PUC Minas
DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA

Pós Graduação *Lato Sensu*

Aprendizado de máquina

Prof. Hugo de Paula

Informações da disciplina

Metodologia para descoberta de conhecimento em banco de dados. Exploração do espaço problema e espaço solução. Técnicas de aprendizado supervisionado e não-supervisionado. Regras de associação, agrupamento (clustering) e classificação. Rede neural, Agrupamento com K-Means. Classificador Naïve Bayesian. Árvore de decisão. Outros algoritmos.

DISTRIBUIÇÃO DE PONTOS:

- 01 Exercícios 60 pontos
- 02 Apresentação estudo de caso (trabalho orientado) 40 pontos

Bibliografia

FACELI, Katti et al. Inteligência artificial: uma abordagem de aprendizado de máquina. Rio de Janeiro, RJ: LTC, 2011. xvi, 378 p. ISBN 9788521618805.

TAN, Pang-Ning, STEINBACH, Michael, KUMAR, Vipin. *Introdução ao Data Mining – Mineração de dados*. Ciência Moderna, 2012. ISBN 978-8573937619.

CHERKASSKY, Vladimir S.; MULIER, Filip. *Learning from data: concepts, theory, and methods*. 2nd ed. Hoboken, N.J.: IEEE Press: Wiley-Interscience, c2007. ISBN 9780470140529 Disponível em: <http://ieeexplore.ieee.org/xpl/bkabstractplus.jsp?bkn=5201503>. Acesso em : 16 set. 2014

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Programa

Unidade 1: Introdução ao aprendizado de máquina

Unidade 2: Regras de associação

Unidade 3: Classificação e previsão

Unidade 4: Clusterização

Unidade 5: Detecção de outliers

Unidade 6: Conclusão

Aprendizado de Máquina

Aprendizado de Máquina (*Machine Learning*)

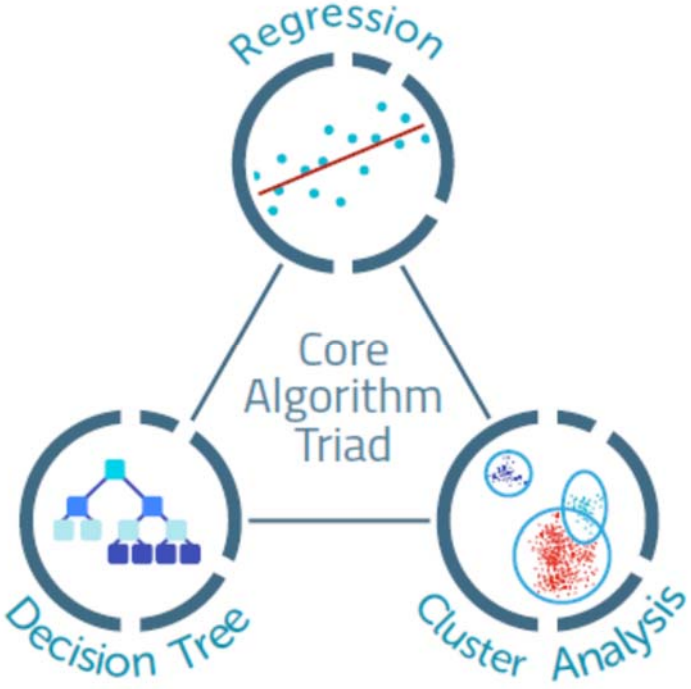
"Machine Learning is the study of computer algorithms that improve automatically through experience"

– *Machine Learning, Tom Mitchell, McGraw Hill, 1997.*

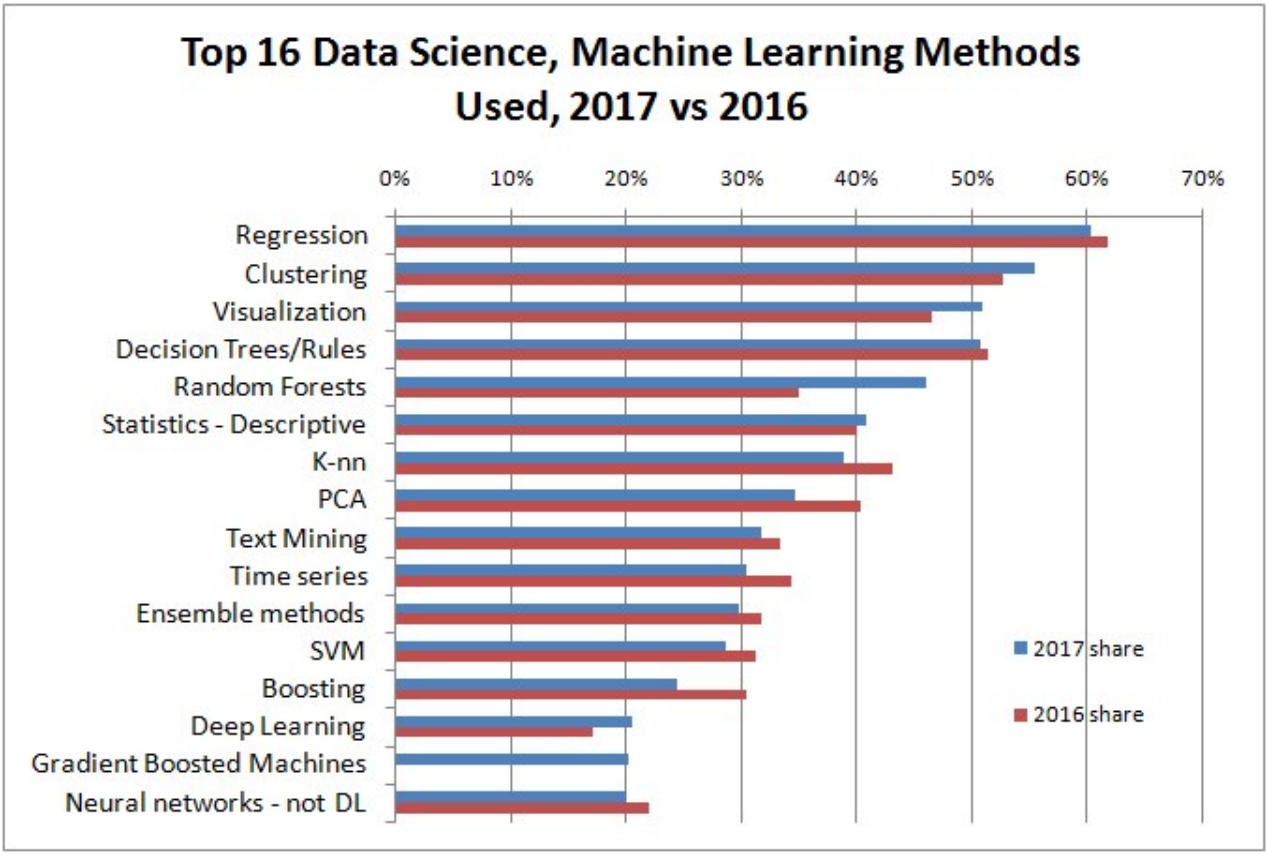
DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Data Science Survey 2015 – Rexer Analytics

www.RexerAnalytics.com

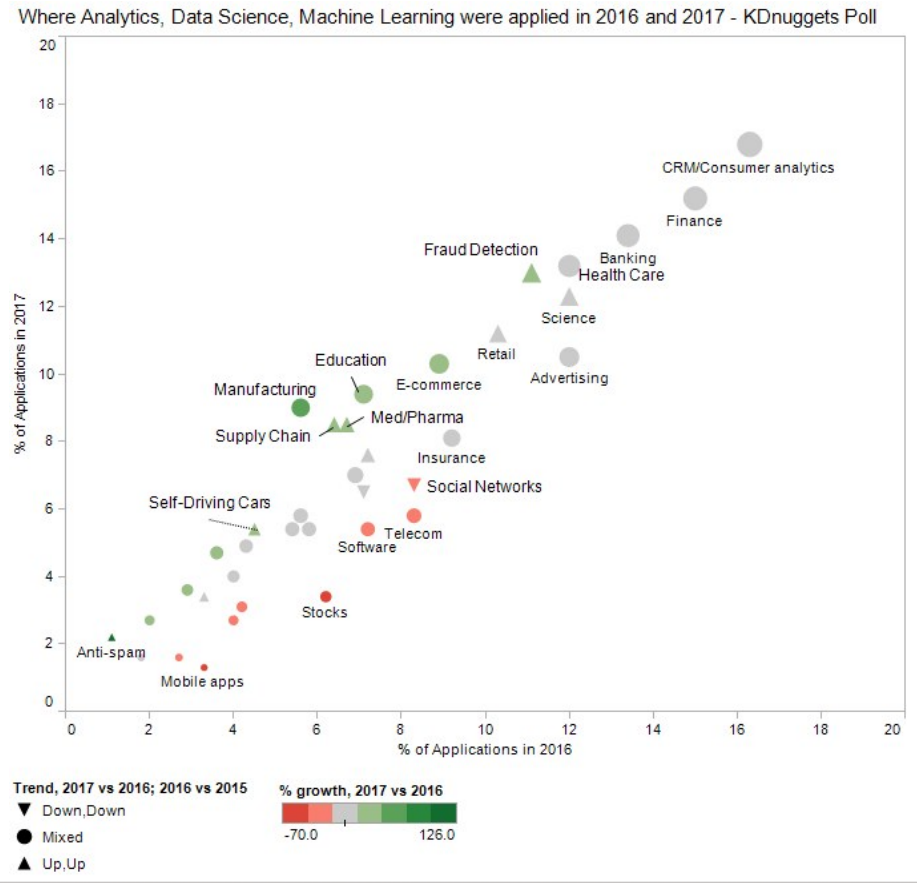


Which DS / ML methods and tools you used in the past 12 months for a real-world application?
https://www.kdnuggets.com/2017/12/top-data-science-machine-learning-methods.htm

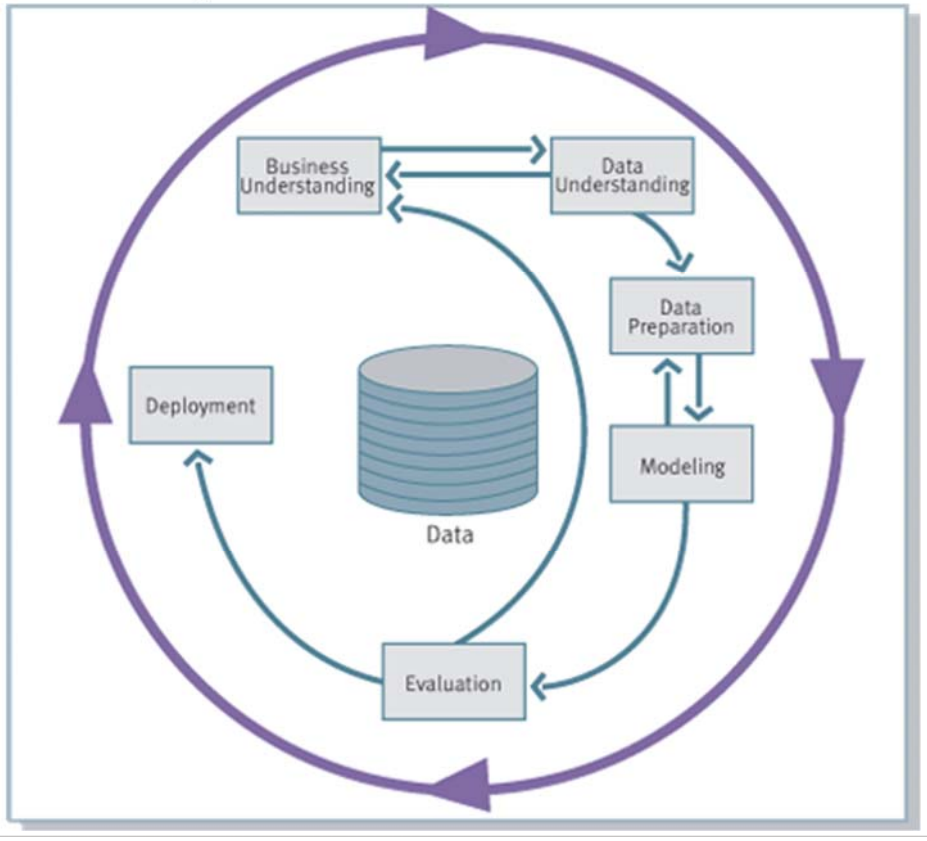


DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Industries / Fields where you applied Analytics, Data Science, Machine Learning in 2017?
https://www.kdnuggets.com/2018/04/poll-analytics-data-science-ml-applied-2017.html



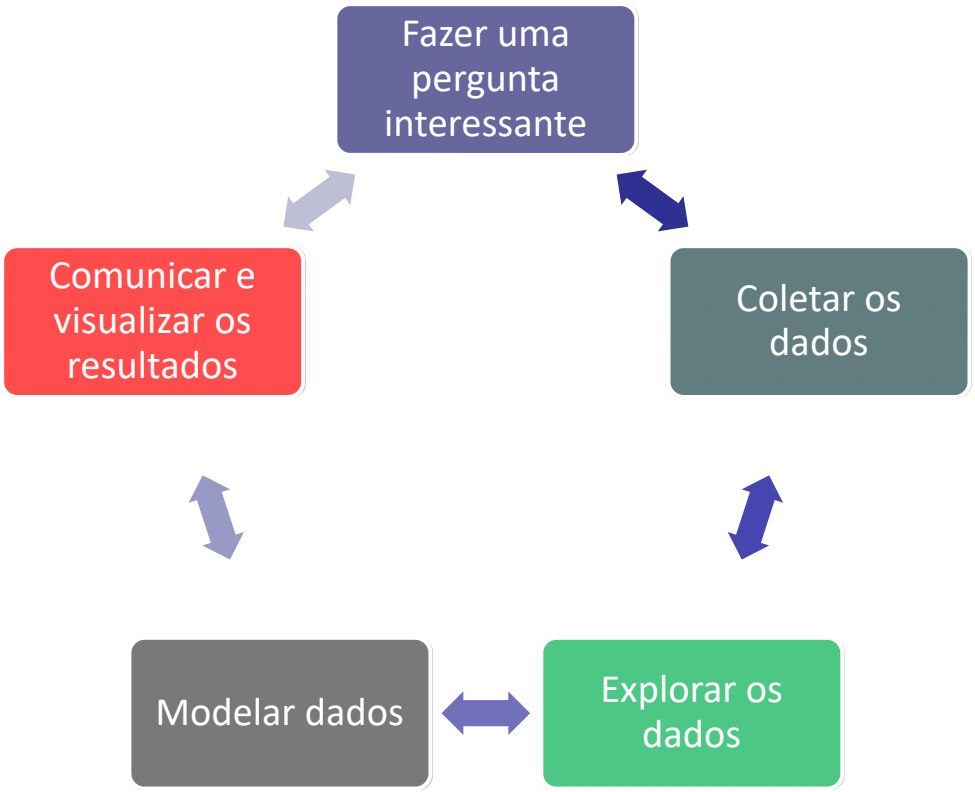
Processo de mineração de dados: CRISP-DM
CRoss Industry Standard Process for Data Mining



DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

O processo de Ciência de Dados (Data Science)

Joe Blitzstein e Hanspeler Plister, "Introduction to Data Science", Harvard Data Science Course http://www.cd109.org



Algoritmos de Machine Learning agrupados por estilo de aprendizagem

Aprendizado supervisionado

- Dado de treinamento possui rótulos conhecidos.
- Cria modelo para fazer previsões e se autocorrige quando as previsões são ruins até atingir acurácia aceitável.

Aprendizado não supervisionado

- Dado não é rotulado ou não possui resultado conhecido.
- Modelo deduz estruturas a partir da entrega.

Aprendizado semisupervisionado

- Mistura dados rotulados e não rotulados.
- Existe uma previsão desejável, mas modelo precisa organizar estruturas.

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Tarefas da mineração de dados

Descrição de dados:

- Caracterização e comparação

Associação:

- Descobrimento de regras.
- Correlação para causalidade.

Classificação e previsão:

- Classificação baseada em valores.
- Estimação de valores ou classes a partir de atributos.

Clusterização ou segmentação:

- Agrupar os dados por semelhança.

Análise de tendências e desvios em séries temporais:

- Encontrar e caracterizar tendências, definir padrões ao longo do tempo, encontrar desvios de dados (controle de estoque).

Indução de hipóteses e viés indutivo

- Em aprendizagem de máquina (supervisionada), o objetivo é encontrar uma função (ou regra ou mapeamento) que mapeie as entradas nas saídas.
  - Um agente deve aprender a função desconhecida com base em alguns exemplos de entradas com os valores das saídas correspondentes (isto é, os valores da função desconhecida).
- Exemplo ou instância
  - Formalmente, um exemplo é um par *[x, f(x)]*, onde *x* é a entrada e *f(x)* é a saída da função desconhecida aplicada a *x*.

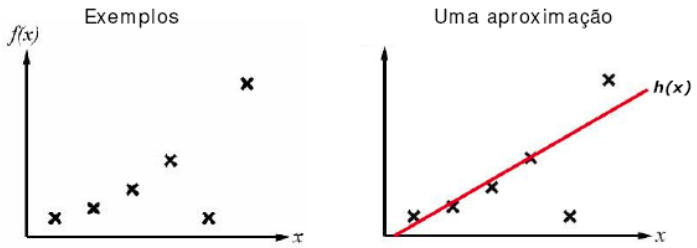
DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Indução de hipóteses e viés indutivo

- Indução
  - Dada uma coleção de exemplos de *f*, indução é uma maneira de encontrar uma função *h* que seja uma aproximação de *f*.
- Hipótese
  - A função *h* é chamada de uma hipótese.
- Generalização
  - É a capacidade de uma função hipótese prever *corretamente* exemplo ainda não vistos (quando da aprendizagem).

Exemplo de Indução: Ajuste de uma curva aos pontos de dados

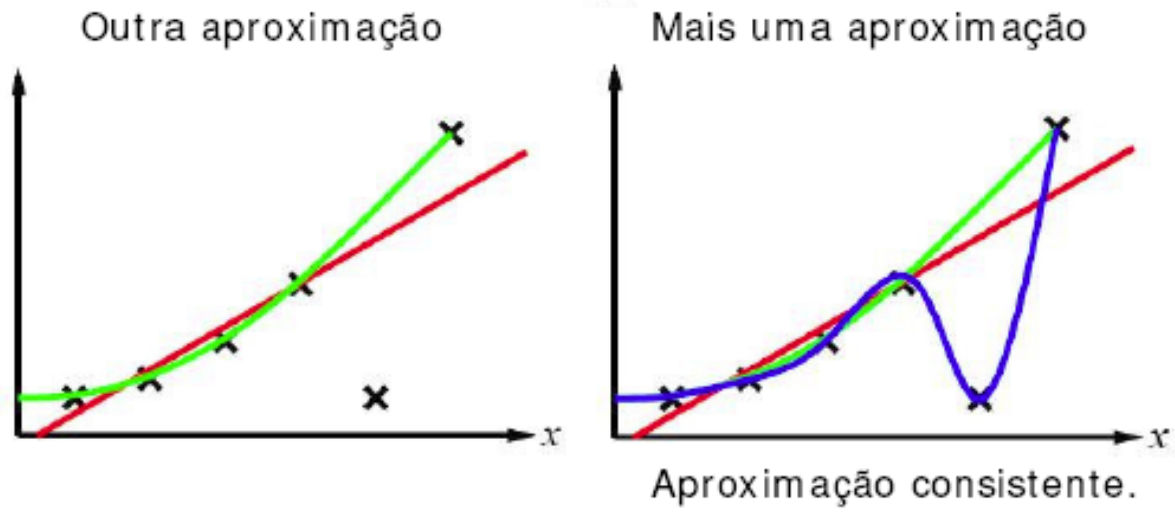
- Seja *f(x)* uma função de uma variável.
- Os exemplos são pares *[x, f(x)]*, sendo *x* e *f(x)* números reais.
- O conjunto de exemplos é chamado de conjunto de treinamento.



- A função hipótese *h* é dita consistente se ela concorda com *f* em todos os exemplos do conjunto de treinamento.
- No gráfico acima, *h* não é consistente.

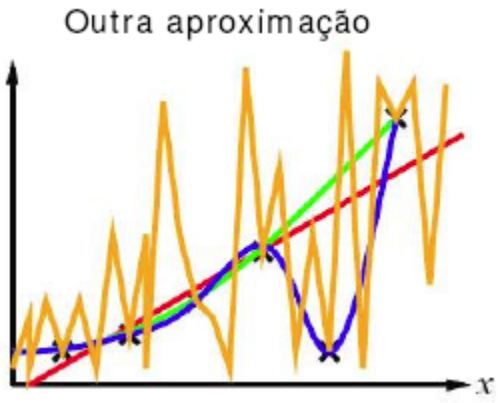
DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Exemplo de Indução: Ajuste de uma curva aos pontos de dados



Exemplo de Indução: Ajuste de uma curva aos pontos de dados

- **Navalha de Ockham** (ou princípio da parcimônia):
  - Maximize a combinação de consistência e simplicidade. Ou seja, prefira a hipótese mais simples que seja consistente com os dados de treinamento.

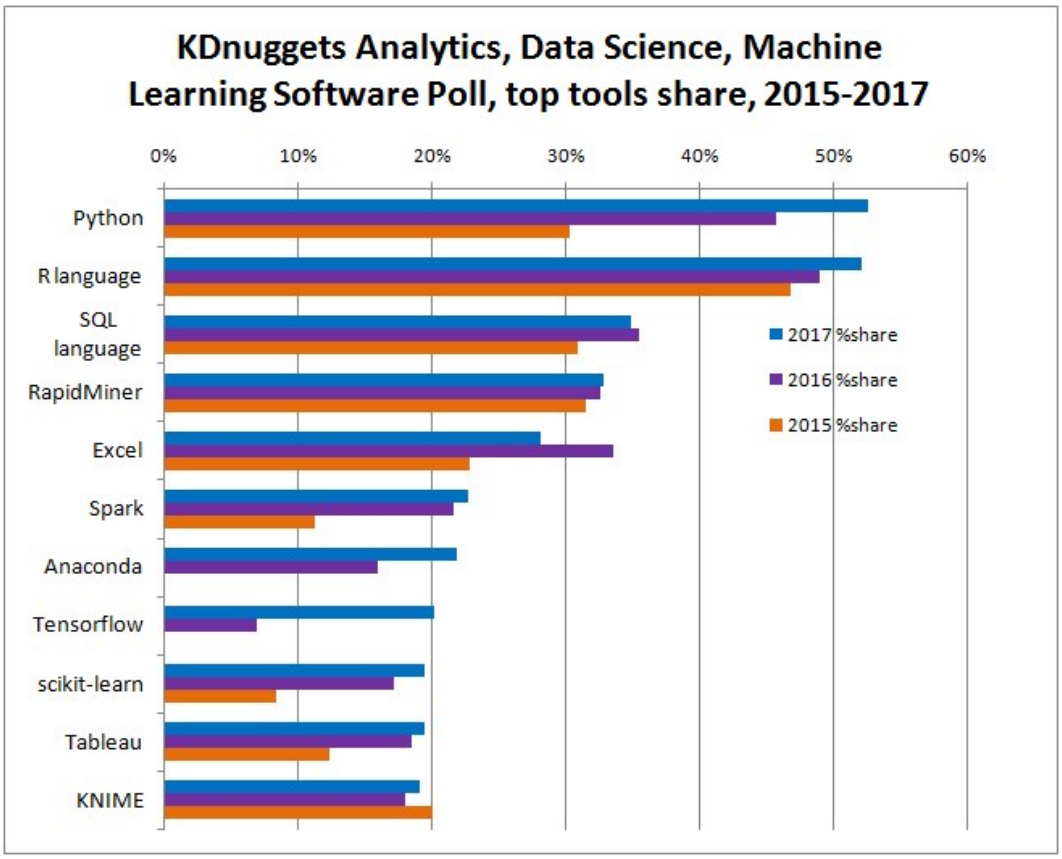


DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Indução de hipóteses e viés indutivo

- Se uma hipótese tem alta capacidade de previsão dos dados de treinamento e baixa capacidade de generalização, provavelmente o modelo pode ter sofrido *overfitting.*
- Se uma hipótese tem baixa capacidade de previsão, mesmo nos dados de treinamento, pode ter sofrido *underfitting.*
- **Viés indutivo:** algoritmos possuem preferências quanto à representação dos dados e à geração de regras, que podem limitar a busca no espaço de hipóteses.

Plataformas para aprendizado de máquina



DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Dados qualitativos, simbólicos ou categóricos

- Binominais / binários:
  - **Sintoma de febre**: sim/não.
  - **Decisão**: Comprou/não comprou.
- Binominais simétricos:
  - Ambos os valores possuem a mesma relevância.
  - **Sexo**: masculino/feminino.
- Binominais assimétricos:
  - Apenas o valor positivo é relevante.
  - **Comprou** um produto / **assistiu** um filme.

Dados qualitativos, simbólicos ou categóricos

- Polinomiais/Nominais não ordinais:
  - **Região**: centro, sul, centro-sul, leste, ...
  - **Setor**: limpeza, laticínios, farináceos, cosméticos, ...
- Categóricos com escala ordinal:
  - **Faixa etária**: criança, jovem, adulto, idoso.
  - **Temperatura**: fria, morna, quente.

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Dados quantitativos

- Binários, inteiros ou reais.
- Escala intervalar:
  - Define faixas de valores e relação entre eles.
  - Nem sempre permitem definir a razão entre os valores. Pro exemplo:
    - temperatura em graus Celsius não permite razão (zero arbitrário).
    - temperatura em Kelvin permite razão (zero absoluto).

Dados quantitativos

- Escala racional:
  - Números possuem significado absoluto (zero absoluto).
  - Pro exemplo: número de consultas em um hospital, peso.

Escalas de dados quantitativos podem ser:

- Normalizados: [0..1]
  - **Capacidade ociosa**: 70% ociosa (0.7)
  - **Andamento da operação**: 30% concluída (0.3)
- Não normalizados: [min..max]
  - **Idade**: [0..120] anos
  - **Temperatura**: [10 .. 40] graus celsius

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Qualidade de dados

- Importante garantir padronização e aplicar técnicas estatísticas para analisar consistência dos modelos encontrados.

Exemplos:

- Nem todos usam o mesmo formato.
- **Datas** podem ser especialmente problemáticas:
  - 25/12/15
  - 25/dez/2015
  - 25-12-2015
  - 25 de dezembro de 2015
- Preços em **moedas** diferentes: R$ versus US$
  - Câmbio pode variar
  - Possibilidade: armazenar na moeda de origem e converter no momento da análise

Limpeza

- Dados podem ser irrelevantes, redundantes.
  - podem produzir conhecimento falso.
  - podem aumentar o tempo de execução dos algoritmos de data mining.
- Problemas de qualidade de dados:
  - Ruído e outliers.
  - Dados duplicados.
  - Dados omissos ou faltantes.

Exemplos:

- **código postal** é fundamental para construir relações geográficas.
- **cpf** não está relacionado com perfil (idade, sexo, cor, etc).
- **data de nascimento** e **idade** correspondem à informação duplicada.
- **preço total = preço unitário * quantidade** (dados redundantes)

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Limpeza

- Dados podem ser conflitantes.

Exemplo:

- DB1 pode informar que João mora no Rio de Janeiro e DB2 informa que João mora em São Paulo.
  - Pode-se usar ambos (vive no Rio e em São Paulo).
  - Pode-se usar o mais recentemente atualizado.
  - Pode-se usar a fonte mais confiável.
  - Pode-se sinalizar o registro para ser investigado manualmente.
  - Pode-se descartar registros conflitantes.

Ruído

Ruído se refere à modificação dos valores originais

- Exemplo: distorção da voz de um locutor, dependendo do dispositivo de captura, transmissão ou reprodução.

Ruídos de atributos:

- Valores errôneos, irrelevantes ou omissos.

Ruídos de classe:

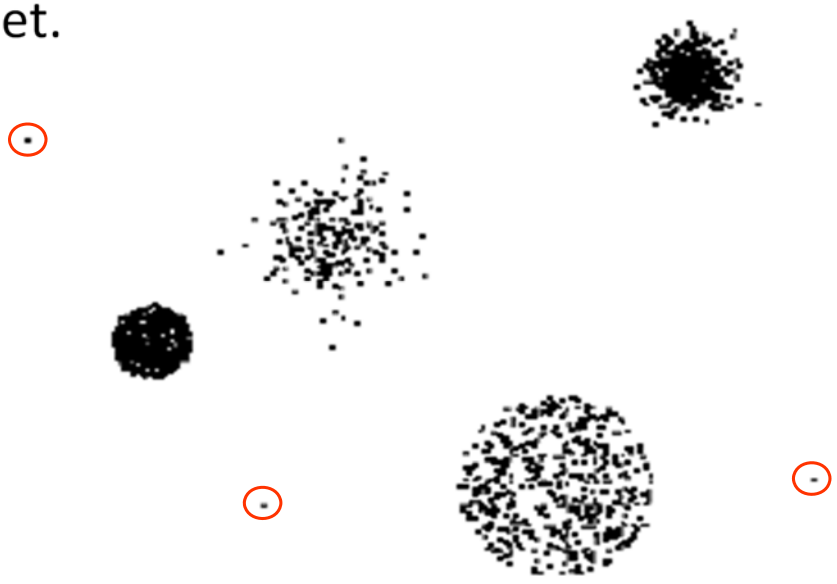
- Exemplos contraditórios ou mal classificados.

- Tipos de ruídos em dados:
  - Ruídos espúrios (ou ruídos de leitura) – normalmente aleatórios.
  - Ruídos de medição.
  - Ruídos de fundo.

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Outliers

- Outliers são exemplos dos dados com características consideravelmente diferentes da maioria dos dados no dataset.



Amostragem de dados

- Principal técnicas utilizada para seleção de dados.
- Utilidade:
  - Análise inicial.
  - Redução de custo de obtenção ou processamento.
- Princípio chave:
  - Se amostra é representativa, aprendizado irá funcionar de forma semelhante à utilização do dado original.
    - Uma amostra é representativa se possui as mesmas propriedades (de interesse) do dataset original.

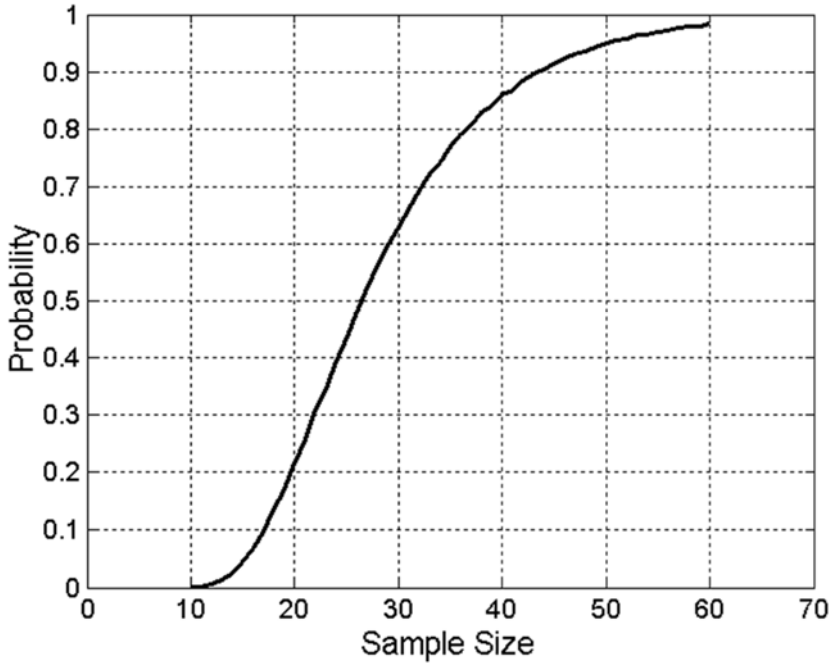
DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Tipos de amostragem

- Amostragem aleatória simples
  - Probabilidade uniforme de se selecionar um item.
- Amostragem sem reposição
  - O elemento selecionado é removido do dataset (selecionado apenas uma vez).
- Amostragem com reposição
  - O mesmo elemento pode ser selecionado mais de uma vez.
- Amostragem estratificada
  - Dataset é particionado e, então, amostragem é realizada.
  - Manter a distribuição original das classes.
- Amostragem progressiva
  - É mais uma estratégia que uma técnica. Aumenta-se gradativamente o tamanho da amostra.

Tamanho da amostra

- Suponha um dataset com 10 classes: a probabilidade de se escolher um elemento de cada classe em função da amostra é:



DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Dados omissos ou faltantes

  - Informação não foi coletada
    (ex.: opção "prefiro não responder" em um questionário)
  - Atributos não se aplicam a todas as classes
    (exg.: renda mensal não se aplica a crianças)

- Podemos tratar dados omissos como:
  - dados podem ser desconsiderados;
  - registros imperfeitos podem ser removidos;
  - valores podem ser inferidos a partir de valores conhecidos;
  - valores omissos podem ser tratados como valores especiais;
  - Valores podem receber valores aproximados por técnicas de probabilidade bayesiana.

Seleção

- Elimina ou reduz a ênfase em certos atributos ou objetos.
- Seleção pode envolver escolher um subconjunto de atributos.
  - Redução de dimensionalidade pode ser usada.
  - Pareamento de atributos é alternativa.
- Seleção pode envolver escolher um subconjunto de objetos
  - Região da tela não suporta grande quantidade de pontos.
  - Pode amostrar, mas deve preservar pontos de áreas esparsas.

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Agregação

- Combina dois ou mais atributos (ou objetos) em um único atributo (ou objeto).

Objetivo:

- Redução de dados.
- Mudança de escala.
  - Cidades agregadas em regiões, estados, países, etc.
- Dados mais estáveis.
  - Menor variação.

Transformação de dados

- Algoritmos de aprendizado podem ser limitados quanto ao tipo de dados compatível.
- Cada caso é um caso.
- Principais conversões relevantes:
  - Categórico não ordinal para binominal.
  - Categórico ordinal para numérico.
  - Numérico para numérico (mudança de escala).

