Medidas de Distância

Prof. Jefferson T. Oliva

Aprendizado de Máquina e Reconhecimento de Padrões (AM28CP)
Engenharia de Computação
Departamento Acadêmico de Informática (Dainf)
Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR)
Campus Pato Branco

DAINF
DEPARTAMENTO ACADÊMICO DE INFORMÁTICA
CÂMPUS PATO BRANCO

UTFPR
UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ

Sumário

Introdução

- Medidas de distância são utilizadas para quantificar a similaridade ou dissimilaridade em objetos ou conjuntos de exemplos em um conjunto de dados

- Diversas abordagens de aprendizado de máquina fazem o uso de medidas de distância:
  - Classificação
  - Agrupamento
  - Detecção de outliers
  - Redução de dimensionalidade

Introdução

- Similaridade
  - Determina o quão semelhantes são dois objetos
  - Quanto maior o valor da medida de distância, maior é a similaridade entre os objetos
  - Geralmente resultam em valores entre 0 e 1
- Dissimilaridade
  - Estabelece o quão diferentes são dois objetos
  - Quanto menor for o valor, maior é a similaridade entre o os objetos
  - O valor mínimo é 0, mas o limite superior varia (∞)
- Proximidade se refere à similaridade ou dissimilaridade

Introdução

- Diversas medidas podem ser utilizadas para o cálculo da similaridade/dissimilaridade
  - Distância Euclidiana
  - Distância de Manhattan
  - Distância de Minkowski
  - Distância de Mahalanobis
  - Coeficiente de casamento simples
  - Similaridade do cosseno
  - ...

Distância Euclidiana

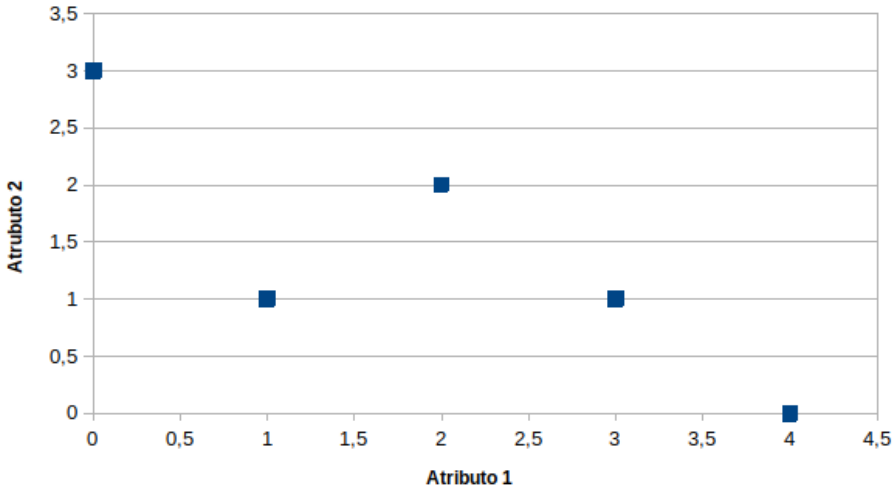
$$d(p, q) = \sqrt{\sum_{i=1}^{m} (p_i - q_i)^2}$$

onde m é o número de características, p_i e q_i são as i-ésimas características dos exemplos p e q, respectivamente

- Caso as escalas entre os atributos forem diferentes, é necessária a padronização dos seus respectivos valores

Distância Euclidiana

Exemplo	Atributo 1	Atributo 2
E1	0	3
E2	4	0
E3	2	2
E4	3	1
E5	1	1



	E1	E2	E3	E4	E5
E1	0	5,00	2,24	3,61	2,24
E2	5,00	0	2,83	1,41	3,16
E3	2,24	2,83	0	1,41	1,41
E4	3,61	1,41	1,41	0	2,00
E5	2,24	3,16	1,41	2,00	0

Matriz de distâncias

Distância de Minkowski

Distância de Minkowski

- Generalização da distância Euclidiana

$$d(p,q) = \left[\sum_{i=1}^{m}(p_i - q_i)^r\right]^{\frac{1}{r}}$$

  - $r = 1$: distância de Manhattan (Norma L_1)
  - $r = 2$: distância Euclidiana (Norma L_2)
  - $r \to \infty$: distância de Chebyshev (Norma L_∞)

