Machine Learning aplicado a las Ciencias Sociales

Clase 3. Fundamentos de clustering

factor-data
EIDAES_UNSAM

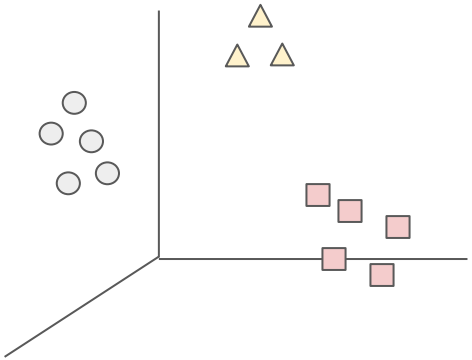
Clustering

- Amplia clase de métodos que buscan detectar grupos y subgrupos en los datos

    - Dado un conjunto de clientes, ¿es posible encontrar segmentos de clientes similares, según su historial de compras?
    - Agrupar películas en función de sus clasificaciones
    - Encontrar grupos de jurisdicciones en función de características sociodemográficas
    - Etc...

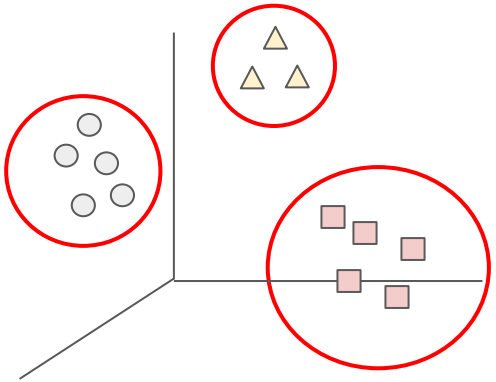
Clustering

Encontrar **subgrupos** (*clústers*) en los datos



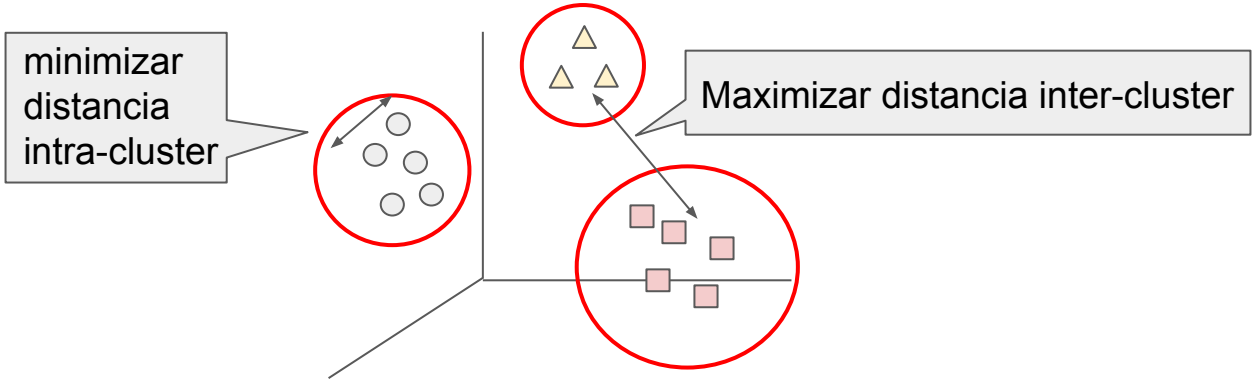
Clustering

Encontrar **subgrupos** (*clústers*) en los datos



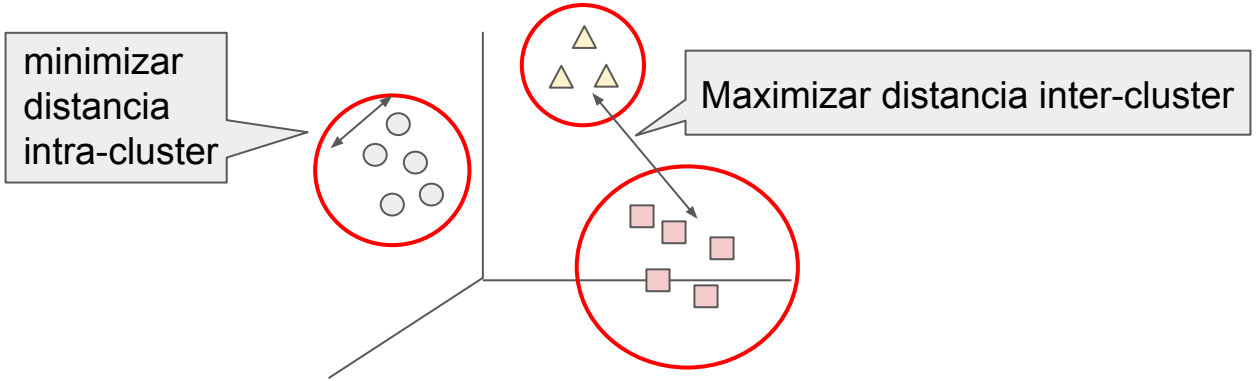
Clustering

Encontrar **subgrupos** (*clústers*) en los datos



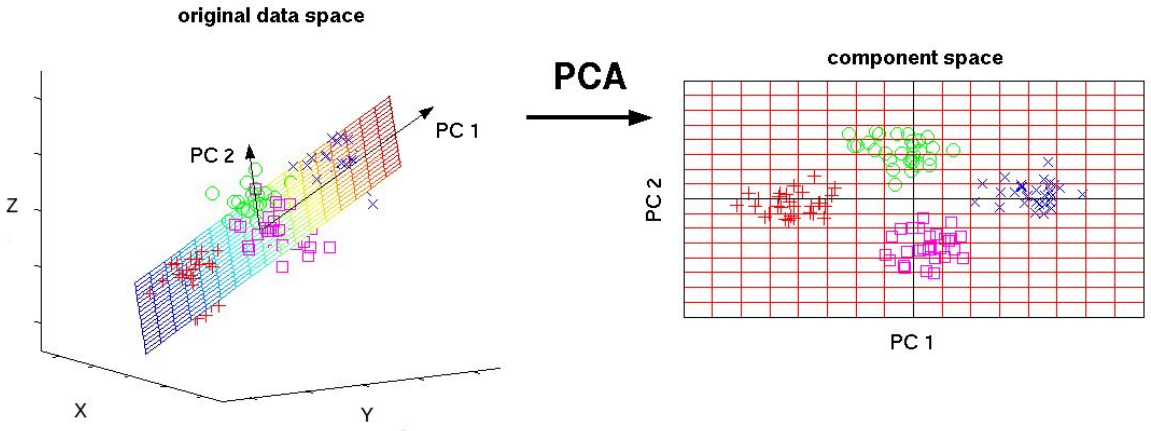
Clustering

Encontrar **subgrupos** (*clústers*) en los datos



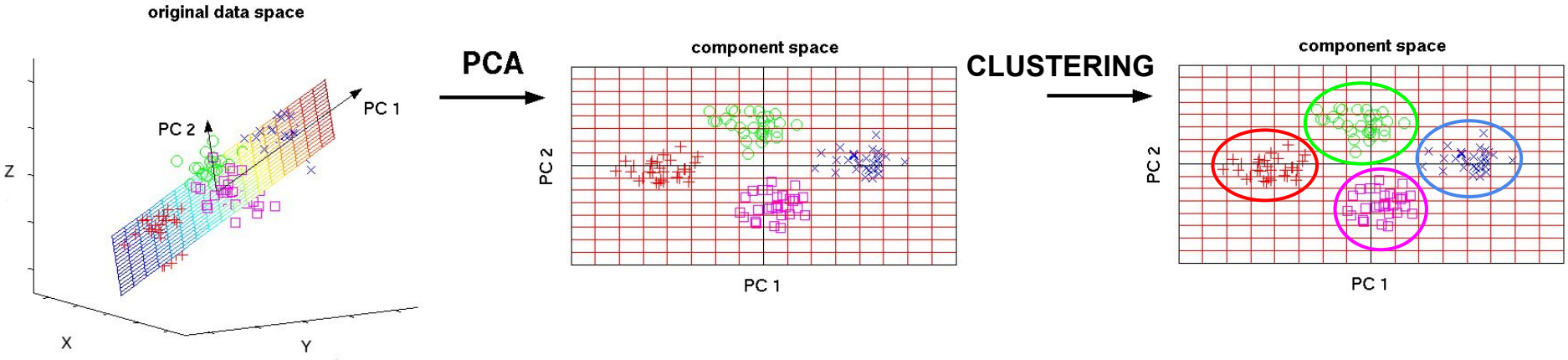
Observaciones dentro de un cluster **similares**
Observaciones entre clusters **no similares**

