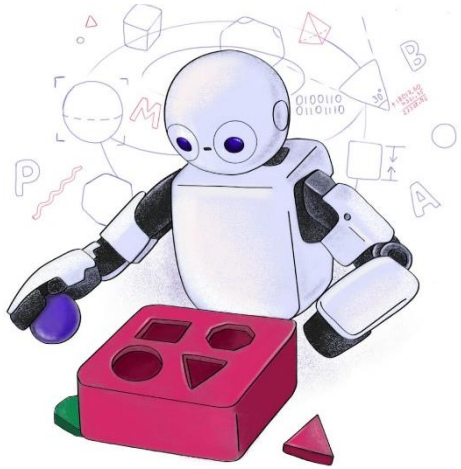
TP555 - Inteligência Artificial e Machine Learning:

k-Médias



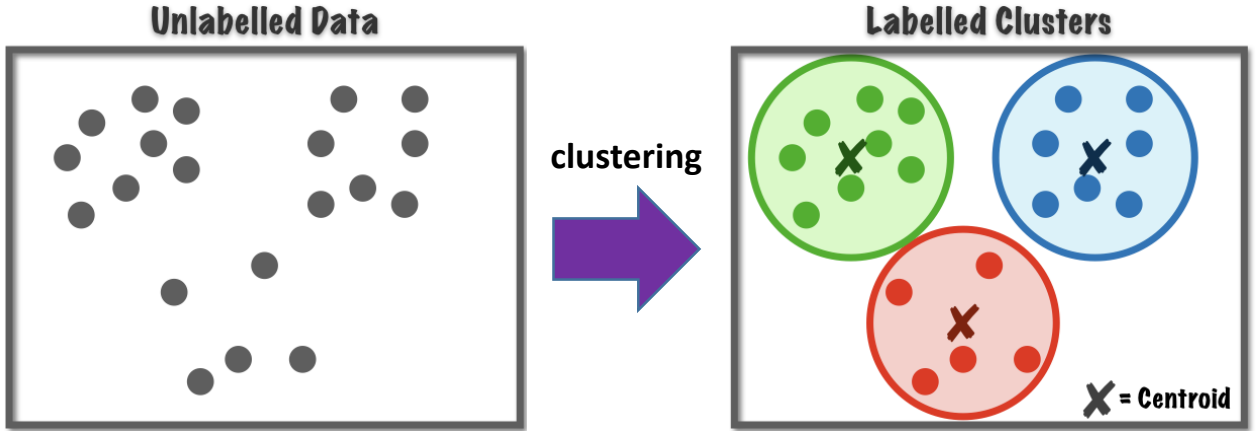
Inatel

Felipe Augusto Pereira de Figueiredo
felipe.figueiredo@inatel.br

Recapitulando

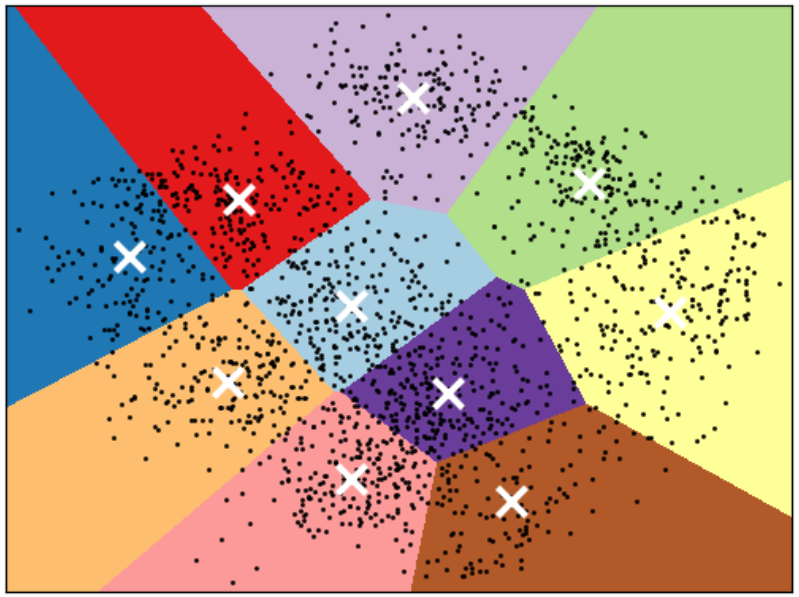
- Até o momento, todos os algoritmos que aprendemos seguiam o paradigma do aprendizado supervisionado.
- Hoje, falaremos sobre ***clustering***, que são algoritmos de ***aprendizado não-supervisionado*** que visam criar agrupamentos de dados (chamados de ***clusters*** ou ***grupos***) segundo seu grau de semelhança.
- Em seguida, aprenderemos sobre o algoritmo chamado de ***k-Médias*** (ou ***k-Means***, em inglês) que é um dos algoritmos mais simples de ***clustering***.

Motivação



- O que podemos fazer se não tivermos informações sobre as classes (i.e., rótulos) a que pertencem os exemplos de entrada?
- Veremos que informações úteis podem ser obtidas mesmo de exemplos cujas classes não são conhecidas.
- Enquanto o ***aprendizado supervisionado*** se concentra na ***indução de classificadores***, o ***aprendizado não-supervisionado*** está interessado em ***descobrir propriedades úteis*** dos dados disponíveis.

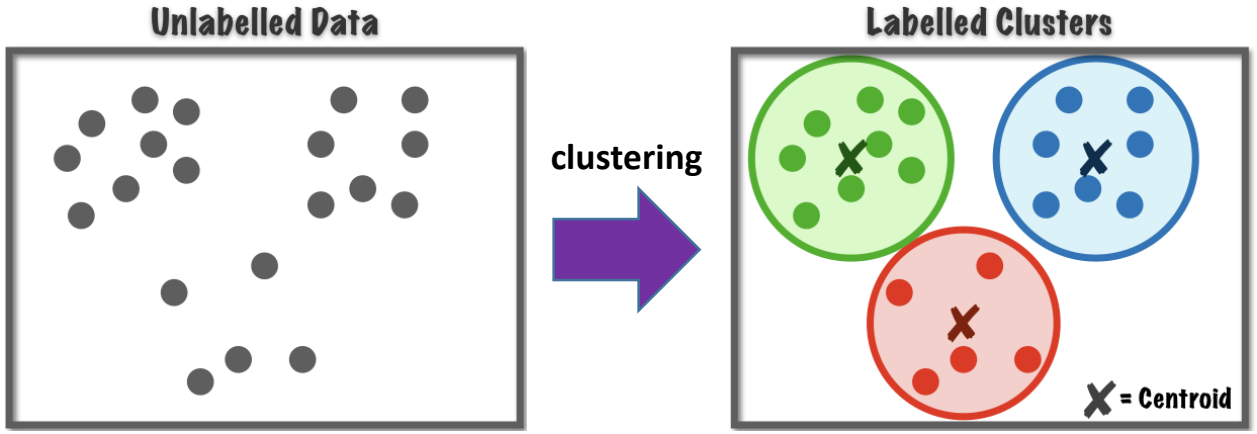
Motivação



- Talvez a tarefa mais popular dos algoritmos deste paradigma seja a procura por ***grupos*** (chamados ***clusters***) de ***exemplos semelhantes***.
- Os ***centroides*** desses ***clusters*** podem então ser usados como
  - centros para redes Bayesianas ou de Função de base radial (RBF),
  - estimativas de valores de atributos desconhecidos (ou ausentes),
  - ferramentas de visualização de dados multidimensionais,
  - auxiliares para criação de classificadores mais simples.

Identificação de clusters

- A tarefa fundamental do ***aprendizado não-supervisionado*** é a ***identificação de clusters***.
- Nessa tarefa, a entrada é um conjunto de vetores de atributo (i.e., exemplos), ***mas sem rótulos***.
- A saída é um conjunto com os ***clusters*** a que pertencem cada um dos exemplos.

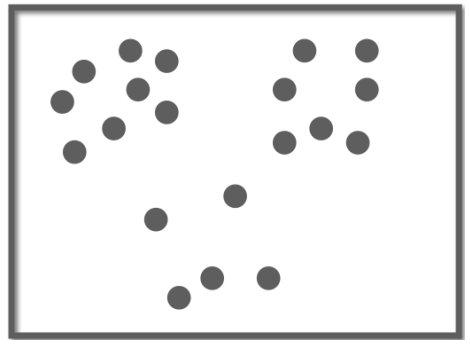


OBS.: A identificação visual de clusters em um espaço bidimensional é fácil, mas em quatro ou mais dimensões isso já não é mais possível. Nesses casos, apenas algoritmos de identificação de clusters conseguem agrupar os dados.

Como representar os clusters?

- Para realizar a identificação, temos que decidir como os ***clusters*** serão representados.
- Existem algumas opções como a localização dos clusters, tamanhos, limites, etc.
- Porém, a abordagem mais simples usa os ***centroides*** (i.e., centros) dos clusters.
- Se os atributos forem numéricos, o ***centroide*** é obtido através das ***médias individuais dos atributos***.
- Por exemplo, suponhamos os seguintes ***vetores de atributos*** em um espaço bidimensional: (2, 5), (1, 4), (3, 6).
- Nesse caso, o ***centroide*** é representado pelo vetor (2, 5), pois
  - A média do primeiro atributo é $\frac{2+1+3}{3} = 2$.
  - A média do segundo atributo é $\frac{5+4+6}{3} = 5$.
- Se os atributos não forem numéricos, devemos transformá-los em numéricos.

Como devem ser os clusters?



- Os clusters ***não devem se sobrepor***: cada exemplo deve pertencer a um e apenas a um cluster.
- Porém, dentro do mesmo cluster, os exemplos devem estar relativamente próximos uns dos outros e distantes dos exemplos dos outros clusters.
- Aí surge uma dúvida. Quantos clusters um conjunto de exemplos contém?
- Na figura acima conseguimos identificar três clusters.
- No entanto, o número de opções existentes não se limita a essa única possibilidade:
  - em um extremo, todo o conjunto de dados pode ser pensado como formando um grande cluster;
  - no outro, cada exemplo pode ser visto como representando seu próprio cluster de um único exemplo.
- Implementações práticas geralmente evitam esse problema pedindo ao usuário que forneça o número de clusters.

Medindo distâncias

- Algoritmos para identificação de clusters geralmente precisam de um mecanismo para ***avaliar a distância*** entre um exemplo e o centroide de um cluster.
- Uma forma de fazer isso quando os atributos são contínuos é usar a ***distância euclidiana*** entre os dois vetores.
- Para exemplos com atributos discretos ou uma mistura de ambos, usamos uma equação mais geral para calcular as distâncias:

$$d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{K} d_a(x_i, y_i)}\,,$$

onde K é o número de atributos, $d_a(x_i, y_i) = (x_i - y_i)^2$ para atributos contínuos e $d_a(x_i, y_i) = 0$ se $x_i = y_i$ e $d_a(x_i, y_i) = 1$ se $x_i \neq y_i$ para atributos discretos.

A qual cluster um exemplo deve pertencer?

- Vamos supor que existam N clusters cujos centroides são denotados por $\boldsymbol{c}_i, \forall i \in (1, N)$.
- Um exemplo $\boldsymbol{x}$ tem uma certa distância $d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{c}_i)$ para cada centroide.
- Se $d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{c}_p)$ é a menor dessas distâncias, então, é natural colocarmos $\boldsymbol{x}$ como pertencente ao centroide $\boldsymbol{c}_p$, ou seja, o p-ésimo cluster.
- Portanto, escolhemos a ***menor distância*** para definir a qual cluster um exemplo pertence.

k-Means

- É talvez o algoritmo mais simples para identificação de clusters.
- O "k" no nome denota o número ***solicitado*** de clusters, ou seja, o número de clusters é um parâmetro definido pelo usuário.
- O pseudocódigo do algoritmo é mostrado abaixo.

Entradas: conjunto de exemplos e número de clusters, k.

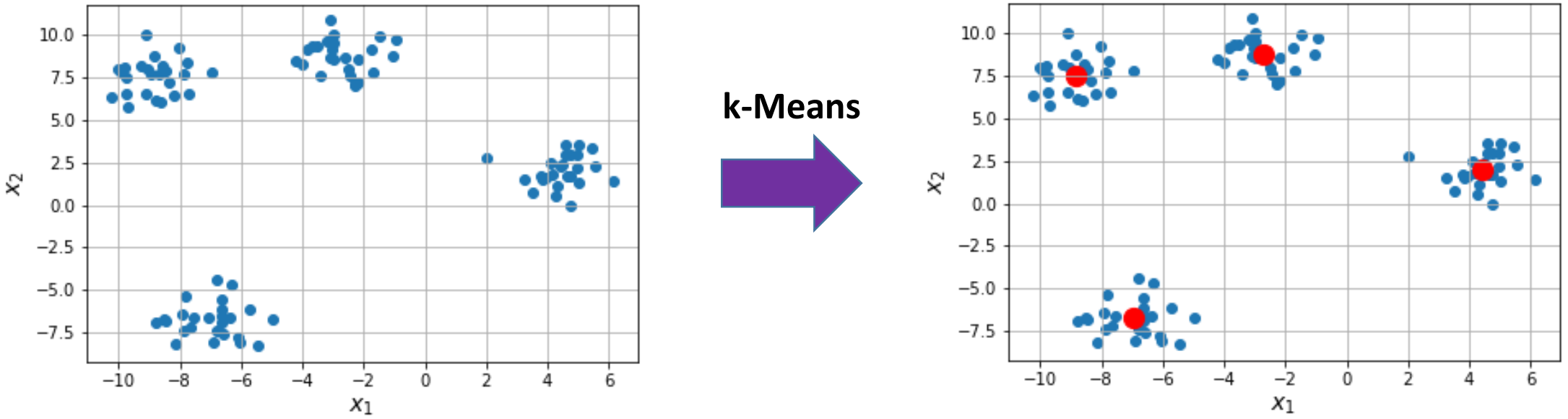
1. **Defina** k centroides iniciais (os centroides representam e definem o número de clusters).
2. **Repita**
   a) Calcule a distância de cada exemplo, $\boldsymbol{x}$, para cada um dos k centroides e atribua cada exemplo ao cluster mais próximo.
   b) Calcule o novo centroide de cada cluster.
3. **Enquanto** as posições dos centroides continuarem mudando.

