Tema 06. Aprendizaje no supervisado y minería de datos

Autor: Ismael Sagredo Olivenza

6.1 Introducción

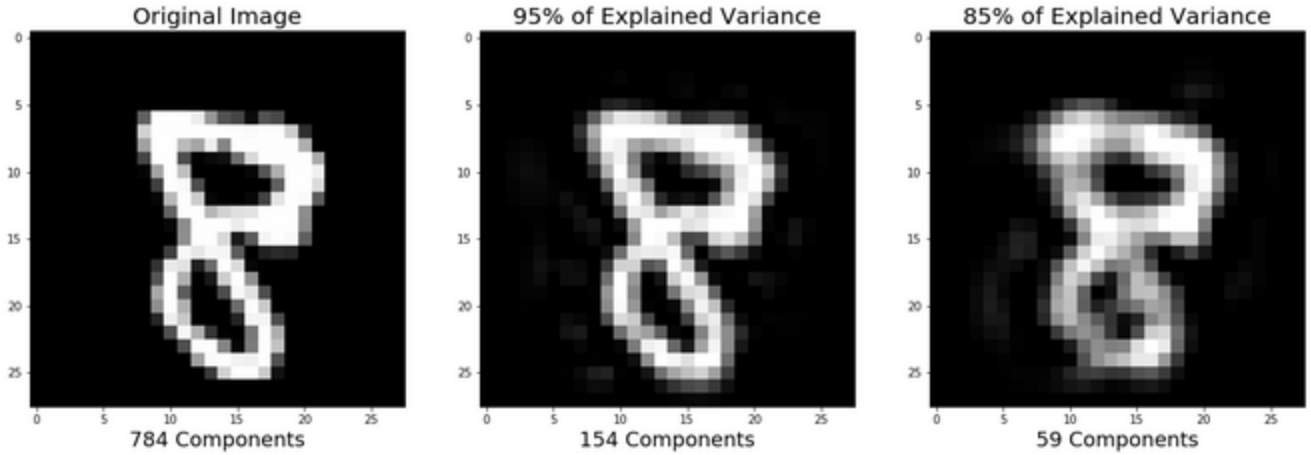
No siempre se conocen las clases o valores esperados de los datos. Si no se conocen, no podemos hacer aprendizaje supervisado y tenemos que recurrir al aprendizaje no supervisado.

También se aplica aprendizaje no supervisado cuando queremos extraer las características más relevantes de un conjunto de datos.

Comenzaremos con algunas técnicas básicas de reducción de dimensionalidad y continuaremos con los algoritmos de agrupamiento clásicos.

6.2 Reducción de dimensionalidad

- Datos con alta dimensionalidad (gran número de atributos) son difíciles de interpretar y procesar.
- Datos con una baja dimensionaldiad son más fáciles de procesar.



Fuente: https://www.codementor.io/@mgalarny/pca-using-python-scikit-learn-pandas-ensfh3huz

6.2.1 Selección de atributos

Podemos seleccionar los atributos de forma manual, pero existen diferentes algoritmos que podemos utilizar para hacerlo de forma automática.

Hay diferentes métodos, unos basados en puntuar el valor del atributo individualmente: **Ranking**. Otros crean subconjuntos de atributos relevantes: **Subset selection**

- **Metodos filter ranking**:
  - Information Gain (Lo vimos en árboles de decisión)
  - Chi-square: mide la diferencia entre los valores observados y los valores esperados

- **Subset selection**:
  - **Correlation Feature Selection (CFS)**: evalúa un subconjunto de atributos calculando la media de las correlaciones de cada atributo con la clase, las correlaciones por redundancias entre atributos.

$$Merit(s) = \frac{k \cdot rcf}{\sqrt{k + k \cdot (k-1) \cdot rff}}$$

Donde: rcf es la correlacion media entre clase y feature y rff es la correlación media entre los atributos.

- **Subset selection**:
  - **Wrapper**: evalúan un subconjunto de atributos ejecutando un algoritmo concreto, sobre un conjunto de entrenamiento. El valor del subconjunto es el porcentaje de aciertos obtenido con esos atributos.

