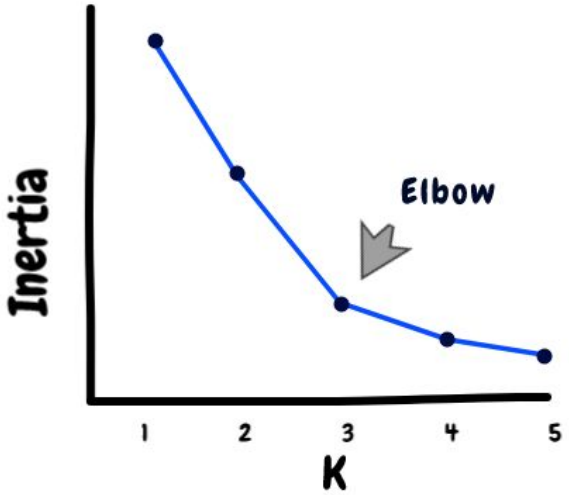
Evaluación: Distancia al centroide (K-Means)

Buscamos una medida para evaluar qué tan bien resulta el clustereo en K-Means.



Evaluación: Distancia al centroide (K-Means)

Buscamos una medida para evaluar qué tan bien resulta el clustereo en K-Means.



Idea: medimos cuál es la distancia media de cada dato al centroide más cercano.

En sklearn: Luego de fitear el modelo, la variable 'model.inertia_' tiene esta información.

K ÓPTIMO: Buscar donde esta el 'codo' de la curva. El valor de inercia siempre desciende con el número de clusters.

Evaluación: Silhouette

Silhouette: es una medida para la validación e interpretación de clusters en un dataset (para cualquier método de clustering que hayan usado).

Definición:

$$s(i) = \begin{cases} 1 - a(i)/b(i), & \text{if } a(i) < b(i) \\ 0, & \text{if } a(i) = b(i) \\ b(i)/a(i) - 1, & \text{if } a(i) > b(i) \end{cases}$$

Idea: medimos qué tan parecidos son los los datos con su propio cluster (cohesión) en comparación con qué tan parecidos son a otros clusters (separación).

s(i): es el valor de silhouette para el dato i.
a(i): distancia media del dato i con el resto de su cluster
b(i): dIstancia media del dato i con el cluster más cercano

Evaluación: Silhouette

Definición:

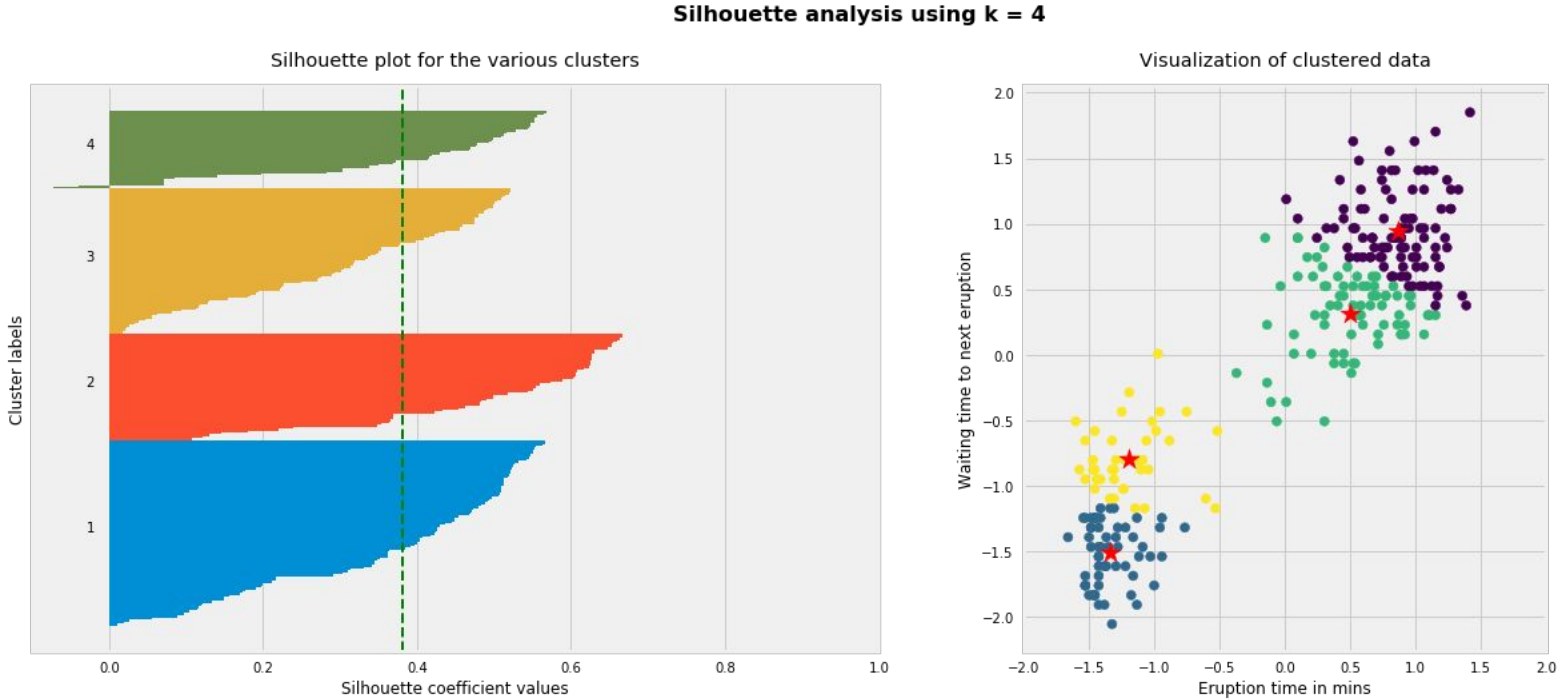
$$s(i) = \begin{cases} 1 - a(i)/b(i), & \text{if } a(i) < b(i) \\ 0, & \text{if } a(i) = b(i) \\ b(i)/a(i) - 1, & \text{if } a(i) > b(i) \end{cases}$$