Clustering - Diferencia con PCA



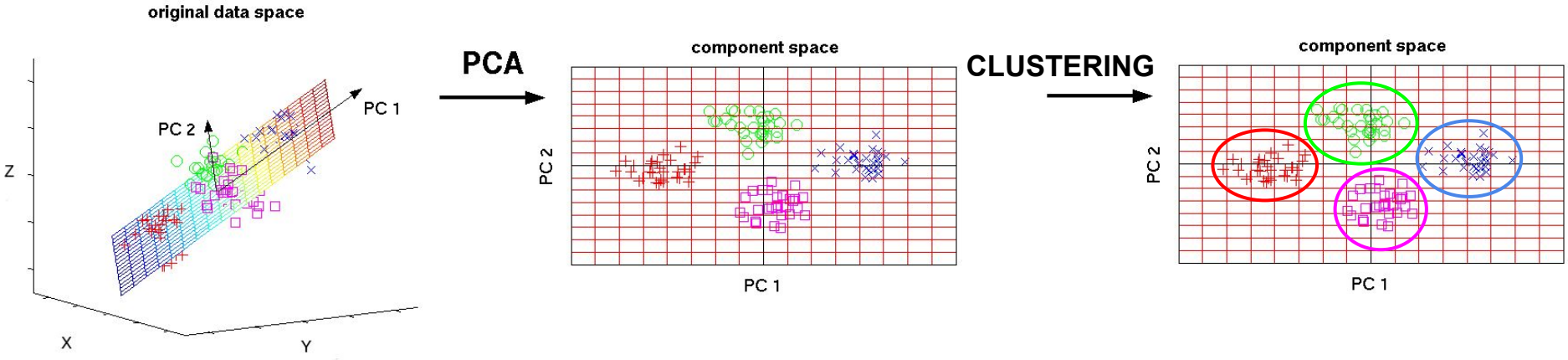
Reducir dimensión maximizando la varianza

Clustering - Diferencia con PCA



Reducir dimensión maximizando la varianza

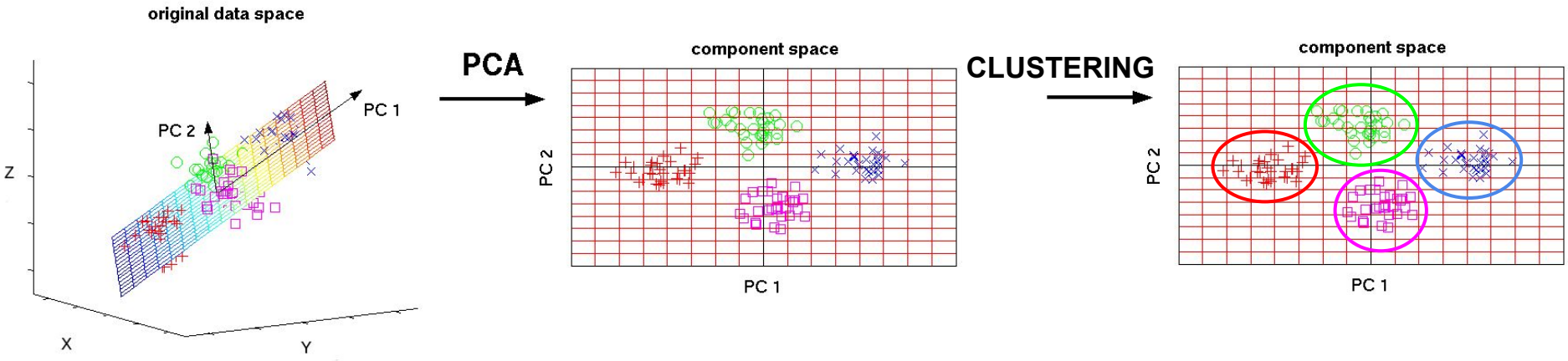
Clustering - Diferencia con PCA



Reducir dimensión maximizando la varianza

Encontrar grupos homogéneos

Clustering - Diferencia con PCA



Reducir dimensión maximizando la varianza

Encontrar grupos homogéneos

Se puede encontrar grupos en el espacio de features original
Si son muchos
-> podría ser costoso computacionalmente
-> podrían esconderse las características que mejor agrupan los datos

Tipos de problemas

- Buscamos encontrar grupos de casos que sean parecidos entre sí
- Es necesario definir qué significa *similitud* o *diferencia*
- El conocimiento del dominio es fundamental en esta definición

Dos métodos (entre muchos otros)

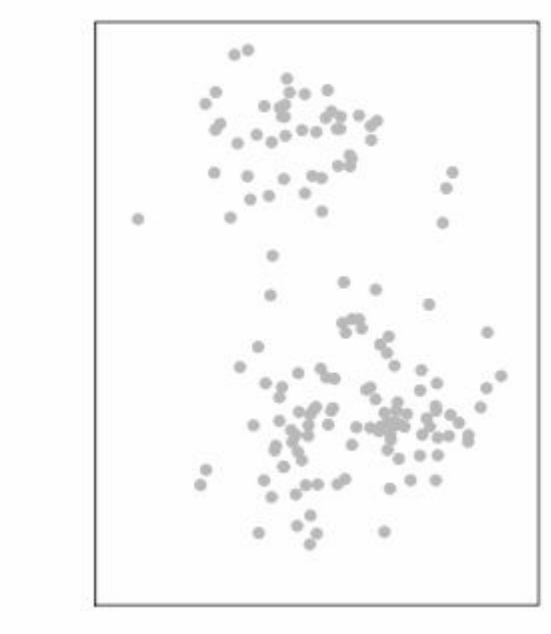
- K-medias

Encontrar una partición de las observaciones según un número pre-definido de clusters

Dos métodos (entre muchos otros)

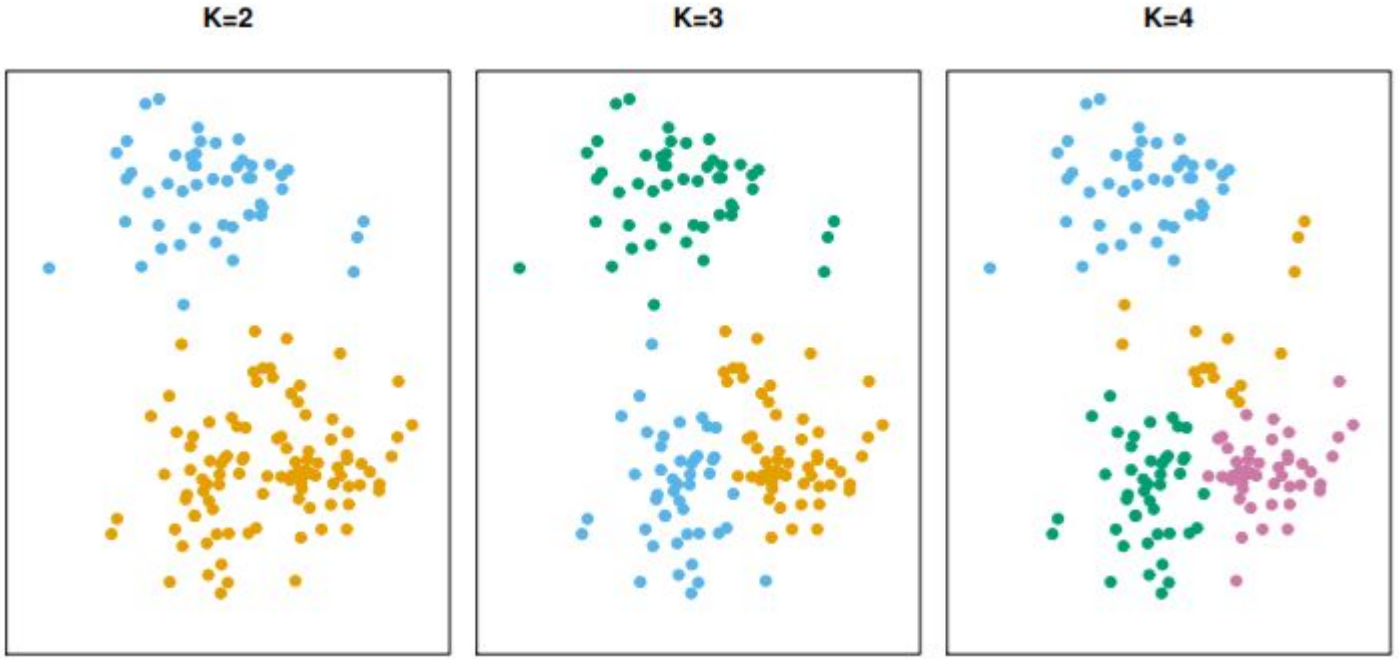
- Clustering jerárquico
  - No conocemos a priori el número de clusters
  - Usamos el *dendograma* para definirlo

K-Medias



- Cada puntito es una persona, caracterizada por su experiencia laboral (eje X) y su ingreso (eje Y)
- ¿Cuántos grupos existen?

K-Medias



K-Medias

- Tenemos K grupos C_1, C_2,..., C_K
- Cada grupo tiene dos propiedades:
  - $C_1 \cup C_2 \cup \ldots \cup C_K = \{1, 2, 3, \ldots, n\}$, es decir que cada unidad pertenece a un cluster
  - $C_1 \cap C_2 \cap \ldots \cap C_K = \emptyset$, es decir, que elemento queda clasificado en un solo cluster

K-Medias

- La idea es que un buen esquema de clustering implica que adentro del cluster existe la menor variabilidad posible
- Variabilidad intra-cluster WCV(C_k): medida que indica cuánto se diferencian los elementos al interior de un cluster

$$\underset{C_1, C_2, \ldots, C_K}{\text{minimize}} \left\{ \sum_{k=1}^{K} WCV(C_k) \right\}$$

K-Medias

- ¿Cómo definimos la medida de variación intra cluster -WCV-? Típicamente, la distancia euclidiana:

$$WCV(C_k) = \frac{1}{|C_k|} \sum_{i,i' \in C_k} \sum_{j=1}^{p} \left(x_{i,j} - x_{i',j} \right)^2$$

- Entonces, queremos minimizar (**nuestra función objetivo**)

$$\underset{C_1, C_2, \ldots, C_k}{\text{minimize}} \left\{ \sum_{k=1}^{K} \frac{1}{|C_k|} \sum_{i,i' \in C_k} \sum_{j=1}^{p} \left(x_{i,j} - x_{i',j} \right)^2 \right\}$$

K-Medias - Algoritmo

1. Asignar aleatoriamente cada observación a un cluster (entre 1 y K). Esto sirve como un punto de inicialización

2. Repetir hasta que la asignación deje de cambiar:

    2.1 Para cada uno de los K clusters, computar el centroide (el vector que contiene el promedio de cada una de las variables a considerar)

    2.2 Computar la distancia euclidiana de cada caso a cada centroide y asignar cada caso al cluster con el centroide más cercano

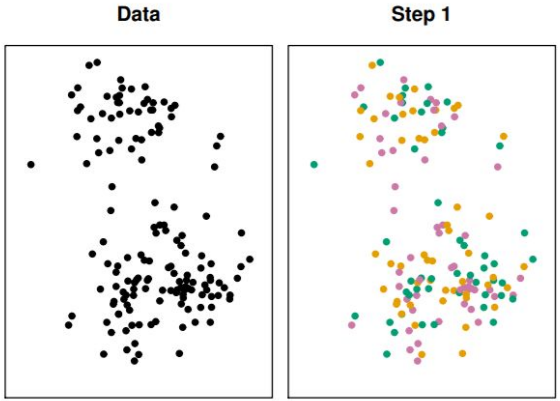
K-Medias - Algoritmo

Definimos el número de clusters que buscamos (k)

K-Medias - Algoritmo

Inicializamos los centroides de forma aleatoria

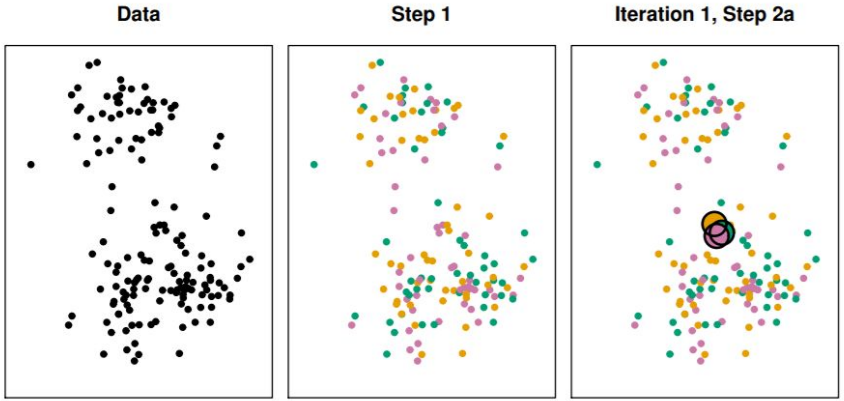
Definimos el número de clusters que buscamos (k)



K-Medias - Algoritmo

Inicializamos los centroides de forma aleatoria

Definimos el número de clusters que buscamos (k)

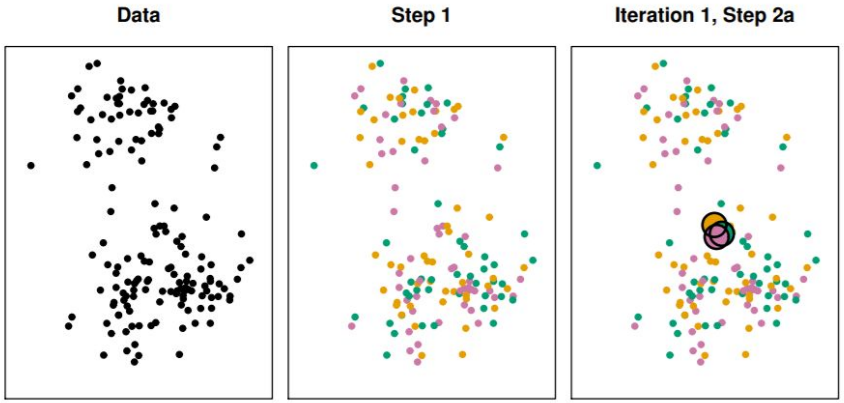


Calculamos los **centroides** (centros) de cada cluster como el promedio de las features de sus samples

K-Medias - Algoritmo

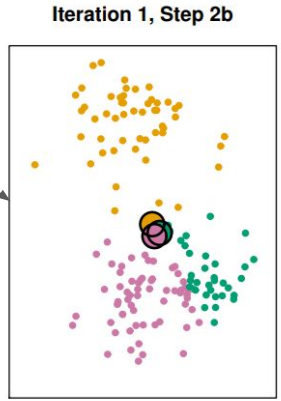
Inicializamos los centroides de forma aleatoria

Definimos el número de clusters que buscamos (k)



Calculamos los **centroides** (centros) de cada cluster como el promedio de las features de sus samples

Asignamos cada caso al cluster con centroide más cercano

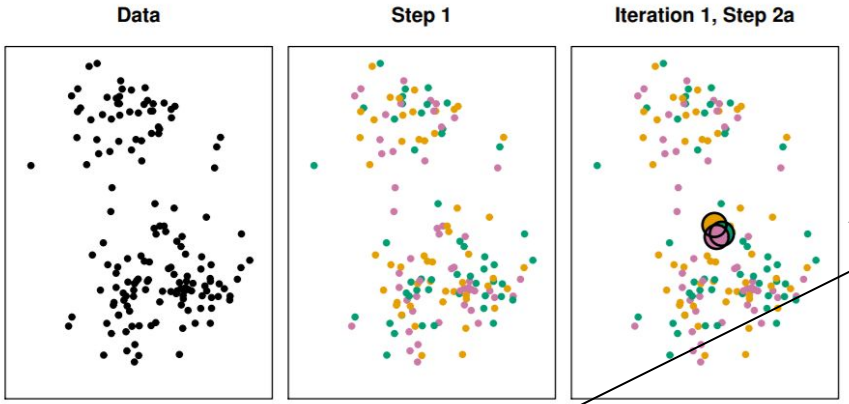


factor~data
EIDAES_UNSAM

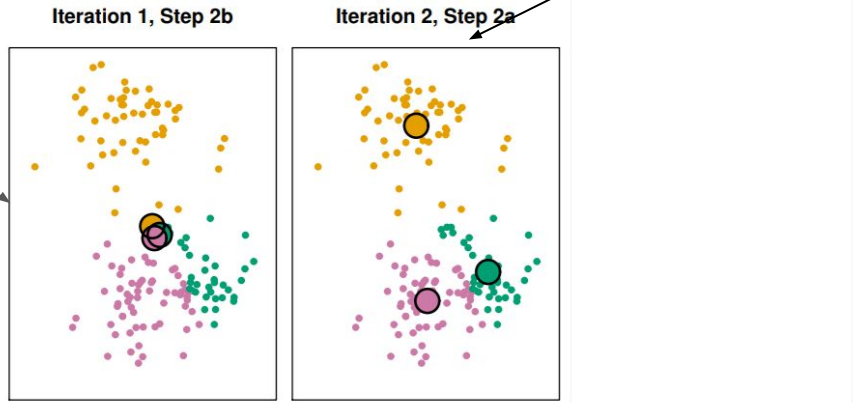
K-Medias - Algoritmo

Inicializamos los centroides de forma aleatoria

Definimos el número de clusters que buscamos (k)



Calculamos los **centroides** (centros) de cada cluster como el promedio de las features de sus samples



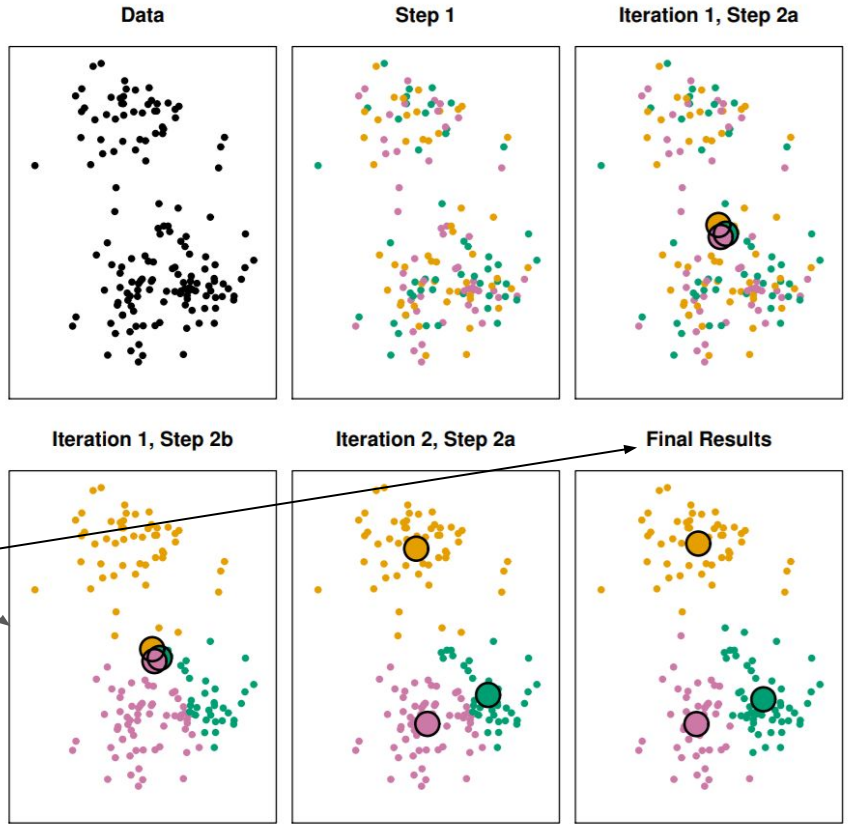
Asignamos cada caso al cluster con centroide más cercano

factor~data
EIDAES_UNSAM

K-Medias - Algoritmo

Inicializamos los centroides de forma aleatoria

Definimos el número de clusters que buscamos (k)

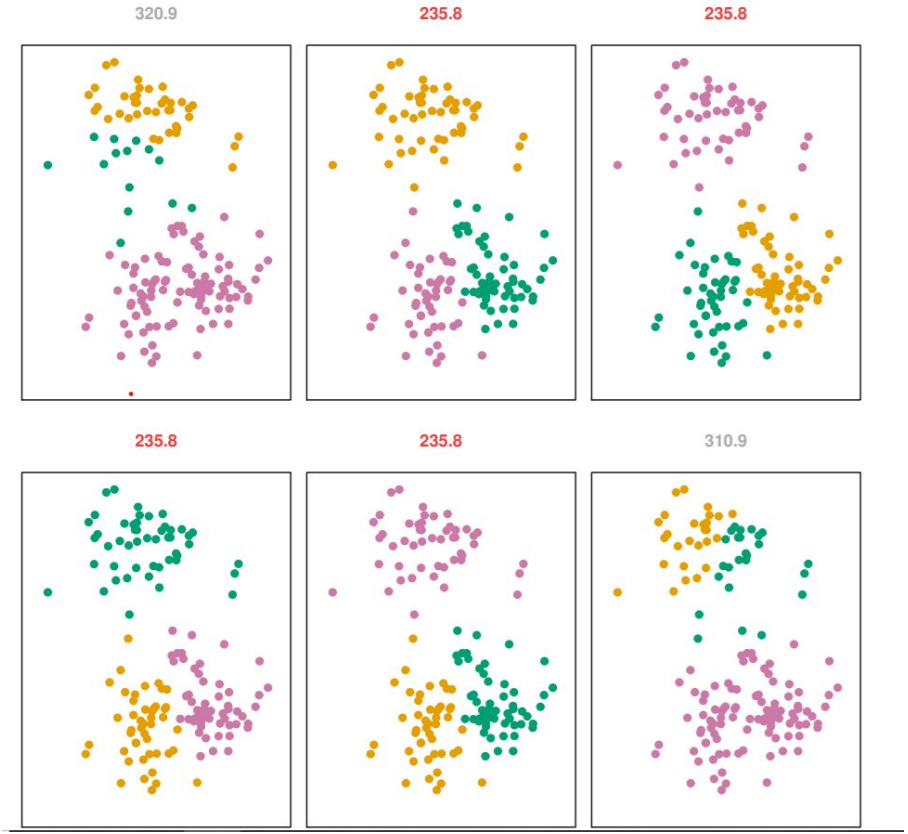


Calculamos los **centroides** (centros) de cada cluster como el promedio de las features de sus samples

Asignamos cada caso al cluster con centroide más cercano

factor~data
EIDAES_UNSAM

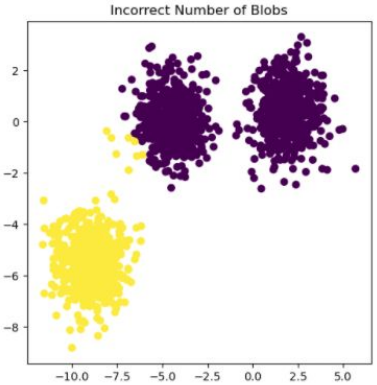
K-Medias - Diferentes inicializaciones

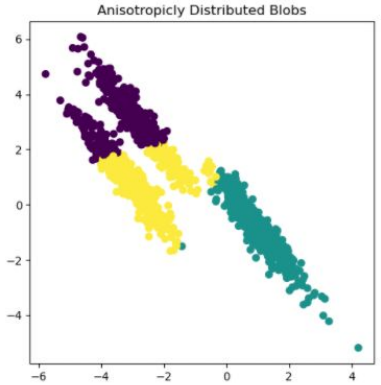


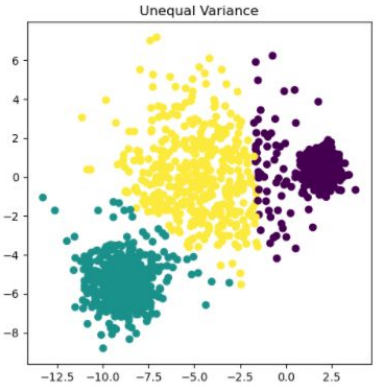
- Inicialización aleatoria: modelo no determinista
- Los resultados dependen de esa inicialización

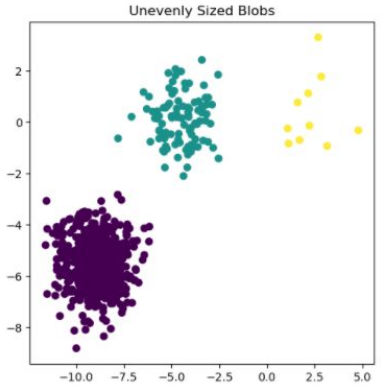
K-Medias - Ventajas y límites

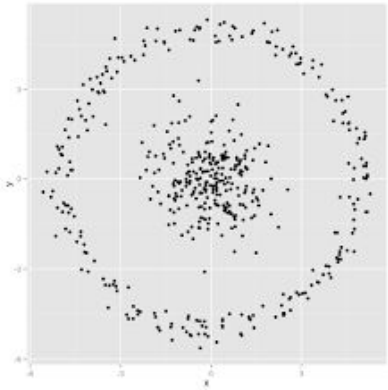
+ Simple y Fácil de implementar
+ Orden del algoritmo es lineal
- Depende de la inicialización
- Tiende a caer en un mínimo local
- Sensible a outliers
- Los clusters tienen que tener forma esférica
- No se puede aplicar a data categórica







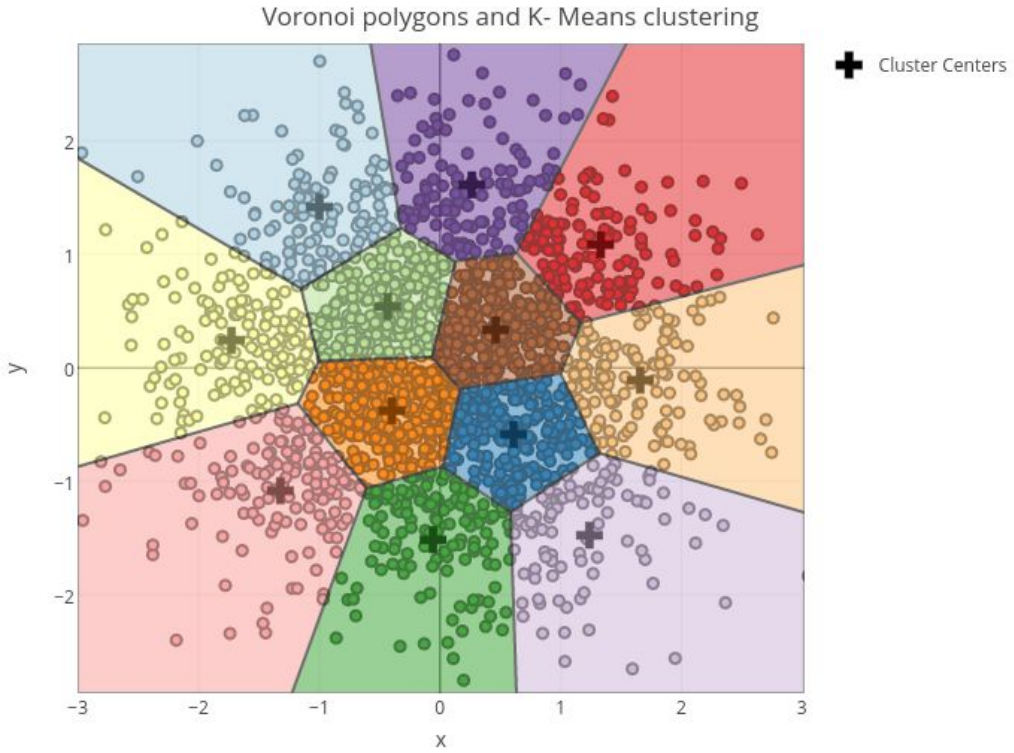




factor~data
EIDAES_UNSAM

K-Medias - Ventajas y límites

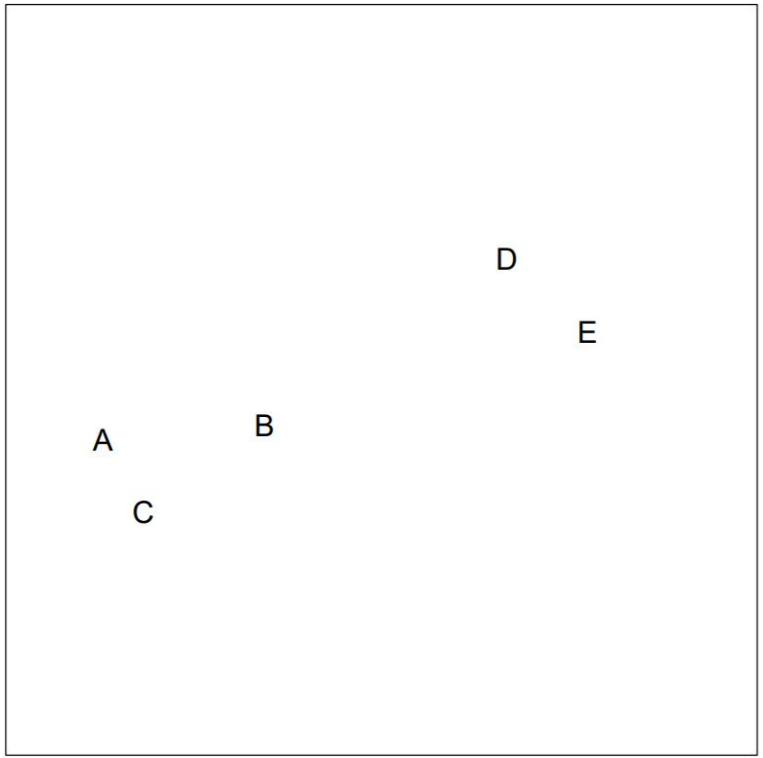
- Da un clustering de los datos aún si los datos no están “clusterizados”



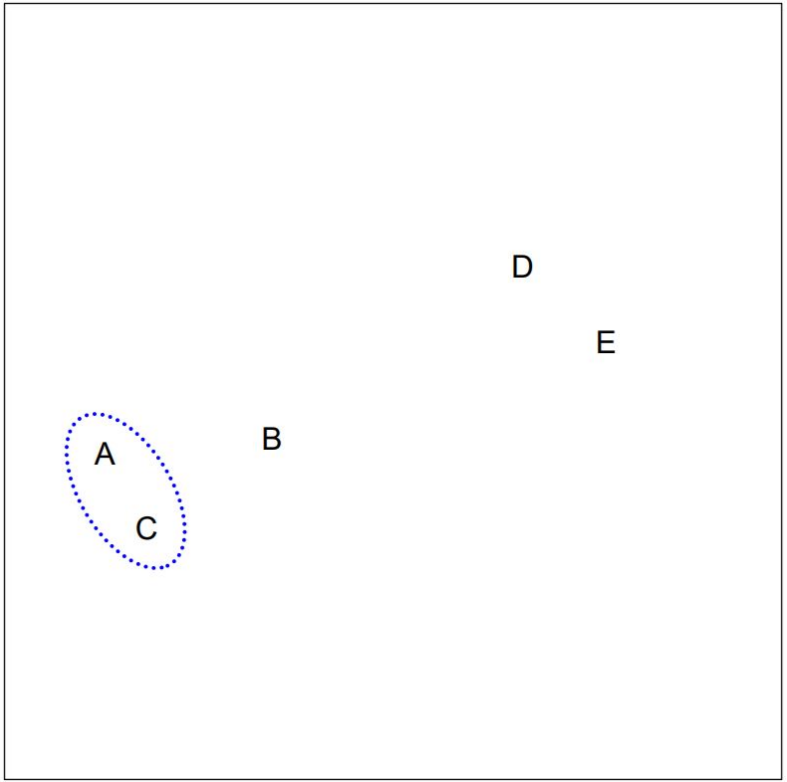
Clustering jerárquico

- K-medias requiere especificar de antemano la cantidad de clusters buscados
- El clustering jerárquico ofrece un método para tratar de estimarlo
- Veremos el método más común de clustering jerárquico: bottom-up o “aglomerativo”

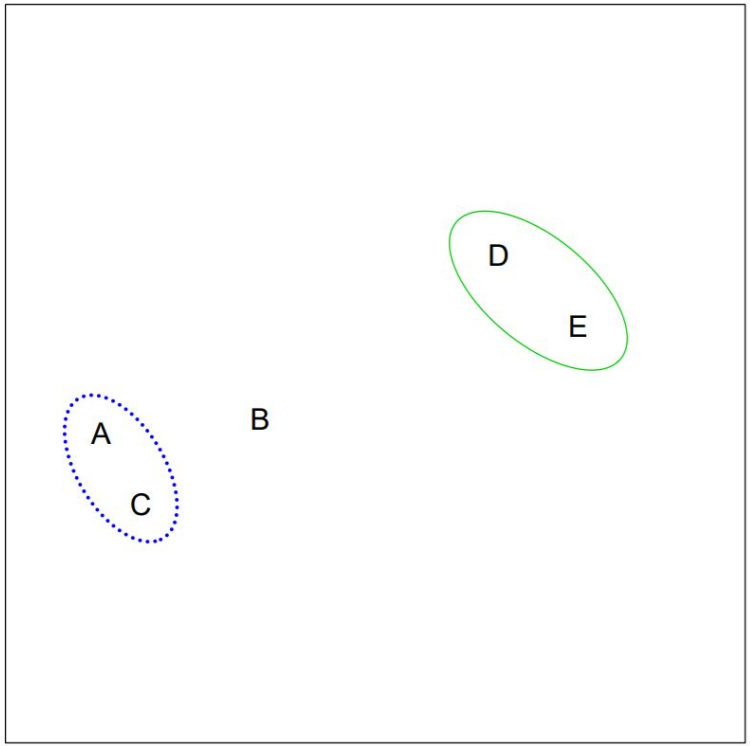
Clustering jerárquico



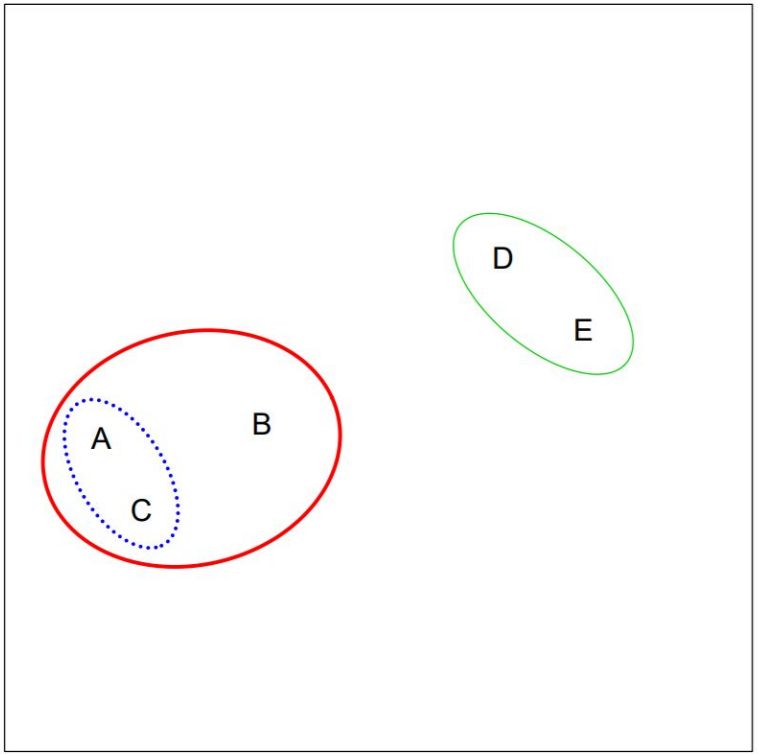
Clustering jerárquico



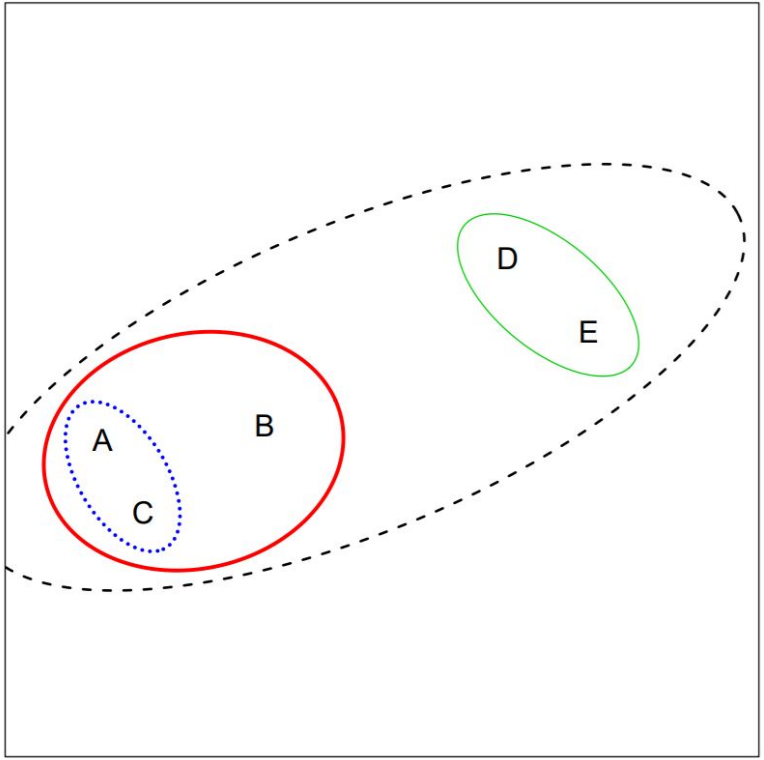
Clustering jerárquico



Clustering jerárquico



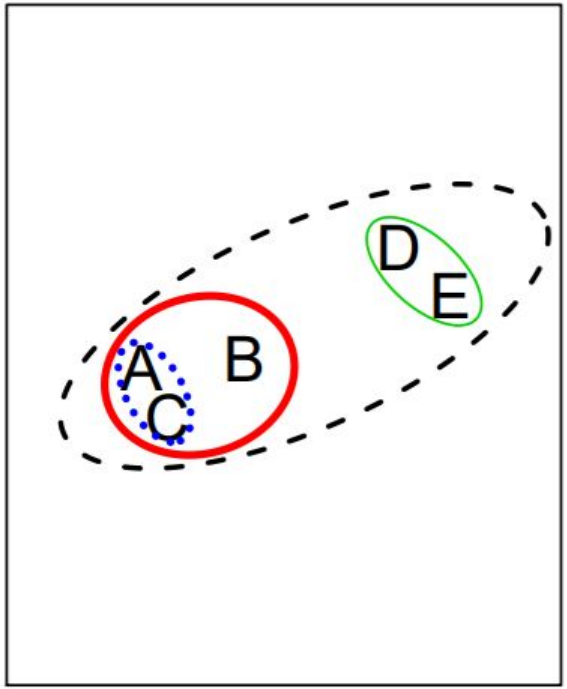
Clustering jerárquico

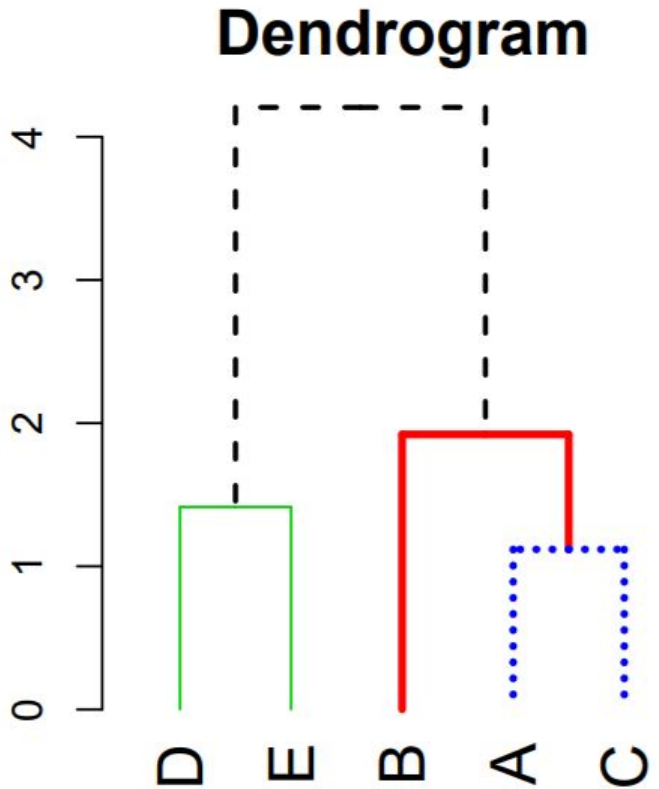


Clustering jerárquico

- Empieza con cada caso como un cluster único
- Identifica los clusters más cercanos y los une
- Repite el procedimiento
- Finaliza cuando todos los puntos han sido asignados a un único cluster

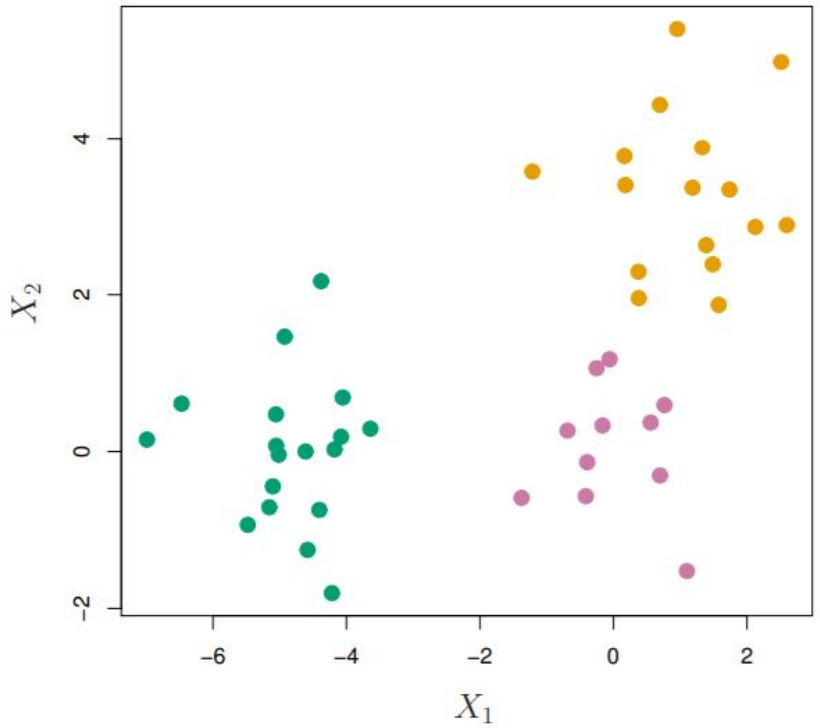
Clustering jerárquico



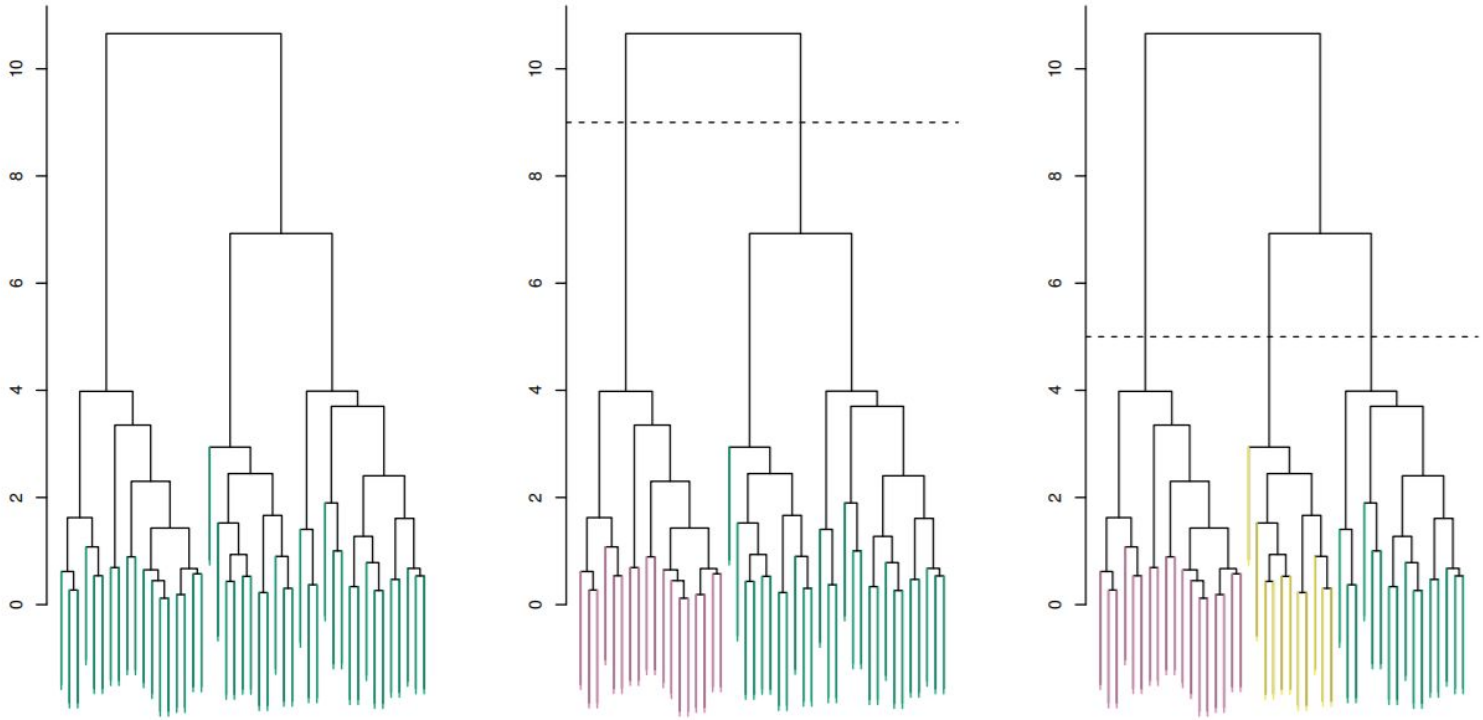


Clustering jerárquico

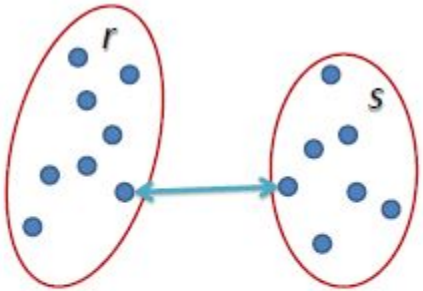
- Otro ejemplo



Clustering jerárquico

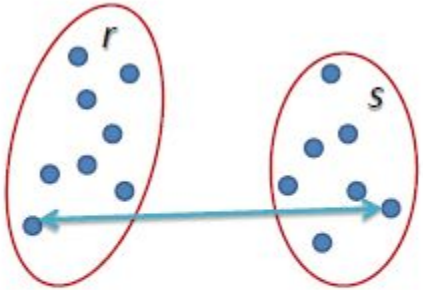


¿Cómo definir el método de aglomeración?



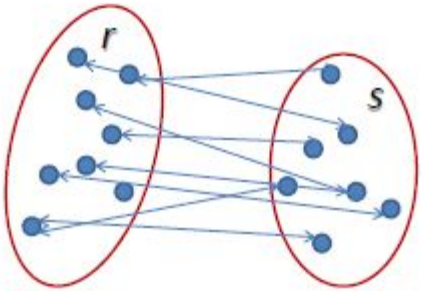
$$L(r,s) = \min(D(x_{ri}, x_{sj}))$$

Single Linkage



$$L(r,s) = \max(D(x_{ri}, x_{sj}))$$

Complete Linkage

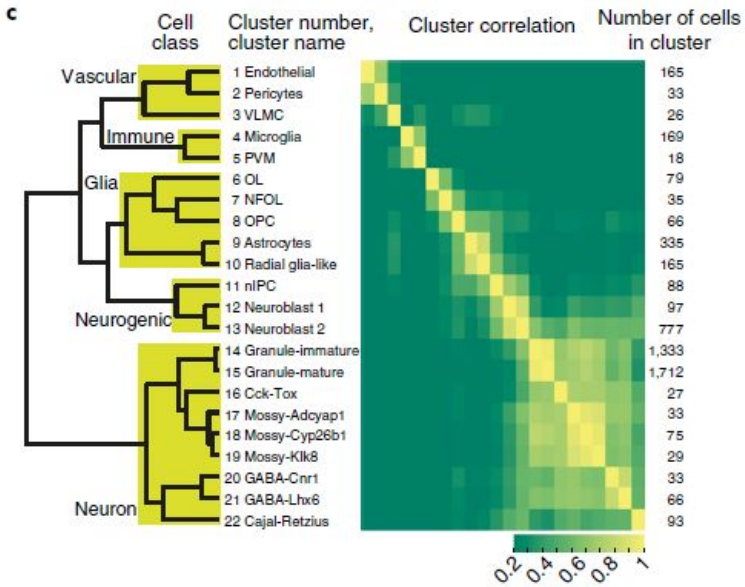


$$L(r,s) = \frac{1}{n_r n_s} \sum_{i=1}^{n_r} \sum_{j=1}^{n_s} D(x_{ri}, x_{sj})$$

Average Linkage

Clustering jerárquico. Ventajas y limitaciones

+ Pueden revelar detalles finos en la relación de los datos
+ Proveen un dendograma interpretable
+ Son determinísticos - producen el mismo resultado si se corre el mismo modelo con el mismo input
- Son computacionalmente costosos



Problemas prácticos

- ¿Es necesario normalizar las escalas de las variables?
- ¿Qué métrica de similaridad usar?
- ¿Qué método de aglomeración?
- ¿Cuál es el número óptimo de clusters a utilizar?