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Transformação de dados

Converter categórico não ordinal para binominal

- Para cada atributo A, criar P atributos binários para os P estados nominais (categorias) de A
- Exemplo: A1: Temp = alta; A2: Temp = média; A3: Temp = baixa

Transformação de dados

Converter categórico ordinal para numérico

- A ordem é importante, exemplo: rank
- Pode ser tratada como *interval-scaled*
- Trocar x_{if} pelo seu rank

$$r_{if} \in \{1, \ldots, M_f\}$$

  - mapear a faixa (range) de cada variável em um intervalo [0, 1]

$$z_{if} = \frac{r_{if} - 1}{M_f - 1}$$

  - Computar a dissimilaridade usando método para variáveis contínuas comuns

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Normalização e padronização de dados numéricos

Z-score:

$$z = \frac{x - \mu}{\sigma}$$

- x: valor, μ: média, σ: desvio padrão
- Distância entre o dado e a população em termos do desvio padrão
- Negativo quando abaixo da média, e positivo caso acima

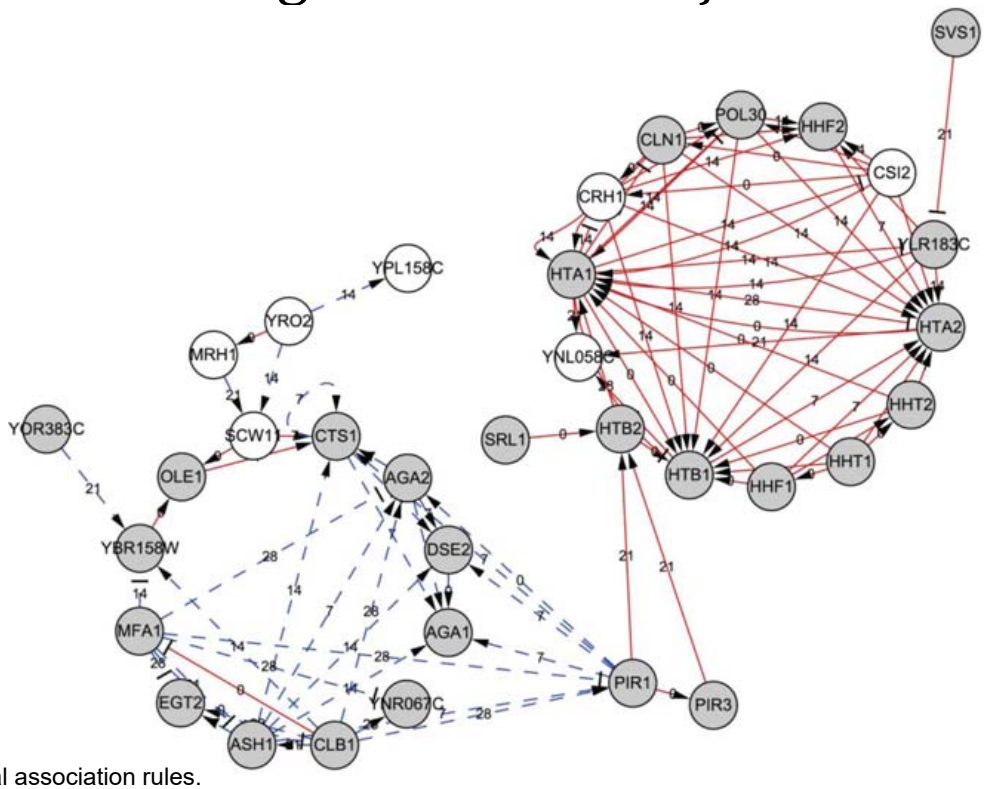
Normalização Min-Max:

$$x'_i = \frac{x_i - \min x_i}{\max x_i - \min x_i}(max_{novo} - min_{novo}) + min_{novo}$$

ID	Gênero	Idade	Salário
1	F	27	19.000
2	M	51	64.000
3	M	52	100.000
4	F	33	55.000
5	M	45	45.000

ID	Gênero	Idade	Salário
1	1	0.00	0.00
2	0	0.96	0.56
3	0	1.00	1.00
4	1	0.24	0.44
5	0	0.72	0.32

Algoritmo de mineração de dados: Regras de associação



Extraído de Temporal association rules.
Nam et al. BMC Bioinformatics 2009 10(Suppl 3):S6

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Regras de associação

Objetivo:

- Encontrar padrões frequentes, associações, correlações entre conjunto de itens ou objetos de um banco de dados transacional, banco de dados relacional ou outro repositório de informação.

Aplicações:

- Análise de cestas de compras, marketing, projeto de catálogos, etc.
  - Quais subsequentes compras após ter comprado um PC?
  - Qual tipo de DNA é sensitivo a uma nova droga?
  - Como classificar documentos WEB?

Exemplos:

- Forma regra: "corpo → cabeça [suporte, confiança]".
- compra(x, "**fraldas**") → compra(x, "**cerveja**") [0.5%, 60%]

Regras de associação: definições

- *Itens I = {i_1, ..., i_m}* um conjunto de literais denotando itens
- *Itens* possuem valores binomiais: $\{(\in, \notin); (V, F)\}$
- *Itemset X*: Conjunto de itens X contido em I
- *Database D*: Conjunto de transações T, cada transação é um conjunto de itens T que contém I
- T contém X → X está contido em T
- Os itens na transação são ordenados:
  - *itemset* X = (x_1, x_2, ..., x_k), onde $x_1 \leq x_2 \leq ... \leq x_k$
- *Tamanho de um itemset*: número de elementos em um *itemset*
- *k-itemset*: itemset de tamanho k

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Regras de associação: definições

- Uma regra de associação X → Y é um relacionamento do tipo:

  SE (X) ENTÃO (Y)

  onde X e Y são conjuntos de itens

Suporte:

$$sup(A \rightarrow B) = \frac{número\ de\ transações\ com\ A\ e\ B}{número\ total\ de\ transações}$$

Outra notação: $sup(A \rightarrow B) = P(A \cup B)$ (probabilidade)

Confiança:

$$conf(A \rightarrow B) = \frac{número\ de\ transações\ que\ suportam\ (A \cup B)}{número\ de\ transações\ que\ suportam\ A}$$

Regras de associação

Suponha que um gerente de um supermercado esteja interessado em conhecer os hábitos de compra de seus clientes, por exemplo:

Produto	Núm. do Produto
Pão	1
Leite	2
Açúcar	3
Papel Higiênico	4
Manteiga	5
Fralda	6
Cerveja	7
Refrigerante	8
Iogurte	9
Suco	10

Exemplo itens de produto

Exemplo BD transações

Num transação	Itens comprados
T1	{1,3,5}
T2	{2,1,3,7,5}
T3	{4,9,2,1}
T4	{5,2,1,3,9}
T5	{1,8,6,4,3,5}
T6	{9,2,8}

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Regras de associação

- Suponha que um *Itemset* que apareça em pelos menos 50% das transações seja considerado frequente

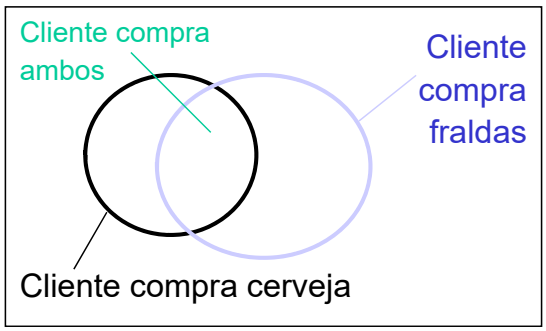
ItemSet	Suporte
{1,3}	0,6666
{2,3}	0,3333
{1,2,7}	0,1666
{2,9}	0,5

Suporte de alguns *Itemsets*

- Os *Itemsets* frequentes são considerados interessantes

Regras de associação

- Regras X & Y → Z
  - suporte = probabilidade de uma transação conter {X U Y U Z}
  - confiança = probabilidade condicional de uma transação ter {X U Y} também conter Z



ID Transação	Itens das compras
2000	A, B, C
1000	A, C
4000	A, D
5000	B, E, F

Usando suporte mínimo de 50%

$A \rightarrow C$ (50%, 66.6%)
$C \rightarrow A$ (50%, 100%)

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Regras de associação: algoritmo *Apriori*

- Baseado na ideia de usar conhecimento já obtido dos *itemsets* anteriores.

Fase I:
Descobrir todos os conjuntos de itens com suporte maior ou igual ao mínimo suporte especificado pelo usuário.

- Um *subset* de um *itemset* frequente também é um *itemset* frequente
  - P. ex., se {AB} é um *itemset* frequente, ambos {A} e {B} devem ser um *itemset* frequente

Fase II:
A partir dos conjuntos de itens frequentes, descobrir regras de associação com fator de confiança maior ou igual ao especificado pelo usuário.

Regras de associação: algoritmo *Apriori*

Database D

TID	Itens
100	1 3 4
200	2 3 5
300	1 2 3 5
400	2 5

Scan D

C_1

itemset	Sup.
{1}	2
{2}	3
{3}	3
{4}	1
{5}	3

L_1

Itemset	Sup.
{1}	2
{2}	3
{3}	3
{5}	3

C_2

itemset
{1 2}
{1 3}
{1 5}
{2 3}
{2 5}
{3 5}

Scan D

C_2

itemset	Sup.
{1 2}	1
{1 3}	2
{1 5}	1
{2 3}	2
{2 5}	3
{3 5}	2

L_2

itemset	Sup.
{1 3}	2
{2 3}	2
{2 5}	3
{3 5}	2

C_3

itemset
{2 3 5}

Scan D

L_3

itemset	Sup.
{2 3 5}	2

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

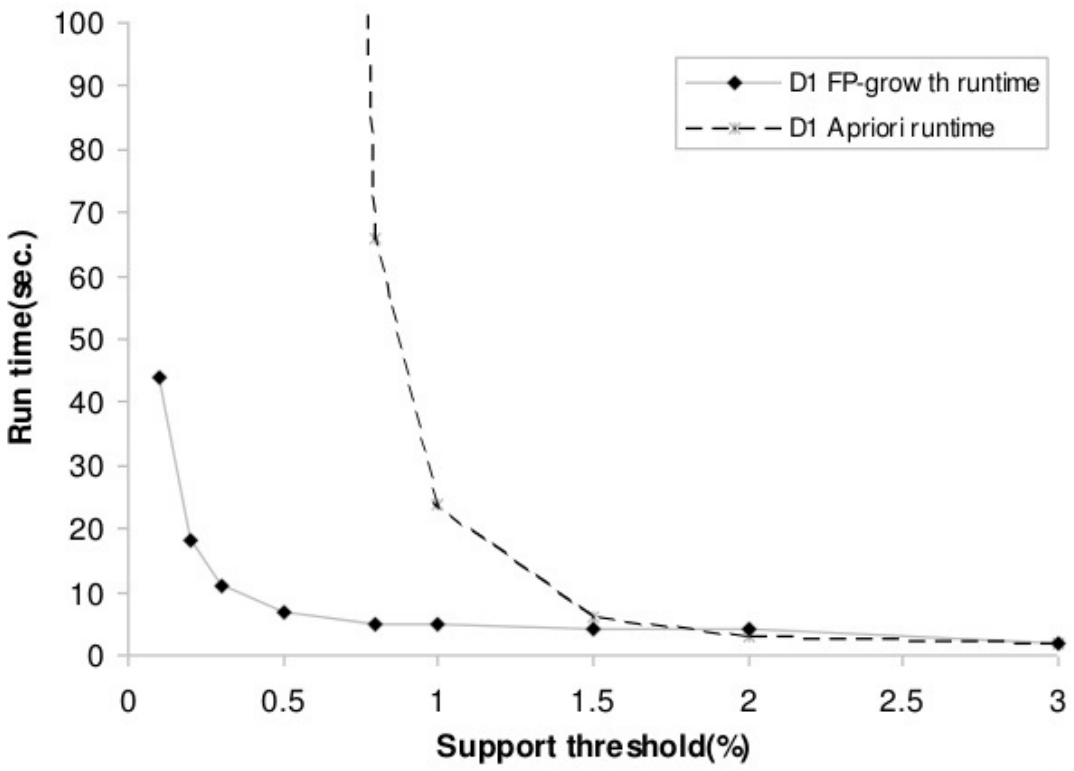
Regras de associação: algoritmo *FP-growth*

- Método de geração de padrões frequentes de itens sem a geração de candidatos.
- Mais eficiente e mais escalável que o algoritmo *Apriori.*
- Percorre o banco de dados apenas duas vezes.

Fase I:
Construir uma estrutura de dados compacta chamada FP-tree.

Fase II:
Extrair *itemsets* frequentes diretamente da FP-tree.

Regras de associação: comparação



Medida de interesse: Lift

- Suporte e confiança podem ser altos e a regra não ser útil.

Exemplo:

  - Clientes que compraram leite também compraram pão. (sup. 30%, conf. 75%)

Entretanto:

  - Clientes sempre compram pão. (sup. 90%)

- Lift indica a força de uma regra sobre a coocorrência aleatória de seus antecedentes e consequentes.

$$lift(A \rightarrow B) = \frac{sup(A \rightarrow B)}{sup(A) \times sup(B)}$$

- Valores inferiores a 1 indicam que a regra não aumentou a probabilidade de se prever uma compra cruzada.
  - Supondo que 40% dos clientes compram leite, então lift é 0,83.

Outras medida de interesse

Convicção: Assim como a confiança, é sensível à direção da regra.

$$conv(A \rightarrow B) = {1 - \sup(B)} \Big/ {1 - \text{conf}(A \rightarrow B)}$$

Ganho: Ganho é calculado baseado em um valor theta ($\boldsymbol{\theta}$) dado. Usualmente $\boldsymbol{\theta = 2.0}$

$$ganho(A \rightarrow B) = \sup(A \cup B) - \theta * \sup(A)$$

Laplace: Laplace é calculado baseado em um parâmetro k. Usualmente $k = 1.0$.

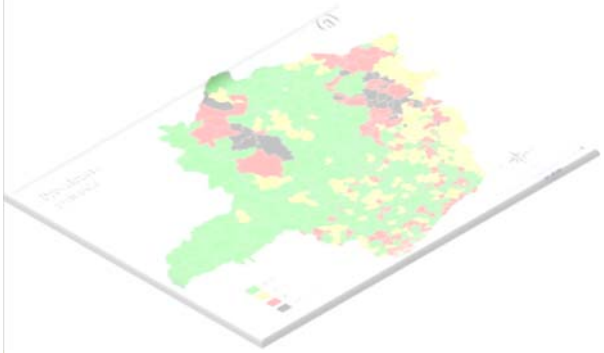
$$laplace(A \rightarrow B) = {\sup(A \cup B) + 1} \Big/ {\sup(A) + k}$$

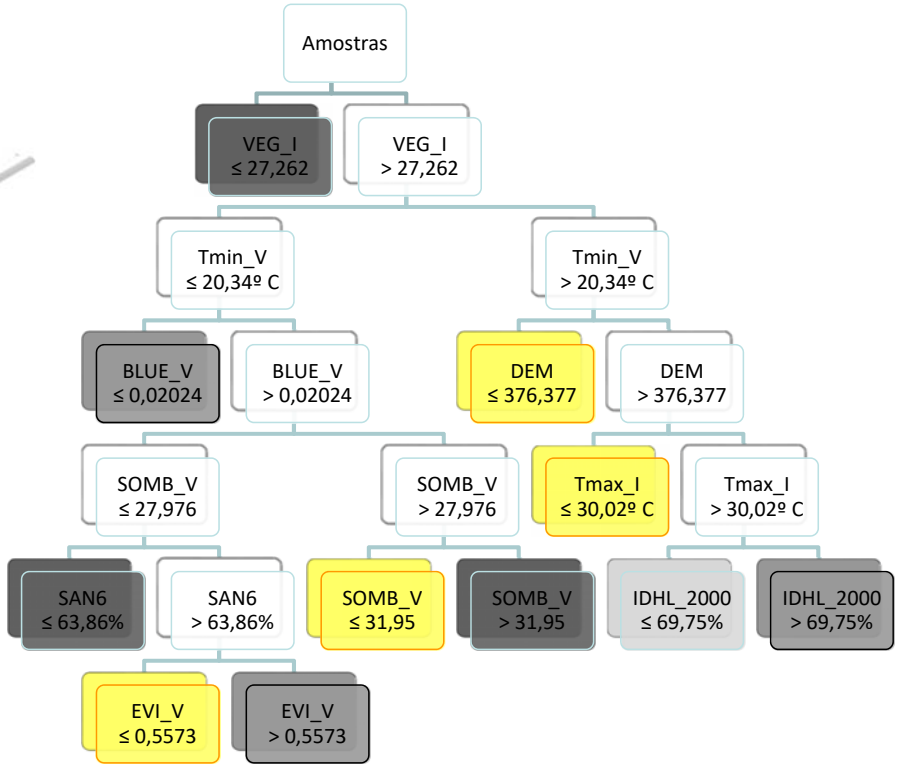
Piatesky-Shaprio (P-S):

$$ps(A \rightarrow B) = \sup(A \cup B) - \sup(A) * \sup(B)$$

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Classificação e previsão





Extraído de Uso de árvore de decisão para previsão da prevalência de esquistossomose no Estado de Minas Gerais, Brasil. Anais XIII Simpósio Brasileiro de Sensoriamento Remoto, Florianópolis, Brasil, 21-26 abril 2007, INPE, p. 2841-2848.

Classificação e previsão

Objetivo:

- Extrair modelos que descrevem importantes classes de dados e também para predizer tendências dos dados.
- Construir ou prever atributos categóricos a partir de um conjunto de outros dados.

Aplicações:

- Aprovação de crédito, marketing direcionado, diagnóstico médico, análise de efetividade.

Exemplos:

- Classificação: se **FEBRE** e **DIFICULDADE_RESP** e **FALTA_DE_APETITE** então **AMIGDALITE**
- Previsão: dados **NUM_QUARTOS**, **ÁREA**, **NUM_VAGAS**, **ELEVADORES**, **REGIAO**, **IDADE** então **VALOR PROVÁVEL DO IMÓVEL**

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Classificação e previsão: processo

Etapa 1:

- Criação do modelo de classificação:
  - etapa de aprendizado : modelo é criado a partir da base de treinamento.
  - modelo é constituído de regras classificam registros da base em um conjunto de classes pré-determinado.

Exemplo:

Base de treinamento

Nome	Idade	Renda	Profissão	Compra Eletrônico
Daniel	<= 30	média	estudante	S
João	31..60	média-alta	professor	S
Carlos	31..60	média-alta	engenheiro	S
Maria	31..61	baixa	vendedora	N
Paulo	<= 30	baixa	porteiro	N
Otávio	> 60	média-alta	aposentado	N

Regras do modelo

(a) SE idade = 31..60 e Renda = Média-Alta
ENTÃO Compra Eletrônico = Sim.

(b) SE Renda = Baixa
ENTÃO Compra Eletrônico = Não.

Classificação e previsão: processo

Etapa 2:

- Verificação do modelo ou Classificação:
  - regras são testadas sobre outra base, independente da base de treinamento, chamado de *banco de dados de testes.*
  - qualidade do modelo é medida em termos da porcentagem corretamente classificada.

Exemplo:

Base de testes

Nome	Idade	Renda	Profissão	Compra Eletrônico
Pedro	31..60	média-alta	ecologista	N
José	31..60	média-alta	professor	N
Luiza	31..60	média-alta	assistente	N
Carla	<= 30	baixa	vendedora	N
Wanda	<= 30	baixa	faxineira	N
Felipe	> 60	média-alta	aposentado	N

Regras do modelo

(a) (1), (2), (3) não são corretamente classificadas pelo modelo.

(b) (4),(5), (6) classificadas corretamente.

Precisão/acurácia: 50%

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Classificação e previsão: processo

Etapa 3:

- Utilização do modelo:
  - modelo é implantado e utilizado sobre novos dados.

Exemplo:

- Dada a base de dados de clientes de uma loja de eletrônicos:
  - enviar marketing direcionado àqueles com maior propensão a consumir eletrônicos, mas que ainda não o fizeram.

Nome	Idade	Renda	Profissão
Jéssica	<= 30	média-alta	vendedora
Lucas	<= 30	baixa	professor
Renata	31..60	baixa	engenheira
Bernardo	> 60	média-alta	aposentado

Classificação e previsão: questões práticas

BASE DE DADOS: separar base de treinamento e base de testes.

- Devem ser semelhantes (estatisticante, cobertura do espaço de solução, etc.)
- Se base de dados é grande, pode-se partir a base (*percentage Split*)
- Caso contrário, usar validação cruzada (*cross validation*), por exemplo,10-partes:
  - Separa a base aleatoriamente em 10 partes, em cada rodada usa-se 9 blocos para treinamento e 1 bloco para teste.

ESCOLHENDO CARACTERÍSTICAS

- Normalmente redundância não é problema.
- Pode-se usar redução de dimensionalidade.

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Classificação e previsão: questões práticas

ESCOLHA DO ALGORITMO

- Tarefa: classificação ou previsão?
- Tipos de dados.
- Distribuição das classes.
- Interpretabilidade dos resultados

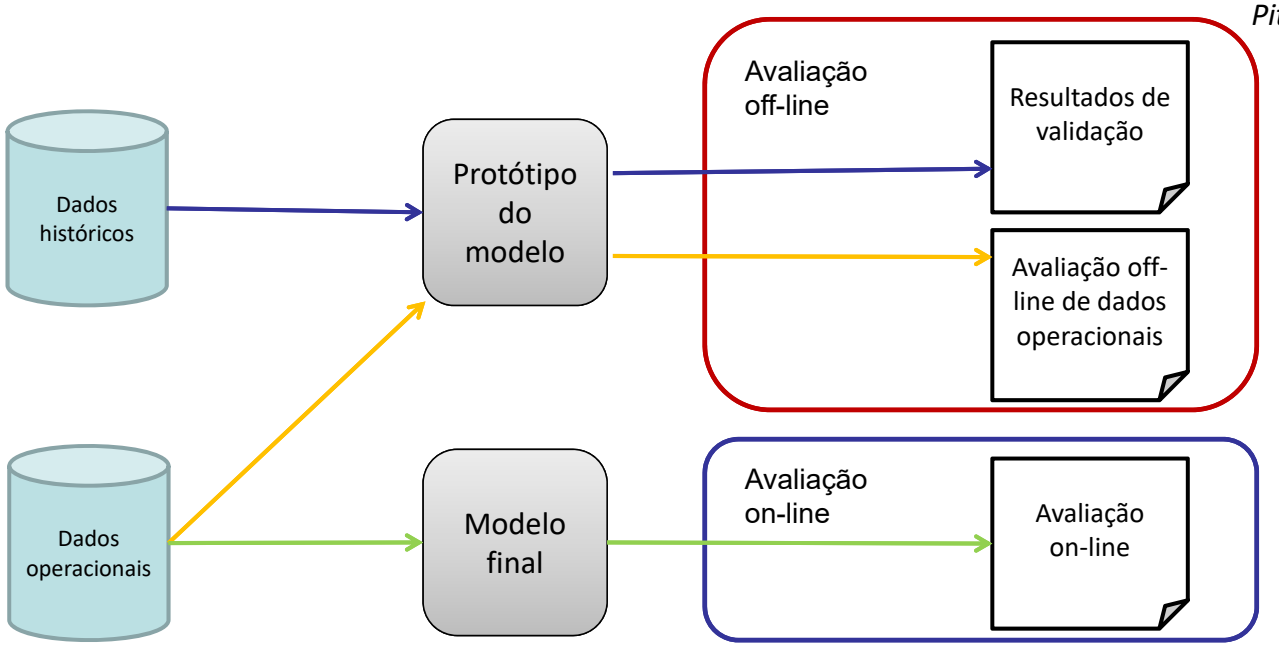
DEFINIÇÃO DOS PARÂMETROS DO MODELO

- Em alguns casos, pode-se utilizar alguma teoria, normalmente baseada em estatística.
- Normalmente, usa-se tentativa e erro (cuidado: se testar de mais ficará caro e propenso a *overfitting*).

Avaliação de modelos de Machine Learning

Cross-validation, RMSE, and grid search walk into a bar. The bar-tender looks up and says, "Who the heck are you?"

Alice Zheng (2015). Evaluating Machine Learning Models, A Beginner's Guide to Key Concepts and Pitfalls



DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Exemplos de métricas de avaliação

Classificação de spam em e-mail:

- Acurácia
- log-loss
- AUC (área debaixo da curva)

Previsão do preço de uma ação

- RMSE (*root mean-squared error*)

Ranqueamento de relevância de um item numa busca

- Precisão-revocação
- NDCG (*normalized discounted cumulative gain*)

Avaliação off-line

OBJETIVO: selecionar o melhor modelo para uma determinada tarefa.

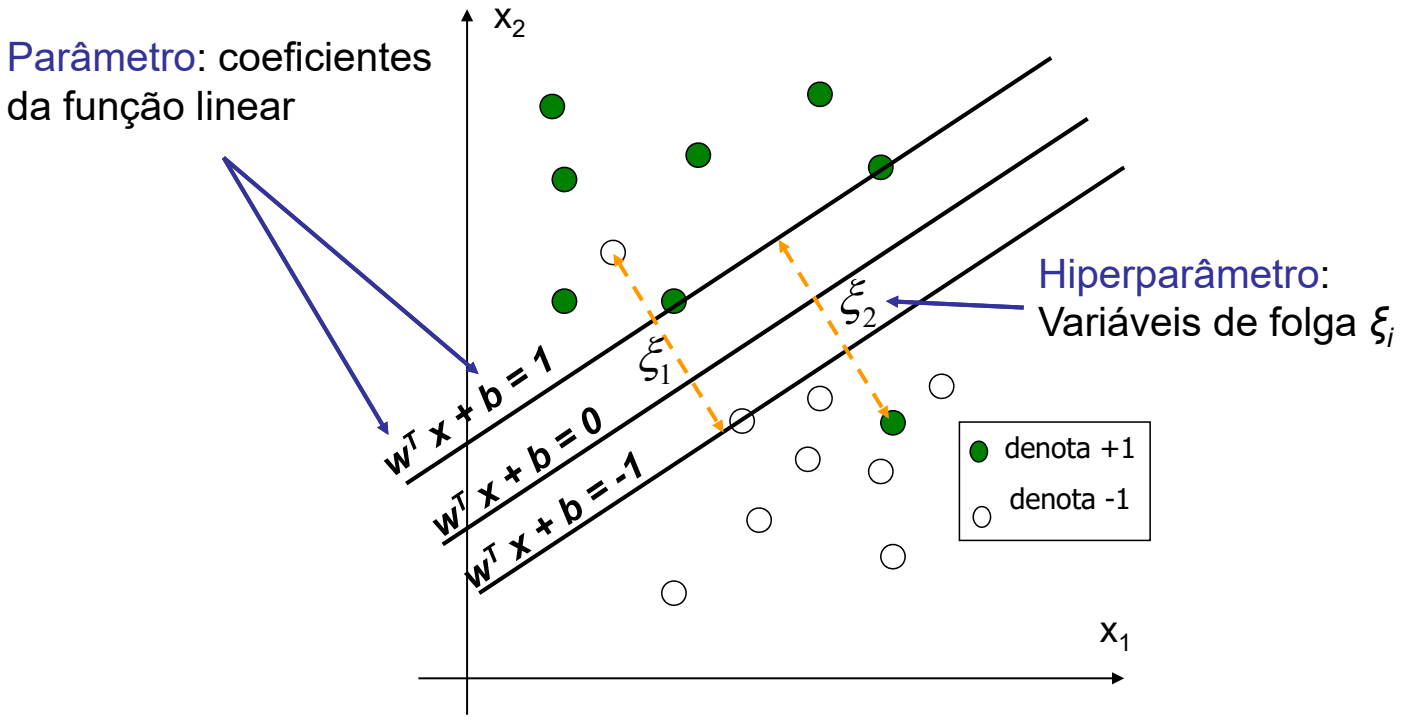
- Avaliado em um dataset estatisticamente independente do dado em que foi treinado.
- Erro de generalização: qualidade com que o modelo se comporta com dados ainda não conhecidos
- Obtenção dos dados de validação
  - Hold-out / percentage Split
  - Cross-validation

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Busca por hiperparâmetros

- Parâmetros versus hiperparâmetros
  - Parâmetros de um modelo: variáveis ajustadas no processo de aprendizado.
  - Hiperparâmetros: precisam ser ajustados, mas não são aprendidos.
- Busca por hiperparâmetros ou *autotuning* ou *grid search* são as técnicas para ajustar os hiperparâmetros de forma a maximizar a qualidade do modelo.

Parâmetros e hiperparâmetros
Exemplo de um classificador linear



DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Medidas de avaliação
Classificação binária

MATRIZ DE CONFUSÃO

- Mostra o número de classificações corretas versus as classificações preditas para cada classe, sobre um conjunto de exemplos T.
- A matriz de confusão de um classificador ideal possui apenas valores na diagonal, demais valores são zero.
- Exemplo:

	CLASSE A	CLASSE B	PRECISÃO
PRED. CLASSE A	T_P	F_P	$T_P/(T_P + F_P)$
PRED. CLASSE B	F_N	T_N	
REVOCAÇÃO	$T_P/(T_P + F_N)$		

Medidas de avaliação
Classificação binária

ACURÁRIA

- Porcentagem de elementos classificados corretamente (positivos ou negativos).
- $A = (T_P + T_N) / (T_P + T_N + F_P + F_N)$

ACURÁCIA POR CLASSE

- Calcula-se a média das acurácias individuais para cada classe.
- Minimiza o problema de desbalanceamento de classe.
- Desvantagem: se uma classe possui poucas amostras, aumenta a variância da medida.

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Medidas de avaliação
Classificação binária

EXEMPLO: DETECÇÃO DE SPAM

	PREV. SPAM	PREV. NÃO SPAM
SPAM	80	20
NÃO SPAM	5	195

ACURÁRIA

$$A = \frac{80 + 195}{100 + 200} = 91{,}7\%$$

ACURÁCIA POR CLASSE

$$A_{SPAM} = \frac{80}{20+80} = 80\% \qquad A_{NÃO\ SPAM} = \frac{195}{5+195} = 97{,}5\%$$

$$A = 80 + 97{,}5/2 = 88{,}75\%$$

Medidas de avaliação
Classificação binária

LOG-LOSS

- Usado quando um classificado retorna uma probabilidade de classificação (“confiança”).

$$\log -loss = -\frac{1}{N}\sum_{i}^{N} y_i \log p_i + (1 - y_i) \log(1 - p_i)$$

HAMMING-LOSS

- Casamento simples (*matching*). Distância média entre o atributo previsto e a classe original.

$$hamming - loss = \frac{1}{N}\sum_{i}^{N} y_i \neq \bar{y}_i$$

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Medidas de avaliação
Classificação binária

PRECISÃO (*precision*)

- Define os chamados positivos verdadeiros. Dentre os exemplos classificados como verdadeiros, quantos eram realmente verdadeiros.

$$P = T_P/(T_P + F_P)$$

REVOCAÇÃO / SENSITIVIDADE (*recall*)

- Capacidade de recuperação da classe. Dentre o total de exemplos verdadeiros, quantos foram classificados como verdadeiros.

$$R = T_P/(T_P + F_N)$$

Medidas de avaliação
Classificação binária

ESPECIFICIDADE

- Porcentagem de amostras negativas identificadas corretamente sobre o total de amostras negativas.
- $S = T_N/(T_N + F_P)$

F-measure ou F-score

- Média ponderada de precisão e revocação.

$$F = 2 \times \frac{(PRECISAO\ X\ REVOCAÇÃO)}{(PRECISAO + REVOCAÇÃO)}$$

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Classificação e previsão

Métodos de classificação:

- Indução de árvore de decisão.
- Classificação Bayesiana.
- Classificação baseada em regras.
- Classificação por propagação reversa (redes neurais).
- Classificação associativa: por análise de regras de associação.

Métodos de previsão:

- Regressão linear / polinomial
- Regressão não-linear

Indução de árvore de decisão

Estrutura da árvore de decisão

- cada nó é um atributo da base de dados.
- nós folha são do tipo do atributo-classe (ou rótulo, *label*),
- cada ramo ligando um nó-filho a um nó-pai é etiquetado com um valor do atributo contido no nó-pai.
- um atributo que aparece num nó não pode aparecer em seus nós descendentes.

Algoritmos de indução da árvore

- ID3 (final dos anos 1970) - *Iterative Dichotomiser*
- C45 (sucessor do ID3)
- CART (1984) - *Classification and Regression Trees*
- J48

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Árvore de decisão: exemplo

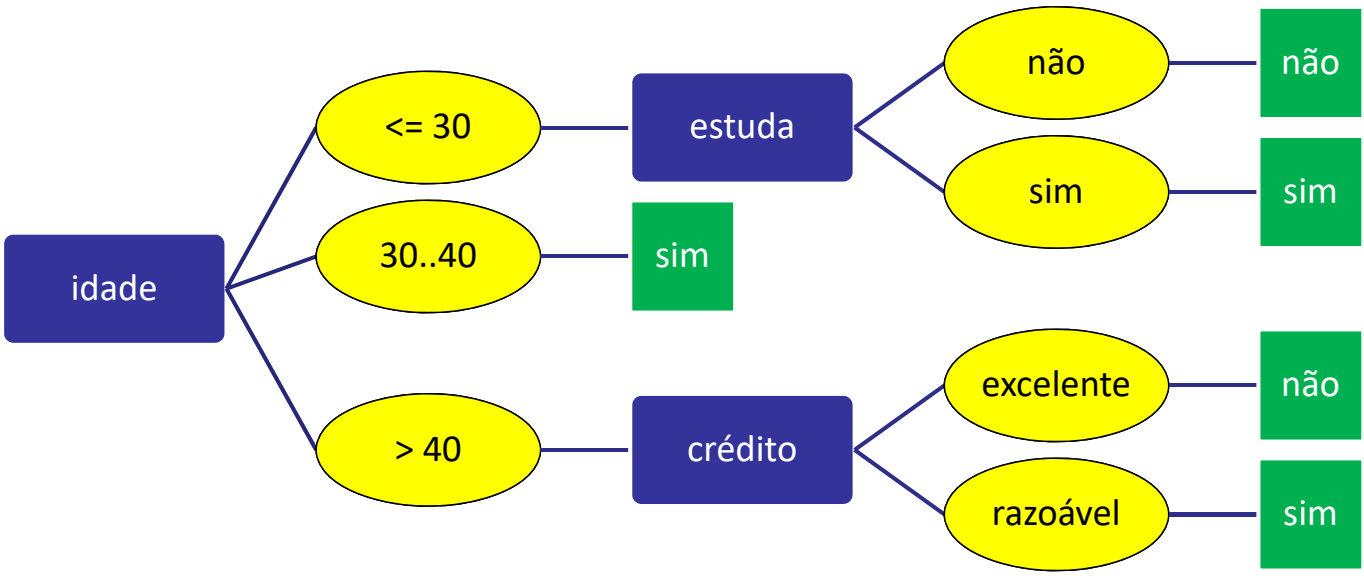
Exemplo de Quinlan's ID3

- Base de treinamento

idade	renda	estuda	crédito	compra computador
<=30	alta	não	razoável	não
<=30	alta	não	excelente	não
31…40	alta	não	razoável	sim
>40	média	não	razoável	sim
>40	baixa	sim	razoável	sim
>40	baixa	sim	excelente	não
31…40	baixa	sim	excelente	sim
<=30	média	não	razoável	não
<=30	baixa	sim	razoável	sim
>40	média	sim	razoável	sim
<=30	média	sim	excelente	sim
31…40	média	não	excelente	sim
31…40	alta	sim	razoável	sim
>40	média	não	excelente	não

Árvore de decisão: exemplo

Uma possível árvore de decisão criada pelo algoritmo: o usuário é um potencial comprador ou não



DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Indução de árvore de decisão

Tipos de dados:

- ID3: dados categóricos.
- C4.5: dados contínuos, suporta omissões).

Parâmetros de entrada:

- base de dados (B).
- lista de atributos candidatos (CAND).
- um atributo-classe (rótulo): sempre categórico.

Métodos de seleção de atributos

- Ganho de informação (ID3).
- Taxa de ganho (C4.5, J48).
- Índice GINI - impureza (CART).

