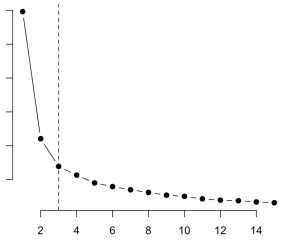
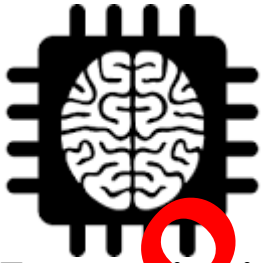
APRENDIZAJE NO SUPERVISADO

AGENDA



Evaluación del clustering

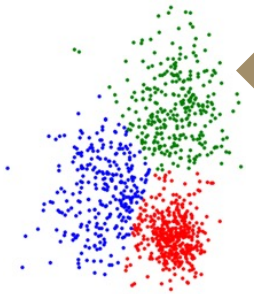


Aprendizaje automático

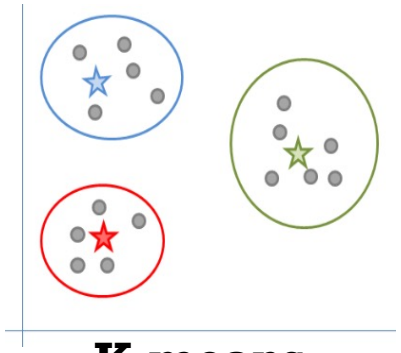
REPASO

Aprendizaje supervisado

Aprendizaje no supervisado



Clustering



K-means

UNIVERSIDAD ICESI

APRENDIZAJE AUTOMÁTICO

Aprendizaje supervisado

- Aprender a partir de un "experto"
- Datos de entrenamiento **etiquetados** con una clase o valor:

$$(x1, x2, \ldots, xn, y)$$

$(x1, x2, \ldots, xn)$: Predictores, explicativos, independientes

y: Dependiente, objetivo, salida

- **Meta**: predecir una clase o valor

Aprendizaje no supervisado

- Sin conocimiento de una clase o valor objetivo
- Datos **no** están **etiquetados**

$$(x1, x2, \ldots, xn)$$

- **Meta**: descubrir factores no observados, estructura, o una representación mas simple de los datos

APRENDIZAJE AUTOMÁTICO

Aprendizaje supervisado

Edad	Ingresos	Tiene carro?
24	1'200.000	NO
23	4'500.000	SI
45	1'250.000	SI
32	1'100.000	NO

Datos **etiquetados**: "Respuestas correctas" disponibles

Factores/atributos/variables independientes, predictores, explicativos

Dependiente, objetivo, respuesta, salida

34	3'500.000	?

¿Cuál es el valor predicho para una instancia dada?

Aprendizaje no supervisado

Edad	Ingresos
24	1'200.000
23	4'500.000
45	1'250.000
32	1'100.000

Factores/atributos/variables

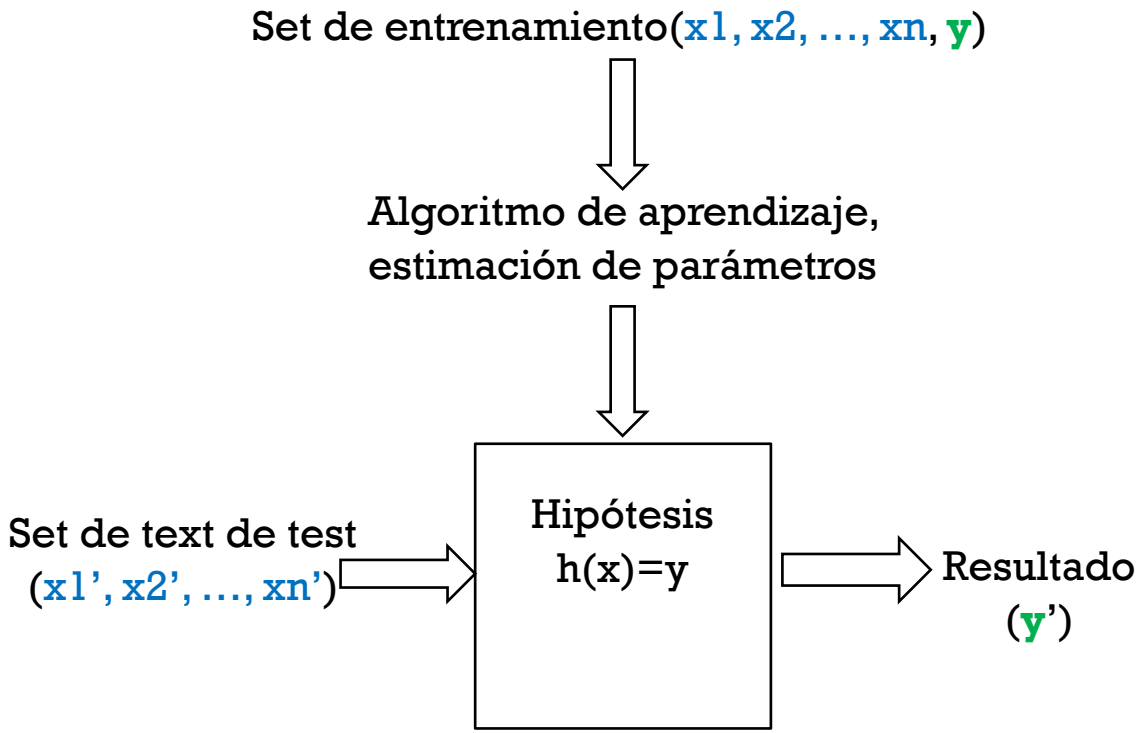
Datos **no etiquetados**: "¿Qué me puede decir de mis datos?"

¿Se puede encontrar alguna estructura en los datos?

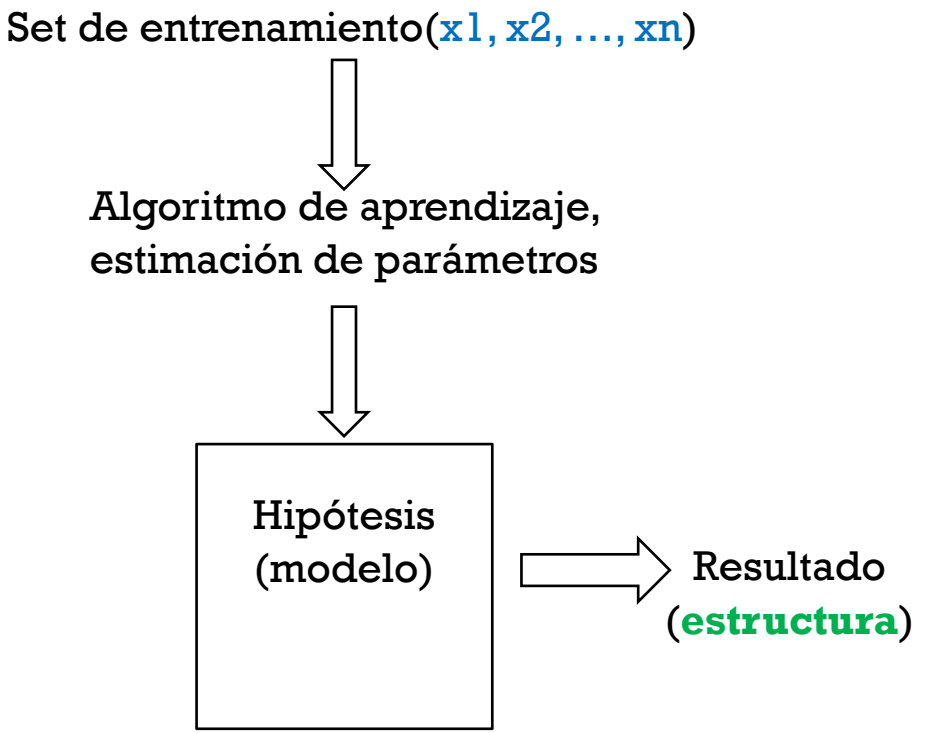
UNIVERSIDAD ICESI

APRENDIZAJE AUTOMÁTICO

Aprendizaje supervisado



Aprendizaje no supervisado



UNIVERSIDAD ICESI

APRENDIZAJE NO SUPERVISADO

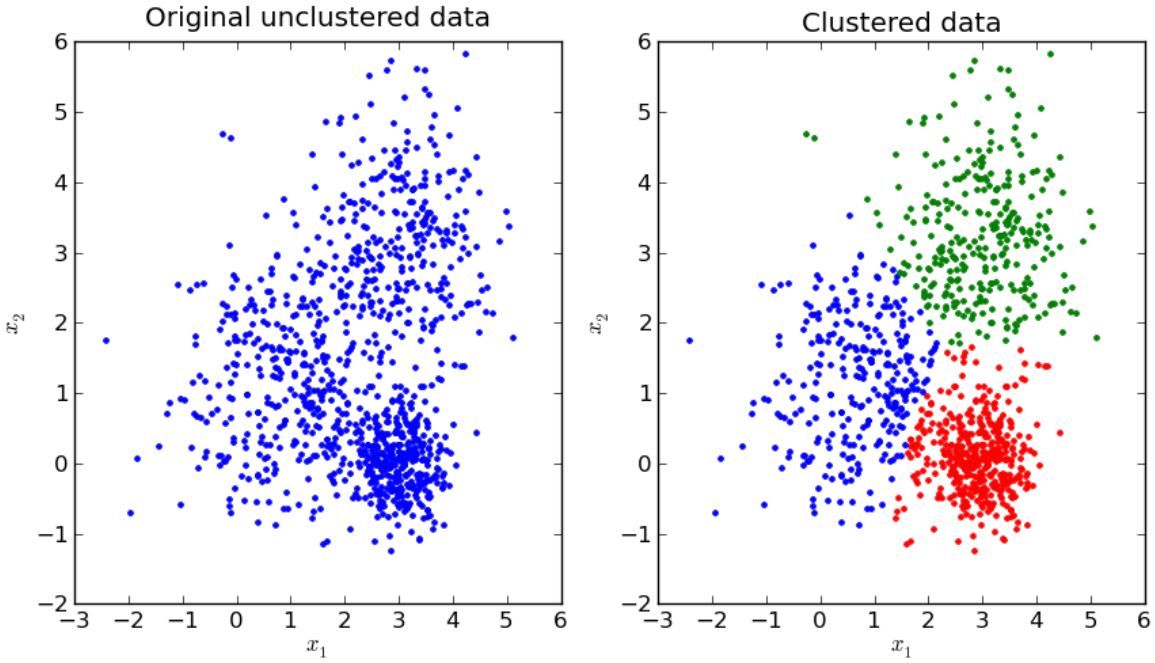
- No se interesa por la predicción sino por encontrar una estructura, un nuevo punto de vista, una simplificación o un resumen de los datos
- Usualmente se incluye en la fase exploratoria de datos
- Tipos de tareas:
  - Segmentación (clustering)
  - Cambio de representación (e.g. reducción de dimensiones, selección de factores)
  - Reglas de asociación
  - Detección de anomalías (i.e. excepciones)
- Difícil de validar los resultados, ya que no se cuenta con un "gold standard"

CLUSTERING

UNIVERSIDAD ICESI

CLUSTERING

- No se tiene una variable objetivo
- Se busca agrupar los datos similares para encontrar patrones globales de los datos
- Agrupamiento por **similitud**, **proximidad**, **densidad**
- Particionar un conjunto heterogéneo en grupos, de forma que elementos en un grupo sean similares entre sí y tan diferentes como sea posible de elementos en otros grupos.



http://pypr.sourceforge.net/kmeans.html

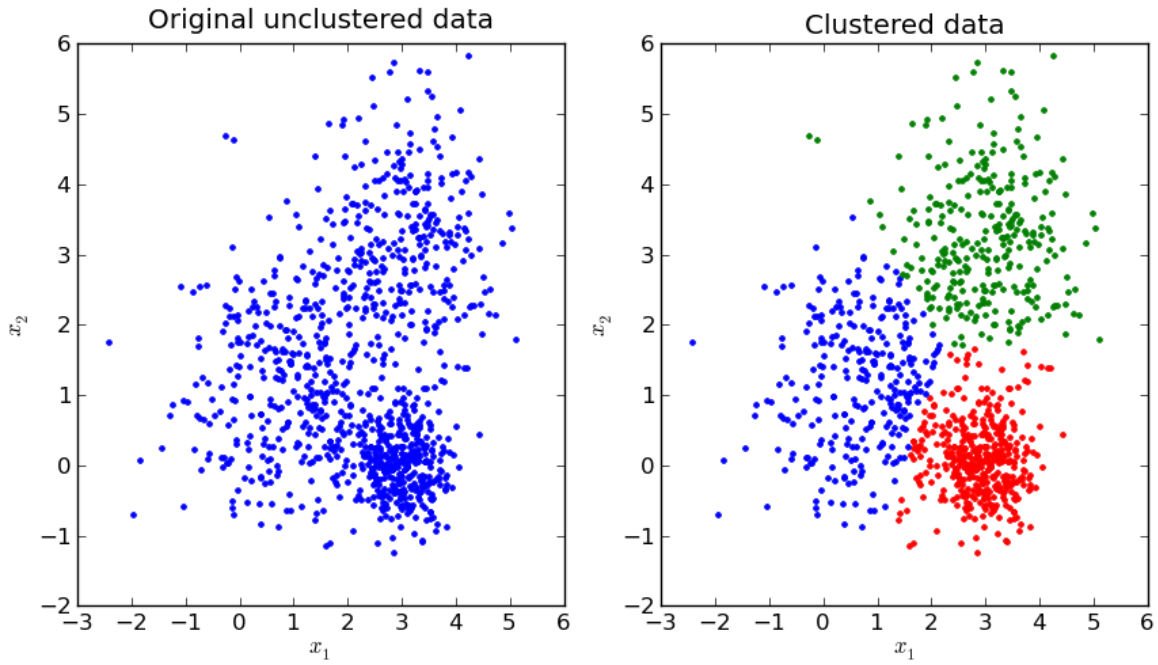
UNIVERSIDAD ICESI

CLUSTERING POR DISTANCIA

- Objetivo: descubrir **k** **grupos** o **segmentos** desconocidos que
  - Minimicen la distancia dentro de los grupos
  - Maximicen la distancia por fuera de los grupos
- Se basan en una noción de **distancia**
  - Definición de la medida a utilizar
  - Unidades de los atributos tienen gran influencia

  →**Normalizar**

  →**Estandarizar**



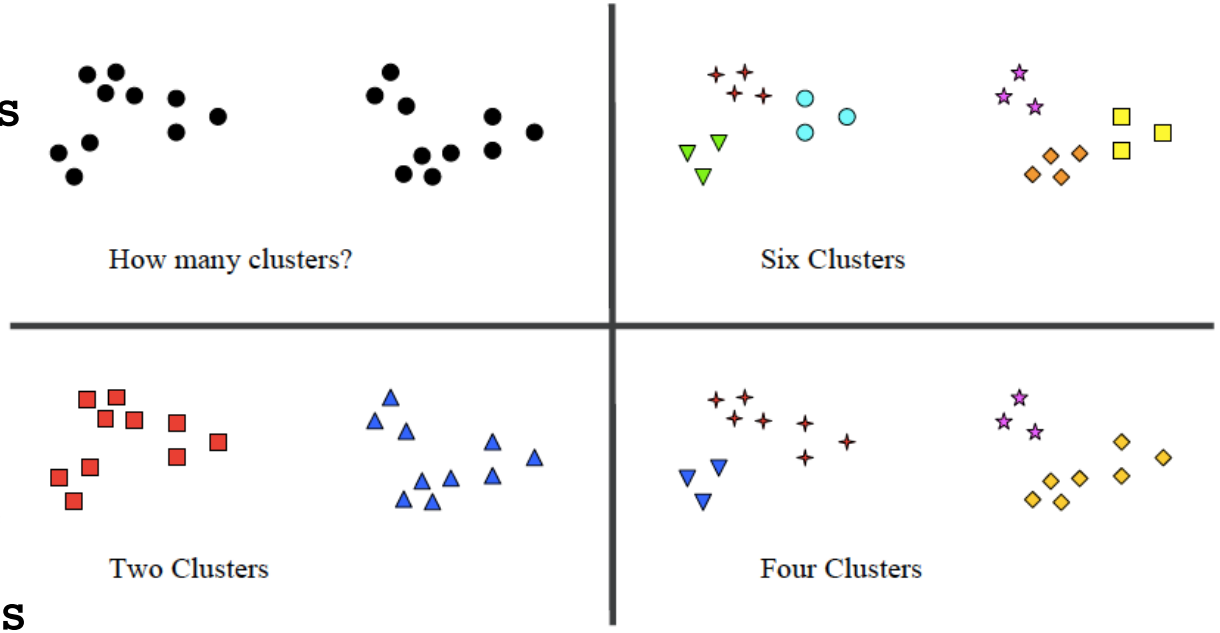
http://pypr.sourceforge.net/kmeans.html

UNIVERSIDAD ICESI

How many clusters?

CLUSTERING POR DISTANCIA

- Se pueden buscar segmentos de observaciones o de atributos (usando los mismos algoritmos)
- No existe un método universal absoluto para establecer **k**, solo heurísticos
- Requiere juicio humano, más difícil de automatizar
- La interpretación de los resultados no se debe de hacer de manera absoluta, sino como un punto de partida para el análisis
- Los datos puede que no contengan estructura, por lo que su segmentación no va a tener tanto sentido

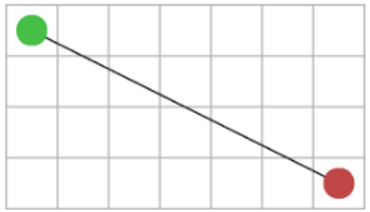


http://governingstochastic.weebly.com/blog/category/clustering

UNIVERSIDAD ICESI

CLUSTERING – DISTANCIAS

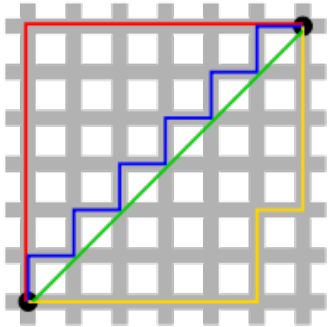
- Medidas de **similitud** o **distancia**:
  - **Euclidiana**: tamaño del segmento linear que une las dos instancias comparadas.



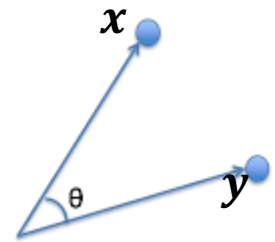
$$\mathrm{d}(\mathbf{p},\mathbf{q}) = \mathrm{d}(\mathbf{q},\mathbf{p}) = \sqrt{(q_1 - p_1)^2 + (q_2 - p_2)^2 + \cdots + (q_n - p_n)^2}$$

