K-Means

Jérémie Cabessa

Laboratoire DAVID, UVSQ

Apprentissage non-supervisé (unsupervised learning)

- On dispose de variables explicatives $X_1, \ldots, X_p$ mais pas de variable réponse Y
- Il s'agit donc de découvrir des structures sous-jacentes à des *données non étiquetées*.
- Techniques de clustering, méthodes de représentation, visualisation, etc.

Apprentissage non-supervisé (unsupervised learning)

- On dispose de variables explicatives $X_1, \ldots, X_p$ mais pas de variable réponse Y
- Il s'agit donc de découvrir des structures sous-jacentes à des *données non étiquetées*.
- Techniques de clustering, méthodes de représentation, visualisation, etc.

Apprentissage non-supervisé (unsupervised learning)

- On dispose de variables explicatives $X_1, \ldots, X_p$ mais pas de variable réponse Y
- Il s'agit donc de découvrir des structures sous-jacentes à des *données non étiquetées*.
- Techniques de clustering, méthodes de représentation, visualisation, etc.

Clustering

- **Clustering:** ensemble de techniques qui visent à identifier des *clusters* homogènes dans un dataset.
- On partitionne les données en clusters. Les données d'un même cluster sont "similaires" entre elles.
- **Exemple:** clusterisation de clients selon leurs âge, sexes, habitudes de consommation, ou tout autre type de données (market segmentation)
- Mais que signifie "similaires"? Quel est le critère de "similarité"?

Clustering

- **Clustering:** ensemble de techniques qui visent à identifier des *clusters* homogènes dans un dataset.
- On partitionne les données en clusters. Les données d'un même cluster sont "similaires" entre elles.
- **Exemple:** clusterisation de clients selon leurs âge, sexes, habitudes de consommation, ou tout autre type de données (market segmentation)
- Mais que signifie "similaires"? Quel est le critère de "similarité"?

Clustering

- **Clustering:** ensemble de techniques qui visent à identifier des *clusters* homogènes dans un dataset.
- On partitionne les données en clusters. Les données d'un même cluster sont "similaires" entre elles.
- **Exemple:** clusterisation de clients selon leurs âge, sexes, habitudes de consommation, ou tout autre type de données (market segmentation)
- Mais que signifie "similaires"? Quel est le critère de "similarité"?

Clustering

- **Clustering:** ensemble de techniques qui visent à identifier des *clusters* homogènes dans un dataset.
- On partitionne les données en clusters. Les données d'un même cluster sont "similaires" entre elles.
- **Exemple:** clusterisation de clients selon leurs âge, sexes, habitudes de consommation, ou tout autre type de données (market segmentation)
- Mais que signifie "similaires"? Quel est le critère de "similarité"?

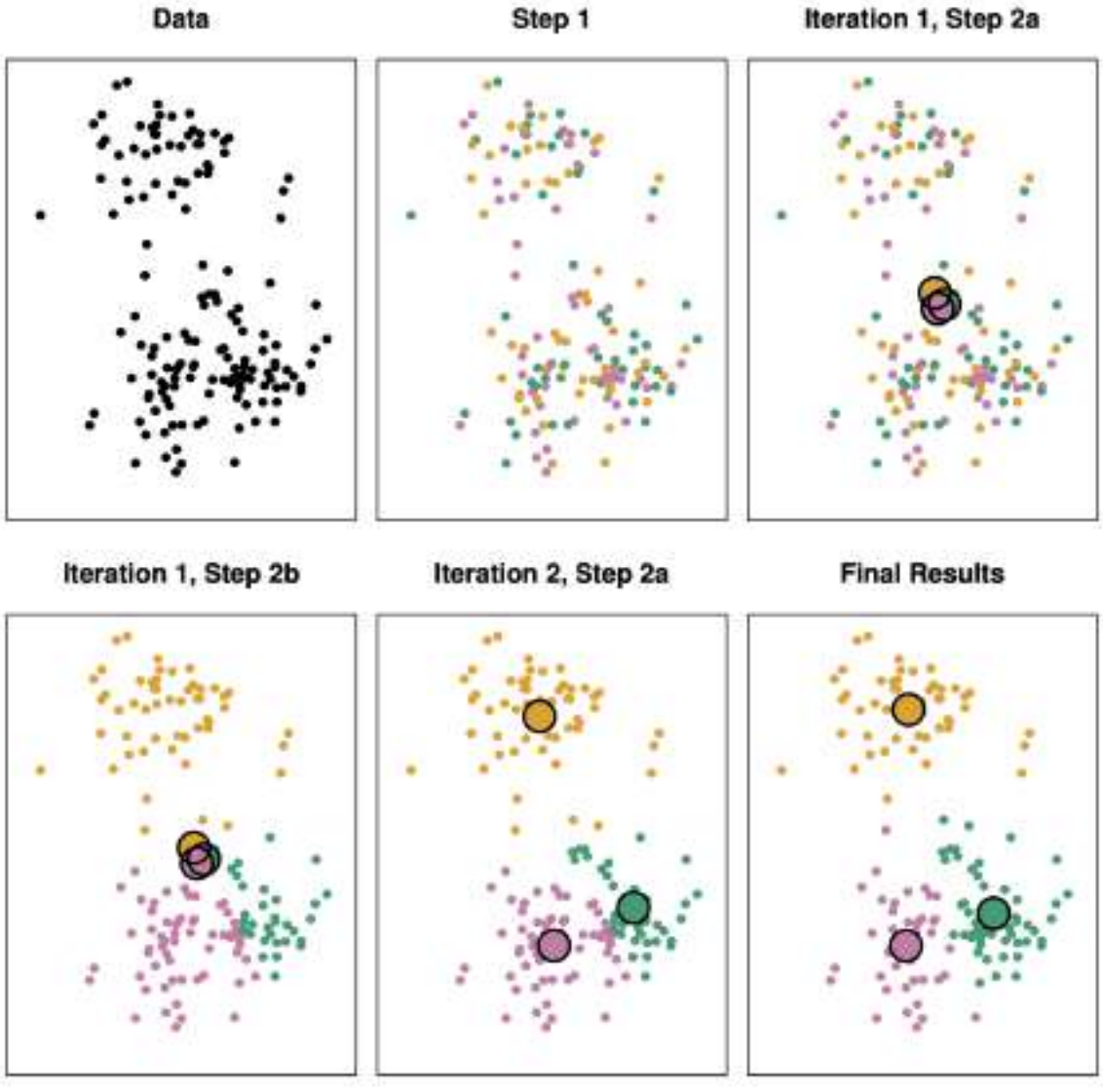
Clustering

- **K-Means:** le nombre de clusters est déterminé à l'avance.
- **Hierarchical Clustering:** le nombre optimal de clusters n'est pas connu à l'avance.

Clustering

- **K-Means:** le nombre de clusters est déterminé à l'avance.
- **Hierarchical Clustering:** le nombre optimal de clusters n'est pas connu à l'avance.

K-Means


Data
Step 1
Iteration 1, Step 2a
Iteration 1, Step 2b
Iteration 2, Step 2a
Final Results

K-Means

- Soient un training set $S_{\text{train}} = \{\boldsymbol{x_1}, \ldots, \boldsymbol{x_N}\}$ et un nombre de clusters $K \in \mathbb{N}$.
- On cherche une bonne partition $C_1, \ldots, C_k$ de S_{train}, i.e.:

$$C_1 \cup \cdots \cup C_K = S_{\text{train}} \quad \text{et} \quad C_i \cap C_j = \emptyset \text{ pour tout } i \neq j.$$

K-Means

- Soient un training set $S_{\text{train}} = \{\boldsymbol{x_1}, \ldots, \boldsymbol{x_N}\}$ et un nombre de clusters $K \in \mathbb{N}$.
- On cherche une bonne partition $C_1, \ldots, C_k$ de S_{train}, i.e.:

$$C_1 \cup \cdots \cup C_K = S_{\text{train}} \quad \text{et} \quad C_i \cap C_j = \emptyset \text{ pour tout } i \neq j.$$

K-Means

- **Idée générale:** on définit une notion de *variation intra-cluster (within-cluster variation)*.
- Plus les data au sein d'un cluster C_k sont proches, plus la variation intra-cluster $W(C_k)$ est petite.
- La meilleure partition et celle qui minimise la *variation intra-cluster totale* (*total within-cluster variation*) $\sum_{k=1}^{K} W(C_k)$.