Visão geral do algoritmo de ID3 (C4.5)

1. Crie um nó N associado à base de dados **B**
   - SE todos os registros de **B** pertencem à mesma classe **C** ENTÃO transforme em nó folha rotulado por **C**.
   - SENÃO SE **CAND = {}** ENTÃO transforme **N** numa folha etiquetada com o valor **C = max(count(atributo-classe(A))**
   - SENÃO seleciona atributo-teste **A = max(Ganho(CAND))** e rotule **N** com o nome de atributo-teste **A**
2. Partição das amostras de B
   - PARA cada valor s_i do atributo-teste FAÇA:
   - Crie um nó-filho N_i, ligado a **N** por um ramo rotulado pelo valor s_i e associe a este nó uma sub-base B_i tal que o **atributo-teste = s_i**
   - SE B_i **= {}** ENTÃO transforme o nó N_i numa folha etiquetada com o valor **C = max(count(atributo-Classe(A))**
   - SENÃO calcule **Arvore(B_i , CAND – (atributo-teste))** e associe ao nó N_i

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Métodos de seleção de atributos

- Ganho de informação (ID3)
  - Dados categóricos (número de categorias = ***v***)
  - Entropia:

$$E(p,n) = -\frac{p}{p+n}\log_2\frac{p}{p+n} - \frac{n}{p+n}\log_2\frac{n}{p+n}$$

  - Usando o atributo **A**, a base de dados **B** será particionada em conjuntos S_i. A quantidade de informação final será:

$$I(A) = \sum_{i=1}^{v}\frac{p_i + n_i}{p+n} I(p_i, n_i)$$

  - Ganho de informação: $G(A) = I(p,n) - I(A)$
- Taxa de ganho (C4.5)
  - Dados categóricos ou contínuos

Métodos de seleção de atributos

- Índice Gini (*IBM IntelligentMiner*)
  - Dados contínuos
  - Se uma base B contém amostras de N classes:

$$gini(B) = 1 - \sum_{j=1}^{n} {p_j}^2$$

onde p_j é a frequência relativa da classe *j* em B.

  - Se B é particionada em duas subclasses B_1 e B_2 com tamanhos N_1 e N_2 , então:

$$gini_{part}(B) = \frac{N_1}{N} gini(B_1) + \frac{N_2}{N} gini(B_2)$$

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Árvore de decisão: exemplo

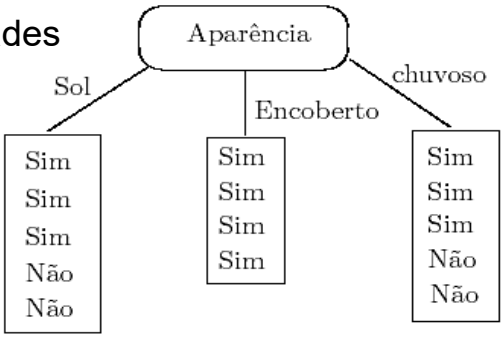
- Considere a base abaixo. O objetivo é identificar quais as condições ideais para se jogar um determinado jogo.

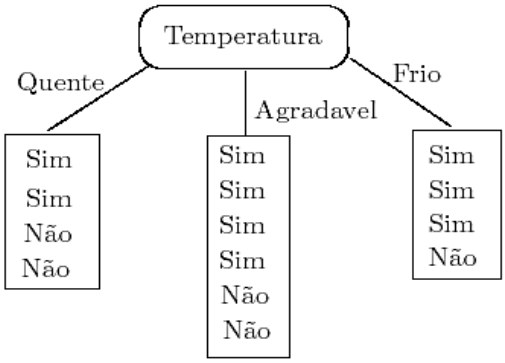
Aparência	Temperatura	Umidade	Vento	Jogar
Ensolarado	Quente	Alta	Fraco	Não
Ensolarado	Quente	Alta	Forte	Não
Nublado	Quente	Alta	Fraco	Sim
Chuvoso	Moderado	Alta	Fraco	Sim
Chuvoso	Frio	Normal	Fraco	Sim
Chuvoso	Frio	Normal	Forte	Não
Nublado	Frio	Normal	Forte	Sim
Ensolarado	Moderado	Alta	Fraco	Não
Ensolarado	Frio	Normal	Fraco	Sim
Chuvoso	Moderado	Normal	Fraco	Sim
Ensolarado	Moderado	Normal	Forte	Sim
Nublado	Moderado	Alta	Forte	Sim
Nublado	Quente	Normal	Fraco	Sim
Chuvoso	Moderado	Alta	Forte	Não

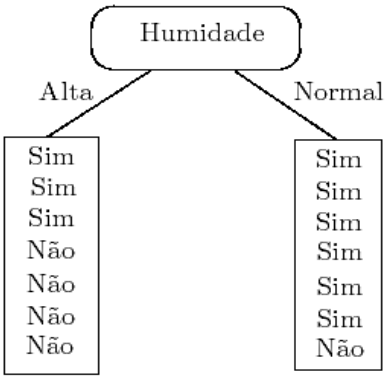
Árvore de decisão: exemplo

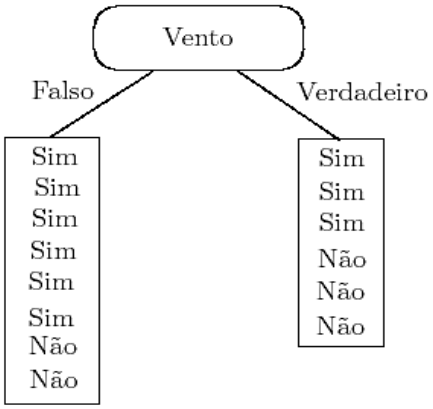
As quatro possibilidades para o atributo do nó raiz.

Critério de escolha intuitivo: atributo que produz os nós mais puros.









DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Árvore de decisão: exemplo

Entropia do atributo **Aparência**:

$$I(Aparencia) = \frac{5}{14}E(Folha_1) + \frac{4}{14}E(Folha_2) + \frac{5}{14}E(Folha_3)$$

$$E(Folha_1) = \frac{2}{5}\log_2\frac{2}{5} + \frac{3}{5}\log_2\frac{3}{5} = 0.971$$

$$E(Folha_2) = \frac{4}{4}\log_2\frac{4}{4} + \frac{0}{4}\log_2\frac{0}{4} = 0$$

$$E(Folha_3) = \frac{3}{5}\log_2\frac{3}{5} + \frac{2}{5}\log_2\frac{2}{5} = 0.971$$

logo

$$I(Aparencia) = \frac{5}{14}0.971 + \frac{4}{14}0 + \frac{5}{14}0.971 = 0.693$$

Como decidir qual o melhor atributo para dividir as amostras

Entropia do atributo **Temperatura**:

$$I(Temperatura) = \frac{4}{14}E(Folha_1) + \frac{6}{14}E(Folha_2) + \frac{4}{14}E(Folha_3) = 0.911$$

Entropia do atributo **Humidade**:

$$I(Humidade) = \frac{7}{14}E(Folha_1) + \frac{7}{14}E(Folha_2) = 0.788.$$

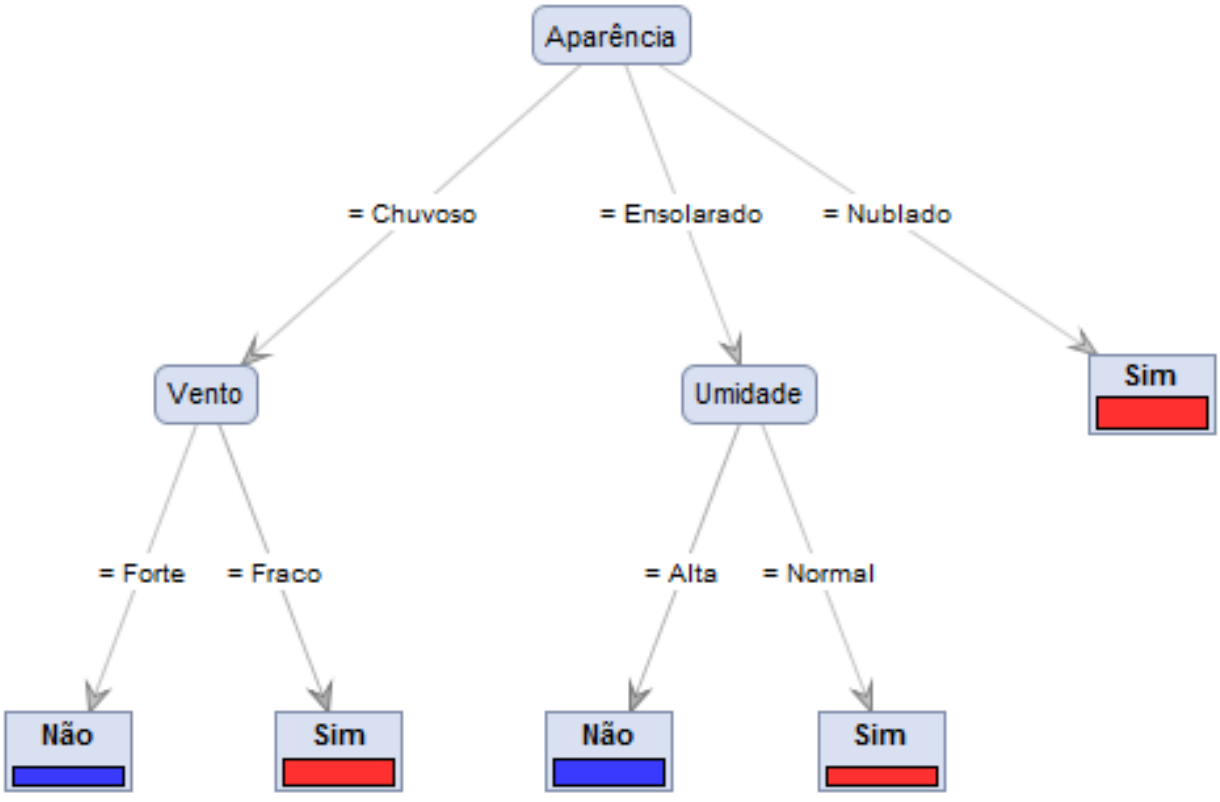
Ganho da informação:

$$I(B) = \frac{9}{14}\log_2\frac{9}{14} + \frac{5}{14}\log_2\frac{5}{14} = 0.940$$

$$\boldsymbol{G(Aparencia) = 0.940 - 0.693 = 0.247}$$
$$G(Tempertura) = 0.940 - 0.911 = 0.029$$
$$G(Humidade) = 0.940 - 0.788 = 0.152$$
$$G(Vento) = 0.940 - 0.892 = 0.020$$

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Resultado final da árvore

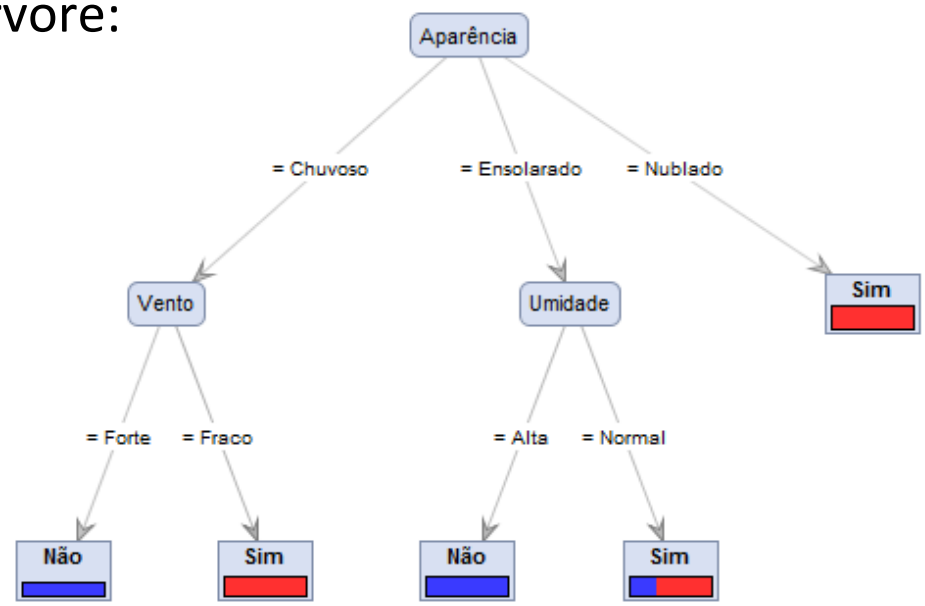


Overfitting (superajustamento) em árvores de decisão

Considere o seguinte ruído na base de treinamento:

<Ensolarado, Quente, Normal, Forte, Não>

Nova árvore:



DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Overfitting

Considere uma hipótese *h* e:

- Taxa de erro sobre o conjunto de treinamento: $err_{train}(h)$
- Erro real sobre todo conjunto de dados: $err_{real}(h)$

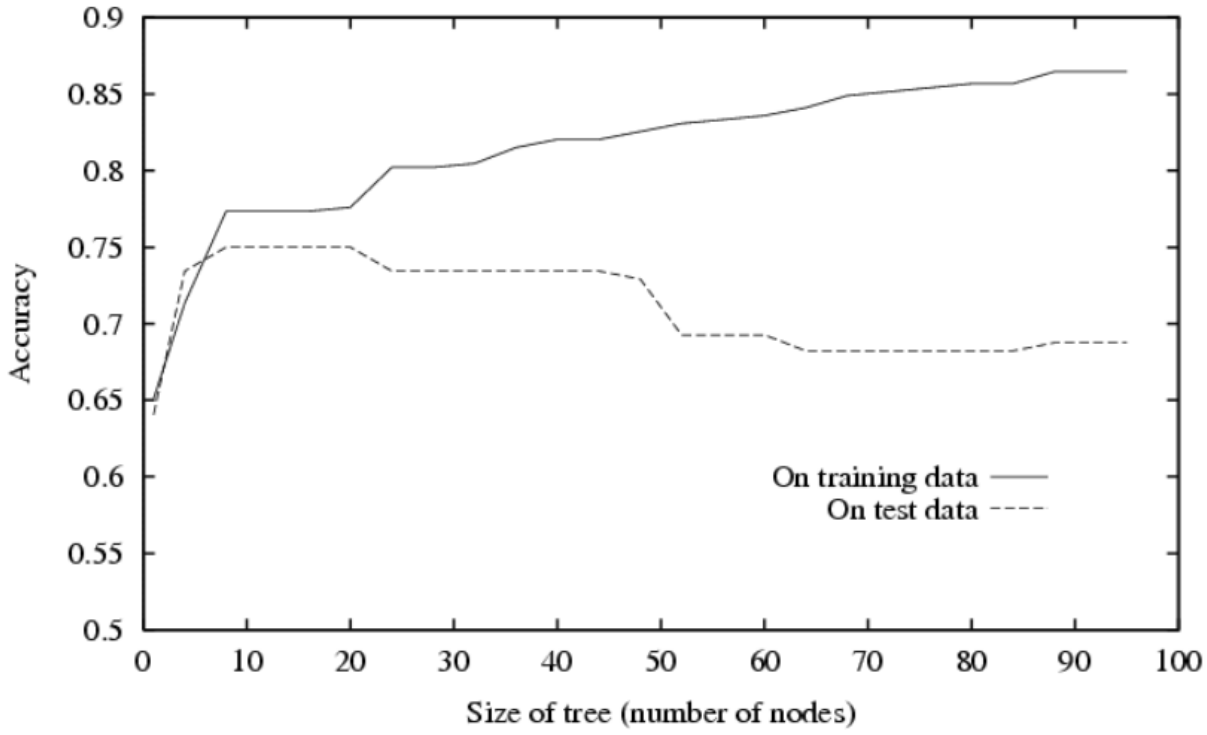
Diz-se que *h* sofre overfitting referente aos dados de treinamento se:

$$err_{real}(h) > err_{train}(h)$$

Quantidade de overfitting

$$err_{real}(h) - err_{train}(h)$$

Overfitting



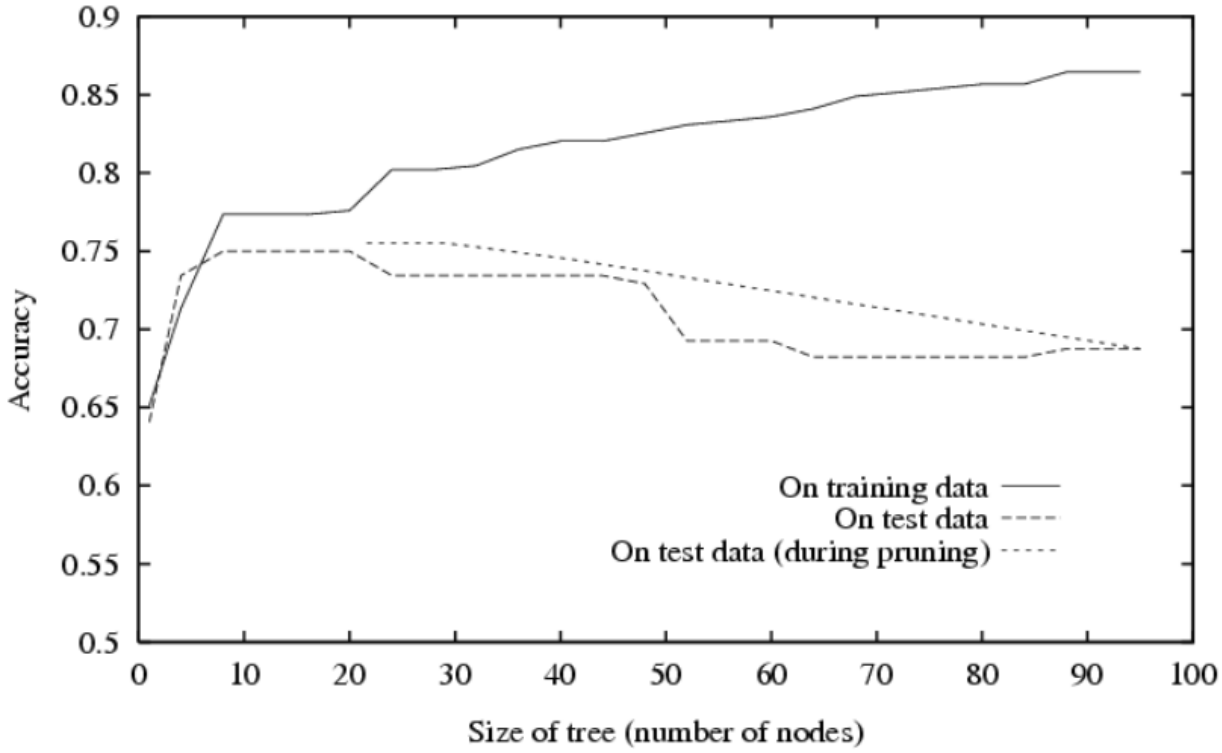
Evitando *overfitting*

- Parar de crescer a árvore quando não for estatisticamente relevante.
- Gerar a árvore completa e depois podá-la.

