dcc
CIENCIAS DE LA COMPUTACIÓN
UNIVERSIDAD DE CHILE

Curso DM
Clustering
Parte 3: Validación de Clusters

Primavera 2023

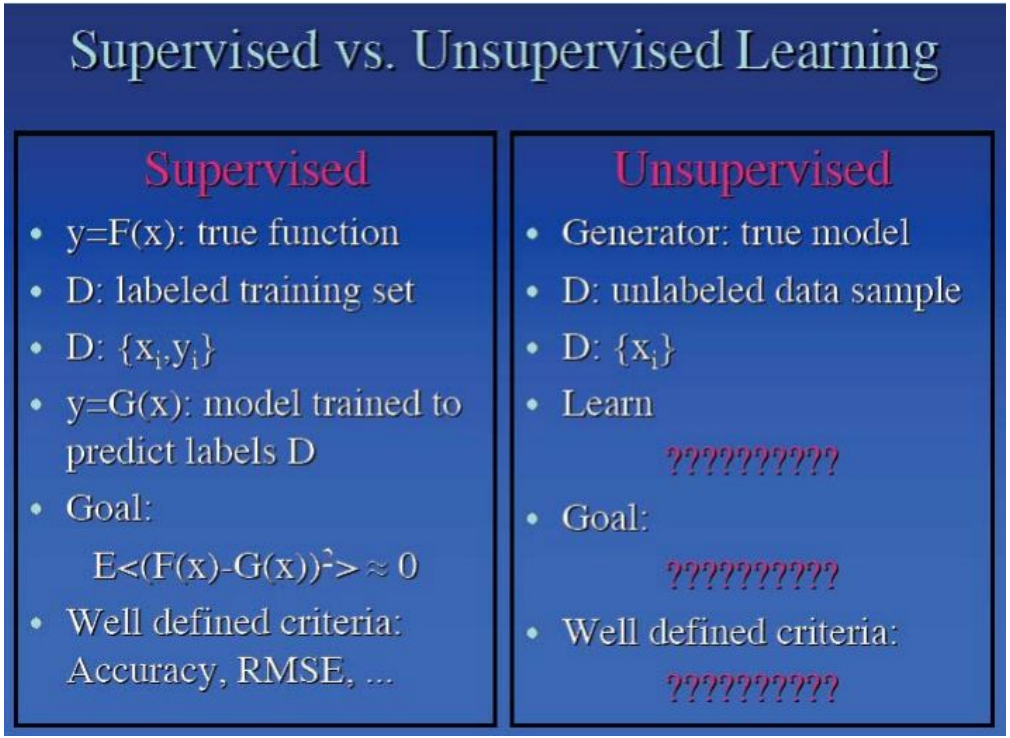
Profesoras: Jazmine Maldonado y Cinthia Sánchez

Basado en las slides de Bárbara Poblete

¿Es necesario validar los clusters?

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

Aprendizaje supervisado vs. no supervisado



Source: http://www.cs.put.poznan.pl/jstefanowski/sed/DM-7clusteringnew.pdf

¿Cómo saber si nuestros clusters son buenos?

- No hay una respuesta absoluta.
- Depende de la aplicación.
- ¿Entonces, para qué evaluar?
  - Clustering es muchas veces parte de un proceso exploratorio.
  - Evaluar parece innecesario en estos casos (pero no!).
  - Cada algoritmo parece necesitar su propio tipo de evaluación.
  - k-means: SSE, pero no funciona para DBSCAN.
  - Es esencial! Porque siempre podemos encontrar clusters (hasta en datos aleatorios).

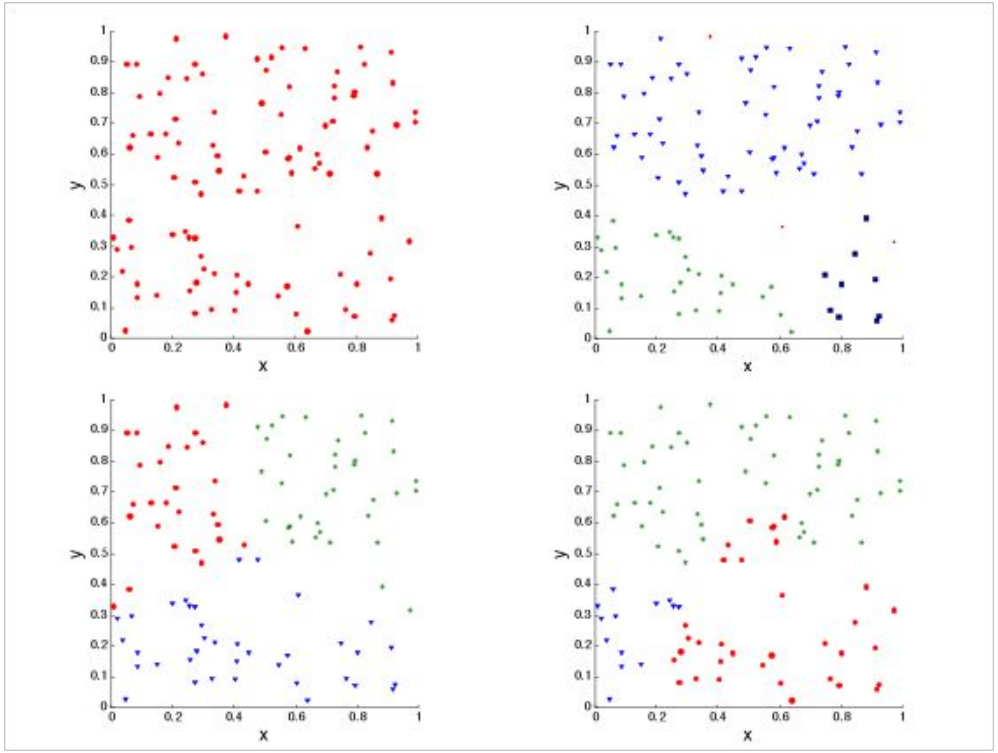
Evaluamos para:

- 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

PUNTOS ALEATORIOS

DBSCAN



K-MEANS

COMPLETE LINK

Aspectos de la validación

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

Medidas de validez

- **External Index** (Supervisado): Utiliza comparación con datos externos (pureza, entropía), para ver si el clustering se ajusta a una estructura externa.
- **Internal Index** (No-Supervisado): Sin datos externos (SSE), cohesión, separación.
- **Relative Index** (Relativo): Compara resultados de clustering o clusters, puede usar medidas anteriores.

Concepto: Matriz de similitud (conversamente: matriz de proximidad)

Table 1. Similarity matrix of the woody genera in the 21 dry to arid regions of the Neotropic. Jaccard index.

	chiquitania	sonora	chamela	coastdes	chilemed	perusouth	guanacaste	venezuela	chacoarg	cochab	patagonia	caatinga	tuichi	perunorth	serrarg	serrbol	prepuna	monte	puna	guajira	chaco
chiquitania	1	0,078	0,273	0,06	0,05	0,103	0,193	0,215	0,12	0,111	0,005	0,251	0,352	0,218	0,191	0,152	0,063	0,077	0,016	0,131	0,235
sonora	0,078	1	0,148	0,19	0,123	0,183	0,042	0,058	0,175	0,176	0,093	0,102	0,092	0,111	0,183	0,166	0,182	0,192	0,136	0,214	0,181
chamela	0,273	0,148	1	0,066	0,034	0,142	0,223	0,23	0,092	0,13	0	0,207	0,267	0,221	0,185	0,176	0,08	0,072	0,022	0,229	0,188
coastdes	0,06	0,19	0,066	1	0,33	0,237	0,033	0,037	0,155	0,295	0,159	0,075	0,077	0,086	0,209	0,207	0,296	0,296	0,188	0,132	0,128
chilemed	0,05	0,123	0,034	0,33	1	0,189	0,029	0,033	0,115	0,227	0,231	0,061	0,058	0,099	0,168	0,186	0,276	0,252	0,217	0,085	0,108
perusouth	0,103	0,183	0,142	0,237	0,189	1	0,052	0,077	0,167	0,358	0,086	0,139	0,131	0,3	0,317	0,42	0,342	0,236	0,135	0,184	0,193
guanacaste	0,193	0,042	0,223	0,033	0,029	0,052	1	0,322	0,074	0,033	0	0,195	0,153	0,142	0,095	0,067	0,027	0,038	0	0,147	0,134
venezuela	0,215	0,058	0,23	0,037	0,033	0,077	0,322	1	0,099	0,056	0	0,269	0,19	0,189	0,117	0,084	0,038	0,041	0,008	0,157	0,15
chacoarg	0,12	0,175	0,092	0,155	0,115	0,167	0,074	0,099	1	0,165	0,065	0,181	0,111	0,152	0,315	0,21	0,172	0,34	0,054	0,197	0,56
cochab	0,111	0,176	0,13	0,295	0,227	0,358	0,033	0,056	0,165	1	0,107	0,116	0,141	0,17	0,399	0,465	0,457	0,289	0,181	0,161	0,195
patagonia	0,005	0,093	0	0,159	0,231	0,086	0	0	0,065	0,107	1	0	0,014	0,019	0,058	0,077	0,155	0,191	0,298	0,027	0,043
caatinga	0,251	0,102	0,207	0,075	0,061	0,139	0,195	0,269	0,181	0,116	0	1	0,175	0,213	0,216	0,18	0,088	0,102	0,02	0,22	0,231
tuichi	0,352	0,092	0,267	0,077	0,058	0,131	0,153	0,19	0,111	0,141	0,014	0,175	1	0,262	0,228	0,184	0,087	0,102	0,024	0,156	0,184
perunorth	0,218	0,111	0,221	0,086	0,099	0,3	0,142	0,189	0,152	0,17	0,019	0,213	0,262	1	0,262	0,269	0,143	0,121	0,033	0,198	0,224
serrarg	0,191	0,183	0,185	0,209	0,168	0,317	0,095	0,117	0,315	0,399	0,058	0,216	0,228	0,262	1	0,586	0,282	0,289	0,093	0,212	0,372
serrbol	0,152	0,166	0,176	0,207	0,186	0,42	0,067	0,084	0,21	0,465	0,077	0,18	0,184	0,269	0,586	1	0,387	0,249	0,137	0,182	0,304
prepuna	0,063	0,182	0,08	0,296	0,276	0,342	0,027	0,038	0,172	0,457	0,155	0,088	0,087	0,143	0,282	0,387	1	0,411	0,28	0,15	0,186
monte	0,077	0,192	0,072	0,296	0,252	0,236	0,038	0,041	0,34	0,289	0,191	0,102	0,102	0,121	0,289	0,249	0,411	1	0,191	0,147	0,281
puna	0,016	0,136	0,022	0,188	0,217	0,135	0	0,008	0,054	0,181	0,298	0,02	0,024	0,033	0,093	0,137	0,28	0,191	1	0,045	0,05
guajira	0,131	0,214	0,229	0,132	0,085	0,184	0,147	0,157	0,197	0,161	0,027	0,22	0,156	0,198	0,212	0,182	0,15	0,147	0,045	1	0,253
chaco	0,235	0,181	0,188	0,128	0,108	0,193	0,134	0,15	0,56	0,195	0,043	0,231	0,184	0,224	0,372	0,304	0,186	0,281	0,05	0,253	1

Distancias comunes

Es común utilizar distancias métricas, como la distancia de Minkowski

- r=2, distancia Euclideana

$$p_{ij} = \left(\sum_{k=1}^{d} \left| x_{ik} - x_{jk} \right|^{r} \right)^{1/r}$$

- otras: Manhattan, y distancia no métrica, Jaccard, por ej.

- similitud coseno

$$\text{similarity} = \cos(\theta) = \frac{\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}}{\|\mathbf{A}\|\|\mathbf{B}\|} = \frac{\sum_{i=1}^{n} A_i B_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} A_i^2} \sqrt{\sum_{i=1}^{n} B_i^2}},$$

Validez usando correlación

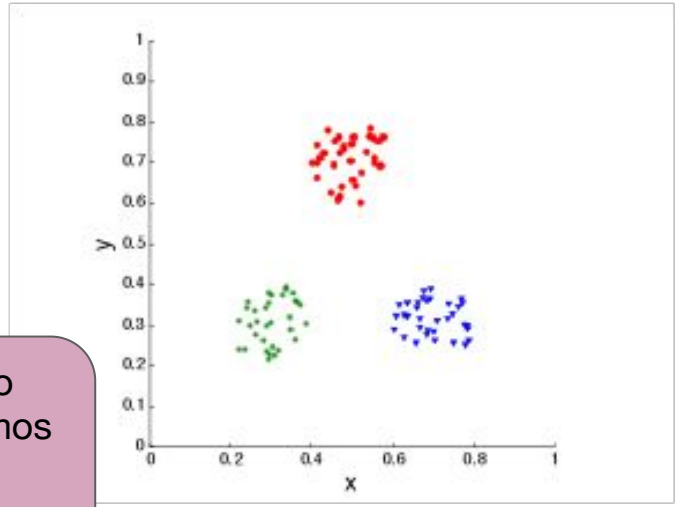
Comparamos 2 matrices:

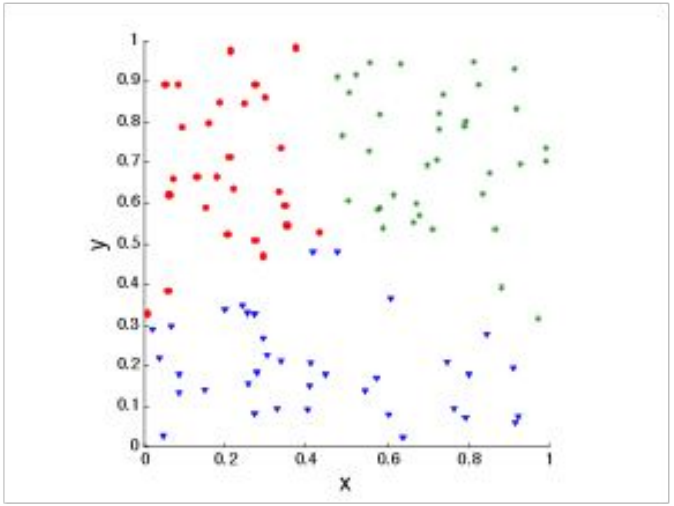
- **Matriz de incidencia** (nxn matriz idealizada usando pertenencia a clusters)
  - una fila y una columna por cada punto
  - un valor es 1 si los dos puntos coinciden en el mismo cluster
  - un valor es 0 si los dos puntos no coinciden en el mismo cluster
- **Matriz de proximidad** (nxn usando la distancia entre puntos)

Calculamos la correlación entre ambas (simétricas, sólo compara n(n-1)/2 veces) implica alta correlación indica que pts en el mismo cluster están cerca.

No es buena medida para algoritmos de clustering basados en densidad o continuidad.

Correlación usando k-means





Es negativo porque estamos utilizando distancia en vez de similitud

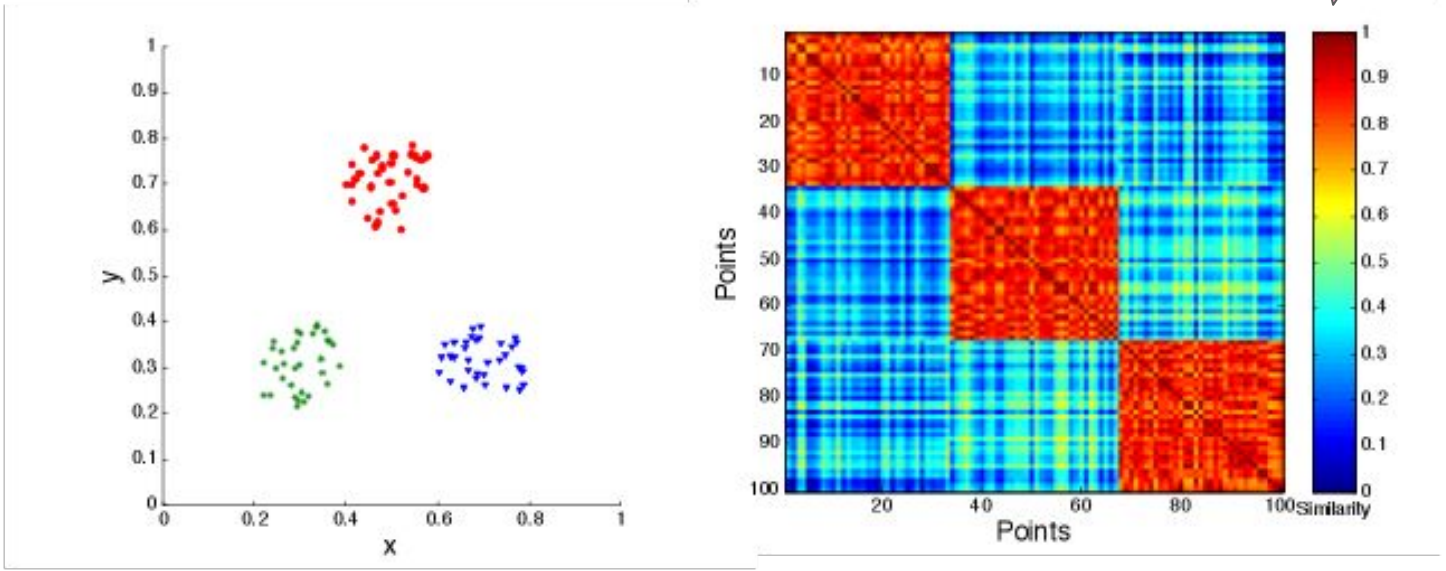
Corr = -0.9235

Corr = -0.5810

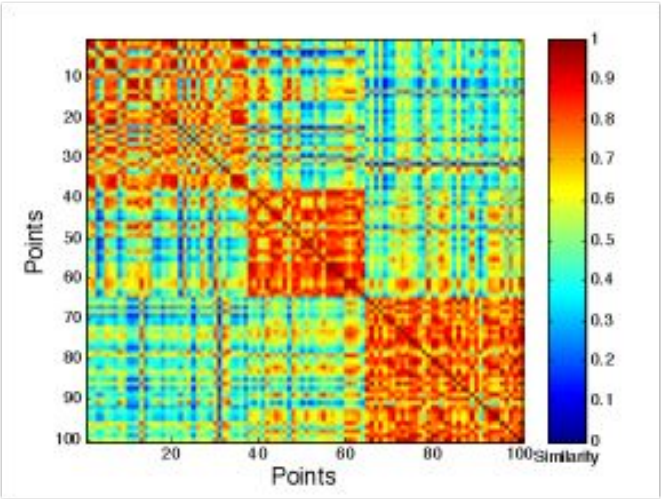
Enfoque visual

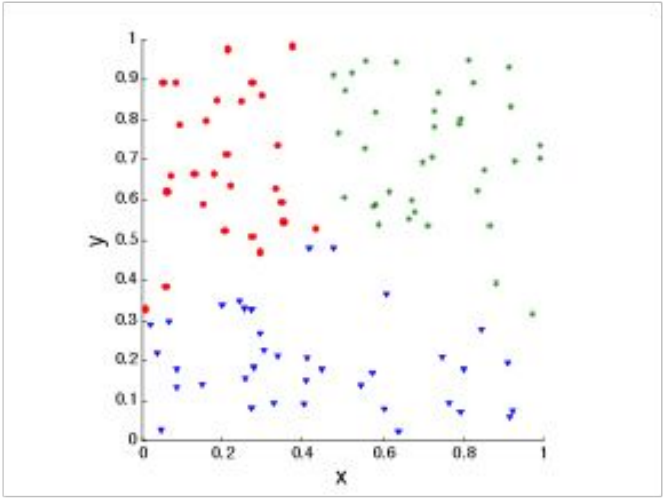
- Ordenar la matriz de similitud con respecto a etiquetas de clusters e inspeccionar visualmente

Visualizando la matriz de similitud (clusters reales)



Visualizando clusters sobre datos aleatorios

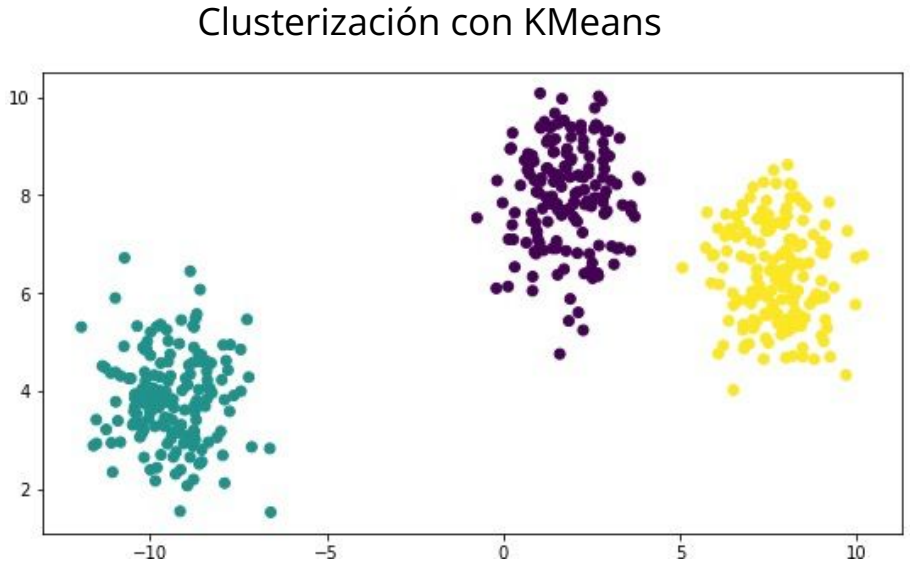


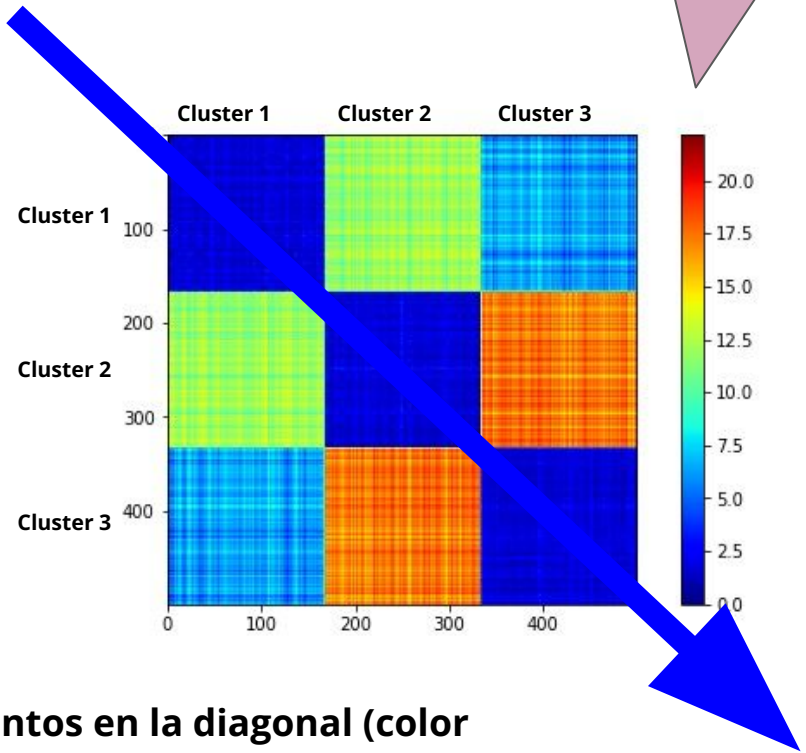


K-means

Matrices de similitud/proximidad

Distancia

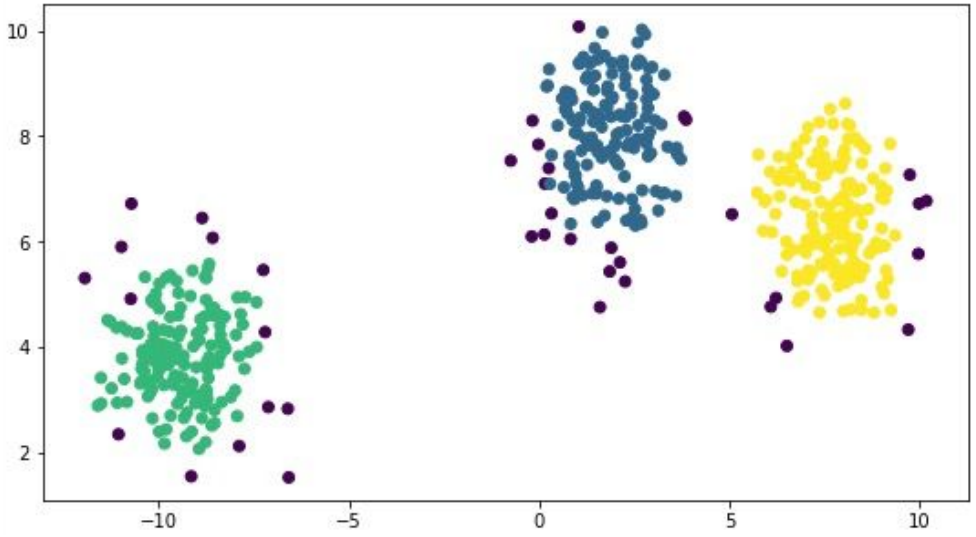


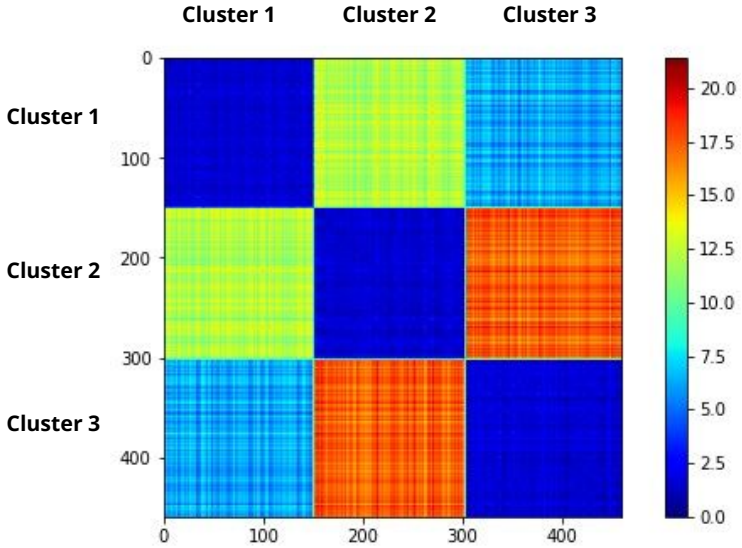


Mientras más cerca estén los puntos en la diagonal (color más homogéneo) los modelos tienden a ser mejores

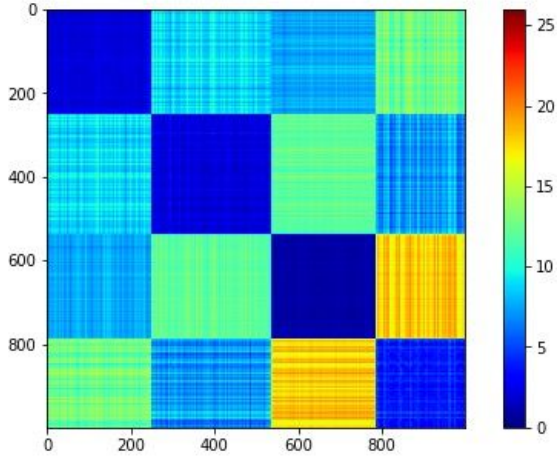
Matrices de similitud/proximidad

Clusterización con DBSCAN

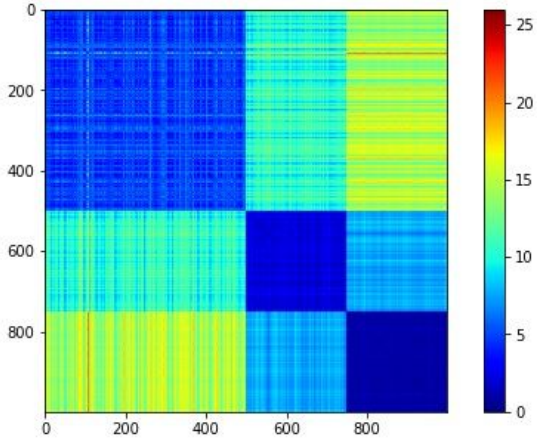




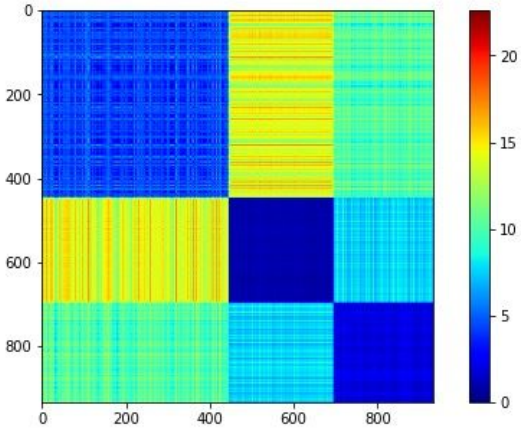
Comparando matrices de similitud



Modelo 1



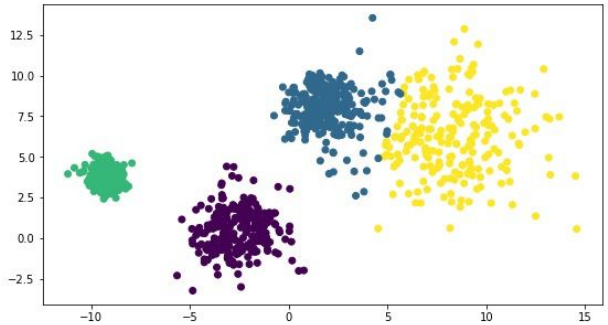
Modelo 2



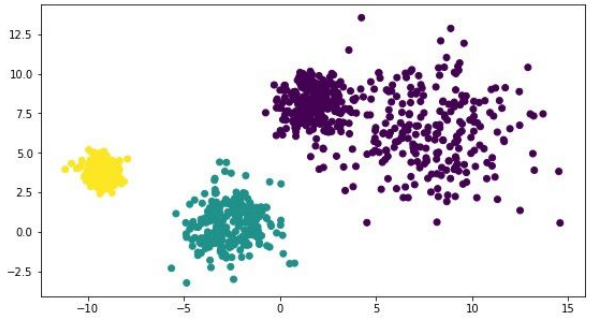
Modelo 3

¿Cuál es mejor?

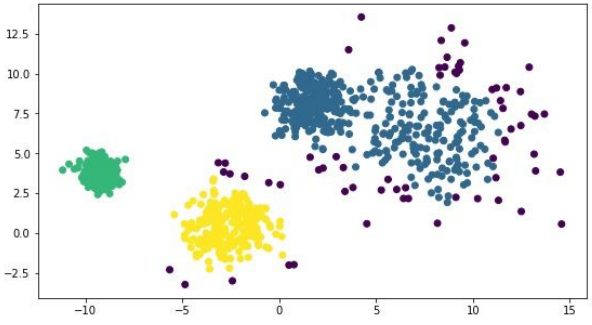
Comparando matrices de similitud



Modelo 1



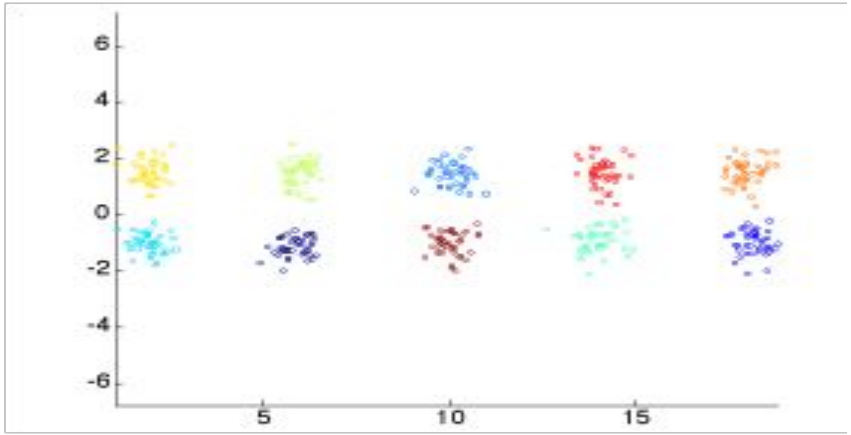
Modelo 2

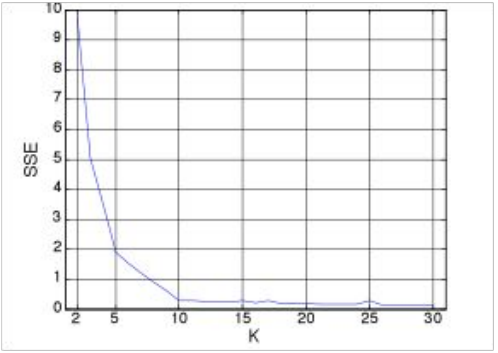


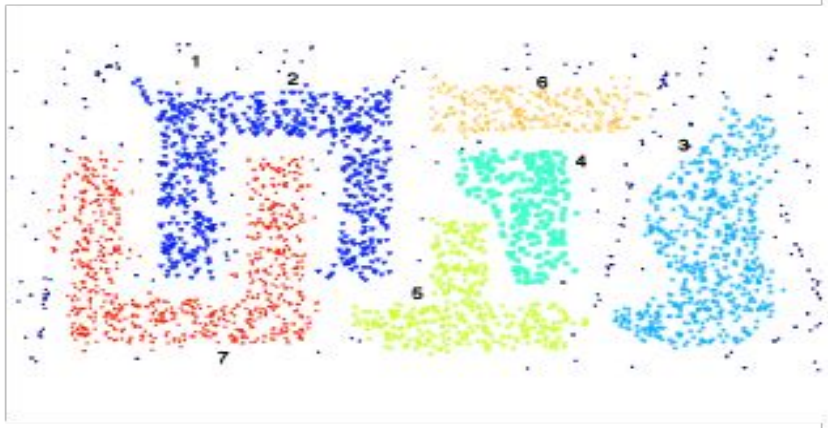
Modelo 3

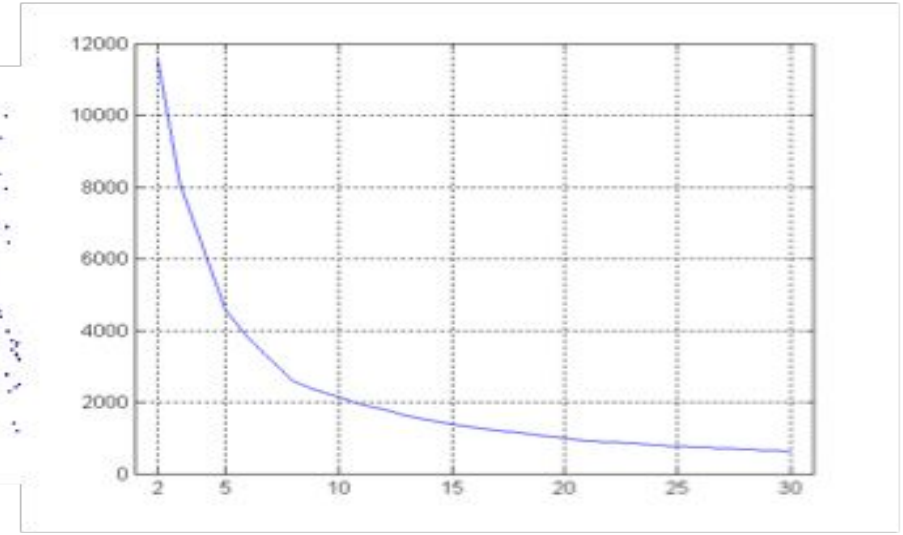
Medidas internas: SSE

- 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









SSE of clusters found using K-means

Curva SSE para un dataset más complicado

Metodología para validar clusters

- Necesidad de contar con una metodología para interpretar cualquier medida (¿qué es bueno? ¿qué no?)

- Usamos la estadística para crear una metodología

Metodología para validar clusters

- Mientras más **atípico** es un resultado, más probable que sea reflejo de estructuras válidas
- Podemos comparar índices que resultan de datos aleatorios, con los de nuestros datos
- Valores poco probables indican resultados válidos

Metodología para validar clusters

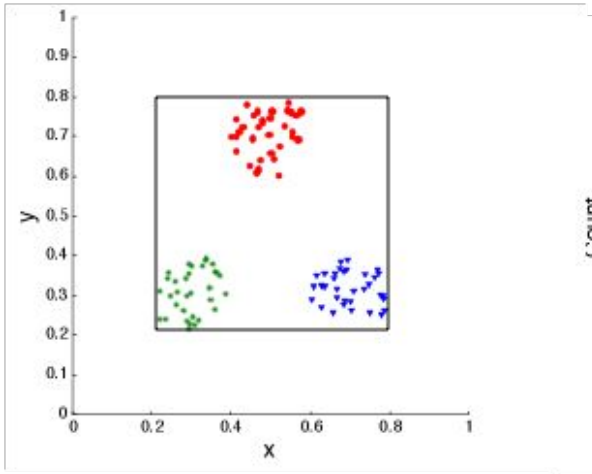
- Al comparar resultados de dos clustering (dos cluster sets), no es muy necesario usar una metodología

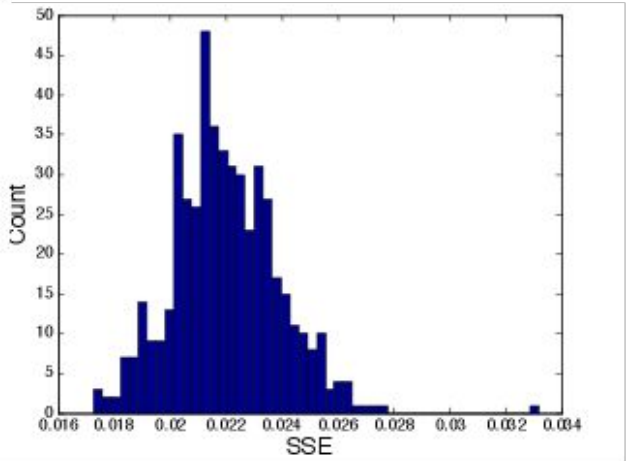
- Pero en este caso la pregunta es si la diferencia es **significativa** (estadísticamente - repetible y en magnitud)

Metodología: Ejemplo SSE

- Comparar SSE = 0.005 contra 3 clusters de datos aleatorios

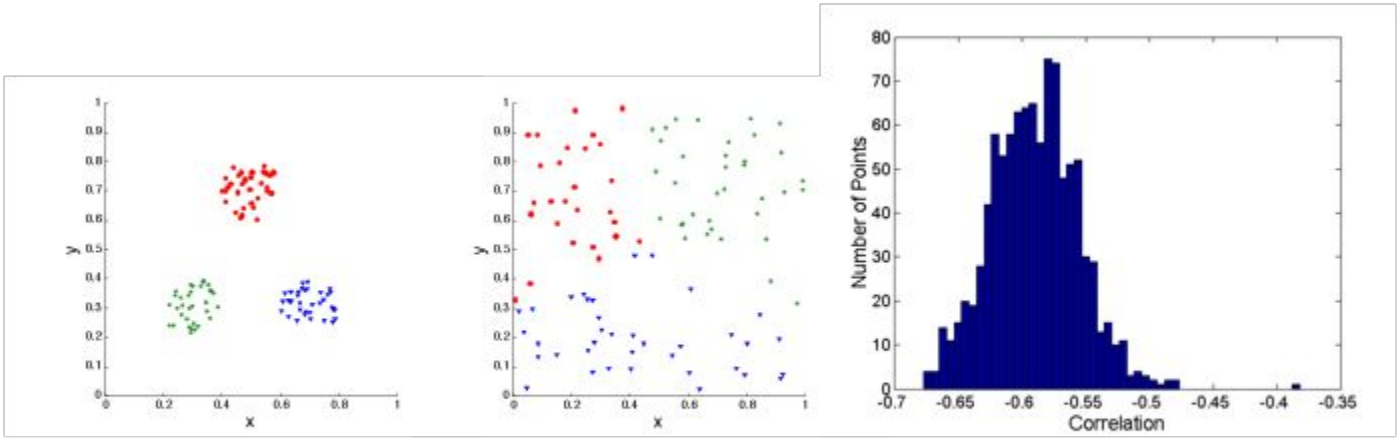
- Histograma muestra distribución SSE para 500 sets de datos aleatorios (100 puntos), en el mismo rango





Otro ejemplo: Correlación

- Correlación entre matrices de incidencia y proximidad para 2 sets de datos



Corr = -0.9235 Corr = -0.5810

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

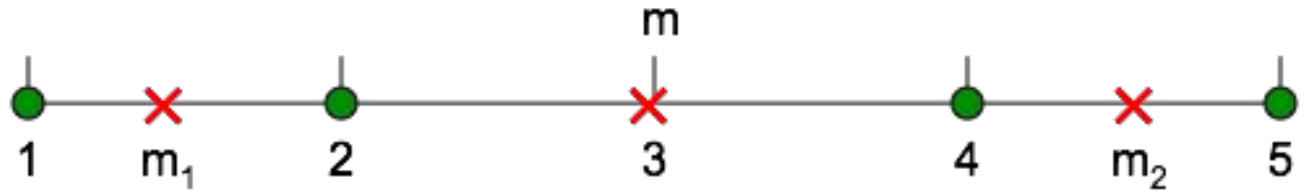
EJ. (SSE) Cohesión y Separación

- Cohesión se mide como **within cluster sum of squares (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:

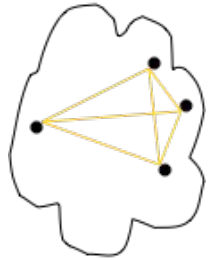
$$WSS = (1-1.5)^2 + (2-1.5)^2 + (4-4.5)^2 + (5-4.5)^2 = 1$$

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

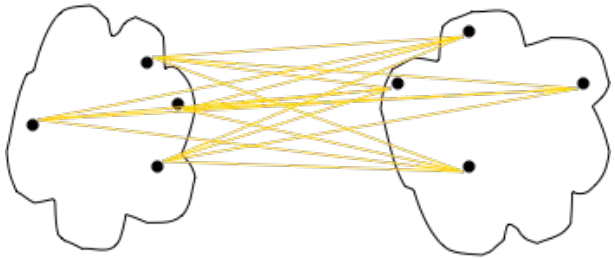
$$Total = 1 + 9 = 10$$

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



cohesion



separation

Medidas internas: Coeficiente de Silhouette

Combina ideas de cohesión y separación, pero para puntos individuales, como también para clusters y clusterings (estos últimos son promedios)

Este coeficiente calcula para cada punto:

1) Su distancia promedio al resto de los puntos en su misma clase (a)
2) Su distancia promedio a todos los puntos del cluster más cercano (b)

$$\frac{(b-a)}{\max(a,b)}$$

- Esta métrica está en un rango entre -1 y 1:
  - 1 significa que algo está bien asignado
  - -1 significa que algo está mal asignado porque hay otro cluster más similar
  - 0 significa que hay solapamiento de clusters.

Pureza y Entropía

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

- Entropía: Cantidad de clases diferentes que contiene un cluster

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

Comentario final

- 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

Implementación

https://colab.research.google.com/drive/1B76wixcQt5S15Rib-5ne9wyT6BY1Llh7?usp=sharing