03/03/2021

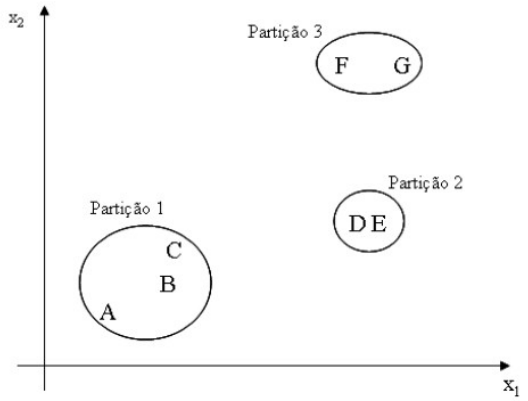
Primeiro Trabalho de Inteligência Artificial e Sistemas Inteligentes

Prof. Flávio Miguel Varejão

I. Descrição do Problema

Agrupamento de dados multidimensionais é um dos problemas mais comuns na área de aprendizado de máquina. Esse problema consiste em dividir um conjunto de pontos em um espaço multidimensional em um determinado número pré-especificado de grupos de modo que os pontos pertencentes a um mesmo grupo estão mais relacionados entre si e menos relacionados em relação aos pontos associados aos outros grupos.

A figura abaixo ilustra um exemplo de agrupamento no qual os sete pontos {A, B, C, D, E, F, G} foram agrupados em três grupos, indicando que os padrões {A, B, C} são mais similares entre si do que em relação aos demais, assim como os padrões {D, E} e {F, G}.



Formalmente, dado um conjunto de dados X com N pontos $\{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N\}$, sendo que cada ponto $\mathbf{x_i} = [x_{i1}, x_{i2}, \ldots, x_{id}]_t$ possui d coordenadas (dimensões), deseja-se encontrar K grupos $\{C_1, \ldots, C_K\}$, de tal forma que as seguintes condições sejam atendidas:

- $C_j \neq \emptyset,\ j = 1, \ldots, K$
- $\bigcup_{j=1}^{K} C_j = X$
- $C_i \cap C_j = \emptyset,\ i \neq j,\ i, j = 1, \ldots, K$

Além de atender essas condições, a qualidade da divisão em grupos deve ser avaliada. Neste trabalho o critério de qualidade utilizado será a soma das distâncias euclidianas quadradas (SSE) entre os pontos pertencentes a cada um dos grupos:

$$SSE = \sum_{j=1}^{K} \sum_{\mathbf{x_i} \in C_j} \|\mathbf{x_i} - \mu_\mathbf{j}\|^2$$

onde $\| x_i - \mu_j \|$ é a distância Euclidiana entre o ponto x_i e o centróide μ_j.

O centróide $\mu_\mathbf{j} = [\mu_{j1}, \mu_{j2}, \ldots, \mu_{jd}]_t$ é o ponto representativo do grupo C_j e é calculado como o centro de massa do grupo:

$$\mu_{\mathbf{j}} = \frac{1}{n_j} \sum_{\mathbf{x_i} \in C_j} \mathbf{x_i}$$

onde n_j é o total de pontos pertencentes ao grupo C_j.

A distância Euclideana $|| x_i - \mu_j ||$ é calculada pela expressão:

$$|| x_i - \mu_j || = \sqrt{ ((x_{i1} - \mu_{j1})^2 + (x_{i2} - \mu_{j2})^2 + ... + (x_{id} - \mu_{jd})^2}$$

Neste problema busca-se a distribuição de pontos em grupos que minimiza a SSE.

Este trabalho consiste em realizar uma comparação experimental entre um conjunto pré-definido de metaheurísticas aplicadas ao problema de agrupamento de dados. As metaheurísticas escolhidas são: Simulated Annealing, Genetic Algorithm e GRASP. O procedimento experimental será dividido em duas etapas: a primeira etapa consiste no ajuste de hiperparâmetros das metaheurísticas e a segunda etapa consiste na comparação das metaheurísticas considerando apenas os valores dos hiperparâmetros selecionados na primeira etapa. Os problemas utilizados para a etapa de treino são necessariamente distintos dos problemas utilizados na etapa de teste. Para limitar o tempo de execução total dos experimentos, cada execução para a resolução de um problema deve ser limitada a um tempo máximo.

1. *Treino*

Na primeira etapa da experimentação será necessário realizar uma busca em grade (grid search) considerando os seguintes valores de hiperparâmetros de cada metaheurística:

Simulated Annealing: {To: [500, 100, 50]; alfa: [0.95, 0.85, 0.7]; numIter (número de iterações): [350, 500]}

GRASP: {numIter (número de iterações): [20, 50, 100, 200, 350, 500], numBest (numero de melhores elementos): [5, 10, 15] }

Genetic Algorithm: {Tamanho da população: [10, 30, 50], taxa de crossover: [0.75, 0.85, 0.95], taxa de mutação: [0.10, 0.20]}

A condição de parada das metaheurísticas deve ser uma combinação entre algum critério definido na própria metaheurística e o tempo máximo de execução de 1 segundo.

O pseudo-código seguinte mostra os passos a serem realizados para o ajuste de hiperparâmetros das metaheurísticas:

```
Para cada método faça
    Para cada problema de treino faça
        Para cada configuração de hiperparâmetros faça
            Executar 10 vezes e obter média e tempo médio
        fim-se
        Padronizar resultados da média com z-score
        Fazer ranqueamento
```

fim-se

Obter média, desvio padrão e ranqueamento médio da configuração

Obter melhor configuração por média e por ranqueamento médio do método

Obter as 5 melhores resultados de médias padronizadas e os tempos correspondentes das configurações de cada método

Obter ranqueamento obtido por cada configuração de método em cada problema e seu ranqueamento médio

fim-se

Retornar tabela com melhor configuração de cada método por média e ranqueamento médio

2. *Teste*

A segunda etapa da experimentação consiste em avaliar as metaheurísticas no conjunto de problemas de teste com os valores de hiperparâmetros selecionados na etapa de treino.

O pseudo-código seguinte mostra os passos a serem realizados para avaliação e comparação das metaheurísticas:

Para cada problema de teste faça

Para cada método com melhor configuração faça

Executar 20 vezes e obter média e tempo médio de execução

fim-se

Executar o método k-means 20 vezes e obter média e tempo médio de execução

Padronizar resultados da média com z-score

Fazer ranqueamento

fim-se

Obter média padronizada e desvio padrão, tempos correspondentes e ranqueamento médio de cada método

Realizar testes estatísticos para comparar os métodos par a par

Usar teste t pareado e wilcoxon

Obter tabela pareada com resultados

Retornar melhor método em geral por média e por ranqueamento médio

3. *Artigo*

Após a realização dos experimentos, um artigo descrevendo todo o processo experimental realizado deverá ser escrito em latex usando o software overleaf. O artigo deve ser estruturado contendo os seguintes componentes:

1. Título

2. Resumo
3. Seção 1. Introdução
4. Seção 2. Descrição do Problema de K Médias
5. Seção 3. Descrição dos Métodos Utilizados
    a. Seção 3.1 Representação do Descritor de Espaço de Estados
    b. Seção 3.2 GRASP
    c. Seção 3.3 Simulated Annealing
    d. Seção 3.4 Genetic Algorithm
6. Seção 4. Descrição dos Resultados dos Experimentos
    a. Seção 4.1 Treino
        i. Apresentação de tabela com os valores dos hiperparâmetros das cinco melhores configuração de cada método
        ii. Apresentação dos bloxplots de média e de tempo de cada método
        iii. Apresentação de tabela com ranqueamento em cada problema e ranqueamento médio de cada método
        iv. Apresentação de tabela com melhor configuração de cada método por média e por ranqueamento médio
        v. Análise dos resultados alcançados
    b. Seção 4.2 Teste
        i. Apresentação da tabela contendo média padronizada, desvio padrão, média e desvio padrão dos tempos de execução de todas os métodos testados
        ii. Apresentação dos bloxplots de média e de tempo de cada método
        iii. Apresentação de tabela contendo os ranqueamentos das métodos para cada problema de teste e o ranqueamento médio
        iv. Apresentar tabela pareada de testes estatíticos com destaque nos pares de métodos onde houve diferença significativas
        v. Apresentar melhor método geral por média e ranqueamento médio
        vi. Análise dos resultados alcançados
7. Seção 5. Conclusões
    a. Análise geral dos resultados
    b. Contribuições do Trabalho
    c. Melhorias e trabalhos futuros
8. Referências Bibliográficas

4. *Informações Complementares*

Os problemas a serem usados para treino e teste estão descritos nos apêndices A e B deste enunciado.

