Atividade 1

Lucas Roda Ximenes dos Santos
(11917239)

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Rua do Matão 1371, 05508-090, Cidade Universitária, São Paulo, Brasil

(Data: 13 de outubro de 2025)

Considere a base de dados contida no arquivo `Stars.cvs`, disponível para download na página da disciplina no Moodle, sobre as características observadas de um conjunto de 240 estrelas. Elabore um código em Python para o processamento desses dados de forma a responder as seguintes questões

---

Comentário: Criei um repositório no Github para salvar os dados e também salvei um arquivo nomeado `Atividade1.ipynb` também no meu GitHub, contendo as mesmas informações e comentários presentes neste PDF, então para tornar a correção possivelmente mais simples, os arquivos estão contidos nos *shields* abaixo, basta clicar em qual arquivo é mais simples de verificar

Abrir No Colab | Abrir no GitHub

1 Como os dados devem ser preparados para o processamento?

Iniciamos nossa análise importando os dados dos arquivos `Stars.csv` e `Categorias.csv`. Para isso, importamos a biblioteca `pandas`

```
import pandas as pd

dS = pd.read_csv('Stars.csv')
dC = pd.read_csv('Categorias.csv')

dS
```

Podemos ver que a tabela `dS` possui as seguintes variáveis

index	Star	Temperature	L	R	A_M	Color	Spectral_Class
0	1	3068	0.002400	0.1700	16.12	Red	M
1	2	3042	0.000500	0.1542	16.60	Red	M
2	3	2600	0.000300	102.0000	18.70	Red	M
3	4	2800	0.000200	0.1600	16.65	Red	M
4	5	1939	0.000138	103.0000	20.06	Red	M
...	...	...	...	...	...	...	...
235	236	38940	374830.000000	1356.0000	-9.93	Blue	O
236	237	30839	834042.000000	1194.0000	-10.63	Blue	O
237	238	8829	537493.000000	1423.0000	-10.73	White	A
238	239	9235	404940.000000	1112.0000	-11.23	White	A
239	240	37882	294903.000000	1783.0000	-7.80	Blue	O

Antes de começar a preparar os dados, uma verificação curial é em relação à existência ou não valores ausentes nas duas tabelas, pois caso exista algum, é necessário fazer uma análise a mais nos dados. Na tabela `dS`:

```
print("Valores ausentes na tabela Stars.csv:")
print(dS.isnull().sum())
```

```
Valores ausentes em Stars.csv:
Temperature       0
L                 0
R                 0
A_M               0
Color             0
Spectral_Class    0
```

e na tabela `dC`:

```
print("Valores ausentes em Categorias.csv:")
print(dC.isnull().sum())
```

```
Valores ausentes em Categorias.csv:
Star    0
Type    0
```

Concluindo que não existem valores ausentes em nenhuma delas e portanto a análise pode ser desenvolvida diretamente.

Ao olha para tabela, vemos que a coluna `Star` é um identificador desnecessário, de modo que para anonimizar os dados, removemos esta coluna. Além disso, temos 4 variáveis numéricas (`Temperature`, `L`, `R` e `A_M`) e 2 variáveis categóricas (`Color` e `Spectral_Class`), tal que podemos separá-las em duas listas independentes.

```python
dS = dS.drop(columns = ['Star'])

varNum = ['Temperature', 'L', 'R', 'A_M']
varCat = ['Color', 'Spectral_Class']
```

Em relação às variáveis numéricas, pode-se notar uma grande variação de escala nos dados, isto é, a variável `Temperature` $\in [1939, 40000]$, a variável `L` $\in [0.000080, 849420.0]$, a variável `R` $\in [0.008400, 6237.0]$ e a variável `A_M` $\in [-7346.0, 14776.0]$.

```python
dS.describe()
```

index	Temperature	L	R	A_M
count	240.000000	240.000000	240.000000	240.000000
mean	10497.462500	107200.578572	415.982944	121.369458
std	9552.425037	179424.946945	963.239600	2089.328079
min	1939.000000	0.000080	0.008400	-7346.000000
25%	3344.250000	0.000865	0.195025	-6.342500
50%	5776.000000	7.960000	18.000000	10.515000
75%	15055.500000	198050.000000	277.500000	14.097500
max	40000.000000	849420.000000	6237.000000	14776.000000

Esta grande variação de escala sugere um reescalonamento destes dados, o que será comentado em mais detalhes no item 2.

Uma análise inicial a ser feita é em relação à variável `A_M`. Em relação aos dados presentes nesta coluna, aproximadamente 95% possui duas casas decimais e estão em torno de um intervalo $[-10, 20]$, porém, existem alguns dados que são > 100 e < -100 ($|$`A_M`$| > 100$), que são números inteiros maiores que 1000, o que sugere uma inconsistência nestes valores. Para isso importamos a biblioteca `numpy`

```python
import numpy as np

bigA_M = np.abs(dS['A_M'])
countBigA_M = (bigA_M > 100).sum()

print(f"{100 * (240 - countBigA_M)/240:.3f}% estão abaixo de |A_M|<100")
bigA_MStars = dS[bigA_M > 100][['A_M']]
```

```
94.583% estão abaixo de |A_M|<100
```

index	A_M
14	11782.0
91	6506.0
92	6228.0
161	-6245.0
193	12854.0
195	13667.0
199	14776.0
216	1236.0
223	-5975.0
226	-7262.0
227	-6224.0
228	-5905.0
229	-7346.0

