Análisis de Conglomerados

José A. Perusquía Cortés

Análisis Multivariado Semestre 2024 - I

- Clustering es el procesos de **agrupar objetos similares** buscando patrones en los datos

- Técnica de aprendizaje no supervisado, i.e., a priori no necesitamos:
  - Conocer el número de clusters (en algunas ocasiones se puede conocer)
  - Un grupo de observaciones etiquetadas (training data)

- Dos tipos de métodos
  - Si no se conoce el número de clusters se tienen métodos jerárquicos aglomerativos y divisivos
  - Si se conoce el número de clusters se crean particiones (cada objeto pertenece a un cluster) o métodos "fuzzy" (cada objeto puede pertenecer a varios clusters)

¿Cómo se define un cluster?

- Necesitamos definir una noción de cercanía
  - Matriz de distancias
  - Matriz de disimilitudes
  - Matriz de similitudes

- En la práctica es común utilizar
  - Distancia euclidiana
  - Distancia Manhattan
  - Distancia Mahalanobis

Métodos jerárquicos aglomerativos (AGNES)

- **¿Qué necesitamos?**

  - Una matriz de proximidades (e.g. distancias, disimilitudes)
  - Medida de distancia entre clusters

- **Idea**

  Crear un árbol de clusters empezando con n grupos de una sola observación y e irlos uniendo por cercanía

- **¿Cómo medir la distancia entre clusters?**

- También conocido como **single linkage method** (Sneath, 1957; Sokal y Sneath, 1963; Johnson, 1967)

- Dados dos clusters C_i y C_j la distancia entre ellos es la disimilitud más pequeña entre uno sus miembros, i.e.

$$d\left(C_i, C_j\right) = \min\left\{d_{rs} : r \in C_i, s \in C_j\right\}$$

- **Algoritmo**
  - Buscar la disimilitud más pequeña entre clusters
  - Recalcular la matriz de disimilitudes

Vecino más lejano

- También conocido como **complete linkage method** (Sokal y Sneath, 1963; McQuitty, 1964)

- Dados dos clusters C_i y C_j la distancia entre ellos es la disimilitud más grande entre uno sus miembros, i.e.

$$d\left(C_i, C_j\right) = \max\left\{d_{rs} : r \in C_i, s \in C_j\right\}$$

- **Algoritmo**
  - Buscar la disimilitud más pequeña entre clusters
  - Recalcular la matriz de disimilitudes

- Dados dos clusters C_i y C_j se define la distancia entre ellos como la "distancia" entre sus centroides (Sokal y Michener, 1958; King, 1966, 1967)

$$\bar{\mathbf{X}}_i = \sum_{n \in C_i} \frac{\mathbf{X}_n}{n_i} \qquad \bar{\mathbf{X}}_j = \sum_{m \in C_j} \frac{\mathbf{X}_n}{n_j} \qquad \rightarrow \qquad d\left(C_i, C_j\right) = \delta\left(\bar{\mathbf{X}}_i, \bar{\mathbf{X}}_j\right)$$

- **Algoritmo**
  - Buscar la disimilitud más pequeña entre clusters
  - Recalcular el centroide

$$\bar{\mathbf{X}}_{Ci \cup C_j} = \frac{n_i \bar{\mathbf{X}}_i + n_j \bar{\mathbf{X}}_j}{n_i + n_j}$$

- También conocido como **incremental sum of squares method** (Wishart, 1969a) basado en la idea de Ward (1963)

- **Algoritmo**
  - Unir los clusters que minimicen

$$I_{C_iC_j} = \sum_{k \in C_i \cup C_j} || \mathbf{X}_k - \bar{\mathbf{X}} ||^2 - \left[\sum_{n \in C_i} || \mathbf{X}_n - \bar{\mathbf{X}}_i ||^2 + \sum_{m \in C_j} || \mathbf{X}_m - \bar{\mathbf{X}}_j ||^2 \right] = \frac{n_i n_j}{n_i + n_j} || \bar{\mathbf{X}}_i - \bar{\mathbf{X}}_j ||^2$$

  - En particular para dos observaciones r, s

$$I_{rs} = \frac{1}{2} || \mathbf{X}_r - \mathbf{X}_s ||^2 = \frac{1}{2} d_{rs}^2$$

- También conocido como **group average method** (Sokal y Michener, 1958; McQuitty, 1964; Lance y Williams, 1966)

- Dados dos clusters C_i y C_j la distancia entre ellos se define como el promedio de las distancias de sus miembros

$$d\left(C_i, C_j\right) = \frac{1}{n_i n_j} \sum_{n \in C_i} \sum_{m \in C_j} d_{nm}$$

- También conocido como **Lance and Williams Flexible Method** (Lance y Williams, 1967a)

- Dados tres clusters C_i , C_j y C_k definimos la distancia de C_k y $C_i \cup C_j$ como:

$$d\left(C_k, C_i \cup C_j\right) = \alpha_1 d(C_k, C_i) + \alpha_2 d(C_k, C_j) + \beta d(C_i, C_j) + \gamma \mid d(C_k, C_i) - d(C_k, C_j) \mid$$

- **Casos particulares:** vecino más cercano, vecino más lejano, centroide, Ward y promedio

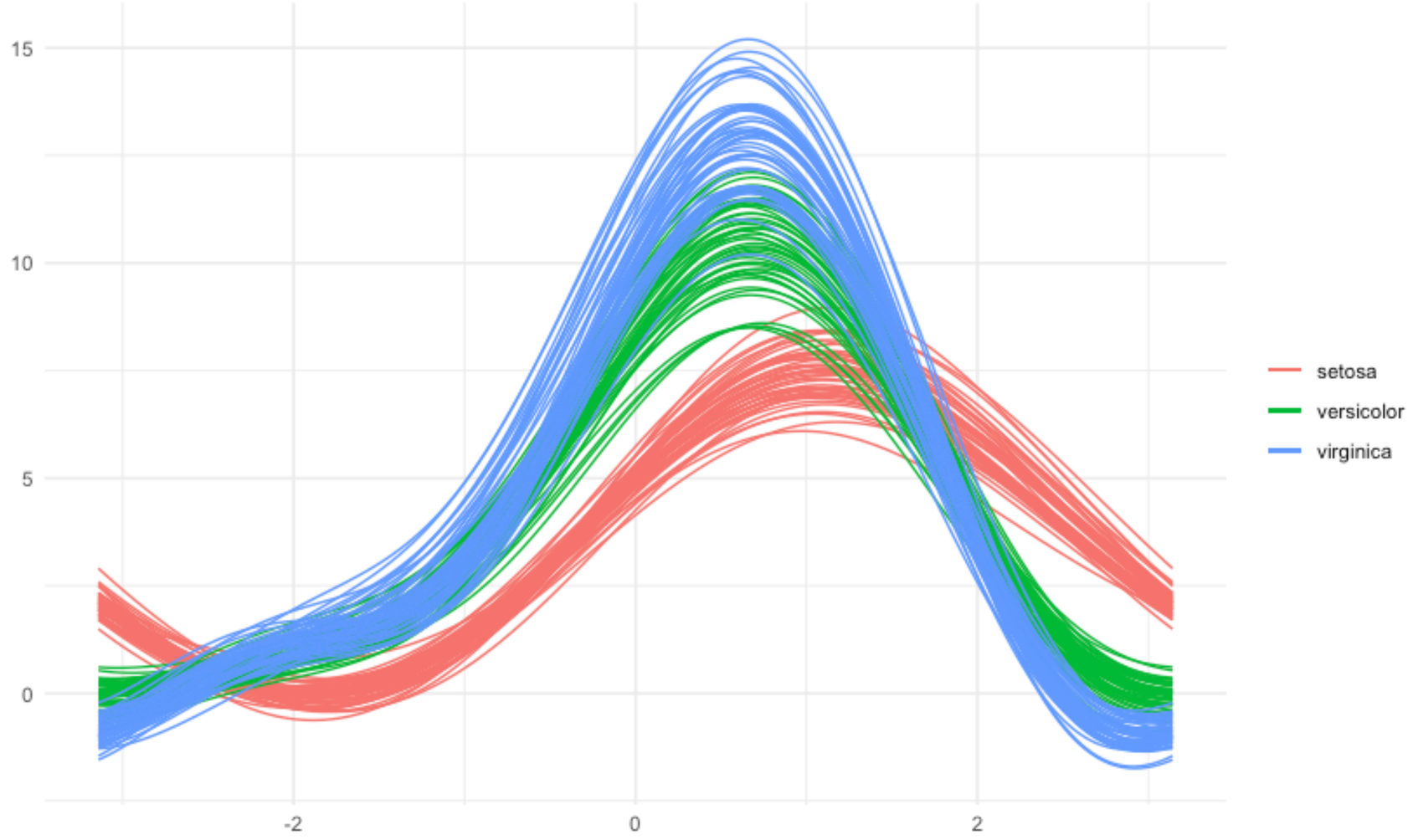
- Lance y Williams sugieren $\alpha_1 = \alpha_2$, $\beta < 1$, $\alpha_1 + \alpha_2 + \beta = 1, \gamma = 0$

- En **R**: librería cluster

- Para un clustering aglomerativo se usa la función agnes y recibe como parámetros:

  - x : datos (matriz o data frame) o matriz de disimilitudes
  - diss : booleano indicando si x es una matriz de disimilitudes
  - metric : la métrica para calcular las disimilitudes de x
  - stand : booleano indicando si se deben estandarizar los datos
  - method : la liga a utilizar par el clustering

Ejemplo: Iris



Ejemplo: Iris

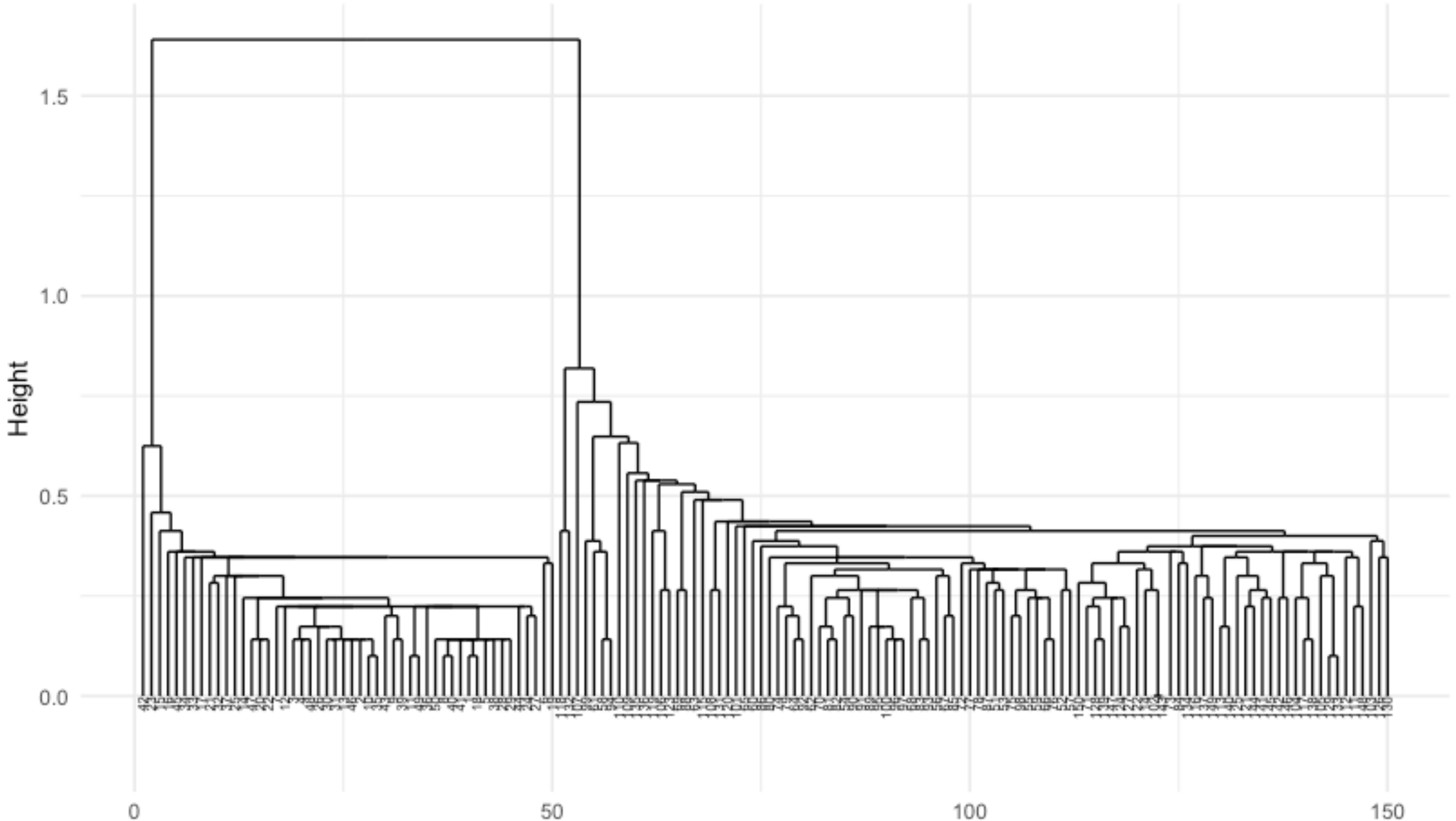
- Estos métodos son para datos de los cuales no se sabe el grupo

