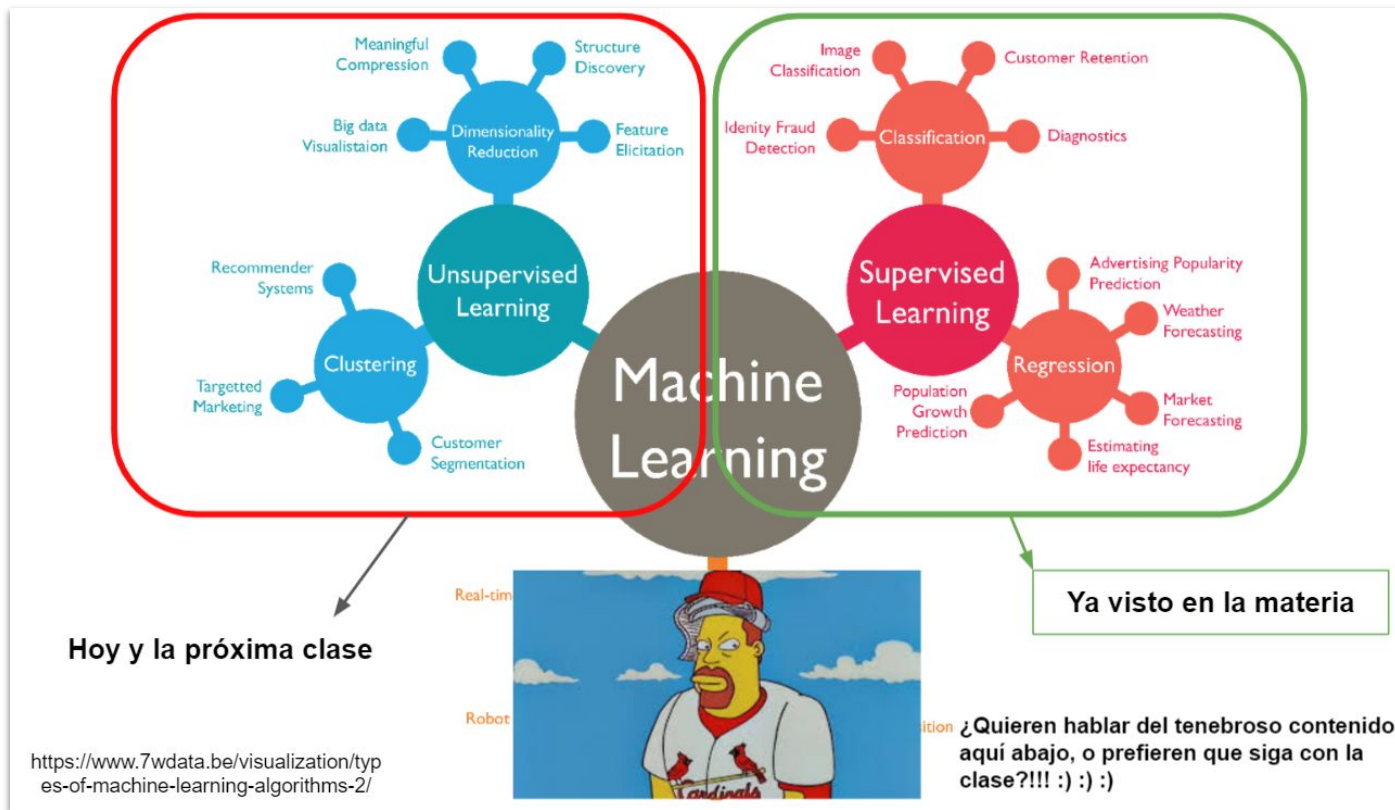


Clase 17: Clustering y K-means

Laboratorio de datos, FCEyN, 17/05/2022

Recordemos...

Clase pasada (PCA)



Motivación

¿Por qué estudiamos aprendizaje No-Supervisado?

Motivación

¿Por qué estudiamos aprendizaje No-Supervisado?

Es más **fácil** conseguir datos y más **barato**, es más que nada data generada con una máquina (no hay que pagarle a alguien para identificar clases o chequear el output)

Motivación

¿Por qué estudiamos aprendizaje No-Supervisado?

Es más **fácil** conseguir datos y más **barato**, es más que nada data generada con una máquina (no hay que pagarle a alguien para identificar clases o chequear el output)



(F) Acción/Crimen

detección de tópicos

Motivación

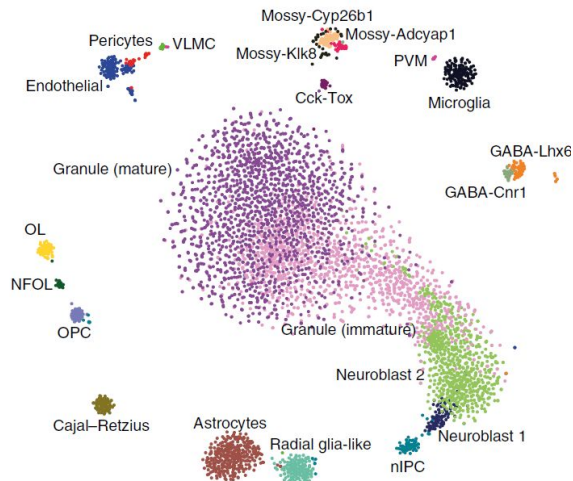
¿Por qué estudiamos aprendizaje No-Supervisado?

Es más **fácil** conseguir datos y más **barato**, es más que nada data generada con una máquina (no hay que pagarle a alguien para identificar clases o chequear el output)



(F) Acción/Crimen

detección de tópicos



Identificación tipos celulares

Motivación

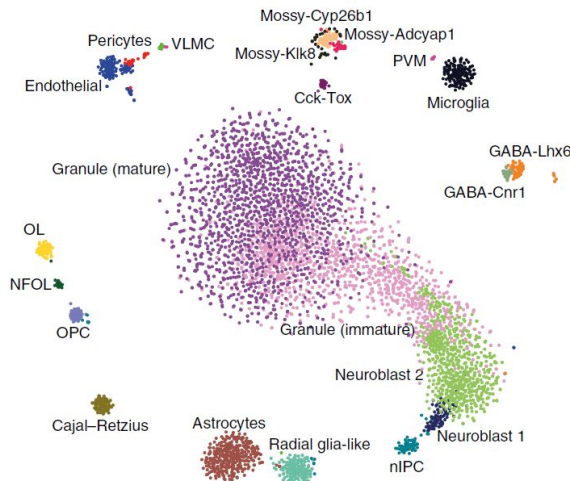
¿Por qué estudiamos aprendizaje No-Supervisado?

Es más **fácil conseguir datos** y más **barato**, es más que nada data generada con una máquina (no hay que pagarle a alguien para identificar clases o chequear el output)






(F) Acción/Crimen

detección de tópicos



Identificación tipos celulares

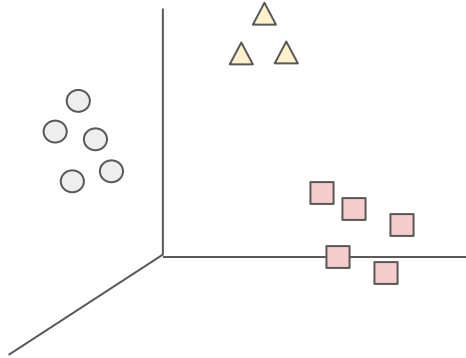
Relacionado con tus visitas en Deportes y Fitness [Ver historial](#)

		
\$ 3.790 Envío gratis	\$ 2.033 ²²	\$ 4.590 Envío gratis

Recomendación/Publicidad

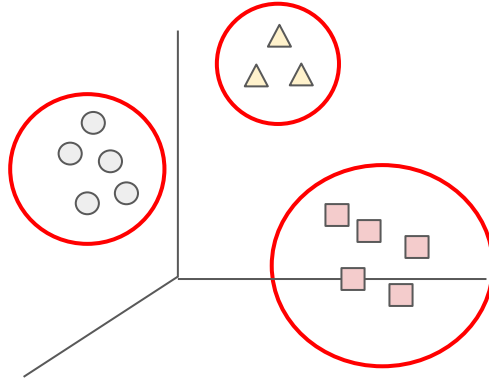
Clustering

Encontrar **subgrupos** (*clústers*) en los datos



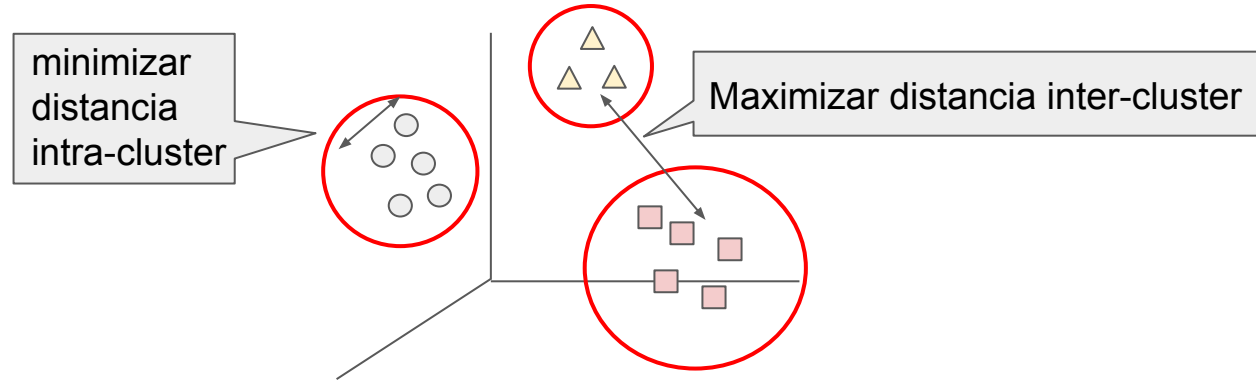
Clustering

Encontrar **subgrupos** (*clústers*) en los datos



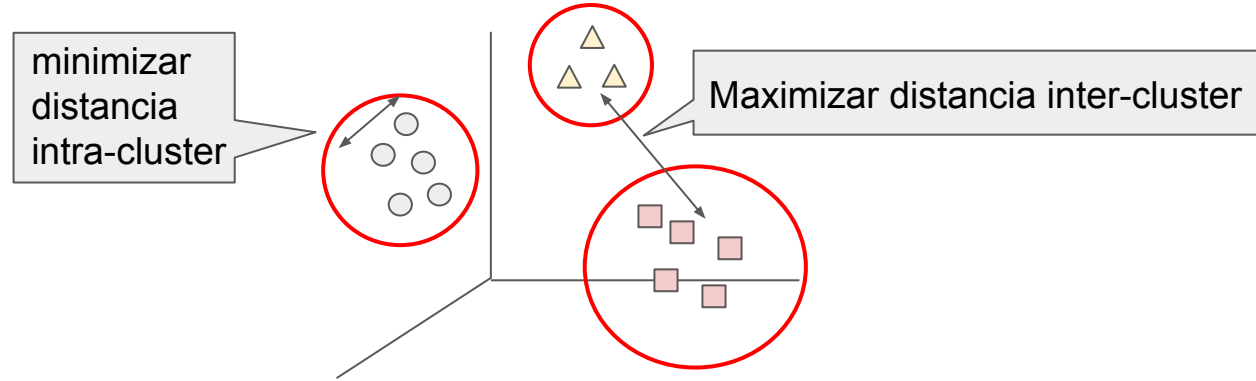
Clustering

Encontrar **subgrupos** (*clústers*) en los datos



Clustering

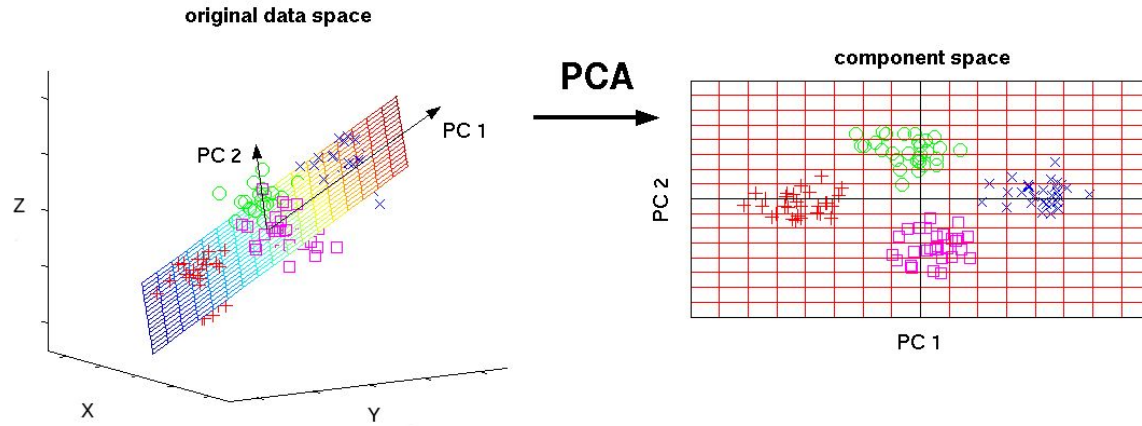
Encontrar **subgrupos** (*clústers*) en los datos



Observaciones dentro de un cluster **similares**

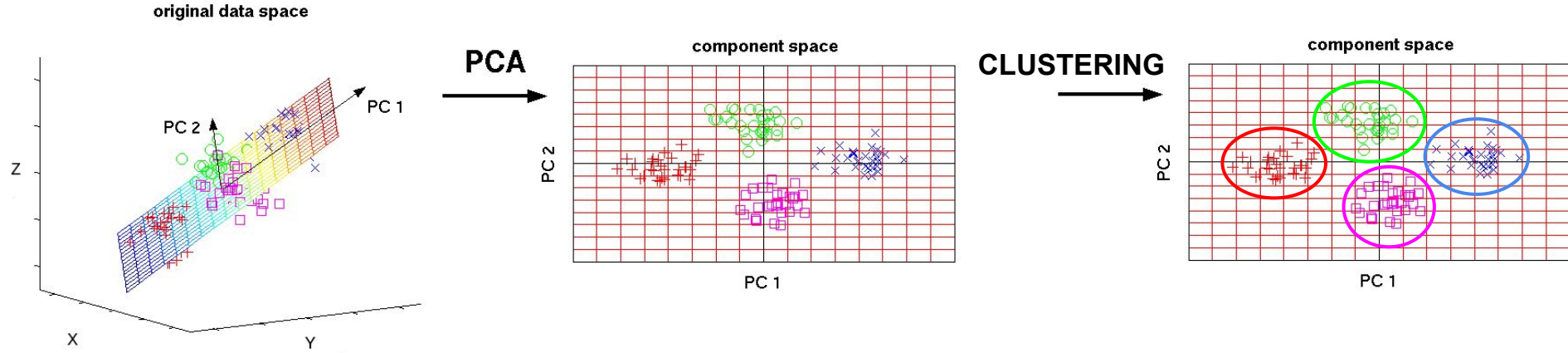
Observaciones entre clusters **no similares**

Clustering - diferencia con PCA



Reducir dimensión maximizando la varianza

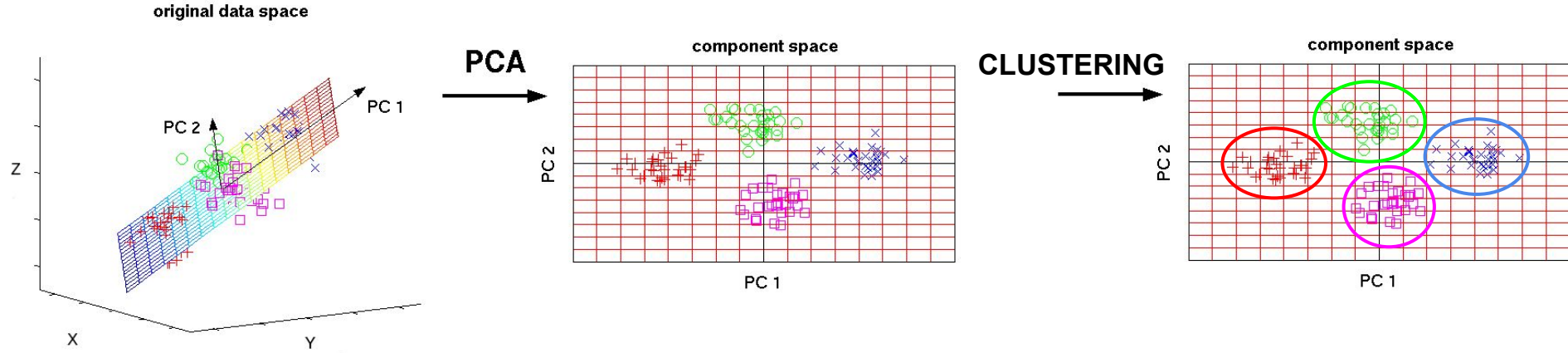
Clustering - diferencia con PCA



Reducir dimensión maximizando la varianza

Encontrar grupos homogéneos

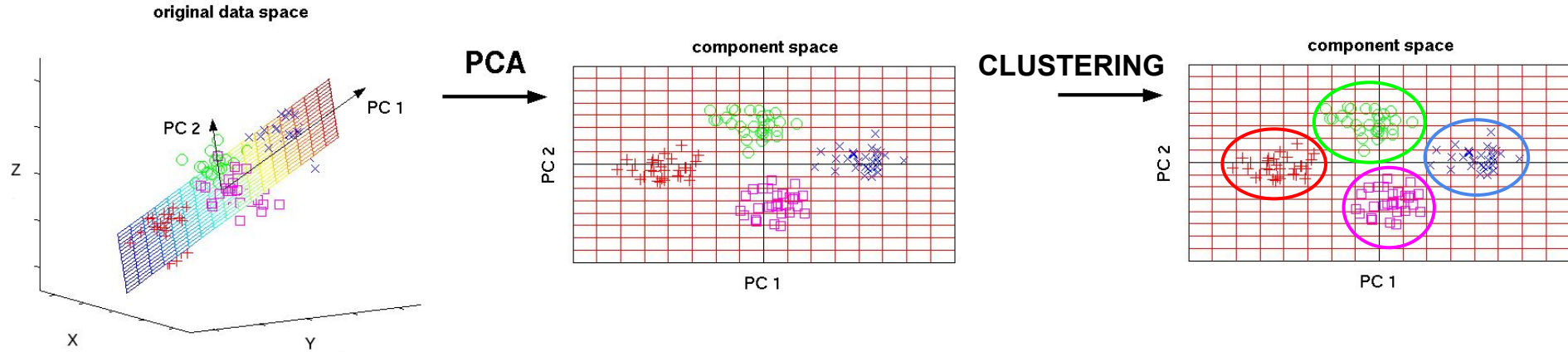
Clustering - diferencia con PCA



Reducir dimensión maximizando la varianza

Encontrar grupos homogéneos

Clustering - diferencia con PCA



Reducir dimensión maximizando la varianza

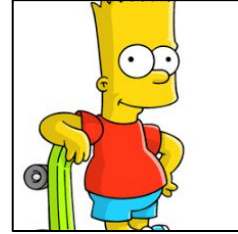
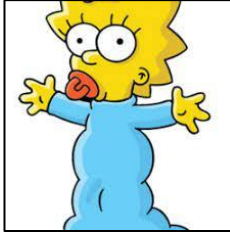
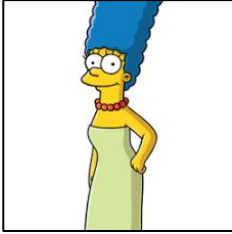
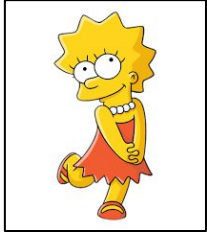
Encontrar grupos homogéneos

Se puede encontrar grupos en el espacio de features original

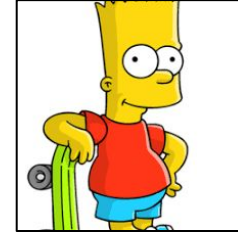
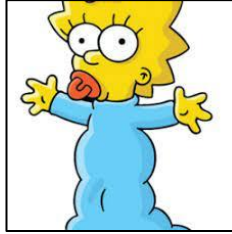
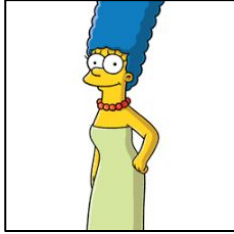
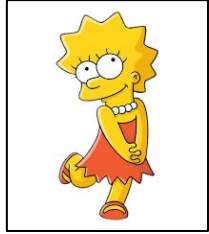
Si son muchos -> podría ser costoso computacionalmente

-> podrían esconderse las características que mejor agrupan los datos

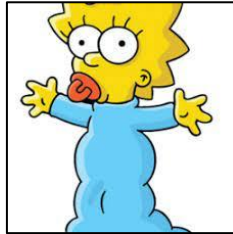
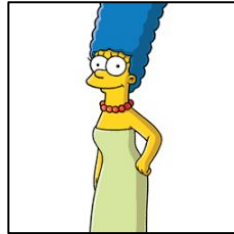
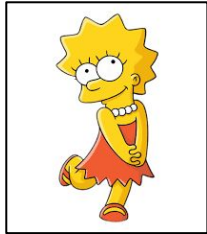
Clustering - forma natural de agrupar los datos



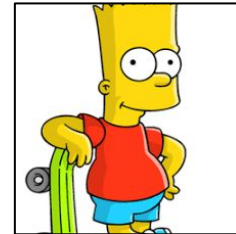
Clustering - forma natural de agrupar los datos



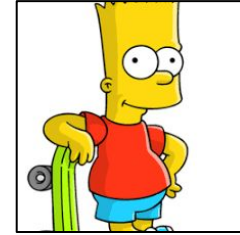
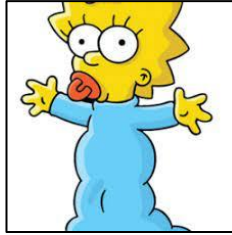
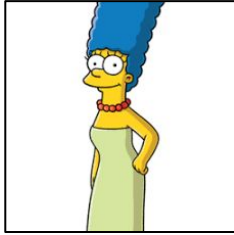
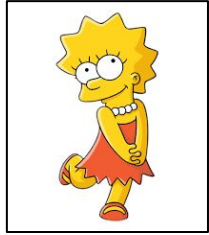
Mujeres



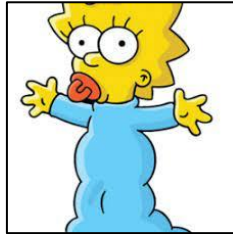
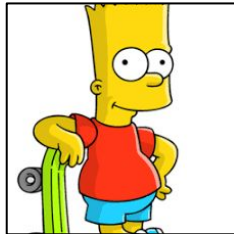
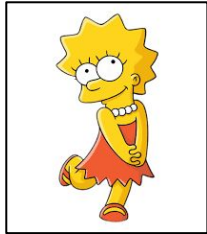
Hombres



Clustering - forma natural de agrupar los datos



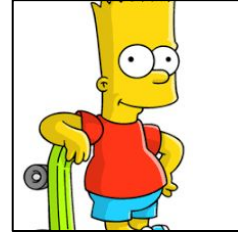
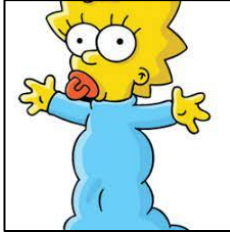
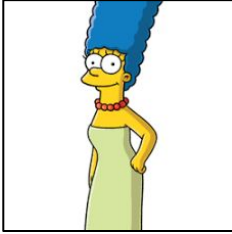
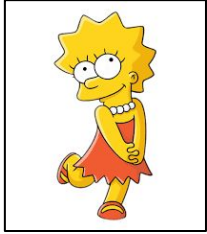
Niños



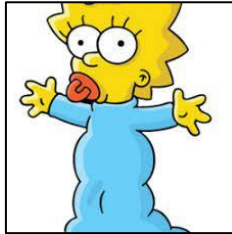
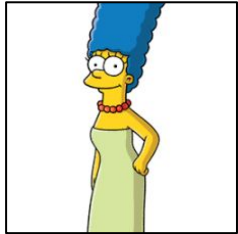
Adultos



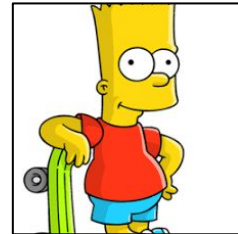
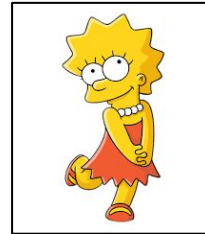
Clustering - forma natural de agrupar los datos



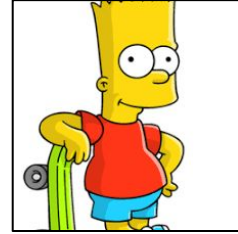
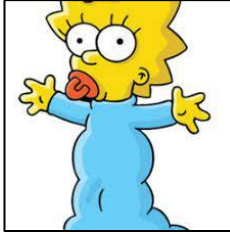
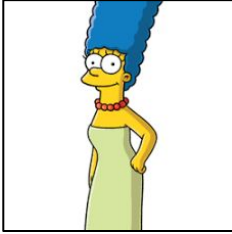
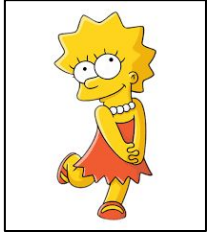
No van a la primaria



Van a la primaria



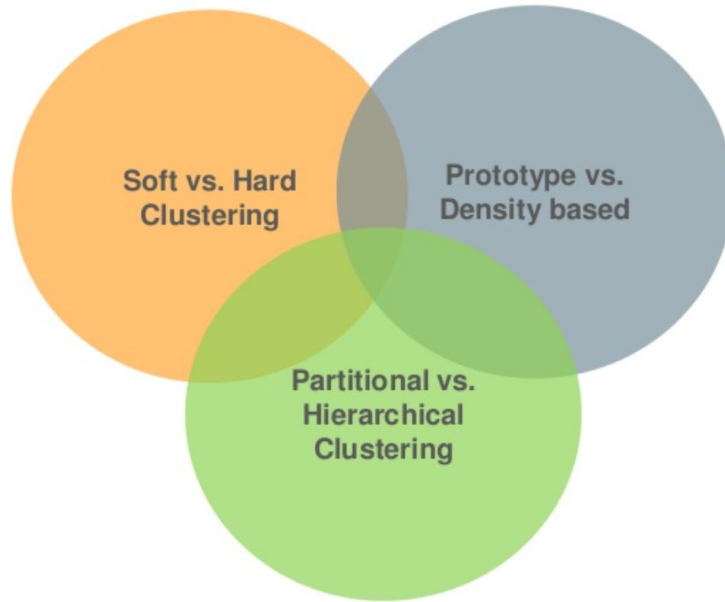
Clustering - forma natural de agrupar los datos



No hay una forma natural de agrupar los datos, el clustering es **subjetivo**, la mejor elección de grupos depende de qué le queremos preguntar a los datos

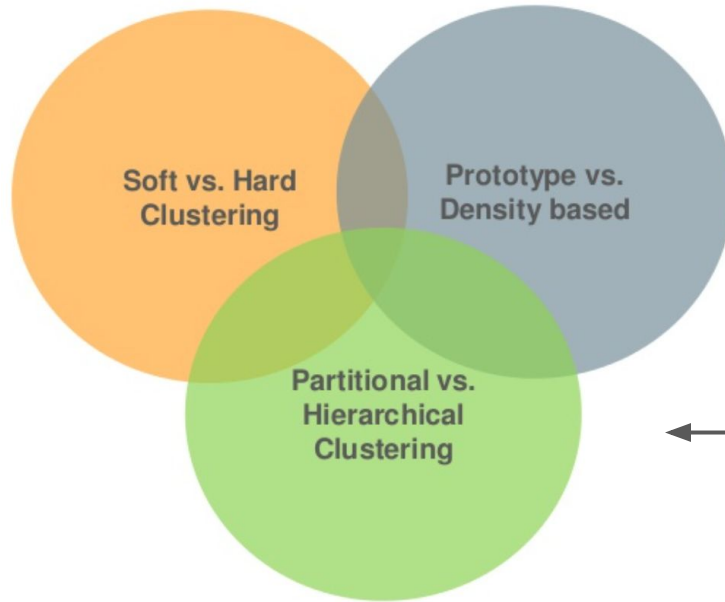
Clustering - estrategias

Hay muuuuchos métodos de clusterización y distintos criterios de división

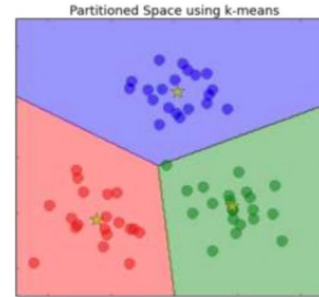


Clustering - estrategias

Hay muuuuchos métodos de clusterización y distintos criterios de división

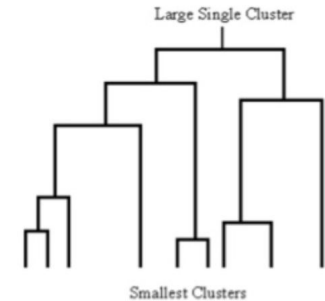


Partición



←
-particiona el espacio
-encuentra todos los
clusters simultáneamente

Jerárquico



-genera una jerarquía
de clusters anidados

K-means: Esquema

Damos el número de clusters k que queremos obtener



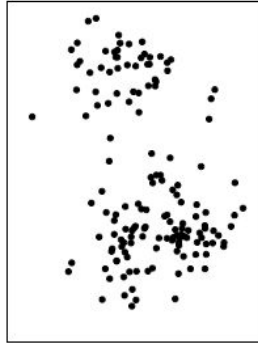
K-means: Esquema

Damos el número de clusters k que queremos obtener

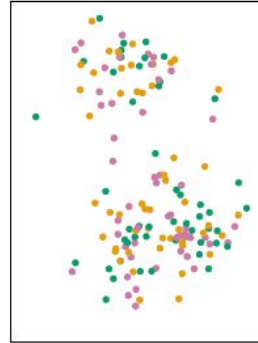
Inicialización random



Data



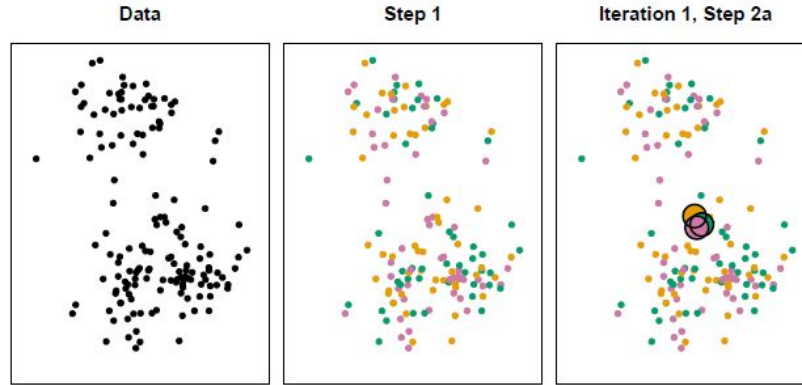
Step 1



K-means: Esquema

Damos el número de clusters k que queremos obtener

Inicialización random

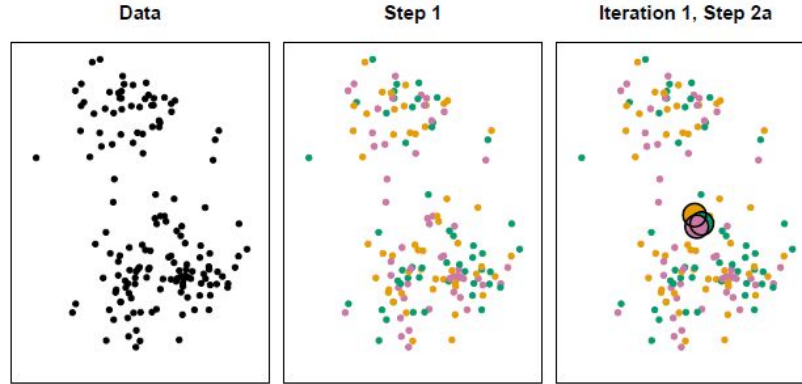


Computa los **centroids** (centros) de cada cluster como el promedio de las features de sus samples

K-means: Esquema

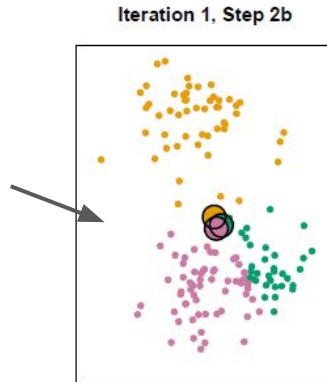
Damos el número de clusters k que queremos obtener

Inicialización random



Computa los **centroids** (centros) de cada cluster como el promedio de las features de sus samples

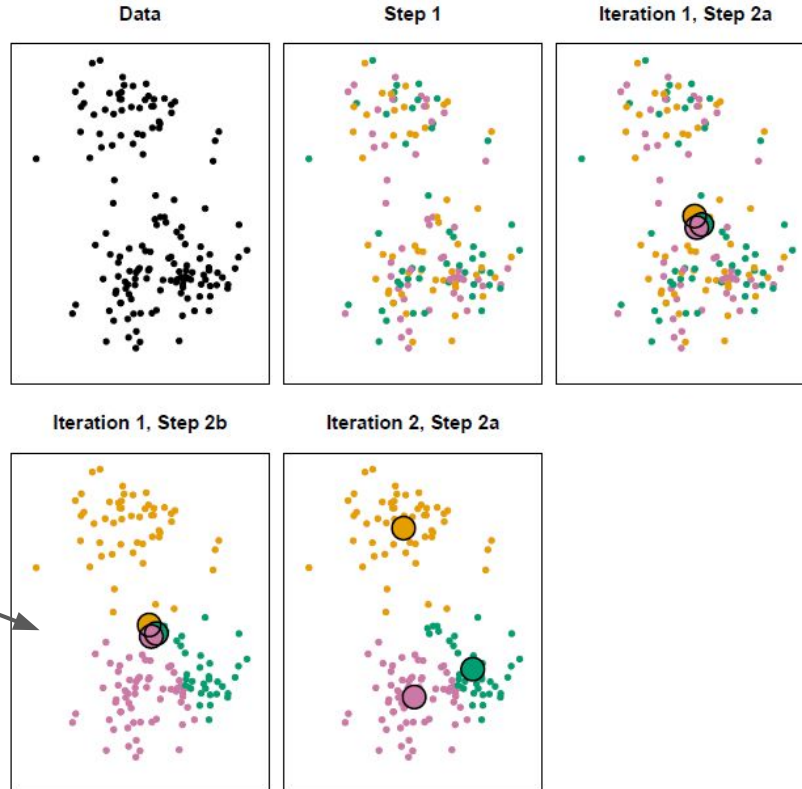
le asigna a cada sample la etiqueta del cluster cuyo centroid es más cercano (distancia euclídea al cuadrado)



