UNIVERSIDAD ORT
Uruguay

O B L I G A T O R I O

Machine Learning No Supervisado

Lic. En Gerencia y Administración
Docente: Ec. Damian Coltzau

Pioli Gastón – N° 166371
Machado Cecilia – N° 213640
Silveyra Andrés – N° 207336

Fecha de entrega: 18 de Noviembre de 2020

Índice

1 – Introducción

1.1 - Descripción de la base de datos.

La base de datos utilizada en la elaboración del siguiente informe se denomina "*pandemia.csv*". Dicha muestra contiene información sobre factores médicos de 2000 individuos. Dichos factores se encuentran representados en 6 dimensiones. Estas son:

- *Hemoglobina*: proteína encargada de transportar el oxígeno a través de la sangre.
- *Glúcidos: representa la concentración de azúcar en sangre*.
- *Temperatura:* temperatura corporal del individuo.
- *LDL:* indica el nivel de una lipoproteína (low density lipoprotein) encargada de transportar el colesterol en sangre.
- Ondas: actividad eléctrica producida por el cerebro
- *Defensas:* conjunto de elementos y procesos biológicos en el organismo que permite mantener la homeóstasis frente a agresiones externas.

2 – Objetivo

El objetivo del presente informe será detectar potenciales portadores de un virus para aislarlos y efectuar sobre los mismos mediciones adicionales, utilizando esta herramienta como clasificador para nuevos individuos, contenidos en la base "nuevos.csv" .

3 – Análisis

3.1 - Análisis descriptivo.

3.1.1 Medidas de tendencia y separación de las variables:

```
> summary(p)
  hemoglobina          glucidos          temperatura
 Min.   :-2.99658   Min.   :-3.063539   Min.   :-2.72951
 1st Qu.:-1.56521   1st Qu.:-0.626107   1st Qu.:-0.85385
 Median :-0.08857   Median :-0.000158   Median : 0.09788
 Mean   :-0.03694   Mean   : 0.000000   Mean   : 0.00000
 3rd Qu.: 1.58631   3rd Qu.: 0.606732   3rd Qu.: 0.78608
 Max.   : 2.99918   Max.   : 4.754172   Max.   : 2.71040
      ldl                ondas             defensas
 Min.   :-2.99637   Min.   :-3.1575   Min.   :-3.9357
 1st Qu.:-1.55462   1st Qu.:-0.4027   1st Qu.:-0.3022
 Median :-0.10725   Median : 0.2499   Median : 0.3575
 Mean   :-0.02952   Mean   : 0.0000   Mean   : 0.0000
 3rd Qu.: 1.52569   3rd Qu.: 0.6914   3rd Qu.: 0.6271
 Max.   : 2.99958   Max.   : 1.9858   Max.   : 1.5662
```

3.1.2 - Verificación de normalización de la base de datos

```
> colMeans(p)
  hemoglobina      glucidos   temperatura           ldl         ondas      defensas
-3.694214e-02  1.657355e-17 -6.784634e-17 -2.951730e-02  3.882311e-17 -4.042123e-17

> apply(p, 2, var)
hemoglobina     glucidos temperatura           ldl         ondas      defensas
   3.149679     1.000000    1.000000      3.078947      1.000000      1.000000
```

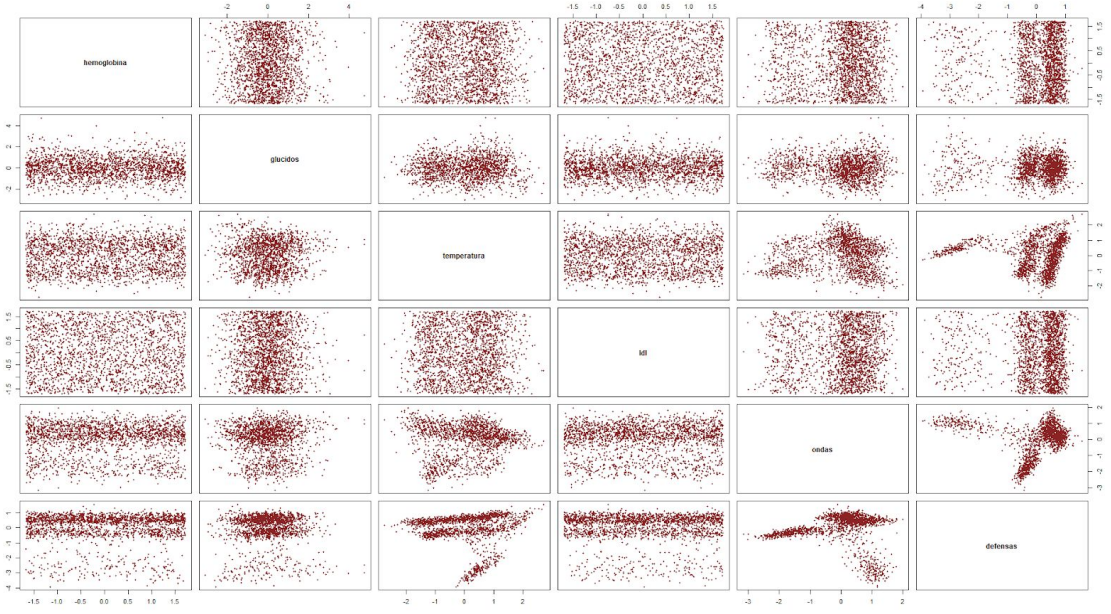
De los datos obtenidos podemos observar que existen dimensiones sin normalizar (hemoglobina y ldl), por lo que procedemos a escalarlos para poder proceder con nuestro análisis. Los siguientes datos confirman la normalización:

```
> colMeans(pscaled)
  hemoglobina      glucidos   temperatura           ldl         ondas      defensas
 1.383832e-17  1.158275e-17 -1.473778e-17  1.385762e-17  2.113761e-17 -1.831608e-17

> apply(pscaled, 2, var)
hemoglobina     glucidos temperatura           ldl         ondas      defensas
          1            1           1             1             1             1
```

3.2 - Representación gráfica de la estructura

Una vez normalizados los datos, procedemos a realizar un análisis visual de manera de verificar la existencia de relación y estructura entre las dimensiones:



Observamos cierta estructura entre algunas de las dimensiones. Las que muestran una correlación más evidente son: “ondas” y “defensas” con respecto a las demás.

Asimismo se pueden apreciar dimensiones que no presentan estructura, tendiendo incluso a la uniformidad por lo que consideramos pertinente eliminar algunas de ellas mediante la aplicación del Modelo de Hopkins.

3.3 - Selección de variables.

Comenzamos analizando el valor del **estadístico de Hopkins** incluyendo todas las dimensiones de la base de datos; su valor es: 0.7289176. Se muestra a continuación su representación gráfica donde se puede apreciar la falta de estructura:

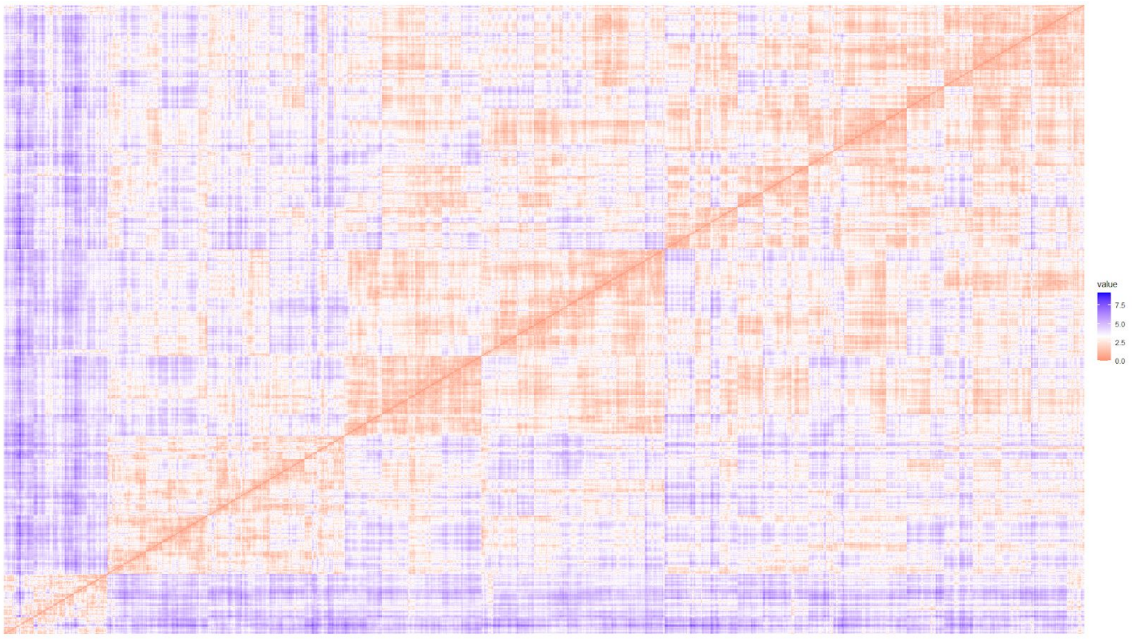


Gráfico: VAT de la base de datos con todas sus dimensiones.

Mediante un proceso iterativo obtenemos el valor del estadístico extrayendo de a una dimensión a la vez. De esta forma conservaremos las dimensiones que maximicen dicho coeficiente, lo cual garantiza eliminar las que no aporten valor a la estructura.

Tras la primera iteración observamos que eliminando la dimensión 4 (Ldl) el estadístico de Hopkins asciende a: 0.8003483. Obteniendo así el siguiente gráfico:

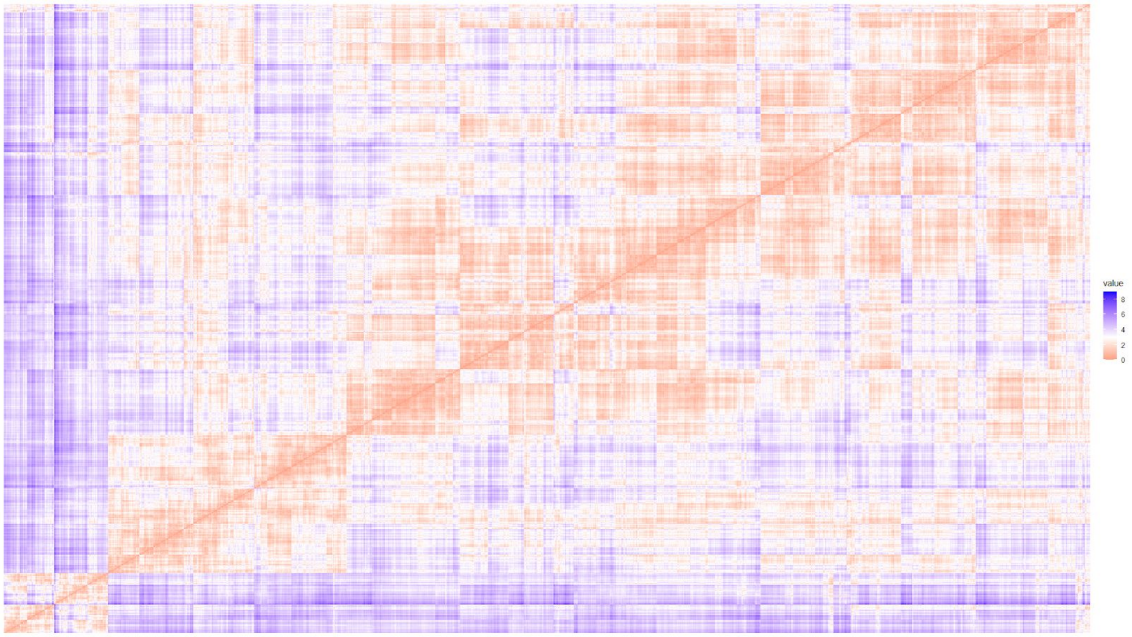


Gráfico: VAT de la base de datos quitando la dimensión ldl (4).

A continuación removemos la dimensión 1 (Hemoglobina) arrojando un resultado de: 0.8503175.

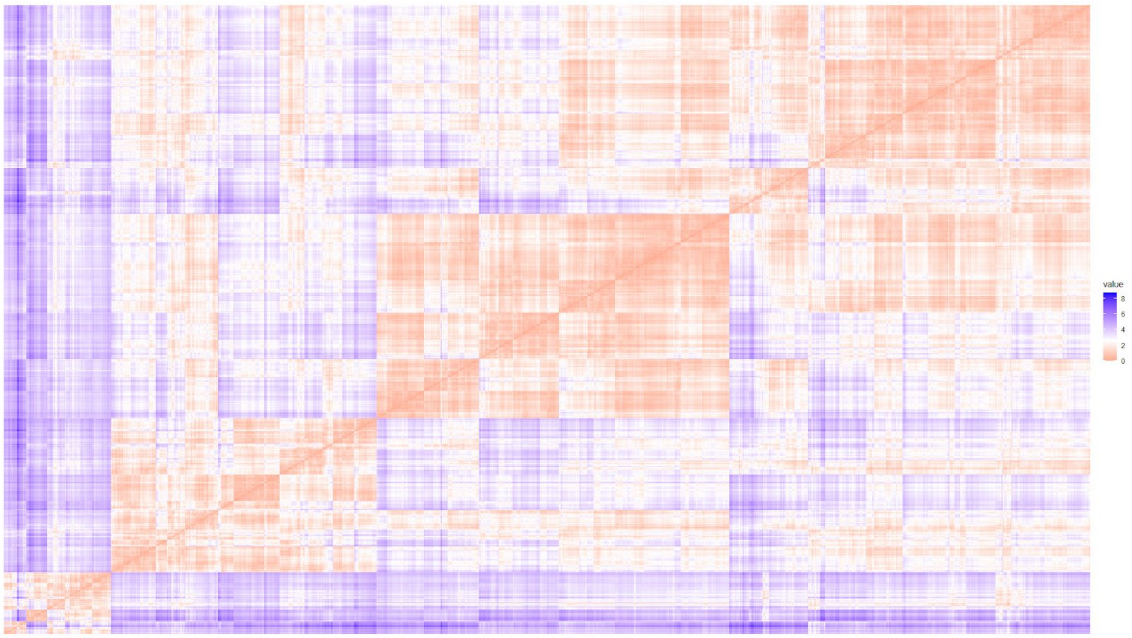


Gráfico: VAT de la base de datos quitando la dimensión ldl (4) y hemoglobina (1).

Posteriormente pasamos a remover la dimensión 2 (Glúcidos) obteniendo un estadístico de: 0.9166725.

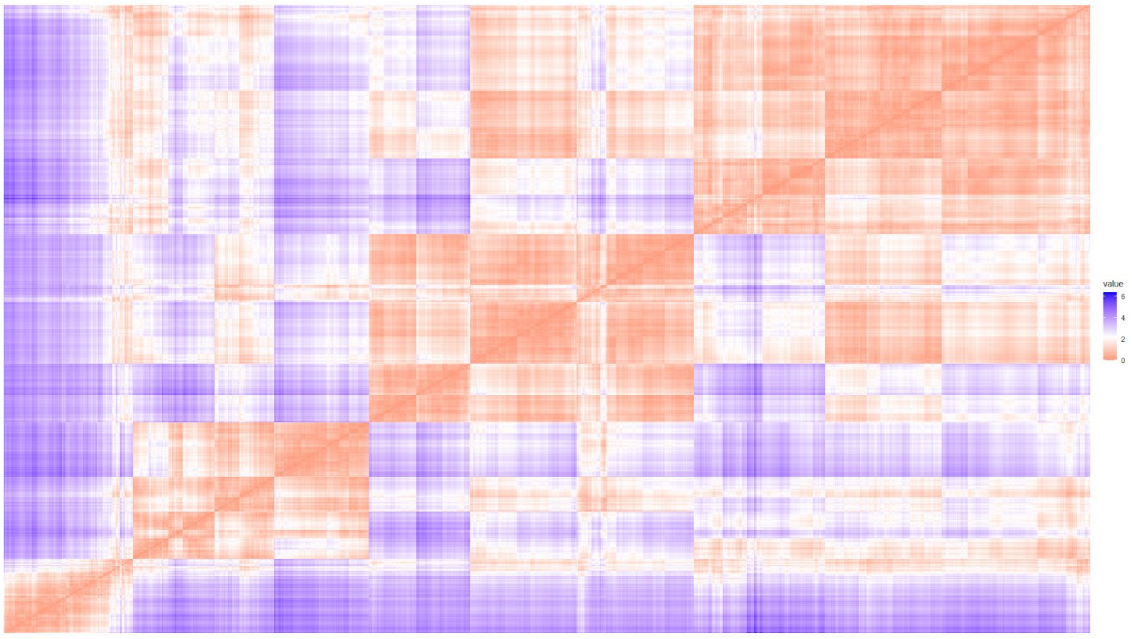


Gráfico: VAT de la base de datos quitando la dimensión ldl (4), hemoglobina (1) y glúcidos (2).

Finalmente quitamos la dimensión 3 (temperatura) lo que nos da un resultado del estadístico de Hopkins de: 0.9566463. De esta manera las dimensiones resultantes son la 5 y la 6 correspondientes a “Ondas” y “Defensas” respectivamente.

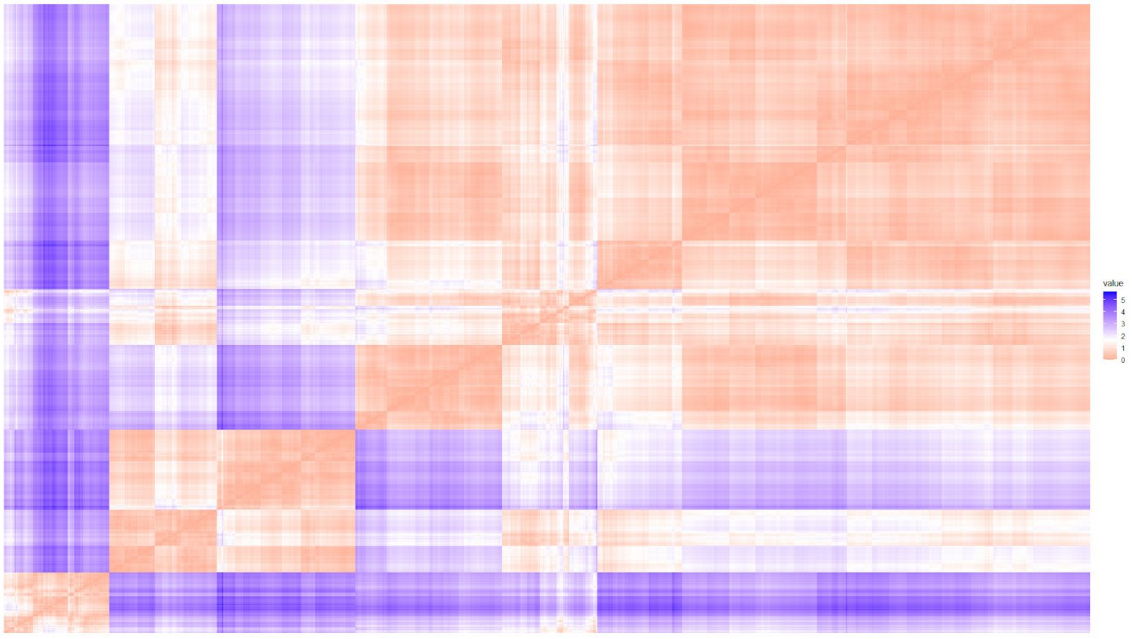
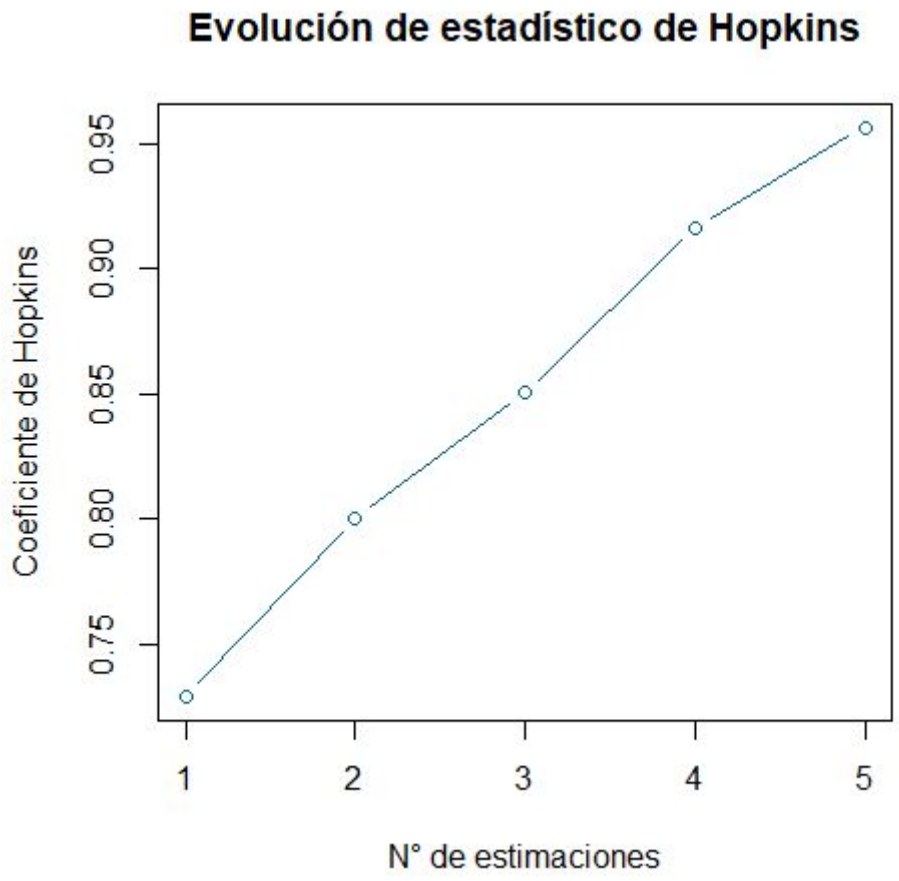


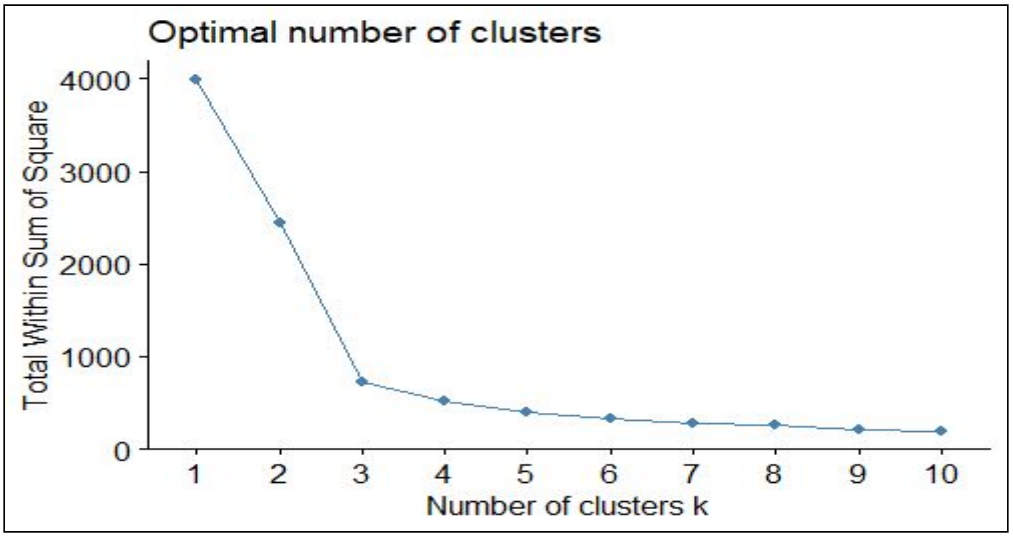
Gráfico: VAT de la base de datos quitando la dimensión ldl (4), hemoglobina (1), glúcidos (2), y temperatura (3).

Podemos observar en el siguiente gráfico la evolución favorable del estadístico de Hopkins a medida que se van removiendo dimensiones:

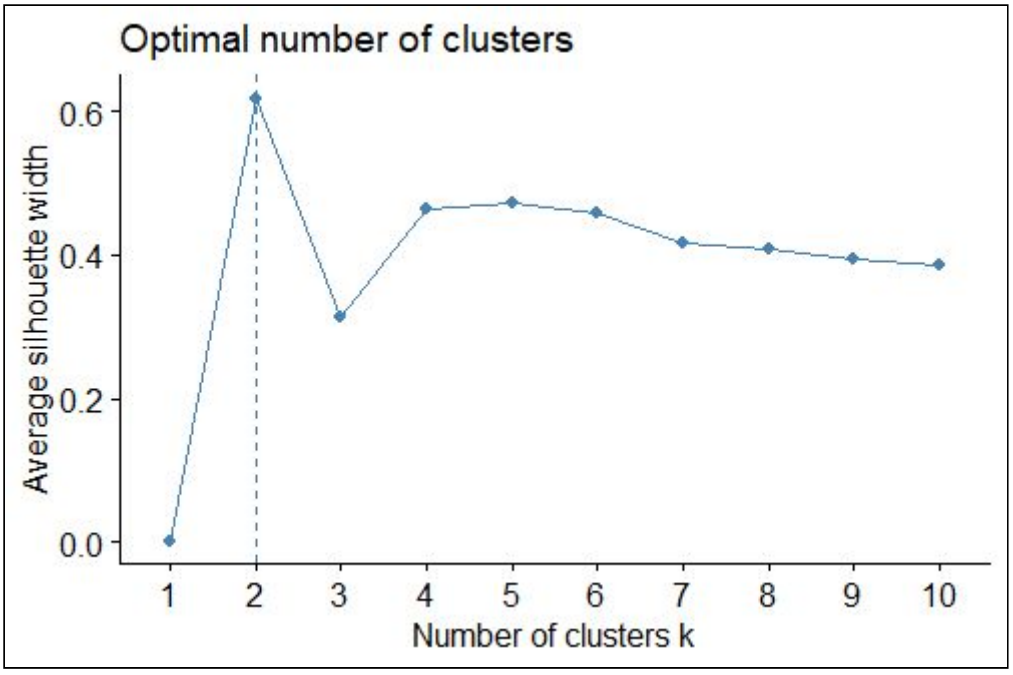


3.4. Validación de Clustering.

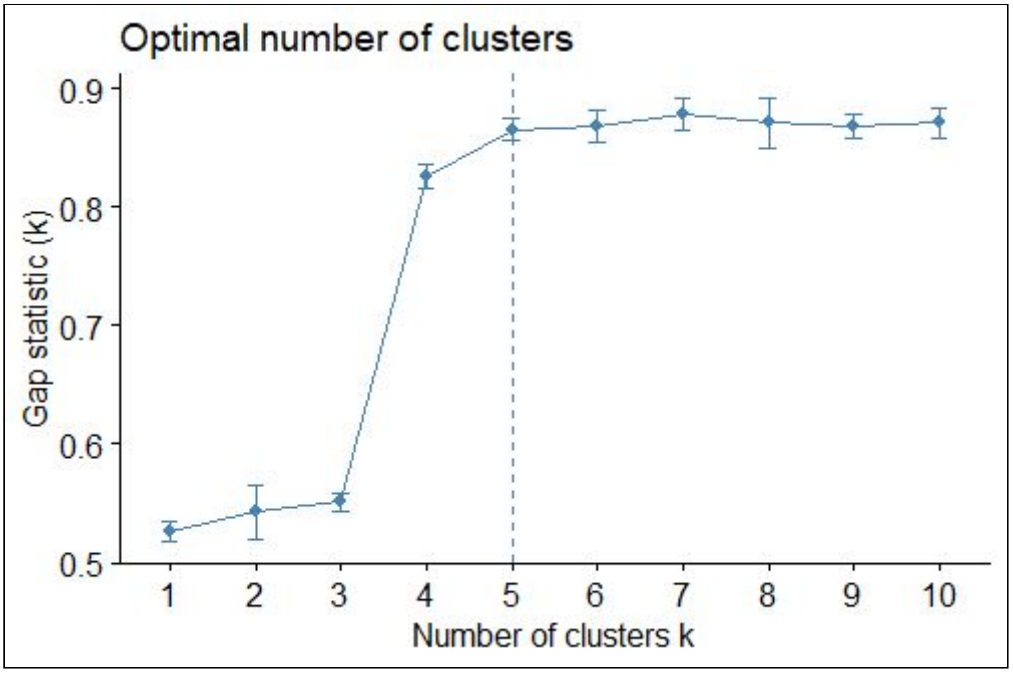
Una vez que encontramos las dimensiones que maximizan el estadístico de Hopkins procedemos a definir el número óptimo de clusters. Para ello recurrimos a tres técnicas:
Método de codo, silueta y GAP.
Mediante el método de **Codo** el modelo arrojó un óptimo de **tres clusters**, lo que podemos ver en el siguiente gráfico:



Aplicamos luego el método **Silueta**, obteniendo la siguiente representación gráfica, la cual indica un óptimo de **dos clusters**:



Por último recurrimos al método de **GAP**, el cual sugiere un óptimo de **cinco clusters**, lo que podemos interpretar en el gráfico mostrado a continuación:



Tras la interpretación de las salidas de los tres métodos y aplicando el conocimiento específico, que sugiere clasificar las observaciones en “infectados” y “no infectados” **concluimos que el número óptimo de cluster para la ejecución de K-means es de dos**, lo cual coincide además con el método **Silueta**.

4 – Clusterización

4.1 Modelo K-Means.

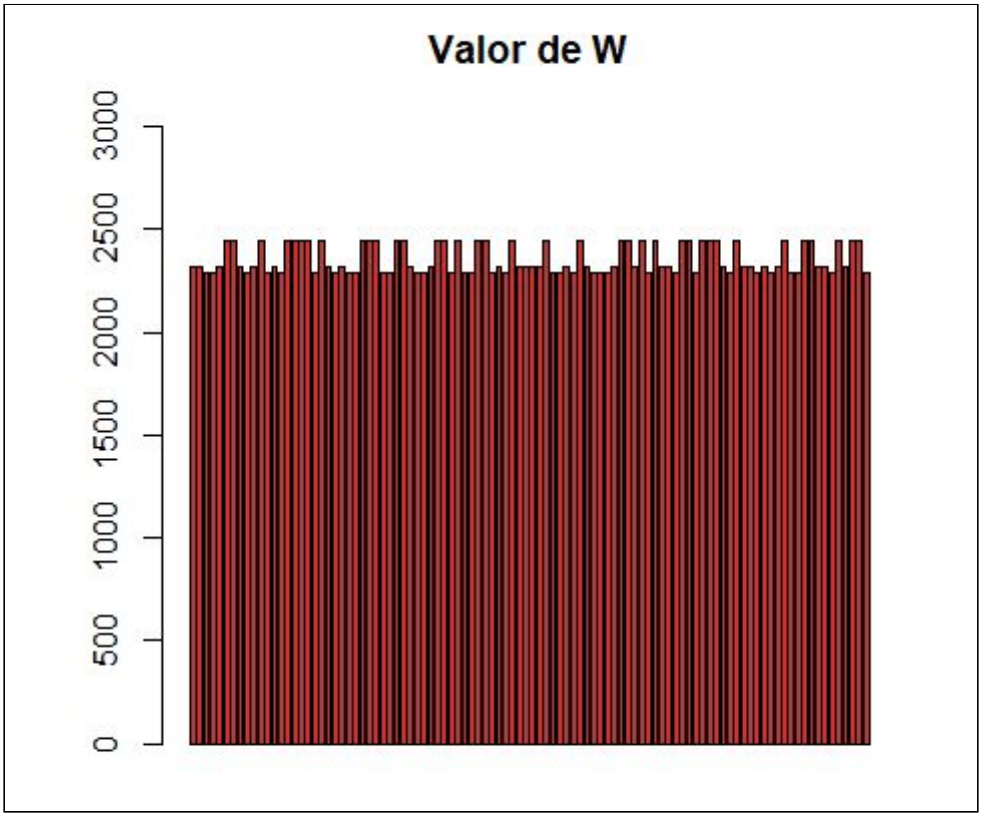
De manera de obtener el "Guess" inicial óptimo ejecutamos K-Means múltiples veces fijando distintas semillas.
Seleccionamos a continuación aquel "Guess" inicial que brinde el menor valor de W (cuadrados intra cluster) , que a su vez repercutirá en un mayor valor de B (cuadrados inter cluster). Esto nos garantizará cluster más compactos y distantes entre sí.
Se muestra a continuación la iteración utilizada para este procedimiento:

```
n = 100
k = 2
w = integer(n)


for (i in 1:n) {
  set.seed(i)
  q <- kmeans(pdepurada, 2)
  w[i] <- q$tot.withinss

}
```

Una vez ejecutada la misma, analizamos los valores almacenados en nuestro vector llamado "w" procurando encontrar el menor W de todos:



Obtenemos como resultado, que el menor valor de W obtenido es aquel obtenido al ejecutar la semilla #3:

```
> ubicacion_menor_w = which.min(w)
> ubicacion_menor_w
[1] 3
>
> valor_menor_w = min(w)
> valor_menor_w
[1] 2292.332
```

Tras los resultados encontrados, podemos replicar el "Guess inicial" brindado por la semilla mencionada con anterioridad en el modelo K-Means, obteniendo así la mejor clasificación dentro de los 100 ensayos realizados.

Aplicamos K-Means con el mejor modelo encontrado, tras lo cual obtenemos la siguiente distribución de observaciones:

```
> ubicacion_centros=q$centers
> ubicacion_centros
       ondas    defensas
1 -0.1070666  0.2867828
2  0.9744145 -2.6100131
```

- El cluster 1 está caracterizado por aquellas observaciones que tienen valores de ondas y defensas próximas a la media (-0,1070 y 0,2867 respectivamente).
- El cluster 2 agrupa a las observaciones con valores más extremos: ondas por encima de la media (0.9744) y defensas muy por debajo de la media (-2.6100).

El segundo clúster por ser el que contiene observaciones anómalas (#2) podría ser identificado como el de sujetos "**infectados**" mientras que el otro concentra las observaciones con valores normales asociadas a los individuos "**no infectados**".

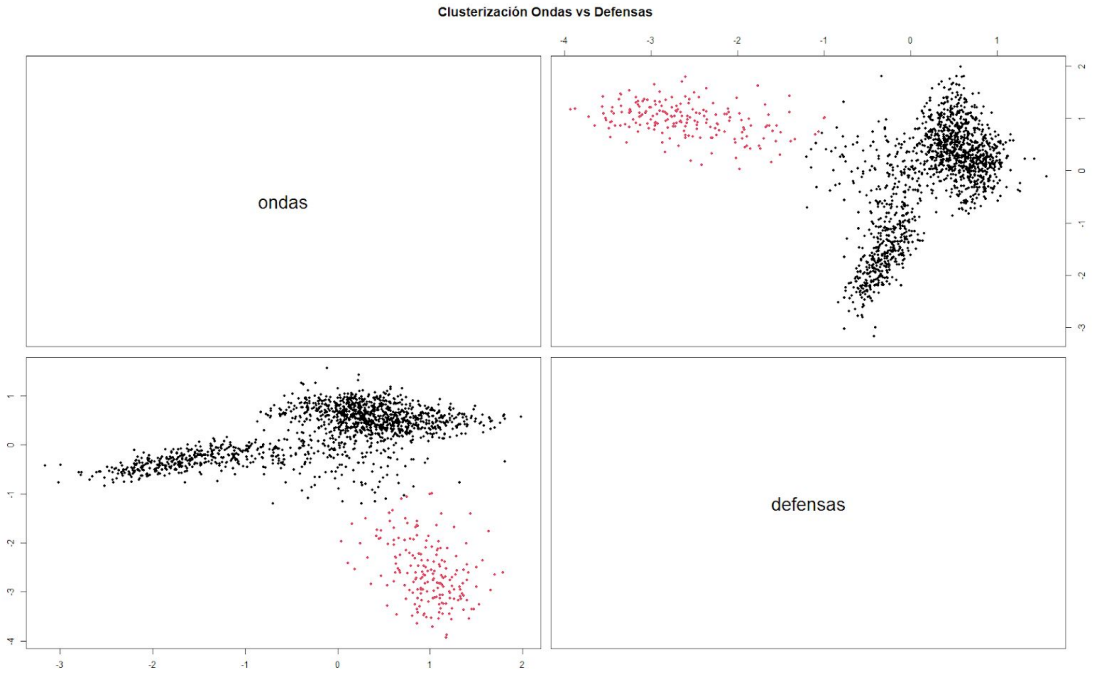


Gráfico: datos originales de pandemia (escalados) Clusterizados con K-Means

El cluster 1 “no infectados” cuenta con un total de 1802 observaciones mientras que el cluster 2 “infectados” agrupa a 198 observaciones.

Los resultados de esta clasificación se encuentran en el vector “clasificacion_clusters” donde es posible identificar la pertenencia de cada observación a su respectivo clúster .

4.2 Clasificación mediante modelo KNN (K-Nearest Neighbor).

Usando el modelo obtenido mediante K-Means, procederemos a clasificar los nuevos casos de la base “nuevos.csv” dentro de los clusters anteriormente definidos.

```
nuevos_casos = knn(q$centers, nscaled, 1:k, k = 1)
nuevos_casos
```

Esto nos permitirá identificar posibles “infectados” y “no infectados” en base al conocimiento generado.

Como resultado, de un total de 4435 observaciones, detectamos que 4023 se agrupan en el cluster 1 “no infectados” mientras que las 412 restantes lo hacen en el cluster 2 “infectados”.

```
> summary(nuevos_casos)
   1    2
4023  412
```

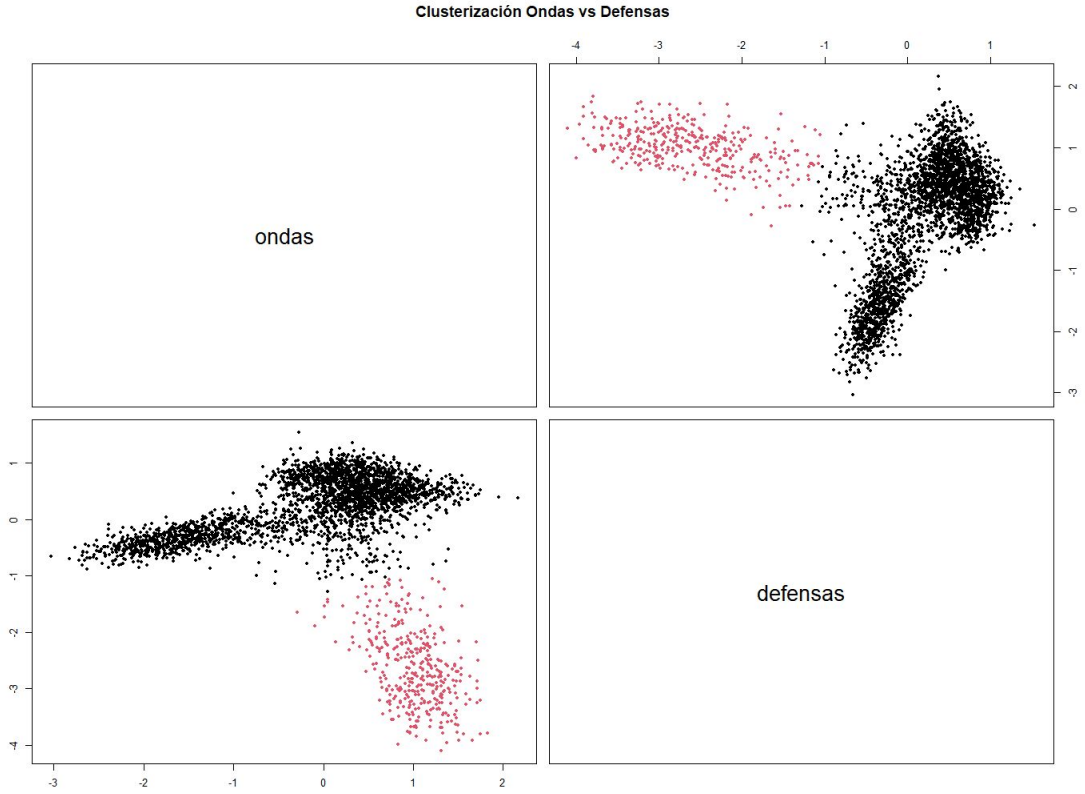


Gráfico: Nuevos casos escalados y clusterizados con el modelo obtenido

Los casos identificados en la nueva base pueden ser encontrados para futuros análisis en la matriz “ncasos” del script adjunto en anexos.

5 - Anexos

```
 ##############################################################
###########----------Universidad ORT Uruguay----------##########
######-----Obligatorio Machine Learning NO Supervisado-----##########
 #######--------------------Machado | Pioli | Silveyra----------##########
 ############----------------Prof. Damian Coltzau----------##########
 ##############################################################
```

```
#=====================================================================
#**********
# Preámbulo
#**********

# Borramos datos de la memoria
rm(list = ls())

# Establecemos directorio de trabajo
setwd("C:/Users/Cecilia Machado/Desktop/Machine")

# Cargamos librerias a utilizar
library(factoextra)
library(class)

# Cargamos el archivo "Pandemia.csv"
p = read.csv('pandemia.csv')

# Visualizamos los datos
View(p)
head(p)

# Resumen de datos más importantes de todas las dimensiones
summary(p)

# Verificamos si los datos están escalados

colMeans(p)
apply(p, 2, var)

# Hay dimensiones sin escalar. Se normalizan

pscaled = scale(p)
```

```
pscaled

# Confirmamos normalización
colMeans(pscaled)
apply(pscaled, 2, var)

# Se confirma normalización ya que todas las desviaciones son = 1

# Fin del preambulo
#=====================================================================

# *************
# Introducción
# *************

# Se aplicarán métodos de selección de variables para depurar la base de datos de aquellas dimensiones que puedan
# ocasionar distorsiones en la futura clusterización.


# **********************
# Selección de variables
# **********************

# Visualizamos los datos para observar si tienen algún tipo de estructura a simple vista

pairs(pscaled, col = "brown3", main = "Estructura de Pandemia.csv", pch = 20)

# Se observa que hay estructura en algunas dimensiones
# pero es necesario eliminar aquellas que presentan una estructura
# Uniforme y pueden ocasionar clusters distorsionados

###################################
# Aplicación de Modelo de Hopkins#
###################################

# Verificamos el coeficiente con todas las dimensiones

n = 50 # cantidad total de dimensiones de la base de datos

Hop_Total = get_clust_tendency(pscaled, n, graph = FALSE)
Hop_Total

# Verificamos el modelo sacando dimensiones de a una, de esta manera vemos si el coeficiente mejora
```

```
v = integer(6)

for(i in 1:6) {
  ni = -1*i
  qi = get_clust_tendency(pscaled[,ni ], n, graph = FALSE)
  v[i]=qi
}
v

# Sancando la dimensión 4 (ldl) se obtiene mejor coeficiente que Hop_Total

Hop_sin_4 = get_clust_tendency(pscaled[,-4], n, graph = FALSE)
Hop_sin_4


# Verificamos el modelo sacando la dimension 4 y otra más

v_4 = integer(6)
for(i in 1:6){
  if(i != 4) {
    ni = -1*i
    q_4 = get_clust_tendency(pscaled[,c(-4,ni)], n, graph = FALSE)
    v_4[i]=q_4
  }
}
v_4

# Creamos tabla comparando resultados

tabla1= cbind(v, v_4)
tabla1

# Sancando la dimensión 4 (ldl) y 1 (hemoglobina) se obtiene mejor coeficiente que Hop_sin_4

Hop_sin_4_1 = get_clust_tendency(pscaled[,c(-4,-1)], n, graph = FALSE)
Hop_sin_4_1

# Verificamos el modelo sacando la dimension 4, 1 y otra más

v_4_1 = integer(6)
for(i in 1:6){
  ni = -1*i
  if( (i != 1) & (i != 4)) {
    q_4_1 = get_clust_tendency(pscaled[,c(-4,-1,ni)], n, graph = FALSE)
```

```
   v_4_1[i]=q_4_1
  }
}
v_4_1

# Creamos tabla comparando resultados

tabla2= cbind(v, v_4, v_4_1)
tabla2

# Sancando la dimensión 4 (ldl), 1 (hemoglobina) y 2 (glucidos) se obtiene mejor coeficiente
que Hop_sin_4_1

Hop_sin_4_1_2 = get_clust_tendency(pscaled[,c(-4,-1,-2)], n, graph = FALSE)
Hop_sin_4_1_2

# Verificamos el modelo sacando la dimension 4, 1, 2 y otra más

v_4_1_2 = integer(6)
for(i in 1:6){
  ni = -1*i
  if( (i != 1) & (i != 4) & (i != 2)) { # no es la columna 1 ni la 2 ni la 4 porque las estoy sacando
    q_4_1_2= get_clust_tendency(pscaled[,c(-4,-1, -2,ni)], n, graph = FALSE)
    v_4_1_2[i]=q_4_1_2
  }
}
v_4_1_2

# Creamos tabla comparando resultados

tabla3= cbind(v, v_4, v_4_1, v_4_1_2)
tabla3

hist()

# Sancando la dimensión 4 (ldl), 1 (hemoglobina), 2 (glucidos) y 3 (temperatura) se obtiene
mejor coeficiente que Hop_sin_4_1_2

Hop_sin_4_1_2_3 = get_clust_tendency(pscaled[,c(-4,-1,-2,-3)], n, graph = FALSE)
Hop_sin_4_1_2_3

# Visualizamos el aumento del estadístico Hopkins a medida que fuimos depurando la base de
datos

tabla4 = c(Hop_Total$hopkins_stat, Hop_sin_4$hopkins_stat, Hop_sin_4_1$hopkins_stat,
```

```
            Hop_sin_4_1_2$hopkins_stat, Hop_sin_4_1_2_3$hopkins_stat)
tabla4

plot(tabla4, xlab = "N° de estimaciones" , ylab = "Coeficiente de Hopkins",
    main = "Evolución de estadístico de Hopkins", type = "b", col="deepskyblue4")

# ************************
# Validación de clustering
# ************************

# Base de datos depurada

pdepurada = pscaled[,c(-4,-1,-2,-3)]

#Visualizamos que haya quedado correctamente depurada
head(pdepurada)

# Buscamos cantidad de clusters óptima por método de Codo
validCodo = fviz_nbclust(pdepurada, FUNcluster = kmeans, method = 'wss', k.max = 1e1, nboot
= 5e1)
validCodo

# El método del codo parece mostrarnos que el número óptimo de clusters es 3, lo cual resulta
contraintuitivo
# con el hecho de que únicamente buscamos infectados y no infectados (2 clusters)

# Aplicación de Silueta para validar la cantidad óptima de K
silueta = fviz_nbclust(pdepurada, FUNcluster = kmeans, method = 'silhouette', k.max = 1e1)
silueta

# El método Silueta nos muestra que el número óptimo de clusters es 2, lo cual coincide con el
conocimiento
# específico mencionado anteriormente

# Aplicación de estadístico de GAP

gap = fviz_nbclust(pdepurada, FUNcluster = kmeans, method = 'gap', nboot = 1e1)
gap

# Misma situación anterior: GAP statistic nos indica que K* es 5, sin embargo esto
# no conicide con el conocimiento específico

#*****************************
#Aplicación de Modelo K-Means
#*****************************
```

```
# Plantamos semilla para fijar resultados

n = 100
k = 2
w = integer(n)


for (i in 1:n) {
  set.seed(i)
  q <- kmeans(pdepurada, 2)
  w[i] <- q$tot.withinss

}

#Visualizamos los W de cada uno de los Guess iniciales

valores_w = w
valores_w

#Graficamos dichos Ws

barplot(w, main = "Valor de W" , ylim=c(0,3000), col = "brown3")

#Buscamos la ubicación y valor del menor W

ubicacion_menor_w = which.min(w)
ubicacion_menor_w

valor_menor_w = min(w)
valor_menor_w

# Nos quedamos la semilla que crea un Guess inicial que minimiza W
# Con este dato aplicamos K-Means

set.seed(3)
q <- kmeans(pdepurada, 2)
q
q$tot.withinss

# Calculamos la proporcion del error bueno sobre T (cuadrados totales)

q$betweenss/q$tot.withinss

# Resultados
```

```
clasificacion_clusters = q$cluster
clasificacion_clusters

ubicacion_centros=q$centers
ubicacion_centros

tamaño_clusters = q$size
tamaño_clusters

# El primer cluster muestra observaciones con ondas y defensas cercanas a la media
# mientras que el cluster número 2, muestra observaciones con ondas por encima de la media
# al igual que las defensas, lo cual podría indicar personas infectadas con el virus

#************************
#Aplicación de Modelo KNN
#************************

# Trabajaremos con otra base de datos que contiene nuevos individuos.
# Intentaremos evaluar su estado(infectado/no infectados) comparandolos con los individuos
ya
# estudiados

# Cargamos el archivo "nuevos.csv"
nuevos = read.csv("nuevos.csv")

# Verificamos si los datos de "nuevos.csv" se encuentran escalados

colMeans(nuevos)
apply(nuevos, 2, var)

# Normalizamos

nscaled = scale(nuevos[,5:6])
nscaled

colMeans(nscaled)
apply(nscaled, 2, var)


# Utilizamos el modelo de KNN para integrar la base "nuevos.csv"

nuevos_casos = knn(q$centers, nscaled, 1:k, k = 1)
nuevos_casos
```

```
# Identificamos las observaciones que presentan características similares
# a las de los clusters 1 y 2 de la base "pandemia.csv"

# Visualizamos los datos con la clusterización obtenida

pairs(pdepurada, col = q$cluster, pch = 20, main= "Clusterización Ondas vs Defensas")

pairs(nscaled, col = nuevos_casos, pch = 20, main= "Clusterización Ondas vs Defensas")

# Identificamos las observaciones reclasificadas en no infectados (1) e infectados (2)
# datos
ncasos = matrix(t(nuevos_casos))

summary(nuevos_casos)

#Fin del análisis
#=========================================================================s
```