# Agrupamento Validação

Aprendizado não supervisionado Heloisa de Arruda Camargo



INFORMAÇÃO,

**TECNOLOGIA** 

& INOVAÇÃO

### Validação de agrupamento

- A maioria dos algoritmos de agrupamento impõem uma estrutura de agrupamento ao conjunto de dados X.
- Entretanto, X pode n\u00e3o possuir uma estrutura de agrupamento.
  - Assim torna-se necessário fazer a avaliação dos resultados obtidos pelo agrupamento.
  - Validação de Clusters: tarefa que avalia quantitativamente os resultados de um algoritmo de agrupamento para verificar se os clusters são significativos

#### Ressalvas....

- "However, it must be emphasized that the results obtained by these methods are only tools at the disposal of the expert in order to evaluate the resulting clustering." (Theodoridis & Koutroumbas, 2009).
- "These index can be useful, but we should keep in mind their limited role and treat the findings implied by them as only useful guidelines." (Pedrycz, 2005).

### Abordagens para validação de agrupamento

#### Critérios externos

- Exigem validação estatística para verificar se o agrupamento obtido não é aleatório
- Usa uma medida externa que mede o grau de correspondência entre um agrupamento C produzido por um algoritmo com uma partição 

   construída independentemente de C

#### Critérios internos

- Exigem validação estatística para verificar se o agrupamento obtido não é aleatório
- Usa uma medida interna que avalia o agrupamento C produzido por um algoritmo com base nos dados e na matriz de proximidade

### Abordagens para validação de agrupamento

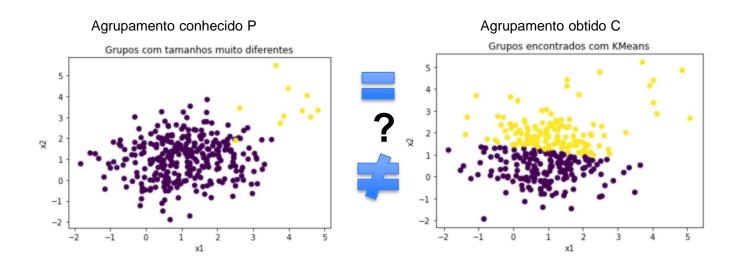
#### Critérios relativos:

- O agrupamento é avaliado por comparação com outras estruturas de agrupamento, resultantes da aplicação:
  - do mesmo algoritmo de agrupamento com diferentes parâmetros ou
  - de outros algoritmos de agrupamento

### Índices de validação

- Um índice de validação é uma estatística pela qual a validade de um agrupamento é testada
- Índices podem ser:
- Internos avaliam o agrupamento com base apenas na matriz de dados ou na matriz de similaridade
- Externos avaliam o agrupamento comparando a partição resultante de um algoritmo com uma partição já conhecida
- OBS- A validação relativa pode utilizar os dois tipos de índices

- Agrupamento obtido C = {C<sub>1</sub>, C<sub>2</sub>, ..., C<sub>m</sub>}
- Agrupamento conhecido P = {P<sub>1</sub>, P<sub>2</sub>, ..., P<sub>s</sub>},
  - O número de grupos em C não precisa ser igual ao número de grupos em P



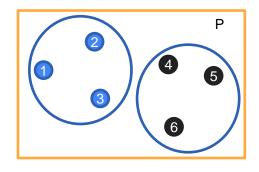
- Considere um par de objetos (x<sub>i</sub>, x<sub>j</sub>)
- Esse par é identificado por:
  - SS se os dois objetos pertencem ao mesmo grupo em C e ao mesmo grupo em P
  - SD se os dois objetos pertencem ao mesmo grupo em C e a grupos diferentes em P
  - DS se os dois objetos pertencem a grupos diferentes em C e ao mesmo grupo em P
  - DD se os dois objetos pertencem a grupos diferentes em C e a grupos diferentes em P

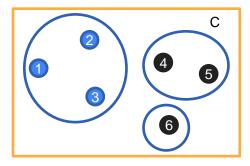
$$X = \{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6\}$$

$$C = \{\{x_1, x_2, x_3\}, \{x_4, x_5\}, \{x_6\}\}$$

$$P = \{\{x_1, x_2, x_3\}, \{x_4, x_5, x_6\}\}$$

	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$\mathcal{X}_4$	$X_5$	$x_6$
$x_1$		SS	SS	DD	DD	DD
$x_2$			SS	DD	DD	DD
$x_3$				DD	DD	DD
$X_4$					SS	DS
$X_5$						DS
$x_6$						



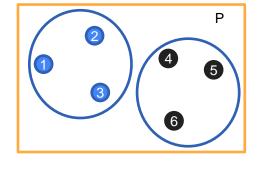


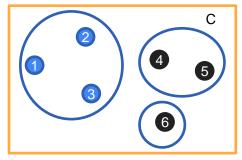
- Sejam:
- a: o número de pares de vetores de X do tipo SS
- b: o número de pares de vetores de X do tipo SD
- c: o número de pares de vetores de X do tipo DS
- d: o número de pares de vetores de X do tipo DD
- Definimos:
- M número total de possíveis pares de vetores em X a+b+c+d = M M = N(N-1)/2
- $m_1 = a+b$  número de pares de objetos que pertencem ao mesmo cluster em C
- m<sub>2</sub> = a+c número de pares de objetos que pertencem ao mesmo cluster em P

$$X = \{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6\}$$

$$C = \{\{x_1, x_2, x_3\}, \{x_4, x_5\}, \{x_6\}\}$$

$$P = \{\{x_1, x_2, x_3\}, \{x_4, x_5, x_6\}\}$$





a=4

b=0

c=2

d=9

#### Índice Rand

Mede a similaridade entre dois agrupamentos

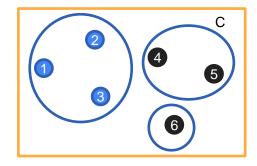
$$R = \frac{a+d}{M}$$

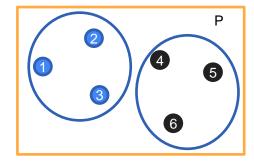
- a: o número de pares de vetores de X do tipo SS
  - (SS os dois objetos pertencem ao mesmo grupo em C e em P)
- d: o número de pares de vetores de X do tipo DD
  - o (DD os dois objetos pertencem a grupos diferentes em C e em P)
- M = a+b+c+d
- Mede a fração do número total de pares SS ou DD
- Valores entre 0 e 1
- Para atingir o valor máximo, é necessário ter m=s.

### Índice Rand

 $x_6$ 

a=4 b=0 c=2 d=9





$$R = (a+d)/M = (4+9)/15 = 13/15 = 0.87$$

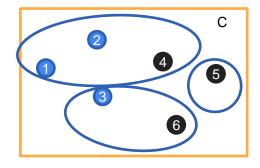
### Índice Rand

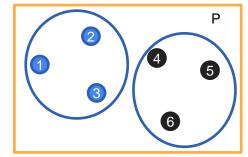
$$X = \{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6\}$$

$$C = \{\{x_1, x_2, x_4\}, \{x_5\}, \{x_3, x_6\}\}$$

$$P = \{\{x_1, x_2, x_3\}, \{x_4, x_5, x_6\}\}$$

a=1 b=3 c=5 d=6





$$R = (a+d)/M = (1+6)/15 = 7/15 = 0,47$$

# Índice Rand corrigido

Ajustado para garantir um valor próximo de zero para agrupamentos aleatórios independente do número de clusters e instâncias e valor 1 para agrupamentos idênticos.

$$RC = \frac{R - E[R]}{\max(R) - E[R]}$$

- Vantagens:
- Agrupamentos aleatórios (grupos não válidos) tem um valor perto de zero independente do número de clusters ou de instâncias
- Valores entre -1 e 1
- Não faz suposições sobre a estrutura dos clusters.
  - Pode ser usado para comparar resultados do K-Means, que encontra clusters globulares com resultados do algoritmo de agrupamento spectral, que pode encontrar clusters de outros formatos

sklearn.metrics.adjusted\_rand\_score(labels\_true, labels\_pred)

#### Parâmetros:

- labels\_true : int array, formato = [n\_samples]
- Rótulos dos grupos conhecidos usados como referência
- labels\_pred : array, formato = [n\_samples]
- Rótulos dos clusters obtidos no agrupamento

#### Retorna:

- o ari : float
- Índice de similaridade entre -1.0 and 1.0.