Para corrigi-los, impomos uma condição de divisão por um fator 1000.

```
dS['A_M'] = np.where(np.abs(dS['A_M']) > 100, dS['A_M'] / 1000, dS['A_M'])
```

Em relação às variáveis categóricas, há uma inconsistência nos dados da variável `Color`. Existem dados que representam a mesma categoria, mas que estão escritas de forma diferente, por exemplo, a opção `Blue Color` pode ser encontrada também nas formas `Blue-Color`, `Blue-color` e `Blue color`, o que pode gerar inconsistências futuras na hora de analisar os dados. Faremos então um remapeamento desta variável levando em conta inconsistências de escrita e, como estamos lidando com cores, proximidades de tons.

```
color_map = {
    'Red': 'Red',
    'Orange': 'Orange',
    'Orange-Red': 'Orange',
    'Pale yellow orange': 'Orange',
    'Yellowish': 'Yellow',
    'yellowish': 'Yellow',
    'Yellowish White': 'Yellowish_White',
    'yellow-white': 'Yellowish_White',
    'White-Yellow': 'Yellowish_White',
    'Whitish': 'White',
    'White': 'White',
    'white': 'White',
    'Blue': 'Blue',
    'Blue White': 'Blue_White',
    'Blue white': 'Blue_White',
    'Blue-white': 'Blue_White',
    'Blue-White': 'Blue_White'
}
dS['Color'] = dS['Color'].map(color_map).fillna(dS['Color'])
```

Com este remapeamento, podemos verificar que o número de tipos de `Color` e a quantidade de `Spectral_Class` são os mesmos e que devem possuir uma forte correlação, pois as quantidades são muito similares, principalmente para `Color = Red` e `Color = Blue_White`, que possuem muitos dados. Podemos então assumir que como uma é equivalente à outra, uma das duas colunas pode ser descartada para simplificação da análise. Neste caso, como os dados de `Color`, originalmente, são inconsistentes e são relativamente difíceis de lidar, pois o nome de uma cor pode ser vista de diversas formas diferentes (ex.: considerar o que é laranja amarelado, laranja e laranja avermelhado acaba sendo um pouco complicado, pois não conseguimos de fato separar o que é mais laranja, mais amarela ou mais vermelho apenas olhando), pode ser interessante retirar esta coluna, de modo que a tabela `dS` vai possuir apenas as colunas `Temperature`, `L`, `R`, `A_M` e `Spectral_Class`.

```
dS = dS.drop(columns = ['Color'])
```

Levando em conta que iremos utilizar o método PCA e formaremos *clusters*, é necessário converter os dados categóricos remanescentes na tabela em valores numérico. Então, para realizar a conversão da variável `Spectral_Class`, podemos utilizar o codificador `OneHotEncoder(sparse_output = False)` da biblioteca `sklearn`, cujo argumento interno é usado para retornar uma matriz densa onde todos os valores binários são explicitamente armazenados.

```
from sklearn.preprocessing import OneHotEncoder

encoder = OneHotEncoder(sparse_output=False)
encodedClass = encoder.fit_transform(dS[['Spectral_Class']])
encodeddS = pd.DataFrame(encodedClass, columns=encoder.get_feature_names_out())
```

onde `encodeddS` vai retornar uma tabela com 240 linhas e 7 colunas, e cada coluna vai ser um dos tipos das `Spectral_Class`.

index	Spectral_Class_A	Spectral_Class_B	···	Spectral_Class_M	Spectral_Class_O
0	0.0	0.0	···	1.0	0.0
1	0.0	0.0	···	1.0	0.0
2	0.0	0.0	···	1.0	0.0
3	0.0	0.0	···	1.0	0.0
4	0.0	0.0	···	1.0	0.0
···	···	···	···	···	···
235	0.0	0.0	···	0.0	1.0
236	0.0	0.0	···	0.0	1.0
237	1.0	0.0	···	0.0	0.0
238	1.0	0.0	···	0.0	0.0
239	0.0	0.0	···	0.0	1.0

2 Quais as variáveis devem ser reescalonadas e por qual método?

Devido à alta diferença de escala nos dados da lista `varNum`, é necessária a realização de um reescalonamento destas variáveis. Primeiro, podemos aplicar uma transformação logarítmica nas variáveis `L` e `R` devido à grande assimetria dos dados nelas contidos, onde somamos uma quantidade insignificante $1.0 \cdot 10^{-10}$ para evitar possíveis casos de $\log(0)$ (que não ocorrem aqui, mas é importante se considerar).

```
dSNum = dS[varNum].copy()

dSNum['L'] = np.log10(dSNum['L'] + 1e-10)
dSNum['R'] = np.log10(dSNum['R'] + 1e-10)
```

