APRENDIZADO DE MÁQUINA

APRENDIZADO NÃO-SUPERVISIONADO (AGRUPAMENTO)

PROF. RONALDO CRISTIANO PRATI

ronaldo.prati@ufabc.edu.br

Bloco A, sala 513-2

TIPOS DE APRENDIZADO

- **Supervisionado** os exemplos tem um atributo de interesse pré-determinado
- **Não supervisionado** não temos um atributo de interesse pré-determinado

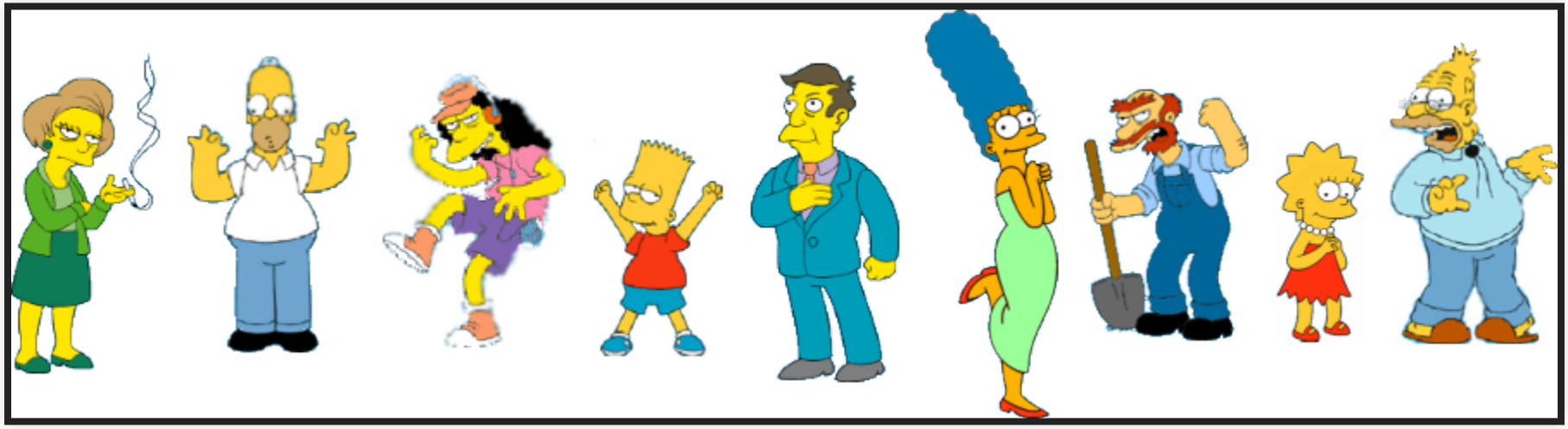
APRENDIZADO NÃO SUPERVISIONADO

- **Agrupamento** identificar alguma estrutura nos dados
- **Redução de dimensionalidade** usar características estruturais para simplificar os dados

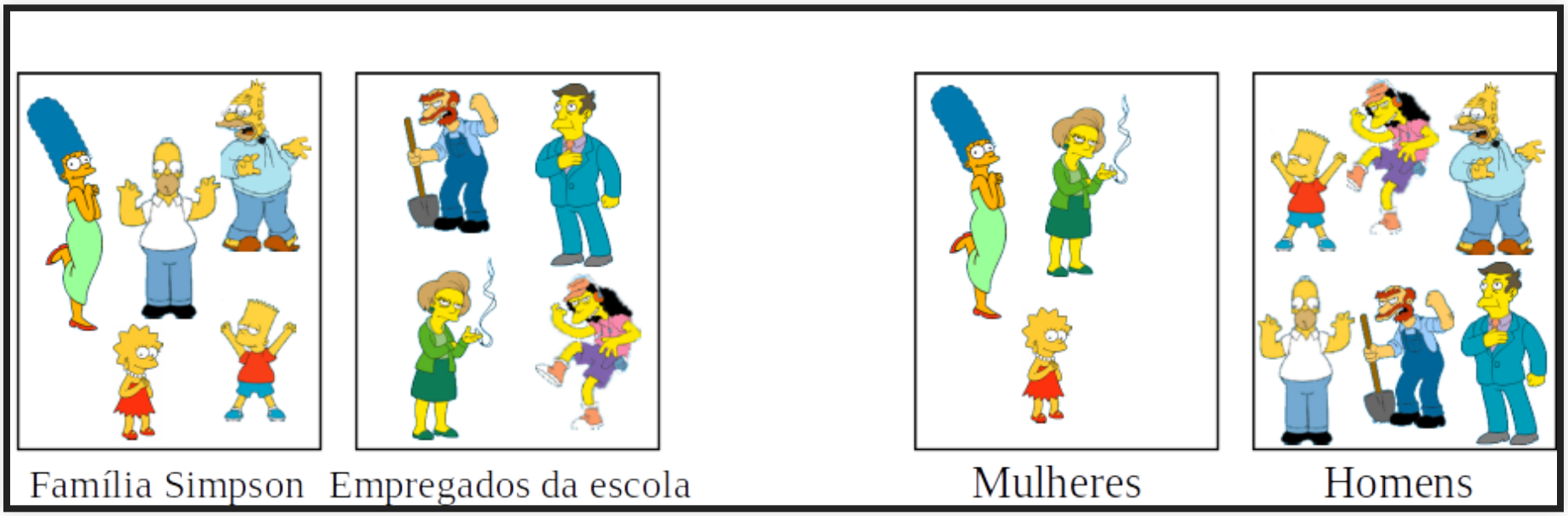
AGRUPAMENTO

- Organizar dados em grupos de forma que exista
  - uma alta similaridade intra-classe
  - uma baixa similaridade inter-classes
- Mais informalmente, encontrar grupos que ocorrem naturalmente entre objetos.

QUAL É O AGRUPAMENTO NATURAL DESSES OBJETOS?

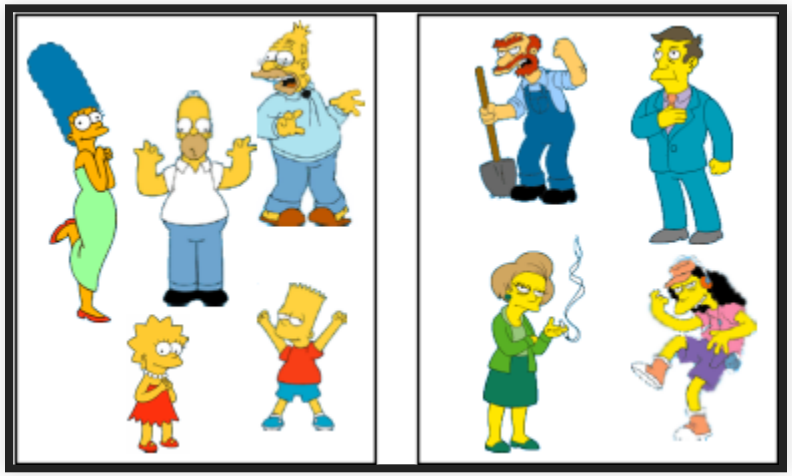


AGRUPAMENTO É SUBJETIVO



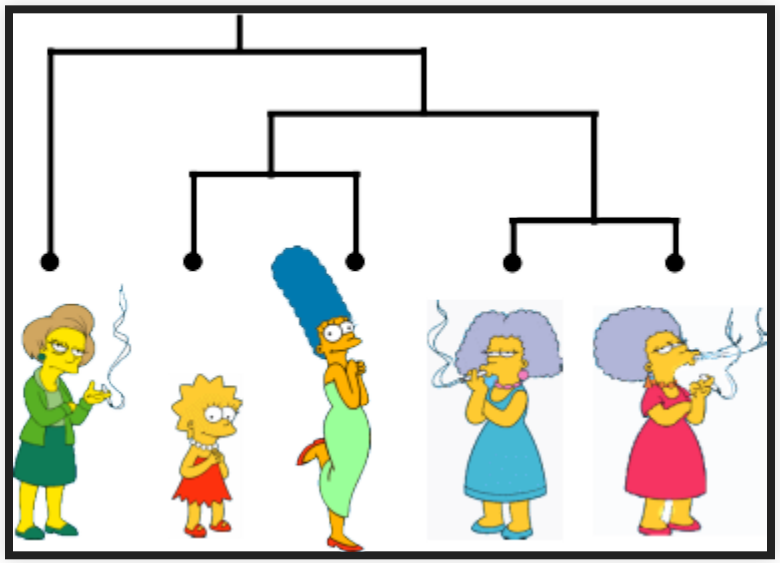
APRUPAMENTO PARTICIONAL

- **Algoritmos Particionais:** Construir diversas partições de acordo com algum critério



APRUPAMENTO HIERÁRQUICO

- **Algoritmos Hierárquicos:** Criar uma decomposição hierárquica de um conjunto de objetos utilizando algum critério



