

# Análise de Agrupamento

Minicurso de Machine Learning · I CiDAMO

Prof. Cesar Taconeli

[taconeli@ufpr.br](mailto:taconeli@ufpr.br)

Prof. Walmes Zeviani

[walmes@ufpr.br](mailto:walmes@ufpr.br)

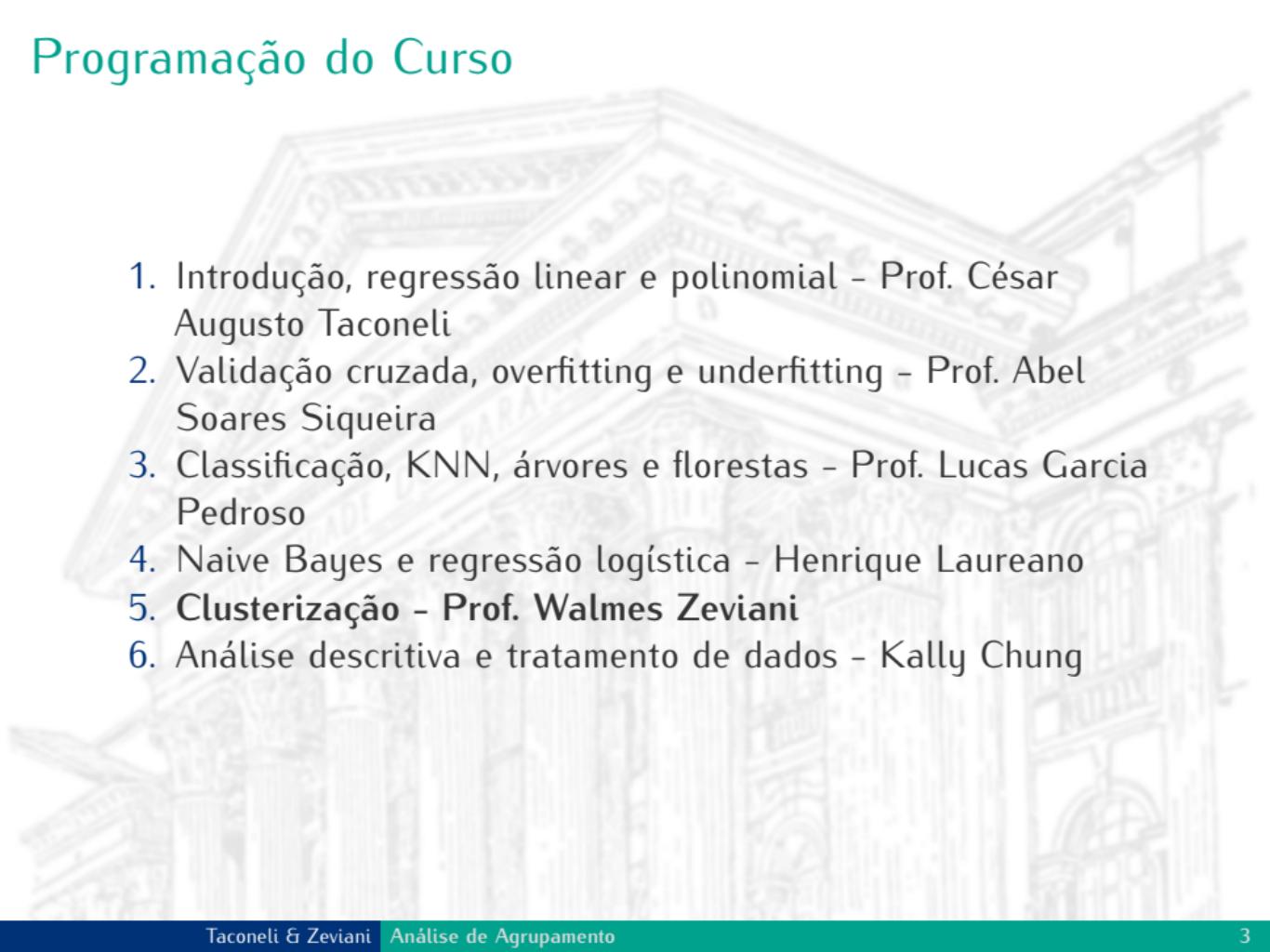
Departamento de Estatística  
Universidade Federal do Paraná

13 de fevereiro, 2020

A faint, light gray watermark-like image of a classical building's facade, featuring multiple columns, arches, and decorative moldings, serves as the background for the slide.

# Contextualização

# Programação do Curso

- 
1. Introdução, regressão linear e polinomial – Prof. César Augusto Taconeli
  2. Validação cruzada, overfitting e underfitting – Prof. Abel Soares Siqueira
  3. Classificação, KNN, árvores e florestas – Prof. Lucas Garcia Pedroso
  4. Naive Bayes e regressão logística – Henrique Laureano
  5. Clusterização – Prof. Walmes Zeviani
  6. Análise descritiva e tratamento de dados – Kally Chung

# Aprendizado Supervisionado

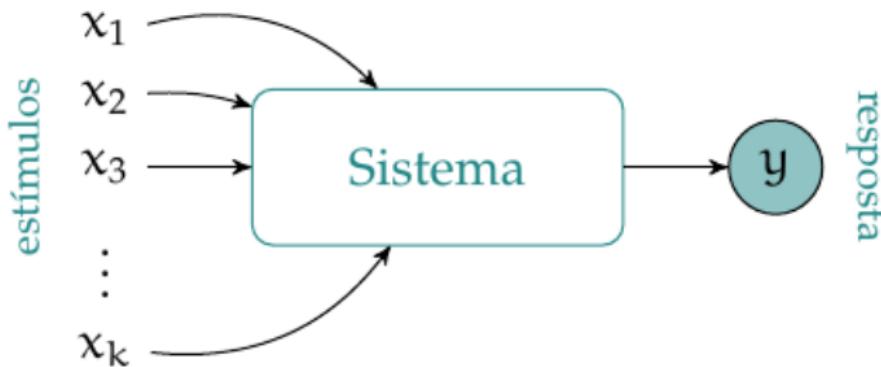


Figura 1. Modelo mental de um algoritmo de aprendizado supervisionado.

- ▶ *Aprendizado supervisionado* refere-se ao caso em que um conjunto de variáveis  $X_1, X_2, \dots, X_p$ , medidas em  $n$  indivíduos, são usadas para explicar (predizer) uma variável resposta ( $Y$ ).



Figura 2. Variáveis que influenciam o preço de uma habitação.

# Aprendizado Não Supervisionado

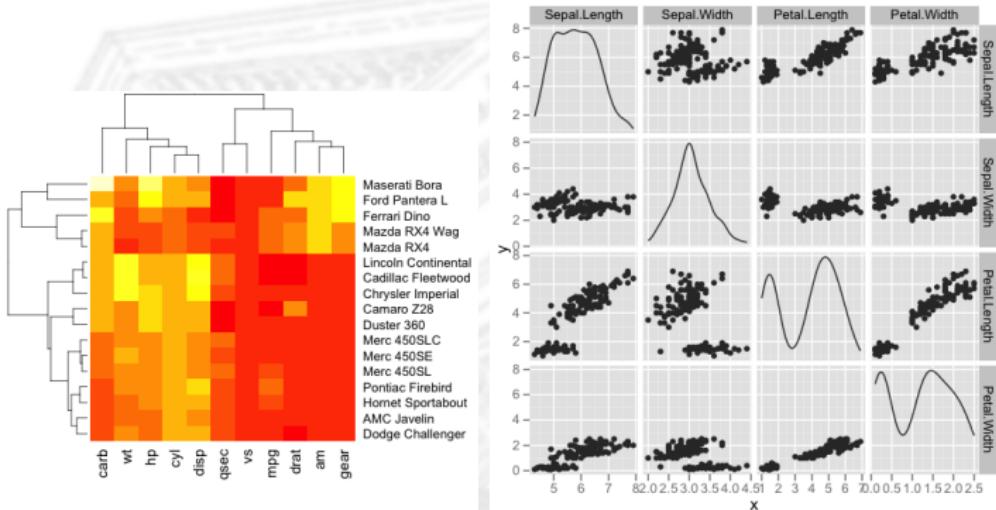


Figura 3. Visualizações gráficas típicas de métodos de aprendizado não supervisionado.

