Unidad VII - Técnicas de Agrupamiento Partitivas

Germán Braun

Facultado de Informática - Universidad Nacional del Comahue german.braun@fi.uncoma.edu.ar

4 de octubre de 2025

Agenda

- 1 Aprendizaje No Supervisado
- 2 Clustering

AA Landscape

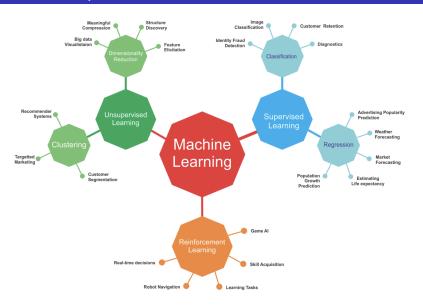


Figura 1.1: Imagen de [?]

■ El dataset no está etiquetado: $\{x^{(1)}...x^{(n)}\}$

- El dataset no está etiquetado: $\{x^{(1)}...x^{(n)}\}$
- El objetivo es encontrar estructuras "interesantes" en los datos → clusters

- El dataset no está etiquetado: $\{x^{(1)}...x^{(n)}\}$
- El objetivo es encontrar estructuras "interesantes" en los datos → clusters
- Los algoritmos descubren patrones ocultos or agrupan datos sin necesidad de intervención humana.

- El dataset no está etiquetado: $\{x^{(1)}...x^{(n)}\}$
- El objetivo es encontrar estructuras "interesantes" en los datos → clusters
- Los algoritmos descubren patrones ocultos or agrupan datos sin necesidad de intervención humana.
- A diferencia del supervisado, el aprendizaje no supervisado puede ser útil para la detección de anomalías, segmentación de clientes, entre otros ...

- El dataset no está etiquetado: $\{x^{(1)}...x^{(n)}\}$
- El objetivo es encontrar estructuras "interesantes" en los datos → clusters
- Los algoritmos descubren patrones ocultos or agrupan datos sin necesidad de intervención humana.
- A diferencia del supervisado, el aprendizaje no supervisado puede ser útil para la detección de anomalías, segmentación de clientes, entre otros ...

Son computacionalmente más complejos debido a que requieren de un dataset más grande para producir una salida satisfactoria

Clustering

Organizar ejemplos en grupos (*clusters*)

- Organizar ejemplos en grupos (*clusters*)
- Luego del entrenamiento, nuevos ejemplos son asignados a los grupos correctos

- Organizar ejemplos en grupos (*clusters*)
- Luego del entrenamiento, nuevos ejemplos son asignados a los grupos correctos

Dado un dataset de entrada, S el conjunto de posibles clusters (finito), $c^{(i)}$ el cluster de $x^{(i)}$ y $\mu_{c^{(i)}}$, la media del cluster $c^{(i)}$:

$$\{x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(n)}\}, \quad x^{(i)} \in \mathbb{R}^d$$

$$S = \{c \mid c \in \{1, 2, \dots, k\}^n\}$$

$$\mu_k = \frac{\sum_{i=1}^n x^{(i)} \cdot 1(c^{(i)} = k)}{\sum_{i=1}^n 1(c^{(i)} = k)}$$

- Organizar ejemplos en grupos (*clusters*)
- Luego del entrenamiento, nuevos ejemplos son asignados a los grupos correctos

Dado un dataset de entrada, S el conjunto de posibles clusters (finito), $c^{(i)}$ el cluster de $x^{(i)}$ y $\mu_{c^{(i)}}$, la media del cluster $c^{(i)}$:

$$\{x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(n)}\}, \quad x^{(i)} \in \mathbb{R}^d$$

$$S = \{c \mid c \in \{1, 2, \dots, k\}^n\}$$

$$\mu_k = \frac{\sum_{i=1}^n x^{(i)} \cdot 1(c^{(i)} = k)}{\sum_{i=1}^n 1(c^{(i)} = k)}$$

El objetivo es

$$\min_{c \in S} \sum_{i=1}^{n} \|x^{(i)} - \boldsymbol{\mu}_{c^{(i)}}\|^2$$

Idea

1 Setear *k* como el número de clusters inicial

- 1 Setear k como el número de clusters inicial
- 2 Tomar k puntos como "centroides" (aleatoriamente) del conjunto de entrenamiento

- 1 Setear k como el número de clusters inicial
- 2 Tomar k puntos como "centroides" (aleatoriamente) del conjunto de entrenamiento
- 3 Agrupar cada observación a su centroide más cercado

- 1 Setear k como el número de clusters inicial
- 2 Tomar k puntos como "centroides" (aleatoriamente) del conjunto de entrenamiento
- 3 Agrupar cada observación a su centroide más cercado
- 4 Actualizar el centroide a el centro de todos las observaciones agrupada hasta el momento

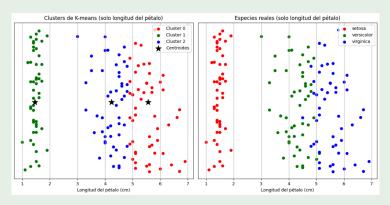
- 1 Setear k como el número de clusters inicial
- 2 Tomar k puntos como "centroides" (aleatoriamente) del conjunto de entrenamiento
- 3 Agrupar cada observación a su centroide más cercado
- 4 Actualizar el centroide a el centro de todos las observaciones agrupada hasta el momento
- 5 Repetir los pasos 3 y 4 un número fijo de veces hasta que todos los centroides se estabilicen

- 1 Setear k como el número de clusters inicial
- 2 Tomar k puntos como "centroides" (aleatoriamente) del conjunto de entrenamiento
- 3 Agrupar cada observación a su centroide más cercado
- 4 Actualizar el centroide a el centro de todos las observaciones agrupada hasta el momento
- 5 Repetir los pasos 3 y 4 un número fijo de veces hasta que todos los centroides se estabilicen
- 6 Evaluación:
 - accuracy con etiquetas reales
 - método del codo (Elbow): el codo es el punto donde dejar de agregar clusters mejora la performance
 - coeficiente de Silhouette: separación de clusters (1/0/-1)

K-means (cont'd)

Agrupar flores de acuerdo a sus características

Supongamos que queremos agrupar las flores de iris analizando sus características: longitud del sépalo, ancho del sépalo, longitud del pétalo, ancho del pétalo



El gráfico muestra los 3 clusters generados, uno para cada flor del dataset: *iris setosa, versicolor y virginica*, usando el algoritmo **k-means**.

Idea

 Las neuronas de la red compiten basadas en la proximidad al patrón de entrada

- Las neuronas de la red compiten basadas en la proximidad al patrón de entrada
- La neurona "ganadora" (winner-takes-all) ajusta su peso para hacerse más próxima

- Las neuronas de la red compiten basadas en la proximidad al patrón de entrada
- La neurona "ganadora" (winner-takes-all) ajusta su peso para hacerse más próxima
- Funcionamiento:

- Las neuronas de la red compiten basadas en la proximidad al patrón de entrada
- La neurona "ganadora" (winner-takes-all) ajusta su peso para hacerse más próxima
- Funcionamiento:
 - Dada una entrada x, se distribuyen pesos w en cada una de las neuronas de la red

- Las neuronas de la red compiten basadas en la proximidad al patrón de entrada
- La neurona "ganadora" (winner-takes-all) ajusta su peso para hacerse más próxima
- Funcionamiento:
 - Dada una entrada x, se distribuyen pesos w en cada una de las neuronas de la red
 - Se calcula la similitud para indicar cual de las neuronas es más "parecida" a la entrada (distancia euclideana/producto punto)

- Las neuronas de la red compiten basadas en la proximidad al patrón de entrada
- La neurona "ganadora" (winner-takes-all) ajusta su peso para hacerse más próxima
- Funcionamiento:
 - Dada una entrada x, se distribuyen pesos w en cada una de las neuronas de la red
 - Se calcula la similitud para indicar cual de las neuronas es más "parecida" a la entrada (distancia euclideana/producto punto)
 - En base a esta similitud de procede a competir

- Las neuronas de la red compiten basadas en la proximidad al patrón de entrada
- La neurona "ganadora" (winner-takes-all) ajusta su peso para hacerse más próxima
- Funcionamiento:
 - Dada una entrada x, se distribuyen pesos w en cada una de las neuronas de la red
 - Se calcula la similitud para indicar cual de las neuronas es más "parecida" a la entrada (distancia euclideana/producto punto)
 - En base a esta similitud de procede a competir
 - Inhibición Lateral: la neurona con mayor simulitud, apaga las demás

- Las neuronas de la red compiten basadas en la proximidad al patrón de entrada
- La neurona "ganadora" (winner-takes-all) ajusta su peso para hacerse más próxima
- Funcionamiento:
 - Dada una entrada x, se distribuyen pesos w en cada una de las neuronas de la red
 - Se calcula la similitud para indicar cual de las neuronas es más "parecida" a la entrada (distancia euclideana/producto punto)
 - En base a esta similitud de procede a competir
 - Inhibición Lateral: la neurona con mayor simulitud, apaga las demás
 - Competencia de Recursos: las neuronas de salida se activan según el grado de similaridad con la entrada

Bibliografía y material de referencia



Alpaydin, Ethem. Introduction to machine learning. 3era Edición *MIT Press*, 2020.

Brett Lantz. Machine Learning with R. Packt Publishing, 1997.

Tom M. Mitchell. Machine Learning. WCB McGraw-Hill, 1997.

Witten I., Frank E., Hall, M., Pal C.. Data Mining: Practical Machine Learning Tools and Techniques. 4th Edition WMorgan Kaufmann. Elsevier, 2017.

Michael A. Nielsen. Neural Networks and Deep Learning. 4th Edition *Determination Press*, 2015.

http://neuralnetworksanddeeplearning.com

Bibliografía y material de referencia



Andrew Ng. Stanford CS229 - Machine Learning Course. https://www.youtube.com/playlist?list= PLoROMvodv4rMiGQp3WXShtMGgzqpfVfbU

Andrew Ng. Deep Learning Al.
https://www.deeplearning.ai/resources/

Kilian Weinberger. Machine Learning for Intelligent Systems. https://www.cs.cornell.edu/courses/cs4780/2018fa/syllabus/

- Corinna Cortes and Vladimir Vapnik. Support-vector networks. Machine Learning. Springer. 1995
- Paul J. Werbos, *Beyond Regression: New Tools for Prediction and Analysis in the Behavioral Sciences*, PhD thesis, Harvard University, 1974.
 - David E. Rumelhart, Geoffrey E. Hinton, and Ronald J. Williams, Learning representations by back-propagating errors, Nature, vol. 323, pp. 533–536, 1986. DOI: 10.1038/323533a0

FIN!

Gracias!

- Agustina Buccella
- Laura Cecchi
- Sandra Roger