Clustering

Aprendizaje Automático Aplicado

Introducción

Clustering

Conjunto de técnicas para agrupar un conjunto de datos en grupos (clusters) de manera que tengan sentido o sean útiles para alguna tarea

> ¿Quién le da el sentido?

Los grupos se arman según la información misma de los datos:

> Buscamos subconjuntos de datos relacionados entre sí, y a su vez separados de los otros

Técnica exploratoria

¿Es igual a clasificación?

Ejemplo

Ejemplo - 2 clusters

Ejemplo - 4 clusters

Ejemplo - 6 clusters

Clustering

Intentamos identificar clusters “naturales”

¿Siempre existen?

Los métodos de clustering intentan encontrar este tipo de clusters de manera automática

Queda a nuestro criterio darles una interpretación semántica

Clustering

Biología

Segmentación de mercado

Análisis de redes sociales

Recuperación de información

Métodos de Clustering

K-means

Agglomerative Hierarchical Clustering

DBSCAN

Otros...

K-means

K-means

Cada cluster se representa mediante un punto en el espacio (denominado centroide)

Tengo K de estos puntos

Los puntos que queden más cerca del centroide c_i que de cualquier otro centroide corresponden al cluster C_i

En python: `sklearn.cluster.KMeans`

K-means

Comienzo sorteando K puntos aleatoriamente (centroides)

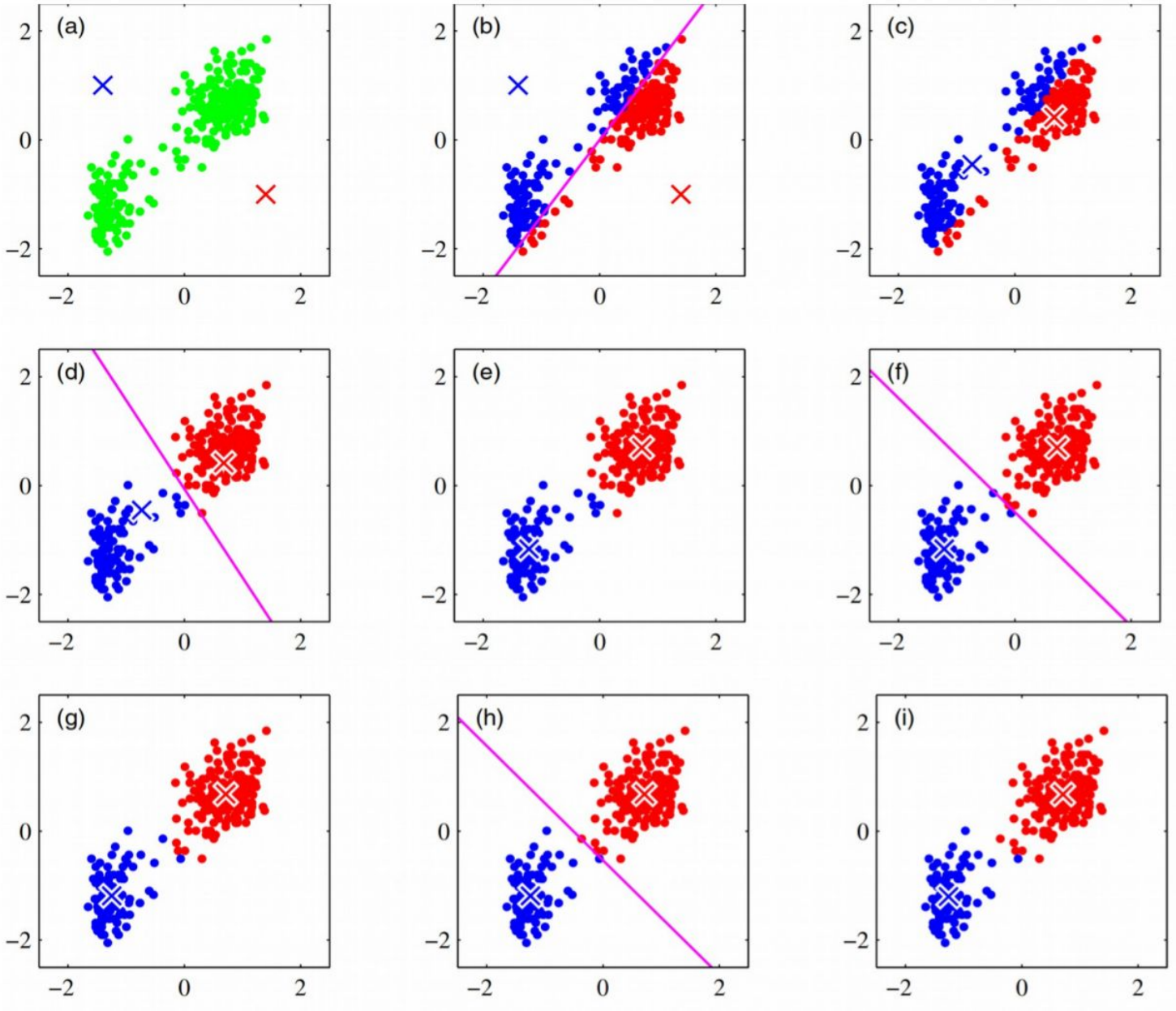
Para cada punto del conjunto de entrenamiento, calculo a qué distancia de los centroides está y le asigno el que quede más cerca

Tomo los nuevos K conjuntos y calculo sus centroides geométricos para generar los nuevos K puntos

Repito hasta que converja:

- Los puntos ya no cambian de conjunto entre una iteración y la siguiente
- (Si son muchos puntos y queda oscilando, que menos de cierto % cambie)

Ejemplo K-means



K-means

Noción de distancia:

- La más habitual es la distancia euclídea
- En otras aplicaciones puede servir más la distancia coseno

Se puede ver como un problema de optimización:

- Costo = Suma del cuadrado de las distancias (SSE, sum of squared error)

$$SSE = \sum_{i=1}^{K} \sum_{x \in C_i} dist(x, c_i)$$

En python: atributo `inertia_` *de* `sklearn.cluster.KMeans`

K-means

En general es muy rápido y converge en pocas iteraciones

Muy sensible a los puntos de inicialización: cae en óptimos locales

- Los algoritmos generalmente realizan varias pasadas y se quedan con la mejor

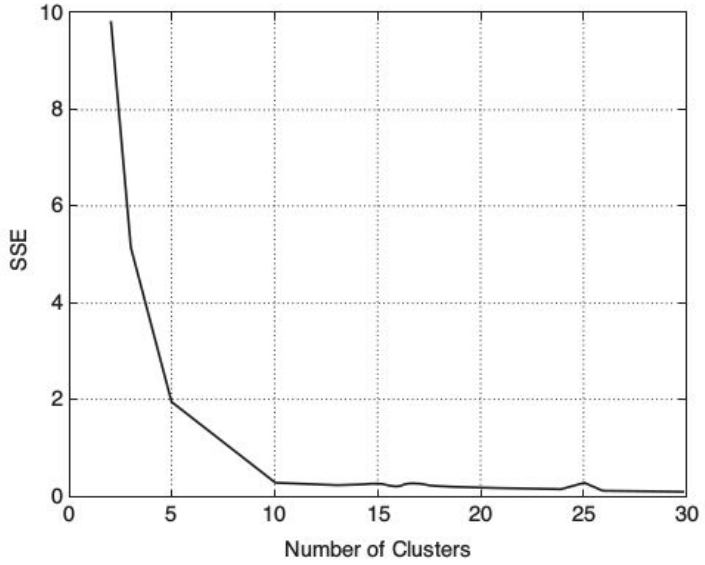
No da buenos resultados si los datos no se adaptan al tipo de cluster que espera K-means

K-means

¿Cómo elijo el mejor K?

Una opción es analizar la función de costo

- La función tiende a 0 cuando aumenta K
- Puede verse que en cierto momento se “desacelera” el descenso del valor



K-means

Se puede usar para clasificar!

¿Cómo?

En python: método `predict()` *de* `sklearn.cluster.KMeans`
No todos los algoritmos de clustering lo tienen!

Agglomerative Hierarchical Clustering

Agglomerative Hierarchical Clustering

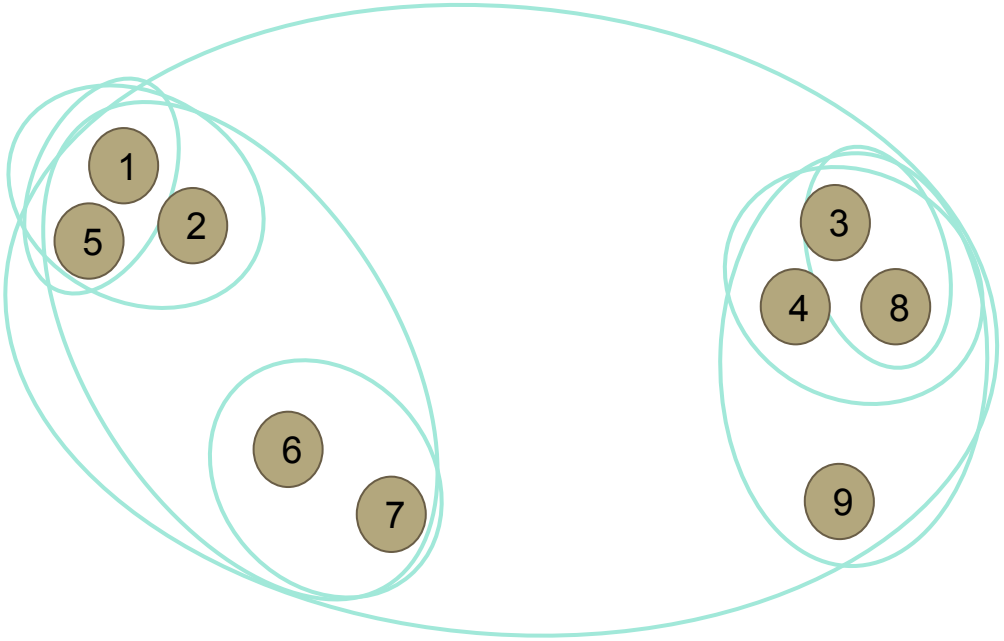
Si tengo N puntos a clusterizar, comienzo con N clusters separados

A cada paso elijo los dos clusters que hayan quedado más “cercanos” y los uno, creando un cluster nuevo

Repito el proceso hasta que queden los K clusters que busco

En python: `sklearn.cluster.AgglomerativeClustering`

Ejemplo



Agglomerative Hierarchical Clustering

Varios criterios de “cercanía”

Cercanía entre dos puntos:

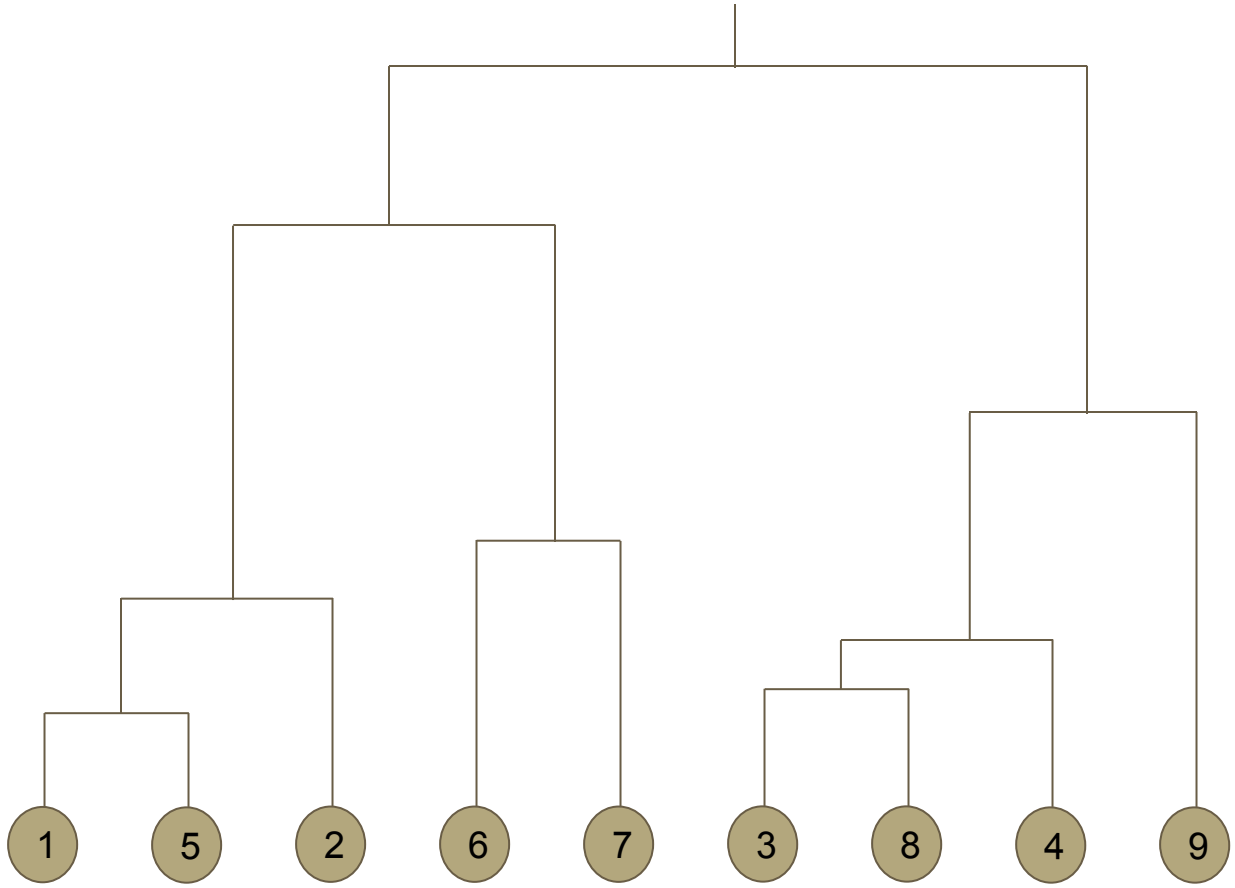
- Distancia eúclidea
- Coseno

Cercanía entre dos clusters:

- Máximo entre pares de puntos
- Promedio de distancias
- Ward: minimizar la varianza

Dendograma

Representación gráfica de cómo se van formando los clusters



Agglomerative Hierarchical Clustering

¿Cómo encuentro el mejor K?

El dendograma puede dar una pista

En python: `scipy.cluster.hierarchy.dendrogram`

Agglomerative Hierarchical Clustering

Es un algoritmo costoso computacionalmente

Bastante sensible a datos ruidosos

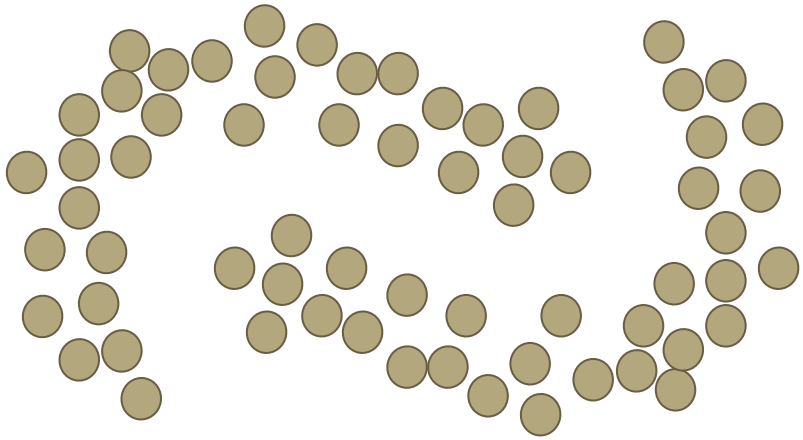
Las decisiones a cada paso son finales

No optimiza globalmente

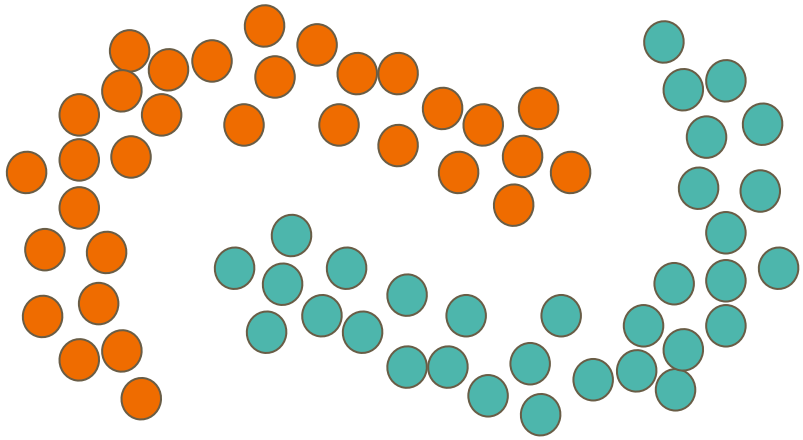
Es útil cuando sabemos que los datos tienen naturalmente una jerarquía

DBSCAN

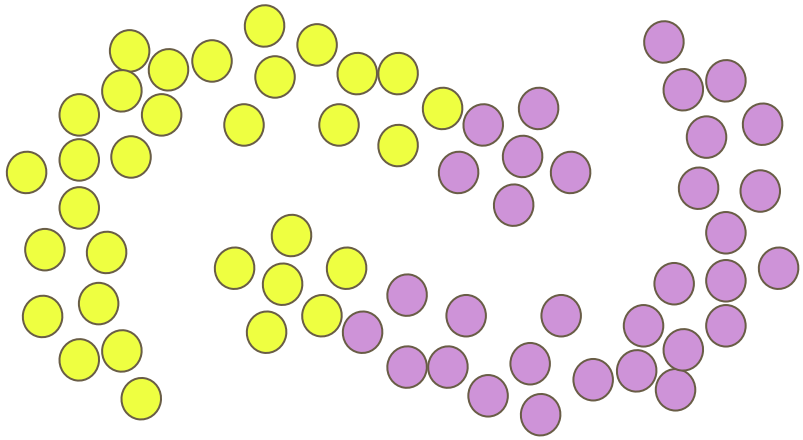
Ejemplo



Ejemplo



Ejemplo



DBSCAN

Método basado en densidad de los datos

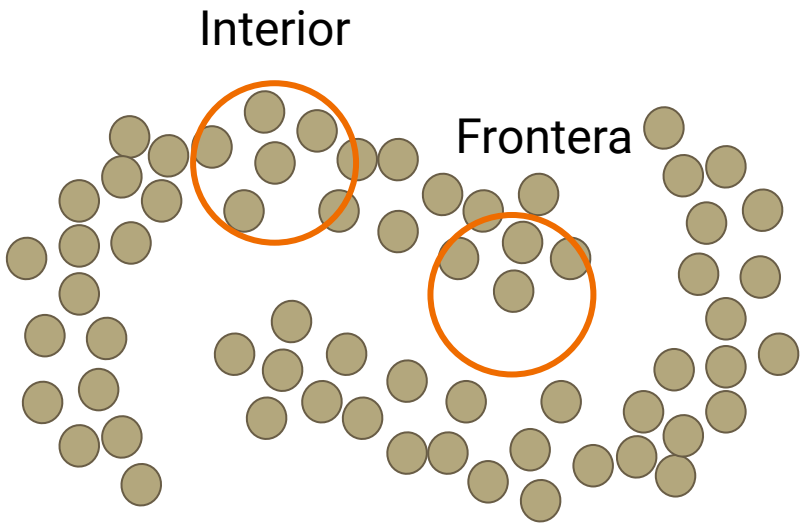
Trazamos un radio *epsilon* desde cada punto y vemos cuántos vecinos tiene

Los categorizamos en puntos “interiores”, “de frontera” o “ruido”

Armamos clusters con todos los puntos interiores posibles limitados por puntos de frontera

En python: `sklearn.cluster.DBSCAN`

DBSCAN



DBSCAN

El algoritmo determina la cantidad de clusters a formar

Pueden quedar puntos fuera de todo cluster (ruido)

Tiene problemas cuando hay clusters con diferentes densidades

Es más lento de calcular

Evaluación

Evaluación

Métricas no supervisadas:

- Mediciones de la coherencia interna de los clusters encontrados según los datos

Métricas supervisadas:

- Si el conjunto está etiquetado, podemos utilizar las etiquetas como información externa y ver qué tanto se parecen los clusters a la distribución de etiquetas

Métricas no supervisadas

Cohesión = Suma de distancias de los puntos dentro de un mismo cluster

Separación = Suma de distancias de los puntos de clusters distintos

Una buena clusterización busca que la cohesión sea baja y la separación alta

Cohesión + Separación = Una constante que es la distancia total entre todos los pares de puntos

Coeficiente de Silueta

Dados un conjunto de datos y los clusters encontrados, para cada punto *i* defino:

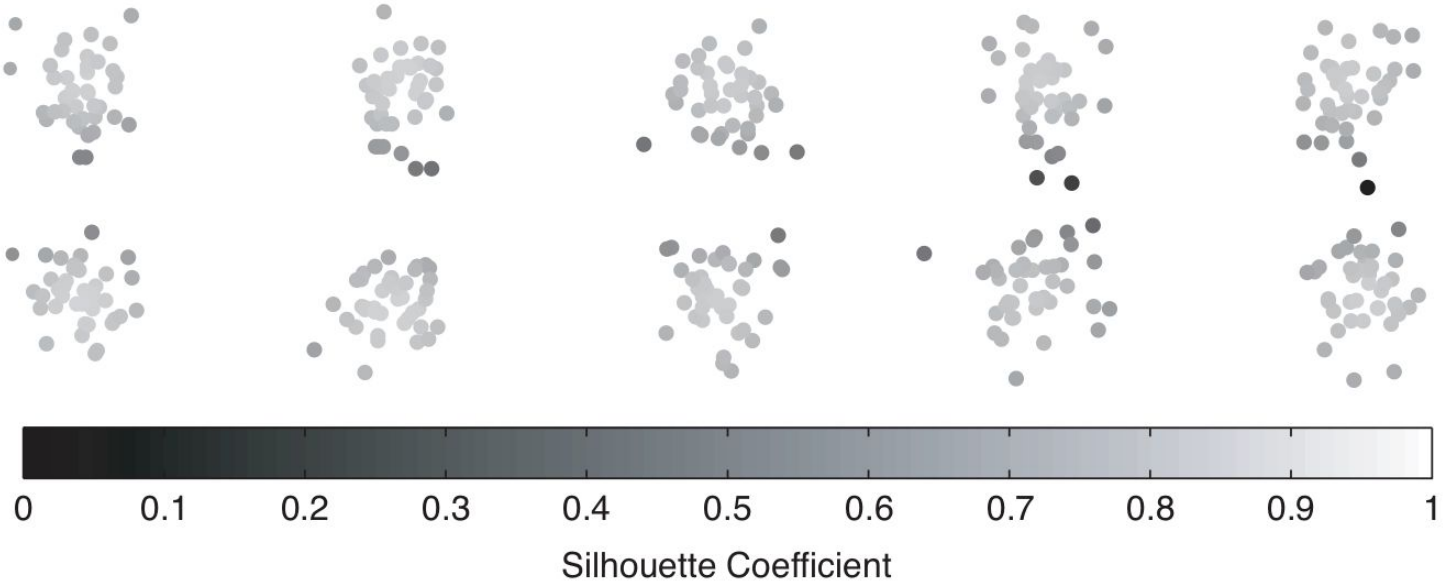
> a_i = promedio de distancias del punto *i* a los demás puntos de su cluster
>
> b_i = mínimo de los promedios de distancias del punto *i* a cualquier cluster que no sea el suyo
>
> Índice de silueta de *i*: $s_i = (b_i - a_i) / max(a_i, b_i)$

Coeficiente de Silueta

Cada s_i varía entre -1 y 1:

valores positivos son mejores

si tiene valor negativo, el punto es más cercano a otro cluster que al que tiene asignado

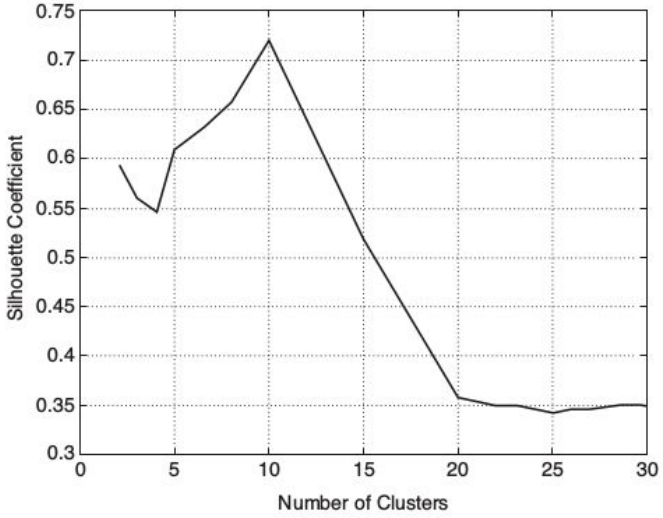


Coeficiente de Silueta

El coeficiente de silueta es el promedio de los s*i* para todos los puntos

Cuanto mayor sea su valor, mejores serán los clusters

Puede servir para encontrar la cantidad de clusters ideal



En python: `sklearn.metrics.silhouette_score`

Métricas supervisadas

En estos casos conozco, además del conjunto de clusters, la etiqueta asociada a cada dato

Homogeneidad: Si cada cluster contiene datos correspondientes a una sola etiqueta

Completitud: Si cada cluster contiene todos los datos correspondientes a una sola etiqueta

v-score: Media armónica entre H y C

En python: `sklearn.metrics.homogeneity_score`

`Sklearn.metrics.completeness_score`

`sklearn.metrics.v_measure_score`

Índice Rand

Puntos: p1, p2, p3, p4, p5

Clusters: C1={p1, p2, p3} y C2={p4 , p5}

Etiquetas: L1={p1, p2} y L2={p3, p4, p5}

Armo una matriz de pertenencia para los clusters y una para las etiquetas

C	p1	p2	p3	p4	p5
p1	1	1	1	0	0
p2	1	1	1	0	0
p3	1	1	1	0	0
p4	0	0	0	1	1
p5	0	0	0	1	1

L	p1	p2	p3	p4	p5
p1	1	1	0	0	0
p2	1	1	0	0	0
p3	0	0	1	1	1
p4	0	0	1	1	1
p5	0	0	1	1	1

Índice Rand

Armo la matriz conjunta

CL	p1	p2	p3	p4	p5
p1	11	11	10	00	00
p2	11	11	10	00	00
p3	10	10	10	01	01
p4	00	00	01	11	11
p5	00	00	01	11	11

Cuento las cantidades f_{11}, f_{00}, f_{10}, f_{11} (la matriz es simétrica, no repetir)

Índice Rand: RI = $(f_{11} + f_{00}) / (f_{01} + f_{11} + f_{00} + f_{10})$

Índice Rand

RI varía entre 0 y 1

En general se utiliza el Índice Rand Ajustado (ARI) que resta la esperanza de que se hayan elegido los clusters por azar

ARI varía entre -1 y 1, siendo 0 el azar y 1 el match perfecto

En python: `sklearn.metrics.adjusted_rand_score`

PCA

PCA

Principal Component Analysis

Método de reducción de dimensionalidad

Sirve para visualización

Técnica exploratoria

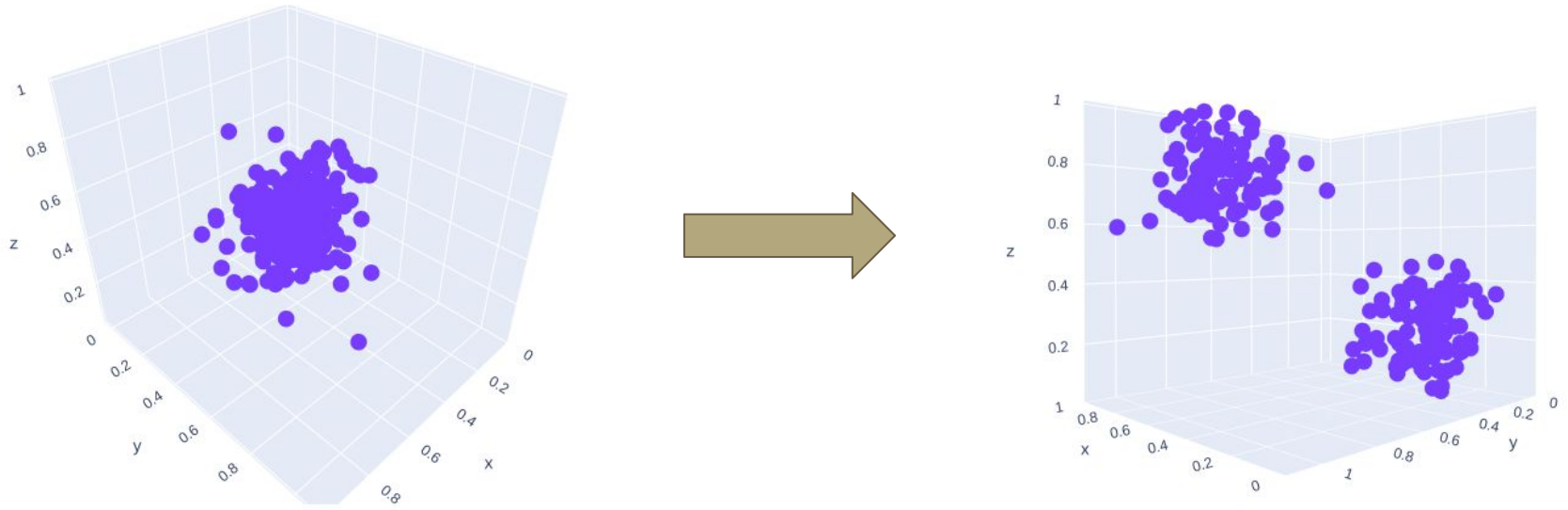
En python: `sklearn.decomposition.PCA`

PCA

El objetivo es encontrar un conjunto de ejes sobre los cuales los datos tengan la mayor varianza

De esta forma al proyectar los datos quedan “separados” lo más posible

PCA



Laboratorio