K-means: Esquema

Damos el número de clusters k que queremos obtener

Inicialización random



Computa los **centroids** (centros) de cada cluster como el promedio de las features de sus samples

le asigna a cada sample la etiqueta del cluster cuyo centroid es más cercano (distancia euclídea al cuadrado)

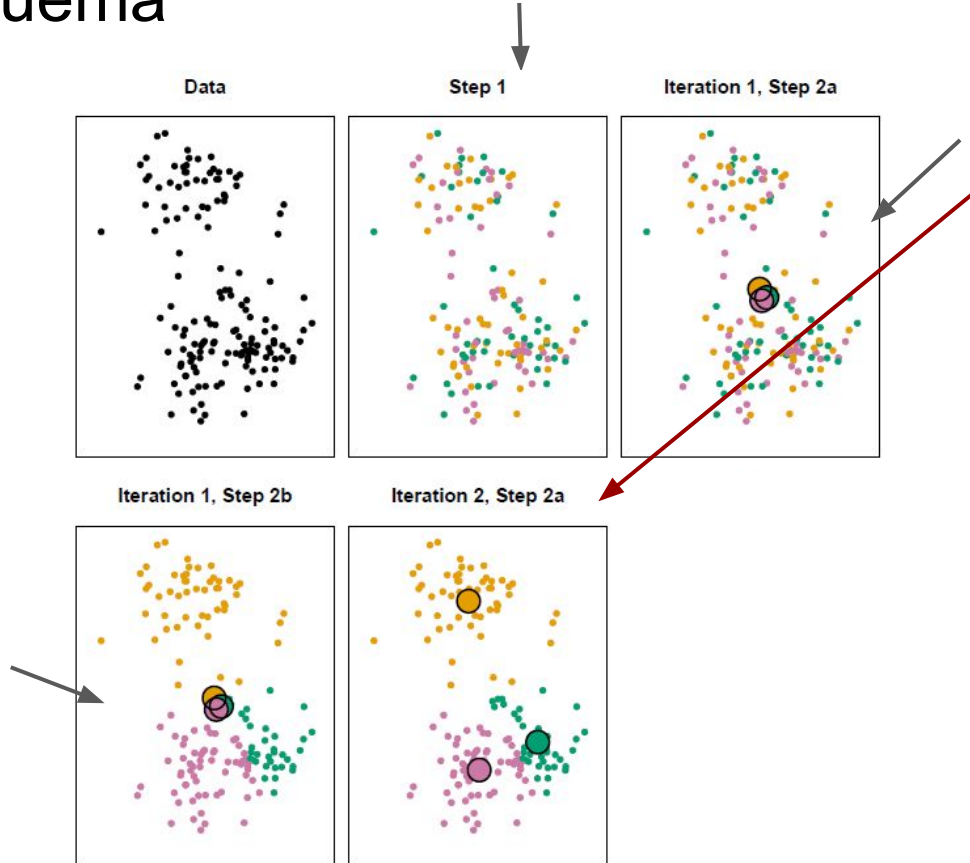
K-means: Esquema

Damos el número de clusters k que queremos obtener

Inicialización random

Computa los **centroids** (centros) de cada cluster como el promedio de las features de sus samples

le asigna a cada sample la etiqueta del cluster cuyo centroid es más cercano (distancia euclídea al cuadrado)



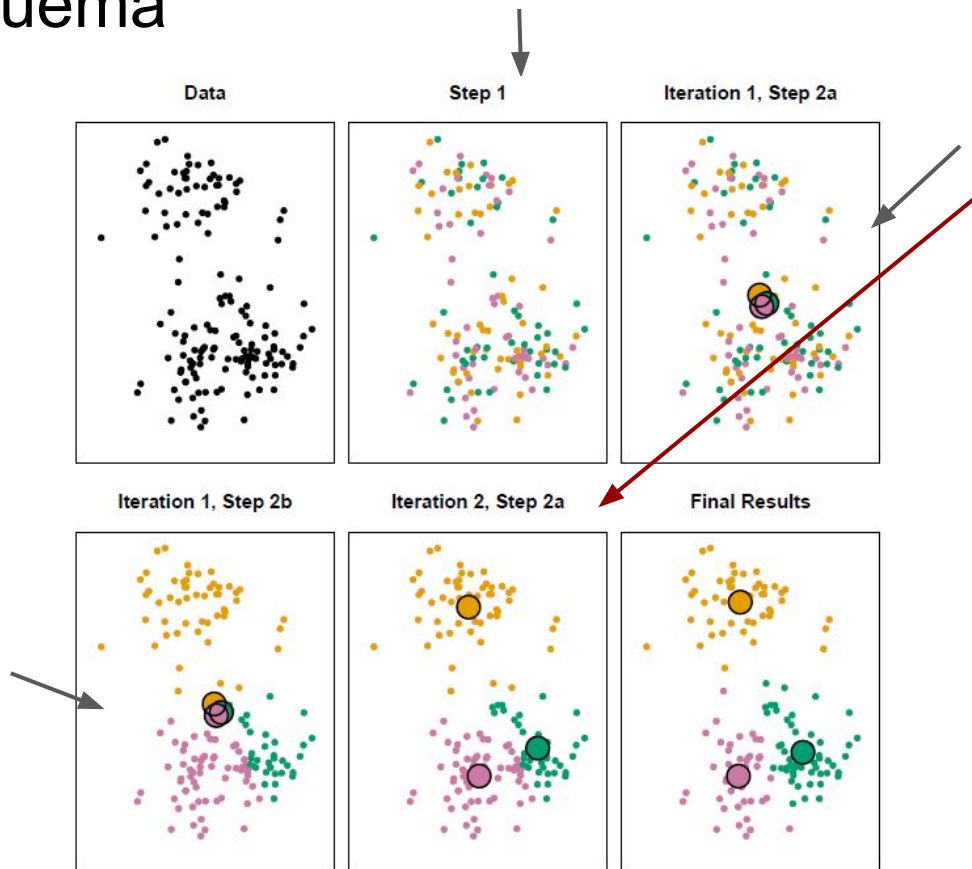
K-means: Esquema

Damos el número de clusters k que queremos obtener

Inicialización random

Computa los **centroids** (centros) de cada cluster como el promedio de las features de sus samples

le asigna a cada sample la etiqueta del cluster cuyo centroid es más cercano (distancia euclídea al cuadrado)



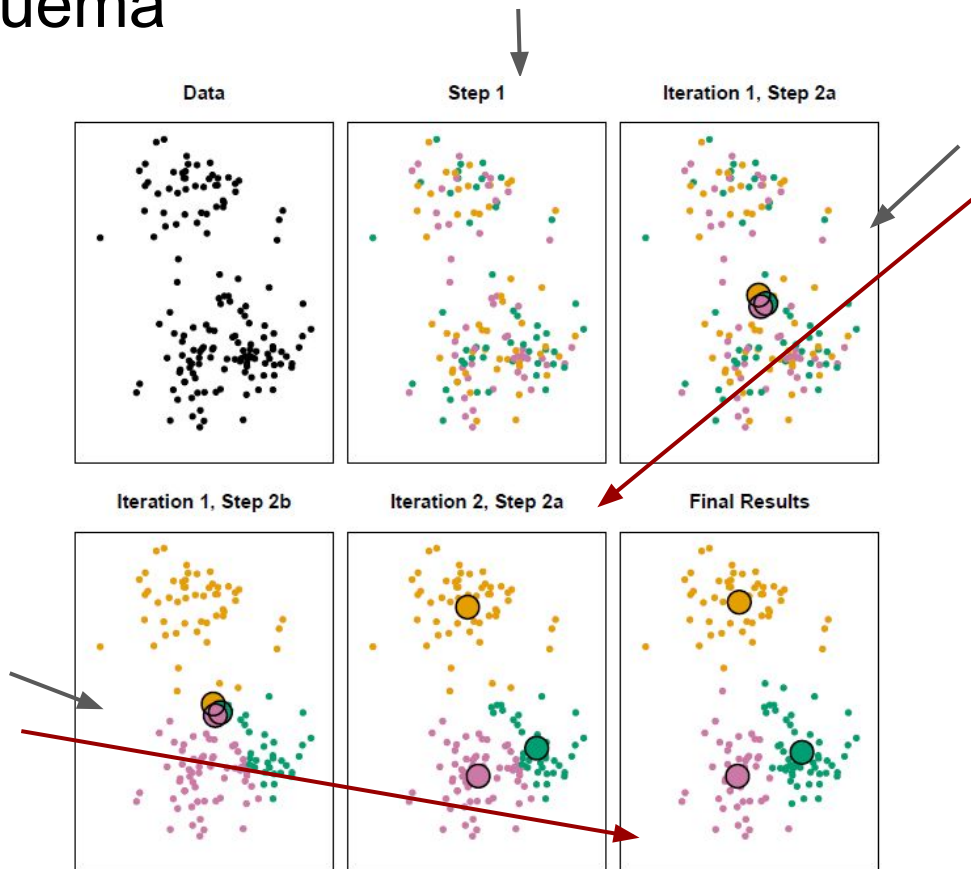
K-means: Esquema

Damos el número de clusters k que queremos obtener

Inicialización random

Computa los **centroids** (centros) de cada cluster como el promedio de las features de sus samples

le asigna a cada sample la etiqueta del cluster cuyo centroid es más cercano (distancia euclídea al cuadrado)



K-means: Esquema

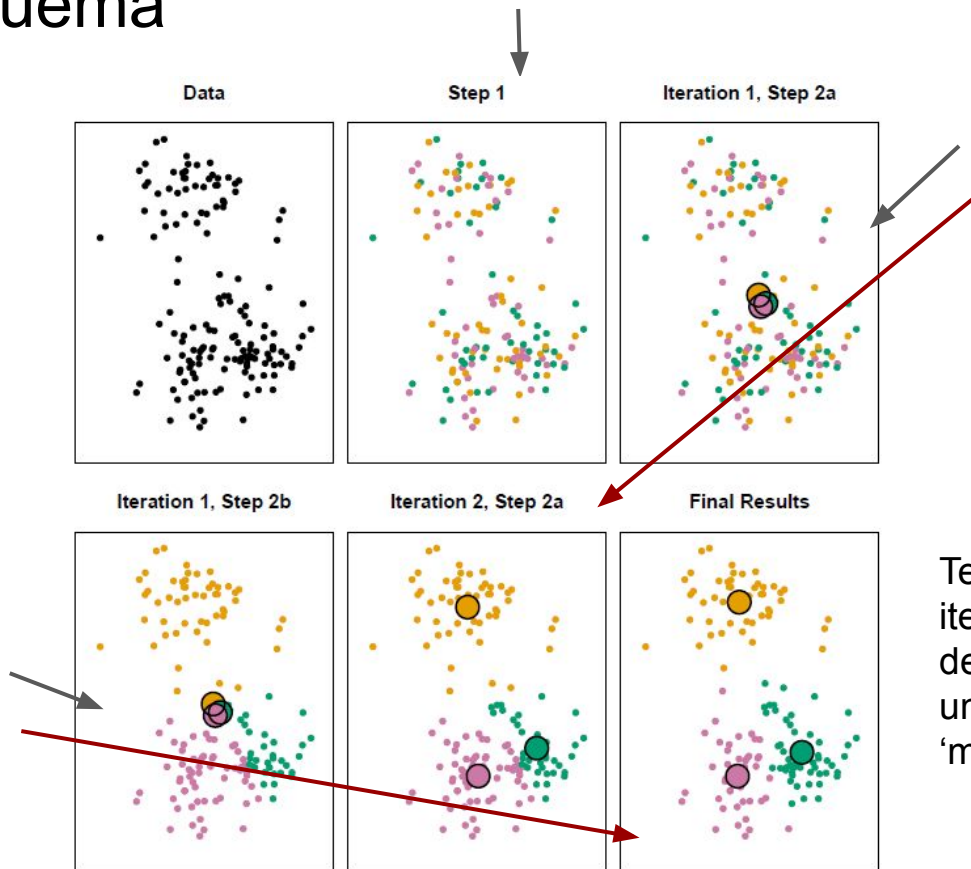
Damos el número de clusters k que queremos obtener

Inicialización random

Computa los **centroids** (centros) de cada cluster como el promedio de las features de sus samples

le asigna a cada sample la etiqueta del cluster cuyo centroid es más cercano (distancia euclídea al cuadrado)

Termina cuando en una iteración no hay cambio de etiqueta o se llega a un máximo de iteraciones 'max_iter'



K-means: Esquema

Inicialización random

Damos el número de clusters k que queremos obtener

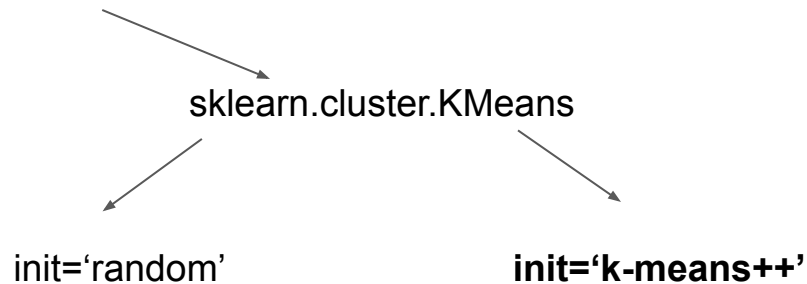


K-means: Esquema

Damos el número de clusters ***k*** que queremos obtener



Inicialización random



K-means: Esquema

Damos el número de clusters ***k*** que queremos obtener



Inicialización random

`sklearn.cluster.KMeans`

`init='random'`

`init='k-means++'`

elige aleatoriamente ***k*** samples como centroids

K-means: Esquema

Damos el número de clusters ***k*** que queremos obtener



Inicialización random

`sklearn.cluster.KMeans`

`init='random'`

elige aleatoriamente ***k*** samples como centroids

`init='k-means++'`

mayor velocidad de convergencia

1. Selecciona aleatoriamente un dato y lo asigna como centroid
2. Para los otros datos x , calcula $D(x)$, distancia entre x y el centro más cercano que ya ha sido seleccionado.
3. Escoge un nuevo punto al azar como nuevo centroid, utilizando una distribución de probabilidad ponderada donde un punto x es escogido con la probabilidad proporcional a $D(x)^2$.
4. Repite paso 2 y 3 hasta que se hayan seleccionado k centroids.

K-means: Función objetivo

Buena clusterización es la que minimiza la varianza entre datos de un mismo cluster

K-means: Función objetivo

Buena clusterización es la que minimiza la varianza entre datos de un mismo cluster

$$\underset{C_1, \dots, C_K}{\text{minimize}} \left\{ \sum_{k=1}^K \frac{1}{|C_k|} \sum_{i, i' \in C_k} \sum_{j=1}^p (x_{ij} - x_{i'j})^2 \right\}$$

K-means: Función objetivo

Buena clusterización es la que minimiza la varianza entre datos de un mismo cluster

$$\underset{C_1, \dots, C_K}{\text{minimize}} \left\{ \sum_{k=1}^K \frac{1}{|C_k|} \sum_{i, i' \in C_k} \sum_{j=1}^p \underbrace{(x_{ij} - x_{i'j})^2}_{\text{distancia euclídea al cuadrado}} \right\}$$

distancia euclídea al
cuadrado - lo más usual

K-means: Función objetivo

Buena clusterización es la que minimiza la varianza entre datos de un mismo cluster

$$\underset{C_1, \dots, C_K}{\text{minimize}} \left\{ \sum_{k=1}^K \frac{1}{|C_k|} \sum_{i, i' \in C_k} \sum_{j=1}^p (x_{ij} - x_{i'j})^2 \right\}$$

K-means: Función objetivo

Buena clusterización es la que minimiza la varianza entre datos de un mismo cluster

$$\underset{C_1, \dots, C_K}{\text{minimize}} \left\{ \sum_{k=1}^K \frac{1}{|C_k|} \sum_{i, i' \in C_k} \sum_{j=1}^p (x_{ij} - x_{i'j})^2 \right\}$$

Básicamente K-means es un algoritmo de optimización de esta función objetivo

K-means: Función objetivo

Buena clusterización es la que minimiza la varianza entre datos de un mismo cluster

$$\underset{C_1, \dots, C_K}{\text{minimize}} \left\{ \sum_{k=1}^K \frac{1}{|C_k|} \sum_{i, i' \in C_k} \sum_{j=1}^p (x_{ij} - x_{i'j})^2 \right\}$$

