Advanced Institute for Artificial Intelligence

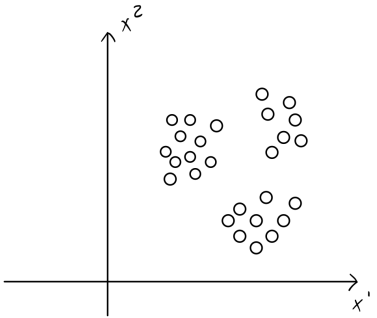
k-Médias

Advanced Institute for Artificial Intelligence – AI2

https://advancedinstitute.ai

Introdução

Existem problemas para os quais não temos acesso aos rótulos da classes, ou seja, temos um problema de **aprendizado não supervisionada** (agrupamento). Nestas situações, não observamos os rótulos das amostras, tendo apenas um conjunto de dados definido da seguinte forma: $\mathcal{X} = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_m\}$, em que $\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^n$.



Uma das abordagens mais conhecidas é a chamada de k-Médias, do inglês k-*Means*, a qual objetiva agrupar dados com base nas distâncias entre as amostras. Geralmente, a distância Euclidiana é uma das mais utilizadas. O objetivo da técnica é particionar as amostras em $k < m$ grupos.

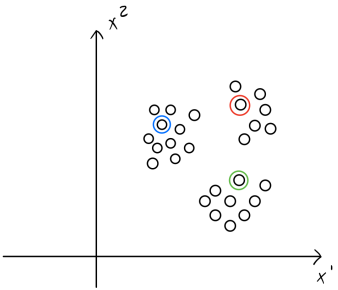
Seja $\mathcal{S} = \{\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \ldots, \mathcal{S}_k\}$ o conjunto de grupos em que $\boldsymbol{\mu}_i \in \mathbb{R}^n$ corresponde ao centroide (ponto médio) do grupo $\mathcal{S}_i$. O algoritmo do k-Médias tenta resolver a seguinte equação:

$$\mathcal{S}^* = \arg\min_{\mathcal{S}} \sum_{i=1}^{k} \sum_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{S}_i} \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_i\|^2. \tag{1}$$

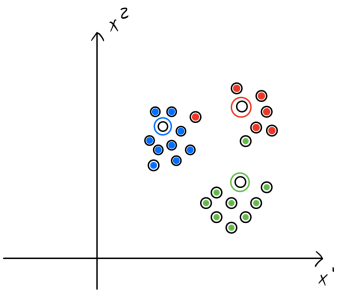
Note que desejamos os centros dos grupos que estão mais próximos dos dados, ou seja, queremos criar agrupamentos de forma a **minimizar** o espalhamento dos dados.

No entanto, a solução para a Equação 1 é um problema NP-Difícil para um número arbitrário de k, ou seja, não conhecemos um algoritmo polinomial que consegue resolvê-lo. O algoritmo é simples e envolve os seguintes passos:

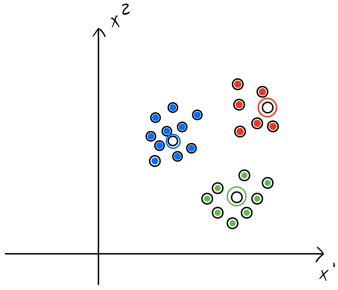
1. Dado um número k, inicialize os centroides $\boldsymbol{\mu}_i$ de maneira aleatória, $i = 1, 2, \ldots, k$. Inicialize, também, os grupos $\mathcal{S}_i \leftarrow \{\}$, $i = 1, 2, \ldots, k$.
2. Associe cada amostra $\boldsymbol{x} \in \mathcal{X}$ ao seu centroide $\boldsymbol{\mu}_j$ mais próximo e faça $\mathcal{S}_j \leftarrow \mathcal{S}_j \cup \{\boldsymbol{x}\}$, $j = 1, 2, \ldots, k$.
3. Calcule o novo centroide $\boldsymbol{\mu}_j$ de cada grupo $\mathcal{S}_j$.
4. Faça $\mathcal{S}_j \leftarrow \{\}$, $j = 1, 2, \ldots, k$.
5. Execute os passos $2 - 4$ até a convergência, ou seja, até os centroides não se moverem mais.



Inicialização dos centros



Atribuição de centros mais próximos



Configuração final

Alguns pontos importantes:

- Qual função de distância utilizar?
- Qual o valor de k?
- k-Médias assume assume que os agrupamentos são **circulamente simétricos** quando utilizamos a distância Euclidiana.