Técnicas de Clustering - 3

Cuántos clusters?

Introducción

- En algunas aplicaciones el número de clusters está predefinido
  - Ejemplo: Hay que dividir n ciudades de Argentina entre k vendedores
- La mayoría de las veces no
- Lamentablemente, los algoritmos siempre devuelven una solución, aunque no tenga sentido
- El número de clusters es otra información que tenemos que sacar de los datos a veces

Introducción

- Cuántos clusters hay en un dataset es una pregunta difícil.
  - No hay “verdad” contra la que comparar
  - No hay métodos con fuerte teoría detrás
- La mayoría de los métodos son empíricos

Métodos a discutir

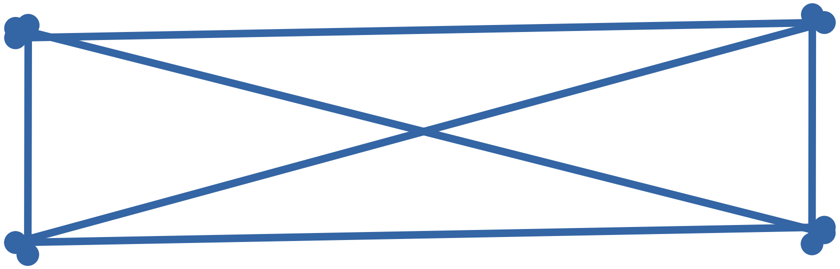
- El “salto” en la función costo
- Gap statistic
- Estabilidad

Método del salto

- Un criterio general para evaluar la calidad de la solución en la suma de las distancias dentro del cluster W_k
  - Es lo que se minimiza en la mayoría de los métodos

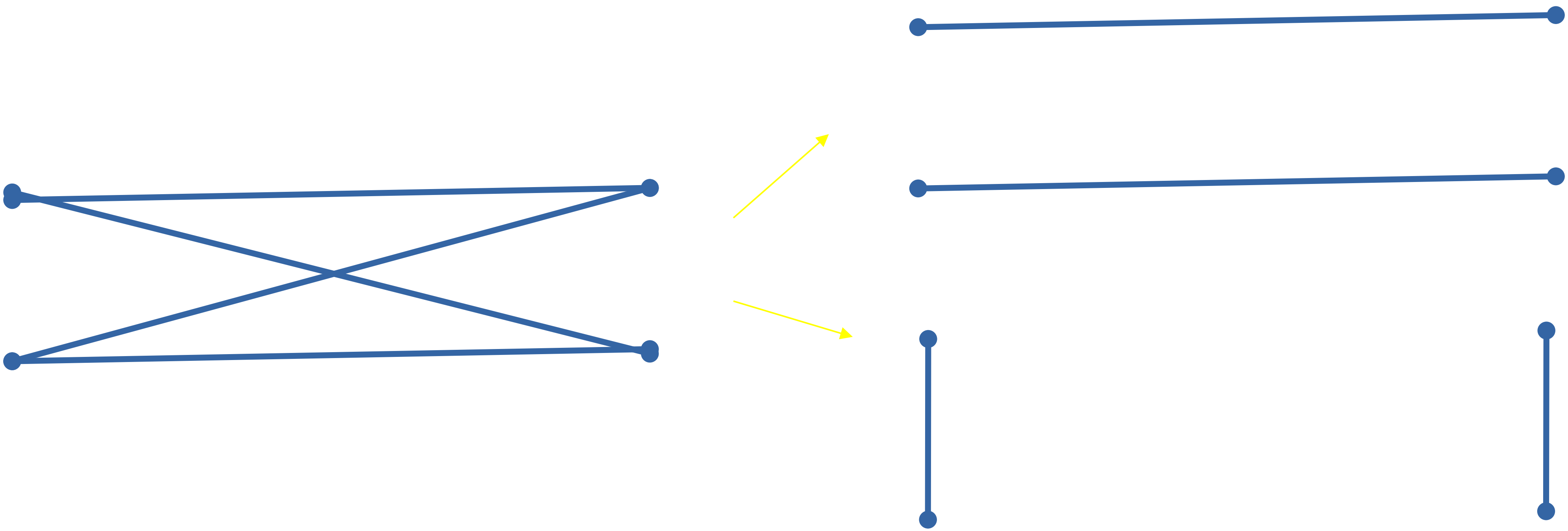
Método del salto

- Un criterio general para evaluar la calidad de la solución en la suma de las distancias dentro del cluster W_k
  - Es lo que se minimiza en la mayoría de los métodos



Método del salto

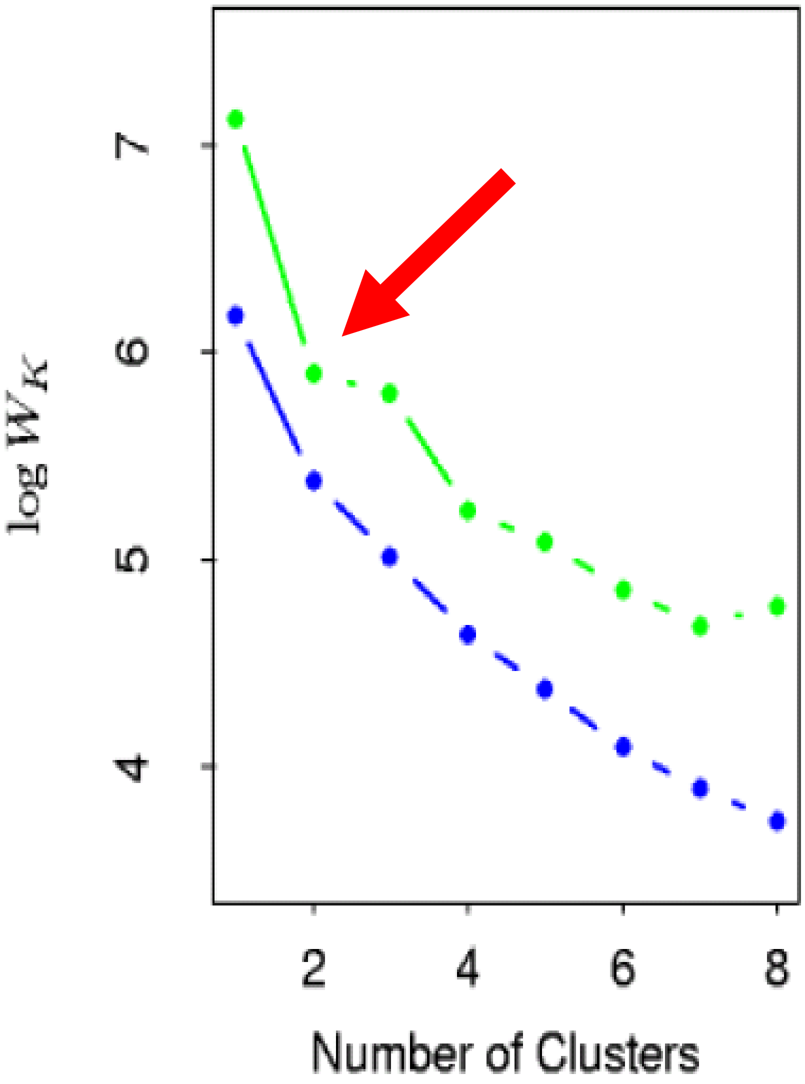
- Un criterio general para evaluar la calidad de la solución en la suma de las distancias dentro del cluster W_k
  - Es lo que se minimiza en la mayoría de los métodos



Método del salto

- Un criterio general para evaluar la calidad de la solución en la suma de las distancias dentro del cluster W_k
  - Es lo que se minimiza en la mayoría de los métodos
- W_k decrece siempre. No sirve buscar el mínimo.
- Pero decrece más cuando separa 2 clusters verdaderos que cuando parte en 2 un cluster “natural”
  - Elimina distancias “largas” en el primer caso

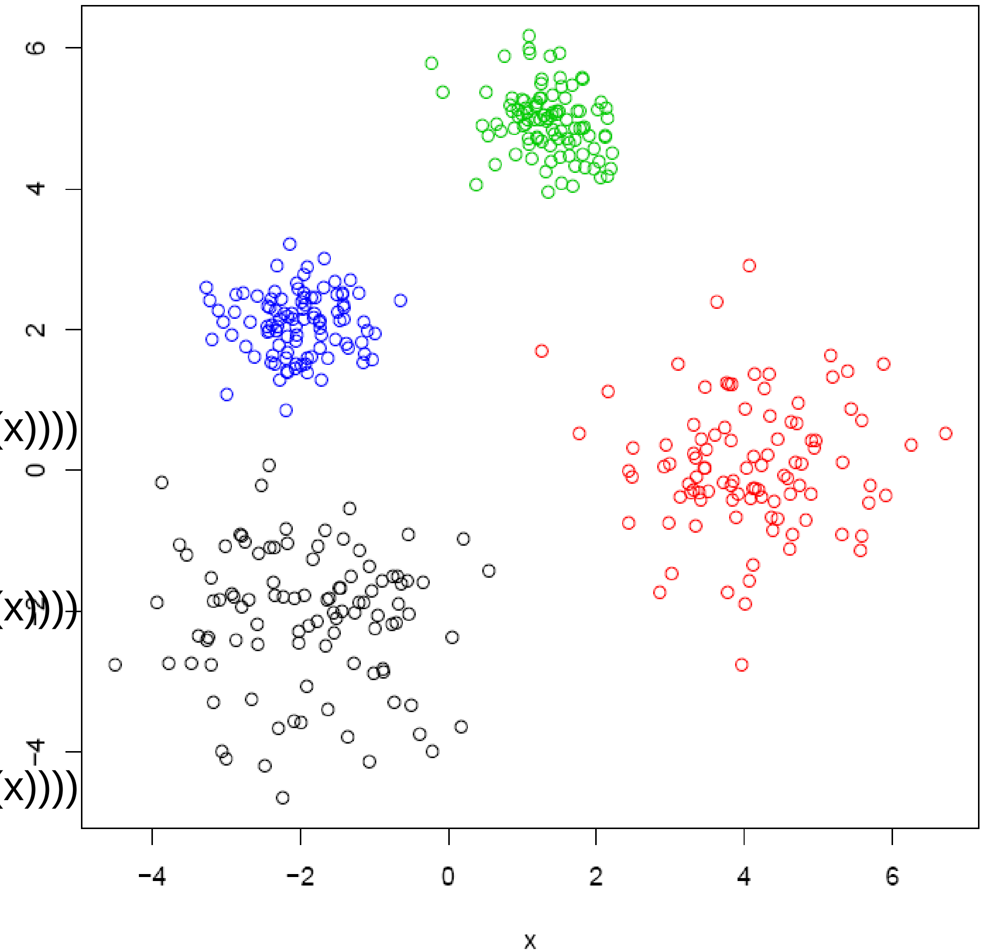
Método del salto



- Hay que buscar un “lomo” o un cambio completo de pendiente

Método del salto

```
#cuatro clusters de dist. gaussianas
tot.puntos<-100
gap=2
x<-rnorm(tot.puntos,mean=-gap)
y<-rnorm(tot.puntos,mean=-gap)
gausianas<-cbind(x,y,rep(1,length(x)))
x<-rnorm(tot.puntos,mean=2*gap)
y<-rnorm(tot.puntos,mean=0)
gausianas<-rbind(gausianas,cbind(x,y,rep(2,length(x))))
x<-rnorm(tot.puntos,mean=0.7*gap,sd=0.5)
y<-rnorm(tot.puntos,mean=2.5*gap,sd=0.5)
gausianas<-rbind(gausianas,cbind(x,y,rep(3,length(x))))
x<-rnorm(tot.puntos,mean=-gap,sd=0.5)
y<-rnorm(tot.puntos,mean=gap,sd=0.5)
gausianas<-rbind(gausianas,cbind(x,y,rep(4,length(x))))
plot(gausianas[,1:2],col=gausianas[,3])
```



Método del salto

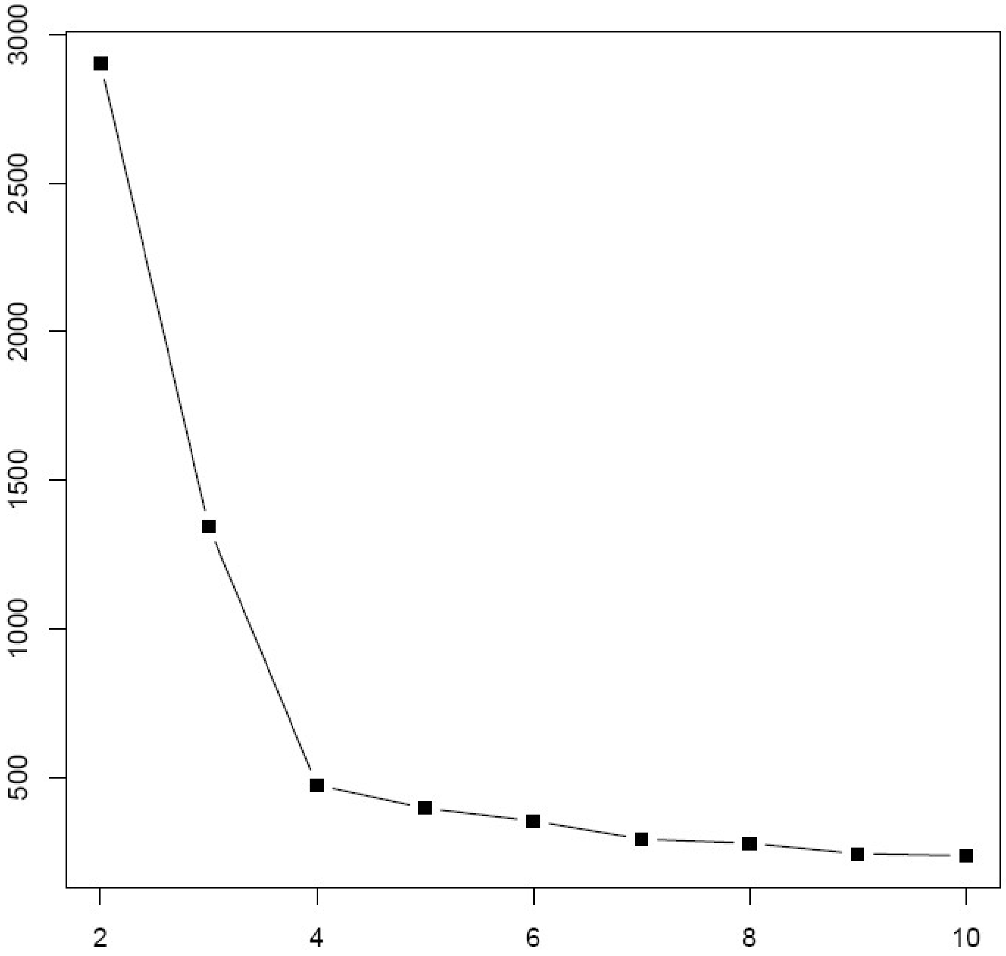
#Ejemplo: 4 Gaussianas

wg=rep(0.0,10)

for(k in 2:10) wg[k]<-
  sum(kmeans(gausianas[,1:
  2],k,nsta=10)$withinss)

matplot(2:10,wg[-1],type='b')

#se ve el quiebre para k=4



Método del salto

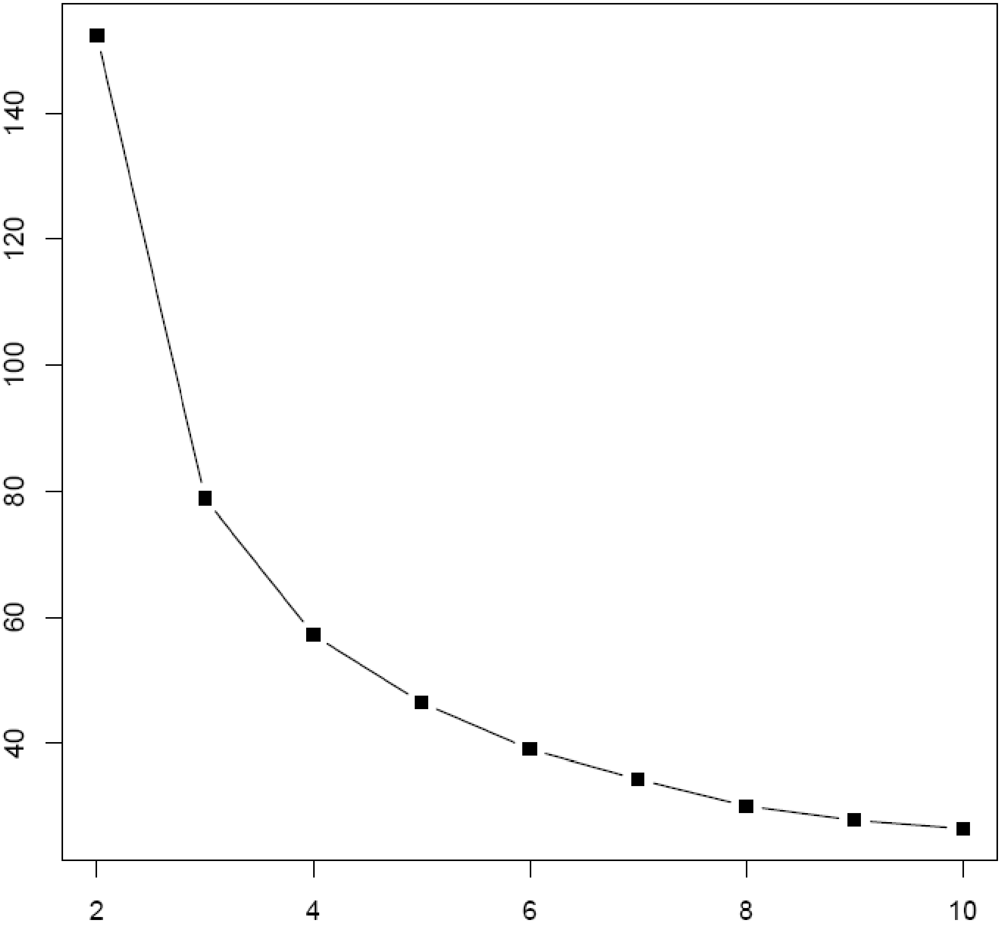
#Ejemplo: Iris

wg=rep(0.0,10)

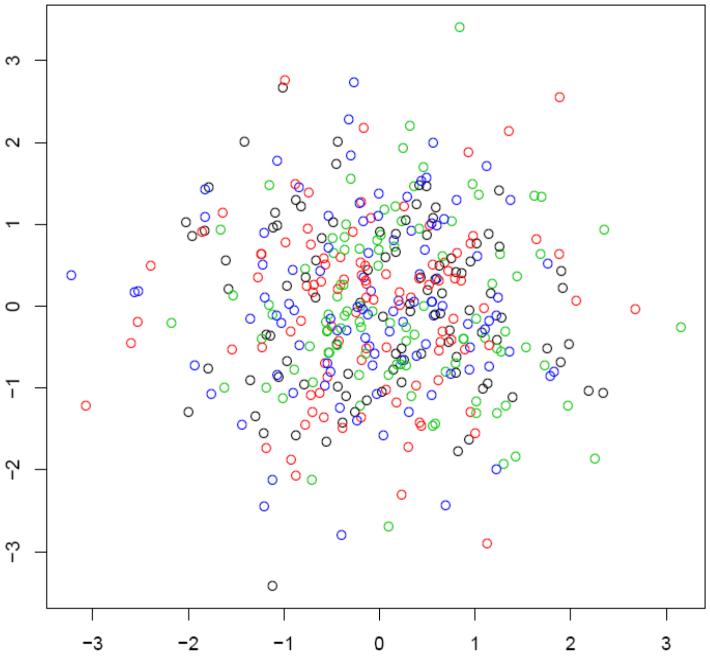
for(k in 2:10) wi[k]<-sum(kmeans(iris[,-5],k,nsta=10)$withinss)

matplot(2:10,wi[-1],type='b')

#se ve el quiebre para k=3, menos claro



Método del salto



#Ejemplo: Uniforme

x<-rnorm(4*tot.puntos,)

y<-rnorm(4*tot.puntos)

gausianas<-cbind(x,y,rep(1:4,tot.puntos))

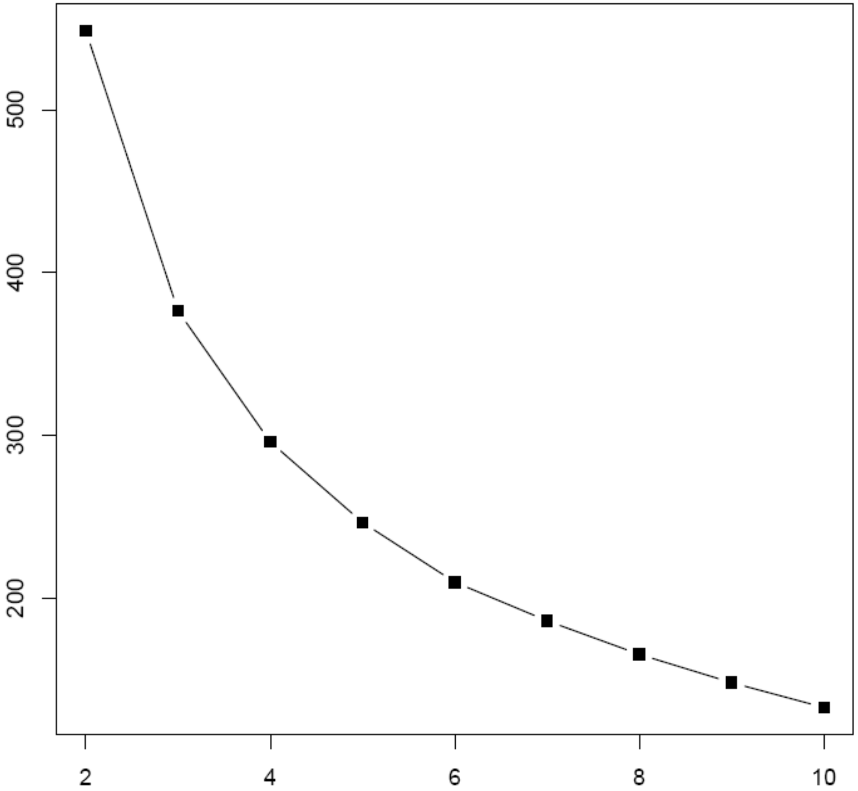
plot(gausianas[,1:2],col=gausianas[,3])

wn=rep(0.0,10)

for(k in 2:10) wn[k]<-sum(kmeans(gausianas[,1:2],k,nsta=10)$withinss)

matplot(2:10,wn[-1],type='b')

#no se ve muy diferente a IRIS



Método del salto

- Suele no ser una medida confiable usada directamente.
- No detecta la falta de clusters.

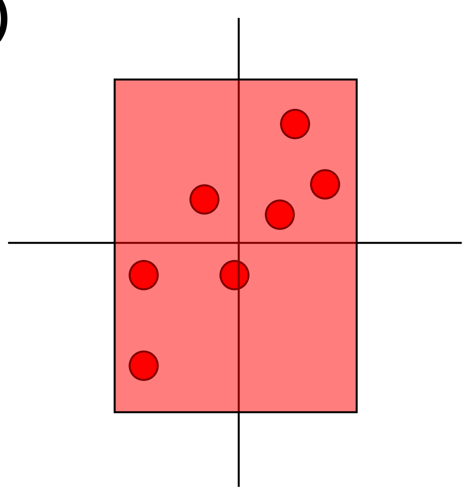
Gap statistic

- Trata de resolver los problemas del salto
- Desarrollado por Tibshirani, Walther y Hastie, *J. Royal Statistical Soc. B*, 2001.
- Idea: comparar la curva anterior con la curva que da una distribución uniforme.
- Cuantificar el salto: Buscar la primer diferencia significatica entre las dos curvas (primer gap)

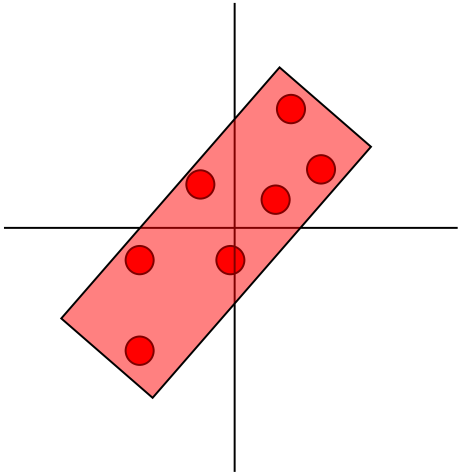
Gap - Referencia

- Dos formas de generar la referencia:
  - a) Tomar una distribución uniforme que ocupe el mismo hiper-rectangulo que la original
  - b) Hacer lo mismo pero sobre una PCA de los datos.

a)



b)



Algoritmo

Computation of the Gap statistic

1. Cluster the observed data, varying the total number of clusters from $k = 1, 2, \ldots K$, giving within dispersion measures $W_k, k = 1, 2, \ldots K$.

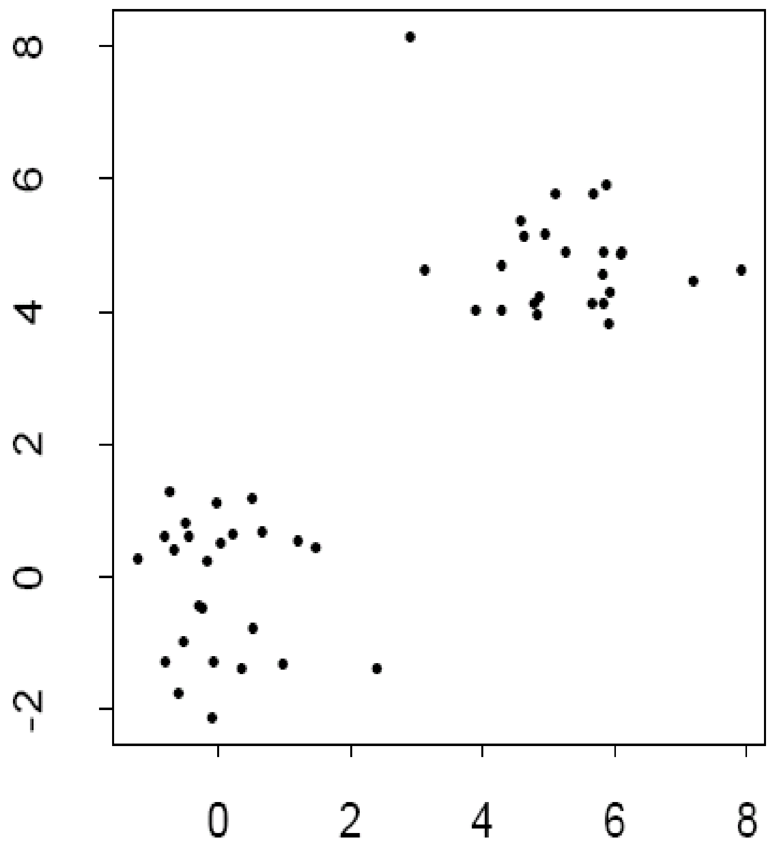
2. Generate B reference datasets, using the uniform prescription (a) or (b) above, and cluster each one giving within dispersion measures W^*_{kb}, $b = 1, 2, \ldots B$, $k = 1, 2, \ldots K$. Compute the (estimated) Gap statistic:

$$\mathrm{Gap}(k) = (1/B) \sum_b \log(W^*_{kb}) - \log(W_k)$$

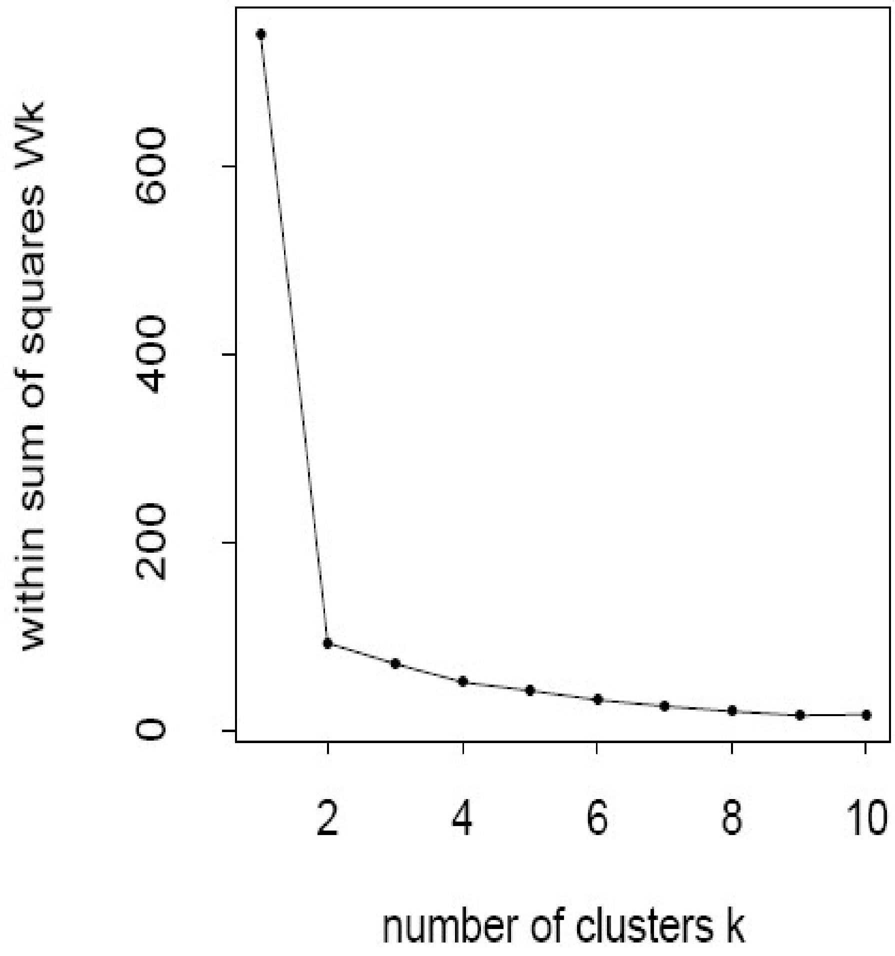
3. Let $\bar{l} = (1/B) \sum_b \log(W^*_{kb})$, compute the standard deviation $\mathrm{sd}_k = [(1/B) \sum_b (\log(W^*_{kb}) - \bar{l})^2]^{1/2}$, and define $s_k = \mathrm{sd}_k \sqrt{1 + 1/B}$. Finally choose the number of clusters via

$$\hat{k} = \text{smallest } k \text{ such that } \mathrm{Gap}(k) \geq \mathrm{Gap}(k+1) - s_{k+1}$$

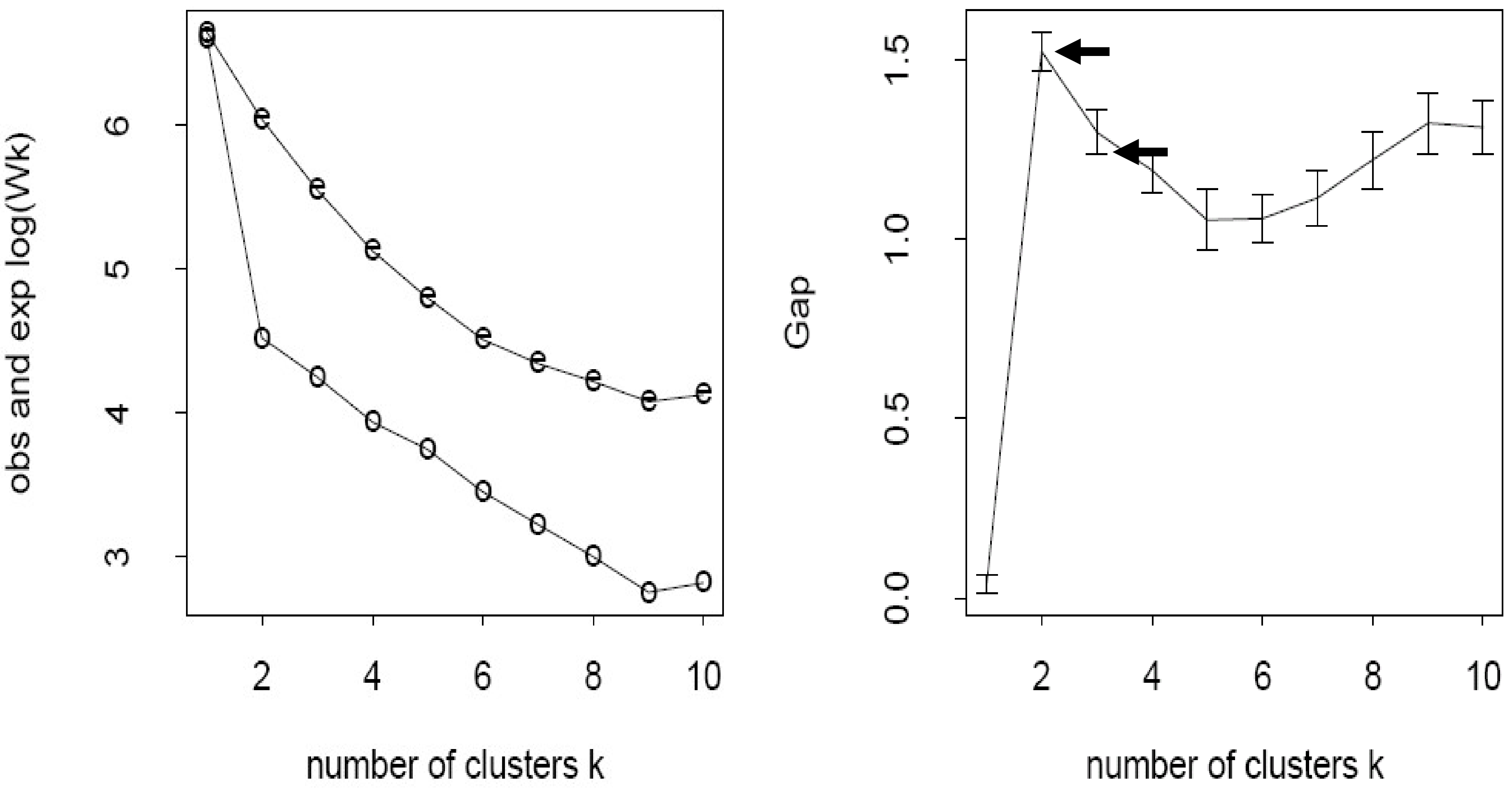
Ejemplo: 2 clusters



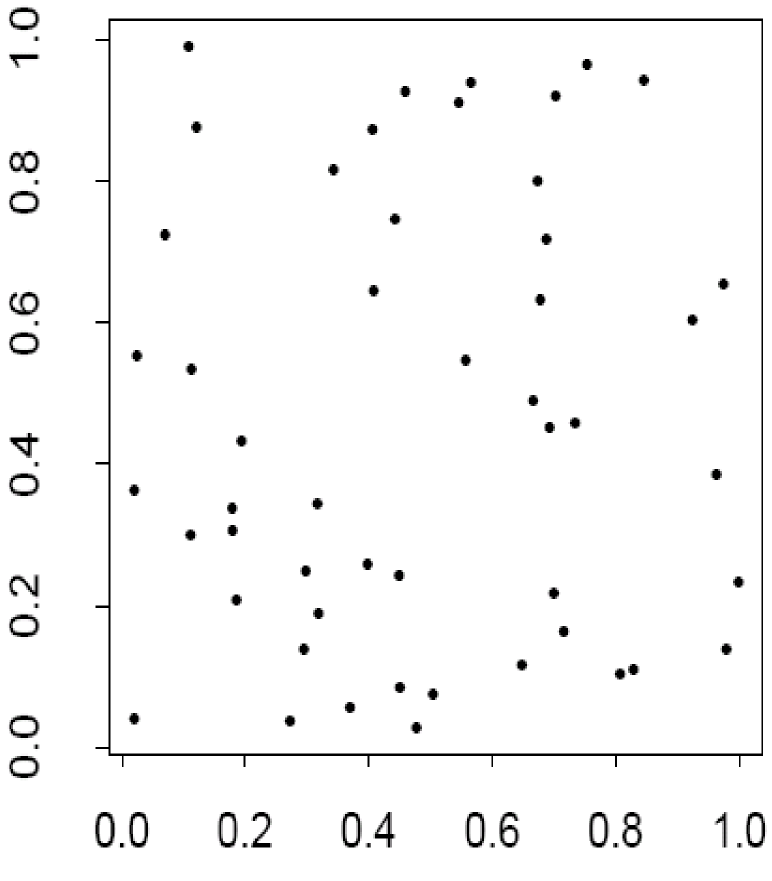
Datos



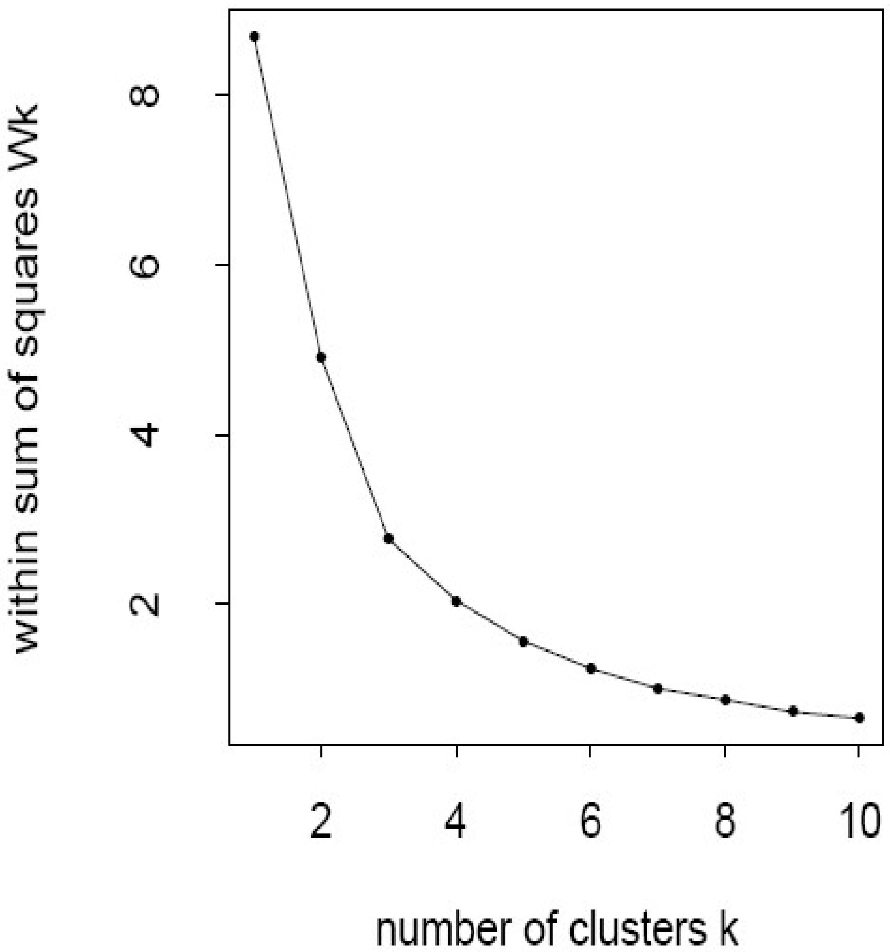
Ejemplo: 2 clusters



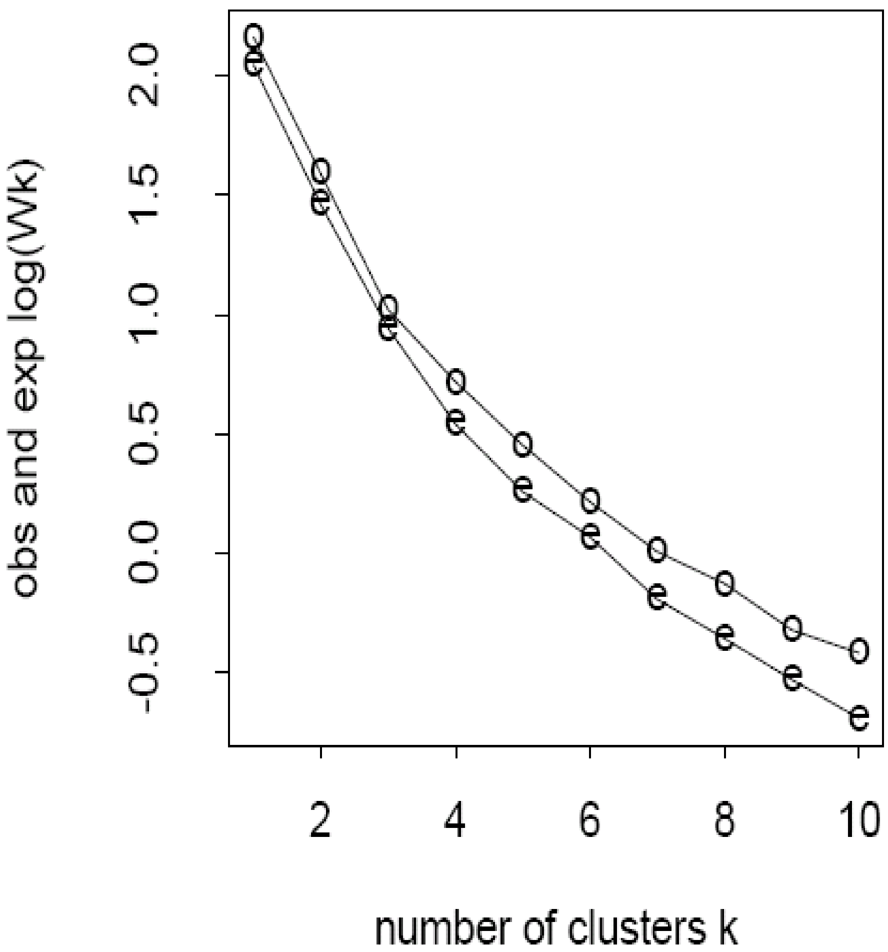
Ejemplo: sin clusters

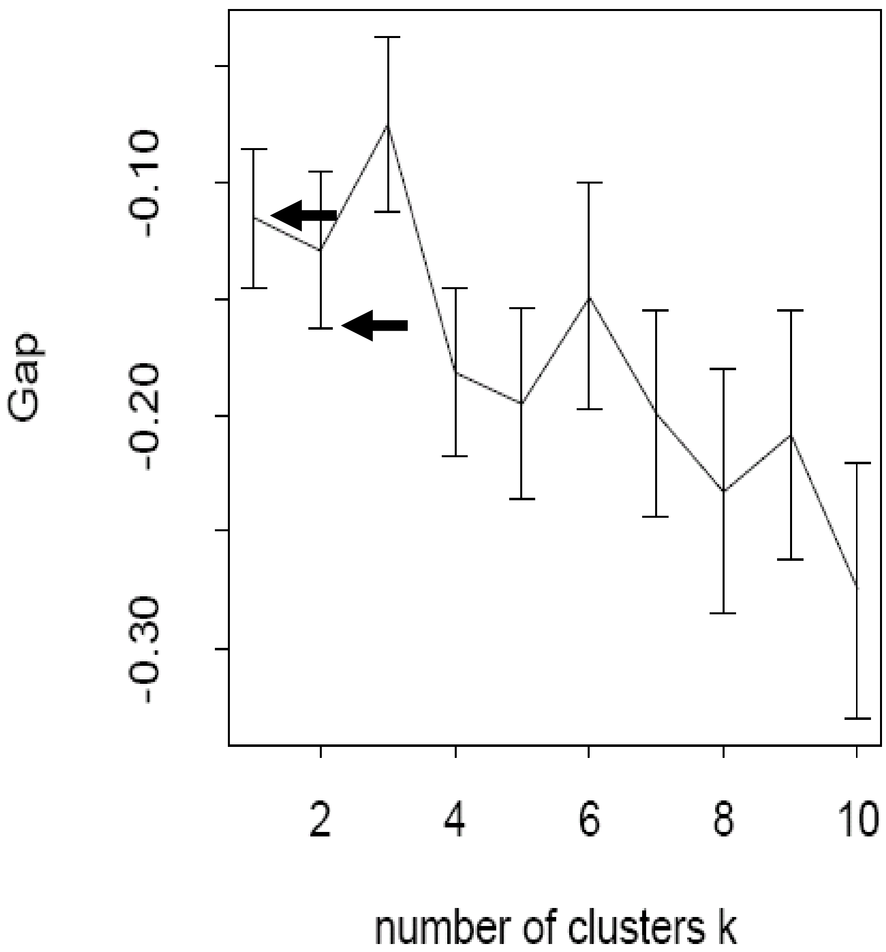


Datos



Ejemplo: sin clusters





Gap: comparación

Method	Estimate of number of clusters $\hat{k}$									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Null model in 10 dimensions										
CH	0*	50	0	0	0	0	0	0	0	0
KL	0*	29	5	3	3	2	2	0	0	0
Hartigan	0*	0	1	20	21	6	0	0	0	0
Silhouette	0*	49	1	0	0	0	0	0	0	0
Gap/unif	49*	1	0	0	0	0	0	0	0	0
Gap/pc	50*	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Three cluster model										
CH	0	0	50*	0	0	0	0	0	0	0
KL	0	0	39*	0	5	1	1	2	0	0
Hartigan	0	0	1*	8	19	13	3	3	2	1
Silhouette	0	0	50*	0	0	0	0	0	0	0
Gap/unif	1	0	49*	0	0	0	0	0	0	0
Gap/pc	2	0	48*	0	0	0	0	0	0	0

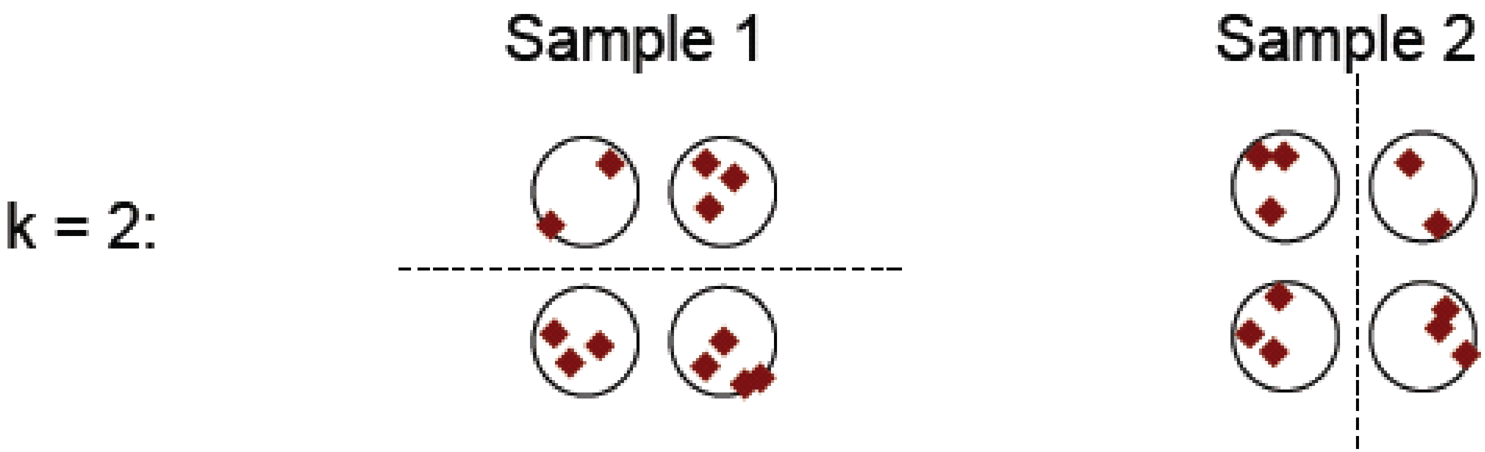
Gap: comparación (cont.)

	Random 4 cluster model in 10 dims.									
CH	0	1	4	44*	1	0	0	0	0	0
KL	0	0	0	45*	3	1	1	0	0	0
Hartigan	0	0	2	48*	0	0	0	0	0	0
Silhouette	0	13	20	16*	5	0	0	0	0	0
Gap/unif	0	0	0	50*	1	0	0	0	0	0
Gap/pc	0	0	4	46*	0	0	0	0	0	0
	Two elongated clusters									
CH	0	0*	0	0	0	0	0	7	16	27
KL	0	50*	0	0	0	0	0	0	0	0
Hartigan	0	0*	0	1	0	2	1	5	6	35
Gap/unif	0	0*	17	16	2	14	1	0	0	0
Gap/pc	0	50*	0	0	0	0	0	0	0	0

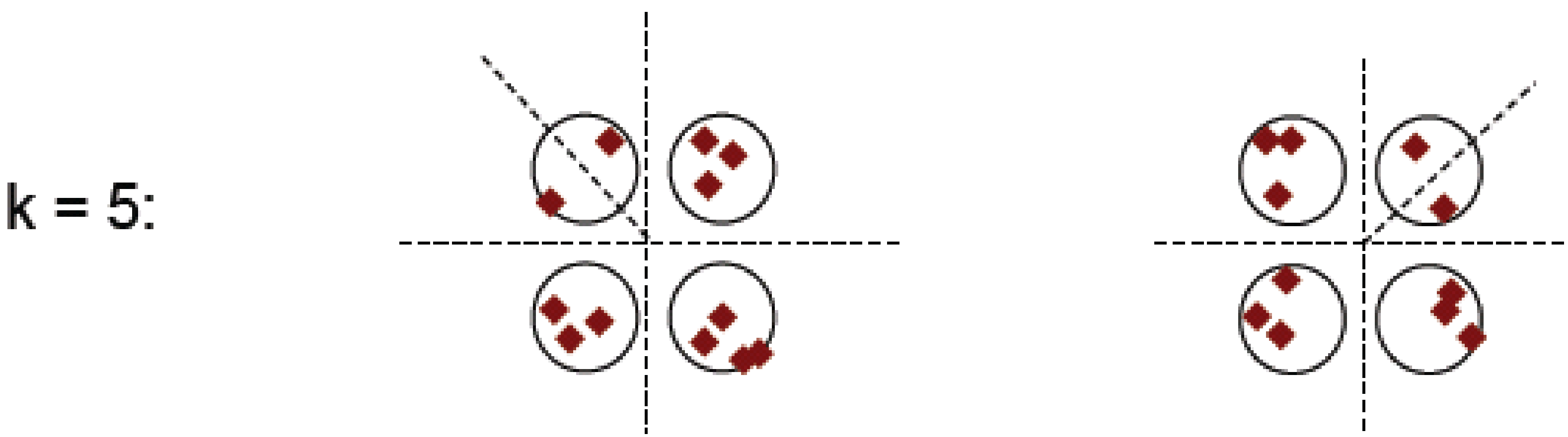
Estabilidad - Introducción

- Idea base: Los resultados científicos tienen que ser reproducibles. Los “clusters naturales” de un problema se tienen que encontrar siempre.
- Si cambio un punto en un problema y la solución desaparece, entonces no son “clusters naturales” sino un resultado ficticio creado por mi algoritmo.

Ejemplo a favor



La división en clusters naturales suele ser la más estable



Estabilidad – Algoritmo base

- Variar la cantidad de clusters
- Construir muchas soluciones replicadas
- Evaluar la estabilidad de las soluciones
- Seleccionar el k con más estabilidad

Soluciones replicadas

- Estabilidad: Problemas similares dan soluciones similares.
- Como muchos algoritmos son deterministas, se necesita generar problemas perturbados
- Hay un trade-off al perturbar:
  - Si cambio mucho puedo destruir la estructura natural
  - Si cambio poco puede parecer estable algo que no es

Cómo generar réplicas?

- Subsample
  - Tomo una muestra al azar de los datos originales
  - Se suele tomar del 70% al 90% de los datos
- Agregar ruido
  - Agregar ruido blanco (normal) a los datos originales
  - Bajo porcentaje de la señal (menos de 10%)
- Proyecciones
  - En datos de alta dimensionalidad, tomar proyecciones sobre un sub-espacio elegido al azar

Soluciones

- Una vez que tengo los datos perturbados, tengo que clusterizarlos.
- Se usa siempre el mismo algoritmo, buscando que la única variación sean los datos
- Próximo paso: Medir cuán diferentes son las soluciones

Evaluación: mismos datos

- Siempre se evalúan pares de soluciones
- Cuando los conjuntos de datos son iguales:
  - Cuento cuantos pares de puntos que están en un mismo cluster en la primer solución también lo están en la segunda
  - Normalizo la cuenta
  - Distintas normalizaciones dan distintos indices:
    - Jaccard
    - Rand
    - Fowlkes and Mallows

Muy similares

Evaluación: distintos datos

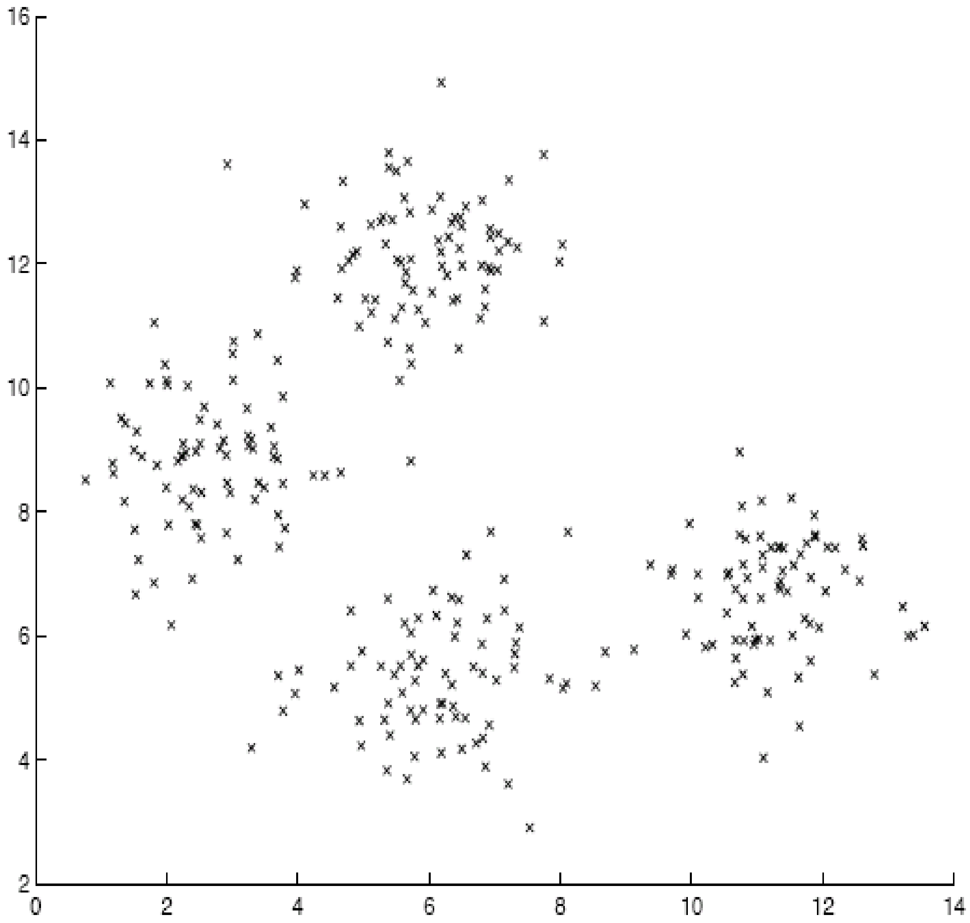
- Cuando los conjuntos de datos son distintos:
  - Restringir: Evaluar la intersección
    - La más usada
    - Tiene sentido si la intersección es grande
    - Se pierde información
  - Extender: Agregar los puntos faltantes a cada solución (obtenida previamente)
    - Por ejemplo, en k-means, asignar al centro cercano
    - En single linkage asigno al primer vecino espacial
    - Menos común

Seleccionar el k

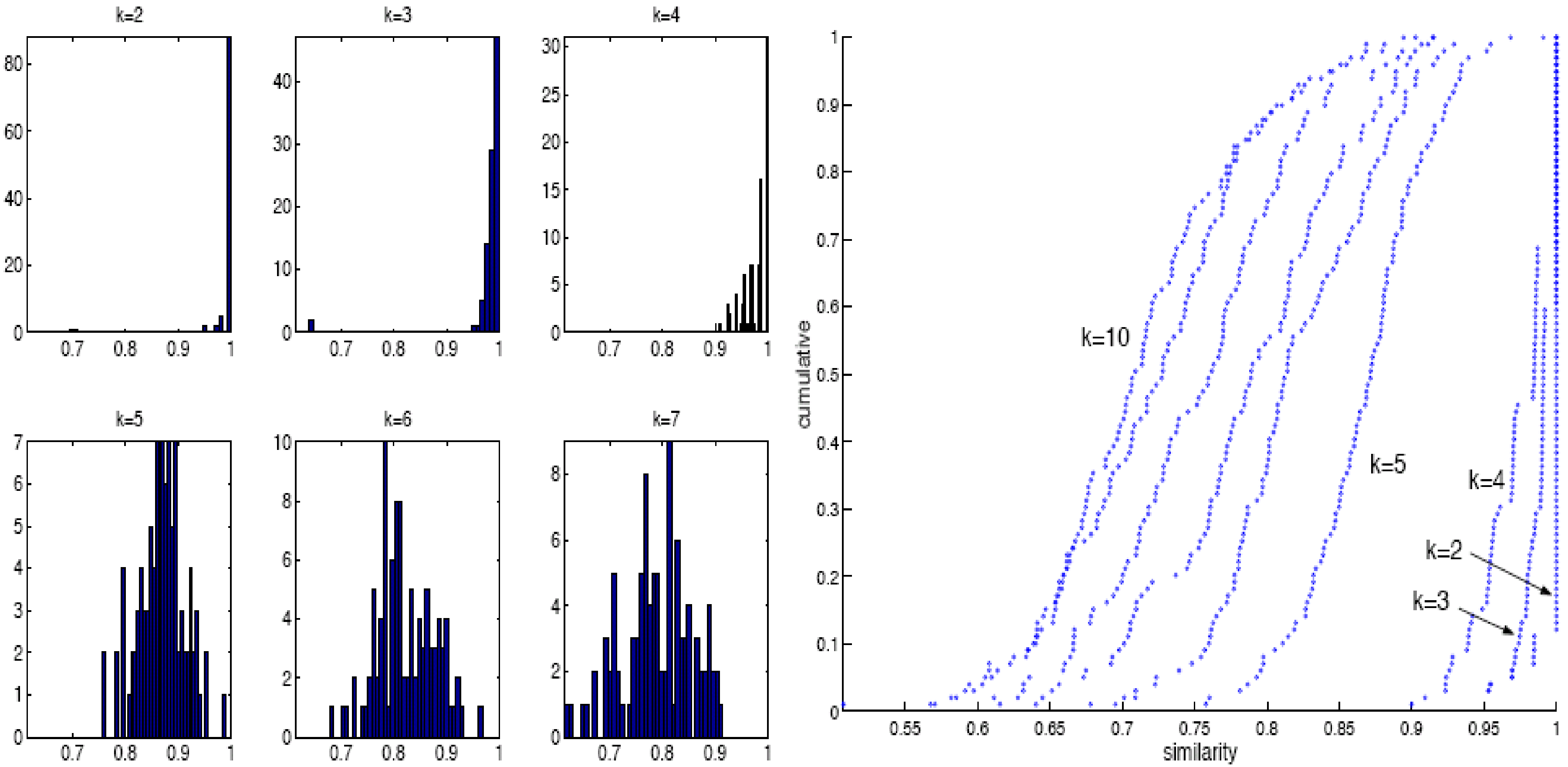
- Tengo una muestra de valores de similaridad entre las soluciones, para distintos k
- Evaluación más simple: tomo la (mayor) media
- Algunos autores miran la concentración del histograma (o el área bajo la cumulativa)

Seleccionar el k (2)

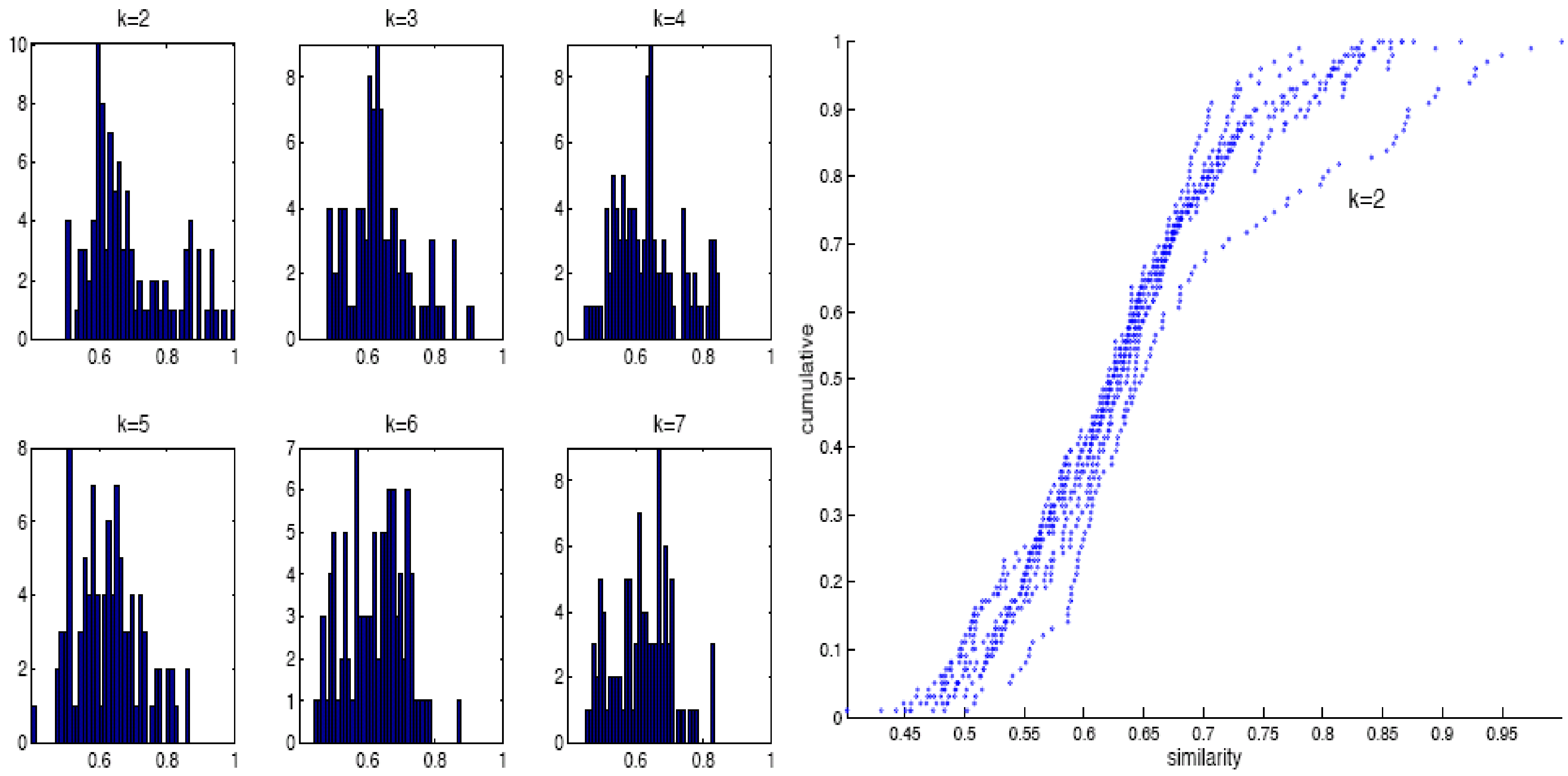
- Ejemplo:
  - 4 clusters gaussianos
  - 250 puntos en cada uno



Seleccionar el k:
4 gaussianas



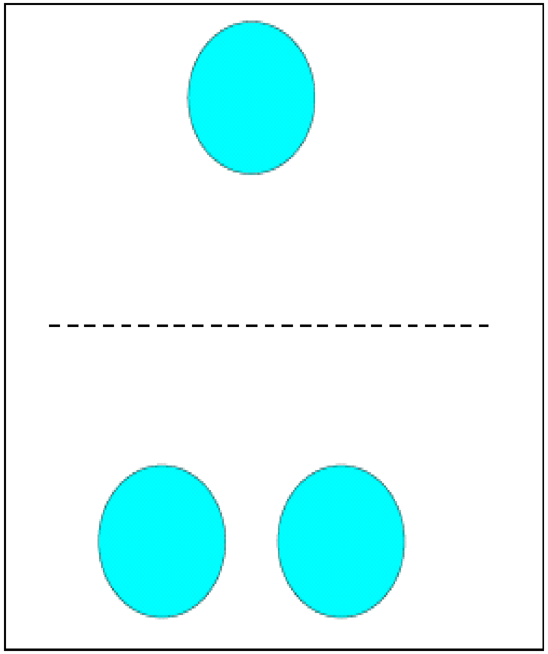
Seleccionar el k: distribución uniforme



Contraejemplos

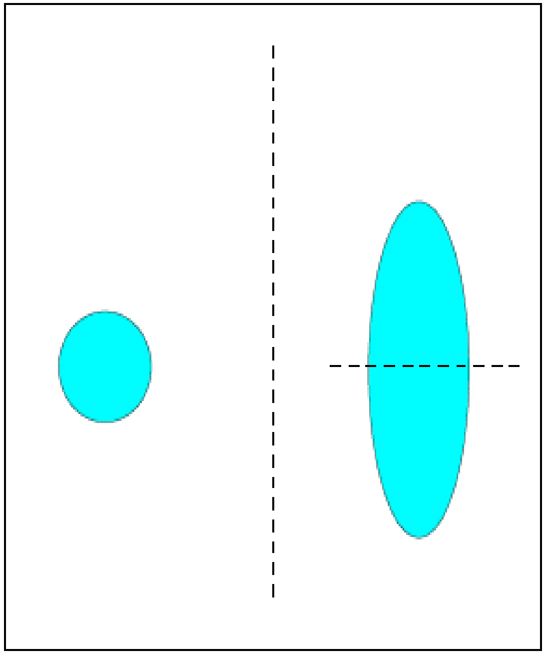
- Uno asume que las soluciones naturales tienen que ser estables
- Lo contrario no está garantizado. Hay soluciones estables que son “artificiales”

Contraejemplos



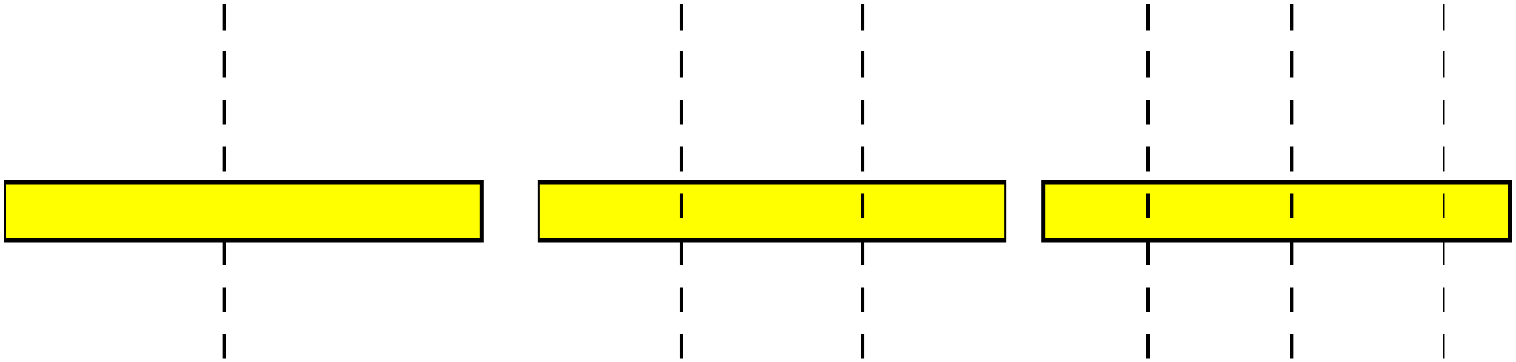
- Distribución asimétrica
- K=2 es un poco mejor que k=3.
- Se suele superar seleccionando, entre todas las estables, la que tiene el mayor k

Contraejemplos



- Un cluster asimétrico
- K=2 es un poco mejor que k=3.
- Pero va en contra del caso anterior
- En este caso se pierde casi siempre

Contraejemplos



- Los algoritmos que buscan “bolas” son estables en distribuciones alargadas para k crecientes
    - K-means en una distribución uniforme unidimendional

Resumen

- Encontrar el número de clusters: problema abierto de interés actual
- Dos heurísticas muy usadas
  - Gap: Comparar la bondad de la solución con una distribución nula
  - Estabilidad: Las soluciones naturales tienen que ser estables
  - Las dos detectan cuando no hay clusters