Distância de Minkowski

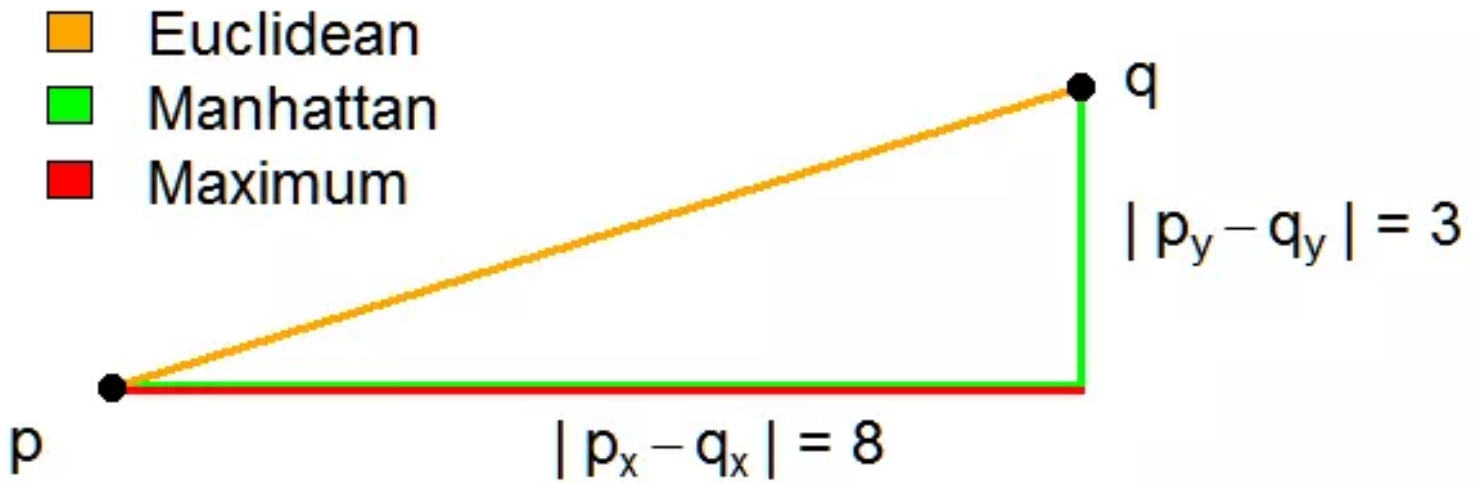
Exemplo	Atributo 1	Atributo 2
E1	0	3
E2	4	0
E3	2	2
E4	3	1
E5	1	1

L1	E1	E2	E3	E4	E5
E1	0	7,00	3,00	5,00	3,00
E2	7,00	0	4,00	2,00	4,00
E3	3,00	4,00	0	2,00	2,00
E4	5,00	2,00	2,00	0	2,00
E5	3,00	4,00	2,00	2,00	0

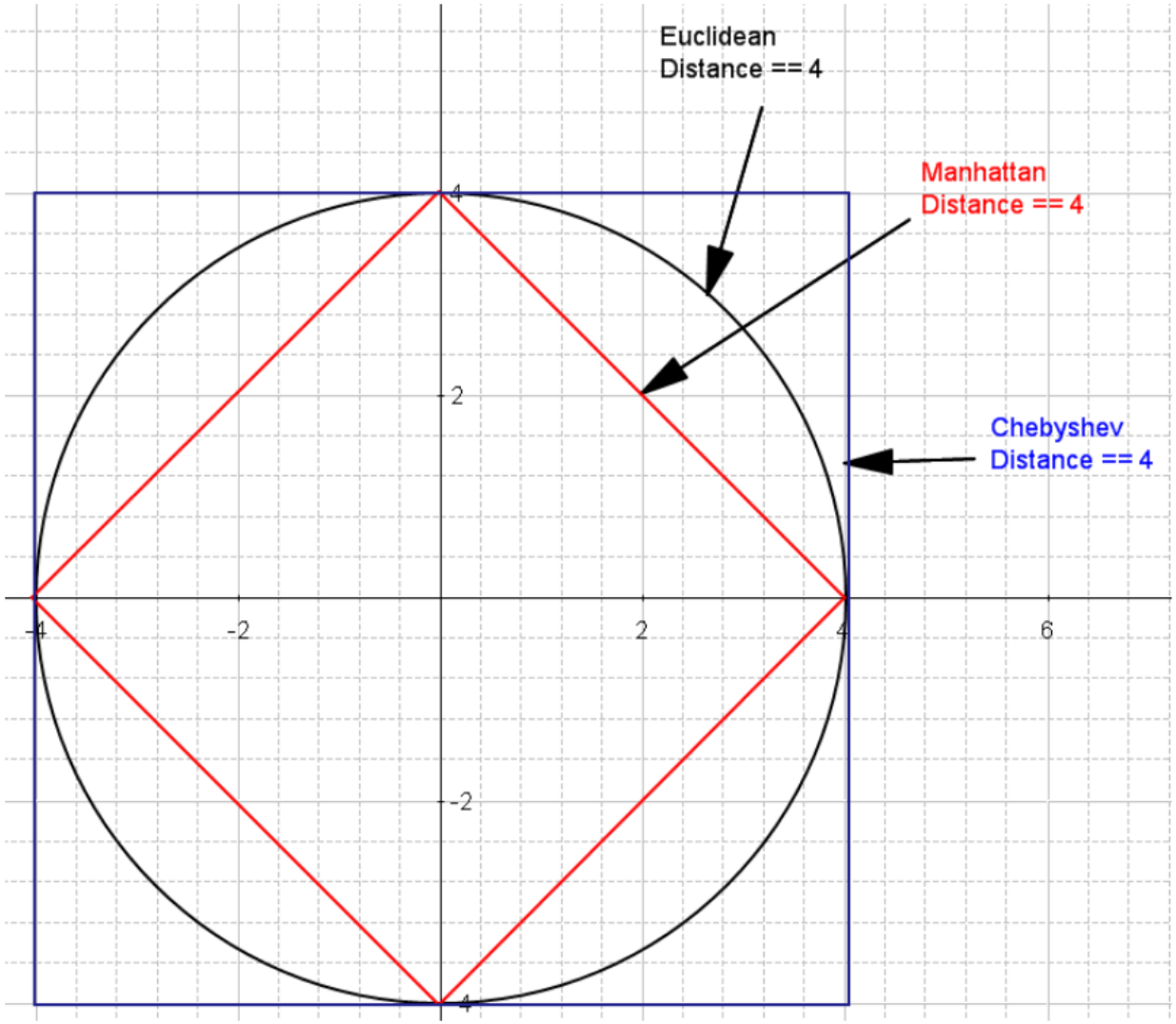
L2	E1	E2	E3	E4	E5
E1	0	5,00	2,24	3,61	2,24
E2	5,00	0	2,83	1,41	3,16
E3	2,24	2,83	0	1,41	1,41
E4	3,61	1,41	1,41	0	2,00
E5	2,24	3,16	1,41	2,00	0

L∞	E1	E2	E3	E4	E5
E1	0	5	2	3	2
E2	5	0	3	1	3
E3	2	2	0	1	1
E4	3	1	1	0	2
E5	2	3	1	2	0

Distância de Minkowski



Distância de Minkowski



Distância de Mahalanobis

Distância de Mahalanobis

$$d(p,q) = \sqrt{(p-q)^T \sum^{-1} (p-q)}$$

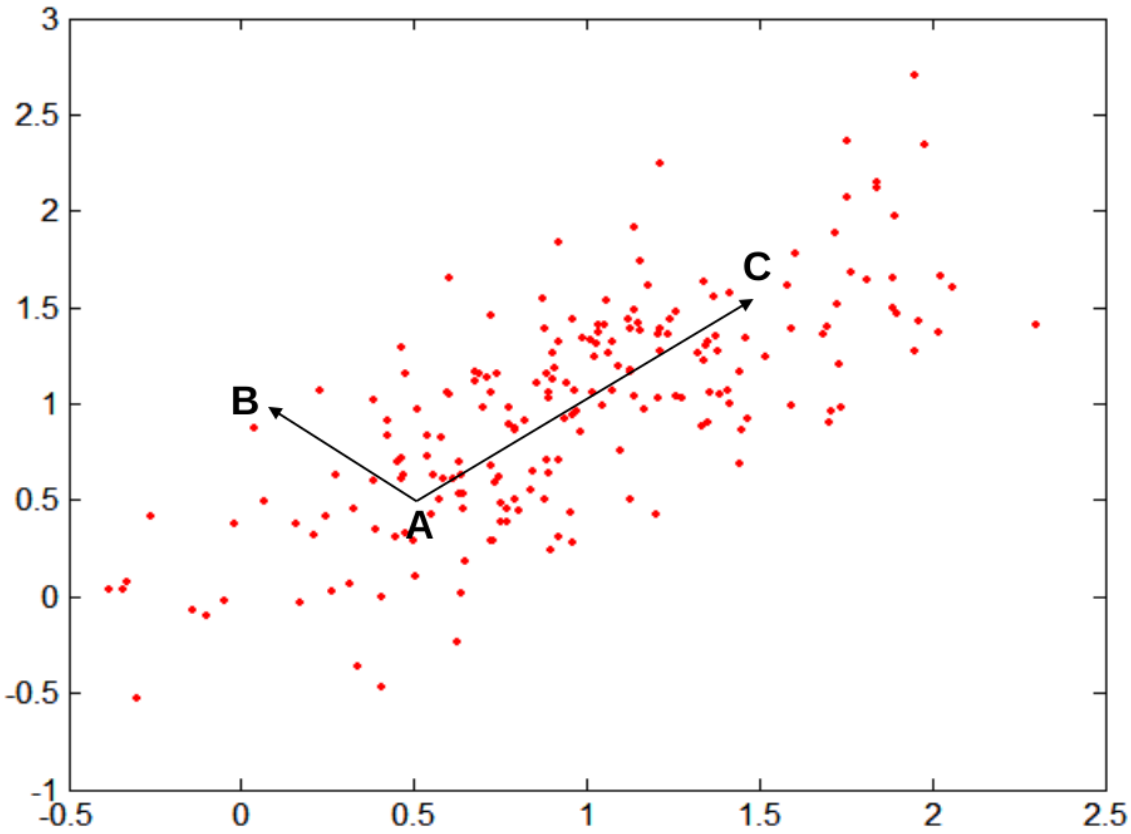
- Onde:
  - $\sum$ é a matriz de co-variância da base de dados X

$$\sum_{i,j} = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^{n} (x_{ki} - \overline{x_i})(x_{kj} - \overline{x_j})$$

  - Caso $\sum$ seja uma matriz identidade, a distância de Mahalanobis é a mesma que a Euclideana

- Essa medida de distância é útil para a detecção de *outliers*

Distância de Mahalanobis



$$\Sigma = \begin{bmatrix} 0.3 & 0.2 \\ 0.2 & 0.3 \end{bmatrix}$$

A: (0.5, 0.5)

B: (0, 1)

C: (1.5, 1.5)

Mahal(A,B) = 5

Mahal(A,C) = 4

Similaridade entre Vetores Binários

Similaridade entre Vetores Binários

- Os exemplos comparados contêm apenas atributos binários
- Para mensurar a similaridade entre exemplos binários, são computados os seguintes parâmetros:
  - M_{00} número de atributos em que $p = 0$ e $q = 0$
  - M_{01} número de atributos em que $p = 0$ e $q = 1$
  - M_{10} número de atributos em que $p = 1$ e $q = 0$
  - M_{11} número de atributos em que $p = 1$ e $q = 1$
- Exemplos de medidas de distância: coeficiente de casamento simples e distância de Jaccard

Similaridade entre Vetores Binários

- Coeficiente de casamento simples

$$d(p,q) = \frac{M_{00} + M_{11}}{M_{00} + M_{10} + M_{01} + M_{11}}$$

  - Conta igualmente 0's e 1's
  - Adequada para atributos simétricos

- Distância (coeficiente) de Jaccard

  ou

$$d(p,q) = \frac{M_{11}}{M_{10} + M_{01} + M_{11}}$$

  - Ignora as ocorrências de pares de 0's (*e.g.* $p_i = p_j = 0$) para lidar adequadamente com atributos assimétricos
    - Afinal, 0 indica apenas a ausência de uma característica

Similaridade entre Vetores Binários

- Exemplo

  p = [1 0 0 0 0 0 0 0 0 0]
  q = [0 0 0 0 0 0 1 0 0 1]

  - $M_{00} = 7$
  - $M_{01} = 2$
  - $M_{10} = 1$
  - $M_{11} = 0$

  - Coeficiente de casamento simples = $\frac{7+0}{7+2+1+0} = 0,7$
  - Coeficiente de Jaccard = $\frac{0}{2+1+0} = 0$

Similaridade entre Vetores Binários

- Exercício: qual é a medida de distância que resulta no menor valor para os vetores abaixo? Manhattan, Euclideana, coeficiente de casamento simples ou coeficiente de Jaccard?

  $p = 1\ 0\ 0\ 1\ 1\ 0\ 1\ 0\ 1\ 1\ 1\ 0$

  $q = 0\ 1\ 0\ 0\ 1\ 1\ 0\ 0\ 1\ 0\ 1\ 1$

Similaridade do Cosseno

Similaridade do Cosseno

- Comumente utilizada no processamento de linguagem natural
  - Os documentos são representados por vetores, onde cada atributo representa a frequência de ocorrência de uma palavra no texto

$$cos(p, q) = \frac{p \bullet q}{||p||.||q||}$$

onde

- $\bullet$ é o produto interno entre os vetores

$||p||$ é a norma do vetor p

Similaridade do Cosseno

- Exemplo:

  p = [3 2 0 5 0 0 0 2 0 0]
  q = [1 0 0 0 0 0 0 1 0 2]

  - $p \bullet q =$
    $3*1+2*0+0*0+5*0+0*0+0*0+0*0+0*2+1+0*0+0*2 = 5$
  - $||p|| = \sqrt{3^2 + 2^2 + 0^2 + 5^2 + 0^2 + 0^2 + 0^2 + 2^2 + 0^2 + 0^2} =$
    $\sqrt{42} = 6,48074069840786$
  - $||q|| = \sqrt{1^2 + 0^2 + 0^2 + 0^2 + 0^2 + 0^2 + 0^2 + 1^2 + 0^2 + 2^2} =$
    $\sqrt{6} = 2,449489742783178$
  - $cos(p, q) = \frac{5}{6,48074069840786*2,449489742783178} =$
    $0,314970394174356$
  - Distância $= 1 - cos(p, q) = 0,685029605825644$

Propriedades Comuns de Distância e de Similaridade

- Medidas de distância, como a Euclidiana, possuem algumas propriedades bem conhecidas
  - $d(p, q) \geq 0$ para todo p e q
  - $d(p, q) = 0$ apenas se $p = q$
  - $d(p, q) = d(q, p)$ para todo p e q (simetria)
  - $d(p, r) \leq d(p, q) + d(q, r)$ para todo p, q e r (desigualdade triangular)

    Onde $d(p, q)$ é a distância (dissimilaridade) entre os exemplos p e q
  - Uma distância que satisfaz essas propriedades é considerada uma medida de distância

Propriedades Comuns de Distância e de Similaridade

- Medidas de similaridade também possuem algumas propriedades bem conhecidas:
  - $s(p, q) = 1$ (similaridade máxima) apenas se $p = q$
  - $s(p, q) = s(q, p)$ para todo p e q (simetria)

Onde $s(p, q)$ é a similaridade entre os exemplos p e q

Referências


CASANOVA, D.
Distance Measures. Aprendizado de Máquina.
Slides. Engenharia de Computação. Dainf/UTFPR, 2020.


RASCHKA, S.; MIRJALILI, V.
Python Machine Learning.
Packt, 2017.


TAN P.; STEINBACK M.; KUMAR V.
Introduction to Data Mining.
Pearson, 2006.