Análisis de conglomerados (Clustering)

Curso de aprendizaje automático para el INE

Víctor Gallego y Roi Naveiro

2019-05-09

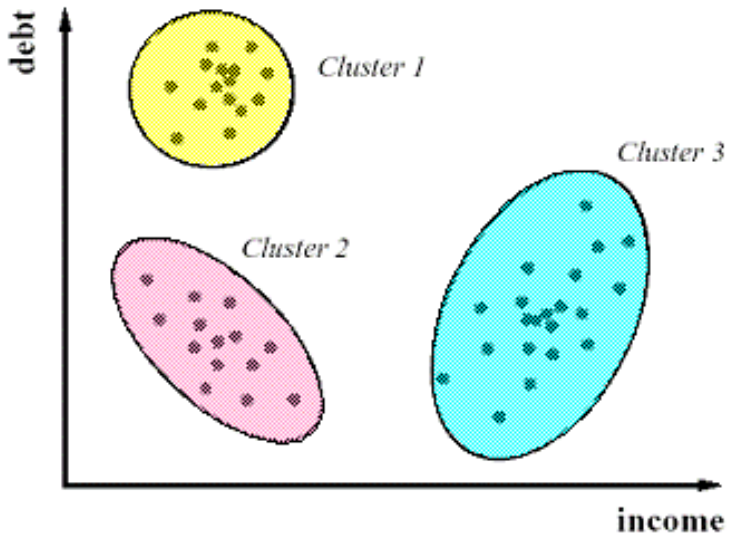
Introducción

Repaso

- **Aprendizaje no supervisado**: solo tenemos datos $\mathcal{X} = \{x_1, \ldots, x_N\}$ sin etiquetar.
- Hasta ahora hemos visto PCA y NMF, que tratan de aprender una representación de los datos en un espacio de menor dimensión.
- Hoy nos centraremos en las técnicas de **clustering** (también conocidas como **segmentación de datos**).

Introducción

- Objetivo: agrupar un conjunto de ejemplos en grupos denominados *clústers*. Ejemplos del mismo clúster más parecidos entre sí que ejemplos de diferentes clústers.
- Otro objetivo: ordenar clusters en jerarquías naturales. En cada nivel de la jerarquía, objetos en el mismo grupo más similares que objetos en grupos distintos.
- Estadístico descriptivo: ¿consisten los datos en un conjunto de subgrupos cada uno con propiedades diferentes?
- Ejemplo típico en banca:



Matrices de proximidad

La mayoría de algoritmos para clustering requieren la siguiente representación para los datos $x_1, \ldots, x_N$:

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} d_{11} & \ldots & d_{1N} \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ d_{N1} & \ldots & d_{NN} \end{pmatrix}$$

- donde $d_{ii'}$ mide la **disimilaridad** entre x_i y $x_{i'}$.
- $\mathbf{D}$ es una matriz de tamaño $N \times N$ (lo cual impone un requisito en la complejidad en memoria de los algoritmos de clustering).
- La mayoría de algoritmos asume una matriz simétrica (si no lo es, usar ($\mathbf{D} + \mathbf{D}^\intercal)/2$).
- **Fundamental**: escoger medida de distancia (disimilaridad).
- Las disimilaridades no son distancias en el sentido estricto, pues no verifican la desigualdad triangular $d_{ii'} \leq d_{ik} + d_{ki'}$.
- Esto depende del problema concreto (similar a elección de coste en aprendizaje supervisado).

Medidas de disimilaridad entre atributos

- Datos: x_{ij} con $i = 1, 2, \ldots, N$ y $j = 1, 2, \ldots, p$. N ejemplos con p atributos.
- Construír medidas de disimilaridad por pares.
- $d_j(x_{ij}, x_{i'j})$: disimilaridad entre valores de atributo j.

$$D(x_i, x_{i'}) = \sum_{j=1}^{p} d_j(x_{ij}, x_{i'j})$$

- No hay por qué pesar todos los atributos igual...

Medidas de disimilaridad entre atributos

- En función del tipo de atributo.
- Variables cuantitativas:

$$d(x_{ij}, x_{i'j}) = l(|x_{ij} - x_{i'j}|)$$

con l función monótona creciente. Error cuadrático o absoluto. También es posible usar correlaciones (medida de similaridad):

$$\rho(x_i, x_{i'}) = \frac{\sum_j (x_{ij} - \bar{x}_i)(x_{i'j} - \bar{x}_{i'})}{\sqrt{\sum_j (x_{ij} - \bar{x}_i)^2 \sum_j (x_{i'j} - \bar{x}_{i'})^2}}$$

- Variables categóricas: Si tienen M categorías: Disimilaridad 0 si categorías iguales, 1 si diferentes. Valores distintos de 1 pueden utilizarse para enfatizar unos errores más que otros.

Medidas de disimilaridad entre objetos

- Procedimiento para combinar p medidas de disimilaridad entre atributos en una medida de disimilarida entre ejemplos $D(x_i, x_{i'})$.
- Combinación convexa

$$D(x_i, x_{i'}) = \sum_{j=1}^{p} \omega_j \cdot d_j(x_{ij}, x_{i'j}); \ \sum_{j=1}^{p} \omega_j = 1$$

- Elección de pesos, depende del problema en cuestión.
- Importante: estudiar cada problema en concreto para construír tanto las medidas de disimilaridad entre atributos como los pesos.
- Aunque no se diga: esta es la parte más importante (y más costosa).

Algoritmos de clustering

Tipos de algoritmos de clustering

- **Algoritmos combinatorios**: trabajan con los datos observados sin hacer referencia al modelo probabilístico subyacente.
- **Modelos de mixturas**: asumen que datos son muestas iid de una mixtura de densidades de probabilidad. Cada componente describe un cluster.

Algoritmos de clustering combinatorios: K-Means

Algoritmos combinatorios

- Asignan cada observación a un cluster, sin preocuparse de la distribución de probabilidad de subyacente.
- Etiquetamos cada observación con $i \in \{1, 2, \ldots, N\}$
- Postulamos un número fijo de clusters $K < N$, etiquetados con $k \in \{1, \ldots, K\}$.
- Objetivo construír función de asignación $k = C(i)$ para cada i.
- Buscar asignación que minimice **dispersión dentro del cluster**

$$W(C) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{K} \sum_{i:C(i)=k} \sum_{i':C(i')=k} d(x_i, x_{i'})$$

Algoritmos combinatorios

- La dispersión total es

$$T = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{i'=1}^{N} d(x_i, x_{i'}) = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{K}\sum_{i:C(i)=k}\left[\sum_{i':C(i')=k} d(x_i, x_{i'}) + \sum_{i':C(i')\neq k} d(x_i, x_{i'})\right]$$
$$= W(C) + B(C)$$

- $B(C)$ es la **dispersión entre clusters**.
- Minimizar $W(C)$ es equivalente a maximizar $B(C)$.
- Optimiziación por enumeración complete **inviable**.
- $N = 19$, $K = 4$ número de asignaciones del orden de 10^{10}.

Algoritmos combinatorios

- Estrategia: *iterative greedy descent*

    1. Asignación inicial.
    2. Iterativamente, cambiar asignación tal que se diminuya $W(C)$.
    3. Parar cuando se deje de mejorar.

- Distintos algoritmos de clustering en función del paso 2.

- Asegurada convergencia a óptimo local...

K-Means

- Todas las variables son cuantitativas.
- Disimilaridad = distancia Euclídea

$$d(x_i, x_{i'}) = \|x_i - x_{i'}\|^2$$

- La distancia Euclídea con pesos puede usarse redefiniendo x_{ij}.
- En este caso,

$$W(C) = \sum_{k=1}^{K} N_k \sum_{i:C(i)=k} \|x_i - \mu_k\|^2$$

- Como $\mu_k = \arg\min_m \sum_{i:C(i)=k} \|x_i - m\|^2$, vemos que la asignación óptima puede obtenerse resolviendo

$$\min_{C, \{m_k\}_1^K} \sum_{k=1}^{K} N_k \sum_{i:C(i)=k} \|x_i - m_k\|^2$$

K-Means

- K-means resuelve utilizando *descenso coordenado*:

    1. Fijar asignación C y minimizar respecto $\{m_1, \dots m_K\}$, asignando las medias de cada cluster.
    2. Fijar las medias $\{m_1, \dots m_K\}$ y minimizar asignando cada observación al cluster de la media más cercana.

$$C(i) = \arg\min_k \|x_i - m_k\|^2$$

1. Iterar 1 y 2 hasta que no cambien las asignaciones.

Cuantización vectorial

- Técnica de teoría de la señal para aproximar datos de alta dimensión.
- Utilizada para compresión de datos.
- Idea: dividir conjunto grande de puntos en grupos y aproximar cada grupo por su centroide.
- En compresión de imágenes:
    1. Dividir imagen de $N \times N$ pixels en grupos de $k \times k$ pixels $(k < N)$.
    2. Considerar cada grupo como un vector de dimensión $k \times k$.
    3. Aplicar K-means y aproximar cada grupo por su centroide más próximo. (Conjunto de centroides se conoce como codebook).

Algoritmos de clustering: K-Medoids

K-Medoids

- K-means es apropiado cuando la disimilaridad es la euclídea cuadrática (datos continuos).
- Además, por estar elevada al cuadrado, pone mucha influencia a distancias grandes, lo que provoca **sensibilidad a outliers**.
- Podemos evitar esto sacrificando eficiencia computacional a cambio de robustez.
- Basta cambiar el paso de minimización en K-means: en lugar de tomar como representante de un cluster las medias de sus observaciones, hacemos que sea alguna observación de ese clúster.

K-Medoids

- Para una asignación de clúster C, encontrar la observación que minimice:

$$i_k^* = \arg \min_{i:C(i)=k} \sum_{C(i')=k} D(x_i, x_{i'})$$

- Entonces $m_k = x_{i_k^*}$.

- Dado un conjunto de centros de clusters $\{m_1, \ldots, m_K\}$, calcular

$$C(i) = \arg \min_{1 \leq k \leq K} D(x_i, m_k)$$

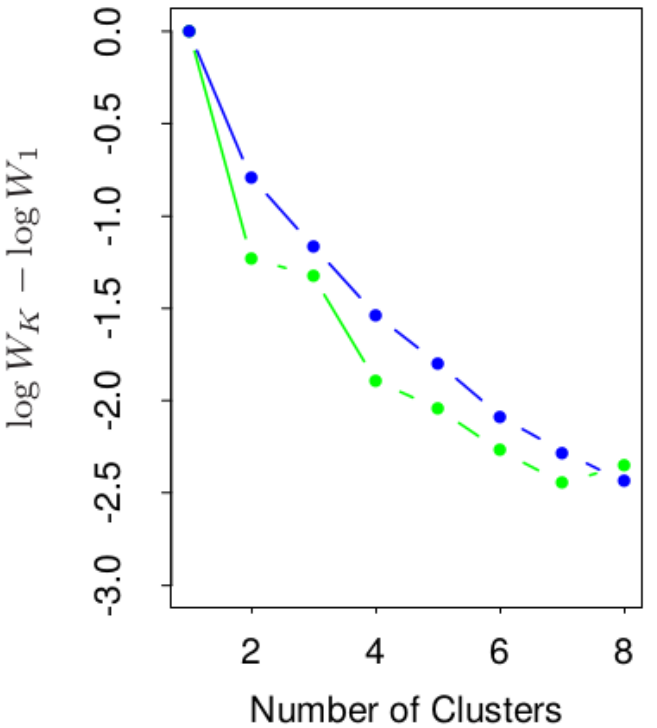
- El paso 1 pasa de tener complejidad lineal a ser $\mathcal{O}(N_k^2)$

Cuestiones prácticas

- Para aplicar K-Means o K-Medoids es necesario seleccionar el número de clústers K^* y una inicialización.
- Para las inicializaciones, la heurística más común es escogerlos **uniformemente aleatorios**, y ejecutar el algoritmo varias veces.
- En cuanto al número de clústers:
  - En aplicaciones de segmentación, K suele venir especificado (ejemplo, segmentar una cartera de clientes teniendo K encargados de marketing).
  - En descubrimiento de datos, no es tan fácil.
  - Una heurística es ir probando con K desde $1, 2, \ldots, K_{max}$, e ir calculando las disimilaridades intra-clúster $W_1, W_2, \ldots, W_{K_{max}}$.
  - Habrá un fuerte decrecimiento en sucesivas diferencias $W_K - W_{K+1}$ en $K = K^*$. Esto es, $\{W_K - W_{K+1} | K < K^*\} >> \{W_K - W_{K+1} | K \geq K^*\}$. Por tanto, podemos identificar K^* buscando un "codo" en la gráfica de W_K como función de K.

Cuestiones prácticas

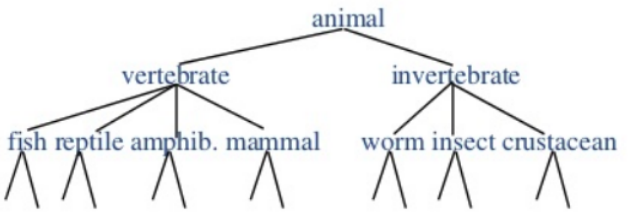
- En este ejemplo el "codo" se ubica en $K = 2$.



Algoritmos de clustering: Clustering jerárquico

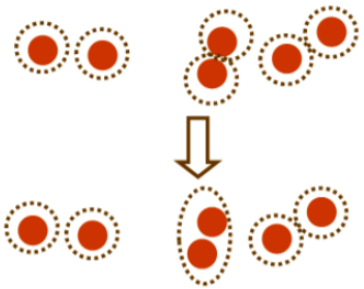
Clustering jerárquico

- **Problema**: ¿cómo elegimos el número de clústers K de antemano?
- Los algoritmos de clustering jerárquico evitan este problema: en lugar de tener que especificarlo:
- construyen toda una jerarquía sobre las observaciones.
- Ejemplos típicos de Biología y Genética:



Tipos de clustering jerárquico

- Clustering **divisivo** (de arriba a abajo)
  - Empieza con todos los puntos en un único clúster (la raíz), luego:
  - Parte la raíz en un conjunto de clústers hijos, y sigue dividiendo recursivamente
  - Para cuando hay un único clúster por observación.
- Clustering **aglomerativo** (de abajo a arriba)
  - Cada observación es un clúster.
  - Se van fusionando clústers más similares en cada iteración.
  - Más estudiado que los divisivos.



Clustering aglomerativo

El algoritmo es el siguiente:

1. Empezar con n observaciones y una medida de todas las disimilaridades de los $\binom{n}{2}$ posibles emparejamientos. Tratar cada observación como un único clúster.

2. Para $i = n, n-1, \ldots, 2$:

    - Examinar todas las disimilaridades inter-cluster e identificar el par de clústers más similar, fusionándolos. La disimilaridad entre estos dos clústers indica la altura del dendrograma a la que irá anotada la fusión.

    - Calcular las nuevas disimilaridades inter-clusters entre los $i-1$ grupos restantes.

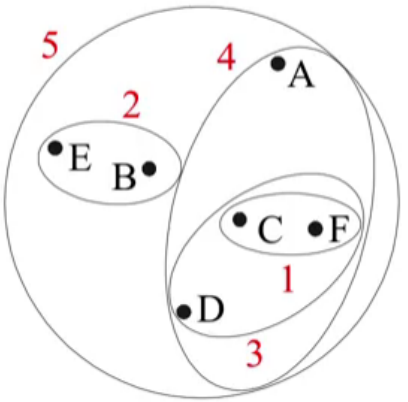
- **Importante**: tenemos que generalizar nuestra noción de distancia entre observaciones a una que mida distancia entre clústers de observaciones.

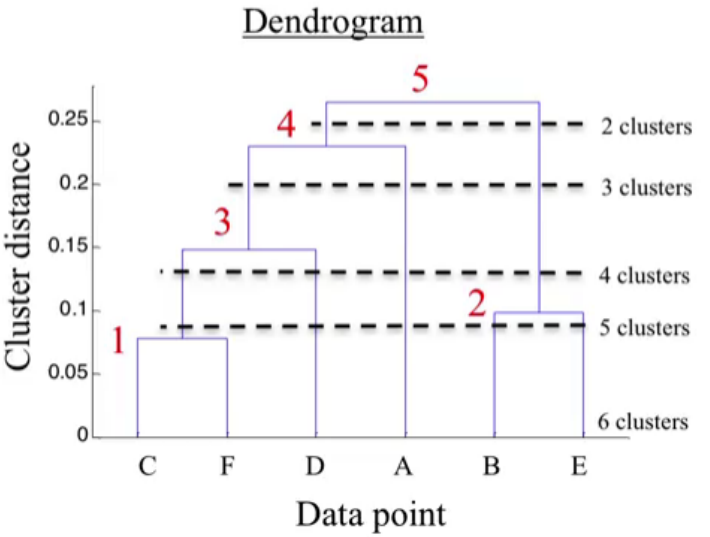
Dendrogramas

- Los algoritmos aglomerativos pueden ser representados como un árbol binario:
  - Los nodos representan los diversos clústers.
  - El nodo raíz es todo el dataset.
  - Los N nodos terminales son cada una de las N observaciones.
  - Dado un nodo, sus dos hijos representan qué clústers han sido fusionados.
- La mayoría de algoritmos aglomerativos poseen la **propiedad de monotonía**: la disimilaridad entre clústers que se fusionan es monótona creciente a medida que aumentamos en la jerarquía.
- Representación gráfica mediante un **dendrograma**:
  - Los nodos terminales (observaciones) los ponemos a altura 0.
  - La altura del resto de nodos es proporcional al valor de la disimilaridad entre sus dos hijos.

Clustering aglomerativo

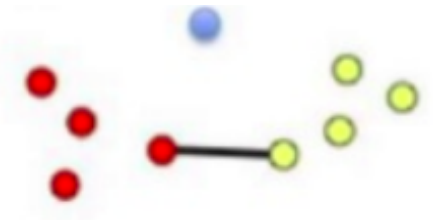
- Ejemplo de un posible resultado:



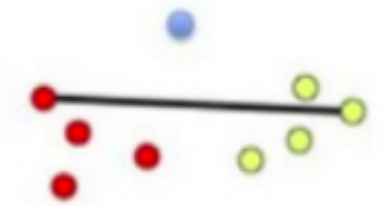


Funciones de link

- ¿Cómo definimos una noción de distancia entre clusters? Hay varias opciones
- **Single link**: $d_{SL}(G, H) = \min_{i \in G, j \in H} d_{ij}$.



- **Complete link**: $d_{CL}(G, H) = \max_{i \in G, j \in H} d_{ij}$.

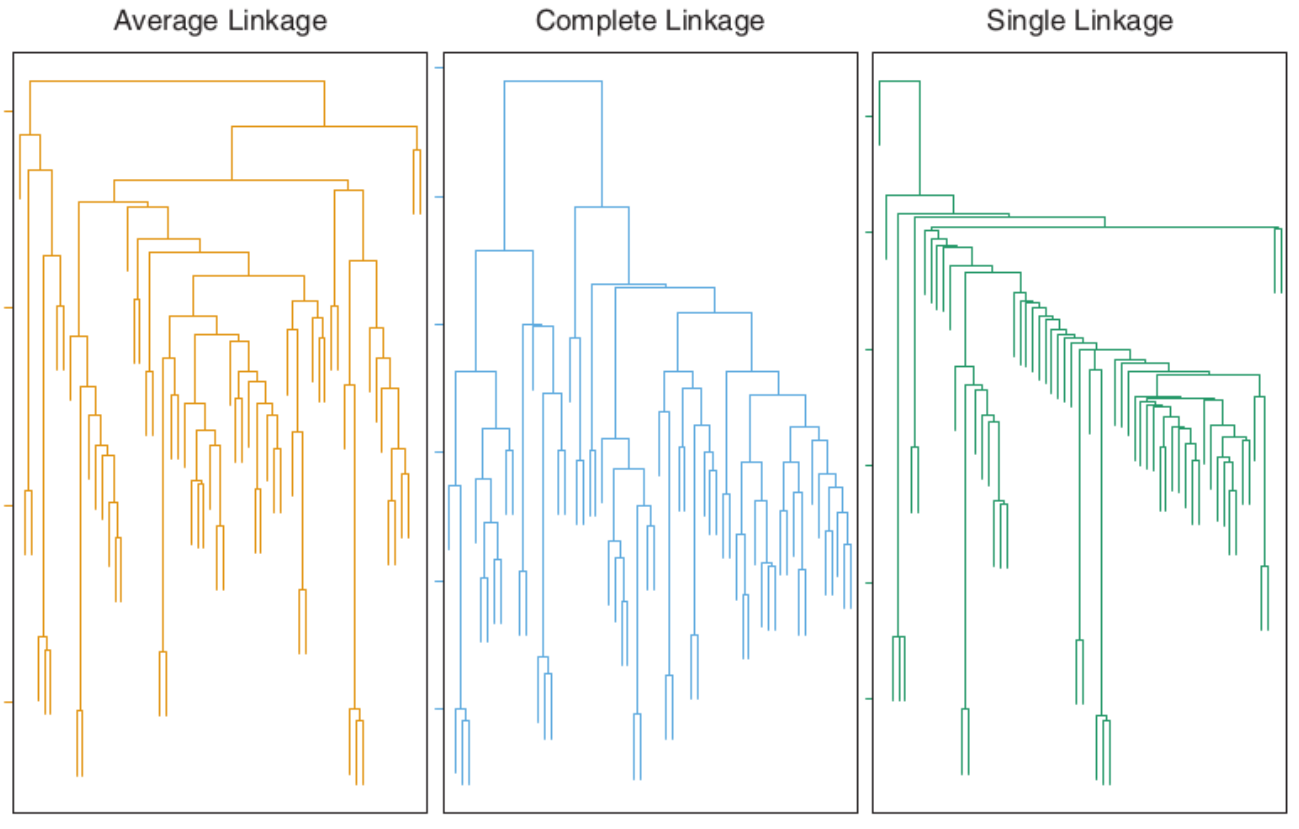


- **Promedio** (group average): $d_{GA}(G, H) = \frac{1}{N_G N_H} \sum_{i \in G} \sum_{j \in H} d_{ij}$.
- También hay otras, como las de la familia Ward que minimizan la varianza intracluster total.

Funciones de link

- ¿Cómo escogemos la función de link?
- Solo hay algunas heurísticas:
    - Single link: puede generar clústers alargados (chaining: a cada clúste solo se le añade una observación cada vez).
    - Complete link: tiende a producir clústers mucho más compactos, aunque puede violar la propiedad de cercanía.
    - Link Promedio: supone un compromiso entre los dos, aunque es sensible a la escala de las distancias d_{ij}.

Funciones de link



Correlación cofenética

- El *cophenetic correlation coefficient* se define como la correlación entre las disimilaridades entre observaciones $d_{ii'}$ y las disimilaridades cofenéticas $C_{ii'}$.
- $C_{ii'}$ se define como la disimilaridad entre los grupos cuando las observaciones i e i' se fusionan en el dendrograma.
- Esto es, $C_{ii'}$ puede verse como la altura a la que i e i' se fusionaron.
- También podemos calcular la correlación cofenética entre dos dendrogramas (generados mediante diferentes funciones de link), para obtener una medida de **cómo de distintos son dos dendrogramas**.

Resumen de clustering jerárquico

- Para un dataset consistente en n puntos:
  - Requiere $\mathcal{O}(n^2)$ memoria (por la matriz de distancias).
  - Requiere $\mathcal{O}(n^3)$ de tiempo en la mayoría de casos (aglomerativo).
- Ventajas:
  - Muy útiles para visualización (dendrograma).
  - Cuando los datos tienen estructura jerárquica, más útil que otros tipos de clustering.
- Inconvenientes:
  - Elevado coste computacional (ver arriba).
  - Sensibles a tipo de algoritmo/distancia escogidas.
- En R:
  - hclust de la librería estándar, bastante sólida.
  - dendextend para trabajar con dendrogramas (ver práctica).

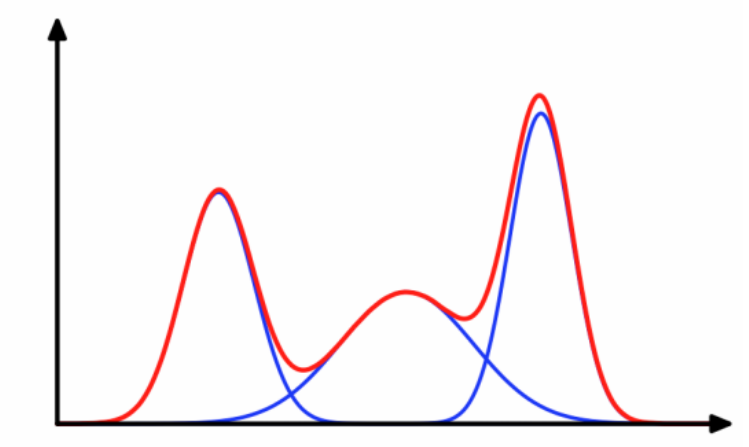
Clustering Probabilístico

Mixturas de Gaussianas (MoG)

- Consisten en una combinación convexa de K distribuciones normales,

$$p(x) = \sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathcal{N}(x|\mu_k, \Sigma_k)$$

- donde $\sum_{k=1}^{K} \pi_k = 1$ y $\pi_k \geq 0$, consiguiendo modelizar distribuciones *multimodales*.



Modelos probabilísticos

- Podemos refinar nuestras inferencias si distinguimos dos tipos de variables (aleatorias):

  1. Variables **observadas**: x, los datos del problema.

  2. Variables **latentes**: z, no son observables, queremos inferirlas a partir de las observaciones.

- Distinguir entre los dos tipos de variables anteriores es la base de los **modelos probabilísticos**.

- Estos modelos definen una distribución conjunta $p(x, z)$.

- Estamos interesados en hacer inferencias de la forma $p(z|x)$ (la distribución a posteriori), para ello recurrimos al Teorema de Bayes:

$$p(z|x) = \frac{p(x, z)}{p(x)} = \frac{p(x, z)}{\int p(z, x) dz}$$

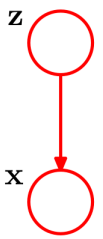
- $p(x)$ suele ser intratable de calcular: surgen numerosas técnicas de aproximación Bayesiana (Markov Chain Monte Carlo, Expectation-Maximization, Variational Inference, ...)

Mixturas de Gaussianas (MoG)

- En el caso de la mixtura de Gaussianas, ¿qué representan las variables latentes z?
- Intuición con clustering: z será una **variable categórica (factor)** que indica a que componente (cluster) pertenece la observación x.
- Podemos simular de una mixtura de Gaussianas mediante el siguiente proceso:

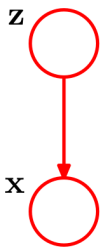
  1. $z \sim Categorical\{1, \ldots, K\}$ (seleccionamos cluster)
  2. Sea $z = k$, $x \sim \mathcal{N}(\mu_k, \Sigma_k)$ (simulamos de ese cluster)

- Gráficamente, lo representamos mediante



donde los nodos son variables aleatorias, y los arcos indican dependencia probabilista.

Mixturas de Gaussianas (MoG)



- Nos indica que la probabilidad conjunta $p(x, z)$ se ha factorizado de la siguiente manera al definir el modelo

$$p(x, z) = p(z)p(x|z)$$

- ¿Quiénes son los factores?
  - $p(z)$: lo definimos tal que $p(z_k = 1) = \pi_k$, donde z es una variable categórica representada mediante OHE.
  - $p(x|z_k = 1) = \mathcal{N}(x|\mu_k, \Sigma_k)$
- De esta forma, tenemos que la marginal es (**coincide con lo original**)

Mixturas de Gaussianas (MoG)

- Si hemos llegado a lo mismo que al principio, **¿para qué hemos hecho todo esto?**
- Al introducir las variables latentes z, podemos responder de forma natural a inferencias del tipo: ¿a qué cluster asignamos x? mediante el posterior $p(z|x)$.
- En el ámbito de MoGs, al posterior también se le denomina **responsabilidad**, y su expresión es

$$p(z_k = 1|x) = \frac{\pi_k \mathcal{N}(x|\mu_k, \Sigma_k)}{\sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathcal{N}(x|\mu_k, \Sigma_k)}$$

- En lugar de obtener una asignación **rígida** a un cluster, tenemos una noción de incertidumbre via $p(z|x)$.
- Además, al introducir las variables latentes z, se pueden desarrollar algoritmos de inferencia más sofisticados (como EM).

Máxima Verosimilitud (ML)

- Todavía no hemos visto cómo obtener valores buenos para los parámetros de las dos distribuciones involucradas:

$$\pi_k, \mu_k, \Sigma_k$$

- El algoritmo más básico (no necesita latentes z) es el de **máxima verosimilitud**.

- Supongamos que tenemos $x_1, \ldots, x_N$ observaciones (independientes), escribimos la log-verosimilitud del modelo

$$\log p(x|\pi, \mu, \Sigma) = \sum_{n=1}^{N} \log\{\sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathcal{N}(x_n|\mu_k, \Sigma_k)\}$$

- Hemos obtenido un problema de optimización

$$\pi^*, \mu^*, \Sigma^* = \arg\max_{\pi,\mu,\Sigma} \log p(x|\pi, \mu, \Sigma)$$

Cuestiones técnicas sobre ML

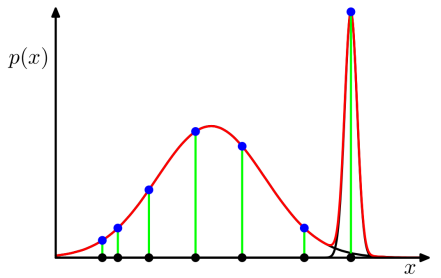
- Desafortunadamente, no hay una solución explícita para el óptimo, pero podemos utilizar **descenso por el gradiente** o similares.

- El problema de optimización presenta **singularidades**. Si "tenemos suerte", puede ocurrir que durante la optimización $x_n = \mu_j$, teniendo que

$$\mathcal{N}(x_n|x_n, \sigma_j^2 I) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sigma_j} \to \infty$$

cuando $\sigma_j \to 0$.

- Es decir, ajustando una componente a un único punto x_n, podemos maximizar la función objetivo tanto como queramos. **El overfitting es real**.



Algoritmo EM (1)

- Técnica general para encontrar soluciones de máxima verosimilitud en modelos probabilísticos con variables latentes.
- Sea un modelo probabilístico en el que denotamos por X el vector de variables observadas y Z el vector de variables latentes (discretas).
- La distribución conjunta, $p(X, Z|\theta)$ viene gobernada por el vector de parámetros θ. Queremos maximizar

$$p(X|\theta) = \sum_{Z} p(X, Z|\theta)$$

- Asumimos que la optimización directa de $p(X|\theta)$ es difícil, pero la de $p(X, Z|\theta)$ es fácil.

Algoritmo EM (2)

- Para cualquier distribución $q(Z)$ sobre las variables latentes se verifica

$$\log[p(X|\theta)] = \mathcal{L}(q,\theta) + KL(q||p)$$

- Donde

$$\mathcal{L}(q,\theta) = \sum_Z q(Z) \log\left[\frac{p(X,Z|\theta)}{q(z)}\right]$$

$$KL(q||p) = -\sum_Z q(Z) \log\left[\frac{p(Z|X,\theta)}{q(z)}\right]$$

- **Ejercicio**: demostrarlo.
- La divergencia de Kullback-Leibler verifica $KL(q||p) \geq 0$ y $KL(q||p) = 0$ si y solo si $q(Z) = p(Z|X,\theta)$.
- Por tanto, $\mathcal{L}(q,\theta) \leq \log[p(X|\theta)]$.

Algoritmo EM (3)

- El algoritmo EM es un algoritmo de optimización iterativo con dos etapas utilizado para encontrar θ que maximiza la verosimilitud.
- Supongamos que l valor actual de θ es θ^{old}
- Paso E: Maximizar $\mathcal{L}(q, \theta^{old})$ con respecto a $q(Z)$. (Demostrar que el máximo se alcanza cuando $q(Z) = p(Z|X, \theta^{old})$).
- Paso M: Mantener fija $q(Z)$ y maximizar $\mathcal{L}(q, \theta)$ con respecto a θ, dando lugar a θ^{new}.
- El paso M hace que $\mathcal{L}(q, \theta)$ crezca y por tanto también la log verosimilitud.
- Como q está determinada usando los parámetros viejos, ya no es idéntica a $p(Z|X, \theta^{new})$ y por tanto la KL será distinta de 0.
- El aumento en log verosimilitud es mayor que el aumento en su cota inferior.

Algoritmo EM (4)

- Después del paso E tenemos que

$$\mathcal{L}(q, \theta) = \sum_{Z} p(Z|X, \theta^{old}) \log p(X, Z|\theta) - \sum_{Z} p(Z|X, \theta^{old}) \log p(X, Z|\theta^{old})$$

- En el paso M maximizamos el valor esperado de $\log p(X, Z|\theta)$.
- θ aparece únicamente en el logaritmo. Si la distribución conjunto es de la familia exponencial, la optimización es muy sencilla.

MoG mediante EM (1)

- En MoG queremos maximizar

$$\log p(X|\pi, \mu, \Sigma) = \sum_{n=1}^{N} \log\{\sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathcal{N}(x_n|\mu_k, \Sigma_k)\}$$

- Difícil pues la suma ocurre dentro del logaritmo.
- En cambio, la **verosimlitud completa**, más fácil pues cambia orden de logaritmo y suma

$$\log p(X, Z|\pi, \mu, \Sigma) = \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} z_{nk} \left\{\log \pi_k + \log \mathcal{N}(x_n|\mu_k, \Sigma_k)\right\}$$

MoG mediante EM (2)

- Usamos EM.
- En el paso E debemos evaluar $p(Z|X, \mu^{old}, \Sigma^{old}, \pi^{old})$

$$p(z_k = 1|x_n) = \frac{\pi_k^{old}\mathcal{N}(x_n|\mu_k^{old}, \Sigma_k^{old})}{\sum_{k=1}^{K}\pi_k^{old}\mathcal{N}(x_n|\mu_k^{old}, \Sigma_k^{old})} = \gamma(z_{nk})$$

- En el paso M, calculamos $\mu^{new}, \Sigma^{new}, \pi^{new}$, maximizando

$$\mathbb{E}[\log p(X, Z|\mu, \Sigma, \pi)] = \sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K}\gamma(z_{nk})\left\{\log \pi_k + \log \mathcal{N}(x_n|\mu_k, \Sigma_k)\right\}$$

MoG mediante EM (3)

- Para μ_k (definiendo $N_k = \sum n = 1^N \gamma z_{nk}$)

$$\mu_k = \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^{N} \gamma(z_{nk}) x_n$$

- Para Σ_k

$$\Sigma_k = \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^{N} \gamma(z_{nk}) (x_n - \mu_k)(x_n - \mu_k)^\top$$

- Para π_k

$$\pi_k = \frac{N_k}{N}$$

Relación entre K-medias y MoG

- Considérese una MoG con $\Sigma_k = \epsilon I$.

$$p(x|\mu_k, \Sigma_k) = \frac{1}{(2\pi\epsilon)^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\epsilon}\|x - \mu_k\|^2\right\}$$

- Usemos EM en este caso. La distribución a posteriori de z será

$$\gamma(z_{nk}) = \frac{\pi_k \exp\{-\frac{1}{2\epsilon}\|x - \mu_k\|^2\}}{\sum_j \pi_j \exp\{-\frac{1}{2\epsilon}\|x - \mu_j\|^2\}}$$

- En el límite $\epsilon \to 0$, $\gamma(z_{nk}) = 0$ para todo k excepto aquel para el cual $\|x - \mu_k\|^2$ sea mínimo.

- Cada punto asignado al cluster con centroide más cercano!!

Relación entre K-medias y MoG

- En este límite, el valor esperado de la log verosimilitud completa se puede escribir como

$$-\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K} I(C(n)=k)\|x_n-\mu_k\|^2 + \text{cte}$$

- Maximizarlo (respecto a μ_k) equivale a escoger

$$\mu_k = \arg\min_m \sum_{n:C(n)=k} \|x_n - m\|^2$$