K-Means

- **Idée générale:** on définit une notion de *variation intra-cluster (within-cluster variation)*.
- Plus les data au sein d'un cluster C_k sont proches, plus la variation intra-cluster $W(C_k)$ est petite.
- La meilleure partition et celle qui minimise la *variation intra-cluster totale* (*total within-cluster variation*) $\sum_{k=1}^{K} W(C_k)$.

K-Means

- **Idée générale:** on définit une notion de *variation intra-cluster (within-cluster variation)*.
- Plus les data au sein d'un cluster C_k sont proches, plus la variation intra-cluster $W(C_k)$ est petite.
- La meilleure partition et celle qui minimise la *variation intra-cluster totale* (*total within-cluster variation*) $\sum_{k=1}^{K} W(C_k)$.

K-Means

- La choix le plus simple et le plus commun de *variation intra-cluster* est basé sur la distance Euclidienne.
- La *variation intra-cluster* $W(C_k)$ est la distance moyenne entre les point de C_k:

$$W(C_k) = \frac{1}{|C_k|} \sum_{\boldsymbol{x_i}, \boldsymbol{x_{i'}} \in C_k} \|\boldsymbol{x_i} - \boldsymbol{x_{i'}}\|^2$$

- On a alors le problème de *minimisation* suivant:

$$\underset{C_1,\ldots,C_K}{\text{minimize}} \sum_{k=1}^{K} W(C_k) = \underset{C_1,\ldots,C_K}{\text{minimize}} \sum_{k=1}^{K} \frac{1}{|C_k|} \sum_{\boldsymbol{x_i}, \boldsymbol{x_{i'}} \in C_k} \|\boldsymbol{x_i} - \boldsymbol{x_{i'}}\|^2$$

K-Means

- La choix le plus simple et le plus commun de *variation intra-cluster* est basé sur la distance Euclidienne.
- La *variation intra-cluster* $W(C_k)$ est la distance moyenne entre les point de C_k:

$$W(C_k) = \frac{1}{|C_k|} \sum_{\boldsymbol{x_i}, \boldsymbol{x_{i'}} \in C_k} \|\boldsymbol{x_i} - \boldsymbol{x_{i'}}\|^2$$

- On a alors le problème de *minimisation* suivant:

$$\underset{C_1,\ldots,C_K}{\text{minimize}} \sum_{k=1}^{K} W(C_k) = \underset{C_1,\ldots,C_K}{\text{minimize}} \sum_{k=1}^{K} \frac{1}{|C_k|} \sum_{\boldsymbol{x_i}, \boldsymbol{x_{i'}} \in C_k} \|\boldsymbol{x_i} - \boldsymbol{x_{i'}}\|^2$$

K-Means

- La choix le plus simple et le plus commun de *variation intra-cluster* est basé sur la distance Euclidienne.
- La *variation intra-cluster* $W(C_k)$ est la distance moyenne entre les point de C_k:

$$W(C_k) = \frac{1}{|C_k|} \sum_{\boldsymbol{x_i}, \boldsymbol{x_{i'}} \in C_k} \|\boldsymbol{x_i} - \boldsymbol{x_{i'}}\|^2$$

- On a alors le problème de *minimisation* suivant:

$$\underset{C_1,\ldots,C_K}{\text{minimize}} \sum_{k=1}^{K} W(C_k) = \underset{C_1,\ldots,C_K}{\text{minimize}} \sum_{k=1}^{K} \frac{1}{|C_k|} \sum_{\boldsymbol{x_i}, \boldsymbol{x_{i'}} \in C_k} \|\boldsymbol{x_i} - \boldsymbol{x_{i'}}\|^2$$

K-Means

- L'approche "bruteforce" de ce problème est trop complexe.
- En effet, il y a environ K^N manières de partitionner N data en K clusters.
- L'algorithme **K-means** est une approche simple qui converge vers un minimum local de ce problème.

K-Means

- L'approche "bruteforce" de ce problème est trop complexe.
- En effet, il y a environ K^N manières de partitionner N data en K clusters.
- L'algorithme **K-means** est une approche simple qui converge vers un minimum local de ce problème.

K-Means

- L'approche "bruteforce" de ce problème est trop complexe.
- En effet, il y a environ K^N manières de partitionner N data en K clusters.
- L'algorithme **K-means** est une approche simple qui converge vers un minimum local de ce problème.

K-Means

Algorithme K-means:

- *Initialisation:* Séparer les data en K clusters aléatoires.
- *Itération:* Tant que les clusters ne se sont pas stabilisés, faire:
  - Calculer les *centroïdes* $c_1, \ldots, c_K$ des clusters $C_1, \ldots, C_K$.
  - Assigner chaque point x au cluster C_k dont le centroïde c_k est le plus proche de lui.

K-Means

Algorithme K-means:

- *Initialisation:* Séparer les data en K clusters aléatoires.
- *Itération:* Tant que les clusters ne se sont pas stabilisés, faire:
  - Calculer les *centroïdes* $\boldsymbol{c_1}, \ldots, \boldsymbol{c_K}$ des clusters $C_1, \ldots, C_K$.
  - Assigner chaque point $\boldsymbol{x}$ au cluster C_k dont le centroïde $\boldsymbol{c_k}$ est le plus proche de lui.

K-Means

Algorithme K-means:

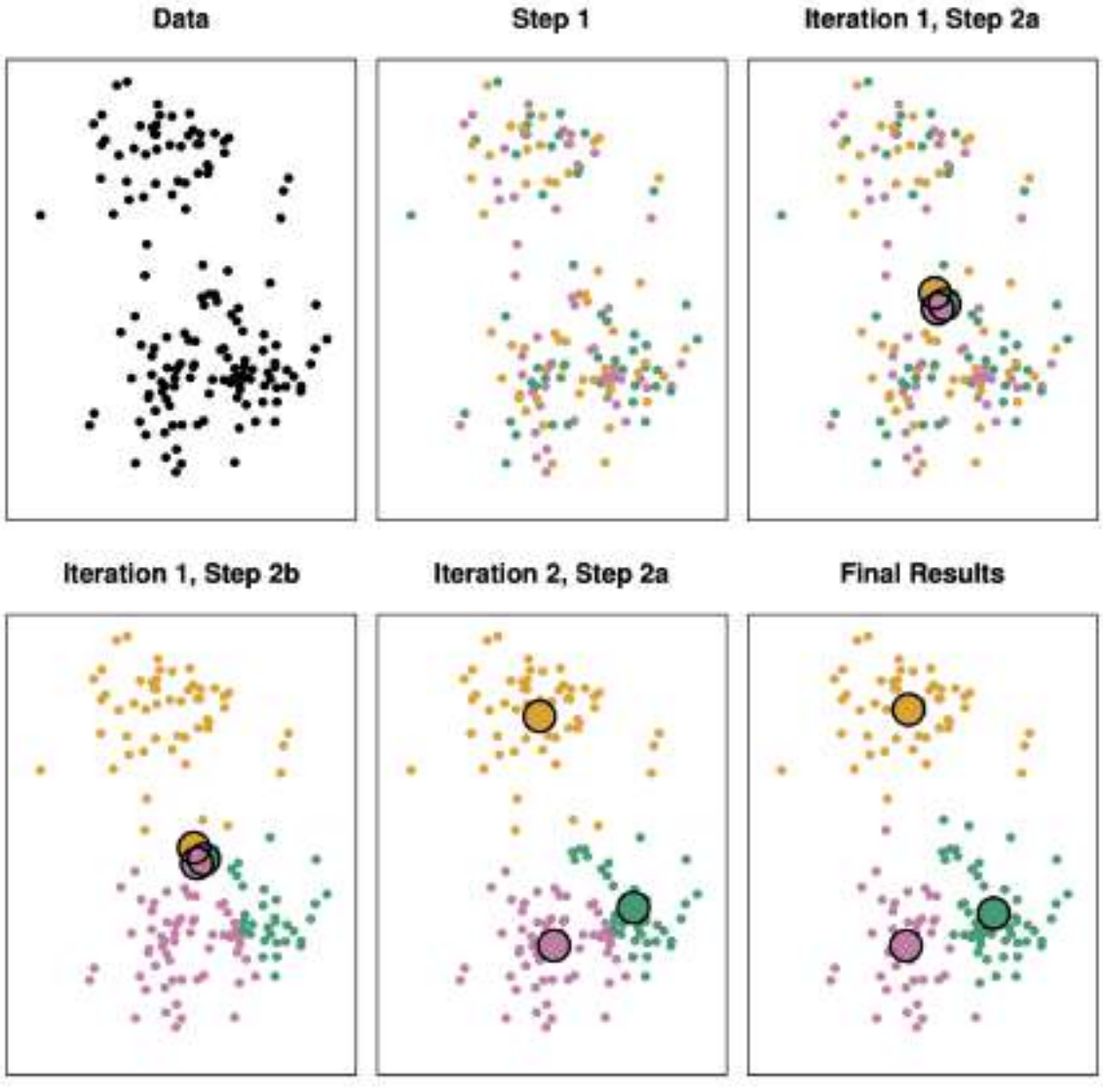
- *Initialisation:* Séparer les data en K clusters aléatoires.
- *Itération:* Tant que les clusters ne se sont pas stabilisés, faire:
  - Calculer les *centroïdes* $\boldsymbol{c_1}, \ldots, \boldsymbol{c_K}$ des clusters $C_1, \ldots, C_K$.
  - Assigner chaque point x au cluster C_k dont le centroïde $\boldsymbol{c_k}$ est le plus proche de lui.

K-Means

Algorithme K-means:

- *Initialisation:* Séparer les data en K clusters aléatoires.
- *Itération:* Tant que les clusters ne se sont pas stabilisés, faire:
  - Calculer les *centroïdes* $\boldsymbol{c_1}, \ldots, \boldsymbol{c_K}$ des clusters $C_1, \ldots, C_K$.
  - Assigner chaque point $\boldsymbol{x}$ au cluster C_k dont le centroïde $\boldsymbol{c_k}$ est le plus proche de lui.

K-Means


Data
Step 1
Iteration 1, Step 2a
Iteration 1, Step 2b
Iteration 2, Step 2a
Final Results

K-means

Algorithm 1: `k_means(dataset, k, stop_dist, max_iter)`

```
iter = 0
dist = [inf] * k
stop_dist = [stop_dist] * k
centroids = initialize_centroids(dataset)
while (dist > stop_dist).any() and iter ≤ max_iter do
    clusters = assign_clusters(dataset, centroids)
    new_centroids = compute_centroids(dataset, clusters)
    dist = norm(centroids − new_centroids)
    centroids = new_centroids
    iter = iter + 1
end
return clusters, centroids
```

- où `assign_clusters(dataset, centroids)` assigne chaque point du dataset au cluster dont le centroïde est le plus proche.

K-means

Algorithm 1: `k_means(dataset, k, stop_dist, max_iter)`

```
iter = 0
dist = [inf] * k
stop_dist = [stop_dist] * k
centroids = initialize_centroids(dataset)
while (dist > stop_dist).any() and iter ≤ max_iter do
    clusters = assign_clusters(dataset, centroids)
    new_centroids = compute_centroids(dataset, clusters)
    dist = norm(centroids − new_centroids)
    centroids = new_centroids
    iter = iter + 1
end
return clusters, centroids
```

- où `assign_clusters(dataset, centroids)` assigne chaque point du dataset au cluster dont le centroïde est le plus proche.

K-means

Algorithm 1: `k_means(dataset, k, stop_dist, max_iter)`

```
iter = 0
dist = [inf] * k
stop_dist = [stop_dist] * k
centroids = initialize_centroids(dataset)
while (dist > stop_dist).any() and iter ≤ max_iter do
    clusters = assign_clusters(dataset, centroids)
    new_centroids = compute_centroids(dataset, clusters)
    dist = norm(centroids − new_centroids)
    centroids = new_centroids
    iter = iter + 1
end
return clusters, centroids
```

- où `assign_clusters(dataset, centroids)` assigne chaque point du dataset au cluster dont le centroïde est le plus proche.

K-means

Algorithm 1: `k_means(dataset, k, stop_dist, max_iter)`

```
iter = 0
dist = [inf] * k
stop_dist = [stop_dist] * k
centroids = initialize_centroids(dataset)
while (dist > stop_dist).any() and iter ≤ max_iter do
    clusters = assign_clusters(dataset, centroids)
    new_centroids = compute_centroids(dataset, clusters)
    dist = norm(centroids − new_centroids)
    centroids = new_centroids
    iter = iter + 1
end
return clusters, centroids
```

- où `assign_clusters(dataset, centroids)` assigne chaque point du dataset au cluster dont le centroïde est le plus proche.

K-means

Algorithm 1: `k_means(dataset, k, stop_dist, max_iter)`

```
iter = 0
dist = [inf] * k
stop_dist = [stop_dist] * k
centroids = initialize_centroids(dataset)
while (dist > stop_dist).any() and iter ≤ max_iter do
    clusters = assign_clusters(dataset, centroids)
    new_centroids = compute_centroids(dataset, clusters)
    dist = norm(centroids − new_centroids)
    centroids = new_centroids
    iter = iter + 1
end
return clusters, centroids
```

- où `assign_clusters(dataset, centroids)` assigne chaque point du dataset au cluster dont le centroïde est le plus proche.

K-means

Algorithm 1: `k_means(dataset, k, stop_dist, max_iter)`

```
iter = 0
dist = [inf] * k
stop_dist = [stop_dist] * k
centroids = initialize_centroids(dataset)
while (dist > stop_dist).any() and iter ≤ max_iter do
    clusters = assign_clusters(dataset, centroids)
    new_centroids = compute_centroids(dataset, clusters)
    dist = norm(centroids − new_centroids)
    centroids = new_centroids
    iter = iter + 1
end
return clusters, centroids
```

- où `assign_clusters(dataset, centroids)` assigne chaque point du dataset au cluster dont le centroïde est le plus proche.

K-means

Algorithm 1: `k_means(dataset, k, stop_dist, max_iter)`

```
iter = 0
dist = [inf] * k
stop_dist = [stop_dist] * k
centroids = initialize_centroids(dataset)
while (dist > stop_dist).any() and iter ≤ max_iter do
    clusters = assign_clusters(dataset, centroids)
    new_centroids = compute_centroids(dataset, clusters)
    dist = norm(centroids − new_centroids)
    centroids = new_centroids
    iter = iter + 1
end
return clusters, centroids
```

- où `assign_clusters(dataset, centroids)` assigne chaque point du dataset au cluster dont le centroïde est le plus proche.

K-means

Algorithm 1: `k_means(dataset, k, stop_dist, max_iter)`

```
iter = 0
dist = [inf] * k
stop_dist = [stop_dist] * k
centroids = initialize_centroids(dataset)
while (dist > stop_dist).any() and iter ≤ max_iter do
    clusters = assign_clusters(dataset, centroids)
    new_centroids = compute_centroids(dataset, clusters)
    dist = norm(centroids − new_centroids)
    centroids = new_centroids
    iter = iter + 1
end
return clusters, centroids
```

- où `assign_clusters(dataset, centroids)` assigne chaque point du dataset au cluster dont le centroïde est le plus proche.

K-means

Algorithm 1: `k_means(dataset, k, stop_dist, max_iter)`

```
iter = 0
dist = [inf] * k
stop_dist = [stop_dist] * k
centroids = initialize_centroids(dataset)
while (dist > stop_dist).any() and iter ≤ max_iter do
    clusters = assign_clusters(dataset, centroids)
    new_centroids = compute_centroids(dataset, clusters)
    dist = norm(centroids − new_centroids)
    centroids = new_centroids
    iter = iter + 1
end
return clusters, centroids
```

- où `assign_clusters(dataset, centroids)` assigne chaque point du dataset au cluster dont le centroïde est le plus proche.

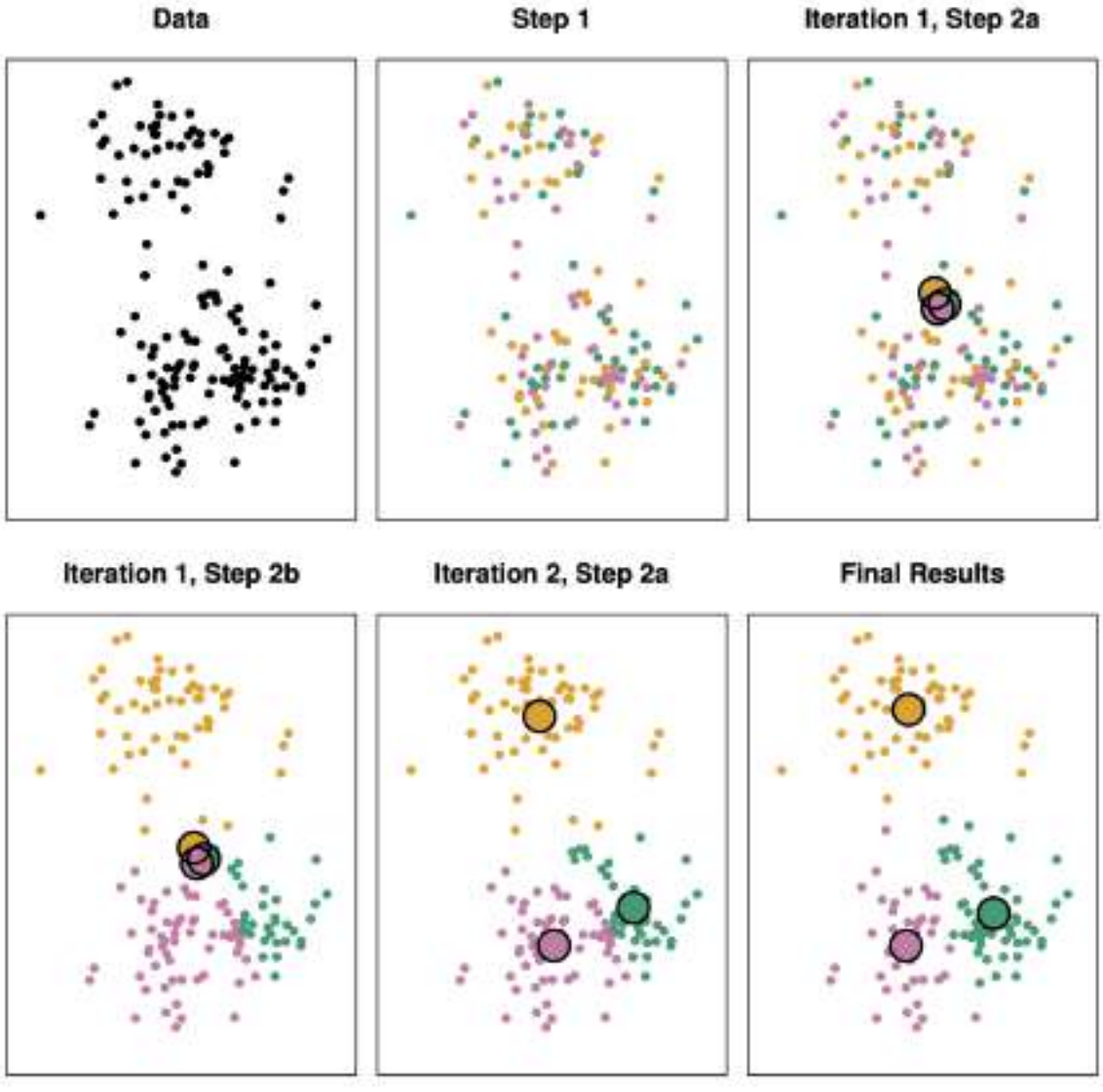
K-means

Algorithm 1: `k_means(dataset, k, stop_dist, max_iter)`

```
iter = 0
dist = [inf] * k
stop_dist = [stop_dist] * k
centroids = initialize_centroids(dataset)
while (dist > stop_dist).any() and iter ≤ max_iter do
    clusters = assign_clusters(dataset, centroids)
    new_centroids = compute_centroids(dataset, clusters)
    dist = norm(centroids − new_centroids)
    centroids = new_centroids
    iter = iter + 1
end
return clusters, centroids
```

- où `assign_clusters(dataset, centroids)` assigne chaque point du dataset au cluster dont le centroïde est le plus proche.

K-Means


Data
Step 1
Iteration 1, Step 2a
Iteration 1, Step 2b
Iteration 2, Step 2a
Final Results

Bibliographie


James, G., Witten, D., Hastie, T., and Tibshirani, R. (2013).
An Introduction to Statistical Learning: with Applications in R, volume 103 of *Springer Texts in Statistics*.
Springer, New York.