João Gama • André Ponce de Leon Carvalho
Katti Faceli • Ana Carolina Lorena • Márcia Oliveira

Extração de Conhecimento de Dados

Data Mining

3ª Edição
Revista e aumentada

EDIÇÕES SÍLABO

Extração de Conhecimento de Dados

Data Mining

JOÃO GAMA
ANDRÉ PONCE DE LEON CARVALHO
KATTI FACELI
ANA CAROLINA LORENA
MÁRCIA OLIVEIRA

3ª EDIÇÃO
Revista e Aumentada

Visite a Sílabo na rede
www.silabo.pt

Este trabalho é financiado por Fundos FEDER através do Programa Operacional Fatores de Competitividade – COMPETE e por Fundos Nacionais através da FCT – Fundação para a Ciência e a Tecnologia no âmbito do projeto «FCOMP--01-0124-FEDER-022701».

This work is funded by the ERDF – European Regional Development Fund through the COMPETE Programme (operational programme for competitiveness) and by National Funds through the FCT – Fundação para a Ciência e a Tecnologia (Portuguese Foundation for Science and Technology) within project «FCOMP-01-0124-FEDER-022701»

Editor: Manuel Robalo

FICHA TÉCNICA:

Título: Extração de Conhecimento de Dados – *Data Mining*
Autores: João Gama, André Ponce de Leon Carvalho, Katti Faceli,
Ana Carolina Lorena, Márcia Oliveira

Capa: Pedro Mota

1ª Edição – Lisboa, outubro de 2012.
3ª Edição – Lisboa, setembro de 2017.
Impressão e acabamentos: Cafilesa – Soluções Gráficas, Lda.
Depósito Legal: 431514/17
ISBN: 978-972-618-914-5

EDIÇÕES SÍLABO, LDA.

R. Cidade de Manchester, 2
1170-100 Lisboa
Tel.: 218130345
Fax: 218166719
e-mail: silabo@silabo.pt
www.silabo.pt

Índice

1 Introdução **9**
1.1 Inteligência Artificial e Aprendizagem Automática 10
1.2 Indução de Hipóteses 12
1.3 Viés Indutivo 13
1.4 Tarefas de aprendizagem 14
1.5 Estrutura do Livro 15

I Preparação de Dados **17**

2 Análise Exploratória de Dados **21**
2.1 Caraterização de Dados 21
2.2 Exploração de Dados 26
2.3 Considerações Finais 38

3 Pré-processamento de Dados **41**
3.1 Teoria da Informação 42
3.2 Eliminação Manual de Atributos 43
3.3 Integração de Dados 44
3.4 Amostragem de Dados 44
3.5 Dados Desbalanceados 46
3.6 Limpeza de Dados 47
3.7 Transformação de Dados 57
3.8 Redução de Dimensionalidade 62
3.9 Considerações Finais 68

II Modelos Preditivos **69**

4 Métodos Baseados em Distâncias **75**
4.1 Introdução 75

4.2 O Algoritmo do 1-Vizinho Mais Próximo 76
4.3 O Algoritmo *k*-NN 79
4.4 Discussão: Vantagens e Desvantagens 80
4.5 Desenvolvimentos 82
4.6 Raciocínio Baseado em Casos 84
4.7 Considerações Finais 87

5 Métodos Probabilísticos 89
5.1 Aprendizagem Bayesiana 90
5.2 O Classificador *Naive* Bayes 93
5.3 Redes Bayesianas para Classificação 98
5.4 Considerações Finais 101

6 Métodos Baseados em Procura 103
6.1 Árvores de Decisão e Regressão 103
6.2 Regras de Decisão 118
6.3 Modelos Avançados para Árvores de Decisão 125
6.4 Considerações Finais 128

7 Métodos Baseados em Otimização 129
7.1 Redes Neuronais Artificiais 129
7.2 Máquinas de Vetores de Suporte 149
7.3 Considerações Finais 164

8 Modelos Múltiplos Preditivos 167
8.1 Combinando Previsões de Classificadores 169
8.2 Combinando Classificadores Homogéneos 174
8.3 Combinando Classificadores Heterogéneos 181
8.4 Considerações Finais 189

9 Avaliação de Modelos Preditivos 191
9.1 Métricas de Erro 192
9.2 Amostragem 193
9.3 Problemas de Duas Classes e o Espaço ROC 197
9.4 Testes de Hipóteses 202
9.5 Decomposição Viés-Variância da Taxa de Erro 206
9.6 Considerações Finais 209

III Modelos Descritivos 211

10 Introdução aos Modelos Descritivos 213

11 Extração de Padrões Frequentes **215**
11.1 Extração de Conjuntos de Itens Frequentes 215
11.2 O Algoritmo Apriori 217
11.3 O Algoritmo FP-growth 221
11.4 Sumarização de *Itemsets* 223
11.5 Considerações Finais 227

12 Análise de Agrupamentos **229**
12.1 Definições Básicas 229
12.2 Etapas da Análise de Agrupamentos 235
12.3 Considerações Finais 247

13 Algoritmos de Agrupamentos **249**
13.1 Algoritmos Hierárquicos 250
13.2 Algoritmos Particionais Baseados em Erro Quadrático 254
13.3 Algoritmos Baseados em Densidade 256
13.4 Algoritmos Baseados em Grafo 258
13.5 Algoritmos Baseados em Redes Neuronais 258
13.6 Algoritmos Baseados em reticulados 259
13.7 Considerações Finais 260

14 Modelos Múltiplos Descritivos **263**
14.1 *Ensembles* de Agrupamentos 264
14.2 Agrupamento Multiobjetivo 276
14.3 *Ensemble* Multiobjetivo 280
14.4 Considerações Finais 281

15 Avaliação de Modelos Descritivos **283**
15.1 Critérios de Validação 284
15.2 Critérios Relativos 289
15.3 Critérios Internos 297
15.4 Critérios Externos 299
15.5 Considerações Finais 304

IV Tópicos Avançados **305**

16 Aprendizagem em Fluxos Contínuos de Dados **309**
16.1 Desafios na Aprendizagem em Fluxos Contínuos de Dados 310
16.2 Algoritmos de Aprendizagem em Fluxos de Dados 311
16.3 Deteção de Mudança 316
16.4 Considerações Finais 318

17 Meta aprendizagem **321**
17.1 Caraterização de Conjuntos de Dados 323
17.2 Medidas de Avaliação dos Algoritmos 325
17.3 Formas de Apresentação de Sugestões 326
17.4 Recomendação com base na Caraterização 326
17.5 Estudo de Casos 327
17.6 Considerações Finais 328

18 Decomposição de Problemas Multiclasse **329**
18.1 Fase de Decomposição 330
18.2 Fase de Reconstrução 337
18.3 Considerações Finais 339

19 Classificação Multirótulo **341**
19.1 Principais Abordagens 342
19.2 Densidade e Cardinalidade do Rótulo 347
19.3 Medidas de Avaliação 348
19.4 Considerações Finais 350

20 Classificação Hierárquica **351**
20.1 Tipos de Problemas 352
20.2 Algoritmos para Classificação Hierárquica 354
20.3 Avaliação de Classificadores Hierárquicos 357
20.4 Considerações Finais 359

21 Computação Natural **361**
21.1 Inteligência de Enxames 362
21.2 Computação Evolutiva 366
21.3 Considerações Finais 370

22 Análise de Redes Sociais **371**
22.1 Introdução 371
22.2 Representação de Redes Sociais 374
22.3 Medidas Estatísticas Elementares 376
22.4 Análise de Ligações 384
22.5 Deteção de Comunidades 387
22.6 Propriedades de Redes Reais 393
22.7 Conclusões e Tendências Atuais 397

Bibliografia **399**

Índice Remissivo **431**

Capítulo 1

Introdução

Em computação, muitos problemas são resolvidos por meio da escrita de um algoritmo que especifica, passo a passo, como resolver um problema. No entanto, não é fácil escrever um programa de computador que realize com eficiência algumas tarefas que realizamos com facilidade no nosso dia a dia. Por exemplo, como reconhecer pessoas pelo rosto ou pela fala? Que caraterísticas dos rostos ou da fala devem ser consideradas? Como podemos codificar aspetos como diferentes expressões faciais de uma mesma pessoa, alterações na face (e.g. óculos, bigode, cortes de cabelo), mudanças na voz (e.g. devido a uma gripe) ou estados de espírito? No entanto, os seres humanos conseguem realizar estas tarefas com relativa facilidade. Fazem isso por meio de reconhecimento de padrões , quando aprendem o que deve ser observado num rosto ou na fala para conseguir identificar pessoas, após terem tido vários exemplos de rostos ou falas com identificação clara.

Um bom médico consegue diagnosticar se um paciente está com problemas cardíacos, tendo por base um conjunto de sintomas e de resultados de exames clínicos. Para esse efeito, o médico utiliza o conhecimento adquirido durante a sua formação e a experiência proveniente do exercício da profissão. Como escrever um programa de computador que, dados os sintomas e os resultados de exames clínicos, apresente um diagnóstico que seja tão bom quanto o de um médico experiente?

Também pode ser difícil escrever um programa que efetue a análise de dados das vendas de uma loja. Para descobrir quantas pessoas fizeram mais de uma compra numa loja no ano anterior, podem ser facilmente utilizados os Sistemas de Gestão de Bases de Dados (SGBD). No entanto, como podemos escrever um programa que responda a questões mais complicadas, como por exemplo:

- Identificar conjuntos de produtos que são frequentemente vendidos em conjunto.
- Recomendar novos produtos a clientes que costumam comprar produtos semelhantes.
- Agrupar os consumidores da loja em grupos de forma a melhorar as operações de marketing.

Não obstante a dificuldade em escrever um programa de computador que possa lidar

de forma eficiente com estas tarefas, o número de vezes em que tarefas tão complexas como estas necessitam ser realizadas diariamente é frequente. Além disso, o volume de informação que precisa ser considerado na sua implementação torna difícil, ou mesmo impossível, a sua realização.

As técnicas de Inteligência Artificial (IA), em particular de Extração de Conhecimento de Dados (ECD) ou Aprendizagem Automática, têm sido utilizadas com sucesso num grande número de problemas reais, incluindo os problemas citados anteriormente.

Este capítulo está organizado da seguinte forma. A Seção 1.1 apresenta a relação entre ECD e IA, mostrando alguns exemplos da utilização de ECD em problemas reais. Na Secção 1.2 é introduzida a relação entre um conjunto de dados e a qualidade da hipótese induzida por um algoritmo de ECD. O conceito de viés indutivo, essencial para que a aprendizagem ocorra, é discutido na Secção 1.3. A Secção 1.4 descreve as diferentes tarefas de aprendizagem, que são agrupadas em aprendizagem preditiva e aprendizagem descritiva. Por fim, a Secção 1.5 apresenta a estrutura dos capítulos do livro.

1.1 Inteligência Artificial e Aprendizagem Automática

Até há alguns anos atrás, a área de IA era vista como uma área teórica, com aplicações apenas em pequenos problemas curiosos, desafiantes, mas de pouco valor prático. Grande parte dos problemas práticos que necessitavam de computação eram resolvidos pela codificação, nalguma linguagem de programação, dos passos necessários à respetiva resolução. A partir da década de 1970, verificou-se uma maior disseminação do uso de técnicas de computação baseadas em IA para a resolução de problemas reais. Muitas vezes, estes problemas eram computacionalmente tratados por meio da aquisição de conhecimento de especialistas do domínio (e.g. especialistas da área da medicina), que era então codificado por regras lógicas, num programa de computador. Estes programas eram conhecidos como Sistemas Especialistas ou Sistemas Baseados em Conhecimento. O processo de aquisição do conhecimento envolvia entrevistas com os especialistas para descobrir as regras utilizadas na tomada de decisão. Esse processo possuía várias limitações, tais como: subjetividade, decorrente do fato dos especialistas sustentarem, com frequência, a tomada de decisão na sua intuição; e dificuldade em verbalizar e exteriorizar esse conhecimento.

Nas últimas décadas, a crescente complexidade dos problemas a serem tratados computacionalmente e o volume de dados gerados em diferentes setores, reforçou a necessidade de desenvolvimento de ferramentas computacionais mais sofisticadas e autónomas, que reduzissem a necessidade de intervenção humana e a dependência de especialistas. Para alcançar estes objetivos, as técnicas desenvolvidas devem ser capazes de criar, de forma autónoma e a partir da experiência passada, uma hipótese, ou função, capaz de resolver o problema que se deseja tratar. Um exemplo simples é a descoberta de uma hipótese, na forma de uma regra ou conjunto de regras, para definir quais os clientes de um supermercado que devem receber publicidade de um novo produto, utilizando os dados de compras anteriores dos clientes registados na base de dados do supermercado. A este processo de indução de uma hipótese (ou aproximação de função) a partir da experiên-

cia passada, dá-se o nome de *Aprendizagem Automática* ou *Extração de Conhecimento de Dados* (ECD).

