

Minería de datos

Tema 4: Algoritmos basados en vecindad

Algoritmos K-vecinos





Agenda:

- Clasificación con métodos basados en vecindad
- Algoritmo K-vecinos
- Ejemplos de aplicaciones



- La predicción se basa en la utilización de instancias o ejemplos "vecinos" al dato que hay que procesar.
- Idea: ante una nueva situación, se podría actuar como se hizo en situaciones anteriores similares, si éstas fueron exitosas.
- La similitud o distancia entre cada ejemplo y el dato a procesar es esencial en el proceso

Ejemplo:

En clasificación:

Asignar una clase a un nuevo dato, observando la clase de datos similares

En regresión:

El valor numérico predicho para un nuevo dato, se obtiene de los valores obtenidos para ejemplos similares



Dos aspectos importantes:

- a) ¿Qué se entiende por similitud?
- b) ¿Cuándo se explota dicha similitud?

a) ¿Qué se entiende por similitud?

Similitud

- Es una medida numérica que indica el grado al cual dos objetos se parecen
- A más alto este valor más parecidos los objetos
- Es no negativa y generalmente entre 1 (similitud máxima) y 0 (no hay similitud)

Sin embargo, es común utilizar la distancia (inverso de la similitud), también conocida como disimilitud:



<u>Distancia</u>

- Es una medida numérica que indica el grado al cual dos objetos son diferentes
- Mientras más bajo este valor, más parecidos
- Puede asumir valores entre [0, 1] o entre [0, ∞]

Las medidas que satisfacen las siguientes tres propiedades

1. Positividad: $d(X, Y) \ge 0 \quad \forall X, Y$

$$d(X, Y) = 0 \longrightarrow X = Y$$

Métricas o distancias

2. Simetría: $d(X, Y) = d(Y, X) \forall X, Y$

3. Designaldad triangular: $d(X, Z) \le d(X, Y) + d(Y, Z) \quad \forall X, Y, Z$

Sin embargo, muchas medidas no satisfacen estas 3 propiedades pero son muy útiles Para las medidas de similitud la desigualdad triangular generalmente no se cumple



Algunas medidas de similitud:

- Para datos numéricos

$$Cos(X, Y) = \frac{X \cdot Y}{||X|| \cdot ||Y||}$$

Ejemplo:

Si
$$X = (2,1), Y = (3,2), Z = (5,1)$$

$$Cos(X, Y) = \frac{(2 \times 3) + (1 \times 2)}{(2.23) \cdot (3.60)} = 0.99$$
 \leftarrow $X, Y son más parecidos$

$$Cos(X, Z) = \frac{(2 \times 5) + (1 \times 1)}{(2.23) \cdot (5.09)} = 0.96$$



- Para datos categóricos

Ejemplo:

Si X = (Rojo, Alto, Maracay, Pequeño, Redondo)

Y = (Rojo, Bajo, Maracay, Grande, Redondo)

Z = (Verde, Bajo, Caracas, Grande, Cuadrado)

Similitud(X, Y) =
$$\frac{3}{3+2}$$
 = 0.6 \leftarrow $\frac{X, Y \text{ son más}}{\text{parecidos}}$

Similitud(Z,Y) =
$$\frac{2}{3+2}$$
 = 0.4



Algunas medidas de distancia:

- Para datos numéricos

Sea
$$X = (x_1, x_2, x_3,, x_d)$$

 $Y = (y_1, y_2, y_3,, y_d)$

Distancia Euclídea =
$$\sqrt{\sum_{i=1}^{d} (x_i - y_i)^2}$$

Distancia Manhattan =
$$\sum_{i=1}^{d} |(x_i - y_i)|$$

Distancia Canberra =
$$\sum_{i=1}^{d} \frac{|(x_i - y_i)|}{|x_i| + |y_i|}$$

También se han definido medidas de similitud o de distancia para datos binarios, datos complejos como cadenas de caracteres, grafos, árboles, datos difusos, entre otros



b) ¿Cuándo se explota esta similitud?

