

Questão 1

1. Pré-processamento da base de dados

In [103...]

```
!pip install plotly --upgrade  
!pip install kneed # To install only knee-detection algorithm
```

```
Requirement already satisfied: plotly in /usr/local/lib/python3.11/dist-packages (6.0.1)  
Requirement already satisfied: narwhals>=1.15.1 in /usr/local/lib/python3.11/dist-packages  
(from plotly) (1.35.0)  
Requirement already satisfied: packaging in /usr/local/lib/python3.11/dist-packages (from pl  
otly) (24.2)  
Requirement already satisfied: kneed in /usr/local/lib/python3.11/dist-packages (0.8.5)  
Requirement already satisfied: numpy>=1.14.2 in /usr/local/lib/python3.11/dist-packages (fro  
m kneed) (2.0.2)  
Requirement already satisfied: scipy>=1.0.0 in /usr/local/lib/python3.11/dist-packages (from  
kneed) (1.14.1)
```

In [104...]

```
import numpy as np  
import pandas as pd  
import seaborn as sns  
import plotly.express as px  
import matplotlib.pyplot as plt  
import plotly.graph_objects as go  
from scipy.stats import zscore  
from sklearn.cluster import KMeans #Importando a função Kmeans  
from sklearn.metrics import silhouette_score  
from kneed import DataGenerator, KneeLocator #para mostrar o número de grupos ideal do agru  
from sklearn.preprocessing import MinMaxScaler #Função utilizada para normalização dos dado  
from sklearn.preprocessing import StandardScaler #Função utilizada para normalização dos da
```

Lendo .csv:

In [105...]

```
df = pd.read_csv("Iris.csv", sep=',', encoding='utf-8')
```

In [106...]

```
df
```

Out[106...]

	sepallength	sepalwidth	petallength	petalwidth	class
0	5.1	3.5	1.4	0.2	Iris-setosa
1	4.9	3.0	1.4	0.2	Iris-setosa
2	4.7	3.2	1.3	0.2	Iris-setosa
3	4.6	3.1	1.5	0.2	Iris-setosa
4	5.0	3.6	1.4	0.2	Iris-setosa
...
145	6.7	3.0	5.2	2.3	Iris-virginica
146	6.3	2.5	5.0	1.9	Iris-virginica
147	6.5	3.0	5.2	2.0	Iris-virginica
148	6.2	3.4	5.4	2.3	Iris-virginica
149	5.9	3.0	5.1	1.8	Iris-virginica

150 rows × 5 columns

Verificando Dados Ausentes

In [107...]

```
missing_indexes = df[df.isnull().any(axis=1)].index
if len(missing_indexes) > 0:
    print('Dados Ausentes:')
    display(df.iloc[missing_indexes])
else:
    print('Não há dados ausentes')
```

Não há dados ausentes

Verificando Dados Redundantes

In [108...]

```
column_names = df.columns[:-1]
df_duplicates = df[df.duplicated(subset=column_names, keep=False)]
if len(df_duplicates) > 0:
    print('Dados Redundantes:')
    display(df_duplicates)
else:
    print('Não há dados redundantes')
```

Dados Redundantes:

	sepallength	sepalwidth	petallength	petalwidth	class
9	4.9	3.1	1.5	0.1	Iris-setosa
34	4.9	3.1	1.5	0.1	Iris-setosa
37	4.9	3.1	1.5	0.1	Iris-setosa
101	5.8	2.7	5.1	1.9	Iris-virginica
142	5.8	2.7	5.1	1.9	Iris-virginica

Removendo Dados Redundantes

In [109...]

```
def delDuplicatas( df_dataset ):
    df_dataset = df_dataset.drop_duplicates(keep = 'first')
```

```
    return df_dataset  
# delDuplicatas  
  
df = delDuplicatas( df )
```

Verificando Dados Inconsistente

```
In [110...]  
df_duplicates = df[df.duplicated(subset=column_names, keep=False)]  
if len(df_duplicates)>0:  
    print('Dados Inconsistentes: ')  
    display(df_duplicates)  
else:  
    print('Não há dados inconsistentes')
```

