Processamento e Análise de Imagens

Algoritmo k-means

Felipe Augusto Lima Reis

PUC Minas

Agenda

Introdução

Introdução

- Muitos algoritmos de aprendizado de máquinas necessitam de dados rotulados para treinamento
  - Rótulos são úteis, porém podem ser difíceis ou caros de serem produzidos;
  - Muitos rótulos são gerados manualmente, por um especialista humano, o que encarece a construção de uma base de dados;
- Para casos onde os rótulos inexistem, são úteis os algoritmos de aprendizado não supervisionados.

Introdução

- Aprendizado não supervisionado pode ser utilizado em tarefas de classificação
  - Tarefas de regressão não podem ser realizadas por esse tipo de algoritmo;
  - Uma vez que não existem classes corretas, o algoritmo irá avaliar a similaridade dos elementos;
  - As similaridades serão utilizadas para clusterizar (agrupar) elementos similares, provendo classificação [Marsland, 2014].

Métricas de Similaridade

Métricas de Similaridade para Variáveis Numéricas

Métricas de Similaridade

- Segundo [Cha, 2007], podemos dividir as similaridades nas seguintes famílias:
  1. Família Minkowski L_p;
  2. Família L_1;
  3. Família de Interseção;
  4. Família de Produto Interno;
  5. Família de Fidelidade ou Família Squared-chord;
  6. Família Quadrática L_2 ;
  7. Família de Entropia de Shannon;
  8. Combinações;

Métricas de Similaridade

1. Família Minkowski L_p
   - Família originada a partir da distância Euclidiana;
     - A distância City Block[1], corresponde à distância absoluta entre coordenadas cartesianas;
     - A generalização da distância City Block corresponde à distância Minkowski [Cha, 2007].

Table 1. L_p Minkowski family

1. Euclidean L_2	$d_{Euc} = \sqrt{\sum_{i=1}^{d} \lvert P_i - Q_i \rvert^2}$	(1)
2. City block L_1	$d_{CB} = \sum_{i=1}^{d} \lvert P_i - Q_i \rvert$	(2)
3. Minkowski L_p	$d_{Mk} = \sqrt[p]{\sum_{i=1}^{d} \lvert P_i - Q_i \rvert^p}$	(3)
4. Chebyshev L_∞	$d_{Cheb} = \max_i \lvert P_i - Q_i \rvert$	(4)

Fonte: [Cha, 2007]

[1] Também conhecida como Manhattan Distance, Distância L_1 ou Taxicab metric.

Métricas de Similaridade

2. Família L_1
   - Família utilizada para cálculo da diferença absoluta (L_1);
     - Sørensen e Canberra são destaques da classe, e usadas na área de biologia;
     - Gower realiza escala do espaço vetorial no espaço normalizado para cálculo da distância [Cha, 2007].
3. Família de Interseção
   - A interseção entre duas Funções Densidade de Probabilidade são muito usadas para similaridades onde não há sobreposição;
     - A maioria das distâncias do grupo podem ser transformadas em distâncias da família L_1 [Cha, 2007].

Métricas de Similaridade

4. Família de Produto Interno
   - Família de similaridades onde há produto interno entre os elementos P e Q;
     - O produto interno normalizado é chamado coeficiente Cosseno, devido ao ângulo entre os dois vetores;
     - Dice é realicionado a uma série de outras medidas, como Sørensen e Czekanowski, e é frequentemente usado para taxonomias biológicas [Cha, 2007].
5. Família de Fidelidade
   - A soma da média geométrica é conhecida como Similaridade de Fidelidade, e métricas relacionadas a essa medida podem ser agrupadas nesta classe [Cha, 2007].

Métricas de Similaridade

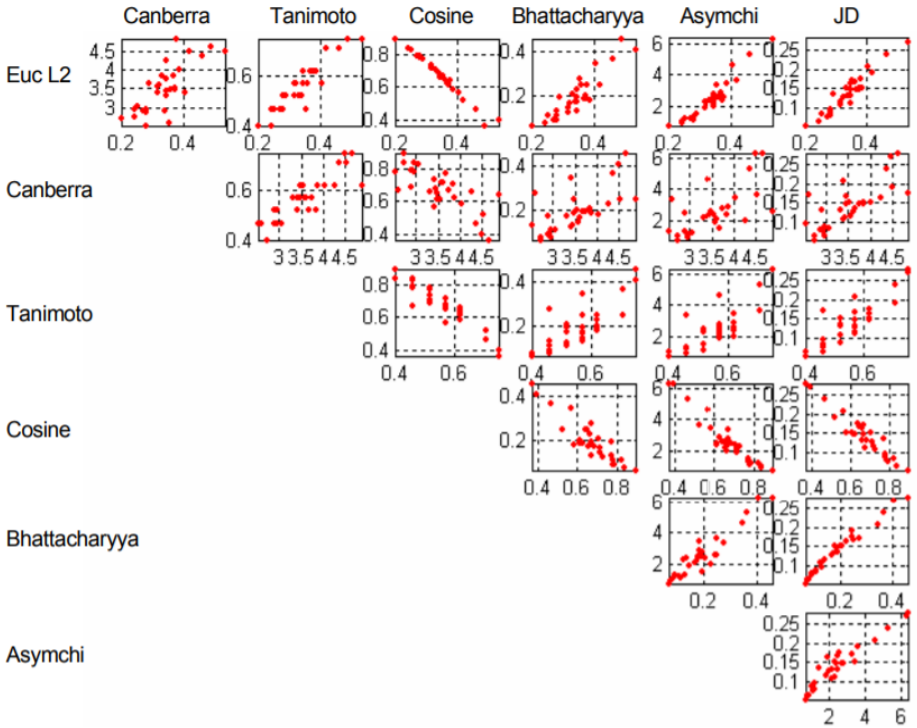
6. Família Quadrática L_2
   - Família agrupa métricas usando a distância Euclidiana Quadrática;
     - Formas alternativas das distâncias de Jaccard e Dice pertencem a essa família [Cha, 2007];

7. Família de Entropia de Shannon
   - A família corresponde ao conceito de incerteza ou entropia, proposto por Shannon [Cha, 2007];

8. Combinações
   - A família contém medidas de distância que contém múltiplas ideias ou medidas [Cha, 2007].

Métricas de Similaridade

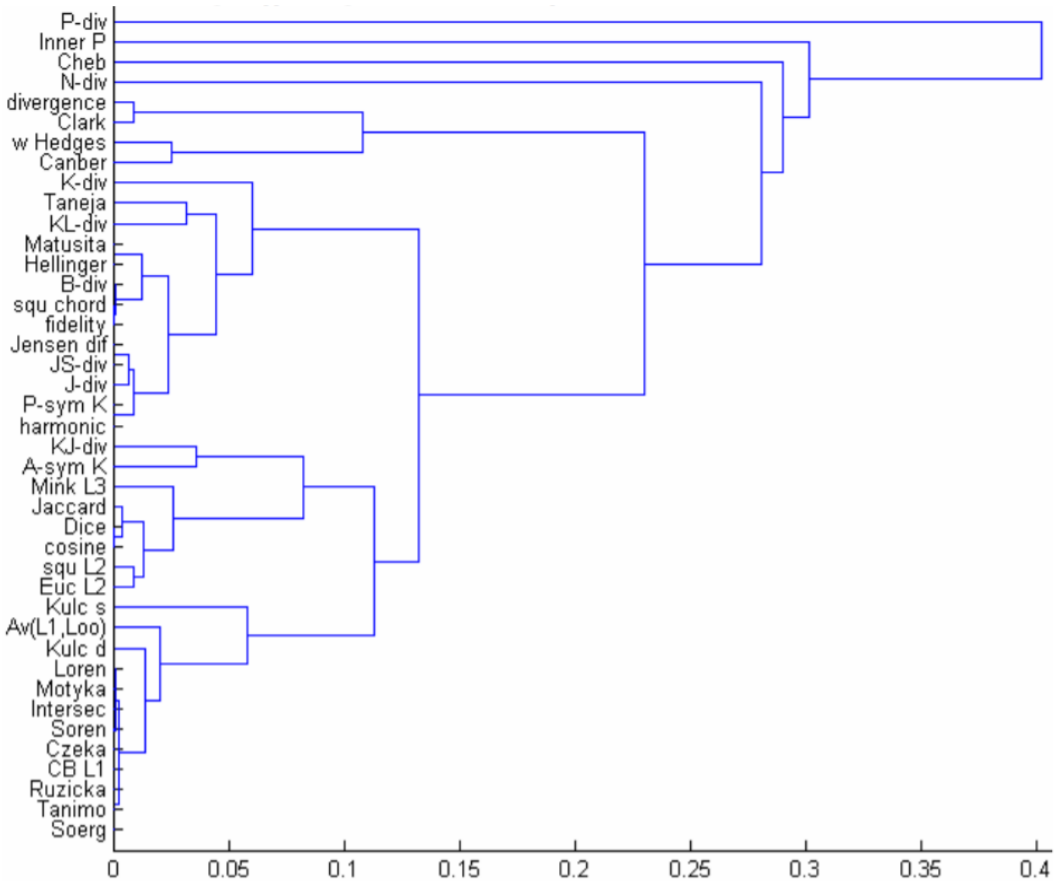
- Podemos indicar a força e a direção entre duas medidas de distâncias pela imagem abaixo
  - Se as distâncias não são similares, o valor tende a 0;
  - Caso contrário, os valores tendem a 1.



Fonte: [Cha, 2007]

Métricas de Similaridade

- Métricas de similaridade podem ainda serem agrupadas com o auxílio do dendrograma abaixo.



Fonte: [Cha, 2007]

Métricas de Similaridade em Dados Categóricos

Métricas de Similaridade - Dados Categóricos

- Segundo [Santos, 2014], as medidas de similaridade em dados categóricos podem ser classificadas em 3 tipos:
  1. Medidas que atribuem valor 1 para *matching* e 0 para *mismatching*;
  2. Atribuem valor 1 para para *matching* e valores entre 0 e 1 para *mismatching*;
  3. Medidas que atribuem valores entre 0 e 1 quando ocorrem *matching* e *mismatching*;

Métricas de Similaridade - Dados Categóricos

- São exemplos de métricas de similaridade para dados categóricos: [Santos, 2014]
  - Métricas do Tipo 1
    - Similaridades de Gower (GOW);
    - Similaridades de Eskin (ESK)
    - Similaridades de Gambaryan (GAM);
  - Métricas do Tipo 2
    - *Inverse Occurrence Frequency* (IOF);
  - Métricas do Tipo 3
    - Similaridade de Lin (LIN);
    - Similaridade de Smirnov (SMI).

Clustering

Clustering

- Clusterização (*clustering*) ou agrupamento é uma das técnicas mais amplamente utilizadas para análise exploratória de dados [Shalev-Shwartz and Ben-David, 2014];
  - O método busca agrupar elementos similares e separar elementos dissimilares;
  - A distância entre elementos de um mesmo grupo devem ser a menor possível, enquanto a distância entre elementos de grupos distintos devem ser a maior possível.

Clustering

- Uma das dificuldades da clusterização é que o processo pode ser entendido como uma relação de equivalência[2]
  - Dentre as características das relações de equivalência, destaca-se a transitividade;
  - Para transformar uma relação não transitiva em um relação transitiva é necessário adicionar novos elementos[3];
  - No entanto, a medida em que novos elementos são adicionados à relação, esta precisa ser revisada, para verificar se os novos elementos não irão causar efeitos colaterais;
  - Novos passos podem ser necessários até que a relação se torne de equivalência ou que um limite de passos seja executado e o algoritmo termine [Shalev-Shwartz and Ben-David, 2014].

[2] Em matemática discreta, uma relação de equivalência deve ser simétrica, reflexiva e transitiva.

[3] Conceitualmente, esses elementos fazem parte de um fecho transitivo.

Clustering

- O método mais simples para criação de *clusters* é utilizando Algoritmos de Clusterização Baseados em Ligação[4];
- Outro método popular é a definição de uma função de custo, com objetivo de encontrar uma partição (*cluster*) de menor custo possível [Shalev-Shwartz and Ben-David, 2014]
  - Nesta técnica, destaca-se o algoritmo *k-means*;
  - Outros algoritmos similares, como *k-medoides*, *k-median* e *k-modes* também são utilizados.

[4] Tradução direta do inglês: *Linkage-Based Clustering Algorithms*.

Linkage-Based Clustering Algorithms

- Esses algoritmos realizam em uma sequência de iterações;
- Começam com um agrupamento trivial, considerando cada ponto no conjunto de dados como um *cluster* de um único elemento;
- Repetidamente, adicionam *clusters* "mais próximos", fazendo fusão de *clusters*
  - Consequentemente, o número de *clusters* diminui a cada iteração;
  - Parâmetros são utilizados para definir a distância máxima entre *clusters* e limitar o número máximo de iterações [Shalev-Shwartz and Ben-David, 2014].

Linkage-Based Clustering Algorithms

- A distância d entre elementos avaliados pelos algoritmos de clusterização podem ser calculadas de diversas formas: [Shalev-Shwartz and Ben-David, 2014]
  - Single Linkage Clustering: a distância entre *clusters* é definida como a distância mínima entre membros de dois *clusters*;
  - Average Linkage Clustering: a distância entre *clusters* é definida como a distância média entre um ponto em um dos *clusters* e um ponto no outro *cluster*;
  - Max Linkage Clustering: a distância entre *clusters* é definida como a distância máxima entre seus elementos.

Linkage-Based Clustering Algorithms

- Os algoritmos de clusterização baseados em ligação são classificados como aglomerativos
  - Iniciam seu processo a partir de dados fragmentados;
  - *Clusters* adicionam novos elementos à medida em que o algoritmo é executado.
- São critérios de parada dos algoritmos de clusterização: [Shalev-Shwartz and Ben-David, 2014]
  - Número fixo de *clusters*;
  - Distância máxima entre *clusters*.

Nota: Além dos algoritmos aglomerativos, existem ainda algoritmos divisivos, no qual o procedimento inicia com um *cluster* de tamanho máximo, que é dividido durante as iterações.

Algoritmo k-means

- O algoritmo k-means é um método de clusterização com objetivo de particionar n elementos em k grupos, de modo que cada elemento pertença ao grupo mais próximo da média
  - É definida uma função de custo e cada cluster deve ter custo mínimo;
  - O problema de clusterização é transformado em um problema de otimização;
  - O problema pode ser classificado como NP-difícil, porém, existem heurísticas comumente empregadas para solução mais rápida [Shalev-Shwartz and Ben-David, 2014].

Algoritmo *k*-means

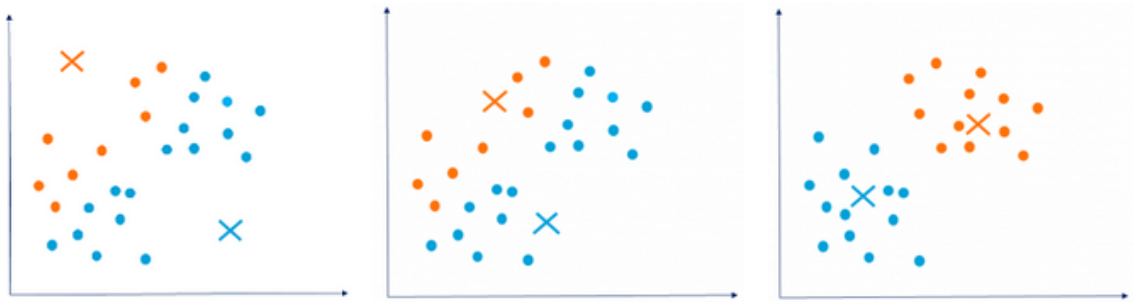
- O algoritmo *k*-means requer a definição à priori da quantidade de *clusters* que serão utilizados para separação dos grupos;
- O algoritmo pode ser dividido nas seguintes etapas:
  1. Inicialização;
  2. Atribuição de Elementos aos *Clusters*;
  3. Movimentação de Centroides;
  4. Otimização dos Centroides;

Algoritmo k-means

- Inicialização
  - São escolhidos o número de *clusters* k;
  - São escolhidas k posições aleatórias no espaço de dados;
  - Os centros de cada um dos k *clusters* são associadas às k posições aleatórias escolhidas
    - Os pontos centrais dos *clusters* são chamados de centroides.
- Atribuição de Elementos aos *Clusters*
  - Para cada elemento do conjunto de dados, são computadas as distâncias (Euclidianas) em relação aos centroides;
  - Cada elemento é atribuído ao centroide mais próximo [Marsland, 2014].

Algoritmo k-means

- Movimentação de Centroides
  - Após atribuição de elementos, a posição dos centroides é recalculada;
  - O novo ponto médio é definido como o valor médio entre os elementos do *cluster* [Marsland, 2014].



Fonte: [Santana, 2017]

Algoritmo k-means

- Otimização dos Centroides
  - O algoritmo executa repetidamente a atribuição de elementos ao *cluster* e a movimentação de centroides;
  - O algoritmo finaliza quando o centro do *cluster* para se mover ou quando o algoritmo atinge algum critério de parada.
- Avaliação de Desempenho e Uso
  - Após o término do aprendizado, o algoritmo pode ser avaliado em um conjunto de testes para análise de desempenho;
  - O algoritmo também pode ser aplicado diretamente a uma situação real, de forma a classificar elementos [Marsland, 2014].

Algoritmo k-means

- O algoritmo k-means pode ser resumido em:

The k-Means Algorithm

- **Initialisation**
  - choose a value for k
  - choose k random positions in the input space
  - assign the cluster centres $\boldsymbol{\mu}_j$ to those positions
- **Learning**
  - repeat
    - for each datapoint $\mathbf{x}_i$:
      - compute the distance to each cluster centre
      - assign the datapoint to the nearest cluster centre with distance

$$d_i = \min_j d(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\mu}_j).$$

    - for each cluster centre:
      - move the position of the centre to the mean of the points in that cluster (N_j is the number of points in cluster j):

$$\boldsymbol{\mu}_j = \frac{1}{N_j} \sum_{i=1}^{N_j} \mathbf{x}_i$$

  - until the cluster centres stop moving
- **Usage**
  - for each test point:
    - compute the distance to each cluster centre
    - assign the datapoint to the nearest cluster centre with distance

$$d_i = \min_j d(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\mu}_j).$$

Fonte: [Marsland, 2014]

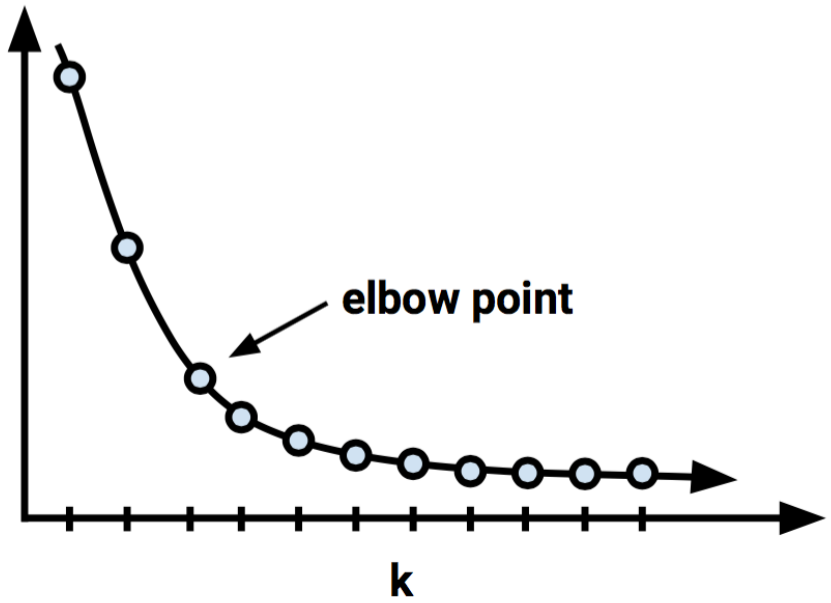
Algoritmo k-means - Escolha Parâmetro k

- Como informado previamente, o algoritmo k-means precisa, obrigatoriamente, de um valor fixo k;
  - Em alguns problemas o número de *clusters* já é previamente definido;
  - No entanto, em alguns cenários, o número de *clusters* precisa ser descoberto pelo próprio algoritmo;
- Em problemas sem um valor de k previamente definido, como escolher, de forma ideal, a quantidade de *clusters*?
  - Uma regra prática é utilizar o Elbow Method[5].

[5] Tradução literal: "Método do Cotovelo".

Elbow Method

- O Elbow Method é uma heurística para determinar o número de *clusters* em uma base de dados;
  - Consiste em variar o número de *clusters*, e testar a variância dos dados;
  - Os registros são plotados em um gráfico e é escolhido o ponto que representa o "cotovelo (ou joelho)" da curva.



Fonte: [Santana, 2017]

k-medoids, *k*-median e *k*-modes

- *k*-medoids, *k*-median e *k*-modes são variações do *k*-means, usando métricas diferentes para definição dos centroides:
  - *k*-medoids:
    - Utiliza um exemplar (medoid) como centro do *cluster*;
    - Possui como vantagem a melhor interpretabilidade do centro do *cluster*, uma vez que o ponto representa um elemento real, e não um local onde pode não haver nenhum elemento;
  - *k*-median:
    - Calcula a mediana para definição dos centroides;
    - Possui como vantagem a minimização da distância L_1 (1-norm ou City Block) e a menor susceptibilidade a ruídos;
  - *k*-modes:
    - Utiliza a moda para definição do centroide;
    - Para alguns cenários pode ser usado para representar os elementos mais comuns.

Segmentação usando k-means

Segmentação usando k-means

- O algoritmo k-means é um método de clusterização com objetivo de particionar n elementos em k grupos, de modo que cada elemento pertença ao grupo mais próximo da média
  - No contexto do processamento de imagens, o k-means pode ser utilizado para segmentar imagens;
  - O k-means será utilizado para calcular a similaridade entre pixels ou conjuntos de pixels, agrupando em segmentos por similaridade.

Segmentação usando k-means

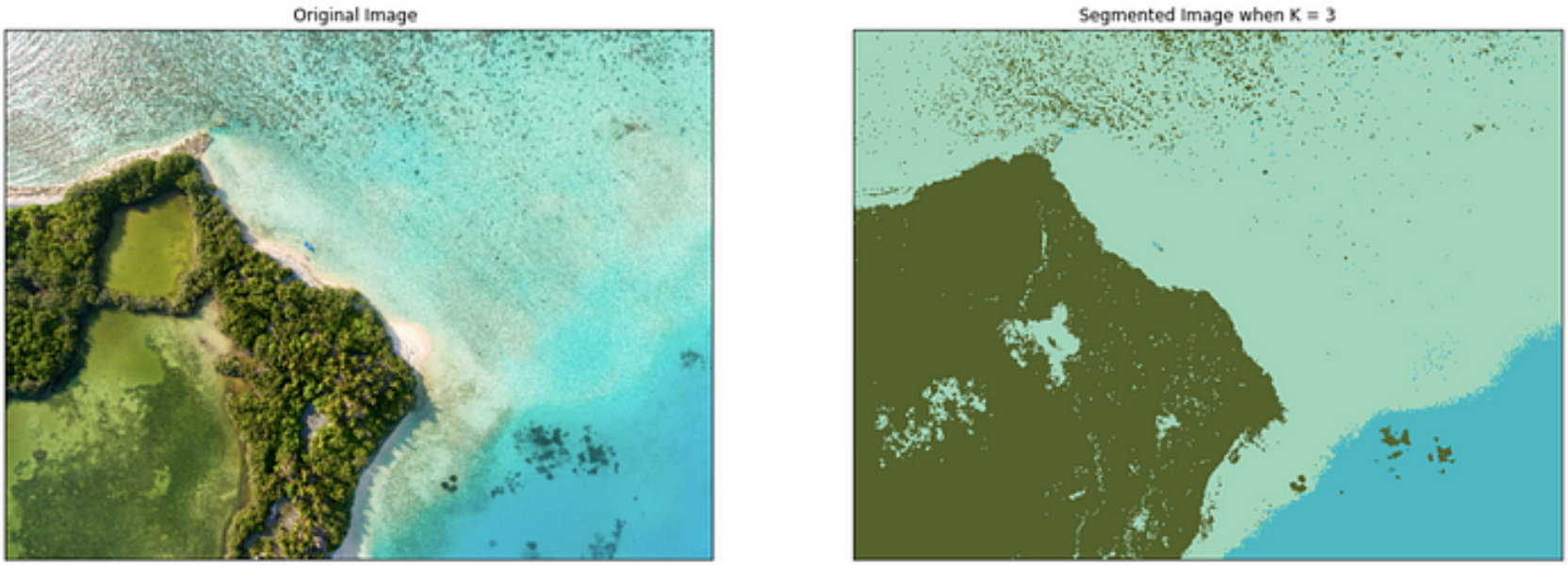
- O algoritmo k-means para segmentação, assim como o algoritmo original, pode ser dividido nas seguintes etapas:
  1. Inicialização;
  2. Atribuição de Elementos aos *Clusters*;
  3. Movimentação de Centroides;
  4. Otimização dos Centroides;

Segmentação usando k-means

- A similaridade dos elementos pode ser definida pelo por diversos fatores, como similaridade entre os canais R, G e B, além da posição dos pixels, no plano x e y;
- O cálculo da similaridade entre pixels pode ser feita de diferentes maneiras, utilizando qualquer uma das métricas previamente citadas;
  - Nessas métricas, será definida a similaridade entre os pixels.