En el marco de clasificación mostrado hasta el momento

- Se realiza un paso inductivo para construir un modelo a partir de los datos.
 - Luego se aplica un paso deductivo para aplicar el modelo a los datos de test.

→ Métodos anticipados

Otro esquema:

- Esperar a que se plantee una predicción sobre un nuevo dato.
- En este momento, determinar las instancias o casos más parecidos (similares) y utilizar estos datos para obtener una respuesta (clase)

Métodos retardados o perezosos



Métodos anticipados:

- Construyen un modelo antes de realizar una tarea de predicción o generalización
- Se construye una aproximación global utilizando la totalidad del conjunto de datos
- Ejemplo: algoritmos de árboles de decisión

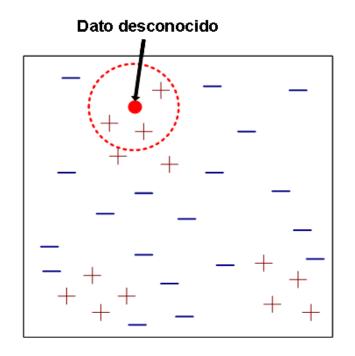
Métodos retardados o perezosos (lazy)

- No construyen un modelo y retrasan la decisión de predicción hasta el instante en que se recibe un nuevo dato a procesar
- Realizan una aproximación local al dato a generalizar (hace predicciones basado en información local).
- Ejemplo: algoritmo k-vecinos





- Idea básica: Encontrar los K ejemplos o instancias del conjunto de aprendizaje que son más similares al nuevo dato a clasificar
- Estos ejemplos = vecinos más próximos
- Se utilizan para determinar la clase de la nueva instancia



Requiere:

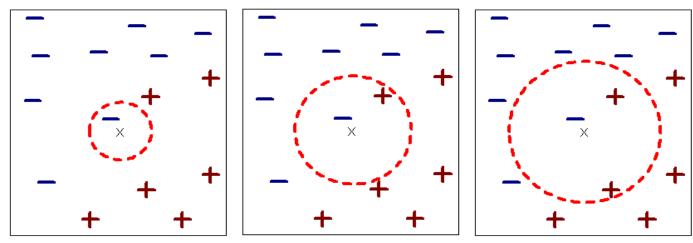
- Un conjunto de datos almacenados
- Una medida de distancia o similitud
- El valor de K, el número de vecinos a recuperar



Para clasificar un nuevo dato:

- Calcular la distancia a todos los datos del conjunto de aprendizaje
- Determinar los k vecinos (más parecidos)
- Utilizar la etiqueta de clase de los vecinos para determinar la clase del nuevo dato (por ejemplo, por mayoría)

Ejemplo:



- a) 1- vecino más próximo
- b) 2- vecinos más próximos c) 3- vecinos más próximos

Clase =

Clase = ?

Clase = +





Algoritmo:

{Entrada: D (conjunto de entrenamiento), K (número de vecinos)}

Para cada ejemplo z_i

Para j = 1 hasta N

 $d_i(z_i, X_i)$ = distancia entre z_i y el ejemplo de entrenamiento X_i

Fin_Para

D₂ = conjunto de los K ejemplos más cercanos a z_i (lista de vecinos)

$$y_i = \underset{v}{\operatorname{argmax}} \sum_{(x_k, y_k) \in D_z} I(v = y_k)$$

 $\begin{aligned} y_i &= \text{argmax} & \sum I \; (v = y_k) & \text{\% Clasifica el ejemplo de acuerdo a la clase} \\ v & (x_k, y_k) \in D_z & \text{mayoritaria de sus vecinos} \end{aligned}$

Fin Para

{Salida: conjunto de ejemplos test clasificados}

Donde,

le ejemplos test clasificados}
$$y_{i} = \underset{v}{\text{argmax}} \sum_{(x_{k}, y_{k}) \in D_{z}} \sum_{v} \text{Función indicadora} = \begin{cases} 1 \text{ si } v = y \\ 0 \text{ si } v \neq y \end{cases}$$