Não há dados inconsistentes

Removendo Dados Inconsistente

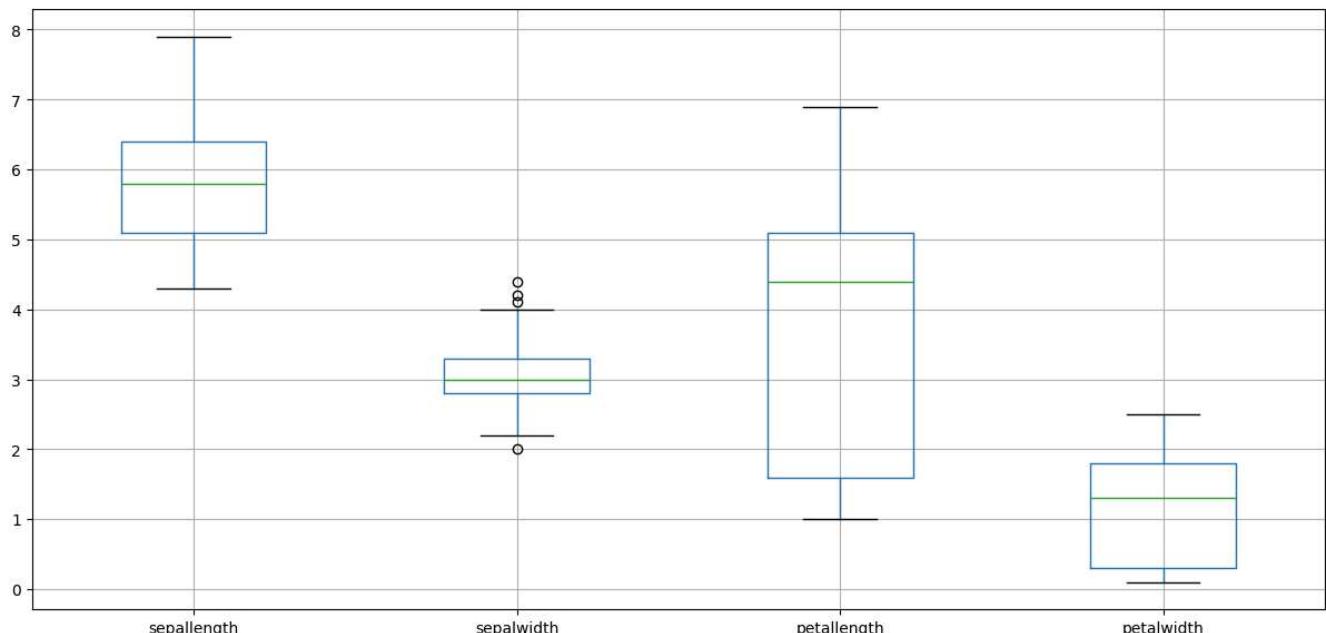
```
In [111...]  
def delInconsistencias(df_dataset):  
    df_dataset = df_dataset.drop_duplicates(subset=column_names, keep=False)  
    return df_dataset  
# delInconsistencias  
  
df = delInconsistencias(df)  
df_duplicates = df[df.duplicated(subset=column_names, keep=False)]  
if len(df_duplicates)>0:  
    display(df_duplicates)  
else:  
    print('Não há dados redundantes ou inconsistentes')
```

Não há dados redundantes ou inconsistentes

Detectando Outliers

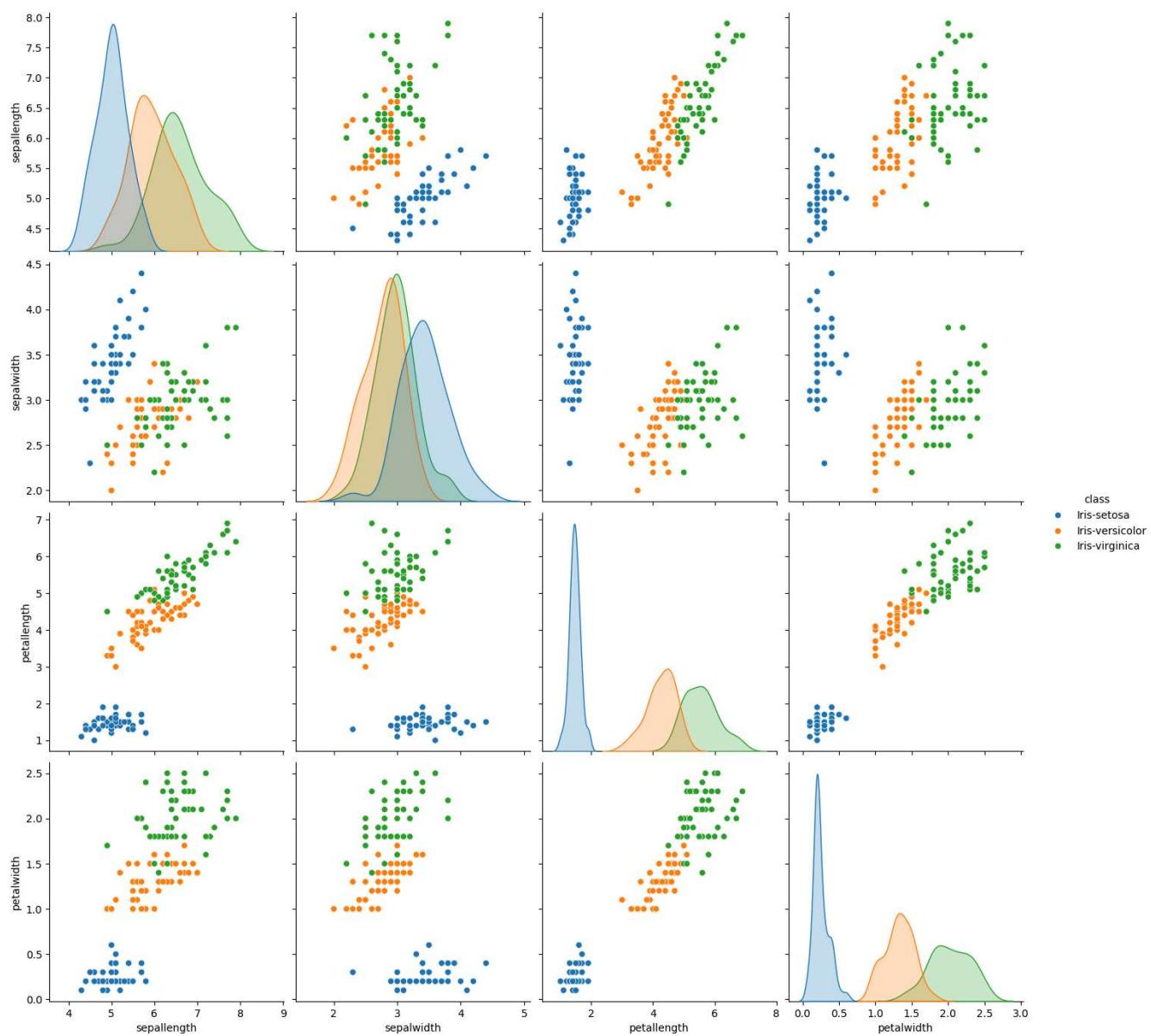
Boxplot:

```
In [112...]  
df.boxplot(figsize=(15,7))  
plt.show()
```