Em seguida, podemos de fato fazer o reescalonamento das variáveis, onde será usado o método `StandardScaler()`, afim de padronizar a média em 0 e a variância em 1. A escolha deste método é devido à sua adequação para aplicação do PCA e da clusterização, lidando bem com distribuições não normais e possíveis *outliers*.

```
from sklearn.preprocessing import StandardScaler

scaler = StandardScaler()
scaledNum = scaler.fit_transform(dSNum)
scaledNumdS = pd.DataFrame(scaledNum, columns = varNum)

X = pd.concat([scaledNumdS, encodeddS], axis = 1)
```

onde agora, `X` é a tabela `dS` com as variáveis numéricas reescalonadas e com as variáveis categóricas agora codificadas em valores binários, sendo então uma tabela com 240 linhas e 18 colunas

index	Temperature	L	R	...	Spectral_Class_M	Spectral_Class_O
0	-0.779382	-0.888096	-0.950995	...	1.0	0.0
1	-0.782110	-1.061480	-0.974683	...	1.0	0.0
2	-0.828477	-1.117944	0.602446	...	1.0	0.0
3	-0.807496	-1.16276	-0.965717	...	1.0	0.0
4	-0.897819	-1.203776	0.604815	...	1.0	0.0
...	...	...	...	...	...	...
235	2.983743	1.197284	1.230755	...	0.0	1.0
236	2.133913	1.285690	1.199858	...	0.0	1.0
237	-0.175029	1.237125	1.242467	...	0.0	0.0
238	-0.132438	1.205825	1.182580	...	0.0	0.0
239	2.872754	1.170775	1.297235	...	0.0	1.0

3 Aplique a redução de variáveis pelo método PCA e determine o número de componentes necessárias para se explicar, pelo menos, 90% da variância dos dados

Para aplicar o método PCA, precisamos importá-lo da biblioteca `sklearn`. Para visualização da quantidade de variáveis que explicam pelo menos 90% da variância dos dados, podemos importar a biblioteca `matplotlib`.

```
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.decomposition import PCA
```

Feito isso, somos capazes de aplicar a redução de variáveis pelo método PCA. Primeiro criamos uma instância do PCA, em seguida ajustamos o modelo PCA aos dados de `X`, calculando as componentes principais com suas variâncias e por fim transformas os dados originais de `X` para o espaço das componentes principais (`x`).

```
pca = PCA()
pca.fit(X)
x = pca.transform(X)
```

Feita a transformação dos dados, podemos determinar a quantidade de variáveis que vão determinar ao menos 90% da variância dos dados. Começamos obtendo a proporção de variância explicada por cada componente principal, seguindo da soma cumulativa destas proporções (explicabilidade). Com isso podemos encontrar o número de componentes necessárias para atingir mais de 90% da variância

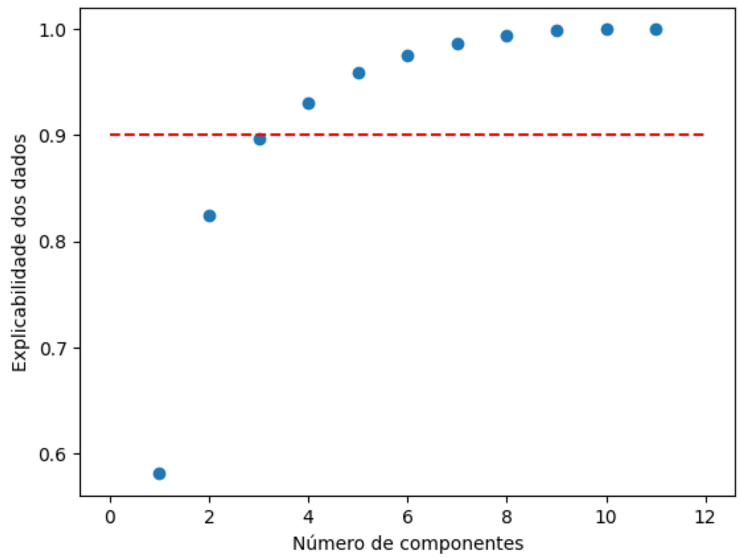
```
propVarExpl = pca.explained_variance_ratio_
explainability = propVarExpl.cumsum()
factors = np.arange(1, x.shape[1] + 1, 1)
p = factors[explainability < 0.9].max() + 1
if p < 2:
    p = 2

print(f"90% dos dados são explicados por {str(p)} componentes")
```

cujo output retorna a resposta:

```
90% dos dados são explicados por 4 componentes
```

Que podemos ver graficamente

```
plt.scatter(factors, explainability)
plt.hlines(0.9, 0, 12,'r', linestyle = '--')
plt.xlabel('Número de componentes');
plt.ylabel('Explicabilidade dos dados');
```



4 Olhando as três primeiras componentes principais do PCA, quais as variáveis da tabela são mais importantes para o agrupamento dos dados?