Tanto CFS como Wrapper necesitan ejecutarse usando un algoritmos de búsqueda que nos determine que subconjunto es el que genera un mejor rendimiento

Podemos elegir difierentes tipos de algoritmos de búsqueda:

- BestFirst: Mejor primero (lento)
- ExhaustiveSearch: Búsqueda exhaustiva (muy lento)
- GeneticSearch: Búsqueda genética (rápido)
- GreedyStepWise: Escalada (muy rápido)
  - Selección hacia delante
  - Selección hacia detrás
- RankSearch: Primero ordena los atributos y después construye el subconjunto de manera incremental, en dirección del mejor al peor, hasta que no merece la pena añadir nuevos atributos (rápido)

- **RELIEF**:

Es realmente un algoritmo de filter Ranking, pero tiene ventajas de subset selection y Wrapper: es capaz de detectar interacciones entre atributos,
siendo muy rápido (pero no detecta atributos redundantes)
- Ventajas: detecta atributos relevantes e incluso aquellos que funcionan bien en grupos
- Desventajas: no detecta atributos redundantes

Algoritmo RELIEF:

- Repetir muchas veces:
- Selecciona aleatoriamente una instancia (dato) x
- Selecciona la instancia más cercana de la misma clase (hit) y la instancia más cercana de la otra clase (miss)
- Incrementa el peso de aquellos atributos que tienen el mismo valor para la instancia hit y distinto valor para la instancia miss
- $Wi <= Wi – (xi – hiti)2 + (xi - missi)2$

Feature selection in SKLearn

- Removing features with low variance (VarianceThreshold): elimina todas las características cuya varianza no alcanza algún umbral.
- Univariate feature selection: consiste en seleccionar las mejores características basándose en pruebas estadísticas univariantes (analiza solo una variable).
  - SelectKBest: elimina todas las características excepto las k de mayor puntuación
  - SelectPercentile: elimina todas las características excepto el porcentaje de puntuación más alto especificado por el usuario
  - SelectFpr (False positive Rate), SelectFdr (false discovery rate) o family wise error SelectFwe.

- Recursive feature elimination: Given an external estimator that assigns weights to features. The goal is to select features by recursively considering smaller and smaller sets of features.
- Feature selection using SelectFromModel: is a meta-transformer that can be used alongside any estimator that assigns importance to each feature through a specific attribute
  - L1-based feature selection
  - Tree-based feature selection
- Sequential Feature Selection: Forward-SFS is a greedy procedure that iteratively finds the best new feature to add to the set of selected features. Backward-SFS follows the same idea but works in the opposite direction

Para saber más, consultad esta URL:

https://scikit-learn.org/stable/modules/feature_selection.html

```
from sklearn.feature_selection import SelectKBest, chi2
select_k_best = SelectKBest(score_func=chi2, k=2)
X_train_k_best = select_k_best.fit_transform(X_train, y_train)
print("Selected features:", X_train.columns[select_k_best.get_support()])
# ------------------------------------------------------
from sklearn.feature_selection import RFE
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
model = LogisticRegression()
rfe = RFE(model, n_features_to_select=2)
X_train_rfe = rfe.fit_transform(X_train, y_train)
print("Selected features:", X_train.columns[rfe.get_support()])
```

Basados en árboles

Como vimos en el tema 5, los arboles de decisión utilizan la ganancia para ordenar la importancia de los atributos a la hora de seleccionar cual es el primero que coloca en la lista.

```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier

# Train random forest and get feature importances
model = RandomForestClassifier()
model.fit(X_train, y_train)
importances = model.feature_importances_
# Display feature importances
feature_importances = pd.Series(importances, index=X_train.columns)
print(feature_importances.sort_values(ascending=False))
```

6.2.2 Principal Component Analysis (PCA)

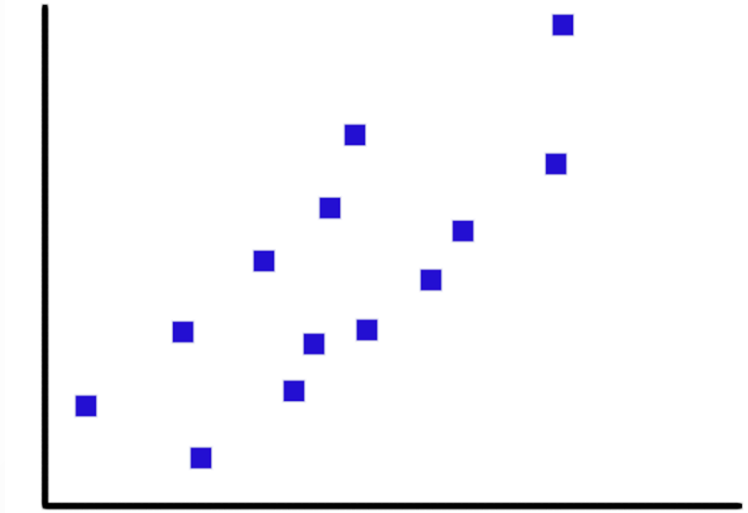
PCA nos permite reducir la dimensionalidad de los datos de entrada sin perder toda la información.

PCA transforma linealmente **las variables correlacionadas** en un número menor de **variables no correlacionadas**. Esto se hace proyectando (producto punto) los datos originales en el espacio reducido utilizando la descomposición en valores y vectores propios de la matriz de covarianza/correlación

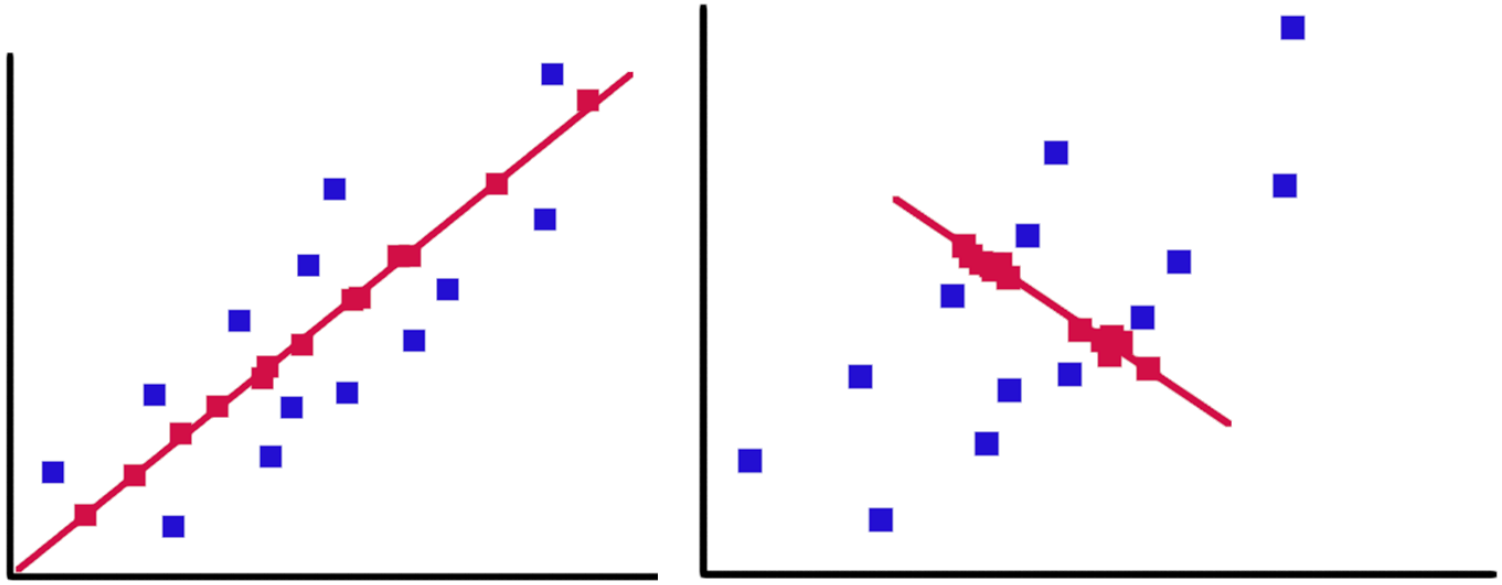
- PCA proyecta la información a un espacio de dimensión menor.
- PCA es **efectivo cuando la correlación es alta**. Podemos mirar primero la correlación y después analizar si podría ser útil o no aplicar PCA.

IDEA: Encontrar una dirección (un vector) sobre la que proyectar los datos para minimizar el error de proyección.
Para reducir de n dimensiones a k dimensiones debemos encontrar K vectores, sobre los que proyectar los datos para
para minimizar el error de proyección.

Veamos un ejemplo: Vamos a imaginar un problema de 2 dimensiones por simplicidad que queremos convertir en 1 dimensión



Ahora queremos proyectar estos puntos a 1 dimensión. ¿Cómo lo hacemos? Podemos hacerlo de dos formas:



La primera gráfica tiene mucha más información que la segunda (mayor varianza)

PCA debe obtener la mayor varianza de los datos proyectados, manteniendo las variables implicadas como independientes entre sí.

Existen dos formas de calcularlo:

- Método basado en la matriz de correlación: datos dimensionalmente no homogéneos
- Método basado en la matriz de covarianzas: cuando los datos son dimensionalmente homogéneos

6.2.3 Método basado en correlaciones

El método parte de la matriz de correlaciones. Para cada uno de los n individuo del conjunto de entrenamiento con m variables de entrada construimos la matriz de correlación como sigue:

$$R = |r_{ij}| = \frac{cov(F_i, F_j)}{\sqrt{var(F_i) \cdot var(F_j)}}$$

La matriz es simétrica y por tanto diagonalizable. Los valores propios de la diagonal deben sumar m. Estos m valores propios son los pesos y cada uno de los principales puede ser descrito como una combinación lineal de los otros

6.2.4 Método basado en las covarianzas

El objetivo es transformar un conjunto dado de datos de dimensión n x m a otro conjunto de datos de menor dimensión n x l con la menor perdida de información útil posible utilizando para ello la matriz de covarianza ($l \leq min(n, m)$)

Escalar los datos: restándoles la media y dividiendo por su desviación típica. Luego calculamos la matriz de covarianzas:

$$cov(X, Y) = \frac{\sum (X_i - \hat{X})(Y_i - \hat{Y})}{n}$$

La matriz se calcula para toda pareja de atributos válida.

Después calculamos los valores propios y vectores propios (eigenvectors, eigenvalues). Estos se calculan usando los multiplicadores de Lagrange para obtener los valores máximos de los componentes seleccionados.

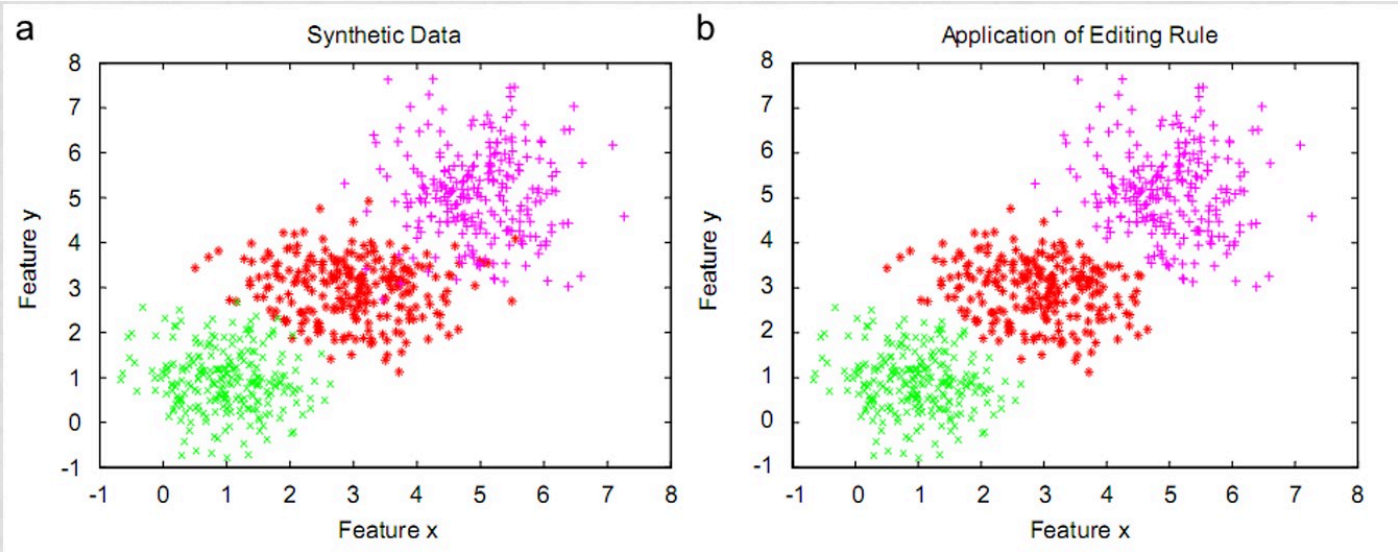
Después, derivar las características de los componentes principales tomando dot product del vector propio y las columnas estandarizadas

```
X_standard = standar(X)
df_cov = X_standard.cov() # dataframe.cov()

from numpy.linalg import eig
eigvalues, eigvectors = eig(df_cov)

X_pca = np.dot(X_standard, eigvectors)
```

6.2.5 Selección de instancias

Nos permite eliminar instancias superfluas (que no aportan información) o engañosas (ruido)

- Wilson editing: (Superfluas, funciona bien si no hay ruido): elimina instancia si es clasificada incorrectamente por sus k vecinos



- Condensed Nearest Neighbor (CNN): Busca superfluas.
  Va recorriendo las instancias, y si esa instancia ya está bien clasificada con las que ya hay guardadas, no la guarda. Sólo guarda aquellas que no se clasifican bien con las ya existentes.
  (Podemos usar KNN como clasificador)
- Reduced Nearest Neighbor RNN: igual pero al reves, va eliminando instancias siempre que esto no afecte a la clasificación de ninguna otra instancia. Puede eliminar ruido en los datos.
- Otros algoritmos: RT3, Iterative case filtering (ICF).

6.2.6 Preprocesado de los datos

Los datos deben estar en la misma escala. Lo normal es normalizar restando por la media y dividiendo por la desviación típica.

Training set: $x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots, x^{(m)}$

Preprocessing (feature scaling/mean normalization):

$$\mu_j = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} x_j^{(i)}$$

Replace each $x_j^{(i)}$ with $x_j - \mu_j$

$$x_j^{(i)} \leftarrow \frac{x_j^{(i)} - \mu_j}{s_j}$$

6.2.7 SKLearn ya lo tenemos implementado.

```
from sklearn.decomposition import PCA
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.datasets import load_breast_cancer

data=load_breast_cancer()
df1=pd.DataFrame(data['data'],columns=data['feature_names'])

scaling=StandardScaler()

scaling.fit(df1)
Scaled_data=scaling.transform(df1)

principal=PCA(n_components=3)
principal.fit(Scaled_data)
x=principal.transform(Scaled_data)
```

6.2.8 Análisis del algoritmo:

- Presupone que los datos pueden ser proyectados usando una combinación lineal.
- Asume cierta correlación entre las características
- Se pierde información
- Se pierde interpretabilidad de los datos. Ahora los datos con los que se entrena el modelo de ML son atributos que están creados a partir de combinaciones lineales de los atributos originales.
- Problema si hay muchos casos atípicos (outlaiers)

6.2.9 Aplicaciones y malos usos

- Mejora el desempeño de los algoritmos de ML.
- Reducción el ruido (menos atributos y con más información)
- Mejora de visualización (más de tres atributos no puedo)

Malos usos:

- No es recomendable usarlo para prevenir el overfitting, mejor usar regularización.
- No usar PCA si sin usarlo se consiguen buenos resultados. Aplicarlo solo cuando sin aplicar los resultados no son los satisfactorios.

6.3 Técnicas de agrupamiento o Clustering

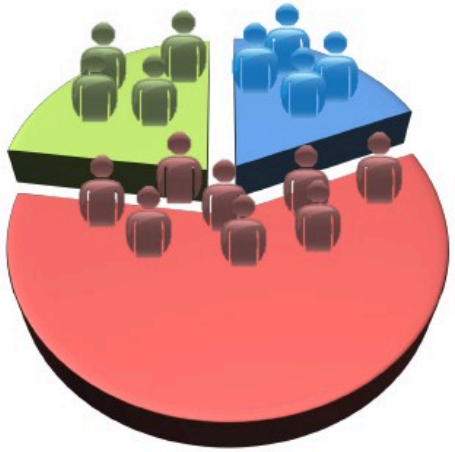
El objetivo es agrupar los n individuos de nuestro conjunto de datos en una serie de grupos de forma que:

- Los individuos del mismo grupo sean lo más similaresentre sí
- Los individuos de grupos diferentes sean lo más diferentes entre sí

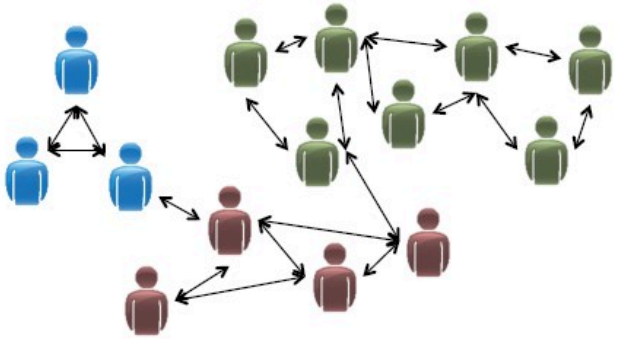
Estos grupos nos revelarán cierta estructura de los datos. Por lo que suele ser útil hacer clustering aunque sólo sea para analizarlos.

- Cuantos grupos puede y cuales son más numerosos
- Grupos más homogéneos o más dispersos, atípicos, etc.

Applications of clustering

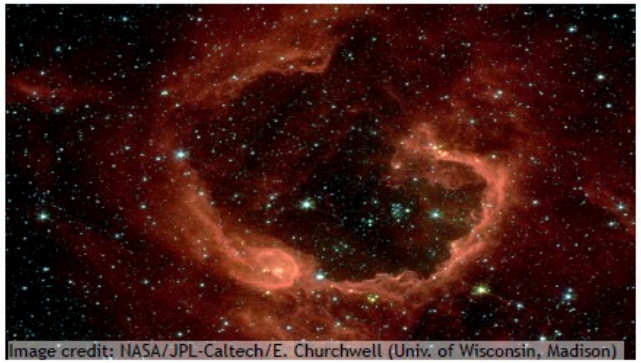


Market segmentation



Social network analysis

Organize computing clusters



Astronomical data analysis

6.4 Estrategia aglomerativa

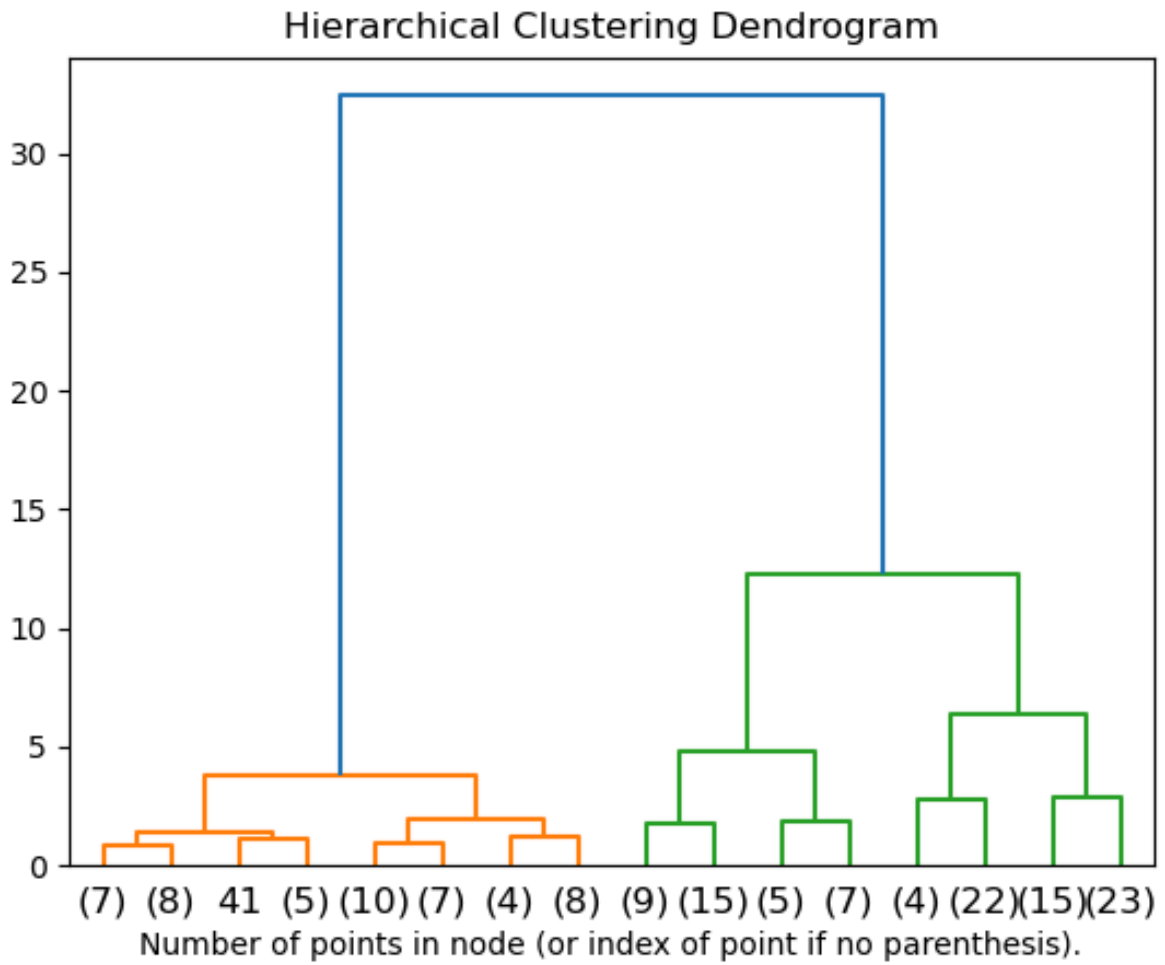
Este algoritmo inicialmente crea una clase por cada ejemplo de entrada. Después y siguiendo el criterio de similitud elegido, busca los dos conceptos más cercanos entre si y los agrupa en un concepto ficticio, sacando estos dos nodos de la lista y sustituyendolos por el nuevo concepto. Este nuevo nodo tendrá a los antiguos como hijos suyos.

el proceso se repite iterativamente hasta que no quedan más nodos que agrupar.

6.4.1 Algoritmo

```
function Agromeratica(E, similitud): nodo
E: ejemplos de entrenamiento
Para todo e de E
  nodos = crearNodo(e)
Mientras nodos.length < 1
  sim1, sim2 = similitud(nodos)
  nuevo = crearNodo()
  nuevo.hijos = {sim1, sim2}
  nodos = nodos - {sim1, sim2}
  nodos = nodos + nuevo
devolver nodos
```

6.4.2 Ejemplo de clustering: Dendograma



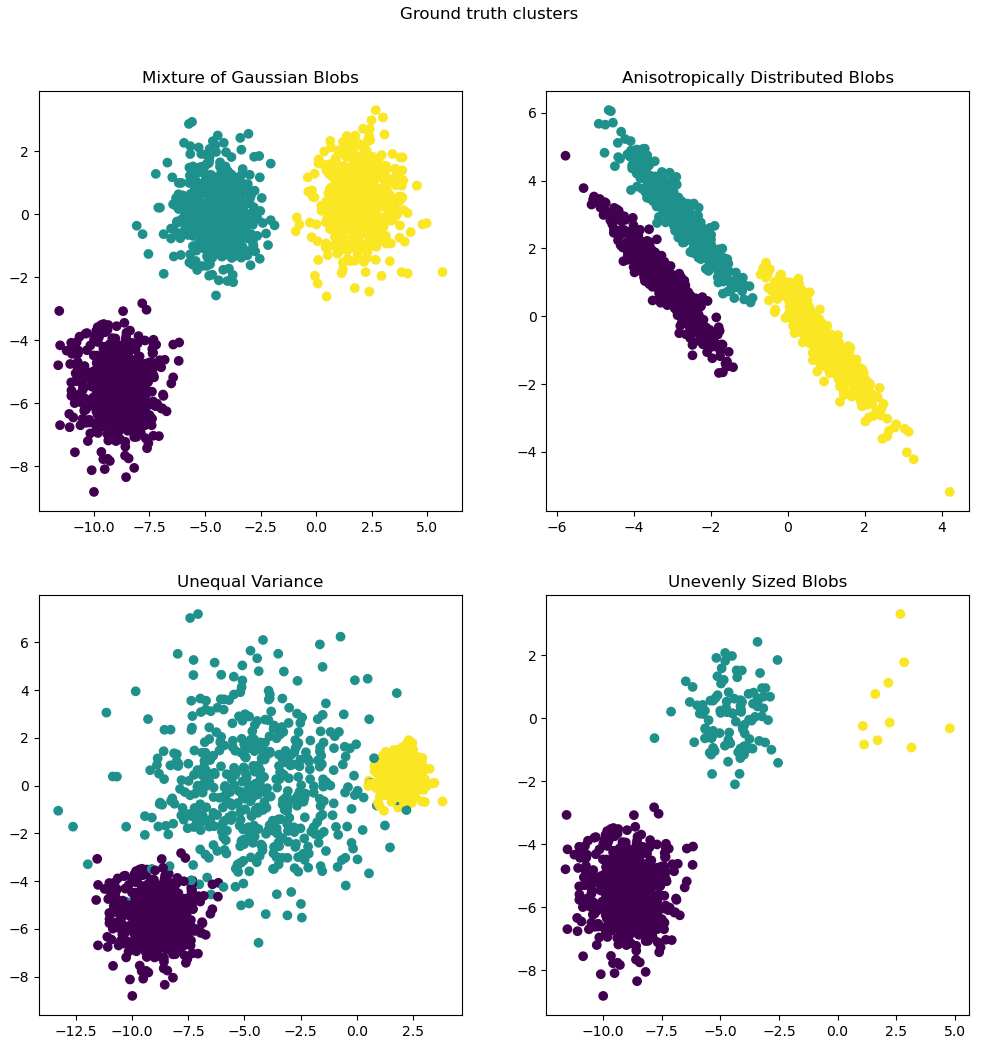
6.5 K-Means

Idea es máximizar la similitud entre los elementos de una clase y minimizar la similitud entre las diferentes clases. No crea jerarquías de clases si no clases de un único nivel.

El algoritmo elije un conjunto de k semillas, siendo k un parámetro dado por el usuario. Despues iterativamente va agrupando los ejemplos en las k clases y recalculando el valor de dicha semilla, como el centroide de dicha clase.

Debe existir un criterio de parada o convergencia que hace que el algoritmo se detenga. Un posible criterio puede ser si durante dos ciclos no cambia la clasificación de los ejemplos.

