Patrones K-Means en R

12/5/2022

- A01245418 Andrés Sarellano Acevedo
- A00829837 Axel Amós Hernández Cárdenas
- A01281371 Izel María Ávila Rodríguez
- A01383422 Melissa Elvia Salazar Carrillo
- A00573134 Macías Romero Jorge Humberto

1. Cargando el dataframe

```
setwd('C:/users/hplax/Desktop/ITESM/CuartoSemestre')
```

2. Filtra y pre-procesa tus datos de acuerdo a lo visto en clase

Matriz Escala

```
df1_data_scale <- scale(df1[,-1])
head(df1_data_scale)</pre>
```

```
Alcohol Malic.acid
                                     Ash Alcalinity.of.ash Magnesium
## [1,] 1.5143408 -0.56066822
                              0.2313998
                                                -1.1663032 1.90852151
## [2,] 0.2455968 -0.49800856 -0.8256672
                                                 -2.4838405 0.01809398
## [3,] 0.1963252 0.02117152
                              1.1062139
                                                 -0.2679823 0.08810981
## [4,] 1.6867914 -0.34583508
                               0.4865539
                                                 -0.8069748 0.92829983
## [5,] 0.2948684 0.22705328
                               1.8352256
                                                 0.4506745 1.27837900
  [6,] 1.4773871 -0.51591132 0.3043010
                                                -1.2860793 0.85828399
##
        Total.phenols Flavanoids Nonflavanoid.phenols Proanthocyanin
## [1,]
            0.8067217
                      1.0319081
                                           -0.6577078
                                                            1.2214385
## [2,]
            0.5670481 0.7315653
                                           -0.8184106
                                                           -0.5431887
## [3,]
            0.8067217 1.2121137
                                           -0.4970050
                                                            2.1299594
## [4,]
            2.4844372
                       1.4623994
                                            -0.9791134
                                                            1.0292513
## [5,]
            0.8067217
                      0.6614853
                                            0.2261576
                                                            0.4002753
  [6,]
            1.5576991
                      1.3622851
                                           -0.1755994
                                                            0.6623487
##
        Color.intensity
                               Hue OD280.OD315.of.diluted.wines
                                                                     Proline
## [1,]
              0.2510088
                         0.3611585
                                                       1.8427215
                                                                 1.01015939
## [2,]
                                                       1.1103172 0.96252635
             -0.2924962 0.4049085
              0.2682629 0.3174085
## [3,]
                                                      0.7863692
                                                                 1.39122370
## [4,]
              1.1827317 -0.4263410
                                                       1.1807407
                                                                  2.32800680
## [5,]
                                                      0.4483365 -0.03776747
             -0.3183774
                         0.3611585
## [6,]
              0.7298108 0.4049085
                                                      0.3356589 2.23274072
```

Observando los rangos de cada variable de la matriz escala

```
apply(df1_data_scale, 2, range)
                                   Ash Alcalinity.of.ash Magnesium Total.phenols
##
          Alcohol Malic.acid
                                                -2.663505 -2.082381
                                                                         -2.101318
## [1,] -2.427388 -1.428952 -3.668813
## [2,]
        2.253415
                    3.100446 3.147447
                                                 3.145637 4.359076
                                                                          2.532372
        Flavanoids Nonflavanoid.phenols Proanthocyanin Color.intensity
##
                                                                               Hue
## [1,]
         -1.691200
                              -1.862979
                                              -2.063214
                                                              -1.629691 -2.088840
## [2,]
          3.054216
                                2.395645
                                               3.475269
                                                               3.425768 3.292407
##
        OD280.OD315.of.diluted.wines
                                       Proline
## [1,]
                           -1.889723 -1.488987
## [2,]
                            1.955399 2.963114
```

Obtención de la matriz de distancias con el método Euclidean

```
df1_dist_mat = dist(df1_data_scale, method = "euclidean")
as.matrix(df2)[1:13,1:13]
```

```
##
         Alcohol Malic.acid Ash Alcalinity.of.ash Magnesium Total.phenols
    [1,]
##
           14.23
                        1.71 2.43
                                                15.6
                                                            127
                                                                          2.80
##
    [2,]
           13.20
                        1.78 2.14
                                                11.2
                                                            100
                                                                          2.65
                                                            101
##
   [3,]
           13.16
                        2.36 2.67
                                                18.6
                                                                          2.80
##
   [4,]
           14.37
                        1.95 2.50
                                                16.8
                                                            113
                                                                          3.85
   [5,]
           13.24
                                                                          2.80
##
                        2.59 2.87
                                                21.0
                                                            118
   [6,]
           14.20
##
                        1.76 2.45
                                                15.2
                                                            112
                                                                          3.27
##
   [7,]
           14.39
                        1.87 2.45
                                                14.6
                                                             96
                                                                          2.50
   [8,]
           14.06
                        2.15 2.61
                                                17.6
                                                            121
                                                                          2.60
##
   [9,]
           14.83
                        1.64 2.17
                                                14.0
                                                             97
                                                                          2.80
## [10,]
           13.86
                        1.35 2.27
                                                16.0
                                                             98
                                                                          2.98
## [11,]
           14.10
                        2.16 2.30
                                                18.0
                                                            105
                                                                          2.95
## [12,]
           14.12
                        1.48 2.32
                                                16.8
                                                             95
                                                                          2.20
                        1.73 2.41
                                                             89
## [13,]
           13.75
                                                16.0
                                                                          2.60
##
         Flavanoids Nonflavanoid.phenols Proanthocyanin Color.intensity Hue
##
   [1,]
               3.06
                                      0.28
                                                      2.29
                                                                       5.64 1.04
##
   [2,]
               2.76
                                      0.26
                                                      1.28
                                                                       4.38 1.05
##
   [3,]
                3.24
                                      0.30
                                                      2.81
                                                                       5.68 1.03
  [4,]
                                      0.24
##
               3.49
                                                      2.18
                                                                       7.80 0.86
##
  [5,]
               2.69
                                      0.39
                                                      1.82
                                                                       4.32 1.04
  [6,]
##
               3.39
                                      0.34
                                                      1.97
                                                                       6.75 1.05
##
   [7,]
                2.52
                                      0.30
                                                      1.98
                                                                       5.25 1.02
##
   [8,]
               2.51
                                      0.31
                                                      1.25
                                                                       5.05 1.06
   [9,]
                2.98
                                      0.29
                                                      1.98
                                                                       5.20 1.08
                                      0.22
## [10,]
                3.15
                                                      1.85
                                                                       7.22 1.01
                                                                       5.75 1.25
## [11,]
                3.32
                                      0.22
                                                      2.38
## [12,]
               2.43
                                      0.26
                                                      1.57
                                                                       5.00 1.17
## [13,]
                2.76
                                      0.29
                                                      1.81
                                                                       5.60 1.15
##
         OD280.OD315.of.diluted.wines Proline
##
   [1,]
                                   3.92
                                           1065
                                   3.40
                                           1050
##
  [2,]
```

##	[3,]	3.17	1185
##	[4,]	3.45	1480
##	[5,]	2.93	735
##	[6,]	2.85	1450
##	[7,]	3.58	1290
##	[8,]	3.58	1295
##	[9,]	2.85	1045
##	[10,]	3.55	1045
##	[11,]	3.17	1510
##	[12,]	2.82	1280
##	[13,]	2.90	1320

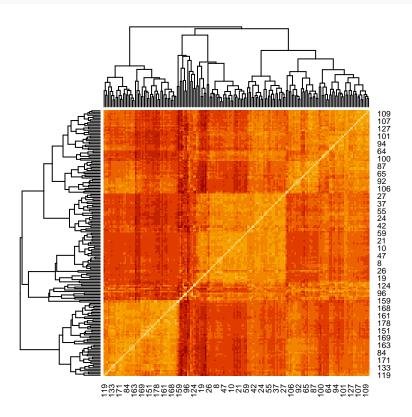
Dimensiones de la matriz de distancias

```
dim(as.matrix(df1_dist_mat))
```

[1] 178 178

Creando el Heatmap de la matriz de distancias

heatmap(as.matrix(df1_dist_mat))



Cambiando el nombre de las variables

```
rownames(df1_data_scale) = paste(df1$Cultivar, seq(1,100), sep="_Cultivo")
head(df1_data_scale)
##
                Alcohol Malic.acid
                                          Ash Alcalinity.of.ash Magnesium
                                                     -1.1663032 1.90852151
## 1_Cultivo1 1.5143408 -0.56066822 0.2313998
## 1_Cultivo2 0.2455968 -0.49800856 -0.8256672
                                                     -2.4838405 0.01809398
## 1_Cultivo3 0.1963252 0.02117152 1.1062139
                                                     -0.2679823 0.08810981
## 1 Cultivo4 1.6867914 -0.34583508 0.4865539
                                                     -0.8069748 0.92829983
## 1_Cultivo5 0.2948684 0.22705328 1.8352256
                                                      0.4506745 1.27837900
## 1_Cultivo6 1.4773871 -0.51591132 0.3043010
                                                     -1.2860793 0.85828399
##
             Total.phenols Flavanoids Nonflavanoid.phenols Proanthocyanin
                 0.8067217 1.0319081
## 1_Cultivo1
                                                -0.6577078
                                                                1.2214385
## 1_Cultivo2
                 0.5670481 0.7315653
                                                -0.8184106
                                                               -0.5431887
## 1 Cultivo3
                 0.8067217 1.2121137
                                                -0.4970050
                                                                2.1299594
## 1_Cultivo4
                 2.4844372 1.4623994
                                                -0.9791134
                                                                1.0292513
## 1_Cultivo5
                 0.8067217 0.6614853
                                                 0.2261576
                                                                0.4002753
## 1_Cultivo6
                 1.5576991 1.3622851
                                                -0.1755994
                                                                0.6623487
##
             Color.intensity
                                    Hue OD280.OD315.of.diluted.wines
                                                                         Proline
## 1_Cultivo1
                   0.2510088 0.3611585
                                                           1.8427215 1.01015939
## 1_Cultivo2
                   -0.2924962 0.4049085
                                                           1.1103172 0.96252635
## 1_Cultivo3
                   0.2682629 0.3174085
                                                           0.7863692 1.39122370
## 1_Cultivo4
                   1.1827317 -0.4263410
                                                           1.1807407 2.32800680
## 1_Cultivo5
                   -0.3183774 0.3611585
                                                           0.4483365 -0.03776747
## 1_Cultivo6
                   0.7298108 0.4049085
                                                           0.3356589 2.23274072
```

Mostrando en forma de matriz el mapa de calor con el metodo de euclidian

```
df1_dist_mat = dist(df1_data_scale, method="euclidian")
as.matrix(df1_dist_mat)[1:5,1:5]
##
             1_Cultivo1 1_Cultivo2 1_Cultivo3 1_Cultivo4 1_Cultivo5
## 1_Cultivo1
               0.000000
                         3.487697
                                    3.018094
                                              2.834509
                                                         3.556821
## 1 Cultivo2
               3.487697
                         0.000000 4.131258
                                              4.348349
                                                        4.614454
## 1_Cultivo3
             3.018094
                         4.131258 0.000000
                                              3.237354 2.972721
                         4.348349 3.237354
## 1_Cultivo4
               2.834509
                                              0.000000
                                                         4.483310
## 1_Cultivo5
               3.556821
                         4.614454
                                    2.972721
                                               4.483310
                                                         0.000000
```

Creación de los hclust

```
hclust(df1_dist_mat, method = "ward.D2")

##

## Call:
## hclust(d = df1_dist_mat, method = "ward.D2")

##

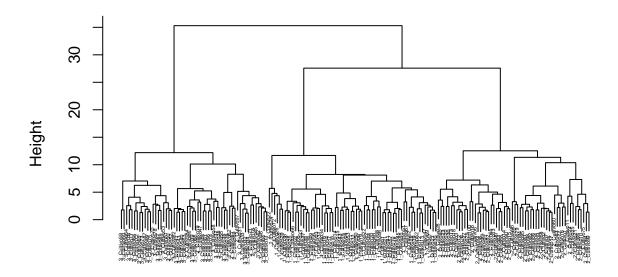
## Cluster method : ward.D2

## Distance : euclidean
## Number of objects: 178
```

Grafica de Dendograma

```
plot(hclust(df1_dist_mat, method = "ward.D2"), cex=0.3)
```

Cluster Dendrogram

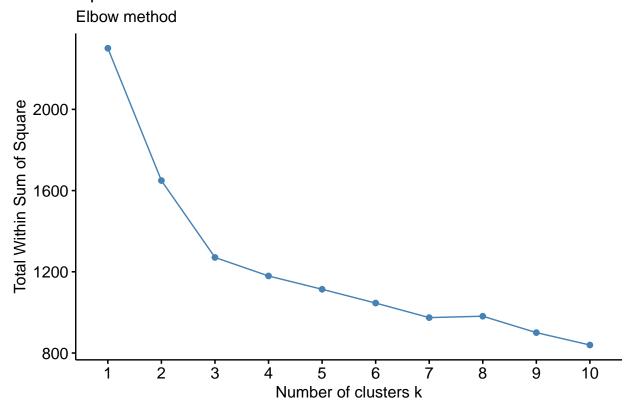


df1_dist_mat hclust (*, "ward.D2")

Gráfica del Metodo de Elbow

fviz_nbclust(df1_data_scale, kmeans, method="wss")+labs(subtitle = "Elbow method")

Optimal number of clusters



Se puede obtener que para el kmeans, center = 3 y nstart = 1300 aproximadamente.

Obtencion del K-means

```
km.out = kmeans(df1_data_scale, center=3, nstart=1300)
km.out
## K-means clustering with 3 clusters of sizes 51, 62, 65
##
## Cluster means:
                                   Ash Alcalinity.of.ash
##
        Alcohol Malic.acid
                                                           Magnesium Total.phenols
     0.1644436 0.8690954
                                               0.5228924 -0.07526047
                                                                        -0.97657548
##
                            0.1863726
##
     0.8328826 -0.3029551 0.3636801
                                              -0.6084749
                                                          0.57596208
                                                                         0.88274724
## 3 -0.9234669 -0.3929331 -0.4931257
                                               0.1701220 -0.49032869
                                                                        -0.07576891
      Flavanoids Nonflavanoid.phenols Proanthocyanin Color.intensity
##
                                                                              Hue
## 1 -1.21182921
                           0.72402116
                                          -0.77751312
                                                            0.9388902 -1.1615122
## 2
     0.97506900
                          -0.56050853
                                           0.57865427
                                                            0.1705823
                                                                        0.4726504
     0.02075402
                          -0.03343924
                                           0.05810161
                                                           -0.8993770
                                                                        0.4605046
     OD280.OD315.of.diluted.wines
##
                                      Proline
## 1
                       -1.2887761 -0.4059428
## 2
                        0.7770551
                                  1.1220202
## 3
                        0.2700025 -0.7517257
##
## Clustering vector:
```

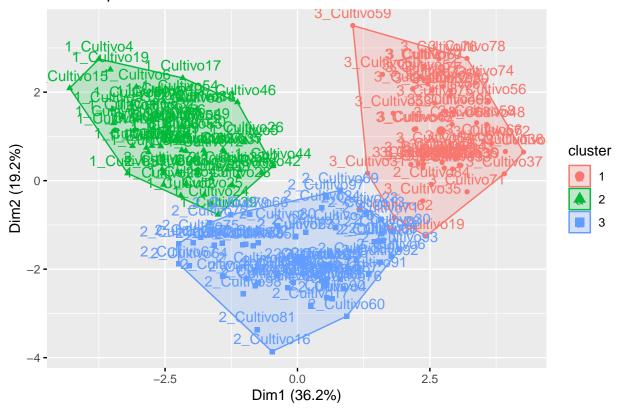
```
1 Cultivo1
                   1 Cultivo2
                                1 Cultivo3
                                              1_Cultivo4
                                                            1_Cultivo5
                                                                          1 Cultivo6
##
##
     1 Cultivo7
                   1 Cultivo8
                                1_Cultivo9
                                             1_Cultivo10 1_Cultivo11
                                                                         1 Cultivo12
##
##
##
    1_Cultivo13
                  1_Cultivo14
                               1_Cultivo15
                                             1_Cultivo16
                                                           1_Cultivo17
##
    1_Cultivo19
                  1 Cultivo20
                               1_Cultivo21
                                             1_Cultivo22
                                                           1_Cultivo23
##
                                                                         1 Cultivo24
##
##
    1_Cultivo25
                 1_Cultivo26
                               1_Cultivo27
                                             1_Cultivo28
                                                           1_Cultivo29
                                                                         1_Cultivo30
##
##
    1_Cultivo31
                 1_Cultivo32
                               1_Cultivo33
                                             1_Cultivo34
                                                           1_Cultivo35
                                                                         1_Cultivo36
##
                                             1_Cultivo40
##
    1_Cultivo37
                 1_Cultivo38
                               1_Cultivo39
                                                           1_Cultivo41
                                                                         1_Cultivo42
##
    1_Cultivo43
                  1_{Cultivo44}
                               1_Cultivo45
                                             1_Cultivo46
                                                           1_Cultivo47
##
                                                                         1_Cultivo48
##
                  1_Cultivo50
                               1_Cultivo51
                                             1_Cultivo52
                                                           1_Cultivo53
                                                                         1_Cultivo54
##
    1_Cultivo49
##
                 1_Cultivo56
                               1_Cultivo57
                                             1_Cultivo58
                                                          1_Cultivo59
                                                                         2 Cultivo60
##
    1_Cultivo55
##
##
    2_Cultivo61
                 2_Cultivo62
                               2_Cultivo63
                                             2_Cultivo64
                                                           2_Cultivo65
                                                                         2_Cultivo66
##
                                             2_{\text{Cultivo}70}
                 2_Cultivo68
                               2_Cultivo69
                                                           2_Cultivo71
##
    2 Cultivo67
                                                                         2 Cultivo72
##
                 2_{\text{Cultivo}}74
                               2_Cultivo75
                                             2_Cultivo76
                                                           2_Cultivo77
                                                                         2 Cultivo78
##
    2 Cultivo73
##
##
    2_Cultivo79
                 2_Cultivo80
                               2_Cultivo81
                                             2_Cultivo82
                                                           2_Cultivo83
                                                                         2_Cultivo84
##
                                             2_Cultivo88
                                                           2_Cultivo89
##
    2_Cultivo85
                  2_Cultivo86
                               2_Cultivo87
                                                                         2_Cultivo90
##
                                             {\tt 2\_Cultivo94}
##
    2_Cultivo91
                  2_Cultivo92
                               2_Cultivo93
                                                           2_Cultivo95
                                                                         2_Cultivo96
##
                  2_Cultivo98
                               2_Cultivo99 2_Cultivo100
##
    2_Cultivo97
                                                            2_Cultivo1
                                                                          2_Cultivo2
##
##
     2 Cultivo3
                  2_Cultivo4
                                2_Cultivo5
                                              2_Cultivo6
                                                            2_Cultivo7
                                                                          2 Cultivo8
##
##
     2 Cultivo9
                  2 Cultivo10
                               2_Cultivo11
                                             2_Cultivo12
                                                           2_Cultivo13
                                                                         2 Cultivo14
##
                 2_Cultivo16
                               2_Cultivo17
                                             2_Cultivo18
                                                           2_Cultivo19
                                                                         2 Cultivo20
##
    2_Cultivo15
##
    2_Cultivo21
                 2 Cultivo22
                               2 Cultivo23
                                             2 Cultivo24
                                                           2 Cultivo25
                                                                         2 Cultivo26
##
##
    2 Cultivo27
                 2 Cultivo28
                               2_Cultivo29
                                             2_Cultivo30
                                                           3 Cultivo31
##
                                                                         3 Cultivo32
##
                 3_{\text{Cultivo}34}
                               3_Cultivo35
                                             3_{Cultivo36}
                                                           3_Cultivo37
##
    3_Cultivo33
                                                                         3_Cultivo38
##
                 3_Cultivo40 3_Cultivo41
                                             3_Cultivo42
                                                           3\_Cultivo43
##
    3_Cultivo39
                                                                         3_Cultivo44
##
##
    3_Cultivo45 3_Cultivo46 3_Cultivo47 3_Cultivo48 3_Cultivo49
                                                                         3_Cultivo50
##
    3_Cultivo51 3_Cultivo52 3_Cultivo53
                                            3_Cultivo54 3_Cultivo55
##
                                                                        3_Cultivo56
##
##
    3_Cultivo57 3_Cultivo58 3_Cultivo59 3_Cultivo60 3_Cultivo61 3_Cultivo62
##
```

```
3_Cultivo63 3_Cultivo64 3_Cultivo65 3_Cultivo66 3_Cultivo67 3_Cultivo68
##
                              3_Cultivo71
                                           3_Cultivo72
                                                        3_Cultivo73
                                                                      3 Cultivo74
##
    3_Cultivo69
                 3_Cultivo70
##
##
    3_Cultivo75
                 3_Cultivo76
                              3_Cultivo77
                                           3_Cultivo78
##
##
## Within cluster sum of squares by cluster:
   [1] 326.3537 385.6983 558.6971
    (between_SS / total_SS = 44.8 %)
##
## Available components:
## [1] "cluster"
                      "centers"
                                      "totss"
                                                     "withinss"
                                                                    "tot.withinss"
## [6] "betweenss"
                      "size"
                                      "iter"
                                                     "ifault"
```

Gráfica de clusters a partir del K-means

```
km.clusters = km.out$cluster
fviz_cluster(list(data=df1_data_scale, cluster=km.clusters))
```

Cluster plot



Preguntas

1. ¿Por qué es necesario escalar los datos?

Es imprescindible escalar los datos ya que cuando se realiza esta acción se normalizan (comprimen o extender valores de la variable para que esté en un rango definido) los datos de forma que no se dé prioridad a una característica concreta. El escalado es muy importante en los algoritmos basados en la distancia.

2. ¿Qué información nos da la gráfica "Elbow plot"?

Esta gráfica nos muestra la cantidad de clusters que serán generados con los datos de nuestra base de datos, por lo que para poder generar nuestro valor de kmeans, gracias al punto de inflexión que nuestra función en la gráfica de codo proporciona, podemos concluir que nuestro valor k que será la entrada de la función de kmeans para generar las agrupaciones, será de 3 clusters, y la cantidad de agrupaciones aleatorias será alrededor de 1300 agrupaciones.

3. Basándote en las matrices de similitud obtenidas, cuáles pares de datos son los más parecidos? ¿Cuáles son los más diferentes? ¿Salen los mismos pares (más parecidos y más diferentes) utilizando otra métrica de distancia?

Omitiendo los datos con valor de 0.0, el dato más cercano (parecido) a cero cuenta con un valor de 1.16084, mientras que el más alejado (diferente) tiene un valor de 2.212 (maximo valor permitido por el print de la consola). Tomando en cuenta que el heatmap tambien puede representar una matriz de similitud, se puede observar que la mayoría de los datos muestran una diferencia entre si.

Por otra parte, es posible que realizar otro método de distancia, como lo es el método de Manhattan, arroje diferentes valores de distancia entre los puntos, haciendolos más parecidos o más diferentes comparandolo con el metodo Euclidian.

4. ¿Hay datos atípicos?

En la gráfica de cluster no se pueden observar datos atípicos. Sin embargo, si se encuentran datos muy alejado de las agrupaciones centrales de cada clusters, sin embargo, estas aun delimitan al cluster por lo que no se considerarán atipicos.

5. ¿Crees que tus resultados serían diferentes si eliminamos variables?

Dependiendo de qué variables sean si pueden cambiar hasta un cierto punto el resultado, ya que independientemente de cuál variable se remueva va afectar en clustering porque se van a agrupar menos datos y hay que tener cuidado en que tantas variables también removemos porque si tenemos una muestra con pocas variables no hay mucho que se va a poder analizar. Pero intenté remover dos variables y no cambió tanto en total sum of clusters solo en la suma y el mapa de calor con las matrices si cambió mucho.

6. ¿Qué es el clustering jerárquico?

El Clustering Jerárquico va agrupando de poco en poco dependiendo de la distancia entre cada uno de los datos y buscando que los clústers sean los más similares entre sí. La representación es a través de un dendrograma. Lo malo de este tipo de mapa es que no son buenos para grandes cantidades de datos y lo más importante es la medición de la distancia entre datos. (Duk2, 2019)

Referencia

Duk2. (2019). Algoritmos de data mining para agrupar datos – Clustering Jerárquico. ESTRATEGIAS DE TRADING. https://estrategiastrading.com/clustering-jerarquico/