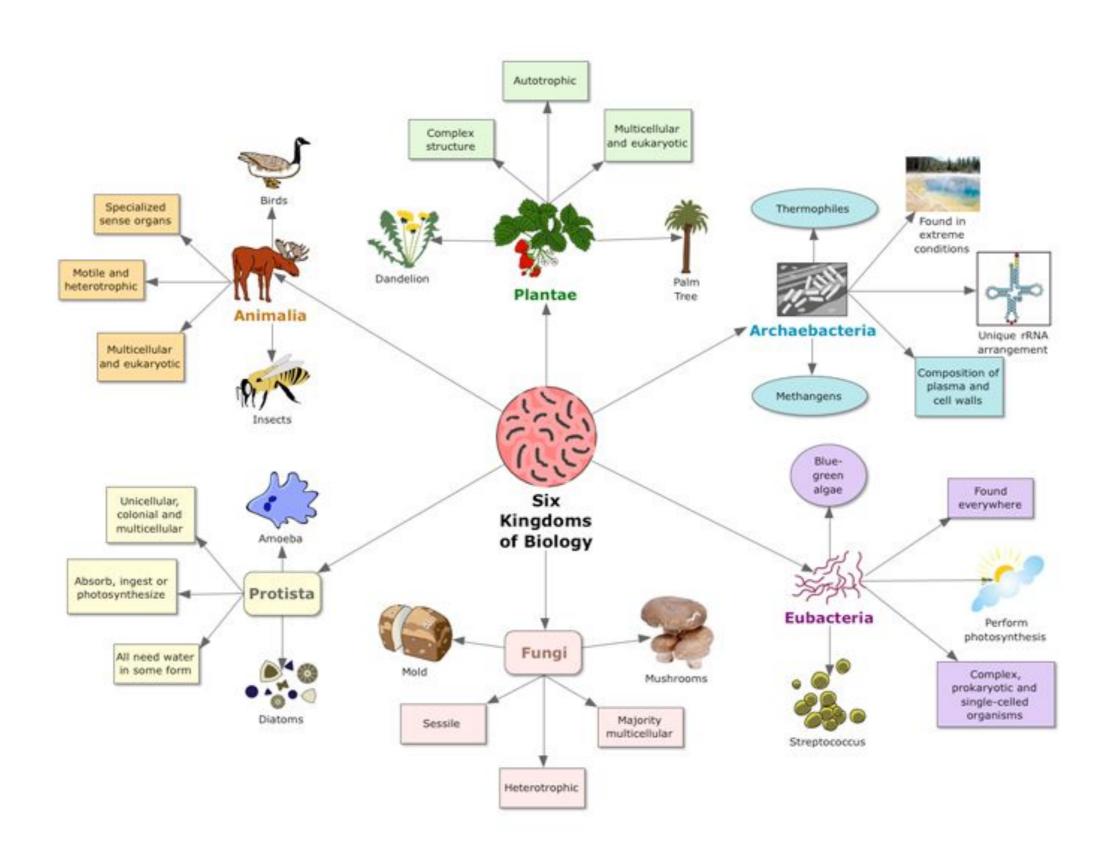


## Clustering

Introducción y Algoritmos

### Inspiración histórica (taxonomía)



## ¿Qué es el clustering?

- Encontrar grupos de objetos especificando que:
- Los objetos en un grupo sean similares (o relacionados) entre sí y
- que sean diferentes (o no relacionados) a los objetos en otros grupos

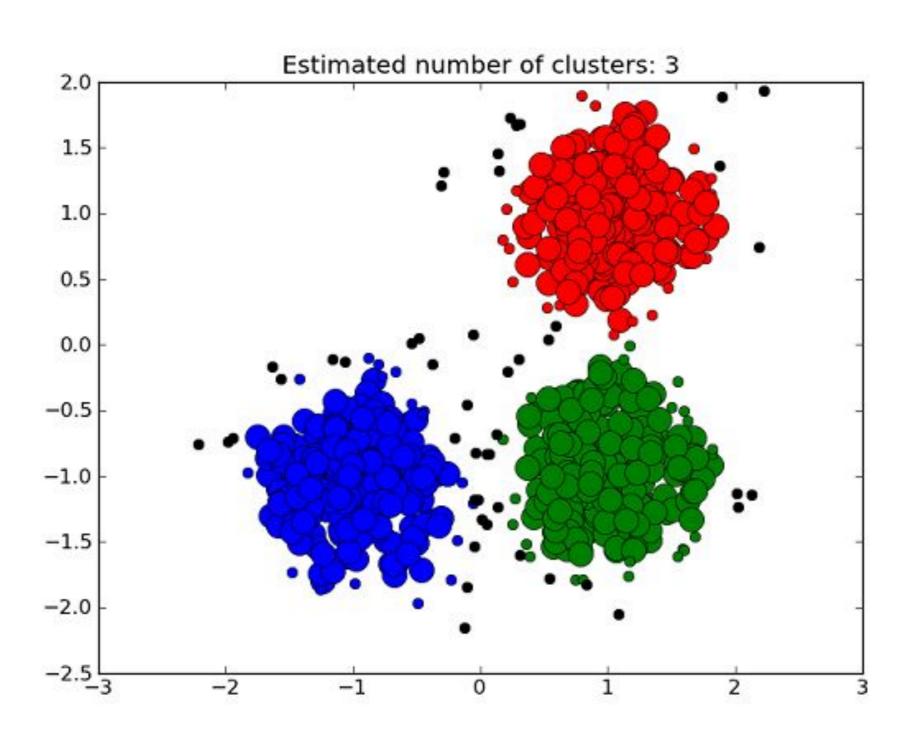
## ¿Cuándo y para qué usar clustering?

- Cuando necesitemos dividir nuestros datos en grupos que sean:
- significativos y/o útiles
- debemos preocuparnos de capturar la estructura natural de los datos
- A veces es sólo un punto de partida

## Clasificación vs. Clustering

- Clasificación: aprendizaje supervisado
- Clustering: aprendizaje no-supervisado

# Busca capturar agrupaciones naturales en los datos



# Análisis de clusters es una tarea esencial para muchas aplicaciones

#### Por ej:

- Encontrar clusters naturales y describir sus propiedades (data understanding)
- Encontrar agrupamientos útiles (data class identification)
- Encontrar representantes para grupos homogéneos (data reduction)
- Encontrar objetos inusuales (outliers detection)
- Encontrar perturbaciones aleatorios de los datos (noise detection)

## Formulación del problema

- Dado un conjunto de puntos, organizarlos en clusters (grupos, clases).
- Clustering: el proceso de agrupar objetos físicos en clases de objetos similares

## Aplicaciones

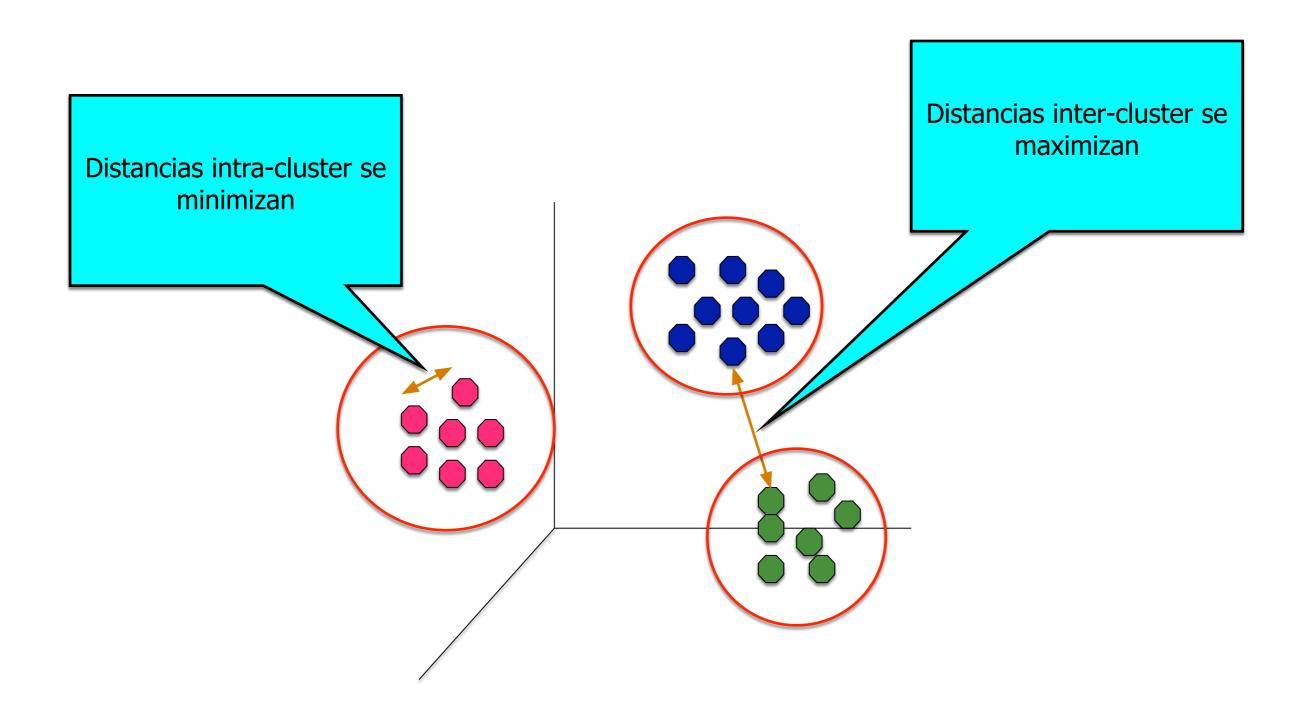
- WWW (e.j. clasificación de documentos en buscadores)
- Reconocimiento de patrones (e.j. agrupar series de tiempo)
- Procesamiento de imágenes
- Recomendación
- etc.

source:

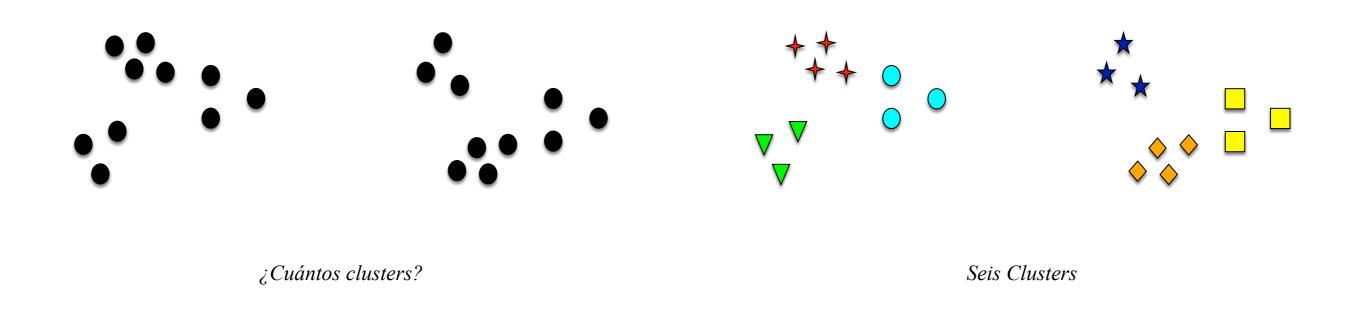
## más aplicaciones

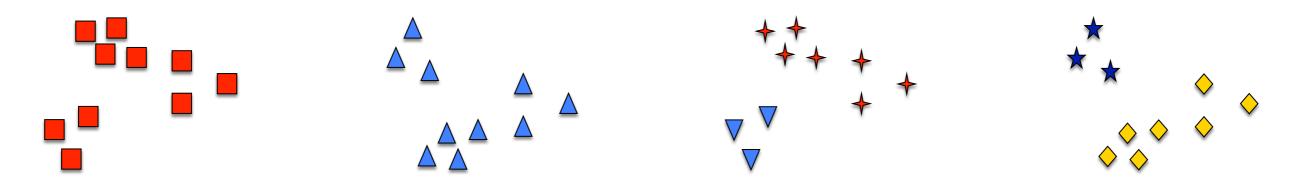
- Imagenes
- Web
- Películas
- Marketing

## ¿Qué es análisis de clusters?



# La noción de cluster puede ser ambigua





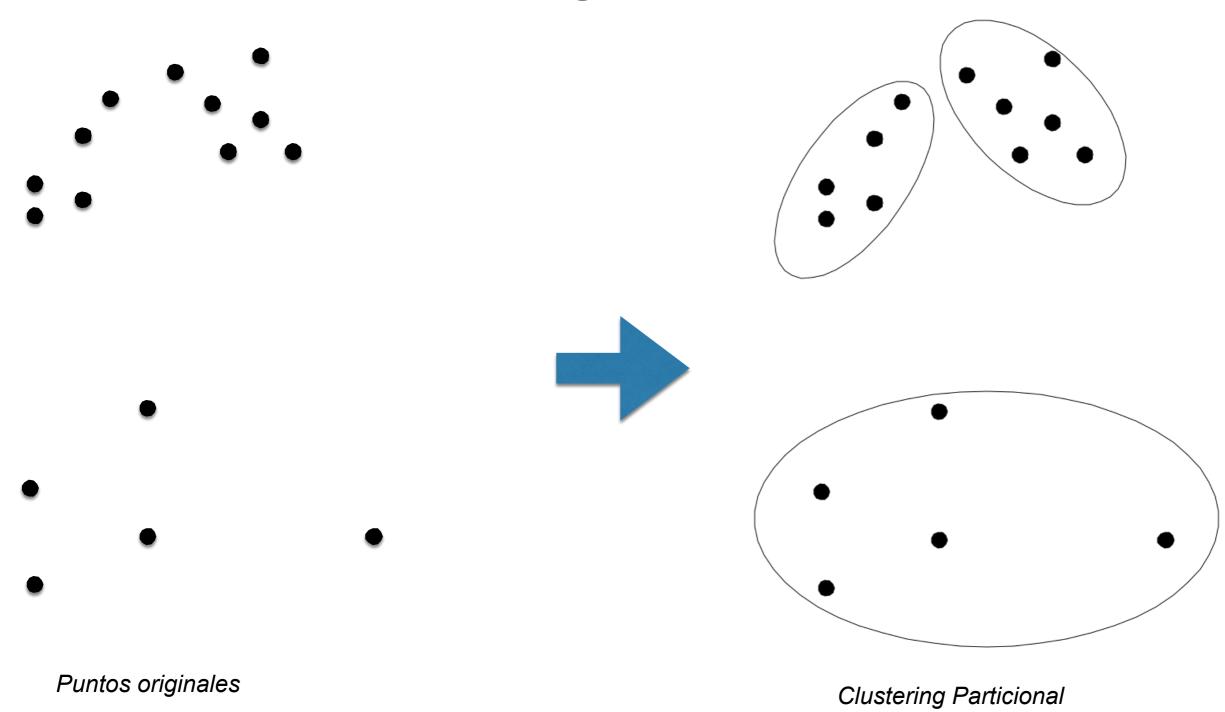
Dos Clusters

Cuatro Clusters

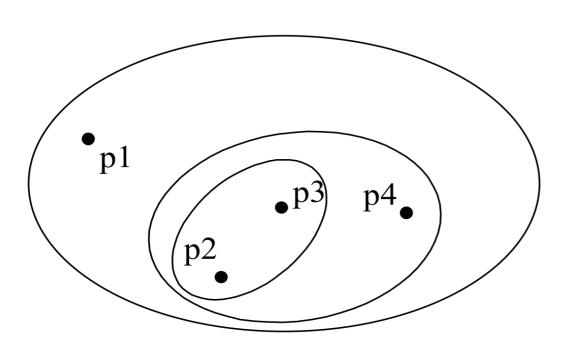
## Tipos de clustering

- Un clustering es un conjunto de clusters
- Distinción importante entre conjuntos de clusters jerárquicos y particionales
- Clustering Particional
  - Divide los datos en subconjuntos sin traslape (clusters), tal que cada dato está en un solo subconjunto
- Clustering Jerárquico
  - Un conjunto de clusters anidados, organizados como un árbol

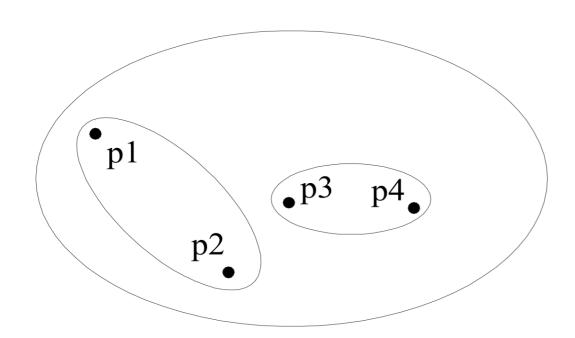
## Clustering particional



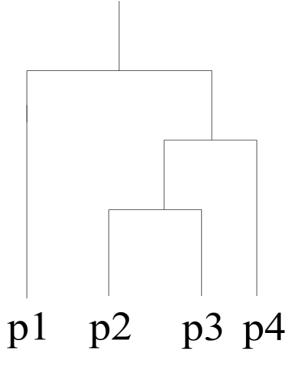
## Clustering jerárquico



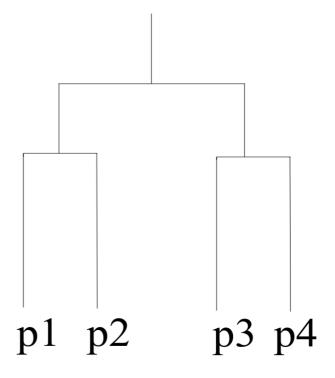
Clustering Jerárquico tradicional



Clustering Jerárquico no tradicional



Dendograma tradicional



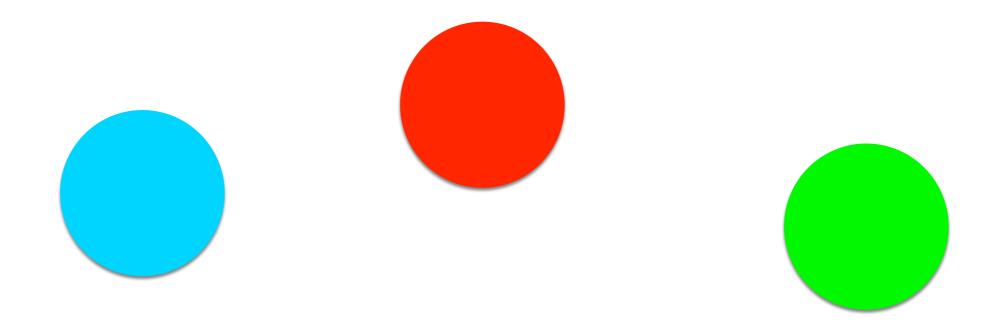
Dendograma no tradicional

## Tipos de clusters

- Bien separados
- Basados en un centro
- Contiguos
- Basados en densidad
- Propiedad o Conceptual

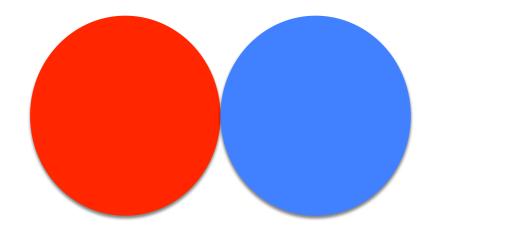
## Clusters bien separados

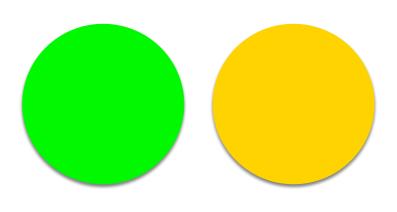
 Un cluster es un conjunto de puntos, tal que: cualquier punto en un cluster está más cerca (es más similar) a cualquier otro punto en el mismo cluster que a cualquier punto fuera de este.



### Clusters basados en un centro

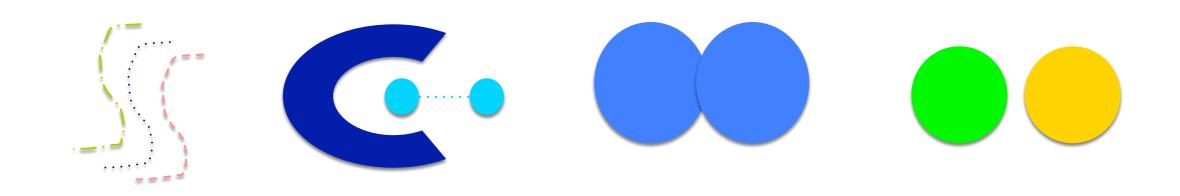
- Un cluster es un conjunto de objetos, tal que: un objeto dentro del cluster está más cerca (es más similar) al centro de este cluster que al centro de cualquier otro.
- El centro de un cluster puede ser el centroide, el promedio de todos los puntos en el cluster, o el medioide, el punto más "representativo" del cluster





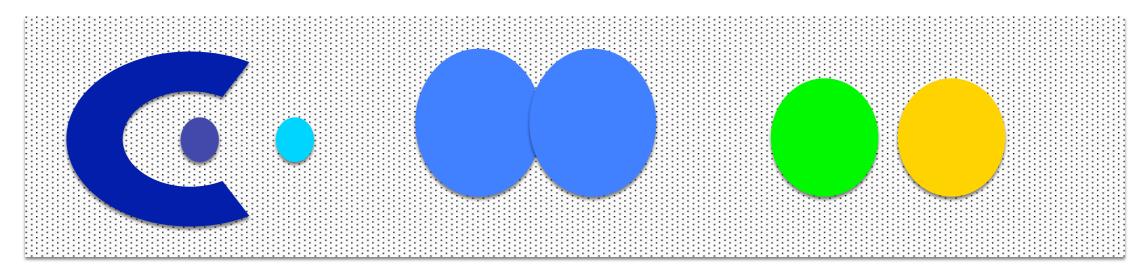
# Clusters contiguos (vecino más cercano o transitivo)

 Un cluster es un conjunto de puntos, tal que: un punto en un cluster está más cerca (es más similar) a uno o más puntos en el cluster que a cualquier punto no en el cluster



### Clusters basados en densidad

- Un cluster es una región densa de puntos, separada por regiones de baja densidad de otras regiones de alta densidad
- Usado cuando los clusters son irregulares o están entrelazados, y cuando hay ruido y outliers





# Algoritmos de Clustering

### Introducción

#### ¿Qué es análisis de clusters?

- Técnica para encontrar grupos de objetos tal que los objetos en un grupo sean similares (o relacionados) entre sí y que sean diferentes (o no relacionados) a los objetos en otros grupos.
- Es una técnica de aprendizaje no-supervisado (no requiere etiquetas para los datos).

### Introducción

# Un clustering es una colección de clusters. Tipos de clusterings:

- Clustering Particional
  - Divide los datos en subconjuntos sin traslape (clusters), tal que cada dato está en un solo subconjunto
- Clustering Probabilístico o Difuso
  - Cada objeto pertenece a cada cluster con un peso de pertenencia entre 0 y 1.
- Clustering Jerárquico
  - Un conjunto de clusters anidados, organizados como un árbol.

## Métodos de clustering

- K-means
- Método jerárquico aglomerativo
- DBSCAN
- Mixture of Gaussians y algoritmo EM

### K-means

#### Método de clustering particional

- Input: Un dataset de atributos numéricos.
- Párametro: número de clusters K
- Se asignan K centroides iniciales (aleatorios)
- Se realizan dos operaciones iterativamente: asignar y recalcular centroides
  - a. Asignar: cada punto es asignado a su centroide más cercano.
  - b. Recalcular centroides: se recalculan los centroides promediando sus puntos.
- Iterar hasta converger.

## Cálculo de Centroide

Sean 3 vectores de tres de dimensiones:

$$\vec{x}_1 = [6, 4, 3], \vec{x}_2 = [4, 5, 1], \vec{x}_3 = [2, -3, 5]$$

El centroide de estos vectores es:

$$c(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3) = [(6+4+2)/3, (4+5-3)/3, (3+1+5)/3] = [4, 2, 3]$$

## Algoritmo

#### **Algorithm 1** Basic K-means Algorithm.

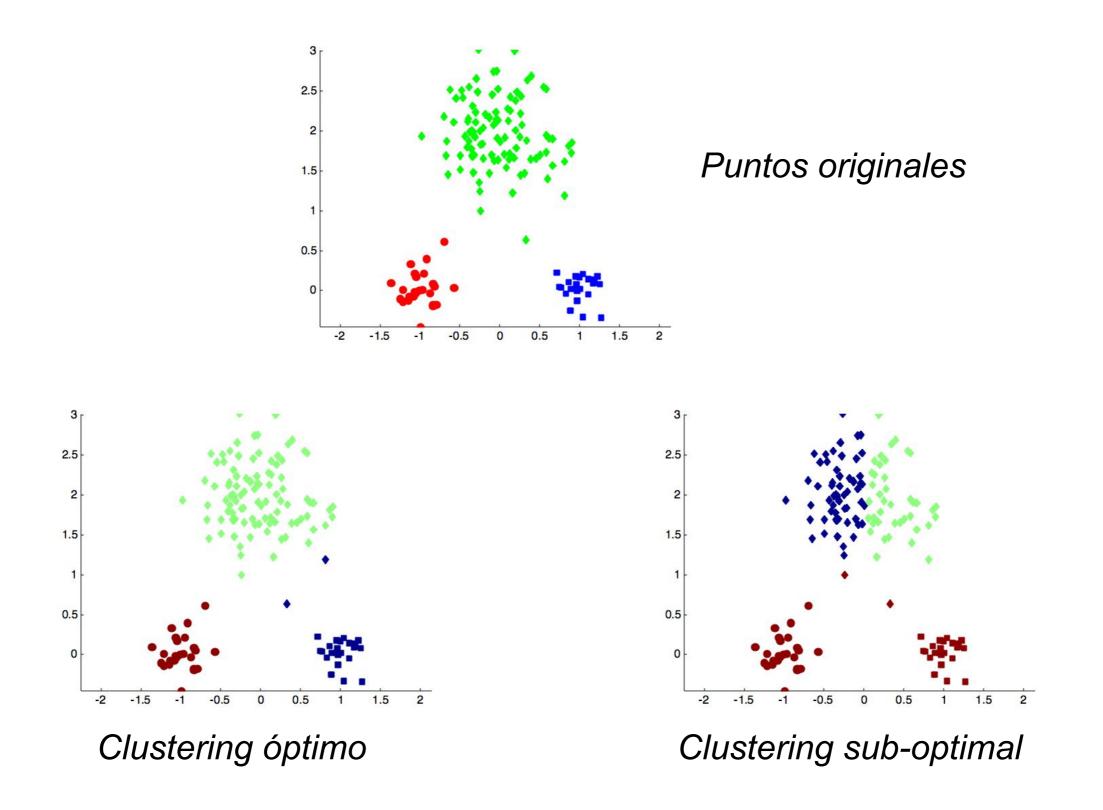
- 1: Select K points as the initial centroids.
- 2: repeat
- 3: Form K clusters by assigning all points to the closest centroid.
- 4: Recompute the centroid of each cluster.
- 5: **until** The centroids don't change

### K-means

#### Detalles del algoritmo

- Centroides iniciales: aleatorios
  - Clusters varían dependiendo de la elección
- "Cercanía" se mide con alguna distancia (generalmente usamos distancia euclidiana para variables númericas)
- K-means converge para distancias "usuales"
- En general la convergencia sucede con pocas iteraciones
  - Iterar hasta que cambien "pocos" puntos de cluster
- Complejidad es O(n \* K \* I \* d )
  - n puntos, K centros, I iteraciones, d dimensiones

#### K-means no asegura encontrar los clusters óptimos



#### K-means: escogiendo los centroides iniciales

- Escoger los centroides iniciales es una pieza clave en K-means.
- Enfoque tradicional: inicializar los centroides aleatoriamente.
- Cuando los centroides iniciales son escogidos aleatoriamente, diferentes ejecuciones de k-means producen distintos valores de SSE.
- Solución simple: correr K-means varias veces variando la semilla aleatoria y quedarse con el modelo de menor SSE.
  - ¡Esto último no garantiza que encontremos los clusters óptimos!

## Sum of Squared Error (SSE)

- Medida más común para evaluar clusters
- Por cada punto, error es la distancia al cluster más cercano
- x: punto en el cluster Ci, mi: centroide Ci
- Dados 2 clusters se escoge el que tiene menos error

$$SSE = \sum_{i=1}^{K} \sum_{x \in C_i} dist^2(m_i, x)$$

#### Repaso SSE

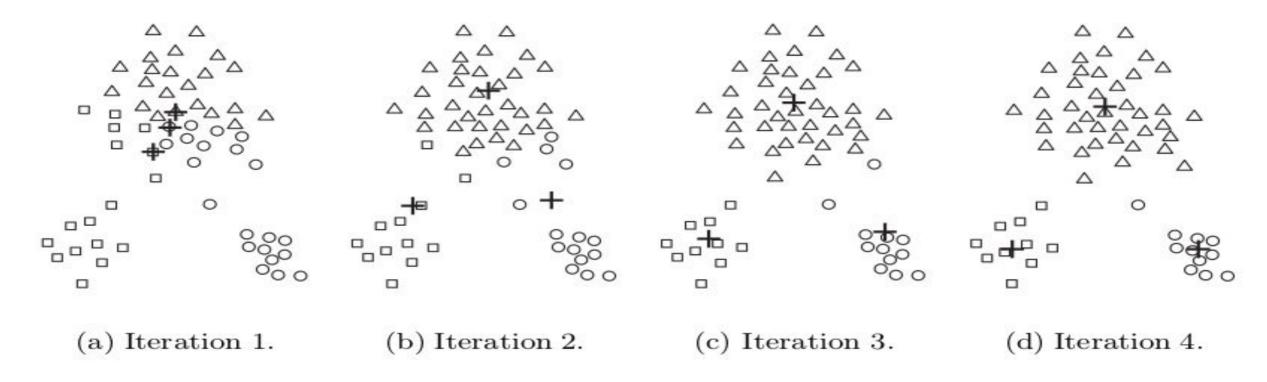
 SSE: Suma de las distancias cuadradas de cada punto al centroide de su cluster asignado.

$$SSE = \sum_{i=1}^{K} \sum_{\mathbf{x} \in C_i} dist(\mathbf{c}_i, \mathbf{x})^2$$

- Propiedad Interesante:
  - SSE permite calcular cual es el aporte individual de cada cluster al SSE total.
  - Eso nos permite juzgar si un cluster es bueno o no.

#### Comparando distintas inicializaciones

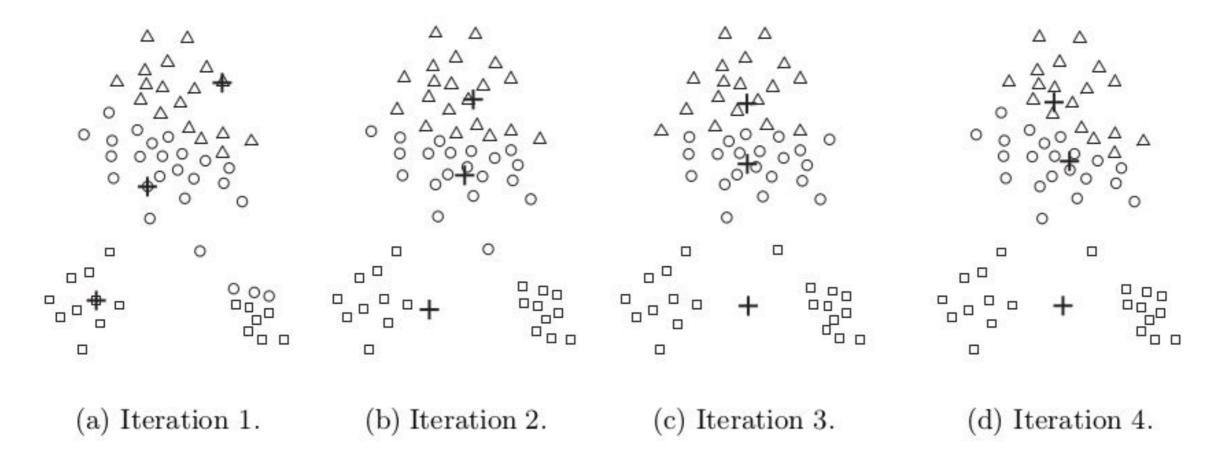
#### Caso1:



Aunque los centroides iniciales están todos en único cluster, igual se converge a los clusters deseados.

#### Comparando distintas inicializaciones

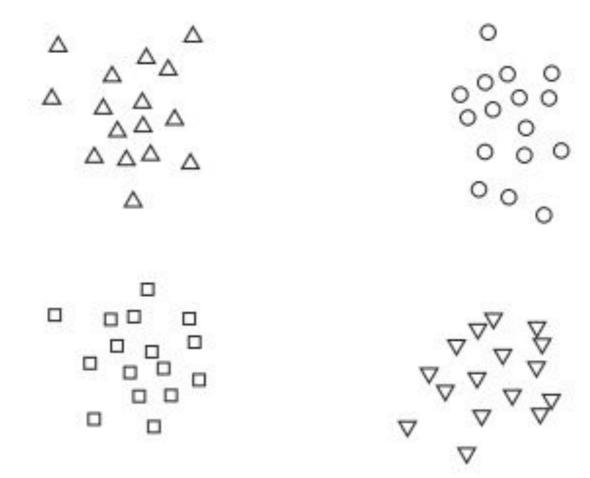
#### Caso 2:



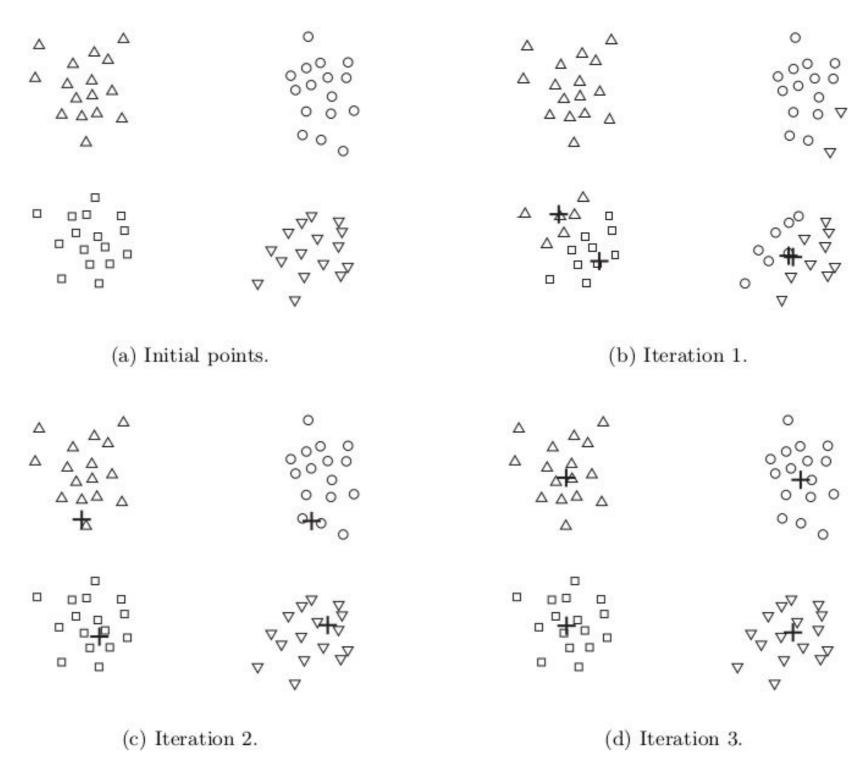
Aunque los centroides iniciales parecen estar mejor repartidos, llegamos a una solución peor que en el caso anterior.

### Otro ejemplo

- Tenemos datos donde hay dos pares de clusters (el par izquierdo y el par derecho).
- Los clusters de cada par están más cerca entre sí que de los clusters del otro par.

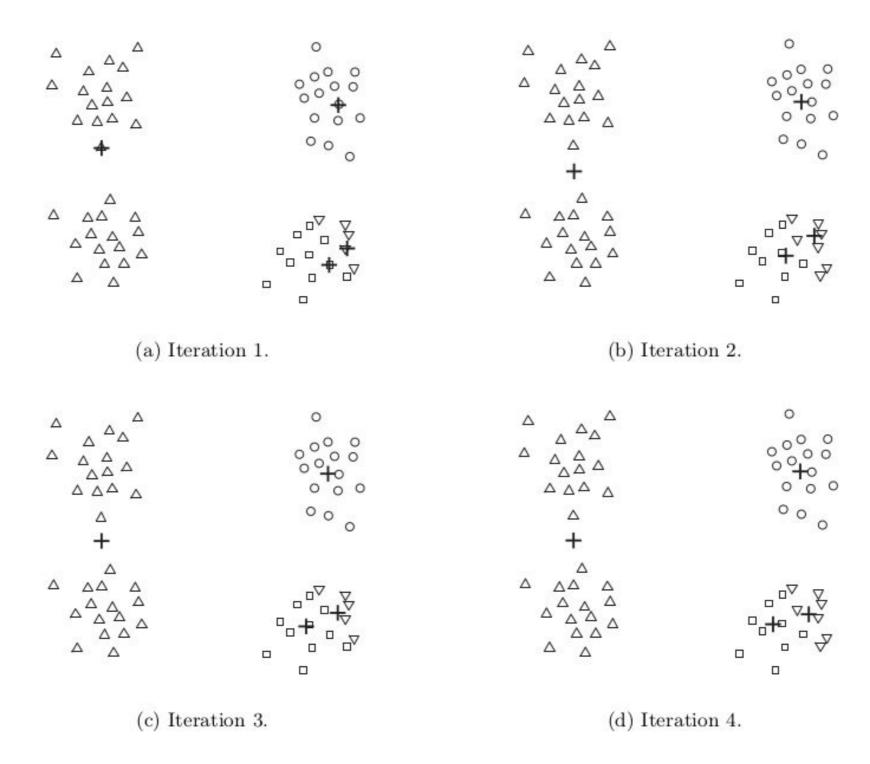


#### Caso 1



Si empezamos con dos centroides iniciales en cada par, incluso si los pares de centroides están en el mismo cluster, los centroides se redistribuyen para encontrar los clusters reales.

#### Caso 2



Por otro lado, si un par de clusters recibe sólo un centroide inicial y el otro par recibe 3, entonces 2 de los clusters reales se combinarán y un cluster será dividido.

- Idealmente nos gustaría partir con un centroide por cluster "real".
- Si hay K clusters "reales", probabilidad de escoger un centroide por cluster es baja

$$P = \frac{\text{\# formas de escoger un centroide de cada cluster}}{\text{\# formas de escoger K centroides}} = \frac{K! n^K}{(Kn)^K} = \frac{K!}{K^K}$$

Ej.: si K = 10, entonces P= 10!/10<sup>10</sup> = 0.00036

### K-means: Manejando clusters vacíos

- Algoritmo K-means puede retornar clusters vacíos si no se le asignan puntos al cluster en el paso de asignación.
- Estrategias para encontrar centroide de reemplazo:
  - Escoger el punto más lejano a todos los centroides como nuevo centroide (punto que contribuye más al SSE)
  - Escoger un punto aleatorio del cluster con mayor SSE.
    - Esto generalmente dividirá ese cluster y reducirá el SSE total.

### K-means: Preprocesamiento

- Normalizar los datos: que todos los atributos aporten lo mismo a las distancias.
- Eliminar outliers: outliers producen centroides no representativos con alto SSE.

### K-means: Postprocesamiento

- Aumentar el número de clusters es la solución trivial para bajar el valor del SSE.
- Eso no es lo queremos => tener K igual al número de datos nos daría un SSE de cero.

#### Bajar el SSE de forma más inteligente:

- Eliminar clusters pequeños que puedan representar outliers
- Dividir clusters "sueltos" (con alto SSE)
- Mezclar clusters cercanos y con bajo SSE.

# Bisecting K-means

- Extensión simple de K-means
- Idea: Dividir el conjunto de todos los puntos en dos clusters, escoger uno de los dos para ser dividido, e iterar hasta producir K clusters.
- Cada división se obtiene ejecutando K-means (con k=2)

#### Algorithm 7.3 Bisecting K-means algorithm.

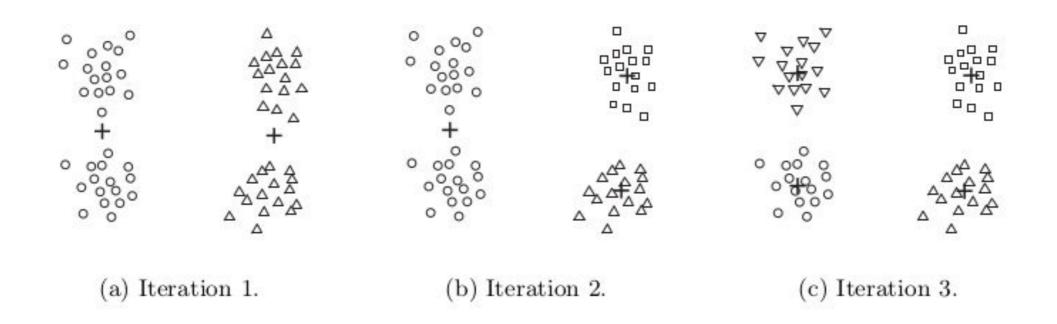
- 1: Initialize the list of clusters to contain the cluster consisting of all points.
- 2: repeat
- Remove a cluster from the list of clusters.
- 4: {Perform several "trial" bisections of the chosen cluster.}
- 5: **for** i = 1 to number of trials **do**
- Bisect the selected cluster using basic K-means.
- 7: end for
- Select the two clusters from the bisection with the lowest total SSE.
- 9: Add these two clusters to the list of clusters.
- 10: until The list of clusters contains K clusters.

## Bisecting K-means

¿Cómo escojo los clusters a dividir (Paso 3 del algoritmo)?

- Opción 1: Escoger el cluster más grande en cada paso.
- Opción 2: Escoger el cluster con mayor SSE.
- Opción 3: Estrategia híbrida entre las dos anteriores

#### Bisecting K-means con datos del ejemplo anterior



Iteración 1: se encuentran dos pares de clusters.

Iteración 2: El par de clusters de la derecha es dividido.

Iteración 3: El par de clusters de la izquierda es dividido.

#### Bisecting K-means

Bisecting K-means tiene menos problemas de inicialización que K-means.

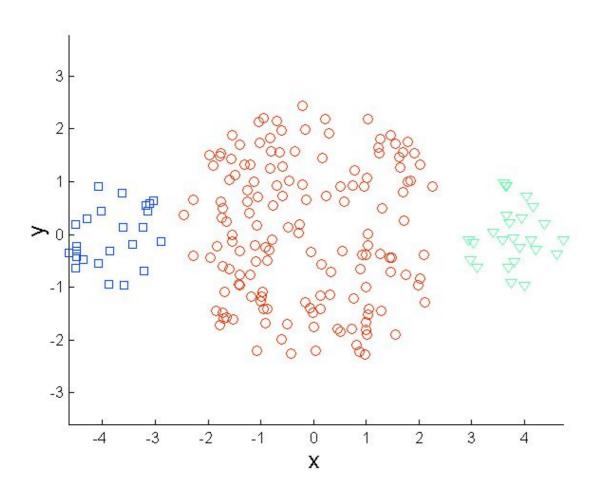
- Esto es porque realiza varios intentos de bisección y toma la bisección de menor SSE.
- Además sólo se consideran dos centroides en cada paso.

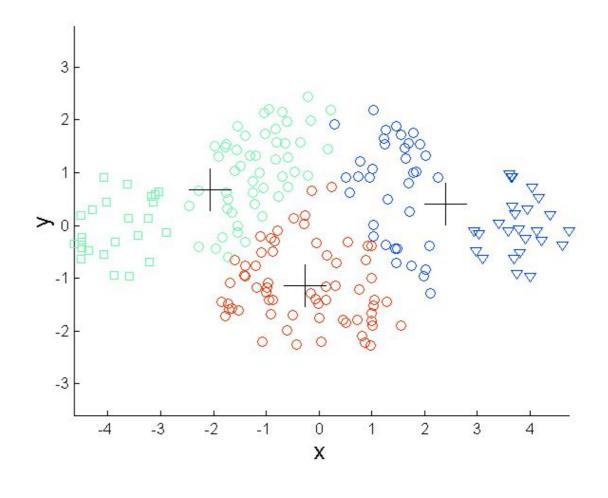
Si registramos la secuencia de clusters bisectados podemos producir un clustering jerárquico.

#### Limitaciones de K-means

- Clusters de diferente tamaño
- Clusters de diferentes densidades
- Clusters con formas no esféricas
- K-means no es robusto a outliers

#### Ejemplo: tamaños diferentes

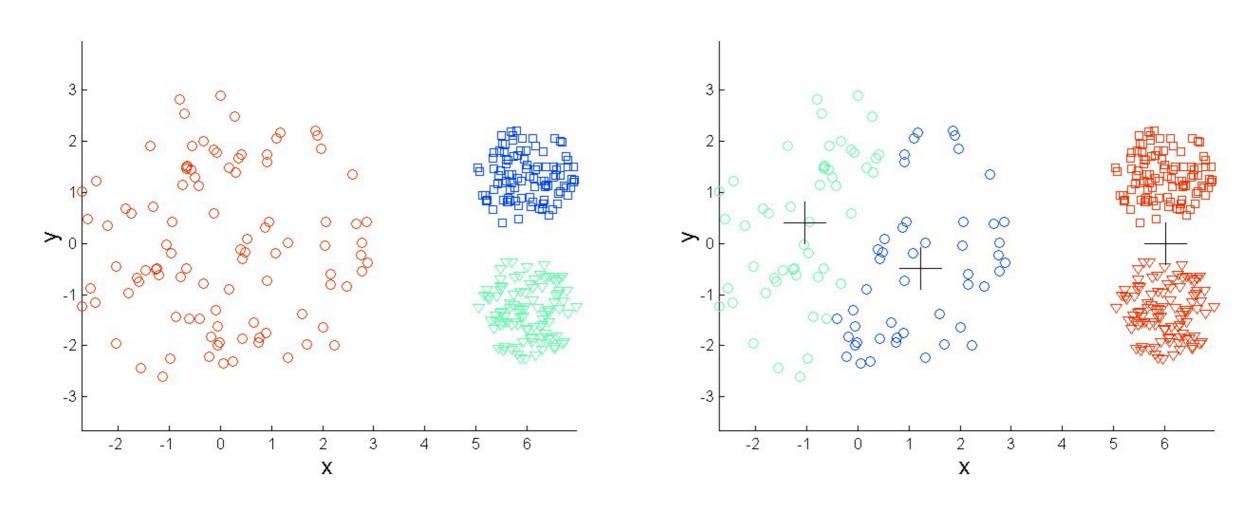




Puntos originales

K-means (tres clusters)

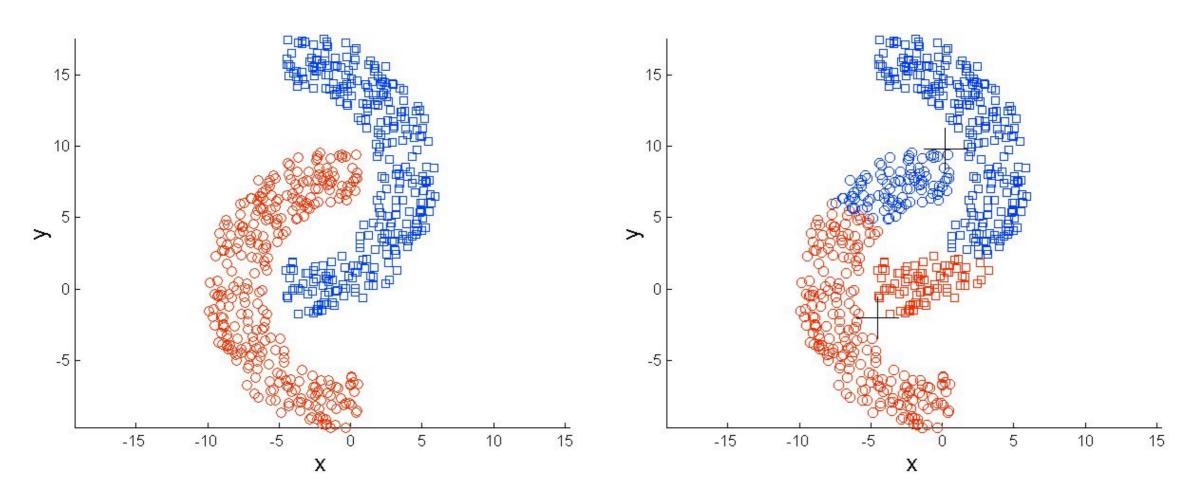
#### · Ejemplo: densidades diferentes



Puntos originales

K-means (tres clusters)

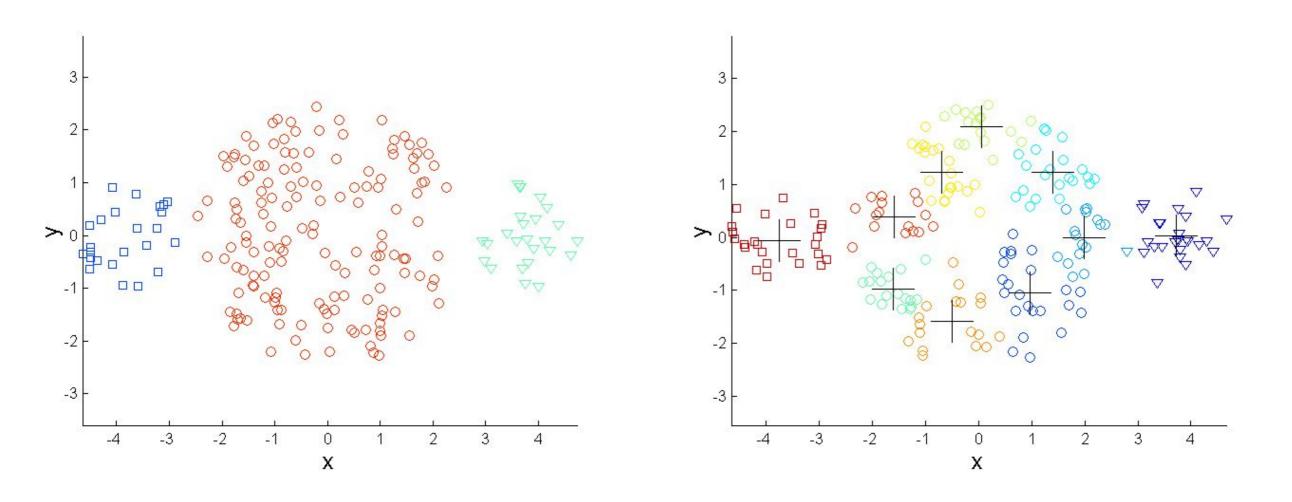
#### · Ejemplo: formas no esféricas



Puntos originales

K-means (dos clusters)

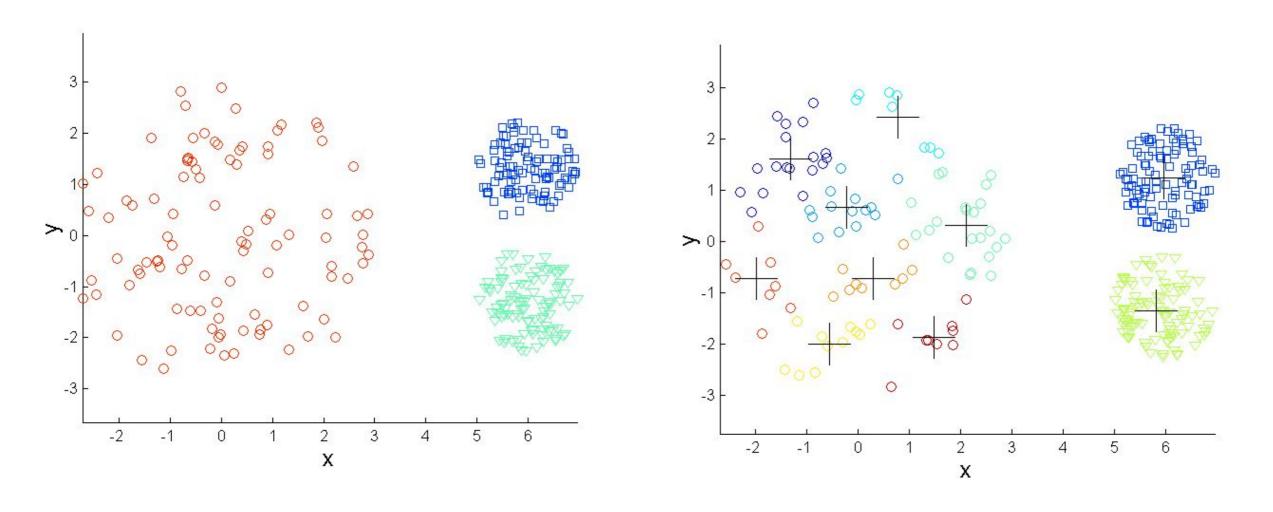
Solución: usar K alto, luego mezclar clusters



Puntos originales

K-means clusters

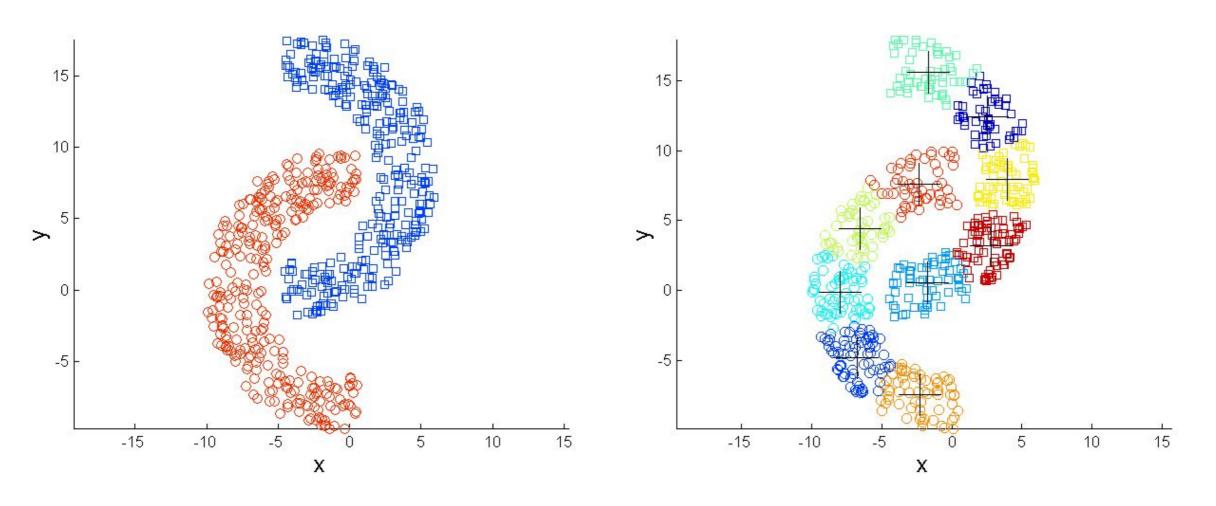
Solución: usar K alto, luego mezclar clusters



Puntos originales

K-means clusters

#### Solución: usar K alto, luego mezclar clusters

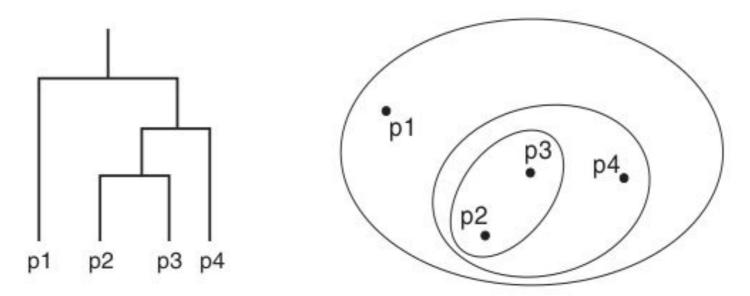


K-means clusters

Produce un conjunto de clusters anidados organizados en un árbol jerárquico. Es una técnica antigua.

#### Visualizaciones:

- a) **Dendograma**: árbol que muestra las relaciones cluster-subcluster y el orden en que los clusters fueron mezclados o divididos.
- b) **Diagrama de clusters anidados**: sólo para puntos 2-dimensionales.



(b) Nested cluster diagram.

#### Fortalezas

- No tiene que suponer un número a priori de clusters
  - Se puede obtener cualquier número de clusters deseado "cortando" el dendograma en el nivel apropiado
- Clusters pueden corresponder a taxonomía
  - Ejemplos en biología.

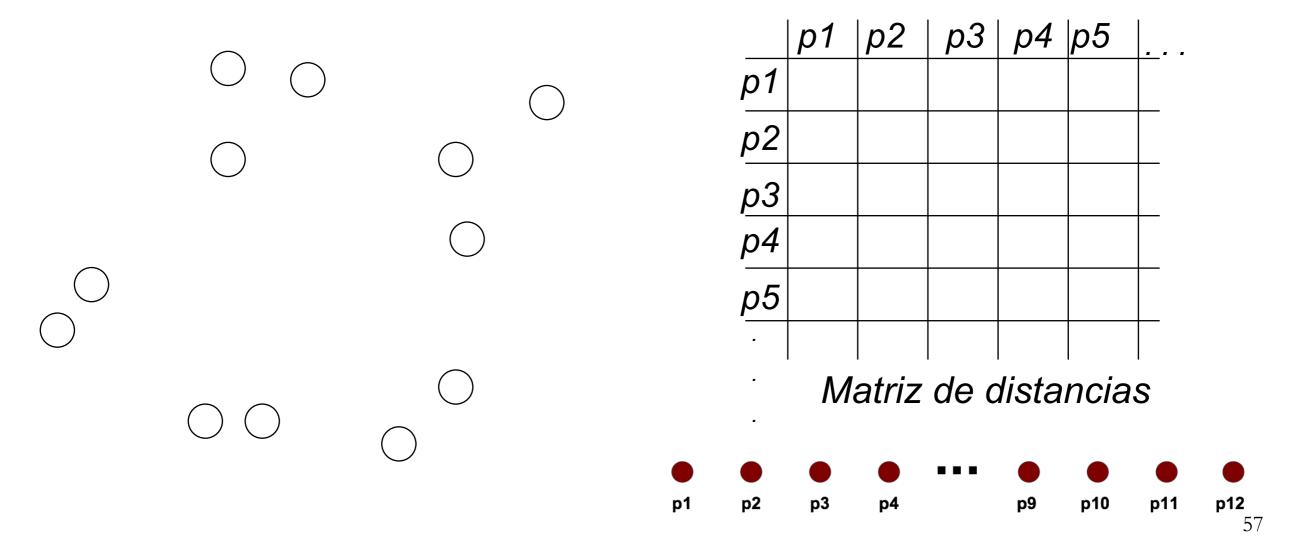
#### Tipos principales de clustering jerárquico

- Aglomerativo
  - Empezar con cada punto como cluster individual
  - En cada paso, mezclar el par de clusters más cercano hasta que quede sólo un cluster (o k clusters)
- Divisivo
  - Empezar con un cluster que contenga todos los puntos
  - En cada paso, dividir un cluster en dos hasta que todo cluster contenga un solo punto (o haya *k* clusters)
- Requieren una definición de proximidad entre clusters.

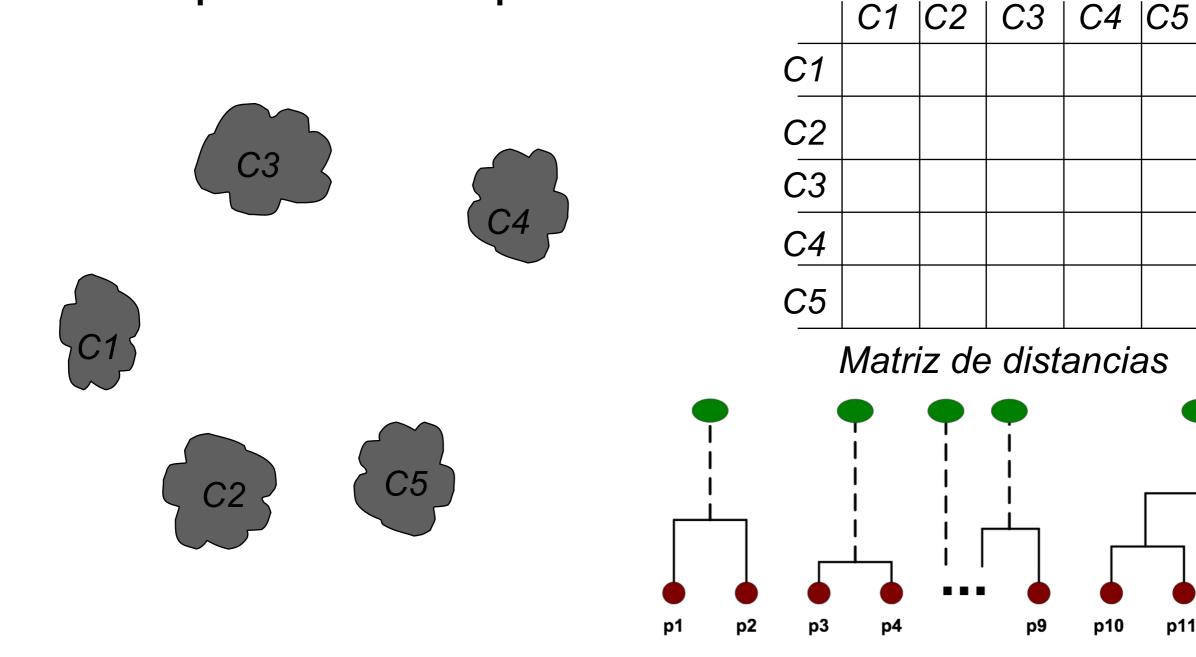
#### Algoritmo básico (aglomerativo)

- Calcular matriz de distancias
- 2. Sea cada punto un cluster
- 3. Repetir
- 4. Mezclar par de clusters más cercano
- Actualizar matriz de distancias
- 6. Hasta que quede sólo un cluster

 Situación inicial: empezar con clusters de puntos individuales y la matriz de distancias



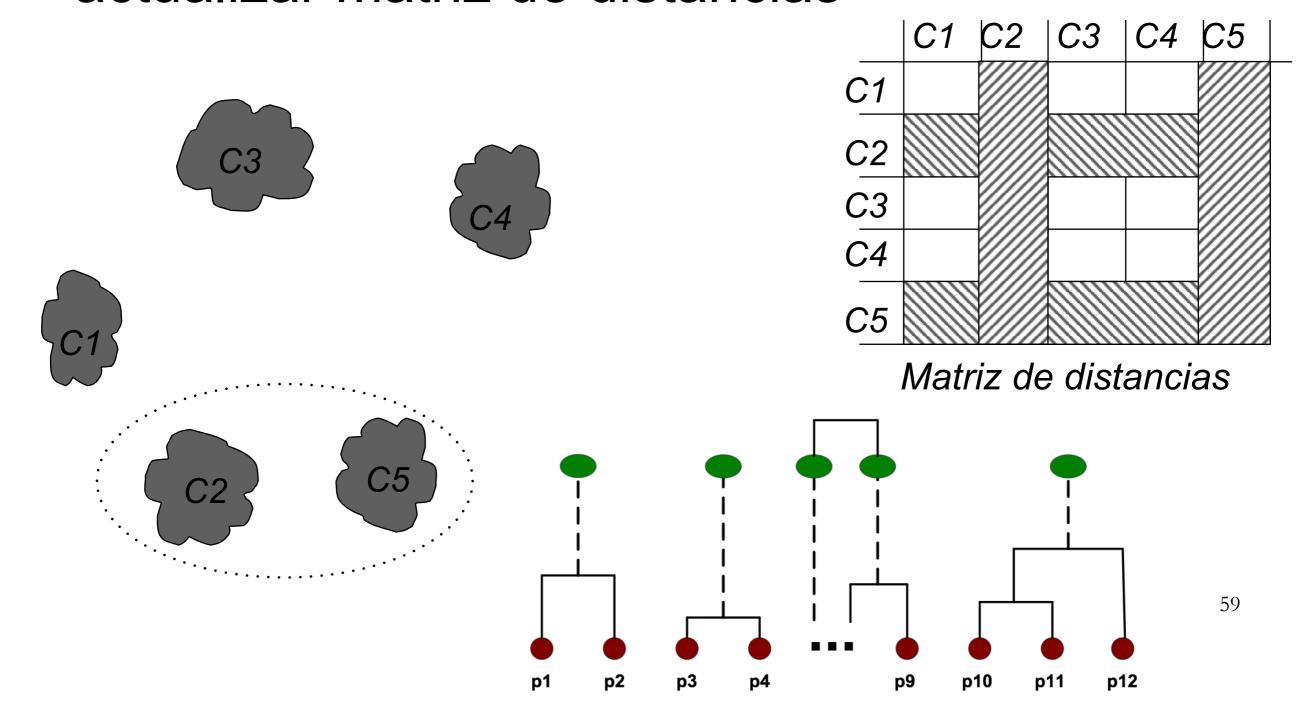
Después de un par de iteraciones...



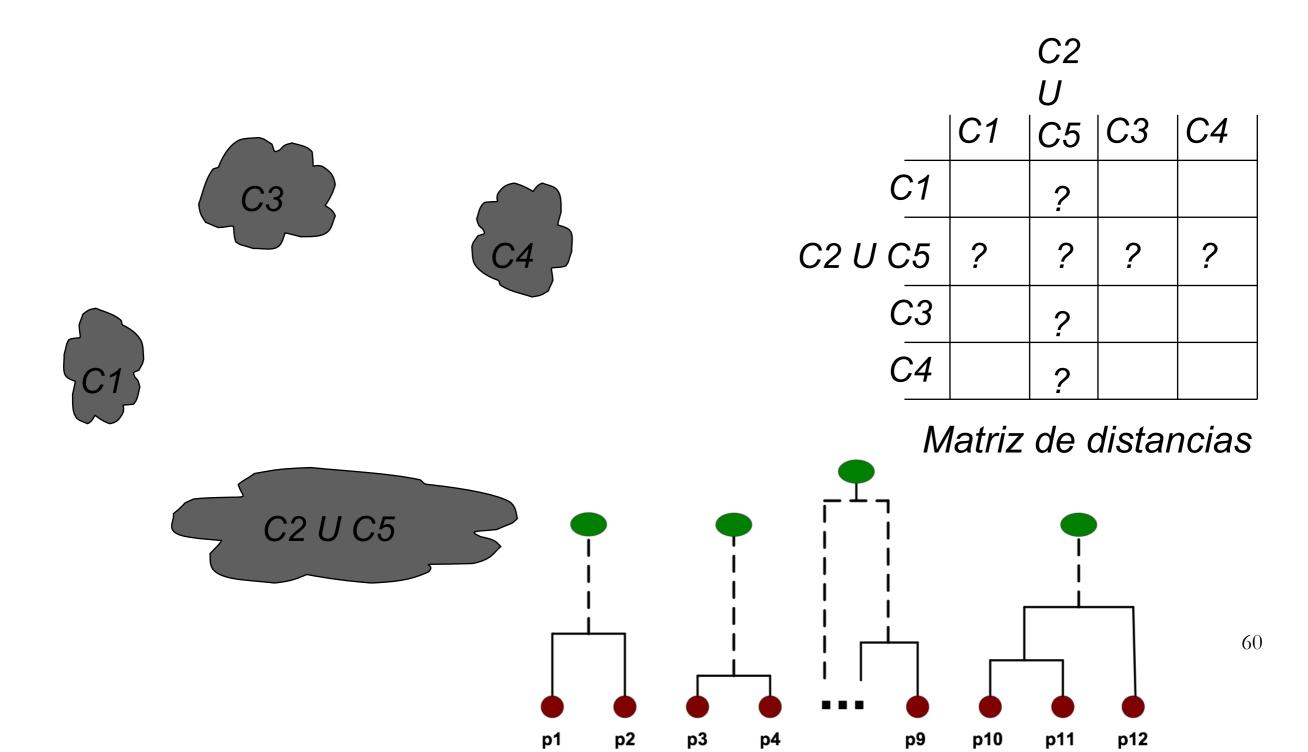
58 **p12** 

p11

 ... mezclar clusters más cercano (C2 y C5) y actualizar matriz de distancias

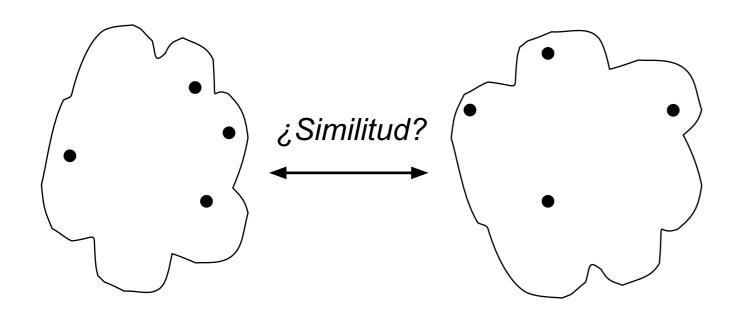


¿Cómo actualizar matriz de distancias?



- Operación clave: cálculo de la distancia entre clusters
  - Diferentes formas de hacerlo distinguen a los diferentes algoritmos
- Intuición: Sabemos como calcular la distancia entre dos puntos, pero ¿cómo calculamos la distancia entre dos clusters? o ¿entre un punto y un cluster?

¿Cómo definir distancias entre clusters?

