Clustering

Estadística Multivariante

Sofía Almeida Bruno
Daniel Bolaños Martínez
José María Borrás Serrano
Fernando de la Hoz Moreno
Pedro Manuel Flores Crespo
María Victoria Granados Pozo

18 de enero de 2020

Clustering

- Objetivo: agrupar objetos similares.
- Dadas $x_1, \cdots, x_n$ medidas de p variables en n objetos considerados *heterogéneos*. El objetivo del análisis clúster es agrupar estos objetos en k clases *homogéneas*, donde k es también desconocido.

Clustering

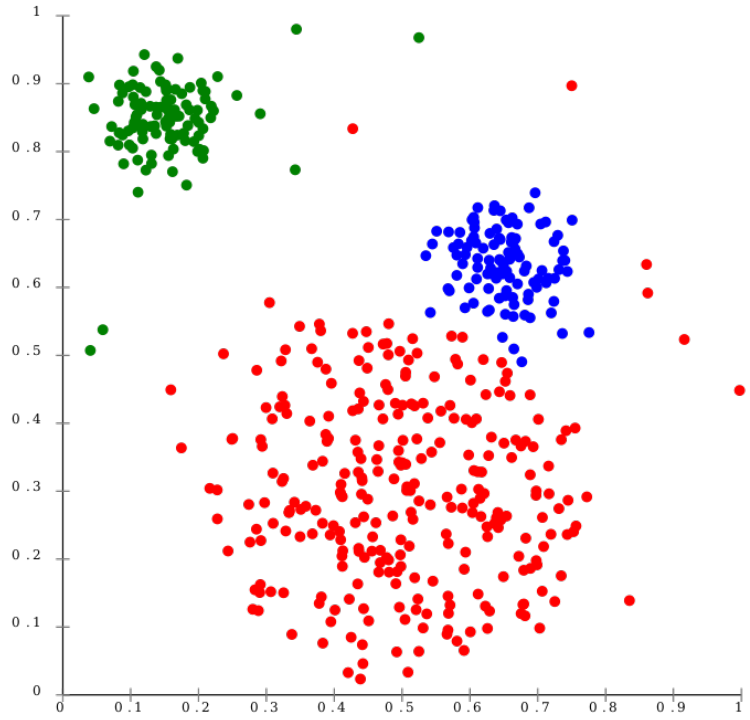


Figura: Ejemplo de *clustering*. [Chi11]

Ejemplos de *Clustering*

- Biología: determinación de especies.
- *Marketing*: descubrimiento de grupos de clientes.

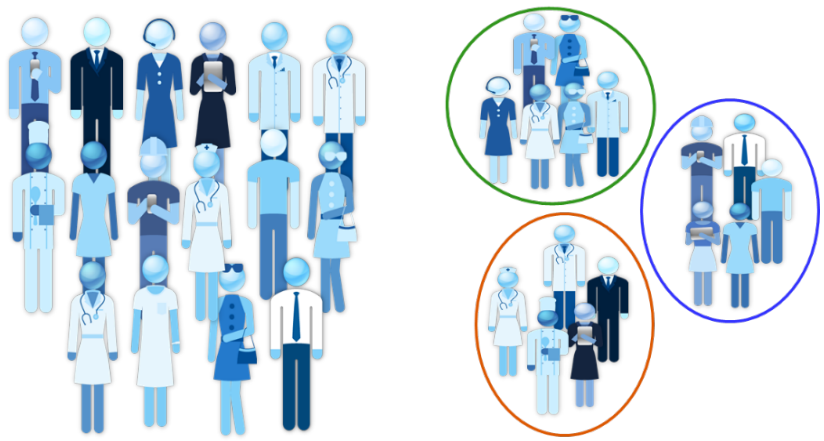


Figura: Ejemplo de *clustering*. [noa]

- Psicología: encontrar tipos de personalidad.
- Arqueología: datar objetos encontrados.
- Planificación urbana: identificar grupos de viviendas.

Clustering

Para realizar un análisis clúster hay que:

- Elegir una medida de similitud.
- Elegir un algoritmo para construir los grupos.
  - Particionamiento.
  - Jerárquicos.

Medidas de similitud

Realizar un agrupamiento simple a partir de un conjunto complejo de datos requiere una medida de "similitud".

Para elegir esta medida es necesario tomar consideraciones iniciales como:

- Naturaleza de las variables (discreta, continua, binaria).
- Escalas de las medidas (nominal, ordinal, intervalo).
- Conocimiento sobre el problema.

Los valores de las variables consideradas deberán ser normalizados.

Distancias de similitud para pares de ítems

La distancia estadística entre dos observaciones p-dimensionales $x' = [x_1, \ldots, x_p]$ e $y' = [y_1, \ldots, y_p]$ es:

$$d(x, y) = \sqrt{(x - y)^T A (x - y)}$$

Donde $A = S^{-1}$ y S contiene las varianzas y covarianzas de la muestra. S no es conocida antes de aplicar clustering, por lo que se suele usar la distancia euclídea:

$$d(x, y) = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + \cdots + (x_p - y_p)^2} = \sqrt{(x - y)^T (x - y)}.$$

Otras medidas y coeficientes de similitud

- Métrica de Minkowski:

$$d(x,y) = \left[\sum_{i=1}^{p} |x_i - y_i|^m \right]^{1/m}$$

- Métrica de Canberra (variables no negativas):

$$d(x,y) = \sum_{i=1}^{p} \frac{|x_i - y_i|}{(x_i + y_i)}$$

- Coeficiente de Czekanowski (variables no negativas):

$$d(x,y) = 1 - \frac{2 \sum_{i=1}^{p} min(x_i, y_i)}{\sum_{i=1}^{p} (x_i + y_i}$$

Binarización de variables

Si los ítems no pueden ser representados por medidas p-dimensionales significativas, las parejas de ítems se suelen comparar según la presencia o ausencia de ciertas características.

Matemáticamente se consigue introduciendo una variable binaria, que toma el valor 1 si la característica está presente y el valor 0 si no.

Variables	1	2	3	4	5
Ítem i	1	0	0	1	1
Ítem k	1	1	0	1	0

Sea x_{ij} la puntuación de la j-ésima variable binaria en el i-ésimo ítem y x_{kj} la de la j-ésima en el k-ésimo ítem, con $j = 1, \ldots, p$. Entonces:

$$(x_{ij} - x_{kj})^2 = \begin{cases} 0 & \text{si } x_{ij} = x_{kj} \\ 1 & \text{si } x_{ij} \neq x_{kj} \end{cases}$$

y $\sum_{j=1}^{p} (x_{ij} - x_{kj})^2$ proporciona una forma de contar el número de disparidades. Una distancia grande corresponde a muchas disparidades, es decir, ítems desemejantes.

En el Ejemplo anterior:

$$\sum_{j=1}^{5} (x_{ij} - x_{kj})^2 = (1-1)^2 + (0-1)^2 + (0-0)^2 + (1-1)^2 + (1-0)^2 = 2.$$

Problemas de la distancia usada

La distancia usada valora por igual las parejas 1-1 y 0-0. En algunos casos no es cierto.

Existen diversos esquemas para definir los coeficientes de similitud. Organizando las frecuencias de las parejas que coinciden y las que no para los ítems i y k en forma de tabla de contingencia:

		Ítem k		
		1	0	Total
Ítem i	1	a	b	$a+b$
	0	c	d	$c+d$
Total		$a+c$	$b+d$	$p=a+b+c+d$

Cuadro: Coeficientes de similitud para ítems *clustering*.

Coeficiente		Fundamento
1	$\frac{a+d}{p}$	Las parejas 1-1 y 0-0 ponderan lo mismo.
2	$\frac{2(a+d)}{2(a+d)+b+c}$	Las parejas 1-1 y 0-0 ponderan el doble.
3	$\frac{a+d}{a+d+2(b+c)}$	Las parejas que no coinciden ponderan el doble.
4	$\frac{a}{p}$	No hay parejas 0-0 en el numerador.

Cuadro: Coeficientes de similitud para ítems *clustering*.

Coeficiente		Fundamento
5	$\frac{a}{a+b+c}$	No hay parejas 0-0 en el numerador ni el denominador (Las parejas 0-0 son irrelevantes).
6	$\frac{2a}{2a+b+c}$	No hay parejas 0-0 en el numerador ni el denominador. Las parejas 1-1 ponderan el doble.
7	$\frac{a}{a+2(b+c)}$	No hay parejas 0-0 en el numerador ni el denominador. Las parejas que no coinciden ponderan el doble.
8	$\frac{a}{b+c}$	Proporción de parejas que coinciden (excluyendo las 0-0) en relación a las parejas que no coinciden.

Ejemplo de cálculo de coeficientes de similitud

Veamos un ejemplo de cálculo de coeficientes de similitud.

Definiremos 5 individuos con diferentes características y 6 variables binarias $X_1, X_2, X_3, X_4, X_5, X_6$.

	Altura (in)	Peso (lb)	Color de ojos	Color de pelo	Mano predominante	Género
Individuo 1	68	140	Verde	Rubio	Derecha	Femenino
Individuo 2	73	185	Marrón	Moreno	Derecha	Masculino
Individuo 3	67	165	Azul	Rubio	Derecha	Masculino
Individuo 4	64	120	Marrón	Moreno	Derecha	Femenino
Individuo 5	76	210	Marrón	Moreno	Izquierda	Masculino

$$X_1 = \begin{cases} 1 & \text{si Altura} \geq 72 \\ 0 & \text{si Altura} < 72 \end{cases}$$

$$X_2 = \begin{cases} 1 & \text{si Peso} \geq 150 \\ 0 & \text{si Peso} < 150 \end{cases}$$

$$X_3 = \begin{cases} 1 & \text{si Ojos marrones} \\ 0 & \text{si otro color de ojos} \end{cases}$$

$$X_4 = \begin{cases} 1 & \text{si Pelo rubio} \\ 0 & \text{si otro color de pelo} \end{cases}$$

$$X_5 = \begin{cases} 1 & \text{si Diestro} \\ 0 & \text{si Zurdo} \end{cases}$$

$$X_6 = \begin{cases} 1 & \text{si Masculino} \\ 0 & \text{si Femenino} \end{cases}.$$

Las puntuaciones de los individuos 1 y 2 en las $p = 6$ variables binarias se muestran a continuación:

	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6
Individuo 1	0	0	0	1	1	1
Individuo 2	1	1	1	0	1	0

El número de parejas que coinciden y las que no se indican a continuación en la tablas de contingencias:

		Individuo 2		
		1	0	Total
Individuo 1	1	1	2	3
	0	3	0	3
Total		4	2	6

Empleando el primer coeficiente de similitud de la tabla, calculamos:

$$\frac{a+d}{p} = \frac{1+0}{6} = \frac{1}{6}.$$

Calcularemos los demás números de similitud para cada pareja de individuos. Mostramos los resultados en la matriz simétrica 5 x 5.

