

Análisis espacial de datos y sus aplicaciones en Python

Profesor: Germán González

Sesión 6: Agrupación y optimización



Índice

Identificación de rutas y tiempo de recorrido

K-medias

K-prototipos

DBSCAN



Índice

Identificación de rutas y tiempo de recorrido

K-medias

K-prototipos

DBSCAN

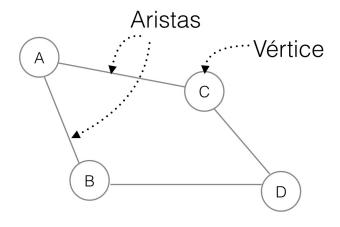


Grafos

Composición de un conjunto de objetos conocidos como nodos que se relacionan con otros nodos a través de un conjunto de conexiones conocidas como aristas.

Sea G un grafo, cuya relación es G=(N,A) donde n es una colección de puntos llamados nodos (o vértices) unidos por líneas llamadas arista. Cada arista une dos vértices.

Los grafos permiten estudiar las relaciones que existen entre unidades que interactúan con otras.

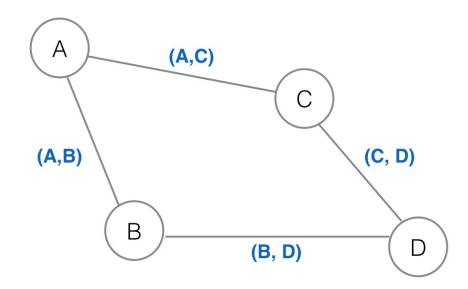


Vértices (Nodos): A, B, C y D



Grafos no ordenados

El orden de los vértices no define nada de información, pero sí índica qué vértices están conectados entre si.



Vértices (Nodos): A, B, C y D Arístas: (A,B), (A,C), (C,D), (B,D)

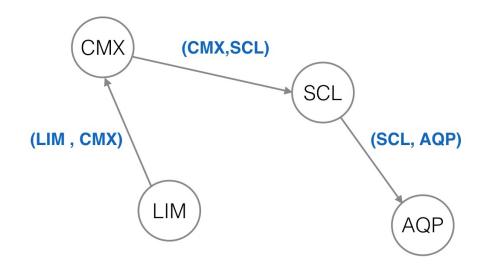


Grafos dirigido

Los vértices tienen un orden y su vez índica qué vértices están conectados entre si. El orden se representa con flechas en las aristas.

Ejemplo: Trayecto de un avión de carga:

Lima (LIM) – Ciudad de México (CMX) – Santiago (SCL) – Arequipa (AQP)



Vértices (Nodos): LIM, CMX, SCL y AQP Aristas: (LIM,CMX),(CMX,SCL),(SCL,AQP)

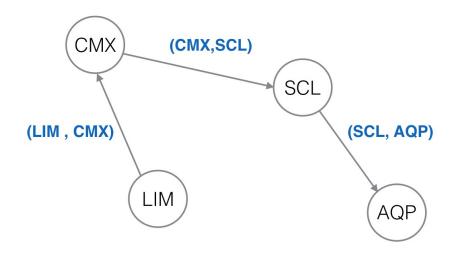


Camino (Path)

En un Grafo dirigido se llama camino a la secuencia de vertices que conectan las aristas del grafo.

En el ejemplo el camino es [LIM, CMX, SCL, AQP]. Este camino es usando 3 aristas para conectar los vértices.

La cantidad de aristas que usa un camino se le llama el *largo* (*length*) del camino



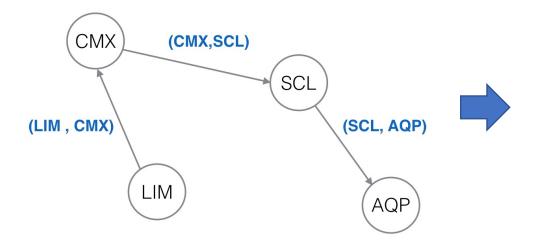
Vértices (Nodos): LIM, CMX, SCL y AQP

Arístas: (LIM,CMX),(CMX,SCL),(SCL,AQP))



Matriz de adyacencia

La matriz de adyacencia es una matriz cuadrada que se utiliza como una forma de representar relaciones binarias.