Scatter

```
In [113...]  
sns.pairplot(df, hue='class', height=3.5);  
plt.show()
```



Removendo Outliers

```
In [114...]
z_scores = zscore(df[list(column_names)])
z_df = pd.DataFrame(z_scores, columns=list(column_names))
outlier_mask = (np.abs(z_df) > 3).any(axis=1)
outliers = df[outlier_mask]

# Visualiza
print(f'{len(outliers)} instância(s) detectada(s) como outlier(s) (z-score > 3):')
display(outliers)

# Remove
df = df[~outlier_mask].reset_index(drop=True)
```

1 instância(s) detectada(s) como outlier(s) (z-score > 3):

	sepallength	sepalwidth	petallength	petalwidth	class
15	5.7	4.4	1.5	0.4	Iris-setosa

2. Encontrando agrupamentos utilizando Silhouette e Elbow

Normalização dos Dados

```
In [115...]
Entrada = df.iloc[:, 0:4].values
scaler = MinMaxScaler()
```

```
Entrada = scaler.fit_transform(Entrada)
```

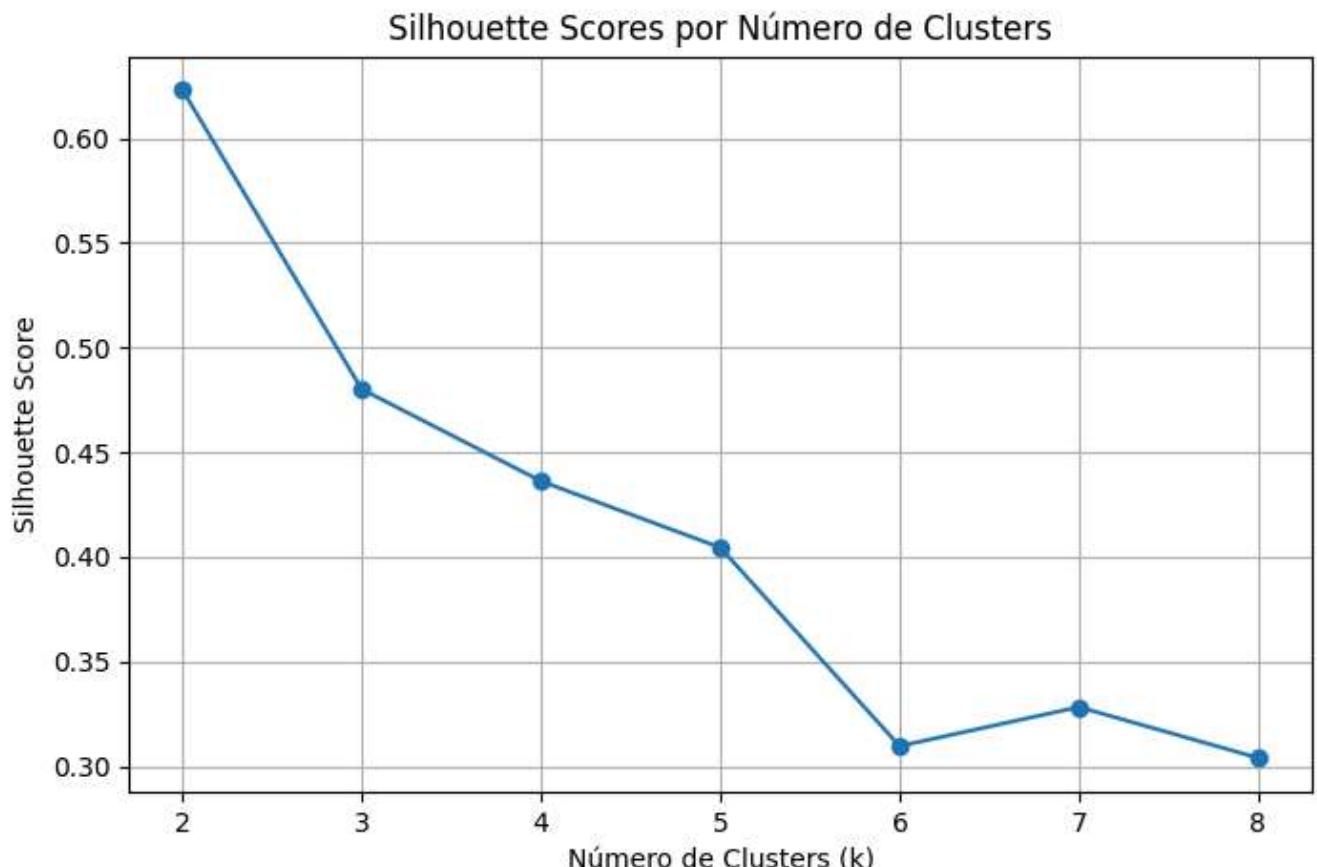
Avaliando Silhouette Score

```
In [116...]  
limit = int((Entrada.shape[0] // 2) ** 0.5)  
sil_scores = []  
k_range = range(2, limit+1)  
  
for k in k_range:  
    model = KMeans(n_clusters=k, random_state=42)  
    labels = model.fit_predict(Entrada)  
    score = silhouette_score(Entrada, labels)  
    sil_scores.append(score)  
    print(f"Silhouette Score k = {k}: {score:.3f}")
```

```
Silhouette Score k = 2: 0.623  
Silhouette Score k = 3: 0.480  
Silhouette Score k = 4: 0.436  
Silhouette Score k = 5: 0.404  
Silhouette Score k = 6: 0.310  
Silhouette Score k = 7: 0.328  
Silhouette Score k = 8: 0.304
```

Gráfico Silhouette:

```
In [117...]  
plt.figure(figsize=(8, 5))  
plt.plot(k_range, sil_scores, marker='o')  
plt.title("Silhouette Scores por Número de Clusters")  
plt.xlabel("Número de Clusters (k)")  
plt.ylabel("Silhouette Score")  
plt.grid(True)  
plt.show()
```



Avaliando o Elbow Method

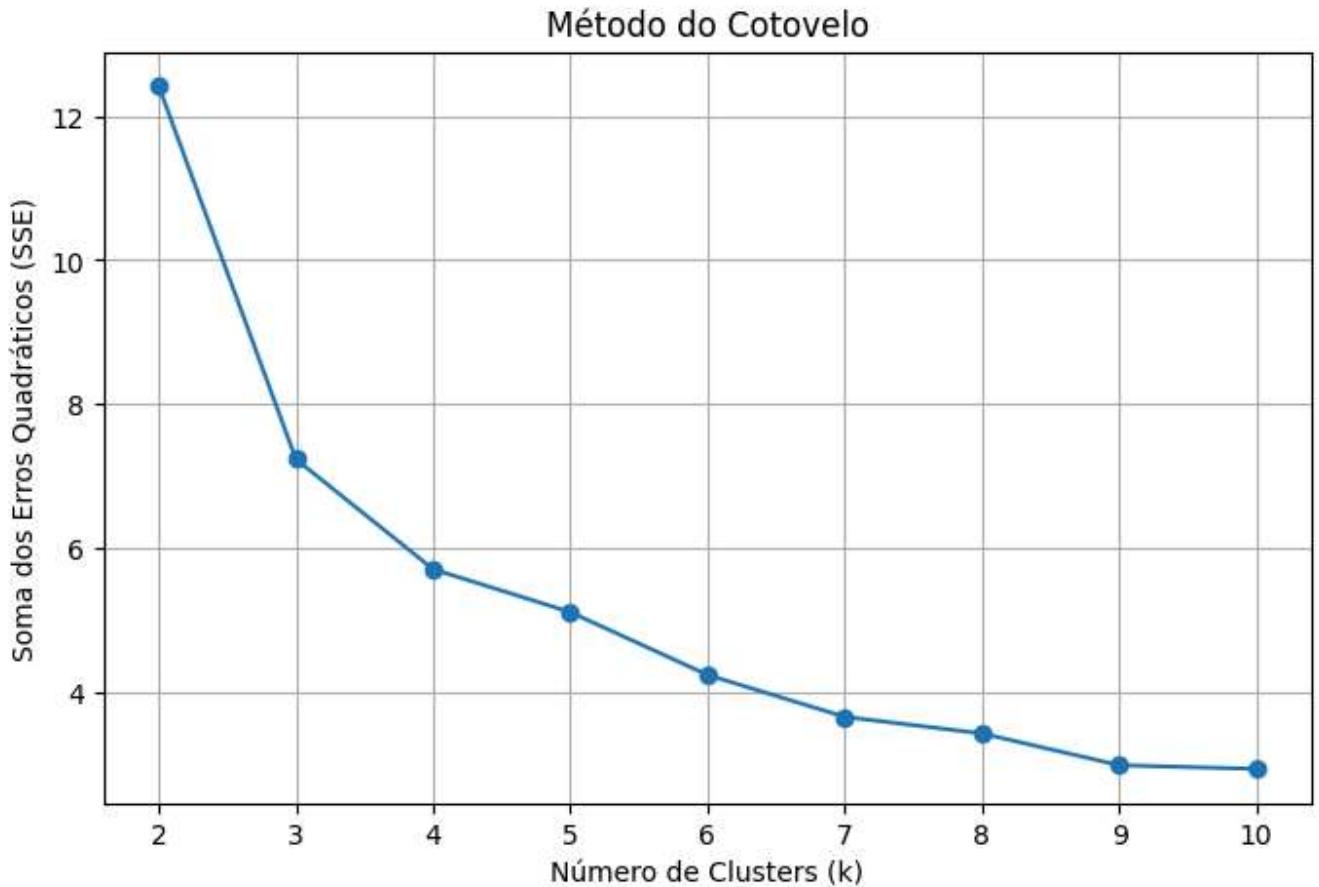
```
In [118...]
```

```
wcss = []
for k in range(2, 11):
    kmeans = KMeans(n_clusters=k, random_state=42)
    kmeans.fit(Entrada)
    wcss.append(kmeans.inertia_)
```

Gráfico Elbow

```
In [119...]
```

```
plt.figure(figsize=(8, 5))
plt.plot(range(2, 11), wcss, marker='o')
plt.title("Método do Cotovelo")
plt.xlabel("Número de Clusters (k)")
plt.ylabel("Soma dos Erros Quadráticos (SSE)")
plt.grid(True)
plt.show()
```



Localiza o cotovelo

```
In [120...]
```

```
kl = KneeLocator(range(2, 11), wcss, curve="convex", direction="decreasing")
k_optimo = int(kl.elbow)
print(f"Valor ótimo de k encontrado pelo método do cotovelo: {k_optimo}")
```