		Individuo 1	2	3	4	5
Individuo	1	1				
	2	1/6	1			
	3	4/6	3/6	1		
	4	4/6	3/6	2/6	1	
	5	0	5/6	2/6	2/6	1

Los individuos 2 y 5 son los más similares mientras que los individuos 1 y 5 son los menos similiares.

Construcción de similitudes a partir de distancias

Fijamos:

$$s_{ik} = \frac{1}{1 + d_{ik}},$$

donde $0 < s_{ik} \leq 1$ es la similitud entre los ítems i y k, entonces d_{ik} es la distancia correspondiente.

No siempre podemos construir distancias "verdaderas", a partir de similitudes. Sólo si la matriz de similitudes es definida no negativa y la máxima similitud cumple $s_{ii} = 1$.

Entonces $d_{ik} = \sqrt{2(1 - s_{ik})}$, cumple las propiedades de una distancia.

Medidas de similitud para pares de variables

Para algunas aplicaciones, son las variables, en lugar de los ítems, las que deben ser agrupadas. Las medidas de similitud para variables suelen tomar la forma de coeficientes de correlaciones muestrales.

Cuando las variables son binarias, los datos se pueden organizar en una tabla de contingencia que tiene la siguiente forma:

		Variable k		Total
		1	0	
Variable i	1	a	b	$a+b$
	0	c	d	$c+d$
Total		$a+c$	$b+d$	$n=a+b+c+d$

La fórmula del coeficiente de correlación producto-momento aplicada a las variables binarias de la tabla de contingencia nos da:

$$r = \frac{ad - bc}{[(a+b)(c+d)(a+c)(b+d)]^{1/2}}.$$

Podemos tomar r como la medida de similitud entre las dos variables.

Se cumple la relación ($r^2 = \chi^2/n$) para evaluar la independencia de dos variables categóricas. Para un n fijo, una similitud (o correlación) grande es consistente con la presencia de dependencia.

Ejemplo idiomas

Medimos las similitudes de 11 lenguajes en base a los primeros 10 números naturales en cada idioma.

Inglés (E)	Noruego (N)	Danés (Da)	Holandés (Du)	Alemán (G)	Francés (Fr)	Español (Sp)	Italiano (I)	Polaco (P)	Húngaro (H)	Finés (Fi)
one	en	en	een	eins	un	uno	uno	jeden	egy	yksi
two	to	to	twee	zwei	deux	dos	due	dwa	ketto	kaksi
three	tre	tre	drie	drei	trois	tres	tre	trzy	harom	kolme
four	fire	fire	vier	vier	quatre	cuatro	quattro	cztery	negy	nelja
five	fem	fem	vijf	funf	cinq	cinco	cinque	piec	ot	viisi
six	seks	seks	zes	sechs	six	seis	sei	szesc	hat	kuusi
seven	sju	syv	zeven	sieben	sept	siete	sette	siedem	het	seitseman
eight	atte	otte	acht	acht	huit	ocho	otto	osiem	nyolc	kahdeksan
nine	ni	ni	negen	neun	neuf	nueve	nove	dziewiec	kilenc	yhdeksan
ten	ti	ti	tien	zehn	dix	diez	dieci	dziesiec	tiz	kymmenen

Vemos que inglés, noruego, danés, holandés y alemán parecen formar un grupo. El francés, español, italiano y polaco forman otro, mientras que el húngaro y el finés no forman parte de ninguno.

	E	N	Da	Du	G	Fr	Sp	I	P	H	Fi
E	10										
N	8	10									
Da	8	9	10								
Du	3	5	4	10							
G	4	6	5	5	10						
Fr	4	4	4	1	3	10					
Sp	4	4	5	1	3	8	10				
I	4	4	5	1	3	9	9	10			
P	3	3	4	0	2	5	7	6	10		
H	1	2	2	2	1	0	0	0	0	10	
Fi	1	1	1	1	1	1	1	1	1	2	10

Número de clústeres

- En los algoritmos de *clustering*, uno de los problemas es determinar el número idóneo de clústeres k.
- Es un proceso ambiguo. Depende de las interpretaciones según la forma y la escala de de la distribución de los datos y la solución deseada.
- Como k decrece de n a 1, el valor de la distancia debería aumentar ya que tendría que ser mayor cuando dos clústeres distintos se agrupan en uno solo.

Número de clústeres-Método del codo

Consiste en dibujar la gráfica de las distancia a los centros de cada clúster en función del número de clústeres. Definimos:

$$SSE_k = \sum_{i=1}^{n_k} = \|\mathbf{y}_i - \bar{\mathbf{y}}_k\|^2,$$

y para cada k dibujamos

$$D_k = \sum_{i=1}^{k} SSE_k.$$

Número de clústeres-Método del codo

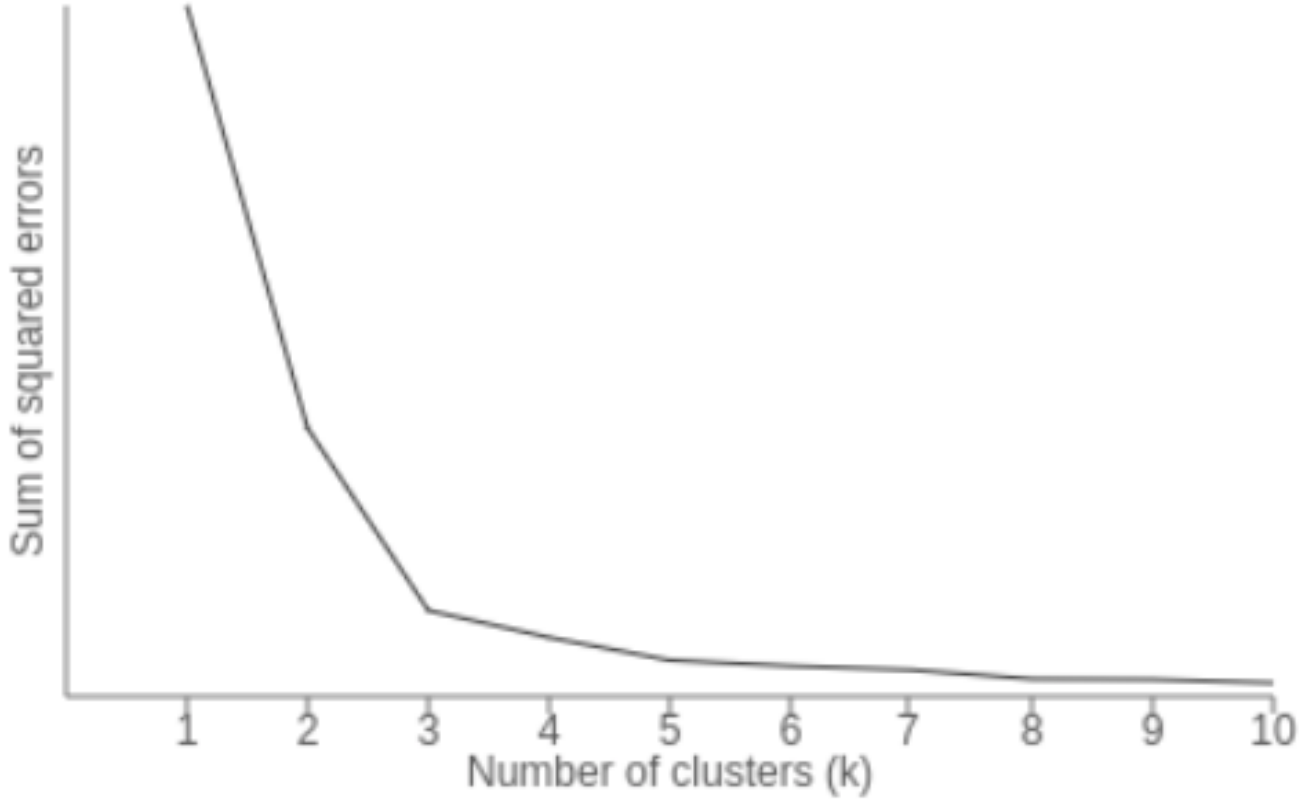


Figura: Ejemplo del método del codo.

Número de clústeres-Estadístico R^2

Para n clústeres la suma total de las distancias al cuadrado es $T = \sum_{i=1}^{n} \|\mathbf{y}_i - \bar{\mathbf{y}}\|^2$. Así, para k clústeres definimos R^2 como

$$R_k^2 = \frac{T - \sum_k SSE_k}{T}.$$

Para n clústeres $SSE_k = 0$ por lo que $R^2 = 1$. Una gran disminución en R_k^2 representaría un agrupamiento diferente.
También podríamos tener en cuenta el cambio en R^2 al unir los clústeres R y S como $SR^2 = R_k^2 - R_{k-1}^2$. El estadístico SR^2 representa, en función de T, la proporción de $SSE_t - (SSE_r + SSE_s)$ donde los clústeres C_R y C_S se han unido para formar el clúster C_T. Cuanto mayor sea el índice mayor será la pérdida de homogeneidad.

Número de clústeres-Varianza agrupada

Para un solo clúster

$$s^2 = \sum_{i=1}^{n} \|\mathbf{y}_i - \bar{\mathbf{y}}\|^2 / p(n-1).$$

Para el clúster C_k

$$s^2 = \sum_{i=1}^{n_k} \|\mathbf{y}_i - \bar{\mathbf{y}}_k\|^2 / p(n_k-1).$$

Valores grandes de la varianza agrupada indica que los clústeres no son homogéneos. Por lo tanto, si tiende a cero para algún $k < n$ indica la formación de un clúster homogéneo.

Número de clústeres-Pseudo estadísticos

El pseudo estadístico F se define como

$$F_k^* = \frac{(T - \sum_k SSE_k)/(k-1)}{\sum_k SSE_k/(n-k)}.$$

El pseudo estadístico t^2 se define como

$$\text{pseudo } t^2 = \frac{[SSE_t - (SSE_r + SSE_s)](n_R + n_S - 2)}{SSE_r + SSE_s}.$$

Número de clústeres-*Silhouette method*

Definimos el índice:

$$s(i) = \frac{b(i) - a(i)}{\max\{b(i), a(i)\}}, \quad \forall i = 1, \ldots, n$$

donde

$$a(i) = \frac{1}{|C_i| - 1} \sum_{j \in C_i, j \neq i} d(i, j)$$

y

$$b(i) = \min_{k \neq i} \frac{1}{|C_k|} \sum_{j \in C_k} d(i, j).$$

Se escoge el k que maximice el valor medio de $s(i)$.

Número de clústeres-*Silhouette method*

k	Silhouette coeff.
2	0.7049787496083262
3	0.5882004012129721
4	0.6505186632729437
5	0.5745566973301872
6	0.4390271118313242 6

Cuadro: Ejemplo *silhouette method*.

Vemos que se obtienen los mejores resultados con 2 o 4 clústeres.