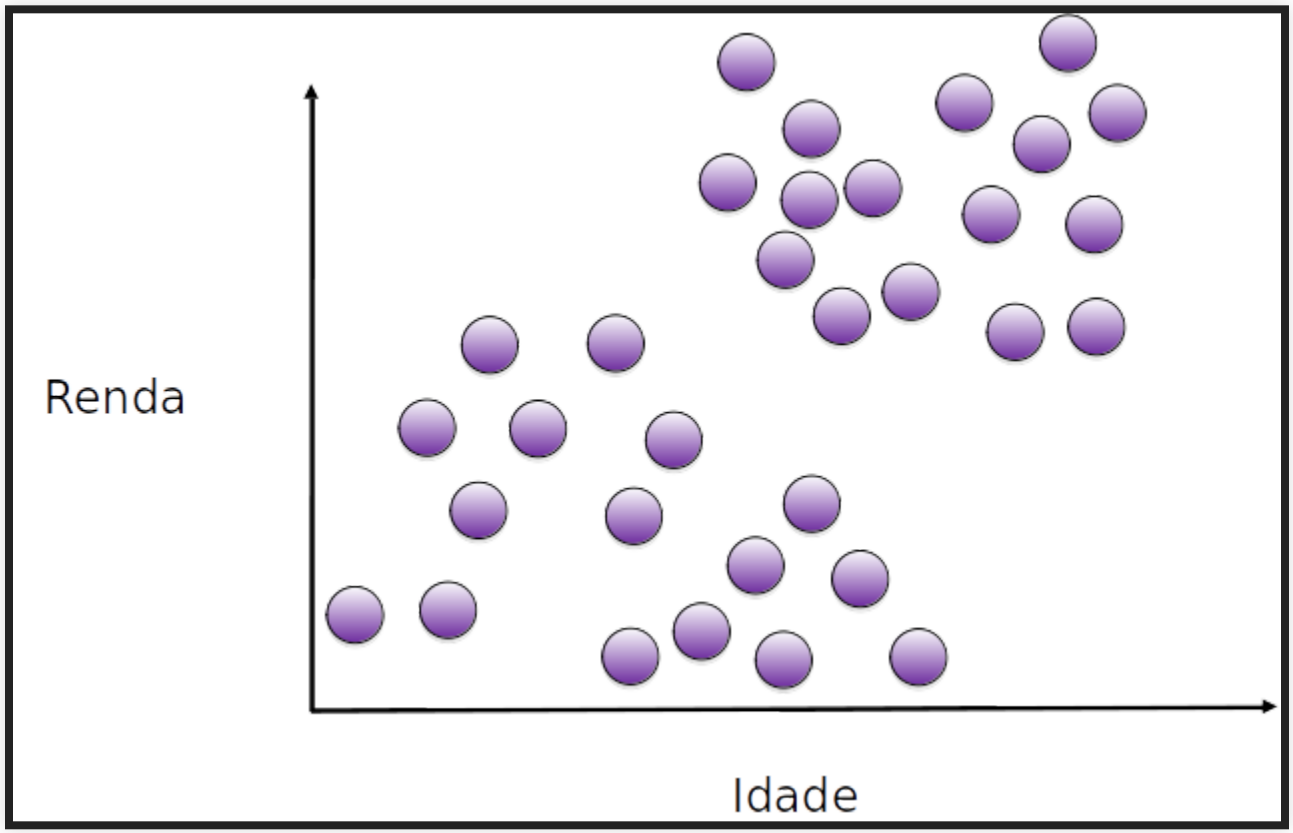
K-MÉDIAS

- Algoritmo particional: cada ponto é associado a um único grupo
- Precisamos decidir antecipadamente o número k de grupos

K-MÉDIAS - ALGORITMO

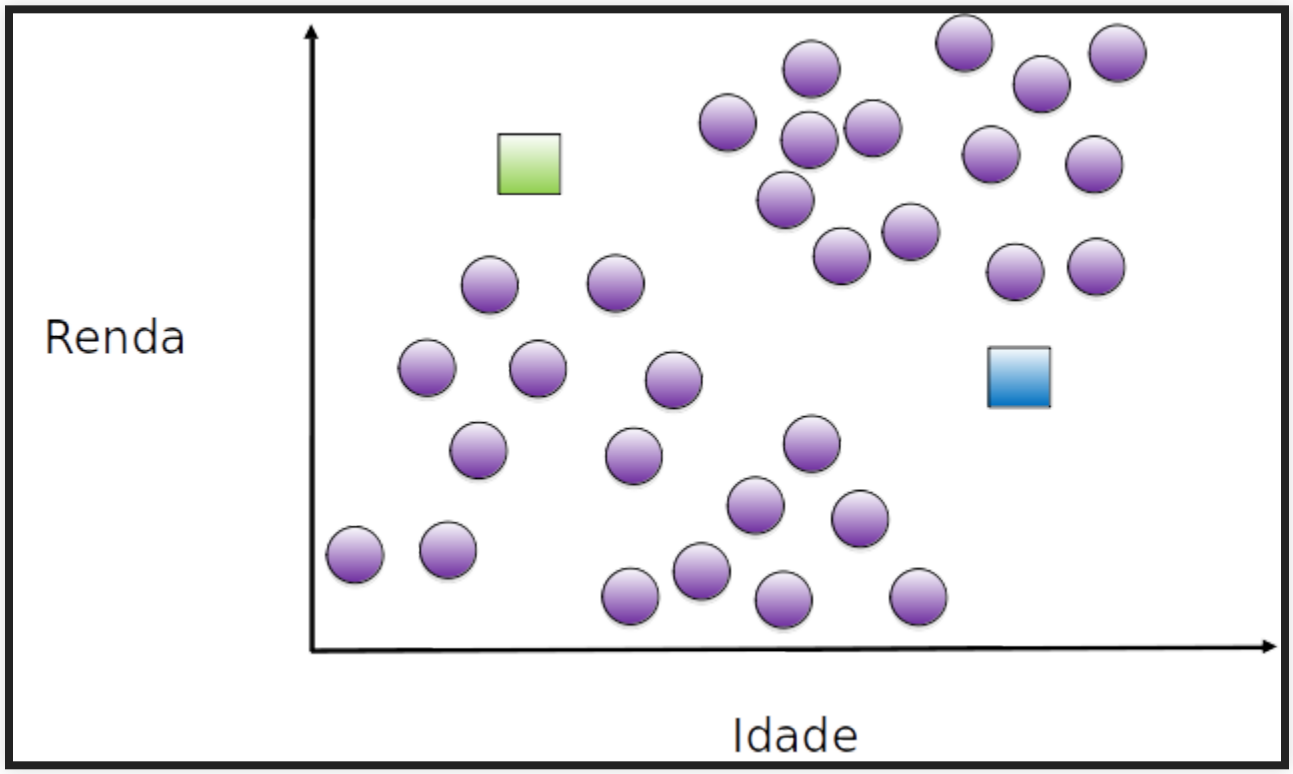
1. Decidir um valor para k.
2. Inicializar os centros dos k grupos (aleatoriamente, se necessário).
3. Decidir o grupo dos N objetos por meio da associação ao centro do grupo mais próximo.
4. Re-estimar os centros dos k grupos, assumindo que a associação com os grupos encontradas anteriormente está correta.
5. Se nenhum dos N objetos mudou de grupo na última iteração, pare. Caso contrário, volte para o passo 3.