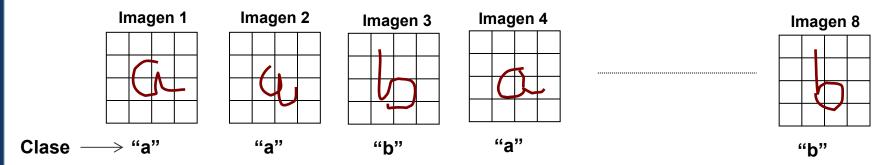
Algoritmo k-vecinos

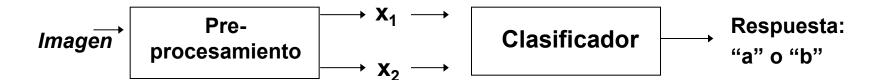
Ejemplo: Reconocimiento de caracteres manuscritos a partir de imágenes

■ Tarea: Clasificación

Algoritmo: K-vecinos

Conjunto de datos:





Donde: x_1 = ancho del caracter

 x_2 = alto del caracter

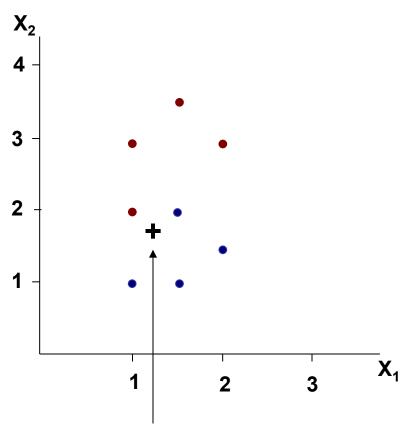




Vista minable:

X ₁	X ₂	CLASE
1.0	1.0	а
1.5	1.0	а
1.5	2.0	а
2.0	1.5	а
1.0	2.0	b
1.0	3.0	b
1.5	3.5	b
2.0	3.0	b





Nuevo dato: z = (1.2, 1.8)

¿Cómo se clasifica?



Algoritmo k-vecinos

Si K = 3 y distancia Euclídea

1. Calcular la distancia de z a cada uno de instancias en el conjunto de datos D:

$$d(x^{1}, z) = 0.82 d(x^{5}, z) = 0.28$$

$$d(x^{2}, z) = 0.85 d(x^{6}, z) = 1.21$$

$$d(x^{3}, z) = 0.36 d(x^{7}, z) = 1.72$$

$$d(x^{4}, z) = 0.85 d(x^{8}, z) = 1.44$$

2. Determinar la lista de los 3 vecinos más próximos:

Vecinos_z =
$$D_z = \{(x^1, y_1), (x^3, y_3), (x^5, y_5)\}$$

3. Clasificar z de acuerdo a la clase mayoritaria:

$$\begin{cases} y_1 = a \\ y_3 = a \\ y_5 = b \end{cases}$$
 Votos para "a" = 2 Votos para "b" = 1



Algunas variaciones de K-NN

Regla K-NN con rechazo:

La clasificación sólo se realiza en el caso de que alguna de las clases reciba un número de votos mayor a un umbral pre-establecido.

Regla K-NN por distancia media:

A partir de los K vecinos más próximos a un nuevo caso a clasificar, se asigna la clase con distancia media menor.

Clasificador de distancia mínima:

Se selecciona un representante o prototipo por clase. Luego, para clasificar un dato, se le asigna la clase del representante más próximo.

Además, se puede utilizar el pesado o ponderación de atributos en las medidas de distancias o similitud; aquellas variables con pesos más grandes tendrán más influencia en el resultado final



Para resumir:

- Utiliza instancias de entrenamiento para hacer predicciones, sin tener que mantener un modelo derivado a partir de datos.
- Requiere de una medida de similitud o distancia y una función de clasificación que retorna la clase o valor predicho para una nueva instancia.
- La clasificación de un ejemplo test puede ser costoso computacionalmente, debido a la necesidad de calcular los valores de proximidad del ejemplo y cada instancia del conjunto de entrenamiento.
- Realizan sus predicciones basados en información local.
- Es importante seleccionar un buen valor de K