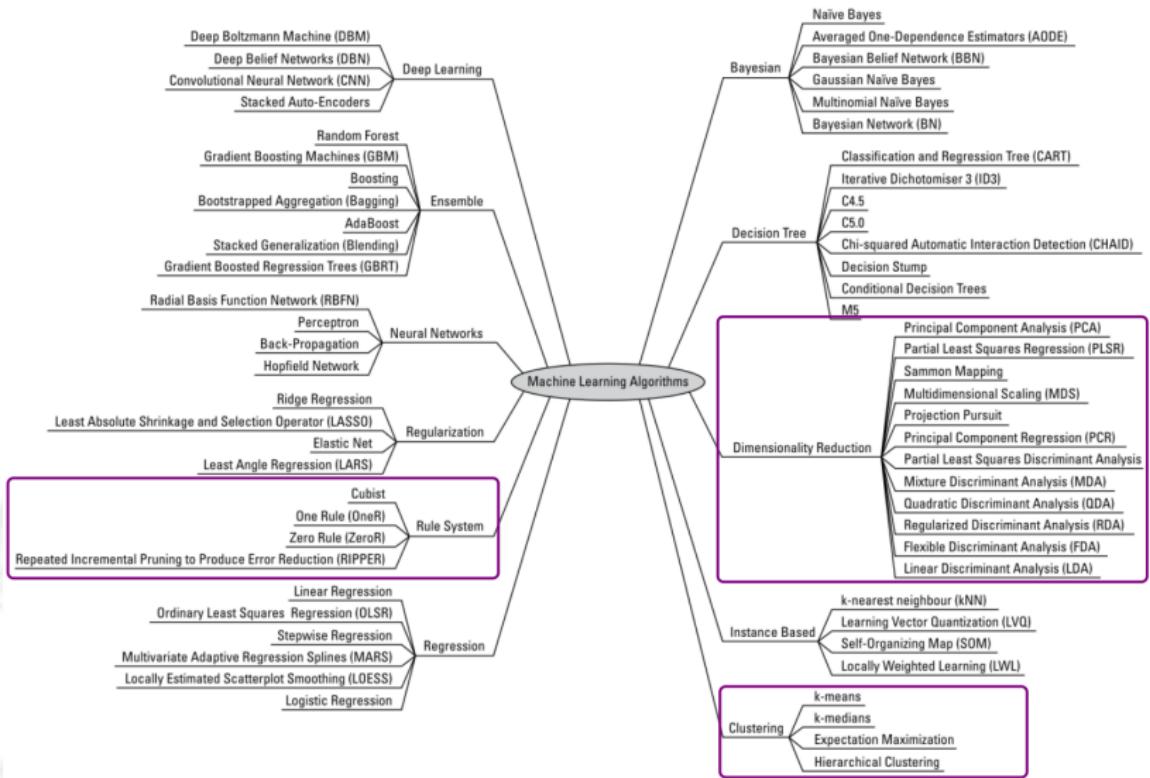
- ▶ No caso de *aprendizado não supervisionado*, não temos uma variável resposta, sendo que o interesse é explorar informações do conjunto de variáveis em análise.

# Principais tarefas não supervisionadas

- ▶ Análise de agrupamento.
- ▶ Regras de associação: .
- ▶ Redução de dimensionalidade.
- ▶ Além de outras dentro de Engenharia de Características.



**Figura 4.** Métodos de machine learning subdivididas em algoritmos. Fonte: Pierson, L. (2017). Data Science for Dummies. John Wiley & Sons.



**Figura 5.** Métodos de machine learning subdivididas em algoritmos com destaque para abordagens não supervisionadas.

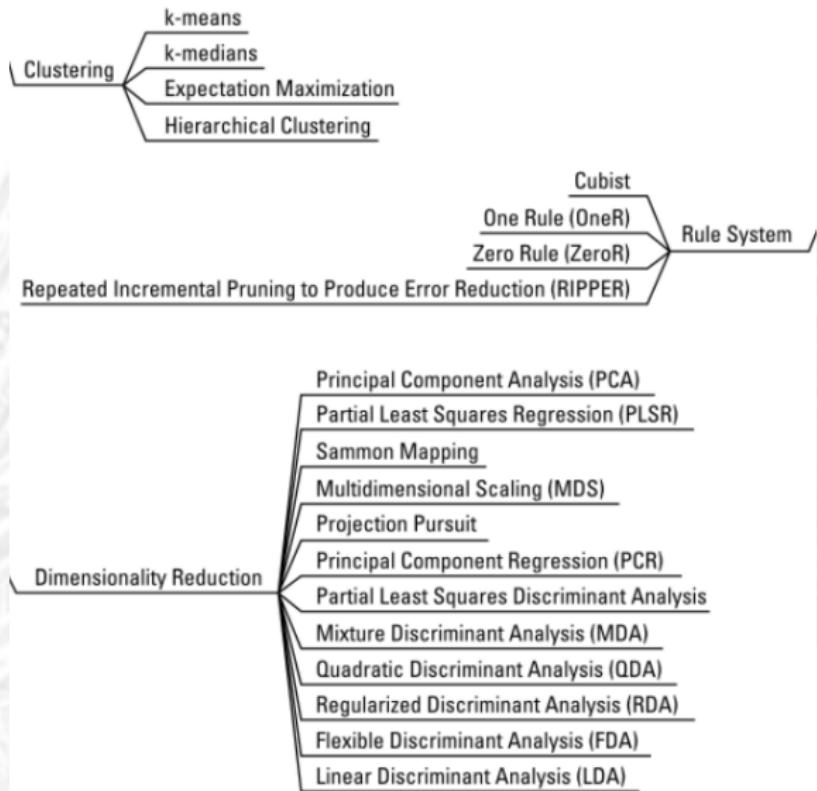


Figura 6. Métodos de machine learning subdivididas em algoritmos com destaque para abordagens não supervisionadas.



# Análise de Agrupamento

# Objetivo

- ▶ A **análise de agrupamento ou clustering** é uma das principais técnicas de aprendizado não supervisionado.
- ▶ Seu objetivo principal é agrupar (ou segmentar) indivíduos em *clusters*, de maneira que:
  - ▶ Indivíduos de um **mesmo cluster** sejam **semelhantes** (similares) em relação aos valores das variáveis em análise;
  - ▶ Por outro lado, indivíduos de **clusters distintos** sejam **diferentes** (dissimilares).

# Exemplos de utilidade

Exemplos do ponto de vista do negócio:

- ▶ Dividir para conquistar → segmentação de clientes.
- ▶ Marketing direcionado → tipos de desconto para grupos de mesmo perfil de compra.
- ▶ Entendimento dos clientes → desenvolvimento de produtos voltados para grupos de necessidades específicas.
- ▶ Sistemas de recomendação → recomendação baseada no comportamento dos pares.

# Como agrupar esses indivíduos?

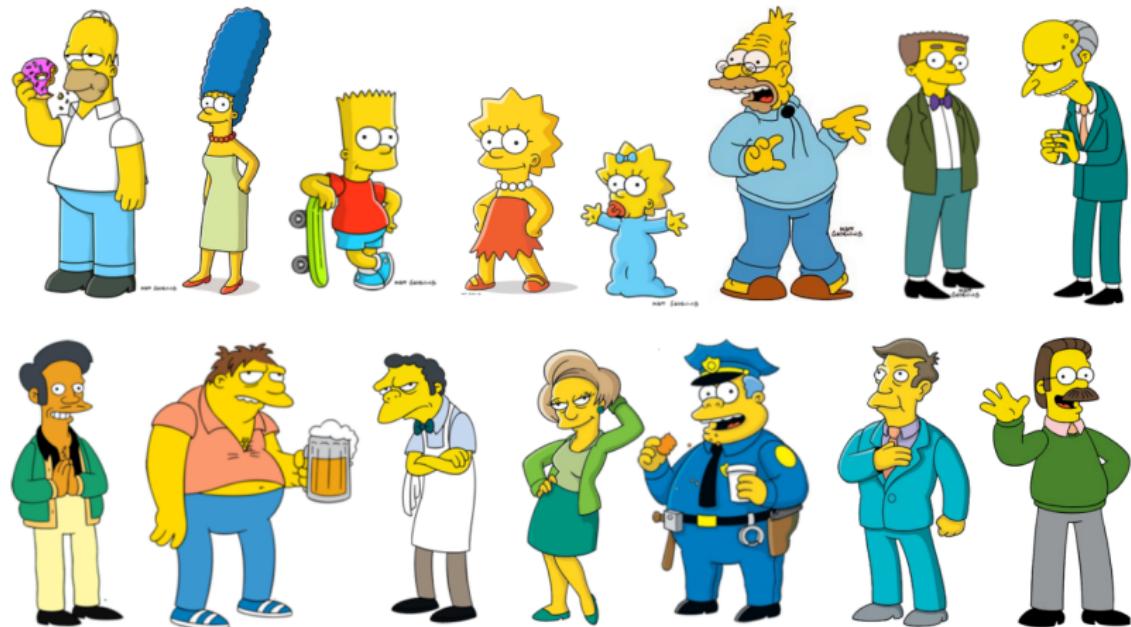


Figura 7. Alguns personagens da série Os Simpsons.

# Pela altura? Idade? Gênero? Parentesco? Hábitos?

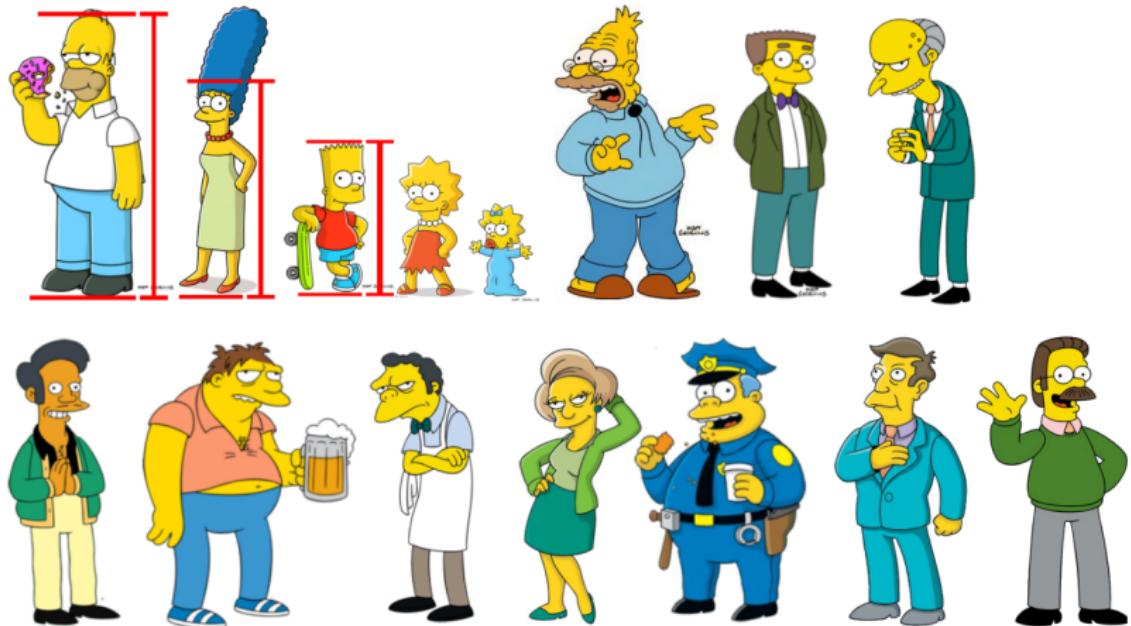


Figura 8. Alguns personagens da série Os Simpsons.

# O que é preciso para bons agrupamentos?

## Sob a perspectiva prática (definido pelo analista)

- ▶ Um contexto com propósito bem definido.
- ▶ Variáveis relevantes para o agrupamento.
- ▶ Uma medida de similaridade e algoritmo apropriado para o contexto.

## Sobre a aplicação (característica dos dados)

- ▶ Densidade: indivíduos similares nas características relevantes ocupando uma mesma região do espaço.
- ▶ Separação: regiões vazias separando os indivíduos dissimilares.

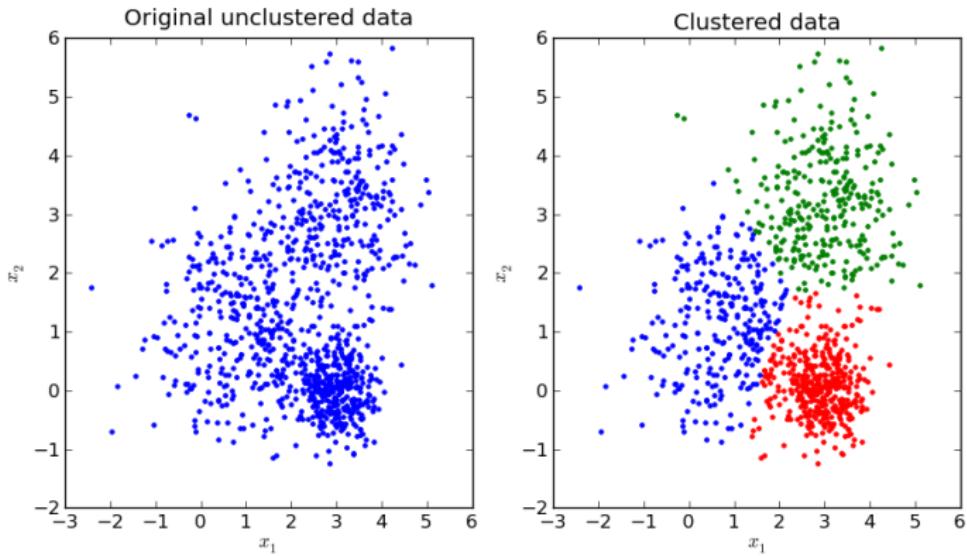


Figura 9. Dados para aplicação de métodos de agrupamento.

# Medidas de dissimilaridade

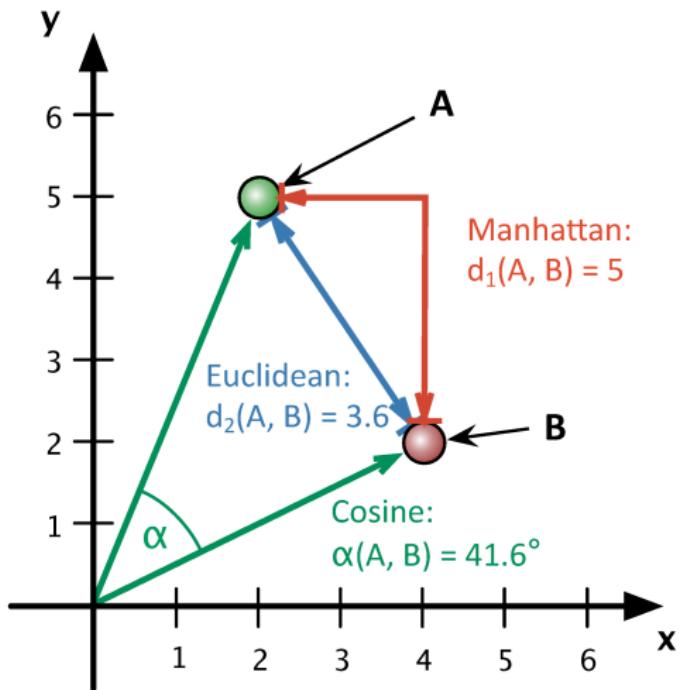


Figura 10. Ilustração em 2D de medidas de dissimilaridade ou distâncias.

# Medidas de dissimilaridade

- ▶ Pode-se expressar proximidade/distância de forma matemática.
- ▶ Algoritmos de análise de clusters baseiam-se em **medidas de dissimilaridade**.
- ▶ Elas permitem quantificar a diferença entre indivíduos com base nos valores apresentados para o conjunto de variáveis.
- ▶ Medidas de dissimilaridade podem ser aplicadas a cada par de indivíduos entre os  $n$  disponíveis.
- ▶ Vamos denotar por  $d_{ii'}$ , com  $i$  e  $i' \in \{1, 2, \dots, n\}$ , a dissimilaridade avaliada para um par de indivíduos  $i$  e  $i'$ .

# Medidas de dissimilaridade

- ▶ O conjunto de medidas de dissimilaridade, calculadas para cada par de indivíduos, é usualmente representado numa matriz de dimensão  $n \times n$ , denominada **matriz de dissimilaridades**, dada por:

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & \dots & d_{1n} \\ d_{21} & d_{22} & \dots & d_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{n1} & d_{n2} & \dots & d_{nn} \end{bmatrix}.$$

- ▶ Há uma grande variedade de formas de se definir (e quantificar) dissimilaridades.

# Medidas de dissimilaridade

- ▶ Dissimilaridades podem ser estabelecidas por um processo *informal*, em que especialistas (juízes) atribuem valores (escores) de dissimilaridade para cada par de indivíduos.
- ▶ Em geral, no entanto, os algoritmos de análise de clusters baseiam-se em medidas de dissimilaridade que atendem às seguintes propriedades:
  1.  $d_{ii''} \geq 0$ , com  $d_{ii''} = 0$  se  $i = i'$ ;
  2.  $d_{ii''} = d_{i'i}$  para todo  $i, i' \in 1, 2, \dots, n$  (simetria);
  3.  $d_{ii''} \leq d_{ik} + d_{i'k}$ , para todo  $k \in 1, 2, \dots, n$  (desigualdade triangular).

# Cálculo para variáveis contínuas

- ▶ Vamos assumir, num primeiro momento, uma variável  $x_j$  contínua.
- ▶ Algumas medidas usuais de dissimilaridade, neste caso, são:

1. Distância quadrática:

$$d_j(x_{ij}, x_{i'j}) = (x_{ij} - x_{i'j})^2 .$$

2. Diferença absoluta:

$$d_j(x_{ij}, x_{i'j}) = |x_{ij} - x_{i'j}| .$$

# Cálculo para variáveis de escala ordinal

- ▶ Em algumas aplicações, determinadas variáveis apresentam escala ordinal.
- ▶ Como exemplo, podemos citar:
  - ▶ Nível de satisfação com um serviço (nada, pouco, muito, totalmente satisfeito).
  - ▶ Formação escolar (sem escolaridade, ensino primário, ensino médio, etc.).
  - ▶ Estágio de uma doença (não manifestada, estágio inicial, estágio intermediário, etc.).
  - ▶ Categoria do cliente (bronze, prata, ouro, platinum).
- ▶ Uma das formas de proceder em situações desse tipo é ranquear as (digamos  $M$ ) categorias da escala ordinal em ordem crescente.

## Cálculo para variáveis de escala ordinal

- ▶ As medidas de dissimilaridade para escalas contínuas podem ser aplicadas substituindo as observações originais por:

$$x_{ij}^* = \frac{k - 1/2}{M},$$

em que  $k \in \{1, 2, \dots, M\}$  representa o ranking correspondente ao resultado de  $x_j$  em  $i$ .

- ▶ Se não for razoável atribuir ranks equidistantes às  $M$  categorias de  $x_j$ , alguma outra configuração mais apropriada de valores pode ser assumida.

# Cálculo para variáveis de escala nominal

- ▶ São exemplos de variáveis com escala nominal:
  - ▶ Marca do modelo de veículo/celular/geladeira, etc.
  - ▶ Time para o qual torce.
  - ▶ Meio de transporte para o trabalho (à pe, bike, carro, público).
  - ▶ Forma de pagamento (dinheiro, cartão de crédito, cartão de débito, cheque).
  - ▶ Finalidade de um empréstimo bancário (pagamento de dívida, compra de imóvel, compra de automóvel, abertura de negócio próprio, etc.).
- ▶ Nesse caso, geralmente não faz sentido atribuir ranks ou escores às categorias, dada a ausência de qualquer sentido de ordenação natural.

# Cálculo para variáveis de escala nominal

- ▶ A forma mais simples de medir dissimilaridades consiste em considerar:

$$d_j(x_{ij}, x_{i'j}) = 0, \text{ se } x_{ij} = x_{i'j},$$

e

$$d_j(x_{ij}, x_{i'j}) > 0, \text{ caso contrário.}$$

- ▶ O mais comum é definir  $d_j(x_{ij}, x_{i'j}) = 1$  sempre que  $x_{ij} \neq x_{i'j}$ , embora configurações alternativas permitam atribuir dissimilaridades maiores para algumas combinações de valores.

# Situação típica em Ciência de Dados

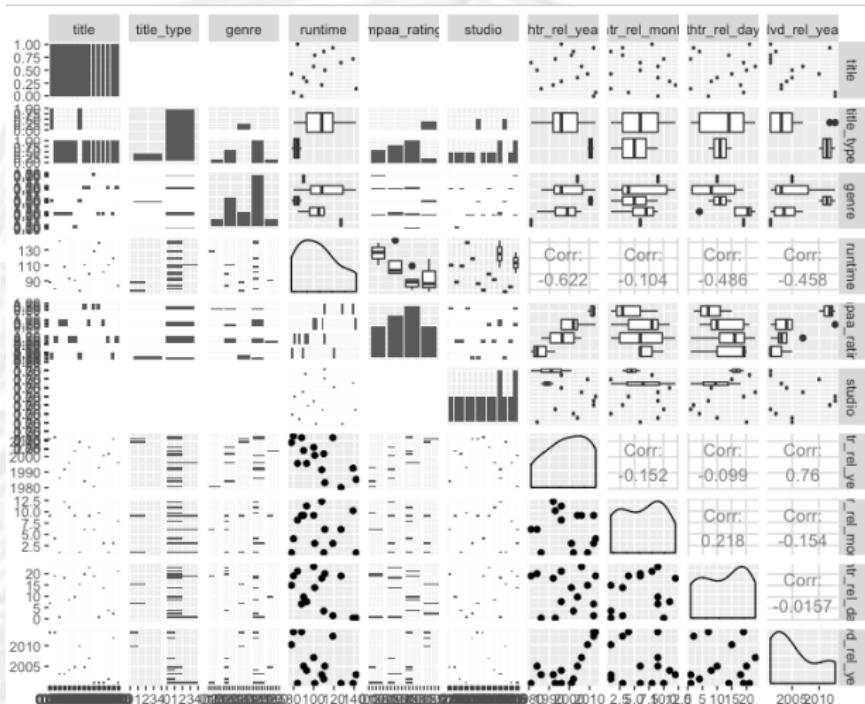


Figura 11. Variáveis de tipos mistos.

# Situação típica em Ciência de Dados

- ▶ Em contextos aplicados dispõe-se de mais de uma variável relevante para a segmentação.
- ▶ Não raramente, as variáveis podem ser de tipos mistos (contínuas, ordinais e nominais).
- ▶ Como representar a dissimilaridade diante desse cenário?

# Dissimilaridade entre pares de indivíduos

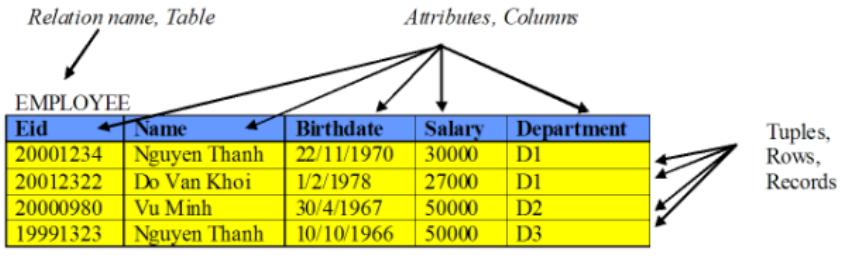


Figura 12. Uma típica tabela de dados de cadastro de pessoa.

- ▶ Pesos diferentes para cada variável podem ser estabelecidos, por exemplo, para refletir a **importância** de cada variável na análise, mas pode ser **subjetivo**.
- ▶ Um motivo adicional para ponderação é remover o efeito de **escala** das  $p$  variáveis.
- ▶ Não havendo motivos para diferentes ponderações, podemos assumir  $\omega_j = 1$ , para  $j = 1, 2, \dots, p$ .

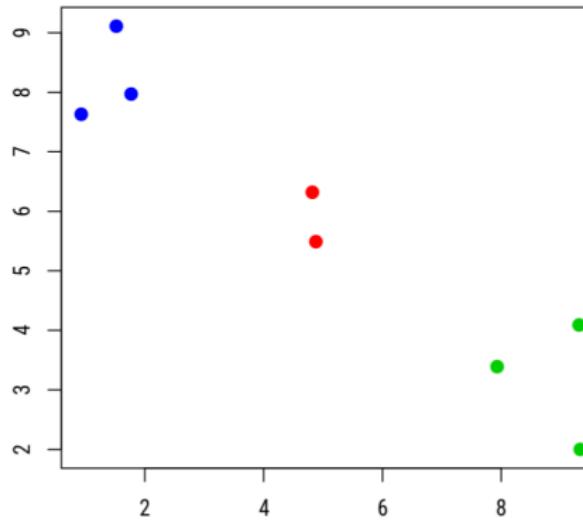
# Algoritmos para análise de agrupamento

# Alocação dos indivíduos aos grupos

- ▶ Como resultado para uma análise de clusters, cada indivíduo ( $i$ ) é alocado a um cluster  $k$  ( $k \in \{1, 2, \dots, K\}$ ) segundo um codificador  $k = C(i)$ .
- ▶ O objetivo é encontrar um codificador “ótimo”, que permita constituir, o máximo possível, clusters homogêneos internamente e heterogêneos entre si.
- ▶ A performance de um codificador  $C$  pode ser avaliada, por exemplo, pela dissimilaridade entre observações alocadas a um mesmo cluster:

$$W(C) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K \sum_{C(i)=k} \sum_{C(i')=k} d_{ii'}.$$

# Decomposição da dissimilaridade total



Dissimilaridades dentro de cluster ·  $W(C)$

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	0	<b>1.59</b>	<b>0.91</b>	4.10	4.49	9.10	8.18	10.11
2		0.00	<b>1.17</b>	4.32	4.94	9.27	8.59	10.56
3			0.00	3.47	3.98	8.48	7.68	9.63
4				0.00	<b>0.83</b>	5.01	4.27	6.25
5					0.00	4.65	3.70	5.66
6						0.00	<b>1.55</b>	<b>2.09</b>
7							0.00	<b>1.97</b>
8								0.00

Dissimilaridades entre cluster ·  $B(C)$

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	0	1.59	0.91	<b>4.10</b>	<b>4.49</b>	<b>9.10</b>	<b>8.18</b>	10.11
2		0.00	1.17	4.32	4.94	9.27	8.59	10.56
3			0.00	3.47	3.98	8.48	7.68	9.63
4				0.00	<b>0.83</b>	5.01	4.27	6.25
5					0.00	4.65	3.70	5.66
6						0.00	<b>1.55</b>	2.09
7							0.00	<b>1.97</b>
8								0.00

Figura 13. Decomposição da dissimilaridade total.

# Decomposição da dissimilaridade total

- ▶ A dissimilaridade total para o conjunto de  $n$  observações da amostra pode ser decomposta por:

$$T = W(C) + B(C)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K \sum_{C(i)=k} \sum_{C(i')=k} d_{ii'} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K \sum_{C(i)=k} \sum_{C(i') \neq k} d_{ii'},$$

em que  $W(C)$  quantifica a dissimilaridade *intra clusters* e  $B(C)$  a dissimilaridade *entre clusters*;

- ▶ Fixado  $K$ , quanto menor  $W(C)$  (e maior, consequentemente,  $B(C)$ ), melhor o codificador (composição dos clusters).

# O número de agrupamentos

- ▶ Fixado o **número de clusters ( $K$ )** o número de codificadores distintos e, consequentemente, diferentes soluções para a análise de clusters, é dado por:

$$S(n, K) = \frac{1}{K!} \sum_{k=1}^K (-1)^{K-k} \binom{K}{k} k^n.$$

- ▶ O **número de soluções** aumenta muito rapidamente conforme aumentam  $n$  e  $k$ .
- ▶ Assim, a avaliação de todas as possíveis soluções torna-se **inviável** mesmo para valores “moderados” de  $n$  e  $k$ .

# Heurísticas dos algoritmos

- ▶ Os algoritmos de análise de cluster permitem avaliar uma **fração** das possíveis soluções e identificar, baseado em algum critério, a melhor.
- ▶ Ao não avaliar todas as possíveis soluções, a solução encontrada pode ser **sub-ótima**.
- ▶ Adicionalmente, diferentes algoritmos (e critérios de avaliação) podem conduzir a soluções bastante diferentes.

# Algoritmos de agrupamento não hierárquicos

- ▶ Os algoritmos **hierárquicos** baseiam-se em sucessivas aglomerações (ou partições) dos indivíduos com base numa matriz de dissimilaridades.
- ▶ Os algoritmos **não hierárquicos**, por sua vez, baseiam-se em sucessivas re-alocações dos indivíduos aos clusters, visando a constituição de clusters internamente mais homogênicos.
- ▶ Dentre os algoritmos não hierárquicos mais conhecidos destacam-se o *K-means* e o *K-medoids*.

## Algoritmo *K-means*

- ▶ O algoritmo *K – means* se aplica quando as variáveis sob análise são quantitativas e a dissimilaridade é baseada na distância Euclideana:

$$d_{ii'} = \sum_{j=1}^p (x_{ij} - x_{i'j})^2 = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i'}\|^2,$$

que pode, eventualmente, ser ponderada.

- ▶ A ponderação pode estar embutida na etapa de padronização das variáveis.
  - ▶ Padronização Z-escore: média 0 e variância 1 ou outra.
  - ▶ Padronização unitária: mínimo 0 e máximo 1 ou outro.

## Algoritmo *K-means*

- A dissimilaridade total intra clusters fica dada por:

$$\begin{aligned} W(C) &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K \sum_{C(i)=k} \sum_{C(i')=k} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i'}\|^2 \\ &= \sum_{k=1}^K N_k \sum_{C(i)=k} \|\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}_k\|^2, \end{aligned}$$

em que  $N_k$  é o número de indivíduos e

$\bar{\mathbf{x}}'_k = (\bar{x}_{1k}, \bar{x}_{2k}, \dots, \bar{x}_{pk})$  é o vetor de médias no cluster  $k$ .

- O algoritmo *k – means* busca identificar uma codificação ( $C^*$ ) em  $K$  clusters ( $K$  fixado) em que a distância das observações à média do cluster seja mínima,

$$C^* = \min_C \sum_{k=1}^K \left[ N_k \sum_{C(i)=k} \|\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}_k\|^2 \right].$$

## Algoritmo *K-means*

- Dado que, para qualquer conjunto de observações  $S$ :

$$\bar{\mathbf{x}}_S = \operatorname{argmin}_m \sum_{i \in S} \|\mathbf{x}_i - m\|^2,$$

então a solução do método *k – means* corresponde à solução do seguinte problema de otimização:

$$\min_{C, m_k} \sum_{k=1}^K \left[ N_k \sum_{C(i)=k} \|\mathbf{x}_i - m_k\|^2 \right].$$

- O algoritmo *k – means* é apresentado na sequência.

# Descrição do algoritmo *K-means*

- ▶ **Passo 1:** Para um dado codificador  $C$ , a variância total intra cluster é minimizada com relação a  $m_1, m_2, \dots, m_K$ , produzindo as médias da alocação atual;
- ▶ **Passo 2:** Dadas as médias atuais, a função objetivo é minimizada re-alocando cada observação ao cluster com média mais próxima, ou seja:

$$C(i) = \arg \min_{1 \leq k \leq K} \|\mathbf{x}_i - m_k\|^2;$$

- ▶ **Passo 3:** Repetir os passos 1 e 2 até que não haja novas re-alocações.

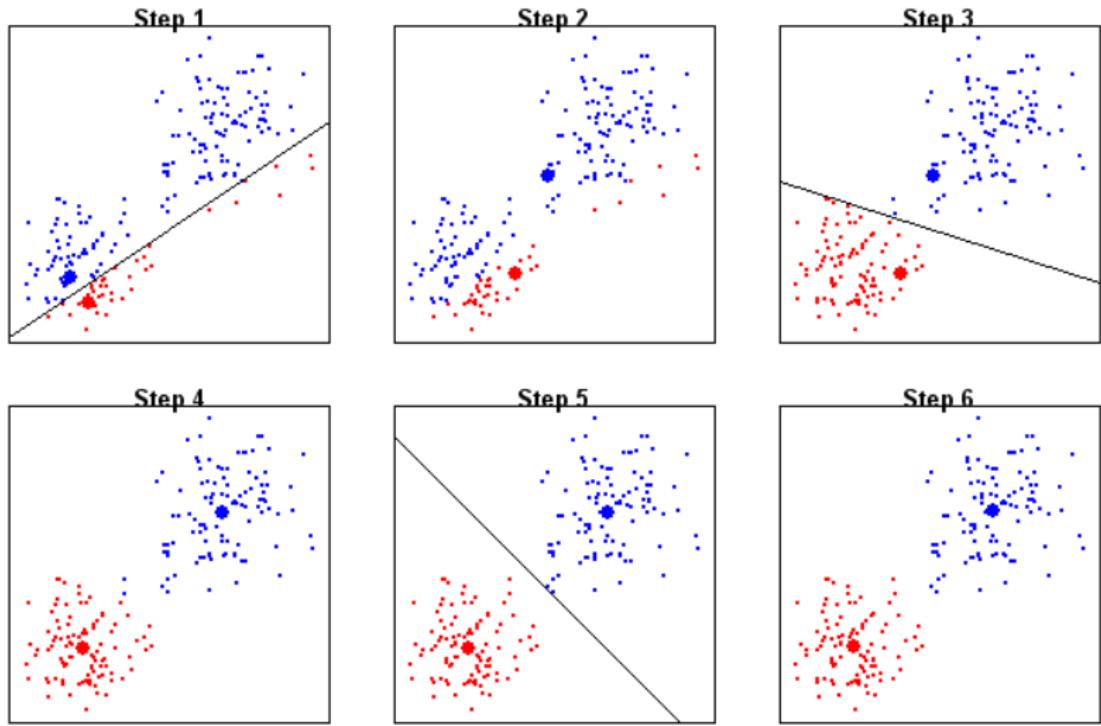


Figura 14. Algoritmo  $k$ -means com 2 grupos.

<https://animoidin.files.wordpress.com/2018/07/0-rrzg3lyonavoepbj.png>.

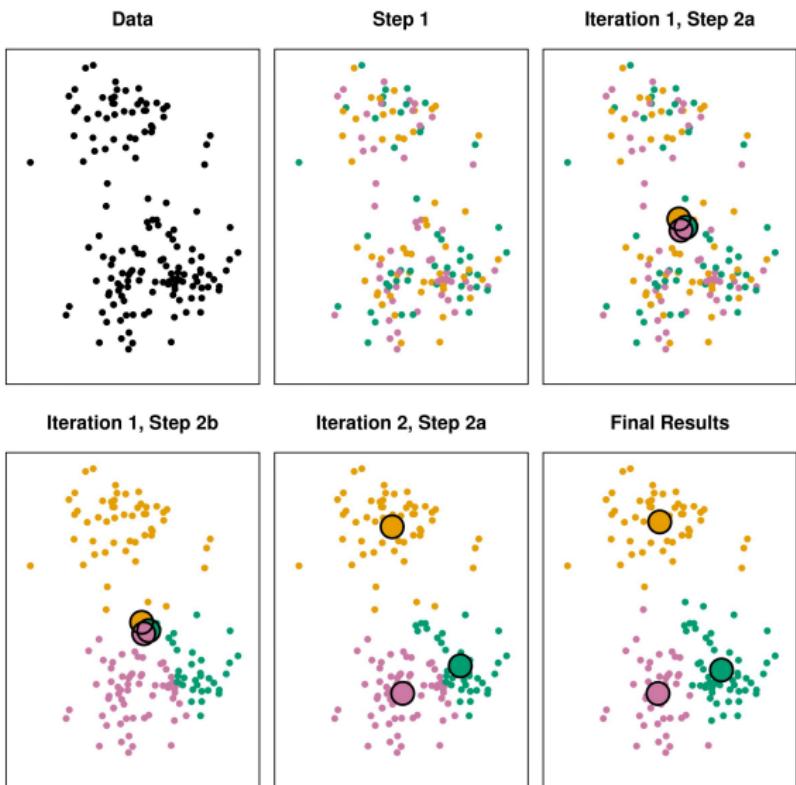


Figura 15. Algoritmo  $K$ -means com 3 grupos.  
<https://i.stack.imgur.com/FQhxk.jpg>.

# Considerações sobre o algoritmo *K-means*

- ▶ O algoritmo *K-means* é sensível à configuração inicial dos clusters no passo 1, podendo produzir resultados diferentes mediante diferentes partições iniciais.
- ▶ O usual é considerar, inicialmente,  $t > 1$  “sementes”, que seriam  $t$  pontos definidos em  $\mathbb{R}^P$ .
- ▶ A solução que produzir menor distância média das observações às respectivas médias dos nós é escolhida.

# Algoritmos de agrupamento hierárquicos

- ▶ Nos **métodos hierárquicos aglomerativos**, cada indivíduo, originalmente, é um cluster, iniciando-se o processo com  $n$  clusters.
- ▶ Na sequência, indivíduos similares são sucessivamente agrupados, até a formação de um único grupo contendo toda a amostra.
- ▶ Nos **métodos divisivos**, partimos de um único cluster que contém toda a amostra, que é sucessivamente subdividido.

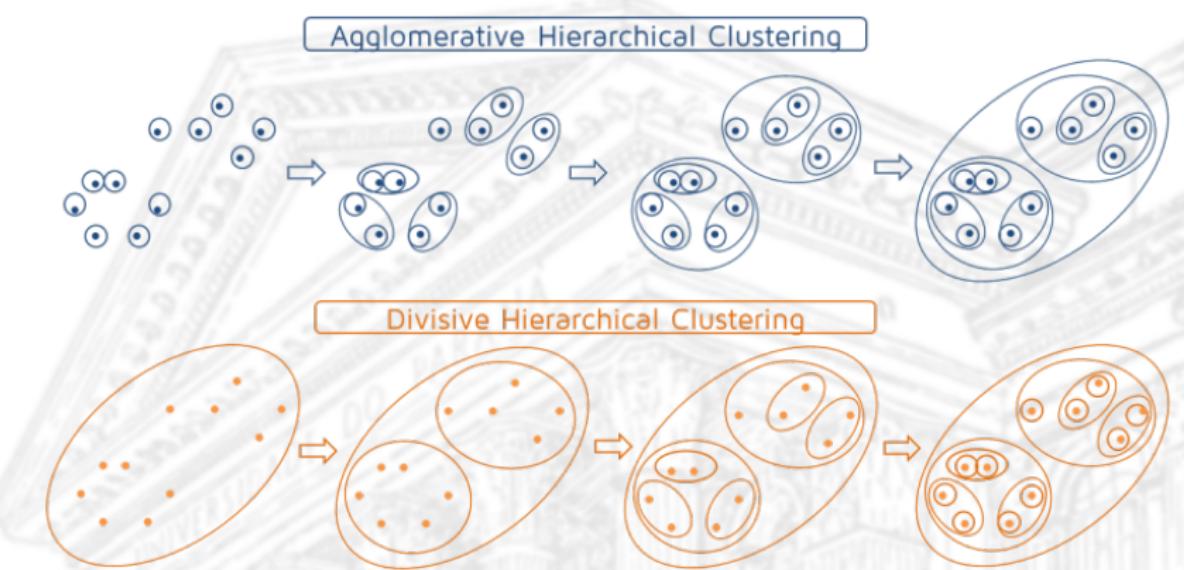


Figura 16. Funcionamento de métodos aglomerativos e divisivos.  
<http://quantdare.com/wp-content/uploads/2016/06/AggoDivHierarClustering-800x389.png>.

# Algoritmos de agrupamento hierárquicos aglomerativos

- ▶ **Passo 1** - Calcule a matriz de distâncias para os  $n$  indivíduos. Nesta etapa, cada indivíduo é um cluster.
- ▶ **Passo 2** - Identifique, na matriz de distâncias, os dois clusters mais similares (menos distantes).
- ▶ **Passo 3** - Agrupe os dois clusters identificados no passo anterior em um único cluster.

# Algoritmos de agrupamento hierárquicos aglomerativos

- ▶ **Passo 4** - Atualize a matriz de distâncias, considerando os clusters remanescentes.
- ▶ **Passo 5** - Repita os passos 2, 3 e 4 sucessivamente, até formar um único cluster.
- ▶ **Passo 6** - Represente os resultados da análise em um gráfico apropriado (dendrograma).

# Algoritmos de agrupamento hierárquicos aglomerativos

- ▶ Ao longo das etapas de algoritmos hierárquicos (aglomerativos ou divisivos), precisamos atribuir dissimilaridades entre pares de indivíduos, indivíduos e cluster e entre pares de clusters.
- ▶ Há diferentes métodos disponíveis para medir dissimilaridades envolvendo clusters, dentre as quais algumas são descritas na sequência.
- ▶ Em todos os casos vamos considerar dois clusters, denotados por  $A$  e  $B$ .
- ▶ Procedimentos similares podem ser aplicados ao medir dissimilaridades entre observações e clusters.

# Métodos aglomerativos

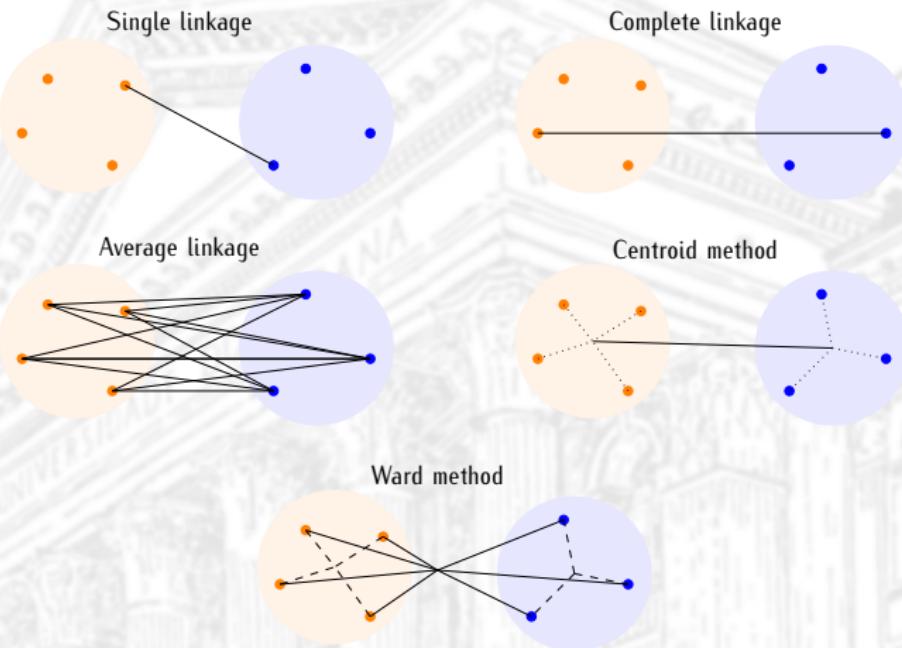


Figura 17. Métodos aglomerativos. Fonte: os autores.

# Métodos aglomerativos

1. **Single linkage** - É o método do vizinho mais próximo, em que a distância entre  $A$  e  $B$  é definida como a menor distância entre uma observação de  $A$  e uma observação de  $B$ .

$$d(A, B) = \min\{d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_{i'})\}, \text{ para } \mathbf{x}_i \in A, \mathbf{x}_{i'} \in B.$$

2. **Complete linkage** - É o método do vizinho mais distante, em que a distância entre  $A$  e  $B$  é a distância entre o elemento de  $A$  mais distante de algum elemento de  $B$ .

$$d(A, B) = \max\{d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_{i'})\}, \text{ para } \mathbf{x}_i \in A, \mathbf{x}_{i'} \in B.$$

# Métodos aglomerativos

3. **Average linkage** - Neste caso, a distância entre  $A$  e  $B$  é a média das  $n_A \times n_B$  distâncias entre os  $n_A$  pontos de  $A$  e os  $n_B$  pontos de  $B$ .

$$d(A, B) = \frac{1}{n_A n_B} \sum_{i=1}^{n_A} \sum_{i'=1}^{n_B} d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_{i'}).$$

4. **Centroide** - A distância entre  $A$  e  $B$  é definida como a distância euclideana entre os centroides (vetores de médias) dos dois clusters:

$$d(A, B) = d(\bar{\mathbf{x}}_A, \bar{\mathbf{x}}_B).$$

# Métodos aglomerativos

- ▶ No método do centroide, após a junção de dois clusters  $A$  e  $B$ , o centroide do novo cluster  $AB$  fica dado pela média ponderada:

$$\bar{x}_{AB} = \frac{n_A \bar{x}_A + n_B \bar{x}_B}{n_A + n_B}.$$

5. **Median** – Similar ao método do centroide mas, ao fundir dois clusters  $A$  e  $B$ , define-se o ponto mediano entre  $\bar{x}_A$  e  $\bar{x}_B$  como referência para calcular distâncias para outros clusters:

$$m_{AB} = \frac{1}{2}(\bar{x}_A + \bar{x}_B).$$

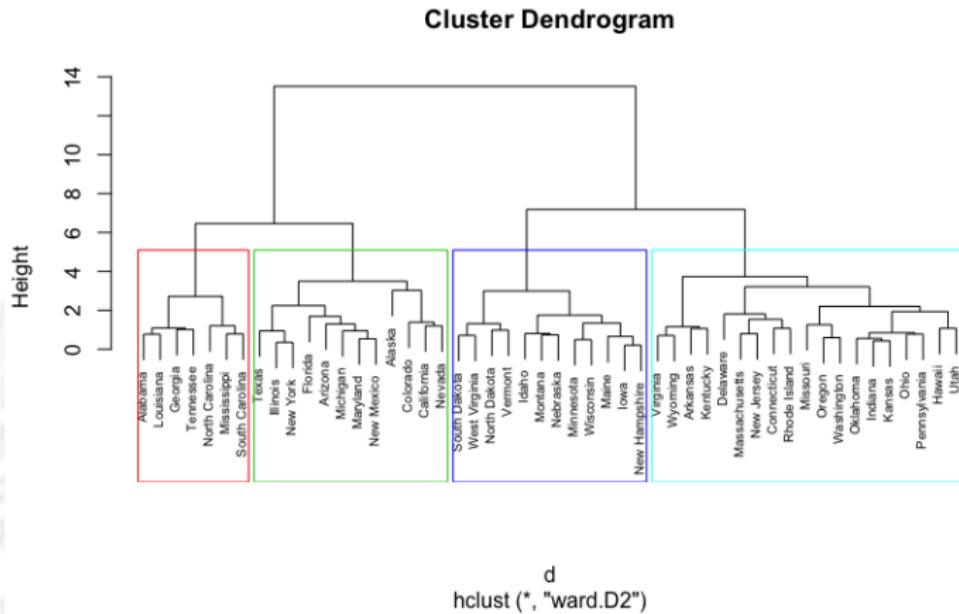


Figura 18. Dendrograma de agrupamento hierárquico. <https://uc-r.github.io/public/images/analytics/clustering/hierarchical/unnamed-chunk-13-1.png>.

# Métodos aglomerativos

- ▶ Considere a soma de quadrados intra-cluster de  $A$ :

$$SQE_A = \sum_{i=1}^{n_A} (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}_A)'(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}_A).$$

- ▶ Definimos o acréscimo na soma de quadrados resultante da junção de dois clusters  $A$  e  $B$  em um cluster  $AB$  por:

$$I_{AB} = SQE_{AB} - (SQE_A + SQE_B).$$

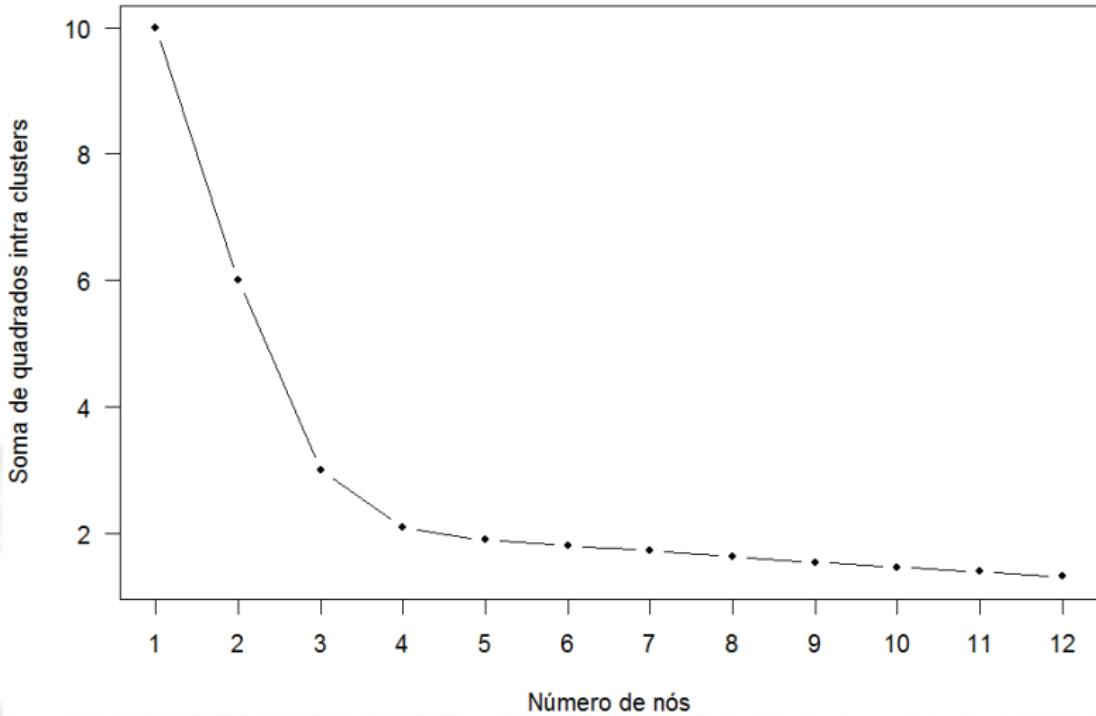
- ▶ Os clusters  $A$  e  $B$  que proporcionarem menor acréscimo na SQE é executada.

# Determinação do número de clusters

- ▶ Uma das principais definições a se fazer, numa análise de clusters, é quanto ao **número de clusters ( $K$ )** que devem ser formados.
- ▶ Diferentes critérios podem ser adotados na determinação do **número ótimo** de clusters.
- ▶ Boa parte dos critérios baseiam-se na soma de quadrados intra-cluster total.

# Determinação do número de clusters

- ▶ Num gráfico da soma de quadrados intra-cluster total vs número de clusters pode ajudar na escolha do número de clusters;
- ▶ O número de clusters a partir do qual a soma de quadrados intra-cluster total pouco reduzir, a cada novo cluster formado, é o número de clusters a ser escolhido.
- ▶ Na Figura ??, por exemplo, os resultados apontam a solução com  $K = 3$  clusters, ou, eventualmente,  $K = 4$ .



**Figura 19.** Escolha do número de cluster pela análise da soma de quadrados intra cluster.

## Gráfico da silhueta

- ▶ A análise (gráfico) da silhueta é um método utilizado para interpretação e validação de uma análise de clusters.
- ▶ Consiste no cálculo e representação gráfica de uma medida de (boa) alocação de cada indivíduo ao respectivo cluster.
- ▶ Tomando a média dessas medidas em um particular cluster, tem-se uma medida de coesão do cluster.
- ▶ Tomando-se a média dessas medidas em toda a amostra, tem-se uma medida de consistência dos agrupamentos formados.

# Gráfico da silhueta

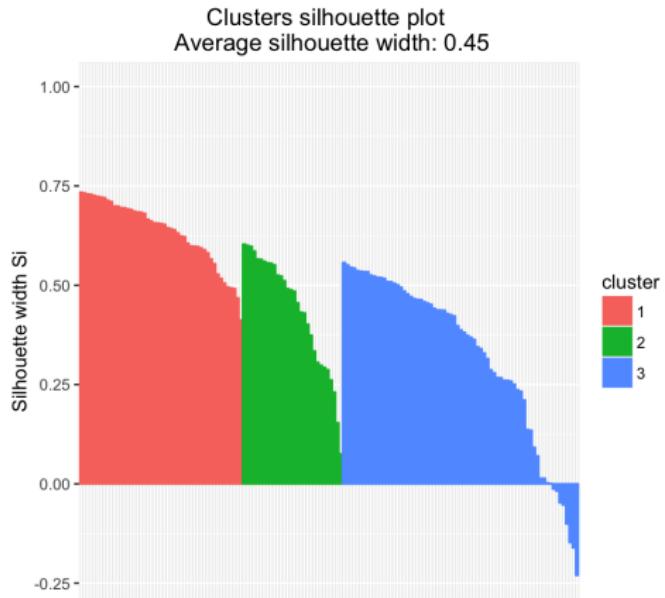


Figura 20. Gráfico da silhueta. <http://www.sthda.com/sthda/RDoc/figure/clustering/cluster-analysis-in-r-silhouette-plot-1.png>.

## Gráfico da silhueta - Medida da silhueta

- ▶ Seja  $a(i)$  a distância média de um elemento  $i$  em relação a todos os elementos do mesmo cluster ao qual ele foi alocado;
- ▶ Seja  $d(i, B)$  a distância média do elemento  $i$  aos elementos de um cluster  $B$ , diferente daquele ao qual o elemento  $i$  foi alocado;
- ▶ Seja  $b(i)$  o menor valor dos  $d(i, B)$ 's, calculados para todos os clusters exceto aquele que contém  $i$ .

## Gráfico da silhueta - Medida da silhueta

- ▶ Define-se a medida da silhueta por:

$$s(i) = \frac{b(i) - a(i)}{\max(a(i), b(i))}, \text{ para } i = 1, 2, \dots, n.$$

- ▶ Repare, pela definição, que  $-1 < s(i) < 1$ .

## Gráfico da silhueta - Medida da silhueta

- ▶ Se  $a(i) <<< b(i)$ ,  $s(i) \approx 1$ , indicando que  $i$  é muito menos dissimilar dos elementos de seu grupo do que dos elementos dos outros grupos (ou seja,  $i$  está bem alocado);
- ▶ Se  $a(i) >>> b(i)$ ,  $s(i) \approx -1$ , indicando que  $i$  é muito mais dissimilar dos elementos de seu grupo do que dos elementos do grupo vizinho (ou seja,  $i$  está mal alocado);
- ▶ Se  $a(i) \approx b(i)$ ,  $s(i) \approx 0$ , indicando que  $i$  está na fronteira de seu grupo e de um grupo vizinho.

# Outros métodos de agrupamento

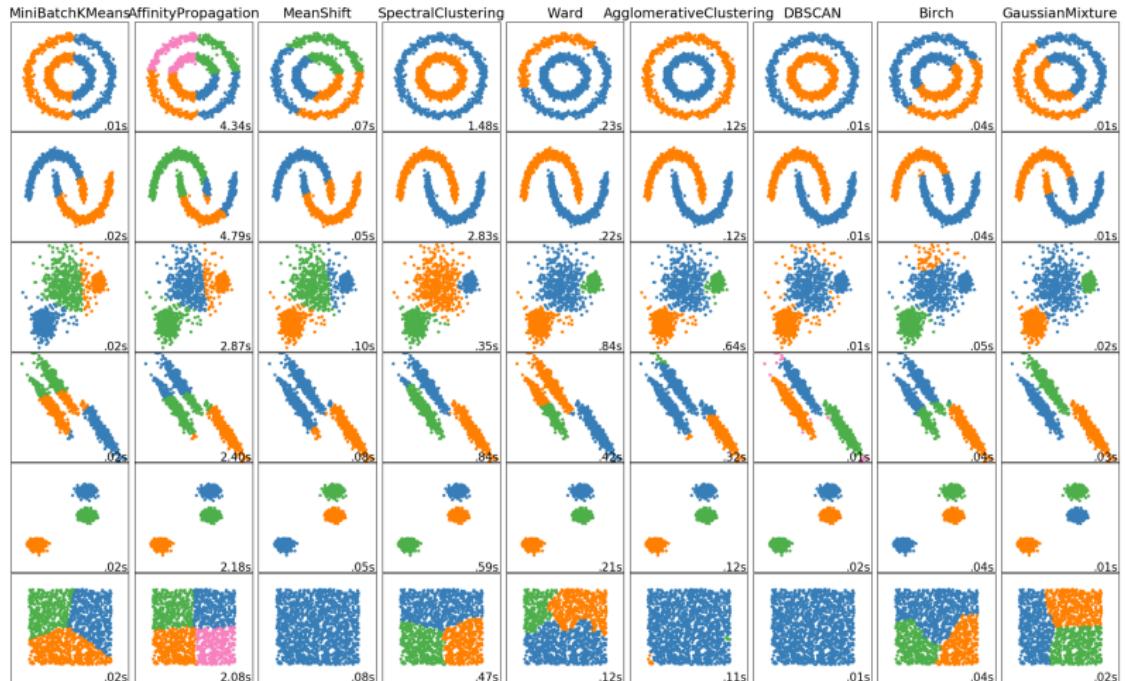


Figura 21. Métodos de agrupamento.

# DBSCAN

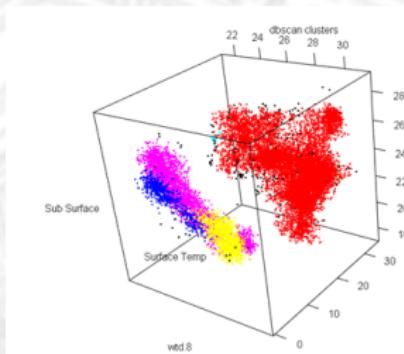
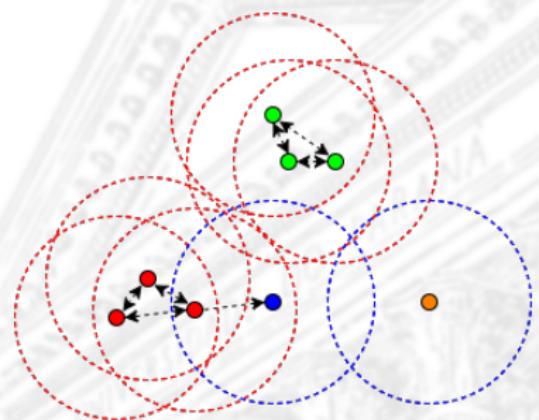
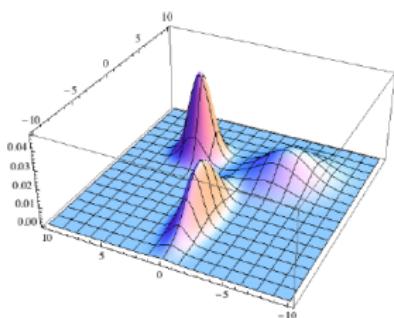
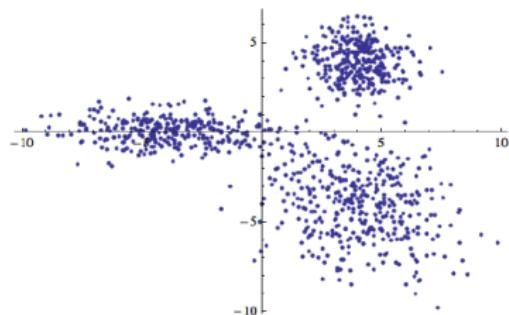


Figura 22. Ilustração do funcionamento do DBSCAN.

# Modelos de mistura Gaussiana



(a) A probability distribution on  $\mathbb{R}^2$ .



(b) Data sampled from this distribution.

Figura 23. Modelos de mistura Gaussiana.

# Agrupamento com restrição espacial

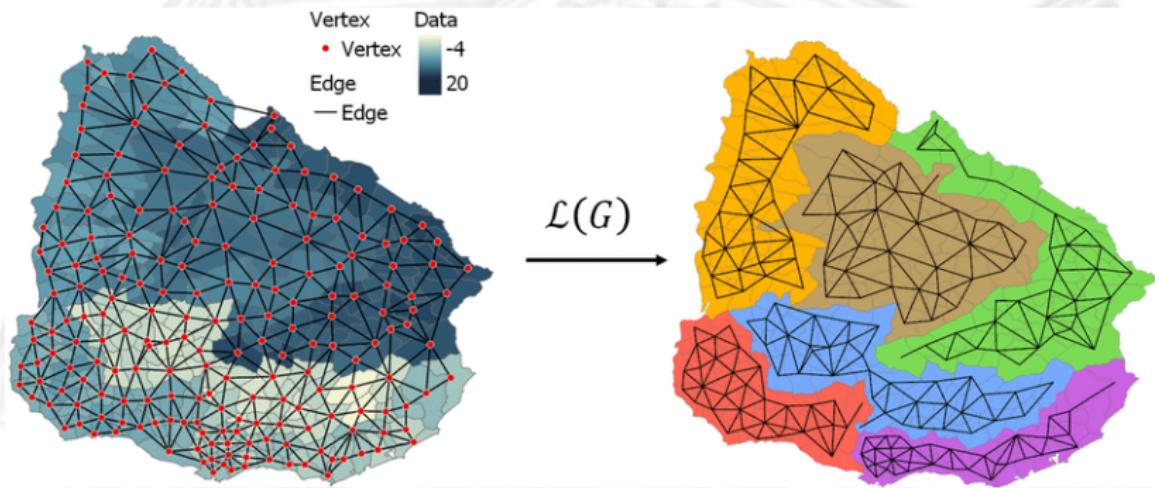


Figura 24. Agrupamento para dados com restrição espacial.

A faint, grayscale watermark-style image of a classical building's facade, featuring multiple columns, arches, and decorative moldings, serves as the background for the slide.

## Considerações finais

# Principais pontos

- ▶ Utilidade prática dos métodos de agrupamento.
- ▶ Tipos de agrupamento.
  - ▶ Não hierárquico.
  - ▶ Hierárquico.
- ▶ Número ótimo de clusters.
- ▶ Medidas de qualidade do agrupamento.
  - ▶ Gráfico da silhueta.
  - ▶ Estatística GAP.