Número de clústeres-*Gap method*

El k elegido será aquel que maximice el valor de:

$$Gap(k) = E_n^*\{\log(W_k)\} - \log(W_k).$$

En la fórmula anterior E_n^* denota la media de una de muestra de tamaño n y

$$W_k = \sum_{R=1}^{k} \frac{1}{2n_R} \sum_{ij \in C_R} d(i,j).$$

Número de clústeres-*Gap method*

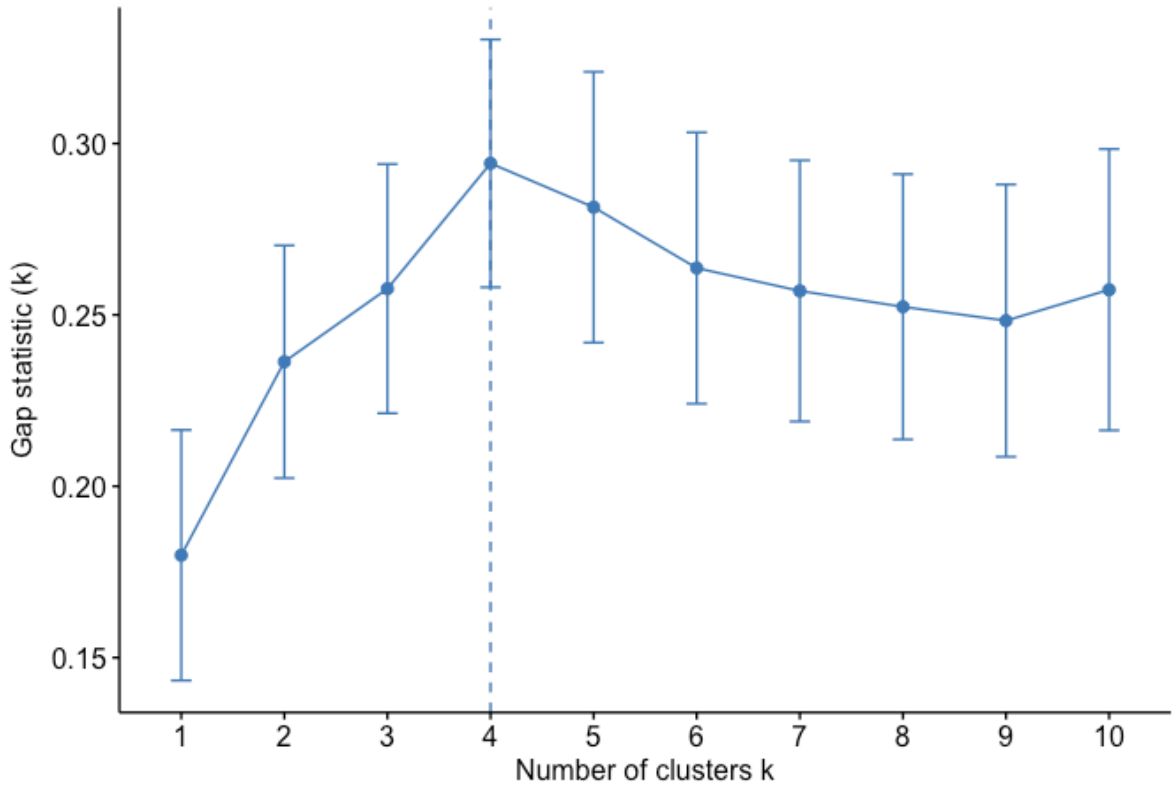


Figura: Ejemplo del método de la brecha.

Caso de estudio : Flor de Iris

Estudiaremos el conjunto de datos iris de **Fisher**.

Contiene 50 muestras de cada una de tres especies de flor **Iris**. Para cada muestra, se recogen las medidas de: largo y ancho del sépalo y y largo y ancho del pétalo, en centímetros.

Figura: Iris Setosa.

Figura: Iris virginica.

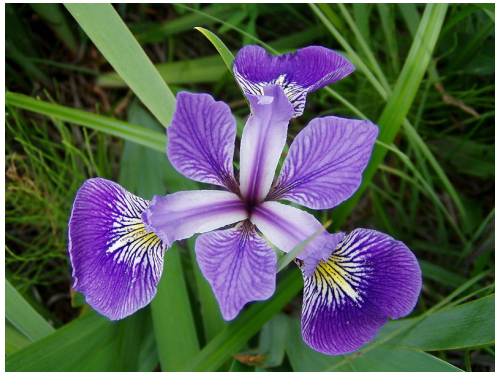


Figura: Iris versicolor.

Métricas utilizadas

Se utilizarán las siguientes métricas para medir la bondad de los algoritmos:

- **Calinski-Harabaz**: Nos indica si estamos usando un buen número de clústeres para un algoritmo en concreto. El número óptimo de clústeres tendrá la solución con el valor de Calinski-Harabasz más alto.
- **Silhouette**: Cuanto mayor sea su valor, más similar será un objeto respecto a su grupo y más diferente a los de otros clúster. Toma valores entre -1 y +1. Si el valor es cercano a 1, la configuración de los clúster es apropiada, si no, habrá más o menos clústeres de los necesarios.

Tabla comparativa de los algoritmos

Las mejores configuraciones son las que hayan obtenido un mayor valor del coeficiente de Silhouette.

Nombre	Nº clústeres	CH	SH	Tiempo (s)	Clústeres
K-Means	3	359.845074	0.504769	0.016456	0: 61 (40.67 %) 1: 50 (33.33 %) 2: 39 (26.00 %)
DBSCAN	4	94.991819	0.306404	0.002353	0: 45 (30.00 %) 1: 39 (26.00 %) -1: 36 (24.00 %) 2: 30 (20.00 %)
AggCluster	3	349.254185	0.504800	0.019058	0: 67 (44.67 %) 1: 50 (33.33 %) 2: 33 (22.00 %)
MeanShift	3	290.470683	0.476961	0.289073	0: 81 (54.00 %) 1: 50 (33.33 %) 2: 19 (12.67 %)

Gráficas

Para cada algoritmo, se mostrarán algunas gráficas que nos ayudarán a comprender como funciona el agrupamiento para el caso de estudio.

Las gráficas utilizadas serán **Scatter Matrix, Heatmap, KPlot y BoxPlot** que mostrarán la matriz de dispersión de las muestras, mapa de calor de los centroides para cada variable y distribución de las muestras según cada variable.

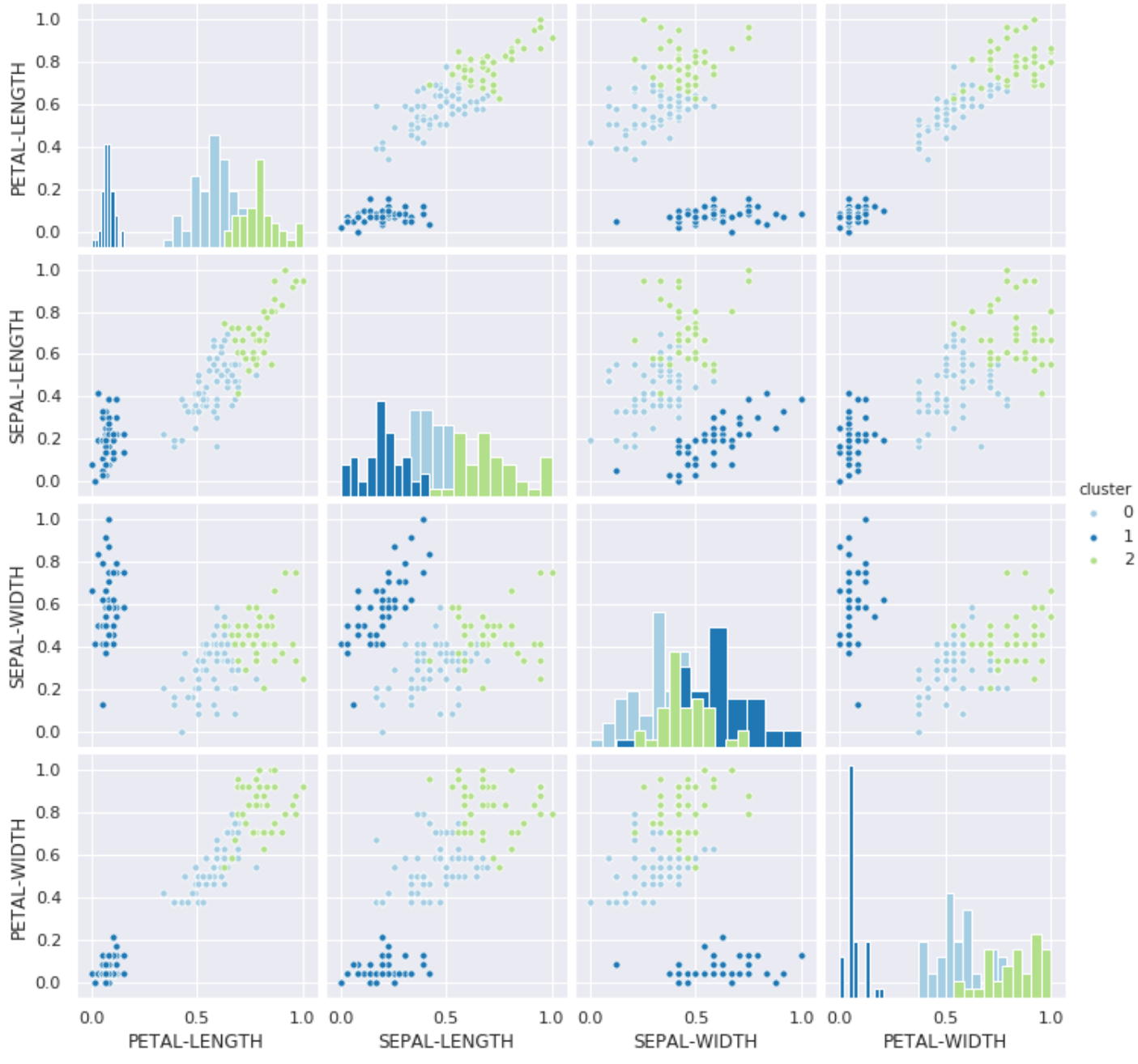
Para el caso del algoritmo **Agglomerative Clustering** mostraremos como se forman los distintos clústers a partir del Dendrograma generado.

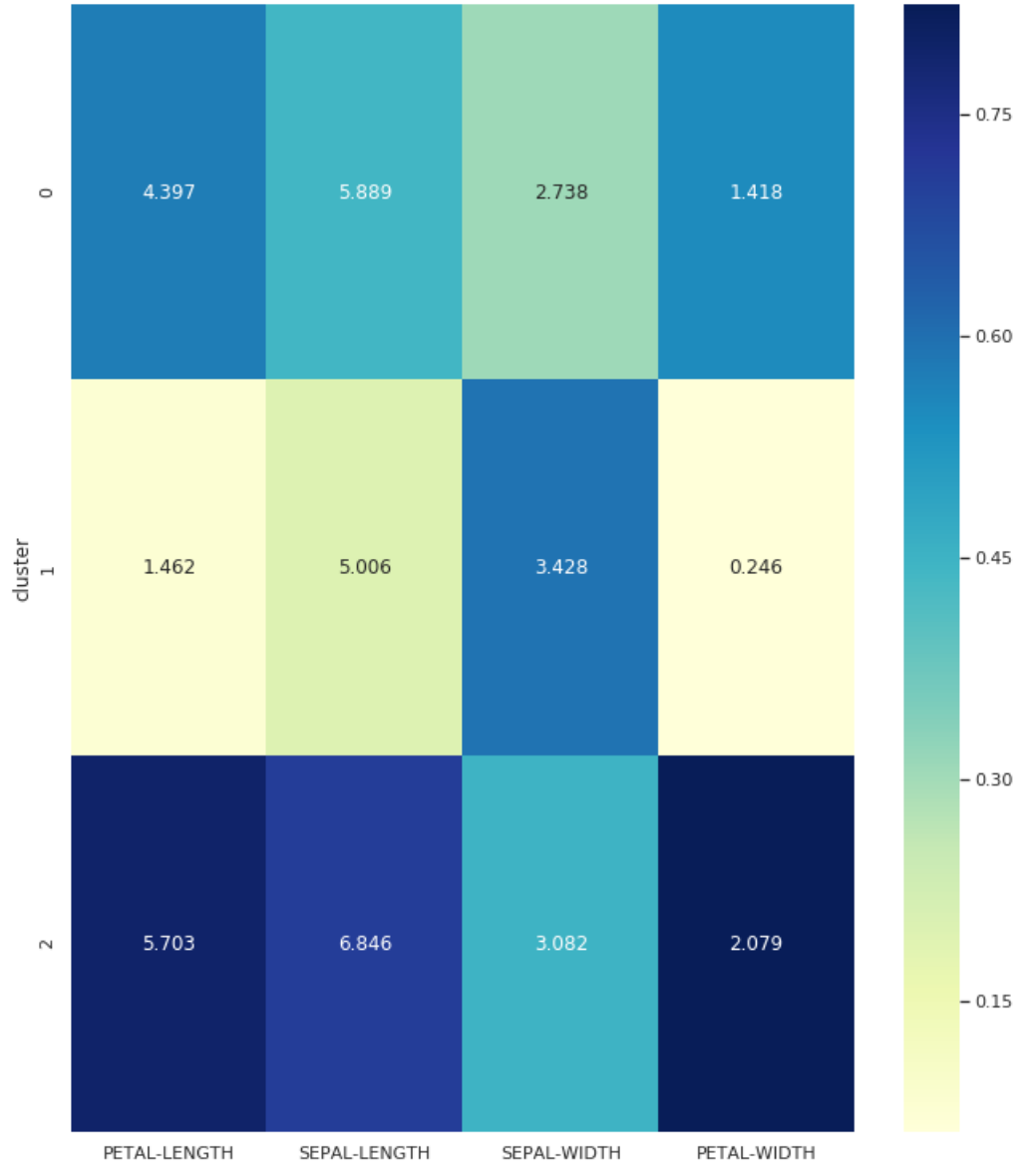
K-Means

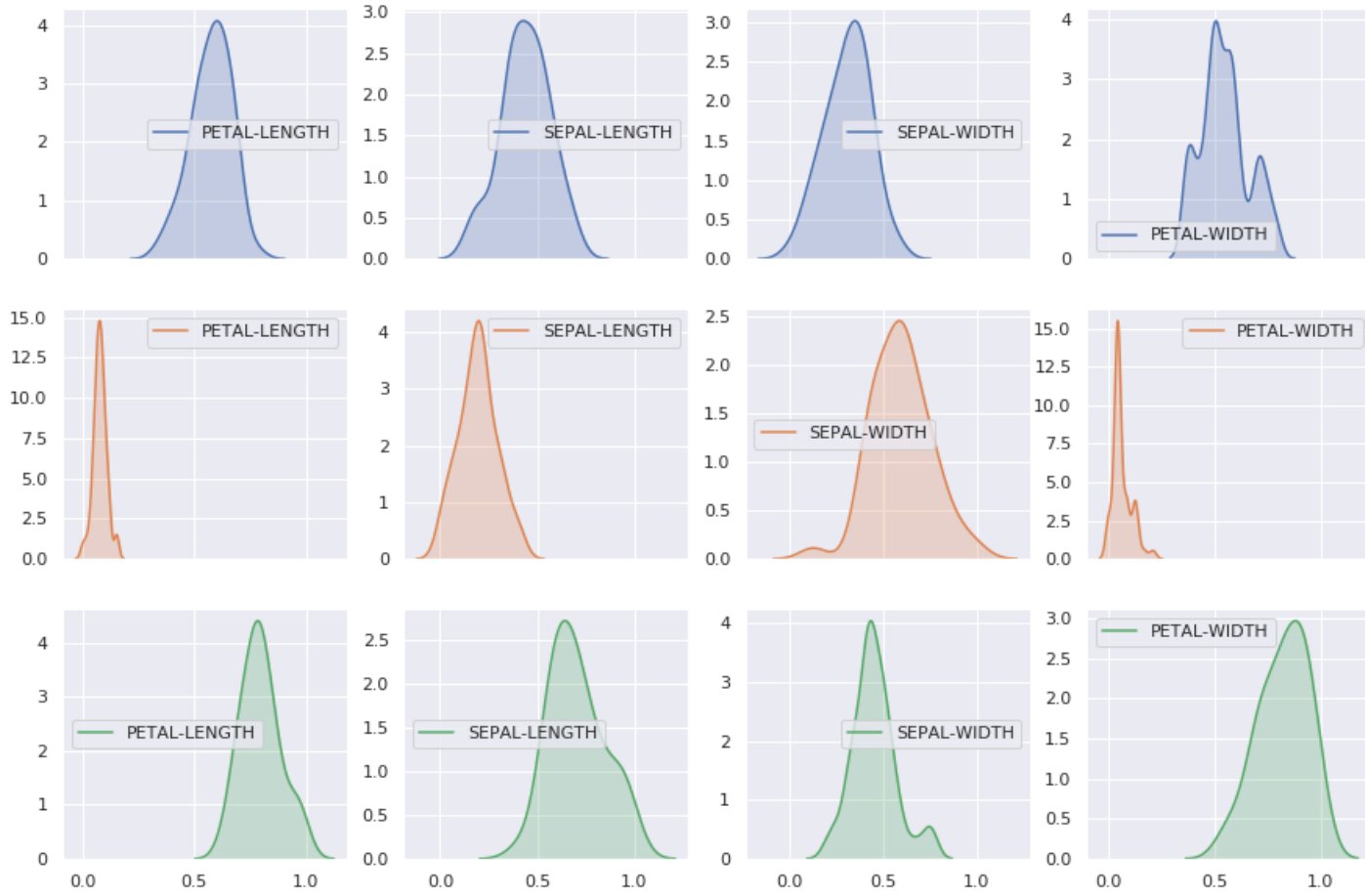
Para el algoritmo K-Means se ha utilizado el siguiente código en python y se ha obtenido la siguiente agrupación de las muestras:

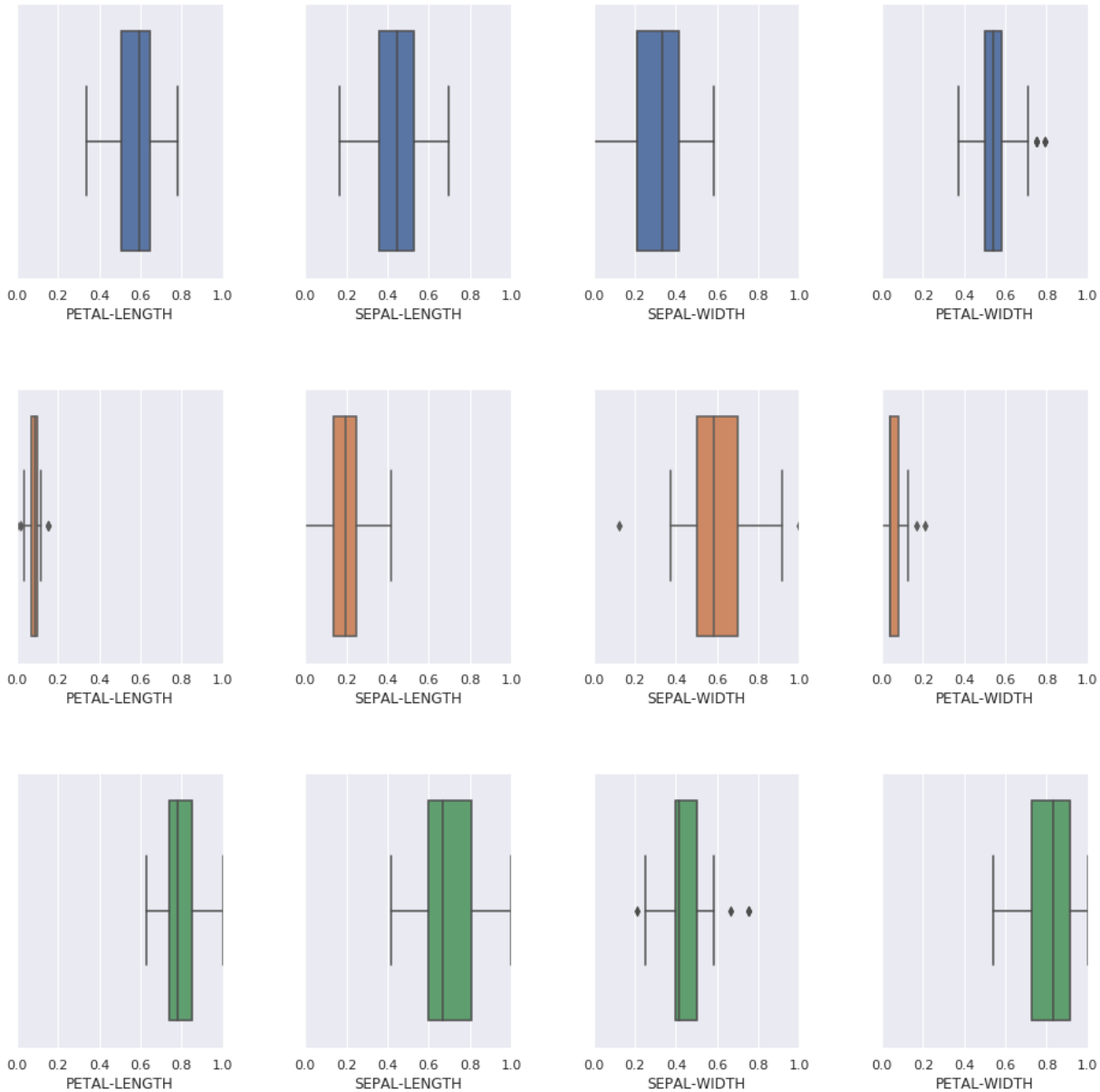
```
KMeans(init='k-means++', n_clusters=3,
       n_init=5, random_state=12345)

cluster 0: 61 (40.67%)
cluster 1: 50 (33.33%)
cluster 2: 39 (26.00%)
```


PETAL-LENGTH
SEPAL-LENGTH
SEPAL-WIDTH
PETAL-WIDTH
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
0.5
cluster
0
1
2


cluster
0
1
2
4.397
5.889
2.738
1.418
1.462
5.006
3.428
0.246
5.703
6.846
3.082
2.079
PETAL-LENGTH
SEPAL-LENGTH
SEPAL-WIDTH
PETAL-WIDTH
0.75
0.60
0.45
0.30
0.15


PETAL-LENGTH
SEPAL-LENGTH
SEPAL-WIDTH
PETAL-WIDTH
PETAL-LENGTH
SEPAL-LENGTH
SEPAL-WIDTH
PETAL-WIDTH
PETAL-LENGTH
SEPAL-LENGTH
SEPAL-WIDTH
PETAL-WIDTH

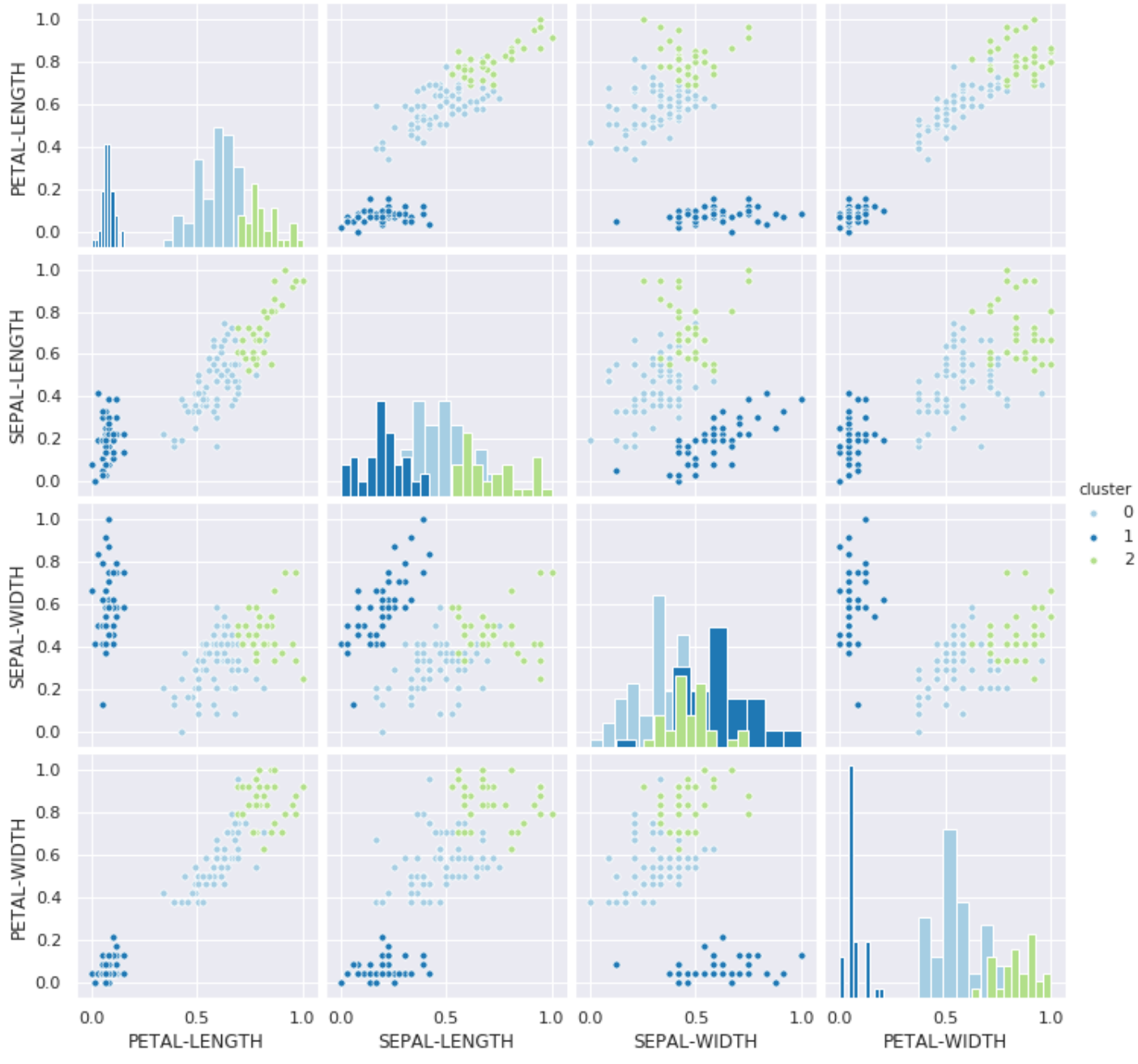

0.0 0.2 0.4 0.6 0.8 1.0
PETAL-LENGTH
0.0 0.2 0.4 0.6 0.8 1.0
SEPAL-LENGTH
0.0 0.2 0.4 0.6 0.8 1.0
SEPAL-WIDTH
0.0 0.2 0.4 0.6 0.8 1.0
PETAL-WIDTH
0.0 0.2 0.4 0.6 0.8 1.0
PETAL-LENGTH
0.0 0.2 0.4 0.6 0.8 1.0
SEPAL-LENGTH
0.0 0.2 0.4 0.6 0.8 1.0
SEPAL-WIDTH
0.0 0.2 0.4 0.6 0.8 1.0
PETAL-WIDTH
0.0 0.2 0.4 0.6 0.8 1.0
PETAL-LENGTH
0.0 0.2 0.4 0.6 0.8 1.0
SEPAL-LENGTH
0.0 0.2 0.4 0.6 0.8 1.0
SEPAL-WIDTH
0.0 0.2 0.4 0.6 0.8 1.0
PETAL-WIDTH

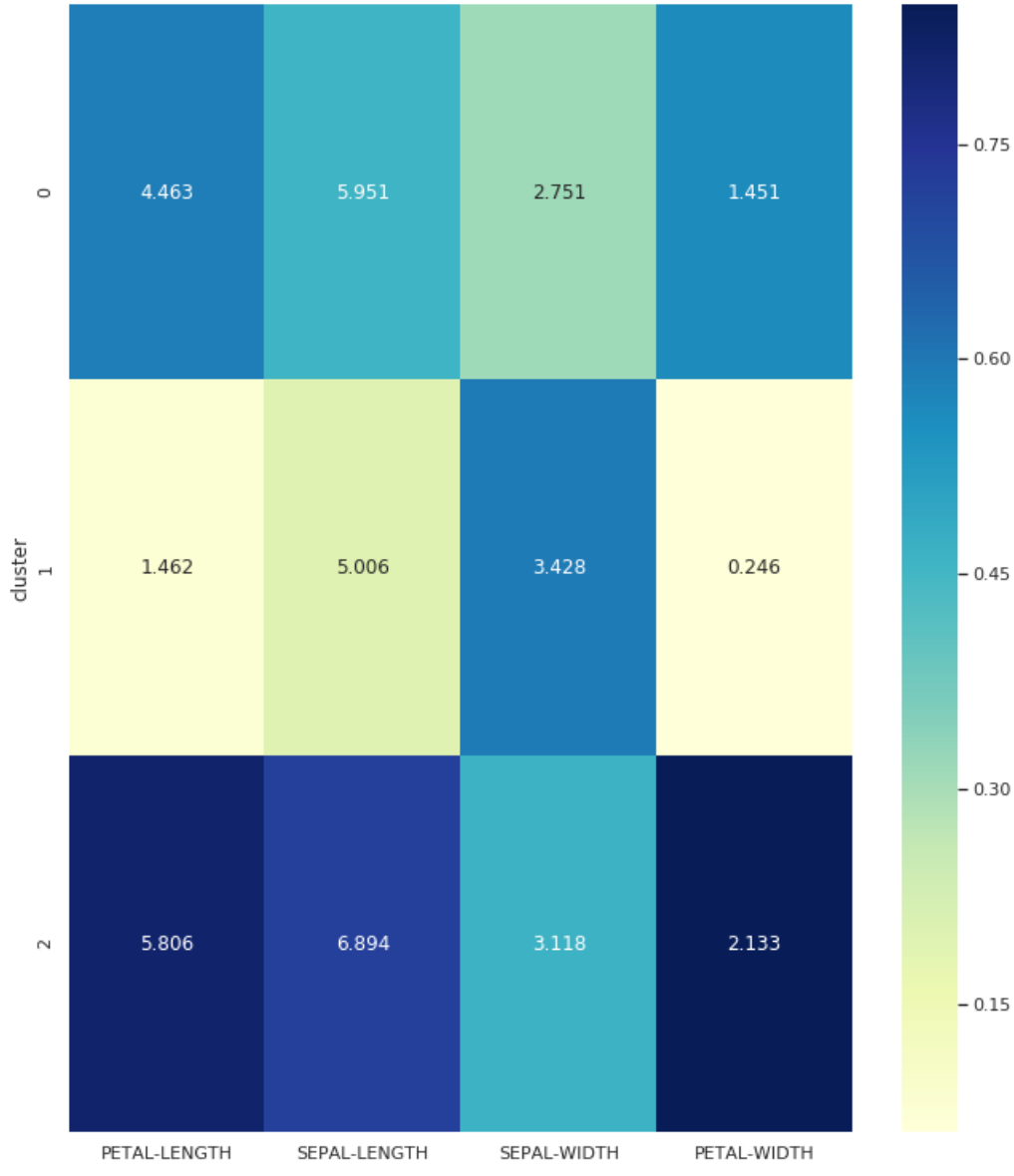
Agrupamiento Jerárquico

Para el algoritmo Aglomerativo Jerárquico, se ha utilizado el siguiente código en python y se ha obtenido la siguiente agrupación de las muestras:

```
AgglomerativeClustering(n_clusters=3,
        linkage="ward", affinity='euclidean')
```

```
cluster 0: 67 (44.67%)
cluster 1: 50 (33.33%)
cluster 2: 33 (22.00%)
```

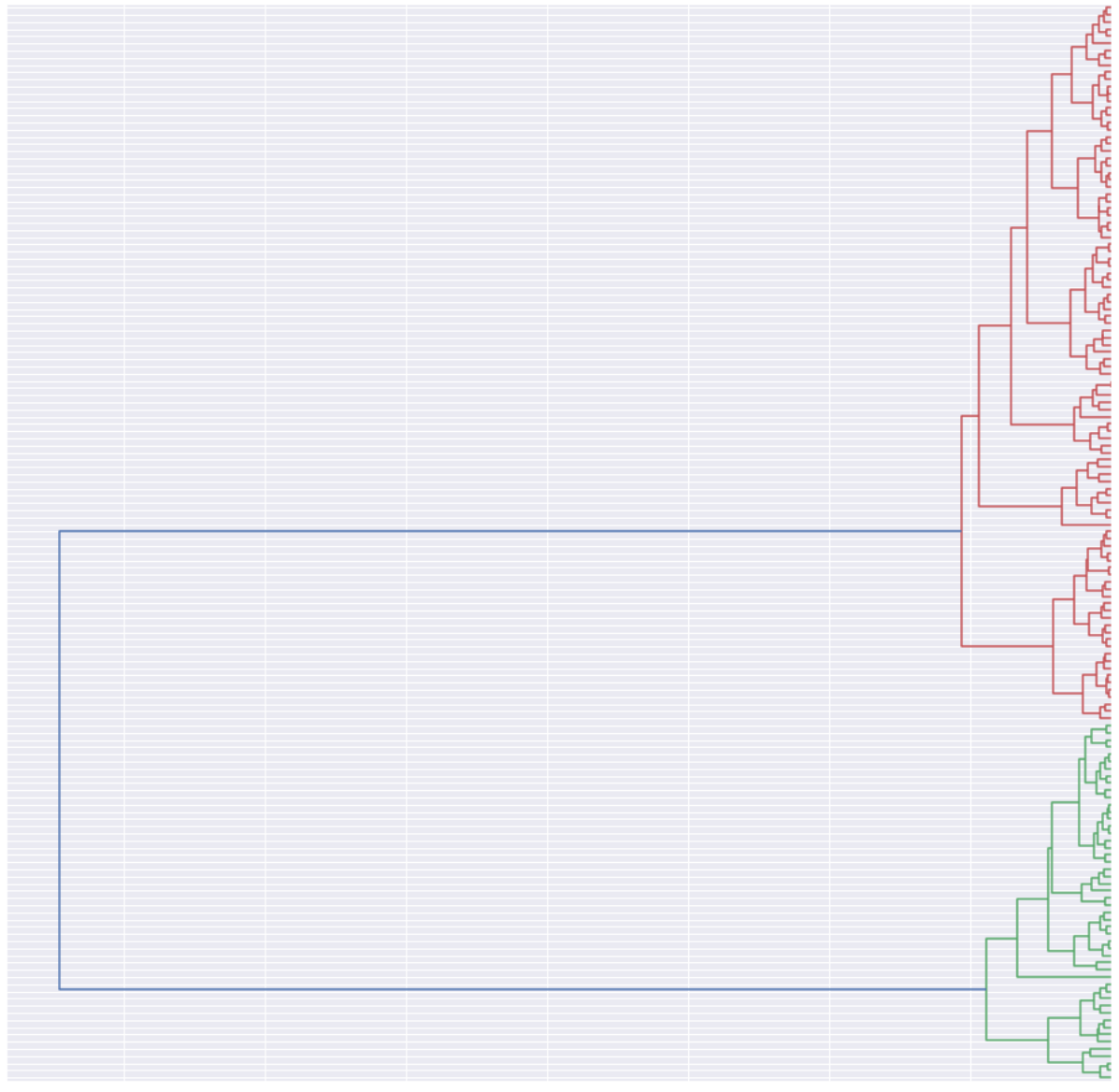

PETAL-LENGTH
SEPAL-LENGTH
SEPAL-WIDTH
PETAL-WIDTH
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
0.5
cluster
0
1
2


cluster
0
1
2
4.463
5.951
2.751
1.451
1.462
5.006
3.428
0.246
5.806
6.894
3.118
2.133
PETAL-LENGTH
SEPAL-LENGTH
SEPAL-WIDTH
PETAL-WIDTH
0.75
0.60
0.45
0.30
0.15

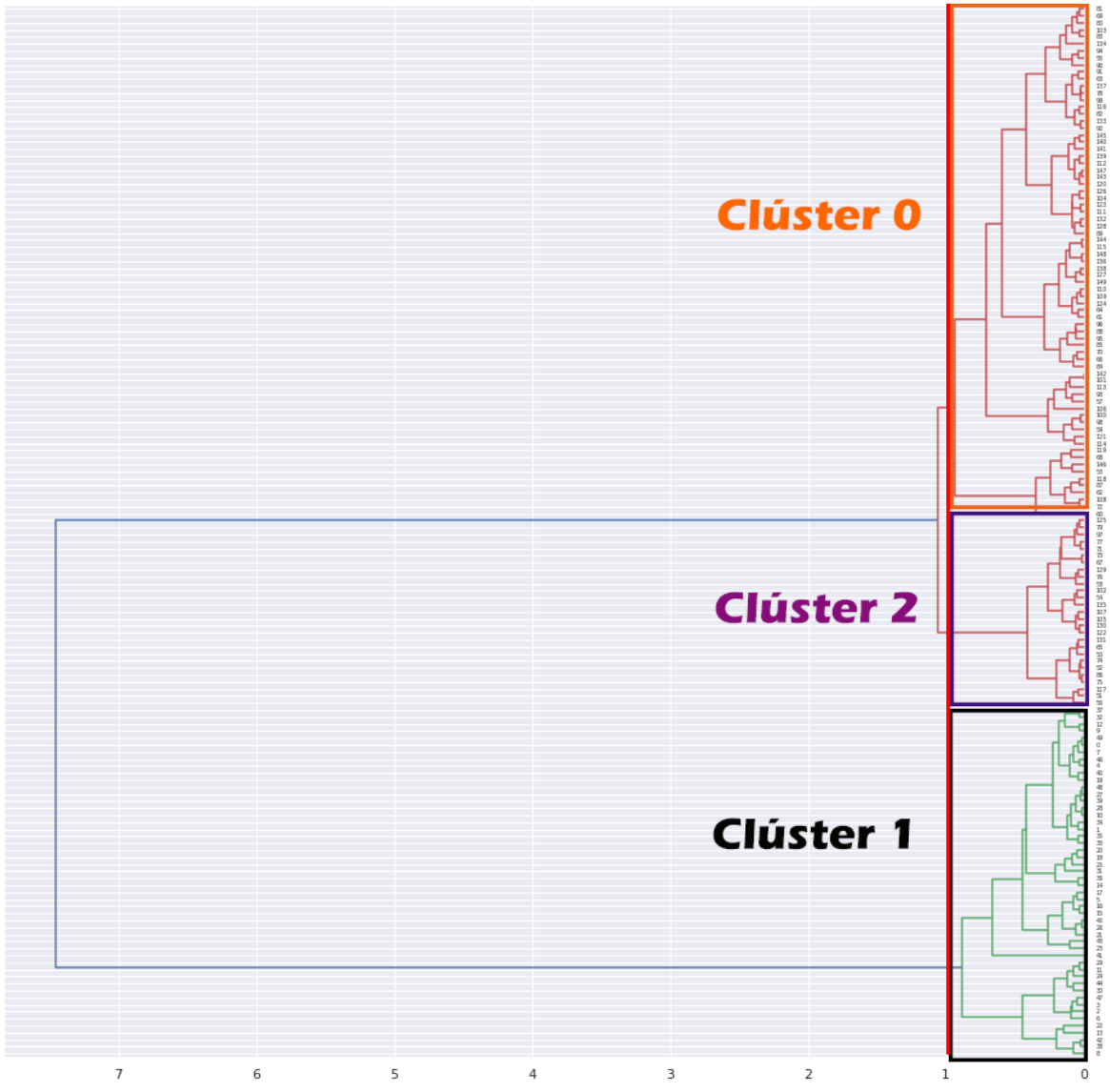
Dendrogramas

Un **dendrograma** es un diagrama de árbol que muestra los grupos que se forman al crear clústers de observaciones en cada paso y sus niveles de similitud.

La decisión acerca de la agrupación final también se conoce como cortar el dendrograma. Cortar el dendrograma es similar a trazar una línea a lo largo del dendrograma para especificar la agrupación final.

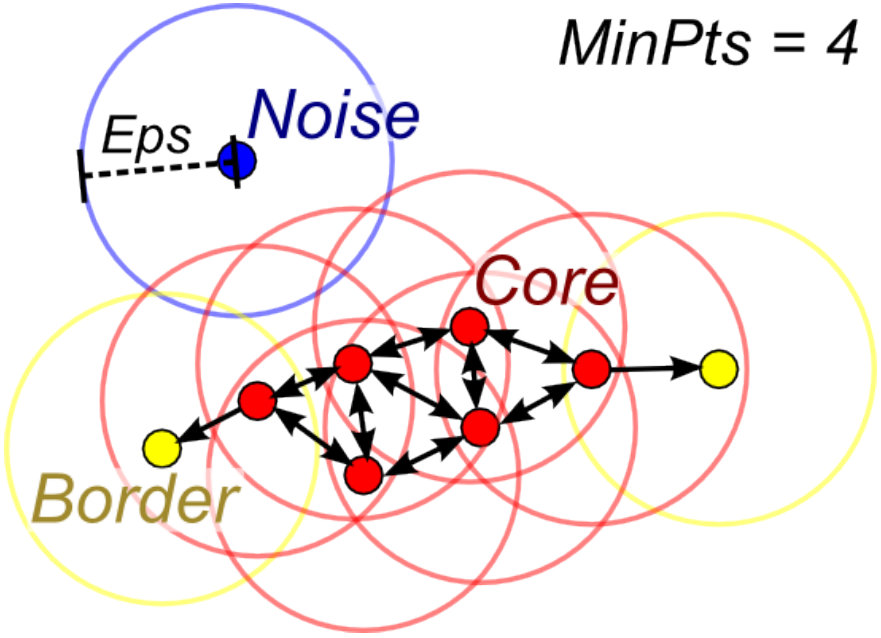

7
6
5
4
3
2
1
0

0: 67 (44.67 %), **1**: 50 (33.33 %), **2**: 33 (22.00 %)



DBSCAN

- Se basa en la densidad de las muestras para identificar los clústeres.
- Los clústers pueden tener cualquier forma.
- Dos parámetros para definir este algoritmo son: **eps** y **min_samples**.



DBSCAN

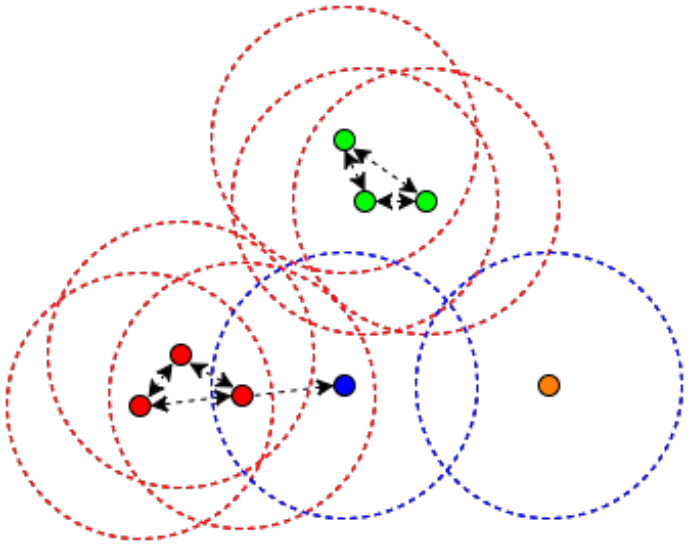
La técnica de agrupación DBSCAN clasifica los puntos como puntos núcleo, puntos (densamente-)alcanzables, o ruido de la siguiente forma:

- Un punto p pertenece al núcleo si al menos $min\_samples$ puntos están a una distancia ϵ de él y esos puntos son directamente alcanzables desde p.
- Un punto q es alcanzable desde p si existe una secuencia de puntos $p_1 \ldots p_n$ donde $p_1 = p$ y $p_n = q$ y cada punto p_{i+1} es directamente alcanzable desde p_i.
- Un punto que no sea alcanzable desde cualquier otro se considera ruido.

DBSCAN

Un clúster generado por DBSCAN satisface dos propiedades:

- Todos los puntos de un mismo clúster están densamente conectados entre sí.
- Si un punto A es alcanzable desde cualquier otro punto B del clúster, entonces A también forma parte del clúster.

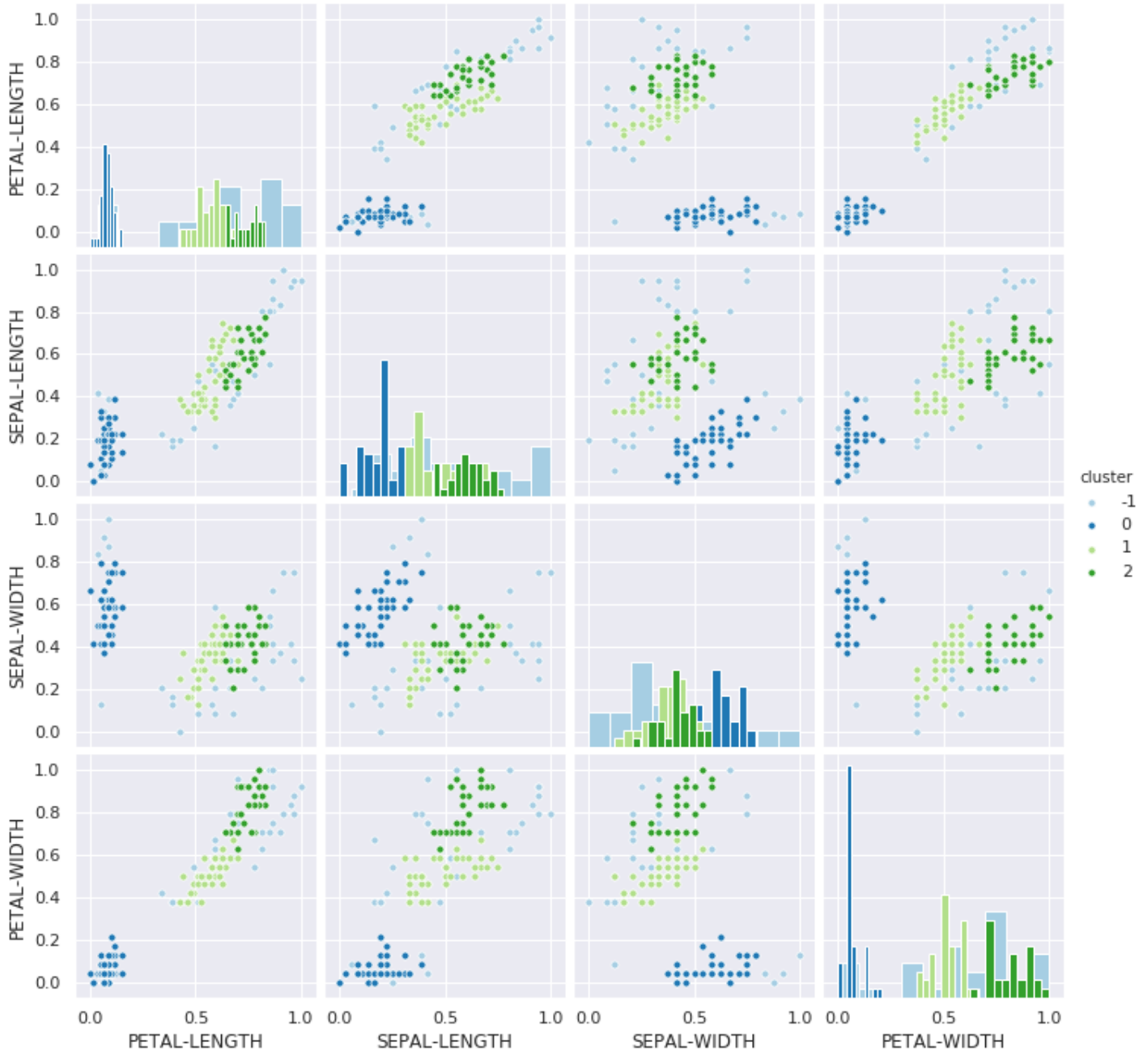


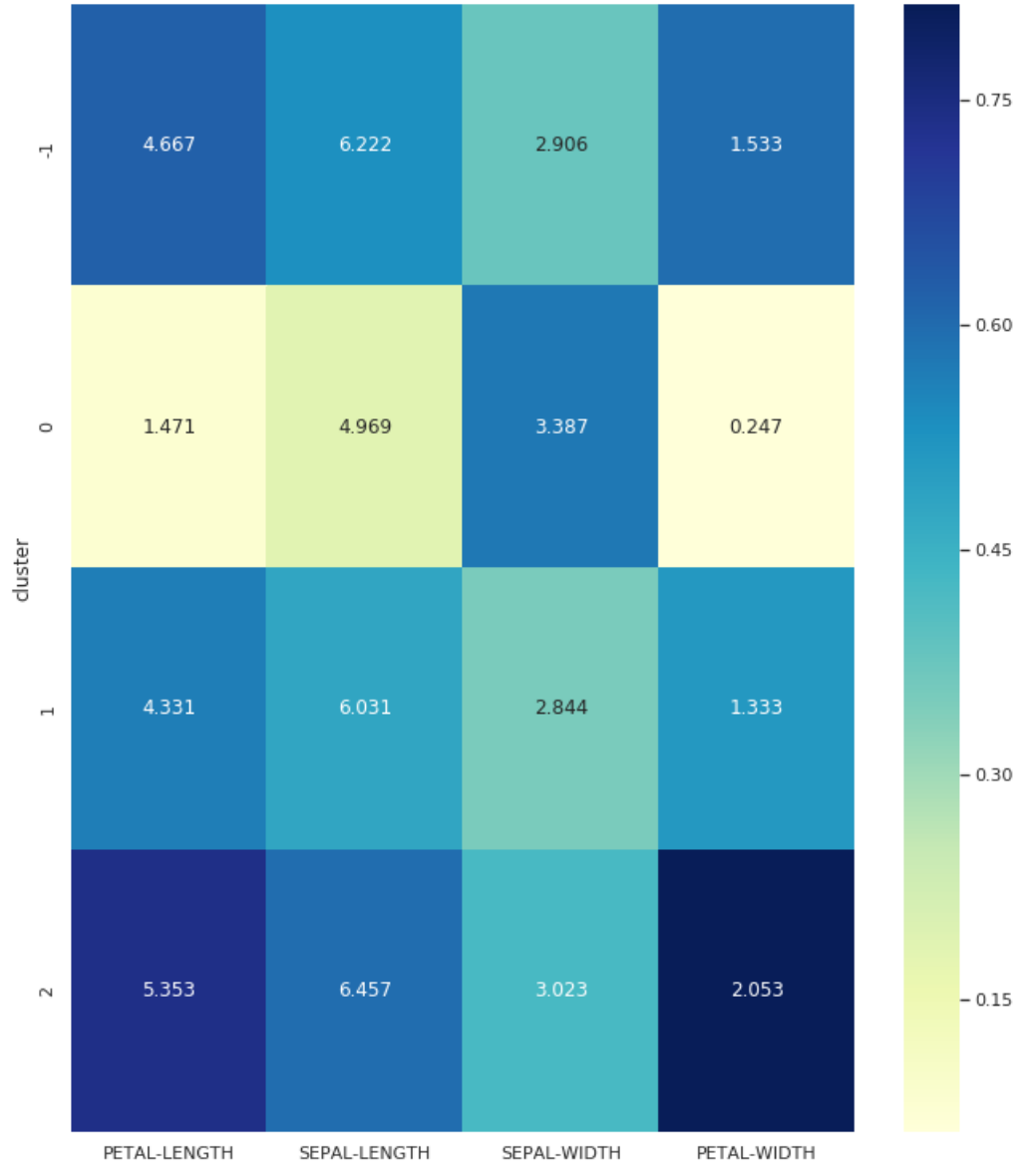
DBSCAN

Para DBSCAN, se ha utilizado el siguiente código en python y se ha obtenido la siguiente agrupación de las muestras, donde el clúster -1 representa las muestras formadas por ruido:

```
DBSCAN(eps=0.12, min_samples=5)

cluster 0:   45 (30.00%)
cluster 1:   39 (26.00%)
ruido  -1:   36 (24.00%)
cluster 2:   30 (20.00%)
```


PETAL-LENGTH
SEPAL-LENGTH
SEPAL-WIDTH
PETAL-WIDTH
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
0.5
cluster
-1
0
1
2


cluster
-1
0
1
2
4.667
6.222
2.906
1.533
1.471
4.969
3.387
0.247
4.331
6.031
2.844
1.333
5.353
6.457
3.023
2.053
PETAL-LENGTH
SEPAL-LENGTH
SEPAL-WIDTH
PETAL-WIDTH
0.75
0.60
0.45
0.30
0.15

Mean Shift

Es una técnica de análisis de espacio de características no paramétrica para localizar los máximos de una función de densidad.

- Método iterativo que parte de una estimación inicial x.
- Define una función núcleo $K(x_i - x)$ que determina los pesos de los puntos cercanos para la reestimación media.

La media ponderada de la densidad en K es:

$$m(x) = \frac{\sum_{x_i \in N(x)} K(x_i - x) x_i}{\sum_{x_i \in N(x)} K(x_i - x)}$$

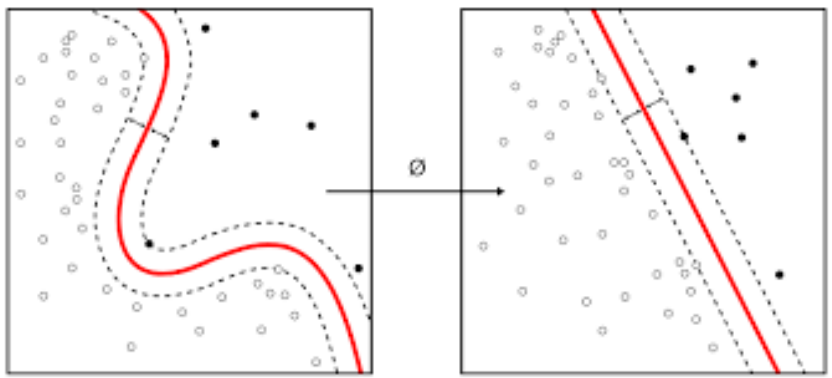
donde $N(x)$ es el vecindario de x, un conjunto de puntos donde $K(x_i) \neq 0$.

Mean Shift

La diferencia $m(x) - x$ se denomina Mean Shift.

El algoritmo establece $m(x) \rightarrow x$ y repite la estimación hasta que $m(x)$ converja.

No existe ninguna prueba de la convergencia del algoritmo en espacios de alta dimensión y el caso unidimensional tiene aplicaciones limitadas en el mundo real.



Mean Shift

Sea un conjunto de datos finito S embebido en el espacio euclídeo n-dimensional X. Sea K un núcleo plano con función característica:

$$K(x) = \begin{cases} 1 \ si \ ||x|| \leq \lambda \\ 0 \ si \ ||x|| > \lambda \end{cases}$$

En cada iteración del algoritmo, se establece $m(x) \longrightarrow x$ para todo $s \in S$ a la vez.

En un conjunto pequeño, estimaremos la función de densidad como:

$$f(x) = \sum_i K(x - x_i) = \sum_i k \frac{||x - x_i||^2}{h^2}$$

donde x_i son las muestras de entrada y k la función núcleo y h es el *bandwidth*.

Mean Shift

Una vez calculado $f(x)$ buscamos sus máximos locales utilizando el ascenso de gradiente o alguna otra técnica de optimización.

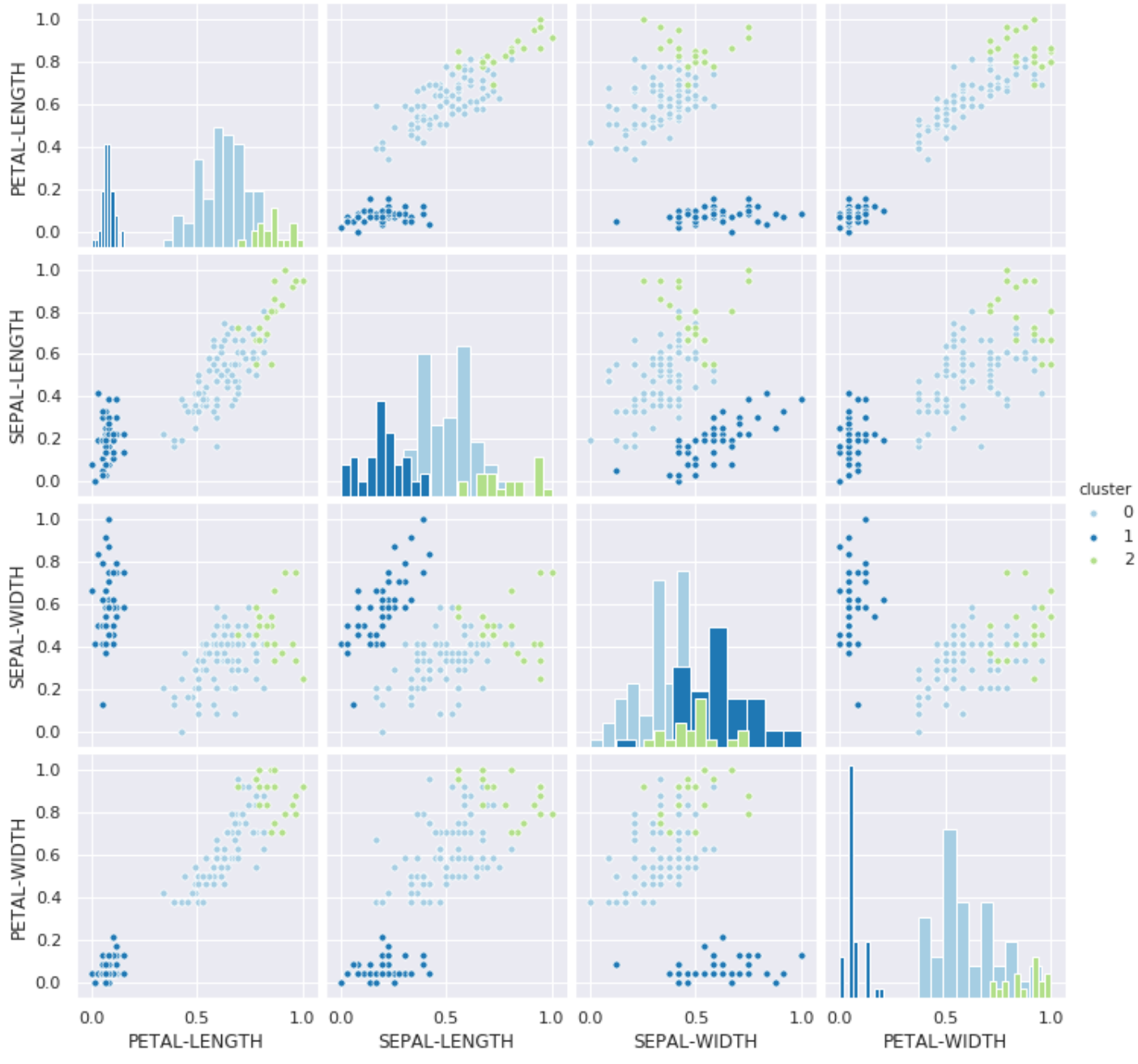
En problemas con grandes dimensiones, se usa la técnica del reinicio de gradiente descendiente múltiple, la cual empieza desde un máximo local y_k y calcula su aproximación $f(x)$ avanzando en esa dirección.

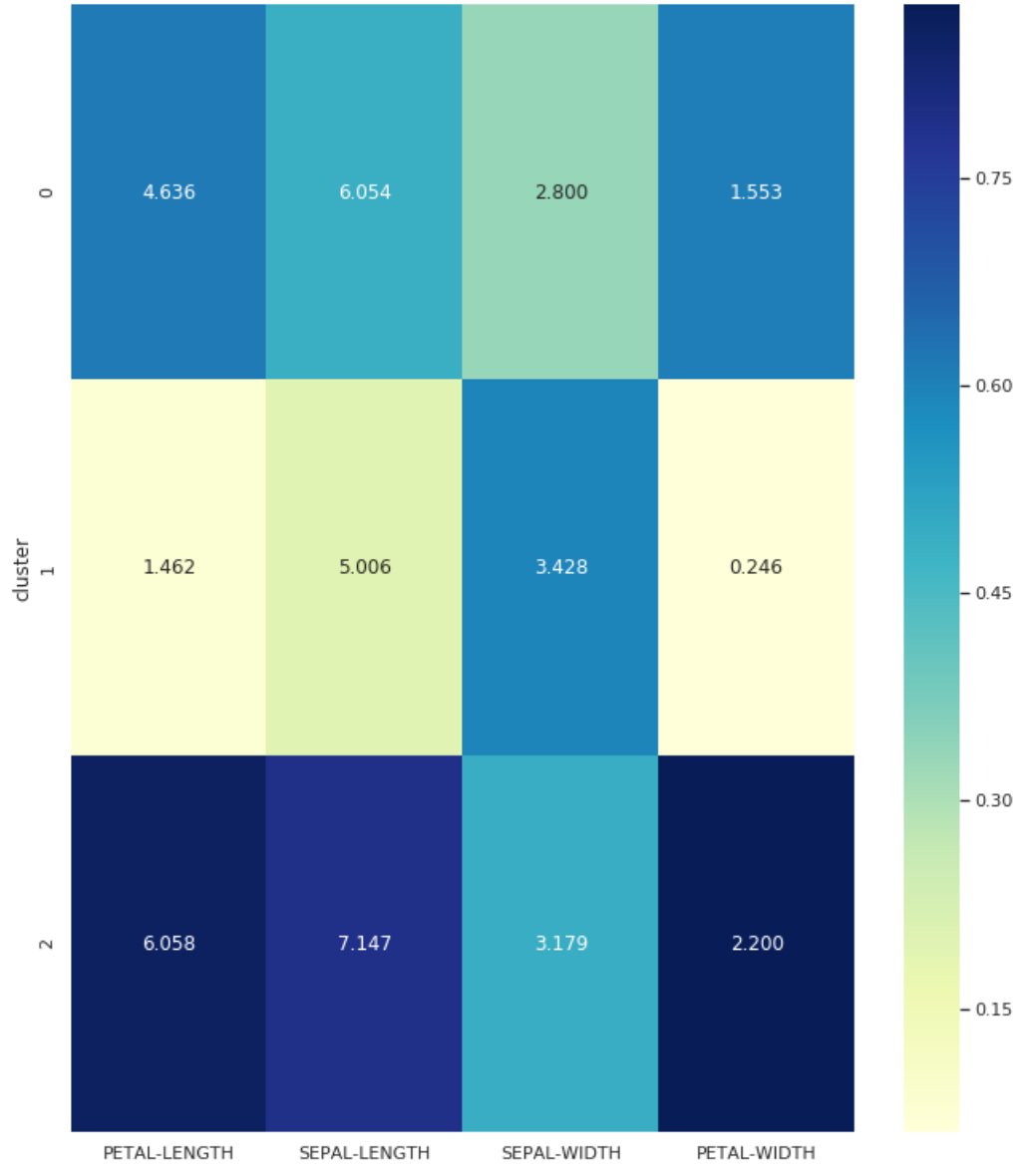
Mean Shift

Para Mean Shift, se ha utilizado el siguiente código en python y se ha obtenido la siguiente agrupación de las muestras:

```
MeanShift(bandwidth=estimate_bandwidth(X_normal,
          quantile=0.67, n_samples=400))
```

```
cluster 0: 81 (54.00%)
cluster 1: 50 (33.33%)
cluster 2: 19 (12.67%)
```


PETAL-LENGTH
SEPAL-LENGTH
SEPAL-WIDTH
PETAL-WIDTH
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
0.5
cluster
0
1
2


cluster
0
1
2
4.636
6.054
2.800
1.553
1.462
5.006
3.428
0.246
6.058
7.147
3.179
2.200
PETAL-LENGTH
SEPAL-LENGTH
SEPAL-WIDTH
PETAL-WIDTH
0.75
0.60
0.45
0.30
0.15

Referencias I


Chire, *Cluster analysis with optics on a density-based data set.*, `https://commons.wikimedia.org/wiki/File:OPTICS-Gaussian-data.svg`, October 2011.


Understanding data mining clustering methods.