Poda com erro reduzido

- Dividir dado em *treinamento* e *validação*
- Criar árvore que classifica *treinamento* corretamente
- Repetir até que seja prejudicial ao modelo
  - Avaliar o impacto da poda de cada nó (e seus descendentes) da árvore na *validação*.
  - Remover nó que mais aumenta a acurácia na *validação* (algoritmo guloso).

Efeito da poda com erro reduzido no *Overfitting*

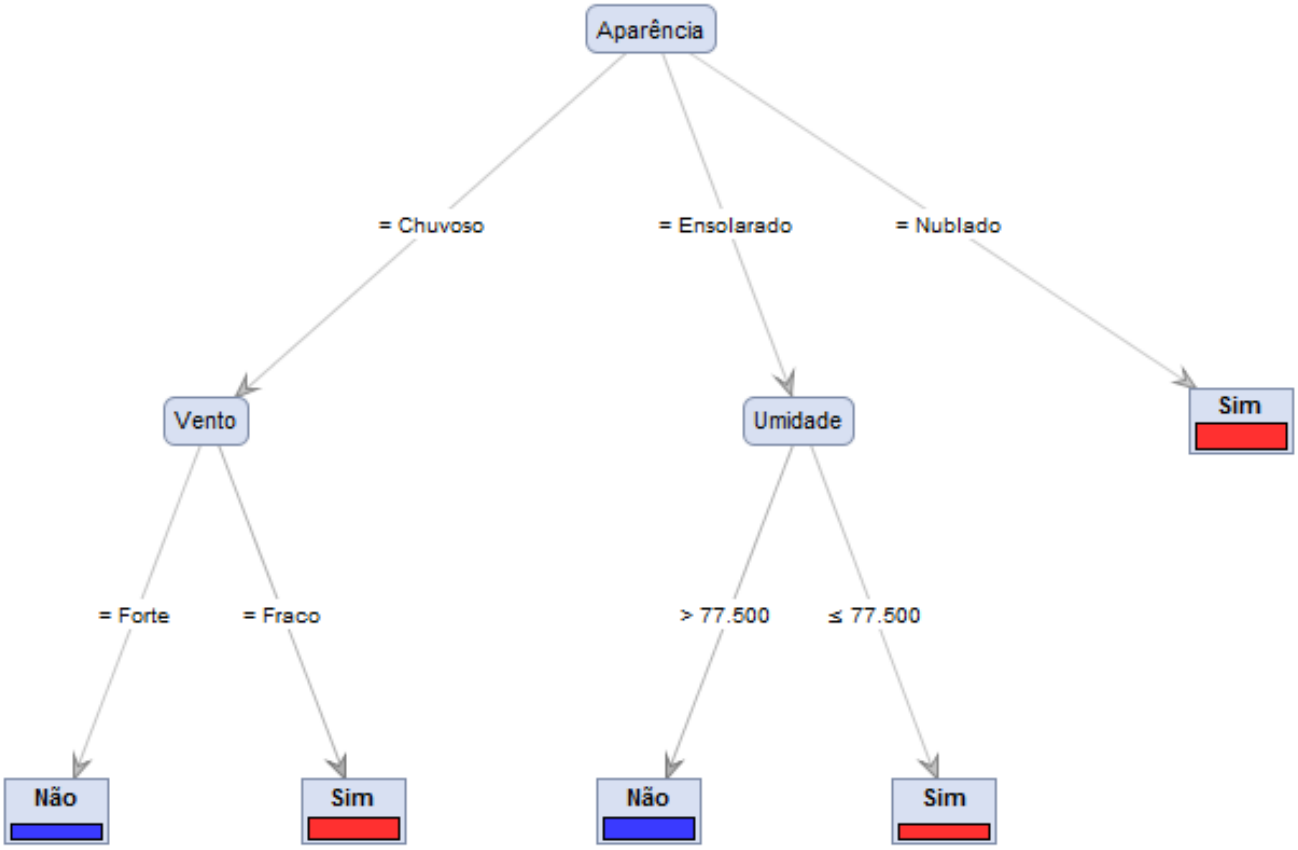


DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Árvores com atributos contínuos

Aparência	Temperatura	Umidade	Vento	Jogar
Ensolarado	Quente	85	85	Não
Ensolarado	Quente	80	90	Não
Nublado	Quente	83	86	Sim
Chuvoso	Moderado	70	96	Sim
Chuvoso	Frio	68	80	Sim
Chuvoso	Frio	65	70	Não
Nublado	Frio	64	65	Sim
Ensolarado	Moderado	72	95	Não
Ensolarado	Frio	69	70	Sim
Chuvoso	Moderado	75	80	Sim
Ensolarado	Moderado	75	70	Sim
Nublado	Moderado	72	90	Sim
Nublado	Quente	81	75	Sim
Chuvoso	Moderado	71	91	Não

Árvores com atributos contínuos



DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Árvores com atributos contínuos

- Criar nó que testa o atributo contínuo:
  - *(Temperatura = 60) == V/F*
  - *(Temperatura > 65) == V/F*
- Problema: se atributo possui muitos valores, ele será selecionado.
- Abordagem é usar *GainRatio*

$$GainRatio(S,A) = \frac{Gain(S,A)}{SplitInformation(S,A)}$$

$$SplitInformation(S,A) = -\sum_{i-1}^{C} \frac{|S_i|}{|S|} \log_2 \frac{|S_i|}{|S|}$$

onde S_i é o subconjunto de S em que A possui o valor v_i

Revisão de probabilidade

Axiomas da probabilidade (di Finetti, 1931):

- 0 <= P(A) <= 1
- P(True) = 1
- P(False) = 0
- P(A ˅ B) = P(A) + P(B) - P(A ^ B)

^ = E (*and*)
˅ = OU (*or*)

- Propriedades úteis:
  - P(~A) + P(A) = 1
  - P(A) = P(A ^ B) + P(A ^ ~B)
- Probabilidade condicional:
  - P(A|B) = P(A ^ B) / P(B)
  - P(A ^ B) = P(A|B) P(B) (Regra da cadeia)

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Classificação Bayesiana (*Naïve Bayes*)

- Este método é baseado em classificador estatístico.
- Trabalha com probabilidades de ocorrência de cada classe para cada valor de atributo.
- Supõe que variáveis são independentes.
- P(C|X) probabilidade do registro **X** ser da classe **C**

$$\mathrm{P(C|X)} = \mathrm{P(C)} \prod_{i=1}^{n} P(X_i|C)$$

- Seleciona P(C|X) máximo.
- Correção de Laplace evita alta influência de valores com probabilidade 0.

Classificação Bayesiana: exemplo

Aparência	
P(sol|sim) = 2/9	P(sol|não) = 3/5
P(nublado|sim) = 4/9	P(nublado|não) = 0
P(chuvoso|sim) = 3/9	P(chuvoso|não) = 2/5
Temperatura	
P(quente|sim) = 2/9	P(quente|não) = 2/5
P(moderado|sim) = 4/9	P(moderado|não) = 2/5
P(frio|sim) = 3/9	P(frio|não) = 1/5
Humidade	
P(alta|sim) = 3/9	P(alta|não) = 4/5
P(normal|sim) = 6/9	P(normal|não) = 2/5
Vento	
P(forte|sim) = 3/9	P(forte|não) = 3/5
P(fraco|sim) = 6/9	P(fraco|não) = 2/5

Jogar
P(sim) = 9/14
P(não) = 5/14

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Classificação Bayesiana: exemplo

Dado X = <chuvoso, quente, alta, não>

P(X|sim)·P(sim)
= P(chuvoso|sim)·P(quente|sim)·P(alta|sim)·P(fraco|sim)·P(sim)
= 3/9·2/9·3/9·6/9·9/14 = 0.010582

P(X|não)·P(não)
= P(chuvoso|não)·P(quente|não)·P(alta|não)·P(fraco|não)·P(nao)
= 2/5·2/5·4/5·2/5·5/14 = 0.018286

Amostra classificada como **não jogar**

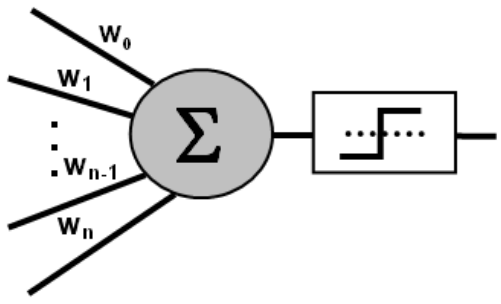
Redes neurais artificiais

- Método bioinspirado baseado em redes de neurônios artificiais interconectados.
- Vantagens:
  - Alta acurácia e robusto à bases com erros
  - Saída pode ser discreta (classificação) ou contínua (previsão) ou multivalorada.
- Críticas:
  - Treinamento demorado e sensível a diversos parâmetros tais como topologia da rede, número de neurônios, taxa de aprendizado, número de épocas utilizadas.
  - Difícil de compreender a função aprendida (pesos).

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Redes neurais artificiais

Neurônio Artificial (perceptron)



$$a = \sum_{i=1}^{N} x_i w_i \qquad f(a) = \begin{cases} 1, se\ a \geq \theta \\ 0, se\ a < \theta \end{cases}$$

Treinamento

- Inicia com pesos aleatórios
- Calcula o erro na saída do neurônio:

$\varepsilon = saida_{RNA} - saida_{REAL}$

- Atualiza pesos:

$w_i(t+1) = w_i(t) + \varepsilon \cdot TxAp \cdot ent$

TxAp é taxa de aprendizado (ex. 0.05)

ent é entrada

Redes neurais artificiais: exemplo

saída: 1 – feliz, 0 – infeliz

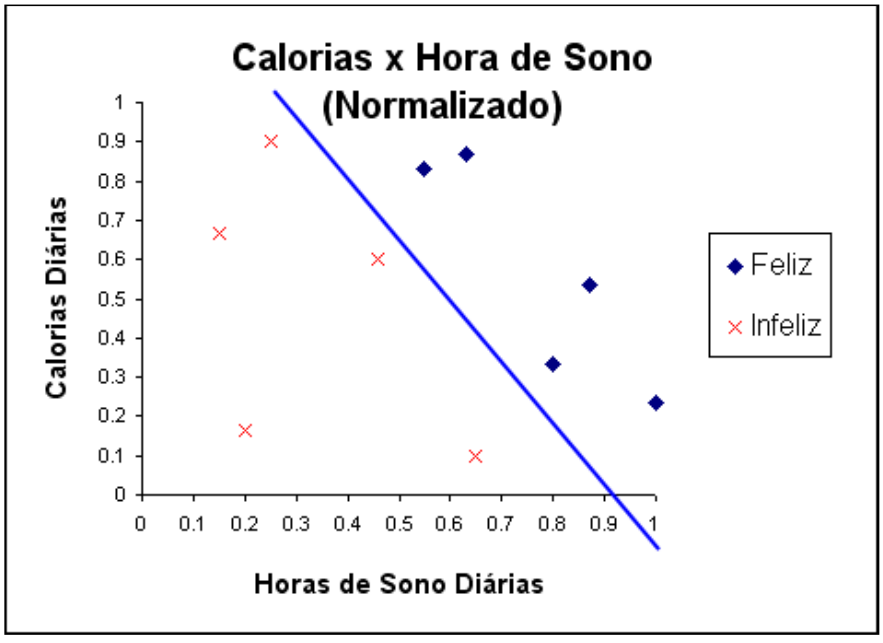
Calorias	Horas Sono	Estado
0.9	0.25	0
0.66	0.15	0
0.83	0.55	1
0.86	0.63	1
0.16	0.2	0
0.1	0.65	0
0.33	0.8	1
0.53	0.87	1
0.6	0.46	0
0.23	1	1

Treinamento

- Parou quando atingiu $\varepsilon = 0.0001$
- Durou 30 épocas (ou 300 iterações)
- TxAp = 0.01
- Limiar da função de ativação $\theta = 0.5$
- Pesos finais:
  W_0 = 0.416882
  W_1= 0.507391
- Tempo de treinamento < 1 s.

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

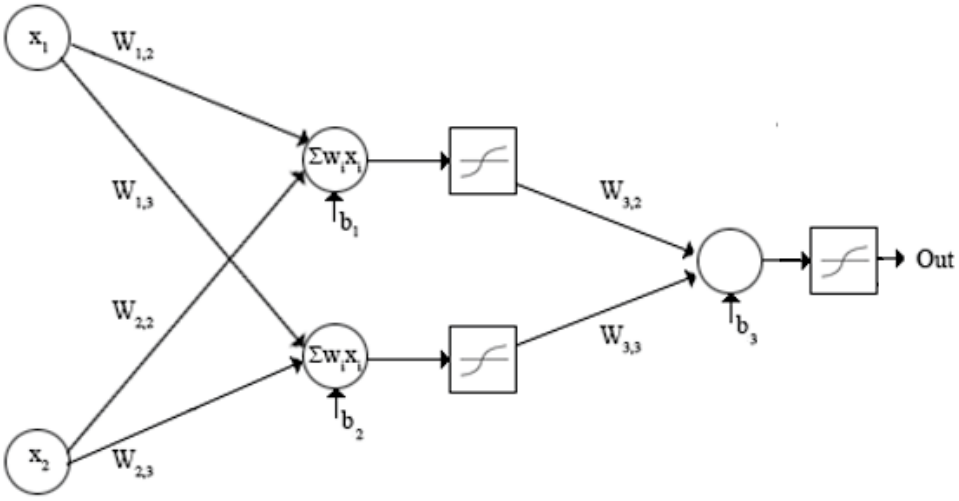
Redes neurais artificiais: exemplo



Desvantagem: só resolve problemas linearmente separáveis

Redes perceptron muticamadas (MLP)

- Dado um número suficiente de neurônios escondidos, uma MLP com uma camada escondida aproxima qualquer função contínua (Cybenko, 1989).
- ***Overfitting***: uma rede hipertreinada, ou possui mais neurônios do que precisa, se ajusta a grupo específico de dados, diminuindo sua generalização.



Redes neurais artificiais: estruturas

- Redes feed-forward
  - *Single-layer* ou *multi-layer*.
  - Implementam funções – não possuem estado interno.
- Redes recorrentes
  - Possuem ciclos direcionados com atrasos – possuem estado interno.
  - Redes de Hopfield: implementam memória associativa.
  - Máquinas de Boltzmann: usa funções estocásticas de ativação.

Critérios para avaliação dos métodos de classificação

- Velocidade
  - refere ao custo e velocidade para gerar e usar os modelos de dados.
- Robustez
  - habilidade do método em detectar e resolver questões relativas a valores omissos (ausentes) ou ruidosos.
- Escalabilidade
  - capacidade de construir eficientemente modelos com grandes volumes de dados.
- Interpretabilidade
  - refere ao nível de entendimento provido pelo modelo.
- Acurácia
  - refere a capacidade do modelo representar bem os dados analisados e também novos dados.

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Considerações entre associação e classificação

Associação	Classificação
Problema simétrico: todos podem ser antecedente ou consequente de uma regra.	Problema assimétrico: um único atributo classe a ser previsto.
Qualidade de uma regra avaliada por fatores de CONF e SUP definidos pelo usuário.	Qualidade é mais difícil de ser avaliada; normalmente avalia-se acurácia.
Definição do problema é clara, determinística: encontrar regras com suporte e confiança especificados.	Regras são avaliadas em dados de teste não vistos na fase de treinamento (prever futuro).
A grande preocupação é em projetar algoritmos eficientes.	A principal preocupação é com o projeto de algoritmos eficazes.

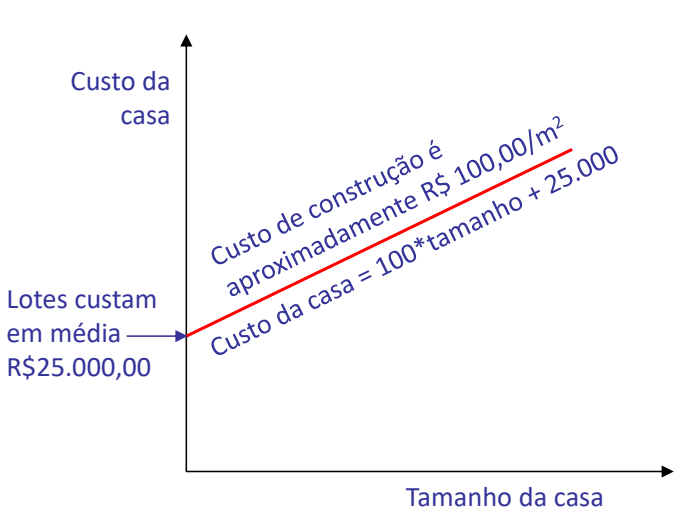
Previsão

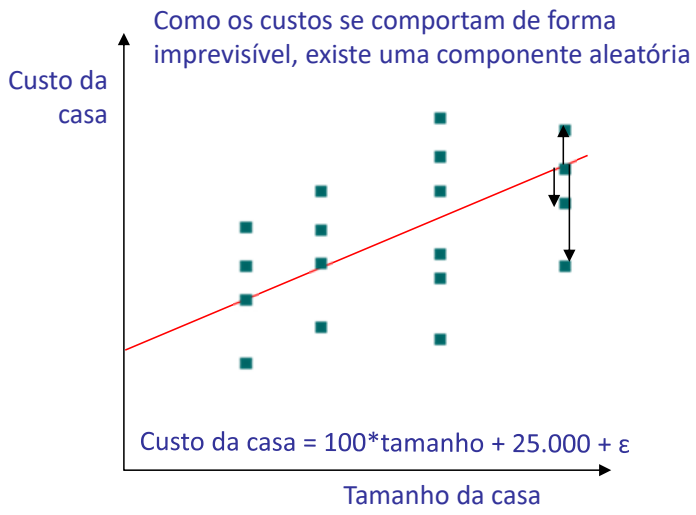
- Modelam funções contínuas.
- Regressão linear: $Y = \alpha X + \beta$
- Regressão não linear: $Y = f(X, \theta)$, onde $f(X, \theta)$ é não linear.

  Exemplos:
  - função exponencial
  - função polinomial
- Estimação de parâmetros: métodos dos mínimos quadrados.
- Algumas aplicações não lineares: modelos de crescimento, modelos de rendimentos.

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Previsão: Regressão Linear





Boosting

- Método para melhorar a precisão de qualquer algoritmo de aprendizado.
- Funciona criando uma série de *datasets* tal que mesmo um desempenho modesto sobre essa base de dados pode ser utilizada para construir um preditor de alta precisão.
- Normalmente se concentra nos exemplos mais difíceis (aqueles que foram incorretamente classificados nas etapas anteriores).
- Combinação dos modelos é feita pela maioria dos votos.

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Adaboost (Adaptive Boosting)

- Adaboost é considerado um dos *Top 10* do *Machine Learning*

Procedimento:

Seja o conjunto de dados:

S = {(x_1, y_1); (x_2, y_2); ...; (xm, ym)}, onde $x \in X, y \in [-1, 1]$

E um modelo de aprendizado fraco *A*

Para *t = 1, 2, ..., T*

(1) Construir Domínio D_t sobre $\{x_1, x_2, ..., x_m\}$

(2) Executar A sobre D_t sobre produzindo H_t: X → Y

(3) Seleciona modelo com menor erro

$\varepsilon_t = P_{x_i \sim D_t}(h_t(x_i) \neq y_i)$, erro de h_t sobre D_t.

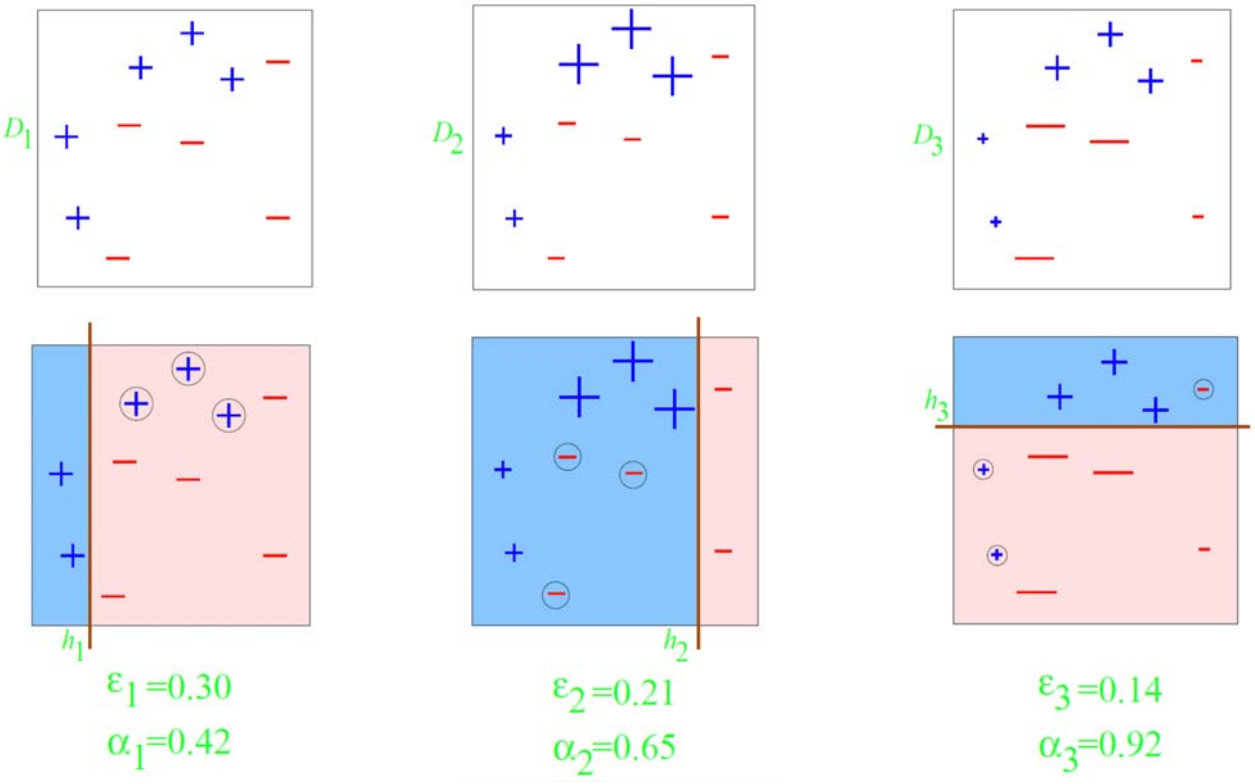
(3) Saída: $H = sign(\sum_{t=1} \alpha_t h_t(x))$

Características do Adaboost

- Pode usar qualquer classificador fraco.
- É rápido, pois faz apenas uma passada na base a cada iteração.
- Mudança de mentalidade: O objetivo é encontrar um classificador que seja marginalmente melhor que adivinhação.
- Adaboost basicamente atribui pesos diferenciados a cada modelo de classificação

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

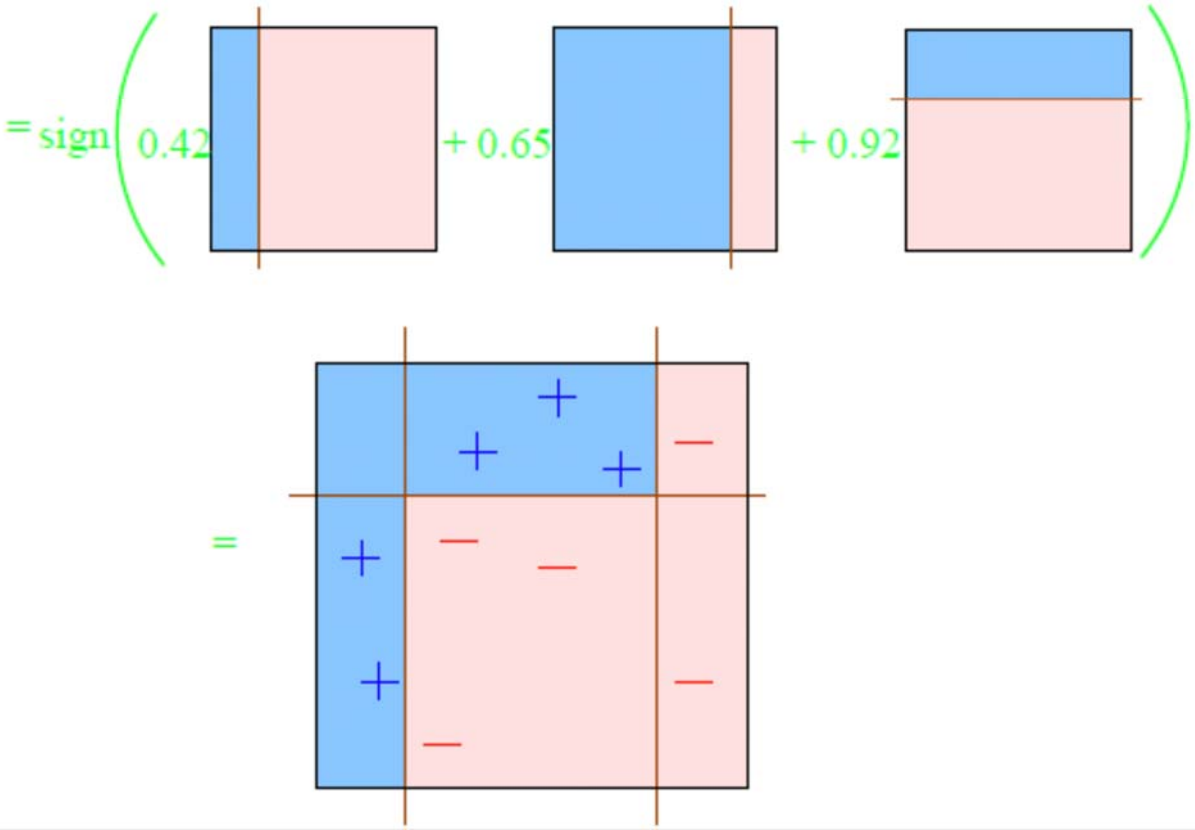
Adaboost: exemplo



Extraído de: Machine Learning, 10-601, Spring 2015, Carnegie Mellon University, Tom Mitchell and Maria-Florina Balcan

Adaboost: exemplo

H_{final}



Exemplo: Base de dados Sonar (UCI, Scott E. Fahlman)

PROBLEMA: Baseado em dados de Sonar, prever se é rocha ou mina.

- 208 exemplos.
- 60 atributos numéricos.

RESULTADO: árvore de decisão

	true Rocha	true Mina	class precision
pred. Rocha	75	7	91.46%
pred. Mina	22	104	82.54%
class recall	77.32%	93.69%	

accuracy: 86.06%
precision: 82.54% (positive class: Mina)
recall: 93.69% (positive class: Mina)

Exemplo: Base de dados Sonar (UCI, Scott E. Fahlman)

RESULTADO: AdaBoost com Árvore de Decisão, 5 modelos

	true Rocha	true Mina	class precision
pred. Rocha	92	4	95.83%
pred. Mina	5	107	95.54%
class recall	94.85%	96.40%	

accuracy: 95.67%
precision: 95.54% (positive class: Mina)
recall: 96.40% (positive class: Mina)

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Exemplo: Base de dados Sonar (UCI, Scott E. Fahlman)

RESULTADO: AdaBoost com Árvore de Decisão, 6 modelos

	true Rocha	true Mina	class precision
pred. Rocha	97	0	100.00%
pred. Mina	0	111	100.00%
class recall	100.00%	100.00%	

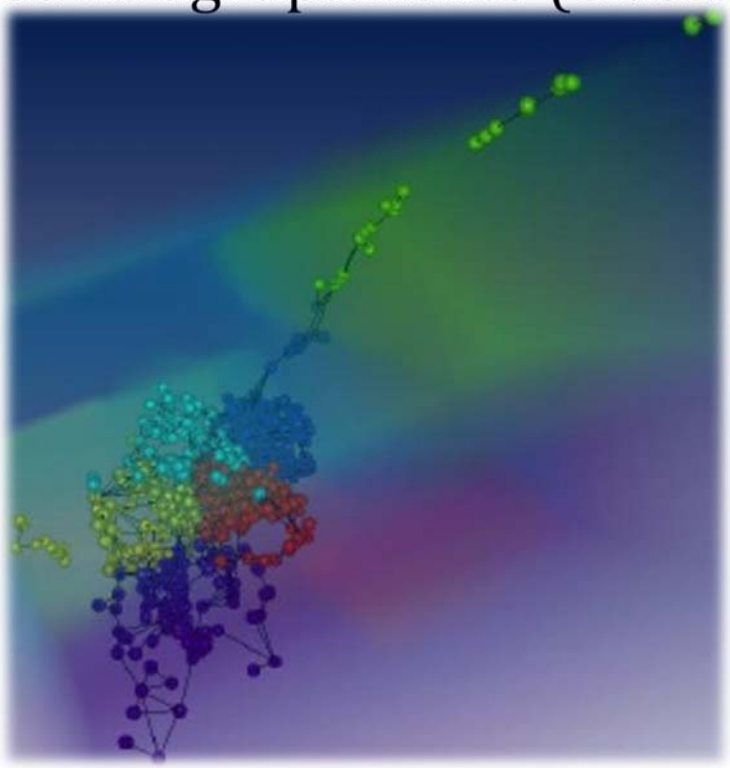
accuracy: 100.00%
precision: 100.00% (positive class: Mina)
recall: 100.00% (positive class: Mina)

Resumo sobre Boosting

- Rápido, mas não tanto quando comparado com os outros métodos.
- Simples e fácil de programar.
- Pode combinar com qualquer algoritmo de treinamento.
- Tende a evitar o *overfitting*

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Algoritmo de mineração de dados: Análise de agrupamento (*Clustering)*



Extraído de Dzwinel, et. al. Cluster Analysis, Data-Mining, Multi-dimensional Visualization of Earthquakes over Space, Time and Feature Space, Earth and Planetary Sci. Letters, August, 2003

Análise de agrupamento: *Clustering*

Cluster

- Coleção de objetos que são similares uns aos outros (de acordo com algum critério de similaridade pré-fixado) e dissimilares a objetos pertencentes a outros clusters.

Análise de cluster (clustering)

- Separa os objetos em grupos com base na similaridade, e em seguida atribuir rótulos a cada grupo.

Aplicações

- Distribuição e pré-processamento de dados.
- Proc. de imagens (segmentação); economia; marketing.
- WWW (Classificação de documentos, padrões de acesso)
- Agricultura (áreas de uso de terra); planejamento de cidades (agrupar casas de acordo com tipos, valores e localização).

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Análise de agrupamento: *Clustering*

- Qualidade do resultado depende da medida da similaridade usada pelo método.
- Requisitos desejáveis:
  - Escalabilidade.
  - Trata diferentes tipos de atributos.
  - Clusters com forma arbitrárias.
  - Mínimo conhecimento do domínio.
  - Resiliência: valores extremos; ruídos; ordem de processamento.
  - Interpretabilidade

Análise de agrupamento: medidas de similaridade e distância

- Algoritmos de agrupamento dependem de uma medida de similaridade ou de distância.

Similaridade

- Medida numérica que identifica o quanto dois objetos são parecidos
- O valor é mais alto quanto mais semelhantes os objetos são
- É comum estar entre a faixa de valores [0,1] (normalizado)

Distância (ex., dissimilaridade)

- Medida numérica que identifica o quanto dois objetos são diferentes
- Valores menores indicam objetos mais semelhantes
- Dissimilaridade mínima é normalmente 0
- Limite superior pode variar.

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Análise de agrupamento: medidas de similaridade e distância

- Dados são representados como um vetor de características ("*feature vectors*")

Tabela de empregados

ID	Gênero	Idade	Salário
1	F	27	19.000
2	M	51	64.000
3	M	52	100.000
4	F	33	55.000
5	M	45	45.000

Vetor de características do Empregado 2:
<M, 51, 64000.0>

Frequência de termos num Documento

	T1	T2	T3	T4	T5	T6
Doc1	0	4	0	0	0	2
Doc2	3	1	4	3	1	2
Doc3	3	0	0	0	3	0
Doc4	0	1	0	3	0	0
Doc5	2	2	2	3	1	4

Vetor de características do Doc 4:
<0, 1, 0, 3, 0, 0>

Análise de agrupamento: medidas de similaridade e distância

- Condições para função de distância métrica d para quaisquer objetos i; j; k:
  - $d(i,j) \geq 0$ (1)
  - $d(i,i) = 0$ (2)
  - $d(i,j) = d(j,i)$ (simetria) (3)
  - $d(i,j) \leq d(i,k) + d(k,j)$ (desigualdade triangular) (4)

onde:

- (1) todos os elementos da matriz de dissimilaridade são não-negativos.
- (2) diagonal da matriz de dissimilaridade é formada por zeros.
- (3) matriz de dissimilaridade é simétrica em relação à diagonal. Existem distâncias assimétricas (exemplo: problema do caixeiro viajante).
- (4) requisito para espaços métricos; existem espaços não métricos (exemplo: julgamentos subjetivos)

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Análise de agrupamento: estruturas de dados

Matriz de dados

- Colunas são atributos.
- Linhas são objetos.
- Cada linha é a representação vetorial de um registro.
- *N* registros e *P* atributos: matriz *N x P*

$$\begin{bmatrix} x_{11} & \dots & x_{1f} & \dots & x_{1p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{i1} & \dots & x_{if} & \dots & x_{ip} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{n1} & \dots & x_{nf} & \dots & x_{np} \end{bmatrix}$$

Matriz de distância (simétrica)

- *N* registros: matriz *N x N*
- distância entre 2 elementos
- Matriz triangular

$$\begin{bmatrix} 0 & & & & \\ d(2,1) & 0 & & & \\ d(3,1) & d(3,2) & 0 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \\ d(n,1) & d(n,2) & \dots & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

Medidas de similaridade: variáveis binomiais ou binárias

- Atributos de tipo binário ou booleano só têm dois valores : 1 ou 0, sim ou não, alto ou baixo.
- Tratar como valores numéricos pode levar a análises errôneas.

Amostra	Objeto j		
	Valor	1	0
Objeto i	1	a	b
	0	c	d

  - a é o número de atributos com valor 1 para i e j
  - b é o número de atributos com valor 1 para i e 0 para j
  - c é o número de atributos com valor 0 para i e 1 para j
  - d é o número de atributos com valor 0 para i e 0 para j

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Medidas de similaridade: variáveis binomiais ou binárias

- Valores casados: a + d
- Valores distintos: b + c
- Numero de atributos: a + b + c + d

- Medida de distância (atributos simétricos) $d(i, j) = \frac{b + c}{a + b + c + d}$
  - Exemplo: gênero, faixa etária

- Medida de distância (atributos assimétricos) $d(i, j) = \frac{b + c}{a + b + c}$
  - Exemplo: compra de produto, resultado de teste

- Coeficiente de Jaccard (similaridade para variáveis binárias assimétricas)

$$sim_{Jaccard}(i, j) = \frac{a}{a + b + c}$$

Medidas de similaridade: variáveis binomiais ou binárias

Exemplo:

Nome	Gênero	Febre	Tosse	Teste 1	Teste 2	Teste 3	Teste 4
João	M	S	N	S	N	N	N
Maria	F	S	N	S	N	S	N
José	M	S	S	N	N	N	N

- Gênero é um atributo simétrico
- Os outros atributos são assimétricos
- Seja S = 1, e N = 0

$$d(joão, maria) = \frac{0+1}{2+0+1} = 0.33$$
$$d(joão, josé) = \frac{1+1}{1+1+1} = 0.67$$
$$d(maria, josé) = \frac{1+2}{1+1+2} = 0.75$$

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Medidas de similaridade: variáveis binomiais ou binárias

Distância	Fórmula	Propriedade
Hamming (Manhattan)	b+c	não normalizada
Euclidiana	sqrt(b+c)	não normalizada
Chebyshev discreto	max(b; c)	não normalizada
Soergel	(b+c)/(b+c+d)	normalizada
Hamming média	(b+c)/(a+b+c+d)	normalizada
Euclidiana média	sqrt((b+c)/(a+b+c+d))	normalizada

Medidas de similaridade: variáveis binomiais ou binárias

Similaridade	Fórmula	Propriedade
Russel & Rao	a/(a+b+c+d)	normalizada
Jaccard	a/(a+b+c)	normalizada
Rogers & Tanimoto	(a+d)/(a+2*(b+c)+d)	normalizada
Hamann	(a (b + c) + d)=(a + b + c + d)	normalizada
Dice	2*a/(2*a+b+c)	normalizada
Match simples	(a+d)/(a+b+c+d)	normalizada
McConnoughy	(a*a - b*c) / sqrt((a+b)*(a+c))	normalizada

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Medidas de similaridade: variáveis nominais ou categóricas

- Generalização de uma variável binária em que ela pode ter mais de dois valores.
  - Exemplo: Temperatura = {alta, média, baixa}.

Método 1: Casamento (matching) Simples

- m: num de matches, p: num total de variáveis

$$d(i, j) = \frac{p - m}{p}$$

Método 2: Converter para o formato de planilha binomial

- Para cada atributo A, criar P atributos binários para os P estados nominais (categorias) de A
- Exemplo: A_1: Temp = alta; A_2: Temp = média; A_3: Temp = baixa

Medidas de similaridade: variáveis categóricas ordinais

- A ordem é importante, exemplo: rank
- Pode ser tratada como *interval-scaled*
- Trocar x_{if} pelo seu rank

$$r_{if} \in \{1, \ldots, M_f\}$$

  - mapear a faixa (range) de cada variável em um intervalo [0, 1]

$$z_{if} = \frac{r_{if} - 1}{M_f - 1}$$

  - Computar a dissimilaridade usando método para variáveis contínuas comuns

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Medidas de similaridade: variáveis contínuas

- Qualquer distância métrica pode ser utilizada.
- Mais importantes são classes de distâncias de Minkowski:

$$d(i,j) = \sqrt[q]{(|x_{i_1} - x_{j_1}|^q + |x_{i_2} - x_{j_2}|^q + \ldots + |x_{i_p} - x_{j_p}|^q)}$$

- Se q = 1, d é a distância de Manhattan
- Se q = 2, d é a distância Euclidiana

$$d(i,j) = \sqrt{(|x_{i_1} - x_{j_1}|^2 + |x_{i_2} - x_{j_2}|^2 + \ldots + |x_{i_p} - x_{j_p}|^2)}$$

Medidas de similaridade: Normalização e padronização de dados numéricos

Z-score:

$$z = \frac{x - \mu}{\sigma}$$

- x: valor, μ: média, σ: desvio padrão
- Distância entre o dado e a população em termos do desvio padrão
- Negativo quando abaixo da média, e positivo caso acima

Normalização Min-Max:

$$x'_i = \frac{x_i - \min x_i}{\max x_i - \min x_i}(max_{novo} - min_{novo}) + min_{novo}$$

ID	Gênero	Idade	Salário
1	F	27	19.000
2	M	51	64.000
3	M	52	100.000
4	F	33	55.000
5	M	45	45.000

ID	Gênero	Idade	Salário
1	1	0.00	0.00
2	0	0.96	0.56
3	0	1.00	1.00
4	1	0.24	0.44
5	0	0.72	0.32

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Medidas de similaridade baseadas em vetor

- Em alguns casos, medidas de distância provêm visão distorcida
  - Ex. Quando o dado é muito esparso e 0´s no vetor não são significativos
  - Nesses casos, melhor utilizar medidas de distância baseada em vetor

$$X = \langle x_1, x_2, \cdots, x_n \rangle \quad Y = \langle y_1, y_2, \cdots, y_n \rangle$$

Similaridade de cosseno (produto escalar normalizado)

- Produto escalar de dois vetores: $sim(X,Y) = X \bullet Y = \sum_i x_i \times y_i$
- A norma do vetor *X* é: $\|X\| = \sqrt{\sum_i x_i^2}$
- A similaridade de cosseno é: $sim(X,Y) = \frac{X \bullet Y}{\|X\| \times \|y\|} = \frac{\sum_i (x_i \times y_i)}{\sqrt{\sum_i x_i^2} \times \sqrt{\sum_i y_i^2}}$

Medidas de similaridade baseadas em vetor

- Exemplo:

  X = <2, 0, 3, 2, 1, 4>

$$\|X\| = \sqrt{\sum_i x_i^2}$$

  ||X|| = SQRT(4+0+9+4+1+16) = 5.83

  X* = X / ||X|| = <0.343, 0, 0.514, 0.343, 0.171, 0.686>

  - Note que ||X*|| = 1
  - Dividir pela norma torna o vetor de comprimento unitário
  - Similaridade de cosseno mede o ângulo de dois vetores de comprimento unitário (ex., a magnitude dos vetores é ignorada).

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Exemplo: Similaridade entre documentos

- Considere a seguinte matriz documento-termo

	T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8
Doc1	0	4	0	0	0	2	1	3
Doc2	3	1	4	3	1	2	0	1
Doc3	3	0	0	0	3	0	3	0
Doc4	0	1	0	3	0	0	2	0
Doc5	2	2	2	3	1	4	0	2

ProdutoEscalar(Doc2,Doc4) = <3,1,4,3,1,2,0,1> * <0,1,0,3,0,0,2,0>
0 + 1 + 0 + 9 + 0 + 0 + 0 + 0 = 10

Norma(Doc2) = SQRT(9+1+16+9+1+4+0+1) = 6.4
Norma(Doc4) = SQRT(0+1+0+9+0+0+4+0) = 3.74

Cosseno(Doc2, Doc4) = 10 / (6.4 * 3.74) = 0.42

Medidas de similaridade: Correlação

- Em casos onde pode haver uma variância média alta entre os dados (ex. avaliação de filmes), o coeficiente de correlação de Pearson é a melhor opção

Correlação de Pearson

$$coor(x, y) = \frac{cov(x, y)}{stdev(x) \cdot stdev(y)}$$

- Normalmente usado em sistemas de recomendação baseados em filtragem colaborativa

Principais métodos de clusterização

Métodos baseados em particionamento:

- Dada uma base de dados de *n* elementos e um número de clusters *k <= n*.

Procedimento:

  - cria-se uma partição inicial aleatória de *k* partes
  - num processo iterativo, os elementos das partes são realocados para outras partes de tal modo a melhorar o particionamento.

Métodos baseados em densidade:

- Adequados para descobrir clusters de formato arbitrário.
  - clusters são regiões densas de objetos no espaço de dados separadas por regiões de baixa densidade (representando ruídos).
  - região densa possui uma x-vizinhança de cada ponto (onde x é um parâmetro dado) contém pelo menos x pontos.

Principais métodos de clusterização

Métodos Hierárquicos aglomerativos:

- inicialmente, cada elemento da base forma um cluster.
- a cada iteração pares de clusters mais próximos são aglutinados num único cluster.
- termina quando número de clusters k é atingido.
- Exemplo: AGNES (*AGlomerative NESting*).

Métodos Hierárquicos divisórios:

- inicialmente, cria-se um único cluster composto por toda a base.
- a cada iteração os clusters são subdivididos em duas partes.
- termina quando número de clusters k é atingido.
- Exemplo: DIANA (*DIvisive ANAlysis*).

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Algoritmo de Particionamento: K-means

Algoritmo k-means (MacQueen'67) (ou *K-médias*) é um dos mais usados

- cada cluster é representado por um ponto central
- informa-se a quantidade (*K*) de clusters desejada
- variações: k-medóides, k-modas, k-medianas
- requer uma medida de distância, e a possibilidade de se calcular médias entre os objetos
- pode encontrar mínimos locais: solução é o *random restart*
- pode entrar em loop infinito: solução é limitar número de iterações

Algoritmo de Particionamento: K-means

Procedimento:

(1) Escolhe-se arbitrariamente *k* objetos $\{p_1;:::;p_k\}$ da base.

– Estes objetos serão os centros de *k* clusters

(2) Para cada objeto O diferente da base calcula-se a distância entre O e cada um dos p_i's

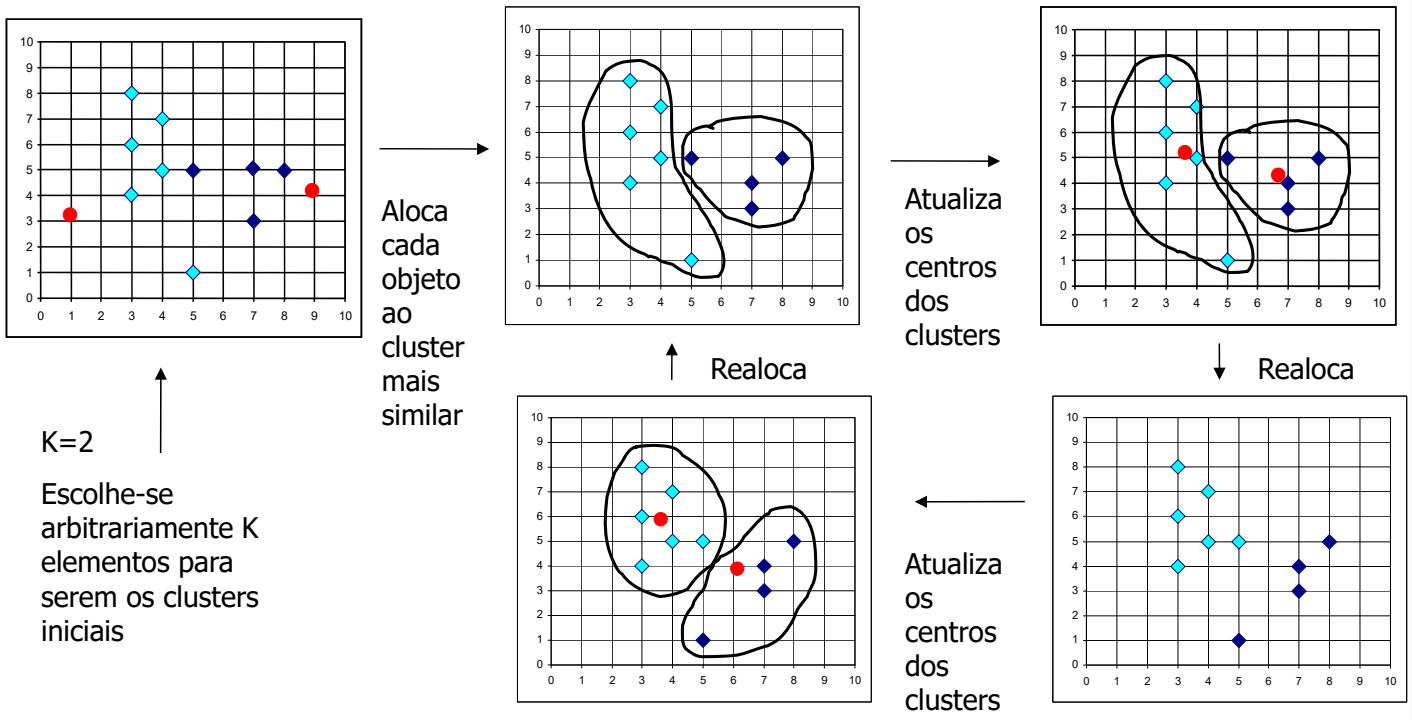
– O objeto O passa a integrar o cluster representado por p_i com menor distância

(3) Calcula-se a média dos elementos de cada cluster, isto é, o seu centro de gravidade. Este ponto será o novo representante do cluster.

(4) Em seguida, volta para o passo 2 até que nenhuma mudança ocorra, isto é, nenhum objeto é realocado para outro cluster.

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Algoritmo de Particionamento: K-means Exemplo (loop infinito)



Algoritmo de Particionamento: K-means Exemplo

Base de dados = {2,4,10,12,3,20,30,11,25}, k=2

Centros iniciais, escolhidos aleatoriamente: m1 = 3, m2 = 4

Primeira iteração

- K1 = {2, 3}; m1 = 2.5; K2 = {4, 10, 12, 20, 30, 11, 25}; m2 = 16

Segunda iteração

- K1 = {2, 3, 4}; m1 = 3; K2 = {10, 12, 20, 30, 11, 25}; m2 = 18

Terceira iteração

- K1 = {2, 3, 4, 10}; m1 = 4.75; K2 = {12, 20, 30, 11, 25}; m2 = 19.6

Quarta iteração

- K1 = {2, 3, 4, 10, 11, 12}; m1 = 7; K2 = {20, 30, 25}; m2 = 25

Quinta iteração

- K1 = {2, 3, 4, 10, 11, 12}; m1 = 7; K2 = {20, 30, 25}; m2 = 25
- Sem alteração em relação à quarta iteração, fim do processamento

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Algoritmos hieráquicos aglomerativos: vizinho mais próximo

- "Nearest Neighbour" ou Distância do Vizinho Mais Próximo
- Também conhecido como "*Single Linkage Method*".

(1) Clusters inicialmente consistindo de um indivíduo.

(2) Grupos são fundidos de acordo com a distância entre os membros mais próximos.

(3) Cada fusão decrementa por um o número de clusters.

Algoritmos hieráquicos aglomerativos: vizinho mais próximo

- Suponha que cinco indivíduos devem ser classificados. Para tal, segue a matriz de distância D1, entre os indivíduos

$$D_1 = \begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{array} \\ \begin{bmatrix} 0 & 2 & 6 & 10 & 9 \\ 2 & 0 & 5 & 9 & 8 \\ 6 & 5 & 0 & 4 & 5 \\ 10 & 9 & 4 & 0 & 3 \\ 9 & 8 & 5 & 3 & 0 \end{bmatrix} \end{array}$$

- Os indivíduos 1 e 2 são fundidos (menor distância) e formam um cluster.

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Algoritmos hieráquicos aglomerativos: vizinho mais próximo

- A distância entre este cluster (1,2) e os três indivíduos restantes (3, 4 e 5) são obtidos da matriz da seguinte forma:

$$d_{(1,2)3} = \min\{d_{1,3}, d_{2,3}\} = d_{2,3} = 5$$

$$d_{(1,2)4} = \min\{d_{1,4}, d_{2,4}\} = d_{2,4} = 9$$

$$d_{(1,2)5} = \min\{d_{1,5}, d_{2,5}\} = d_{2,5} = 8$$

$$D_2 = \begin{array}{c} \\ (1,2) \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} \_\_\_ & (1,2) & 3 & 4 & 5 \end{array} \\ \begin{bmatrix} 0 & 5 & 9 & 8 \\ 5 & 0 & 4 & 5 \\ 9 & 4 & 0 & 3 \\ 8 & 5 & 3 & 0 \end{bmatrix} \end{array}$$

Algoritmos hieráquicos aglomerativos: vizinho mais próximo

- Na nova matriz, a menor distância é 3, em (4,5) e, portanto serão fundidos para formar um segundo grupo.

$$d_{(1,2)(4,5)} = \min\{d_{1,4}, d_{1,5}, d_{2,4}, d_{2,5}\} = d_{2,5} = 8$$

$$d_{(4,5)3} = \min\{d_{3,4}, d_{3,5}\} = d_{3,4} = 4$$

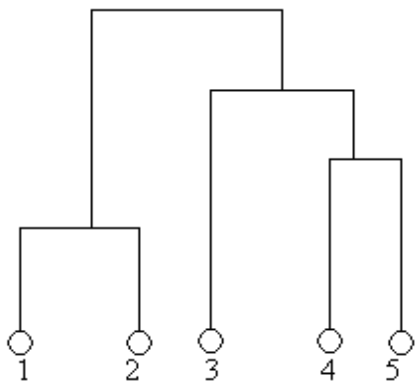
- Podemos representar os valores obtidos na matriz .

$$D_3 = \begin{matrix} \\ 3 \\ \\ \end{matrix} \begin{matrix} (1,2) \\ \\ (4,5) \end{matrix} \begin{bmatrix} 0 & 5 & 8 \\ 5 & 0 & 4 \\ 8 & 4 & 0 \end{bmatrix}$$

DIRETORIA DE EDUCAÇÃO CONTINUADA
IEC • PREPES PUC Minas

Algoritmos hieráquicos aglomerativos: vizinho mais próximo

- A menor distância agora é do individuo 3, que é adicionado ao cluster contendo os indivíduos 4 e 5.
- Finalmente, a fusão dos dois grupos ocorre e um único cluster contendo os cinco indivíduos é gerado.
- A seguir o dendrograma detalhando estas fusões



Considerações entre classificação e cluterização

Classificação	Clusterização
Há um atributo alvo e os demais são previsores.	Não há atributos especiais.
Parte do problema consiste em determinar automaticamente a importância dos atributos previsores.	A importância de cada atributo é geralmente considerada equivalente à dos demais.
Há medidas objetivas para medir a qualidade da classificação (exemplo: taxa de acerto).	Ë difícil medir a qualidade de clustering.
Classificação é usada principalmente para previsão e controles.	Clustering é usado principalmente para exploração, descrição e sumarização de dados.
Existem várias técnicas e combinações de algoritmos.	Existem várias técnicas e combinações de algoritmos.