Centro de Investigación en Matemáticas, A.C.

Reconocimiento de Patrones

Tarea 3

CIMAT

Pregunta 2

- ¿Cuál método es más robusto a datos atípicos: k-medias o agrupamiento aglomerativo? ¿De qué depende? Integra en tu respuesta algunos ejemplos didácticos apoyados con unas gráficas informativas.

In [1]:
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import pandas as pd
import random
import seaborn as sns;
from scipy.spatial.distance import pdist, squareform
from scipy.cluster.hierarchy import dendrogram, linkage, cut_tree
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.cluster import KMeans
from sklearn.decomposition import PCA

np.random.seed(2025)
```

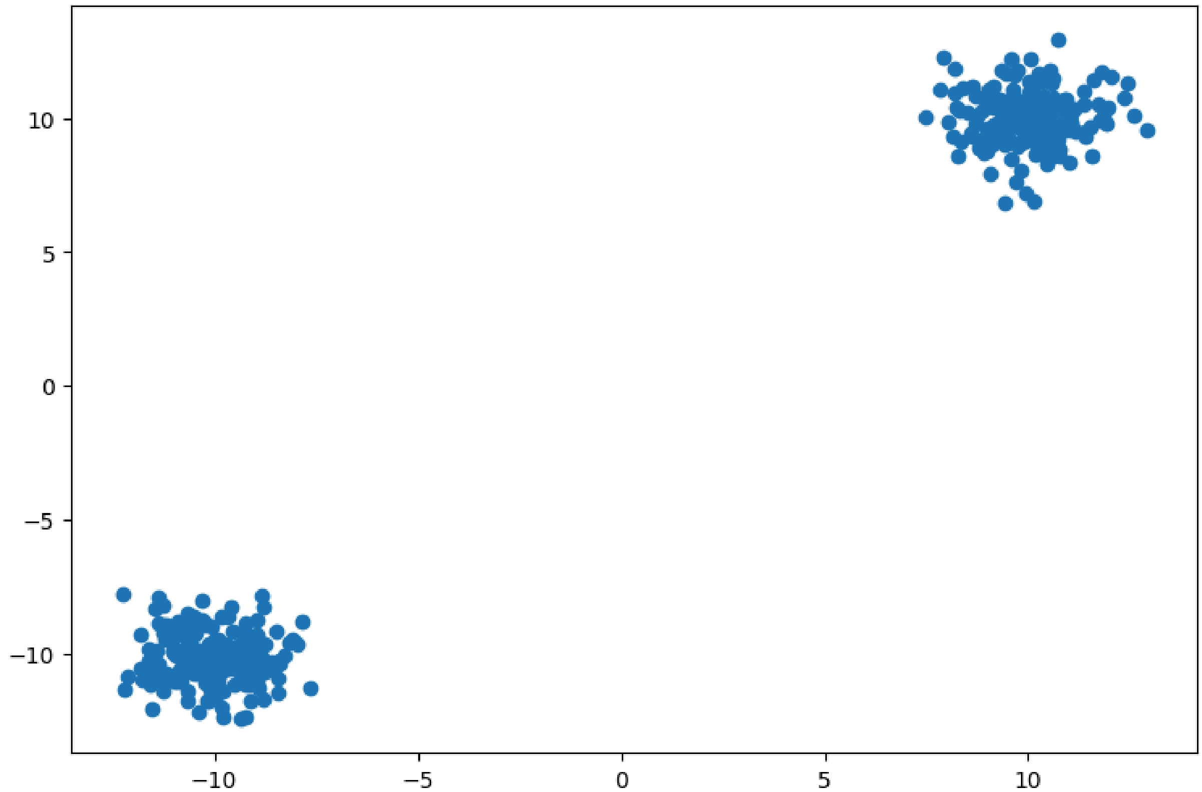
Los dos métodos son sensibles a datos atípicos. Sin embargo, el método de agrupamiento jerárquico es sensible a datos atípicos que k-medias no es, mientras que los datos atípicos a los que k-medias es sensible también afectan al agrupamiento jerárquico. Para ejemplificar, generamos datos de dos bivariadas normales:

In [2]:
```
# Create two DataFrame objects with normal distributions of x and y coordinates
df1 = pd.DataFrame({'x':np.random.normal(-10, 1, 200),
                    'y': np.random.normal(-10, 1, 200)})

df2 = pd.DataFrame({'x':np.random.normal(10, 1, 200),
                    'y': np.random.normal(10, 1, 200)})

# Create a list of DataFrame objects to be concatenated
frames = [df1, df2]
```

```
# Concatenate the DataFrame objects into a single DataFrame
data = pd.concat(frames)
```

Podemos ver que naturalmente estos datos se pueden clasificar en dos grupos:

In [3]:
```
# Create a scatter plot of x and y data
plt.figure(figsize=(9, 6)) # Set figure size to 9x6 inches
plt.scatter(data['x'], data['y']) # Scatter plot of x vs. y coordinates
plt.show()
```



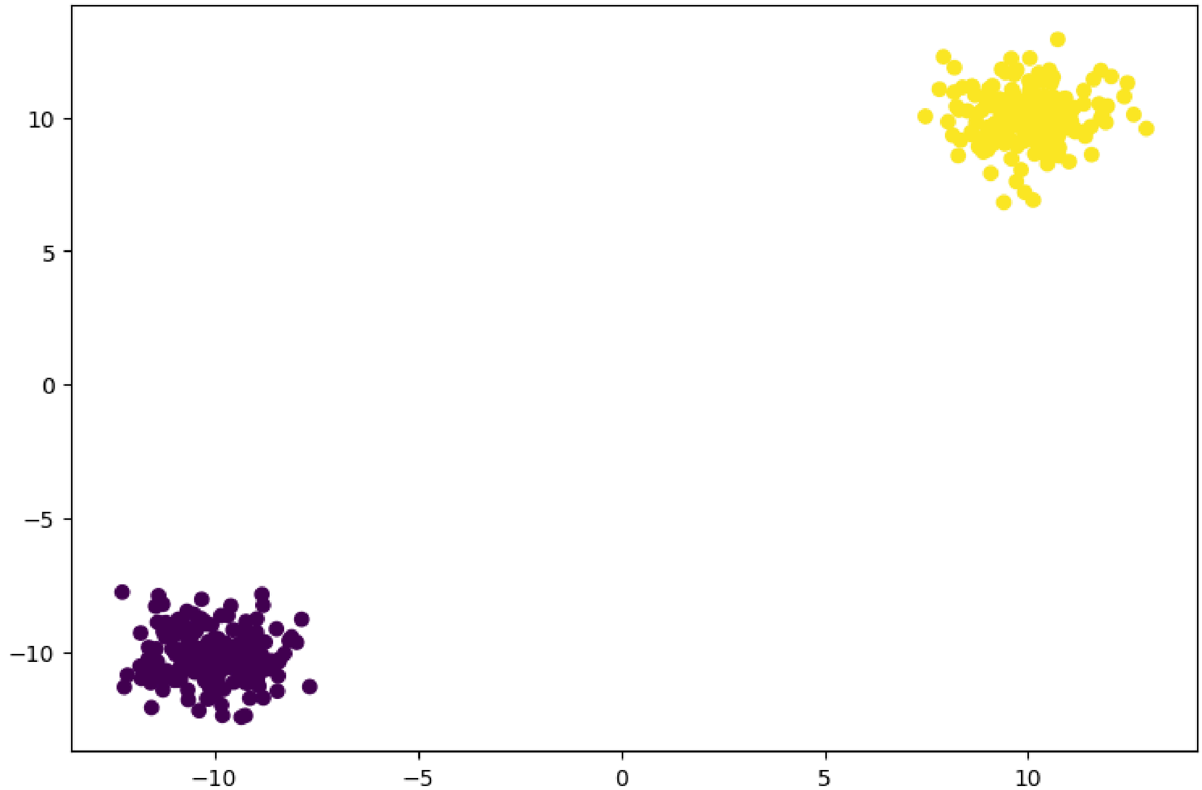
Utilizamos linkage para hacer agrupamiento aglomerativo:

Para saber en cuál grupo una observación queda al cortar tal que el número de grupos es igual a lo que uno especifica:

In [4]:
```
# Compute the linkage matrix using the single method and Euclidean metric
linkage_data = linkage(data, method='single', metric='euclidean')

