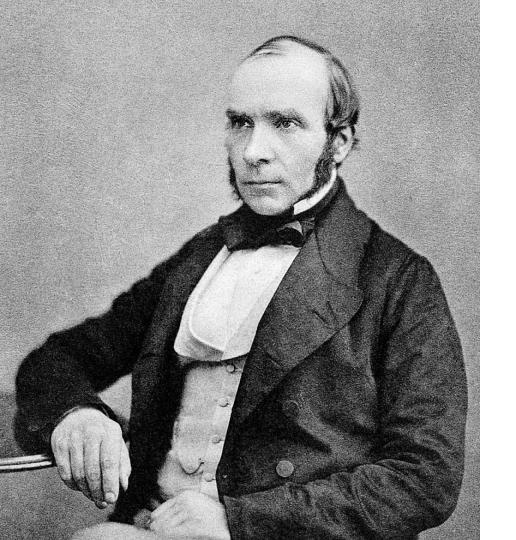
Data Mining y Visualización

Vanessa P. Araya www.varaya.cl Equipo <u>ILDA</u>, Inria

El misterio del cólera







John Snow: 1813–1858

Médico inglés, considerado padre de la epidemiología moderna

Recolección de datos

Table VI.

The Mortality from Cholera in 1854, in Thirty-one Sub-Districts, as compared with Calculations founded on the Results shown in Table V.

on Districts.		1891.	Estimated population supplied with water as under.			Deaths from cholers, in 1894.		Calculated mortality in the populat supplied with water as under.			
	Registration 5ub-Districts.	Population in 1831.	Southwark and Vanchall Co.	Lambeth Co.	Both Companies together.	Total deaths.	Deaths per 10,000 living.	Southwark and Yauchall Co. at 100 per 10,000.	Lambeth Co. at 27 per 10,000.	The two Companies.	Calculated
r, Southw	1. Christchurch	10,022	2,015	13,234	16,149	113	71	46	36	82	
	2. St. Saviour	19,700	16,337	898	17,235	378	192	261	2	263	1
	1. St. Olave	8,015	8,745	0	8,745	161	201	140	0	140	1
	2. St. John, Horselydown	11,300	9,300	0	9,300	152	134	150	0	150	
ey	1. St. James	18,899	23,173	603	23,866	362	192	370	2	372	1
	2. St. Mary Magdalen -	13,934	17,258	0	17,258	247	177	276	0	276	1
	3. Leather Market	15,295	14,003	1,002	15,095	237	155	224	3	227	1
, Southw	1. Kent Road	18,126	12,630	3,997	16,627	177	98	202	11	213	
Sometinees.	2. Borough Road	15,862	8,937	6,672	15,000	271	171	143	18	101	
- 1	3. London Road	17,836	2,872	11,497	14,369	95	53	46	31	79	1
n	1. Trinity	20,922	10,132	8,370	18,502	211	101	102	22	184	
- 3	2. St. Peter, Walworth .	29,861	14,274	10,794	24,908	391	131	228	29	257	
- 3	3. St. Mary	14,033	2,983	5,484	8,467	0:2	66	48	15	63	

Visualización de los datos





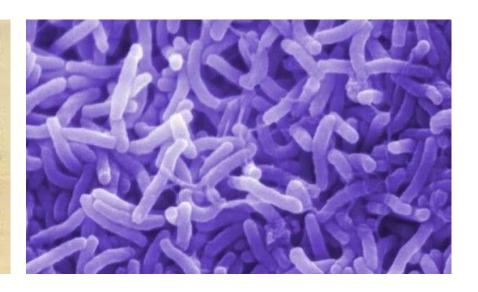


Conclusiones

Descubrimiento del cólera

NOT TO DRINK ANY WATER WHICH HAS NOT PREVIOUSLY BEEN BOILED.

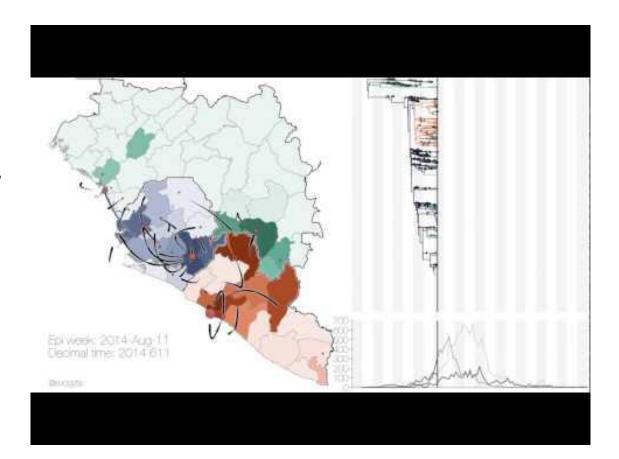
Fresh Water ought to be Boiled every Morning for the day's use, and what remains of it ought to be thrown away at night. The Water ought not to stand where any kind of dirt can get into it, and great care ought to be given to see that Water Butts and Cisterns are free from dirt.



Gytis Dudas et all.

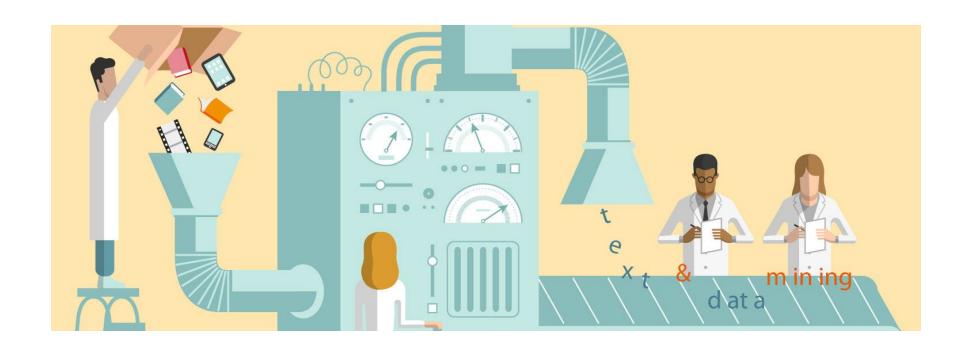
Virus genomes reveal factors that spread and sustained the Ebola epidemic.

Nature, 2017



¿Qué es minería de datos?

Descubrir automáticamente información útil en grandes repositorios de datos



Tareas a seguir

- Establecer el problema
- Obtener datos adecuados
- Limpiar y explorar los datos -> ¡Visualización!
- Modelar nuestros datos
- Interpretar y comunicar

Tareas a seguir

- Establecer el problema
- Obtener datos adecuados
- Limpiar y explorar los datos -> ¡Visualización!
- Modelar nuestros datos
- Interpretar y comunicar

Parte 1:

Preprocesamiento y Visualización

Parte 2:

Aprendizaje Supervisado

Parte 3:

Aprendizaje No Supervisado

- Establecer el problema
- Obtener datos adecuados
- Limpiar y explorar los datos -> ¡Visualización!
- Modelar nuestros datos

Estructura general

Parte 1:

Preprocesamiento y Visualización

Parte 2:

Aprendizaje Supervisado

Parte 3:

Aprendizaje No Supervisado

Estructura general

Parte 1:

Preprocesamiento y Visualización

Parte 2:

Aprendizaje Supervisado

Parte 3:

Aprendizaje No Supervisado

Establecer el problema

- ¿Qué enfermedad quiero entender?
- ¿Por qué entender esta enfermedad es importante?
- ¿Quiénes se ven afectados por esta enfermedad?
- ¿Qué espero obtener de mi análisis que pueda cambiar?

Obtener los datos puede ser difícil

As far as public datasets, the public has to realize that you're not going to be able to see the raw information. Just imagine the sorts of privacy rights issues you'd have in the U.S. with HIPAA compliance. Public health officials are not going to share exact names and identities of those affected, never mind all their suspected contacts over weeks. The best that the public can hope for will be analysis of aggregate, anecdotal or incidental data and metadata—such as social media posts, or global flight information. Some companies like <u>BlueDot</u> and <u>Metabiota</u> already have services that provide analysis of such data. But, again, these are not public open data sets.

Fuente https://towardsdatascience.com/chasing-the-data-coronavirus-802d8a1c4e9a

Obtener los datos puede ser difícil



Fuente https://www.minciencia.gob.cl/covid19

Algunas fuentes de datos

- https://archive.ics.uci.edu/ml/index.php
- https://www.kaggle.com/
- https://www.who.int/
- https://github.com/curran/data

Preprocesar los datos

- Creación de atributos
- Selección de un subconjunto de atributos
- Agregación
- Normalización
- Muestreo
- Reducción de dimensionalidad
- Discretización y binarización
- Transformación

Lectura recomendada:

https://jakevdp.github.io/PythonDataScience Handbook/05.04-feature-engineering.html

Explorar los datos usando Visualización

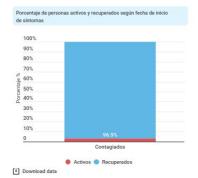
¿Por qué?

- La visión humana es muy poderosa
- Tenemos la capacidad de reconocer patrones

-> Colaboración entre el humano y el computador

Explorar los datos usando Visualización

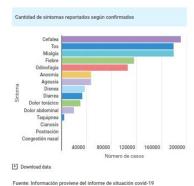
Porcentaje de activos y recuperados según fecha de inicio de síntomas



Fuente: Base de datos Ministerio de Ciencia, en base a Reporte Diario

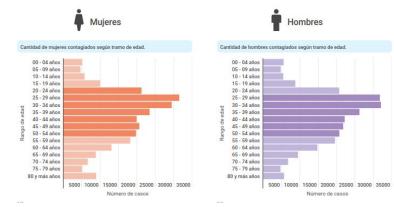
Coronavirus Ministerio de Salud.

Casos confirmados COVID-19, según sintomatología reportada



(http://epi.minsal.cl/informes-covid-19/)

Número total de casos confirmados según tramo de edad



Fuente https://www.gob.cl/coronavirus/cifrasoficiales/#datos

Cuarteto de Anscombe

Anscombe's quartet

1		II		"	Ш	IV	
х	У	х	У	x	У	x	У
10.0	8.04	10.0	9.14	10.0	7.46	8.0	6.58
8.0	6.95	8.0	8.14	8.0	6.77	8.0	5.76
13.0	7.58	13.0	8.74	13.0	12.74	8.0	7.71
9.0	8.81	9.0	8.77	9.0	7.11	8.0	8.84
11.0	8.33	11.0	9.26	11.0	7.81	8.0	8.47
14.0	9.96	14.0	8.10	14.0	8.84	8.0	7.04
6.0	7.24	6.0	6.13	6.0	6.08	8.0	5.25
4.0	4.26	4.0	3.10	4.0	5.39	19.0	12.50
12.0	10.84	12.0	9.13	12.0	8.15	8.0	5.56
7.0	4.82	7.0	7.26	7.0	6.42	8.0	7.91
5.0	5.68	5.0	4.74	5.0	5.73	8.0	6.89

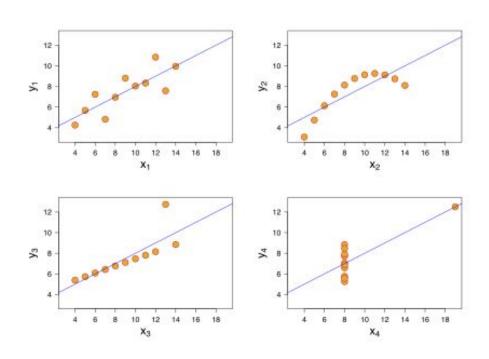
Propiedad	Valor	Exactitud
Promedio de X	9	Exacto
Varianza de la muestra de x	11	Exacto
Promedio de y	5.50	Hasta dos decimales
Varianza de la muestra de y	4.125	± 0.003
Correlación entre x ey	0.816	Hasta 3 decimales