Clasificación de documentos de TEG

- Motivación principal = posibilidad de realizar una asignación automática de jurados o evaluadores, en función de los objetivos o temas abordados en los TEG.
- En muchos casos, debido a la interdisciplinariedad presente en estos documentos, esta tarea no es fácil de realizar por las comisiones designadas para tal fin, debido a que no se dispone de la experticia necesaria para decidir a cuál área u opción pertenece un TEG, lo cual es necesario para llevar a cabo una asignación adecuada de jurados

Objetivo: Realizar, de manera automática, una categorización de documentos de TEG según las Opciones Profesionales

Tarea de minería de datos: Clasificación





Recolección de los datos:

El corpus o conjunto de datos está constituido por documentos de Trabajos Especiales de Grado de la Licenciatura de Computación de la Universidad Central de Venezuela, para un período de dos años

Áreas	Cant. de docs. digitales	Cant. de docs. en físico	Cant. de docs. por área		
Aplicaciones de Tecnología Internet (ATI)	24	26	50		
Tecnología en Comunicaciones y Redes de Computadoras (Redes)	20	29	49		
Bases de Datos (BD)	9	41	50		
Inteligencia Artificial (IA)	7	42	49		
Total	60	138	N = 198		
N = cantidad de documentos de la colección (D)					

De los TEG sólo se consideraron el título, resumen (o en su defecto la introducción) y palabras claves.





Preparación de los datos:

- Eliminación de signos de puntuación y demás caracteres especiales.
 Los acentos también fueron removidos, para facilitar el análisis de los textos.
- Construcción un diccionario de palabras frecuentes en el español que no aportan información para la tarea de clasificación de textos (artículos, adjetivos, pronombres, entre otros).
- Estas palabras fueron eliminadas de los documentos aplicando un proceso de comparación con el diccionario.
- Luego se realizó el proceso de lematización (stemming) sobre el resto, mediante la aplicación del algoritmo Porter Stemming para el español.
- Como resultado se obtuvo un total de 3.747 raíces informativas a partir de los documentos recopilados.

a) Indexación:

 Se utilizó la representación mediante el modelo de espacio vectorial, calculando el peso a_{ii} del término j en el documento i

	t ₁	 t _j	•••	T ₃₇₄₇
d ₁	a ₁₁	 a 1j		a _{1 3747}
d _i	a _{i1}	 a _{ij}		a _{i 3747}
d ₁₉₈	a ₁₉₈₁	 a _{198 j}		a _{198 3747}

Algunas opciones para obtener a_{ii}

- Frecuencia del término - a_{ij} = f_{ij} Frecuencia del término j en el documento i

- Frecuencia relativa \longrightarrow $a_{ij} = f_{ij} * log(N/n_j)$ $n_j = n \text{úmero total de veces que el término j aparece en la colección (D).$

- Otras: entropía, tfc, ltc,





Tabla atributo – valor:

	Inalambr	 neuronal		manej	siti	Opción
d ₁	0.295	 0.000		0.001	0.000	Redes
d ₂	0.000	0.000		0.002	0.135	ATI
d ₃	0.000	 0.318		0.000	0.002	IA
i		i			i	i
d ₁₉₈	0.000	 0.000	•••	0.115	0.000	BD





b) Selección de variables (reducción de la dimensionalidad):

- Se utilizaron diferentes técnicas de selección de atributos con el fin de identificar las variables más informativas para la tarea de clasificación.
- Para seleccionar los atributos se utilizó un esquema de votación simple, por mayoría.

Resultado de la fase de preparación de datos:



Vista minable	No. de atributos seleccionados
Pesado por <i>tfc</i>	41
Pesado por <i>Itc</i>	41
Pesado por e <i>ntropía</i>	35





Minería de datos y evaluación:

- Tarea de minería de datos: Clasificación
- Algoritmo: k-vecinos más cercanos
- Medida de rendimiento: exactitud predictiva
- Técnica de evaluación: validación cruzada de 10 particiones



 Se realizaron varios experimentos aplicando el algoritmo k-NN, configurando sus parámetros a los siguientes valores:

- Valor de k: 1, 3, 5 y 7.

- Medida de distancia: Euclídea

Distancia	K	tfc	Itc	entropía
	1	78.78	78.28	80.81
Euclídea —	3	80.80	82.32	80.81
Euclidea	5	77.27	81.31	76.76
	7	75.75	80.30	74.75
	1	78.78	78.28	80.81
Euclídea	3	80.80	81.81	79.79
ponderada	5	79.79	81.81	82.32
,	7	78.78	80.80	80.81

Distancia Euclidea =
$$\sqrt{\sum_{i=1}^{d} (x_i - y_i)^2}$$

Euclidea ponderada =
$$\sqrt{\sum_{i=1}^{d} w_i (x_i - y_i)^2}$$



Donde:

$$a_{ij}(tfc) = \frac{f_{ij} \times log\left(\frac{N}{n_j}\right)}{\sqrt{\sum_{j=1..M} \left[f_{ij} \times log\left(\frac{N}{n_j}\right)\right]^2}}$$

 f_{ij} = frecuencia del término j en el documento i n_{j} = número total de veces que el término j aparece en la colección (D)

N = cantidad de documentos en la colección (cardinalidad de D)

M = cantidad de términos en la colección (cardinalidad de T);

$$a_{ij}(ltc) = \frac{log\left(f_{ij} + 1.0\right) \times log\left(\frac{N}{n_{j}}\right)}{\sqrt{\sum_{i=1..M} \left[log\left(f_{ij} + 1.0\right) \times log\left(\frac{N}{n_{j}}\right)\right]^{2}}}$$

$$a_{ij}(entropia) = log(f_{ij} + 1.0) \times \left(1 + \frac{1}{log(N)} \sum_{i=1..M} \frac{f_{ij}}{n_j} \times log(\frac{f_{ij}}{n_j})\right)$$



Resultados:

Clasificaciones correctas		163 82,3232%				
Clasificaciones Incorrecta	as	35	17,6768%			
Medidas de Rendimiento	o Precisión Sensibilio			ibilidad		
Clase a = ATI	0,729 0,860					
Clase b = Redes	1,0	000	0,816			
Clase c = BD	0,6	395	0,820			
Clase d = IA	0,975		0,796			
Promedio	0,8	348	0,823			
				Clasi	ficador	
			а	b	С	d
		а	43	0	7	0
Matriz de confusión	Poalos	b	4	40	5	0
	Reales					

8

4

С

0

0

41

6

1

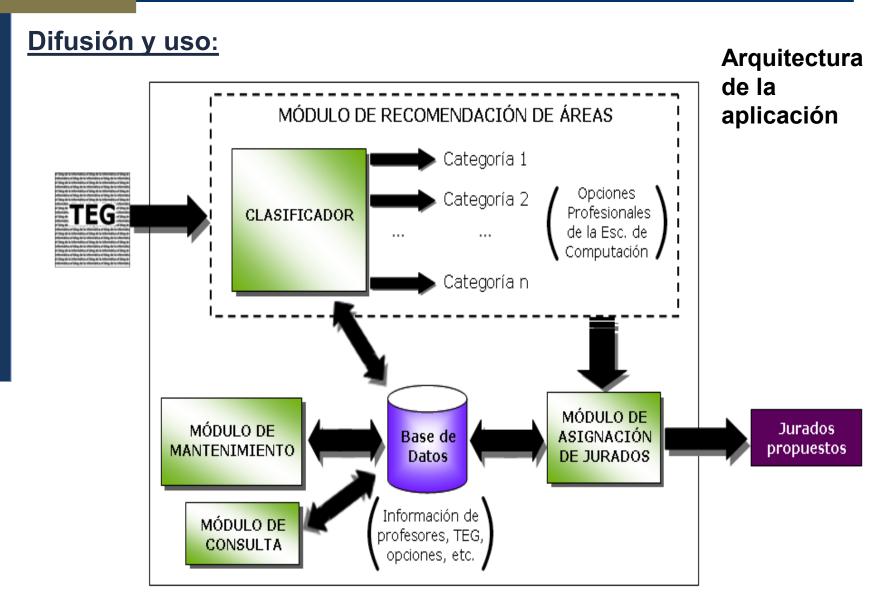
39

kNN con K=5 y distancia Euclídea ponderada como 1/distancia

Sensibilidad o recall:

Precisión:







Interfaz de la aplicación:





Una vez desarrollada la aplicación, se clasificaron 23 documentos de TEG, pertenecientes a un corpus que fue coleccionado después de la construcción del clasificador.

Cada documento en este corpus estaba asociado a una opción profesional; sin embargo, con el apoyo de expertos, en algunos casos se asignó una segunda área considerando la posible interdisciplinariedad presente en estos trabajos.

	Categorización	Recomendación realizada		
Nro. TEG	proporcionada	por la aplicación		
	por los expertos			
1	ATI	ATI		
2	REDES	REDES y BD		
3	ATI	ATI		
4	REDES	REDES		
5	ATI y BD	BD y ATI		
6	REDES	REDES		
7	ATI y BD	ATI		
8	ATI	АТІ		
9	REDES	REDES e IA		
10	REDES	REDES		
11	ATI	ATI		
12	ATI	ATI y BD		
13	ATI	АТІ		
14	IA	REDES		
15	REDES	REDES		
16	ATI	BD y ATI		
17	BD	BD		
18	BD y ATI	ATI y BD		
19	ATI	ATI		
20	ATI y BD	BD y ATI		
21	ATI	ATI		
22	ATI y BD	BD		
23	IA	BD e IA		



Se quiere construir un sistema para apoyar el diagnóstico de cáncer de mamá basado en una plataforma de telemedicina. El usuario se podrá comunicar con un módulo experto a través de una interfaz Web, mediante la cual podrá introducir las características que observa en las células del tejido. El módulo experto le enviará como respuesta si la muestra es benigna o maligna. Como se dispone de registros médicos asociados a pacientes, se quiere utilizar la minería de datos para construir el modelo de diagnóstico.

Aplique el proceso de minería de datos para construir este modelo de clasificación utilizando el conjunto de datos BREAST-CANCER-WISCONSIN, del repositorio UCI. Utilice tres técnicas: C4.5, RIPPER y K-NN. Compare el rendimiento de los clasificadores utilizando validación cruzada y la matriz de confusión. ¿Cuál escogería tomando en cuenta que los expertos consideran que los errores cometidos al diagnosticar una muestra maligna tienen un peso mayor que los cometidos sobre una muestra benigna?



Conjunto de datos BREAST-CANCER-WISCONSIN:

Número de instancias: Clases: BENIGNO (65.5%) = 2699

Número de variables: MALIGNANT (34.5%) = 410

Nombre	Tipo	Ausencias	Media	StdDev	Mínimo	Máximo	Moda
ID	Numérico	0	1071704.099	617095.73	61634	13454352	
CLUMP	Numérico	0	4.418	2.816	1	10	
USIZ	Numérico	0	3.134	3.051	1	10	
USHA	Numérico	0	3.207	2.972	1	10	
MAR	Numérico	0	2.807	2.855	1	10	
EPI	Numérico	0	3.216	2.214	1	10	
BARE	Numérico	16 (2%)	3.545	3.644	1	10	
BLAN	Numérico	0	3.438	2.438	1	10	
NORM	Numérico	0	2.867	3.054	1	10	
MIT	Numérico	0	1.589	1.715	1	10	
CLASE	Nominal						4 3



1) Preparación de los datos:

- a) Limpieza de los datos
 - Se eliminaron los registros con ausencias (16)
- b) Eliminación/Selección de variables
 - Se eliminó la variable ID (identificador)

2) Minería de datos

- Tarea de minería de datos: Clasificación
- Algoritmos: C4.5, RIPPER y K-NN
- Medida de rendimiento: exactitud predictiva
- Técnica de evaluación: validación cruzada de 10 particiones