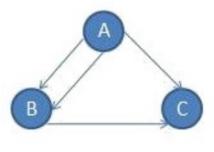
	LIM	CMX	SCL	AQP	
LIM		0	1	0	0
CMX		1	0	1	0
SCL		0	1	0	1
AQP		0	0	1	0



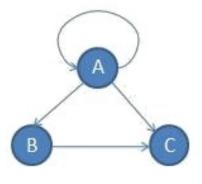
Multigrafo

Este tipo de atienen la capacidad de tener múltiples aristas aristas que relacionan los mismos nodos. De esta forma, dos nodos pueden estar conectados por más de una arista.

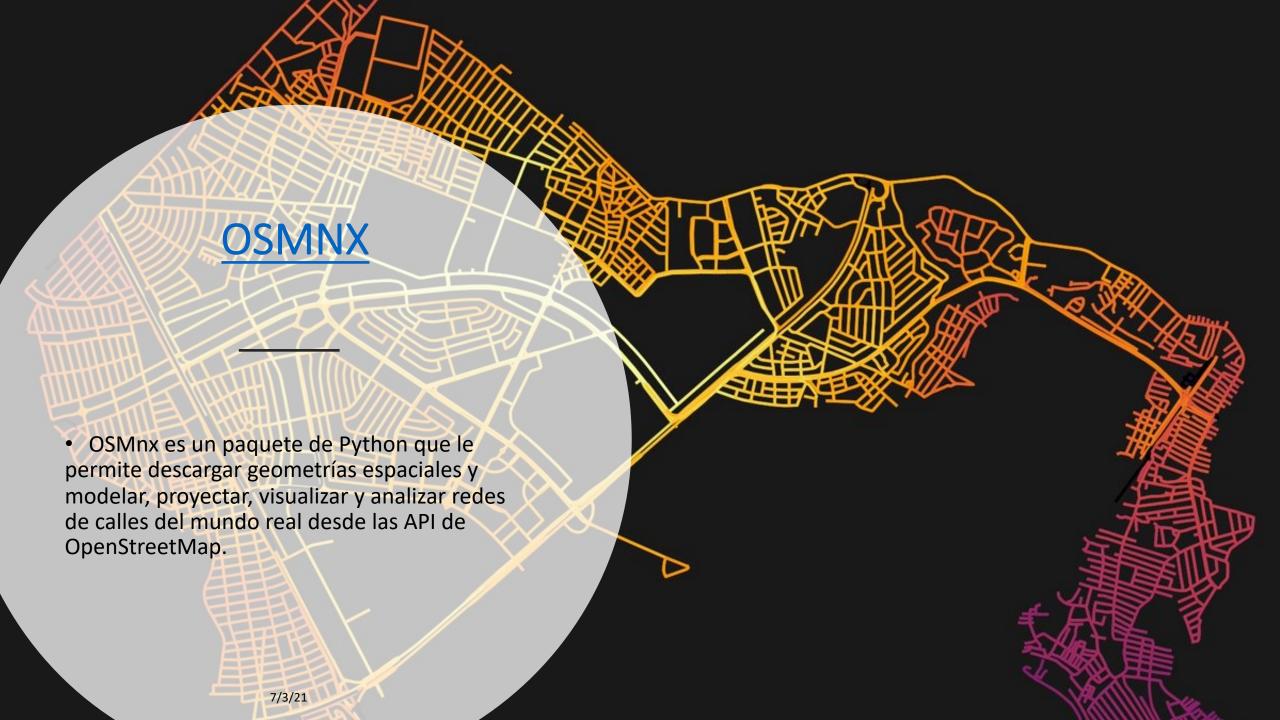
Sea G un multigrafo, G=(N,A) donde n es una colección de puntos llamados nodos (o vértices), y A es un multiconjunto de pares no ordenados de nodos.



Multigrafo



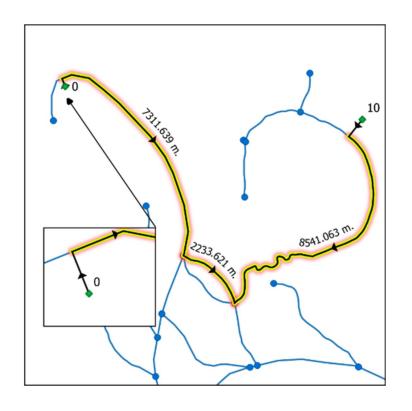
Multigrafo





Calles - Aristas







Dijkstra's

Objetivo: Encontrar la ruta más corta (camino) que conecta a dos puntos en un grafo. Puede utilizar grafos dirigidos y no dirigidos.

Paso 1: Establecer vértices objetivo: (Punto de llegada y punto de salida)

Paso 2: Se elige el nodo de inicio y se evalúa el costo a los vértices adyacentes

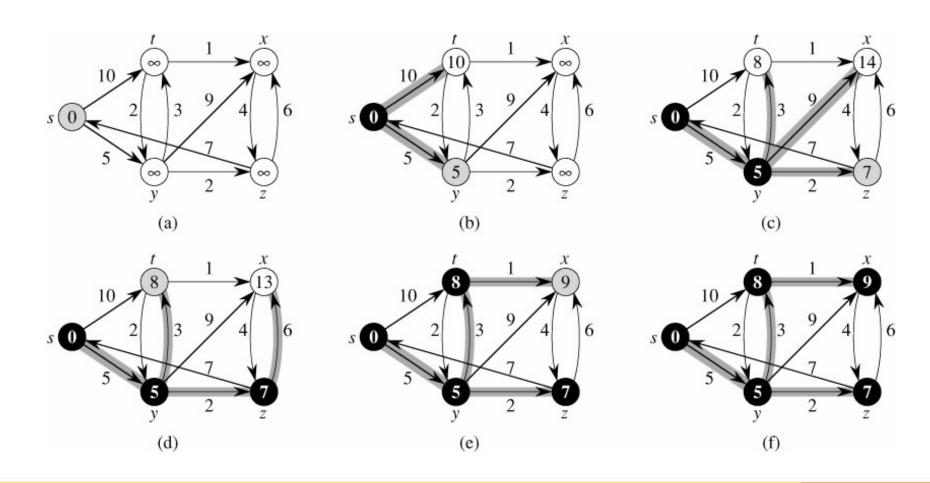
Paso 3: Se selecciona el nodo adyacente con costo mínimo y se fija como nodo de inicio.

Paso 4: Los pasos 2 y 3 deben repetirse teniendo en cuenta que el costo de va acumulando a medida que se va visitando cada nodo.

Se debe tener en cuenta si al intentar calcular los pesos para los nodos adyacentes a un nodo que esta siendo visitado, uno de estos ya tiene un peso asignado, deben calcularse los demás pesos cuantas veces sean necesario, y siempre se tomara el peso mínimo calculado. (Los nodos pueden ser visitados una sola vez)

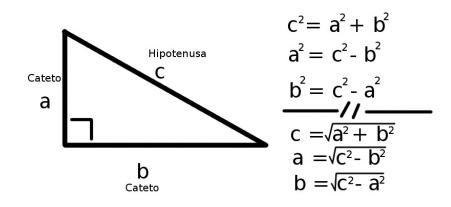


Dijkstra: S (inicial) -> x (final)

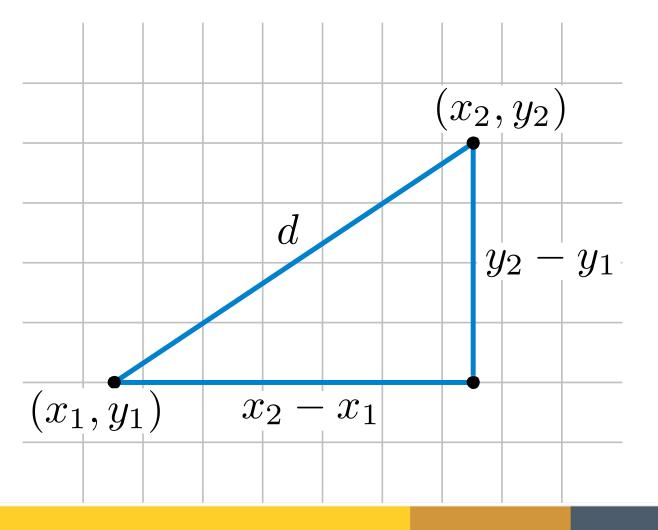




Distancia Euclidiana



$$d_E(P_1,P_2) = \sqrt{(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2}$$





