OCE 313
TÉCNICAS DE ANÁLISIS NO PARAMÉTRICO

CLASE 12 – Análisis de cluster

Dr. José Gallardo

Junio 2021

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE VALPARAÍSO

Contenidos de la clase

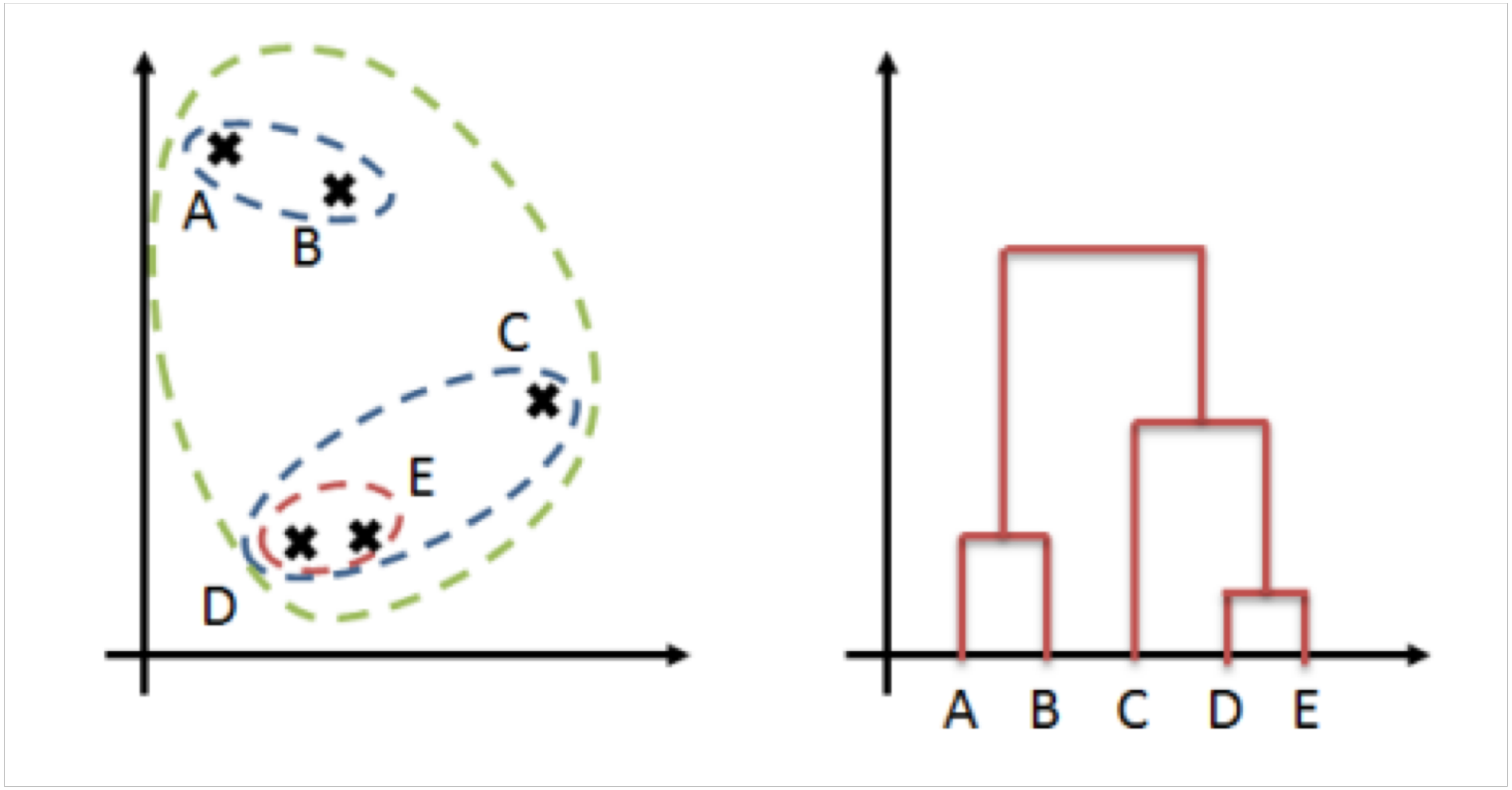
- ¿Qué son los análisis de cluster?
- Clasificación: jerárquico v/s no jerárquico
- Elaborar análisis de cluster jerárquico manual
- Elaborar análisis de cluster jerárquico y no jerárquico con R

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE VALPARAÍSO

¿Qué son los análisis de cluster?

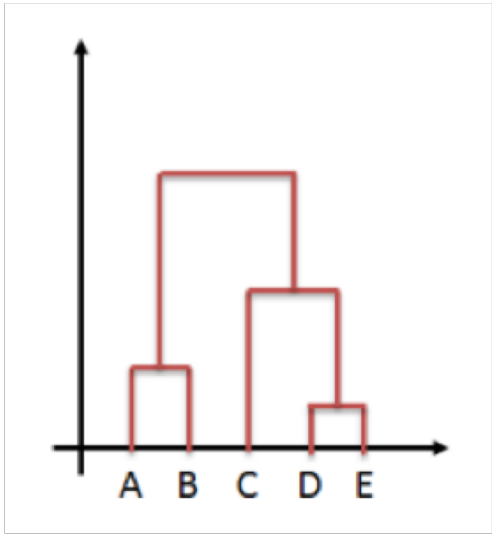
Análisis de cluster

Son herramientas de exploración de datos que permiten agrupar y visualizar datos multivariados con base a su similitud.

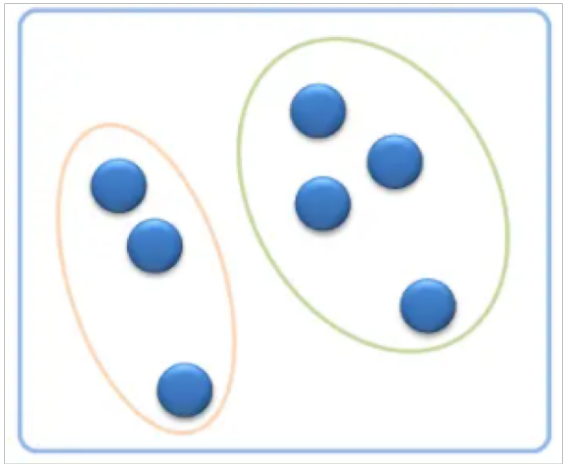


Clasificación de análisis de cluster.

Jerárquico:
Los grupos se fusionan sucesivamente siguiendo una jerarquía de homogeneidad, la cual decrece a medida que se agregan más elementos al grupo.



No jerárquico:
Se forman grupos homogéneos sin establecer relaciones o jerarquía entre ellos.



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE VALPARAÍSO

Métodos para análisis jerárquico

¿Qué hace el algoritmo estándar?

1.- Agrupa dos elementos por su similitud.

2.- Recalcula la matriz de distancia (muchas opciones).

3.- Vuelve a punto 1.

4.- Finaliza cuando todos los elementos han sido asignados a cluster.

¿Cómo recalculo la matriz?:

- Método de distancia máxima , vecino más lejano o Enlace completo.
- Método de distancia mínima, vecino más próximo o Enlace simple.
- Método de **agrupación de vinculación inter-grupo** o *unweighted Pair-group arithmetic averages* (UPGMA).
- Muchos más.

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE VALPARAÍSO

Métodos para análisis no jerárquico

Métodos para análisis No jerárquico:

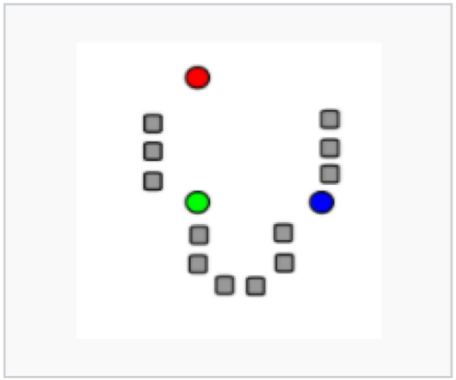
- k-means
- Muchos más.

¿Qué hace el algoritmo k-means?

