Pontifícia Universidade Católica
do Rio de Janeiro

INF 1771 – Inteligência Artificial

Aula 17 – Aprendizado Não-Supervisionado

2016.1

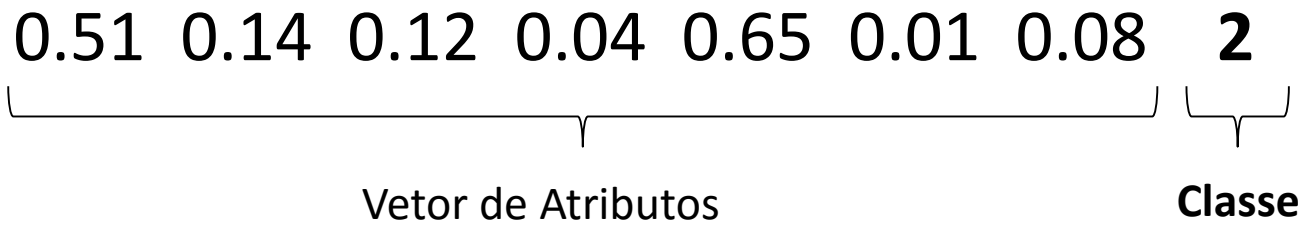
Prof. Augusto Baffa
<abaffa@inf.puc-rio.br>

Formas de Aprendizado

- Aprendizado Supervisionado
  - Árvores de Decisão.
  - K-Nearest Neighbor (KNN).
  - Support Vector Machines (SVM).
  - Redes Neurais.
- **Aprendizado Não-Supervisionado**
- Aprendizado Por Reforço

Introdução

- No aprendizado **supervisionado**, todas os exemplos de treinamento eram **rotulados**.



- Estes exemplos são ditos “supervisionados”, pois, contém tanto a **entrada** (atributos), quanto a **saída** (classe).

Introdução

- Porém, muitas vezes temos que lidar com exemplos "**não–supervisionados**", isto é, exemplos **não rotulados**.

- **Por que?**

  – Coletar e rotular um grande conjunto de exemplos pode custar muito tempo, esforço, dinheiro...

Introdução

- Entretanto, podemos utilizar grandes quantidades de dados **não rotulados** para encontrar padrões existentes nestes dados. E somente depois supervisionar a rotulação dos agrupamentos encontrados.

- Esta abordagem é bastante utilizada em aplicações de **mineração de dados** (datamining), onde o conteúdo de grandes bases de dados não é conhecido antecipadamente.

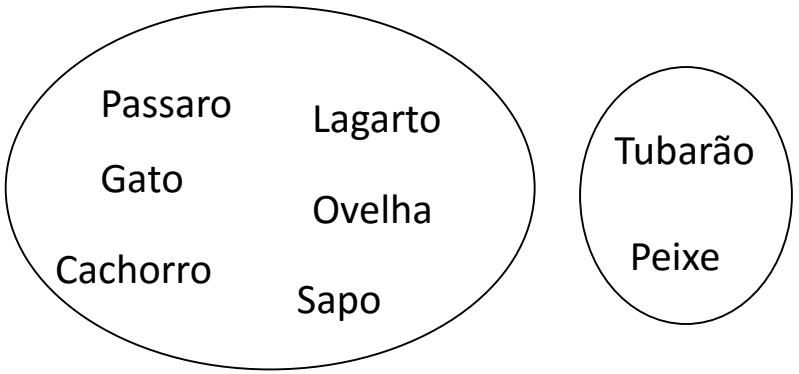
Introdução

- O principal interesse do aprendizado não-supervisionado é desvendar a organização dos padrões existentes nos dados através de **clusters** (agrupamentos) consistentes.

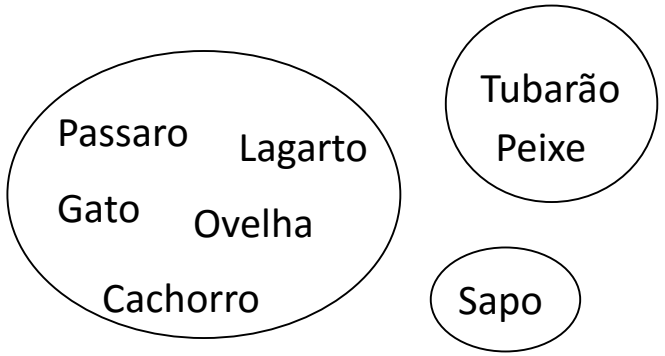
- Com isso, é possível descobrir **similaridades e diferenças** entre os padrões existentes, assim como derivar conclusões úteis a respeito deles.

Introdução

- Exemplos de agrupamentos (clusters):



Existencia de pulmões



Ambiente onde vivem

Clusterização

- A **clusterização** é o processo de **agrupar** um conjunto de objetos físicos ou abstratos em classes de objetos **similares**.

- Um cluster é uma coleção de objetos que são similares uns aos outros (de acordo com algum **critério de similaridade** pré-definido) e dissimilares a objetos pertencentes a outros clusters.

Critério de Similaridade

- A similaridade é difícil de ser definida...

Processo de Aprendizado Não-Supervisionado

- As **etapas do processo** de aprendizagem não supervisionada são:

  (1) Seleção de atributos
  (2) Medida de proximidade
  (3) Critério de agrupamento
  (4) Algoritmo de agrupamento
  (5) Verificação dos resultados
  (6) Interpretação dos resultados

Processo de Aprendizado Não-Supervisionado

- **(1) Seleção de Atributos**:
  - Atributos devem ser adequadamente selecionados de forma a codificar a **maior quantidade possível de informações** relacionada a tarefa de interesse.
  - Os atributos devem ter também uma **redundância mínima** entre eles.

Processo de Aprendizado Não-Supervisionado

- **(2) Medida de Proximidade**:
  - Medida para quantificar quão **similar** ou **dissimilar** são dois vetores de atributos.
  - É ideal que todos os atributos **contribuam de maneira igual** no cálculo da medida de proximidade.
    - Um atributo não pode ser dominante sobre o outro, ou seja, é importante normalizar os dados.

Processo de Aprendizado Não-Supervisionado

- **(3) Critério de Agrupamento**:
  - Depende da interpretação que o especialista dá ao termo **sensível** com base no tipo de cluster que são esperados.
  - Por exemplo, um cluster compacto de vetores de atributos pode ser sensível de acordo com um critério enquanto outro cluster alongado, pode ser sensível de acordo com outro critério.

Processo de Aprendizado Não-Supervisionado

- **(4) Algoritmo de Agrupamento**:
  - Tendo adotado uma medida de proximidade e um critério de agrupamento devemos escolher um **algoritmo de clusterização** que revele a estrutura agrupada do conjunto de dados.

Processo de Aprendizado Não-Supervisionado

- **(5) Validação dos Resultados**:
  - Uma vez obtidos os resultados do algoritmo de agrupamento, devemos verificar se o **resultado esta correto**.
  - Isto geralmente é feito através de testes apropriados.

Processo de Aprendizado Não-Supervisionado

- **(6) Interpretação dos Resultados**:
  - Em geral, os resultados da clusterização devem ser integrados com outras **evidências experimentais** e análises para chegar as conclusões corretas.

Processo de Aprendizado Não-Supervisionado

- Diferentes escolhas de atributos, medidas de proximidade, critérios de agrupamento e algoritmos de clusterização levam a **resultados totalmente diferentes**.

- Qual resultado é o correto?

Clusterização

- Dado um conjunto de dados X:

  $X = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$

- Definimos como um *m*–agrupamento de X a partição de *X* em *m* conjuntos (clusters ou grupos) C_1, C_2, ..., C_m tal que as três condições seguintes sejam satisfeitas:
  - Nenhum cluster pode ser vazio ($C_i \neq \emptyset$).
  - A união de todos os cluster deve ser igual ao conjunto de dados que gerou os clusters, ou seja, X.
  - A interseção de dois clusters deve ser vazio, ou seja, dois cluster não podem conter vetores em comum ($C_i \cap C_j = \emptyset$).

Clusterização

- Os vetores contidos em um cluster C_i devem ser mais similares uns aos outros e menos similares aos vetores presentes nos outros clusters.

- Tipos de Clusters:

Clusters compactos

Clusters alongados

Clusters esféricos e elipsoidais

Medidas de Proximidade

- **Medidas de Dissimilaridade:**
  - Métrica l_p ponderada;
  - Métrica Norma l_∞ ponderada;
  - Métrica l_2 ponderada (Mahalanobis);
  - Métrica l_p especial (Manhattan);
  - Distância de Hamming;

- **Medidas de Similaridade:**
  - Produto interno (inner);
  - Medida de Tanimoto;

Algoritmos de Clustering

- Os **algoritmos de clusterização** buscam identificar padrões existentes em conjuntos de dados.

- Os algoritmos de clusterização podem ser divididos em varias categorias:
  - Sequenciais;
  - Hierárquicos;
  - Baseados na otimização de funções custo;
  - Outros: Fuzzy, Redes Neurais SOM (Self Organized Maps), Redes Neurais LVQ (Learning Vector Quantization)...

Algoritmos Sequenciais

- São algoritmos diretos e rápidos.
- Geralmente, todos os vetores de características são apresentados ao algoritmo uma ou várias vezes.
- O resultado final geralmente depende da ordem de apresentação dos vetores de características.

Algoritmos Sequenciais

- Basic Sequential Algorithmic Scheme (BSAS)
  - Todos os vetores são apresentados uma única vez ao algoritmo.
  - Número de clusters não é conhecido inicialmente.
  - Novos clusters são criados enquanto o algoritmo evolui.

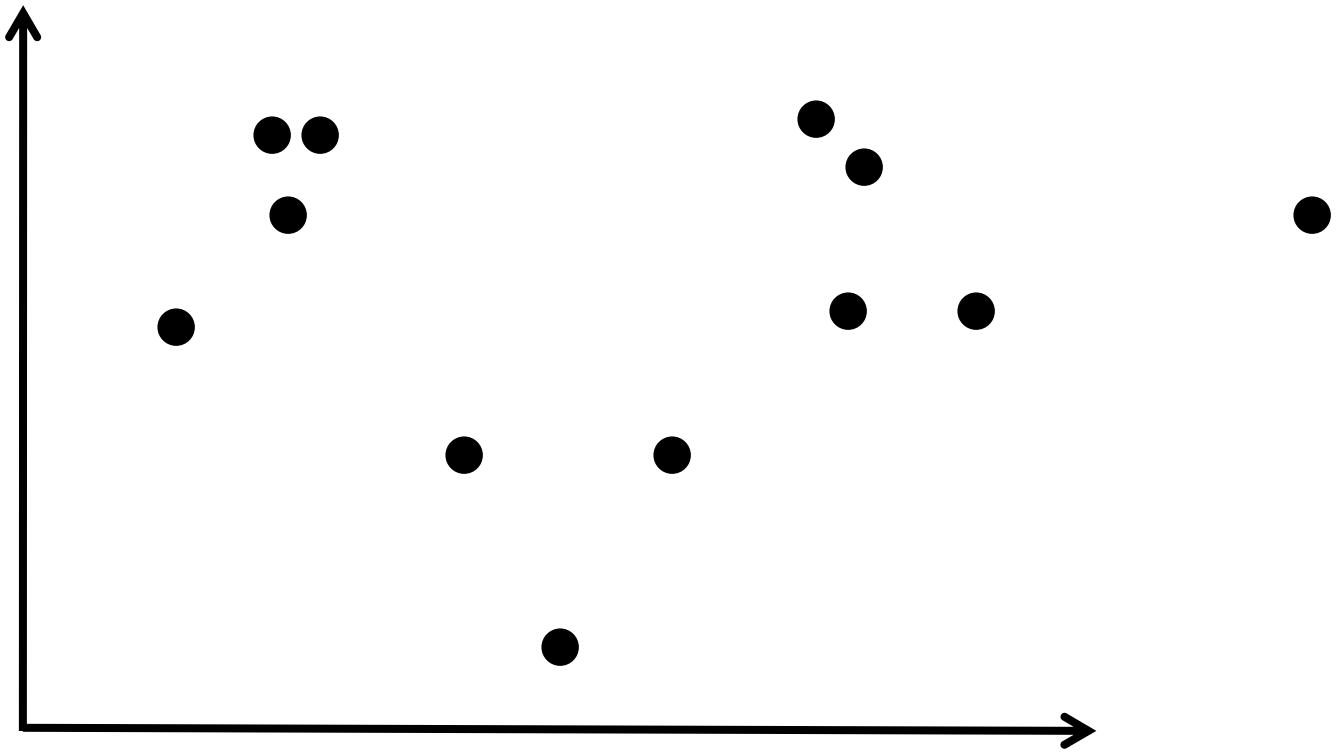
Basic Sequential Algorithmic Scheme (BSAS)

- **Parâmetros do BSAS:**
  - **d(x, C):** métrica de distância entre um vetor de características x e um cluster C.
  - **Θ:** limiar de dissimilaridade.
  - **q:** número máximo de clusters.