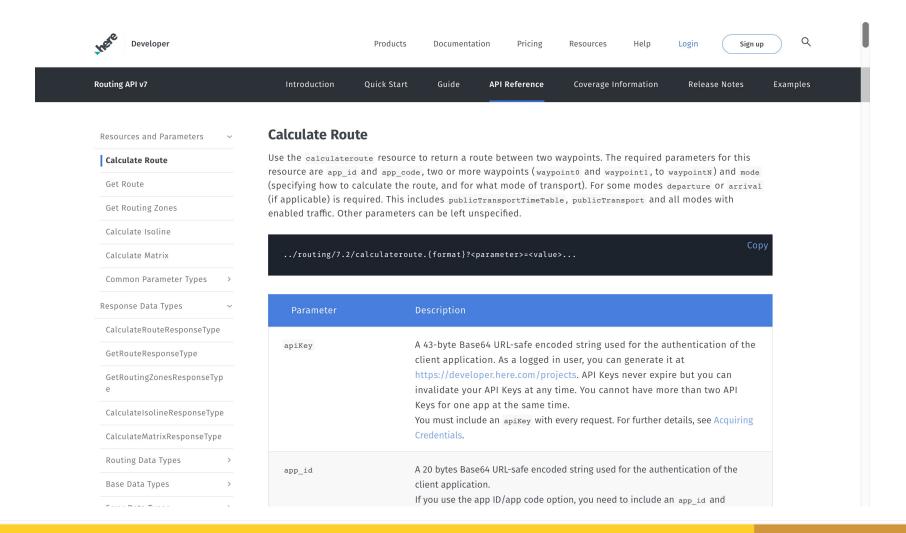
Análisis de movilidad



7/3/21 15

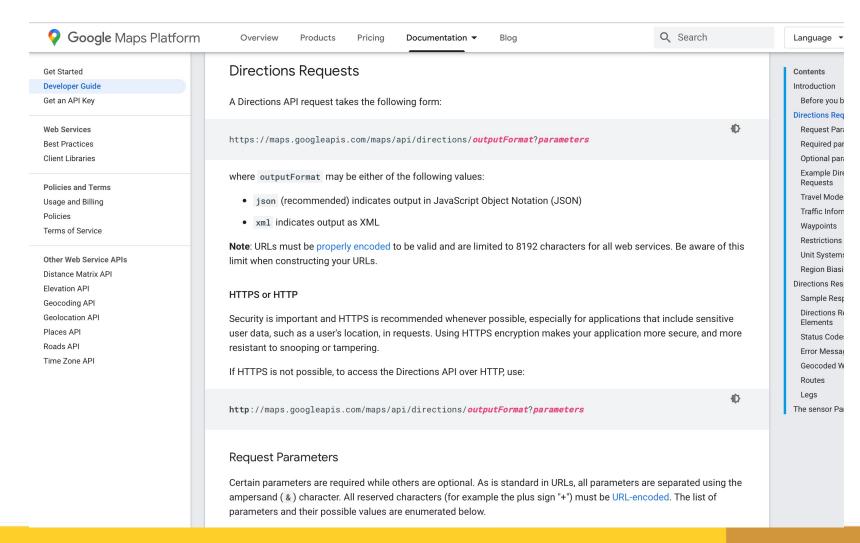


HERE





Google



 \perp

GTFS - Transporte Público

Objetivo

El formato común para los horarios de transporte público y la información geográfica relacionada. Los "Feeds" GTFS permiten que las empresas de transporte público publiquen sus datos y que los desarrolladores programen aplicaciones que consuman esos datos de transporte público de manera interoperable.

- Descripción
- Referencias
- Tiempo real
- GTFS por país
- <u>Colombia</u>







Índice

Identificación de rutas y tiempo de recorrido

K-medias

K-prototipos

DBSCAN

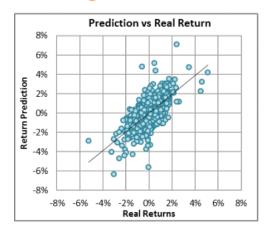


Machine Learning

Modelos supervisados:

El aprendizaje supervisado utiliza como entrenamiento un set de datos que contiene una marca o etiqueta en los datos. En este tipo de aprendizaje es claro la distinción entre las variables independientes y la variable dependiente.

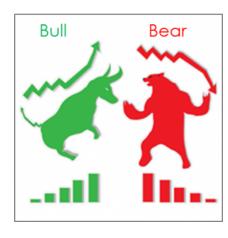
Regression



Regresión: Estimación continua

Classification

VS



Clasificación: Estimación discreta

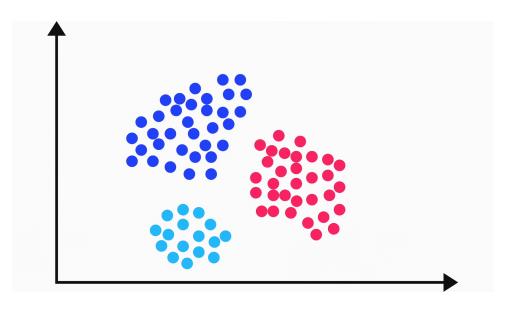


No-supervisado

Sin conocer una etiqueta previa de los datos, se busca entender la distribución intrínseca de nuestros datos.

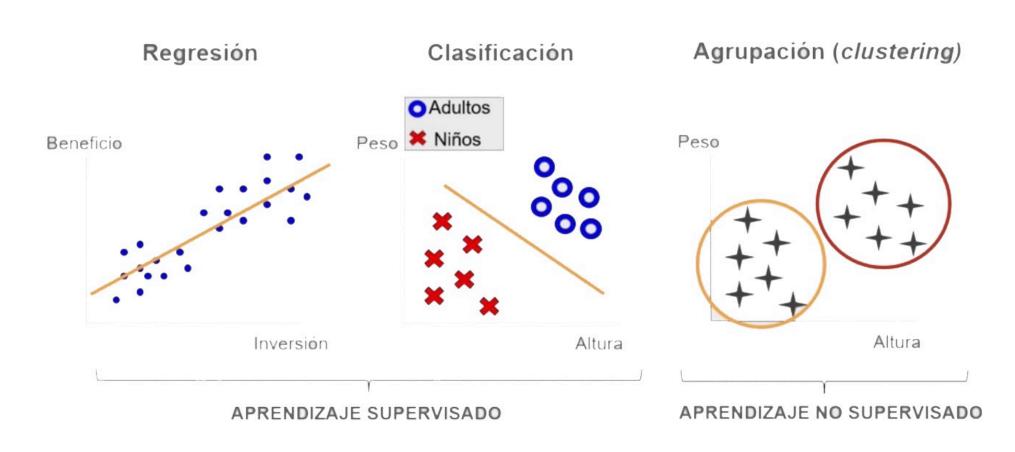
Aplicaciones:

- Métodos de agrupamiento
- Reducción de dimensionalidad.
- Detección de anomalías.
- Estimación de distribución empírica.





Machine Learning

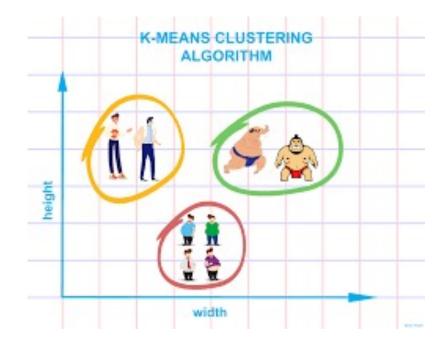




Los métodos de agrupamiento buscan subgrupos homogéneos, coherentes e interesantes de observaciones, para separar los datos entre tales subconjuntos.

Queremos dividir la base de datos en diferentes grupos tales que las observaciones en un mismo grupo sean similares entre sí, y observaciones en grupos distintos sean diferentes entre ellas.

¿Cómo definimos que dos datos como similares o diferentes?





¿Cómo definimos que dos datos como similares o diferentes?

Este es un método de aprendizaje no supervisado porque intenta rescatar información y estructura (distintos subgrupos) de la base de datos.

