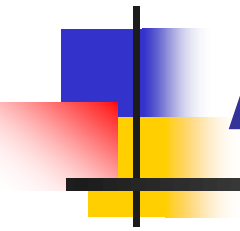
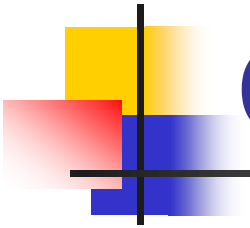


SCC5895 – Análise de Agrupamento de Dados

Algoritmos Particionais: Parte I

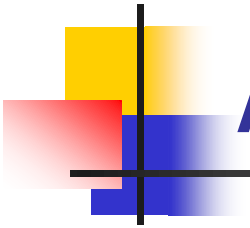
Prof. Eduardo R. Hruschka

PPG-CCMC / ICMC / USP



Créditos

- Este material consiste de adaptações e extensões dos originais:
  - Elaborados por Eduardo R. Hruschka e Ricardo J.G.B. Campello
  - de (Tan et al., 2006)
  - de E. Keogh (SBBD 2003)
  - de G. Piatetsky-Shapiro (KDNuggets)



Aula de Hoje

- Definições
- Algoritmos Particionais sem Sobreposição
  - k-Means
    - Raizes Históricas e Algoritmo Básico
    - Inicialização e Implementações Eficientes
    - Fundamentação Teórica (perspectiva de otimização)
  - K-Means Paralelo e Distribuído
  - Variantes do k-Means
    - K-Medianas, k-Medóides, ...
  - Estimativa do Número de Grupos k

Definição de Partição de Dados (Revisão)

- Consideremos um conjunto de N objetos a serem agrupados: $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, ..., \mathbf{x}_N\}$
- **Partição** (rígida): coleção de k grupos não sobrepostos $\mathbf{P} = \{\mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2, ..., \mathbf{C}_k\}$ tal que:

$$\mathbf{C}_1 \cup \mathbf{C}_2 \cup ... \cup \mathbf{C}_k = \mathbf{X}$$

$$\mathbf{C}_i \neq \emptyset$$

$$\mathbf{C}_i \cap \mathbf{C}_j = \emptyset \text{ para } i \neq j$$

- Exemplo: $\mathbf{P} = \{ (\mathbf{x}_1), (\mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \mathbf{x}_6), (\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_5) \}$

Matriz de Partição

- **Matriz de Partição** é uma matriz com *k* linhas (no. de grupos) e *N* colunas (no. de objetos) na qual cada elemento μ_{ij} indica o *grau de pertinência* do j-ésimo objeto ($\mathbf{x}_j$) ao i-ésimo grupo ($\mathbf{C}_i$)

$$\mathbf{U}(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} \mu_{11} & \mu_{12} & \cdots & \mu_{1N} \\ \mu_{21} & \mu_{22} & \cdots & \mu_{2N} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \mu_{k1} & \mu_{k2} & \cdots & \mu_{kN} \end{bmatrix}$$

- Se essa matriz for **binária**, ou seja, $\mu_{ij} \in \{0,1\}$, e ainda, se a restrição $\sum_i(\mu_{ij}) = 1 \ \forall j$ for respeitada, então denomina-se:
  - *matriz de partição* ***rígida***, ***exclusiva*** ou *sem* ***sobreposição***

Matriz de Partição

- **Exemplo:**
  - $\mathbf{P} = \{ (\mathbf{x}_1), (\mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \mathbf{x}_6), (\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_5) \}$

$$\mathbf{U}(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Métodos Particionais (Sem Sobreposição)

- Métodos *particionais* sem sobreposição referem-se a algoritmos de agrupamento que buscam (explícita ou implicitamente) por uma matriz de partição rígida de um conjunto de objetos **X**

Encontrar uma Matriz de Partição U(X): Equivale a particionar o conjunto $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, ..., \mathbf{x}_N\}$ de N objetos em uma coleção $\mathbf{C} = \{\mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2, ..., \mathbf{C}_k\}$ de k grupos disjuntos $\mathbf{C}_i$ tal que $\mathbf{C}_1 \cup \mathbf{C}_2 \cup ... \cup \mathbf{C}_k = \mathbf{X}$, $\mathbf{C}_i \neq \emptyset$, e $\mathbf{C}_i \cap \mathbf{C}_j = \emptyset$ para $i \neq j$

Particionamento como Problema Combinatório

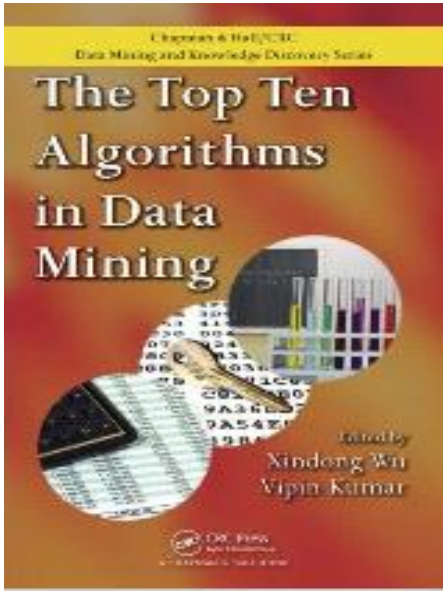
- **Problema**: Assumindo que *k* seja conhecido, o no. de possíveis formas de agrupar *N* objetos em *k clusters* é dado por (Liu, 1968):

$$NM(N,k) = \frac{1}{k!}\sum_{i=0}^{k}(-1)^{i}\binom{k}{i}(k-i)^{N}$$

- Por exemplo, NM(100, 5) $\approx$ 56.6x10^{67}.
  - Em um computador com capacidade de avaliar 10^{9} partições/s, precisaríamos $\approx$ 1.8x10^{50} séculos para processar todas as avaliações
- Como k em geral é desconhecido, problema é ainda maior...
  - **NP-Hard**: Avaliação computacional exaustiva é impraticável...
- **Solução**: formulações alternativas...

Algoritmo k-Means

- Começaremos nosso estudo com um dos algoritmos mais clássicos da área de **mineração de dados** em geral
  - algoritmo das **k-médias** ou ***k-means***
  - listado entre os **Top 10 Most Influential Algorithms in DM**



- Wu, X. and Kumar, V. (Editors), *The Top Ten Algorithms in Data Mining*, CRC Press, 2009

- X. Wu et al., "Top 10 Algorithms in Data Mining", *Knowledge and Info. Systems*, vol. 14, pp. 1-37, 2008

Algoritmo k-Means

- **Referência Mais Aceita como Original**:

J. B. MacQueen, *Some methods of classification and analysis of multivariate observations*, In Proceedings 5th Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, Berkeley, California, USA, 1967, 281–297

- **Porém...**

"K-means has a rich and diverse history as it was independently discovered in different scientific fields by Steinhaus (1956), Lloyd (proposed in 1957, published in 1982), Ball & Hall (1965) and MacQueen (1967)" [**Jain, *Data Clustering: 50 Years Beyond K-Means*, Patt. Rec. Lett., 2010**]

- **... e tem sido assunto por mais de meio século !**

Douglas Steinley, *K-Means Clustering: A Half-Century Synthesis*, British Journal of Mathematical and Statistical Psychology, Vol. 59, 2006

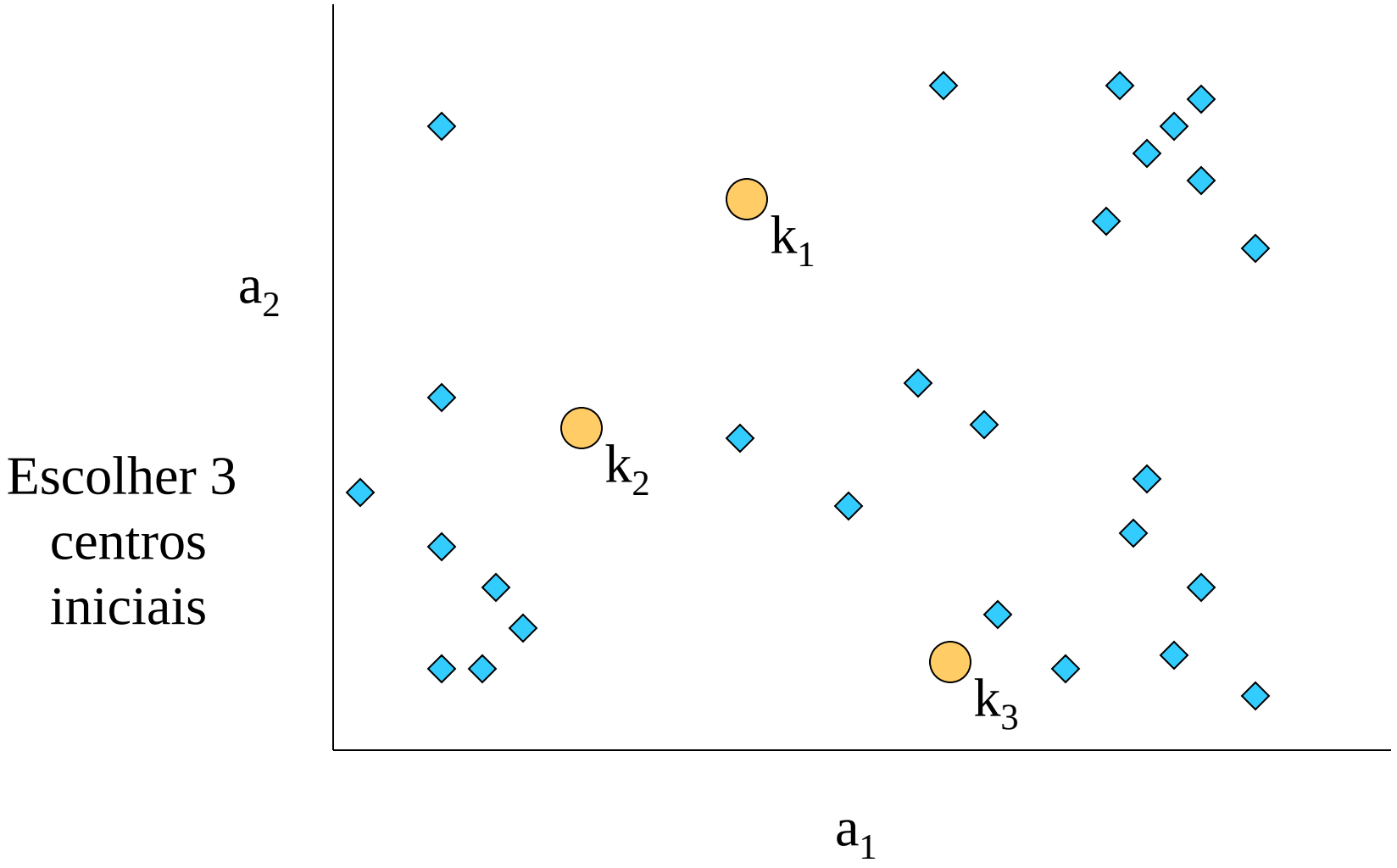
k-Means

1) Escolher aleatoriamente um número *k* de protótipos (centros) para os clusters
2) Atribuir cada objeto para o cluster de centro mais *próximo* (segundo alguma distância, e.g. Euclidiana)
3) Mover cada centro para a média (centróide) dos objetos do cluster correspondente
4) Repetir os passos 2 e 3 até que algum critério de convergência seja obtido:

   - número máximo de iterações

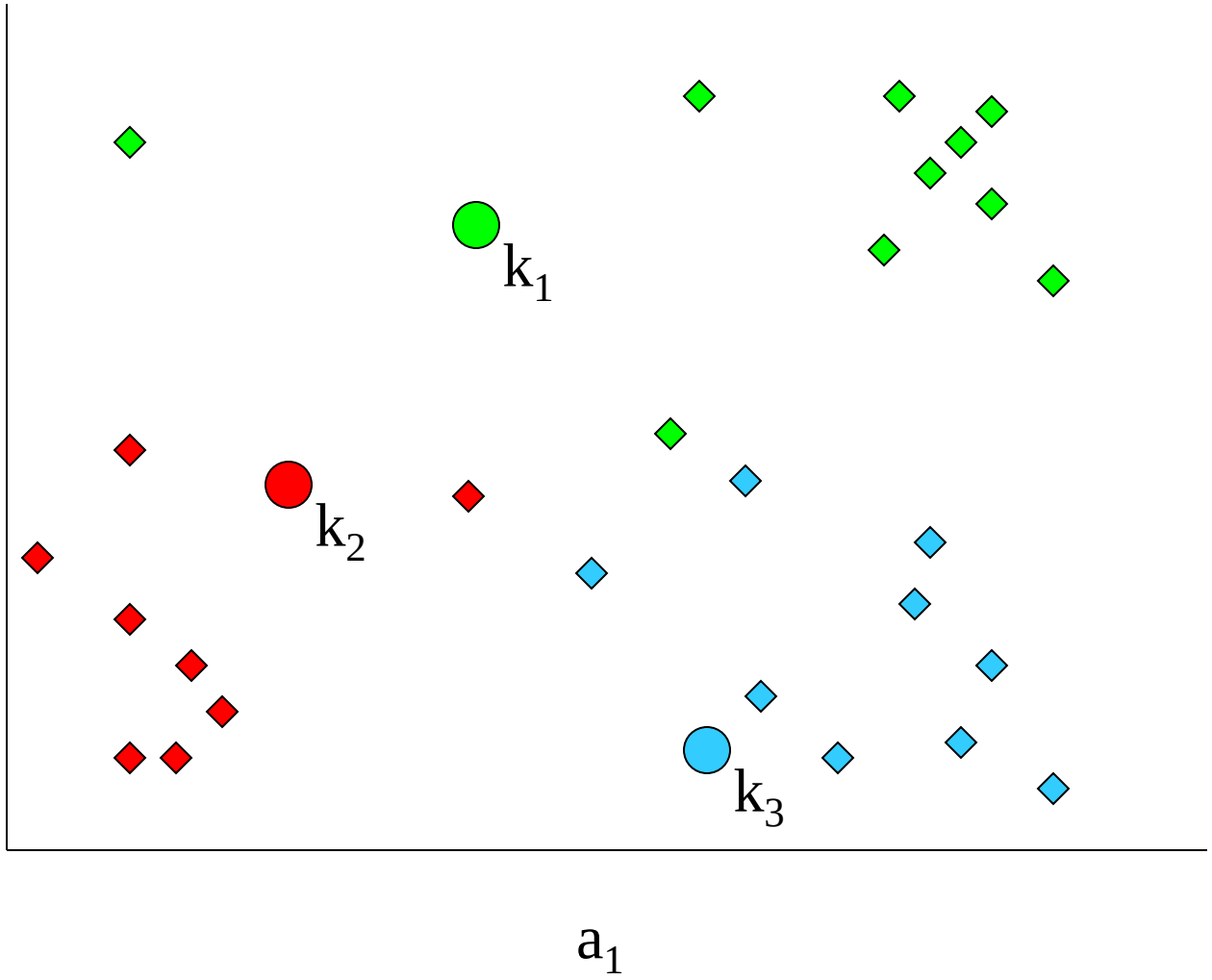
   - limiar mínimo de mudanças nos centróides

k-Means - passo 1:



Slide baseado no curso de Gregory Piatetsky-Shapiro, disponível em http://www.kdnuggets.com

k-Means - passo 2:

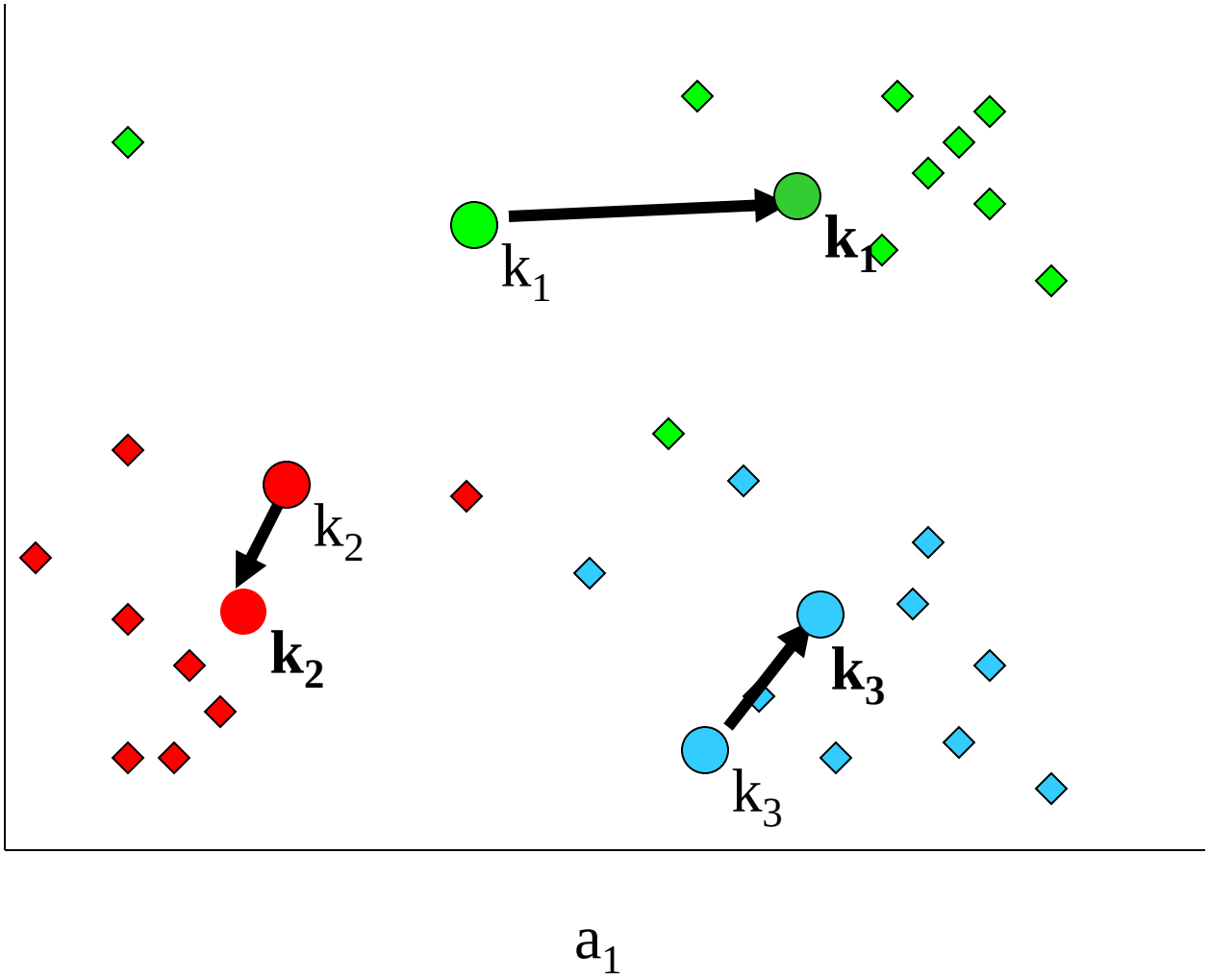


Atribuir cada objeto ao cluster de centro + próximo

Slide baseado no curso de Gregory Piatetsky-Shapiro, disponível em http://www.kdnuggets.com

k-Means - passo 3:

Mover cada centro para o vetor médio do cluster (centróide)

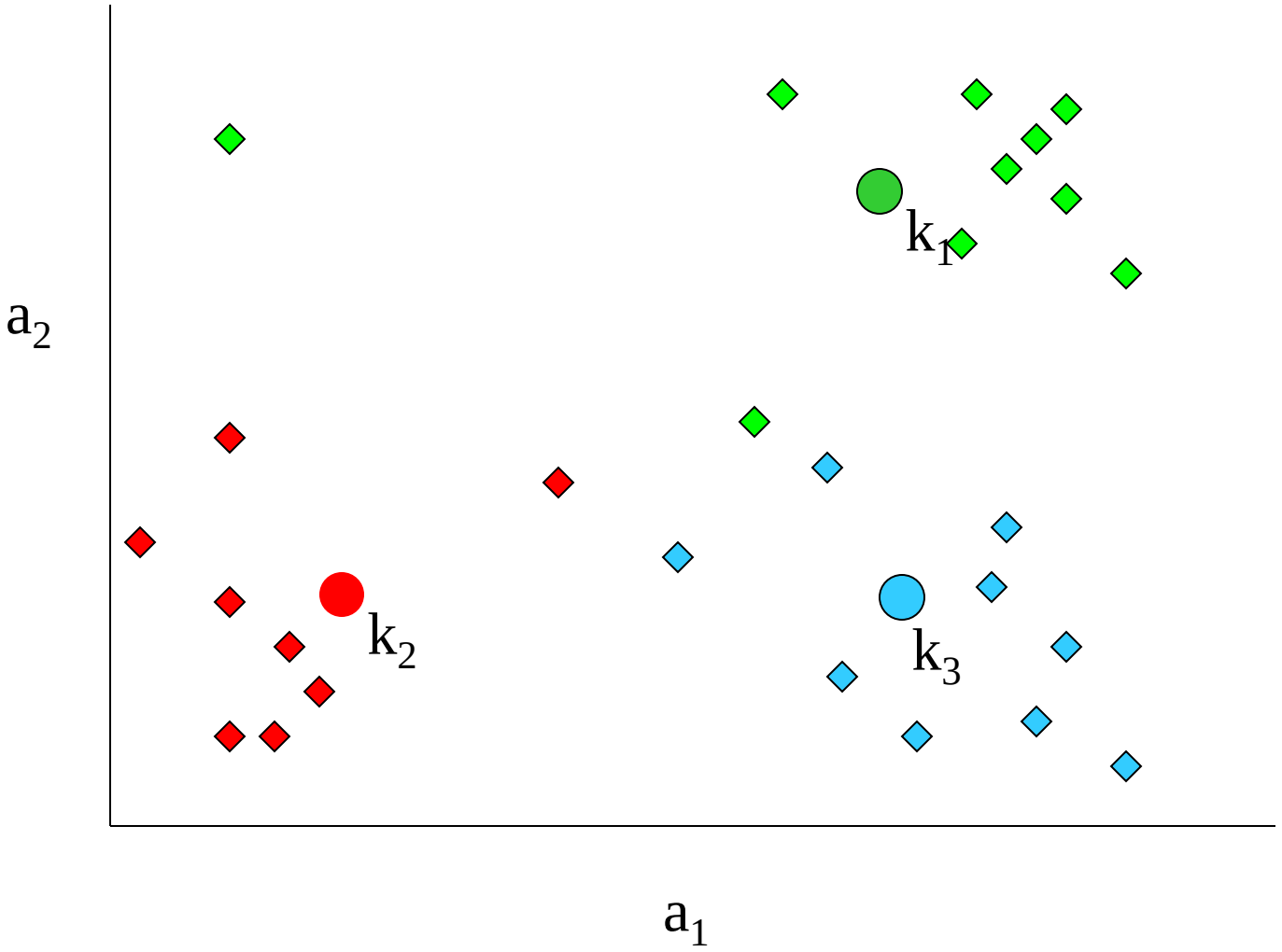


Slide baseado no curso de Gregory Piatetsky-Shapiro, disponível em http://www.kdnuggets.com

k-Means:

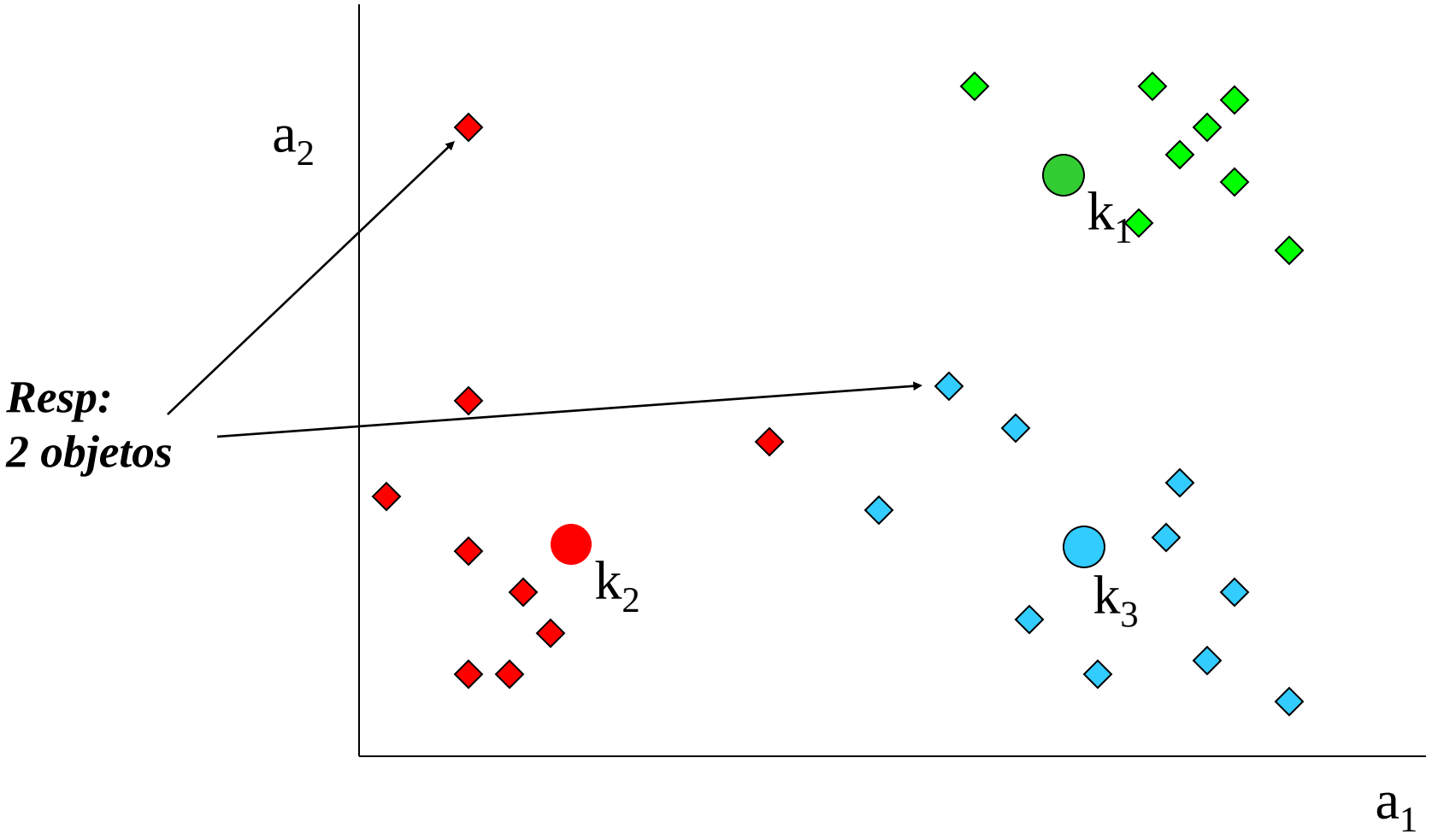
Re-atribuir objetos aos clusters de centróides mais próximos

Quais objetos mudarão de cluster?



Slide baseado no curso de Gregory Piatetsky-Shapiro, disponível em http://www.kdnuggets.com

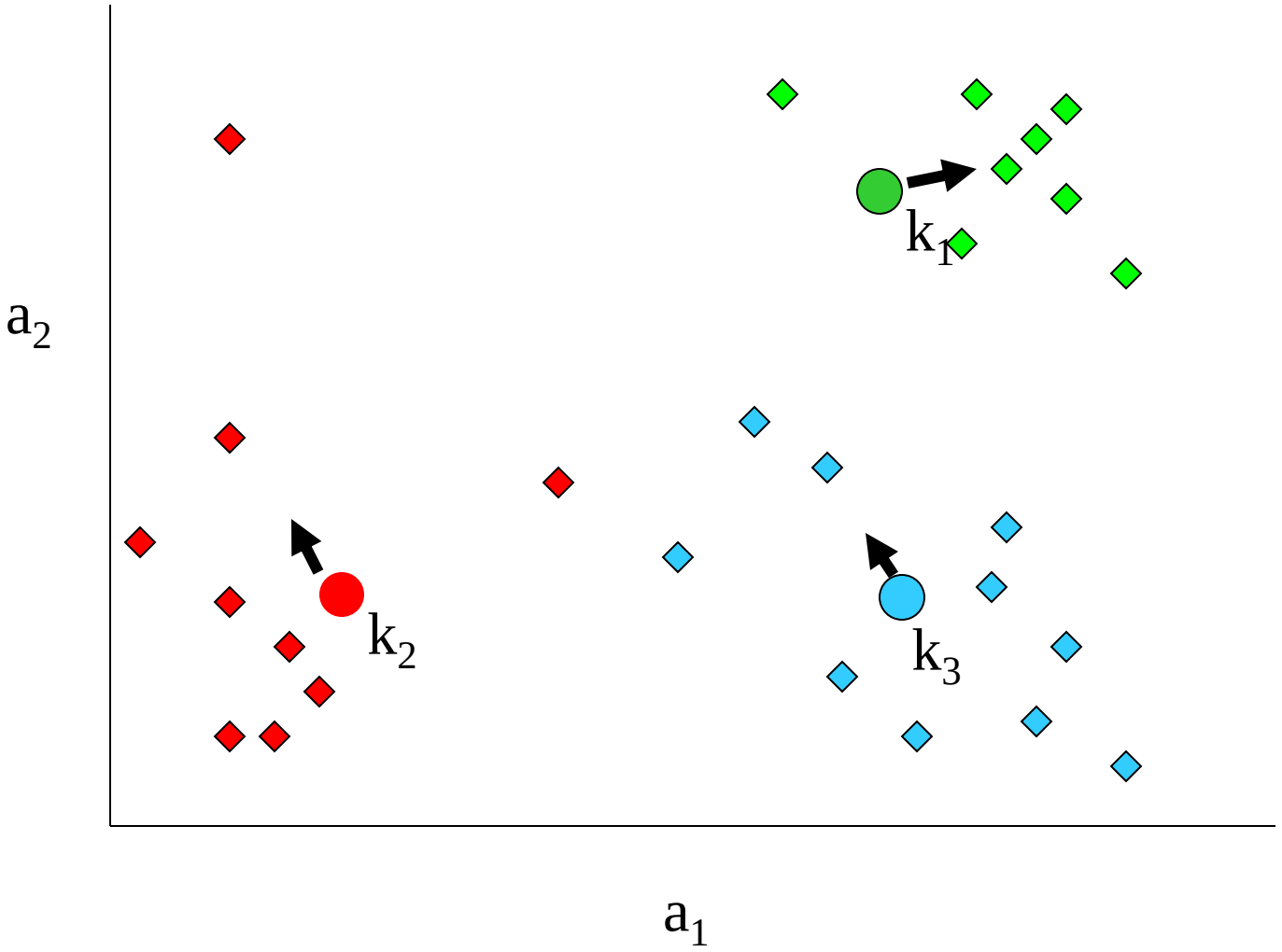
k-Means:



Slide baseado no curso de Gregory Piatetsky-Shapiro, disponível em http://www.kdnuggets.com

k-Means:

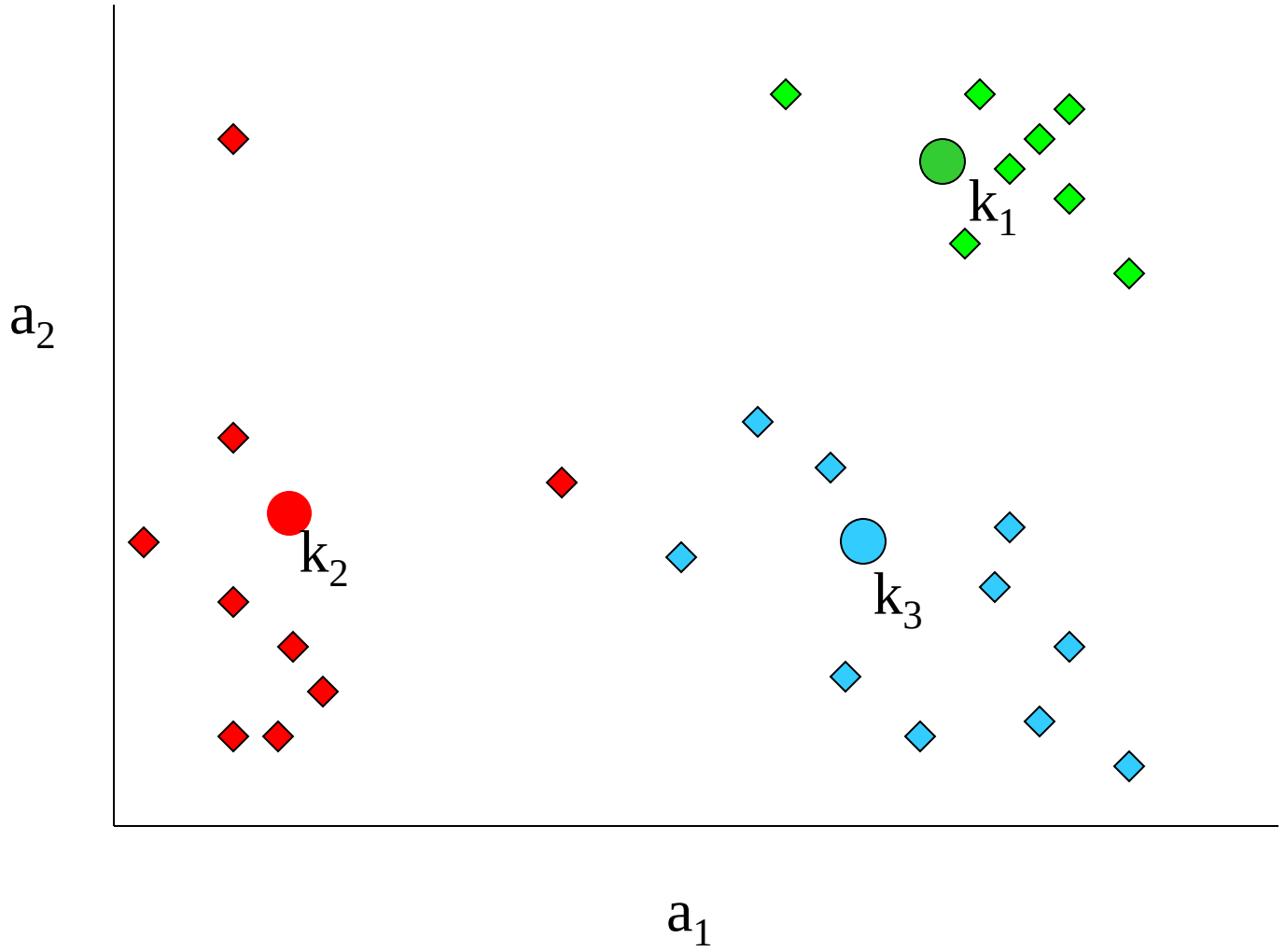
re-calcular vetores médios



Slide baseado no curso de Gregory Piatetsky-Shapiro, disponível em http://www.kdnuggets.com

k-Means:

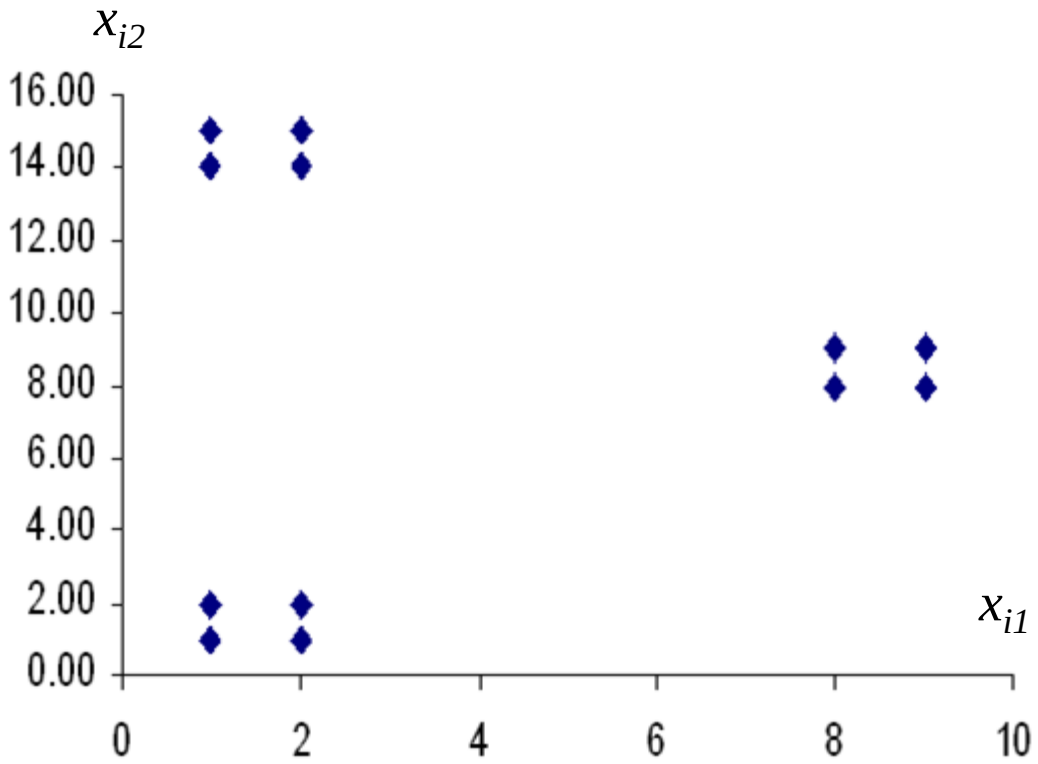
mover centros dos clusters…



Slide baseado no curso de Gregory Piatetsky-Shapiro, disponível em http://www.kdnuggets.com

Exercício

Objeto $\mathbf{x}_i$	x_{i1}	x_{i2}
1	1	2
2	2	1
3	1	1
4	2	2
5	**8**	**9**
6	**9**	**8**
7	**9**	**9**
8	**8**	**8**
9	1	15
10	2	15
11	1	14
12	2	14



- Executar k-means com k=3 nos dados acima a partir dos protótipos [6 6], [4 6] e [5 10] e outros a sua escolha

K-Means sob Perspectiva de Otimização

- Algoritmo minimiza a seguinte função objetivo:
  - **SSE** = *Sum of Squared Erros* (**variâncias intra-cluster)**

$$J = \sum_{c=1}^{k} \sum_{\mathbf{x}_j \in \mathbf{C}_c} d\left(\mathbf{x}_j, \bar{\mathbf{x}}_c\right)^2$$

onde d = Euclidiana e $\bar{\mathbf{x}}_c$ é o centróide do c-ésimo grupo:

$$\bar{\mathbf{x}}_c = \frac{1}{\left|\mathbf{C}_c\right|} \sum_{\mathbf{x}_j \in \mathbf{C}_c} \mathbf{x}_j$$

K-Means sob a Perspectiva de Otimização:

- Assumamos:
  - conjunto de objetos $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, ..., \mathbf{x}_N\}$
  - conjunto de k centróides quaisquer $\{\bar{\mathbf{x}}_1, \bar{\mathbf{x}}_2, ..., \bar{\mathbf{x}}_k\}$
- Podemos reescrever o critério SSE de forma equivalente como:

$$J = \sum_{j=1}^{N}\sum_{c=1}^{k} \mu_{cj} \left\| \mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}_c \right\|^2 \; ; \; \sum_{c=1}^{k} \mu_{cj} = 1 \; \forall j \; ; \; \mu_{cj} \in \{0,1\}$$

- Desejamos minimizar J com respeito a $\{\bar{\mathbf{x}}_c\}$ e $\{\mu_{cj}\}$
- Pode-se fazer isso via um procedimento iterativo (2 passos):

a) Fixar $\{\bar{\mathbf{x}}_c\}$ e minimizar J com respeito a $\{\mu_{cj}\}$ (**E**)

b) Minimizar J com respeito a $\{\bar{\mathbf{x}}_c\}$, fixando-se $\{\mu_{cj}\}$ (**M**)

K-Means sob a Perspectiva de Otimização:

$$J = \sum_{j=1}^{N}\sum_{c=1}^{k} \mu_{cj} \left\| \mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}_c \right\|^2 ; \; \sum_{c=1}^{k} \mu_{cj} = 1 \; \forall j \; ; \; \mu_{cj} \in \{0,1\}$$

a) Fixar $\{\bar{\mathbf{x}}_c\}$ e minimizar J com respeito a $\{\mu_{cj}\}$ (**Passo E**)

- Termos envolvendo diferentes j são independentes
- Logo, pode-se otimizá-los separadamente
- $\mu_{cj} = 1$ para c que fornece o menor valor do erro quadrático

* **Atribuir $\mu_{cj} = 1$ para o grupo mais próximo**.

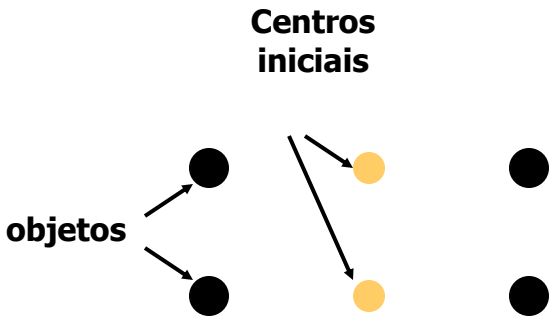
b) Minimizar J com respeito a $\{\bar{\mathbf{x}}_c\}$, fixando-se $\{\mu_{cj}\}$ (**Passo M**)

- Derivar J com respeito a cada $\bar{\mathbf{x}}_c$ e igualar a zero:

$$\nabla_{\bar{\mathbf{x}}_c} J = \sum_{j=1}^{N} \mu_{cj} \nabla_{\bar{\mathbf{x}}_c} \left[\left(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}_c \right)^T \left(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}_c \right) \right] = 2 \sum_{j=1}^{N} \mu_{cj} \left(\bar{\mathbf{x}}_c - \mathbf{x}_j \right) = \mathbf{0} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}_c = \frac{\sum_{j=1}^{N} \mu_{cj} \mathbf{x}_j}{\sum_{j=1}^{N} \mu_{cj}}$$

Discussão

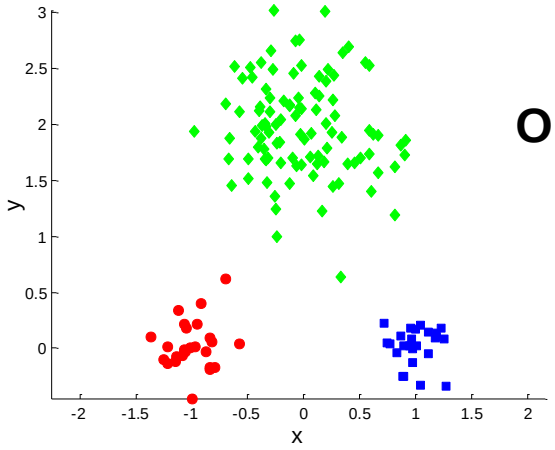
- Resultado pode variar significativamente dependendo da escolha das sementes (protótipos) iniciais
- k-means pode "ficar preso" em ótimos locais
  - Exemplo:



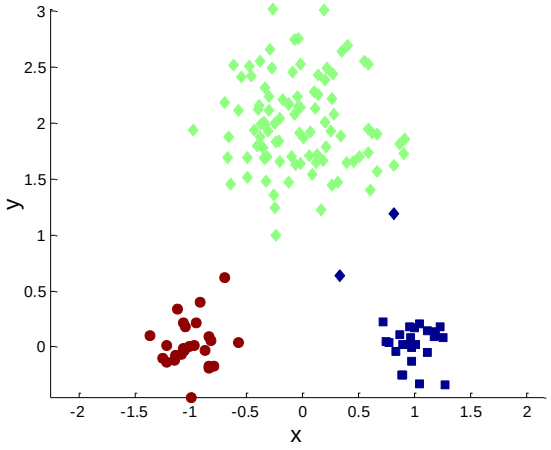
- Como evitar ... ?

Slide baseado no curso de Gregory Piatetsky-Shapiro, disponível em http://www.kdnuggets.com