# Use the cut_tree function to assign each data point to a cluster based on the lin
# The n_clusters parameter specifies the number of clusters to create
h_cluster_id = cut_tree(linkage_data, n_clusters=2)
```

Vemos que el agrupamiento obtenido es el correcto:

In [5]:
```
# Create a scatter plot of x and y data grouped by linkages
plt.figure(figsize=(9, 6))
plt.scatter(data['x'],data['y'], c=h_cluster_id)
plt.show()
```

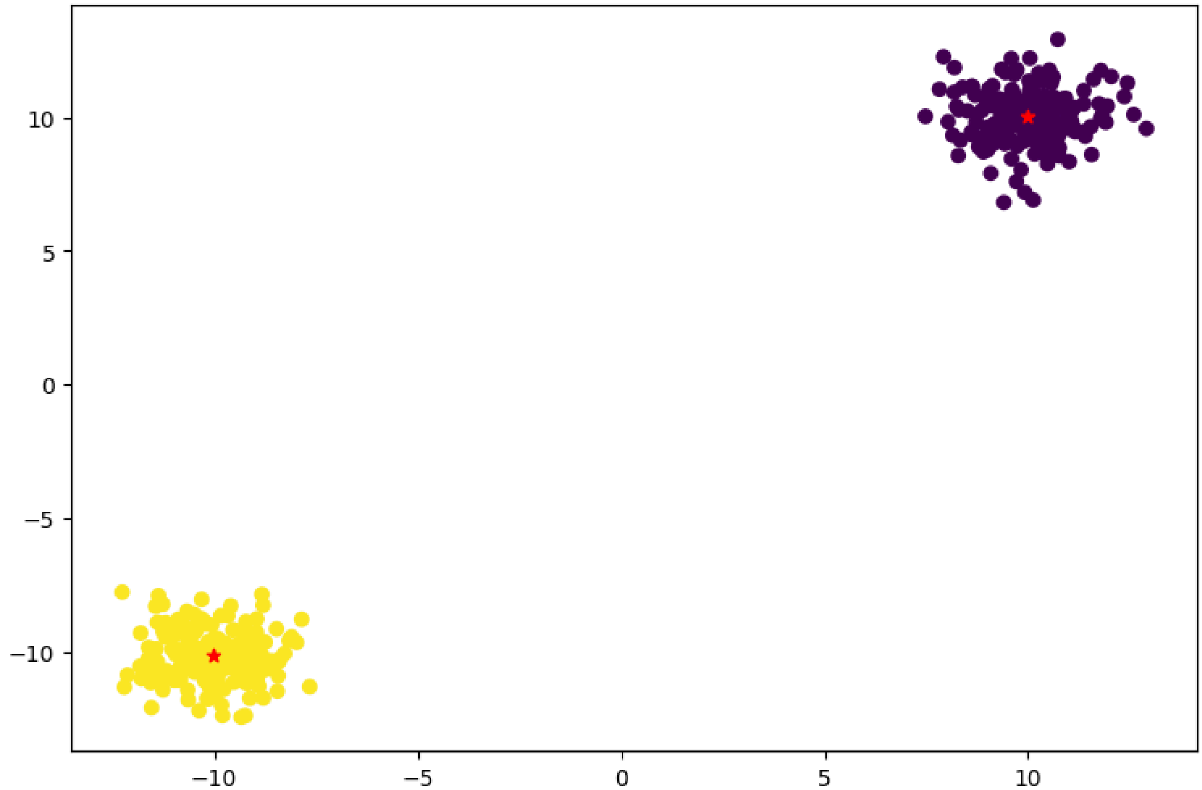


Ahora, utilizamos k-means para agrupar los mismos datos.

In [6]:
```
# Create an instance of the KMeans class with 2 clusters
kmeans = KMeans(n_clusters=2)