Valor ótimo de k encontrado pelo método do cotovelo: 4

Kmeans

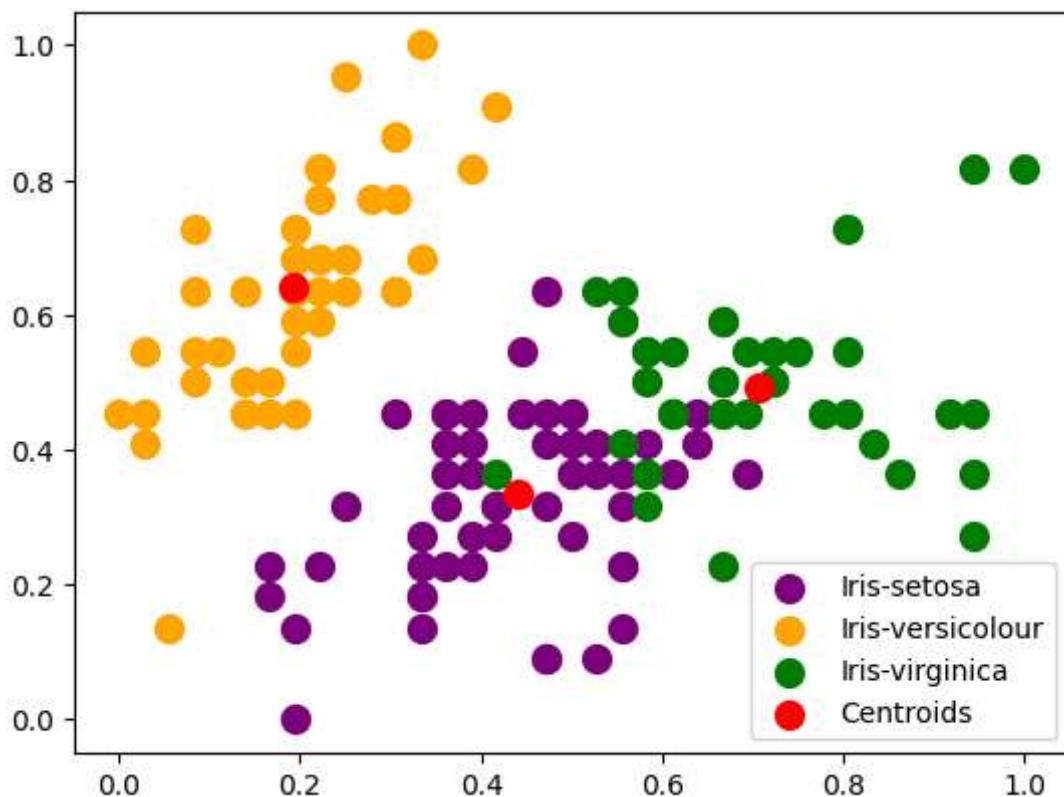
```
In [121...]
```

```
kmeans = KMeans(n_clusters=3, random_state=0)
saida_kmeans = kmeans.fit_predict(Entrada)
```

```
In [122...]
```

```
plt.scatter(Entrada[saida_kmeans == 0, 0], Entrada[saida_kmeans == 0, 1], s = 100, c = 'purple')
plt.scatter(Entrada[saida_kmeans == 1, 0], Entrada[saida_kmeans == 1, 1], s = 100, c = 'orange')
plt.scatter(Entrada[saida_kmeans == 2, 0], Entrada[saida_kmeans == 2, 1], s = 100, c = 'green')
plt.scatter(kmeans.cluster_centers_[:, 0], kmeans.cluster_centers_[:, 1], s = 100, c = 'red')
plt.legend()
```

Out[122... <matplotlib.legend.Legend at 0x7a9988991610>



Conclusão

Os resultados do Silhouette Score indicaram que o **agrupamento com 2 clusters teve a melhor separação** entre grupos, com um score de 0.623. Os valores com mais clusters apresentaram scores fracos ou não substanciais, indicando que 2 clusters é o melhor possível nesse caso.

Além disso, o método do cotovelo sugeriu que o valor ideal de clusters é **k = 4**, ponto em que a redução da soma dos erros quadráticos (SSE) deixa de ser significativa.

Dessa maneira, para equilibrar uma boa separação, coesão e menor overfitting, 3 ou 4 clusters seriam o ideal.

3. Investigando os hiperparâmetros do K-means

1. init : Método de inicialização dos centróides

Este parâmetro controla **como os centróides iniciais** são escolhidos, o que pode influenciar fortemente os resultados.

- `'k-means++'` (default):
Inicializa os centróides de forma inteligente, espalhando-os para melhorar a convergência e evitar más soluções locais.
 - Recomendado na maioria dos casos.
- `'random'` :
Escolhe centróides iniciais aleatoriamente, o que pode levar a soluções ruins, especialmente em bases grandes ou mal distribuídas.
 - Pode causar variações nos resultados entre execuções.

2. `n_init` : Número de inicializações

Define **quantas vezes o algoritmo será rodado com diferentes centróides iniciais**. O melhor resultado (com menor inércia) é mantido.

- Valor padrão até 2023 era `10` ; atualmente pode ser `'auto'` (inteligente).
 - Um valor mais alto reduz o risco de cair num **mínimo local ruim**, mas aumenta o tempo de processamento.
-

3. Distância usada (KMeans sempre usa Euclidiana)

O **KMeans tradicional** usa **somente a distância Euclidiana** para calcular a proximidade dos pontos aos centróides, por definição.

Outras distâncias:

- Distância **manhattan (L1), coseno**, etc., exigem variantes como:
 - `KMedoids` (do pacote `scikit-learn-extra`)
 - `DBSCAN` (suporta diversas distâncias)
 - `AgglomerativeClustering` (em clustering hierárquico)
-

4. `max_iter` : Número máximo de iterações

Número de iterações para o algoritmo convergir:

- Valor padrão: `300`
 - Se os dados forem complexos ou muitos clusters, aumentar isso evita parar cedo.
-

5. `tol` : Tolerância para convergência

Define o quanto os centróides podem mudar antes de o algoritmo considerar que "convergiu".

- Um valor muito pequeno pode levar a mais iterações, sem ganho significativo.
-

4. Explicação das Métricas: Silhouette Score e SSE

1. SSE (Sum of Squared Errors / Soma dos Erros Quadráticos)

É a métrica usada no **Elbow Method**.

Definição:

Para cada ponto no cluster, calcula a **distância ao centróide do cluster e eleva ao quadrado**. A soma total de todos os clusters define o erro total.

Fórmula:

$$\text{SSE} = \sum_{i=1}^k \sum_{x \in C_i} \|x - \mu_i\|^2$$

- k : número de clusters
- C_i : conjunto de pontos no cluster i
- μ_i : centróide do cluster i

- x : ponto no cluster
- $\|x - \mu_i\|^2$: distância euclidiana ao quadrado do ponto ao centróide

Interpretação:

Quanto menor o SSE, mais coesos são os clusters. Porém, à medida que k aumenta, o SSE sempre diminui — daí a utilidade do "**cotovelo**" para escolher um bom trade-off.

2. Silhouette Score

É uma métrica de **coerência interna e separação entre clusters**. Mede o quanto bem cada ponto está inserido no seu cluster comparado aos demais.

Fórmula:

$$s(i) = \frac{b(i) - a(i)}{\max\{a(i), b(i)\}}$$

- $a(i)$: distância média entre o ponto i e todos os outros pontos no **mesmo cluster**
- $b(i)$: menor distância média do ponto i a **outros clusters** (i.e., cluster mais próximo)
- $s(i)$ varia entre -1 e 1:
 - Perto de **1**: ponto bem agrupado
 - Perto de **0**: ponto entre clusters
 - Negativo: ponto agrupado no cluster errado

5. Métrica de avaliação diferente das 2 anteriores

Davies-Bouldin Index (DBI)

Definição:

O **DBI** mede a **semelhança entre clusters**, comparando **distância entre centróides e dispersão dentro de cada cluster**.

Fórmula:

$$\text{DBI} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \max_{j \neq i} \left(\frac{s_i + s_j}{d_{ij}} \right)$$

- k : número de clusters
- s_i : dispersão média do cluster i (distância média dos pontos ao centróide)
- d_{ij} : distância entre os centróides dos clusters i e j
- A fórmula busca o **pior caso (máximo)** de similaridade de i com qualquer outro cluster j

Interpretação:

- **Quanto menor, melhor** o agrupamento.
- Valores próximos de **0** indicam clusters bem separados e compactos.

In [123...]

```
from sklearn.metrics import davies_bouldin_score

for k in range(2, 12):
    model = KMeans(n_clusters=k, random_state=42)
    labels = model.fit_predict(Entrada)
    dbi = davies_bouldin_score(Entrada, labels)
    print(f"Davies-Bouldin Index k={k}: {dbi:.3f}")
```

```
Davies-Bouldin Index k=2: 0.495
Davies-Bouldin Index k=3: 0.786
Davies-Bouldin Index k=4: 0.888
Davies-Bouldin Index k=5: 0.973
Davies-Bouldin Index k=6: 1.011
Davies-Bouldin Index k=7: 1.087
Davies-Bouldin Index k=8: 1.110
Davies-Bouldin Index k=9: 1.012
Davies-Bouldin Index k=10: 1.019
Davies-Bouldin Index k=11: 1.009
```

6. Aplicar DBSCAN e SOM e comparar com KMeans

DBSCAN

Agrupamento baseado em densidade. Identifica regiões densas de pontos e marca como outliers os pontos isolados.

In [124...]

```
from sklearn.cluster import DBSCAN

dbscan = DBSCAN(eps=0.3, min_samples=5)
dbscan_labels = dbscan.fit_predict(Entrada)
# Número de clusters encontrados (desconsiderando rótulo -1, que é ruído)
n_clusters_dbscan = len(set(dbscan_labels)) - (1 if -1 in dbscan_labels else 0)

print(f"Número de clusters encontrados pelo DBSCAN: {n_clusters_dbscan}")
```

Número de clusters encontrados pelo DBSCAN: 2

SOM (Self-Organizing Maps)

Rede neural não supervisionada que projeta os dados em um mapa 2D e organiza por similaridade.

In [125...]

```
!pip install minisom

Requirement already satisfied: minisom in /usr/local/lib/python3.11/dist-packages (2.3.5)
```

In [126...]

```
from minisom import MiniSom

som = MiniSom(x=2, y=2, input_len=Entrada.shape[1], sigma=0.5, learning_rate=0.5)
som.train_random(Entrada, 100)
som_labels = np.array([som.winner(x) for x in Entrada])
unique_som_labels = np.unique(som_labels, axis=0)
som_n_clusters = len(unique_som_labels)

print(f"Número de clusters encontrados pelo SOM: {som_n_clusters}")
```

Número de clusters encontrados pelo SOM: 3

7. Mostrando as instâncias agrupadas incorretamente

In [127...]

```
from scipy.stats import mode
from sklearn.decomposition import PCA
from sklearn.metrics import accuracy_score
```

Separar as características e os rótulos reais

In [128...]

```
iris_data = df.iloc[:, 0:4].values
iris_target = df['class']
```

Normalizar os dados

```
In [129...]: scaler = MinMaxScaler()
iris_data = scaler.fit_transform(iris_data)
```

Aplicar K-Means com 3 clusters

```
In [130...]: kmeans = KMeans(n_clusters=3, random_state=0)
kmeans_labels = kmeans.fit_predict(Entrada)
```

Redução para visualização 2D

```
In [131...]: pca = PCA(n_components=2)
X_2d = pca.fit_transform(Entrada)
```

Mapear os rótulos previstos para as classes reais

```
In [132...]: unique_labels = np.unique(iris_target)
labels = np.zeros_like(kmeans_labels)
for i in range(3):
    mask = (kmeans_labels == i)
    labels[mask] = mode([np.where(unique_labels == y)[0][0] for y in iris_target[mask]])[0]
```

Calcular a acurácia

```
In [133...]: accuracy = accuracy_score([np.where(unique_labels == y)[0][0] for y in iris_target], labels)
print(f"Acurácia do K-Means em relação aos rótulos reais: {accuracy * 100:.2f}%")
```

Acurácia do K-Means em relação aos rótulos reais: 89.04%

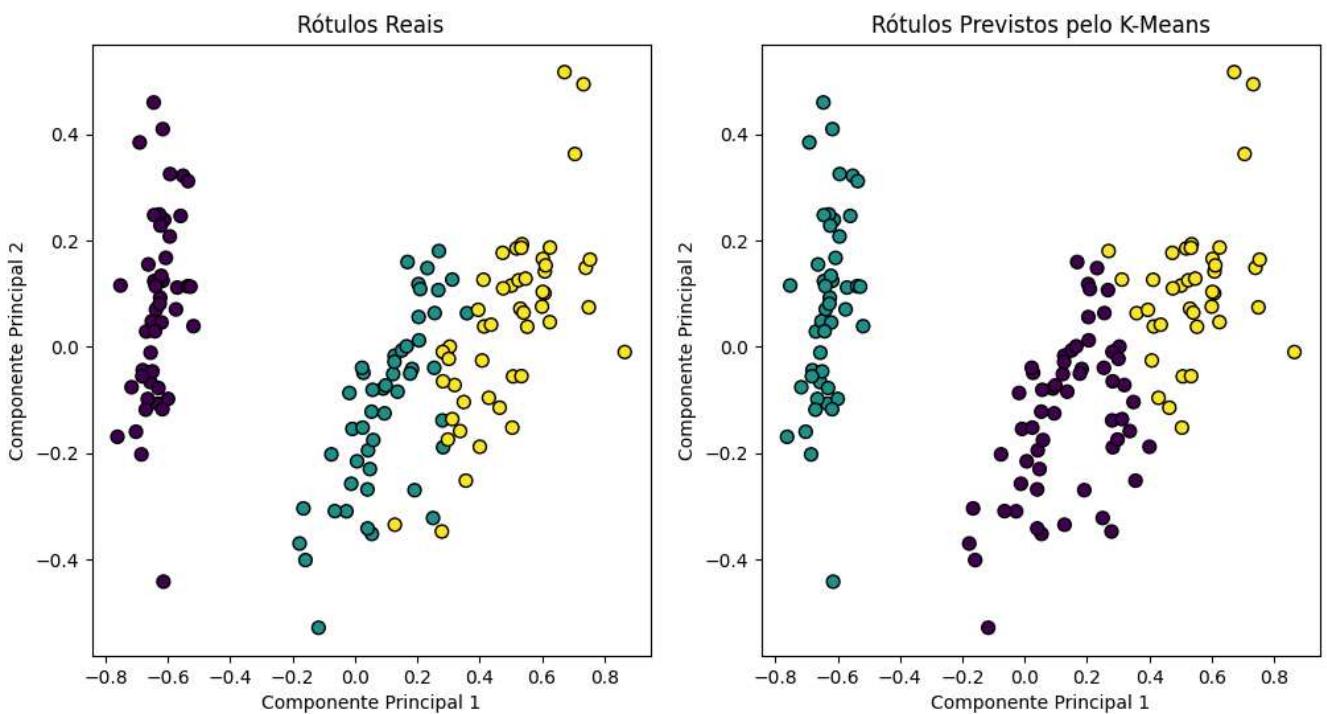
Visualizar os clusters e os rótulos reais

```
In [134...]: plt.figure(figsize=(12, 6))

# Plot com os rótulos reais
plt.subplot(1, 2, 1)
plt.scatter(X_2d[:, 0], X_2d[:, 1], c=[np.where(unique_labels == y)[0][0] for y in iris_target],
            cmap='viridis', edgecolor='k', s=50)
plt.title("Rótulos Reais")
plt.xlabel("Componente Principal 1")
plt.ylabel("Componente Principal 2")

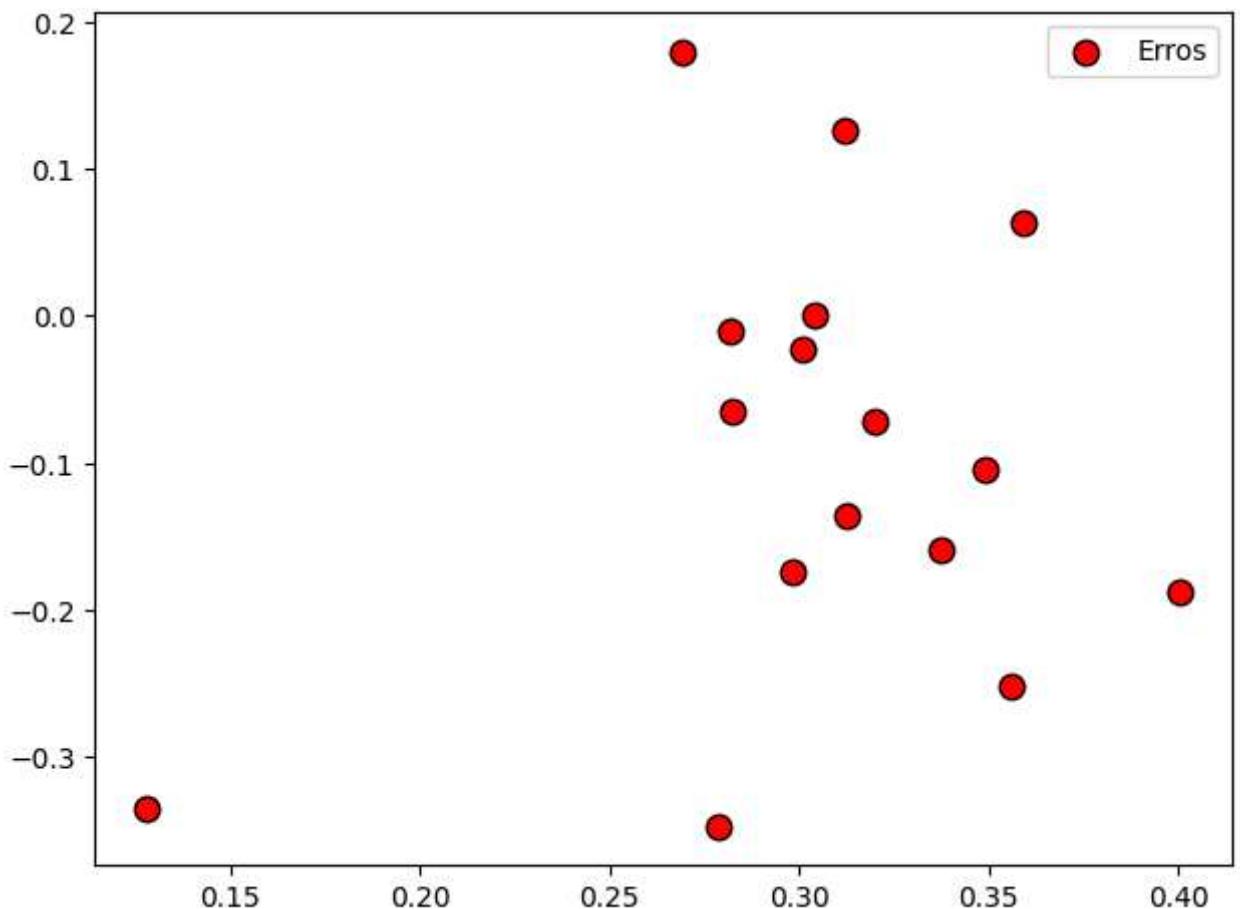
# Plot com os rótulos previstos pelo K-Means
plt.subplot(1, 2, 2)
plt.scatter(X_2d[:, 0], X_2d[:, 1], c=kmeans_labels, cmap='viridis', edgecolor='k', s=50)
plt.title("Rótulos Previstos pelo K-Means")
plt.xlabel("Componente Principal 1")
plt.ylabel("Componente Principal 2")
```

```
Out[134...]: Text(0, 0.5, 'Componente Principal 2')
```