#Calcular o RC para o conjunto definido

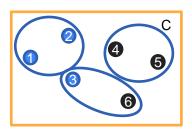
#### from sklearn.cluster import metrics

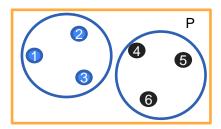
labels\_true = [0, 0, 0, 1, 1, 1]

labels\_pred = [0, 0, 1, 1, 2, 2]

metrics.adjusted\_rand\_score(labels\_true, labels\_pred)

0.242424242424246





#Se permutar 0 e 1 e trocar 2 por 3 o resultado é o mesmo

labels\_pred = [1, 1, 0, 0, 3, 3]
metrics.adjusted\_rand\_score(labels\_true, labels\_pred)

0.242424242424246

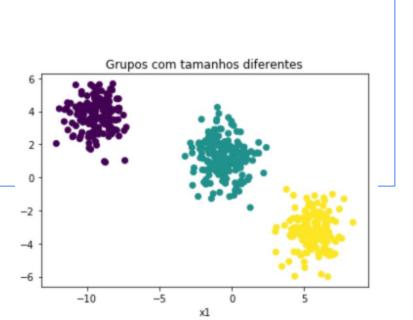
#O cálculo do índice RC é simétrico

metrics.adjusted\_rand\_score(labels\_pred, labels\_true)

0.242424242424246

#Calcular o RC para o conjunto definido- gerado com make\_blobs

```
#gerando grupos com tamanhos diferentes
X, y = make_blobs(n_samples=[150,200,150])
plt.scatter(X[:,0], X[:,1], c=y)
plt.title("Grupos com tamanhos diferentes")
plt.xlabel("x1")
plt.ylabel("x2")
```



#### #Agrupar com Kmeans

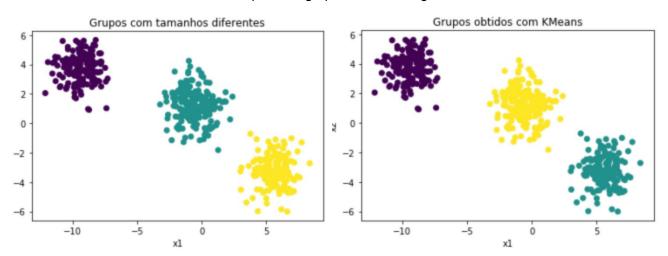
-10

#Calcular RC

metrics.adjusted\_rand\_score(km.labels\_,y)

1.0

Neste exemplo, os agrupamentos são iguais



#### Coeficiente de Jaccard

 Calcula a probabilidade de que dois objetos pertencentes ao mesmo cluster em uma das partições também pertençam ao mesmo cluster na outra partição

$$J = \frac{a}{a+b+c}$$

- Agrupamentos aleatórios (grupos não válidos) tem um valor perto de zero independente do número de clusters ou de instâncias
- Valores entre -1 e 1
- Não faz suposições sobre a estrutura dos clusters.
  - Pode ser usado para comparar resultados do K-Means, que encontra clusters globulares com resultados do algoritmo de agrupamento spectral, que pode encontrar clusters de outros formatos

### Índices baseados em informação mútua

- Calcula a concordância entre duas partições
  - MI (Mutual Information)
  - NMI (Normalized Mutual Information)
  - AMI (Adjusted Mutual Information)

#### Vantagens:

- Para AMI, agrupamentos aleatórios (grupos não válidos) tem um valor perto de zero independente do número de clusters ou de instâncias(o que não acontece para MI ou medida V)
  - Limite superior de 1: Valores próximos de zero indicam agrupamentos independentes,
     valores próximos de 1 indicam concordância significativa entre os agrupamentos

### Índice AMI em Python

sklearn.metrics.adjusted\_mutual\_info\_score(labels\_true, labels\_pred, average\_method='arithmetic')

#### Parâmetros:

- o labels\_true : int array, formato = [n\_samples]
- Rótulos dos grupos conhecidos usados como referência
- labels\_pred : array, formato = [n\_samples]
- Rótulos dos clusters obtidos no agrupamento
- average\_method: string (optional) (default: 'arithmetic')
- Como calcular o normalizador no denominador
- Opções: 'min', 'geometric', 'arithmetic', 'max'.

#### Retorna:

- ami : float
- Índice de similaridade entre -1.0 and 1.0.