Segmentação usando k-means

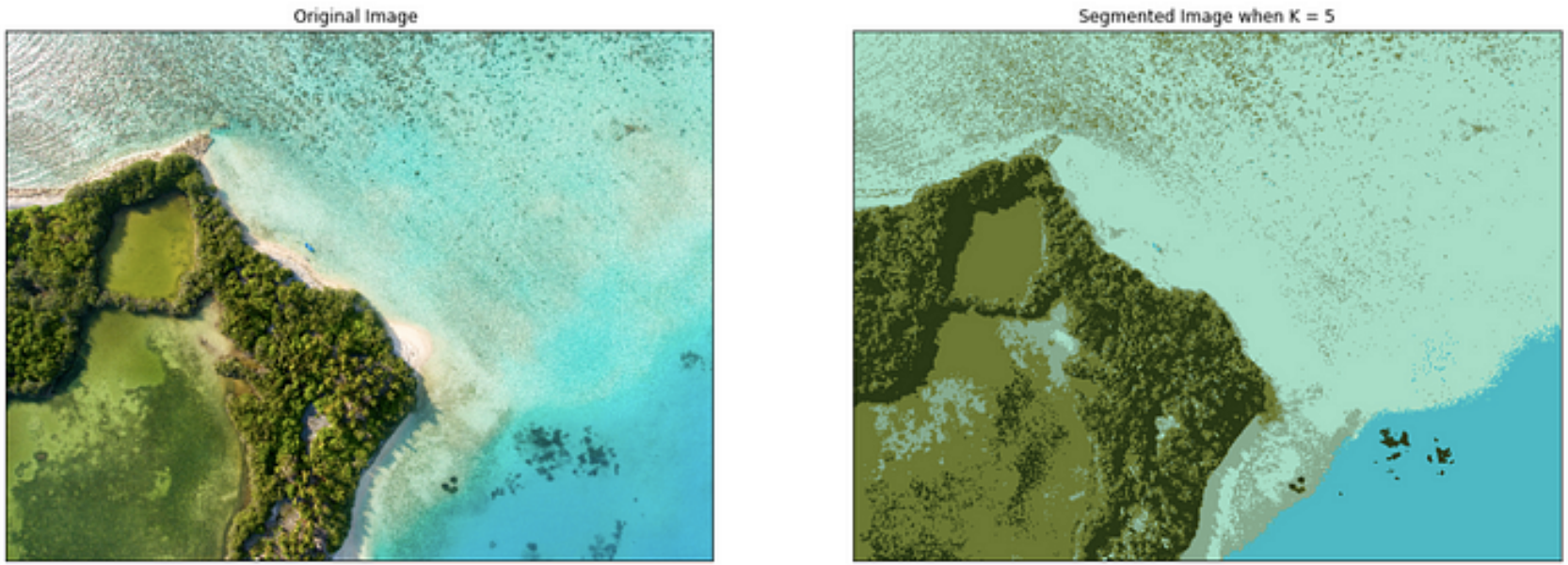
- Um exemplo de segmentação usando k-means, para $k = 3$ pode ser vista na figura abaixo:



Fonte: [Chauhan, 2019]

Segmentação usando k-means

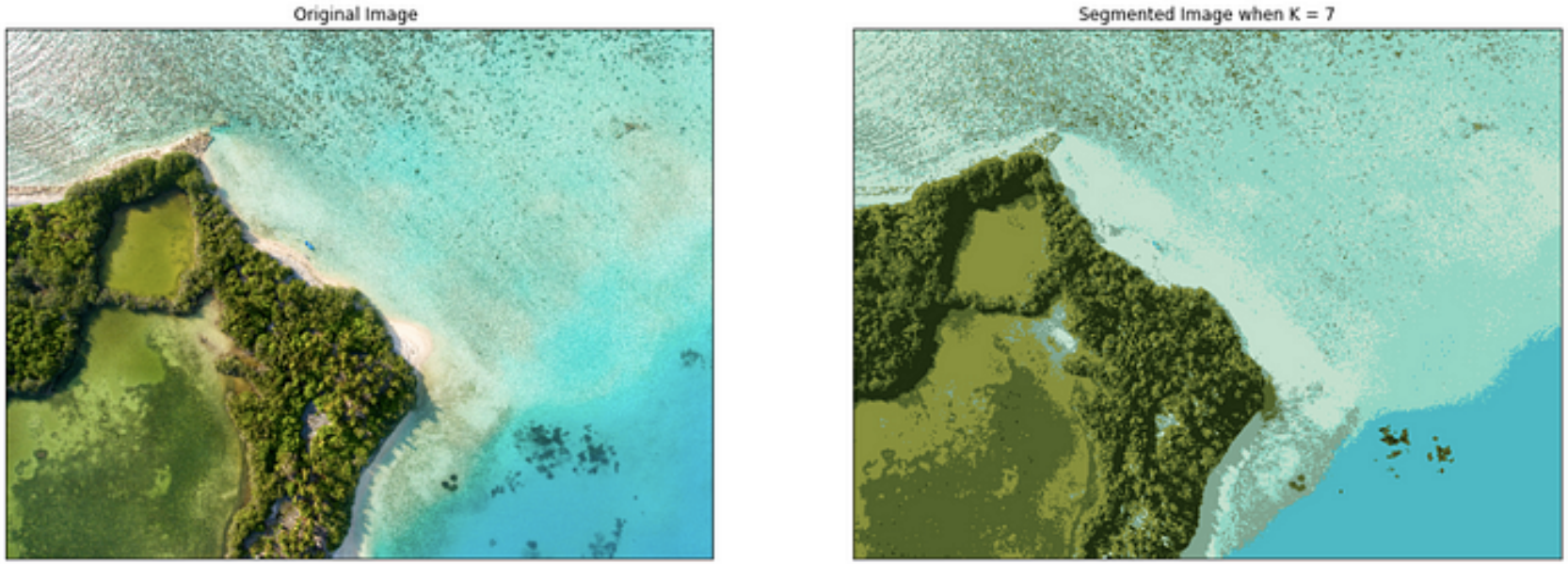
- Um exemplo de segmentação usando k-means, para $k = 5$ pode ser vista na figura abaixo:



Fonte: [Chauhan, 2019]

Segmentação usando k-means

- Um exemplo de segmentação usando k-means, para $k = 7$ pode ser vista na figura abaixo:



Fonte: [Chauhan, 2019]

Segmentação usando k-means

- A imagem abaixo contém outro exemplo de segmentação utilizando o k-means, para $k = 6$:

Fonte: [Chauhan, 2019]

Segmentação usando k-means

- A imagem abaixo contém outro exemplo de segmentação utilizando o k-means, para $k = 6$:

Fonte: [Chauhan, 2019]

Referências I

Cha, S.-H. (2007).

Comprehensive survey on distance/similarity measures between probability density functions.
International Journal of Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, 1(4):300–307.
[Online]; acessado em 23 de Março de 2021. Disponível em:
https://www.naun.org/main/NAUN/ijmmas/mmmas-49.pdf.

Chauhan, N. S. (2019).

Introduction to image segmentation with k-means clustering.
[Online]; acessado em 19 de maio de 2023. Disponível em: https://www.kdnuggets.com/2019/08/introduction-image-segmentation-k-means-clustering.html.

Kopec, D. (2019).

Classic Computer Science Problems in Python.
Manning Publications Co, 1 edition.

Marsland, S. (2014).

Machine Learning: An Algorithm Perspective.
CRC Press, 2 edition.
Disponível em: https://homepages.ecs.vuw.ac.nz/ marslast/MLbook.html.

Richert, W. and Coelho, L. P. (2013).

Building Machine Learning Systems with Python.
Packt Publishing Ltd., 1 edition.

Referências II

Santana, F. (2017).

Entenda o algoritmo k-means e saiba como aplicar essa técnica.
[Online]; acessado em 24 de Março de 2021. Disponível em:
https://minerandodados.com.br/entenda-o-algoritmo-k-means.

Santos, T. (2014).

Uma Análise comparativa de Medidas de Similaridade para Agrupamento de dados Categóricos.
PhD thesis, Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais- Programa de Pós-Graduação em Informática.
[Online]; acessado em 23 de Março de 2021. Disponível em:
http://www.biblioteca.pucminas.br/teses/Informatica_SantosTRL_1.pdf.

Shalev-Shwartz, S. and Ben-David, S. (2014).

Understanding Machine Learning: From Theory to Algorithms.
Cambridge University Press, 1 edition.
Disponível em: http://www.cs.huji.ac.il/ shais/UnderstandingMachineLearning.