Aprendizaje no supervisado

Agrupamiento por particiones: K-means

Javier Sevilla

Universidad Internacional de Valencia

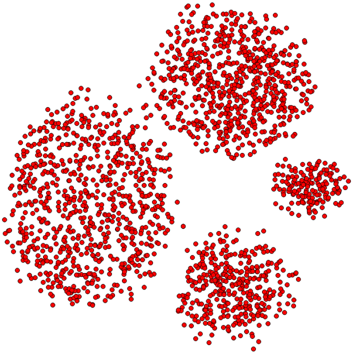
25.02.2020

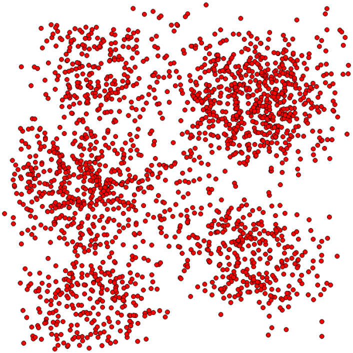
Definición

Dado un conjunto de datos, el agrupamiento trata de identificar subgrupos homogéneos de ejemplos que manifiestan diferencias relevantes con los otros subgrupos que se formen.

Definición

Dado un conjunto de datos, el agrupamiento trata de identificar subgrupos homogéneos de ejemplos que manifiestan diferencias relevantes con los otros subgrupos que se formen.





Definición

Dado un conjunto de datos, el agrupamiento trata de identificar subgrupos homogéneos de ejemplos que manifiestan diferencias relevantes con los otros subgrupos que se formen.

- Vectores descriptores de los ejemplos
- Conjunto de datos
- No existe ninguna variable “especial” respuesta
- Formar grupos:
  - * No se conoce el número de grupos
  - * No se conocen las pertenencias de ejemplos a grupos

Dos instrucciones:

Definición

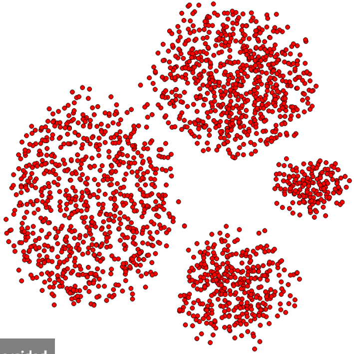
Dado un conjunto de datos, el agrupamiento trata de identificar **subgrupos homogéneos** de ejemplos que manifiestan **diferencias relevantes con los otros subgrupos** que se formen.

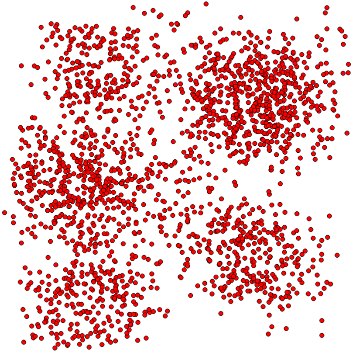
- Dispersión intraclúster
- Dispersión interclúster

Dos instrucciones:

Definición

Dado un conjunto de datos, el agrupamiento trata de identificar **subgrupos homogéneos** de ejemplos que manifiestan **diferencias relevantes con los otros subgrupos** que se formen.





Objetivo

Encontrar un agrupamiento que maximice la dispersión interclúster y minimice la dispersión intraclúster:

- Dispersión intraclúster

$$I(C) = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{K}\sum_{i:C(x_i)=k}\sum_{i':C(x_{i'})=k} d(x_i, x_{i'})$$

- Dispersión interclúster

$$O(C) = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{K}\sum_{i:C(x_i)=k}\sum_{i':C(x_{i'})\neq k} d(x_i, x_{i'})$$

Objetivo

Encontrar un agrupamiento que maximice la dispersión interclúster y minimice la dispersión intraclúster:

¡Ambos objetivos son equivalentes!

Objetivo

Encontrar un agrupamiento que maximice la dispersión interclúster y minimice la dispersión intraclúster:

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{i'=1}^{n} d(x_i, x_{i'})$$

Objetivo

Encontrar un agrupamiento que maximice la dispersión interclúster y minimice la dispersión intraclúster:

$$T = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{K} \sum_{i:C(x_i)=k} \left(\sum_{i':C(x_{i'})=k} d(x_i, x_{i'}) + \sum_{i':C(x_{i'})\neq k} d(x_i, x_{i'}) \right)$$

Objetivo

Encontrar un agrupamiento que maximice la dispersión interclúster y minimice la dispersión intraclúster:

$$T = I(C) + O(C)$$

$$\arg\min_{C} I(C) = \arg\min_{C} T - O(C) = \arg\max_{C} O(C)$$

El objetivo es buscar el mejor agrupamiento C que maximiza (minimiza) la dispersión intraclúster (interclúster)

$$\arg \min_{C} I(C) = \arg \min_{C} T - O(C) = \arg \max_{C} O(C)$$

Agrupamiento

El objetivo es buscar el mejor agrupamiento C que maximiza (minimiza) la dispersión intraclúster (interclúster)

$$\arg\min_{C} I(C) = \arg\min_{C} T - O(C) = \arg\max_{C} O(C)$$

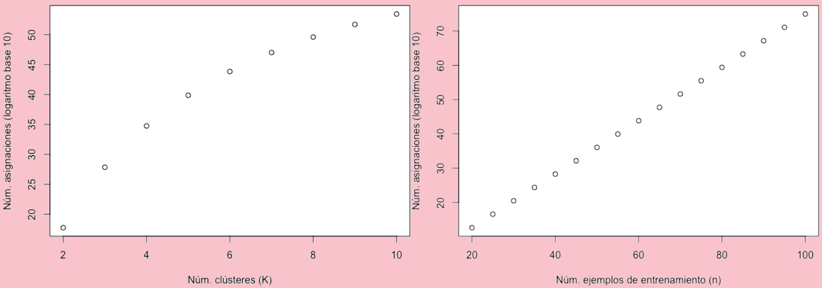
¡Número inabarcable de posibles combinaciones!

$$S(n, K) = \frac{1}{K!} \sum_{k=1}^{K} (-1)^{K-k} \binom{K}{k} k^{n}$$

El objetivo es buscar el mejor agrupamiento C que maximiza (minimiza) la dispersión intraclúster (interclúster)

$$\arg\min_{C} I(C) = \arg\min_{C} T - O(C) = \arg\max_{C} O(C)$$

¡Número inabarcable de posibles combinaciones!



¡Necesario recurrir a heurísticas de búsqueda!

¡Necesario recurrir a heurísticas de búsqueda!

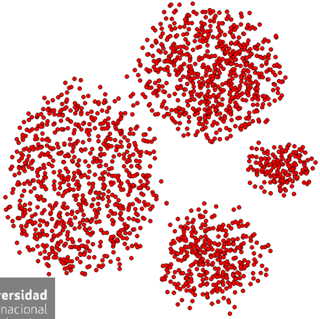
Heurística

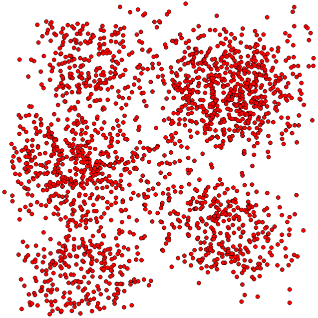
En informática, se trata de técnicas diseñadas para resolver un problema de manera rápida cuando la aproximación exhaustiva es muy lenta y/o para encontrar una solución aproximada cuando encontrar la solución exacta es muy difícil o imposible.

Se puede expresar como un *trade-off* (balance) entre velocidad y optimalidad-completitud.

Heurísticas de búsqueda del mejor agrupamiento

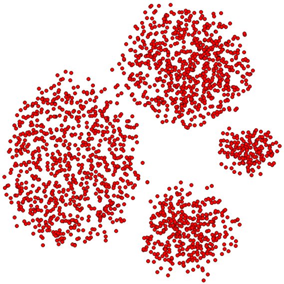
1. Encontrar un agrupamiento válido
2. Plantear diferentes alternativas a ese agrupamiento
3. Escoger la mejor alternativa
4. Volver al paso 2

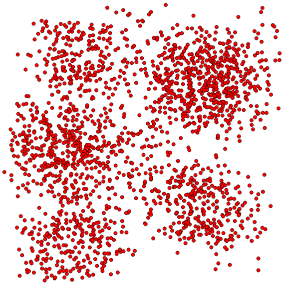




Tipos de algoritmos de agrupamiento

- Basados en particiones
- Jerárquicos
- Espectrales
- Basados en densidad
- Probabilísticos



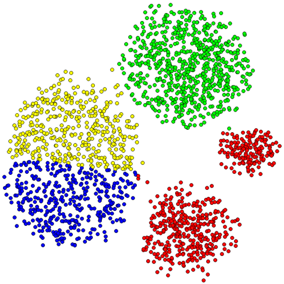


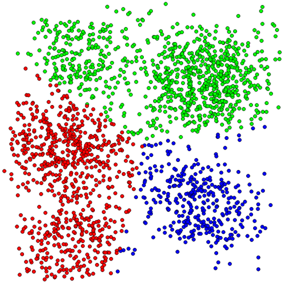
Búsqueda de la mejor partición de los datos

Se particiona el dataset según criterios basados en distancia

** Uso de centro(ide)s

** ¿Fijar el número de clústeres (K)?





Agrupamiento basado en particiones

Búsqueda de la mejor partición de los datos

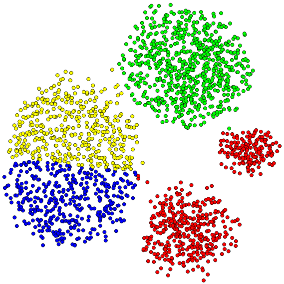
Se particiona el dataset según criterios basados en distancia

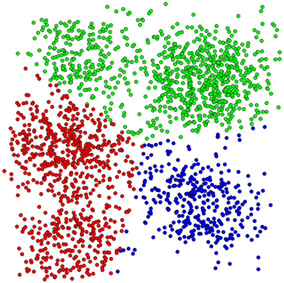
** Uso de centro(ide)s

** ¿Fijar el número de clústeres (K)?

Algoritmos:

- K-means
- K-medoids





Agrupamiento basado en particiones (KMEANS)

Intuición

Los clústeres homogéneos se agrupan alrededor de un centro. Por lo tanto, se puede calcular:

1. **Centro**: El centro de un clúster es la medio de los elementos que pertenecen al él
2. **Pertenencia**: Un ejemplo pertenece al clúster cuyo centro le es más cercano

** La combinación de ambos conceptos permite construir el agrupamiento

Dispersión intraclúster

$$I(C) = \sum_{k=1}^{K} N_k \cdot \sum_{x_i : C(x_i)=k} ||x_i - \bar{x}_k||^2$$

Objetivo a minimizar

$$\arg \min_{C:(\bar{x}_1,\ldots,\bar{x}_K)} I(C)$$

Heurística

Partiendo de un conjunto de centros aleatorio, buscar la pertenencia más probable de los ejemplos a los clústeres y obtener un nuevo conjunto de centros (agrupamiento)

¡Naturaleza iterativa!

K-means

Recibe: Conjunto de entrenamiento, $\{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n\}$; número de clústeres, K

1. Elección (aleatoria) de K puntos del conjunto de entrenamiento como centros, $\{\overline{\boldsymbol{x}}_1, \ldots, \overline{\boldsymbol{x}}_K\}$.

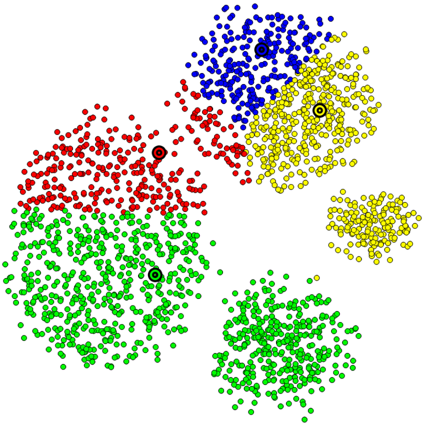
2. Asignar cada ejemplo $\boldsymbol{x}_i$ al clúster del centro más cercano: $C(\boldsymbol{x}_i) = \operatorname{argmin}_{k\in\{1,\ldots,K\}} ||\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}}_k||^2$

3. Para cada clúster k, recalcular su centro: $\overline{\boldsymbol{x}}_k = \operatorname{argmin}_{\boldsymbol{x}} \sum_{\boldsymbol{x}_i : C(\boldsymbol{x}_i)=k} ||\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}||^2$

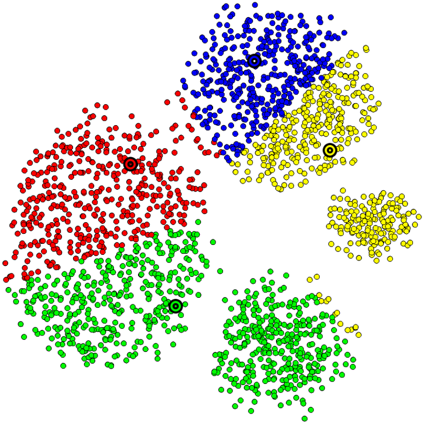
4. Los pasos 2 y 3 se iteran hasta que los centros no cambian.

Devuelve: Conjunto de centros, $\{\overline{\boldsymbol{x}}_1, \ldots, \overline{\boldsymbol{x}}_K\}$; Asignación, C

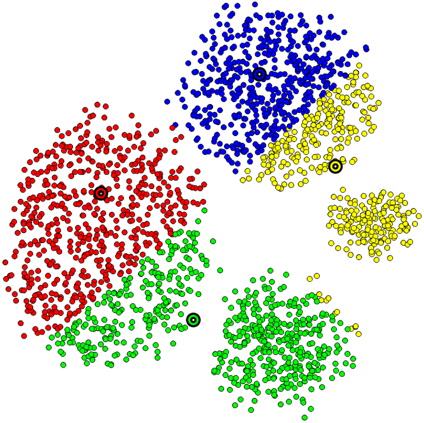
Agrupamiento basado en particiones (KMEANS)



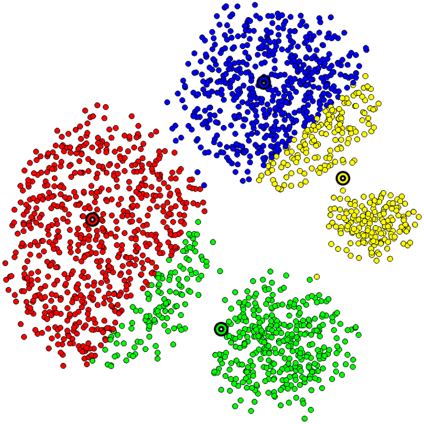
Agrupamiento basado en particiones (KMEANS)



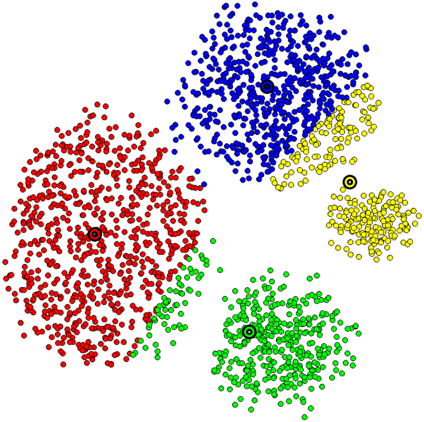
Agrupamiento basado en particiones (KMEANS)



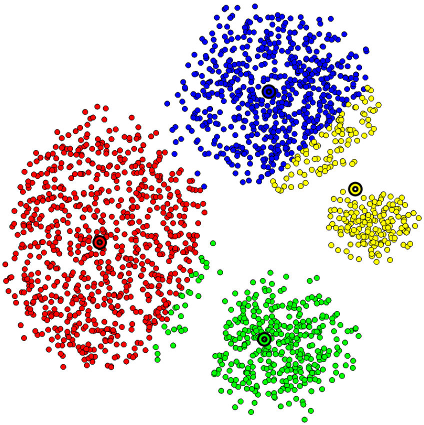
Agrupamiento basado en particiones (KMEANS)



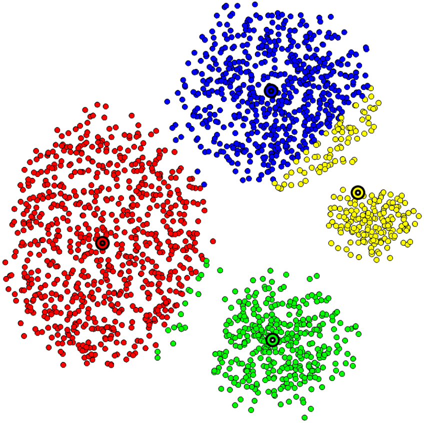
Agrupamiento basado en particiones (KMEANS)



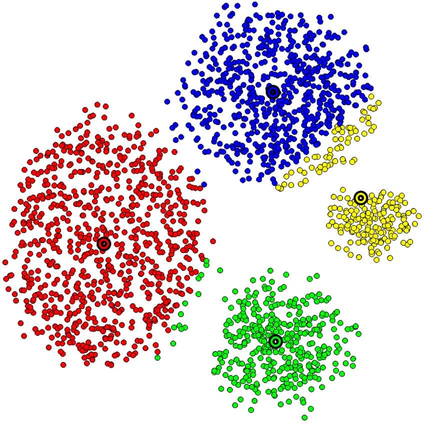
Agrupamiento basado en particiones (KMEANS)



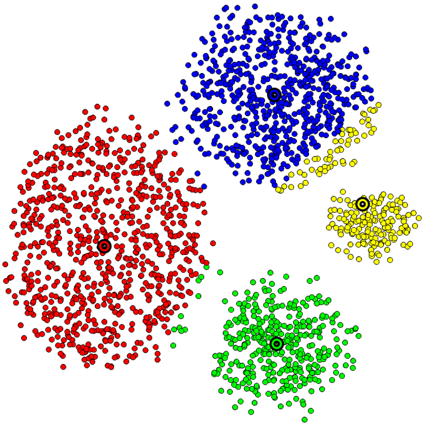
Agrupamiento basado en particiones (KMEANS)



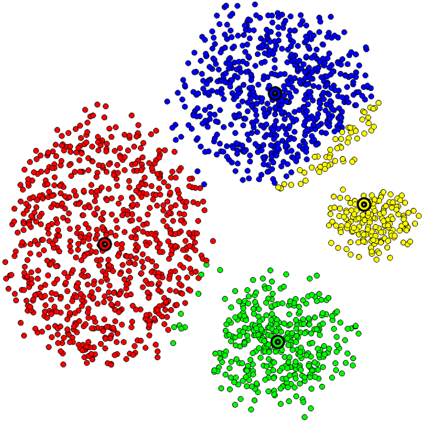
Agrupamiento basado en particiones (KMEANS)



Agrupamiento basado en particiones (KMEANS)



Agrupamiento basado en particiones (KMEANS)



Ventajas

- Intuitivo
- Rápido
- Sencillo
- Mejorable

¡Algoritmo de *clustering* más popular!

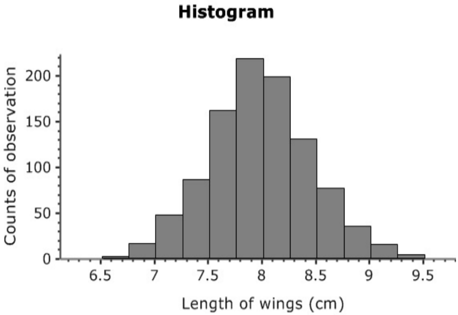
Desventajas

- El número de clústeres es un parámetro (K)
- Dependencia de la inicialización
- Dependencia de los *outliers*
- Funciona con variables descriptivas continuas
- Dificultades cuando los clústeres son de diferente tamaño y/o densidad, o no son convexos

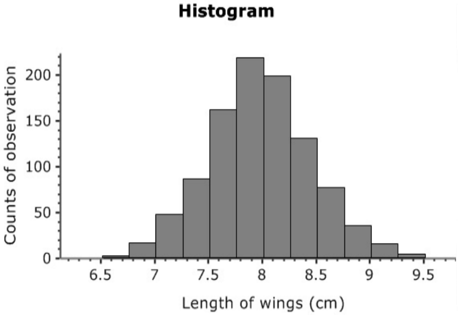
Desventajas

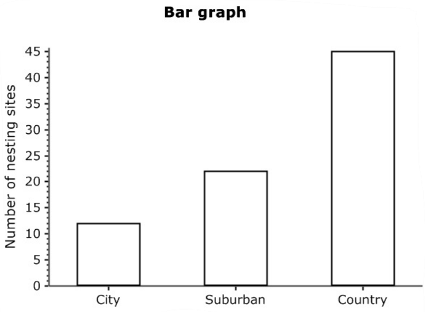
- El número de clústeres es un parámetro (K)
  Validación cruzada
- Dependencia de la inicialización
  Múltiples ejecuciones del algoritmo, K-means++
- Dependencia de los *outliers*
  Preproceso
- Funciona con variables descriptivas continuas
  K-medoids
- Dificultades cuando los clústeres son de diferente tamaño y/o densidad, o no son convexos

Agrupamiento basado en particiones (K-MEDOIDS)



Agrupamiento basado en particiones (K-MEDOIDS)





Agrupamiento basado en particiones (K-MEDOIDS)

Intuición

La idea iterativa de K-means

Se cambia el centro por el centriode:
Los centros son, en todo momento, ejemplos del conjunto de entrenamiento

K-means

Recibe: Conjunto de entrenamiento, $\{\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_n\}$; número de clústeres, K

1. Elección (aleatoria) de K puntos del conjunto de entrenamiento como centros, $\{\overline{\boldsymbol{x}}_1, \dots, \overline{\boldsymbol{x}}_K\}$.

2. Asignar cada ejemplo $\boldsymbol{x}_i$ al clúster del centro más cercano: $C(\boldsymbol{x}_i) = \operatorname{argmin}_{k \in \{1,\dots,K\}} ||\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}}_k||^2$

3. Para cada clúster k, recalcular su centro: $\overline{\boldsymbol{x}}_k = \operatorname{argmin}_{\boldsymbol{x}} \sum_{\boldsymbol{x}_i : C(\boldsymbol{x}_i)=k} ||\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}||^2$

4. Los pasos 2 y 3 se iteran hasta que los centros no cambian.

Devuelve: Conjunto de centros, $\{\overline{\boldsymbol{x}}_1, \dots, \overline{\boldsymbol{x}}_K\}$; Asignación, C

K-medoids

Recibe: Conjunto de entrenamiento, $\{\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_n\}$; número de clústeres, K

1. Elección (aleatoria) de K puntos del conjunto de entrenamiento como medoides, $\{\breve{\boldsymbol{x}}_1, \dots, \breve{\boldsymbol{x}}_K\}$.

2. Asignar cada ejemplo $\boldsymbol{x}_i$ al clúster del medoide más cercano: $C(\boldsymbol{x}_i) = \operatorname{argmin}_{k \in \{1,\dots,K\}} d(\boldsymbol{x}_i, \breve{\boldsymbol{x}}_k)$

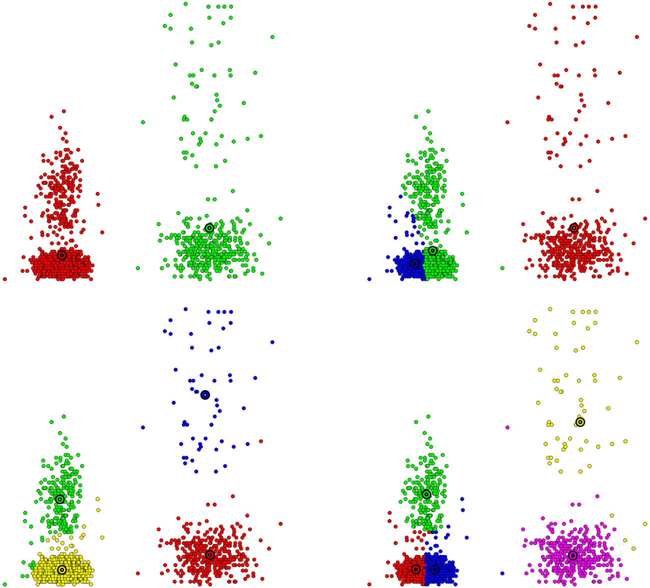
3. Para cada clúster k, recalcular su medoide: $\breve{\boldsymbol{x}}_k = \operatorname{argmin}_{\boldsymbol{x}:C(\boldsymbol{x})=k} \sum_{\boldsymbol{x}_i:C(\boldsymbol{x}_i)=k} d(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x})$

4. Los pasos 2 y 3 se iteran hasta que los centros no cambian.

Devuelve: Conjunto de centros, $\{\breve{\boldsymbol{x}}_1, \dots, \breve{\boldsymbol{x}}_K\}$; Asignación, C

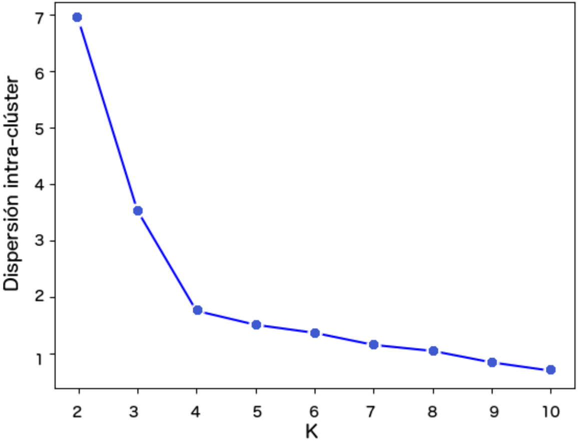
Agrupamiento basado en particiones

ELEGIR Nº CLUSTERS (K)



Agrupamiento basado en particiones

ELEGIR Nº CLUSTERS (K)



Agrupamiento basado en particiones

Ideas:

- La dispersión intraclúster siempre se reduce
- Elegir el punto donde el cambio de tendencia es más pronunciado

Gracias

Universidad
Internacional
de Valencia