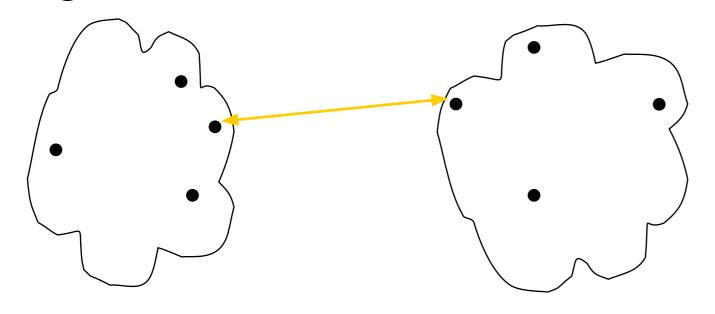


•	MIN	(singl	le Iir	ık)
---	-----	--------	--------	-----

- MAX (complete link)
- Promedio del grupo
- Distancia entre centroides

	p1	<i>p</i> 2	рЗ	p4	p5	<u>.</u>
<u>p1</u>						
<u>p2</u> <u>p3</u>						
<u>р4</u> <u>р5</u>						
<u> </u>						

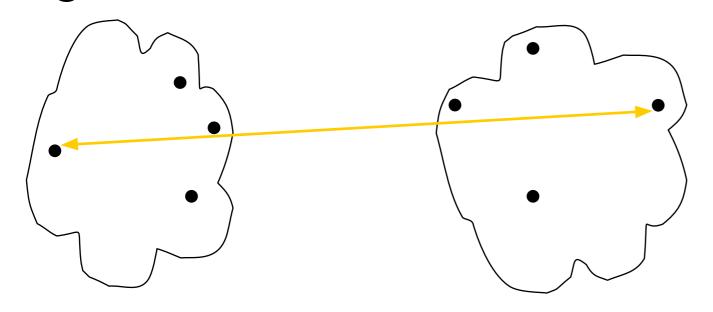
¿Cómo definir distancias entre clusters?



	p1	p2	р3	p4	<i>p</i> 5	<u>.</u>
p1						
<u>p2</u>						
<u>р2</u> <u>р3</u>						
<u>р4</u> р5						

- MIN (single link)
  - Considero los dos puntos más cercanos entre sí (cada uno de un cluster distinto)

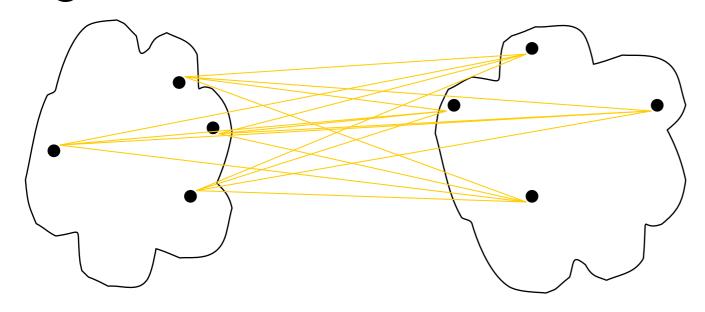
¿Cómo definir distancias entre clusters?



	p1	<i>p</i> 2	рЗ	p4	p5	<u>.</u>
<u>p1</u>						
<u>p2</u>						
<u>р2</u> р3						
<u>р4</u> р5						

- MAX (complete link)
  - Considero los dos puntos más lejanos entre sí (cada uno de un cluster distinto)

¿Cómo definir distancias entre clusters?

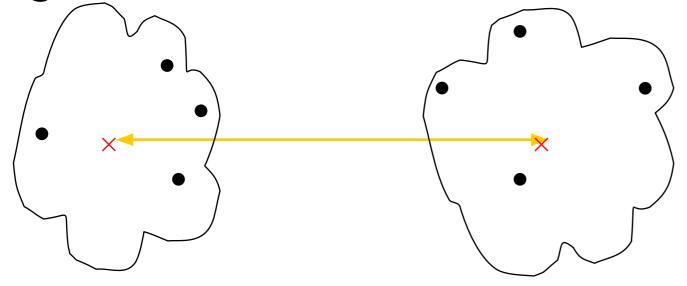


p1			
<u>p2</u>			
<u>р2</u> р3			
<u>р4</u> р5			
_			

p1 | p2 | p3 | p4 | p5

- Promedio del grupo
  - Distancia promedio de todos los pares de puntos (cada par tiene un punto por cluster)

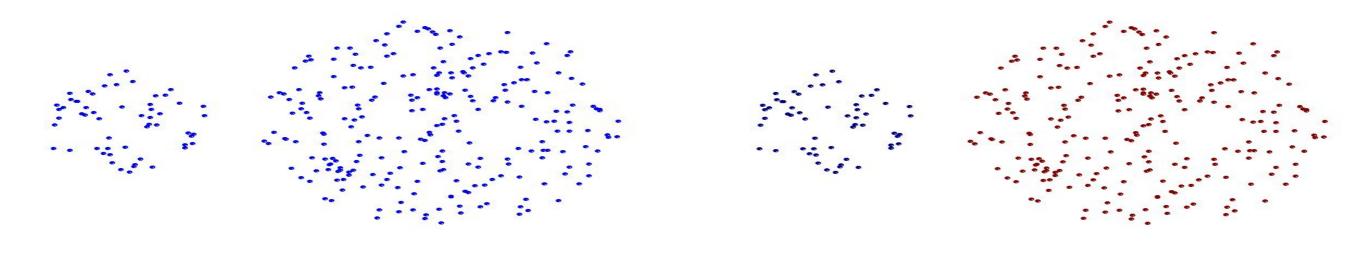
¿Cómo definir distancias entre clusters?



	p1	<i>p</i> 2	рЗ	p4	p5	<u>.</u>
<u>p1</u>						
p2						
<u>p2</u> <u>p3</u>						
<u>р4</u> р5						
1 <u>5 5</u>						

- Distancia entre centroides
  - distancia entre los centroides de cada grupo

Fortaleza de distancia MIN

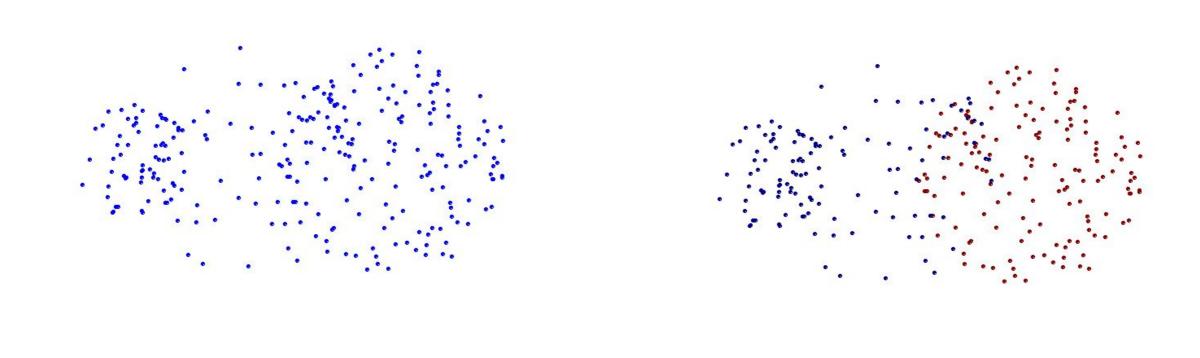


Puntos originales

Dos Clusters

Puede manejar formas no-elípticas

Limitaciones de distancia MIN

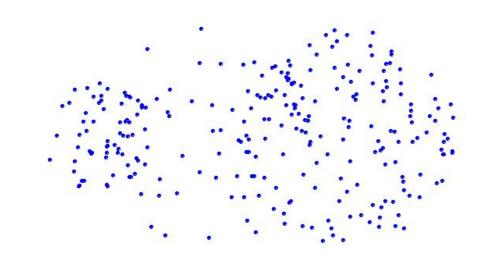


Puntos originales

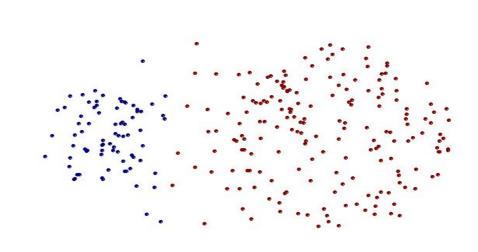
Dos Clusters

• Sensible a ruido y outliers

#### Fortaleza de MAX



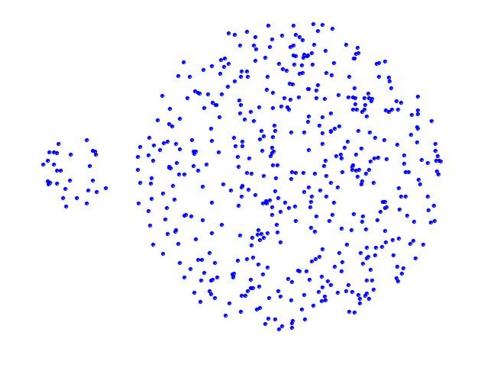
Puntos originales

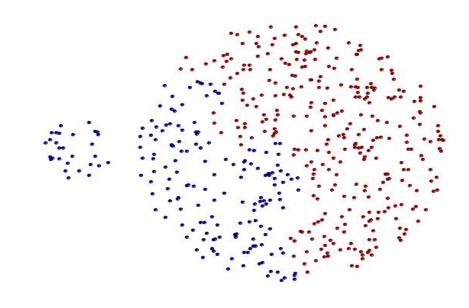


Dos Clusters

• Menos susceptible a ruido y outliers

#### Limitaciones de MAX





Puntos originales

- Tiende a quebrar clusters grandes
- Sesgado a clusters esféricos

Dos Clusters

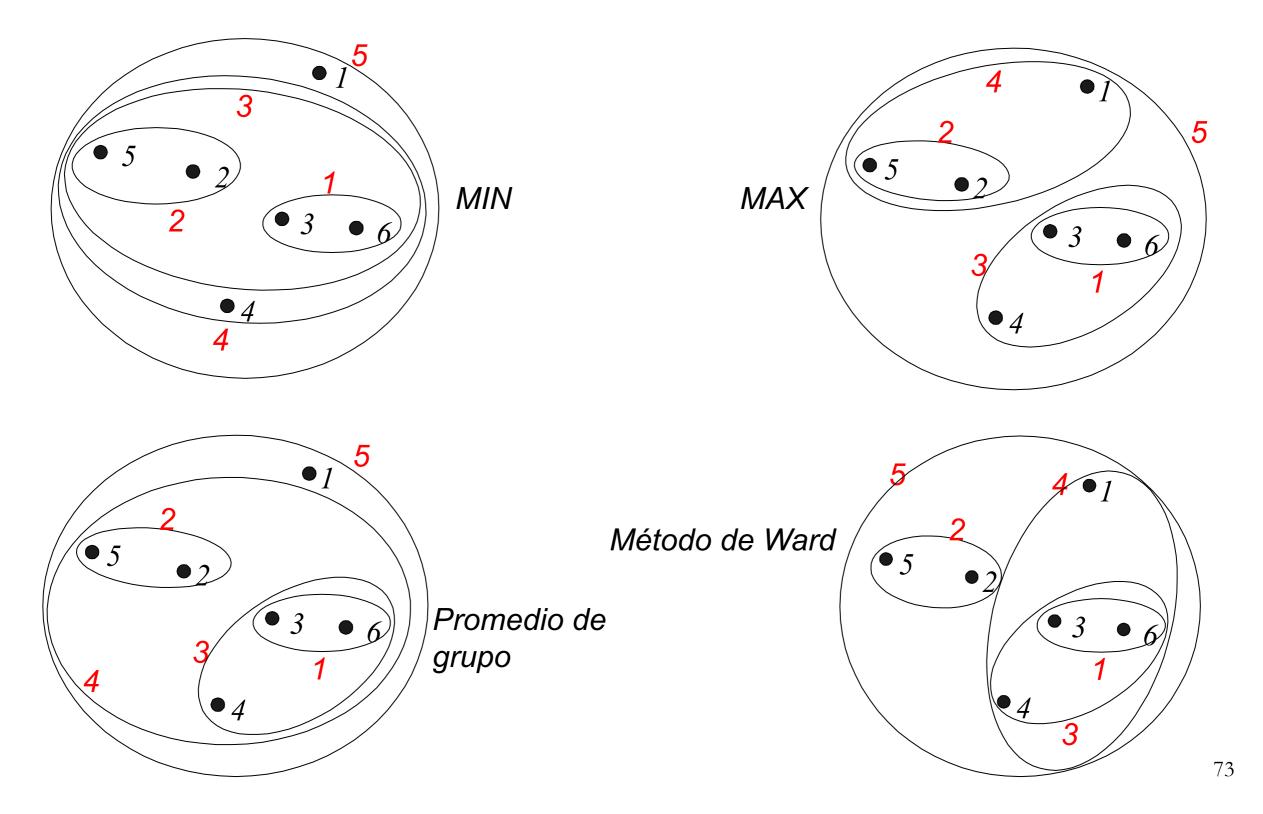
#### Distancia promedio de grupo

- Compromiso entre MIN y MAX
- Fortalezas
  - Menos susceptible a ruido y outliers
- Limitaciones
  - Sesgado a clusters esféricos

#### Método de Ward

- Similitud entre clusters se basa en el incremento del SSE cuando se mezclan dos clusters
  - Similar a distancia promedio de grupo si la distancia entre puntos es distancia cuadrada
- Menos susceptible a ruido y outliers
- Sesgado a clusters esféricos

## Clustering Jerárquico Aglomerativo



## Clustering Jerárquico Aglomerativo

#### Requerimientos de tiempo y espacio

- Espacio: O(N²) para guardar matriz de distancias
  - N: número de puntos
- Tiempo: O(N³) en muchos casos
  - Para N pasos, se debe actualizar matriz de similitud en cada paso
  - Complejidad puede reducirse a  $O(N^2 \log N)$  usando listas ordenadas o heaps

## Clustering Jerárquico Aglomerativo

#### Problemas y limitaciones

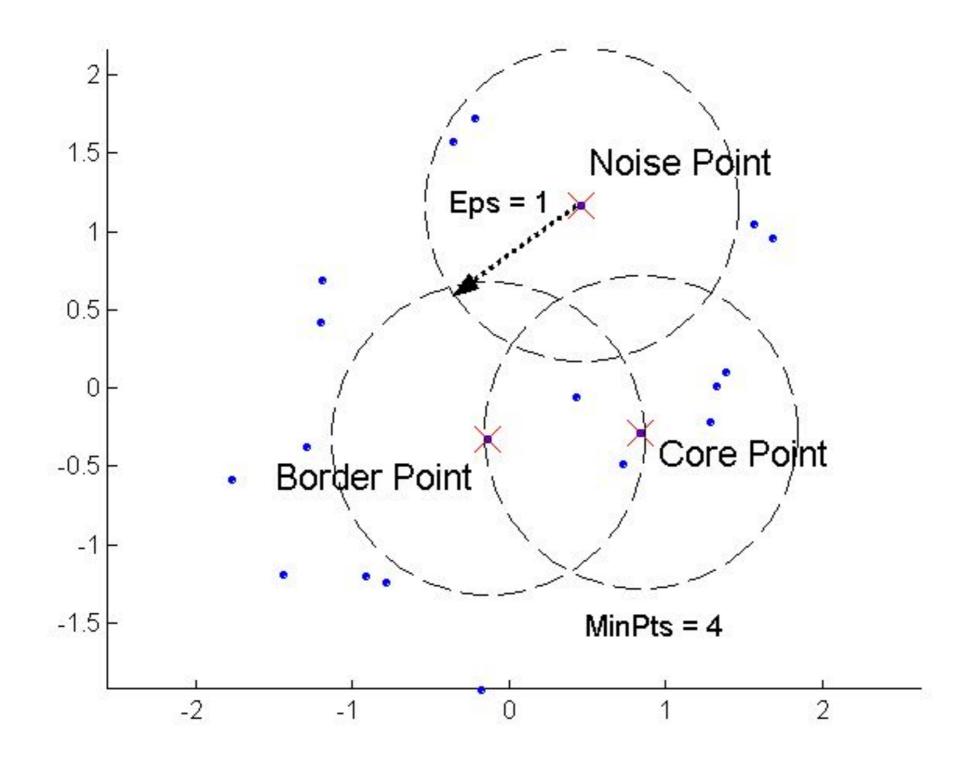
- Una vez decidido unir dos clusters, no se puede deshacer
- No hay una función objetivo que sea directamente minimizada
- Problemas de los diferentes esquemas:
  - Sensibles a ruido y outliers
  - Dificultad para manejar clusters de distinto tamaño
  - Pueden romper clusters grandes

Algoritmo de clustering basado en densidad

Idea: encontrar regiones de alta densidad de puntos separado por regiones de baja densidad.

- Las regiones densas corresponden a los clusters.
- La densidad de un punto es el número de puntos que tiene dentro de un radio dado.

- Parámetros:
  - 1) Eps: radio especificado
  - 2) MinPts: número mínimo de puntos en una región.
- Tipos de punto:
  - Punto "core": punto con más puntos que MinPts a distancia Eps
    - Éstos son los puntos dentro del cluster
  - Punto "border": tiene menos que MinPts puntos en el radio Eps, pero está en la vecindad de un punto core.
  - Punto "noise": cualquier punto que no sea core ni border.

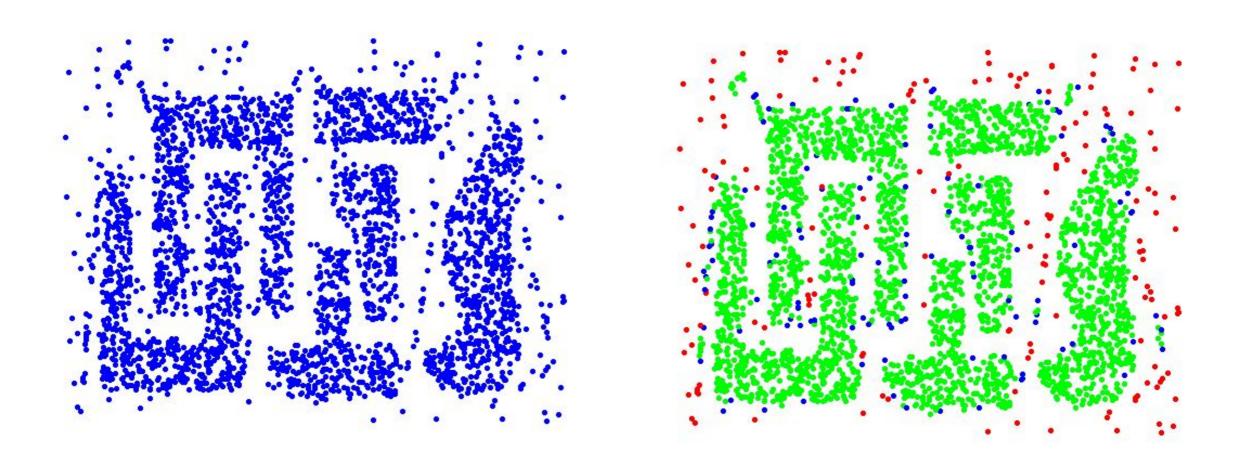


## DBSCAN Algoritmo

- Cualquier par de puntos core que tengan una distancia entre sí menor que Eps son asignados al mismo cluster.
- Cualquier punto border que esté a una distancia menor que Eps de un punto core pc se le asigna el cluster de pc.
  - Hay que definir una estrategia cuando el punto border está cerca de dos puntos core de distinto cluster.
- Eliminar los puntos de ruido.

#### Algorithm 7.5 DBSCAN algorithm.

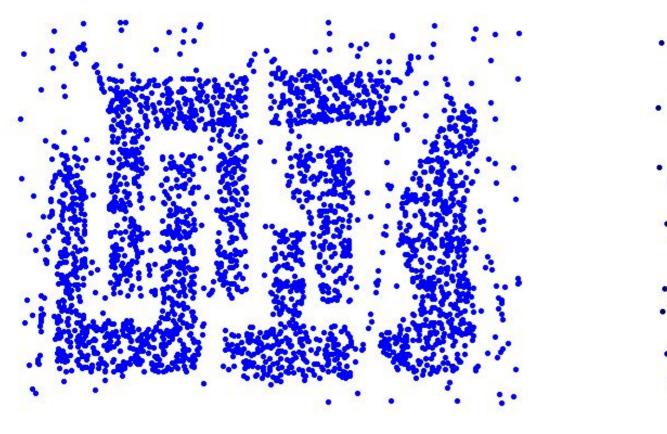
- 1: Label all points as core, border, or noise points.
- 2: Eliminate noise points.
- 3: Put an edge between all core points within a distance Eps of each other.
- 4: Make each group of connected core points into a separate cluster.
- 5: Assign each border point to one of the clusters of its associated core points.



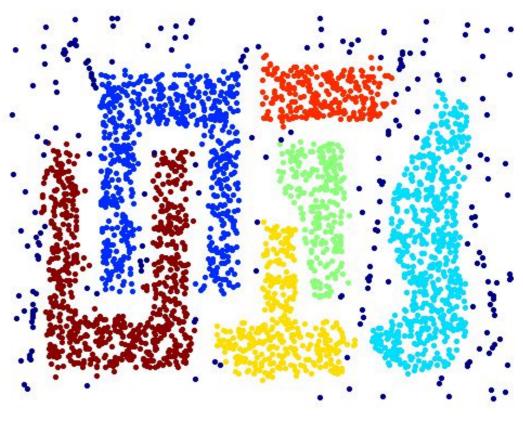
Puntos originales

Tipos de punto: core, border y noise

*Eps* = 10, *MinPts* = 4



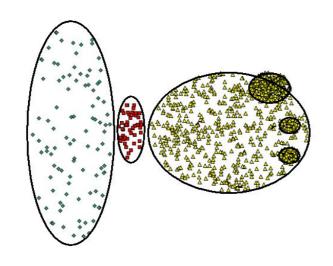
Puntos originales



Clusters

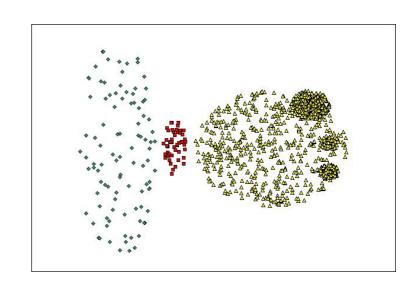
- Resistente a ruido
- Puede encontrar clusters de diferentes formas y tamaños

#### No funciona bien en:

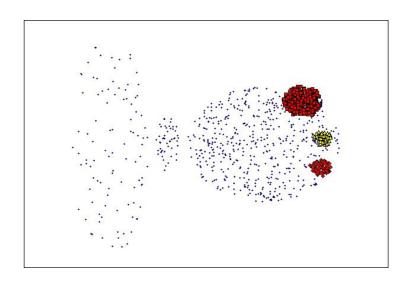


Puntos originales

- Densidades variables: clusters de baja densidad son confundidos con ruido.
- Datos de alta dimensionalidad: definición de densidad se vuelve compleja.



(MinPts=4, Eps=9.92)



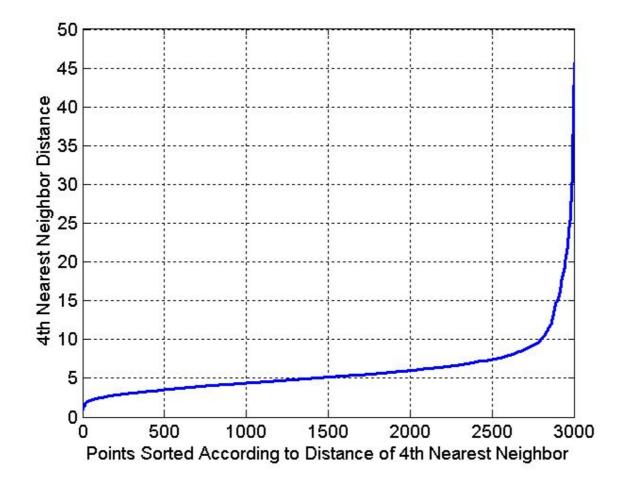
#### DBSCAN: Determinando Eps y MinPts

- Analizamos el comportamiento de la distancia de un punto a su k-ésimo vecino más cercano (k-dist).
- Para puntos que pertenecen a un cluster, el valor de k-dist será pequeño
  - siempre y cuando el valor de k no sea mayor que el tamaño del cluster al que pertenecen.
- Para puntos que no pertenecen a un cluster (como los noise points), el valor de k-dist será alto.

 Calculamos el valor de k-dist para todos los puntos con un valor de k fijo y los ordenamos de manera creciente.

Graficamos k-dist vs la cantidad de puntos con ese

valor.



85

# Otras técnicas

- Mapas auto-organizados (SOM) o redes de Kohonen
- Fuzzy C-means
- Mezcla de Gaussianas y algoritmo EM



www.dcc.uchile.cl

