PLANO DE TRABALHO

Programa de Mestrado em Ciência da Computação Universidade Federal de Uberlândia

Aluno: Rodolfo Martignon Sevilhano Mendes

Orientador: Prof. Dr. Humberto Luiz Razente

Título do Trabalho: Uma nova abordagem para aumento da escalabilidade na geração de agrupamentos hierárquicos de séries espaço-temporais

Título do Trabalho: Efeitos da Amostragem no Agrupamento Hierárquico de Séries Temporais

Data de Início como Aluno Regular: 11/08/2014

Previsão da Defesa: Fevereiro de 2017

1 Introdução

A análise de séries temporais de imagens de satélite tem se mostrado uma importante ferramenta no estudo dos impactos das mudanças climáticas globais. A partir destas séries temporais, é possível analisar o uso e a cobertura do solo em uma determinada região, e como este uso varia ao longo do tempo.

Uma das possíveis técnicas para extrair conhecimento destas imagens é o agrupamento de séries temporais. A partir das imagens de satélite, métricas como temperatura da superfície, índice de reflexão e índice de vegetação são extraídos para cada pixel da imagem, para cada instante no tempo. O agrupamento das séries temporais obtidas, combinado com a visualização em mapa a quais grupos cada série pertence, permite ao tomador de decisão entender como o uso do solo está distribuído em uma região.

Por sua vez, o avanço das tecnologias de sensoreamento têm permitido que satélites coletem imagens com resoluções cada vez maiores. Isso significa que os conjuntos de dados são representados por um número cada vez maior de séries temporais, na ordem de milhões e até mesmo bilhões de séries para serem agrupadas.

Por meio do algoritmo k-médias é possível agrupar dados com complexidade de tempo linear, O(n). Porém, esse algoritmo possui algumas desvantagens com relação ao significado dos agrupamentos gerados. Uma destas desvantagens é a necessidade do usuário fornecer antecipadamente o número de agrupamentos desejados através do parâmetro k. Ou seja, é necessário que o usuário tenha algum conhecimento prévio sobre o domínio do problema e que ele tenha uma estimativa do número de grupos existente no conjunto

de dados. Outra limitação está relacionada ao formato dos agrupamentos no espaço dos atributos. No k-médias, cada instância do conjunto de dados é atribuída ao grupo cujo centro esteja mais próximo, que por sua vez é recalculado a cada iteração. Assim, os agrupamentos tendem a ter formatos esféricos ou regiões densas são divididas por hiperplanos separadores projetados, o que nem sempre corresponde à melhor descrição dos dados.

Uma abordagem alternativa são os algoritmos hierárquicos aglomerativos. Nestes algoritmos, cada instância do conjunto de dados é colocada em seu próprio grupo inicialmente. Em seguida, os agrupamentos são aglutinados em grupos maiores, formando uma hierarquia de grupos. Diferentemente do k-médias, o usuário não precisa fornecer o número k de grupos previamente. Embora a saída do algoritmo hierárquico seja um dendograma (uma hierarquia de grupos), este pode ser convertido em uma partição de k grupos por meio de uma poda na árvore resultante. Por sua vez, as partições resultantes deste processo não estão limitadas a formatos esféricos, sendo o algoritmo capaz de detectar agrupamento com formatos arbitrários. Apesar dessas vantagens, os algoritmos hierárquicos tem alto custo computacional, de ordem $O(n^2)$ (quadrática) ou $O(n^3)$ (cúbica) para tempo e espaço, tornando sua aplicação impraticável para grandes conjuntos de dados como séries temporais de imagens de satélites de alta resolução.

Neste trabalho, propomos uma nova abordagem para que se possa aproveitar as vantagens dos algoritmos hierárquicos mesmo em grandes conjuntos de dados. Esta abordagem consiste em, inicialmente, reduzir o conjunto de dados, e em seguida, aplicar o agrupamento hierárquico neste conjunto de dados reduzido. Por fim, as instâncias restantes são atribuídas ao seu vizinho mais próximo (1-NN) completando o agrupamento. Esperase que, com esta abordagem, seja possível aplicar o agrupamento hierárquico em tempo consideravelmente menor, mas sem perder a qualidade dos agrupamentos resultantes.

