# Clase 8: Aprendizaje No Supervisado - Clustering

#### Matías Leoni

**Aprendizaje Automático I** *Maestría en IA - Universidad de San Andrés* 

5 de Agosto de 2025

• Introducción al Aprendizaje No Supervisado

- Introducción al Aprendizaje No Supervisado
- K-Means: Agrupamiento por Centroides

- Introducción al Aprendizaje No Supervisado
- K-Means: Agrupamiento por Centroides
- Clustering Jerárquico: Aglomerativo y Divisivo

- Introducción al Aprendizaje No Supervisado
- K-Means: Agrupamiento por Centroides
- Clustering Jerárquico: Aglomerativo y Divisivo
- DBSCAN: Agrupamiento Basado en Densidad

- Introducción al Aprendizaje No Supervisado
- K-Means: Agrupamiento por Centroides
- Clustering Jerárquico: Aglomerativo y Divisivo
- DBSCAN: Agrupamiento Basado en Densidad
- Comparativa y Elección del Método Adecuado

- Introducción al Aprendizaje No Supervisado
- K-Means: Agrupamiento por Centroides
- Clustering Jerárquico: Aglomerativo y Divisivo
- DBSCAN: Agrupamiento Basado en Densidad
- Comparativa y Elección del Método Adecuado
- Taller Práctico en Jupyter Notebook

Aprendizaje Supervisado vs. No Supervisado

Aprendizaje Supervisado vs. No Supervisado

Aprendizaje Supervisado vs. No Supervisado

### Aprendizaje Supervisado

• **Objetivo:** Predecir una variable objetivo (etiqueta) *Y* a partir de un conjunto de features *X*.

Aprendizaje Supervisado vs. No Supervisado

- **Objetivo:** Predecir una variable objetivo (etiqueta) *Y* a partir de un conjunto de features *X*.
- Datos de Entrada: Pares (X, Y).

Aprendizaje Supervisado vs. No Supervisado

- **Objetivo:** Predecir una variable objetivo (etiqueta) *Y* a partir de un conjunto de features *X*.
- Datos de Entrada: Pares (X, Y).
- **Ejemplos:** Regresión (predecir un valor continuo), Clasificación (predecir una categoría).

Aprendizaje Supervisado vs. No Supervisado

- **Objetivo:** Predecir una variable objetivo (etiqueta) *Y* a partir de un conjunto de features *X*.
- Datos de Entrada: Pares (X, Y).
- **Ejemplos:** Regresión (predecir un valor continuo), Clasificación (predecir una categoría).
- Evaluación: Métrica de error clara sobre un set de prueba (ej. Accuracy, MSE).

Aprendizaje Supervisado vs. No Supervisado

### Aprendizaje Supervisado

- **Objetivo:** Predecir una variable objetivo (etiqueta) *Y* a partir de un conjunto de features *X*.
- Datos de Entrada: Pares (X, Y).
- **Ejemplos:** Regresión (predecir un valor continuo), Clasificación (predecir una categoría).
- Evaluación: Métrica de error clara sobre un set de prueba (ej. Accuracy, MSE).

Aprendizaje Supervisado vs. No Supervisado

### Aprendizaje Supervisado

- **Objetivo:** Predecir una variable objetivo (etiqueta) *Y* a partir de un conjunto de features *X*.
- Datos de Entrada: Pares (X, Y).
- **Ejemplos:** Regresión (predecir un valor continuo), Clasificación (predecir una categoría).
- Evaluación: Métrica de error clara sobre un set de prueba (ej. Accuracy, MSE).

### Aprendizaje No Supervisado

 Objetivo: Descubrir patrones, estructuras o subgrupos inherentes en los datos.

Aprendizaje Supervisado vs. No Supervisado

### Aprendizaje Supervisado

- **Objetivo:** Predecir una variable objetivo (etiqueta) *Y* a partir de un conjunto de features *X*.
- Datos de Entrada: Pares (X, Y).
- **Ejemplos:** Regresión (predecir un valor continuo), Clasificación (predecir una categoría).
- Evaluación: Métrica de error clara sobre un set de prueba (ej. Accuracy, MSE).

- Objetivo: Descubrir patrones, estructuras o subgrupos inherentes en los datos.
- Datos de Entrada: Solamente features X, sin una etiqueta Y asociada.

Aprendizaje Supervisado vs. No Supervisado

### Aprendizaje Supervisado

- **Objetivo:** Predecir una variable objetivo (etiqueta) *Y* a partir de un conjunto de features *X*.
- Datos de Entrada: Pares (X, Y).
- **Ejemplos:** Regresión (predecir un valor continuo), Clasificación (predecir una categoría).
- Evaluación: Métrica de error clara sobre un set de prueba (ej. Accuracy, MSE).

- Objetivo: Descubrir patrones, estructuras o subgrupos inherentes en los datos.
- Datos de Entrada: Solamente features X, sin una etiqueta Y asociada.
- Ejemplos: Clustering, Reducción de Dimensionalidad (PCA),
   Detección de Anomalías.



Aprendizaje Supervisado vs. No Supervisado

### Aprendizaje Supervisado

- **Objetivo:** Predecir una variable objetivo (etiqueta) *Y* a partir de un conjunto de features *X*.
- Datos de Entrada: Pares (X, Y).
- **Ejemplos:** Regresión (predecir un valor continuo), Clasificación (predecir una categoría).
- Evaluación: Métrica de error clara sobre un set de prueba (ej. Accuracy, MSE).

- Objetivo: Descubrir patrones, estructuras o subgrupos inherentes en los datos.
- Datos de Entrada: Solamente features X, sin una etiqueta Y asociada.
- Ejemplos: Clustering, Reducción de Dimensionalidad (PCA),
   Detección de Anomalías.
- Evaluación: Más subjetiva, a menudo exploratoria y sin una "verdad" única.

### Descubriendo Grupos en los Datos

• **Definición:** Es la tarea de agrupar un conjunto de objetos de tal manera que los objetos en el mismo grupo (o **cluster**) sean más similares entre sí que con los de otros grupos.

#### Descubriendo Grupos en los Datos

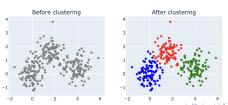
- **Definición:** Es la tarea de agrupar un conjunto de objetos de tal manera que los objetos en el mismo grupo (o **cluster**) sean más similares entre sí que con los de otros grupos.
- **Principio Clave:** Maximizar la similitud *intra-cluster* y minimizar la similitud *inter-cluster*.

#### Descubriendo Grupos en los Datos

- Definición: Es la tarea de agrupar un conjunto de objetos de tal manera que los objetos en el mismo grupo (o cluster) sean más similares entre sí que con los de otros grupos.
- Principio Clave: Maximizar la similitud intra-cluster y minimizar la similitud inter-cluster.
- La "similitud" se define comúnmente a través de una métrica de distancia (ej. distancia Euclidiana) o una medida de correlación.

#### Descubriendo Grupos en los Datos

- Definición: Es la tarea de agrupar un conjunto de objetos de tal manera que los objetos en el mismo grupo (o cluster) sean más similares entre sí que con los de otros grupos.
- **Principio Clave:** Maximizar la similitud *intra-cluster* y minimizar la similitud *inter-cluster*.
- La "similitud" se define comúnmente a través de una métrica de distancia (ej. distancia Euclidiana) o una medida de correlación.
- **Aplicaciones:** Segmentación de clientes en marketing, agrupación de documentos, bioinformática (agrupar genes con patrones de expresión similares), etc.



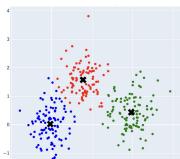
• Es un algoritmo de **particionamiento**: divide el dataset en un número K de clusters predefinido por el usuario.

- Es un algoritmo de particionamiento: divide el dataset en un número K de clusters predefinido por el usuario.
- Cada cluster es representado por su **centroide**, que es la media de todos los puntos de datos pertenecientes a ese cluster.

- Es un algoritmo de particionamiento: divide el dataset en un número K de clusters predefinido por el usuario.
- Cada cluster es representado por su centroide, que es la media de todos los puntos de datos pertenecientes a ese cluster.
- **Objetivo:** Minimizar la suma de las distancias cuadradas entre cada punto y el centroide de su cluster asignado.

- Es un algoritmo de particionamiento: divide el dataset en un número K de clusters predefinido por el usuario.
- Cada cluster es representado por su centroide, que es la media de todos los puntos de datos pertenecientes a ese cluster.
- **Objetivo:** Minimizar la suma de las distancias cuadradas entre cada punto y el centroide de su cluster asignado.
- A esta medida se le conoce como Inercia o Within-Cluster Sum of Squares (WCSS).

- Es un algoritmo de particionamiento: divide el dataset en un número K de clusters predefinido por el usuario.
- Cada cluster es representado por su centroide, que es la media de todos los puntos de datos pertenecientes a ese cluster.
- **Objetivo:** Minimizar la suma de las distancias cuadradas entre cada punto y el centroide de su cluster asignado.
- A esta medida se le conoce como **Inercia** o *Within-Cluster Sum of Squares (WCSS)*.



Paso 1: Inicialización

### Paso 1: Inicialización

• Elegir el número de clusters, K.

#### Paso 1: Inicialización

- Elegir el número de clusters, K.
- Asignar aleatoriamente K puntos del dataset como centroides iniciales.

#### Paso 1: Inicialización

- Elegir el número de clusters, K.
- Asignar aleatoriamente K puntos del dataset como centroides iniciales.

Paso 2: Iteración (Repetir hasta la convergencia)

#### Paso 1: Inicialización

- Elegir el número de clusters, K.
- Asignar aleatoriamente K puntos del dataset como centroides iniciales.

Paso 2: Iteración (Repetir hasta la convergencia)

Paso de Asignación: Asignar cada punto de dato al cluster cuyo centroide esté más cercano (usando, e.g. distancia Euclidiana).

#### Paso 1: Inicialización

- Elegir el número de clusters, K.
- Asignar aleatoriamente K puntos del dataset como centroides iniciales.

### Paso 2: Iteración (Repetir hasta la convergencia)

- Paso de Asignación: Asignar cada punto de dato al cluster cuyo centroide esté más cercano (usando, e.g. distancia Euclidiana).
- Paso de Actualización: Recalcular el centroide de cada cluster como la media de todos los puntos asignados a él.

#### Paso 1: Inicialización

- Elegir el número de clusters, K.
- Asignar aleatoriamente K puntos del dataset como centroides iniciales.

### Paso 2: Iteración (Repetir hasta la convergencia)

- Paso de Asignación: Asignar cada punto de dato al cluster cuyo centroide esté más cercano (usando, e.g. distancia Euclidiana).
- Paso de Actualización: Recalcular el centroide de cada cluster como la media de todos los puntos asignados a él.

**Convergencia:** El algoritmo converge cuando las asignaciones de los clusters no cambian en una iteración.

#### Paso 1: Inicialización

- Elegir el número de clusters, K.
- Asignar aleatoriamente K puntos del dataset como centroides iniciales.

### Paso 2: Iteración (Repetir hasta la convergencia)

- Paso de Asignación: Asignar cada punto de dato al cluster cuyo centroide esté más cercano (usando, e.g. distancia Euclidiana).
- Paso de Actualización: Recalcular el centroide de cada cluster como la media de todos los puntos asignados a él.

**Convergencia:** El algoritmo converge cuando las asignaciones de los clusters no cambian en una iteración.

• Buscamos una partición de las n observaciones en K conjuntos disjuntos  $C_1, C_2, \ldots, C_K$ .

- Buscamos una partición de las n observaciones en K conjuntos disjuntos  $C_1, C_2, \ldots, C_K$ .
- El objetivo es minimizar la Inercia, que es la variación total intra-cluster:

$$J(C,\mu) = \sum_{k=1}^{K} W(C_k); \qquad \min_{C_1,\ldots,C_K} J(C,\mu)$$

- Buscamos una partición de las n observaciones en K conjuntos disjuntos  $C_1, C_2, \ldots, C_K$ .
- El objetivo es minimizar la Inercia, que es la variación total intra-cluster:

$$J(C,\mu) = \sum_{k=1}^{K} W(C_k); \qquad \min_{C_1,\ldots,C_K} J(C,\mu)$$

• Donde  $W(C_k)$  es la suma de las distancias cuadradas de los puntos en el cluster k a su centroide  $\mu_k$ :

$$W(C_k) = \sum_{x_i \in C_k} ||x_i - \mu_k||^2$$

- Buscamos una partición de las n observaciones en K conjuntos disjuntos  $C_1, C_2, \ldots, C_K$ .
- El objetivo es minimizar la Inercia, que es la variación total intra-cluster:

$$J(C,\mu) = \sum_{k=1}^{K} W(C_k); \qquad \min_{C_1,\ldots,C_K} J(C,\mu)$$

• Donde  $W(C_k)$  es la suma de las distancias cuadradas de los puntos en el cluster k a su centroide  $\mu_k$ :

$$W(C_k) = \sum_{x_i \in C_k} ||x_i - \mu_k||^2$$

• El centroide  $\mu_k$  es el vector medio de los puntos en el cluster  $C_k$ :

$$\mu_k = \frac{1}{|C_k|} \sum_{x_i \in C_k} x_i$$



- Buscamos una partición de las n observaciones en K conjuntos disjuntos  $C_1, C_2, \ldots, C_K$ .
- El objetivo es minimizar la Inercia, que es la variación total intra-cluster:

$$J(C,\mu) = \sum_{k=1}^{K} W(C_k); \qquad \min_{C_1,\ldots,C_K} J(C,\mu)$$

• Donde  $W(C_k)$  es la suma de las distancias cuadradas de los puntos en el cluster k a su centroide  $\mu_k$ :

$$W(C_k) = \sum_{x_i \in C_k} ||x_i - \mu_k||^2$$

• El centroide  $\mu_k$  es el vector medio de los puntos en el cluster  $C_k$ :

$$\mu_k = \frac{1}{|C_k|} \sum_{x_i \in C_k} x_i$$

Un valor bajo de Inercia indica clusters más densos y compactos.

Un Resultado Matemático Clave

Un Resultado Matemático Clave

#### Teorema

El algoritmo K-Means **siempre converge** a un óptimo local.

Un Resultado Matemático Clave

#### **Teorema**

El algoritmo K-Means **siempre converge** a un óptimo local.

• ¿Por qué? En cada paso, el valor de la función objetivo (Inercia) está garantizado a disminuir o permanecer igual. Nunca aumenta.

Un Resultado Matemático Clave

#### **Teorema**

El algoritmo K-Means **siempre converge** a un óptimo local.

- ¿Por qué? En cada paso, el valor de la función objetivo (Inercia) está garantizado a disminuir o permanecer igual. Nunca aumenta.
- Paso de Asignación: Al reasignar un punto a un centroide más cercano, por definición, se reduce su contribución a la suma total de distancias cuadradas.

Un Resultado Matemático Clave

#### **Teorema**

El algoritmo K-Means **siempre converge** a un óptimo local.

- ¿Por qué? En cada paso, el valor de la función objetivo (Inercia) está garantizado a disminuir o permanecer igual. Nunca aumenta.
- Paso de Asignación: Al reasignar un punto a un centroide más cercano, por definición, se reduce su contribución a la suma total de distancias cuadradas.
- Paso de Actualización: La media de un conjunto de puntos es el punto que minimiza la suma de distancias euclidianas al cuadrado a dichos puntos. Al recalcular el centroide, encontramos el "mejor" centro posible para los puntos recién asignados, minimizando la inercia del cluster.

Un Resultado Matemático Clave

#### **Teorema**

El algoritmo K-Means **siempre converge** a un óptimo local.

- ¿Por qué? En cada paso, el valor de la función objetivo (Inercia) está garantizado a disminuir o permanecer igual. Nunca aumenta.
- Paso de Asignación: Al reasignar un punto a un centroide más cercano, por definición, se reduce su contribución a la suma total de distancias cuadradas.
- Paso de Actualización: La media de un conjunto de puntos es el punto que minimiza la suma de distancias euclidianas al cuadrado a dichos puntos. Al recalcular el centroide, encontramos el "mejor" centro posible para los puntos recién asignados, minimizando la inercia del cluster.

#### Para los interesados

Se demuestra formalmente este teorema utilizando que el centroide minimiza la suma de distancias al cuadrado:

$$J^{(t+1)} = J(C^{(t+1)}, \mu^{(t+1)}) \le J(C^{(t+1)}, \mu^{(t)}) \le J(C^{(t)}, \mu^{(t)}) = J^{(t)}$$

• La **Inercia** mide la cohesión del clustering. Un valor más bajo es generalmente mejor.

- La Inercia mide la cohesión del clustering. Un valor más bajo es generalmente mejor.
- **Problema:** La inercia siempre disminuye a medida que K aumenta. Si K = n (cada punto es un cluster), la inercia es 0. ¡Esto no es útil!

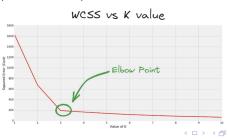
- La Inercia mide la cohesión del clustering. Un valor más bajo es generalmente mejor.
- **Problema:** La inercia siempre disminuye a medida que K aumenta. Si K = n (cada punto es un cluster), la inercia es 0. ¡Esto no es útil!
- Método del Codo (Elbow Method):

- La **Inercia** mide la cohesión del clustering. Un valor más bajo es generalmente mejor.
- **Problema:** La inercia siempre disminuye a medida que K aumenta. Si K = n (cada punto es un cluster), la inercia es 0. ¡Esto no es útil!
- Método del Codo (Elbow Method):
  - **①** Se ejecuta K-Means para un rango de valores de K (ej.,  $K=1,\ldots,10$ ).

- La Inercia mide la cohesión del clustering. Un valor más bajo es generalmente mejor.
- **Problema:** La inercia siempre disminuye a medida que K aumenta. Si K = n (cada punto es un cluster), la inercia es 0. ¡Esto no es útil!
- Método del Codo (Elbow Method):
  - Se ejecuta K-Means para un rango de valores de K (ej.,  $K = 1, \ldots, 10$ ).
  - $oldsymbol{2}$  Se grafica la Inercia (WCSS) en función de K.

- La **Inercia** mide la cohesión del clustering. Un valor más bajo es generalmente mejor.
- **Problema:** La inercia siempre disminuye a medida que K aumenta. Si K = n (cada punto es un cluster), la inercia es 0. ¡Esto no es útil!
- Método del Codo (Elbow Method):
  - lacktriangle Se ejecuta K-Means para un rango de valores de K (ej.,  $K=1,\ldots,10$ ).
  - Se grafica la Inercia (WCSS) en función de K.
  - 3 Se busca el "codo" en la gráfica: el punto donde la tasa de disminución de la inercia se aplana significativamente. Este punto es un buen candidato para el valor óptimo de K.

- La Inercia mide la cohesión del clustering. Un valor más bajo es generalmente mejor.
- **Problema:** La inercia siempre disminuye a medida que K aumenta. Si K = n (cada punto es un cluster), la inercia es 0. ¡Esto no es útil!
- Método del Codo (Elbow Method):
  - Se ejecuta K-Means para un rango de valores de K (ej.,  $K = 1, \ldots, 10$ ).
  - 2 Se grafica la Inercia (WCSS) en función de K.
  - 3 Se busca el "codo" en la gráfica: el punto donde la tasa de disminución de la inercia se aplana significativamente. Este punto es un buen candidato para el valor óptimo de K.



 Mide qué tan bien una observación está agrupada, considerando tanto la cohesión (proximidad a su propio cluster) como la separación (lejanía de otros clusters).

- Mide qué tan bien una observación está agrupada, considerando tanto la cohesión (proximidad a su propio cluster) como la separación (lejanía de otros clusters).
- Para cada punto i:

- Mide qué tan bien una observación está agrupada, considerando tanto la cohesión (proximidad a su propio cluster) como la separación (lejanía de otros clusters).
- Para cada punto i:
  - a(i): Distancia media a otros puntos en el mismo cluster.

- Mide qué tan bien una observación está agrupada, considerando tanto la cohesión (proximidad a su propio cluster) como la separación (lejanía de otros clusters).
- Para cada punto i:
  - a(i): Distancia media a otros puntos en el **mismo** cluster.
  - b(i): Distancia media a los puntos en el cluster más cercano (distinto al suyo).

- Mide qué tan bien una observación está agrupada, considerando tanto la cohesión (proximidad a su propio cluster) como la separación (lejanía de otros clusters).
- Para cada punto i:
  - a(i): Distancia media a otros puntos en el **mismo** cluster.
  - b(i): Distancia media a los puntos en el cluster más cercano (distinto al suyo).
- Coeficiente de Silueta para el punto i:

- Mide qué tan bien una observación está agrupada, considerando tanto la cohesión (proximidad a su propio cluster) como la separación (lejanía de otros clusters).
- Para cada punto i:
  - a(i): Distancia media a otros puntos en el **mismo** cluster.
  - b(i): Distancia media a los puntos en el cluster más cercano (distinto al suyo).
- Coeficiente de Silueta para el punto i:

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

Interpretación del valor (entre -1 y 1):

- Mide qué tan bien una observación está agrupada, considerando tanto la cohesión (proximidad a su propio cluster) como la separación (lejanía de otros clusters).
- Para cada punto i:
  - a(i): Distancia media a otros puntos en el **mismo** cluster.
  - b(i): Distancia media a los puntos en el cluster más cercano (distinto al suyo).
- Coeficiente de Silueta para el punto i:

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

- Interpretación del valor (entre -1 y 1):
  - $s(i) \approx 1 \implies$  El punto está bien agrupado.
  - $s(i) \approx 0 \implies$  El punto está en el límite entre dos clusters.
  - $s(i) \approx -1 \implies$  El punto podría estar en el cluster incorrecto.

- Mide qué tan bien una observación está agrupada, considerando tanto la cohesión (proximidad a su propio cluster) como la separación (lejanía de otros clusters).
- Para cada punto i:
  - a(i): Distancia media a otros puntos en el **mismo** cluster.
  - b(i): Distancia media a los puntos en el cluster más cercano (distinto al suyo).
- Coeficiente de Silueta para el punto i:

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

- Interpretación del valor (entre -1 y 1):
  - $s(i) \approx 1 \implies$  El punto está bien agrupado.
  - $s(i) \approx 0 \implies$  El punto está en el límite entre dos clusters.
  - $s(i) \approx -1 \implies$  El punto podría estar en el cluster incorrecto.
- El score de silueta de un clustering es el promedio de s(i) sobre todos los puntos.

# **Pausa**

(15 minutos)

• A diferencia de K-Means, **no requiere** pre-especificar el número de clusters *K*.

- A diferencia de K-Means, no requiere pre-especificar el número de clusters K.
- Crea una jerarquía de clusters que se puede visualizar con un diagrama de árbol llamado dendrograma.

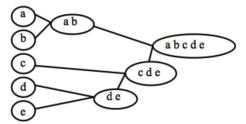
- A diferencia de K-Means, no requiere pre-especificar el número de clusters K.
- Crea una jerarquía de clusters que se puede visualizar con un diagrama de árbol llamado dendrograma.
- Dos enfoques principales:

- A diferencia de K-Means, no requiere pre-especificar el número de clusters K.
- Crea una jerarquía de clusters que se puede visualizar con un diagrama de árbol llamado dendrograma.
- Dos enfoques principales:
  - **Aglomerativo (Bottom-Up):** El más común. Comienza con cada punto como un cluster individual y fusiona progresivamente los pares de clusters más cercanos hasta que solo queda uno.

- A diferencia de K-Means, no requiere pre-especificar el número de clusters K.
- Crea una jerarquía de clusters que se puede visualizar con un diagrama de árbol llamado dendrograma.
- Dos enfoques principales:
  - Aglomerativo (Bottom-Up): El más común. Comienza con cada punto como un cluster individual y fusiona progresivamente los pares de clusters más cercanos hasta que solo queda uno.
  - Divisivo (Top-Down): Comienza con todos los puntos en un único cluster y los divide recursivamente en sub-clusters.

## Clustering Jerárquico: Creando una Taxonomía

- A diferencia de K-Means, no requiere pre-especificar el número de clusters K.
- Crea una jerarquía de clusters que se puede visualizar con un diagrama de árbol llamado **dendrograma**.
- Dos enfoques principales:
  - Aglomerativo (Bottom-Up): El más común. Comienza con cada punto como un cluster individual y fusiona progresivamente los pares de clusters más cercanos hasta que solo queda uno.
  - **Divisivo (Top-Down):** Comienza con todos los puntos en un único cluster y los divide recursivamente en sub-clusters.



## Algoritmo Jerárquico Aglomerativo

Construyendo el Dendrograma "Bottom-Up"

**1 Inicialización:** Empezar con n clusters, donde cada observación es su propio cluster. Calcular todas las  $\binom{n}{2}$  disimilitudes (distancias) entre los pares de observaciones.

## Algoritmo Jerárquico Aglomerativo

Construyendo el Dendrograma "Bottom-Up"

- **1 Inicialización:** Empezar con n clusters, donde cada observación es su propio cluster. Calcular todas las  $\binom{n}{2}$  disimilitudes (distancias) entre los pares de observaciones.
- 2 Iterar n-1 veces (mientras haya más de un cluster):
  - a) Encontrar par más cercano: Identificar el par de clusters (A, B)
    que son más similares (tienen la menor disimilitud) según el criterio de
    linkage elegido.
  - b) Fusionar: Unir los clusters A y B en un nuevo cluster único (AB). La disimilitud a la que se fusionaron define la altura en el dendrograma.
  - c) Actualizar Distancias: Calcular las disimilitudes entre el nuevo cluster (AB) y todos los demás clusters existentes.

## Algoritmo Jerárquico Aglomerativo

Construyendo el Dendrograma "Bottom-Up"

- **1 Inicialización:** Empezar con n clusters, donde cada observación es su propio cluster. Calcular todas las  $\binom{n}{2}$  disimilitudes (distancias) entre los pares de observaciones.
- 2 Iterar n-1 veces (mientras haya más de un cluster):
  - a) Encontrar par más cercano: Identificar el par de clusters (A, B) que son más similares (tienen la menor disimilitud) según el criterio de linkage elegido.
  - b) Fusionar: Unir los clusters A y B en un nuevo cluster único (AB). La disimilitud a la que se fusionaron define la altura en el dendrograma.
  - c) Actualizar Distancias: Calcular las disimilitudes entre el nuevo cluster (AB) y todos los demás clusters existentes.
- Finalización: El algoritmo termina cuando todas las observaciones pertenecen a un único cluster.

Este es un algoritmo "voraz" (greedy): en cada paso toma la decisión localmente óptima (la mejor fusión), y esa decisión es final.

Dividiendo el Universo

 Inicialización: Empezar con un único cluster que contiene todas las n observaciones.

- Inicialización: Empezar con un único cluster que contiene todas las n observaciones.
- ② Iterar:
  - a) Seleccionar un cluster a dividir.

- Inicialización: Empezar con un único cluster que contiene todas las n observaciones.
- ② Iterar:
  - a) Seleccionar un cluster a dividir.
  - b) Realizar la división: Partir el cluster seleccionado en dos sub-clusters. La división se debe hacer de forma que los dos nuevos grupos estén lo más separados posible entre sí.

- Inicialización: Empezar con un único cluster que contiene todas las n observaciones.
- ② Iterar:
  - a) Seleccionar un cluster a dividir.
  - b) Realizar la división: Partir el cluster seleccionado en dos sub-clusters. La división se debe hacer de forma que los dos nuevos grupos estén lo más separados posible entre sí.
    - Este sub-problema es computacionalmente complejo, ya que hay  $2^{k-1} 1$  formas de dividir un cluster de k puntos en dos.

- Inicialización: Empezar con un único cluster que contiene todas las n observaciones.
- 4 Iterar:
  - a) Seleccionar un cluster a dividir.
  - b) Realizar la división: Partir el cluster seleccionado en dos sub-clusters. La división se debe hacer de forma que los dos nuevos grupos estén lo más separados posible entre sí.
    - Este sub-problema es computacionalmente complejo, ya que hay  $2^{k-1}-1$  formas de dividir un cluster de k puntos en dos.
  - c) Repetir el proceso recursivamente sobre los nuevos clusters hasta que cada observación forme su propio cluster.

### Dividiendo el Universo

- Inicialización: Empezar con un único cluster que contiene todas las n observaciones.
- ② Iterar:
  - a) Seleccionar un cluster a dividir.
  - b) Realizar la división: Partir el cluster seleccionado en dos sub-clusters. La división se debe hacer de forma que los dos nuevos grupos estén lo más separados posible entre sí.
    - Este sub-problema es computacionalmente complejo, ya que hay  $2^{k-1} 1$  formas de dividir un cluster de k puntos en dos.
  - c) Repetir el proceso recursivamente sobre los nuevos clusters hasta que cada observación forme su propio cluster.

### Aglomerativo vs. Divisivo:

### Dividiendo el Universo

- Inicialización: Empezar con un único cluster que contiene todas las n observaciones.
- Iterar:
  - a) Seleccionar un cluster a dividir.
  - b) Realizar la división: Partir el cluster seleccionado en dos sub-clusters. La división se debe hacer de forma que los dos nuevos grupos estén lo más separados posible entre sí.
    - Este sub-problema es computacionalmente complejo, ya que hay  $2^{k-1}-1$  formas de dividir un cluster de k puntos en dos.
  - c) Repetir el proceso recursivamente sobre los nuevos clusters hasta que cada observación forme su propio cluster.

### Aglomerativo vs. Divisivo:

 Aglomerativo: Se enfoca en micro-estructuras (qué puntos son muy similares). Es computacionalmente más eficiente y mucho más común en la práctica.

### Dividiendo el Universo

- Inicialización: Empezar con un único cluster que contiene todas las n observaciones.
- ② Iterar:
  - a) Seleccionar un cluster a dividir.
  - b) Realizar la división: Partir el cluster seleccionado en dos sub-clusters. La división se debe hacer de forma que los dos nuevos grupos estén lo más separados posible entre sí.
    - Este sub-problema es computacionalmente complejo, ya que hay  $2^{k-1} 1$  formas de dividir un cluster de k puntos en dos.
  - c) Repetir el proceso recursivamente sobre los nuevos clusters hasta que cada observación forme su propio cluster.

### Aglomerativo vs. Divisivo:

- Aglomerativo: Se enfoca en micro-estructuras (qué puntos son muy similares). Es computacionalmente más eficiente y mucho más común en la práctica.
- Divisivo: Se enfoca en macro-estructuras (cuáles son las divisiones principales en los datos). Puede ser más preciso, pero su costo computacional es prohibitivo para datasets grandes.

 El dendrograma muestra el orden de las fusiones. Cada hoja es una observación.

- El dendrograma muestra el orden de las fusiones. Cada hoja es una observación.
- El eje vertical representa la disimilitud (distancia) a la que se fusionan los clusters. Fusiones más bajas indican mayor similitud.

- El dendrograma muestra el orden de las fusiones. Cada hoja es una observación.
- El eje vertical representa la disimilitud (distancia) a la que se fusionan los clusters. Fusiones más bajas indican mayor similitud.
- Se pueden obtener K clusters haciendo un **corte horizontal** en el dendrograma.

- El dendrograma muestra el orden de las fusiones. Cada hoja es una observación.
- El eje vertical representa la disimilitud (distancia) a la que se fusionan los clusters. Fusiones más bajas indican mayor similitud.
- Se pueden obtener K clusters haciendo un corte horizontal en el dendrograma.



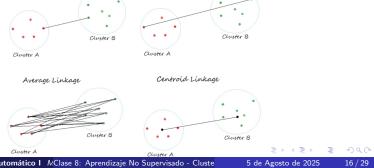
• Criterio de Linkage: ¿Cómo se mide la distancia entre dos clusters?

- Criterio de Linkage: ¿Cómo se mide la distancia entre dos clusters?
  - Complete (Máximo): Distancia máxima entre un punto de un cluster y un punto del otro. Tiende a crear clusters compactos y balanceados.

- Criterio de Linkage: ¿Cómo se mide la distancia entre dos clusters?
  - Complete (Máximo): Distancia máxima entre un punto de un cluster y un punto del otro. Tiende a crear clusters compactos y balanceados.
  - **Single (Mínimo):** Distancia mínima. Puede crear clusters alargados ("efecto cadena").

- Criterio de Linkage: ¿Cómo se mide la distancia entre dos clusters?
  - Complete (Máximo): Distancia máxima entre un punto de un cluster y un punto del otro. Tiende a crear clusters compactos y balanceados.
  - **Single (Mínimo):** Distancia mínima. Puede crear clusters alargados ("efecto cadena").
  - **Average (Promedio):** Distancia promedio entre todos los pares de puntos. Un buen compromiso entre los dos anteriores.

- Criterio de Linkage: ¿Cómo se mide la distancia entre dos clusters?
  - Complete (Máximo): Distancia máxima entre un punto de un cluster y un punto del otro. Tiende a crear clusters compactos y balanceados.
  - Single (Mínimo): Distancia mínima. Puede crear clusters alargados ("efecto cadena").
  - Average (Promedio): Distancia promedio entre todos los pares de puntos. Un buen compromiso entre los dos anteriores.



Complete Linkage

Single Linkage

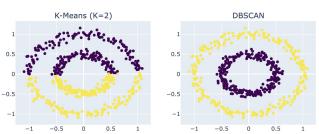
• **DBSCAN**: Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise.

- DBSCAN: Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise.
- Idea Clave: Un cluster es una región de alta densidad de puntos, separada de otras regiones similares por áreas de baja densidad.

- DBSCAN: Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise.
- **Idea Clave:** Un cluster es una región de alta densidad de puntos, separada de otras regiones similares por áreas de baja densidad.
- Ventajas Principales:
  - No asume que los clusters tienen formas esféricas. Puede encontrar clusters de formas arbitrarias.

- DBSCAN: Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise.
- **Idea Clave:** Un cluster es una región de alta densidad de puntos, separada de otras regiones similares por áreas de baja densidad.
- Ventajas Principales:
  - No asume que los clusters tienen formas esféricas. Puede encontrar clusters de formas arbitrarias.
  - Es robusto a los outliers, a los que identifica explícitamente como ruido.

- DBSCAN: Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise.
- **Idea Clave:** Un cluster es una región de alta densidad de puntos, separada de otras regiones similares por áreas de baja densidad.
- Ventajas Principales:
  - No asume que los clusters tienen formas esféricas. Puede encontrar clusters de formas arbitrarias.
  - Es robusto a los outliers, a los que identifica explícitamente como ruido.
  - No requiere especificar el número de clusters de antemano.



Puntos Núcleo, Frontera y Ruido

Puntos Núcleo, Frontera y Ruido

DBSCAN se define por dos hiperparámetros:

Puntos Núcleo, Frontera y Ruido

DBSCAN se define por dos hiperparámetros:

•  $\epsilon$  (eps): El radio de la vecindad a considerar alrededor de cada punto.

Puntos Núcleo, Frontera y Ruido

DBSCAN se define por dos hiperparámetros:

- $\epsilon$  (eps): El radio de la vecindad a considerar alrededor de cada punto.
- minPts: El número mínimo de puntos requeridos dentro de la vecindad  $\epsilon$  para que una región sea considerada densa.

Puntos Núcleo, Frontera y Ruido

DBSCAN se define por dos hiperparámetros:

- $\epsilon$  (eps): El radio de la vecindad a considerar alrededor de cada punto.
- minPts: El número mínimo de puntos requeridos dentro de la vecindad  $\epsilon$  para que una región sea considerada densa.

A partir de ellos, los puntos se clasifican como:

Puntos Núcleo, Frontera y Ruido

DBSCAN se define por dos hiperparámetros:

- $\epsilon$  (eps): El radio de la vecindad a considerar alrededor de cada punto.
- minPts: El número mínimo de puntos requeridos dentro de la vecindad  $\epsilon$  para que una región sea considerada densa.

A partir de ellos, los puntos se clasifican como:

• Punto Núcleo (Core Point): Un punto con al menos minPts vecinos (incluyéndose a sí mismo) dentro de su radio  $\epsilon$ .

Puntos Núcleo, Frontera y Ruido

DBSCAN se define por dos hiperparámetros:

- $\epsilon$  (eps): El radio de la vecindad a considerar alrededor de cada punto.
- minPts: El número mínimo de puntos requeridos dentro de la vecindad  $\epsilon$  para que una región sea considerada densa.

A partir de ellos, los puntos se clasifican como:

- Punto Núcleo (Core Point): Un punto con al menos minPts vecinos (incluyéndose a sí mismo) dentro de su radio  $\epsilon$ .
- Punto Frontera (Border Point): Un punto que no es núcleo, pero es vecino de un punto núcleo (está en la "orilla" de un cluster).

# DBSCAN: Conceptos Clave

Puntos Núcleo, Frontera y Ruido

DBSCAN se define por dos hiperparámetros:

- $\epsilon$  (eps): El radio de la vecindad a considerar alrededor de cada punto.
- minPts: El número mínimo de puntos requeridos dentro de la vecindad  $\epsilon$  para que una región sea considerada densa.

A partir de ellos, los puntos se clasifican como:

- Punto Núcleo (Core Point): Un punto con al menos minPts vecinos (incluyéndose a sí mismo) dentro de su radio  $\epsilon$ .
- Punto Frontera (Border Point): Un punto que no es núcleo, pero es vecino de un punto núcleo (está en la "orilla" de un cluster).
- Punto de Ruido (Noise Point): Un punto que no es ni núcleo ni frontera. Es un outlier.

# DBSCAN: Conceptos Clave

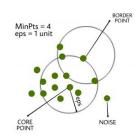
Puntos Núcleo, Frontera y Ruido

DBSCAN se define por dos hiperparámetros:

- $\epsilon$  (eps): El radio de la vecindad a considerar alrededor de cada punto.
- minPts: El número mínimo de puntos requeridos dentro de la vecindad  $\epsilon$  para que una región sea considerada densa.

A partir de ellos, los puntos se clasifican como:

- Punto Núcleo (Core Point): Un punto con al menos minPts vecinos (incluyéndose a sí mismo) dentro de su radio  $\epsilon$ .
- Punto Frontera (Border Point): Un punto que no es núcleo, pero es vecino de un punto núcleo (está en la "orilla" de un cluster).
- Punto de Ruido (Noise Point): Un punto que no es ni núcleo ni frontera. Es un outlier.



Seleccionar un punto arbitrario p que no haya sido visitado.

- Seleccionar un punto arbitrario p que no haya sido visitado.
- **②** Marcar p como visitado y encontrar sus vecinos en el radio  $\epsilon$ .

- Seleccionar un punto arbitrario p que no haya sido visitado.
- ② Marcar p como visitado y encontrar sus vecinos en el radio  $\epsilon$ .
- Si el número de vecinos ≥ minPts:

- Seleccionar un punto arbitrario p que no haya sido visitado.
- ② Marcar p como visitado y encontrar sus vecinos en el radio  $\epsilon$ .
- Si el número de vecinos ≥ minPts:
  - p es un **punto núcleo**. Se crea un nuevo cluster y se le añade p.

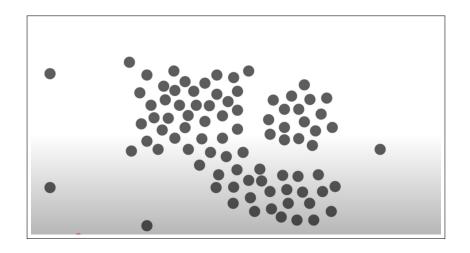
- **1** Seleccionar un punto arbitrario p que no haya sido visitado.
- ② Marcar p como visitado y encontrar sus vecinos en el radio  $\epsilon$ .
- Si el número de vecinos > minPts:
  - p es un **punto núcleo**. Se crea un nuevo cluster y se le añade p.
  - Se examinan todos los vecinos de p. Si un vecino q también es un punto núcleo, sus vecinos se añaden al cluster. El proceso se repite, expandiendo el cluster a partir de todos los puntos núcleo alcanzables (density-reachable).

- **1** Seleccionar un punto arbitrario p que no haya sido visitado.
- ② Marcar p como visitado y encontrar sus vecinos en el radio  $\epsilon$ .
- Si el número de vecinos ≥ minPts:
  - p es un punto núcleo. Se crea un nuevo cluster y se le añade p.
  - Se examinan todos los vecinos de p. Si un vecino q también es un punto núcleo, sus vecinos se añaden al cluster. El proceso se repite, expandiendo el cluster a partir de todos los puntos núcleo alcanzables (density-reachable).
- Si no:

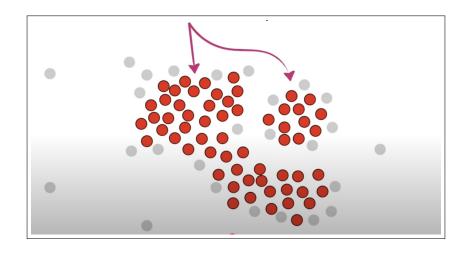
- **1** Seleccionar un punto arbitrario p que no haya sido visitado.
- ② Marcar p como visitado y encontrar sus vecinos en el radio  $\epsilon$ .
- Si el número de vecinos ≥ minPts:
  - p es un punto núcleo. Se crea un nuevo cluster y se le añade p.
  - Se examinan todos los vecinos de p. Si un vecino q también es un punto núcleo, sus vecinos se añaden al cluster. El proceso se repite, expandiendo el cluster a partir de todos los puntos núcleo alcanzables (density-reachable).
- Si no:
  - p es marcado (temporalmente) como ruido. Puede ser "reclamado" más tarde por un cluster si resulta ser un punto frontera.

- **1** Seleccionar un punto arbitrario p que no haya sido visitado.
- 2 Marcar p como visitado y encontrar sus vecinos en el radio  $\epsilon$ .
- **3** Si el número de vecinos ≥ minPts:
  - p es un **punto núcleo**. Se crea un nuevo cluster y se le añade p.
  - Se examinan todos los vecinos de p. Si un vecino q también es un punto núcleo, sus vecinos se añaden al cluster. El proceso se repite, expandiendo el cluster a partir de todos los puntos núcleo alcanzables (density-reachable).
- Si no:
  - *p* es marcado (temporalmente) como **ruido**. Puede ser "reclamado" más tarde por un cluster si resulta ser un punto frontera.
- Repetir los pasos 1-4 hasta que todos los puntos hayan sido visitados.

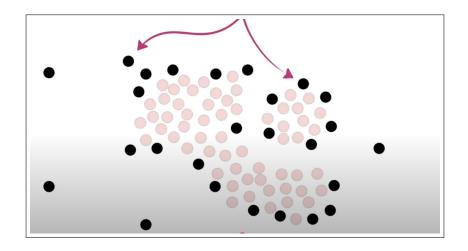
# DBSCAN: Ejemplo Visual del Proceso (1)



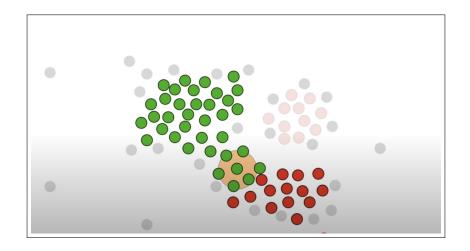
# DBSCAN: Ejemplo Visual del Proceso (2)



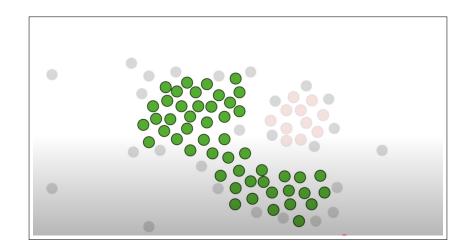
# DBSCAN: Ejemplo Visual del Proceso (3)



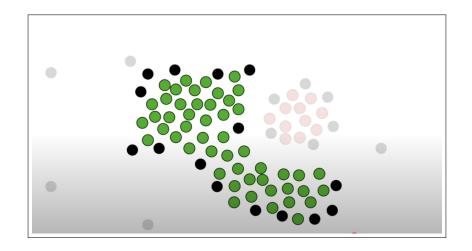
# DBSCAN: Ejemplo Visual del Proceso (4)



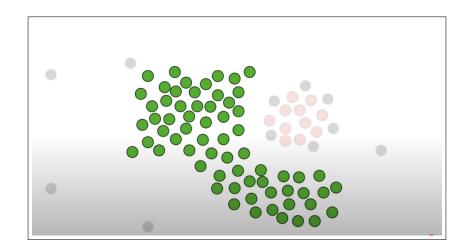
# DBSCAN: Ejemplo Visual del Proceso (5)



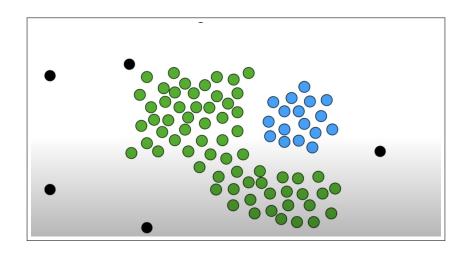
# DBSCAN: Ejemplo Visual del Proceso (6)



# DBSCAN: Ejemplo Visual del Proceso (7)



# DBSCAN: Ejemplo Visual del Proceso (8)



# Comparación de Métodos de Clustering

Método	Ventajas	Desventajas
K-Means	- Simple y rápido.	- Requiere K a priori.
	- Escalable a grandes datasets.	- Sensible a la inicialización y
	- Bueno para clusters	outliers.
	esféricos/convexos.	- Malo para formas no
	,	convexas y densidades
		variables.
Jerárquico	- No requiere K.	- Computacionalmente costoso
	- El dendrograma es muy	$(O(n^2)$ o más).
	informativo y visual.	- Las fusiones son irreversibles.
		- Sensible al tipo de linkage.
DBSCAN	- No requiere K.	- La elección de 'eps' y 'minPts'
	- Encuentra formas arbitrarias.	es crucial y no trivial.
	- Robusto a outliers (ruido).	- No funciona bien con clusters
		de densidades muy diferentes.

 El aprendizaje no supervisado, y en particular el clustering, es una herramienta poderosa para explorar y encontrar estructura en datos no etiquetados.

- El aprendizaje no supervisado, y en particular el clustering, es una herramienta poderosa para explorar y encontrar estructura en datos no etiquetados.
- K-Means agrupa por centroides. Es rápido y efectivo para clusters compactos y esféricos. Se evalúa con *Inercia* y *Coeficiente de Silueta*.

- El aprendizaje no supervisado, y en particular el clustering, es una herramienta poderosa para explorar y encontrar estructura en datos no etiquetados.
- K-Means agrupa por centroides. Es rápido y efectivo para clusters compactos y esféricos. Se evalúa con Inercia y Coeficiente de Silueta.
- Clustering Jerárquico construye una taxonomía de los datos, visualizada en un dendrograma, que ofrece una visión multi-escala de las agrupaciones.

- El aprendizaje no supervisado, y en particular el clustering, es una herramienta poderosa para explorar y encontrar estructura en datos no etiquetados.
- K-Means agrupa por centroides. Es rápido y efectivo para clusters compactos y esféricos. Se evalúa con *Inercia* y *Coeficiente de Silueta*.
- Clustering Jerárquico construye una taxonomía de los datos, visualizada en un dendrograma, que ofrece una visión multi-escala de las agrupaciones.
- DBSCAN agrupa por densidad. Es excelente para identificar clusters de formas complejas y para separar el ruido de la señal.

- El aprendizaje no supervisado, y en particular el clustering, es una herramienta poderosa para explorar y encontrar estructura en datos no etiquetados.
- K-Means agrupa por centroides. Es rápido y efectivo para clusters compactos y esféricos. Se evalúa con Inercia y Coeficiente de Silueta.
- Clustering Jerárquico construye una taxonomía de los datos, visualizada en un dendrograma, que ofrece una visión multi-escala de las agrupaciones.
- DBSCAN agrupa por densidad. Es excelente para identificar clusters de formas complejas y para separar el ruido de la señal.
- La elección del método depende fundamentalmente de la estructura de los datos y los objetivos del análisis.

- El aprendizaje no supervisado, y en particular el clustering, es una herramienta poderosa para explorar y encontrar estructura en datos no etiquetados.
- K-Means agrupa por centroides. Es rápido y efectivo para clusters compactos y esféricos. Se evalúa con Inercia y Coeficiente de Silueta.
- Clustering Jerárquico construye una taxonomía de los datos, visualizada en un dendrograma, que ofrece una visión multi-escala de las agrupaciones.
- DBSCAN agrupa por densidad. Es excelente para identificar clusters de formas complejas y para separar el ruido de la señal.
- La elección del método depende fundamentalmente de la estructura de los datos y los objetivos del análisis.
- A continuación: Taller Práctico para aplicar estos métodos en Python.