Podemos ver as três primeiras componentes principais do PCA utilizando a biblioteca `pandas`. Destas componentes, é possível identificar as variáveis mais importantes selecionando valores absolutos das componentes principais do PCA mais altos

```
pcaComponents = pd.DataFrame(pca.components_[0:3].T, columns=['PC1', 'PC2', 'PC3'], index=X.columns)

abs(pcaComponents)
```

	PCA_1	PCA_2	PCA_2
Temperature	0.332925	0.730708	0.458173
L	0.585445	0.065731	0.335921
R	0.425175	0.542428	0.689673
A_M	0.578364	0.046945	0.439852
Spectral_Class_A	0.004354	0.012189	0.048415
Spectral_Class_B	0.010021	0.218581	0.005799
Spectral_Class_F	0.023540	0.021188	0.037369
Spectral_Class_G	0.002907	0.003656	0.004012
Spectral_Class_K	0.006852	0.020092	0.003542
Spectral_Class_M	0.119179	0.326802	0.028266
Spectral_Class_O	0.127293	0.098593	0.059273

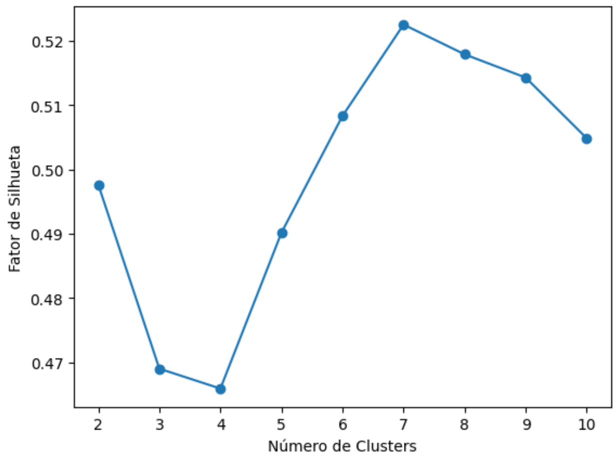
Na primeira componente do PCA (PCA_1), as variáveis da tabela X que são dominantes são L, A_M, R e Temperature (> 0.3), na componente PCA_2, as variáveis dominantes são Termperature, R, Spectral_Class_M e Spectral_Class_B (> 0.3) e na última componente principal do PCA, as variáveis mais importantes são R, Temperature, A_M e L (> 0.3). Podemos então estabelecer que para um *threshold* igual a 0.3 as variáveis mais importantes para o agrupamento dos dados são principalmente as numéricas Temperature, L, R e A_M, mas sem excluir a importância das duas variáveis categóricas que demonstraram importância na segunda componente principal do PCA. Estas duas variáveis podem ser entendidas como importantes na componente do PCA devido à grande quantidade de estrelas classificadas pelas classes M e B.

Determinadas as variáveis mais importantes para explicar no mínimo 90% da variância dos dados (que são as variáveis numéricas), podemos utilizar apenas a tabela que possui estes dados reescalonados e pré-processados, que é a tabela scaledNumdS.

5 Utilize o método de agrupamento hierárquico para agrupar as estrelas de acordo com suas características. Qual o número de agrupamentos ideal para análise desses dados?

A fim de utilizar o método de agrupamento hierárquico para agrupar as estrelas, podemos descobrir o número de agrupamentos ideal para análise de dados via AgglomerativeClustering, de modo que num *range* de 2 a 11 *clusters*, podemos visualizar qual é este valor ideal de *clusters*.

```
from sklearn.cluster import AgglomerativeClustering
from sklearn.metrics import silhouette_score, silhouette_samples

silHier = []
for n in range(2, 11):
    hier = AgglomerativeClustering(n_clusters=n, linkage='ward')
    labels = hier.fit_predict(scaledNumdS)
    silHier.append(silhouette_score(scaledNumdS, labels))

plt.plot(range(2,11), silHier, marker='o')
plt.xlabel('Número de Clusters')
plt.ylabel('Fator de Silhoueta')
plt.show()
```

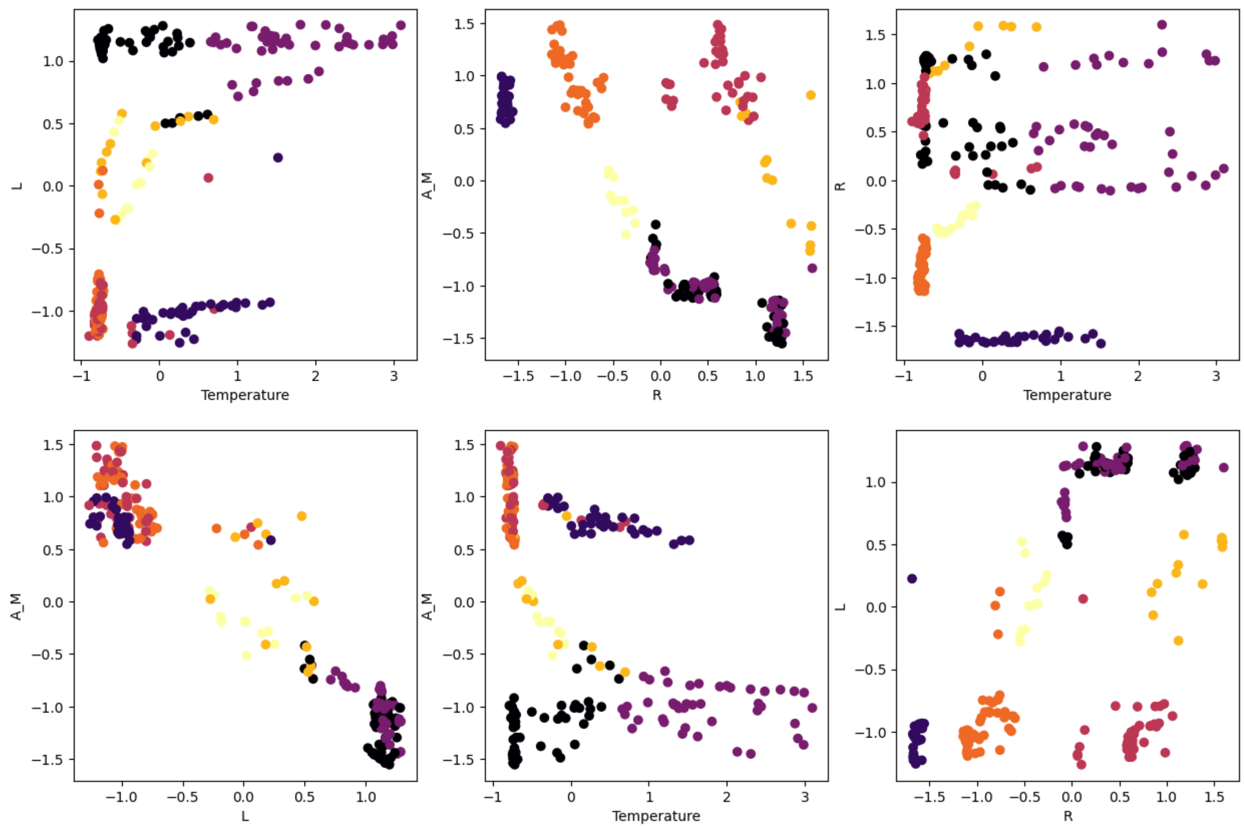


cujo número ideal de *clusters* vai ser definido pelo maior fator de silhueta observado no gráfico, o que podemos gravar no comando

```
bestNumberClustersHier = list(range(2,11))[np.argmax(silHier)]
```

que, para este caso, guardará o valor `bestNumberClusterHier = 7`. Com isso podemos agrupar as estrelas em 7 *clusters*, de tal forma que os gráficos relacionando as características principais das estrelas são facilmente construídos.

```
hierarchical = AgglomerativeClustering(n_clusters=bestNumberClustersHier,
↪  linkage='ward').fit(scaledNumdS)
categoriasHier = hierarchical.labels_

plt.figure(figsize=(15,10))
for i, (xVar, yVar) in enumerate([('Temperature', 'L'), ('R','A_M'), ('Temperature','R'), ('L','A_M'),
↪  ('Temperature', 'A_M'), ('R','L')], 1):
    plt.subplot(2,3,i)
    plt.scatter(scaledNumdS[xVar], scaledNumdS[yVar], c=categoriasHier, cmap='inferno')
    plt.xlabel(xVar)
    plt.ylabel(yVar)
```



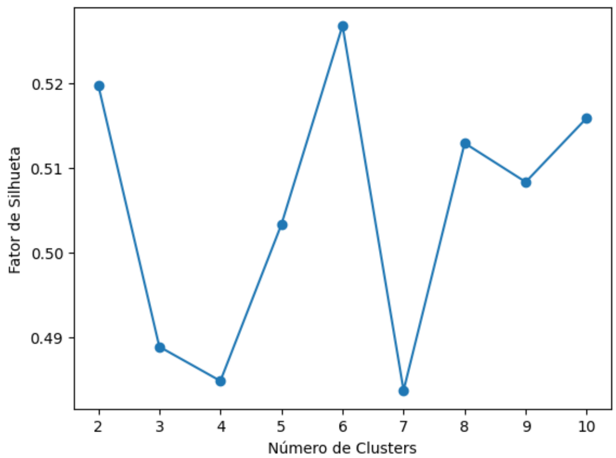
6 Utilize o método KMeans para agrupar as estrelas de acordo com suas características. Qual o número de agrupamentos ideal para análise desses dados?

Em relação ao método KMeans para agrupar as estrelas de acordo com suas características, é necessário escolher um estado alatório (`random_state = `) para aplicação do KMeans, pois caso contrário, a análise não torna-se reprodutível, dado que para cada estado aleatório escolhido pelo próprio KMeans, a quantidade ótima de *clusters* vai sempre mudar, prejudicando a análise. Portanto, podemos escolher um `random_state = 2`[1] na implementação do KMeans. Construímos então o fato de silhueta importando o `KMeans` da biblioteca `sklearn.cluster`.

```
from sklearn.cluster import KMeans

silKMeans = []
```