1.1 Objetivos e Desafios de Pesquisa

O objetivo geral deste trabalho é desenvolver uma abordagem escalável para o agrupamento hierárquico de séries espaço-temporais de imagens de satélite que permita reduzir significativamente a complexidade de tempo de execução e espaço do algoritmo, sem no entanto reduzir a qualidade dos agrupamentos produzidos. Especificamente, deseja-se obter:

- Desenvolvimento de uma abordagem para o agrupamento hierárquico aglomerativo de séries espaço-temporais incluindo uma etapa de pré-processamento baseada em redução de dados;
- 2. Desenvolvimento de uma abordagem para a geração de amostras de séries espaçotemporais por meio da análise de auto-similaridade;
- 3. Avaliar experimentalmente as novas abordagens em termos de tempo de execução, consumo de memória e qualidade dos agrupamentos gerados visando o agrupamento dos diversos tipos de vegetação para identificação de áreas de plantio de culturas como a cana-de-açúcar.

A etapa 1 encontra-se concluída e os resultados experimentais iniciais encontram-se descritos na Seção ???. A implementação da etapa 2 está em andamento espera-se concluíla em

1.2 Hipótese

A hipótese deste projeto de pesquisa consiste em: "A redução do conjunto dos dados de entrada permite executar o agrupamento hierárquico aglomerativo em tempo menor, mas mantendo a qualidade dos agrupamentos produzidos".

1.2.1 Amostragem baseada em fractais

A hipótese de uso da teoria dos fractais para a geração de amostras significativas baseadas na análise da auto-similaridade vem do fato de que técnicas de amostragem ingênuas (naive), como amostragens aleatórias e amostragens estratificadas, não são adequadas para conjuntos de dados reais com presença de dados ruidosos e de exceções, uma vez que o comportamento desses algoritmos é imprevisível. Como não há atributos de classe disponíveis, pretende-se fazer uma amostragem baseada na densidade da estrutura box count. O objetivo é obter um conjunto mínimo de instâncias que represente as características do conjunto original.

1.3 Contribuição

A contribuição esperada é uma estratégia para o agrupamento hierárquico aglomerativo que produza respostas mais rápidas para o usuário.

2 Revisão da Literatura Correlata

Nesta seção apresentaremos os principais conceitos teóricos relacionados ao trabalho desenvolvido. Na subseção ?? apresentaremos o processo de descoberta de conhecimento em banco de dados e suas principais etapas.

2.1 Descoberta de Conhecimento em Bancos de Dados

A Descoberta de Conhecimento em Bancos de Dados, tambonhecida pela sigla KDD (Knowledge Discovery in Databases) rocesso pelo qual dados brutos, coletados a partir das mais variadas fontes, srocessados e transformados em informas teis. Por sua vez, estas informas permitem o aprimoramento da tomada de decis atsmo amplia do conhecimento cientos sobre um determinado fenmeno [?].

O processo de KDD envolve desde a aquisi dos dados atisponibiliza do conhecimento para o usuo final. De acordo com [?], este processo pode ser descrito pelas seguintes etapas:

- 1. Prrocessamento
- 2. Minera de dados
- 3. Processamento

O objetivo da etapa de prrocessamento eparar os dados que alimentar etapa de minera de dados. Nesta etapa, podem ser realizadas uma se de tarefas que visam aumentar a qualidade dos dados fornecidos nera de dados. Na tarefa de limpeza dos dados, sratados atributos sem valor definido e rus. A tarefa de integra de dados consiste em consolidar fontes de dados de diversos tipos (arquivos de texto, planilhas, web-services, arquivos XML, bancos de dados) em uma nica fonte de dados consolidada, usualmente um data-warehouse. A redu da dimensionalidade consiste em diminuir o nmero de atributos que seronsiderados na minera de dados. Dentre as principais ticas podemos citar PCA (Principal Component Analysis) e DWT (Discrete Wavelets Transforms). Por fim, a redu da numerosidade busca representar o conjunto de dados atrave um nmero reduzido de instias [?].

O reconhecimento de padres etivamente realizado na etapa de minera de dados. As tarefas desta etapa sategorizadas de acordo com o conhecimento que se deseja extrair da base de dados analisada. Na tarefa de minera de itens frequentes, deseja-se extrair de um banco de transas quais itens ocorrem conjuntamente com maior frequia. Na tarefa de classifica, o objetivo ferir um modelo a partir do qual seja possl prever al classe uma determinada instia de dados pertence. Por fim, na anse de agrupamentos deseja-se descobrir a existia de grupos (clusters) de dados. Assim, eciso que se estabelema medida de similaridade entre as instias do banco de dados, de forma que se maximize a similaridade entre instias de grupos diferentes.

