Algoritmos de Agrupamento - Aprendizado Não Supervisionado

Fabrício Jailson Barth

Pós Graduação - BandTec

Maio de 2015

Sumário

- Introdução e Definições
- Aplicações
- Algoritmos de Agrupamento
  - ⋆ Agrupamento Plano
  - ⋆ Agrupamento Hierárquico
- Considerações Finais

Introdução

Introdução e Definições

- Os algoritmos de agrupamento particionam um conjunto de objetos em agrupamentos.
- Normalmente, objetos são descritos e agrupados usando um conjunto de atributos e valores.
- **Não existe nenhuma informação sobre a classe ou categoria dos objetos**.

- Os algoritmos de agrupamento manipulam um conjunto de objetos. Este conjunto de objetos é chamado de **bags**.
- As **bags** permitem o aparecimento de múltiplos objetos com a mesma representação.
- **O objetivo dos algoritmos de agrupamento é colocar os objetos similares em um mesmo grupo e objetos não similares em grupos diferentes**.

Exemplo de dataset

	Sepal.Length	Sepal.Width	Petal.Length	Petal.Width
1	5.10	3.50	1.40	0.20
2	4.90	3.00	1.40	0.20
3	4.70	3.20	1.30	0.20
4	4.60	3.10	1.50	0.20
5	5.00	3.60	1.40	0.20
6	5.40	3.90	1.70	0.40

Aplicações

- Agrupamento de objetos similares, onde **"objetos"** podem ser:
  - ⋆ agrupamento de documentos (textos) similares
  - ⋆ identificação de grupos em redes sociais
  - ⋆ segmentação de clientes
  - ⋆ pessoas - sistemas de recomendação
  - ⋆ palavras - processamento de linguagem natural
  - ⋆ identificação de plantas com características comuns
  - ⋆ entre outras coisas $\cdots$

Algoritmos

Algoritmos de Agrupamento

Existem dois tipos de estruturas produzidas por algoritmos de agrupamento:

- não hierárquicos ou **planos**
- agrupamentos **hierárquicos**

Agrupamento Plano

- Agrupamentos planos simplesmente contêm um certo número de agrupamentos e a **relação** entre os agrupamentos e geralmente **não-determinada**.
- A maioria dos algoritmos que produzem agrupamentos planos são **iterativos**.
- Eles iniciam com um conjunto inicial de agrupamentos e realocam os objetos em cada agrupamento de maneira iterativa.
- Até uma determinada **condição de parada**.

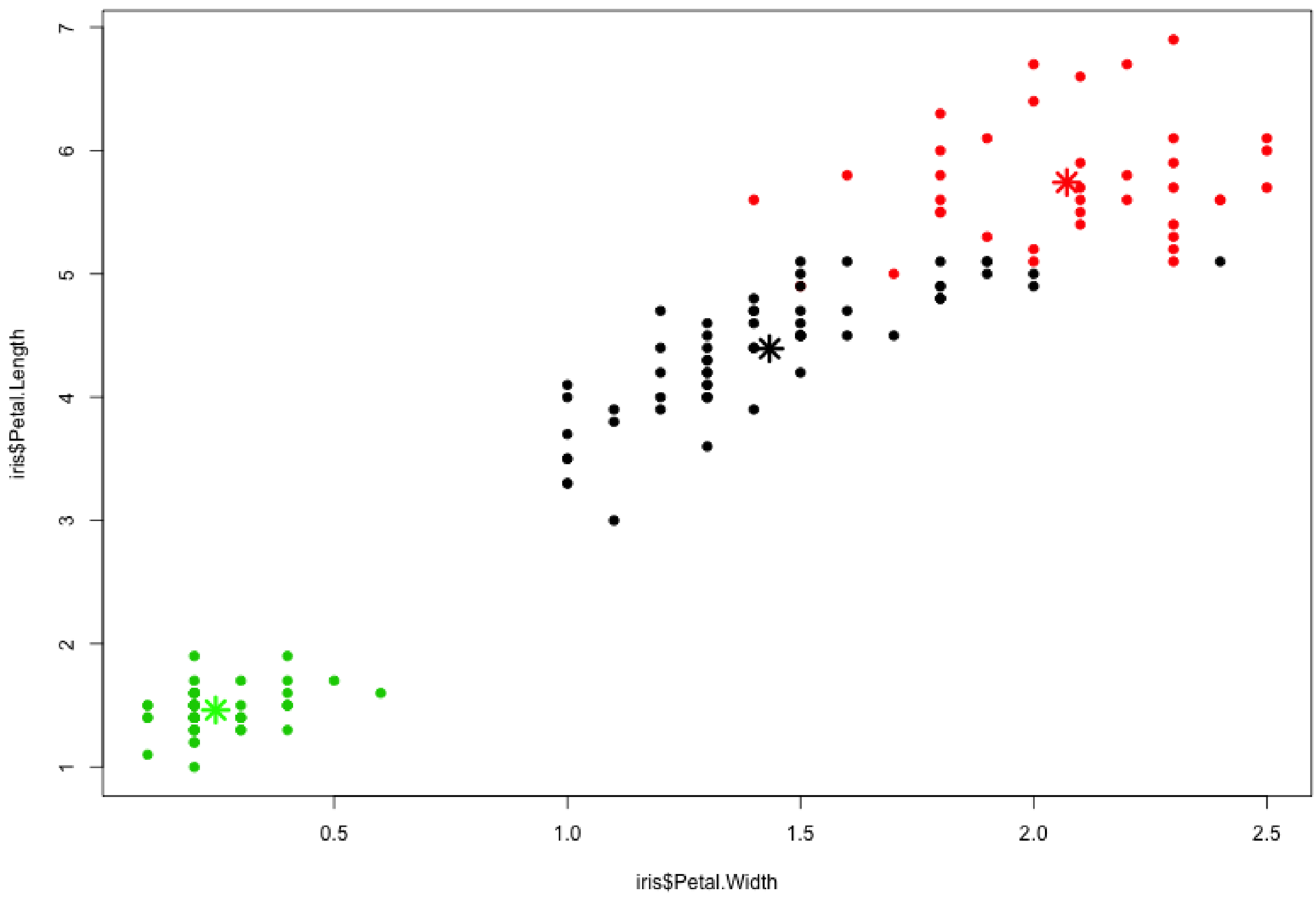
Agrupamentos **soft** e **hard**

Além da divisão entre os algoritmos hierárquicos e planos, tem-se a divisão entre os algoritmos **soft** e **hard**.

- Na abordagem **hard** cada objeto é inserido em um e somente um agrupamento.
- Na abordagem **soft** um objeto pode ser inserido em vários agrupamentos com diferentes níveis de pertinência.

Em agrupamentos hierárquicos, geralmente a abordagem é **hard**. Em agrupamentos planos, ambos os tipos de abordagens são comuns.

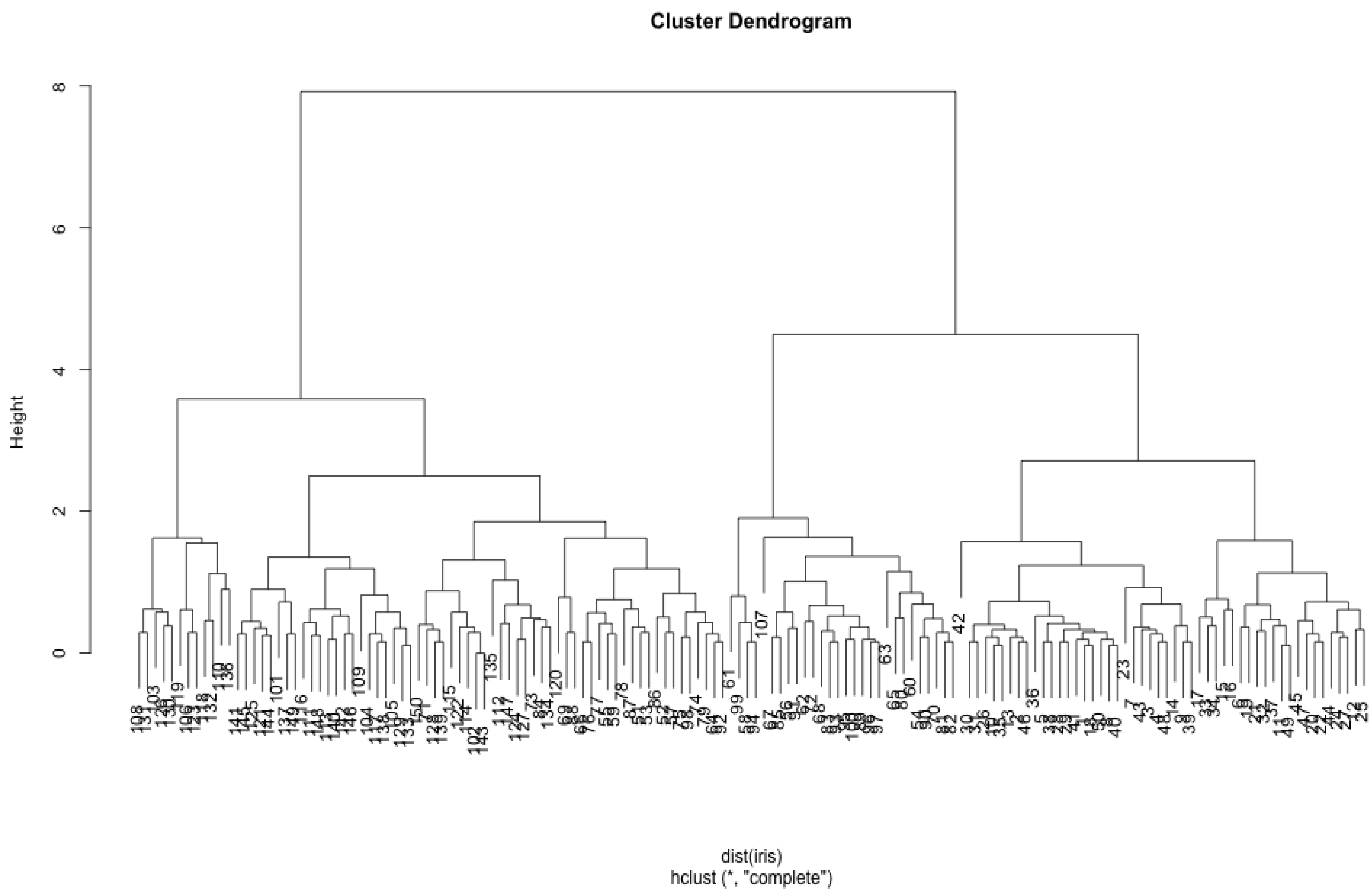
Agrupamento Plano *hard* (Exemplo)



Agrupamento Hierárquico

- Um agrupamento hierárquico é representado por uma árvore.
- Os nós folhas são os objetos.
- Cada nó intermediário representa o agrupamento que contêm todos os objetos de seus descendentes.

