# Estudo e extensão da metodologia DAMICORE para tarefas de classificação

***Bruno Kim Medeiros Cesar***

**Bruno Kim Medeiros Cesar**

# Estudo e extensão da metodologia DAMICORE para tarefas de classificação

Dissertação apresentada ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação – ICMC-USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional. *VERSÃO REVISADA*

Área de Concentração: Ciências de Computação e Matemática Computacional

Orientador: Prof. Dr. Francisco José Monaco

**USP – São Carlos**
**Junho de 2016**

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Achille Bassi
e Seção Técnica de Informática, ICMC/USP,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Cesar, Bruno Kim Medeiros
C421e Estudo e extensão da metodologia DAMICORE para tarefas de classificação / Bruno Kim Medeiros Cesar; orientador Francisco José Monaco. - São Carlos - SP, 2016.
119 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em Ciências de Computação e Matemática Computacional) - Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, 2016.

1. Aprendizado de Máquina. 2. DAMICORE. 3. Classificação. 4. Dissertação. I. Monaco, Francisco José, orient. II. Título.

**Bruno Kim Medeiros Cesar**

# Research and extension of the DAMICORE methodology for classification tasks

Master dissertation submitted to the Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação – ICMC-USP, in partial fulfillment of the requirements for the degree of the Master Program in Computer Science and Computational Mathematics. *FINAL VERSION*

Concentration Area: Computer Science and Computational Mathematics

Advisor: Prof. Dr. Francisco José Monaco

**USP – São Carlos**
**June 2016**

*À Luzia, pela alegria e paciência.*

# AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus orientadores, Francisco Monaco e Alexandre Delbem, pelas ideias, críticas, paciência e oportunidades concedidas.

Agradeço à CAPES pelo financiamento deste trabalho, e ao ICMC e LaSDPC pela estrutura concedida para o seu desenvolvimento.

Agradeço à Google e aos meus colegas pelo companheirismo e aprendizado, e que nunca deixaram de me perturbar sobre a importância de concluir logo a dissertação

Aos meus amigos Danilo, Isotília, Salomão, Carmona, Roberta, Fer e Ziggy, que tiveram e terão sempre um papel especial na minha vida.

Agradeço aos meus pais e à minha irmã pela presença e apoio constante, e tolerância com esse nerd que só fala de coisa chata.

Finalmente, agradeço a Luzia, meu ponto de luz e felicidade em todos os momentos.

*"If you're an engineer, you essentially want to be wrong half the time. If you do experiments and you're always right, then you aren't getting enough information out of those experiments. You want your experiment to be like the flip of a coin: You have no idea if it is going to come up heads or tails. You want to not know what the results are going to be." —- Peter Norvig*

# RESUMO

MEDEIROS CESAR, B. K.. **Estudo e extensão da metodologia DAMICORE para tarefas de classificação**. 2016. 119 f. Dissertação (Mestrado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC/USP), São Carlos – SP.

A área de aprendizado de máquina adquiriu grande importância na última década graças à sua capacidade de analisar conjuntos de dados complexos em larga escala. Em diversas áreas do conhecimento existe a demanda pela análise de dados por especialistas, seja para obter agrupamentos latentes ou classificar instâncias em classes conhecidas. As ferramentas acessíveis a especialistas leigos em programação são limitadas a problemas específicos e demandam um custo de desenvolvimento às vezes proibitivo, sendo interessante buscar por ferramentas genéricas e aplicáveis a qualquer área do conhecimento. Este trabalho busca estender e implementar uma metodologia genérica de aprendizado de máquina capaz de analisar quaisquer conjuntos de arquivos de forma praticamente livre de configuração. Foram obtidos resultados satisfatórios de sua aplicação em um conjunto amplo de problemas para agrupamento e classificação de executáveis, spam e detecção de línguas.

**Palavras-chave:** Aprendizado de Máquina, DAMICORE, Classificação, Dissertação.

# ABSTRACT

MEDEIROS CESAR, B. K.. **Estudo e extensão da metodologia DAMICORE para tarefas de classificação**. 2016. 119 f. Dissertação (Mestrado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC/USP), São Carlos – SP.

Machine learning has rised in importance in the last decade thanks to its power to analyse complex datasets in large scale. At several areas of knowledge there is a demand for data analysis by domain experts, be it for discovering latent clusters or classifying instances into known groups. The tools available for experts that do not master computer programming are limited to specific tasks and demand a high development cost, which sometimes is prohibitive. It is interesting, then, to develop generic tools useful to any area of knowledge. This master's thesis seeks to extend and implement a generic machine learning methodology capable of analysing any set of files mostly free of configuration. Its application produced satisfactory results in a wide set of clustering and classification problems over binary executables, spam classification, and language identification.

**Key-words:** Machine Learning, DAMICORE, Classification, Master's Thesis.

# LISTA DE ILUSTRAÇÕES

# LISTA DE TABELAS

# SUMÁRIO

CAPÍTULO

# 1

# INTRODUÇÃO

## 1.1 Contexto

A tarefa do analista ou cientista de dados não é simples: mais do que aplicar ferramentas estatísticas para obter conhecimento e tomar decisões a partir de dados, suas tarefas também em geral incluem obter, limpar e extrair os parâmetros relevantes de um conjunto de dados antes de conseguir aplicar as referidas técnicas; uma vez obtido um modelo apropriado, também deve apresentar e visualizar os padrões encontrados.

Apesar de tais tarefas também estarem presentes no arcabouço da estatística, a crescente disponibilidade de dados advindos de ferramentas computacionais e, em geral, a falta de controle sobre sua coleta, implicam uma importância maior para estas etapas. Assim, é esperado que um analista tenha a compreensão do domínio, conhecimento estatístico, e capacidade de programação para obter um resultado confiável e significativo a partir de uma análise. Ferramentas de análise de dados direcionadas a especialistas de domínio leigos em programação, como médicos, biólogos e cientistas sociais, têm desenvolvimento caro e são restritas a poucas tarefas.

Neste cenário, uma ferramenta genérica capaz de realizar tarefas simples de agrupamento e classificação em quaisquer tipos de dados teria um grande impacto, pois viabiliza a análise de dados em larga escala a um grande contingente de especialistas que, de outra maneira, não teriam acesso às técnicas poderosas desenvolvidas nas últimas décadas. Uma ferramenta universal dificilmente seria tão eficaz como técnicas dirigidas a um domínio específico, o que deve ser contrabalançado por sua generalidade e apresentar uma taxa de acerto aceitável para as análises realizadas.

A metodologia DAMICORE, desenvolvida por Sanches, Cardoso e Delbem (2011), apresenta-se como um método genérico capaz de produzir agrupamentos em quaisquer tipos de dados. Isto é possível graças ao uso da NCD[1] como métrica de comparação de elementos, que aplica um compressor genérico sobre a representação binária dos dados e compara o tamanho

dos elementos comprimidos (LI *et al.*, 2004). Vale destacar que o método é livre de configuração, não exigindo *a priori* a escolha de nenhum parâmetro para sua operação.

O método inicialmente propôs a utilização de três técnicas específicas para sua operação, incluídas na implementação distribuída a outros pesquisadores. Como primeiro passo, computa-se a matriz das distâncias par a par dos elementos com a NCD; em seguida, a matriz de distâncias é transformada em uma árvore filogenética com o algoritmo de Junção de Vizinhos (SAITOU; NEI, 1987); por fim, os nós da árvore são agrupados com o método *Fast Newman* (NEWMAN, 2004b), e emite-se o agrupamento obtido dos nós-folha, correspondente aos elementos do conjunto de dados.

Por ser uma técnica de análise de dados binários, este método é apropriado também para uma etapa exploratória de um conjunto de dados. Um analista inexperiente pode ter uma boa noção da organização de um conjunto de dados; um analista capacitado pode, de forma iterativa, limpar e extrair as características relevantes do conjunto e reaplicar o método a cada iteração, ressaltando as semelhanças e os grupos subjacentes do conjunto de dados, se existirem.

## 1.2 Proposta

Neste trabalho, foi observado que as técnicas aplicadas na implementação da DAMICORE podem ser consideradas apenas instâncias de uma classe mais genérica de métodos, que formam portanto uma metodologia. Inicialmente, computa-se a matriz de distâncias com uma **métrica** definida - em geral, a NCD. Então, interpretando a matriz de distâncias como um grafo completo ponderado, realiza-se sua **simplificação** para um grafo esparso que mantém as principais relações de proximidade entre os elementos. Por fim, aplica-se um método para **detecção de comunidades** neste grafo, que correspondem então ao agrupamento dos elementos iniciais.

Com esta visão, buscou-se explorar maneiras alternativas para se configurar este fluxo de processos, substituindo e avaliando a influência de diferentes combinações de ferramentas. A NCD é na verdade um conjunto de possíveis métricas, definidas pelo compressor utilizado e por uma função de pareamento de elementos. A etapa de simplificação pode tanto visualizar a matriz de distâncias como uma matriz de dissimilaridade, para a qual existem diversas técnicas na Filogenia Computacional que geram árvores binárias; quanto pode ser interpretada como um grafo, que leva a outras possibilidades de processamento. Por fim, a área de Detecção de Comunidades é uma das mais ativas na pesquisa em Redes Complexas, com uma gama de métodos à disposição para serem utilizados.

Outra direção de extensão da técnica está em torná-la aplicável a outras classes de problemas, além de tarefas de agrupamento. O trabalho de Delbem (2012) expõe um método de classificação binário (isto é, entre duas classes) que transforma o problema de modo a obter-se

[1] Do inglês *Normalized Compression Distance*, ou Distância de Compressão Normalizada

o agrupamento de quatro elementos; este problema transformado é então solucionado com o método DAMICORE. Neste trabalho, foi realizada a extensão deste método para um número qualquer de classes, propondo ainda uma medida de confiança para a classificação obtida e permitindo soluções parciais, contendo múltiplas classes possíveis. O método citado também prescreve uma distância de ponto a conjunto (para obter a distância de um elemento à classe) baseada na concatenação dos elementos da classe; neste trabalho, expomos outras distâncias de ponto a conjunto e de conjunto a conjunto possíveis.

Como parte desta exploração, tornou-se necessária uma nova implementação da DAMICORE, que foi denominada `damicorepy`. A implementação existente se vale de ferramentas de linha de comando existentes de difícil compatibilização, não tendo sido planejada para permitir o uso de componentes diferentes ou ser incorporada como uma biblioteca, por exemplo. Neste trabalho, a arquitetura da nova implementação foi realizada de modo a garantir:

- Modularidade, permitindo a substituição de componentes por outros métodos ou implementações, assim como o uso de componentes separadamente;
- Extensibilidade, permitindo a criação de novos módulos bastando apenas atender a interfaces comuns e simples;
- Compatibilidade, utilizando-se de formatos padrão de entrada/saída de dados, assim como permitindo interfacear com a implementação existente, se necessário;
- Manutenibilidade, utilizando-se de uma implementação legível, com testes, e seguindo boas práticas de desenvolvimento de software científico.

Uma nova implementação exige testes de validação de sua corretude, tanto em termos dos algoritmos que implementa quanto em sua efetividade ao realizar as tarefas de agrupamento e classificação propostas. Para isso, foram estudados e implementados métodos de validação externa, então aplicados para mensurar a efetividade da `damicorepy` sobre conjuntos de dados com organização conhecida.

A versatilidade de parâmetros da ferramenta encontra-se em oposição à elegância da implementação original, que mostra-se praticamente livre de configurações. Deste modo, foi buscado identificar a influência de cada conjunto de parâmetros sobre a efetividade do método, de modo a poder aconselhar analistas para uma configuração apropriada para o conjunto de dados sob análise, e tornar padrão algumas escolhas seguras.

## 1.3 Objetivos

Criar uma ferramenta computacional de fácil utilização para agrupamento e classificação de conjuntos de dados binários, implementando a metodologia DAMICORE. Como parte deste trabalho é necessário:

- Estudar em detalhes a técnica e suas etapas;
- Implementar corretamente a técnica;
- Realizar a validação da implementação e dos seus resultados em comparação com outras técnicas de aprendizado de máquina.
- Permitir a utilização de diferentes ferramentas em cada uma das etapas;
- Ser extensível e combinável com outras ferramentas, preferindo métodos padrão de entrada/saída de dados.
- Ser acessível a especialistas leigos em computação.

## 1.4 Organização

Esta dissertação está organizada da seguinte forma:

- O capítulo 2 apresenta o estudo da metodologia DAMICORE, com a revisão bibliográfica das técnicas empregadas: NCD, filogenética computacional, detecção de comunidades em grafos, técnicas de validação, e classificação.
- O capítulo 3 apresenta os principais desenvolvimentos teóricos e práticos propostos neste trabalho, incluindo um método novo para classificação.
- O capítulo 4 apresenta o desenvolvimento da ferramenta computacional, sua arquitetura e principais componentes desenvolvidas;
- O capítulo 5 apresenta experimentos realizados com a ferramenta, tanto para testar seu desempenho computacional, quanto na aplicação em conjuntos de dados diversificados;
- Por fim, o capítulo 6 realiza a avaliação do desenvolvimento, apresentando as contribuições do trabalho, aplicações esperadas e trabalhos que podem ser desenvolvidos sobre a ferramenta e técnicas desenvolvidas.

CAPÍTULO

# 2

# METODOLOGIA

Este capítulo expõe o embasamento teórico para a técnica DAMICORE para agrupamento de um conjunto de dados (SANCHES; CARDOSO; DELBEM, 2011). Tal técnica consiste em uma composição de ferramentas, inicialmente escolhidas pela compatibilidade de entradas e saídas.

1. Cálculo de uma matriz de distâncias entre as instâncias de um conjunto de dados binários, utilizando a métrica NCD com o compressor PPMd;

2. Transformação da matriz de distâncias em uma árvore binária sem raiz contendo as instâncias como folhas, onde os comprimentos das arestas indicam o grau de similaridade entre as instâncias;

3. Agrupamento hierárquico das instâncias de forma a obter uma partição do conjunto de dados original, obtida com a técnica de detecção de comunidades *Fast Newman*.

De fato, a técnica pode ser compreendida como um *framework* para quaisquer técnicas que sigam um fluxo de métrica-simplificação-agrupamento que possuam entradas e saídas compatíveis. Mansour utiliza métricas para comparação de genomas para o primeiro passo (MANSOUR, 2013); Soares adiciona uma etapa de combinação de árvores anterior ao agrupamento (SOARES, 2013); e Pinto utiliza três diferentes conjuntos de dados advindos da mesma fonte simultaneamente para obter uma classificação (PINTO, 2013).

O embasamento teórico de cada ferramenta é estudado e explorado nas seções deste capítulo:

- A seção 2.1 estuda a métrica NCD e sua base na Teoria da Informação, incluindo a exposição de algoritmos de compressão e suas implementações em compressores práticos, utilizadas e disponíveis na ferramenta computacional desenvolvida.

- A seção 2.2 estuda técnicas de simplificação para obtenção de uma árvore binária a partir de uma matriz de distâncias. O algoritmo de Junção de Vizinhos advindo para reconstrução filogenética é apresentado, assim como algumas outras alternativas derivadas da Filogenética e da área de Redes Complexas.
- A seção 2.3 expõe conceitos básicos sobre a área de Redes Complexas para a compreensão de técnicas de detecção de comunidades, incluindo o estudo da medida de modularidade de grafos e as técnicas mais populares, como *Fast Newman*.
- A seção 2.4 expõe brevemente algumas das técnicas de classificação básicas, cujas características inspiram a motivação para o método desenvolvido neste trabalho, baseado na DAMICORE.
- A seção 2.5 revisa as técnicas estatísticas utilizadas para testar a efetividade dos agrupamentos e classificações obtidos. São apresentados tanto métodos de validação externa, onde a classificação correta é conhecida, e testes de confiabilidade baseados no próprio conjunto de dados.

## 2.1 NCD

Na área de Aprendizado de Máquina, diversos métodos dependem da definição de uma **métrica** para fornecer a distância entre instâncias de dados. A escolha da métrica é um dos passos mais sensíveis ao desenvolver um algoritmo efetivo, dado que ela define como os elementos são similares/dissimilares entre si e irá impactar em como elementos são considerados "próximos" ou "distantes" ao obter agrupamentos e/ou classificar instâncias.

Uma métrica $D(x,y)$ é uma função que satisfaz as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned} D(x,x) &= 0 && \text{coincidência} \\ D(x,y) &= D(y,x) && \text{simetria} \\ D(x,y) &> 0, x \neq y && \text{positividade} \\ D(x,z) &\leq D(x,y) + D(y,z) && \text{desigualdade triangular} \end{aligned}$$

A escolha das métricas depende do tipo de atributos das instâncias de dados sob estudo. Alguns tipos de dados possuem métricas muito descritivas já definidas: vetores em $\mathbb{R}^n$ (com $n$ pequeno) podem utilizar a distância Euclidiana; cadeias de caracteres curtas podem ser comparadas com a distância de Levenshtein (ou distância de edição); e vetores de bits podem utilizar a distância de Hamming. Contudo, tipos de dados mais complexos, como linguagem natural ou imagens, podem exigir uma etapa de processamento para **extração de características**, onde as propriedades relevantes são obtidas e compõem um **vetor de características**. Tais vetores

pode então ser comparados com uma métrica simples. Linguagem natural, por exemplo, pode exigir uma sequência de procedimentos como remoção de pontuação, eliminação de *stop words* e radiciação até obter uma tabela de frequência de palavras que caracterize o texto dado.

Dado um conjunto de dados $D = \{d_1, d_2, \ldots, d_n\}$, a DAMICORE utiliza uma métrica para calcular a **matriz de distância** entre todas as instâncias.

O núcleo da DAMICORE depende da Distância de Compressão Normalizada (NCD, da sigla em inglês para *Normalized Compression Distance*) (LI *et al.*, 2004). Esta métrica é unica por não depender de uma representação estruturada dos dados, tal como tuplas ou pares de chave-valor, mas apenas em sua codificação binária. Esta sequência de bits, ou simplesmente **string**, é fornecida a um compressor de arquivos genérico para obter uma medida do seu conteúdo de informação. De fato, a NCD é uma família de métricas parametrizada pelo compressor escolhido $Z$, e depende essencialmente da sua capacidade em detectar similaridades que produzam uma distância significativa. Esta métrica é adequada para uma ampla variedade de tipos de dado com compressores eficientes já desenvolvidos, como linguagem natural, executáveis binários, sequências de genoma e proteoma, imagens de bitmap e mais (CILIBRASI; VITÁNYI, 2005).

As seções a seguir apresentam a teoria por trás da NCD, assim como alguns compressores que foram utilizados ao longo desta pesquisa.

### 2.1.1 Complexidade de Kolmogorov

A **complexidade de Kolmogorov** $K(x)$ de um objeto $x$, representado como uma *string*, é o comprimento da menor descrição deste objeto em uma linguagem universal fixada $L$, como uma linguagem de programação (C, Lisp, etc.) ou uma máquina de Turing universal (BENNETT *et al.*, 1998). Por exemplo, a expressão em Python `'ha'*5` descreve a string `hahahahaha`, e é possivelmente sua menor descrição com 6 bytes.

A escolha da linguagem importa apenas por um termo constante independente de $x$. Pela hipótese de Church-Turing, todas as linguagens Turing-completas são equivalentes em poder e podem simular umas às outras (MING; VITÁNYI, 1997). Se o menor programa na linguagem $L_1$ que computa $x$ possui comprimento $z$, é possível obter um programa curto em outra linguagem $L_2$ escrevendo um interpretador de $L_1$ de comprimento $I$, e então computar $x$ executando o interpretador com o programa original. O comprimento do programa mais curto em $L_2$ que computa $x$ é então limitado superiormente por $I + z$, onde $I$ é independente de $x$.

Kolmogorov propôs esta medida como uma definição de aleatoriedade que não dependesse em assumir uma distribuição de probabilidade para todas as *strings* possíveis. Posto de forma simples, uma *string* $x$ é dita **aleatória** se não existe nenhum programa que compute $x$ mais curto que a própria $x$, isto é, $K(x) \geq |x|$. Tal programa não seria muito maior que a própria *string*, com $K(x) = |x| + c$, onde $c \geq 0$ é uma constante independente de $x$ (MING; VITÁNYI, 1997). Por exemplo, a *string* `engzpoqalj` é representada pela expressão em Python `'engzpoqalj'`

com apenas 2 bytes extras para as aspas, e é provavelmente sua menor descrição nesta linguagem.

Podemos também definir a complexidade de se transformar uma *string* em outra pela **complexidade condicional** $K(x|y)$, que é o comprimento do menor programa que emite $x$ dado $y$ como entrada. Assim, $K(x) = K(x|\varepsilon)$, onde $\varepsilon$ é a *string* vazia. É intuitivo que $K(x|x) = \mathcal{O}(1)$. A **complexidade conjunta** $K(x,y)$ é o comprimento do menor programa que emite ambos $x$ e $y$: "emite ambos" significa "emite uma *string* que pode ser decodificada de forma inambígua em cada uma de suas *strings* componentes". Tal codificação pode ser obtida por uma função de pareamento $\langle x,y\rangle$ com inversas $\langle\cdot\rangle_1$ e $\langle\cdot\rangle_2$, tal que

$$\langle\langle x,y\rangle\rangle_1 = x$$
$$\langle\langle x,y\rangle\rangle_2 = y$$

Para uma dada função de pareamento fixada $\langle\cdot,\cdot\rangle$, a complexidade conjunta é então definida em termos da complexidade de Kolmogorov como $K(x,y) = K(\langle x,y\rangle)$. Um possível pareamento é $\langle x,y\rangle = l(x)xy$, onde $l(x)$ é uma codificação livre de prefixo do comprimento de $x$, e possui comprimento $\mathcal{O}(\log|x|)$. As inversas podem ser obtidas facilmente pela leitura de $l(x)$ e então: 1) ler este número de bits para obter $x$; ou 2) ignorar este número de bits e ler até o fim da *string* para obter $y$.

Um resultado muito útil fornece uma relação entre as complexidades condicional e conjunta de um par de *strings* (BENNETT *et al.*, 1998):

$$\begin{aligned} K(x,y) &= K(x) + K(y|\langle x,K(x)\rangle) + \mathcal{O}(1) \\ &= K(x) + K(y|x) + \mathcal{O}(\log(K(x,y))) \\ &= K(y) + K(x|y) + \mathcal{O}(\log(K(x,y))) \end{aligned}$$

Esta relação pode ser interpretada como segue: o menor programa que emite ambos $x$ e $y$ pode ser construído pela união do menor programa que emite $x$ (com comprimento $K(x)$) e o menor programa que transforma $x$ em $y$ (de comprimento $K(y|x)$). Este programa possui comprimento dentro de um termo logarítmico de $K(x)+K(y|x)$. É claro, $x$ e $y$ podem ser trocados na interpretação acima.

De agora em diante, iremos abusar da notação de igualdade para ignorar os termos de erro, escrevendo então $K(x,y) = K(x)+K(y|x)$ e $K(x|x) = 0$.

### 2.1.2 Distância de Informação Normalizada

Podemos utilizar a complexidade de Kolmogorov para obter uma métrica universal entre objetos quaisquer, desde que eles sejam representados de forma significativa como *strings*

binárias finitas. A complexidade condicional $K(x|y)$ já fornece uma medida da similaridades entre dois objetos: mesmo *strings* aleatórias podem ser similares o suficiente tal que um programa curto possa transformar uma na outra. Contudo, ela não é uma métrica pois, em geral, $K(x|y) \neq K(y|x)$, não satisfazendo a propriedade de simetria.

Definimos a **distância de informação** $E(x,y)$ como o comprimento do menor programa que pode transformar entre $x$ e $y$. Um resultado de Bennett *et al.* (1998) é que, dentro de um termo logarítmico, o comprimento do programa pode ser dado pela Equação 2.1:

$$\begin{aligned} E(x,y) &= \max\{K(y|x), K(x|y)\} \\ &= \max\{K(x,y) - K(x), K(x,y) - K(y)\} \\ &= K(x,y) - \min\{K(x), K(y)\} \end{aligned} \tag{2.1}$$

A distância de informação é absoluta, no sentido de que possui uma unidade em bits (comprimento do programa). Para detecção de similaridades, contudo, é mais desejável uma distância relativa ao comprimento (ou complexidade) das *strings* comparadas. Se existe um programa de 100 bytes que converte entre duas *strings* aleatórias de 10,000 bytes, estas são mais similares do que duas *strings* aleatórias de 1,000 bytes separadas pela mesma distância. A **distância de informação normalizada** (NID, da sigla em inglês para *Normalized Information Distance*), dada na Equação 2.2, também chamada **métrica de similaridade**, fornece esta distinção (LI *et al.*, 2004).

$$\begin{aligned} \mathrm{NID}(x,y) &= \frac{\max\{K(x|y), K(y|x)\}}{\max\{K(x), K(y)\}} \\ &= \frac{K(x,y) - \min\{K(x), K(y)\}}{\max\{K(x), K(y)\}} \end{aligned} \tag{2.2}$$

Esta métrica está limitada ao intervalo $[0,1]$ (daí, normalizada), onde $\mathrm{NID}(x,x) = 0$ e $\mathrm{NID}(x,y) = 1 \Leftrightarrow K(x,y) = K(x) + K(y)$. O segundo caso ocorre se $K(y|x) = K(y)$ e $K(x|y) = K(x)$, isto é, não existe nenhuma informação algorítmica mútua entre elas tal que prover uma de entrada para um programa que emite a outra é equivalente a prover a *string* vazia $\varepsilon$.

### 2.1.3 Distância de Compressão Normalizada

A complexidade de Kolmogorov é, infelimente, incomputável. Suponha que exista um programa $C(x)$ de tamanho $M$ que emite a complexidade de Kolmogorov de qualquer *string* $x$. Podemos escrever um programa curto de tamanho $N$ que implementa o seguinte algoritmo:

Este algoritmo com certeza termina, já que sempre existe uma *string* com complexidade de Kolmogorov maior do que qualquer número dado[1] (especificamente, $M+N$). Contudo, nós

```
Lista ordenada lexicograficamente de todas as strings binárias
B_∞ ← {ε, 0, 1, 00, 01, 10, 11, 000, ...}
for x ∈ B_∞ do
    if C(x) > M + N then
        return x
```

acabamos de descrever um programa que computa uma *string* com complexidade maior do que o comprimento do próprio programa. Isto é uma contradição, e portanto nossa hipótese inicial de que existe tal programa para computar a complexidade de Kolmogorov deve ser falsa.

A busca por um programa $z$ que produza uma dada *string* $x$, de tal modo que $|z| < |x|$, está fadada ao fracasso para *strings* arbitrárias, não apenas pela maioria das *strings* serem aleatórias como pela tarefa ser incomputável. Contudo, a maior parte das *strings* que nos interessam possuem significados que as colocam longe da aleatoriedade: texto, imagens, vídeo e música são criadas por processos que podem ser compreendidos e modelados, que podem então ser utilizados para escrever programas que emitem a representação condensada dos dados. Esta é a arte da **compressão de dados**.

Seja $B_\infty$ o conjunto de todas as *strings* binárias, e $P \subset B_\infty$ o conjunto de todos os programas possíveis em uma linguagem fixada $L$. Um compressor sem perdas $Z : B_\infty \mapsto P$ é uma função bijetiva que emite o programa $z$ em $L$ que descreve $x$; o descompressor $Z^{-1} : P \mapsto B_\infty$ é simplesmente um interpretador desta linguagem. Note que compressores práticos não utilizam uma linguagem universal, uma vez que isto poderia resultar em não-terminação ao descomprimir *strings* arbitrárias.

Na prática, deseja-se que o compressor seja capaz de emitir uma descrição mais curta do que a própria *string*, isto é, $|Z(x)| < |x|$. O comprimento da saída oferece um limitante superior computável para a complexidade de Kolmogorov de uma *string*. Então, define-se a **distância de compressão normalizada** ($\mathrm{NCD}_Z$, da sigla em inglês para *Normalized Compression Distance*) substituindo $K(x)$ por $|Z(x)|$ na Equação 2.2.

$$\mathrm{NCD}_Z(x,y) = \frac{|Z(\langle x,y\rangle)| - \min\{|Z(x)|,|Z(y)|\}}{\max\{|Z(x)|,|Z(y)|\}} \tag{2.3}$$

A qualidade desta aproximação depende fortemente da taxa de compressão do compressor, que por sua vez depende do tipo de dados em que o compressor é efetivo. Isto também depende da função de pareamento empregada para "unir" duas instâncias de dados distintas, em geral empregando-se uma simples concatenação. Um método original de pareamento será exposto na Seção 3.1.

[1] De outro modo, se existisse uma complexidade de Kolmogorov máxima $K$, existiriam no máximo $2^{(K+1)} - 1$ programas possíveis para gerar uma infinitude de *strings*.

### 2.1.4 Compressores

Esta seção estuda os diferentes compressores utilizados neste trabalho. O compressor escolhido pode ser o passo mais sensível ao se utilizar a NCD, uma vez que ele é o responsável por detectar padrões que possam ser descritos de forma compacta. Todos os compressores utilizados são sem perdas, para melhor aproximar a formulação teórica da NID; contudo, compressores com perdas, como os utilizados para codificação MP3 ou JPEG, podem também ser utilizados com sucesso (QUISPE-AYALA; ASALDE-ALVAREZ; ROMAN-GONZALEZ, 2010).

#### 2.1.4.1 Codificação

Seja $S$ o conjunto dos símbolos (ou **alfabeto**) com os quais podemos construir uma mensagem. Como desejamos codificar esta mensagem em binário, precisamos mapear cada símbolo para uma sequência de bits. Sem informações adicionais sobre a natureza da mensagem, podemos escolher um código de tamanho fixo grande o suficiente para codificar todos os símbolos - por exemplo, o código ASCII atribui todas as letras maiúsculas e minúsculas em inglês, números e pontuação para palavras de 7 bits. Com o conhecimento da distribuição de probabilidades $P(S)$ de todos os símbolos $s \in S$, podemos usar um código de tamanho variável para atribuir palavras curtas aos símbolos mais frequentes, e palavras longas para símbolos infrequentes.

Seja $S_n$ o alfabeto criado ao combinar $n$ símbolos de $S$ em uma palavra, isto é:

$$S_n = \begin{cases} S & \text{se } n = 1 \\ S \times S_{n-1} & \text{se } n > 1 \end{cases}$$

Logo $B = \{0,1\}$, $B_2 = \{00,01,10,11\}$, $B_3 = \{000,001,010,011,100,101,110,111\}$ e $B_\infty$ é o conjunto de todas as possíveis mensagens binárias. A **entropia** $H_n$ de uma mensagem é o número ótimo de bits por símbolo que pode ser alcançado por qualquer código utilizando estes símbolos, dada pela Equação 2.4 (AUGERI *et al.*, 2007).

$$H_n = -\frac{1}{n} \sum_{s \in S_n} P(s) \log_2 P(s) \tag{2.4}$$

A distribuição de probabilidades pode ser obtida com antecedência, mas a maioria dos compressores a obtém da própria mensagem, analisando a frequência relativa dos símbolos. A entropia verdadeira, $H = H_\infty$, corresponde a um modelo com conhecimento perfeito de todas as mensagens possíveis, e a compressão máxima alcançável pelo codificador.

A **codificação de Huffman** é um mapeamento ótimo de símbolos para palavras de código, apesar de restrita a utilizar pelo menos 1 bit por símbolo. Isto se mostra sub-ótimo para mensagens onde a frequência de um dado símbolo é muito desigual: por exemplo, se temos um alfabeto $\Gamma = \{a,b\}$ com 90% de frequência para $a$ e 10% para $b$, precisamos de pelo menos 1 bit/símbolo com a codificação de Huffman, embora a entropia de tais mensagens seja de 0.469

Tabela 1 – Codificação de Huffman para alfabetos de maior ordem

| | $\Gamma$ | $\Gamma_2$ | $\Gamma_3$ |
|---|---|---|---|
| Código | $\begin{cases} a: & 0 \\ b: & 1 \end{cases}$ | $\begin{cases} aa: & 0 \\ ab: & 10 \\ ba: & 110 \\ bb: & 111 \end{cases}$ | $\begin{cases} aaa: & 0 \\ aab: & 100 \\ aba: & 101 \\ aab: & 110 \\ abb: & 11100 \\ bab: & 11101 \\ bba: & 11110 \\ bbb: & 11111 \end{cases}$ |
| Bits/símbolo | 1 | 1.29 | 1.598 |
| Bits/letra | 1 | 0.645 | 0.533 |

bits/símbolo. Esta limitação pode ser minimizada ao utilizar combinações de símbolos para modelar alfabetos de ordem mais alta, como mostrado na Tabela 1.

