

Outline

Introducción

Medidas de
similaridad

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

Clustering

Eduardo Morales, Hugo Jair Escalante

INAOE

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad**1** Introducción**2** Medidas de similaridad**3** Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

4 ¿Cuántos Clusters?**5** Medidas de Calidad

Variantes de aprendizaje

- **Aprendizaje supervisado:** hacer predicciones con respecto a una o más variables
- **Aprendizaje no-supervisado:** hallar la mejor estructura para los datos
- Otras variantes:
 - Aprendizaje por refuerzo
 - Semi supervisado
 - Auto supervisado



<https://www.theguardian.com/science/2017/jul/26/cats-vs-dogs-in-terms-of-evolution-are-we-backing-up-the-wrong-tree>



<https://medium.com/analytcs-yidhya/customer-segmentation-for-differentiated-targeting-in-marketing-using-clustering-analysis-3ed0b883c18b>

Outline

Introducción

Medidas de similaridad

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos Clusters?

Medidas de Calidad

Clustering

Outline

Introducción

Medidas de
similaridad

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- *Clustering* es el proceso de agrupar datos en clases o *clusters* de tal forma que los objetos de un *cluster* tengan una similaridad / similitud alta entre ellos, y baja (sean muy diferentes) con objetos de otros *clusters*.
- La medida de similaridad está basada en los atributos que describen a los objetos.
- Los grupos pueden ser exclusivos, con traslapes, probabilísticos, jerárquicos.
- *Clustering* puede ser aplicado, por ejemplo, para caracterizar clientes, formar taxonomías, clasificar documentos, etc.

Clustering

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

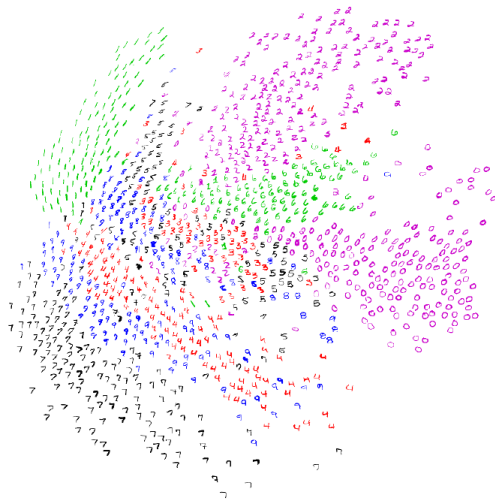
Extensiones

AutoClass

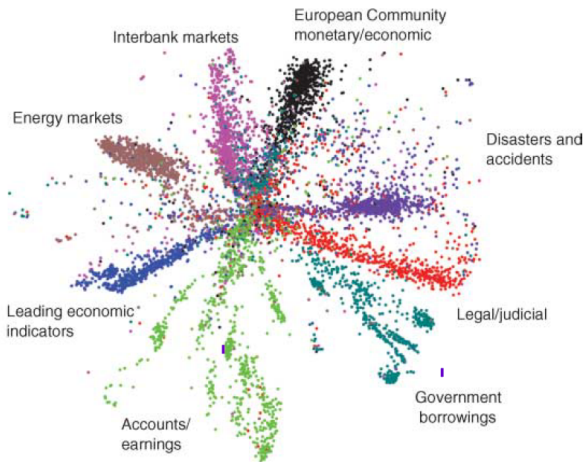
DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad



Clustering



Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

Retos

- Escalabilidad: Normalmente corren con pocos datos.
- Capacidad de manejar diferentes tipos de atributos: Numéricos (lo más común), binarios, nominales, ordinales, etc.
- *Clusters* de formas arbitrarias: Los basados en distancias numéricas tienden a encontrar *cluster* esféricos.
- Requerimientos mínimos para especificar parámetros, como el número de *clusters*.
- Manejo de ruido: Muchos son sensibles a datos erróneos.
- Independientes del orden de los datos.
- Poder funcionar eficientemente con alta dimensionalidad.
- Capacidad de añadir restricciones.
- Que los *clusters* sean interpretables y utilizables.

Outline

Introducción

Medidas de
similaridad

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

Clustering

Outline

Introducción

Medidas de
similaridad

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- La medida de similaridad se define normalmente por proximidad en un espacio multidimensional.
- Para datos numéricos, usualmente se pasa primero por un proceso de estandarización.
- La medida z (z -score) elimina las unidades de los datos:

$$Z_{if} = \frac{X_{if} - \mu_f}{\sigma_f}$$

Clustering

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Donde, σ_f es la desviación media absoluta de la variable f , μ_f es su media y x_{if} es el i -ésimo valor de f .

$$\sigma_f = \frac{1}{n} (|x_{1f} - \mu_f| + |x_{2f} - \mu_f| + \dots + |x_{nf} - \mu_f|)$$

$$\mu_f = \frac{1}{n} (x_{1f} + x_{2f} + \dots + x_{nf})$$

Medidas de similitud

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

Existen medidas para:

- Variables numéricas
- Variables binarias
- Variables nominales
- Variables ordinales
- Variables escalares no lineales
- Variables mixtas

Variables numéricas (lineales)

- Euclideana:

$$d(i, j) = \sqrt{|x_{i1} - x_{j1}|^2 + |x_{i2} - x_{j2}|^2 + \dots + |x_{in} - x_{jn}|^2}$$

- Manhattan:

$$d(i, j) = |x_{i1} - x_{j1}| + |x_{i2} - x_{j2}| + \dots + |x_{in} - x_{jn}|$$

- Minkowski (Si $q = 1$ es Manhattan y si $q = 2$ es Euclideana)

$$d(i, j) = (|x_{i1} - x_{j1}|^q + |x_{i2} - x_{j2}|^q + \dots + |x_{in} - x_{jn}|^q)^{1/q}$$

- Distancia Pesada (e.g., Euclideana):

$$d(i, j) = \sqrt{w_1|x_{i1} - x_{j1}|^2 + w_2|x_{i2} - x_{j2}|^2 + \dots + w_n|x_{in} - x_{jn}|^2}$$

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

Distancias

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

Propiedades de distancias:

❶ $d(i, j) \geq 0$

❷ $d(i, i) = 0$

❸ $d(i, j) = d(j, i)$, y (iv) $d(i, j) \leq d(i, h) + d(h, j)$

Variables Binarias (0,1)

- Simétricas (ambos valores tienen el mismo peso):

$$d(i,j) = \frac{r + s}{q + r + s + t}$$

donde:

- q = número de valores que son 1 en las dos
 - r = número de valores que son 1 en i y 0 en j
 - s = número de valores que son 0 en i y 1 en j
 - t = número de valores que son 0 en las dos.
- No-simétricas (el más importante y más raro vale 1), conocido como el coeficiente Jaccard:

$$d(i,j) = \frac{r + s}{q + r + s}$$

Outline

Introducción

Medidas de similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos Clusters?

Medidas de Calidad

Variables nominales

Outline

Introducción

Medidas de similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos Clusters?

Medidas de Calidad

- Por ejemplo, “color”:

$$d(i, j) = \frac{p - m}{p}$$

donde: m = número de valores iguales, p = número total de casos.

- Se pueden incluir pesos para darle más importancia a m .
- Se pueden crear nuevas variables binarias asimétricas a partir de las nominales (e.g., es amarillo o no).

Variables ordinales

- Son como las nominales pero con un orden relevante. El orden es importante, pero no la magnitud.

- Pasos:

- 1 Cambia el valor de cada variable por un ranqueo $r_{if} \in \{1, \dots, M_f\}$, donde M_f es el índice del valor más alto de la variable
- 2 Mapea el ranqueo entre 0 y 1 para darle igual peso

$$z_{if} = \frac{r_{if} - 1}{M_f - 1}$$

- 3 Usa cualquiera de las medidas numéricas anteriores.

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

VARIABLES ESCALARES NO LINEALES

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Son variables que siguen una escala no lineal, por ejemplo, una escala exponencial
- Posibilidades:
 - 1 Tratarlas como numérica normal.
 - 2 Obten su logaritmo (o alguna otra transformación) antes para convertirlas en lineales.
 - 3 Consideralas como variables ordinales.

Variables mixtas

- Una posibilidad es escalar todas las variables a un intervalo común (entre 0 y 1):

$$d(i, j) = \frac{\sum_{f=1}^p \delta_{ij}^{(f)} d_{ij}^{(f)}}{\sum_{f=1}^p \delta_{ij}^{(f)}}$$

donde:

$\delta_{ij}^{(f)} = 0$ si x_{if} o x_{jf} se desconocen o si los dos valores son 0 y la variable es asimétrica binaria. En caso contrario vale 1.

$d_{ij}^{(f)}$ depende del tipo:

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

Variables mixtas

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

- Si f es binaria o nominal: $d_{ij}^{(f)} = 0$ si $x_{if} = x_{jf}$, si no, $d_{ij}^{(f)} = 1$.
- Si f es numérica lineal: $d_{ij}^{(f)} = \frac{|x_{if} - x_{jf}|}{\max_h x_{hf} - \min_h x_{hf}}$
- Si f es ordinal o numérica no lineal: calcula los índices r_{if} y $z_{if} = \frac{r_{if} - 1}{M_f - 1}$ y toma a z_{if} como numérica lineal.

HVDM

- Otra medida popular entre dos vectores \vec{x}, \vec{y} es HVDM (*Heterogeneous Value Difference Metric*) definida como:

$$HVDM(\vec{x}, \vec{y}) = \sqrt{\sum_{i=1}^m d_a^2(x_i, y_i)}$$

donde m es el número de atributos y

$$d_a(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \text{ o } y \text{ son desconocidas} \\ norm_vdm_a(x, y) & \text{si } a \text{ es nominal} \\ norm_diff_a(x, y) & \text{si } a \text{ es numérico} \end{cases}$$

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

HVDM

- Como el 95% de los valores de una distribución normal están dentro de dos desviaciones estándar de la media, la distancia se divide entre $4\sigma_a$

$$\text{norm_diff}_a(x, y) = \frac{|x - y|}{4\sigma_a}$$

- Originalmente se propusieron 3 medidas:

$$N1 : \text{norm_vdm1}_a(x, y) = \sum_{c=1}^C C \left| \frac{N_{a,x,c}}{N_{a,x}} - \frac{N_{a,y,c}}{N_{a,y}} \right|$$

$N_{a,x}$ = número de instancias con valor x en el atributo a

$N_{a,x,c}$ = número de instancias con valor x en el atributo a y clase c

C = número de clases

* two values are considered to be closer if they have more similar classifications (i.e., more similar correlations with the output classes), regardless of what order the values may be give

HVDM

- N2: Equivalente a Euclideana y Manhattan (N1)

$$N2 : \text{norm_vdm2}_a(x, y) = \sqrt{\sum_{c=1}^C C \left| \frac{N_{a,x,c}}{N_{a,x}} - \frac{N_{a,y,c}}{N_{a,y}} \right|^2}$$

- N3: Original

$$N3 : \text{norm_vdm3}_a(x, y) = \sqrt{C * \sum_{c=1}^C C \left| \frac{N_{a,x,c}}{N_{a,x}} - \frac{N_{a,y,c}}{N_{a,y}} \right|^2}$$

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

Algoritmos de Clustering

Existe una gran cantidad de algoritmos de *clustering* (sólo vamos a ver algunos). En particular existen diferentes algoritmos basados en:

- Particiones
- Jerárquicos
- Densidades
- Rejillas
- Modelos
- Teoría de grafos
- Búsqueda combinatoria
- Técnicas Fuzzy
- Redes neuronales
- Kernels
- Para datos secuenciales
- Para grandes conjuntos de datos

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

Métodos basados en particiones

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Construyen k particiones de los datos, donde cada partición representa un grupo o *cluster*
- Cada grupo tiene al menos un elemento y cada elemento pertenece a un solo grupo.
- Estos métodos, crean una partición inicial e iteran hasta un criterio de paro
- Los más populares son k -medias y k -medianas (otros: CLARA y CLARANS).

Métodos Jerárquicos

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Crean descomposiciones jerárquicas
- Existen dos tipos:
 - 1 El método aglomerativo o *bottom-up*, empieza con un grupo por cada objeto y une los grupos más parecidos hasta llegar a un solo grupo u otro criterio de paro (e.g., AGNES, BIRCH, CURE, ROCK).
 - 2 El método divisorio o *top-down*, empieza con un solo grupo y lo divide en grupos más pequeños hasta llegar a grupos de un solo elemento u otro criterio de paro (e.g., DIANA, MONA).

Otros Métodos

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Métodos basados en densidades: Se agrupan objetos mientras su densidad (número de objetos) en la “vecindad” esté dentro de un cierto umbral (e.g., DBSCAN, DENCLUE).
- Métodos basados en rejillas: Se divide el espacio en rejillas a diferentes niveles (e.g, STING, CLIQUE).
- Métodos basados en modelos: Se encuentra un modelo para cada *cluster* que mejor ajuste los datos de ese grupo (e.g., COBWEB, AutoClass).

Otros Métodos

- Métodos basados en teoría de grafos: Utilizan representaciones basadas en grafos (e.g., Chameleon, *Delaunay triangulation graph* (DTG), *highly connected subgraphs* (HCS), *clustering identification via connectivity kernels* (CLICK), *cluster affinity search technique* (CAST))
- Técnicas basadas en Búsqueda Combinatoria (e.g., *Genetically guided algorithm* (GGA), *TS clustering*, *SA clustering*)
- Técnicas Fuzzy (e.g., Fuzzy c-means (FCM), *mountain method* (MM), *possibilistic c-means clustering algorithm* (PCM), *fuzzy c-shells* (FCS))

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

Otros Métodos

- Técnicas basadas en Redes Neuronales (e.g., *Learning vector quantization* (LVQ), *self-organizing feature map* (SOFM), ART, *simplified ART* (SART), *hyperellipsoidal clustering network* (HEC), *self-splitting competitive learning network* (SPLL))
- Técnicas basadas en Kernels (e.g. *Kernel K-means*, *support vector clustering* (SVC))
- Técnicas para Datos Secuenciales (e.g. Similaridad secuencial, *clustering* secuencial indirecto, *clustering* secuencial estadístico)
- Técnicas para grandes conjuntos de datos (e.g., CLARA, CURE, CLARANS, BIRCH, DBSCAN, DENCLUE, WaveCluster, FC, ART)

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

k-Means

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Es de los más conocidos y usados
- Toma como parámetro k que es el número de *clusters* que forma.
- Pasos:
 - 1 Selecciona k elementos aleatoriamente, los cuales representan el centro o media de cada *cluster*.
 - 2 A cada objeto restante se le asigna el *cluster* con el cual más se parece, basándose en una distancia entre el objeto y la media del *cluster*
 - 3 Después calcula la nueva media del *cluster* e itera hasta no cambiar de medias.

Algoritmo de k-means

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

Selecciona k objetos aleatoriamente

repeat

Re(asigna) cada objeto al *cluster* más similar
con el valor medio

Actualiza el valor de las medias de los *clusters*

until no hay cambio

k-means

- Normalmente se utiliza una medida de similaridad basada en el error cuadrático:

$$E = \sum_{i=1}^k \sum_{p \in C_i} |p - m_i|^2$$

donde: p representa al objeto y m_i a la media del *cluster* C_i (ambos son objetos multidimensionales).

- *k-means* es susceptible a valores extremos porque distorsionan la distribución de los datos.
- También se pueden utilizar las modas (*k-modes*) para agrupar objetos categóricos.

Outline

Introducción

Medidas de
similaridad

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

k-Medias

- Otra posibilidad es usar medianas (*k-medoids*) para agrupar con base al objeto más representativo del *cluster*
- La idea básica es encontrar un objeto representativo
- La estrategia es reemplazar una de las medianas por otro objeto en forma aleatoria y medir si la calidad de los *clusters* resultantes mejoran
- La calidad se evalúa con base en una función de costo que mide la disimilaridad promedio entre un objeto y la mediana en su *cluster*.

$$E = \frac{1}{N} \sum_{p \in D/M} \min_{m_i \in M} d(p, m_i)$$

Outline

Introducción

Medidas de
similaridad

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

k-Medias

- Para ver si un objeto aleatorio es un buen reemplazo de la mediana actual, se consideran todos los objetos que no sean medianas y se analiza la re-distribución de los objetos a partir de la cual se calcula un costo basado, por ejemplo, en el error cuadrático
- Esto se repite hasta que no exista mejora.
- Cómo en muchos de los métodos vistos, no garantiza encontrar el mínimo global, por lo que se recomienda correr varias veces el algoritmo con diferentes valores iniciales.
- Otra variante es hacer un *k-means* jerárquico, en donde se empieza con $k = 2$ y se continua formando *clusters* sucesivos en cada rama.
- Si queremos escalarlo a grandes bases de datos, podemos tomar únicamente muestras de los datos.

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

Cobweb

Outline

Introducción

Medidas de
similaridad

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Crea un *cluster* jerárquico con un árbol de clasificación.
- En un árbol de clasificación cada nodo es un concepto que tiene una descripción probabilística de ese concepto que resume los objetos clasificados bajo ese nodo.
- La descripción probabilística incluye la probabilidad del concepto ($P(C_j)$) y las probabilidades condicionales de pares atributos-valor dado el concepto ($P(A_i = V_{ij} | C_k)$).

Cobweb

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

FUNCTION COBWEB (Object, Root { of a classification tree })

1) Update counts of the Root

2) IF Root is a leaf

THEN Return the expanded leaf to accommodate the new object

ELSE Find that child of Root that best hosts Object and

perform **one** of the following

a) Consider creating a new class and do so if appropriate

b) Consider node merging and do so if appropriate and
call COBWEB (Object, Merged node)

c) Consider node splitting and do so if appropriate and
call COBWEB (Object, Root)

d) IF none of the above (a, b, or c) were performed
THEN call COBWEB (Object, Best child of Root)

Cobweb

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Utiliza una medida llamada *utilidad de la categoría* para construir el árbol:

$$CU = \frac{\sum_{k=1}^n P(C_k) \left[\sum_i \sum_j P(A_i = V_{ij} | C_k)^2 - \sum_i \sum_j P(A_i = V_{ij})^2 \right]}{n}$$

donde: n es el número de clases en un nivel del árbol.

- La utilidad de la categoría mide el valor esperado de valores de atributos que pueden ser adivinados a partir de la partición sobre los valores que se pueden adivinar sin esa partición.

Cobweb

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

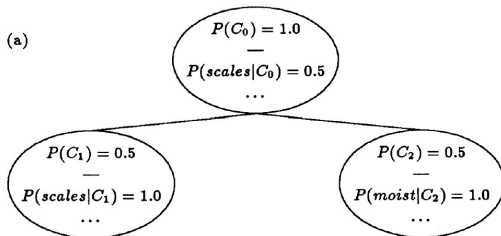
¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Si la partición no ayuda en esto, entonces no es buena partición.
- Entre más grande es la proporción de elementos de la clase que tienen ese atributo-valor, ese atributo-valor es más predictivo sobre la clase.
- COBWEB desciende el árbol buscando el mejor lugar o nodo para cada objeto
- Esto se basa en poner el objeto en cada nodo y en un nodo nuevo y medir en cual se tiene la mayor ganancia de utilidad de categoría.

Cobweb

<i>Name</i>	<i>BodyCover</i>	<i>HeartChamber</i>	<i>BodyTemp</i>	<i>Fertilization</i>
'mammal'	hair	four	regulated	internal
'bird'	feathers	four	regulated	internal
'reptile'	cornified-skin	imperfect-four	unregulated	internal
'amphibian'	moist-skin	three	unregulated	external
'fish'	scales	two	unregulated	external



Outline

Introducción

Medidas de
similaridad

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

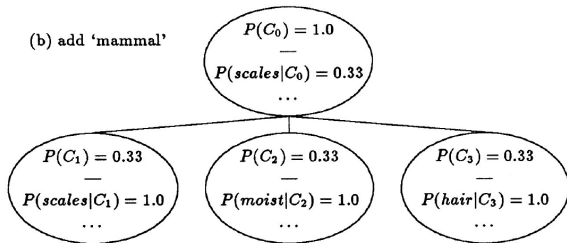
DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

Cobweb

<i>Name</i>	<i>BodyCover</i>	<i>HeartChamber</i>	<i>BodyTemp</i>	<i>Fertilization</i>
'mammal'	hair	four	regulated	internal
'bird'	feathers	four	regulated	internal
'reptile'	cornified-skin	imperfect-four	unregulated	internal
'amphibian'	moist-skin	three	unregulated	external
'fish'	scales	two	unregulated	external

(b) add 'mammal'



Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

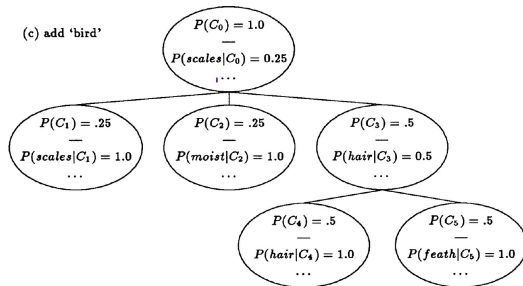
DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

Cobweb

Name	BodyCover	HeartChamber	BodyTemp	Fertilization
'mammal'	hair	four	regulated	internal
'bird'	feathers	four	regulated	internal
'reptile'	cornified-skin	imperfect-four	unregulated	internal
'amphibian'	moist-skin	three	unregulated	external
'fish'	scales	two	unregulated	external

(c) add 'bird'



Outline

Introducción

Medidas de
similaridad

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

Cobweb

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

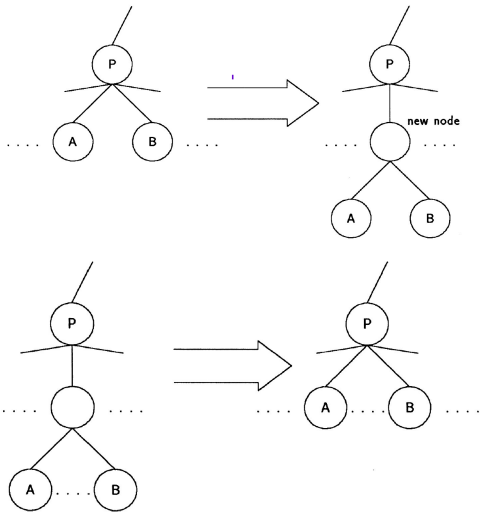
DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- COBWEB también considera en cada iteración unir los dos mejores nodos evaluados (*los nodos combinados son hijos del nuevo nodo*) y dividir el mejor nodo evaluado (*los nodos divididos están en el mismo nivel que el original*)
- Esto es, cada vez que se considera un lugar en un nivel para un nuevo objeto, se consideran los dos mejores objetos (de mayor utilidad) y se considera juntarlos.
- El caso contrario, sucede una vez que se encuentra el mejor lugar para un nuevo objeto, pero el unir nodos no resulta beneficioso, entonces se considera dividir ese nodo.

Cobweb



Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

Cobweb

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- COBWEB depende del orden de los objetos, por lo que a veces es conveniente probarlo con objetos en diferente orden.
- La división entre el número de *cluster* sirve para incentivar tener *clusters* con más de un elemento.
- COBWEB supone que la distribución de probabilidad de los atributos es independiente de las demás.

Cobweb

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

FUNCTION COBWEB (Object, Root { of a classification tree })

1) Update counts of the Root

2) IF Root is a leaf

THEN Return the expanded leaf to accommodate the new object

ELSE Find that child of Root that best hosts Object and

perform **one** of the following

a) Consider creating a new class and do so if appropriate

b) Consider node merging and do so if appropriate and
call COBWEB (Object, Merged node)

c) Consider node splitting and do so if appropriate and
call COBWEB (Object, Root)

d) IF none of the above (a, b, or c) were performed
THEN call COBWEB (Object, Best child of Root)

Classit

- Cobweb se puede extender a valores numéricos usando gaussianas (CLASSIT).

$$f(a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(a-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

- El equivalente a la sumatoria de probabilidades es:

$$\sum_j P(A_i = V_{ij})^2 \sim \int f(a_i)^2 da_i = \frac{1}{2\sqrt{\pi\sigma_i}}$$

- Ahora se estima la desviación estandar del atributo numérico con los datos en el *cluster* y en los datos para todos los *clusters*:

$$CU = \frac{1}{k} \sum_{k=1}^n P(C_k) \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_j \left(\frac{1}{\sigma_{ik}} - \frac{1}{\sigma_j} \right)$$

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

Classit

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Si la desviación estandar es cero el valor de utilidad se vuelve infinito, por lo que se impone un valor de varianza mínimo en cada atributo (*acuity*).
- El otro parámetro que se usa en COBWEB es el de corte (*cutoff*), que básicamente se usa para parar la generación de nuevos nodos.

Clustering basado en probabilidades

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Desde el punto de vista bayesiano, lo que buscamos es el grupo de *clusters* más probable dados los datos.
- Ahora los objetos tienen cierta probabilidad de pertenecer a un grupo o *cluster*.
- La base de un *clustering* probabilístico está basado en un modelo estadístico llamado *finite mixtures* (mezcla de distribuciones).
- Una mezcla es un conjunto de k distribuciones, representando k *clusters*.

Clustering basado en probabilidades

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Cada distribución nos da la probabilidad de que un objeto tenga un conjunto particular de pares atributo-valor si se supiera que fuera miembro de ese *cluster*.
- La mezcla más sencilla es cuando tenemos puros atributos numéricos con distribuciones gaussianas con diferentes medias y varianzas.
- La idea es, dado un conjunto de datos, determinar las k distribuciones normales (medias y varianzas) y las probabilidades particulares de cada distribución (pueden ser diferentes).

Mezcla de Gaussinas

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Por ejemplo, si tuvieramos dos distribuciones A y B con μ_A, σ_A y μ_B, σ_B , y P_A ($P_A + P_B = 1$), podemos generar un conjunto de datos.
- Si supieramos de qué distribución salió cada dato, es fácil calcular su media y varianza, y las P_A y P_B .

$$\mu = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{n}$$

$$\sigma^2 = \frac{(x_1 - \mu)^2 + (x_2 - \mu)^2 + \dots + (x_n - \mu)^2}{n - 1}$$

Mezcla de Gaussinas

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Calcular la probabilidad de que un objeto (x) pertenezca a un *cluster* (e.g., A), es:

$$P(A|x) = \frac{P(x|A)P(A)}{P(x)} = \frac{f(x; \mu_A, \sigma_A)P_A}{P(x)}$$

donde $f(x; \mu_A, \sigma_A)$ es una distribución normal:

$$f(x; \mu_A, \sigma_A) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

Podemos ignorar $P(x)$ y al final normalizar.

Algoritmo EM

Outline

Introducción

Medidas de
similaridad

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- El problema es que no sabemos de qué distribución viene cada dato y no conocemos los parámetros de las distribuciones.
- El algoritmo EM (*Expectation Maximization*) empieza adivinando los parámetros de las distribuciones y los usa para calcular las probabilidades de que cada objeto pertenezca a un *cluster*
- Usa esas probabilidades para re-estimar los parámetros de las probabilidades, hasta converger (se puede empezar adivinando las probabilidades de que un objeto pertenezca a una clase).

Algoritmo EM

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- El cálculo de las probabilidades de las clases o los valores esperados de las clases es la parte de *expectation*.
- El paso de calcular los valores de los parámetros de las distribuciones, es *maximization*, maximizar la verosimilitud de las distribuciones dados los datos.
- Para estimar los parámetros, tenemos que considerar que tenemos únicamente las probabilidades de pertenecer a cada *cluster* y no los *clusters* en si.

Algoritmo EM

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Estas probabilidades actúan como pesos:

$$\mu_A = \frac{w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_n x_n}{w_1 + w_2 + \dots + w_n}$$

$$\sigma_A^2 = \frac{w_1 (x_1 - \mu)^2 + w_2 (x_2 - \mu)^2 + \dots + w_n (x_n - \mu)^2}{w_1 + w_2 + \dots + w_n}$$

donde w_i es la probabilidad de que el objeto i pertenezca al *cluster* A y se suma sobre todos los objetos (no sólo los de A).

Algoritmo EM

- El algoritmo tiende a converger pero nunca llega a un punto fijo.
- Podemos ver qué tanto se acerca calculando la versorimilitud general de los datos con esos parámetros, multiplicando las probabilidades de los objetos individuales (i):

$$\prod_i (P_A P(x_i|A) + P_B P(x_i|B))$$

- Esta medida crece en cada iteración, y se itera hasta que el crecimiento es despreciable.
- Aunque EM garantiza convergencia, esta puede ser a un máximo local, por lo que se recomienda repetir el proceso varias veces.

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

Extensiones

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Extender a más de dos distribuciones es prácticamente directo.
- Extenderlo a instancias con atributos múltiples, si se supone independencia de los atributos, se puede hacer multiplicando las probabilidades para obtener una distribución de probabilidad conjunta.
- Si existen dos atributos correlacionados, se pueden analizar con una distribución normal bi-variable en donde se utiliza una matriz de covarianza
- El número de parámetros crece al cuadrado del número de atributos que se consideren correlacionados entre sí

Extensiones

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Se pueden especificar diferentes distribuciones (cada una con sus propios parámetros) para diferentes tipos de datos.
- Se puede penalizar el modelo que introduzca parámetros y el que defina un número mayor de *clusters*.

AutoClass

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Realiza un descubrimiento automático de clases en datos (P. Cheeseman, J. Stutz).
- Una vez que las clases han sido identificadas, éstas pueden servir para clasificar nuevos datos.
- La idea es encontrar la hipótesis más probable, dados los datos e información *a priori*.

AutoClass

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Normalmente se busca un balance entre qué tan bien se ajustan los datos a las clases y complejidad de las clases (casos extremos, una clase por dato o una sola clase para todos los datos).
- En AutoClass los datos se pueden representar por valores discretos, enteros y reales.
- El modelo es una mezcla finita de distribuciones de probabilidad, cada una con su conjunto de parámetros.

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

Para cada dato se asigna una probabilidad de pertenencia a una clase (o un peso).

$$P(X_i \in C_j \mid \vec{V}_c, T_c, S, \mathcal{I}) \equiv \pi_j.$$

Muy parecido a GMMs, pero más general, y Bayesiano:

$$P(\pi_1, \dots, \pi_J \mid T_c, S, \mathcal{I}) \equiv \frac{\Gamma(J+1)}{[\Gamma(1+1/J)]^J} \prod_j \pi_j^{\frac{1}{J}}$$

AutoClass

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Dado un conjunto de datos se busca:
 - 1 Los valores más probables (MAP) de los parámetros (para las distribuciones y clases dadas), dada una distribución de probabilidad.
 - 2 La distribución de probabilidad más probable (número de clases y modelos alternativos), independientemente de los parámetros.

AutoClass

Outline

Introducción

Medidas de
similaridad

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

- Se supone que los datos son condicionalmente independientes dada la clase, por lo que la distribución conjunta de los datos es el producto de las probabilidades individuales.

$$P(\vec{X}_i, X_i \in C_j | \vec{V}_j, T_j, \vec{V}_c, T_c, S, \mathcal{I}) = \pi_j \prod_k P(X_{ik} | X_i \in C_j, \vec{V}_{jk}, T_{jk}, S, \mathcal{I}).$$

- Cada dato pertenece a una y solo una clase (de un conjunto disjunto de clases) con probabilidad $P(X_i \in C_j | \vec{V}_c, T_c)$, donde \vec{V}_c es el vector de parámetros de la distribución y T_c es la distribución particular).
- Las clases representan una partición discreta de los datos y por lo tanto la distribución más apropiada es una distribución Bernoulli o binomial

AutoClass

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

AutoClass trata de encontrar los parámetros de las distribuciones de probabilidad dependiendo del tipo de valores de las variables:

- Discretos: Bernoulli
- Reales: Gaussianas
- Reales - Escalares (e.g., edad, peso): log-Gaussianas
- Enteros: Poisson

AutoClass

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- En general se debe de establecer cuantas clases y correr el proceso.
- Al correrlo, existen muchos máximos locales, por lo que hay que correr el proceso varias veces a partir de diferentes valores iniciales para los parámetros.

DBSCAN

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise (DBSCAN)
- Ventajas:
 - Casi no requiere conocimiento del dominio
 - Puede encontrar clusters de formas arbitrarias
 - Es eficiente en bases de datos grandes
- La idea principal de DBSCAN es localizar regiones con alta densidad que estén separadas de regiones de baja densidad

DBSCAN

Outline

Introducción

Medidas de
similaridad

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Para medir la densidad de un punto p se cuentan cuántos datos están dentro de un círculo de radio ϵ alrededor de p
- Una región se considera *densa* si contiene al menos un número mínimo de datos (*MinPts*)
- Los vecinos a un punto se definen como:

$$N_{\epsilon}(p) = \{q \in D \mid \text{dist}(p, q) \leq \epsilon\}$$

DBSCAN

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

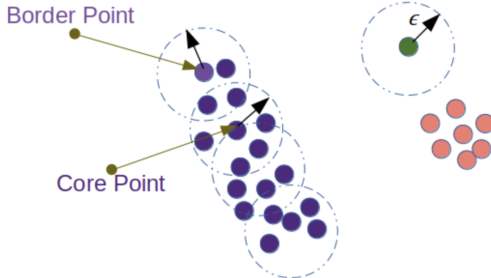
DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Un punto base o núcleo (*core point*) es aquel que:
 $|N_{\epsilon}(p)| \geq MinPts$
- Como es de esperarse los *core points* están en los centros de los grupos
- Un punto orilla (*border point*) es aquel que tiene menos puntos que *MinPts*, pero que es vecino de un *core point*
- Ruido es todo punto que no es ni *border* ni *core*

DBSCAN



$$N_{\epsilon}(p) = \{q \in D \text{ such that } \text{dist}(p, q) \leq \epsilon\}$$

$$\epsilon = 1 \text{ unit, MinPts} = 7$$

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

DBSCAN

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- El valor de puntos mínimos puede incluir ruido si se selecciona muy bajo
- Un punto a es *directly density reachable* de un punto b si:
 - 1 $|N_\epsilon(b)| \geq MinPts$ (i.e., es un punto *core*)
 - 2 $a \in N_\epsilon(b)$ (a está en el vecindario ϵ de b)

DBSCAN

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

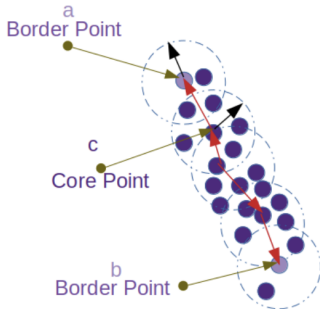
DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Un punto a es *density reachable* de un punto b si en una cadena de puntos b_1, b_2, \dots, b_n , $b_1 = b$, $b_n = a$ y b_{i+1} es *directly density reachable* de b_i
- Es una relación transitiva, no simétrica.
- Dos puntos frontera (*border*) pueden estar densamente conectados, sin que compartan un punto núcleo (*core*)
- Un punto a está densamente conectado (*density connected*) a un punto b , si existe un punto c tal que tanto a como b son *density reachable* de c

DBSCAN



a, b are Density Reachable from a core point c.

a, b are called Density Connected points.

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

Algoritmo

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- 1 Selecciona un punto arbitrario que no se haya visitado antes
- 2 Si tiene *MinPts* vecinos, empieza la formación de clusters, si no, etiquétalo como ruido
- 3 Si un punto se identifica como núcleo, todos los puntos dentro de su vecindad ϵ se consideran dentro del cluster, junto con sus vecinos ϵ si son puntos núcleo
- 4 Continúa formando el núcleo y cuando pares, selecciona otro nuevo punto

DBSCAN

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

Dos posibles problemas:

- Si se tienen puntos con clusters de diferente densidad se pueden tener problemas
- No es fácil definir ϵ y *MinPts*, por lo que muchas veces se hacen varias corridas con diferentes valores para estos parámetros

<https://www.naftaliharris.com/blog/visualizing-dbscan-clustering/>

¿Cuántos *Clusters*?

Outline

Introducción

Medidas de
similaridad

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Para algunas aplicaciones es fácil determinar el número de *clusters*, "K", de acuerdo al conocimiento del dominio.
- Para la mayoría de los casos, "K" se desconoce y se estima a partir de los datos.
- Muchos algoritmos de *clustering* requieren a "K" como parámetro de entrada y la calidad de los resultados está fuertemente ligada a este valor.

El método del “codo”

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Una técnica heurística común es usar el método del codo (a veces también se conoce como “la rodilla de la curva”)
- La idea es graficar una medida de dispersión de los datos (e.g., varianza) con respecto al número de clusters y seleccionar el número de cluster en dónde añadir más no mejora mucho
- Este método implica correr el algoritmo de clustering varias veces y después determinar heurísticamente el mejor número

Número de Clusters

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

Algunos métodos que se han utilizado para encontrar el número adecuado de *clusters* son:

- Visualización del conjunto de datos, lo que funciona bien para dos dimensiones pero generalmente nuestros conjuntos de datos son mucho más complicados.
- Construcción de índices (o reglas de paro). En este caso se utilizan índices para enfatizar la compactés intra-*cluster* y aislamiento inter-*cluster* considerando efectos tales como: el error cuadrático, propiedades geométricas o estadísticas de los datos, el número de patrones, la disimilaridad o similaridad, número de *clusters*.

Número de Clusters

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Optimización de alguna función de criterio bajo el marco del modelo de mezcla de probabilidades.
- En este caso se utiliza el algoritmo EM (usualmente), para encontrar el valor de "K" que maximice o minimize el criterio definido como óptimo.
 - Criterio de Información de Akaike (AIC).
 - Criterio de Inferencia Bayesiana.
- Otros métodos heurísticos basados en una variedad de técnicas y teorías.

X-means

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

Variante de K-means para determinar automáticamente el número de clusters

Algoritmo X-Means (rango de $K : [K_{min} \dots K_{max}]$)

- 1 Mejora parámetros (corre K-means)
- 2 Mejora estructura (ver abajo)
- 3 Si $K > K_{max}$ termina y regresa el modelo mejor evaluado, si no regresa a 1

Mejora Estructura

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Divide cada cluster en 2 (a una distancia proporcional a su tamaño a lo largo de un vector aleatorio)
- Corre un K-means local, con $K=2$
- Evalúa si la medida mejora (con 2 clusters) o no (cluster original)

Medida

$$BIC(M_j) = \hat{l}(D_j) - \frac{p_j}{2} \cdot \log R$$

$$\hat{l}(D_n) = -\frac{R_n}{2} \log(2\pi) - \frac{R_n \cdot M}{2} \log(\hat{\sigma}^2) - \frac{R_n - K}{2} + R_n \log R_n - R_n \log R$$

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{R - K} \sum_i (x_i - \mu_{(i)})^2$$

p_j = número de parámetros = $K - 1 + (M \cdot K) + 1$

$R = |D|$ y $R_j = |D_j|$

M = número de dimensiones

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

X-means

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

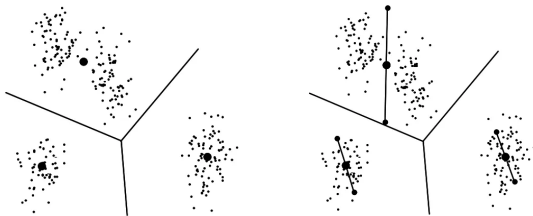
Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad



X-means

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

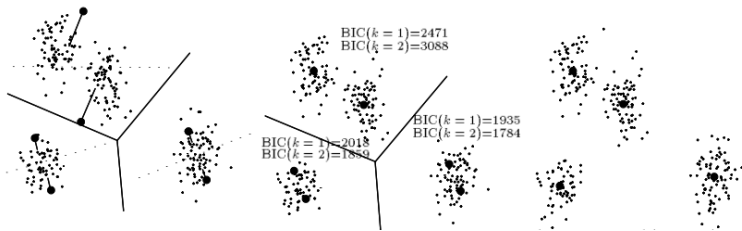
Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

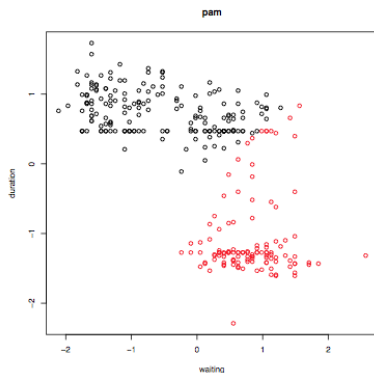
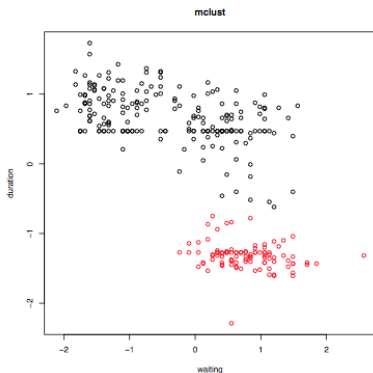
AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

Medidas de Calidad

- La evaluación de los *clusters* también es complicada
- ¿Cuál agrupación es mejor?



Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

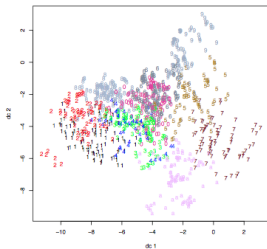
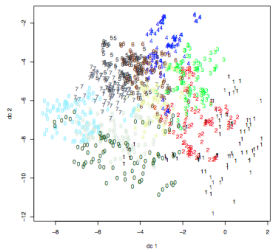
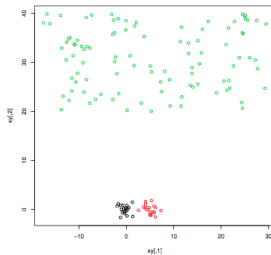
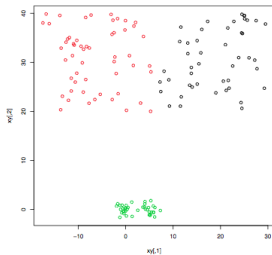
Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

¿Cuál agrupación es mejor?



Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

Medidas de Calidad

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

Existen dos clases:

- Evaluación interna: Entre los grupos generados
- Evaluación externa: Contra grupos conocidos

La evaluación final generalmente la realiza una persona

Índice Davies-Bouldin (interna)

$$DB = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \max_{j \neq i} \left(\frac{\sigma_i + \sigma_j}{d(c_i, c_j)} \right)$$

- n = número de *clusters*
- c_x = centroide del cluster x
- σ_x = distancia promedio de todos los elementos en el *cluster* x a su centroide c_x y $d(c_i, c_j)$ es la distancia entre centroides c_i y c_j .
- El algoritmo que produce el valor menor entre todos los *clusters* es el mejor

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

Índice Dunn (interna)

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Busca identificar *clusters* densos y claramente separados.

$$D = \frac{\min_{1 \leq i < j \leq n} d(i, j)}{\max_{1 \leq k \leq n} d'(k)}$$

- $d(i, j)$ = distancia entre *clusters* i y j (inter-clusters), que puede ser la distancia entre centroides.
- $d'(k)$ = distancia intra-cluster de cluster k . Puede ser la distancia máxima entre pares de elementos del cluster.
- Grupos con valores mayores del índice son mejores

Coeficiente de Silueta (interna)

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- El coeficiente de silueta (*silhouette*) contrasta la distancia promedio de elementos en el mismo *cluster* con la distancia promedio de elementos en otros *clusters*
- Elementos con alto valor se consideran bien agrupados, mientras que objetos con medidas bajas se consideran *outliers*
- Funciona bien para k-means

Coeficiente de Silueta (interna)

$$SC = \max_k \bar{s}(k)$$

$$s(i) = \frac{b(i) - a(i)}{\max\{a(i), b(i)\}}$$

Distancia entre i contra todos los elementos de su mismo cluster:

$$a(i) = \frac{1}{|C_i| - 1} \sum_{j \in C_i, i \neq j} d(i, j)$$

Distancia mínima de i a todos los elementos de otros clusters:

$$b(i) = \min_{k \neq i} \frac{1}{|C_k|} \sum_{j \in C_k} d(i, j)$$

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

Coeficiente de Silueta (interna)

$$SC = \max_k \bar{s}(k)$$

$$s(i) = \begin{cases} 1 - a(i)/b(i) & \text{si } a(i) < b(i) \\ 0 & \text{si } a(i) = b(i) \\ b(i)/a(i) - 1 & \text{si } a(i) > b(i) \end{cases}$$

Distancia entre i contra todos los elementos de su mismo cluster:

$$a(i) = \frac{1}{|C_i| - 1} \sum_{j \in C_i, i \neq j} d(i, j)$$

Distancia mínima de i a todos los elementos de otros clusters:

$$b(i) = \min_{k \neq i} \frac{1}{|C_k|} \sum_{j \in C_k} d(i, j)$$

Outline

Introducción

Medidas de
similaridad

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?Medidas de
Calidad

Purity (externa)

- La pureza mide en qué medida los *clusters* contienen una sola clase

$$\frac{1}{N} \sum_{m \in M} \max_{d \in D} |m \cap d|$$

- M = clusters
- D = clases
- N = datos

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

Índice Rand (externa)

- Mide que tan parecidos son los *clusters* a las clases

$$RI = \frac{TP + TN}{TP + FP + TN + FN}$$

- TP = true positives
- FP = false positives
- TN = true negatives
- FN = false negatives

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

F-Measure (externa)

- Puede balancear los falsos negativos usando precisión (P) y recuerdo (R)

$$F_{\beta} = \frac{(\beta^2 + 1) \cdot P \cdot R}{\beta^2 \cdot P + R}$$

$$P = \frac{TP}{TP + FP}$$

$$R = \frac{TP}{TP + FN}$$

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

Índice de Jaccard (externo)

Outline

Introducción

Medidas de
similaridad

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

- Mide la similaridad entre dos grupos.
- Los elementos comunes entre los dos grupos entre los elementos de los dos grupos

$$J(A, B) = \frac{|A \cap B|}{|A \cup B|} = \frac{TP}{TP + FP + FN}$$

Otros (externos)

Outline

Introducción

Medidas de
similitud

Algoritmos

k-Means

COBWEB

Clustering basado en
probabilidades

Algoritmo EM

Extensiones

AutoClass

DBSCAN

¿Cuántos
Clusters?

Medidas de
Calidad

Índice Dice:

$$D(A, B) = \frac{2TP}{2TP + FP + FN}$$

Índice Fowlkes-Mallows: La media geométrica de precisión y recuerdo (también conocida como *G – measure* (F-Measure es la media armónica))

$$FM = \sqrt{\frac{TP}{TP + FP} \cdot \frac{TP}{TP + FN}}$$