# Fit the k-means model to the data and assign labels to each point in the dataset
labels = kmeans.fit_predict(data)
```

Vemos que los datos nuevamente se agrupan correctamente. La estrella roja marca el centroide:

In [7]:
```
# Create a scatter plot of x and y data grouped by k-means
plt.figure(figsize=(9, 6))
plt.scatter(data['x'],data['y'], c=labels)
plt.scatter(kmeans.cluster_centers_[:, 0], kmeans.cluster_centers_[:, 1],c='red',ma
plt.show()
```



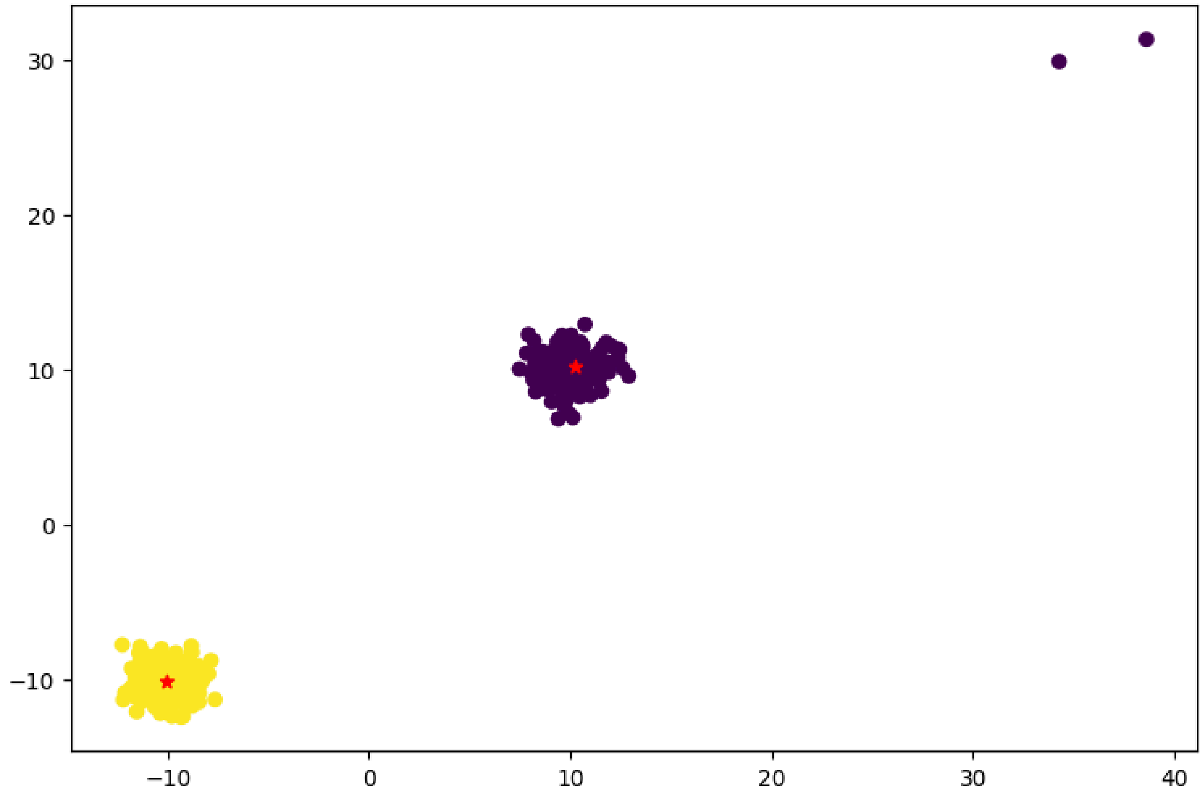
Para iniciar, añadimos dos outliers:

In [8]:
```
# Add an outlier at the end of the dataset

theta = np.random.normal(np.pi/4,np.pi/16,2)
r = np.random.normal(60,5,2)

outlier_data = pd.DataFrame({'x': r*np.cos(theta), 'y': r*np.sin(theta)})

# Append the outlier to the original dataframe
sample_1 = pd.concat([data, outlier_data], ignore_index=True)
```

In [9]:
```
# Apply k-means clustering to the data with outliers
kmeans = KMeans(n_clusters=2)
labels = kmeans.fit_predict(sample_1)

# Compute hierarchical linkage of the sample data using the 'complete' method and E
linkage_data_1 = linkage(sample_1, method='complete', metric='euclidean')

