

# Análisis exploratorio de datos

## Aprendizaje automático



Juan David Martínez

[jdmartinev@eafit.edu.co](mailto:jdmartinev@eafit.edu.co)

2023

# Agenda

- Análisis exploratorio de datos
- Ingeniería de características

# **Análisis exploratorio de datos**

# Análisis exploratorio de datos

**Exploratory Data Analysis (EDA):** Metodología para analizar bases de datos y encontrar sus principales características.

- **Coleccionar** o concatenar datos
- **Realizar investigaciones iniciales** para descubrir patrones, detectar anomalías, validar hipótesis y verificar suposiciones:
  - Estadísticas descriptivas
  - Representaciones gráficas (histogramas, barras,...)
- **Procesar** los datos para obtener información relevante
- **¡Más un arte que una ciencia!**



# Estadística descriptiva

## Estadísticas generales - `df.head()`, `df.shape`, `df.info()`

- Número de muestras (filas)
- Número de características (columnas)

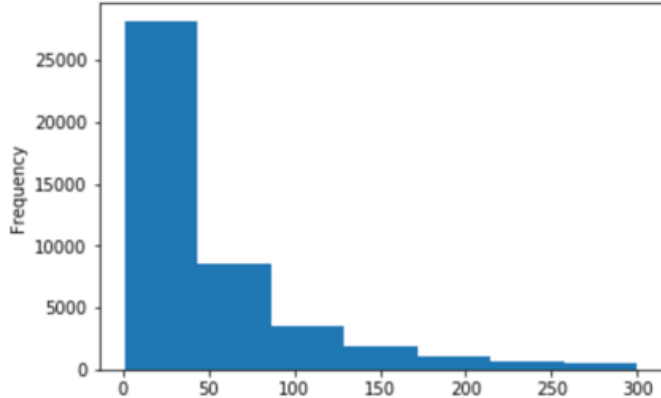
## Estadística univariada (para cada característica)

- Estadística para variables numéricas (media, varianza, histogramas)  
`df.describe()`, `hist(df[feature])`
- Estadística para variables categóricas (histogramas, moda, valores más/menos frecuentes, porcentajes, número de valores únicos)
  - Histograma de valores - `df[feature].value_counts()`, `sns.distplot()`
- Estadísticas de la variable objetivo
  - Distribución de clases - `df[target].value_counts()`, `np.bincount(y)`

# Estadística descriptiva

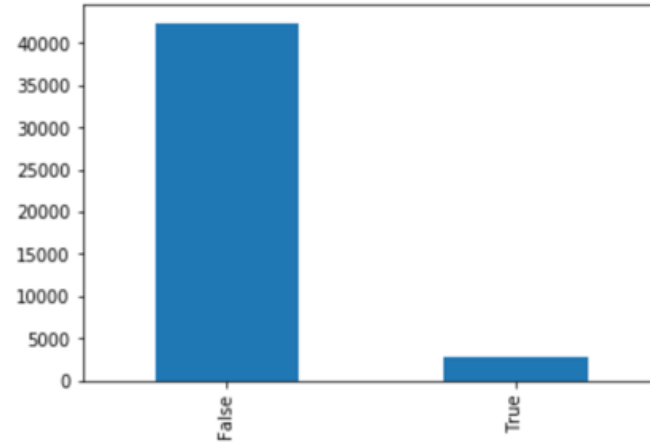
## Características numéricas

```
import matplotlib.pyplot as plt  
  
df[num_feature].plot.hist(bins = 7)  
plt.show()
```



## Características categóricas

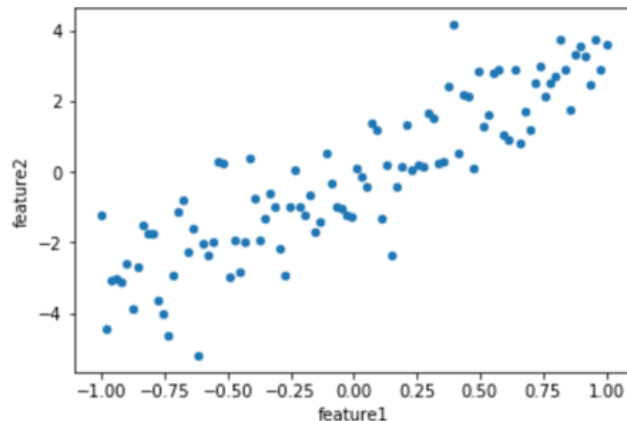
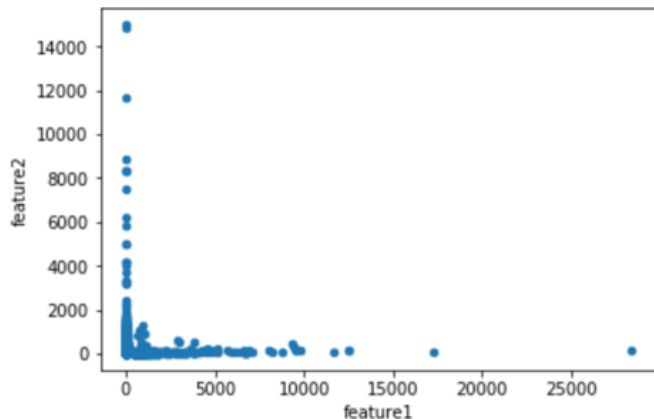
```
import matplotlib.pyplot as plt  
  
df[cat_feature].value_counts().plot.bar()  
plt.show()
```



# Estadística multivariada

## Estadísticas multivariadas (más de una característica)

- Correlaciones – `df.plot.scatter(feature1, feature2), df[[feature1, feature2]]`



Relaciones lineales entre pares de características o una característica y la variable objetivo

# Estadística multivariada

## Estadísticas multivariadas (más de una característica)

Correlaciones: Cómo se relacionan (linealmente) pares de características

```
[feature1, feature2]  
df[cols].corr()
```

	feature1	feature2
feature1	1	0.0128493
feature2	0.0128493	1

	feature1	feature2
feature1	1	0.882106
feature2	0.882106	1

Los valores de la correlación están entre -1 y 1: -1 significa correlación negativa perfecta, 1 significa correlación positiva perfecta, 0 significa que no hay correlación entre las variables.



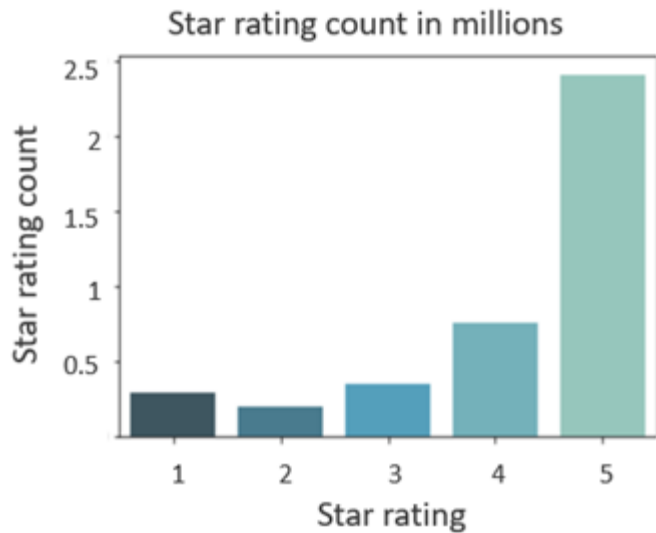
# Estadística multivariada

Las características altamente correlacionadas pueden afectar el rendimiento de algunos modelos de aprendizaje de máquina, como la regresión lineal o logística, cuando su implementación involucra el cálculo de inversas de matrices. Además, puede esconder la relevancia de alguna característica.

- Seleccione una de las características correlacionadas y descarte las demás
- Otros modelos, como los árboles de decisión, son inmunes a este problema

Adicionalmente, características altamente correlacionadas con la variable objetivo podrían mejorar el rendimiento de modelos lineales.

# Bases de datos desbalanceadas



- El número de muestras por clase no está distribuido equitativamente
- El modelo de ML puede no reconocer adecuadamente la clase poco frecuente

## Ejemplos:

- Detección de fraudes
- Detección de anomalías
- Diagnóstico médico

**Amazon review dataset:** El número de calificaciones con 5 estrellas es casi igual a la suma del número de calificaciones de los otros tipos

# Bases de datos desbalanceadas

¿Cómo manejar el problema de desbalance de clases?

## Submuestreo

Reducir el número de muestras de la clase dominante

## Remuestreo

Aumentar el tamaño de la o las clases con pocas muestras

## Generación de datos

Crear nuevas muestras, similares, pero no idénticas

## Pesos para cada muestra

Para modelos que tienen función de costo, asignar mayores pesos a la clase rara

El ajuste se debe hacer únicamente en los datos de entrenamiento. Los conjuntos de validación y prueba deben conservar la distribución original de los datos

# Imputación de datos faltantes

**Descartar** filas y/o columnas con valores faltantes: Remover esas filas y/o columnas de la base de datos.

Una menor cantidad de datos puede generar modelos sobre/sub entrenados

**Imputar (completar) los valores faltantes:**

- **Reemplazar** los valores faltantes de características numéricas con el promedio o de características categóricas con la moda `df['col'].fillna((df['col'].mean())), df['col'].fillna((df['col'].mode()))`
- **Placeholder:** Asignar un valor común a los valores faltantes
- **Técnicas avanzadas:** Predecir los valores faltantes usando ML (AWS Datawig usa NNs)

<https://github.com/awsmlabs/datawig>

# Imputación de datos faltantes

**SimpleImputer:** Clase de **sklearn** para utilizar métodos de imputación, implementa los métodos `.fit()` y `.transform()`

**SimpleImputer**(missing\_values=nan, strategy='mean', fill\_value=None)

- **numerical data:**

Strategy = “mean”, replace missing values using the mean along each column

Strategy = “median”, replace missing values using the median along each column

- **numerical or categorical data:**

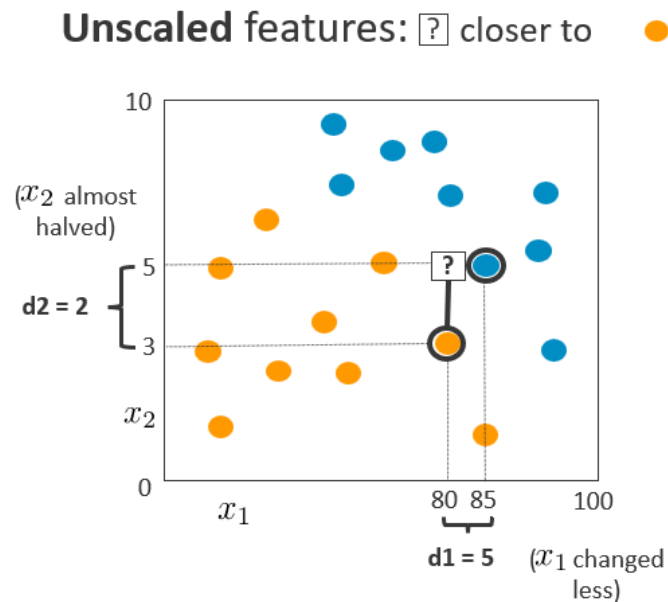
Strategy = “most\_frequent”, replace missing using the most frequent value along each column

Strategy = “constant”, replace missing values with fill\_value

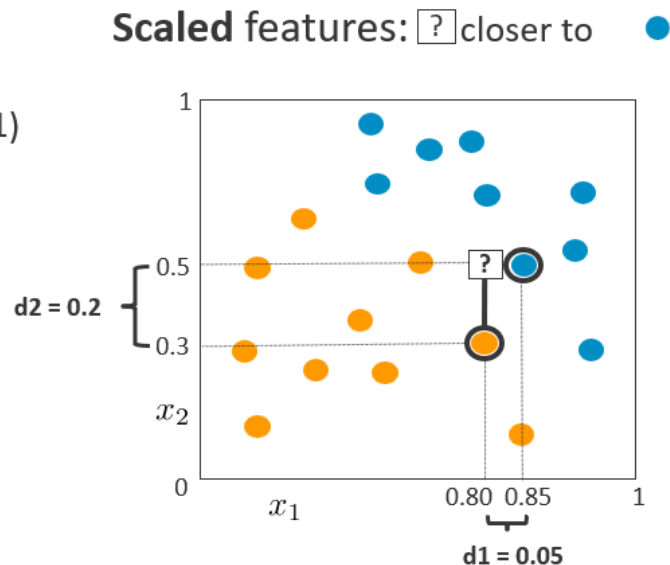
# Estandarización de características

**Motivación:** Algoritmos como kNN y redes neuronales cambian su comportamiento cuando las características no están en la misma escala.

