Minería de Datos
IIC2433

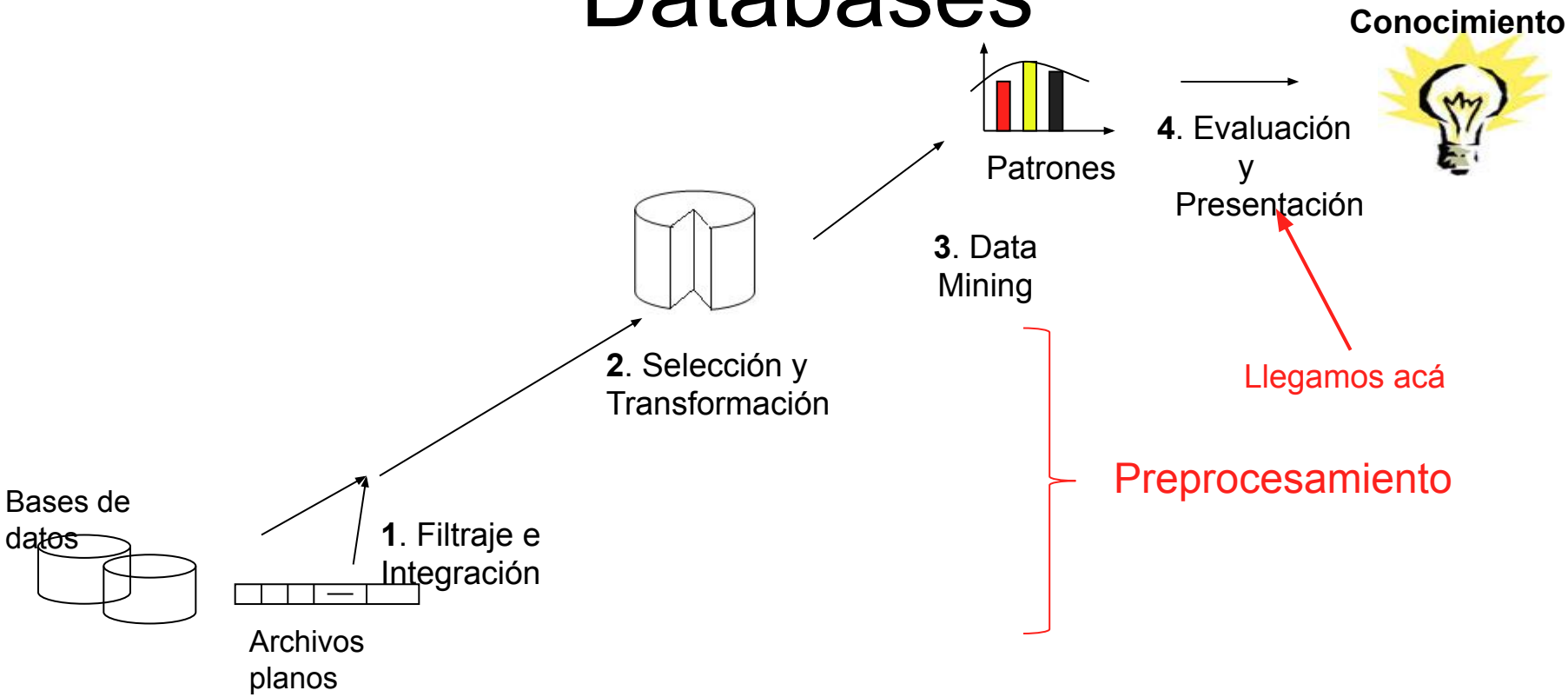
Validación de Clustering

Vicente Domínguez

¿Qué veremos esta clase?

- Como validar nuestros resultados obtenidos en el proceso de clustering

Knowledge Discovery in Databases



¿Es necesario validar los clusters?

- Por lo menos en Clasificación, la validación es parte integral del proceso
- No así en Clustering...

* Esta presentación está basada en slides del curso de Minería de Datos de la Profesora Bárbara Poblete

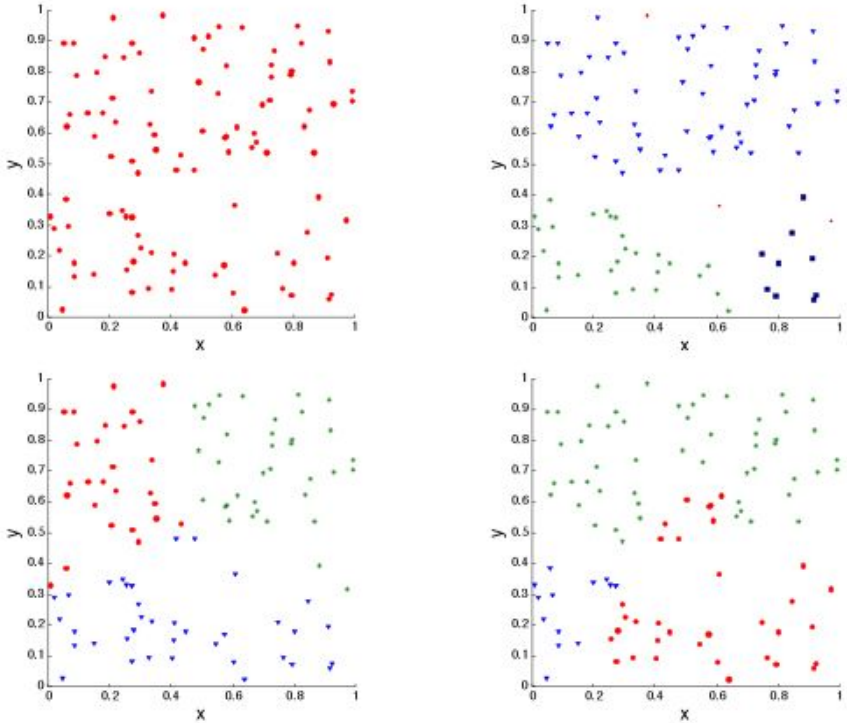
¿Cómo saber si nuestros clusters son buenos?

- No hay una respuesta absoluta
- Depende de la aplicación
- ¿Entonces, para qué evaluar?

Evaluamos para:

- Evitar encontrar patrones en el ruido
- Para comparar algoritmos de clustering diferentes
- Para comparar conjuntos de clusters diferentes
- Para comprar dos clusters

Clusters en datos aleatorios



Aspectos de la validación

- Determinar la **tendencia de agrupamiento** (clustering tendency), i.e.: si existe una estructura no-aleatoria en los datos
- Encontrar el número correcto de clusters
- Evaluar qué tan bien los resultados se ajustan a los datos (sin consultar datos externos)
- Comparar resultados con resultados externos, i.e.: clases asignadas manualmente
- Comparar dos conjuntos de clusters para saber cuál es mejor

Medidas de validez

- **External Index** (Supervisado)
- **Internal Index** (No-Supervisado)
- **Relative Index** (Relativo)

Concepto: Matriz de similitud

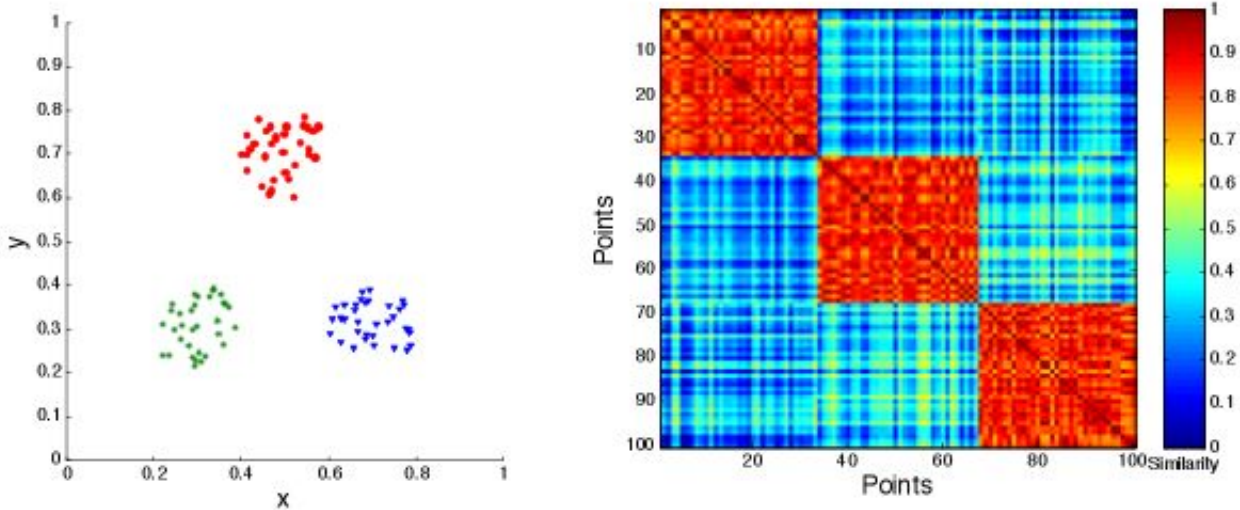
	G1	G2	G3	G4
G1	1	0.83	0	0
G2	0.83	1	0	0
G3	0	0	1	0.32
G4	0	0	0.32	1

https://www.researchgate.net/publication/315628119_Discovering_Attackers_Past_Behavior_to_Generate_Online_Hyper-Alerts

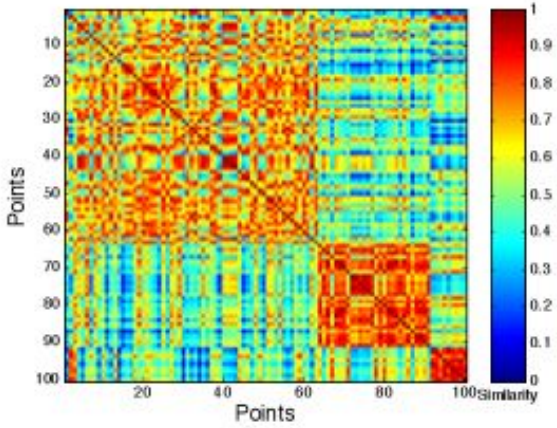
Enfoque visual

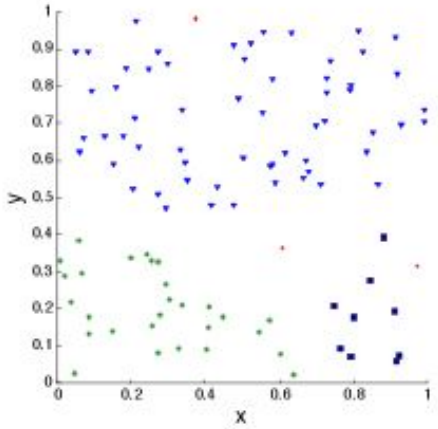
- Ordenar la matriz de similitud con respecto a etiquetas de clusters e inspeccionar visualmente

Visualizando la matriz de similitud (clusters reales)



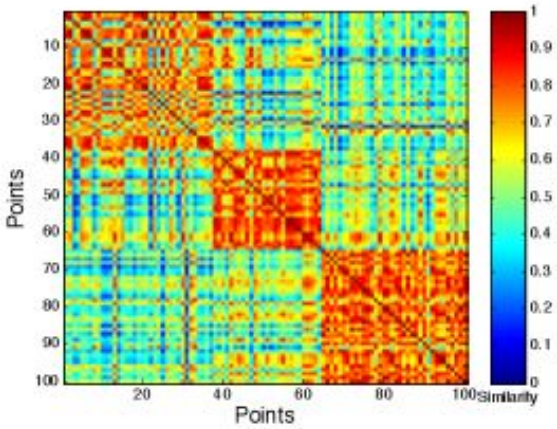
Visualizando clusters sobre datos aleatorios

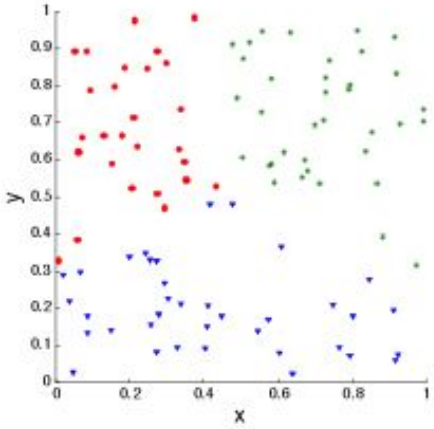




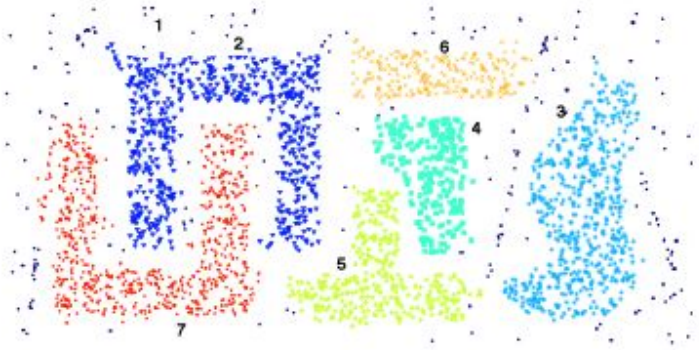
DBSCAN

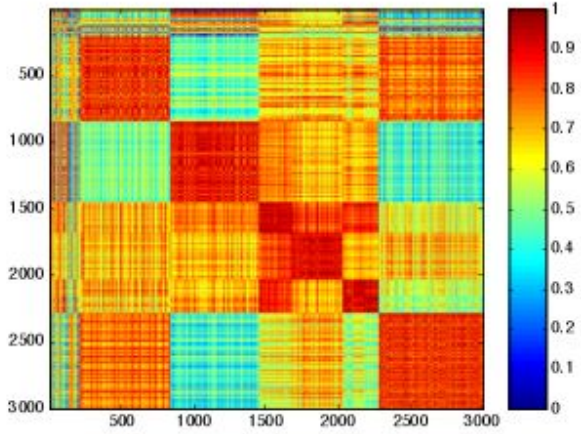
Visualizando clusters sobre datos aleatorios





K-means

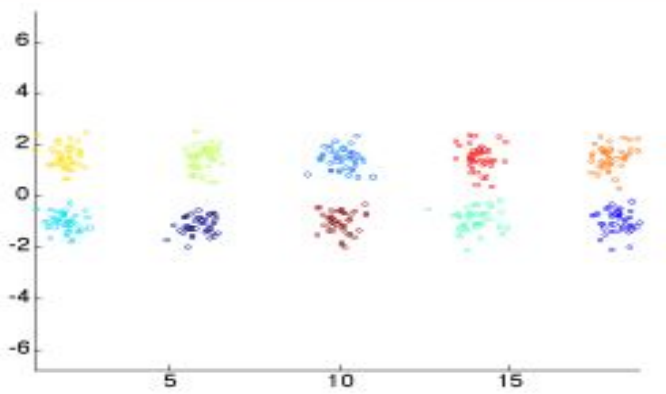

1
2
3
4
5
6
7

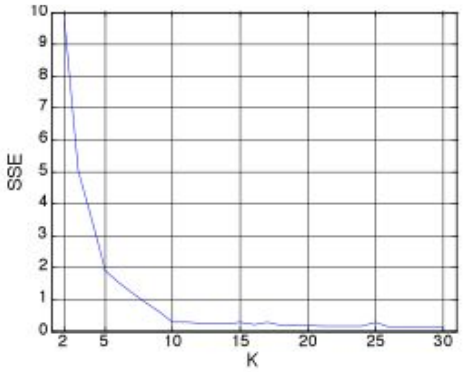

500
1000
1500
2000
2500
3000
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0

DBSCAN

Medidas internas: SSE

- Clusters en figuras más complicadas no están bien separados
- Indice interno: SSE
- Permite comparar 2 clusters, o 2 soluciones de clustering
- Permite estimar el número de clusters

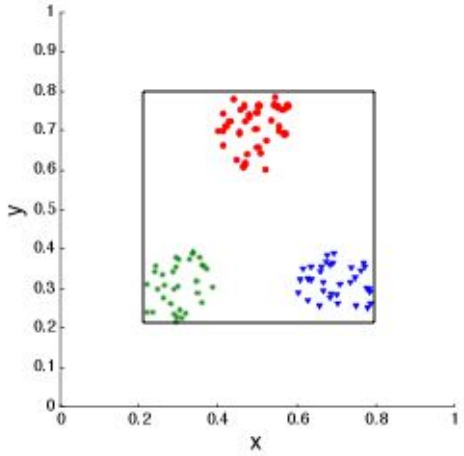


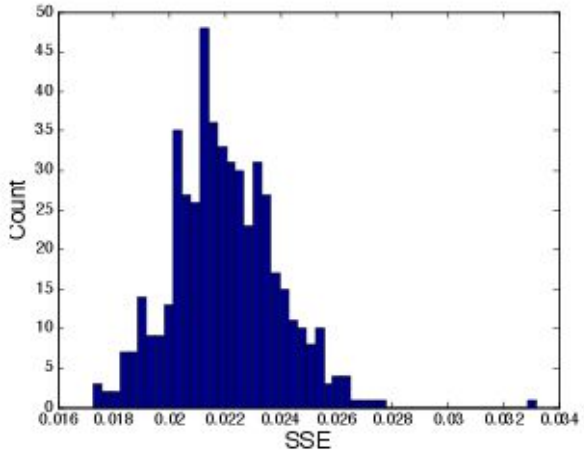


Metodología: Ejemplo SSE

- Comparar SSE = 0.005 contra 3 clusters de datos aleatorios

- Histograma muestra distribución SSE para 500 sets de datos aleatorios (100 puntos), en el mismo rango





Medidas internas: Cohesión y separación

- **Cohesión de clusters**: mide qué tan cercanos son los objetos en un cluster (ej: SSE)

- **Separación de clusters:** mide qué tan diferente o bien separado es un cluster de otros

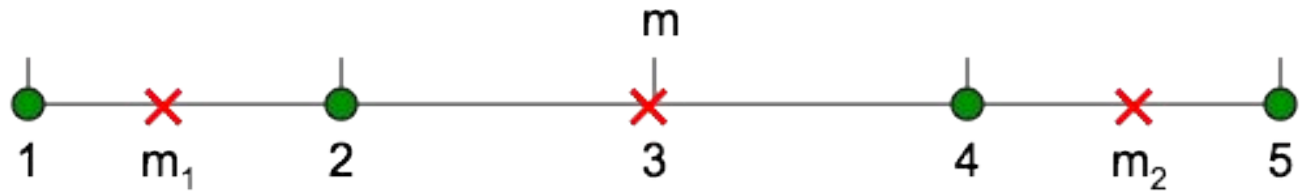
EJ. (SSE) Cohesión y Separación

- Cohesión se mide como **within cluster sum of squares (WSS o SSE)**

$$WSS = \sum_{i} \sum_{x \in C_i} (x - m_i)^2$$

- Separación se mide como **between cluster sum of squares (BSS)**

$$BSS = \sum_{i} |C_i| (m - m_i)^2$$



K=1 cluster:

$$WSS = (1-3)^2 + (2-3)^2 + (4-3)^2 + (5-3)^2 = 10$$

$$BSS = 4 \times (3-3)^2 = 0$$

$$Total = 10 + 0 = 10$$

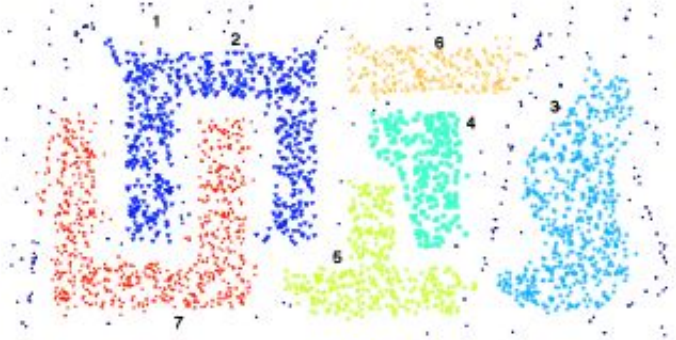
K=2 clusters:

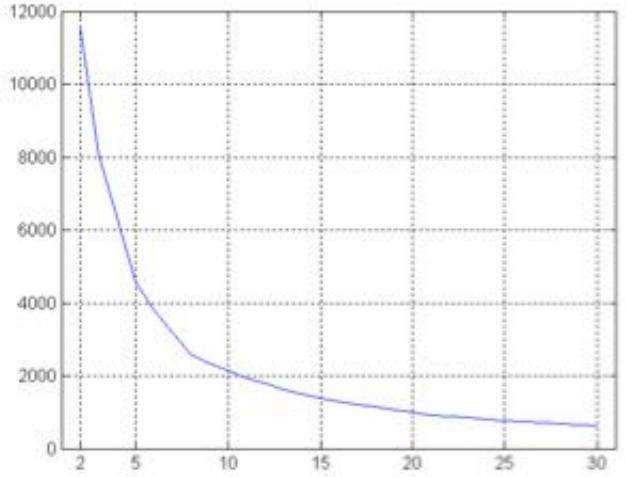
$$WSS = (1-1.5)^2 + (2-1.5)^2 + (4-4.5)^2 + (5-4.5)^2 = 1$$

$$BSS = 2 \times (3-1.5)^2 + 2 \times (4.5-3)^2 = 9$$

$$Total = 1 + 9 = 10$$

Curva SSE para un dataset más complicado

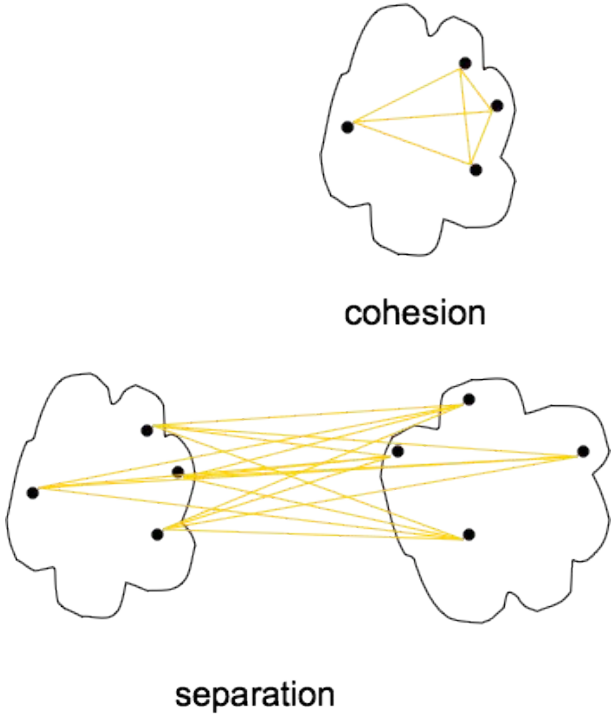




SSE of clusters found using K-means

Medidas internas: Cohesión y separación

- Enfoque basado en grafos de proximidad
- Cohesión: suma de los pesos de todos los arcos en un cluster
- Separación: suma de los pesos entre nodos del cluster y de otros clusters



Medidas Externas: Pureza y Entropía

- **Pureza**: Nivel en que un cluster contiene elementos de una sóla clase (se usa la clase predominante)

- **Entropia**: Cantidad de clases diferentes que contiene un cluster

Medidas Externas: Pureza y Entropía

Table 1: Entropy and Purity in CLUTO

	Entropy	**Purity**
Single Cluster	$E(S_r) = -\frac{1}{\log q}\sum_{i=1}^{q}\frac{n_r^i}{n_r}\log\frac{n_r^i}{n_r}$	$P(S_r) = \frac{1}{n_r}\max_i(n_r^i)$
Overall	$Entropy = \sum_{r=1}^{k}\frac{n_r}{n}E(S_r)$	$Purity = \sum_{r=1}^{k}\frac{n_r}{n}P(S_r)$

$\boldsymbol{S_r}$ is a cluster, $\boldsymbol{n_r}$ is the size of the cluster, $\boldsymbol{q}$ is the number of classes, $\boldsymbol{n^i_r}$ is the number of concepts from the **ith** class that were assigned to the **rth** cluster, and $\boldsymbol{n}$ is the number of concepts and $\boldsymbol{k}$ is the number of clusters.

https://www.researchgate.net/publication/228632901_Concept_learning_and_categorization_from_the_web

Validación con Expertos

- Se pueden evaluar los clusters para ver si producen el resultado esperado y comparar con otras soluciones

- Se puede generar una clasificación de validación

Comentarios finales

- La etapa de validación es la parte más difícil y frustrante del análisis de clusters
- Sin embargo es necesario
- Idealmente se deben combinar medidas externas e internas