Inteligência Artificial

Raoni F. S. Teixeira

Aula 13 - Aprendizado Não-supervisionado: Clustering k-means e Autoencoder

1 Introdução

O objetivo do aprendizado não supervisionado é identificar padrões em conjuntos de dados que não possuem rótulos ou respostas pré-definidas. Diferentemente do aprendizado supervisionado, não há uma saída específica para guiar o treinamento.

Nesta aula, vamos estudar dois métodos: k-means e autoencoder, que abordam problemas como agrupamento e redução de dimensionalidade.

2 Algoritmo k-means

K-means é um algoritmo de *clustering* que recebe um conjunto de dados de treinamento $\{x^{(1)}, \ldots, x^{(m)}\}$ e busca agrupá-los em k subconjuntos coesos chamados de *clusters*. Cada subconjunto j é representado pelo seu centróide μ_j. O algoritmo pode ser descrito pelos seguintes passos:

1. Inicialize os centróides $\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_k \in \mathbb{R}^n$ aleatoriamente.
2. Repita até a convergência:
   - Para cada exemplo i, atualize a atribuição do cluster:
   $$c^{(i)} \leftarrow \arg\min_j \|x^{(i)} - \mu_j\|^2.$$
   - Para cada centróide j, atualize sua posição:
   $$\mu_j \leftarrow \frac{\sum_{i=1}^{m} \mathbb{1}\{c^{(i)} = j\} x^{(i)}}{\sum_{i=1}^{m} \mathbb{1}\{c^{(i)} = j\}}.$$

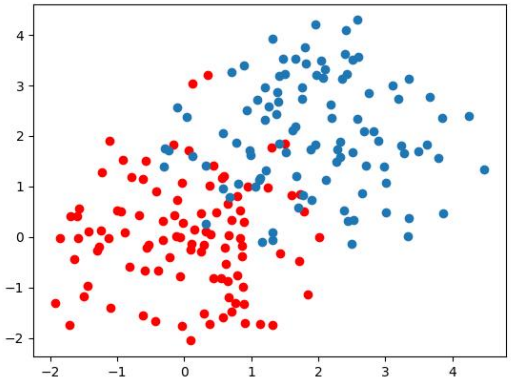


Figura 1: Distribuição gaussiana com duas classes. Vermelho: $\mu_1 = [0, 0]$. Azul: $\mu_2 = [2, 2]$.

No algoritmo acima, k é um parâmetro que representa o número de clusters desejado, enquanto os centróides μ_j indicam as posições estimadas dos centros desses clusters. A inicialização dos centróides pode ser feita escolhendo aleatoriamente k exemplos de treinamento e definindo os centróides iguais aos valores desses exemplos.

A Figura 1 mostra dois grupos de pontos gerados por distribuições gaussianas: pontos vermelhos com média $\mu_1 = [0, 0]$ e azuis com média $\mu_2 = [2, 2]$, ambos com matriz de covariância $C = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$.

A Figura 2 mostra o algoritmo k-means aplicado aos dados da Figura 1. A cada iteração, o algoritmo alterna entre duas etapas:

1. Atribuição: cada ponto é associado ao centróide mais próximo
2. Atualização: os centróides são recalculados como a média dos pontos associados

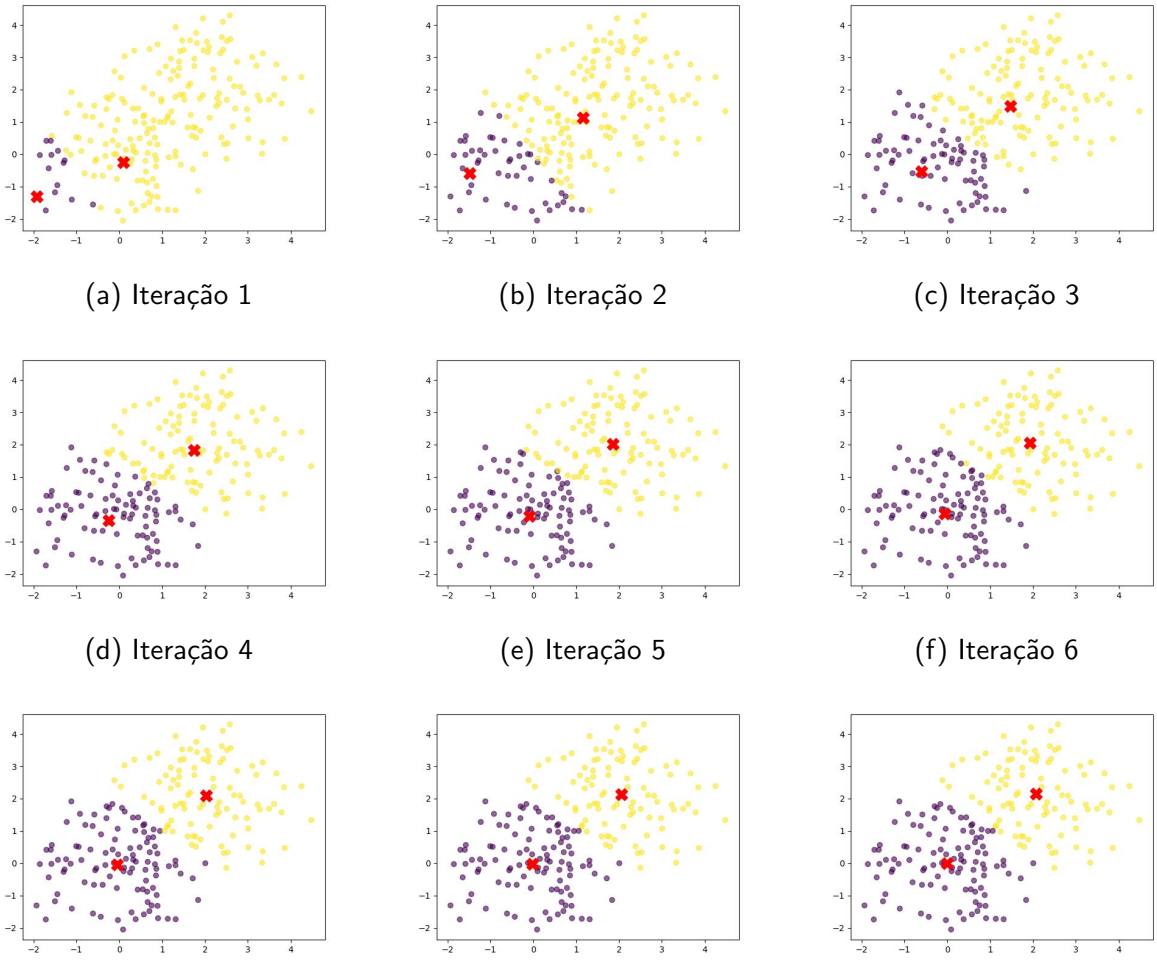
Após convergência, os centróides ($c_1 = [-0.003, -0.009]$ e $c_2 = [2.071, 2.143]$) aproximam-se das médias originais.

O algoritmo minimiza a função de custo:

$$J = \sum_{i=1}^{k} \sum_{x \in C_i} \|x - \mu_i\|^2,$$

em que C_i corresponde aos pontos do cluster i, μ_i é i centróide do cluster i e $\|x - \mu_i\|^2$ é a distância euclidiana ao quadrado.

A Figura 3 mostra a função de custo e a convergência do algoritmo em cada iteração. A medida que os centroides se aproximam dos valores iniciais (Figura 2 a)-f)) a função de custo diminui (Figura 3).



(a) Iteração 1 (b) Iteração 2 (c) Iteração 3

(d) Iteração 4 (e) Iteração 5 (f) Iteração 6

(g) Iteração 7 (h) Iteração 8 (i) Iteração 9

Figura 2: Evolução do k-means em nove iterações. Cruzes vermelhas indicam centróides. Os valores finais aproximam-se das médias originais.

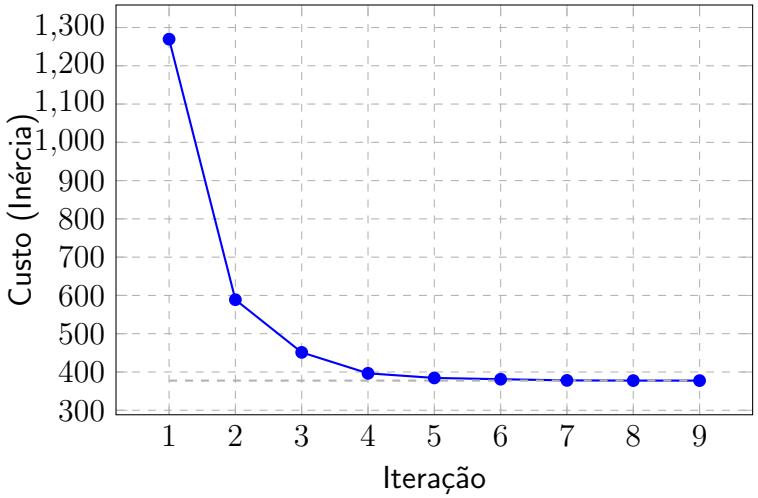


Figura 3: Convergência do K-Means: Função de Custo ao longo das iterações.

2.1 Aplicações

No mundo real, o k-means é utilizado em aplicações de segmentação de mercado. Por exemplo, uma fábrica de camisas pode utilizar o algoritmo para agrupar clientes com base em medidas corporais como circunferência do tronco e comprimento dos braços.

A Figura 4 mostra um agrupamento de pessoas em tamanhos de camisas (P, M, G) com base nessas medidas. As cruzes correspondem aos centróides. Ao escolher cuidadosamente os parâmetros do algoritmo, a fábrica pode garantir que a maior parte da população será atendida com seus tamanhos padrão.

O k-means também pode ser utilizado para reduzir a resolução de imagens através de quantização de cores. A Figura 5 mostra um exemplo desse processo usando diferentes valores de k (32, 16, 8, 4 e 2 cores).

O algoritmo funciona da seguinte forma:

- Agrupa as cores da imagem original em k clusters
- Substitui cada pixel pelo centróide do seu cluster correspondente
- Gera uma nova imagem com apenas k cores distintas

Esse processo reduz efetivamente a complexidade da imagem enquanto mantém suas características principais.

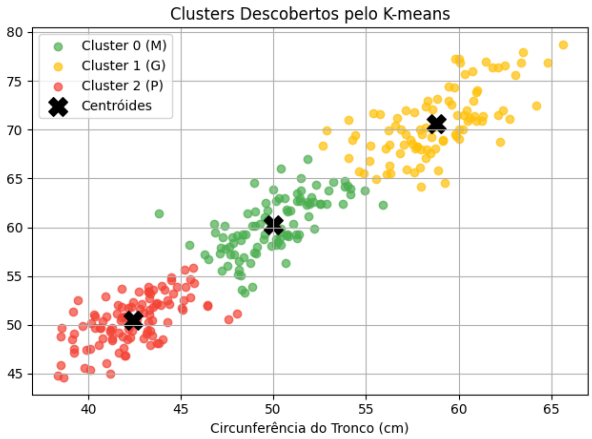


Figura 4: Agrupamento de tamanhos de camisas usando k-means com base em medidas corporais

3 Autoencoders

Um autoencoder é uma rede neural que aprende representações compactas de dados de forma não supervisionada. Seu funcionamento baseia-se em dois processos:

- **Codificação**: Transforma os dados em uma representação compacta (espaço latente) e
- **Decodificação**: Reconstrói os dados originais a partir dessa versão comprimida.

A Figura 6 mostra como esses dois processos são incorporados na arquitetura do modelo. O **Encoder** é uma rede neural que reduz progressivamente a dimensionalidade da entrada (por exemplo, $784 \to 256 \to 32$). O **Espaço Latente** é a representação da entrada original compactada $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^K$, com $Kmuitomenorque D$. Por fim, o **Decoder** é a rede que reconstitui os dados a partir do espaço latente z – a dimensão aumenta progressivamente, por exemplo, $32 \to 256 \to 784$.

Tanto o encoder quanto o decoder (representados pelos trapézios vermelhos na Figura 6) podem ser implementados com diversos componentes neurais — desde camadas densas até arquiteturas convolucionais ou *transformers*.

O autoencoder aprende minimizando o erro de reconstrução:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \|\mathbf{x}_i - \text{Decoder}(\text{Encoder}(\mathbf{x}_i))\|^2, \tag{1}$$

em que $\mathbf{x}_i$ representa os dados originais e n o número de amostras. Essa função de custo mede a perda de informação durante o processo de compressão e reconstrução. Quanto menor o valor de $\mathcal{L}$ mais precisa é a reconstrução $\text{Decoder}(\text{Encoder}(\mathbf{x}_i))$.

(a) Imagem original (b) $k = 32$ cores (c) $k = 16$ cores

(d) $k = 8$ cores (e) $k = 4$ cores (f) $k = 2$ cores

Figura 5: Quantização de cores usando k-means com diferentes valores de k

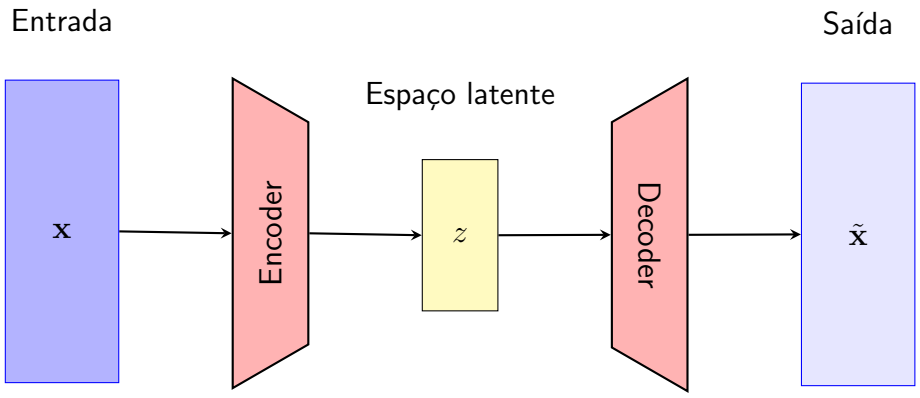


Figura 6: Arquitetura de um autoencoder

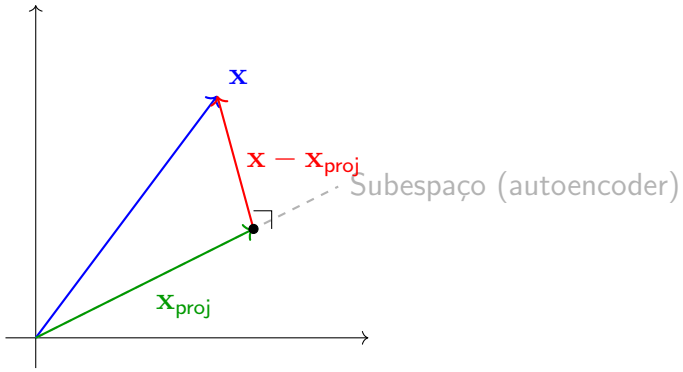


Figura 7: Projeção ortogonal no subespaço do autoencoder linear.

3.1 Autoencoder Linear

O autoencoder linear é a versão mais simples de autoencoder. Ele usa uma rede neural com apenas uma camada oculta e uma função de ativação linear.

Matematicamente, ele reconstrói a entrada $\mathbf{x}$ como:

$$\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{U}\mathbf{V}\mathbf{x}$$

em que $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{K\times D}$ é uma matriz de pesos que comprime os dados para o subespaço K-dimensional S e $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{D\times K}$ reconstrói a aproximação no espaço original.

Na solução ideal, $\mathbf{U}$ e $\mathbf{V}$ formam uma projeção ortogonal:

$$\mathbf{U} = \mathbf{Q}, \quad \mathbf{V} = \mathbf{Q}^\top \tag{2}$$

com $\mathbf{Q}$ sendo uma base ortonormal que satisfaz $\mathbf{Q}^\top\mathbf{Q} = \mathbf{I}_K$.

Este modelo resolve simultaneamente dois problemas:

1. Minimiza o erro de reconstrução:

$$\underset{\mathbf{U},\mathbf{V}}{\text{arg-min}} \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \|\mathbf{x}^{(i)} - \tilde{\mathbf{x}}^{(i)}\|^2 \tag{3}$$

2. Maximiza a variância:

$$\max \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \|\tilde{\mathbf{x}}^{(i)} - \boldsymbol{\mu}\|^2 \tag{4}$$

Geometricamente, o autoencoder linear projeta o vetor $\mathbf{x}$ ortogonalmente em um subespaço linear. A projeção $\mathbf{x}_{\text{proj}}$ é o ponto mais próximo de $\mathbf{x}$ nesse subespaço. A diferença $\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\text{proj}}$ é o erro de projeção. A Figura7 ilustra esses conceitos em duas dimensões.

A decomposição é dada por:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_{\text{proj}} + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\text{proj}})$$

em que $\mathbf{x}_{\text{proj}}$ representa a parte explicada pelo modelo e $\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\text{proj}}$ é o erro não explicado.

Pelo Teorema de Pitágoras:

$$\|\mathbf{x}\|^2 = \|\mathbf{x}_{\text{proj}}\|^2 + \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\text{proj}}\|^2$$

Esta equação mostra que a energia (variância) total do vetor é a soma da energia (variância) explicada e do erro residual.

A solução deste problema é idêntica à Análise de Componentes Principais (PCA), que pode ser resolvida analiticamente usando projeções ortogonais.

A Figura 8 mostra a evolução da função de perda durante o treinamento do modelo de reconstrução linear. O valor da função de perda diminui consistentemente a cada época, indicando a convergência do algoritmo de otimização.

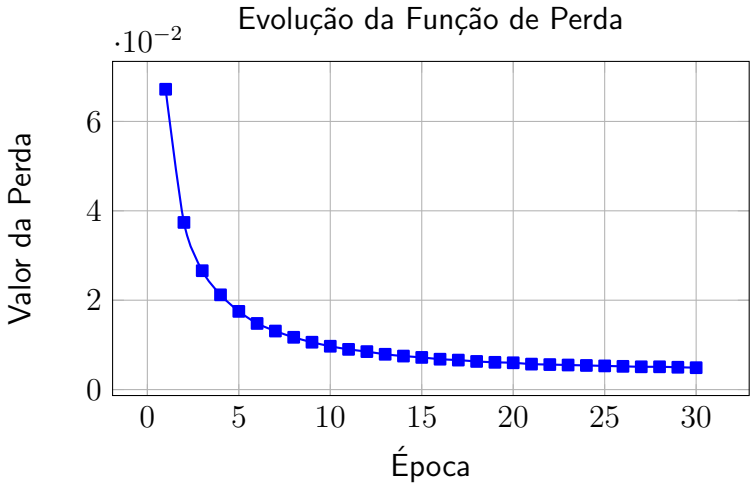


Figura 8: Evolução da função de perda durante o treinamento do autoencoder linear

A Figura 9 apresenta os resultados da reconstrução para cinco dígitos manuscritos do conjunto de dados MNIST, utilizando um espaço latente de dimensão 64 (ou seja, os 400 pixels originais - 20×20 - são comprimidos em um vetor de 64 dimensões). A primeira linha exibe as imagens originais, enquanto a segunda linha mostra as reconstruções geradas pelo modelo. Os resultados demonstram uma reconstrução razoavelmente fiel, porém com um leve efeito de borramento, característico da compressão linear.

Figura 9: Resultados de reconstrução do autoencoder linear para dígitos MNIST (acima: originais; abaixo: reconstruções)

3.2 Autoencoder Convolucional

Os autoencoders não lineares superam as limitações dos modelos lineares ao aprender representações complexas em variedades não lineares (*manifolds*). Nesses modelos, o decodificador define o *manifold* como sua imagem, realizando uma redução de dimensionalidade que preserva estruturas não lineares nos dados.

Um exemplo eficiente é o autoencoder convolucional com as seguintes características:

- **Codificador**:
  - Três camadas convolucionais com filtros 3×3
  - Função de ativação ReLU após cada operação convolucional
  - Operações de *MaxPooling* para redução dimensional progressiva
  - Camada densa final projetando em espaço latente de 128 dimensões
- **Decodificador**:
  - Camada densa inicial expandindo a representação latente
  - Três camadas de convolução transposta para reconstrução espacial
  - Função de ativação sigmoide na camada de saída (valores em $[0, 1]$)

A Figura 10 apresenta os resultados da reconstrução com um autoencoder convolucional para cinco dígitos manuscritos do conjunto de dados MNIST no espaço latente de dimensão 128. A primeira linha exibe as imagens originais, enquanto a segunda linha mostra as reconstruções geradas pelo modelo. Os resultados demonstram alta fidelidade na reconstrução dos padrões e ausência de borramento.

A Figura 11 mostra a evolução da função de perda durante o treinamento do modelo de reconstrução linear. O gráfico mostra uma rápida diminuição da função de perda nos primeiros passos, seguida por uma convergência gradual.

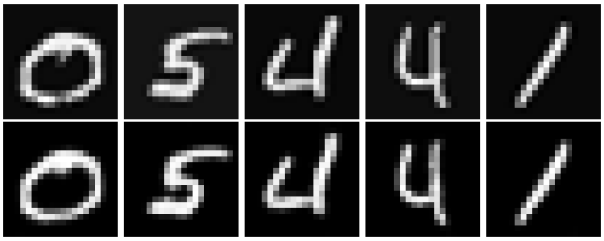


Figura 10: Resultados de reconstrução do autoencoder convolucional para dígitos MNIST (acima: originais; abaixo: reconstruções).

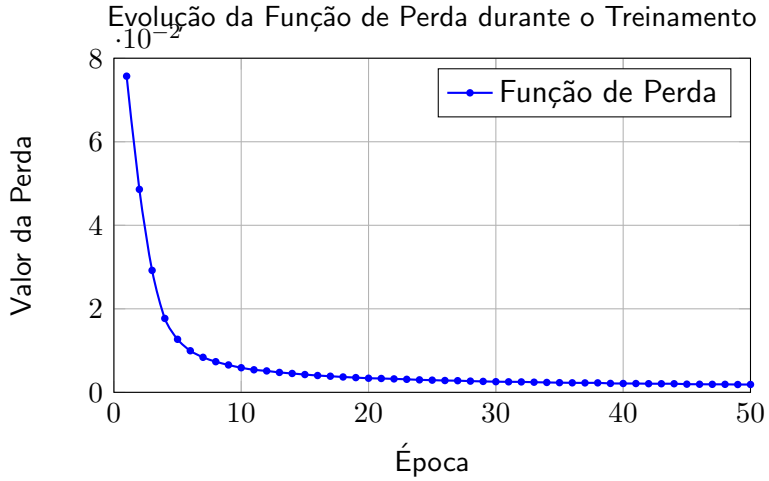


Figura 11: Evolução da função de perda do autoencoder convolucional.

4 Aplicações

Autoencoders são aplicados a muitos problemas, incluindo reconhecimento facial, detecção de características, detecção de anomalias e aprendizagem do significado das palavras. Também podem ser utilizados para síntese de dados, para gerar aleatoriamente novos dados semelhantes aos dados de entrada (treinamento).