Técnicas de Clustering

Programa

- Introducción
- Métodos Divisivos
- Métodos Jerárquicos
- Algunos otros métodos
- Cuantos clusters? estabilidad

Introducción

- Definiciones previas:
  - Cluster: Agrupamiento de objetos.
  - Idea de grupo: Objetos que son similares entre sí pero diferentes del resto.
  - Métrica: medida de similitud entre objetos

Idea intuitiva

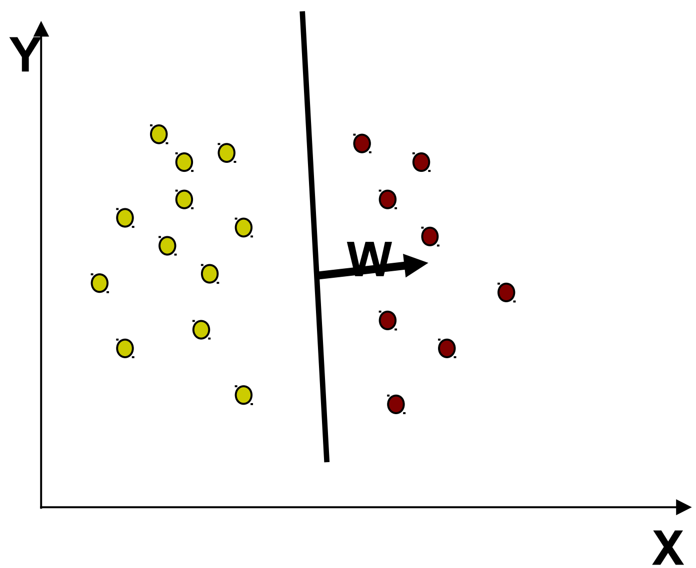
- Dados
  - un conjunto de objetos (datos)
  - una medida de similitud entre ellos (métrica)
- Encontrar una partición de los mismos /
  - Mismo grupo → Similares
  - Distinto grupo → Distintos
  - Que tenga sentido, que sea interesante

Objetivos

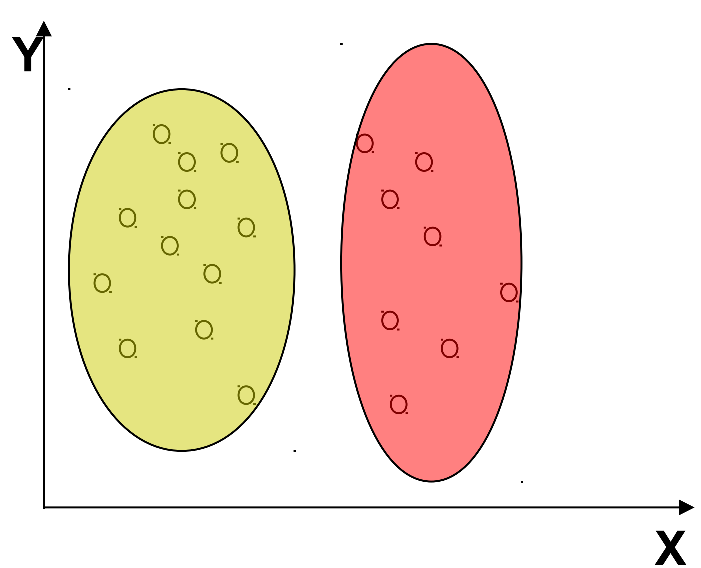
- Descubrir información
  - Encontrar “grupos naturales” en un conjunto de datos del que no se conocen “clases”.
  - Encontrar jerarquías de similaridad en los datos (taxonomías)
- Resumir los datos
  - Encontrar “prototipos” que sean representativos de un conjunto grande de ejemplos
- Dividir los datos + otros…

Clustering no es clasificación

- Clustering es aprendizaje no-supervizado
  - Se conocen los datos, no los grupos en que están organizados. El objetivo es encontrar la organización.

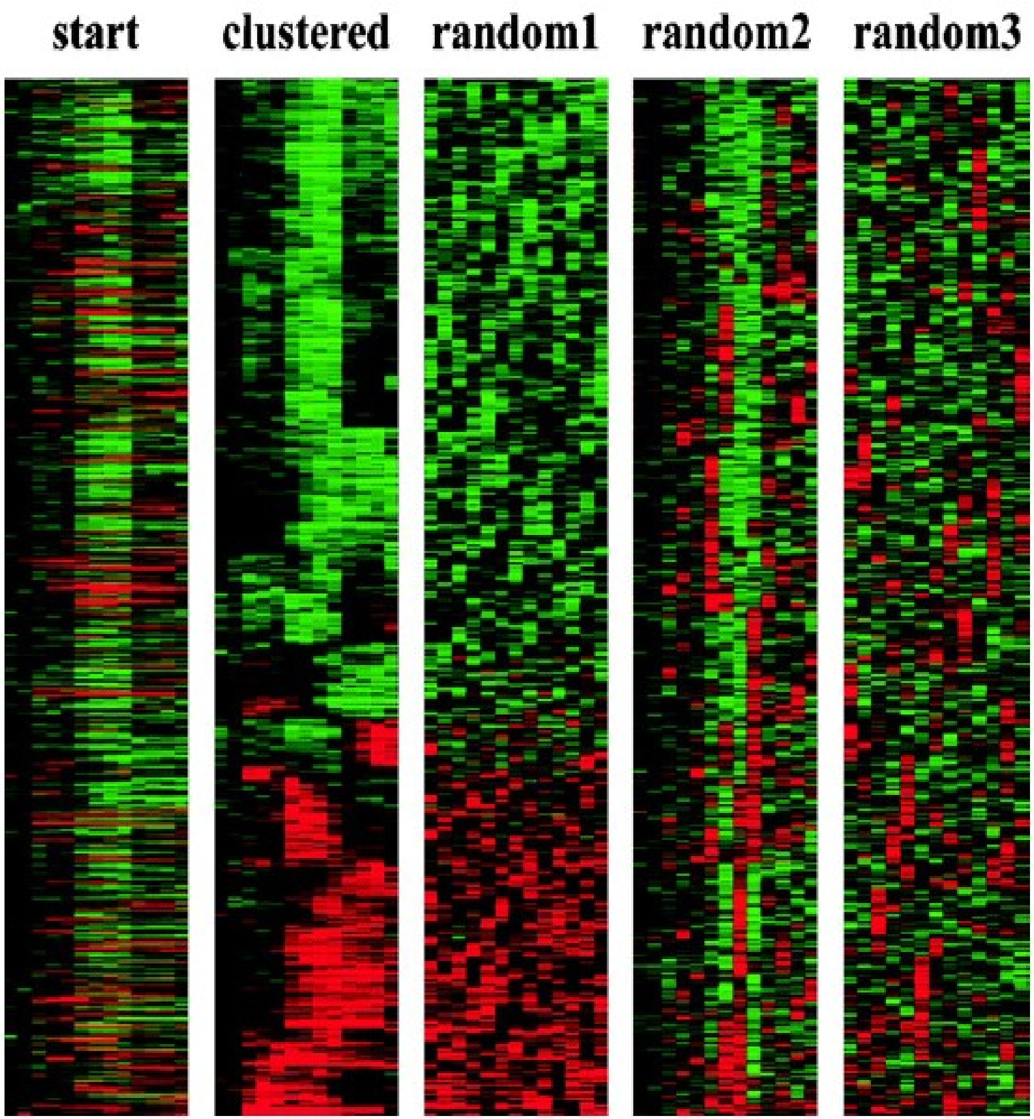


Clasificación

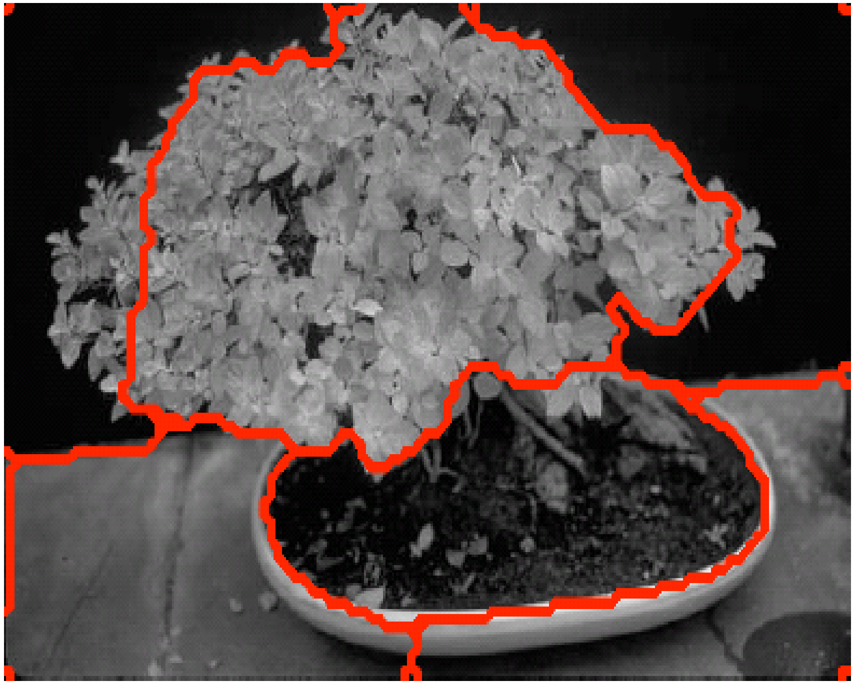


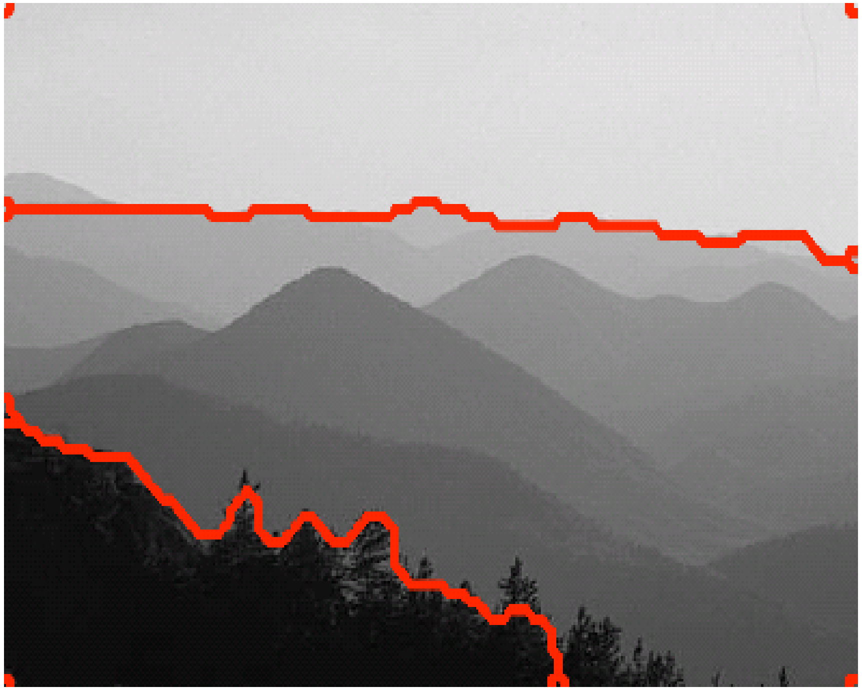
Clustering

Ejemplo:
Expresión de genes

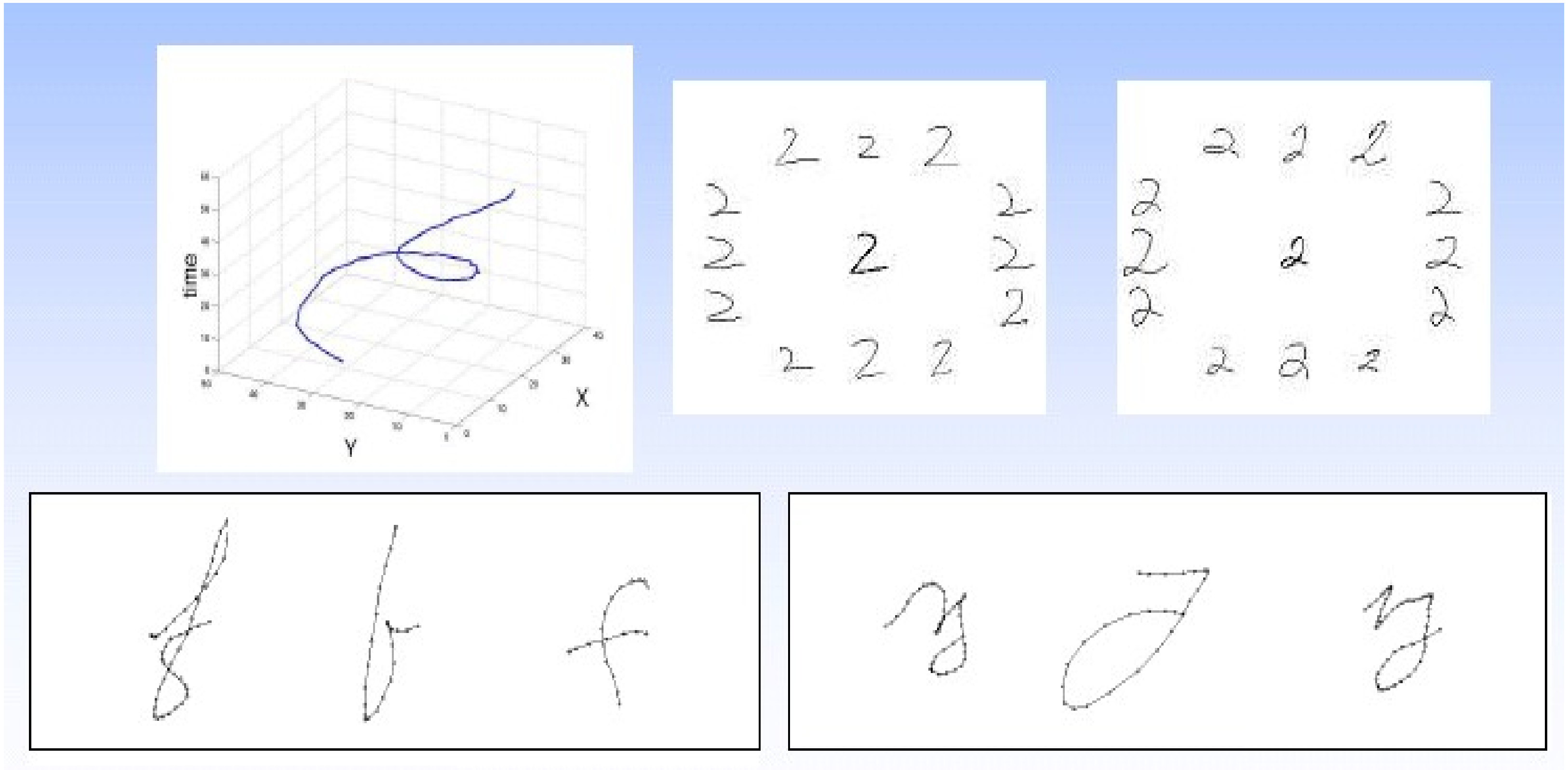


Ejemplo: Segmentación de imágenes

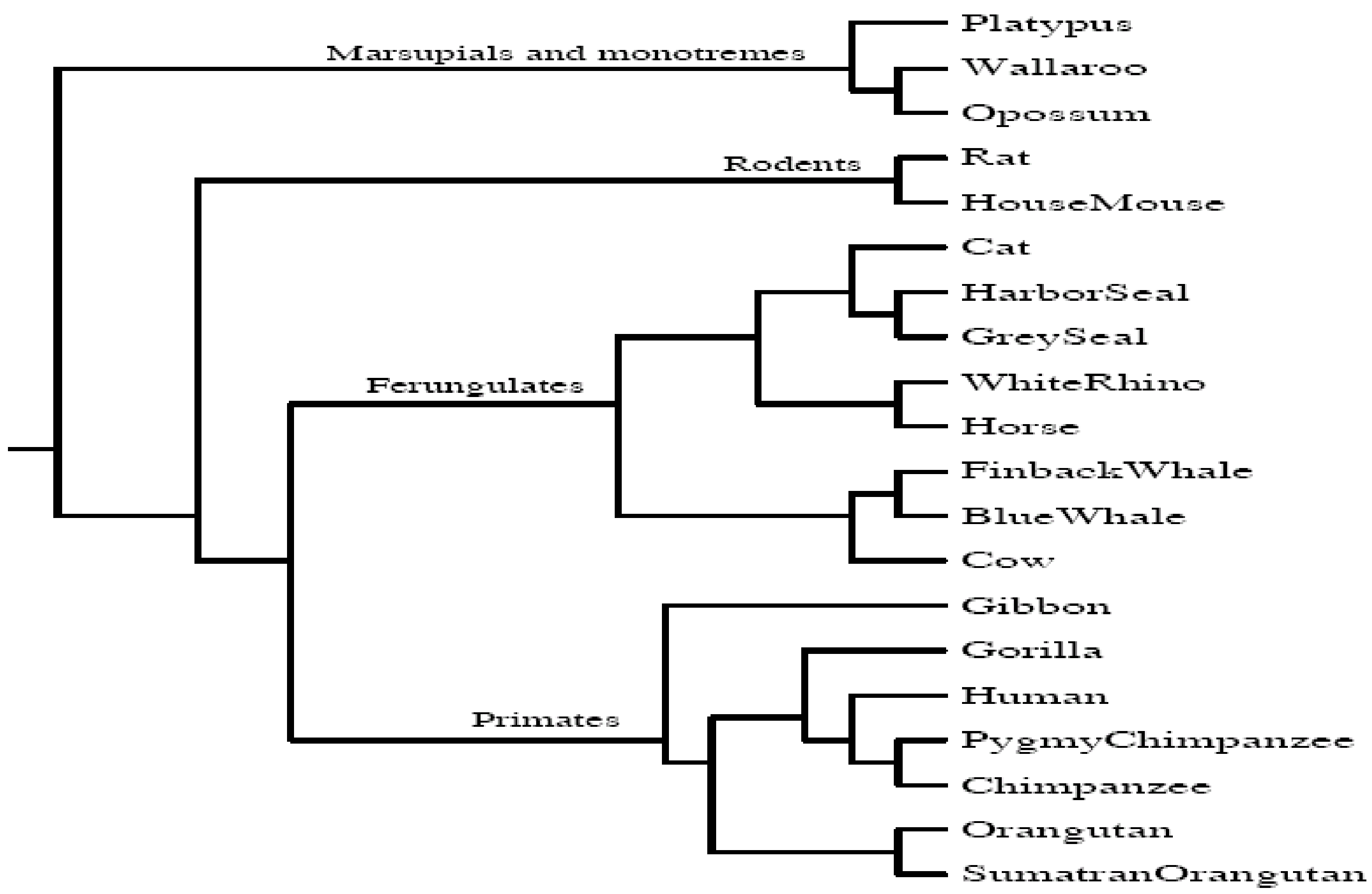




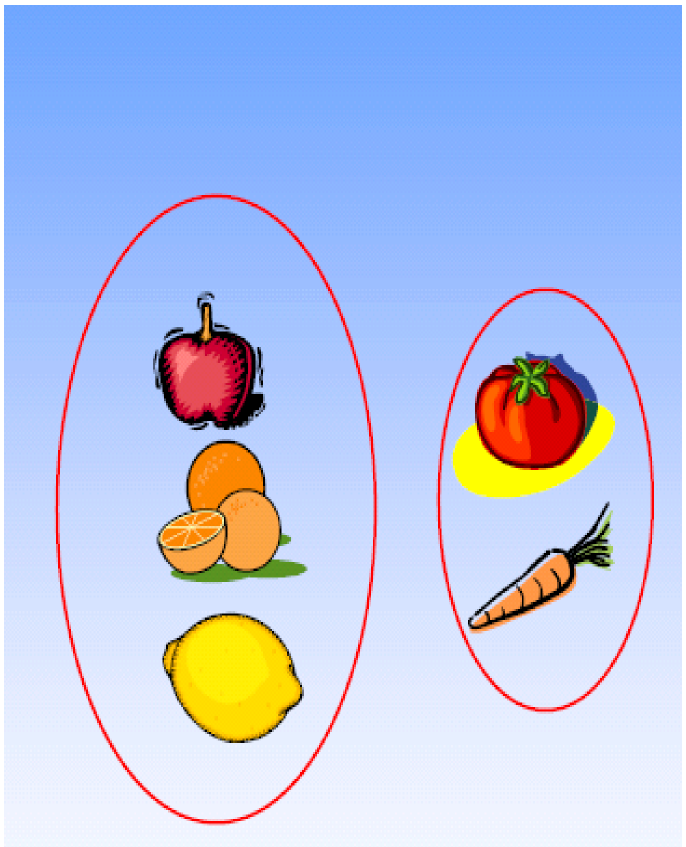
Ejemplo: Identificación de estilos de escritura.



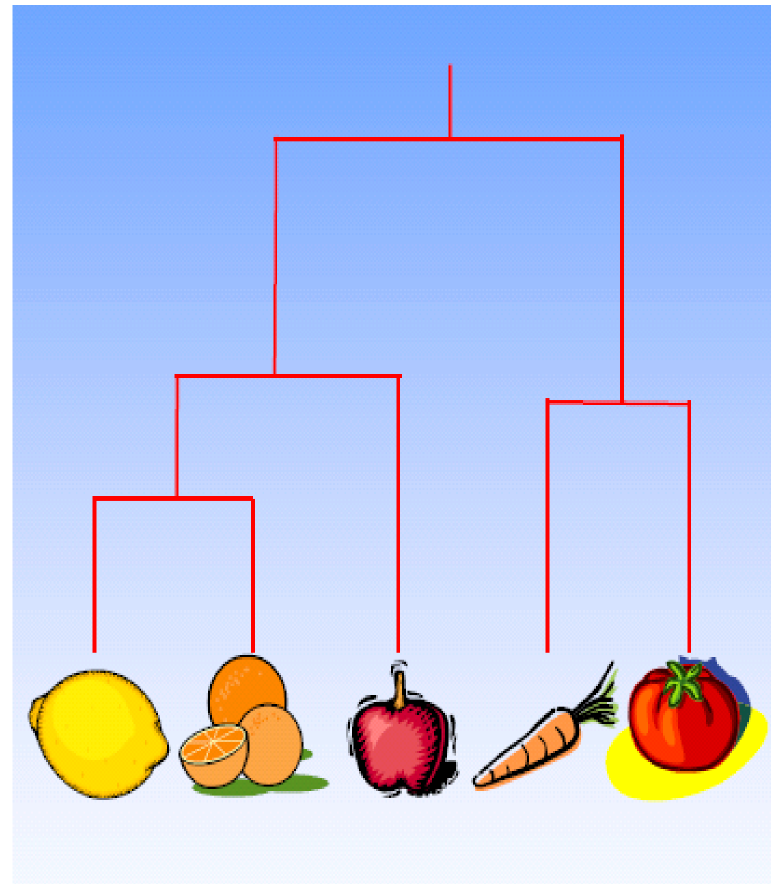
Ejemplo:
Distancia genética entre animales



Dos clases de algoritmos



Divisivos

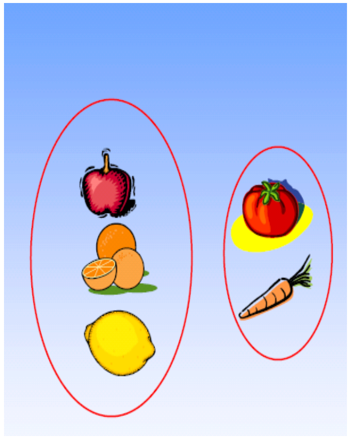


Jerárquicos

Dos clases de algoritmos

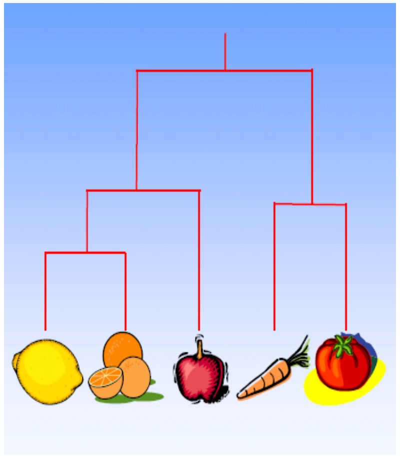
Divisivos

- “Clustering plano”: Clustering como una partición del espacio.
- Queremos la partición “más significativa” en un número fijo de partes.



Jerárquico

- El objetivo es construir una anidación de particiones, de la que se puede extraer luego una cantidad dada de partes.



Desarrollo histórico

- Cluster analysis: En nombre aparece en el título de un artículo de análisis de datos antropológicos *(JSTOR, 1954).*
- Hierarchical Clustering: *Sneath (1957), Sorensen (1957)*
- K-Means: Descubierto independientemente por *Steinhaus (1956), Lloyd (1957), Cox (1957), Ball & Hall (1967), McQueen (1967)*
- Mixture models (*Wolfe, 1970*)
- Métodos de teoría de grafos *(Zahn, 1971)*
- K Nearest neighbors *(Jarvis & Patrick, 1973)*
- Fuzzy clustering *(Bezdek, 1973)*
- Self Organizing Map *(Kohonen, 1982)*
- Vector Quantization *(Gersho and Gray, 1992)*

Datos para clustering

- Datos vectoriales
  - Dos modos: filas y columnas

$$\begin{bmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1f} & \cdots & x_{1p} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x_{i1} & \cdots & x_{if} & \cdots & x_{ip} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x_{n1} & \cdots & x_{nf} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix}$$

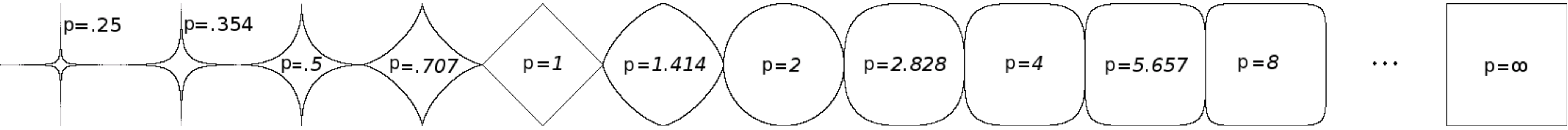
- Matriz de distancias
  - Un modo

$$\begin{bmatrix} 0 & & & & \\ d(2,1) & 0 & & & \\ d(3,1) & d(3,2) & 0 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \\ d(n,1) & d(n,2) & \cdots & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

- R usa los dos

Métricas

- Para datos vectoriales:
  - Minkowski: $$d(i,j)=\sqrt[p]{\sum |x_{id}-x_{jd}|^p}$$
  - p=1 Manhattan $$d(i,j)=|x_{i1}-x_{j1}|+|x_{i2}-x_{j2}|+\ldots+|x_{iq}-x_{jq}|$$
  - p=2 Euclidea $$d(i,j)=\sqrt{\left(|x_{i1}-x_{j1}|^2+|x_{i2}-x_{j2}|^2+\ldots+|x_{iq}-x_{jq}|^2\right)}$$

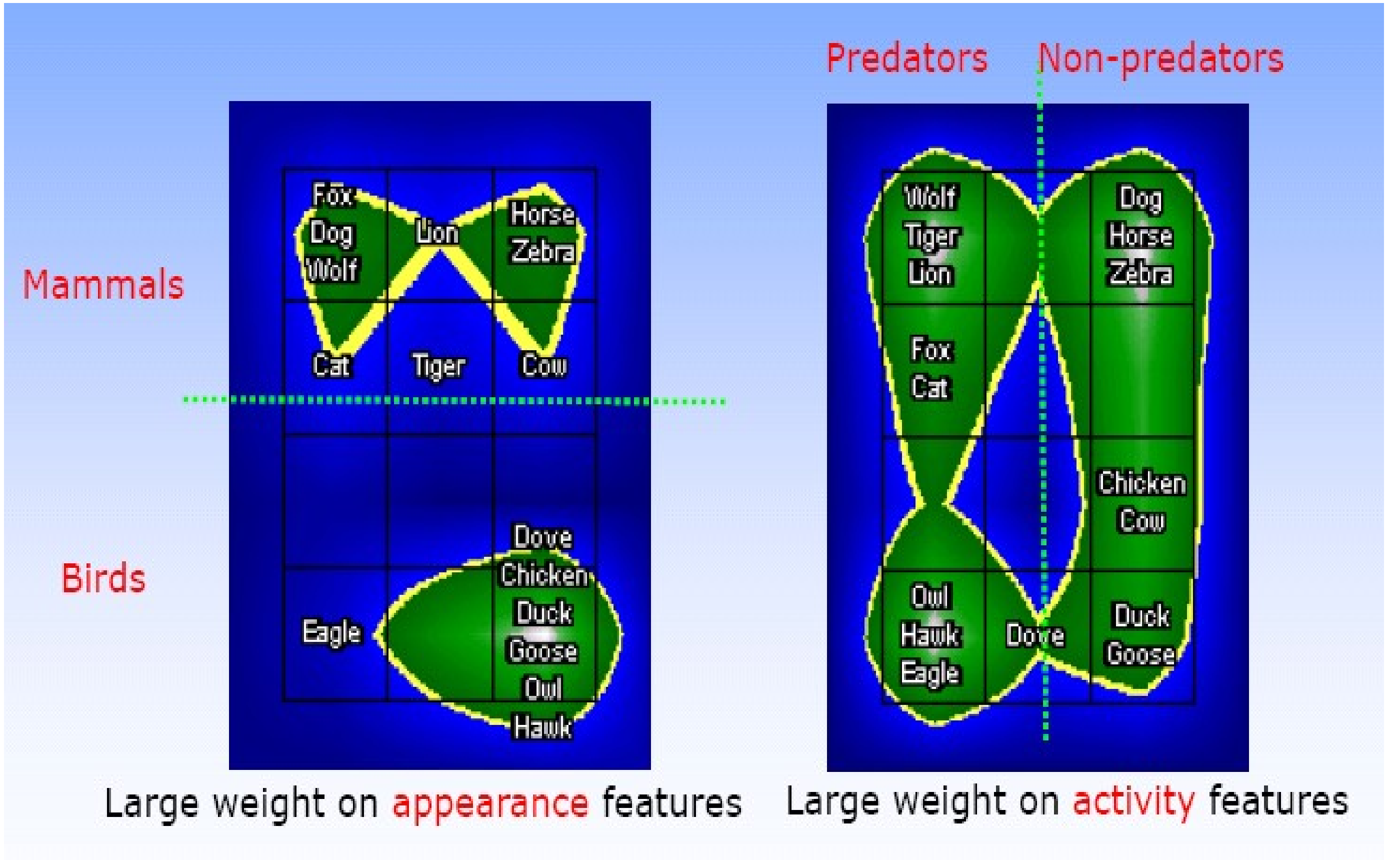


Métricas (2)

- Para datos vectoriales (otras):
  - Información mutua
  - Correlación
  - Coseno
- Para datos binarios, ordinales o categóricos se definen medidas particulares
- Se pueden definir métricas para tipos especiales
  - Videos, imágenes, texto, etc…

Pesado de las variables

- 16 animales
- 13 booleanos
- Describen caracteristicas y comportamiento
- Al cambiar el peso de un grupo de variables a otro cambia totalmente el clustering



Algoritmo general

- Usar una métrica dada para calcular todas las distancias entre los datos
- Definir una medida de bondad del clustering
  - Por ejemplo, suma de las distancias entre los puntos
- Minimizar la medida de bondad (normalmente con alguna heurística)

Métodos divisivos

K-means

- Objetivo: Encontrar una partición de los datos en k grupos, tal que la distancia media dentro de los puntos de cada grupo sea mínima
  - Grupos apretados, clusters compactos
  - Al minimizar la distancia total dentro de los grupos estamos maximizando la distancia entre los grupos.

K-means: Planteo

Queremos encontrar una particion tal que:

$$\min_{\{C_1,\ldots,C_K\}} \sum_{k=1}^{K} \frac{1}{|C_k|^2} \sum_{i\in C_k, j\in C_k} \|X_i - X_j\|^2$$

Se puede ver que es igual a:

$$\min_{\{C_1,\ldots,C_K\}} \sum_{k=1}^{K} \sum_{i\in C_k} \|X_i - m_k\|^2$$

$$m_k := \frac{1}{|C_k|} \sum_{j\in C_k} X_j$$

m_k es la media del cluster k

K-means: Planteo

Queremos el mínimo del costo J:

$$J = \sum_{j=1}^{c} \sum_{\mathbf{x}_i \in \mathcal{D}_j} ||\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_j||^2 = \sum_{j=1}^{c} \sum_{i=1}^{n} I(z_i = j) ||\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_j||^2$$

Donde los z son las etiquetas de cluster de cada punto.

J es función de los z y los μ

Si los μ están fijos y varían los z, J es mínimo si:

$$z_i = \arg\min_j ||\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_j|| \qquad \forall i$$

Si los μ varían, J es mínimo si:

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}_j} J = 0 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{\mu}_j = \frac{\sum_{i=1}^{n} I(z_i = j)\mathbf{x}_i}{\sum_{i=1}^{n} I(z_i = j)} = \frac{\sum_{\mathbf{x}_i \in \mathcal{D}_j} \mathbf{x}_i}{|\mathcal{D}_j|}$$

K-means: Planteo

- Para minimizar J puedo iterar los dos procesos alternativamente.
- Se puede mostrar que J desciende siempre.
- Esto se llama minimización alternada
- Si desciende siempre, que garantía tengo???

Voy a encontrar un mínimo LOCAL de J

en tiempo finito

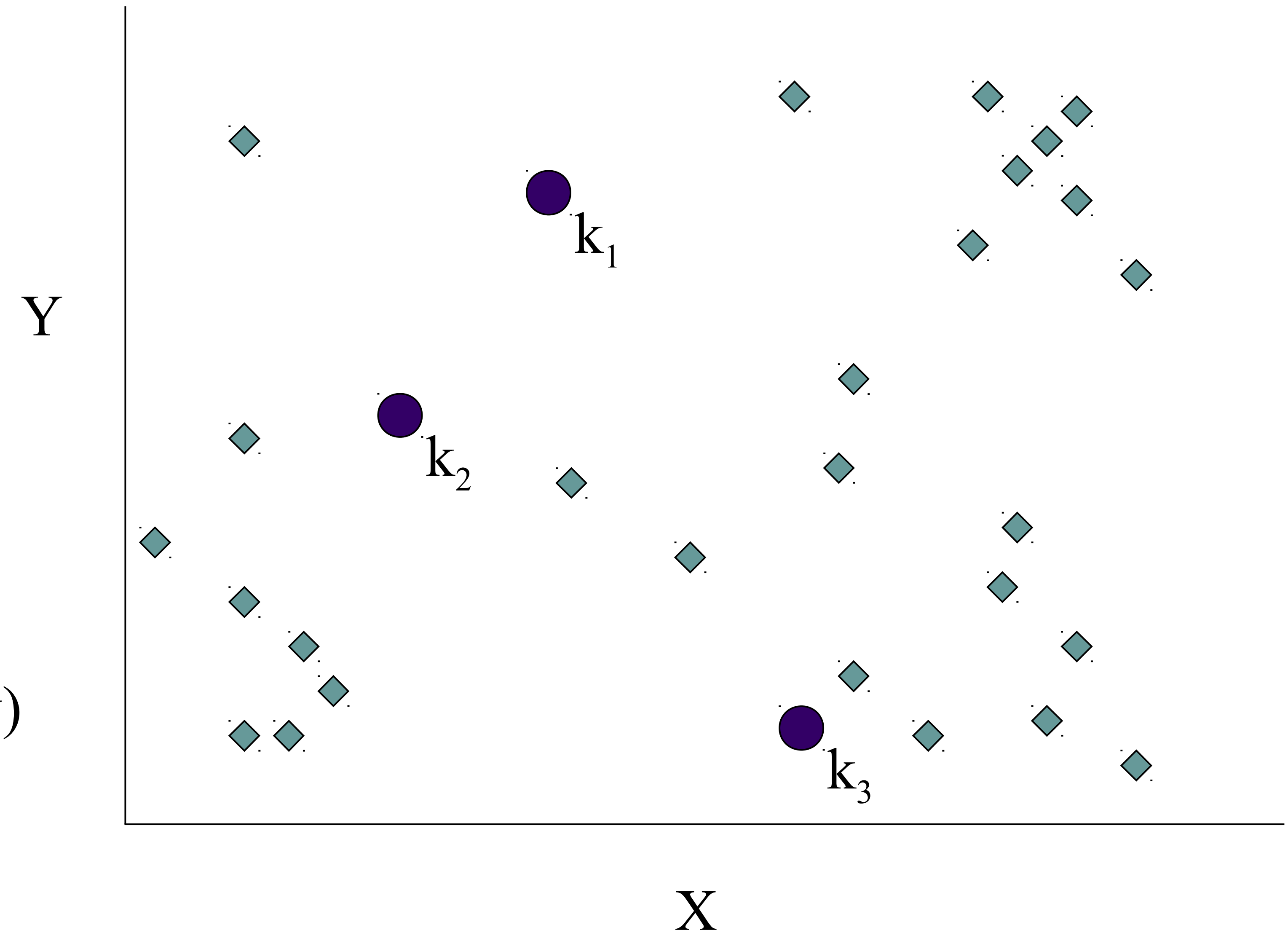
K-means: algoritmo base

- Empezar con k centros al azar
- Iterar:
  - Asignar cada punto al centro más cercano
  - Asignar cada centro como la media de sus puntos

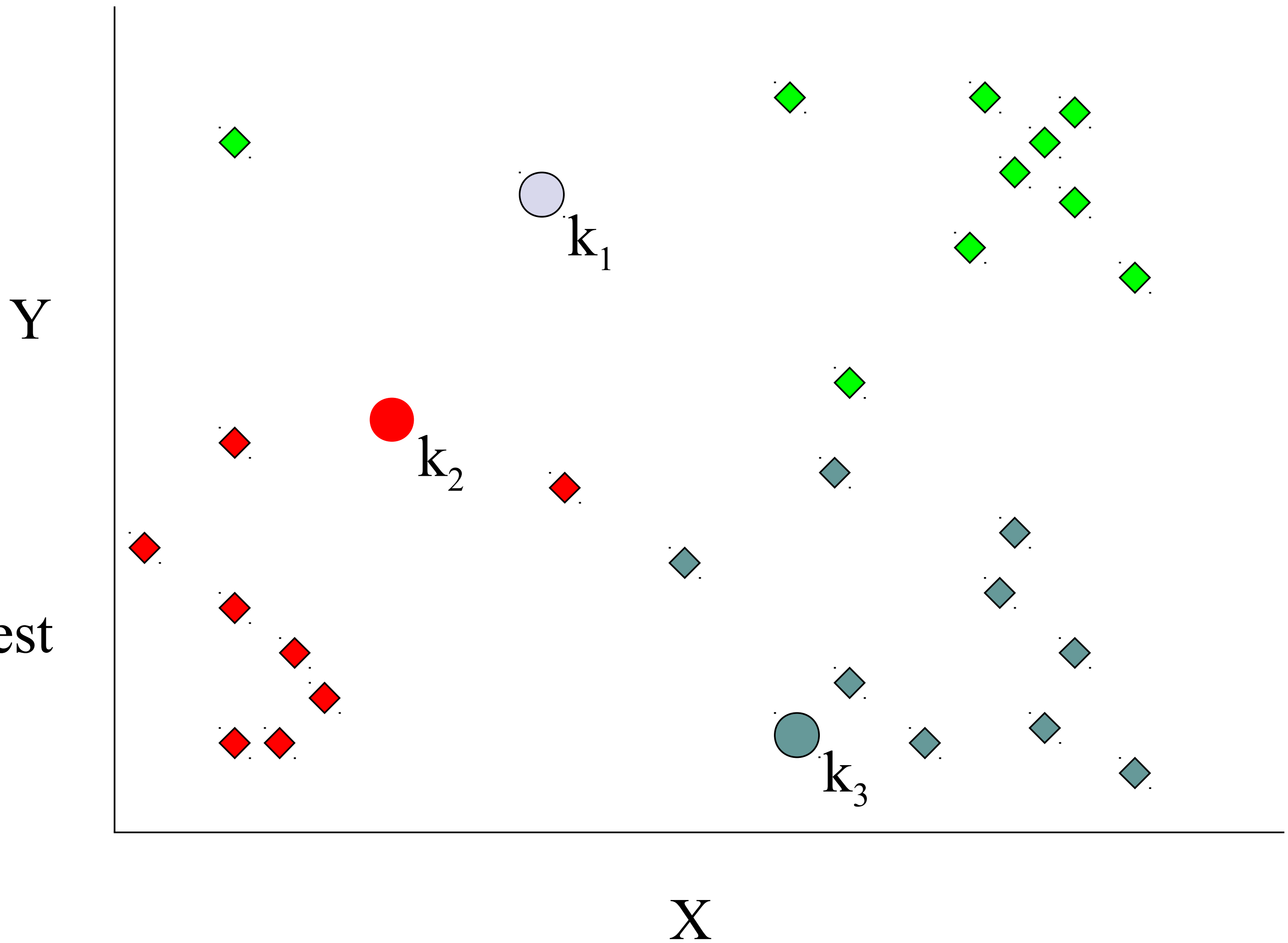
Próximas slides: animación del método

K-means example, step 1

Pick 3 initial cluster centers (randomly)



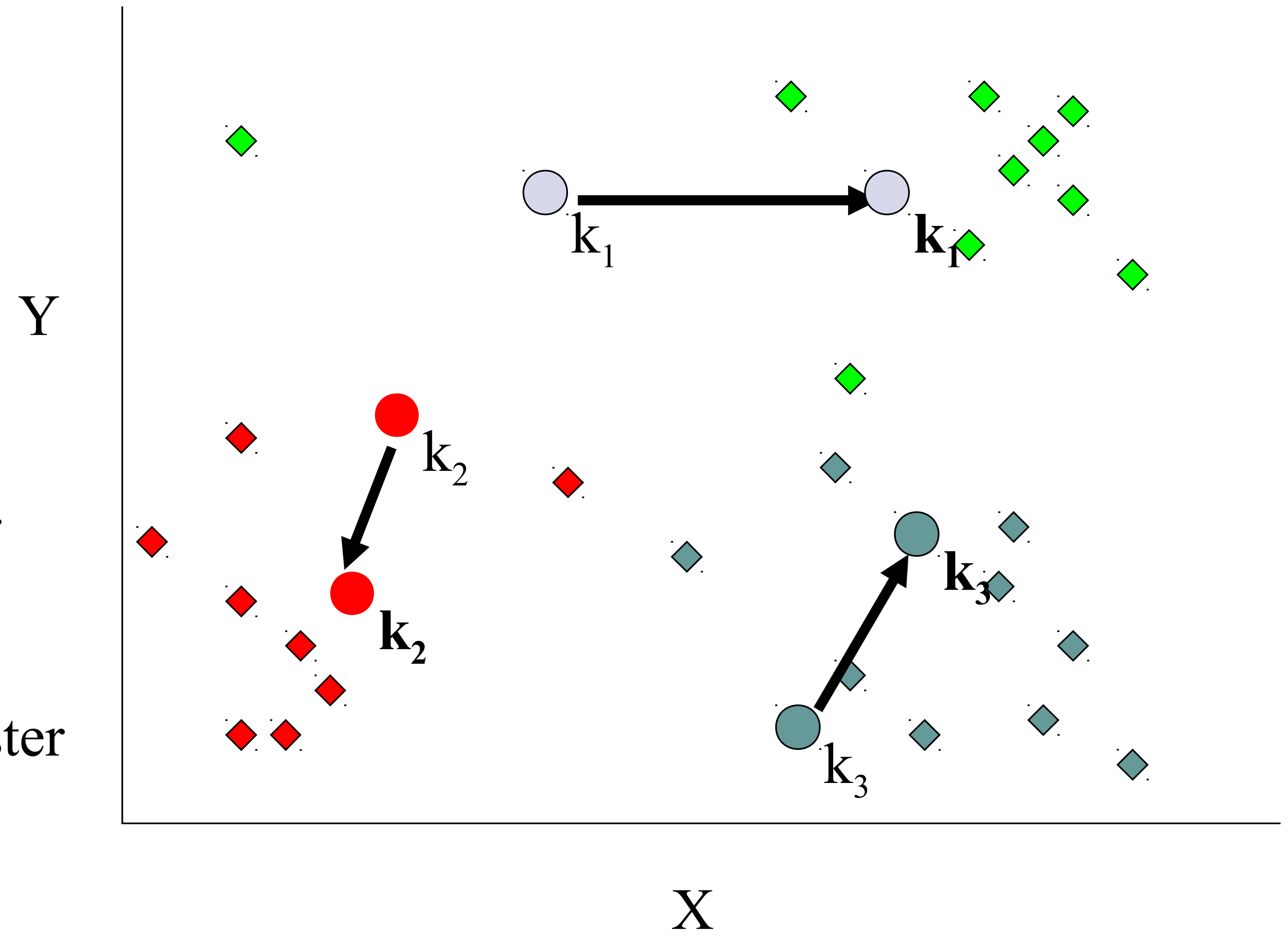
K-means example, step 2



Assign each point to the closest cluster center

K-means example, step 3

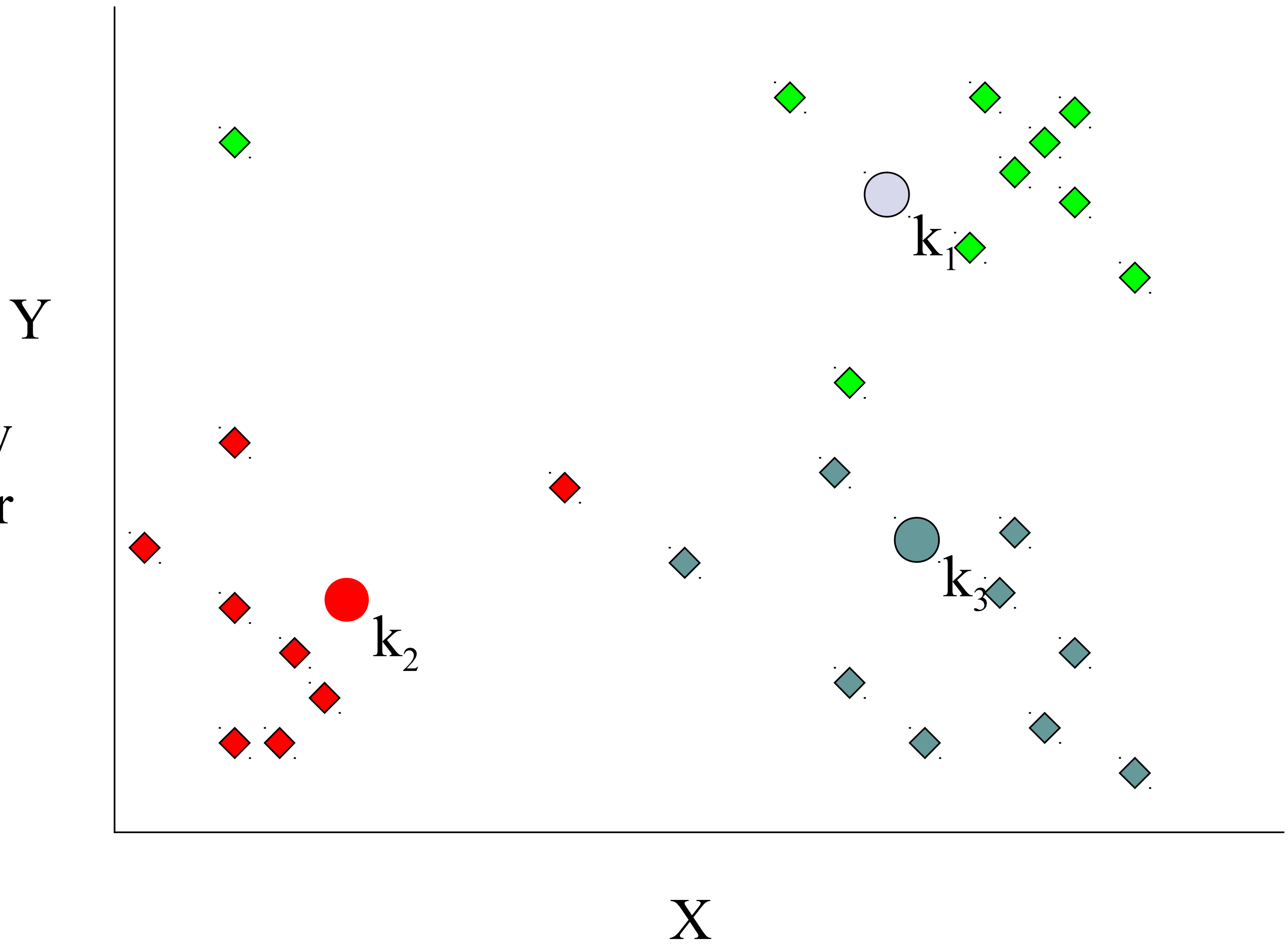
Move
each cluster
center
to the mean
of each cluster



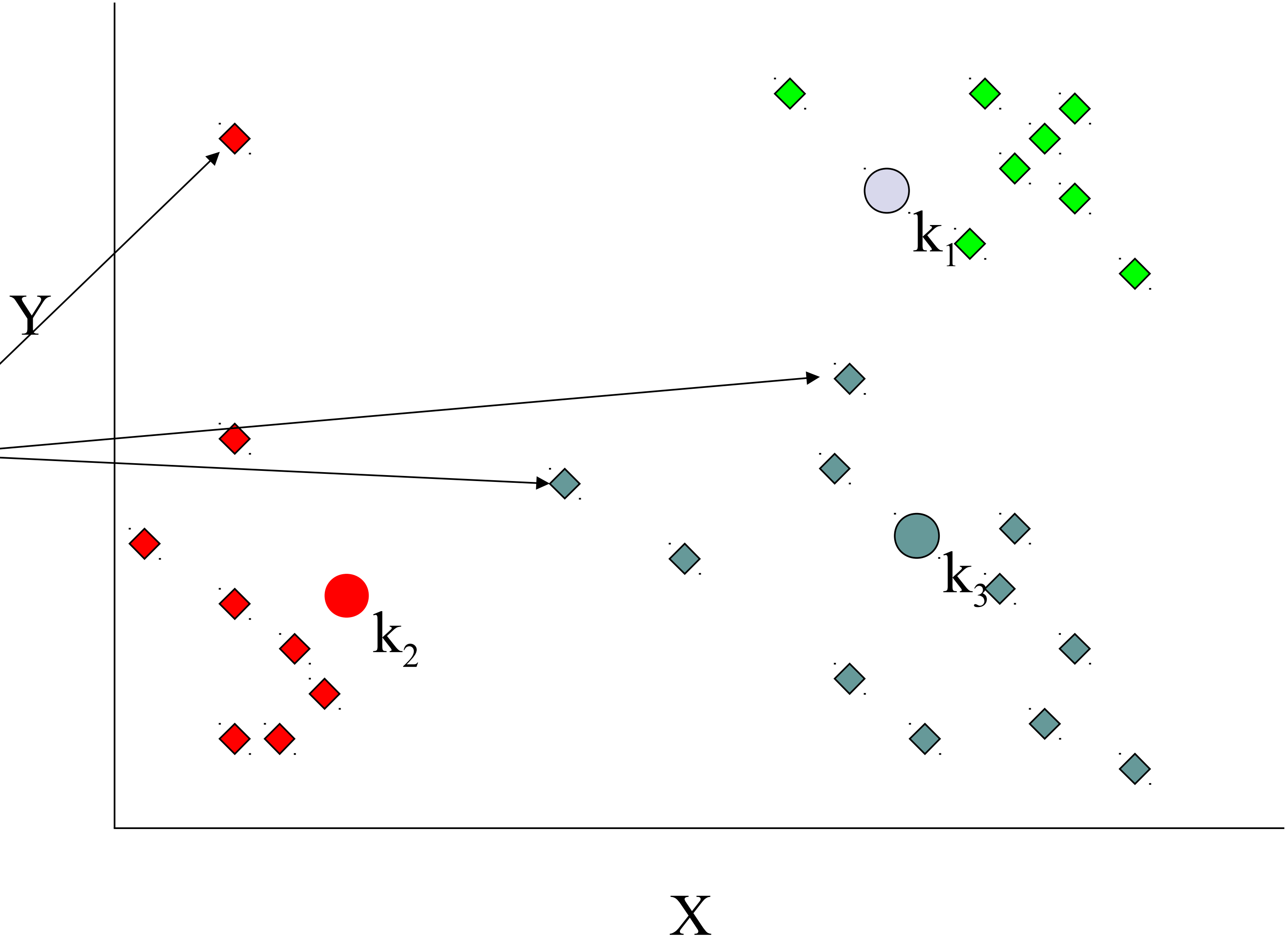
K-means example, step 4

Reassign points closest to a different new cluster center

Q: Which points are reassigned?



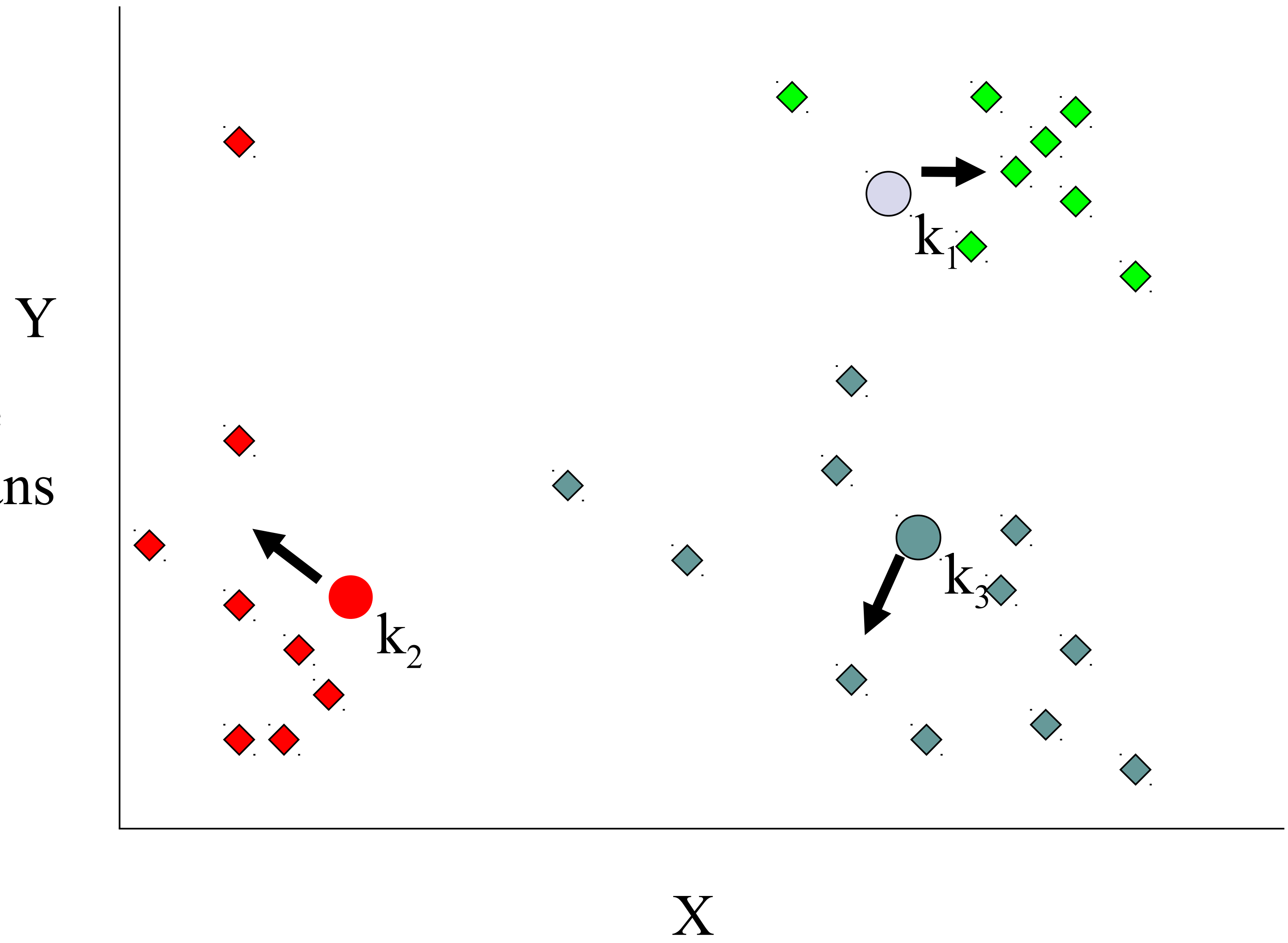
K-means example, step 4 …



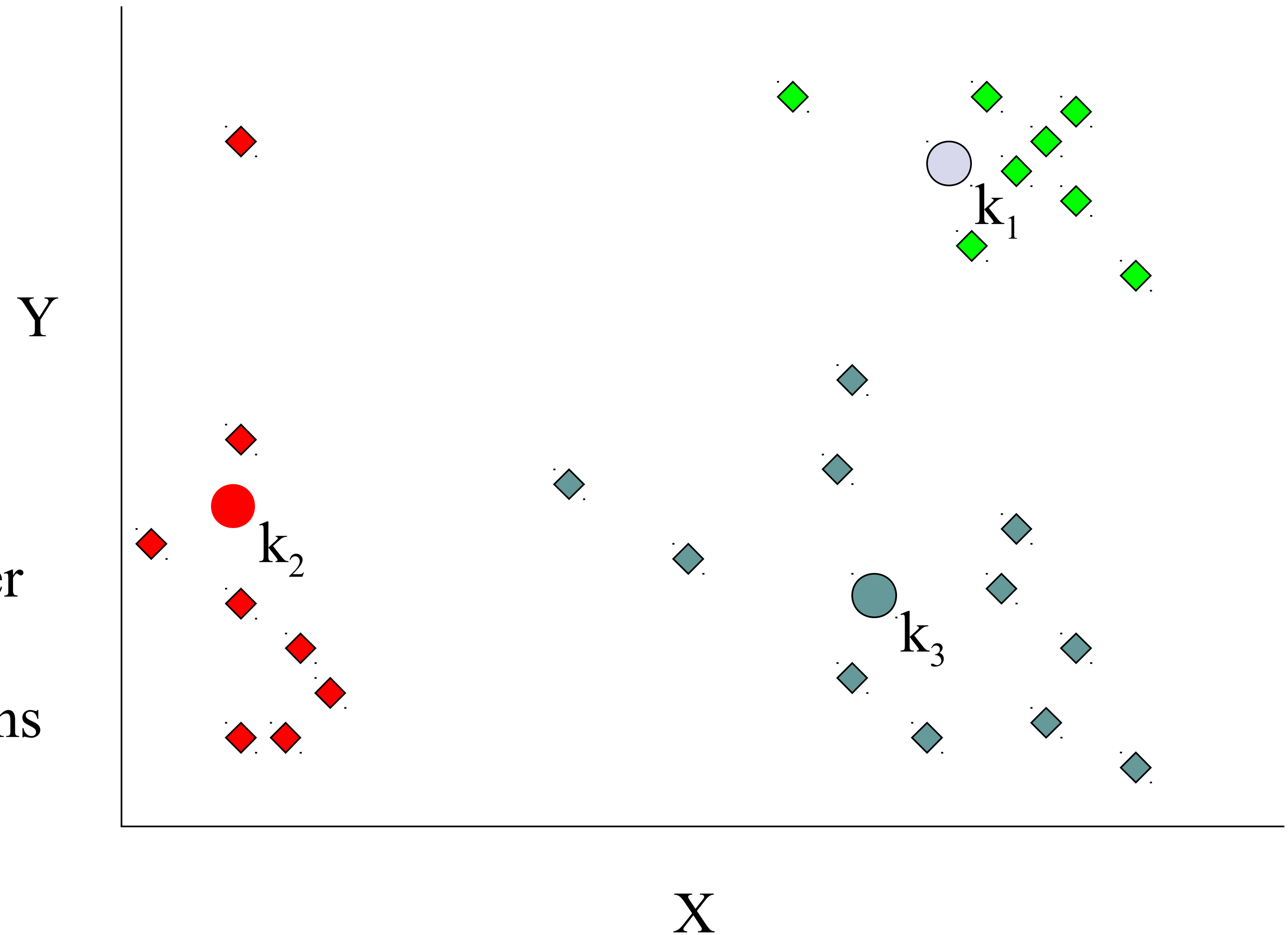
A: three points with animation

K-means example, step 4b

re-compute cluster means



K-means example, step 5



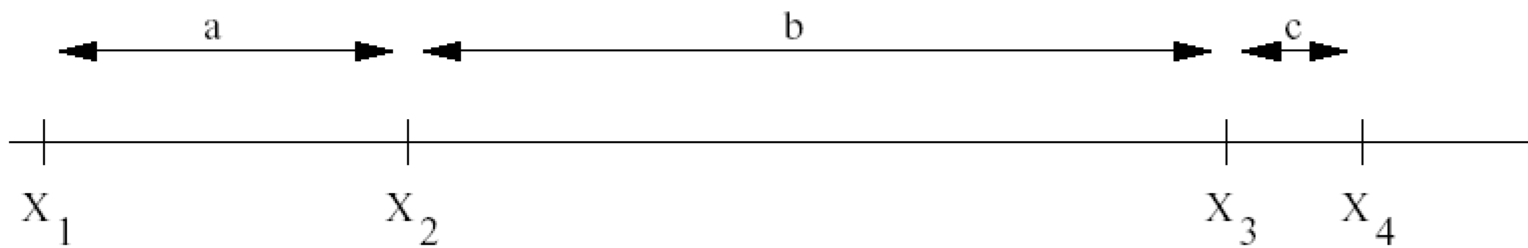
move cluster centers to cluster means

Fortalezas de k-means

- Eficiente: $O(tkn)$, donde
  - n es # objetos
  - k es # clusters
  - t *es* # iteraciones
  - Normalmente, k, $t \ll n$
- Garantía de convergencia (a mínimo local)

Problemas de k-means

4 puntos en 1 dimensión, 3 clusters



Solución óptima: $J=c^2/2$

Solución local: $J=a^2/2$

Cambiando la relación entre a y c puede ser tan mala como quiera

Solución

- Para aumentar la chance de encontrar el mínimo global se usan varias corridas desde distintos valores iniciales, y se compara el J final
    - Les suena de algún lado?

Problemas de k-means (2)

- K-means depende fuertemente de los outliers
  - Media de 1, 3, 5, 7, 9 es **5**
  - Media de 1, 3, 5, 7, 1009 es **205**
  - Mediana de 1, 3, 5, 7, 1009 es **5**
  - Ventaja de la Mediana: no la afectan los valores extremos

- K-means solo vale en espacios vectoriales

Solución (2)

- K-medoids
  - Representar cada cluster por su medoid (es el punto del cluster situado más centralmente)
  - Aplicar la misma iteración que en k-means
  - Soluciona los outliers y vale para espacios arbitrarios
  - PAM (Partitioning Around Medoids, 1987)
  - Mucho más caro computacionalmente $O(k(n-k)^2)$

Práctica en R

- Ver archivo de códigos, tiene ejemplos en datos artificiales y reales