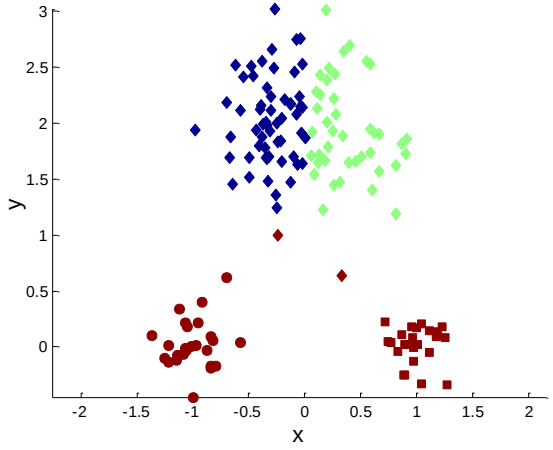
Two different K-means Clusterings



Original Points

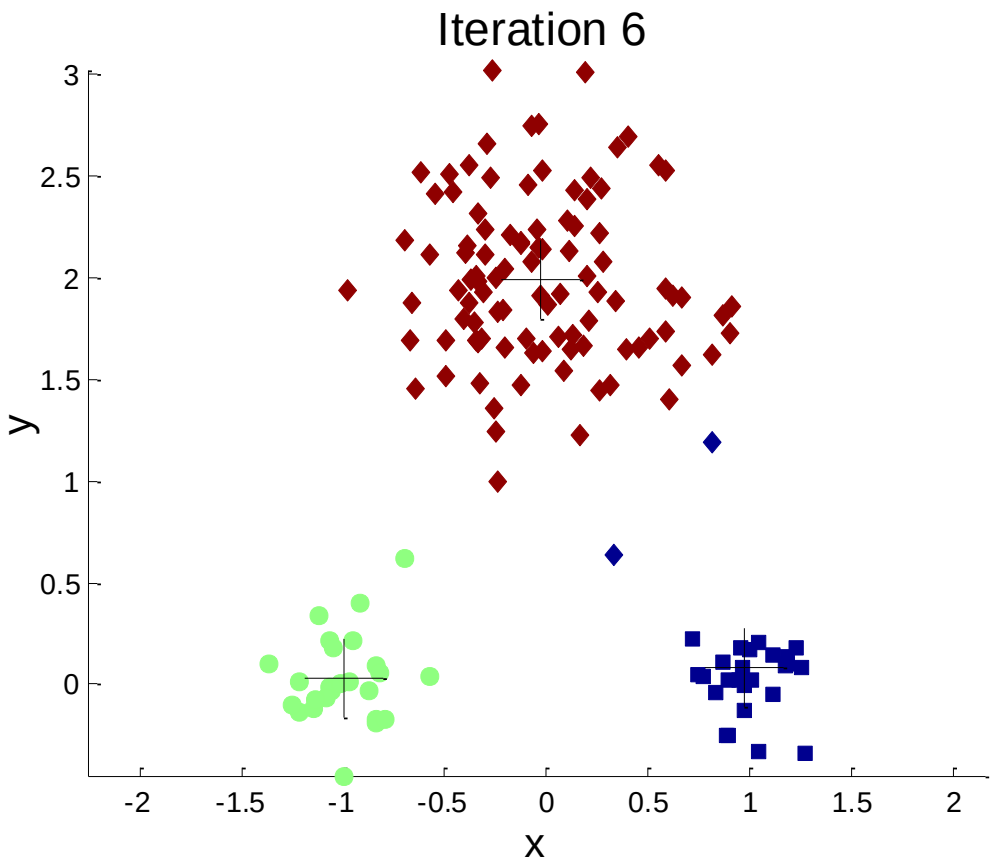


Optimal Clustering

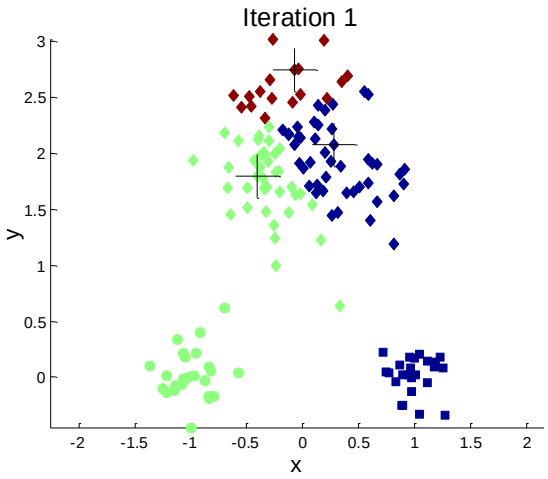


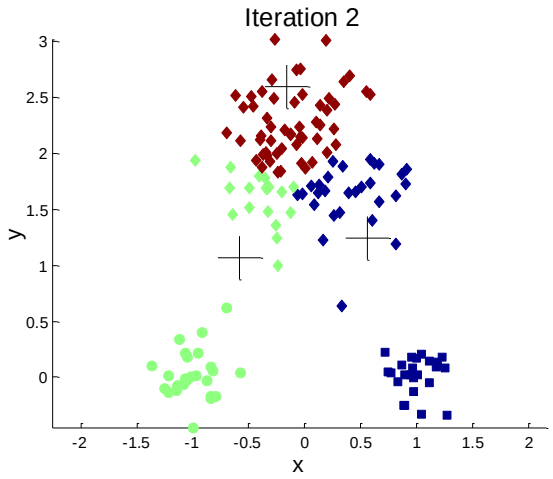
Sub-optimal Clustering

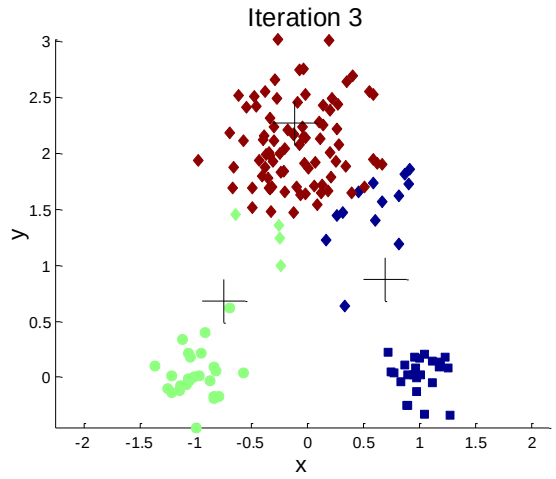
Importance of Choosing Initial Centroids

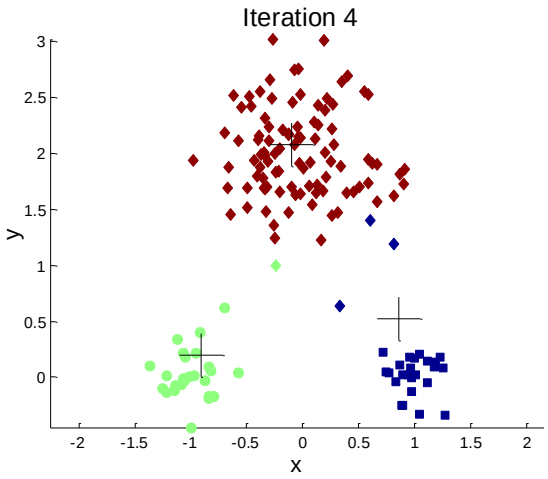


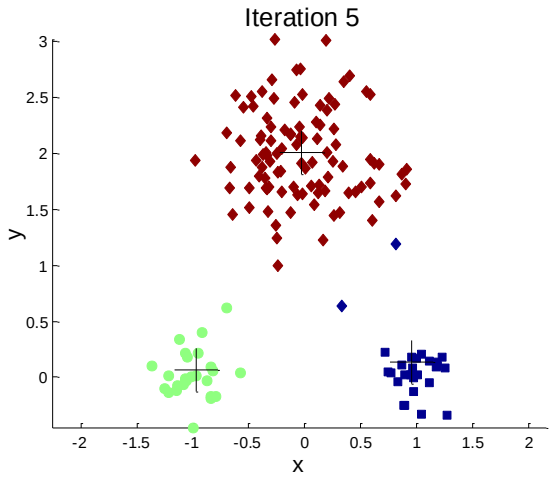
Importance of Choosing Initial Centroids

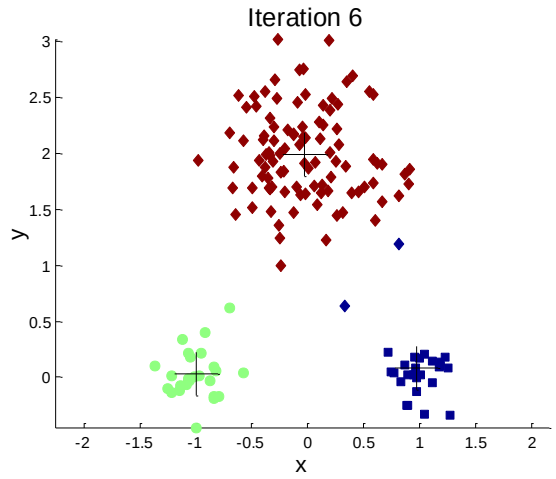




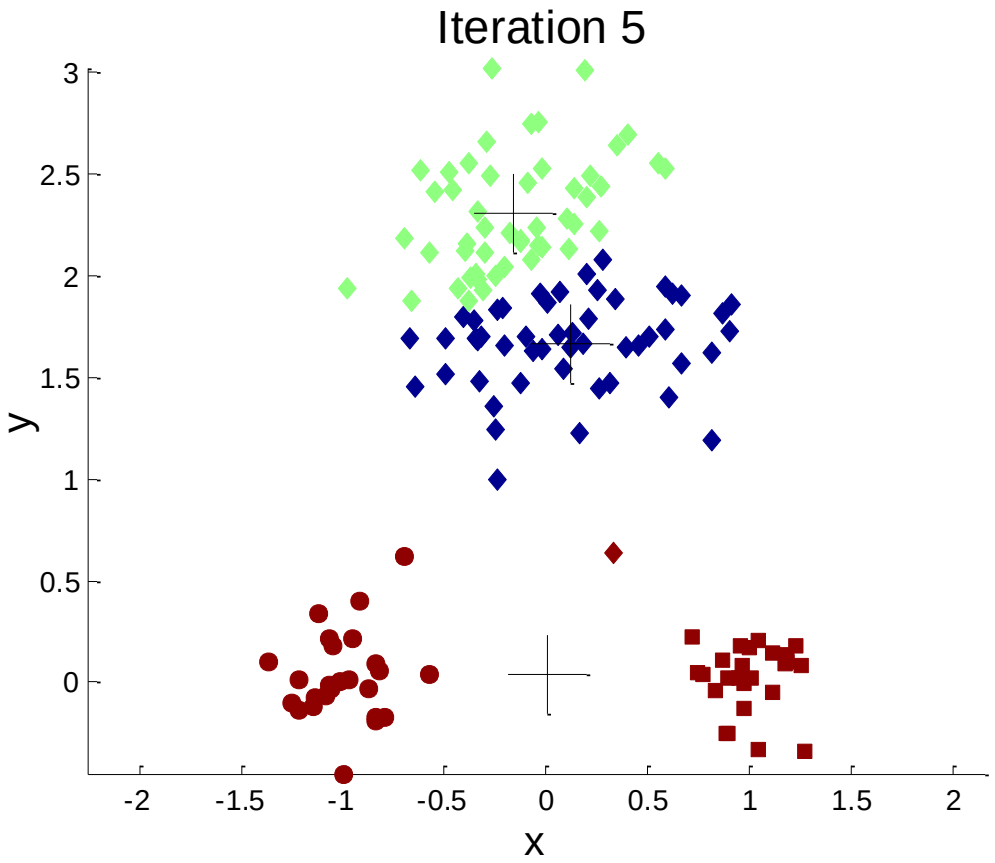




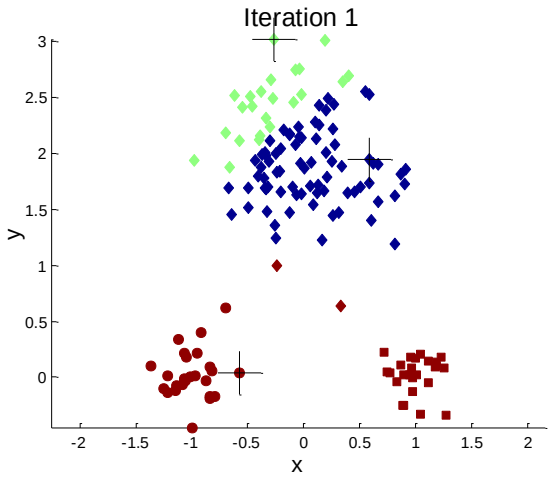


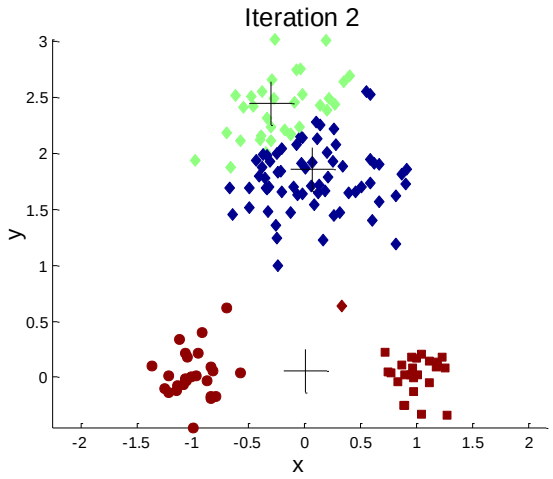


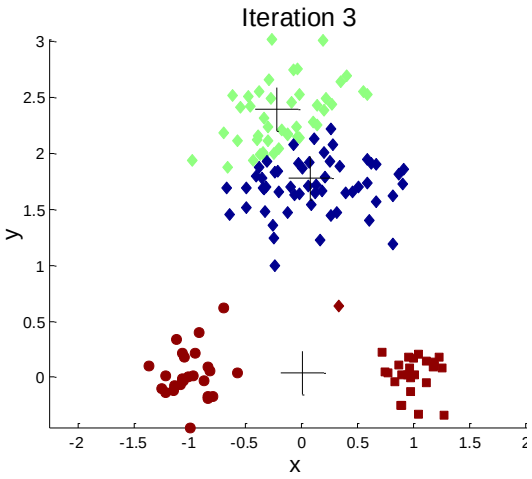
Importance of Choosing Initial Centroids …

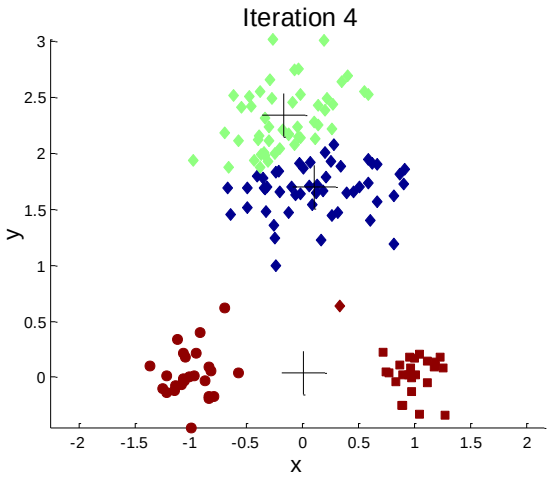


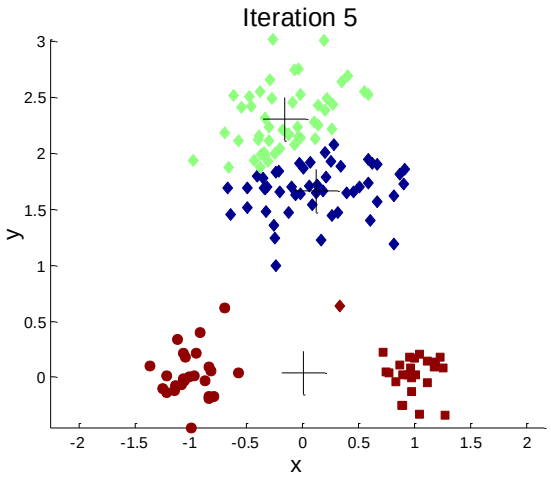
Importance of Choosing Initial Centroids …











Análise da Seleção dos Protótipos Iniciais

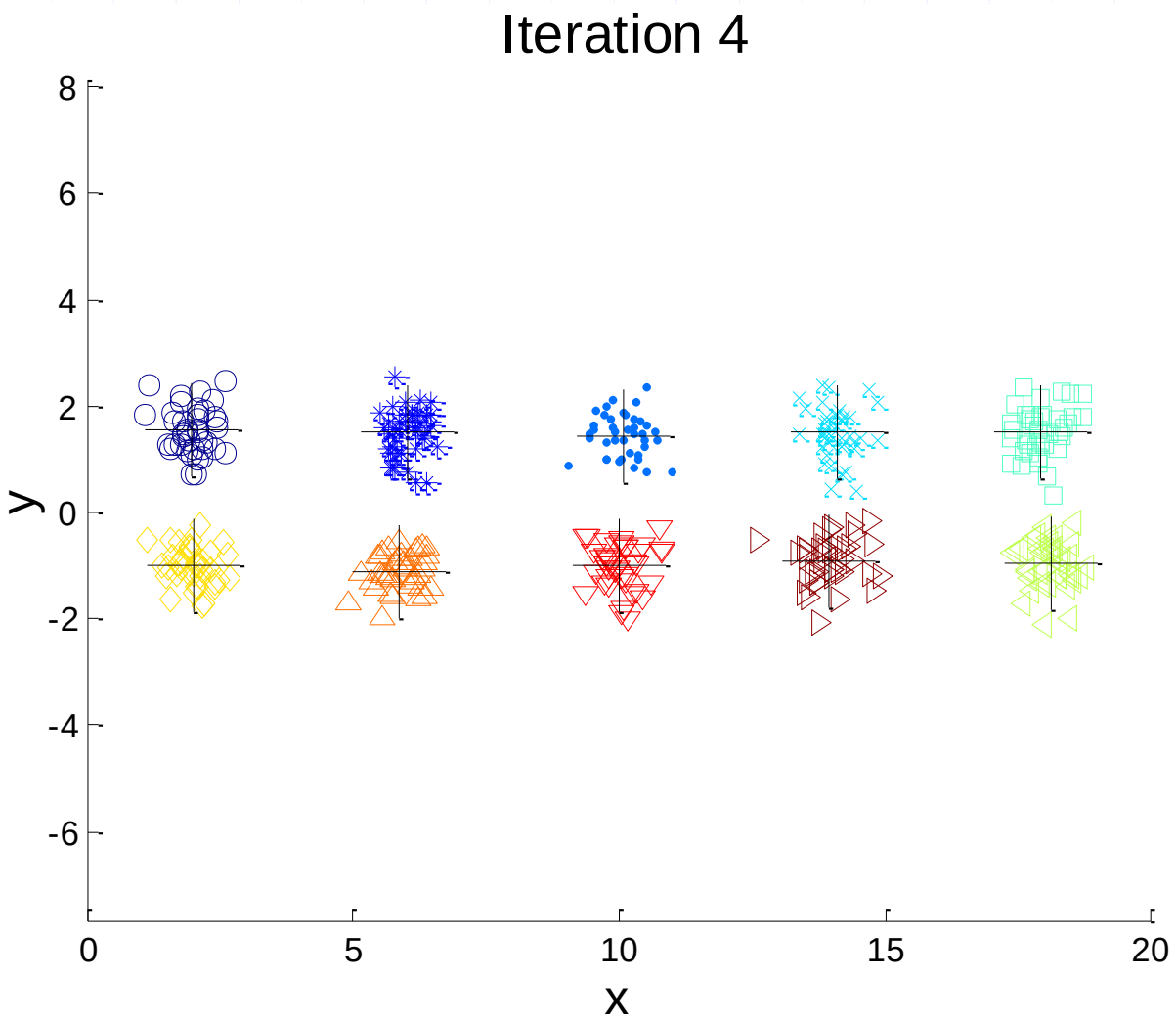
- **Premissa**: Uma boa seleção de k protótipos iniciais em uma base de dados com k grupos naturais é tal que cada protótipo é um objeto de um grupo diferente
- No entanto, a chance de se selecionar um protótipo de cada grupo é pequena, especialmente para k grande...
- Assumamos grupos balanceados, com uma mesma quantidade g = N / k de objetos cada:
  - Podemos calcular a probabilidade de selecionar 1 protótipo de cada grupo diferente como:

$$P = \frac{\text{no. de maneiras de selecionar 1 objeto de cada grupo (com N / k objetos)}}{\text{no. de maneiras de selecionar k dentre N objetos}}$$

Análise da Seleção dos Protótipos Iniciais

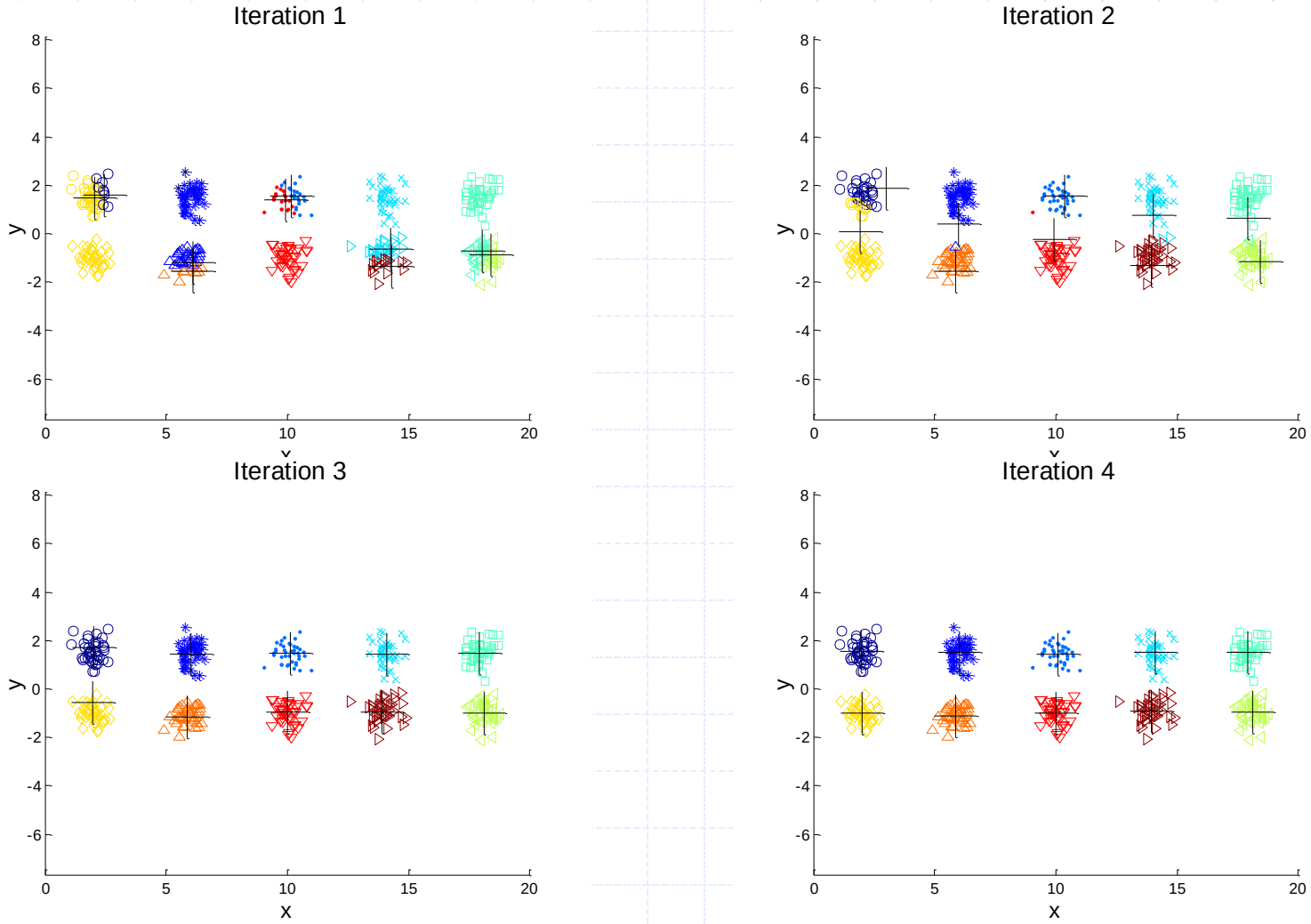
- Nº de formas de selecionar k protótipos (denominador)
  - cada um dos N = k·g objetos pode ser selecionado em cada um dos k sorteios, com reposição, logo tem-se $(k \cdot g)^k$ formas
- Nº de formas de escolher 1 protótipo por grupo (numerador)
  - No 1º sorteio, qualquer um dos N = k·g objetos pode ser selecionado. No 2º sorteio, qualquer objeto exceto aqueles g do mesmo grupo do 1º sorteio podem ser selecionados, ou seja, $k \cdot g - g = (k - 1) \cdot g$ podem ser selecionados, e assim por diante. Logo, tem-se $k \cdot g \times (k - 1) \cdot g \times \ldots \times g = k! g^k$
- Portanto, tem-se $P = k! g^k / k^k g^k \rightarrow \boxed{P = k! / k^k}$
- Exemplo: se k = 10, P = 0.00036

Exemplo: Iniciando com 2 centróides iniciais em um grupo de cada par...



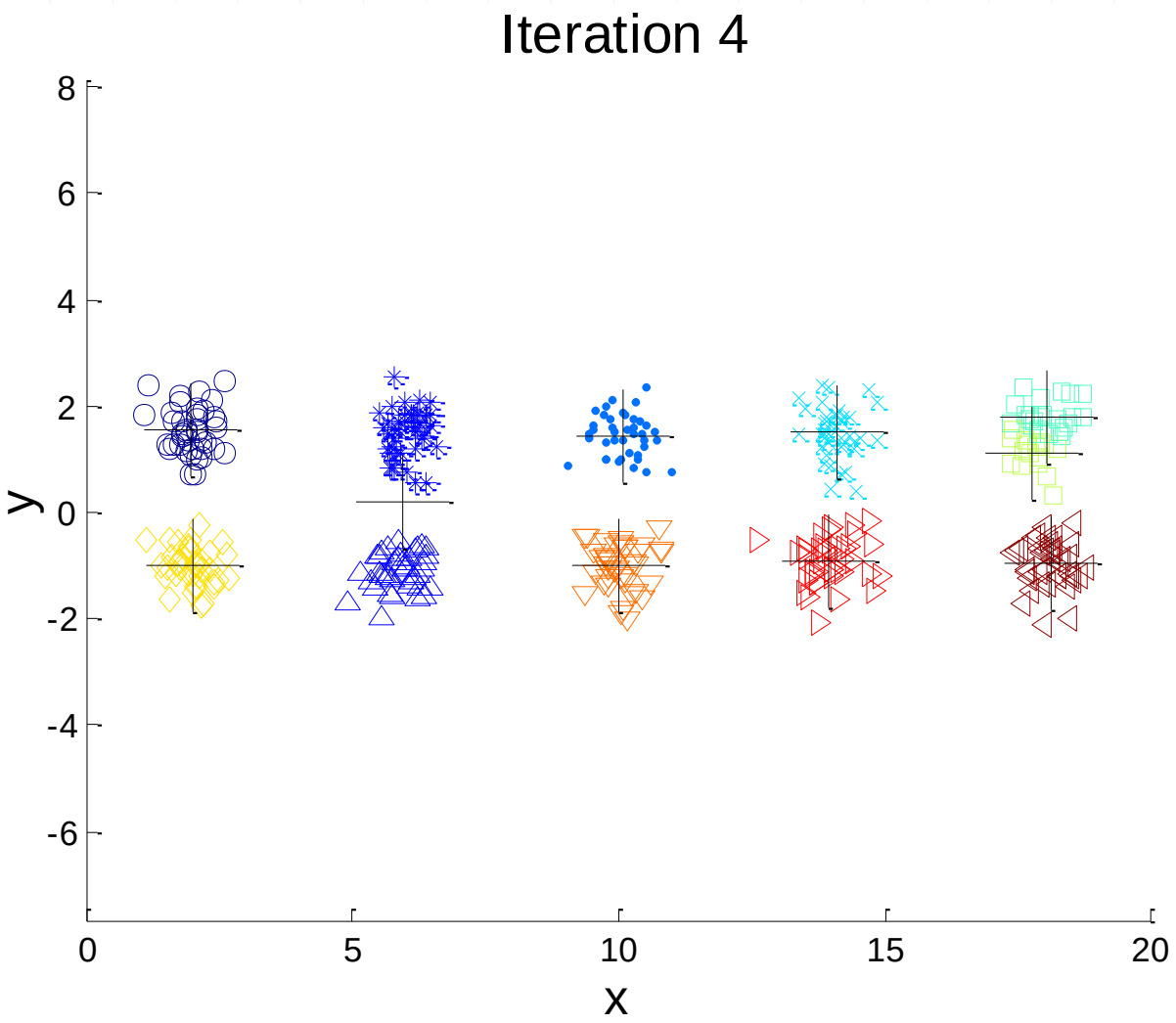
Tan, Steinbach & Kumar, Introduction to Data Mining, 2006.

Ilustrando Todas as Iterações:

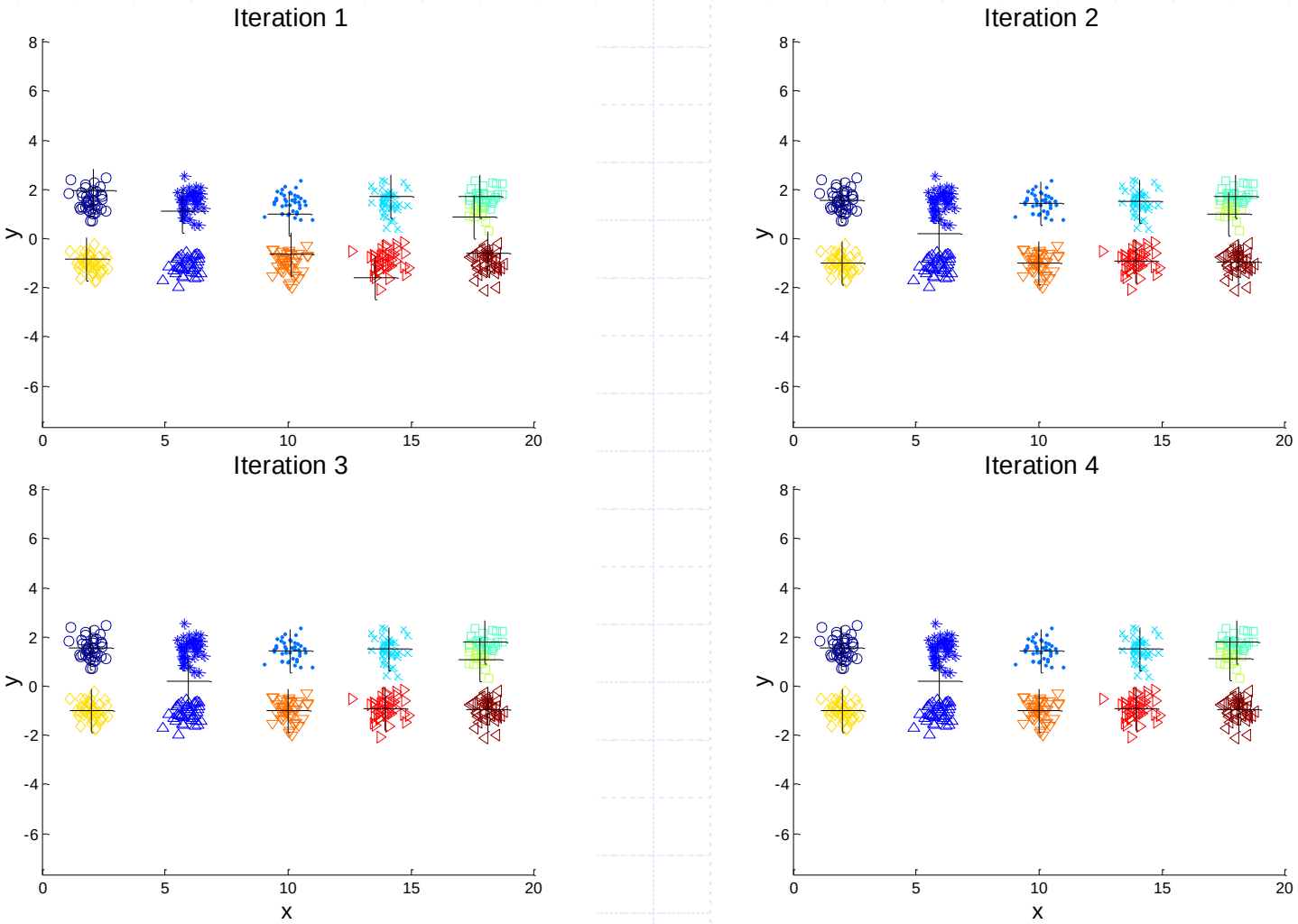


Tan, Steinbach & Kumar, Introduction to Data Mining, 2006.

Agora Vejamos Outra Inicialização:



Ilustrando Todas as Iterações:



Tan, Steinbach & Kumar, Introduction to Data Mining, 2006.

Alternativas para Inicialização

- Múltiplas Execuções (inicializações aleatórias):
  - funciona bem em muitos problemas.
  - mas em bases de dados complexas, pode demandar um no. enorme de execuções.
  - em particular para no. de grupos grande.
    - especialmente dado que k é, em geral, desconhecido
- Agrupamento Hierárquico:
  - agrupa-se uma amostra dos dados
  - tomam-se os centros da partição com k grupos

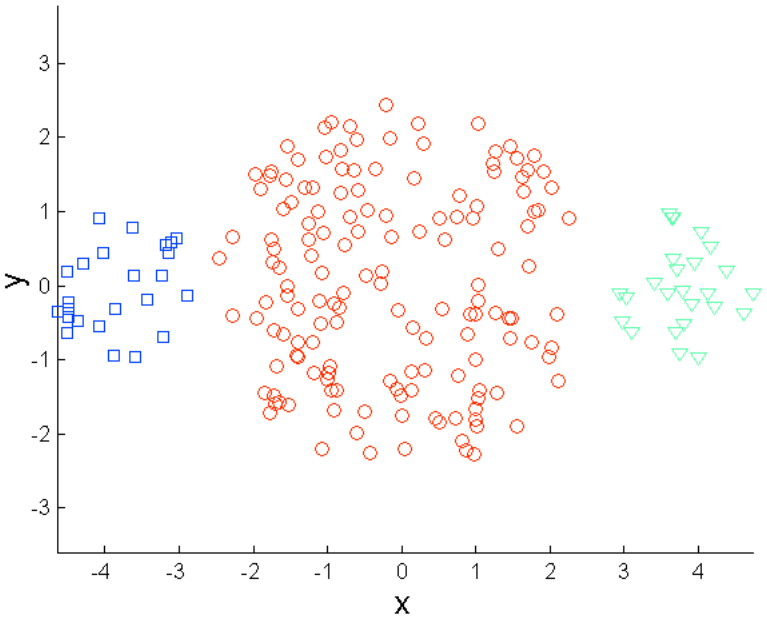
Alternativas para Inicialização

- Seleção "Informada" :
  - toma-se o 1º protótipo como um objeto aleatório
    - ou como o centro dos dados (*grand mean*)
  - sucessivamente escolhe-se o próximo protótipo
    - como o objeto mais distante dos protótipos correntes
  - **Nota**: para reduzir o esforço computacional e minimizar a probabilidade de seleção de outliers
    - processa-se apenas uma amostra dos dados
- Busca Guiada:
  - **X-means**, **k-means evolutivo**, ...

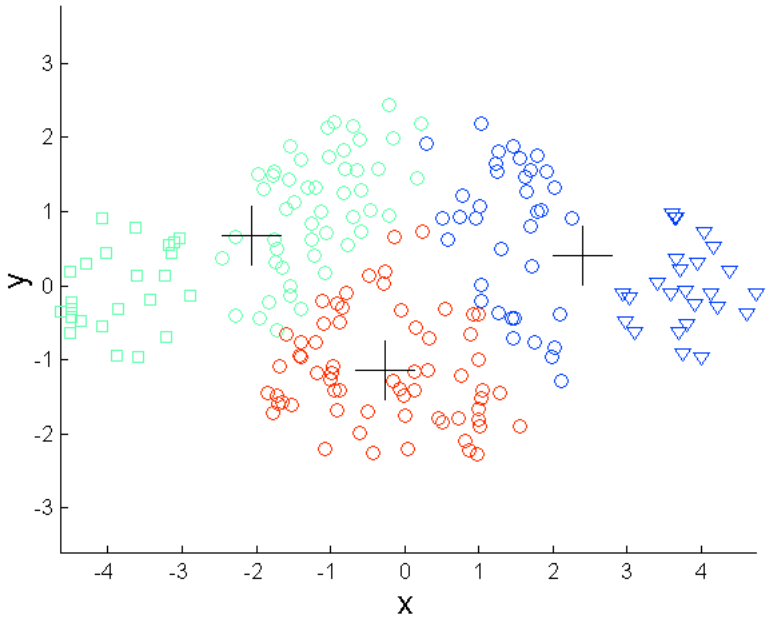
Discussão

- k-means é mais susceptível a problemas quando clusters são de diferentes
  - Tamanhos
  - Densidades
  - Formas não-globulares

Differing Sizes

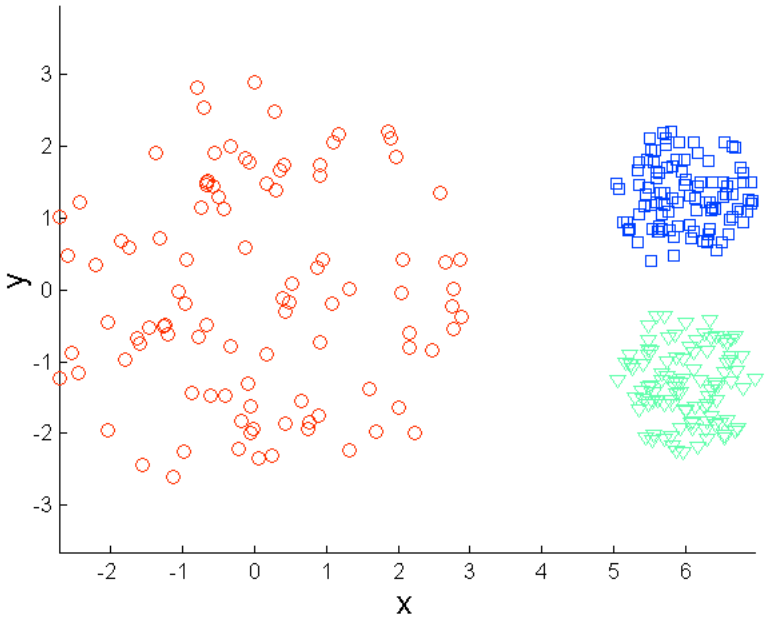


Original Points

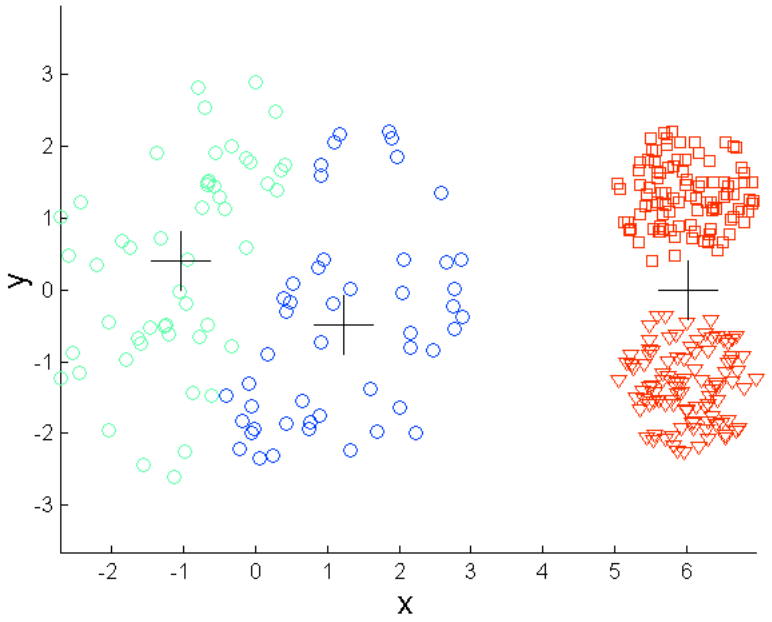


K-means (3 Clusters)

Differing Density



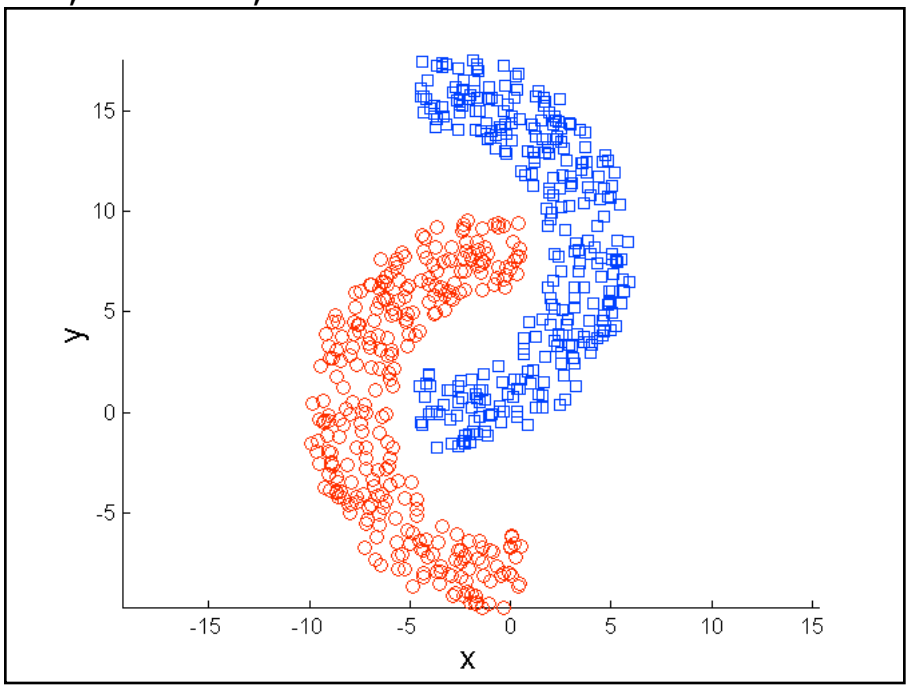
Original Points

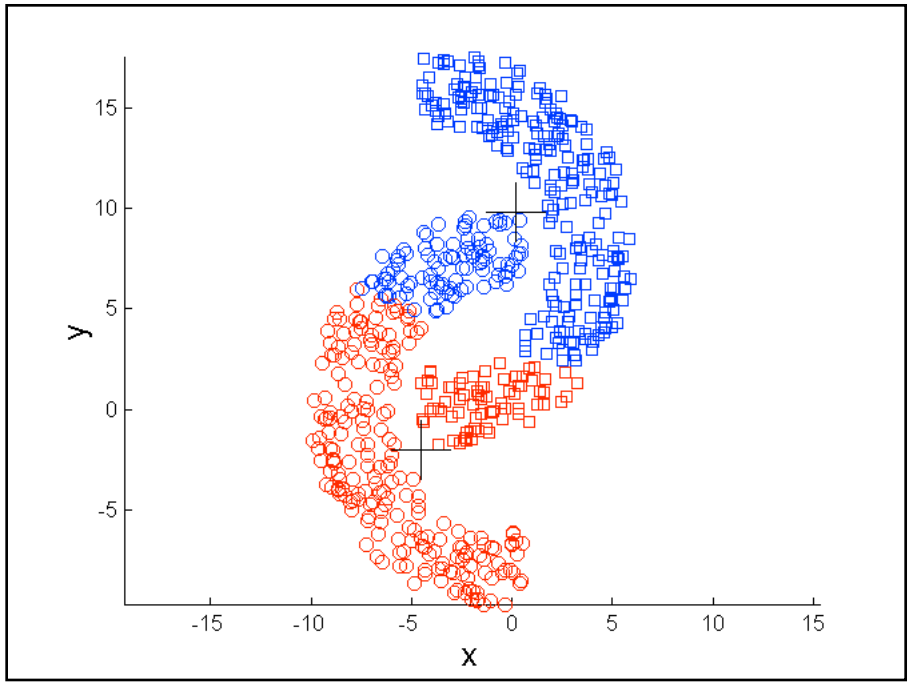


K-means (3 Clusters)

Formas Não-Globulares

Tan, Steinbach, Kumar

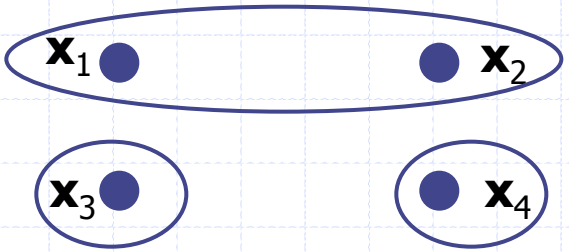




- **Nota**: na prática, esse problema em geral não é crítico, i.e., há pouco interesse na maioria das aplicações de mundo real
  - Grandes BDs (muitos objetos & atributos) e necessidade de interpretação dos resultados (e.g. segmentação de mercado...)

Manipulando Grupos Vazios

- k-means pode gerar **grupos vazios**
  - Por inicialização em pontos "dominados" do espaço
    - protótipos não representativos: nenhum objeto mais próximo
    - inicialização como objetos ao invés de pontos aleatórios resolve
  - Pela inicialização de grupos
    - cujos protótipos são não representativos; por exemplo:



Grupos iniciais

***k* =3**

  - Ao longo das iterações

Manipulando Grupos Vazios

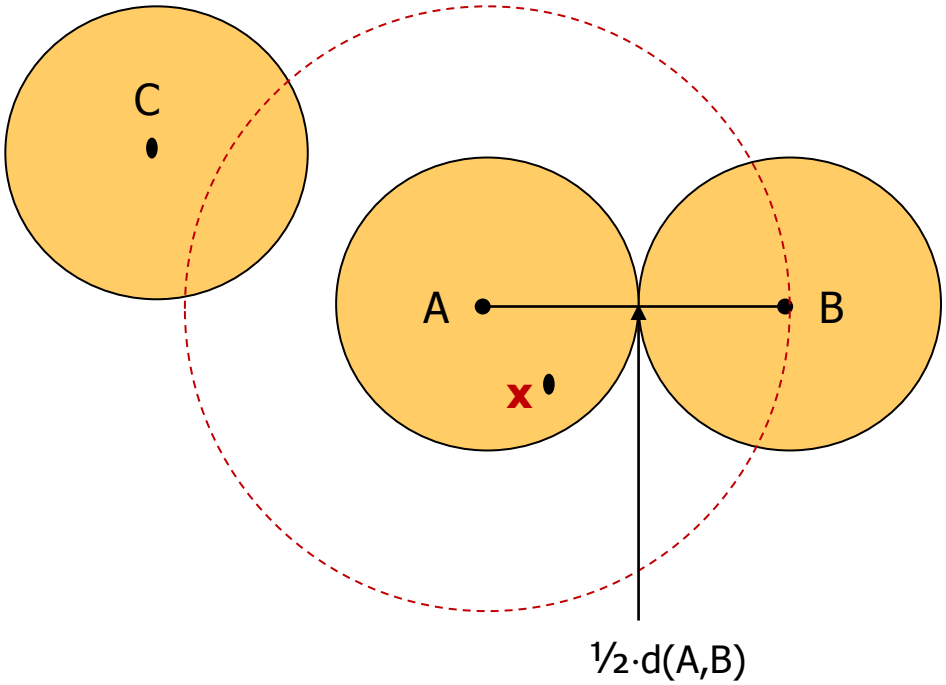
- Estratégias para contornar o problema:
  - Eliminar os protótipos não representativos (reduz k)
    - viável se o número inicial de grupos, k, puder ser reduzido
    - pode ser útil para ajustar valores superestimados de k
  - Substituir cada protótipo não representativo (mantém k)
    - pelo objeto que mais contribui para o SSE da partição
    - por um dos objetos do grupo com maior MSE
      - visa dividir o grupo com maior erro quadrático médio
    - **Nota**: a execução do algoritmo prossegue após a substituição

Implementações Eficientes

- Desempenho computacional pode ser melhorado...
  - **Estruturas de Dados**, e.g.
    - **kd-trees** (seminários...)
  - **Algoritmos**, e.g.
    - **Atualização recursiva dos centróides**
      - Cálculo dos centróides só depende dos valores anteriores, dos nos. de objetos dos grupos e dos objetos que mudaram de grupo
        - Não demanda recalcular tudo novamente
      - **Exercício:** a partir da equação do cálculo do centróide, escrever a equação de atualização recursiva descrita acima.
    - **Uso da desigualdade triangular** (vide discussão a seguir)
    - **Paralelização** (vide discussão a seguir)

Uso da Desigualdade Triangular

- **Lema:** Se d(x,A)≤d(A,B)/2 então d(x,B)≥d(x,A).
  - **Prova:** d(A,B)≤d(A,x)+d(x,B); ...
- **Interpretação Geométrica**:



K-Means Paralelo / Distribuído

- Dados distribuídos em múltiplos *data sites* ou processadores
- **Algoritmo**:
  - Mesmos protótipos iniciais são distribuídos a cada sítio de dados
  - Cada sítio executa (em paralelo) uma iteração de k-means
  - Protótipos locais e nos. de objetos dos grupos são comunicados
  - Protótipos globais são calculados e retransmitidos aos sítios
  - Repete-se o processo

Exercício

Objeto $\mathbf{x}_i$	x_{i1}	x_{i2}	Processador
1	1	2	A
2	2	1	B
3	1	1	A
4	2	2	B
5	**8**	**9**	**A**
6	**9**	**8**	**B**
7	**9**	**9**	**B**
8	**8**	**8**	**A**
9	1	15	B
10	2	15	A
11	1	14	B
12	2	14	A

Executar k-means paralelo nos dados ao lado, com k=3, a partir dos protótipos iniciais [6 6], [4 6] e [5 10]

Resumo do k-means

Vantagens

- Simples e intuitivo
- Complexidade computacional **linear** em todas as variáveis críticas: O(N n k)
  - quadrático apenas se n ≈ N ...
- Eficaz em muitos cenários de aplicação e produz resultados de interpretação relativamente simples
- Considerado um dos 10 mais influentes algoritmos em Data Mining (Wu & Kumar, 2009).

Desvantagens

- k = ?
- Sensível à inicialização dos protótipos (mínimos locais de J)
- Limita-se a encontrar clusters volumétricos / globulares
- Cada item deve pertencer a um único cluster (**partição rígida**, ou seja, sem sobreposição)
- Limitado a atributos numéricos
- Sensível a *outliers*

Generalização:

- Banerjee et al. (*Clustering with Bregman Divergences*, JMLR, 2005) apresentam uma visão unificada para a classe de algoritmos de agrupamento baseados em centróides (*ao estilo* k-means);
- Estudo teórico minucioso baseado em Divergentes de Bregman:

$$d_\phi(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \phi(\mathbf{x}) - \phi(\mathbf{y}) - < \mathbf{x}-\mathbf{y}, \nabla\phi(\mathbf{y}) >$$

- Distância Euclidiana ao quadrado, Mahalanobis, KL, perda quadrática, perda logística, etc.;
  - Exemplo: $\phi(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T\mathbf{x}$ é estritamente convexa e diferenciável em $\Re^n$...
- Algoritmos derivados mantém simplicidade, garantias teóricas e escalabilidade do k-médias;
- Aplicável a diferentes tipos de atributos --- diferentes funcões convexas escolhidas para diferentes subconjuntos de atributos.

Algumas Variantes do k-means

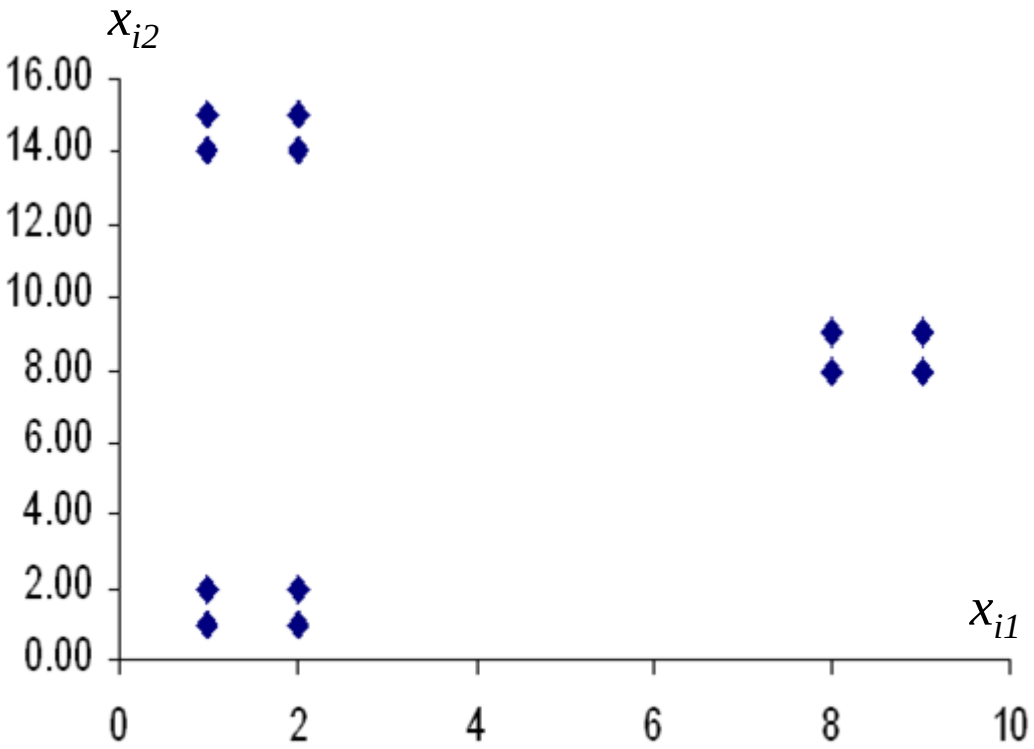
- **K-medianas:** Substituir as médias pelas medianas
  - Média de 1, 3, 5, 7, 9 é **5**
  - Média de 1, 3, 5, 7, 1009 é **205**
  - Mediana de 1, 3, 5, 7, 1009 é **5**
  - **Vantagem:** menos sensível a outliers*
  - **Desvantagem:** implementação mais complexa
    - cálculo da mediana em cada atributo...
- Pode-se mostrar que minimiza a soma das **distâncias de Manhattan** dos objetos aos centros (medianas) dos grupos

Algumas Variantes do k-means

- **K-medóides:** Substituir cada centróide por um objeto representativo do cluster, denominado **medóide**
  - Medóide = objeto mais próximo aos demais objetos do cluster
    - mais próximo em média (empates resolvidos aleatoriamente)
  - **Vantagens:**
    - menos sensível a outliers
    - permite cálculo relacional (apenas matriz de distâncias)
      - logo, pode ser aplicado a bases com atributos categóricos
    - convergência assegurada com qualquer medida de (dis)similaridade
  - **Desvantagem:** Complexidade quadrática com nº. de objetos (N)

Exercício

Objeto $\mathbf{x}_i$	x_{i1}	x_{i2}
1	1	2
2	2	1
3	1	1
4	2	2
5	**8**	**9**
6	**9**	**8**
7	**9**	**9**
8	**8**	**8**
9	1	15
10	2	15
11	1	14
12	2	14



- Executar k-medóides com k=3 nos dados acima, com medóides iniciais dados pelos objetos 5, 6 e 8

Algumas Variantes do k-means

- **K-means para Fluxos de Dados (Data Streams):**
  - Em geral, usa conceito de vizinhos mais próximos (K-NN)
  - Objetos dinamicamente incorporados ao cluster mais próximo
    - Atualização do centróide do cluster pode ser **incremental**
      - centróide atualizado a cada novo objeto incorporado
      - mas isso introduz dependência de ordem dos dados...
  - Heurísticas podem ser usadas para criar e/ou remover clusters
  - Ver Silva, Faria, Barros, Hruschka, de Carvalho, Gama, *Data Stream Clustering: A Survey,* **ACM Computing Surveys**, *to appear.*

Algumas Variantes do k-means

- **Métodos de Múltiplas Execuções de k-means:**
  - Executam k-means repetidas vezes a partir de diferentes valores de k e de posições iniciais dos protótipos
    - Ordenado: n_p inicializações de protótipos para cada $k \in [k_{min}, k_{max}]$
    - Aleatório: n_T inicializações de protótipos com k sorteado em $[k_{min}, k_{max}]$
  - Tomam a melhor partição resultante de acordo com algum critério de qualidade (**critério de validade de agrupamento**)
  - **Vantagens:** Estimam k e são menos sensíveis a mínimos locais
  - **Desvantagem:** Custo computacional pode ser elevado

Questão...

- J poderia ser utilizada como medida de qualidade para escolher a melhor partição dentre um conjunto de candidatas ?
  - Resposta é sim se todas têm o mesmo no. k de clusters (fixo)
  - Mas e se k for desconhecido e, portanto, variável ?
- Para responder, considere, por exemplo, que as partições são geradas a partir de múltiplas execuções do algoritmo:
  - com protótipos iniciais aleatórios
  - com no. variável de grupos $k \in [k_{min}, k_{max}]$

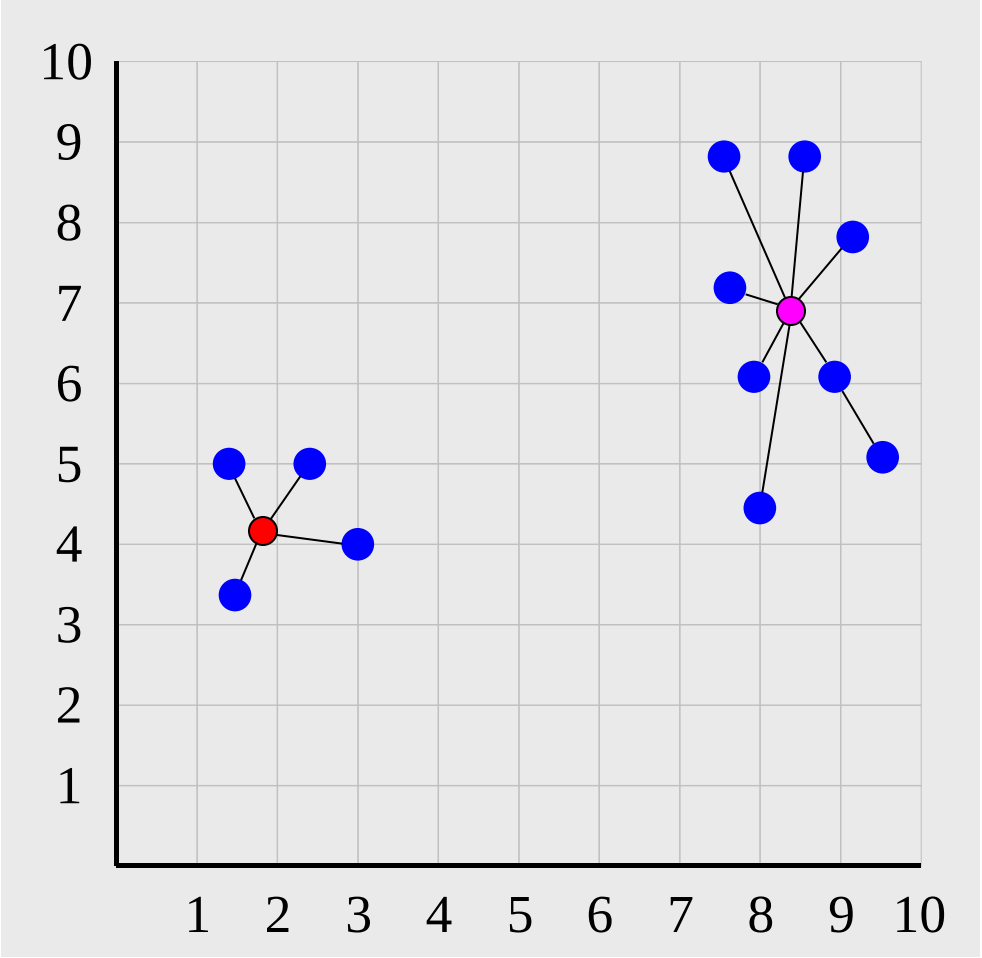
Questão...

- Para tentar responder a questão anterior, vamos considerar o método de múltiplas execuções ordenadas de k-means, com uso da função objetivo J

Erro Quadrático:

$$J = \sum_{i=1}^{k} \sum_{\mathbf{x}_j \in \mathbf{C}_i} d\left(\mathbf{x}_j, \bar{\mathbf{x}}_i\right)^2$$

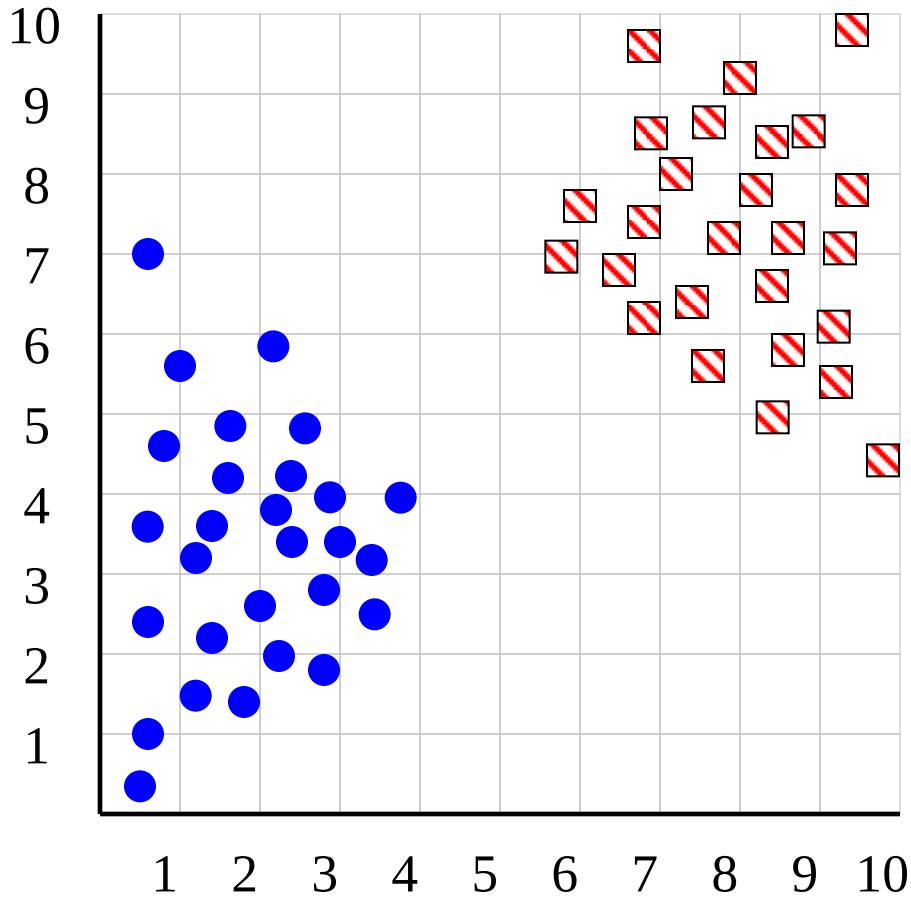
Função Objetivo



Keogh, E. A Gentle Introduction to Machine Learning and Data Mining for the Database Community, SBBD 2003, Manaus.

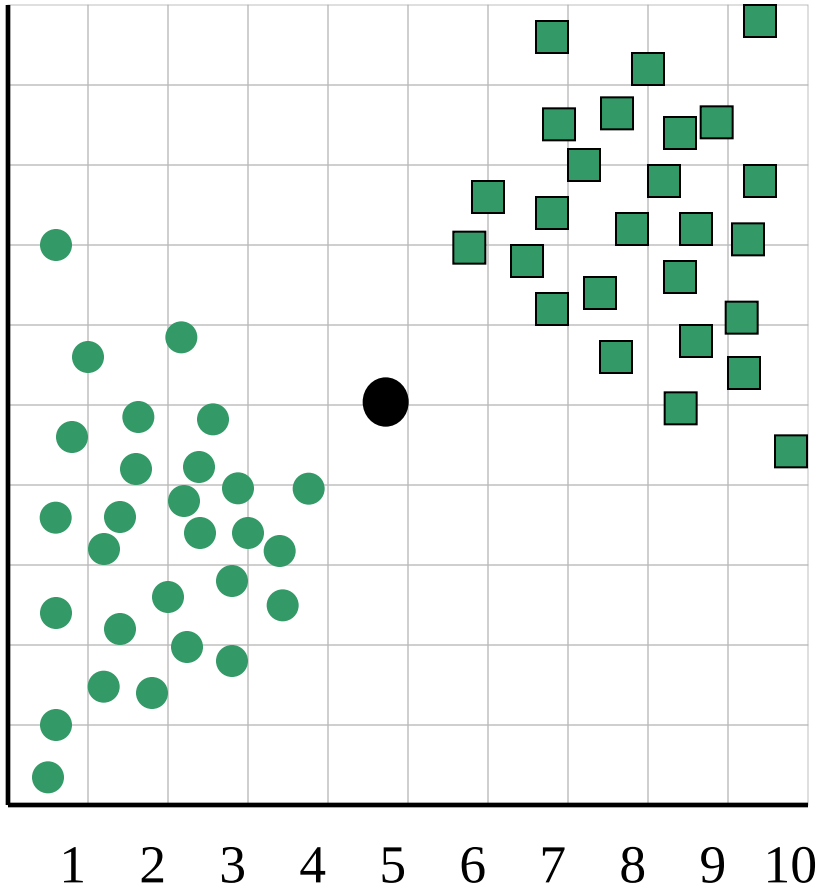
Questão...

