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(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 Breast-Cancer.

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:
                             "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...
##
    $ Cell.size
                      : Ord.factor w/ 10 levels "1"<"2"<"3"<"4"<...: 1 4 1 8 1 10 1 1 1 ...
                      : Ord.factor w/ 10 levels "1"<"2"<"3"<"4"<...: 1 4 1 8 1 10 1 2 1 ...
##
    $ Cell.shape
    $ 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 ...
##
    $ Bl.cromatin
                      : Factor w/ 10 levels "1", "2", "3", "4", ...: 3 3 3 3 3 9 3 3 1 2 ...
    $ 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 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)
```

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

• 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]))</pre>
str(BreastCancer, width = 85, strict.width = "cut")
## 'data.frame':
                   683 obs. of 11 variables:
  $ Id
                    : num 1000025 1002945 1015425 1016277 1017023 ...
## $ Cl.thickness : num 5 5 3 6 4 8 1 2 2 4 ...
## $ Cell.size
                    : num 1 4 1 8 1 10 1 1 1 2 ...
##
  $ Cell.shape
                    : num 1 4 1 8 1 10 1 2 1 1 ...
##
  $ Marg.adhesion : num 1 5 1 1 3 8 1 1 1 1 ...
##
   $ Epith.c.size
                    : num 2 7 2 3 2 7 2 2 2 2 ...
##
   $ Bare.nuclei
                    : num 1 10 2 4 1 10 10 1 1 1 ...
##
   $ Bl.cromatin : num 3 3 3 3 3 9 3 3 1 2 ...
## $ Normal.nucleoli: num 1 2 1 7 1 7 1 1 1 1 ...
## $ Mitoses
                    : num 1 1 1 1 1 1 1 5 1 ...
   $ 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
                                                       1
## 2
                 5
                                                                      7
                                                                                  10
                            4
                                        4
                                                       5
## 3
                 3
                                                                      2
                                                                                   2
                            1
                                        1
                                                       1
##
     Bl.cromatin Normal.nucleoli Mitoses
                                          1 benign
## 1
                3
                                 1
## 2
                3
                                 2
                                          1 benign
## 3
                3
                                 1
                                          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.

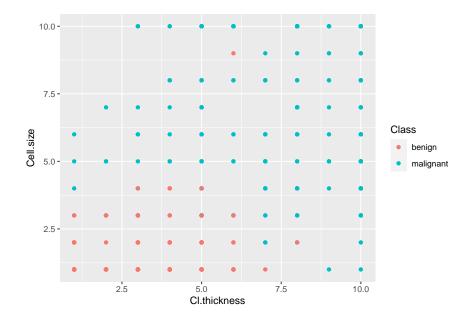
Nota: se recomienda utilizar la función preProcess(.., method = "scale") de la librería caret.

```
# 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
                     : num
                            0.326 1.305 0.326 2.61 0.326 ...
##
   $ Cell.shape
                           0.335 1.338 0.335 2.677 0.335 ...
                     : num
   $ Marg.adhesion : num
                            0.349 1.745 0.349 0.349 1.047 ...
   $ Epith.c.size
                            0.9 3.15 0.9 1.35 0.9 ...
##
                     : num
##
   $ Bare.nuclei
                            0.274 2.744 0.549 1.098 0.274 ...
                     : num
   $ Bl.cromatin
                     : num
                           1.22 1.22 1.22 1.22 1.22 ...
   $ Normal.nucleoli: num 0.328 0.655 0.328 2.293 0.328 ...
                            0.577 0.577 0.577 0.577 0.577 ...
   $ Mitoses
                     : 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.

```
# En este caso solo estamos mostrando el gráfico para las variables Cl.thickness y Cell.size.
ggplot(BreastCancer, aes(Cl.thickness, Cell.size, color = Class)) + geom_point()
```



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.