# Índice AMI em Python

#Calcular o AMI para o conjunto definido

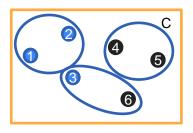
#### from sklearn.cluster import metrics

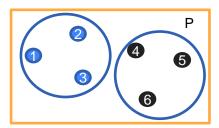
labels\_true = [0, 0, 0, 1, 1, 1]

labels\_pred = [0, 0, 1, 1, 2, 2]

metrics.adjusted\_mutual\_info\_score(labels\_pred, labels\_true ,average\_method='arithmetic')

#### 0.29879245817089006





# Índice AMI em Python

#Agrupamentos muito diferentes – índice zero

metrics.adjusted\_mutual\_info\_score([0, 0, 0, 0], [0, 1, 2, 3], average\_method ='arithmetic')

0.0

#Agrupamentos idênticos – índice 1

metrics.adjusted\_mutual\_info\_score([0, 0, 1, 1], [0, 0, 1, 1], average\_method='arithmetic'))

1.0

### Homogeneidade, completeza e medida V

- Homogeneidade: um agrupamento satisfaz homogeneidade se todos os seus clusters contêm apenas dados de uma mesma classe
- Completeza (completeness): um agrupamento satisfaz completeza se todos os membros de uma dada classe são atribuídos ao mesmo cluster
- Medida-V: média harmônica de homogeneidade e completeza
  - v = (1 + beta) \* homogeneity \* completeness / (beta \* homogeneity + completeness)

#### Vantagens:

- Possui valores limitados: 0 indica agrupamentos ruins, 1 indica agrupamento perfeito
- Não faz suposições sobre a estrutura dos clusters pode ser usado para comparar clusters de diferentes formatos

### Homogeneidade, completeza e medida V em Python

- sklearn.metrics.homogeneity\_score(labels\_true, labels\_pred)
- Retorna homogeneity
- sklearn.metrics.completeness\_score(labels\_true, labels\_pred)
- Retorna completeness
- sklearn.metrics.v\_measure\_score(labels\_true, labels\_pred, beta=1.0)
- Retorna v\_measure

### Homogeneidade, completeza e medida V em Python

#Calcular homogeneidade, completeza e medida V para o conjunto definido

#### from sklearn import metrics

```
labels_true = [0, 0, 0, 1, 1, 1]
```

labels\_pred = [0, 0, 1, 1, 2, 2]

print("Homogeneidade: %0.3f " % metrics.homogeneity\_score(labels\_true, labels\_pred))

print("Completeza: %0.3f " % metrics.completeness\_score(labels\_true, labels\_pred))

print("Medida-V %0.3f " % metrics.v\_measure\_score(labels\_true, labels\_pred))

Homogeneidade: 0.667

Completeza: 0.421 Medida-V 0.516

### Homogeneidade, completeza e medida V em Python

As medidas de homogeneidade, completeza e medida V podem ser calculadas de uma só vez:

sklearn.metrics.homogeneity\_completeness\_v\_measure(labels\_true, labels\_pred, beta=1.0)

#### from sklearn import metrics

labels\_true = [0, 0, 0, 1, 1, 1]

labels\_pred = [0, 0, 1, 1, 2, 2]

metrics.homogeneity\_completeness\_v\_measure(labels\_true, labels\_pred)

(0.6666666666666669, 0.420619835714305, 0.5158037429793889)

### Índice de Fowlkes e Mallows

Avalia a similaridade entre duas partições

$$FM(C,P) = \frac{a}{\sqrt{(m_1)(m_2)}}$$

- Vantagens:
- Agrupamentos aleatórios (grupos não válidos) tem um valor perto de zero independentemente do número de clusters ou de instâncias(o que não acontece para MI ou medida V)
  - Limite superior de 1: Valores próximos de zero indicam agrupamentos independentes,
     valores próximos de 1 indicam concordância significativa entre os agrupamentos
  - Não faz suposições sobre a estrutura dos clusters pode ser usado para comparar clusters de diferentes formatos

# Índice Fowlkes e Mallows em Python

sklearn.metrics.fowlkes\_mallows\_score(labels\_true, labels\_pred, sparse=False)

#### Parâmetros:

- labels\_true : int array, formato = [n\_samples]
- Rótulos dos grupos conhecidos usados como referência
- labels\_pred : array, formato = [n\_samples]
- Rótulos dos clusters obtidos no agrupamento
- sparse: booleano
- Calcula matriz de contingência internamente

#### Retorna:

- score : float
- Índice de similaridade entre -1.0 and 1.0.