- Iris tiene etiquetas y **solo** lo utilizamos para ejemplificar los métodos y ver como algunas ligas pueden tener un mejor performance

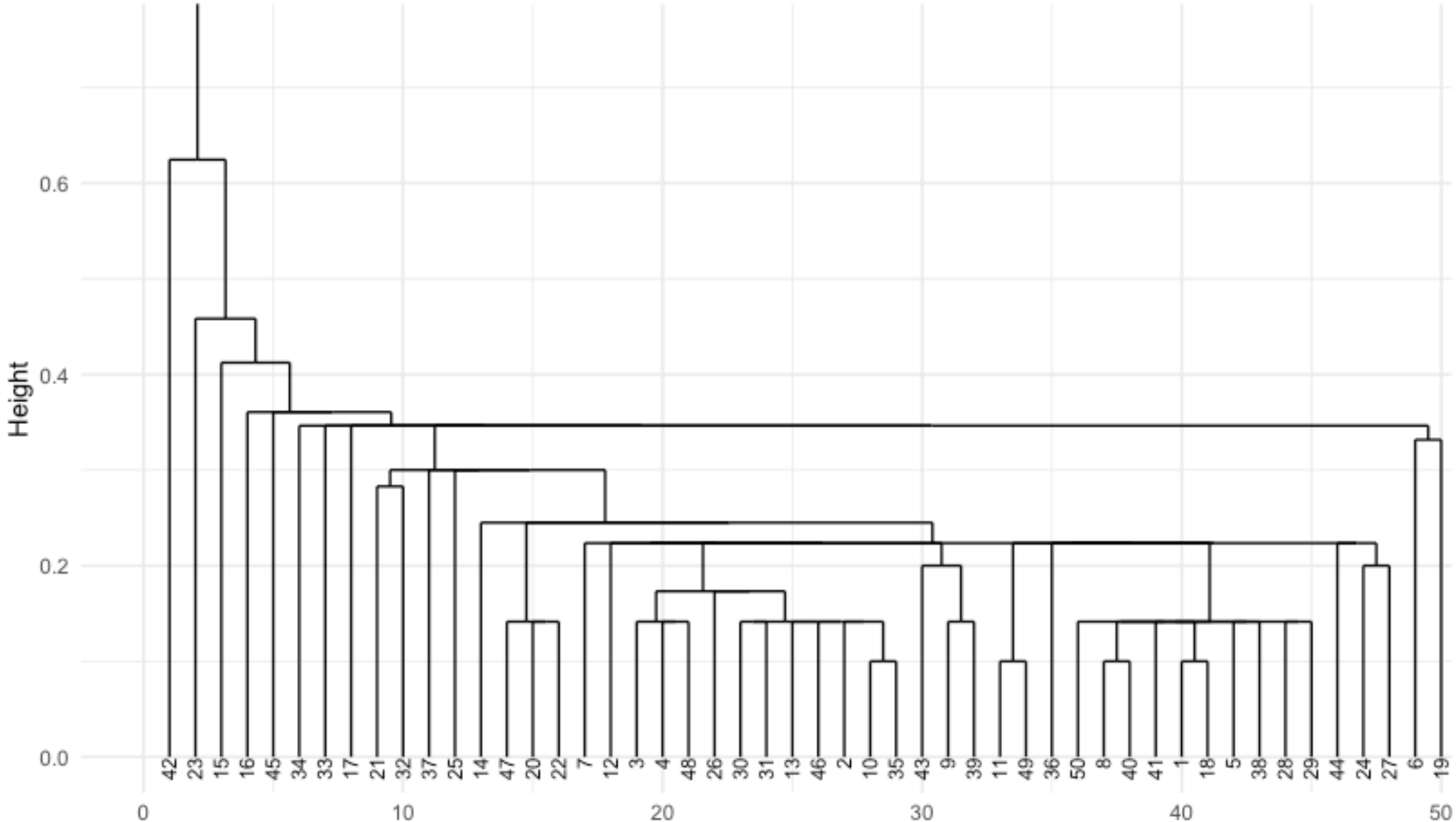
- Si en la vida real ya conocen los grupos no es necesario hacer clustering a menos de que existan dudas en los grupos iniciales

Ejemplo: Iris

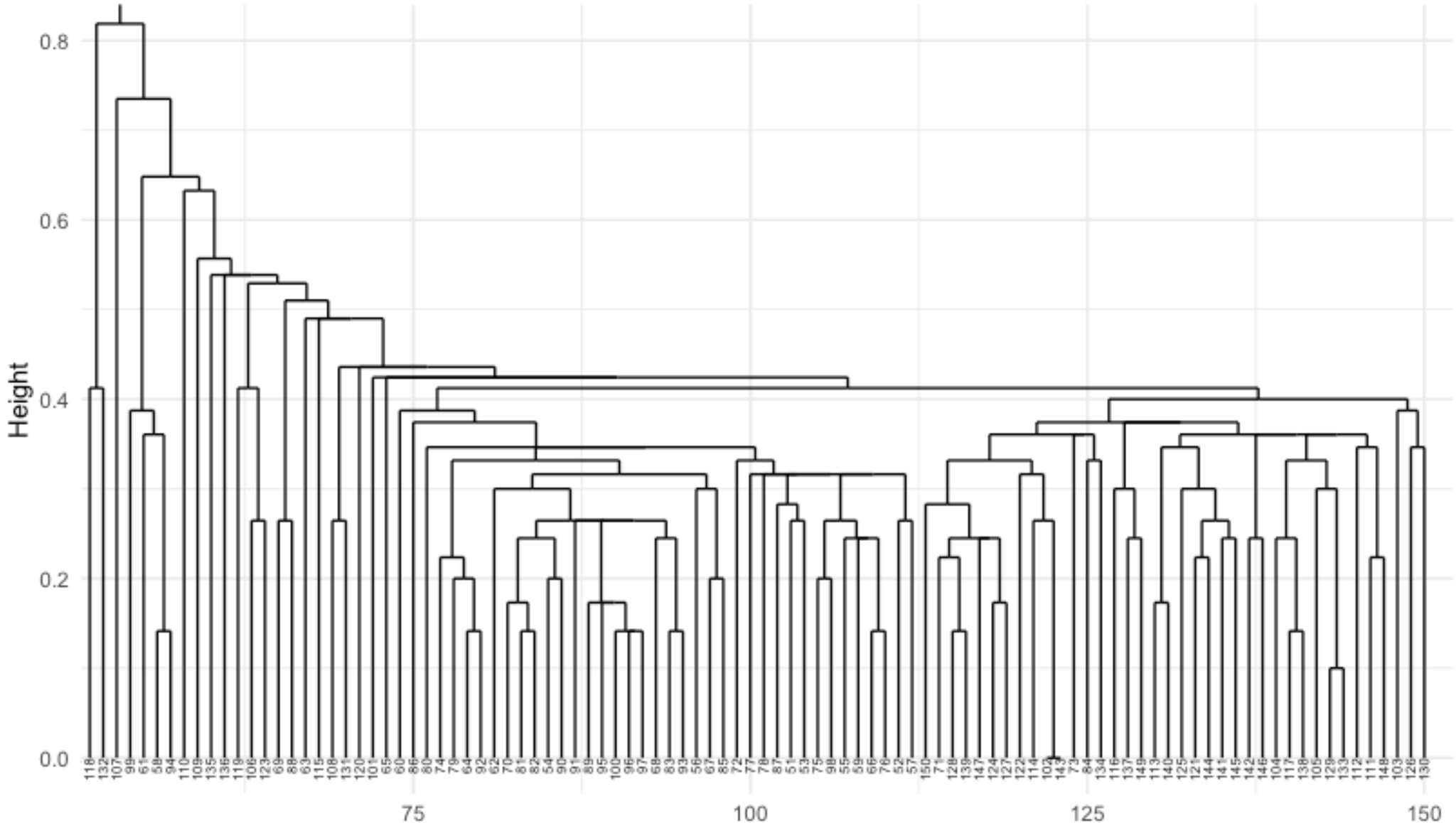
- Vecino más cercano



- Primer grupo

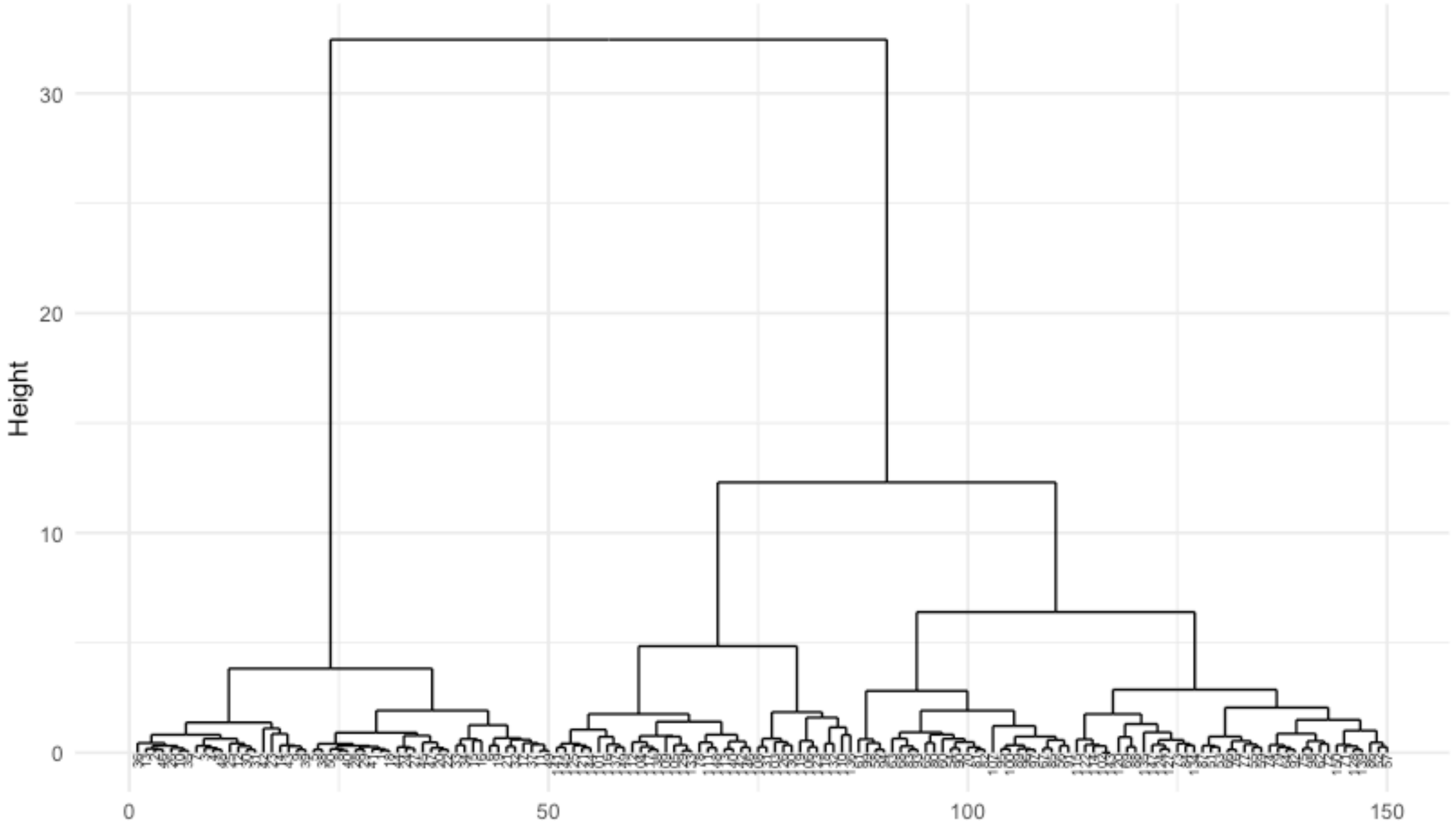


- Segundo grupo

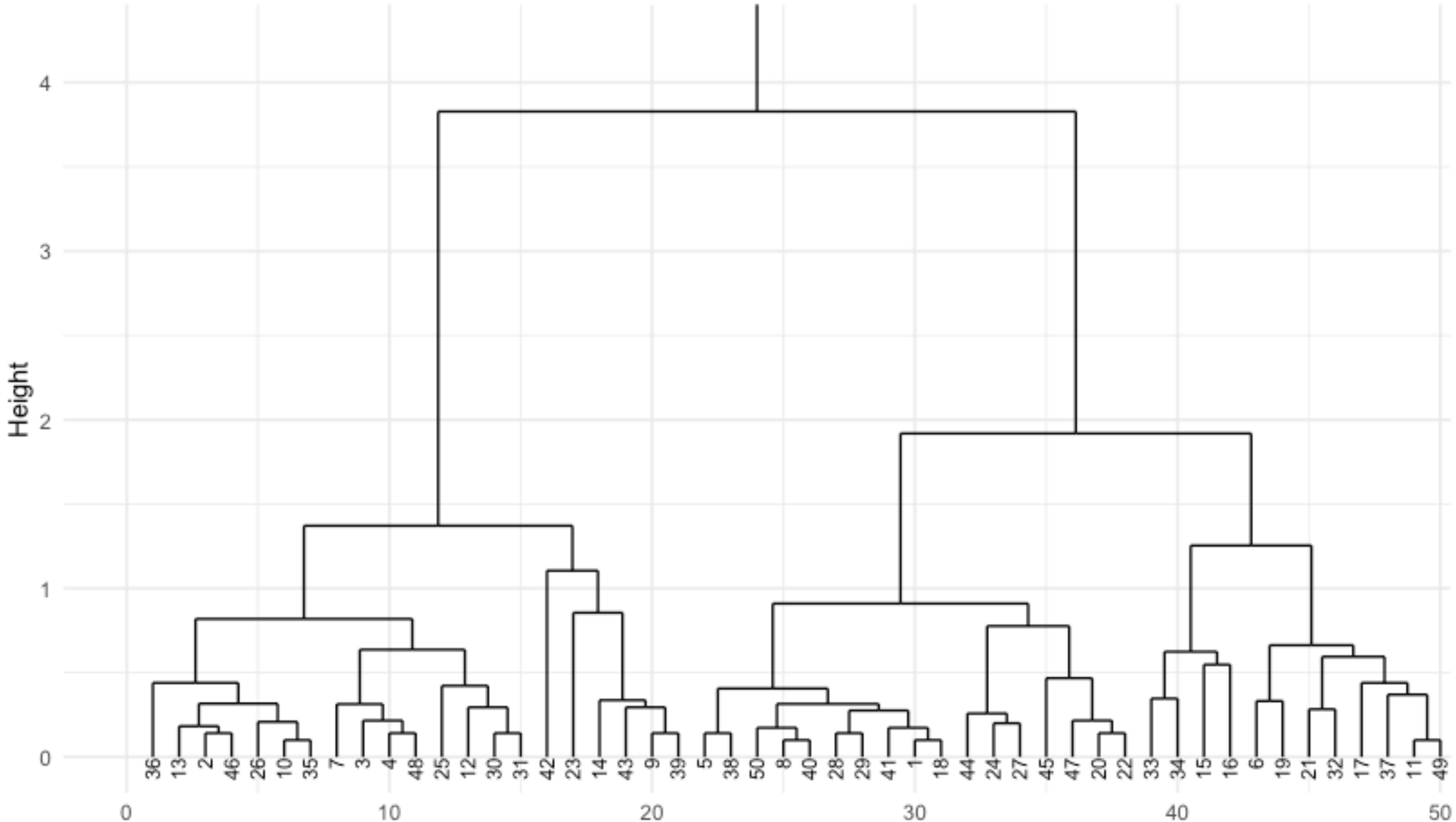


Ejemplo: Iris

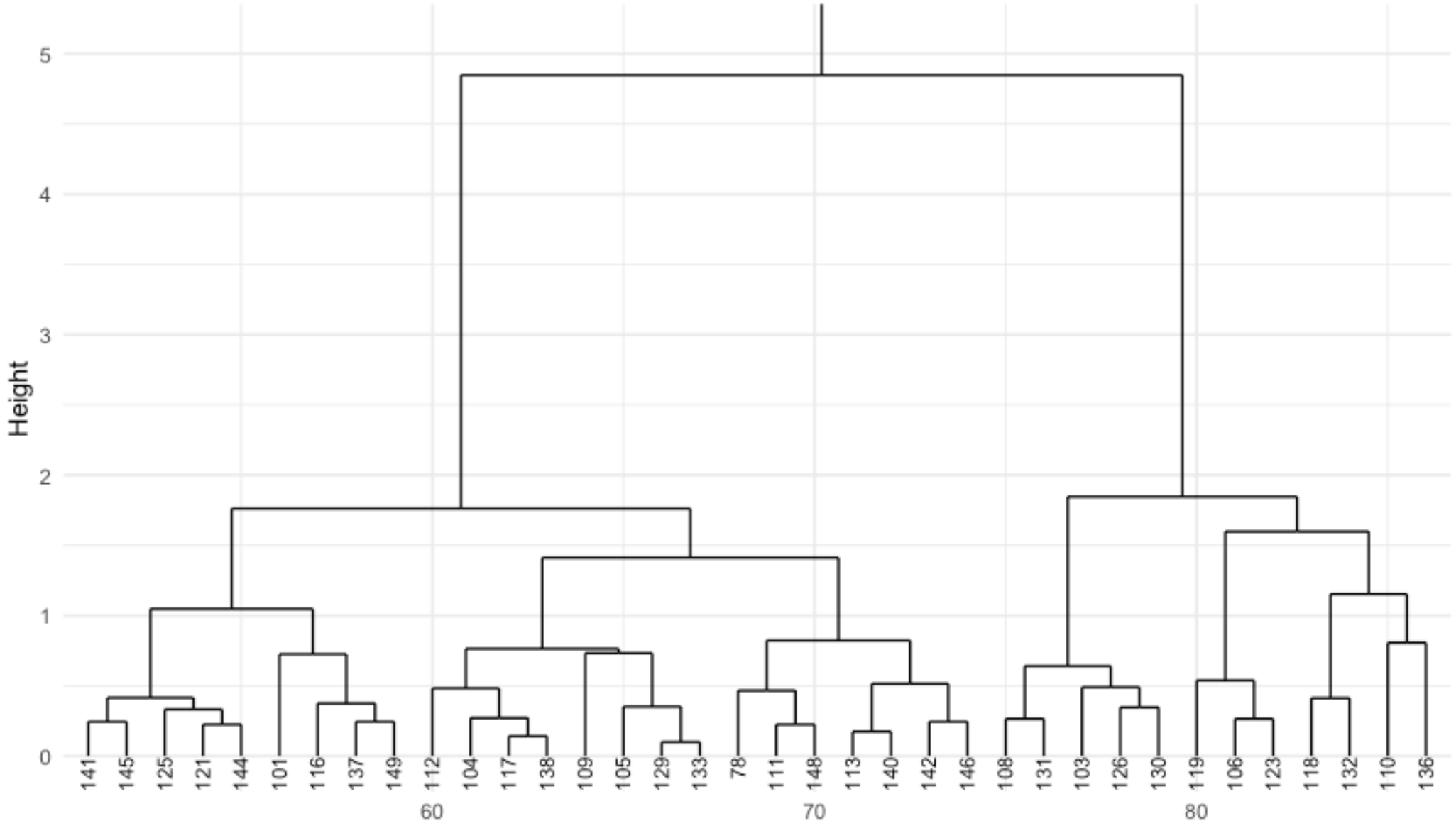
- Ward



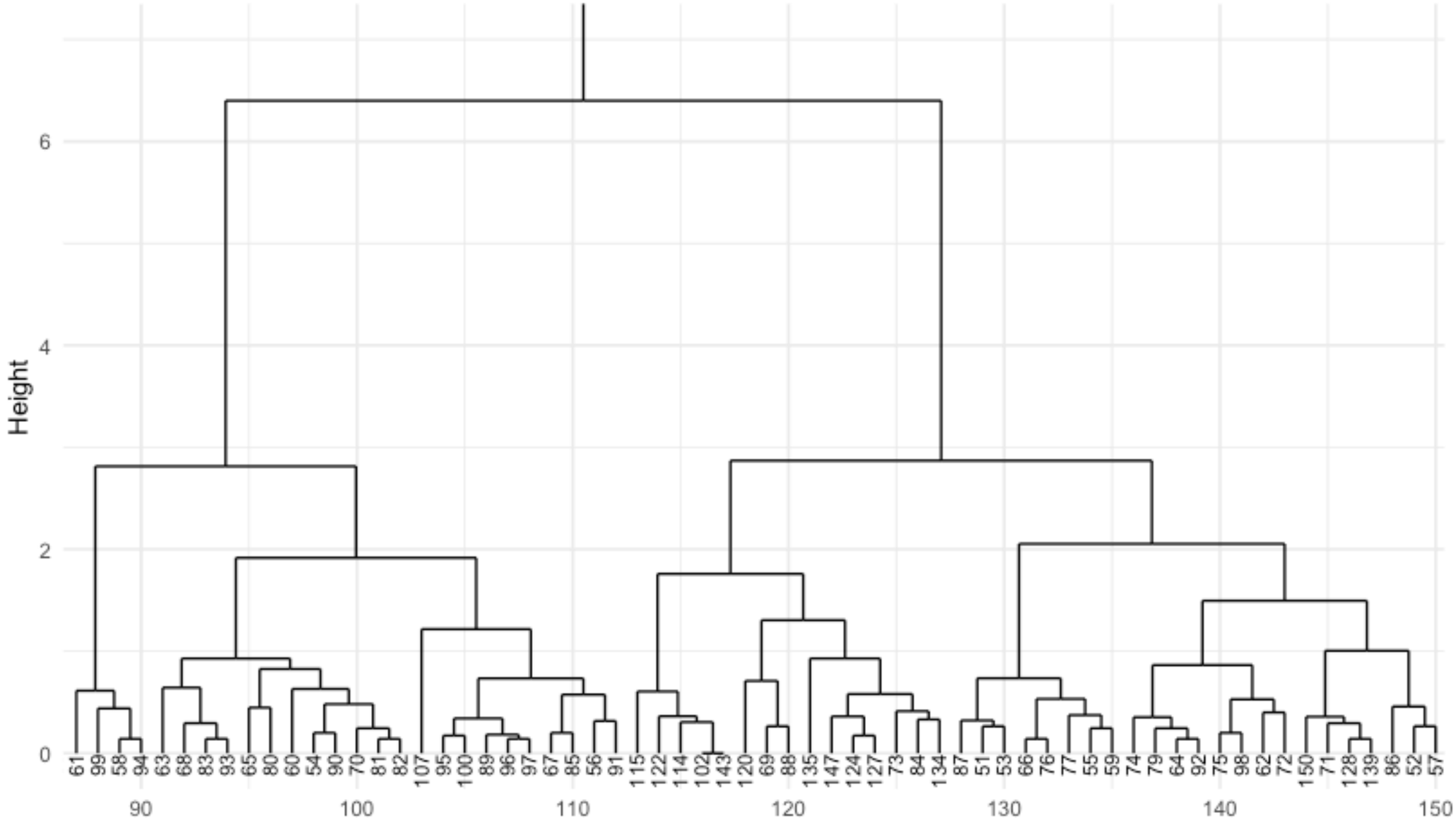
- Primer grupo



- Segundo grupo



- Tercer grupo



- Medida de similitud de un objeto y el cluster al que pertenece comparado con el resto (Rousseeuw, 1987).

- Construcción para el i-ésimo objeto en el cluster A:
  - Obtener la disimilitud promedio de su cluster $a(i)$
  - Obtener el mínimo de las disimilitudes promedio de los otros clusters, i.e., $b(i) = \min_{C \neq A} \{d(i, C)\}$ (dicho cluster es la segunda mejor opción)
  - Definimos la silhouette como:

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

Observaciones

- $-1 \leq s(i) \leq 1$ por lo que:
  - Si $s(i) > 0$ el objeto está bien clasificado
  - Si $s(i) = 0$ el objeto está a la misma distancia de A y de B
  - Si $s(i) < 0$ el objeto está mal clasificado

- Podemos crear una gráfica poniendo los silhouettes ordenados por cada cluster, en **R** usar la función silhouette()

- Proporciona una forma de medir que tanta estructura hemos descubierto usando el promedio de las silhouettes $\bar{s}(k)$ y una posible forma de elegir k con el silhouette coefficient $SC = \max_k \{\bar{s}(k)\}$

- (Posible interpretación) Kaufman (1990) proporciona la siguiente tabla basado en su experiencia:

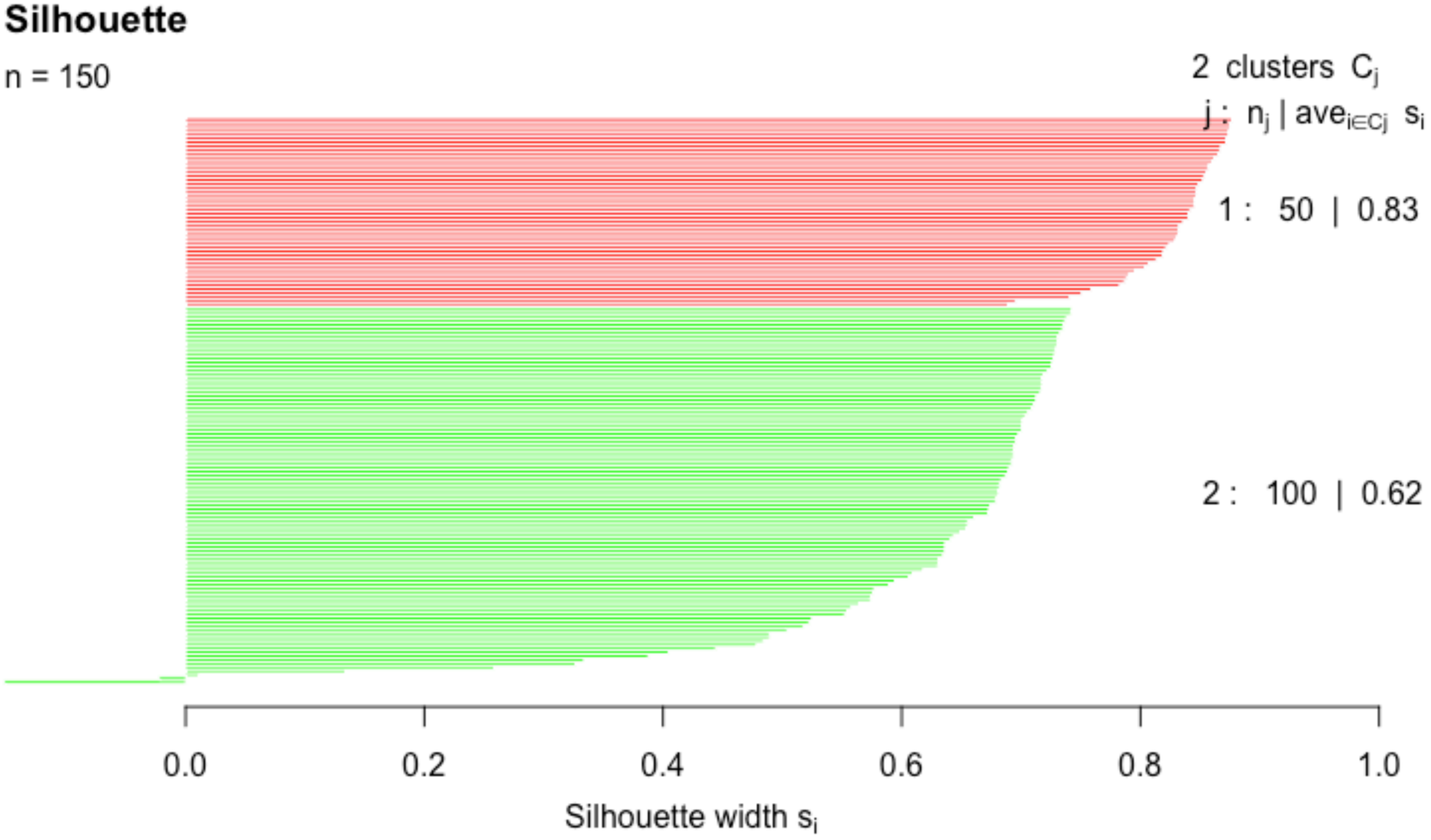
  - Si $SC \in (.70,1]$ se ha encontrado una fuerte estructura de clustering

  - Si $SC \in (.5,.7]$ se ha encontrado una estructura razonable

  - Si $SC \in (.25,.5]$ la estructura es débil y se debe considerar otro método

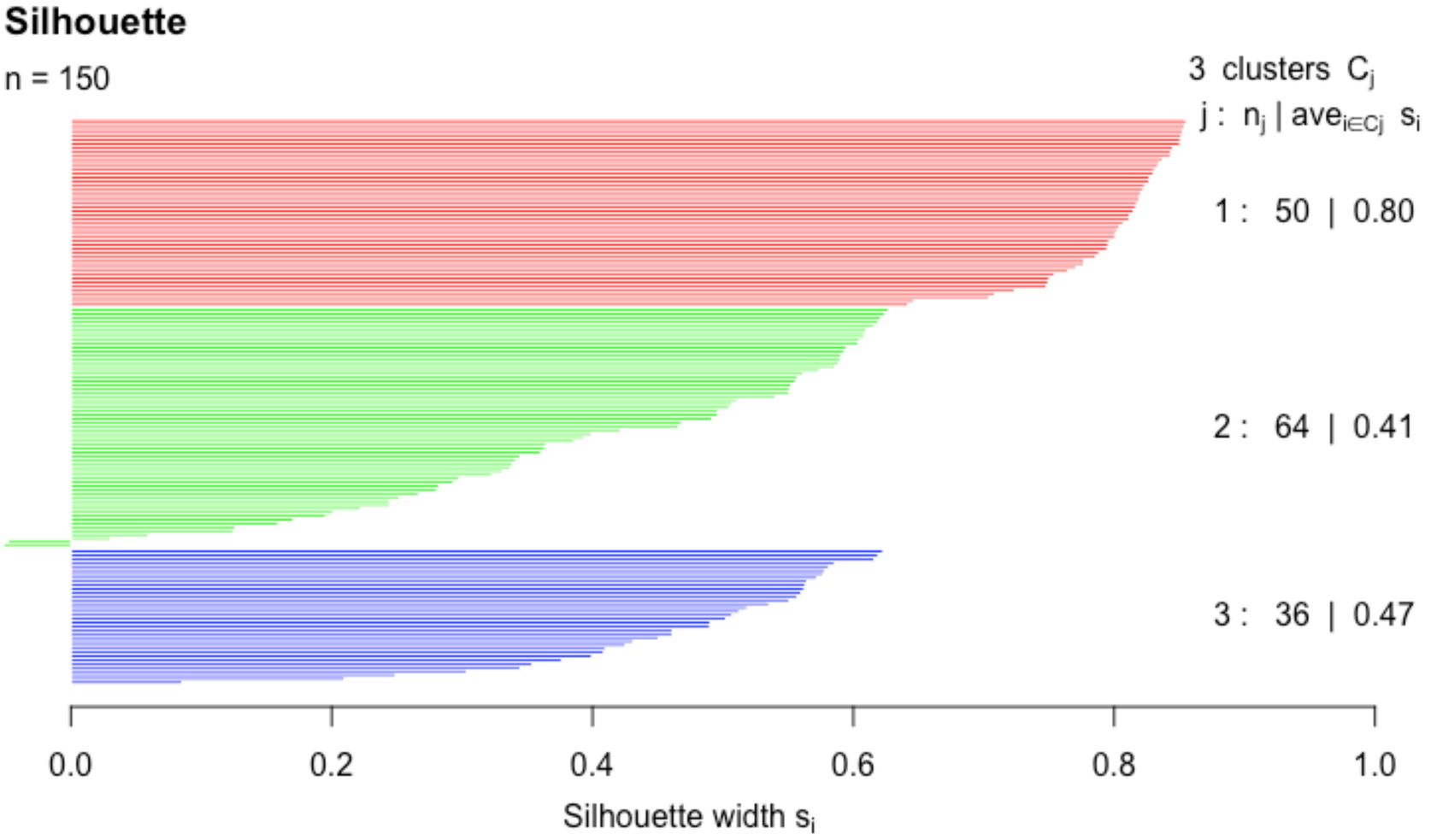
  - Si $SC \leq .25$ no se encontró una estructura sustancial

Ejemplo: Iris + agnes (single)



Obs.	Cluster	Alternativa	Silhouette
58	2	1	-0.02211145
99	2	1	-0.15177853

Ejemplo: Iris + agnes (ward)



Obs.	Cluster	Alternativa	Silhouette
53	2	3	-0.05092527
135	2	3	-0.04842929

Métodos jerárquicos divisivos (DIANA)

- **Idea**

  Empezar con un cluster de tamaño n e irlo dividiendo.

- **Ventajas** (Williams y Lance, 1977)
  - El proceso empieza con el contenido máximo de información.
  - La división no tiene que continuar hasta tener n clusters.

- **Restricción**
  - $2^{n-1} - 1$ formas de separar n objetos en 2 grupos … imposible analizar todos los casos

- **Idea**

  La división se basa en una sola variable

- **Problemas**
  - Sensible a outliers
  - Difícil de adaptar con una mezcla de variables cuantitativas y cualitativas
  - Errores frecuentes de clasificación

- Si todas las variables son dicotómicas:
  - Dividimos las observaciones en dos grupos dependiendo si tienen el atributo A

- **¿Cómo elegimos a A?**
  - Maximice alguna medida de distancia entre dos grupos e.g.: estadístico χ^2

Var. r\ Var. s	Presente	Ausente	Total
Presente	a	b	a+b
Ausente	c	d	c+d
Total	a+c	b+d	a+b+c+

$$\chi^2_{rs} = \frac{n(ad-bc)^2}{(a+b)(a+c)(b+d)(c+d)}$$

Elegimos A como la que maximice: $\sum_{j:j\neq A} \chi^2_{jA}$

- Para variables cuantitativas:
  - Dividir de tal forma que se minimice la suma de cuadrados dentro del grupo (within-group)

    o maximizar la suma de cuadrados entre grupos (between-group)

$$B = n_1\left(\bar{x}_1 - \bar{x}\right)^2 + n_2\left(\bar{x}_1 - \bar{x}\right)^2 = n_1\bar{x}_1^2 + n_2\bar{x}_2^2 - n\bar{x}^2$$

- Para no considerar todas las posibles divisiones se sugiere:
  - Ordenar los datos y hacer la división en la r donde se maximice

$$R = r\bar{x}_1^2 + (n-r)\bar{x}_2^2$$

- **Objetivo**

  La división se basa elegir en cada paso a la observación más disimilar en promedio

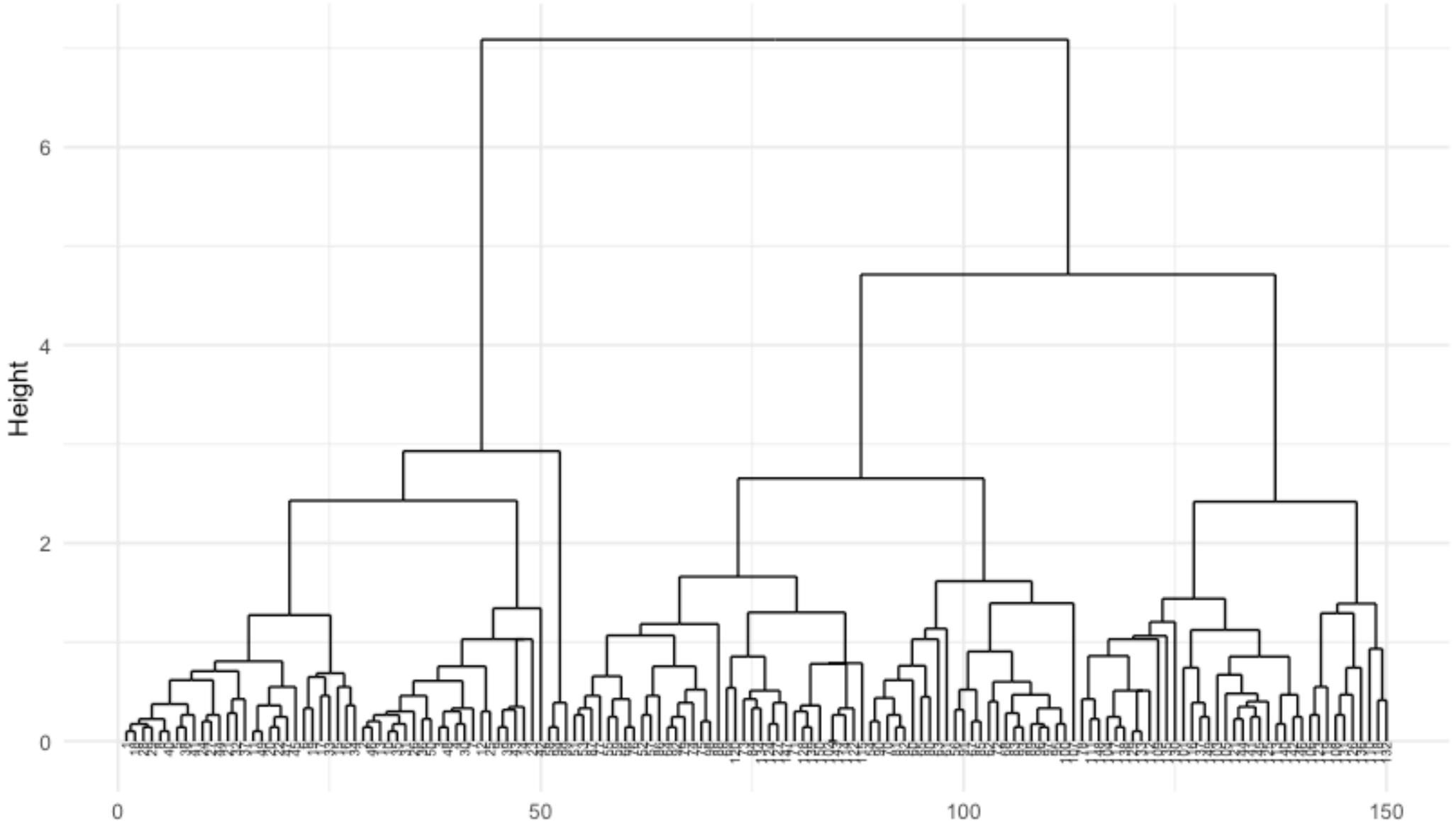
- **Algoritmo**
  - Seleccionar el cluster más grande
  - Buscar la observación más disimilar en promedio
  - Empezar un nuevo grupo con esta observación
  - Reagrupar las observaciones dependiendo su disimilitud entre los miembros del grupo antiguo y el nuevo

- En **R**: librería cluster

- Para un clustering aglomerativo se usa la función diana y recibe como parámetros:

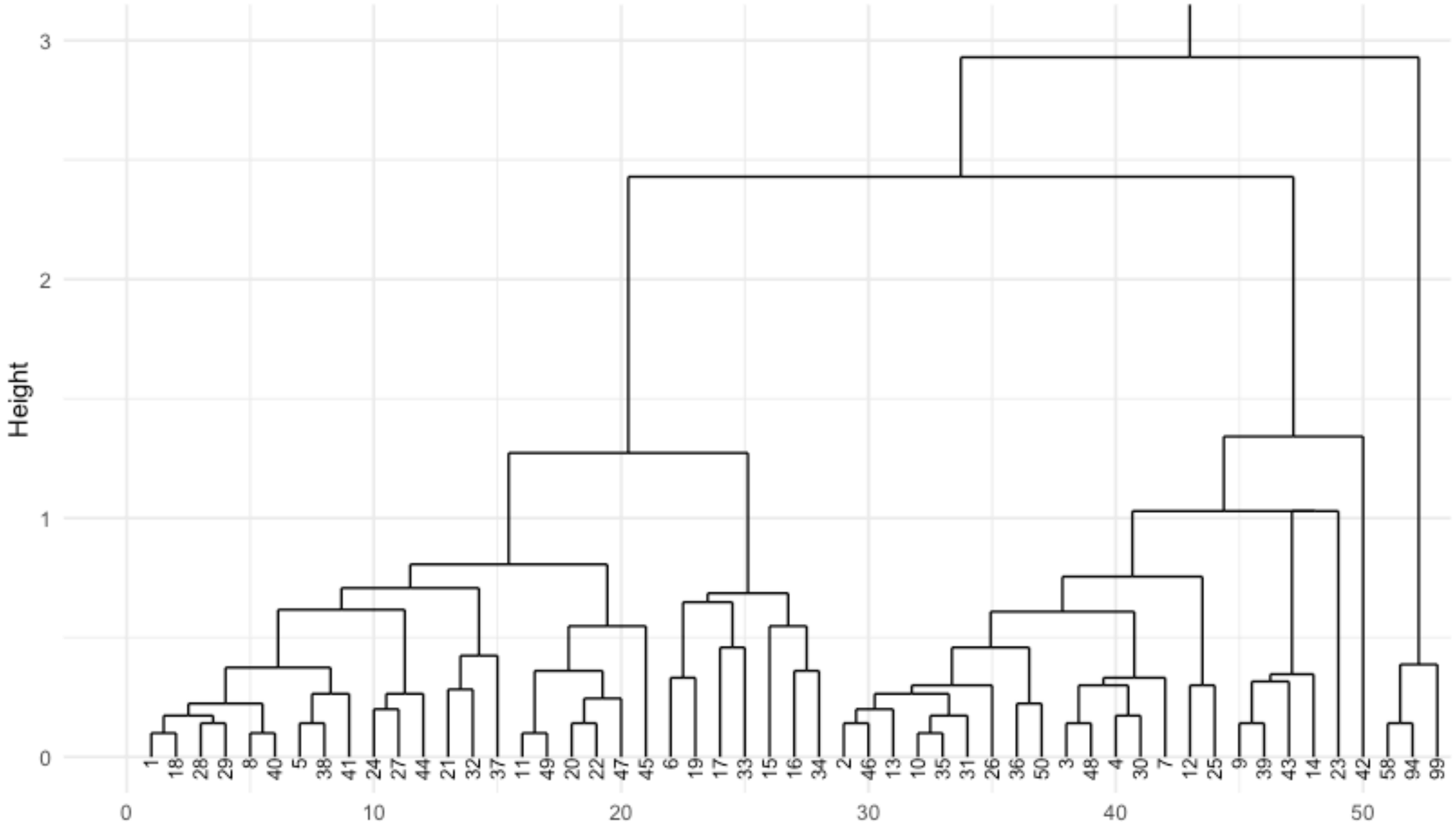
  - x: datos (matriz o data frame) o matriz de disimilitudes
  - diss: booleano indicando si x es una matriz de disimilitudes
  - metric: la métrica para calcular las disimilitudes de x
  - stand: booleano indicando si se deben estandarizar los datos
  - stop.at.k: el valor en el cual se debe detener la división

Ejemplo: Iris

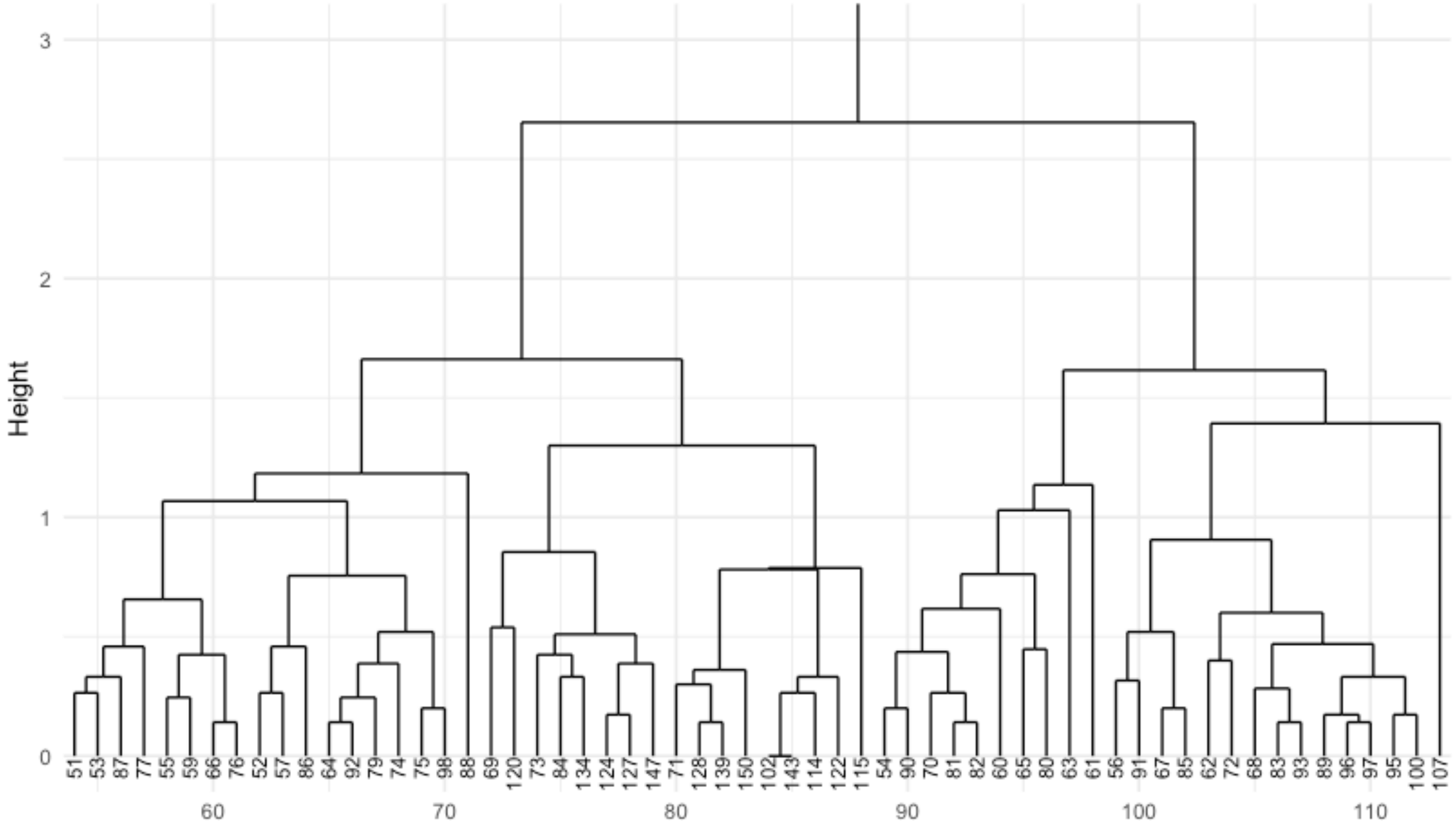


Ejemplo: Iris

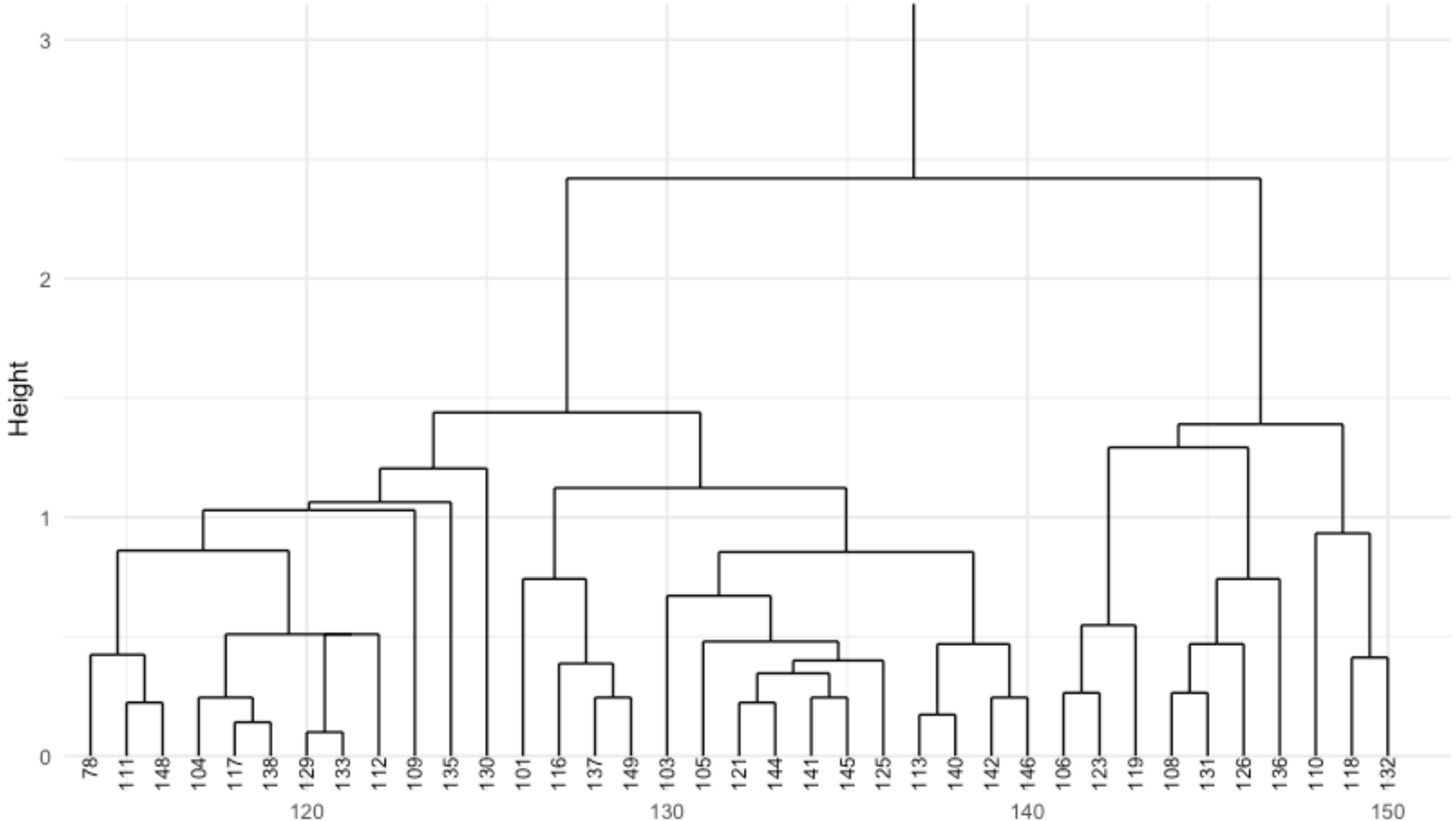
- Primer grupo



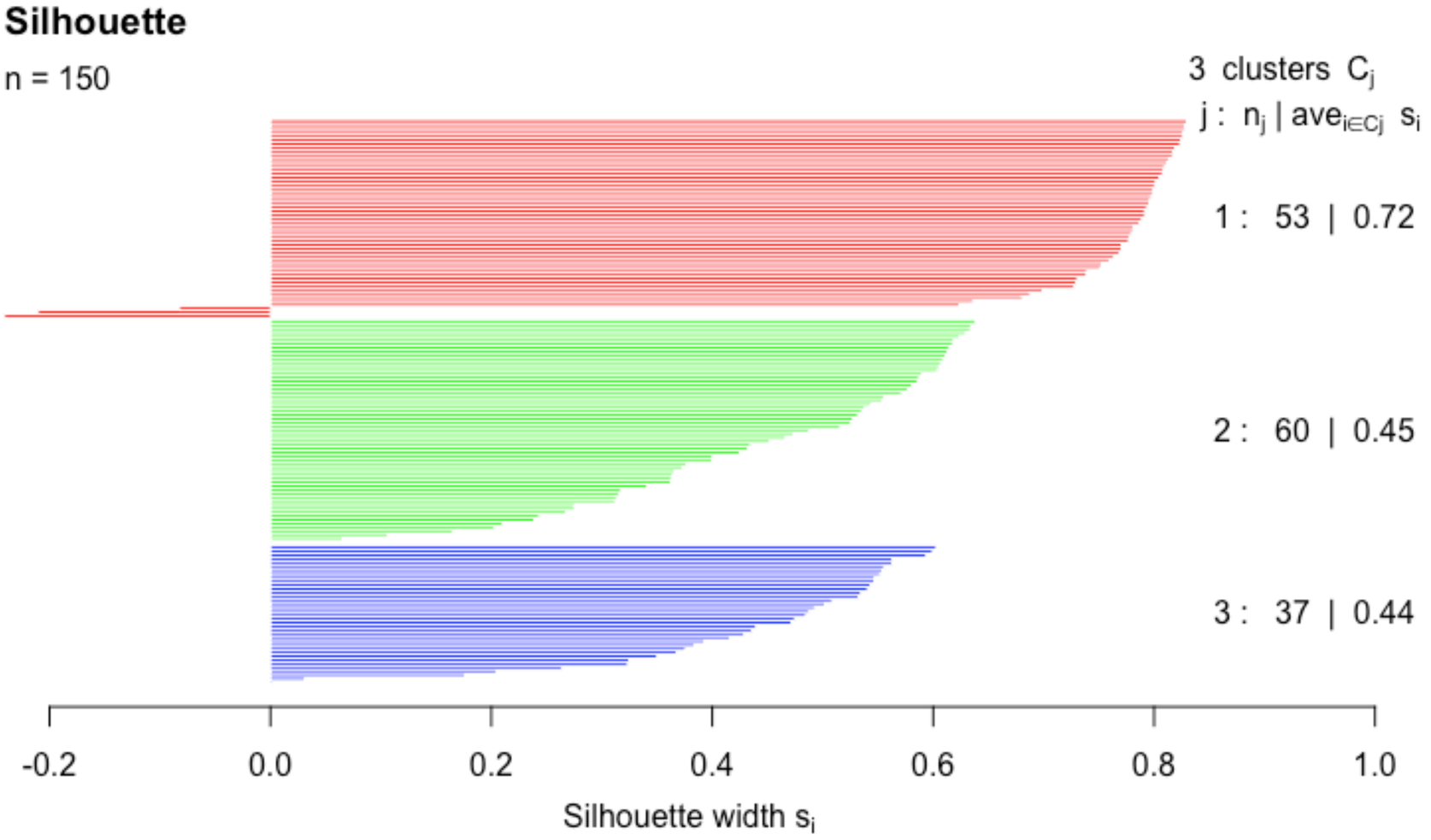
- Segundo grupo



- Tercer grupo



Ejemplo: Iris + diana



Obs.	Cluster	Alternativa	Silhouette
58	1	2	-0.21035377
94	1	2	-0.24078366
99	1	2	-0.082634985

Métodos de particiones

¿De qué va?

- Dado un número de clusters k se busca agrupar las n observaciones en estos clusters optimizando algún criterio.

- **Dificultad**

  El número de formas de separar n objetos en k grupos está dado por el número de Sterling del segundo tipo:

$$S(n,k) = \left\{ \begin{matrix} n \\ k \end{matrix} \right\}$$

- Por ejemplo: $S(16,8) = 2{,}141{,}764{,}053$ (Imposible considerar todas las particiones)

¿ Cómo escoger k ?

- Usar método aglomerativo (no es ideal)
- Usar algún modelo que permita reasignar las observaciones

- **Algoritmo**

1. Seleccionar k observaciones como los centroides de los clusters
2. Asignar el resto de las observaciones al cluster más cercano
3. Actualizar el centroide a cada paso (e.g. k-means) o hasta el final
4. Buscar objetos mal asignados y reasignar
5. Repetir hasta optimizar el criterio

- Varios criterios han sido propuestos basados en la identidad

$$\mathbf{T} = \mathbf{W} + \mathbf{B} = \sum_{i=1}^{n} \left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}\right) \left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}\right)^T$$

- Donde:
  - $\mathbf{W}$ es la matriz de variación dentro del cluster (within-cluster).
  - $\mathbf{B}$ es la matriz de variación entre clusters (between-cluster).

- Se busca minimizar (alguna función) de $\mathbf{W}$ o maximizar (alguna función) $\mathbf{B}$

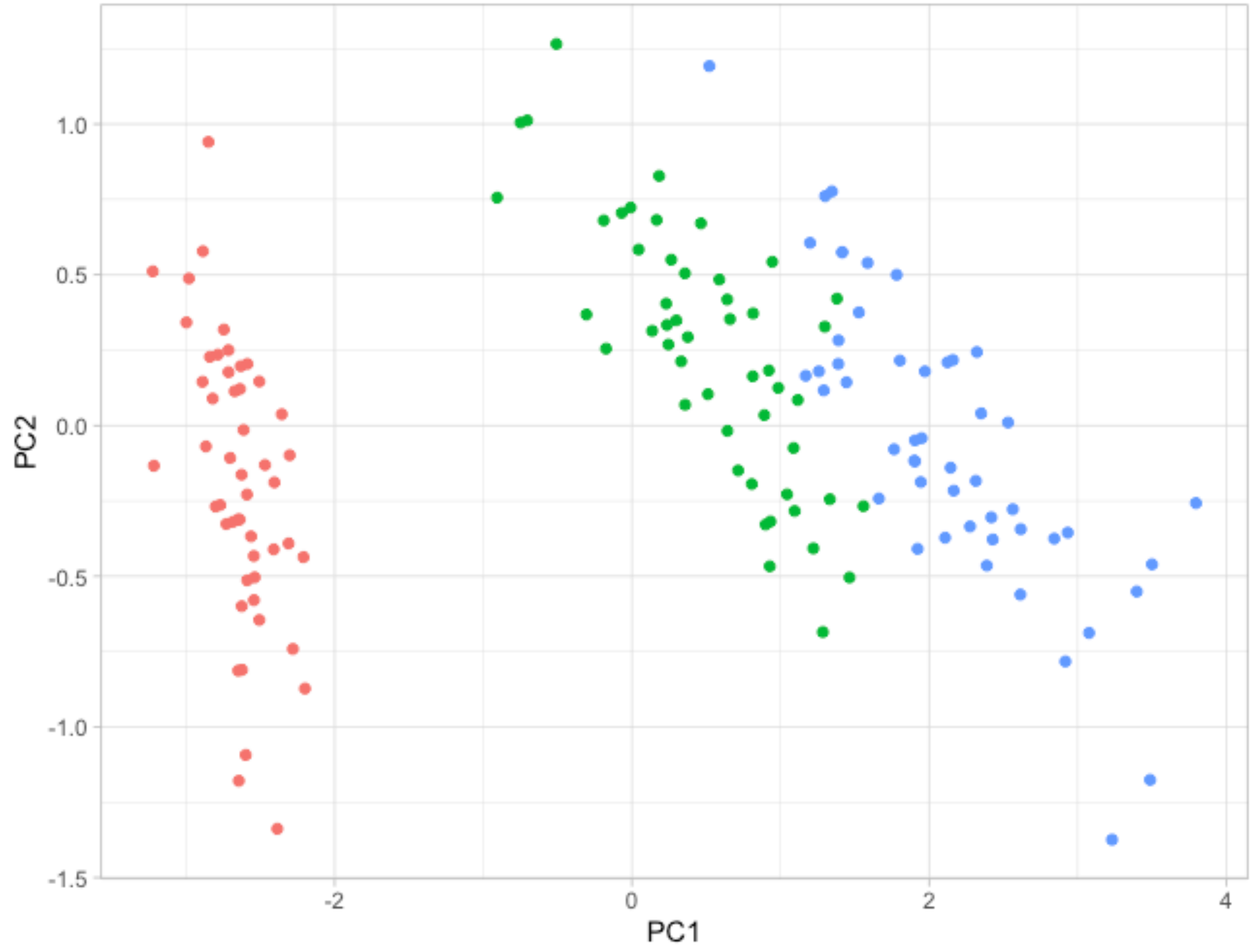
Criterios de clustering

- Minimizar $\text{tr}(\mathbf{W})$
  - Popular por su simplicidad y costo computacional
  - Invariante ante transformaciones ortogonales pero no ante todas las transformaciones singulares no lineales (i.e. diferente soluciones para los datos y los datos estandarizados)

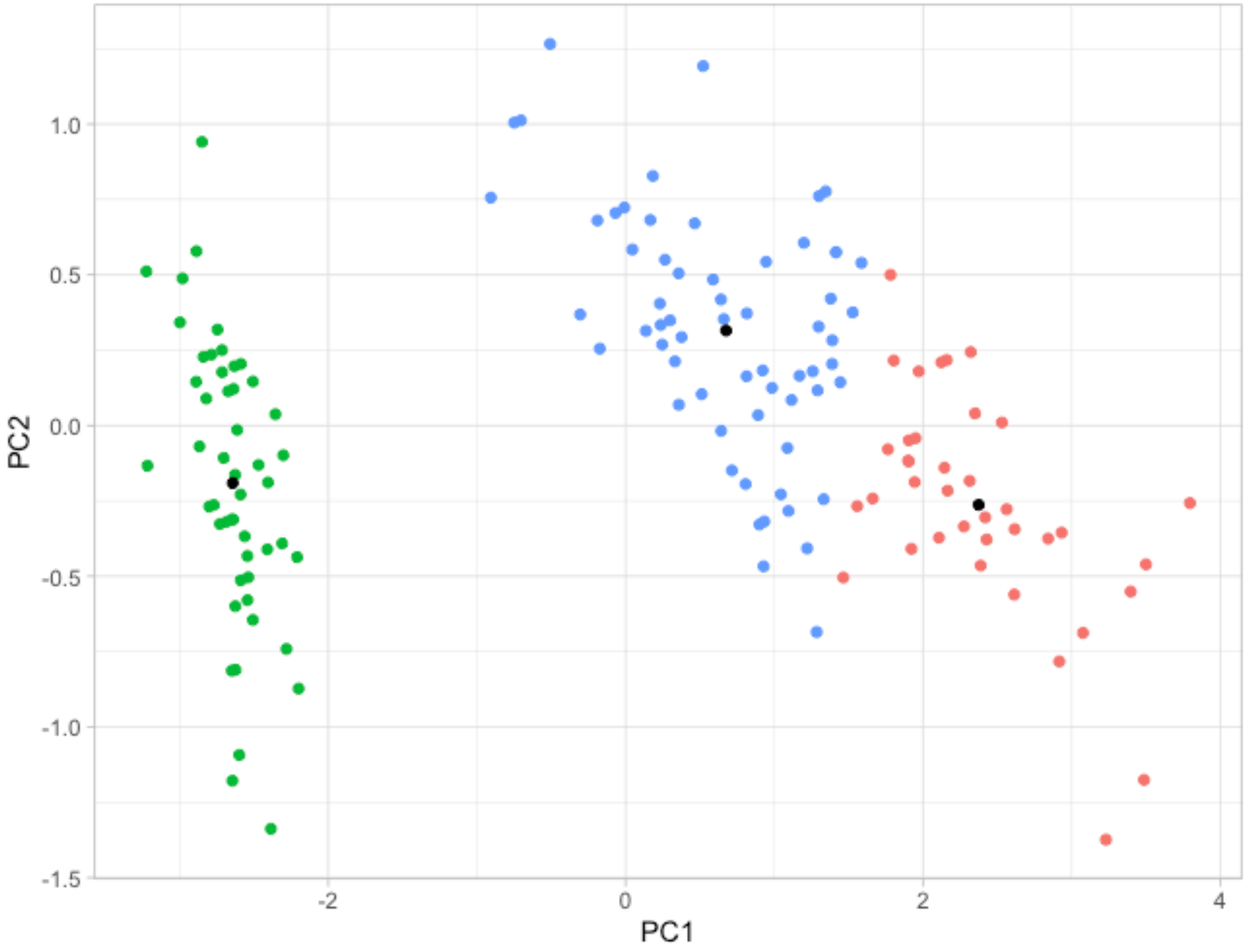
- Maximizar $\text{tr}\,(\mathbf{BW})^{-1}$
  - No es muy confiable ya que no corrige errores en los grupos (Maronna y Jacovkis, 1974)

- Minimizar $\mathbf{W}$
  - Invariante ante transformaciones no singulares
  - Mayor sensibilidad a la estructura de los datos (Friedman y Rubin, 1967)
  - Puede verse influenciado por una variable que permita crear clusters bien definidos (Marriott, 1971)

Ejemplo: Iris y k-means



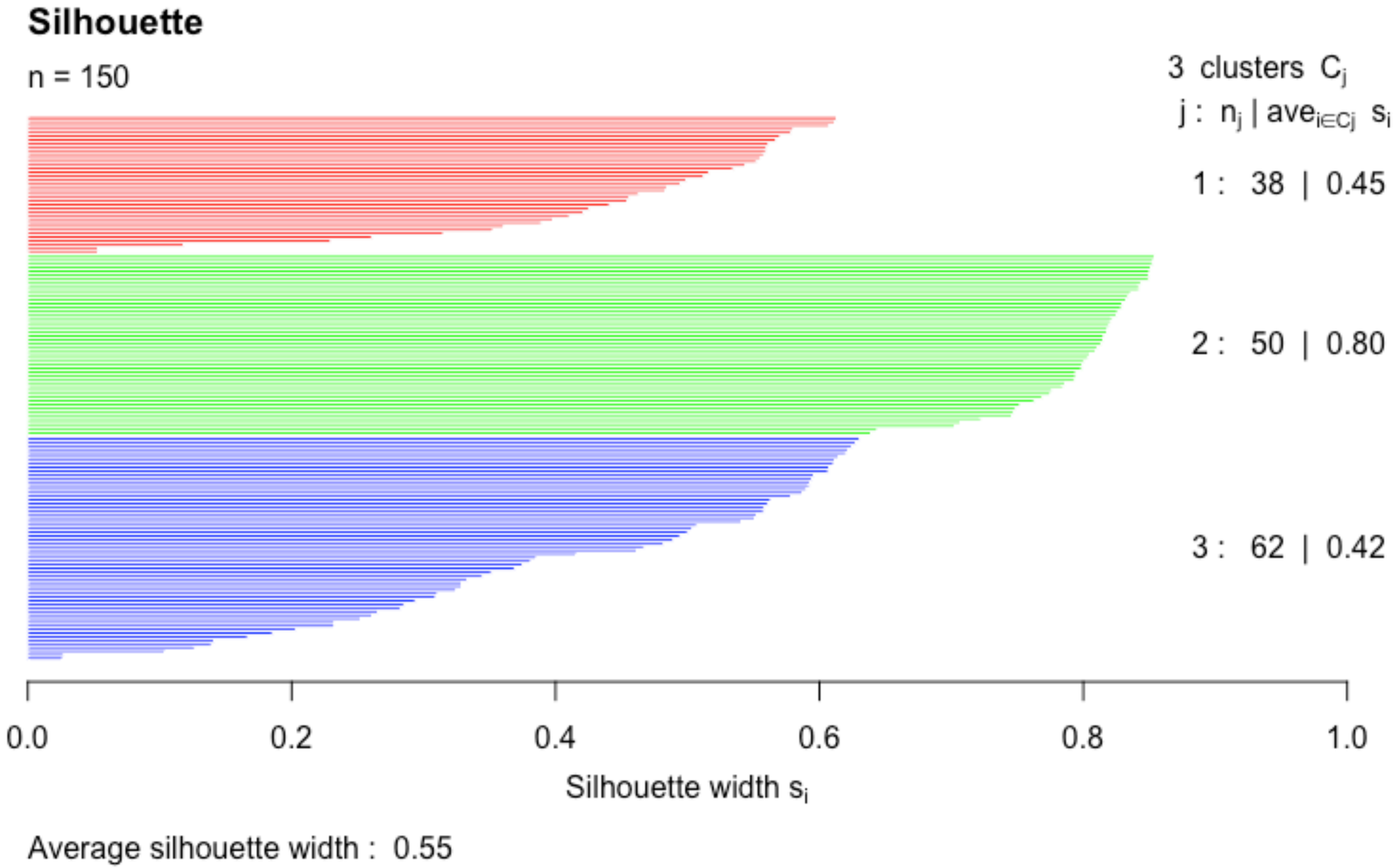
Etiquetas originales



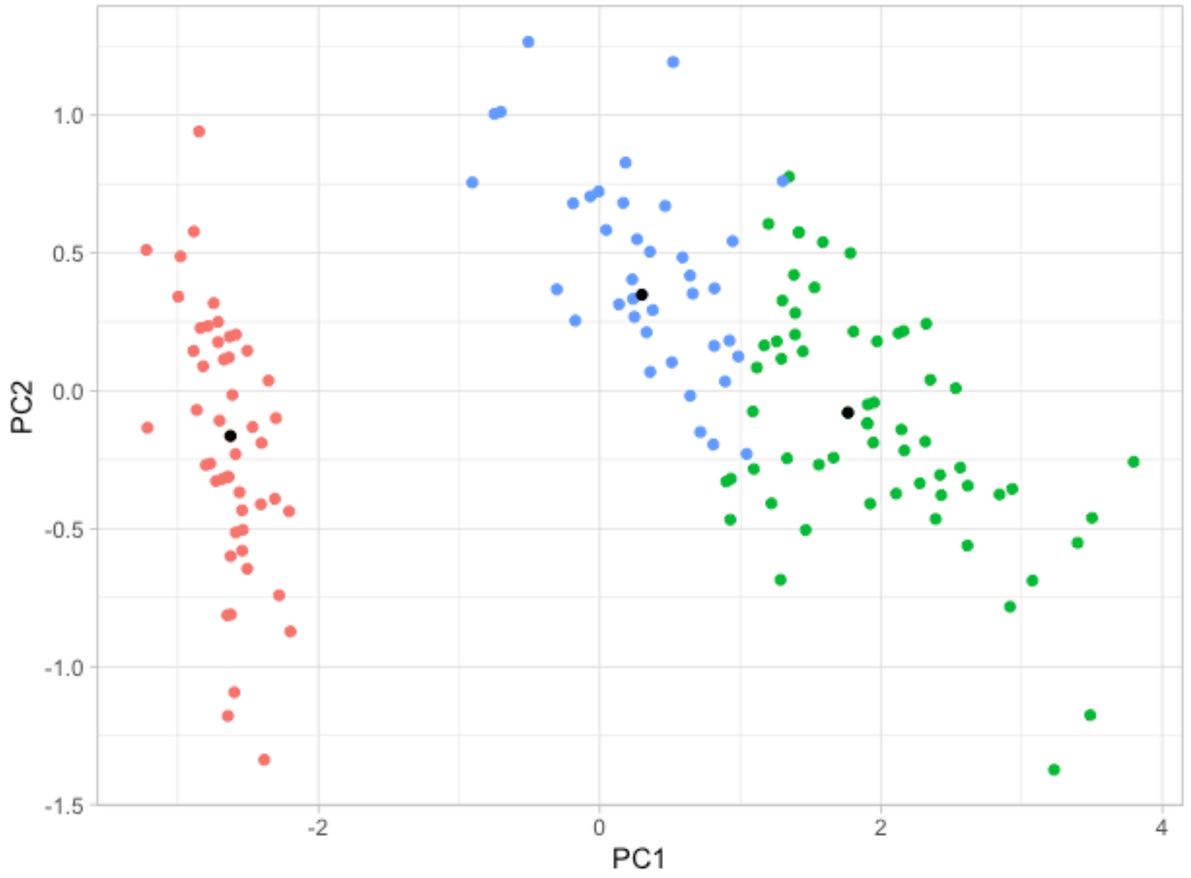
k-means

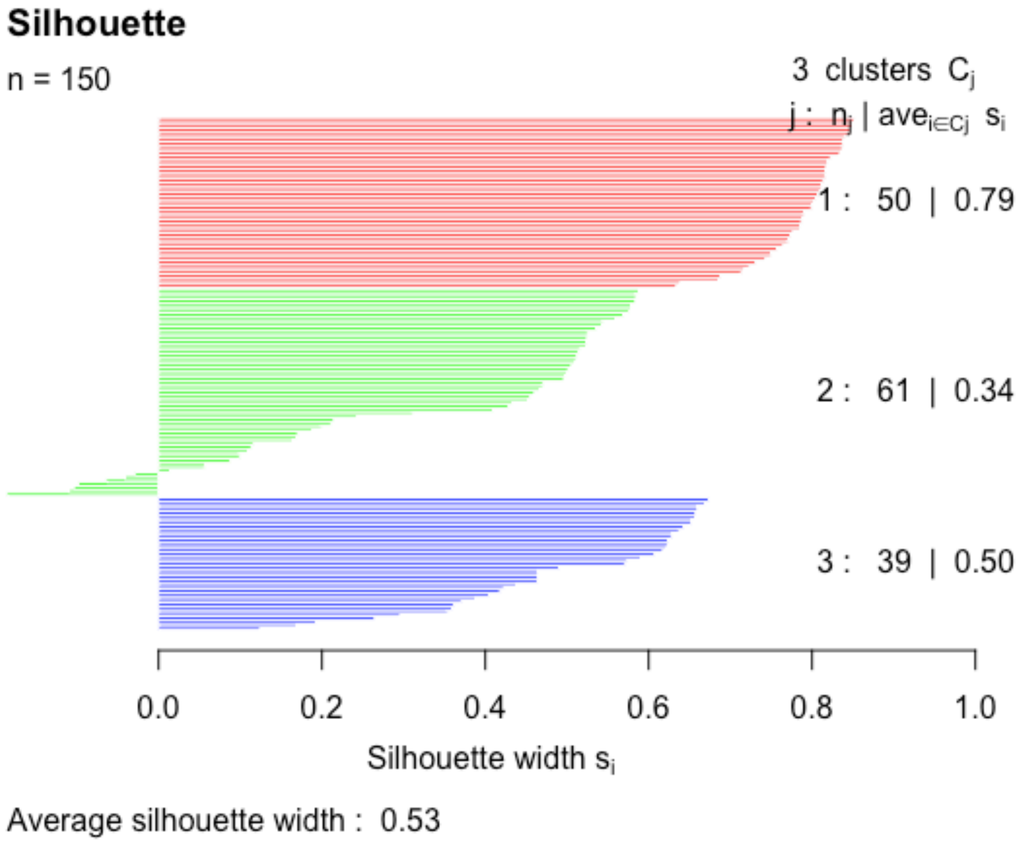
Ejemplo: Iris y k-means

- No hay indicio de observaciones mal clasificadas



- Seleccionar otra métrica (e.g. Manhattan)
- Usar el medoide en lugar de la medias (algoritmo pam() en R)





- Encontramos que las observaciones mal clasificadas son:

Observación	Cluster Asignado	Cluster Alternativo	Silhouette
114	2	3	-0.028
122	2	3	-0.042
73	2	3	-0.063
52	2	3	-0.098
55	2	3	-0.103
66	2	3	-0.109
76	2	3	-0.185

Métodos de Multi-Pertenencia

Motivación

En ocasiones es más significativo permitir que las observaciones pertenezcan a varios grupos.

Idea

Encontrar un coeficiente de pertenencia para cada objeto, $u_{im} \in [0,1]$, (membership coefficient) para cada cluster de tal forma que $\sum_{m=1}^{k} u_{im} = 1$

Algoritmo Fanny

- Algoritmo iterativo propuesto por Kaufman en 1990 (en **R** usamos fanny())

- Se busca minimizar la función:

$$\sum_{m=1}^{k} \frac{\sum_{i,j=1}^{n} u_{im}^2 u_{jm}^2 d(i,j)}{2\sum_{j=1}^{n} u_{jm}^2}$$

- Para medir el tipo de clustering (suave o duro) usamos el coeficiente de Dunn (1976):

$$F_k = \sum_{i=1}^{n}\sum_{m=1}^{k} \frac{u_{im}^2}{n}$$

- El mínimo de F_k se alcanza cuando hay máxima difusión (complete fuzziness) y el máximo cuando se crea una partición.

Ejemplo: Iris

- Algunos coeficientes de pertenencia

Observación	Grupo 1	Grupo 2	Grupo 3
102	0.32	0.22	0.45
143	0.08	0.16	0.75
57	0.09	0.65	0.25
71	0.07	0.44	0.47
139	0.06	0.72	0.20
84	0.05	0.69	0.25
114	0.05	0.75	0.18
122	0.11	0.61	0.27
73	0.14	0.28	0.56
52	0.09	0.63	0.27
55	0.07	0.65	0.27
66	0.11	0.62	0.26
76	0.05	0.69	0.25

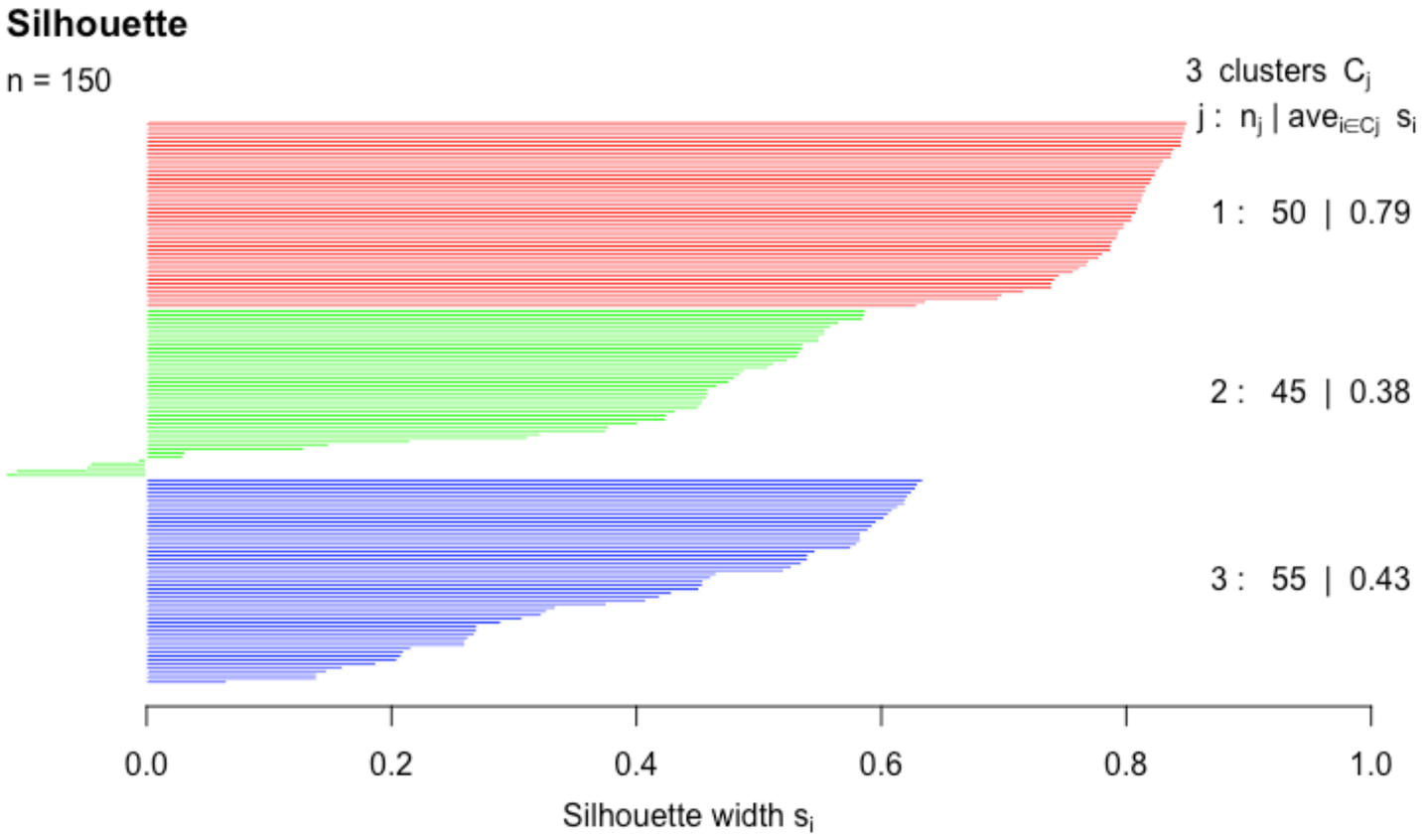
- ¿Cómo podemos pasar a un clustering duro?

Ejemplo: Iris

- Elegir el grupo con la probabilidad más grande

Observación	Grupo 1	Grupo 2	Grupo 3
102	0.32	0.22	**0.45**
143	0.08	0.16	**0.75**
57	0.09	**0.65**	0.25
71	0.07	0.44	**0.47**
139	0.06	**0.72**	0.20
84	0.05	**0.69**	0.25
114	0.05	**0.75**	0.18
122	0.11	**0.61**	0.27
73	0.14	0.28	**0.56**
52	0.09	**0.63**	0.27
55	0.07	**0.65**	0.27
66	0.11	**0.62**	0.26
76	0.05	**0.69**	0.25

Ejemplo: Iris



Obs.	Cluster	Alternativa	Silhouette
77	2	3	-0.049675159
124	2	3	-0.106637328
134	2	3	-0.046329606
147	2	3	-0.007183398
150	2	3	-0.114522411