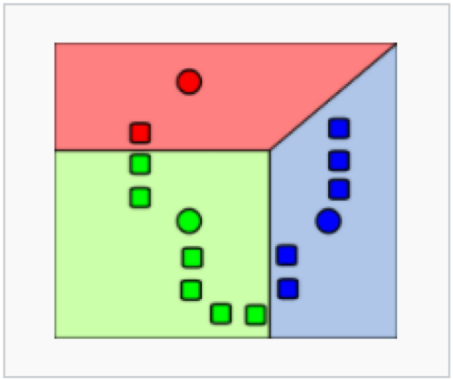
1. Se crea un conjunto inicial de k centroides (lo define el investigador).
2. Asigna cada elemento al grupo con la media más cercana.
3. Calcula un nuevo centroide para cada grupo.
4. Finaliza cuando las asignaciones no cambian

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE VALPARAÍSO

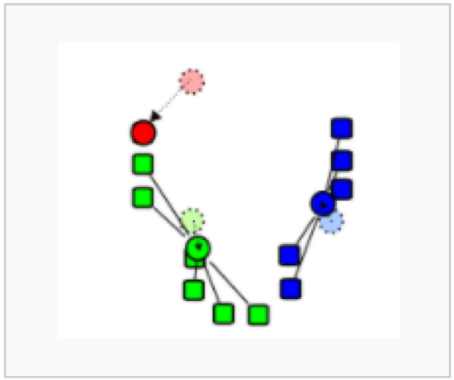
Diagrama de algoritmo k-means



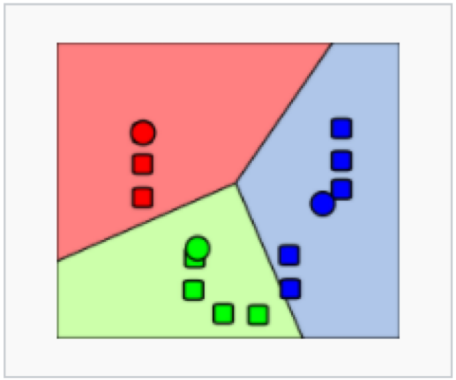
1) *k* centroides iniciales (en este caso *k*=3) son generados aleatoriamente dentro de un conjunto de datos (mostrados en color).



2) *k* grupos son generados asociándole el punto con la media más cercana. La partición aquí representa el diagrama de Voronoi generado por los centroides.



3) EL centroide de cada uno de los *k* grupos se recalcula.



4) Pasos 2 y 3 se repiten hasta que se logre la convergencia.

https://es.wikipedia.org/wiki/K-medias

Ventajas y desventajas

Jerárquico

Ventajas:

- No requiere especificar grupos al inicio.

Desventajas:

- Difícil decidir que grupos son relevantes y cuales no.
- Difícil de interpretar cuando existen muchos elementos.

No jerárquico:

Ventajas:

- Útil cuando existen muchos elementos.

Desventajas:

- El número de cluster que se define al inicio, podría no ser el adecuado.

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE VALPARAÍSO

Análisis de cluster jerárquico manual

Datos: Presencia / ausencia de especies en 7 sitios.

¿Cuán similares son las muestras entre si?
¿Qué muestras pertenecen a una variable latente categórica?

Samples	Species									
	sp1	*sp2*	*sp3*	*sp4*	*sp5*	*sp6*	*sp7*	*sp8*	*sp9*	*sp10*
A	1	1	1	0	1	0	0	1	1	1
B	1	1	0	1	1	0	0	0	0	1
C	0	1	1	0	1	0	0	1	0	0
D	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0
E	1	1	1	0	1	0	1	1	1	0
F	0	1	0	1	1	0	0	0	0	1
G	0	1	1	0	1	1	0	1	1	0

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE VALPARAÍSO

Fundación BBVA, 2014 © All rights reserved

Conteo de similitud entre A y B

Sitio	*sp1*	*sp2*	*sp3*	*sp4*	*sp5*	*sp6*	*sp7*	*sp8*	*sp9*	*sp10*
A	1	1	1	0	1	0	0	1	1	1
B	1	1	0	1	1	0	0	0	0	1

Co-presencias (4), Co-ausencias (2), no coincidentes (4)

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE VALPARAÍSO

Fundación BBVA, 2014 © All rights reserved

Índice de Jaccard

Índice de Similitud de Jaccard es muy utilizado en <u>Oceanografía</u> para expresar el grado en el que dos muestras son semejantes por las especies presentes en ellas.

Co-presencias (a), Co-ausencias (d)
no coincidentes (b + c)

		Sample 2		
		1	0	
Sample 1	1	a	b	$a+b$
	0	c	d	$c+d$
		$a+c$	$b+d$	$a+b+c+d$

Índice de Jaccard (disimiliridad)

Jaccard index dissimilarity: $$\frac{b+c}{a+b+c} = 1 - \frac{a}{a+b+c}$$

Sitio	sp1	sp2	sp3	sp4	sp5	sp6	sp7	sp8	sp9	sp10
A	1	1	1	0	1	0	0	1	1	1
B	1	1	0	1	1	0	0	0	0	1

Sitio	sp1	sp2	sp3	sp4	sp5	sp6	sp7	sp8	sp9	sp10
A	1	1	1	0	1	0	0	1	1	1
F	0	1	0	1	1	0	0	0	0	1

Sitio	sp1	sp2	sp3	sp4	sp5	sp6	sp7	sp8	sp9	sp10
B	1	1	0	1	1	0	0	0	0	1
F	0	1	0	1	1	0	0	0	0	1

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE VALPARAÍSO

Tabla Índice de Jaccard

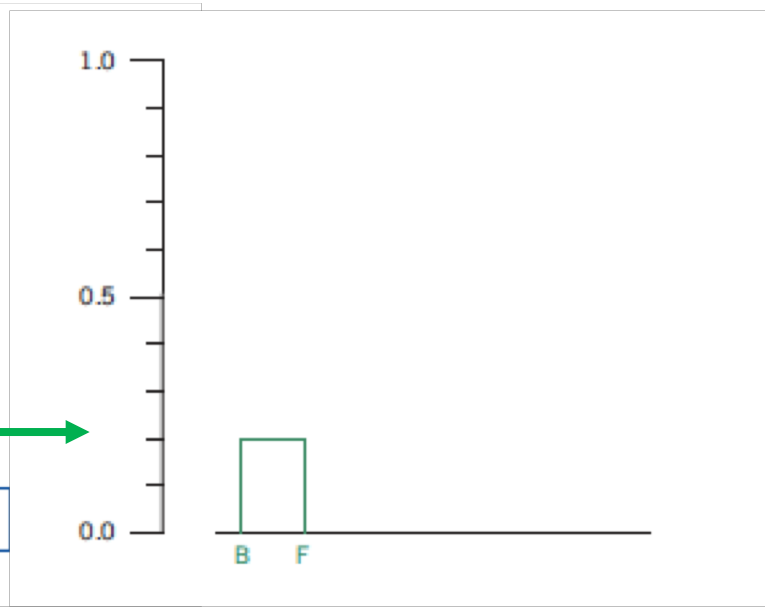
SAMPLES	A	B	C	D	E	F	G
A	0.000	0.500	0.429	1.000	0.250	0.625	0.375
B	0.500	0.000	0.714	0.833	0.667	0.200	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.429	0.667	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	1.000	0.800	0.857
E	0.250	0.667	0.429	1.000	0.000	0.778	0.375
F	0.625	0.200	0.667	0.800	0.778	0.000	0.750
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.375	0.750	0.000

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE VALPARAÍSO

Agrupamiento jerárquico: paso 1

Construcción del primer nodo:
Mayor similitud entre B y F

SAMPLES	A	B	C	D	E	F
A	0.000	0.500	0.429	1.000	0.250	0.625
B	0.500	0.000	0.714	0.833	0.667	0.200
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.429	0.667
D	1.000	0.833	1.000	0.000	1.000	0.800
E	0.250	0.667	0.429	1.000	0.000	0.778
F	0.625	0.200	0.667	0.800	0.778	0.000
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.375	0.750



Agrupamiento jerárquico: paso 2

SAMPLES	A	B	C	D	E	F	G
A	0.000	0.500	0.429	1.000	0.250	0.625	0.375
B	0.500	0.000	0.714	0.833	0.667	0.200	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.429	0.667	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	1.000	0.800	0.857
E	0.250	0.667	0.429	1.000	0.000	0.778	0.375
F	0.625	0.200	0.667	0.800	0.778	0.000	0.750
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.375	0.750	0.000

SAMPLES	A	(B,F)	C	D	E	G
A	0.000	0.625	0.429	1.000	0.250	0.375
(B,F)	0.625	0.000	0.714	0.833	0.778	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.429	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	1.000	0.857
E	0.250	0.778	0.429	1.000	0.000	0.375
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.375	0.000

Construcción nueva matriz usando método de distancia máxima.

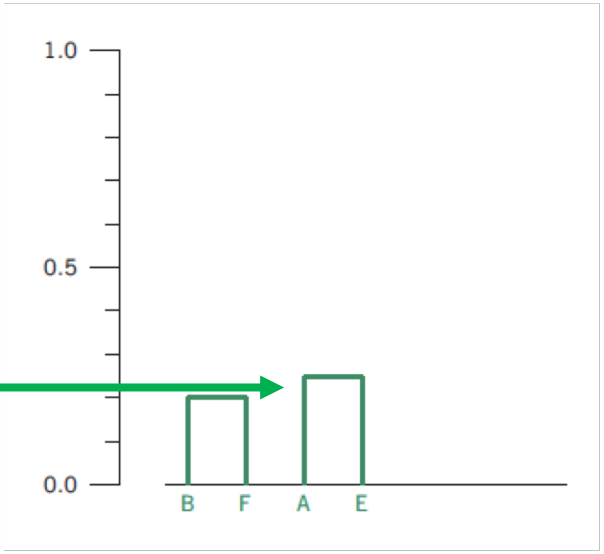
(B-F)-A
(B-F)-C
(B-F)-D
(B-F)-E
(B-F)-G

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE VALPARAÍSO

Agrupamiento jerárquico: paso 3

Construcción del segundo nodo:
Mayor similitud entre A y E

SAMPLES	A	(B,F)	C	D	E	G
A	0.000	0.625	0.429	1.000	0.250	0.375
(B,F)	0.625	0.000	0.714	0.833	0.778	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.429	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	1.000	0.857
E	0.250	0.778	0.429	1.000	0.000	0.375
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.375	0.000



Agrupamiento jerárquico: paso 4

SAMPLES	A	(B,F)	C	D	E	G
A	0.000	0.625	0.429	1.000	0.250	0.375
(B,F)	0.625	0.000	0.714	0.833	0.778	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.429	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	1.000	0.857
E	0.250	0.778	0.429	1.000	0.000	0.375
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.375	0.000

SAMPLES	(A,E)	(B,F)	C	D	G
(A,E)	0.000	0.778	0.429	1.000	0.375
(B,F)	0.778	0.000	0.714	0.833	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	0.857
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.000

Construcción nueva matriz usando método de distancia máxima.

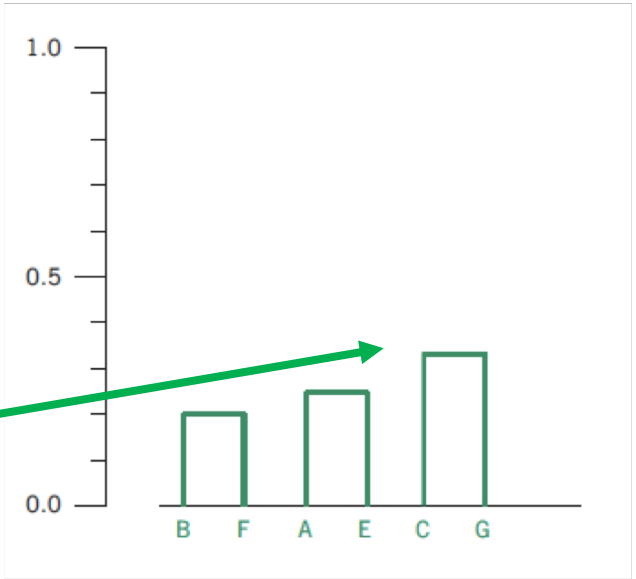
(A-E)-(B-F)
(A-E)-C
(A-E)-D
(A-E)-G

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE VALPARAÍSO

Agrupamiento jerárquico: paso 5

Construcción del tercer nodo:
Mayor similitud entre C y G

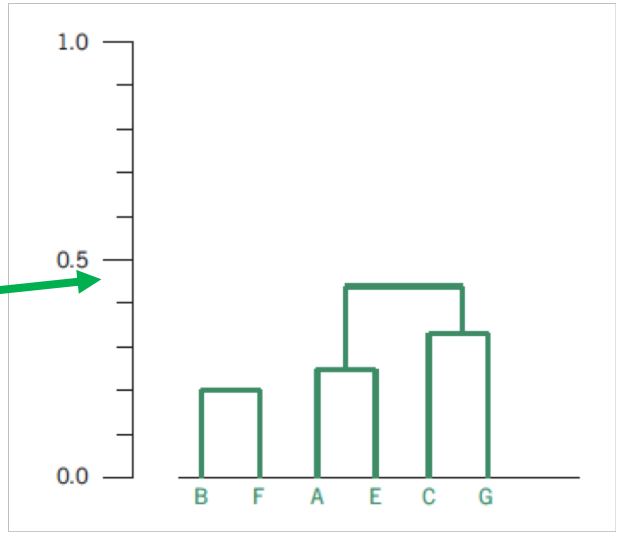
SAMPLES	(A,E)	(B,F)	C	D	G
(A,E)	0.000	0.778	0.429	1.000	0.375
(B,F)	0.778	0.000	0.714	0.833	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	0.857
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.000



Agrupamiento jerárquico: paso 6-7

Construcción del cuarto nodo:
Mayor similitud entre A-E y C-G

SAMPLES	(A,E)	(B,F)	(C,G)	D
(A,E)	0.000	0.778	0.429	1.000
(B,F)	0.778	0.000	0.778	0.833
(C,G)	0.429	0.778	0.000	1.000
D	1.000	0.833	1.000	0.000

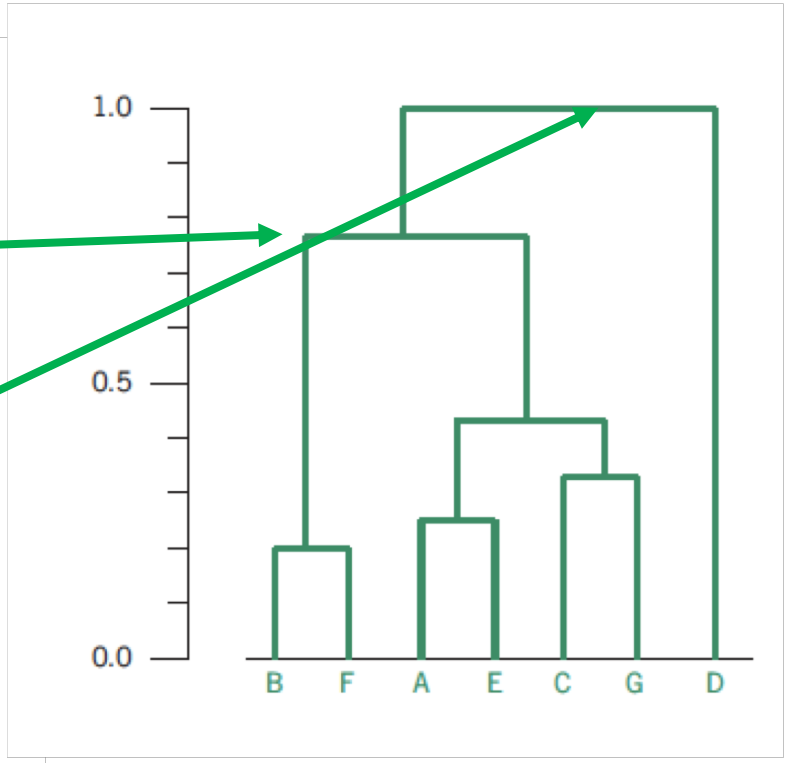


Agrupamiento jerárquico: paso 8-9

Construcción del quinto y sexto nodo: Mayor similitud entre A-E-C-G con B-F y entre estos con D.

SAMPLES	(A,E,C,G)	(B,F)	D
(A,E,C,G)	0.000	0.778	1.000
(B,F)	0.778	0.000	0.833
D	1.000	0.833	0.000

SAMPLES	(A,E,C,G,B,F)	D
(A,E,C,G,B,F)	0.000	1.000
D	1.000	0.000



Resumen de la clase

- Revisión de Análisis de clusters jerárquicos y no jerárquicos.

- Práctica de análisis de cluster manual y con R