MUBD

Màster Universitari en Enginyeria de Dades Massives (Big Data)

Estadística

Índice – Clusterización jerárquica

Introducción

Objetivo

- Se desea formar grupos de observaciones similares entre sí y distintas entre grupos según unas características determinadas.
- Es un problema de clasificación de instancias.
- Hay distintas metodologías (algoritmos) de alcanzar este objetivo
  - Clusterización jerárquica
  - K-means
  - …

Introducción

Aplicabilidad

- Biología
  - Agrupar organismos en especies
  - Agrupar en familias genéticas
- Medicina
  - Análisis de imágenes
- Marketing
  - Crear segmentos de consumidores
  - Clasificación de productos
- Sociología
  - Organizar comunidades a través de relaciones en las redes sociales
  - Identificar grupos de estudiantes dentro de una comunidad educativa
- Otros…

Introducción

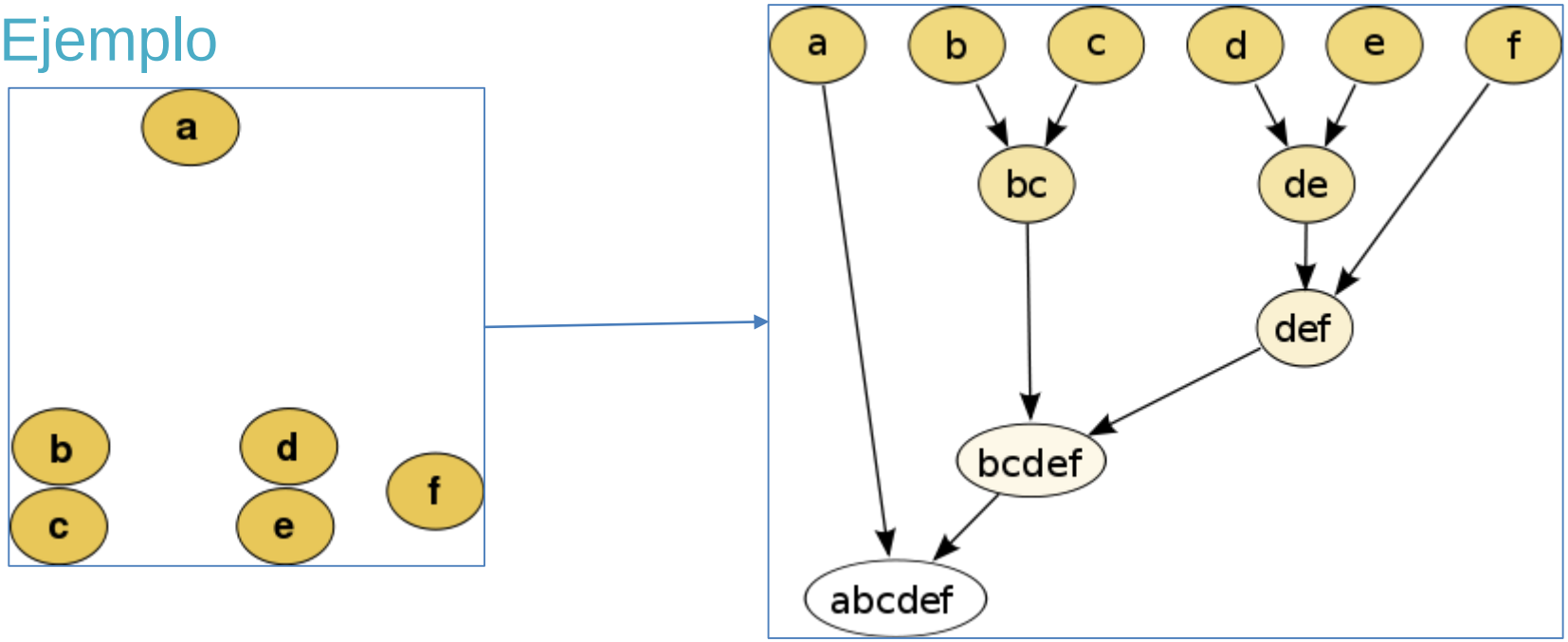
Tipos de problemas

- No supervisado (Clustering analysis)
  - Sin variable respuesta
  - Evaluación de la calidad del algoritmo complicada
  - Ej: clusterización jerárquica, K-means

- Supervisado (Discriminant analysis)
  - Se dispone de una variable respuesta
  - Fácil evaluación de la capacidad predictiva
  - Ej: conditional trees, random forest, KNN, Naive-Bayes, SVM

Clusterización jerárquica

Ejemplo



	A	B	C	D	E	F
A						
B	6					
C	7	1				
D	6	3	4			
E	7	4	3	1		
F	8	5	5	2	2	

	A	B-C	D-E	F
A				
B-C	7			
D-E	7	4		
F	8	5	2	

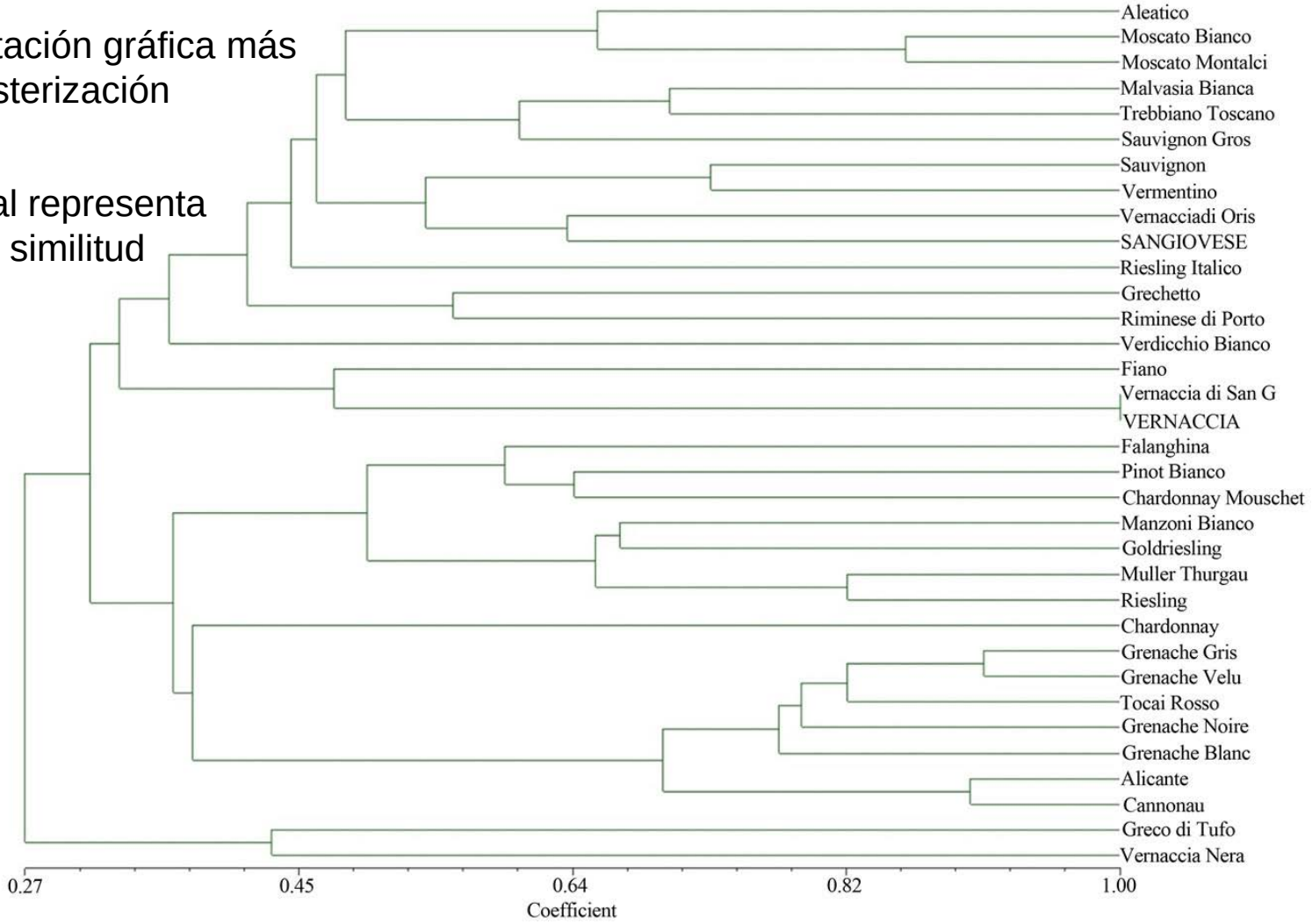
	A	B-C	D-E-F
A			
B-C	7		
D-E-F	8	5	

	A	B-C-D-E-F
A		
B-C-D-E-F	8	

Clusterización jerárquica

Dendograma

- Es la representación gráfica más usual de la clusterización jerárquica
- El eje horizontal representa una medida de similitud



Clusterización jerárquica

Introducción

- Ventajas
  - No es imprescindible tener variables cuantitativas (aunque es más usual) ya que se pueden definir distancias para variables categóricas
  - No requiere definir el número de agrupaciones a priori. Se calcula un árbol jerárquico independientemente de los grupos
  - El árbol permite visualizar de forma intuitiva distancias entre individuos para tamaños muestrales no muy grandes

- Inconvenientes
  - Requiere definir un tipo de distancia
  - Requiere el cálculo de todos los pares de distancias. Mayor tiempo de computación para muestras grandes (>500)

Clusterización jerárquica

Proceso

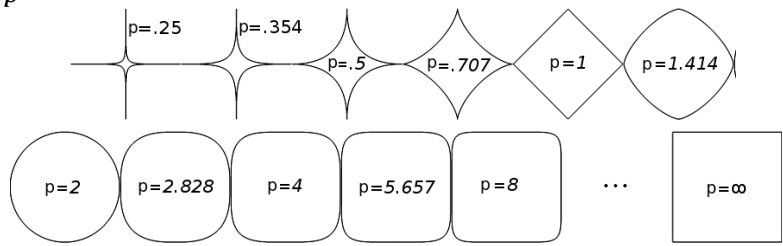
Al realizar una clusterización jerarárquica, se deben realizar los siguientes pasos (en azul, decisiones a tomar):

1. Decidir el tipo de distancia a emplear (euclídea, manhattan…)
2. Construir la matriz de disimilitudes
3. Decidir el método de agrupación (aglomerativo o divisivo)
4. Decidir el sub-método de agrupación (Ward, completo…)
5. Aplicar el algoritmo de clusterización
6. Decidir el criterio para realizar la partición de los clústeres
7. Particionar la muestra

Distancias entre observaciones

Tipos

- ***Minkowski*** $d(i,l) = \left(\sum_{k=1}^{K} |x_{ik} - x_{lk}|^p\right)^{\frac{1}{p}}$
  - ***Manhattan*** *(p = 1)* $d(i,l) = \sum_{k=1}^{K} |x_{ik} - x_{lk}|$
  - ***Euclídea*** *(p = 2)* $d^2(i,l) = \sum_{k=1}^{K} (x_{ik} - x_{lk})^2$
  - ***Máxima*** *(p = ∞)* $d(i,l) = \max_k \|x_{ik} - x_{lk}\|$



- ***Mahalanobis*** $d^2(i,l) = (x_i - x_l)^{\mathrm{T}}\, \Sigma^{-1} (x_i - x_l)$ → Σ es la matriz de var-covar

- ***Canberra*** $d(i,l) = \sum_{k=1}^{K} \frac{|x_{ik} - x_{lk}|}{|x_{ik} + x_{lk}|}$

- ***Gower*** $d_k(i,l) = \sum_{k=1}^{n} d_k(i,l) \rightarrow d_k(i,l) = \begin{cases} 1 \; si \; i_k \neq j_k \\ 0 \; si \; i_k = j_k \end{cases}$ (variables categóricas)

- ***Índice de Jaccard*** $d(i,l) = \frac{\boldsymbol{n_{++}}}{\boldsymbol{n_{++}} + \boldsymbol{n_{+-}} + \boldsymbol{n_{-+}}}$ (variables categóricas)

Distancias entre grupos de observaciones

Tipos

- ***Simple.*** Mínima distancia entre dos puntos pertenecientes uno a cada grupo
- ***Completa.*** Máxima distancia entre dos puntos pertenecientes uno a cada grupo
- ***Entre centros de gravedad.*** Distancia entre los centros de gravedad
- ***Criterio de Ward.*** No es una distancia en sí, sino un criterio para hacer la agrupación que consiste en minimizar la inercia.

Inercia

Definición

- La inercia es una medida de la heterogeneidad existente en un conjunto de datos.
- Dada una partición en Q grupos formados por I_q elementos en un espacio K-dimensional (K variables) se define:

Inercia Total	$\sum_{k=1}^{K}\sum_{q=1}^{Q}\sum_{i=1}^{I_q}\left(y_{iqk}-\bar{y}_k\right)^2$	*[Distancia de cada punto al centro de gravedad]*
Inercia Entre-grupo	$\sum_{k=1}^{K}\sum_{q=1}^{Q} I_q\left(\bar{y}_{qk}-\bar{y}_k\right)^2$	*[Distancia del centro de los grupos al centro global]*
Inercia Intra-grupo	$\sum_{k=1}^{K}\sum_{q=1}^{Q}\sum_{i=1}^{I_q}\left(y_{iqk}-\bar{y}_{qk}\right)^2$	*[Distancia de cada punto al centro de su grupo]*

- Se cumple que:

Inercia Total = Inercia Entre-grupo + Inercia Intra-grupo

Inercia

Propiedades

- La calidad de una partición puede medirse como el % de variabilidad explicada por los grupos (similar al R^2 del modelo lineal), es decir:

$$Variabilidad\ explicada = \frac{Inercia \quad entre\text{-}grupos}{Inercia\ total}$$

- El porcentaje de variabilidad explicada siempre crece a medida que se incrementan el número de grupos:

Mayor número de grupos → **Más** variabilidad explicada → **Más** inercia entre-grupos

Menor número de grupos → **Menos** variabilidad explicada → **Menos** inercia entre-grupos

Método de agrupación

Aglomerativo vs. Divisivo

- El agrupamiento ***aglomerativo*** es el más común: AGNES (AGglomerative NESting).
  - Funciona de una manera **ascendente**
  - El algoritmo comienza tratando cada objeto como un único clúster.
  - En cada iteración, los 2 clústeres más similares se combinan en un nuevo clúster (nodo). Este proceso se repite hasta que todos los puntos pertenezcan a un único gran grupo (raíz)
- El proceso inverso de la agrupación aglomerativa es la agrupación ***divisiva***, también conocida como DIANA (Divisve ANAlysis)
  - Funciona de manera **descendente**
  - Comienza con la raíz, en la cual todos los objetos están incluidos en un solo grupo.
  - En cada iteración, el clúster más heterogéneo se divide en dos. El proceso se itera hasta que todos los objetos sean un único clúster.
- La agrupación aglomerativa es buena para identificar pequeños grupos y la divisiva sirve para identificar grandes agrupaciones.

Criterio de Ward

Agrupación

- Se parte de *Q* clústeres
- Se desea una agrupación ideal que pase a *Q-1* clústeres
- Sea el clúster *p* (con centro de gravedad g_p y tamaño I_p) y el clúster *q* (con centro de gravedad g_q y tamaño I_q). El incremento en la inercia intra-grupo se cuantifica por:

$$\Delta(p,q) = \frac{I_p I_q}{I_p + I_q} d^2(g_p, g_q)$$

- El criterio de Ward consiste en juntar aquellos clústeres tales que minimicen el cambio en la inercia intra-grupo.
- Este criterio favorece juntar:
  - Los clústeres cercanos
  - Los clústeres pequeños

Clusterización jerárquica

Algoritmo aglomerativo

1. Construir la matriz de distancias

2. Se escogen los dos puntos (o agrupaciones de puntos) más próximos o según algún criterio (p.ej, Ward)

3. Se representa la agrupación uniendo ambos puntos (o agrupaciones) a una altura equivalente a la distancia (o al cambio en la inercia).

4. Se actualiza la matriz de distancias agrupando las filas y las columnas correspondientes a los puntos agrupados y recalculando las distancias de todos los puntos al nuevo conglomerado.

5. Se vuelve al punto 2 mientras queden agrupaciones posibles

Calidad del árbol jerárquico

Distancia y correlación cofenética

- Para evaluar la calidad del árbol construido se deben comparar cuán similares son las distancias (alturas) producidas por el dendograma respecto a las distancias originales.
- Las distancias obtenidas del dendograma se denominan **distancias cofenéticas**.
- Para evaluar la calidad, se calcula la **correlación cofenética** entre estas distancias y las distancias originales.
- Si la agrupación es válida, debe existir una fuerte correlación entre estas distancias. Se considera que los valores superiores a 0.75 son aceptables.
- Escoger distancias “medias” para la agrupación produce valores altos de esta correlación.

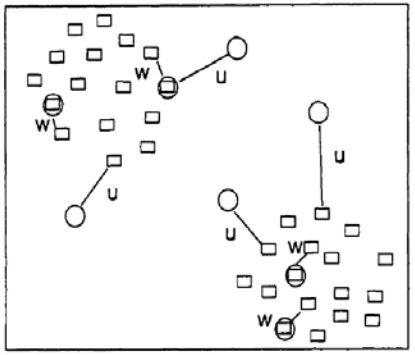
Clusterización jerárquica

Número de clústeres

- Una vez se tiene el dendograma, se debe definir una partición en *K* clústeres.
- Criterios para escoger una partición:
  - **Visual**. A partir del dendograma
  - **Cambio de inercia**
    - Regla del codo.
    - Minimizar el cociente Δ(q) / Δ(q+1) donde Δ(q) es el cambio en la inercia intra al pasar de *q* a *q-1* clústeres
  - **Parsimonia**. No es conveniente escoger un gran número de clústeres
  - **Interpretabilidad**. Los grupos deben tener algún sentido

Tendencia a la agrupación

Estadístico de Hopkins



- Escoger n puntos aleatorios D'=(p_1,…,p_n) de nuestro conjunto de datos (D)
- Para cada punto $p_i \in D'$, buscar su vecino más próximo $p_j \in D$ y calcular su distancia (w_i)
- Generar un conjunto de datos simulado (R) con distribución uniforme con n puntos (q_1,…,q_n) y la misma variabilidad que el conjunto de datos D.
- Para cada punto $q_i \in D$, buscar su vecino más próximo dentro del conjunto real de puntos y calcular su distancia (u_i)
- El estadístico de *Hopkins* será:

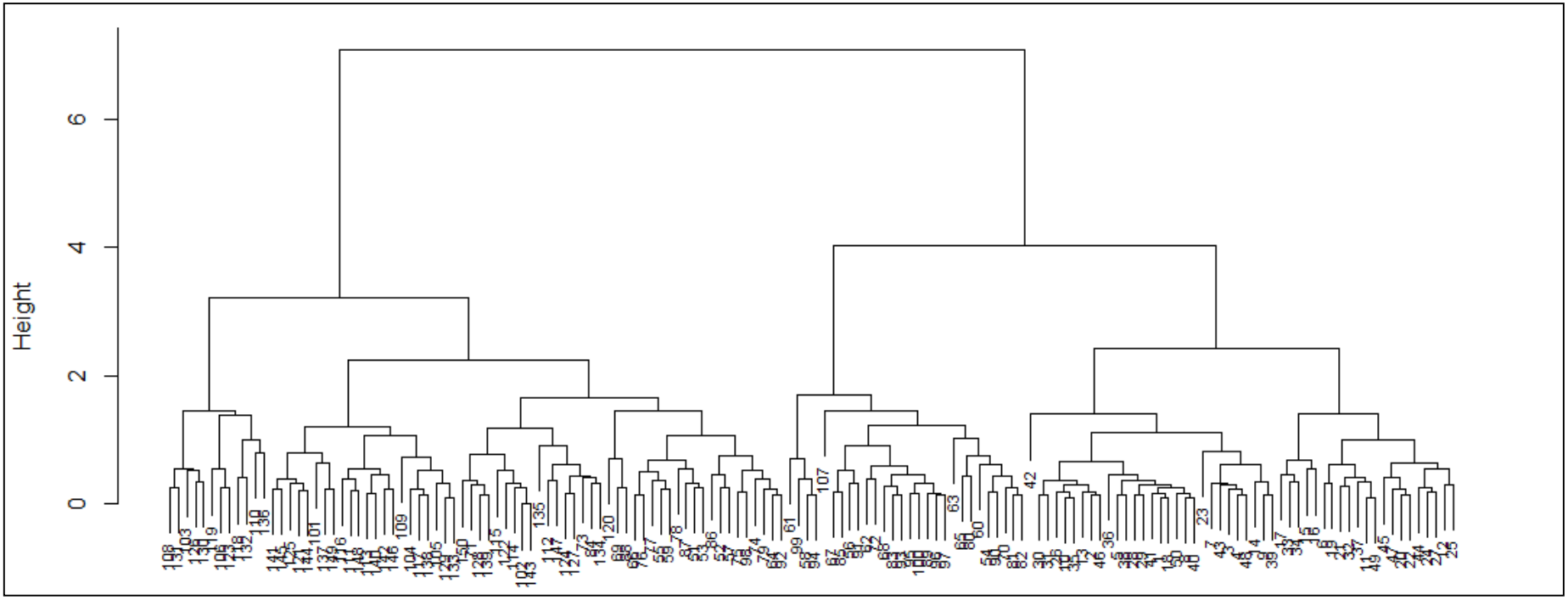
$$H = \frac{\sum u_i}{\sum w_i + \sum u_i}$$