Agrupamento Hierárquico (Exemplo)



Agrupamento Hierárquico (Exemplo)

	Sepal.Length	Sepal.Width	Petal.Length	Petal.Width
108	7.30	2.90	6.30	1.80
131	7.40	2.80	6.10	1.90
42	**4.50**	**2.30**	**1.30**	**0.30**

Algoritmos para Agrupamento Plano

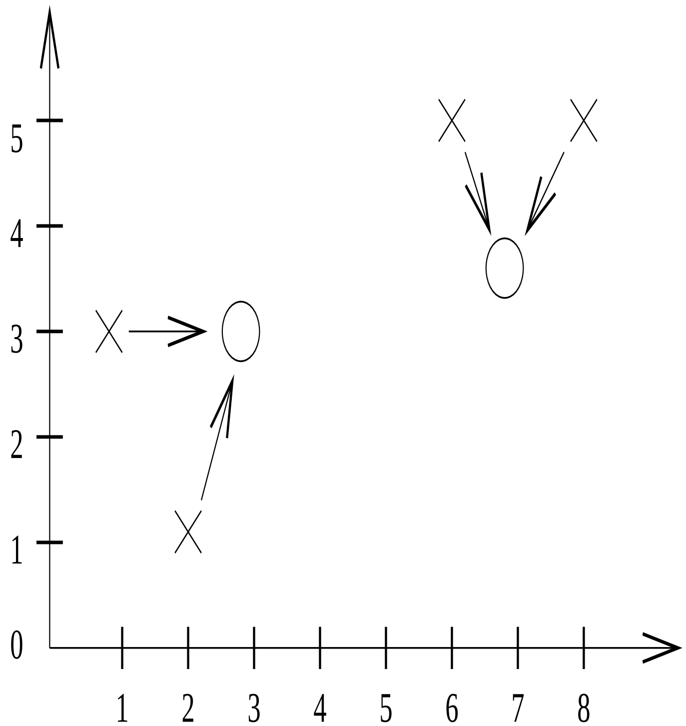
Algoritmos para agrupamento plano

- Utiliza diversas **iterações** para realocar os objetos nos melhores agrupamentos.
- **Critério de parada** é baseado na qualidade dos agrupamentos (similaridade média e cálculo para informação comum entre agrupamentos).
- É necessário determinar o **número de agrupamentos**:
  - ⋆ usando conhecimento à priori
  - ⋆ k, $k-1$ aumento significativo da qualidade, $k+1$ aumento reduzido da qualidade. Procurar por um k com este comportamento.

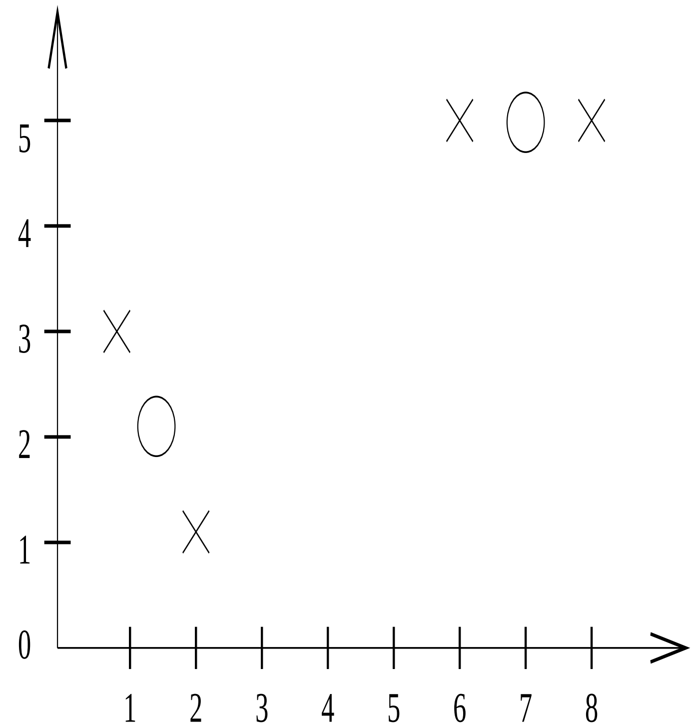
K-means

- Algoritmo de agrupamento **hard**
- Define o agrupamento pelo centro de massa dos seus membros.
- É necessário um conjunto inicial de agrupamentos.
- Seqüência de ações iterativas.
- Usualmente, diversas iterações são necessárias para o algoritmo convergir.

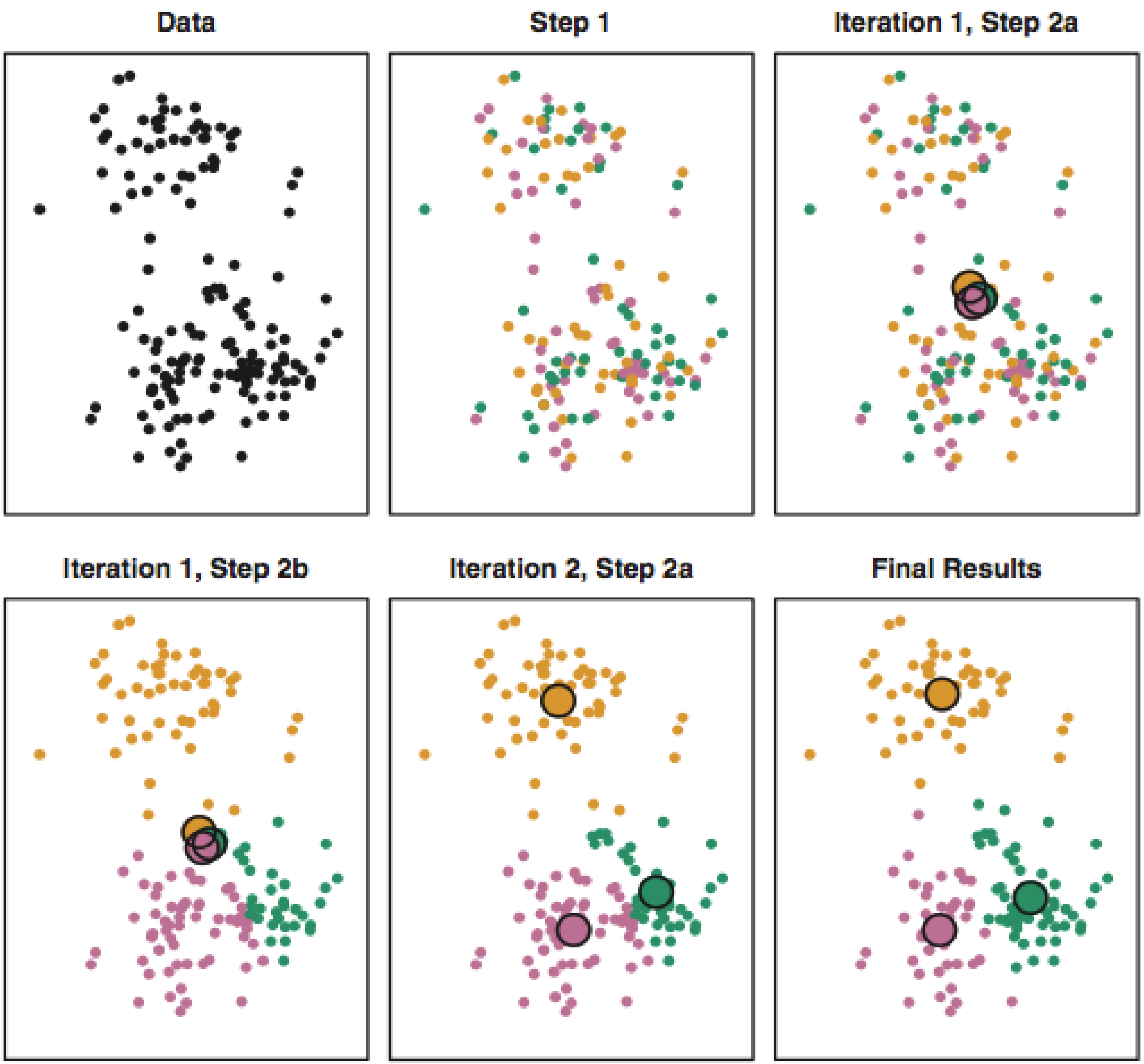
Iteração do algoritmo **K-means**



(1) Atribuição dos objetos aos agrupamentos



(2) Definição do centro do agrupamento


Data
Step 1
Iteration 1, Step 2a
Iteration 1, Step 2b
Iteration 2, Step 2a
Final Results

Algoritmo **K-means**

entrada: um conjunto $X = \{\overrightarrow{x_1}, \cdots, \overrightarrow{x_n}\} \subset \Re^m$

{conjunto inicial de agrupamentos}

uma medida de distância: $d \colon \Re^m \times \Re^m \rightarrow \Re$

uma função para computar o ponto central:

$\mu \colon P(\Re) \rightarrow \Re^m$

selecionar k centros iniciais $\overrightarrow{f_1}, \cdots, \overrightarrow{f_k}$

while o critério de parada não for verdadeiro **do**

  for todos os agrupamentos c_j **do**

    $c_j = \{\overrightarrow{x_i} \mid \forall \overrightarrow{f_l} d(\overrightarrow{x_i}, \overrightarrow{f_j}) \leq d(\overrightarrow{x_i}, \overrightarrow{f_l})\}$ {os agrupamentos c_j recebem objetos levando-se em consideração o seu centro f_j}

  end for

  for todos os pontos centrais $\overrightarrow{f_j}$ **do**

    $\overrightarrow{f_j} = \mu(c_j)$

  end for

end while

Algoritmo **K-means**

- A medida de distância pode ser a distância Euclidiana:

$$|\overrightarrow{x} - \overrightarrow{y}| = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i - y_i)^2} \tag{1}$$

- a função para computar o ponto central pode ser:

$$\overrightarrow{\mu} = \frac{1}{M}\sum_{\overrightarrow{x} \in C} \overrightarrow{x} \tag{2}$$

onde M é igual ao número de pontos no agrupamento C.

Problema...

Iris Problem

- Considere uma base de dados sobre flores do gênero **Iris**.
- Esta base de dados possui informações sobre o **comprimento** e **largura** das **sépalas** e das **pétalas** das flores.