# Cut the hierarchical tree into two clusters based on the computed linkage data
h_cluster_id = cut_tree(linkage_data_1, n_clusters=2)
```

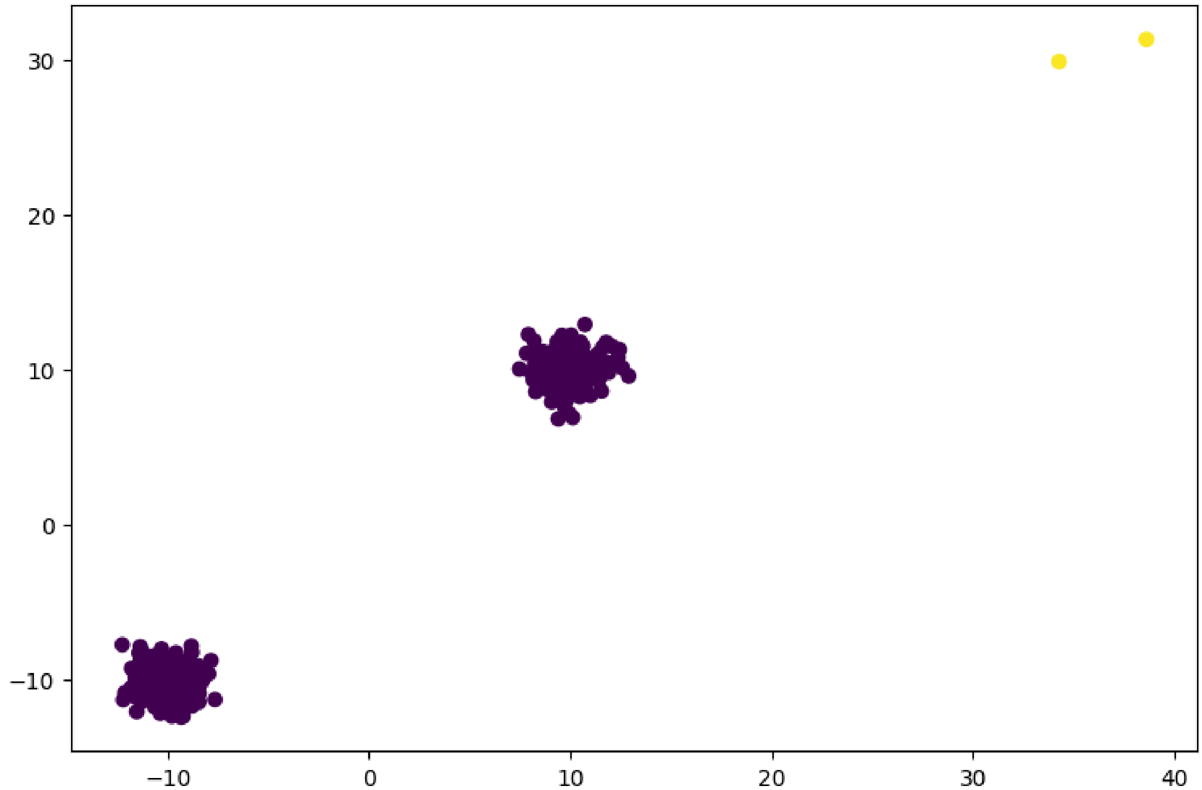
Vemos que k-medias continúa separando los grupos:

In [10]:
```
# Create a scatter plot of x and y data with outliers grouped using k-means
plt.figure(figsize=(9, 6))
plt.scatter(sample_1['x'], sample_1['y'], c = labels)
plt.scatter(kmeans.cluster_centers_[:, 0], kmeans.cluster_centers_[:, 1],c='red',ma
plt.show()
```



Sin embargo, agrupamiento aglomerativo clasifica por un lado los outliers y por otro los datos originales.

In [11]:
```
# Create a scatter plot of x and y data with outliers grouped using hierarchical cl
plt.figure(figsize=(9, 6))
plt.scatter(sample_1['x'],sample_1['y'], c=h_cluster_id)
plt.show()
```



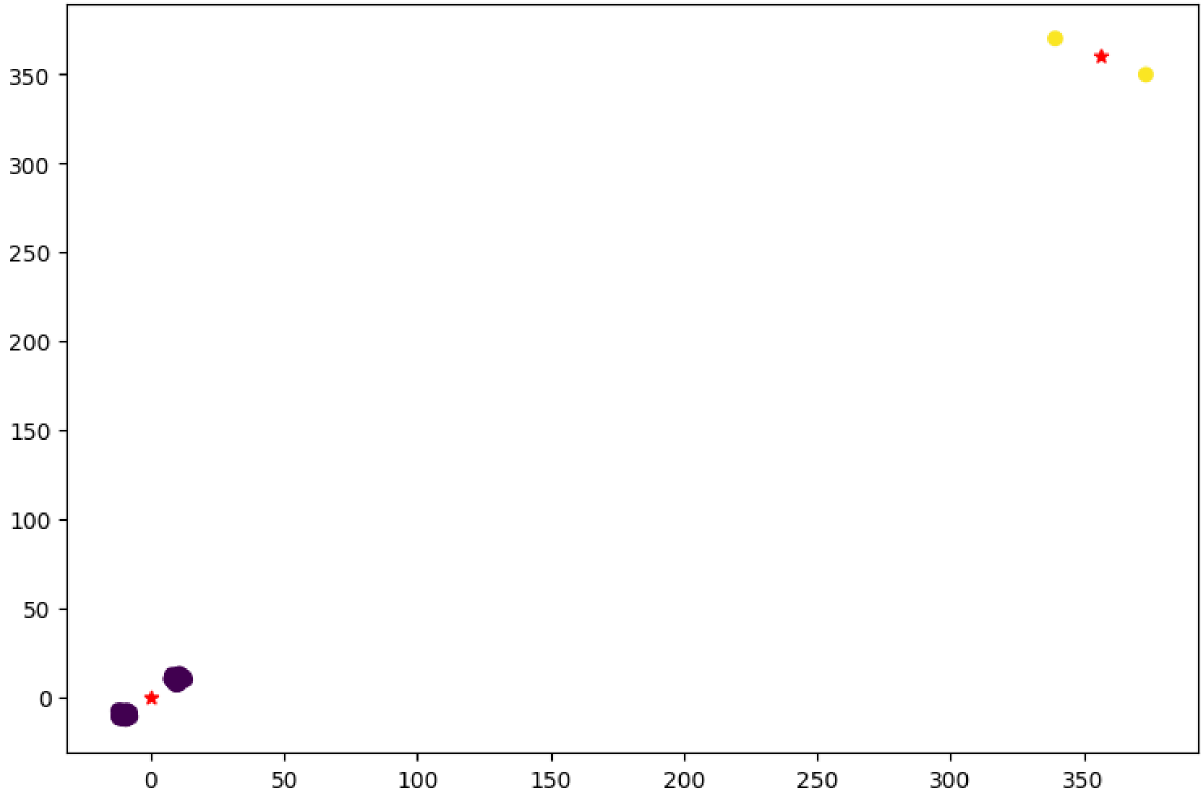
Veamos ahora que esto no significa que k-medias sea infalible. Incrementemos la distancia de los grupos a los outliers:

In [12]:
```
# Add outliers at the end of the dataset

theta = np.random.normal(np.pi/4,np.pi/16,2)
r = np.random.normal(500,5,2)

outlier_data = pd.DataFrame({'x': r*np.cos(theta),
                             'y': r*np.sin(theta)})

# Append the outlier to the original dataframe
sample_1 = pd.concat([data, outlier_data], ignore_index=True)
```

In [13]:
```
# Create an instance of KMeans with n_clusters=2 to divide the data into 2 clusters
kmeans = KMeans(n_clusters=2)

# Fit the model to the sample_1 dataset and predict labels for each point in the da
labels = kmeans.fit_predict(sample_1)

# Perform hierarchical clustering on the sample_1 dataset using 'complete' linkage
linkage_data_1 = linkage(sample_1, method='complete', metric='euclidean')

# Use cut_tree to determine which cluster each point belongs to based on the hierar
h_cluster_id = cut_tree(linkage_data_1, n_clusters=2)
```

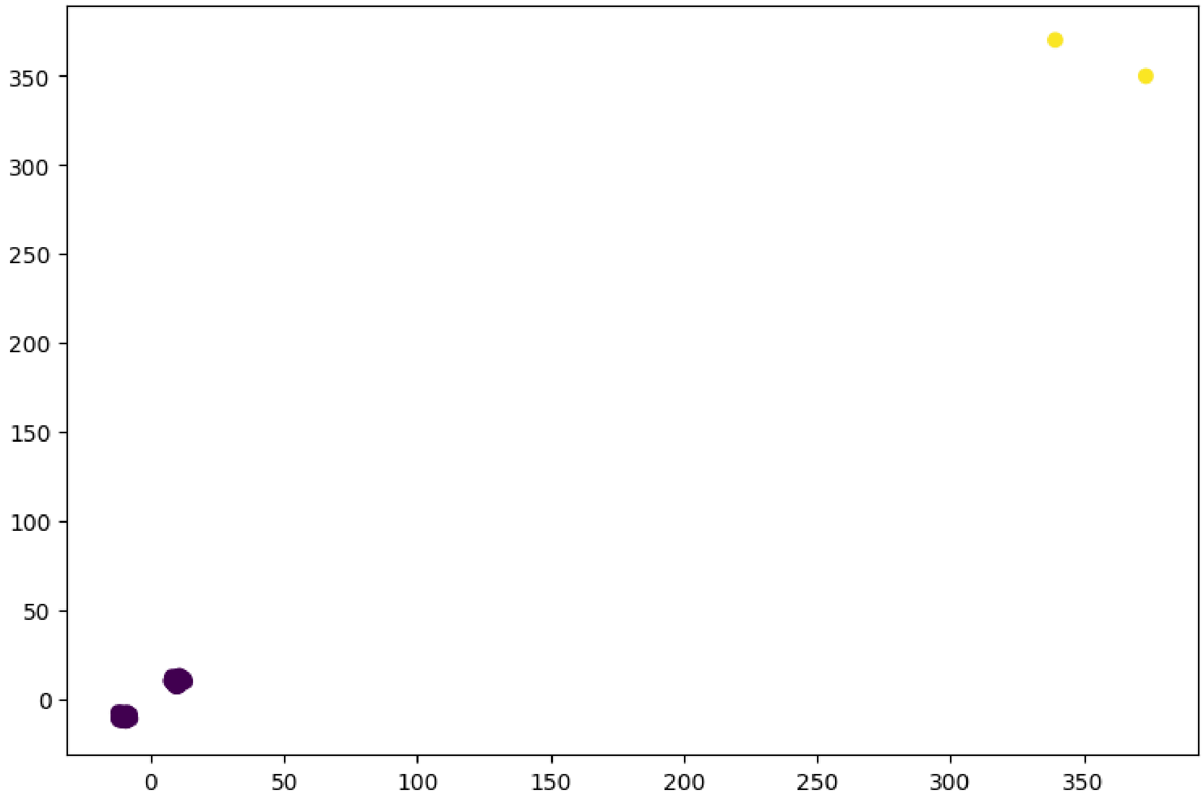
En este caso, k-medias falla:

In [14]:
```
# Create a scatter plot of x and y data with outliers grouped using k-means
plt.figure(figsize=(9, 6))
plt.scatter(sample_1['x'], sample_1['y'], c = labels)
plt.scatter(kmeans.cluster_centers_[:, 0], kmeans.cluster_centers_[:, 1],c='red',ma
plt.show()
```



Al igual que agrupamiento aglomerativo:

In [15]:
```
# Create a scatter plot of x and y data with outliers grouped using hierarchical cl
plt.figure(figsize=(9, 6))
plt.scatter(sample_1['x'],sample_1['y'], c=h_cluster_id)
plt.show()
```



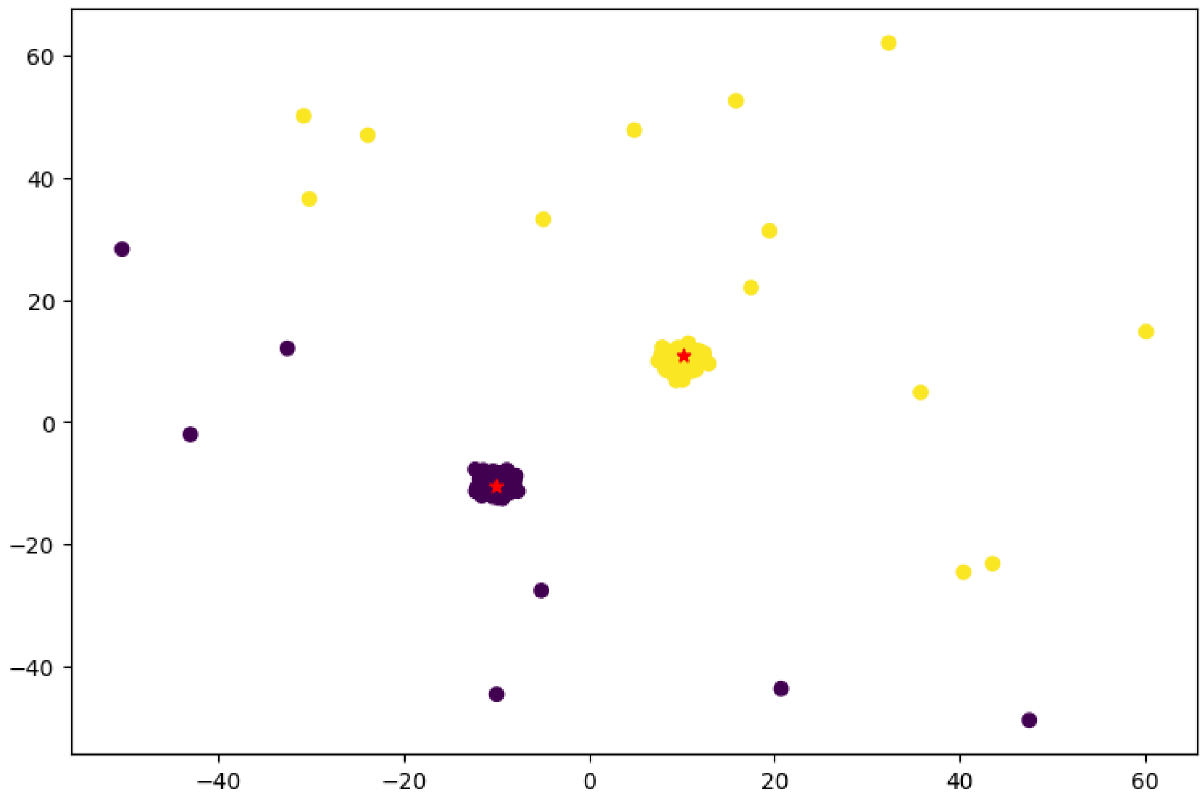
A continuación presentamos otro ejemplo donde k-medias clasifica correctamente y agrupamiento jerárquico no:

In [16]:
```
# Create the outlier data
theta = np.random.normal(0, np.pi, 20)  # Random angle
r = np.random.normal(50, 10, 20)  # Random radius (large to create an outlier)

new_data = pd.DataFrame({
    'x': r * np.cos(theta),  # Convert polar to Cartesian coordinates
    'y': r * np.sin(theta)
})

sample_2 = pd.concat([data, new_data], ignore_index=True)
```

In [17]:
```
# Create a KMeans model with 2 clusters
kmeans = KMeans(n_clusters=2)
# Fit the model to the sample data and get the cluster labels
labels = kmeans.fit_predict(sample_2)

# Create a linkage matrix using the average method and Euclidean distance
linkage_data_2 = linkage(sample_2, method='average', metric='euclidean')

# Use cut_tree to assign hierarchical clustering labels to each observation
h_cluster_id = cut_tree(linkage_data_2, n_clusters=2)
```

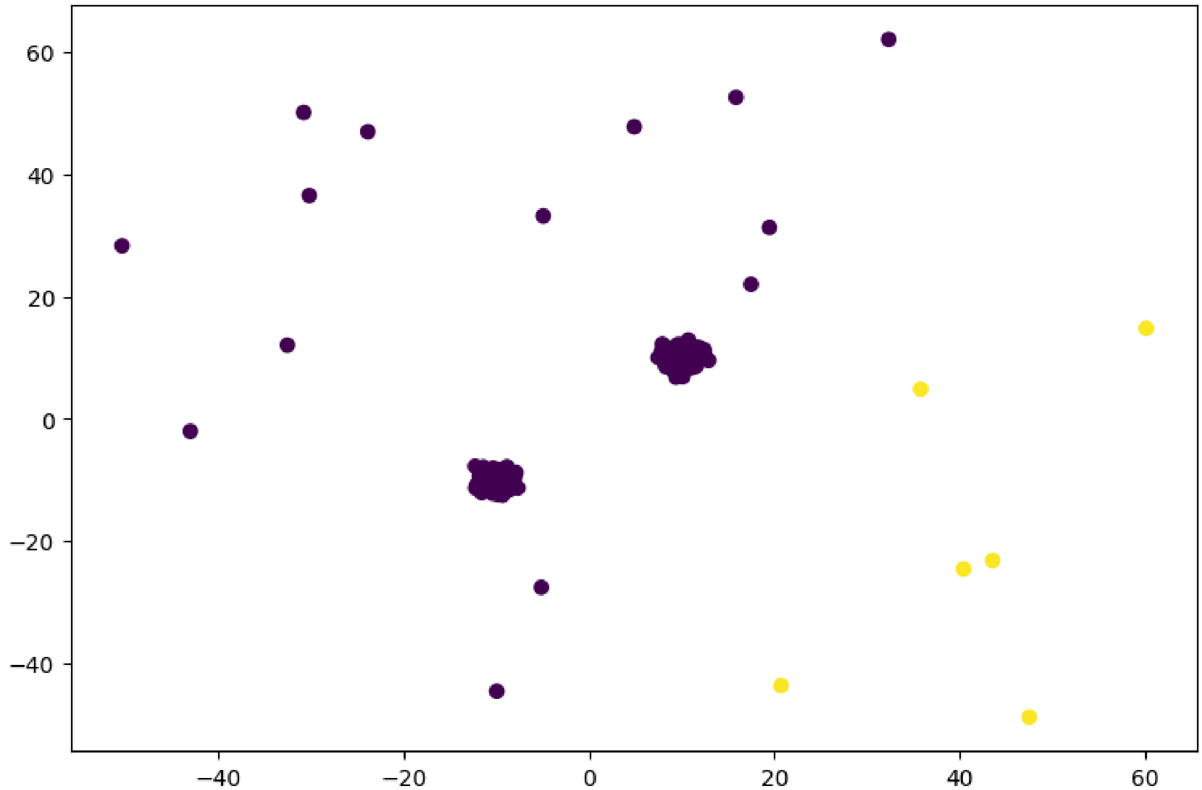
In [18]:
```
# Create a scatter plot of x and y data with outliers grouped using k-means
plt.figure(figsize=(9, 6))
plt.scatter(sample_2['x'],sample_2['y'], c=labels)
```

```
plt.scatter(kmeans.cluster_centers_[:, 0], kmeans.cluster_centers_[:, 1],c='red',ma
plt.show()
```



In [19]:

```
# Create a scatter plot of x and y data with outliers grouped using hierarchical cl
plt.figure(figsize=(9, 6))
plt.scatter(sample_2['x'],sample_2['y'], c=h_cluster_id)
plt.show()
```



Parece que k-medias falla cuando los datos atípicos modifican la media del cluster más cercano, lo que requiere una gran cantidad de datos atípicos o datos con valores muy atípicos para un conjunto de datos de tamaño mediano o grande.

Por otro lado, se requiere que la distancia entre los datos atípicos y los clusters sea mayor que la distancia entre dos clusters, sin importar cuál distancia estemos tomando(single, average o complete linkage).

Pregunta 3

- Supongamos que en agrupamiento jerárquico aplicamos una función monótona creciente a las distancias entre las observaciones que usamos como punto de partida. Por ejemplo, usamos $d^2_{i;j}$ en lugar de $d_{i;j}$. Discute: ¿van a cambiar los resultados de single, average y complete linkage?

Una función monótona creciente no debe afectar a los resultados para single y complete linkages, simplemente puede que en el dendograma, las distancias de corte resulten más cercanas o lejanas. Primero, veamos que para el single linkage:

$$D(A, B) = \min_{a\in A, b\in B} d(a, b)$$
$$D(A, B) = \min_{a\in A, b\in B} d(a, b) \leq \min_{x\in X, y\in Y} d(x, y) = D(X, Y)$$

Para cualquier otro agrupamiento X, Y. Una vez que f es monótona creciente, preserva la desigualdad.

$$\min_{a\in A, b\in B} f(d(a,b)) \leq \min_{x\in X, y\in Y} f(d(x,y))$$
$$D_f(A,B) \leq D_f(X,Y)$$

Para complete linkage,

$$D(A,B) = \max_{a\in A, b\in B} d(a,b)$$
$$D(A,B) = \max_{a\in A, b\in B} d(a,b) \leq \max_{x\in X, y\in Y} d(x,y) = D(X,Y)$$

Para cualquier otro agrupamiento X, Y. Una vez que f es monótona creciente, preserva la desigualdad.

$$\max_{a\in A, b\in B} f(d(a,b)) \leq \max_{x\in X, y\in Y} f(d(x,y))$$
$$D_f(A,B) \leq D_f(X,Y)$$

Si tomamos el mismo razonamiento para average linkage:

$$D(A,B) = \frac{1}{|A||B|}\sum_{a\in A}\sum_{b\in B} d(a,b) \leq \frac{1}{|X||Y|}\sum_{x\in X}\sum_{y\in Y} d(x,y) = D(X,Y)$$

Podemos asegurar:

$$f\left(\frac{1}{|A||B|}\sum_{a\in A}\sum_{b\in B} d(a,b)\right) \leq f\left(\frac{1}{|X||Y|}\sum_{x\in X}\sum_{y\in Y} d(x,y)\right)$$

Sin embargo no podemos asegurar que la suma de las nuevas distancias preserve la desigualdad.

A pesar de esto, no he encontrado un ejemplo en el que no se preserven las desigualdades.

Pregunta 4

Supongamos que para un problema de clasificación binaria, se construye un clasificador donde se permite, además de regresar como predición 0 y 1, también abstenerse.

El costo de predecir 1 si la verdadera categoria es 0, es 1 peso. El costo de predecir 0 si la verdadera categoria es 1, también es 1 peso. El costo de abstenerse es θ, una constante dada de antemano: $0 < \theta < \frac{1}{2}$.

Calcula el clasificador Bayesiano óptimo en función de θ y $\mathbb{P}(Y = 1 \mid X = x)$.

Para encontrar el clasificador Bayesiano óptimo en función de θ y $p := \mathbb{P}(Y = 1 \mid X = x)$, debemos minimizar:

$$\sum_x \mathbb{E}\left[L(Y, \hat{Y}(x)) \mid X = x\right] \mathbb{P}(X = x)$$

Nótese que

$$\mathbb{E}\left[L(Y, \hat{Y}(x)) \mid X = x\right] = \mathbb{P}(Y = 1 \mid X = x) = p$$

Mientras que en el caso que $\hat{Y}(x) = 1$

$$\mathbb{E}\left[L(Y, \hat{Y}(x)) \mid X = x\right] = \mathbb{P}(Y = 0 \mid X = x) = 1 - p$$

Finalmente, en el caso de abstenerse,

$$\mathbb{E}\left[L(Y, \hat{Y}(x)) \mid X = x\right] = \theta$$

Entonces, el clasificador bayesiano óptimo es:

$$ \hat{Y}(x) = \begin{cases} 0, & p \leq \min\{1 - p, \theta\} \\ 1, & 1 - p \leq \min\{p, \theta\} \\ \text{abstenerse}, & \theta < \min\{p, 1 - p\} \end{cases}$$

Pregunta 5

Supongamos que X, Y sean v.a. discretas:

	$X = 0$	$X = 1$	$X = 2$
$Y = 0$	0.1	0.3	0.25
$Y = 1$	0.25	0.05	0.05

Si $L(0, 1) = L(1, 0)$, calcula el clasificador Bayesiano óptimo de Y usando X.

Si $L(0, 1) = 2L(1, 0)$ calcula el clasificador Bayesiano óptimo y su error (promedio) correspondiente.

Primero, supongamos que $L(0, 1) = L(1, 0)$. Recordemos que, en este caso, el clasificador bayesiano óptimo para este problema está dado por:

$$\mathbf{1}\left(\frac{\mathbb{P}(Y = 1 \mid X = x)}{\mathbb{P}(Y = 0 \mid X = x)} > 1\right)$$

De forma que el clasificador bayesiano óptimo para el problema es:

$$\hat{Y}(x) = \begin{cases} 1, & x = 0 \\ 0, & x = 1 \\ 0, & x = 2 \end{cases}$$

Ahora, si $L(0, 1) = 2L(1, 0)$, el clasificador bayesiano óptimo está dado por:

$$\mathbf{1}\left(\frac{\mathbb{P}(Y=1 \mid X=x)}{\mathbb{P}(Y=0 \mid X=x)} > 2\right)$$

El clasificador bayesiano óptimo es el mismo que antes:

$$\hat{Y}(x) = \begin{cases} 1, & x=0 \\ 0, & x=1 \\ 0, & x=2 \end{cases}$$

El error promedio esperado en este caso es:

$$\mathbb{E}\left[L(Y, \hat{Y}(x))\right] = \sum_x \mathbb{E}\left[L(Y, \hat{Y}(x)) \mid X=x\right] \mathbb{P}($$

$$\mathbb{E}\left[L(Y, \hat{Y}(x))\right] = L(0,1)\frac{0.1}{\mathbb{P}(X=0)}\mathbb{P}(X=0) + L(1,0)\frac{0.05}{\mathbb{P}(X=1)}\mathbb{P}(X=1) + L(1,0)\frac{}{\mathbb{P}(}$$

Pregunta 6

Haz un análisis de agrupamiento para los datos sat.csv. Se trata de los resultados de pruebas psicométricas de 700 personas.

Importamos la base de datos, quitamos los datos faltantes y normalizamos las variables:

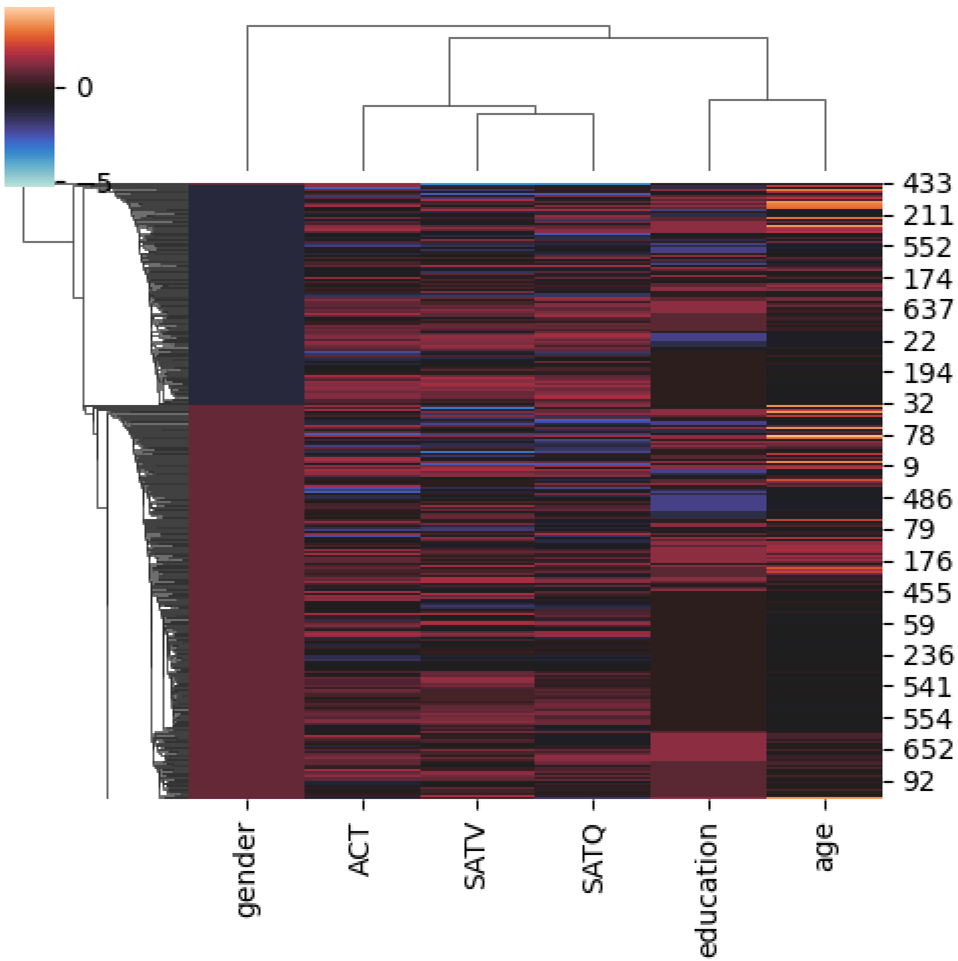
In [20]:
```
# Load the 'sat.csv' file into a DataFrame, using the first column as the index
sat = pd.read_csv('sat.csv', index_col=0)

# Drop any rows with missing values from the DataFrame
sat = sat.dropna()

# Create an instance of the StandardScaler class
scaler = StandardScaler()

# Extract all numeric columns from the 'sat' DataFrame
numeric_columns = sat.columns

# Fit and transform the scaled data using the standard scaler
scaled_data = scaler.fit_transform(sat)

# Convert the scaled data back to a DataFrame with appropriate column names
sat = pd.DataFrame(scaled_data, columns=numeric_columns)
```

Para el análisis de agrupamiento, tomaremos la matriz de distancias:

In [21]:
```
# Compute row-wise distances between points in 'sat' matrix using Euclidean metric
row_distances = pdist(sat, metric='euclidean')

# Compute column-wise distances (correlation) between columns in 'sat' matrix
col_distances = pdist(sat.T, metric='correlation')
```

Hacemos el análisis de agrupamiento y vemos el clustermap:

In [22]:
```
# Define the linkage method for the hierarchical clustering algorithm
link_fun = 'single'

# Perform hierarchical clustering on rows using the defined linkage method
row_link = linkage(row_distances, method = link_fun)

# Perform hierarchical clustering on columns using the defined linkage method
col_link = linkage(col_distances, method = link_fun)

# Create a clustermap visualization of the satellite data
g = sns.clustermap(sat, row_linkage=row_link, col_linkage=col_link, figsize=(5,5),
```



Notamos que el mayor agrupamiento lo hace por el género, después por la educación y la edad, y finalmente por los resultados psicométricos. Si bien, esto no es muy informativo, aprendemos que podemos clasificar las variables en tres grupos: resultados de la prueba, edad y educación, y género.

Ahora, hagámos un análisis de componentes principales para ver si podemos obtener un mejor agrupamiento:

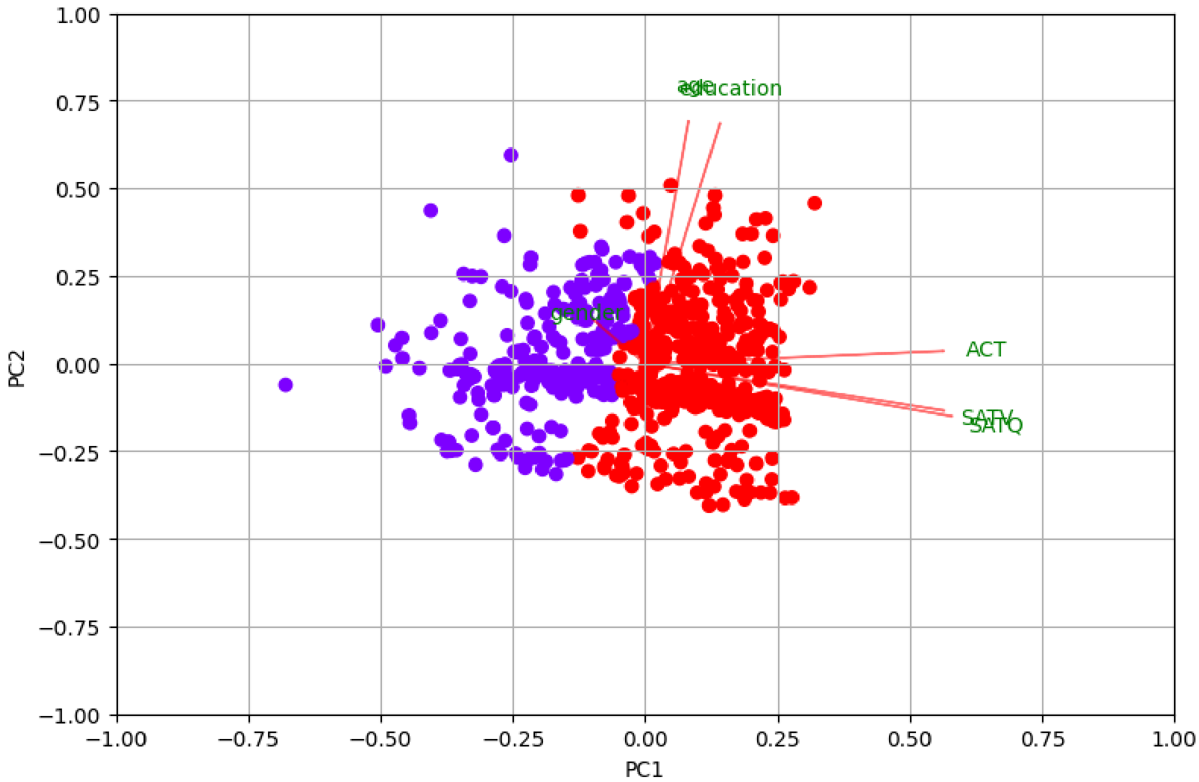
In [23]:
```
# Perform PCA to reduce data to 2 dimensions
pca = PCA(2)
pca_data = pca.fit_transform(sat)
```

```
# Create a hierarchical clustering linkage matrix using complete linkage method
pca_link = linkage(pca_data[:,:2], method = 'complete')

# Use the linkage matrix to create cluster labels
pca_labels = cut_tree(pca_link, n_clusters=2)
```

Modificamos la función my_plot proporcionada para que pueda mostrar los puntos con colores distintos dependiendo del agrupamiento.

In [24]:
```
def myplot(score,coeff,var_labels=None, points_labels=None):
    # xs and ys are the first two principal components of the score matrix
    xs = score[:,0]
    ys = score[:,1]

    # n is the number of variables in the original data set
    n = coeff.shape[0]

    # scalex and scaley are used to normalize the scores so they fit within a unit
    scalex = 1.0/(xs.max() - xs.min())
    scaley = 1.0/(ys.max() - ys.min())

    # Initialize the figure
    plt.figure(figsize=(9, 6))

    # If no points_labels are provided, scatter plot all the scores using different
    if points_labels is None:
        plt.scatter(xs * scalex, ys * scaley, cmap='rainbow')
    else:
        # If points_labels are provided, scatter plot the scores using different co
        plt.scatter(xs * scalex, ys * scaley, c=points_labels, cmap='rainbow')

    # Loop through each variable in the original data set and draw an arrow pointin
    for i in range(n):
        plt.arrow(0, 0, coeff[i,0], coeff[i,1], color = 'r',alpha = 0.5)

        # If no var_labels are provided, label each principal component with the va
        if var_labels is None:
            plt.text(coeff[i,0]* 1.15, coeff[i,1] * 1.15, "Var"+str(i+1), color = '
        else:
            # If var_labels are provided, label each principal component with the v
            plt.text(coeff[i,0]* 1.15, coeff[i,1] * 1.15, var_labels[i], color = 'g

    # Set the x and y limits of the plot to be within a unit square for better visu
    plt.xlim(-1,1)
    plt.ylim(-1,1)

    # Label the axes with "PC{}".format(1) and "PC{}".format(2)
    plt.xlabel("PC{}".format(1))
    plt.ylabel("PC{}".format(2))

    # Show a grid on the plot for better readability
    plt.grid()
```

In [25]:
```
myplot(pca_data[:,0:2], np.transpose(pca.components_[0:2, :]), var_labels = sat.col
```



Vemos que, como era de esperarse, el análisis PCA arroja la variable de mayor varianza a los resultados de las pruebas SAT, mientras que la segunda variable de mayor varianza se relaciona con la edad y los años de educación. El agrupamiento jerárquico agrupa los datos por el resultado en las pruebas SAT: en general, los primeros tienen bajo rendimiento y el resto alto rendimiento, aunque algunos de mayor educación también se encuentran en el segundo grupo a pesar de su rendimiento menor que el promedio.