Práctica en R del tema Clustering

Laura Rodríguez Navas

10/07/2020

Parte introductoria de la práctica

Para la correcta ejecución de esta práctica, el estudiante debe verificar que los paquetes **mlbench** y **caret** están correctamente instalados en la plataforma R. Para instalar estos paquetes en R, solo debe ejecutar:

- install.packages("mlbench")
- install.packages("caret")

Además, para esta práctica se ha decidido que se necesitan los siguientes paquetes de R:

- install.packages("lattice")
- install.packages("ggplot2")
- install.packages("factoextra")
- install.packages("ggdendro")
- install.packages("cluster")

Luego de haber instalado los paquetes en R, pasamos a cargar en memoria las librerías que usaremos.

```
library(mlbench)
library(lattice)
library(ggplot2)
library(caret)
library(factoextra)
library(ggdendro)
library(cluster)
```

El paquete **mlbench** se utiliza para cargar los datasets con los cuales trabajaremos en esta práctica. El paquete **caret** engloba más de 200 modelos de clasificación así como funciones útiles para el preprocesado de datos. A continuación cargamos el dataset BreastCancer de la librería **mlbench**. El objetivo de este dataset es describir si los pacientes tienen un cáncer benigno o maligno.

```
data(BreastCancer)
```

El dataset ya se encuentra disponible en el entorno, ahora solo podrás referenciarlo con la variable BreastCancer.

Ejercicios

A continuación debe resolver los siguientes ejercicios, escribiendo el código en cada sección correspondiente después del comentario #INSERTAR CÓDIGO AQUÍ.

Preprocesamiento de datos

Describa brevemente el dataset BreastCancer. Puede apoyarse en las funciones str(..) y summary (..). Como mínimo se espera que aporte la siguiente información:

- Número de ejemplos (observaciones).
- Número de variables.

- Tipo de variables.
- Distribuciones de datos por cada variable.
- Número de valores perdidos.

```
#INSERTAR CÓDIGO AQUÍ
str(BreastCancer, width = 85, strict.width = "cut")
```

```
'data.frame':
                    699 obs. of 11 variables:
##
                      : chr "1000025" "1002945" "1015425" "1016277" ...
##
    $ Id
    $ Cl.thickness
                      : Ord.factor w/ 10 levels "1"<"2"<"3"<"4"<...: 5 5 3 6 4 8 1 2 2 4...
##
                      : Ord.factor w/ 10 levels "1"<"2"<"3"<"4"<...: 1 4 1 8 1 10 1 1 1 ...
##
    $ Cell.size
##
    $ Cell.shape
                      : Ord.factor w/ 10 levels "1"<"2"<"3"<"4"<...: 1 4 1 8 1 10 1 2 1 ...
    $ Marg.adhesion
                     : Ord.factor w/ 10 levels "1"<"2"<"3"<"4"<...: 1 5 1 1 3 8 1 1 1 1...
                      : Ord.factor w/ 10 levels "1"<"2"<"3"<"4"<..: 2 7 2 3 2 7 2 2 2 2...
    $ Epith.c.size
##
    $ Bare.nuclei
                      : Factor w/ 10 levels "1", "2", "3", "4", ...: 1 10 2 4 1 10 10 1 1 1 ...
##
                      : Factor w/ 10 levels "1", "2", "3", "4", ...: 3 3 3 3 3 9 3 3 1 2 ...
    $ Bl.cromatin
##
    $ Normal.nucleoli: Factor w/ 10 levels "1","2","3","4",..: 1 2 1 7 1 7 1 1 1 1 ...
                      : Factor w/ 9 levels "1","2","3","4",...: 1 1 1 1 1 1 1 5 1 ...
##
    $ Mitoses
                      : Factor w/ 2 levels "benign", "malignant": 1 1 1 1 1 2 1 1 1 1 ...
    $ Class
```

- Número de ejemplos (observaciones) = 699.
- Número de variables = 11.
- Tipo de variables. Consideramos el dataset BreastCancer definido sobre 10 variables descriptoras (9 discretas, 5 de ellas ordenadas; y una variable de tipo carácter) y una variable clase binaria {benign, malignant}.
- Distribuciones de datos por cada variable:

```
#INSERTAR CÓDIGO AQUÍ
summary(BreastCancer)
```

```
Marg.adhesion
##
          Id
                           Cl.thickness
                                             Cell.size
                                                             Cell.shape
    Length:699
##
                          1
                                   :145
                                          1
                                                   :384
                                                           1
                                                                   :353
                                                                           1
                                                                                   :407
##
    Class : character
                          5
                                   :130
                                          10
                                                   : 67
                                                           2
                                                                   : 59
                                                                           2
                                                                                   : 58
##
    Mode :character
                          3
                                   :108
                                          3
                                                     52
                                                                     58
                                                                           3
                                                                                   : 58
                                                           10
##
                          4
                                   : 80
                                          2
                                                     45
                                                           3
                                                                   : 56
                                                                           10
                                                                                   : 55
                                                                                   : 33
##
                          10
                                   : 69
                                          4
                                                     40
                                                                    44
                                                                           4
##
                          2
                                  : 50
                                          5
                                                   :
                                                     30
                                                           5
                                                                   : 34
                                                                           8
                                                                                   : 25
##
                          (Other):117
                                           (Other): 81
                                                           (Other): 95
                                                                           (Other): 63
##
                     Bare.nuclei
                                      Bl.cromatin
                                                     Normal.nucleoli
                                                                           Mitoses
     Epith.c.size
    2
##
            :386
                    1
                             :402
                                     2
                                             :166
                                                     1
                                                             :443
                                                                        1
                                                                                :579
    3
            : 72
                                     3
                                                                        2
                                                                                : 35
##
                    10
                             :132
                                             :165
                                                     10
                                                             : 61
##
    4
              48
                    2
                             : 30
                                     1
                                             :152
                                                     3
                                                             : 44
                                                                        3
                                                                                : 33
##
    1
              47
                    5
                             : 30
                                     7
                                             : 73
                                                     2
                                                             : 36
                                                                        10
                                                                                : 14
##
              41
                    3
                             : 28
                                             : 40
                                                     8
                                                             : 24
                                                                        4
                                                                                : 12
                                     4
                                                             : 22
                                                                        7
##
            :
              39
                     (Other): 61
                                     5
                                             : 34
                                                                                   9
                                                     6
##
    (Other):
              66
                    NA's
                            : 16
                                     (Other): 69
                                                     (Other): 69
                                                                        (Other): 17
##
           Class
##
    benign
               :458
##
    malignant:241
##
##
##
##
##
```

• Número de valores perdidos.

```
#INSERTAR CÓDIGO AQUÍ
sum(is.na(BreastCancer))
```

[1] 16

• En caso de ser necesario, elimine los valores perdidos (R los representa como NA).

```
#INSERTAR CÓDIGO AQUÍ
BreastCancer <- na.omit(BreastCancer)
any(is.na(BreastCancer))</pre>
```

[1] FALSE

Nota: en esta práctica, solo con la eliminación de registros es suficiente. Sin embargo, tenga en cuenta que la eliminación de registros que presentan valores perdidos no es una alternativa efectiva en la mayoría de los casos.

• Ahora, transforma todas las variables descriptoras a tipo numérico. Esto es necesario porque muchos métodos de clustering trabajan solamente con variables numéricas.

```
#INSERTAR CÓDIGO AQUÍ
for (i in 1:(ncol(BreastCancer) - 1))
   BreastCancer[, i] <- as.numeric(as.character(BreastCancer[, i]))

str(BreastCancer, width = 85, strict.width = "cut")

## 'data.frame': 683 obs. of 11 variables:
## $ Id : num 1000025 1002945 1015425 1016277 1017023 ...</pre>
```

```
$ Cl.thickness
##
                           5 5 3 6 4 8 1 2 2 4 ...
                    : num
##
   $ Cell.size
                           1 4 1 8 1 10 1 1 1 2 ...
                    : num
##
                          1 4 1 8 1 10 1 2 1 1 ...
   $ Cell.shape
                    : num
##
   $ Marg.adhesion : num
                          1511381111...
##
   $ Epith.c.size
                    : num 2 7 2 3 2 7 2 2 2 2 ...
                    : num
##
   $ Bare.nuclei
                           1 10 2 4 1 10 10 1 1 1 ...
                    : num 3 3 3 3 3 9 3 3 1 2 ...
##
   $ Bl.cromatin
##
  $ Normal.nucleoli: num 1 2 1 7 1 7 1 1 1 1 ...
##
                    : num 1 1 1 1 1 1 1 5 1 ...
  $ Mitoses
##
   $ Class
                    : Factor w/ 2 levels "benign", "malignant": 1 1 1 1 1 2 1 1 1 1 ...
   - attr(*, "na.action")= 'omit' Named int [1:16] 24 41 140 146 159 165 236 250 276 ...
    ..- attr(*, "names")= chr [1:16] "24" "41" "140" "146" ...
```

• La variable "ID" representa un identificador que es único para cada paciente y no aporta ninguna información para el aprendizaje automático, por lo que podemos eliminarlo con seguridad.

```
#INSERTAR CÓDIGO AQUÍ
BreastCancer$Id <- NULL
head(BreastCancer, 3)
```

```
##
     Cl.thickness Cell.size Cell.shape Marg.adhesion Epith.c.size Bare.nuclei
## 1
                 5
                            1
                                        1
                                                       1
                                                                     2
## 2
                 5
                            4
                                        4
                                                       5
                                                                     7
                                                                                 10
                 3
                                                                     2
## 3
                                        1
                                                       1
                                                                                  2
##
     Bl.cromatin Normal.nucleoli Mitoses
                                            Class
## 1
                3
                                 1
                                          1 benign
                3
                                 2
## 2
                                          1 benign
## 3
                3
                                          1 benign
```

• Debido a que los algoritmos de clustering se basan en el cómputo de valores de distancias entre los ejemplos, es ventajoso tener todas las variables en la misma escala para el cálculo de las distancias entre ejemplos. Convierta todos los atributos descriptores a una misma escala.