K-MÉDIAS - EXEMPLO



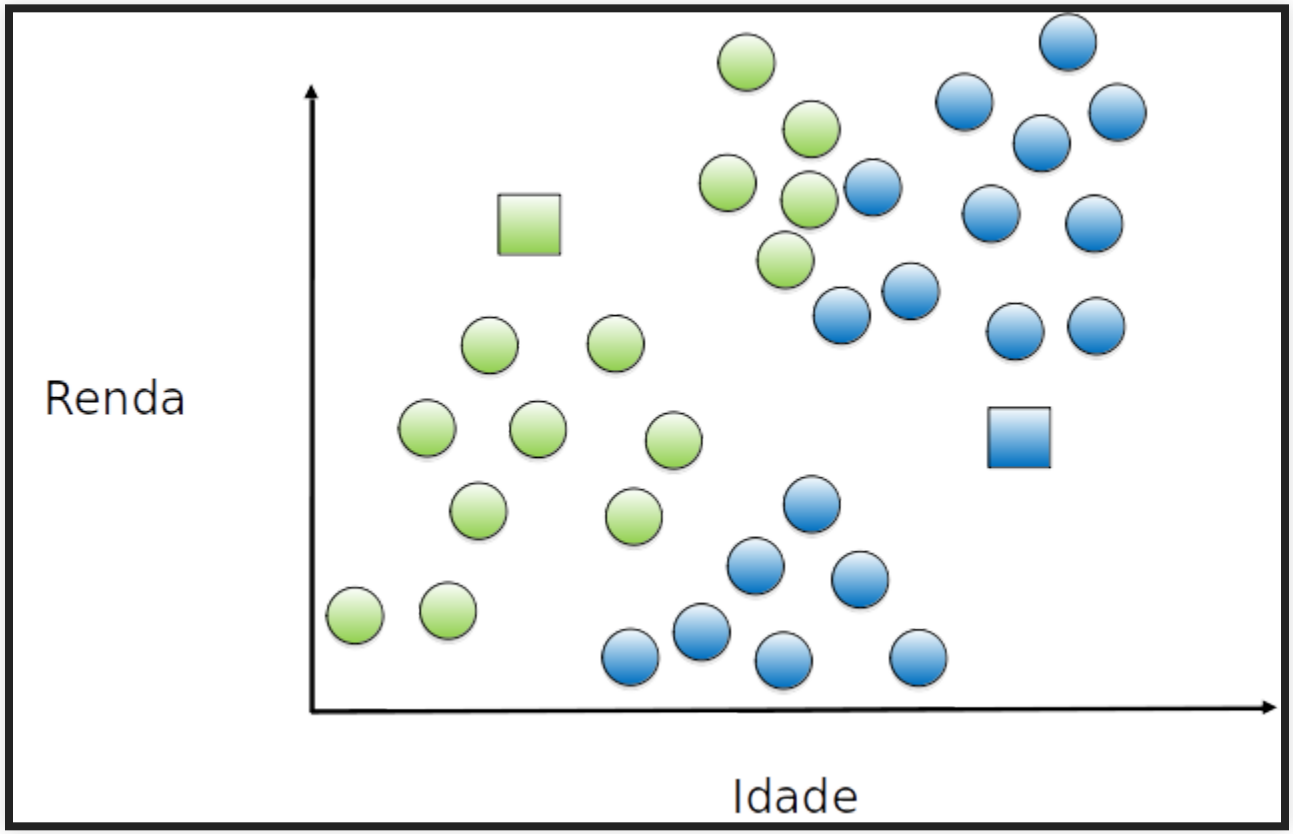
queremos encontrar 2 grupos

K-MÉDIAS - EXEMPLO



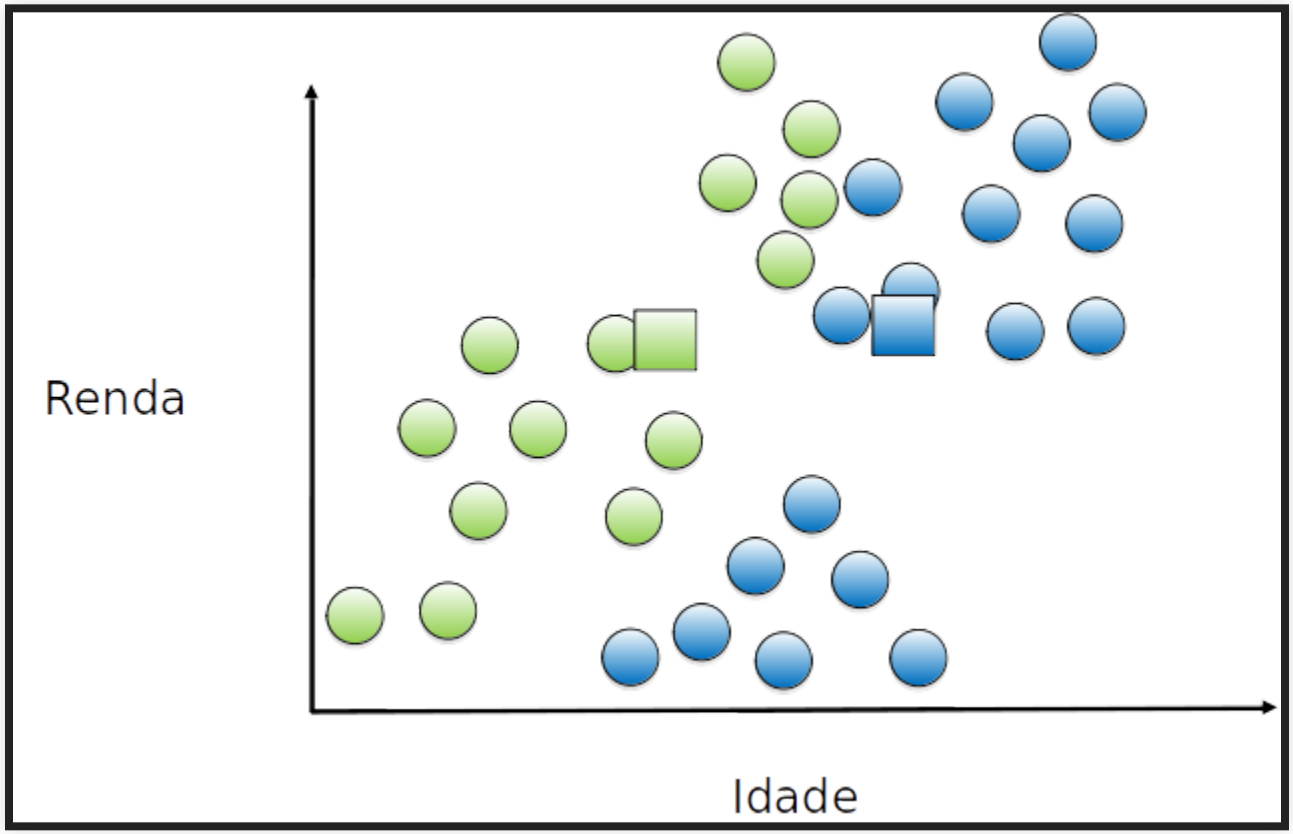
inicalizamos aleatoriamente o centróide dos dois grupos

K-MÉDIAS - EXEMPLO



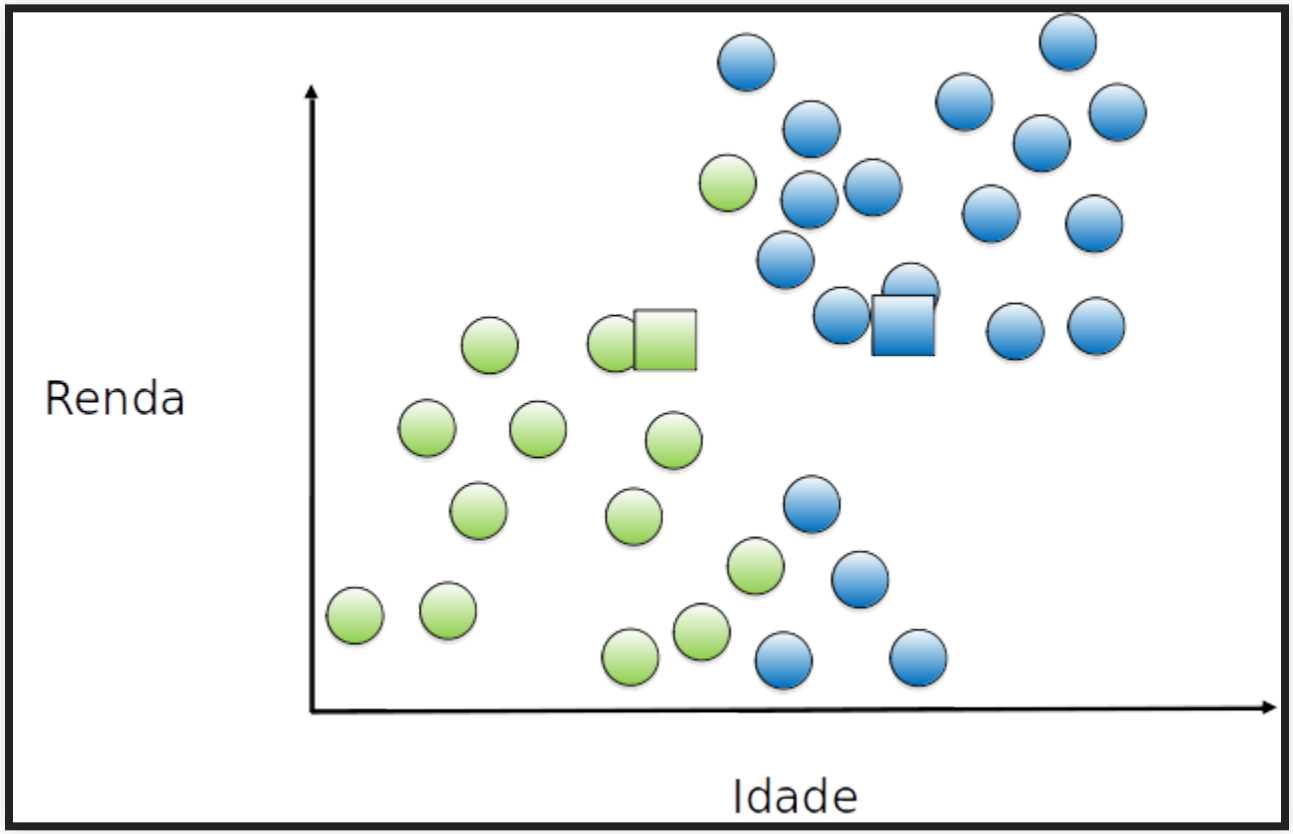
Cada exemplo é atribuído a um grupo, de acordo com o centróide mais próximo

K-MÉDIAS - EXEMPLO



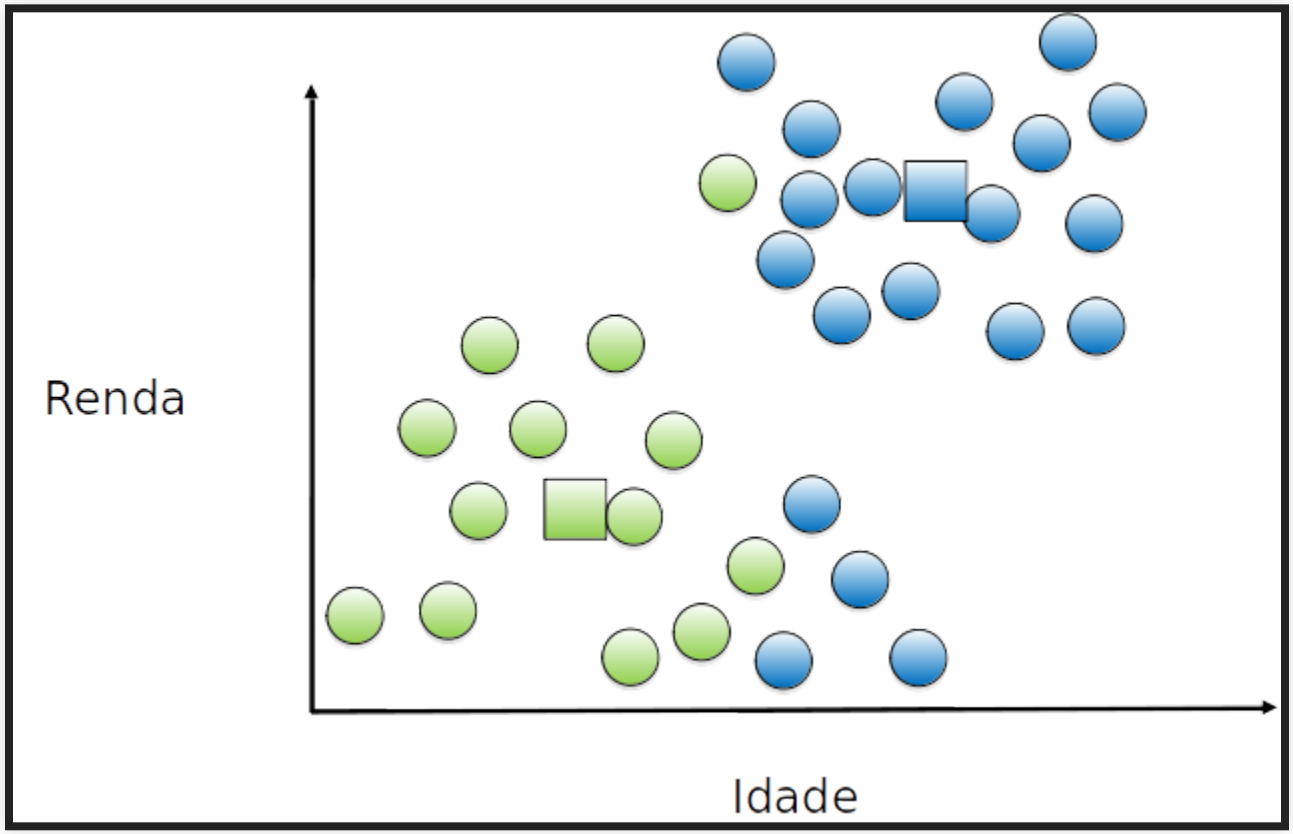
O centróide do grupo é movido para o centro de cada grupo