A **codificação de sequências** (RLE, do inglês para *Run-Length Encoding*) codifica sequências longas de símbolos repetidos em um par símbolo-comprimento. Por exemplo, a *string* 'aaaaabbbababba' seria codificada como '(a,5)(b,2)aba(b,2)a'. Para isso é necessário incluir símbolos adicionais para codificar um par, o que pode acarretar em um incremento no tamanho da mensagem. A ocorrência de sequências repetidas é comum em alguns tipos de dados, como figuras *bitmap*, mas sua principal utilização é como um passo intermediário em outros compressores, como bzip2.

A **codificação mover-pra-frente** é uma simples transformação intermediária que melhora a taxa de compressão da codificação RLE. Esta codificação mantém os símbolos em uma tabela e emite seus índices ao invés do símbolo em si; após um símbolo ser utilizado, ele é movido para a frente da tabela. Deste modo, toda repetição consiste em uma longa lista de zeros e símbolos frequentes recebem índices pequenos. Isto torna a distribuição de probabilidades mais enviesada para números pequenos, favorecendo métodos de codificação de entropia como a codificação de Huffman.

A **codificação aritmética** é uma abordagem diferente para a codificação de entropia, buscando codificar a "posição" de uma *string* na linha dos números reais: cada *string* recebe um intervalo entre 0 e 1 proporcional à sua probabilidade de ocorrência, e a codificação consiste em emitir um número deste intervalo com precisão suficiente. *Strings* mais prováveis requerem menor precisão, e portanto são necessários menos bits para codificar o número. Seu principal atrativo é não estar limitada a 1 bit/símbolo como a codificação de Huffman.

#### 2.1.4.2 Compressores práticos

**gzip** é um compressor baseado em dicionários que internamente utiliza a biblioteca `zlib`, que por sua vez é baseada no algoritmo LZ77 (ZIV; LEMPEL, 1977; DEUTSCH; GAILLY, 1996). Ao percorrer uma *string* de bytes, o algoritmo busca por ocorrências prévias dos bytes seguintes. Ao encontrar um padrão repetido, uma referência como "copie os *n* bytes ocorridos *m* bytes atrás" é emitida; do contrário, os bytes sem compressão são emitidos. A saída está ilustrada na Figura 1. Uma restrição adicional presente na biblioteca `zlib` impõe um limite máximo de 32 KiB para o *offset*, correspondente a uma janela deslizante durante a leitura da *string*. O compressor gzip é rápido e amplamente utilizado como parte do protocolo HTTP e para compressão de arquivos de texto.

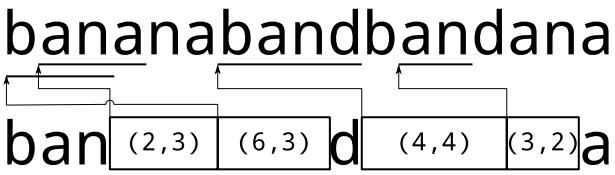



Figura 1 – Exemplo simplificado da saída do algoritmo LZ77. Sequências repetidas são representadas por uma referência dada por um par (*offset*, comprimento). A etapa de compressão exige realizar uma busca reversa pela ocorrência dos bytes seguintes, cuja eficiência pode ser configurada.

**bzip2** é um compressor de ordenação de contexto, construído sobre a transformada de Burrows- Wheeler, e internamente utiliza a biblioteca `bz2` (SEWARD, 1996; BURROWS; WHEELER, 1994). Esta transformada ordena todas as rotações de uma dada *string* de bytes e emite o último byte de cada rotação, ou o byte anterior ao início da rotação, como ilustrado na Tabela 2.

Com isso, contextos similares ficam próximos ao serem ordenados, e o byte anterior destes também devem ser similares. Por exemplo, em português, a sequência "que " é muito comum; dada uma rotação que se inicia com "ue ", quase sempre ela será precedida pela letra "q". Tais rotações estariam próximas quando ordenadas, de modo que a transformada conteria uma longa sequência da letra "q". A *string* transformada pode ser codificada de forma eficiente pelas codificações RLE e mover-para-frente, dado que contém longas sequências de símbolos repetidos. A biblioteca `bz2` comprime em blocos, cujos tamanhos podem ser configurados entre 100 KiB a 900 KiB. O compressor bzip2 é apropriado para grandes arquivos e tem bom desempenho em textos de linguagem natural, possuindo melhor performance para descompressão do que compressão.

O compressor **PPMd** utiliza um modelo de cadeias de Markov dinâmicas para predizer a ocorrência de cada byte à medida que percorre a *string* (SHKARIN, 2010). O tamanho máximo do contexto da cadeia pode ser configurado entre 2 e 16 bytes. Um exemplo de atualização dinâmica de um modelo de ordem 2 está ilustrada na Figura 2. O compressor emite a probabilidade de ocorrência de um byte após um dado contexto, que é obtida contando quantas vezes o byte já ocorreu após este contexto. A sequência de probabilidades é então codificada utilizando

Tabela 2 – Exemplo da transformada de Burrows-Wheeler da *string* 'bananabandbandana'. Também é necessário retornar o índice da primeira rotação, já que todas as rotações possuem a mesma transformada.

| bananabandbandana | | | |
|---|---|---|---|
| Rotações | | Ordenação | |
| 0 | bananabandbandana | 16 | abananabandbanda**n** |
| 1 | ananabandbandanab | 5 | abandbandanabana**n** |
| 2 | nanabandbandanaba | 14 | anabananabandban**d** |
| 3 | anabandbandanaban | 3 | anabandbandanaba**n** |
| 4 | nabandbandanabana | 1 | ananabandbandana**b** |
| 5 | abandbandanabanan | 11 | andanabananaband**b** |
| 6 | bandbandanabanana | 7 | andbandanabanana**b** |
| 7 | andbandanabananab | 0 | bananabandbandan**a** |
| 8 | ndbandanabananaba | 10 | bandanabananaban**d** |
| 9 | dbandanabananaban | 6 | bandbandanabanan**a** |
| 10 | bandanabananaband | 13 | danabananabandba**n** |
| 11 | andanabananabandb | 9 | dbandanabananaba**n** |
| 12 | ndanabananabandba | 15 | nabananabandband**a** |
| 13 | danabananabandban | 4 | nabandbandanaban**a** |
| 14 | anabananabandband | 2 | nanabandbandanab**a** |
| 15 | nabananabandbanda | 12 | ndanabananabandb**a** |
| 16 | abananabandbandan | 8 | ndbandanabananab**a** |
| transformada: nndnbbbadannaaaaa, primeiro índice: 16 | | | |

codificação aritmética. Este compressor é adequado para compressão de textos, e não muito eficiente para dados analógicos digitais, como som e imagens.

**PAQ8** é um compressor de mistura de contextos que mantém simultaneamente diversos modelos para predizer os bytes seguintes (MAHONEY, 2006). A verdadeira predição é uma combinação de todas as predições ponderadas pelo seu desempenho anterior, e o algoritmo emite a sequência de probabilidades em codificação aritmética como o PPMd. Isto torna o compressor muito bem sucedido em uma ampla gama de tipos de dados, já que ele simultaneamente executa modelos para ilustrações, imagens, texto, binários executáveis e mesmo tipos de arquivo especializados como JPEG. Contudo, com isso ele sofre uma degradação de desempenho considerável, sendo ordens de magnitude mais lento que outros compressores mais práticos.

## 2.2 Simplificação - *Neighbor Joining*

A matriz de distâncias pode ser vista como um grafo completo entre os nós, com as distâncias representando uma relação presente nas arestas. O passo de simplificação é utilizado para resumir esta informação completa e obter uma rede complexa que destaca a informação latente nas relações. Existem diversos métodos para isto, sendo os mais comuns:

- **Limiarização**: Remove todas as arestas cuja distância está acima de um limiar $\theta$. Este método pode resultar em um grafo desconexo.

- **kNN**: Para cada elemento, mantém as arestas para seus $k$ vizinhos mais próximos. Este método possui o benefício de sempre fornecer um grafo conexo, embora em geral com uma distribuição de graus exponencial com grau mínimo $k$, o que nem sempre caracteriza bem as relações subjacentes.

Existem diversas variantes destes métodos, como ignorar as distâncias para obter um grafo não-direcionado simples, ou utilizar uma função de base radial para remover pesos insignificantes. A maioria destes métodos requer a seleção de um parâmetro apropriado, como $\theta$ ou $k$ acima, que pode ser obtido *ad-hoc* a partir da distribuição de distâncias, ou determinado por um especialista. Neste trabalho, utilizamos um método livre de parâmetros derivado da Filogenética, que constroi uma árvore a partir da matriz de distâncias fornecida.

### 2.2.1 Reconstrução filogenética

A Teoria da Evolução, proposta independentemente por Charles Darwin e Alfred Wallace (DARWIN, 1859; DARWIN; WALLACE, 1858), prescreve uma história evolucionária para todas as espécies vivas, como descrito por Amorim (AMORIM, 2002):

> Quaisquer duas espécies possuem um ancestral comum. Quaisquer três espécies no presente ou surgiram simultaneamente de um ancestral comum, ou duas delas compartilham um ancestral não comum à terceira. Aplicando este pensamento para

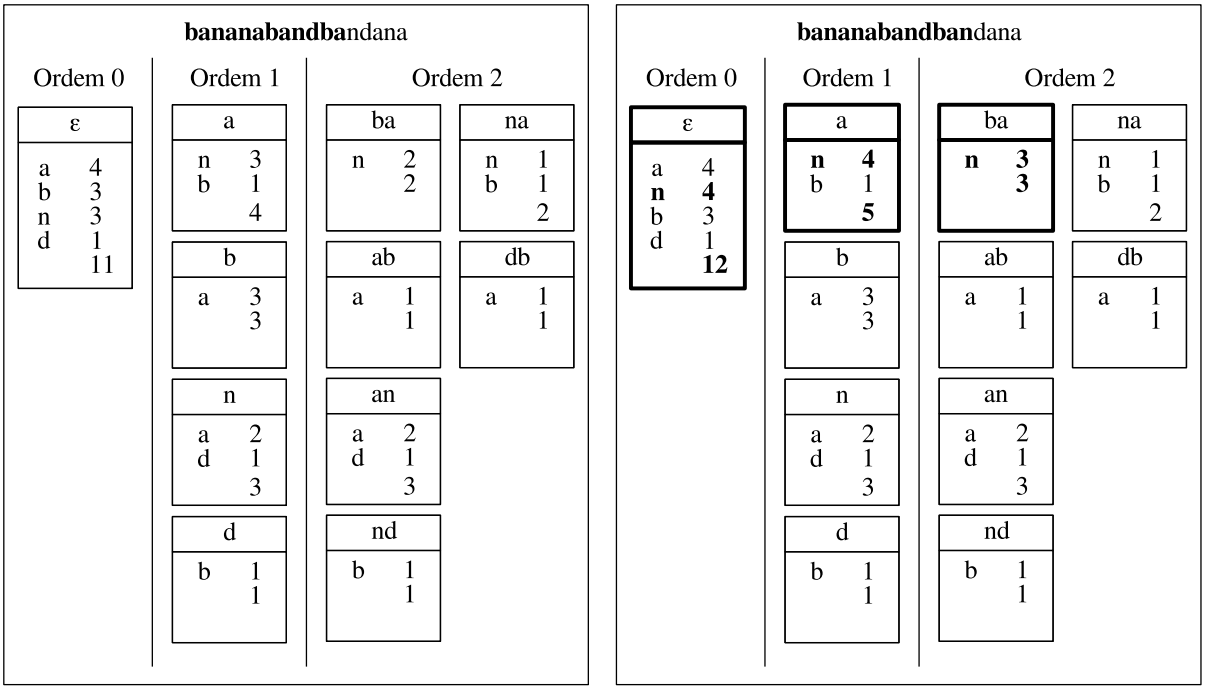



Figura 2 – Exemplo de atualização de modelo no compressor PPMd: após ler a *string* 'bananabandba', o byte 'n' é encontrado, e os contextos para '', 'a' e 'ba' são incrementados em 1 para o byte 'n'. A atualização de fato é mais complexa, pois também considera a inclusão de símbolos de escape para quando um símbolo ainda não presente na tabela é encontrado.

> todas as espécies, obtemos um imagem de uma sequência gigantesca de divisões que fragmentaram de uma única espécie ancestral - ancestral de todos os seres vivos - até as espécies atuais (assumindo que a vida na Terra se originou uma única vez).

Outro conceito chave é o de **caracteres homólogos**, isto é, caracteres encontrados em duas espécies que estavam presentes em seu ancestral comum. Quanto mais recente é um ancestral comum, mais características compartilhadas são homólogas. Isto fornece uma maneira de se comparar duas espécies e prover uma distância entre elas.

A Filogenética se preocupa em reconstruir a árvore evolucionária, isto é, a **filogenia** de um grupo de espécies, dado uma distância entre elas. Tais distâncias podem ser obtidas por uma variedade de métodos, como comparação de sequências moleculares (por exemplo, alinhamento de sequências de DNA) e comparação de caracteres morfológicos. Como métodos de filogenia apenas requerem uma matriz de distâncias e não em como ela é obtida, eles são adequados para os propósitos do passo de simplificação da DAMICORE.

Um aspecto desafiador em filogenética é que caracteres podem ter se originado múltiplas vezes durante a história evolutiva. Como espécies próximas possuem as mesmas estruturas comuns e estão, na maioria das vezes, sob as mesmas pressões ambientais, é comum que evoluam a mesma adaptação.

Finalmente, simplificar uma matriz de distâncias para uma árvore evolutiva inclui a suposição que os dados podem ser descritos por um processo onde instâncias de dados diferentes são transformações de um ancestral comum. Em alguns casos, a história de uma instância inclui ancestrais diferentes. Por exemplo, a língua inglesa possui um ancestral comum com o Alemão, mas também contém em seu vocabulário diversos termos latinos derivados do Francês (*see* e *view* possuem o mesmo significado mas origens diferentes). A riqueza das influências cruzadas pode ser perdida ao se simplificar em uma única árvore.

### 2.2.2 Filogenética computacional

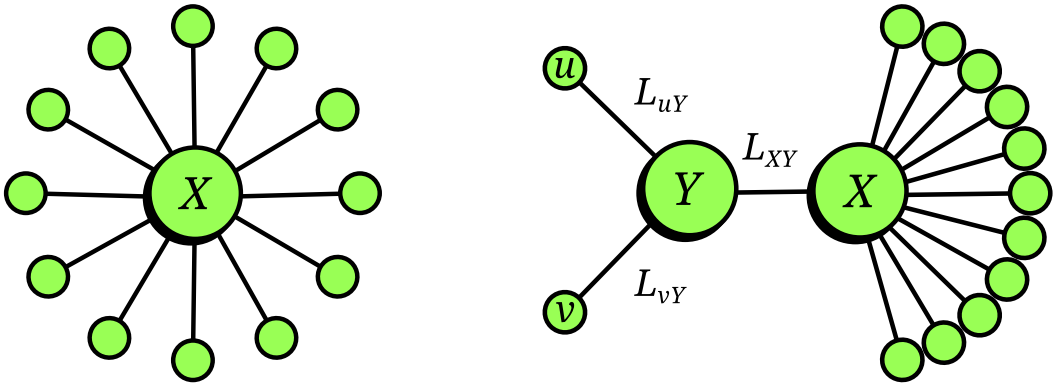
O objetivo da filogenética computacional é prover uma árvore evolutiva $\mathscr{T}$ para um dado conjunto de $n$ táxons, onde a distância $M_{ij}$ entre táxons $i$ e $j$ é conhecida. $\mathscr{T}$ é uma árvore ponderada sem raiz, cujos pesos de aresta representam a distância de um táxon para seu ancestral. Ela possui $n$ folhas, correspondente aos táxons. Cada nó interno representa o ancestral comum mais recente entre seus filhos; se a árvore for binária, existem $n-2$ ancestrais.

Para escolher uma filogenia para um conjunto de táxons, precisamos ser capazes de comparar árvores e decidir qual é melhor. O princípio da **máxima parcimônia** determina que dentre duas árvores, é preferível aquela que supõe o menor número de modificações de cada ancestral para seus descendentes. Isto é similar à navalha de Occam, que escolhe a explicação mais simples entre duas igualmente poderosas. Se as mudanças entre ancestrais e descendentes é

mensurada pelo comprimento de aresta, este princípio é equivalente a minimizar a soma total dos comprimentos da árvore.

Simplesmente enumerar todas as árvores possíveis e compará-las é inviável exceto para conjuntos muito pequenos de dados, já que o número de árvores com $n$ folhas cresce super-exponencialmente com $n$ [2]. Métodos filogenéticos precisam confiar em heurísticas para buscar o espaço de árvores, preferencialmente evitando hipóteses não promissoras. Os algoritmos mais avançados, como MrBayes (RONQUIST; HUELSENBECK, 2003), realizam mutações em uma árvore para explorar o espaço e encontrar árvores que sejam mais parcimoniosas. Estes métodos são muito caros computationalmente, e precisam de um passo inicial bom para serem bem sucedidos.

O método de **junção de vizinhos** (NJ, do inglês para *Neighbor Joining*) é um algoritmo que busca minimizar a soma total de comprimentos de aresta com uma abordagem *bottom-up* gulosa (SAITOU; NEI, 1987). Este método encontra a árvore mais parcimoniosa se assumirmos que a métrica entre elementos é aditiva - isto é, $M_{ij} + M_{jk} = M_{ik}$. Neste trabalho, buscando compreender totalmente seu mecanismo, foram demonstradas as passagens do algoritmo que são apresentadas a seguir.




(a) Árvore inicial (b) Árvore após junção de vizinhos

Figura 3 – Exemplo de iteração do NJ

No estado inicial, assumimos que todos os $n$ táxons possuem um único ancestral comum $X$, ilustrado na Figura 3a. Seja $L_{iX}$ a distância entre os táxons $i$ e $X$, e $M_{ij} = L_{iX} + L_{jX}$ a distância entre táxons $i$ e $j$ dada na matriz de distâncias $M$ (onde, especialmente, $M_{ii} = L_{iX} - L_{iX} = 0$). A soma total de comprimento de arestas $S^n$ nesta árvore é dada por

$$S^n = \sum_i L_{iX} \tag{2.5}$$

[2] Especificamente, existem $(2n-5)!! = \frac{(2n-4)!}{2^n(n-2)!}$ árvores binárias sem raiz com $n$ folhas, o que é aproximadamente $(0.74(n-2))^{n-2}$.

Somando todas as entradas na matriz de distâncias, deduzimos uma relação entre $M$ e $S^n$:

$$\begin{aligned}\sum_{ij} M_{ij} &= \sum_i \sum_{j\neq i} (L_{iX} + L_{jX}) \\ &= \sum_i \left( \sum_j (L_{iX} + L_{jX}) - 2L_{iX} \right) \\ &= \sum_{ij} L_{iX} + \sum_{ij} L_{jX} - \sum_i 2L_{iX} \\ &= 2n \sum_i L_{iX} - 2\sum_i L_{iX} \\ &= 2(n-1)\sum_i L_{iX} = 2(n-1)S^n \end{aligned} \tag{2.6}$$

Agora, suponha que juntamos os táxons $u$ e $v$ sob um ancestral comum mais recente $Y$, obtendo a árvore na Figura 3b. Neste caso, a soma total dos comprimentos de aresta $S_{uv}^{n-1}$ nesta árvore é dada por

$$S_{uv}^{n-1} = \sum_{i\neq u,v} L_{iX} + L_{XY} + (L_{uY} + L_{vY}) \tag{2.7}$$

$$\Rightarrow L_{XY} = S_{uv}^{n-1} - \sum_{i\neq u,v} L_{iX} - (L_{uY} + L_{vY}) \tag{2.8}$$

Desejamos obter uma relação entre $M$ e $S_{uv}^{n-1}$. Considere a soma das entradas nas linhas $u$ e $v$:

$$M_{iu} = L_{iX} + L_{XY} + L_{uY}, i \notin \{u,v\} \tag{2.9}$$

$$M_{iv} = L_{iX} + L_{XY} + L_{vY}, i \notin \{u,v\} \tag{2.10}$$

$$\begin{aligned} M_{iu} + M_{iv} &= 2L_{iX} + 2L_{XY} + (L_{uY} + L_{vY}), i \notin \{u,v\} \\ \sum_{i\neq u,v} (M_{iu} + M_{iv}) &= 2\sum_{i\neq u,v} L_{iX} + 2(n-2)L_{XY} + (n-2)(L_{uY} + L_{vY}) \end{aligned} \tag{2.11}$$

Substituindo a equação 2.8 na equação 2.11, obtemos:

$$\sum_{i\neq u,v} (M_{iu} + M_{iv}) = 2(n-2)S_{uv}^{n-1} - 2(n-3)\sum_{i\neq u,v} L_{iX} - (n-2)(L_{uY} + L_{vY}) \tag{2.12}$$

Da equação 2.6, obtemos que $2(n-3)\sum_{i\neq u,v} L_{iX} = \sum_{i,j\neq u,v} M_{ij}$. Também, da propriedade aditiva, $L_{uY} + L_{vY} = M_{uv}$. Substituindo estes na equação 2.12 e rearranjando, obtemos a relação desejada:

$$
\begin{aligned}
S_{uv}^{n-1} &= \frac{1}{2(n-2)} \sum_{i,j \neq u,v} M_{ij} + \frac{1}{2(n-2)} \sum_{i \neq u,v} (M_{iu} + M_{iv}) + \frac{1}{2} M_{uv} \\
&= \frac{1}{2(n-2)} \sum_{i \neq u,v} \sum_{j} M_{ij} + \frac{1}{2} M_{uv} \\
&= \frac{1}{2(n-2)} \left( \sum_{ij} M_{ij} - \sum_{i} M_{iu} - \sum_{i} M_{iv} \right) + \frac{1}{2} M_{uv} \qquad (2.13)
\end{aligned}
$$

Deseja-se, então, escolher o par $u$-$v$ que minimiza a nova soma total das arestas $S_{uv}^{n-1}$. Não é necessário calcular esta soma diretamente, pois o problema de otimização $\min S_{uv}^{n-1}$ é equivalente a

$$
\begin{aligned}
\min Q_{uv} &= 2(n-2) S_{uv}^{n-1} - \sum_{ij} M_{ij} \qquad (2.14) \\
&= (n-2) M_{uv} - \sum_{i} M_{iu} - \sum_{i} M_{iv} \qquad (2.15)
\end{aligned}
$$

que requer menos operações. Testando todos os pares, encontra-se aquele que minimiza $Q_{uv}$, chamados **vizinhos mais próximos**. O método então os une de forma gulosa sob um mesmo ancestral, e repete recursivamente o procedimento para a árvore com todos os descendentes de $X$, que agora contém $Y$ mas não $u$ e $v$. O algoritmo pára quando restarem apenas dois nós, que são então conectados diretamente.

Para cada iteração, é necessário atualizar a matriz de distância para conter as distâncias de todos os outros nós a $Y$, dadas por

$$
M_{iY} = \frac{1}{2}(M_{iu} + M_{iv} - M_{uv}), i \notin \{u, v\} \qquad (2.16)
$$

Para a construção da árvore, deseja-se os comprimentos das arestas $uY$ e $vY$. Subtraindo as equações 2.9 e 2.10, e da relação $L_{vY} = L_{uY} - M_{uv}$, obtém-se o comprimento $L_{uY}$ como segue:

$$
\begin{aligned}
M_{iu} - M_{iv} &= L_{uY} - L_{vY}, \forall i \notin \{u, v\} \\
\sum_{i \neq u,v} (M_{iu} - M_{iv}) &= (n-2)(L_{uY} - L_{vY}) \\
\sum_{i \neq u,v} (M_{iu} - M_{iv}) &= (n-2)(2L_{uY} - M_{uv}) \\
L_{uY} &= \frac{1}{2} M_{uv} + \frac{1}{2(n-2)} \sum_{i \neq u,v} (M_{iu} - M_{iv}) \qquad (2.17)
\end{aligned}
$$

Realiza-se uma derivação similar para obter $L_{vY}$:

$$
L_{vY} = \frac{1}{2} M_{uv} + \frac{1}{2(n-2)} \sum_{i \neq u,v} (M_{iv} - M_{iu}) \qquad (2.18)
$$

Mesmo sendo relativamente simples, este algoritmo alcança boas topologias de árvore, com soma total de comprimentos de aresta próxima daquelas encontradas por algoritmos de máxima parcimônia. Ainda, o cálculo de $Q$ a cada iteração é um problema **embaraçosamente paralelo**, já que cada $Q_{uv}$ pode ser calculado de forma independente, permitindo implementações muito eficientes.

## 2.3 Detecção de comunidades[3]

**Grafos** ou **redes** são uma representação de relacionamentos entre objetos. Cada objeto é representado por um nó ou vértice e sua relação com outro objeto por uma aresta que os conecta. Apesar de ser uma transformação muito simples e crua, ela pode fornecer informações preciosas sobre a função e estrutura de um sistema, e análises de grafos encontraram aplicações em uma diversidade de áreas como biologia, sociologia, telecomunicações e engenharia de computação. Ainda mais interessante é a ocorrência de polinização cruzada entre áreas tão distintas, com as técnicas desenvolvidas em uma sendo utilizadas para compreender redes em outra.

Nas últimas décadas, avanços na computação permitiram obter e analisar redes muito maiores que antes, com milhões ou mesmo bilhões de nós. Ainda mais, foi descoberto que redes com origens diferentes compartilham características inesperadas em comum, o que nos leva a crer que existem leis universais sobre como sistemas complexos se organizam. Os desafios que esta mudança impôs criaram uma nova disciplina chamada de **Redes Complexas** ou **Ciência das Redes**, que busca compreender e caracterizar a grande quantidade de redes de mundo real e seus sistemas subjacentes.

Dentre as características em comum, se descobriu que as redes reais estão longe de serem homogêneas, o que seria esperado caso as conexões entre elementos ocorressem tanto de forma aleatória, como de forma estruturada. A distribuição de graus, isto é, a distribuição de arestas entre os vértices, é em geral muito larga, com muitos vértices com poucas arestas e poucos vértices com muitas, muitas arestas. A distribuição de arestas é também localmente não-homogênea, com uma grande concentração de arestas contidas em certos grupos de vértices e menos arestas ocorrendo entre estes grupos. Esta característica é chamada **estrutura de comunidade**, **estrutura modular** ou **agrupamento**. Um exemplo de um grafo com estrutura de comunidade é ilustrado na Figura 4.

A ocorrência de comunidades é conhecida e estudada dentro da sociologia por um longo período, e o pequeno tamanho das redes sob estudo muitas vezes exigiam apenas um olho vivo para detectar este tipo de organização. Com redes maiores, contudo, o problema de **detecção de comunidades** (também chamado de **agrupamento de grafos** ou **partição de grafos**) se torna mais difícil, pois o próprio conceito de comunidade não é bem definido. A ocorrência

[3] Esta seção é baseada na excelente introdução da revisão sobre detecção de comunidades de Fortunato (2010).

de estruturas hierárquicas, aleatoriedade parcial e sobreposição entre comunidades traz mais desafios para esta área de pesquisa sob desenvolvimento constante.

Diversas redes de mundo real com propriedades modulares possuem uma explicação subjacente para o fenômeno, como tendências de formação de "panelinhas" em redes sociais ou uma estrutura hierárquica imposta em uma empresa, por exemplo. Nas redes sintéticas geradas neste trabalho, a detecção de comunidades pode ser entendida como um método de **agrupamento de dados** onde as relações de vizinhança são comprimidas e simplificadas em um grafo. Desde que exista um agrupamento real no conjunto de dados subjacente, e o processo de simplificação traduza esta informação fielmente na rede, espera-se que os métodos existentes encontrarão os grupos como comunidades.

### 2.3.1 Definições básicas

Um **grafo** ou **rede** $G(V,E)$ é uma tupla de $n$ vértices e $m$ arestas, onde os vértices $v \in V$ são objetos do domínio sob estudo e as arestas $e_{ij} = (v_i, v_j)$ representam relações entre objetos. Quando as arestas não são ordenadas diz-se que o grafo é **não-direcionado**, onde as relações são simétricas. Quando as relações não são simétricas, diz-se que as arestas são ordenadas e o grafo é **direcionado**. Um exemplo do primeiro caso é a Internet, onde as conexões entre roteadores é bidirecional; e um exemplo do segundo é a **World Wide Web**, onde os links entre páginas não são, em geral, recíprocos. Uma representação usual de grafos é como uma **matriz de adjacência** $A \in \mathbb{B}^{n\times n}$, onde $A_{ij} = 1$ se existe uma aresta entre os vértices $v_i$ e $v_j$, e 0 caso contrário.

O **grau** $k_i$ de um vértice $v_i$ é o número de arestas que contém este vértice. Em grafos direcionados é necessário distinguir entre o grau de entrada $k_i^{\text{in}}$ e o grau de saída $k_i^{\text{out}}$, respectivamente, o número de arestas entrando ou saindo do vértice. O **grau médio** $\langle k \rangle$ de um grafo é o número médio de arestas por vértice. Se $\langle k \rangle = \mathcal{O}(1)$ diz-se que o grafo é **esparso**, enquanto se $\langle k \rangle = \mathcal{O}(n)$ diz-se que o grafo é **denso**.

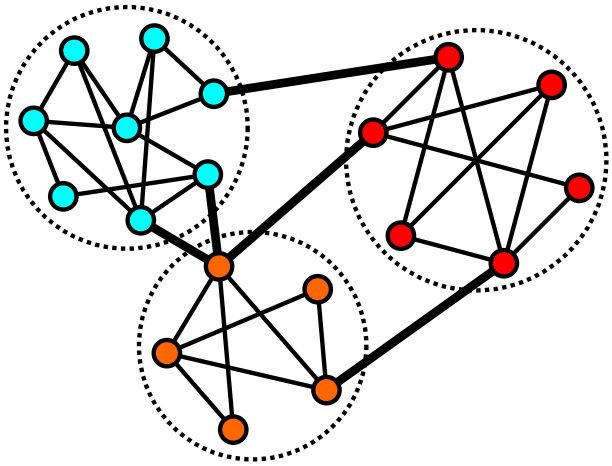


Figura 4 – Exemplo de um grafo com estrutura de comunidade, com as comunidades circuladas. Arestas em destaque entre as comunidades possuem maiores valor de intermediação, como discutido na seção 2.3.3.1.

Pode-se representar a intensidade de uma relação por um peso $w_{ij}$ associado a cada aresta $e_{ij}$; neste caso, diz-se que o grafo é **ponderado**. Um grafo não-ponderado é um caso especial onde todos os pesos são unitários. Pode-se estender a definição de grau para considerar o peso das arestas, que é chamado **força** $s_i$ de um vértice. De modo equivalente, pode-se definir a força de entrada e saída de um vértice em um grafo ponderado direcionado. O cálculo dessas definições é mostrado na tabela 3.

Tabela 3 – Cálculo das definições apresentadas em função da matriz de adjacência $A$.

| | | | Não-direcionado | Direcionado |
|---|---|---|---|---|
| | #arestas | $m$ | $\frac{1}{2}\sum_{ij} A_{ij}$ | $\sum_{ij} A_{ij}$ |
| | grau | $k_i$ | $\sum_j A_{ij}$ | $\sum_j (A_{ij} + A_{ji})$ |
| | grau de entrada | $k_i^{\text{in}}$ | $= k_i$ | $\sum_j A_{ij}$ |
| | grau de saída | $k_i^{\text{out}}$ | $= k_i$ | $\sum_j A_{ji}$ |
| | grau médio | $\langle k \rangle$ | $m/n$ | |
| Ponderado | força total | $S$ | $\frac{1}{2}\sum_{ij} A_{ij} w_{ij}$ | $\sum_{ij} A_{ij} w_{ij}$ |
| Ponderado | força | $s_i$ | $\sum_j A_{ij} w_{ij}$ | $\sum_j (A_{ij} w_{ij} + A_{ji} w_{ji})$ |
| Ponderado | força de entrada | $s_i^{\text{in}}$ | $= s_i$ | $\sum_j A_{ij} w_{ij}$ |
| Ponderado | força de saída | $s_i^{\text{out}}$ | $= s_i$ | $\sum_j A_{ji} w_{ji}$ |
| Ponderado | força média | $\langle s \rangle$ | $S/n$ | |

Um **caminho** $p = (p_1, p_2, \ldots, p_l)$ de comprimento $l$ é uma sequência de vértices conectados por arestas, isto é, tal que as arestas $e_{p_1,p_2}, e_{p_2,p_3}, \ldots, e_{p_{l-1},p_l}$ existam. Um **caminho geodésico** entre dois vértices é um caminho com o menor comprimento possível. Um **ciclo** é um caminho fechado, onde o primeiro vértice é também o último, e um **ciclo simples** é um ciclo que não possui arestas ou vértices repetidos, exceto seus extremos. Uma **árvore** é um grafo que não possui ciclos simples com comprimento maior que 1. Uma **árvore binária** é uma árvore onde nenhum vértice possui grau maior que 3. Um **grafo completo** $K_n$ é um grafo onde todas as arestas possíves entre os $n$ vértices existem, com $n(n-1)/2$ arestas em grafos não-direcionados e $n(n-1)$ arestas em grafos direcionados.

### 2.3.2 Modularidade

Não existe uma definição quantitativa amplamente aceita para "o que é uma comunidade". Espera-se que uma comunidade seja um subgrafo conectado com mais arestas dentro do que fora da comunidade, mas diversas definições são compatíveis com esta intuição. Existem até mesmo definições algorítmicas, onde a comunidade é simplesmente aquilo que o método produz sem uma definição *a priori* (FORTUNATO, 2010). Uma definição local busca avaliar cada comunidade separadamente do restante do grafo, enquanto uma definição global avalia toda a partição.

Uma classe de definições globais é de que o grafo possui estrutura de comunidade se ele for diferente de um modelo nulo aleatório. A definição global mais popular é baseada na medida de **modularidade** de um grafo, que compara a densidade de arestas de um subgrafo

com a densidade esperada se as arestas se conectassem de modo independente da estrutura de comunidade (NEWMAN; GIRVAN, 2004). Esta medida $Q$ é definida na equação 2.19 para redes não-direcionadas ponderadas.

$$Q = \frac{1}{2S}\sum_{ij}(A_{ij}w_{ij} - \langle w_{ij}\rangle)\delta(C_i, C_j) \tag{2.19}$$

onde $\langle w_{ij}\rangle$ é o peso esperado da aresta entre os vértices $i$ e $j$ de acordo com o modelo nulo. Para grafos não-ponderados, é apenas a probabilidade $P_{ij}$ de que estes vértices se conectem. Dado que a única contribuição para a modularidade vem de vértices dentro da mesma comunidade $C$, pode-se realizar a soma sobre todas as comunidades como na equação 2.20:

$$\begin{aligned} Q &= \frac{1}{2S}\sum_{C}\sum_{i\in C}\sum_{j\in C}(A_{ij}w_{ij} - \langle w_{ij}\rangle) \\ &= \frac{1}{2S}\sum_{C}(2S_C - 2\langle S_C\rangle) \end{aligned} \tag{2.20}$$

onde $S_C$ é o peso total das arestas totalmente dentro da comunidade $C$, e $\langle S_C\rangle$ é o peso total esperado de acordo com o modelo nulo. O modelo nulo mais utilizado é o **modelo de configuração**, que preserva a distribuição de graus enquanto conecta arestas aleatoriamente (MOLLOY; REED, 1995). O peso esperado é então simplesmente $\langle w_{ij}\rangle = s_i s_j/2S$, reduzido a $P_{ij} = k_i k_j/2m$ para grafos não-ponderados. Isto fornece a medida de modularidade usual na equação 2.21:

$$\begin{aligned} Q &= \frac{1}{2S}\sum_{ij}\left(A_{ij}w_{ij} - \frac{s_i s_j}{2S}\right)\delta(C_i, C_j) \\ &= \sum_{C}\left[\frac{S_C}{S} - \left(\frac{W_C}{2S}\right)^2\right] \end{aligned} \tag{2.21}$$

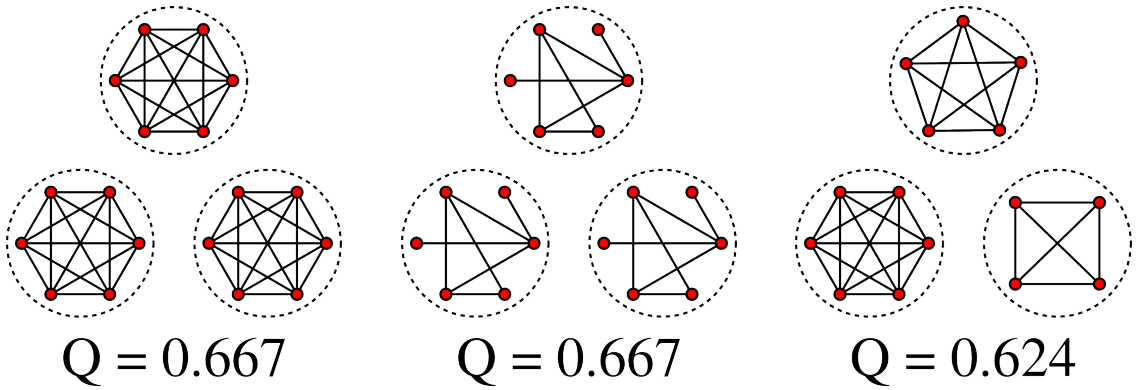
onde $W_C = \sum_{i\in C} s_i$ é a soma das forças de todos os vértices em $C$, o que se reduz a $d_C = \sum_{i\in C} k_i$ para grafos não-direcionados.

Esta medida está limitada a $Q \in [-1/2, 1)$, onde $Q = 1$ ocorre no limite de um grafo desconexo com infinitas componentes, onde cada componente é uma comunidade (BRANDES *et al.*, 2008). Existem diversos cenários onde o mínimo pode ser alcançado, como um grafo conexo contendo apenas dois vértices onde cada um está em sua própria comunidade. De modo mais interessante, $Q = 0$ é obtido quando o grafo não é diferente do modelo nulo, ou quando o grafo inteiro é incluído em uma única comunidade.

A modularidade é usada não apenas como uma medida de qualidade de uma partição, mas também como função objetivo a ser otimizada para determinar comunidades, utilizada

assim pelos métodos mais populares; e também como uma definição *ad hoc* de estrutura de comunidades - como regra prática, diz-se que uma rede possui estrutura de comunidade se ela possui uma partição com $Q \geq 0.3$ (NEWMAN, 2004a).

Mesmo tendo ampla utilização, esta métrica não é livre de críticas. Dado que é uma medida global, seu valor depende da forma de todo o grafo, e não apenas da organização de cada comunidade. Por exemplo, qualquer grafo com $p$ componentes idênticos terá a mesma modularidade de $Q = 1 - 1/p$, não importando quão densamente conectada cada componente é (figuras 5a e 5b). Também, a modularidade será menor se uma componente possuir menos arestas, mesmo que seja tão conectada quanto (figura 5c).




(a) Componentes idênticas densamente conectadas

(b) Componentes idênticas esparsamente conectadas

(c) Componentes desiguais densamente conectadas

Figura 5 – Modularidade de grafos com componentes desconexas.

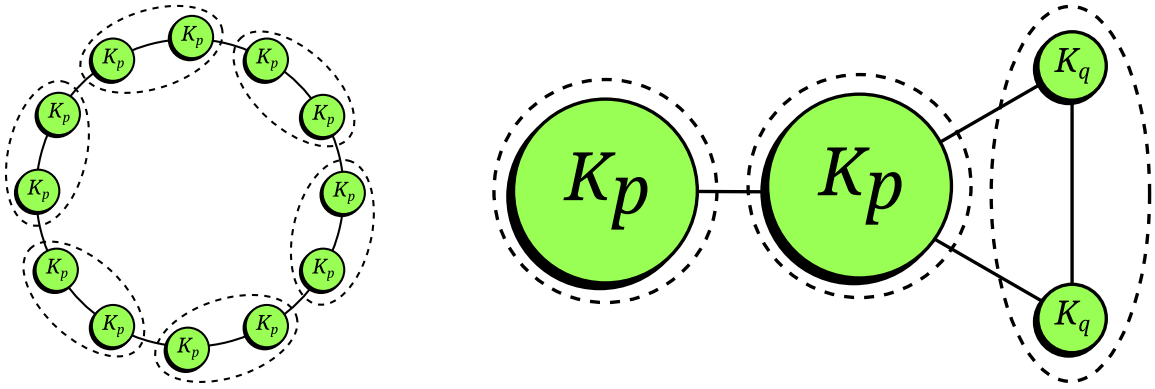
Finalmente, a modularidade possui uma escala intrínsica $l_s \sim \sqrt{m}$ que limita sua resolução para detectar comunidades pequenas. Uma partição contendo comunidades com menos que $l_s$ arestas possui modularidade menor que uma partição que aglutina tais grupos pequenos (FORTUNATO; BARTHELEMY, 2007). Isto ocorre mesmo se a comunidade for um subgrafo completo com poucas arestas conectando-a ao restante da rede, como mostrado na figura 6.

### 2.3.3 Método de detecção de comunidades

Nesta seção apresentamos alguns métodos de detecção de comunidades da literatura apropriados para a escala de grafos utilizados neste trabalho, e disponíveis na implementação da ferramenta `damicorepy`.

#### 2.3.3.1 Método divisivo

O conceito de que uma comunidade possui "mais arestas dentro do que fora" indica que caminhos geodésicos entre vértices de uma mesma comunidade são, na média, mais curtos que aqueles entre vértices de comunidades distintas, pois existem menos arestas para serem "utilizadas" para a passagem. Dentre todos os caminhos geodésicos entre todos os pares de




(a) Anel com $n_c$ módulos e $p$ vértices por módulo, com $n_c > \sqrt{m} \sim p^2/2$

(b) Configuração com quatro módulos, com $p > \sqrt{2}q^2$

Figura 6 – Exemplo de limite de resolução da modularidade. Os círculos preenchidos $K_n$ são grafos completos com $n$ vértices e $n(n-1)/2$ arestas. As linhas pontilhadas são grupos que maximizam a modularidade na configuração dada. Figura adaptada de (FORTUNATO; BARTHELEMY, 2007).

vértices, arestas conectando comunidades deveriam possuir mais caminhos passando por elas, como ilustrado na Figura 4. A **intermediação** $B_e$ de uma aresta mede esta propriedade de estar "no meio do caminho", contando quantos caminhos geodésicos a utilizam, como dado na equação 2.22:

$$B_e = \sum_{ij} \frac{\text{Número de caminhos geodésicos entre os vértices } i \text{ e } j \text{ que contém } e}{\text{Número de caminhos geodésicos entre os vértices } i \text{ e } j} \tag{2.22}$$

O método divisivo de Girvan-Newman busca identificar as arestas conectando comunidades e removê-las, tornando cada comunidade um componente desconexo (GIRVAN; NEWMAN, 2002). A cada passo, o método encontra a aresta com intermediação máxima e a remove da rede, até que todas as arestas sejam removidas e cada vértice esteja isolado. Este procedimento *top-down* retorna um agrupamento hierárquico, onde em cada nível uma componente é dividida em dois. Os primeiros passos do algoritmo são ilustrados na figura 7.

O cálculo de intermediação para todas as arestas em um grafo possui complexidade $\mathcal{O}(mn)$ usando o método de Brandes (BRANDES, 2001), e o método requer $m$ cortes de aresta. O pior caso possui complexidade $\mathcal{O}(m^2n)$, mas à medida que as comunidades são divididas pode-se analisar cada componente separadamente. Para grafos esparsos, isto se traduz em uma complexidade $\mathcal{O}(n^3)$, o que torna o método inviável para grafos muito grandes.

O agrupamento hierárquico obtido pode ser cortado em qualquer nível para obter uma partição para o grafo. É possível ou determinar o número de grupos a serem retornados, ou retornar a partição que maximiza a modularidade.

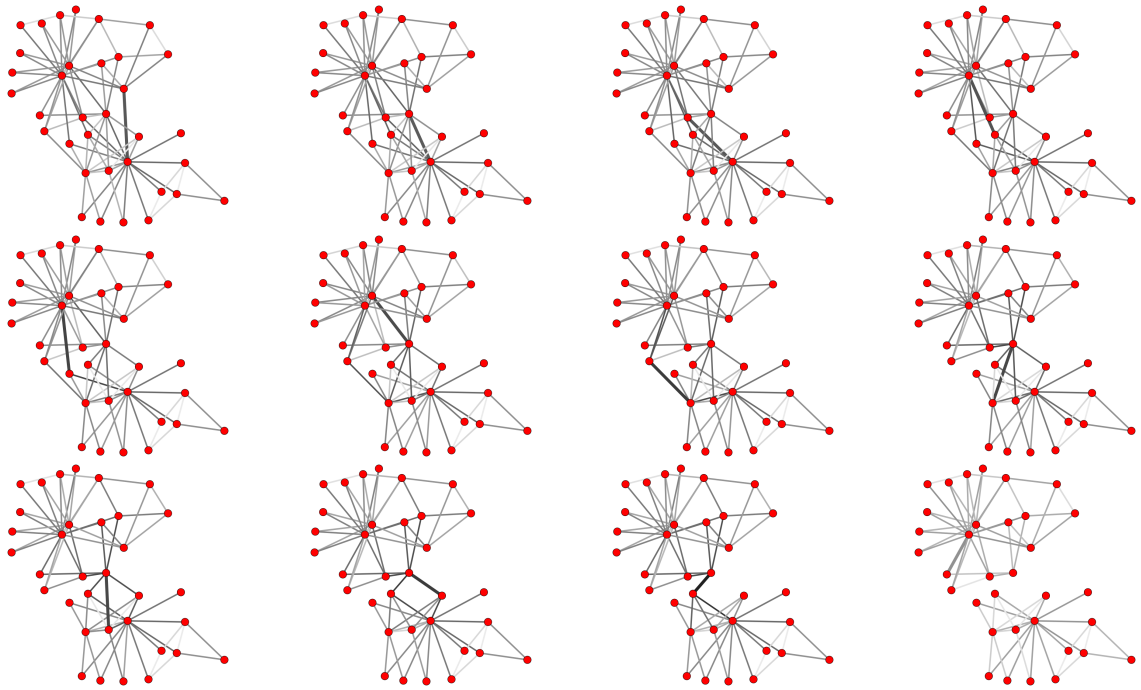


Figura 7 – Exemplo do algoritmo divisivo de Girvan-Newman até a primeira separação de comunidades, sobre a rede do clube de karate de Zachary (ZACHARY, 1977). A intermediação é visualizada em uma escala logarítmica, e a aresta a ser cortada é destacada.

#### 2.3.3.2 Otimização de modularidade

Apesar de suas limitações, a modularidade é o padrão *de facto* para avaliar estruturas de comunidade, e a maioria dos algoritmos buscam selecionar uma partição que a maximize. É possível formular um problema de programação linear inteira para obter o máximo global da modularidade, solucionável por métodos como Simplex (BRANDES *et al.*, 2008). Seja $\delta_{ij}$ uma variável de decisão, onde $\delta_{ij} = 1$ se os vértices $i$ e $j$ estão na mesma comunidade, e 0 caso contrário. Isto é uma relação de equivalência, onde vértices equivalentes pertencem à mesma comunidade. Ao incluir as seguintes restrições, obtém-se a modularidade máxima:

$$
\begin{array}{lll}
\max & & Q = \frac{1}{2m}\sum_{(i,j)\in E}\left(w_{ij} - \frac{s_i s_j}{2m}\right)\delta_{ij} \\
\text{s.t.} & \forall i: & \delta_{ii} = 1 \qquad \text{reflexividade} \\
& \forall i > j: & \delta_{ij} = \delta_{ji} \qquad \text{simetria} \\
& \forall i > j > k: & \begin{cases} \delta_{ij} + \delta_{jk} - 2\delta_{ik} \leq 1 \\ \delta_{ik} + \delta_{kj} - 2\delta_{ij} \leq 1 \\ \delta_{jk} + \delta_{ki} - 2\delta_{ji} \leq 1 \end{cases} \qquad \text{transitividade} \\
& \forall i, j: & \delta_{ij} \in \{0, 1\}
\end{array}
$$

Este método, contudo, é muito custoso computacionalmente e é viável apenas para grafos pequenos, com menos de uma centena de vértices. Diversos métodos buscam uma solução aproximada empregando heurísticas ou diferentes técnicas de otimização, como recozimento simulado ou otimização espectral (FORTUNATO, 2010).

Uma das heurísticas mais popular é o **algoritmo guloso** (também chamado de “Fast

Newman"), que a cada passo seleciona e aplica a junção de comunidades que mais aumenta a modularidade (NEWMAN, 2004b). Ela é de certo modo similar ao algoritmo de Junção de Vizinhos apresentado na seção 2.2, onde comunidades são aglutinadas de modo *bottom-up*. Inicialmente, cada vértice está em sua própria comunidade; a cada passo, para cada par de comunidades $(C_u, C_v)$ que compartilham uma aresta, calcula-se o ganho de modularidade $\Delta Q_{uv} = Q_{uv} - Q$ por uni-las, mostrado na equação 2.23.

$$\Delta Q_{uv} = \frac{2}{S}(w_{uv} - S_u S_v) \tag{2.23}$$

onde $S_u = \sum_{i \in C_u} s_i$ é a soma das forças dos vértices na comunidade $C_u$ (respectivamente para $S_v$ e $C_v$), e $w_{uv}$ é a soma dos pesos das arestas com um extremo em $C_u$ e outro em $C_v$. A junção que maximiza $\Delta Q_{uv}$ é então realizada, e o algoritmo continua até que todo o grafo esteja em uma única comunidade. Note que o termo constante $2/S$ pode ser omitido nos cálculos para se obter o máximo.

Este procedimento produz um agrupamento hierárquico, que pode então ser cortado onde a modularidade é maximizada, ou de modo a se obter um número pré-fixado de comunidades. A cada passo este algoritmo requer no máximo $m$ cálculos para $\Delta Q_{uv}$, e realiza $n$ passos para uma complexidade de $\mathcal{O}(mn)$. Estruturas de dados especiais podem ser utilizadas para obter uma complexidade de $\mathcal{O}(m \log^2 n)$, permitindo a análise de grafos muito grandes (CLAUSET; NEWMAN; MOORE, 2004).

## 2.4 Classificação

Tarefas de classificação são aquelas onde um pequeno conjunto de amostras classificadas, chamada conjunto de treinamento, é utilizado para ensinar padrões à máquina, que então deve emitir a classe para um conjunto de amostras de classe desconhecida. Como exemplos desse tipo de problema temos problemas de previsão, detecção de objetos em imagens, reconhecimento de línguas, dentre outros. Tais problemas surgem com frequência quando há um corpus grande de dados, e métodos de qualidade para obter uma classe são caros - por exemplo, determinar se uma imagem contém ou não um pássaro. Assim, classifica-se um pequeno conjunto destes dados para então aplicar este treinamento ao conjunto completo.

Seja $\mathscr{D}$ um espaço genérico de onde instâncias de dados são obtidas, e $\mathscr{C}$ um conjunto de classes ou anotações, normalmente discreto e finito. Uma função de classificação $f(x) : \mathscr{D} \mapsto \mathscr{C}$ mapeia cada instância a uma classe. Esta função pode até mesmo ser não-determinística, isto é, duas instâncias de dados idênticas podem ser classificadas de forma diferente. Um **problema de classificação** é a tarefa de encontrar uma função aceitável $\hat{f}(x)$ que tem bom desempenho como aproximação de $f$.

Um **conjunto de treinamento** $T = \{\langle t_1, c_1 \rangle, \ldots, \langle t_m, c_m \rangle\}$ , onde $t_i \in \mathscr{D}$ e $c_i \in \mathscr{C}$, é um

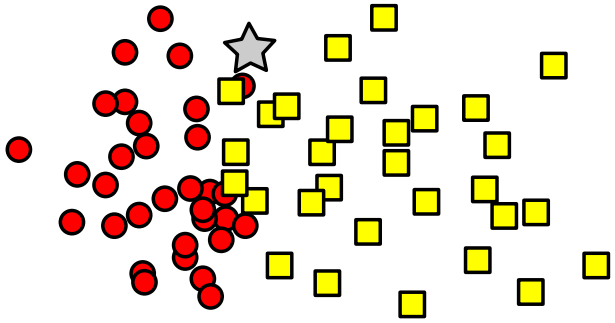


Figura 8 – Exemplo de problema de classificação. Deve-se designar uma classe para a nova instância (estrela) utilizando a distância às instâncias de dados já classificadas (círculos e quadrados).

conjunto de valores "verdadeiros" onde $f(t_i) = c_i$. Este conjunto de dados nos dá uma base para construir nosso classificador $\hat{f}$ e também nos informa em como nossa função executa sobre instâncias já anotadas. As instâncias de teste $X = \{x_1, \ldots, x_n\}$, com $x_i \in \mathscr{D}$, para as quais deve-se retornar as classificações $\{\hat{f}(x_1), \ldots, \hat{f}(x_n)\}$. A Figura 8 ilustra este problema.

Dada uma métrica $d$ definida sobre $\mathscr{D}$, pode-se definir uma distância entre um elemento $x$ e uma classe $C$ construindo sobre a distância entre $x$ e os elementos $y \in C$:

- Mínimo: $d_{\min}(x, C) = \min_{y \in C}\{d(x, y)\}$
- Máximo: $d_{\max}(x, C) = \max_{y \in C}\{d(x, y)\}$
- Média: $d_{\text{avg}}(x, C) = \frac{1}{|C|}\sum_{y \in C} d(x, y)$

Outra opção, única para a métrica NCD, consiste em concatenar todos os elementos dentro de uma classe em uma única *string*, e então empregar a distância usual do elemento para o agregado:

$$d_{\text{aggr}}(x, C) = \text{NCD}(x, \text{concat}(y | \forall y \in C))$$

De maneira similar, pode-se definir a distância entre as próprias classes ao estender estas definições. Contudo, não há nenhuma garantia de que a distância seja uma métrica, satisfazendo as propriedades delineadas na Seção 2.1. As distâncias mais usuais entre duas classes $C$ e $C'$ são as seguintes:

- Mínimo: $d_{\min}(C, C') = \min_{t \in C}\{d_{\min}(t, C')\}$
- Distância de Hausdorff dirigida: $d_h(C, C') = \max_{t \in C}\{d_{\min}(t, C')\}$
- Distância de Hausdorff: $d_H(C, C') = \max\{d_h(C, C'), d_h(C', C)\}$

### 2.4.1 Classificadores $k$-NN

Dada a distância entre um elemento e uma classe $d(x,C)$, pode-se atribuir uma instância não anotada simplesmente para a classe mais próxima a ela. Define-se então um **classificador simples** como na equação 2.24. Classificar todas as instâncias de dados em $X$ requer $\mathcal{O}(mn)$ cálculos de distância.

$$\hat{f}(x) \leftarrow \arg\min_{C \in \mathscr{C}} d(x,C) \tag{2.24}$$

O **classificador $k$-NN**, para uma dada distância entre elementos $d$, atribui um elemento à classe mais frequente dentre seus $k$ vizinhos mais próximos (MITCHELL, 1997). Empates devem ser quebrados de acordo com uma estratégia, tal como escolher aleatoriamente ou simplesmente deixar o elemento sem classificação. O classificador simples acima é equivalente ao classificador 1-NN com $d(x,C) = d_{\min}$. O classificador $k$-NN é dado pela equação 3.3:

$$\hat{f}(x) \leftarrow \arg\max_{C \in \mathscr{C}} \sum_{y \in K(x)} \delta(C, f(y)) \tag{2.25}$$

onde $K(x) = \{y_1, \ldots y_k\}$ é o conjunto dos $k$ elementos $y \in T$ mais próximos a $x$, e $\delta(C,C')$ é o delta de Kronecker.

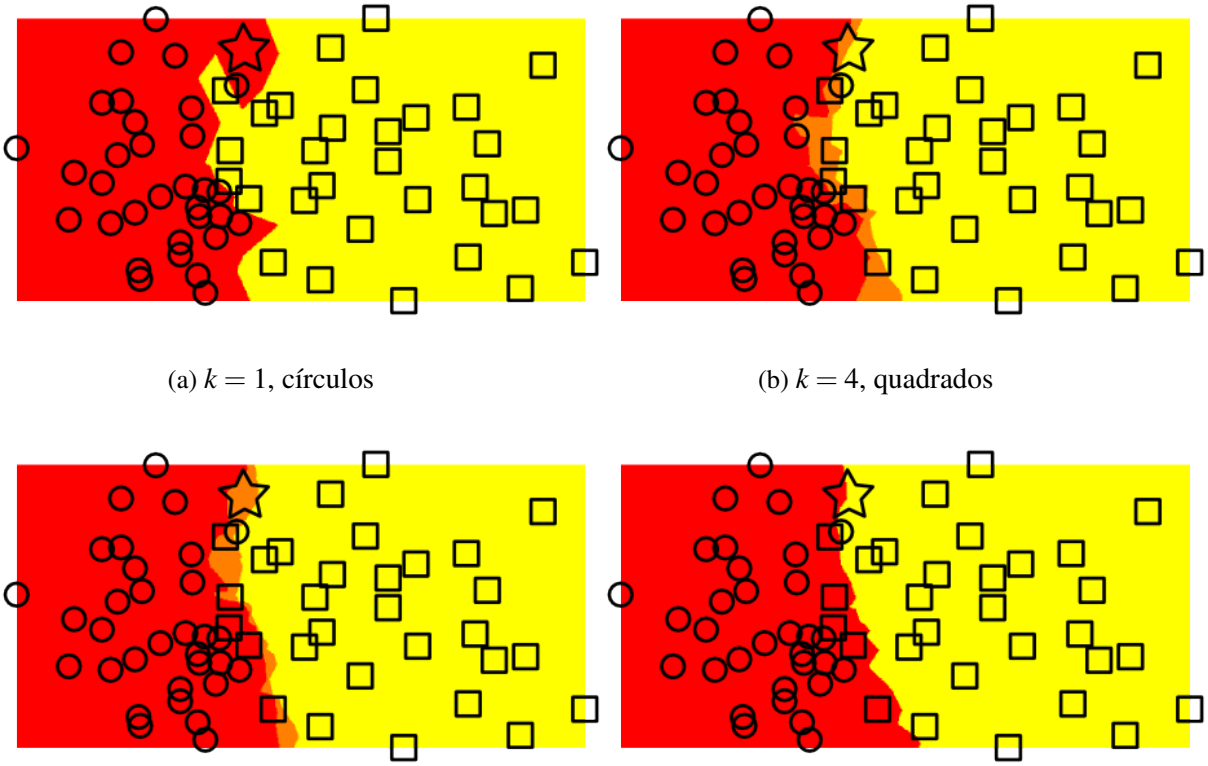
Este classificador é tanto poderoso quanto mal compreendido, já que o parâmetro $k$ influencia fortemente sua efetividade mas não existe regra geral que pode ser aplicada para escolhê-lo. Baixos valores de $k$ tornam o método altamente local com fronteiras de decisão "denteadas" (Figuras 9a e 9b), enquanto valores maiores de $k$ tornam o método global, com fronteiras de decisão suaves (Figuras 9c e 9d). No limite de $k = m$, o classificador se torna o **classificador trivial**, que atribui a classe mais observada para todas as instâncias de teste.

### 2.4.2 Classificadores Bayesianos

Outra abordagem para o problema de classificação é assumir que as instâncias de dado são governadas por distribuições de probabilidade, e que decisões ótimas podem ser tomadas considerando tais probabilidades em conjunto com os dados observados. Suponha que a probabilidade condicional $P(C|x)$ de um elemento $x$ pertencer à classe $C$ seja conhecida. A hipótese de máximo *a posteriori* (MAP) é que o elemento pertence à classe que maximiza tal probabilidade, isto é,

$$C_{\text{MAP}} = \arg\max_{C \in \mathscr{C}} P(C|x)$$

Ao aplicar o teorema de Bayes $P(A|B) = P(B|A)\frac{P(A)}{P(B)}$, pode-se reescrever este classificador como



(a) $k = 1$, círculos

(b) $k = 4$, quadrados

(c) $k = 10$, não classificado

(d) $k = 15$, quadrados

Figura 9 – Fronteiras de decisão para alguns valores de $k$ para o classificador $k$-NN. Regiões onde há um empate apresentam cores intermediárias. Empates não ocorrem com $k$ ímpar pois só existem duas classes para escolher. Note que a classificação da nova instância depende de $k$ e pode até mesmo não ser classificada.

$$\begin{aligned} C_{\text{MAP}}(x) &= \arg\max_{C \in \mathscr{C}} \frac{P(x|C)P(C)}{P(x)} \\ &= \arg\max_{C \in \mathscr{C}} P(x|C)P(C) \end{aligned}$$

Esta equação permite uma estimativa mais simples da distribuição de probabilidade subjacente utilizando os dados observados. Pode-se estimar $P(C)$ pela fração $m_C/m$, onde $m_C$ é o número de elementos em $C$ no conjunto de treinamento. Estimar $P(x|C)$ é mais difícil, pois na maioria dos problemas $x$ não é sequer observado nos dados de treinamento.

Suponha que este problema pode ser simplificado assumindo-se que os atributos de $x = (x_1, \ldots, x_d)$ são condicionalmente independentes entre si. Então, a probabilidade de se observar um elemento $x$ é a conjunção de se observar cada atributo $x_1, \ldots, x_d$ independentemente, o que é dado simplesmente pelo produto da probabilidade de se observar cada um deles $P(x|C) = P(x_1, \ldots, x_d|C) = \prod_i P(x_i|C)$. Esta suposição ingênua (*naive*, em inglês) é a base do **classificador**

**Naive Bayes**, dado na equação 2.26.

$$\hat{f}(x) \leftarrow \arg\max_{C \in \mathscr{C}} P(C) \prod_i P(x_i|C) \tag{2.26}$$

Para atributos discretos e finitos, a probabilidade $P(x_i|C)$ pode ser estimada pela fração $x_i(C)/m_C$, onde $x_i(C)$ é o número de vezes em que o atributo $x_i$ aparece em $C$. Para atributos contínuos, deve-se assumir uma função de probabilidade a partir dos quais eles são obtidos. Assumindo uma distribuição normal, estima-se a média $\mu_i(C)$ e desvio padrão $\sigma_i(C)$ como segue, e a estimativa de probabilidade é dada em 2.27.

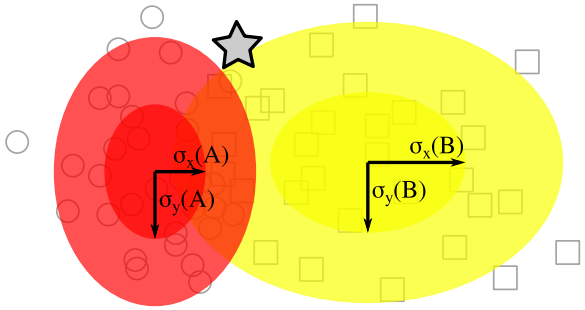
$$\begin{aligned}
\mu_i(C) &= \frac{1}{m_C} \sum_{y \in C} y_i \\
\sigma_i(C) &= \sqrt{\frac{1}{m_C} \sum_{y \in C} (y_i - \mu_i(C))^2} \\
P(x_i|C) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_i(C)^2}} \exp\left( -\frac{1}{2\sigma_i(C)^2} (x_i - \mu_i(C))^2 \right)
\end{aligned} \tag{2.27}$$

A Figura 10 ilustra este método de classificação. Os atributos das instâncias de dados são suas coordenadas $x$ e $y$, e a Figura 10a mostra a distribuição gaussiana estimada ao assumir que essas variáveis são independentes. A definição 2.26 leva a uma classificação discreta, com a fronteira de decisão do método mostrada na Figura 10b. Contudo, uma vez que cada classe fornece um valor $v_C = P(C)\prod_i P(x_i|C)$ sobre conter a instância $x$, podemos retornar as probabilidades $p_C = v_C / \sum_C v_C$ da instância pertencer a cada classe, em uma classificação nebulosa (*fuzzy*), como ilustrado na Figura 10c.

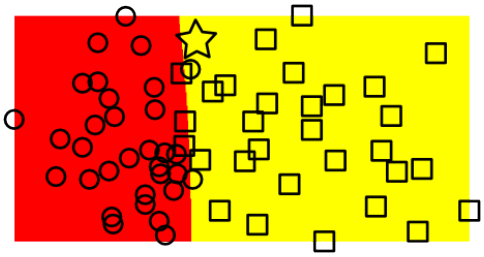
Neste trabalho, não é realizado uma etapa de extração de características das instâncias de dados, tendo como informação apenas a sua distância para outros elementos, obtido pela NCD. Para utilizar-se o classificador Naive Bayes, construi-se para cada instância $x$ um vetor de características $u$ composto pelas distâncias de $x$ para cada classe, isto é, $u_i = d(x, C_i)$, para uma dada distância $d$ entre ponto e classe. Neste caso, as medidas $\mu_i(C)$ e $\sigma_i(C)$ tornam-se a média e variância da distribuição de distâncias entre classes $D(C, C_i) = (d(x, C_i)|x \in C)$. Isto apresenta problemas ao utilizar a métrica $d_{\min}$, uma vez que $D(C, C) = (0, 0, \dots), \mu = \sigma = 0$, e a distribuição normal torna-se uma função delta. Neste caso, exclui-se $x$ da classe ao calcular a distância para si mesma, isto é, $D^*(C, C) = (d_{\min}(x, C \setminus \{x\})|x \in C)$.

## 2.5 Validação

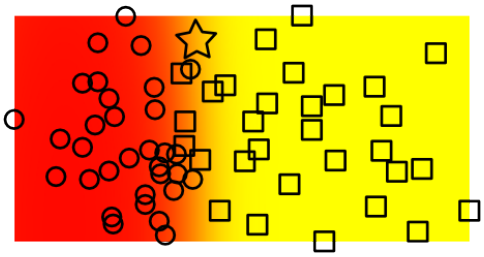
Nesta pesquisa, foi necessário testar a implementação da ferramenta para garantir sua qualidade e a validade na análise de novos conjuntos. As ferramentas desenvolvidas para esta




(a) Visualização da distribuição normal estimada para cada classe.



(b) Classificação discreta.



(c) Classificação nebulosa.

Figura 10 – Classificador Naive Bayes.

validação foram incluídas na ferramenta computacional, de modo que usuários também possam validar a qualidade de suas análises com o método e escolher as componentes disponíveis mais adequadas para cada conjunto de dados.

### 2.5.1 Validação externa

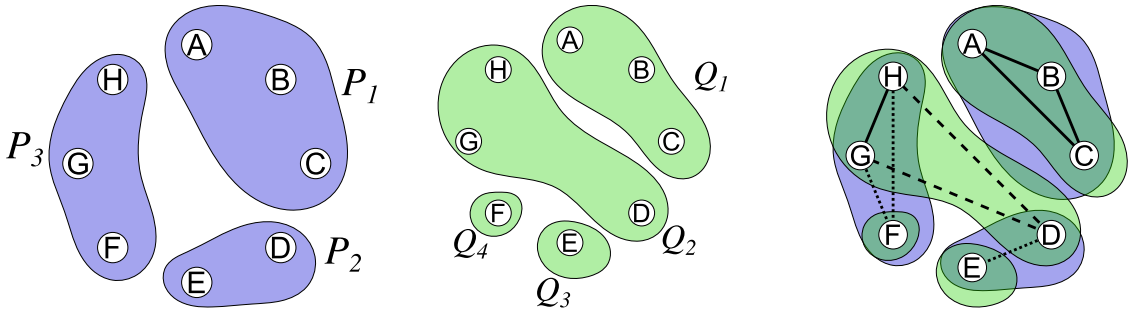
Em nossa pesquisa, todos os conjuntos de dados eram completamente anotados, então após encontrar um agrupamento de elementos por detecção de comunidades poderíamos validar o resultado com a classe real de cada elemento. Isto é chamado **validação externa**, e aqui apresentamos os índices utilizados para analisar e comparar os agrupamentos obtidos.

Dado um conjunto de dados $D = \{d_1, \ldots, d_n\}$, um **agrupamento** ou **partição** é um conjunto de grupos $P = \{p_1, \ldots, p_c\}$ onde cada grupo é um subconjunto de $D$. Ainda, impomos que $\bigcup_i p_i = D$ e $p_i \cap p_j = \emptyset, i \neq j$, isto é, a partição cobre o conjunto completamente e os grupos não se sobrepõem.

Dados duas partições $U$ and $V$, seja $n_{ij} = |U_i \cap V_j|$ o número de elementos em comum entre os grupos $U_i$ e $V_j$. A matriz definida por $n_{ij}, \forall i = 1, \ldots, |U|, \forall j = 1, \ldots, |V|$ é chamada **matriz de confusão** ou **tabela de contingência**. Necessitamos das seguintes definições antes de definir as métricas entre partições. A nomenclatura assume que $U$ é o conjunto de referência e $V$ é o conjunto de teste.

- $N = \binom{n}{2}$: número de pares de elementos em $D$.
- $N_U = \sum_i \binom{|U_i|}{2}$: número de pares de elementos dentro dos grupos em $U$.
- $N_V = \sum_j \binom{|V_j|}{2}$: número de pares de elementos dentro dos grupos em $V$.
- $\text{TP} = \sum_{ij} \binom{n_{ij}}{2}$: verdadeiros positivos, número de pares de elementos que ocorrem dentro do mesmo grupo tanto em $U$ quanto em $V$.
- $\text{FP} = N_U - \text{TP}$: falsos positivos, número de pares que ocorrem dentro do mesmo grupo em $U$ mas não em $V$.
- $\text{FN} = N_V - \text{TP}$: falsos negativos, número de pares que ocorrem dentro do mesmo grupo em $V$ mas não em $U$.
- $\text{TN} = N - (\text{TP} + \text{FP} + \text{FN}) = N - (N_U + N_V) + \text{TP}$: verdadeiros negativos, número de pares que não ocorrem dentro do mesmo grupo em $U$ e $V$.
- $\text{A} = \text{TP} + \text{TN}$: concordâncias; número de pares que são postos do mesmo modo em ambas as partições.
- $\text{D} = \text{FP} + \text{FN}$: discordâncias; número de pares que são postos de modos diferentes em cada partição.

A Figura 11 apresenta um exemplo de duas partições em um conjunto de dados e ilustra a classificação de cada par de elementos. A Tabela 4 mostra a classificação completa e a Tabela 5 mostra a matriz de contingência.




(a) Partição $U$. (b) Partição $V$. (c) Partições superpostas.

Figura 11 – Exemplo de partições. Linhas sólidas são verdadeiros positivos, linhas tracejadas são falsos positivos e linhas pontilhadas são falsos negativos. Não são mostrados os verdadeiros negativos.

#### 2.5.1.1 Índices comuns

O índice de Rand (RAND, 1971), dado na equação 2.28 é uma simples razão das concordâncias pelo número de pares. Este índice pode ser compreendido como a probabilidade de se selecionar um par aleatório posto do mesmo modo em ambas as partições: tanto dentro do

mesmo grupo em ambas, ou fora do mesmo grupo. Na prática, o número de verdadeiros negativos domina a análise e o índice tende a 1 à medida que $n$ cresce, o que não é uma característica central para agrupamentos (HUBERT; ARABIE, 1985).

$$R = \frac{\mathrm{A}}{N} = \frac{\mathrm{A}}{\mathrm{A}+\mathrm{D}} = \frac{\mathrm{TP}+\mathrm{TN}}{\mathrm{TP}+\mathrm{TN}+\mathrm{FP}+\mathrm{FN}} \tag{2.28}$$

O índice de Jaccard (JACCARD, 1912) (que antecede o de Rand) remove TN do índice de Rand, como dado na equação 2.29. Ele pode ser interpretado como a probabilidade de se escolher um verdadeiro positivo dentre todos os pares que ocorrem dentro de um grupo em pelo menos uma das partições.

$$J = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP}+\mathrm{D}} = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP}+\mathrm{FP}+\mathrm{FN}} \tag{2.29}$$

Fowlkes e Mallows propuseram um índice de similaridade considerando os verdadeiros positivos sobre a média geométrica de pares possíveis (FOWLKES; MALLOWS, 1983), como dado na equação 2.30. Este índice foi originalmente proposto por Ochiai em 1957 (OCHIAI, 1957).

$$\mathrm{FM} = \frac{\mathrm{TP}}{\sqrt{N_P N_Q}} \tag{2.30}$$

Em um comentário sobre o artigo de Fowlkes e Mallows, David Wallace propôs um par de índices que normaliza TP pelo número de pares em cada partição (WALLACE, 1983), como dado na equação 2.31. O índice $W_U$ pode ser interpretado como a probabilidade condicional de encontrar um par concordante em $V$, dado que ele concorda em $U$; respectivamente para $W_V$, trocando $U$ e $V$. O índice FM se torna então a média geométrica de $W_U$ e $W_V$.

$$W_U = \frac{\mathrm{TP}}{N_U}, \quad W_V = \frac{\mathrm{TP}}{N_V} \tag{2.31}$$

| | A | B | C | D | E | F | G | H |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| A | | ● | ● | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| B | | | ● | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| C | | | | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| D | | | | | ◐ | ○ | ◑ | ◑ |
| E | | | | | | ○ | ○ | ○ |
| F | | | | | | | ◐ | ◐ |
| G | | | | | | | | ● |
| H | | | | | | | | |

Tabela 4 – Congruência dos pares entre partições $U$ e $V$ apresentadas na Figura 11. ● denota verdadeiro positivo, ○ denota verdadeiro negativo, ◐ denota falso negativo e ◑ denota falso positivo.

| $n_{ij}$ | $Q_1$ | $Q_2$ | $Q_3$ | $Q_4$ |
|---|---|---|---|---|
| $P_1$ | 3 | - | - | - |
| $P_2$ | - | 1 | 1 | - |
| $P_3$ | - | 2 | - | 1 |

Tabela 5 – Matriz de contingência do exemplo na Figura 11.

É necessário analisar ambos os índices simultaneamente, especialmente se a distância entre $N_U$ e $N_V$ for grande. Por exemplo, se $V$ é composto por uma única partição, então $N_V = N$ e $N_U = \text{TP}$, e consequentemente $W_U = 1$. Contudo, se $U$ é composto por $k$ partes com aproximadamente o mesmo tamanho, então $W_V \approx 1/k \ll 1$. Isto mostra que um dos índices pode parecer indicar uma grande concordância enquanto o outro indica o oposto.

Meilă propõe um critério que minimiza o número de erros quando correspondemos os grupos de uma partição com os da outra (MEILA, 2005). Assumindo que $|U| \leq |V|$, seja $\pi$ um mapeamento injetivo de $(1,\ldots,|U|)$ em $(1,\ldots,|V|)$, o que significa que o grupo $U_i$ "corresponde ao" grupo $V_{\pi(i)}$. Podemos definir uma matriz de permutação $\delta$ tal que $\pi(i) = j \Leftrightarrow \delta_{ij} = 1$. O número ótimo de correspondências $C$ é obtido pela solução do seguinte problema de otimização linear:

$$\begin{array}{lll} \max & C = \sum_{ij} \delta_{ij} n_{ij} & \\ \text{s.a} & \forall i: & \sum_j \delta_{ij} \leq 1 \\ & \forall j: & \sum_i \delta_{ij} \leq 1 \\ & \forall i,j: & \delta_{ij} \in \{0,1\} \end{array}$$

Isto é uma instância do problema de atribuição, que pode ser solucionado de forma eficiente pelo método de Munkres (MUNKRES, 1957). Devemos salientar que se $|U| \neq |V|$, então nem todos os grupos terão um correspondente. O índice de classificação $c$ é definido simplesmente como $c = C/n$. Este índice pondera correspondências entre agrupamentos igualmente, e é igual a 1 para agrupamentos idênticos. Contudo, o índice ignora completamente a organização da parte sem correspondência de cada grupo, e portanto não diferencia embaralhamentos diferentes entre partições com o mesmo número de correspondências a uma partição de referência (MEILA, 2007).

#### 2.5.1.2 Correção para o acaso

Uma preocupação comum entre estes índices é que, mesmo que todos variem em $[0,1]$ e alguns possam ser interpretados como probabilidades, eles não variem linearmente neste intervalo ou mesmo possuam um mínimo de zero (WALLACE, 1983). Mesmo que o analista seja apresentado com um valor de 0.8, não há indicação se este é um valor "alto" ou "baixo" para a correspondência entre os agrupamentos.

Uma maneira de aumentar a interpretabilidade dos índices é **corrigindo para o acaso**, isto é, ajustá-los para assumir um valor constante (normalmente 0) quando comparando partições

aleatórias contra um modelo nulo. A forma geral de um índice ajustado é

$$I' = \frac{I - \langle I \rangle}{\max\{I\} - \langle I \rangle} \tag{2.32}$$

onde $\langle \cdot \rangle$ é o valor esperado do índice e $\max\{I\}$ é o máximo valor possível. Deste modo, $I'$ assume um máximo de 1, e assume 0 quando $I = \langle I \rangle$. O índice pode então assumir valores negativos, que são de difícil interpretação.

Contudo, o modelo nulo requer definir uma distribuição da qual um modelo aleatório pode ser definido e amostrado. Uma distribuição comum para partições é a distribuição hipergeométrica, que provê uma matriz de contingência aleatória para partições dado a soma das colunas e linhas ($\sum_j U_{ij}$ e $\sum_i V_{ij}$) (HUBERT; ARABIE, 1985). Esta escolha encontra algumas críticas, como posto por Meilă (MEILA, 2003):

> Um problema com índices ajustados é que o ponto de origem é uma expectativa sob uma hipótese nula. A hipótese nula é que a) os dois agrupamentos são amostrados de modo independente, e b) os agrupamentos são amostrados do conjunto de todos os pares de partições com $|U_i|, |V_j|$ pontos fixados em cada grupo (FOWLKES; MALLOWS, 1983; HUBERT; ARABIE, 1985). Na prática, a segunda suposição é normalmente violada. Muitos algoritmos têm como entrada um número $K$ de grupos, mas o número de pontos em cada grupo é um resultado da execução do algoritmo. Na maioria das situações de análise exploratória de dados, não é natural assumir que alguém possa saber exatamente quantos pontos há em cada grupo. Os problemas listados acima já são conhecidos há muito tempo pela comunidade estatística; veja por exemplo (WALLACE, 1983).

Albatineh e Niewiadomska-Bugaj (2011) realizaram a correção de diversos índices da literatura com o modelo nulo proposto. Eles também utilizam uma abordagem por expansão de séries de Taylor que não será discutida aqui.

Sob a distribuição hipergeométrica, onde o número de elementos em cada grupo é fixado tanto em $U$ quanto em $V$, o valor esperado para o número de verdadeiros positivos TP é dado na equação 2.33 (HUBERT; ARABIE, 1985).

$$\langle \mathrm{TP} \rangle = \frac{N_U N_V}{N} \tag{2.33}$$

O índice de Rand ajustado AR, proposto por Hubert e Arabie (1985), utiliza o valor esperado do índice de Rand na equação 2.34.

$$\begin{aligned}\langle R\rangle &= 1 + 2N_U N_V/N^2 - (N_U + N_V)/N \\ \mathrm{AR} &= \frac{\mathrm{TP} - N_U N_V/N}{\frac{1}{2}(N_U + N_V) - N_U N_V/N} \\ &= \frac{\mathrm{TP} - \langle \mathrm{TP}\rangle}{\frac{1}{2}(N_U + N_V) - \langle \mathrm{TP}\rangle}\end{aligned} \tag{2.34}$$

O índice de Fowlkes-Mallows ajustado AFM utiliza o valor esperado para o índice de Fowlkes-Mallows dado na equação 2.35 (FOWLKES; MALLOWS, 1983).

$$\begin{aligned}\langle \mathrm{FM}\rangle &= \frac{\sqrt{N_U N_V}}{N} \\ \mathrm{AFM} &= \frac{\mathrm{TP} - N_U N_V/N}{\sqrt{N_U N_V} - N_U N_V/N} \\ &= \frac{\mathrm{TP} - \langle \mathrm{TP}\rangle}{\sqrt{N_U N_V} - \langle \mathrm{TP}\rangle}\end{aligned} \tag{2.35}$$

Não foi encontrado na literatura o cálculo de índices de Wallace ajustados. Foi feita sua derivação inicialmente calculando os índices esperados (equação 2.36), e os índices ajustados $\mathrm{AW}_U$ e $\mathrm{AW}_V$ seguem facilmente utilizando a equação 2.33:

$$\begin{aligned}\langle W_U\rangle &= N_V/N \quad \mathrm{AW}_U = \tfrac{\mathrm{TP} - \langle \mathrm{TP}\rangle}{N_U - \langle \mathrm{TP}\rangle} \\ \langle W_V\rangle &= N_U/N \quad \mathrm{AW}_V = \tfrac{\mathrm{TP} - \langle \mathrm{TP}\rangle}{N_V - \langle \mathrm{TP}\rangle}\end{aligned} \tag{2.36}$$

Não encontramos uma derivação para o valor esperado do índice de classificação $c$. O índice de Jaccard ajustado possui uma derivação mais complexa e é baseado em uma aproximação, e não foi utilizado nesta pesquisa. Para maiores informações, consulte (ALBATINEH, 2010; ALBATINEH; NIEWIADOMSKA-BUGAJ, 2011).

#### 2.5.1.3 *Informação mútua*

A informação mútua $I(U,V)$ é um índice com um histórico diferente dos anteriores, buscando calcular a informação (em bits) compartilhada entre dois agrupamentos (MEILA, 2007). Ela assume que a matriz de contingência é uma amostra das medidas de duas distribuições de probabilidade (possivelmente não independentes) que atribuem cada elemento em grupos em $U$ e $V$.

Inicialmente, definimos $u_i = |U_i|/n$, $v_j = |V_j|/n$ e $r_{ij} = n_{ij}/n$ como a probabilidade de selecionar um elemento aleatoriamente de, respectivamente, $U_i$, $V_j$, e ambos $U_i$ e $V_j$. Nós definimos as entropias de cada partição $H(U)$ e $H(V)$ e a entropia conjunta $H(U,V)$ como segue. Também definimos $0 \lg 0 \equiv 0$.

$$H(U) = -\sum_i u_i \lg u_i \quad H(V) = -\sum_j v_j \lg v_j$$
$$H(U,V) = -\sum_{ij} r_{ij} \lg r_{ij}$$

Podemos interpretar as entropias $H(U)$ e $H(V)$ como o mínimo número médio de bits necessário para codificar a qual grupo um elemento pertence. A entropia conjunta $H(U,V)$ é então o mínimo número médio de bits necessário para codificar os dois grupos ao qual um elemento pertence, simultaneamente. Se um agrupamento é completamente dependente do outro - por exemplo, se dado o grupo $U_i$ ao qual um elemento pertence não existe dúvida sobre qual grupo $V_j$ ele pertence - então $H(U,V) = \max\{H(U),H(V)\}$. Do contrário, se eles forem estatisticamente independentes, então $H(U,V) = H(U) + H(V)$.

Com esta compreensão podemos definir a **informação mútua** $I(U,V)$ entre agrupamentos como a quantidade de informação compartilhada entre eles. Por exemplo, dado que um elemento pertence ao grupo $U_i$ em $U$, qual é o decréscimo de informação necessária para codificar seu grupo $V_j$ em $V$? A média deste decréscimo de informação é a informação mútua, como dada na equação 2.37.

$$I(U,V) = H(U) + H(V) - H(U,V) = \sum_{ij} r_{ij} \lg \left( \frac{r_{ij}}{p_i q_j} \right) \tag{2.37}$$

Se os agrupamentos são independentes, a informação mútua é zero; se forem perfeitamente dependentes ou iguais, a informação mútua é o mínimo das suas entropias. A Figura 12 ilustra estes conceitos.

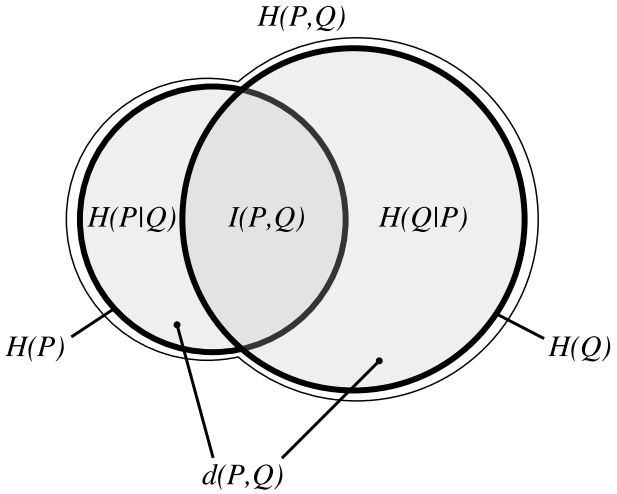



Figura 12 – Ilustração das entropias de cada partição e conceitos relacionados.

A informação mútua pode ser utilizada para definir uma métrica entre partições. A entropia condicional $H(U|V) = H(U) - I(U,V)$ representa a quantidade de informação "independente" ou "não explicada" em $U$ quando o grupo de um elemento em $V$ é conhecido;

respectivamente para $H(V|U)$, trocando $U$ e $V$. A **distância de variação de informação** $d(U,V)$ é uma medida simétrica desta quantidade de informação independente, como definido na equação 2.38. Esta medida satisfaz as propriedades de uma métrica, e não depende em contar o número de pares em comum ou em encontrar grupos correspondentes (MEILA, 2007).

$$\begin{aligned} d(U,V) &= H(U|V) + H(V|U) \\ &= H(U) + H(V) - 2I(U,V) \\ &= H(U,V) - I(U,V) = \sum_{ij} r_{ij} \lg(u_i v_j) \end{aligned} \tag{2.38}$$

Esta métrica também é medida em bits, e pode ser desejável normalizá-la para obter um índice entre 0 e 1. Existem diversas propostas de fatores de normalização:

- entropia conjunta $H(U,V)$;
- máximo das entropias $\max\{H(U),H(V)\}$
- mínimo das entropias $\min\{H(U),H(V)\}$
- média aritmética das entropias $\frac{1}{2}(H(U)+H(V))$
- média geométrica das entropias $\sqrt{H(U)H(V)}$

Vinh, Epps e Bailey (2010) apresentam correções para o acaso de diversas dessas normalizações sob o modelo nulo hipergeométrico, que não foram utilizadas nessa pesquisa.

#### 2.5.1.4 *Partições binárias*

Algumas tarefas de classificação exigem classificar elementos em apenas dois grupos, em geral como parte de um problema de decisão: classificar um email como spam ou não, de modo a decidir se ele deve ser mostrado ao usuário; analisar o perfil de um cliente e decidir conceder ou não crédito; detecção de doenças; dentre outras aplicações. Nestes casos, a matriz de confusão se torna mais simples, com apenas 2x2 entradas, e podemos aplicar outras medidas para avaliar a qualidade de um agrupamento.

As medidas de precisão $P$ e sensibilidade (*recall*) $R$ fornecem uma visão conjunta da efetividade de um classificador:

- **Precisão**: fração das instâncias classificadas como positivas que são corretas (Equação 2.39);
- **Sensitividade**: fração das instâncias positivas classificadas corretamente (Equação 2.40).

$$P = \frac{\text{TP}}{\text{TP}+\text{FP}} \tag{2.39}$$

$$R = \frac{\text{TP}}{\text{TP}+\text{FN}} \tag{2.40}$$

Por exemplo, no contexto de classificação de spam, a precisão fornece a probabilidade de mensagens classificadas como spam serem, de fato, spam; e a sensitividade fornece a probabilidade de mensagens de spam serem classificadas como tal. É trivial alcançar uma sensitividade de 100% simplesmente classificando todas como spam, de modo que é necessário avaliar ambas as medidas em conjunto. A métrica $F_1$ fornece um coeficiente que unifica ambas utilizando sua média harmônica:

$$F_1 = \left[\frac{1}{2}\left(\frac{1}{P}+\frac{1}{R}\right)\right]^{-1} = 2\frac{P\cdot R}{P+R} \tag{2.41}$$

Neste caso, ambas as métricas são ponderadas igualmente. Na prática, podemos dar maior importância para uma em relação à outra: no caso de spam, uma mensagem legítima classificada incorretamente possui maior custo que uma mensagem de spam chegando ao usuário, de modo que desejaríamos maximizar a precisão. Isto pode ser obtido com a métrica $F_\beta$, onde $0 < \beta < 1$ privilegia a precisão enquanto $\beta > 1$ privilegia a sensitividade:

$$F_\beta = (1+\beta^2)\frac{P\cdot R}{\beta^2\cdot P+R} \tag{2.42}$$

Tais métricas apresentam o problema de eleger uma das classes como "positiva" e tomá-la como referência, ignorando a quantidade de falsos negativos encontrados. Isto não traz problemas quando cada classe representa exatamente metade das instâncias do conjunto; se este não for o caso, encontramos uma medida de qualidade muito diferente para a mesma matriz de confusão ao analisar as medidas duais tomando a outra classe como positiva (e.g., não-spam). A Tabela 6 ilustra esta diferença para a classificação de dois conjuntos de dados com proporções diferentes de exemplos positivos e negativos.

O coeficiente de correlação de Matthews $M$ provê uma medida menos enviesada pela proporção das classes no conjunto, além de ser simétrico, sem assumir que uma das classes é "positiva" (MATTHEWS *et al.*, 1985). Sua fórmula é dada na Equação 2.43. Seu valor varia entre -1 e +1, onde +1 indica classificação perfeita, 0 indica que ela não é distinguível de uma classificação aleatória e -1 indica uma classificação reversa perfeita.

| | | Conjunto 1 | | Conjunto 2 | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | Spam (100) | Legítimo (100) | Spam (100) | Legítimo (900) |
| Classes | Spam | 90 | 5 | 90 | 5 |
| | Legítimo | 10 | **95** | 10 | **895** |
| | | $P = 90/100$ | $\hat{\mathbf{P}} = \mathbf{95/100}$ | $P = 90/100$ | $\hat{\mathbf{P}} = \mathbf{895/900}$ |
| | | $R = 90/95$ | $\hat{\mathbf{R}} = \mathbf{95/105}$ | $R = 90/95$ | $\hat{\mathbf{R}} = \mathbf{895/905}$ |
| | | $M = 0.851$ | | $M = 0.915$ | |

Tabela 6 – Exemplo de diferentes matrizes de confusão com os mesmos valores de precisão ($P$) e sensitividade ($R$) para uma classe, mas diferentes para a outra ($\hat{P}$ e $\hat{R}$). Note que o conjunto 1 está igualmente dividido entre as classes, e os valores duais $\hat{P}$ e $\hat{R}$ encontram-se na mesma escala que os primais. No conjunto 2, existem muitos mais exemplos de elementos legítimos, e logo as medidas duais são distintas e mais próximas de 1. Intuitivamente, o classificador é mais efetivo no conjunto 2, uma vez que classifica corretamente muito bem os elementos "negativos". Esta característica é capturada pelo coeficiente de Matthews $M$.

$$\begin{aligned} s &= \frac{\mathrm{TP}+\mathrm{FN}}{N} \\ p &= \frac{\mathrm{TP}+\mathrm{FP}}{N} \\ M &= \frac{\mathrm{TP}/N - sp}{\sqrt{sp(1-s)(1-p)}} \end{aligned} \tag{2.43}$$

## 2.5.2 Teste de confiabilidade

Na seção 2.5.1 mostramos índices para validação de agrupamentos/partições quando se possui uma partição de referência, onde os resultados esperados são conhecidos. Na análise exploratória de dados, contudo, tal conjunto de referência não existe ou é apenas parcial. Obter uma estimativa da confiabilidade de um resultado é uma tarefa necessária para interpretá-lo corretamente e tomar decisões baseadas nele. Uma vez que nessas situações possuímos apenas o conjunto de dados que desejamos analisar, qualquer estimativa da distribuição "real" de onde o conjunto foi amostrado deve ser estimada a partir dos próprios elementos.

### 2.5.2.1 Métodos de reamostragem

Uma técnica para se obter uma distribuição de um estimador - digamos, a média de um conjunto - é realizar a amostra de novos conjuntos de dados a partir do universo original e calcular o estimador para cada um deles. Evidentemente, tal técnica é muito custosa e pode não ser possível realizar novas amostras de um universo, como se notam em diversos conjuntos de dados disponíveis.

Os **métodos de reamostragem** consistem em utilizar o conjunto de dados original como se fosse o universo de onde instâncias podem ser amostradas, e então calcular estimadores sobre sub-amostras dele para obter uma distribuição. Se o conjunto de dados original foi amostrado

de forma independente, então diversos estimadores como média e variância se aproximam com quase certeza do estimador original.

Uma abordagem simples, chamada *jackknife* (“canivete”) (TUKEY, 1958), consiste em repetir diversas vezes a análise de uma sub-amostra do conjunto: para um conjunto de $N$ elementos, realizamos $N$ análises com $N-1$ elementos, a cada vez removendo o $i$-ésimo elemento, com $i = 1..N$. Uma ligeira deficiência deste método é que os conjuntos reamostrados não possuem a mesma dimensão do conjunto original.

Uma abordagem um pouco mais complexa, mas mais poderosa, é chamada *bootstrap* (“autoinicialização”) (FELSENSTEIN, 1985), e consiste em realizar reamostras aleatoriamente com reposição até obter um novo conjunto com a mesma dimensão do original. Este procedimento é repetido um grande número de vezes para se obter uma distribuição representativa do estimador desejado. Caso o conjunto seja pequeno é possível enumerar todos as reamostras possíveis e obter o estimador para cada uma delas: para um conjunto de tamanho $N$, existem $\binom{2N-1}{N}$ possíveis novos conjuntos.

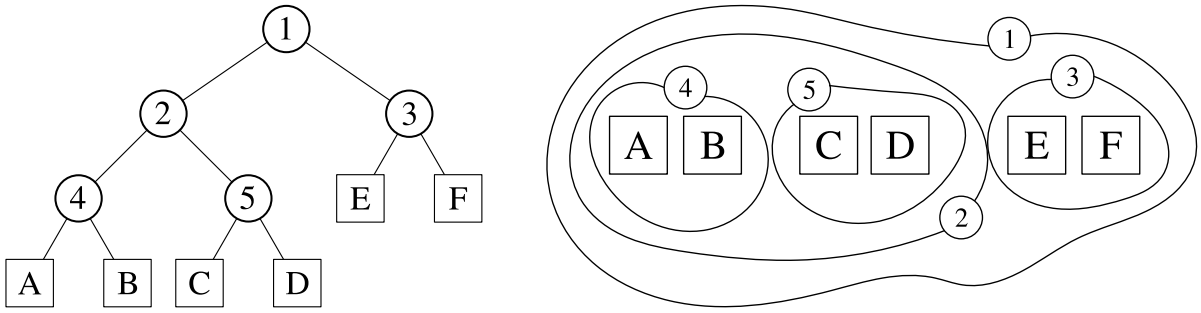
#### 2.5.2.2 Teste para filogenias

Quando aplicado em filogenia, onde se tem uma matriz de $M$ táxons por $N$ caracteres, é necessário decidir qual é o conjunto a ser reamostrado: seriam as espécies presentes com suas características, ou os caracteres que as compõem? Felsenstein argumenta que o conjunto verdadeiramente independente é o dos caracteres, que seriam uma amostra aleatória de todos os caracteres possíveis (FELSENSTEIN, 1985). Tal discussão não é tão interessante no nosso caso, uma vez que a matriz que utilizamos é quadrada e simétrica.

Uma vez realizadas diversas reamostragens, seja pelo *jackknife* ou *bootstrap*, obtemos um conjunto de árvores filogenéticas como resultado. Um método simples para determinar uma única árvore deste conjunto é realizar uma **árvore de maioria**, onde as ramificações mais frequentes são adotadas como corretas. Cada ramificação possui então um certo grau de certeza, dado pela frequência em que ocorre por todas as árvores.

Outro método mais estrito visualiza uma árvore (enraizada) como um conjunto de grupos induzidos pelos descendentes dos nós internos, direta ou indiretamente. Em Biologia, tais grupos são chamados **grupos monofiléticos**, sendo um grupo de espécies que possuem um ancestral comum que não é ancestral de nenhuma outra espécie fora do grupo. Caso as árvores não possuam raiz, selecionamos aleatoriamente um mesmo elemento para ser a raiz em todas as árvores. Tais grupos estão ilustrados na Figura 13.

Desta maneira, podemos simplesmente contar a ocorrência de tais grupos dentre todas as árvores, e determinar quais grupos são frequentes o suficiente. Por exemplo, se desejarmos um nível de confiança de 95%, escolheríamos todos os grupos que ocorrem em mais de 95% das árvores. A árvore de consenso resultante poderá conter ramificações múltiplas, que consistem




(a) Árvore com nós anotados (b) Grupos induzidos

Figura 13 – Grupos de folhas induzidos pelos nós internos

em grupos cuja estrutura interna não é consistente o bastante. Note que a árvore de maioria corresponde a um nível de confiança de 50% das replicações.

CAPÍTULO

# 3

# EXTENSÕES PROPOSTAS

Neste capítulo, ressaltamos as principais extensões propostas neste trabalho às etapas do método DAMICORE, que também podem ter aplicabilidade mais ampla. Além destes tópicos, também deve ser ressaltada a própria construção da ferramenta `damicorepy`, detalhada no capítulo 4, que contém mais possibilidades de configuração que a implementação existente, contando por exemplo com alternativas para métodos de detecção de comunidades além do *Fast Newman*.

Neste capítulo, propomos:

- Na seção 3.1, propomos uma variação da métrica NCD utilizando uma função de pareamento alternativa, que não a concatenação usualmente empregada. Esta função soluciona uma limitação da NCD identificada na literatura.
- Na seção 3.2, destacamos uma limitação do modelo de configuração de grafos quando aplicados a árvores, e propomos dois novos modelos que levam a definições alternativas da medida de modularidade. Por conseguinte, uma medida de modularidade alternativa leva a diferentes implementações dos métodos de otimização de modularidade apresentados na seção 2.3.3.2.
- Na seção 3.3, propomos um novo método de classificação baseado na DAMICORE.

## 3.1 NCD com pareamento por intercalação de blocos

Alguns compressores limitam a quantidade de memória utilizada, trabalhando a cada passo com apenas uma seção da *string* original. A distribuição padrão do compressor gzip limita a busca de referências prévias a uma janela deslizante de aproximadamente 32 KiB, enquanto o compressor bzip2 permite realizar a transformação de Burrows-Wheeler em blocos de no

máximo 900 KiB. Isto limita a efetividade da NCD em detecção de similaridades para objetos grandes, como observado por Cebrian, Alfonseca e Ortega (2005).

Nestes casos, ao usar concatenação como função de pareamento, o compressor obtém informação conjunta dos objetos apenas no espaço $W$ da janela que intercepta ambos, como ilustrado na Figura 14a. Uma vez que a soma do tamanho de ambos seja maior que a janela, alguma seção de alguma das *strings* será comprimida sem possuir contexto de padrões do outro objeto. Outro efeito é que uma *string* $x$ aleatória com $\|x\| > W$ possui $\mathrm{NCD}(x,x) \gg 0$, violando a propriedade de coincidência. Isto indica que mesmo a comparação mais simples, de dois objetos idênticos, pode não produzir resultados significativos.

Para superar esta limitação, este trabalho propõe uma função de pareamento que intercala blocos de de cada *string*, como ilustrado na Figura 14b. Os blocos possuem tamanho fixo $b$, exceto pelo último em cada *string*, que pode ser menor. Apenas os primeiros blocos de cada objeto são intercalados; caso uma *string* seja maior que a outra, seus últimos blocos são simplesmente concatenados.


(a) Concatenação


(b) Intercalação

Figura 14 – Ao se usar alternação de blocos como codificação de dois objetos, um compressor que enxerga apenas uma parte da sequência de bits por vez (janela) pode visualizar uma fração igual de cada objeto.

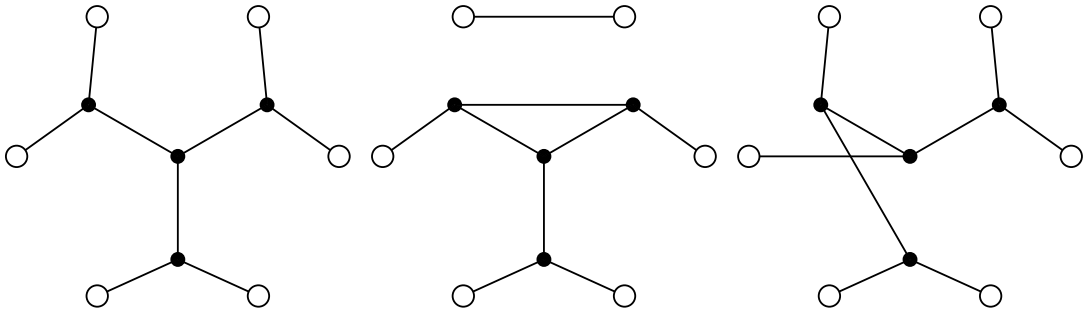
Como descrito, a intercalação já seria capaz de garantir a propriedade de coincidência, uma vez que cada janela conteria uma subsequência composta de blocos idênticos, como será comprovado na seção 5.1.1. Parece interessante que $b$ seja um divisor exato de $W$ para que a janela contenha sempre uma fração igual de ambos os objetos. Um ponto negativo desta estratégia é que a separação em blocos pode remover periodicidades ou separar subsequências frequentes da *string* ao adicionar um espaçamento entre partes do mesmo objeto. Também, não está claro se é legítimo utilizar o tamanho da compressão dos objetos individuais ($|Z(x)|$ e $|Z(y)|$) na fórmula da NCD ou se deveria-se modificar o objeto de alguma maneira.

## 3.2 Agrupamento em árvores

Embora árvores sejam apenas um tipo específico de grafo, elas possuem algumas propriedades que são ignoradas ao utilizar um algoritmo de detecção de comunidades genérico. Para começar, a intuição que uma comunidade possui “mais arestas” dentro do que fora faz pouco

sentido em árvores: qualquer sub-árvore conexa $c$ com $n_c$ nós possui exatamente $n_c - 1$ arestas dentro, e a única incógnita é o número de arestas exteriores.

O modelo nulo utilizado para calcular modularidade também ignora a propriedade de árvores não conterem ciclos. O modelo de configuração apenas busca preservar a distribuição de graus de um grafo, mas esta é uma propriedade fixada em árvores binárias: uma árvore binária com $n$ folhas possui $n$ vértices com grau 1 (as folhas) e $n-2$ vértices com grau 3 (nós internos). Contudo, um grafo aleatório com esta distribuição de graus provavelmente é desconexo e com ciclos, com probabilidade $\approx 1 - \exp(-0.14n)$[1]. A figura 15 ilustra alguns possíveis grafos aleatórios obtidos reconectando arestas de uma árvore binária.



(a) Árvore binária original (b) Reconexão desconexa (c) Reconexão conexa

Figura 15 – Exemplos de grafos nulos com a mesma distribuição de graus do grafo original. Um grafo nulo pode ser obtido a partir do original trocando aleatoriamente os extremos de duas arestas simultaneamente, o que preserva a distribuição de graus.

Existem diversos métodos clássicos para particionamento de árvores na literatura, mas em geral estes requerem que algum parâmetro externo seja especificado. Um problema de partição de árvore pode ser visto como o problema de encontrar as $k$ arestas que devem ser cortadas para produzir cada grupo como uma componente, ou $k+1$ sub-árvores. Seja $w_s = \sum_{ij \in s} w_{ij}$ a soma dos pesos das arestas da sub-árvore $s$. O método de Lukes' encontra a partição que minimiza o peso das arestas cortadas com a restrição de que $w_s \leq W$ para todas as sub-árvores induzidas pelos cortes, para um dado $W$ (LUKES, 1974). Frederickson (1991) apresenta algoritmos lineares que ou maximizam o mínimo $w_s$, ou minimizam o máximo $w_s$ para um número fixado de cortes $k$. Maravalle, Simeone e Naldini (1997) possuem uma abordagem diferente, onde a árvore é simplesmente uma topologia das relações e a (dis)similaridade entre os elementos é dada por uma matriz de distâncias. Eles apresentam um algoritmo cúbico que maximiza o *split*[2]entre

[1] Considere o grafo aleatório em construção, com $n$ vértices contendo um "toco" de aresta (folhas) e $n-2$ contendo três "tocos" (nós internos). A cada passo, selecionam-se dois "tocos" para formar uma aresta. Se duas folhas se conectarem, o grafo se torna desconexo. Conectando-se uma folha por vez, é necessário escolher um dos $\approx 3n$ tocos internos dentre os $\approx 4n$ disponíveis; e a cada folha seguinte existe um toco interno a menos e dois tocos totais a menos. A probabilidade de duas folhas não se conectarem é aproximadamente

$$\prod_{i=0}^{n-1} \frac{3n-i}{4n-2i} \approx \exp\left(-\frac{n}{2}(\log 4 - \log 3)\right) \approx \exp(-0.14n)$$

grupos para um número fixado de cortes $k$.

Este trabalho propõe duas variações do algoritmo "Fast Newman" ao alterar o modelo nulo utilizado para calcular a modularidade. A primeira é restrita a árvores binárias sem raiz e não-ponderadas, onde há interesse apenas na probabilidade $P_{ij}$ de conexão entre vértices. A segunda é aplicável a quaisquer grafos, mas exige uma amostragem suficiente de uma distribuição que grafos genéricos nem sempre possuem.

### 3.2.1 Modelo de árvore conexa

Sob o modelo de configuração, a probabilidade $P_{ij} = \frac{k_i k_j}{2m}$ de conexão entre dois nós $i$ e $j$ de uma árvore binária depende apenas de suas classes enquanto nós folha ($L$, com $k = 1$) ou interno ($I$, com $k = 3$). A probabilidade de conexão entre elementos de cada classe pode ser expressa na seguinte tabela, onde $m = 2n - 3$ é o número de arestas em uma árvore com $n$ folhas.

| $P_{C_i,C_j}$ | Folha ($L$) | Nó interno ($I$) |
|---|---|---|
| Folha ($L$) | $\frac{1}{2m}$ | $\frac{3}{2m}$ |
| Nó interno ($I$) | $\frac{3}{2m}$ | $\frac{9}{2m}$ |

Uma maneira para garantir a conectividade de uma árvore binária, preservando a distribuição de graus e proibindo a formação de ciclos, é garantir que as folhas se conectem apenas a nós internos ao zerar a probabilidade de conexão $P_{LL}$. As probabilidades $P_{LI} = P_{IL}$ e $P_{II}$ são então alteradas para garantir as seguintes restrições:

$$P_L = \sum_{i \in L} P_{LL} + \sum_{j \in I} P_{LI} = 1$$
$$P_I = \sum_{i \in L} P_{IL} + \sum_{j \in I} P_{II} = 3$$

Isto nos leva à seguinte tabela, para um modelo de configuração que gera árvores binárias aleatórias dado um parâmetro $n$, ao qual chamamos **modelo de árvore conexa I**.

| $P_{C_i,C_j}$ | Folha ($L$) | Nó interno ($I$) |
|---|---|---|
| Folha ($L$) | $0$ | $\frac{1}{n-2}$ |
| Nó interno ($I$) | $\frac{1}{n-2}$ | $\frac{2(n-3)}{(n-2)^2}$ |

Este modelo nulo é uma melhor aproximação de qualquer árvore com $n$ folhas, mas não aproxima a estrutura da árvore com a mesma qualidade que é possível em um grafo genérico. Árvores binárias sem raiz possuem uma distribuição de graus muito estreita, de modo que podem-se designar quatro classes de vértice, baseado em seu grau e a quais nós ele está conectado:

[2] *Split* é definido como a mínima distância entre quaisquer pares de grupos. A distância entre grupos é definida como o mínimo das distâncias entre os pares de elementos de cada grupo ($d_{\min}$, como definido na seção 2.4).

- $k = 1$: folha ($L$)
- $k = 3$: nó interno ($I$)
  - $A$: conectado a um nó interno
  - $B$: conectado a dois nós internos
  - $C$: conectado a três nós internos

Esta classificação está ilustrada na figura 16. O número de vértices na classe $A$ é um parâmetro livre $a$, variando entre $[2, \lfloor n/2 \rfloor]$. O número de vértices nas classes $B$ e $C$ são dados em função de $n$ e $a$: $b = n - 2a$ e $c = a - 2$, respectivamente. Com esta classificação de nós, podemos capturar com mais fidelidade a estrutura da árvore em um modelo aleatório, o qual chamamos de **modelo de árvore conexa II**.

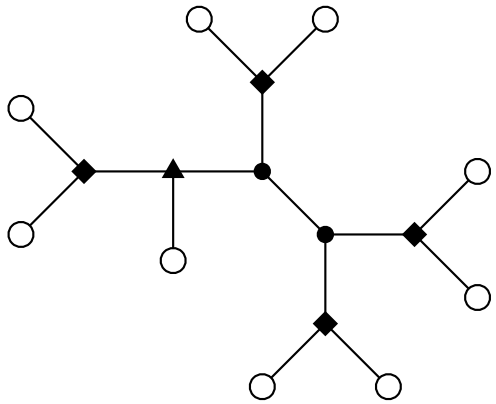


Figura 16 – Classificação dos vértices em uma árvore binária sem raiz. Círculos brancos são folhas, quadrados pretos pertencem à classe $A$, triângulos pretos pertencem à classe $B$ e círculos pretos à classe $C$. Nesta árvore tem-se: $n = 9, a = 4, b = 1, c = 2$.

As probabilidades de conexão das folhas com as outras classes são de fácil derivação, como segue:

$$\sum_{i \in L} P_{LL} = 0 \Rightarrow P_{LL} = 0$$
$$\sum_{i \in L} P_{AL} = 2 \Rightarrow P_{AL} = \frac{2}{n}$$
$$\sum_{i \in L} P_{BL} = 1 \Rightarrow P_{BL} = \frac{1}{n}$$
$$\sum_{i \in L} P_{CL} = 0 \Rightarrow P_{CL} = 0$$

As probabilidades de conexão entre os nós internos, por sua vez, devem satisfazer algumas restrições para garantir a distribuição de graus. Determinamos que $P_{AA} = 0$ para $n > 4$,

para evitar outro caso de árvore desconexa. Finalmente, assumimos que a probabilidade de conexão entre nós internos é idêntica para cada classe.

$$\sum_{j\in I} P_{AI} = 1$$
$$\sum_{j\in I} P_{BI} = 2$$
$$\sum_{j\in I} P_{CI} = 3$$
$$P_{AA} = 0$$
$$P_A = P_{AB} = P_{AC}$$
$$P_B = P_{AB} = P_{BB} = P_{BC}$$
$$P_C = P_{AC} = P_{BC} = P_{CC}$$

Estas restrições levam à seguinte tabela de probabilidades $P_{ij}$. A modularidade de uma partição da árvore é então calculada pela equação 2.21. Note que em ambos os tipos I e II de modelos de árvore conexa estamos ignorando o peso das arestas.

| $P_{C_i,C_j}$ | $L$ | $A$ | $B$ | $C$ |
|---|---|---|---|---|
| $L$ | 0 | $\frac{2}{n}$ | $\frac{1}{n}$ | 0 |
| $A$ | | 0 | $\frac{1}{n}$ | 0 |
| $B$ | | | $\frac{1}{n}$ | 0 |
| $C$ | | | | 0 |

### 3.2.2 Correlação de graus

O segundo modelo proposto consiste em criar um grafo aleatório que preserve não apenas a distribuição de graus, mas também sua correlação. A **correlação de graus** é a distribuição conjunta $P(k,k')$ das arestas contendo um extremo com grau $k$ e outro com grau $k'$. Esta distribuição pode ser obtida de um grafo simplesmente por:

$$P(k,k') = \frac{m_{kk'}}{m} = \frac{1}{2m}\sum_{k_i=k}\sum_{k_j=k'} A_{ij} \tag{3.1}$$

onde $m_{kk'}$ é o número de arestas com vértices com graus $k$ e $k'$. Esta medida também pode ser estendida para grafos ponderados, fornecendo o peso esperado $\langle w(k,k')\rangle$:

$$\langle w(k,k')\rangle = \frac{1}{2S}\sum_{k_i=k}\sum_{k_j=k'} A_{ij}w_{ij} \tag{3.2}$$

A probabilidade de conexão $P_{ij}$ deste modelo nulo pode ser obtida simplesmente por $P(k_i,k_j)$, e respectivamente para pesos esperados. Para grafos com distribuição de graus com

cauda longa, como a maioria das redes complexas observadas no mundo real, as probabilidades/pesos esperados são difíceis de obter experimentalmente, pois existem poucas amostras de vértices com grau alto. Contudo, este modelo é promissor para árvores e grafos quase regulares, onde a distribuição de graus é bastante estreita e existem várias instâncias de arestas $k - k'$ para os graus observados.

Considerando apenas os graus de folha ($L$, com $k = 1$) e nós internos ($I$, com $k = 3$), podemos calculas os pesos esperados como:

$$\begin{aligned}
\langle w(L,L)\rangle &= 0 \\
\langle w(L,I)\rangle &= \frac{1}{2S}\sum_{i\in L}\sum_{j\in I} A_{ij}w_{ij} = \frac{S_L}{2S_L + 2S_I} \\
\langle w(I,I)\rangle &= \frac{1}{2S}\sum_{j\in I}\sum_{j\in I} A_{ij}w_{ij} = \frac{S_I}{2S_L + 2S_I}
\end{aligned}$$

onde $S_L$ é a soma dos pesos das arestas que contém uma folha como extremo, e $S_I$ é a soma dos pesos das arestas que contém apenas nós internos como extremos. Desconsiderando-os os pesos, obtemos probabilidades similares às obtidas para o modelo de árvores conexas I:

$$\begin{aligned}
P_{LL} &= 0 \\
P_{LI} &= \frac{n}{4n-6} \\
P_{II} &= \frac{n-2}{4n-6}
\end{aligned}$$

É possível modificar este modelo para utilizar o **grau médio dos vizinhos** $k_{nn}(k)$, definido como a média dos graus de todos os vértices adjacentes a vértices de grau $k$, como dado na equação 3.3. Esta métrica é mais robusta que a correlação de graus para o problema de amostragem citado acima, para grafos com distribuição de graus de cauda longa.

$$\begin{aligned}
k^i_{nn} &= \frac{1}{k_i}\sum_j k_j A_{ij} \\
k_{nn}(k) &= \sum_{k'} k' P(k'|k) \\
&= \frac{1}{N_k}\sum_{k_i=k} k^i_{nn}
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Note que as classes no modelo de árvores conexas II podem ser compreendidas como uma tupla $(k_i, k^i_{nn})$ onde

- $L = (1,3)$: grau 1, único vizinho possui grau 3

- $A = (3,5/3)$: grau 3, onde dois vizinhos têm grau 1 (folhas) e um vizinho tem grau 3
- $B = (3,7/3)$: grau 3, onde um vizinho tem grau 1 (folha) e dois vizinhos têm grau 3
- $C = (3,3)$: grau 3, onde todos os vizinhos têm grau 3

Este modelo é ainda mais atrelado à estrutura da árvore, uma vez que utiliza a quantidade de arestas $k - k_{nn}$ para determinar os pesos observados, sem assumir que a probabilidade de conexão entre nós internos é a mesma.

## 3.3 Classificação por árvores de quarteto

A metodologia DAMICORE apresentada é um *framework* de agrupamento para aprendizado não-supervisionado. Um dos objetivos desta pesquisa é estender suas capacidades para tarefas de classificação, onde amostras não anotadas são comparadas com um conjunto de treinamento para determinar suas anotações.

Este é um objetivo muito relevante em si mesmo, permitindo aplicar a metodologia para um conjunto de problemas que ainda não consideramos. Também, tal desenvolvimento pode ajudar a aplicar a ferramenta de agrupamento para conjuntos de dados maiores. Análises de desempenho indicam que o gargalo da metodologia de agrupamento encontra-se no passo de cálculo da métrica: construir uma matriz de distâncias de tamanho $\mathcal{O}(n^2)$ é custoso para conjuntos de tamanho moderado (~1000 elementos), e aplicar esta técnica para conjuntos maiores é infactível sem recursos computacionais consideráveis.

Uma maneira de contornar essa limitação é agrupar um pequeno subconjunto de $k$ elementos e determinar seus grupos como classes; então, podem-se classificar os elementos restantes para estes grupos obtidos, o que possui complexidade $\mathcal{O}(k(n-k))$. Se $k$ é um fator constante $\alpha$ de $n$, o ganho em desempenho é da ordem de $\alpha(1-\alpha)$.

Uma deficiência do classificador Naive Bayes é exigir que se suponha uma função de distribuição de probabilidades para avaliar $P(x_i|C)$. A derivação apresentada para a distribuição normal pode não ser uma boa escolha para o problema em vista, requerendo, talvez, empregar uma de diversas técnicas de estimação de densidade não-paramétrica.

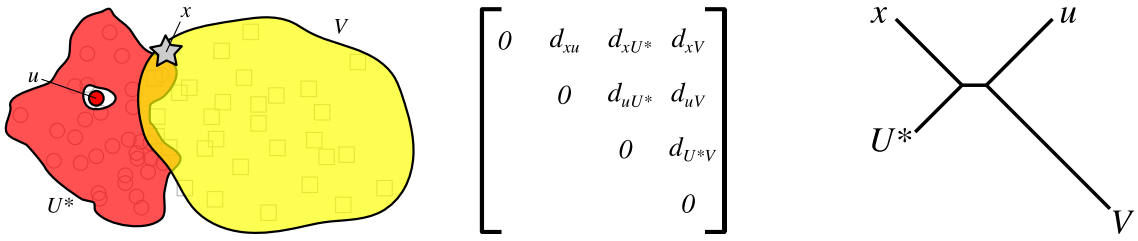
Intuitivamente, busca-se uma medida da proximidade e espalhamento entre classes, incluindo de uma classe para si mesma. Se um elemento é tanto "próximo" quanto "dentro da largura" de uma dada classe, mas não de outras, podemos ter confiança de que este elemento pertence à classe.

Uma estratégia desenvolvida por Delbem (2012) busca identificar se uma instância $x$ pode ser classificada dentro de uma classe $U$ ao tentar agrupá-la com a própria classe e com seu complemento $\bar{U} = V$. Para se certificar de que o agrupamento tem mérito, um elemento $u$ é removido de $U$, chamado de *outgroup*, e "compete" com $x$ para se agrupar com $U$.

O propósito do *outgroup* é prover uma medida do "espalhamento" de uma classe no espaço de características com a distância $d_{uU}$, e sua "sobreposição" em outras classes com a distância $d_{uV}$. A escolha do *outgroup* pode ser realizada de diversas maneiras:

- Seleção aleatória;
- Elemento mais próximo do grupo, isto é, $\arg\min_u d_{uU}$;
- Elemento mediano, isto é, o elemento cuja distância é a mediana da distribuição de distâncias dentro da classe $D^*(U,U)$.

A técnica utiliza, na realidade, a classe $U^* = U \setminus \{u\}$, isto é, o conjunto $U$ sem o *outgroup*. Isto é necessário pois a distância $d(u,U)$ pode ser artificialmente pequena se $u$ estiver contido em $U$, ou zero caso $d = d_{\min}$. Uma vez computadas todas as distâncias entre os elementos $x$, $u$, $U^*$ e $V$, constrói-se uma árvore filogenética com o método de Junção de Vizinhos, como mostrado na Figura 17.

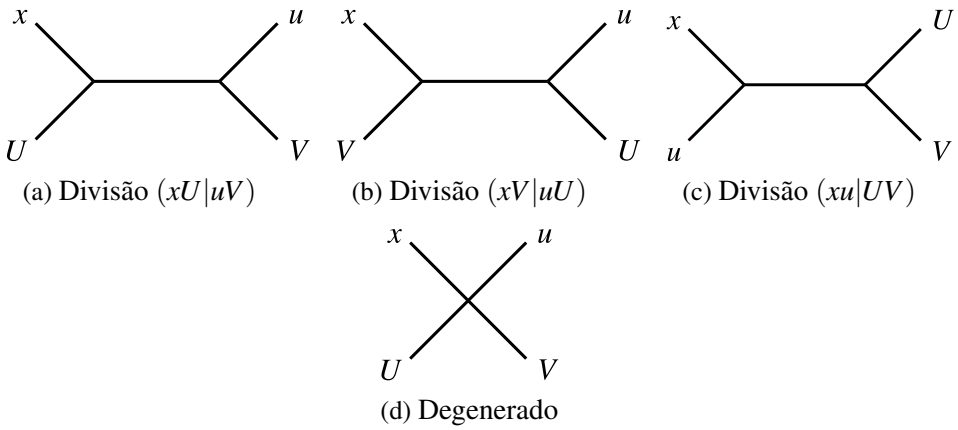



(a) Elementos (b) Matriz de distância (c) Árvore filogenética

Figura 17 – Sequência de classificação, testando se $x \in U$

Ao invés de realizar um passo de detecção de comunidades, que tem pouco significado para uma árvore tão pequena, considera-se apenas a divisão entre os elementos. Existem quatro possíveis resultados para este procedimento, correspondentes a cada uma das possíveis **árvores de quarteto** ilustradas na Figura 18:

- Divisão $(xU|uV)$: $x$ está mais próximo de $U$ que $u$. Considera-se isso um resultado **positivo forte** de que $x$ pertence a $U$ (figura 18a);
- Divisão $(xV|uU)$: $u$ está mais próximo de $U$ que $x$. Considera-se isso um resultado **negativo fraco** de que $x$ pertence a $U$ (figura 18b);
- Divisão $(xu|UV)$: os elementos $x$ e $u$ estão mais próximos entre si do que a cada uma das classes. Considera-se isso um resultado **neutro** (figura 18c);
- Sem divisão: todos os elementos estão equidistantes entre si e a árvore é degenerada. Considera-se isso também um resultado **neutro** (figura 18d).




(a) Divisão $(xU|uV)$ (b) Divisão $(xV|uU)$ (c) Divisão $(xu|UV)$

(d) Degenerado

Figura 18 – Possíveis árvores de quarteto rotuladas

Realizando este procedimento para todas as classes em $\mathscr{C}$, obtém-se um vetor de resultados positivos-neutros-negativos para cada instância. Pode-se então classificar um elemento com o seguinte processo de decisão:

1. Se existe um único resultado positivo para a classe $C$, emita $C$;
2. Senão, se existem múltiplos resultados positivos, ou apenas resultados negativos, emita "erro";
3. Senão, se existe um único resultado neutro para a classe $C$ e resultados negativos para todas as otras classes, emita $C$ por eliminação;
4. Senão, existe mais de um resultado neutro, emita a lista de classes possíveis ou "sem classificação".

Como exemplo deste procedimento, considere o seguinte caso, obtido de um experimento de identificação de línguas exposto na seção 5.4, onde buscamos classificar diversos documentos HTML em um conjunto de línguas europeias. Para cada instância efetuamos o teste de pertencimento a cada língua conforme descrito, usando o compressor PPMd e $d_{\min}$ como distância ponto-a-ponto e ponto-a-conjunto.

| Documento | Língua | Resultados | | | | | | | Classificação |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | en | de | fr | it | es | pt | fi | |
| dev0087.html | es | - | - | - | - | + | - | - | es |
| dev0179.html | de | - | - | - | - | - | - | - | Erro |
| trn0049.html | fi | o | - | - | - | - | - | + | fi |
| trn0120.html | it | - | - | + | + | - | - | - | fr, it |
| trn0155.html | pt | - | - | - | - | o | + | - | pt |
| trn0803.html | it | - | - | o | + | + | - | - | it, es |

Pode-se medir a confiança em uma classificação contando o número de resultados positivos e negativos. Uma classificação bem sucedida contendo muitos contra-exemplos negativos

fornece uma conclusão forte, enquanto uma com diversos contra-exemplos neutros é uma conclusão fraca, e uma classificação mal-sucedida receberia uma pontuação negativa. Seja $n^+$ o número de resultados positivos, $n^-$ o número de resultados negativos e $n = |\mathscr{C}|$ o número de resultados. A confiança $t$ da classificação é dado pela Equação 3.4.

$$t = \begin{cases} (n^+ + n^-)/n & \text{se } n^+ \leq 1 \text{ e } n^- < n \\ -|n^+ - n^-|/n & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{3.4}$$

No exemplo anterior, teríamos os seguintes valores de confiança para cada classificação.

| Documento | Língua | Número de resultados | | | Classificação | Confiança |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | | Positivos | Negativos | Neutros | | |
| dev0087.html | es | 1 | 6 | 0 | es | 1.0 |
| dev0179.html | de | 0 | 7 | 0 | Erro | −1.0 |
| trn0049.html | fi | 1 | 5 | 1 | fi | 0.86 |
| trn0120.html | it | 2 | 5 | 0 | fr, it | −0.43 |
| trn0155.html | pt | 1 | 5 | 1 | pt | 0.86 |
| trn0803.html | it | 2 | 4 | 1 | it, es | −0.29 |

Um exemplo para todos os possíveis resultados com $n = 4$ é mostrado na Figura 19. Neste diagrama, são mostradas todas as combinações possíveis de resultados positivos, neutros e negativos para uma classificação, assim como a confiança atribuída a esta. As combinações estão organizadas em uma treliça, onde cada elemento adjacente (representado por uma aresta) contém a modificação mais "próxima", onde uma classificação positiva torna-se neutra, uma neutra em uma negativa, e vice-versa. Cada nível desta treliça corresponde a um número de resultados neutros em ordem decrescente.

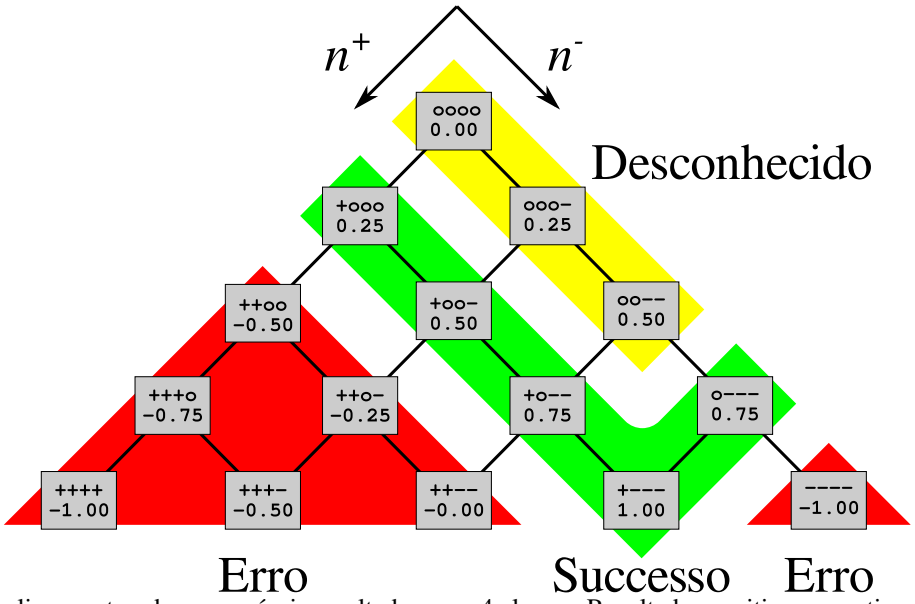



Figura 19 – Treliça mostrando os possíveis resultados com 4 classes. Resultados positivos, negativos e neutros são mostrados por, respectivamente, '+', '-' e 'o'. A confiança é mostrada abaixo de cada combinação.

CAPÍTULO

# 4

# DESENVOLVIMENTO

Neste trabalho, desenvolvemos uma biblioteca compreensiva de ferramentas para realizar experimentos com a metodologia DAMICORE, contendo também utilitários independentes que podem ser de interesse de qualquer pesquisador. Cada ferramenta foi implementada como um módulo em Python com interface por linha de comando, de modo que pode ser utilizada diretamente por um usuário final, integrada com programas na mesma linguagem, ou vista como um binário isolado que pode ser invocado com chamadas ao sistema ou *scripts* de *shell*. Este capítulo detalha a motivação para seu desenvolvimento, a arquitetura extensível do sistema, e suas principais contribuições técnicas.

## 4.1 Motivação

A metodologia DAMICORE foi implementada inicialmente por Delbem utilizando-se de componentes já disponíveis: a implementação da NCD disponibilizada pelos seus autores originais no *toolkit* CompLearn, a implementação de Junção de Vizinhos disponibilizada no software `PHYLIP` e uma implementação do algoritmo *Fast Newman* desenvolvida por Soares em C (CILIBRASI, 2005; PLOTREE; PLOTGRAM, 1989). Tal implementação já permitia a composição de ferramentas simplesmente pela combinação de entradas e saídas textuais, embora o formato utilizado por cada ferramenta fosse dissimilar: enquanto o binário `ncd` da CompLearn seja configurável por *flags* pela linha de comando, o `PHYLIP` requer entrada interativa, simulada com uma sequência pela entrada padrão, e a implementação de *Fast Newman* não permite nenhuma configuração. Ainda, são necessários *scripts* para conversão entre o formato de saída de uma componente e outra, uma vez que a única interface entre elas é textual.

Outra deficiência desta implementação é não permitir modificações nos próprios algoritmos utilizados em cada componente: por exemplo, utilizar uma função de pareamento ou compressor diferentes para a NCD ou diferentes algoritmos de detecção de comunidades. Dado que um objetivo inicial deste trabalho era estudar a propriedade e impacto de cada componente

no resultado de agrupamento final, era necessário uma arquitetura mais extensível que permitisse um controle mais granular das propriedades de cada etapa.

Os principais aspectos considerados para a escolha da linguagem foram desempenho, manutenibilidade e extensibilidade, que são justificados a seguir.

### 4.1.1 Desempenho

A escolha padrão em computação científica é realizar implementações diretas em C ou Fortran para obter o máximo desempenho possível em todos os aspectos do programa, evitando assim possíveis gargalos produzidos pelas abstrações da linguagem ou custos de *runtime* em linguagens interpretadas. Contudo, vêm aumentando o interesse em utilizar linguagens de mais alto nível como Python, Lua e Java para a coordenação geral de um programa, delegando apenas as tarefas mais custosas como cálculos matriciais para bibliotecas otimizadas.

De fato, Python possui crescente utilização pela comunidade científica graças a bibliotecas numéricas eficientes e com alto nível de abstração, como numpy, scipy, matplotlib e pandas (JONES *et al.*, 2001–). O fato de ser uma linguagem dinâmica, flexível e de rápido desenvolvimento atrai pesquisadores em análise exploratória de dados, que desejam realizar experimentos em sequência, iterando rapidamente na exploração de um conjunto de dados ou de parâmetros de modelos.

Neste trabalho, em específico, foi detectado que o gargalo de desempenho encontra-se na etapa de cálculo da matriz de distâncias, sendo a compressão realizada por bibliotecas de ligação dinâmica ou binários externos. Portanto, a sobrecarga de coordenação do programa em Python seria pequena em comparação com o custo computacional de compressão, idêntico independentemente da linguagem escolhida. Tal expectativa foi confirmada por experimentos, descritos na seção 5.2.

### 4.1.2 Extensibilidade e manutenibilidade

Python, por ser uma linguagem dinâmica, é adequada para desenvolvimento rápido e iterativo, podendo mesmo dispensar a etapa de compilação. Um modelo de experimentação popular consiste em manter uma sessão interativa onde o pesquisador manipula, depura e aprimora seu código enquanto mantém objetos em memória para serem analisados e testados. Este modelo pode ser experimentado não só pelo console como também por ferramentas como IPython Notebook, que produz um relatório com gráficos, imagens e tabelas em conjunto com o código que os produziu (PÉREZ; GRANGER, 2007).

Python impõe poucas restrições aos programadores, permitindo escolher o paradigma mais adequado para se modelar o domínio do problema. Neste trabalho optamos por um modelo orientado a objetos, que permitiu encapsular diversos aspectos díspares de implementações sob uma interface comum, simplificando as dependências entre partes não relacionadas do sistema.

Uma preocupação inicial foi a experiência de futuros mantenedores e usuários da ferramenta com a linguagem. A princípio, os primeiros usuários desta ferramenta serão outros pesquisadores com conhecimento para analisar o código-fonte, realizando modificações que sejam necessárias para seus experimentos, e criando ferramentas derivadas. A linguagem deve ser, portanto, de fácil compreensão e aprendizado; e de fato, embora a maioria dos pesquisadores sejam proficientes em C, a sintaxe de Python possui as mesmas raízes de outras linguagens procedurais e de orientação a objeto, buscando uma estrutura similar a formatos de pseudo-código. Algumas capacidades únicas e sem analogias em linguagens mais populares, como *monkey-patching* e idiomas funcionais, foram evitadas na implementação deste trabalho, preferindo a legibilidade acima de ser idiomático.

Para aumentar a manutenibilidade, estabeleceram-se algumas convenções de interface entre as componentes, permitindo que qualquer ferramenta receba/envie entrada e saída de arquivos quaisquer, ou das entradas e saída padrão; que todas utilizem um formato consistente de configuração por *flags* de linha de comando; e que as entradas e saídas devem ser no formato CSV, exceto quando for necessário para interoperar com outros programas.

## 4.2 Arquitetura

A arquitetura do sistema faz uso de orientação a objetos para garantir uma interface consistente para entidades, de modo a desacoplar conceitos e permitir a troca de componentes sem afetar a funcionalidade. As interfaces básicas são:

- `DataSource`: representa uma fonte de dados, podendo fornecer tanto uma *string* de bytes como um nome de arquivo contendo os dados;
- `DataSourceFactory`: representa um conjunto de dados capaz de produzir `DataSources`.
- `Compressor`: representa um compressor capaz de comprimir os bytes produzidos por um `DataSource`.

O diagrama de classes dos compressores está apresentado na Figura 20. A necessidade de se modelar uma fonte de dados de modo abstrato se deve a alguns compressores esperarem uma *string* de bytes como entrada (especificamente, aqueles que se utilizam das bibliotecas `zlib` e `bz2`) enquanto os demais esperam um nome de arquivo em disco. Assim, uma mesma fonte de dados pode ser utilizada por qualquer tipo de compressor, que pode ou ler uma *string* diretamente, ou invocar um binário que lerá de um arquivo.

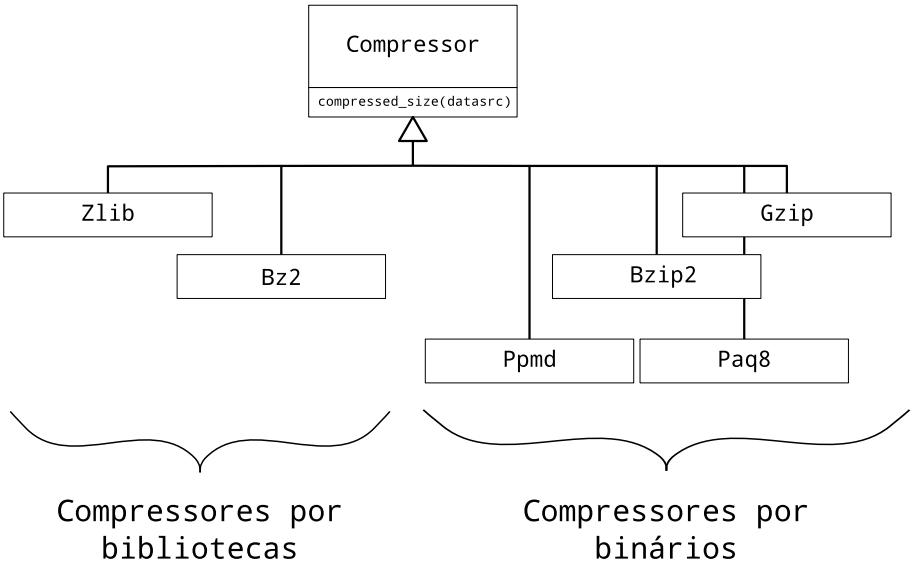



Figura 20 – Diagrama da hierarquia de classes de `Compressor`.

A abstração de uma fonte de dados é necessária não somente para compatibilizar com qualquer compressor, mas também porque os próprios dados podem ser lidos de diferentes formas. A Figura 21 apresenta o diagrama de classes do `DataSource`, onde se vê que dentre suas subclasses se encontram `String`, que contém uma sequência de bytes armazenadas em memória, e um `Filename`, que contém o nome de um arquivo em disco. Caso um cliente invoque `String.get_filename()`, o objeto cria um arquivo temporário contendo o conteúdo da *string* e retorna seu nome, e o destroi na chamada de `String.close()`. De modo equivalente, caso um cliente invoque `Filename.get_string()`, o objeto então lê os bytes do arquivo. Em ambos os casos, o resultado da chamada é armazenado em *cache* para evitar a criação de múltiplos arquivos ou a leitura repetida do disco.

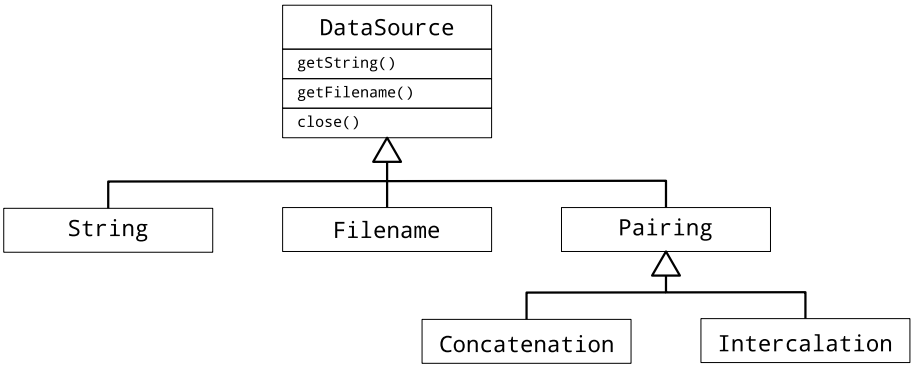



Figura 21 – Diagrama da hierarquia de classes de `DataSource`.

Com isso, a etapa de compressão será mais eficiente se existir uma compatibilidade entre o compressor e a origem do `DataSource`: se o compressor `Zlib` for utilizado com uma `String`, não será necessário criar arquivos temporários, e se o compressor `Gzip` for utilizado com um

`Filename`, não será necessário abrir o arquivo e ler diretamente para a memória do programa, delegando ao binário realizar isso.

A subclasse `Pairing` de `DataSource` representa uma função de pareamento utilizada na NCD: `Concatenation` realiza a concatenação dos bytes de dois `DataSources`, e `Intercalation` realiza sua intercalação, como descrito na seção 3.1, para um tamanho de bloco especificado na construção do objeto. Esta implementação também é mais eficiente caso os `DataSources` sejam compatíveis, podendo realizar operações em memória para duas `Strings` e manipulação de blocos com chamadas ao sistema com dois `Filenames`. Estas operações são sempre realizadas de forma "atrasada" (*lazy*), para evitar a produção de muitos arquivos intermediários e/ou sequências de bytes longas em memória.

Então, define-se um objeto que realiza a NCD entre dois `DataSources`, definida na Equação 2.3, da seguinte maneira:

```
class Ncd(object):
  # Construtor, recebendo um compressor e uma função de pareamento
  def __init__(self, compressor, pairing):
    self.compressor = compressor
    self.pairing = pairing

  # x e y são do tipo DataSource. __call__ fornece a sobrecarga de chamada
  # de função em Python.
  def __call__(self, x, y):
    # Calcula o comprimento comprimido de cada DataSource
    zx = self.compressor.compressed_size(x)
    zy = self.compressor.compressed_size(y)

    # Calcula o comprimento comprimido do pareamento de DataSources
    xy = self.pairing.pair(x, y)
    zxy = self.compressor.compressed_size(xy)
    xy.close()

    # Calcula a NCD dos DataSources
    return float(zxy - min(zx, zy)) / max(zx, zy)

# Exemplo de uso
x = String("aaabaaaabbabbabbbbbaabbaaa"*300)
y = Filename("./path/to/file.dat")
compressor = Zlib(level=9)
pairing = Intercalation(block_size=1024)
ncd = Ncd(compressor, pairing)
print ncd(x, y) # Chamamos a instância como uma função.
```

Finalmente, a terceira abstração de interesse é a de `DataSourceFactory`, cujo diagrama de classes é apresentado na Figura 22. Esta classe implementa o padrão de projeto de Fábrica,

encarregado de produzir outras instâncias de um dado tipo. No caso, as fábricas produzem uma sequência de `DataSources` relacionados, representando um conjunto de dados:

- A `FileLinesFactory` modela um conjunto de dados dado por um arquivo, onde cada linha consiste em uma instância, e produz `Datasources` do tipo `String`;
- A `DirectoryFactory` modela um conjunto de arquivos em um mesmo diretório, produzindo `Datasources` do tipo `Filename`;
- A `InMemoryFactory` apenas envelopa `Datasources` já existentes em memória, útil para agregar fontes de dados díspares;
- As `CollectionFactory` modelam uma coleção de outras fábricas, permitindo, por exemplo, modelar um conjunto de dados único organizado em subdiretórios. As subclasses desta fábrica são:
  - `FilesFactory`, contendo uma coleção de `FileLinesFactory`;
  - `DirectoriesFactory`, contendo uma coleção de `DirectoryFactory`;
  - `IndirectFactory`, contendo uma coleção de outros `DataSourceFactory` quaisquer;

Esta flexibilidade permite que um usuário final possa configurar com facilidade a ferramenta para ler seus dados da maneira mais próxima em que eles estão armazenados. De fato, a implementação está abstraída em uma única função, `create_factory(path)`, que cria uma fábrica apropriada dependendo do tipo de caminho no sistema de arquivos dado como argumento. Uma fábrica do tipo `IndirectFactory` é obtida com um arquivo de formato especial, que contém uma lista de caminhos que são processados recursivamente.

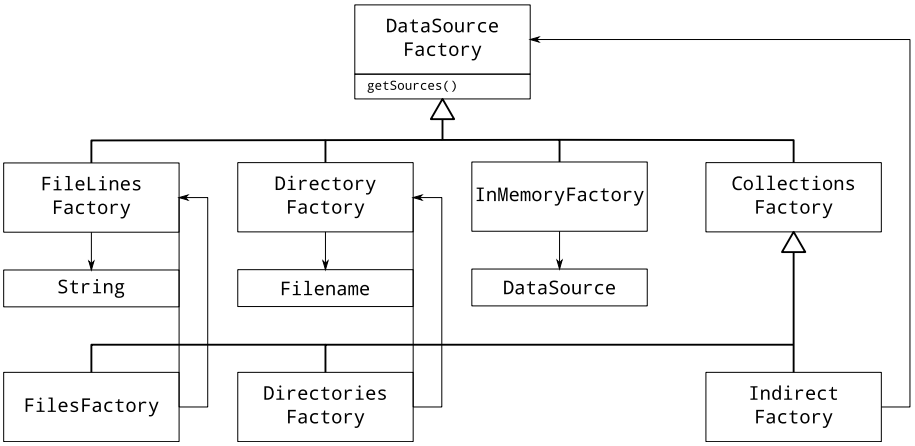



Figura 22 – Diagrama da hierarquia de classes de `DataSourceFactory`.

## 4.3 Bibliotecas/Ferramentas

Como descrito, as principais bibliotecas desenvolvidas possuem também uma interface por linha de comando, de modo que podem ser utilizadas como *scripts* de *shell* ou invocadas pelo interpretador de Python do sistema. As ferramentas e bibliotecas desenvolvidas estão disponibilizadas em um repositório *online* [1], e estão descritas nas próximas seções.

### 4.3.1 NCD

As bibliotecas para o cálculo da NCD estão organizadas em pacotes relacionados, e uma ferramenta de linha de comando (`ncd2.py`) realiza o cálculo da métrica de maneira similar à ferramenta disponibilizada pelo *toolkit* CompLearn.

#### 4.3.1.1 Pacote `datasource`

Este é o pacote básico para a arquitetura de fontes de dados exposta na seção 4.2. Para se obterem `DataSources`, é recomendado utilizar a função `create_factory` descrita abaixo, embora seja possível instanciar um `DataSource` ou `DataSourceFactory` diretamente.

- `create_factory((path|path_list))`: Cria um `DataSourceFactory` a partir de um caminho (ou lista de caminhos) do sistema de arquivos, gerando recursivamente a fábrica apropriada caso seja um arquivo (`FileLinesFactory` ou `IndirectFactory`), diretório (`DirectoryFactory`) ou lista de caminhos (`CollectionFactory`).

- `parse_indirect_factory_file(f)`: Recebe um objeto similar a arquivo (como uma chamada a `open()`) e realiza o parseamento como um arquivo de indireção. Lança `ValueError` caso não satisfaça o formato.

- `indirect_file(filename, paths, sources)`: Escreve um arquivo contendo os caminhos e fontes de dados no formato de um arquivo de indireção.

Ao ler um arquivo, a função verifica se ela possui o formato de indireção: se sim, é criado um `IndirectFactory`; senão, é criado um `FileLinesFactory`. Um arquivo de indireção possui o seguinte formato:

```
#indirect path-to-datasource*
[source-name-1]
[source-name-2]
...
```

[1] <https://gitlab.com/adaptsys/damicorepy>

O arquivo contém uma lista de caminhos para outros `DataSourceFactories` (que podem até mesmo serem arquivos de indireção) e uma lista opcional de nomes de `Sources` a serem utilizados. Caso nenhuma fonte seja definida, utiliza todas. Assim, ele permite não apenas referenciar outros conjuntos de dados como filtrar quais fontes neste conjunto devem ser utilizadas. Isto permite, por exemplo, particionar um conjunto de arquivos entre teste e treinamento apenas escrevendo um arquivo de indireção, ao invés de reorganizá-los em diretórios.

As classes que representam uma fonte de dados são descritas a seguir:

- `DataSource(name)`: classe base abstrata representando uma fonte de dados. Define os métodos `get_string`, para obter seu conteúdo como uma sequência de bytes, e `get_filename`, para obter seu conteúdo como um arquivo em disco. Também define o método `close`, que limpa quaisquer recursos alocados pela classe, e deve sempre ser chamado quando esta não for mais necessária. Toda fonte de dados deve possuir um nome, como seu número de sequência ou nome no sistema de arquivos.
- `String(data)`: classe que contém uma sequência de bytes em memória. Seu nome padrão é o *hash* da sequência.
- `Filename(filename)`: classe que contém o nome de um arquivo no sistema de arquivos. Seu nome padrão é o nome do arquivo.

As classes que representam um conjunto de dados são descritas a seguir:

- `DataSourceFactory(name)`: classe base abstrata representando um conjunto de dados. Define o método `get_sources`, que retorna uma lista contendo as fontes de dados.
- `FileLinesFactory(filename)`: classe que lê um conjunto de dados como linhas de um arquivo. Caso o arquivo esteja no formato CSV, utiliza a primeira coluna como nome da fonte, e o segundo como a fonte em si; senão, utiliza toda a linha como um `String`.
- `DirectoryFactory(path)`: classe que lê os arquivos de um diretório como fontes de dados, retornando uma lista de `Filename`.
- `InMemoryFactory(sources)`: classe que contém uma lista de `DataSources` já alocados.
- `CollectionFactory(factories)`: classe que contém outras `DataSourceFactories` como fonte de dados, concatenando suas listas de `DataSources` individuais.
- `DirectoriesFactory(paths)`: subclasse de `CollectionFactory` que contém uma lista de diretórios como `DirectoryFactory`.
- `FilesFactory(filenames)`: subclasse de `CollectionFactory` que contém uma lista de nomes de arquivo como `FileLinesFactory`.

- `IndirectFactory`: subclasse de `DataSourceFactory` instanciada a partir de um arquivo de indireção, referenciando quaisquer outros `DataSourceFactories`.

Finalmente, este pacote também funções de pareamentos de dados, como descrito a seguir:

- `Pairing(datasrc1, datasrc2)`: Subclasse abstrata de `DataSource`, realiza o pareamento entre outros `DataSources` quaisquer. Exige que suas subclasses implementem os métodos `_gen_string` e `_gen_filename`, responsáveis por produzir, respectivamente, uma *string* ou nome de arquivo a partir das fontes de dados recebidas.
- `Concatenation`: Subclasse de `Pairing` que realiza a concatenação simples das fontes de dados. Caso sejam ambos arquivos em disco (isto é, do tipo `Filename`), utiliza-se de ferramentas do sistema operacional para efetuar a concatenação de forma eficiente. Caso contrário, simplesmente lê as sequências de bytes e as concatena.
- `Interleaving(block_size)`: Subclasse de `Pairing` que realiza a intercalação entre duas fontes de dados com o tamanho de bloco `block_size` fornecido. Busca realizar a intercalação de forma eficiente, dependendo se as fontes de dados são `Filename` ou `String`.

#### 4.3.1.2 Pacote `compressor`

Este pacote contém as classes e implementações de compressores expostas na seção 4.2 e descritos na seção 2.1.4.2. O pacote contém as seguintes funções:

- `list_compressors()`: Lista os compressores disponíveis no sistema.
- `get_compressor(name, [params]*)`: Retorna um compressor pelo nome. A função aceita parâmetros que serão passados para a construção da instância.

As classes de compressor são declaradas dinamicamente durante o carregamento do pacote, apenas se o sistema suporta a implementação do compressor. Os compressores `Zlib`, `Bz2`, `Gzip`, e `Bzip2` aceitam como parâmetro o nível de compressão `level`, variando entre 1 (mais rápido) e 9 (maior compressão). O valor padrão é 6.

- `Compressor`: classe base abstrata de todos os compressores, define o método `compressed_size(datasrc)`. Este método retorna o comprimento comprimido de um dado `DataSource`.
- `Zlib(level)`: compressor baseado na biblioteca `zlib`, que comprime uma *string* em memória.

- `Bz2(level)`: compressor baseado na biblioteca de ligação dinâmica `bz2`, que comprime uma *string* em memória.
- `Gzip(level)`: compressor que envelopa o binário `gzip`, que comprime um arquivo em disco.
- `Bzip2(level)`: compressor que envelopa o binário `bzip2`, que comprime um arquivo em disco.
- `Ppmd(model_order, memory, restoration_method)`: compressor que envelopa o binário `ppmd`, comprimindo um arquivo em disco. Ele aceita como parâmetros os seguintes valores:
  - `model_order`: Ordem do modelo de cadeia de Markov, variando entre 2 (mais rápido, menos memória) e 16 (maior compressão, mais memória). O valor padrão é 6.
  - `memory`: Memória disponível ao programa, variando entre 1 e 256 MiB. O valor padrão é 10.
  - `restoration_method`: Método de restauração do modelo quando a memória se torna insuficiente. Os valores possíveis são: "restart", mais rápido, destruindo o modelo e recomeçando; "cutoff", mais lento, que remove os estados de maior ordem gradativamente; e "freeze", mais ineficiente, que simplesmente para de atualizar o modelo. O padrão é "restart".
- `Paq8(model_order)`: compressor envelopando o binário `paq8`, que comprime um arquivo em disco. Ele aceita como parâmetro a ordem do modelo, variando entre 2 (mais rápido, menos memória) e 16 (maior compressão, menos memória). O valor padrão é 6.

#### 4.3.1.3 Pacote `ncd_base`

Este pacote fornece as classes básicas para cálculo da NCD, incluindo

- `NcdResult`: estrutura que contém um resultado completo de NCD, contendo
  - $x, y$: tamanho das fontes $|x|$ e $|y|$;
  - $zx, zy$: tamanho comprimido das fontes $|Z(x)|$ e $|Z(y)|$;
  - $zxy$: tamanho do pareamento $|Z(\langle x, y \rangle)|$;
  - $ncd$: cálculo da NCD com base nos outros valores.

  Este objeto pode ser acessado como um dicionário.
- `Ncd(compressor, pairing)`: classe que realiza o cálculo da métrica, com base em uma função de pareamento `pairing`) e um compressor `compressor`. A função de pareamento padrão é `Concatenation`. Uma instância pode ser chamada como uma função, e retorna um `NcdResult`.

#### 4.3.1.4 Pacote `ncd2`

Este pacote realiza as operações necessárias para calcular a matriz de distâncias entre conjuntos de dados, sejam eles o mesmo (necessário para agrupamento) ou diferentes (necessário para classificação). Esta operação pode ser realizada de modo paralelo ou serial. No modo paralelo, é designado a cada processo uma seção da matriz que deve ser computada, e cada um escreve isoladamente no disco o seu pedaço dos resultados em formato CSV. Uma vez que todos completam seus cálculos, os pedaços são concatenados para formar a resposta completa.

As principais classes declaradas são:

- `NcdResults`: classe abstrata que descreve uma lista de `NcdResult`. Define o método `get_results`, para obtê-los como uma lista, e `get_filename`, para obtê-los como um arquivo CSV em disco.
- `InMemoryNcdResults`: subclasse de `NcdResults` que contém uma lista de resultados em memória, emitido pelo cálculo serial da NCD.
- `FilenameNcdResults`: subclasse de `NcdResults` que armazena os resultados em um arquivo em disco, emitido pelo cálculo paralelo da NCD.
- `TempfileNcdResults`: subclasse de `FilenameNcdResults` que armazena os resultados em um arquivo temporário em disco, emitido por cada um dos processos da execução paralela.

As principais funções declaradas são descritas a seguir:

- `ncd_pairs(ncd, sources1, sources2, is_upper, is_parallel)`: Retorna um `NcdResults` obtido da aplicação de `ncd` (do tipo `Ncd`) sobre todos os pares de elementos entre `sources1` e `sources2`. Se `is_upper` é verdadeiro, computa os pares como se fosse uma matriz simétrica (isto é, apenas NCD$(A,B)$ e não NCD$(B,A)$); do contrário, computa todos os pares. Se `is_parallel` for verdadeiro, computa a matriz em paralelo; serial, caso contrário.
- `distance_matrix(ncd, factories, is_parallel)`: Obtém a matriz de distância calculada com a aplicação de `ncd` sobre as fábricas `factories`. Se `factories` contiver apenas uma fábrica, computa a porção triangular superior das distâncias da fábrica com ela mesma.
- `csv_write(f, ncd_results)`: Escreve os resultados do tipo `NcdResults` em um objeto similar a arquivo `f` no formato CSV.
- `write_phylip(f, ncd_results)`: Escreve os resultados do tipo `NcdResults` em um objeto similar a arquivo `f` no formato Phylip.

- `to_matrix(ncd_results)`: Converte os resultados em uma matriz de distâncias, contendo apenas o valor da NCD como entrada. A saída é uma tupla no formato `(matriz, [[x1, x2, ...], [y1, y2, ...]])`, onde o segundo elemento contém as listas de nomes das fontes de dados.

#### 4.3.1.5 Utilitário `ncd2.py`

A composição das bibliotecas anteriores é fornecida também como a ferramenta de linha de comando `ncd2.py`. A ferramenta permite invocar com *flags* as principais opções dos compressores, pareamento, leitura de dados, formatos de saída e configurações da NCD.

- Aceita como entrada conjuntos expressos como linhas em um arquivo, arquivos em um diretório, ou quaisquer mistura destes casos.
- Permite realizar o cálculo da matriz de distâncias completa ou apenas a porção triangular superior para maior eficiência.
- Permite escolher dentre as cinco opções de compressores, duas opções de pareamento, e as configurações diversas para cada compressor.
- Permite emitir a saída em formato CSV ou Phylip, para compatibilidade com a ferramenta de mesmo nome.

### 4.3.2 Simplificação

No momento, o utilitário de simplificação implementa apenas o método de Junção de Vizinhos descrito na seção 2.2, de maneira similar à ferramenta `phylip`. Pretendemos ampliá-lo para outros métodos de simplificação de grafos e de filogenética computacional.

#### 4.3.2.1 Pacote `tree`

Este pacote contém as definições básicas para a definição de uma árvore com raiz, binária ou não, podendo conter comprimento nas arestas. As classes básicas para sua definição são:

- `Edge(length, dest)`: Representa uma aresta terminando em `dest` com comprimento `length`.
- `Node(content, [edges]*)`: Representa um nó, contendo algum dado `content` e uma lista de arestas.
- `Leaf(content)`: Subclasse de `Node`, representa uma folha sem nenhuma aresta de saída.

Com esta representação, a árvore da figura 23 pode ser representada da seguinte forma:

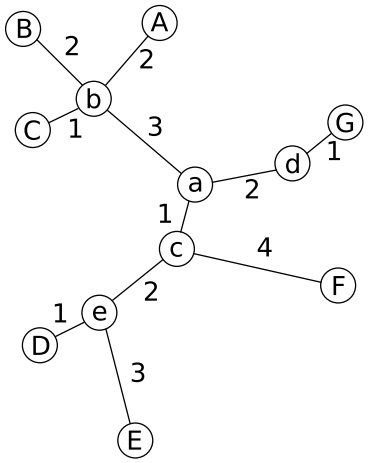



Figura 23 – Árvore de exemplo, com nomes nos vértices e comprimento de arestas

```
tree = Node('a',
          Edge(3, Node('b',
                     Edge(2, Leaf('A')),
                     Edge(2, Leaf('B')),
                     Edge(1, Leaf('C')))),
          Edge(1, Node('c',
                     Edge(2, Node('e',
                       Edge(1, Leaf('D')),
                       Edge(3, Leaf('E')))),
                     Edge(4, Leaf('F')))),
          Edge(2, Node('d',
                     Edge(1, Leaf('G')))))
```

O pacote contém as seguintes funções de destaque:

- `to_graph(tree)`: Converte a árvore em uma estrutura de grafo da biblioteca igraph.
- `distance_matrix(tree)`: Retorna uma matriz contendo todos os pares de distância entre as folhas, calculadas pela soma dos comprimentos de aresta no caminho entre os nós.
- `newick_format(tree)`: Emite a árvore no formato de Newick (**??**), com o conteúdo dos nós entre aspas para escapar símbolos especiais.

A árvore de exemplo acima teria a seguinte representação no formato de Newick:

```
(("A":2,"B":2,"C":1)"b":3,(("D":1,"E":3)"e":2,"F":4)"c":1,("G":1)"d":2)"a"
```

#### 4.3.2.2 *Pacote `tree_simplification`*

Este pacote contém a implementação do método de Junção de Vizinhos, produzindo uma estrutura de árvore como definida no pacote `tree`. Atualmente, a principal função exposta é

`neighbor_joining(m, [ids])`, que recebe uma matriz de distâncias `m` e uma lista opcional com identificadores de cada elemento. A função retorna um `Node` como a raiz arbitrária da árvore filogenética, contendo os elementos da matriz como folhas e nós internos contendo identificadores artificiais.

#### 4.3.2.3 Utilitário `tree_simplification.py`

Esta ferramenta de linha de comando simplesmente invoca o método de Junção de Vizinhos sobre uma matriz de distâncias fornecida pela linha de comando, e emite como saída uma árvore no formato Newick, compatível com programas de filogenia computacional como FigTree. Outros formatos de saída serão desenvolvidos. Suas principais características são:

- Aceita como entrada matrizes de distância em formato CSV, PHYLIP (completa ou triangular inferior) e no formato emitido pela `ncd` da CompLearn.
- Pode produzir como saída árvores em formato Newick.

### 4.3.3 Validação

Estes pacotes e ferramentas de linha de comando foram realizados para a validação dos resultados obtidos pelas ferramentas de agrupamento e classificação. Elas são razoavelmente independentes das outras implementações, sendo úteis para qualquer pesquisador que necessite manipular conjuntos de dados e realizar a validação externa de uma classificação ou agrupamento.

#### 4.3.3.1 Pacote `partition`

Este pacote contém as implementações dos métodos descritos na seção 2.5.1, para validar uma dada atribuição de classes contra um conjunto de referência. As principais funções deste pacote, além dos índices em si, são:

- `membership_parse(filename)`: Realiza o *parsing* de um arquivo CSV contendo a associação de referência de cada instância à classe. Retorna um dicionário com formato {elemento: classe}.
- `membership_to_clusters(membership)`: Transforma um dicionário de associação no formato {elemento: classe} em um conjunto de conjuntos, ou partição, no formato {classe: [elemento1, elemento2, ...]}.
- `clusters_to_membership(clusters)`: Realiza a transformação inversa da anterior, levando de um conjunto de conjuntos para um dicionário de associações.
- `contingency(u, v)`: Calcula a matriz de contingência das partições $U$ e $V$ no formato de conjunto de conjuntos. Retorna um dicionário contendo como chaves:

  - "keys1", "keys2": Chaves ordenadas correspondendo às classes das partições $U$ e $V$, respectivamente;
  - "intersections": Retorna uma matriz contendo, na posição $(i, j)$, os elementos da interseção $U_i \cap V_j$.
  - "table": Retorna a tabela de contingência com o número de elementos em cada interseção.

Todas as seguintes funções, exceto onde notado, calculam um índice (correspondendo ao seu nome em inglês) e recebem como entrada uma tabela de contingência como a saída de `contingency`.

- Índices comuns e ajustados
  - `rand_index(table)`
  - `adjusted_rand_index(table)`
  - `jaccard_index(table)`
  - `wallace_indices(table)`: Retorna uma tupla contendo os índices de Wallace $(W_U, W_V)$.
  - `adjusted_wallace_indices(table)`: Retorna uma tupla contendo os índices ajustados de Wallace $(AW_U, AW_V)$.
  - `fowlkes_mallows_index(table)`
  - `adjusted_fowlkes_mallows_index(table)`
- Índices relacionados a entropia
  - `mutual_information(table)`
  - `variation_of_information(table)`
  - `normalized_mutual_information(table, norm)`: Normaliza a informação mútua de acordo com um fator normalizante `norm`:
    - "max": Retorna $I(U,V)/\max\{H(U), H(V)\}$;
    - "min": Retorna $I(U,V)/\min\{H(U), H(V)\}$;
    - "joint": Retorna $I(U,V)/H(U,V)$;
    - "mean": Retorna $I(U,V)/(H(U)+H(V))/2$;
    - "geom": Retorna $I(U,V)/\sqrt{H(U)H(V)}$;
  - `normalized_variation_of_information(table)`: Retorna $1 - I(U,V)/H(U,V)$
  - `normalized_information_distance(table)`: Retorna $1 - I(U,V)/\max\{H(U), H(V)\}$
- Índices de combinatória

  - `incongruence_number(table)`
  - `normalized_incongruence(table)`
  - `classification_index(table)`

- Índices binários
  - `precision(table)`
  - `recall(table)`
  - `f1(table)`
  - `f_beta(table, beta)`: Calcula $F_\beta$.
  - `matthews(table)`

#### 4.3.3.2 Pacote `dataset`

Este pacote efetua operações sobre conjuntos de dados (representados como `DataSourceFactory`) para prepará-los para etapas de validação, como amostragem, particionamento e separação entre conjuntos de treinamento e de teste.

- `partition_dataset(factory, membership, num_parts)`: Particiona aleatoriamente um conjunto de dados dado por `factory` em `num_parts` de mesmo tamanho, mantendo a proporção de classes inalterada em cada partição.
- `split_dataset(factory, membership, fraction)`: Divide aleatoriamente um conjunto de dados dado por `factory` em conjuntos de treinamento e de teste, mantendo a proporção de classes inalterada em cada parte. `fraction` dá a fração de classes que deve ser usada para treinamento, sendo 0.5 por padrão.
- `sample_dataset(factory, membership, fraction)`: Amostra aleatoriamente a fração `fraction` dos elementos de um conjunto de dados, mantendo a proporção de classes constante.

As classes devem ser dadas como um mapa de associações {elemento: classe} em `membership`. Se uma classe não puder ser dividida igualmente entre as partições, alguns de seus elementos serão descartados; caso a classe contenha menos elementos que `num_parts` (ou $1/$`fraction`), ela não estará presente em nenhuma partição.

#### 4.3.3.3 Utilitário `partition.py`

Esta ferramenta de linha de comando compara dois arquivos de associação elemento-classe (ou classe-elementos) e fornece os índices selecionados. Ele também permite computar todos os índices implementados.

- Pode-se especificar um conjunto de índices de interesse, ou simplesmente calcular todos os aplicáveis, inclusive aqueles dedicados a partições binárias caso a matriz seja 2x2.

- Aceita como entrada arquivos CSV de agrupamento ou classificação, permitindo especificar um limiar de confiança para classes onde a classificação é nebulosa.

#### 4.3.3.4 Utilitário `dataset.py`

Esta ferramenta simplesmente expõe as funções do pacote `dataset` para um dado conjunto de dados e um arquivo de associação elemento-classe. Entre suas funcionalidades, encontram-se:

- Permite realizar a divisão, amostragem e particionamento de um conjunto de dados mantendo a proporção de classes inicial.

- Permite concatenar as entradas de referência para produzir um arquivo agregado representando a totalidade de uma classe.

### 4.3.4 Agrupamento e classificação

#### 4.3.4.1 Pacote `clustering`

Este pacote utiliza-se da bibliotaca igraph para realizar a detecção de comunidades sobre as árvores/grafos. Assim, tem-se acesso a versões altamente eficientes dos algoritmos descritos na seção 2.3.3, como *Fast Newman*, método divisivo, otimização de modularidade exata, etc. Além destes, também implementamos os algoritmos de modularidade sobre árvores propostos na seção 3.2.

- `tree_clustering(g, ids, community_detection_name)`: Realiza o agrupamento dos nós-folha (identificados por `ids`) de uma árvore dada como um grafo `g`. O nome do método de detecção de comunidades pode ser um dos seguintes:

  - "fast", "newman": utiliza o método *Fast Newman* com a modularidade usual;
  - "betweenness", "divisive": utiliza o método divisivo de Girvan-Newman;
  - "optimal": utiliza a otimização exata de modularidade;
  - "tree1", "tree2": utiliza o método de *Fast Newman* com a modularidade dada pelo modelo de árvores conexas I e II, respectivamente.
  - "correlation": utiliza o método de *Fast Newman* com a modularidade dada pelo modelo de correlação de graus.

#### 4.3.4.2 Pacote `classification`

Este pacote implementa os métodos de classificação expostos na seção 2.4, assim como o método de quartetos exposto na seção 3.3. As principais funções definidas neste pacote são:

- `knn(k, distances_by_class)`: Retorna a classificação dos elementos utilizando a classe majoritária dentre seus $k$ vizinhos mais próximos, ou nenhuma caso haja um empate. `distances_by_class` é um dicionário com formato {elemento: {classe: distância elemento-classe}}.

- `quartet_classifier(refs, tests, membership, distances)`: classifica os elementos em `test` utilizando os elementos `refs` e suas associações conhecidas armazenadas em `membership`, no formato {elemento: classe}. A matriz de distâncias `distances` contém as distâncias entre elementos dos elementos de referência com os de teste.

- `pipeline`: Esta função realiza todo o procedimento de calcular a NCD entre os elementos de referência e de testes, organizar os formatos de entrada e então invocar um dos classificadores.

#### 4.3.4.3 Utilitário `damicore.py`

Esta ferramenta de linha de comando realiza o agrupamento de conjuntos de dados, realizando todas as etapas de métrica-simplificação-comunidades e, opcionalmente, validação. Suas principais características são:

- Aceita como entrada grafos em todos os formatos suportados pela biblioteca igraph, assim como árvores no formato Newick.

- Fornece seis opções de algoritmos de agrupamento, incluindo dois específicos para árvores desenvolvidos e descritos na seção 3.2.

- Permite especificar o número de grupos desejados, ou escolher aquele que maximiza a modularidade.

- Produz como saída um arquivo CSV com o mapeamento instância-grupo, e pode também imprimir uma imagem da árvore com nós e seus grupos anotados.

- Pode realizar as saídas de todas as etapas intermediárias, aumentando a compreensão de como o fluxo se realiza e permitindo depurar eventuais falhas nos algoritmos implementados.

#### 4.3.4.4 Utilitário `classification.py`

Finalmente, esta ferramenta realiza a classificação de um conjunto de dados oferecendo-se um primeiro como treinamento. Esta ferramenta deve ser agregada no futuro na ferramenta principal `damicore.py`. Suas principais funcionalidades são:

- Expõe todas as opções de compressores e pré-processamento de conjunto de dados oferecidos no pacote `dataset`.
- Permite selecionar os métodos de distância ponto-a-ponto e ponto-a-conjunto desejados.
- Oferece as duas opções de classificadores, e um terceiro método de quartetos experimental, utilizando contra-provas.

CAPÍTULO

# 5

# RESULTADOS

Para avaliar a ferramenta desenvolvida, foi utilizada uma diversidade de conjuntos de dados com diferentes distribuições de tamanho e classes, como mostrado na Tabela 7.

Tabela 7 – Conjuntos de dados utilizados

| Conjunto de dados | Instâncias | Tipo | Classes | Quartis de comprimento (bytes) | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | 25% | 50% | 90% | 95% |
| `LingSpam-Bare` | 2893 | Spam | 2 | 997 | 2066 | 7413 | 10428 |
| `LingSpam-Proc` | 2893 | Spam | 2 | 769 | 1624 | 5805 | 8388 |
| `SMSSpam` | 5574 | Spam | 2 | 36 | 62 | 156 | 161 |
| `EuroGOV` | 1500 | Línguas | 10 | 3373 | 5619 | 38085 | 61029 |
| `TCL` | 3174 | Línguas | 60 | 991 | 1820 | 5031 | 6780 |
| `Wikipedia` | 4963 | Línguas | 67 | 139 | 512 | 3332 | 5527 |
| `Binaries` | 80 | Binários | 2 | 8473 | 15616 | 182671 | 573564 |

Os conjuntos `LingSpam-Bare` e `LingSpam-Proc` consistem em e-mails de uma lista de discussões pública de linguistas, e spam recebido pelos autores (ANDROUTSOPOULOS *et al.*, 2000). A versão `Bare` contém os e-mails sem processamento, enquanto a versão `LemmStop` foi processado para lematização e remoção de *stop words*. O conjunto `SMSSpam` consiste em mensagens de SMS, que por padrão são muito mais curtas que outros tipos de texto e apresentam outros desafios para classificação. Tal conjunto foi organizado em Almeida, Hidalgo e Silva (2013).

O conjunto `EuroGOV` consiste em uma amostra de documentos da coleção EuroGOV (SIGURBJÖRNSSON; KAMPS; RIJKE, 2006), distribuído entre 10 línguas ocidentais. O conjunto `TCL`, organizado pelo Thai Computational Linguistics Laboratory em 2005, é mais diversificado, contendo 60 línguas de todo o mundo em doze codificações diferentes. O conjunto `Wikipedia` consiste em uma amostra de páginas da Wikipedia dentre línguas contendo mais de 1000 páginas, e mantendo a distribuição de línguas encontrada na Web. Todos estes conjuntos foram organizados e analisados em Baldwin e Lui (2010).

O conjunto `Binaries` consiste de programas executáveis compilados para a plataforma x86 de 64 bits para o sistema operacional GNU/Linux. Tais programas incluem utilitários do sistema operacional, como `ls`, `find` e `cat`; aplicativos no nível de sistemas de arquivos, como `dd` e `shred`; e vários outros aplicativos, como um solucionador de torres de Hanoi, compressores, e calculadoras de *checksum*. Tais binários foram classificados em termos de sua característica de desempenho como intensos em processamento (*CPU-intensive*) ou entrada/saída (*I/O-intensive*) e analisados em Pinto (2013).

A distribuição de classes nestes grupos é variável, como ilustrado na Figura 24. O conjunto `Binaries` possui igual proporção de programas *CPU-intensive* e *I/O-intensive*; os conjuntos `SMSSpam` e `LingSpam` possuem muito mais exemplos de mensagens legítimas ("ham") do que spam; o conjunto `EuroGOV` possui uma distribuição quase uniforme de línguas, enquanto os conjuntos `TCL` e `Wikipedia` possuem uma distribuição de cauda longa, mais próxima da distribuição de páginas Web.

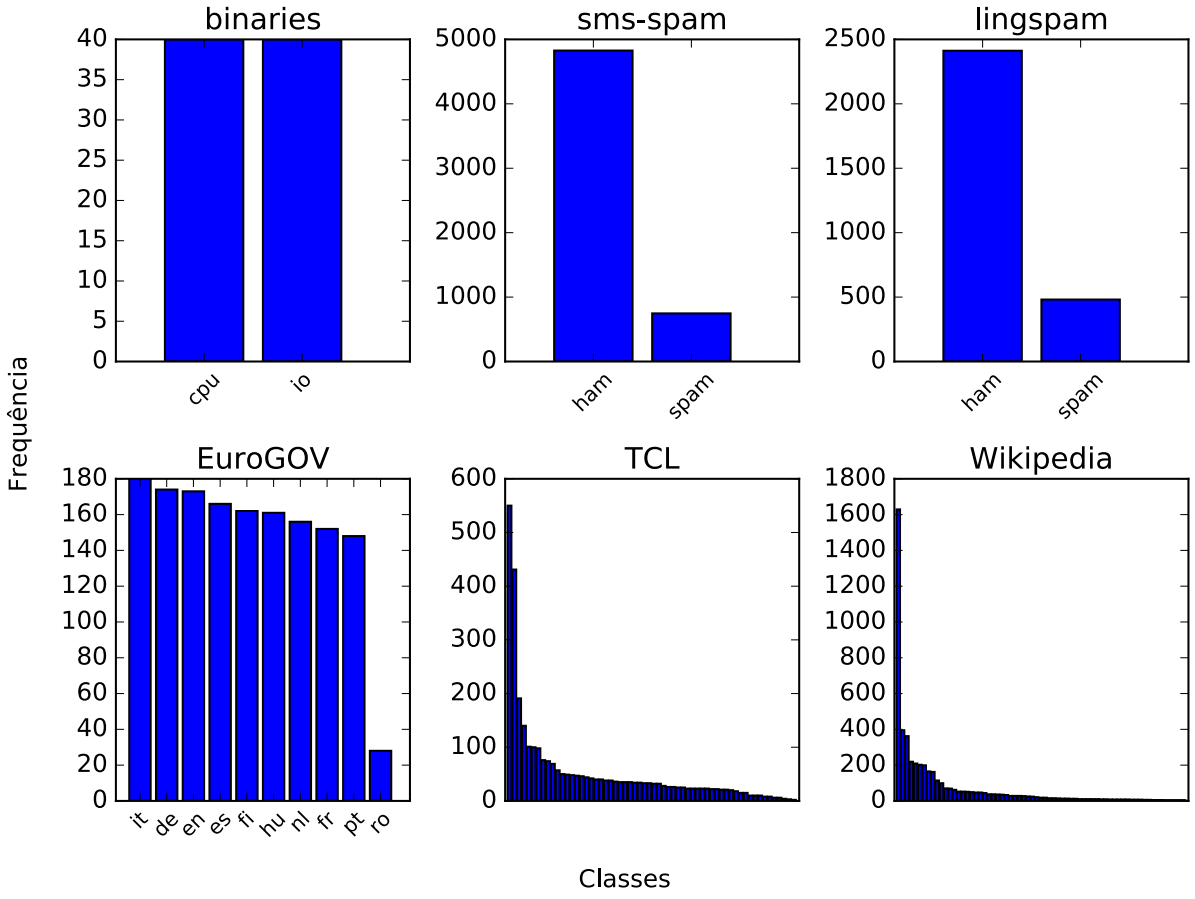



Figura 24 – Distribuição de classes nos conjuntos de dados analisados. Não foi possível incluir a legenda para cada classe dos conjuntos `TCL` e `Wikipedia` devido à grande quantidade.

## 5.1 Aplicação de intercalação como função de pareamento

Dentre os conjuntos de dados estudados, o conjunto `Binaries` possui maior tamanho médio de arquivos, com mais de 40% possuindo tamanho maior que a janela máxima do compressor gzip. Neste contexto parece justificada a aplicação da função de pareamento de intercalação proposta na seção 3.1.

Foi investigado o efeito do tamanho de blocos na matriz de distâncias calculada e a efetividade resultante para a tarefa de agrupamento. Realizamos o cálculo da matriz de distâncias completa, contendo tanto os elementos da diagonal (NCD$(x,x)$) como elementos teoricamente simétricos (NCD$(x,y)$ e NCD$(y,x)$). O tamanho dos blocos foi variado em uma função linear por partes que explora em detalhes tamanhos de blocos menores:

1. Em $[16,128)$ bytes com passos de 16 bytes (7 pontos);
2. Em $[128,1024)$ com passos de 128 bytes (7 pontos);
3. Em $[1024,32768)$ com passos de 1024 bytes (31 pontos);
4. Em $[32640,33664)$ com passos de 128 bytes (8 pontos).

Note que a última seção testa tamanhos de bloco maiores que a janela deslizante. Também foi calculada a matriz de distâncias utilizando concatenação simples para comparação da efetividade da intercalação. Foi utilizado apenas o compressor gzip para o cálculo da NCD, uma vez que apenas uma instância do conjunto possui comprimento superior à máxima janela do compressor bzip2 (900 KiB).

### 5.1.1 Distância de instância para si mesmo

A distância de um elemento para si mesmo (auto-distância) varia consideravelmente em função do tamanho de bloco, como ilustrado na Figura 25.

Nota-se que a concatenação é suficiente para produzir um valor próximo de zero caso a *string* seja menor que a janela do compressor (randrw, vecsum, io_thrash). Uma vez que o tamanho supera a janela, a auto-distância com concatenação fica próxima a 1 (fractal, genisoimage, mandelbulber). Para todos os casos, a auto-distância com intercalação decresce em função do tamanho de bloco, atingindo um mínimo logo antes do tamanho da janela.

Este fenômeno pode ser compreendido em termos da representação de referências pelo compressor gzip. Suponha uma *string* de tamanho $n$, comprimido em blocos intercalados consigo mesmo de tamanho $b$. Idealmente, o compressor deveria comprimir um bloco, e então emitir uma referência com *offset* e comprimento $(b,b)$ para indicar a repetição. Portanto, seriam necessárias $n/b$ referências prévias, valor que pode ser minimizado ao maximizar $b$.

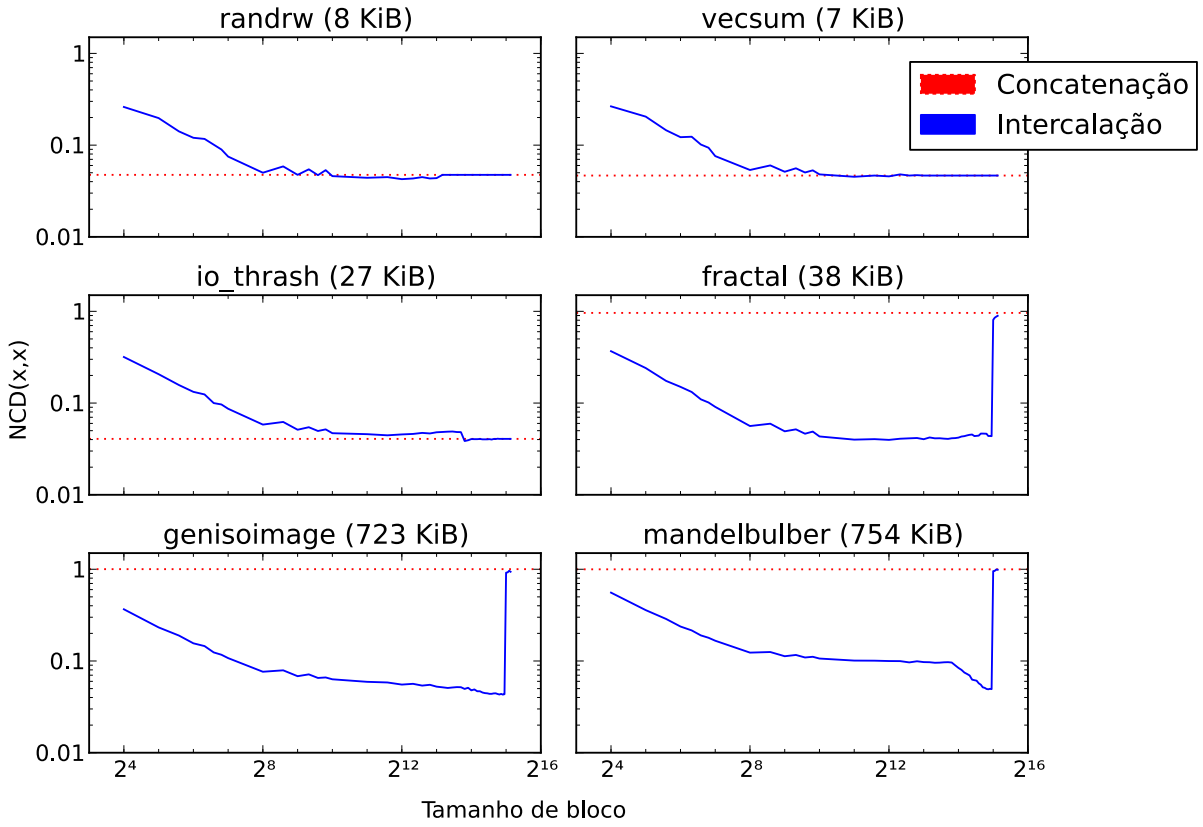



Figura 25 – NCD$(x,x)$ em função do tamanho de bloco para algumas instâncias selecionadas. A coluna da esquerda contém executáveis *I/O-intensive* e a coluna da direita executáveis *CPU-intensive*.

### 5.1.2 Impacto do tamanho de blocos sobre agrupamento

Apesar de o uso de intercalação como pareamento melhorar a auto-distância de instâncias grandes, ela também produz outros artefatos na matriz de distância. Por exemplo, em alguns casos a NCD$(x,y)$ entre duas *strings* diferentes resulta maior que 1; isto é, ocorre uma expansão ao se aplicar a compressão e $|Z(\langle x,y\rangle)| > |Z(x)| + |Z(y)|$.

Tais artefatos podem comprometer a qualidade do agrupamento obtido com a ferramenta, de modo que foi analisado o resultado de agrupamento para diferentes tamanhos de bloco e comparados com as medidas de validação para partições binárias apresentadas na seção 2.5.1.4. O agrupamento foi realizado com as técnicas padrão da metodologia DAMICORE, utilizando Junção de Vizinhos para simplificação da matriz e o algoritmo de detecção de comunidades *Fast Newman* para obter os agrupamentos a partir da árvore filogenética. Este último foi configurado para executar o corte do dendrograma de modo a produzir dois grupos, ao invés de maximizar a modularidade. Ainda, foi adicionada uma etapa intermediária que normaliza os valores das arestas da árvore para remover arestas de tamanho negativo, que impedem a execução correta da detecção de comunidades.

Os resultados obtidos são apresentados na Figura 26, onde as medidas de precisão, sensitividade, $F_1$ e o coeficiente de correlação de Matthews $M$ foram aplicadas sobre cada matriz de confusão obtida ao se comparar o agrupamento obtido com a referência organizada por Pinto

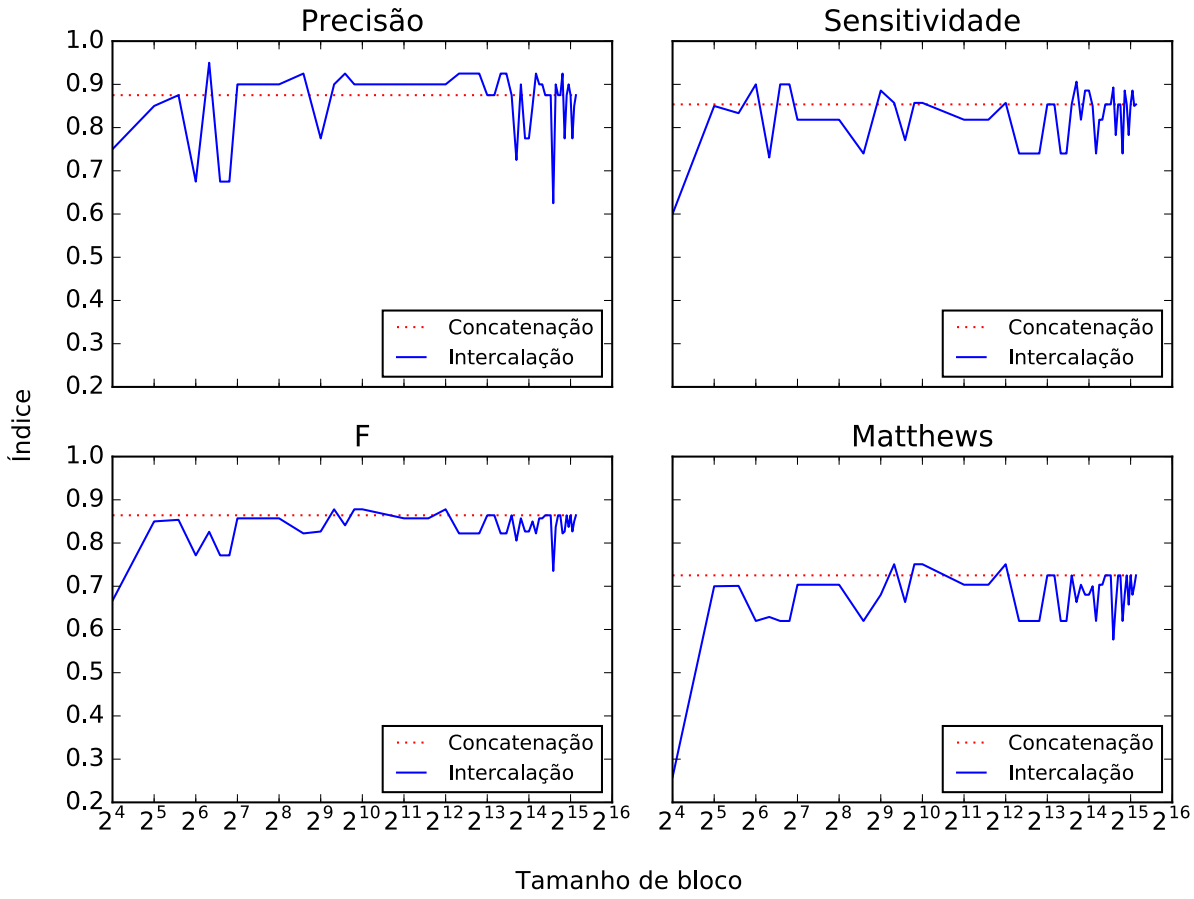



Figura 26 – Índices de qualidade de agrupamento, comparando o uso de concatenação e intercalação

(2013).

Inicialmente, observa-se que tamanhos de blocos muito pequenos ($\approx$ 16 bytes) comprometem a qualidade do agrupamento, tornando-se próximo a um agrupamento aleatório de acordo com o coeficiente de Matthews. Ainda, tais medidas são próximas àquelas obtidas com concatenação, embora na maioria dos casos sejam menores. A única exceção parece ser a medida de precisão para blocos entre 128 e 8192 bytes, que supera consistentemente a obtida com concatenação. Seriam necessários mais experimentos com um número maior de pontos para determinar a probabilidade de tal observação ser verdadeira.

## 5.2 Validação da implementação da NCD

Neste projeto foi implementado em Python o algoritmo da métrica NCD (CILIBRASI; VITÁNYI, 2005), o que permite uma maior flexibilidade para inclusão de novos compressores, assim como torna a integração com as outras ferramentas do *framework* mais fácil. Esta biblioteca específica é chamada `ncd2`. Os autores originais da métrica disponibilizam uma implementação no *toolkit* CompLearn (CILIBRASI, 2005), o que nos permitiu validar nossa implementação e

verificar seu desempenho[1].

A implementação CompLearn possui algumas características diferentes da ferramenta desenvolvida, que demandaram compatibilização:

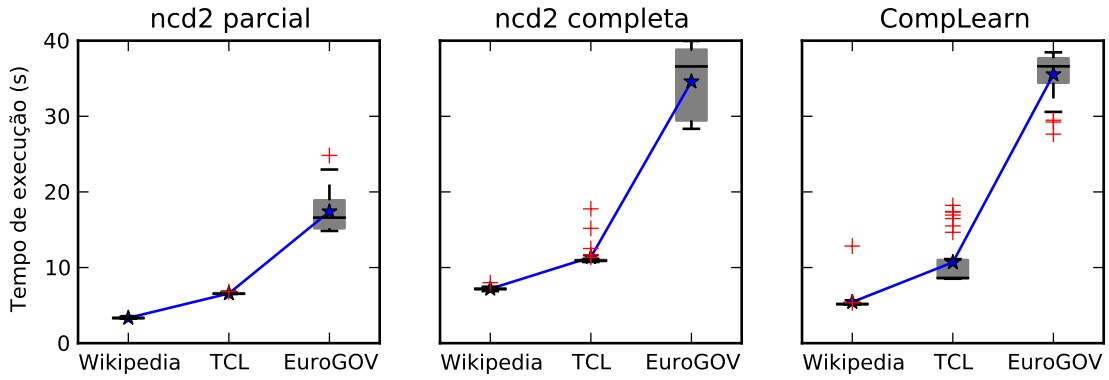
- A CompLearn permite apenas calcular uma matriz completa dos dados, o que pode dar origem a uma matriz não-simétrica, dado que $\mathrm{NCD}(A,B)$ não necessariamente é igual a $\mathrm{NCD}(B,A)$. A `ncd2` permite assumir que a matriz é simétrica, e então calcular apenas a porção triangular superior da matriz para uma execução mais rápida.
- Ao calcular uma matriz completa, a `ncd2` calcula as distâncias na diagonal, isto é, $\mathrm{NCD}(A,A)$, que em geral são não-nulas. Por sua vez, a CompLearn identifica que está calculando esta distância na diagonal e retorna apenas zero.
- A matriz de distância calculada pela `ncd2` é determinística, onde os elementos na entrada $(i,j)$ correspondem sempre a $\mathrm{NCD}(D_i,D_j)$. A CompLearn, por outro lado, permuta algumas das entradas de modo não-determinístico, de modo que a entrada $(i,j)$ pode corresponder a $\mathrm{NCD}(D_i,D_j)$ ou a $\mathrm{NCD}(D_j,D_i)$. Caso a hipótese de simetria não seja válida, isto introduz inconsistências entre execuções distintas da ferramenta.

Foi realizada uma série de experimentos com amostras de diferentes conjuntos de dados (Wikipedia, TCL e EuroGOV), com $n = 200$. Os conjuntos foram amostrados de modo a manter a proporção de classes inalterada. Para cada conjunto, a matriz de distâncias foi calculada utilizando os compressores `zlib` e `bz2`, com cada uma das implementações: `ncd2` parcial, `ncd2` completa e CompLearn. Cada execução foi repetida 30 vezes para obter uma amostra confiável do tempo de execução e poder comparar as médias com o teste t de Student. O tempo de execução observado para cada compressor está mostrado na Figura 27.

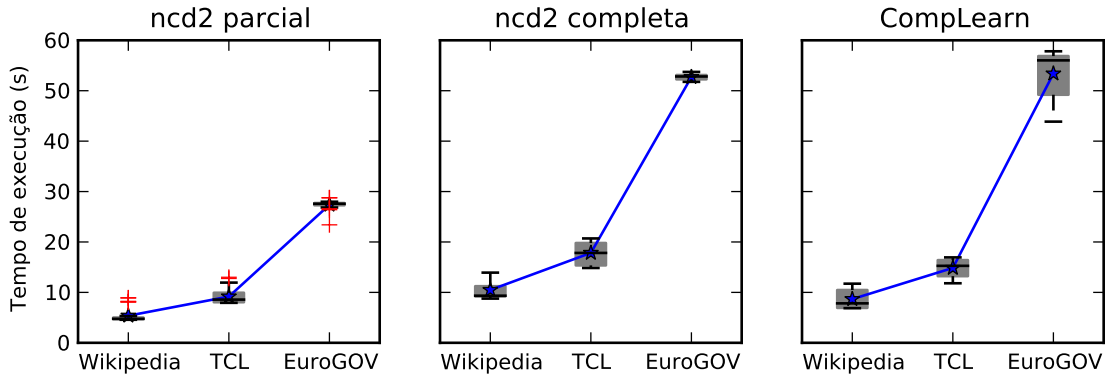
Dado que a `ncd2` completa e a CompLearn possuem implementações mais similares, é possível comparar o tempo de processamento em cada e o ganho no tempo de execução. Foram analisados também o $p$-valor do teste t de Student para decidir se as médias do tempo de execução são ou não distintas. Buscou-se comparar os valores nas matrizes, mas devido ao não-determinismo da CompLearn isto não foi satisfatório; para os conjuntos onde a saída foi determinística, notamos que a diferença é da ordem de $10^{-6}$, ou a precisão da saída da ferramenta em modo texto. Os resultados estão sumarizados na tabela 8.

Nota-se que para o conjunto Wikipedia e o conjunto TCL com `bz2`, a `ncd2` no modo completo é significativamente mais lenta que a CompLearn, enquanto para as outras combinações seu tempo de execução é equivalente ($p > 0,05$). Nestes últimos, a média de tamanhos das instâncias no conjunto de dados é maior, o que leva a um maior tempo gasto em compressão e

[1] Realizamos o experimento utilizando a versão 1.1.7 da biblioteca CompLearn, em sistema operacional Linux (kernel 3.2.0-93-generic-pae) e distribuição Ubuntu 12.04. O processador utilizado é Intel® Core™ i7-2670QM CPU @ 2.20GHz × 8.




(a) Compressor `zlib`




(b) Compressor `bz2`

Figura 27 – Distribuição dos tempos de execução para cada combinação de compressor, conjunto de dados e implementação. As estrelas azuis indicam a média de cada distribuição.

Tabela 8 – Comparação entre as implementações `ncd2` completa e CompLearn. Descrição das colunas no texto.

| Compressor | Conjunto | Ganho | $p$-valor |
|---|---|---|---|
| `zlib` | Wikipedia | $-32\%$ | $6,8 \times 10^{-9}$ |
| | TCL | $6,0\%$ | $0,33$ |
| | EuroGOV | $2,7\%$ | $0,34$ |
| `bz2` | Wikipedia | $-21\%$ | $3,3 \times 10^{-4}$ |
| | TCL | $-20\%$ | $1,1 \times 10^{-7}$ |
| | EuroGOV | $1,3\%$ | $0,41$ |

menos em coordenação dos cálculos. Como ambas utilizam as mesmas bibliotecas de compressão, a sobrecarga da coordenação não é evidente.

Nos casos com instâncias de dados menores a diferença de desempenho das ferramentas é aparente, possivelmente devido à diferença de linguagens utilizadas. Contudo, nota-se que a implementação de `ncd2` parcial leva metade do tempo que a `ncd2` completa, como esperado; assim, se for possível assumir que a matriz é simétrica, pode-se obter um ganho significativo ao se percorrer apenas uma metade da matriz com a `ncd2`, o que não é possível com a CompLearn.

## 5.3 Classificação de spam

Spam é caracterizado como qualquer mensagem não solicitada, enviada para milhares de recipientes simultaneamente (ANDROUTSOPOULOS *et al.*, 2000). Tais mensagens representam um alto custo em produtividade perdida, e as estratégias de mitigação evoluíram conforme *spammers* desenvolvem sistemas sofisticados para burlar as proteções - atualmente, são necessários sistemas distribuídos de tempo real para uma visão atualizada dos IPs de onde se originam mensagens de spam, assim como a detecção de padrões constantemente em mutação para detectar mensagens indesejadas (KONG *et al.*, 2006).

Adicionalmente ao fenômeno em mensagens de email, a ocorrência de spam vem crescendo em mensagens de SMS. Com a diminuição significativa dos custos de tais mensagens, sua ocorrência cresceu de forma explosiva, representando cerca de 30% das mensagens recebidas em algumas regiões da Ásia (ALMEIDA; HIDALGO; SILVA, 2013). Modelos para classificação de SMS apresentam desafios com o pequeno tamanho das mensagens e a alta frequência de palavras resumidas e gírias.

Uma componente básica destes sistemas é detectar se novas mensagens apresentam padrão de spam. Tal categorização deve levar em conta que um falso positivo possui um custo maior do que falsos negativos - isto é, não mostrar ao usuário uma mensagem legítima possui um custo maior do que mostrar uma mensagem de spam. Esta é uma classificação binária, e sua validação é realizada com as métricas definidas na seção 2.5.1.4.

Foi investigado o desempenho dos compressores `zlib`, `bz2` e `ppmd`, em combinação com os classificadores $k$NN com $k \in \{1, 5, 10\}$ e o classificador de quartetos proposto. Para a base `LingSpam`, foram utilizadas as versões `Bare` e `LemmStop` para avaliar o impacto do pré-processamento sobre a efetividade da ferramenta. Para os conjuntos analisados, os elementos foram particionados em 10% para treinamento e 90% de forma aleatória, mas mantendo a proporção de classes. Os resultados estão sumarizados na Tabela 9; como os resultados dos classificadores de $k$NN foram similares, apresentamos apenas para $k = 5$.

Nota-se que, para todas as combinações, o classificador $k$NN realiza a classificação em mais de 99% dos elementos, enquanto o classificador de quartetos retorna uma classe para apenas $35 - 55\%$ dos elementos. Para os elementos classificados, em geral, os classificadores apresentam comportamento oposto com relação às métricas: enquanto o classificador $k$NN apresenta boa precisão, o classificador de quartetos apresenta boa sensitividade. Tais características podem ser combinadas para obter uma classificação mais efetiva, por exemplo, empregando o $k$NN para localizar mensagens de spam com precisão, e então utilizar o classificador de quartetos sobre as mensagens remanescentes para detectar mensagens de spam perdidas.

Com relação aos compressores, o `ppmd` é consistentemente melhor para mensagens longas do conjunto `LingSpam`, mas não para as mensagens curtas, onde o compressor `zlib` se destaca. Isto se deve, possivelmente, à simplicidade deste e ao fato de que exige menos

Tabela 9 – Desempenho para classificação de spam. As métricas são apresentadas apenas para os elementos classificados. Para cada combinação de conjunto de dados e classificador, foi destacada a melhor métrica.

| Conjunto de dados | Classificador | Compressor | Precisão | Sensitividade | Classificado |
|---|---|---|---|---|---|
| LingSpam-Bare | *k*NN | zlib | **99.3**% | 67.6% | 99.1% |
| | | bz2 | 98.3% | 68.4% | 99.0% |
| | | ppmd | 96.7% | **76.4**% | 99.4% |
| | Quartetos | zlib | 87.8% | **96.7**% | 43.2% |
| | | bz2 | 80.4% | 96.4% | 37.9% |
| | | ppmd | **95.2**% | 96.3% | 39.6% |
| LingSpam-Proc | *k*NN | zlib | 97.9% | 67.6% | 99.3% |
| | | bz2 | 97.9% | 68.1% | 98.9% |
| | | ppmd | **98.7**% | **74.3**% | 99.3% |
| | Quartetos | zlib | 72.4% | **98.3**% | 36.2% |
| | | bz2 | 73.1% | 92.3% | 45.4% |
| | | ppmd | **77.8**% | 96.4% | 38.8% |
| SMSSpam | *k*NN | zlib | 98.9% | **82.7**% | 99.8% |
| | | bz2 | 99.8% | 60.0% | 99.7% |
| | | ppmd | **100**% | 74.4% | 99.7% |
| | Quartetos | zlib | **78.2**% | **96.9**% | 51.6% |
| | | bz2 | 66.0% | 94.7% | 54.2% |
| | | ppmd | 69.2% | 96.5% | 53.1% |

informações da entrada para construir um modelo efetivo.

Por fim, comparando-se os conjuntos LingSpam-Bare e LingSpam-Proc, nota-se que em geral a precisão da NCD diminui com o pré-processamento, enquanto a sensitividade e a fração de elementos classificados não variam de forma significativa. Uma possível causa é que enquanto tais informações adicionam ruído para métricas tradicionais, elas são significativas para a NCD.

## 5.4 Identificação de línguas

A tarefa de identificação de línguas consiste em detectar a língua em que um certo documento foi escrito, o que possui importância para ferramentas de *crawling* da Web e outras ferramentas agregadoras de conteúdo (BALDWIN; LUI, 2010). A tarefa parece simples ao se considerar textos longos em línguas ocidentais, mas é complicada quando extendida para as diversas línguas presentes na Web, tanto por similaridades entre línguas com a mesma raiz e pela falta de *corpora* para treinamento. Textos curtos (por exemplo, comentários de usuários) também são de difícil reconhecimento.

Para avaliar a qualidade dos classificadores estudados, foram realizados experimentos sobre as bases de dados EuroGOV, TCL e Wikipedia, particionando 10% do conjunto de dados para treinamento e 90% para teste de forma aleatória, mas mantendo a proporção de classes. Empregamos todos os índices de validação descritos na seção 2.5.1, mas apenas o índice de

Tabela 10 – Desempenho para identificação de línguas. As métricas de distância de informação normalizada e índice de classificação são apresentadas apenas para os elementos classificados.

| Conjunto de dados | Classificador | Compressor | $d$ | $c$ | Classificado |
|---|---|---|---|---|---|
| EuroGOV | *k*NN | zlib | 0.08 | 0.96 | 94.9% |
| | | bz2 | 0.09 | 0.96 | 95.9% |
| | | ppmd | **0.06** | **0.97** | 96.1% |
| | Quartetos | zlib | 0.41 | 0.76 | 50.0% |
| | | bz2 | 0.39 | 0.78 | 49.1% |
| | | ppmd | **0.33** | **0.81** | 49.3% |
| TCL | *k*NN | zlib | 0.08 | 0.94 | 87.0% |
| | | bz2 | 0.07 | 0.95 | 88.7% |
| | | ppmd | **0.06** | **0.96** | 88.6% |
| | Quartetos | zlib | 0.17 | 0.85 | 48.8% |
| | | bz2 | 0.10 | 0.91 | 50.2% |
| | | ppmd | **0.02** | **0.98** | 48.0% |
| Wikipedia | *k*NN | zlib | 0.42 | 0.78 | 85.9% |
| | | bz2 | 0.43 | 0.78 | 84.3% |
| | | ppmd | **0.34** | **0.83** | 85.2% |
| | Quartetos | zlib | 0.32 | 0.66 | 4.25% |
| | | bz2 | 0.38 | 0.60 | 2.37% |
| | | ppmd | **0.25** | **0.77** | 6.28% |

classificação $c$ (descrito na seção 2.5.1.1) e a distância de informação normalizada pela entropia conjunta $d = d(U,V)/H(U,V)$, descrita na seção 2.5.1.3, são apresentados. As métricas ajustadas para o acaso ficaram distantes de zero ($> 0,37$), indicando que a classificação não é aleatória. A Tabela 10 apresenta os resultados para todas as combinações de conjunto, classificador e compressor utilizado.

Nota-se que o classificador `ppmd` apresenta o melhor desempenho em todos os casos, o que se justifica pela sua melhor taxa de compressão em textos longos. O classificador de quartetos apresenta um grande número de confusão, emitindo uma classificação para cerca de 50% dos elementos nos conjuntos `EuroGOV` e `TCL` e apenas 6% dos elementos no conjunto `Wikipedia`. O classificador *k*NN é capaz de classificar mais elementos, embora apresente resultados ligeiramente piores para os conjuntos mais diversificados (`TCL` e `Wikipedia`), embora ainda alcance um índice de classificação superior a 0.8.

CAPÍTULO

# 6

# CONCLUSÃO

A metodologia DAMICORE está em ativo desenvolvimento, sendo extendida e aplicada em uma variedade de áreas de conhecimento como detecção de plágio e doenças em monoculturas, navegação de robôs, obtenção de clados em conjuntos de genoma, além do agrupamento e classificação apresentados neste trabalho. Ela é flexível e genérica para ser incorporada em fluxos de trabalho de pesquisadores e analistas de dados, e este trabalho colabora para a compreensão de seus mecanismos internos, classificação de conjuntos e para uma maior acessibilidade a quaisquer interessados.

## 6.1 Contribuições

A principal contribuição deste trabalho é a extensão da metodologia DAMICORE para tarefas de classificação, com o desenvolvimento e implementação de um método não-paramétrico que permite uma nova gama de aplicações que se beneficiem das capacidades únicas da NCD. Este método se baseia no trabalho de Delbem (2012) e inclui as seguintes extensões:

- Aplicável para um número arbitrário de classes;
- Cálculo da confiança na classificação;
- Processo de decisão capaz de rejeitar classificar uma instância se suas conclusões não forem confiáveis;
- Falha gradual, podendo emitir uma lista de classes prováveis quando não é capaz de escolher apenas uma.

Além da classificação de spam com boa sensitividade apresentada neste trabalho, este método foi utilizado com sucesso por Pinto (2013), classificando binários executáveis com 100% de acurácia com a técnica de validação *leave-one-out*.

A segunda contribuição relevante é o próprio conjunto de ferramentas implementando a DAMICORE e seus utilitários. Pesquisadores terão disponível uma ferramenta de linha de comando capaz de produzir o agrupamento ou classificação de um conjunto de dados binários de forma automática, incluindo a etapa de validação contra um conjunto de referência. A ferramenta é eficiente e paralela, adequada para conjuntos de dados de tamanho moderado (1.000 a 10.000 instâncias) e capaz de rodar em computadores pessoais. Ainda, sua arquitetura permite incluir novos compressores, algoritmos de simplificação e detecção de comunidades, índices de validação ou mesmo novas métricas, que poderão ser necessários para tarefas especializadas. A ferramenta possui testes extensivos para garantir a corretude dos algoritmos e métricas implementadas, incluindo testes de compatibilidade com outras implementações.

Também, a função de pareamento de intercalação proposta é uma novidade na aplicação da NCD, uma vez que na literatura não existe exploração de funções alternativas à concatenação. Apesar de não ter sido obtida uma melhora significativa na aplicação de agrupamento, a utilização de tal técnica oferece garantias teóricas melhores para instâncias grandes, isto é, maiores que a janela do compressor. Isto remove um obstáculo para a utilização do compressor gzip, que em geral é preterido em favor do PPMd devido a possuir uma taxa de compressão cerca de 10% menor, mesmo sendo 5-10x mais rápido. O compressor PPMd não sofre com condições de janela, e gzip e bzi2 podem ser também aprimorados com o uso de intercalação.

Demais contribuições incluem:

- Investigação de uma função de pareamento alternativa na aplicação da NCD, com desempenho similar à concatenação e maior garantia teórica para instâncias grandes.
- Novos métodos de detecção de comunidades em árvores, com a definição de duas medidas de modularidade específicas para árvores;
- Detecção de *bugs* não-determinísticos na ferramenta CompLearn.

Por fim, espera-se que esta própria dissertação torne-se um recurso de estudos para quem desejar compreender as técnicas utilizadas pela metodologia DAMICORE, uma vez que abrange estudos em teoria da informação, compressores, filogenética, grafos e detecção de comunidades, classificadores e métodos de validação.

## 6.2 Trabalhos futuros

### *6.2.1* NCD

A métrica NCD é definida por dois parâmetros: a função de pareamento e o compressor utilizado. Uma modificação interessante proposta em Cilibrasi e Vitanyi (2007) propõe utilizar a quantidade de páginas retornadas pelo buscador Google como uma medida de frequência de um

termo; quanto menos frequente, maior seria a quantidade de bits necessários para codificá-lo. O pareamento consiste simplesmente em buscar ambos os termos em conjunto, o que produz uma medida de similaridade baseada em todo o conhecimento indexado pelo Google.

Este método, porém, é falho, uma vez que o próprio buscador admite que os resultados são apenas aproximados e podem retornar mais páginas ao se buscar a interseção de dois termos (SULLIVAN, 2011). Uma técnica mais robusta necessitaria da implementação de um indexador confiável, o qual dificilmente alcançaria a escala obtida pelo Google. Ainda assim, uma aplicação possível seria indexar a totalidade de uma área e obter relações significativos em um contexto: enquanto os termos "bomba"e "caixa"parecem pouco relacionados, no contexto de engenharia civil eles são similares por serem interpretados como "bomba d'água"e "caixa d'água".

Outros trabalhos possíveis para a extensão da NCD incluem buscar novas funções de pareamento e aplicação de compressores especializados, como compressores de mensagens curtas, documentos XML, imagens de bitmap e séries temporais. Ainda, pouca pesquisa foi realizada em termos de utilizar a NCD com compressores com perdas, como os utilizados pelo formato JPEG em imagens e MP3 para músicas. Embora contrários à formulação teórica da métrica por não serem reversíveis, tais compressores fornecem uma transformação de dados quase imperceptível para seres humanos, de modo que podem revelar similaridades de acordo com a percepção humana ao invés de em termos de teoria da informação.

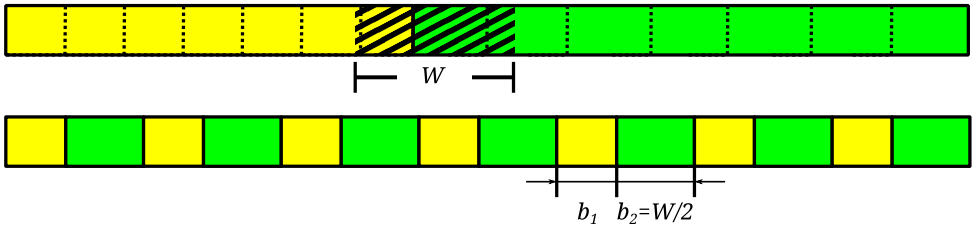
### 6.2.2 Intercalação

Como apresentada, a função de pareamento por intercalação de blocos é capaz de obter $\mathrm{NCD}(x,x) \approx 0$ mesmo para objetos maiores que a janela do compressor. Outras estratégias mais elaboradas podem ser construídas, como:

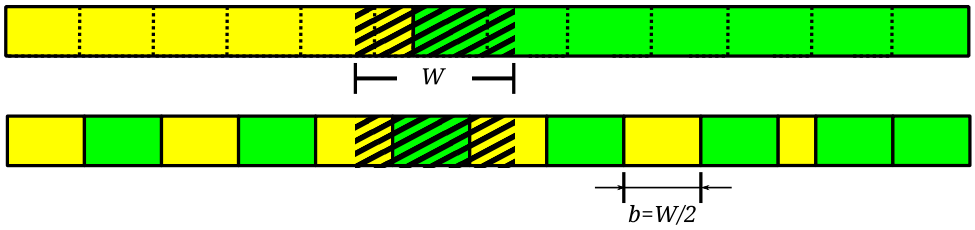
- particionar as *strings* em $n$ blocos que garantam que cada um tenha tamanho menor ou igual a $W$. Pode-se forçar que cada *string* possua uma quantidade de blocos iguais (Figura 28a) ou não (Figura 28b). No primeiro caso, caso as *strings* possuam tamanhos diferentes, não existirá uma seção final composta de conteúdo de uma única *string*. No segundo, garante-se que quando a janela contiver conteúdo de ambas as *string*, será em igual proporção.

- particionar as *strings* em blocos de tamanhos desiguais de modo a minimizar as quebras de padrões internos. Uma variante do algoritmo de Rabin-Karp permite localizar uma série de subsequências idênticas em uma *string* grande de forma eficiente (KARP; RABIN, 1987). Isto permitiria encontrar trechos idênticos de uma *string* em si mesma ou na outra *string*. Utilizando-se uma função de hash menos eficiente, mas que mapeie *strings* similares para valores próximos, pode-se ainda buscar por padrões próximos mas não idênticos.

- comparação simultânea de mais que dois objetos, ou a métrica de um multiconjunto. Esta abordagem foi formalizada e explorada por Cohen e Vitányi (2012) com concatenação simples, e a intercalação pode ter maior poder para um compressor de mundo real.




(a) Intercalação com número de blocos igual para *strings* de tamanhos diferentes.




(b) Intercalação com tamanho de blocos igual para *strings* de tamanhos diferentes.

Figura 28 – Intercalação não parametrizada, com tamanho de bloco máximo igual a $W/2$.

### 6.2.3 Ferramenta DAMICORE

A ferramenta desenvolvida ainda deverá ser disponibilizada ao público geral, embora alguns membros do grupo de pesquisa já a utilizem. Um desenvolvimento significativo é permitir uma interface mais acessível para um especialista leigo em programação, como um binário executável com interface gráfica ou uma página Web.

Outro desenvolvimento significativo seria a adaptação da ferramenta para execução distribuída, que será necessária para obter respostas rápidas sobre conjuntos de dados muito grandes. O aprimoramento em eficiência para permitir a análise de conjuntos moderados em computadores pessoais, não exclui o benefício de se executar uma análise em um *cluster* dedicado ou em provedores de nuvem. Um ganho significativo deve ser obtido ao distribuir o cálculo da matriz de distância, que é a etapa mais custosa mas também embaraçosamente paralela. Particionando-se o conjunto em $n$ partes, pode-se alocar $n^2$ máquinas em uma grade $n \times n$, onde a máquina $(i, j)$ deverá comprimir a submatriz contendo os elementos das partes $i$ e $j$.

A ferramenta ainda não inclui diversas opções de compressores populares, como RAR, 7Zip e ZIP; opções de etapas de simplificação como limiarização, $k$NN e UPGMA; e não contém implementações eficientes das novas medidas de modularidade propostas ou de distâncias de ponto-a-grupo e grupo-a-grupo. Espera-se que a adição de tais funcionalidades seja acessível a terceiros devido à sua arquitetura extensível.

### 6.2.4 Classificador por árvores de quarteto

O classificador por árvores de quarteto possui características únicas que ainda não foram exploradas por completo. Inicialmente, a escolha de *outgroup* necessita de uma heurística melhor que a aleatória, e preferencialmente determinística. A exploração do espaço de parâmetros possíveis é extensa e não é garantido que seja transferível de aplicação para aplicação, podendo depender da distribuição multidimensional dos elementos do conjunto.

Ainda, a capacidade de o classificador retornar que um elemento não foi classificado pode não ser desejável para um especialista. Algumas maneiras antevistas para se solucionar isto é acoplar o classificador a outro mais robusto, como proposto com o *k*NN na seção 5.3. Outras possibilidades incluem: realizar a classificação de forma iterativa, inserindo elementos classificados com segurança no grupo, e realizar a classificação novamente com este acréscimo de informação; utilizar simultaneamente diversos *outgroups* com heurísticas diferentes, e obter um consenso entre as classificações obtidas; e utilizar técnicas alternativas para agrupamento dos elementos da matriz $4 \times 4$ que não a reconstrução filogenética.

# REFERÊNCIAS


ALBATINEH, A. N. Means and variances for a family of similarity indices used in cluster analysis. **Journal of Statistical Planning and Inference**, Elsevier, v. 140, n. 10, p. 2828–2838, 2010. Citado na página 59.

ALBATINEH, A. N.; NIEWIADOMSKA-BUGAJ, M. Correcting jaccard and other similarity indices for chance agreement in cluster analysis. **Advances in Data Analysis and Classification**, Springer, v. 5, n. 3, p. 179–200, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 58 e 59.

ALMEIDA, T.; HIDALGO, J. M. G.; SILVA, T. P. Towards sms spam filtering: Results under a new dataset. **International Journal of Information Security Science**, v. 2, n. 1, p. 1–18, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 99 e 106.

AMORIM, D. de S. **Fundamentos de Sistemática Filogenética**. [S.l.]: Holos Editora, 2002. Citado na página 37.

ANDROUTSOPOULOS, I.; KOUTSIAS, J.; CHANDRINOS, K. V.; PALIOURAS, G.; SPYROPOULOS, C. D. An evaluation of naive bayesian anti-spam filtering. **arXiv preprint cs/0006013**, 2000. Citado 2 vezes nas páginas 99 e 106.

AUGERI, C. J.; BULUTOGLU, D. A.; MULLINS, B. E.; BALDWIN, R. O.; III, L. C. B. An analysis of xml compression efficiency. In: ACM. **Proceedings of the 2007 workshop on Experimental computer science**. [S.l.], 2007. p. 7. Citado na página 33.

BALDWIN, T.; LUI, M. Language identification: The long and the short of the matter. In: ASSOCIATION FOR COMPUTATIONAL LINGUISTICS. **Human Language Technologies: The 2010 Annual Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics**. [S.l.], 2010. p. 229–237. Citado 2 vezes nas páginas 99 e 107.

BENNETT, C. H.; GÁCS, P.; LI, M.; VITÁNYI, P. M.; ZUREK, W. H. Information distance. **Information Theory, IEEE Transactions on**, IEEE, v. 44, n. 4, p. 1407–1423, 1998. Citado 3 vezes nas páginas 29, 30 e 31.

BRANDES, U. A faster algorithm for betweenness centrality*. **Journal of Mathematical Sociology**, Taylor & Francis, v. 25, n. 2, p. 163–177, 2001. Citado na página 47.

BRANDES, U.; DELLING, D.; GAERTLER, M.; GORKE, R.; HOEFER, M.; NIKOLOSKI, Z.; WAGNER, D. On modularity clustering. **Knowledge and Data Engineering, IEEE Transactions on**, IEEE, v. 20, n. 2, p. 172–188, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 45 e 48.

BURROWS, M.; WHEELER, D. J. A block-sorting lossless data compression algorithm. Citeseer, 1994. Citado na página 35.

CEBRIAN, M.; ALFONSECA, M.; ORTEGA, A. Common pitfalls using the normalized compression distance: What to watch out for in a compressor. **Communications in Information & Systems**, International Press of Boston, v. 5, n. 4, p. 367–384, 2005. Citado na página 68.

CILIBRASI, R. Complearn toolkit. 2005. Citado 2 vezes nas páginas 79 e 103.

CILIBRASI, R.; VITÁNYI, P. M. Clustering by compression. **Information Theory, IEEE Transactions on**, IEEE, v. 51, n. 4, p. 1523–1545, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 103.

CILIBRASI, R. L.; VITANYI, P. The google similarity distance. **Knowledge and Data Engineering, IEEE Transactions on**, IEEE, v. 19, n. 3, p. 370–383, 2007. Citado na página 110.

CLAUSET, A.; NEWMAN, M. E.; MOORE, C. Finding community structure in very large networks. **Physical review E**, APS, v. 70, n. 6, p. 066111, 2004. Citado na página 49.

COHEN, A. R.; VITÁNYI, P. M. B. Normalized compression distance of multisets with applications. **CoRR**, abs/1212.5711, 2012. Citado na página 112.

DARWIN, C. On the origin of species. 1. **London: Murray**, 1859. Citado na página 37.

DARWIN, C.; WALLACE, A. On the tendency of species to form varieties; and on the perpetuation of varieties and species by natural means of selection. **Journal of the proceedings of the Linnean Society of London. Zoology**, Wiley Online Library, v. 3, n. 9, p. 45–62, 1858. Citado na página 37.

DELBEM, A. C. **Mineração de dados de biofotônica e climáticos para aumento da precisão e da robustez de modelos de predição/detecção do Greening**. [S.l.], 2012. Citado 3 vezes nas páginas 24, 74 e 109.

DEUTSCH, P.; GAILLY, J.-L. **Zlib compressed data format specification version 3.3**. [S.l.], 1996. Citado na página 35.

FELSENSTEIN, J. Confidence limits on phylogenies: an approach using the bootstrap. **Evolution**, JSTOR, p. 783–791, 1985. Citado na página 64.

FORTUNATO, S. Community detection in graphs. **Physics Reports**, Elsevier, v. 486, n. 3, p. 75–174, 2010. Citado 3 vezes nas páginas 42, 44 e 48.

FORTUNATO, S.; BARTHELEMY, M. Resolution limit in community detection. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, National Acad Sciences, v. 104, n. 1, p. 36–41, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 15, 46 e 47.

FOWLKES, E. B.; MALLOWS, C. L. A method for comparing two hierarchical clusterings. **Journal of the American Statistical Association**, v. 78, n. 383, p. 553–569, 1983. Disponível em: <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/01621459.1983.10478008>. Citado 3 vezes nas páginas 56, 58 e 59.

FREDERICKSON, G. N. Optimal algorithms for tree partitioning. In: **SODA**. [S.l.: s.n.], 1991. p. 168–177. Citado na página 69.

GIRVAN, M.; NEWMAN, M. E. Community structure in social and biological networks. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, National Acad Sciences, v. 99, n. 12, p. 7821–7826, 2002. Citado na página 47.

HUBERT, L.; ARABIE, P. Comparing partitions. **Journal of classification**, Springer, v. 2, n. 1, p. 193–218, 1985. Citado 2 vezes nas páginas 56 e 58.

JACCARD, P. The distribution of the flora in the alpine zone. 1. **New phytologist**, Wiley Online Library, v. 11, n. 2, p. 37–50, 1912. Citado na página 56.

JONES, E.; OLIPHANT, T.; PETERSON, P. *et al.* **SciPy: Open source scientific tools for Python**. 2001–. [Online; accessed 2016-01-27]. Disponível em: <http://www.scipy.org/>. Citado na página 80.

KARP, R. M.; RABIN, M. O. Efficient randomized pattern-matching algorithms. **IBM Journal of Research and Development**, IBM, v. 31, n. 2, p. 249–260, 1987. Citado na página 111.

KONG, J. S.; REZAEI, B.; SARSHAR, N.; ROYCHOWDHURY, V. P.; BOYKIN, P. O. *et al.* Collaborative spam filtering using e-mail networks. **Computer**, IEEE, v. 39, n. 8, p. 67–73, 2006. Citado na página 106.

LI, M.; CHEN, X.; LI, X.; MA, B.; VITÁNYI, P. M. The similarity metric. **Information Theory, IEEE Transactions on**, IEEE, v. 50, n. 12, p. 3250–3264, 2004. Citado 3 vezes nas páginas 24, 29 e 31.

LUKES, J. A. Efficient algorithm for the partitioning of trees. **IBM Journal of Research and Development**, IBM, v. 18, n. 3, p. 217–224, 1974. Citado na página 69.

MAHONEY, M. Paq8f. **Online]. http://mattmahoney.net/dc/paq.html#paq8**, 2006. Acessado em 29 de Novembro de 2015. Citado na página 36.

MANSOUR, E. R. M. **Método automático de determinação de clados utilizando algoritmo de detecção de comunidades**. Dissertação (Mestrado) — Universidade de São Paulo, 2013. Citado na página 27.

MARAVALLE, M.; SIMEONE, B.; NALDINI, R. Clustering on trees. **Computational Statistics & Data Analysis**, Elsevier, v. 24, n. 2, p. 217–234, 1997. Citado na página 69.

MATTHEWS, D.; HOSKER, J.; RUDENSKI, A.; NAYLOR, B.; TREACHER, D.; TURNER, R. Homeostasis model assessment: insulin resistance and $\beta$-cell function from fasting plasma glucose and insulin concentrations in man. **Diabetologia**, Springer, v. 28, n. 7, p. 412–419, 1985. Citado na página 62.

MEILA, M. Comparing clusterings by the variation of information. In: **Learning theory and kernel machines**. [S.l.]: Springer, 2003. p. 173–187. Citado na página 58.

____. Comparing clusterings: an axiomatic view. In: ACM. **Proceedings of the 22nd international conference on Machine learning**. [S.l.], 2005. p. 577–584. Citado na página 57.

____. Comparing clusterings—an information based distance. **Journal of Multivariate Analysis**, Elsevier, v. 98, n. 5, p. 873–895, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 57, 59 e 61.

MING, L.; VITÁNYI, P. **An introduction to Kolmogorov complexity and its applications**. [S.l.]: Springer Heidelberg, 1997. Citado na página 29.

MITCHELL, T. M. **Machine Learning**. [S.l.]: McGraw-Hill, 1997. Citado na página 51.

MOLLOY, M.; REED, B. A critical point for random graphs with a given degree sequence. **Random structures & algorithms**, Wiley Online Library, v. 6, n. 2-3, p. 161–180, 1995. Citado na página 45.

MUNKRES, J. Algorithms for the assignment and transportation problems. **Journal of the Society for Industrial & Applied Mathematics**, SIAM, v. 5, n. 1, p. 32–38, 1957. Citado na página 57.

NEWMAN, M. E. Analysis of weighted networks. **Physical Review E**, APS, v. 70, n. 5, p. 056131, 2004. Citado na página 46.

____. Fast algorithm for detecting community structure in networks. **Physical review E**, APS, v. 69, n. 6, p. 066133, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 49.

NEWMAN, M. E.; GIRVAN, M. Finding and evaluating community structure in networks. **Physical review E**, APS, v. 69, n. 2, p. 026113, 2004. Citado na página 45.

OCHIAI, A. Zoogeographic studies on the solenoid fishes found in japan and its neighbouring regions. **Bulletin of the Japanese Society for the Science of Fish**, n. 22, p. 526–530, 1957. Citado na página 56.

PÉREZ, F.; GRANGER, B. E. IPython: a system for interactive scientific computing. **Computing in Science and Engineering**, IEEE Computer Society, v. 9, n. 3, p. 21–29, maio 2007. ISSN 1521-9615. Disponível em: <http://ipython.org>. Citado na página 80.

PINTO, R. d. S. **Predição de perfis de carga de processos a partir de executáveis utilizando método de mineração de dados de repositório de códigos**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2013. (em andamento). Citado 4 vezes nas páginas 27, 100, 103 e 109.

PLOTREE, D.; PLOTGRAM, D. Phylip-phylogeny inference package (version 3.2). **cladistics**, Wiley Online Library, v. 5, p. 163–166, 1989. Citado na página 79.

QUISPE-AYALA, M. R.; ASALDE-ALVAREZ, K.; ROMAN-GONZALEZ, A. Image classification using data compression techniques. In: IEEE. **Electrical and Electronics Engineers in Israel (IEEEI), 2010 IEEE 26th Convention of**. [S.l.], 2010. p. 000349–000353. Citado na página 33.

RAND, W. M. Objective criteria for the evaluation of clustering methods. **Journal of the American Statistical association**, Taylor & Francis Group, v. 66, n. 336, p. 846–850, 1971. Citado na página 55.

RONQUIST, F.; HUELSENBECK, J. P. Mrbayes 3: Bayesian phylogenetic inference under mixed models. **Bioinformatics**, Oxford Univ Press, v. 19, n. 12, p. 1572–1574, 2003. Citado na página 39.

SAITOU, N.; NEI, M. The neighbor-joining method: a new method for reconstructing phylogenetic trees. **Molecular biology and evolution**, SMBE, v. 4, n. 4, p. 406–425, 1987. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 39.

SANCHES, A.; CARDOSO, J. M.; DELBEM, A. C. Identifying merge-beneficial software kernels for hardware implementation. In: IEEE. **Reconfigurable Computing and FPGAs (ReConFig), 2011 International Conference on**. [S.l.], 2011. p. 74–79. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 27.

SEWARD, J. The bzip2 and libbzip2 official home page. **Online]. http://www.bzip.org**, 1996. Acessado em 29 de Novembro de 2015. Citado na página 35.

SHKARIN, D. Ppmd. **Online]. http://compression.ru/ds/**, 2010. Acessado em 29 de Novembro de 2015. Citado na página 35.

SIGURBJÖRNSSON, B.; KAMPS, J.; RIJKE, M. D. **EuroGOV: Engineering a multilingual Web corpus**. [S.l.]: Springer, 2006. Citado na página 99.

SOARES, A. H. M. **Algoritmos de Estimação de Distribuição baseados em Árvores Filogenéticas**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2013. (em andamento). Citado na página 27.

SULLIVAN, D. **Why Google Can't Count Results Properly**. 2011. Disponível em: <http://searchengineland.com/why-google-cant-count-results-properly-53559>. Citado na página 111.

TUKEY, J. W. Bias and confidence in not-quite large samples. **The Annals of Mathematical Statistics**, Institute of Mathematical Statistics, v. 29, n. 2, p. pp. 614–623, 1958. ISSN 00034851. Disponível em: <http://www.jstor.org/stable/2237363>. Citado na página 64.

VINH, N. X.; EPPS, J.; BAILEY, J. Information theoretic measures for clusterings comparison: Variants, properties, normalization and correction for chance. **The Journal of Machine Learning Research**, JMLR. org, v. 11, p. 2837–2854, 2010. Citado na página 61.

WALLACE, D. L. Comment. **Journal of the American Statistical Association**, Taylor & Francis Group, v. 78, n. 383, p. 569–576, 1983. Citado 3 vezes nas páginas 56, 57 e 58.

ZACHARY, W. W. An information flow model for conflict and fission in small groups. **Journal of anthropological research**, JSTOR, p. 452–473, 1977. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 48.

ZIV, J.; LEMPEL, A. A universal algorithm for sequential data compression. **IEEE Transactions on information theory**, v. 23, n. 3, p. 337–343, 1977. Citado na página 35.