Marcar as instâncias incorretamente classificadas

```
In [135...]  
incorrect = (labels != [np.where(unique_labels == y)[0][0] for y in iris_target])  
plt.scatter(X_2d[incorrect, 0], X_2d[incorrect, 1], color='red', edgecolor='k', s=80, label="Erros")  
plt.legend()  
plt.tight_layout()  
plt.show()
```



8. Relatório sobre as etapas de pré-processamento e resultados obtidos

1. Pré-processamento dos Dados

- **Base de dados utilizada:** Iris (disponível no `sklearn.datasets`)
- **Atributos utilizados:** Quatro atributos numéricos referentes às medidas de sépalas e pétalas.
- **Normalização:** Foi aplicada a técnica MinMaxScaler para escalonar os dados no intervalo [0, 1], uma etapa necessária para algoritmos baseados em distância como KMeans e DBSCAN.
- **Detectção e remoção de outliers:** Utilizou-se o método baseado no escore Z (z-score). Instâncias com valores absolutos superiores a 3 foram identificadas como outliers e removidas da base de dados.

2. Agrupamento com KMeans

- **Número ideal de clusters:** Avaliado por meio do método do cotovelo (Elbow Method), que indicou o valor ótimo de $k = 4$. Contudo, como a base contém três classes conhecidas, foi utilizada também a configuração $k = 3$.
- **Análise da qualidade do agrupamento:** Foi aplicada a métrica Silhouette Score, que apresentou os seguintes resultados:

```
k = 2: 0.623
k = 3: 0.480
k = 4: 0.436
```

- A escolha de $k = 3$ reflete melhor a estrutura real da base, considerando que existem três espécies de flores na base Iris (Setosa, Versicolor, Virginica).
- **Caracterização dos clusters:** O algoritmo foi capaz de identificar de forma clara a classe Setosa. Já as classes Versicolor e Virginica apresentaram maior sobreposição nos agrupamentos.

3. Conclusão

O algoritmo KMeans apresentou bom desempenho na base Iris, especialmente após a remoção de outliers e a normalização dos atributos. A aplicação de métricas como Silhouette Score, Elbow Method e Davies-Bouldin Index permitiu uma avaliação mais precisa da qualidade dos agrupamentos.

Os algoritmos alternativos DBSCAN e SOM mostraram resultados compatíveis, com o DBSCAN identificando ruídos e o SOM organizando os dados de forma topológica.

A comparação com as classes reais demonstrou que o agrupamento é capaz de refletir a estrutura da base, com destaque para a separação da classe Setosa. Pequenas confusões entre Virginica e Versicolor reforçam a complexidade da tarefa de agrupamento não supervisionado.