Blue Flag Iris - Dados

	Sepal.Length	Sepal.Width	Petal.Length	Petal.Width
1	5.10	3.50	1.40	0.20
2	4.90	3.00	1.40	0.20
3	4.70	3.20	1.30	0.20
4	4.60	3.10	1.50	0.20
5	5.00	3.60	1.40	0.20
6	5.40	3.90	1.70	0.40

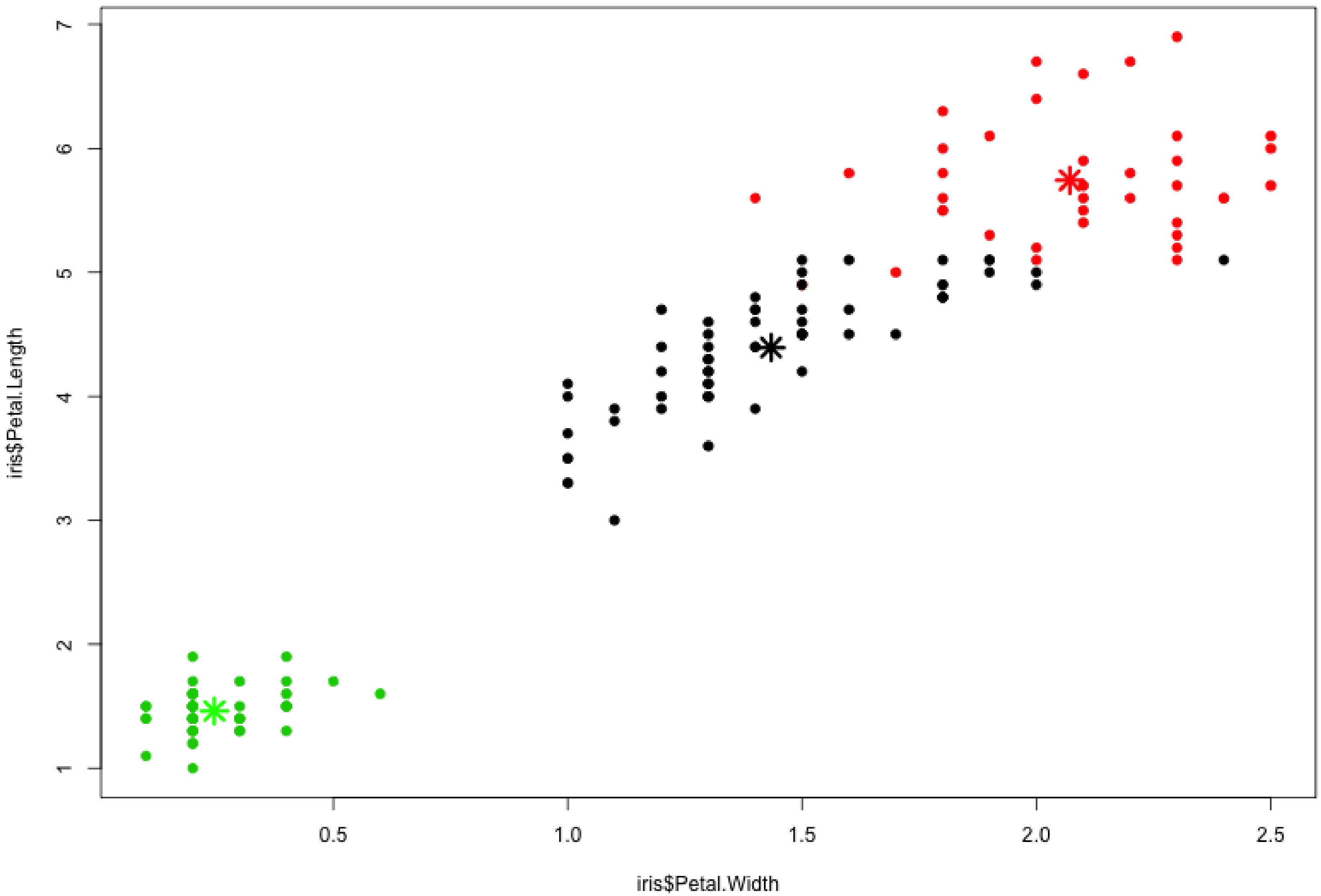
Todas as medidas são em cm.

Pergunta

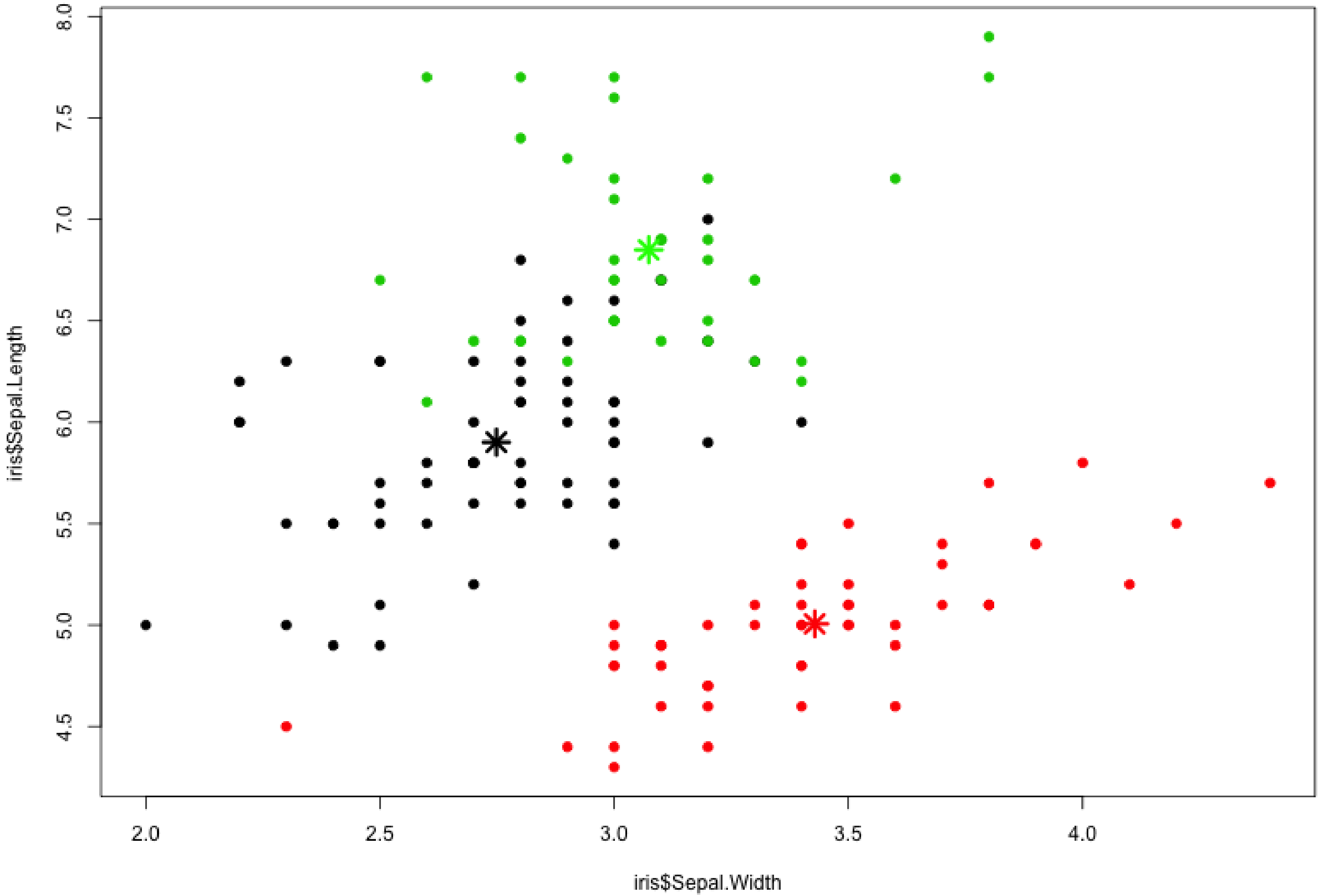
Será que as plantas deste gênero podem ser dividas em espécies?

Aplicando o algoritmo K-means

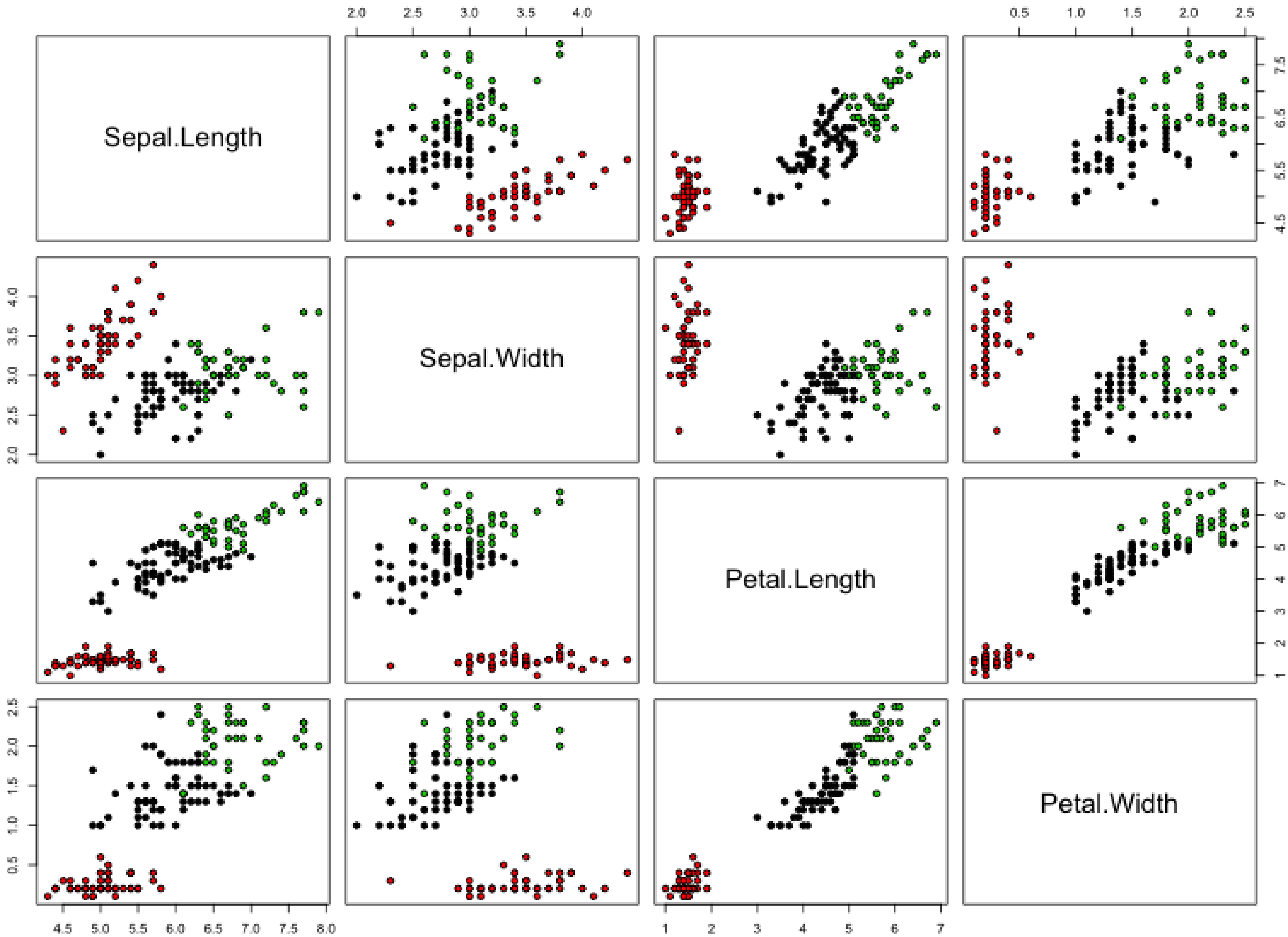
```
> model <- kmeans(iris, centers = 3)
> model
K-means clustering with 3 clusters of sizes 50, 62, 38

Cluster means:
  Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
1     5.006000    3.428000     1.462000    0.246000
2     5.901613    2.748387     4.393548    1.433871
3     6.850000    3.073684     5.742105    2.071053

> model$withinss
[1] 15.15100 39.82097 23.87947
```



