Clustering

Partitional algorithms

Christian Oliva Moya

Dpto. de Ingeniería Informática, Escuela Politécnica Superior

Universidad Autónoma de Madrid

28049 Madrid, Spain

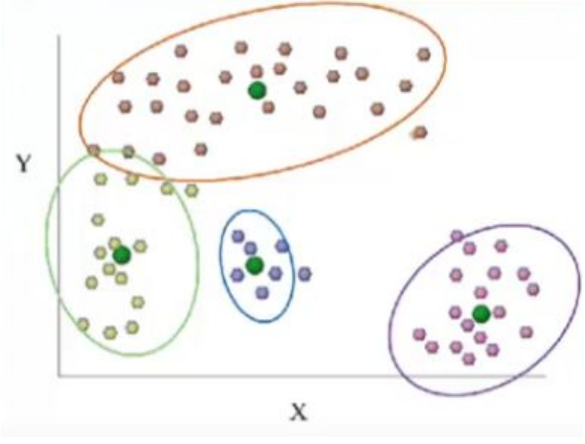
v2 - 28/02/2024

Introducción

- Partitional clustering (Centroid clustering)

  Se deben definir cuántos grupos se van a formar

  Se basan en centroides:



K-means (1)

Input S: conjunto de todos los posibles datos (N datos, D atributos)

Input K: número de clusters (hiperparámetro)

Output: K clusters $\{S_1, S_2, \ldots, S_k\}$

inicializar los K centroides

while no se cumpla la condición de parada **do**

Asignar cada dato x_i al centroide más cercano

Actualizar los centroides según cierta operación

end

N patterns

$S = S_1 \cup S_2 \cup S_3 \cdots \cup S_k$ $S_i \cap S_j = \emptyset, \forall i \neq j$

$x_i \in S_j$

K-means (2)

Input S: conjunto de todos los posibles datos (N, D)

Input K: número de clusters

Output: K clusters $\{S_1, S_2, \ldots, S_k\}$

inicializar los K centroides

while no se cumpla la condición de parada **do**

Asignar cada dato x_i al centroide más cercano

Actualizar los centroides según cierta operación

end

¿Cómo inicializar los K centroides?

¿Cuál es la condición de parada?

¿Cómo actualizar los centroides?

K-means (3)

¿Cómo inicializar los K centroides?

Se seleccionan puntos aleatorios del conjunto de datos

¿Cuál es la condición de parada?

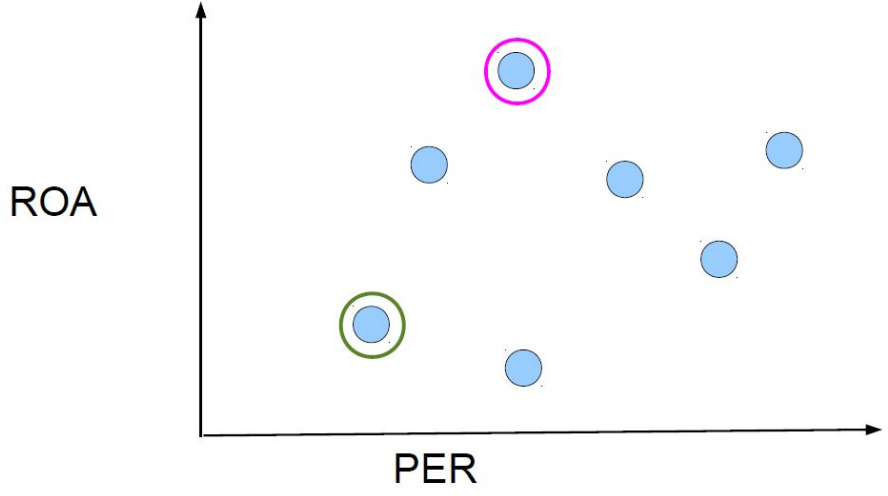
Que en una iteración del algoritmo no se modifique ningún centroide

¿Cómo actualizar los centroides?

Actualizar el centroide por el promedio de los puntos del cluster

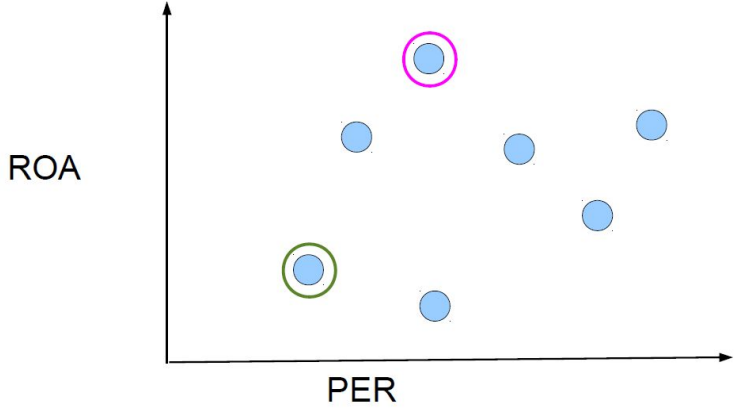
K-means (4) - Ejemplo

- Se muestra un ejemplo con K=2 como hiperparámetro
  - Se inicializan los centroides en K=2 instancias aleatorias del conjunto de entrenamiento



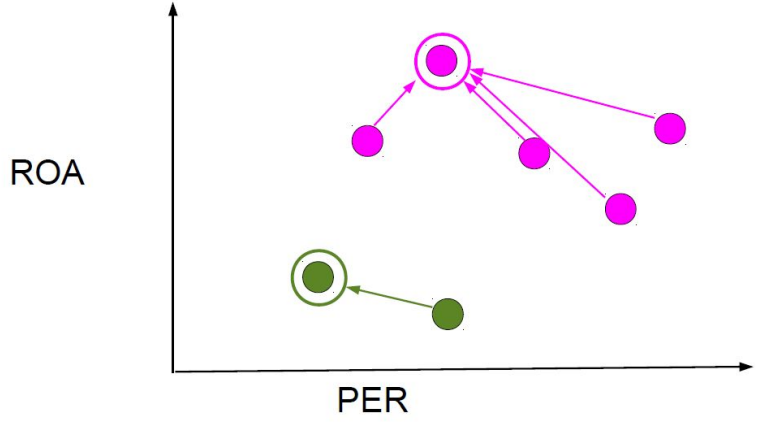
K-means (4) - Ejemplo

- Mientras los centroides se vayan modificando
  - Asignación: Asignar cada instancia al cluster más cercano
  - Actualización: Calcular los centroides



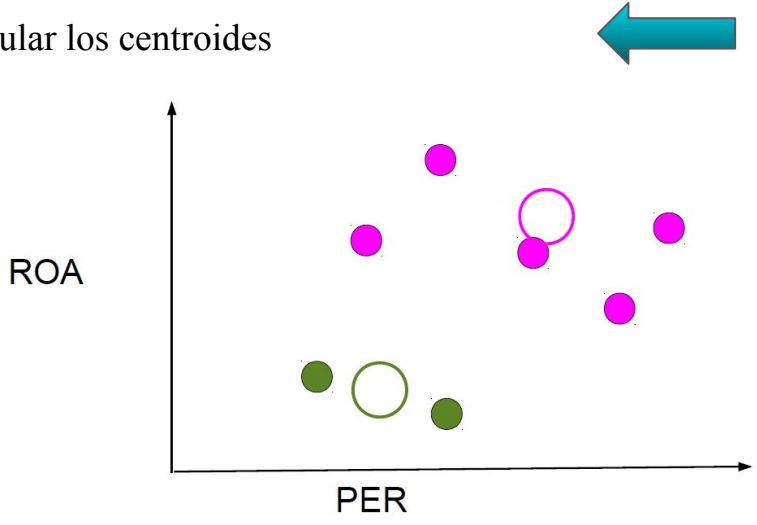
K-means (4) - Ejemplo

- Mientras los centroides se vayan modificando
  - Asignación: Asignar cada instancia al cluster más cercano
  - Actualización: Calcular los centroides



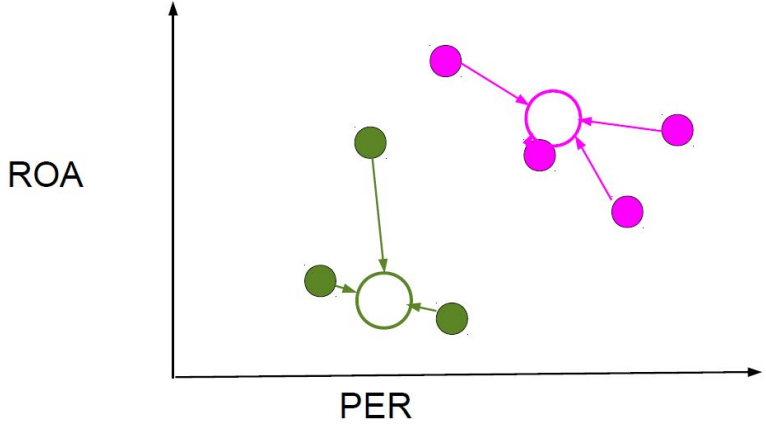
K-means (4) - Ejemplo

- Mientras los centroides se vayan modificando
  - Asignación: Asignar cada instancia al cluster más cercano
  - Actualización: Calcular los centroides



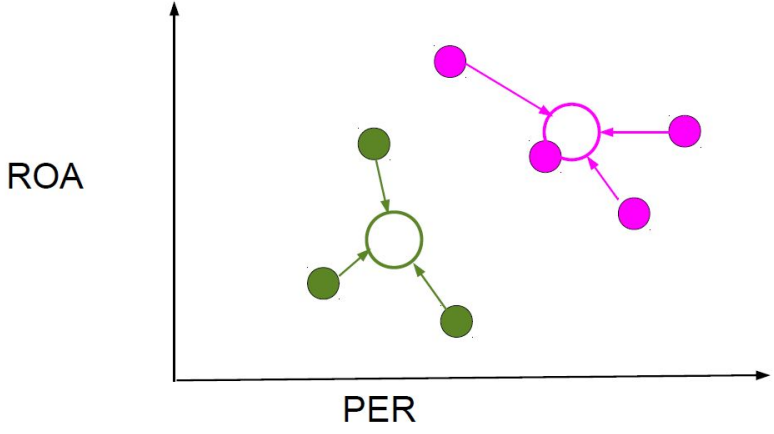
K-means (4) - Ejemplo

- Mientras los centroides se vayan modificando
  - Asignación: Asignar cada instancia al cluster más cercano
  - Actualización: Calcular los centroides



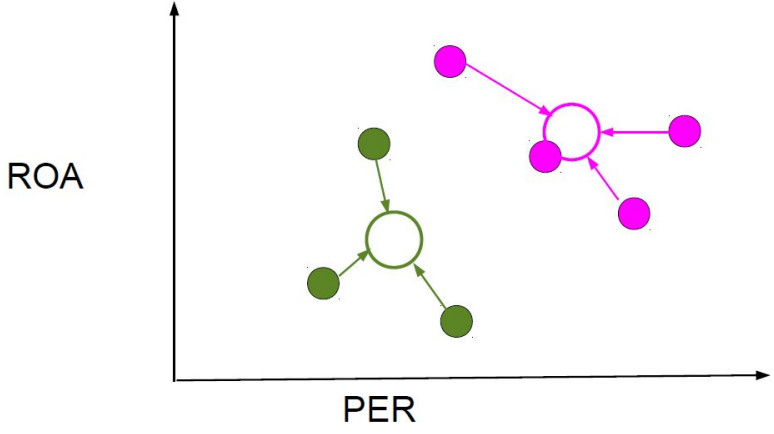
K-means (4) - Ejemplo

- Mientras los centroides se vayan modificando
  - Asignación: Asignar cada instancia al cluster más cercano
  - Actualización: Calcular los centroides



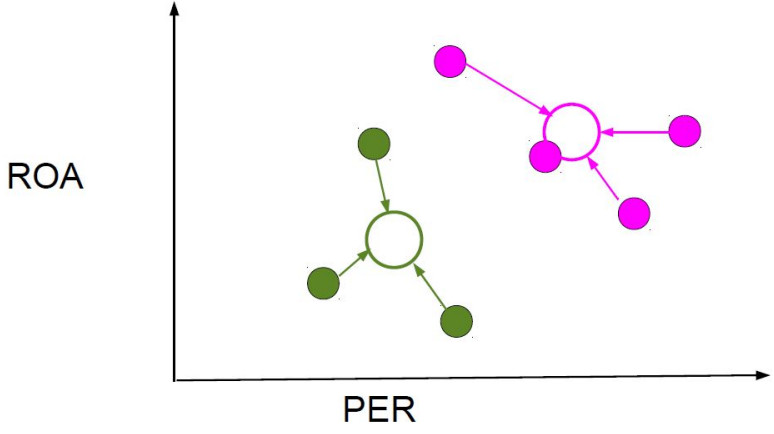
K-means (4) - Ejemplo

- Mientras los centroides se vayan modificando
  - Asignación: Asignar cada instancia al cluster más cercano
  - Actualización: Calcular los centroides



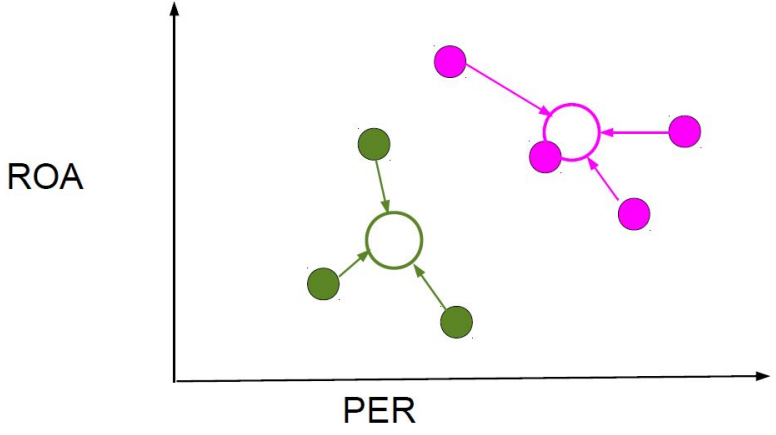
K-means (4) - Ejemplo

- Mientras los centroides se vayan modificando
  - Asignación: Asignar cada instancia al cluster más cercano
  - Actualización: Calcular los centroides



K-means (4) - Ejemplo

- Ya no se mueven los centroides. Fin del algoritmo



K-means (5)

- Ventajas de K-means
  - Baja complejidad, fácil interpretación e implementación
  - Centroides como representantes de cada cluster
- Desventajas de K-means
  - Alta sensibilidad a la partición inicial
  - Alta sensibilidad a datos ruidosos y outliers
  - Solamente se puede calcular si la media está bien definida (datos numéricos)
  - Necesario definir correctamente el valor K

K-means (4)

- Notebook 03_fundamentos_kmeans.ipynb

Problemas de inicialización en K-means: K-means++

- K-means es extremadamente sensible a la inicialización de los centroides y tiene una baja tasa de convergencia
- Medidas para solventarlo:
  - Desarrollar una heurística para la selección de los centroides. Por ejemplo, elegir el segundo como el más lejano al primero, elegir el tercero como el más lejano a ambos, etc.
  - Probar múltiples inicializaciones y escoger la que mejor resultado da.
  - Usar otros procedimientos de inicialización como K-means++ (Pena et al. 1999)