- Un valor de 0.5 indicará que los clústeres son parecidos y que por tanto, no existen clústeres. Un valor próximos a 1 indicará presencia de clústeres.
- **Nota**: la función *hopkins{clustertend}* de R proporciona el estadístico 1-H

Clusterización jerárquica

Ejemplo con R (iris)

```
d <- dist(iris2, method = "euclidean") # matriz de distancias
View(as.matrix(d))                     # ver matriz
hc <- hclust(d,method = "complete")    # jerarquización
windows(14,7)                          # representar jerarquía
plot(hc,cex=0.5)
```



Clusterización jerárquica

Ejemplo R (iris)

- Se ha establecido una jerarquía sin fijar el número de grupos
- La instrucción *cutree* permite fijar un número de clusters determinando haciendo un corte transversal del árbol a la altura que proporcione dicho número de clusters

```
cutree(hc, k = 3)
```

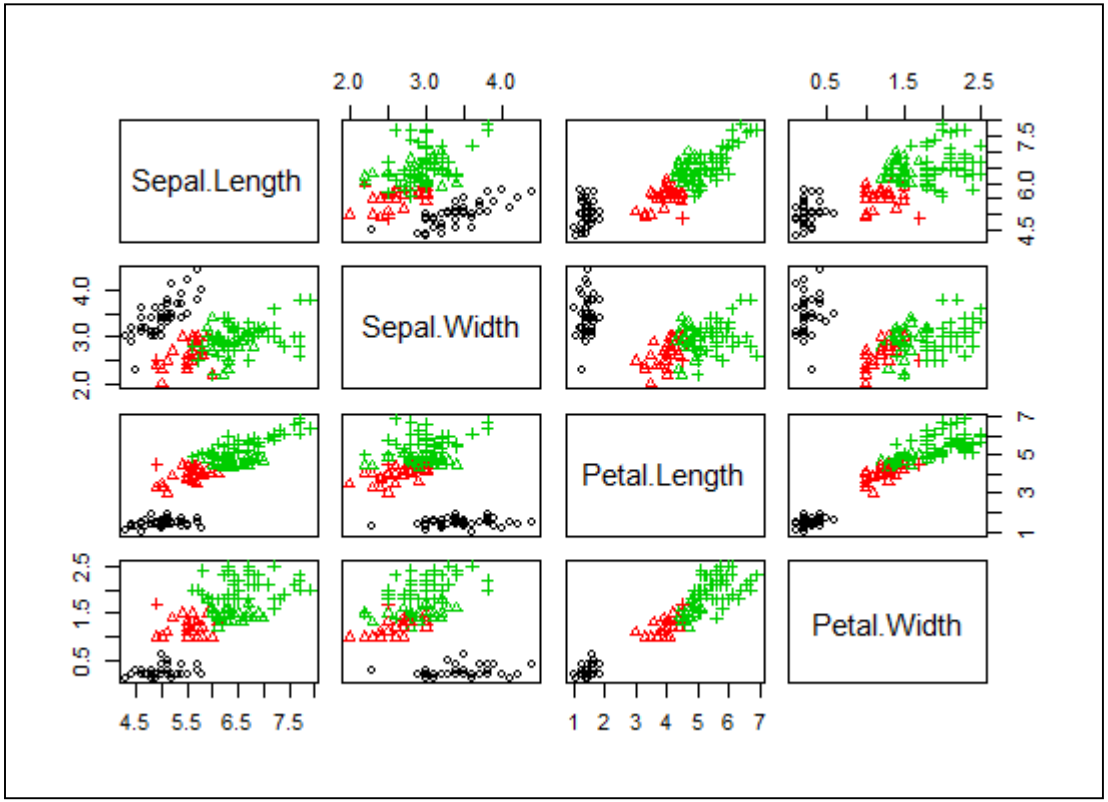
```
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 2 2 3 2 3 2 3 2 3 3 3 3 2 3 2
3 3 2 3 2 3 2 2 2 2 2 2 2 3 3 3 3 2 3 2 2 2 3 3 3 2 3 3 3 3 3 2 3
3 2 2 2 2 2 2 3 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
```

Clusterización jerárquica

Ejemplo R (iris)

- Correspondencia entre clústeres y especies da un 84% de acierto

	Clúster		
	1	**2**	**3**
setosa	50	0	0
versicolor	0	27	23
virginica	0	1	49



K-means

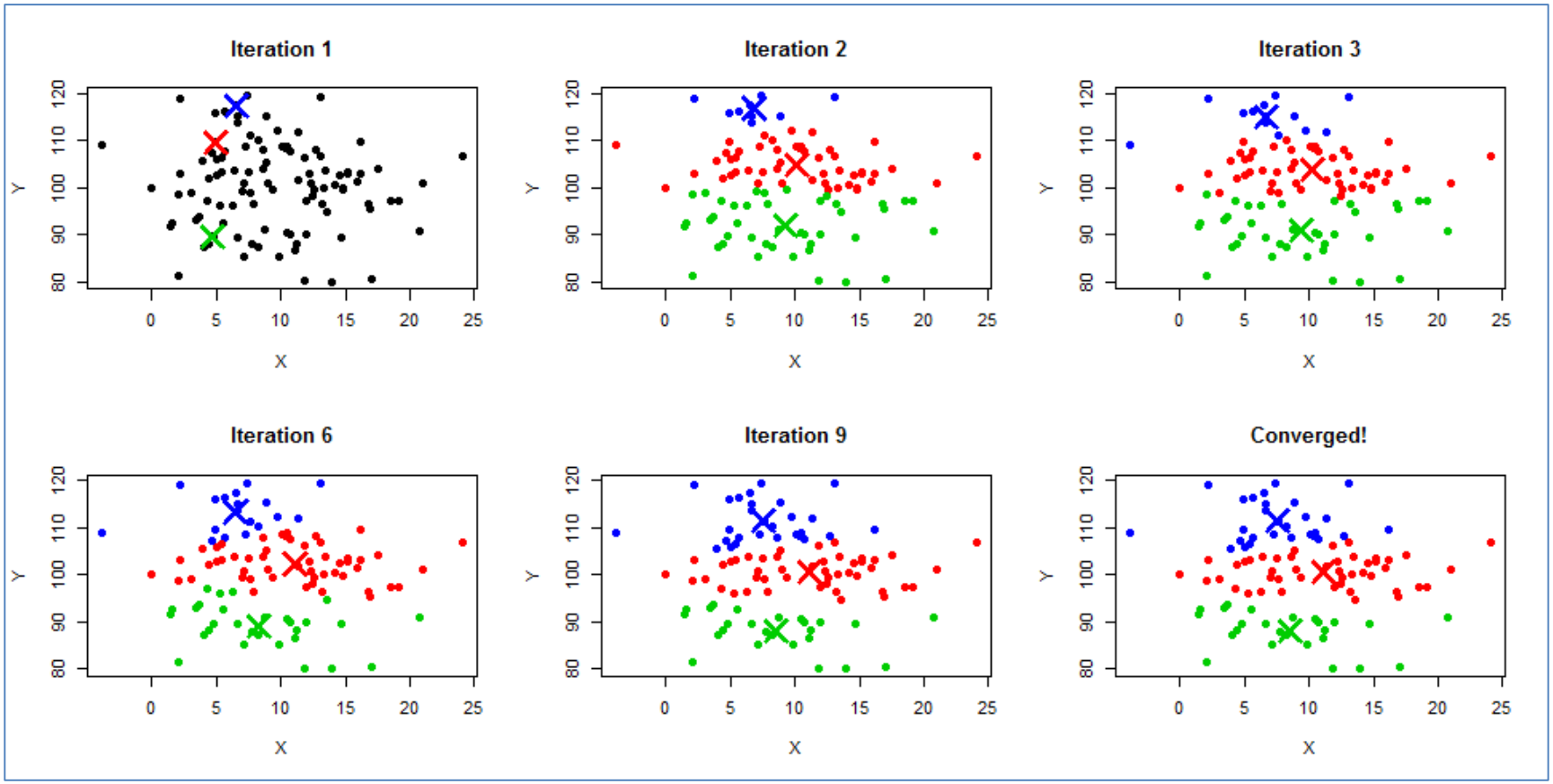
Introducción

- Tipos de variables: idealmente se precisan variables cuantitativas o ordinales con un gran número de categorías (aunque pueden implementarse distancias para otro tipo de variables)
- Ventajas
  - No requiere del cálculo de todos los pares de distancias
  - Requiere menos tiempo de computación que la clusterización jerárquica
- Inconvenientes
  - Resultados inaceptables para según qué tipo de clústeres (sobre todo NO convexos). Sol: usar versiones de K-means que minimicen este problema.
  - Distintos resultados dependiendo de los parámetros iniciales (sobre todo para conjuntos de datos pequeños). Sol: fijar distintos puntos iniciales.
  - Requiere fijar el número de clústeres a priori. Sol: si el coste computacional no es muy alto, probar diversos números de clústeres.
  - Al basarse en distancias medias, los *outliers* pueden afectar drásticamente al resultado. Sol: probar algoritmos más robustos (K-medians, K-mediods).

K-means

Ejemplo

- En cada iteración los puntos se van agrupando según sus similitudes



K-means

Proceso

- Objetivo: definir los clústeres de tal manera que se minimice la variabilidad intra-cluster.
- Determinar los parámetros iniciales
  - Número de clústeres
  - Número máximo de iteraciones
  - Número de ejecuciones con distintos puntos iniciales
- Ejecución del algoritmo

K-means

Algoritmo

Inicialización:

1. Especificar el número de clústeres (k)
2. Seleccionar aleatoriamente k elementos del conjunto de datos como centro de los clústeres

Repetir **iterativamente**:

3. Asignar cada elemento al clúster cuyo centro este más cercano
4. Recalcular el centro de gravedad para cada clúster

Se **deja de iterar** si se cumple algún criterio:

- Se alcanza el máximo número de iteraciones
- El cambio en la variabilidad-intra entre 2 iteraciones consecutivas es menor que un determinado umbral (o incluso nulo)

K-means

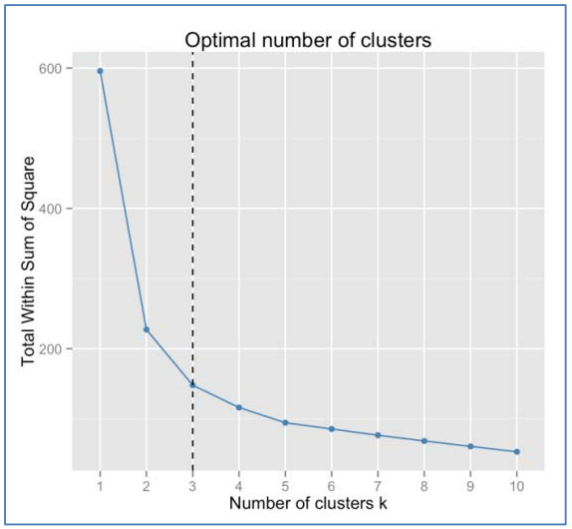
Parámetros iniciales

- ***Número máximo de iteraciones***. K-means suele converger con pocas iteraciones. Ajustar según capacidad computacional, pero no debería ser un problema.
- ***Número de ejecuciones con distintos puntos iniciales***. K-means tiene una componente aleatoria en la elección de los centroides iniciales. Conviene:
  - Realizar más de una ejecución del algoritmo (*nstart*) y quedarnos con la mejor
  - Poner una semilla para hacer los resultados reproducibles

K-means

Número de grupos

- **Regla del codo**. Comparar el porcentaje de variabilidad explicada (o variabilidad intra) para cada número de clúster. El punto en que se encuentre un codo (variación constante a partir de él) indicará el número idóneo de clústeres



- Coger un **número de clústeres *k* en función del número de observaciones**

$$k = \sqrt{n/2}$$ P.ej. para 800 observaciones, se obtendrían 20 clústeres

- **Usar otra indicador**. Hay múltiples indicadores aparte de la inercia para evaluar el rendimiento del algoritmo.