Por fim, na etapa de processamento avalia-se se os padres descobertos de fato representam um conhecimento novo sobre os dados. Para cada tipo de padrescoberto, pode-se estabelecer uma medida objetiva sobre a qualidade do padrhan2011data. No caso dos agrupamentos, por exemplo, a qualidade destes pode ser medida em termos de coes e separa [?].

Neste trabalho, serfatizada a tarefa de agrupamento de dados, com aten especial aos algoritmos hieruicos de agrupamento. Tamberscutido como as ticas de redu de numero-sidade influenciam o tempo de execu dos algoritmos hieruicos e a qualidade dos agrupamentos produzidos, como etapa de prrocessamento.

2.2 Técnicas de Amostragem de dados

O objetivo das técnicas de amostragem de dados é reduzir o número de instâncias submetidas aos algoritmos de mineração de dados. Entre os desafios da amostragem de dados estão o balanceamento das instâncias com relação à ocorrência de instâncias raras ou de exceções. Conside um conjunto T com cardinalidade |T| = N. Entre as técnicas propostas na literatura destacam-se [?]:

- Amostragem aleatória de tamanho s sem substituição: criada pela escolha de s instâncias de T (s < N), onde a probabilidade de um exemplo ser escolhido é de 1/N, de modo que todas as instâncias têm a mesma chance de serem escolhidas;
- Amostragem aleatória de tamanho s com substituição: semelhante à anterior, exceto
 pelo fato que a cada vez que uma instância é escolhida, permanece no conjunto e
 pode ser escolhida novamente;

- Amostragem balanceada: criada levando-se em consideração um conjunto de critérios pré-definidos, por exemplo, para manter a proporcionalidade de instâncias entre classes conhecidas;
- Amostragem de agrupamentos: escolha de grupos específicos resultantes de técnicas de agrupamento;
- Amostragem estratificada: obtida por meio da divisão de um conjunto T em partes mutualmente disjunta seguida da escolha de uma amostragem aleatória em cada divisão.

2.3 Análise de Agrupamentos

A análise de agrupamentos é uma tarefa de mineração de dados cujo objetivo é, automaticamente, particionar o conjunto de dados em subconjuntos chamados grupos. Os objetos reunidos em um mesmo grupo devem ser similares entre si, enquanto que objetos de grupos separados devem ser diferentes. Ao conjunto dos grupos resultantes da análise dá-se o nome de agrupamento.

A análise de agrupamentos pode ser usada como uma ferramenta para extração de conhecimento sobre um conjunto de dados ou então, como um etapa de pré-processamento para outras tarefas de mineração de dados. Por exemplo, em [?], a análise de agrupamentos foi utilizada para identificar o uso do terreno em diferentes regiões do estado de São Paulo, Brasil. Já em [?], a análise de agrupamentos foi utilizada para eleger protótipos que posteriormente seriam utilizados como dados de treinamento para a tarefa de classificação 1-NN.

Existem diversas abordagens para o agrupamento de dados. No agrupamento por particionamento o conjunto de dados é dividido em k grupos, com cada grupo contendo pelo menos um objeto do conjunto. De maneira geral, estes algoritmos consistem em: a partir de um agrupamento inicial, iterativamente realocar os objetos em grupos mais significativos até que um critério de parada seja atingido. Podemos incluir nesta categoria os algoritmos k-médias e k-medoids.

Uma abordagem alternativa é o agrupamento hierárquico. Nesta abordagem, os objetos são organizados em uma hierarquia de grupos. Por sua vez, esta hierarquia pode ser construída por duas maneiras diferentes: aglomerativa e divisiva.

Na abordagem aglomerativa cada objeto de dados é inicialmente incluído em seu próprio grupo. Em seguida, cada grupo é aglomerado com o seu grupo mais próximo, formando uma relação "pai-filho" entre o grupo resultante e os grupos menores. Esse processo se repete até que um único grupo, que contenha todos os dados do conjunto, seja obtido. Já na abordagem divisiva o processo se inverte. Todos os objetos de dados são agrupados em um único grupo inicial, que será a raiz da hierarquia. Por sua vez, este grupo inicial é sucessivamente dividido em grupos menores, até que cada objeto esteja em seu próprio grupo.

Na subseção ?? a abordagem hierárquica será explorada com mais detalhes.

2.4 Abordagem Hierárquica para Agrupamentos

Na abordagem hierárquica de agrupamento, os grupos são organizados em árvore, de forma que cada nodo desta árvore representa um grupo. Desta maneira, estabelece-se uma relação pai-filho entre os grupos, tal que, dado um grupo pai C_p que tenha n filhos $\{C_1, C_2, ..., C_n\}$, então $C_i \subset C_p$ para todo $1 \le i \le n$, como mostra a Figura ??(b). Nas folhas desta árvore, encontram-se as instâncias de dados, cada uma incluída em seu próprio grupo. Por sua vez, na raiz encontra-se o grupo que abrange todo o conjunto de dados. A Figura ??(a) mostra a hierarquia entre os grupos através de um diagrama conhecido como dendrograma.

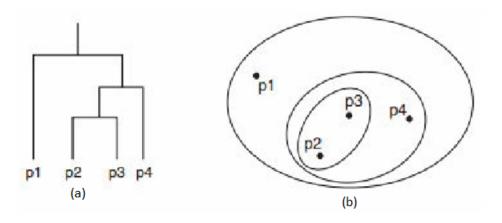


Figura 1: Exemplo de agrupamento hierárquico [?].

A organização de grupos em hierarquias tem aplicações em diversas áreas. Em recuperação da informação por exemplo, documentos podem ser agrupados de maneira hierárquica de acordo com o assunto, revelando uma estrutura de tópicos e sub-tópicos. Em Biologia, o agrupamento de espécies de acordo com suas características pode ajudar na compreensão sobre como essas espécies evoluíram ao longo do tempo.

Uma das principais vantagens da abordagem hierárquica de agrupamento é que não é necessário que o usuário informe o número k de grupos desejado previamente. Porém, nem sempre é interessante para o usuário analisar todos os grupos obtidos pelo agrupamento hierárquico. Nestes casos, a hierarquia original pode ser convertida em um particionamento através do procedimento de poda (prunning).

Nesta subseção serão discutidos os principais aspectos relativos ao agrupamento hierárquicos. Serão abordados: algoritmo AGNES para agrupamento aglomerativo, algoritmo DIANA para agrupamento hierárquico divisivo e as principais medidas de distância entre clusters: single linkage, complete linkage, average linkage, mean distance e Ward's distance. Por fim serão analisados vantagens e desvantagens da abordagem hierárquica.

2.4.1 AGNES: algoritmo aglomerativo

O algoritmo AGNES (AGglomerative NESting) é o algoritmo elementar para executar o agrupamento hierárquico aglomerativo. Basicamente, seu procedimento consiste alocar inicialmente cada instância de dados em seu próprio grupo e então, sucessivamente, fundir

os grupos mais próximos entre si, até que todos os objetos sejam aglomerados em um único grupo, como mostra o Algoritmo ??.

Algoritmo 1: Algoritmo aglomerativo para agrupamento hierárquico

```
Entrada: conjunto de dados X

Saída: agrupamento hierárquico n \leftarrow |X|

\mathcal{C} \leftarrow \{C_i = \{x_i\} \mid x_i \in X\}

M \leftarrow (m_{ij})_{n \times n} \mid m_{ij} = dist\left(C_i, C_j\right), C_i, C_j \in \mathcal{C}

repita encontra o par de grupos mais próximos C_i e C_j

C \leftarrow C_i \cup C_j

C \leftarrow (\mathcal{C} \setminus \{C_i, C_j\}) \cup \{C\}

recalcula M

até C \equiv X
```

Após cada instância de dados ser atribuída ao seu próprio grupo, a matriz de distâncias M é calculada, armazenando a distância de cada par de grupos existente. Então, sucessivamente, o algoritmo localiza a menor entrada na matriz de distância M, que equivale a encontrar o par dos grupos mais próximos, aglomera os grupos encontrados e recalcula a matriz de distância M.

Dado o algoritmo básico do agrupamento hierárquico aglomerativo, a principal diferença entre as diferentes abordagens nesta categoria são as medidas de similaridade entre grupos usadas. Por sua vez, estas podem ser baseadas em grafos ou baseadas em protótipos [?]. São medidas de distância baseadas em grafos:

• Ligação simples: A ligação simples, ou *single linkage*, toma como similaridade entre dois grupos a distância entre seus elementos mais próximos, e é calculada pela Equação ??:

$$dist(C_i, C_j) = \min_{x_i \in C_i, x_j \in C_j} \{|x_i - x_j|\}$$
 (1)

Ao tomar-se as instâncias de dados como vértices de um grafo, e as ligações entre grupos como vértices ponderados, então o agrupamento gerado é correspondente a uma árvore geradora mínima [?], de forma que os grupos formados tendem a ser contíguos no espaço dos atributos [?].

• Ligação completa: A ligação completa, ou complete linkage é a medida oposta à ligação simples, pois toma como similaridade entre dois grupos a distância entre seus elementos mais distantes, sendo calculada pela Equação ??:

$$dist(C_{i}, C_{j}) = \max_{x_{i} \in C_{i}, x_{j} \in C_{j}} \{|x_{i} - x_{j}|\}$$
(2)

• Distância Média: Por fim, a similaridade entre dois grupos pode ser medida através da distância média entre os pares dos grupos (group average). Essa medida é um balanceamento entre a ligação simples e a ligação completa, e é obtida pela média das distâncias entre cada um dos pares ordenados (x_i, x_i) , com $x_i \in C_i$ e $x_i \in C_j$. É obtida pela Equação ??:

$$dist(C_{i}, C_{j}) = \frac{1}{n_{i}n_{j}} \sum_{x_{i} \in C_{i}} \sum_{x_{j} \in C_{j}} |x_{i} - x_{j}|$$
(3)

Além das medidas baseadas em grafos, também podem ser aplicadas medidas baseadas em protótipos. São elas:

 Distância entre centroides: a distância entre centroides toma como medida de similaridade entre grupos a distância entre as médias dos grupos. Seja o centroide μ_i de um grupo o seu objeto médio, dados pela Equação ??:

$$\mu_i = \frac{1}{|C_i|} \sum_{x_i \in C_i} x_i \tag{4}$$

Então, a distância entre os grupos é dada pela distância entre os respectivos centroides, como mostra a Equação ??:

$$dist\left(C_{i},C_{j}\right) = \left|\mu_{i} - \mu_{j}\right| \tag{5}$$

• **Método de Ward**: o método de Ward também considera o centroide como representante do grupo todo. Porém, a distância entre grupos é medida pela variação da soma dos erros quadrados, ou SSE (squared sum of errors), que se obtém ao aglomerar dois grupos C_i e C_j . Seja a soma dos erros quadrados de um grupo i, dada pela Equação ??:

$$SSE_i = \sum_{x \in C_i} |x - \mu_i|^2 \tag{6}$$

Então, a distância de Ward será dada pela variação da soma dos erros quadrados obtida ao aglomerar os grupos C_i e C_j :

$$dist(C_i, C_j) = \Delta SSE_{ij} = SSE_{ij} - SSE_i - SSE_j$$
(7)

Em [?], é demonstrado que o método de Ward corresponde a uma versão ponderada da distância entre centroides:

$$dist(C_i, C_j) = \Delta SSE_{ij} = \left(\frac{n_i n_j}{n_i + n_j}\right) \left|\mu_i - \mu_j\right|^2 \tag{8}$$

A primeira etapa do algoritmo AGNES envolve o cálculo da matriz de distâncias entre os grupos iniciais. Dado o número n de instâncias no conjunto de dados, o cálculo da distância entre todos os pares de objetos envolve $\frac{n(n-1)}{2}$ cálculos, considerando $dist(C_i, C_j) = dist(C_j, C_i)$. Assim, o cálculo da matriz de distâncias tem complexidade de tempo e espaço $O(n^2)$.

Na etapa de aglomeração, o laço principal do algoritmo deve ser executado n-1 vezes. A cada iteração i, a busca pelos pares mais próximos leva tempo proporcional a $(n-i)^2 = O(n^2)$, assim como o recálculo da matriz de distâncias. Portanto, o algoritmo AGNES tem complexidade de tempo $O(n^3)$.

2.4.2 DIANA: algoritmo divisivo

2.5 Fractais e a propriedade de auto-similaridade

Um fractal pode ser definido pelo conceito de auto similaridade, no qual partes de qualquer tamanho de um fractal são similares (exata ou estatisticamente) ao conjunto todo. Um exemplo clássico de um fractal criado por meio da construção repetitiva é o triângulo de Sierpinski, construído por meio de um processo iterativo, onde se retira de um triângulo o triângulo central e para cada triângulo resultante realiza-se o mesmo processo, recursivamente, conforme apresentado na Figura ??. O triângulo de Sierpinski apresenta características interessantes, como o fato de cada triângulo interior ser uma miniatura do triângulo em que está inserido, perímetro tendendo ao infinito e área tendendo a zero quando o número de iterações tende ao infinito [?].

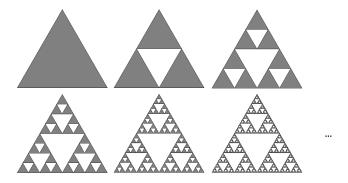


Figura 2: Construção do triângulo de Sierpinski [?].

O conceito de auto similaridade está relacionado com periodicidade. Muitos fenômenos naturais e humanos acontecem com periodicidade. São exemplos o uso do solo pela agricultura, o valor das moedas e das ações, o comportamento de redes de comunicação, as filas de caixa de supermercado, o uso das estradas, as músicas que tocam nas rádios e os efeitos da economia na vida das pessoas. Uma razão para a universalidade dessas movimentações harmônicas é a linearidade aproximada de muitos sistemas e a sua invariância com deslocamento no espaço e tempo. Experimentos realizados com alguns conjuntos de dados sintéticos e reais mostram que os dados referentes aos fenômenos humanos caracterizam-se por apresentarem uma distribuição fractal [?].

Para a análise da auto similaridade de conjuntos contendo fenômenos naturais e humanos, chamados de fractais estatisticamente auto-similares, utiliza-se o método *Box*-

Counting. Para encontrar o Box-Counting de um conjunto de dados imerso em um espaço E-dimensional, deve-se dividir esse espaço em células de um hipercubo de lado r, recursivamente, até encontrar um elemento por célula [?]. O método foi proposto para cálculo da dimensão fractal, que corresponde ao número mínimo de dimensões para representação de um conjunto (dimensionalidade intrínseca).

Ainda preciso escrever sobre box plot com base em [?].

2.6 Séries Temporais

Uma série temporal é uma sequencia ordenada de valores coletados ao longo do tempo. Elas são usadas para medir fenômenos que variam com o tempo, e sua análise permite a construção de modelos que explicam estes fenômenos [?]. São exemplos de séries temporais: o volume de poupança em um banco ao longo dos meses, a temperatura média de uma cidade durante a semana, ou ainda, o número de acessos a um website durante o dia.

Uma série temporal pode ser representada por uma função Z(t), cujo domínio representa o tempo, e t, um determinado instante no tempo. Dada essa representação, uma série temporal pode ser classificada em discreta ou contínua, de acordo com o tipo de conjunto que representa o tempo [?]. Por exemplo: o faturamento diário de um supermercado é uma série temporal discreta, pois o tempo é representado por um conjunto de intervalos enumeráveis, neste caso, dias. Por outro lado, a velocidade de um carro de corrida durante uma prova é um exemplo de série temporal contínua, pois a duração da corrida é um intervalo contínuo de tempo. Ainda, uma série temporal discreta pode ser obtida a partir de uma série contínua, bastando tomar amostras dos valores da série contínua em intervalos regulares de tempo.

No entanto, há casos em que são necessárias mais de uma variável para representar o fenômeno medido pela série temporal. Por exemplo, o candlestick diário de uma ação no mercado de capitais é formado por quatro valores: preço de abertura, preço mínimo, preço máximo e preço de fechamento. Nestes casos, a série temporal é classificada como multivariada, e é representada por uma função vetorial $Z(t) = [Z_1(t), Z_2(t), ...Z_r(t)]$, onde r é o número de variáveis que descrevem o fenômeno. Caso (Z_t) seja um escalar, a série temporal é classificada como univariada [?].

3 Métodos de Pesquisa

4 Agrupamento hierárquico aglomerativo de séries espaço-temporais

descrever a tecnica proposta!!!

5 Resultados Preliminares

descrever os resultados preliminares!!!

6 Cronograma de Execução

Uberlândia, 14 de Dezembro de 2015.

Assinatura do Orientador:

Assinatura do Aluno: