



Tecnológico Nacional de México
Instituto Tecnológico de Tijuana

REPORTE FINAL / LIBRO DE TEXTO

Introducción a la Minería de Datos

José Mario García Valdez

Periodo Sabático 14 de agosto de 2017 - 13 de agosto de 2018

AS-2-270/2017

Índice general

Dedicatoria	6
Palabras de Agradecimiento	6
Introducción	6
Descubrimiento de conocimiento en bases de datos	7
Algunas definiciones y tecnologías complementarias	10
Minería de datos	10
Aprendizaje automático (<i>Machine Learning</i>)	10
Ciencia de datos	10
Computación inteligente	10
<i>Big Data</i>	11
<i>Cloud Computing</i>	11
Aplicaciones	11
Modelado de sistemas no lineales	11
Procesamiento del Ruido	12
Internet de las Cosas	12
Reconocimiento de patrones	13
Negocios	13
Minería de textos	13
Las Tareas de la Minería de Datos	13
Clasificación	13
Regresión	14
Agrupamiento	14
Análisis de asociación	14
Detección de anomalías	15
Optimización	15
Los retos que motivan a la Minería de Datos	15
Lectura adicional	17
Ejercicio: ¿Setosa, Virginica o Versicolor?	17
Paso 1: identificar el objetivo	18
Paso 2: seleccionar y recolectar	18
Paso 3: Preprocesar los datos.	20
Paso 4: Transformar los datos	22
Paso 5: Seleccionar la tarea de minería de datos	22
Paso 6: Análisis exploratorio	22

Paso 7: Minería de Datos	25
Paso 8. Interpretar y evaluar	28
Paso 9. Aplicar el conocimiento adquirido	29
Los Datos	29
Datos y objetos	29
Clasificación de escalas de medición	31
Tipos de conjuntos de datos	33
Tablas	33
Matrices	35
Documento-Término	35
Filtrado Colaborativo	36
Grafos	37
Calidad de los Datos	39
Fuentes de datos poco confiables	40
Errores de medición y recolección de datos	40
Valores atípicos	41
Datos con Ruido	42
Preprocesamiento	42
Estandarización	43
Escalado a un rango	49
Escalado con valores atípicos	51
Medidas de Similitud y Normalización	52
Datos Agregados	56
Muestreo	59
Muestreo aleatorio simple	59
Muestreo sistemático	60
Muestreo estratificado	60
Muestro por conglomerados (<i>cluster sampling</i>)	60
Muestreo aleatorio simple en Python	61
Python para Análisis de Datos: Pandas	61
Breve Introducción al DataFrame de Pandas	63
Creando un DataFrame desde un archivo de texto	63
Creando un DataFrame con el constructor	70
DataFrame como matriz	74
Relaciones entre objetos	74

Operaciones básicas del <i>DataFrame</i>	76
Seleccionando	78
Concatenar	82
Join estilo SQL	83
Agrupando	84
Resumen	84
Ejercicios	84
Lectura adicional	85
Bibliografía	85
Python para Análisis de Datos: NumPy	85
Computo numérico en Python	85
NumPy: array	86
Selección y cortes en arreglos multidimensionales	89
Operaciones básicas	90
Selección con arreglos de booleanos	93
Iteración	94
Generación de arreglos con números secuenciales	95
Exploración de los Datos	97
Estadística descriptiva	97
Parámetros estadísticos	98
Medidas de posición	98
Medidas de dispersión	99
Visualización	100
Gráficas utilizadas en visualización de datos	105
Gráfica de barras	105
Histograma	106
Diagrama de dispersión	108
Gráfica de cajas	109
Coordenadas paralelas	111
Caras de Chernoff	113
OLAP y análisis de datos multidimensional	114
Almacenes de Datos	115
El cubo OLAP	116
Regla de Inferencia Composicional	118
Razonamiento Difuso	119
Método para el Razonamiento Difuso	120

Sistemas de Inferencia Difusos	120
Clasificación Básica	122
Preliminares	122
Algoritmos de Inducción de Árboles de Decisión	125
La Matriz de confusión	129
Ejemplo de una matriz de confusión	132
Sobreajuste de modelos	132
Evaluando el desempeño de los clasificadores	134
Holdout	134
Holdout con muestras aleatorias	134
Validación Cruzada o Cross-validation	135
Métodos para comparar clasificadores	135
Otras Técnicas de Clasificación	136
Clasificadores basados en reglas	136
k vecinos más próximos	137
Naïve Bayes	138
Redes Neuronales Artificiales	141
Funciones Discriminantes	142
El perceptrón	144
Red Neuronal Artificial Multicapa	146
Support Vector Machines	147
El caso linealmente separable	149
Métodos Ensamble	150
Bagging	151
Boosting	151
Análisis de Asociaciones	152
Definición formal del problema	152
Generación de conjuntos de artículos frecuentes	153
El principio Apriori	154
Generación de reglas	155
Representación compacta de conjuntos de artículos frecuentes	156
El algoritmo FP-Growth	156
Análisis de Clusters	159
Clustering basado en prototipos	162
Clustering basado en densidades	163

Clustering basado en grafos	163
k -medias	163
La selección incorrecta de las posiciones iniciales de los centroides	164
¿Como evaluamos la calidad de los clusters generados?	165
¿Como evitamos los errores provocados por la inicialización aleatoria?	166
C -medias difuso	166
Agrupamiento Jerárquico	167
Ejercicio	170
DBSCAN	171
Conclusiones	173
Bibliografía	173

Dedicatoria

A mi familia

Palabras de Agradecimiento

Agradezco a las instituciones que promueven programas para el desarrollo académico de los docentes ya que este libro fue elaborado durante el ejercicio del periodo Sabático,

Agradezco a los desarrolladores de software libre y a los investigadores que promueven la cooperación y la ciencia abierta.

Introducción

Esta sección tiene como objetivo que tengas una visión general acerca del tema central de este libro: La extracción de conocimiento a partir de grandes cantidades de datos. Como tal vez te imagines esto no es una tarea sencilla ya que involucra distintas áreas de investigación científica y un buen número de tecnologías. No te preocupes, vamos a empezar por revisar los conceptos básicos procurando que tengas una buena idea de donde y cuando aplicar estas técnicas. Algunas de las preguntas que podrás responder al final del capítulo son:

- ¿Qué buscamos en los datos?
- ¿Cuál es proceso para el descubrimiento de conocimiento en bases de datos?

- ¿Qué tecnologías intervienen en este proceso?
- ¿Qué técnicas de minería de datos aprenderás a utilizar?
- ¿Dónde podemos aplicar la minería de datos?
- ¿Que retos y limitaciones existen actualmente en el área?

Cuando visitamos al médico, confiamos en que el haya adquirido un amplio **conocimiento** a base de interactuar con su entorno y su capacidad de procesar la información que lo rodea. Utilizando este conocimiento él podrá ser capaz de darnos un diagnóstico acertado. Si en lugar de asistir con un humano eligiéramos visitar a un robot-médico, más vale que cuente con una buena inteligencia artificial.

Según Rusell y Norvig (2016) el término inteligencia artificial se aplica cuando una máquina imita las funciones cognitivas que nosotros los humanos asociamos con otras mentes humanas, como por ejemplo: **aprender y resolver problemas**. Precisamente, una de las primeras aplicaciones de la inteligencia artificial han sido los Sistemas Expertos, los cuales pueden emular la toma de decisiones de un humano experto, tal como un médico. Un exponente importante de este tipo de sistemas fue Mycin el cual se basaba en un sencillo motor de inferencia, que manejaba una base de conocimiento de aproximadamente unas 500 reglas. Estas reglas representaban el conocimiento de los médicos. Una desventaja de este tipo de sistemas era que se requería de mucho esfuerzo y recursos para extraer el conocimiento de los expertos. Se debía entrevistarlos utilizando técnicas de elicitación del conocimiento para después representar dicho conocimiento de alguna manera para después almacenarlo en una *base de conocimiento*. Digamos que se realizaba una extracción manual del conocimiento a partir de las ideas de los expertos. Cualquier desarrollador que ha tenido que extraer los requerimientos de un usuario te dirá que fue una tarea cercana a lo imposible. No es descabellado preguntarnos entonces: ¿el conocimiento «humano» podrá ser extraído de otras fuentes?, ¿y si contamos con una base de datos de miles de diagnósticos realizados anteriormente?, ¿podremos extraer de esta base de datos un nuevo conocimiento?. Este es el tipo de preguntas son las que se trata de contestar el área de investigación en inteligencia artificial, pero como veremos más adelante, en la búsqueda de respuestas se involucran muchas otras áreas de investigación.

Descubrimiento de conocimiento en bases de datos

(KDD) Al proceso de extraer conocimiento útil a partir de datos se le denomina *Descubrimiento de Conocimiento en Bases de Datos* o *KDD* ya que es muy común utilizar las siglas en inglés de «Knowledge Discovery from Databases». Este proceso puede hacerse manualmente, expertos en algún dominio pueden consultar y analizar bases de datos para descubrir patrones que les ayuden a tomar decisiones. Por ejemplo, en la película «The Big Short» podemos ver al inversionista Michael Burry analizando grandes cantidades de datos, para después predecir el eminente desplome de la burbuja inmobiliaria. Como podemos imaginar, este proceso no es trivial, no es simplemente hacer una consulta en una

base de datos o en un motor de búsqueda. Es necesario encontrar patrones que involucren diferentes variables y relaciones no lineales entre ellas. El KDD sigue evolucionando involucrando cada vez más áreas de investigación: aprendizaje automático, reconocimiento de patrones, computación inteligente, estadística, procesamiento de lenguaje natural, visualización, ingeniería de software entre otras.

La Minería de Datos de hecho es uno de los componentes del proceso KDD. Veamos el proceso del KDD, según el esquema de Brachman y Anand:

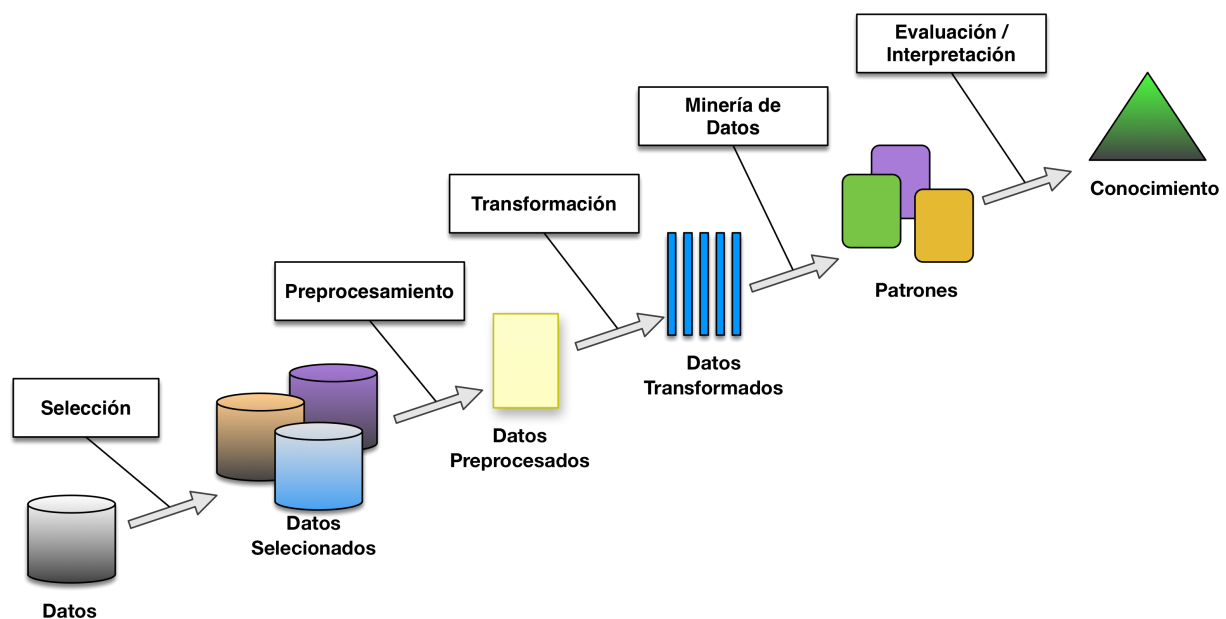


Figura 1: El proceso del KDD según Brachman y Anand [-brachman1996process].

1. Como primer paso debemos *identificar el objetivo* del proceso de KDD. Por ejemplo, un proveedor de telefonía móvil podría estar interesado en identificar a aquellos clientes que ya no renovarían su contrato y se irán con la competencia. A esto se le llama la tasa de cancelación de clientes (en inglés churn rate o attrition rate) y es crucial para estimar el desempeño de la empresa.
2. El siguiente paso es *seleccionar y recolectar* aquellos datos necesarios para el proceso. Para nuestro ejemplo, podríamos requerir el historial de pago de los clientes, datos sobre quejas y llamadas que han hecho a soporte, servicios adicionales que se han contratado o cancelado, etc. Esta información puede estar distribuida en diferentes bases de datos. También se puede incluir información que se colecte por medio de sensores o sistemas externos, por ejemplo lecturas del GPS, caídas de la conexión o el número de aplicaciones que el cliente se ha instalado.
3. Es necesario *preprocesar* los datos para limpiarlos de datos erróneos, datos faltantes, cambios

de formato, inconsistencias, etc. Este proceso complicado y depende bastante de los requerimientos de la empresa.

4. Dependiendo de los objetivos se deben *transformar* los datos para simplificar su procesamiento. Por ejemplo un documento de texto es necesario transformarlo en vector representativo. Una imagen puede ser transformada en una representación simplificada pero conservando sus características esenciales. Muchas veces también es necesario eliminar campos que no aportan mucho a la tarea de KDD. Siguiendo nuestro ejemplo, después de un análisis podríamos darnos cuenta que el número de teléfono en sí no es un dato importante para distinguir el comportamiento de los clientes, y que al contrario la marca y modelo de sus móviles son muy importantes.
5. Este paso consiste en *seleccionar la tarea de minería de datos* adecuado de acuerdo con la meta establecida para el proceso de KDD. Por ejemplo, clasificación, regresión, agrupamiento, etc.
6. Se hace un *análisis exploratorio*, podemos experimentar con diferentes algoritmos de minería de datos o de aprendizaje automático. Al seleccionar los algoritmos debemos considerar los tipos de datos que tenemos. Por ejemplo algunos algoritmos no son apropiados para datos categóricos (modelo de celular). También debemos ajustar los parámetros para mejorar el desempeño y comparar el rendimiento entre los algoritmos.
7. En este paso se realiza la *minería de datos* a partir de el o los algoritmos seleccionados en el paso anterior.

Este paso nos arroja los *patrones ocultos* que describen a los datos. Siguiendo nuestro ejemplo, el resultado podría ser un conjunto de reglas nos que pueden servir para decidir si un cliente cancelará su suscripción. Una de las regla podría ser:

```
1 SI el cliente tiene un promedio mayor a 7 días de retraso
2   AND su promedio de llamadas del mes es menor que 10
3 ENTONCES:
4   el cliente cancelará el servicio
```

Los patrones son entonces **modelos** que se ajustan a los datos. Los modelos no siempre están expresados en un lenguaje que los humanos podamos entender. Por ejemplo el resultado de un algoritmo de agrupamiento podrían ser simplemente grupos de clientes, que después deberíamos de interpretar.

En el texto utilizaremos el término modelo en lugar de patrones, ya que es más usual actualmente. Algo muy importante es que los modelos deben de representar también a datos nuevos. Digamos nuevos clientes que se suscriban el mes siguiente.

8. En este paso nos toca *interpretar y evaluar* los patrones que encontramos en el paso anterior. Visualizar los patrones y modelos extraídos. Decidir si se ha encontrado algún conocimiento útil.

9. El último paso es hacer algo con el conocimiento adquirido. Se puede utilizar directamente para tomar decisiones, incorporarlo como parte de un sistema o simplemente reportar los resultados a los interesados.

Algunas definiciones y tecnologías complementarias

Minería de datos

El libro se enfocará principalmente en el componente de Minería de Datos, que como vimos es un paso importante en el proceso de KDD. Pero también te haz dado cuenta que es muy importante hacer bien los pasos anteriores. De hecho en la mayoría de los proyectos los otros pasos requieren de mayor trabajo. La minería de datos entonces podemos definirla como: El proceso de búsqueda de patrones aplicando distintos algoritmos a grandes cantidades de datos. Algunas veces se utiliza el término Minería de Datos para referirse a todo el proceso de KDD.

Aprendizaje automático (*Machine Learning*)

El aprendizaje automático es el área de las ciencias computacionales encargada de estudiar y desarrollar los algoritmos capaces de aprender y hacer predicciones a partir de los datos. Podríamos decir que en el proceso de vamos a aplicar algoritmos de aprendizaje automático, por lo que debemos conocer muy bien sus fundamentos y limitaciones.

Ciencia de datos

Como hemos visto el proceso de KDD busca extraer conocimiento partir de los datos. ¿Y si vamos más allá?. La ciencia de datos es similar al KDD pero el conocimiento que se busca es el conocimiento científico. Es hacer ciencia a partir de los datos. La ciencia apoyada en datos (en inglés data-driven science) al igual que el KDD es una campo interdisciplinario que incluye métodos científicos, procesos, y sistemas para extraer conocimiento o entendimiento a partir de los datos.

Computación inteligente

La expresión computación inteligente (CI de computational intelligence) se asocia a la habilidad de un sistema de computo de aprender a realizar una tarea a partir de datos o la observación. Una distinción importante es que los métodos empleados son inspirados en la naturaleza. La CI busca resolver problemas complejos del mundo-real para los cuales el modelado tradicional o matemático

son insuficientes. Los métodos más representativos son: redes neuronales artificiales, lógica difusa y computación evolutiva.

Big Data

Big Data se refiere al caso de sistemas que cuentan con cantidades enormes de datos. Normalmente los datos se almacenan en un servidor central. En el caso de Big Data los datos son tantos que deben almacenarse en muchos servidores. También el tipo de dato podría ser muy grande, por ejemplo un registro de un experimento determinado podría medir un terabyte. En estos casos las técnicas o algoritmos tradicionales resultan inadecuados. El usar Big Data no implica Minería de Datos, muchos sistemas solamente requieren procesar los datos, por ejemplo para realizar una consulta o algún cálculo. Claro que también hay procesos de Minería de Datos que se realizan utilizando Big Data, esto requiere de tecnología y algoritmos especializados.

Cloud Computing

¿Quién no ha escuchado esto de la nube?. El Cloud Computing es el nuevo modelo de desarrollo de sistemas. Básicamente pagamos por el poder computacional más servicios adicionales como bases de datos, algoritmos en línea y software pagando solo lo que ocupemos. Empresas con mucha experiencia en minería de datos e inmensos recursos computacionales están brindando el servicio de *On-Demand Machine Learning*. Google con ml-engine, Amazon ML, IBM con Watson, Azure de Microsoft entre muchos otros nos permiten hacer todo el proceso de KDD en sus servidores siguiendo el modelo de Cloud Computing. En lugar de nosotros implementar los algoritmos, instalar los lenguajes, procesar los datos, mantener todo actualizado, etc. podemos contratar el servicio de Almacenamiento, Procesamiento y Machine Learning. Nuestra labor se volverá entonces elegir los algoritmos adecuados, preparar los datos y otras tareas más bien de diseño.

Vamos a implementar nuestros sistemas pensando siempre en la nube como plataforma de ejecución. Esto nos permitirá desplegar elementos de nuestro sistema en la nube o utilizar diferentes servicios bajo demanda. Por último, tal vez después de que diseñes un algoritmo que funcione muy bien, podrías ponerlo a funcionar en la nube para que lo utilicemos tus clientes.

Aplicaciones

Modelado de sistemas no lineales

En general se utiliza la Minería de Datos para modelar sistemas no lineales. En caso de que no estés familiarizado veamos un ejemplo. Ana entra a trabajar a las 7:00 am. El trabajo de Ana está a 10 km de

su casa. Ella normalmente sale de su casa a las 6:20 y llega a las 6:40, hace 20 minutos. En ocasiones sale a las 6:10 y claro llega a las 6:30. Hasta aquí todo va bien, los tiempos siguen un comportamiento lineal y constante. Incluso podemos calcular que si antes deja a sus hijos en la escuela que está a 5 km, llegará en 10 minutos. El problema viene cuando Ana sale de casa a las 6:25 en ese caso hace 25 minutos y si sale a las 6:30 hace 40 minutos y llega tarde a su trabajo. ¿Por que el sistema no sigue un comportamiento lineal?. El problema es que el tiempo que hace a su trabajo no solo depende de la velocidad promedio y la distancia. El tiempo depende del tráfico, la ruta que tome, si se pone un policía a dirigir el tráfico, si hay alguna manifestación, si las primarias están de vacaciones, etc. El problema se vuelve no lineal por que está ubicado en el mundo real, y si queremos hacer un calculo más exacto tendríamos que considerar muchas variables, incluso podríamos hacer un simulador. Cuando salimos a nuestro trabajo muchos hacemos un cálculo mental del tiempo que haremos por eso los optimistas llegamos tarde. Pero, ¿en que basamos nuestro cálculo si el sistema es no lineal y por lo tanto muy complejo?. Así es, en nuestra experiencia, es decir en extraer de nuestra mente el tiempo que hemos hecho los días anteriores, de nuestro sentido común «hoy es viernes, habrá mucho tráfico». La minería de datos puede ayudarnos a modelar este tipo de sistemas, sin que tengamos nosotros que establecer las relaciones no lineales entre muchas variables.

Procesamiento del Ruido

El ruido es una complicación común en sistemas del mundo-real. Por ejemplo, cuando se le pone un sensor a un paciente, en ocasiones las lecturas se ven afectadas por los movimientos del paciente y registran valores erróneos o muy altos o bajos en comparación con el valor real. Descubrir patrones en presencia de ruido es bastante difícil, por lo que se deben elegir técnicas de modelado que toleren el ruido.

Internet de las Cosas

El concepto de Internet de las Cosas (IoT) se refiere básicamente a que todas las cosas están conectadas al Internet y pueden recopilar e intercambiar datos. Crear modelos de sistemas no lineales con muchísimas variables es muy complicado. La tecnología de IoT se puede aplicar en sistemas de ciudades inteligentes, para agilizar el tráfico en tiempo real o abrir el paso a los bomberos cuando se dirigen a atender una emergencia. Estos sistemas deben considerar las lecturas en tiempo real de muchísimos sensores y determinar como se afectan entre sí, para determinar si hay alguna emergencia grave, predecir el tráfico. Utilizando técnicas de aprendizaje automático es posible modelar este tipo de sistemas.

Reconocimiento de patrones

Al momento de subir a Facebook la tradicional *selfie* con los amigos, el sistema nos sugiere etiquetar las caras de ellos con su nombre de usuario correcto. Es decir, el sistema reconoció al usuario a partir de la imagen una imagen de rostro. Esto es parecido a lo que hicimos anteriormente con las flores Iris. Pero en lugar de 4 variables de entrada tenemos un arreglo de los cientos de píxeles que hacen la imagen y en lugar de tres flores, tenemos cientos de amigos. En el caso de las flores recordamos que ya estaban etiquetadas. En el caso de Facebook, la extracción del modelo requiere que ya haya ejemplos de los rostros asociados a los usuarios. Nosotros mismos agregamos ejemplos clasificados cada que manualmente etiquetamos un rostro. Las mismas técnicas pueden utilizarse para reconocer gestos, la voz, huellas digitales, firmas, letra escrita, copias de videos y muchos otros patrones.

Negocios

Se utiliza el KDD principalmente para el mercadeo dirigido, para calcular el riesgo de alguna operación, predecir cambios en los mercados, identificar tendencias a partir de las publicaciones en redes sociales, recomendar productos o personalizar servicios.

Minería de textos

El texto sigue siendo el medio de comunicación más efectivo en Internet. Va desde mensajes cortos tipo SMS o de mensajería instantánea, blogs, correos electrónicos, reportes, artículos, páginas web. La minería de textos sigue siendo uno de los campos con mayor actividad y constantemente se desarrollan nuevas técnicas para su minado. Existen temas que aunque hay avances considerable aun siguen abiertos, como la traducción automática, la generación automática de informes sobre hilos de discusión, clasificación de correos, noticias y otros mensajes. Análisis de Sentimientos de textos, por mencionar algunos.

Las Tareas de la Minería de Datos

Clasificación

Un problema muy común es el de asignar un objeto a una clase o categoría. Veamos varios ejemplos. Los correos electrónicos que recibimos podemos clasificarlos en dos clases: *correo válido* o *correo no deseado*. Actualmente en Google Mail hay otras categorías: *social*, *promociones*, *foros*. La noticia de un periódico: *deportes*, *nacional*, *internacional*. Un usuario visitando una tienda en-línea: *compra*, *no-compra*. Una imagen de dígitos escritos a mano: *0,1,2,3,4,5,6,7,8,9*. La imagen de una galaxia: *sua-ve,disco,estrella*. La imagen de una persona: *ana, tom, joe, sue*. El problema de Clasificación es el de

identificar a que clase pertenece un objeto, basándose en un conjunto de objetos en los cuales la clase o categoría ya se conoce. Por ejemplo para el caso de la clasificación de correos electrónicos, primero debemos contar con un buen número de correos que han sido clasificados previamente por humanos. A partir de estos datos un algoritmo de clasificación es capaz de aprender un modelo que podemos utilizar después para clasificar nuevos correos que nos lleguen. La tarea entonces es predecir una clase o etiqueta a partir de un conjunto de características.

Regresión

La Regresión es la misma tarea de la clasificación pero en lugar de asignarle una clase a cada instancia le asignamos un valor continuo. Por ejemplo, las instancias podrían ser casas y la variable objetivo podría ser el costo de venta en el mercado. De nuevo para hacer la predicción nos basamos en un conjunto de casas que además de tener valores en todas las características cuentan también con el precio de venta.

El objetivo del Aprendizaje Supervisado

El objetivo de la Clasificación y la Regresión es el de minimizar el error de predicción. El error es la diferencia que hay entre el valor o categoría reales y la predicción. Este es un tema muy importante que veremos en la sección de [Evaluación de Modelos]. Las dos tareas entonces son ejemplos de aprendizaje supervisado ya que requieren de datos de entrenamiento para extraer de ahí el modelo o la predicción directamente.

Agrupamiento

El agrupamiento es un ejemplo de Aprendizaje no supervisado en el cual no se requiere de contar con datos previamente clasificados. El objetivo del análisis de Agrupamiento o *Clustering* es el de encontrar grupos de objetos los cuales estén estrechamente relacionados o sean similares. El objetivo en este caso es tratar de que la distancia promedio entre los miembros del mismo grupo sea menor que la distancia promedio entre objetos de distintos grupos. Por ejemplo, un sistema de recuperación de información puede regresar los documentos de una búsqueda con mayor eficiencia si los documentos similares se guardan juntos. También podemos encontrar a clientes similares a los cuales les podríamos ofrecer ciertos servicios.

Análisis de asociación

En ocasiones podemos descubrir patrones interesantes los cuales asocian hechos que con frecuencia suceden al mismo tiempo o en cierto orden. En México por ejemplo podríamos encontrar que si un

consumidor compra cebollas y tomate al mismo tiempo, es muy probable que también compre carne. Es muy probable que las tortillas las compre siempre. Normalmente los patrones de asociación se expresan como reglas de asociación. Para el ejemplo anterior la regla sería:

{cebollas, tomate} -> {carne}

Este tipo de análisis se utiliza para hacer toma de decisiones de marketing, ubicación de artículos en aparadores, ofrecer agregar algún producto al carrito de compra, entre otros.

Detección de anomalías

El objetivo de esta tarea es encontrar objetos que sean muy diferentes al resto. A este tipo de objetos se les conoce como anomalías o outliers. El reto es no etiquetar como anomalías a objetos que no lo son y viceversa. Este tipo de análisis nos permite detectar fraudes con las tarjetas de crédito, robo de identidad, ciertas enfermedades, problemas en ecosistemas entre otras aplicaciones.

Optimización

La optimización no es en si misma una tarea de la minería de datos, pero la mayoría de las técnicas que se utilizan para realizar las tareas anteriormente utilizan algoritmos de optimización. Un algoritmo de optimización podemos verlo como un algoritmo de búsqueda. Tratamos de encontrar una combinación de objetos que nos resuelva un problema de manera óptima. En este libro nos enfocaremos en algoritmos de optimización inspirados en la naturaleza.

¿Buscar o inferir patrones?

Hay casos en los que un algoritmo de optimización puede utilizarse para hacer minería de datos. El problema de extracción de conocimiento podemos verlo como la búsqueda del modelo óptimo de para los datos en cuestión. Por ejemplo debemos buscar el conjunto de reglas que mejor clasifique ciertos correos electrónicos. Es importante recordar que la extracción de conocimiento no siempre se basa en inferencia estadística.

Los retos que motivan a la Minería de Datos

Tan, Steinbach y Kumar mencionan los principales retos que han motivado el desarrollo de la minería de datos:

- **Escalabilidad.** Actualmente contamos con inmensas cantidades de datos. No es raro utilizar conjuntos de datos que rondan en los terabytes o incluso petabytes. Los algoritmos, estructuras

y bases de datos deben ser capaces de escalar a los niveles del *Big Data*. Esto sigue siendo un reto, que involucra otras áreas como el computo distribuido y paralelo, cómputo en la nube. Además se deben de utilizar técnicas de muestreo.

- **La maldición de la dimensión.** Hace algunos años era inconcebible tener objetos con miles de características. Ahora este tipo de instancias son comunes. Si un objeto tuviera solo dos o tres características lo podríamos representar en 2D o en 3D un eje por cada una. Pero cuando un objeto tiene muchas características y sobrepasa por mucho el 3D decimos que se encuentra en un espacio de alta dimensión. Podríamos imaginarnos que el espacio donde se encuentra ubicado el objeto es cada vez mayor por cada nueva dimensión que agreguemos y comparativamente el número de objetos que cabrían en ese espacio sería muchísimo mayor. A este fenómeno se le conoce como la maldición de la dimensión pues el volumen del espacio aumenta exponencialmente haciendo que los datos disponibles se vuelvan dispersos. El reto es que algunos algoritmos de análisis de datos no dan buenos resultados al trabajar en altas dimensiones.

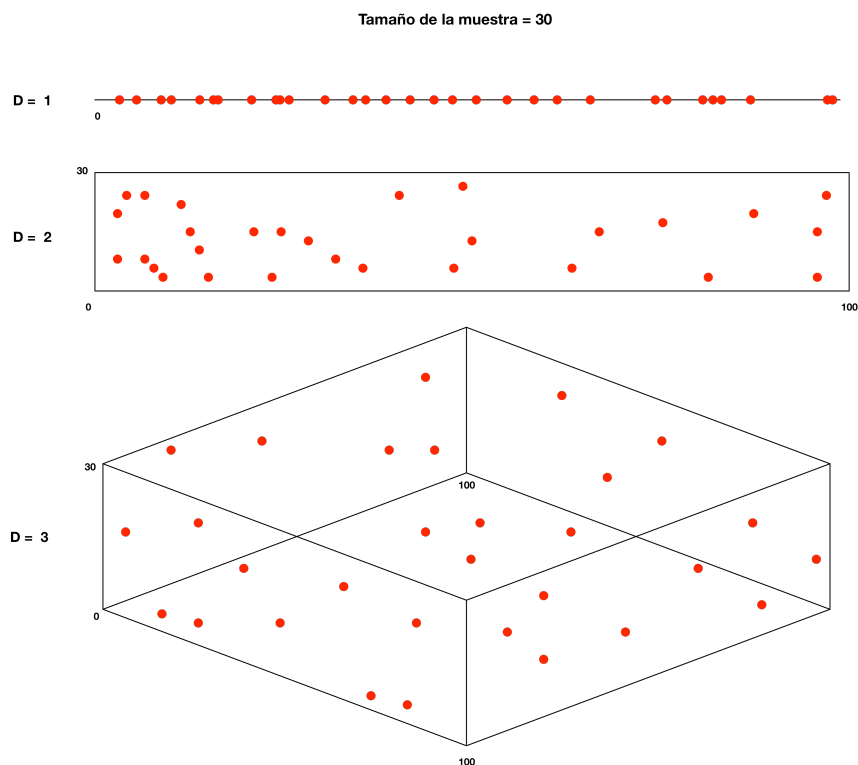


Figura 2: El tamaño del espacio aumenta exponencialmente haciendo que los datos disponibles se vuelvan dispersos

- **Datos Heterogéneos y Complejos.** Los datos que tradicionalmente se han empleado en análisis de datos son los categóricos o continuos. En la actualidad contamos con datos muy diversos como documentos, páginas web, videos, lecturas de sensores, datos con georreferenciación,

series de tiempo, grafos, secuencias DNA entre muchos otros. Los algoritmos deben considerar las relaciones y propiedades intrínsecas a los datos, relaciones temporales, propiedades de los grafos, etc.

Lectura adicional

Visión General de KDD

KD Nuggets Es un sitio con mucha información relacionada con minería de datos y KDD.

Ejercicio: ¿Setosa, Virginica o Versicolor?

En esta sección vamos a hacer un ejercicio práctico del proceso de KDD. Utilizaremos Python y algunas de las bibliotecas que utilizaremos a lo largo del libro. Al terminar el ejercicio tendrás una idea del tipo de programación que se requiere para el análisis de datos en Python.

Nota:

Para realizar los ejercicios debes tener previamente instalada la distribución Anaconda con python 2.7. En caso de que requieras ayuda en la instalación o alguna de las instrucciones, visita antes la sección [Python para Análisis de Datos].

Como primer ejercicio vamos a seguir el proceso de KDD para extraer conocimiento a partir del famoso conjunto de datos de flores Iris. El conjunto de datos incluso cuenta con su propia entrada en wikipedia. El conjunto de datos fue introducido por Ronald Fisher en un artículo en 1936. Contiene 50 muestras de tres especies de la flor Iris (Iris setosa, Iris virginica e Iris versicolor). Fisher midió cuatro características de cada muestra: el largo y ancho del sépalo y el largo y ancho del pétalo, en centímetros. Basado en la combinación de estos cuatro rasgos, Fisher se desarrolló un modelo discriminante lineal para distinguir entre una especie y otra. Como ejemplo veamos un fragmento que incluye varios registros de cada flor:

iris.data

```
1 sepal_length, sepal_width, petal_length, petal_width, species
2 5.1, 3.5, 1.4, 0.2, setosa
3 4.9, 3.0, 1.4, 0.2, setosa
4 4.7, 3.2, 1.3, 0.2, setosa
5 4.6, 3.1, 1.5, 0.2, setosa
6 7.0, 3.2, 4.7, 1.4, versicolor
7 6.4, 3.2, 4.5, 1.5, versicolor
```

```
8 6.9,3.1,4.9,1.5,versicolor
9 5.5,2.3,4.0,1.3,versicolor
10 6.5,2.8,4.6,1.5,versicolor
11 6.3,3.3,6.0,2.5,virginica
12 5.8,2.7,5.1,1.9,virginica
13 7.1,3.0,5.9,2.1,virginica
14 6.3,2.9,5.6,1.8,virginica
15 6.5,3.0,5.8,2.2,virginica
```

Para compartir los conjuntos de datos normalmente se utilizan archivos en formato texto. En este caso el *dataset* se encuentra en formato CSV (comma-separated values) con el cual es muy fácil representar datos tabulares. Los archivos CSV se pueden abrir e importar sin ningún problema a hojas de cálculo y sistemas de bases de datos. Como podemos ver en el ejemplo los registros están separados por saltos de línea, y en la primera se indica el nombre de la columna. En este caso cada registro cuenta con cinco campos. Los primeros cuatro son las lecturas correspondientes en centímetros y el último es muy importante ya que es la etiqueta o clase. En este caso en particular la etiqueta indica el tipo de flor.

Paso 1: identificar el objetivo

El objetivo del proceso de KDD será encontrar algunos patrones que nos permitan clasificar las flores, o algún otro conocimiento nuevo.

Paso 2: seleccionar y recolectar

En este caso lo que debemos hacer es simplemente bajarnos el archivo *iris.csv* de alguna parte. Esto lo podemos hacer manualmente o directamente con Python.

Recolectar archivo *iris.data*

Esto lo vamos a hacer de manera interactiva desde el intérprete. Para ejecutar el intérprete simplemente escribimos python en la línea de comandos.

El intérprete nos da la bienvenida:

```
1 Python 2.7.13 |Anaconda custom (x86_64)| (default, Dec 20 2016,
   23:05:08)
2 [GCC 4.2.1 Compatible Apple LLVM 6.0 (clang-600.0.57)] on darwin
3 Type "help", "copyright", "credits" or "license" for more information.
4 Anaconda is brought to you by Continuum Analytics.
```

```
5 Please check out: http://continuum.io/thanks and https://anaconda.org
6 >>>
```

El archivo lo podemos bajar del Machine Learning Repository de la UCI (University of California Irvine). La URL directa es la siguiente: <https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/iris/iris.data>. Me ha tocado algunas veces que no esta disponible el servidor, si esto sucede descárgalo de algún otro lado.

Para bajarlo utilizaremos la biblioteca de python requests. Esta biblioteca ya viene instalada en Anaconda. Solamente tenemos que importarla:

```
1 >>> import requests
```

Hacemos la petición get al archivo (esto puede tardar unos segundos):

```
1 >>> r = requests.get('https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-
databases/iris/iris.data')
```

Imprimimos el texto para ver que se haya bajado bien. Se debería ver algo como esto (es un fragmento):

```
1 >>> r.text
2 u'5.7,3.8,1.7,0.3,Iris-setosa\n5.1,3.8,1.5,0.3,Iris-setosa\n5
.4,3.4,1.7,0.2,Iris-setosa\n5.1,3.7,1.5,0.4,Iris-versicolor\n5
.8,2.7,3.9,1.2,Iris-versicolor\n6.0,2.7,5.1,1.6,Iris-versicolor\n5
.4,3.0,4.5,1.5,Iris-versicolor\n6.0,3.4,4.5,1.6,Iris-versicolor\n6
.7,3.1,4.7,1.5,Iris-versicolor\n6.3,2.3,4.4,1.3,Iris-versicolor\n5
.6,3.0,4.1,1.3,Iris-versicolor\n5.5,2.5,4.0,1.3,Iris-versicolor\n5
.5,2.6,4.4,1.2,Iris-versicolor\n6.1,3.0,4.6,1.4,Iris-versicolor\n5
.8,2.6,4.0,1.2,Iris-versicolor\n5.0,2.3,3.3,1.0,Iris-versicolor\n5
.6,2.7,4.2,1.3,Iris-versicolor\n5.7,3.0,4.2,1.2,Iris-versicolor\n5
.7,2.9,4.2,1.3,Iris-versicolor\n6.2,2.9,4.3,1.3,Iris-versicolor\n5
.1,2.5,3.0,1.1,Iris-versicolor\n5.7,2.8,4.1,1.3,Iris-versicolor\n6
.3,3.3,6.0,2.5,Iris-virginica\n5.8,2.7,5.1,1.9,Iris-virginica\n7
.1,3.0,5.9,2.1,.2,Iris-virginica\n6.3,2.8,5.1,1.5,Iris-virginica\n6
.1,2.6,5.6,1.4,Iris-virginica\n7.7,3.0,6.1,2.3,Iris-virginica\n6
.3,3.4,5.6,2.4,Iris-virginica\n6.4,3.1,5.5,1.8,Iris-virginica\n6
.0,3.0,4.8,1.8,Iris-virginica\n6.9,3.1,5.4,2.1,Iris-virginica\n6
.7,3.1,5.6,2.4,Iris-virginica\n6.9,3.1,5.1,2.3,Iris-virginica\n5
.8,2.7,5.1,1.9,Iris-virginica\n6.8,3.2,5.9,2.3,Iris-virginica\n6
.7,3.3,5.7,2.5,Iris-virginica\n6.7,3.0,5.2,2.3,Iris-virginica\n6
.3,2.5,5.0,1.9,Iris-virginica\n6.5,3.0,5.2,2.0,Iris-virginica\n6
.2,3.4,5.4,2.3,Iris-virginica\n5.9,3.0,5.1,1.8,Iris-virginica\n\n'
```

¡Muy bien!, a lo que sigue.

Paso 3: Preprocesar los datos.

Una cadena enorme contiene todos los datos. Esto no nos sirve de mucho. El objetivo de este paso será procesar la cadena para tener como resultado un arreglo multidimensional de NumPy [QuickStart] (<https://docs.scipy.org/doc/numpy-dev/user/quickstart.html>). Este tipo de arreglos nos permite leer secciones a lo largo y ancho lo cual será muy útil en nuestro análisis. Más adelante veremos otras bibliotecas que simplificarán aun más este proceso como la biblioteca de análisis de datos Pandas.

Empezaremos por crear una lista a partir de una separación de la cadena. Esto lo hacemos con el método `split()` separando la cadena por los saltos de línea («\n»):

```
1 >>> renglones_iris = r.text.split('\n')
```

Revisemos un poco el contenido de la lista:

```
1 >>> renglones_iris[:5]
2 [u'5.1,3.5,1.4,0.2,Iris-setosa', u'4.9,3.0,1.4,0.2,Iris-setosa', u'
   4.7,3.2,1.3,0.2,Iris-setosa', u'4.6,3.1,1.5,0.2,Iris-setosa', u'
   5.0,3.6,1.4,0.2,Iris-setosa']
```

Podemos ver un detalle importante al final de la lista: los últimos dos renglones están vacíos:

```
1 >>> renglones_iris[-4:]
2 [u'6.2,3.4,5.4,2.3,Iris-virginica', u'5.9,3.0,5.1,1.8,Iris-virginica',
   u'', u'']
```

Observamos también que cada uno de los elementos de la lista a su vez está separado por comas y no necesitamos el último dato ya que queremos solo las medidas en centímetros. Lo que queremos entonces es crear una nueva lista a partir de `renglones_iris` que tenga como elementos a su vez listas con las medidas. Para esto utilizaremos comprensión de listas. Primero vamos a hacer algunas pruebas:

```
1 >>> [ renglon.split(',')[:-1] for renglon in renglones_iris[:-2]]
2 [[u'5.1', u'3.5', u'1.4', u'0.2'], [u'4.9', u'3.0', u'1.4', u'0.2'], [u'
   '5.0', u'3.3', u'1.4', u'0.2'], [u'7.0', u'3.2', u'4.7', u'1.4'], [u'
   '6.4', u'3.2', u'4.5', u'1.5'], [u'6.9', u'3.1', u'4.9', u'1.5'], [u'
   '5.5', u'2.3', u'4.0', u'1.3'], [u'6.5', u'2.8', u'4.6', u'1.5'], [u'
   '5.7', u'2.8', u'4.5', u'1.3'], [u'6.3', u'3.3', u'4.7', u'1.6'], [u'
   '4.9', u'2.4', u'3.3', u'1.0'], [u'6.6', u'2.9', u'4.6', u'1.3'], [u'
   '5.2', u'2.7', u'3.9', u'1.4'], [u'5.0', u'2.0', u'3.5', u'1.0'], [u'
   '5.9', u'3.0', u'4.2', u'1.5'], [u'6.0', u'2.2', u'4.0', u'1.0'], [u'
```



```
'6.1', u'2.9', u'4.7', u'1.4'], [u'5.6', u'2.9', u'3.6', u'1.3'], [
u'6.7', u'3.3', u'5.7', u'2.5'], [u'6.7', u'3.0', u'5.2', u'2.3'], [
u'6.3', u'2.5', u'5.0', u'1.9'], [u'6.5', u'3.0', u'5.2', u'2.0'], [
u'6.2', u'3.4', u'5.4', u'2.3'], [u'5.9', u'3.0', u'5.1', u'1.8']]
```

Lo que estamos haciendo es lo siguiente: a partir de la lista `renglones_iris` menos sus últimos dos elementos (`renglones_iris[:-2]`) vamos a generar una lista nueva procesando cada uno de sus elementos. Cada una de las cadenas en `renglones_iris` la vamos a separar por las comas y nos quedaremos con los primeros cuatro elementos (`renglon.split(«,»)[:1]`). Ya casi tenemos lo que necesitamos. Solamente faltaría convertir cada elemento a tipo flotante ya que como vemos son todas cadenas. Esto lo podemos hacer utilizando la función `map()` la cual aplica una función a cada elemento de la lista regresando una nueva. En este caso queremos utilizar la función `float()`. Veamos:

```
1 >>> [map(float, renglon.split(«,»)[:1]) for renglon in
      renglones_iris[:-2]]
2 [[5.1, 3.5, 1.4, 0.2], [4.9, 3.0, 1.4, 0.2], [4.7, 3.2, 1.3, 0.2],
   [4.6, 3.1, 1.5, 0.2], [5.0, 3.6, 1.4, 0.2], [5.4, 3.9, 1.7, 0.4],
   [4.6, 3.4, 1.4, 0.3], [5.0, 3.4, 1.5, 0.2], [4.4, 2.9, 1.4, 0.2],
   [4.9, 3.1, 1.5, 0.1], [5.4, 3.7, 1.5, 0.2], [4.8, 3.4, 1.6, 0.2],
   [4.8, 3.0, 1.4, 0.1], [4.3, 3.0, 1.1, 0.1], [5.8, 4.0, 1.2, 0.2],
   [5.7, 4.4, 1.5, 0.4], [5.4, 3.9, 1.3, 0.4], [5.1, 3.5, 1.4, 0.3],
   [5.7, 3.8, 1.7, 0.3], [5.1, 3.8, 1.5, 0.3], [5.4, 3.4, 1.7, 0.2],
   [5.1, 3.7, 1.5, 0.4], [4.6, 3.6, 1.0, 0.2], [5.1, 3.3, 1.7,
   0.5], [6.9, 3.1, 5.1, 2.3], [5.8, 2.7, 5.1, 1.9], [6.8, 3.2, 5.9,
   2.3], [6.7, 3.3, 5.7, 2.5], [6.7, 3.0, 5.2, 2.3], [6.3, 2.5, 5.0,
   1.9], [6.5, 3.0, 5.2, 2.0], [6.2, 3.4, 5.4, 2.3], [5.9, 3.0, 5.1,
   1.8]]
```

Ya que obtuvimos el código paso a paso, vamos a utilizarlo para crear el nuevo arreglo:

```
1 >>> import numpy
2 >>> iris_data = [map(float, renglon.split(«,»)[:1]) for renglon in
      renglones_iris[:-2]]
3 >>> iris = numpy.array(iris_data)
```

Listo ya tenemos nuestros datos en una estructura adecuada:

```
1 >>> iris[:10]
2 array([[ 5.1,  3.5,  1.4,  0.2],
3        [ 4.9,  3. ,  1.4,  0.2],
4        [ 4.7,  3.2,  1.3,  0.2],
5        [ 4.6,  3.1,  1.5,  0.2],
```

```
6      [ 5. ,  3.6,  1.4,  0.2],
7      [ 5.4,  3.9,  1.7,  0.4],
8      [ 4.6,  3.4,  1.4,  0.3],
9      [ 5. ,  3.4,  1.5,  0.2],
10     [ 4.4,  2.9,  1.4,  0.2],
11     [ 4.9,  3.1,  1.5,  0.1]])
```

Paso 4: Transformar los datos

En este caso sencillo no será necesario transformar los datos.

Paso 5: Seleccionar la tarea de minería de datos

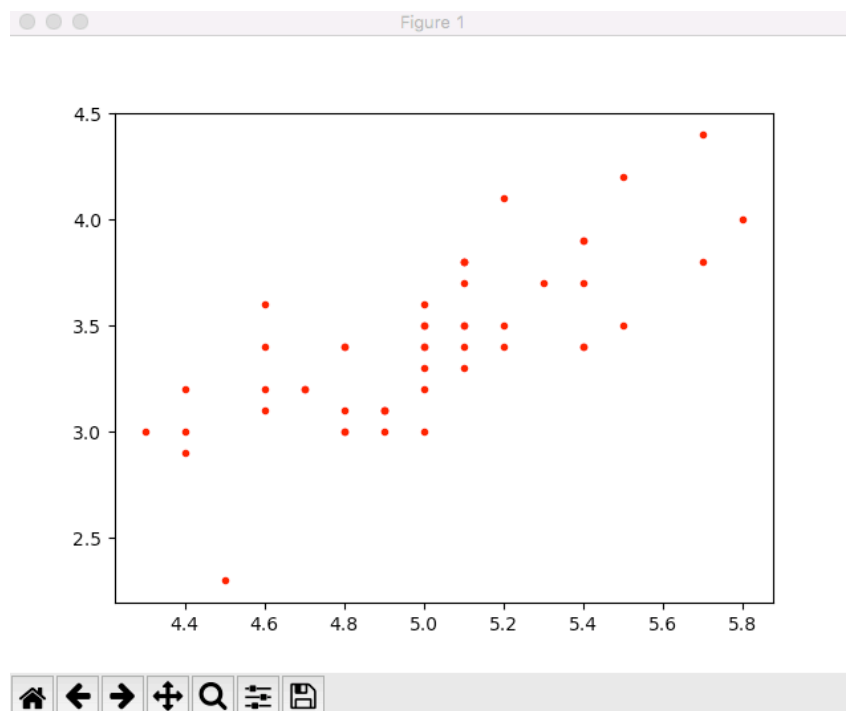
La tarea que vamos a realizar será *Clasificación*.

Paso 6: Análisis exploratorio

La minería de datos en este primer ejercicio la vamos a realizar manualmente, para esto vamos a explorar los datos visualmente. Para ello utilizaremos la popular biblioteca matplotlib. Primero vamos a seleccionar las dos primeras características: ancho y largo del sépalo para ver si hay algún patrón útil. Importamos matplotlib y hacemos el plot de la primera flor. Los primeros cincuenta datos son de Iris Setosa:

```
1 >>> import matplotlib.pyplot as plt
2 >>> x = iris[:50,0]
3 >>> y = iris[:50,1]
4 >>> plt.plot(x, y, 'r.')
5 >>> plt.show()
```

Al ejecutar la instrucción `plt.show()` se debería mostrar lo siguiente:

**Figura 3:** Setosa

En el eje **x** tenemos el ancho del sépalo Y en el eje **y** el largo, ambos en cm. El parámetro «r.» indica que las flores Setosa se representarán por puntos rojos («r.» red dots).

Ahora graficaremos al mismo tiempo las flores Setosa y Versicolor:

```
1 >>> plt.plot( iris[:50,0], iris[:50,1], 'r.') # Setosa
2 [<matplotlib.lines.Line2D object at 0x1066ed610>]
3 >>> plt.plot( iris[51:100,0], iris[51:100,1], 'b.')
4 [<matplotlib.lines.Line2D object at 0x113731710>] # Virginica
5 >>> plt.show()
```

Descubrimos algo, es posible separar linealmente o clasificar ambas flores utilizando estas dos características:

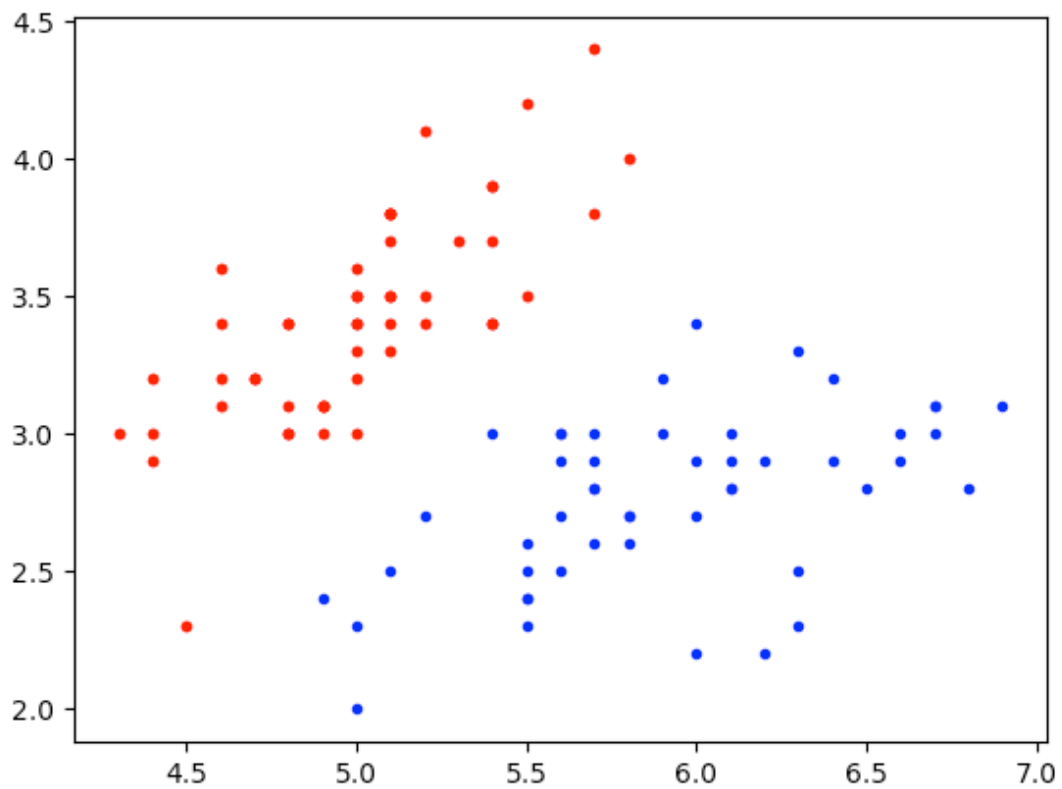


Figura 4: Setosa y Virginica

```
1 >>> plt.plot( iris[51:100,0], iris[51:100,1], 'b.')
2 [<matplotlib.lines.Line2D object at 0x114cae950>]
3 >>> plt.plot( iris[101:,0], iris[101:,1], 'g.')
4 [<matplotlib.lines.Line2D object at 0x114cbc110>]
5 >>> plt.show()
```

Veremos si corremos con igual suerte al agregar la Versicolor:

```
1 [<matplotlib.lines.Line2D object at 0x114cae850>]
2 >>> plt.plot( iris[51:100,0], iris[51:100,1], 'b.')
3 [<matplotlib.lines.Line2D object at 0x114cae950>]
4 >>> plt.plot( iris[101:,0], iris[101:,1], 'g.')
5 [<matplotlib.lines.Line2D object at 0x114cbc110>]
6 >>> plt.show()
```

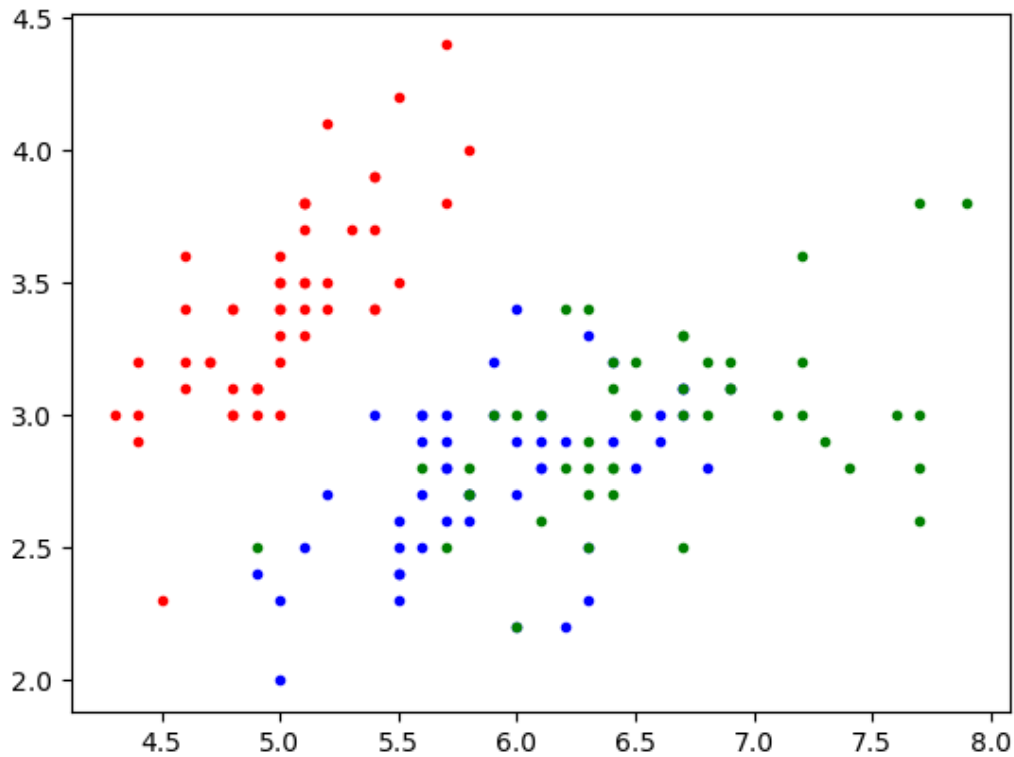


Figura 5: Setosa, Virginica, Versicolor

Por lo menos al considerar estas dos características vemos que es difícil distinguir entre las flores Virginica y Versicolor.

Paso 7: Minería de Datos

Este paso lo vamos a hacer manualmente por lo pronto. ¿Como podríamos especificar el modelo?. Una manera muy sencilla sería la siguiente:

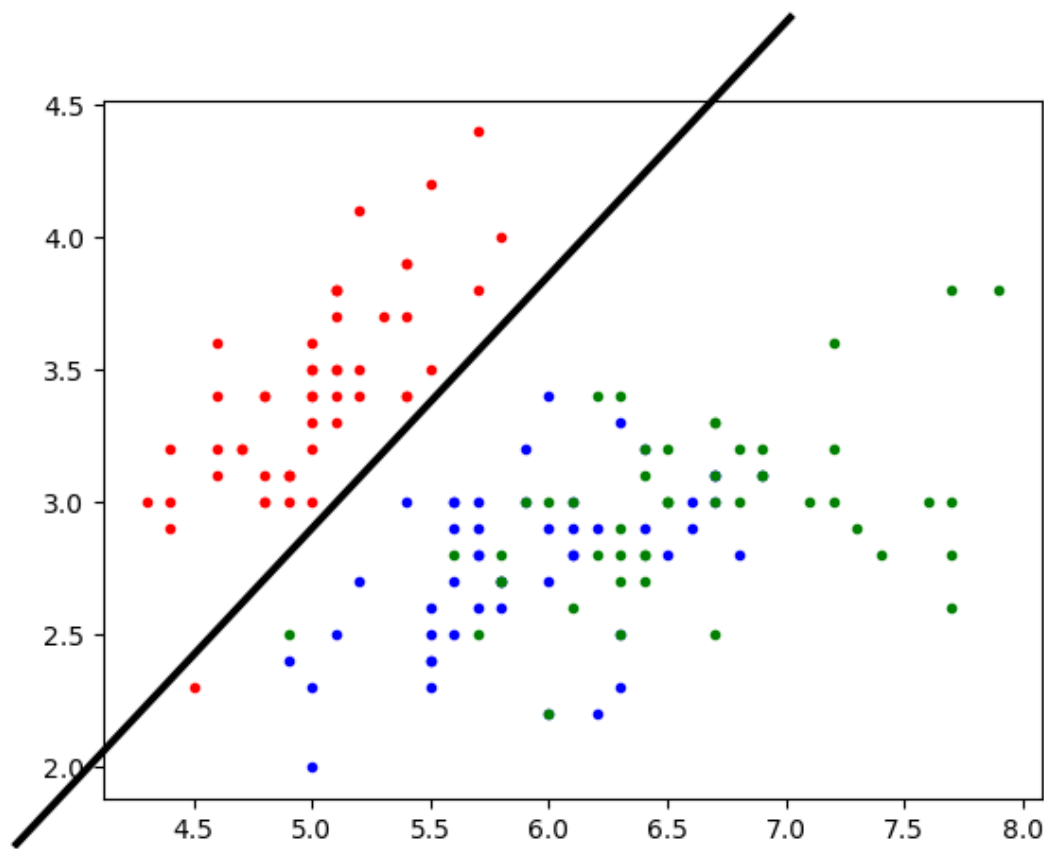


Figura 6: Setosa, Virginica, Versicolor

Utilizando una recta para separar a las flores Setosa del resto. Podríamos además utilizar varias rectas o incluso funciones no lineales. Estas ideas las podremos llevar acabo «manualmente» ya que solo estamos considerando dos características. Esto se puede tornar más difícil al considerar las otras dos medidas pues estaríamos trabajando en dimensión cuatro.

Otra modelo podría ser expresado en forma de reglas:

```
1 R1:
2   SI sepal_length < 5.9 AND sepal_width > 2.9
3   ENTONCES:
4     Setosa
5
6 R2:
7   SI sepal_length < 4.7 AND sepal_width <= 2.9
8   ENTONCES:
9     Setosa
```

Gráficamente sería algo como:

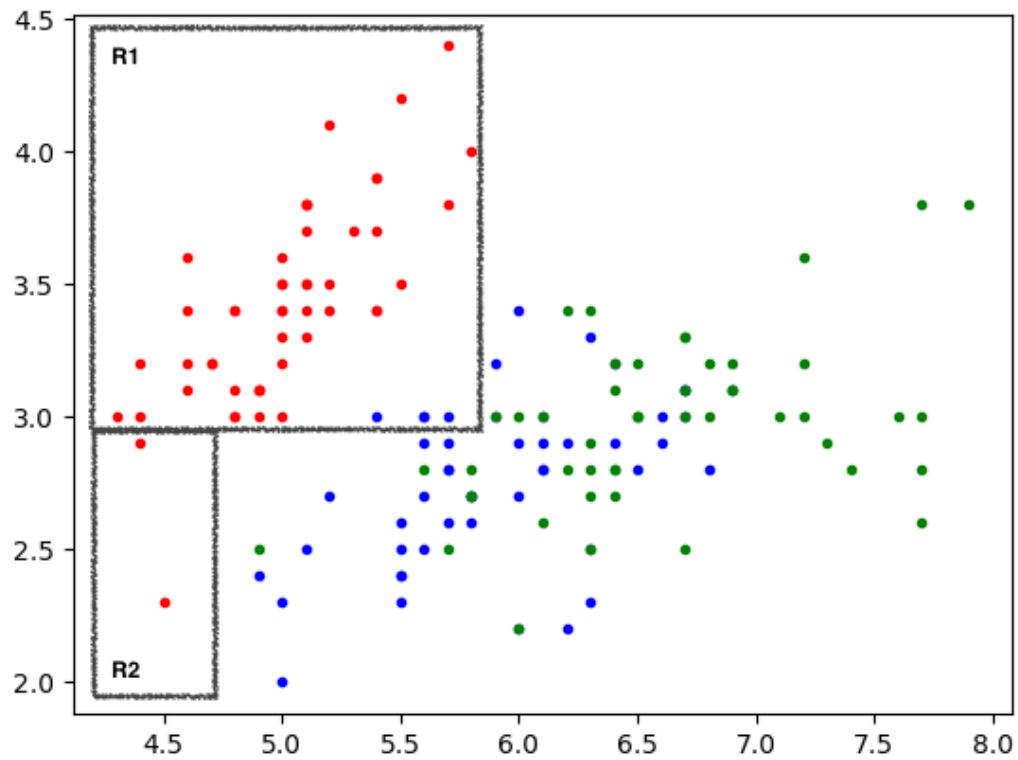


Figura 7: Setosa, Virginica, Versicolor

Ya que estamos en esto podemos proponer un nuevo modelo simplemente agregando otra regla:

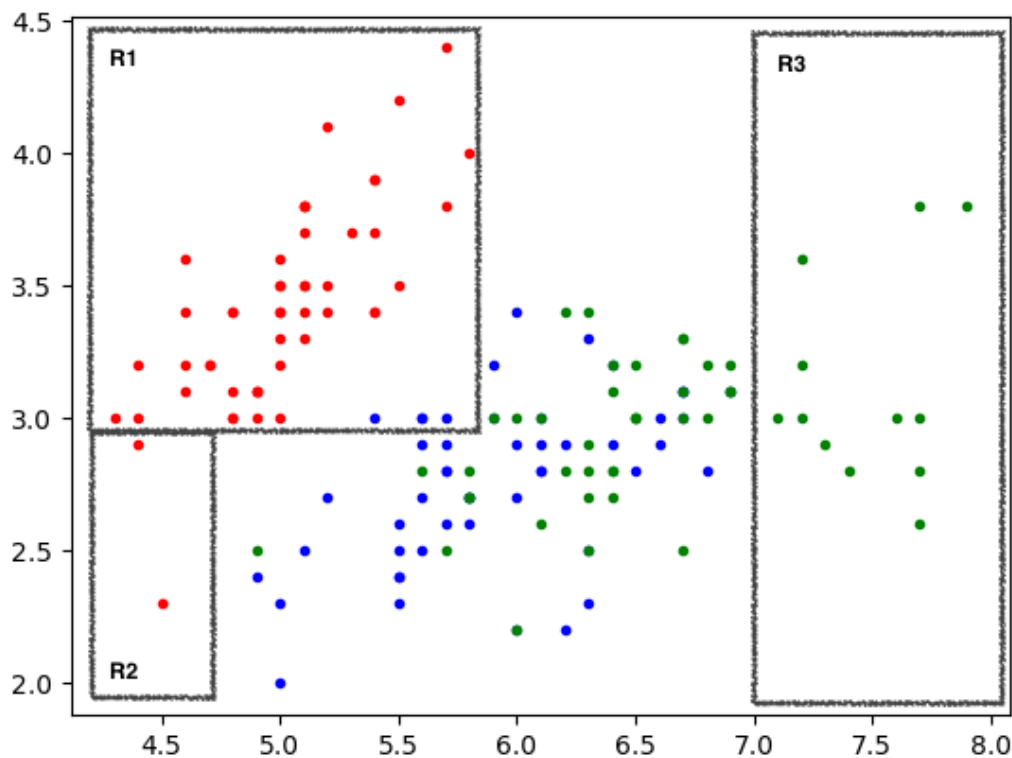


Figura 8: Setosa, Virginica, Versicolor

Podríamos seguir buscando, por ejemplo cambiando un poco los antecedentes de las reglas, por ejemplo de `sepal_length < 5.9` a `sepal_length < 6.0`. Nos empezamos a dar cuenta que no es fácil hacer esto manualmente. Mejor hagamos programas que hagan este trabajo de generar modelos automáticamente. Es decir, algoritmos de aprendizaje automático.

Paso 8. Interpretar y evaluar

Esto lo haremos más adelante, pero vale la pena pensar un poco al respecto. ¿Cual es mejor modelo?, ¿El mejor es suficientemente bueno?, ¿Existe un modelo óptimo?. ¿Que pasará cuando agreguemos nuevas flores al conjunto de datos?. También debemos pensar si pudimos extraer algún conocimiento nuevo. ¿Es útil?.

Paso 9. Aplicar el conocimiento adquirido

De este pequeño ejercicio podríamos reportar que las flores Setosa son fáciles de identificar.

Este ejercicio es básico y además no hicimos todas las consideraciones. Más adelante veremos otros detalles que no hemos considerado y por supuesto ya no haremos la minería de datos manualmente. El ejercicio también ha servido para darnos idea de como trabajaremos con Python y sus bibliotecas para este tipo de tareas. Seguro te diste cuenta que no hemos utilizado ciclos, enviamos funciones como parámetros y trabajamos de forma interactiva para llegar a la solución.

Atención estudiantes:

Si te fijas el proceso de KDD también puede ser utilizado como guía para hacer proyectos de investigación en el área. El proceso es el mismo pero cambian los algoritmos, aplicaciones y tipos de datos.

Los Datos

La materia prima para realizar nuestra labor de mineros de datos es inagotable. Hablamos de los datos, ese recurso en bruto que debemos procesar para sacarle provecho. En esta sección discutiremos temas relacionados con los conjuntos de datos y el tipo de operaciones que podemos hacer con ellos. Las tareas de esta sección serán:

- Definir a los datos como objetos.
- Conocer los tipos de estructuras para conjuntos de datos:
 - Tablas
 - Matrices
 - Grafos

Datos y objetos

Como la Minería de Datos es una actividad multidisciplinar, muchas veces hay confusión o incluso diferencias ideológicas con respecto a los nombres y términos que se utilizan. Si a esto le agregamos la traducción al castellano, podríamos pasarnos mucho tiempo discutiendo sin llegar a una definición única. Por ejemplo en inglés se le llama «data» al plural de «datum» o dato, esto al principio nos puede confundir a los que hablamos castellano.

Pero no a los que sepan que *data* es el plural neutro para un sustantivo de la primera declinación en latín.

Como primer paso vamos a definir los conceptos básicos utilizando de ser posible términos que sean familiares a los profesionistas en informática.

Datos: son una representación de las observaciones recolectadas. Por ejemplo un médico puede tomar (recolectar) la temperatura corporal de varios pacientes y representar la lectura en grados centígrados.

Objetos: Normalmente representamos a cada observación como un objeto o registro. Por ejemplo una lectura de los signos vitales de un paciente se podría representar como el siguiente objeto:

Atributo	Valor
id	1
nombre	Juan Pérez
día	Lunes
estatura	175
temperatura	36.2
presión_diastólica	80
presión_sistólica	135
frecuencia_cardíaca	90

Atributos: Son las propiedades o características que tienen los objetos de cierto tipo. Todas las observaciones que se hagan del mismo tipo de objeto tendrán los mismos atributos. Para el ejemplo anterior los atributos serán {*id*, *nombre*, *estatura*, *temperatura*, *presión_diastólica*, *presión_sistólica*, *frecuencia_cardíaca* }.

Valores: El *estado* de un objeto corresponde a los valores que tienen sus atributos en un momento dado. En el análisis de datos nos enfocamos en datos históricos por lo que es poco común que haya cambios de estado en los objetos. Los valores a su vez debemos considerarlos como objetos. Por ejemplo, en la lectura de ejemplo el atributo *nombre* tiene como valor al objeto tipo cadena «Juan Pérez». Para analizar las observaciones estadísticamente debemos de considerar su tipo:

- **Dato cualitativo:** Normalmente la observación es expresada en palabras. Por ejemplo, la reseña de un restaurante. Los datos cualitativos pueden ayudarnos a etiquetar a un objeto como miembro de una clase o grupo. En el caso de un objeto tipo restaurante, su atributo «tipo de

cocina» nos ayuda a clasificarlo por cocina: *mexicana, japonesa, italiana*.

- Dato *cuantitativo*: La observación se realiza sobre algún atributo que tiene cierta magnitud. Se tienen dos tipos:
 - Discretos. Estos datos se expresan en números enteros y normalmente se refieren a conteos. Ejemplos: *Número de empleados, visitas, número de páginas, temporada*.
 - Continuos. Los datos corresponden a mediciones en números reales, como *temperatura corporal, sueldo o duración*.

Conjunto de datos: Los conjuntos de datos (en inglés *dataset*) son colecciones de objetos que casi siempre son del mismo tipo. Es común representar a un conjunto de datos en forma de registros en una tabla. Como ejemplo aquí tenemos un conjunto de datos de lecturas de signos vitales:

id	nombre	temperatura	día	estatura
1	Juan Pérez	36.2	Lunes	175
2	Ana Rivas	136.3	Martes	125
3	María Sánchez	36.5	Jueves	190
4	Luis Duarte	39.0	Lunes	180
5	José Arias	36.5	Viernes	90
6	Margarita Lee	39.0	Jueves	173

A los conjuntos de datos cuando no se han procesado les llamamos *datos crudos* (raw data), en este caso por ejemplo se tienen datos erróneos, la temperatura del paciente con $id = 2$, no es posible que sea de 136.3°C. También podría ser necesario anonimizar los datos al tratarse de datos confidenciales.

Clasificación de escalas de medición

El tipo de análisis que se puedan hacer en un conjunto de datos dependerá del tipo de variable de sus atributos. Por ejemplo, en el caso del conjunto de datos de pacientes, podríamos calcular la media de la estatura, pero no tendría sentido hacer el cálculo para el atributo nombre. Incluso cuando utilizamos datos enteros la media podría no tener sentido. Por ejemplo, la media del atributo *id* no nos diría nada sobre las lecturas ya que es solo una etiqueta que resulta ser entera. Utilizaremos la clasificación de Stevens para clasificar los tipos de valores asignados a los atributos en cuatro niveles:

Nominal o categórica

Esta es una medición cualitativa como vimos anteriormente y nos puede servir para asignar a los objetos a un grupo o categoría. Por ejemplo, el atributo *especie* de las flores Iris, puede tomar los valores: «Setosa», «Virgínica» o «Versicolor». Estos valores nos indican a que categoría pertenece cada flor. Una medida categórica no siempre va a ser texto. Por ejemplo, el número de serie o un número de teléfono. En algunos casos nos brindan información cualitativa sobre el objeto: *país de origen*, *sexo*, *estado civil*.

- Los operadores que podemos utilizar en atributos que usan este tipo de medida son: $=$, $\neq$.
- Podemos calcular la moda, entropía, prueba χ^2 .
- Podemos agrupar.

Ordinal

Esta es también una medición categórica, pero existe un orden con el cual podemos ordenar a los objetos. Por ejemplo, los valores de dificultad «Fácil», «Difícil»; talla de la ropa, el nivel máximo de estudios. Otro ejemplo son los valores de una escala de agrado: «nada», «poco», «regular», «mucho», estos valores cubren un espectro de posibilidades.

- Los operadores que podemos utilizar son: $=$, $\neq$, $>$, $<$.
- Podemos calcular la moda, mediana, percentiles, pruebas de signos.
- Podemos agrupar y ordenar.

Intervalar

Esta nos permite establecer diferencia entre los objetos, pero como no tiene un cero absoluto no se puede calcular la proporción entre dos valores. Un ejemplo clásico de este tipo de medición es la temperatura cuando la medimos en grados centígrados, podemos decir que la diferencia entre 3°C y 5°C grados son 2°C. Pero no podemos decir que 20°C es el doble de caliente que la temperatura a 20°C.

- Los operadores que podemos utilizar son: $=$, $\neq$, $>$, $<$, $+$, $-$.
- Como medida de tendencia central podemos calcular la moda, mediana y la media aritmética. Son válidas las medidas de dispersión de rango y desviación estándar.
- Podemos agrupar, ordenar, calcular la diferencia.

Razón

Se cuanta con un cero absoluto, por lo que las proporciones son válidas. La mayoría de las mediciones en ingeniería o física utilizan este tipo de escalas. Por ejemplo masa, longitud, duración, carga eléctrica, corriente eléctrica, temperatura en grados Kelvin.

- Los operadores que podemos utilizar son: $=$, $\neq$, $>$, $<$, $+$, $-$, $\times$, $\div$.

- Como medida de tendencia central podemos calcular la moda, mediana y la media aritmética, media geométrica y media armónica. Son válidas las medidas de dispersión de rango y desviación estándar.
- Podemos agrupar, ordenar, calcular la diferencia.

Tipos de conjuntos de datos

Muchos que ya contamos con algo de experiencia en temas de *Bases de Datos* tenemos la idea equivocada de que la *Minería de Datos* consiste en algún tipo de extensión a los lenguajes de consulta como SQL. La verdad es que la mayoría de los algoritmos de minería de datos se realizan fuera del servidor, utilizando lenguajes de propósito general como Python o Java. Recordemos que los algoritmos han sido desarrollados en gran parte por especialistas en áreas muy distintas como álgebra lineal, inferencia estadística, inteligencia artificial y reconocimiento de patrones. En estas áreas es común utilizar vectores y matrices como entradas a los algoritmos ya que estos nos permiten expresar operaciones de una manera muy eficiente.

Como este es un material de introductorio nos enfocaremos en tres conjuntos de datos básicos: tablas, matrices y grafos. A continuación veremos una descripción breve de cada tipo.

Tablas

Recordemos que los primeros pasos del proceso de KDD están dedicados a pasar los datos de su fuente original al formato requerido por los algoritmos de minería. El formato de entrada para la mayoría de los algoritmos es un arreglo de vectores de características el cual podemos representar como una tabla.

Cuando utilizamos la estructura de tabla, en algunas bibliotecas o software para Minería de Datos como Orange o Rapid Miner se deben especificar ciertos *metadatos*. Los *metadatos* en este caso vienen siendo datos adicionales sobre cada atributo. Por ejemplo, el tipo de atributo (categórico/nominal, continuo, discreto, tiempo, cadena) y el rol (característica, clase/etiqueta, ponderación, ignorar).

Por ejemplo, para el conjunto de datos Iris:

sepal_length	sepal_width	petal_length	petal_width	species
5.1	3.5	1.4	0.2	setosa
4.9	3.0	1.4	0.2	setosa
7.0	3.2	4.7	1.4	versicolor
6.4	3.2	4.5	1.5	versicolor

sepal_length	sepal_width	petal_length	petal_width	species
6.3	3.3	6.0	2.5	virginica
5.8	2.7	5.1	1.9	virginica

En el software Orange para cada atributo debemos indicar los metadatos de la siguiente manera:

atributo	tipo	rol	meta
sepal_length	continuo	característica	
sepal_width	continuo	característica	
petal_length	continuo	característica	
petal_width	continuo	característica	
species	nominal	etiqueta	setosa, versicolor, virginica

En otros casos, como la biblioteca scikit-learn, no es necesario especificar metadatos, se requieren los datos de cierta manera para identificar de que tipo son. Por ejemplo, nos pueden pedir dos arreglos, uno para las características:

```
1 [[5.1, 3.5, 1.4, 0.2], # setosa
2  [4.9, 3.0, 1.4, 0.2], # setosa
3  [7.0, 3.2, 4.7, 1.4], # versicolor
4  [6.4, 3.2, 4.5, 1.5], # versicolor
5  [6.3, 3.3, 6.0, 2.5], # virginica
6  [5.8, 2.7, 5.1, 1.9]] # virginica
```

Y otro para las etiquetas:

```
1 ['setosa', 'setosa', 'versicolor', 'versicolor', 'virginica', 'virginica']
```

En este caso, como no especificamos que es que, debemos de separar los datos a la entrada. Unos son características y los otros la clase. Aunque son dos arreglos distintos, se trata del mismo objeto. Es por esto que deben de corresponder las posiciones en ambos arreglos.

Independientemente de la representación es muy importante conocer el tipo y rol de los atributos. Por ejemplo en este caso vemos que todas las características son continuas y solo la etiqueta es categórica. Sabemos entonces que solo podremos utilizar estos datos en algoritmos que puedan recibir valores continuos. Existen algoritmos que solo pueden trabajar con datos categóricos o aquellos en los que la

etiqueta debe ser binaria. En la sección de preprocesamiento veremos varias técnicas para modificar los datos de tal manera que podamos utilizar la mayor cantidad de algoritmos posible y en algunos casos mejorar el desempeño de los compatibles.

Matrices

A diferencia de las tablas, en las matrices las columnas no representan atributos de los objetos. Más bien, las matrices representan relaciones entre objetos. Por ejemplo, en una matriz podemos representar la distancia que existe entre dos ciudades o indicar las materias que ha cursado un alumno. Veámoslo también como celdas:

	Tijuana	Ensenada	Mexicali
Tijuana	0	104.2	185.5
Ensenada	104.2	0	240.3
Mexicali	185.5	240.3	0

	Cloud Computing	Big Data	Complex Systems
Ana	1	1	1
Tom	0	1	0
Joe	0	0	0

Algunas de las matrices tienen características interesantes, por ejemplo vemos que la matriz de distancia entre ciudades es simétrica o la de los cursos tiene solo datos binarios. Veamos ejemplos de matrices que utilizamos comúnmente en minería de datos:

Documento-Término

Esta matriz describe a una colección de documentos a través de los términos que aparecen en ellos. Cada renglón representa un documento y cada columna corresponde a un término. Los términos se extraen inicialmente de todos los documentos. En cada celda se tiene algún valor representativo de la relación documento-término. Los valores tienen que ver con la frecuencia con la que aparece el término en el documento y en los demás. Una representación común es el peso Tf-idf (del inglés Term

frequency – Inverse document frequency) el cual se describiremos a detalle en la sección de preprocesamiento. Para entender mejor la idea consideremos estos dos documentos:

- 1 D1 : "La vida no vale nada, no vale nada la vida"
- 2 D2 : "Toda la vida coleccionado mil amores"

Podemos representar a estos documentos con la siguiente matriz, la cual captura simplemente la frecuencia los términos en cada documento:

	vida	no	vale	toda	coleccionando	mil	amores
D1	2	2	2	0	0	0	0
D2	1	0	0	1	1	1	1

Podemos observar que el proceso de generación de la matriz también removi6 algunos términos que son demasiado comunes. Eliminamos a los términos que aparecen en casi todos los documentos por que no nos dicen nada distintivo de los documentos.

Una característica importante de la matriz documento-término es que la mayoría de los elementos tendrán el valor de cero, por eso decimos que es una matriz escasa. Las matrices escasas normalmente se implementan utilizando estructuras de datos especiales para no desperdiciar espacio y que el procesamiento sea más rápido.

Filtrado Colaborativo

Los sistemas de recomendación tienen como objetivo recomendar a un usuario diferentes artículos como películas, restaurantes y libros de manera personalizada. Una técnica muy utilizada para hacer recomendaciones es el filtrado colaborativo. El algoritmo toma como base una matriz donde se indica que calificación le han puesto los usuarios a los artículos. Para el caso de un sistema de recomendación de películas, podríamos tener la siguiente matriz:

	The Matrix	Matando Cabos	Mad Max: Fury Road
Ana	0	1	5
Tom	4	4	0
Joe	5	5	5
Tim	0	1	5

Esta de nuevo es una matriz escasa donde se indica en cada entrada la calificación o utilidad que le asignó un usuario a un artículo. Comúnmente el valor de cero indica que el usuario no le ha asignado todavía una calificación al artículo. Las calificaciones normalmente son valores positivos discretos.

Una característica interesante de esta matriz es que nos permite recomendar artículos de dos maneras. Podemos recomendar buscando usuarios que son similares o películas que son similares. Para hacer esto solo necesitamos girar la matriz. En la sección de sistemas de recomendación veremos el tema con mayor detalle.

Grafos

Al igual que las matrices, los grafos nos permiten representar de una manera natural relaciones entre distintos objetos o incluso objetos y sus atributos.

Un grafo que relacione objetos del mismo tipo lo podemos representar directamente como una matriz. Veamos un ejemplo. En la red social de Twitter tenemos la relación de *sigue a* entre objetos tipo usuarios. Esta matriz no es simétrica, por ejemplo Tom sigue a Ana pero Ana no sigue a Tom.

	Ana	Tom	Joe	Tim
Ana	0	0	0	0
Tom	1	0	1	0
Joe	1	1	0	0
Tim	1	1	1	0

Estas relaciones las podríamos representar con un grafo, el cual se puede representar gráficamente como:

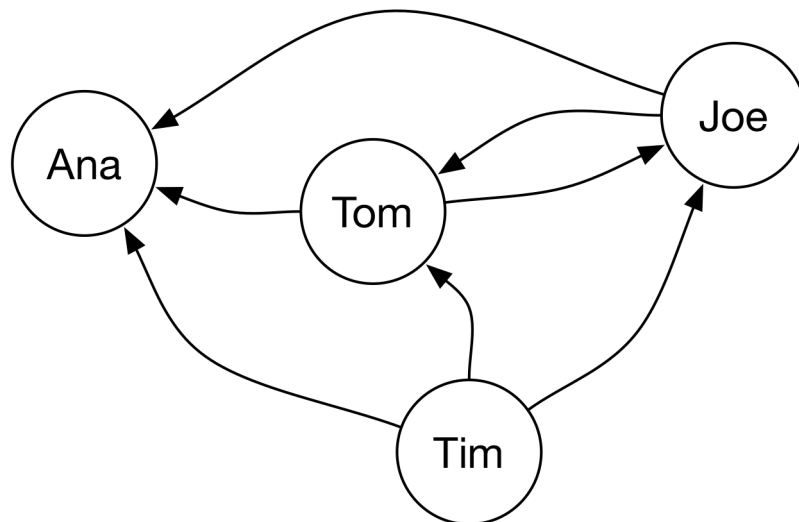


Figura 9: Una matriz expresada en forma de grafo

Un grafo nos permite representar diferentes tipos de relaciones y objetos al mismo tiempo:

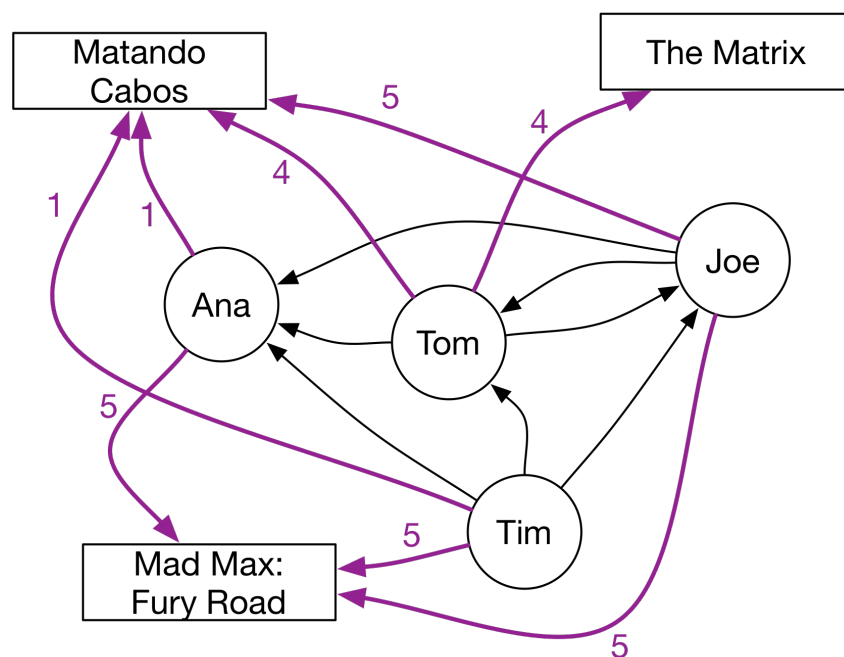


Figura 10: Ejemplo de un grafo con distintos tipos de relaciones

Mientras algunos algoritmos pueden trabajar directamente con grafos otros requieren su representación matricial.

A lo largo del material utilizaremos estos tres tipos de conjuntos de datos. Existen variantes de estos

y algunos otros especializados. Por ejemplo, para encontrar patrones en imágenes, videos, gestos, el genoma humano, series de tiempo, y muchas otros tipos de datos. Recuerda que este material es solo el principio de muchos otros cursos, tutoriales, videos y artículos que seguramente revisarás.

Ejercicios

Da un ejemplo de cada concepto: Observación, Dato, Objeto, Atributo, Medida, Categórico, Nominal, Razón, Ordinal, Intervalar, Conjunto de Dato, Tabla, Matriz, Grafo.

Lectura adicional

Sobre la Teoría de las Escalas de Medición

Calidad de los Datos

Uno de los principios más antiguos de la informática nos dice «entra basura, sale basura» y se refiere al hecho de que si un programa recibe como entrada datos incorrectos o sin sentido en la salida tendremos lo mismo. Este principio también se aplica a la ciencia de datos pues el éxito del proceso depende de la validez de los datos que utilizamos. El asegurar la calidad de los datos que recolectamos es uno de los mayores retos de la minería de datos, por esto es muy importante realizar un proceso previo de verificación y *limpieza de datos*. Para darnos una idea de la complejidad de estas tareas, vamos a considerar la recolección de datos para el desarrollo de un Observatorio de Lesiones. El objetivo de estos sistemas según la secretaría de salud es «... generar datos y evidencia científica para la prevención de lesiones ocasionadas por accidentes viales». Es indispensable para este tipo de sistemas contar con información confiable sobre los accidentes de tráfico, pero como veremos esto no es nada fácil. Para empezar, atender un accidente involucra varias organizaciones, cruz roja, paramédicos, policía, hospitales, call-centers de emergencia, rescatistas, agencias de seguros entre otras. Por otro lado, se involucran transeúntes, vehículos, pasajeros, edificios, reporteros etc. Para obtener información sobre lo sucedido normalmente se debe entrevistar a los testigos e involucrados. Desde aquí empieza el problema, ya que cada persona tiene su versión de los hechos, puede cambiarla o estar incapacitada para darla. Cada dependencia tiene la urgencia de recolectar solo la información necesaria para cumplir con su propósito y cada una tiene una versión parcial de los hechos. El accidente puede relacionarse con otros eventos posteriores, por ejemplo una persona puede sufrir secuelas del accidente mucho tiempo después. Entonces, la tarea de integrar los datos requiere la cooperación entre distintas dependencias lo cual nos da un primer golpe de realidad: **En muchas ocasiones no estará en nuestras manos la calidad de los datos, ni tendremos control sobre la fuente de los mismos.** Por lo anterior la minería de datos se enfoca solamente en dos tareas básicas (Tan, Steinbach, and Kumar 2007): (1) la detección y corrección de problemas en los datos y (2) la utilización de algoritmos

que puedan tolerar datos de mala calidad. Dicho de otra manera, no son nuestro objetivo ni la gestión ni el control de la calidad de los datos, ya que esto involucraría intervenir en los mismos sistemas de recolección.

Decimos que un producto o servicio es de buena calidad si satisface nuestras necesidades. En el caso de los datos, debemos asegurarnos de que sirvan para nuestros propósitos. Por ejemplo, una tarea de nuestro observatorio podría ser el optimizar la ubicación de estaciones de rescate. Entre los datos requeridos para este objetivo se debe incluir la ubicación exacta de los accidentes. Aquellos registros que solo incluyan la zona o la calle del accidente no tendrán la calidad para esta tarea, pero podrían ser de utilidad o tener buena calidad para otros propósitos; a continuación revisaremos algunos problemas que afectan la calidad de los datos.

Fuentes de datos poco confiables

Muchas de las colecciones de datos disponibles, no se recolectaron originalmente para realizar una investigación científica, por lo que varían mucho en su autenticidad y calidad. Liu et al. (2016) identificaron tres diferencias entre la recolección de datos realizada por una empresa comercial y una institución de investigación científica:

1. Las empresas no adoptan procedimientos científicos de recolección de datos, como muestreos aleatorios o procedimientos para evitar el sesgo. Las empresas recolectan información con el objetivo de producir ganancias, no para hacer ciencia. Normalmente el muestreo de datos se realiza sobre la población objetivo de las empresas y no sobre el público en general.
2. Los métodos de recolección de datos no son públicos y pueden cambiar sin aviso alguno.
3. Las plataformas comerciales no se pueden hacer responsables de la autenticidad ni la validez de los datos que coleccionan. Por ejemplo, al utilizar datos de una red social como Twitter debemos considerar a las cuentas de *Bots*, usuarios pagados para producir contenido, anuncios y publicaciones tipo *Spam*.

Como podemos ver, la calidad de los datos no solo se refiere a la medición o la captura en sí, también debemos tener en cuenta el procedimiento utilizado en la recolección.

Errores de medición y recolección de datos

Llamamos errores de medición a aquellos problemas que suceden en el proceso de medición o captura. En el caso de los atributos continuos, llamaremos error a la diferencia numérica entre el valor real y el medido. Un error de medición se puede dar también cuando un sensor no tiene la precisión adecuada e incluso cuando la medición se trunca al almacenarse en una variable que no tiene la escala o precisión adecuada.

Un error de recolección de datos se refiere a problemas de captura al nivel de objetos o atributos. Por ejemplo, cuando omitimos el valor de un atributo o capturamos un objeto en una categoría equivocada.

Valores desconocidos

En muchas ocasiones el valor de algunos de los atributos no se conoce. Por ejemplo, en el caso de un accidente pudo no haberse recolectado la edad del conductor, el número de pasajeros o la información meteorológica. Normalmente se indica la ausencia de valor utilizando alguna palabra reservada o etiqueta como NULL, None o Nil. Necesitamos determinar como vamos a tratar los casos en los que desconocemos el valor. Algunas de las alternativas son:

- *Estimar el valor* Esto puede ser peligroso ya que el valor podría ni siquiera estar en el conjunto de datos.
- *Eliminar el objeto* Algunos algoritmos no pueden procesar objetos con valores desconocidos o simplemente determinamos que el objeto en esta condición no aporta información. El objeto se puede eliminar por completo o lo podemos omitir en ciertos casos.
- *Utilizar un valor por defecto*
- *Agregar objetos con todos los valores posibles* Incluso se pueden ponderar los valores de acuerdo a su probabilidad de aparecer.

Valores atípicos

Los atributos de los objetos en ocasiones tienen valores muy distintos o alejados numéricamente del resto de los datos. A estos valores les llamamos atípicos o es común utilizar su nombre en inglés *outliers*. Estos valores en ocasiones se deben a errores en la lectura o en los procedimientos y deben eliminarse, pero también pueden suceder por casualidad en cualquier distribución de probabilidad.

Los conjuntos de datos que incluyen valores atípicos, pueden engañarnos al momento de describir los datos estadísticamente. Por ejemplo, si medimos los caballos de fuerza promedio de 8 autos en un estacionamiento, la mayoría tendría entre 50 y 170 hp, pero si de suerte hay un *Mercedes F1 W06 Hybrid* con 950 hp, este sería un claro *outlier*.

Vamos a tomar como ejemplo una muestra de auto-mpg.data:

hp	nombre
91.00	«audi 100ls»
115.0	«saab 99le»
53.00	«honda civic»

hp	nombre
180.0	«pontiac grand prix lj»
140.0	«dodge diplomat»
125.0	«cadillac eldorado»
950.0	«Mercedes F1 W06 Hybrid»

En este caso la mediana sería 125 y la media 236. Debido al valor atípico, la mediana refleja mejor la potencia de un auto si lo seleccionamos al azar de un estacionamiento. Los valores atípicos pueden alertarnos de objetos que pertenecen a otra población, en este caso nuestro Mercedes es propio de una escudería de Formula 1.

Una de las tareas de limpieza es el identificar objetos atípicos para removerlos, pero hay casos en los que el encontrar a estos objetos es el objetivo principal de todo el proceso. Un objeto *outlier* podría ser una transacción fraudulenta o una persona de interés.

El tema de los valores atípicos lo seguiremos durante todo el proceso ya que incluso el desempeño de un algoritmo puede ser atípico. Podríamos estar muy felices por un experimento que nos dio muy buenos resultados, solo para darnos cuenta al hacer más pruebas que el desempeño esperado es mucho menor.

Datos con Ruido

En algunas publicaciones llaman *ruido* a las imperfecciones en los datos. Tal como sucede cuando hay interferencia en la señal de radio y escuchamos la música con ruido. El ruido en los datos son precisamente los errores de medición, recolección, valores atípicos e inconsistencias en los datos. En ocasiones es necesario perturbar o agregar ruido a los datos ya sea para conservar la privacidad de la fuente o para probar que tan robusto es un algoritmo. Para agregar ruido a un conjunto de datos normalmente se agregan componentes aleatorios. Por ejemplo, se pueden agregar nuevos objetos con atributos aleatorios

Preprocesamiento

En esta etapa vamos a procesar los objetos crudos para pasarlos a representaciones favorables para los algoritmos que utilizaremos más adelante. También es conveniente reducir en lo posible la cantidad de datos y los atributos de los objetos para no incrementar el costo computacional. Para lograr lo anterior, en la etapa de preprocesamiento podemos realizar algunas de estas tareas:

- Estandarización
- Escalado
- Normalización
- Agregación
- Codificación de atributos categóricos
- Muestreo
- Reducción de la dimensión
- Creación de características
- Transformación de atributos

Estandarización

Muchos algoritmos de aprendizaje automático requieren que los datos estén normalizados para funcionar correctamente. Vamos a entender la razón por medio de un ejemplo. Vamos a observar de nuevo los datos de auto-mpg:

```
1 >>> import numpy as np
2 >>> import pandas as pd
3 >>> import matplotlib.pyplot as plt
4 >>> auto_mpg = pd.read_csv('datos-ejemplo/auto-mpg.data', sep='\s+',
5     header=None, na_values='?', names=['mpg','cylinders','displacement','horsepower',
6     'weight','acceleration','model_year','origin','car_name'],
7     dtype={'mpg':'f4', 'cylinders':'i4',
8     'displacement':'f4','horsepower':'f4','weight':'f4',
9     'acceleration':'f4','model_year':'i4','origin':'category',
10    'car_name':'category'})
11
12 >>> auto_mpg["origin"].cat.categories = ["USA", "Japan", "Germany"]
13 >>> auto_mpg.tail(3)
14      mpg  cylinders  displacement  horsepower  weight  acceleration \
15 395    32.0         4          135.0         84.0   2295.0          11.6
16 396    28.0         4          120.0         79.0   2625.0          18.6
17 397    31.0         4          119.0         82.0   2720.0          19.4
18
19      model_year origin      car_name
20 395          82    USA  dodge rampage
21 396          82    USA   ford ranger
22 397          82    USA   chevy s-10
```

Nos vamos a concentrar en dos atributos: *weight* y *mpg*, vamos a graficar a los objetos:

```
1 >>> auto_mpg.plot.scatter(x='weight', y='mpg');  
2 >>> plt.show()
```

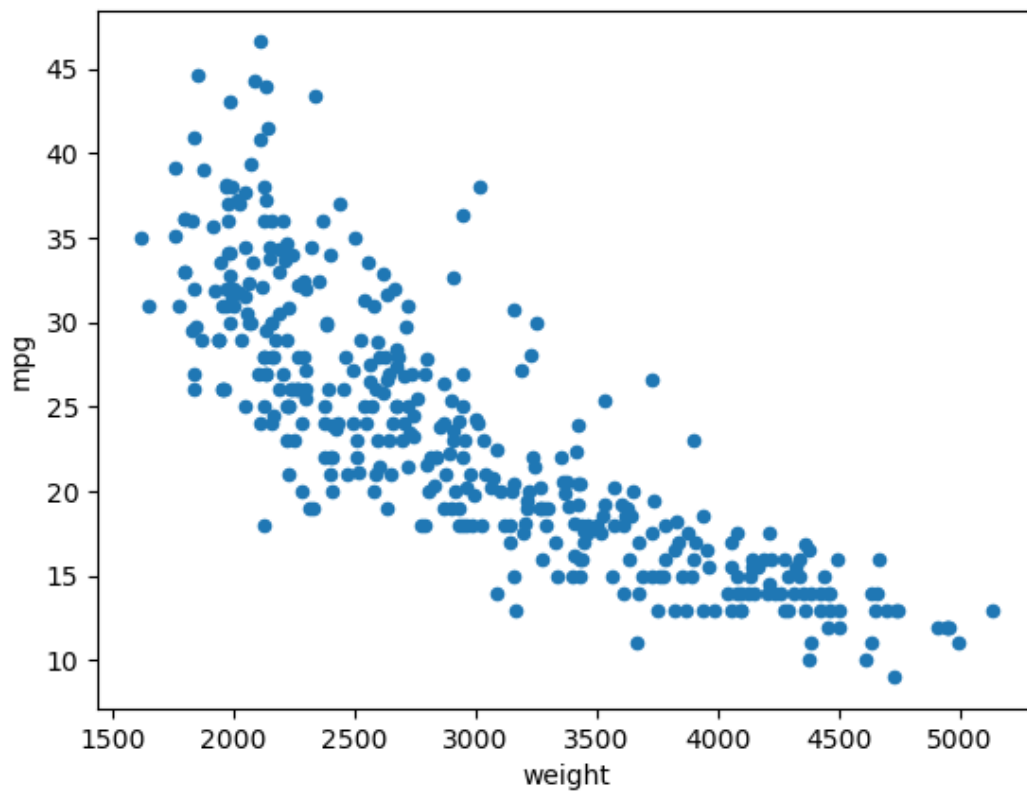


Figura 11: MPG Data

Nos damos cuenta al observar la gráfica (o la tabla) que los valores numéricos son muy distintos, una diferencia de 20 unidades en el caso de mpg es mucha, mientras que en el peso no es así.

Ahora veamos como están distribuidos los valores utilizando un histograma:

```
1 >>> auto_mpg.hist(column='weight');  
2 >>> plt.show()
```

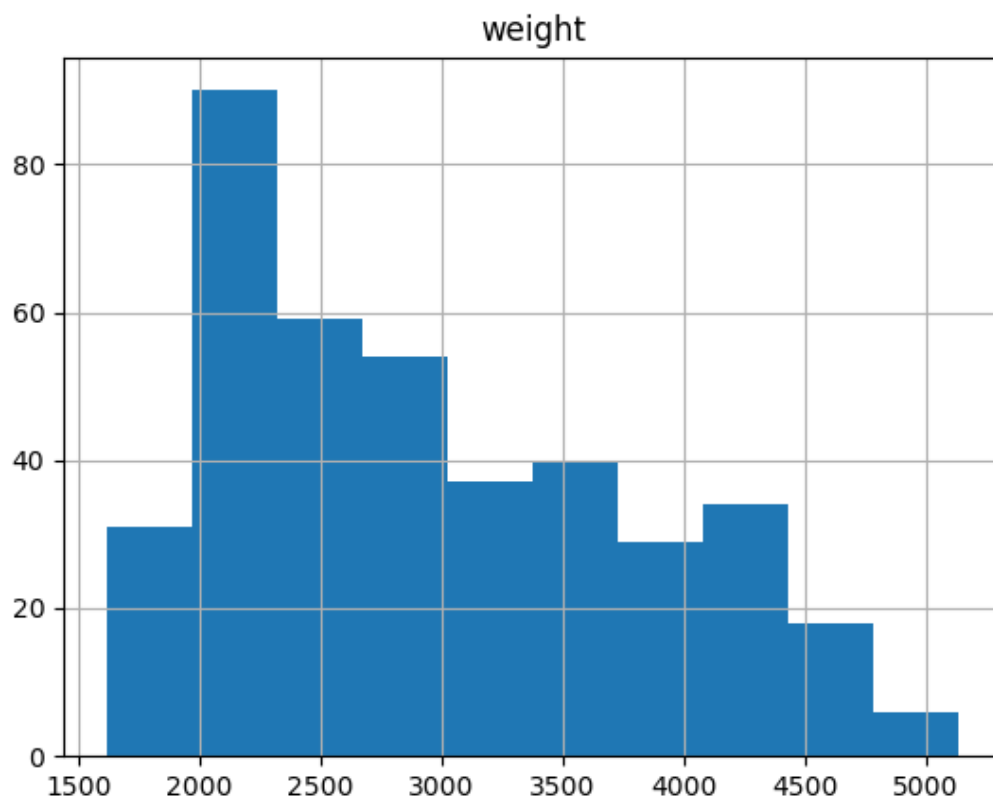



Figura 12: MPG Data

```
1 >>> auto_mpg.hist(column='mpg');  
2 >>> plt.show()
```

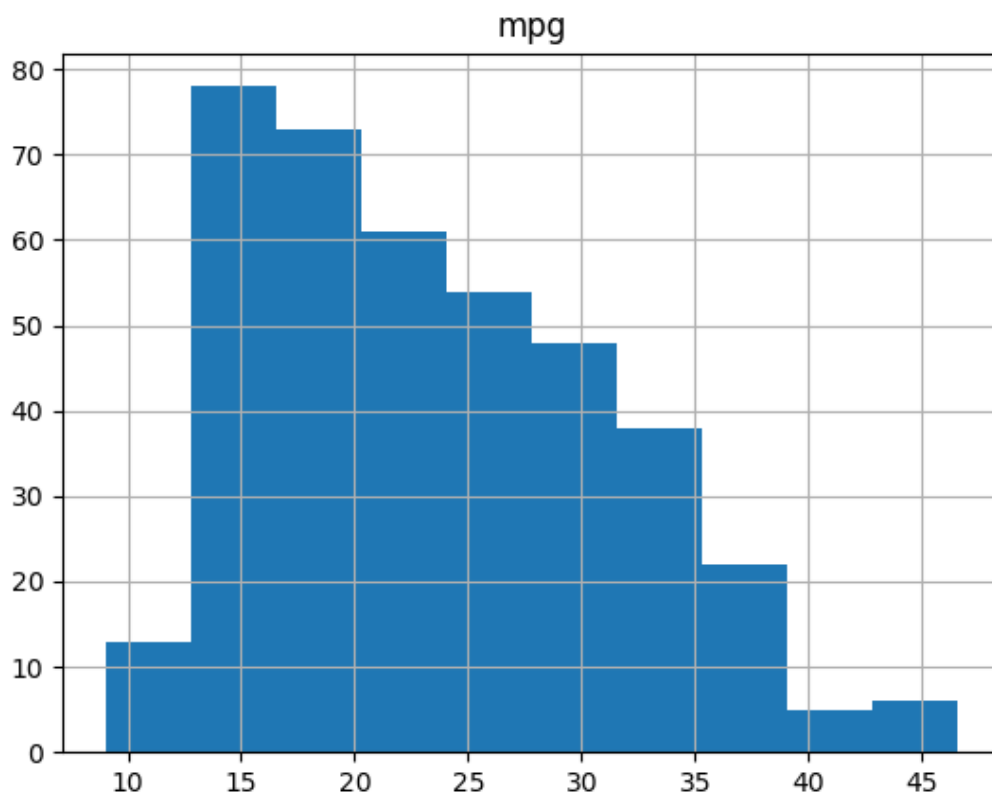


Figura 13: MPG Data

Si te fijas algunos valores se repiten más que otros, por ejemplo en el caso de las millas por galón vemos que un auto con 40 mpg es mucho menos probable que uno con 20 mpg. Si asumimos que los valores siguen una distribución normal podríamos calcular la probabilidad de tener 10, 30 o 40 mpg, si conocemos la media y la desviación estándar. Esto se simplifica bastante si los datos siguen una distribución normal estandarizada, es decir una distribución normal con una media de 0 y una desviación estándar de 1.

Para transformar los datos que tenemos solo debemos de utilizar la siguiente ecuación:

$$Z = \frac{(X - \mu)}{\sigma}$$

Es decir el z-score para un valor X es X menos la media, dividido entre la desviación estándar.

Podemos observar gráficamente esta distribución:

```
1 >>> import math
2 >>> import matplotlib.mlab as mlab
3
4 >>> mu = 0
5 >>> variance = 1
6 >>> sigma = math.sqrt(variance)
7 >>> x = np.linspace(mu - 3*sigma, mu + 3*sigma, 100)
8 >>> plt.plot(x, mlab.normpdf(x, mu, sigma))
9 >>> plt.show()
```

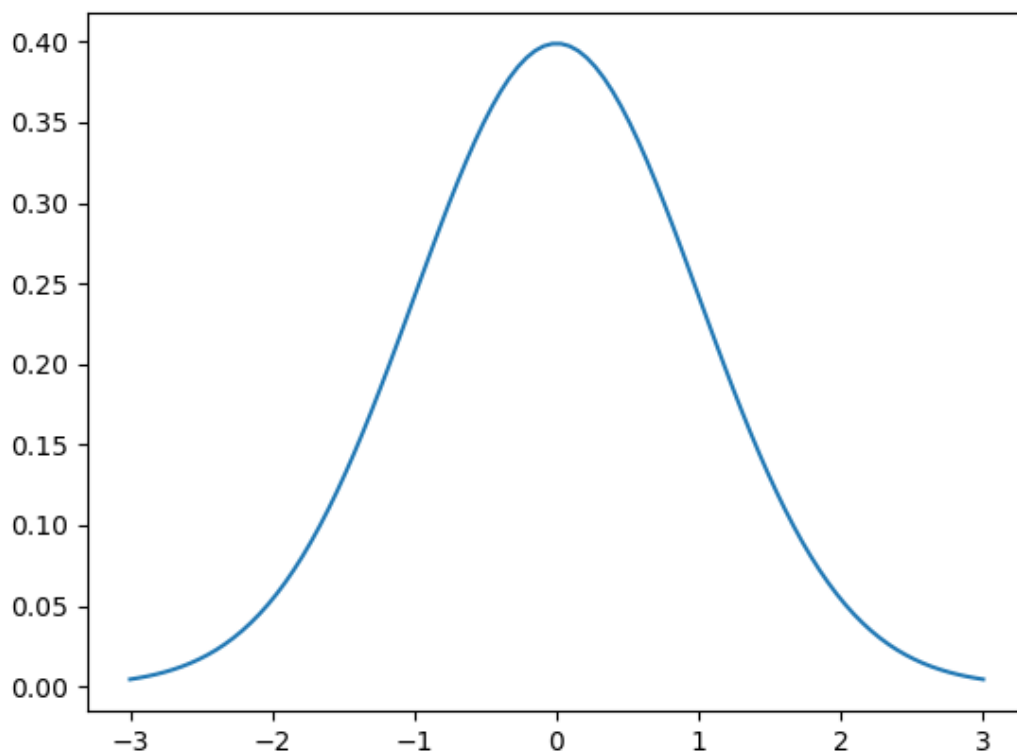


Figura 14: estandar

Podemos estandarizar los datos utilizando la biblioteca sci-kitlearn:

```
1 >>> from sklearn import preprocessing
2 >>> datos = auto_mpg.loc[:, ['mpg', 'weight']]
3 >>> datos_estandarizados = preprocessing.scale(datos)
4 >>> df = pd.DataFrame(datos_estandarizados)
```

```
5 >>> df.plot.scatter(x='weight', y='mpg');  
6 >>> plt.show()
```

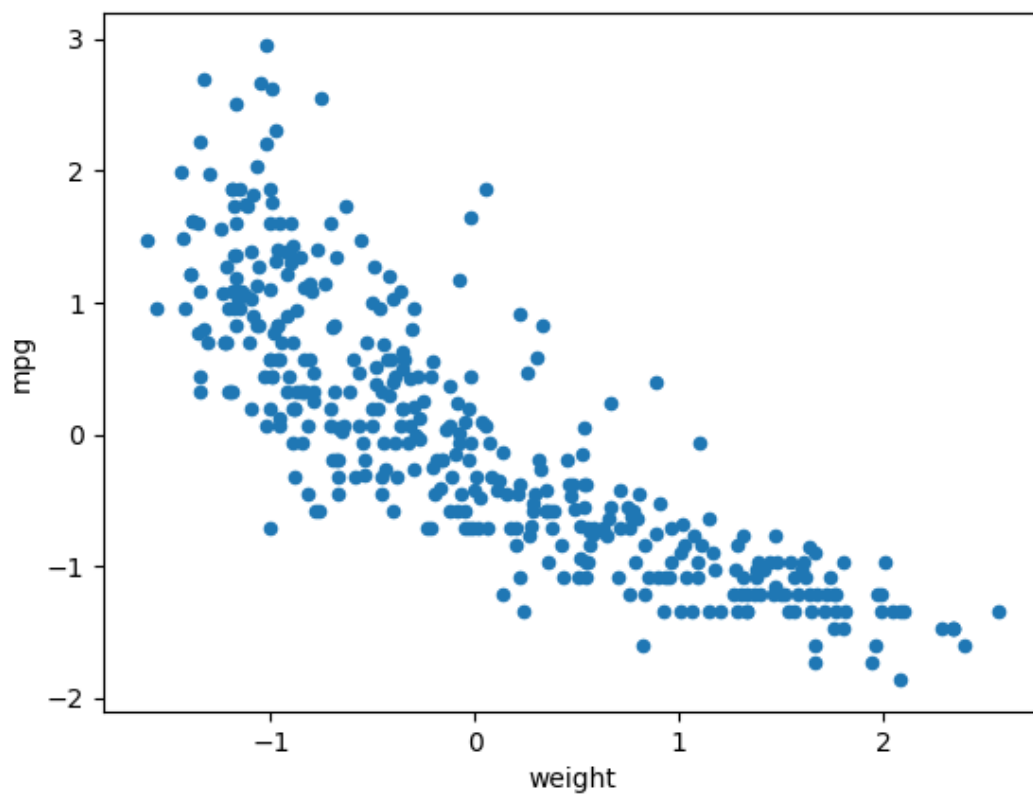


Figura 15: MPG Data

Vemos que ahora los valores numéricos no son tan distintos y en el caso del histograma de mpg:

```
1 >>> df.hist(column='mpg');  
2 >>> plt.show()
```

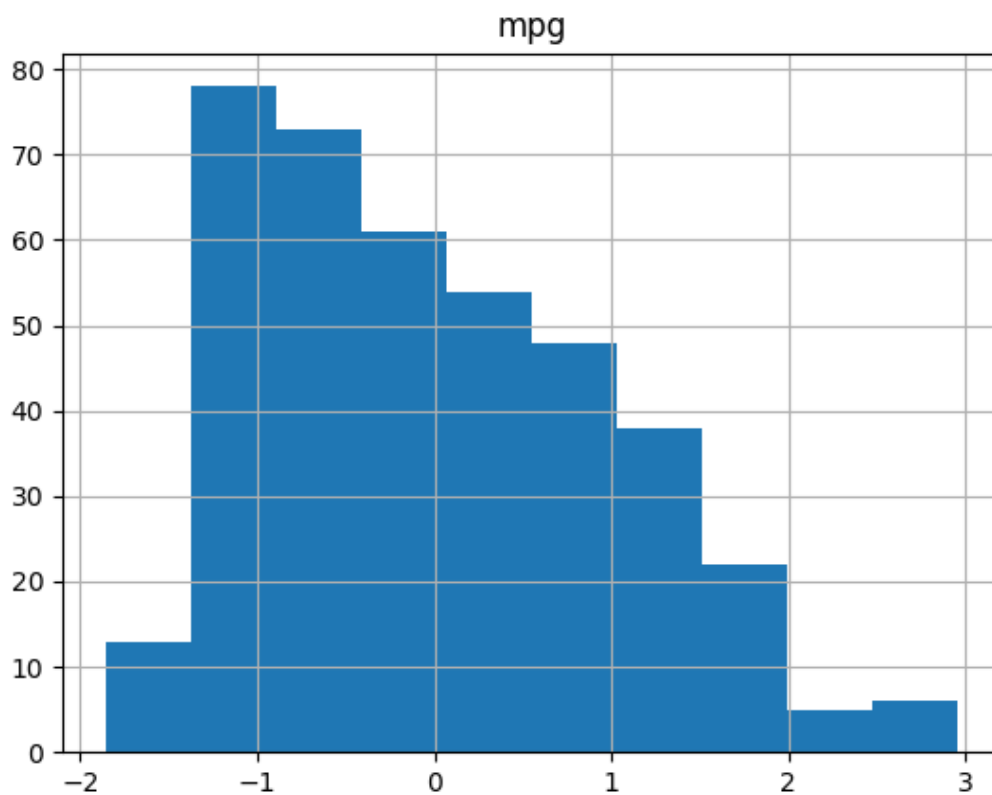


Figura 16: MPG Data

Nos damos cuenta que los datos siguen una distribución sesgada a la izquierda cuando la comparamos con la distribución normalizada anteriormente.

En muchos casos vamos a realizar este proceso en varios conjuntos de datos, por lo que el modulo *preprocessing* nos brinda la clase *StandardScaler* para calcular la media y desviación estándar en un conjunto de entrenamiento para después hacer la misma estandarización en el conjunto de datos de prueba. Hablaremos sobre estos conjuntos de datos en la sección de clasificación.

Escalado a un rango

Otra transformación que podemos hacer para *weight* y *mpg*, es cambiar la escala de los valores a un rango entre cero y uno. Podemos hacerlo de la siguiente manera:

```
1 >>> datos = auto_mpg.loc[:, ['mpg', 'weight']]
2 >>> min_max_scaler = preprocessing.MinMaxScaler()
```

```
3 >>> datos_minmax = min_max_scaler.fit_transform(datos)
4 >>> df = pd.DataFrame(datos_minmax, columns=['mpg', 'weight'] )
5 >>> df.plot.scatter(x='weight', y='mpg');
6 >>> plt.show()
```

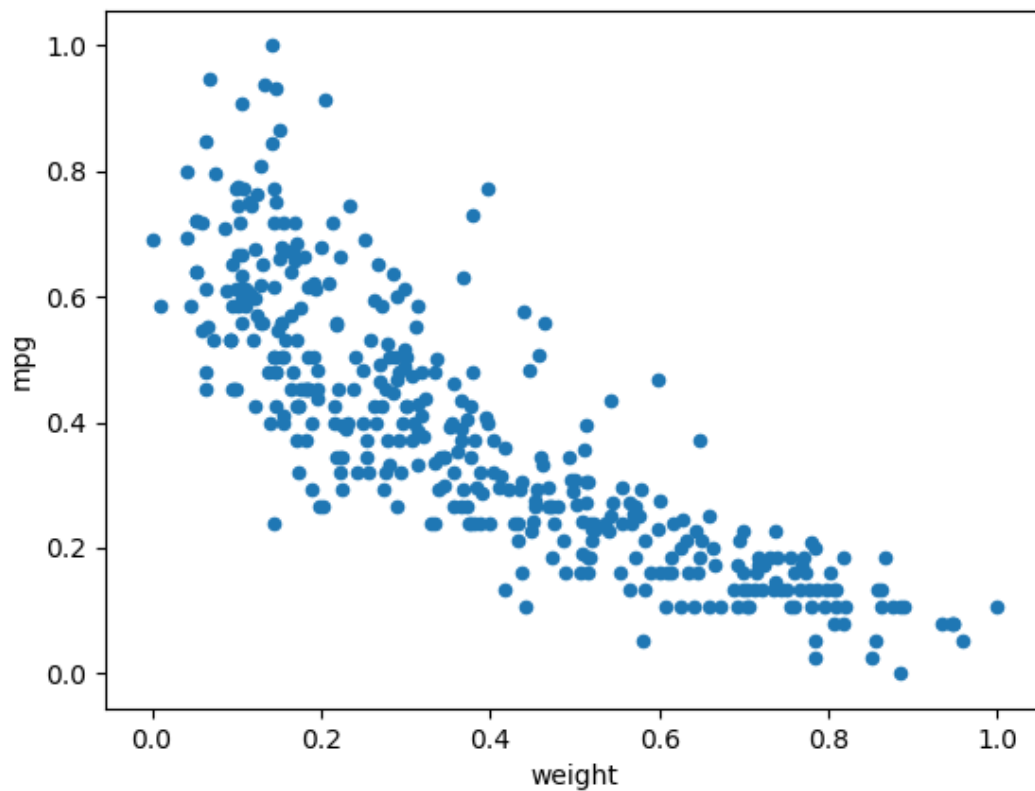


Figura 17: MPG Data

Para escalar a otros rangos enviamos una tupla en el constructor, por ejemplo:

```
1 >>> min = -1
2 >>> max = 1
3 >>> min_max_scaler = preprocessing.MinMaxScaler( feature_range=(min,
    max))
```

Escalado con valores atípicos

En caso de que los datos que estamos procesando incluyan valores atípicos, debemos utilizar una función de escalado que utilice una estadística que tolere *outliers*. Una estrategia es utilizar la mediana y escalar los datos de acuerdo a rangos establecidos por percentiles. En el caso de la clase *RobustScaler* de scikit-learn, por defecto se utiliza el rango entre el primer (percentil 25%) y tercer (percentil 75%) cuartil.

```
1 >>> datos = auto_mpg.loc[:, ['mpg', 'weight']]
2 >>> robust_scaler = preprocessing.RobustScaler()
3 >>> datos_robustos = robust_scaler.fit_transform(datos)
4 >>> df = pd.DataFrame(datos_robustos, columns=['mpg', 'weight'])
5 >>> df.plot.scatter(x='weight', y='mpg');
6 <matplotlib.axes._subplots.AxesSubplot object at 0x11f5e6050>
7 >>> plt.show()
```

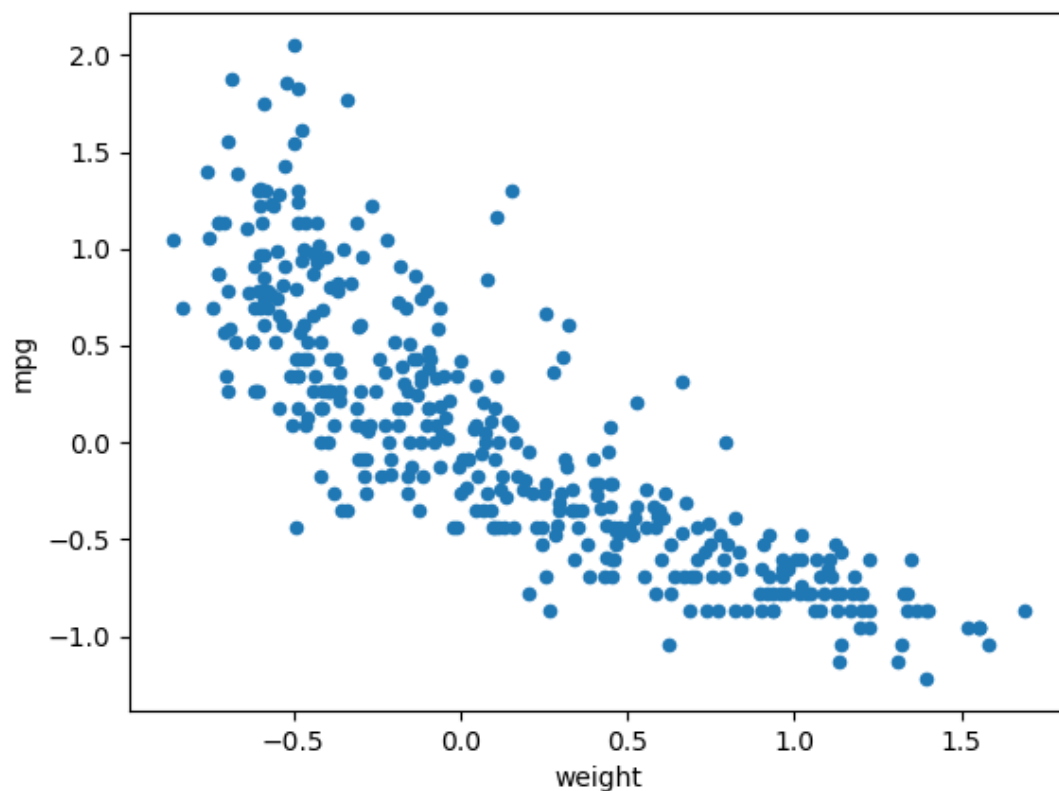


Figura 18: MPG Data

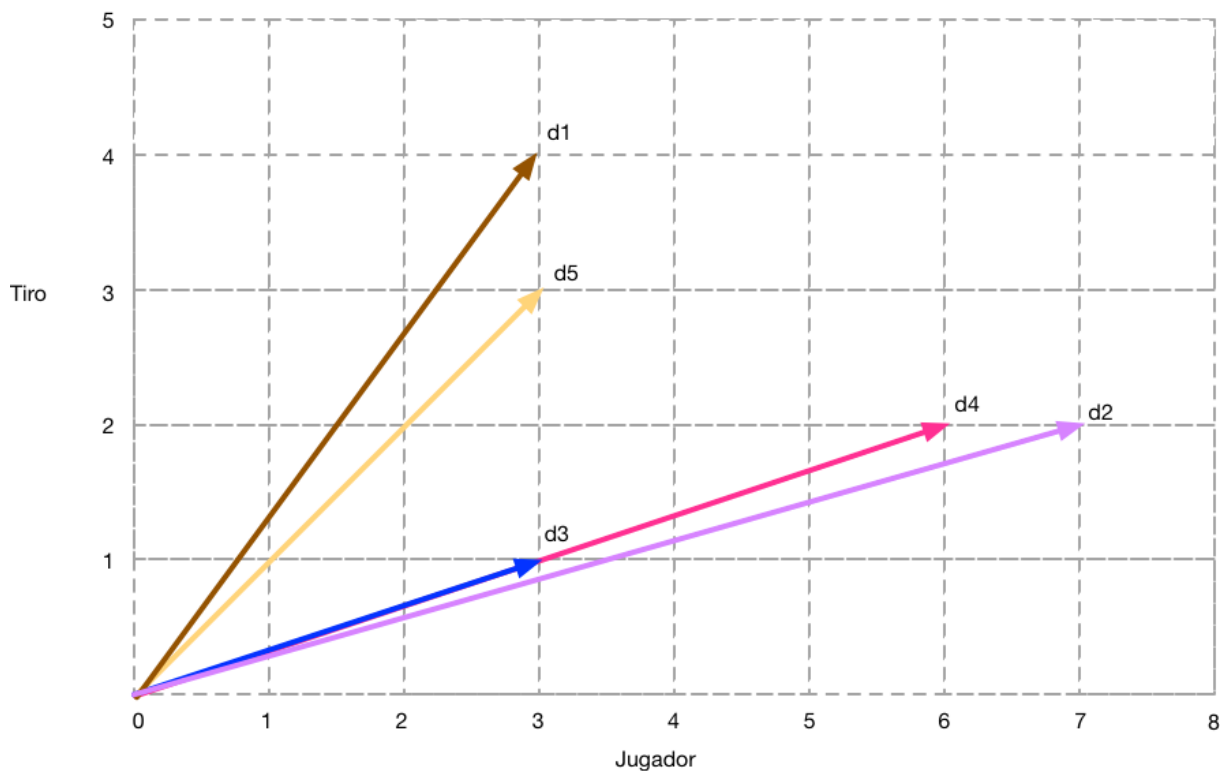
Medidas de Similitud y Normalización

Algunos algoritmos de clasificación de textos utilizan una representación de los documentos llamada modelo de espacio vectorial. En este modelo, cada documento es representado como un vector en el cual cada componente representa la ponderación de cierto término en el documento. Por ejemplo, veamos la representación de cuatro documentos:

	Home Run	Gol	Jugador	Penal	Tiro	Doble Play
d1	3	0	3	0	4	2
d2	0	5	7	3	2	0
d3	0	0	3	3	1	0
d4	5	0	6	0	2	3
d5	5	0	3	0	3	3

El Documento 1, habla de beisbol, por lo que no aparecen en él, los términos Gol ni Penal. Por otro lado, el Documento 2 habla de fútbol, por lo que no se menciona el término *Home Run*. Una manera de medir que tan parecidos o distintos son los documentos es simplemente calculando el producto punto entre los vectores, de tal manera que la similaridad está representada por el ángulo entre ellos.

Vamos a considerar un caso bien básico, que los documentos solo tiene dos términos: *Jugador* y *Tiro*. Al tener solo vectores con dos componentes, los podemos representa de la siguiente manera:

**Figura 19:** Vectores

Los documentos menos similares son el d1 y d2, ya que el ángulo entre ellos es mayor. Los más similares son d3 y d4 ya que tienen el mismo ángulo. El cálculo de estos ángulos se simplifica si todos los vectores tienen una longitud unitaria ver. Por lo anterior es común normalizar (o escalar) los vectores a una longitud unitaria, dividiendo cada componente entre la longitud euclidiana del vector (a esto se le llama norma L2). Como vemos en la siguiente figura los vectores se han escalado considerando una longitud o norma euclidiana. Aunque cada documento sigue teniendo el mismo ángulo todos tienen una longitud unitaria.

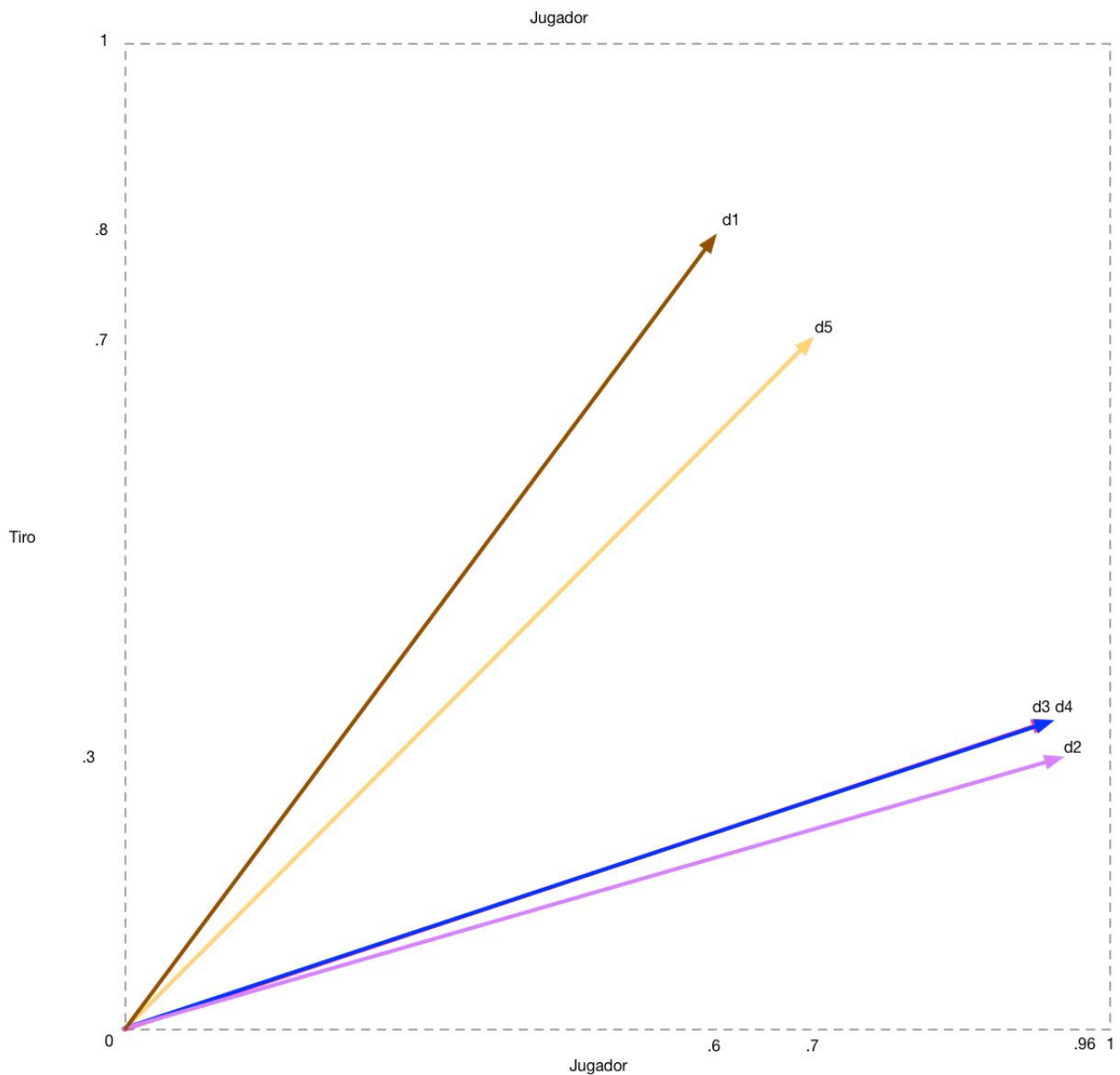


Figura 20: Norma L_2

```

1 >>> from sklearn import preprocessing
2 >>> import numpy as np
3
4 >>> X = np.array([[ 3., 4.], [7., 2.], [3., 1.], [6., 2.], [3., 3.] ])
5 >>> X_normalized = preprocessing.normalize(X, norm='l2')
6
7 >>> X_normalized
8 array([[ 0.6         ,  0.8         ],
9        [ 0.96152395,  0.27472113],

```

```

10      [ 0.9486833 , 0.31622777],
11      [ 0.9486833 , 0.31622777],
12      [ 0.70710678, 0.70710678]])

```

En este ejemplo los documentos d3 y d4 tienen la misma dirección por lo que se consideran documentos iguales, lo comprobamos con el producto punto que nos da 1.

```

1 >>> np.dot(X_normalized[2],X_normalized[3])
2      0.9999999999999999

```

En ocasiones también se utiliza una norma L1, también llamada distancia Manhattan.

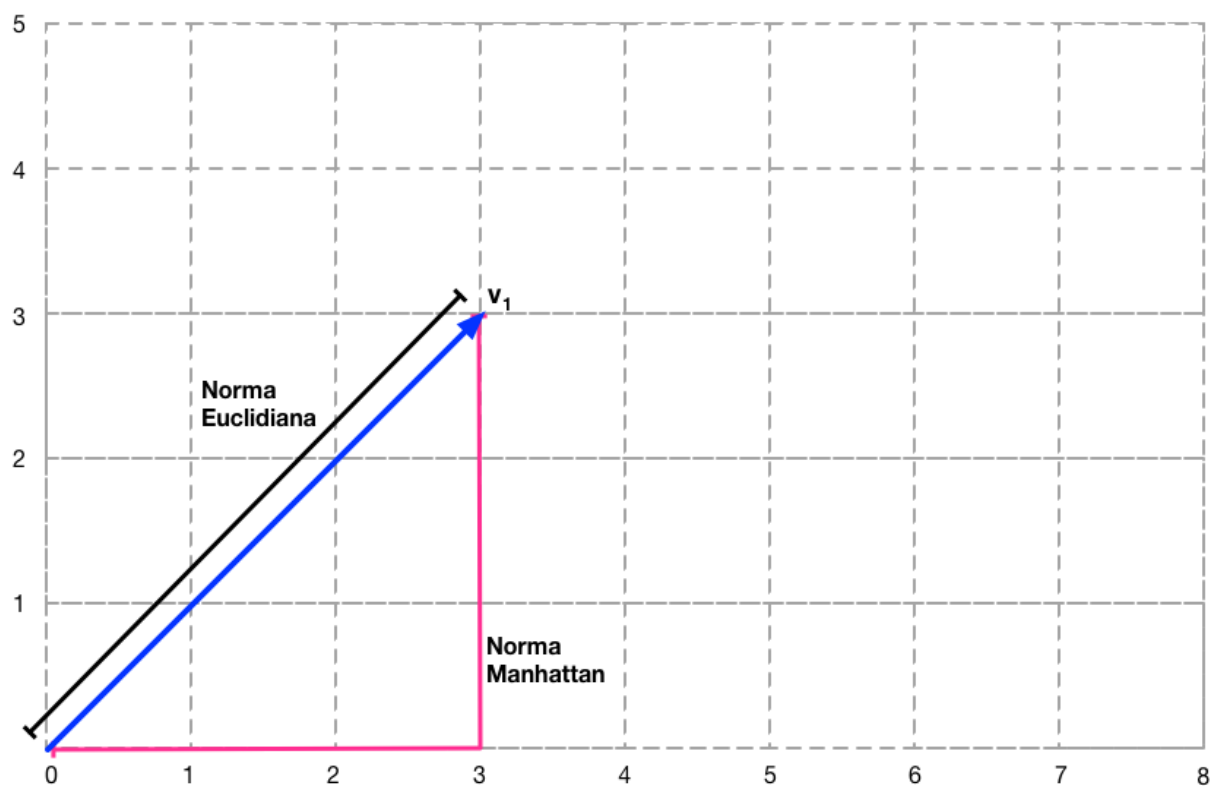


Figura 21: Norma L_1

```

1 >>> X_manhattan = preprocessing.normalize(X, norm='l2')
2 >>> X_manhattan
3 array([[ 0.42857143,  0.57142857],
4        [ 0.77777778,  0.22222222],
5        [ 0.75       ,  0.25       ],
6        [ 0.75       ,  0.25       ],
7        [ 0.5        ,  0.5        ]])

```

Datos Agregados

Imagina que eres el ejecutivo de una cadena de librerías y tienes que tomar decisiones a cerca de los productos que se deben de promover en la siguiente temporada. Para apoyarte en la toma de decisiones utilizas un sistema OLAP el cual te permite ver los datos de las ventas con distintos nivel de detalle. Puedes ir desde el nivel de granularidad más bajo:

Producto	Cantidad	Tienda	Ciudad	Pais	Fecha	Mes	Año
El Principito	3	123	LA	USA	10/02/16	FEB	2016
El Principito	0	156	LA	USA	10/02/16	FEB	2016
El Hobbit	5	123	LA	USA	10/02/16	FEB	2016
El Hobbit	1	156	LA	USA	10/02/16	FEB	2016

Lo que vemos son las ventas diarias de cada libro en cada tienda. Como la información es muy detallada prefieres verla a otro nivel de detalle, por ejemplo:

Producto	Cantidad	Ciudad	Pais	Mes	Año
El Principito	10	LA	USA	ENE	2016
El Principito	30	LA	USA	FEB	2016
El Hobbit	30	LA	USA	ENE	2016
El Hobbit	30	LA	USA	FEB	2016

Esta vista te presenta los datos agregados por ciudad y mes. Agregar los datos consiste en hacer grupos que coincidan en determinado atributo y realizar alguna operación sobre el grupo, sumarlos en este caso. Podemos agregar todavía más:

Producto	Cantidad	Pais	Año
El Principito	29,203	México	2016
El Principito	29,788	USA	2016
El Hobbit	18,987	México	2017
El Hobbit	36,699	USA	2017

Dependiendo del tipo de análisis que estés haciendo será el tipo de agrupación que necesites. Como agregar reduce la cantidad de datos, tenemos las siguientes ventajas:

- Si solo almacenamos los datos agregados, ahorramos espacio de almacenamiento.
- Se reduce el número de atributos.
- Los datos agrupados tienen menor variabilidad.

Los datos agregados tienen mucha importancia en los sistemas de toma de decisiones, almacenes de datos y el concepto de cubos de datos. Este tema se revisa con mayor detalle en la sección de OLAP.

- Codificación de atributos categóricos

Muchos algoritmos de aprendizaje automático solo pueden recibir como entrada vectores de características con valores continuos. ¿Qué hacemos con aquellos objetos que tienen atributos con valores categóricos?. Por ejemplo, una persona puede tener el atributo genero [«masculino», «femenino»] o estado civil [«soltero», «en una relación», «casado», «es complicado», «divorciado», «viudo»]. Una manera de común de solucionar este problema es simplemente asignarle un número entero a cada opción. Así, los valores de genero [«masculino», «femenino»] los cambiamos a [0, 1] y las opciones de estado civil que acabo de decir, quedaría como [0, 1, 2, 3, 4, 5]. El problema que tiene esta solución es que se asume un orden, pero estos atributos no son ordinales; lo cual puede ser un problema en algunos casos.

Una manera sencilla de codificar los valores categóricos es utilizando una representación binaria. En esta representación se agrega un atributo por cada valor posible, así el atributo genero quedaría de la siguiente manera:

Original:

Nombre	Genero
Ana	Femenino
Tom	Masculino
Sue	Femenino
Jim	Masculino

Representación Binaria:

Nombre	Femenino	Masculino
Ana	1	0
Tom	0	1

Nombre	Femenino	Masculino
Sue	1	0
Jim	0	1

Esta representación convierte cada atributo categórico con n valores posibles a n atributos binarios. Indicamos el valor categórico activando el atributo de la opción correspondiente; todos los otros atributos se desactivan. Para desactivar o activar los valores se utiliza el cero y uno respectivamente. De esta manera el atributo estado civil visto anteriormente quedaría:

Nombre	Soltero	En una relación	Casado	Es complicado	Divorciado	Viudo
Ana	1	0	0	0	0	0
Tom	0	0	0	0	1	0
Sue	0	0	1	0	0	0
Jim	1	0	0	0	0	0

Vamos a practicar codificando el atributo origen de nuestro dataset *auto_mpg*. Recordemos que el atributo origen puede tener los valores categóricos: [0, 1, 2] que corresponden a [«USA», «Japan», «Germany»]. Vamos a utilizar el codificador *OneHotEncoder* de la biblioteca *sklearn*. Esta implementación solo puede codificar números enteros y no acepta valores nulos. Basándonos en el código visto anteriormente, primero importamos el módulo *preprocessing*. Después creamos un objeto codificador (enc) con el constructor *OneHotEncoder()*. Vamos a construir el codificador con el método *fit()*, a cual le enviamos como parámetro la columna *origin*. Ya una vez creado el codificador, podemos continuar pidiéndole que transforme la columna original. La transformación la guardamos temporalmente en *a*. La transformación es un arreglo escaso (sparse array), por consiguiente, si lo queremos desplegar debemos convertirlo a un array. En el ejercicio imprimimos el primer renglón, como vemos tiene tres columnas y la primera es 1, es decir: «USA».

```
1 >>> import numpy as np
2 >>> import pandas as pd
3 >>> import matplotlib.pyplot as plt
4 >>> from sklearn import preprocessing
5
6 >>> auto_mpg = pd.read_csv('auto-mpg.data', sep='\s+',
7     header=None, na_values='?', names=['mpg', 'cylinders', '
    displacement', 'horsepower',
```

```
8      'weight', 'acceleration', 'model_year', 'origin', 'car_name'],
9      dtype={'mpg': 'f4', 'cylinders': 'i4',
10      'displacement': 'f4', 'horsepower': 'f4', 'weight': 'f4',
11      'acceleration': 'f4', 'model_year': 'i4', 'origin': 'category',
12      'car_name': 'category'})
13 >>> auto_mpg["origin"].cat.categories = ["USA", "Japan", "Germany"]
14
15 >>> enc = preprocessing.OneHotEncoder()
16 >>> enc.fit(auto_mpg[['origin']])
17 >>> a = enc.transform(auto_mpg[['origin']])
18 >>> a.toarray()[0]
19 >>> array([ 1.,  0.,  0.]
```

Muestreo

En estadística el muestreo es una herramienta de la investigación científica, que tiene como objetivo determinar la selección de una muestra de objetos de una población, que nos permita realizar inferencias sobre dicha población. Trabajamos con muestras, por que puede ser muy difícil o costoso analizar a todos los objetos de una población. Si la muestra es representativa, podemos reducir los costos llegando a las mismas conclusiones. En ocasiones simplemente no tenemos datos suficientes por la dificultad que representa obtenerlos. Cuando hablamos de minería de datos, parecería que tenemos el problema contrario, partimos de datos que se han recolectado en ocasiones masivamente, considerando objetos con un gran número de atributos. Debido a la gran cantidad de datos disponible, es necesario utilizar muestras para reducir el costo computacional del análisis. También se utilizan distintas técnicas de muestreo con el objetivo de evaluar los modelos o comparar distintos algoritmos de aprendizaje automático. Las técnicas de muestreo utilizadas en minería de datos se basan en las técnicas estándar de estadística. Algunas de las técnicas más utilizadas son el muestreo aleatorio simple o estratificado, con o sin reemplazo. Cuando se busca estimar el desempeño de los modelos, se utilizan técnicas de partición de datos, como leave-one-out y validación cruzada de k-particiones (k-fold cross validation). Veamos ejemplos de cada tipo.

Muestreo aleatorio simple

Este tipo de muestreo puede aplicarse cuando podemos calcular la probabilidad de selección de cada uno de los objetos. En el caso de minería de datos, nosotros tenemos mucho control sobre la selección de objetos que hacemos en datos electrónicos disponibles. Pero debemos tener cuidado, la validez de nuestras inferencias podrían no ser representativas de los objetos del mundo real; debido a un

sesgo de origen, causado desde la misma recolección de los datos. El muestreo entonces es probabilístico, debido a que cualquiera de los objetos tiene una probabilidad de ser seleccionado. Los tipos de muestreo aleatorio simple son:

- Sin reemplazo: Cada objeto seleccionado se extrae de la población, por lo que ya no podrá ser seleccionado otra vez. Debemos considerar que cuando extraemos los objetos, el tamaño de la población y por lo tanto la probabilidad que tienen los objetos de ser seleccionados ira cambiando.
- Con reemplazo: Los objetos seleccionados se reinsertan a la población, un objeto puede ser seleccionado más de una vez y el tamaño de la población permanece constante.

Muestreo sistemático

En esta técnica se van removiendo objetos de una lista circular ordenada, se elige un punto de inicio al azar y utilizando intervalo correspondiente para el tamaño de la muestra, vamos dando saltos seleccionando a los demás objetos.

Muestreo estratificado

En ocasiones tenemos objetos que comparten cierta característica que nos permite agruparlos, pero se tiene el problema que los objetos de ese grupo son muy pocos comparados con la población en general. Por ejemplo los deportistas de Polo comparados con los de Fútbol. Si buscamos que todos los grupos estén representados en la muestra aleatoria, podemos hacer un muestreo estratificado. Para esto asignamos primero una cuota para cada grupo, por ejemplo 100 futbolistas y 2 jugadores de polo. Dentro de cada grupo o estrato utilizamos una técnica de muestreo sistemático.

Muestro por conglomerados (*cluster sampling*)

En ocasiones existen agrupamientos (o clusters) de objetos homogéneos en una población. Por ejemplo, grupos de estudiantes de alguna universidad con sedes en distintos estados; en general los grupos tienen características similares. Sin embargo, los elementos que constituyen cada agrupamiento (los estudiantes) deben ser diferentes entre sí; estudiantes de distintos semestres, carreras, calificaciones, etc. En estos casos se hace una selección aleatoria de los grupos. Por ejemplo, se eligen al azar un número de universidades, después en las universidades seleccionadas una muestra aleatoria de alumnos contestarán una encuesta. Esto puede ahorrar dinero a los investigadores, pues si hubieran elegido alumnos al azar deberían aplicar la encuesta en muchas universidades.

Muestreo aleatorio simple en Python

Igual en algunos casos, podemos utilizar la biblioteca estándar de Python *random* para tomar muestras aleatorias de secuencias de objetos:

```
1 >>> import random
2 >>> pop = ["juan", "luis", "paco", "pedro", "jorge", "victor", "ana", "ada", "megan", "emma"]
3 >>> random.sample(pop, 3)
4 ['juan', 'luis', 'emma']
5 >>> random.sample(range(1000000000), 3)
6 [67307206, 72755273, 50751539]
```

Python para Análisis de Datos: Pandas

El análisis de datos comúnmente se realiza sobre datos que se encuentran organizados en forma de tablas. Probablemente ya haz utilizado datos organizados de esta manera al utilizar una hoja de cálculo o tablas en servidores de bases de datos relacionales como Oracle, PostgreSQL o SQLServer. En python incluso podemos almacenar los datos de una tabla utilizando un arreglo de tuplas. Primero veamos algunas otras tecnologías que podríamos utilizar:

Tablas de SQL

Los sistemas de bases de datos tienen como objetivo almacenar grandes cantidades de datos y al mismo tiempo nos permiten realizar un gran número de transacciones de manera concurrente. Dicho de otra manera los servidores nos permiten realizar la parte operativa de una empresa, vender boletos para conciertos, inscribir alumnos, llevar el control de un almacén, procesar los pedidos en una tienda en línea, etc. Además de esto cuentan con un lenguaje de alto nivel para definir, manipular y consultar a los datos. El lenguaje estándar SQL ha sido el preferido por los desarrolladores para consultar de una manera muy flexible a los datos relacionales. El problema que tenemos en estos sistemas es que su objetivo principal no es el analizar los datos, estos sistemas nos permiten más bien implementar sistemas que necesitan manipular datos en-línea para funcionar. Por otro lado, para hacer nuestro análisis, podemos utilizar perfectamente datos que estén fuera de línea, datos históricos o incluso datos ficticios. Mucho del *overhead* de un servidor de bases de datos se tiene precisamente por que estos deben ser capaces de modificar las estructuras de las tablas, hacer modificaciones a objetos, mantener la consistencia, controlar el acceso y muchas otras operaciones. Todo en línea. Al no tener estos requisitos podemos operar con estructuras diseñadas precisamente para el análisis de datos. Dicho esto, algunos sistemas de bases de datos han agregado la funcionalidad necesaria para realizar

el tipo de análisis que veremos, pero esto no es todavía el estándar. Los sistemas de bases de datos nos pueden servir para almacenar los datos que utilizaremos en el análisis y realizar algunas consultas con SQL. Podemos utilizar también la biblioteca SQLite para almacenar bitácoras, intercambiar información con otros sistemas o como parte del preprocesamiento.

NoSQL

Últimamente se han propuesto gestores de datos que aunque no siguen el modelo relacional nos permiten hacer cierto tipo de consultas de una manera mucho más eficiente. Por ejemplo, los almacenes clave-valor (key-value) pueden recuperar bastante rápido los datos por medio de su clave; pero el lenguaje de consulta, si es que lo hay, no es muy flexible. Son muy buenos para recuperar muy rápido un documento html o un objeto con solo especificar su clave, pero no podemos hacer consultas *ad-hoc* como «recupera aquellos productos que tengan ventas superiores al promedio en las tiendas de California o Arizona, siempre que no sean del departamento de electrónica». Estos sistemas nos pueden servir sobre todo como memoria cache o memoria compartida para realizar operaciones en paralelo.

Data Warehouse

Las técnicas de Almacenes de Datos (Data Warehouse) nos permiten realizar de una manera muy sencilla consultas *tipo cubo* sobre bases de datos relacionales. Aunque las consultas permiten a los ejecutivos tomar decisiones y tener una buena idea de lo que sucede en la empresa, su objetivo no es el de extraer patrones de los datos. Sin embargo el objetivo general y el diseño de los Almacenes de Datos tiene algunas cosas en común con el proceso de KDD. Ambos trabajan con datos históricos y requieren de un proceso previo de extracción de los datos al cual se le conoce como ETL (Extract, Transform and Load) o Extraer, Transformar y Cargar). El proceso de ETL permite a las empresas extraer datos desde diferentes fuentes, cambiar de formato y limpiarlos con el objetivo de cargarlos en el almacén de datos.

Hojas de Cálculo

De hecho las hojas de cálculo son una herramienta aceptable para realizar análisis de datos. Muchos analistas utilizan hojas de calculo como herramienta principal. No se requiere tener un amplio conocimiento de programación para sacarles provecho y pueden complementares con otras herramientas por ejemplo con sistemas de bases de datos. Los programadores normalmente preferimos tener un control total sobre el proceso de KDD y nos gusta poder integrar fácilmente nuestro código en distintas aplicaciones, por lo que preferimos la flexibilidad que nos brinda un lenguaje de propósito general.

Breve Introducción al DataFrame de Pandas

Pandas es una biblioteca código abierto en Python la cual se ha diseñado con el objetivo específico de brindarnos una estructura de tabla rápida y flexible para el análisis de datos. Según su documentación pandas nos permite operar con distintos tipos de datos:

- Tablas con atributos heterogéneos.
- Series de tiempo, ordenadas o no.
- Matrices homogéneas o heterogéneas.

Para esto en pandas se implementan dos estructuras principales: *Series* y *DataFrame*. La estructura *Series* nos permite trabajar con datos de series de tiempo especificadas como un vector. Por otro lado está *DataFrame* nos sirve para aquellos datos que tienen una estructura de tabla o matriz. En esta sección nos enfocaremos en la estructura *DataFrame* ya que nos interesa trabajar con datos organizados como tabla.

Creando un DataFrame desde un archivo de texto

Como ejemplo, vamos a utilizar una estructura tipo DataFrame para almacenar el conjunto de datos conocido como Auto MPG. Lo primero que debemos hacer es ver los tipos de datos de los atributos:

nombre	tipo	medida	descripción
mpg	continuo	razón	millas por galón
cylinders	discreto	ordinal	número de cilindros
displacement	continuo	razón	desplazamiento
horsepower	continuo	razón	caballos de fuerza
weight	continuo	razón	peso en libras US
acceleration	continuo	razón	aceleración
model_year	discreto	razón	año de fabricación
origin	discreto	categorico	origen
car_name	cadena	categorico	nombre único del auto

Como vemos estas observaciones tienen atributos heterogéneos ya que son de distintos tipos. El objetivo original de este conjunto de datos era el de predecir el consumo de combustible en millas por galón (mpg) utilizando los otros atributos.

Como siguiente paso vamos a descargar el conjunto de datos del repositorio de machine learning de la UC-Irvine. El archivo se llama **auto-mpg.data**. Al abrir el archivo en un editor de texto vemos que está separado por espacios y faltan algunos valores. Veamos un fragmento:

1	11.0	8	350.0	180.0	3664.	11.0	73	1	"oldsmobile omega"
2	20.0	6	198.0	95.00	3102.	16.5	74	1	"plymouth duster"
3	21.0	6	200.0	?	2875.	17.0	74	1	"ford maverick"

Pandas nos brinda *IO Tools* un API de entrada/salida donde se incluyen métodos de lectura para formatos de texto, binarios y SQL. En el caso de text se incluyen lectores para formatos CSV, JSON y HTML. Vamos a intentar leer el archivo utilizando el método `read_csv()` para más detalle puedes ver la documentación. La manera en la que se lee y se hace el «parsing» a los archivos se puede configurar de una manera muy detallada, para este ejemplo solo modificaremos algunos parámetros básicos. Recordemos que en los archivos CSV, como el nombre lo dice, los valores de los atributos se separan por comas. Ya vimos que en el caso del archivo **auto-mpg.data** la separación se hace por medio de espacios en blanco. Un problema adicional es que el número de espacios no siempre es el mismo. Para leer el archivo correctamente, vamos a utilizar el parámetro `sep` el cual recibe una especificación del separador que se va a utilizar, por defecto una coma «,». En nuestro caso el separador será una expresión regular la cual le diga al método que son uno o más espacios. El espacio y tabuladores se especifican en la expresión regular con la cadena «\s», mientras que el operador «+» indica que se puede repetir una o más veces. Nuestro primer intento quedaría de la siguiente manera:

```
1 >>> import matplotlib.pyplot as plt
2 >>> import pandas as pd
3 >>> import numpy as np
4 >>> df = pd.read_csv('datos-ejemplo/auto-mpg.data', sep='\s+')
```

Antes que nada importamos las bibliotecas que utilizaremos en estos ejercicios (1-3). Como primer parámetro enviamos la ruta al archivo *auto-mpg.data*, si ejecutamos el comando dentro del directorio del libro solamente especificamos la ruta de la siguiente manera: «*datos-ejemplo/auto-mpg.data*». En caso de que se encuentre en otro lado simplemente cambiamos la ruta.

Nota:

En caso de que te marque algún error, tal vez debas actualizar las versiones de las bibliotecas de anaconda. Desde la línea de comando de tu sistema operativo ejecuta este comando:

```
1 conda update --all
```

```
1 >>> df
2      18.0  8  307.0  130.0   3504.   12.0  70  1  \
3 0      15.0  8  350.0  165.0   3693.   11.5  70  1
4 1      18.0  8  318.0  150.0   3436.   11.0  70  1
5 2      16.0  8  304.0  150.0   3433.   12.0  70
6 ..
7 chevrolet chevelle malibu
8 0                      buick skylark 320
9 1                      plymouth satellite
10 2                      amc rebel sst
11 3                      ford torino
12
13
14 [397 rows x 9 columns]
```

El método lector espera que el primer renglón tenga el nombre de los atributos, pero nuestro archivo no los tiene. Por lo que el nombre de los atributos no tienen mucho sentido «18.0 8 307.0 130.0 3504. 12.0 70 1 chevrolet chevelle malibu». Debemos indicar que nuestro archivo no incluye el renglón de encabezados con el argumento `header=None`. En este caso, como no hemos especificado nombres aun los atributos tendrán como nombre simplemente un índice.

Vamos a corregir el problema indicando que no se tiene una línea de encabezado:

```
1 >>> df = pd.read_csv('datos-ejemplo/auto-mpg.data', sep='\s+', header=
    None)
2
3 >>> df
4      0  1      2      3      4      5  6  7  \
5 0      18.0  8  307.0  130.0   3504.0  12.0  70  1
6 1      15.0  8  350.0  165.0   3693.0  11.5  70  1
7 ..
8 8
9 0      chevrolet chevelle malibu
10 1      buick skylark 320
11 ..
12
13 [398 rows x 9 columns]
```

Vamos especificando los nombres de los atributos, esto se hace agregando el parámetro **names** y enviando una lista con los nombres:

```
1 >>> df2 = pd.read_csv('datos-ejemplo/auto-mpg.data', sep='\s+', header=
    None,
2     names=['mpg','cylinders','displacement','horsepower','weight','
    acceleration',
3     'model_year','origin','car_name'])
4
5 >>> df2
6      mpg  cylinders  displacement  horsepower  weight  acceleration  \
7  0    18.0         8         307.0         130.0   3504.0          12.0
8  1    15.0         8         350.0         165.0   3693.0          11.5
9  2    18.0         8         318.0         150.0   3436.0          11.0
```

Mucho mejor, veamos que tipo de datos infirió el método de lectura para cada una de las columnas:

```
1 >>> df2.dtypes
2
3 mpg                float64
4 cylinders           int64
5 displacement       float64
6 horsepower         object
7 weight            float64
8 acceleration       float64
9 model_year         int64
10 origin            int64
11 car_name          object
12 dtype: object
```

Hay un problema con el atributo *horsepower* este debería de ser float64. Lo que sucede es que al leer el carácter ? el método de lectura no sabe que tipo de dato inferir. Lo bueno es que podemos configurar como queremos que se resuelvan los casos donde tenemos datos «no disponibles» y también como se debe pasar este tipo de valores. El argumento que vamos a utilizar es *na_values*, podemos indicar una lista de valores o como en este caso simplemente el símbolo correspondiente.

```
1 >>> df2 = pd.read_csv('datos-ejemplo/auto-mpg.data', sep='\s+', header=
    None,
2     names=['mpg','cylinders','displacement','horsepower','weight',
3     'acceleration','model_year','origin','car_name'], na_values='?
    ')
4
5 In [12]: df2.dtypes
6 Out[12]:
7 mpg                float64
8 cylinders           int64
```

```
9 displacement    float64
10 horsepower      float64
11 weight          float64
12 acceleration    float64
13 model_year      int64
14 origin          int64
15 car_name        object
16 dtype: object
```

Ahora si, cada una de las columnas corresponde al tipo de dato de los atributos de la tabla anterior. Si queremos también podemos indicar al momento de la lectura el nombre y tipo de dato de los atributos. Incluso podemos indicar si tenemos algún dato categórico.

```
1 >>> df2 = pd.read_csv('datos-ejemplo/auto-mpg.data', sep='\s+',
2     header=None, na_values='?', names=['mpg','cylinders','
3     displacement','horsepower',
4     'weight','acceleration','model_year','origin','car_name'],
5     dtype={'mpg':'f4','cylinders':'i4','displacement':'f4',
6     'horsepower':'f4','weight':'f4','acceleration':'f4',
7     'model_year':'i4','origin':'category','car_name':'category'})
8 >>> df2.dtypes
9
10 mpg                float32
11 cylinders           int32
12 displacement       float32
13 horsepower          float32
14 weight              float32
15 acceleration        float32
16 model_year          int32
17 origin              category
18 car_name            category
19 dtype: object
```

Una vez leído correctamente el *DataFrame* podemos utilizar el método **describe()** para generar un resumen estadístico descriptivo que incluye la tendencia central, dispersión y la distribución del conjunto de datos, excluyendo datos categóricos y valores no disponibles.

```
1 >>> df2.describe()
2
3                mpg    cylinders  displacement  horsepower    weight \
4 count    398.000000    398.000000    398.000000    392.000000    398.000000
5 mean      23.514574      5.454774     193.425873     104.469391    2970.424561
```

6	std	7.815985	1.701004	104.269859	38.491138	846.841431
7	min	9.000000	3.000000	68.000000	46.000000	1613.000000
8	25%	17.500000	4.000000	104.250000	75.000000	2223.750000
9	50%	23.000000	4.000000	148.500000	93.500000	2803.500000
10	75%	29.000000	8.000000	262.000000	126.000000	3608.000000
11	max	46.599998	8.000000	455.000000	230.000000	5140.000000
12						
13		acceleration	model_year			
14	count	398.000000	398.000000			
15	mean	15.568086	76.010050			
16	std	2.757689	3.697627			
17	min	8.000000	70.000000			
18	25%	13.825000	73.000000			
19	50%	15.500000	76.000000			
20	75%	17.175001	79.000000			
21	max	24.799999	82.000000			

Ya que hablamos de los datos categóricos, vamos especificando el nombre de cada categoría. En el archivo solo se especifican los valores 1, 2 y 3. Al ver los modelos de los autos, inferimos que deben ser «USA», «Japan» y «Germany».

```
1 >>> df2["origin"].cat.categories = ["USA", "Japan", "Germany"]
2
3 >>> df2['origin']
4
5 0      USA
6 1      USA
7 2      USA
8 3      USA
9 4      USA
10 ..
11 390    Germany
12 391      USA
13 392      USA
14 393      USA
15 394    Japan
16 395      USA
17 396      USA
18 397      USA
19
20 Name: origin, Length: 398, dtype: category
21 Categories (3, object): [USA, Japan, Germany]
```


¡Muy bien!, ¿ahora que tal si hacemos una gráfica de pastel?. Para esto generamos la gráfica con el método **plot()**. Todo esto lo veremos a detalle en la sección de visualización de datos.

```
1 >>> df2['origin'].value_counts().plot(kind='bar')
2 <matplotlib.axes._subplots.AxesSubplot at 0x10d1d1cd0>
```

Una vez creada la gráfica la mostramos con el método **show()** de la biblioteca *matplotlib*.

```
1 >>> plt.show()
```

Deberíamos ver la siguiente gráfica:

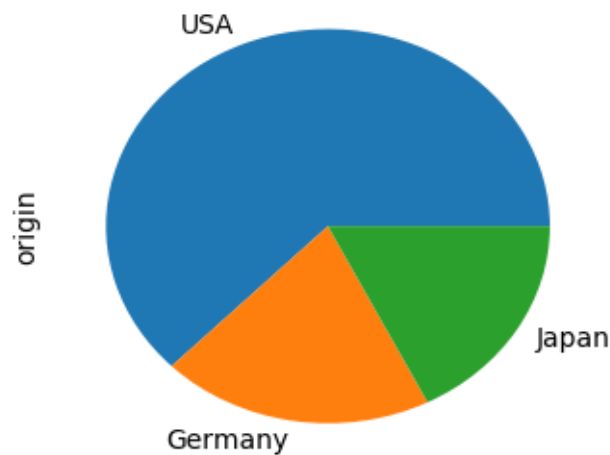


Figura 22: pie

Nota:

Debes de cerrar la ventana donde se muestra la gráfica para desbloquear el interprete y poder continuar. Puedes grabar la gráfica si gustas.

Vamos ahora a graficar tres variables para ver si vemos algo interesante:

```
1 >>> df2.plot.scatter(x='weight', y='mpg',c='horsepower',cmap='viridis')
;
2 >>> plt.show()
```

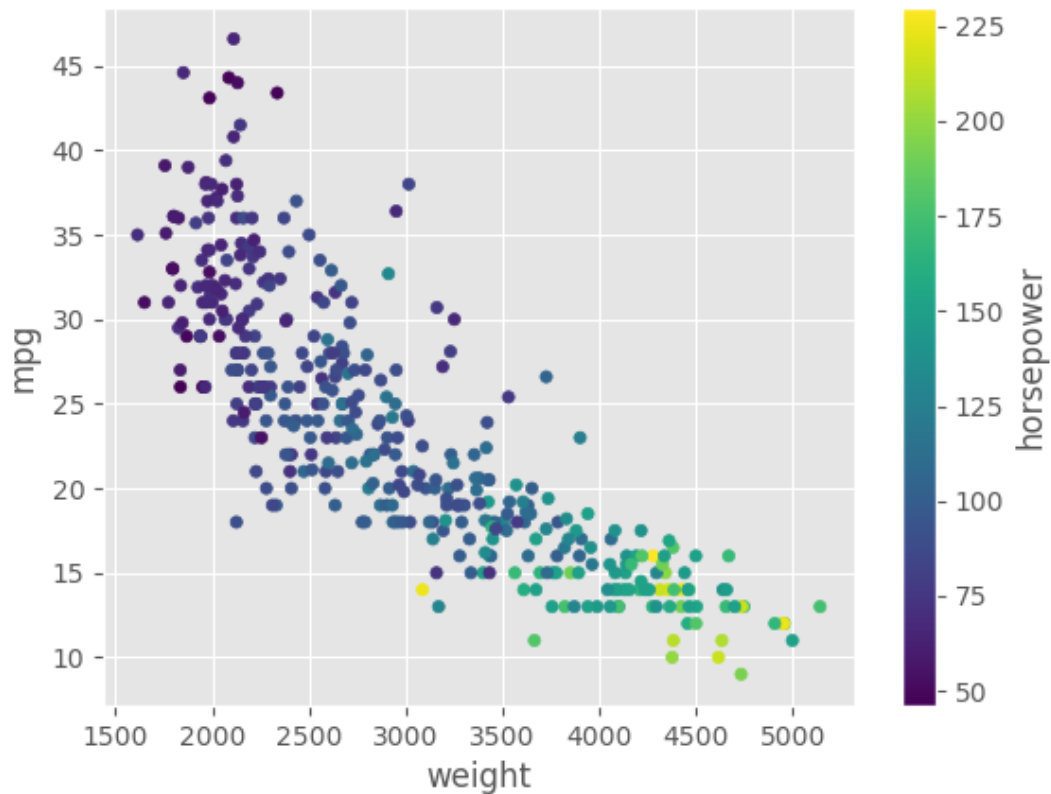


Figura 23: Plot con mapa de colores

Intenta cambiar el mapa de colores con otras opciones Color Maps.

Si quieres intentar algunas otras gráficas adelante: <http://pandas.pydata.org/pandas-docs/stable/visualization.html#>

Como hemos visto una vez que tenemos nuestros datos en la estructura *DataFrame* podemos hacer cosas interesantes muy fácilmente.

En esta sección vimos un ejemplo sencillo de como leer los datos de un archivo ya que es una tarea muy común. Ahora veremos como almacenar los datos utilizando objetos de python ya que esto nos brindará una flexibilidad adicional, por ejemplo para leer los datos desde una base de datos No-SQL o por http.

Creando un *DataFrame* con el constructor

El constructor de la clase *DataFrame* puede tomar los siguientes parámetros: **data**, **index**, **columns**, **dtype** y **copy**. Vemos cada uno de ellos:

data

En este parámetro enviamos los datos, como sucede muchas veces en Python, estos pueden ser de varios tipos:

lista de tuplas

La manera más sencilla de enviar datos a un *DataFrame* es utilizando una lista de tuplas:

```
1 >>> import matplotlib.pyplot as plt
2 >>> import pandas as pd
3 >>> import numpy as np
4 >>> datos = [('ana', 'ann@example.com', 'active'),
5              ('tom', 'tommy@example.com', 'active'),
6              ('joe', 'jj@example.com', 'active')]
7 >>> df2 = pd.DataFrame(datos)
8 >>> df2
9      0      1      2
10 0  ana  ann@example.com  active
11 1  tom  tommy@example.com  active
12 2  joe   jj@example.com  active
13 >>>
```

La lista de tuplas puede venir de una consulta de base de datos u otro proceso.

numpy.ndarray

Los datos pueden venir también como un arreglo *n-dimensional* de la biblioteca *numpy*. De hecho la estructura *DataFrame* utiliza internamente este tipo de objetos. Un *ndarray* es un contenedor multidimensional de objetos del mismo tipo y tamaño. Los arreglos multidimensionales también cuentan con un objeto de definición de tipo (data-type *dtype*).

Como ejemplo vamos a crear un arreglo *dimensión-2*, de tamaño 2x4 el cual contiene enteros de 32 bits:

```
1 >>> arreglo = np.array([[1, 2, 3, 4], [9, 9, 4, 8]], dtype=np.int32)
2 >>> type(arreglo)
3 <type 'numpy.ndarray'>
4 >>> arreglo.shape
5 (2, 4)
6 >>> arreglo.dtype
7 dtype('int32')
```

Podemos revisar el tamaño y tipo de los objetos *numpy.ndarray* con los atributos *shape* y *dtype* respectivamente. Si te fijas la tupla que regresa el atributo *shape* nos dice el número de renglones primero y después el número de columnas.

Ahora vamos a crear un *DataFrame* a partir de nuestro arreglo:

```
1 >>> df = pd.DataFrame(arreglo)
2 >>> print df
3      0  1  2  3
4 0    1  2  3  4
5 1    9  9  4  8
6 >>> print arreglo
7 [[1 2 3 4]
8  [9 9 4 8]]
```

Aunque tienen los mismos elementos, podemos ver que el objeto *df* incluye el nombre de los atributos y renglones. En este caso por defecto los nombres son de nuevo un índice. Más adelante veremos los parámetro *index* y *columns* para cambiar los nombres. Recordemos que en el caso de conjuntos de datos tipo matriz podría no tener mucho sentido el nombre de las columnas ya que no representan atributos de un objeto.

Diccionario

Podemos utilizar un diccionario de python para enviar los datos. Podemos utilizar dos variantes:

{atributo: secuencia}

En este caso las claves son los nombres de atributos y el valor de cada clave es un vector con los datos correspondientes:

```
1 >>> datos = {'nombre': ['ana', 'tom', 'joe'],
2             'email': ['ann@example.com', 'tommy@example.com', 'jj@example.com']}
3 >>> df2 = pd.DataFrame(datos)
4 >>> df2
5              email nombre
6 0  ann@example.com   ana
7 1  tommy@example.com  tom
8 2   jj@example.com   joe
```

Como vemos el nombre de los renglones es el índice. En caso de que pasemos a un solo objeto en lugar de un vector, el valor de este se va a repetir en cada renglón.

```
1 >>> datos = {'nombre':['ana','tom','joe'],
2             'email':['ann@example.com','tommy@example.com','jj@example.com'],
3             'current_state':'active'}
4 >>> df2 = pd.DataFrame(datos)
5 >>> df2
6      current_state      email nombre
7  0      active  ann@example.com   ana
8  1      active  tommy@example.com  tom
9  2      active   jj@example.com   joe
```

{atributo: diccionario}

Si queremos especificar el nombre de cada renglón lo podemos hacer pasando un diccionario por cada atributo, en el diccionario la clave es el nombre del renglón:

```
1 >>>> datos = {
2     'nombre': {
3         'row1':'ana',
4         'row2':'tom',
5         'row3':'joe'},
6     'email':{'row1':'ann@example.com',
7             'row2':'tommy@example.com',
8             'row3':'jj@example.com'}}
9 >>> df3 = pd.DataFrame(datos)
10 >>> print df3
11      email nombre
12 row1  ann@example.com   ana
13 row2  tommy@example.com  tom
14 row3   jj@example.com   joe
```

index

En este parámetro se especifica el índice o nombre de cada renglón.

columns

En este parámetro se especifica el nombre de cada atributo o columna.

Vamos a pasar ciertos valores para **index** y **columns**:

```
1 >>> datos = [('ana', 'ann@example.com', 'active'),
2              ('tom', 'tommy@example.com', 'active'),
3              ('joe', 'jj@example.com', 'active')]
4
5 >>> nombre_columna = ['nombre', 'email', 'current_status']
6 >>> nombre_renglon = ['r1', 'r2', 'r3']
7 >>> df2 = pd.DataFrame(datos, index=nombre_renglon, columns=
8                          nombre_columna)
9 >>> df2
10      nombre      email current_status
11 r1      ana  ann@example.com         active
12 r2      tom  tommy@example.com         active
13 r3      joe   jj@example.com         active
14 >>>
```

copy

Cuando enviamos datos utilizando el *numpy.ndarray*, realmente pasamos una referencia a *data*. Esto es más eficiente ya que no se crea una copia adicional. Si lo que queremos es que los datos se copien debemos enviar *True* al parámetro booleano *copy*.

DataFrame como matriz

¿Podemos utilizar un *DataFrame* para representar una matriz?. Intentemos representar los conjuntos de datos vistos en la sección Los Datos.

Relaciones entre objetos

	Tijuana	Ensenada	Mexicali
Tijuana	0	104.2	185.5
Ensenada	104.2	0	240.3
Mexicali	185.5	240.3	0

Para esta matriz va bien un diccionario:

```
1 >>> datos = {
```

```
2  'Tijuana': {'Tijuana':0, 'Ensenada':104.2, 'Mexicali':185.5},
3  'Ensenada': {'Tijuana':104.2, 'Ensenada':0, 'Mexicali':240.3},
4  'Mexicali': {'Tijuana':185.5, 'Ensenada':240.3, 'Mexicali':0}
5  }
6
7  >>> distancias = pd.DataFrame(datos)
8
9  >>> distancias
10
11           Ensenada  Mexicali  Tijuana
12 Ensenada         0.0      240.3    104.2
13 Mexicali      240.3         0.0    185.5
14 Tijuana       104.2      185.5         0.0
```

¿Por qué el orden de las ciudades es distinto?

¿Podremos ahorrar espacio o simplificar esta matriz? Si te fijas la matriz es simétrica, es la misma distancia de Tijuana a Ensenada que de Ensenada a Tijuana. También todas las distancias entre la misma ciudad son obviamente cero.

¿Que tal si eliminamos los casos de la misma ciudad?

```
1  >>> datos = { 'Tijuana': {'Ensenada':104.2, 'Mexicali':185.5},
2                'Ensenada': {'Tijuana':104.2, 'Mexicali':240.3},
3                'Mexicali': {'Tijuana':185.5, 'Ensenada':240.3}}
```

¿Que tal si eliminamos los casos repetidos?

```
1  >>> datos = { 'Tijuana': {'Ensenada':104.2, 'Mexicali':185.5},
2                'Ensenada': {'Mexicali':240.3}
3                }
```

Ya que veamos operaciones con matrices, matrices escasas y la biblioteca *NumPy* vamos a regresar a estos ejemplos.

¿Y que tal una matriz para filtrado colaborativo como *DataFrame*?

	The Matrix	Matando Cabos	Mad Max: Fury Road
Ana	0	1	5
Tom	4	4	0
Joe	5	5	5

	The Matrix	Matando Cabos	Mad Max: Fury Road
Tim	0	1	5

Haz esta matriz como ejercicio. Por lo pronto utiliza un diccionario y utiliza una matriz densa, es decir agrega todas las relaciones incluso cuando el valor es cero. Recuerda que el valor de cero en este caso significa que el usuario no ha evaluado la película.

Más adelante veremos como «girar» la matriz para tener en los renglones a las películas y en las columnas a los usuarios.

Nota:

Si te fijas, un diccionario nos puede servir perfectamente para almacenar una matriz. En algunos casos incluso será más eficiente y tenemos la ventaja de pasar el diccionario a un *DataFrame* directamente.

Operaciones básicas del *DataFrame*

Ya tenemos los datos en nuestro *DataFrame*, ¿y ahora?. En esta sección veremos como realizar operaciones básicas de consulta y manipulación de conjuntos de datos.

Vamos a trabajar con los datos de auto-mpg:

```
1 >>> import numpy as np
2 >>> import pandas as pd
3 >>> auto_mpg = pd.read_csv('datos-ejemplo/auto-mpg.data', sep='\s+',
4     header=None, na_values='?', names=['mpg','cylinders','
5     displacement','horsepower',
6     'weight','acceleration','model_year','origin','car_name'],
7     dtype={'mpg':'f4', 'cylinders':'i4',
8     'displacement':'f4','horsepower':'f4','weight':'f4',
9     'acceleration':'f4','model_year':'i4','origin':'category',
10    'car_name':'category'})
11 >>> auto_mpg["origin"].cat.categories = ["USA", "Japan", "Germany"]
```

Podemos ver una pequeña muestra de los **primeros** y **últimos** renglones del conjunto de datos, utilizando los métodos *head()* y *tail()*. En ambos casos el número de registros a mostrar por defecto son 5. Aunque podemos enviar como parámetro el número que deseamos ver. Veamos los tres últimos registros:


```
1 >>> auto_mpg.tail(3)
2           mpg  cylinders  displacement  horsepower  weight  acceleration  \
3 395    32.0           4           135.0           84.0  2295.0           11.6
4 396    28.0           4           120.0           79.0  2625.0           18.6
5 397    31.0           4           119.0           82.0  2720.0           19.4
6
7           model_year origin      car_name
8 395              82    USA  dodge rampage
9 396              82    USA   ford ranger
10 397              82    USA   chevy s-10
```

Mostrar información sobre los *índices* o nombres de renglón y las columnas:

```
1 >>> auto_mpg.index
2 RangeIndex(start=0, stop=398, step=1)
3 >>> auto_mpg.columns
4 Index([u'mpg', u'cylinders', u'displacement', u'horsepower', u'weight',
5        u'acceleration', u'model_year', u'origin', u'car_name'],
6        dtype='object')
```

Ver los datos almacenado internamente como *numpy.array*:

```
1 >>> auto_mpg.values
2 array([[18.0, 8, 307.0, ..., 70, 'USA', 'chevrolet chevelle malibu'],
3        [15.0, 8, 350.0, ..., 70, 'USA', 'buick skylark 320'],
4        [18.0, 8, 318.0, ..., 70, 'USA', 'plymouth satellite'],
5        ...,
6        [32.0, 4, 135.0, ..., 82, 'USA', 'dodge rampage'],
7        [28.0, 4, 120.0, ..., 82, 'USA', 'ford ranger'],
8        [31.0, 4, 119.0, ..., 82, 'USA', 'chevy s-10']], dtype=object)
9 >>>
```

Para ordenar por algún atributo se utiliza *sort_values()*, veamos los primeros registros ordenados por *car_name*:

```
1 >>> auto_mpg.sort_values(by='car_name').head()
2           mpg  cylinders  displacement  horsepower  weight
3 96    13.000000           8           360.0           175.0  3821.0
4      11.000000
4 9      15.000000           8           390.0           190.0  3850.0
5      8.500000
```

5	66	17.000000	8	304.0	150.0	3672.0
		11.500000				
6	315	24.299999	4	151.0	90.0	3003.0
		20.100000				
7	257	19.400000	6	232.0	90.0	3210.0
		17.200001				
8						
9		model_year	origin			car_name
10	96	73	USA	amc	ambassador	brougham
11	9	70	USA		amc ambassador	dpl
12	66	72	USA		amc ambassador	sst
13	315	80	USA			amc concord
14	257	78	USA			amc concord

Se pueden pasar varios atributos al ordenar:

```
1 >>> auto_mpg.sort_values(by=['origin','car_name']).tail()
2      mpg  cylinders  displacement  horsepower  weight
      acceleration \
3  123    20.000000          6       156.0       122.0  2807.0
      13.500000
4  210    19.000000          6       156.0       108.0  2930.0
      15.500000
5  343    39.099998          4        79.0        58.0  1755.0
      16.900000
6  348    37.700001          4        89.0        62.0  2050.0
      17.299999
7   82    23.000000          4       120.0        97.0  2506.0
      14.500000
8
9      model_year  origin          car_name
10  123          73  Germany  toyota mark ii
11  210          76  Germany  toyota mark ii
12  343          81  Germany  toyota starlet
13  348          81  Germany  toyota tercel
14   82          72  Germany  toyouta corona mark ii (sw)
```

Seleccionando

Podemos utilizar tajadas (*slicing*) sobre los renglones:

```
1 >>> auto_mpg[2:5]
```

		mpg	cylinders	displacement	horsepower	weight	acceleration	\
3	2	18.0	8	318.0	150.0	3436.0	11.0	
4	3	16.0	8	304.0	150.0	3433.0	12.0	
5	4	17.0	8	302.0	140.0	3449.0	10.5	

También podemos utilizar el nombre de la columna como un atributo del objeto *DataFrame*.

```
1 >>> auto_mpg.car_name[:3]
2 0    chevrolet chevelle malibu
3 1          buick skylark 320
4 2    plymouth satellite
5 Name: car_name, dtype: category
```

Podemos pasar también una lista de atributos:

```
1 >>> auto_mpg[['car_name', 'origin', 'model_year' ] ].head()
2                car_name origin  model_year
3 0  chevrolet chevelle malibu    USA        70
4 1          buick skylark 320    USA        70
5 2    plymouth satellite    USA        70
6 3          amc rebel sst    USA        70
7 4          ford torino    USA        70
```

Se recomienda utilizar el atributo *loc* para hacer slicing indexado por las etiquetas. Veamos un ejemplo:

```
1 >>> auto_mpg.loc[3:5, 'mpg': 'weight']
2      mpg  cylinders  displacement  horsepower  weight
3 3  16.0           8          304.0         150.0  3433.0
4 4  17.0           8          302.0         140.0  3449.0
5 5  15.0           8          429.0         198.0  4341.0
```

Es importante ver que la tajada difiere de los cortes de Python pues el resultado abarca ambas etiquetas.

También se puede pasar una lista de las etiquetas que requerimos:

```
1 >>> auto_mpg.loc[[3,2,5], 'mpg': 'weight']
2      mpg  cylinders  displacement  horsepower  weight
3 3  16.0           8          304.0         150.0  3433.0
4 2  18.0           8          318.0         150.0  3436.0
5 5  15.0           8          429.0         198.0  4341.0
```

Si enviamos una lista binaria, se hace un *match* con solo las posiciones que tienen valor verdadero:

```
1 >>> auto_mpg.loc[[0,12,167,234], [True,True,False,False,False,True,
    False,True,True]].head()
2      mpg  cylinders  acceleration  origin  car_name
3  0    18.0         8          12.0    USA  chevrolet chevelle malibu
4  12   15.0         8           9.5    USA    chevrolet monte carlo
5  167  29.0         4          16.0  Germany    toyota corolla
6  234  24.5         4          16.0    USA    pontiac sunbird coupe
```

Para cortes basados en la posición se utiliza *iloc*:

```
1 >>> auto_mpg.iloc[0:2,0:2]
2      mpg  cylinders
3  0    18.0         8
4  1    15.0         8
```

En este caso los cortes funcionan igual que en Python.

Un aspecto poderoso de estas estructuras es que podemos realizar operaciones tipo *map()* de una manera muy sencilla. Por ejemplo, para calcular el doble de la columna *mpg* y regresar una nueva lista se haría lo siguiente:

```
1 >>> auto_mpg.mpg.head() * 2
2  0    36.0
3  1    30.0
4  2    36.0
5  3    32.0
6  4    34.0
```

Esta operación no se podría hacer en datos categóricos:

```
1 >>> auto_mpg.origin.head() * 2
2 Traceback (most recent call last):
3   File "<stdin>", line 1, in <module>
4   File "/Users/mariosky/anaconda/lib/python2.7/site-packages/pandas/
    core/ops.py", line 721, in wrapper
5     result = wrap_results(safe_na_op(lvalues, rvalues))
6   File "/Users/mariosky/anaconda/lib/python2.7/site-packages/pandas/
    core/ops.py", line 682, in safe_na_op
7     return na_op(lvalues, rvalues)
8   File "/Users/mariosky/anaconda/lib/python2.7/site-packages/pandas/
    core/ops.py", line 672, in na_op
9     op=str_rep))
10  TypeError: Categorical cannot perform the operation *
```

En los datos categóricos podemos utilizar métodos de cadenas mediante el atributo `str`:

```
1 >>> auto_mpg.car_name.str.upper().iloc[:5]
2 0    CHEVROLET CHEVELLE MALIBU
3 1          BUICK SKYLARK 320
4 2    PLYMOUTH SATELLITE
5 3          AMC REBEL SST
6 4          FORD TORINO
7 Name: car_name, dtype: object
```

Vamos a utilizar varios conceptos vistos hasta este momento para resolver un problema. Vamos a comprar un auto, pero queremos que tenga un rendimiento superior a 40 mpg.

Como primer paso vamos a generar una lista binaria con aquellos autos que cumplen con la condición:

```
1 >>> auto_mpg.mpg > 40
2 0    False
3 1    False
4      ...
5 393   False
6 394    True
7 395   False
8 396   False
9 397   False
10 Name: mpg, Length: 398, dtype: bool
```

Ahora vamos a realizar un corte a partir de la lista binaria como lo habíamos hecho antes y vamos a mostrar solo cuatro atributos:

```
1 >>> auto_mpg[auto_mpg.mpg > 40 ].loc[ :, ['mpg','model_year','origin','car_name']]
2      mpg  model_year  origin  car_name
3 244  43.099998      78   Japan  volkswagen rabbit custom diesel
4 309  41.500000      80   Japan          vw rabbit
5 322  46.599998      80  Germany          mazda glc
6 324  40.799999      80  Germany          datsun 210
7 325  44.299999      80   Japan  vw rabbit c (diesel)
8 326  43.400002      80   Japan          vw dasher (diesel)
9 329  44.599998      80  Germany  honda civic 1500 gl
10 330  40.900002      80   Japan  renault lecar deluxe
11 394  44.000000      82   Japan          vw pickup
```

Podemos ver que solo autos de Japón y Alemania cumplen con la condición.

Si queremos filtrar por datos categóricos podemos utilizar comprensión de listas. Por ejemplo, para ver solo aquellos autos de Japón:

```
1 >>> auto_mpg[[ auto in ['Japan'] for auto in auto_mpg.origin]].loc
    [19:55,['mpg','model_year','origin','car_name']]
2      mpg  model_year  origin  car_name
3  19   26.0         70  Japan  volkswagen 1131 deluxe sedan
4  20   25.0         70  Japan          peugeot 504
5  21   24.0         70  Japan          audi 100 ls
6  22   25.0         70  Japan          saab 99e
7  23   26.0         70  Japan          bmw 2002
8  50   28.0         71  Japan          opel 1900
9  51   30.0         71  Japan          peugeot 304
10 52   30.0         71  Japan          fiat 124b
11 55   27.0         71  Japan    volkswagen model 111
```

Un detalle de este ejemplo es que al utilizar el corte por etiqueta *loc* los valores que se ponen en la especificación del rango *19:55* corresponden a la etiqueta no a la posición. Si hubiéramos puesto *0:5* para obtener los primeros 5 valores realmente nos regresaría un *DataFrame* vacío. Para utilizar ese estilo debemos de utilizar el atributo *iloc*.

Concatenar

Primeramente vamos a extraer a los autos de Japón y Alemania:

```
1 >>> japon = auto_mpg[[ auto in ['Japan'] for auto in auto_mpg.origin
2 >>> alemania = auto_mpg[[ auto in ['Germany'] for auto in auto_mpg.
    origin]]
```

Ahora vamos a crear un nuevo *DataFrame* con ambos conjuntos de datos:

```
1 >>> non_usa = pd.concat([japon, alemania])
2 >>> non_usa.loc[:, ['mpg','model_year','origin','car_name']]
3
4      mpg  model_year  origin  car_name
5  19   26.000000      70  Japan  volkswagen 1131 deluxe sedan
6  20   25.000000      70  Japan          peugeot 504
7  21   24.000000      70  Japan          audi 100 ls
8  22   25.000000      70  Japan          saab 99e
9  23   26.000000      70  Japan          bmw 2002
10 50   28.000000      71  Japan          opel 1900
```

```
11  51    30.000000          71    Japan          peugeot 304
12  52    30.000000          71    Japan          fiat 124b
13
14  ...
15
16  380    36.000000          82    Germany        nissan stanza xe
17  381    36.000000          82    Germany        honda accord
18  382    34.000000          82    Germany        toyota corolla
19  383    38.000000          82    Germany        honda civic
20  384    32.000000          82    Germany        honda civic (auto)
21  385    38.000000          82    Germany        datsun 310 gx
22  390    32.000000          82    Germany        toyota celica gt
23
24  [149 rows x 4 columns]
```

Join estilo SQL

Aunque es preferible hacer estas operaciones en el sistema de base de datos, es posible hacer *Joins* entre estructuras *DataFrame*. Como ejemplo vamos a crear dos *DataFrames* para empleados y sus puestos.

```
1  >>> empleado = {'nombre':['ana','tom','joe'],
2                  'email':['ann@example.com','tommy@example.com',
3                          'jj@example.com'],
4                  'puesto':[1,1,2] }
5
6  >>> emplado_df = pd.DataFrame(empleado)
7  >>> emplado_df
8  >>> emplado_df
9      departamento          email nombre
10  0              1  ann@example.com   ana
11  1              1  tommy@example.com   tom
12  2              2    jj@example.com   joe
13
14  >>> puesto = {'pid':[1,2,3],
15              'puesto':['DBA','ML','DQ'] }
16  >>> puesto_df = pd.DataFrame(puesto)
17  >>> puesto_df
18      pid puesto
19  0      1    DBA
20  1      2     ML
```

```
21 2      3      DQ
```

Ahora vamos a hacer un *Join* para desplegar los datos del empleado y su departamento:

```
1 >>> pd.merge(empleado_df, puesto_df, left_on='puesto', right_on='pid')
2
3          email nombre  puesto_x  pid puesto_y
4 0  ann@example.com   ana         1     1      DBA
5 1  tommy@example.com  tom         1     1      DBA
6 2   jj@example.com   joe         2     2      ML
```

Para otros tipos de Join la documentación de pandas es una buena referencia.

Agrupando

```
1 >>> auto_mpg.groupby('origin').count().loc[:, 'mpg']
2 origin
3 USA          249
4 Japan         70
5 Germany       79
```

Resumen

Pandas es una biblioteca para el análisis de datos en Python, que tiene como principales estructuras a *Series* y *DataFrame*. La estructura *Series* nos permite procesar datos en dimensión-1 para series de tiempo y vectores. Para los conjuntos de datos en forma tabular y de matriz de n-dimensiones se utiliza el *DataFrame*. Debes de saber como crear objetos tipo *DataFrame* ya sea leyendo de un archivo de texto o desde código en Python. También debes conocer como crear matrices para distintas aplicaciones.

Ejercicios

iris.data

1. Lee desde archivo el conjunto de datos iris.data utiliza el método **read_csv()**.
2. Nombra a los atributos como se especifica en la información del conjunto de datos:

```
1  Attribute Information:
2  1. sepal length in cm
```



```
3     2. sepal width in cm
4     3. petal length in cm
5     4. petal width in cm
6     5. class:
7         -- Iris Setosa
8         -- Iris Versicolour
9         -- Iris Virginica
```

3. Haz una gráfica con los datos como se hizo en el ejercicio de introducción utilizando el método **plot()**.
4. Imprime cual es el ancho y largo promedio del sépalo y pétalo.

Lectura adicional

Python for Data Analysis: Data Wrangling with Pandas, NumPy, and IPython por William McKinney.

Bibliografía

Documentación de la biblioteca Pandas

Python para Análisis de Datos: NumPy

Computo numérico en Python

El lenguaje Fortran con sus más de 50 años sigue siendo muy importante en las áreas de computo científico y de alto rendimiento. Fortran se considera la *referencia* cuando se habla de bibliotecas para cómputo numérico, bibliotecas como LAPACK (Linear Algebra Package) o BLAS que sirven para realizar (entre otras cosas) operaciones con vectores y matrices, tienen más de 25 años de desarrollo. Fuera del computo científico el lenguaje no es tan popular lo que ha provocado que se desarrollen herramientas e incluso lenguajes de programación para realizar operaciones numéricas utilizando sus bibliotecas. Ejemplos de herramientas de código cerrado y propietario incluyen a MATLAB, Maple y Mathematica. El problema que tienen estas plataformas es que crean una dependencia del proveedor y además representan un alto costo a los usuarios. El problema mayor que tienen estas herramientas es que van en contra del movimiento de ciencia abierta. Existen opciones de código libre que incluso son compatibles con los productos anteriores, como GNU Octave y SageMath. En el caso de lenguajes de programación libres, dos exponentes importantes son Julia para el cómputo numérico y R para

el computo estadístico. En el caso de Python contamos con la biblioteca NumPy como componente básico para el computo científico numérico. Numpy entre otras cosas nos brinda:

- Una estructura para arreglos de N-dimensiones.
- Herramientas para integrar de manera transparente código de Fortran y C//C++
- Soporte para álgebra lineal, transformadas de Fourier y números aleatorios.
- Integración con sistemas de bases de datos.
- Operaciones entre arreglos de distintas dimensiones (Broadcasting).

El código de NumPy tiene una licencia de código abierto BSD.

NumPy se utiliza en conjunto con otras bibliotecas y herramientas como matplotlib, SciPy, pandas, Jupyter, IPython, scikit-learn, theano, orange para complementar una plataforma para el análisis de datos bastante decente. Una desventaja de tener tantos proyectos por separado es que podemos sufrir al momento de integrarlo, para evitarnos la pena se han desarrollado distribuciones que integran todo esto y más, por ejemplo sage, Canopy y Anaconda Distribution.

Esta sección tipo taller, tiene como objetivo que conozcas y apliques los arreglos multidimensionales que ofrece la biblioteca NumPy. Estos conocimientos los utilizaremos en las secciones posteriores y de seguro lo agregarás a tu caja de herramientas.

NumPy: array

Mientras que en Python tenemos colecciones de objetos tipo secuencia como las listas, éstas no tienen una estructura adecuada que nos permita realizar operaciones generales sobre ellas. Como ejemplo tenemos la siguiente lista de listas:

```
1 >>> lista_objetos = [[1,2,3],
2                       [2,2],
3                       ['Hola', 11],
4                       [2]]
```

Esta lista tiene dos problemas: las listas son de distintos tamaños y tienen objetos de distintos tipos. Por ejemplo, no podemos sumar todos los números en la primera posición o en la tercera. En el primer caso no podemos sumar la cadena «Hola» y en el segundo hay dos listas que no tienen un elemento en la tercera posición.

La estructura básica de NumPy es un arreglo homogéneo multidimensional. Dicho de otra manera, un arreglo es una lista que debe seguir ciertas reglas. Primero, es un arreglo homogéneo, es decir todos los elementos son del mismo tipo, casi siempre numérico. Segundo, todas las listas contenidas tienen el mismo tamaño. Vamos a crear una lista que siga estas reglas:

```
1 >>> lista_nums = [[1, 2, 3],
2                   [2, 2, 4],
3                   [2, 3, 11],
4                   [2, 1, 4]]
```

Esta lista es homogénea, ya que tiene puros enteros. Digamos que es rectangular ya que todas las listas interiores tienen el mismo número de elementos. Aunque no podemos decir todavía que es un arreglo homogéneo de dos dimensiones, vamos a crear un arreglo de NumPy a partir de nuestra lista:

```
1 >>> import numpy as np
2 >>> arreglo = np.array(lista_nums)
3 >>> arreglo
4 array([[ 1,  2,  3],
5        [ 2,  2,  4],
6        [ 2,  3, 11],
7        [ 2,  1,  4]])
```

Ahora sí. Una dimensión de este arreglo son los renglones y otra dimensión son las columnas. ¿Y su tipo de dato?:

```
1 >>> arreglo.dtype
2 dtype('int64')
```

¿Que pasaría si queremos hacer un arreglo con la anterior lista de objetos?. Vamos a intentarlo:

```
1 >>> arreglo_objs = np.array(lista_objetos)
2 >>> arreglo_objs
3 array([[1, 2, 3], [2, 2], ['Hola', 11], [2]], dtype=object)
```

Como vemos no se crea un arreglo de dos dimensiones, se crea un arreglo de una sola dimensión con objetos de un mismo tipo: **object**. Esto por supuesto no es muy útil. Nos damos cuenta que *arreglo_objs* es un arreglo de dimensión uno, homogéneo pero no de una manera muy útil ya que no podemos hacer muchas operaciones matemáticas con objetos tipo **object**.

Mejor vamos a crear un arreglo *Dimensión-1* que contenga solamente enteros:

```
1 >>> arreglo_enteros = np.array([1, 2, 45])
2 >>> arreglo_enteros
3 array([ 1,  2, 45])
```

Vamos a comparar el atributo dimensión de los arreglos:

```
1 >>> arreglo.ndim
2 2
3 >>> arreglo_enteros.ndim
4 1
```

El número de dimensiones se le conoce en NumPy como el **rank** (rango) del arreglo. Un atributo importante es la *forma* (**shape**) del arreglo:

```
1 >>> arreglo.shape
2 (4, 3)
```

El primer valor de la tupla nos dice el número de renglones y el segundo el número de columnas. Para acordarnos de este orden podemos imaginar que los arreglos o matrices son como los cines. Para encontrar nuestro asiento primero debemos ubicar la fila (renglón) y después el número de asiento. Veamos el caso del arreglo de una dimensión:

```
1 >>> arreglo_enteros.shape
2 (3,)
```

En este caso podemos ver que se trata de un cine con un solo asiento por fila. El tamaño es el número de elementos, que como vemos es el equivalente del producto de los elementos de la tupla *shape*.

```
1 >>> arreglo.size # 4*3
2 12
```

También podemos especificar el tipo de dato al crear el arreglo. Por ejemplo:

```
1 >>> arreglo_complejos = np.array( [ [3 , 2], [3, 4] ], dtype=complex )
2 >>> arreglo_complejos
3 array([[ 3.+0.j,  2.+0.j],
4        [ 3.+0.j,  4.+0.j]])
```

En ocasiones queremos crear arreglos con datos iniciales, por ejemplo ceros, unos o valores arbitrarios:

```
1 >>> np.zeros( (3,4) )
2 array([[ 0.,  0.,  0.,  0.],
3        [ 0.,  0.,  0.,  0.],
4        [ 0.,  0.,  0.,  0.]])
5 >>> np.ones( (2,3,4))
6 array([[[ 1.,  1.,  1.,  1.],
7        [ 1.,  1.,  1.,  1.]])
```

```
8      [ 1.,  1.,  1.,  1.]],
9
10     [[ 1.,  1.,  1.,  1.],
11      [ 1.,  1.,  1.,  1.],
12      [ 1.,  1.,  1.,  1.]])
13 >>> np.empty( (6,))
14 array([ -2.68156159e+154, -2.68156159e+154,  2.23182566e-314,
15        -2.68156159e+154,  6.94181405e-310,  6.15378780e-313])
```

Selección y cortes en arreglos multidimensionales

Vamos a considerar la siguiente lista de calificaciones donde cada alumno tiene tres calificaciones que van de 0 a 100:

id	nombre	tarea	examen	proyecto
1	Juan Pérez	86.2	90.0	95.0
2	Ana Rivas	100.0	95.0	95.0
3	María Sánchez	76.5	100.0	85.0
4	Luis Duarte	89.0	90.0	95.0

Vamos a capturar las calificaciones en un arreglo de NumPy:

```
1 >>> lista_nums = [[86.2, 90.0, 95.0],[100.0, 95.0, 95.0],
2                  [76.5, 100.0, 85.0], [89.0, 90.0, 95.0]]
3 >>> cal = np.array(lista_nums)
4 >>> cal
5 array([[ 86.2,   90. ,   95. ],
6        [ 100. ,   95. ,   95. ],
7        [  76.5,  100. ,   85. ],
8        [  89. ,   90. ,   95. ]])
```

Los arreglos al igual que otros objetos tipo secuencia tienen índices que inician en cero. El arreglo *cal* tiene dos índices ya que tiene dos dimensiones o ejes (*axes*) en terminología NumPy. Para leer una posición enviamos una tupla con los índices, dos en este caso (*renglón, columna*):

```
1 >>> cal[1,0]
2     100.0
3 >>> cal[(1,0)] # Podemos enviar un tupla
```

```
4      100.0
```

Veamos otros ejemplos:

```
1 >>> cal[:,0] # Todas las calificaciones de la tarea
2 array([ 86.2, 100. ,  76.5,  89. ])
3
4 >>> cal[:,0:2] # Tareas y exámenes
5 array([[ 86.2,  90. ],
6        [ 100. ,  95. ],
7        [  76.5, 100. ],
8        [  89. ,  90. ]])
9
10 >>> cal[1:3,:] # Calificaciones de Ana y María
11 array([[ 100. ,  95. ,  95. ],
12        [  76.5, 100. ,  85. ]])
```

Cuando enviamos una tupla con menos índices de los que tiene el arreglo, se considera queremos regresar todos los elementos de los ejes restantes:

```
1 >>> cal[0] # Equivalente a cal[0,:]
2 array([ 86.2,  90. ,  95. ])
```

Otra manera de indicar lo mismo es utilizando tres puntos (...).

```
1 >>> cal[0, ...]
2 array([ 86.2,  90. ,  95. ])
3
4 >>> cal[...]
5 array([[ 86.2,  90. ,  95. ],
6        [ 100. ,  95. ,  95. ],
7        [  76.5, 100. ,  85. ],
8        [  89. ,  90. ,  95. ]])
9
10 >>> cal[...,2] # Tercera columna
11 array([ 95.,  95.,  85.,  95.]
```

Operaciones básicas

Cuando utilizamos operaciones aritméticas sobre arreglos, la operación se realiza para cada elemento y se regresa un nuevo arreglo con el resultado. Vamos a suponer que debido al buen desempeño de todos los alumnos se subirá un punto a todas las calificaciones:

```
1 >>> cal + 1
2 array([[ 87.2,  91. ,  96. ],
3        [ 101. ,  96. ,  96. ],
4        [  77.5, 101. ,  86. ],
5        [  90. ,  91. ,  96. ]])
```

También lo podríamos hacer solo para el primer alumno:

```
1 >>> cal[0] + 1
2 array([ 87.2,  91. ,  96. ])
```

En este caso no se ha modificado todavía el arreglo *cal*, solo estamos regresando una vista.

Las operaciones también se pueden hacer entre arreglos. Por ejemplo, vamos a suponer que tenemos un arreglo con los puntos extra que han obtenido los alumnos:

```
1 >>> puntos = [[0, 1, 0],[1, 0, 0], [0, 0, 0], [1, 2, 4]]
2 >>> extras = np.array(puntos)
3 >>> extras
4 array([[0, 1, 0],
5        [1, 0, 0],
6        [0, 0, 0],
7        [1, 2, 4]])
8
9 >>> cal
10 array([[ 86.2,  90. ,  95. ],
11         [ 100. ,  95. ,  95. ],
12         [  76.5, 100. ,  85. ],
13         [  89. ,  90. ,  95. ]])
14
15 >>> cal + extras
16 array([[ 86.2,  91. ,  95. ],
17         [ 101. ,  95. ,  95. ],
18         [  76.5, 100. ,  85. ],
19         [  90. ,  92. ,  99. ]])
```

En este caso tenemos una calificación errónea ya que no se puede tener 101 de calificación.

Vamos ahora a suponer que deseamos ponderar cada una de las calificaciones, por ejemplo:

tarea	examen	proyecto
.30	.30	.40

NumPy permite realizar operaciones entre arreglos con distinta forma (shape) mediante un mecanismo que llaman *Broadcast*. En este caso se hace una búsqueda de una operación que tenga sentido. Por ejemplo:

```
1 >>> pesos = np.array([.30, .30, .40])
2 >>> cal * pesos
3 array([[ 25.86,  27.  ,  38.  ],
4        [ 30.  ,  28.5 ,  38.  ],
5        [ 22.95,  30.  ,  34.  ],
6        [ 26.7 ,  27.  ,  38.  ]])
```

Implícitamente se completa la matriz de pesos para que tenga la misma forma que **cal** y después se hace la multiplicación como siempre, posición por posición.

Para saber la calificación final de cada alumno debemos sumar sus calificaciones ponderadas. Esto lo hacemos aplicando la función suma a los elementos del eje correspondiente (*axis=1*). Veamos:

```
1 >>> cal_ponderada = cal * pesos
2 >>> cal_ponderada.sum(axis=1)
3 array([ 90.86,  96.5 ,  86.95,  91.7 ])
```

El parámetro *axis=1* indica que se suman los renglones, si hubiéramos pasado *axis=0* se sumarían las columnas.

Para finalizar esta sección vamos a resolver un problema. ¿Como podríamos crear la una matriz de pesos que tenga la misma forma que *cal*?. Digamos algo así:

```
1 >>> pesos
2 array([[ 0.3,  0.3,  0.4],
3        [ 0.3,  0.3,  0.4],
4        [ 0.3,  0.3,  0.4],
5        [ 0.3,  0.3,  0.4]])
```

Para resolver el problema debemos aprovechar las propiedades de los arreglos. Primero vamos a generar un arreglo con la forma de *cal* pero que contenga solo unos:

```
1 >>> unos = np.ones((4,3))
2 >>> unos
```



```
3 array([[ 1.,  1.,  1.],
4        [ 1.,  1.,  1.],
5        [ 1.,  1.,  1.],
6        [ 1.,  1.,  1.]])
```

Después simplemente multiplicamos este arreglo por el arreglo *pesos*:

```
1 >>> pesos = np.array([.30, .30, .40])
2 >>> unos * pesos
3 array([[ 0.3,  0.3,  0.4],
4        [ 0.3,  0.3,  0.4],
5        [ 0.3,  0.3,  0.4],
6        [ 0.3,  0.3,  0.4]])
```

Para lograr el mismo objetivo, ¿Podríamos utilizar un arreglo con ceros *np.zeros((4,3))*?

Es importante recordar que estas operaciones no pueden realizarse en las listas convencionales de Python, por ejemplo:

```
1 >>> lista = [2,3,4]
2 >>> lista * 5
3 [2, 3, 4, 2, 3, 4, 2, 3, 4, 2, 3, 4, 2, 3, 4]
4
5 >>> np.array([2,3,4]) * 5
6 array([10, 15, 20])
```

Selección con arreglos de booleanos

Podemos enviar un arreglo de booleanos para seleccionar elementos de un arreglo. Por ejemplo, a las calificaciones iguales a 95 le vamos a sumar 5 punto:

Primero vamos a crear nuestro filtro:

```
1 >>> cal == 95
2 array([[False, False,  True],
3        [False,  True,  True],
4        [False, False, False],
5        [False, False,  True]], dtype=bool)
6 >>> filtro = cal == 95
```

Si te fijas cada posición que cumple con la condición de *cal == 95* tiene *True*. Ahora vamos a modificar a aquellos elementos que cumplan con la condición:

```
1 >>> cal[filtro]
2 array([ 95.,  95.,  95.,  95.]) # Solo los valores que tienen True
3 >>> cal[filtro]+= 5 # Le sumamos 5 al valor actual
4 >>> cal
5 array([[ 86.2,   90. ,  100. ],
6        [ 100. ,  100. ,  100. ],
7        [  76.5,  100. ,   85. ],
8        [  89. ,   90. ,  100. ]])
9 >>>
```

Podemos utilizar esta técnica también para filtrar columnas por ejemplo:

```
1 >>> cal[:, np.array([False, True, True])]
2 array([[ 90.,  100.],
3        [ 100.,  100.],
4        [ 100.,   85.],
5        [  90.,  100.]])
```

Como utilizamos un operador de asignación efectivamente estamos modificando al arreglo *cal*.

Iteración

En ocasiones necesitamos recorrer el arreglo haciendo alguna operación sobre los datos. ¡Cuidado! debemos tratar de utilizar lo menos posible el ciclo *for* para realizar operaciones con el arreglo. Por un lado debemos acostumbrarnos a un estilo de programación más funcional o estilo python (*pythonic*). Piensa siempre primero en como hacerlo utilizando comprensión de listas u operaciones a nivel de arreglo como vimos anteriormente.

Como última opción, cuando utilizamos ciclos en arreglos estos se hacen a partir del primer eje:

```
1 >>> for row in cal:
2 ...     print(row)
3 ...
4 [ 86.2   90.  100. ]
5 [ 100.  100.  100.]
6 [  76.5  100.   85. ]
7 [  89.   90.  100.]
```

Podemos leer todos los elementos del arreglo secuencialmente con el atributo *flat* (plano):

```
1 >>> for item in cal.flat:
2 ...     print (item)
```

```
3 ...
4 86.2
5 90.0
6 100.0
7 100.0
8 100.0
9 100.0
10 76.5
11 100.0
12 85.0
13 89.0
14 90.0
15 100.0
```

Generación de arreglos con números secuenciales

En Python utilizamos la función *range()* para generar listas de números con secuencias de enteros. De manera similar en NumPy utilizamos *arange()* para generar arreglos de NumPy con valores secuenciales.

```
1 >>> np.arange(10)
2 array([0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9])
3
4 >>> np.arange(0, 10, .33)
5 array([ 0.   ,  0.33,  0.66,  0.99,  1.32,  1.65,  1.98,  2.31,  2.64,
6         2.97,  3.3  ,  3.63,  3.96,  4.29,  4.62,  4.95,  5.28,  5.61,
7         5.94,  6.27,  6.6  ,  6.93,  7.26,  7.59,  7.92,  8.25,  8.58,
8         8.91,  9.24,  9.57,  9.9  ])
```

En el segundo caso utilizamos un flotante para decirle a la función que nos genere números del 0 al 10, avanzando con pasos de 0.33. Un problema que podemos tener en este caso es que no sabemos cuantos elementos se van a generar y que tanto se acercará al valor final (en este caso 10). Para evitar esto, tenemos la función *linspace()* a la cual le decimos, dame 31 valores entre 0 y 10 inclusive:

```
1 >>> np.linspace(0, 10, 31)
2 array([ 0.   ,  0.33333333,  0.66666667,  1.   ,
3         1.33333333,  1.66666667,  2.   ,  2.33333333,
4         2.66666667,  3.   ,  3.33333333,  3.66666667,
5         4.   ,  4.33333333,  4.66666667,  5.   ,
6         5.33333333,  5.66666667,  6.   ,  6.33333333,
7         6.66666667,  7.   ,  7.33333333,  7.66666667,
```

```
8      8.      ,      8.33333333,      8.66666667,      9.      ,  
9      9.33333333,      9.66666667,      10.      ])
```

De esta manera sabemos exactamente cuantos valores tendremos. Esta función se utiliza mucho para graficar funciones ya que nos genera los valores de x con los que vamos a evaluar la función.

Un ejemplo clásico es el siguiente:

```
1 >>> import matplotlib.pyplot as plt  
2 >>> from numpy import pi  
3 >>> x = np.linspace( 0, 2*pi, 100 ) # 100 números entre 0 y 2pi  
4 >>> f = np.sin(x) # Creamos un arreglo con los resultados de sin(x)  
5 >>> plt.plot(x,f) # Graficamos  
6 >>> plt.show()
```

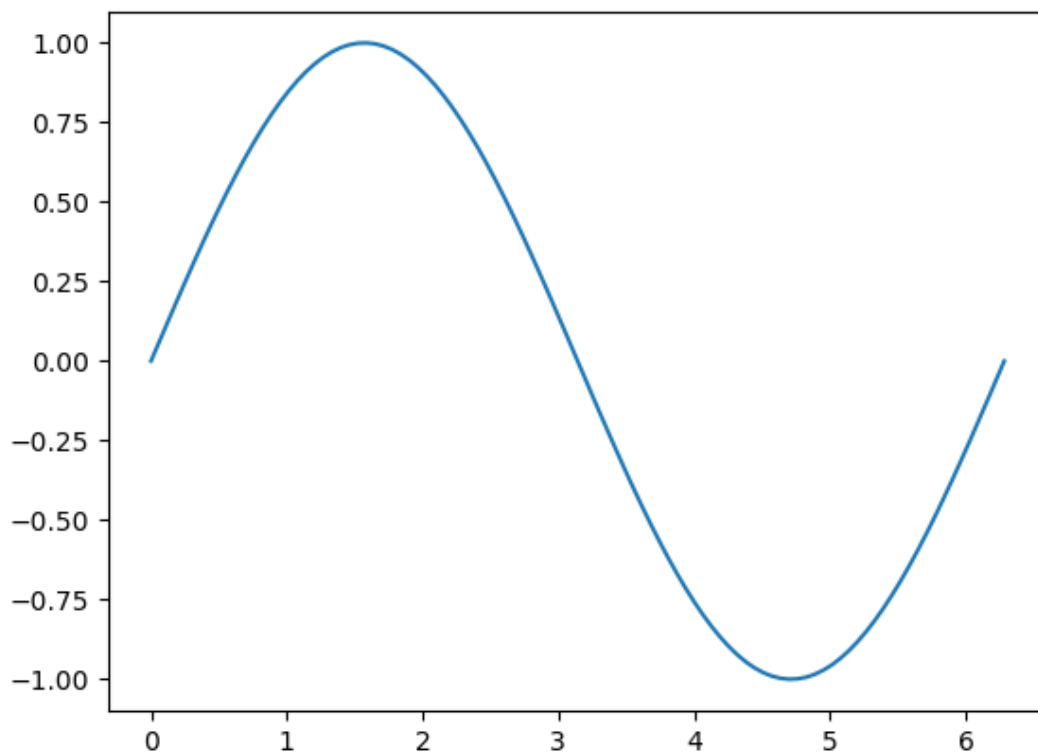


Figura 24: sin

Las funciones `linspace()` y `range()` generan arreglos de Dimensión-1, no te preocupes, podemos crear

arreglos de mayor rango con la función de *reshape()*:

```
1 >>> np.linspace(0, 10,30).reshape(6,5)
2 array([[ 0.          ,  0.34482759,  0.68965517,  1.03448276,
3         1.37931034],
4        [ 1.72413793,  2.06896552,  2.4137931 ,  2.75862069,
5         3.10344828],
6        [ 3.44827586,  3.79310345,  4.13793103,  4.48275862,
7         4.82758621],
8        [ 5.17241379,  5.51724138,  5.86206897,  6.20689655,
9         6.55172414],
10       [ 6.89655172,  7.24137931,  7.5862069 ,  7.93103448,
11       8.27586207],
12       [ 8.62068966,  8.96551724,  9.31034483,  9.65517241, 10.
          ]])
```

Exploración de los Datos

Estadística descriptiva

Para darnos una mejor idea de la naturaleza de los fenómenos capturados por los datos debemos explorarlos. En esta sección vamos a conocer algunas de las técnicas más populares para explorar los datos.

Como primera herramienta tenemos a la estadística descriptiva, la cual nos permite organizar, presentar y describir a conjuntos de datos. También contamos con herramientas de apoyo como las gráficas, tablas e incluso animaciones las cuales complementan a las medidas numéricas. Un herramienta muy importante entonces, es la visualización. Esta técnica de análisis nos permite convertir a los datos a formatos visuales, para resaltar las características o relaciones que existen entre los distintos objetos que representan.

Un ejemplo muy importante que resalta la necesidad de visualizar los datos es el ejercicio publicado por autodeskresearch.com. El ejercicio nos presenta varios conjuntos de datos lo cuales tienen las mismas medidas estadísticas pero con muy distintas gráficas.

Antes de elegir las herramientas de análisis que vamos a utilizar o incluso el tipo de preprocesamiento necesario, es recomendable que hagamos una exploración preliminar de los datos. No hay que olvidar que nosotros como humanos somos excelentes para reconocer patrones, así que antes de utilizar toda la maquinaria de análisis vale la pena que echemos un vistazo. Podemos encontrar patrones los cuales nos ayuden a seleccionar las herramientas para el análisis posterior.

En esta sección nos enfocaremos en los siguientes temas:

- Parámetros estadísticos
- Visualización
- Herramientas OLAP (Online Analytical Processing)

Parámetros estadísticos

Cuando analizamos una gran cantidad de objetos, por ejemplo los alumnos de una escuela o la población de un país, muchas veces utilizamos números que nos sirven para resumir alguna característica de dichos objetos. Por ejemplo, si comparamos las edades de ciertos habitantes de dos países podríamos hablar de la edad promedio de uno y otro país. En este caso decimos que la edad es una variable estadística y la media aritmética o promedio de edad es un parámetro estadístico. Podemos decir que el parámetro o número se obtiene realizando un cálculo sobre el conjunto de datos. Como hemos visto anteriormente el tipo de cálculo que podemos hacer sobre las variables estadísticas dependerá del tipo de medición. Recordemos que hay operaciones que pueden hacerse con valores continuos pero no con valores categóricos.

Medidas de posición

Estos parámetros tienen cierta posición dentro del rango de valores que encontramos en el conjunto de datos.

Media

La media o media aritmética es uno de los parámetros estadísticos más utilizados y se calcula muy fácilmente, simplemente se suman todos los valores y esta suma se divide entre el número de ellos.

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

Cuando los datos son muy variados o existen valores atípicos la media realmente no nos dice mucho acerca de los datos. Por ejemplo si un grupo de personas tuviera las siguientes edades: [10, 10, 90, 10, 10] la media aritmética se calcularía $(10+10+90+10+10)/5$ lo que nos arroja 26 años. En cambio para las edades: [12, 11, 9, 10, 10] la media de 10.4 años es mucho más representativa. La mediana es una mejor opción cuando tenemos casos atípicos.

Mediana

Para calcular la mediana primero ordenamos a los valores de menor a mayor y el resultado es el valor que está a la mitad. En caso de que el número de elementos sea impar el valor en el centro es el resultado en otro caso es el promedio de los dos valores centrales. Por ejemplo, para las edades: [10, 10, 90, 10, 10], primero ordenamos: [10, 10, 10, 10, 90] y como el número de elementos es impar (5) el valor de 10 es la mediana: [10, 10, 10, 10, 90]. En caso de que sea un número de elementos par: [10, 12, 24, 90] regresamos el promedio de los valores (12, 24), en este caso la mediana es 18. El cálculo de la media lo podemos expresar de la siguiente manera:

Sea n el número de elementos ordenados en orden creciente:

$$x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$$

Si n es par: el valor x_p en la posición $(n + 1)/2$.

Si n es impar: la media aritmética de los valores que ocupan la posiciones centrales en las posiciones: $n/2$ y $(n/2) + 1$.

Moda

En el caso de variables cualitativas no podemos calcular los parámetros anteriores, podemos sin embargo calcular la frecuencia con que se repiten los valores. La moda es simplemente es el valor con mayor frecuencia en una distribución de datos.

Medidas de dispersión

Estas medidas nos dan un resumen que tan distintos son de los valores.

Varianza

Si queremos ver que tanto varían los valores de una variable en un conjunto de datos podemos a considerar a la media aritmética como el punto de referencia. Si tomo un valor y calculo la diferencia con respecto a la media veo que tan diferente es. Por ejemplo, vamos a suponer las edades [12, 11, 9, 10, 10], sabemos que la media es 10.4 y ahora vamos a tomar dos valores por ejemplo 9 y 12, y sus diferencias con respecto a la media son: $9 - 10.4$ (-1.4) y $12 - 10.4$ (1.6). Podemos calcular entonces la media de las diferencias elevadas al cuadrado para que no haya problemas por las restas que nos arrojen valores negativos. Básicamente así se calcula varianza para un conjunto de datos:

$$\sigma_n^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$$

Donde: x_i es el dato en la posición i de una lista.

$\bar{x}$ es la media.

n es el número de datos.

La unidad de medida del resultado es al cuadrado de la unidad de medida de la variable. Si calculamos la raíz cuadrada de la varianza obtenemos la desviación estándar. Como ventaja de la desviación estándar queda expresada en las mismas unidades que la variable en cuestión. Al igual que la media, estas medidas de dispersión también se ven afectadas por la presencia de valores atípicos (outliers).

Desviación Absoluta Promedio

En lugar de elevar al cuadrado la diferencia de los valores con respecto a la media se calcula el valor absoluto de la diferencia:

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |x_i - m(X)|$$

Desviación Absoluta Media

La desviación absoluta media o MAD (del inglés Median Absolute Deviation) es una medida de dispersión robusta, ya que es más resistente a los valores atípicos. En lugar de utilizar las medias como en los casos anteriores se utiliza la mediana de las diferencias absolutas contra la mediana:

$$MAD(x) = \text{mediana} (|x_i - \text{mediana}(x)|)$$

Visualización

Los datos, como lo hemos visto hasta ahora, representan a objetos del mundo real los cuales no son entidades aisladas ni estáticas. Se relacionan entre ellos, son dinámicos y además pueden tener muchos atributos. A manera de ejemplo, pensemos en una base de datos de películas como IMDb. Por supuesto, los objetos importantes son las películas, pero además de tenemos muchos otros datos a partir de las relaciones con otros objetos, como los actores, los críticos, las reseñas de usuarios, entre otros. También las películas tienen historia, por ejemplo, los **Trailers**, la fecha de estreno y el ingreso semanal en los distintos países, si ya está disponible en Blu-ray, su popularidad en el tiempo, entre

otros. El poder visualizar de distintas maneras estos datos nos puede ayudar a encontrar patrones interesantes y tomar decisiones. Por ejemplo, si queremos decidir que película ver hoy, podemos ver una tabla con las películas que se estrenan esta semana. En la tabla solo vemos información básica de las películas ignorando muchos detalles:

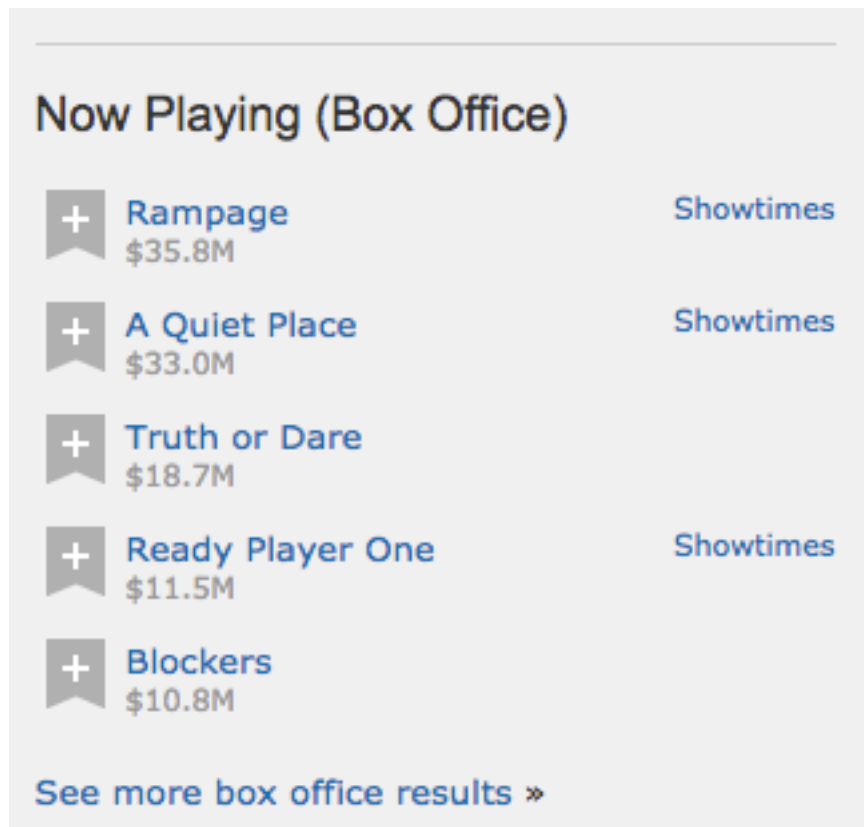


Figura 25: En cartelera

En la aplicación Web, Solo hasta elegir la película que nos interesa podemos ver más detalles:

Rank ↕	Title ↕	Initial gross (unadjusted) ↕	Unadjusted ↕	Adjusted ↕	Year ↕
			Lifetime gross		
1	<i>Star Wars: The Force Awakens</i>	\$936,662,225	\$936,662,225	\$967,038,327	2015
2	<i>Avatar</i>	\$749,766,139	\$760,507,625	\$867,301,893	2009
3	<i>Black Panther</i> †	\$673,797,522	\$673,797,522	\$673,797,522	2018
4	<i>Titanic</i>	\$600,788,188	\$659,363,944	\$978,271,484	1997
5	<i>Jurassic World</i>	\$652,270,625	\$652,270,625	\$673,423,863	2015
6	<i>The Avengers</i>	\$623,357,910	\$623,357,910	\$664,469,354	2012
7	<i>Star Wars: The Last Jedi</i> †	\$620,164,565	\$620,164,565	\$620,164,565	2017
8	<i>The Dark Knight</i>	\$533,345,358	\$534,858,444	\$607,829,532	2008
9	<i>Rogue One: A Star Wars Story</i>	\$532,177,324	\$532,177,324	\$542,655,580	2016
10	<i>Beauty and the Beast</i>	\$504,014,165	\$504,014,165	\$504,014,165	2017
11	<i>Finding Dory</i>	\$486,295,561	\$486,295,561	\$495,870,432	2016
12	<i>Star Wars: Episode I – The Phantom Menace</i>	\$431,088,301	\$474,544,677	\$679,607,130	1999
13	<i>Star Wars</i>	\$221,280,994 [*]	\$460,998,007	\$1,430,350,624	1977
14	<i>Avengers: Age of Ultron</i>	\$459,005,868	\$459,005,868	\$473,891,500	2015
15	<i>The Dark Knight Rises</i>	\$448,139,099	\$448,139,099	\$477,694,584	2012

Figura 27: Recaudación neta en Estados Unidos

Para ver mejor esta información, tenemos que ignorar muchos atributos de las películas, solo nos quedamos con el título, y resaltamos en las otras columnas las ganancias y otros atributos importantes como el año de estreno y el ranking.

Ahora, si queremos analizar la relación que existe entre los atributos de las películas, debemos ignorar casi todo lo demás, la abstracción es tal que cada película solo la representamos como un punto. Esto nos permitirá ver patrones interesantes que difícilmente podríamos ver en una tabla.

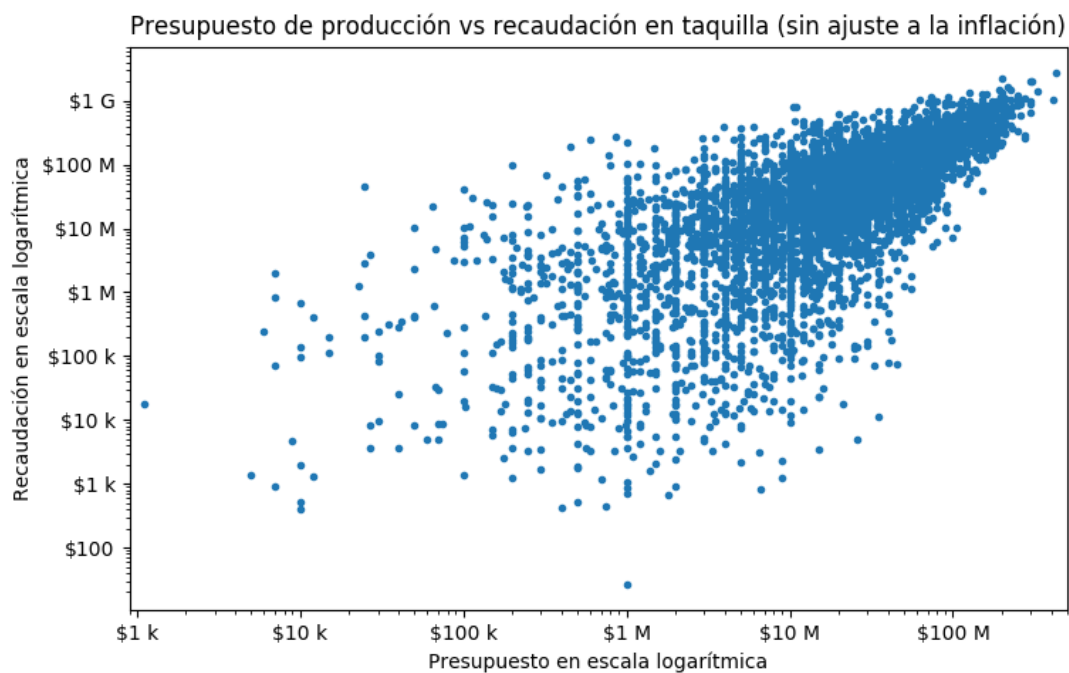
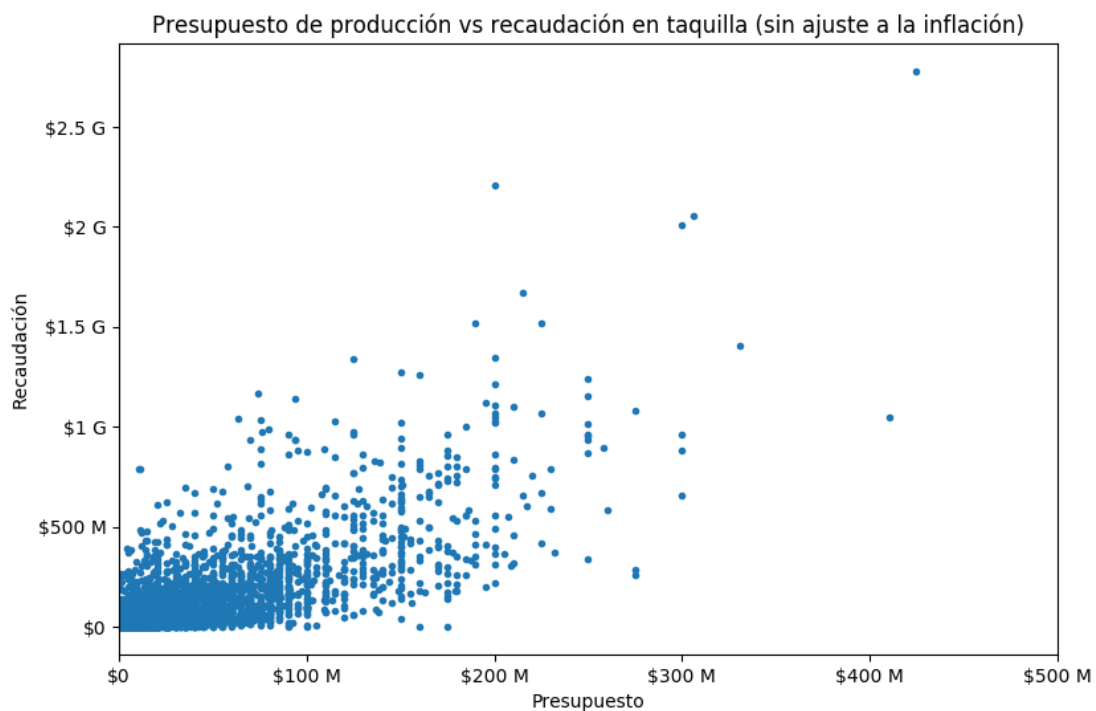


Figura 28: Presupuesto vs recaudación escala logarítmica

Entonces, el ignorar los detalles individuales o incluso transformarlos, nos permite visualizar aspectos que de otra manera serían muy difíciles de observar. En ocasiones podemos necesitar incluso trabajar con muestras de los datos, ya que aun siendo solo puntos, el desplegar grandes cantidades de datos podría significar un costo computacional muy elevado o incluso la técnica de visualización podría no ser apropiada para trabajar con todo el conjunto de datos.

Aunque las gráficas nos permiten tener una buena idea de la naturaleza de los datos, tenemos que dar una advertencia: la visualización es solo una herramienta auxiliar y no un sustituto de la estadística ni del análisis de datos. Incluso una gráfica mal diseñada puede interpretarse de manera incorrecta o ya de plano engañar a los lectores. Es importante recordar que el tema es muy amplio y se relaciona con otras áreas como la Infografía, la Visualización científica o la Visualización Interactiva de Datos e incluso el Diseño Gráfico.



Gráficas utilizadas en visualización de datos

Gráfica de barras

La gráfica de barras es una manera muy popular de presentar conjuntos de datos o valores. Para cada conjunto o propiedad se tiene una barra con un tamaño proporcional a los valores representados. Las barras del mismo color, representan las mismas cantidades. Por ejemplo, en la Figura se tienen barras que representan la cantidad de asistentes a las Copas del Mundo de la FIFA. La gráfica nos permite ver las diferencias y tendencias de asistencia. Las barras se pueden organizar horizontal o verticalmente. En este caso se optó por una presentación horizontal, para facilitar la lectura de los nombres de las sedes de los mundiales. Cuando se presentan varios resultados las barras se pueden agrupar y representar con distintos colores.

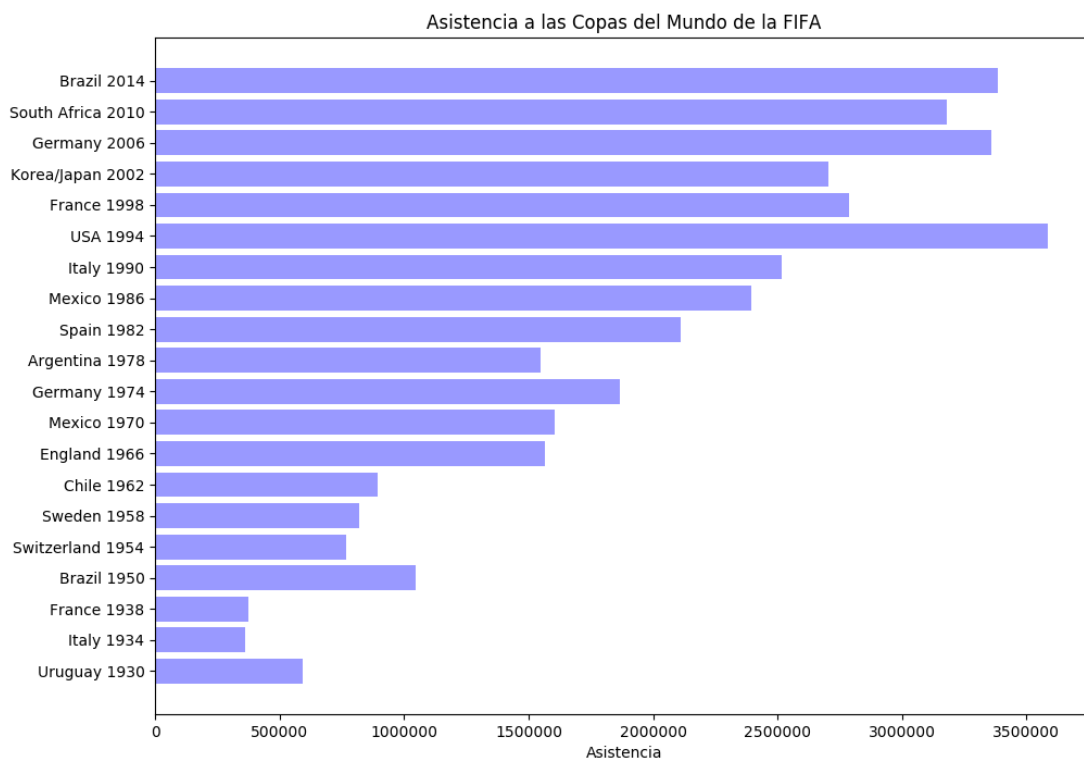


Figura 29: Asistencia a las Copas del Mundo de la FIFA

Histograma

Un histograma también presenta la información en forma de barra, pero en este caso las barras siempre son proporcionales a la frecuencia de los datos en un rango determinado de valores. Un histograma nos permite ver a simple vista tendencias en la distribución de una población o muestra. Un histograma puede verse a distintas resoluciones, cambiando el rango o la anchura de las barras. Los histogramas pueden representar valores continuos o discretos.

Por ejemplo, en el histograma se muestra la distribución del número de goles por partido, de nuevo, en las Copas del Mundo.

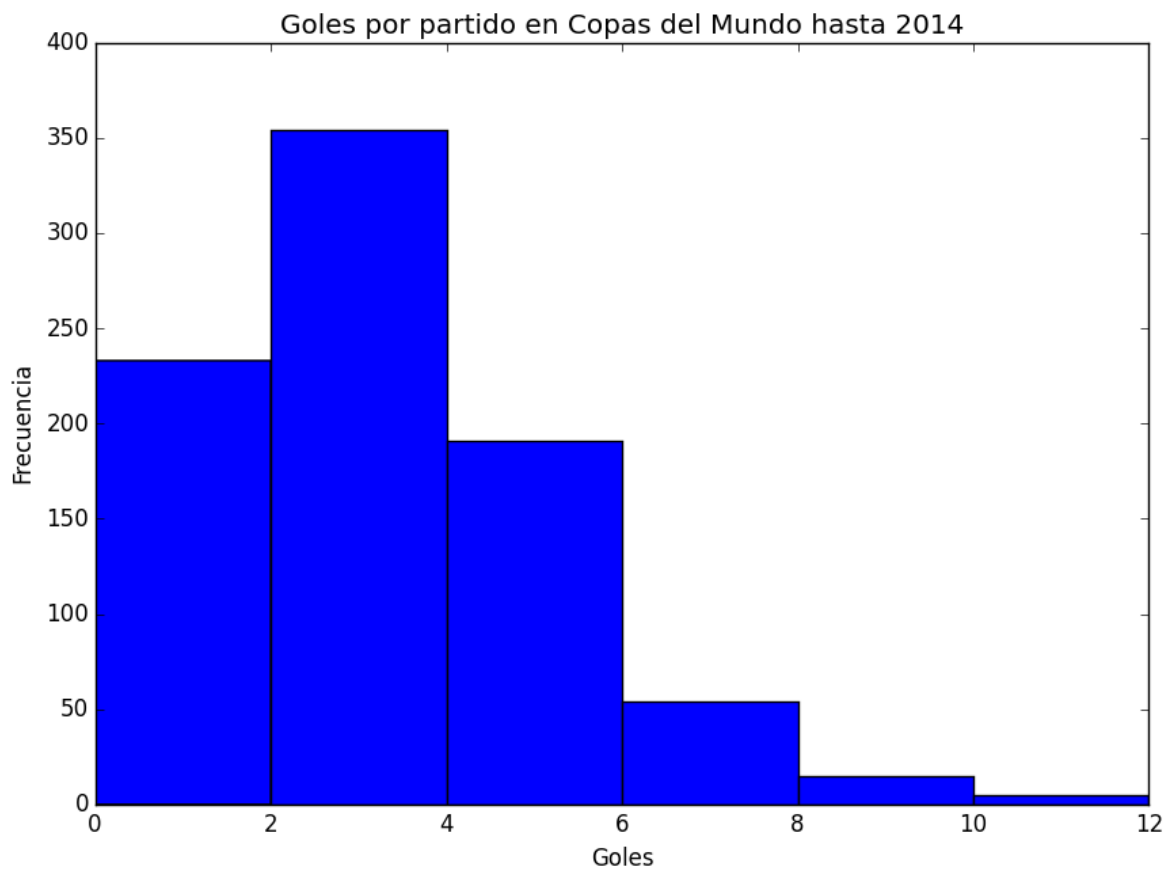


Figura 30: Goles por partido en Copas del Mundo

En el siguiente histograma, se tiene una distribución normal que representa a el IQ de cierta población. Estos son datos continuos.

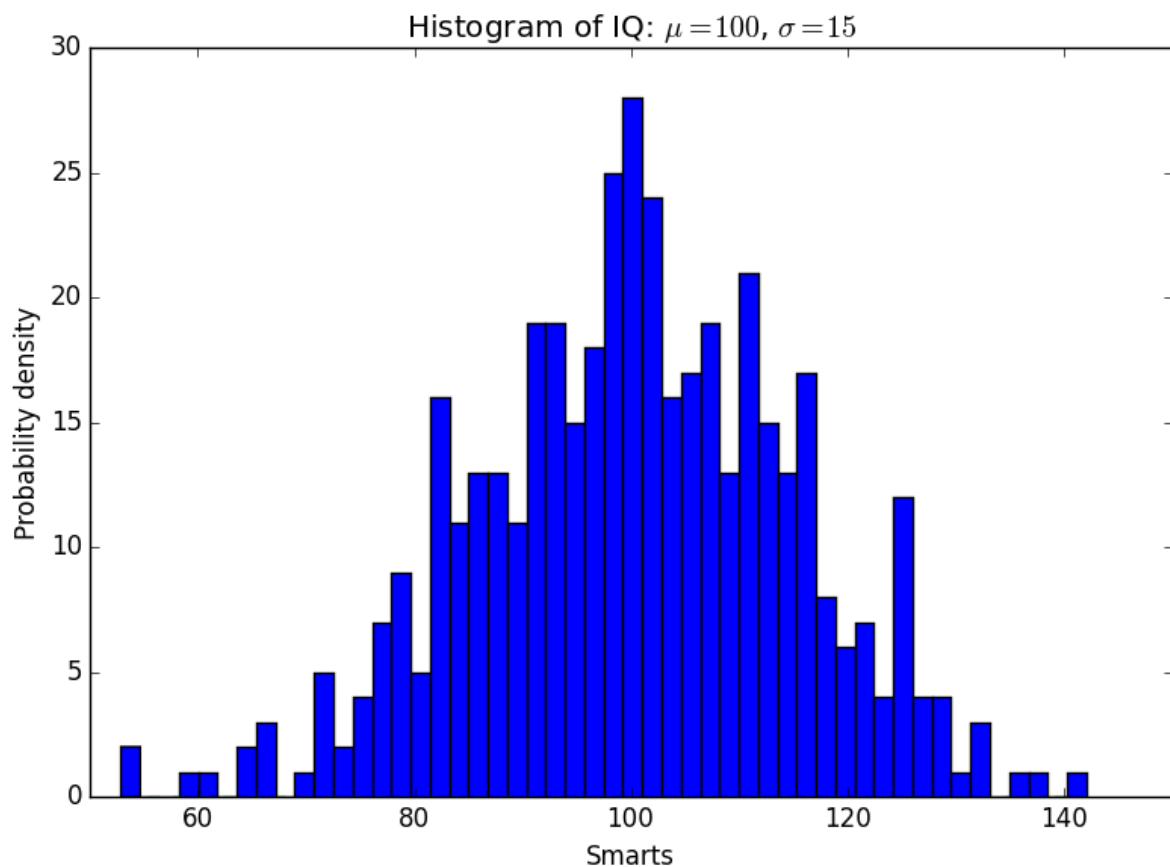


Figura 31: Histograma de datos continuos

Diagrama de dispersión

Este diagrama se utiliza para ver la relación que hay entre dos variables o más variables. Los datos se ubican en un sistema de coordenadas de dos dimensiones, por lo que la posición da la relación de dos variables, se utilizan otros elementos para representar otras variables, por ejemplo el color, tamaño o forma de los puntos. En el ejemplo se relacionan tres variables: Peso, Millas por Galón y caballos de fuerza. Los caballos de fuerza se representan por mapa de color.

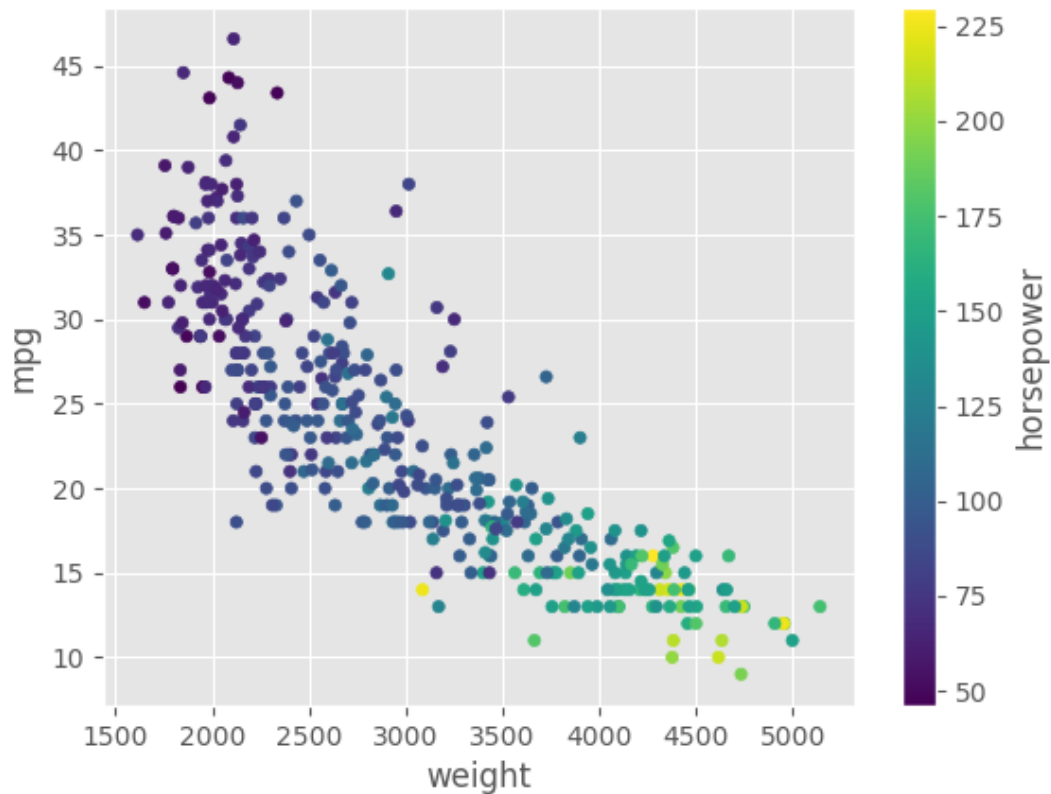


Figura 32: Diagrama de dispersión mostrando la relación entre tres variables

Gráfica de cajas

La gráfica de cajas, nos presenta la distribución de un conjunto de datos utilizando cuartiles. En la mitad de la caja se tiene la Mediana, y la caja va de 25% al 75% de los datos. Los dos cuartiles restantes se especifican con líneas de acotación. Los valores atípicos se grafican fuera de estas líneas, y se representan por una asterisco o algún punto.

En el ejemplo se muestra en una vista de caja, los mismos datos que utilizamos para el histograma. Goles por partido en Copas del Mundo.

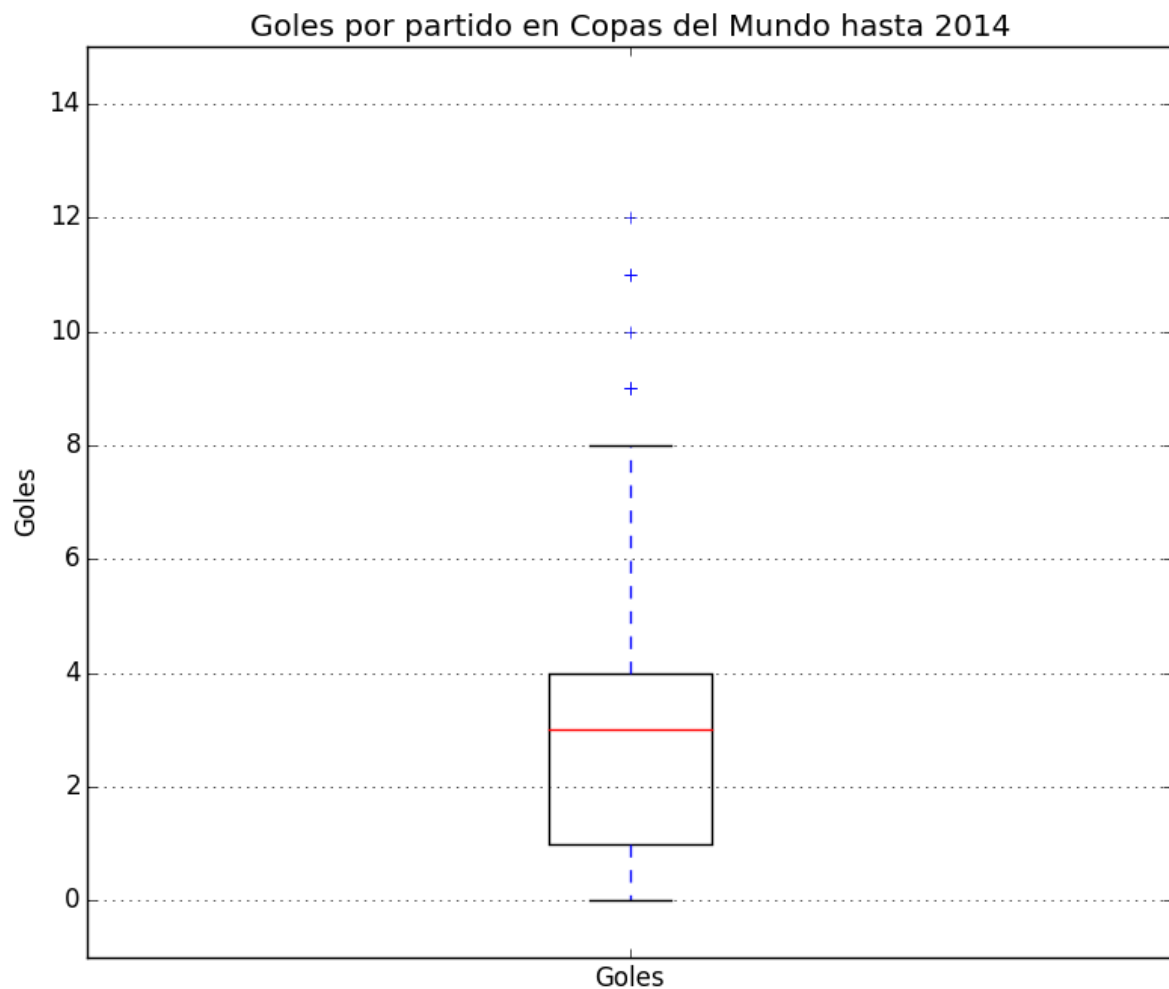


Figura 33: Goles por partido en Copas del Mundo

Es común comparar el rendimiento de algún proceso utilizando gráficas de cajas. Por ejemplo, Aquí vemos el rendimiento en MPG de los autos fabricados por Japón, Estados Unidos y Alemania.

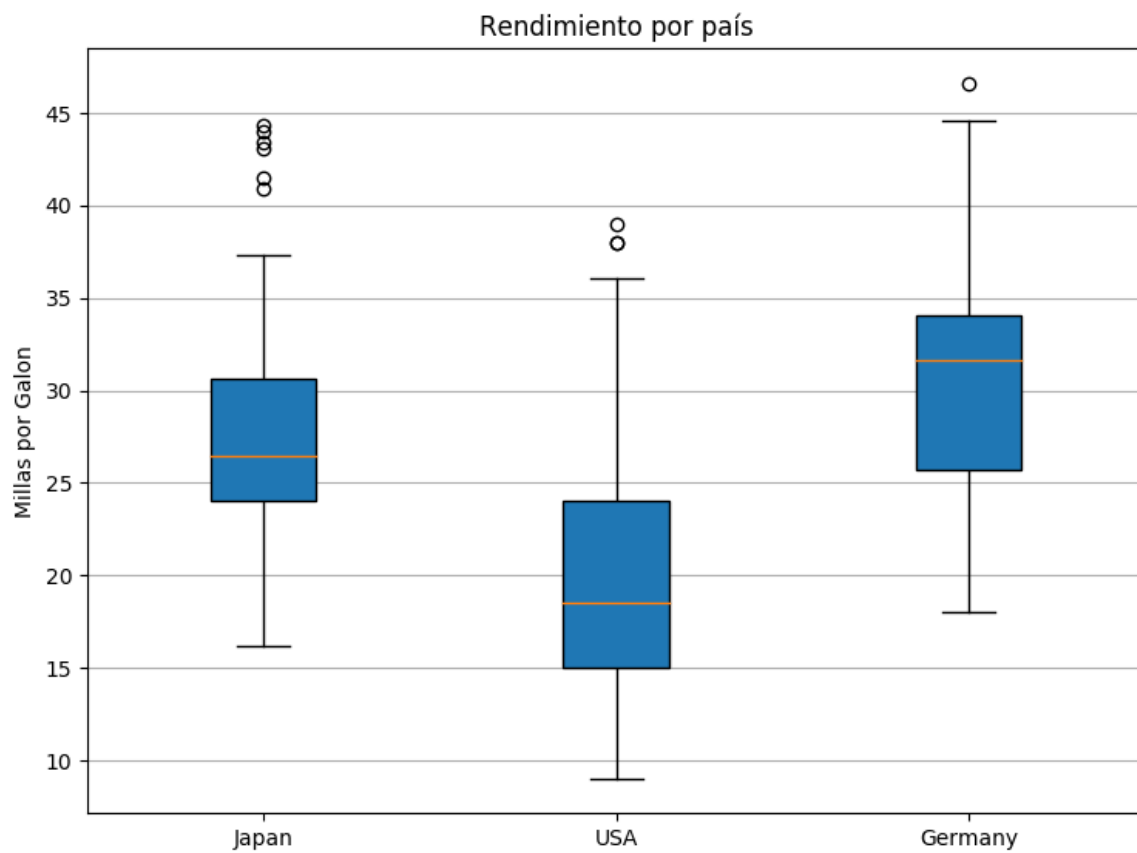


Figura 34: Diagrama de Cajas del rendimiento en MPG de los autos fabricados por Japón, Estados Unidos y Alemania.

Coordenadas paralelas

Las gráficas paralelas pueden relacionar múltiples variables y sirven para ver relaciones entre ellas.

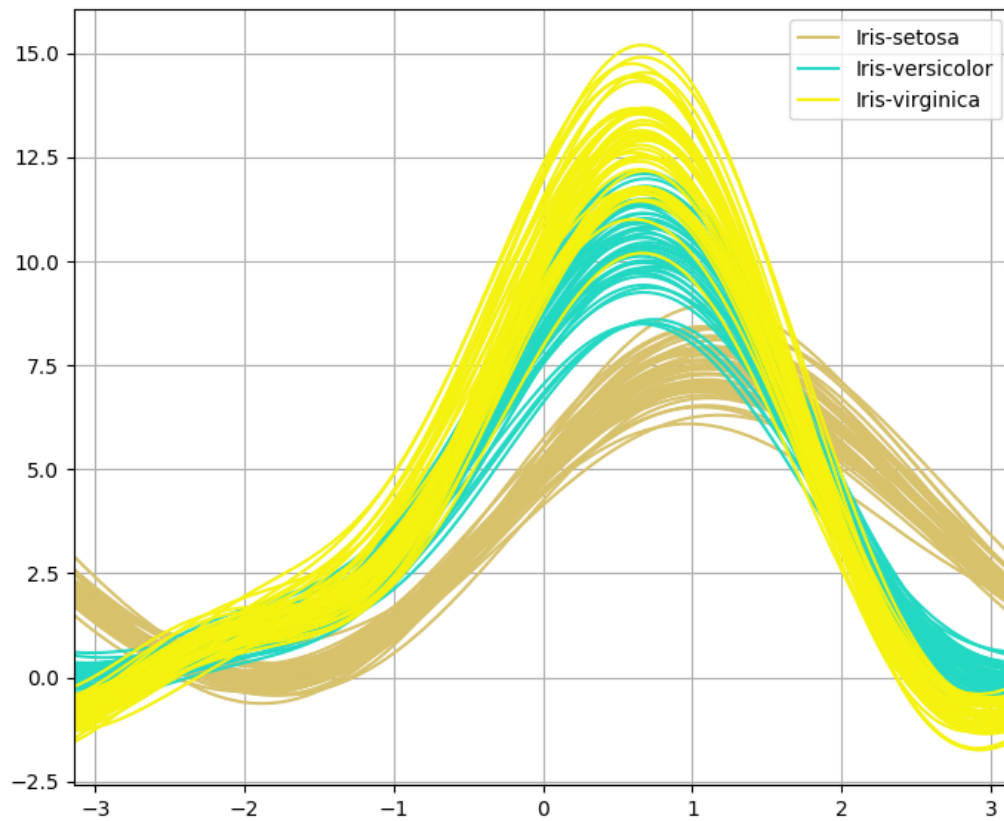


Figura 35: Gráficas paralelas que representan las cuatro variables del conjunto de datos Iris

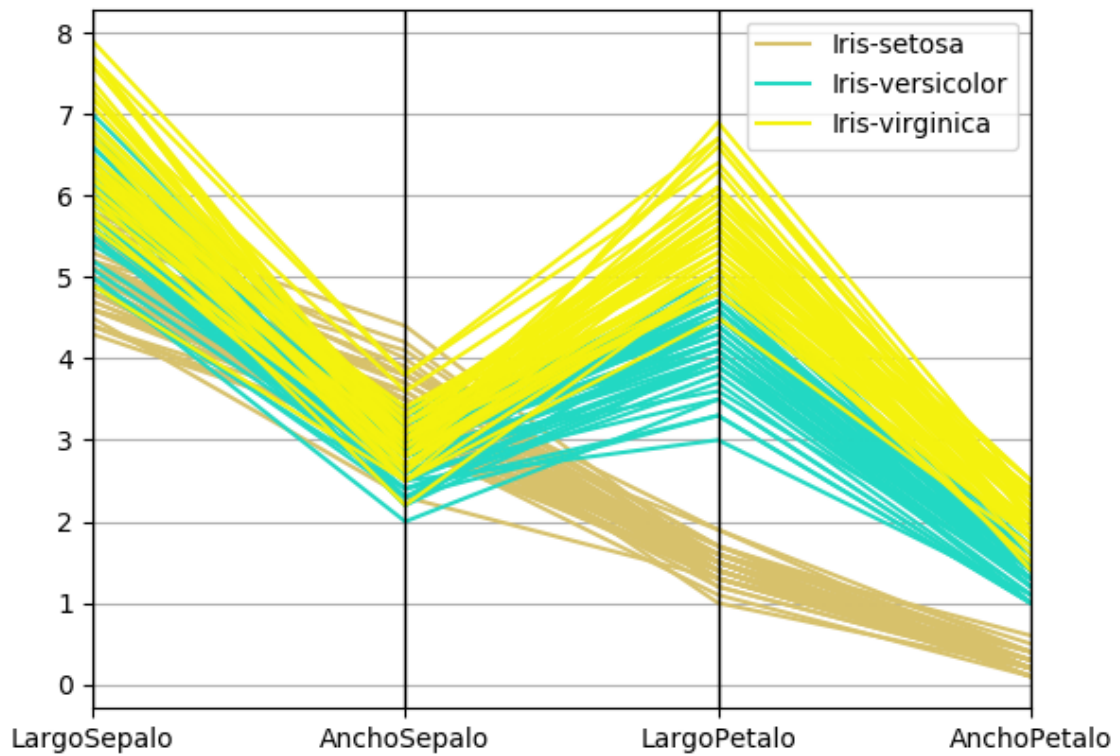


Figura 36: Gráficas paralelas que representan las cuatro variables del conjunto de datos Iris

Caras de Chernoff

Las caras de Chernoff, también son útiles para representar múltiples variables, en este caso los rasgos de las caras son proporcionales a los valores de ciertas variables.

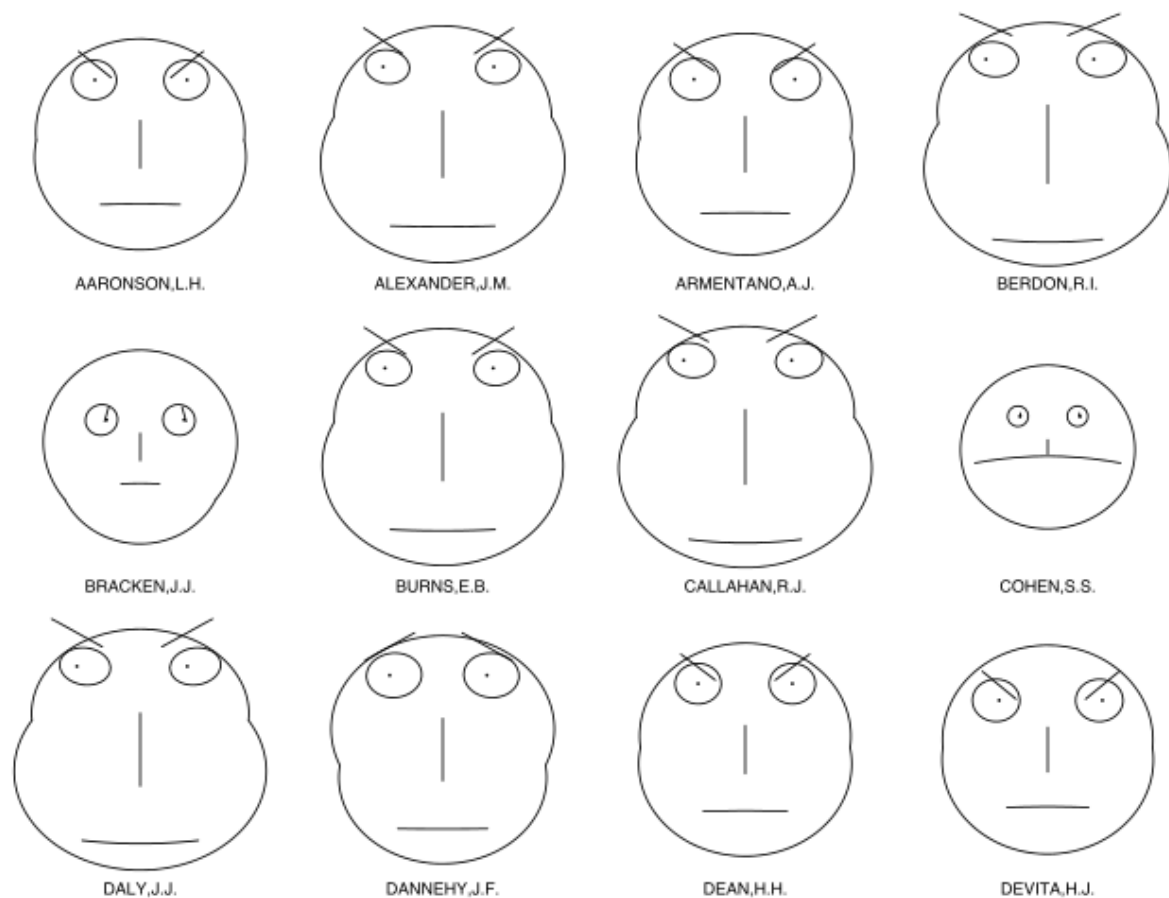


Figura 37: Chernoff_faces

Lectura adicional

The Visual Display of Quantitative Information de Edward R. Tufte (2001). Fundamentals of Data Visualization de Claus O. Wilke en-línea

OLAP y análisis de datos multidimensional

Cuando hablamos de extracción de conocimiento en bases de datos, muchos pensamos en técnicas avanzadas para consultar bases de datos relacionales (Codd 1970), utilizando el lenguaje SQL (Date and Darwen 1989) haciendo reportes y estadísticas utilizando las técnicas de visualización vistas anteriormente. Estas actividades están más relacionadas con el campo conocido como Inteligencia de Negocios (BI de Business Intelligence) que se enfoca sobre todo en reportes de datos históricos de las operaciones empresariales. Este tipo de tareas se considera en desarrollo de sistemas de apoyo

a la toma de decisiones (DSS Decision Support Systems) y sobre todo aplicaciones de OLAP (del inglés *Online Analytical Processing*). Este tipo de aplicaciones tienen mayor relación con aplicaciones de consulta a grandes cantidades de datos, sobre todo realizando operaciones de agrupamiento sobre dimensiones. Por ejemplo, un ejecutivo que desea ver las ventas de cierta categoría de un producto en el primer trimestre del año en el estado de Nueva York. En este caso tenemos datos agrupados (ventas) en la dimensión categoría de producto, en la dimensión tiempo (primer trimestre), la dimensión geográfica (Nueva York). El mismo ejecutivo, podría querer ver ahora la misma información pero ahora para todo el año, o solo el segundo semestre, etc. A este tipo de consultas se les conoce como análisis de datos multidimensional y se hace comúnmente sobre datos históricos almacenados en Almacenes de Datos. En esta sección vamos a dar un vistazo a estas tecnologías ya que pueden ser complementarias con las técnicas de Minería de Datos. Empezaremos por revisar la tecnología de Almacenes de Datos.

Almacenes de Datos

Un Almacen de Datos (DW de Data Warehouse) es un repositorio donde se almacenan principalmente datos históricos que provienen de distintas fuentes y tienen el objetivo de alimentar aplicaciones de análisis de datos (OLAP) y reportes empresariales para la toma de decisiones.

Al igual que con los datos que utilizamos en Minería de Datos, el hecho de que los datos provienen de bases de datos externas normalmente presenta un desafío cargar y mantener actualizados los almacenes. A esta importante tarea del proceso de almacenamiento se le llama ETL (Extract, Transform, Load) e incluye técnicas y herramientas para realizar el proceso.

Aunque podemos implementar un Almacen de Datos utilizando un sistema de bases de datos como Oracle o PostgreSQL, el diseño no sigue las reglas de almacenamiento relaciones, ya que no está diseñado para el procesamiento de transacciones, el objetivo principal es ejecutar rápidamente consultas multidimensionales. Por esta razón, el diseño relacional de un DW está no está normalizado y por el contrario se sigue un diseño estrella o incluso copo de nieve.

Data Marts

Los *Data Marts* son almacenes intermedios los cuales no incluyen los datos de toda la empresa. Normalmente se especializan en cierta funcionalidad local de la empresa. La ventaja de un *Data Mart* es que no requiere tantos recursos de extracción ya que se concentra en un departamento o actividad empresarial, por ejemplo ventas o contabilidad.

Data Lakes

Un Data Lake es un almacén de datos crudos en su formato original, no se tiene necesariamente un diseño de los atributos o metadatos. En un Data Lake podemos tener imágenes, archivos de texto, pdfs, lecturas de sensores, etc. Es un repositorio parecido a un Data Mart en el sentido de que se enfoca en cierta aplicación y no es información global. Este tipo de almacenes es sobre todo utilizado para realizar tareas de Minería de Datos.

El cubo OLAP

Para realizar operaciones OLAP tipo cubo es necesario tener a los datos en una estructura multidimensional y siguiendo un diseño estrella, como el que se muestra en el Figura:

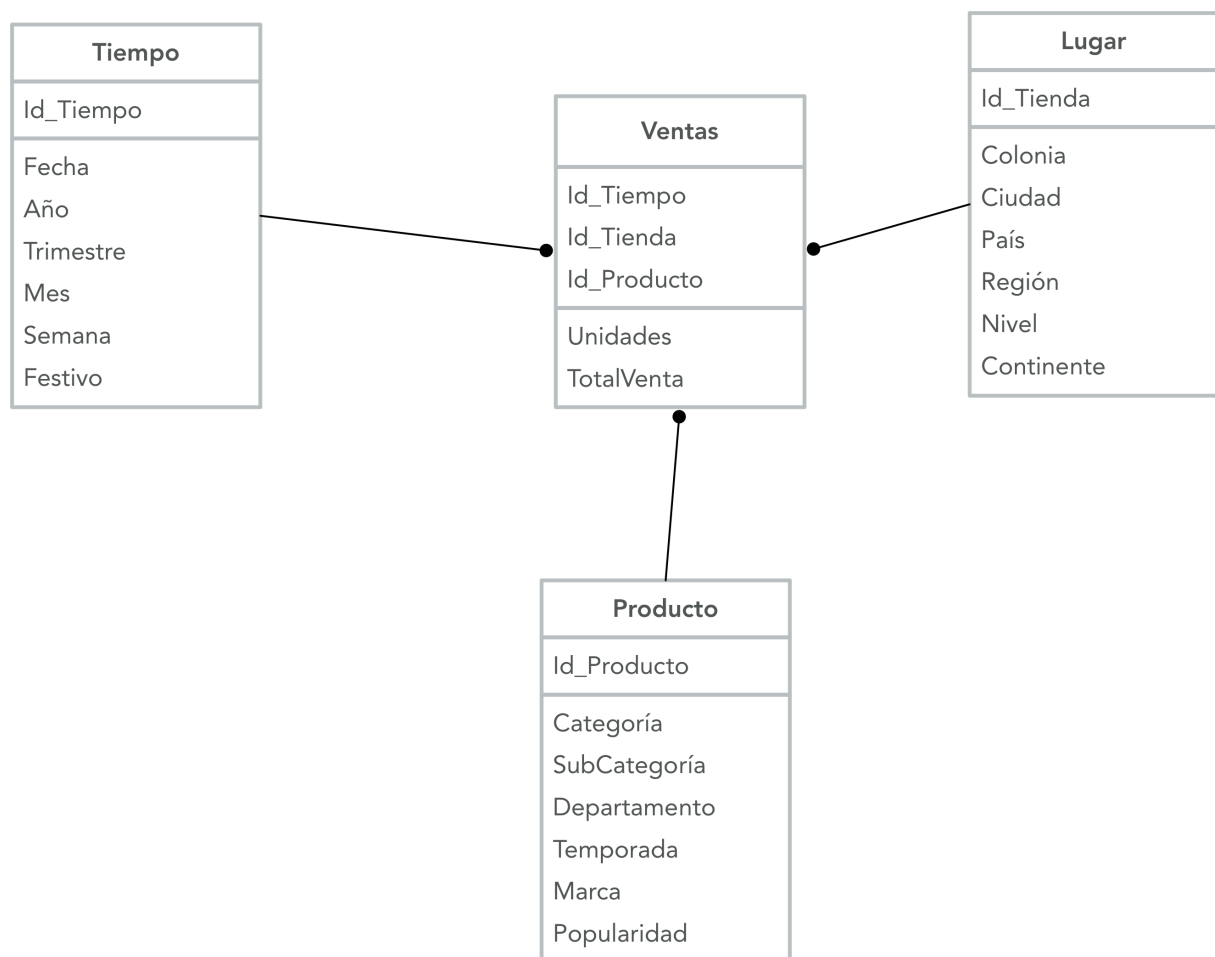


Figura 38: Diseño Estrella

El diseño estrella tiene dos tipos de tablas:

1. Hechos. Esta es una sola tabla, en ella se registra el evento que se desea analizar. Un detalle importante de diseño es la granularidad que se va a tener. Por ejemplo, se van a almacenar todas las ventas o solo las ventas acumuladas de un producto por día. Esta decisión es importante ya que de ella dependerá en gran medida el tamaño del almacén.
2. Dimensiones. En estas tablas se almacenan las dimensiones por las que se harán las consultas, no están normalizadas ya que preferimos que se duplique información a tener que realizar un operación *JOIN* para obtener los datos. La dimensión debe seguir un orden incremental, por ejemplo: Colonia > Ciudad > Estado > País.

La información del diseño estrella, podemos visualizarla como un cubo (ver Figura siguiente), donde en cada lado se muestran los datos de una dimensión. En la figura se muestran tres dimensiones del hecho ventas: el tiempo, producto y tienda. En este caso el detalle se muestra por año, estado y categoría.

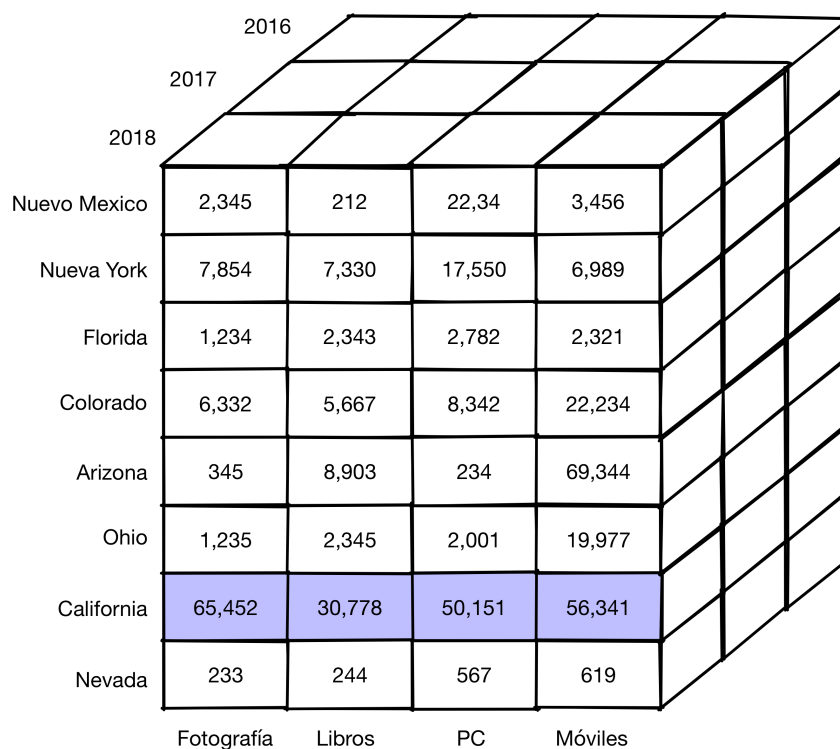


Figura 39: Cubo OLAP para el almacén de ventas

Sobre el cubo, se pueden realizar las siguientes operaciones:

- Drill-down: Esta operación nos muestra mayor detalle sobre cierta dimensión. Por ejemplo, si estamos viendo el agregado de ventas por estado, haciendo drill-down en California, podemos ver el detall por ciudad. Esto se muestra en la figura.

- **Roll-up:** Esta operación agrega los datos, subiendo la categoría de una dimensión. Por ejemplo, en la figura se puede ir del detalle por ciudad (cubo derecho para California) al agregado por estado (cubo izquierdo).
- **Slice:** Con esta operación se selecciona una cara o dimensión del cubo. Da como resultado una tabla.
- **Dice:** Seleccionando dos dimensiones, podemos extraer un sub-cubo.

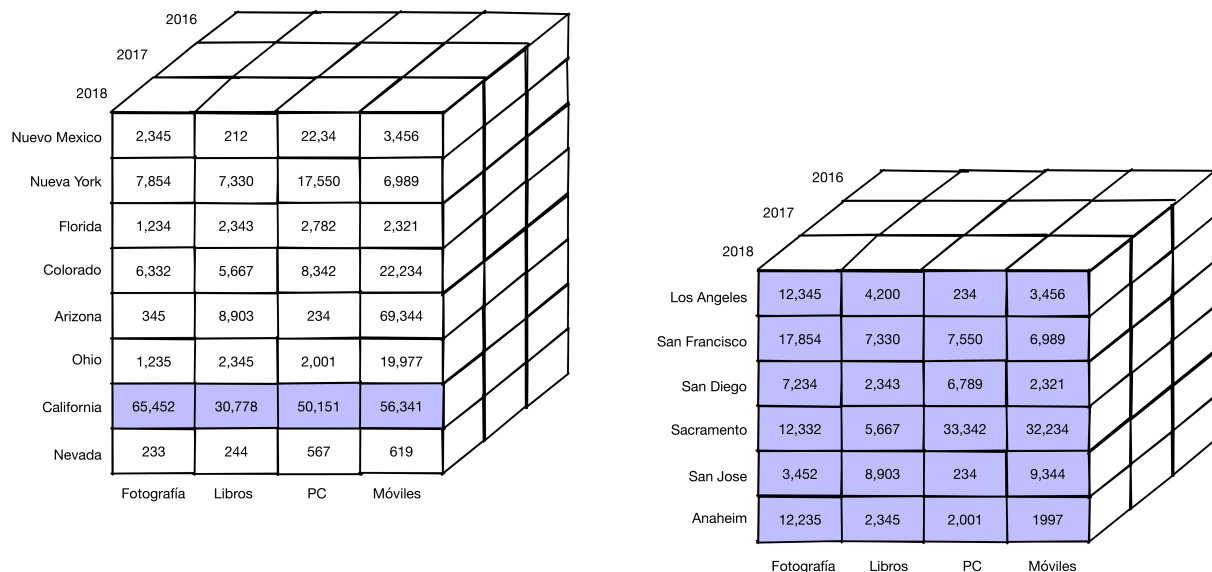


Figura 40: Operación Drill-Down

Regla de Inferencia Composicional

Los sistemas de producción representan el conocimiento en forma de reglas *IF-THEN*, las cuales especifican que acciones se realizarán cuando ciertas condiciones se cumplan, también son conocidos como sistemas basados en reglas. La mayoría de las implementaciones tienen los siguientes componentes principales:

- **Reglas de Producción.** Un conjunto de reglas de producción (también conocidas como reglas *IF-THEN*) las cuales tienen un estructura de dos partes; el antecedente, conformado por un conjunto de condiciones y el consecuente un conjunto de acciones.
- **Memoria de Trabajo.** Representa el conocimiento actual o hechos los cuales se sabe son ciertos hasta este momento. Estos hechos son evaluados por las condiciones del antecedente de las reglas y las acciones de la parte consecuente modifican sus estado.

- **Máquina de Inferencia.** Este interprete empata las variables de las condiciones en las reglas de producción con los datos o instancias de variables que se encuentran en la *Memoria de Trabajo*, derivando nuevas consecuencias.

La operación básica de estos sistemas se puede describir como un ciclo de tres pasos:

1. Reconocimiento. Se encuentran que reglas se satisfacen en el estado actual de la Memoria de Trabajo. La parte del antecedente de las producciones consiste en un conjunto de cláusulas conectadas por operadores AND, cuando todas estas cláusulas son verdaderas con los datos correspondientes en la Memoria de Trabajo, esta regla tiene oportunidad de dispararse.
2. Resolución de Conflictos. Solo una producción puede dispararse a la vez, así que cuando dos o mas reglas pueden dispararse al mismo tiempo, ocurre un conflicto. En este paso se eligen cuales de las reglas con oportunidad deberán de dispararse.
3. Acciones. Se modifica el estado de la Memoria de Trabajo realizando las acciones especificadas en la parte del consecuente de las reglas seleccionadas en el paso anterior. Los cambios ocurren añadiendo o eliminando elementos de la Memoria de Trabajo.

Este ciclo continúa hasta que no se pueden disparar nuevas reglas de producción. A esta estrategia de control se le conoce como: dirigida por los datos (*data-driven*), ya que cuando el antecedente se satisface, la regla es reconocida; también se le conoce a esta regla como de encadenamiento hacia adelante. En el caso de estrategia de encadenamiento hacia atrás, las metas de la Memoria de Trabajo son emparejadas con consecuentes de las reglas de producción.

Una de las desventajas que se ha reconocido en este tipo de sistemas de reglas, es que en ocasiones algunas reglas no se eligen en el paso de *Reconocimiento* pues no existe un emparejamiento apropiado en la Memoria de Trabajo. El hecho de que no exista un emparejamiento parcial puede ser una limitante en algunos tipos de sistemas, por que no se desea una terminación prematura del ciclo de inferencia. Una de las formas de tratar esta limitante es utilizando lógica difusa. En la siguiente sección se presenta una de las extensiones a los sistemas de producción que utilizan lógica difusa.

Razonamiento Difuso

Los Sistemas de Inferencia Difusos (del inglés Fuzzy Inference System) han sido utilizados con éxito en sistemas de control industrial no lineales con numerosas variables de entrada. Una ventaja de este tipo de sistemas es que no requieren de información precisa para trabajar. Estos controladores difusos son un tipo de **Sistema de Producción** donde las reglas modelan un sistema dinámico, dando una relación de entrada salida. A diferencia de los sistemas de producción un FIS no necesita varios ciclos de activación de las reglas pues se tienen dos conjuntos disjuntos de variables de entrada y salida. Como ventaja se tiene que estas reglas se pueden disparar en paralelo (Konar 2004).

Método para el Razonamiento Difuso

Las reglas de producción difusas, utilizan conjuntos difusos para caracterizar las variables y los términos utilizados en las proposiciones de las reglas. Las reglas IF-THEN son expresiones de la forma IF *antecedente* THEN *consecuente*, donde el antecedente es una proposición de la forma x es A donde x es una variable lingüística y A es un término lingüístico. El valor de verdad de esta preposición depende en el grado de emparejamiento entre x y A . Estas preposiciones pueden estar conectadas por operadores *AND* y *OR* y también pueden ser negados por el operador *NOT*. Dependiendo del tipo de consecuente, se pueden distinguir dos tipos de sistemas de inferencia difusos:

- Modelo difuso lingüístico: donde ambos el antecedente y consecuentes son proposiciones difusas.
- Modelo difuso Takagi-Sugeno* el antecedente es una preposición difusa; el consecuente es una función nítida (*crisp*).

Las variables lingüísticas son variables a las que se le puede asignar términos lingüísticos como valores, por ejemplo: si se define una variable lingüística VELOCIDAD a esta se le puede asignar los términos lingüísticos LENTO, MEDIO o RAPIDO. El significado de estos términos está definido por sus *funciones de membresía* (MF). Las variables lingüísticas (VL) pueden definirse como la tupla (v, T, X, g, m) , donde v es el nombre de la variable, X es el dominio de v , g es una regla sintáctica para generar términos lingüísticos, m es una regla semántica que asigna a cada término t su significado m , el cual es un conjunto difuso definido en X .

Sistemas de Inferencia Difusos

Los sistemas de inferencia difusos (FISs) también llamados *Modelos Difusos* son sistemas basados en reglas difusas, que tienen el objetivo de modelar relaciones de entrada-salida. Babuska describe a los FIS como “*funciones matemáticas flexibles las cuales pueden aproximarse a otras funciones o a valores con la precisión deseada*”. Los FIS definen una relación entre variables de entrada y de salida. Las variables de entrada se definen en el antecedente de la regla y las variables de salida en el consecuente. Estos sistemas como se dijo anteriormente, son utilizados en sistemas de control y se componen básicamente de cinco módulos, ver Figura:

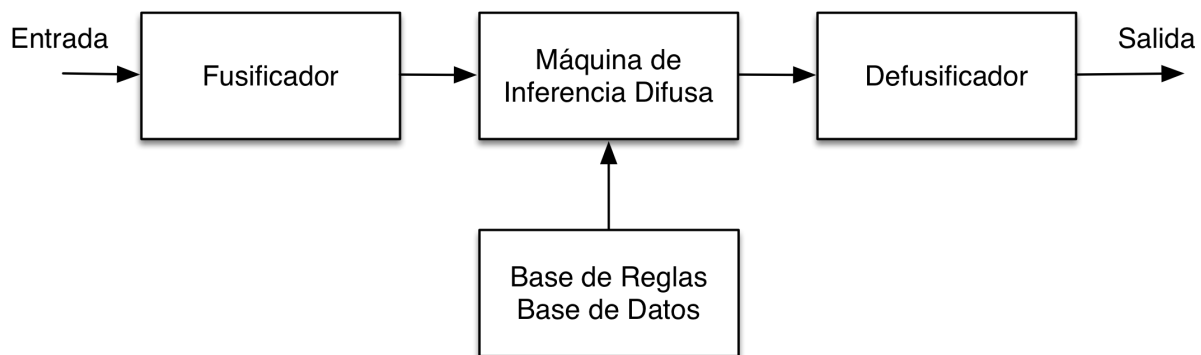


Figura 41: Componentes Principales de un Sistema de Inferencia Difuso

1. Base de Reglas. El conjunto de reglas difusas.
2. Base de Datos. Donde se definen las funciones de membresía.
3. Máquina de Inferencia Difusa. Este modulo ejecuta las operaciones de inferencia difusa.
4. Fusificador. Este modulo transforma las entradas del sistema (valores numéricos) en valores lingüísticos.
5. Defusificador. Transforma los resultados difusas a valores numéricos.

Usualmente se le llama *Base de Conocimiento* a la Base de Reglas y Base de Datos en conjunto. Esta Base de Conocimiento es distinta a la Memoria de Trabajo, por que las variables de salida no pueden ser variables de entrada, por lo que el proceso de inferencia es acíclico. Los pasos involucrados en la inferencia difusa de un FIS son:

1. Comparar las variables de entrada con las funciones de membresía en el antecedente, para obtener los valores de membresía de cada término lingüístico. A este paso se le llama también fusificación.
2. Componer a través de un operador T-Norm específico (normalmente max-min o max-producto) los valores de membresía para obtener el grado de soporte de cada regla.
3. Generar la consecuencia calificada para cada regla dependiendo de los grados de soporte. Estas salidas son después agregadas para formar un salida unificada.
4. Finalmente el conjunto difuso de salida es resuelto o defusificado a un valor nítido.

A continuación se describen los tres principales tipos de sistemas de inferencia difusos:

- Tsakumoto. La salida es el promedio de los grados de soporte de cada regla. Las funciones de membresía utilizadas en este método deben ser monotónicas no decrecientes.
- Mamdani. La salida es calculada aplicando el operador min-max a la salida difusa, cada una igual al mínimo grado de soporte y la función de membresía de la regla. Se han propuesto diferentes esquemas para elegir una salida nítida basada en la salida difusa; estas incluyen al método del centroide, bisección de área, promedio máximo y criterio máximo.

- Sugeno. La salida de cada regla es una combinación lineal de las variables de entrada mas un término constante, y la salida es el promedio del grado de soporte de cada regla.

Clasificación Básica

Preliminares

Clasificar consiste en asignar a los objetos cierta categoría, la cual seleccionamos de un conjunto de categorías previamente definido. Esta es una tarea necesaria en muchos sistemas informáticos, por ejemplo, una funcionalidad básica de los servicios de correo electrónico es la de asignar automáticamente los mensajes recibidos a una de dos categorías: *correo válido* o *correo no deseado*. Para clasificar los correos, el sistema considera ciertas características del correo como son el título y el texto del mensaje. Podemos ver a un clasificador como una función la cual toma las características de un objeto y nos regresa la categoría a la que pertenece.

Un ejemplo de un clasificador muy sencillo podría ser uno que simplemente considere si el mensaje incluye ciertos términos:

```
1 def clasificador(mensaje):
2     for palabra in ['Rolex', 'Buy Bitcoins', 'Free Vacations']:
3         if palabra in mensaje
4             return 'spam'
5     return 'ham'
```

Este clasificador no es muy bueno ya que los creadores de correos no deseados podrían hacer variaciones de los términos para engañar a nuestro clasificador. Por ejemplo cambiando «Free Vacations» por «Free-Vacations». Una mejor idea es la de ver a la tarea de clasificación como un generador de funciones de clasificación. Tomando como entrada a un conjunto de correos previamente clasificados, el generador debe ser capaz de construir automáticamente una función que pueda clasificar correos correctamente.

En esta sección vamos a conocer los conceptos básicos de clasificación y veremos como evaluar el desempeño de los clasificadores y por último como comparar las distintas técnicas de clasificación.

Un clasificador (o técnica de clasificación) es un algoritmo que tiene como objetivo generar funciones o modelos de clasificación a partir de un conjunto de datos de entrenamiento (Tan, Steinbach, and Kumar 2007). El conjunto de datos de entrenamiento consiste en registros que a su vez se componen de un vector de características y la categoría a la que pertenece el objeto. Podemos representar a cada registro como una tupla $(\vec{x}, y)$ donde $\vec{x}$ es el vector de características y y la categoría (también se le llama etiqueta o clase). En la sección de *Los Datos* vimos ejemplos de conjuntos de datos, en este caso

el vector de características puede incluir datos discretos o continuos pero la clase siempre es un tipo de dato discreto. Recordemos el conjunto de datos Iris:

sepal_length	sepal_width	petal_length	petal_width	label
5.1	3.5	1.4	0.2	setosa
4.9	3.0	1.4	0.2	setosa
7.0	3.2	4.7	1.4	versicolor
6.4	3.2	4.5	1.5	versicolor
6.3	3.3	6.0	2.5	virginica
5.8	2.7	5.1	1.9	virginica

En este caso cada registro tiene un vector con cuatro características continuas y la clase de flor: [«setosa», «virginica», «versicolor»].

El modelo que genera el algoritmo podemos aplicarlo a nuevos conjuntos de datos, para ver que tan bueno es el clasificador resultante podemos aplicarlo a un nuevo conjunto de datos llamado de prueba el cual tiene oculta la categoría de los objetos. Para ver que tan bueno es, comparamos las predicciones con las categorías reales del conjunto de prueba. En la Figura 1 podemos ver de manera esquemática el proceso general de los algoritmos supervisados:

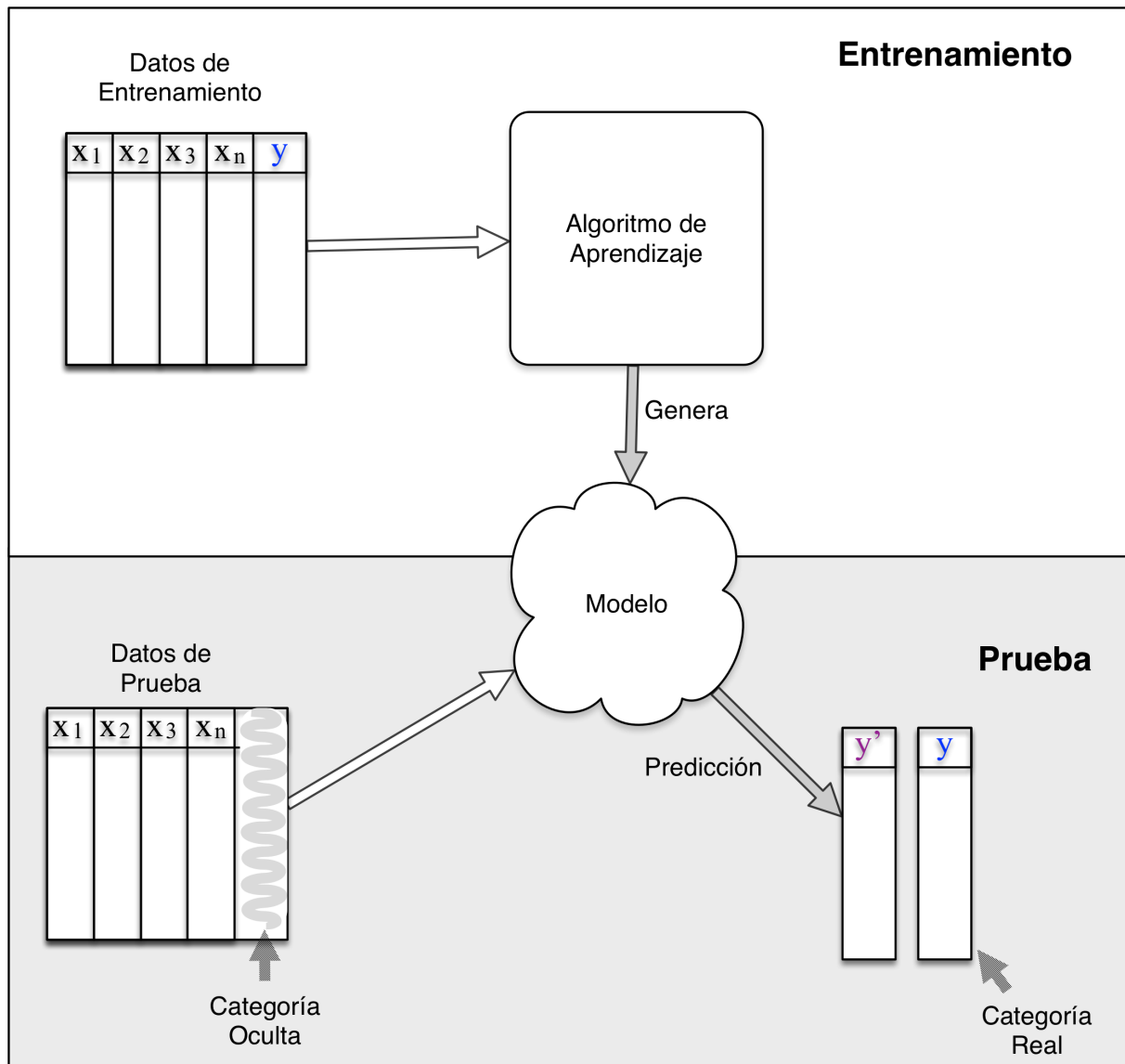


Figura 42: Aprendizaje supervisado

En la etapa de prueba, la predicción que arroja el modelo de clasificación puede compararse con la categoría real la cual se ocultó de los datos de entrada al modelo. Como podemos ver en la Figura 1, al final contamos con dos vectores: y con la categoría real y el vector y' con las categorías que ha predicho el modelo. Si ambos vectores son iguales significaría que el modelo generado no ha tenido errores, por lo menos para este conjunto de datos de prueba y entrenamiento.

A este tipo de algoritmos se les llama algoritmos de aprendizaje supervisado, en este caso decimos que entrenamos a un clasificador pero también podemos entrenar a un algoritmo de regresión. Lo importante aquí es la idea de tener primero un conjunto de datos que utilizaremos para entrenar al

algoritmo y después otro conjunto para evaluar que tan bien generaliza el algoritmo. Cuando hablamos de generalización estamos pensando en que tan bueno es para predecir a partir de datos que no ha visto previamente. Más adelante veremos la problemática del sobre-entrenamiento, es decir cuando el modelo generado se ajusta demasiado a los datos de entrenamiento y no es bueno para generalizar.

Algoritmos de Inducción de Árboles de Decisión

Vamos a ver nuestro primer algoritmo de aprendizaje supervisado: los algoritmos de inducción de árboles de decisión. Este tipo de algoritmos son populares ya que nos permiten interpretar, hasta cierto punto, el modelo que se generan. Para entender el concepto de arboles de decisión vamos a inducir manualmente un árbol a partir del siguiente conjunto de datos:

id	hotel	estrellas	alberca	WiFi Gratis
1	Mariots	2	Sí	Sí
2	Díaz Inn	2	No	Sí
3	Mandarina	5	Sí	No
4	Le Hotel	3	Sí	No
5	Halton	4	No	Sí
6	Tromp	4	Sí	No

En este caso deseamos a predecir si un hotel ofrece a sus huéspedes WiFi de manera gratuita o no. Un árbol de decisión considera una de las características del conjunto de datos en cada uno de sus nodos, segmentando a los objetos en uno o más grupos. La segmentación se establece con una condición, si se cumple se sigue a la siguiente rama hasta llegar a las hojas las cuales representan a las categorías. Vamos entonces a proponer el árbol de decisión. Bueno, lo primero que observamos es que los atributos «id» y «hotel» son identificadores y no características por las que podamos discriminar. Veamos entonces la característica «estrellas», podemos observar que todos los hoteles de 5 estrellas no ofrecen WiFi gratis. Aunque probablemente esto no sea muy lógico, debemos recordar que el algoritmo solo puede considerar aquello que se expresa en el conjunto de datos. Digamos que si la condición «estrellas» = 5 es verdadera la categoría es «WiFi Gratis». En caso contrario no estamos todavía seguros de la categoría, por lo que necesitamos seguir buscando otras condiciones que se cumplan para otros objetos. En este caso para nuestra búsqueda ya no vamos a considerar a los objetos que cumplan con las condiciones anteriores. Entonces vemos que si el hotel tiene alberca entonces no ofrece WiFi gratis. Esto de nuevo lo expresamos con otro nodo y la hoja correspondiente. Nuestro árbol de

decisión en este momento sería el siguiente:

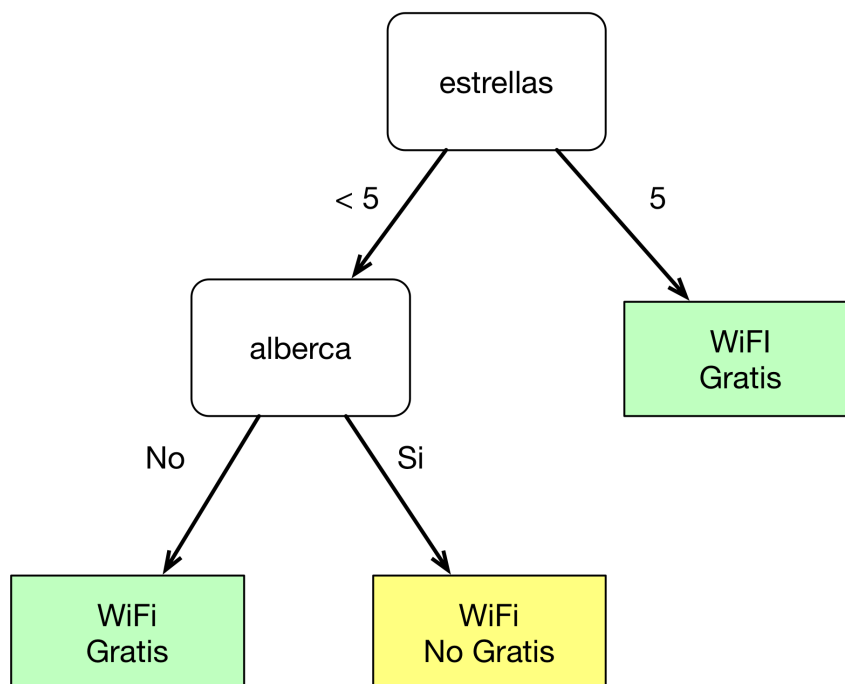


Figura 43: Árbol de decisión propuesto

El árbol propuesto no logra tener una exactitud del 100% ya que el hotel «Mariots» se clasificaría incorrectamente por el árbol. Sin embargo para todos los demás casos la clasificación sería correcta. Por el momento lo importante es que entendamos como funciona el árbol. Por ejemplo, vamos a clasificar el siguiente registro del conjunto de datos de prueba:

id	hotel	estrellas	alberca	WiFi Gratis
12	Bella-Gio	4	Sí	?

Iniciamos en la **nodo raíz** del árbol, evaluando si el atributo «estrellas» es igual a 5. En este caso el valor es menor que 5, por lo que continuamos bajando al **nodo interno** «alberca». Como el hotel que estamos considerando Sí tiene alberca, concluimos al llegar al **nodo hoja** el cual nos dice que el hotel no ofrece WiFi Gratis.

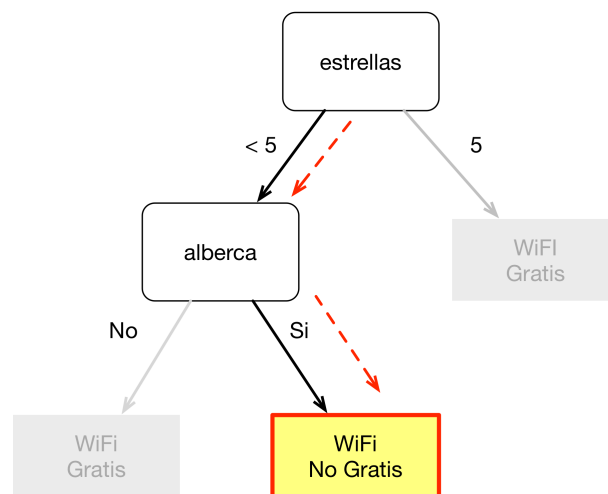


Figura 44: Ruta de disparo para clasificar el registro de prueba

id	hotel	estrellas	alberca	WiFi Gratis
12	Bella-Gio	4	Sí	No

Aun en este caso tan sencillo, podemos proponer una gran cantidad de árboles de decisión y en la mayoría de los casos no será posible evaluar todas las opciones posibles ya que el espacio de búsqueda es muy grande. Es importante entonces pensar en alguna heurística que nos permita guiarnos al momento de generar a los árboles ya que no podemos simplemente generarlos manera arbitraria. La mayoría de los algoritmos explota una observación importante: cuando agregamos un nodo de decisión, lo que estamos haciendo es partir en dos grupos los registros que se evalúan en dicho nodo. Si te fijas, cuando creamos el árbol manualmente, buscábamos expresiones que dividieran a los grupos buscando que todos los registros de los sub-grupos pertenecieran a la misma categoría. En términos más formales, preferíamos formar grupos homogéneos. Esto es muy importante, ya que ahora tenemos una manera de guiar la búsqueda, pues podemos evaluar si es conveniente agregar un nodo o no, midiendo que tan homogéneos son los registros que cubren las expresiones.

Uno de los primeros algoritmos de inducción árboles de decisión fue propuesto por Hunt, Marin, and Stone (1966) en el trabajo de *Concept Learning System (CLS)* (Barros et al. 2015). Este trabajo ha sido la base para otros algoritmos actuales como ID3 (J. Ross Quinlan 1986), su extensión C4.5 (J Ross Quinlan 1993) y CART (Breiman et al. 1984). Estos algoritmos recursivos básicamente buscan dividir el conjunto de datos en sub-grupos cada vez más homogéneos o puros (Tan, Steinbach, and Kumar 2007):

1. Para un nodo t vamos a considerar el conjunto de registros D_t que llegan al el. Si todos los registros en D_t pertenecen a la misma clase y_t , entonces el nodo t se considera un **nodo hoja** y

se le asigna la etiqueta y_t .

2. En el caso de que en D_t haya registros más de una clase, entonces debemos de seleccionar una nueva **condición de selección** agregando un nuevo nodo hijo para cada una de las condiciones. De manera recursiva, se continúa haciendo lo mismo para los nodos hijo.

El componente importante de estos algoritmos es precisamente la selección de la nueva condición. Ya que se seleccionará la que produzca sub-grupos más puros, como vimos anteriormente. También se debe de considerar el caso de que haya nodos para los que el conjunto D_t sea nulo. En este caso se puede asignar la etiqueta y_t que más se repita en el nodo padre. También puede haber un caso en el que haya registros con las mismos datos en sus propiedades pero con clases distintas. En este caso también se crea un **nodo hoja** la etiqueta y_t que más se repita en D_t . Las métricas para evaluar que tan buena es una condición de selección, son medidas de pureza de los conjuntos resultantes en caso de división así como del D_t sin dividir. Las más utilizadas son:

$$\text{Entropía}(D_t) = - \sum_{y \in Y} p(x) \log_2 p(x)$$

Donde,

- D_t – El conjunto de registros para los que la entropía será calculada. A veces se abrevia como t
- Y – El conjunto de clases en D_t
- $p(x)$ – La proporción del número de registros con las clase y contra el número de registros en D_t

Se selecciona el atributo que genere el D_t con **menor** entropía.

Otros algoritmos consideran el coeficiente de Gini:

$$\text{Gini}(D_t) = 1 - \sum_{y \in Y} [p(x)]^2$$

Una vez calculada la pureza de los nodos hijo, se debe comparar contra la pureza del nodo padre para ver si conviene hacer la división, ya que debemos preferir a los árboles con menor número de nodos, más adelante en el tema de sobre-entrenamiento justificaremos el porqué. Para tomar esta decisión se puede utilizar una medida de Ganancia (también llamada Ganancia de Información), denominada como Δ la cual considera la impureza antes (del nodo padre) y después de la división (nodos hijo) (Tan, Steinbach, and Kumar 2007):

$$\Delta = I(\text{padre}) - \sum_{j=1}^k \frac{N(h_j)}{N} I(h_j)$$

Donde,

- $I(t)$ es la impureza de los datos en cierto nodo
- N es el número de registros en el nodo padre
- $N(h_j)$ es el número de registros en el nodo hijo, h_j .

En algoritmos como el ID3 se calcula la Ganancia para cada atributo y se elige subdividir (o no) el nodo t considerando el atributo con **mayor** Ganancia.

Ejercicio

- Implementa o utiliza una biblioteca para probar algún algoritmo de inducción de árboles de decisión en los siguientes conjuntos de Zoo y Spam en SMS :
- Prueba con distintas métricas de pureza como el coeficiente Gini o Entropía.
- ¿El algoritmo tiene algún parámetro para ajustar que tanto se dividen los nodos?
- ¿Como puedes comparar el desempeño al cambiar los parámetros del algoritmo?

La Matriz de confusión

Una matriz de confusión (Kohavi and Provost 1998) es una tabla que nos permite visualizar el desempeño de los algoritmos de clasificación. En las columnas y renglones se especifican las categorías que se consideraron en la predicción, en el mismo orden. En las columnas se contabilizan los objetos que se han asignado a dicha categoría según la predicción, por otro lado en los renglones se contabilizan los objetos que realmente pertenecen a esa categoría. Por ejemplo en la Figura 2 tenemos una matriz de confusión para cierto clasificador del conjunto de datos Iris:

		Predicción		
		Setosa	Virginia	Versicolor
Real	Setosa	50	0	0
	Virginia	0	48	2
	Versicolor	0	1	49

Figura 45: Matriz de confusión de un clasificador para el conjunto de datos Iris

Esta matriz la interpretamos de la siguiente manera:

Primero vemos que tenemos tres categorías y de cada una tenemos 50 objetos en el conjunto de datos de prueba. Esto lo sabemos sumando los valores de cada renglón. Ahora, podemos decir que el clasificador tiene una exactitud del 100% al clasificar flores de tipo Setosa ya que todos los objetos a los que se les ha asignado dicha categoría efectivamente son de ese tipo. Esto lo vemos en la columna setosa, ya que el total los cincuenta objetos están en el renglón de setosa. Si el clasificador se hubiera equivocado, por ejemplo clasificando un objeto setosa como Virgínica, el renglón de Setosa tendría 49 y el renglón de Virgínica tendría el valor de uno. Este es el caso de los objetos clasificados como Versicolor, ya que fueron 51 en total, clasificando dos objetos erróneamente como Versicolor cuando en verdad eran Virgínica. Esto lo sabemos por el valor de 2 en la celda Renglón Virgínica (Real) y Columna Versicolor (Predicción). Un clasificador sin errores debería tener 50 en cada celda de la diagonal y ceros en todas la otras celdas.

Para los casos de clasificación binaria, como es el caso de la clasificación de correo legítimo (comúnmente llamado ham) e ilegítimo (comúnmente llamado Spam) podemos tener dos tipos de error. El primero sería clasificar un correo como legítimo cuando en realidad es Spam, esto tiene la desventaja de que veríamos correos spam en nuestra bandeja de entrada. Por otro lado el segundo tipo de error es más grave, clasificar un correo legítimo como Spam, en este caso no veríamos el correo cuando tal vez era importante. En ocasiones puede ser muy importante que no se cometa cierto tipo de error, sobre todo cuando se trata de diagnosticar una enfermedad. Por ejemplo, al detectar la presencia de un tumor cancerígeno. En estos casos la matriz de confusión consideraría los errores como Falso Positivo, cuando el diagnóstico determina que se tiene la enfermedad erróneamente y Falso Negativo, cuando erróneamente se determina que la persona está sana. Esto se puede ver en la Figura 3.

		Valor Predicho	
		Positivo	Negativo
Valor Real	Positivo	Verdadero Positivo	Falso Negativo
	Negativo	Falso Positivo	Verdadero Negativo

Figura 46: Matriz de confusión para un clasificador binario

A partir de los datos contenidos en la matriz de confusión se pueden calcular ciertas métricas del

desempeño del algoritmo:

La exactitud mide simplemente la proporción de predicciones correctas sobre el total de predicciones realizadas:

$$\text{Exactitud} = \frac{VP + VN}{VP + VN + VP + FN}$$

La sensibilidad (también llamada exhaustividad o recall), mide la proporción de Verdaderos Positivos predichos. Por ejemplo, en el caso de una prueba para detectar una enfermedad, la sensibilidad nos dice cuantas personas enfermas fueron efectivamente detectadas como tal (Altman and Bland 1994). Un clasificador con una sensibilidad sugiere pocos falsos negativos.

$$\text{Sensibilidad} = \frac{VP}{VP + FN}$$

Por otro lado la Especificidad mide la proporción de Verdaderos Negativos, ¿Cuántas personas efectivamente no tienen la enfermedad?.

$$\text{Especificidad} = \frac{VN}{VN + FP}$$

La precisión mide la proporción de verdaderos positivos reales sobre el total de predicciones positivas:

$$\text{Precisión} = \frac{VP}{VP + FP}$$

Por otro lado el valor de predicción negativo (R. Parikh et al. 2008), se refiere a la proporción de predicciones negativas correctas. Volviendo al ejemplo de la detección de enfermedades es el porcentaje de pacientes que correctamente se ha predicho que no tienen la enfermedad.

$$\text{Valor de predicción negativo} = \frac{VN}{VN + FN}$$

El F-Score es una medida de exactitud que considera la media armónica de los valores de precisión y sensibilidad.

$$F_1 = \frac{2}{\frac{1}{\text{sensibilidad}} + \frac{1}{\text{precisión}}}$$

La ventaja del F-Score es que califica al clasificador considerando las dos medidas importantes. Digamos que un buen F-Score garantiza pocos falsos positivos o negativos.

Ejemplo de una matriz de confusión

Ejercicio

- Genera las matrices de confusión para distintos parámetros de un algoritmo de clasificación.
- Calcula además las medidas de exactitud y precisión

Sobreajuste de modelos

Un problema de los algoritmos de aprendizaje supervisado es el sobreentrenamiento, esto sucede cuando se minimiza demasiado el error de clasificación en la fase de entrenamiento o si se generan modelos demasiado ajustados. Veamos un ejemplo gráficamente:

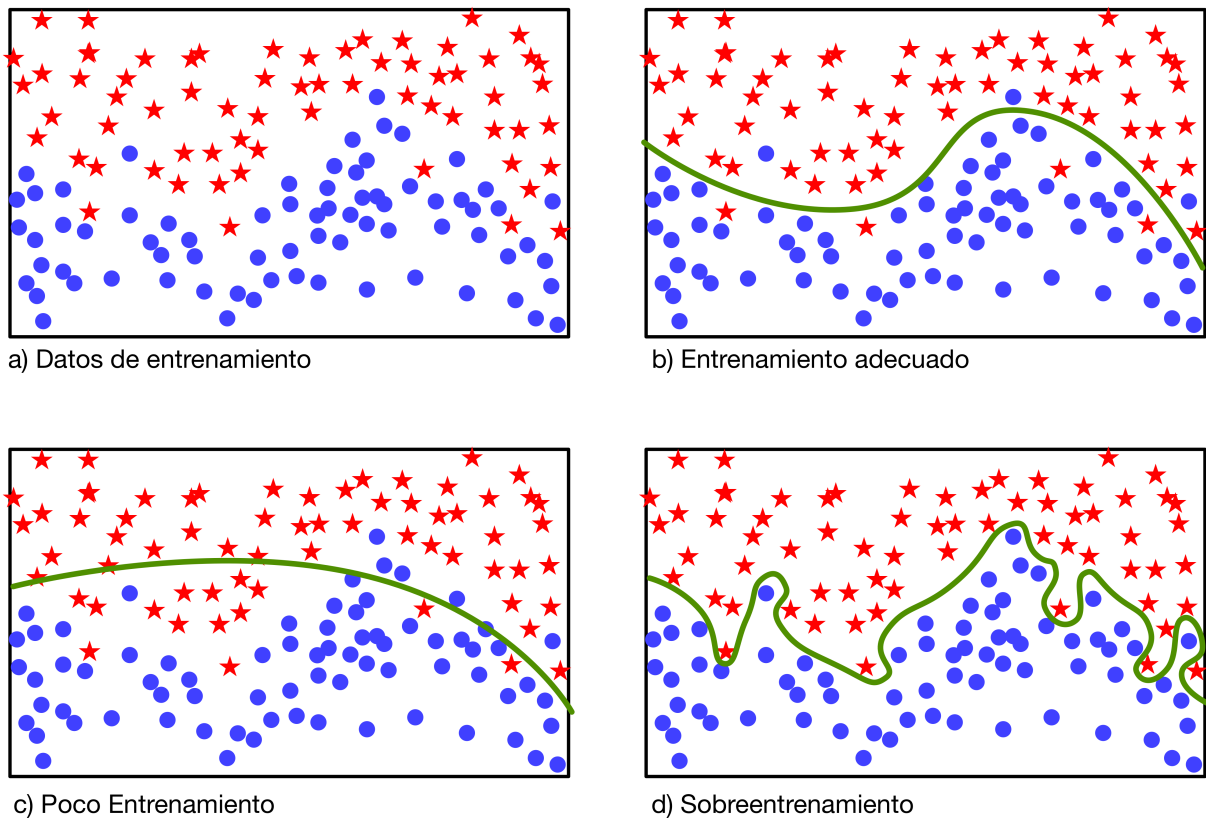


Figura 47: Ejemplo gráfico de sobreajuste de modelos debido al sobreentrenamiento de un algoritmo supervisado

En el recuadro a, podemos ver los datos utilizados para entrenar al algoritmo. El recuadro b, nos muestra un modelo el cual se representa por la curva verde, el error de clasificación como podemos observar todavía es alto por lo que intentamos ajustarlo más. En el recuadro c vemos un modelo que se

ajusta bien, sigue habiendo cierto error, pero el modelo es adecuado. Si intentamos seguir disminuyendo el error, podemos caer en el sobreentrenamiento como se muestra en el cuadro d. En este caso no se tiene un error, pero el modelo resultante es muy elaborado y requiere más información para expresarse. Por ejemplo, al crear las gráficas manualmente en un editor de vectores de líneas, para el primer caso se requiere solo una curva bezier con un punto medio, para el segundo dos y para el caso de sobreentrenamiento se requieren 23. Esto significa que aun en este ejemplo, la cantidad de información requerida para expresar el modelo es mayor. Esta idea la observamos en otros modelos, por ejemplo en los árboles de decisión, donde un árbol con muchos nodos, requiere mayor información para expresarse que uno con menos nodos. Un caso típico de la relación entre la cantidad de entrenamiento y los errores en las etapas de prueba y entrenamiento la podemos ver en la siguiente figura. En este caso la cantidad de entrenamiento se muestra como el número de iteraciones o generaciones en el caso de un algoritmo de redes neuronales. La línea punteada indica la cantidad de entrenamiento adecuada, mayor disminución en el error de entrenamiento significaría un incremento en el error en la etapa de prueba.

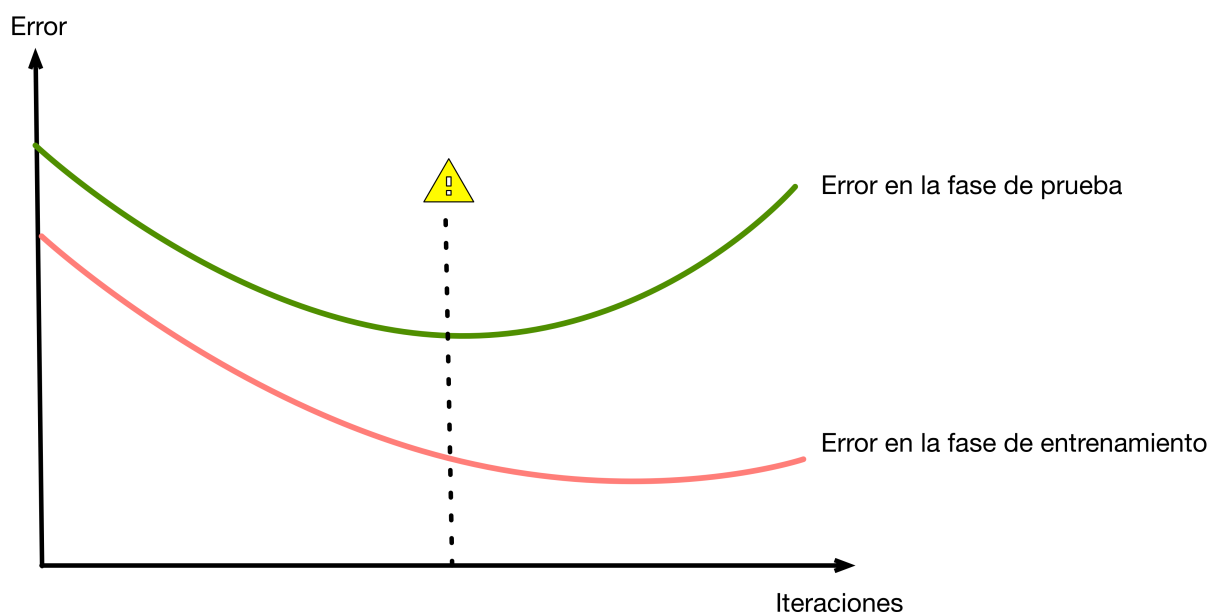


Figura 48: Relación entre la cantidad de entrenamiento y los errores en las etapas de prueba y entrenamiento

Otros de los motivos por lo que se pueden generar modelos con sobreajuste son:

- Una elección incorrecta del conjunto de datos de entrenamiento. Por ejemplo, alguien podría simplemente tomar los primeros n registros en lugar de tomar una muestra aleatoria. Por ejemplo en el conjunto de datos de Iris, los datos se encuentran ordenados por categoría, por lo que podría sobre entrenarse en ciertas clases.

- El conjunto de datos no es representativo de los datos reales.
- Existe ruido en los datos, por ejemplo no están clasificados correctamente o se incluyen muchos datos atípicos.

Evaluando el desempeño de los clasificadores

Como parte del proceso de los algoritmos supervisados, vamos a generar distintos modelos y un problema importante será seleccionar el modelo adecuado. ¿Como podemos asegurarnos de que nuestro modelo tiene la complejidad justa y no está sobreentrenado? ¿Los datos que utilizamos para entrenar y probar hacen la diferencia?. Para estimar el desempeño del modelo debemos hacerlo utilizando los datos de prueba, tratando de que la estimación sea lo menos sesgada posible. A continuación se describen algunos de los métodos utilizados para estimar el desempeño de nuestros modelos. Estas técnicas se enfocan en la selección adecuada de los datos de entrenamiento y prueba.

Holdout

Este método consiste en dividir el total de los datos disponibles en dos conjuntos complementarios. Por ejemplo, tomando el 70% de los datos para entrenar y el 30% restante para los datos de prueba. La proporción de los dos conjuntos de datos se define por el analista, pero es común que por lo menos se reserve un 50% de los datos para entrenar. Este es un método muy sencillo y rápido de ejecutar, pero tiene varias desventajas (Tan, Steinbach, and Kumar 2007):

1. Se tiene un menor número de registros para realizar el entrenamiento.
2. Existe una dependencia a la proporción entre los datos de entrenamiento y prueba.
3. Los conjuntos resultantes no son independientes. Por ejemplo, si una clase está sobrerrepresentada en un conjunto es probable que este infrarepresentada en el otro.

Holdout con muestras aleatorias

Una manera de mitigar el sesgo del método anterior es realizar varias veces la prueba, utilizando distintas muestras aleatorias con las mismas proporciones. Así la estimación será el promedio del error en las pruebas individuales. Uno de los problemas de esta estrategia es que no se puede garantizar el número de veces que se selecciona un registro individual. Un registro podría estar en todos los conjuntos de entrenamiento o en ninguno.

Validación Cruzada o Cross-validation

La versión más común del método de validación cruzada (o crossvalidation en inglés) es la que utiliza cierto número k de particiones, por lo que se llama validación cruzada de k -particiones (k -fold). La técnica consiste en dividir primero el conjunto total de datos en k particiones del mismo tamaño. La evaluación se realizará k veces, utilizando en cada una partición distinta para probar y el resto de las particiones para entrenar.

La técnica **leave one out** es un caso de validación cruzada en la cual en lugar de utilizar particiones, se toma a cada registro individual como conjunto de prueba (en este caso el conjunto solo tiene un registro) y el resto de los registros para entrenar.

Métodos para comparar clasificadores

Una de las tareas más importantes de un minero de datos es el seleccionar al mejor clasificador para cierto conjunto de datos. Este problema puede ser muy variado ya que en ocasiones los clasificadores disponibles no han sido entrenados con la misma cantidad de datos o en el caso de algoritmos publicados en la literatura no se conocen las condiciones exactas utilizadas cuando se midió su desempeño.

Normalmente se utilizan pruebas estadísticas para comprobar la hipótesis de que un clasificador tiene un mejor desempeño que otro. Se debe tener cuidado al llevar a cabo la prueba ya que algunas pruebas tienen una alta probabilidad de cometer un error Tipo I (determinar que hay una diferencia cuando no la hay) (1998).

Al diseñar las pruebas debemos considerar las fuentes de variación (Dietterich 1998):

1. La variación aleatoria existente en la selección de los datos de prueba. Un clasificador podría ser mejor que otro en este subconjunto de datos, pero no cuando se consideren todos u otra muestra distinta.
2. El mismo problema existe en la elección de los datos de entrenamiento.
3. Los algoritmos de clasificación en muchos casos no son deterministas. Por ejemplo, una red neuronal inicia a partir de un estado aleatorio.

Algunas de las pruebas utilizadas son:

1. Prueba de McNemar (1947) utilizando los mismos conjuntos de datos para ambos clasificadores.
2. Utilizando una validación cruzada con un número k lo suficientemente grande (>10) para que la diferencia entre los errores tenga una distribución normal. Se registran los errores para cada iteración de la validación cruzada (con los mismos datos) y se hace una prueba de hipótesis t para la diferencia de los errores.

Ejercicio

Compara utilizando una prueba estadística los clasificadores que realizaste en la sección anterior.

Otras Técnicas de Clasificación

Clasificadores basados en reglas

En la sección anterior, el modelo utilizado para clasificar se representaba como un árbol de decisión. Los clasificadores que veremos a continuación representan al modelo como conjunto de reglas **IF-THEN**. Estas reglas son similares a las condiciones de los nodos de los árboles de decisión, una regla para clasificar hoteles podría ser:

```
1 Regla 1: IF alberca = sí THEN WifiGratis = Sí.
```

Las reglas tienen dos partes:

1. El antecedente o precondition **IF** en la cual hay expresiones condicionales sobre los atributos, de manera opcional utilizando operadores lógicos, por ejemplo, *alberca = sí* OR *estrellas < 5*.
2. El consecuente **THEN** donde se expresa la predicción de la clase o categoría a la que pertenece el objeto.

Ejemplo

Recordemos el ejemplo de los hoteles visto anteriormente:

id	hotel	estrellas	alberca	WiFi Gratis
1	Mariots	2	Sí	Sí
2	Díaz Inn	2	No	Sí
3	Mandarina	5	Sí	No
4	Le Hotel	3	Sí	No
5	Halton	4	No	Sí
6	Tromp	4	Sí	No

Un modelo basado en reglas para clasificar a los hoteles puede ser:

```
1 IF estrellas = 5 OR estrellas = 3 THEN WiFiGratis = Sí
2 IF alberca = No THEN WiFiGratis = Sí
3 IF alberca = Sí THEN WiFiGratis = No
```

Los algoritmos clasificadores basados en reglas extraen las reglas de los datos mediante:

1. La extracción de reglas a partir de árboles de decisión. Las rutas de la raíz a las hojas son las precondiciones las hojas son los consecuentes (Han, Pei, and Kamber 2011).
2. Se generan las reglas a partir de los datos, utilizando un algoritmo de cobertura, por ejemplo RIPPER (Cohen 1995) o CN2 (Clark and Niblett 1989):

k vecinos más próximos

Este algoritmo se basa en una idea sencilla: asignar la clase que tengan los objetos del conjunto de entrenamiento que más se parezcan al objeto a clasificar. Para calcular la similaridad entre dos objetos, se puede calcular simplemente la distancia euclidiana entre los vectores de características de cada objeto. El parámetro k especifica cuantos objetos (ordenados por similaridad) se van a considerar para la asignación. En el caso más sencillo se le asigna al objeto la clase mayoritaria.

El método es muy fácil de implementar. La selección del valor de k puede afectar el desempeño del algoritmo. La figura muestra un ejemplo de clasificación para distintos valores de k . Si elegimos un valor de k muy pequeño puede ser afectado por el ruido o valores atípicos, por otro lado valores muy grandes se tenderá a considerar un número mayor de datos con otras clases. El valor del voto que asigna cada objeto puede ponderarse con respecto a la distancia.

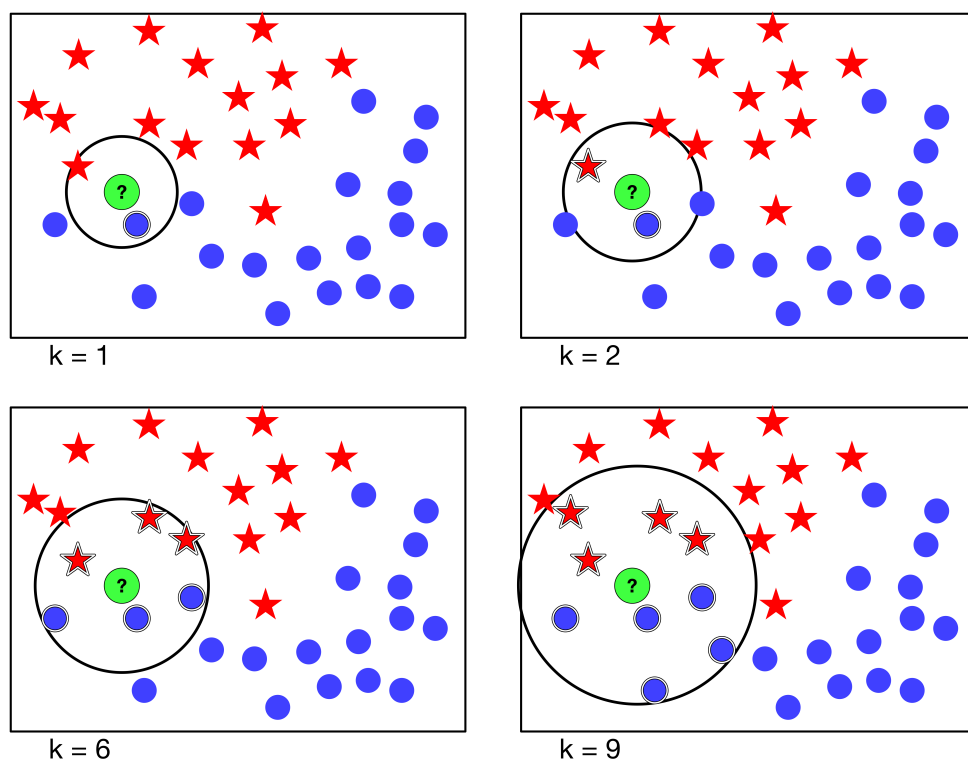


Figura 49: Efecto de la elección del número de vecinos k

Naïve Bayes

Este clasificador básico recibe el nombre de Naïve que se traduce al español como ingenuo. La razón de esto es que considera que los valores de los atributos de un objeto son variables independientes. Es fácil ver que esta consideración no siempre es real. Por ejemplo, para los atributos de un hotel: «número de estrellas» y «alberca» podemos imaginar que un hotel de más de 4 estrellas es muy probable que cuente con una o más. También es muy probable que un hotel de dos estrellas no cuente con una. Entonces, un clasificador Naïve Bayes considera que para una clase C dado un objeto con los atributos $\{A_1, A_2, \dots, A_n\}$ podemos calcular la probabilidad condicional:

$$P\{C|A_1, A_2, \dots, A_n\}$$

Esto significa tratar de estimar las probabilidades a partir del conjunto de datos de entrenamiento. Para clasificar un registro se debe de calcular la probabilidad condicional para cada clase C_j y elegir la mayor:

$$P\{C_j|A_1, A_2, \dots, A_n\} = \frac{P\{A_1, A_2, \dots, A_n|C_j\} \cdot P(C_j)}{P\{A_1, A_2, \dots, A_n\}}$$

Como solo estamos interesados en elegir la mejor opción basta con calcular:

$$P\{A_1, A_2, \dots, A_n|C_j\} \cdot P(C_j)$$

Si consideramos (ingenuamente) los atributos como variables independientes, el primer término se simplifica:

$$P\{A_1, A_2, \dots, A_n|C_j\} = P\{A_1|C_j\} \cdot P\{A_2|C_j\} \cdots P\{A_n|C_j\}$$

Ejemplo

Como ejemplo vamos a utilizar un fragemento del conjunto de datos de enfermedades agudas y utilizaremos un clasificador Naïve Bayes para determinar si un paciente tienen una inflamación aguda de la vejiga.

Datos:

temp	nausea	dolor lumbar	necesidad constante	dolor al orinar	comezón en la uretra	infección
35.5	no	yes	no	no	no	no
36.0	no	yes	no	no	no	no
36.8	no	no	yes	yes	yes	yes
37.0	no	no	yes	yes	yes	yes
37.4	no	no	yes	no	no	yes
37.1	no	no	yes	no	no	yes
37.6	no	no	yes	yes	no	yes
37.8	no	no	yes	yes	yes	yes
38.0	no	yes	yes	no	yes	no
39.0	no	yes	yes	no	yes	no
40.4	yes	yes	no	yes	no	no
40.8	no	yes	yes	no	yes	no

temp	nausea	dolor lumbar	necesidad constante	dolor al orinar	comezón en la uretra	infección
41.5	yes	yes	no	yes	no	no
41.5	no	yes	yes	no	yes	no

Paciente:

temp	nausea	dolor lumbar	necesidad constante	dolor al orinar	comezón en la uretra	infección
36.6	no	no	yes	yes	yes	yes

Como primer paso vamos a calcular $P(C_j)$:

$$P(C_j) = \frac{N}{N_c}$$

$$P('yes') = 6/14 = 0.429$$

$$P('no') = 8/14 = 0.571$$

Para calcular los atributos discretos:

$$P(A_i|C_k) = \frac{|A_i k|}{N_C k}$$

Donde,

- $|A_i k|$ es el número de registros con el atributo $A_i k$ pertenecientes a la clase C_k
- $N_C k$ es el número de registros pertenecientes a la clase C_k

En la siguiente tabla tenemos las probabilidades de los atributos discretos:

clase	nausea	dolor lumbar	necesidad constante	dolor al orinar	comezón en la uretra
yes	0.14	0.57	0.71	0.43	0.5
no	0.86	0.43	0.29	0.57	0.5

Para el caso de datos continuos hay varias opciones @[tan2007introduction]:

- Se discretiza el rango creando particiones y asignando un solo valor a cada una.

- Se hace una división de dos vías a partir de un valor.
- Se estima la densidad de la probabilidad.
 - Se asume que los valores siguen una distribución normal.
 - Se utilizan los datos para calcular los parámetros de la distribución.
 - Una vez que se conoce la distribución se puede calcular la probabilidad condicional.

En este caso tenemos al atributo temperatura como atributo continuo.

clase	media	stdev	distribución normal $\mu=36.3$
yes	37.28	2.38	0.16
no	39.09	0.34	0

Incluso antes de multiplicar las probabilidades vemos que en el atributo «temperatura» la clase «no» tiene cero de probabilidad, por lo que la probabilidad de la clase «yes» será mayor.

$$P(\text{Paciente}|\text{No}) = 0.86 * 0.43 * 0.29 * 0.57 * 0.5 * 0.16 = 0.0048$$

$$P(\text{Paciente}|\text{Yes}) = 0.14 * 0.57 * 0.71 * 0.43 * 0.5 * 0 = 0$$

$$P(\text{Paciente}|\text{No})P(\text{No}) = 0.0027$$

$$P(\text{Paciente}|\text{Yes})P(\text{Yes}) = 0$$

Como $P(\text{Paciente}|\text{No})P(\text{No})$ es mayor, **la clase para el registro Paciente es «yes»**

Redes Neuronales Artificiales

Las técnicas de clasificación que exploraremos en estos dos capítulos, las *redes neuronales artificiales* y las *máquinas de vectores de soporte* siguen una misma idea: encontrar funciones que definan un frontera de decisión. Por ejemplo, en el caso de una clasificación binaria tendríamos una función que tome como entrada un vector de características y lo asigne a una de las clases. Para entender mejor esta idea vamos a empezar primero resolviendo un caso sencillo de clasificación. Los conjuntos de datos *linealmente separables* son aquellos que podríamos clasificar simplemente trazando una línea recta y diciendo de este lado es la clase A y del otro la clase B. Claro, lo de la línea recta solo sería posible si los datos estuvieran en un espacio de dos dimensiones, es por eso que de manera general hablamos de *hiperplanos* de *dimensión* — $(D - 1)$, con esto es 2D el hiperplano es de 1D (la recta) y en 3D un plano y así sucesivamente. Una manera de clasificar este tipo de conjuntos de datos es empleando funciones discriminantes.

Funciones Discriminantes

Un discriminante es una función que toma un vector $\vec{x}$ como entrada y le asigna una clase. Nos vamos a concentrar solamente en discriminantes lineales, aquellos para los que la superficie de decisión es un hiperplano. También por el momento atacaremos problemas de clasificación binarios. Una función discriminante toma como entrada un vector de características:

$$y(\vec{x}) = \vec{w}^T \vec{x} + w_0$$

donde a $\vec{w}$ se le conoce como el *vector de pesos* y a w_0 como el *sesgo* (a $-w_0$ se le conoce también como el *umbral*). Si tenemos dos clases $C = \{c_1, c_2\}$, podemos decir que si $y(\vec{x} \geq 0)$ se le asigna al objeto la clase c_1 y de lo contrario la clase c_2 . Veamos a la función discriminante gráficamente:

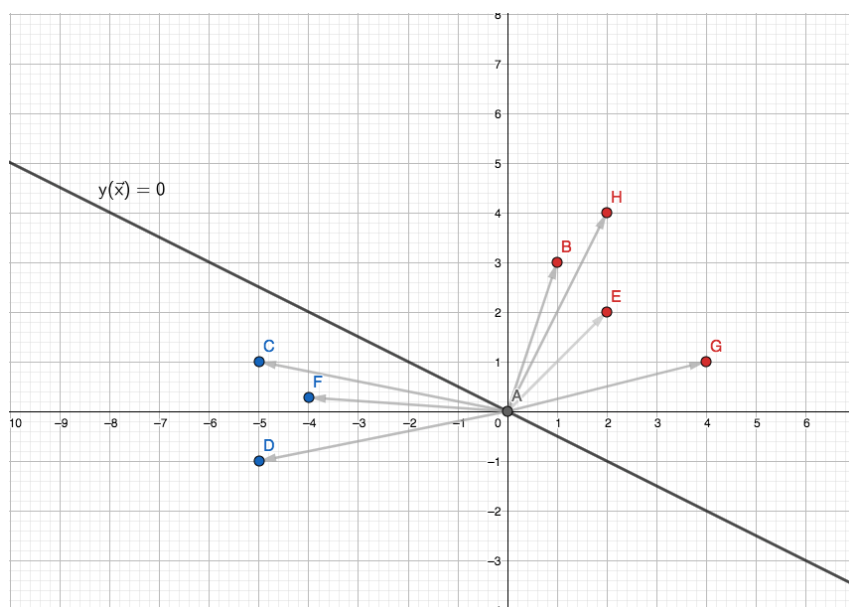


Figura 50: Objetos y función discriminante en 2D

En la gráfica vemos la representación vectorial del conjunto de datos, la clase a la que perteneces esta indicada por el color. Unos de los hiperplanos que discrimina a dichos objetos se muestra como $y(\vec{x}) = 0$. Veamos ahora como se establece este hiperplano en la figura siguiente:

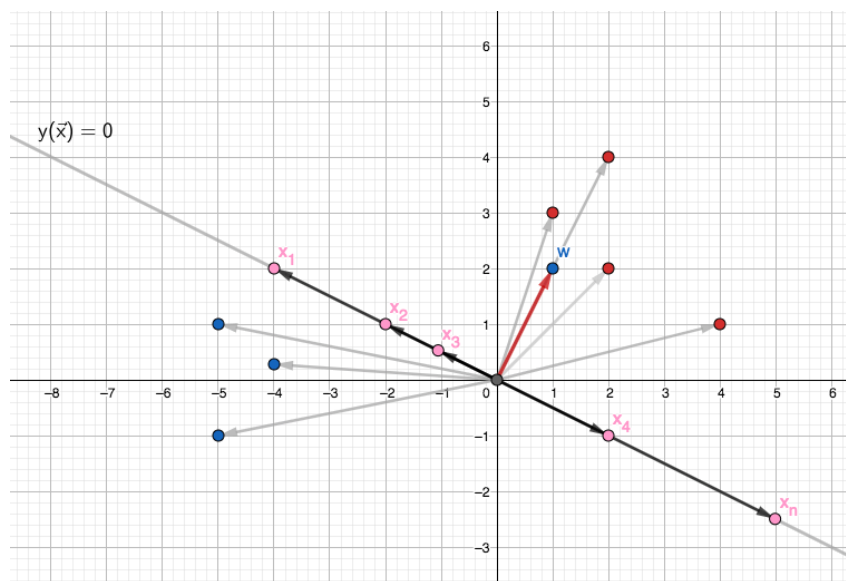


Figura 51: Función discriminante definida por $\vec{w}$ y vectores ortogonales

El hiperplano se define por medio del vector de pesos $\vec{w}$ y todos aquellos vectores que son ortogonales a él. Por ejemplo, en la gráfica $\vec{w} = (1, 2)$, si consideramos el vector de entrada $x_2 = (-2, 1)$, vemos que el producto punto entre ambos es igual a cero ya que son ortogonales, lo mismo sería para $x_1, x_3, \dots, x_n$ y todos los vectores ortogonales a w . Para cambiar la inclinación del hiperplano solamente tendríamos que ajustar a los componentes de $\vec{w}$. Ahora evaluemos el vector $\vec{x} = (1, 3)$ en rojo, para esto solo tenemos que calcular de nuevo $\vec{w}^T \vec{x}$, vemos que el resultado es positivo y para $\vec{x} = (-5, 1)$ es negativo. De esta manera sin necesidad de mover del origen al hiperplano hemos establecido una función discriminante con solo encontrar un $\vec{w}$ apropiado. Para aquellos casos en los que el hiperplano debe moverse del origen, esto se ajusta con el sesgo w_0 , como se muestra en la figura, donde el hiperplano, mostrado en azul, está fuera del origen.

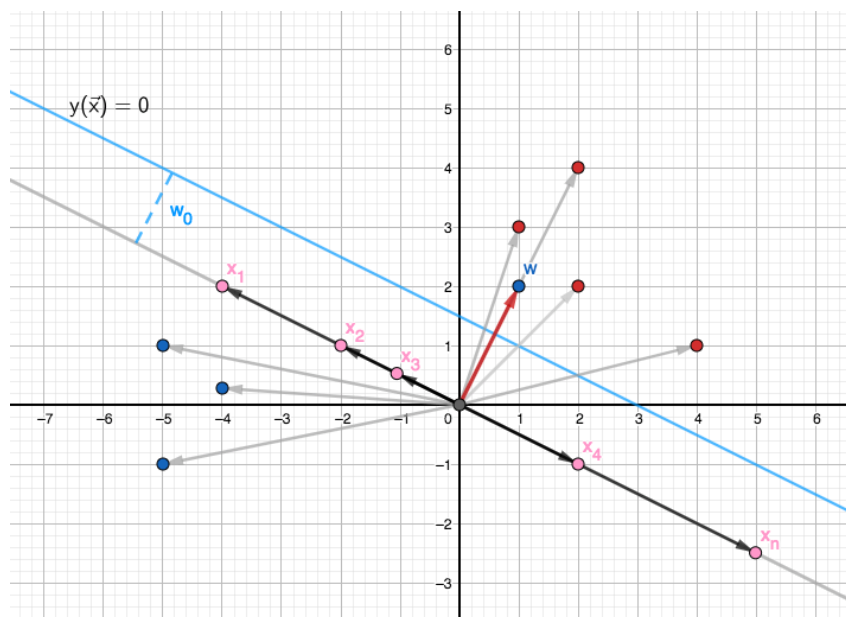


Figura 52: Función discriminante definida por $\vec{w}$, vectores ortogonales más un sesgo w_0 , en azul

El objetivo del entrenamiento en este tipo de clasificadores es resolver un problema de optimización: encontrar los parámetros $\vec{w}$ y w_0 que minimicen el error de clasificación del conjunto de datos.

El perceptrón

Vamos a ver ahora un discriminante lineal de gran importancia histórica, el perceptrón de (Rosenblatt 1962). El aunque perceptrón solo es capaz de clasificar conjuntos de datos linealmente separables, su desarrollo sentó las bases para las redes neuronales artificiales, tanto en las técnica como en la inspiración en un modelo simplificado de las neuronas biológicas. En la figura podemos ver un esquema de los componentes básicos del perceptrón.

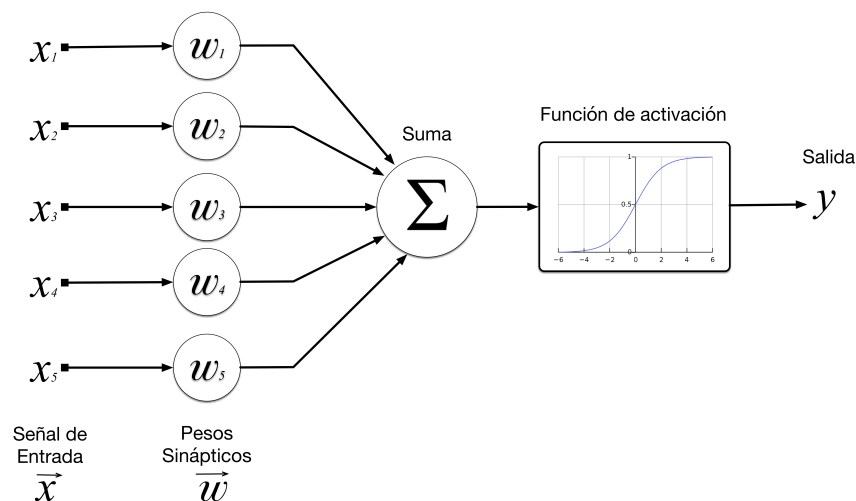


Figura 53: Componentes básicos del perceptrón

Vemos algunos componentes familiares de la función discriminante, la entrada es un vector x , en este caso cada componente se considera una señal, cada componente se multiplica por un peso y los resultados se suman, esto es el producto punto $\vec{x}^T \vec{w}$. El perceptrón agrega un componente adicional, el resultado de la suma, pasa por una función de activación, la cual decide que tanto se dispara el resultado. En el caso básico, la función de activación no lineal está dada por

$$f(a) = \begin{cases} +1, & a \geq 0 \\ -1, & a < 0 \end{cases}$$

Otro componente (Nasrabadi 2007), el cual no se considera cuando se presenta el modelo de manera esquemática, es una transformación no lineal fija que se hace al vector de entrada de la forma $\phi(\vec{w})$. Por lo que el modelo de lineal generalizado tiene la forma

$$y(\vec{x}) = f(\vec{w}^T \phi(\vec{w}))$$

Aunque el sesgo no se visualiza en el esquema, ni en la función $f()$, normalmente se incluye como $\phi_0(\vec{w}) = 1$. Es importante considerar también la diferencia de la salida de $f()$, ahora toma el valor +1 para la clase c_1 y -1 para la clase c_2 . Cuando comparemos el valor objetivo t (del inglés target) este también se debe especificar como $t \in \{-1, +1\}$. Esto nos permite tener solo una función que satisficiera $\vec{w}^T \phi(\vec{x}_n) t_n > 0$, ya que si los signos son iguales el resultado será 1 y si son distintos será -1. Lo que se busca en todos los casos es minimizar el error, por lo que el criterio perceptron de error, es la suma de todos los objetos clasificados incorrectamente para determinado $\vec{w}$:

$$E_P(\vec{w}) = - \sum_{n \in M} \vec{w}^T \phi(\vec{x}_n) t_n$$

Donde M es el conjunto de los objetos clasificados incorrectamente.

Algoritmo de Aprendizaje

Una vez definida la función objetivo podemos evaluar que tan bueno es cierto vector de pesos $\vec{w}$, esto nos sirve también para saber como ajustarlo utilizando alguna técnica optimización. Al proceso de ajustar los pesos le llamamos aprendizaje, ya que un algoritmo ajustará los pesos, (moverá a $\vec{w}$) de acuerdo al desempeño que se tenga con los datos de entrenamiento. El entrenamiento que consiste en clasificar los objetos, si se clasifica un objeto correctamente, pues no ajustamos nada, pero si se comete un error debemos ajustar a $\vec{w}$. Vamos a utilizar la técnica del gradiente descendiente estocástico (SGD) para ir ajustando los pesos de manera iterativa. Esto es posible ya que la función del error $E_P(\vec{w})$ es lineal y diferenciable. La actualización de los pesos estará dada por:

$$\vec{w}^{(\tau+1)} = \vec{w}^{(\tau)} - \eta \nabla E_P(\vec{w}) = \vec{w}^{(\tau)} + \eta \phi(x_n) t_n$$

Utilizamos al entero τ para indicar el avance en la iteración o el tiempo. Con (τ) nos referimos al vector actual y con $(\tau + 1)$ al vector en su nueva posición. La segunda expresión se refiere a la actualización propuesta por (SGD) la cual tiene el componente η que es la tasa de aprendizaje, esto nos indica que tan grande queremos que sea el movimiento del vector, también tenemos al gradiente ∇ que nos indicaría la dirección, y también el error del perceptrón E_P . En este caso la actualización se realiza con la tercera expresión, donde en caso de error de clasificación a $\vec{w}^{(\tau)}$ le sumamos o restamos (dado por t_n) el vector que se clasificó incorrectamente $\vec{x}_n$. En este caso η puede ser igual a 1. En caso de que los datos sean efectivamente separables linealmente, el algoritmo está garantizado que el algoritmo converge.

Red Neuronal Artificial Multicapa

Un perceptrón por si solo, es incapaz de clasificar datos como los mostrados en la figura, en este caso los datos modelan a una compuerta lógica XOR. Este problema si puede ser modelado con una red conocida como *perceptrón multi capas* (Multi Layer Perceptron MLP). Una MLP consiste normalmente de mínimo tres capas como vemos en la figura. Digamos que iniciamos con un perceptrón pero en lugar tomar la salida, esta alimenta (feeds-forward) a otro conjunto de perceptrones en una nueva *capa oculta*, puede haber más capas ocultas y cada capa oculta puede tener distinto número de nodos. Las capas ocultas también tienen funciones de activación no lineales.

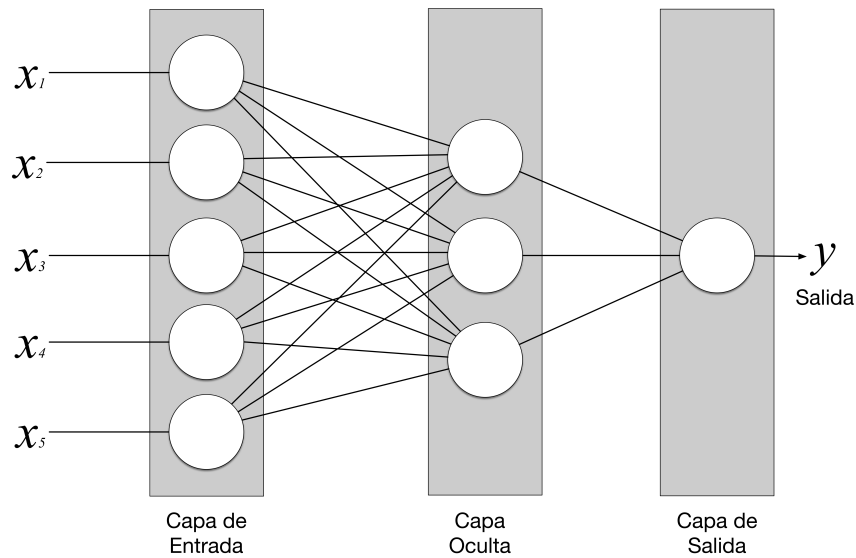


Figura 54: Red neuronal artificial multicapa

Al igual que con el perceptrón, el aprendizaje de los pesos es lo que hace la magia. En este caso el aprendizaje es más complicado, pues la función del error no es lineal como antes. El algoritmo de aprendizaje más utilizado para este tipo de redes es *backpropagation* utilizando también una técnica basada en el gradiente descendente.

Support Vector Machines

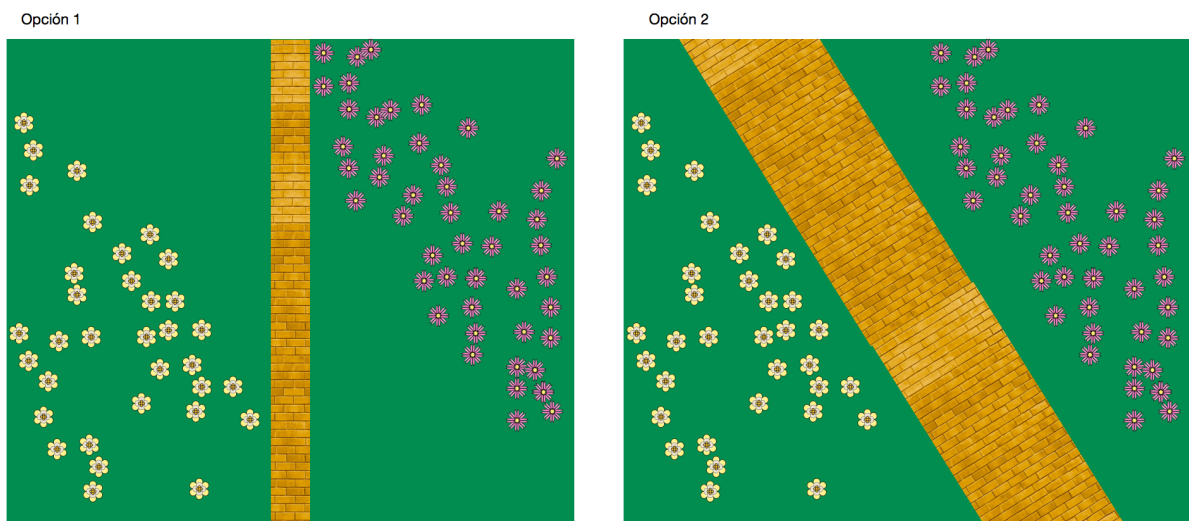


Figura 55: Dos opciones para el camino que pasa por el jardín

El algoritmo de Support Vector Machines (SVM) también es un algoritmo que utiliza una función discriminante lineal para hacer clasificación. Lo que distingue a SVM de otros algoritmos es una restricción adicional que pone a la función discriminante. La función debe estar en una posición tal, que maximice el margen de esta función. El concepto de máximo margen lo podemos entender con un ejemplo. Digamos que yo tengo un jardín dos grupos de flores linealmente separados, como se muestra en la figura. Justo en la separación de ambos grupos y quiero construir un camino de ladrillos amarillos para pasar por el jardín. La única restricción que tengo es que no puedo tocar ninguna de las flores. Me presentan dos opciones y ambas cumplen con lo dicho. ¿Qué diferencia hay entre ellas?

1. La primera opción nos brinda un camino muy angosto aunque cumple su cometido. Digamos que esta opción tiene un margen algo angosto.
2. La segunda opción también cumple, pero como está inclinada y debido a la posición de las flores nos permite ensanchar el camino. Digamos ahora que esta opción tiene un margen mayor.

Si en ambos casos trazo una recta que pase justo a la mitad de los caminos, esta recta sería la función discriminante y el camino en sí sería el margen.

Bueno, SVM sugiere eso, buscar una función en tal posición que maximice dicho margen. Ni la función discriminante, ni el perceptrón se ponen exigentes a momento de ajustar los pesos, se detienen en cuanto clasifican correctamente a los objetos. Ahora, la ventaja de maximizar el margen obliga al algoritmo a explorar más, pero al cumplir con el objetivo tendrá posiblemente un mejor clasificador. La razón tiene que ver con los datos que no se han visto, los datos de prueba. Un margen mayor, es más general, casi por definición no estará sobre ajustado. De hecho en el ejemplo, podemos decir que la opción con mayor margen refleja o aprendió mejor la manera en que crecen las flores en el jardín.

El caso linealmente separable

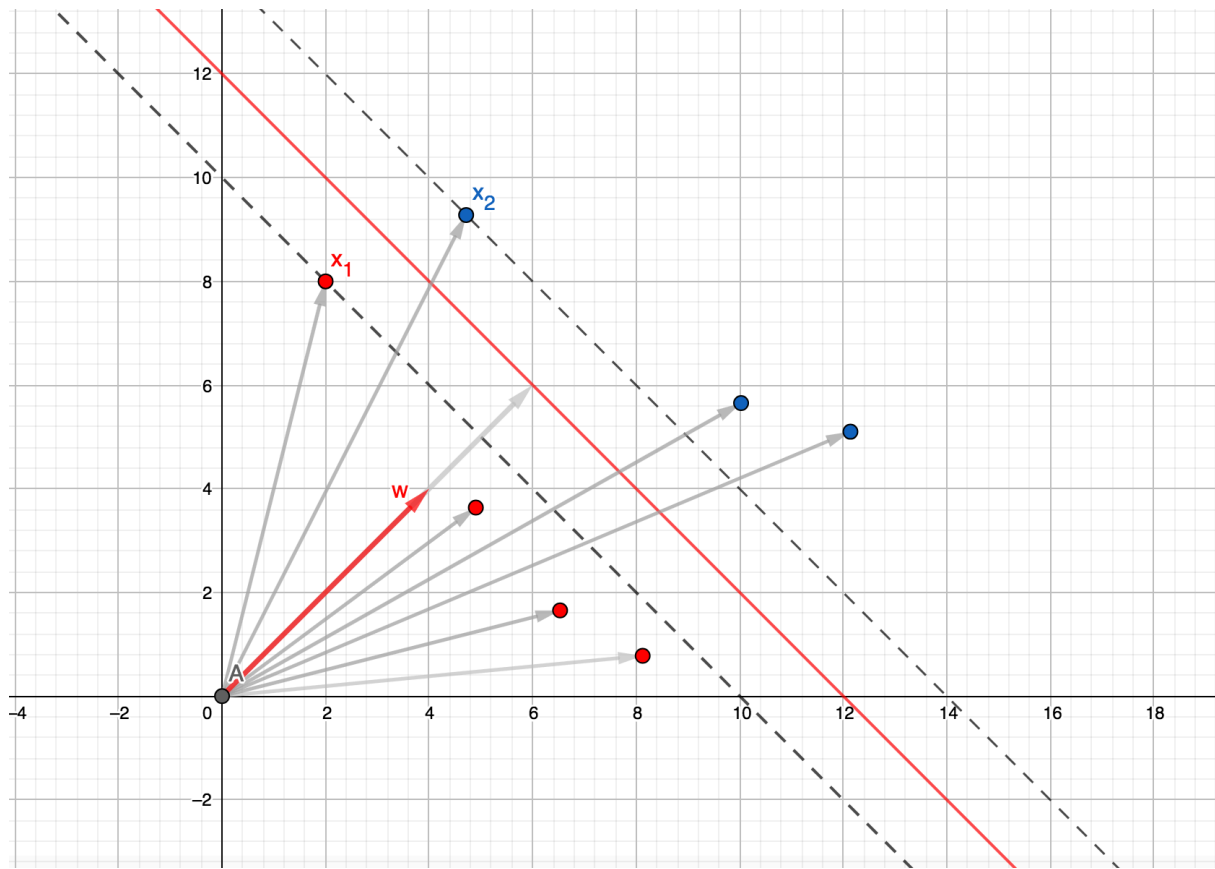


Figura 56: Vectores de soporte

Vamos a considerar una función discriminante lineal, recordemos que se define como:

$$y(\vec{x}) = \vec{w}^T \vec{x} + w_0$$

En la literatura de SVM (Cortes and Vapnik 1995) al sesgo se le conoce como b (por sesgo en inglés *bias*), esto puede crear confusión por que también se utiliza un vector $\vec{x}_0$. Para esta sección vamos a renombrar entonces a la función discriminante como (también se asumirá la transpuesta de $\vec{w}$):

$$y(\vec{x}) = \vec{w} \cdot \vec{x} + b$$

Esta frontera se muestra en rojo en la figura, y vemos al vector w ortogonal a la hiperplano $y(\vec{x}) = 0$. Como el hiperplano no está en el origen sabemos que el valor de b no es cero. El conjunto de datos esta representado por vectores de dos clases: rojos y azules. Estos objetos están separados linealmente.

Fíjate como en este caso el hiperplano tiene un margen máximo con respecto a los vectores $\vec{x}_1$ y $\vec{x}_2$, rojo y azul respectivamente. Estos son vectores de los datos de entrenamiento, correctamente clasificados, cercanos a la frontera y nos ayudan a encontrar el hiperplano con máximo margen, si, estos son los vectores de soporte. Nos apoyamos en ellos para encontrar al hiperplano. ¿Cómo nos ayudan?. Bueno, si sabemos que estos dos vectores son los más cercanos a la frontera y están clasificados correctamente, es solo cuestión de encontrar al hiperplano que este más lejos de los dos o el que esté en la mitad es lo mismo. Ocupamos ver como podemos medir la distancia entre ellos y también como expresar a ambos hiperplanos. Los hiperplanos se expresan de la siguiente manera:

$$\vec{w}^T \vec{x}_2 + b = 1 \quad \vec{w}^T \vec{x}_1 + b = -1$$

Si evaluamos los vectores $\vec{x}_1$ y $\vec{x}_2$, para los valores de w y b actuales, estos tendrán el signo correcto, pero no los valores 1 y -1. ¿Qué pasaría si multiplicamos a w o a b por un escalar?. Se generaría un hiperplano paralelo a $\vec{w}^T \vec{x} + b$. Entonces solo es cuestión de escalar ambos parámetros de la frontera de decisión para que encontrar los hiperplanos paralelos. El margen está dado por:

$$\frac{2}{\|\vec{w}\|} = \frac{2}{\sqrt{\vec{w} \cdot \vec{w}}}.$$

Decimos entonces que el hiperplano óptimo es aquel que minimiza a $\vec{w} \cdot \vec{w}$ bajo la restricción general:

$$y_i(\vec{w}^T \vec{x} + b) \geq 1, i = 1, \dots, N$$

Este problema de optimización que se resuelve con técnicas de programación cuadrática. Una vez encontrados w y b el clasificador debe incluir los multiplicadores de Lagrange.

Métodos Ensamble

Cuando vamos a tomar una decisión difícil, por ejemplo un juicio, un padecimiento médico delicado, decidir el rumbo de una empresa, y otros. Es preferible consultar a un grupo de expertos, ya que la experiencia de alguna manera se puede complementar, habrá diferentes áreas de experiencia, distintos puntos de vista e incluso una probabilidad que todos cometan todos el mismo error de omisión. Esta misma estrategia se ha utilizado con éxito en minería de datos. En nuestro caso, cada modelo de clasificación puede ser visto un experto distinto, entrenado con distintos enfoques (datos de entrenamiento) o hasta distintos tipos de entrenamiento (técnicas de clasificación). En un método *ensamble* se utilizan varios métodos de clasificación con el objetivo de mejorar el desempeño predictivo.

Los métodos ensamble, en general, siguen de una u otra manera el proceso ilustrado en la figura. Se tienen n fragmentos de los datos de entrenamiento, con los cuales se entrenan independientemente

a igual número de clasificadores, una vez entrenados, se les pide clasificar a los datos de manera independiente y se tiene al final un módulo encargado de tomar la decisión a partir de las predicciones individuales.

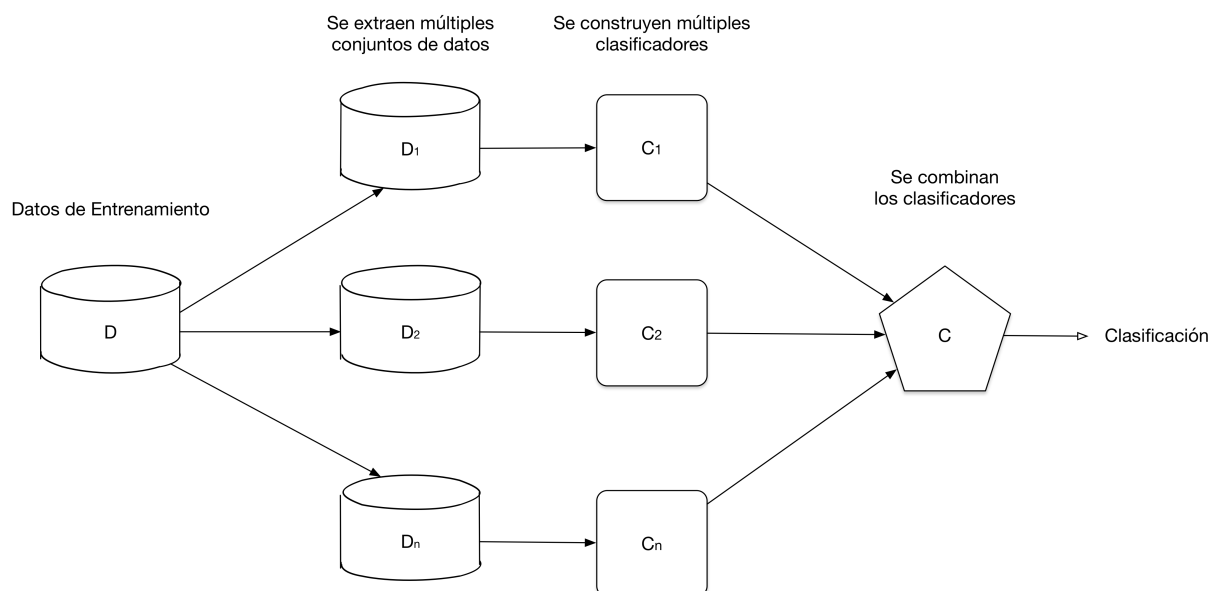


Figura 57: Esquema general del aprendizaje ensemble

A continuación se describen dos de los métodos ensemble más populares.

Bagging

Esta técnica de Bagging (Breiman 1996) consiste en tomar n muestras con reemplazo del conjunto de datos de entrenamiento. Como se utiliza reemplazo habrá algunos datos repetidos en cada muestra, A estas muestras se les conoce como muestras *bootstrap* y son utilizadas para entrenar a n clasificadores. Al predecir, los resultados de los clasificadores son promediados o se considera a cada predicción como una votación. La técnica ha tenido éxito en clasificadores basados en redes neuronales artificiales, árboles de clasificación y regresión.

Boosting

En lugar de tomar n muestras del conjunto de datos en un solo paso, en el método de Boosting, estas muestras se van tomando de manera secuencial, se toma una primer muestra y se entrena un clasificador, al evaluar al clasificador se registran aquellos objetos que fueron clasificados incorrectamente. Al tomar la segunda muestra, se hace con un sesgo hacia aquellos objetos que se clasificaron

incorrectamente en el primer paso. Esto tiene como objetivo el especializar al segundo clasificador en resolver los problemas que tuvo el primero. Esto se repite n veces. AdaBoost (Adaptive Boosting) (Freund and Schapire 1997) es la implementación más popular de Boosting, al agregar a los clasificadores, las predicciones se ponderan de acuerdo al desempeño del clasificador en la etapa de prueba.

Análisis de Asociaciones

La tarea de la minería de datos es extraer de manera eficiente patrones útiles de grandes bases de datos. La extracción de reglas de asociación surge con el fin descubrir patrones de compra interesantes minando las transacciones de compra en tiendas al menudeo (Hilderman and Hamilton 1999). Debido a su principal aplicación también se le conoce como *Market Basket Analysis* y fue propuesta inicialmente en (Agrawal, Imieliński, and Swami 1993). Las reglas que se extraen tienen que ver con los artículos que se compran en una transacción y tienen una forma de implicación, por ejemplo:

$$\{Skittles, Donas\} \implies \{DietCoke\}$$

La regla sugiere que las personas que compran *Skittles* y *Donas* también compran *Diet Coke*. Las reglas incluyen un porcentaje de transacciones que cumplen con ella. Este conocimiento puede ser utilizado por los empresarios para la toma de decisiones. Por ejemplo, surtir más un producto, hacer promociones o ver el impacto que tendría discontinuar algún artículo.

Definición formal del problema

El problema se ha definido formalmente por Agrawal, Imieliński, and Swami (1993): Sea $I = \{i_1, i_2, \dots, i_m\}$ un conjunto de m atributos binarios a los que llamaremos *ítems*. Sea $T = \{t_1, t_2, \dots, t_m\}$ un conjunto de m transacciones al que llamaremos *database*. Cada transacción t es representada por un vector binario, donde $t[k] = 1$ si en la transacción se compró el ítem i_k en caso contrario $t[k] = 0$. Sea X un conjunto de ítems en I . Decimos que la transacción t *satisface* a X , si para todos los ítems I_k en X , se cumple que $t[k] = 1$, es decir se compraron todos los ítems X . Una *regla de asociación* se define como una implicación $X \implies I_j$. Como podemos ver originalmente se consideraba en el consecuente solo un ítem, actualmente se considera a un conjunto de ítems. Los conjuntos X e I no tienen ítems en común y a ambos se les denomina *itemsets*, conjuntos de ítems.

También se definen dos restricciones que deben cumplir las reglas, el soporte y la confianza.

- **Soporte** el soporte indica la frecuencia en la que las transacciones T incluyen a cierto ítemset.

$$\text{supp}(X) = \frac{|\{t \in T; X \subseteq t\}|}{|T|}$$

- **Confianza** indica que tan frecuentemente se cumple cierta regla $X \Rightarrow I$ en T

$$\text{conf}(X \Rightarrow I) = \text{supp}(X \cup I) / \text{supp}(I)$$

Estas restricciones tienen como objetivo el filtrar aquellas reglas que no sean interesantes o que sean poco comunes. El soporte y la confianza se proporcionan al algoritmo como un umbral mínimo que deben cumplir las reglas que resulten de la búsqueda.

El proceso de minado de reglas puede resumirse en dos pasos:

1. Encontrar todos los conjuntos de artículos que tengan la frecuencia mínima indicada por el umbral de soporte.
2. A partir de los conjuntos de artículos encontrados en el primer paso, se generan reglas que cumplan con la restricción de confianza mínima.

Las dos tareas se detallan en las siguientes secciones.

Generación de conjuntos de artículos frecuentes

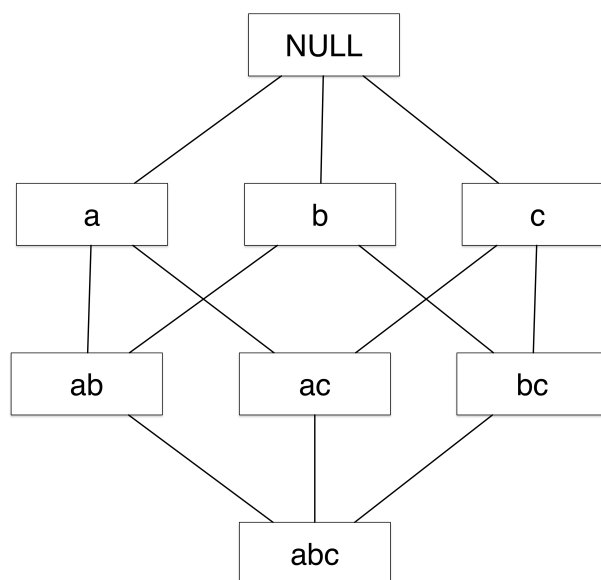


Figura 58: Rejilla de ítemset

Para enumerar todos los posibles ítemsets se emplea una rejilla. Como ejemplo en la figura se muestra la rejilla para el conjunto de ítems $I = \{a, b, c\}$. Al incrementar el número de ítems el número de ítemsets se incrementa exponencialmente. Evaluar a fuerza bruta el soporte de cada una de las transacciones en T tiene un costo computacional muy alto ya que se tiene que comparar cada ítemset candidato con todas las transacciones. La técnica *Apriori* es utilizada para reducir la complejidad computacional.

El principio Apriori

Para reducir el número de ítemsets candidatos a evaluar, se utiliza el principio Apriori :

Si un ítemset ocurre de manera frecuente, entonces todos sus subconjuntos también son frecuentes Esto se ilustra en la figura, donde suponemos que el ítemset $\{b, c\}$ es frecuente, también los serán $\{b\}$ y $\{c\}$.

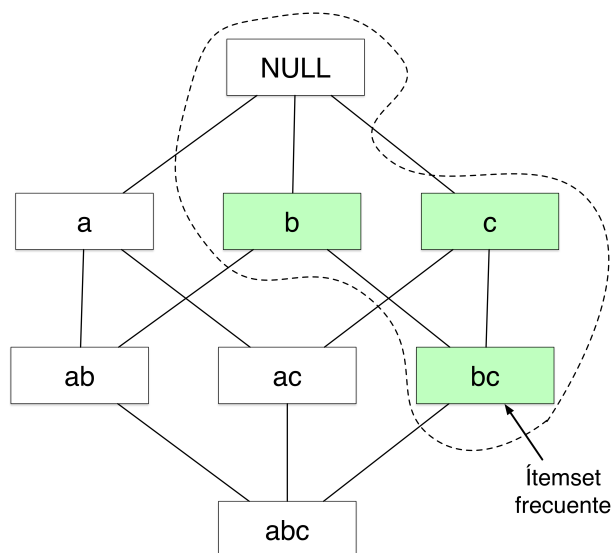


Figura 59: Rejilla de ítemset

Por otro lado, si el ítemset $\{a\}$ es infrecuente los super conjuntos también lo serán. Esto permite eliminar de la rejilla aquellos ítemsets bajo el ítemset infrecuente. Por ejemplo en la Figura, si hay evidencia de que el ítemset $\{a\}$ es infrecuente, también los serán $\{a, b\}$, $\{a, c\}$ y $\{a, b, c\}$ por lo que no hay necesidad de evaluarlos. El algoritmo de generación de ítemsets Apriori se aprovecha de este principio. Se empieza en la raíz de la rejilla evaluando el soporte de los ítemsets con un solo elemento y solo continúa evaluando los ítemsets que incluyan solo a los ítems con el soporte necesario.

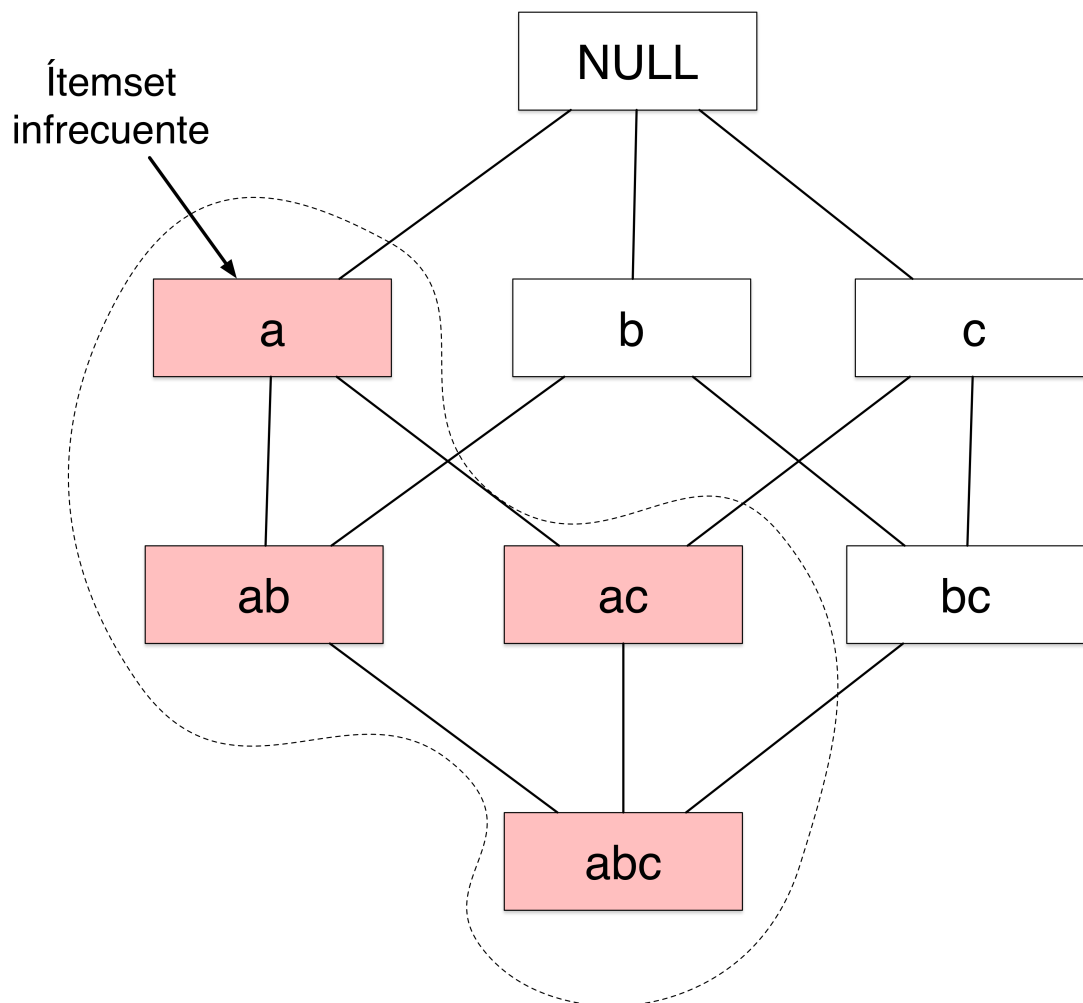


Figura 60: Rejilla de ítemset

Generación de reglas

Una vez que tenemos los ítemsets frecuentes, podemos empezar a generar reglas. Tomemos un ítemset Y con k ítems, podríamos generar $2^k - 2$ reglas de asociación sin considerar aquellas reglas con ítemsets nulos. Para generar una regla, basta dividir a Y en dos conjuntos no nulos: X y $Y - X$. Obtenemos la regla $X \Rightarrow Y - X$, ahora solo tenemos que evaluar si cumple con la restricción de confianza mínima.

Para calcular la confianza, no es necesario evaluar en todas las transacciones, ya que la función de confianza se calcula utilizando el soporte de los ítemsets y esto ya lo calculamos en el paso anterior.

Representación compacta de conjuntos de artículos frecuentes

Con el objetivo práctico de reducir el espacio de almacenamiento, se han propuesto técnicas para representar de una manera compacta a la rejilla de artículos frecuentes. Veamos una técnica basada en el concepto de artículos frecuentes máximos. Un ítemset de frecuencia máximo es aquel que en la rejilla no tiene un superconjunto inmediato superior que también sea frecuente.

En la figura se presenta una rejilla con tres ítemsets de frecuencia máximos $\{a, d\}$, $\{a, c, e\}$, $\{b, c, d, e\}$. Solo con estos ítemsets podemos derivar los ítemsets frecuentes restantes ya que están incluido (son subconjuntos) de los mismos.

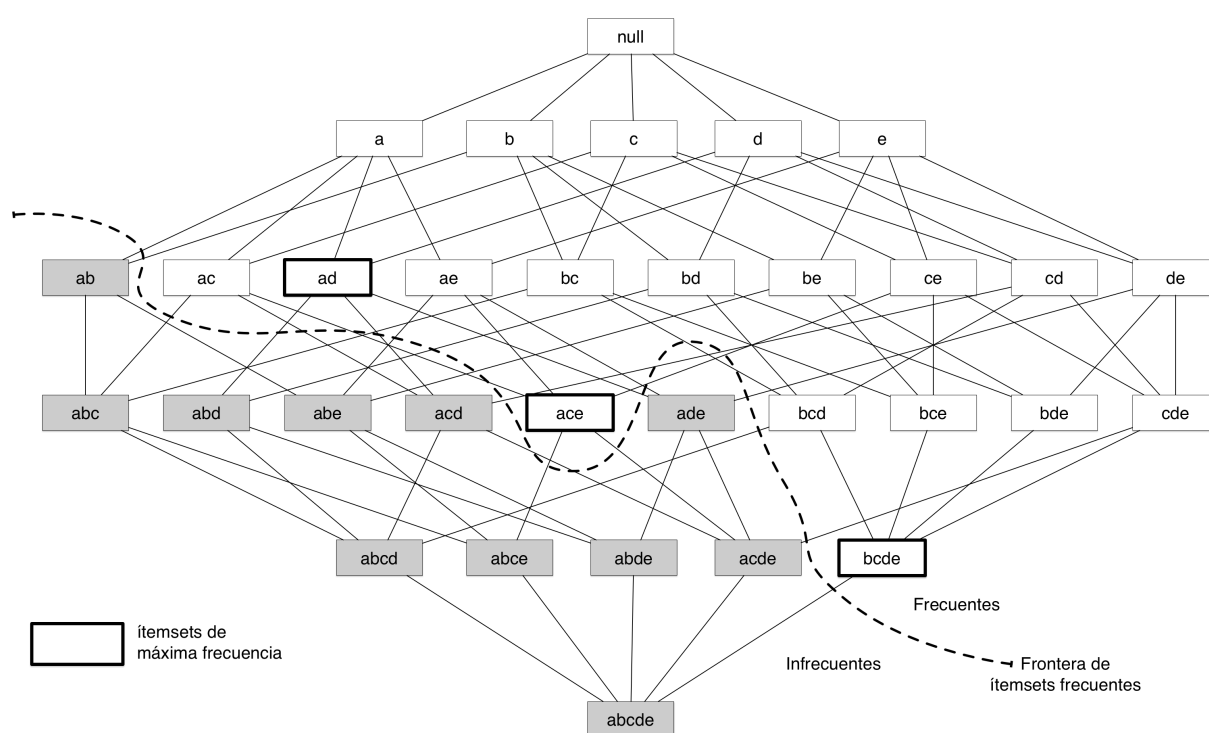


Figura 61: Rejilla de ítemset Tan, Steinbach, and Kumar (2007)

El algoritmo FP-Growth

Uno de los algoritmos más utilizados para el minado de reglas de asociación es el algoritmo FP-Growth (Han, Pei, and Yin 2000). El algoritmo aborda el problema de generación de ítemsets de una manera muy distinta a la estrategia utilizada por *Apriori*. El algoritmo propone el uso de una estructura compacta llamada *FP-tree* de donde se extraen directamente los ítemsets frecuentes:

1. El algoritmo empieza haciendo un recorrido de la base de datos de transacciones *Trans*, copiando a una lista *F* solo los ítems frecuentes con su soporte. Después se ordena *F* de mayor a

menor soporte y al resultado le llamaremos L la lista de ítems frecuentes.

2. Se crea el FP-tree, T , insertando el nodo raíz el cual se etiqueta como *null*.
3. Se recorre de nuevo $Trans$ y para cada transacción se hace lo siguiente:
 1. Se ordenan sus ítems de acuerdo al orden especificado en L .
 2. A la lista ordenada de ítems se le considera como $[p|P]$, donde p es el primer elemento y P el resto. Hecho esto se llama al método `insert_tree([p|P], T)`.
 3. `insert_tree([p|P], T)` hace lo siguiente. Si el árbol T tiene un nodo hijo N con el mismo nombre que p , se incrementa el contador de N ; en caso contrario se crea un nuevo nodo y se le asigna 1 a su contador. El padre de este nuevo nodo será T . El nodo también se liga a otros nodos con el mismo nombre por medio de una estructura adicional llamada «node-link». Si P no está vacío se llama de forma recursiva `insert_tree(P, N)`.

Ejercicio

Siguiendo el algoritmo anterior y utilizando la siguiente base de datos de transacciones, recrea en tu mente los pasos necesarios para crear el árbol de la figura. Ver los detalles en (Han, Pei, and Yin 2000):

Tid	Ítems	Ítems frecuentes (ordenados)
1	f, a, c, d, g, i, m, p	f, c, a, m, p
2	a, b, c, f, l, m; o	f, c, a, b, m
3	b, f, h, j, o,	f, b
4	b, c, k, s, p,	c, b, p
5	a, f, c, e, l, p, m, n	f, c, a, m, p

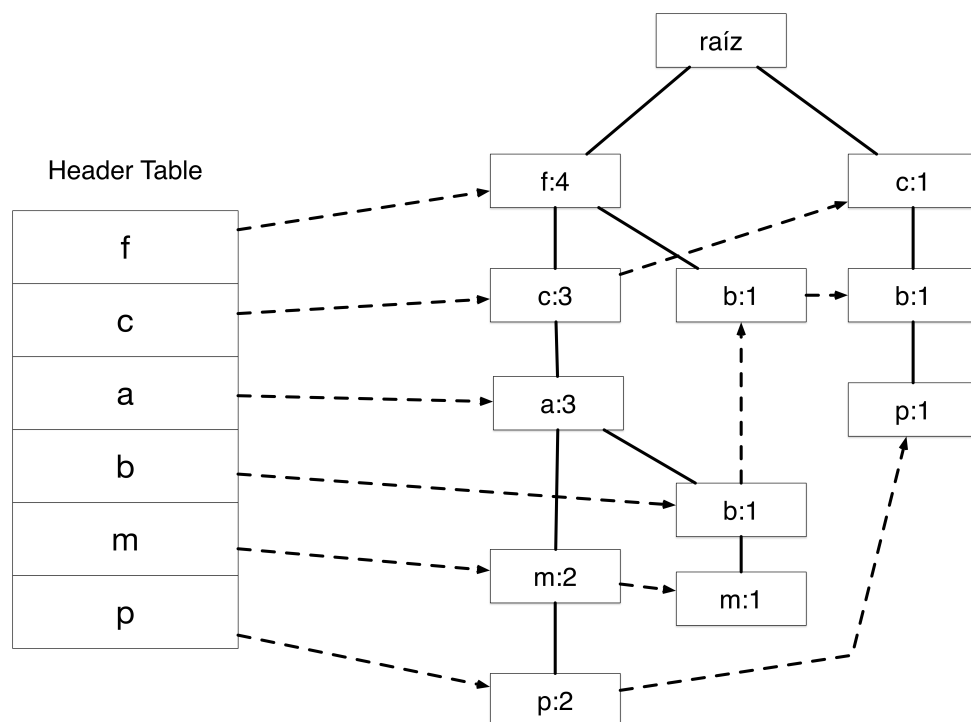


Figura 62: Ejemplo de F-Tree Han, Pei, and Yin (2000)

Antes de minar la estructura veamos las operaciones que nos permite la estructura:

1. Seguir el «node_link» (flechas punteadas) desde la «Header Table» cualquier ítem a_i para saber en que ítemsets participa. Por ejemplo, el ítem «p», aparece tres ítemsets, en dos ítemsets iguales {f, c, a, m, p} y en {c, b, p}.
2. Siguiendo los valores de soporte desde la raíz podemos ver cuantas veces se ha repetido el ítemset hasta el nodo deseado. Por ejemplo, {f, c, a} tiene un soporte de 3, ya que al final de la ruta en el árbol el último elemento tiene 3 (a:3).

El minado se realiza siguiendo una estrategia *bottom-up*.

Por ejemplo, empezando con el ítem p , vamos a extraer aquellos ítem sets en los que participa con un soporte de 3.

Primero vemos en que rutas participa. Siguiendo el «node_link»: vemos que en {f, c, a, m, p} y {c, b, p}. Empezamos por revisar el soporte del ítemset {p}, vemos siguiendo el «node_link» que tiene: «p:2» + «p:1» = 3. Por lo tanto tiene un soporte adecuado, decimos que es un ítemset frecuente. Siguiendo la primer ruta, ahora revisaremos {m, p}, {a, p}, {c, p} y {f, p}. Es importante actualizar el soporte de los ítems de la ruta durante el proceso. Ya que recordemos que no todos los ítemsets registrados más arriba incluyen a p . Debemos actualizar el soporte de todos a 2. Consideremos entonces {f:2, c:2, a:2, m:2, p:2} y la otra ruta {c:1, b:1, p:1}. Al evaluar {m, p} vemos que el soporte es 2, por lo que no es

frecuente. Solo $\{c,e\}$ es frecuente ya que tenemos $c:2 + c1$, considerando la otra ruta a través del «node-link». Por lo tanto con el ítem p , solo encontramos dos ítemsets frecuentes: $\{p\}$ y $\{c, p\}$. El algoritmo seguiría minando ahora con el ítem m y así sucesivamente.

El algoritmo FP-Growth, es un buen ejemplo de el uso de estructuras de datos para mejorar los algoritmos y atacar los problemas con un nuevo enfoque. Incluso en algunos casos FP-Growth mejora el desempeño de *Apriori* por varios órdenes de magnitud.

Análisis de Clusters

El análisis de clusters o grupos, es la tarea de aglutinar conjuntos de objetos similares (en cierto sentido). Los objetos que pertenecen a un cluster formado como resultado del análisis, deben ser más similares entre sí que con los objetos de otros grupos, incluso se desea que la distancia entre los grupos se lo mayor posible. Es una de las principales tareas de la minería de datos, y el aprendizaje no supervisado.

Podemos hacer análisis de grupos sin necesidad de programar algoritmos o utilizar métodos matemáticos ya que el *agrupar objetos* es una de las tareas, que sin pensar, realizamos todos los días. ¿Como agruparías a los objetos de la siguiente figura?. Recuerda que se deben agrupar objetos similares. Podemos agrupar a los objetos, considerando su (a) ubicación, (b) tamaño, (c) color o algún otro atributo, incluso podemos considerar varias características, por ejemplo, el color y la figura. En todos estos casos hemos realizado un *análisis de grupos* sobre las figuras. Una de las preguntas que debemos hacernos al realizar este tipo de análisis es ¿Cual de las agrupaciones es la correcta?, para ayudarnos a contestarla se han propuesto varias métricas, pero mucho depende del contexto de aplicación.

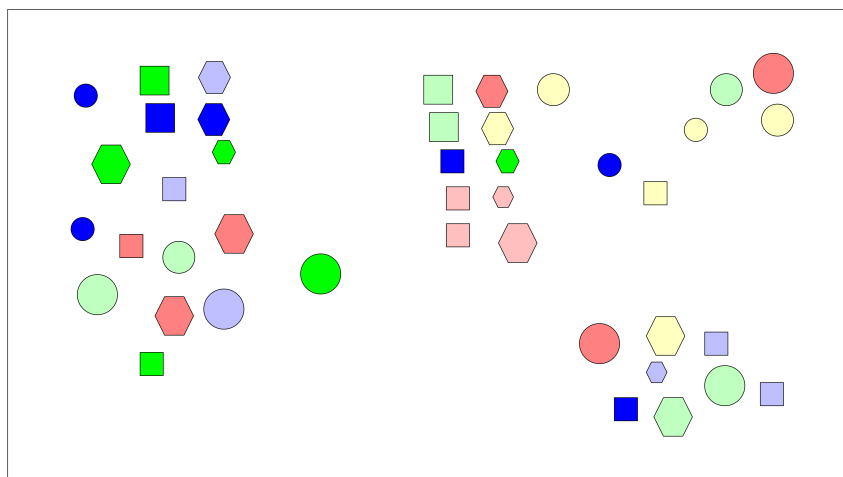


Figura 63: Conjunto de objetos con distinta posición, figura, color y tamaño.

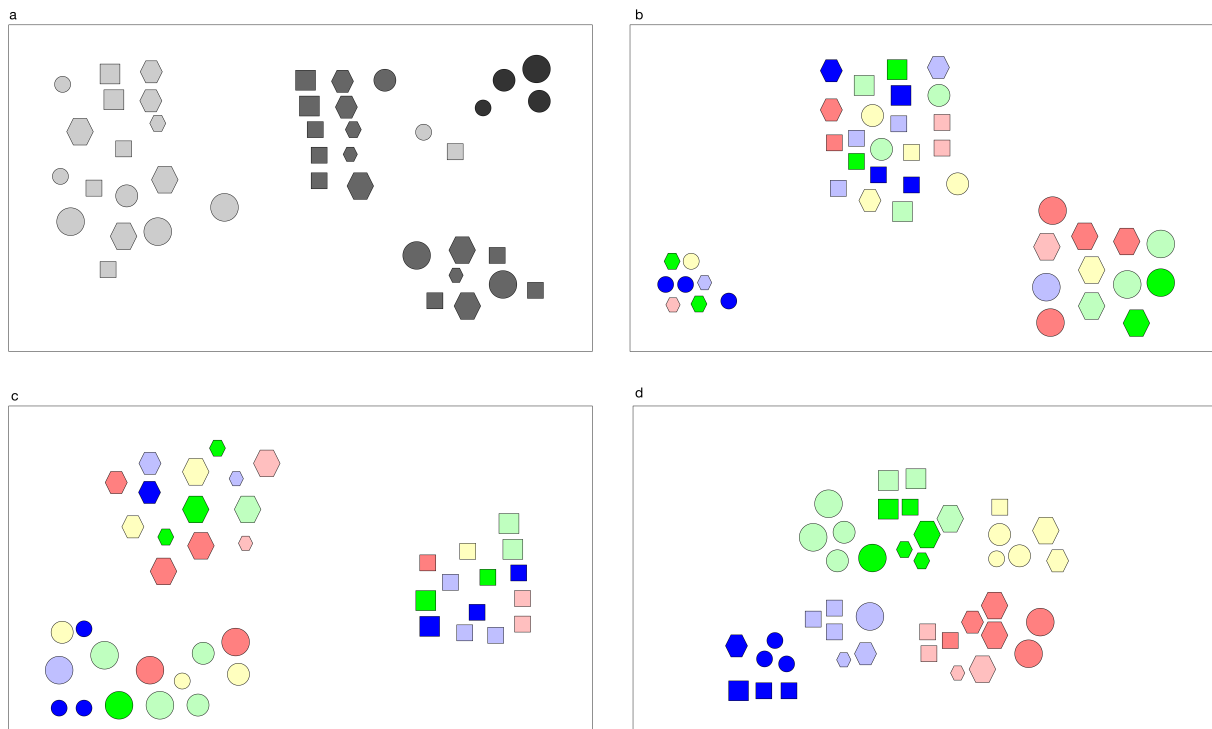


Figura 64: Distintos grupos extraídos de un análisis de grupos realizado sobre el conjunto de datos de ejemplo.

Si te fijas, esta misma actividad la realizan los científicos para clasificar o entender distintos fenómenos. Por ejemplo, el estudio de la evolución de las especies requiere de agrupar animales que tienen características similares. En la figura siguiente, se muestra un dendograma, donde se agrupan las relaciones evolutivas entre animales del orden carnívora (imagen del Instituto de Biología Canina), donde podemos datos interesantes, como que el oso negro es más parecido a una morsa que a un perro.

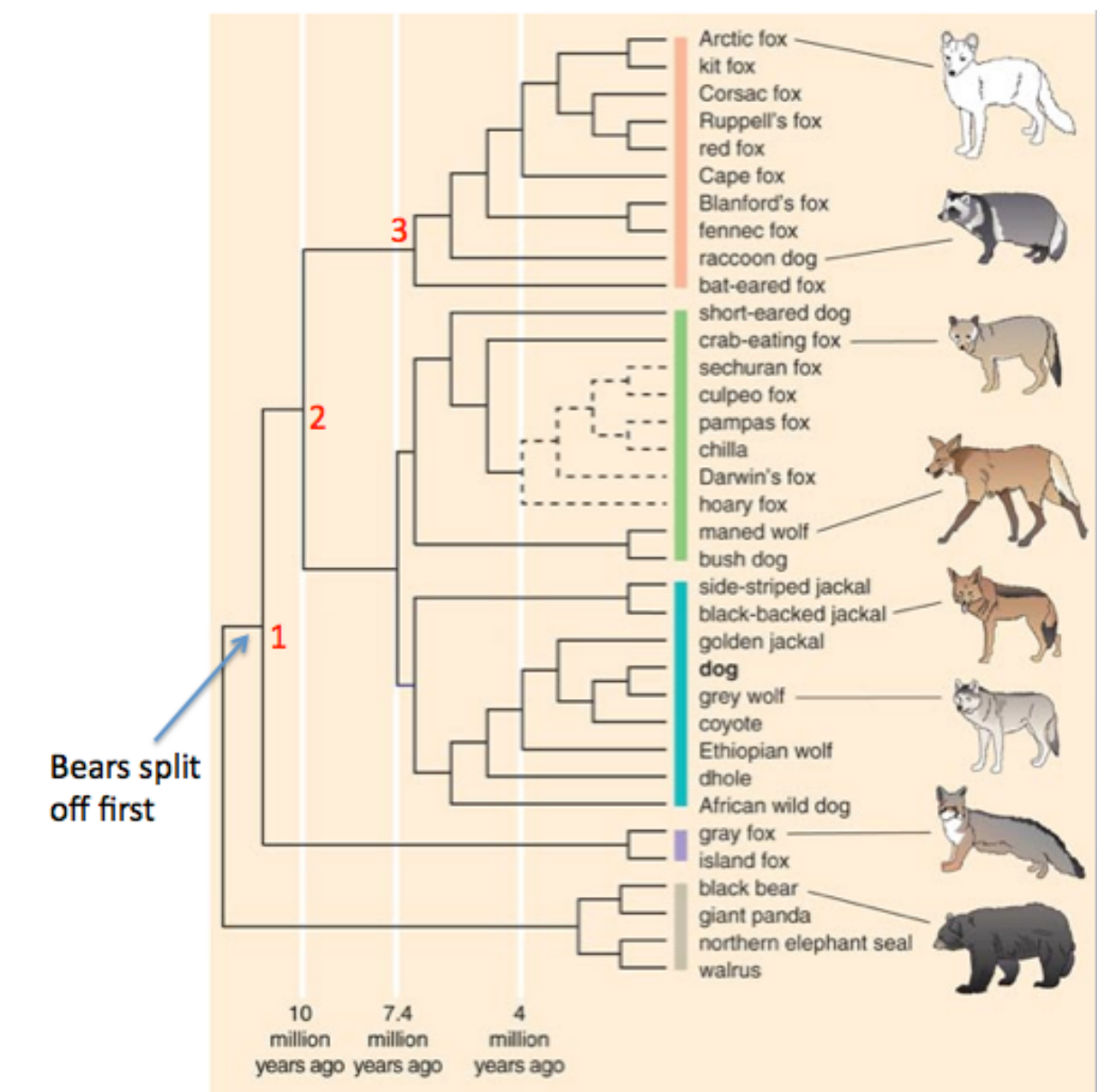


Figura 65: Imagen del Instituto de Biología Canina

Los métodos matemáticos de análisis de grupos, pueden realizar la misma tarea, pero en lugar de objetos reales como los animales o figuras, trabajan sobre datos que representan a los objetos. La representación más común es una matriz con vectores de datos continuos, categóricos u ordinales. Por ejemplo, las figuras analizadas anteriormente, pueden ser representadas por la siguiente matriz:

id	Figura	Posición	Color	Tamaño
1	Círculo	100, 230	0000FF	50, 50
2	Cuadrado	430, 450	CCFFCC	70, 70
3	Círculo	600, 230	FFFFCC	30, 30
4	Hexágono	300, 330	99DDFF	30, 30
5	Hexágono	700, 530	0000FF	70, 70
6	Cuadrado	200, 230	FFFFCC	70, 70

Los grupos encontrados a partir del análisis de clusters, son potencialmente *clases o categorías* de objetos: Podemos sugerir que el análisis de grupos es el descubrimiento de categorías sin necesidad de entrenamiento ya que las clases pueden extraerse de los datos sin necesidad de que sean asignados previamente. Cuidado, los algoritmos de análisis de grupos no reemplazan a los algoritmos de clasificación, ya que las categorías no solo dependen de la similaridad de ciertas características. Antes de pasar a los algoritmos veamos primero algunas de las aplicaciones de las técnicas de agrupamiento:

- **Videojuegos** Para los desarrolladores empresas es útil, identificar usuarios con comportamientos similares. Por ejemplo, a partir de capturar el movimiento y actividades de los usuarios, se han identificado tipos de jugadores como: agresivos, cazadores, exploradores, etc. Esta información se utiliza después para hacer cambios en la mecánica del video juego o para dar promociones a otros usuarios.
- **Recuperación de Información** Para mejorar el desempeño de la recuperación de la información, los documentos similares pueden almacenarse cerca unos de otros, mismo servidor, archivo, máquina, etc.
- **Datos Representativos** En lugar de trabajar con todos los datos para realizar algún análisis, se puede trabajar con objetos representativos de los distintos clusters generados previamente.
- **Cuantificación Vectorial** A partir de los clusters se pueden obtener vectores característicos. Existen técnicas de compresión como la cuantificación vectorial, que se basan en encontrar vectores característicos para un grupo de objetos similares, así en lugar de almacenar todos los datos de estos objetos, solo se almacena el identificador de su vector característico.

Clustering basado en prototipos

En este tipo de algoritmo, se tiene un objeto prototipo para cada uno de los grupos. Así la membresía de los objetos a su grupo depende de la similaridad con los prototipos. Para conjuntos de datos

continuos, el prototipo es el centroide de todos los objetos que pertenecen al grupo.

Clustering basado en densidades

Los grupos se definen como una región de alta densidad rodeada de regiones de baja densidad.

Clustering basado en grafos

Los objetos dentro de la estructura de un grafo tienen conexiones intra-grupales pero no conexiones con otros grupos.

k -medias

El algoritmo de k -medias es un algoritmo muy sencillo basado en prototipos. Solo requerimos especificar el parámetro k donde indicamos el número de clusters que deseamos obtener. En este algoritmo cada centroide define a un clúster. El algoritmo es el siguiente:

1. Se elige de manera aleatoria la posición de los k centroides.

Repetir estos pasos hasta que los centroides no se muevan:

1. Cada objeto se asigna al centroide más cercano.
2. Se Recalculan de nuevo los centroides a partir de los objetos que pertenecen a ellos.
3. Detener si ninguno cambia de posición, de otro modo continuar el ciclo.

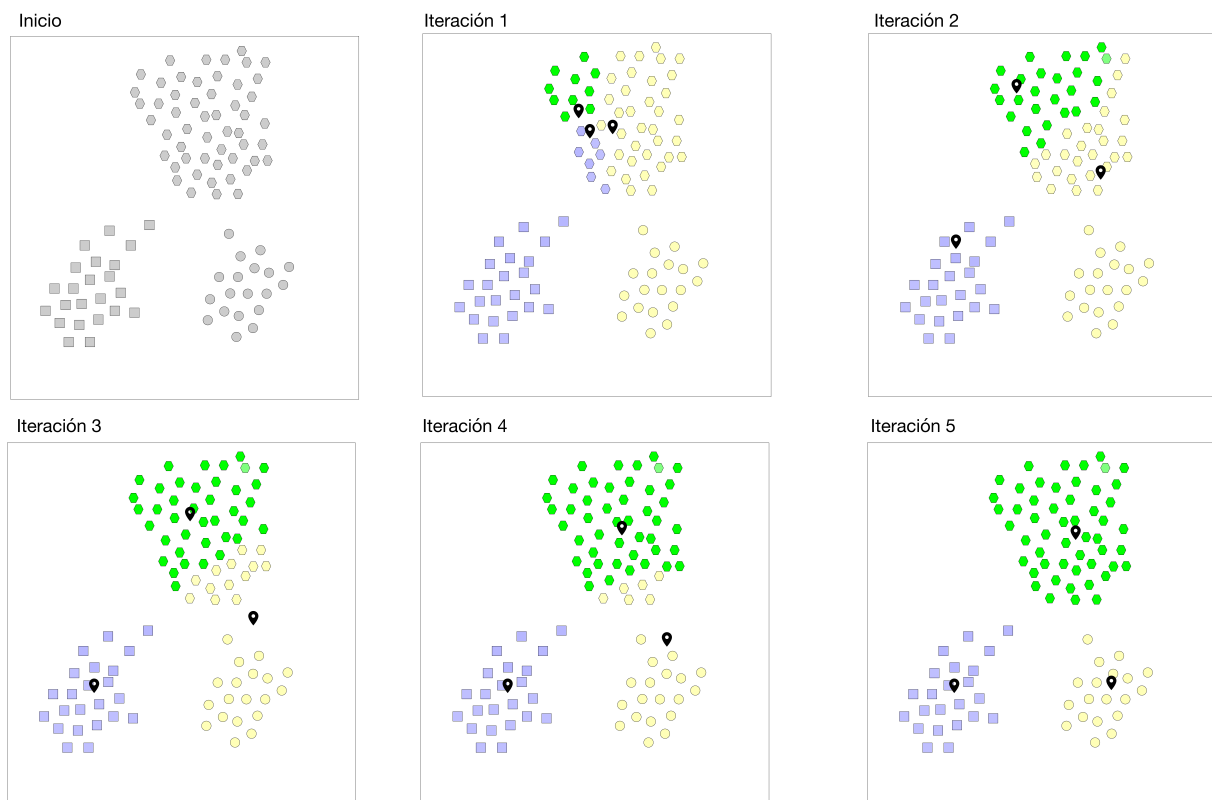


Figura 66: Ejemplo del algoritmo k -medias

Veamos los detalles del algoritmo sobre los datos de la figura x. Podemos observar que hay tres grupos **bien formados**, designados como círculos, rectángulos y hexágonos. Al inicio se posicionan los tres centroides, indicados por el ícono de lugar en el mapa. El siguiente paso es calcular la distancia o similitud entre los objetos y los centroides. En este caso utilizamos la distancia euclidiana, ésta es muy común ya que es fácil de interpretar y Digamos que para cada objeto se calcula la distancia con cada centroide y se asigna al centroide más cercano, en este caso aquí lo indicamos con el color. Antes de iniciar la siguiente iteración se vuelven a calcular los centroides y como su posición cambió se inicia la iteración siguiente. En la figura podemos ver como después de cinco iteraciones y se ven pintados correctamente los grupos.

La selección incorrecta de las posiciones iniciales de los centroides

Debemos tener cuidado al ejecutar el algoritmo ya que la ubicación inicial aleatoria puede tener un efecto adverso. Como ejemplo, veamos el posicionamiento sugerido en la figura 2. Como vemos los clusters generados no son buenos ya que claramente vemos que en lugar de dos grupos en la parte superior debería de ser uno, y en la parte inferior dos en lugar de uno.

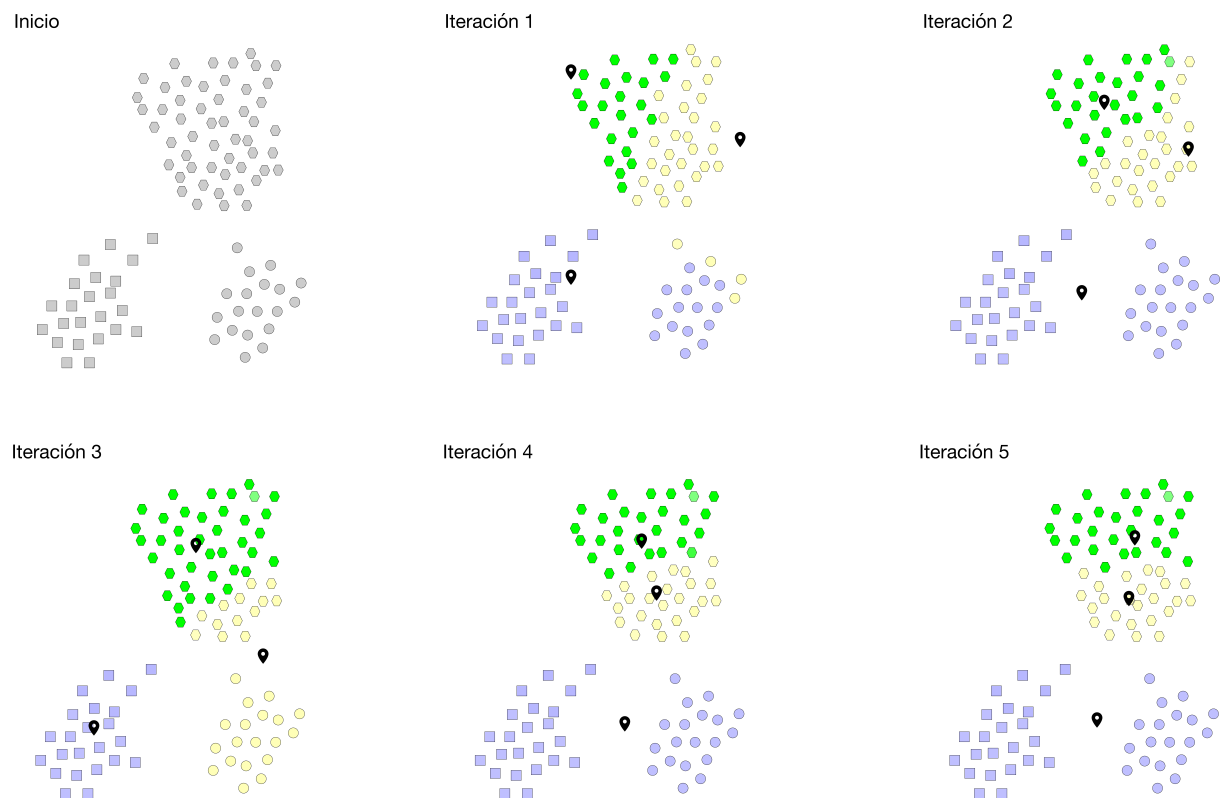


Figura 67: Incorrecta selección de posiciones iniciales de los centroides

¿Como evaluamos la calidad de los clusters generados?

Recordemos que lo que buscamos es minimizar la distancia interna de los miembros de un grupo y maximizar la distancia entre grupos. Como observamos en el clustering insuficiente de la figura x, en la parte superior hay dos clusters muy juntos y la parte inferior cluster con objetos muy lejanos entre sí. Una métrica muy utilizada es la de Suma del Error Cuadrático o SSE (del inglés Sum of Square Error), esta métrica considera precisamente la distancia de cada objeto a su centroide como un error, de tal manera que por lo menos eliminamos el problema de la parte inferior ya que al hacer el cálculo seguro dará un error mayor al de la agrupación correcta. La formula es esta:

$$SSE = \sum_{i=1}^k \sum_{x \in C_i} dist(m_i, x)^2$$

Donde,

- k es el número de centroides
- C_i es el conjunto de los miembros del centroide actual

- x es el objeto actual
- m_i es el centroide actual
- $disteslafuncindedistancia(enestecaso es el error)$

Aunque no hay distancias negativas y por lo tanto no hay errores negativos, se mantiene la costumbre de elevar al cuadrado. También podemos observar que si aumentamos el número de clusters k el error es muy posible que disminuya ya que el error se distribuye. El error que suman dos miembros es probable que sea menor que el que generan 3.

¿Como evitamos los errores provocados por la inicialización aleatoria?

- Múltiples ejecuciones
- Inicialmente selecciona un número mayor de k centroides y luego de ellos.
- Utiliza otra clustering jerárquico para determinar los centroides.

C -medias difuso

En un algoritmo de agrupamiento difuso, un objeto es asignado a más de un grupo o incluso a todos, con distinto grado de membresía. El algoritmo de agrupamiento difuso más utilizado es *Fuzzy C-Means* (FCM) (Dunn 1973). El algoritmo es muy parecido a k -means, pero los componentes cambian para considerar el aspecto difuso:

Los objetos

En otros algoritmos, cada objeto tiene una etiqueta indicando a que cluster pertenece. En el caso difuso, cada objeto x debe tener un coeficiente que indique su grado de pertenencia a cada cluster k . El grado de pertenencia se especifica como un peso $w_k(x)$.

El centroide

El centroide difuso considera a todos los puntos para calcularse. Al calcularse, aquellos objetos que tienen mayor membresía tienen mayor peso, mientras que otros solo van a contribuir muy poco al centroide:

$$c_k = \frac{\sum_x w_k(x)^m x}{\sum_x w_k(x)^m},$$

donde m es un parámetro que indica que tan *fuzzy* o *crisp* será la agrupación. Mientras mayor sea, más difusa será la agrupación. Típicamente tiene un valor de 2.

El algoritmo

Para un conjunto de datos $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$, el algoritmo regresa como resultado una lista de centroides $C = \{\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_c\}$ y una matriz de pertenencia $W = w_{i,j} \in [0, 1]$, $i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, c$, en la cual cada elemento $w_{i,j}$, especifica el grado de pertenencia de cada elemento, $\mathbf{x}_i$, a cada cluster $\mathbf{c}_j$.

El algoritmo tiene como objetivo minimizar la distancia (o maximizar la similaridad) dentro de cada cluster, como vimos anteriormente esta es una métrica de calidad de los algoritmos de agrupación:

$$\arg \min_C \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^c w_{ij}^m \|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|^2,$$

donde:

$$w_{ij} = \frac{1}{\sum_{k=1}^c \left(\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_j\|}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_k\|} \right)^{\frac{2}{m-1}}}.$$

Agrupamiento Jerárquico

Esta técnica busca crear una jerarquía de agrupamientos y se representa típicamente mediante un dendrograma. La representación nos permite ver como se han ido formado los grupos paso a paso, iniciando con objetos individuales en el primer nivel hasta llegar al nivel más alto que incluye a todos los objetos. A diferencia del algoritmo k -medias el cual crea un número determinado de agrupaciones en una agrupación jerárquica elegimos el nivel de agrupación deseado mediante la selección de un punto de corte en el árbol.

Primero vamos a ver el resultado final de un agrupamiento jerárquico.

	Tijuana	Ensenada	Mexicali	San Diego	Los Angeles	San Francisco	Las Vegas	San Jose	Barstow
Tijuana	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Ensenada	104	-	-	-	-	-	-	-	-
Mexicali	181	240	-	-	-	-	-	-	-
San Diego	32	144	198	-	-	-	-	-	-
Los Angeles	221	332	367	124	-	-	-	-	-
San Francisco	836	947	980	808	614	-	-	-	-
Las Vegas	560	669	515	532	432	915	-	-	-
San Jose	768	879	912	740	340	77	848	-	-
Barstow	309	420	394	176	185	664	254	597	-

Figura 68: Ejemplo de agrupamiento jerárquico

Antes de aplicar el método de agrupamiento debemos tener una matriz de similaridad como la mostrada en la figura anterior. En este ejemplo básico, la similaridad es igual a la distancia que hay por carretera entre las ciudades, según Google Maps. En otros casos la similaridad deberá calcularse y de ser necesario utilizando datos normalizados.

El método de agrupamiento que utilizaremos recibe el nombre de **método de grupo-par sin pesos, utilizando promedios aritméticos**, en inglés se le conoce por su abreviación UPGMA (Sokal 1958). El método genera un dendrograma el cual refleja la estructura de la matriz de similaridad.

En cada paso se deben seleccionar los dos clusters más similares y combinarlos en uno solo. En caso de empate se selecciona uno de los empatados de manera aleatoria.

En el ejemplo los objetos más similares son Tijuana-San Diego con 28 kilómetros. Estos dos clusters serán reemplazados en la matriz por un cluster al que llamaremos *Merge-1*. Es necesario calcular la distancia entre *Merge-1* y los otros objetos, esto se hace calculando el promedio de las distancias de Tijuana y San Diego a los objetos, ver la Figura. Una vez hecho esto, especificamos la primera conexión en el dendrograma.

	Merge 1	Ensenada	Mexicali	Los Angeles	San Francisco	Las Vegas	San Jose	Barstow
Merge 1	-	-	-	-	-	-	-	-
Ensenada	124	-	-	-	-	-	-	-
Mexicali	190	240	-	-	-	-	-	-
Los Angeles	207	332	367	-	-	-	-	-
San Francisco	822	947	980	614	-	-	-	-
Las Vegas	546	669	515	432	915	-	-	-
San Jose	754	879	912	340	77	848	-	-
Barstow	296	420	394	185	664	254	597	-
	Tijuana	San Diego	Promedio					
Ensenada	104	144	124					
Mexicali	181	198	189.5					
Los Angeles	221	193	207					
San Francisco	836	808	822					
Las Vegas	560	532	546					
San Jose	768	740	754					
Barstow	309	283	296					

Figura 69: Matriz despues de la combinación de Tijuana-San Diego

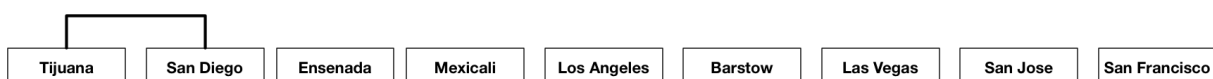


Figura 70: Primer paso de la construcción del dendrograma

Se repite el paso hasta que queden solo dos grupos en la matriz y ambos se atan a la raíz del dendrograma.

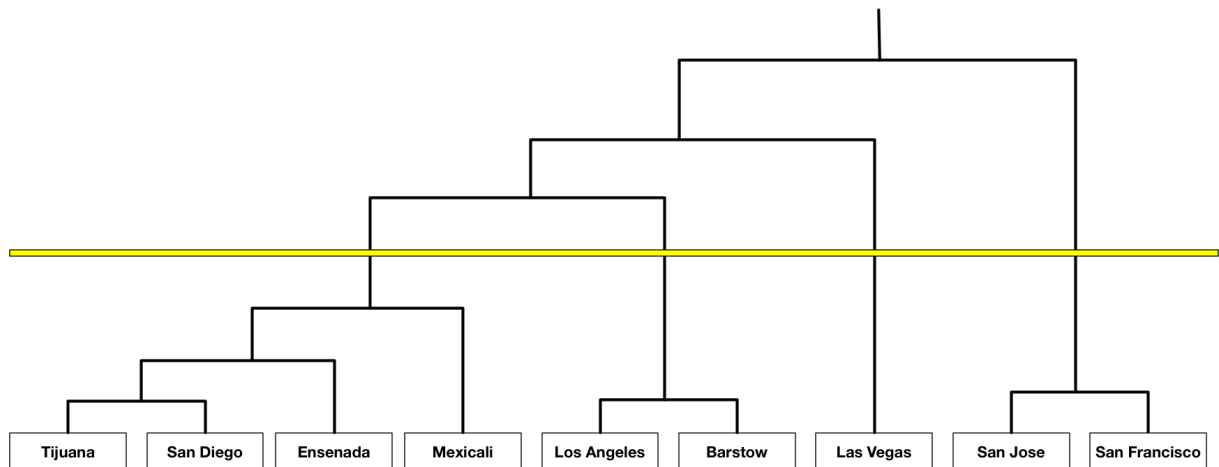


Figura 71: Ejemplo de agrupamiento jerárquico

En este caso estipulamos un corte para obtener cuatro grupos. El resultado también se puede expresar gráficamente como se muestra en la figura.

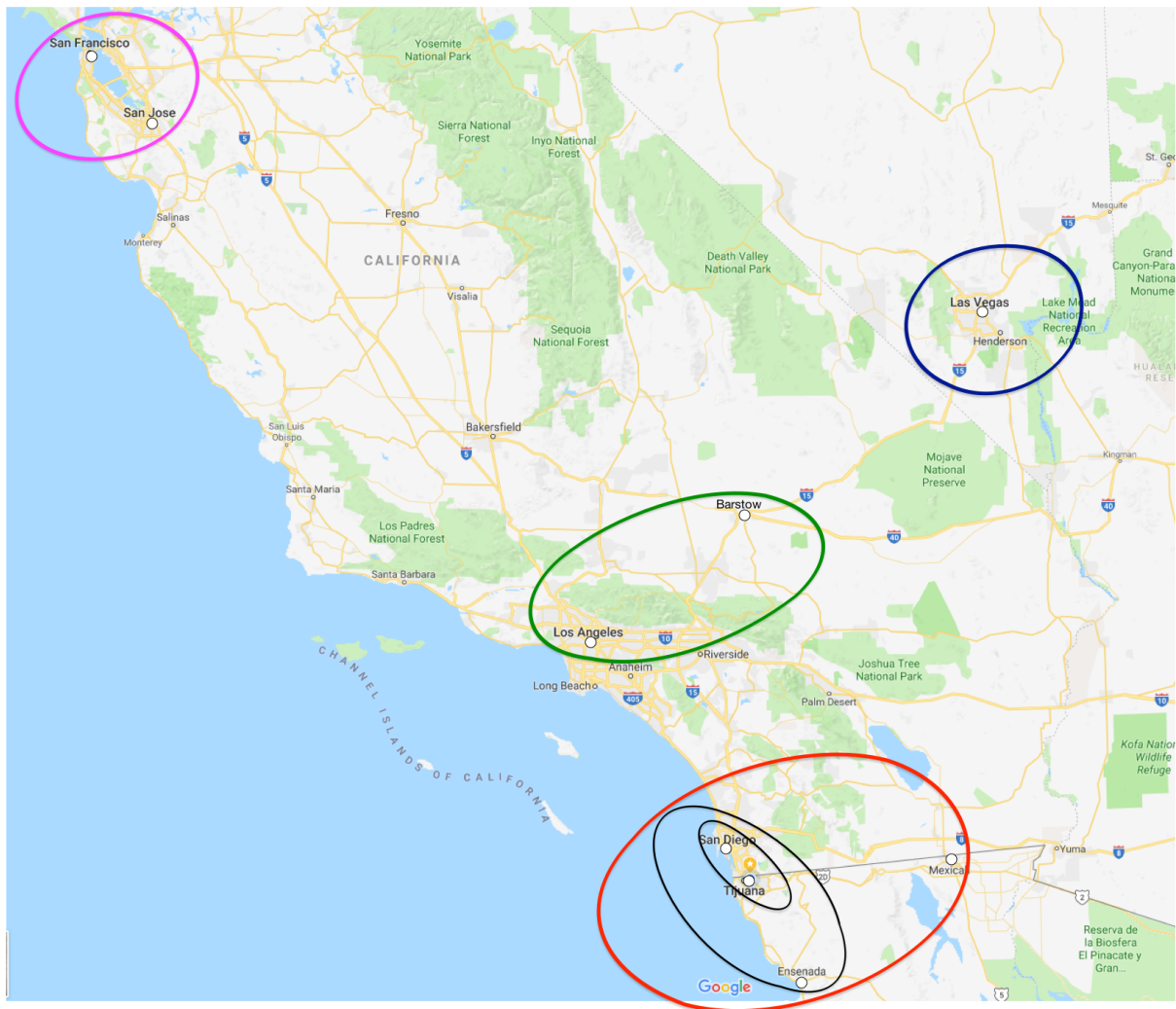


Figura 72: Agrupación jerárquica

Una de las desventajas del método UPGMA es que tiene una complejidad en tiempo de $O(n^3)$. Esto significa que es muy lento para grandes cantidades de datos.

Ejercicio

Busca algún otro algoritmo de agrupamiento jerárquico que tenga una complejidad menor que $O(n^3)$. ¿Que otras opciones hay para calcular la distancia a un aglomerado además de el promedio? ¿Cómo cambiaría el dendrograma del ejercicio el uso de otra técnica?

DBSCAN

Los algoritmos basados en densidad, como su nombre lo dice, no solo consideran la similitud (o distancia) entre los objetos para definir a los grupos. Estos algoritmos también consideran que haya un mínimo número de objetos en cierta región para considerar que existe un grupo ahí. El objetivo que se busca es evitar que el ruido o los objetos atípicos afecten la agrupación. Algoritmos como k -medias, no discriminan a los objetos que están fuera de cierta frontera que de manera natural forman ciertos objetos. En esas ocasiones cuando los objetos no forman la típica nube que surge de una distribución normal, más bien tiene una forma de anillo o son incluso formas rectangulares (ver figura), es mejor utilizar un algoritmo basado en densidad.

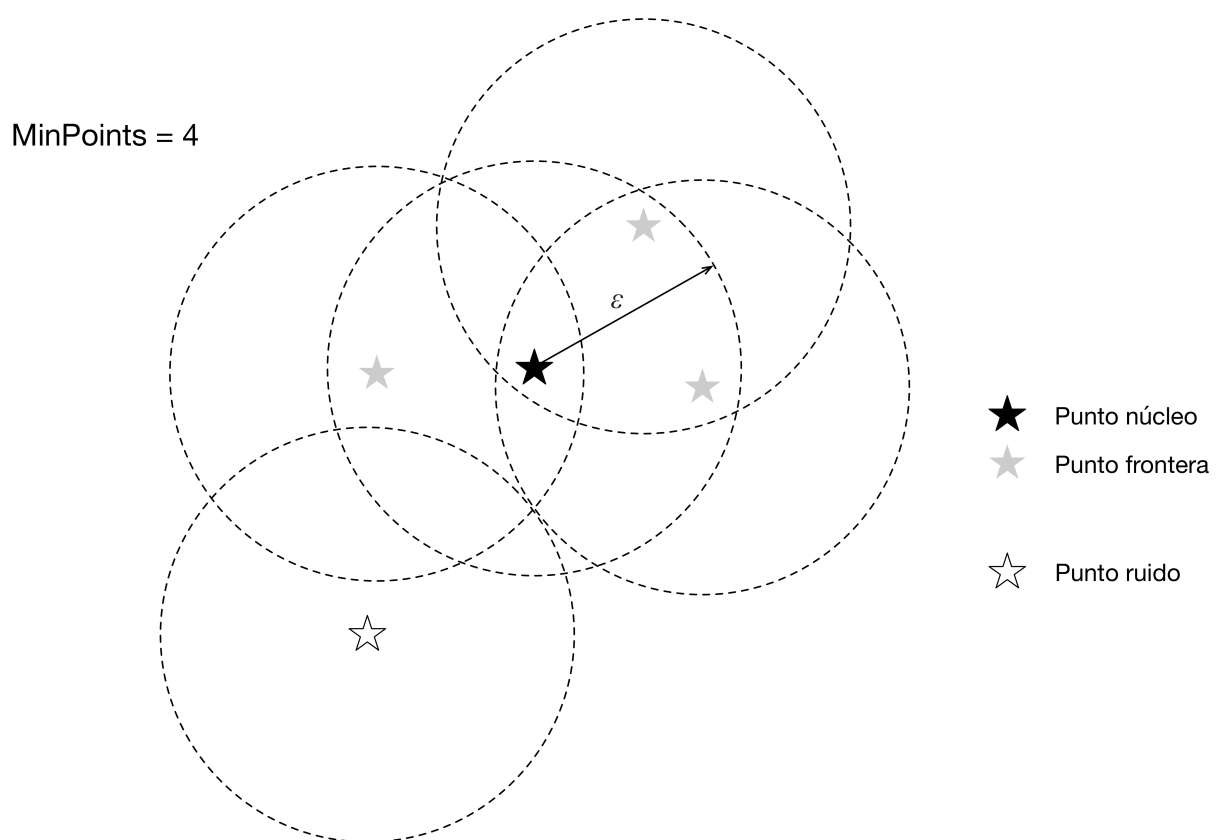


Figura 73: Agrupación DBSCAN

DBSCAN (del inglés *Density-based spatial clustering of applications with noise*) (Ester et al. 1996), es un algoritmo basado en densidad, es muy popular, es sencillo de entender y lo veremos a continuación.

El algoritmo toma como entrada dos parámetros:

1. El radio Eps , el cual define el *campo de visión* de cada objeto.

2. *MinPoints*, el número mínimo de objetos que debe haber dentro del círculo definido por *Eps*, para que el objeto (o punto) en el centro, sea considerado el núcleo de un cluster.

DBSCAN considera tres tipos de puntos, los cuales se ilustran en la figura:

1. Puntos núcleo (Core points). De nuevo, son aquellos puntos los cuales tienen un número igual o mayor que *MinPoints* en el área definida por el radio *Eps*. El propio punto se contabiliza. Estos puntos son considerados como la parte interna del cluster.
2. Puntos frontera (Border points). Estos puntos no tienen el número mínimo para ser considerados *core* pero se encuentra dentro del área de uno. Estos puntos forman parte del cluster aunque no de su parte interna.
3. Puntos ruido (Noise points). Todos los otros puntos son considerados ruido.

El pseudocódigo de DBSCAN en python es el siguiente:

```
1 def DBSCAN(Puntos, eps, minPts, calcula_distancia):
2     C = 0 # Contador de clusters
3     for punto in Puntos:
4         if punto.etiqueta != "indefinido":
5             continue # Este punto ya se visitó
6         # encuentra los vecinos + punto actual
7         vecinos = encuentra_vecinos(Puntos, calcula_distancia, punto, eps
8                                     )
9         if len(vecinos) < minPts: # Hay suficientes puntos?
10            punto.etiqueta = "ruido" # No hay, entonces es ruido
11            continue
12            C+= 1 # Si hay, entonces es un cluster
13            punto.etiqueta = str(C) # Se etiqueta al punto inicial
14            vecinos.remove(punto) # Removemos a punto de los vecinos para
15                                   procesarlos
16            for vecino in vecinos: # Revisamos cada vecino
17                if vecino.etiqueta == "ruido":
18                    vecino.etiqueta = str(C) # El punto ruido se cambia a
19                                           frontera
20                if vecino.etiqueta != "indefinido":
21                    continue # Este punto ya se visitó
22                    vecino.etiqueta = str(C) # Se etiqueta como parte del cluster
23                    otros_vecinos = encuentra_vecinos(Puntos, calcula_distancia,
24                                                       vecino, eps)
25                    if len(otros_vecinos) >= minPts: # Se revisa, si es núcleo
26                        vecinos.extend(otros_vecinos) # Si es, se agrega a
27                                                       vecinos
```


El método *calcula_distancia* puede variar dependiendo del problema.

Conclusiones

El campo de la minería de datos sigue desarrollándose a pasos agigantados, nuevas herramientas y técnicas se ponen a prueba cada día. De la misma manera, se incrementan exponencialmente la cantidad de datos, retos y aplicaciones a los que debemos hacer frente. Por lo tanto, ningún libro puede ser una obra estática, el desarrollo de este material deberá seguirse actualizando y enriqueciendo con otro tipo de materiales como videos y *Jupyter notebooks*.

Este curso tiene como objetivo que el alumno reciba una primera introducción al campo de la Minería de Datos y debemos recordar que las técnicas aquí descritas son clásicas, son solo antecedentes, herramientas para iniciar el camino. Serán necesarias otras lecturas y cursar otras materias complementarias, ya que cada sección vista es prácticamente un área de investigación en si misma. Espero que los alumnos se motiven a continuar estudiando y que en futuro apliquen alguna de estas técnicas en si propia investigación o desarrollo tecnológico.

Bibliografía

- Agrawal, Rakesh, Tomasz Imieliński, and Arun Swami. 1993. "Mining Association Rules Between Sets of Items in Large Databases." In *Acm Sigmod Record*, 22:207–16. 2. ACM.
- Altman, D G, and J M Bland. 1994. "Statistics Notes: Diagnostic Tests 1: Sensitivity and Specificity." *BMJ* 308 (6943). BMJ Publishing Group Ltd: 1552. doi:10.1136/bmj.308.6943.1552.
- Barros, Rodrigo C, André CPLF De Carvalho, Alex A Freitas, and others. 2015. *Automatic Design of Decision-Tree Induction Algorithms*. Springer.
- Breiman, Leo. 1996. "Bagging Predictors." *Machine Learning* 24 (2). Springer: 123–40.
- Breiman, Leo, Jerome H Friedman, Richard A Olshen, and Charles J Stone. 1984. "Classification and Regression Trees." Wadsworth & Brooks/Cole Advanced Books & Software.
- Clark, Peter, and Tim Niblett. 1989. "The Cn2 Induction Algorithm." *Machine Learning* 3 (4). Springer: 261–83.
- Codd, Edgar F. 1970. "A Relational Model of Data for Large Shared Data Banks." *Communications of the ACM* 13 (6). ACM: 377–87.
- Cohen, William W. 1995. "Fast Effective Rule Induction." In *Machine Learning Proceedings 1995*, 115–23.

Elsevier.

Cortes, Corinna, and Vladimir Vapnik. 1995. "Support-Vector Networks." *Machine Learning* 20 (3). Springer: 273–97.

Date, Chris J, and Hugh Darwen. 1989. *A Guide to the Sql Standard: A User's Guide to the Standard Relational Language Sql*. Addison-Wesley.

Dietterich, Thomas G. 1998. "Approximate Statistical Tests for Comparing Supervised Classification Learning Algorithms." *Neural Computation* 10 (7). MIT Press: 1895–1923.

Dunn, Joseph C. 1973. "A Fuzzy Relative of the Isodata Process and Its Use in Detecting Compact Well-Separated Clusters." Taylor & Francis.

Ester, Martin, Hans-Peter Kriegel, Jörg Sander, Xiaowei Xu, and others. 1996. "A Density-Based Algorithm for Discovering Clusters in Large Spatial Databases with Noise." In *Kdd*, 96:226–31. 34.

Freund, Yoav, and Robert E Schapire. 1997. "A Decision-Theoretic Generalization of on-Line Learning and an Application to Boosting." *Journal of Computer and System Sciences* 55 (1). Elsevier: 119–39.

Han, Jiawei, Jian Pei, and Micheline Kamber. 2011. *Data Mining: Concepts and Techniques*. Elsevier.

Han, Jiawei, Jian Pei, and Yiwen Yin. 2000. "Mining Frequent Patterns Without Candidate Generation." In *ACM Sigmod Record*, 29:1–12. 2. ACM.

Hilderman, Robert James, and Howard John Hamilton. 1999. *Knowledge Discovery and Interestingness Measures: A Survey*. Citeseer.

Hunt, Earl B, Janet Marin, and Philip J Stone. 1966. "Experiments in Induction." Academic press.

Kohavi, R, and F Provost. 1998. "Glossary of Terms." *Special Issue on Applications of Machine Learning and the Knowledge Discovery Process* 30 (271): 127–32.

Konar, A. 2004. *Computational Intelligence: Principles, Techniques and Applications*. Springer, Berlin.

Liu, Jianzheng, Jie Li, Weifeng Li, and Jiansheng Wu. 2016. "Rethinking Big Data: A Review on the Data Quality and Usage Issues." *ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing* 115. Elsevier: 134–42.

McNemar, Quinn. 1947. "Note on the Sampling Error of the Difference Between Correlated Proportions or Percentages." *Psychometrika* 12 (2). Springer: 153–57.

Nasrabadi, Nasser M. 2007. "Pattern Recognition and Machine Learning." *Journal of Electronic Imaging* 16 (4). International Society for Optics; Photonics: 049901.

Parikh, Rajul, Annie Mathai, Shefali Parikh, G Chandra Sekhar, and Ravi Thomas. 2008. "Understanding and Using Sensitivity, Specificity and Predictive Values." *Indian Journal of Ophthalmology* 56 (1).

Wolters Kluwer–Medknow Publications: 45.

Quinlan, J Ross. 1993. “C4. 5: Programming for Machine Learning.” *Morgan Kauffmann* 38: 48.

Quinlan, J. Ross. 1986. “Induction of Decision Trees.” *Machine Learning* 1 (1). Springer: 81–106.

Rosenblatt, Frank. 1962. *Principles of Neurodynamics: Perceptrons and the Theory of Brain Mechanisms*. Spartan books.

Russell, Stuart J, and Peter Norvig. 2016. *Artificial Intelligence: A Modern Approach*. Malaysia; Pearson Education Limited,

Sokal, Robert R. 1958. “A Statistical Method for Evaluating Systematic Relationship.” *University of Kansas Science Bulletin* 28: 1409–38.

Tan, Pang-Ning, Michael Steinbach, and Vipin Kumar. 2007. *Introduction to Data Mining*. Pearson Education India.