No se conoce la cantidad ni la forma que tienen estos clusters, ni tampoco a qué grupo pertenece cada observación:

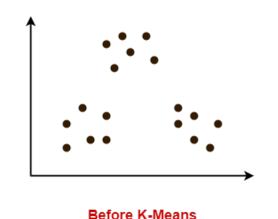
¿Cómo evaluamos qué tan buena es nuestra separación de los datos?

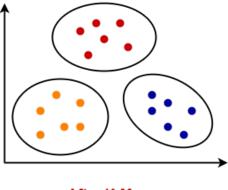


Si tenemos un conjunto de N observaciones $\{x_1,...,x_N\}$ (x_i es el vector de características del registro i), queremos encontrar conjuntos $C_1,...,C_K$ que agrupen los datos, y que cumplan dos condiciones:

- C₁ U C₂ U...U C_K ={x₁,...,x_M}: Cada observación pertenece al menos a uno de los K grupos.
- Ck ∩ Ck = Ø para todo k = k: Los grupos no se sobrelapan, i.e. ninguna observación pertenece a mas de un grupo.

Estas dos condiciones combinadas resultan en que cada una de las observaciones xi pertenece a uno, y solo uno, de los clusters Ck.



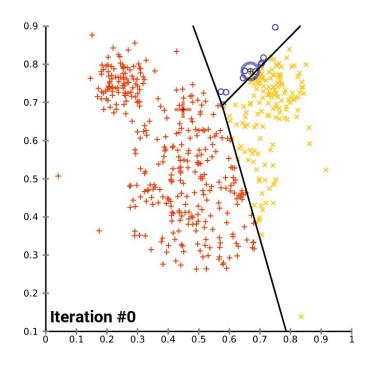


After K-Means



- Intuitivo y fácil de usar.
- Eficiente computacionalmente.
- Muy popular y conocido.

La idea detrás de este método de agrupamiento es que una buena manera de segmentar los datos es haciendo que la varianza dentro de cada grupo sea tan pequeña como sea posible.





Dado un subconjunto de los datos Ck, se calcula su media interior para la característica j como:

$$\overline{x}_1^k = \frac{1}{|c_k|} \sum_{x_i \in C_k} x_{i,j}$$

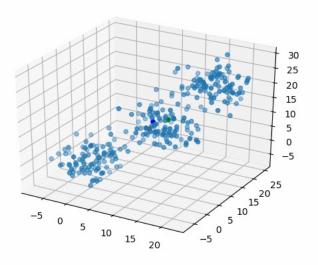
En Donde

- |Ck| el número de elementos en el clúster
- $\sum_{x_i \in C_k} x_{i,j}$ la suma solo se tienen en cuenta aquellas observaciones pertenecientes al grupo.



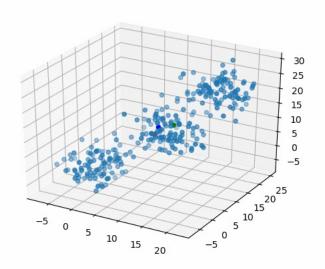
Al vector que recoge la media de cada variable al interior de un cluster se le conoce como centroide del grupo, y se denota con la letra griega µ.

 $\mu_k = (\overline{x}_1^k, \overline{x}_2^k, \dots, \overline{x}_p^k)$ es el centroide del cluster C_k con p caracteristicas





Se calcula entonces la varianza dentro del grupo (within cluster variation) Ck:



$$Var(C_k) = \sum_{j=1}^p Var(X_j^k) = \sum_{j=1}^p \left(\frac{1}{|C_k| - 1} \sum_{x_i \in C_k} (x_{i,j} - \bar{X}_j^k)^2
ight).$$

Queremos que esta varianza sea lo más pequeña posible, en otras palabras, que los datos dentro del cluster sean lo más parecidos.



De esta manera, queremos encontrar subgrupos de la base de datos C₁, . . . , C_k, tales que la suma de sus respectivas varianzas sea lo m´as pequen˜a posible.

