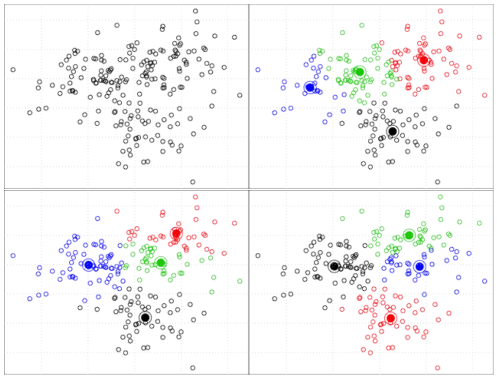
Atividade 4: K-Means

K-Means é um método de quantização vetorial que tem como objetivo separar amostras, de acordo com suas características . Este trabalho apresenta um implementação do método em linguagem Java 1.8, para a disciplina de tópicos especiais em aprendizagem.

Introdução

k-Means clustering é um método de quantização vetorial que tem como objetivo separar amostras, de acordo com suas características, em um determinado número de clusters. Para alcançar esse objetivo, o algoritmo inicia com K pontos (que devem ser selecionados pelo usuário) centrais de clusters e executa dois passos. O primeiro consiste em separas um conjunto de amostras que estejam mais próximas a um ponto central, formando assim os clusters. O segundo ponto calcula a média das amostras que estão em cada cluster para formar um novo ponto central. O processo é repetido até que o problema convirja.



Métodos

Kmeans matematicamente, para um conjunto k de centros m 1 , ..., m k a formula para a etapa de atribuição se da por:

$$S_i^{(t)} = \{x_p : \|x_p - m_i^{(t)}\|^2 \leq \|x_p - m_j^{(t)}\|^2 \forall j, 1 \leq j \leq k\}$$

As médias são calculadas a partir da fórmula na atualizações**:**

$$m_i^{(t+1)} = \frac{1}{|S_i^{(t)}|} \sum_{x_j \in S_i^{(t)}} x_j$$

Desenvolvimento

Os métodos foram implementados acertivamente para os problema propostos. Diferente métodos foram criados que em conjunto implementam o método K-means.

Matriz de Dispersão

```
for (int c=0; c<ClassVector.size(); c++){

      int N = ClassVector[c].size();

      Sb = this->somaMatrix( Sb,

this->multiplicaMatrix( N,

this->multiplicaMatrix( this->transpose(this->subMa

trix(meanSample, meanClass[c])),
```

```
this->transpose(this->transpose(this->subMatrix(me
anSample, meanClass[c])))
            )
          )
       );
   }
```

```
if(dist < min_dist){
                min_dist = dist;
                id_cluster_center = i;
                                        }
                                    }
```

K-Means

```
for(int i = 0; i < total_values; i++){
sum += pow(clusters[0].get_central_value(i) -
point.get_value(i),2.0);}
                                min_dist = sqrt(sum);

for(int i = 1; i < K; i++){
                double dist;
                Sum = 0.0;
for(int j = 0; j < total_values; j++)
sum += pow(clusters[i].get_central_value(j) - point.get_value(j),
2.0);
dist = sqrt(sum);
```

Calculo da Matriz Inversa

```
public static double[][] calculaInversa(double[][] matriz, int
tamanho) {
    double[][] inversa = new double[tamanho][tamanho];
    double[][] adjunta = calculaAdjunta(matriz, tamanho);
    double determinante = calculaDeterminante(matriz,
tamanho);
    for (int i = 0; i < tamanho; i++){
        for (int j = 0; j < tamanho; j++){
            inversa[i][j] = (1/determinante) * adjunta[i][j];
        }
    }
    return inversa;
}
```

Calculo da Matriz Transposta

```
public static double[][] calculaTransposta(double[][] matriz, int

tamanho) {

    double[][] transp = new double[tamanho][tamanho];

    for (int i = 0; i < tamanho; i++) {

        for (int j = 0; j < tamanho; j++) {

            transp[j][i] = matriz[i][j];

        }

    }

    return transp;

}
```

Resultados

Abaixo estão representados de forma matricial os resultados obtidos a partir dos dados de exemplo de entrada.

Exemplo retirado do Slide
Cluster 1
Valor do cluster: 2, 62857 6, 5
total de pontos: 7

Cluster 2
Valor do cluster: 1, 36667 2, 15
total de pontos: 6

Cluster 3
Valor do cluster: 4, 775 3, 05
total de pontos: 4

Iris Dataset
Cluster 1

Valor do cluster: [5, 88 2,74 4,39 1,43]
iris-versicolor: 47
iris-virginica: 14
iris-setosa: 0
total de pontos: 61

Cluster 2

Valor do cluster: [6, 86 3,08 5,72 2,05]
iris-versicolor: 3
iris-virginica: 36
iris-setosa: 0
total de pontos: 39

Cluster 3

Valor do cluster: [5, 01 3,42 1,46 0,24]
iris-versicolor: 0
iris-virginica: 0
iris-setosa: 50
total de pontos: 50

Seeds Dataset
Cluster 1

Valor do cluster: [11, 9644 13, 2748 0, 8522 5, 22929 2, 872924, 75974 5, 08852]
Canadian: 68
Kama: 9

Rosa: 0
total de pontos: 77

Cluster 2
Valor do cluster: [14, 6485 14, 4604 0, 879167 5, 56378 3, 2779 2, 64893 5, 19232]
Canadian: 2
Kama: 60
Rosa: 10
total de pontos: 72

Cluster 3
Valor do cluster: [18, 7218 16, 2974 0, 885087 6, 20893 3, 72267 3, 60359 6, 0661]
Canadian: 0
4Kama: 1
Rosa: 60
total de pontos: 61
Lenses Dataset

Cluster 1
Valor do cluster: [1, 46154 1, 46154 1, 07692 3]
hard-lenses: 4
soft-lenses: 4
no-lenses: 5
total de pontos: 13

Cluster 2
Valor do cluster:[2 2 2 3]
hard-lenses: 0
soft-lenses: 1
no-lenses: 1
total de pontos: 2

Cluster 3
Valor do cluster: [1, 44444 1, 44444 2 1, 55556]
hard-lenses: 4
soft-lenses: 3
no-lenses: 2
total de pontos: 9

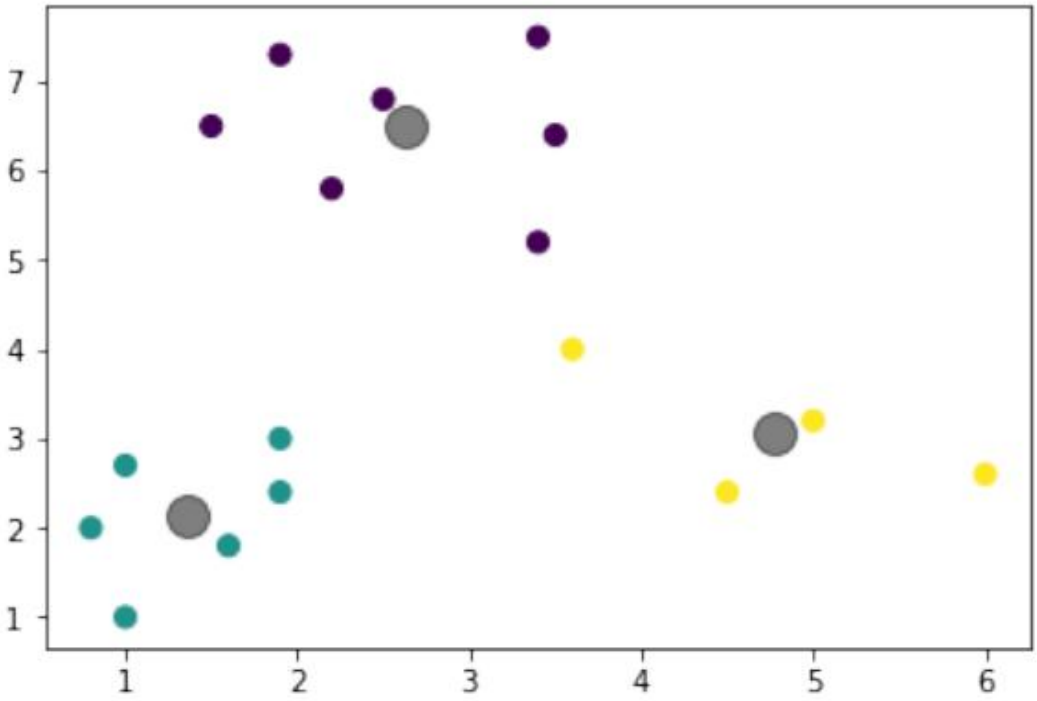


Figura 1. Resultado plotado

Conclusão

A partir do algoritmo implementado foi possível executar os exemplos indicados com sucesso, absorvendo os conceitos teóricos e as aplicações.

Em sua aplicação sobre as bases utilizadas, foi possível separar em classes os dados, como mostrado no gráfico plotado, de forma satisfatória. Os exemplos comparados aos obtidos com PCA, sendo visualmente bem próximos quando comparados, porém, por conta da não propriedade de redução de dimensionalidade que ocorre no PCA, os resultados finais são mais fieis utilizando-se o método K-means. Por outro lado, este fato não indica que o K-means é sempre melhor em todos os casos de problemas, onde ambos algoritmos podem ser considerados, levando-se em conta os requisitos do problema, como velocidade de execução e fidelidade dos dados.

Referências

1. Trevor Hastie, Robert Tibshirani, and Jerome Friedman. The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction. Springer, 2001.

2. Introduction to K-means Clustering, 2016 (Acesso em 11 de outubro de 2017) https://www.datascience.com/blog/k-means-clustering