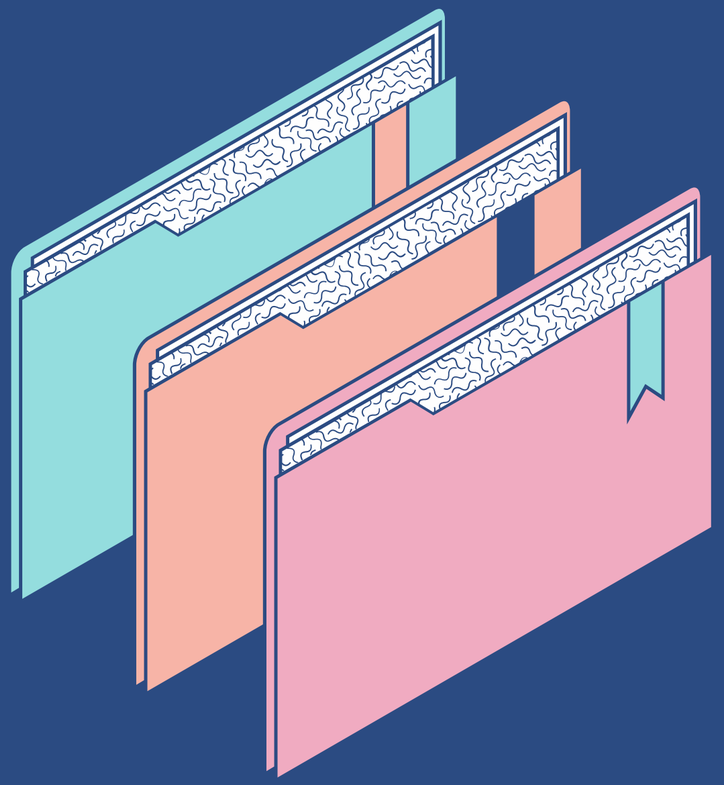
UNIVERSIDAD DE COSTA RICA
FACULTAD DE INGENIERÍAS
ESCUELA DE CIENCIAS DE LA
COMPUTACIÓN E INFORMÁTICA

Grupo ZZZ:
Nathalie Alfaro Quesada - B90221
José Pablo Mora Cubillo - B75044

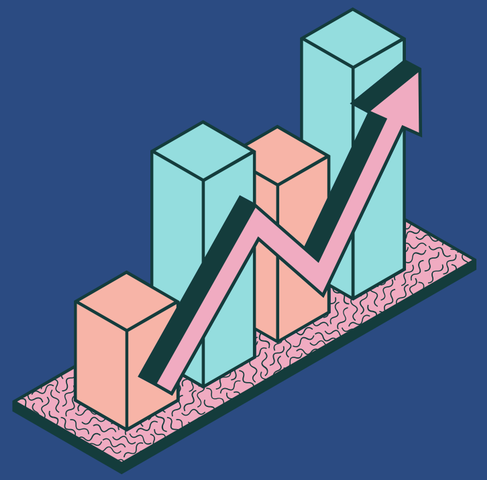
CI - 0124 Computabilidad y Complejidad
II Semestre, 2024



TAREA PROGRAMADA 2

ALGORITMO DE AGRUPAMIENTO EN DATOS DE CÉLULAS

CLUSTERING



Técnica utilizada en el análisis de datos para agrupar un conjunto de objetos en grupos (o clusters) de manera que los objetos dentro de un mismo grupo sean más similares entre sí que con los objetos de otros grupos.

Considerados *NP-Hard*.

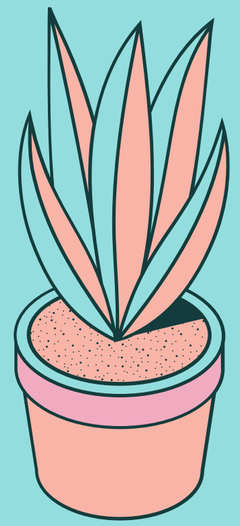
ANEUPLOIDÍAS

Alteraciones cromosómicas que se caracterizan por la ganancia o pérdida de cromosomas completos o segmentos cromosómicos.

Frecuentes en el cáncer.

Número de copias (CN) a nivel de gen en condiciones normales este valor debería ser de 2.

Datos de CN de 718 genes implicados en cáncer para 1398 líneas celulares cancerígenas.



OBJETIVO

Busca agrupar estas líneas celulares en grupos de acuerdo a similitudes en los valores de CN, por lo cual se va a utilizar algoritmos de agrupamiento.

IMPORTANCIA

Se puede hipotetizar que las líneas celulares con patrones parecidos de CN tienen comportamientos similares, por ejemplo, sensibilidad al mismo tipo de fármacos.

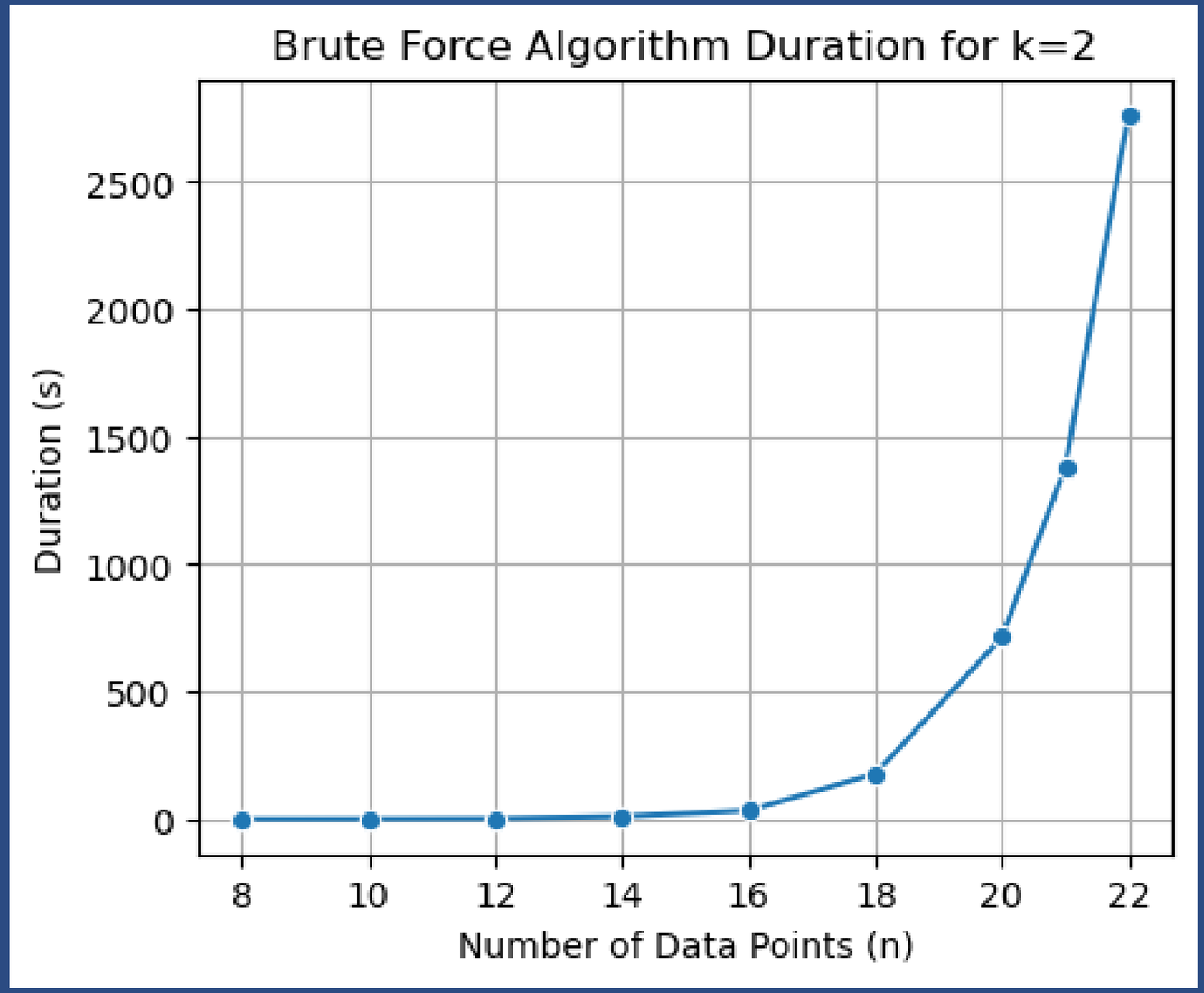
DATOS

symbol model_id	ABCB1	ABI1	ABL1	ABL2	ACKR3	ACSL3	ACVR1	ACVR2A	AFDN	AFF1	...	ZNF208	ZNF331	ZNF384	ZNF429	ZNF521	ZNF626
SIDM00001	3.0000	2.0000	3.0000	2.0000	1.903779	2.0000	2.0000	2.5000	1.0000	2.0000	...	1.5000	1.0000	2.0000	1.5000	2.0000	1.5000
SIDM00002	3.0000	3.0000	3.0000	3.0000	3.000000	3.0000	3.0000	3.0000	2.0000	3.0000	...	3.0000	3.0000	3.0000	3.0000	3.0000	3.0000
SIDM00003	4.0000	3.0000	3.0000	3.0000	3.000000	3.0000	3.0000	3.0000	2.0000	2.0000	...	3.0000	3.0000	3.0000	3.0000	3.0000	3.0000
SIDM00008	5.0000	3.0000	2.0000	4.0000	4.000000	4.0000	4.0000	5.0000	3.0000	3.0000	...	3.0000	3.0000	3.0000	3.0000	4.0000	3.0000
SIDM00011	7.0000	3.0000	3.0000	4.0000	4.000000	4.0000	4.0000	4.0000	3.0000	3.0000	...	2.0000	3.0000	3.0000	2.0000	3.0000	2.0000
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
SIDM02076	3.8307	2.0521	4.2114	3.2612	3.079400	3.0782	3.1249	3.1249	2.9867	3.1873	...	3.3713	3.7299	3.8227	3.3713	3.6534	3.3713
SIDM02077	2.9821	2.4088	2.1983	1.6317	1.636200	1.6362	1.6053	0.9731	1.6669	1.0377	...	0.9191	1.9538	2.0136	1.8329	1.9477	1.9803
SIDM02078	2.9376	1.9788	2.8560	2.0221	2.882000	2.8820	2.8694	2.8694	2.0289	2.9833	...	1.9748	3.7649	4.9985	1.9748	1.0058	1.9748
SIDM02079	2.9775	2.7970	3.8654	3.1729	1.998400	4.0418	1.9879	1.9879	2.0014	1.1020	...	1.9649	3.8902	3.6761	1.9649	3.0050	1.9649
SIDM02080	1.8506	1.9958	2.0053	2.1766	2.071200	2.0117	2.0267	2.0267	2.0100	1.0082	...	1.9783	2.0057	1.0433	1.9783	3.8952	1.9783

1398 rows × 718 columns

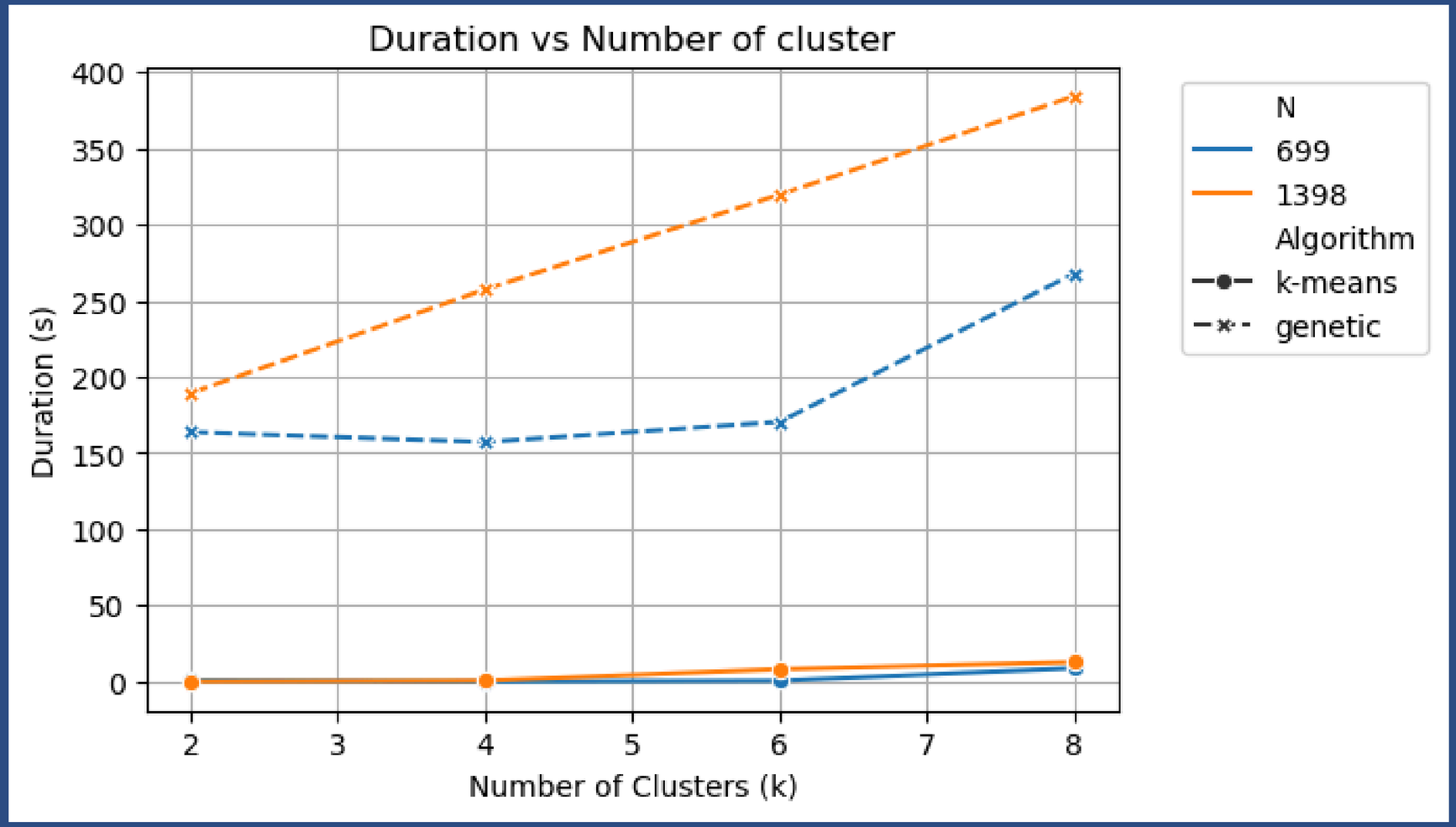
RENDIMIENTO DE FUERZA BRUTA

- Debe realizar k^n comparaciones, donde k es el número de clusters y n la cantidad de datos.
- No fue posible ejecutarlo para el set de datos completos (n = 1398)



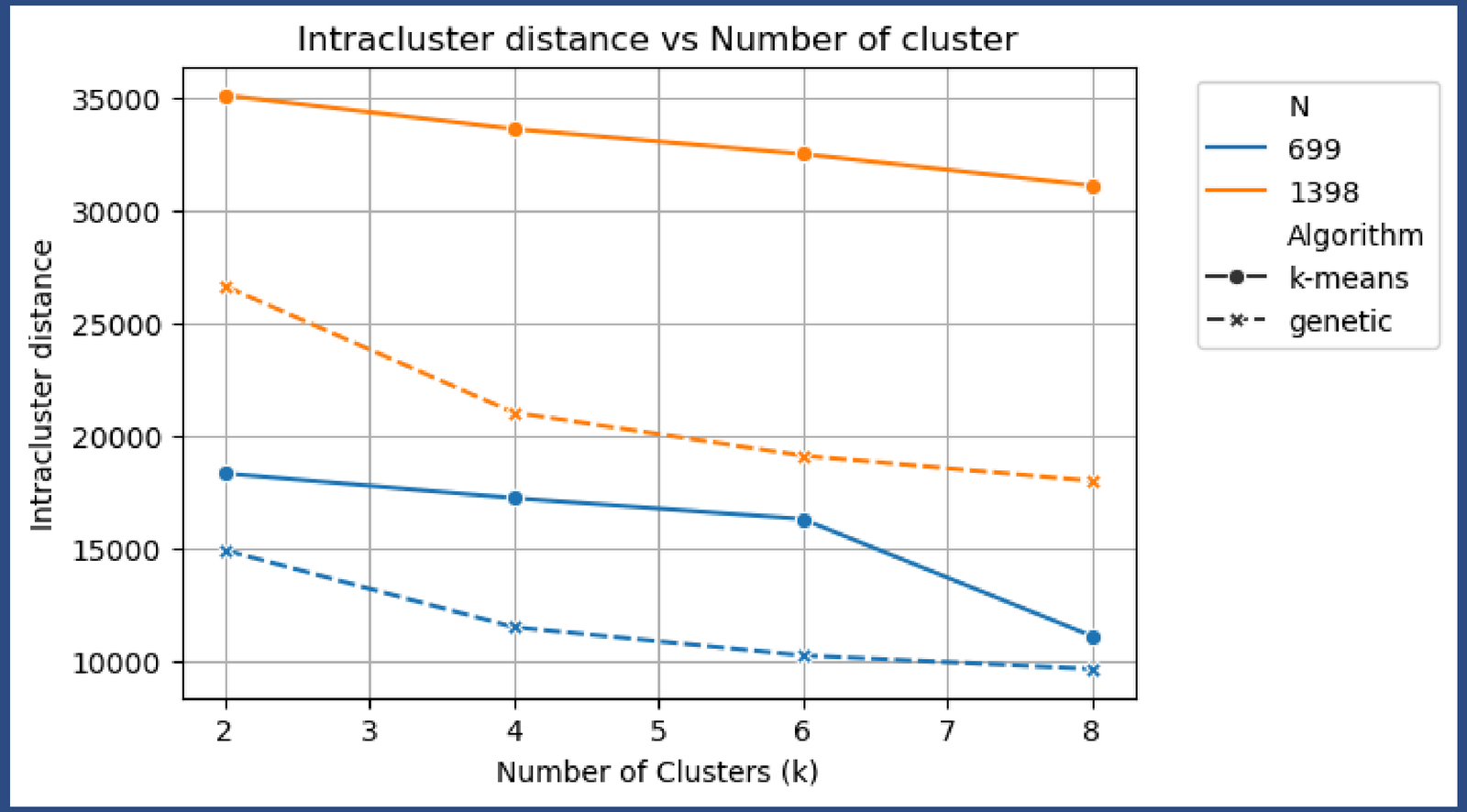
RENDIMIENTO DE K-MEANS Y ALG. GENÉTICO (1)

- Duración incrementa con el número de clusters.



RENDIMIENTO DE K-MEANS Y ALG. GENÉTICO (2)

- El algoritmo genético tiene una duración mayor, pero tiende a dat mejores resultados. K-means se queda atrapado en óptimos locales.



CONCLUSIONES

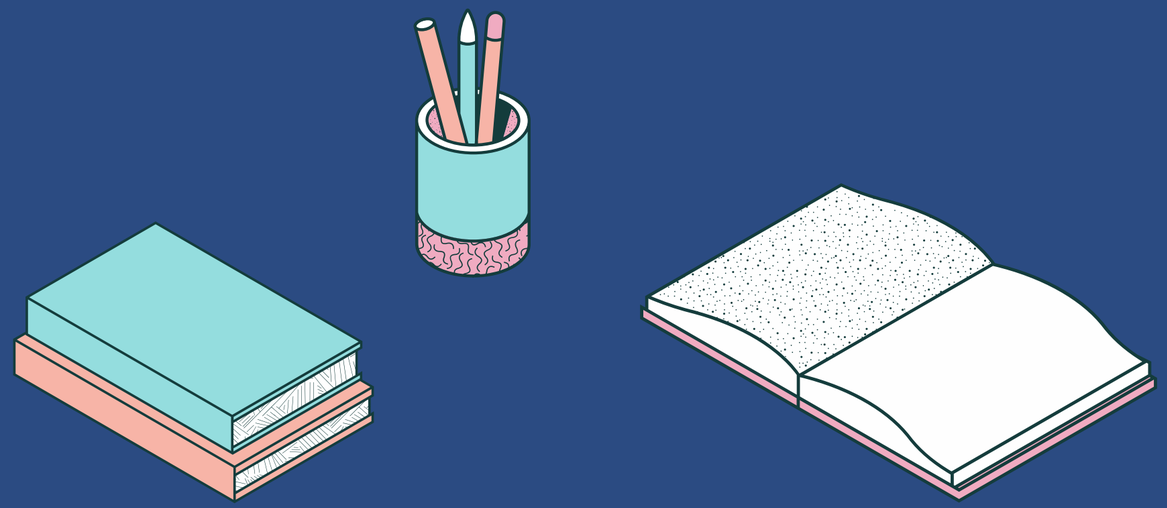
K-means: Rápido, grandes volúmenes de datos y menor complejidad computacional.

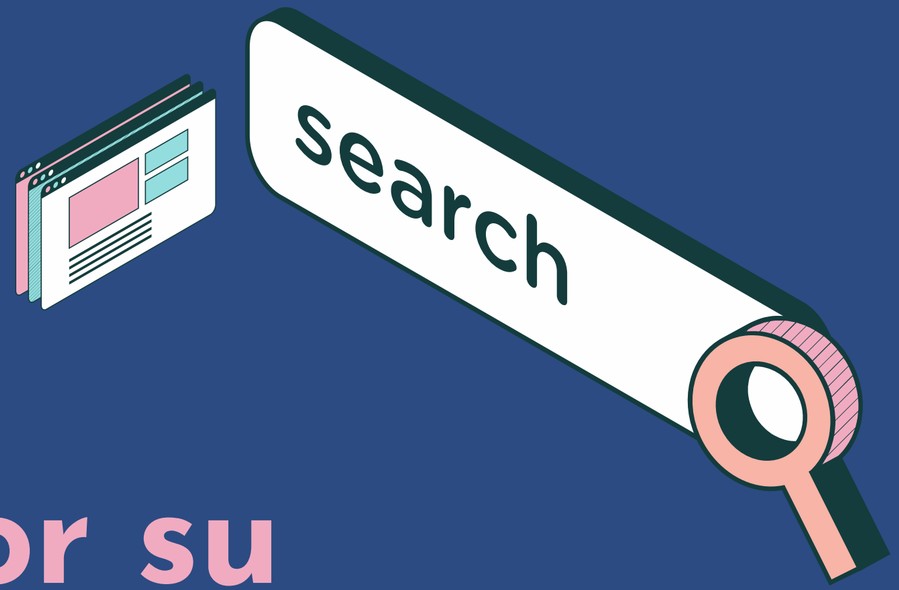
Algoritmo Genético: Calidad del agrupamiento, grupos definidos, menor distancia, pero alta complejidad computacional.

El algoritmo genético para calidad de los clústeres, pero se necesita suficientes recursos computacionales.

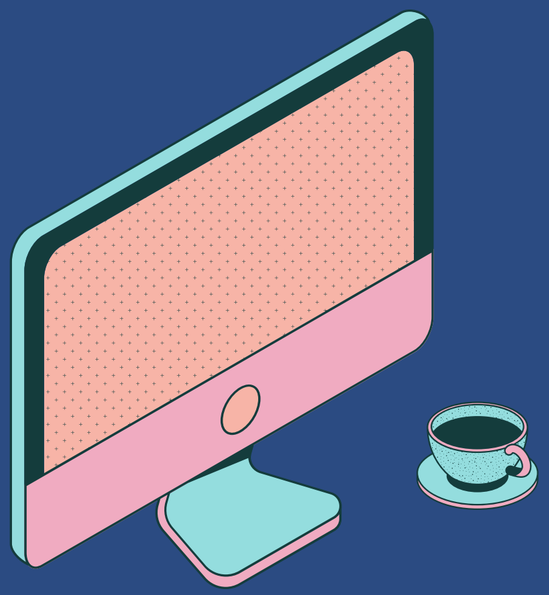
REFERENCIAS

Maulik, U., & Bandyopadhyay, S. (2000). Genetic algorithm-based clustering technique. *Pattern recognition*, 33(9), 1455-1465.





Gracias por su atención

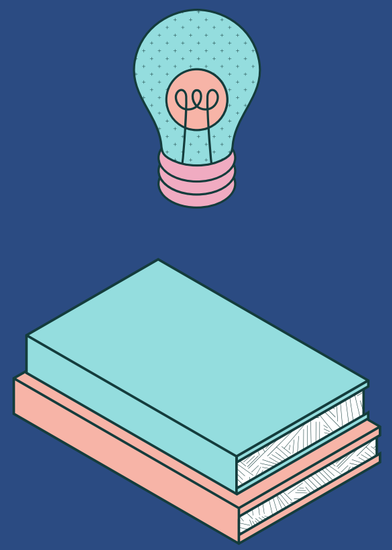


HEURÍSTICA

Algoritmo k-means (también llamado algoritmo de Lloyd).

Algoritmo iterativo.

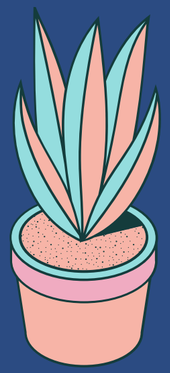
Problemas de agrupamiento y que se puede quedar atrapado en óptimos locales.



Se reciben los datos y un valor k que representa la cantidad de grupos a generar y la primera iteración k centroides aleatorios y cada entrada de los datos se asigna al cluster cuyo centroide se encuentra más cerca según una distancia euclidiana.

K-MEANS

1. Inicializar los centroides, ya sea aleatoriamente o seleccionando puntos al azar del conjunto de datos.
2. Asignar cada punto al cluster cuyo centroide esté más cercano, utilizando la distancia euclidiana.
3. Recalcular los centroides de los clusters, donde el nuevo centroide estará formado por los promedios por dimensión de cada entrada presente en el cluster.
4. Repetir los pasos de (2) y (3) hasta que las asignaciones de los puntos de datos ya no cambien significativamente.



METAHEURÍSTICA

Algoritmos genéticos para clustering, basándonos en Maulik y Bandyopadhyay (2000).

Se asume que el usuario va a brindar la cantidad k de clusters en los que se deben agrupar los datos.

Empleando una distancia euclidiana.

Espacio de búsqueda consiste en todos los posibles valores que van a tomar los k centroides, el cromosoma va a estar formado por estos mismos valores.