iris$Petal.Length
iris$Petal.Width
0.5
1.0
1.5
2.0
2.5
1
2
3
4
5
6
7

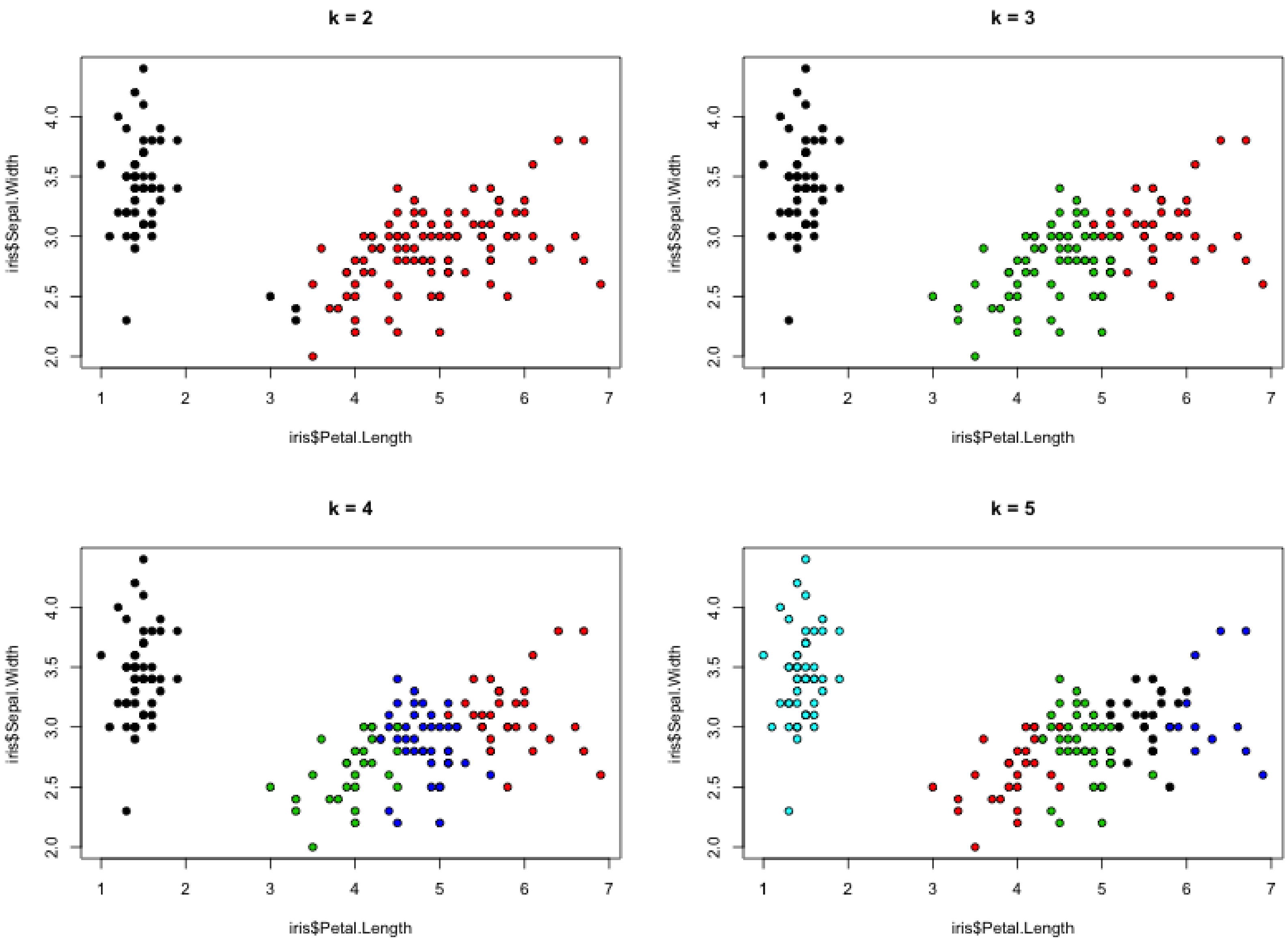


iris$Sepal.Length
iris$Sepal.Width
8.0
7.5
7.0
6.5
6.0
5.5
5.0
4.5
2.0
2.5
3.0
3.5
4.0

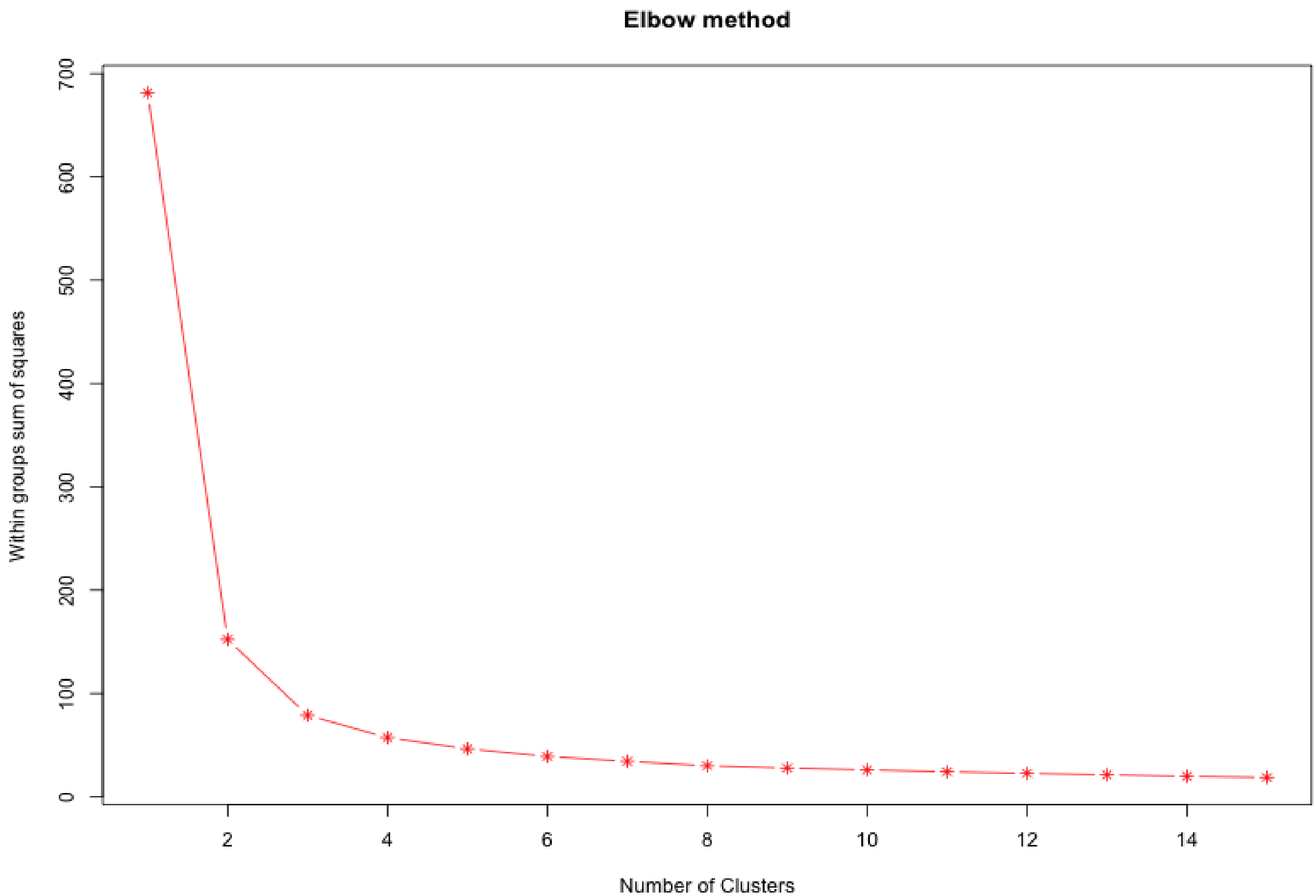

Sepal.Length
Sepal.Width
Petal.Length
Petal.Width
2.0 2.5 3.0 3.5 4.0
0.5 1.0 1.5 2.0 2.5
4.5 5.5 6.5 7.5
2.0 2.5 3.0 3.5 4.0
1 2 3 4 5 6 7
0.5 1.0 1.5 2.0 2.5
4.5 5.0 5.5 6.0 6.5 7.0 7.5 8.0
1 2 3 4 5 6 7

Dúvida...

Qual é o melhor número de clusters (k)?


k = 2
k = 3
k = 4
k = 5
iris$Sepal.Width
iris$Petal.Length
2.0
2.5
3.0
3.5
4.0
1
2
3
4
5
6
7

Como determinar o melhor k?



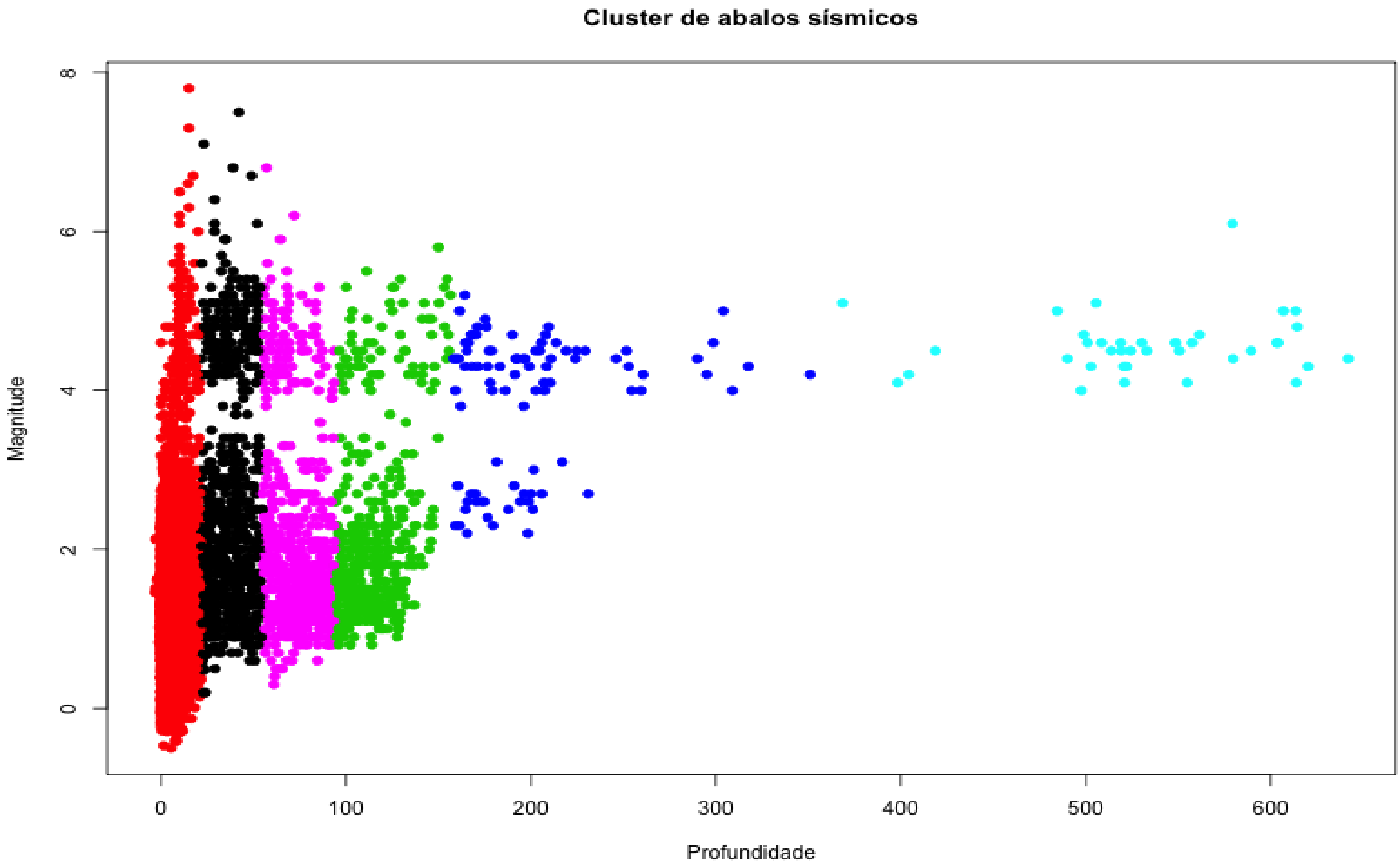
A medida de distribuição dos pontos normalmente empregada é *sum of squared errors*.

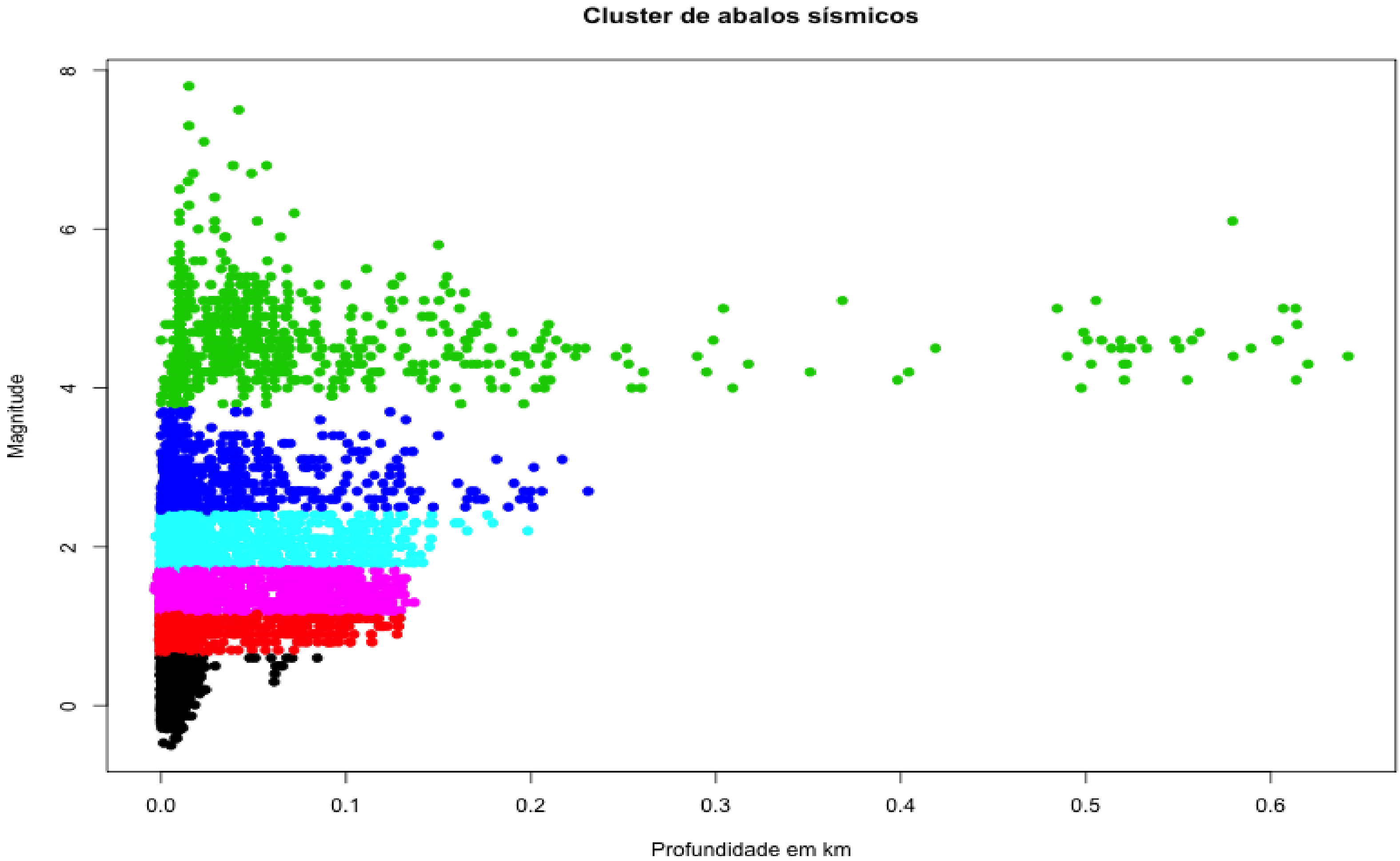
Exercícios

- Usando o dataset **survey** da biblioteca **UsingR**, identifique clusters de pessoas com base apenas nos atributos **Wr.Hnd** e **NW.Hnd**.
- Fazendo uso dos dados coletados em [a], agrupe os abalos sísmicos levando-se em consideração a magnitude e profundidade do abalo.

[a] http://earthquake.usgs.gov/earthquakes/feed/v1.0/summary/all_month.csv

Clusters com dados em escalas diferentes




Cluster de abalos sísmicos
Magnitude
Profundidade em km
0
2
4
6
8
0.0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6

Rescaling data

Feature scaling:

$$x_{new} = \frac{x - x_{min}}{x_{max} - x_{min}} \tag{3}$$

Standardization:

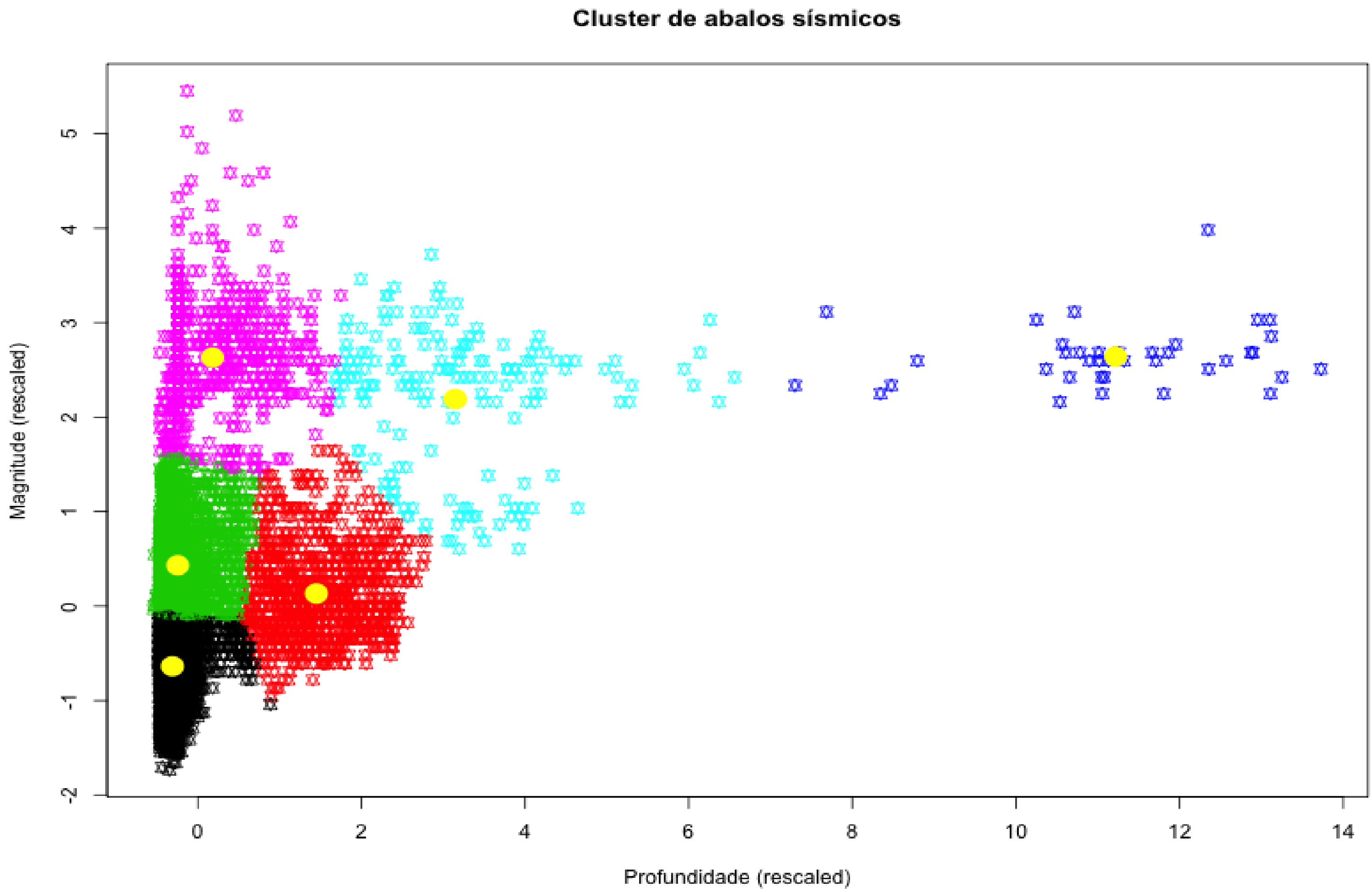
$$x_{new} = \frac{x - mean(x)}{x_{max} - x_{min}} \tag{4}$$

$$x_{new} = \frac{x - \mu}{\sigma} = \frac{x - mean(x)}{sd(x)} \tag{5}$$

Cluster com dados normalizados

```
standardization <- function(x){
  return ((x - mean(x)) / sd(x))
}

filtrados$depthR <- standardization(filtrados$depth)
filtrados$magR <- standardization(filtrados$mag)
elbow(filtrados[,c('depthR','magR')])
model <- kmeans(filtrados[,c('depthR','magR')], centers = 6)

plot(filtrados$depthR, filtrados$magR,
     col=model$cluster,
     pch=11, main="Cluster de abalos sísmicos",
     xlab="Profundidade (rescaled)", ylab="Magnitude (rescaled)")
points(model$centers, col = "yellow", pch=19,cex=2,lwd=3)
```

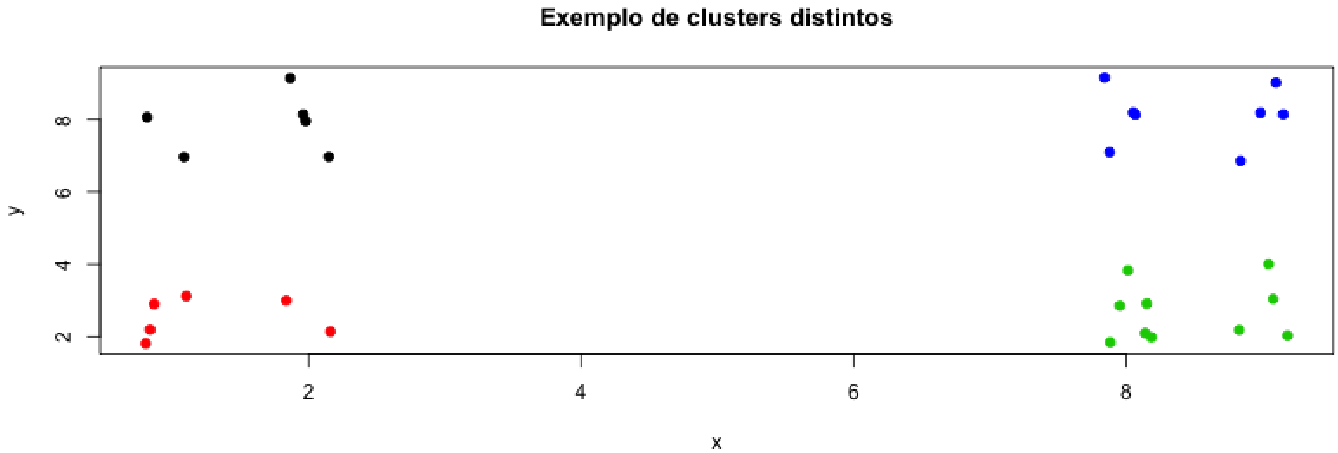
Cluster com dados normalizados

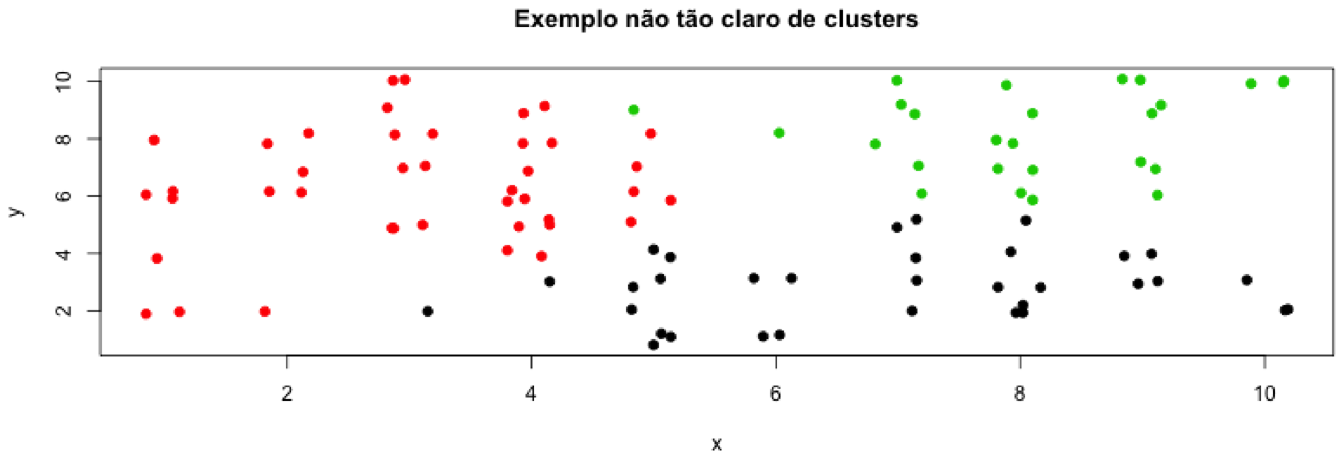


Diagnóstico

- Os clusters estão bem separados uns dos outros?
- Os centroides dos clusters estão bem separados uns dos outros?
- Existe algum cluster com poucos pontos?
- Os pontos de cada cluster estão bem agrupados?

Diagnóstico





Trabalhando com dados qualitativos

- O algoritmo k-means trabalha apenas com dados numéricos, pois utiliza a distância euclidiana como função para calcular a distância entre objetos.
- Para trabalhar com dados qualitativos é necessário fazer uso de outra função de distância, por exemplo a **distância de Hamming**.

Distância de Hamming

$$d(x_i, x_j) = \sum_{q=1}^{d} \alpha(x_i^q, x_j^q) \tag{6}$$

$$\alpha(x_i^q, x_j^q) = \begin{cases} 1 & \text{if } x_i^q \neq x_j^q \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{7}$$

Cluster de valores categóricos no R

- Função **kmodes** do pacote **klaR**
- Exemplo na conta https://github.com/fbarth, projeto posGraducao, código ExemplosClustering/script/clusteringValoresCategoricos.R

Alguns cuidados

- Que atributos devem ser incluídos na análise?
- Que unidades de medida (por exemplo, milhas, kilômetros, metros) devem ser utilizados em cada atributo?
- Os atributos precisam ser normalizados?
- Que outras considerações devem ser aplicadas?

Considerações adicionais

- O algoritmo k-means é sensível com relação aos pontos iniciais escolhidos para os centroides.
- Por isso, é importante executar várias vezes o algoritmo k-means para o mesmo **K** e escolher o resultado de cluster com menor WSS (*Within sum of squares*).
- No R isto é feito com o parâmetro **nstart** da função **k-means**.

Algoritmos para Agrupamento Hierárquico

Algoritmos para agrupamento hierárquico

Os algoritmos que utilizam a abordagem de agrupamento hierárquico podem implementar abordagens:

- **bottom-up (agglomerative clustering)**
- **top-down (divisive clustering)**

Agrupamento hierárquico **bottom-up**

Entrada: um conjunto $x = \{x_1, \cdots, x_n\}$ de objetos e uma função $sim\colon P(X) \times P(X) \rightarrow \Re$

for i:=1 até n **do**

  $c_i := \{x_i\}$ {Inicia com um agrupamento para cada objeto}

end for

j := n + 1

while $|C| > 1$ **do**

$(c_{n1}, c_{n2}) := \arg\max_{c_u, c_v \in C \times C} sim(c_u, c_v)$ {Em cada passo, os dois agrupamentos mais similares são determinados}

$c_j := c_{n1} \cup c_{n2}$ {Unidos em um novo agrupamento}

$C := C \setminus \{c_{n1}, c_{n2}\} \cup \{c_j\}$ {Elimina-se os dois agrupamentos mais similares e adiciona-se o novo agrupamento ao conjunto de agrupamentos}

$j := j + 1$

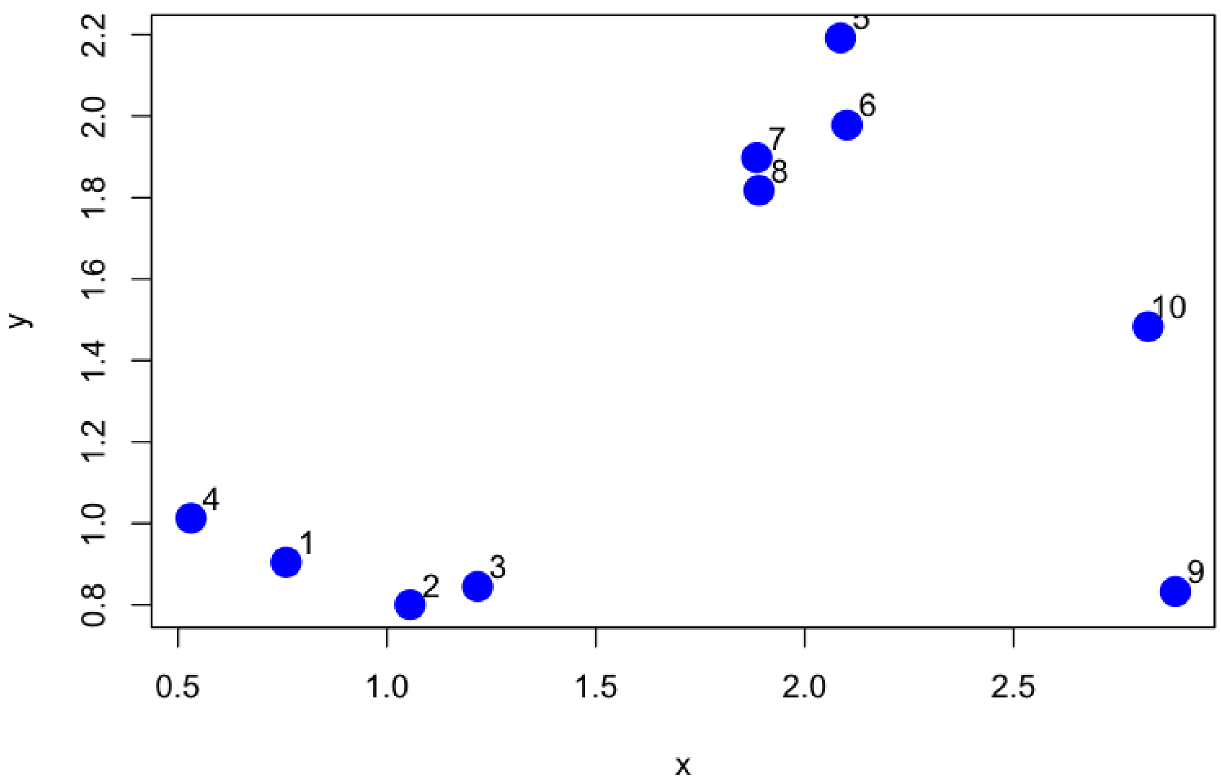
end while

Agrupamento hierárquico **bottom-up** - Função de similaridade

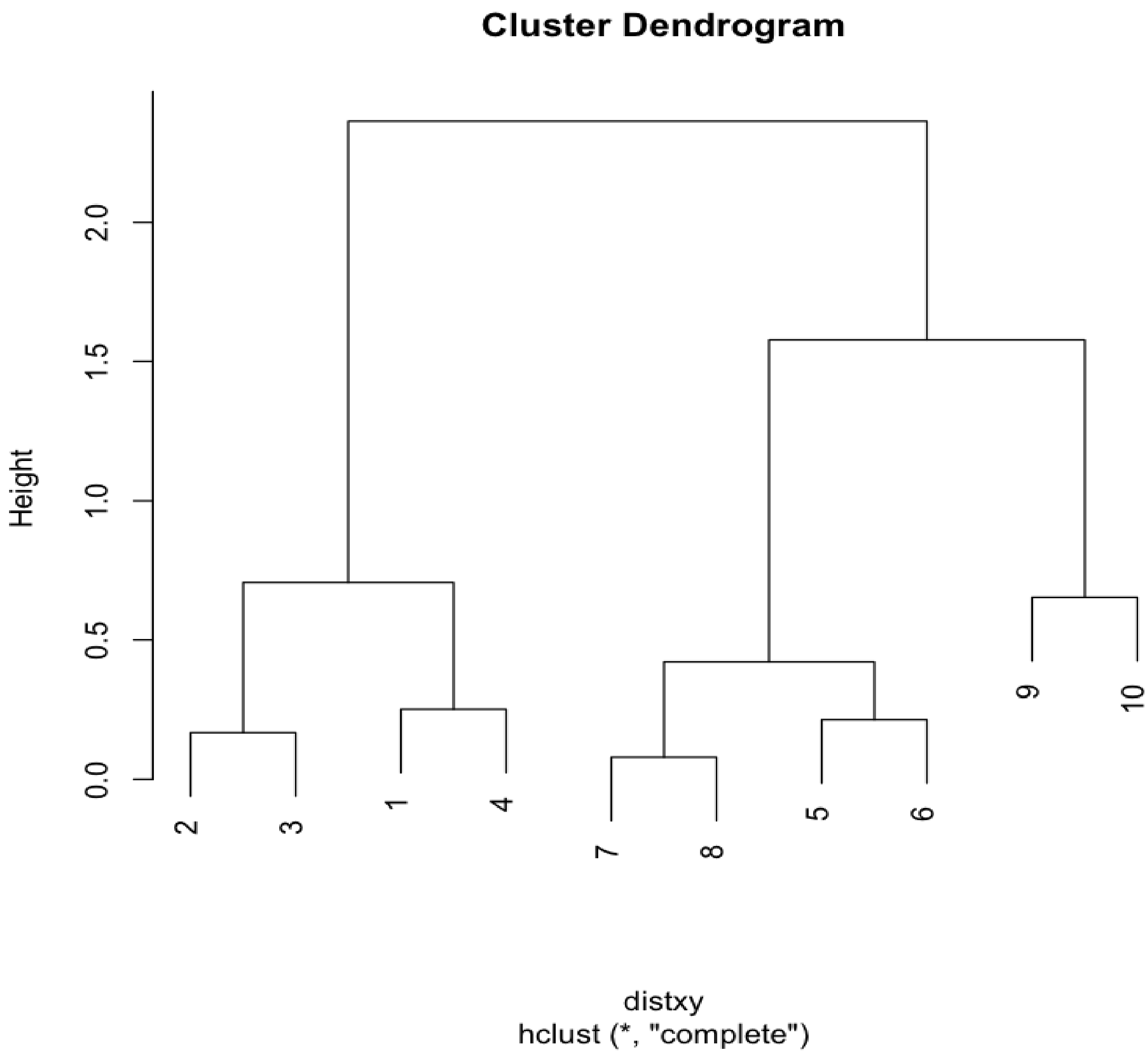
- A função de similaridade pode ser a distância Euclidiana:

$$| \overrightarrow{x} - \overrightarrow{y} | = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2} \qquad (8)$$

Funcionamento do algoritmo



	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	0.00	0.31	0.46	0.25	1.85	1.72	1.50	1.45	2.13	2.14
2	0.31	0.00	0.17	0.57	1.73	1.57	1.38	1.32	1.83	1.89
3	0.46	**0.17**	0.00	0.71	1.60	1.44	1.25	1.18	1.67	1.73
4	0.25	0.57	0.71	0.00	1.95	1.84	1.62	1.58	2.36	2.34
5	1.85	1.73	1.60	1.95	0.00	0.21	0.36	0.42	1.58	1.02
6	1.72	1.57	1.44	1.84	0.21	0.00	0.23	0.26	1.39	0.87
7	1.50	1.38	1.25	1.62	0.36	0.23	0.00	0.08	1.46	1.02
8	1.45	1.32	1.18	1.58	0.42	0.26	**0.08**	0.00	1.40	0.99
9	2.13	1.83	1.67	2.36	1.58	1.39	1.46	1.40	0.00	0.65
10	2.14	1.89	1.73	2.34	1.02	0.87	1.02	0.99	0.65	0.00

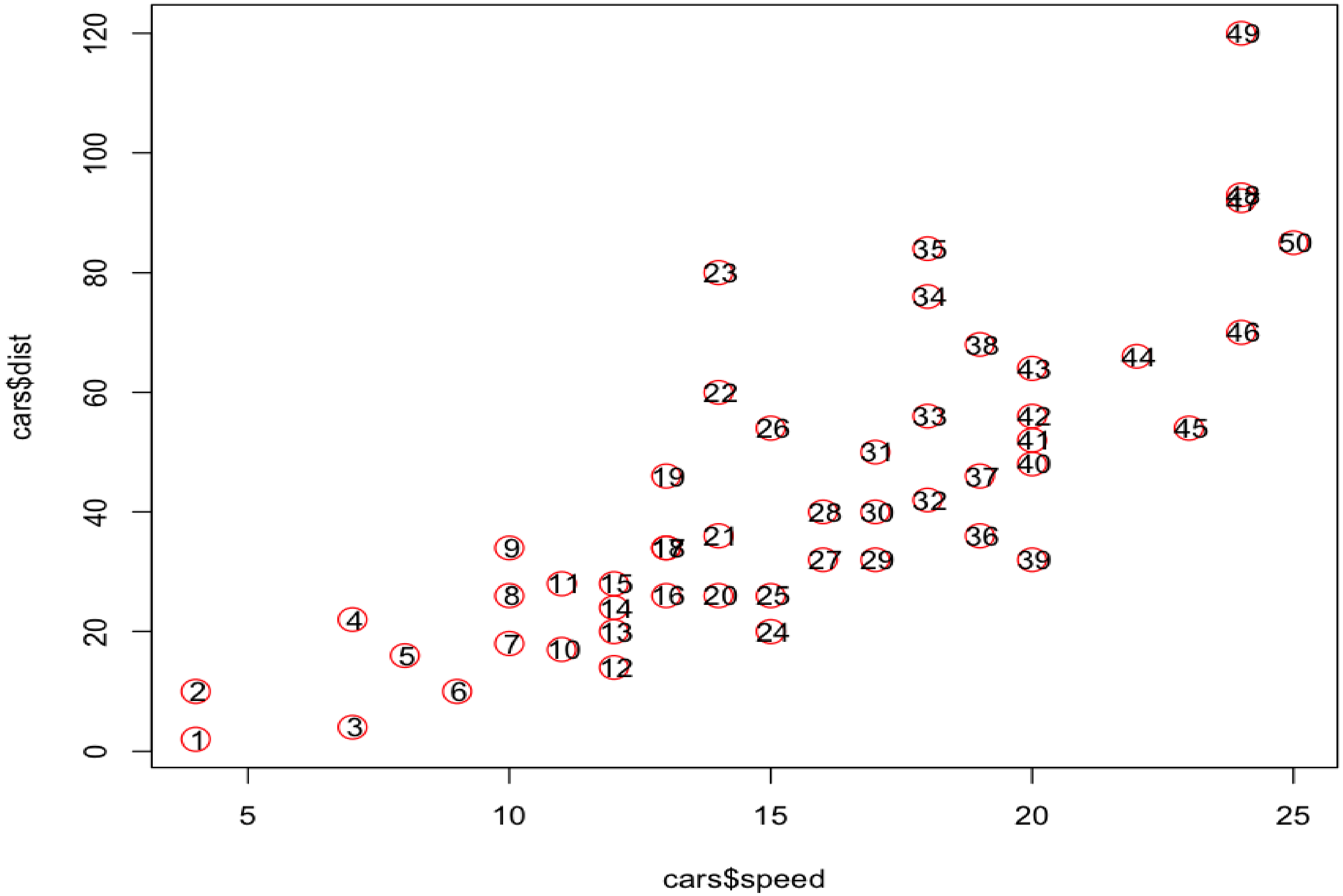

Cluster Dendrogram
Height
0.0
0.5
1.0
1.5
2.0
2
3
1
4
7
8
5
6
9
10
distxy
hclust (*, "complete")

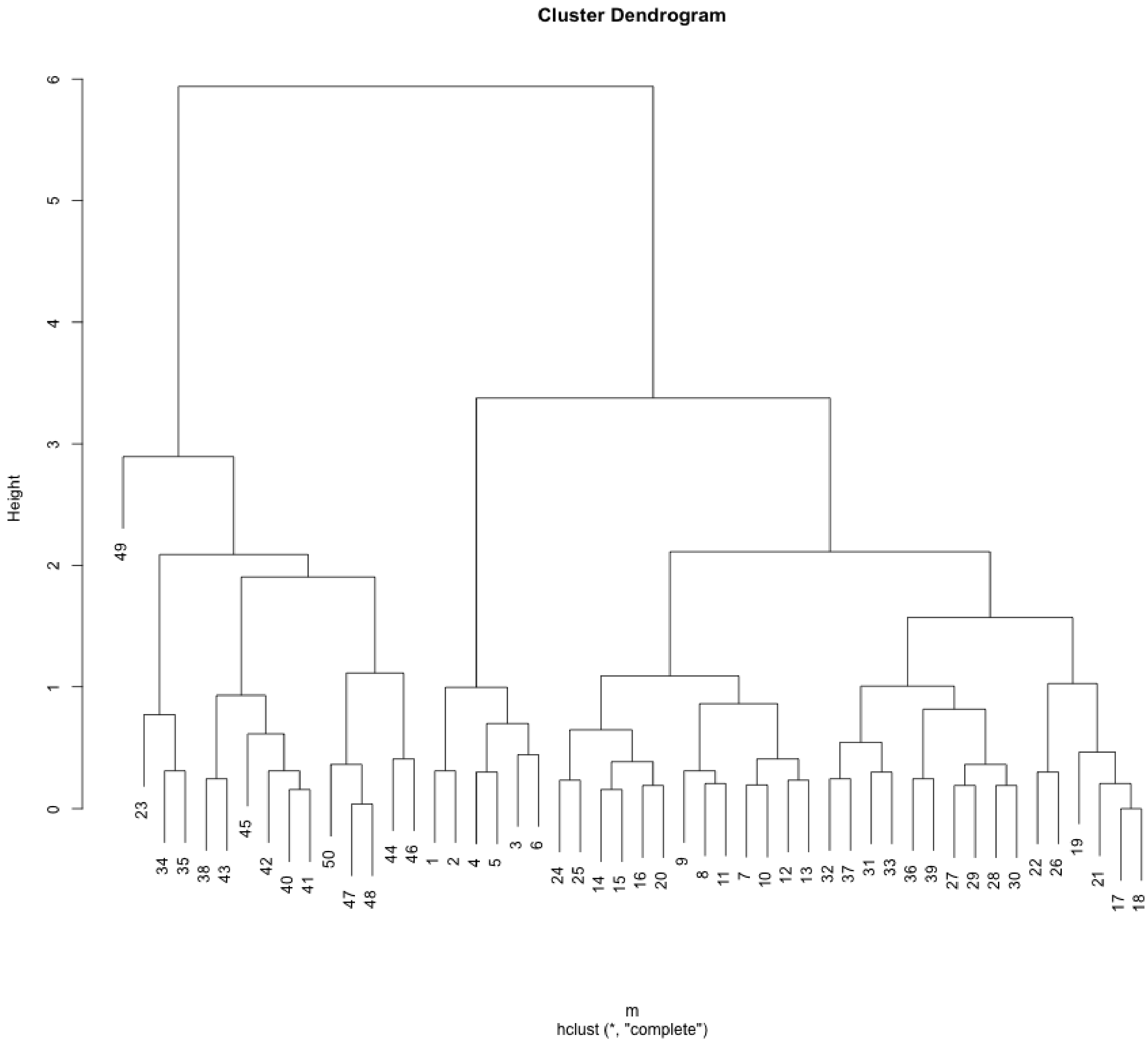
Tipos de funções de similaridade

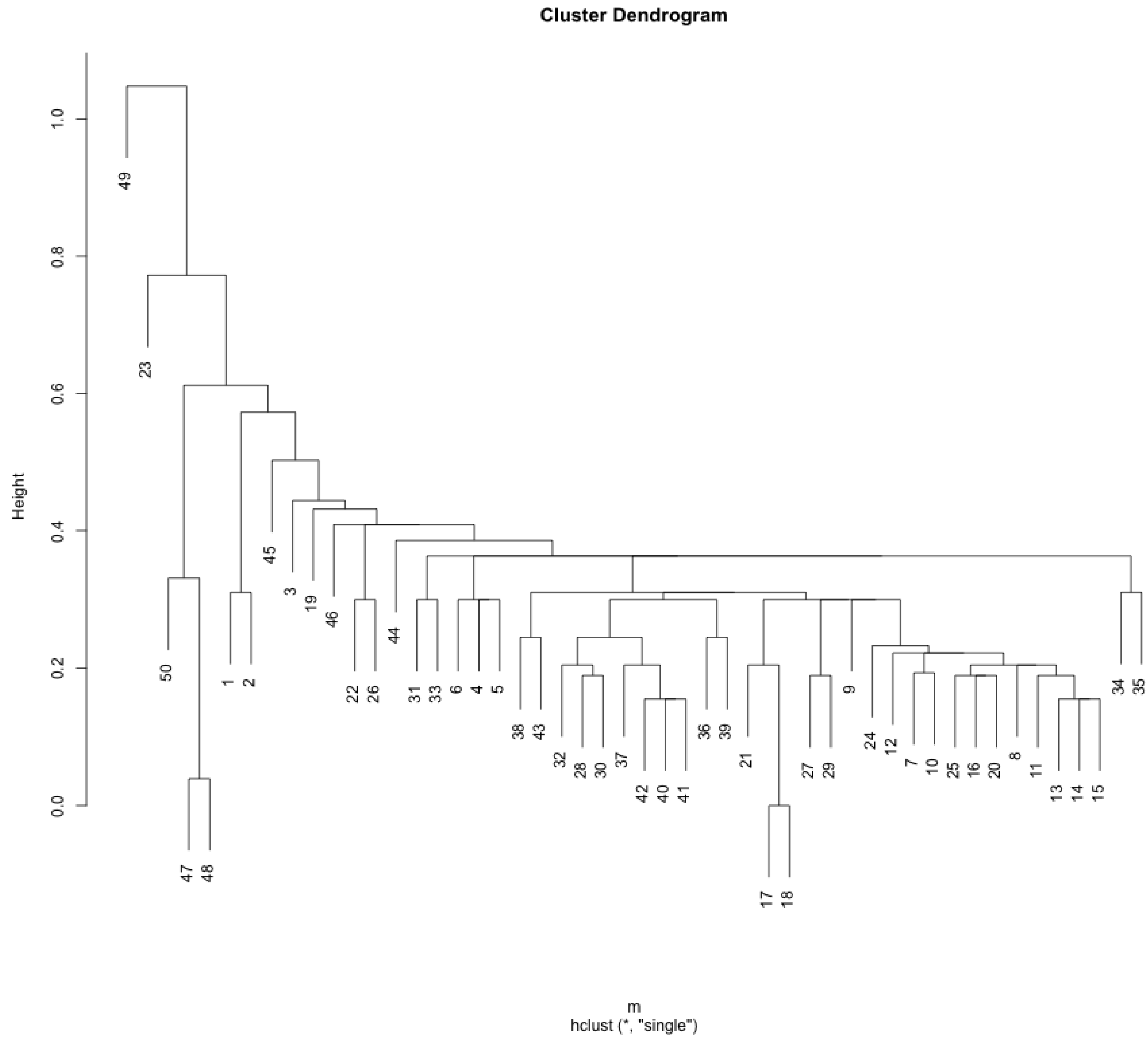
- ligação simples (**single link**): a similaridade entre dois agrupamentos é o melhor resultado retornado da similaridade entre os seus membros **mais** similares.
- ligação completa (**complete link**): a similaridade entre dois agrupamentos é o melhor resultado retornado da similaridade entre os seus membros **menos** similares.
- média do grupo (**group-average**): a similaridade entre dois agrupamentos é a **média** da similaridade entre os membros dos agrupamentos.

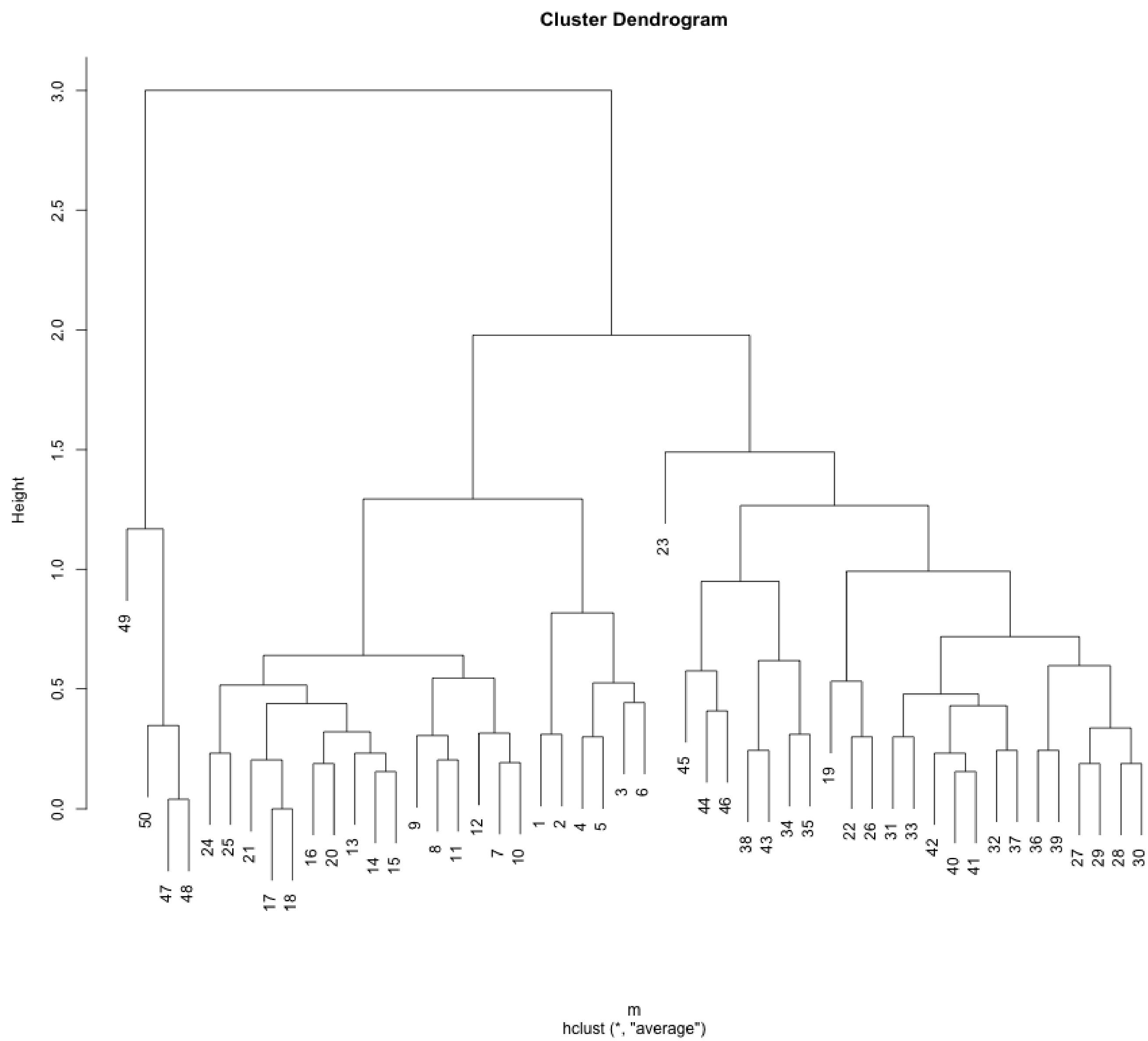
Exemplos

- Vamos utilizar um dataset sobre carros com medidas de velocidades e distância de parada. Este dataset foi gerado em 1920. As velocidades foram medidas em *mph* e a distância em *ft*.


cars$dist
cars$speed
0
20
40
60
80
100
120
5
10
15
20
25
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50


Cluster Dendrogram
Height
0
1
2
3
4
5
6
m
hclust (*, "complete")


Cluster Dendrogram
Height
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
49
23
50
47 48
1 2
45
3
19
46
22 26
44
31 33 6 4 5
38 43
32
28 30
37
42 40 41
36 39
21
17 18
27 29
9
24
12
7 10
25 16 20
8
11
13 14 15
34 35
m
hclust (*, "single")


Cluster Dendrogram
Height
0.0
0.5
1.0
1.5
2.0
2.5
3.0
49
50
47
48
24
25
21
17
18
16
20
13
14
15
9
8
11
12
7
10
1
2
4
5
3
6
23
45
44
46
38
43
34
35
19
22
26
31
33
42
40
41
32
37
36
39
27
29
28
30
m
hclust (*, "average")

Agrupamento hierárquico **top-down**

Entrada: um conjunto $x = \{x_1, \cdots, x_n\}$ de objetos,
uma funcao de coesao $coh\colon P(X) \to \Re$
e uma funcao de divisao $split\colon P(X) \to P(X) \times P(X)$
$C := \{X\}(= \{c_1\})$ {Inicia com um agrupamento com todos os objetos}
$j := 1$
while $\{\exists c_i \in C \ \mid \ |c_i| > 1\}$ **do**
  $c_u := \arg\min_{c_v \in C} coh(c_v)$ {Determina que agrupamento eh o menos coerente}
  $(c_{j+1}, c_{j+2}) := split(c_u)$ {Divide o agrupamento}
  $C := C \setminus \{c_u\} \cup \{c_{j+1}, c_{j+2}\}$
  $j := j + 2$
end while

Restrição sobre os agrupamentos hierárquicos

Agrupamento hierárquico só faz sentido se a função de similaridade é monotônica decrescente das folhas para a raiz da árvore:

$$\forall c, c', c'' \subseteq S : \min(sim(c, c'), sim(c, c'')) \geq sim(c, c' \cup c'') \tag{9}$$

Considerações Finais

Algumas considerações sobre agrupamentos

- Um agrupamento é um grupo de objetos centrados em torno de um ponto central.
- Os agrupamentos mais compactos são os preferidos.

Sumário dos atributos dos algoritmos

Agrupamento hierárquico:

- É a melhor abordagem para análise exploratória de dados.
- Fornece mais informação que agrupamento plano.
- Menos eficiente que agrupamento plano (tempo e memória gastos).

Sumário dos atributos dos algoritmos

Agrupamento plano:

- É preferível se a eficiência é um atributo importante e se o conjunto de dados é muito grande.
- O algoritmo **K-means** é o método mais simples e deve ser usado sobre novos conjuntos de dados porque os resultados são geralmente suficientes.
- **K-means** assume um espaço de representação Euclidiano, e não pode ser usado para muitos conjuntos de dados, por exemplo, dados nominais.

Referências

- Capítulo 4 do livro EMC Education Services, editor. Data Science and Big Data Analytics: Discovering, Analysing, Visualizing and Presenting Data. John Wiley & Sons, 2015.
- Capítulo 10 do livro Gareth James, Daniela Witten, Trevor Hastie, and Robert Tibshirani. An Introduction to Statistical Learning with Applications in R. Springer, 4th edition, 2014.