

## **AGRUPAMIENTO JERÁRQUICO**

ALAN REYES-FIGUEROA  
APRENDIZAJE ESTADÍSTICO

(AULA 14) 28.FEBRERO.2025

# Clasificación

Consideramos el problema de clasificación en un conjunto  $\mathbb{X} \subseteq \mathbb{R}^d$ . Si  $\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ . Este problema consiste en construir una función de asignación

$$h : \mathbb{X} \rightarrow C, \quad h(\mathbf{x}_i) = c_i,$$

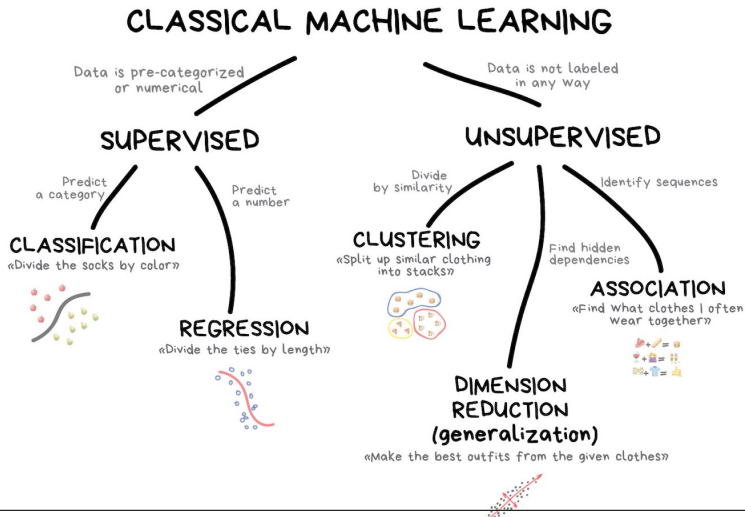
donde  $C = \{c_1, c_2, \dots, c_k\}$  es un conjunto finito de categorías o clases. El problema de clasificación consiste en asignarle a cada  $\mathbf{x}_i$  una clase correspondiente  $c_i$  utilizando algún criterio específico.

En casos más generales, construimos un mapa

$$h : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{R}^k, \quad h(\mathbf{x}_i) = (p_1(\mathbf{x}_i), p_2(\mathbf{x}_i), \dots, p_k(\mathbf{x}_i)),$$

donde cada  $p_j(\mathbf{x}_i) = \mathbb{P}(\mathbf{x}_i \in C_j)$ , esto es,  $p_j(\mathbf{x}_i)$  es la probabilidad de que  $\mathbf{x}_i$  pertenezca a la categoría  $j$ .

# Clasificación supervisada y no supervisada



# Clasificación supervisada y no supervisada

- En la clasificación supervisada, además del conjunto de datos  $\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n$ , se cuenta adicionalmente con un conjunto de etiquetas ya predefinidas  $\mathbf{y} = \{y_i\}_{i=1}^n$ . El conjunto  $C$  y la cantidad de etiquetas las da el contexto. Tales pares  $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}$  se utilizan para construir un modelo de clasificación  $h : \tilde{\mathbb{X}} \rightarrow C$ , el cual permite clasificar elementos en un superconjunto mayor a  $\mathbb{X}$ . (Típicamente  $\mathbb{X}$  es el conjunto de entrenamiento).
- En el caso no supervisado (clustering), no se cuenta con el conjunto de etiquetas  $\mathbf{y}$ . En ese caso, se utiliza la misma estructura de los datos para detectar o agrupar los datos en conglomerados. El conjunto  $C$  y la cantidad de etiquetas  $k$  no se conoce.

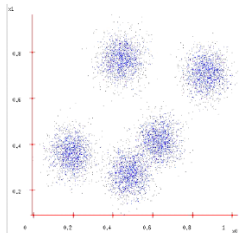
# Clasificación supervisada y no supervisada

Clasificación no supervisada = Agrupamiento (*clustering*).

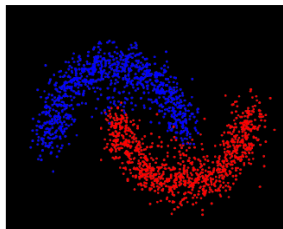
## Problema:

- Segmentar datos en subgrupos homogéneos.
- Encontrar grupos en base de semejanza.

Situación idónea:

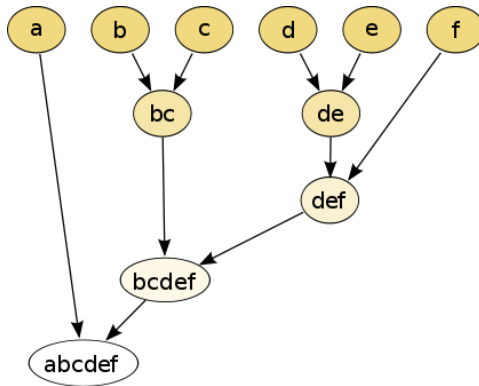


dolor de cabeza:



# Agrupamiento jerárquico

Agrupamiento jerárquico Definimos distancias entre grupos de observaciones a partir de distancias entre puntos  $x_i$ .

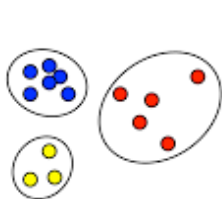


# Agrupamiento jerárquico

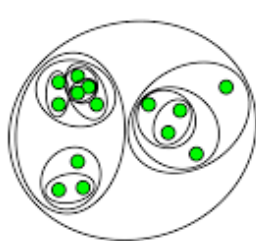
Diferencias entre agrupamiento jerárquico y agrupamiento particional.

- En el particional, los grupos son (o suelen ser) disjuntos.
- En el esquema jerárquico, los grupos están encadenados.

## Partitional vs hierarchical clustering



Partitional clustering finds  
a fixed number of clusters

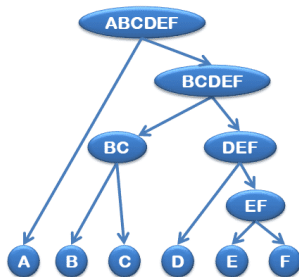
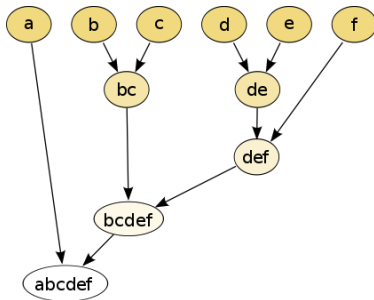


Hierarchical clustering creates  
a series of clusterings  
contained in each other

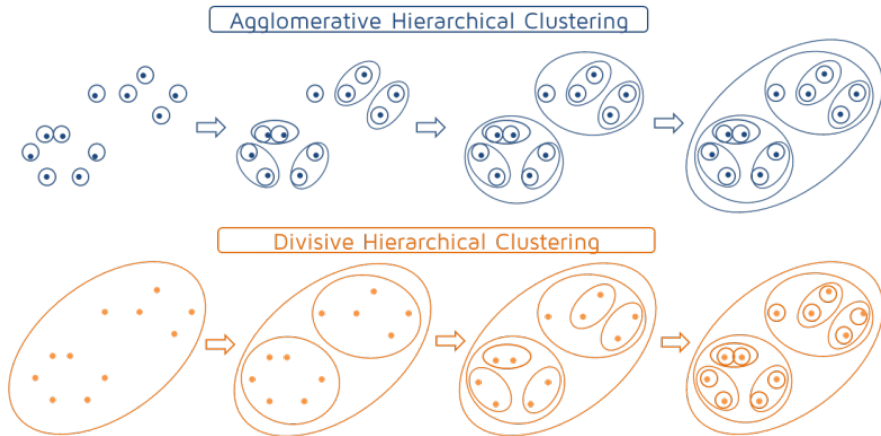
# Agrupamiento jerárquico

Hay dos esquemas

- Aglomerativo o *bottom up*: se inicia con cada punto es un clúster, y en cada iteración se van agrupando.
- Divisivo o *top down*: se inicia con único cluster conteniendo todos los puntos, y en cada iteración se van separando.



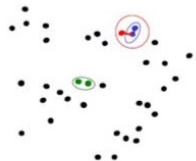
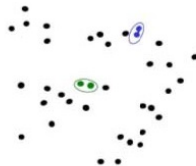
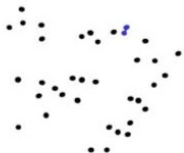
# Agrupamiento jerárquico



# Agrupamiento jerárquico

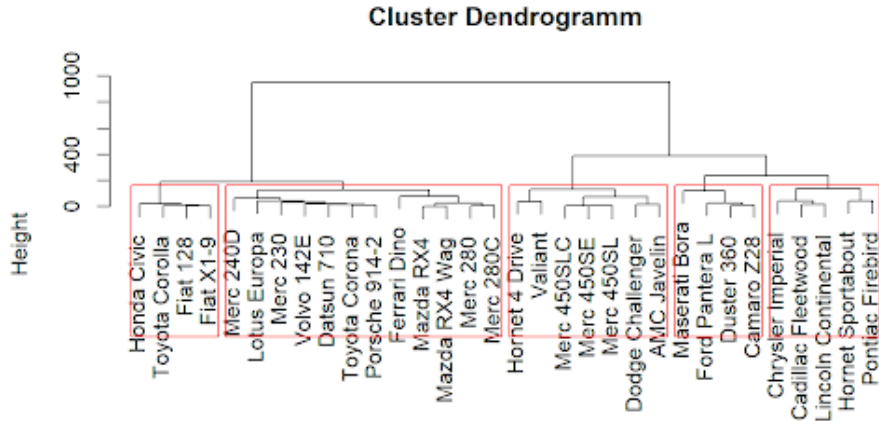
Idea en el esquema aglomerativo:

- Definir cada dato como un cluster.
- Repetir hasta tener un sólo cluster: Unir los dos clústers más cercanos según  $d(\cdot, \cdot)$  en un sólo clúster nuevo.

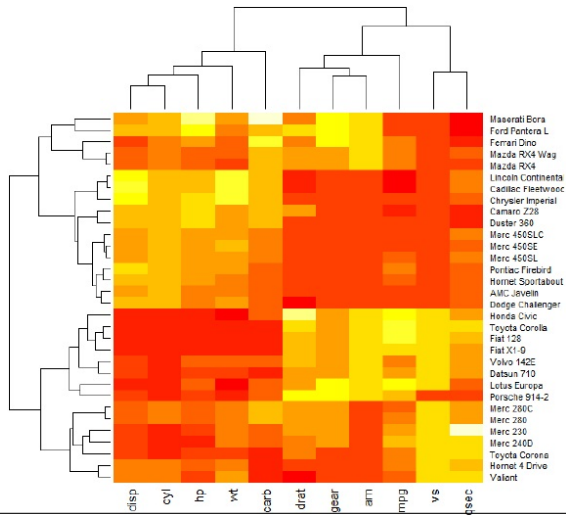


# Agrupamiento jerárquico

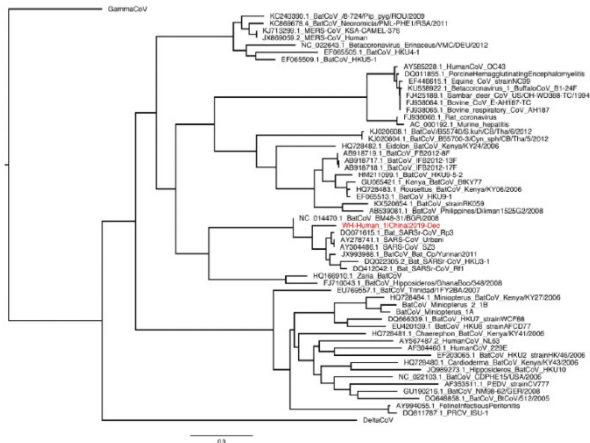
La salida típica viene en forma de un dendrograma.



# Agrupamiento jerárquico



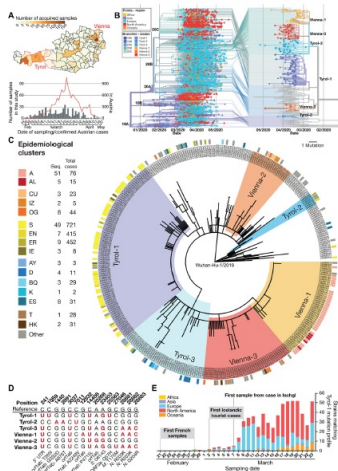
# Agrupamiento jerárquico



**Preliminary maximum likelihood phylogenetic analysis of novel Wuhan, China human CoV in red, GenBank (accession MN908947)**

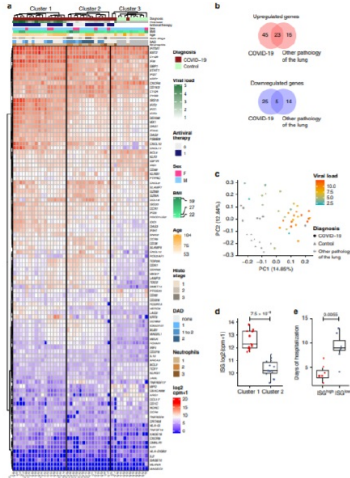
Novel CoV seq data from: <http://virological.org/t/initial-genome-release-of-novel-coronavirus/319>, The Shanghai Public Health Clinical Center & School of Public Health, in collaboration with the Central Hospital of Wuhan, Huazhong University of Science and Technology, the Wuhan Center for Disease Control and Prevention, the National Institute for Communicable Disease Control and Prevention, Chinese Center for Disease Control, and the University of Sydney, Sydney, Australia.

# Agrupamiento jerárquico



<https://stm.sciencemag.org/content/12/573/eabe2555/tab-figures-data>

# Agrupamiento jerárquico



# Agrupamiento jerárquico

Para construir un agrupamiento jerárquico, necesitamos dos ingredientes:

1. Una **métrica** o distancia entre puntos:  $\mathbb{D} = [d_{ij}]$ .
2. Un **método** o distancia entre clústers.

En general  $d(\cdot, \cdot)$  puede ser una distancia, o una versión más relajada (e.g., discrepancia, disimilitud).

Cuidado! No siempre se obtiene un dendrograma. La función  $d : \mathbb{X} \times \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{R}$  debe cumplir ciertas condiciones:

1. (simetría)  $d(a, b) = d(b, a)$
2. (desigualdad triangular)  $d(a, c) < \max\{d(a, b), d(b, c)\}$
3. (no negatividad)  $d(a, b) \geq 0$  o no es necesaria. Pero sí debe cumplir que  $d$  está limitada inferiormente.

# Agrupamiento jerárquico

Métricas comunes:

- distancia euclídeana  $d(a, b) = \|a - b\|_2 = \left( \sum_{i=1}^d (a_i - b_i)^2 \right)^{1/2}$ .
- distancia euclídeana cuadrada  $d(a, b) = \|a - b\|_2^2 = \sum_{i=1}^d (a_i - b_i)^2$ .
- distancias de Minkowski  $d(a, b) = \|a - b\|_p = \left( \sum_{i=1}^d (a_i - b_i)^p \right)^{1/p}$ .
- Norma 1 o distancia *Manhattan*  $d(a, b) = \|a - b\|_1 = \sum_{i=1}^d |a_i - b_i|$ .
- distancia de Mahalanobis  $d(a, b) = ((\mathbf{a} - \mathbf{b})^T \Sigma^{-1} (\mathbf{a} - \mathbf{b}))^{1/2}$ .

# Agrupamiento jerárquico

¿Cómo elegir  $d(\cdot, \cdot)$ ? Existen muchos métodos

- *Maximum or complete-linkage*

$$d(A, B) = \max\{d(a, b) : a \in A, b \in B\}.$$

- *Minimum or single-linkage*

$$d(A, B) = \min\{d(a, b) : a \in A, b \in B\}.$$

- *Averaged linkage*

$$d(A, B) = \frac{1}{|A| \cdot |B|} \sum_{a \in A} \sum_{b \in B} d(a, b).$$

# Agrupamiento jerárquico

¿Cómo elegir  $d(\cdot, \cdot)$ ? Existen muchos métodos

- *Weighted averaged linkage*

$$d(\{i\} \cup \{j\}, k) = \frac{d(i, k) + d(j, k)}{2}.$$

- *Centroid linkage*

$d(A, B) = \|c_A - c_B\|$ ,  $c_A, c_B$  son los centroides de los clúster  $A, B$ , resp.

- *Minimum energy clustering*

$$d(A, B) = \frac{2}{|A| \cdot |B|} \sum_{i=1}^{|A|} \sum_{j=1}^{|B|} d(a_i, b_j) - \frac{1}{|A|^2} \sum_{i,j=1}^{|A|} d(a_i, a_j) - \frac{1}{|B|^2} \sum_{i,j=1}^{|B|} d(b_i, b_j).$$

# Agrupamiento jerárquico

¿Cómo elegir  $d(\cdot, \cdot)$ ? Existen muchos métodos

- *Maximum or complete-linkage*

$$d(A, B) = \max\{d(a, b) : a \in A, b \in B\}.$$

- *Minimum or single-linkage*

$$d(A, B) = \min\{d(a, b) : a \in A, b \in B\}.$$

- *Averaged linkage*

$$d(A, B) = \frac{1}{|A| \cdot |B|} \sum_{a \in A} \sum_{b \in B} d(a, b).$$

Otros criterios de *linkage* incluyen:

- La suma de todas la varianzas intragrupos.
- El aumento de la varianza para el grupo que se fusiona (criterio de Ward).
- La probabilidad de que los grupos candidatos se generen a partir de la misma función de distribución (*V-linkage*).
- El producto de grados de entrada y de salida en un grafo de  $k$ -vecinos más cercanos.
- El incremento de algún descriptor de conglomerado (es decir, una cantidad definida para medir la calidad de un conglomerado) después de fusionar dos conglomerados.

# Agrupamiento jerárquico

## El método de Ward:

El criterio de varianza mínima de Ward minimiza la varianza total intragrupos: en cada paso encuentra el par de grupos que conduzca a un aumento mínimo en la varianza total dentro del grupo después de la fusión. Este aumento es una distancia al cuadrado ponderada entre los centros de los conglomerados. AL inicio, se la distancia inicial entre objetos individuales como la norma euclidiana al cuadrado.

En la práctica, se utiliza el algoritmo de Lance-Williams:

- Suponga que los clústers  $C_i$ ,  $C_j$  son los siguientes a fusionarse. La siguiente fórmula produce la actualización de las distancias  $d_{ij} = d(C_i, C_j)$ .
- $$d(C_i \cup C_j, C_k) = \frac{n_i + n_k}{n_i + n_j + n_k} d_{ik} + \frac{n_j + n_k}{n_i + n_j + n_k} d_{jk} - \frac{n_i + n_j}{n_i + n_j + n_k} d_{ij}.$$

# Ejemplo

Ejemplo 1: Realizar un agrupamiento jerárquico usando diferentes métodos: single-linkage, complete-linkage, average linkage.  
Comparar los resultados.

|   | a   | b   | c   | d   |
|---|-----|-----|-----|-----|
| a | 0   | 5   | 6.1 | 7   |
| b | 5   | 0   | 4   | 6.2 |
| c | 6.1 | 4.0 | 0   | 6   |
| d | 7   | 6.2 | 6   | 0   |

# Agrupamiento jerárquico

Ejemplo 2: Realizar un agrupamiento jerárquico usando diferentes métodos: single-linkage, complete-linkage, average linkage.  
Comparar los resultados.

|   | a   | b   | c   | d   |
|---|-----|-----|-----|-----|
| a | 0   | 5.0 | 5.6 | 7.2 |
| b | 5.0 | 0   | 4.6 | 5.6 |
| c | 5.6 | 4.6 | 0   | 4.9 |
| d | 7.2 | 5.6 | 4.9 | 0   |