K-MÉDIAS - EXEMPLO



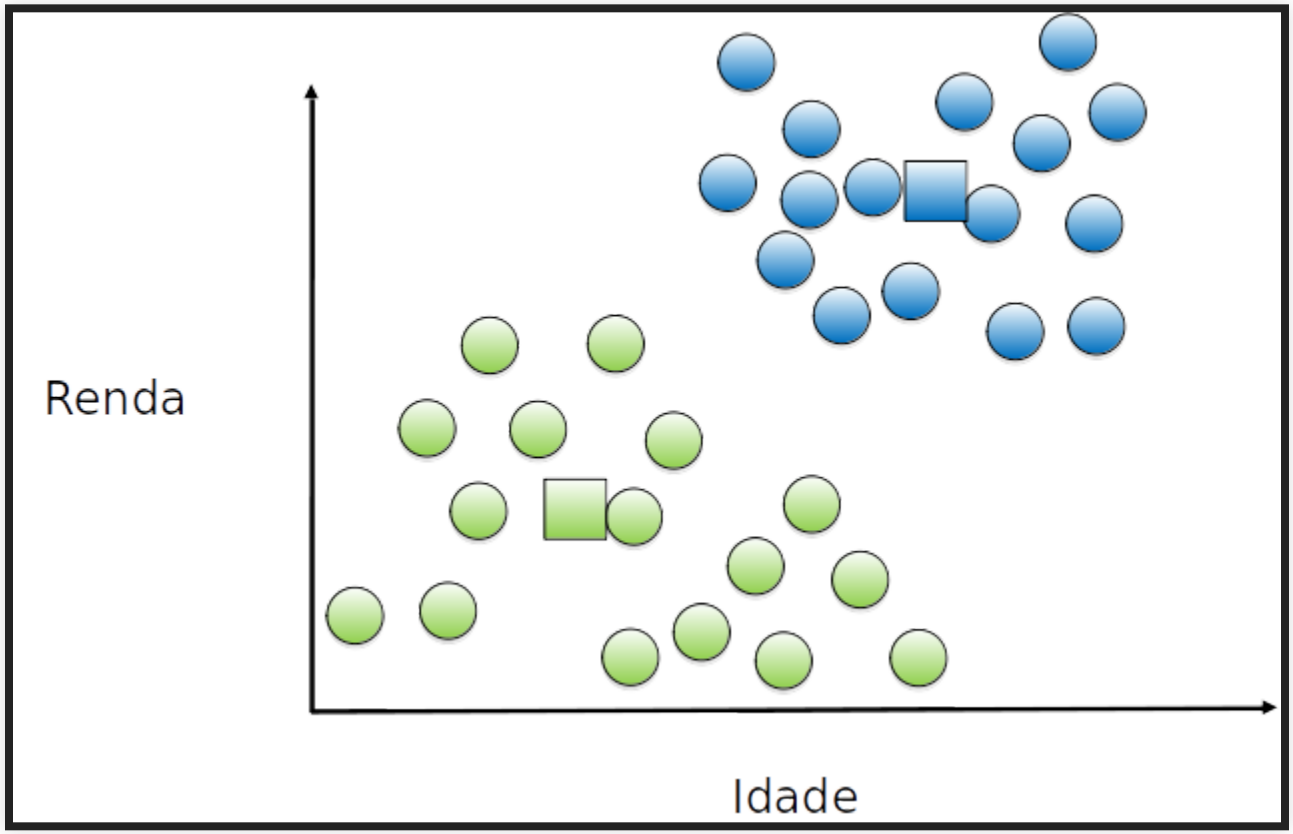
Cada exemplo é (re)atribuído a um grupo, de acordo com o (novo) centróide mais próximo

K-MÉDIAS - EXEMPLO



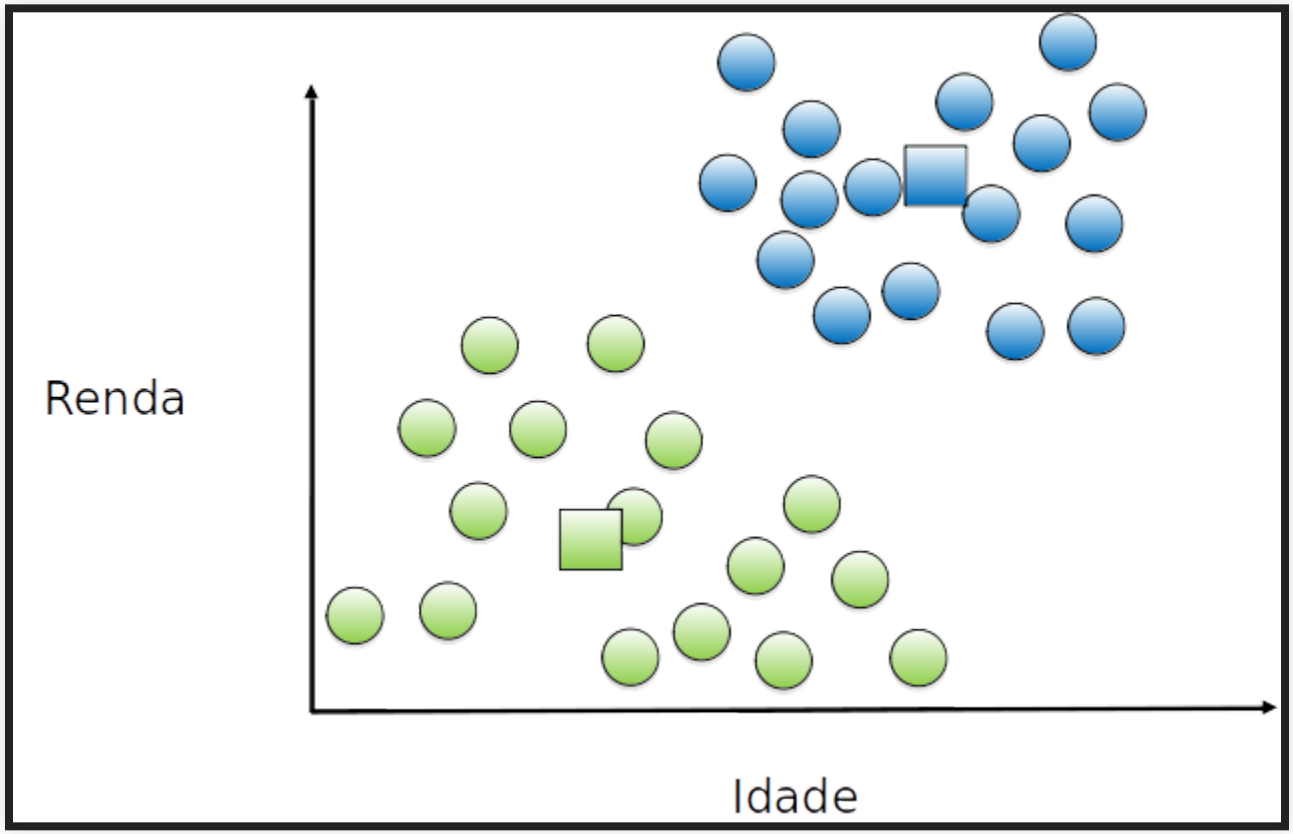
O centróide do grupo é movido (novamente) para o (novo) centro de cada grupo

K-MÉDIAS - EXEMPLO



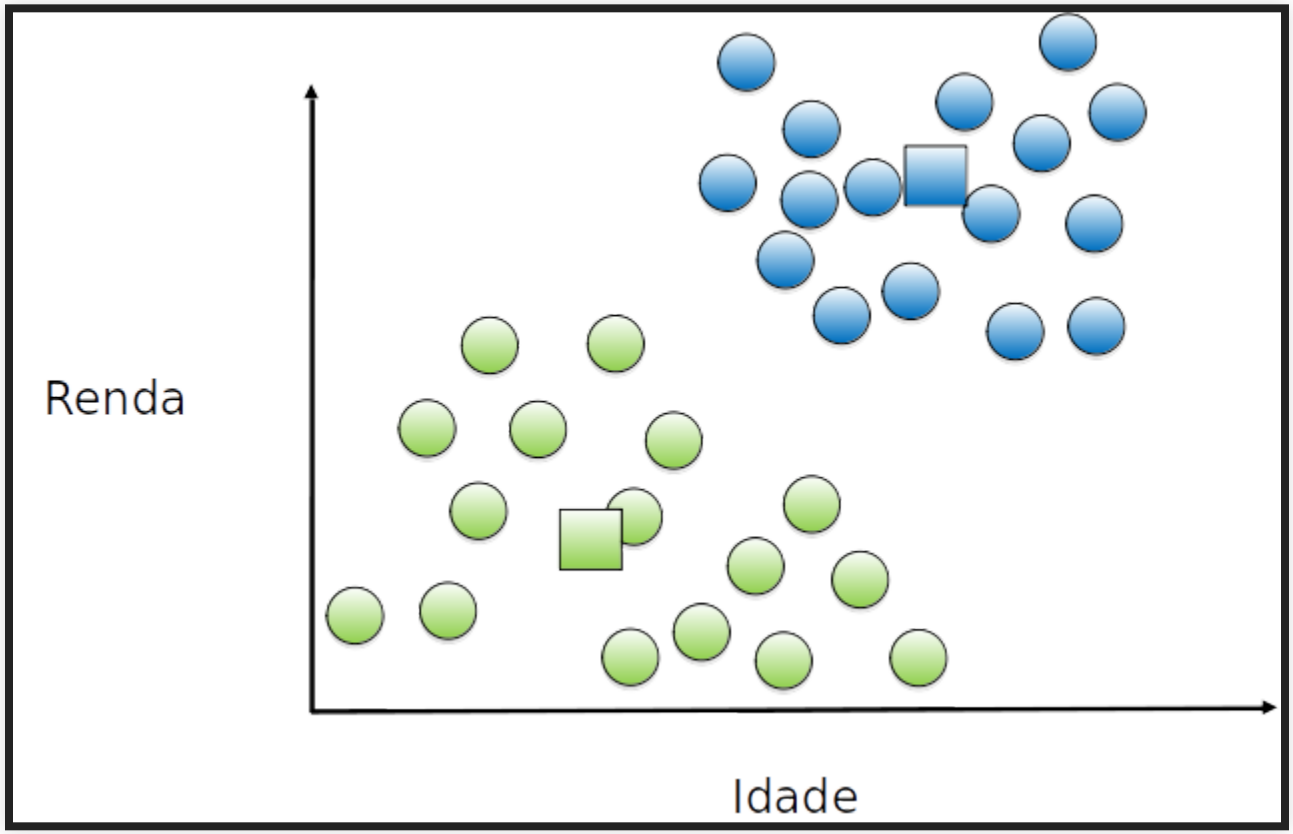
Cada exemplo é (re)atribuído a um grupo, de acordo com o (novo) centróide mais próximo

K-MÉDIAS - EXEMPLO



O centróide do grupo é movido (novamente) para o (novo) centro de cada grupo.

K-MÉDIAS - EXEMPLO



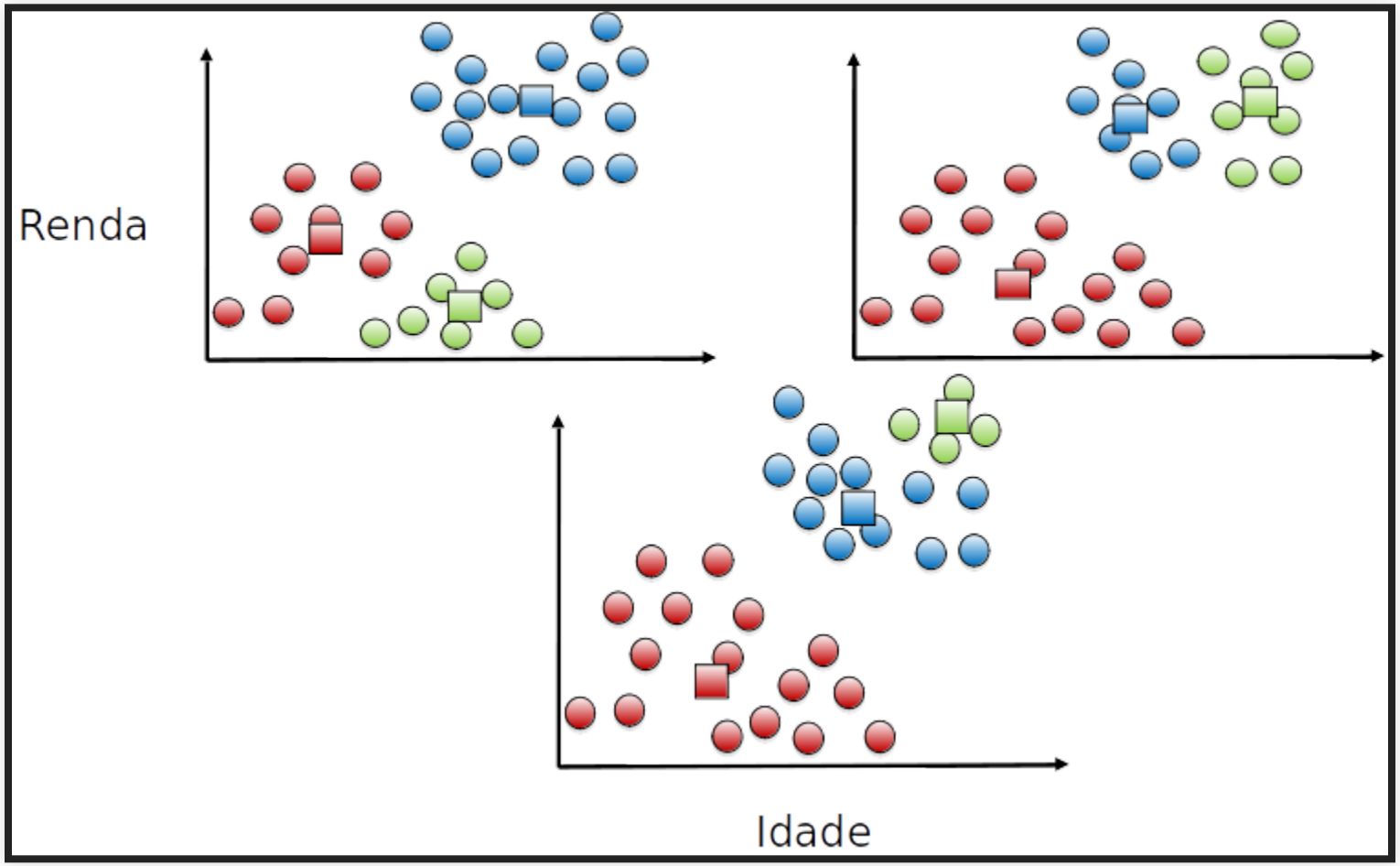
Cada exemplo é (re)atribuído a um grupo, de acordo com o (novo) centróide mais próximo.

Como não houve alteração, convergiu.

K-MÉDIAS

- O k-médias é dependente do número de cluster k
- O k-médias é sensível à inicialização dos clusters

K-MÉDIAS - DIFERENTES EXECUÇÕES



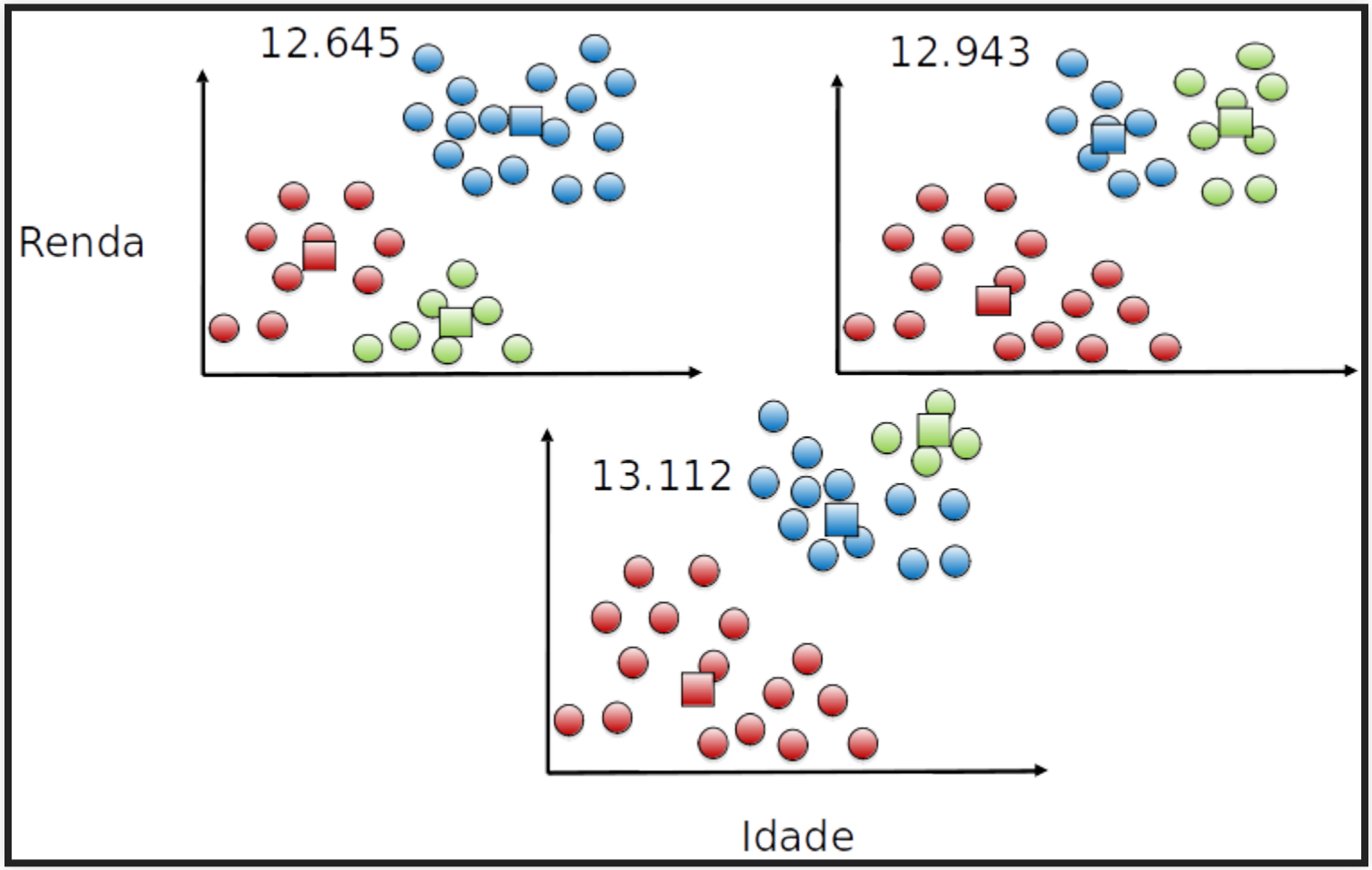
FUNÇÃO OBJETIVO

- Seja c^i o cluster i, μ_{c^i} o centróide do cluster i e x^i um exemplo associado ao cluster i. Podemos definir a função objetivo como:

$$J(c^1, \ldots, c^k, \mu_{c^1}, \ldots, \mu_{c^k}) = \frac{1}{m} \sum_{i}^{m} \| x^i - \mu_{c^i} \|^2$$

- Soma dos quadrados da distância de cada ponto ao seu respectivo cluster.
- Também chamado de inércia.

FUNÇÃO OBJETIVO



ESCOLHA DO VALOR DE K

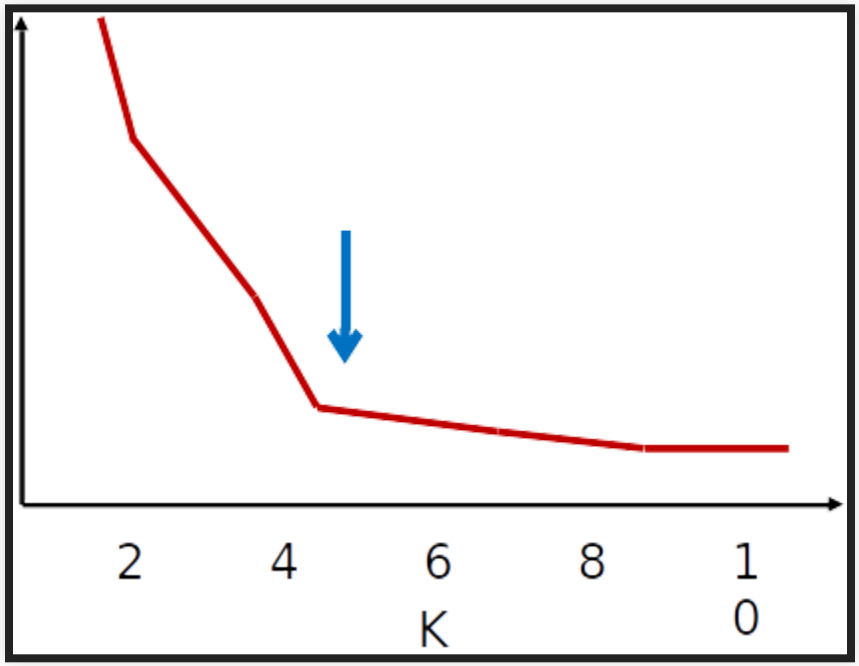
- Alguns problemas tem um valor de k bem definido
  - Agrupar tarefas similares em 4 núcleos de CPU ($k = 4$)
  - Agrupar roupas em 5 diferentes tamanhos para cobrir a maioris das pessoas ($k = 5$)
  - Agrupar comentários similares em 10 grupos ($k = 10$)

ESCOLHA DO VALOR DE K

- Quando não temos conhecimento do domínio, escolher k
- Método do "cotovelo"
  - Executar k-médias para diferentes valores de k
  - Fazer um gráfico de k por J
  - Escolher k em que J se "estabiliza"

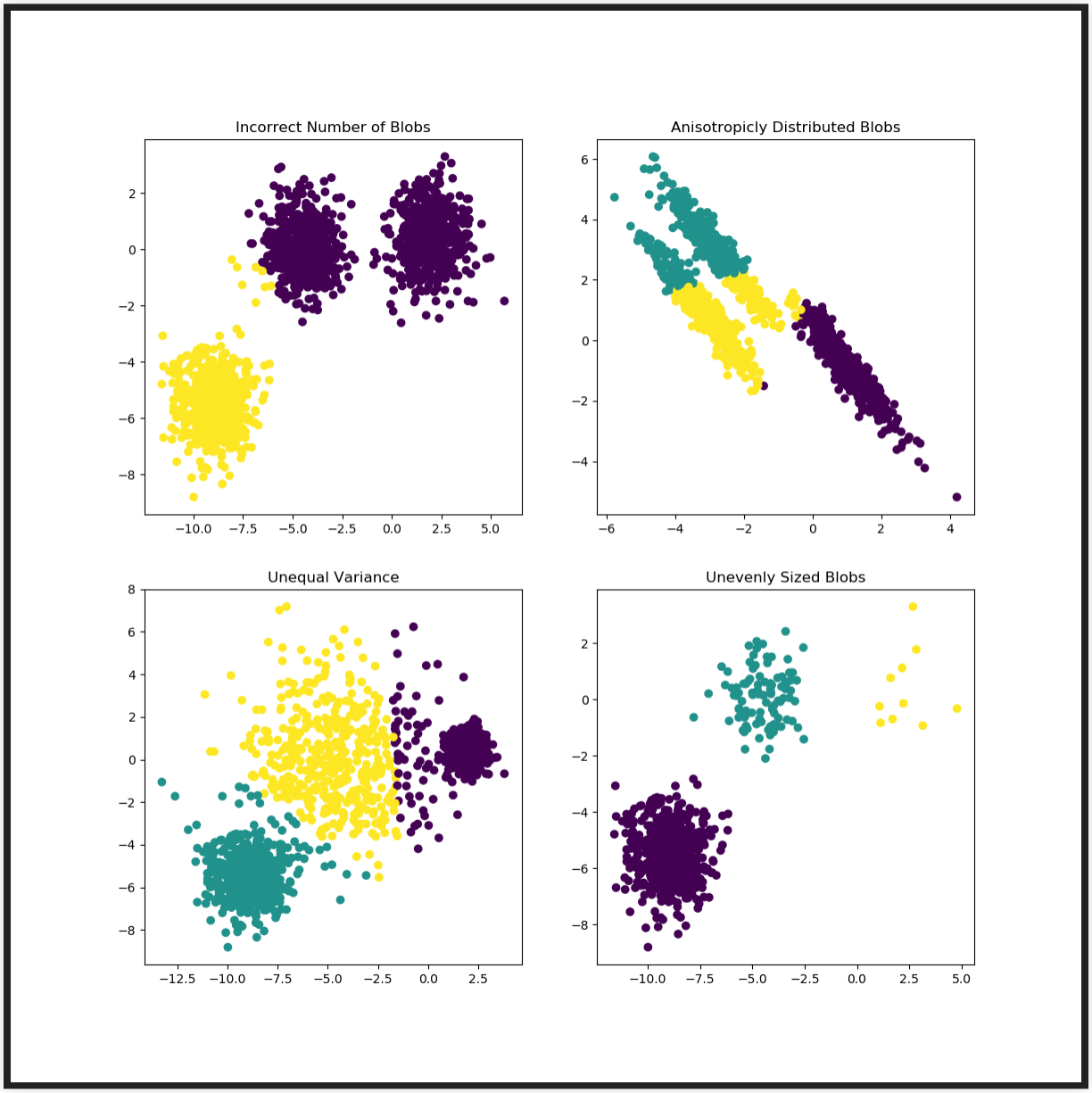
ESCOLHA DO VALOR DE K

- Chama-se método do "cotovelo" pois espera-se que o gráfico tenha o formato de um braço dobrado, e o k adequado seria o "cotovelo"



- Nem sempre tem esse formato

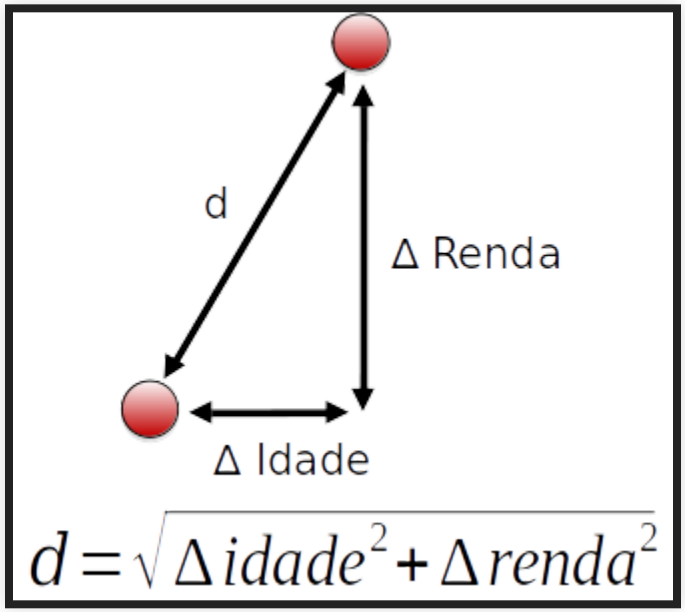
SUPOSIÇÕES


Incorrect Number of Blobs
Anisotropicly Distributed Blobs
Unequal Variance
Unevenly Sized Blobs

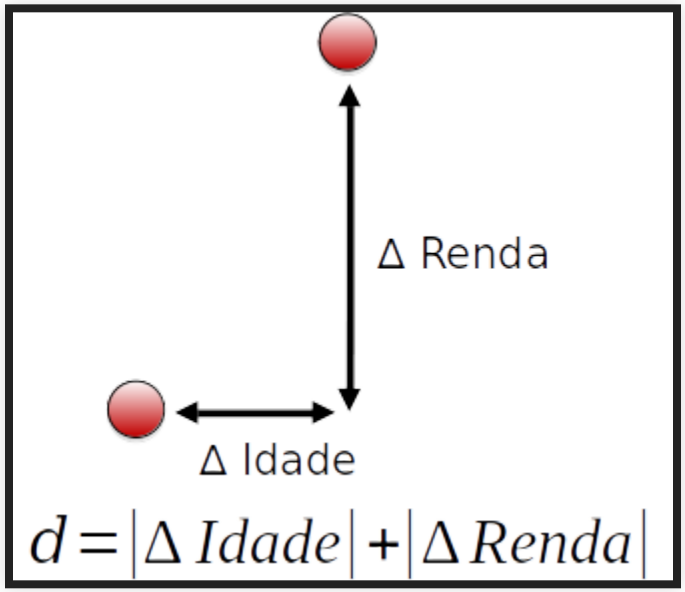
ESCOLHA DA MEDIDA DE DISTÂNCIA

- A escolha da medida de distância é extremamente importante para o sucesso do agrupamento
- Cada métrica tem vantagens/desvantagens e casos de uso mais apropriado
- Muitas vezes é preciso realizar uma avaliação empírica

DISTÂNCIA EUCLIDEANA

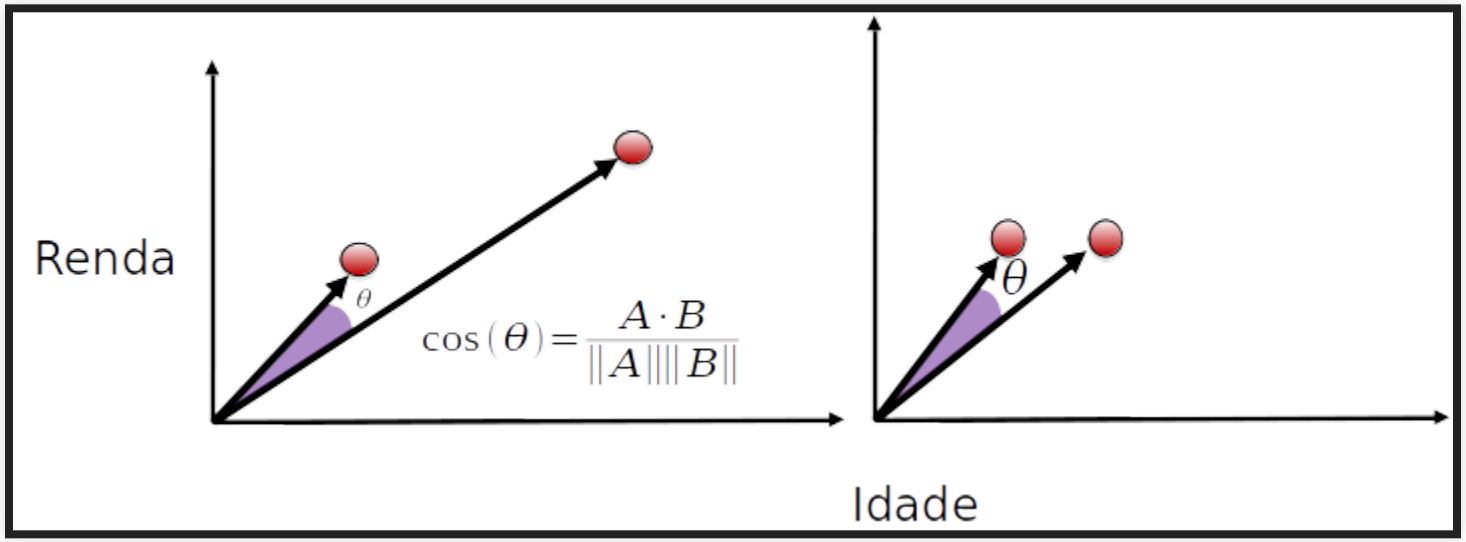


DISTÂNCIA MANHATTAN



- Menos sensível a outliers

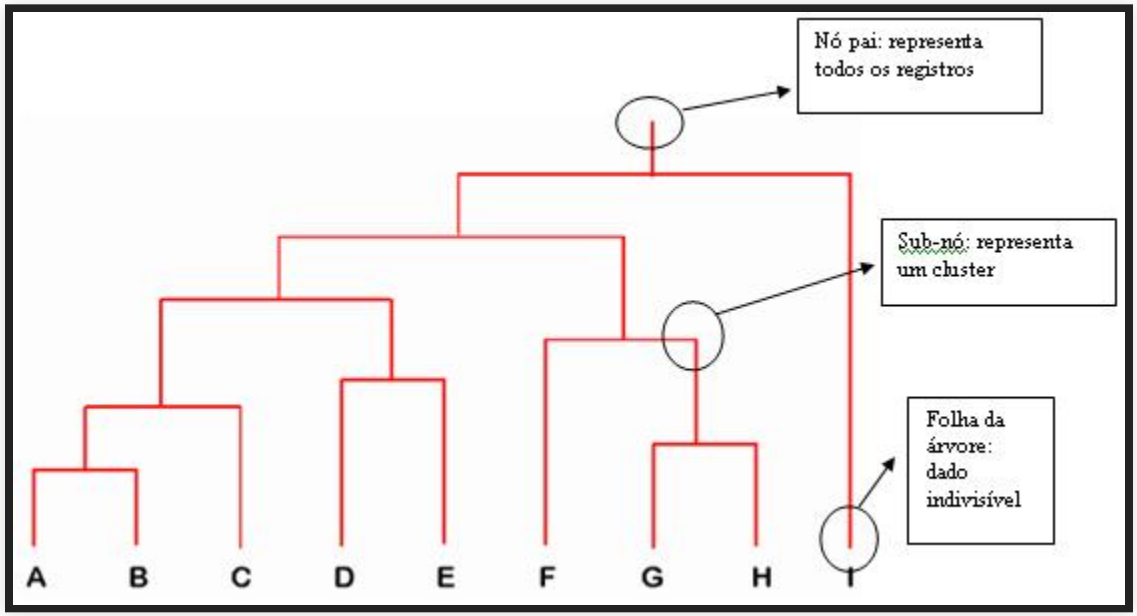
DISTÂNCIA DE COSENOS



- Menos sensível a escala e dimensionalidade

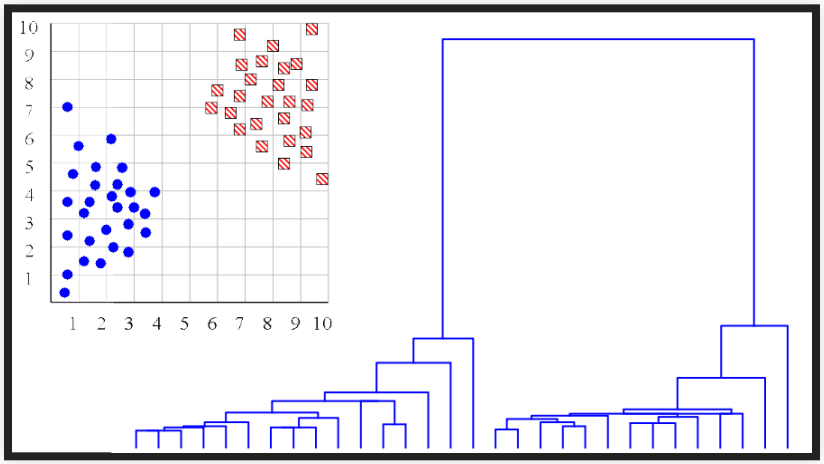
AGRUPAMENTO HIERÁRQUICO

- Representa a similaridade entre os dados por meio de um dendograma
- A similaridade entre dois objetos em um dendograma é representada pela altura do nó interno mais baixo que eles compartilham.


Nó pai: representa todos os registros
Sub-nó: representa um cluster
Folha da árvore: dado indivisível
A
B
C
D
E
F
G
H
I

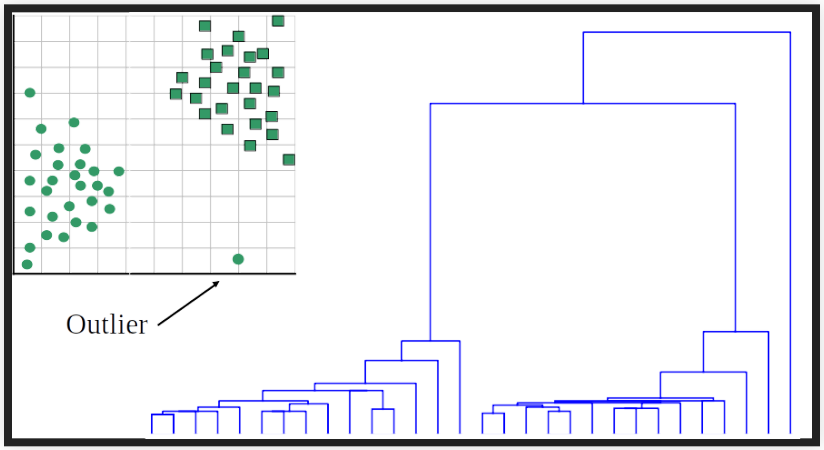
NÚMERO DE CLUSTERS

- O dendograma pode ajudar a determinar o número “correto” de agrupamentos. Nesse caso, a existência de duas árvores bem separadas é um forte indicativo de dois clusters.
- Infelizmente, raramente as coisas são assim tão claras.



OUTLIERS

- Um possível uso de dendogramas é a detecção de outliers
- Um ramo único e isolado sugere um dado que é muito diferente de todos os demais

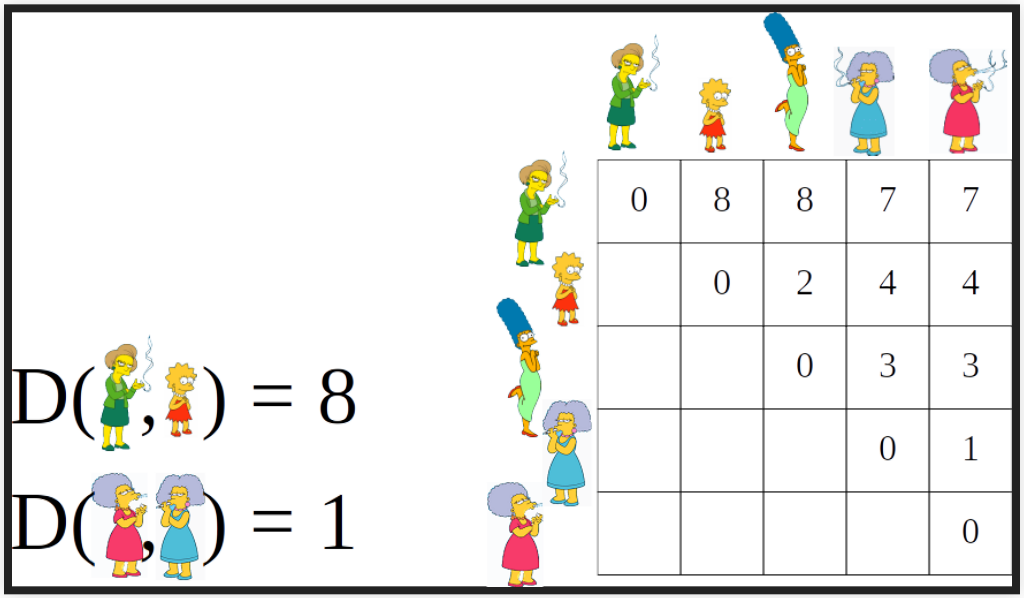


AGRUPAMENTO HIERÁRQUICO

- O número possível de dendogramas cresce exponencialmente com o tamanho do dataset
- Busca heurística:
  - **aglomerativo**: começa agrupando exemplos individualmente até construir um único cluster
  - **divisivo**: começa com um único cluster e vai dividindo recursivamente até chegar nos exemplos.

MATRIZ DE DISTÂNCIA

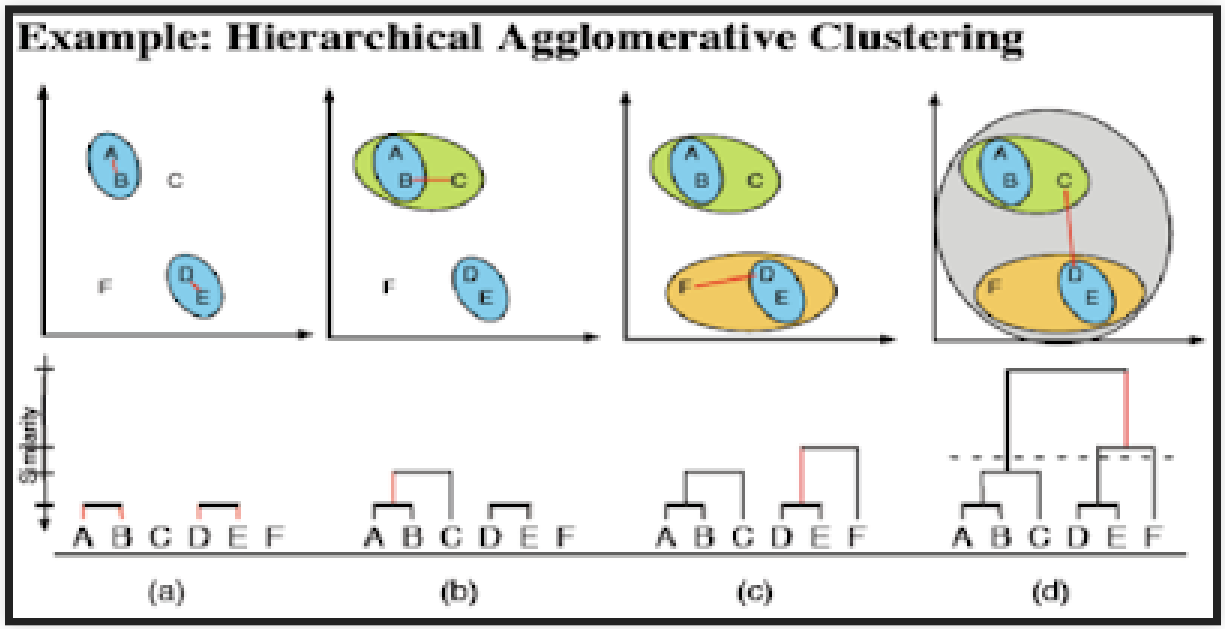
- contém as distâncias entre cada par de objetos da base de dados