Fuente: https://en.wikipedia.org/wiki/Anscombe%27s_quartet

Cuarteto de Anscombe

Anscombe's quartet

1		11		1	Ш	IV	
Х	у	х	У	х	У	x	У
10.0	8.04	10.0	9.14	10.0	7.46	8.0	6.58
8.0	6.95	8.0	8.14	8.0	6.77	8.0	5.76
13.0	7.58	13.0	8.74	13.0	12.74	8.0	7.71
9.0	8.81	9.0	8.77	9.0	7.11	8.0	8.84
11.0	8.33	11.0	9.26	11.0	7.81	8.0	8.47
14.0	9.96	14.0	8.10	14.0	8.84	8.0	7.04
6.0	7.24	6.0	6.13	6.0	6.08	8.0	5.25
4.0	4.26	4.0	3.10	4.0	5.39	19.0	12.50
12.0	10.84	12.0	9.13	12.0	8.15	8.0	5.56
7.0	4.82	7.0	7.26	7.0	6.42	8.0	7.91
5.0	5.68	5.0	4.74	5.0	5.73	8.0	6.89



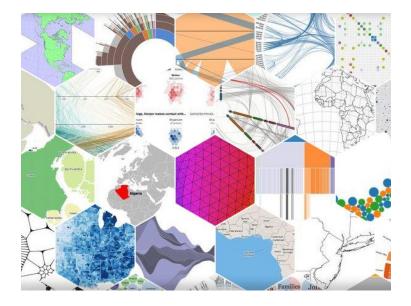
Fuente: https://en.wikipedia.org/wiki/Anscombe%27s_quartet

Algunas herramientas de visualización disponibles

Tableau, pagada:'(

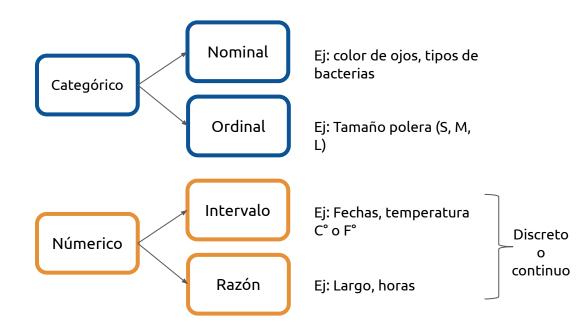


D3js (web interactivas)



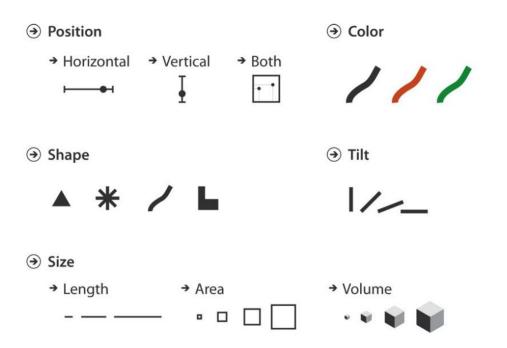
¿Cómo visualizamos de manera efectiva?

1) Entender los datos



¿Cómo visualizamos de manera efectiva?

Ver qué posibilidades tengo

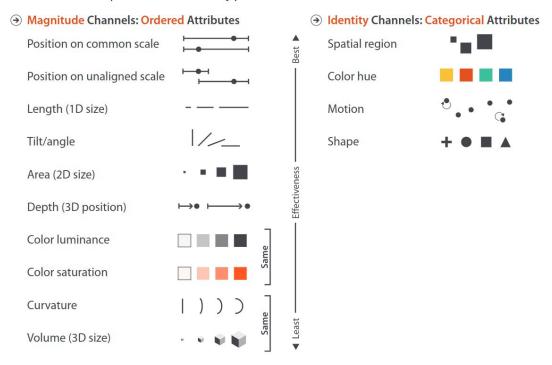


Visual (encoding) channels control the appearance of marks

¿Cómo visualizamos de manera efectiva?

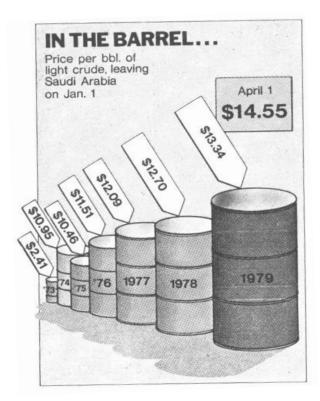
3) Buscar mejor match

Channels: Expressiveness Types and Effectiveness Ranks

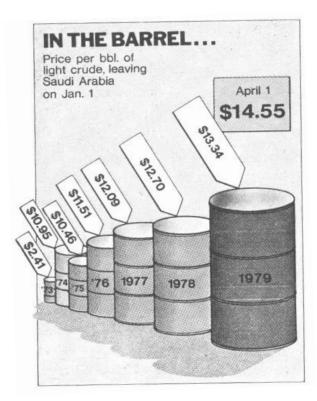


Fuente: Visualization Analysis and Design, Tamara Munzner

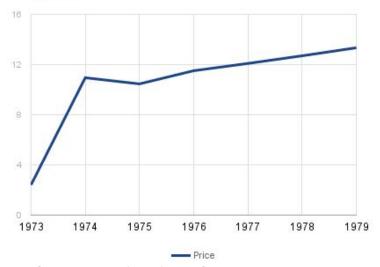
Por ejemplo



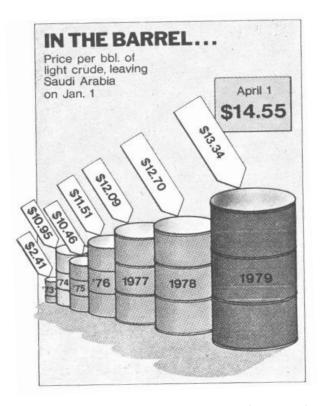
Por ejemplo



Price per bbl. of light crude leaving Saudi Arabia

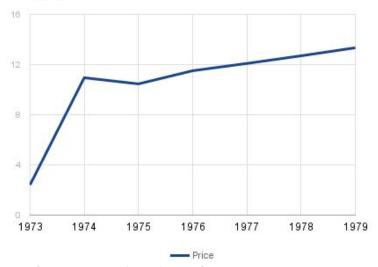


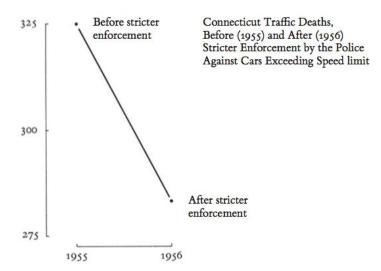
Por ejemplo

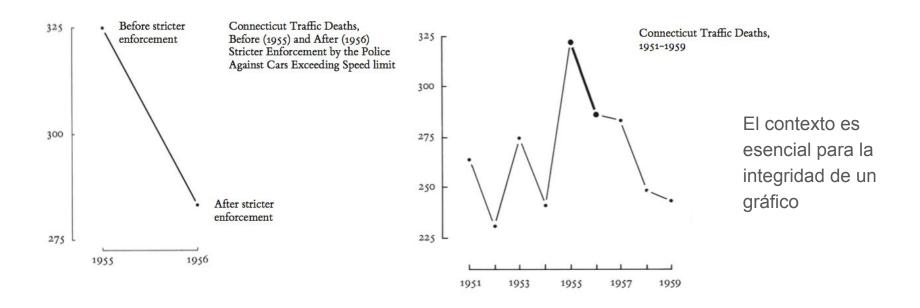


Número de dimensiones en una vis no debe exceder el n° de dimensiones de los datos:

Price per bbl. of light crude leaving Saudi Arabia



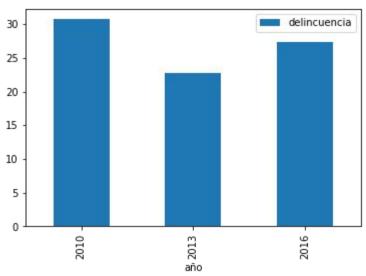






Fuente: https://viz.wtf/post/167382195183/the-former-president-of-chile-and-now-candidate





Fuente: https://viz.wtf/post/167382195183/the-former-president-of-chile-and-now-candidate

Recursos acerca de visualización

- Slides de Tamara Munzner: https://www.cs.ubc.ca/~tmm/vadbook/
- Edward Tufte: https://www.edwardtufte.com/tufte/, en particular el libro The Visual Display of Quantitative Information
- Como no hacer visualizaciones: https://viz.wtf/

Resumen

- Establecer el problema
- Obtener datos adecuados
- Limpiar y explorar los datos -> ¡Visualización!
- Modelar nuestros datos

Resumen

- Establecer el problema
- Obtener datos adecuados
- Limpiar y explorar los datos -> ¡Visualización!
- Modelar nuestros datos

-> Ir a Jupyter lab parte 1

Estructura general

Parte 1:

Preprocesamiento y Visualización

Parte 2:

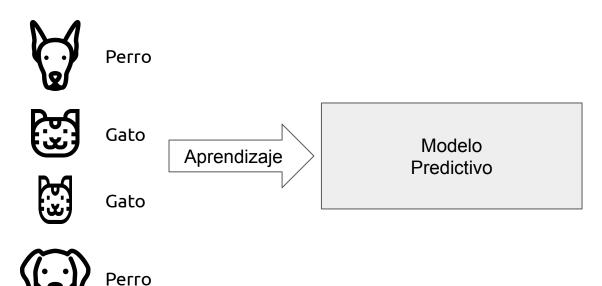
Aprendizaje Supervisado

Parte 3:

Aprendizaje No Supervisado

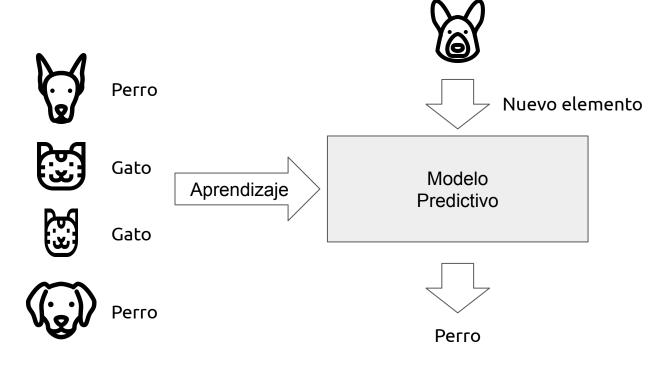
Aprendizaje Supervisado

Crear una función que dado un set de datos de entrenamiento, pueda predecir el output deseado



Aprendizaje Supervisado

Crear una función que dado un set de datos de entrenamiento, pueda predecir el output deseado



Dos tipos de aprendizaje supervisado

Clasificación:

Queremos obtener valores discretos.

Por ejemplo:

- Predecir si una célula cancerígena es maligna o benigna
- Predecir si un email es spam

Dos tipos de aprendizaje supervisado

Clasificación:

Queremos obtener valores discretos.

Por ejemplo:

- Predecir si una célula cancerígena es maligna o benigna
- Predecir si un email es spam

Regresión:

Nuestro target es continuo.

Por ejemplo: predecir el nivel de azúcar en la sangre dado una dosis de una medicina.

Podemos crear una función:

Nivel_azucar(dosis) = nivel_azucar_base + factor * dosis

Ingredientes necesarios

- Datos de entrenamiento
- Datos a predecir
- Método a usar

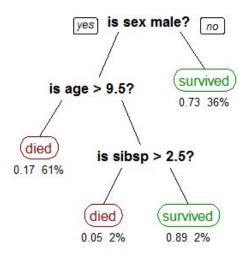
¿Qué obtenemos?

- Modelo
- Métricas de evaluación

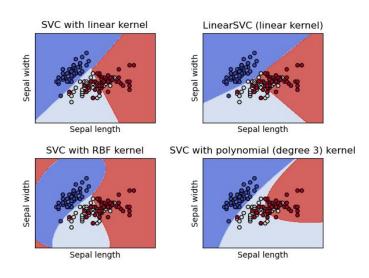


Nosotros veremos dos métodos de clasificación

Árboles de decisión

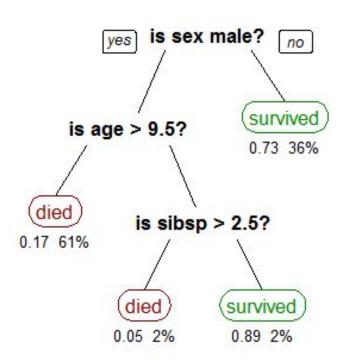


Support Vector Machine



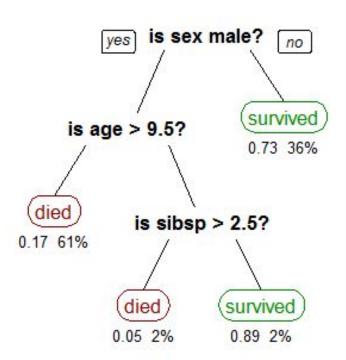
Árboles de decisión

Un método no paramétrico que construye un modelo aprendiendo reglas de decisión.



Árboles de decisión

Un método **no paramétrico** que construye un modelo aprendiendo reglas de decisión.



Métodos paramétricos

Asumen algunos parámetros de entrada.

¿Por qué? Porque hacen la vida más simple.

Funcionan así:

- Seleccionan la forma de una función
- Aprenden los coeficientes de esa función dado los datos de entrada

Métodos paramétricos

Asumen algunos parámetros de entrada.

¿Por qué? Porque hacen la vida más simple.

Métodos no paramétricos

No asumen nada y pueden aprender más libremente.

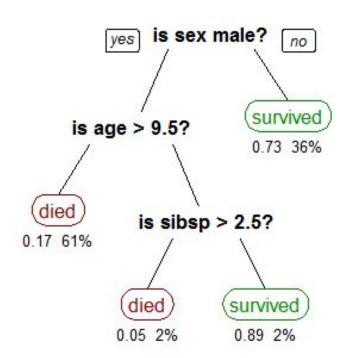
Funcionan así:

- Seleccionan la forma de una función
- Aprenden los coeficientes de esa función dado los datos de entrada

¿Por qué? Porque a veces no sabemos nada de los datos y no queremos tener que definir ningún parámetro a priori

Árboles de decisión

Un método **no paramétrico** que construye un modelo aprendiendo reglas de decisión.



Sexo	Fuma	Diabetes	Muerte
F	Sí	Sí	Sí
F	No	Sí	No
M	No	No	Sí
M	No	Sí	No
M	Sí	No	Sí
F	Sí	No	Sí
M	No	No	No
M	Sí	Sí	Sí
F	Sí	Sí	Sí
F	Sí	Sí	Sí

Sexo	Fuma	Diabetes	Muerte
F	Sí	Sí	Sí
F	No	Sí	No
M	No	No	Sí
M	No	Sí	No
М	Sí	No	Sí
F	Sí	No	Sí
М	No	No	No
М	Sí	Sí	Sí
F	Sí	Sí	Sí
F	Sí	Sí	Sí

¿Qué atributo me da más información para cortar el árbol en dos?

El índice Gini mide el grado de que una variable haya sido clasificada de manera errónea.

Gini = 1 -
$$\sum_{i=1}^{n} (p_i)^2$$

Sexo	Fuma	Diabetes	Muerte
F	Sí	Sí	Sí
F	No	Sí	No
М	No	No	Sí
М	No	Sí	No
М	Sí	No	Sí
F	Sí	No	Sí
М	No	No	No
М	Sí	Sí	Sí
F	Sí	Sí	Sí
F	Sí	Sí	Sí

¿Qué atributo me da más información para cortar el árbol en dos?

El índice Gini mide el grado de que una variable haya sido clasificada de manera errónea.

Si es igual a cero, entonces todos mis elementos están bien clasificados. Si es igual a 1, entonces mis elementos están asignados aleatoriamente

Gini = 1 -
$$\sum_{i=1}^{n} (p_i)^2$$

Sexo	Fuma	Diabetes	Muerte
F	Sí	Sí	Sí
F	No	Sí	No
М	No	No	Sí
М	No	Sí	No
М	Sí	No	Sí
F	Sí	No	Sí
M	No	No	No
М	Sí	Sí	Sí
F	Sí	Sí	Sí
F	Sí	Sí	Sí

Gini = 1 -
$$\sum_{i=1}^{n} (p_i)^2$$

Calculemos el Gini index para el atributo sexo:

$$P(sexo = F \& muerte = Si) = 4/5$$

$$P(sexo = F \& muerte = No) = 1/5$$

$$Gi_sexo_F = 1 - ((4/5)^2 + (1/5)^2) = 0.32$$

$$P(sexo = M \& muerte = Si) = 3/5$$

$$P(sexo = M \& muerte = No) = 2/5$$

Gi sexo
$$M = 1 - ((3/5)^2 + (2/5)^2) = 0.48$$

$$Gi_sexo = P(sexo == F) * 0.32 + P(sexo == M) * 0.48 = 0.4$$

$$Gi_sexo = 5/10 * 0.32 + 5/10 * 0.48 = 0.4$$

Sexo	Fuma	Diabetes	Muerte
F	Sí	Sí	Sí
F	No	Sí	No
M	No	No	Sí
M	No	Sí	No
М	Sí	No	Sí
F	Sí	No	Sí
М	No	No	No
М	Sí	Sí	Sí
F	Sí	Sí	Sí
F	Sí	Sí	Sí

Gini = 1 -
$$\sum_{i=1}^{n} (p_i)^2$$

Calculemos el Gini index para el atributo Fuma:

$$Gi_fuma_Si = 1 - ((1)^2 + (0)^2) = 0$$

$$Gi_fuma_no = 1 - ((1/4)^2 + (3/4)^2) = 0.375$$

$$Gi_fuma = 6/10 * 0 + 4/10 * 0.375 = 0.15$$

Sexo	Fuma	Diabetes	Muerte
F	Sí	Sí	Sí
F	No	Sí	No
М	No	No	Sí
М	No	Sí	No
М	Sí	No	Sí
F	Sí	No	Sí
М	No	No	No
М	Sí	Sí	Sí
F	Sí	Sí	Sí
F	Sí	Sí	Sí

Gini = 1 -
$$\sum_{i=1}^{n} (p_i)^2$$

Calculemos el Gini index para el atributo Diabetes:

P(diabetes = Sí & muerte = Sí) = 4/6 P(diabetes = Sí & muerte = No) = 2/6

 $Gi_diabetes_Si = 1 - ((4/6)^2 + (2/6)^2) = 0.44$

P(diabetes = No & muerte = Sí) = 3/4 P(diabetes = No & muerte = No) = 1/4

 $Gi_diabetes_no = 1 - ((3/4)^2 + (1/4)^2) = 0.375$

 $Gi_diabetes = 6/10 * 0.44 + 4/10 * 0.375 = 0.414$

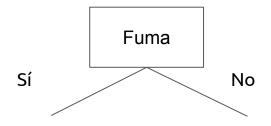
Sexo	Fuma	Diabetes	Muerte
F	Sí	Sí	Sí
F	No	Sí	No
М	No	No	Sí
М	No	Sí	No
М	Sí	No	Sí
F	Sí	No	Sí
М	No	No	No
М	Sí	Sí	Sí
F	Sí	Sí	Sí
F	Sí	Sí	Sí

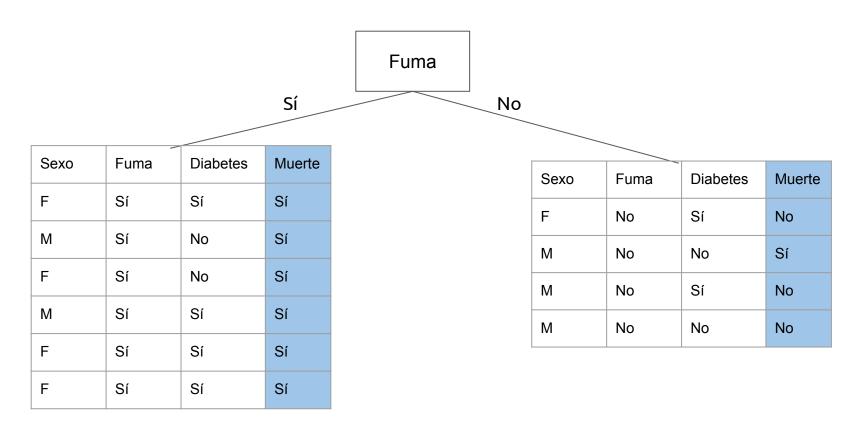
Gini = 1 -
$$\sum_{i=1}^{n} (p_i)^2$$

Gi_sexo = 0.4 **Gi_fuma = 0.15** Gi_diabetes = 0.414

Sexo	Fuma	Diabetes	Muerte
F	Sí	Sí	Sí
F	No	Sí	No
М	No	No	Sí
М	No	Sí	No
М	Sí	No	Sí
F	Sí	No	Sí
М	No	No	No
М	Sí	Sí	Sí
F	Sí	Sí	Sí
F	Sí	Sí	Sí

Gini = 1 -
$$\sum_{i=1}^{n} (p_i)^2$$





Recursos acerca de Árboles de decisión

Árboles de regresión:

https://www.datadriveninvestor.com/2020/04/13/how-do-regression-trees-work/

Otros algoritmos:

- ID3: http://saedsayad.com/decision-tree-reg.htm
- C4.5: https://sefiks.com/2018/05/13/a-step-by-step-c4-5-decision-tree-example/
- Random forests (usar muchos árboles de decisión): https://www.analyticsvidhya.com/blog/2020/05/decision-tree-vs-random-forest-algorithm/

Clasificación: Cómo saber si nuestro modelo es bueno

- Métricas de desempeño:
 - Accuracy (Exactitud): métrica más usada
 - Error rate (Tasa de error)

- Probando con datos de prueba y otros datasets (generalizable, i.e. bajo error de generalización)

Accuracy (exactitud)
y
Precision
(error)

wv	ww.shmula.com	Accuracy	
	W.Simula.vom	Accurate	Not Accurate
sion	Precise	True Value Accurate & Precise	Not Accurate & Precise
Precision	Not Precise	Accurate & Not Precise	Not Accurate & Not Precise

Accuracy (exactitud) y Precision (error)

	Clase predichas		
Clase real		Class = Yes	Class = No
	Class = Yes	TP	FN
	Class = No	FP	TN

Accuracy =
$$\frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$$
 Precision = $\frac{TP}{TP + FP}$ Recall = $\frac{TP}{TP + FN}$

Recall =
$$\frac{TP}{TP + FN}$$

Probamos con datos de prueba

Dejamos un porcentaje de los datos para entrenar y otros para testear

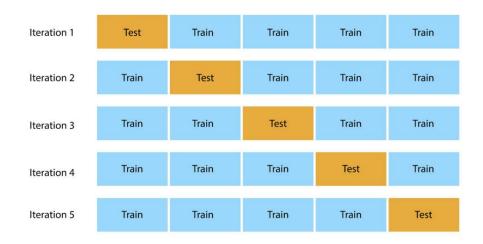
Train

Test

Probamos con datos de prueba

Validación cruzada (cross-validation): particionar datos en k conjuntos disjuntos

k-fold: entrenar con k-1, testear con el restante



Fuente: https://www.mygreatlearning.com/blog/cross-validation/

Problemas prácticos de clasificación

- Errores de entrenamiento (malos resultados sobre los datos de entrenamiento)
- Errores de generalización (malos resultados sobre datos nuevos)
 - Overfitting
 - Underfitting

Modelos de aprendizaje supervisados: toman un conjunto de datos de **entrenamiento** para producir una función que prediga uno o más valores en un dataset nuevo.

Resumen

Modelos de aprendizaje supervisados: toman un conjunto de datos de **entrenamiento** para producir una función que prediga uno o más valores en un dataset nuevo.

Resumen

Podemos clasificarlos en dos tipos principales: clasificación (el objetivo es discreto) o regresión (el objetivo es continuo).

Modelos de aprendizaje supervisados: toman un conjunto de datos de **entrenamiento** para producir una función que prediga uno o más valores en un dataset nuevo.

Resumen

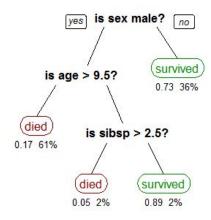
Podemos clasificarlos en dos tipos principales: clasificación (el objetivo es discreto) o regresión (el objetivo es continuo).

Los métodos pueden ser **paramétricos** (asumen funciones a priori) o **no paramétricos** (no asumen nada).

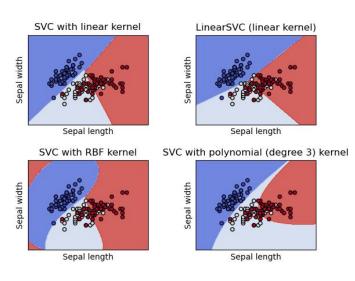
Veremos dos métodos

Árboles de decisión

No paramétrico y que puede ser usado para clasificación o para regresión



Support Vector Machine



-> Ir a Jupyter notebook Parte 2

Estructura general

Parte 1:

Preprocesamiento y Visualización

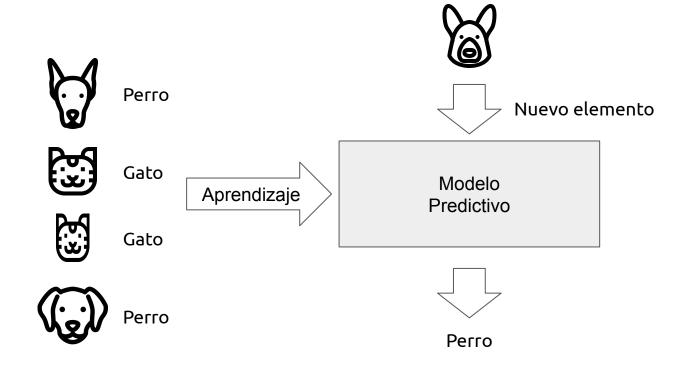
Parte 2:

Aprendizaje Supervisado

Parte 3:

Aprendizaje No Supervisado

Aprendizaje Supervisado



Aprendizaje **No** Supervisado

Intenta encontrar
patrones
desconocidos en los
datos, sin
conocimiento previo.







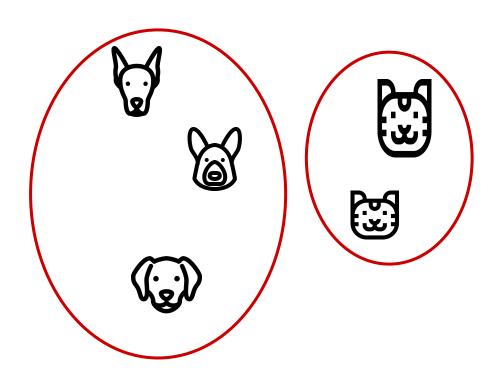




Aprendizaje **No** Supervisado

Intenta encontrar
patrones
desconocidos en los
datos, sin
conocimiento previo.

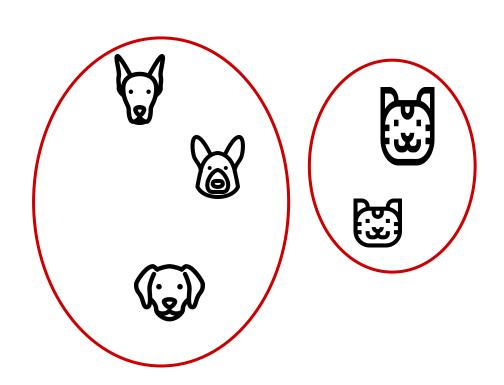
Clustering es uno de los más conocidos



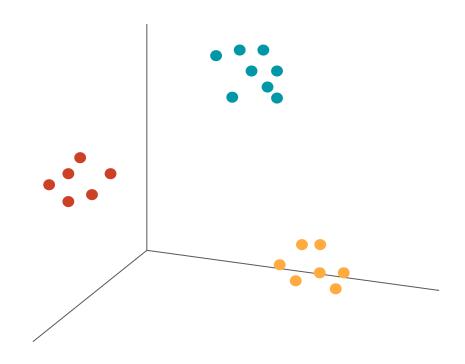
Clustering

Encontrar grupos de objetos especificando que:

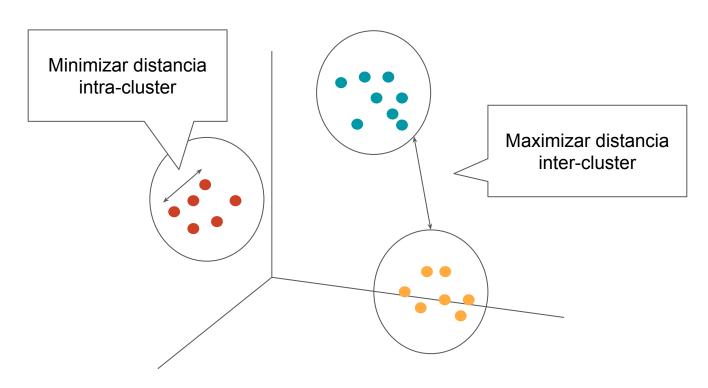
- Los objetos en un grupo sean similares (o relacionados) entre sí y,
- que sean diferentes (o no relacionados) a los objetos en otros grupos



Clustering



Clustering

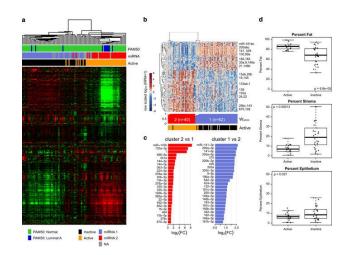


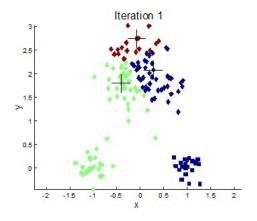
Ejemplos

- Agrupar imágenes para búsqueda.



 Agrupar pacientes por condiciones médicas





K-Means es uno de los métodos más conocidos

Iteration 1

Partimos seleccionando K centroides iniciales al azar.

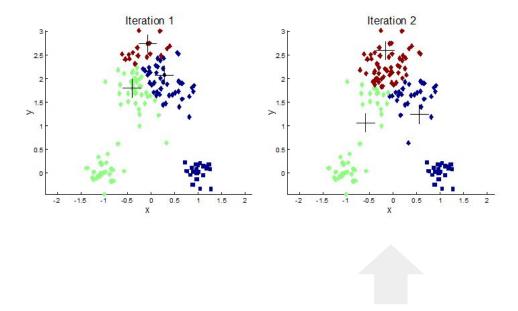
K-Means es uno de los métodos más conocidos

Iteration :

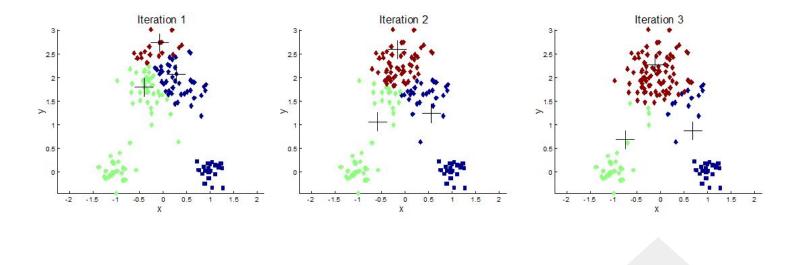
Partimos seleccionando K centroides iniciales al azar.

Asignamos cada elemento en el dataset al centroide que esté más cerca.

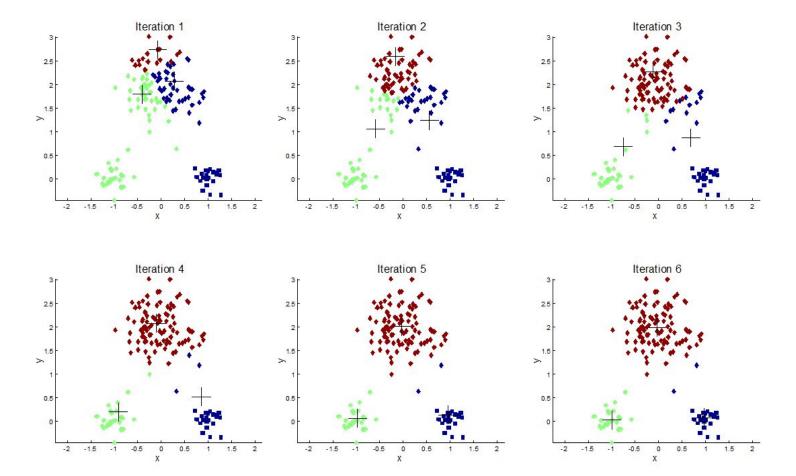
K-Means es uno de los métodos más conocidos



Calculamos nuevos centroides



Iteramos



¿Son buenos nuestros clusters?

No hay respuesta absoluta -> depende de la aplicación

- Evitar encontrar patrones en el ruido
- Para comparar algoritmos de clustering diferentes
- Para comparar conjuntos de clusters diferentes
- Para comprar dos clusters

Evaluar clusterings

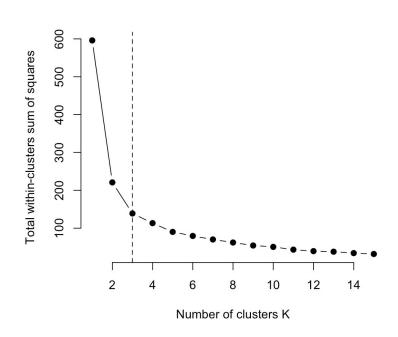
Suma error cuadrático: medida más común para evaluar clusters

- Por cada punto, error es la distancia al centroide del cluster
- x: punto en el cluster C_i, m_i: centroide C_i
- Dados 2 clusters se escoge el que tiene menos error

$$SSE = \sum_{i=1}^{K} \sum_{x \in C_i} dist^2(m_i, x)$$

Método del codo

- Evaluar suma total de error cuadrático para distintos valores de K
- Buscar el "codo" que es el punto en que el error cuadrático baja de manera consistente



Modelos de aprendizaje no supervisados: toman un conjunto de datos y crean una función que trate de darle sentido a datos de los que **no conocemos** la estructura.

Resumen

Vimos el método K-Means.

-> Ir a jupyter notebook parte 3

Estructura general

Parte 1:

Preprocesamiento y Visualización

Parte 2:

Aprendizaje Supervisado

Parte 3:

Aprendizaje No Supervisado

¿Y redes neuronales artificiales?

¡Es un área muy grande! Algunos recursos:

- Curso en español del professor Jorge Pérez (UChile):
 https://github.com/dccuchile/CC6204
- Libro profesor Alexandre Bergel (UChile):
 https://b-ok.cc/book/5679843/309d91 (está en el lenguage Pharo pero está bien completo también)