- **Ideia Geral do Algoritmo:**
  - Para um dado vetor de características, designá–lo para um cluster existente ou criar um novo cluster (depende da distância entre o vetor e os clusters já formados).

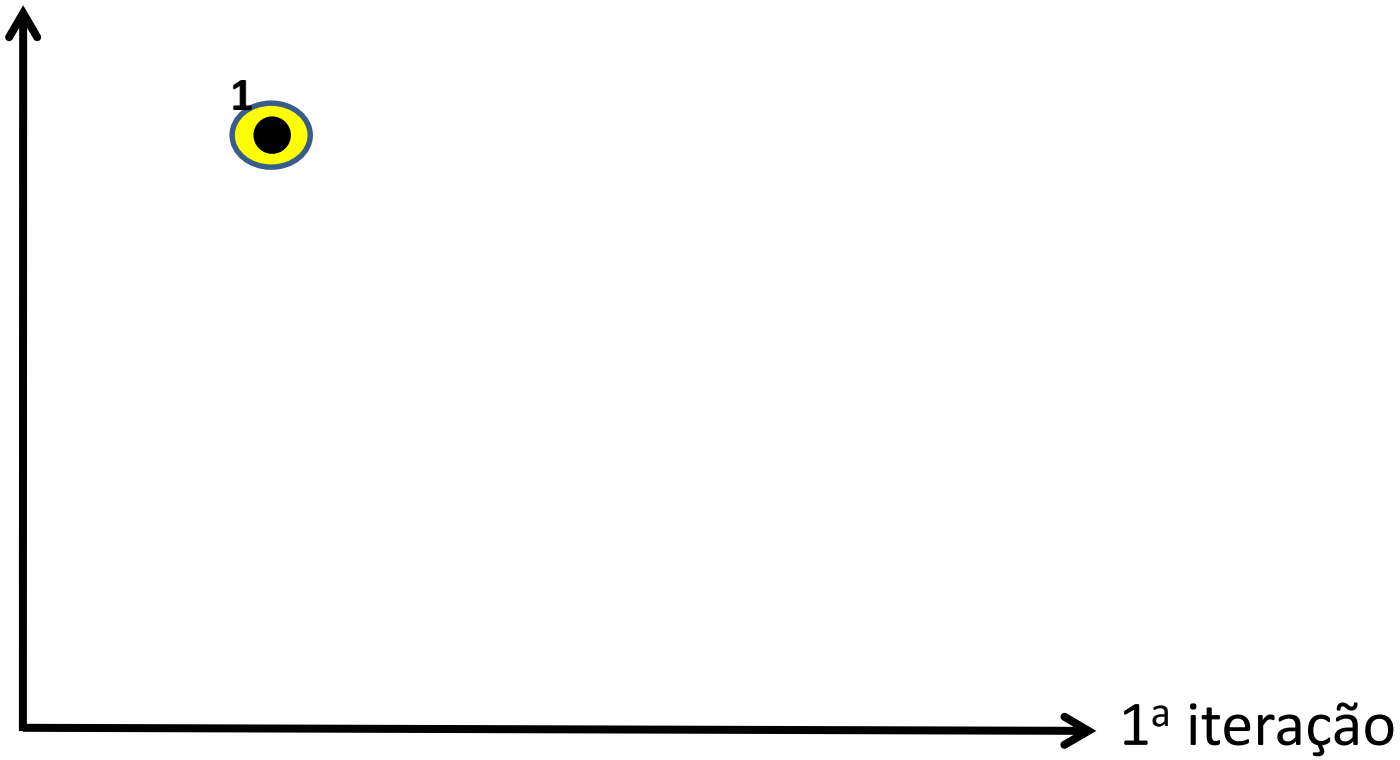
Basic Sequential Algorithmic Scheme (BSAS)

- Exemplo 1:



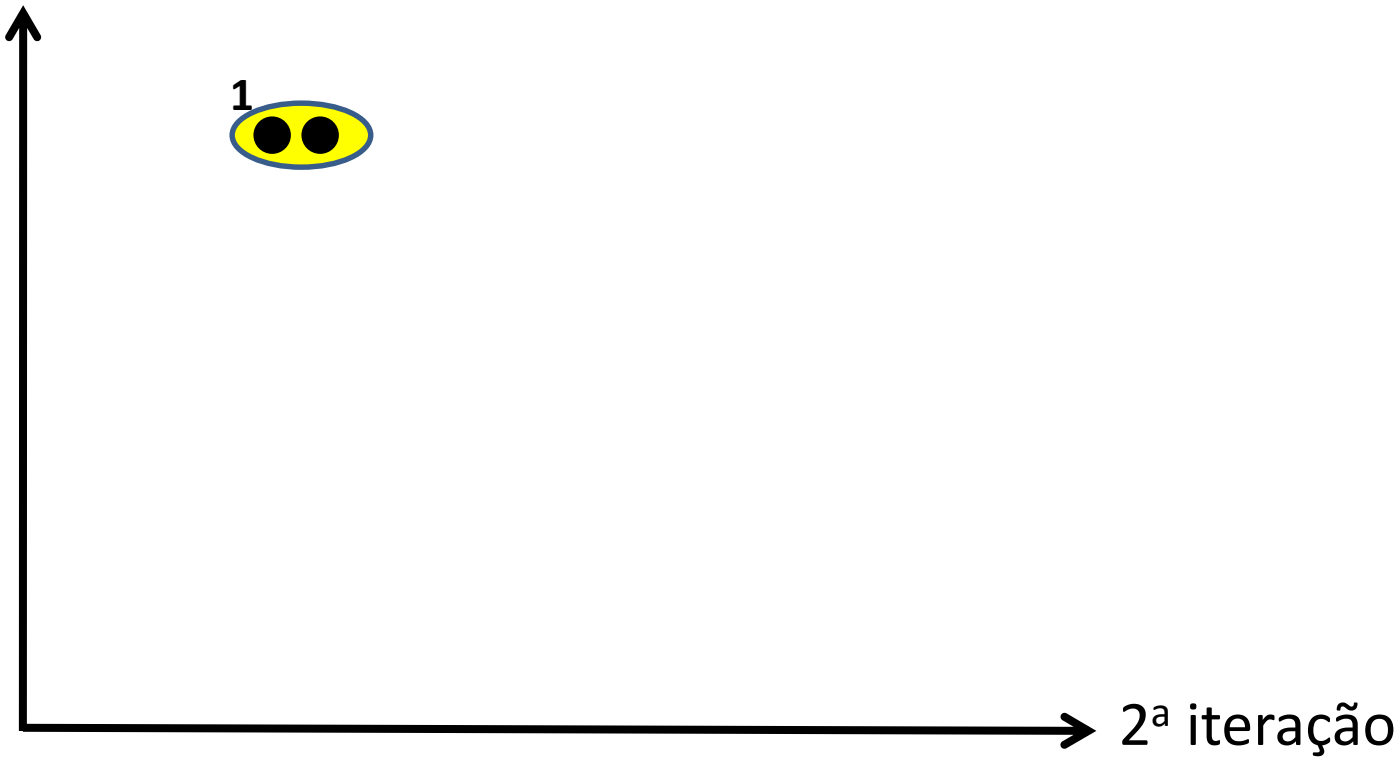
Basic Sequential Algorithmic Scheme (BSAS)

- Exemplo 1:



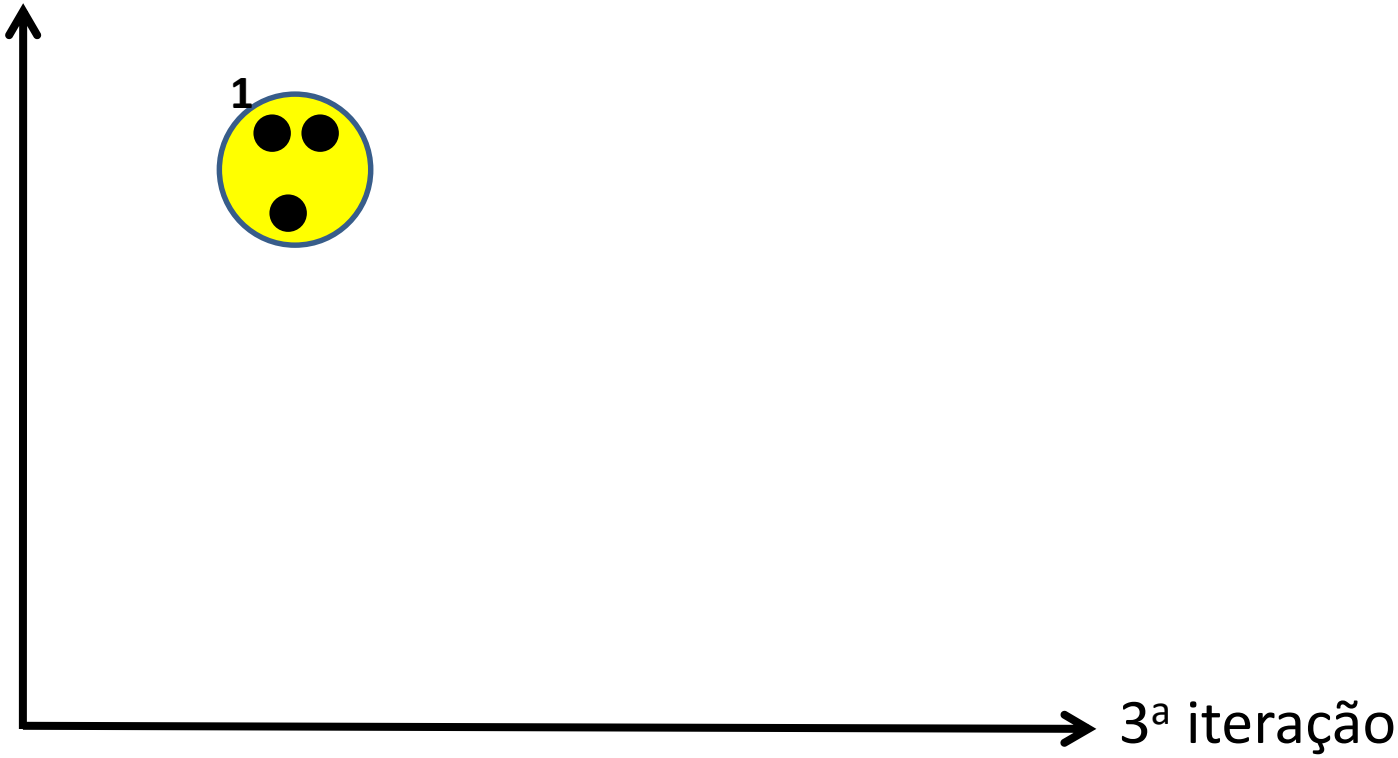
Basic Sequential Algorithmic Scheme (BSAS)

- Exemplo 1:



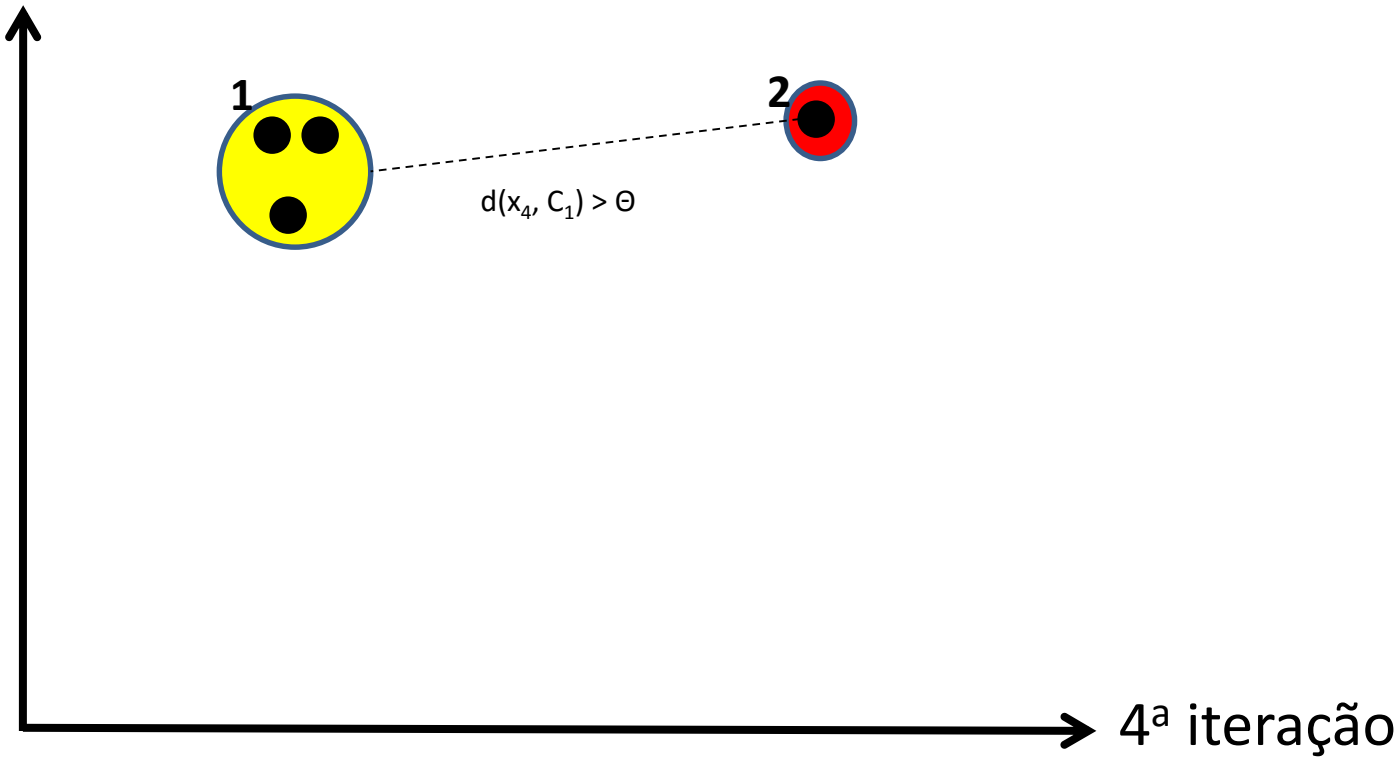
Basic Sequential Algorithmic Scheme (BSAS)

- Exemplo 1:



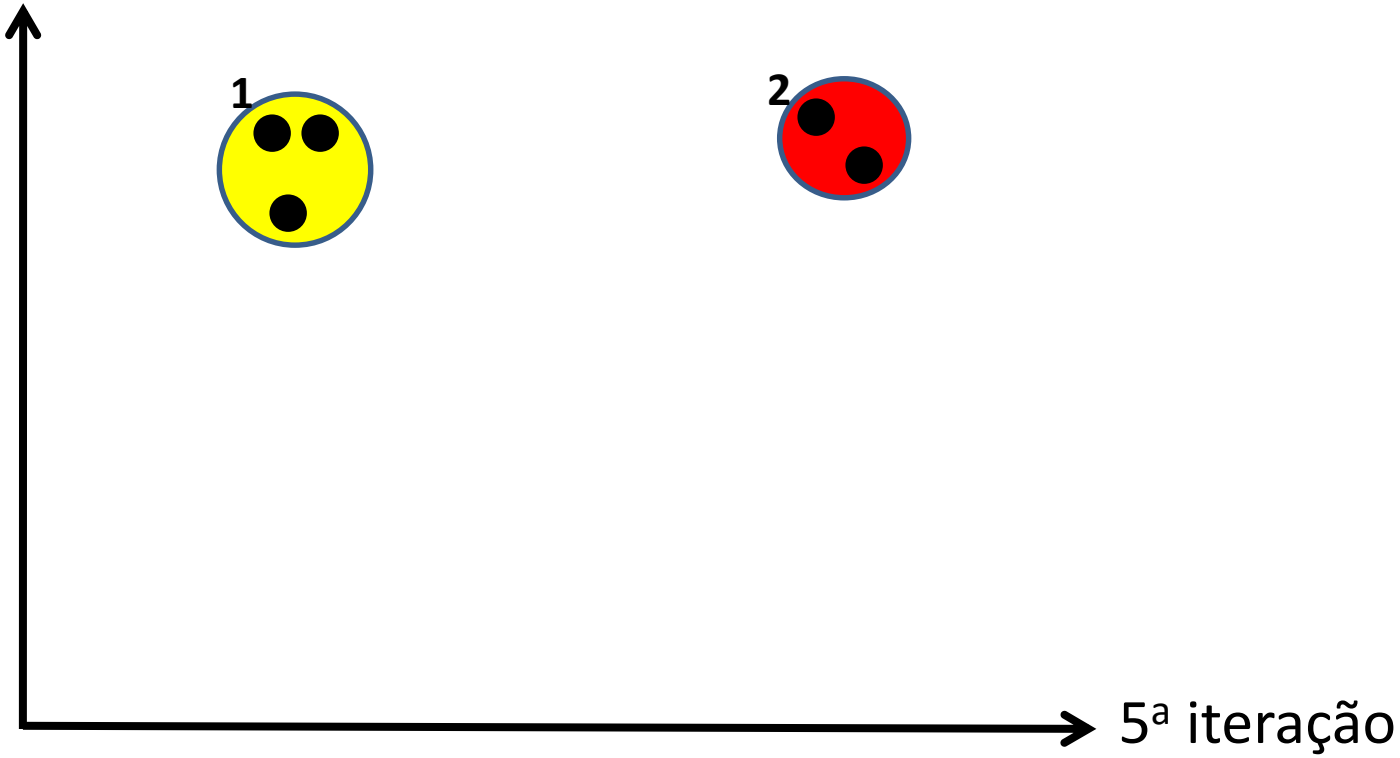
Basic Sequential Algorithmic Scheme (BSAS)

- Exemplo 1:



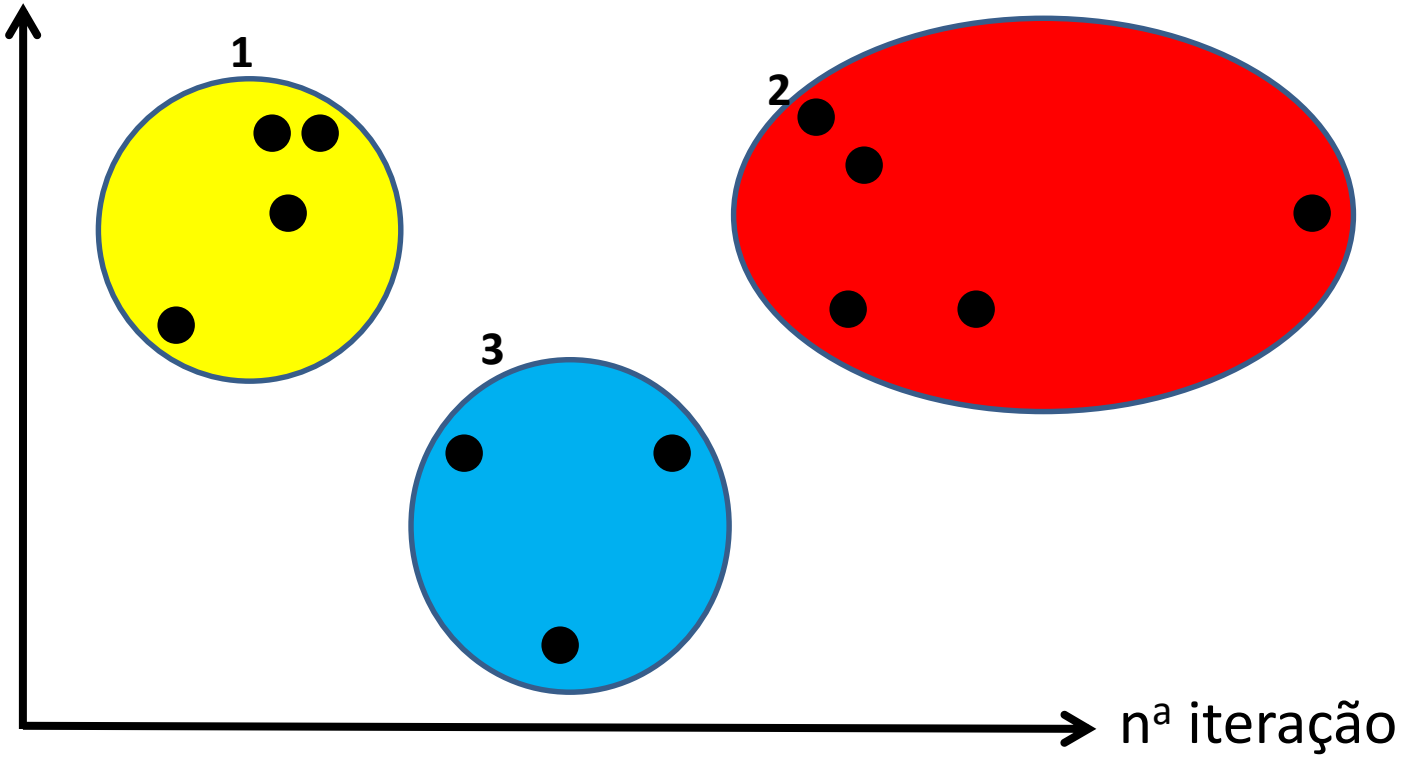
Basic Sequential Algorithmic Scheme (BSAS)

- Exemplo 1:



Basic Sequential Algorithmic Scheme (BSAS)

- Exemplo 1:



Clusterização Hierárquica

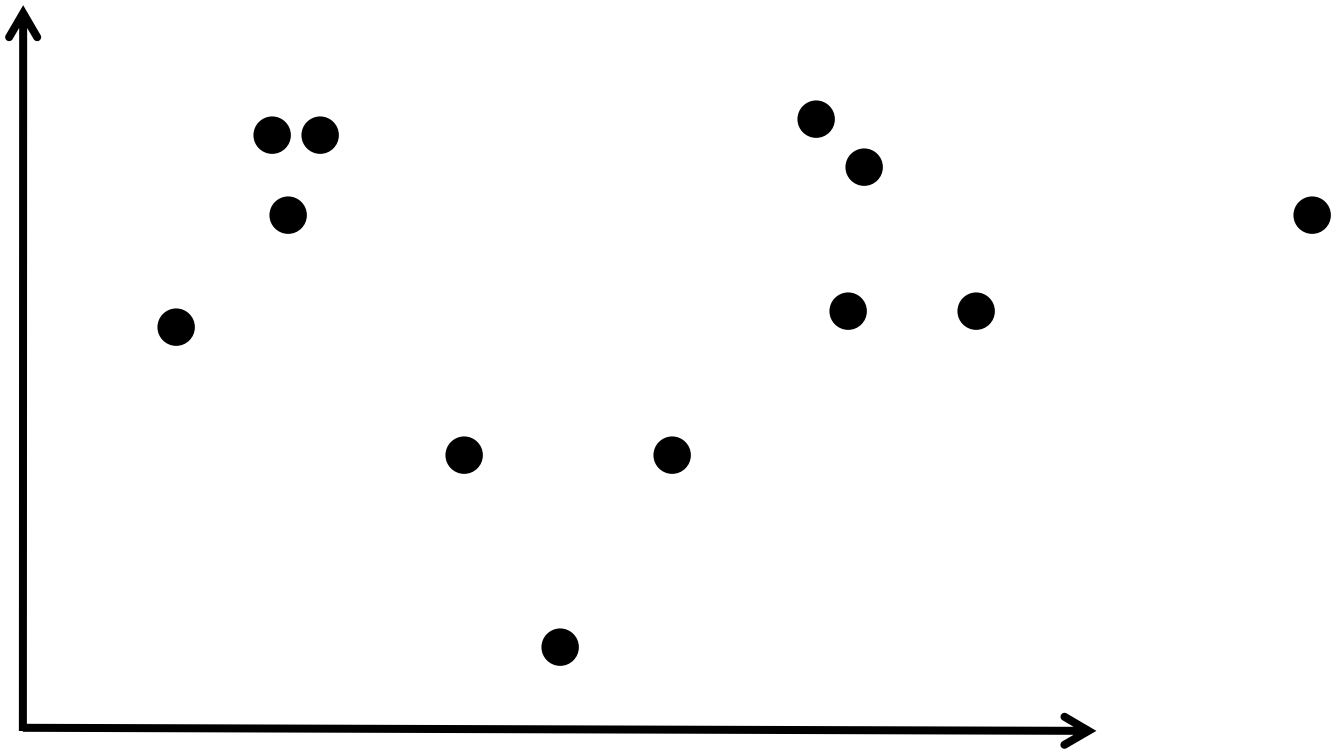
- Os algoritmos de **clusterização hierárquica** pode ser divididos em 2 subcategorias:

- **Aglomerativos:**
  - Produzem uma sequência de agrupamentos com um número decrescente de clusters a cada passo.
  - Os agrupamentos produzidos em cada passo resultam da fusão de dois clusters em um.

- **Divisivos:**
  - Atuam na direção oposta, isto é, eles produzem uma sequência de agrupamentos com um número crescente de clusters a cada passo.
  - Os agrupamentos produzidos em cada passo resultam da partição de um único cluster em dois.

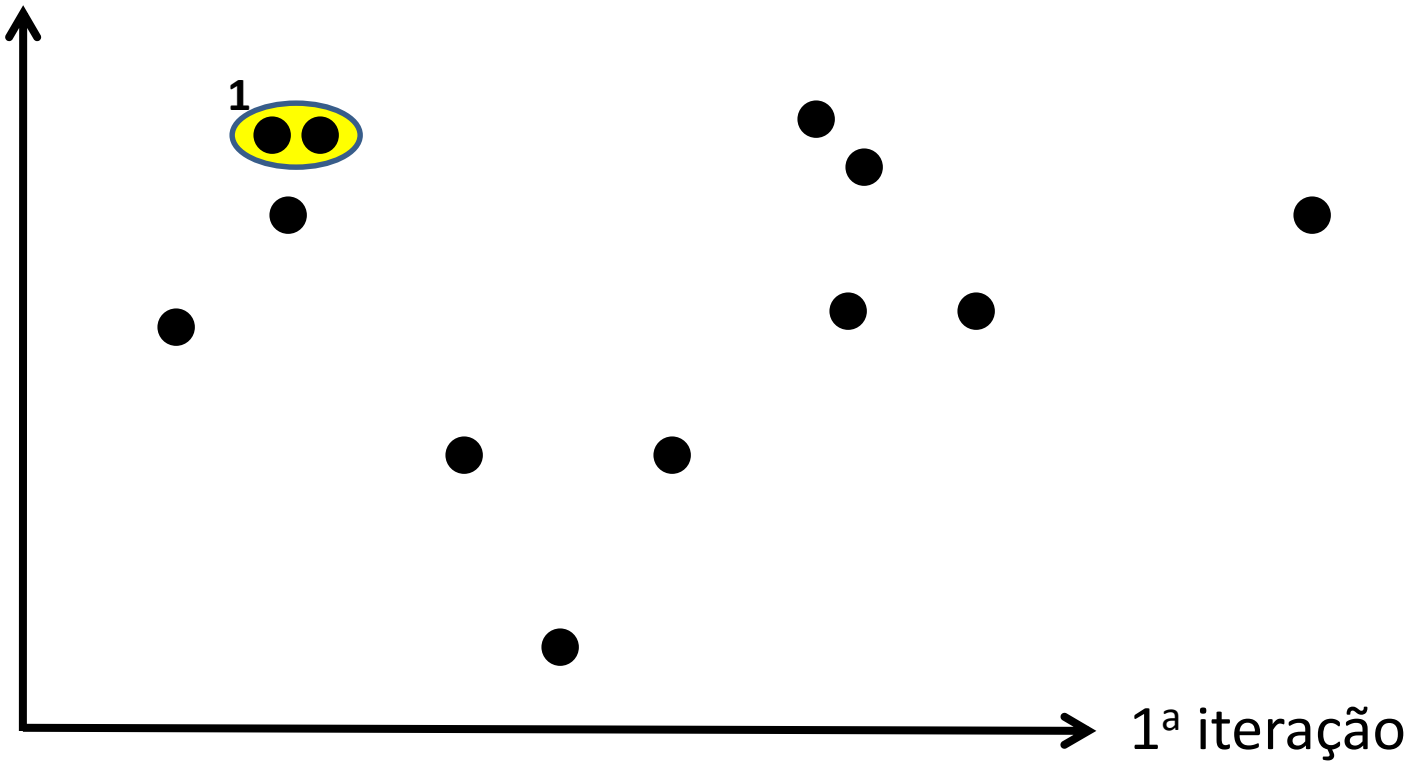
Clusterização Hierárquica

- Exemplo 1 – Aglomerativo:



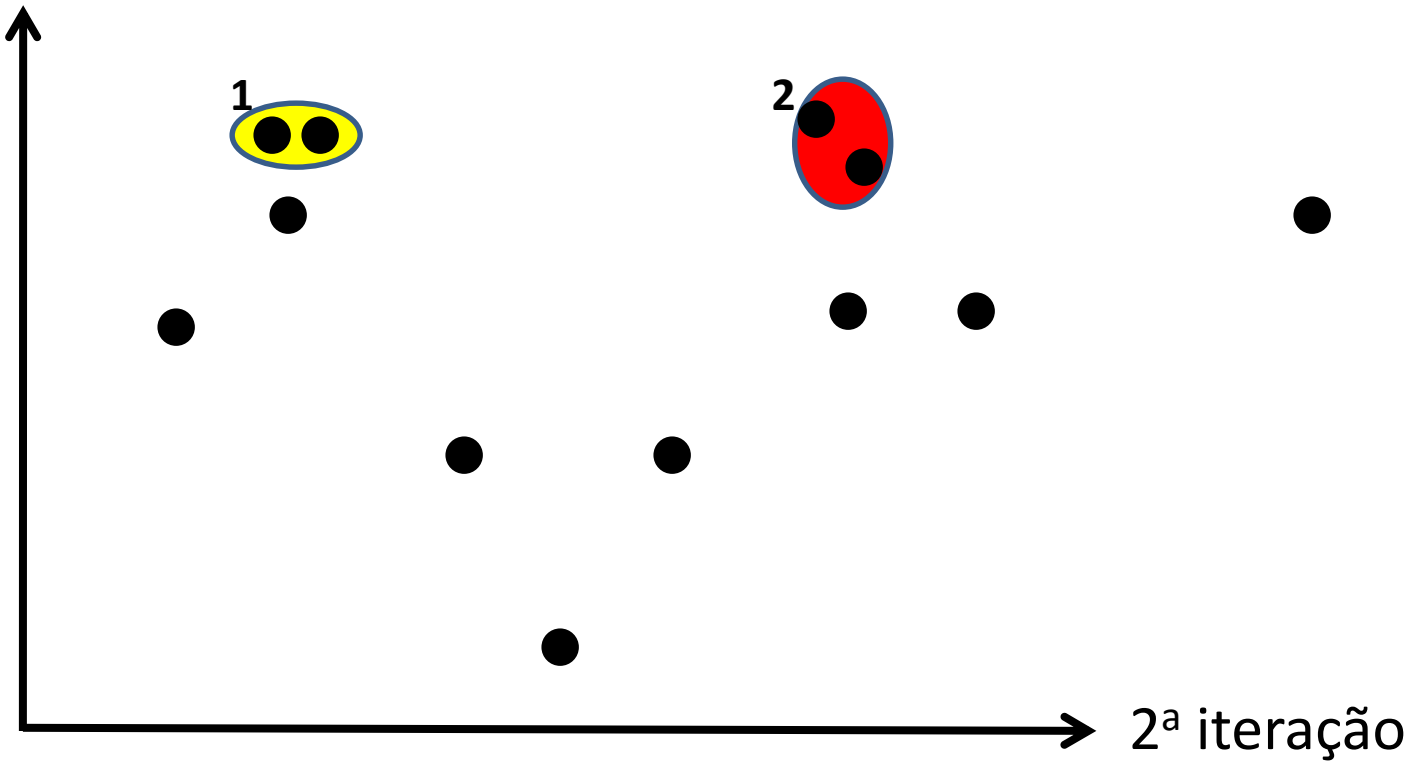
Clusterização Hierárquica

- Exemplo 1 – Aglomerativo:



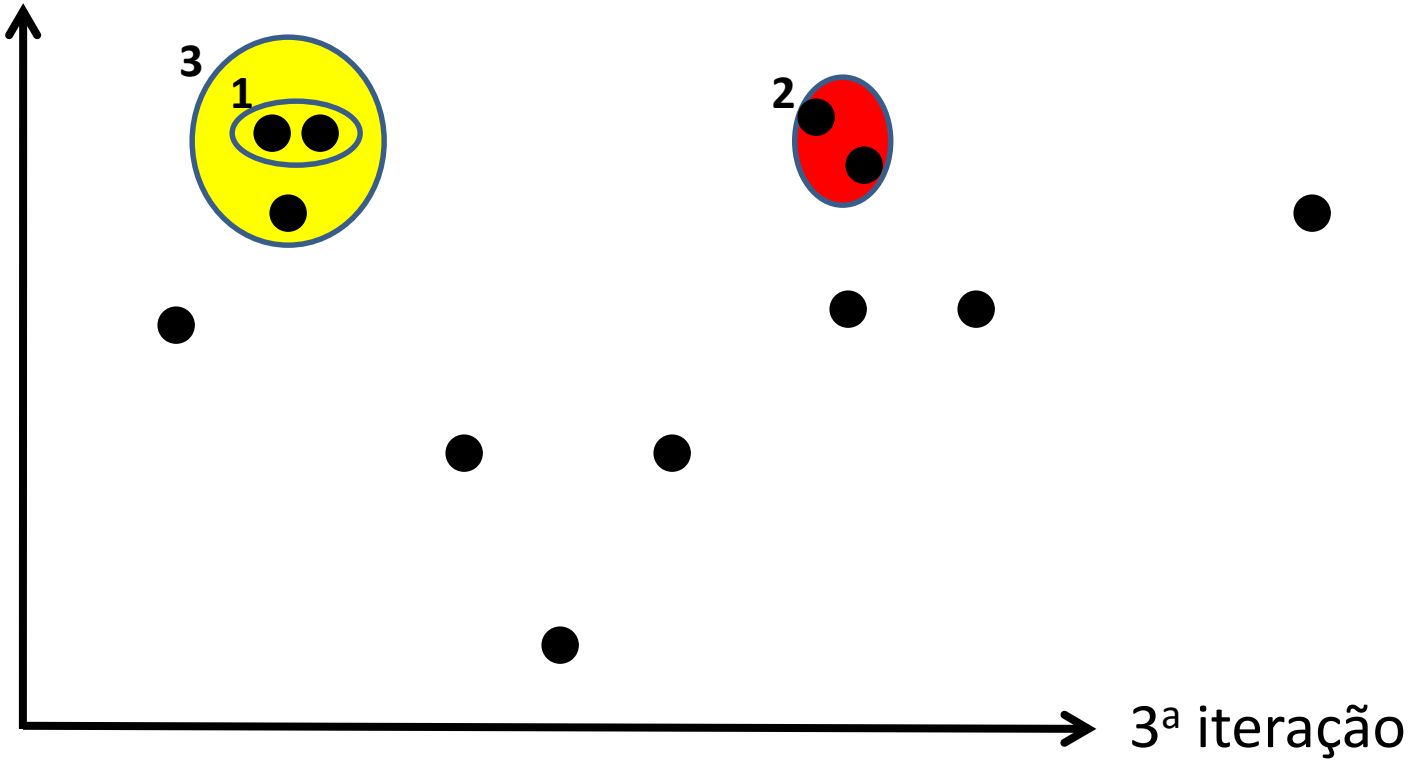
Clusterização Hierárquica

- Exemplo 1 – Aglomerativo:



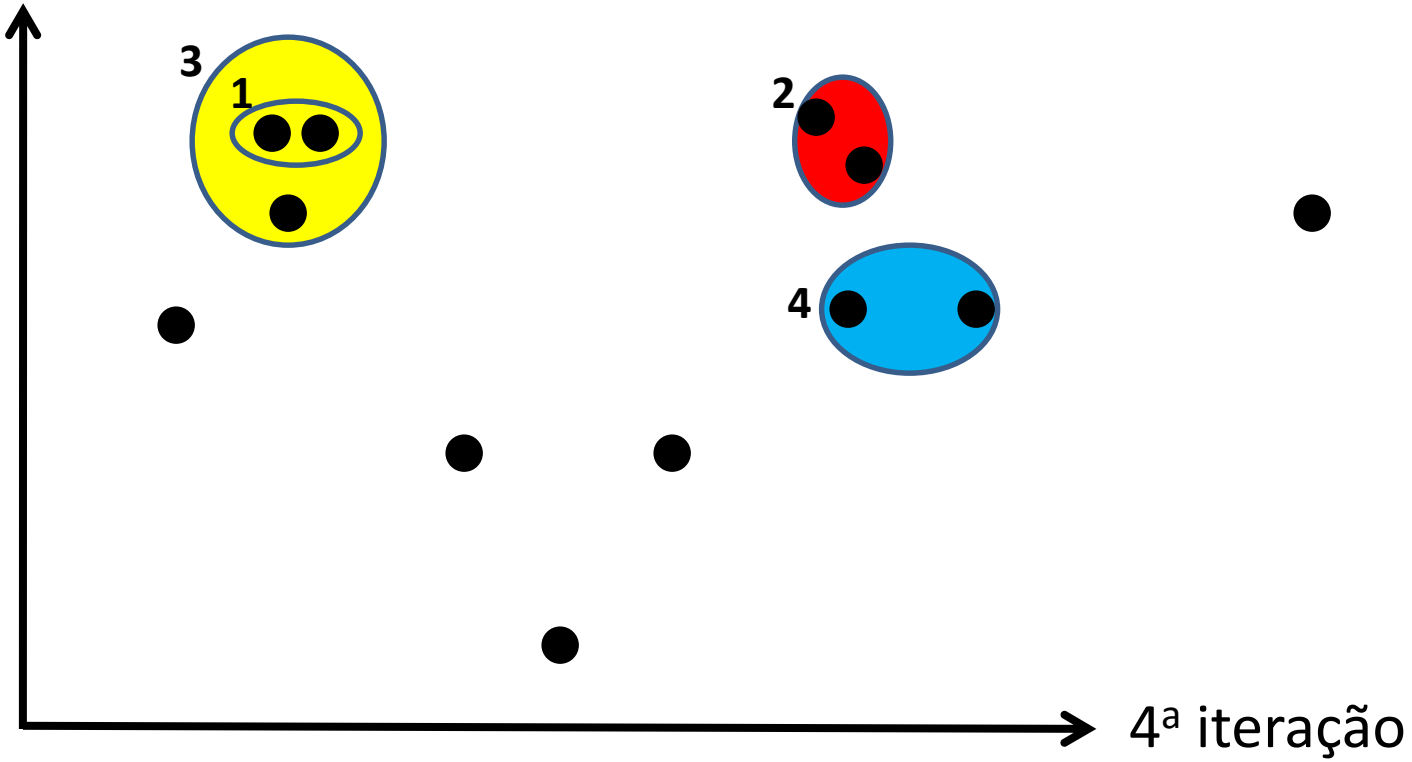
Clusterização Hierárquica

- Exemplo 1 – Aglomerativo:



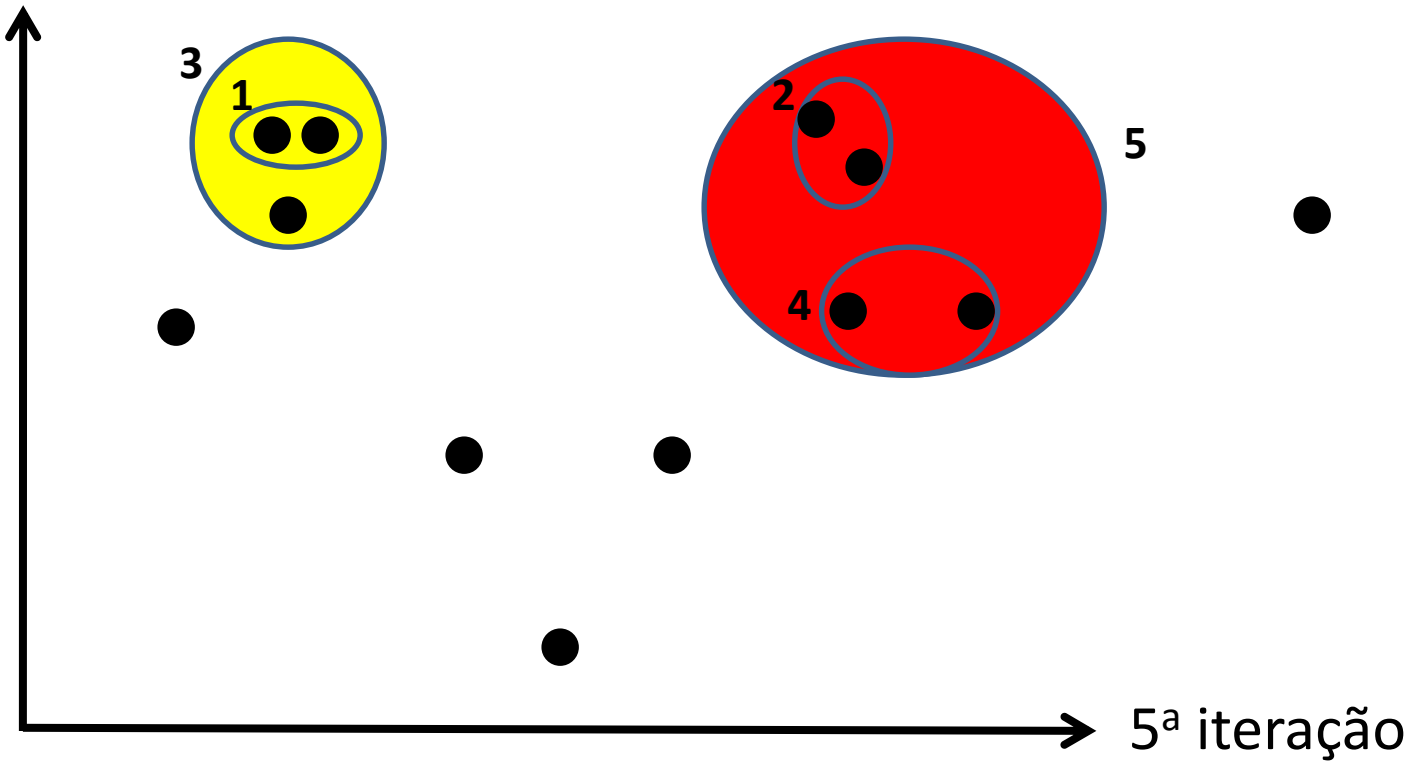
Clusterização Hierárquica

- Exemplo 1 – Aglomerativo:



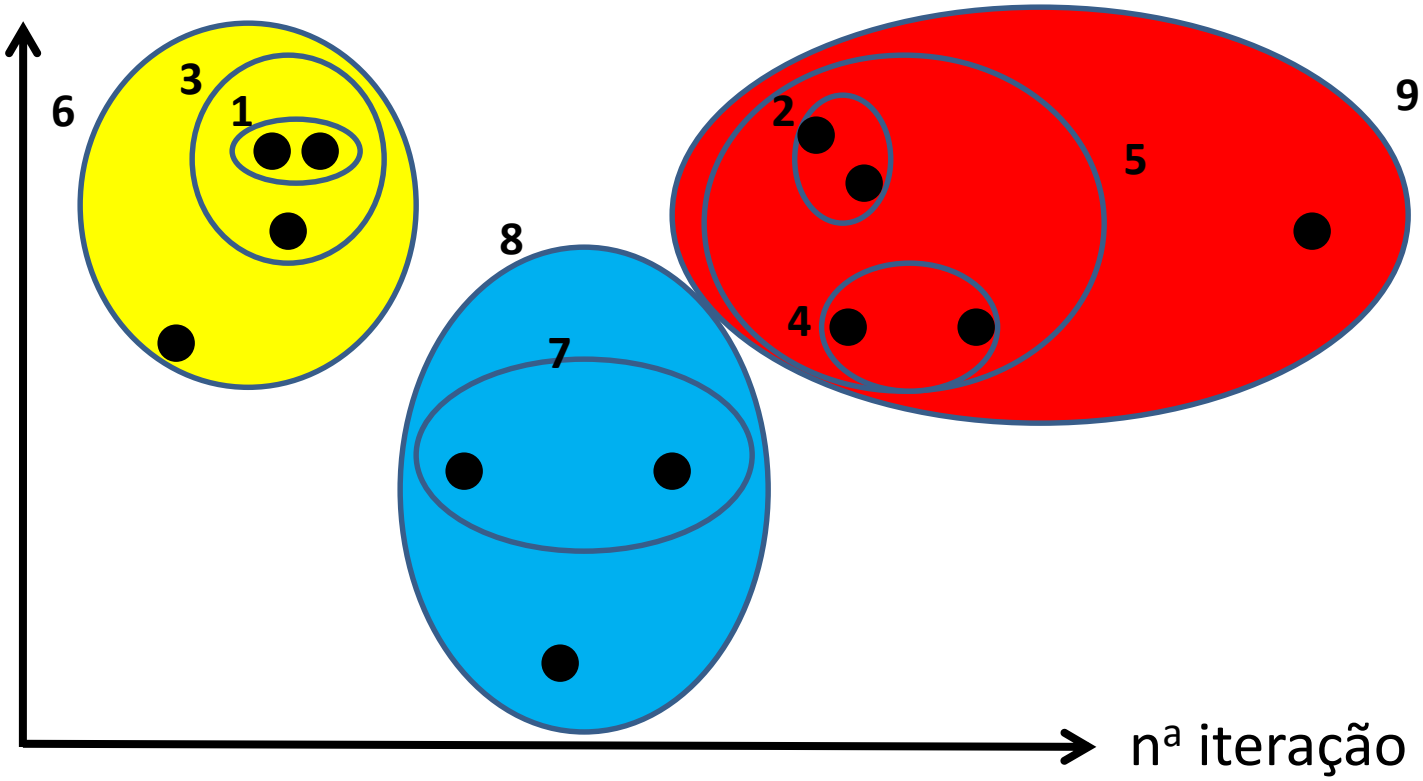
Clusterização Hierárquica

- Exemplo 1 – Aglomerativo:



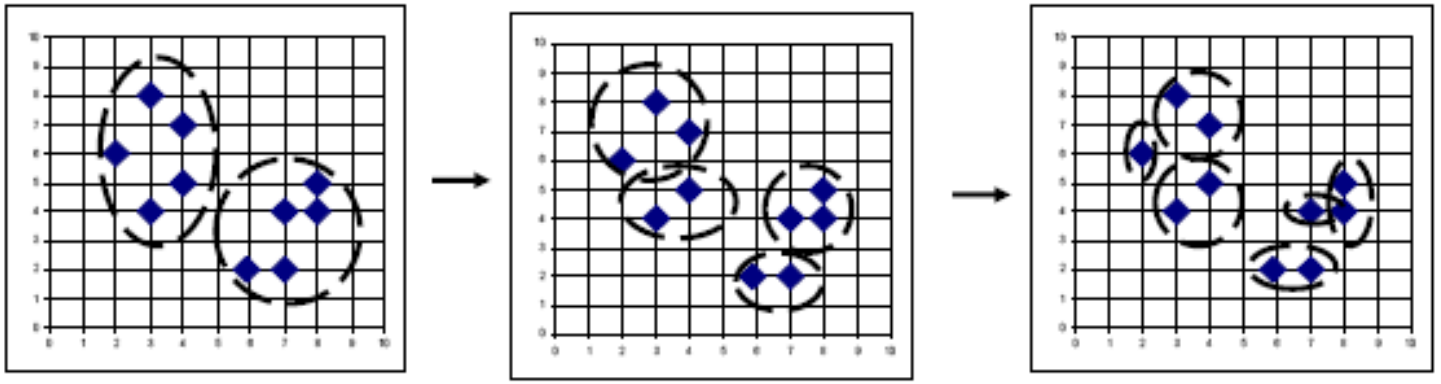
Clusterização Hierárquica

- Exemplo 1 – Aglomerativo:



Clusterização Hierárquica

- Exemplo 2 – Divisivo:



- Processo inverso.

K-Means

- É a técnica **mais simples** de aprendizagem não supervisionada.
- Consiste em fixar **k centróides** (de maneira aleatória), um para cada grupo (clusters).
- Associar cada indivíduo ao seu **centróide mais próximo**.
- Recalcular os centróides com base nos indivíduos classificados.

Algoritmo K-Means

(1) Selecione k centróides iniciais.

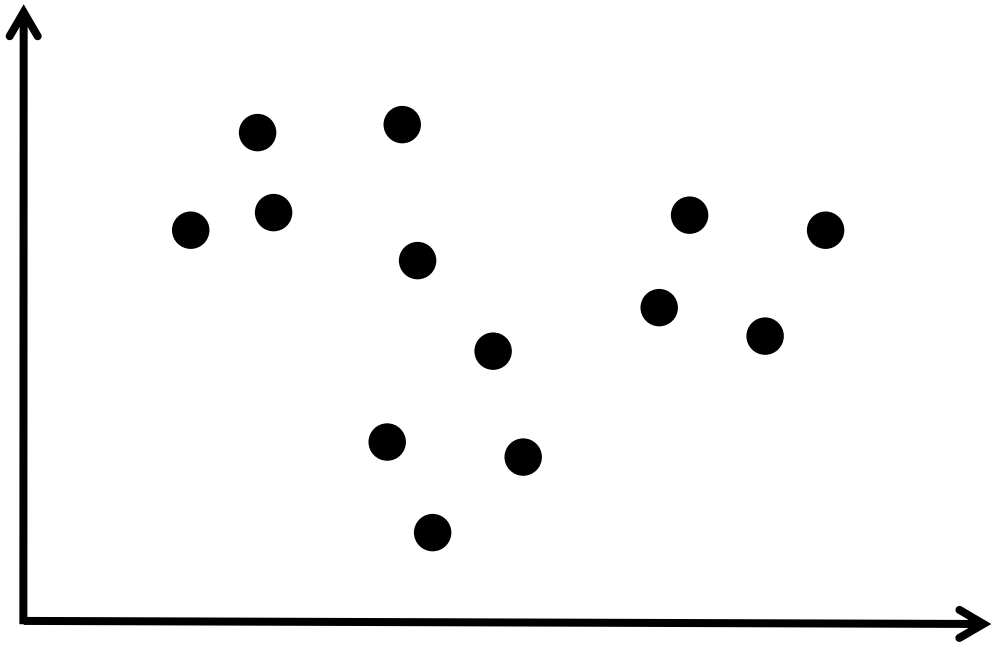
(2) Forme k clusters associando cada exemplo ao seu centróide mais próximo.

(3) Recalcule a posição dos centróides com base no centro de gravidade do cluster.

(4) Repita os passos 2 e 3 até que os centróides não sejam mais movimentados.

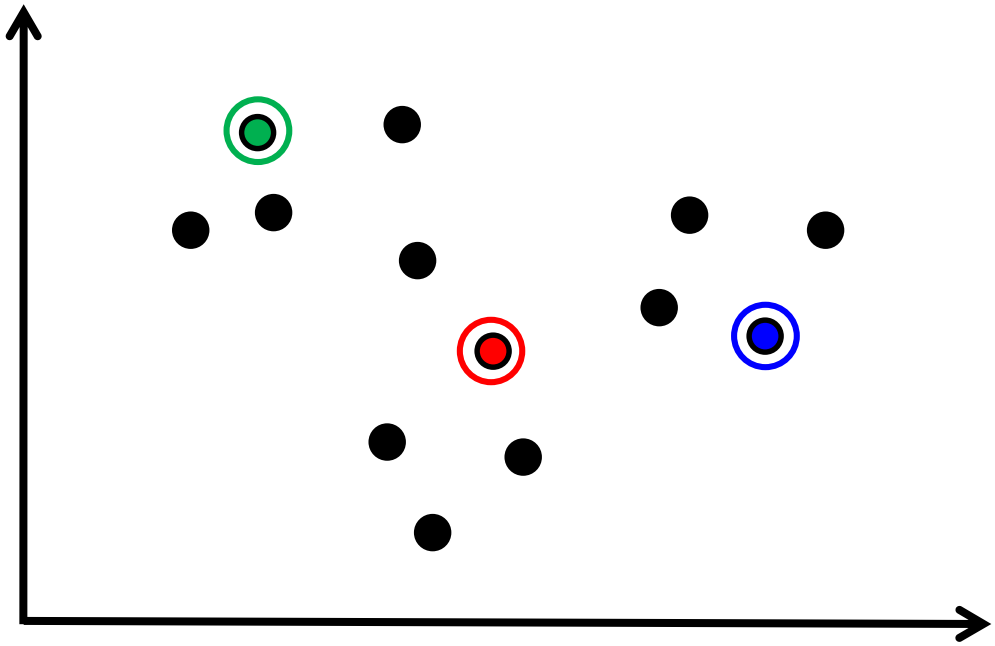
Algoritmo K-Means

- Exemplo:



Algoritmo K-Means

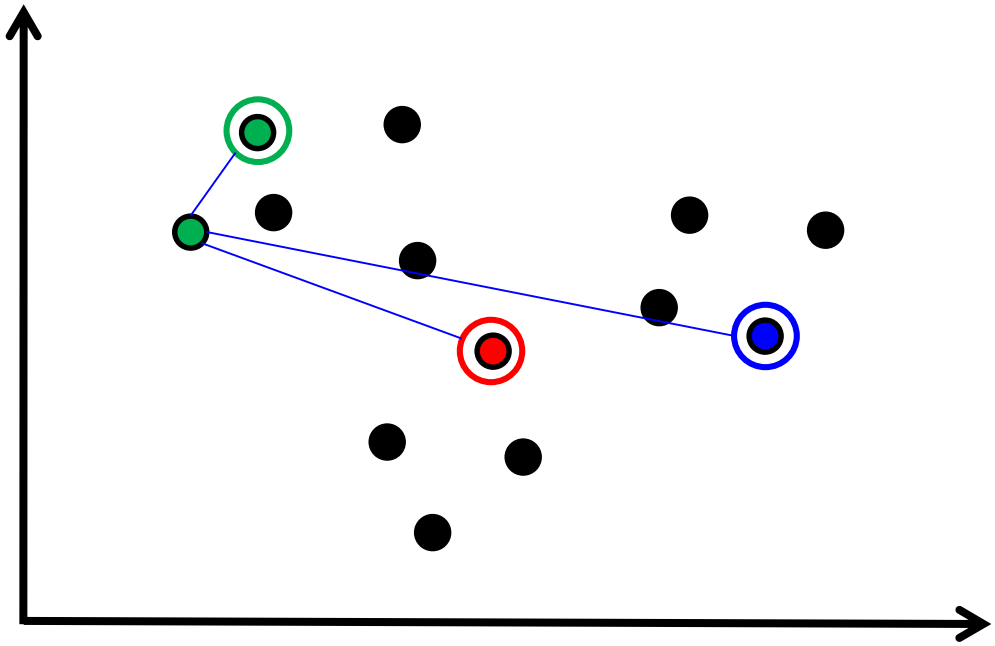
- Exemplo: k = 3



Seleciona-se k centróides iniciais.

Algoritmo K-Means

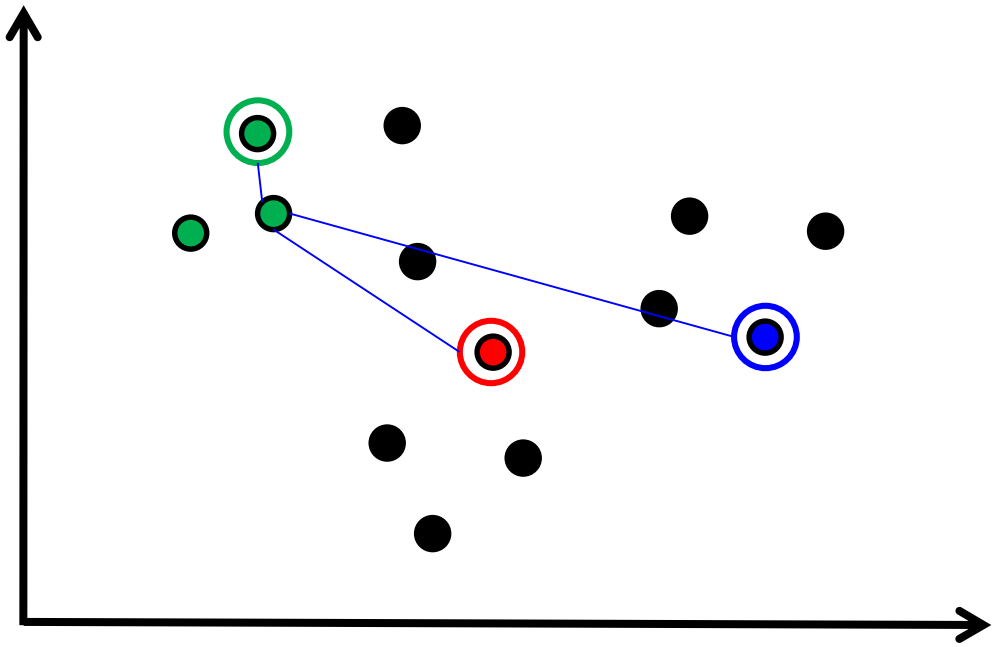
- Exemplo: k = 3



1ª iteração

Algoritmo K-Means

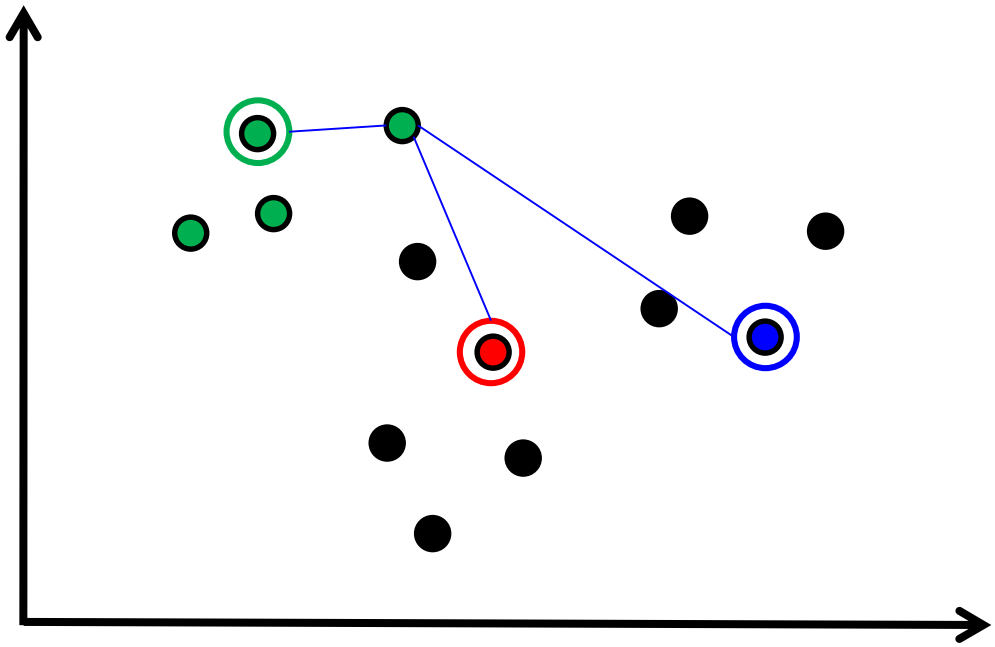
- Exemplo: k = 3



2ª iteração

Algoritmo K-Means

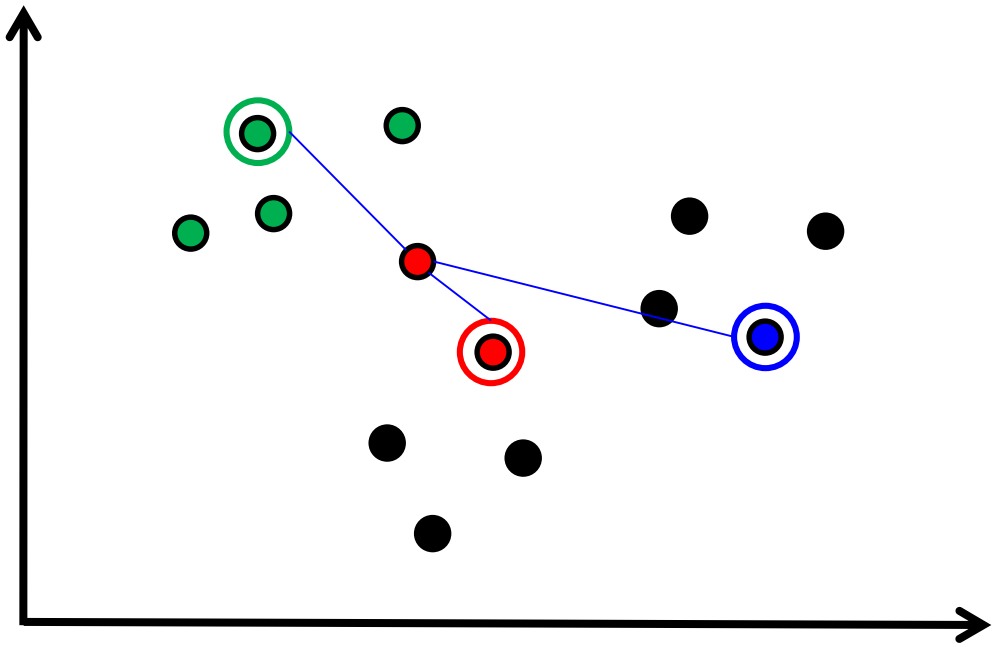
- Exemplo: k = 3



3ª iteração

Algoritmo K-Means

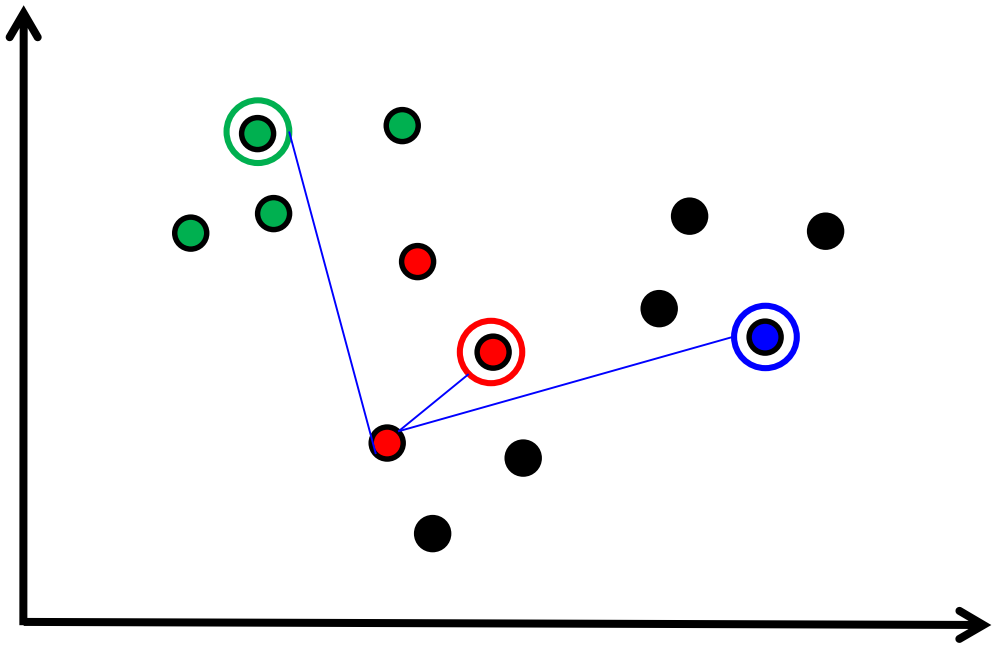
- Exemplo: k = 3



4ª iteração

Algoritmo K-Means

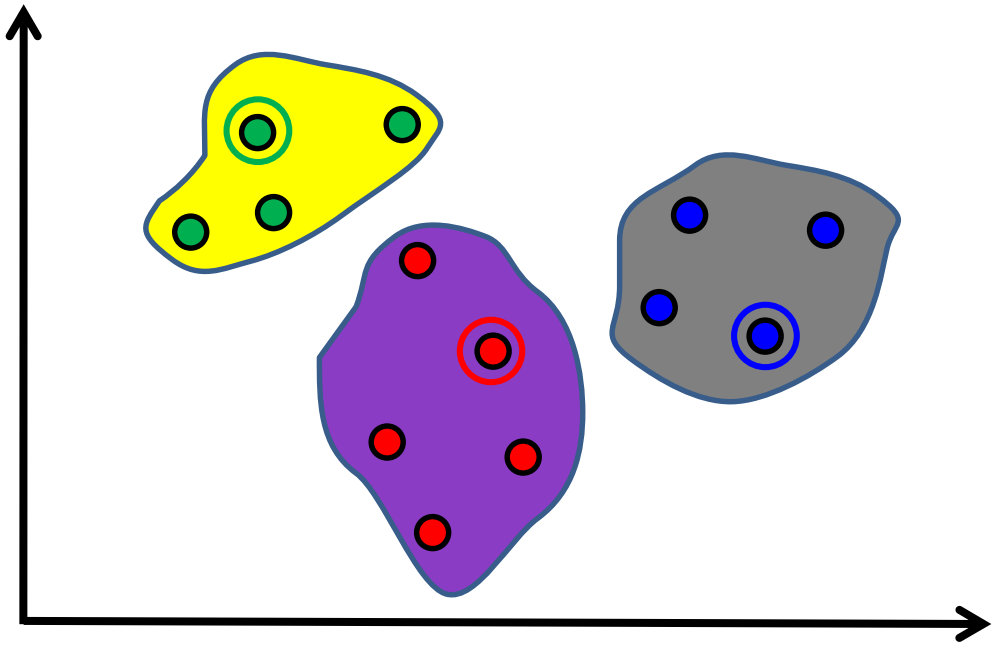
- Exemplo: k = 3



5ª iteração

Algoritmo K-Means

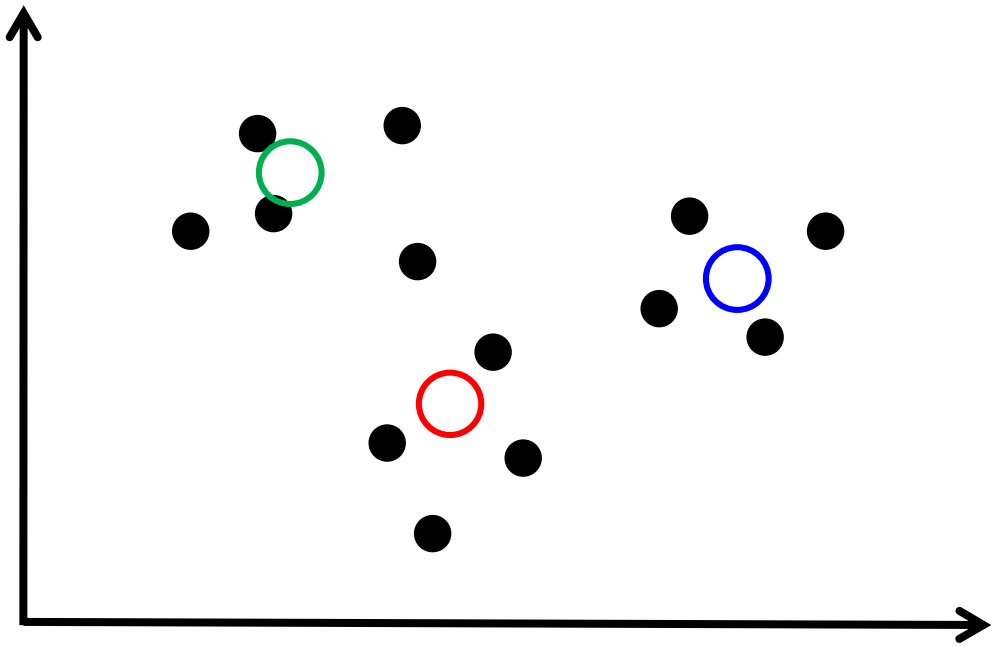
- Exemplo: k = 3



nª iteração

Algoritmo K-Means

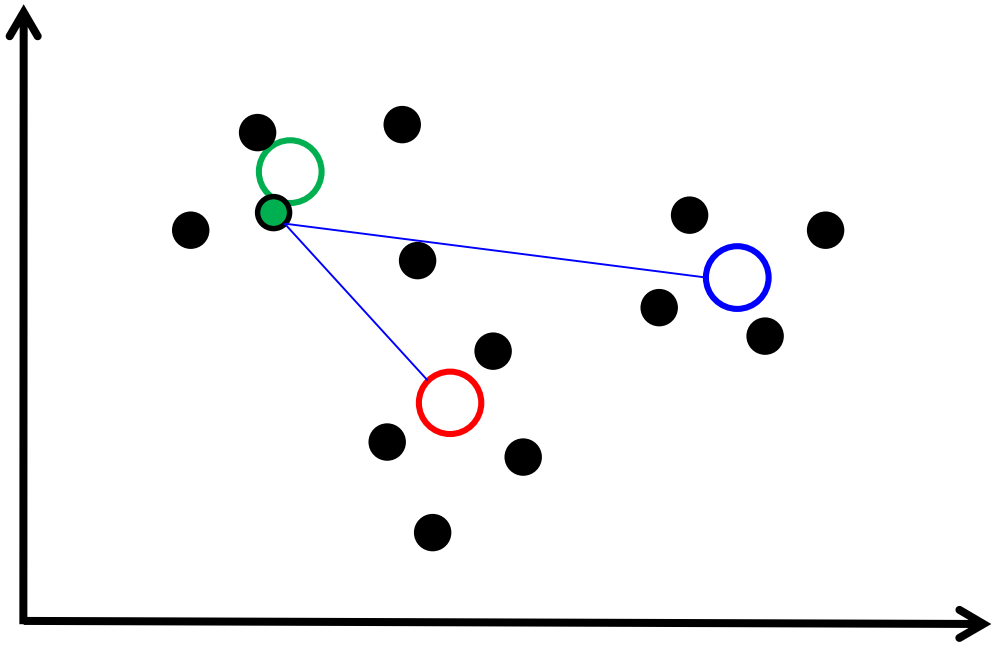
- Exemplo: k = 3



Repite-se os passos anteriores até que os centróides não se movam mais.