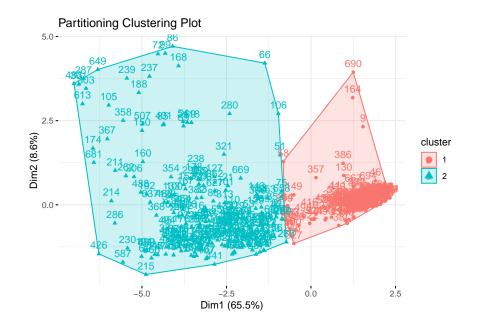
Nota: recuerde que la variable Class no se debe tener en cuenta a la hora de realizar el clustering, ya que estamos haciendo un aprendizaje no supervisado. El atributo Class es útil para usar una métrica de evaluación externa y así comprobar la calidad del agrupamiento.

```
#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
          1.077629 0.4191542
                                 0.4712566
                                                 0.4700817
                                                               0.9423492
                                                                             0.3840871
## 2
          2.554044 2.2270031
                                2.2665986
                                                 2.0080464
                                                               2.4642601
                                                                             2.1322365
##
     Bl.cromatin Normal.nucleoli Mitoses
        0.8578798
##
  1
                          0.4092973 0.617912
##
   2
        2.4865546
                          1.9854346 1.530682
##
##
   Clustering vector:
##
          2
              3
                   4
                            6
                                 7
                                     8
                                             10
                                                  11
                                                      12
                                                           13
                                                               14
                                                                    15
                                                                        16
                                                                                  18
                                                                                           20
     1
                        5
                                          9
                                                                             17
                                                                                      19
          2
                   2
                            2
                                                                          2
##
     1
              1
                        1
                                 1
                                     1
                                          1
                                              1
                                                   1
                                                       1
                                                            1
                                                                 1
                                                                     2
                                                                              1
                                                                                   1
                                                                                       2
                                                                                            1
##
    21
         22
             23
                  25
                      26
                           27
                                28
                                    29
                                         30
                                             31
                                                  32
                                                      33
                                                           34
                                                               35
                                                                    36
                                                                        37
                                                                             38
                                                                                  39
                                                                                      40
                                                                                           42
          2
                                                                          2
                                                                                   2
                                                                                       2
                                                                                            2
##
     2
              1
                   1
                       1
                            1
                                 1
                                     1
                                          1
                                              1
                                                   1
                                                       2
                                                            1
                                                                 1
                                                                     1
                                                                              1
##
    43
         44
             45
                  46
                      47
                           48
                               49
                                    50
                                         51
                                             52
                                                  53
                                                      54
                                                           55
                                                               56
                                                                    57
                                                                        58
                                                                             59
                                                                                  60
                                                                                           62
                                                                                      61
                                          2
                                                   2
##
     2
          2
              2
                        2
                                     2
                                              1
                                                       2
                                                            2
                                                                 2
                                                                     2
                                                                                       2
                   1
                            1
                                 1
                                                                          1
                                                                              1
                                                                                   1
                                                                                            1
```

```
## 616 617 619 620 621 622 623 624 625 626 627 628 629 630 631 632 633 634 635 636
##
                                                 2
                                                                                2
         1
              1
                           1
                               1
                                    1
                                        1
                                             1
                                                     1
                                                          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
                                                          2
                       1
                           1
                               1
                                    1
                                        1
                                             1
                                                 1
                                                     1
                                                              1
                                                                   1
                                                                       1
                                                                           1
##
       658
           659
                660
                    661 662 663
                                 664 665 666
                                              667
                                                   668 669 670
                                                                671 672 673 674
         2
                                                          2
                                                              2
                                                                   2
##
              2
                               1
                                    1
                                        1
                                             1
                                                     1
                                                                       1
       678 679
                680 681 682 683
                                 684 685 686
                                              687 688 689 690 691 692 693 694 695 696
                           2
                                                                       2
##
         1
              1
                       2
                               1
                                    1
                                        1
                                             1
                                                 1
                                                     1
                                                          1
                                                              1
                                                                   1
                                                                           1
##
  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:

Clusters silhouette plot

```
#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
```

Average silhouette width: 0.57 1.00 0.75 0.50 0.25 0.00

• 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:

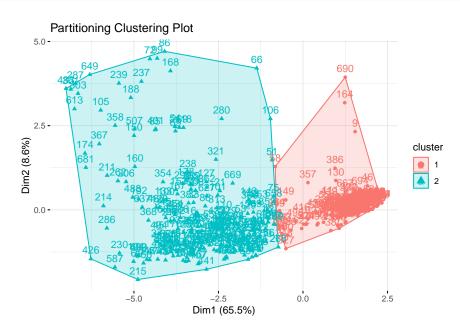
```
c("center", "scale")
c("center", "scale", "YeoJohnson")
c("range")
c("range", "YeoJohnson")
```

-0.25 **-**

Ayúdate de los resultados obtenidos con table y ggplot.

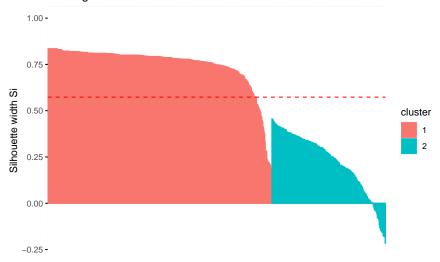
• c("center", "scale")

