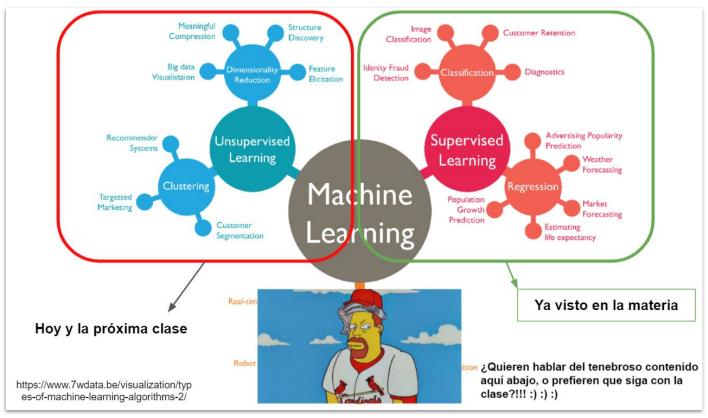
Clase 17: Clustering y K-means

Laboratorio de datos, FCEyN, 17/05/2022

Recordemos...

Clase pasada (PCA)



¿Por qué estudiamos aprendizaje No-Supervisado?

¿Por qué estudiamos aprendizaje No-Supervisado?

Es más **fácil** <u>conseguir datos</u> y más **barato**, es más que nada data generada con una máquina (no hay que pagarle a alguien para identificar clases o chequear el output)

¿Por qué estudiamos aprendizaje No-Supervisado?

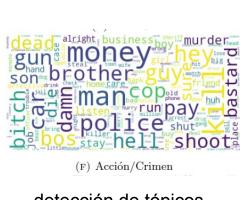
Es más **fácil** <u>conseguir datos</u> y más **barato**, es más que nada data generada con una máquina (no hay que pagarle a alguien para identificar clases o chequear el output)



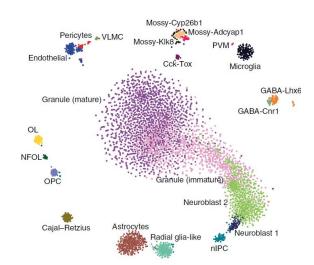
detección de tópicos

¿Por qué estudiamos aprendizaje No-Supervisado?

Es más **fácil** <u>conseguir datos</u> y más **barato**, es más que nada data generada con una máquina (no hay que pagarle a alguien para identificar clases o chequear el output)



detección de tópicos

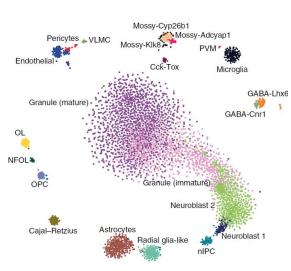


Identificación tipos celulares

¿Por qué estudiamos aprendizaje No-Supervisado?

Es más **fácil** <u>conseguir datos</u> y más **barato**, es más que nada data generada con una máquina (no hay que pagarle a alguien para identificar clases o chequear el output)





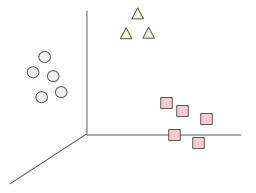
\$ 3.790 Envío gratis \$ 2.03322 \$ 4.590 Envío gratis

Relacionado con tus visitas en Deportes y Fitness ver historial

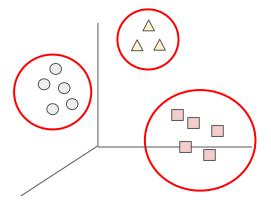
Identificación tipos celulares

Recomendación/Publicidad

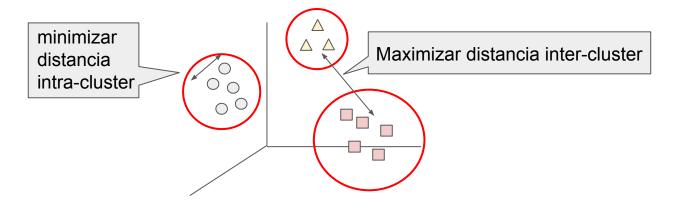
Encontrar **subgrupos** (clústers) en los datos



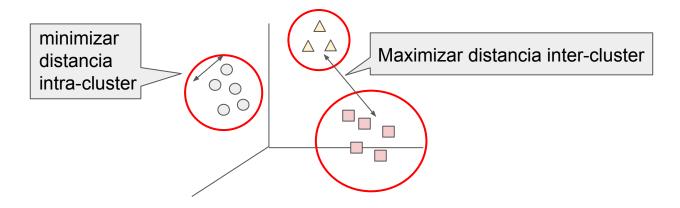
Encontrar **subgrupos** (clústers) en los datos



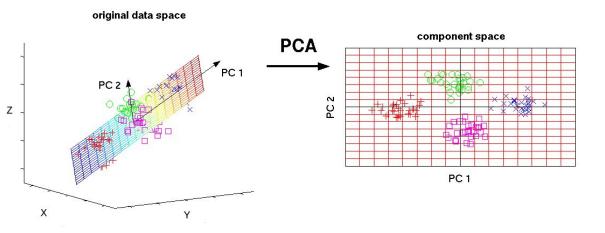
Encontrar **subgrupos** (*clústers*) en los datos



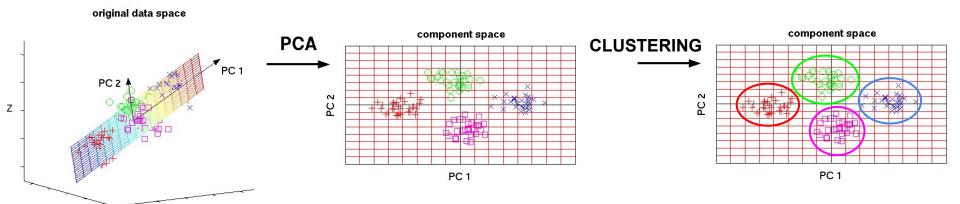
Encontrar **subgrupos** (*clústers*) en los datos



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



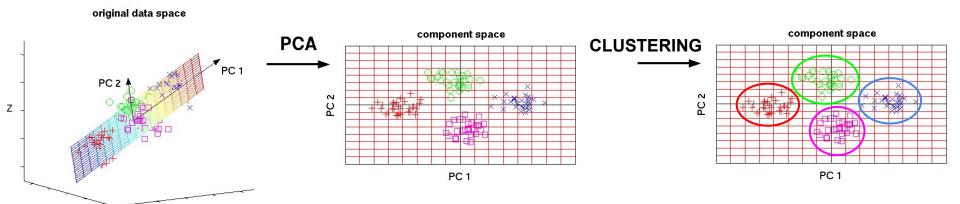
Reducir dimensión maximizando la varianza



Reducir dimensión maximizando la varianza

X

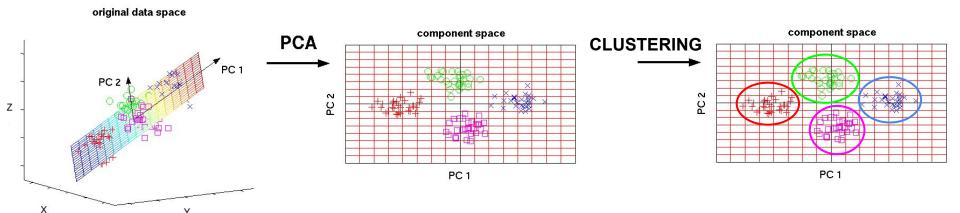
Encontrar grupos homogéneos



Reducir dimensión maximizando la varianza

X

Encontrar grupos homogéneos



Reducir dimensión maximizando la varianza

Encontrar grupos homogéneos

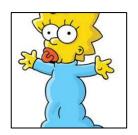
Se puede encontrar grupos en el espacio de features original

Si son muchos -> podría ser costoso computacionalmente

-> podrían esconderse las características que mejor agrupan los datos



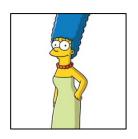


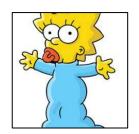








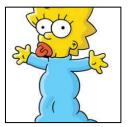












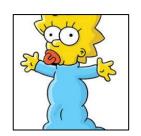
Hombres









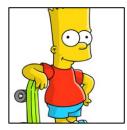


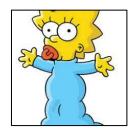




Niñes

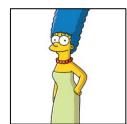




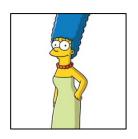


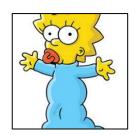
Adultos



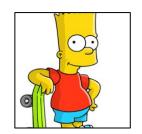




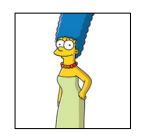




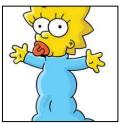




No van a la primaria





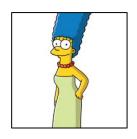


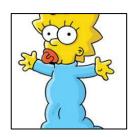
Van a la primaria



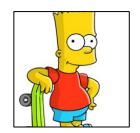








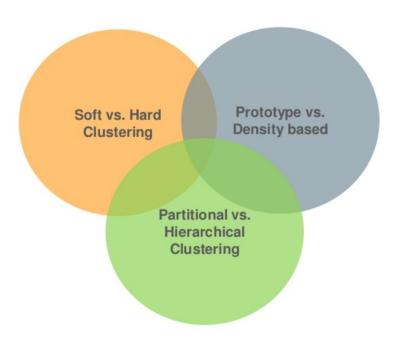




No hay una forma natural de agrupar los datos, el clustering es **subjetivo**, la mejor elección de grupos depende de qué le queremos preguntar a los datos

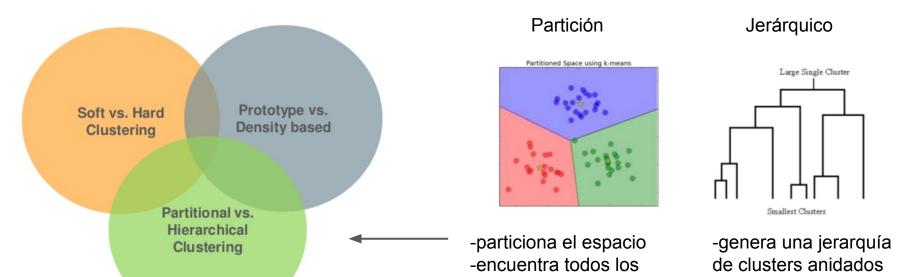
Clustering - estrategias

Hay muuuuchos métodos de clusterización y distintos criterios de división

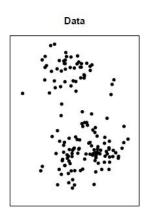


Clustering - estrategias

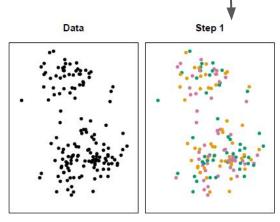
Hay muuuuchos métodos de clusterización y distintos criterios de división



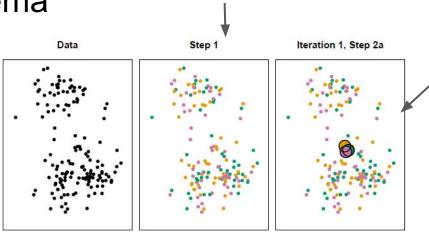
clusters simultáneamente



Inicialización random



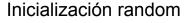
Damos el número de clusters **k** que queremos obtener

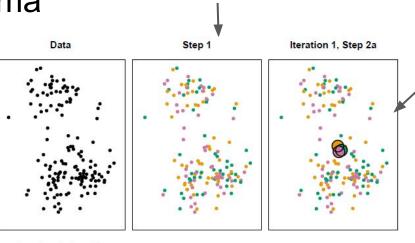


Inicialización random

Computa los centroids (centros) de cada cluster como el promedio de las features de sus samples

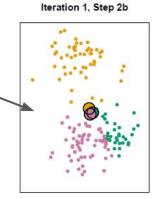
Damos el número de clusters **k** que queremos obtener



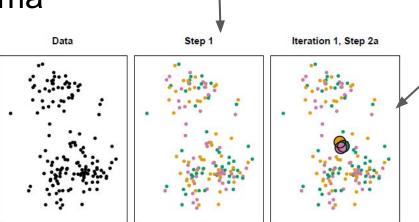


Computa los centroids (centros) de cada cluster como el promedio de las features de sus samples

le asigna a cada sample la etiqueta del cluster cuyo centroid es más cercano (distancia euclídea al cuadrado)



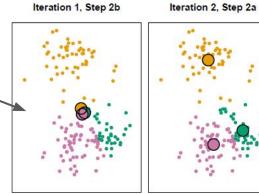
Damos el número de clusters **k** que queremos obtener

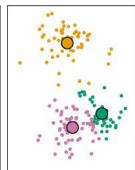


Inicialización random

Computa los *centroids* (centros) de cada cluster como el promedio de las features de sus samples

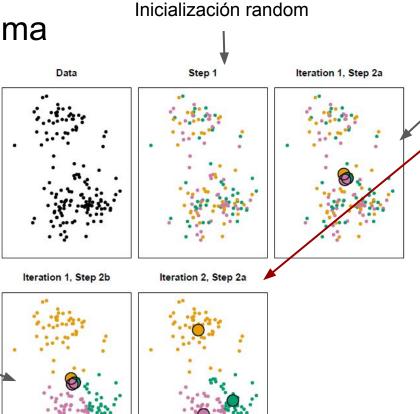
le asigna a cada sample la etiqueta del cluster cuyo centroid es más cercano (distancia euclídea al cuadrado)





Damos el número de clusters **k** que queremos obtener

le asigna a cada sample la etiqueta del cluster cuyo centroid es más cercano (distancia euclídea al cuadrado)



Computa los

sus samples

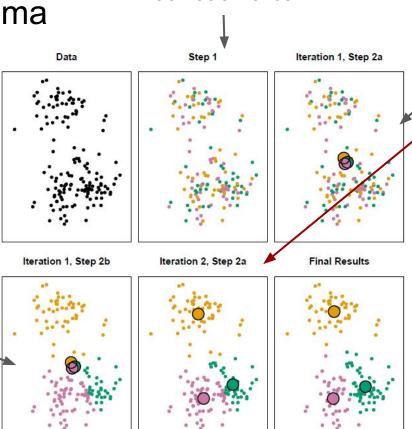
de cada cluster como el promedio

de las features de

centroids (centros)

Damos el número de clusters **k** que queremos obtener

le asigna a cada sample la etiqueta del cluster cuyo centroid es más cercano (distancia euclídea al cuadrado)



Inicialización random

Computa los *centroids* (centros) de cada cluster como el promedio de las features de sus samples

Inicialización random

Damos el número de clusters **k** que queremos obtener

Data

Step 1

Iteration 1, Step 2a

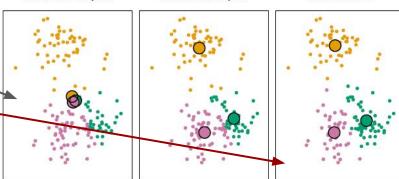
Iteration 1, Step 2b

Iteration 2, Step 2a

Final Results

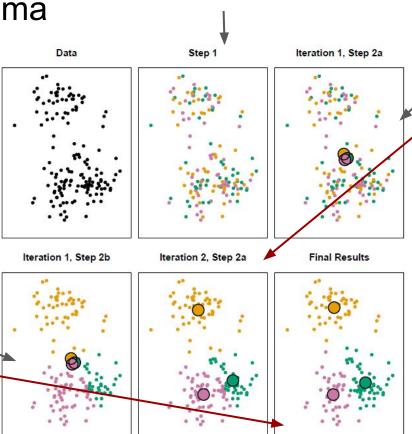
Computa los
centroids (centros)
de cada cluster
como el promedio
de las features de
sus samples

le asigna a cada sample la etiqueta del cluster cuyo centroid es más cercano (distancia euclídea al cuadrado)



Damos el número de clusters **k** que queremos obtener

le asigna a cada sample la etiqueta del cluster cuyo centroid es más cercano (distancia euclídea al cuadrado)



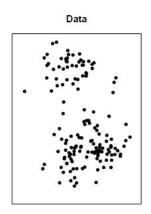
Inicialización random

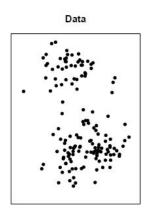
Computa los *centroids* (centros) de cada cluster como el promedio de las features de sus samples

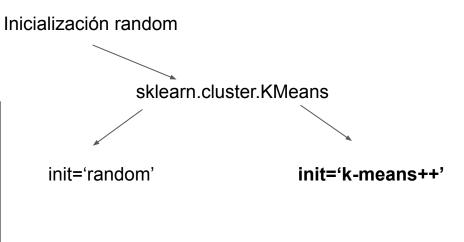
Termina cuando en una iteración no hay cambio de etiqueta o se llega a un máximo de iteraciones 'max_iter'

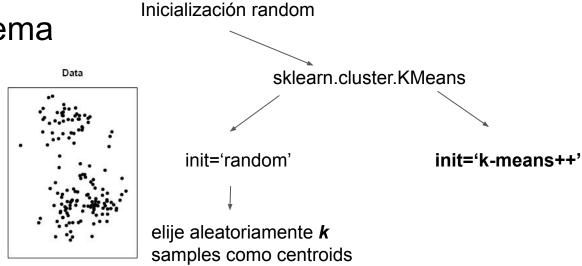
Inicialización random

K-means: Esquema

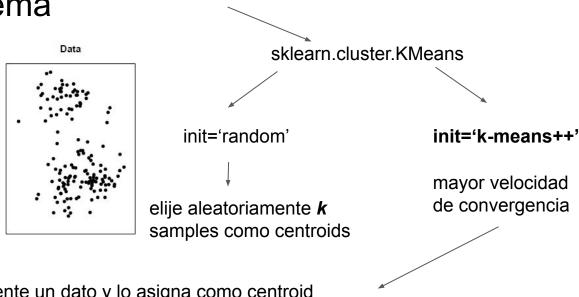








Damos el número de clusters **k** que queremos obtener



Inicialización random

- 1. Selecciona aleatoriamente un dato y lo asigna como centroid
- 2. Para los otros datos x, calcula D(x), distancia entre x y el centro más cercano que ya ha sido seleccionado.
- 3. Escoge un nuevo punto al azar como nuevo centroid, utilizando una distribución de probabilidad ponderada donde un punto x es escogido con la probabilidad proporcional a $D(x)^2$.
- 4. Repite paso 2 y 3 hasta que se hayan seleccionado k centroids.

K-means: Función objetivo

Buena clusterización es la que minimiza la varianza entre datos de un mismo cluster

Buena clusterización es la que minimiza la varianza entre datos de un mismo cluster

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

Buena clusterización es la que minimiza la varianza entre datos de un mismo cluster

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

distancia euclídea al cuadrado - lo más usual

Buena clusterización es la que minimiza la varianza entre datos de un mismo cluster

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

Buena clusterización es la que minimiza la varianza entre datos de un mismo cluster

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

Básicamente K-means es un algoritmo de optimización de esta función objetivo

Buena clusterización es la que minimiza la varianza entre datos de un mismo cluster

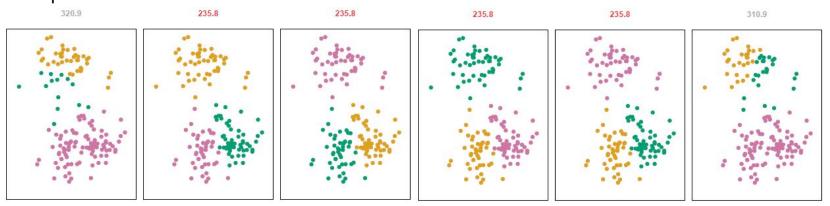
$$\underset{C_1,...,C_K}{\text{minimize}} \left\{ \sum_{k=1}^K \frac{1}{|C_k|} \sum_{i,i' \in C_k} \sum_{j=1}^p (x_{ij} - x_{i'j})^2 \right\}$$

Básicamente K-means es un algoritmo de optimización de esta función objetivo Depende de la inicialización -> modelo no determinista

Buena clusterización es la que minimiza la varianza entre datos de un mismo cluster

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

Básicamente K-means es un algoritmo de optimización de esta función objetivo Depende de la inicialización -> modelo no determinista

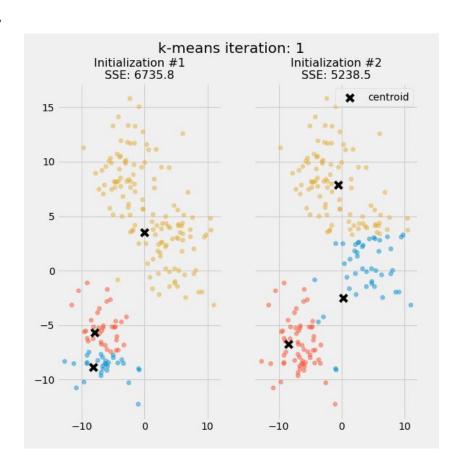


distintas inicializaciones del mismo modelo con los mismos datos

Buena clusterización es la que minimiza la varianza entre datos de un mismo cluster

distintas inicializaciones del mismo modelo con los mismos datos 'n_init'

K-means: Gif



Una solución posible es iterar muchas veces el algoritmo y quedarme con el clustering que minimiza el valor de la función objetivo.

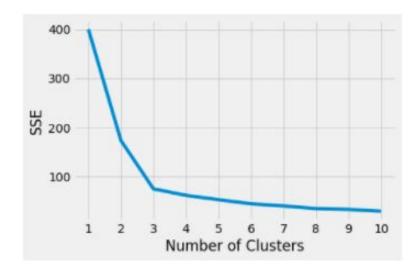
No es trivial elegir **k** en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

No es trivial elegir **k** en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

"Método del codo"

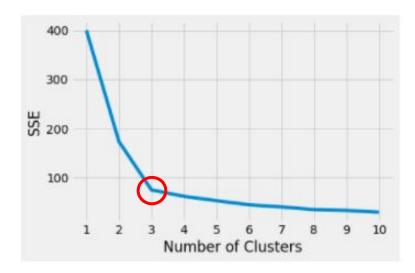
No es trivial elegir **k** en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

"Método del codo"



No es trivial elegir *k* en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

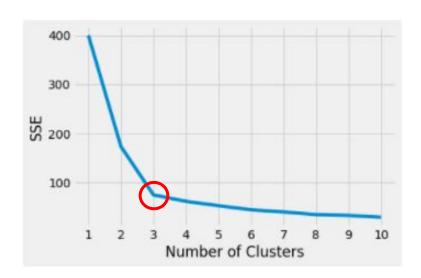
"Método del codo"



No es trivial elegir **k** en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

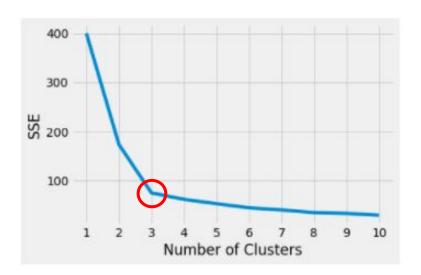
"Método del codo"

"coeficiente de Silhouette"



No es trivial elegir **k** en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

"Método del codo"

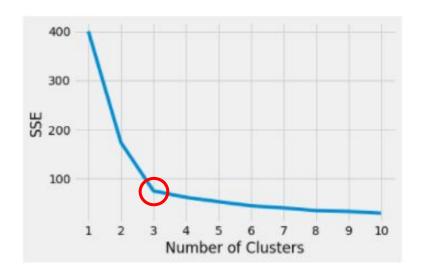


"coeficiente de Silhouette"

medida de cuán similar es un dado dato a los datos de su cluster en comparación a los datos del cluster más cercano

No es trivial elegir **k** en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

"Método del codo"



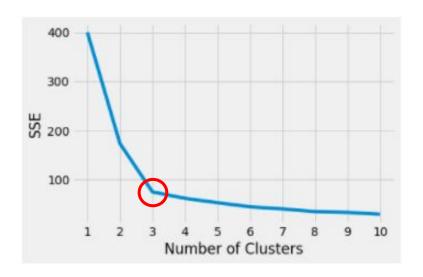
"coeficiente de Silhouette"

medida de cuán similar es un dado dato a los datos de su cluster en comparación a los datos del cluster más cercano

su valor va [-1,1]

No es trivial elegir **k** en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

"Método del codo"



"coeficiente de Silhouette"

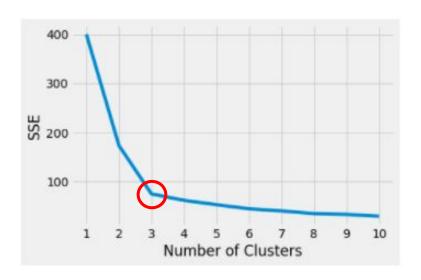
medida de cuán similar es un dado dato a los datos de su cluster en comparación a los datos del cluster más cercano

su valor va [-1,1]

1 indica que el dato está bien emparejado en su propio cluster y mal emparejado con los datos de otros clusters

No es trivial elegir **k** en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

"Método del codo"



"coeficiente de Silhouette"

medida de cuán similar es un dado dato a los datos de su cluster en comparación a los datos del cluster más cercano

su valor va [-1,1]

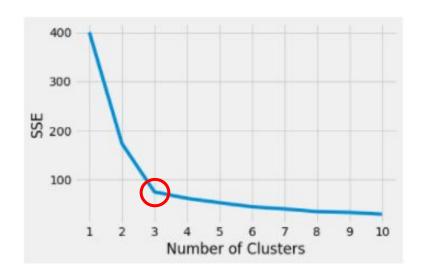
1 indica que el dato está bien emparejado en su propio cluster y mal emparejado con los datos de otros clusters

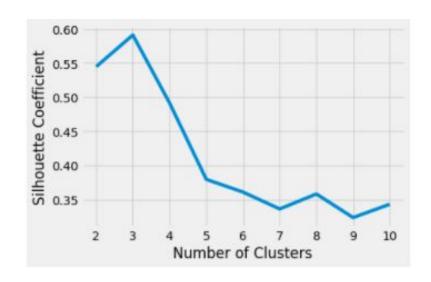
$$s(i) = rac{b(i) - a(i)}{\max\{a(i), b(i)\}}$$
 , if $|C_i| > 1$ $a(i) = rac{1}{|C_i| - 1} \sum_{j \in C_i, i
eq j} d(i, j)$ $b(i) = \min_{k
eq i} rac{1}{|C_k|} \sum_{i \in C_i} d(i, j)$

No es trivial elegir **k** en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

"Método del codo"

"coeficiente de Silhouette"

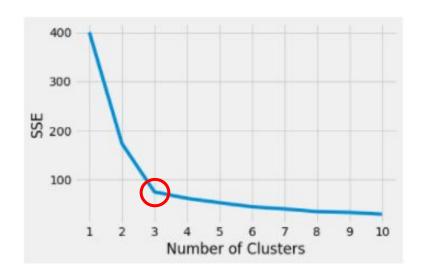


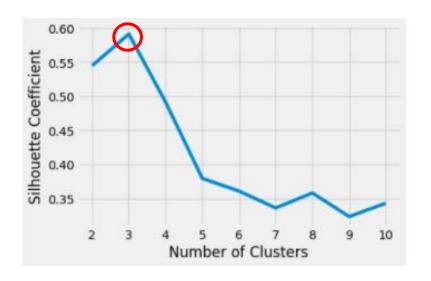


No es trivial elegir **k** en la mayoría de los dataset reales. No hay algún método que funcione siempre.

"Método del codo"

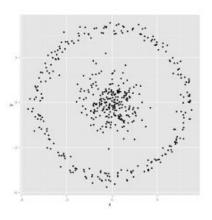
"coeficiente de Silhouette"

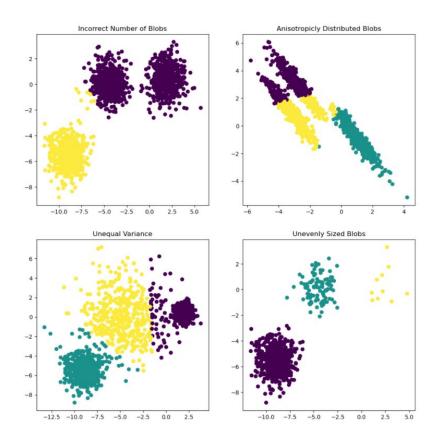




K-means: Pros y Cons

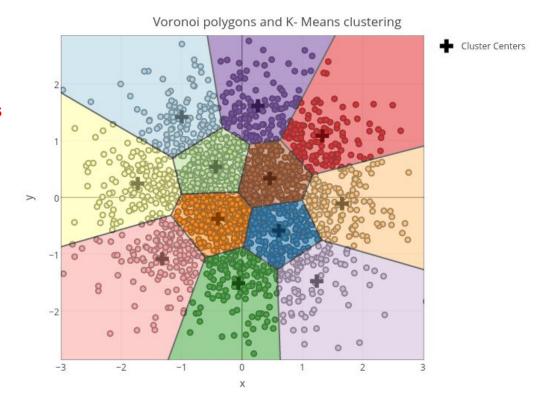
- + Simple y Fácil de implementar
- Orden del algoritmo es lineal
- Depende de la inicialización
- Tiende a caer en un mínimo local
- Sensible a outliers
- Los clusters tienen que tener forma esférica
- No se puede aplicar a data categórica



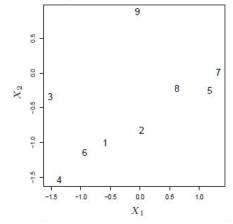


K-means: Pros y Cons

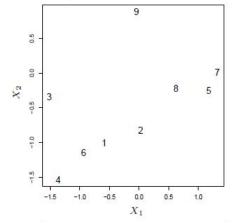
- Da un clustering de los datos aún si los datos no están "clusterizados"



n samplesn clusters

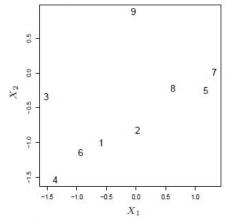


n samplesn clusters



medida de distancia entre samples ('affinity'), usualmente la euclídea

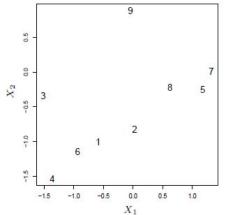
n samplesn clusters



medida de distancia entre samples ('affinity'), usualmente la euclídea

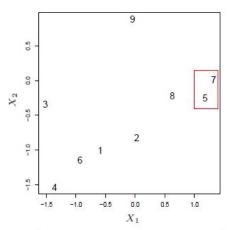
junto los dos cluster que están a menor distancia

n samplesn clusters



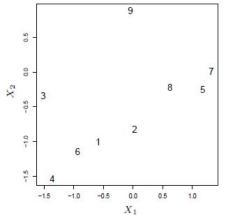
medida de distancia entre samples ('affinity'), usualmente la euclídea

junto los dos cluster que están a menor distancia



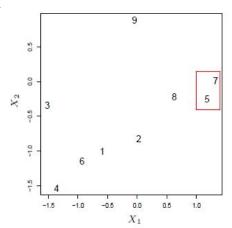
n-1 clusters

n samplesn clusters



medida de distancia entre samples ('affinity'), usualmente la euclídea

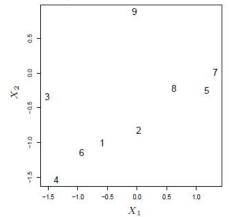
junto los dos cluster que están a menor distancia



n-1 clusters

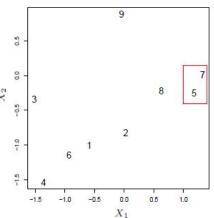
distancia entre clusters de >=1 elementos ('linkage')

n samplesn clusters



medida de **distancia entre samples** ('affinity'), usualmente la euclídea

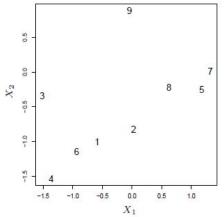
junto los dos cluster que están a menor distancia



n-1 clusters

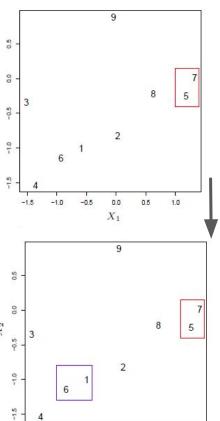
distancia entre clusters de >=1 elementos ('linkage')

n samplesn clusters



medida de distancia entre samples ('affinity'), usualmente la euclídea

junto los dos cluster que están a menor distancia

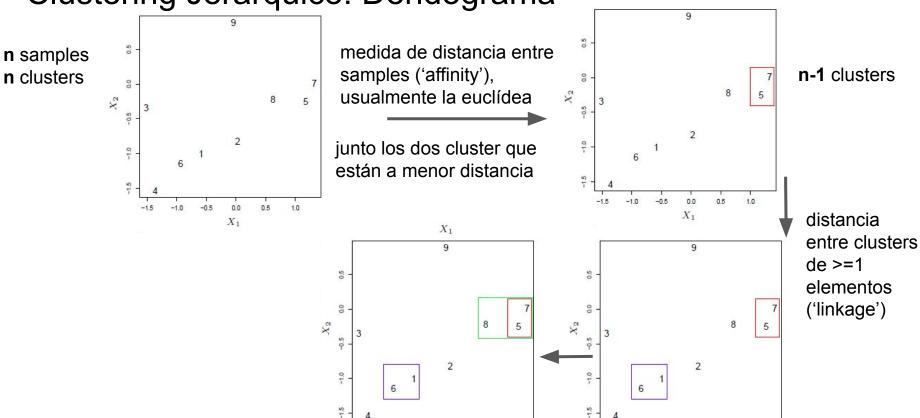


 X_1

1.0

n-1 clusters

distancia entre clusters de >=1 elementos ('linkage')

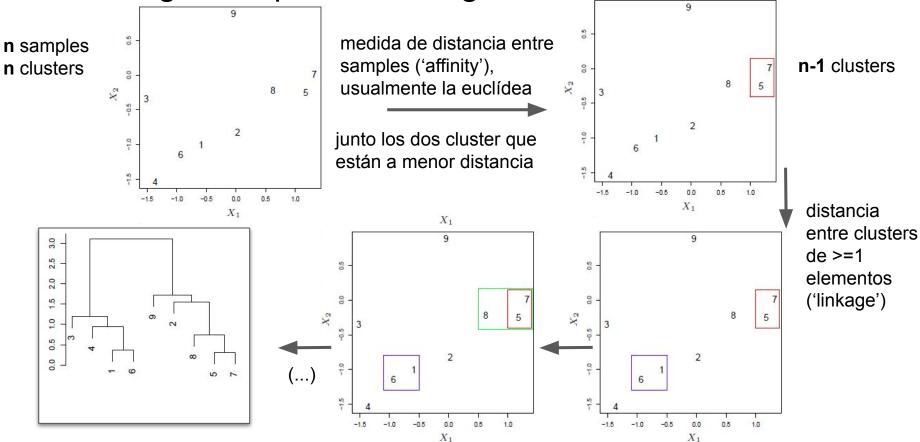


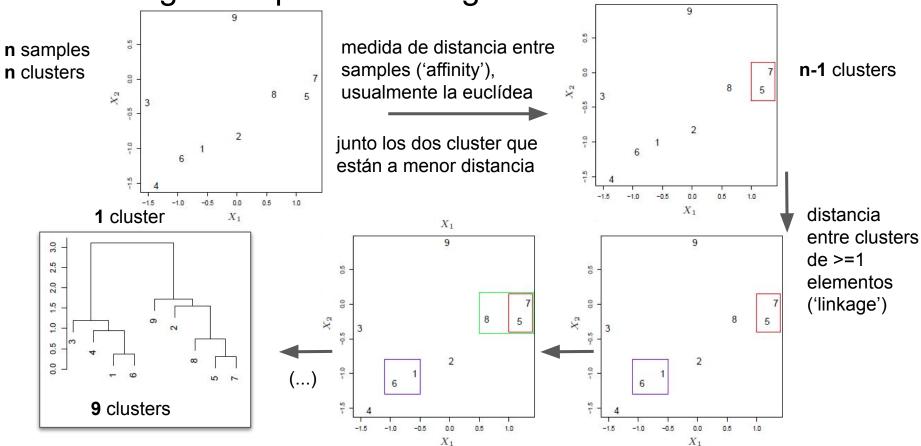
 X_1

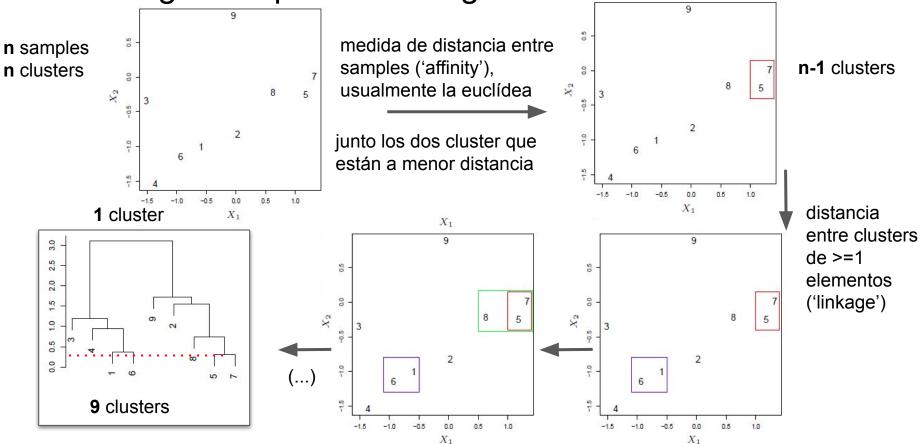
1.0

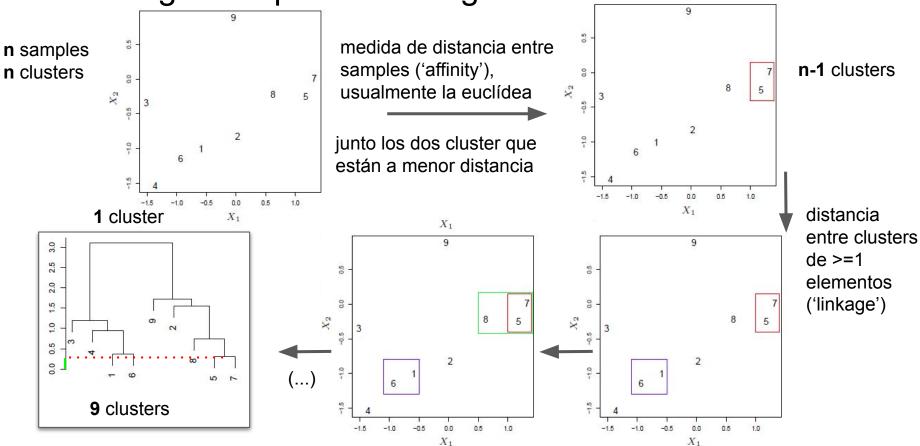
1.0

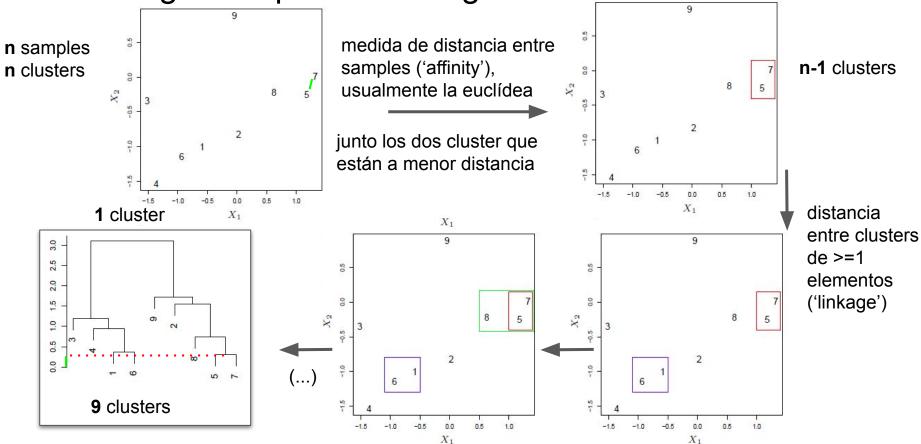
 X_1



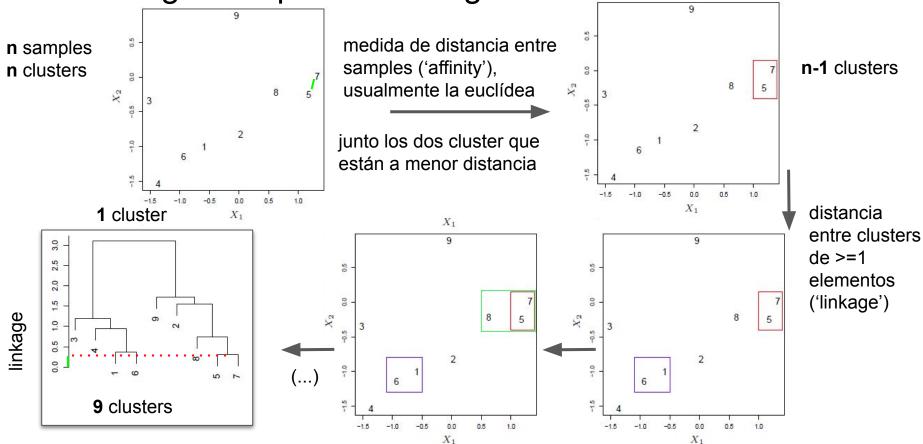




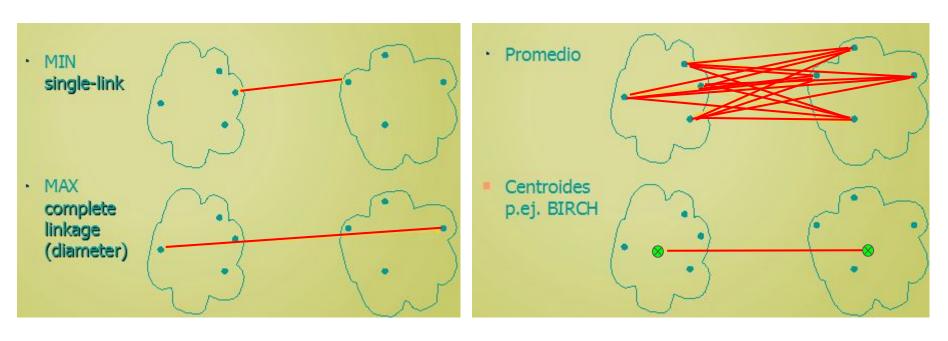




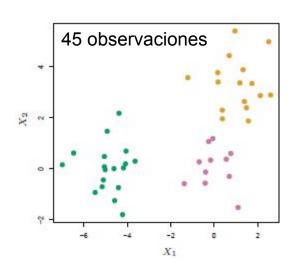
Clustering Jerárquico: Dendograma

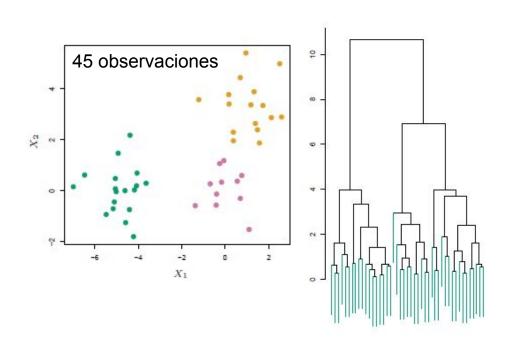


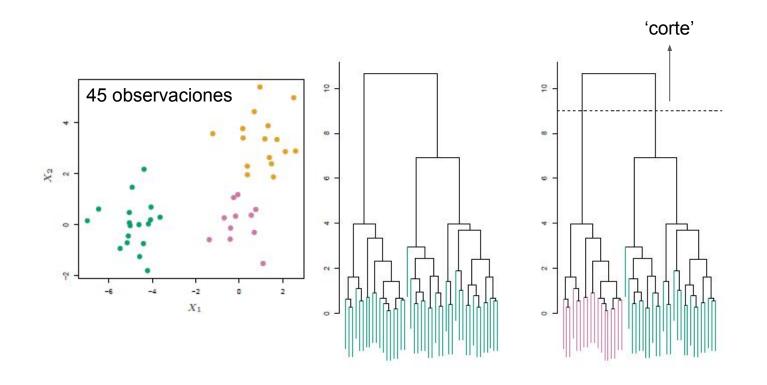
Clustering Jerárquico: Linkage

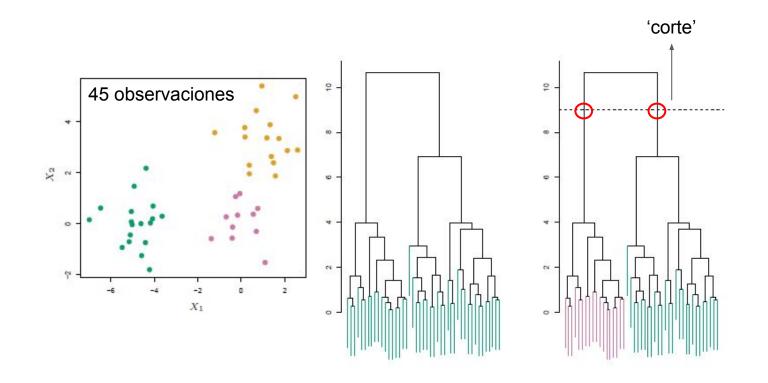


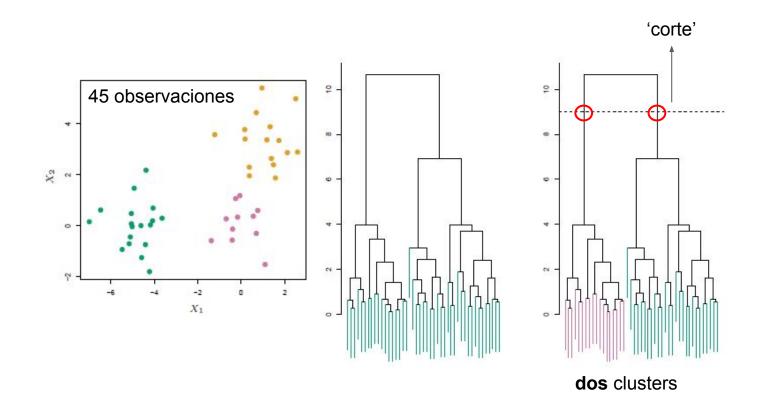
ward: minimiza la varianza del cluster que se va a mergear

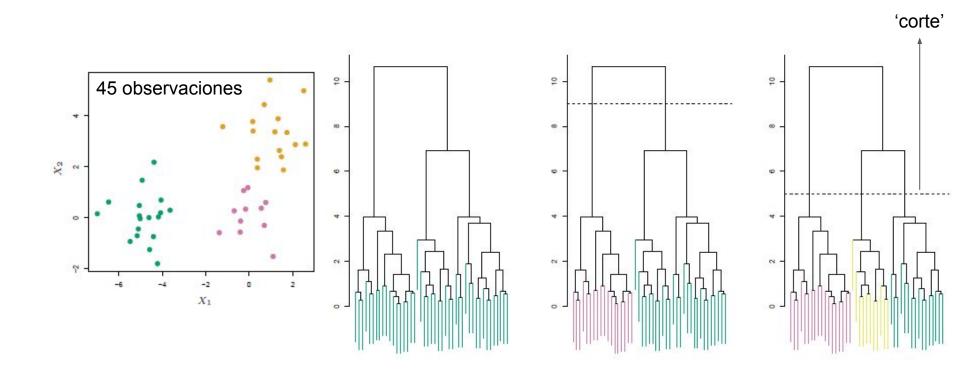


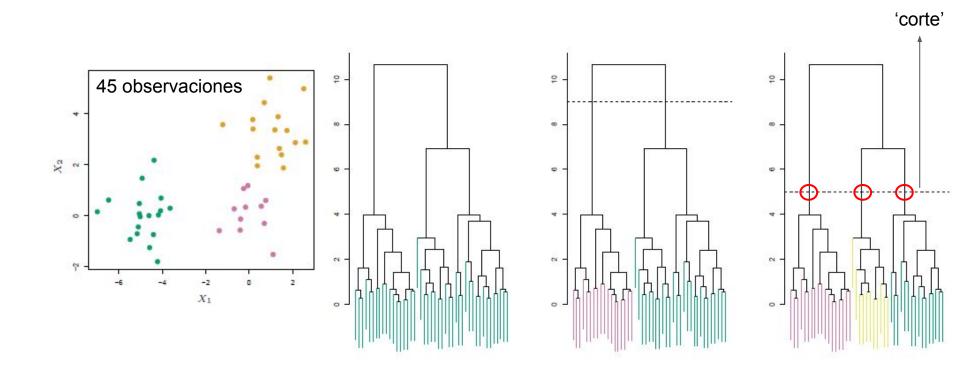


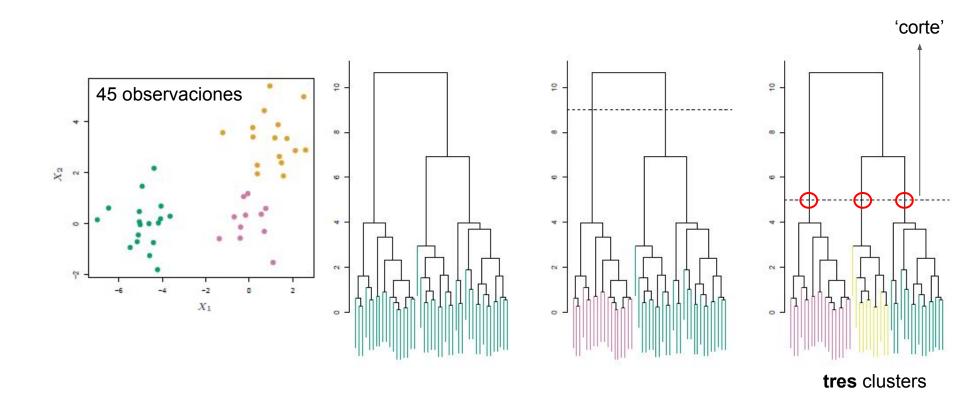


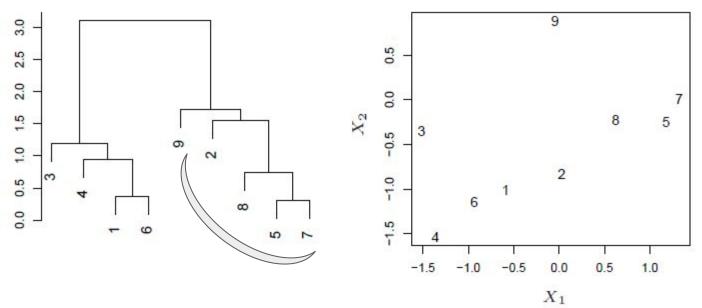










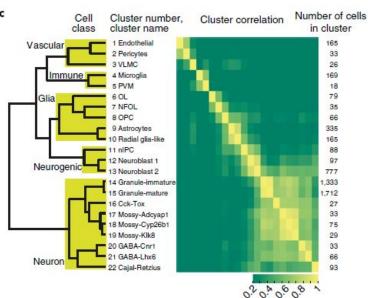


clusters que se obtienen cortando el dendograma a una dada altura estan anidados con los clusteres que se obtienen al cortar el dendograma en una altura superior

Este puede ser un requisito fuerte para un dataset real donde no necesariamente la mejor clusterizacion de los datos en 3 grupos resulta de tomar la mejor clusterizacion de los datos en dos grupos y separarlos

Clustering Jerárquico: Pros y Cons

- + 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



Consideraciones

Tanto K-means como clustering jerárquico asignan un cluster a cada sample, por lo que los clusters encontrados pueden distorsionarse fuertemente debido a la presencia de outliers que no pertenecen a algún determinado grupo -> modelos mixtos están pensados para lidiar con outliers

Los algoritmos de clusterización no suelen ser robustos ante permutaciones en los datos. Si computamos un set de k clusters en nuestros datos, removemos algunas muestras de forma aleatoria y volvemos a clusterizar los resultados pueden ser muy distintos

Los resultados de una clusterización no deberían ser vistos como una verdad absoluta si no que deberían dar un puntapie inicial al desarrollo de una hipótesis científica e investigación futura, preferentemente, en un dataset independiente

Sugerencias

Realizar varias inicializaciones de los modelos cambiando los parámetros para ver las estructuras que emergen consistentemente

Testear la robustez del método aplicándolo sobre subsets aleatorios de los datos

(sklearn) K-means clustering

max iter - el número máximo de iteraciones si es que no converge antes

sklearn.cluster.KMeans

```
class sklearn.cluster.KMeans(n\_clusters=8, *, init='k-means++', n\_init=10, max\_iter=300, tol=0.0001, precompute\_distances='deprecated', verbose=0, random\_state=None, copy_x=True, n\_jobs='deprecated', algorithm='auto') [source]
```

EL parámetro es *n_clusters* con el cual indicamos al modelo el número de clusters que queremos obtener *init* - es el método de inicialización de los k centroids (random, k-means++) *n_init* - cuantas veces queremos inicializar el modelo ya que no es determinista (output es el de menor SSE)

(sklearn) Clustering Jerárquico

sklearn.cluster.AgglomerativeClustering

class $sklearn.cluster.AgglomerativeClustering(n_clusters=2, *, affinity='euclidean', memory=None, connectivity=None, compute_full_tree='auto', linkage='ward', distance_threshold=None, compute_distances=False)$ [source]

affinity - medida de disimilaridad de para el primer paso del algoritmo (distancia euclídea o basada en correlación)

linkage - medida de disimilaridad cuando un cluster tiene más de un elemento