Algoritmo K-Means

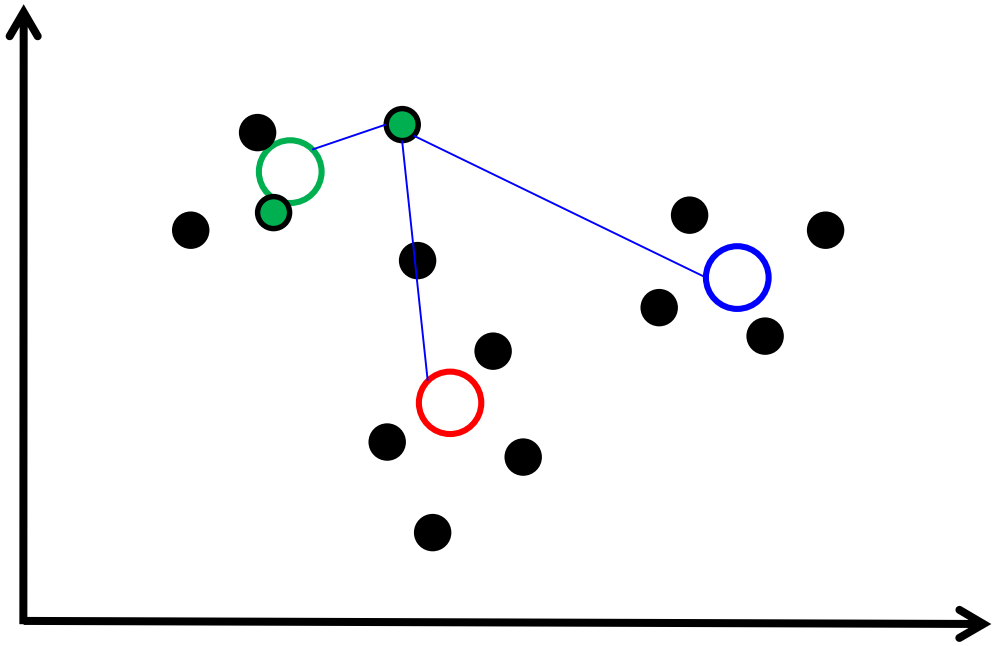
- Exemplo: k = 3



1ª iteração

Algoritmo K-Means

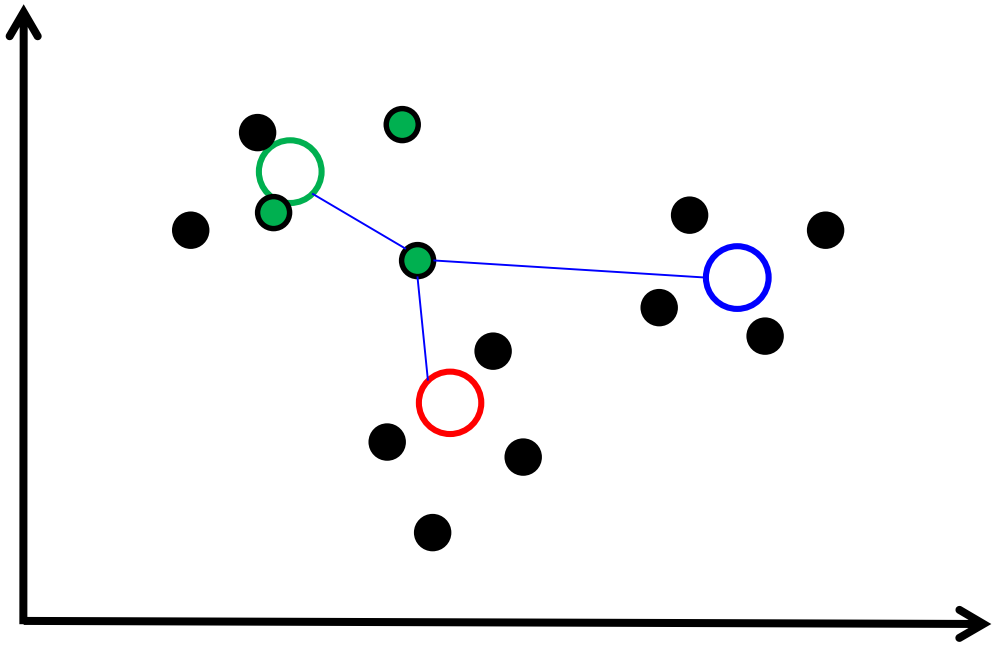
- Exemplo: k = 3



2ª iteração

Algoritmo K-Means

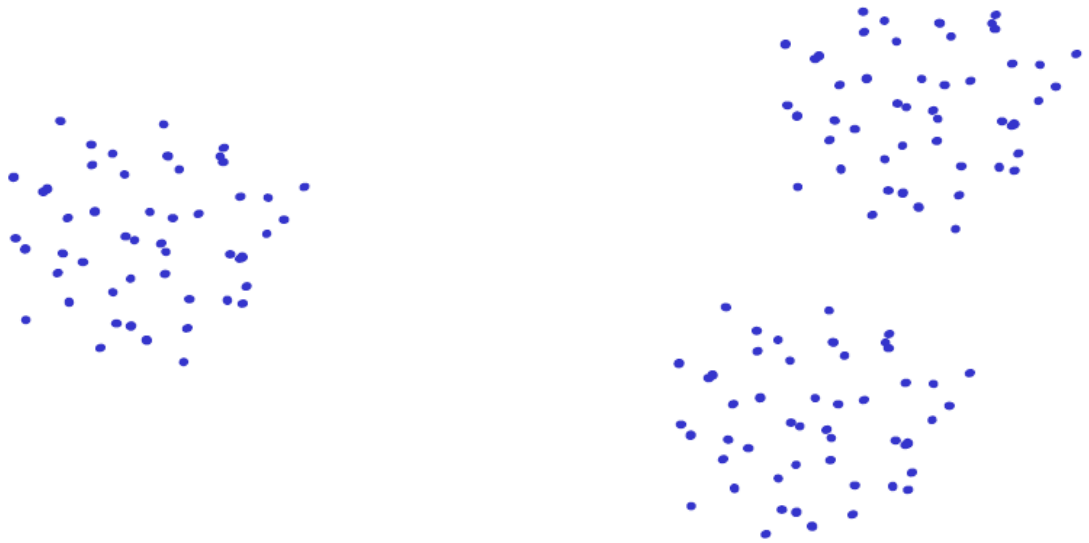
- Exemplo: k = 3



3ª iteração

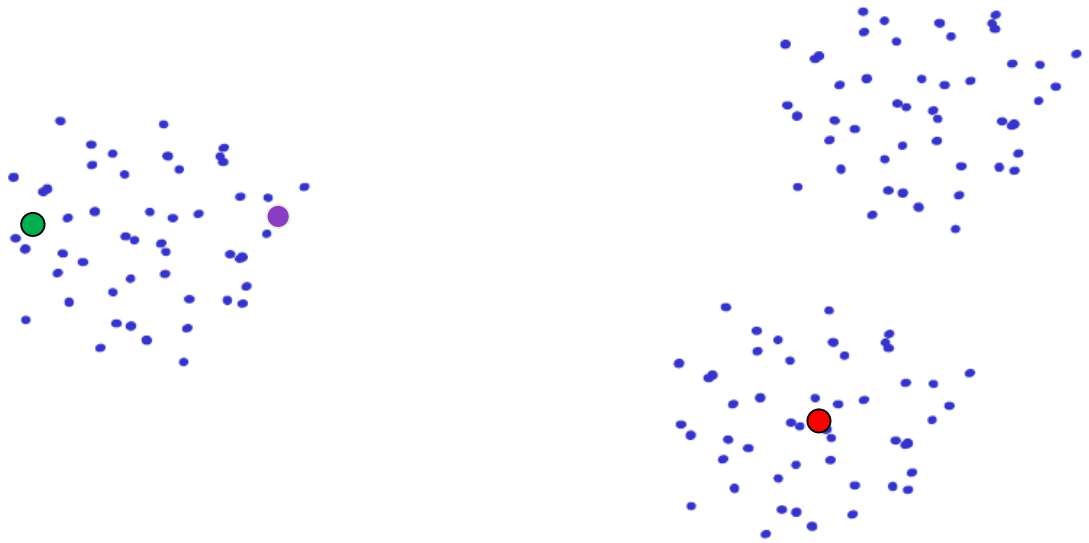
Problemas do K-Means

- O principal problema do K-Means é a dependência de uma **boa inicialização**.



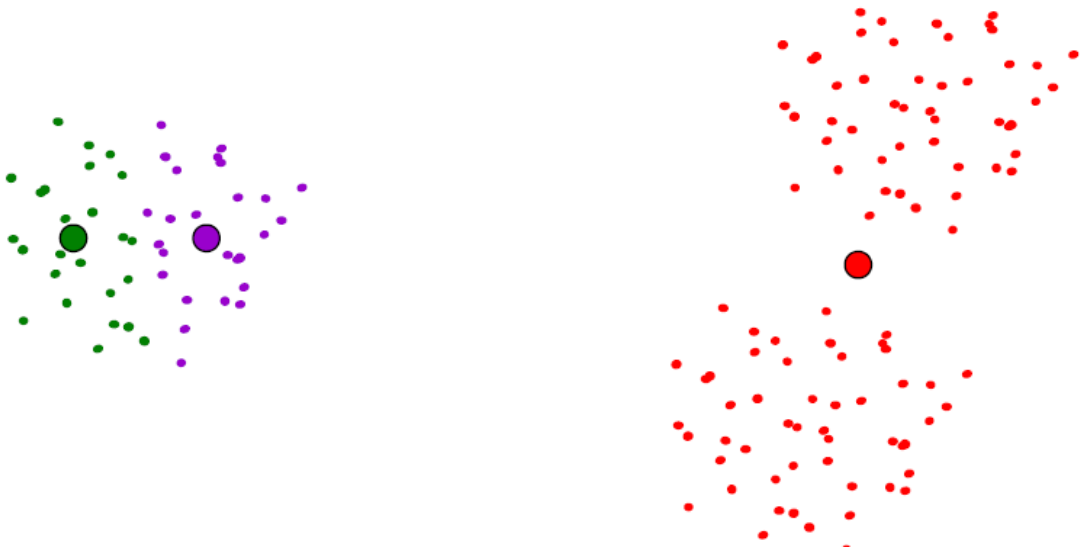
Problemas do K-Means

- O principal problema do K-Means é a dependência de uma **boa inicialização**.



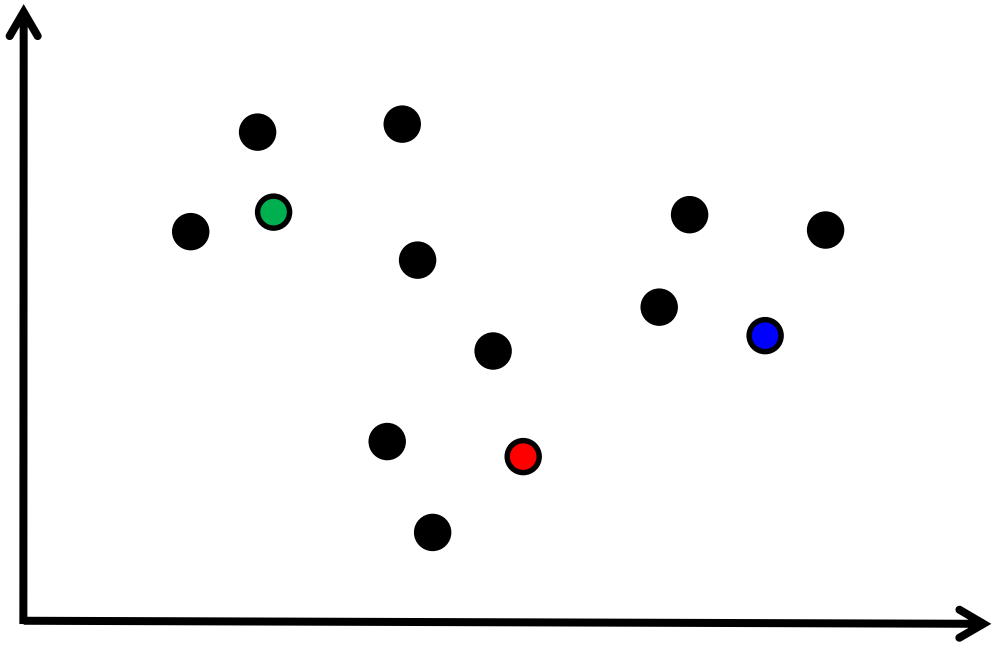
Problemas do K-Means

- O principal problema do K-Means é a dependência de uma **boa inicialização**.



Algoritmo K-Medoids

- Diferença para o k-means é que o representante do grupo é uma instância do próprio grupo e não mais um centróide (ponto médio);



Características Desejáveis

- Descobrir clusters com forma arbitrária;
- Identificar clusters de tamanhos variados;
- Trabalhar com objetos com qualquer número de atributos (dimensões);
- Ser escalável para lidar com qualquer quantidade de objetos;
- Exigir o mínimo de conhecimento para determinar os parâmetros de entrada;
- Encontrar o número adequado de clusters.

Considerações Finais

- O **aprendizado não-supervisionado** ou clusterização (agrupamento) busca extrair informação relevante de dados **não rotulados**.

- Existem **vários** algoritmos agrupamento de dados.

- Diferentes escolhas de atributos, medidas de proximidade, critérios de agrupamento e algoritmos de clusterização levam a resultados totalmente diferentes.

Considerações Finais

- O problema de clusterização é NP-Completo

- Para um conjunto com 10 elementos:
  - com 2 clusters são 511 grupos possíveis
  - na clusterização automática serão 115.975

Leitura Complementar

- Mitchell, T. **Machine Learning**, McGraw–Hill Science/Engineering/Math, 1997.

- Duda, R., Hart, P., Stork, D., **Pattern Classification**, John Wiley & Sons, 2000