ABORDAGEM AGLOMERATIVA

1. Cada exemplo representa um grupo
2. Encontra o melhor par para (menor distância) para criar um novo grupo
3. Recalcula a distânci do grupo criado para os demais
4. Volta ao passo 2. até que um único grupo seja formado

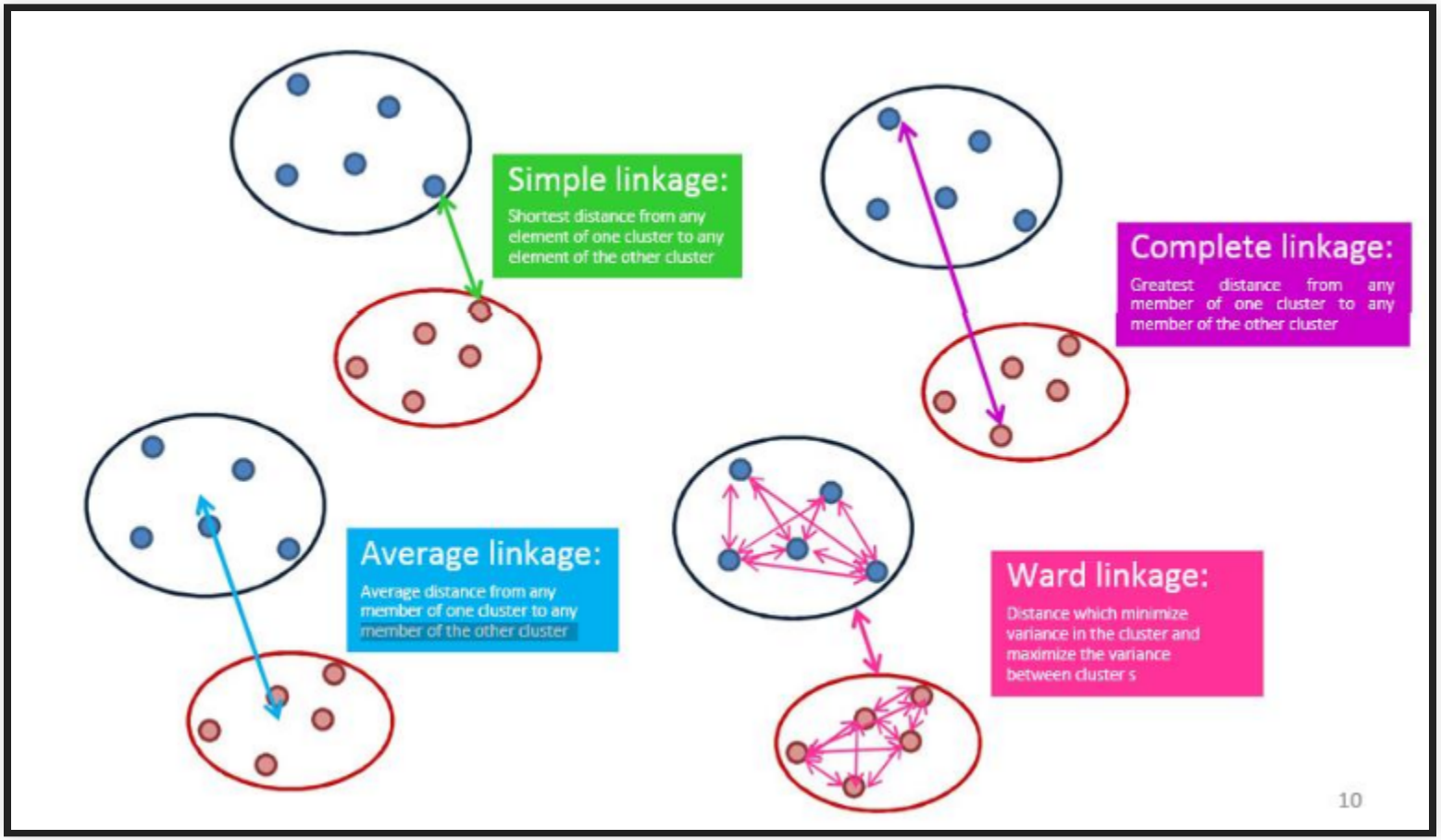
ABORDAGEM AGLOMERATIVA



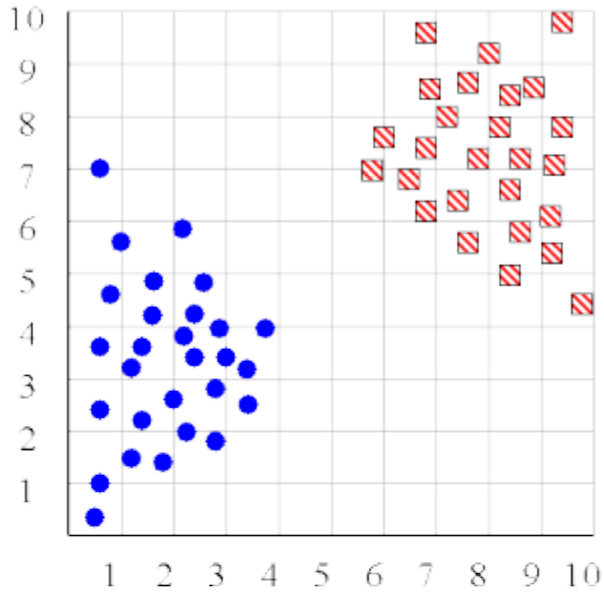
DISTÂNCIA ENTRE CLUSTERS

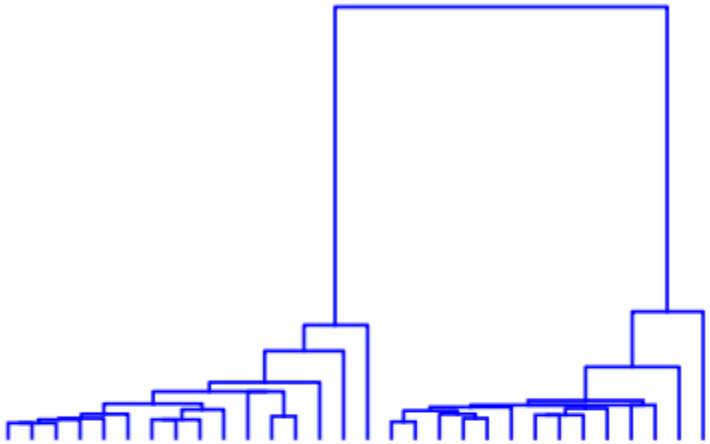
- Ligação simples (vizinho mais próximo): distância entre os dois objetos mais próximos (vizinhos mais próximos) nos diferentes clusters.
- Ligação completa (vizinho mais distante): maior distância entre dois objetos nos diferentes clusters (“vizinhos mais distantes”).
- Ligação média de grupo: distância média entre todos os pares de objetos nos diferentes clusters.
- Ligação Wards: minimiza a variância entre os dois clusters aglomerados.

DISTÂNCIA ENTRE CLUSTERS

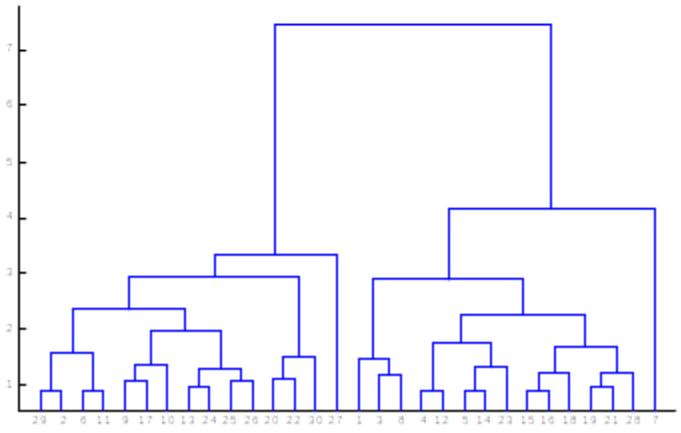


DISTÂNCIA ENTRE CLUSTERS

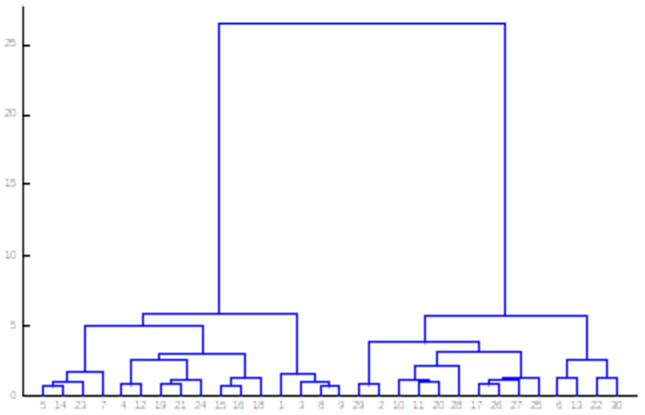




Ligação simples



Ligação média



Ligação Wards

AGRUPAMENTO HIERÁRQUICO

- Não existe a necessidade de especificar o número de clusters a priori.
- A natureza hierárquica é facilmente mapeada pela intuição humana para alguns domínios.
- Eles não escalam bem: a complexidade de tempo é pelo menos $O(n^2)$, na qual n é o número de objetos.
- Como qualquer algoritmo de busca heurística, mínimos locais são um problema.
- A interpretação dos resultados é (muito) subjetiva.