s(i): es el valor de silhouette para el dato i.
a(i): distancia media del dato i con el resto de su cluster
b(i): dIstancia media del dato i con el cluster más cercano

Esto nos da una medida para cada dato de qué tan bien está ubicado en los clusters. Para una medida de todo el conjunto, se toma la media de todos los s(i).

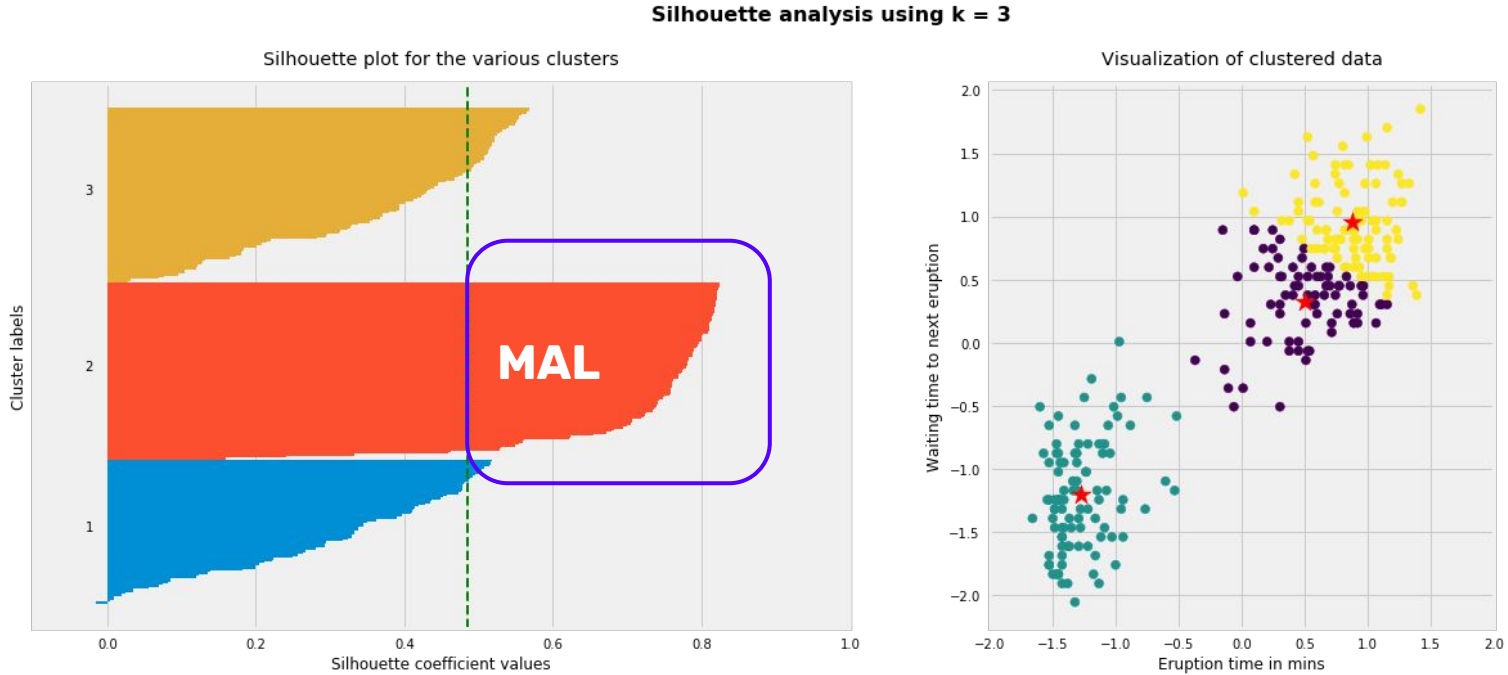
Evaluación: Silhouette

Resultados: se suele mirar el perfil de todos los datos, buscamos que sea parejo.



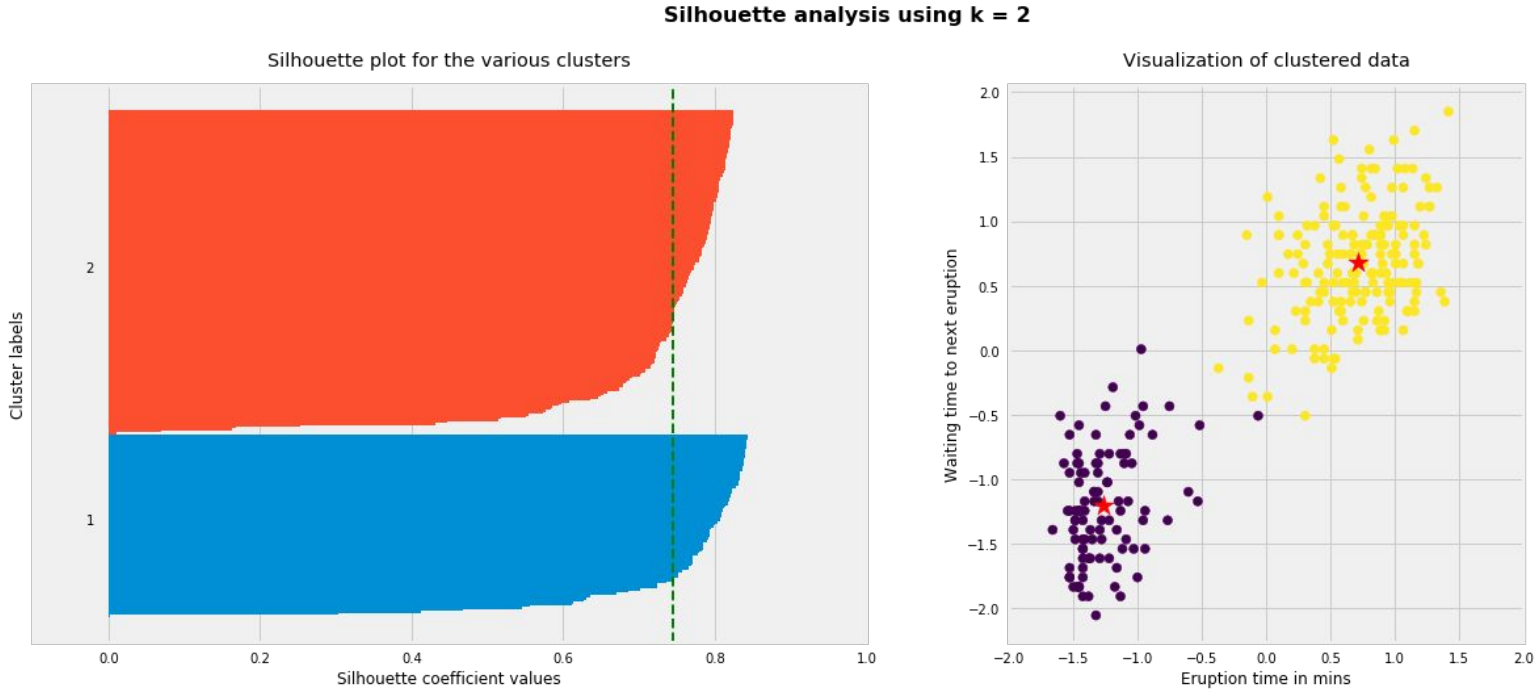
Evaluación: Silhouette

Resultados: se suele mirar el perfil de todos los datos, buscamos que sea parejo.



Evaluación: Silhouette

Resultados: se suele mirar el perfil de todos los datos, buscamos que sea parejo.



¡BREAK!

Ph. Credit: Drew Coffmann

Hands-on training

Hands-on training

DS_Encuentro_37_Clustering_Metricas.ipynb

Para la próxima

1. Ver los videos de “Aprendizaje No Supervisado: Reducción de Dimensionalidad”.
2. Completar los notebooks de hoy y atrasados.

ACÁMICA