

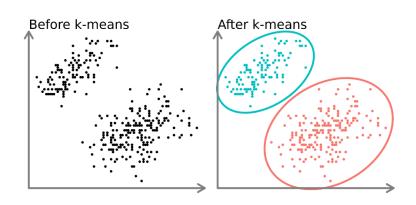
Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías



Universidad de Guadalajara

Práctica 7: k-medias (k-means)

Aprendizaje Máquina



Alumno: Samuel David Pérez Brambila

Código: 222966286

Profesora: Karla Ávila Cárdenas

Sección: D01

Fecha de Entrega: 10 de Noviembre de 2024

Introducción

El algoritmo k-means es "un método de agrupamiento que divide un conjunto de datos en k grupos o clusters. Los datos se agrupan de tal manera que los puntos en el mismo clúster sean más similares entre sí que los puntos en otros clusters." (Ramírez, 2023)

Del grupo de los algoritmos de aprendizaje no supervisado, K-means sigue siendo uno de los algoritmos más conocidos para el aprendizaje no supervisado, aunque alternativas más avanzadas como DBSCAN o algoritmos basados en clustering espectral han ganado popularidad en ciertos escenarios debido a su capacidad para manejar conjuntos de datos más complejos y de mayor dimensión. De acuerdo con Ramírez (2023), la razón por la que existe este método es porque en 2024, la cantidad total de datos creados, capturados, copiados y consumidos globalmente ha superado los 200 Zettabytes, impulsada principalmente por el crecimiento de dispositivos IoT, la inteligencia artificial generativa y las redes 5G. Con el algoritmo k-means es posible recopilar grandes cantidades de información similar en un mismo lugar, hecho que ayuda a encontrar patrones y hacer predicciones en grandes conjuntos de datos.

Para implementar el algoritmo K-means, primero se especifica el número de clusters deseados (k). Por ejemplo, al establecer k igual a 2, su conjunto de datos se agrupará en 2 grupos, mientras que, si establece k igual a 4 agrupará los datos en 4 grupos. Cada grupo está representado por su centro o centroide, que corresponde a la media aritmética de los puntos de datos asignados al grupo. De esta manera, el algoritmo funciona a través de un proceso iterativo hasta que cada punto de datos está más cerca del centroide de su propio grupo que de los centroides de otros grupos, minimizando la distancia dentro del grupo en cada paso. A continuación, se detalla paso a paso el funcionamiento de este algoritmo:

- Especificar el número de clústeres deseados (k): El primer paso es especificar cuántos clústeres queremos dividir el conjunto de datos. Este número se denomina k.
- Seleccionar k puntos al azar del conjunto de datos como los centroides iniciales de cada clúster: Luego, se eligen k puntos al azar del conjunto de datos para servir como los centroides iniciales de cada clúster. Estos centroides son el punto central o el promedio de cada clúster.
- 3. Asignar cada punto del conjunto de datos al clúster cuyo centroide esté más cerca: A continuación, el algoritmo asigna cada punto del conjunto de datos al clúster cuyo centroide esté más cerca. Para hacer esto, se calcula la distancia entre cada punto y cada centroide y se asigna el punto al clúster cuyo centroide tenga la menor distancia.

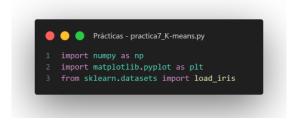
- 4. Recalcular los centroides de cada clúster como la media de todos los puntos del clúster: Una vez que todos los puntos han sido asignados a un clúster, se recalculan los centroides de cada clúster como la media de todos los puntos del clúster. Esto significa que se actualiza la posición del centroide para reflejar la nueva agrupación.
- 5. Repetir los pasos 3 y 4 hasta que los centroides de los clústeres ya no cambien o hasta que se alcance el número máximo de iteraciones.

Teniendo entendido cómo debe ser la implementación del algoritmo K-Means, en la siguiente práctica se implementará un algoritmo de este tipo utilizando el dataset de Iris. Para desarrollar este modelo, emplearemos librerías adicionales como Numpy, Pandas, Matplotlib, entre otras, que facilitarán la carga, procesamiento y visualización de los resultados.

Contenido de la Actividad

El presente código implementa el algoritmo de K-means para el conjunto de datos de Iris, el cual contiene tres clases de flores (setosa, versicolor, y virginica), utilizando 4 características: largo y ancho del sépalo, y largo y ancho del pétalo. Se aplican tres configuraciones de K-means con 3, 5 y 10 centroides, para explorar la agrupación del conjunto de datos en estos distintos niveles de granularidad. Cada agrupación muestra los datos de Iris junto con los centroides y una simbología que ayuda a identificar cada grupo. Además, el código calcula e imprime las distancias entre los centroides en cada configuración de K-means utilizando las métricas Manhattan, Euclidiana (Minkowski con p=2), y Chebyshev, proporcionando una idea de la proximidad relativa entre los grupos en cada caso.

Importación de bibliotecas para tratamiento de datos



- <u>import numpy as np:</u> numpy se usa para manejar arreglos y realizar operaciones matemáticas avanzadas de forma eficiente, como la manipulación de matrices y el cálculo de distancias entre puntos.
- <u>import matplotlib.pyplot as plt:</u> matplotlib.pyplot es una biblioteca para visualizar gráficos en Python. Aquí se utiliza para mostrar la distribución de los clusters y sus centroides.
- from sklearn.datasets import load_iris: load_iris permite cargar el conjunto de datos de Iris, que contiene información sobre tres especies de flores: setosa, versicolor, y virginica, con características como el ancho y largo del sépalo y del pétalo.

Definición de la clase KMeans

```
Prácticas - practica7_K-means.py

class KMeans:

def __init__(self, n_clusters, max_iter=1300):

self.n_clusters = n_clusters

self.max_iter = max_iter
```

- <u>Clase KMeans:</u> Esta clase implementa el algoritmo de K-means, que agrupa datos en un número específico de clusters (n_clusters).
- Método init : Este es el inicializador de la clase.
 - self.n_clusters: Define la cantidad de clusters (grupos) en los que se quiere dividir los datos.
 - o <u>self.max_iter:</u> Limita el número de iteraciones que el algoritmo ejecutará al intentar encontrar la mejor agrupación de datos.

Inicialización de los centroides (entrenar el modelo)

```
Prácticas - practica7_K-means.py

10 def fit(self, X):
11 # Paso 1: Inicialización de los centroides
12 self.centroids = X[np.random.choice(X.shape[0], self.n_clusters, replace=False)]
```

- <u>Método fit:</u> Este método ejecuta el algoritmo de K-means. Recibe como entrada X, el conjunto de datos.
- Inicialización de Centroides:
 - self.centroids selecciona aleatoriamente n_clusters puntos del conjunto de datos X para servir como los centroides iniciales.
 - o <u>np.random.choice(X.shape[0], self.n_clusters, replace=False)</u> selecciona índices al azar de X sin repetición (replace=False), asegurando que cada centroide sea único.

Iteración para Actualización de Centroides

```
Prácticas - practica7_K-means.py

14 for _ in range(self.max_iter):

15  # Paso 2: Asignar etiquetas al centroide más cercano

16  labels = self._assign_labels(X)
```

- Un ciclo for se ejecuta hasta max iter veces o hasta que el modelo converja.
- <u>Asignación de Etiquetas:</u> labels = self._assign_labels(X) asigna a cada punto en X el índice del centroide más cercano.

Actualización de Centroides

```
Prácticas - practica7_K-means.py

18  # Paso 3: Actualizar los centroides
19  new_centroids = np.array([X[labels == i].mean(axis=0) for i in range(self.n_clusters)])
```

- Esta línea calcula el nuevo centroide para cada cluster promediando las posiciones de los puntos asignados a dicho clúster.
- X[labels == i] selecciona todos los puntos etiquetados con i.
- mean(axis=0) calcula el promedio en cada dimensión (característica) para obtener las coordenadas del nuevo centroide.

Comprobación de convergencia

```
Prácticas - practica7_K-means.py

21  # Comprobar convergencia
22  if np.all(self.centroids == new_centroids):
23  break
24  self.centroids = new_centroids
```

- np.all(self.centroids == new_centroids) compara los centroides actuales con los nuevos. Si son iguales, el algoritmo ha convergido y el ciclo for se detiene (break).
- <u>self.centroids = new_centroids</u> actualiza los centroides para la siguiente iteración si aún no han convergido.

Finalización de fit (o entrenamiento)

```
Prácticas - practica7_K-means.py

26 self.labels_ = labels

27 return self
```

Guarda las etiquetas finales en self.labels_, que identifica a qué cluster pertenece cada punto, y devuelve el objeto KMeans ajustado.

Método _assign_labels para asignar etiquetas

```
Prácticas - practica7_K-means.py

def _assign_labels(self, X):

# Calcular distancias de cada punto a cada centroide

distances = np.sqrt(((X[:, np.newaxis] - self.centroids) ** 2).sum(axis=2))

return np.argmin(distances, axis=1)
```

- Método assign labels: Asigna a cada punto en X la etiqueta del centroide más cercano.
 - Cálculo de Distancias: np.sqrt(((X[:, np.newaxis] self.centroids) **
 2).sum(axis=2)) calcula la distancia euclidiana entre cada punto de X y cada centroide.
 - Asignación de Etiquetas: np.argmin(distances, axis=1) devuelve el índice del centroide más cercano para cada punto en X.

Funciones de distancia

```
Prácticas - practica7_K-means.py

# Funciones de distancia
def distancia_manhattan(p, q):
return np.sum(np.abs(q - p))

def distancia_minkowski(p, q, p_value):
return np.power(np.sum(np.power(np.abs(q - p), p_value)), 1 / p_value)

def distancia_chebyshev(p, q):
return np.max(np.abs(q - p))
```

• <u>Distancia de Manhattan:</u> Calcula la suma de las diferencias absolutas entre cada coordenada de p y q.

- <u>Distancia de Minkowski:</u> Generaliza la distancia euclidiana. Con p_value = 2, equivale a la distancia euclidiana. Es útil para diferentes métricas de distancia.
- <u>Distancia de Chebyshev:</u> Toma la mayor diferencia absoluta entre las coordenadas de p y q, reflejando la mayor distancia en cualquier dimensión.

Cargar el dataset Iris

```
Prácticas - practica7_K-means.py

44  # Cargar el conjunto de datos de Iris

45  data = load_iris()

46  X = data.data
```

<u>load_iris()</u> carga el conjunto de datos y <u>data.data</u> contiene las características de las flores.

Ejecución de K-Means y Cálculo de Distancias

```
Prácticas - practica7_K-means.py

# Aplicar K-Means con 3, 5 y 10 centroides

for n_clusters in [3, 5, 10]:

kmeans_custom = KMeans(n_clusters=n_clusters)

kmeans_custom.fit(X)

centroids = kmeans_custom.centroids

labels = kmeans_custom.labels_
```

Ajustar Modelo para Diferentes Clusters:

Para eficientar el algoritmo, a través de un for se define que haga el proceso de 3, 5 y 10 clústeres desde un inicio, esto lo que hará es primer hacer el proceso para 3 clústeres, al finalizar haría para 5 clústeres y ya al final el de 10 clústeres, así ya no hay necesidad de ajustarlo manualmente.

- o Se define el número de clusters como 3, 5, y 10.
- Para cada configuración, se ajusta el modelo y se obtienen los centroides y etiquetas.

Cálculo e impresión de distancias entre clústeres

Muestra las distancias entre cada par de centroides en cada configuración de clusters usando las métricas de Manhattan, Minkowski (Euclidiana) y Chebyshev.

Visualización con Leyenda de Clusters

```
Prácticas - practica7_K-means.py

# Visualización con cuadro de simbología

plt.figure()

scatter = plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=labels, s=50, cmap='viridis')

plt.scatter(centroids[:, 0], centroids[:, 1], c='red', s=200, alpha=0.5, label='Centroides')

plt.title(f'clustering K-Means con {n_clusters} Centroides')

plt.xlabel(data.feature_names[0])

plt.ylabel(data.feature_names[1])
```

Visualización de Clusters:

- Se genera una gráfica que muestra cada punto coloreado según su etiqueta y el centroide de cada cluster en rojo.
- data.feature_names[0] y [1] se utilizan para etiquetar los ejes con los nombres de las características.

• Leyenda de clústeres:

 Aplicamos un condicional, donde para el caso de 3 clústeres, le colocamos el nombre a cada clúster en base a la especie incluida en el dataset, solamente aplicaría para el de 3, ya que solamente se incluyen las especies "Setosa", "Versicolor" y "Virginica" en el dataset.

- Define la leyenda para diferenciar visualmente cada cluster, usando legend_labels.
- o plt.legend crea una leyenda final que identifica los clusters y sus centroides en el gráfico.

Es así que obtenemos los siguientes resultados, donde tenemos las condiciones de 3, 5 y 10 clústeres aplicando K-means:

```
Distancias para 3 centroides:
Centroides 1 y 2:

- Distancia Manhattan: 8.303473684210527

- Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 5.017568519752919

- Distancia Chebyshev: 4.280105263157893
Centroides 1 y 3:

- Distancia Manhattan: 5.6946451612903255

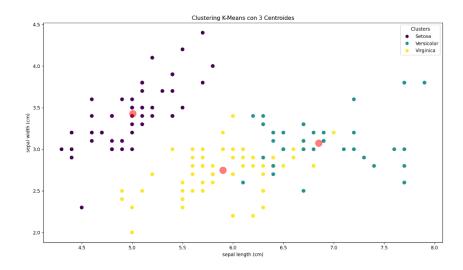
- Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 3.35693454695641

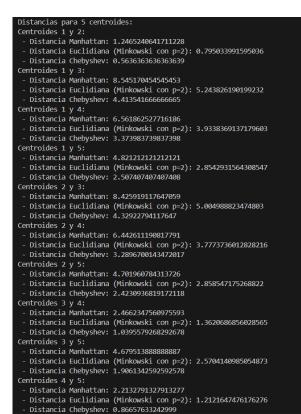
- Distancia Chebyshev: 2.931548387096775
Centroides 2 y 3:

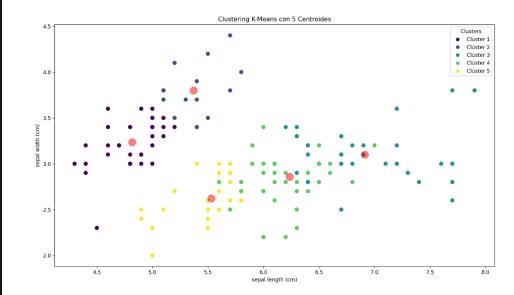
- Distancia Manhattan: 3.259422750424444

- Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 1.7971817988854295

- Distancia Chebyshev: 1.3485568760611182
```







Distancias para 10 centroides: Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 3.854694908745201 Distancia Chebyshev: 3.175 Centroides 1 y 3: - Distancia Manhattan: 1.485135135135134 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 0.840493828544723 Distancia Chebyshev: 0.6804054054054047 Centroides 1 y 4: - Distancia Manhattan: 6.353846153846153 - Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 3.5947138211019376 - Distancia Chebyshev: 3.036538461538461 Distancia Manhattan: 6.420000000000002 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 3.742445724389333 Distancia Chebyshev: 3.05499999999997 Distancia Manhattan: 6.437499999999999 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 3.5767259819561237 Distancia Chebyshev: 2.887499999999999 - Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 0.9100848631648953 - Distancia Chebyshev: 0.6101851851851858 Distancia Manhattan: 6.1000000000000005 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 3.389675500693245 Distancia Chebyshev: 2.795 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 3.562849982808706 Distancia Chebyshev: 3.024999999999999

Centroides 1 y 5: Centroides 1 y 7: - Distancia Manhattan: 1.6407407407407413 Centroides 1 y 8: Centroides 1 y 9: - Distancia Manhattan: 6.22 Centroides 1 y 10: - Distancia Manhattan: 3.8406249999999984 - Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 1.9793588174267436 - Distancia Chebyshev: 1.371874999999993 Centroides 2 y 3:
Distancia Manhattan: 6.9909909909905
Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 4.20298199737792
Distancia Chebyshev: 3.52972972972988

Distancia Manhattan: 0.8475000000000000

Centroides 6 y 8:

Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 0.5059582492656882 Distancia Chebyshev: 0.407499999999975

entroides 2 y 4 Distancia Manhattan: 1.0803418803418798 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 0.7095798355299581 Distancia Chebyshev: 0.6350427350427355 Centroides 2 y 5: Distancia Manhattan: 2.211111111111111 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 1.4256053511697933 Distancia Chebyshev: 1.1088888888888 Distancia Manhattan: 1.69861111111111 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 0.9915139549393667 Distancia Chebyshev: 0.7013888888888 Distancia Manhattan: 5.225925925925925 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 3.0710136483793478 Distancia Chebyshev: 2.659259259259259 Distancia Manhattan: 1.21111111111111 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 0.6404126755942043 Distancia Chebyshev: 0.428888888888888888 Distancia Manhattan: 0.6466666666666665 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 0.394708831581452 Distancia Chebyshev: 0.3188888888888 Centroides 2 y 10: - Distancia Manhattan: 8.957291666666668 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 5.493315647814174 Distancia Chebyshev: 4.5468749999999999

ntroides 3 y 7: Distancia Manhattan: 2.272172172172171

Distancia Chebyshev: 0.8704704704704693

Centroides 3 y 9: - Distancia Manhattan: 6.344324324324324

Centroides 4 y 6: - Distancia Manhattan: 0.6182692307692301

Centroides 4 y 8: - Distancia Manhattan: 0.6661538461538461

Centroides 4 y 9: - Distancia Manhattan: 0.8123076923076914

Distancia Manhattan: 8.444471153846152

Distancia Chebyshev: 4.40841346153846

Distancia Chebyshev: 1.0171452702702704

entroides 3 y 8:

ntroides 4 y 7:

Centroides 4 y 10:

Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 1.240692938892725

Distancia Manhattan: 6.224324324324325 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 3.6736027143457948 Distancia Chebyshev: 3.149729729729729

Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 3.9433529614434035 Distancia Chebyshev: 3.3797297297297284

Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 1.3189803934369502

- Distancia Chebyshev. 1.01714/2702704 Centroides 4 y 5: - Distancia Manhattan: 1.1676923076923078 - Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 0.7674271162124943 - Distancia Chebyshev: 0.5984615384615397

Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 0.3904923591369987 Distancia Chebyshev: 0.35096153846153877

Distancia Manhattan: 4.713105413105411 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 2.8590277329191527 Distancia Chebyshev: 2.520797720797721

Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 0.3595164405224291 Distancia Chebyshev: 0.24153846153846126

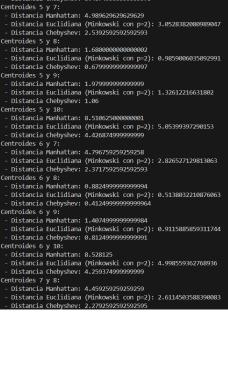
Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 0.560032754747909 Distancia Chebyshev: 0.46153846153846034

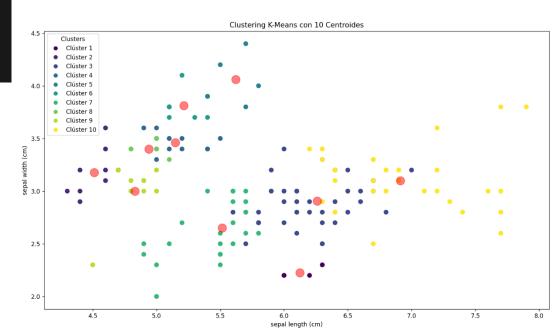
Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 5.1308793138940905

Centroides 3 y 4:
- Distancia Manhattan: 6.478170478170477 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 3.8805458915830573 Distancia Chebyshev: 3.39126819126819 Centroides 3 y 5: - Distancia Manhattan: 6.544324324324326

Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 3.8942653798623867 Distancia Chebyshev: 3.4097297297297287 Centroides 3 y 6: - Distancia Manhattan: 6.5618243243243235

Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 3.780965392792883 Distancia Chebyshev: 3.2422297297297287 Distancia Manhattan: 4.579259259259259
Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 2.8217027323964725
Distancia Chebyshev: 2.5092592592592595 entroides 7 y 10: - Distancia Manhattan: 4.627662037037036 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 2.5528553910078755 Distancia Chebyshev: 1.8876157407407397 Centroides 8 y 9: - Distancia Manhattan: 0.91999999999999 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 0.5073460357586322 Distancia Chebyshev: 0.39999999999947 Centroides 8 y 10: - Distancia Manhattan: 8.190625 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 4.940696315108327 Distancia Chebyshev: 4.16687499999999 Distancia Manhattan: 8.510624999999997 Distancia Euclidiana (Minkowski con p=2): 5.23536460794518 Distancia Chebyshev: 4.39687499999999





Conclusiones

Al concluir la práctica de agrupamiento utilizando el algoritmo K-means en Python, se ha evidenciado que este método es una herramienta efectiva para resolver problemas de clasificación no supervisada. A lo largo del proceso, se enfatizó la importancia de seleccionar adecuadamente el número de clusters, ya que este parámetro impacta directamente en la capacidad del modelo para representar la estructura subyacente de los datos, algo que pudimos visualizar al momento de hacer 3 casos distintos (3, 5 y 10 clústeres).

Durante el desarrollo del modelo, se destacó la relevancia de la preparación de los datos, como la correcta normalización y selección de características, que influye en el rendimiento de K-means. Además, el cálculo de distancias entre los centroides permitió una comprensión más profunda de las relaciones entre los distintos grupos, lo cual es esencial para la interpretación de los resultados.

El uso de visualizaciones gráficas facilitó la identificación de los clústeres y sus centroides, ofreciendo una representación clara de cómo se agrupan los datos en el espacio de características. Esta representación visual fue particularmente útil para observar la distribución de las distintas especies en el conjunto de datos de Iris y cómo K-means las clasifica.

Asimismo, el análisis de las distancias entre los centroides proporcionó información valiosa sobre la separabilidad de los clústeres y permitió evaluar la efectividad del modelo. Las métricas utilizadas para cuantificar estas distancias, como las de Manhattan, Minkowski y Chebyshev, ofrecieron diferentes perspectivas sobre la estructura de los datos y la relación entre los clústeres.

En resumen, esta práctica ha demostrado que K-means es un enfoque robusto para la agrupación de datos en un contexto no supervisado, enfatizando la importancia de la elección adecuada de hiperparámetros y la visualización de resultados. La experiencia adquirida ha sido fundamental para comprender mejor los fundamentos del aprendizaje no supervisado, proporcionando una base sólida para futuros proyectos en el ámbito de la ciencia de datos y el aprendizaje automático. Herramientas como NumPy y Matplotlib han sido cruciales en el desarrollo de modelos, subrayando su utilidad en el análisis y visualización de datos.

Referencias

Ramírez, L. (2023, 5 de enero). Algoritmo k-means: ¿Qué es y cómo funciona?. IEBS School. Recuperado el 31 de Octubre de 2024 de: https://www.iebschool.com/blog/algoritmo-k-means-que-es-y-como-funciona-big-data/