A capacidade de aprendizagem é considerada essencial para um comportamento inteligente. Atividades como memorizar, observar e explorar situações para aprender fatos, melhorar habilidades motoras/cognitivas através da prática, organizar conhecimento novo e utilizar representações apropriadas, podem ser consideradas atividades relacionadas com aprendizagem. Existem várias definições de ECD na literatura. Uma delas, apresentada em Mitchell (1997), define ECD como:

> *'A capacidade de melhorar o desempenho na realização de alguma tarefa por meio da experiência.'*

Em ECD, os computadores são programados para aprender com a experiência passada. Para tal, empregam um princípio de inferência denominado indução, no qual se obtêm conclusões genéricas a partir de um conjunto particular de exemplos. Assim, os algoritmos de ECD aprendem a induzir uma função, ou hipótese, capaz de resolver um problema, a partir de dados que representam instâncias do problema a ser resolvido. Estes dados formam um conjunto, simplesmente denominado conjunto de dados (Seção 1.2). Embora ECD esteja naturalmente associada à IA, outras áreas de investigação são importantes e têm contribuições diretas e significativas no avanço da ECD, tais como, Probabilidade e Estatística, Teoria da Computação, Neurociência, Teoria da Informação, entre outras. ECD é uma das áreas de investigação da computação que mais tem crescido nos últimos anos. Diferentes algoritmos de ECD, diferentes formas de utilizar os algoritmos existentes e adaptações de algoritmos são continuamente propostos. Além disso, em cada instante surgem novas variações nas caraterísticas dos problemas reais a serem tratados.

Existem várias aplicações bem-sucedidas de técnicas de ECD na resolução de problemas reais, entre as quais podem ser citadas:

- Reconhecimento de voz - palavras faladas;
- Predição de taxas de cura de pacientes com diferentes doenças;
- Deteção do uso fraudulento de cartões de crédito;
- Condução autónoma de automóveis;
- Ferramentas que jogam gamão e xadrez ao nível de campeões;
- Diagnóstico de cancro por meio da análise de dados de expressão genética.

Além do enorme volume de aplicações que beneficiam das caraterísticas da área de ECD, outros fatores têm favorecido a expansão desta área, nomeadamente, o desenvolvimento de algoritmos cada vez mais eficazes e eficientes, e a elevada capacidade dos recursos computacionais atualmente disponíveis. Outras motivações para a investigação em ECD incluem a possibilidade de aumentar a compreensão de como se processa a aprendizagem nos seres vivos. Além disso, algumas tarefas são naturalmente melhor definidas por meio de exemplos. Os modelos gerados são, ainda, capazes de lidar com situações não apresentadas durante o seu desenvolvimento, sem necessariamente necessitar de uma nova fase de projeto.

1.2 Indução de Hipóteses

Para caracterizar um conjunto de dados, vamos considerar a informação sobre os doentes de um hospital. Neste conjunto, cada observação corresponde a um doente. Cada observação, também denominada objeto, exemplo ou registo, é uma tupla formada pelos valores das caraterísticas que descrevem os principais aspetos desse doente. Essas características são designadas por atributos ou variáveis independentes). A título de exemplo, os atributos de um doente podem ser: a sua identificação, o nome, a idade, o género, o estado civil, os sintomas e resultados de exames clínicos. Exemplos de sintomas podem ser presença e distribuição de manchas na pele, o peso e a temperatura do corpo.

Conforme será visto mais adiante, em algumas tarefas de extração de conhecimento, um dos atributos é considerado o atributo de saída (também denominado atributo alvo ou variável dependente), cujos valores podem ser estimados utilizando os valores dos demais atributos, denominados atributos de entrada, ou atributos previsores. O objetivo de um algoritmo de ECD utilizado nestas tarefas é aprender, a partir de um subconjunto dos dados, denominado conjunto de treino, um modelo ou hipótese capaz de relacionar os valores dos atributos de entrada de um objeto com o valor do seu atributo de saída.

Um requisito importante para os algoritmos de ECD é a capacidade de lidar com dados imperfeitos. Muitos conjuntos de dados apresentam algum tipo de problema, como presença de ruído, dados inconsistentes, dados em falta e dados redundantes. Idealmente, os algoritmos de ECD devem ser robustos a estes problemas, minimizando a sua influência no processo de indução de hipóteses. Porém, dependendo da sua extensão, estes problemas podem prejudicar o processo indutivo. Por esse motivo, técnicas de pré-processamento são frequentemente utilizadas na identificação e minimização da ocorrência desses problemas.

Retomando o exemplo dos pacientes, considere a situação em que um algoritmo de ECD é utilizado para aprender uma hipótese (por exemplo, uma regra) capaz de diagnosticar pacientes de acordo com os valores associados aos seus atributos de entrada. Os atributos referentes à identificação e nome do paciente não são considerados entradas relevantes, uma vez que não possuem qualquer tipo de relação com o diagnóstico de uma doença. Na verdade, o que se pretende, é induzir uma hipótese capaz de realizar diagnósticos corretos para novos pacientes, i.e. pacientes diferentes daqueles que foram utilizados na aprendizagem da regra de decisão. Assim, uma vez induzida uma hipótese, é desejável que esta também seja válida para outros objetos do mesmo domínio, ou problema, que não fazem parte do conjunto de treino. A esta propriedade de uma hipótese continuar a ser válida para novos objetos dá-se o nome de *capacidade de generalização da hipótese*. Para que uma hipótese se revista de utilidade quando aplicada a novos dados, é fundamental que apresente uma boa capacidade de generalização.

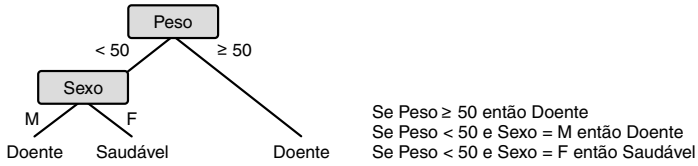
Quando uma hipótese apresenta uma capacidade de generalização reduzida, pode ser porque esta se encontra superajustada aos dados (*overfitting*). Neste caso, diz-se que a hipótese memorizou, ou especializou-se nos dados de treino. No caso inverso, o algoritmo de ECD pode induzir hipóteses que apresentem uma baixa taxa de acerto mesmo no conjunto de treino, gerando uma condição de subajustamento (*underfitting*). Esta situação

pode ocorrer, por exemplo, quando os exemplos de treino disponíveis são pouco representativos, ou o modelo usado é muito simples e, por conseguinte, incapaz de capturar os padrões existentes nos dados (Monard e Baranauskas, 2003). Estes conceitos são ilustrados e novamente discutidos na Secção 7.2.1. São feitas então considerações e motivações sobre a escolha de modelos com boa capacidade de generalização.

1.3 Viés Indutivo

Quando um algoritmo de ECD aprende a partir de um conjunto de dados de treino, procura uma hipótese, no espaço de hipóteses possíveis, que seja capaz de descrever as relações entre os objetos, e que melhor se ajuste aos dados de treino.

Cada algoritmo utiliza uma forma, ou representação, para descrever a hipótese induzida. Por exemplo, as redes neuronais artificiais representam uma hipótese por um conjunto de valores reais, associados aos pesos das conexões da rede. As árvores de decisão utilizam uma estrutura de árvore em que cada nó interno é representado por uma pergunta referente ao valor de um atributo e cada nó externo está associado a uma classe. A representação utilizada define a preferência ou viés (*bias*) de representação do algoritmo e pode restringir o conjunto de hipóteses que podem ser induzidas pelo algoritmo. A Figura 1.1 ilustra o viés de representação utilizado por técnicas de indução de árvores de decisão, redes neuronais artificiais e regras de decisão.



(a) Árvore de decisão (b) Conjunto de regras

$$\begin{pmatrix} 0{,}45 & -0{,}40 & 0{,}54 & 0{,}12 & 0{,}98 & 0{,}37 \\ -0{,}45 & 0{,}11 & 0{,}91 & 0{,}34 & -0{,}20 & 0{,}83 \\ -0{,}29 & 0{,}32 & -0{,}25 & -0{,}51 & 0{,}41 & 0{,}70 \end{pmatrix}$$

(c) Redes neuronais

Figura 1.1 *Diferentes vieses de representação.*

Além do viés de representação, os algoritmos de ECD possuem também um viés de procura. O viés de procura de um algoritmo é a forma como o algoritmo procura a hipótese que melhor se ajusta aos dados de treino. Este viés define como as hipóteses são procuradas no espaço de hipóteses. Por exemplo, o algoritmo ID3, que é utilizado na indução de árvores de decisão, tem como viés de procura a preferência por árvores de decisão com poucos nós, conforme será apresentado no Capítulo 6.

Assim, cada algoritmo de ECD possui dois vieses: um *viés de representação* e um *viés de procura*. O viés é necessário para restringir as hipóteses a serem visitadas no

espaço de procura. Sem viés não haveria aprendizagem/generalização. Os modelos seriam especializados para os exemplos individuais. Embora, à primeira vista, o viés pareça ser uma limitação dos algoritmos de ECD, segundo Mitchell (1997), sem viés um algoritmo de ECD não consegue generalizar o conhecimento adquirido durante o treino para aplicá-lo com sucesso a novos dados.

1.4 Tarefas de aprendizagem

Os algoritmos de ECD têm sido amplamente utilizados em diversas tarefas, que podem ser organizadas de acordo com diferentes critérios. Um deles diz respeito ao paradigma de aprendizagem a ser adotado para lidar com a tarefa. De acordo com esse critério, as tarefas de aprendizagem podem ser divididas em: **Preditivas** e **Descritivas**.

Em tarefas de previsão, o objetivo consiste em encontrar uma função (também denominada de modelo, ou hipótese), a partir dos dados de treino, que possa ser utilizada para prever um rótulo, ou valor, que caraterize um novo exemplo, com base nos valores dos seus atributos de entrada. Para esse efeito, é necessário que cada objeto do conjunto de treino possua atributos de entrada e de saída.

Os algoritmos, ou métodos, de ECD utilizados nesta tarefa induzem modelos preditivos. Estes algoritmos seguem o paradigma da aprendizagem supervisionada. O termo *supervisionada* vem da simulação da presença de um *supervisor externo*, que conhece a saída (rótulo) associada a cada exemplo (conjunto de valores para os atributos de entrada). Com base neste conhecimento, o supervisor externo pode avaliar a capacidade da hipótese induzida em predizer o valor de saída para novos exemplos.

Em tarefas de descrição, o objetivo consiste em explorar, ou descrever, um conjunto de dados. Os algoritmos de ECD utilizados nestas tarefas ignoram o atributo de saída. Por esse motivo, diz-se que estes algoritmos seguem o paradigma de aprendizagem não supervisionada. Por exemplo, uma tarefa descritiva de agrupamento de dados tem por meta encontrar grupos de objetos semelhantes no conjunto de dados. Outra tarefa descritiva consiste em encontrar regras de associação que relacionam um grupo de atributos com outro grupo de atributos.

A Figura 1.2 apresenta uma hierarquia de aprendizagem, de acordo com os tipos de tarefas de aprendizagem. No topo aparece a aprendizagem indutiva, processo pelo qual são realizadas as generalizações a partir dos dados. Em seguida, surgem os tipos de aprendizagem supervisionada (preditivo) e não supervisionada (descritivo). As tarefas supervisionadas distinguem-se pelo tipo dos rótulos dos dados: discreto, no caso de classificação; e contínuo, no caso de regressão. As tarefas descritivas são genericamente divididas em: agrupamento, em que os dados são agrupados de acordo com sua semelhança; sumarização, cujo objetivo é encontrar uma descrição simples e compacta de um conjunto de dados; e associação, que consiste em encontrar padrões frequentes de associações entre os atributos de um conjunto de dados. Com exceção da sumarização, as demais tarefas serão descritas neste livro.

Note-se que, apesar desta divisão básica de modelos em preditivos e descritivos, um

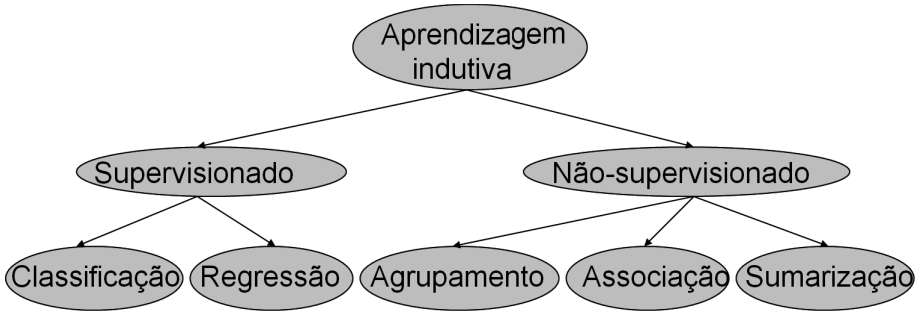


Figura 1.2 *Hierarquia de aprendizagem.*

modelo preditivo também providencia uma descrição compacta de um conjunto de dados, e um modelo descritivo pode efetuar previsões após ser validado.

Uma tarefa de aprendizagem que não se enquadra nas tarefas anteriores é a de *aprendizagem por reforço*. Nesta tarefa, o objetivo é reforçar, ou recompensar, uma ação considerada positiva, e punir uma ação considerada negativa. Um exemplo de tarefa de reforço é ensinar um robô a encontrar a melhor trajetória entre dois pontos. Os algoritmos de aprendizagem utilizados nesta tarefa, em geral, punem a passagem por caminhos pouco promissores, e recompensam a passagem por caminhos promissores. Devido ao foco adotado para este livro, esta tarefa não será abordada.

1.5 Estrutura do Livro

Este livro tem por objetivo apresentar os principais conceitos e algoritmos de ECD e mostrar como ECD pode ser utilizada para na resolução de problemas reais. Para esse efeito, serão cobertos tanto temas tradicionais como resultados de pesquisas recentes na área.

De forma a agrupar os temas cobertos de uma maneira mais uniforme, os capítulos do livro foram organizados em três grandes temas ou módulos:

- **Preparação de dados:** engloba tópicos de descrição dos dados, análise estatística de dados e pré-processamento de dados.
- **Métodos preditivos:** este módulo está relacionado com o paradigma da aprendizagem supervisionada e, após definir os conceitos gerais referentes a este tema, descreve os principais algoritmos de aprendizagem preditiva, explica como as hipóteses podem ser combinadas formando comités, introduz possíveis estratégias para planear experiências com esses métodos, e descreve as principais métricas utilizadas na avaliação do seu desempenho.

- **Modelos descritivos:** este módulo foca a aprendizagem não supervisionada. São abordados os temas de padrões frequentes e análise de agrupamentos. Descrevemos os conceitos básicos, os algoritmos principais, e as formas de combinação. É também discutido como as experiências utilizando estes métodos podem ser planeados e avaliados.
- **Tópicos avançados:** inclui temas de investigação recente na área de ECD. Os temas considerados são: fluxos de dados, meta-aprendizagem, estratégias para classificação multiclasse, classificação hierárquica, classificação multirótulo e análise de redes sociais.

Estes tópicos foram cuidadosamente escolhidos, de modo a que os leitores tenham acesso a uma dose equilibrada entre abrangência e profundidade dos temas básicos e avançados nas áreas de Inteligência Artificial, que utilizam aprendizagem automática na indução de modelos de decisão. Esperamos que este livro, ao mesmo tempo que introduz o leitor aos principais aspetos de ECD e a temas de investigação recentes, sirva de alicerce à realização de investigação que promova o crescimento e o fortalecimento da área. Esperamos ainda que o livro estimule o leitor a utilizar as várias técnicas aqui abordadas na resolução de problemas reais.

Parte I

Preparação de Dados

Introdução

Todos os dias é gerada uma enorme quantidade de dados. Estima-se que, a cada 20 meses, a quantidade de dados armazenada em todas as bases de dados do mundo duplica (Witten et al., 2011). Estes dados são gerados por atividades como transações financeiras, monitorização ambiental, obtenção de dados clínicos e genéticos, captura de imagens, tráfego na internet, entre outras. Os dados podem, ainda, assumir vários formatos diferentes, como séries temporais, conjuntos de produtos em transações, grafos ou redes sociais, textos, páginas web, imagens (vídeos) e áudio (músicas). Com o aumento crescente da quantidade de dados gerada, o fosso entre a quantidade de dados existente e a porção de dados que é analisada e compreendida tem-se acentuado de forma significativa ao longo do tempo.

Conjuntos de dados são formados por objetos que podem representar um objeto físico, como uma cadeira, ou uma noção abstrata, como os sintomas apresentados por um paciente que se dirige a um hospital. Em geral, cada objeto é descrito por um conjunto de atributos de entrada, ou vetor de caraterísticas. Cada objeto corresponde a uma ocorrência dos dados. Cada atributo está associado a uma propriedade do objeto.

Formalmente, um conjunto de dados pode ser representado por uma matriz de objetos $\mathbf{X}_{n\times d}$, em que n é o número de objetos e d é o número de atributos de entrada de cada objeto. O valor de d define a dimensionalidade dos objetos, ou do espaço de objetos (também denominado espaço de entradas, ou espaço de atributos). Cada elemento dessa matriz, x_i^j, contém o valor da j-ésima caraterística para o i-ésimo objeto. Os d atributos também podem ser vistos como um conjunto de eixos ortogonais e os objetos, como pontos no espaço de dimensão d, também designado por espaço de objetos. A Figura 1.3 ilustra um exemplo de um espaço de objetos. Nesse espaço, a posição de cada objeto é definida pelos valores de dois atributos de entrada ($d = 2$) que, neste caso, representam os resultados de dois exames clínicos. O atributo de saída é representado pelo formato do objeto na figura: círculo para pacientes doentes e triângulo para pacientes saudáveis.

Apesar do crescente número de bases de dados disponíveis, na maioria das vezes não é possível utilizar diretamente algoritmos de ECD sobre esses dados. Técnicas de pré-processamento são frequentemente utilizadas para tornar os conjuntos de dados mais adequados para o uso de algoritmos de ECD. Essas técnicas podem ser agrupadas nas seguintes tarefas: **Integração de dados**, **Amostragem de dados**, **Balanceamento de dados**, **Limpeza de dados**, **Redução de dimensionalidade**, e **Transformação de dados**.

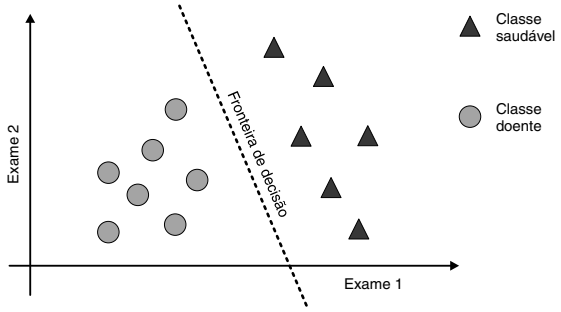


Figura 1.3 *Objetos no espaço definido pelos atributos.*

Grande parte das empresas, órgãos do governo e outras organizações possuem os seus dados armazenados em bases de dados. Assim, os dados podem ser oriundos de mais do que uma fonte, ou tabela atributo-valor. Quando os dados presentes em diferentes conjuntos precisam ser utilizados por um algoritmo de ECD, esses conjuntos devem ser integrados de forma a constituir uma única tabela. Essa integração pode levar a inconsistências e redundâncias. Os algoritmos de ECD também podem apresentar dificuldades quando precisam de lidar com um grande volume de dados. Essa grande quantidade pode estar relacionada com o número de objetos, com o número de atributos, ou ambos. Problemas como a redundância e a inconsistência, estão muitas vezes relacionados com a quantidade de dados. Técnicas de amostragem e de seleção de atributos têm sido empregues para amenizar estes problemas. Em dados reais, a distribuição dos objetos entre as classes pode não ser uniforme. Por conseguinte, algumas classes podem ter um número de objetos muito superior a outras, formando um conjunto de dados desbalanceado. Alguns algoritmos de ECD têm dificuldade em induzir um bom modelo a partir de conjuntos desbalanceados. Muitos dos conjuntos de dados reais apresentam problemas, tais como, a presença de ruído e dados incompletos e/ou inconsistentes. Os dados podem estar incompletos devido à ausência de valores. Os dados podem ser inconsistentes por causa de erros na sua geração, captação ou entrada. O desempenho da maioria dos algoritmos de ECD é afetado pela presença destes problemas. Para lidar com eles, diversas técnicas para limpeza de dados têm sido propostas e investigadas na literatura de ECD. Mesmo após a eliminação de atributos por especialistas no domínio, os atributos que restam podem dificultar a tarefa de algoritmos de ECD, devido a diversos motivos, como sejam a presença de um número muito grande de atributos, de atributos redundantes, irrelevantes e/ou inconsistentes.

Vários algoritmos de ECD têm dificuldade em utilizar os dados no seu formato original. Para tratar este problema, são efetuadas transformações aos dados originais antes destes serem utilizados pelo algoritmo. Um exemplo de transformação é a conversão de valores simbólicos em valores numéricos.

Capítulo 2

Análise Exploratória de Dados

A análise das caraterísticas presentes num conjunto de dados permite a descoberta de padrões e tendências que podem fornecer informações valiosas que ajudem a compreender o processo que gera os dados. Muitas dessas caraterísticas podem ser obtidas por meio da aplicação de fórmulas estatísticas simples. Outras podem ser observadas por meio do uso de técnicas de visualização. Neste capítulo são descritas as principais caraterísticas para a análise e compreensão de um conjunto de dados utilizados em experiências de ECD. Analisa-se a forma como os dados podem estar organizados e os tipos de valores que estes podem assumir. Serão apresentados ainda vários tipos de gráficos que facilitam a análise visual da distribuição dos valores em conjuntos de dados com uma ou mais variáveis. Este capítulo está organizado da seguinte maneira. A Seção 2.1 descreve como os atributos de um conjunto de dados podem ser caraterizados pelo seu tipo e escala. Por fim, na Seção 2.2, são apresentadas várias medidas, assim como gráficos, que permitem descrever conjuntos de dados, tanto univariados como multivariados.

2.1 Caraterização de Dados

Os conjuntos de dados são formados por objetos que podem representar um objeto físico, como uma cadeira, ou uma noção abstrata, como os sintomas apresentados por um paciente que se dirige a um hospital. Estes objetos são também designados por instâncias, objetos, registos ou exemplos. Em geral, são representados por um vetor de caraterísticas que os descreve, também denominadas atributos, campos ou variáveis. Cada objeto corresponde a uma linha na tabela de dados. Cada atributo está associado a uma propriedade do objeto.

Formalmente, os dados podem ser representados por uma matriz de objetos $\mathbf{X}_{n\times d}$, em que n é o número de objetos e d é o número de atributos de entrada de cada objeto. O valor de d define a dimensionalidade dos objetos ou do espaço de objetos. Cada elemento dessa matriz, x_i^j, contém o valor da j-ésima caraterística para o i-ésimo objeto. Os d atributos também podem ser interpretados como um conjunto de eixos ortogonais, e os objetos como pontos no espaço de dimensão d, denominado espaço de objetos.

Para ilustrar os conceitos abordados neste capítulo com um exemplo prático, considere

novamente o conjunto de dados provenientes de pacientes de um hospital, denominado `hospital`, ilustrado pela Tabela 2.1. Este conjunto foi inicialmente apresentado no Capítulo 1. No conjunto `hospital`, cada objeto corresponde a um paciente, sendo por isso formado pelos valores de atributos de entrada (também denominados atributos preditivos) referentes ao paciente. Esses atributos são: identificação, nome, idade, sexo, sintomas e resultados de exames clínicos. Exemplos de sintomas são presença e distribuição de manchas na pele, peso do paciente e temperatura do seu corpo. Além destes atributos, a tabela apresenta um atributo alvo, também denominado atributo meta ou de saída, que representa o fenómeno de interesse sobre o qual se pretende fazer previsões. Em tarefas descritivas, os dados não apresentam este atributo e, muitas vezes, a definição deste tipo de atributo pode ser obtida como um dos seus resultados. Por outro lado, as tarefas preditivas baseiam-se na presença deste atributo, como mencionado no Capítulo 1. Na maioria dos casos, os dados apresentam apenas um atributo alvo [1].

Quando um atributo alvo contém rótulos que identificam categorias ou classes às quais os objetos pertencem, é denominado classe e assume valores discretos $1,\ldots,k$. Nestes casos, estamos perante um problema de classificação. Se o número de objetos por classe for diferente, a classe mais frequente é denominada classe maioritária, e a menos frequente, minoritária. Por outro lado, se o atributo alvo é descrito por valores numéricos contínuos, estamos perante um problema de regressão (Mitchell, 1997). Um caso especial de regressão é a previsão de valores em séries temporais, que se carateriza pelo fato de os seus valores apresentarem uma relação de periodicidade. Quer em problemas de classificação quer em problemas de regressão, os restantes atributos são denominados atributos preditivos, por poderem ser utilizados na previsão do valor do atributo alvo.

Na Tabela 2.1, para cada paciente são apresentados os valores dos atributos *Id.* (identificação do paciente), *Nome*, *Idade*, *Sexo*, *Peso*, *Manchas* (presença e distribuição de manchas no corpo), *Temp.* (temperatura do corpo), *#Int.* (número de internamentos), *Est.* (estado de origem) e *Diagnóstico*, que indica o diagnóstico do paciente e corresponde ao atributo alvo. As tabelas com este formato também são denominadas por tabelas atributo-valor.

O domínio de um atributo, ou seja os possíveis valores que um atributo pode assumir, determina o tipo de análise que podemos efetuar. Neste livro, consideramos dois aspetos: *tipo* e *escala*. O tipo de um atributo diz respeito ao grau de quantificação nos dados, e a escala indica a significância relativa dos seus valores. Conhecer o tipo e a escala dos atributos permite identificar a forma adequada para a preparação dos dados e posterior modelação. As definições que apresentamos são utilizadas para classificar os valores que os atributos podem assumir no que diz respeito aos dois aspetos mencionados (Jain e Dubes, 1988; Barbara, 2000; Yang et al., 2005).

[1] Resultados mais recentes consideram dados com mais de um atributo alvo. Este é o foco, por exemplo, da classificação multirótulo.

Tabela 2.1 *Conjunto de dados* `hospital` *com seus atributos*

Id.	Nome	Idade	Sexo	Peso	Manchas	Temp.	# Int.	Est.	Diagnóstico
4201	João	28	M	79	Concentradas	38,0	2	SP	Doente
3217	Maria	18	F	67	Inexistentes	39,5	4	MG	Doente
4039	Luiz	49	M	92	Espalhadas	38,0	2	RS	Saudável
1920	José	18	M	43	Inexistentes	38,5	8	MG	Doente
4340	Cláudia	21	F	52	Uniformes	37,6	1	PE	Saudável
2301	Ana	22	F	72	Inexistentes	38,0	3	RJ	Doente
1322	Marta	19	F	87	Espalhadas	39,0	6	ECD	Doente
3027	Paulo	34	M	67	Uniformes	38,4	2	GO	Saudável

2.1.1 Tipo

O tipo define se o atributo representa quantidades, sendo então denominado quantitativo ou numérico, ou qualidades, sendo então designado de qualitativo, simbólico ou categórico, pois os seus valores podem ser associados a categorias. Exemplos de conjuntos de valores qualitativos são {*pequeno*, *médio*, *grande*} e {*matemática*, *física*, *química*}. Apesar de alguns atributos qualitativos poderem ter os respetivos valores ordenados, não podem ser aplicadas operações aritméticas. Os atributos quantitativos são numéricos, como no conjunto de valores $\{23, 45, 12\}$. Os valores de um atributo quantitativo são ordenados e podem ser utilizados em operações aritméticas. Os valores quantitativos podem ser ainda contínuos ou discretos.

Os atributos contínuos podem assumir um número infinito de valores. Geralmente esses atributos são resultados de medidas, sendo os seus valores representados por números reais. No entanto, deve-se timar em consideração que em computadores digitais a precisão para valores reais é, geralmente, limitada. Exemplos de atributos contínuos são atributos que representam pesos, tamanhos ou distâncias.

Os atributos discretos contêm um número finito ou infinito contável de valores. Um caso especial de atributos discretos são os atributos binários (ou booleanos), que apresentam apenas dois valores, como 0/1, sim/não, ausência/presença e verdadeiro/falso. Para efeitos ilustrativos, na Tabela 2.2 é apresentada a classificação por tipo dos atributos presentes no conjunto de dados da Tabela 2.1.

É importante observar que uma medida quantitativa possui, além do valor numérico, uma unidade, por exemplo, *metro*. No processo de extração de conhecimento, se o atributo *altura* assume o valor 100, o valor em si não indica se a altura é medida em centímetros, metros ou jardas, e essa informação pode ser importante na avaliação do conhecimento adquirido.

Os atributos quantitativos ou numéricos podem assumir valores binários, inteiros ou reais. Por outro lado, atributos qualitativos são, geralmente, representados por um número finito de símbolos ou nomes. Em alguns casos, os atributos categóricos são representados por números. No entanto, estes números não representam quantidades pelo que não são passíveis de serem submetidos a operações aritméticas. Por exemplo, qual seria o sentido

Tabela 2.2 *Tipo dos atributos do conjunto* `hospital`

Atributo	Classificação
Id.	Qualitativo
Nome	Qualitativo
Idade	Quantitativo discreto
Sexo	Qualitativo
Peso	Quantitativo contínuo
Manchas	Qualitativo
Temp.	Quantitativo contínuo
#Int.	Quantitativo discreto
Est.	Qualitativo
Diagnóstico	Qualitativo

de calcular a média dos valores de um atributo categórico representando o número de identificação de um paciente?

2.1.2 Escala

A escala define as operações que podem ser realizadas sobre os valores do atributo. Em relação à escala, os atributos podem ser classificados como nominais, ordinais, intervalares e racionais. Os dois primeiros são do tipo qualitativo e os dois últimos são do tipo quantitativo. Estas quatro escalas são seguidamente definidas em detalhe.

Na escala nominal, os valores consistem apenas nomes diferentes, carregando a menor quantidade de informação possível, não existindo uma relação de ordem entre os seus valores. Consequentemente, as operações mais utilizadas na manipulação dos seus valores são as de igualdade e desigualdade entre valores. Por exemplo, se o atributo representa continentes do planeta, apenas é possível verificar se dois valores são iguais ou diferentes (a não ser que se pretenda ordenar os continentes por ordem alfabética, mas nesse caso o atributo seria do tipo ordinal). São exemplos de atributos com escala nominal: nome do paciente, RG, CPF, número da conta no banco, CEP, cores (com as categorias verde, amarelo, branco etc.) e sexo (com as categorias feminino e masculino).

Os valores numa escala ordinal refletem também uma ordem das categorias representadas. Dessa forma, além dos operadores anteriores, podem também ser utilizados operadores como $<$, $>$, $\leq$, $\geq$. Por exemplo, quando um atributo categórico possui como domínio o conjunto *pequeno*, *médio* e *grande*, é possível definir uma relação de ordem, ou seja indicar se um valor é igual, maior ou menor que outro. Exemplos de atributos com escala ordinal incluem a hierarquia militar e avaliações qualitativas de temperatura, como frio, morno e quente.

Na escala intervalar, os atributos são representados por números que variam dentro de um intervalo. Assim, é possível definir tanto a ordem como a diferença em magnitude entre dois valores. A diferença em magnitude indica a distância que separa dois valores no

João Gama é Professor Associado com Agregação na Universidade do Porto. É investigador sénior e vice-diretor do LIAAD, uma unidade do INESC TEC. Trabalhou em vários projetos nacionais e europeus nas áreas de aprendizagem incremental e adaptativa. Foi *Program Chair* de várias conferências internacionais e europeias, coorganizador da sessão *Data Streams* no ACM SAC desde 2007. Organizou vários *workshops* sobre descoberta de conhecimento em fluxos de dados em conferências internacionais. É autor de vários livros de ECD e de uma monografia sobre *Knowledge Discovery from Data Streams*. Publicou mais de 250 artigos com avaliação pelos pares em áreas relacionadas com a aprendizagem automática e aprendizagem em fluxos continuou de dados. É membro do conselho editorial das revistas mais relevantes na área de extração de conhecimento de dados. É membro Sénior do IEEE e *Distinguish Speaker* da ACM.

André C. P. L. F. de Carvalho é professor titular do Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, da Universidade de São Paulo (USP), campus São Carlos. É diretor do centro de Aprendizado de Máquina em Análise de Dados, e bolsista de Produtividade em Pesquisa 1A do CNPq. É mestre em Ciências da Computação (1990) pela Universidade Federal de Pernambuco, e doutorado em *Electronic Engineering* pela *University of Kent* (1994). Já orientou ou coorientou mais de 25 teses de doutorado em diferentes universidades do Brasil e de Portugal e supervisionou cerca de 15 pós-doutorados. Faz parte do Comité Editorial e do Comité de Programa dos principais periódicos e congressos da área de Inteligência Artificial, Ciência de Dados, Mineração de Dados e Aprendizado de Máquina. É vice-diretor do Centro de Ciências Matemáticas Aplicadas à Indústria. Seus principais interesses de pesquisa são Aprendizado de Máquina, Mineração de Dados e Ciência de Dados.

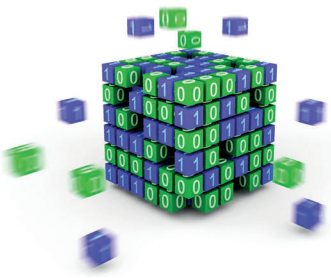
Ana Carolina Lorena é Professora Associada do Instituto de Ciência e Tecnologia da Universidade Federal de São Paulo, em São José dos Campos-SP, Brasil. Possui graduação em Ciência de Computação pelo Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação da Universidade de São Paulo (ICMC-USP) (2001), doutorado em Ciência da Computação pelo ICMC-USP (2006) e pós-doutorado em Ciência da Computação pelo ICMC-USP (2007). Foi docente da Universidade Federal do ABC de 2007 a 2012. Tem experiência na área de Ciência da Computação, atuando principalmente nos seguintes temas: mineração de dados, aprendizado de máquina supervisionado e ciência de dados.

Katti Faceli é Professora Associada da Universidade Federal de São Carlos, Campus de Sorocaba. Possui graduação em Ciências da Computação pela Universidade de São Paulo (1998), mestrado (2001) e doutorado (2006) em Ciências da Computação e Matemática Computacional pela Universidade de São Paulo e pós-doutorado em Ciência da Computação pela Universidade de São Paulo – São Carlos (2008). Em 2016 atuou como pesquisadora visitante na *Manchester Business School*, Universidade de Manchester, Inglaterra. Tem experiência na área de Ciência da Computação, com ênfase em Inteligência Artificial, atuando principalmente nos seguintes temas: aprendizagem automática, e-science, análise de agrupamento, visualização e sistemas inteligentes híbridos.

Márcia Oliveira é Doutorada pela Universidade do Porto e investigadora no LIAAD-INESC TEC, o laboratório de Inteligência Artificial e Análise de Dados da Universidade do Porto. É especialista em análise de redes sociais.

Este livro, agora em terceira edição, apresenta os temas clássicos e as tendências atuais nas áreas de aprendizagem automática, reconhecimento de padrões e análise de dados. Oferece uma perspetiva abrangente dos principais aspetos destas áreas. O conteúdo está organizado em três grandes tópicos: Análise Exploratória de Dados, Métodos Preditivos e Tópicos Avançados. O livro é orientado para estudantes de mestrado e doutoramento, introduzindo o leitor nos principais conceitos e algoritmos de aprendizagem automática e apontando caminhos para a sua implementação prática. Com uma abordagem equilibrada entre tópicos básicos e avançados e com um forte caráter didático o livro preenche uma lacuna de obras abrangentes e atualizadas voltadas para o púbico de língua portuguesa.

Em *Extração de Conhecimento de Dados*, os autores combinam as suas experiências no ensino e na investigação para apresentar os principais conceitos bem como a sua utilização em problemas reais. Este livro pode ser adotado como livro-texto ou material de apoio para estudantes de mestrado e doutoramento nas áreas de inteligência artificial, aprendizagem automática, análise de dados e sistemas inteligentes. Os leitores terão acesso a uma obra abrangente sobre os principais temas numa das áreas da informática e ciências da computação com maior crescimento e impacto industrial nos últimos anos.



Este livro teve o patrocínio:

COMPETE
PROGRAMA OPERACIONAL FACTORES DE COMPETITIVIDADE

QREN
QUADRO DE REFERÊNCIA ESTRATÉGICO NACIONAL
PORTUGAL 2007.2013

UNIÃO EUROPEIA
Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional

439

ISBN 978-972-618-914-5

9 789726 189145