6.5.1 Ejemplo de clustering con K-means



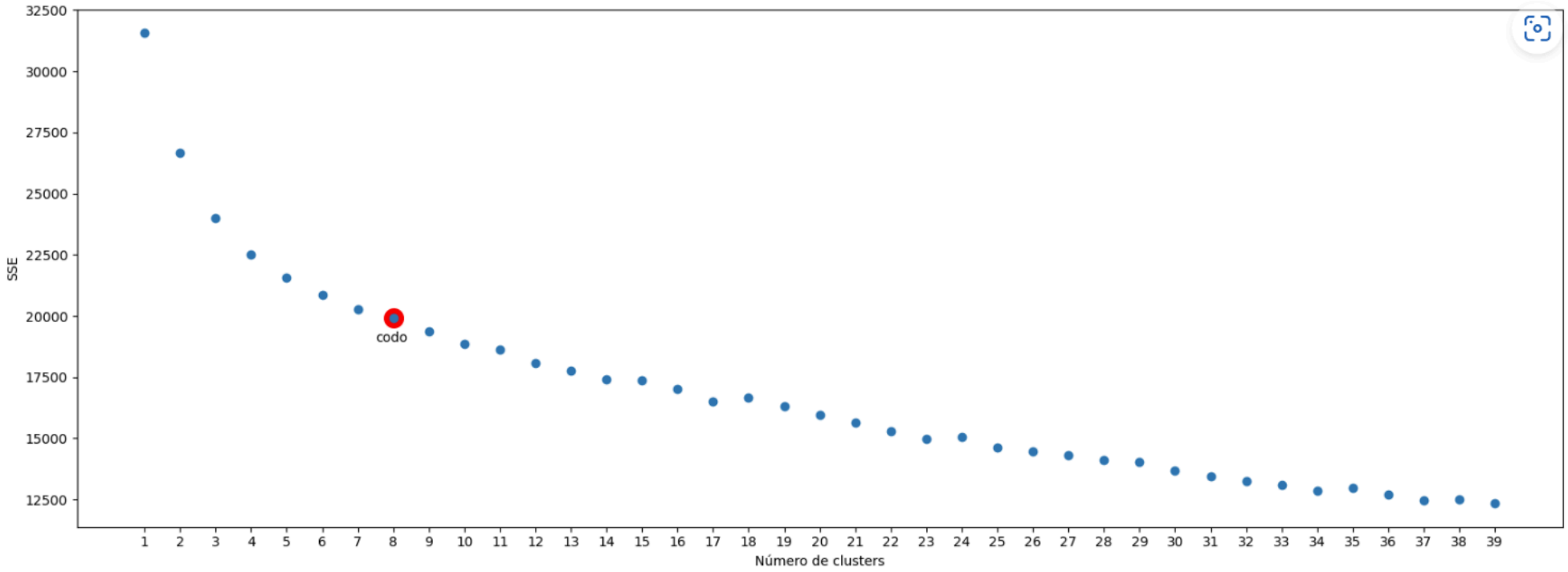
6.5.2 Algoritmo

```
function Kmeans(E, similitud, K, Convergencia): clases
E: ejemplos de entrenamiento
K: clases que se desean
Para todo k de K
  c = crearClase(k)
  clase.semilla = crearSemilla(c)
  clases = clases + c
Mientras no Convergencia(clases)
  Para cada e de E
    c = claseMassimilar(clases,e)
    c.ejemplos += e
  para cada c en C
    c.semilla = CalcCentroide(c.ejemplos)
devolver clases
```

6.5.3 Métodos para intuir el valor óptimo de K

No sabemos cuál es el valor óptimo de K que mejor agrupa. No sabemos cuantos grupos hay realmente y por tanto no podemos saber cual es el valor óptimo de k.

si k es más grande la distancia acumulada de los ejemplos de cada cluster a los centroides será siempre menor. Por lo que, lo que debemos intentar es encontrar el valor de k que produce un punto de inflexión en la curva. A esto se le denomina **técnica del Codo**. Y se puede hacer manualmente graficando la función de "inercia" de k-means por cada k elegido.



Pero normalmente hay librerias disponibles que nos lo permiten calcularlo.

```
from kneed import KneeLocator
kl = KneeLocator(range(1, 40), sse, curve="convex", direction="decreasing")
```

6.5.3.1 Coeficiente de Silhouette para medir el rendimiento

El coeficiente de Silhouette mide qué tan cerca está una muestra a las otras muestras de su cluster y qué tan lejos está con respecto a las muestras del cluster más cercano. Este coeficiente toma valores de [-1,1], -1 sería si los clusters están superpuestos, 0 si hay overlap y 1 que no se tocan.

El puntaje de Silhouette es el promedio de los coeficientes de Silhouette de todas las samples y se computa con la clase.

Valores bajos cercanos a 0 nos indica que la calidad de los clusters no es muy buena

6.5.3.2 Ejemplo en SKLearn

```
# importamos el puntaje de silhouette
from sklearn.metrics import silhouette_score

for k in range(2, 20):
    kkkmeans = KMeans(n_clusters=k)
    kkkmeans.fit(data)
    score = silhouette_score(data, kkkmeans.labels_)
    silhouette_coefficients.append(score)

fig, ax = plt.subplots(figsize = (24, 7))

ax.scatter(range(2, 20), silhouette_coefficients)
ax.set_xticks(range(2, 20))
ax.set_xlabel("Número de clusters")
ax.set_ylabel("Promedio coeficientes de Silhouette")
```

6.5.3.3 Se precisa de analisis del cientifico de datos

Normalmente el método del codo puede ayudarnos a ver por donde van los datos, pero en la mayoria de ocasiones, tener intuición y conocimiento del dominio ayuda a elegir el k óptimo.

en la mayoria de casos es el investigador el que debe analizar cuál es el k que mejor clasifica y más sentido tiene.

6.5.4 Ejemplo de clustering con todos los conceptos que hemos contado está disponible en el campus

- Usamos sklearn
- Utilizamos cluster jerárquico aglomerativo y k-means
- Detección del codo
- Metrica siluette.

Otros métodos de clustering usando SKLearn:
https://scikit-learn.org/stable/modules/clustering.html