# Índice FM em Python

#Calcular índice FM para o conjunto definido

```
from sklearn.cluster import metrics
labels_true = [0, 0, 0, 1, 1, 1]
labels_pred = [0, 0, 1, 1, 2, 2]
print(sm.fowlkes_mallows_score(labels_true, labels_pred))
print(sm.fowlkes_mallows_score([0, 0, 1, 1], [0, 0, 1, 1]))
print(sm.fowlkes_mallows_score([0, 0, 1, 1], [1, 1, 0, 0]))
```

```
0.4714045207910317
1.0
1.0
```

# Índices externos de validação de agrupamento

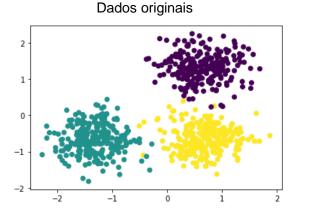
Exercícios em Python no Colab

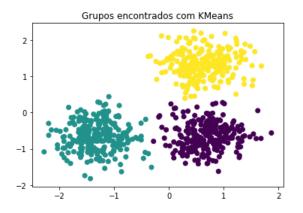


# Índices externos em Python

#### #Agrupar com KMeans

```
km = KMeans(n_clusters = 3, init='random').fit(X)
labels_true = y
rotulos_km = km.labels_
plt.scatter(X[:,0], X[:,1], c=rotulos_km)
plt.title("Grupos encontrados com KMeans")
```





### Índices externos em Python

#Calcular índices de validação externos do agrupamento com KMeans

```
h = metrics.homogeneity score(labels true, rotulos km)
print("Homogeneidade: %0.3f" % h)
c = metrics.completeness score(labels true, rotulos km)
print("Completeza: %0.3f" % c)
v = metrics.v measure score(labels true, rotulos km)
print("Medida V: %0.3f" % v )
ari = metrics.adjusted rand score(labels true, rotulos km)
print("Índice Rand corrigido: %0.3f" % ari)
ami = metrics.adjusted mutual info score(labels true, rotulos km,
    average method='arithmetic')
print("Adjusted Mutual Information: %0.3f" % ami)
fm = metrics.fowlkes mallows score(labels true, rotulos km)
print("Índice Fowlkes-Mallows: %0.3f" % fm )
```

## Índices externos em Python

#Calcular índices de validação externos do agrupamento com KMeans

```
h = metrics.homogeneity score(labels true, rotulos km)
print("Homogeneidade: %0.3f" % h)
c = metrics.completeness score(labels true, rotulos km)
print("Completeza: %0.3f" % c)
v = metrics.v measure score(labels true, rotulos km)
print("Medida V: %0.3f" % v )
ari = metrics.adjusted rand score(labels true, rotulos km)
print("Índice Rand corrigido: %0.3f" % ari)
ami = metrics.adjusted mutual info score(labels true, rotulos km, average method='arithmetic')
print("Adjusted Mutual Information: %0.3f" % ami )
fm = metrics.fowlkes mallows score(labels_true, rotulos_km)
print("Índice Fowlkes-Mallows: %0.3f" % fm )
```

Homogeneidade: 0.945 Completeza: 0.945

Medida V: 0.945 Índice Rand corrigido: 0.968 Adjusted Mutual Information: 0.945 Índice Fowlkes-

Mallows: 0.979

Grupos encontrados com KMeans

## Índices de validação internos

- Índices que avaliam a qualidade do agrupamento com base apenas nas estruturas internas como matriz de dados ou matriz de similaridade
- Nenhuma informação externa sobre os grupos é conhecida

Matriz de dados

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 5 & 4 \\ 6 & 5 \\ 6.5 & 6 \end{bmatrix}$$

Matriz de dissimilaridade distância Euclidiana

### Coeficiente de silhueta

 A medida se baseia na proximidade entre os objetos de um cluster e na distância dos objetos de um cluster ao cluster mais próximo

#### Avalia:

- A adequação de cada objeto ao seu cluster
- A qualidade de um cluster individualmente
- A qualidade de uma partição
- Valores entre [-1, 1]
- Melhor partição tem valor 1

### Coeficiente de silhueta

- a: Distância média entre um objeto e todos os outros do mesmo cluster
- **b**: Distância média entre um objeto e todos os outros do cluster mais próximo
- Silhueta de um objeto x<sub>i</sub>:

$$sil(x_i) = \frac{b-a}{\max(a,b)}$$

Silhueta de um cluster:

$$sil(C_j) = \frac{1}{|C_j|} \sum_{x_i \in C_j} sil(x_i)$$

Silhueta de um agrupamento:

$$sil(C) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} sil(x_i)$$

### Coeficiente de silhueta

### Vantagens:

- Limitado entre -1 para agrupamentos incorretos e +1 para agrupamentos densos
- Índices próximos de zero indicam clusters sobrepostos
- O índice é mais alto quando os clusters são densos e separados

### Interpretação:

 $S \le 0.25$ Não foi encontrada uma estrutura  $0.26 \le S \le 0.5$ Estrutura fraca  $0.51 \le S \le 0.7$ Estrutura razoável  $0.71 \ge S \le 1$ Estrutura forte

### Desvantagens:

- Custo computacional elevado
- É melhor para clusters convexos (obtidos por Kmeans) do que para clusters com outros formatos (densos, DBSCAN)

## Coeficiente de silhueta em Python

 sklearn.metrics.silhouette\_score(X, labels, metric='euclidean', sample\_size=None, rand om\_state=None, \*\*kwds)

#### Parâmetros:

- X: int array, formato = [n\_samples, n\_features]
- Matriz de dados
- labels: array, formato = [n\_samples]
- Rótulos dos clusters obtidos no agrupamento
- Metric: string : string
- Medida de distância utilizada

#### Retorna:

- silhouette : float
- Coeficiente de silhueta entre -1.0 and 1.0.

### Índice Davies Bouldin

- Calcula a similaridade média entre cada cluster e o mais parecido com ele
- Vantagens:
- O cálculo é mais simples do que a silhueta

### Desvantagens:

- O índice é maior para custers convexos do que para outros conceitos de clusters, tais como clusters baseados em densidade como os obtidos pelo DBSCAN
- O uso de centroides limita a métrica de distância para o espaço Euclidiano
- A obtenção de um valor bom por esse método não implica que o melhor agrupamento foi obtido.

## Índice Davies-Bouldin em Python

sklearn.metrics.davies\_bouldin\_score(X, labels)

#### Parâmetros:

- X : int array, formato = [n\_samples, n\_features]
- Matriz de dados
- labels: array, formato = [n\_samples]
- Rótulos dos clusters obtidos no agrupamento

### Retorna:

- score : float
- Índice Davis Bouldin

### Índice Caliski-Harabasz

- Calcula a razão entre a dispersão média entre pares de clusters e a dispersão intra-clusters
- Valores mais altos indicam clusters mais bem definidos

### Vantagens:

- O índice é alto quando os clusters são densos e bem separados, o que está relacionado a um conceito padrão de cluster
- É rápido para calcular

## Índice Caliski-Harabasz em Python

sklearn.metrics.calinski\_harabasz\_score(X, labels)

#### Parâmetros:

- X : int array, formato = [n\_samples, n\_features]
- Matriz de dados
- labels: array, formato = [n\_samples]
- Rótulos dos clusters obtidos no agrupamento

#### Retorna:

- score : float
- Índice Calisnke-Harabasz

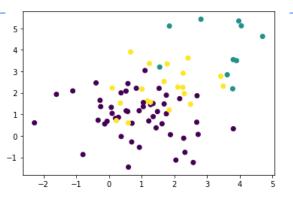
# Índices internos de validação de agrupamento

Exercícios em Python no Colab



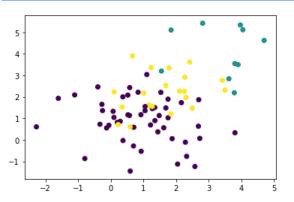
## Índices de validação internos em Python

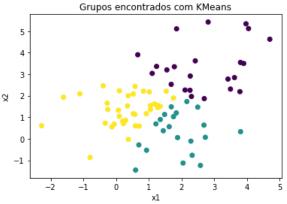
#Gerar conjunto de dados, agrupar e calcular os índices internos



## Índices de validação internos em Python

```
# Executando KMeans e mostrando o resultado
y_pred = KMeans(n_clusters=3,init='random')
y_pred.fit(X)
#Usando os rótulos dos grupos para plotar os grupos obtidos
rotulos= y_pred.labels_
plt.scatter(X[:,0], X[:,1], c=rotulos)
plt.title("Grupos encontrados com KMeans")
plt.xlabel("x1")
plt.ylabel("x2")
```





## Índices de validação internos em Python

#Calcular índices internos para o agrupamento resultante

```
s= metrics.silhouette_score(X, rotulos, metric='euclidean')
print("Coeficiente de Silhueta: %0.3f" % s)
ch = metrics.calinski_harabasz_score(X, rotulos)
print("Calinski_harabasz: %0.3f" % ch)
dbs = metrics.davies_bouldin_score(X, rotulos)
print("Davies Bouldin: %0.3f" % dbs)
```

Coeficiente de Silhueta: 0.332 Calinski\_harabasz: 58.099

Davies Bouldin: 0.983