$$= \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (q_i - p_i)^2}.$$

  - **Manhattan**: basada en una organización en bloques rectilíneos

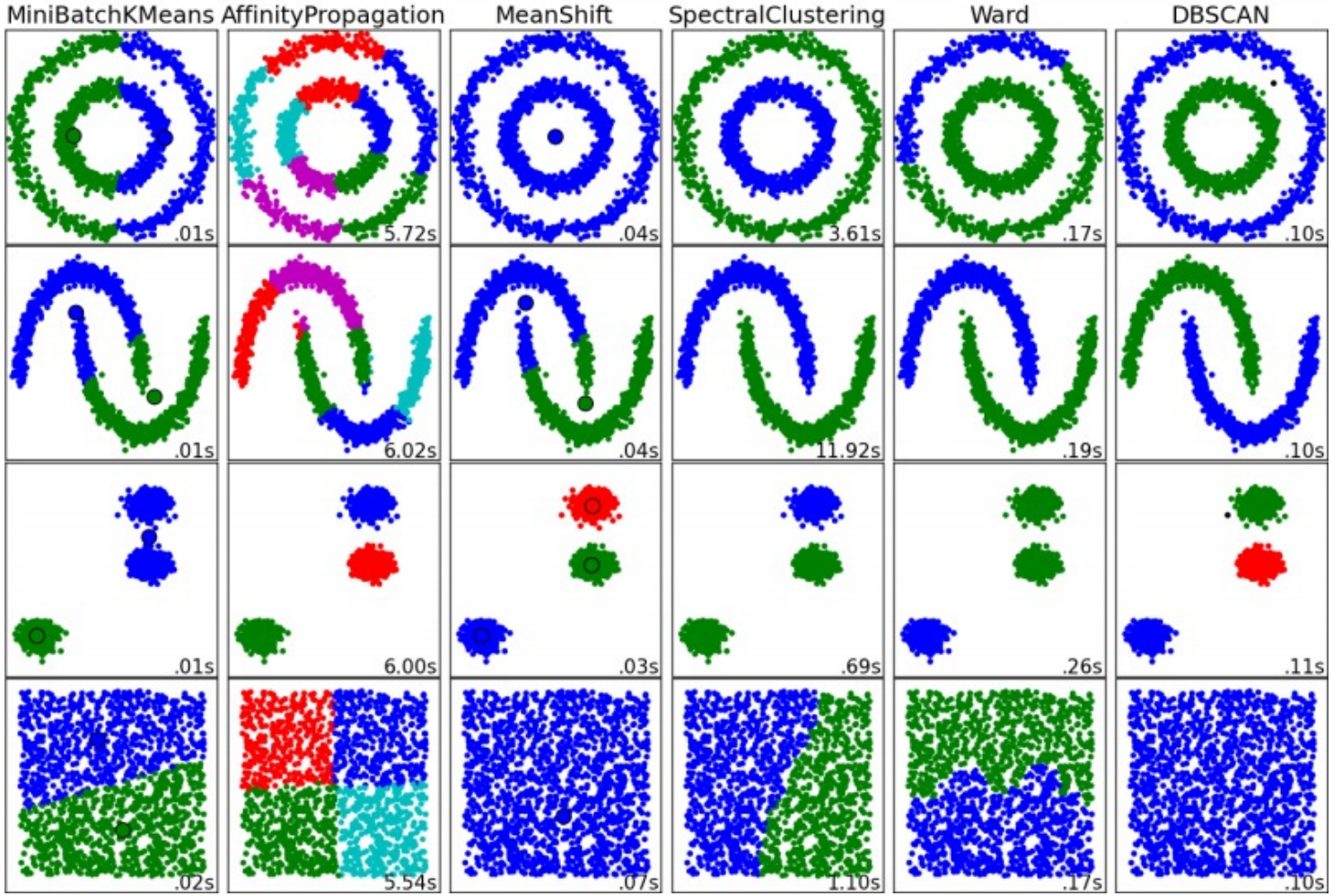


  - **Coseno**: coseno del ángulo entre las dos instancias comparadas → Alta dimensionalidad y **big data**



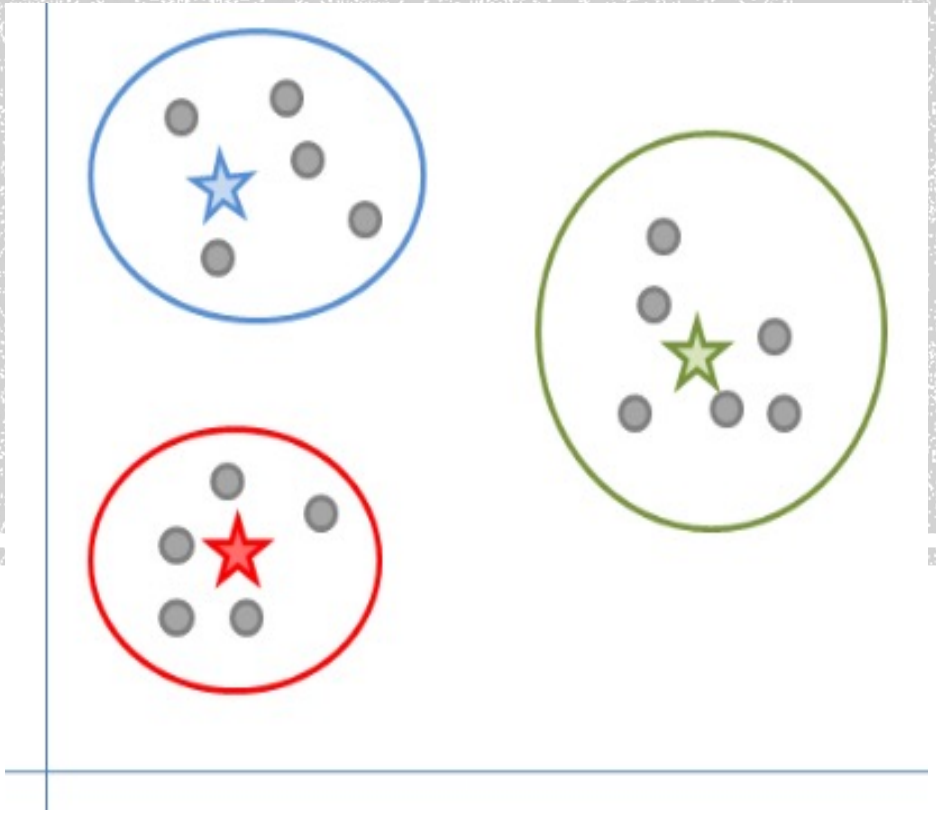
$$sim(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \cos(\theta_{x,y}) = \frac{\boldsymbol{x}.\boldsymbol{y}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|} = \frac{\sum_i x_i * y_i}{\sqrt{\left(\sum_i x_i * x_i\right) * \sum_i y_i * y_i}}$$

CLUSTERING



UNIVERSIDAD ICESI

K-MEANS

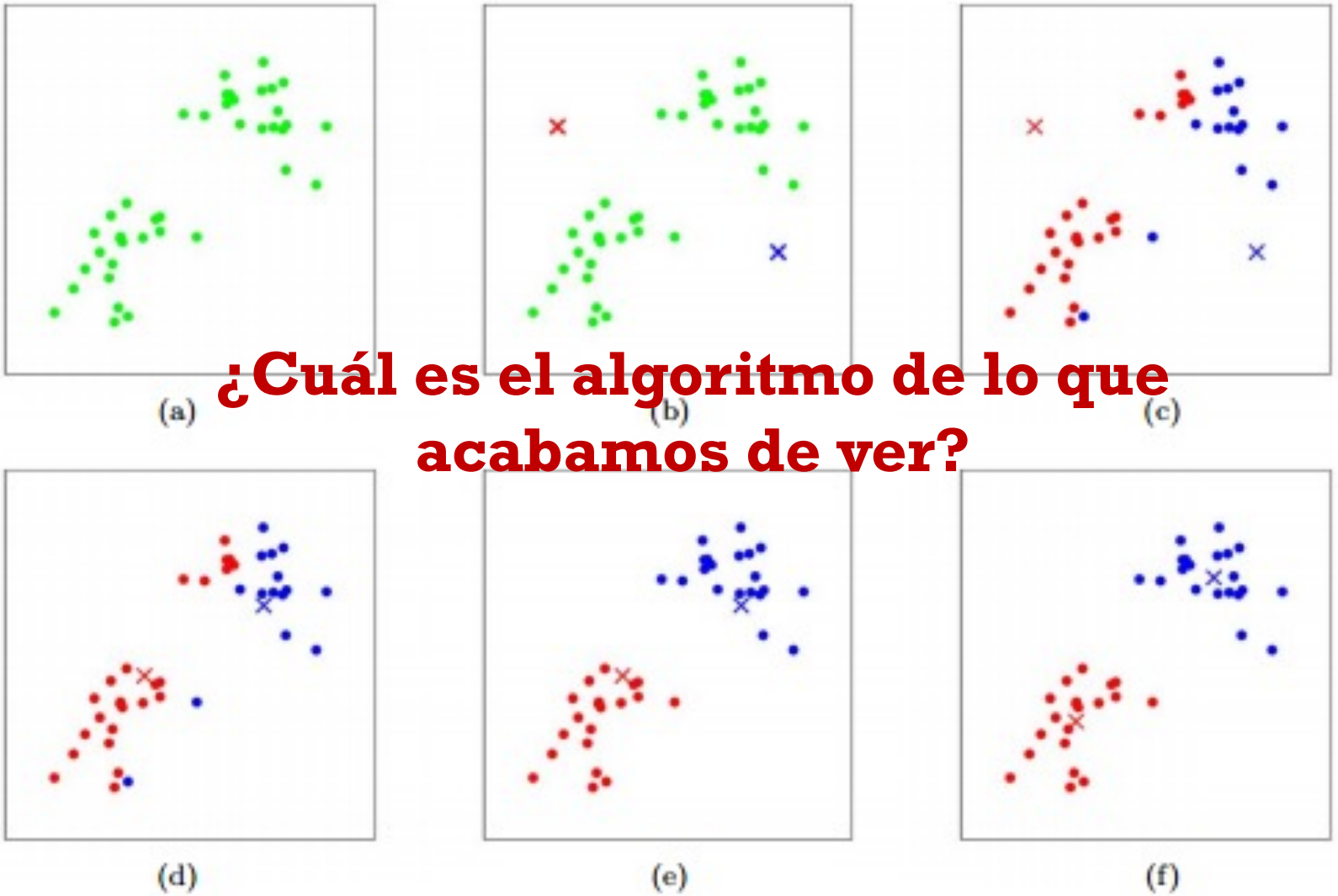


UNIVERSIDAD ICESI

K-MEANS

(a)

K-MEANS



¿Cuál es el algoritmo de lo que acabamos de ver?

K-MEANS

- Algoritmo:
  1. Inicializar los K centroides
  2. Asignar cada instancia al cluster del centroide más cercano
  3. Re calcular los centroides de cada cluster (el baricentro/promedio)
  4. Repetir pasos 2 y 3 hasta convergencia (hasta que los centroides permanezcan estáticos)
- Cada observación se asigna a un solo cluster, de manera absoluta
- Los clusters no se sobrelapan
- Objetivo: minimizar la variación dentro de los clusters (Within Sum of Squares - WSS):

$$WSS = \sum_{i=1}^{\#instancias} distancia(\boldsymbol{x_i} - centroide(\boldsymbol{x_i}))^2$$

UNIVERSIDAD ICESI

K-MEANS

- Consideraciones:
  - ¿Cómo estimar el número de clusters (K)?
    - Mardia (1979): $\sqrt{n/2}$
    - Método "del codo"
    - Método Silhouette
    - Medida de CH
  - ¿Cómo inicializar los centroides de los clusters?
    - Escoger centros completamente aleatorios
    - Escoger puntos existentes aleatoriamente
    - Escoger los centroides utilizando K-Means ++

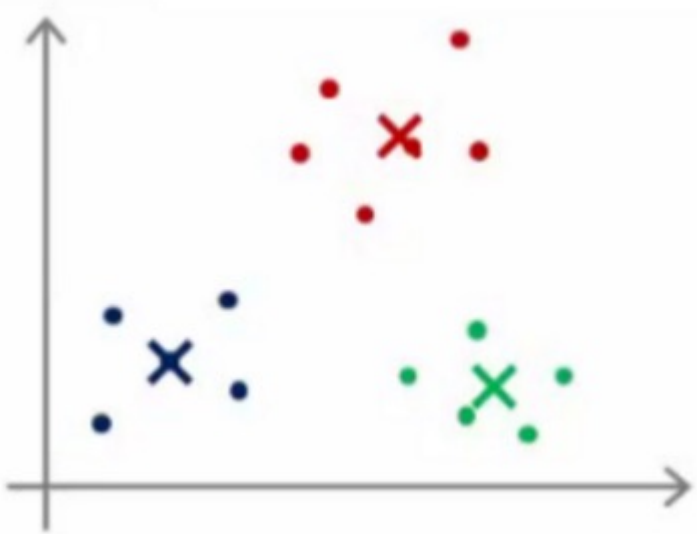
K-MEANS

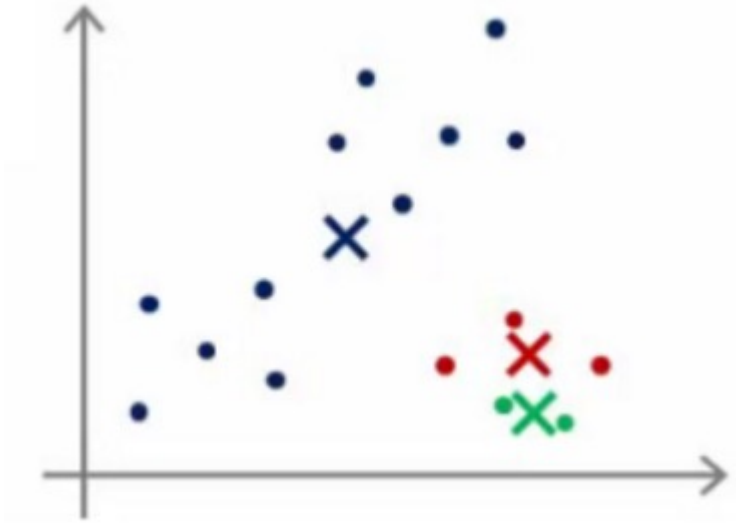
K-Means++

- La idea es inicializar los centros lo más lejanos los unos de los otros
- Algoritmo K-Means++:
  1. Se comienza con un conjunto M de centroides vacío
  2. Se escoge aleatoriamente una instancia que no sea ya un centroide y se agrega a M.
  3. Se calcula la distancia mínima de las instancias que quedan con los centroides en M
  4. Se escoge una nueva instancia como centroide de manera aleatoria asociando una probabilidad a cada instancia dada por su distancia mínima calculada anteriormente
  5. Repetir pasos 3 y 4 hasta haber seleccionado K centroides
  6. Continuar con el algoritmo K-Means clásico.

K-MEANS

- Consideraciones:
  - ¿Cómo evitar los óptimos locales?
    - Ejecutar varias veces el algoritmo con diferentes inicializaciones, seleccionar e clustering con el mínimo WSS





UNIVERSIDAD ICESI

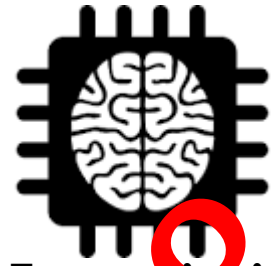
K-MEANS

- Consideraciones:
  - Algoritmo de particionamiento
  - Muy fácil de implementar
  - Más rápido que clustering jerárquico
  - Sólo trabaja con atributos numéricos (noción de promedio)
  - Muy sensible a excepciones
  - Funciona muy bien con datos generados siguiendo un proceso Gaussiano, cuyas fronteras son lineales en el caso de la distancia euclideana (Voronoi)
  - No funciona para identificar clusters con formas no convexas

TALLER: K-MEANS – CLIENTES SUPERMERCADOS

Desarrollar el taller de clustering de clientes de supermercados 09-SUPERMERCADOS-K-Means-STUD.html (hasta antes de la determinación del k).

AGENDA

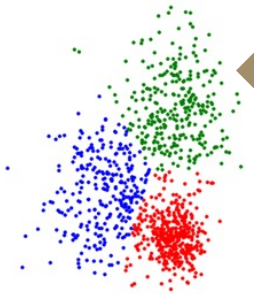


Aprendizaje automático

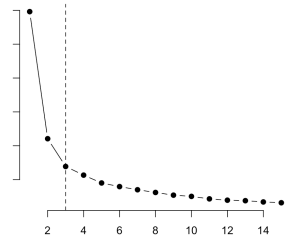
REPASO

Aprendizaje supervisado

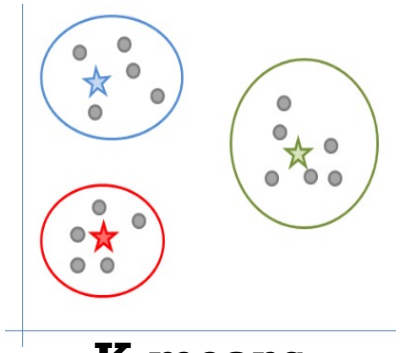
Aprendizaje no supervisado



Clustering



Evaluación del clustering

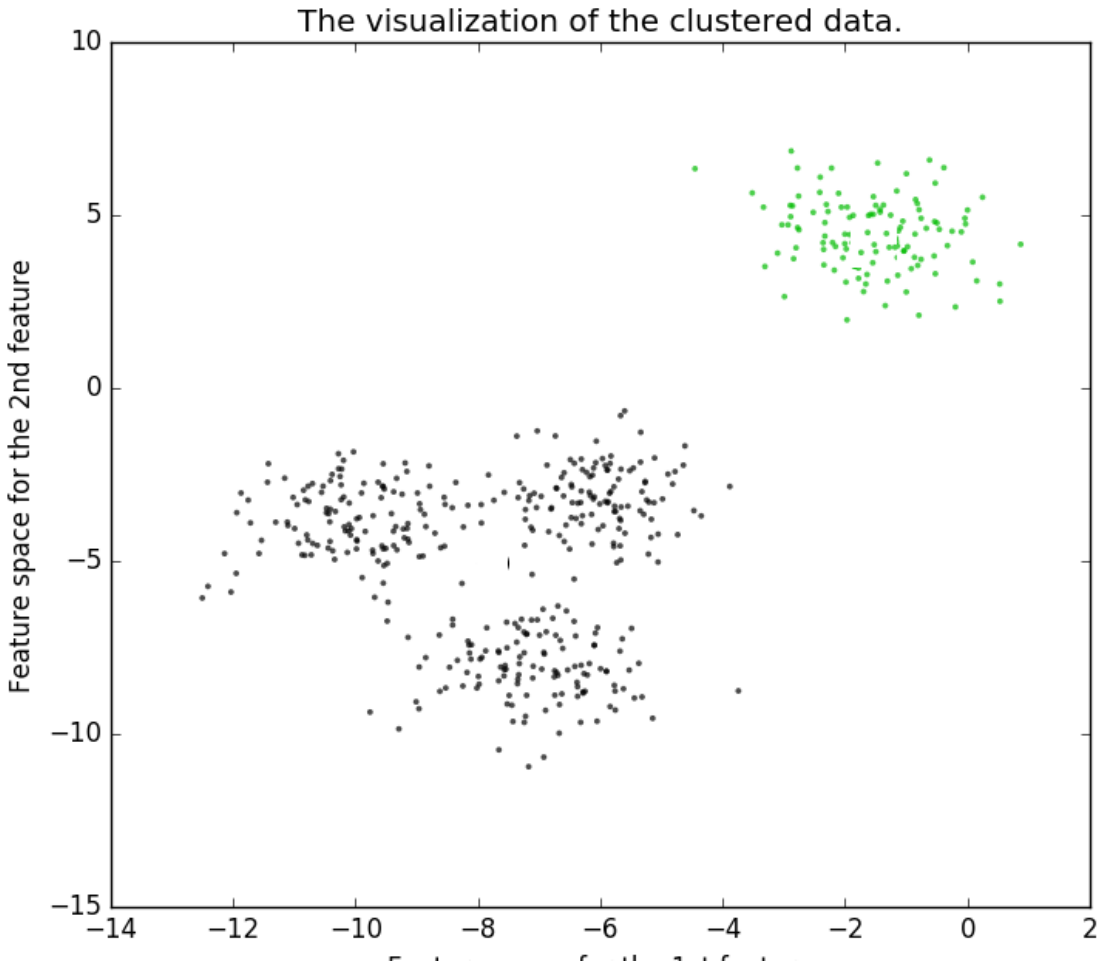


K-means

EVALUACIÓN DE CLUSTERING

UNIVERSIDAD ICESI

ESCOGENCIA DEL K



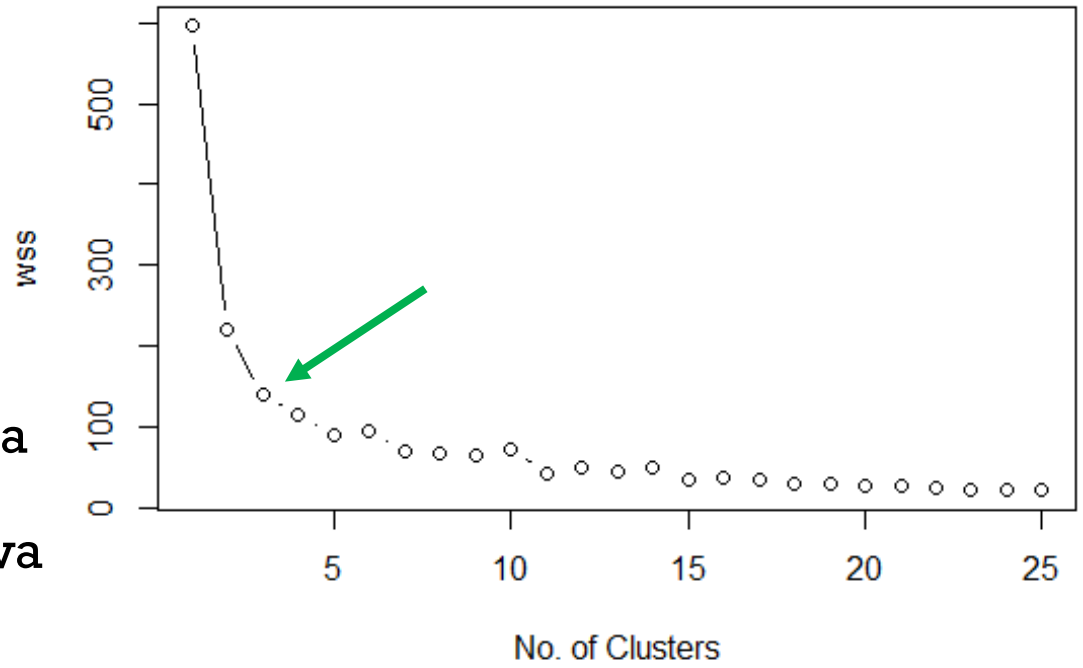
http://scikit-learn.org/stable/auto_examples/cluster/plot_kmeans_silhouette_analysis.html

UNIVERSIDAD ICESI

¿Cuántos clusters ven uds aquí?

ESCOGENCIA DEL K – CODO

- Heurísticos:
  - No hay un método absoluto
  - Dependen del juicio del analista, se requiere conocimiento del negocio
- Método "del codo":
  - Plotear WSS para cada valor de K
  - Escoger el último valor de K que implica una reducción "considerable" del WSS del clustering resultante, cuando la curva se vuelve aproximadamente lineal



$$WSS = \sum_{i=1}^{\#instancias} distancia(\boldsymbol{x_i} - centroide(\boldsymbol{x_i}))^2$$

UNIVERSIDAD ICESI

ESCOGENCIA DEL K – SILHOUETTE

- Método Silhouette
  - Se busca el K que maximice la **separación** entre clusters, con clusters lo más **compactos** posibles
  - Analizar el ajuste de cada instancia al cluster al que fue asignado
  - Qué tan cerca está cada observación de las demás de su propio cluster
    - 0,7-1,0: el cluster es fuertemente robusto
    - 0,5-0,7: el cluster es razonablemente robusto
    - 0,25-0,5: el cluster puede ser artificial y puede no denotar una noción de estructura necesariamente
    - Inferior a 0,25: el cluster debería descartarse, no indica estructura
  - Se busca la maximización del valor Silhouette promedio de los clusters

UNIVERSIDAD ICESI

ESCOGENCIA DEL K – SILUETA

- Método Silueta (Silhouette)
  - Calcular el valor de silueta de cada punto:
    - Cohesión del punto con su cluster C_i (promedio de distancias con puntos de su mismo cluster):

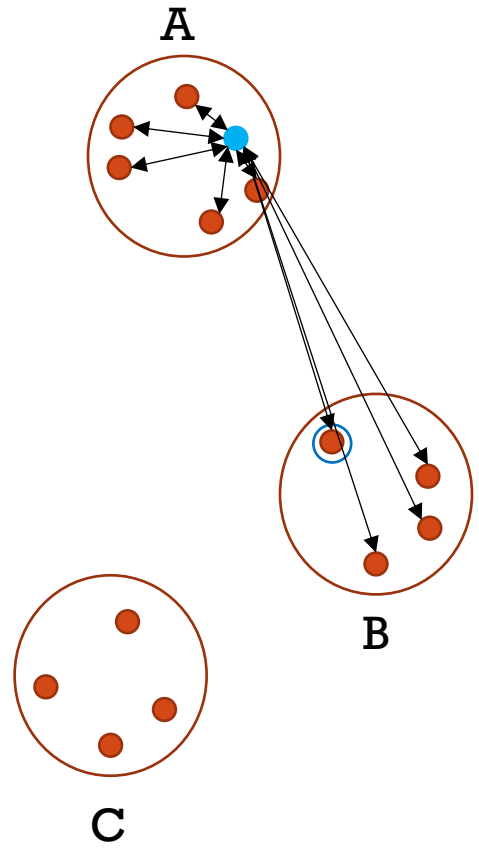
$$cohesión(p) = a(p) = \frac{\sum_{p' \in C_i,\ p' \neq p} distancia(p, p')}{|C_i| - 1}$$

    - Separación de los puntos de otros clusters (distancia promedio con los puntos del cluster más cercano):

$$separación(p) = b(p) = \min_{C_j : 1 \leq j \leq k, j \neq i} \left(\frac{\sum_{p' \in C_j} distancia(p, p')}{|C_j|} \right)$$

    - El valor de silueta del punto es entonces:

$$silueta(p) = s(p) = \frac{b(p) - a(p)}{\max\big(b(p), a(p)\big)}$$



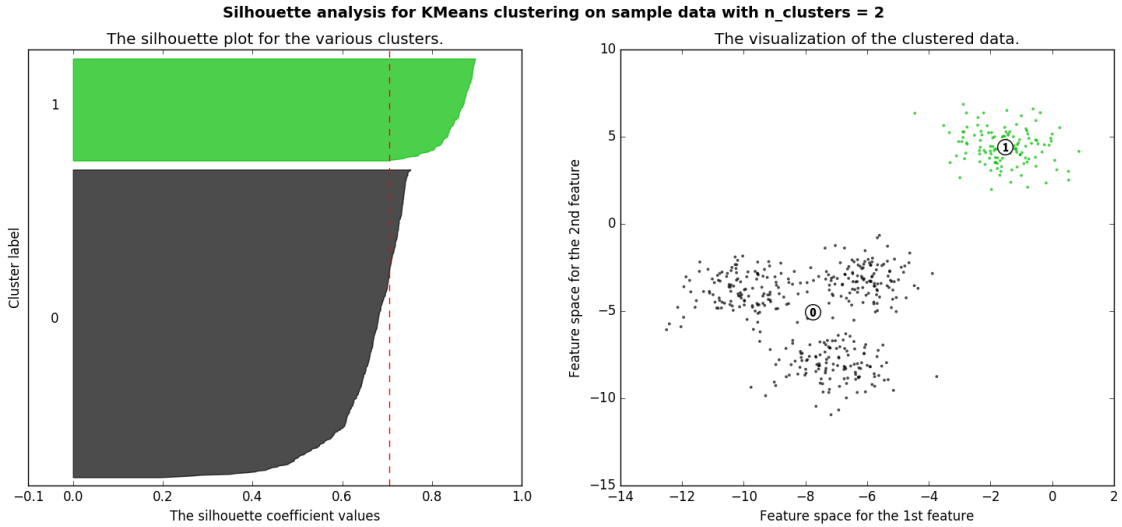
ESCOGENCIA DEL K – SILUETA

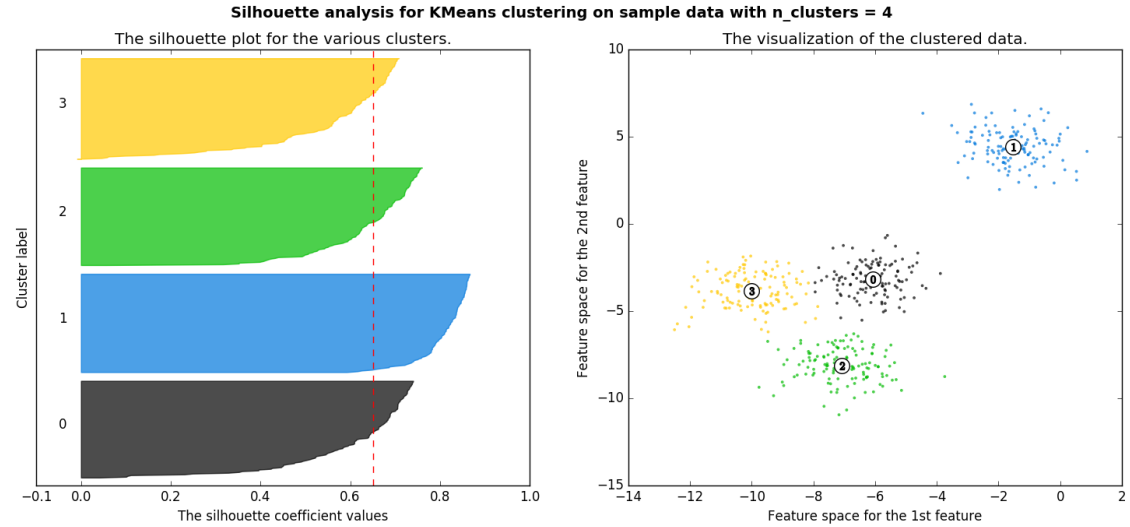
- Método Silueta (Silhouette)
  - Calcular el valor de silueta de cada cluster (promedio de las siluetas de sus puntos).

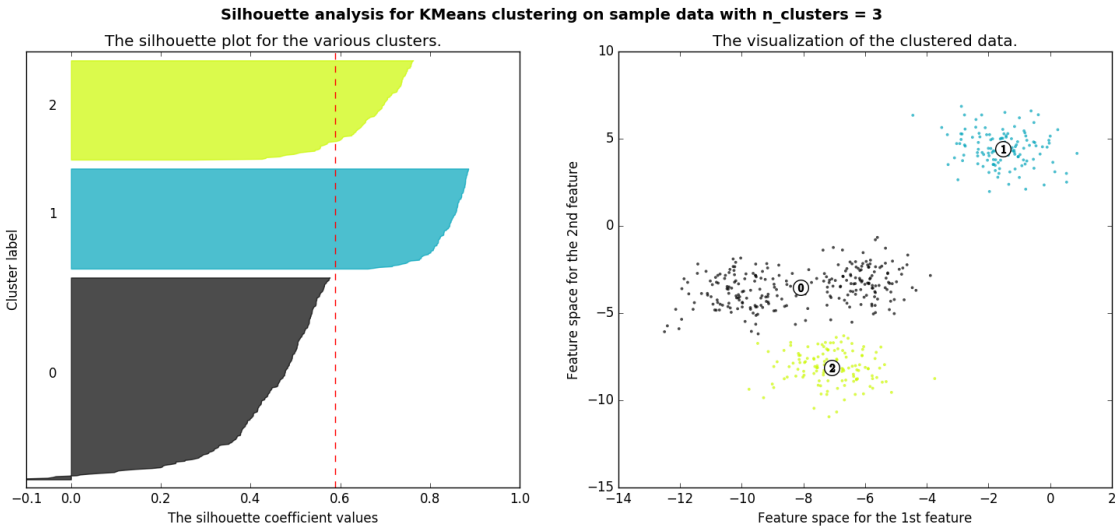
$$silueta(C_i) = \frac{1}{|C_i|} \sum_{p \in C_i} s(p)$$

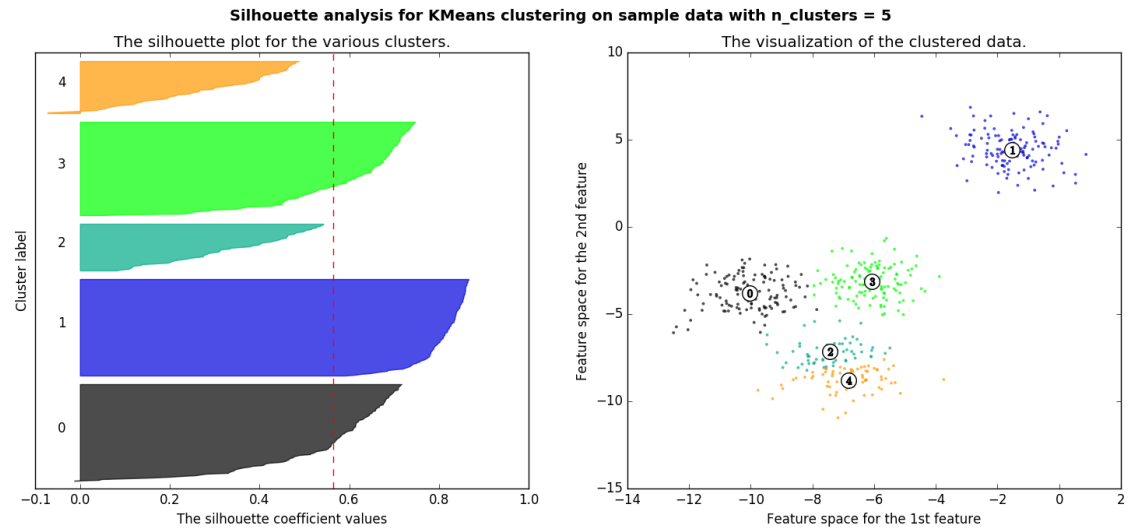
  - Analizar los puntos y clusters, buscando posibles problemas de asignación dados por el valor del K:
    - El rango de la silueta está entre -1 y 1
    - Una silueta de 0 implica que la asignación de un punto a su cluster es indiferente
    - Se espera que los puntos del mismo cluster estén más cercanos al punto en cuestión: para que la silueta sea positiva tenemos que $a(p) < b(p)$

ESCOGENCIA DEL K – SILHOUETTE





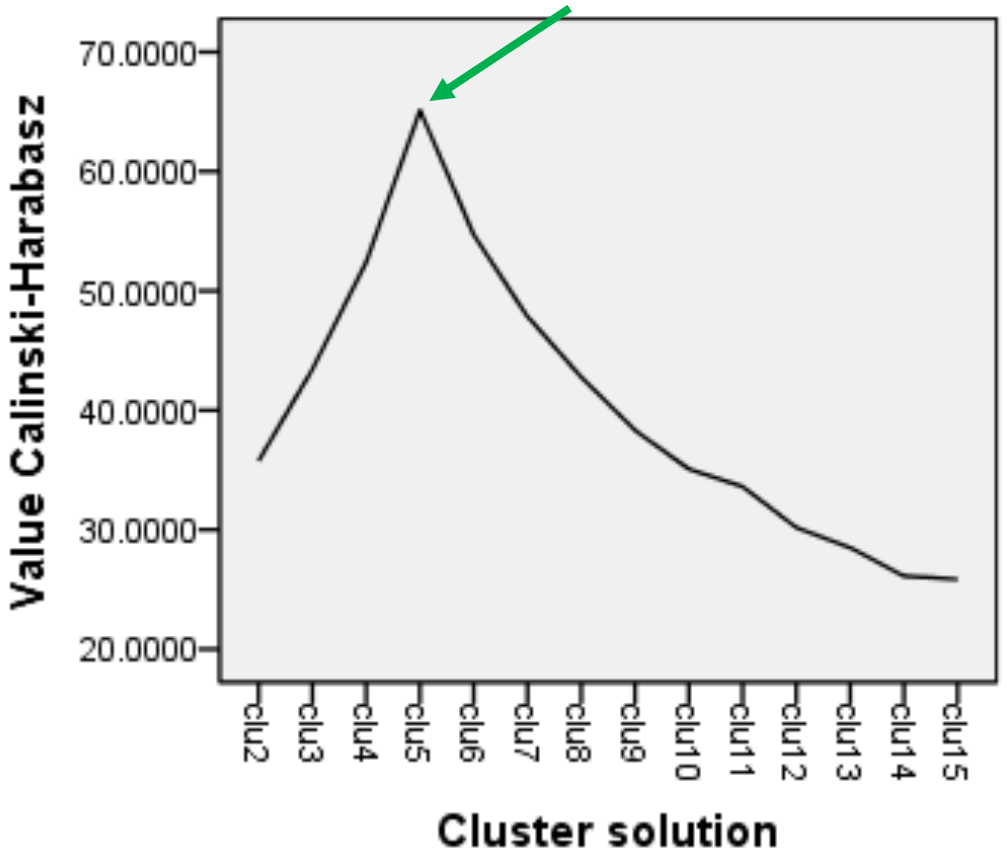




ESCOGENCIA DEL K – CALINSKI-HARABASZ

- Método de Calinski-Harabasz:
  - Se busca el K que maximice la **separación** entre clusters, con clusters lo más **compactos** posibles
  - TSS = variación total (entre todos los datos y el centro global)
  - WSS = variación intra-cluster (entre los puntos de cada cluster y sus centroides
  - BSS = variación inter-cluster (entre los centroides de los clusters y el centro global). BSS = TSS - WSS
  - CH = ratio entre la variación entre clusters (BSS) y el promedio de la variación interna de los clusters (WSS). Se busca maximizar CH:

$$CH = \frac{BSS}{WSS} * \frac{N-k}{k-1}$$



UNIVERSIDAD ICESI

TALLER: EVALUACIÓN DE CLUSTERING

Continuar con el taller de clustering de clientes de supermercado 09-SUPERMERCADOS- K-Means-STUD.html con la parte dedicada a la determinación y evaluación del número de clusters.

UNIVERSIDAD ICESI