K-means

R

- *kmeans(x, centers, iter.max = 10, nstart = 1, algorithm =c("Hartigan-Wong", "Lloyd", "Forgy","MacQueen"), trace=FALSE)*
  - *x: datos*
  - *centers: número de clústeres*
  - *iter.max: número máximo de iteraciones*
  - *nstart: número de puntos iniciales distintos*
  - *algorithm: método refinado del algoritmo*
  - *trace: printar proceso*

K-means

Convergencia

- La convergencia hacia una solución está garantizada dado que la inercia-intra disminuye en cada iteración. Sin embargo, no está garantizado que converja hacía el óptimo.
- La convergencia es rápida (generalmente menos de 5 iteraciones, incluso, para grandes cantidades de datos).
- En general, se ejecuta el algoritmo con diferentes particiones iniciales y se retiene la solución más satisfactoria.
- Debido a la componente aleatoria, conviene poner una semilla antes de ejecutar el algoritmo.

K-means

Métodos

R implementa 4 métodos para hacer la partición:

- **Hartigan-Wong** (método por defecto). Optimiza el cálculo de distancias dividiendo los puntos pertenecientes a clústeres actualizados y no actualizados en cada iteración.
- **Lloyd**. Explicado en diapositivas previas. Método más simple.
- **Forgy** (o Forgy-Lloyd). Igual que el de Lloyd pero para los centroides iniciales se eligen puntos aleatorios dispersos (más eficiente con el algoritmo común)
- **MacQueen**. Actualiza los centros en cada punto que se mueve. Usa probabilidades y convergencias asintóticas.

K-means

Variantes. Paquetes de R

Diversos paquetes implementan métodos alternativos del k-means:

- ***clustMixType***. Variables categóricas y numéricas
- ***kml***. Datos longitudinales
- ***skmeans***. Sperichal K-means
- ***trimcluster***. Métodos robustos ante la presencia de outliers
- ***Biganalytics***. Contiene la función *bigkmeans* para grandes conjuntos de datos

K-means

Variantes

- ***K-medians.*** Usa medianas en vez de medias (más robusto)
- ***K-mediods***. Usa la instancia más representativa dentro del clúster. Puede usarse cualquier distancia (se pueden usar variables categóricas)
- ***Fuzzy C-Means***. Cada punto tiene un grado difuso de pertenecía a cada grupo.
- ***Esperanza-maximización***. Modelos de mezclas gaussianas. Emplean una asignación probabilística a cada grupo, en vez de asignaciones deterministas.
- ***K-means++***. Cambia el método de elección de los centroides iniciales.
- ***KD-trees***. Filtrado para mejorar la eficiencia en cada paso del algoritmo.
- ***Spherical k-means***. Para datos direccionales (ángulos en vez de distancias).
- ***Minkowski metric weighted k-means***. Soluciona el problema del ruido asignando pesos a las componentes de los vectores por grupos

Variantes

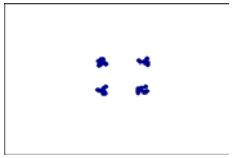
K-mediods

- La diferencia básica con el K-means es que en vez de escoger el centro de gravedad como centro del clúster, se escoge el **elemento (*mediod*) más representativo**
- No confundir con el algoritmo K-medians que se basa en las medianas univariantes.
- El *mediod* es aquel punto cuya **distancia media al resto de puntos del clúster es mínima**
- Es un algoritmo **más robusto** que el K-means ya que no es tan sensible a la presencia de outliers
- Una variante del algoritmo de **K-mediods** es **CLARA** (*CLustering LARge Applications*) que mejora el rendimiento para grandes volúmenes de datos
- En *R* existen funciones para K-mediods [*pam* (*cluster*)] y para su variante [*clara* (*cluster*)]

Medidas de rendimiento

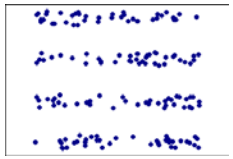
Tipos

- ***Internas.*** Evalúa la calidad de la agrupación sin ninguna referencia externa. Hay distintas propiedades deseables:
  - **Compacidad**. Baja variabilidad-intra



  - **Separación**. Alta variabilidad-entre

  - **Conectividad**. Hasta qué punto los elementos conexos pertenecen al mismo clúster.



- ***Externas.*** Comparan la agrupación con un resultado externo (otra agrupación o un conjunto que ya haya sido etiquetado)

Clustering

Medidas de rendimiento internas (1 agrupación)

- ***Inercia intra*** (suma de las distancias euclideas al cuadrado de cada punto a su respectivo centroide). Valores entre 0 e ∞. Decrece monótonamente al aumentar el número de clústeres:

$$I = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_k} (x_{ij} - c_j)^2$$

- ***Dunn index*** (cociente entre distancia mínima entre puntos de distintos clústeres y la distancia máxima entre puntos del mismo clúster). Valores entre 0 e ∞. Se debe maximizar. *R: dunn(clValid)*

$$\mathrm{D} = \frac{d_{mín}}{d_{máx}}$$

- ***Silhouette coefficient***. Valores entre -1 y 1. Se debe maximizar. Para un punto concreto *i*, a(i) es la media de las distancias a los puntos del mismo clúster y b(i), la mínima distancia a puntos de otro clúster. Este coeficiente es la media de todos los s(i). R: *silhouette (cluster)*

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

Clustering

Medidas de rendimiento externas (similitud de 2 agrupaciones)

- Para cada pareja de puntos en 2 agrupaciones (C1 y C2), se define:

A: parejas en mismo clúster en ambas agrupaciones C1 y C2
B: parejas en distintos clústeres en ambas agrupaciones C1 y C2
C: parejas en mismo clúster en C1 y distinto clúster en C2
D: parejas en distinto clúster en C1 y mismo clúster en C2

- ***Rand index*** (Proporción de parejas igual de agrupadas en ambas agrupaciones). Toma valores entre 0 y 1. Cuánto mayor, más similitud. R: *randIndex (flexclust)*

$$R = \frac{\#\ coincidencias\ por\ parejas}{\#\ parejas} = \frac{A + B}{A + B + C + D}$$

- ***Jaccard index*** (Proporción de parejas en el mismo clúster). Toma valores entre 0 y 1. Cuánto mayor, más similitud. R: *jaccard_indep (clusteval)*

$$J = \frac{\#\ parejas\ en\ el\ mismo\ clúster}{\#\ parejas\ -\#parejas\ en\ distintos\ clústeres\ en\ ambas} = \frac{A}{A + C + D}$$

Sistemas mixtos

K-means + Clusterización jerárquica

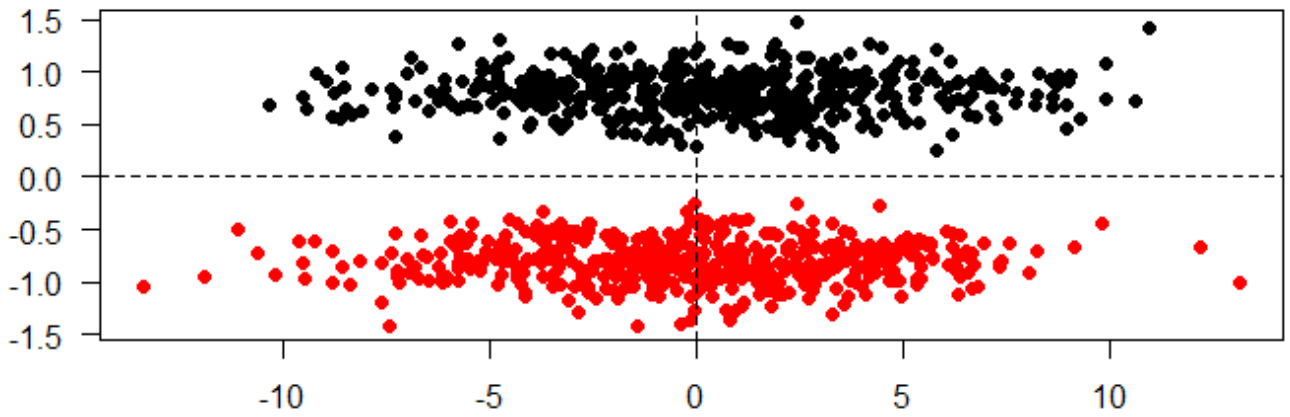
- **Opción 1**: Útil con un gran número de observaciones
  - **Etapa 1**. Se realiza un k-means con un elevado número de grupos (p.ej, 100)
  - **Etapa 2**. Se realiza una clusterización jerárquica de los grupos usando sus centros de gravedad.

- **Opción 2**: Útil con pocas observaciones. En ciertos casos, mejora el rendimiento
  - **Etapa 1**. Se realiza una clusterización jerárquica
  - **Etapa 2**. Partiendo de una partición inicial de esta clusterización se pueden reasignar los puntos según el algoritmo de k-means

Sistemas mixtos

(ACP o ACM) + (K-means o clusterización jerárquica)

- Útil para eliminar ruido (variables irrelevantes) o para tratar con todo tipo de variables.
  - Se realiza un ACP y/o ACM y se retiene las componentes principales con varianza no nula
  - Se aplica una clusterización jerárquica/k-means con dichas componentes usando la distancia euclidea
- Inconveniente: En algunos casos, el ACP puede ser contraproducente

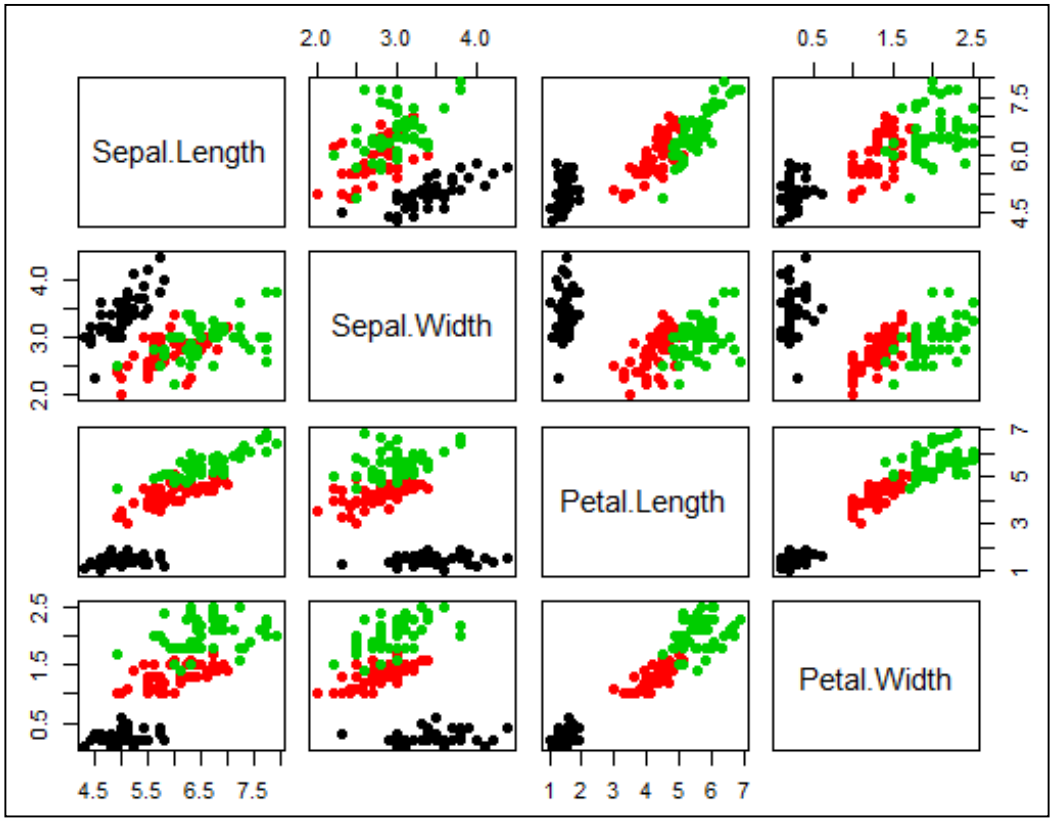


K-means

Ejemplo R

Datos de longitud y anchura de sépalos y pétalos de 3 tipos de especie de plantas

```
iris2 <- scale(iris[,1:4])                    # Se elimina especie
pairs(iris2,col=iris$Species,pch=19)          # Descriptiva bivariante
```



K-means

Ejemplo R – 2 grupos

- En un principio, se desconoce el número de grupos. Se prueba 2, 3 y 4

```
km2 <- kmeans(iris2,2,nstart=10) # Algoritmo de k-means para 2 grupos
km2

K-means clustering with 2 clusters of sizes 97, 53
Cluster means:
 Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
1     6.301031    2.886598     4.958763    1.695876
2     5.005660    3.369811     1.560377    0.290566
Clustering vector:
2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 1 1 1 1 1 1 1 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 1 1 1 1 2 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1


Within cluster sum of squares by cluster:
[1] 123.79588 28.55208
(between_SS / total_SS = 77.6 %)
```

K-means

Ejemplo R – 3 grupos

```
km3 <- kmeans(iris2,3,nstart=10) # k-means para 3 grupos
km3

K-means clustering with 3 clusters of sizes 62, 50, 38
Cluster means:
  Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
1     5.901613    2.748387     4.393548    1.433871
2     5.006000    3.428000     1.462000    0.246000
3     6.850000    3.073684     5.742105    2.071053
Clustering vector:
2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 1 1 3 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 3 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 3 1 3 3 3
3 1 3 3 3 3 3 3 1 1 3 3 3  3 1 3 1 3 1 3 3 1 1 3 3 3 3 3 1 3 3 3 3 1
3 3 3 1 3 3 3 1 3 3 1

Within cluster sum of squares by cluster:
[1] 39.82097 15.15100 23.87947
(between_SS / total_SS = 88.4)
```

K-means

Ejemplo R – 4 grupos

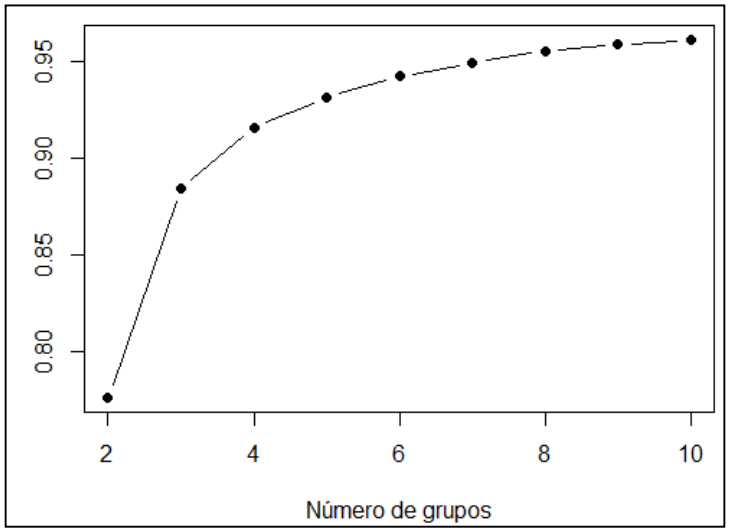
```
km4 <- kmeans(iris2,4,nstart=10) # k-means para 4 grupos
km4
K-means clustering with 4 clusters of sizes 32, 28, 40, 50
Cluster means:
  Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
1     6.912500    3.100000     5.846875    2.131250
2     5.532143    2.635714     3.960714    1.228571
3     6.252500    2.855000     4.815000    1.625000
4     5.006000    3.428000     1.462000    0.246000
Clustering vector: 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4
4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 3 3 3 2 3 2 3 2 3 2
2 2 2 3 2 3 2 2 3 2 3 2 3 3 3 3 3 3 3 2 2 2 2 3 2 3 3 3 2 2 2 3 2 2 2
2 2 3 2 2 1 3 1 1 1 1 2 1 1 1 3 3 1 3 3 1 1 1 1 3 1 3 1 3 1 1 3 3 1 1
1 1 1 3 3 1 1 1 3 1 1 1 3 1 1 1 3 3 1 3

Within cluster sum of squares by cluster:
[1] 18.703437 9.749286 13.624750 15.151000
(between_SS / total_SS = 91.6 %)
```

K-means

Ejemplo R

- Variabilidad explicada:
  - 2 grupos: 77.6%
  - 3 grupos: 88.4%
  - 4 grupos: 91.6%
- La ganancia de variabilidad explicada por los grupos respecto al total al pasar de 2 a 3 personas es suficientemente importante como para considerarla. No ocurre lo mismo con el paso de 3 a 4. Por tanto, parece que la mejor opción es quedarse con 3 grupos.



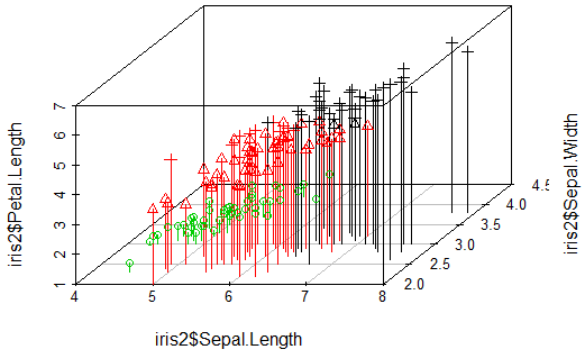
K-means

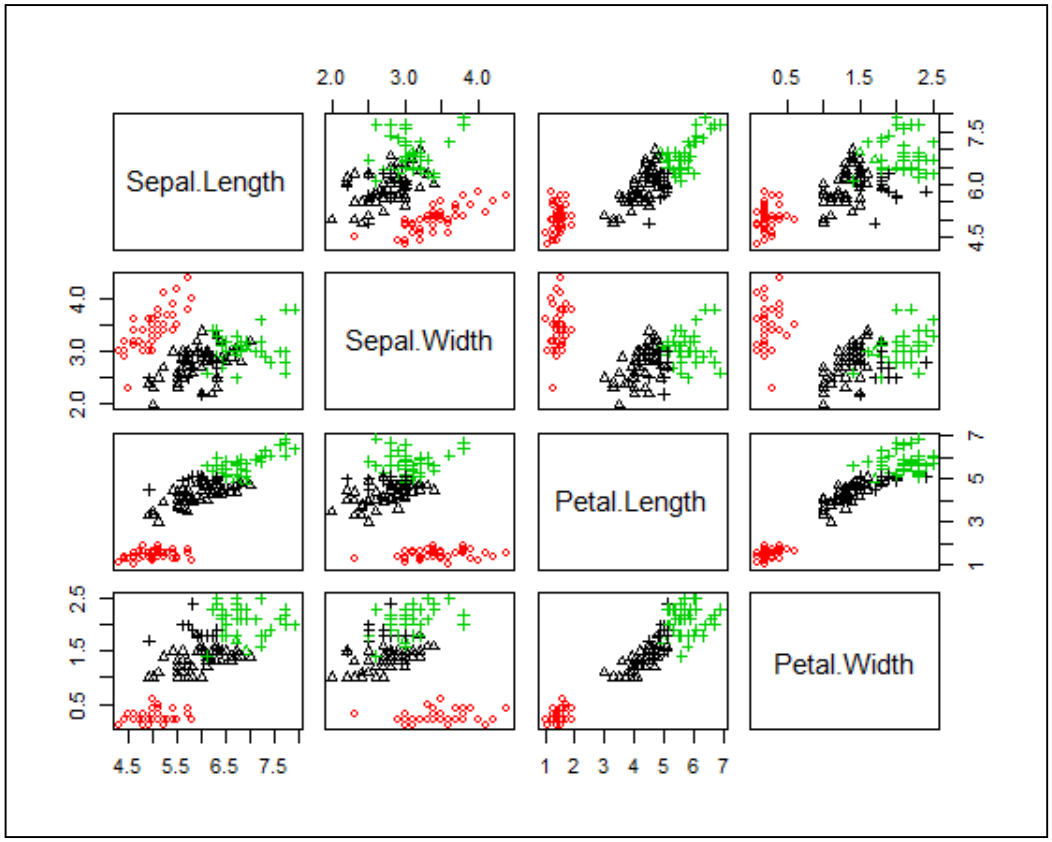
Ejemplo R

- El algoritmo de k-means es no supervisado. No obstante, en este caso, podemos chequear si concuerdan los grupos con las especies (acierto: 89%)

	Cluster		
	1	**2**	**3**
setosa	50	0	0
versicolor	0	48	2
virginica	0	14	36

- Podría ser que una 3ª dimensión no visible en el plano aportase más información





MUBD

Màster Universitari en Enginyeria de Dades Massives (Big Data)

Estadística