```
#INSERTAR CÓDIGO AQUÍ
BreastCancer.scale <- preProcess(BreastCancer[, 1:9], method=c("center", "scale"))
BreastCancer.features <- predict(BreastCancer.scale, BreastCancer[, 1:9])
set.seed(101)</pre>
```



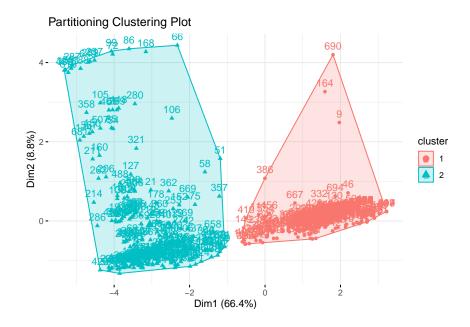
sil <- silhouette(km_clusters\$cluster, dist(BreastCancer.features))
fviz_silhouette(sil)</pre>

Clusters silhouette plot Average silhouette width: 0.57

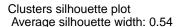


El resultado de agrupamiento no presenta mejoras.

• c("center", "scale", "YeoJohnson")



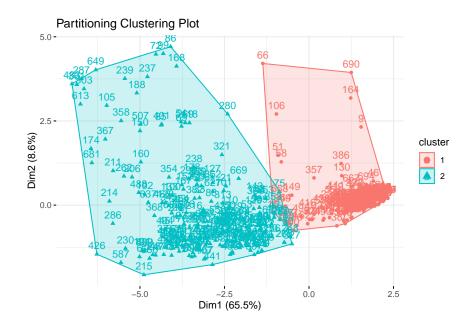
```
sil <- silhouette(km_clusters$cluster, dist(BreastCancer.features))
fviz_silhouette(sil)</pre>
```





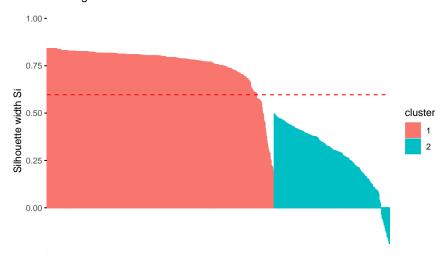
El resultado de agrupamiento sí presenta mejoras. Los clusters están más definidos. Ya no existe *overlapping* entre ellos.

• c("range")



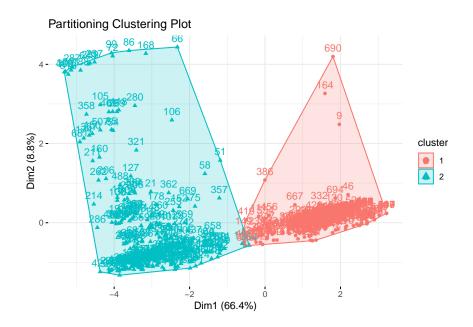
```
sil <- silhouette(km_clusters$cluster, dist(BreastCancer.features))
fviz_silhouette(sil)</pre>
```

Clusters silhouette plot Average silhouette width: 0.6

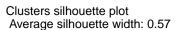


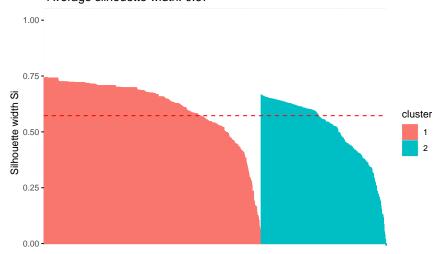
El resultado de agrupamiento sí presenta mejoras.

• c("range", "YeoJohnson")



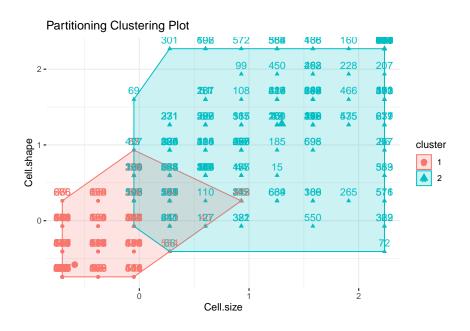
sil <- silhouette(km_clusters\$cluster, dist(BreastCancer.features))
fviz_silhouette(sil)</pre>





El resultado de agrupamiento no presenta mejoras.

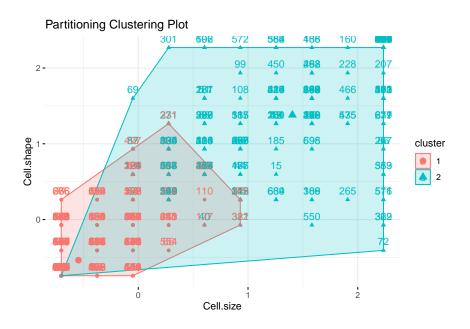
• A partir del par de variables seleccionadas, cree un agrupamiento conformado por tres variables; las dos variables previamente seleccionadas y otra variable seleccionada aleatoriamente entre las variables descriptoras restantes. Este proceso debes repetirlo cinco veces de tal manera que en cada ejecución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



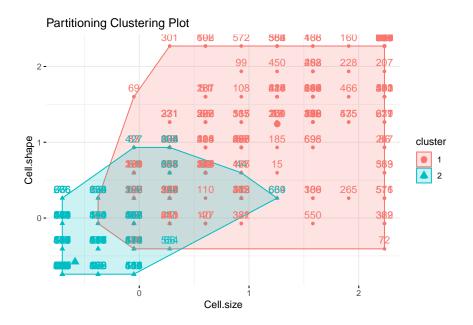
func(vars[2])



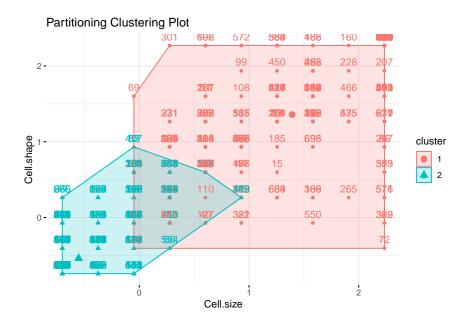
func(vars[3])



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

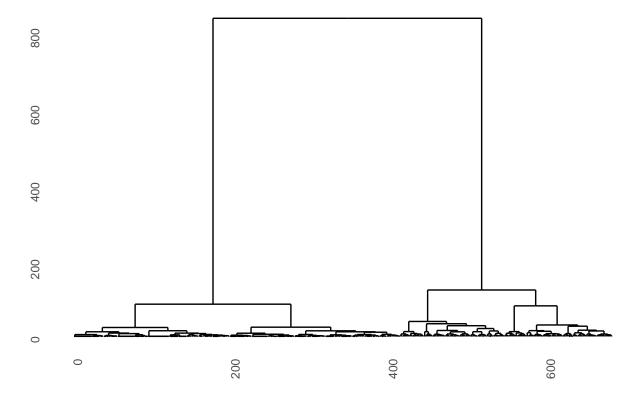
esa información a priori, por lo que necesitaremos de otro tipo de técnicas, como por ejemplo el agrupamiento jerárquico. Un agrupamiento jerárquico en R se puede realizar mediante la función hclust(..), para ello debemos especificar el tipo de método de aglomeración a usar.

• 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")</pre>
```

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(..) ?

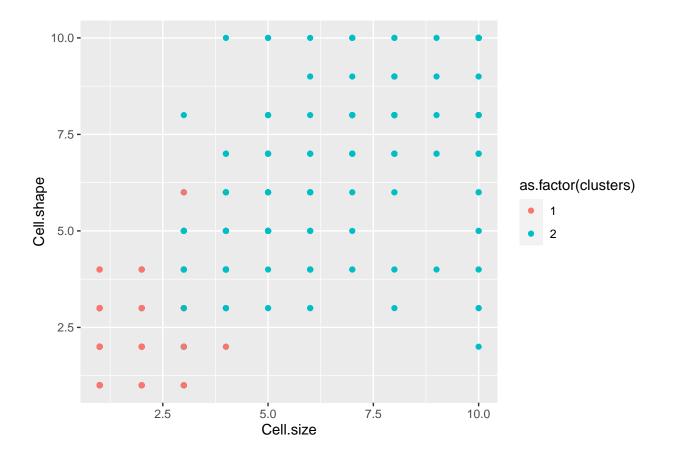
RESPUESTA:

• ¿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)
```

```
## clusters
## 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: