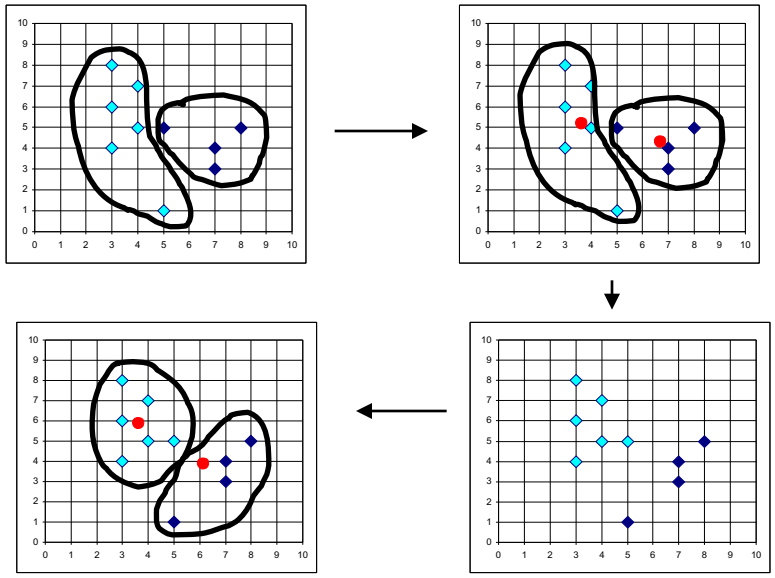
PROMiDAT
IBEROAMERICANO

Programa Iberoamericano de Formación en Minería de Datos

Método de las k-medias (k-means)

[Una introducción]

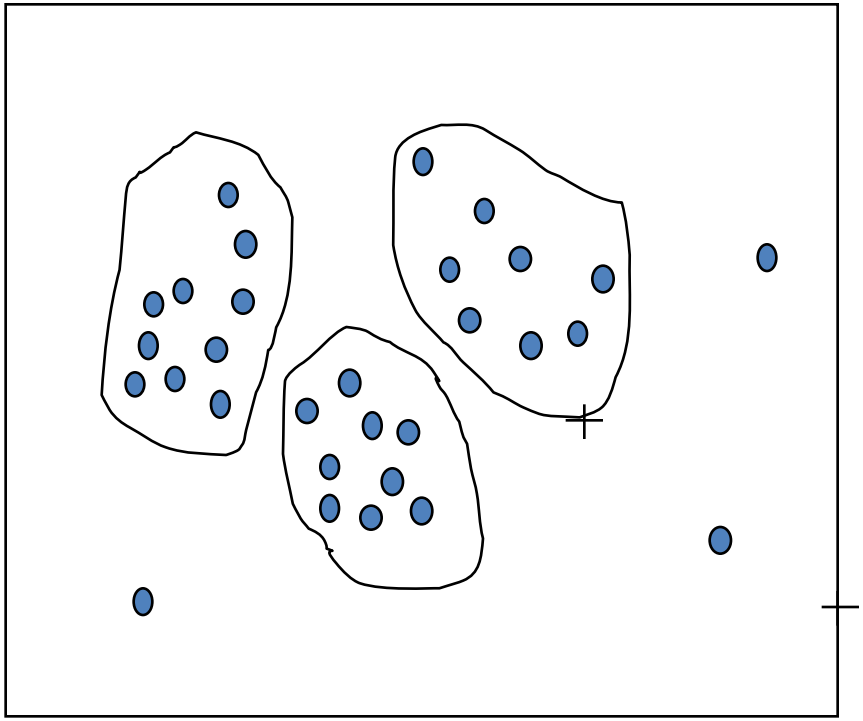
Método K-Means (Nubes Dinámicas)



Tareas de la Minería de Datos

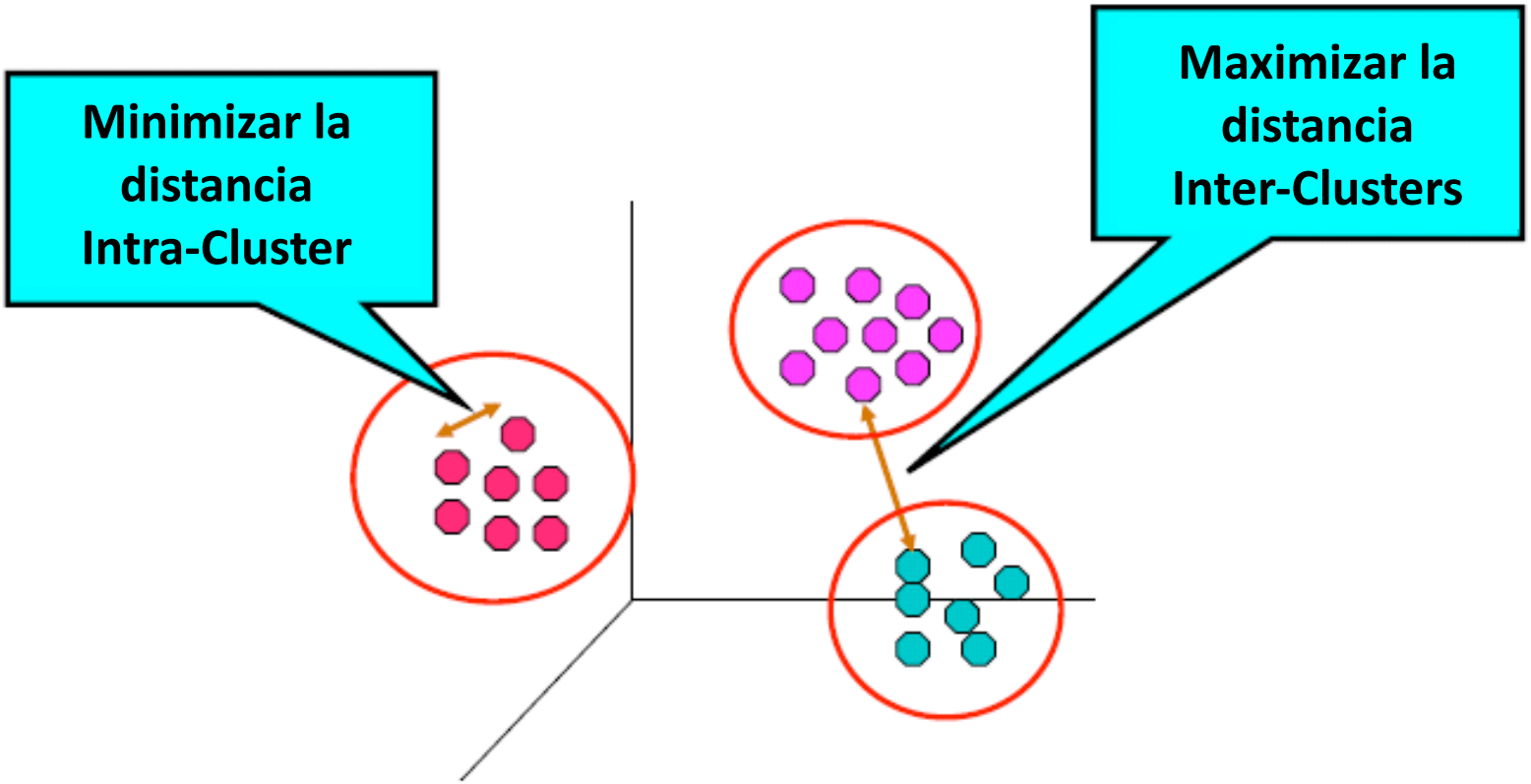
- ***"Clustering":*** (clasificación no supervisada, aprendizaje no supervizado): Es similar a la clasificación (discriminación), excepto que los grupos no son predefinidos. El objetivo es particionar o segmentar un conjunto de datos o individuos en grupos que pueden ser disjuntos o no. Los grupos se forman basados en la similaridad de los datos o individuos en ciertas variables. Como los grupos no son dados a priori el experto debe dar una interpretación de los grupos que se forman.
- Métodos:
  - Clasificación Jerárquica (grupos disjuntos).
  - Nubes Dinámicas – k-means (grupos disjuntos).
  - Clasificación Piramidal (grupos NO disjuntos).

Análisis de Conglomerados

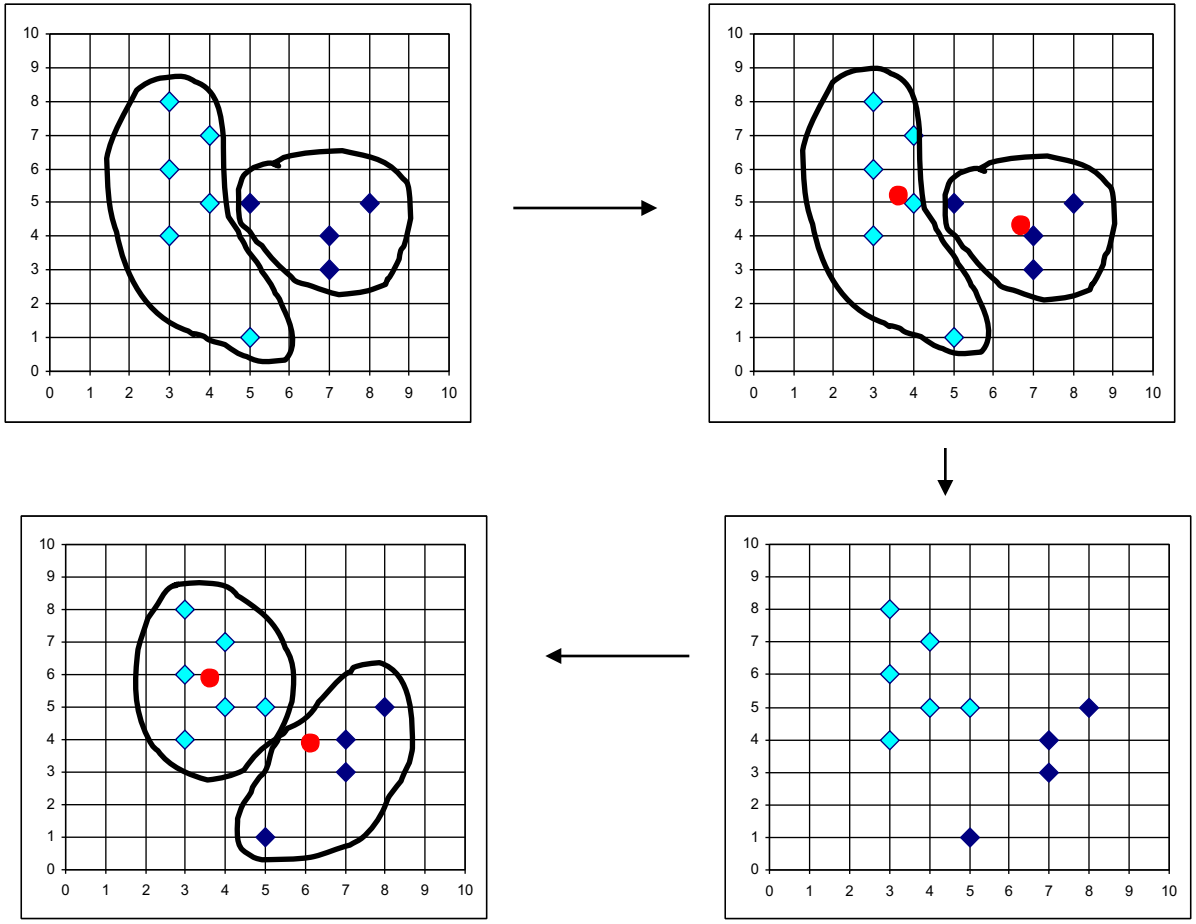


Objetivo:
Obtener clases lo más homogéneas posibles y tal que estén suficientemente separadas.

Criterio de la Inercia



The *K-Means* Clustering Method (nubes dinámicas)



Criterio de la inercia

Como se ha mencionado, se quiere obtener clases lo más homogéneas posibles y tal que estén suficientemente separadas. Este objetivo se puede concretar numéricamente a partir de la siguiente propiedad:
supóngase que se está en presencia de una partición $P = (C_1, C_2, \ldots, C_K)$ de Ω, donde $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \ldots, \mathbf{g}_K$ son los centros de gravedad de las clases:

$$\mathbf{g}_k = \frac{1}{|C_k|} \sum_{i \in C_k} \mathbf{x}_i,$$

$\mathbf{g}$ es el centro de gravedad total:

$$\mathbf{g} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i$$

Ejemplo: Estudiantes

Ver NotasEscolaresExcelKMeans.xlsx

Análisis de los Clústeres

	Matemáticas	Ciencias	Español	Historia	EdFísica
Lucía	7	6.5	9.2	8.6	8
Pedro	7.5	9.4	7.3	7	7
Inés	7.6	9.2	8	8	7.5
Luis	5	6.5	6.5	7	9
Andrés	6	6	7.8	8.9	7.3
Ana	7.8	9.6	7.7	8	6.5
Carlos	6.3	6.4	8.2	9	7.2
José	7.9	9.7	7.5	8	6
Sonía	6	6	6.5	5.5	8.7
María	6.8	7.2	8.7	9	7

Centro Gravedad Total de la Nube de Puntos

Matemáticas	Ciencias	Español	Historia	EdFísica
6.79	7.65	7.74	7.9	7.42

Centro Gravedad C1={Pedro,Inés,Ana,José}

Matemáticas	Ciencias	Español	Historia	EdFísica
7.7	9.475	7.625	7.75	6.75

Centro Gravedad C2={Luis,Sonia}

Matemáticas	Ciencias	Español	Historia	EdFísica
5.5	6.25	6.5	6.25	8.85

Centro Gravedad C3={Lucía,Andrés,Carlos,María}

Matemáticas	Ciencias	Español	Historia	EdFísica
6.525	6.525	8.475	8.875	7.375

Definiciones

- *Inercia total* de la nube de puntos:

$$I = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} ||\mathbf{x}_i - \mathbf{g}||^2$$

- *Inercia inter-clases*, es decir la inercia de los centros de gravedad respecto al centro de gravedad total:

$$B(P) = \sum_{k=1}^{K} \frac{|C_k|}{n} ||\mathbf{g}_k - \mathbf{g}||^2$$

- *Inercia intra-clases*, es decir la inercia al interior de cada clase:

$$W(P) = \sum_{k=1}^{K} I(C_k) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{K} \sum_{i \in C_k} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{g}_k\|^2$$

Teorema: Igualdad de Fisher

- *Inercia total = Inercia inter-clases*

  +

  Inercia intra-clases

$$I = B(P) + W(P)$$

Ejemplo: Estudiantes

Ver NotasEscolaresExcelKMeans.xlsx

Análisis de los Clústeres

	Matemáticas	Ciencias	Español	Historia	EdFísica
Lucía	7	6.5	9.2	8.6	8
Pedro	7.5	9.4	7.3	7	7
Inés	7.6	9.2	8	8	7.5
Luis	5	6.5	6.5	7	9
Andrés	6	6	7.8	8.9	7.3
Ana	7.8	9.6	7.7	8	6.5
Carlos	6.3	6.4	8.2	9	7.2
José	7.9	9.7	7.5	8	6
Sonía	6	6	6.5	5.5	8.7
María	6.8	7.2	8.7	9	7

Cálculo de I=Inercia Total

	4.3246
	4.7466
	3.1426
	9.3706
	4.3646
	5.6806
	3.2726
	7.5186
	12.283
	2.5106
I=	*5.7214*

Cálculo de B(P)=Inercia Inter-Clases

	4.6434
	9.9291
	2.8287
B(P)=	4.9747

Cálculo de W(P)=Inercia Intra-Clases

1.2181	0.7763	0.8975
1.0131	0.8513	0.8975
0.1881	0.1563	1.795
0.7381	0.7313	
3.1575	2.515	

W(P)= *0.7468*

I=B(P)+W(P) *5.7214*

Centro Gravedad Total de la Nube de Puntos

Matemáticas	Ciencias	Español	Historia	EdFísica
6.79	7.65	7.74	7.9	7.42

Centro Gravedad C1={Pedro,Inés,Ana,José}

Matemáticas	Ciencias	Español	Historia	EdFísica
7.7	9.475	7.625	7.75	6.75

Centro Gravedad C2={Luis,Sonia}

Matemáticas	Ciencias	Español	Historia	EdFísica
5.5	6.25	6.5	6.25	8.85

Centro Gravedad C3={Lucía,Andrés,Carlos,María}

Matemáticas	Ciencias	Español	Historia	EdFísica
6.525	6.525	8.475	8.875	7.375

- ***Objetivo:*** Se quiere que *B(P)* sea máxima y *W(P)* sea mínima

- Como la inercia *I(P)* es fija, dada la nube de puntos, entonces al maximizar *B(P)* se minimiza automáticamente *W(P)*.

- Por lo tanto, los dos objetivos (homogeneidad al interior de las clases y separación entre las clases) se alcanzan al mismo tiempo al querer minimizar *W(P)*.

Problema combinatorio

- Es necesario hacer notar que, cuando se quiere obtener una partición en *K* clases de un conjunto con *n* individuos, no tiene sentido examinar *todas* las posibles particiones del conjunto de individuos en *K* clases.
- En efecto, se está en presencia de un problema combinatorio muy complejo; sólo para efectos de ilustración, mencionemos que el número de particiones en 2 clases de un conjunto con 60 elementos es aproximadamente 10^{18}, y para 100 elementos en 5 clases anda por 10^{68}.

Objetivo del Método K-means

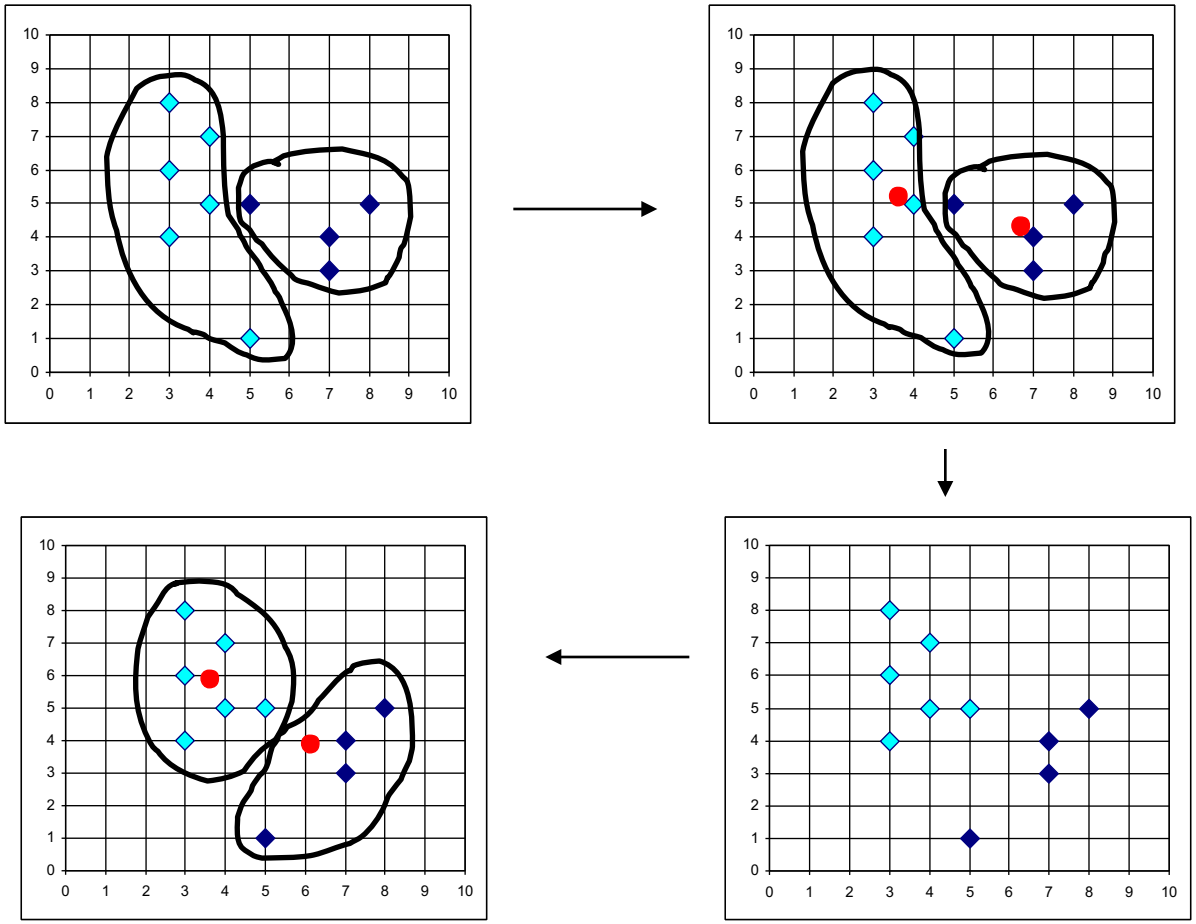
- Así, el objetivo en el método de K-means es encontrar una partición *P* de $\mathbf{W}$ y representantes de las clases, tales que *W*(*P*) sea mínima.

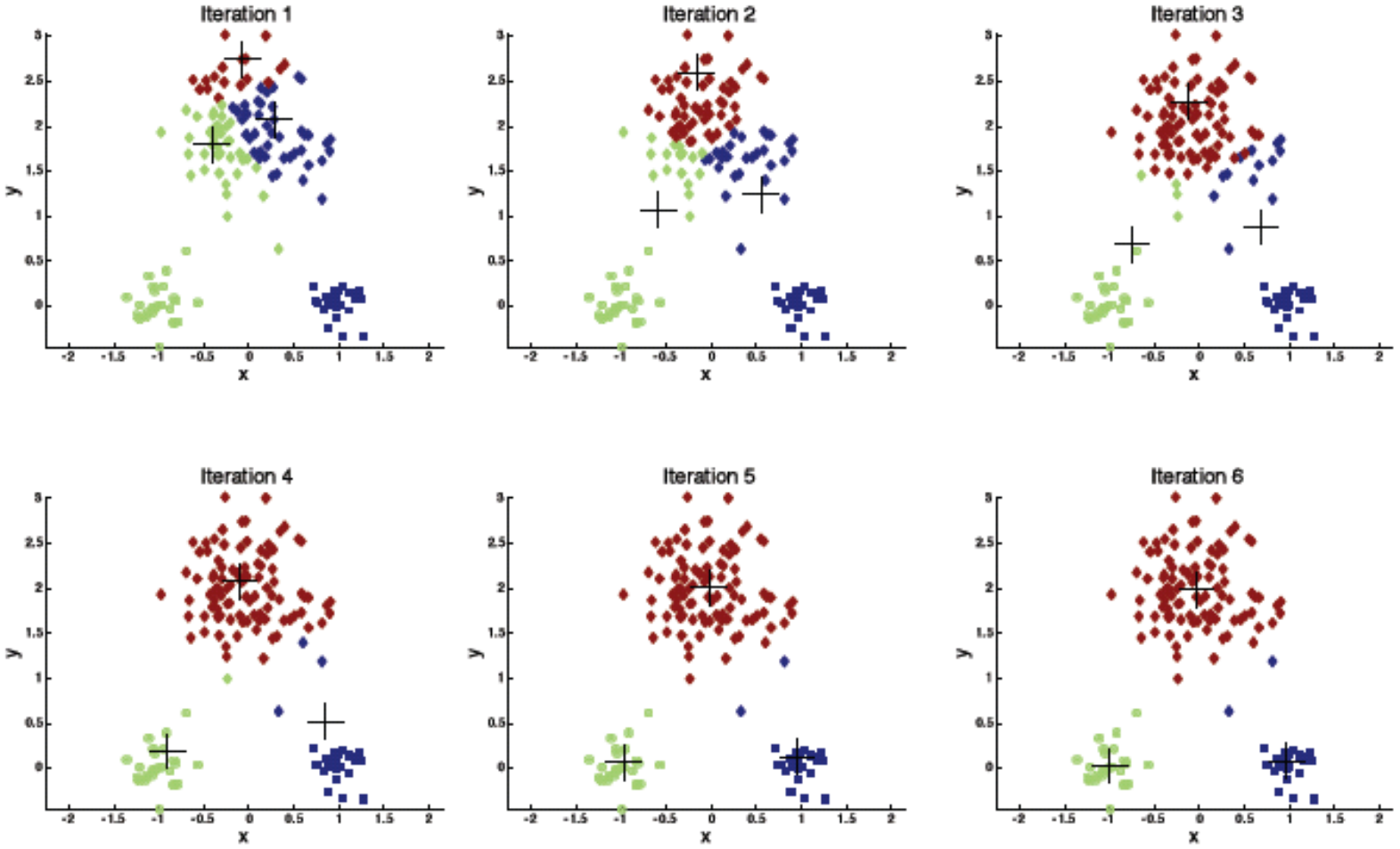
Método de k-medias

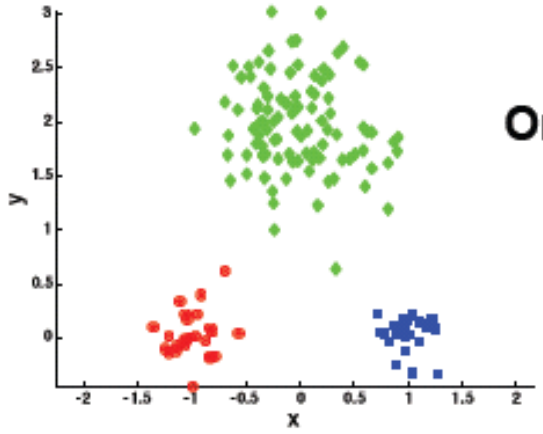
- Existe un poco de confusión en la literatura acerca del método de las k-medias, ya que hay dos métodos distintos que son llamados con el mismo nombre.
- Originalmente, Forgy propuso en 1965 un primer método de reasignación-recentraje que consiste básicamente en la iteración sucesiva, hasta obtener convergencia, de las dos operaciones siguientes:

1. Representar una clase por su centro de gravedad, esto es, por su vector de promedios.
2. Asignar los objetos a la clase del centro de gravedad más cercano.

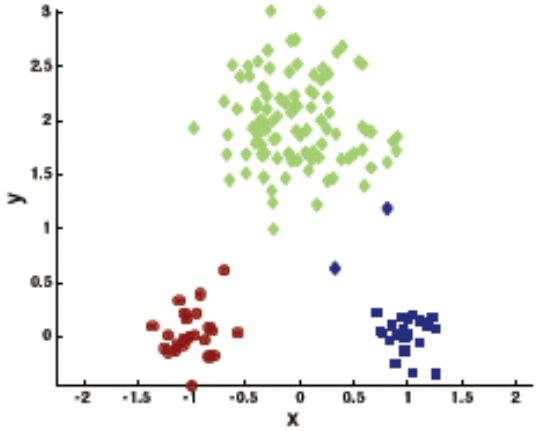
The *K-Means* Clustering Method (nubes dinámicas)



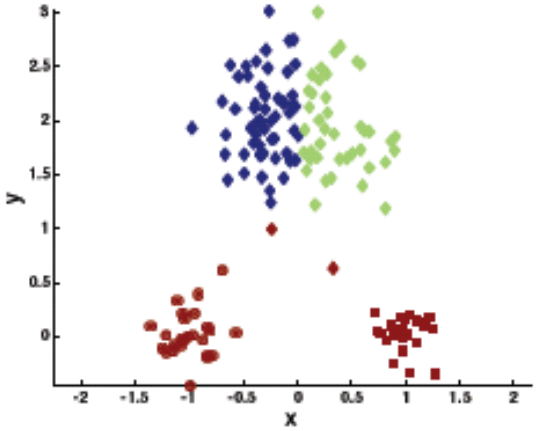

Iteration 1
Iteration 2
Iteration 3
Iteration 4
Iteration 5
Iteration 6
x
y



Original Points

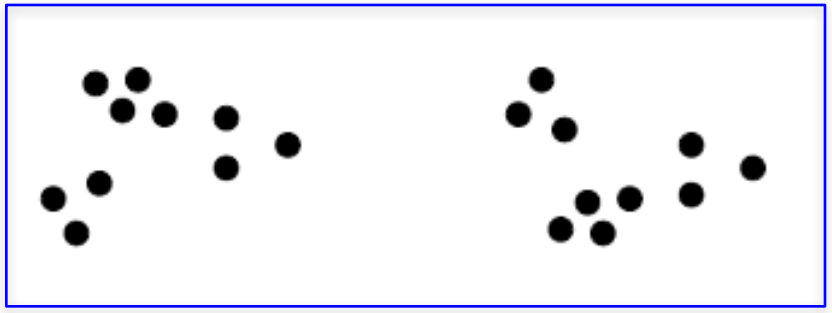


Optimal Clustering

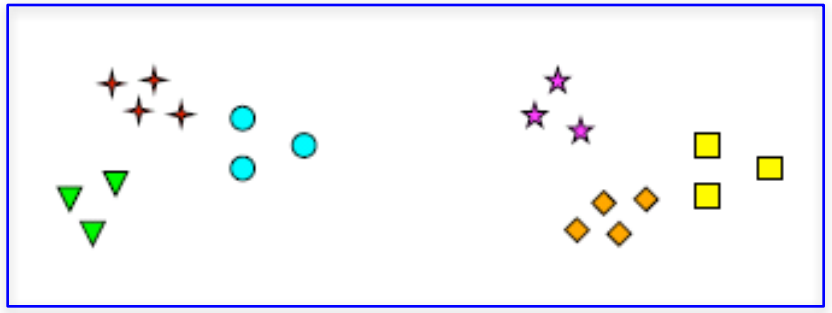


Sub-optimal Clustering

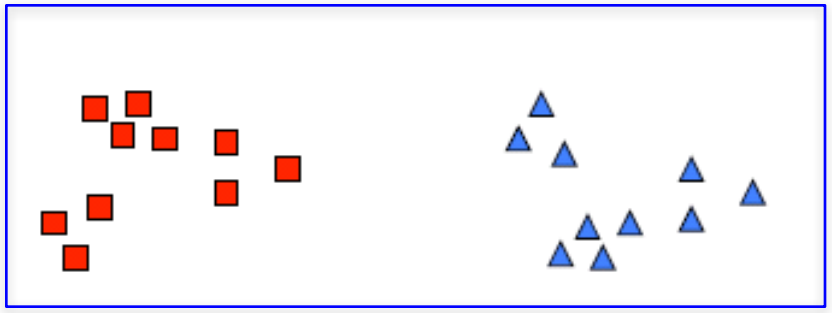
¿Cuántos clústeres?



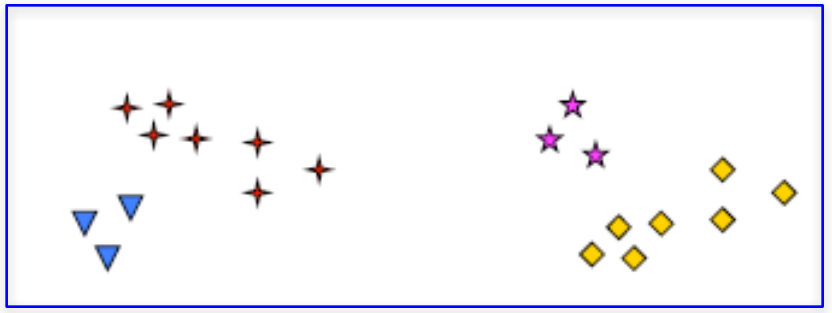
Datos originales



6 clústeres

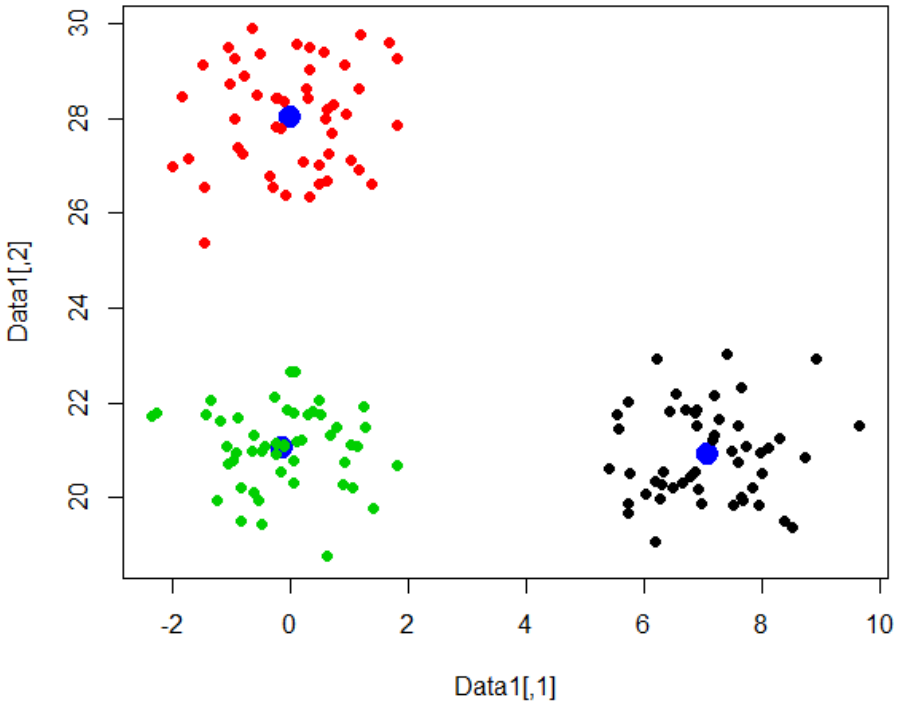


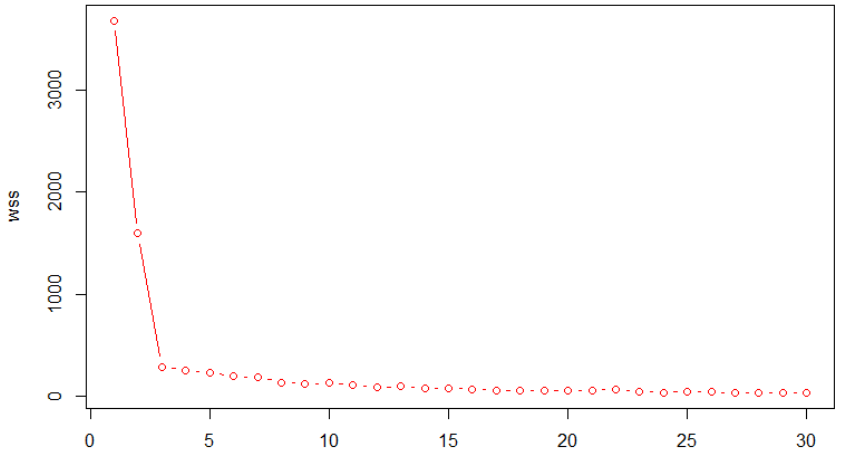
2 clústeres



4 clústeres

¿Cuántos clústeres?





k x (inercia intra-clases)

El “codo” indica que k=3 es la cantidad adecuada de clústeres

K-Means Clustering Algorithm

Algorithm 1 Basic K-means Algorithm.

1: Select K points as the initial centroids.
2: **repeat**
3: Form K clusters by assigning all points to the closest centroid.
4: Recompute the centroid of each cluster.
5: **until** The centroids don't change

Ejemplo de las notas escolares

Partición P	Número de veces obtenida	$W(P)$	$B(P)$
$C_1 = \{$Lucía,Andrés,Carlos,María$\}$ $C_2 = \{$Luis,Sonia$\}$ $C_3 = \{$Pedro,Inés,Ana,José$\}$	17 (68%)	0.75	4.97
$C_1 = \{$Lucía,Andrés,Carlos,María, Luis,Sonia$\}$ $C_2 = \{$Pedro,Inés$\}$ $C_3 = \{$Ana,José$\}$	3 (12%)	2.48	3.24
$C_1 = \{$Lucía,Andrés,Carlos,María, Luis,Sonia$\}$ $C_2 = \{$Inés,Ana,José$\}$ $C_3 = \{$Pedro$\}$	2 (8%)	2.52	3.20
$C_1 = \{$Lucía,Andrés,Carlos,María, Luis,Sonia$\}$ $C_2 = \{$Inés,Ana$\}$ $C_3 = \{$Pedro,José$\}$	1 (4%)	2.55	3.17
$C_1 = \{$Lucía,Andrés,Carlos,Luis, Sonia$\}$ $C_2 = \{$Pedro,Inés$\}$ $C_3 = \{$Ana,José,María$\}$	1 (4%)	2.72	3.00
$C_1 = \{$Lucía,Andrés,Carlos,María, Pedro,Inés,Ana,José$\}$ $C_2 = \{$Luis$\}$ $C_3 = \{$Sonia$\}$	1 (4%)	3.06	2.66

PR0MiDAT

IBEROAMERICANO

Programa Iberoamericano de Formación en Minería de Datos

Gracias….