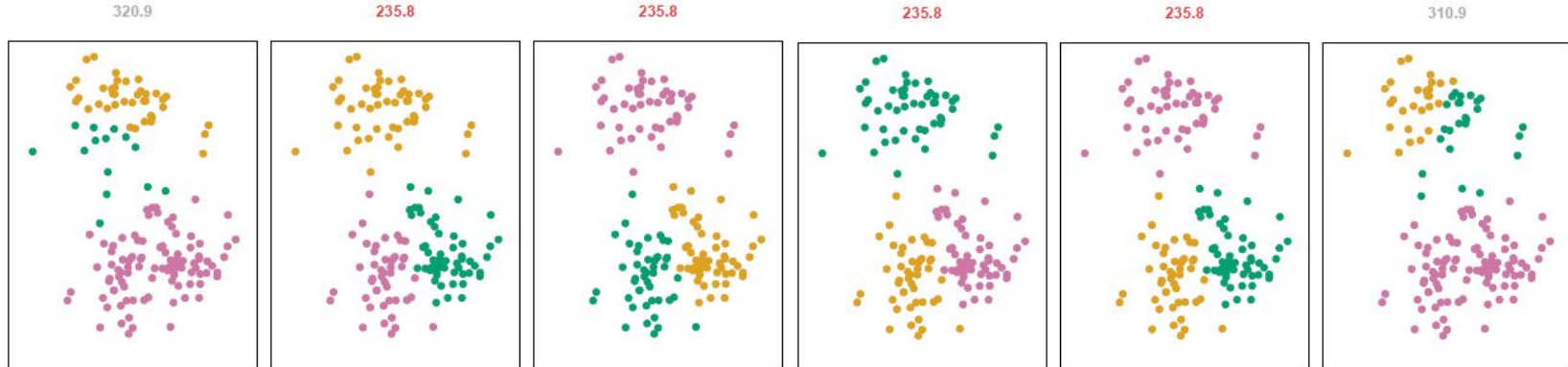
Básicamente K-means es un algoritmo de optimización de esta función objetivo
Depende de la inicialización -> **modelo no determinista**

K-means: Función objetivo

Buena clusterización es la que minimiza la varianza entre datos de un mismo cluster

$$\text{minimize}_{C_1, \dots, C_K} \left\{ \sum_{k=1}^K \frac{1}{|C_k|} \sum_{i, i' \in C_k} \sum_{j=1}^p (x_{ij} - x_{i'j})^2 \right\}$$

Básicamente K-means es un algoritmo de optimización de esta función objetivo
Depende de la inicialización -> **modelo no determinista**



distintas inicializaciones del mismo modelo con los mismos datos

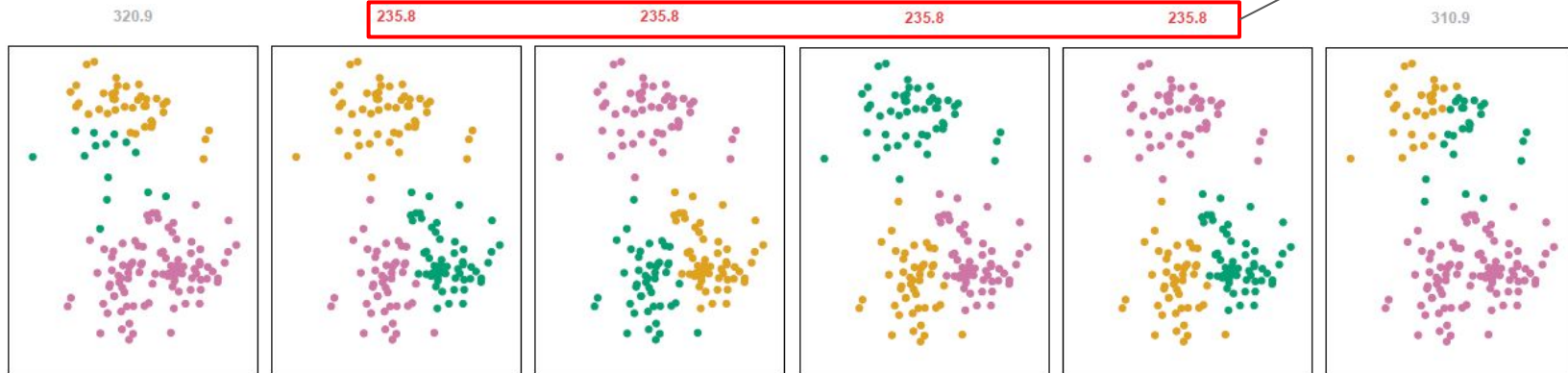
K-means: Función objetivo

Buena clusterización es la que minimiza la varianza entre datos de un mismo cluster

$$\text{SSE} = \underset{C_1, \dots, C_K}{\text{minimize}} \left\{ \sum_{k=1}^K \frac{1}{|C_k|} \sum_{i, i' \in C_k} \sum_{j=1}^p (x_{ij} - x_{i'j})^2 \right\}$$

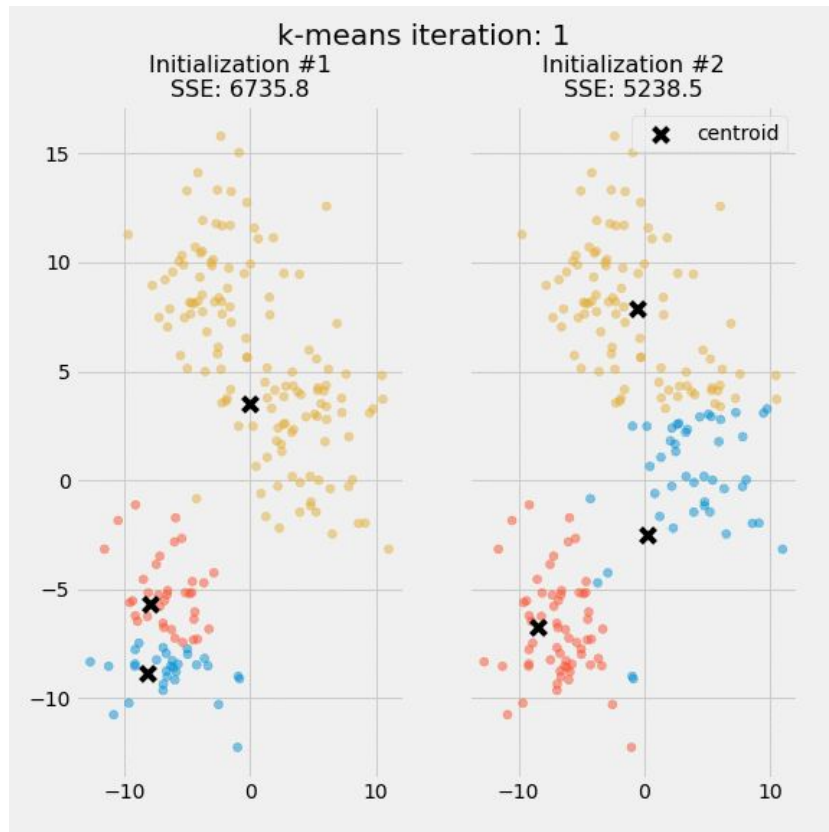
Elige alguna de estas
4 inicializaciones

Básicamente K-means es un algoritmo de optimización de esta función objetivo
Depende de la inicialización -> **modelo no determinista**



distintas inicializaciones del mismo modelo con los mismos datos 'n_init'

K-means: Gif



K-means: Función objetivo

Una solución posible es iterar muchas veces el algoritmo y quedarme con el clustering que minimiza el valor de la función objetivo.

K-means: Elección de k

No es trivial elegir k en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

K-means: Elección de k

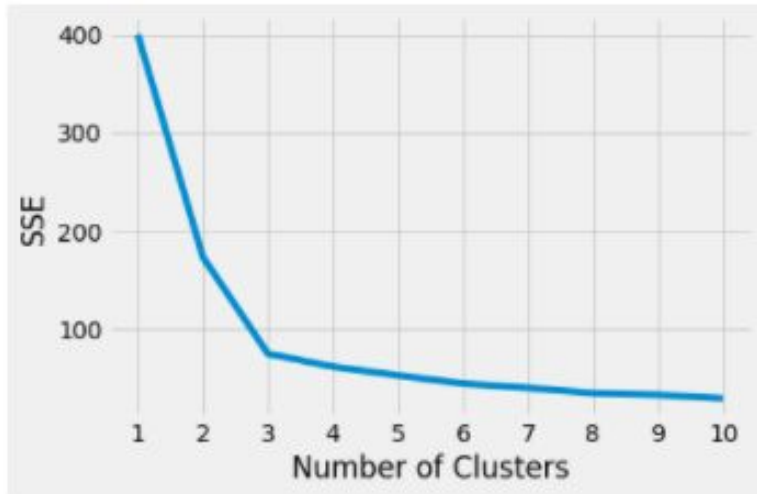
No es trivial elegir k en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

“Método del codo”

K-means: Elección de k

No es trivial elegir k en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

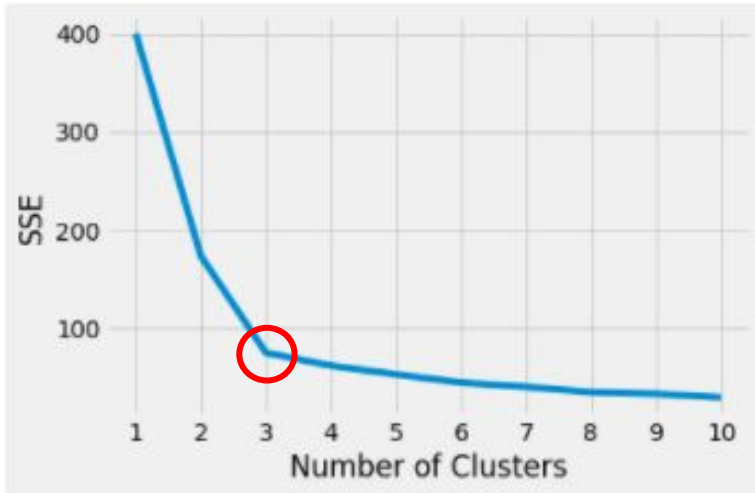
“Método del codo”



K-means: Elección de k

No es trivial elegir k en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

“Método del codo”

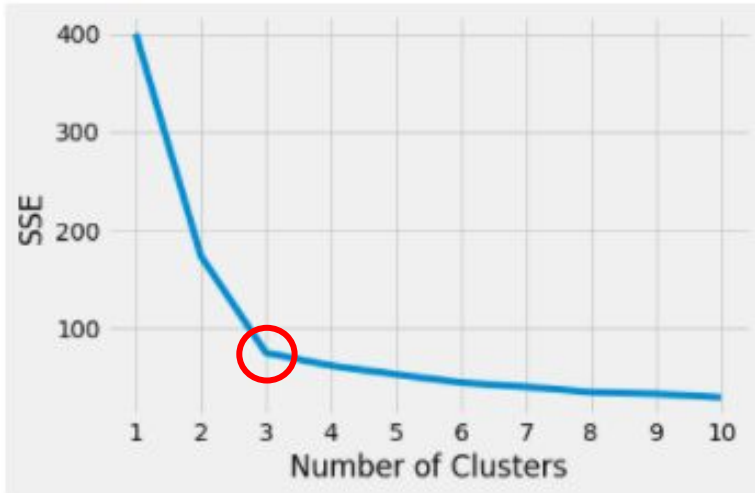


K-means: Elección de k

No es trivial elegir k en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

“Método del codo”

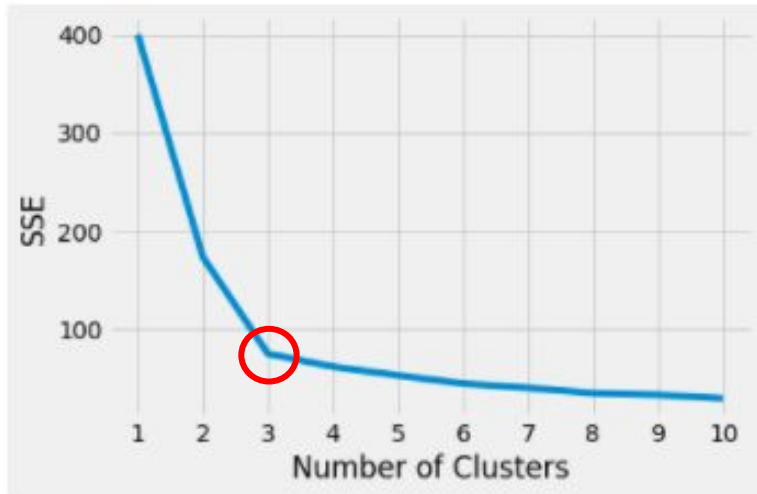
“coeficiente de Silhouette”



K-means: Elección de k

No es trivial elegir k en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

“Método del codo”



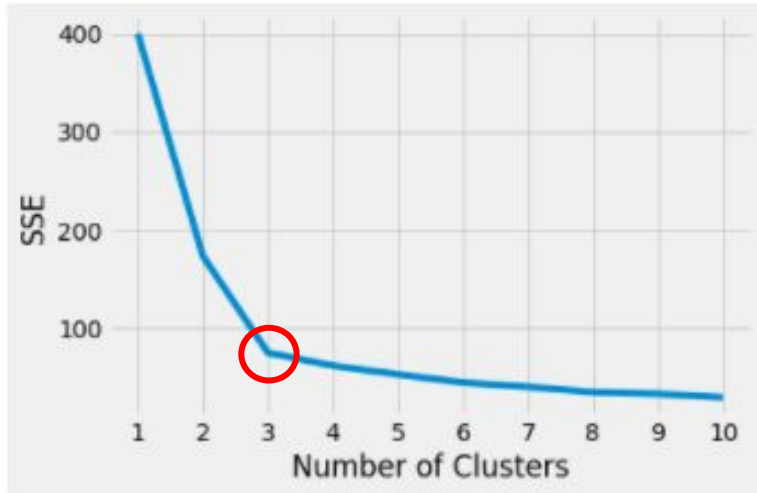
“coeficiente de Silhouette”

medida de cuán similar es un dado dato a los datos de su cluster en comparación a los datos del cluster más cercano

K-means: Elección de k

No es trivial elegir k en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

“Método del codo”



“coeficiente de Silhouette”

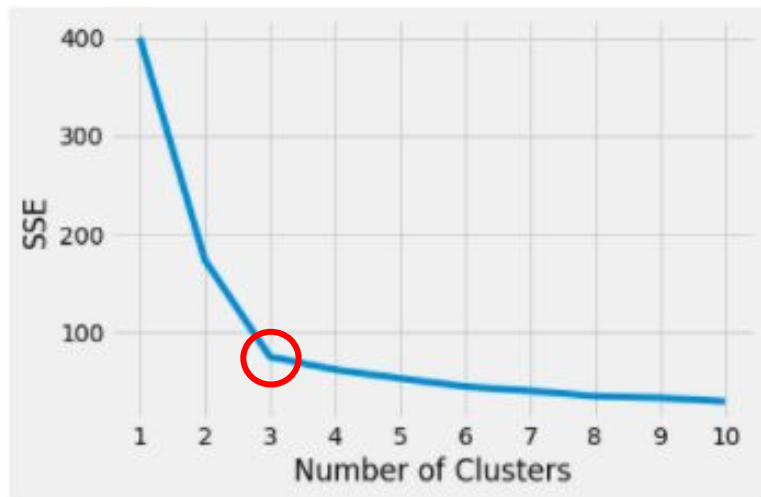
medida de cuán similar es un dado dato a los datos de su cluster en comparación a los datos del cluster más cercano

su valor va $[-1, 1]$

K-means: Elección de k

No es trivial elegir k en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

“Método del codo”



“coeficiente de Silhouette”

medida de cuán similar es un dado dato a los datos de su cluster en comparación a los datos del cluster más cercano

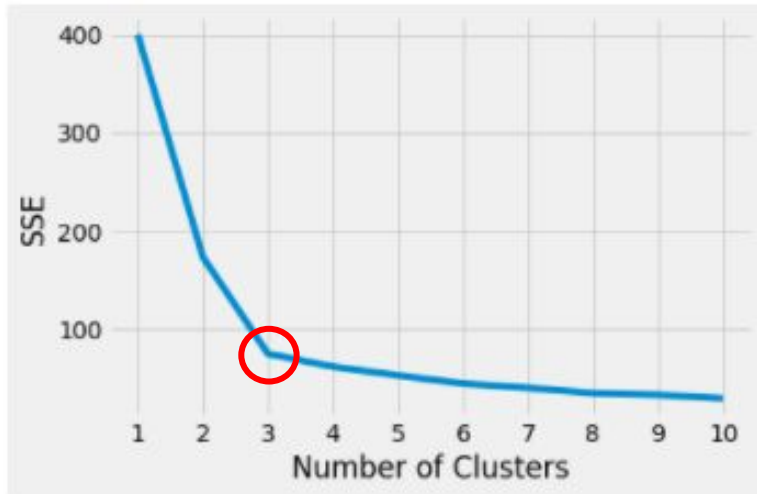
su valor va $[-1, 1]$

1 indica que el dato está bien emparejado en su propio cluster y mal emparejado con los datos de otros clusters

K-means: Elección de k

No es trivial elegir k en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

“Método del codo”



“coeficiente de Silhouette”

medida de cuán similar es un dado dato a los datos de su cluster en comparación a los datos del cluster más cercano

su valor va $[-1, 1]$

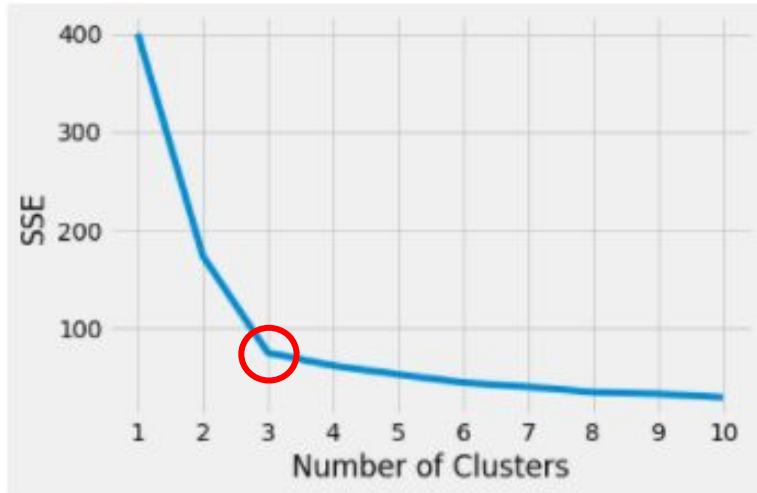
1 indica que el dato está bien emparejado en su propio cluster y mal emparejado con los datos de otros clusters

$$s(i) = \frac{b(i) - a(i)}{\max\{a(i), b(i)\}}, \text{ if } |C_i| > 1$$
$$a(i) = \frac{1}{|C_i| - 1} \sum_{j \in C_i, i \neq j} d(i, j)$$
$$b(i) = \min_{k \neq i} \frac{1}{|C_k|} \sum_{j \in C_k} d(i, j)$$

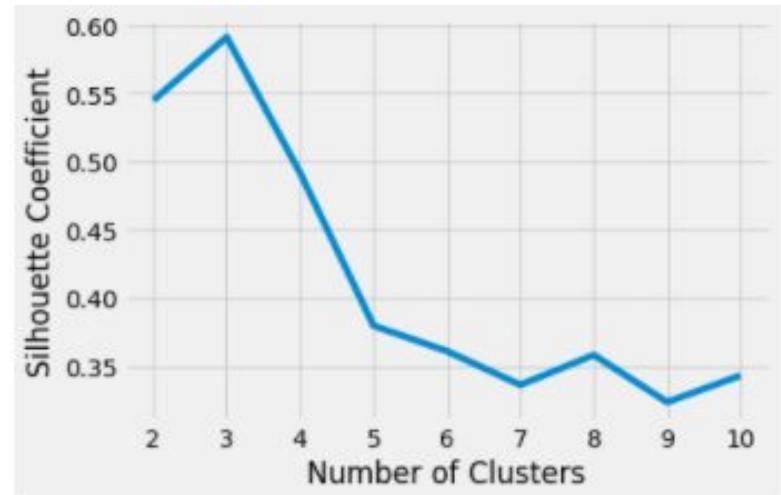
K-means: Elección de k

No es trivial elegir k en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

“Método del codo”



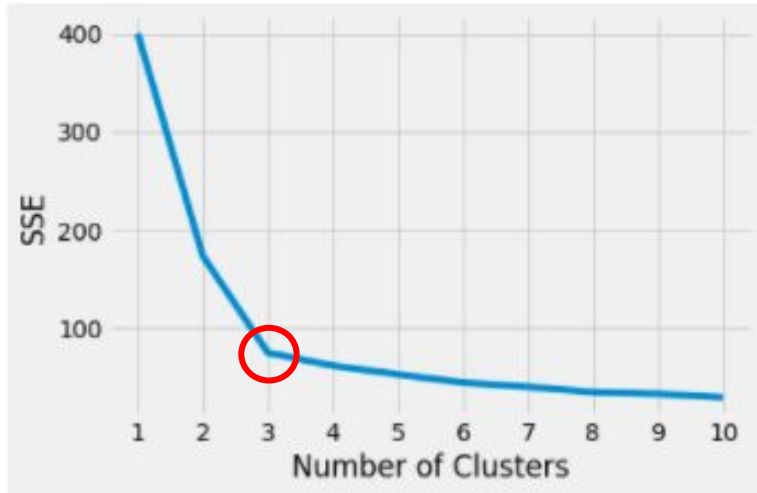
“coeficiente de Silhouette”



K-means: Elección de k

No es trivial elegir k en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

“Método del codo”

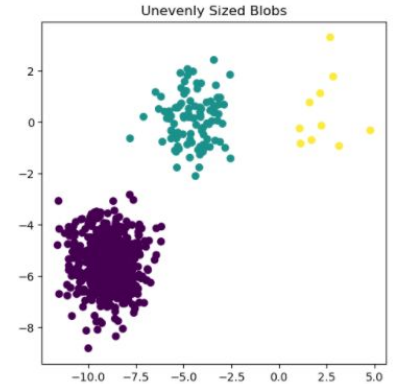
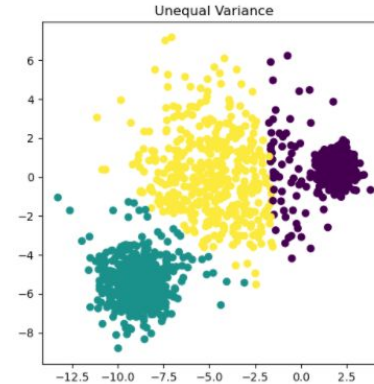
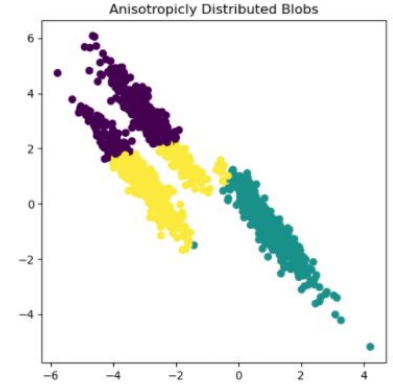
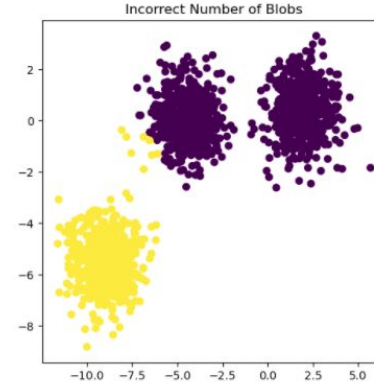
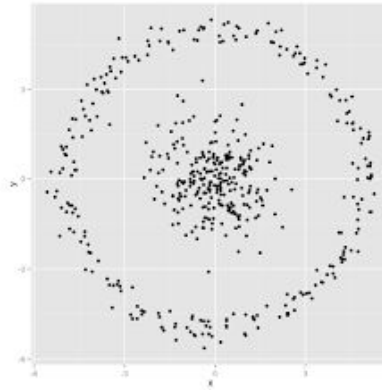


“coeficiente de Silhouette”



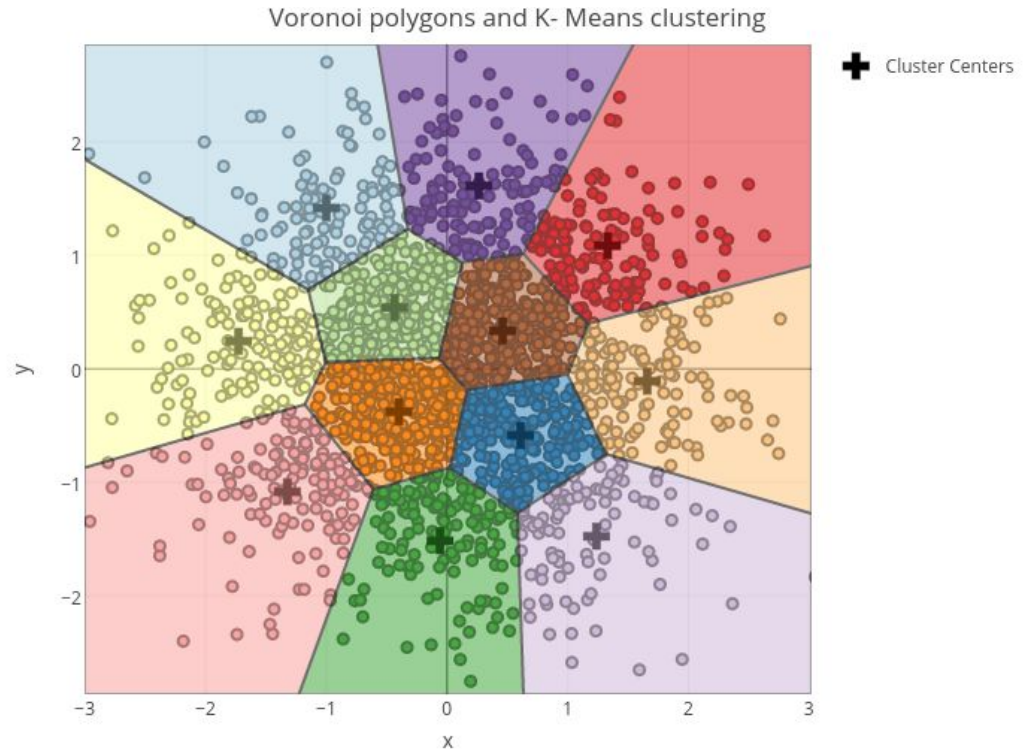
K-means: Pros y Cons

- + Simple y Fácil de implementar
- + Orden del algoritmo es lineal
- Depende de la inicialización
- Tiende a caer en un mínimo local
- Sensible a outliers
- Los clusters tienen que tener forma esférica
- No se puede aplicar a data categórica



K-means: Pros y Cons

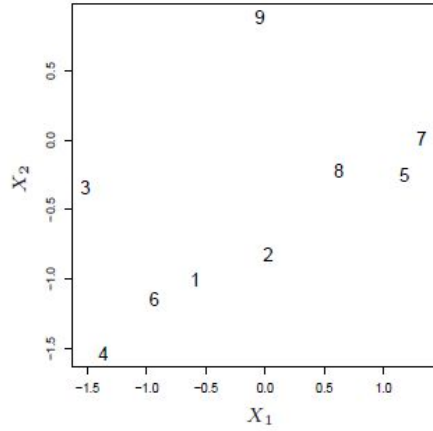
- Da un clustering de los datos aún si los datos no están “clusterizados”



Clustering Jerárquico: Dendograma

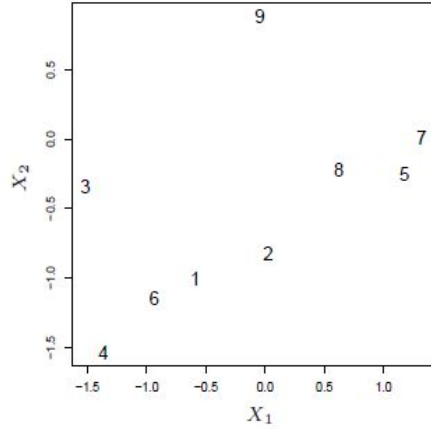
Clustering Jerárquico: Dendograma

n samples
n clusters



Clustering Jerárquico: Dendograma

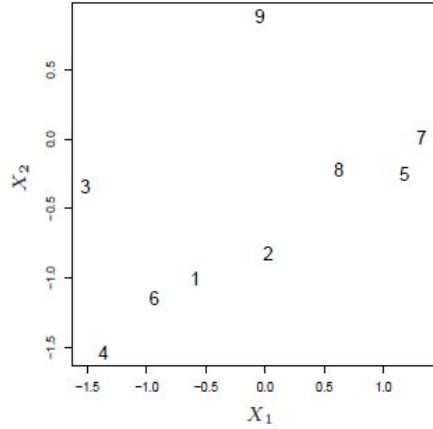
n samples
n clusters



medida de distancia entre
samples ('affinity'),
usualmente la euclídea

Clustering Jerárquico: Dendograma

n samples
n clusters



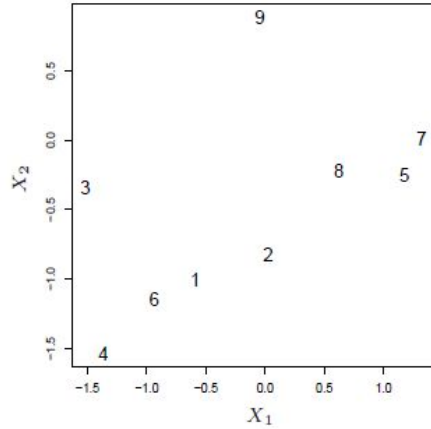
medida de distancia entre
samples ('affinity'),
usualmente la euclídea



junto los dos cluster que
están a menor distancia

Clustering Jerárquico: Dendograma

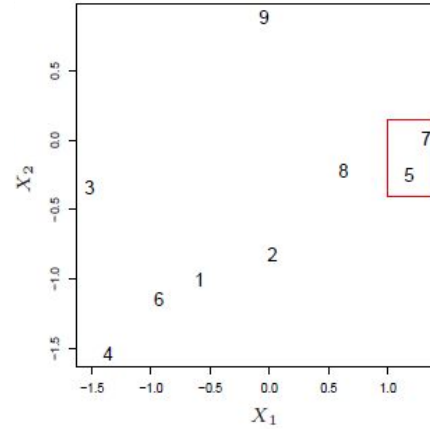
n samples
n clusters



medida de distancia entre
samples ('affinity'),
usualmente la euclídea



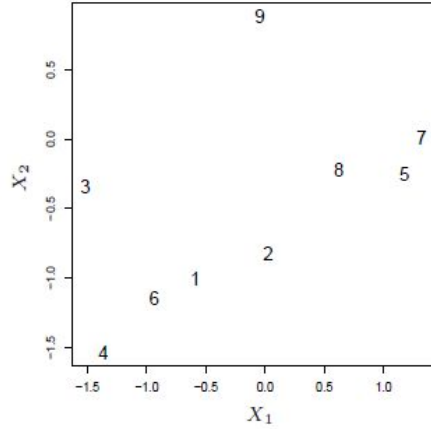
junto los dos cluster
que están a menor distancia



n-1 clusters

Clustering Jerárquico: Dendograma

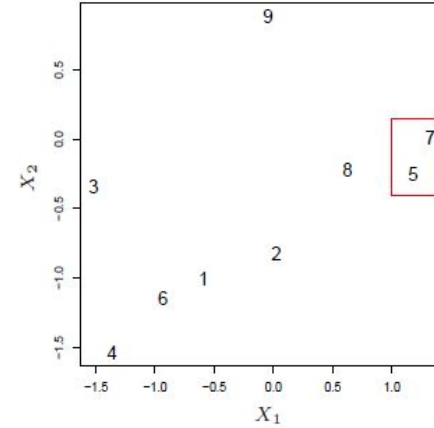
n samples
n clusters



medida de distancia entre
samples ('affinity'),
usualmente la euclídea



junto los dos cluster que
están a menor distancia

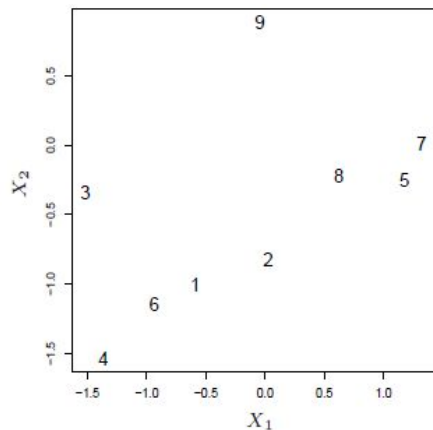


n-1 clusters

distancia
entre clusters
de ≥ 1
elementos
(‘linkage’)

Clustering Jerárquico: Dendograma

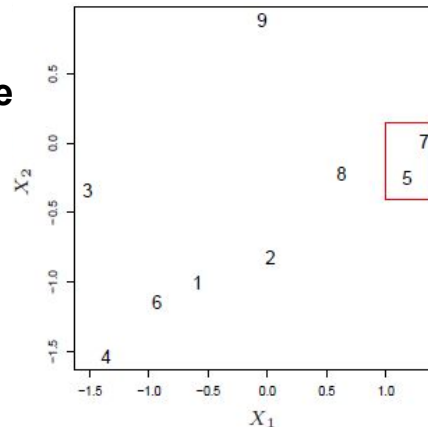
n samples
n clusters



medida de **distancia entre samples** ('affinity'),
usualmente la euclídea



junto los dos cluster que
están a menor distancia

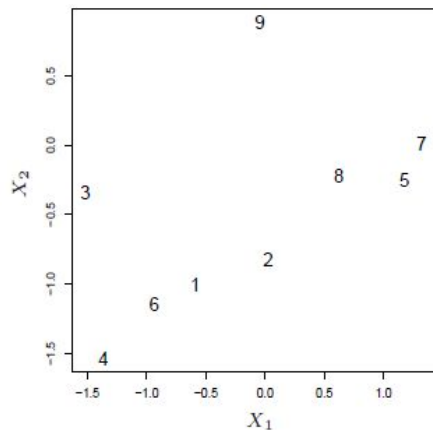


n-1 clusters

distancia entre clusters de
 ≥ 1
elementos
(**'linkage'**)

Clustering Jerárquico: Dendograma

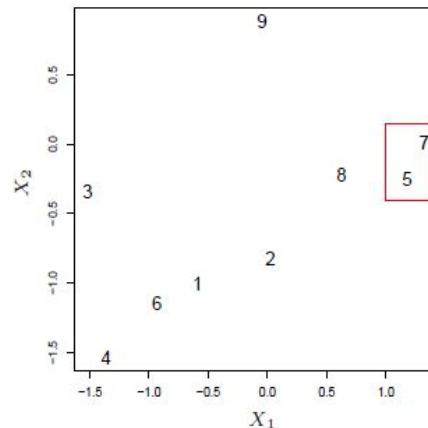
n samples
n clusters



medida de distancia entre
samples ('affinity'),
usualmente la euclídea



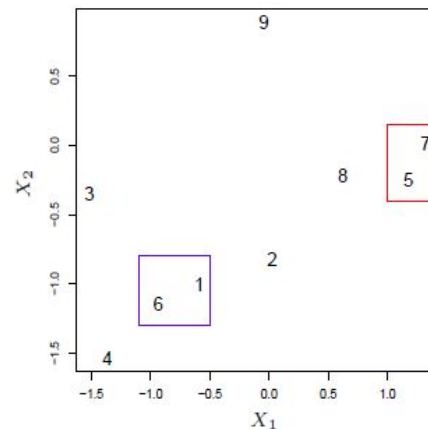
junto los dos cluster que
están a menor distancia



n-1 clusters

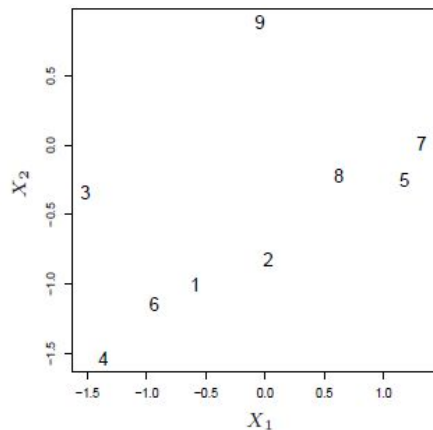


distancia
entre clusters
de ≥ 1
elementos
(*'linkage'*)



Clustering Jerárquico: Dendograma

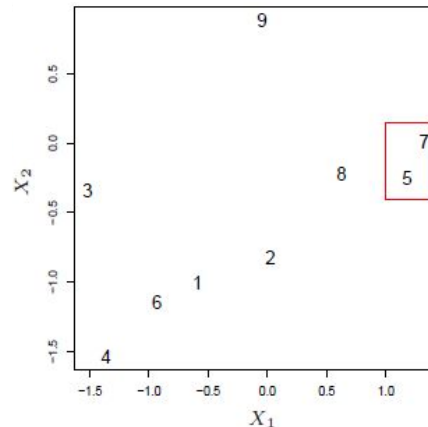
n samples
n clusters



medida de distancia entre
samples ('affinity'),
usualmente la euclídea



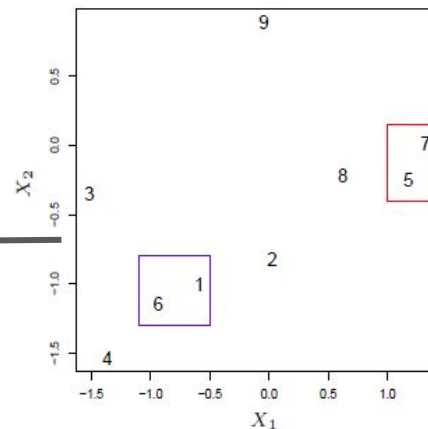
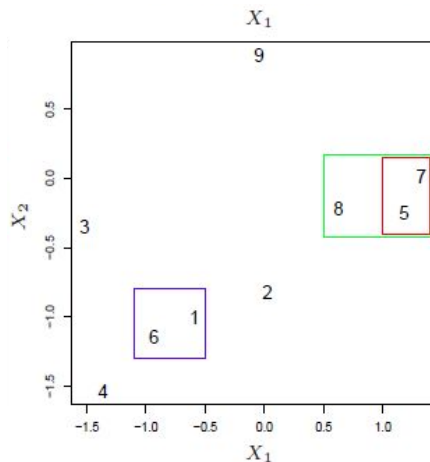
junto los dos cluster
que están a menor distancia



n-1 clusters

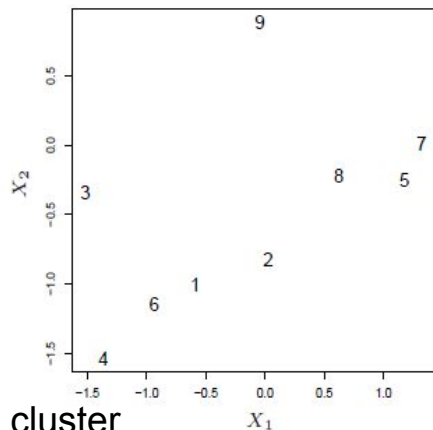


distancia
entre clusters
de ≥ 1
elementos
(*'linkage'*)



Clustering Jerárquico: Dendograma

n samples
n clusters

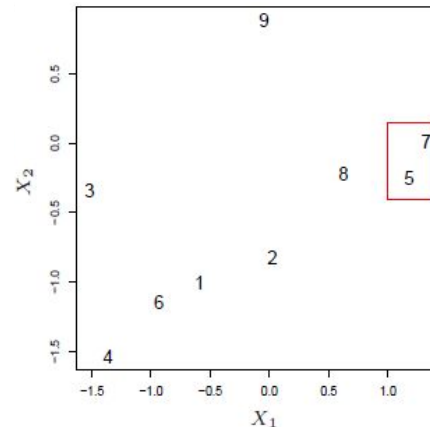


1 cluster

medida de distancia entre
samples ('affinity'),
usualmente la euclídea



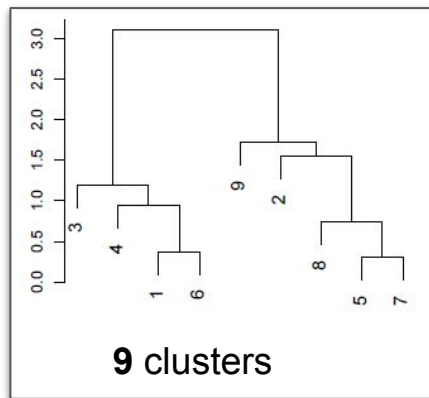
junto los dos cluster
que están a menor distancia



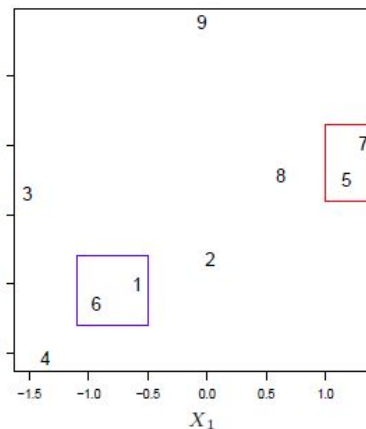
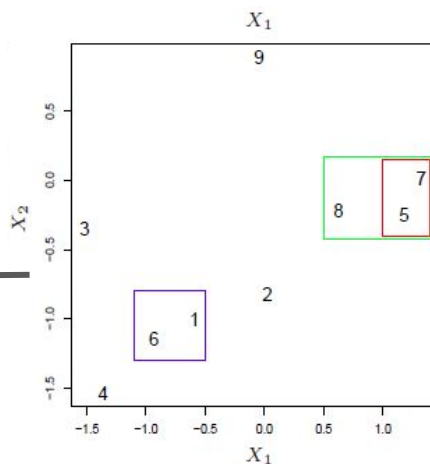
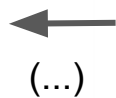
n-1 clusters



distancia
entre clusters
de ≥ 1
elementos
(*'linkage'*)

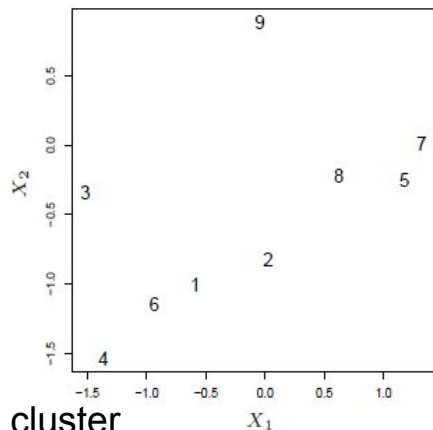


9 clusters



Clustering Jerárquico: Dendograma

n samples
n clusters

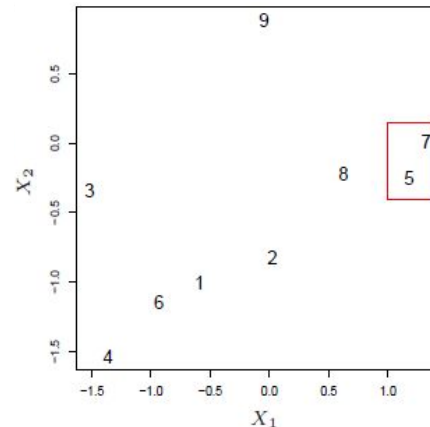


1 cluster

medida de distancia entre
samples ('affinity'),
usualmente la euclídea



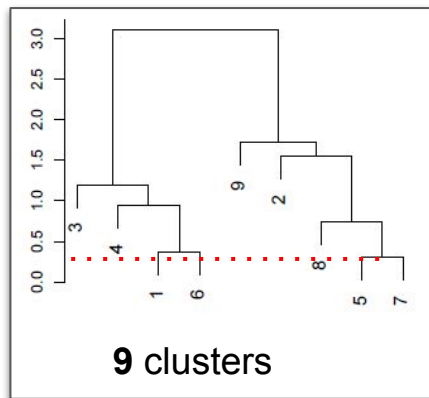
junto los dos cluster
que están a menor distancia



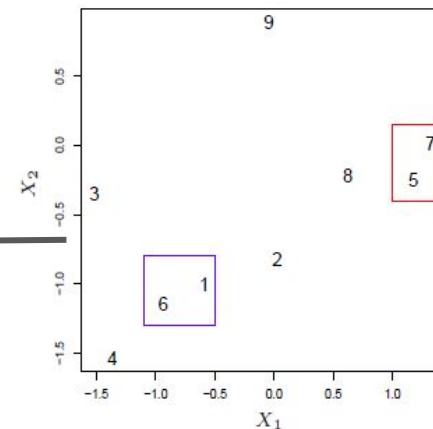
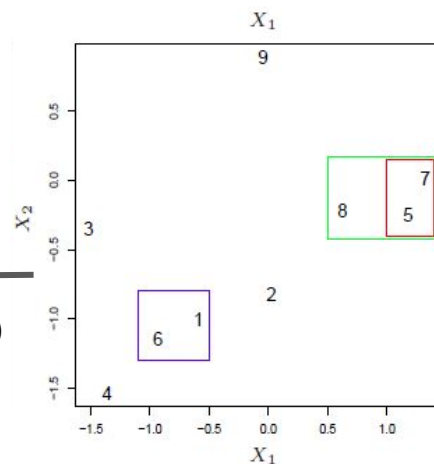
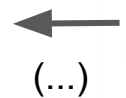
n-1 clusters



distancia
entre clusters
de ≥ 1
elementos
(*'linkage'*)

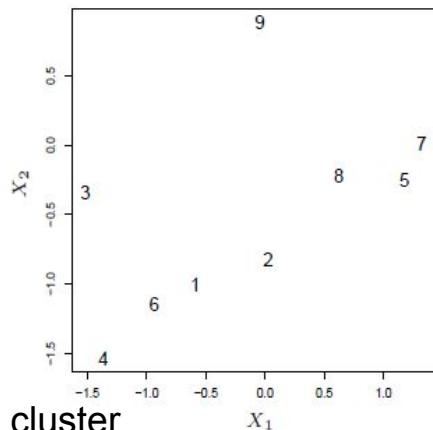


9 clusters



Clustering Jerárquico: Dendograma

n samples
n clusters

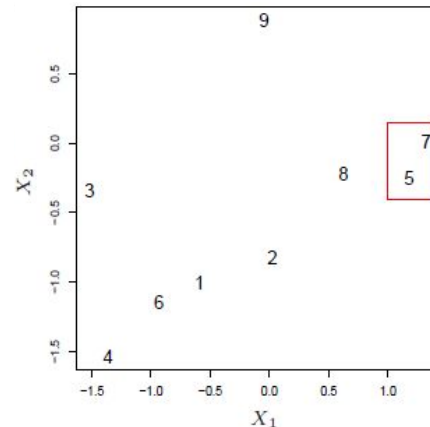


1 cluster

medida de distancia entre
samples ('affinity'),
usualmente la euclídea



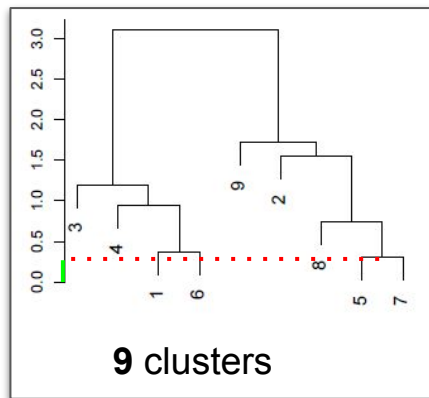
junto los dos cluster
que están a menor distancia



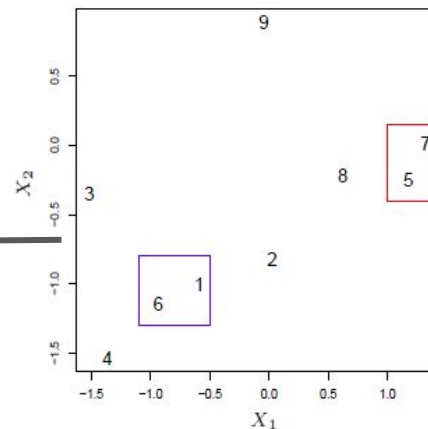
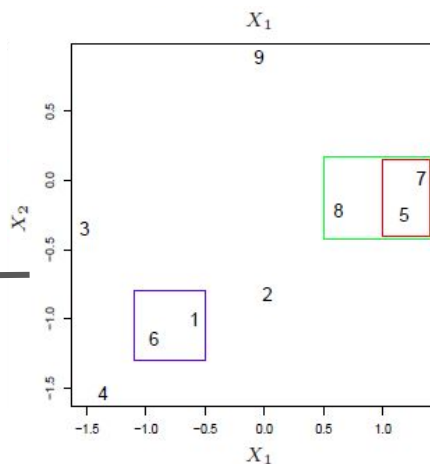
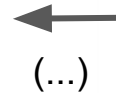
n-1 clusters



distancia
entre clusters
de ≥ 1
elementos
(*'linkage'*)

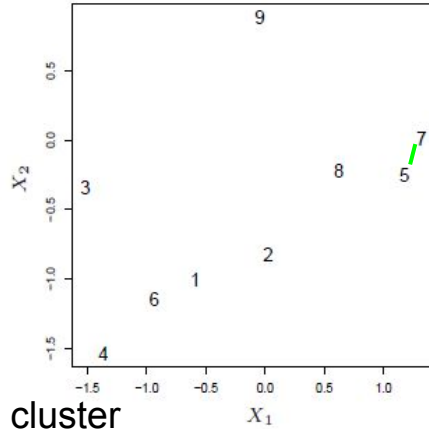


9 clusters



Clustering Jerárquico: Dendograma

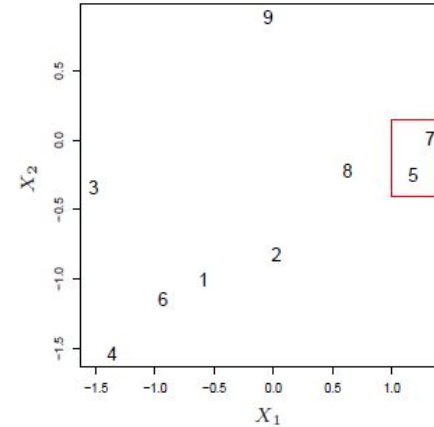
n samples
n clusters



1 cluster

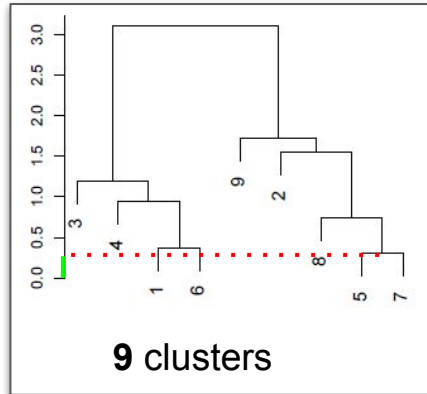
medida de distancia entre
samples ('affinity'),
usualmente la euclídea

junto los dos cluster
que están a menor distancia

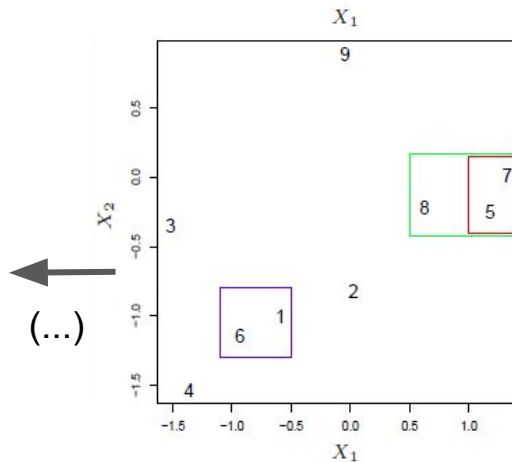


n-1 clusters

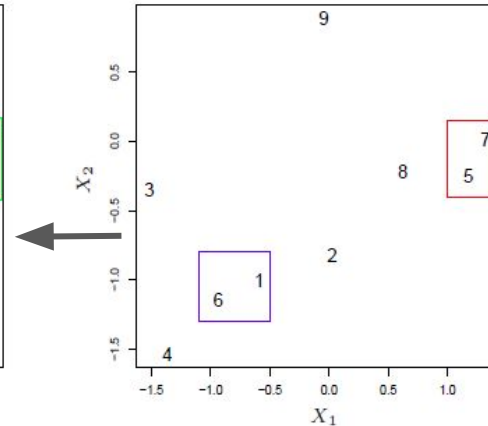
distancia
entre clusters
de ≥ 1
elementos
(*'linkage'*)



9 clusters

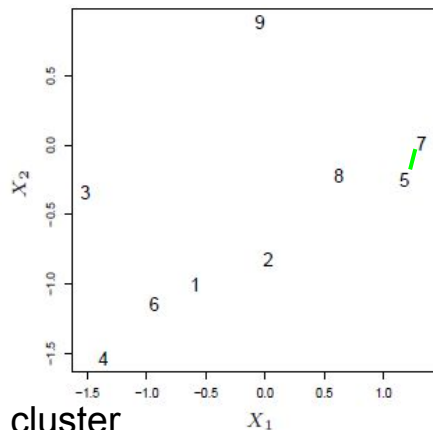


(...)



Clustering Jerárquico: Dendrograma

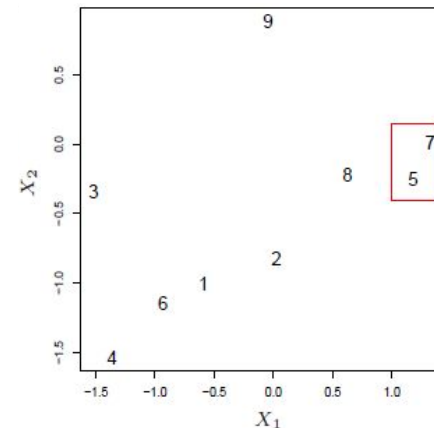
n samples
n clusters



medida de distancia entre
samples ('affinity'),
usualmente la euclídea



junto los dos cluster
que están a menor distancia

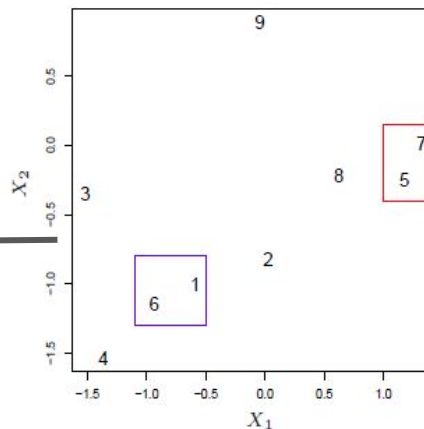
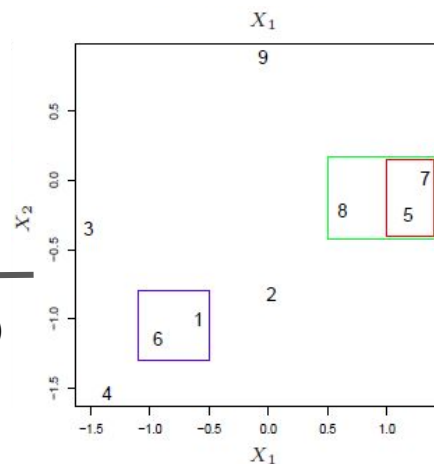
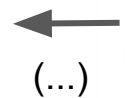
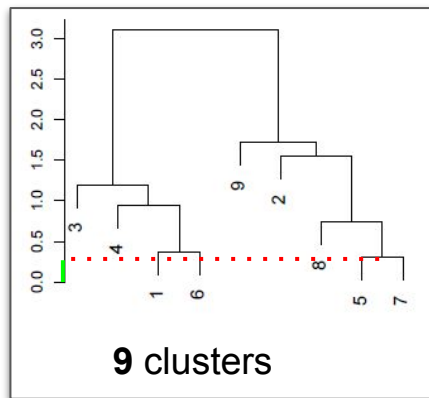


n-1 clusters

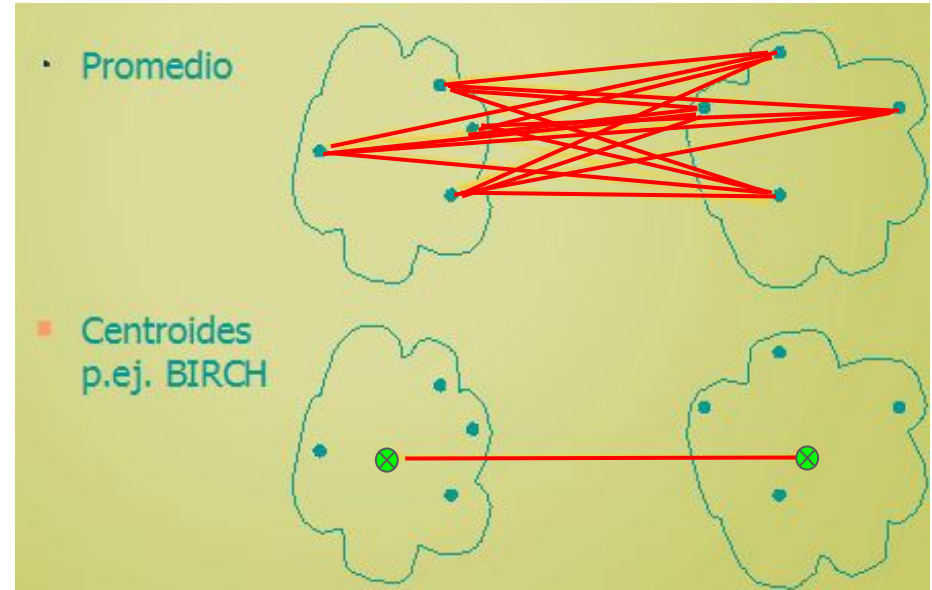
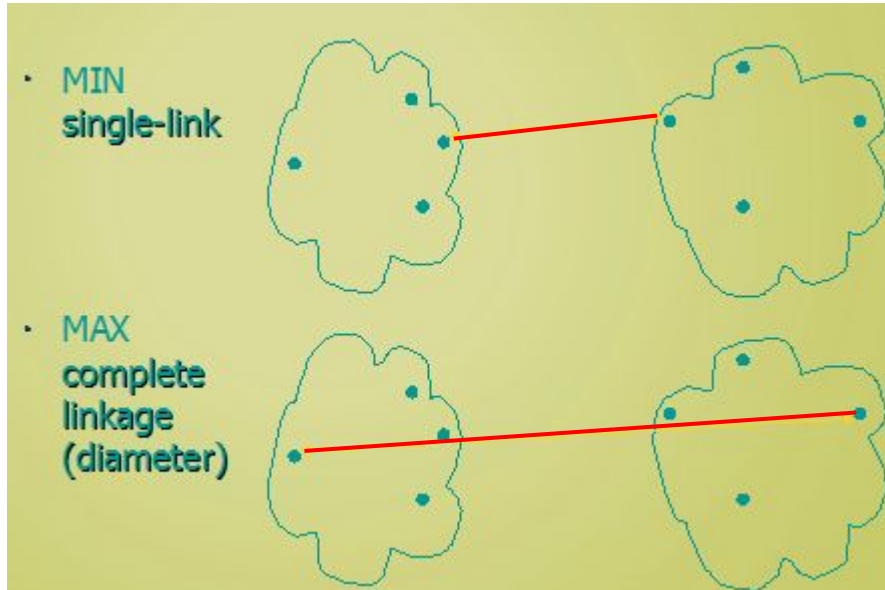


distancia
entre clusters
de ≥ 1
elementos
(*'linkage'*)

linkage

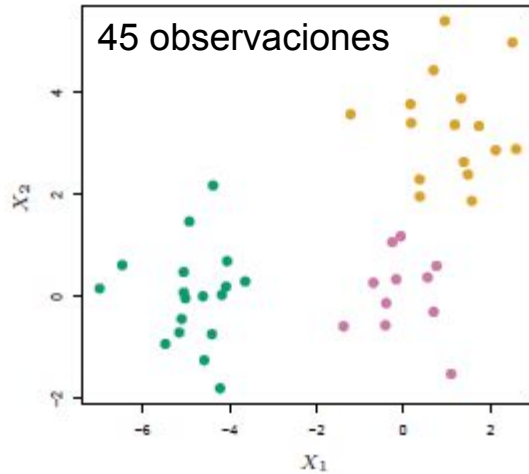


Clustering Jerárquico: Linkage

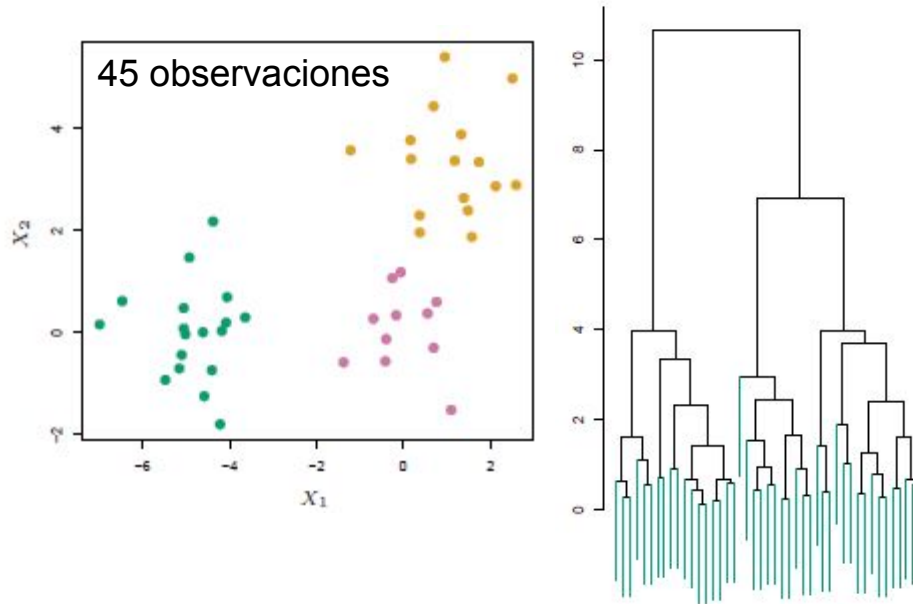


- **ward**: minimiza la varianza del cluster que se va a *mergear*

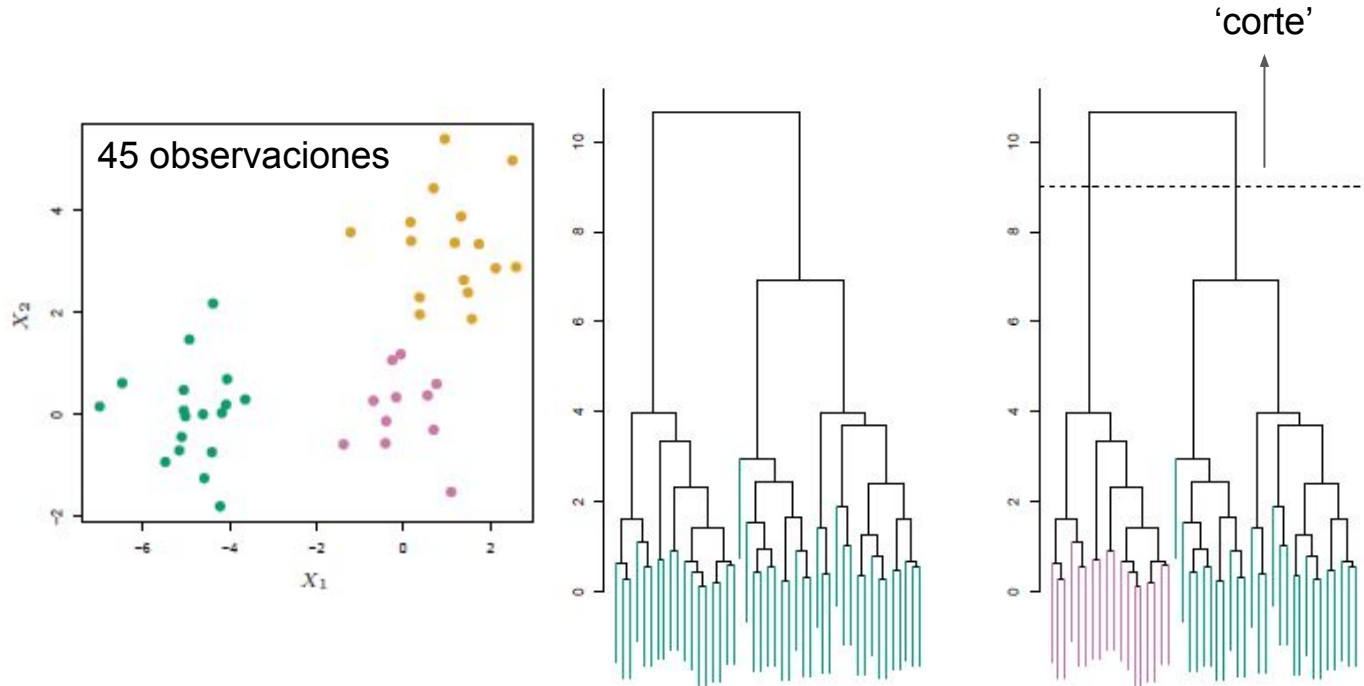
Clustering Jerárquico: Devuelta al dendograma



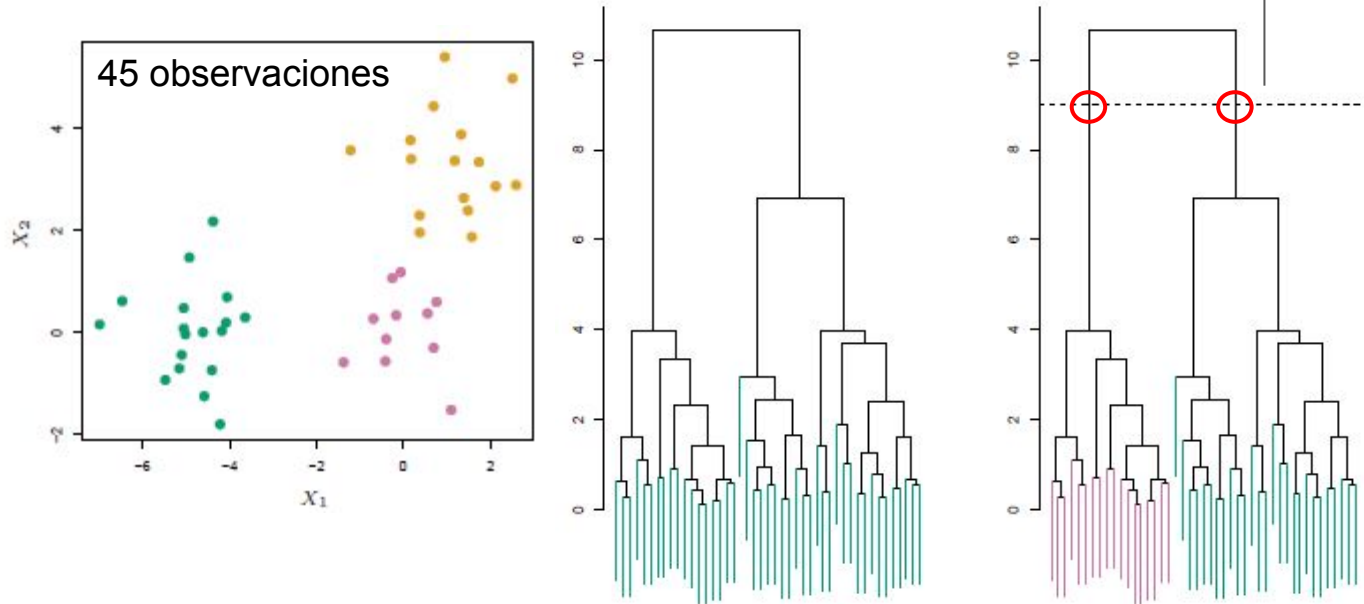
Clustering Jerárquico: Devuelta al dendrograma



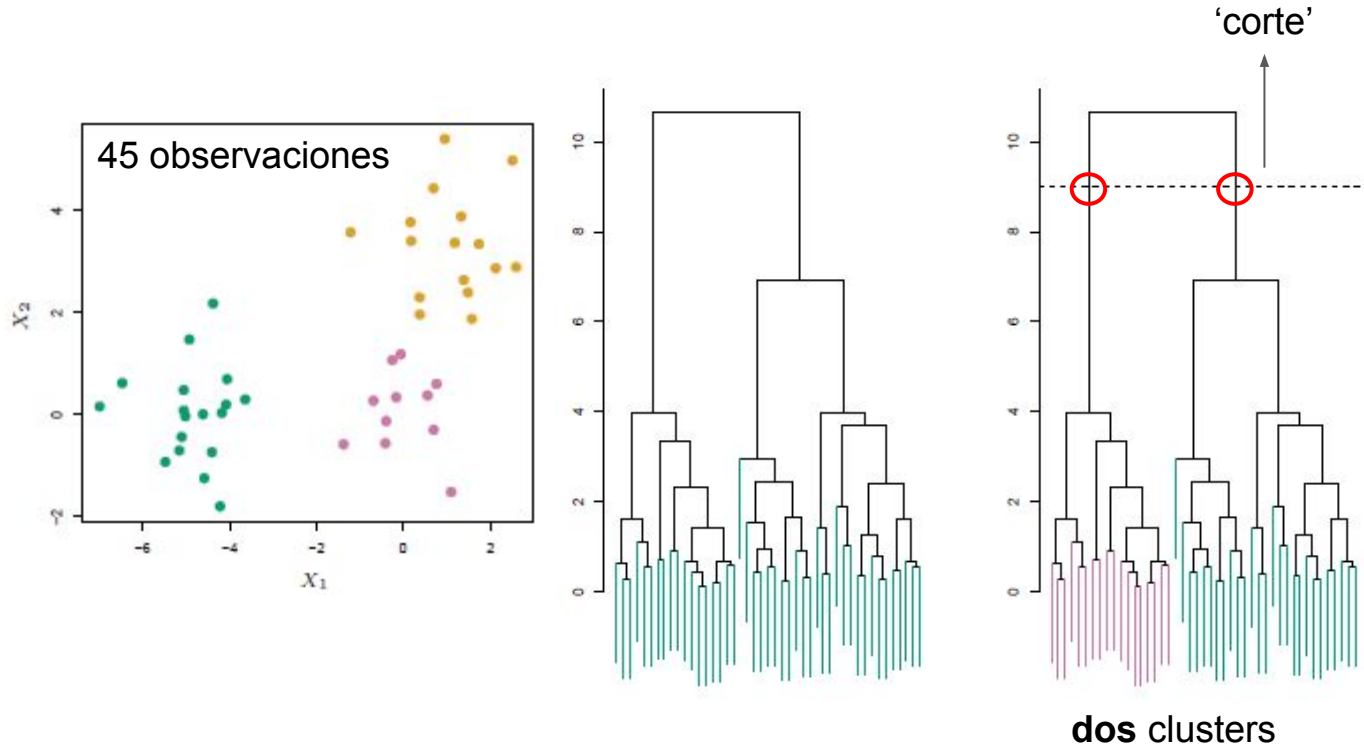
Clustering Jerárquico: Devuelta al dendrograma



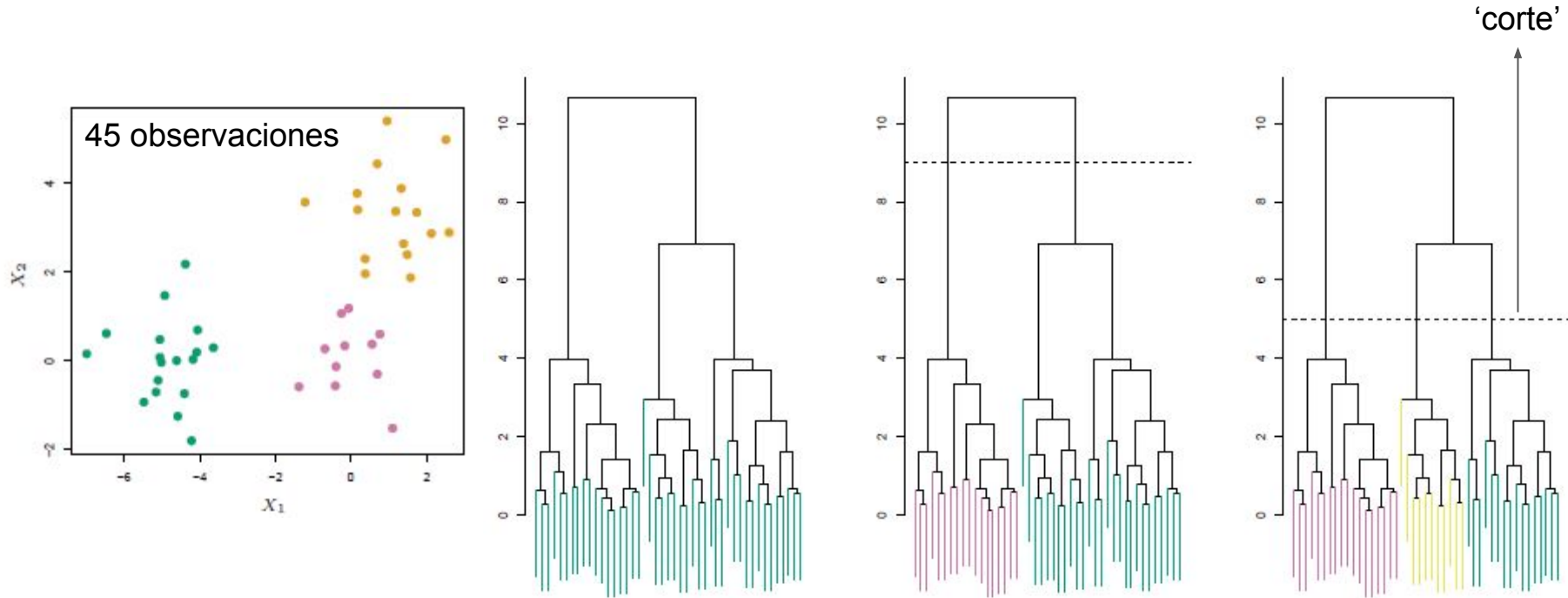
Clustering Jerárquico: Devuelta al dendrograma



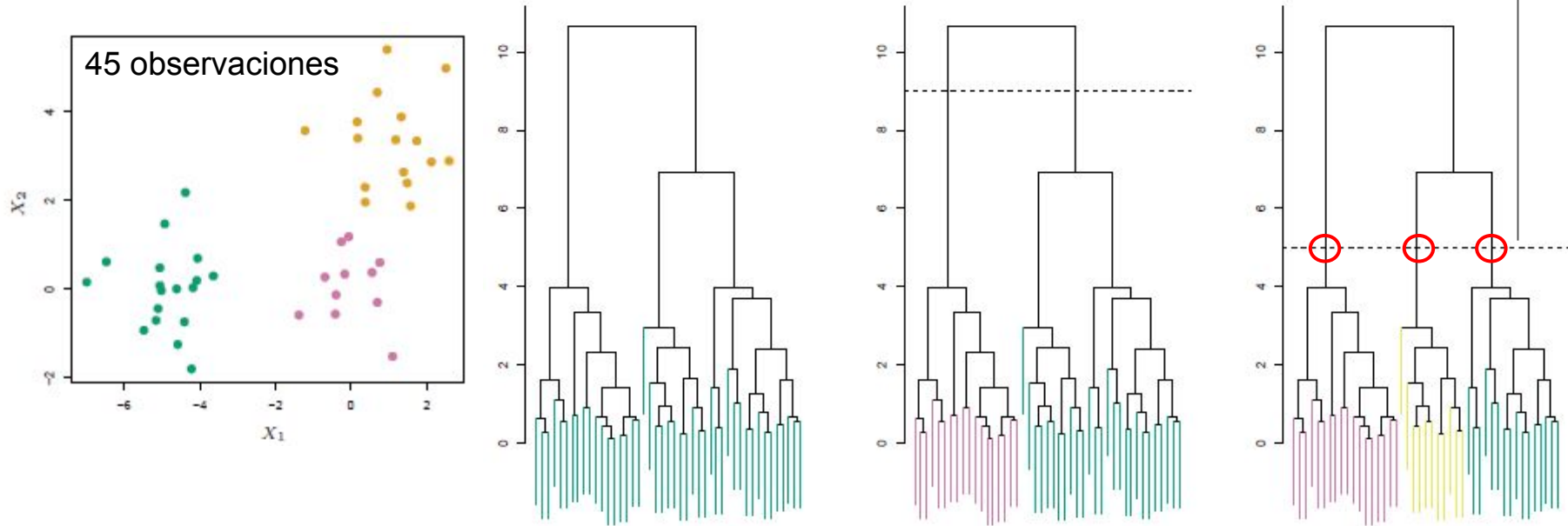
Clustering Jerárquico: Devuelta al dendrograma



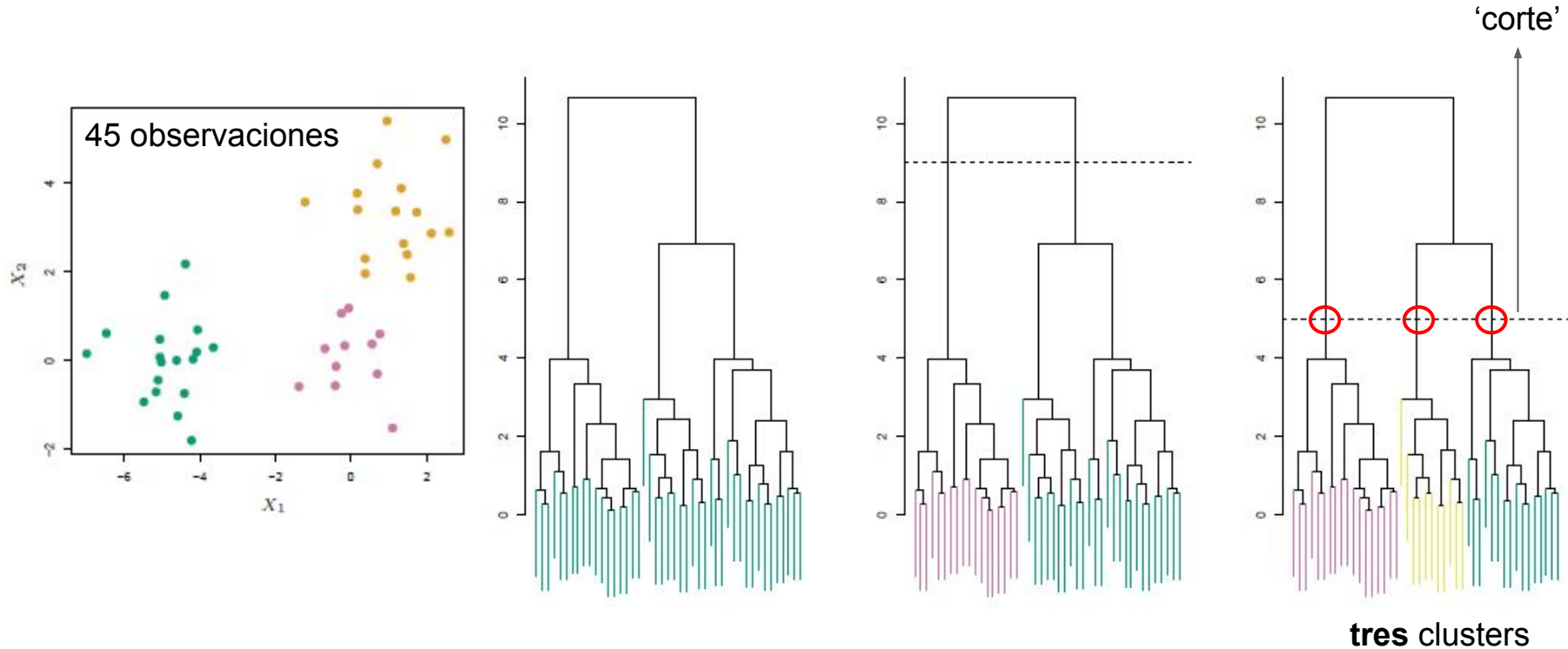
Clustering Jerárquico: Devuelta al dendrograma



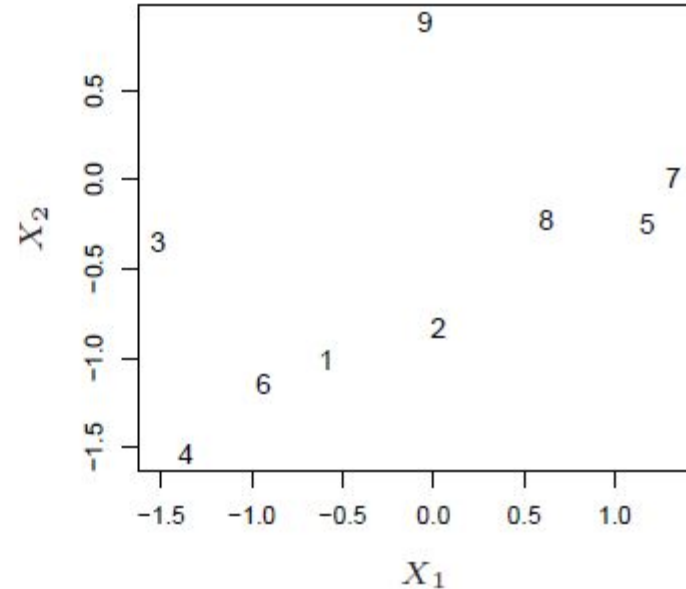
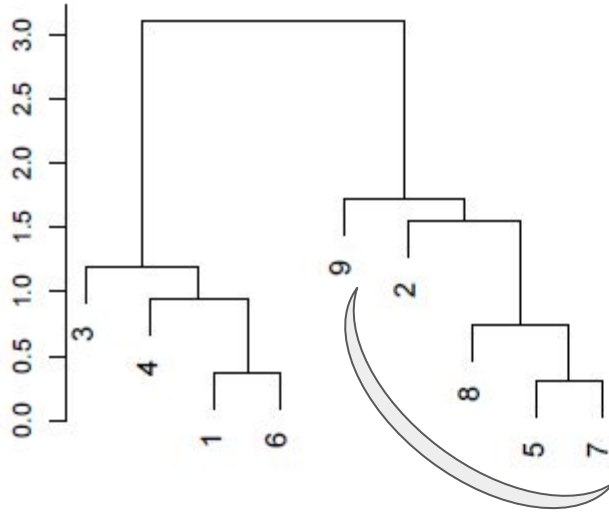
Clustering Jerárquico: Devuelta al dendrograma



Clustering Jerárquico: Devuelta al dendrograma



Clustering Jerárquico: Devuelta al dendrograma

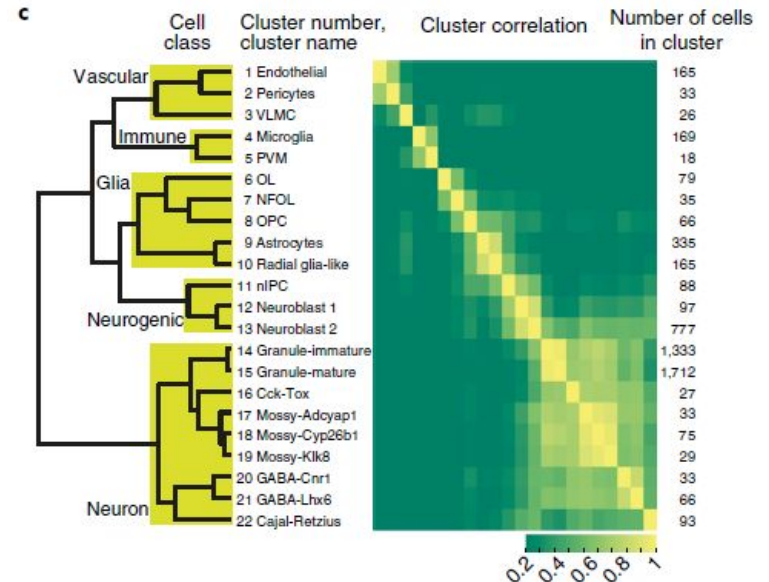


clusters que se obtienen cortando el dendrograma a una dada altura están anidados con los clusters que se obtienen al cortar el dendrograma en una altura superior

Este puede ser un requisito fuerte para un dataset real donde no necesariamente la mejor clusterización de los datos en 3 grupos resulta de tomar la mejor clusterización de los datos en dos grupos y separarlos

Clustering Jerárquico: Pros y Cons

- + Pueden revelar detalles finos en la relación de los datos
- + Proveen un dendograma interpretable
- + Son determinísticos - producen el mismo resultado si se corre el mismo modelo con el mismo input
- Son computacionalmente costosos



Consideraciones

Tanto K-means como clustering jerárquico asignan un cluster a cada sample, por lo que los clusters encontrados pueden distorsionarse fuertemente debido a la presencia de outliers que no pertenecen a algún determinado grupo -> modelos mixtos están pensados para lidiar con outliers

Los algoritmos de clusterización no suelen ser robustos ante permutaciones en los datos. Si computamos un set de k clusters en nuestros datos, removemos algunas muestras de forma aleatoria y volvemos a clusterizar los resultados pueden ser muy distintos

Los resultados de una clusterización no deberían ser vistos como una verdad absoluta si no que deberían dar un puntapie inicial al desarrollo de una hipótesis científica e investigación futura, preferentemente, en un dataset independiente

Sugerencias

Realizar varias inicializaciones de los modelos cambiando los parámetros para ver las estructuras que emergen consistentemente

Testear la robustez del método aplicándolo sobre subsets aleatorios de los datos

(sklearn) K-means clustering

sklearn.cluster.KMeans

```
class sklearn.cluster.KMeans(n_clusters=8, *, init='k-means++', n_init=10, max_iter=300, tol=0.0001,  
precompute_distances='deprecated', verbose=0, random_state=None, copy_x=True, n_jobs='deprecated', algorithm='auto') \[source\]
```

EL parámetro es *n_clusters* con el cual indicamos al modelo el número de clusters que queremos obtener

init - es el método de inicialización de los k centroids (random, k-means++)

n_init - cuantas veces queremos inicializar el modelo ya que no es determinista (output es el de menor SSE)

max_iter - el número máximo de iteraciones si es que no converge antes

(sklearn) Clustering Jerárquico

`sklearn.cluster.AgglomerativeClustering`

```
class sklearn.cluster.AgglomerativeClustering(n_clusters=2, *, affinity='euclidean', memory=None, connectivity=None, compute_full_tree='auto', linkage='ward', distance_threshold=None, compute_distances=False)
```

[\[source\]](#)

affinity - medida de disimilaridad de para el primer paso del algoritmo (distancia euclídea o basada en correlación)

linkage - medida de disimilaridad cuando un cluster tiene más de un elemento