- O algoritmo garantidamente chega a uma situação em que cada exemplo se encontra no cluster mais próximo, de modo que, a partir deste momento, os centroides não mudem mais.

Como inicializar os centroides?

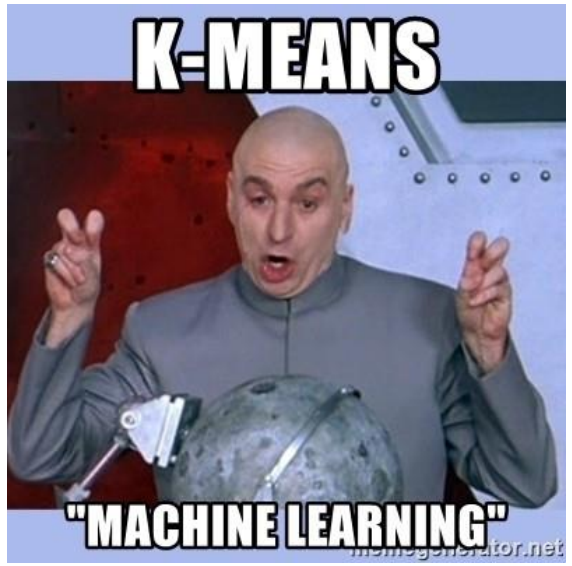
- O procedimento mais simples para inicializar os centroides é escolher k exemplos de treinamento aleatórios e os considerar como os centroides iniciais.
- Os clusters iniciais são então criados associando cada um dos exemplos ao seu centroide mais próximo.
- O número de transferências de um exemplo de um cluster para outro depende dos centroides iniciais.
- Se os centroides iniciais já forem perfeitos, nenhum exemplo precisa ser atribuído a outro cluster e o algoritmo é encerado.
- Portanto, a inicialização é importante no sentido de que um ponto de partida melhor garante que a solução seja encontrada mais rápido.

SciKit-Learn: k-Means



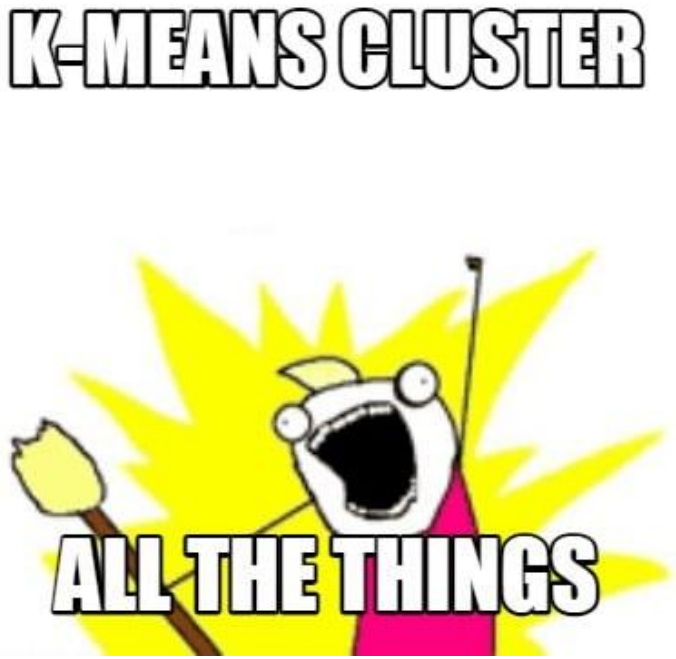
[Exemplo: kmeans_example.ipynb]

Obrigado!


K-MEANS
"MACHINE LEARNING"


STILL RUNNING...
FIRST K-MEANS ITERATION


k-means be like:


K-MEANS CLUSTER
ALL THE THINGS


BRACE YOURSELF
K-MEANS IS COMING
makeameme.org