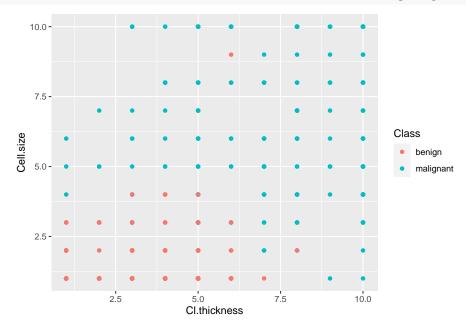
Nota: se recomienda utilizar la función preProcess(..., method = "scale") de la librería caret.

```
# INSERTAR CÓDIGO AQUÍ
BreastCancer.scale <- preProcess(BreastCancer[, 1:9], method=c("scale"))</pre>
BreastCancer.features <- predict(BreastCancer.scale, BreastCancer[, 1:9])</pre>
str(BreastCancer.features, width = 85, strict.width = "cut")
##
   'data.frame':
                     683 obs. of 9 variables:
##
    $ Cl.thickness
                             1.77 1.77 1.06 2.13 1.42 ...
                      : num
##
    $ Cell.size
                             0.326 1.305 0.326 2.61 0.326 ...
                      : num
##
    $ Cell.shape
                      : num
                             0.335 1.338 0.335 2.677 0.335 ...
##
    $ Marg.adhesion
                             0.349 1.745 0.349 0.349 1.047 ...
                      : num
##
    $ Epith.c.size
                             0.9 3.15 0.9 1.35 0.9 ...
                      : num
##
    $ Bare.nuclei
                      : num
                             0.274 2.744 0.549 1.098 0.274 ...
     Bl.cromatin
                             1.22 1.22 1.22 1.22 1.22 ...
##
                      : num
##
    $ Normal.nucleoli: num
                             0.328 0.655 0.328 2.293 0.328 ...
    $ Mitoses
                             0.577 0.577 0.577 0.577 0.577 ...
                      : num
```

Clustering con kMeans

Una vez que los datos han sido preprocesados, la librería ggplot2, la cual es automaticamente importada por la librería caret, nos permite visualizar los datos para comprobar cómo las diferentes variables afectan al tipo de cáncer.





Se puede apreciar que considerando estos pares de variables se observan dos grupos claramente definidos.

• Pasemos ahora a ejecutar algoritmos de clustering sobre nuestros datos. Mediante un agrupamiento usando kmeans(..), encuentre el par de variables descriptoras a partir del cual se logra un mejor agrupamiento. Utilice 20 asignaciones aleatorias para inicializar los centroides y además fije el número de cluster igual al número de clases existentes en el dataset.

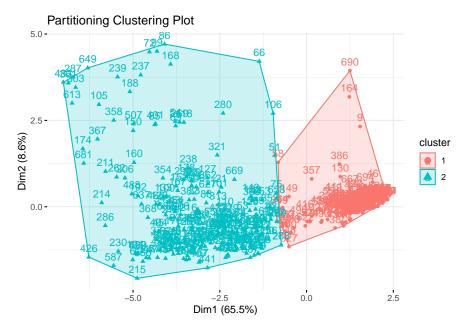
Nota: recuerde que la variable Class no se debe tener en cuenta a la hora de realizar el clustering, ya que estamos haciendo un aprendizaje no supervisado. El atributo Class es útil para usar una métrica de evaluación externa y así comprobar la calidad del agrupamiento.

```
#INSERTAR CÓDIGO AQUÍ
set.seed(101)
km_clusters <- kmeans(BreastCancer.features, centers = 2, nstart = 20)
km clusters
## K-means clustering with 2 clusters of sizes 453, 230
##
  Cluster means:
##
     Cl.thickness Cell.size Cell.shape Marg.adhesion Epith.c.size Bare.nuclei
          1.077629 0.4191542
                                 0.4712566
                                                 0.4700817
## 1
                                                                0.9423492
                                                                              0.3840871
## 2
          2.554044 2.2270031
                                 2.2665986
                                                 2.0080464
                                                                2.4642601
                                                                              2.1322365
##
     Bl.cromatin Normal.nucleoli Mitoses
## 1
        0.8578798
                          0.4092973 0.617912
        2.4865546
##
                          1.9854346 1.530682
##
##
   Clustering vector:
          2
              3
                            6
                                 7
                                                                                            20
##
     1
                   4
                        5
                                      8
                                          9
                                              10
                                                  11
                                                       12
                                                           13
                                                                14
                                                                     15
                                                                         16
                                                                              17
                                                                                  18
                                                                                       19
##
          2
                   2
                        1
                            2
                                 1
                                      1
                                          1
                                                   1
                                                        1
                                                             1
                                                                 1
                                                                      2
                                                                          2
                                                                               1
                                                                                   1
                                                                                        2
                                                                                             1
     1
               1
                                               1
##
         22
             23
                  25
                                28
                                    29
                                                  32
                                                                35
                                                                                            42
    21
                      26
                           27
                                         30
                                             31
                                                       33
                                                           34
                                                                    36
                                                                         37
                                                                              38
                                                                                  39
                                                                                       40
##
     2
          2
                                          1
                                                   1
                                                        2
                                                             1
                                                                 1
                                                                          2
                                                                                   2
                                                                                        2
                                                                                             2
              1
                   1
                        1
                            1
                                 1
                                     1
                                               1
                                                                      1
                                                                               1
    43
                  46
                      47
                                49
                                    50
                                                  53
                                                       54
                                                                56
                                                                    57
                                                                         58
##
         44
             45
                           48
                                         51
                                             52
                                                           55
                                                                              59
                                                                                  60
                                                                                       61
                                                                                            62
     2
          2
              2
                   1
                        2
                            1
                                 1
                                      2
                                          2
                                               1
                                                   2
                                                        2
                                                            2
                                                                 2
                                                                      2
                                                                                   1
                                                                                        2
##
                                                                          1
                                                                               1
                                                                                             1
         64
                                    70
                                             72
                                                                                  80
##
    63
             65
                  66
                      67
                           68
                                69
                                         71
                                                  73
                                                       74
                                                           75
                                                                76
                                                                    77
                                                                         78
                                                                              79
                                                                                       81
                                                                                            82
     2
                   2
                            2
                                 2
                                               2
                                                        2
                                                             2
##
          1
              1
                        1
                                     1
                                          1
                                                   1
                                                                 1
                                                                      1
                                                                          1
                                                                               1
                                                                                   1
                                                                                        1
##
    83
             85
                  86
                      87
                           88
                                89
                                    90
                                         91
                                              92
                                                  93
                                                       94
                                                           95
                                                                96
                                                                     97
                                                                         98
                                                                              99
                                                                                 100
                                                                                      101 102
         84
                   2
                            2
                                                                               2
##
     1
          1
               2
                        2
                                 1
                                      1
                                          1
                                               1
                                                   1
                                                        1
                                                             1
                                                                 1
                                                                      1
                                                                          1
                                                                                   2
                                                                                        2
            105
                106 107 108 109
                                   110 111 112 113 114 115 116 117
                                                                        118
                                                                            119 120
##
   103
       104
                                                                                     121 122
##
     1
          1
               2
                   2
                        2
                            2
                                 1
                                      2
                                          1
                                               2
                                                   2
                                                        2
                                                             1
                                                                 1
                                                                      1
                                                                          2
                                                                               1
                                                                                   1
##
   123
       124
            125
                126 127 128 129
                                   130 131 132 133 134 135 136 137 138 139
                                                                                 141
                                                                                     142 143
##
     2
          2
               2
                        2
                            1
                                 2
                                      1
                                          1
                                               1
                                                   2
                                                             1
                                                                 1
                                                                      1
                                                                          1
                                                                               1
                                                                                   1
                                                                                        1
                   1
                                                        1
            147 148 149 150 151 152 153 154 155 156 157 158 160 161 162 163 164 166
##
   144 145
##
                            2
                                 1
                                      2
                                          2
                                                        2
                                                                 1
                                                                      2
                                                                          2
     1
          1
               1
                   1
                        1
                                               1
                                                   1
                                                             1
                                                                               1
                                                                                   1
##
   167 168 169 170 171 172 173 174 175 176 177 178 179 180 181 182 183 184 185 186
##
     2
          2
               1
                            1
                                 1
                                      2
                                          2
                                               2
                                                   1
                                                        2
                                                             1
                                                                 1
                                                                      1
                                                                          1
                                                                               1
                                                                                   2
                                                                                        2
                        1
##
   187 188 189 190 191 192 193 194 195 196 197 198 199 200
                                                                   201 202 203 204
                                                                                      205 206
##
     2
          2
               2
                   1
                        2
                            2
                                 1
                                      1
                                          1
                                               1
                                                   2
                                                        1
                                                             1
                                                                 1
                                                                      2
                                                                          2
                                                                               1
                                                                                   1
                                                                                             2
   207 208 209 210 211 212 213
                                   214 215 216 217
                                                     218 219 220
                                                                   221
                                                                        222 223
                                                                                 224
                                                                                      225
##
                                                                                          226
                                      2
                                          2
                                                                          2
                                                                                   2
##
     2
                        2
                            2
                                               2
                                                             2
                                                                                        2
          1
               1
                   1
                                 1
                                                   1
                                                        1
                                                                 1
                                                                      1
                                                                               1
##
   227 228 229 230 231 232 233
                                   234 235 237
                                                 238 239 240 241
                                                                   242 243 244 245
                                                                                     246 247
          2
                   2
                        2
                            2
                                      2
                                               2
                                                   2
                                                        2
                                                             2
##
               1
                                 1
                                          1
                                                                 1
                                                                      1
                                                                          1
                                                                                   1
                                                                               1
   248 249 251 252 253 254 255 256 257 258 259
                                                     260 261 262 263 264 265 266
##
                                                                                      267
##
          1
                   2
                        2
                            2
                                 2
                                      2
                                          1
                                               1
                                                             2
                                                                 2
                                                                      2
                                                                          2
                                                                               2
                                                                                   1
     1
               1
                                                   1
                                                        2
                272 273 274 275
                                   277 278 279
                                                 280
                                                     281 282 283
   269 270 271
                                                                   284 285 286 287
                                                                                      288
                                                                                          289
                                                                      2
##
          1
               2
                   1
                        2
                            1
                                 1
                                      1
                                          1
                                               1
                                                   2
                                                        1
                                                             1
                                                                 2
                                                                          2
                                                                               2
                                                                                   2
##
  290 291 292 294 296 297 299
                                   300 301 302 303
                                                     304 305 306 307
                                                                        308 309 310
                                                                                      311 312
                   2
                            2
                                      2
                                          2
                                                   2
                                                             2
                                                                 2
                                                                               2
##
     2
          1
               1
                        2
                                 1
                                               1
                                                                      1
                                                                          1
   313 314 315 317 318 319 320 321 323 324 325 326 327 328 329 330 331 332 333 334
##
          1
               1
                   2
                        2
                            1
                                 2
                                      2
                                          1
                                               2
                                                   1
                                                        1
                                                             1
                                                                 1
                                                                      2
                                                                          2
                                                                               2
                                                                                    1
  335 336 337 338 339 340 341 342 343 344 345 346 347 348 349 350 351 352 353 354
##
                            2
                                 2
                                      1
                                          1
                                               1
                                                   2
                                                        1
                                                             1
                                                                 1
                                                                      1
                                                                          2
## 355 356 357 358 359 360 361 362 363 364 365 366 367 368 369 370 371 372 373 374
```

```
2
##
                                2
                                     2
                                         1
                                              1
                                                   1
                                                       1
                                                            2
                                                                2
                                                                     1
                378 379 380 381 382 383 384 385 386 387 388 389 390 391 392
##
   375 376 377
                                                                                    393
                                     2
                                         1
   395 396 397 398 399 400 401 402 403 404 405 406 407 408 409 410 411 413 414
##
##
              1
                   1
                       1
                            1
                                2
                                     1
                                         1
                                              1
                                                   1
                                                       1
                                                            1
                                                                1
                                                                     1
                                                                         1
                                                426 427 428 429
                                                                                    434 435
   416 417 418 419 420 421 422 423 424 425
                                                                  430 431
                                                                           432 433
##
##
          2
                            1
                                2
                                     1
                                         1
                                              1
                                                   2
                                                            2
                                                                1
                                                                     1
                       1
##
   436 437 438 439 440 441 442 443 444 445 446 447 448 449 450 451 452 453 454 455
##
     2
          2
              1
                            2
                                1
                                         1
                                              1
                                                   1
                                                            1
                                                                1
                                                                     2
                                                                                  1
                   1
                       1
                                     1
                                                       1
                                                                         1
                                                                              1
##
   456
       457 458
                459 460 461 462
                                  463 464
                                           465
                                                466
                                                    467
                                                         468 469
                                                                  470 471
                                                                           472
                                                                                473
          2
              2
                                1
                                         1
                                                   2
                                                       2
                                                            2
                                                                1
                                                                     1
                   1
                       1
                            1
                                     1
                                              1
                                                                         1
                                                                              1
##
   476 477 478 479 480 481 482 483 484 485
                                                486 487 488 489
                                                                  490 491 492 493
                                                                                    494
                                                                                         495
##
                       2
                                1
                                     2
                                         2
                                                   1
                                                            2
                                                                2
                                                                              2
          1
              1
                   1
                            1
                                              1
                                                       1
                                                                     1
                                                                         1
                                                                                  1
##
   496
       497 498 499 500 501 502 503 504 505
                                                506 507 508 509 510 511 512 513 514 515
                                                       2
##
              1
                   1
                       1
                            1
                                1
                                     1
                                         1
                                              1
                                                   1
                                                            1
                                                                1
                                                                     1
                                                                         1
                                                                              1
                                                                                  1
                                                                                           2
   516 517 518 519 520 521 522 523 524 525 526 527 528 529
                                                                  530 531 532 533
                                                                                    534 535
                                     2
                                         2
##
                       2
                                                                         2
          1
              1
                   1
                            1
                                1
                                              1
                                                   1
                                                       1
                                                            1
                                                                1
                                                                     1
                                                                              1
                                                                                  1
   536 537 538 539 540 541 542 543 544 545
                                                546 547 548 549 550 551 552 553
##
                                                       2
                                                                     2
                   1
                       1
                            1
                                1
                                     1
                                         1
                                              1
                                                   1
                                                            1
                                                                1
                                                                         1
                                                                              1
##
   556 557 558 559 560 561 562 563 564 565 566 567 568 569 570 571 572 573
                                                                                    574 575
##
          1
              1
                   1
                            1
                                1
                                         1
                                              1
                                                   2
                                                       1
                                                            1
                                                                2
                                                                     2
                                                                         2
                                                                              2
                                                                                  1
     1
                       1
                                     1
   576 577 578 579 580 581 582 583 584 585
                                                586 587 588 589 590 591 592 593
##
                                2
                                     2
                                                       2
                                                                2
                                                                         2
                                                                              2
                                                                                  2
          1
              1
                   1
                       1
                            1
                                         1
                                              1
                                                   1
                                                            1
                                                                     1
   596 597 598 599 600 601 602 603 604 605
                                                606 607 608 609
                                                                                    614 615
##
                                                                  610 611 612 613
##
          1
                   1
                       1
                            1
                                1
                                     1
                                         2
                                              2
                                                   2
                                                       1
                                                            1
                                                                2
                                                                     1
                                                                         2
                                                                              2
   616 617 619 620 621 622 623 624 625 626 627 628 629 630 631 632 633
                                                                               634
                                                                                    635
                                                                                         636
##
              1
                   1
                       1
                            1
                                1
                                     1
                                         1
                                              1
                                                   2
                                                       1
                                                            1
                                                                1
                                                                     1
                                                                         1
   637 638 639 640 641 642 643
                                  644 645 646 647 648 649 650
##
                                                                  651 652 653 654
                                                                                    655 656
##
          1
              1
                       1
                            1
                                1
                                     1
                                         1
                                              1
                                                   1
                                                       1
                                                            2
                                                                1
                                                                     1
                                                                         1
   657 658 659
                660 661 662 663 664 665 666 667
                                                    668 669 670
                                                                  671 672 673 674
                                                                                    675 676
##
          2
              2
                       1
                            1
                                1
                                     1
                                         1
                                              1
                                                   1
                                                            2
                                                                2
                                                                     2
                                                                         1
##
   677 678 679
                680 681 682 683
                                  684 685 686 687
                                                    688 689 690
                                                                  691
                                                                       692
                                                                           693 694
                                                                                    695
                                                                                         696
##
   697 698 699
##
##
          2
##
## Within cluster sum of squares by cluster:
       573.4613 2150.6939
##
    (between_SS / total_SS = 55.6 %)
##
##
##
  Available components:
##
## [1] "cluster"
                         "centers"
                                          "totss"
                                                           "withinss"
                                                                            "tot.withinss"
  [6] "betweenss"
                         "size"
                                          "iter"
                                                           "ifault"
```

• A partir de los resultados obtenidos, ¿Por qué se puede considerar un buen agrupamiento? Justifica de forma clara y concisa la elección del par de atributos. Puedes ayudarte con la funciones table(..) y ggplot(..) para justificar tu respuesta.

RESPUESTA:



La propia función $(fviz_cluster)$ determina las dos dimensiones, es decir, el par de variables más representativo en el dataset.

Si observamos la anterior figura, el agrupamiento no ha sido del todo bueno. Los clusters no acaban de verse bien diferenciados, y se puede observar un poco de *overlapping* entre ellos.

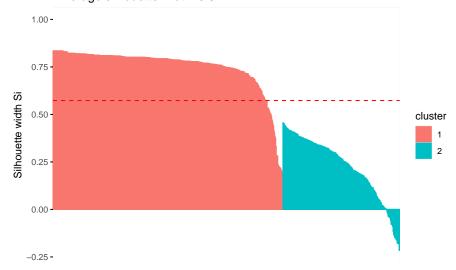
Para la validación de los clusters se utiliza el coeficiente de Silhouette: un valor de Si cercano a 1 indica que el cluster estará bien agrupado. Un valor de Si cercano a -1 indicará que el cluster estará mal agrupado.

A continuación vemos la representación del coeficiente de Silhouette:

```
#INSERTAR CÓDIGO AQUÍ
sil <- silhouette(km_clusters$cluster, dist(BreastCancer.features))
fviz_silhouette(sil)</pre>
```

```
## cluster size ave.sil.width
## 1 1 453 0.75
## 2 2 230 0.23
```

Clusters silhouette plot Average silhouette width: 0.57

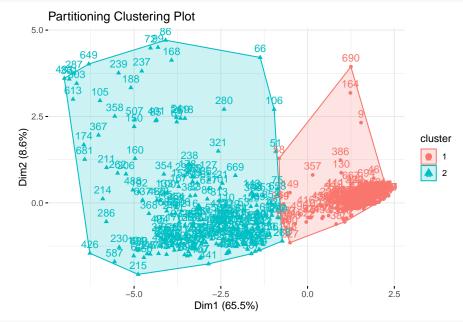


• Mediante la función preprocess(..) de la librería caret, analice si se obtienen mejores resultados de agrupamiento con el par de atributos seleccionados anteriormente, pero en este caso haciendo inicialmente las siguientes combinaciones de transformaciones a los datos:

```
c("center", "scale")
c("center", "scale", "YeoJohnson")
c("range")
c("range", "YeoJohnson")
```

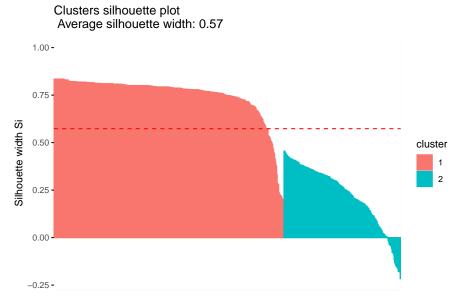
Ayúdate de los resultados obtenidos con table y ggplot.

• c("center", "scale")



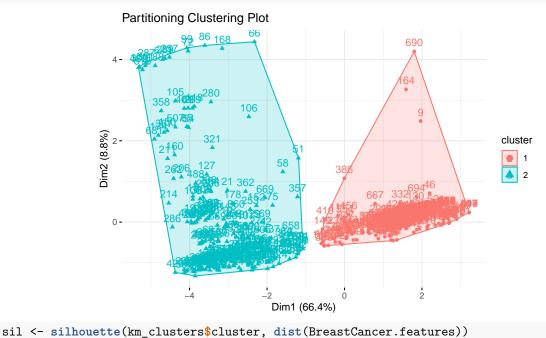
```
sil <- silhouette(km_clusters$cluster, dist(BreastCancer.features))
fviz_silhouette(sil)</pre>
```

```
## cluster size ave.sil.width
## 1 1 453 0.75
## 2 2 230 0.23
```



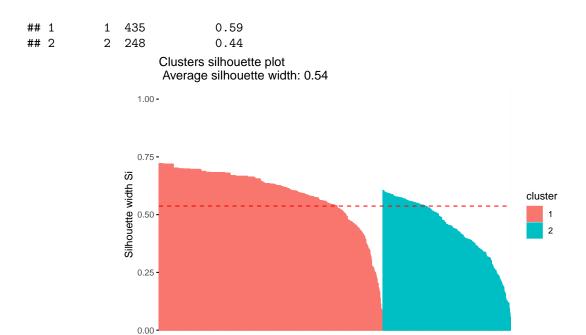
El resultado de agrupamiento no presenta mejoras.

• c("center", "scale", "YeoJohnson")



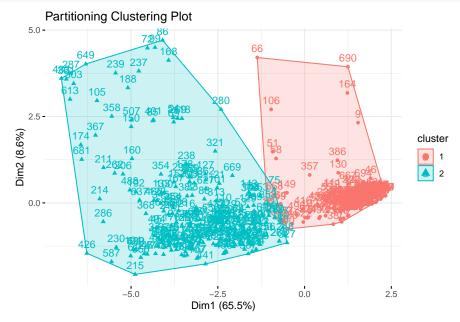
cluster size ave.sil.width

fviz_silhouette(sil)



El resultado de agrupamiento sí presenta mejoras. Los clusters están más definidos. Ya no existe *overlapping* entre ellos.

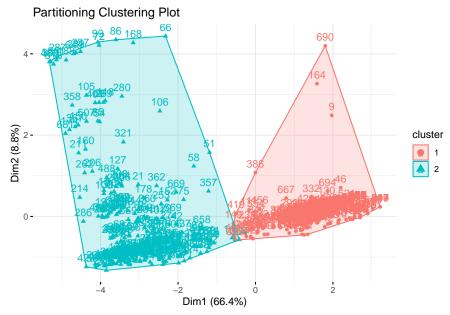
• c("range")



```
sil <- silhouette(km_clusters$cluster, dist(BreastCancer.features))</pre>
fviz_silhouette(sil)
      cluster size ave.sil.width
## 1
                                 0.76
             1 453
                                 0.28
## 2
             2 230
                       Clusters silhouette plot
                       Average silhouette width: 0.6
                   1.00 -
                   0.75 -
                Silhouette width Si
                                                                                        cluster
                   0.00
```

El resultado de agrupamiento sí presenta mejoras.

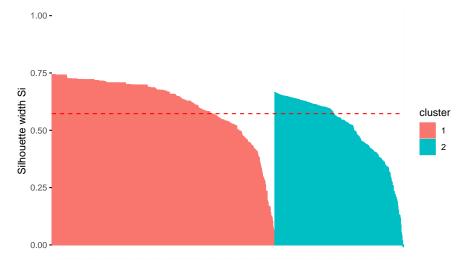
• c("range", "YeoJohnson")



sil <- silhouette(km_clusters\$cluster, dist(BreastCancer.features))
fviz_silhouette(sil)</pre>

```
## cluster size ave.sil.width
## 1 1 433 0.61
## 2 2 250 0.50
```

Clusters silhouette plot Average silhouette width: 0.57



El resultado de agrupamiento no presenta mejoras.

• A partir del par de variables seleccionadas, cree un agrupamiento conformado por tres variables; las dos variables previamente seleccionadas y otra variable seleccionada aleatoriamente entre las variables descriptoras restantes. Este proceso debes repetirlo cinco veces de tal manera que en cada ejecución la variable añadida no necesariamente sea la misma.

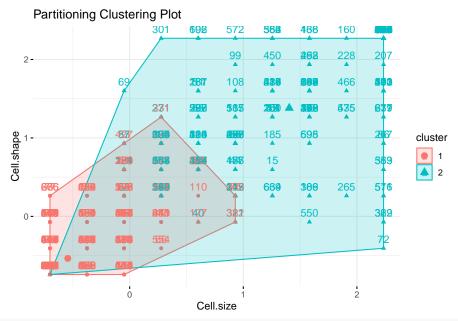
```
#INSERTAR CÓDIGO AQUÍ
BreastCancer.scale <- preProcess(BreastCancer[, 1:9], method=c("scale"))
BreastCancer.features <- predict(BreastCancer.scale, BreastCancer[, 1:9])</pre>
```



func(vars[2])



func(vars[3])



func(vars[4])



func(vars[5])



• A partir de los resultados obtenidos responda lo siguiente, ¿Tiene alguna ventaja o desventaja incluir más variables? ¿Qué posible explicación puedes darle a los resultados?

En todos los casos es una desventaja. Al incluir más variables los dos clusters se agrupan incorrectamente. Vemos como existe overlapping.

Clustering jerárquico

Como hemos visto, con kmeans debemos de especificar a priori el número de clusters que queremos obtener. Dado que el clustering es una tarea de aprendizaje no supervisado, en algunos casos puede que no tengamos esa información a priori, por lo que necesitaremos de otro tipo de técnicas, como por ejemplo el agrupamiento jerárquico. Un agrupamiento jerárquico en R se puede realizar mediante la función hclust(..), para ello debemos especificar el tipo de método de aglomeración a usar.

• Crea un agrupamiento jerárquico usando hclust(..), para ello debe encontrar el método de aglomeración que mejor agrupa los tipos de cáncer. Una vez encontrado el mejor método, gráfica un dendograma que muestre información sobre el agrupamiento.

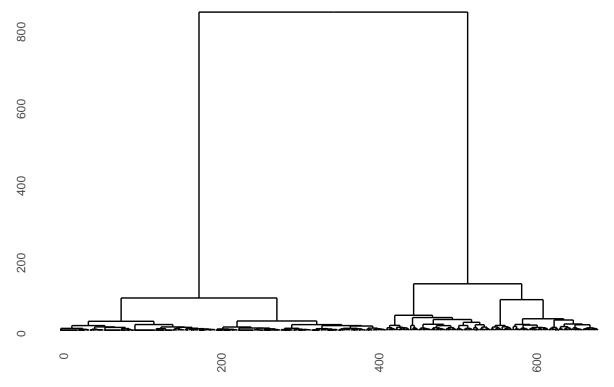
Nota: Consulta la ayuda de la función hclust(..) para ver los tipos de métodos de aglomeración que soporta. También puedes ayudarte de las funciones table(..) y plot(..) para realizar tu elección final. Además, recuerda que no debes tener en cuenta la variable Class cuando ejecutas la función hclust(..).

```
#INSERTAR CÓDIGO AQUÍ

dendrogram <- hclust(dist(BreastCancer.features, method = 'euclidean'), method = 'ward.D')

ggdendrogram(dendrogram, rotate = FALSE, labels = FALSE, theme_dendro = TRUE) + labs(title = "Dendrogram")
```

Dendrograma



 ¿Por qué el dendograma tendrá tantos grupos en el nivel más bajo? ¿Coincide este número con algún otro? Justifica.

RESPUESTA:

• ¿Por qué es necesario usar la función dist(..) al llamar a hclust(..) ?

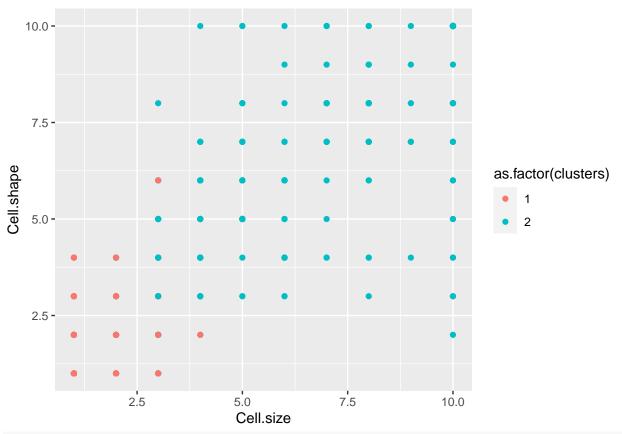
RESPUESTA:

• ¿Por qué no es necesario usar set.seed(..) antes de llamar a hclust(..) ?

RESPUESTA:

• Debido a que helust puede crear un número elevado de clústers, utilice la función cutree(..) para fijar el número de clúster igual al número de clases existentes en el dataset.

```
#INSERTAR CÓDIGO AQUÍ
agrupamientoJ <- hclust(dist(BreastCancer.features, method = 'euclidean'), method = 'ward.D')
clases_aj <- cutree(agrupamientoJ, k = 2)
BreastCancer.features$cluster <- clases_aj
clusters <- BreastCancer.features$cluster</pre>
ggplot(BreastCancer, aes(Cell.size, Cell.shape, color = as.factor(clusters))) + geom_point()
```



table(BreastCancer\$Class, clusters)

##	•	crusi	ters
##		1	2
##	benign	412	32
##	malignant	2	237

-¿Cuando hacemos esta última operación con la función cutree(..), el agrupamiento que obtenemos por hclust(..) es mejor al obtenido con kMeans en el ejercicio anterior?

RESPUESTA: