Inteligencia de Negocio: Práctica 2 Visualización y Segmentación

David Cabezas Berrido

Grupo 2: Viernes

dxabezas@correo.ugr.es

30 de noviembre de 2020

Índice general

Ι	Vis	sualización	2
	1.	Visualización de medidas	3
		1.1. Por procesamiento	
		1.2. Por modelo	
	2.	Gráficas de la curva ROC	
	3.	Análisis de atributos	
II	Se	${f egmentaci\'on}$	17
	1.	Introducción	18
	2.	Caso de estudio 1: Análisis de los accidentes en condiciones óptimas para la conducción	
		2.1. Algoritmos de clustering y resultados	21
		2.2. Interpretación de la segmentación	
	3.	Caso de estudio 2: Análisis de los accidentes a altas horas de la madrugada frente a los ocurridos en	
		horas puntas	29
		3.1. Accidentes a altas horas de la madrugada	31
		3.2. Accidentes a horas puntas	
		3.3. Comparación de ambas clases	42
	4.	Contenido adicional	43
		4.1. Outliers y la poca importancia de los heridos graves y muertos	
		4.2. Estudio de variables circunstanciales y de tipo dentro de los clusters	
	5.	Bibliografía/Webgrafía	

Parte I Visualización

Sobre los resultados de la práctica 1, realizaremos representaciones de los resultados obtenidos por cada algoritmo y preprocesamiento, también de las relaciones entre los atributos. No nos centraremos en por qué unos modelos o preprocesamientos son mejores que otros, ni en detalles de los mismos (hiperparámetros configurados o por defecto. Eso ya lo hicimos en la práctica anterior. Nos centraremos cómo podemos interpretar las visualizaciones para ayudarnos a distinguir qué algoritmo o procesamiento es más adecuado en cada caso, o qué relaciones hay entre los atributos.

1. Visualización de medidas

Compararemos los scores de todos los modelos para cada preprocesamiento y viceversa. Las métricas que representaremos son la Accuracy y el F1-score.

1.1. Por procesamiento

El primer procesamiento consiste en eliminar las instancias con valores perdidos.

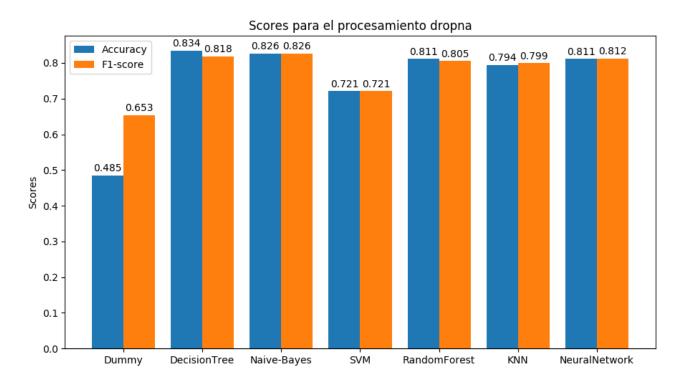


Figura 1: Desempeño de los algoritmos sobre el preprocesado 1: Eliminación de valores perdidos

La barra azul (Accuracy) representa el desempeño general del modelo, la proporción de instancias bien clasificadas en validación cruzada. Mientras que la barra naranja (F1-score) le da una mayor prioridad a la clasificación de instancias positivas, que tienen mayor importancia en este problema, puesto que un falso negativo es más grave que un falso positivo.

Los modelos que más score han obtenido para este preprocesamiento son el Árbol de Decisión y Naive-Bayes. El Árbol de Decisión tiene ligeramente mayor Accuracy, mientras que Naive-Bayes tiene más F1-score, esto significa que Decision Tree clasifica mejor las instancias negativas que Naive-Bayes, y éste último clasifica mejor las positivas.

SVM presenta resultados bastante peores al resto de algoritmos (obviando Dummy).

Generalmente, la Accuracy y la F1-score son similares. La excepción es Dummy, que clasifica bien todas las positivas pero ninguna negativa.

El **segundo procesamiento** consiste en **imputar los valores perdidos**, para las variables numéricas usamos la mediana y para las nominales, la moda.

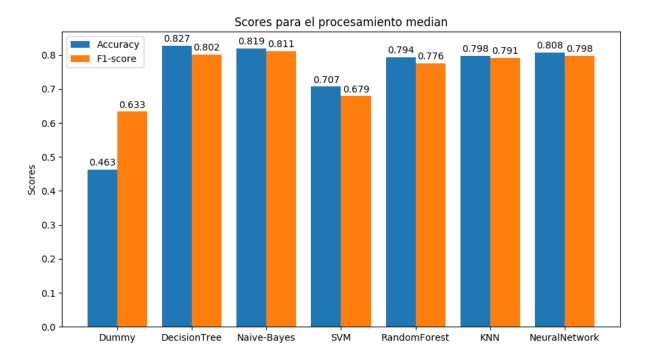


Figura 2: Desempeño de los algoritmos sobre el preprocesado 2: Imputación de valores perdidos

La comparación entre los modelos no ha cambiado mucho, salvo un descenso en el desempeño de todos los modelos. La gráfica nos ayuda a observar, comparando las barras azules con las naranjas, que el descenso ha sido mayor en la F1-score (la barra naranja ahora está más abajo que la azul en todos los algoritmos salvo Dummy), esto significa que, en general, ha empeorado la clasificación de instancias positivas.

El **tercer procesamiento** consiste en **simplificar el conjunto de atributos**. Concretamente, eliminamos Density y simplificamos la distribución de BI-Rads para que sólo tome los valores 4 y 5.

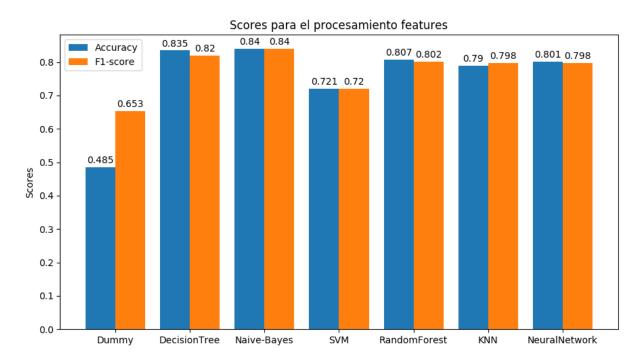


Figura 3: Desempeño de los algoritmos sobre el preprocesado 3: Eliminación de características innecesarias

Con este preprocesamiento, observamos que se ha recuperado la similitud entre los valores de F1-score y Accuracy, puesto que se hizo sobre los datos del preprocesado 1 y no sobre los del 2. También se ha producido una mejora general en la mayoría de modelos, sobre todo en Naive-Bayes por lo que comentamos en la práctica anterior de que supone los atributos independientes. Sin embargo, la comparación entre los modelos no cambia demasiado.

El cuarto procesamiento consiste en binarizar las características nominales, Shape y Margin. Esto lo hicimos porque no tenía sentido medir la distancia entre valores de una variable nominal si los numerábamos con números naturales, y algoritmos que no tratan bien las variables nominales como KNN y Neural Network podían verse afectados por esto.

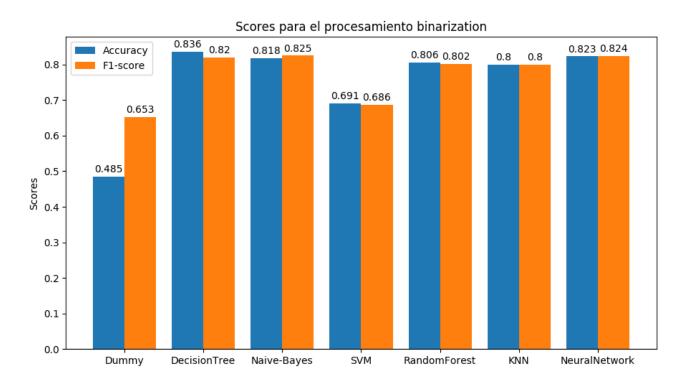


Figura 4: Desempeño de los algoritmos sobre el preprocesado 4: Binarización de características nominales

Se aprecia un descenso en Naive-Bayes, por haber introducido nuevas características que no son independientes unas de otras (cuando una vale 1, el resto de características binarizas asociadas a la misma variable nominal están forzadas a valer 0). La mejora en KNN es muy leve, pero sí destaca ahora una subida en la colummna de Neural Network.

Este procesamiento también perjudica aún más a SVM, aumenta más la diferencia entre su columna y el resto.

El quinto procesamiento consiste en reescalar las variables, para que tengan media 0 y varianza 1. Esto se hizo para solucionar la importancia exagerada que cobraba la variable Age en algoritmos como KNN.

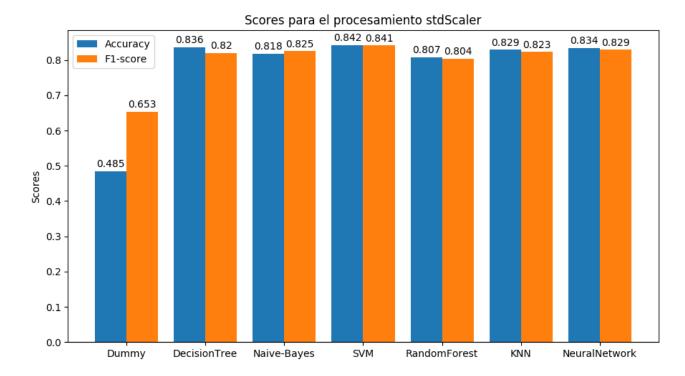


Figura 5: Desempeño de los algoritmos sobre el preprocesado 5: Estandarizado de los datos

Lo que más descata en esta gráfica es la importante subida de SVM, su columna sube hasta acabar ligeramente por encima del resto. También observamos una subida notable en el desempeño de KNN, cuya barra adelanta a la de Random Forest.

1.2. Por modelo

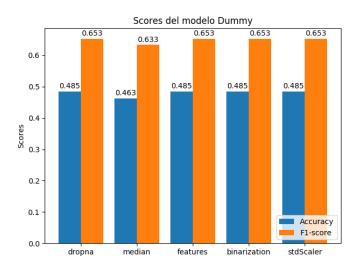


Figura 6: Desempeño de Dummy para cada preprocesamiento

No hay mucho que comentar de Dummy, consigue los mismos scores para todos los preprocesamientos, ya que ignora los datos de entrada y se limita a predecir siempre maligno. Cambia para el el segundo preprocesamiento, porque varía el número de instancias, ya que no eliminamos las instancias con valores perdidos.

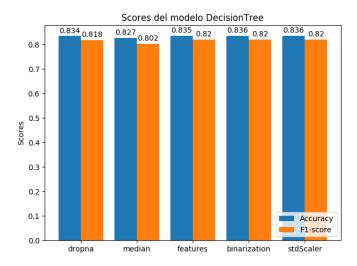


Figura 7: Desempeño de Decision Tree para cada preprocesamiento

La eficacia de Decision Tree no se vió afectada apenas por ninguno de los procesamientos que planteamos. Trabaja con las variables por separado, por lo que no le afecta el reescalado; trabaja bien con las variables nominales, por lo que no se ve beneficiado de la binarización de las mismas. Sí que observamos que este modelo acostumbra a clasificar mejor las instancias negativas, ya que su desempeño general (barra azul) está por encima de su F1-score (barra naranja), que da mayor importancia a los ejemplos positivos.

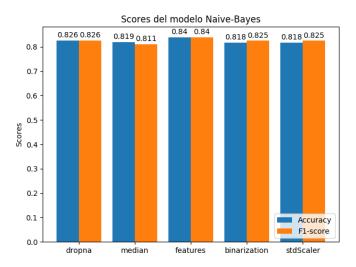


Figura 8: Desempeño de Naive-Bayes para cada preprocesamiento

Sobre este modelo percibimos que funciona mejor tras la simplificación del conjunto de características, pero empeora al introducir características nuevas que no son independientes cuando binarizamos las características nominales. Sobre algunos preprocesamientos ha tenido similar desempeño al clasificar instancias positivas y negativas (las barras azul y naranja están a la misma altura). Al igual que el resto de modelos, al imputar los valores perdidos pierde bastante efectividad sobre los ejemplos positivos (la barra naranja está más abajo que la azul). Al introducir las características dependientes en la binarización de variables nominales, decrece su eficacia sobre todo para los ejemplos negativos (la barra naranja no decrece tanto como la azul), y tampoco se ve afectado por el reescalado de los datos.

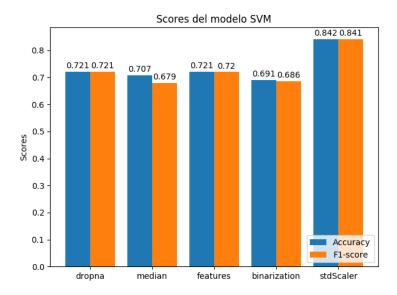


Figura 9: Desempeño de SVM para cada preprocesamiento

SVM presenta un desempeño bastante pobre hasta llegar al reescalado de las variables, cuando se convierte en el modelo que más score consigue. Se ve perjudicado por la binarización de características nominales y, exceptuando lo que les ocurre a todos los algoritmos con el segundo preprocesado (imputar valores perdidos), su desempeño es similar en las características positivas y en las negativas (las barras azul y naranja están muy igualadas).

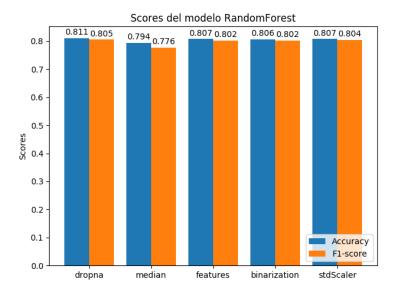


Figura 10: Desempeño de Random Forest para cada preprocesamiento

A Random Forest le ocurre lo mismo que a Decision Tree (Random Forest es un modelo que promedia varios Decision Tree), aunque su desempeño en general es peor. Hay un poco menos de diferencia entre las barras azul y naranja, por lo que no empeora tanto al clasificar instancias positivas.

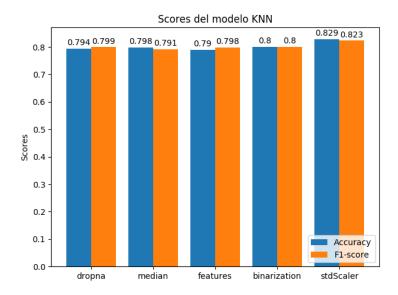


Figura 11: Desempeño de KNN para cada preprocesamiento

KNN se ve beneficiado por los dos últimos procesamientos, sobre todo con el último, el reescalado de las variables. Presenta resultados similares para todos los procesamientos, en comparación con los otros modelos, empeora poco con la imputación de valores perdidos. Su desempeño es similar para todos los preprocesamientos excepto para el último, donde la mejora es notable.

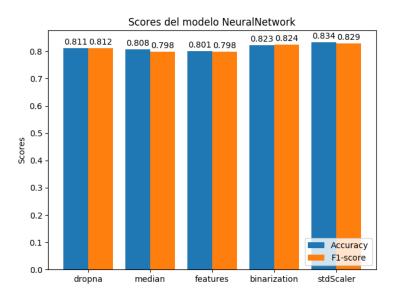


Figura 12: Desempeño de Neural Network para cada preprocesamiento

Neural Network se ve perjudicado por la simplificación del conjunto de características, probablemente porque es un modelo con una alta complejidad y capacidad explicativa y sea capaz de aprovechas la poca información que se pierde con esta simplificación. Los preprocesados de binarización y estandarización le benefician en gran medida. En general, su eficacia es similar en ejemplos positivos y negativos, las barras azul y naranja están prácticamente a la misma altura.

2. Gráficas de la curva ROC

Para cada preprocesamiento, compararemos los modelos representándolos en el espacio ROC. Los estamos tratando como modelos discretos (sólo atendemos a la clase que predigan, no la probabilidad que asignen de pertenencia a cada clase), por lo que no vamos a dibujar sus curvas ROC como es habitual verlas, con forma de codo. Esto podríamos hacerlo con la función roc_curve de sklearn.metrics, pero tenemos que tener clara la interpretación continua que se hace del modelo para interpretar las curvas. Por ejemplo un árbol de decisión se puede interpretar como un modelo continuo de la siguiente manera: si una instancia cae sobre una hoja con p instancias de entrenamiento de la clase maligno y q de la clase benigno, puede asignar una probabilidad de $\frac{p}{p+q}$ para la clase maligno y una de $\frac{q}{p+q}$ para la clase benigno.

En su lugar, cada modelo aparecerá como un punto en el plano, concretamente en el intervalo $[0,1] \times [0,1]$.

El análisis gráfico por gráfico sería muy repetitivo, por lo que nos limitaremos a explicar cómo se interpretan estos gráficos. Lo haremos sobre el primero de ellos.

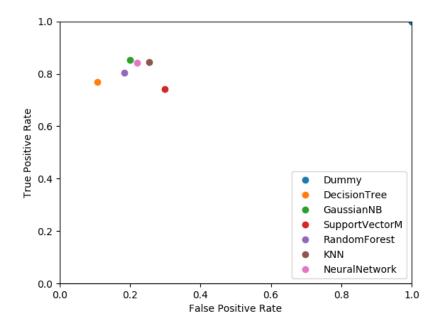


Figura 13: Algoritmos sobre el preprocesado 1 representados en el espacio ROC

En el eje horizontal se representa el FPR, la tasa de falsos positivos (número de predicciones positivas incorrectas entre el número total de ejemplos negativos). En el eje vertical se representa el TPR, la tasa de verdaderos positivos (número de predicciones positivas correctas entre el número total de ejemplos positivos).

Cuanto más a la izquierda esté un punto, menor será la FPR del modelo, luego mejor clasificará ejemplos negativos. Cuanto más a arriba esté un punto, mayor será la TPR del modelo, luego mejor clasificará ejemplos positivos.

Si un modelo está situado arriba a la derecha de otro, significa que predice mejor tanto los ejemplos positivos como los negativos, por lo que podemos considerarlo mejor en cuanto a resultados, sin tener en cuenta la simplicidad ni la facilidad de interpretación de los modelos. De otra forma, dos modelos no son tan fácilmente comparables, por lo que tendríamos que atender a sus diferencias de FPR y TPR, a la importancia que le demos a cada una.

En este ejemplo concreto (Figura 13), Naive-Bayes es mejor que Neural Network, KNN y SVM. Obviamente Dummy supera a todos a la hora de clasificar ejemplos positivos, pero es el peor clasificando negativos. Naive-Bayes supera al árbol de decisión a la hora de clasificar instancias positivas, pero es peor clasificando instancias negativas. También apreciamos que SVM es el peor de todos sin contar Dummy.

A continuación están las representaciones de los modelos en el espacio ROC para el resto de preprocesamientos.

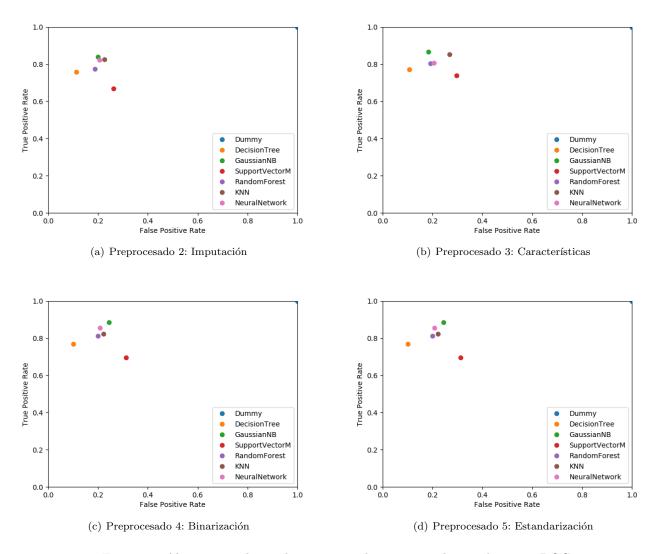


Figura 14: Algoritmos sobre cada preprocesado representados en el espacio ROC

La métrica $AUC = \frac{1 + TPR - FPR}{2}$ mide el área bajo la curva que une el punto en el espacio con los puntos (0,0) y (1,1). En la Figura 15 pueden observarse estas curvas para los algoritmos con el preprocesamiento 1 (los de la Figura 13). Clarametente cuanto más arriba y a la izquierda esté un punto, mayor será este área y por tanto la AUC del modelo. Esta métrica es similar a Accuracy en el sentido que mide el desemepeño general del modelo sin priorizar ninguna de las dos clases (positiva/negativa), con la diferencia de que equilibra la importancia de las clases sin importar lo balanceadas que estén, por tanto es recomendable utilizar AUC cuando tenemos clases desbalanceadas y queremos evitar que se ignore/desprecie la clase minoritaria.

En la Tabla 1, recogemos los distintos valores de este área para los modelos sobre el preprocesado 1 (Figura 13 o Figura 15) y también sobre el resto de preprocesamientos (Figura 14).

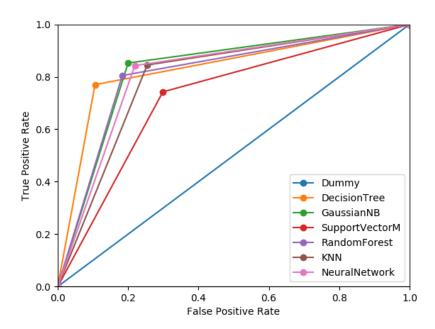


Figura 15: Curvas ROC de los algoritmos sobre el preprocesado $1\,$

	Dummy	DecisionTree	GaussianNB	SupportVectorM	RandomForest	KNN	NeuralNetwork
Preprocesado 0	0.5	0.832	0.8262	0.7219	0.8108	0.7954	0.8118
Preprocesado 1	0.5	0.8224	0.8204	0.704	0.7925	0.8001	0.8086
Preprocesado 2	0.5	0.8333	0.8408	0.7218	0.8072	0.7922	0.8014
Preprocesado 3	0.5	0.8344	0.8202	0.691	0.8062	0.8006	0.824
Preprocesado 4	0.5	0.8344	0.8202	0.843	0.8076	0.8288	0.8339

Tabla 1: AUC de cada modelo y procesamiento

3. Análisis de atributos

Para cada atributo, representamos para cada posible valor el número de instancias positivas (en azul) y negativas (en naranja). Utilizamos un gráfico de barras apiladas, con el número de instancias malignas abajo. En este tipo de gráficos será fácil saber cuantas instancias malignas tienen determinado valor de una variable, y también cuantas instancias totales. Para ver el número de instancias benignas habrá que tener en cuenta donde empieza la barra.

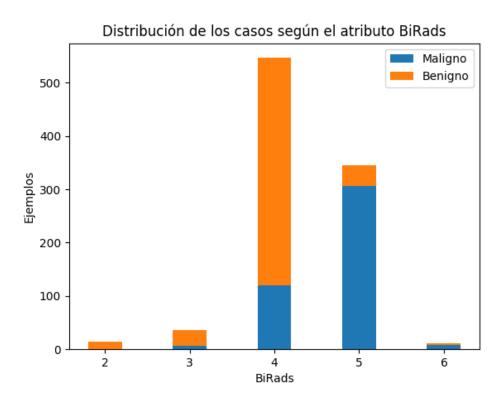


Figura 16: Distribución de ejemplos de cada clase para los distintos valores de BI-RADS

La mayoría de instancias tienen los valores 4 y 5. Al aumentar el valor de la variable, aumenta considerablemente la proporción de ejemplos malignos con ese valor. Por tanto, vemos que esta variable está altamente relacionada con la severidad del tumor.

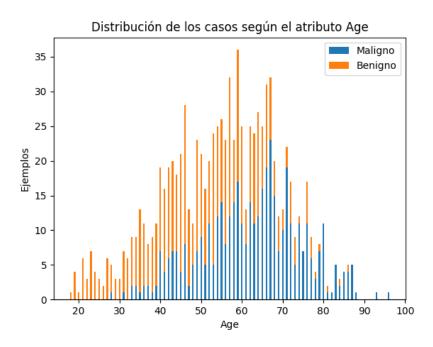


Figura 17: Distribución de ejemplos de cada clase para los distintos valores de Age

Al haber tantos valores es lógico que halla impurezas, pero al igual que antes, observamos un aumento en la proporción de ejemplos malignos para valores altos de la variable. Por lo que también concluimos que la edad está bastante relacionada con la severidad.

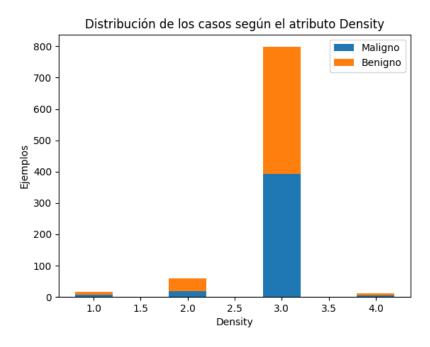


Figura 18: Distribución de ejemplos de cada clase para los distintos valores de Density

Observamos que la mayoría de las instancias presentan el valor 3 de esta variable. Además, para cada valor el número de instancias positivas y negativas que lo presentan es prácticamente el mismo. Por tanto, no parece que esta variable influya en la severidad del tumor.

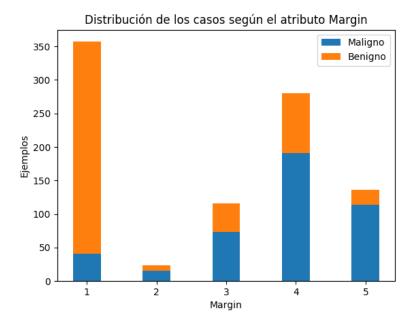


Figura 19: Distribución de ejemplos de cada clase para los distintos valores de Margin

La mayoría de las instancias que presentan el valor 1 corresponden a tumores benignos y la mayortía de las que presentan el valor 5, a malignos. Para el resto de valores (2, 3 y 4), la proporción de instancias malignas es mayor que la de benignas. Concluimos que este atributo sí puede aportarnos información sobre la severidad del tumor.

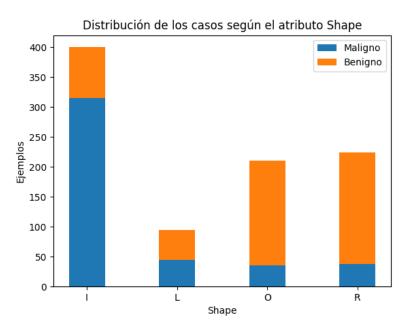


Figura 20: Distribución de ejemplos de cada clase para los distintos valores de Shape

La mayoría de instancias que presentan el valor I de esta variable, corresponden a tumores malignos. La mayoría de las instancias que presentan los valores O o R de esta variable, corresponden a benignos. Mientras que hay aproximadamente las mismas instancias benignas que malignas entre las que tienen valor L. Por tanto, esta variable también está relacionada con la severidad.

Parte II Segmentación

1. Introducción

En esta práctica emplearemos técnicas de aprendizaje no supervisado, como es el clustering, para realizar un análisis relacional mediante segmentación.

Nuestro dataset consta de todos los accidentes ocurridos en España durante el año 2013. Los datos están publicados por la DGT. Disponemos de datos de 89519 accidentes, y 32 variables que miden circunstancias en las que ocurre cada accidente (día, hora, visibilidad, superficie de la calzada, factores atmosféricos, zona ...), el tipo (alcance, choque frontal, choque lateral, atropello a peatón o animal, colisión con obstáculo ...) y la gravedad (número de heridos leves y graves y número de muertos).

Los algoritmos de clustering que utilizaremos son:

- K-means: Un algoritmo iterativo basado en particionamiento. Es relativamente eficiente (O(tkn)) donde n es el número de datos, k el de clusters y t el de iteraciones) y suele alcanzar óptimos locales bastante buenos. Por otra parte, sólo trabaja bien cuando los datos son numéricos, necesita prefijar el número de clusters, sólo encuentra clusters esféricos y no lidia bien con datos ruidosos y outliers.
- DBSCAN: También basado en particionamiento. No necesita a priori el número de clusters, en su lugar requiere el radio máximo de cada cluster y el tamaño mínimo de los mismos. También es capaz de encontrar clusters con distintas formas y es robusto a datos ruidosos y outliers.
- Ward: Es un método aglomerativo, es decir, parte de un cluster para cada elemento y fusiona los clusters que generen en el agrupamiento con mínima varianza. Necesita el número de cluster o una distancia límite a partir de la cual no fusiona dos clusters.

Para estimar los hiperparámetros de los algoritmos atenderemos a dos métricas para interpretar la bondad de un agrupamiento:

■ Coeficiente Silhouette: Compara la similitud de de los objetos de un mismo cluster (cohesión) con los de otros clusters (separación). Para cada elemento i, se calcula a(i) como la distancia media entre i y el resto de elementos del cluster, mientras que que b(i) representa el mínimo de las distancias entre i y cada cluster distinto del suyo (la distancia de i a un cluster se calcula como la media de las distancias de i a cada elemento del cluster). Tomando

$$s(i) = \frac{b(i) - a(i)}{\max a(i), b(i)}$$

se tiene $s(i) \in [-1, 1]$. Si s(i) es negativo (b(i) < a(i)), claramente el elemento i pertenece al cluster equivocado (está más cerca de un cluster distinto al suyo); si s(i) está cerca de 1, significa que i está mucho más cerca de los elementos de su cluster que del resto de clusters. El coeficiente silhoutte se calcula como la media de los s(i) para todos los ejemplos i. Usualmente se encuentra entre 0 y 1.

■ Razón de Calinski-Harabasz: Razón entre la dispersión intra-clusters (dentro de cada cluster) cantidad que y la dispersión inter-clusters (entre clusters). Su cálculo es más complejo que el anterior y su valor no está entre 0 y 1, en nuestro caso toma valores del orden de miles.

Otro factor muy importante a tener en cuanta será el número de clusters generados, ya un elevado número de clusters dificulta las tareas de interpretación y análisis de los resultados. El hecho de generar un número excesivo de clusters con el fin de maximizar las métricas al precio de dificultar el análisis y la interpretabilidad sería el equivalente a lo que en aprendizaje supervisado conocíamos como sobreajuste, podemos llamarle también de ese modo. Representaremos los scores frente al número de cluster en gráficas y elegiremos los hiperparámetros por un criterio similar al método del codo, a partir de la gráfica intentaremos determinar cuando la ganancia de score deja de compensar el aumento en el número de clusters.

Debido al elevado número de datos, los algoritmos de clustering (que suelen presentar un elevado orden de complejidad) podrían tardar un tiempo excesivo en ejecutarse, por lo que realizaremos dos casos de estudio en cada uno de los cuales seleccionaremos un subconjunto de las instancias. Para cada caso de estudio, restringiremos el número de datos fijando los valores de una o más variables de carácter circunstancial o de tipo, y realizaremos el agrupamiento basándonos en las variables que miden la gravedad de los accidentes, pues son numéricas y nos evitan problemas como la dificultad de K-means para trabajar con variables nominales.

Existe una amplia variedad de casos de estudio con sentido e interés que podríamos analizar: accidentes bajo condiciones climatológicas adversas frente a buen tiempo, en zonas urbanas frente a interurbanas, atropellos, colisiones,

etc. Nosotros analizaremos los accidentes en condiciones óptimas para la conducción y los accidentes que ocurren a altas horas de la madrugada. En cada caso de estudio, realizaremos segmentación con dos algoritmos, K-means y uno de los otros.

Es importante normalizar los datos (reescalarlos por columnas para que estén en el intervalo [0,1] antes de realizar la segmentación para que los algoritmos funcionen correctamente. De lo contrario, algunas dimensiones cobrarían más importancia que otras. Para ello, utilizamos MinMaxScaler de sklearn.

Para ciertas tareas como el cálulo de las métricas y la visualización de los centroides y las distribuciones por pares de atributos en los clusters, utilizamos las funciones que se nos proporcionan en el fichero pract2_utils.py, que internamente utiliza skleran para las métricas y seaborn para las visualizaciones. Hemos relizado pequeñas modificaciones en este fichero: la posibilidad de introducir los centroides ya desnormalizados para su visualización y cambios en las paletas de colores para hacer las visualizaciones más fácilmente interpretables.

2. Caso de estudio 1: Análisis de los accidentes en condiciones óptimas para la conducción

Para este primer caso de estudio, seleccionamos los accidentes que ocurren en condiciones óptimas para la conducción. Estos accidentes pueden ocurrir bien por factor vehículo o bien por factor humano, ya que eliminaremos el factor vía seleccionando ejemplos de accidentes que ocurren en calzadas secas y limpias. No disponemos de datos relativos al factor vehículo, pero dentro del factor humano, eliminaremos también las condiciones que favorecen los errores humanos como la falta de luminosidad, visibilidad o la circulación densa. Teniendo en cuenta que el factor vehículo es causa de un porcentaje relativamente bajo de accidentes (menos del 10 %), principalmente tenemos accidentes debidos al factor humano que han ocurrido en condiciones óptimas para la conducción: buen tiempo, buena visibilidad, calzada limpia y seca, tráfico fluido, etc. Es decir, accidentes debidos a factor humano que se podrían haber evitado. Aquí radica el interés de este caso de estudio.

En concreto, estos son los valores que fijamos para las variables:

LUMINOSIDAD=='NOCHE: ILUMINACIÓN SUFICIENTE' | LUMINOSIDAD=='PLENO DÍA'
DENSIDAD_CIRCULACION=='FLUIDA'
DIASEMANA==6
OTRA_CIRCUNSTANCIA=='NINGUNA'
FACTORES_ATMOSFERICOS=='BUEN TIEMPO'
MEDIDAS_ESPECIALES=='NINGUNA MEDIDA'
SUPERFICIE_CALZADA=='SECA Y LIMPIA'
VISIBILIDAD_RESTRINGIDA=='SIN RESTRICCIÓN'

Con OTRA_CIRCUNSTANCIA=='NINGUNA' descartamos accidentes ocurridos con obras, inundaciones, baches, badenes, cambios de rasante, estrechamientos, pasos a nivel y demás circunstancias que podrían dificultar la conducción. Con MEDIDAS_ESPECIALES=='NINGUNA MEDIDA' descartamos accidentes ocurridos en carriles reversibles o con habilitación del arcén, que podríamos considerar fuera de la conducción "normal".

Además, para quedarnos con menos datos nos restringimos a los accidentes ocurridos en sábado con DIASEMANA==6. Los días del lunes al jueves son más propensos a presentar accidentes con una sola víctima (como apreciamos en la Figura 21), esto ocurre porque va mucha más gente a trabajar, mientras que en fin de semana es más usual que viajen varias personas en el coche. Así que elegimos este día para obtener un mayor número de accidentes con múltiples víctimas. El hecho de que viajen más personas en el coche a parte del conductor, por una parte puede aumentar la responsabilidad y por otra puede aumentar las distracciones o crear una falsa sensación de confianza. Esto hace los accidentes ocurridos en fin de semana más interesantes, en mi opinión. Motivo por el cuál elegimos un día del fin de semana.

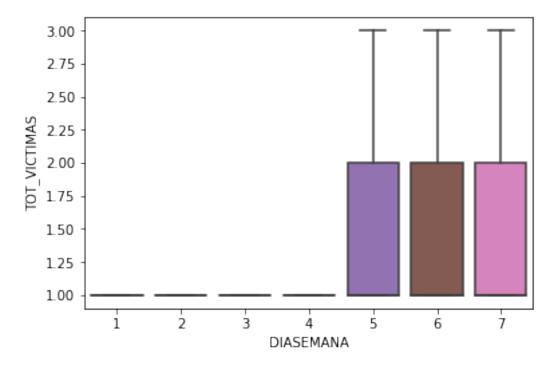


Figura 21: De lunes a jueves la mayoría de accidentes ocasionan una sola víctima (considera los accidentes con más víctimas como outliers). En fin de semana hay más accidentes con múltiples víctimas.

Fijando estos valores, nos quedamos con 4143 instancias, por lo que nuestros algoritmos se ejecutarán bastante rápido.

Anticipando problemas posteriores, debemos eliminar los outliers para poder visualizar la segmentación correctamente. Utilizando Counter observamos que hay un accidente con 52 víctimas, esto distorsiona las escalas de los ejes en las gráficas de víctimas y heridos, lo que dificulta su interpretación.

Por tanto, eliminamos los outliers con el siguiente código, que colapsa los valores por encima del máximo de la whisker box, que admite hasta la media más 3 por la desviación típica $(\mu + 3 \cdot \sigma)$, en dicho máximo.

```
# Eliminar outliers, ya que distorsionan las gráficas
for a in atributos:
   if a in {'TOT_MUERTOS','TOT_HERIDOS_GRAVES'}:
        continue
   d=data[a][abs(zscore(data[a]))<3]
   data[a][zscore(data[a])<-3]=d.min()
   data[a][zscore(data[a])>3]=d.max()
```

La gran mayoría de accidentes no presenta muertos ni heridos graves, lo que provoca que los muertos y heridos graves se consideren outliers, por eso los dejamos tal y como están. En la siguiente gráfica podemos comparar las distribuciones de las variables, se elminan la mayoría de outliers y se regula la escala de los ejes, salvo en los dos atributos que no hemos modificado.

Adelantando acontecimientos, esta limpieza de los datos presenta inconvenientes que discutimos en la Sección 4.1.

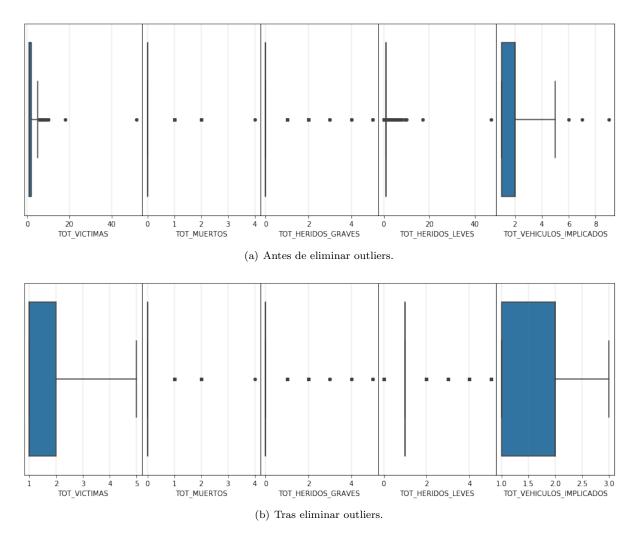


Figura 22: Distribución de los valores de cada variable.

2.1. Algoritmos de clustering y resultados

El primer algoritmo que probaremos para abordar este problema es **K-means**, utilizaremos la implementación del módulo de clusters de sklearn. En primer lugar debemos escoger un valor de K adecuado, para ello nos basamos en las métricas Silhouette y Calinski(-Harabasz). Probando diferentes valores de K, obtenemos la siguiente tabla:

K	Calinski	Silhouette
2	3042.33	0.5541
3	4703.28	0.6437
4	4136.87	0.6577
5	4038.97	0.6892
6	3853.22	0.7027
7	4151.42	0.7369
8	4226.28	0.7867
9	4805.5	0.8417

Tabla 2: Scores de K-means para distinto número de clusters.

Nos ayudamos de representaciones gráficas para elegir un valor de K adecuado. Buscamos un valor bajo para K y valores altos para las métricas.

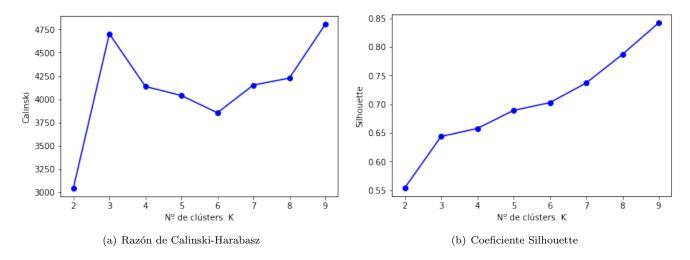


Figura 23: Representaciones de los scores de K-means para distinto número de clusters.

La gráfica de Calinski claramente sugiere tomar K=3, ya que presenta un máximo local bastante alto, sólo superado por K=9 y no por mucho. En cambio, la gráfica de Silhouette no experimenta una ganancia tan abrupta para este valor, pero la ganancia es aun más suave para valores posteriores, por lo que de no tomar K=3, sugeriría tomar K=8 o K=9. Esto complica bastante la posterior interpretación de la segmentación, por lo que nos decantamos por K=3.

El siguiente código realiza el agrupamiento y obtiene las etiquetas (el cluster al que pertenece cada ejemplo) y los centroides de cada cluster.

K=3

results = KMeans(n_clusters=K, random_state=0).fit(data_norm)
labels=results.labels_
centroids=results.cluster_centers_

 $\label{eq:consultamos} \mbox{Con Counter}, \mbox{consultamos el tamaño} \mbox{ (n\'umero de elementos) de cada cluster. Observamos que el cluster 0 es bastante m\'as pequeño que los otro dos.$

```
Counter(labels)
> Counter({0: 419, 1: 1673, 2: 2051})
```

Dejaremos la visualización de los centroides y de las distribuciones de los clusters para la interpretación, en la Sección 2.2. Relizaremos ahora el agrupamiento con el algoritmo **Ward**, un método acumulativo. La implementación que usamos es la de clustering aglomerativo de *sklearn*, indicando Ward (mínima varianza) como criterio para fusionar clusters (parámetro linkage).

Para seleccionar un número adecuado de clusters, realizamos un experimento análogo al de la Tabla 2. Obteniendo:

K	Calinski	Silhouette
2	3038.94	0.5539
3	3263.5	0.6002
4	3211.22	0.6236
5	3504.66	0.6674
6	3925.91	0.715
7	3951.38	0.7541
8	4090.58	0.7905
9	4256.87	0.8254

Tabla 3: Scores de Ward para distinto número de clusters.

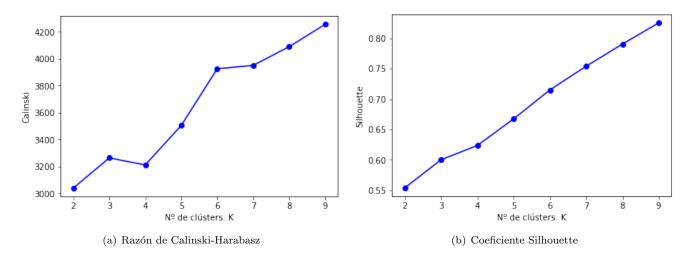


Figura 24: Representaciones de los scores de Ward para distinto número de clusters.

La métrica de Calinski sugiere los valores K=3 y K=6, mientras que Silhouette crece prácticamente de forma lineal. Tomaremos K=6, ya que la ganancia en la métrica de Calinski es significativa y así tendremos la oportunidad de analizar un agrupamiento con un número de clusters algo mayor.

El siguiente código realiza el agrupamiento y obtiene las etiquetas (el cluster al que pertenece cada ejemplo).

K=6

```
results = AgglomerativeClustering(distance_threshold=None, n_clusters=K).fit(data_norm)
labels=results.labels_
```

Este algoritmo no devuelve los centroides, para calcularlos agrupamos los datos por etiqueta y hacemos la media de cada atributo.

```
dataC=data.copy()
dataC['cluster']=labels
centroids = dataC.groupby('cluster').mean()
```

Vemos que hay diferentes tamaños de cluster.

```
Counter(labels)
```

```
> Counter({0: 1493, 1: 549, 2: 1535, 3: 140, 4: 264, 5: 162})
```

2.2. Interpretación de la segmentación

Comenzaremos por el agrupamiento generado por el algoritmo K-means. Visualizamos los centroides con la función visualize_centroides del fichero pract2_utils.py. Visualizamos también cómo se distribuyen los valores de las variables en cada cluster.

Visualizar los centroides nos da una idea del tipo de accidentes en cada cluster, pero visualizar la distribución de las variables en un diagrama de cajas y bigotes nos proporciona más información. Porque podemos saber cómo de cerca están los elementos del cluster de ese centroide. Si vemos una sola línea, significa que la mayoría de elementos del cluster tienen ese valor, los suficientes para considerar el resto como outliers.

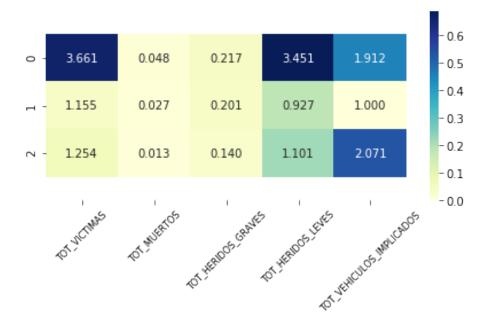


Figura 25: Centroides de los clusters generados por K-means.

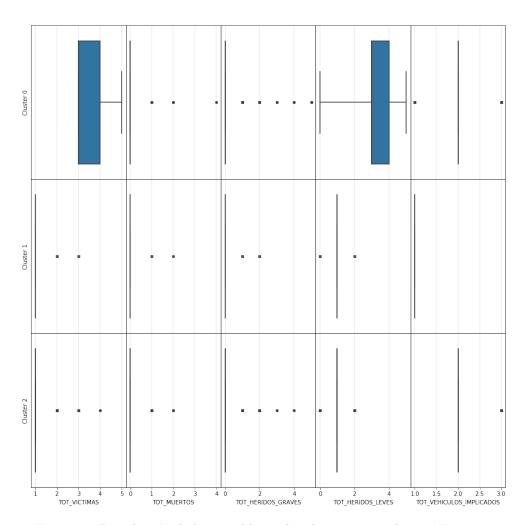


Figura 26: Distribución de las variables en los clusters generados por K-means.

Tenemos el cluster 0, que agrupa los accidentes con 3 o más víctimas, la mayoría de las cuales son heridos leves. Generalmente son accidentes con dos vehículos implicados, aunque en la Figura 25 apreciamos que debe haber algunos accidentes con un sólo vehículo implicado (la media es ligeramente menor a 2), pero la Figura 26 vemos que estos casos constituyen un porcentaje tan bajo que los considera outliers. Los elementos de este cluster probablemente representen en su mayoría choques frontales/laterales de vehículos, que suelen ser los que más víctimas ocasionan.

En el cluster 1, tenemos accidentes con generalmente una vícitma (que acostumbra a ser leve) y un vehículo implicado. Podrían tratarse, por ejemplo, de choques de un solo vehículo con un obstáculo, generalmente con un sólo conductor y leves. En la Figura 26 apreciamos que en algunas ocasiones (outliers) hay más heridos o de mayor gravedad, pero en el caso de los vehículos implicados únicamente hay accidentes con un vehículo implicado.

Por último, el cluster 2 agrupa accidentes con dos vehículos implicados pero con bajo número de víctimas y generalmente leves. Pueden tratarse en su mayoría de colisiones por alcance, que acostumbran a ser más leves que el resto de colisiones. Aunque la Figura 25 nos dice que deben existir en este cluster accidentes don más de dos vehículos implicados (la media es ligeramente mayor que 2), en la Figura 26 observamos que son una minoría (los considera outliers).

Atendiendo al tamaño de los clusters, observamos que los accidentes leves con dos vehículos implicados son los más comunes (cluster 2, \sim 49.5%), le siguen los accidentes leves con un vehículo implicado (cluster 1, \sim 40.4%). Y por último, los accidentes con un mayor número de víctimas y generalmente dos vehículos implicados (cluster 0, \sim 10.1%). Así nos hacemos una idea de la frecuencia de cada tipo de accidente en las condiciones descritas en el caso de estudio.

Debemos resaltar que la proporción de muertos y heridos graves es demasiado baja como para que se consideren a la hora de agrupar por los datos, en la Figura 26 observamos que los valores distintos de 0 para estas dos variables los considera outliers. Nos surge aquí la siguiente duda que tendremos la oportunidad de responder más adelante: ¿Al aumentar el número de clusters tendrá en cuenta los valores de estas variables para agrupar? En caso afirmativo, ¿a partir de qué número de clusters? ¿merecerá la pena aumentar el número de cluster o esto provocará también que se "fuerce la separación" de clusters que tiene perfecto sentido fusionar? Lo que sería sobreajuste.

Los 4143 accidentes acumulan 92 muertos y 714 heridos graves.

Podemos también visualizar los cluster en un *pairplot* para observar la relación entre las variables dos a dos, así como la distribución de los valores de las variables en cada cluster.

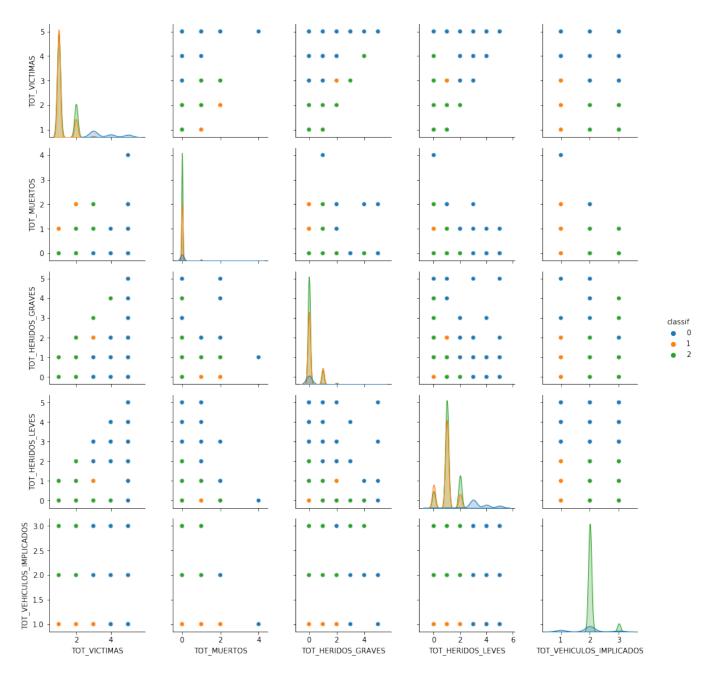


Figura 27: Distribución de las variables en los clusters generados por K-means, por pares.

En las diagonales, observamos las distribuciones para cada cluster de los valores del atributo correspondiente. Por ejemplo en los heridos leves y en el núemero de víctimas observamos que el cluster 0 llega a tomar valores más altos (la distribución está más a la derecha), mientras que en los otros dos clusters hay poca diferencia, el cluster 2 (verde) toma el valor 2 con ligeramente más frecuencia. Si observamos los muertos, concluimos que esta variable no nos ayuda a diferenciar los clusters, porque todos tienen su distribución prácticamente degenerada en 0. Si observamos en la diagonal los vehículos implicados, vemos que no aparece el cluster 1 por tomar todos sus elementos el valor 1 para esta variable, lo que hace que la "línea" tenga grosor 0. Esto nos lo advierte un warning (Dataset has 0 variance; skipping density estimate) al generar el gráfico. El principal problema de este tipo de gráfico es que se representan cantidades absolutas, por lo que al existir algunos cluster más grandes que otros, se distorsionan las gráficas, por ejemplo el cluster 0 (azul) es menos numeroso y cuesta distribuciones, por lo que son muy difíciles de interpretar si el número de clusters es elevado.

Fuera de la diagonal, representamos en la posición (i,j) la relación entre los valores de los atributos $i \ y \ j$ (de ahí el nombre de pairplot), por lo que el gráfico es simétrico salvo cambiar los ejes. Los problemas de estas representaciones son dos. El primero es que los puntos se tapan unos a otros: por ejemplo en la esquina inferior izquierda vemos un punto naranja (cluster 1) representando un accidente con 1 víctima y un vehículo implicado, pero esto no quiere decir que en los cluster 0 y 2 no puedan existir dichos casos, sólo que son más frecuentes en el cluster 1 (en proporción dentro del propio cluster, si no los cluster más pequeños no aparecerían nunca), pero no sabemos si mucho más frecuentes o sólo un poco más frecuentes que en el resto de clusters, el gráfico no nos dice si el punto es "claramente naranja" o ha quedado a unos pocos ejemplos de ser dibujado en otro color. El segundo problema es que no tiene en cuenta las densidades en cada punto: por ejemplo en la comparación entre los heridos leves y las víctimas aparece un punto azul indicando que al menos hay un accidente con 5 víctimas y 0 heridos leves, y un punto verde indicando que hay accidentes con una víctima y un herido leve. Este último caso es mucho más frecuente, pero esto el gráfico no lo refleja, sólo refleja que al menos hay un accidente con esos valores. Por tanto, estos gráficos no reflejan correctamente las relaciones entre los atributos.

Tras explicar cómo se interpretan este tipo de gráficos y exponer sus inconvenientes, basaremos los futuros análisis en gráficos como las figuras 25 y 26, más fácilmente interpretables.

Ahora pasemos a la segmentación obtenida con el algoritmo aglomerativo Ward, hemos seleccionado 6 clusters.

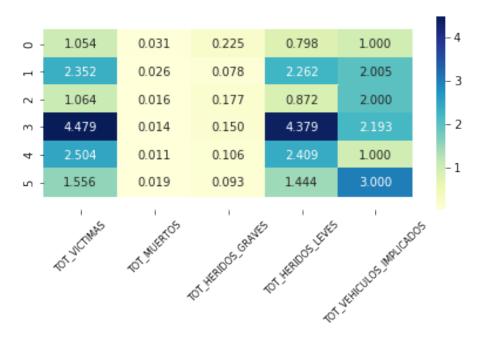


Figura 28: Centroides de los clusters generados por Ward.

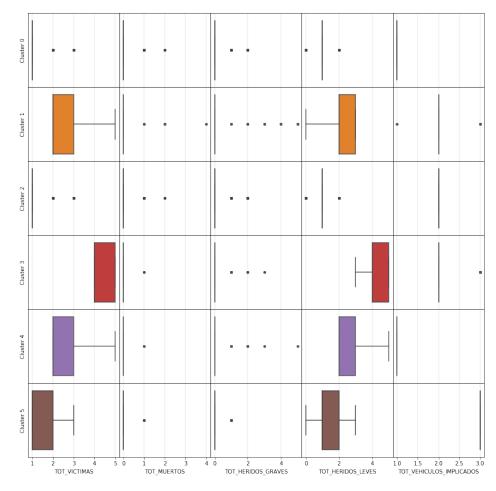


Figura 29: Distribución de las variables en los clusters generados por Ward.

Comprobamos que tampoco utiliza los muertos ni los heridos graves para agrupar los clusters. Sí que hay algunas diferencias entre los valores de estas variables en cada cluster, pero la inmensa mayoría presentan el valor 0 y los considera como outliers (dentro del cluster). Por tanto el número de cluster necesarios para tener una distinción en estos atributos será mayor que 6 (al menos con este algoritmo). El problema de esto es que los poco muertos y heridos graves se reparten entre todos los clusters, aparecen algunos dentro de los clusters de accidentes "leves" (con pocas víctimas, clusters 0 y 2), tratándose claramente de excepciones e impurezas en la segmentación, lo que también ocurre en el anterior agrupamiento.

Cada par de clusters se diferencian significativamente en el valor de al menos una variable. Por ejemplo, los clusters 0 y 2 son muy similares en cuanto a la distribución de valores de los atributos en todas las variables salvo el total de vehículos implicados. Ambos podrían costar de choques leves, pero los accidentes del cluster 2 (2 vehículos implicados) serían choques entre vehículos y los del cluster 0 (1 vehículo implicado) serían choques con obstáculos.

En la Figura 26 vimos que, exceptuando las víctimas y heridos leves del cluster 0, cada atributo de cada cluster presenta una distribución muy concentrada (sólo vemos una línea y algunos puntos sueltos que considera outliers). En esta ocasión, los atributos total de víctimas y total de heridos leves en los clusters 1, 3, 4 y 5 presentan distribuciones con rangos de valores más amplios, ya que estos clusters son más pequeños y concentran accidentes con diferentes rangos de valores de estas variables, no centrados (de forma casi degenerada) en el valor 1.

Los clusters 1 y 4 son similares, contienen accidentes con dos o más víctimas, la mayoría (como en todos los clusters) heridos leves. Se diferencian principalmente en que los accidentes del cluster 1 acostumbran a tener dos vehículos implicados (podrían tratarse colisiones entre vehículos con varios pasajeros de los cuales dos o más resultan heridos), mientras que absolutamente todos los accidentes del cluster 4 presentan un vehículo implicado (podrían tratarse de colisones con obstáculos con varios pasajeros en el vehículo de los cuales dos o más resultan heridos, y/o también atropellos múltiples).

El cluster 3 concentra los accidente con mayor número de heridos, observamos que generalmente hay dos vehículos implicados, por lo que podrían tratarse de choques fuertes frontales y laterales, los más peligrosos.

El cluster 5 agrupa accidentes con exactamente 3 vehículos implicados. Suelen presentar 1 o 2 víctimas, 3 en algunas ocasiones, como podemos ver en la Figura 29 abajo (cluster 5) a la izquierda (total de víctimas). La mayoría de las víctimas son leves, como ocurre en todos los clusters.

Además, teniendo en cuenta el tamaño de cada cluster observamos que los accidentes leves con uno o dos vehículos implicados (clusters 0, $\sim 36\%$ y 2, $\sim 37\%$ respectivamente) son los más comunes. Les siguen accidentes algo más graves con dos vehículos implicados (cluster 1, $\sim 13\%$) o un solo vehículo implicado (cluster 4, $\sim 6.4\%$). Después el cluster 5 ($\sim 4\%$) con accidentes con 3 vehículos implicados, y por último el cluster 3 ($\sim 3.4\%$), con los accidentes con mayor número de víctimas. Así nos hacemos una idea de la frecuenca de cada tipo de accidente en las condiciones descritas en el caso de estudio.

Comparamos finalmente los scores de ambos algoritmos.

	Calinski	Silhouette	K
K-means	4703.28	0.6437	3
Ward	3925.91	0.715	6

Tabla 4: Métricas Silhouette y Calinski para ambos agrupamientos.

K-means consigue mejor razón de Calinski, mientras que Ward consigue un coeficiente Silhouette más alto. Por tanto, no tenemos en terminos de score un claro ganador, aunque el agrupamiento que consigue K-means ha sido más fácilmente interpretable debido al menor número de clusters. El agrupamiento de Ward nos ha permitido formar grupos más concretos de accidentes, pero quizá en algunos casos sean demasiado concretos. Por ejemplo, los clusters 1, 2 y 3 constan de accidentes con generalmente dos vehículos implicados, el cluster 2 agrupa los más leves (menos heridos) y el cluster 3 los más graves (más heridos), mientras que el cluster 1 estaría "entre el 2 y el 3", accidentes graves pero no demasiado. Probablemente se podrían agrupar las instancias del cluster 1 representando accidentes más leves en el cluster 2 y fusionar el resto con el cluster 3, formando entonces un cluster para accidentes leves con dos vehículos implicados y otro para los más graves.

Si entre los 6 cluster generados por Ward hubiese uno o más que agrupasen accidentes por muertos o heridos graves, sí que podría compensar este aumento en el número de clusters generado. Aunque en definitiva tenemos ya dos segmentaciones analizadas con distinto número de clusters, por lo que se podría consultar una u otra según si un problema requiere una segmentación con grupos más generales y heterogéneos o más concretos y homogéneos.

3. Caso de estudio 2: Análisis de los accidentes a altas horas de la madrugada frente a los ocurridos en horas puntas

Nuestro segundo caso de estudio contrastará accidentes según la hora a la que ocurren. En concreto distinguiremos dos clases de accidentes, los ocurridos a altas horas de la noche y los ocurridos en horas puntas. En el primer caso, tomamos accidentes ocurridos entre las 12 de la noche y las 6 de la madrugada. Horas en las que la gente suele estar durmiendo, salvo transportistas de largas distancias (conductores de camiones y trailers, por ejemplo), personas que trabajan por la noche, personas que están en un viaje largo o que salen de ocio nocturno, entre otros. Cabe esperar que en la mayoría de estos accidentes (al menos los ocurridos a trabajadores) sólo vaya un ocupante en el vehículo, y también que el accidente sea causado por una distracción a causa del sueño o un exceso de confianza por la baja densidad del tráfico. Esta última causa, además permitiría a los conductores "sentirse cómodos" conduciendo a altas velocidades y podría traducirse en un aumento en la gravedad de los accidentes.

En el segundo caso, tomaremos accidentes ocurridos en horas puntas. Para ello, observaremos la distribución de accidentes respecto a la hora en la que ocurren. Obtenemos este dato a partir del DataFrame combinando los métodos groupby y count, y consultando cualquier columna de la tabla:

n_accidentes=list(data.groupby('HORA').count().MES)

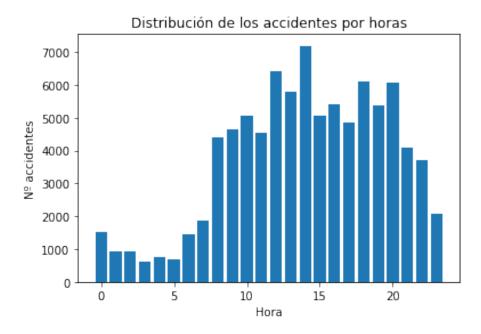


Figura 30: Distribución de accidentes por horas.

Hay varias horas puntas en las que ocurren mayor cantidad de accidentes. Tomaremos dos horas puntas: las 14h (salida de los colegios) y las 20h (salida de turnos de tarde).

En el primer caso, tenemos 5969 instancias. Comprobamos con Counter que en esta ocasión hemos dejado fuera al accidente con 52 víctimas, por lo que las escalas de los ejes no están demasiado distorsionadas y no necesitamos limpiar los outliers (en la sección 4.1 discutimos las consecuencias de eliminarlos).

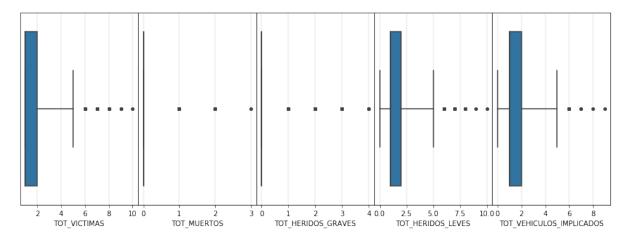


Figura 31: Distribución de las variables en los accidentes a altas horas de la madrugada.

En la segunda clase vuelve a aparecer el accidente con 52 víctimas, si realizasemos una limpieza de outliers similar a la del primer caso de estudio, tendríamos dificultades para comparar ambas clases por el motivo que comentamos en la Sección 4.1. Por tanto, lo eliminamos con la siguiente línea de código:

data = data[data.TOT_VICTIMAS <=20]</pre>

quedándonos con 6671 instancias. Observamos como varía la escala de los ejes sólo con eliminar esta instancia.

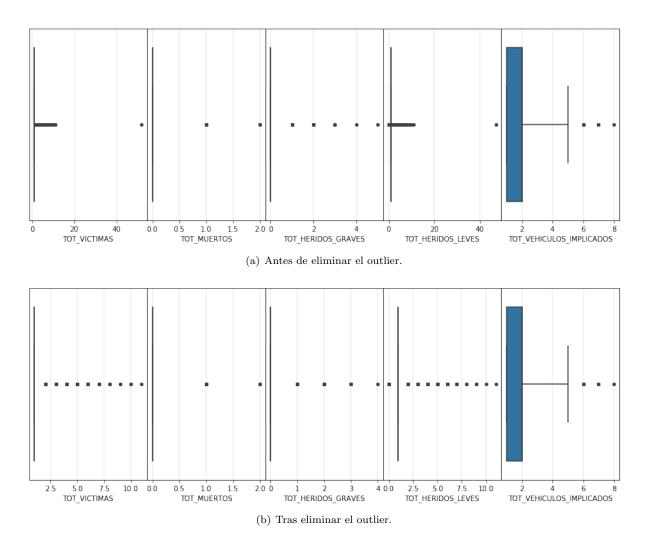


Figura 32: Distribución de las variables en los accidentes a horas puntas.

3.1. Accidentes a altas horas de la madrugada

Algoritmos de clustering y resultados

De nuevo comenzamos agrupando con **K-means**, seguimos el mismo procedimiento que en la Sección 2.1 para determinar un valor de K adecuado. Obtenemos los siguientes resultados:

K	Calinski	Silhouette
2	3023.23	0.5977
3	3620.77	0.6052
4	3403.01	0.56
5	3516.71	0.5981
6	3796.63	0.7136
7	3884.41	0.7199
8	3916.43	0.7376
9	4347.46	0.7777

Tabla 5: Scores de K-means para distinto número de clusters.

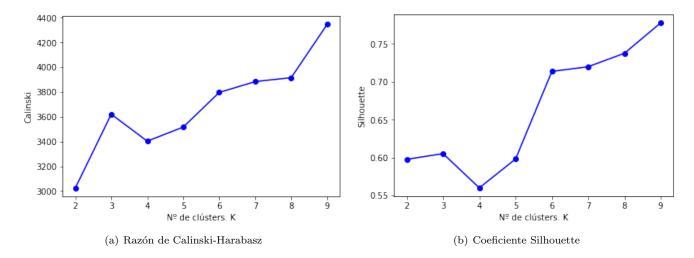


Figura 33: Representaciones de los scores de K-means para distinto número de clusters.

Observamos dos ganancias importantes de score, para K=3 en la razón de Calinski y para K=6 en el coeficiente Silhouette. Analizaremos los dos agrupamientos, pero no entraremos en tantos detalles como en el caso anterior y nos centraremos en clusters especialmente interesantes. Por ejemplo, si alguno agrupa accidentes por muertos y/o por heridos graves.

Para K=3, obtenemos los siguientes tamaños de cluster:

Counter({0: 4652, 1: 717, 2: 600})

Mientras que para K=6 obtenemos:

Counter({1: 2213, 5: 1399, 0: 1213, 4: 688, 2: 301, 3: 155})

Esta vez el otro algoritmo que utilizaremos es **DBSCAN**. Los dos parámetros que debemos proporcionarle son el radio máximo (epsilon, ε) y el tamaño mínimo de cada cluster. En la documentación de *sklearn* explica que ε es el parámetro más influyente, por lo que fijaremos el tamaño mínimo a 50 y probaremos varios valores de ε (Figura 34). Observamos mucha diferencia entre los valores 0.1 y 0.15 tanto en Silhouette como en el número de clusters, así que realizamos una segunda tanda de mediciones dentro de este intervalo.

En la segunda tanda de mediciones, descartamos 0.1 y 0.11 por producir demasiados clusters. Los valores 0.12, 0.13 y 0.14 consiguen los mismos scores porque producen las mismas particiones, la métrica Calinski nos sugiere estos valores, pero tiene dos inconvenientes: Generan un particionamiento con 8 clusters (sin contar el -1) y no son capaces de agrupar 266 elementos (que los considera como ruidosos y los concentra en el cluster -1). Tomaremos $\varepsilon = 0.15$ porque produce sólo 3 clusters y sólo desecha 183 instancias.

ε	K	Calinski	Silhouette
0.1	14	888.21	0.871
0.15	3	1053.3	0.535
0.2	4	848.14	0.5414
0.25	4	862.67	0.5417
0.3	2	358.65	0.526
0.35	1	189.82	0.7647

ε	K	Calinski	Silhouette
0.1	14	888.21	0.871
0.11	14	888.21	0.871
0.12	8	1540.86	0.59
0.13	8	1540.86	0.59
0.14	8	1540.86	0.59
0.15	3	1053.3	0.535

Tabla 6: Scores de DBSCAN para distintos radios máximos de cluster.

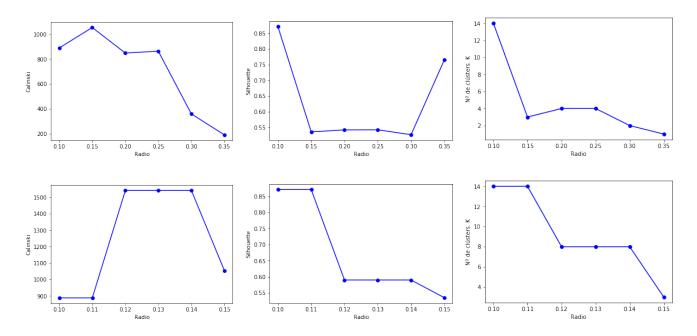


Figura 34: Scores y Nº de clusters de DBSCAN para distintos radios máximos.

Hay que tener en cuenta que este algoritmo agrupa los datos que considera ruidosos en un único cluster con la etiqueta -1. Desecharemos este cluster, por lo que perderemos algunas instancias, en este caso 183. También vemos el tamaño del resto de clusters.

```
Counter({-1: 183, 0: 5042, 1: 628, 2: 116})
```

Desechamos el cluster -1 con el siguientes código, y también aprovechamos para calcular los centroides a mano como hicimos con Ward.

```
dataC=data.copy()
dataC['cluster']=labels
dataC.drop(dataC[dataC['cluster']==-1].index,inplace=True)
centroids = dataC.groupby('cluster').mean().values
```

Interpretación de la segmentación

Representamos primero para K=3 los centroides y distribuciones de cada cluster.

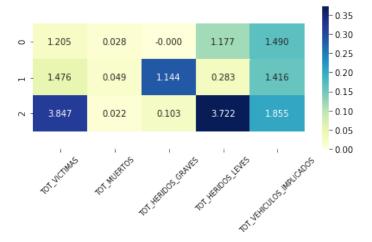


Figura 35: Centroides de los clusters generados por K-means.

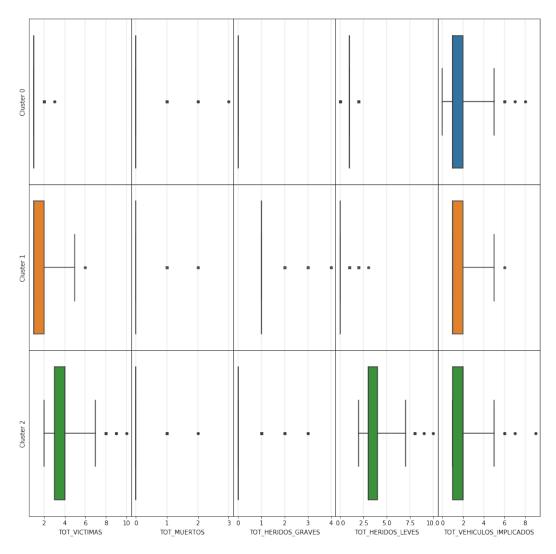


Figura 36: Distribución de las variables en los clusters generados por K-means.

Observamos que el número de vehículos implicados no se utiliza para distinguir clusters. Tenemos el cluster 0 (mucho más grande) con accidentes leves, el cluster 2 con accidentes con un elevado número de víctimas (la mayoría leves) y el cluster 1, que agrupa los accidentes con heridos graves, generalmente hay 1, podrían tratarse de atropellos, por ejemplo.

El número de muertos sigue sin ser lo suficientemente significativo para que se tenga en cuenta en esta segmentación, pero por primera vez observamos un cluster que agrupa accidentes con heridos graves.

Esta vez los 5969 accidentes acumulan 180 muertos y 882 heridos graves. En cuanto a muertos, es una proporción más grande que en el primer caso de estudio. Mientras que en cuanto a heridos graves es una proporción similar.

Al igual que en el anterior caso de estudio, la mayoría de las víctimas son leves. Pero en este uno de los problemas que comentamos en pairplot (no se distinguía si había un accidente o 1000 con determinados valores de las variables, simplemente aparecía un punto) no nos impide visualizarlo. En la Figura 37, observamos que las gráficas que comparan el número de víctimas con el número de heridos leves tienen aproximadamente una tendencia lineal con pendiente 1, esto significa que el número de heridos leves es casi el número de víctimas. Obviamente no puede haber más heridos leves que víctimas, puesto que

TOT_VICTIMAS=TOT_MUERTOS+TOT_HERIDOS_GRAVES+TOT_HERIDOS_LEVES

El cluster 1 (puntos naranjas) es una excepción a esta tendencia, puesto que agrupa los accidentes con heridos graves.

Esta tendencia lineal entre el número de víctimas y heridos leves se observa en el resto de pairplots de este caso de uso para todas las segmentaciones, tanto con los accidentes a altas horas de la madrugada como con los accidentes en horas puntas. Así que omitiremos el resto de pairplots.

También en la Figura 37, en la gráfica de la diagonal correspondiente a los heridos graves observamos que los elemenos del cluster 1 concentran la mayoría de accidentes con heridos graves, exceptuando algunos accidentes sueltos que están en el cluster 2, probablemente porque presenten un elevado número de víctimas. En la Figura 36 se observa que el cluster 0 no presenta un sólo accidente con heridos graves, por lo que no aparece (no se representan distribuciones degeneradas, salta un warning de varianza 0).

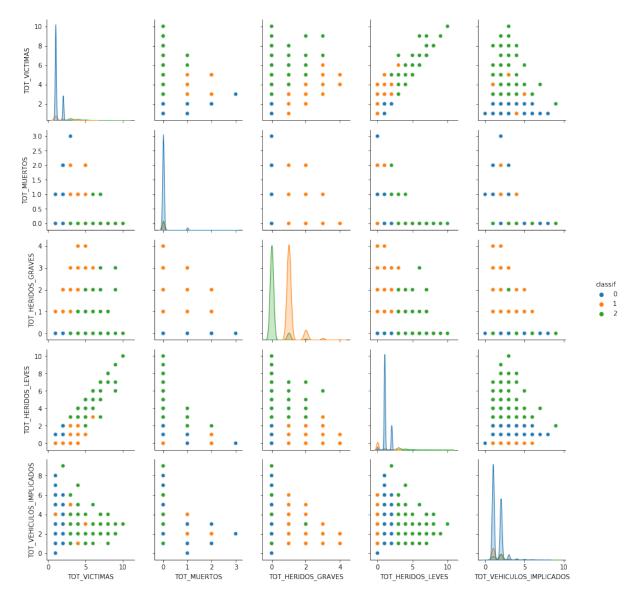


Figura 37: Pairplot del agrupamiento generado por K-means para K=3.

Para K=6 generamos las representaciones análogas:

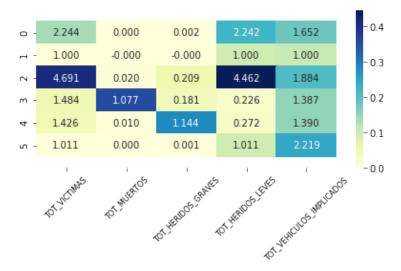


Figura 38: Centroides de los clusters generados por K-means.

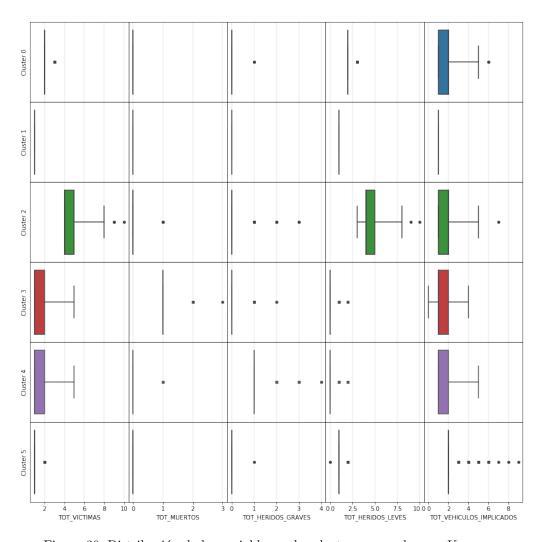


Figura 39: Distribución de las variables en los clusters generados por K-means.

Esta vez tenemos por fin un cluster que agrupa por muertos (cluster 3) y otro que agrupa por heridos graves (cluster 4). Como consecuencia, el resto de cluster apenas presentan muertos, sólo hay algunos accidentes con muertos en los cluster 2 (porque presentará un elevado número de víctimas) y en cluster 4 (porque también habrá heridos graves).

En la segmentación con **DBSCAN** tenemos las siguientes representaciones:

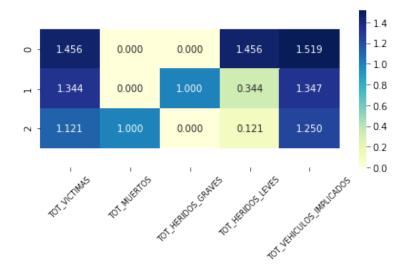


Figura 40: Centroides de los clusters generados por DBSCAN.

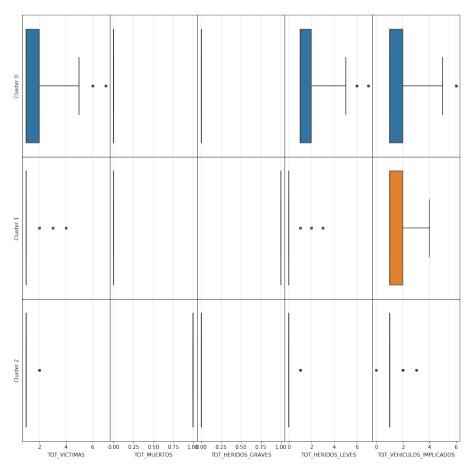


Figura 41: Distribución de las variables en los clusters generados por DBSCAN.

Esta vez se han utilizado únicamente los muertos y heridos graves para la segmentación. El cluster 0 incluye accidentes donde todos los heridos son leves. El cluster 1 incluye accidentes donde hay un único herido grave y ningún muerto. Y el cluster 2 incluye accidentes donde hay un único muerto y ningún herido grave. Podemos observar en la figura 41 que no hay excepciones a esta regla, esto se debe a que los accidentes con más de un muerto, más de un herido grave o tanto muertos como heridos graves han sido agrupados con los outliers y descartados en el cluster -1.

No se ha utilizado el número de víctimas ni de vehículos implicados para el agrupamiento, pero podemos observar en la figura 40 que los accidentes con mayor gravedad (con muertos, seguidos de con heridos graves) acostumbran a presentar un menor número de vehículos implicados y menor número de víctimas totales. Aunque tenemos que interpretar esto con cuidado, pues el número de elementos en el cluster 2 (116) es menor que el del cluster -1 (183). Por tanto, esas 183 instancias que el algoritmo ha dejado sin agrupar podrían cambiar drásticamente esta tendencia.

3.2. Accidentes a horas puntas

Algoritmos de clustering y resultados

Una vez más, buscamos un K adecuado para K-means, probamos valores y obtenemos los siguientes scores:

K	Calinski	Silhouette
2	2696.34	0.6136
3	3042.18	0.6097
4	3856.17	0.6435
5	3842.02	0.7095
6	4015.9	0.7259
7	4439.09	0.7731
8	4621.84	0.805
9	4772.9	0.8667

Tabla 7: Scores de K-means para distinto número de clusters.

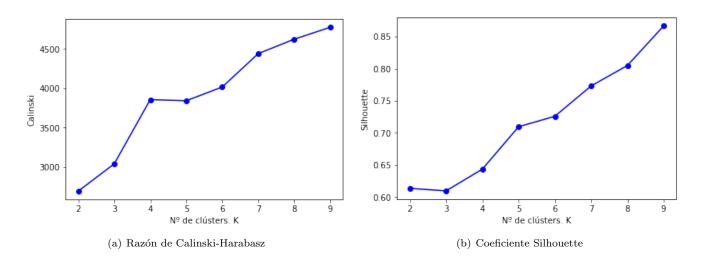


Figura 42: Representaciones de los scores de K-means para distinto número de clusters.

Observando las gráficas, Calinski nos sugiere K=4 y Silhouette K=5. Elegimos K=4 para que la segmentación sea más fácilemente interpretable. Obtenemos los siguientes tamaños de cluster:

Counter({0: 3629, 1: 497, 2: 2020, 3: 525})

Hacemos lo mismo con **DBSCAN** para estimar un radio adecuado.

ε	K	Calinski	Silhouette
0.1	10	1217.9	0.8902
0.15	2	1071.13	0.5441
0.2	2	1024.81	0.5426
0.25	2	1024.81	0.5426
0.3	1	445.16	0.7473
0.35	1	449.2	0.7369

ε	K	Calinski	Silhouette
0.1	10	1217.9	0.8902
0.11	10	1217.9	0.8902
0.12	10	1217.9	0.8902
0.13	10	1217.9	0.8902
0.14	6	1111.97	0.6051
0.15	2	1071.13	0.5441

Tabla 8: Scores de DBSCAN para distintos radios máximos de cluster.

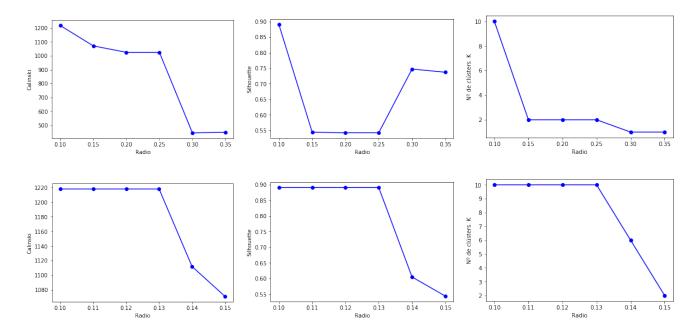


Figura 43: Scores y Nº de clusters de DBSCAN para distintos radios máximos.

Nos ha vuelto a ocurrir lo mismo, había mucha diferencia en Silhouette y en el número de clusters entre $\varepsilon=0.1$ y $\varepsilon=0.15$. Por lo que volvemos a evaluar las métricas para varios valores de ese intervalo. Nos quedaremos con $\varepsilon=0.15$, que genera menos clusters (2 frente a 6), agrupa menos elementos en el cluster -1 (124 frente a 170) y la diferencia en las métricas no es demasiada. Obtenemos los siguientes tamaños de cluster, y descartaremos el cluster -1.

Counter({-1: 124, 0: 6074, 1: 473})

Interpretación de la segmentación

Visualizamos los centroides y la distribución los valores de los atributos en cada cluster para el agrupamiento generado por **K-means**.

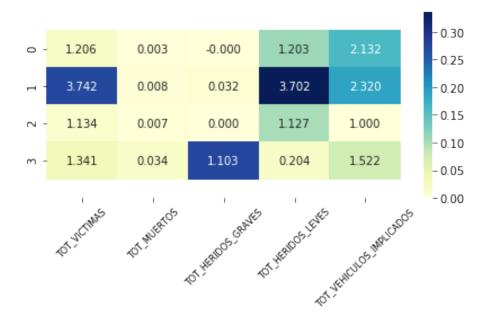


Figura 44: Centroides de los clusters generados por K-means.

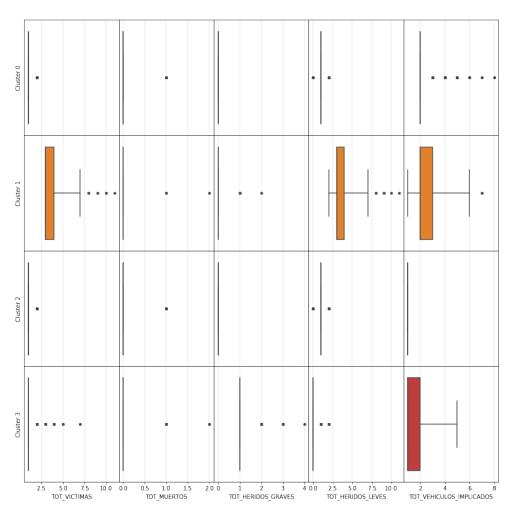


Figura 45: Distribución de las variables en los clusters generados por K-means.

Observamos dos clusters de accidentes leves (normalmente un sólo herido leve), uno con exactamente (en la Figura 45 se ve una barra en el 1 y ningún punto en el resto de valores) un vehículo implicado (cluster 2) y el otro con dos o más (cluster 0). Otro cluster (cluster 1) con accidentes con más víctimas, aunque la mayoría leves. El cluster 3 agrupa los accidentes con heridos graves.

En esta ocasión, el agrupamiento tampoco diferencia por el total de muertos, probablemente por el reducido número de muertos en estos accidentes. Entre los 6671 accidentes suman 47 muertos, la proporción más baja entre las clases que hemos estudiado.

Ahora analizamos el agrupamiento generado por **DBSCAN**:

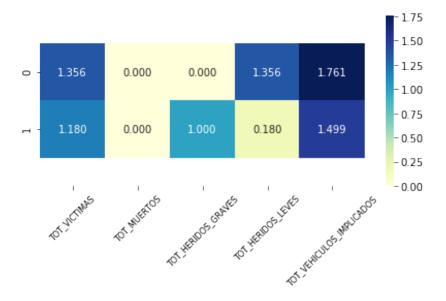


Figura 46: Centroides de los clusters generados por DBSCAN.

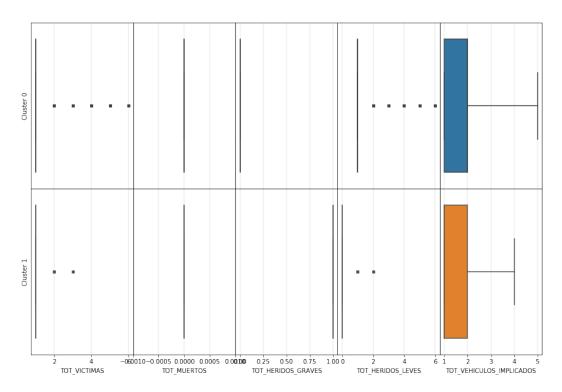


Figura 47: Distribución de las variables en los clusters generados por DBSCAN.

Tenemos el cluster 0, mucho más numeroso, que agrupa los accidentes sin heridos leves. Mientras que el cluster 1, más reducido, agrupa los accidentes con un único herido grave. En la Figura 47 observamos que no hay excepciones.

Entre los 124 datos que DBSCAN considera como ruidosos y agrupa en el cluster -1, están todos los accidentes con víctimas mortales y los que tienen más de un herido grave. Por la baja proporción de este tipo de accidentes dentro de la clase, el algoritmo los ha considerado como ruidosos.

3.3. Comparación de ambas clases

Compararemos las dos clases que acabamos de segmentar. Intuitivamente, los accidentes a altas horas de la noche deberían producirse en calles o carreteras prácticamente vacías, donde la gente suele conducir muy rápido, a la máxima velocidad permitida por la vía y en ocasiones sobrepasando el límite. Esto se traduciría en accidentes graves.

Los accidentes a horas puntas deberían producirse en el interior de las ciudades y en circunvalaciones, con tráfico denso o colapsado, donde la gente va más atenta y despacio. Según esta intuición deberían de ser accidentes más leves, como choques suaves o por alcance en el caso de atascos o semáforos.

Atenderemos a los agrupamientos generados por K-means. En la clase de accidentes a altas horas de la madrugada tenemos 5969 instancias. El agrupamiento con K = 3 (figuras 35 y 36) nos proporcina los siguientes clusters:

- 0. 4652 instancias. Accidentes con normalmente un herido leve y sin heridos graves ni muertos. Generalmente 1 o 2 vehículos implicados.
- 1. 717 instancias. Accidentes con al menos un herido grave (la mayoría tienen 1), normalmente no tienen heridos leves (salvo alguna excepción).
- 2. 600 instancias. Accidentes con dos o más víctimas, la mayoría de ellas leves. Aunque la mayoría de accidentes de este cluster presentan 3 ó 4 víctimas.

En la clase de accidentes a horas puntas tenemos 6671 instancias. El agrupamiento con K = 4 (figuras 44 y 45) nos proporciona los siguientes clusters:

- 0. 3629 instancias. Accidentes con normalmente un herido leve y sin heridos graves ni muertos, con 2 o más vehículos implicados (generalmente dos).
- 1. 497 instancias. Accidentes con dos o más víctimas, la mayoría de ellas leves. Aunque la mayoría de accidentes de este cluster presentan 3 ó 4 víctimas.
- 2. 2020 instancias. Accidentes con normalmente un herido leve y sin heridos graves ni muertos, con exactamente un vehículo implicado.
- 3. 525 instancias. Accidentes con al menos un herido grave (la mayoría tienen 1), normalmente no tienen heridos leves (salvo alguna excepción).

Parece que los agrupamientos son similares y que el cluster 0 de la primera clase equivale a los clusters 0 y 2 de la segunda. Estos accidentes más leves (una sola víctima y leve) representan un 77.936% de los accidentes en la primera clase (madrugada) y un 84.68% de los accidentes en la segunda (horas puntas).

El cluster 1 de la primera clase equivale al cluster 3 de la segunda clase. Estos accidentes con heridos graves representan un 12% en la primera clase y un 7.87% en la segunda.

El cluster 2 de la primera clase equivale al cluster 1 de la segunda. Estos accidentes con múltiples víctimas (la mayoría leves) representan un 10.05% de los accidentes de la primera clase y un 7.45% de los de la segunda.

Estos dos últimos párrafos describen dos clases de accidentes de mayor gravedad, ya sea por número de heridos o por gravedad de los heridos. Entre los accidentes a altas horas de la madrugada, estos más graves representan un porcentaje mayor que en los accidentes en horas puntas, donde la proporción de accidentes con sólo un herido leve es mayor. Esto apoya nuestra intuición de que los accidentes a horas puntas son más leves que los accidentes a altas horas de la madrugada.

4. Contenido adicional

4.1. Outliers y la poca importancia de los heridos graves y muertos

Hemos observado que en el primer caso de uso ninguno de los algoritmos ha distinguido por heridos graves ni muertos a la hora de generar los clusters. Los 4143 datos del caso de estudio 1 suman 92 muertos y 714 heridos graves, que en proporción es mayor a los 595 heridos graves y 47 muertos que acumulan los 6671 accidentes ocurridos a horas puntas, donde sí se ha utilizado el atributo total de heridos graves para la segmentación.

Este problema genera impurezas en los clusters, por ejemplo un accidente con un sola víctima que muere o resulta herida grave (un atropello, por ejemplo) podría aparecerer en el cluster de los accidentes leves (un sola víctima, que normalmente es leve), por el hecho de presentar una sóla víctima. Cuando, de no agrupar por heridos graves y muertos, quizá tuviese más sentido agrupar ese accidente en un cluster de accidentes con múltiples víctimas, que podemos considerar accidentes más graves.

El origen de este problema se debe a que hemos tomado la decisión de limpiar los datos de outliers en el resto de atributos (número de víctimas, heridos leves y vehículos implicados). Esto provoca que al normalizar los atributos entre 0 y 1, los atributos en los que limpiamos los outliers ganen más relevancia.

Por ejemplo, en presencia del accidente con 52 víctimas. Al normalizar con MinMaxScaler, los accidentes con 5 víctimas obtienen el valor $\frac{5-1}{52-1}\approx 0.078$. Mientras que si el máximo de víctimas fuese 10, este valor sería de $\frac{5-1}{10-1}\approx 0.44$. Si el número máximo de muertos es 4, un accidente con un muerto pasaría a tener el valor $\frac{1}{4}=0.25$. En el primer caso (sin limpiar outliers), se considerarían dos accidentes con el mismo número de muertos pero que se diferencien en 5 víctimas más similares que dos accidentes que se diferencien en 1 muerto pero en menos de 5 víctimas. En el segundo caso (limpiando outliers), ocurre lo contrario.

Esto se podría solucionar de diversas formas, al menos para el agrupamiento con K=6:

- Crear una métrica customizada en lugar de la euclídea que utilizan por defecto los algoritmos para dar más peso a estas variables.
- No limpiar los outliers, al coste de que las gráficas tengan ejes con escalas desproporcionadas. En presencia de un accidente con 52 víctimas, no podríamos distinguir entre 1 víctima y 4 víctimas con un simple vistazo a la gráfica, ya que se verían muy próximos.
- Haber limpiado también los outliers en los atributos número de muertos y de heridos graves. El problema de esta medida es que tomando $\mu \pm 3 \cdot \sigma$ como margen (normalmente se utiliza 1.5 en lugar de 3), se eliminaban todos los muertos y heridos graves. Podríamos haber tomado más margen, o simplemente haber colapsado en 1 ó 2 los valores de estos atributos que los superasen, de forma que los atributos número de muertos y heridos graves pierdan menos importancia al normalizar.
- Haber limpiado los outliers manualmente. Esto no siempre es posible, pero es lo que hemos aplicado en el segundo caso de estudio eliminando solamente el accidente con 52 víctimas.

4.2. Estudio de variables circunstanciales y de tipo dentro de los clusters

En la interpretación del agrupamiento por K-means del **primer caso de estudio** (figuras 25 y 26), especulamos con los tipos de accidentes que podrían formar cada cluster. Comprobaremos si estábamos en lo cierto.

Primero estudiaremos la proporción de choques frontales y laterales respecto a los choques por alcance. Compararemos dichas proporciones entre clusters y con la clase completa (accidentes en condiciones "óptimas" para la conducción).

Conjunto de datos	Choques frontales o laterales	Choques por alcance
General	0.3367	0.1624
Cluster 0	0.4105	0.2888
Cluster 1	0.0	0.0
Cluster 2	0.5963	0.2691

Tabla 9: Proporción de los tipos de choque entre los distintos conjuntos de datos.

Obviamente en el cluster 1 no hay ningún choque entre vehículos, puesto que todos los accidentes que lo componen tienen un sólo vehículo implicado.

Nos sorprende que en el cluster 0, donde hay accidentes con más víctimas, abunden más los choques por alcance que los frontales y laterales que en el cluster 2, donde los accidentes acostumbran a tener menos víctimas; y para los choques por alcance ocurre lo contrario. Esto es lo opuesto a lo que razonamos teniendo en cuenta que los choques frontales y laterales suelen ser más graves que los choques por alcance.

Sospechamos que la mayoría de choques del cluster 2 se produjeron a baja velocidad en zonas urbanas.

Conjunto de datos	Vías urbanas	Vías interurbanas
General	0.518	0.482
Cluster 0	0.3985	0.6014
Cluster 1	0.4591	0.5409
Cluster 2	0.5904	0.4096

Tabla 10: Proporción de las zonas donde ocurren los accidentes en los distintos conjuntos de datos.

Observando la tabla, podemos concluir que la mayor gravedad de los accidentes del cluster 0 respecto al 2 no se debe al tipo de accidentes, sino a que una mayor proporción de accidentes ocurren en vías interurbanas, donde se circula más rápido.

Ahora, analizaremos el agrupamiento generado por K-means con K=6 del **segundo caso de estudio** para la clase de accidentes a altas horas de la madrugada (figuras 38 y 39). En concreto investigaremos qué variables de circunstancia o tipo diferencian a los clusters 3 y 4 (con muertos y heridos graves respectivamente) del resto.

Empezamos por las proporciones de los tipos de choque.

Conjunto de datos	Choques frontales o laterales	Choques por alcance
General	0.2173	0.1184
Cluster 3	0.1226	0.0645
Cluster 4	0.1599	0.0683

Tabla 11: Proporción de los tipos de choque entre los distintos conjuntos de datos.

Observamos que la proporción de choques frontales o laterales es menor en estos clusters que en la clase completa, sobre todo en el de muertos. Aún menor es la proporción de choques por alcance, lo que indica que los choques por alcance son menos propensos a producir muertos y heridos graves que los choques frontales y laterales. Sin embargo, el tipo de choques no parece la causa de que los accidentes de los clusters 3 y 4 presenten muertos y heridos graves, volvemos a probar con la zona en la que ocurren.

Conjunto de datos	Vías urbanas	Vías interurbanas
General	0.5016	0.4984
Cluster 3	0.271	0.729
Cluster 4	0.4535	0.5465

Tabla 12: Proporción de las zonas donde ocurren los accidentes en los distintos conjuntos de datos.

Observamos que en los clusters 3 y 4 hay una mayor proporción de accidentes en zonas interurbanas, sobre todo en el 3 (el de los accidentes con muertes). La zona en la que ocurren los accidentes parece ser un factor más influyente en la gravedad (en el sentido de que haya heridos graves y muertos) de los accidentes.

Por último, comprobamos que la proporción de atropellos entre los accidentes mortales es mucho mayor que en la totalidad de la clase. En el caso del cluster de accidente con heridos graves, la proporción de atropellos es también mayor, pero no destaca tanto como en el cluster 3. Esto sugiere que los atropellos son más propensos a presentar víctimas graves y sobre todo mortales entre la totalidad de la clase.

Conjunto de datos	Atropellos
General	0.0591
Cluster 3	0.1742
Cluster 4	0.0959

Tabla 13: Proporción de atropellos en los distintos conjuntos de datos.

5. Bibliografía/Webgrafía

Portal estadístico DGT:

https://sedeapl.dgt.gob.es/WEB_IEST_CONSULTA/subcategoria.faces

Wikipedia:

- Algoritmo K-means: https://en.wikipedia.org/wiki/K-means_clustering
- Algoritmo DBSCAN: https://en.wikipedia.org/wiki/DBSCAN
- Algoritmo Ward: https://en.wikipedia.org/wiki/Ward%27s_method
- Índice Silhouette: https://en.wikipedia.org/wiki/Silhouette_%28clustering%29
- Razón de Calinski-Harabasz: https://www.tandfonline.com/doi/pdf/10.1080/03610927408827101?needAccess=true
- Método del codo: https://en.wikipedia.org/wiki/Elbow_method_%28clustering%29

Documentación sklearn:

- MinMaxScaler: https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.preprocessing.MinMaxScaler.html
- $\blacksquare \ Algoritmo \ K-means: \ https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.cluster.KMeans.html$
- ${\color{red} \bullet \ \, Clustering \, aglomerativo: https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.cluster. Agglomerative Clustering.html}}$
- Algoritmo DBSCAN: https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.cluster.DBSCAN.html