Os gráficos bloxplot requeridos no treino e no teste devem ser gerados usando função específica do pacote seaborn (ver instruções de instalação e uso no apêndice C deste enunciado).

O apêndice D deste enunciado apresenta instruções de instalação e uso do overleaf para a escrita do artigo.

O apêndice E contém instruções de como obter as bases de dados utilizadas no trabalho.

5. *Condições de Entrega*

O trabalho deve ser feito individualmente e submetido pelo sistema da sala virtual até a data limite (24 de março de 2021).

O trabalho deve ser submetido em dois arquivos: um arquivo pdf com o artigo produzido no trabalho e todos os arquivos com código fonte em python utilizados em um arquivo zip. Tanto o arquivo pdf quanto o zip devem possuir o mesmo nome Trab1_Nome_Sobrenome. Note que a data limite já leva em conta um dia adicional de tolerância para o caso de problemas de submissão via rede. Isso significa que o aluno deve submeter seu trabalho até no máximo um dia antes da data limite. Se o aluno resolver submeter o trabalho na data limite, estará fazendo isso assumindo o risco do trabalho ser cadastrado no sistema após o prazo. Em caso de recebimento do trabalho após a data limite, o trabalho não será avaliado e a nota será ZERO. Aluno que receber zero por este motivo e vier pedir para o professor considerar o trabalho não será considerado. Plágio ou cópia de trabalhos serão verificadas automaticamente por sistemas como o moss. Trabalhos em que se configure cópia receberão nota zero independente de quem fez ou quem copiou.

6. Requisitos da implementação

- Modularize seu código adequadamente.
- Crie códigos claros e organizados. Utilize um estilo de programação consistente, Comente seu código.
- Os arquivos do programa devem ser lidos e gerados na mesma pasta onde se encontram os arquivos fonte do seu programa.

Observação importante

Caso haja algum erro neste documento, serão publicadas novas versões e divulgadas erratas em sala de aula. É responsabilidade do aluno manter-se informado, freqüentando as aulas ou acompanhando as novidades na página da disciplina na sala virtual.

Apêndice A. Problemas de Treino

Base de dados Iris - k = [3, 7, 10, 13, 22]
Base de dados Wine - k = [2, 6, 9, 11, 33]

Apêndice B. Problemas de Teste

Base de dados Iris - k = [2, 4, 8, 11, 15, 17, 23, 28, 32, 50]
Base de dados Wine - k = [3, 5, 13, 15, 20, 23, 25, 30, 41, 45]

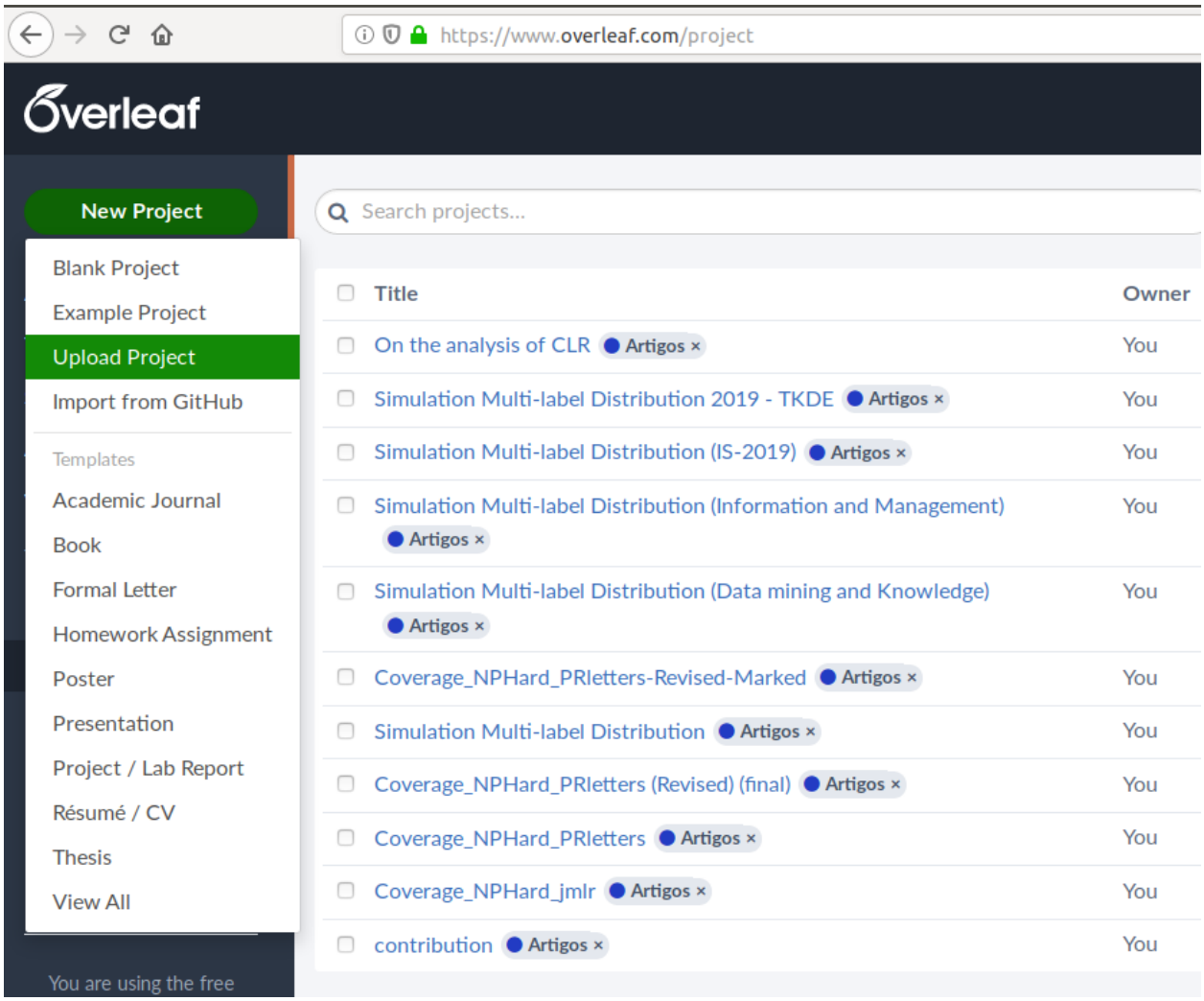
Base de dados Ionosphere - k = [2, 3, 5, 10, 15, 20, 25, 30, 40, 50]

Apêndice C. Boxplots usando seaborn

```
Instruções de instalação para python3:
      sudo apt install python3 python3-pip
      pip3 install seaborn

# arquivo bloxplot.py
# library & dataset
import seaborn as sns
Instruções de instalaçãoimport matplotlib.pyplot as plt

def example1():
      mydata=[1,2,3,4,5,6,12]
      sns.boxplot(y=mydata) # Also accepts numpy arrays
      plt.show()

def example2():
      df = sns.load_dataset('iris')
      #returns a DataFrame object. This dataset has 150 examples.
      #print(df)
      # Make boxplot for each group
      sns.boxplot( data=df.loc[:,:] )
      # loc[:,:] means all lines and all columns
      plt.show()

example1()
example2()

Uso em python3:
      python3 boxplot.py
```

Apêndice D. Artigo em Latex usando Overleaf

Juntamente com este enunciado foi disponibilizado um arquivo zip com o template de latex para confecção do artigo. O primeiro passo a ser feito é criar uma conta pessoal no Overleaf (https://www.overleaf.com/register). Uma vez criada sua conta, deve-se entrar nela. Para incluir o template no overleaf, basta apenas selecionar "New Project>Upload Project" e selecionar o arquivo zip, como mostrado na figura abaixo. Não é necessário descompactar, faça o upload do zip direto. Lembrar de renomear o artigo após o upload do arquivo.



Apêndice E. Bases de dados

```
import numpy as np
from sklearn.datasets import load_iris, load_wine
from pandas import read_csv

iris = load_iris()
wine = load_wine()
ionos = read_csv('~/ionosphere.data') # colocar path apropriada
ionosphere = np.asarray([i[:34] for i in ionosphere])
```

ionosphere.data pode ser obtido em http://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Ionosphere