**Solución:** Llevar las características a la misma escala (mean/variance, MinMax)



( $K = 1$ )





# Estandarización de características

**StandardScaler** Clase de **sklearn**, implementa los métodos `.fit()` y `.transform()` para escalar cada característica (columna) de forma que quede con media y desviación estándar 1.

$$x_{scaled} = \frac{x - x_{mean}}{x_{std}}$$

**MinMaxScaler** Clase de **sklearn**, implementa los métodos `.fit()` y `.transform()` para escalar cada característica (columna) de forma que los valores mínimo y máximo sean 0 y 1.

$$x_{scaled} = \frac{x - x_{min}}{x_{max} - x_{min}}$$

# Pipeline (sklearn)

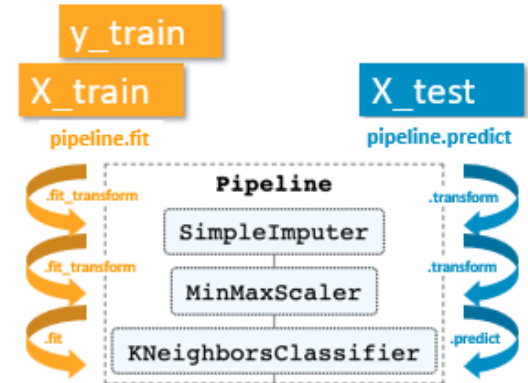
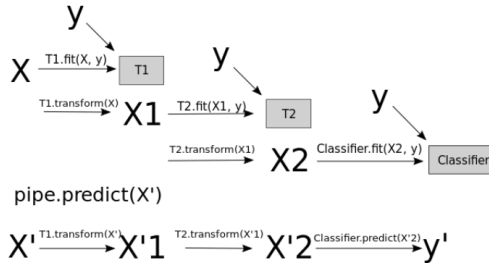
**Pipeline:** secuencia de transformaciones de datos que, generalmente, finaliza con un estimador, implementa los métodos `.fit()` y `.predict()`. Previene el sesgo a los datos de entrenamiento.

```
pipeline = Pipeline([
    ('imputer', SimpleImputer(strategy='mean')),
    ('scaler', MinMaxScaler()),
    ('clf', KNeighborsClassifier(n_neighbors = 3))
])

pipeline.fit(X_train, y_train)
predictions = pipeline.predict(X_test)
```

```
pipe = make_pipeline(T1(), T2(), Classifier())
```

```
pipe.fit(X, y)
```



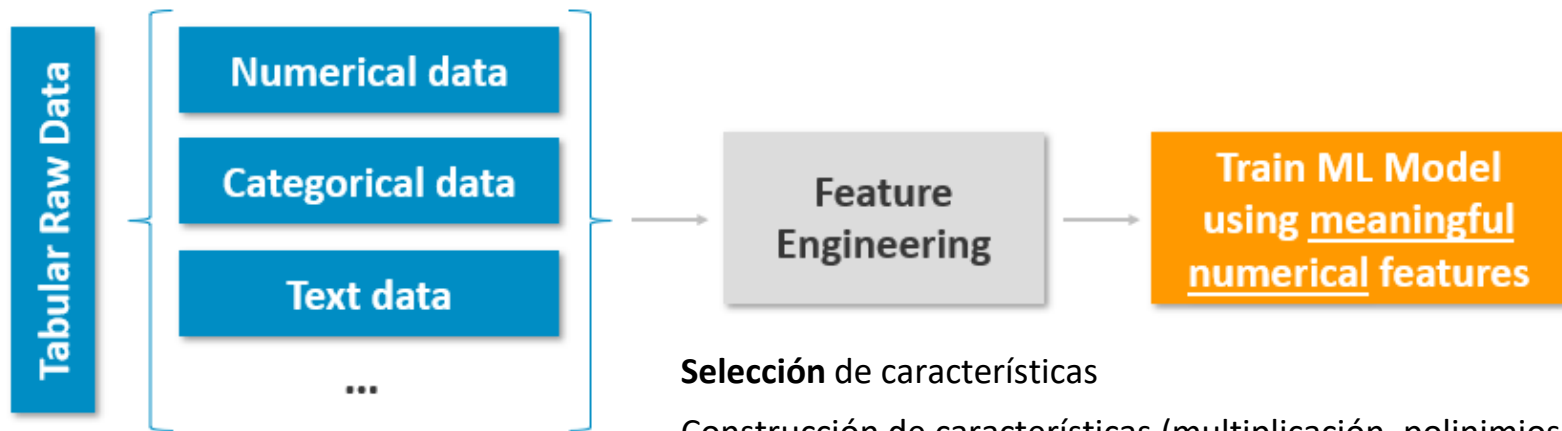
# Ingeniería de características

# Ingeniería de características

Utiliza conocimiento del **dominio y de los datos** para crear **nuevas características a partir de los datos crudos** como entradas para los modelos de ML.

**Intuición:** ¿Qué información utilizaría un humano para hacer predicciones?

¡A menudo, este proceso es más un arte que una ciencia!



**Selección** de características

Construcción de características (multiplicación, polinomios, logaritmos, kernels,...)

# Codificación de características

**Características categóricas:** No tienen una representación numérica natural.

**Ejemplo:** color  $\in \{\text{green, red, blue}\}$ , fraude  $\in \{\text{falso, verdadero}\}$

La mayoría de modelos de ML requieren convertir estas categorías a números.

**Codificación (encoding):** Asignar un número a cada categoría.

**Ordinal:** Las categorías están ordenadas, ejemplo, tamaño  $\in \{L > M > S\}$ . Podemos asignar los valores  $L \rightarrow 3$ ,  $M \rightarrow 2$ ,  $S \rightarrow 1$ .

**Nominal:** Las categorías no tienen un orden específico, ejemplo, color  $\in \{\text{green, red, blue}\}$ . Podemos asignar números de forma aleatoria.



# Codificación de características

**LabelEncoder:** Clase de **sklearn**, codifica variables categóricas con valores entre 0 y  $n\_classes - 1$ . Implementa los métodos `.fit()` y `.transform()`.

- Codifica las variables objetivo o una sola característica, no la matriz completa **X**.

	color	size	price	classlabel
0	green	S	10.1	shirt
1	red	M	13.5	pants
2	blue	L	15.3	shirt

```
from sklearn.preprocessing import LabelEncoder
```

```
le = LabelEncoder()
```

```
df['color'] = le.fit_transform(df['color'])
```

	color	size	price	classlabel
0	1	S	10.1	shirt
1	2	M	13.5	pants
2	0	L	15.3	shirt



# Codificación de características

**OrdinalEncoder:** Clase de **sklearn**, codifica variables categóricas con valores entre 0 y  $n\_classes - 1$ . Implementa los métodos `.fit()` y `.transform()`.

- Codifica dos o más variables categóricas. No funciona para una sola característica.
- Devuelve una sola columna de enteros por característica.

	color	size	price	classlabel
0	green	S	10.1	shirt
1	red	M	13.5	pants
2	blue	L	15.3	shirt

```
from sklearn.preprocessing import OrdinalEncoder  
oe = OrdinalEncoder()
```

```
df[['color', 'size', 'classlabel']] =  
oe.fit_transform(df[['color', 'size', 'classlabel']])
```

	color	size	price	classlabel
0	1.0	2.0	10.1	1.0
1	2.0	1.0	13.5	0.0
2	0.0	0.0	15.3	1.0

# Codificación de características

**Problema:** La codificación ordinal tiene problemas en algunos modelos de ML porque el orden y tamaño de los enteros no debería importar.

**One-hot-encoding** expande cada característica categórica en muchas características binarias (tantas como categorías en cada característica).

**OneHotEncoder: Clase de sklearn,** codifica variables categóricas como un arreglo numérico. Implementa los métodos `.fit()` y `.transform()`.

- No asigna nombre a las nuevas variables. Funciona para más de dos características, para una sola se debe usar `LabelBinarizer()`.

# Codificación de características

`get_dummies`: versión de **Pandas** para **one-hot-encoding**.

	color	size	price	classlabel
0	green	S	10.1	shirt
1	red	M	13.5	pants
2	blue	L	15.3	shirt

	size	price	classlabel	color_blue	color_green	color_red
0	S	10.1	shirt	0	1	0
1	M	13.5	pants	0	0	1
2	L	15.3	shirt	1	0	0

# Codificación de características

**Problema:** Demasiadas categorías. Para esto se puede:

- Definir una estructura jerárquica: códigos zip  
regiones -> estados -> ciudades  
Escoger un nivel específico para codificar esta característica
- Agrupar las categorías en diferentes grupos: edades  
grupos de edades 1-15, 16-22, 23-30

# Codificación de características

**Codificación usando la variable objetivo:** Codificar utilizando valores que puedan explicar la variable objetivo.

**Ejemplo:** Promediar la variable objetivo para cada categoría. Después, reemplazar los valores categóricos con los valores promediados.

$x_1$	$x_2$	$y$
a	c	1
a	d	1
b	c	0
a	d	0
a	d	0
a	d	1
b	d	0

$$x_1 \rightarrow \text{cat a} \rightarrow 3/5 = 0.6$$

$$x_1 \rightarrow \text{cat b} \rightarrow 0/2 = 0$$

$$x_2 \rightarrow \text{cat c} \rightarrow 1/2 = 0.5$$

$$x_2 \rightarrow \text{cat d} \rightarrow 2/5 = 0.4$$



$x_1$	$x_2$	$y$
0.6	0.5	1
0.6	0.4	1
0	0.5	0
0.6	0.4	0
0.6	0.4	0
0.6	0.4	1
0	0.4	0

# Procesamiento de datos



# Transformaciones en sklearn

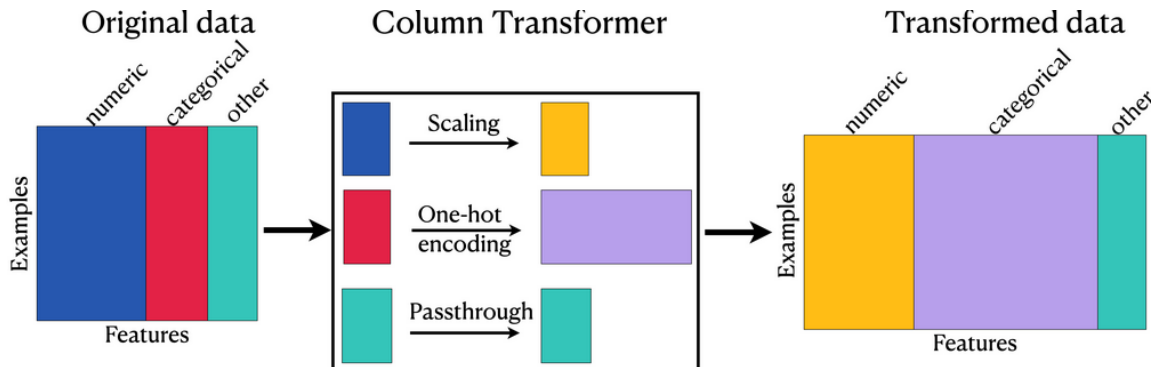
SimpleImputer, StandardScaler, MinMaxScaler, LabelEncoder, OrdinalEncoder, OneHotEncoder, CountVectorizer pertenecen a la clase **Transformers** de **sklearn**. Todos tienen los métodos:

- `.fit()`: aprende la transformación a partir de los datos de **entrenamiento**
- `.transform()` aplica la transformación a cualquier conjunto (entrenamiento, validación, prueba).
- En el conjunto de entrenamiento, también se puede aplicar `.fit_transform()`
-

# ColumnTransformer en sklearn

**ColumnTransformer** aplica las transformaciones a las columnas de un arreglo de Numpy o a un DataFrame de Pandas. Implementa los métodos `.fit()` y `.transform()`.

- Permite aplicar transformaciones a subconjuntos de características (numérica, categóricas, texto), de forma individual.
- Las características generadas por cada transformación se concatenarán para conformar un solo grupo de características



# ColumnTransformer y Pipeline

```
numerical_processing = Pipeline([
    ('num_imputer', SimpleImputer(strategy='mean')),
    ('num_scaler', MinMaxScaler())])

categorical_processing = Pipeline([
    ('cat_imputer', Imputer(strategy='constant', fill_value='missing')),
    ('cat_encoder', OneHotEncoder(handle_unknown='ignore'))])

processor = ColumnTransformer(transformers=[
    ('num_processing', numerical_processing, ('feature1', 'feature3')),
    ('cat_processing', categorical_processing, ('feature0', 'feature2'))])

pipeline = Pipeline([('data_processing', processor),
    ('estimator', KNeighborsClassifier())])

pipeline.fit(X_train, y_train)
predictions = pipeline.predict(X_test)
```