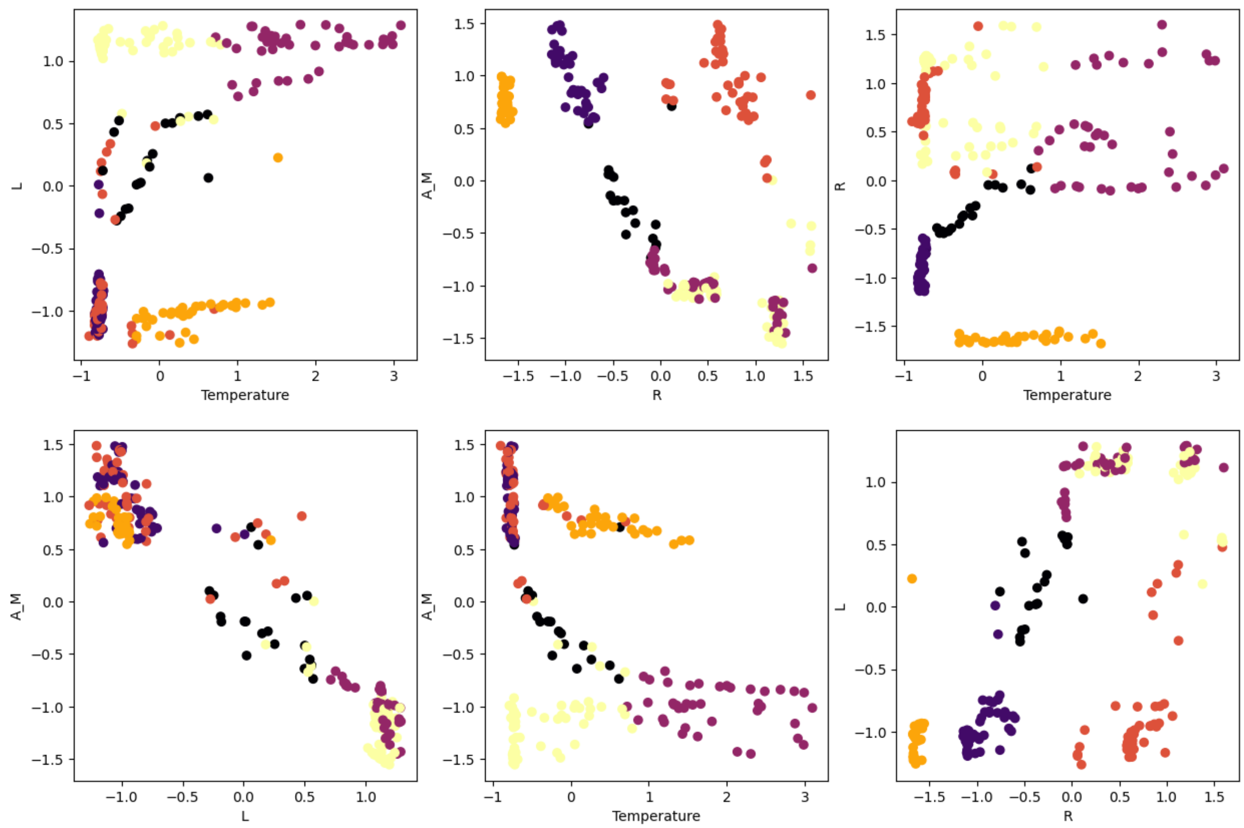
[1] A escolha do `random_state = 2` é feita com base na quantidade de tipos existentes na tabela `Categorias.csv`, pois a análise, *a posteriori*, indica que o número ideal de *clusters* é igual a 6. Foi estudada a possibilidade de diminuir a tolerância do KMeans (que por padrão é `0.0001`) para evitar que os gráficos se alterem a cada compilação, porém mesmo diminuindo até 10^{-20}, sempre ocorria uma mudança no fator de silhueta, influenciando diretamente na quantidade de *clusters* e portanto na análise.

```
for n in range(2, 11):
    kmeans = KMeans(n_clusters=n, random_state=2).fit(scaledNumdS)
    labels = kmeans.fit_predict(scaledNumdS)
    silKMeans.append(silhouette_score(scaledNumdS, labels))

plt.plot(range(2,11), silKMeans, marker='o')
plt.xlabel('Número de Clusters')
plt.ylabel('Fator de Silhueta')
plt.show()
```



Com isso, somos capazes de formar os *clusters* definindo uma variável que armazena o valor máximo do fator de silhueta e aplicando `n_clusters` igual a este valor.

```
bestNumberClustersKMeans = list(range(2,11))[np.argmax(silKMeans)]

kmeans = KMeans(n_clusters=bestNumberClustersKMeans).fit(scaledNumdS)
categoriasKMeans = kmeans.labels_

plt.figure(figsize=(15,10))
for i, (xVar, yVar) in enumerate([('Temperature', 'L'), ('R','A_M'), ('Temperature','R'), ('L','A_M'),
↪   ('Temperature', 'A_M'), ('R','L')], 1):
    plt.subplot(2,3,i)
    plt.scatter(scaledNumdS[xVar], scaledNumdS[yVar], c=categoriasKMeans, cmap='inferno')
    plt.xlabel(xVar)
    plt.ylabel(yVar)
```

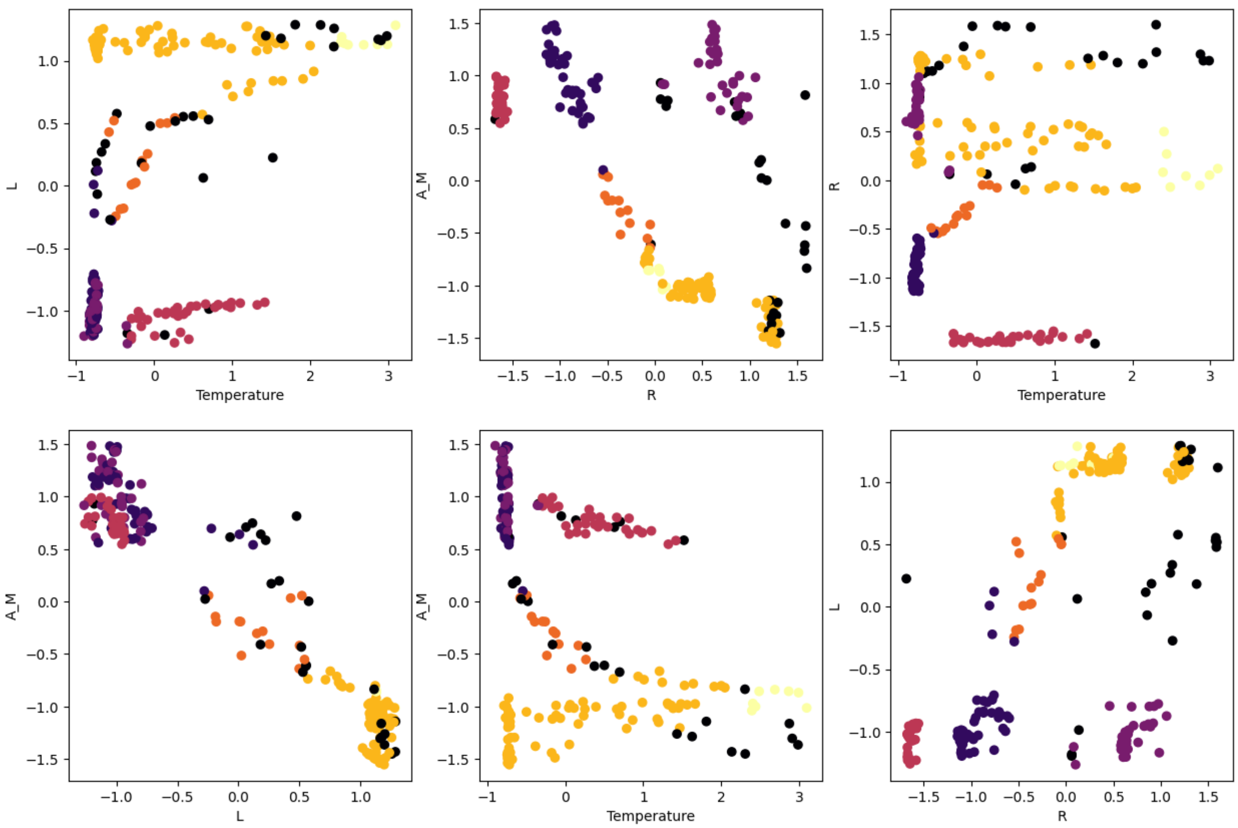


7 Utilize o método DBSCAN para agrupar as estrelas de acordo com suas características. Qual o número de agrupamentos obtido? Comente sobre a presença ou não de *outliers*

Para usar o DBSCAN, é necessário determinar valores de distância, ε, entre os pontos e o valor mínimo de amostras, $\min_N$, que minimizem os *outliers*, mas que ainda haja a formação de *clusters* consistentes. Um bom chute dessas variáveis, após vários testes iniciais, é $\varepsilon = 0.695$ e $\min_N = 11$.

```
from sklearn.cluster import DBSCAN

epsilon = 0.695
minN = 11

dbscan = DBSCAN(eps=epsilon, min_samples=minN).fit(scaledNumdS)
categoriasDBSCAN = dbscan.labels_

plt.figure(figsize=(15,10))
for i, (xVar, yVar) in enumerate([('Temperature', 'L'), ('R','A_M'), ('Temperature','R'), ('L','A_M'),
↪  ('Temperature', 'A_M'), ('R','L')], 1):
```

```
plt.subplot(2,3,i)
plt.scatter(scaledNumdS[xVar], scaledNumdS[yVar], c=categoriasDBSCAN, cmap='inferno')
plt.xlabel(xVar)
plt.ylabel(yVar)
```



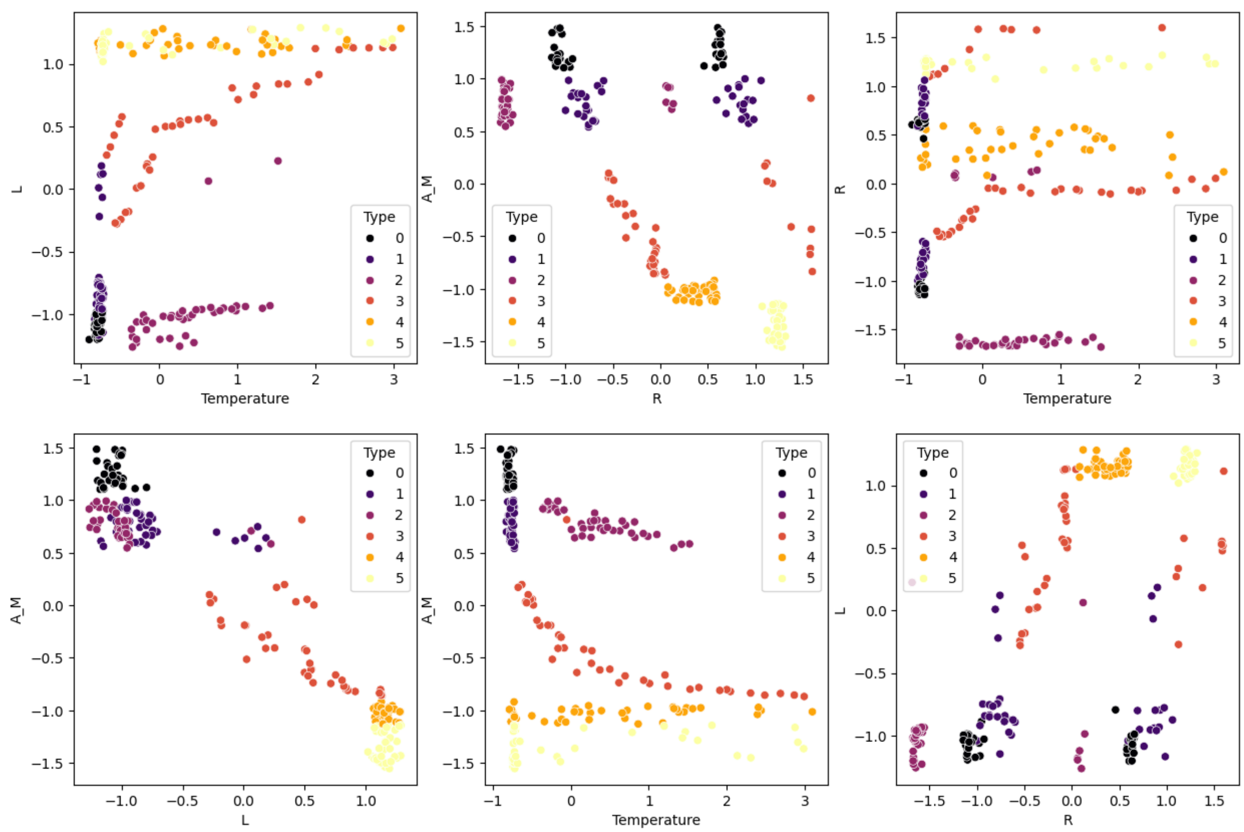
Com esta configuração foram obtidos 27 *outliers*[2] e 6 *clusters*[3], onde os *outliers* são os pontos em preto nos gráficos.

[2]`str((categoriasDBSCAN == -1).sum())`
[3]`str(categoriasDBSCAN.max() + 1)`

8 Faça uma análise sobre a performance geral dos algoritmos utilizados nos itens de 5 a 7 comparando com as categorias definidas manualmente e que podem ser encontradas no arquivo `Categorias.csv`

As categorias definidas manualmente na tabela `dC` podem ser visualizadas em *clusters*, onde cada tipo da variável `Type` vai definir um *cluster*, de modo que a visualização pode ser feita utilizando a biblioteca `seaborn`.

```
import seaborn as sns

plt.figure(figsize=(15, 10))
for i, (x_feature, y_feature) in enumerate([('Temperature', 'L'), ('R', 'A_M'), ('Temperature', 'R'),
↪   ('L', 'A_M'), ('Temperature', 'A_M'), ('R', 'L')], 1):
    plt.subplot(2, 3, i)
    sns.scatterplot(x=x_feature, y=y_feature, hue=dC['Type'], data=scaledNumdS, palette='inferno')
```



Vemos aqui que os *clusters* são muito bem separados e de clara visualização. Em comparação com os agrupamentos feitos com agrupamento Hierárquico, KMeans e DBSCAN, podemos verificar o quão parecido os *clusters* são utilizando a métrica *Adjusted Rand Index* (ARI).

```
from sklearn.metrics import adjusted_rand_score

ariHierarchical = adjusted_rand_score(dC['Type'], categoriasHier)
ariKMeans = adjusted_rand_score(dC['Type'], categoriasKMeans)
ariDBSCAN = adjusted_rand_score(dC['Type'], categoriasDBSCAN)

print(f'ARI Hierárquico: {ariHierarchical:.3f}')
print(f'ARI KMeans: {ariKMeans:.3f}')
print(f'ARI DBSCAN: {ariDBSCAN:.3f}')
```

```
ARI Hierárquico: 0.396
ARI KMeans: 0.397
ARI DBSCAN: 0.406
```

Podemos ver então que os *clusters* formados pelos métodos de agrupamento hierárquico, KMeans e DBSCAN são relativamente inferiores (DBSCAN > KMeans > Hierárquico) quando comparados às categorias definidas manualmente, no entanto, alguns *clusters* obtidos por estes métodos são relativamente parecidos com os manuais.

Um comentário importante a ser feito é em relação ao uso do `random_state=2`no KMeans. Ao impormos isso, a *clusterização* fica única, porém ela pode não ser a melhor formação de *clusters* quando fazemos `kmeans = KMeans(n_clusters=bestNumberClustersKMeans, random_state=2).fit(scaledNumdS)`, dado que existe uma variedade de `random_state` que nos dão um valor ótimo de *clusters* igual a 6, mas todos eles acabam por ser diferentes e o ARI do KMeans vai sempre mudar.