Práctica: clustering en R

Laura Rodríguez Navas

12/07/2020

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("factoextra")
- install.packages("ggdendro")
- install.packages("corrplot")

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

```
library(mlbench)
library(caret)
library(factoextra)
library(ggdendro)
library(corrplot)
```

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
```

```
##
            : 41
                           : 28
                                           : 40
                                                          : 24
                                                                            : 12
            : 39
                    (Other): 61
    5
                                   5
                                                          : 22
##
                                           : 34
                                                  6
                                                                    7
                                                                            : 9
##
    (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]))</pre>
str(BreastCancer, width = 85, strict.width = "cut")
## 'data.frame':
                    683 obs. of 11 variables:
##
   $ Id
                           1000025 1002945 1015425 1016277 1017023 ...
                           5 5 3 6 4 8 1 2 2 4 ...
   $ Cl.thickness
                     : num
##
   $ Cell.size
                           1 4 1 8 1 10 1 1 1 2 ...
                     : num
##
   $ Cell.shape
                     : num 1 4 1 8 1 10 1 2 1 1 ...
                          1511381111...
##
   $ Marg.adhesion
                    : num
   $ Epith.c.size
                     : num 2 7 2 3 2 7 2 2 2 2 ...
##
   $ Bare.nuclei
                            1 10 2 4 1 10 10 1 1 1 ...
                     : num
##
   $ 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 1 5 1 ...
## $ Class : Factor w/ 2 levels "benign", "malignant": 1 1 1 1 1 2 1 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</pre>
head(BreastCancer, 3)
     Cl.thickness Cell.size Cell.shape Marg.adhesion Epith.c.size Bare.nuclei
## 1
                 5
                            1
                                        1
                                                                     7
## 2
                 5
                            4
                                        4
                                                       5
                                                                                 10
## 3
                 3
                            1
                                        1
                                                       1
                                                                     2
                                                                                  2
##
     Bl.cromatin Normal.nucleoli Mitoses Class
```

1 benign

1 benign

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.

1

2

1

```
# INSERTAR CÓDIGO AQUÍ
BreastCancer.scale <- preProcess(BreastCancer[, 1:9], method=c("scale"))
BreastCancer.features <- predict(BreastCancer.scale, BreastCancer[, 1:9])
str(BreastCancer.features, width = 85, strict.width = "cut")
## 'data.frame': 683 obs. of 9 variables:</pre>
```

```
: num 1.77 1.77 1.06 2.13 1.42 ...
##
   $ Cl.thickness
##
   $ 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
##
                     : num 0.274 2.744 0.549 1.098 0.274 ...
   $ Bare.nuclei
  $ 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   ...
##
   $ Mitoses
                     : num 0.577 0.577 0.577 0.577 ...
```

Se ha eliminado la variable clase.

Clustering con kMeans

1

2

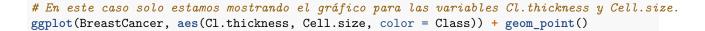
3

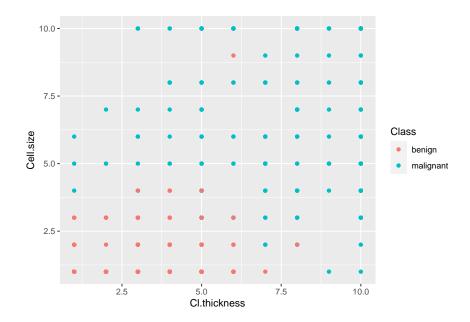
3

3

3

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[, c(2, 3)], centers = 2, nstart = 20)
km_clusters
## K-means clustering with 2 clusters of sizes 500, 183
##
## Cluster means:
##
     Cell.size Cell.shape
## 1 0.4874158
                   0.547417
##
   2 2.5048068
                   2.519609
##
##
   Clustering vector:
              3
##
     1
          2
                   4
                        5
                            6
                                 7
                                      8
                                          9
                                              10
                                                  11
                                                       12
                                                           13
                                                                14
                                                                    15
                                                                         16
                                                                              17
                                                                                  18
                                                                                       19
                                                                                           20
          1
                   2
                        1
                            2
                                 1
                                      1
                                          1
                                                   1
                                                        1
                                                            1
                                                                 1
                                                                     2
                                                                          2
                                                                               1
                                                                                   1
                                                                                        2
                                                                                             1
##
     1
              1
                                               1
##
    21
         22
             23
                  25
                      26
                           27
                                28
                                    29
                                         30
                                             31
                                                  32
                                                       33
                                                           34
                                                                35
                                                                    36
                                                                         37
                                                                              38
                                                                                  39
                                                                                       40
                                                                                           42
          2
                                                   1
                                                        2
                                                                          2
##
     1
              1
                   1
                        1
                            1
                                 1
                                      1
                                          1
                                               1
                                                            1
                                                                 1
                                                                      1
                                                                               1
                                                                                   1
                                                                                        1
                                                                                             1
```

##

46 47

```
##
                                        2
                                                 2
                           1
                                1
                                    1
                                             1
                                                      1
                                                              2
                                                                   1
                                                                                  635
  616 617 619 620 621 622 623 624 625 626 627 628 629 630 631 632 633 634
##
                                                                                      636
##
                                                 2
                                                                   1
                640 641 642 643 644 645 646 647 648 649 650 651 652 653 654 655
##
  637 638
           639
                                                                                      656
##
         1
              1
                  1
                       1
                           1
                                1
                                    1
                                        1
                                             1
                                                 1
                                                      1
                                                          2
                                                               1
                                                                   1
                                                                       1
                                                                            1
                                                                                1
                                                                                    1
                660 661 662 663 664 665 666
                                              667 668 669 670
                                                                671 672 673 674
##
   657 658
           659
                                                                                  675 676
                                                               2
                                                                   2
##
         1
              2
                       1
                           1
                                1
                                    1
                                        1
                                             1
                                                 1
                                                      1
                                                          2
                                                                       1
                                                                            1
##
  677 678 679
                680 681 682 683 684 685 686
                                              687 688 689 690 691 692 693 694 695 696
##
         1
              1
                       2
                           2
                                1
                                    1
                                        1
                                             1
                                                 1
                                                      1
                                                          1
                                                               1
                                                                       2
##
   697 698
           699
##
     2
         2
##
## Within cluster sum of squares by cluster:
   [1] 118.6897 179.0062
    (between_SS / total_SS = 78.2 %)
##
##
##
  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:

El resultado obtenido del clustering representa el 78.2% de la información del dataset.

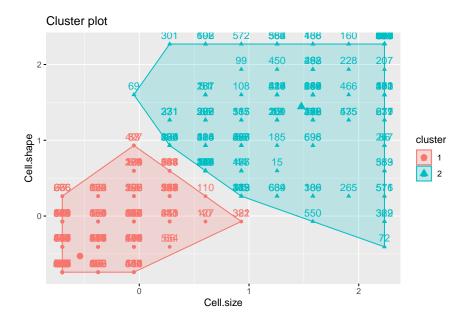
```
table(km_clusters$cluster, BreastCancer$Class)
```

```
## benign malignant
## 1 440 60
## 2 4 179
```

Podemos apreciar que el primer cluster engloba a un mayor número de ejemplos benignos que malignos. También se puede apreciar que el segundo cluster engloba a más ejemplos malignos que benignos. Sin embargo, el primer cluster también alberga ejemplos del tipo maligno. Y el segundo cluster, también alberga ejemplos del tipo benigno. Por ello, podemos concluir que es un buen agrupamiento aunque los resultados son mejorables; el número de ejemplos benignos del segundo cluster es muy pequeño (4), casi se ha agrupado perfectamente.

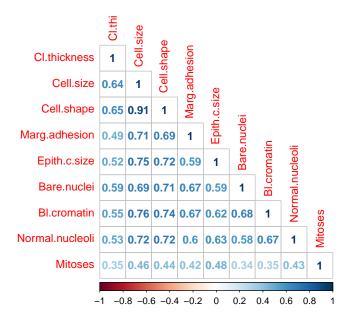
Si representamos los resultados en una gráfica, se puede apreciar en ella que los clusters están bien definidos con una frontera clara entre ellos.

```
#INSERTAR CÓDIGO AQUÍ
fviz_cluster(km_clusters, data = BreastCancer.features[, c(2, 3)])
```



Para el clustering, se han elegido las variables *Cell.size* y *Cell.shape* porqué forman el par de variables más correlacionadas del dataset. Cuanto más correlacionadas están dos variables, serán más fáciles de agrupar, porqué sus valores están más agrupados.

```
#INSERTAR CÓDIGO AQUÍ
corrplot(cor(BreastCancer.features), method = "number", type = "lower")
```



• 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")
```

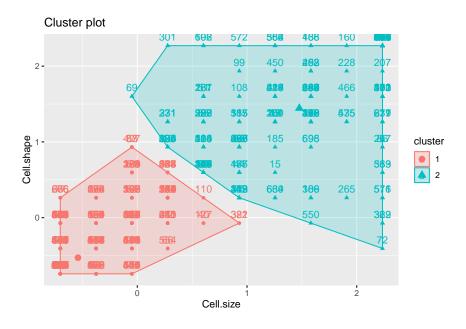
Ayúdate de los resultados obtenidos con table y ggplot.

• c("center", "scale")

```
#INSERTAR CÓDIGO AQUÍ
BreastCancer.scale <- preProcess(BreastCancer[, 1:9], method=c("center", "scale"))
BreastCancer.features <- predict(BreastCancer.scale, BreastCancer[, 1:9])
set.seed(101)
km_clusters <- kmeans(BreastCancer.features[, c(2, 3)], centers = 2, nstart = 20)
table(km_clusters$cluster, BreastCancer$Class)</pre>
```

```
## benign malignant
## 1 440 60
## 2 4 179
```

```
fviz_cluster(km_clusters, data = BreastCancer.features[, c(2, 3)])
```



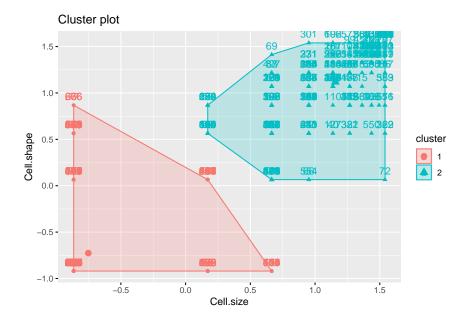
El resultado no presenta mejoras.

• c("center", "scale", "YeoJohnson")

```
set.seed(101)
km_clusters <- kmeans(BreastCancer.features[, c(2, 3)], centers = 2, nstart = 20)
table(km_clusters$cluster, BreastCancer$Class)</pre>
```

```
## benign malignant
## 1 409 5
## 2 35 234
```

```
fviz_cluster(km_clusters, data = BreastCancer.features[, c(2, 3)])
```

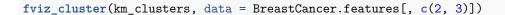


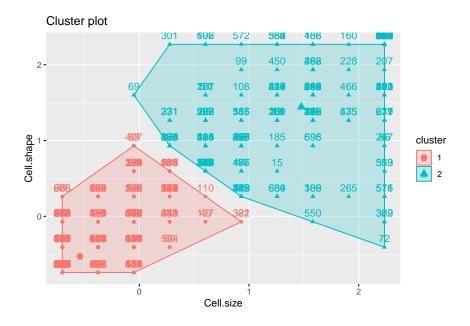
El resultado de agrupamiento presenta mejoras. El primer cluster ha reducido el número de ejemplos malignos a 5, y casi se ha agrupado perfectamente. Y aunque, han aumentado el número de ejemplos benignos en el segundo cluster, este presenta mayor número de ejemplos malignos. Visualmente vemos que el segundo cluster se ha cohesionado mucho más, y la separación entre los clusters ha aumentado.

• c("range")

```
#INSERTAR CÓDIGO AQUÍ
BreastCancer.scale <- preProcess(BreastCancer[, 1:9], method=c("range"))
BreastCancer.features <- predict(BreastCancer.scale, BreastCancer[, 1:9])
set.seed(101)
km_clusters <- kmeans(BreastCancer.features[, c(2, 3)], centers = 2, nstart = 20)
table(km_clusters$cluster, BreastCancer$Class)</pre>
```

```
## benign malignant
## 1 440 60
## 2 4 179
```





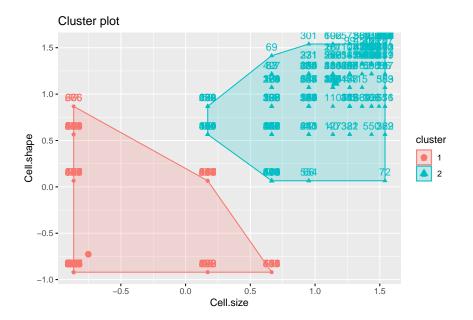
El resultado no presenta mejoras.

• c("range", "YeoJohnson")

```
#INSERTAR CÓDIGO AQUÍ
BreastCancer.scale <- preProcess(BreastCancer[, 1:9], method=c("range", "YeoJohnson"))
BreastCancer.features <- predict(BreastCancer.scale, BreastCancer[, 1:9])
set.seed(101)
km_clusters <- kmeans(BreastCancer.features[, c(2, 3)], centers = 2, nstart = 20)
table(km_clusters$cluster, BreastCancer$Class)</pre>
```

```
##
## benign malignant
## 1 409 5
## 2 35 234
```

fviz_cluster(km_clusters, data = BreastCancer.features[, c(2, 3)])



El resultado de agrupamiento presenta mejoras. Justamente, presenta las mismas mejoras que si escalamos con el método que contiene c("center", "scale", "YeoJohnson").

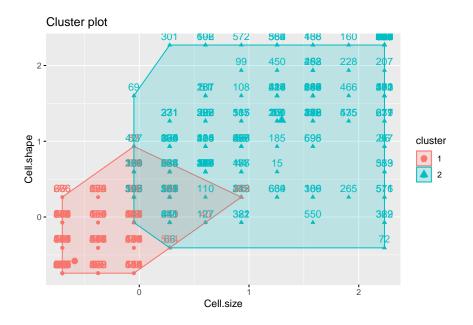
• A partir del par de variables seleccionadas, cree un agrupamiento conformado por tres variables; las dos variables previamente seleccionadas y otra variable seleccionada aleatoriamente entre las variables descriptoras restantes. Este proceso debes repetirlo cinco veces de tal manera que en cada ejecución 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])

func <- function (var) {
   new_data <- c("Cell.size", "Cell.shape", var)
   set.seed(101)
   km_clusters <- kmeans(BreastCancer.features[new_data], centers = 2, nstart = 20)
   fviz_cluster(km_clusters, data = BreastCancer.features[, c("Cell.size", "Cell.shape")])
}

vars <- c("Cl.thickness", "Marg.adhesion", "Epith.c.size", "Bare.nuclei", "Bl.cromatin")

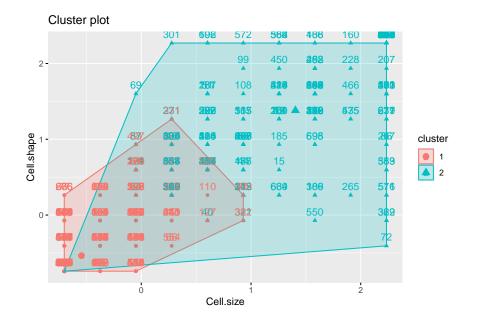
func(vars[1])</pre>
```



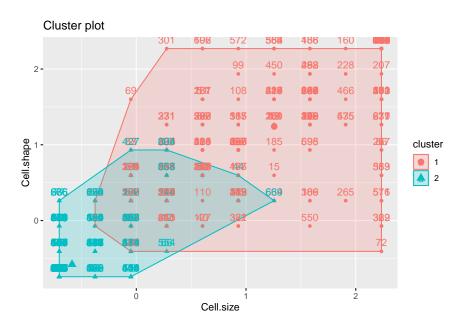
func(vars[2])



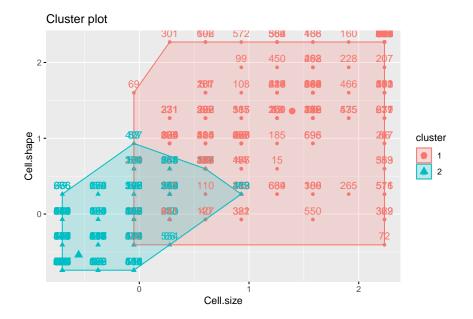
func(vars[3])



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

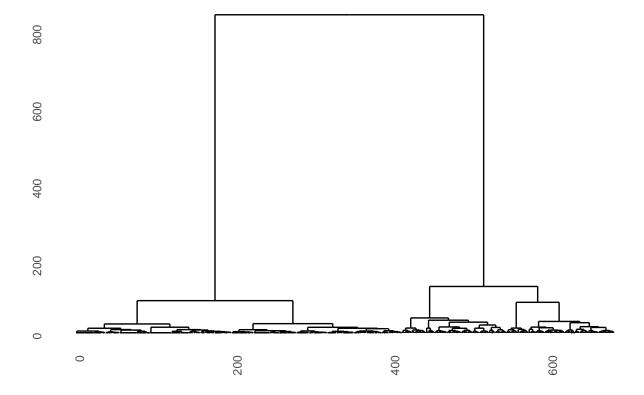
Como hemos visto, con kmeans debemos de especificar a priori el número de clusters que queremos obtener. Dado que el clustering es una tarea de aprendizaje no supervisado, en algunos casos puede que no tengamos esa información a priori, por lo que necesitaremos de otro tipo de técnicas, como por ejemplo 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")</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(..) ?

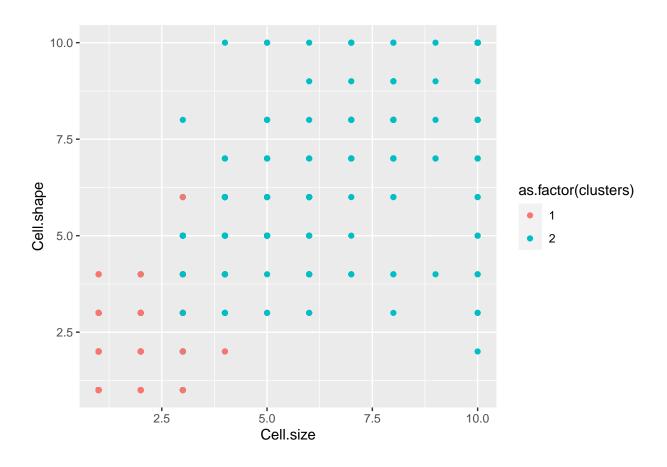
RESPUESTA:

• ¿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: