### Tema 7: Clústering



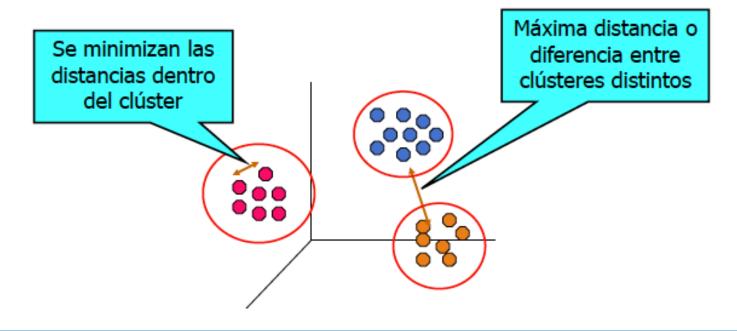
Alberto Nogales
alberto.nogales@ufv.es
Curso 2022-2023

### Índice

- Definición del problema.
- Algoritmos de clústering: k-means, clústering jerárquico aglomerado, DBSCAN.
- Medidas de distancia.
- Calculo de clústers.



**Objetivo:** Encontrar agrupaciones de objetos que sean similares o que estén relacionados entre sí y sean diferentes o no estén relacionados con objetos de otras agrupaciones.



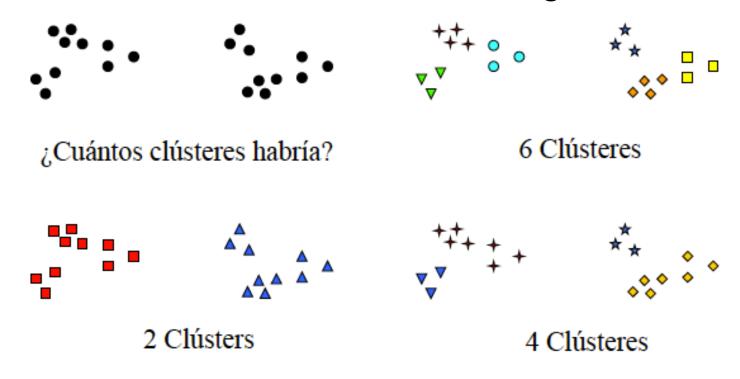


1) Minimizar distancias dentro del clúster: la dispersión dentro de clústers sea pequeña respecto a la dispersión total.

2) Maximizar la distancia entre clústers: refleja el hecho que se esté tratando con el número "correcto" de clústers K.



Dado un conjunto de vectores X1, . . . , Xn queremos formar con ellos K grupos "homogéneos" que sean "distintos" entre ellos. El tamaño de los clústers es ambiguo.





Es parecido a los problemas de clasificación pero sin un conjunto de entrenamiento que permita guiar el cómo se generan los clústers. No se clasifica, por lo tanto no están etiquetados.

#### **Utilidad:**

1) Comprensión: Agrupar información relacionada entre sí con funciones o características similares.

2) Preprocesamiento: Encontrar outliers o usar el tamaño óptimo de los conjuntos de datos (reducción).



#### Aplicaciones:

- Biología: para buscar genes que tengan funciones similares.
- Clima: la interpretación del clima requiere encontrar patrones en la atmósfera y en el océano.
- Psicología y medicina: una enfermedad puede tener muchas variantes y con clústering pueden obtenerse esas subcategorías.
- Negocio: la información de clientes o potenciales que se obtiene se puede someter clústering para segmentarlos.

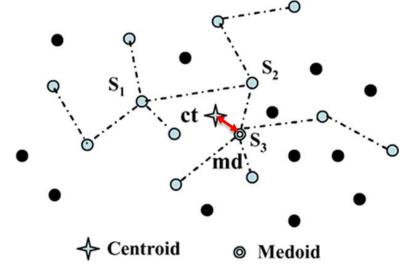


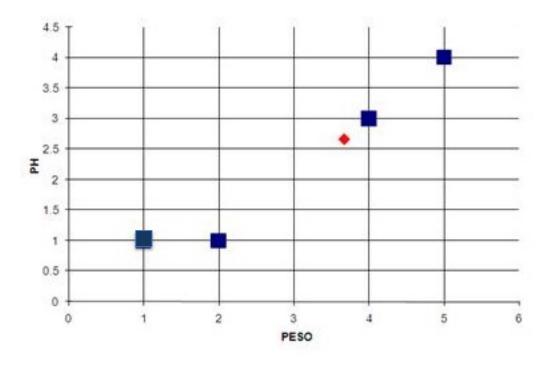
 Centroide: el centro del clúster, es decir, la media de todos los elementos del clúster.

$$centroid = C_m = \frac{\sum_{i=1}^{N} (t_{mi})}{N}$$

Medoide, es el punto más representativo del

clúster.





Centroide: [(2+4+5)/3, (1+3+4)/3] = [3,66, 2,66]

Medoide (el más cercano al centroide): [4, 3]



Tipos de clústering:

1) Clústering particionado

Los grupos no se superponen uno a otro, de modo que cada elemento pertenece únicamente a un clúster.

2) Clústering jerárquico

Conjunto de clústeres anidados y organizados como un árbol jerárquico.

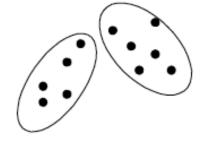


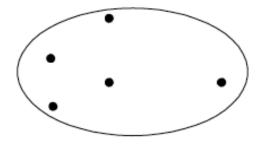
## Clústering particionado





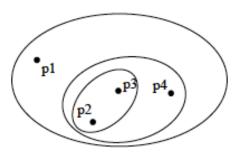
**Puntos originales** 



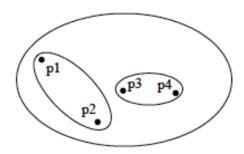


**Particiones** 

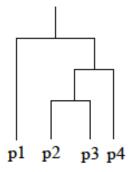
### Clústering jerárquico



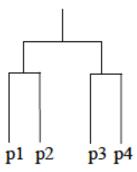
Clúster jerárquico tradicional



Clúster jerárquico no tradicional



Dendrograma tradicional



Dendrograma no tradicional

#### Diferencias entre clústering

- 1) Exclusivo vs no-exclusivo: Los no-exclusivos tienen elementos que pueden pertenecer a varios clústeres. Esto permite interpretar múltiples clases o elementos de frontera, es decir que admiten varios comportamientos.
- 2) Difuso vs no-difuso: En los difusos, los puntos pertenecen a mas clústeres, pero con un peso determinado entre 0 y 1. La suma de los pesos de un individuo es 1. En inglés fuzzy.



3) Parcial vs completo: Es parcial cuando sólo se quiere agrupar algunos datos.

4)Heterogéneo vs homogéneo: Son heterogéneos cuando hay agrupaciones de distinta naturaleza, como diferentes formas, tamaños o densidades.

#### Tipos de clústers:

- Bien definidos/separados.
- Centrados.
- Contiguos.
- Según su densidad.
- De propiedades o conceptuales.
- Descritos por una función objetivo.



Bien definidos o separados: cualquier punto en el clúster es más cercano a cualquier otro punto en el clúster que a cualquier otro punto que no esté en el clúster.





Centrados: un elemento está más cerca al centro del clúster, que al centro de otro clúster. El centro del clúster será un medoide.



4 clusters basados en el centro



Contiguos: los puntos del mismo clúster están cercanos o son similares a otro punto (o conjunto) del mismo clúster en comparación con otros puntos que no pertenecen al clúster en cuestión.



Según densidad: cuando están separadas regiones de baja densidad, de otras regiones de alta densidad.

Se usan cuando los clústers son irregulares o entrelazados, y cuando se presenta ruido y datos atípicos



Conceptuales: Son clústers que tienen alguna propiedad en común o representan un concepto particular.

Encuentra características comunes entre los elementos de los clústers. Por ejemplo tipos de textos.

Los jerárquicos son conceptuales.



Basados en una función objetivo: Son clústers que minimizan o maximizan una función objetivo.

Enumeran todas las posibles formas de dividir los puntos dentro de un clúster y evalúan la "bondad" de cada conjunto potencial de clústers usando una función objetivo dada.

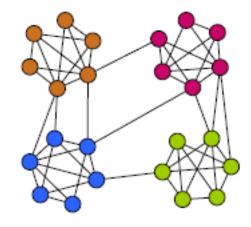


Si es necesario se puede aplicar una función de transformación para mapear el problema de clústering a un dominio diferente y resolver el problema en dicho dominio:

- •Con una matriz de adyacencia se define un grafo con pesos en el que los nodos son los puntos a agrupar y las conexiones son la distancia entre puntos.
- •Así el clústering equivale a descomponer el grafo en componentes conectadas, una de cada clúster.
- Se busca minimizar las conexiones entre clústeres y maximizar la distancia dentro del clúster.



```
\begin{pmatrix} d11 & d12 & \cdots & d1n \\ d21 & d22 & \cdots & d2n \\ \vdots & \cdots & \cdots & d3n \\ d2n & \cdots & \cdots & dnn \end{pmatrix}
```



Sirve para clústering particionado.

Cada clúster está asociado con un centroide (valor de la media del clúster).

Cada punto es asignado al clúster más cercano al centroide.

El número de clústers "K" debe ser especificado.

Estandarizar los datos si es necesario.



#### Pasos:

Eliminar outliers

Seleccionar K puntos diferentes como los centroides iniciales (puede ser aleatoriamente)

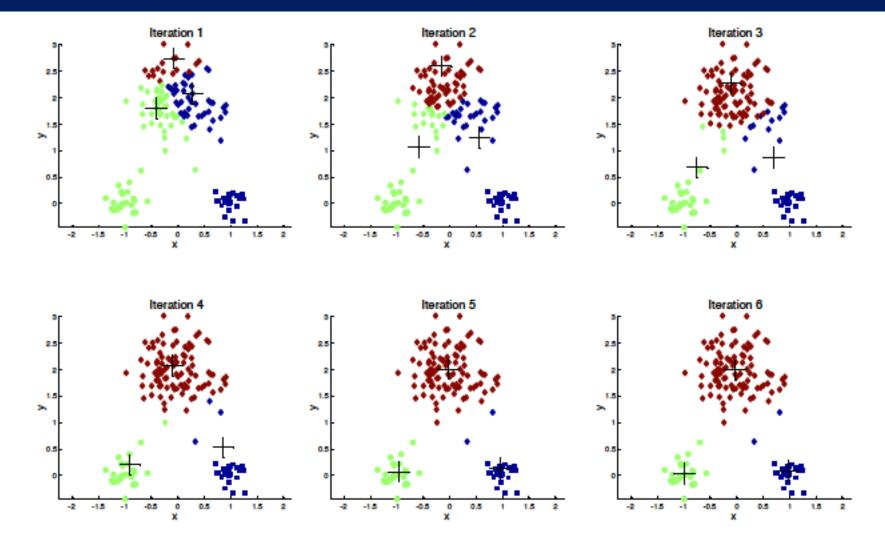
### Repetir

Desde K clústers asignar todos los puntos al centroide más cercano

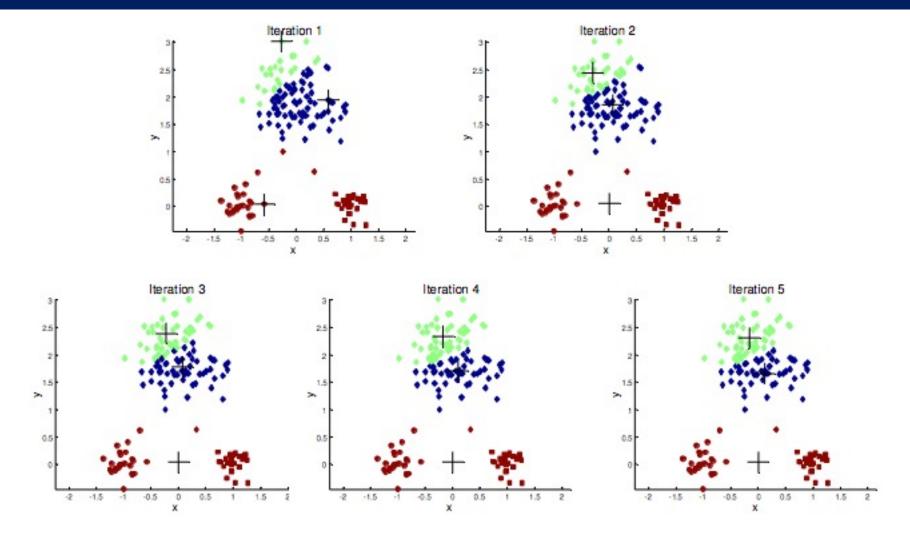
Recalcular el centroide de cada clúster

Hasta que el centroide no cambia









¿Cómo se eligen los centroides?

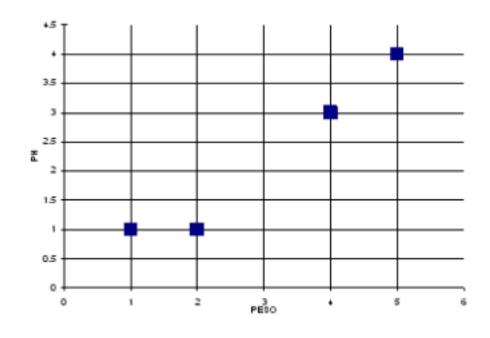
- Repetir la ejecución varias veces por fuerza bruta.
- Seleccionar más de K centroides iniciales y entonces elegir de entre esos donde se estabiliza la distancia media al centroide. Método del codo.
- Con la diferencia entre la distancia media al centroide (a) y al cluster más cercano (b). S= (b-a)/max(a,b)
- Postprocesamiento.



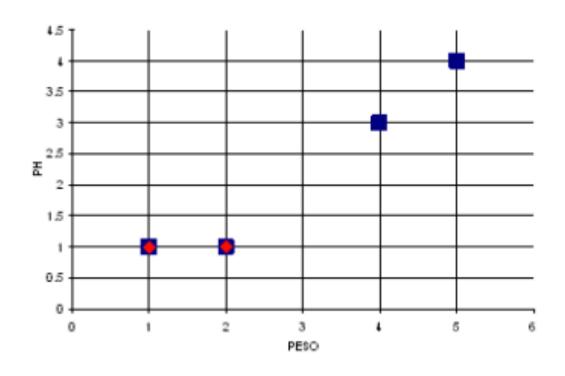
#### Ejemplo (medicamentos):

K=2

Peso	Índice ph
1	1
2	1
4	3
5	4



#### Se eligen los centroides



Calculo la distancia entre los puntos y los centroides:

Usando la distancia Euclídea, la distancia entre el punto (4,3) y el centroide (1,1) es:

$$\sqrt{(4-1)^2+(3-1)^2}=3,61$$

La distancia del mismo punto con el otro centroide es 2,83

Se plantea una matriz de distancias entre los puntos y los centroides (las columnas son los puntos y las filas los centroides)

$$\begin{pmatrix} 0,00 & 1,00 & 3,61 & 5,00 \\ 1,00 & 0,00 & 2,83 & 4,24 \end{pmatrix}$$



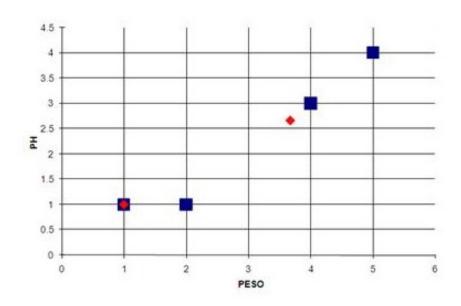
A partir de la matriz anterior y teniendo en cuenta las distancias mínimas a los centroides. Se genera otra matriz con las asignaciones de los clústers (0 no pertenece al clúster y 1 pertenece). Dependiendo de la fila en la que se encuentre será el clúster asociado a un centroide o al otro.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Por último se calculan los nuevos centroides. Si no se han movido se para. En caso contrario se repite el proceso.

$$C1 = [1,0]$$

$$C2 = [(2+4+5)/3, (1+3+4)/3] = [3,66,2,66]$$



Se obtiene la matriz de distancias (centroides/filas vs individuos/columnas):

$$\begin{pmatrix} 0,00 & 1,00 & 3,61 & 5,00 \\ 3,14 & 2,36 & 0,47 & 1,89 \end{pmatrix}$$

La matriz para los clústers:

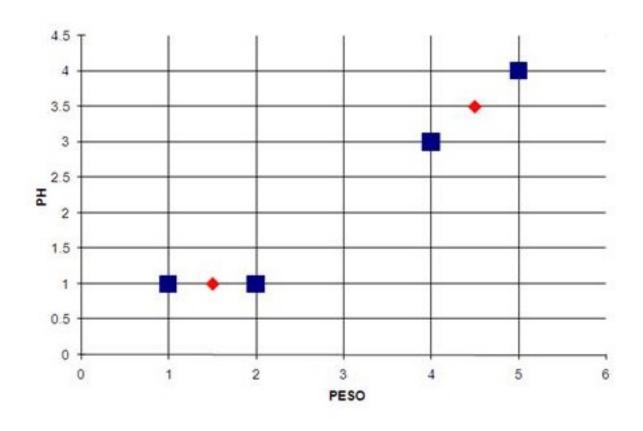
$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Los valores de los centroides:

$$C1=[1,5,1]$$
  $C2=[4,5,3,5]$ 



Se dibujan los nuevos centroides



#### Otra iteración

Se obtiene la matriz de distancias :

$$\begin{pmatrix} 0,50 & 0,50 & 3,20 & 4,61 \\ 4,30 & 3,54 & 0,71 & 0,71 \end{pmatrix}$$

La matriz para los clústers:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

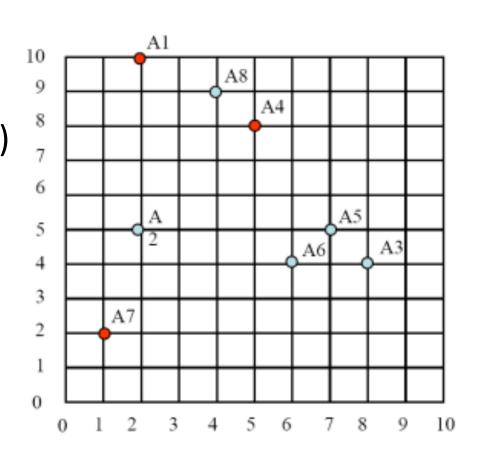
Cómo no se han movido, se puede decir que se ha llegado al final.

### Ejercicio:

Para k=3

Centroides: (1,2), (2,10), (5,8)

X	Υ
2	5
4	9
6	4
7	5
8	4
1	2
2	10
5	8



#### Paso 1:

Matriz de distancias

#### Clústers

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Nuevos centroides: (1,5 3,5) (2 10) (6 6)



#### Paso 2:

Matriz de distancias

#### Clústers

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Nuevos centroides: (1,5 3,5) (3 9,5) (6,5 5,25)



#### Paso 3:

Matriz de distancias

#### Clústers

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Nuevos centroides: (1,5 3,5) (3,66 9) (7 4,33)



Paso 4:

Matriz de distancias

Clústers

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Nuevos centroides: No hay. PARAMOS!!!!



Ejercicio (anchura y altura minerales)

K=2 inicializado en (1,3) y (3,7)

Anchura	Altura
1	1
3	2
4	4
6	4

### Evaluación de los clústers:

### Suma del error cuadrático (SSE)

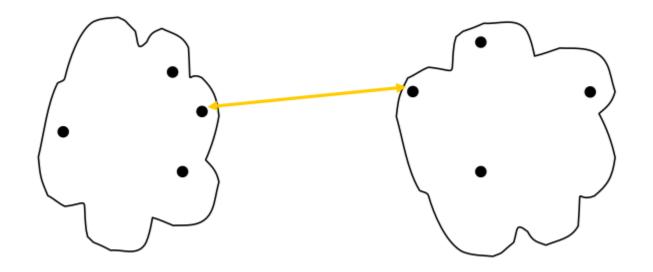
Para cada punto, el error es la distancia al clúster más cercano:

$$SSE = \sum_{i=1}^{K} \sum_{x \in C_i} dist^2(m_i, x)$$

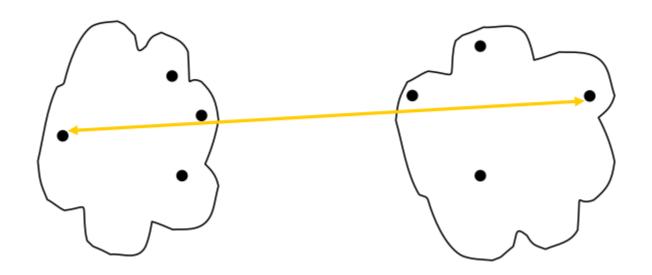
x es un punto del clúster C<sub>i</sub> y m<sub>i</sub> es el centroide

Se puede reducir el SSE incrementando el número de clústeres K. Hay que minimizar la función.

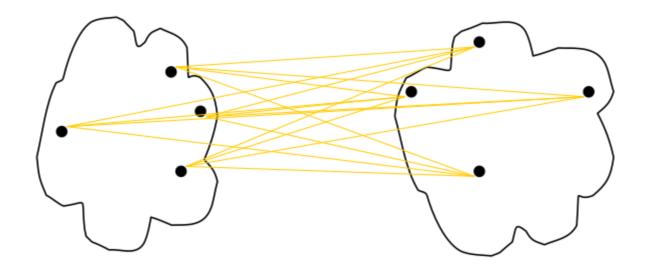
### Distancia mínima



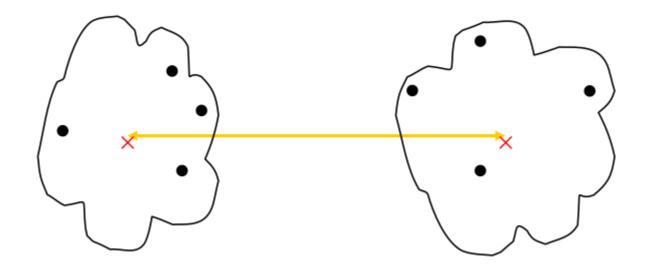
### Distancia máxima



### Distancia media



### Distancia centroide



### Validación de los clústers

- 1. Determinación de la tendencia del clústering de un conjunto de datos, es decir, si se da algún tipo de tendencia que no sea al azar.
- 2. Comparar los resultados del análisis con resultados externos conocidos, alguna variable clase.
- 3. Evaluar lo bien que se ajusta el resultado del análisis sin referencias a información externa.
- 4. Comparar los resultados de dos conjuntos de datos para ver cuál es mejor.



Estrategias de postprocesamiento:

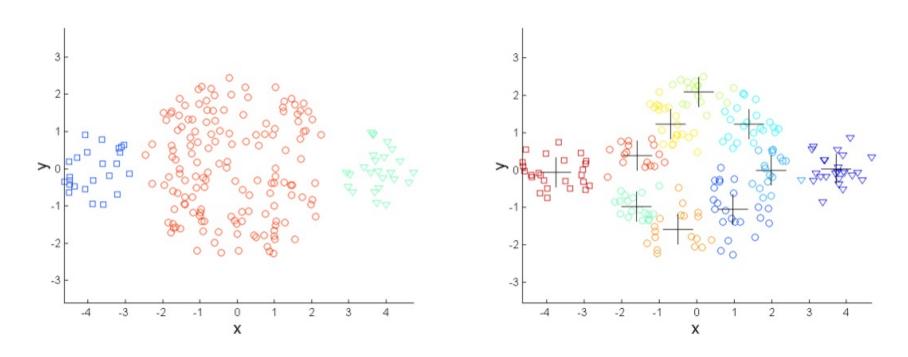
- Elimina los clústeres de posibles datos atípicos.
- Divide clústeres dudosos con alto SSE.
- Mezcla clústeres cercanos con un bajo SSE.
- A veces se pueden añadir estos procesos dentro del procesamiento básico de clústering.

El algoritmo K-means tiene problemas cuando los clústeres son muy diferentes en:

- Tamaño.
- Densidad.
- Forma (formas irregulares).
- Cuando hay datos atípicos.



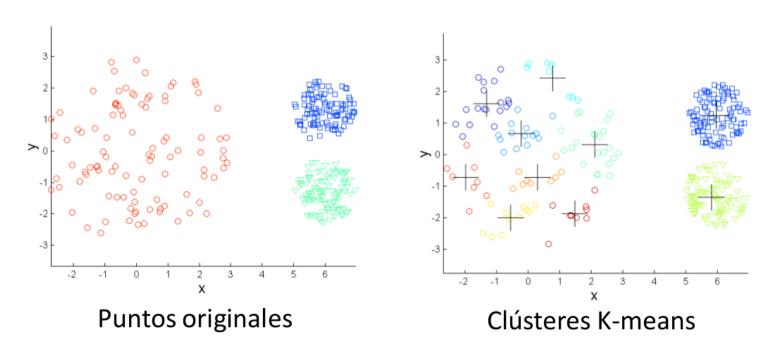
### Tamaño



Generar muchos clústers y juntar los más cercanos.



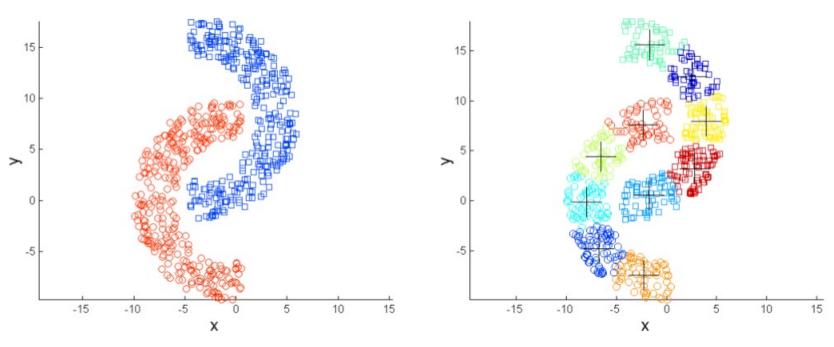
### Densidad



Poner más centroides donde menos densidad hay.



Forma (formas irregulares).



Generar los centroides a lo largo o ancho de las formas.



Produce un conjunto de clústeres anidados organizados con un árbol jerárquico:

- Se puede emplear un dendrograma: un diagrama arbóreo que representa las divisiones o mezclas.
- No se necesita asumir un número previo de clústeres.



### 2 tipos principales:

 Aglomerativo: Al inicio, cada punto es un clúster. En cada paso, se mezcla los pares de clústeres más cercanos entre sí en un único elemento.

• Disociativo: Empezar con un clúster que incluya todo. En cada paso, dividir un clúster hasta que tengamos k clústeres o solo haya un punto por clúster.



Algoritmo de single linkage aglomerativo:

Calcula la matriz de proximidad

Cada punto es un clúster

Repetir

Mezclar dos clústeres que estén lo más cerca posible.

Actualizar la matriz de proximidad

Hasta solo quede un clúster



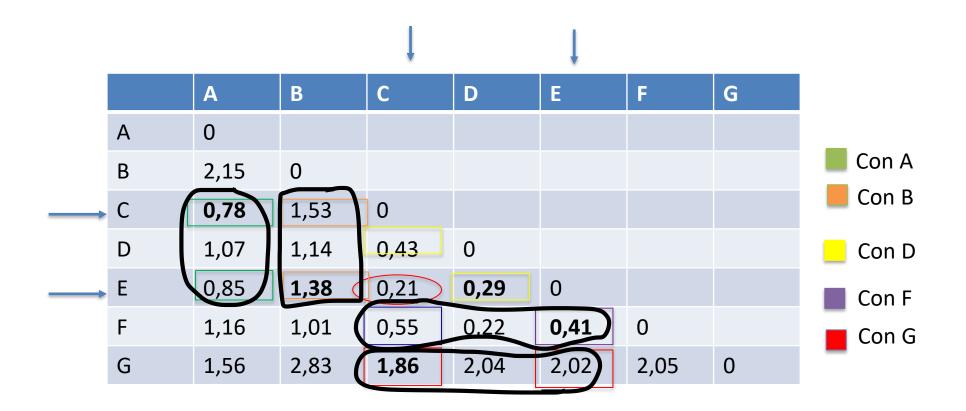
### Ejemplo:

1) Se calcula la matriz de adyacencia

	A	В	С	D	Е	F	G
А	0						
В	2,15	0					
С	0,78	1,53	0				
D	1,07	1,14	0,43	0			
Е	0,85	1,38	0,21	0,29	0		
F	1,16	1,01	0,55	0,22	0,41	0	
G	1,56	2,83	1,856	2,04	2,02	2,05	0

2) Los más cercanos son C y E con distancia 0,21. Se crea un clúster con ellos.

3) Se calcula la nueva matriz de adyacencia con las distancias menores de los nodos que forman el clúster al resto de nodos que tengan en común.



3) Se calcula la matriz de adyacencia otra vez hasta que no haya más grupos que hacer.

	A	В	(C,E)	D	F	G
Α	0					
В	2,15	0				
(C,E)	0,78	1,38	0			
D	1,07	1,14	0,29	0		
F	1,16	1,01	0,41	0,22	0	
G	1,56	2,83	1,86	2,04	2,05	0



4) Se calcula la matriz de adyacencia otra vez hasta que no haya nada más. Para D y F que es la menor distancia.

	A	В	(C,E)	(D,F)	G
А	0				
В	2,15	0			
(C,E)	0,78	1,38	0		
(D,F)	1,07	1,01	0,29	0	
G	1,56	2,83	1,86	2,04	0



5)

	A	В	((C,E), (D,F))	G
Α	0			
В	2,15	0		
((C,E), (D,F))	0,78	1,01	0	
G	1,56	2,83	1,86	0

6)

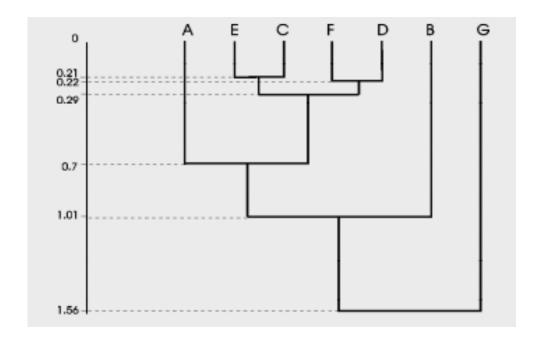
	(A, ((C,E), (D,F))	В	G
(A, ((C,E), (D,F)))	0		
В	1,01	0	
G	1,56	2,83	0

7

	( B,(A, ((C,E), (D,F))))	G
(B,(A, ((C,E), (D,F))))	0	
G	1,56	0



7) Se obtiene el dendrograma desde dentro hacia afuera.



### Ejemplo:

Animal	Orejas	Movilidad	Hábitat	Pico
Gato	Punta	Cuadrúpedo	Doméstico	No
Tigre	Punta	Cuadrúpedo	Salvaje	No
Oso	Redonda	Cuadrúpedo	Salvaje	No
Cuervo	No	Bípedo	Salvaje	Si
Ornitorrinco	No	Cuadrúpedo	Salvaje	Si

### Ejemplo:

Animal	Orejas	Movilidad	Hábitat	Pico
Gato	1	1	1	1
Tigre	1	1	2	1
Oso	2	1	2	1
Cuervo	3	2	2	2
Ornitorrinco	3	1	2	2

	G	Т	0	С	Or
G	0				
T	1	0			
0	1,41	1	0		
С	2,46	2,44	1,73	0	
Or	2,44	2,23	1,73	1,41	0

	G	T	0	С	Or
G	0				
$T \subset$	1	0			
0	1,41	1	0		
С	2,46	2,44	1,73	0	
Or	2,44	2,23	1,73	1,41	0



	(G,T)	0	С	Or	
(G,T)	0				
0 (	1	0			
С	2,44	1,73	0		
Or	2,23	1,73	1,41	0	



	(G,T), O	С	Or
(G,T),O	0		
С	1,73	0	
Or	1,73	1,41	0



	((G,T),O)	(C, Or)
((G,T),O), C	0	
Or	1,73	0



Interpretación:

((G,T),O), (C,Or))

El gato, el tigre se parecen mucho (uno es doméstico y otro salvaje) y el oso se parece a ellos en parte. Luego jerárquicamente encontramos al cuervo y al ornitorrinco (tienen pico) pero no se parecen en prácticamente nada al resto.

### Ej:

	A	В	С	D
А	0			
В	9	0		
С	4	5	0	
D	7	3	11	0

Tiene un enfoque basado en la densidad, modelando los clústers como cúmulos de alta densidad de puntos. Por lo cual, si un punto pertenece o no a un clúster, debe estar cerca de un montón de otros puntos de dicho clúster.

#### Pasos:

A partir de épsilon positivo (radio del cluster) y un minPoints (individuos mínimos en el clúster)

Repetir hasta que no se generen nuevos clusters:

Se elige un punto arbitrario en el conjunto de datos.

Creo un cluster que cumpla con minPoints a una distancia épsilon.

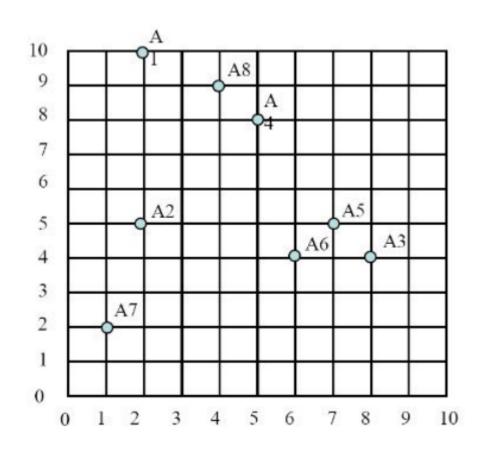
Si un cluster no cumple con la condición de minPoints se considera un outlier.



Ejemplo:

minPoints=2

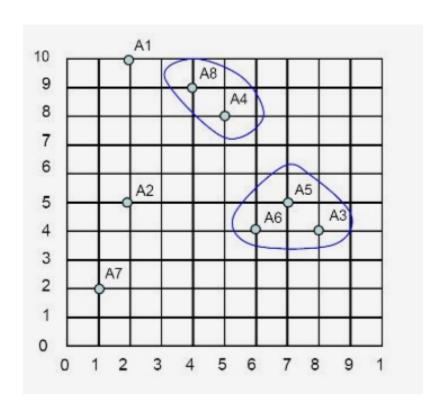
Epsilon= $\sqrt{2}$ 



### 1) Se calcula la matriz de adyacencia con la distancia Euclídea

	A1	A2	A3	A4	A5	A6	A7	A8
A1	0							
A2	Sqrt(25)	0						
A3	Sqrt(72)	Sqrt(37)	0					
A4	Sqrt(7)	Sqrt()18	Sqrt(25)	0				
A5	Sqrt(50)	Sqrt(25)	Sqrt(2)	Sqrt(13)	0			
A6	Sqrt(52)	Sqrt(17)	Sqrt(4)	Sqrt(17)	Sqrt(2)	0		
A7	Sqrt(65)	Sqrt(10)	Sqrt(53)	Sqrt(52)	Sqrt(45)	Sqrt(29)	0	
A8	Sqrt(5)	Sqrt(20)	Sqrt(41) (	Sqrt(2)	Sqrt(25)	Sqrt(29)	Sqrt(58)	0

2) Los que cumplan con la regla de épsilon se agrupan



### 3) Al haber outilers se aumenta la épsilon a $\sqrt{10}$

	A1	A2	A3	A4	A5	A6	A7	A8
A1	0							
A2	Sqrt(25)	0						
A3	Sqrt(72)	Sqrt(37)	0					
A4	Sqrt(7)	Sqrt(18)	Sqrt(25)	0				
A5	Sqrt(50)	Sqrt(25)	Sqrt(2)	Sqrt(13)	0			
A6	Sqrt(52)	Sqrt(17)	Sqrt(4)	Sqrt(17)	Sqrt(2)	0		
A7	Sqrt(65)	Sqrt(10)	Sqrt(53)	Sqrt(52)	Sqrt(45)	Sqrt(29)	0	
A8	Sqrt(5)	Sqrt(20)	Sqrt(41) (	Sqrt(2)	Sqrt(25)	Sqrt(29)	Sqrt(58)	0

4) Los clusters cumplen con la condición mínima. Se

para.