Matemáticamente,

$$\min_{C_1,...,C_k} \sum_{k=1}^K Var(C_k) = \min_{C_1,...,C_k} \sum_{k=1}^K \left[\sum_{j=1}^p \left(\frac{1}{|C_k|-1} \sum_{x_i \in C_k} (x_{i,j} - \bar{X}_j^k)^2 \right) \right]$$



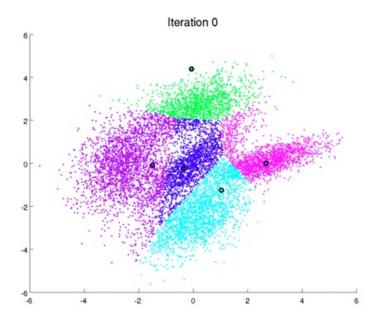
Se calcula entonces la varianza dentro del grupo (within cluster variation) Ck:

Dado el número K de grupos a encontrar:

 Seleccione aleatoriamente K observaciones de su muestra, y supongamos que estos son los centroides de los grupos buscados.

2. Repetir hasta que los grupos no varíen:

- a) Asignar a cada elemento el grupo del centroide mas cercano.
- b) Actualizar los centroides con los nuevos grupos formados.

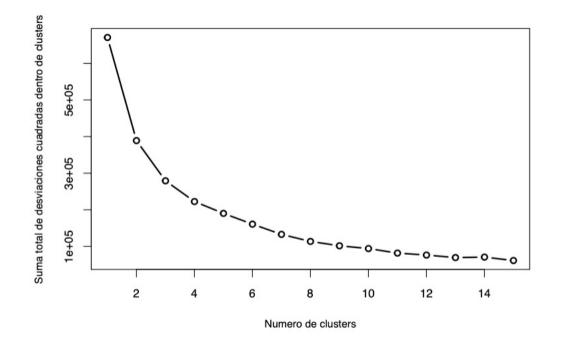




Se calcula entonces la varianza dentro del grupo (within cluster variation) Ck:

¿Cómo escogemos el número de grupos K?

- Con información previa del problema.
- Regla del codo.
- Criterio de la situlueta



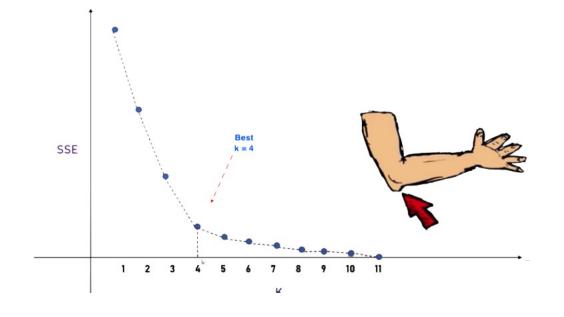


Regla del codo

Este método utiliza como criterio la suma de los cuadrados de las desviaciones entre cada punto (individuo) y la media del cluster en el que se integra. Esto se calcula para diferentes número sde Clusters (desde 1 a N Clusters).

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \widehat{y}_i)^2$$

Objetivo: Identificar el número de grupos en dónde el cambio de la suma de los cuadrados de las desviaciones entre cada punto y el centroide del cluster sea más drástico.





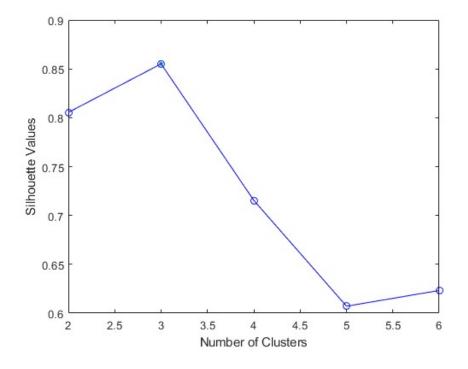
Criterio de la silueta

El criterio de la silueta se define como la diferencia entre la **separación** y la **cohesión** sobre el máximo de la cohesión y la separación.

La intuición detrás, es que un buen agrupamiento se logra cuando se alcanza la mayor separación entre los grupos respetando la cohesión entre estos.

Este criterio toma valores de -1 y 1.

- -1 significa un mal agrupamiento
- 0 indiferente
- 1 un buen agrupamiento.





Índice

Identificación de rutas y tiempo de recorrido

K-medias

K-prototipos

DBSCAN



Otras alternativas

La distancia euclideana base de K-medias no funciona para variables categóricas.

K-Modas, K-Medianas, K-medoids, K-prototipos.

K-Medianas: El centroide de cada grupo se construye con la mediana de cada variable. Limitado a datos continuos pero más robusto a datos atípicos.

K-Modas: En lugar de usar como centroide la media de cada variable, se utiliza la moda. Especialmente útil para variables categóricas, junto con distancias discretas.



Otras alternativas

La distancia euclideana base de K-medias no funciona para variables categóricas.

K-Medianas: El centroide de cada grupo se construye con la mediana de cada variable. Limitado a datos continuos pero más robusto a datos atípicos.

K-Modas: En lugar de usar como centroide la media de cada variable, se utiliza la moda. Especialmente útil para variables categóricas, junto con distancias discretas.

K-Medoides: El centroide de cada grupo es una de sus observaciones, y debe ser "central" al interior del grupo. Combina variables numéricas y categóricas. Costoso computacionalmente.

K-Prototipos: Combina medias de variables continuas con modas de variables categóricas, y distancias para cada tipo de variables.

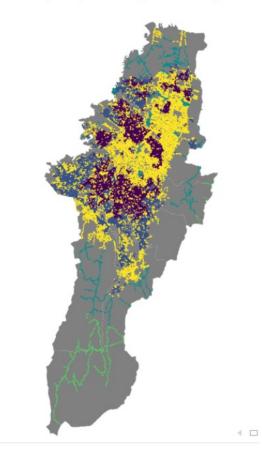


Ejemplo: K-protipos

Grupos espaciales Bogotá, 5-Prototipos

Se generaron grupos de lugares en la ciudad similares usando el estrato socioeconómico, si está en zona rural o urbana, y su distancia al CAI más cercano:

Metodología K – prototipos y escogencia de grupos por regla del codo.





Índice

Identificación de rutas y tiempo de recorrido

K-medias

K-prototipos

DBSCAN

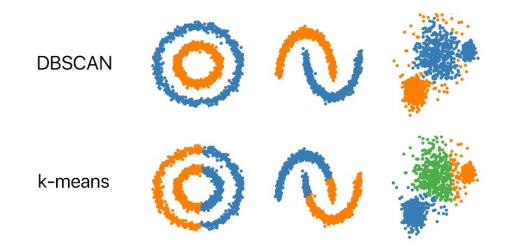


Clustering espacial basado en la densidad de aplicaciones con ruido (DBSCAN)

Se deben especificar dos parámetros:

Radio ε: La máxima distancia (euclideana) permitida para que un par de puntos sean considerados vecinos.

Min Points: Número mínimo de observaciones en cada grupo.





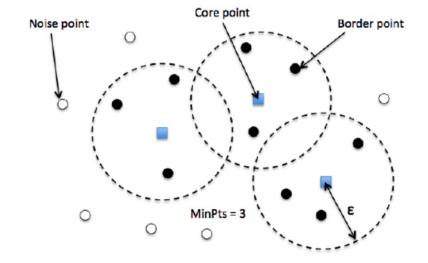
DBSCAN

Cada observación se cataloga en uno de tres tipos:

Punto central: Si existen más de Min Points observaciones (incluyéndolo a él mismo) a una distancia menor que ε .

Punto frontera: Observaciones que están a una distancia menor o igual que ϵ de alguno de los puntos centrales identificados, y no son ellas mismas puntos centrales.

Punto ruido: Registros no clasificados ni como punto central ni como punto frontera. Se encuentran a una distancia mayor que ϵ que todos los puntos centrales identificados, y se consideran observaciones ať ipicas.



7/3/21 41



DBSCAN

Ventajas:

- No se debe especificar el número de grupos.
- Flexibilidad en los tamaños y formas que toman los grupos identificados.
- Identifica simultáneamente observaciones ruido o atípicas.

Desventajas

- No determinístico por puntos a distancia menor que ε de varios puntos centrales.
- Escoger ε es difícil especialmente en dimensiones altas.
- No funciona bien para grupos de densidad variable. Aunque agrupa las regiones de alta densidad y las separan de las de baja densidad, tiene muchas dificultades en el caso de los grupos de densidad similar.

Gracias



7/3/21 43