- Considere o seguinte exemplo:

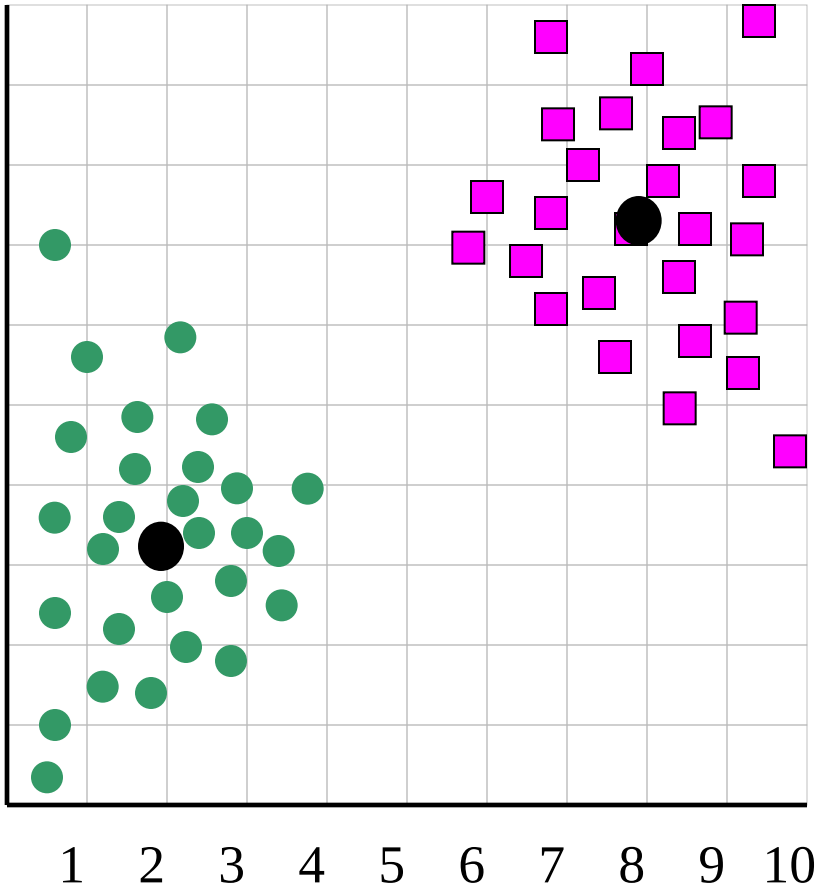


Keogh, E. A Gentle Introduction to Machine Learning and Data Mining for the Database Community, SBBD 2003, Manaus.

Para k = 1, o valor da função objetivo é 873,0

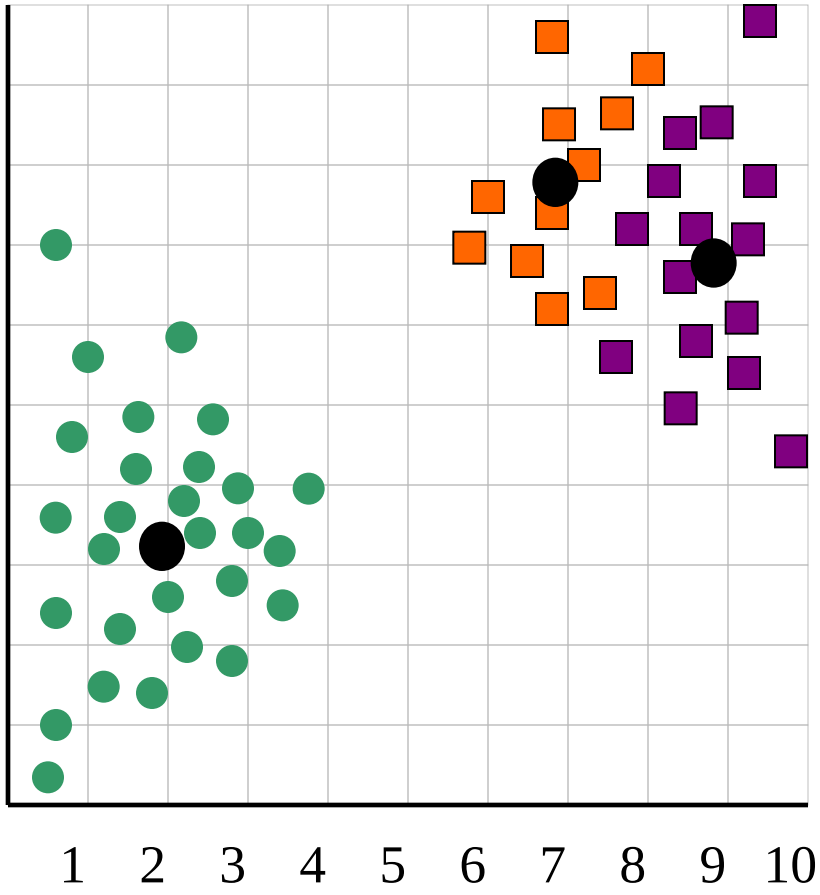


Para $k = 2$, o valor da função objetivo é 173,1



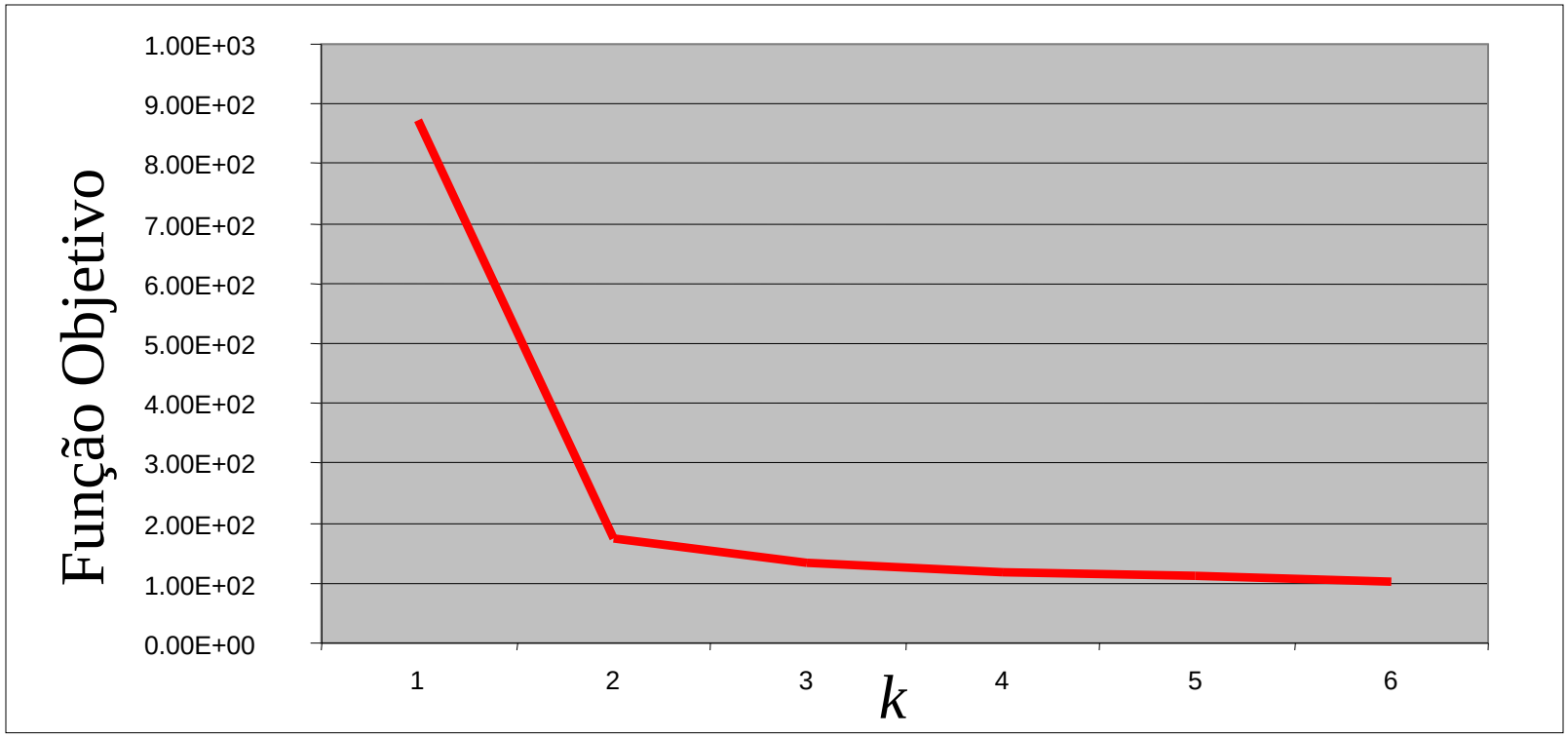
Keogh, E. A Gentle Introduction to Machine Learning and Data Mining for the Database Community, SBBD 2003, Manaus.

Para k = 3, o valor da função objetivo é 133,6



Keogh, E. A Gentle Introduction to Machine Learning and Data Mining for the Database Community, SBBD 2003, Manaus.

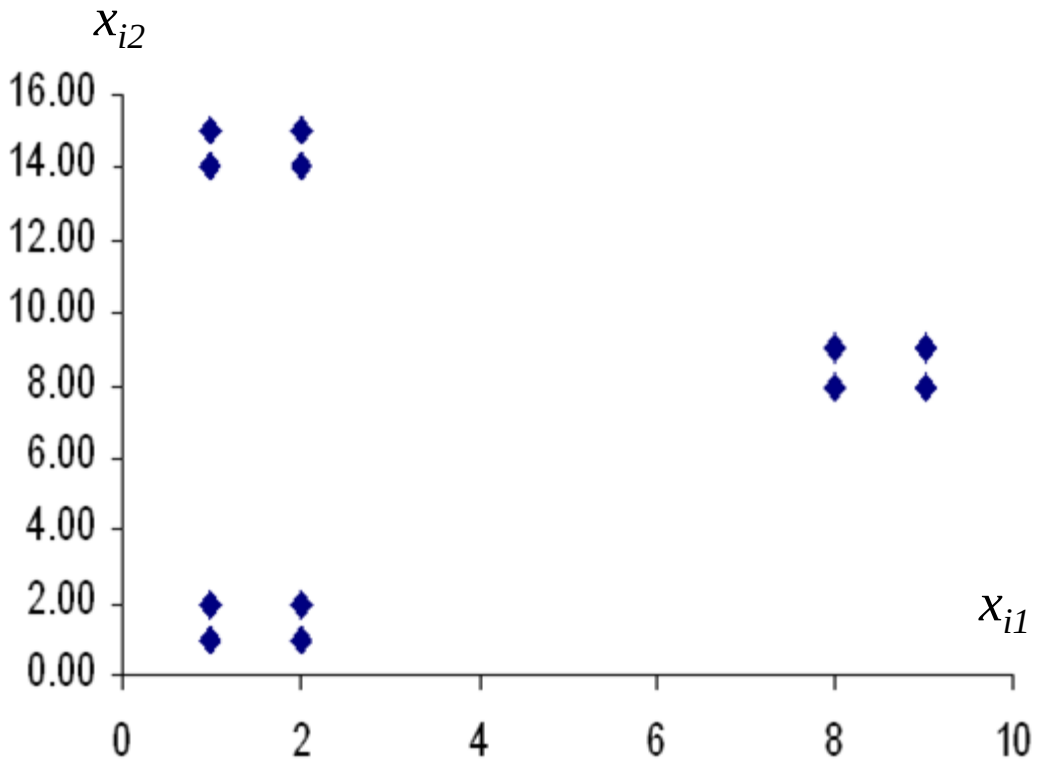
Podemos então repetir este procedimento e plotar os valores da função objetivo J para k =1,…,6, ... e tentar identificar um “joelho” :



Keogh, E. A Gentle Introduction to Machine Learning and Data Mining for the Database Community, SBBD 2003, Manaus.

Exercício

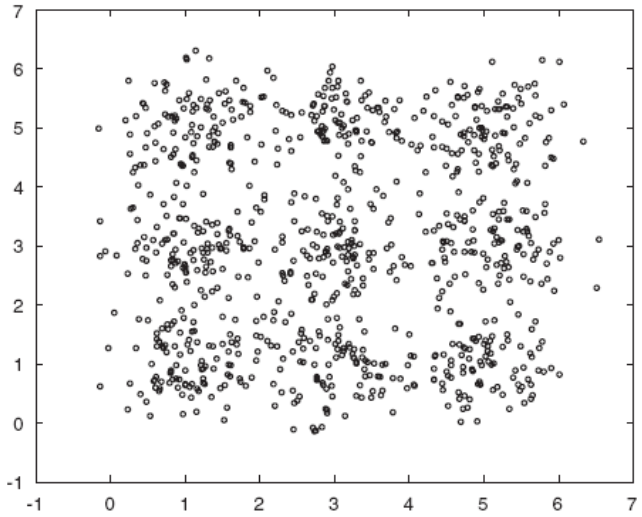
Objeto $\mathbf{x}_i$	x_{i1}	x_{i2}
1	1	2
2	2	1
3	1	1
4	2	2
5	**8**	**9**
6	**9**	**8**
7	**9**	**9**
8	**8**	**8**
9	1	15
10	2	15
11	1	14
12	2	14

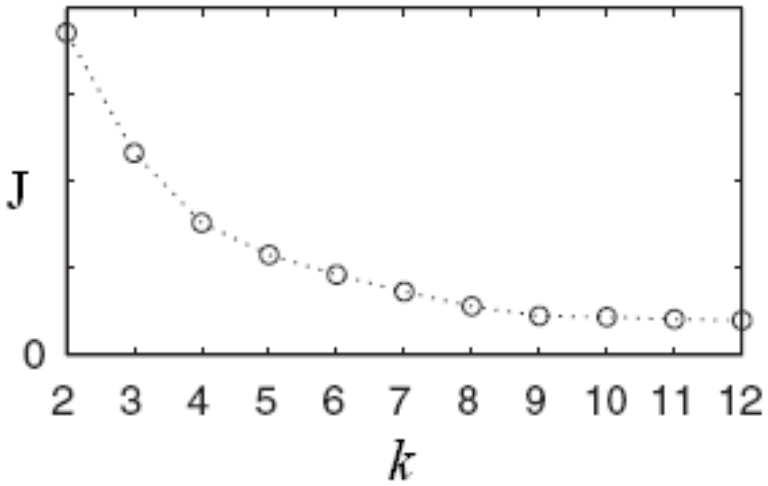


- Executar k-means com k=2 até k=5 nos dados acima e representar graficamente a f. objetivo J em função de k

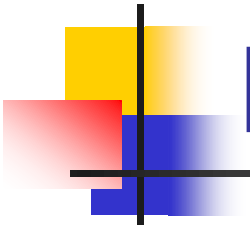
Questão...

- Infelizmente os resultados não são sempre tão claros quanto no exemplo anterior... Vide exemplo abaixo...





- Além disso, como utilizar essa metodologia em variantes baseadas em busca guiada, que otimizam k ?
  - X-means, k-means evolutivo, ...
- Solução: vide aulas de **validação de agrupamento** !



Referências

- Jain, A. K. and Dubes, R. C., Algorithms for Clustering Data, Prentice Hall, 1988
- Kaufman, L., Rousseeuw, P. J., Finding Groups in Data – An Introduction to Cluster Analysis, Wiley, 2005.
- Tan, P.-N., Steinbach, M., and Kumar, V., *Introduction to Data Mining*, Addison-Wesley, 2006
- Wu, X. and Kumar, V., *The Top Ten Algorithms in Data Mining*, Chapman & Hall/CRC, 2009
- D. Steinley, *K-Means Clustering: A Half-Century Synthesis*, British J. of Mathematical and Stat. Psychology, V. 59, 2006