

Taula de contingut

Format d´entrega	2
Exercici 1	4
Exercici 2	5
Requisits	5
Preparació de les dades	6
Determinació del nombre de clústers	8
Mètode d´agregació <i>k-means</i>	12
Exercici 3	17
Mètode d´agregació <i>k-medoids</i>	17
Estimació del nombre òptim de clùsters	18
Càlcul del mètode PAM	19
El mètode aglomeradors <i>AGNES</i>	23
Mesures de similitud	23
Càlcul de l´arbre jeràrquic	
Tallar el dendograma en diferents grups	
Comparació dels mètodes d´agrupació	
Bibliografia	



Format d´entrega

Aquest document s´ha realitzat mitjançant Markdown¹ amb l´ajuda de l´entorn de desenvolupament RStudio² utilitzant les característiques que aquest ofereix per a la creació de documents R reproduïbles.

La documentació generada en la realització de la pràctica es troba allotjada en **GitHub** al següent repositori:

https://github.com/rsanchezs/data-minig

En aquest repositori es poden trobar els següents fitxers:

- Aquest document en formats **pdf** i **docx** amb el nom rsanchezs_PAC2.
- Un document **R Markdown**³ que es pot utilitzar per a reproduir tots els exemples presentats a la PAC.
- El conjunt de dades utilitzades.

¹ La documentació oficial es pot trobar a: http://www.sthda.com/english/rpkgs/factoextra.

² Per a més informació: https://es.wikipedia.org/wiki/K-medoids

³ https://rmarkdown.rstudio.com/



1. Nota: Propietat intel·lectual

Sovint és inevitable, al produir una obra multimèdia, fer ús de recursos creats per terceres persones. És per tant comprensible fer-lo en el marc d'una pràctica dels Estudis, sempre que això es documenti clarament i no suposi plagi en la pràctica.

Per tant, al presentar una pràctica que faci ús de recursos aliens, s'ha de presentar juntament amb ella un document en quin es detallin tots ells, especificant el nom de cada recurs, el seu autor, el lloc on es va obtenir i el seu estatus legal: si l'obra està protegida pel copyright o s'acull a alguna altra llicència d'ús (Creative Commons, llicència GNU, GPL ...).

L'estudiant haurà d'assegurar-se que la llicència no impedeix específicament el seu ús en el marc de la pràctica. En cas de no trobar la informació corresponent haurà d'assumir que l'obra està protegida per copyright.

Hauríeu de, a més, adjuntar els fitxers originals quan les obres utilitzades siguin digitals, i el seu codi font si correspon.



Exercici 1

En relació amb el cas pràctic que vaig desenvolupar a la PAC1 es tractava d'implementar un *recommender system* (de l'anglès, sistemes de recomanació). És per això que, utilitzar els mètodes no supervistats no seria un bona elecció.

Avui dia, l'algoritme *Nearest Neighborhood* (de l'anglès, algoritme del veí més proper), és el més utilitzat avui dia en els sistemes de recomanació.

Els algoritmes de veïns més pròxims s´han desenvolupat en dues perspectives possibles: recomanació de veïns pròxims per usuari i per ítem:

- **Centrats en usuari** (*User kNN*): Es recomanen a l'usuari ítems que han agradat a usuaris similars.
- **Centrats en ítem (Item kNN):** Es recomanen a l'usuari ítems que es pareixen a ítems que li han agradat.



Exercici 2

Requisits

Per començar, per a la realització del nostre anàlisi necessitarem els següents paquets:

- cluster per a la computació dels algoritmes d'agregació.
- factoextra per a la visualització de resultats d'agregació i que es fonamenta en el paquet ggplot2.⁴
- clValid que s´utilitza per a comparar els mètodes d´agregació.

El paquet **factoextra** conté funcions per anàlisi de *clustering* i visualització dels resultats:

Funció	Descripció
<pre>dist(fviz_dist, get_dist)</pre>	Visualització i computació de la matriu de distàncies
<pre>get_clust_tendency</pre>	Avaluació de la tendència d´agregació
<pre>fviz_nbclust(fviz_gap_stat)</pre>	Determinació del nombre òptim de clústers
fviz_dend	Visualització de dendrogrames

⁴ La documentació oficial es pot trobar a: http://www.sthda.com/english/rpkgs/factoextra.



fviz_cluster Visualització dels resultats d´agrupament

fviz_mclust Visualització dels resultats del model

d'agrupament

fviz silhouette Visualització de la informació de la silueta

hkmeans K-means jeràrquic

eclust Visualització de l'anàlisi de agrupament

Podem instal·lar els dos paquets com es mostra en la següent línia de codi:

```
# Instalació paquets clustering
install.packages(c("cluster", "factoextra", "clValid"))
```

En acabat, ens caldrà carregar les llibreries a la sessió R:

```
# Carreguem les llibreries
library(cluster)
library(factoextra)
library(clValid)
```

Preparació de les dades

D´entrada, per a realitzar una anàlisi d´agregació en R cal assegurar-se d´unes quantes coses:

- Que les files es corresponen a observacions (individuals) i les columnes a variables.
- Qualsevol valor desconegut en el nostre conjunt de dades ha de ser o bé eliminat o bé substituït per exemple amb el valor de la mitjana o per el valor més freqüent.
- Les dades han de ser estar discretitzades.



Per il·lustrar l'anàlisi d'agregació farem ús del conjunt de dades USArrests, que conté dades estadístiques d'agressions, assassinats i violacions en cada un dels 50 estats d'USA l'any 1973.

```
# Carreguem les dades
data("USArrests")
df <- USArrests</pre>
```

En primer lloc, podem eliminar els valors desconeguts en el nostre conjunt de dades com es mostra a continuació:

```
# Eliminem valors desconeguts
df <- na.omit(df)</pre>
```

En segon lloc, discretitzarem les nostres dades estandaritzant-les amb l'ajuda de la funció scale():

```
# Estandaritzem les variables

df <- scale(df)
head(df, n = 3)

## Murder Assault UrbanPop Rape
## Alabama 1.24256408 0.7828393 -0.5209066 -0.003416473
## Alaska 0.50786248 1.1068225 -1.2117642 2.484202941
## Arizona 0.07163341 1.4788032 0.9989801 1.042878388
```



Determinació del nombre de clústers

Per a determinar el nombre de clústers farem ús de la funció fviz_nbclust() del paquet factoextra que calcula els mètodes Elbow, Silhouhette i Gap.

El prototip de la funció es el següent:

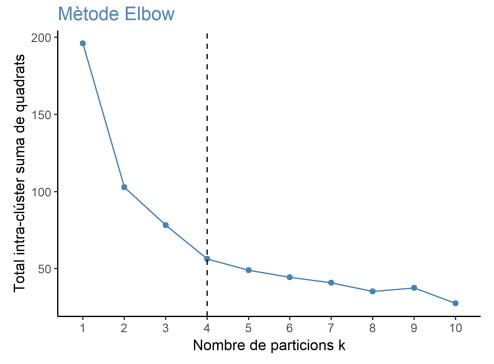
```
fviz_nbclust(x, FUNcluster, method = c("silhouette", "wss", "gap_stat"))
```

on els arguments són els següents:

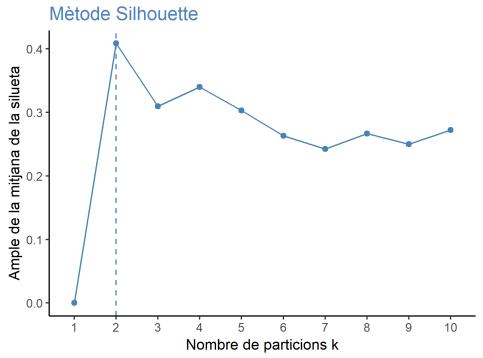
- x: matriu o data frame.
- **FUNcluster:** una funció d´agregació. Valors possibles: kmeans, pam, clara i hcut.
- **method:** mètode per a determinar el nombre òptim de clústers. Valors possibles: **Elbow**, **Silhouhette** i **Gap**

A continuació, es mostra com determinar el nombre òptim de particions per al mètode *k-means*.

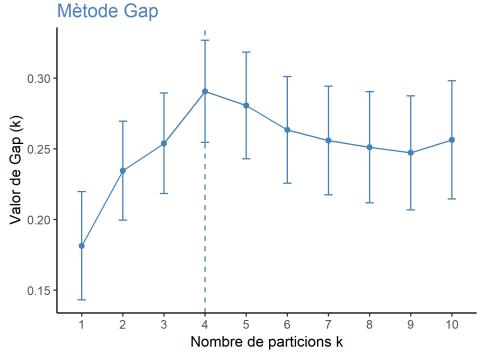












Com podem observar en els gràfics:

- El mètode Elbow ens suggereix 4 clústers.
- El mètode Silhoutte ens suggereix 2 clústers.
- El mètode Gap ens sugereix 4 clústers.

Així és que, segons aquestes observacions podem considerar k = 4 com el nombre òptim de clústers.



Mètode d'agregació k-means

A causa de que, l'algoritme *k-means* comença seleccionant un centroide aleatòriament, es recomanable fer ús de la funció set.seed() a l'efecte de aconseguir resultats reproduïbles. Així el lector d'aquest document obtindrà els mateixos resultats que es presenten tot seguit.

A continuació es mostra com aplicar l'algorisme k-means amb k = 4:

```
# Execució k-means amb k = 4
set.seed(123)
kmeansFit <- kmeans(df, 4, nstart = 25)</pre>
```

Podem mostrar per pantalla els resultats amb la següent línia de codi:

```
# Mostrem els resultats
print(kmeansFit)
## K-means clustering with 4 clusters of sizes 13, 16, 13, 8
##
## Cluster means:
        Murder Assault UrbanPop
                                            Rape
## 1 -0.9615407 -1.1066010 -0.9301069 -0.96676331
## 2 -0.4894375 -0.3826001 0.5758298 -0.26165379
## 3 0.6950701 1.0394414 0.7226370 1.27693964
## 4 1.4118898 0.8743346 -0.8145211 0.01927104
##
## Clustering vector:
         Alabama
                         Alaska
                                      Arizona
                                                     Arkansas
##
California
##
                              3
                                             3
               4
                                                            4
3
        Colorado Connecticut
                                                      Florida
##
                                      Delaware
Georgia
##
                3
                              2
                                             2
                                                            3
```



##	Hawaii	Idaho	Illinois	Indiana	
Iowa			2		
##	2	1	3	2	
1	V	Vantualni	Laudaiana	Medica	
## Maraya	Kansas	Kentucky	Louisiana	Maine	
Mary!	2 2	1	4	1	
3	2	1	4	1	
	Massachusetts	Michigan	Minnesota	Mississippi	
Miss		Hitchigan	Hillicsoca	Піззіззіррі	
##	2	3	1	4	
3	_	3	-		
##	Montana	Nebraska	Nevada	New Hampshire	
New 3	Jersey			'	
##	1	1	3	1	
2					
##	New Mexico	New York	North Carolina	North Dakota	
Ohio					
##	3	3	4	1	
2	-17.1				
##	Oklahoma	Oregon	Pennsylvania	Rhode Island Sou	
	arolina	2	2	2	
## 4	2	2	2	2	
##	South Dakota	Tennessee	Texas	Utah	
Verm		Tellile33ee	TEXAS	Ocan	
##	1	4	3	2	
1	_	·		_	
##	Virginia	Washington	West Virginia	Wisconsin	
Wyom:		<u> </u>	J		
##	2	2	1	1	
2					
##					
## Within cluster sum of squares by cluster:					
## [1] 11.952463 16.212213 19.922437 8.316061					
<pre>## (between_SS / total_SS = 71.2 %)</pre>					
##					
## Available components:					
## ## [·	1] "cluster"	"centers"	"totss"	"withinss"	
## [.	Il cingrei.	center's	LULSS	MT CHTHI22	



```
## [5] "tot.withinss" "betweenss" "size" "iter"
## [9] "ifault"
```

Podem observar en la sortida el següent:

- La mitjana de clústers: una matriu, on les files són el nombre de clúster i les columnes són les variables.
- El vector de particions: un vector d´enters (de 1:k) que indica el clúster on cada observació ha sigut agrupada.

Així mateix, és recomanable realitzar un gràfic amb els resultats del model. Ja sigui, per a escollir el nombre de clústers, ja sigui per a comparar diferents anàlisis.

Una possible opció és visualitzar les dades en un diagrama de dispersió acolorint cada observació d'acord al grup assignat.

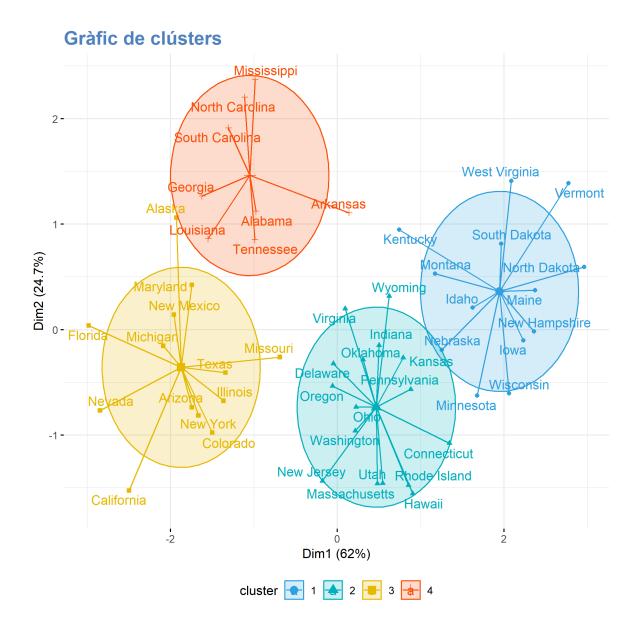
El problema és que el nostre conjunt de dades conté més de 2 variables i no és possible representar el model en dues dimensions.

Convé fer ressaltar que, una possible solució és reduir la dimensionalitat fent ús d'un algoritme de reducció del nombre d'atributs, com per exemple **Principal Component Analysis (PCA)**.

En aquest sentit, farem ús de la funció fviz_cluster() que ens permetrà visualitzar els clústers i que utilitza PCA quan el nombre de variables és més gran de 2. Passarem com a arguments el resultat del model i el conjunt de dades original:







Podem observar en el gràfic que les observacions són representades mitjançant punts i que en el nostre cas s´ha usat PCA. A més, s´han dibuixat el.lipses per tal de diferenciar cada clúster.



Exercici 3

Mètode d'agregació k-medoids

El següent apartat tracta del mètode d'agregació k-medoids i la seva implementació mitjançant l'algoritme de Partició al voltant de Medoids PAM).

Igual com k-means, K-medoid és una tècnica clàssica de partició de grups que divideix les dades conformades per n objectes en k grups (amb k fixat *a priori*).

És més robust davant el soroll i valors atípics que k-means perquè minimitza una suma de dissimilituds (entre parells de punts) en comptes d'una suma de distàncies euclidiana quadrades.

Un **medoid** pot ser definit com l'objecte d'un grup on la seva dissimilitud mitjana a tots els objectes en el grup és mínima. És el punt situat més cap al centre en tot el grup.⁵

Per a determinar el nombre de clústers farem ús de la funció pam() del paquet cluster.

El prototip de la funció es el següent:

on els arguments són els següents:

⁵ Per a més informació: https://es.wikipedia.org/wiki/K-medoids

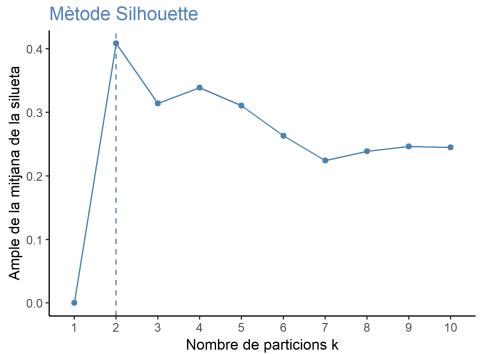


- x: on x pot ser:
- Una matriu o data frame de tipus numèric: cada fila correspon a una observació i cada columna a una variable.
- Una matriu de dissimilituds: en aquest cas x es normalment la sortida o bé de la funció daisy() o bé de dist().
- K: el nombre de clústers.
- **metric:** la mesura de similitud. O bé "euclidiana" o bé "manhattan".
- **stand:** un valor de tipus lògic; si es TRUE, les variables en x són estandarditzades.

Estimació del nombre òptim de clùsters

Per a estimar el nombre òptim de clústers utilitzarem la mètrica de Silhoutte. La idea central és calcular l'algoritme PAM amb diferents valors de k. Per a la realització d'aquesta tasca farem ús de la funció fviz nbclust():





Com podem observar en el gràfic el resultat per al mètode Silhoutte ens suggereix 2 clústers.

Càlcul del mètode PAM

El següent codi calcula el mètode PAM amb k = 2:

```
# Execució de l'algoritme PAM
pamFit <- pam(df, 2)
# Visualització de resultats
print(pamFit)
## Medoids:
## ID Murder Assault UrbanPop Rape
## New Mexico 31 0.8292944 1.3708088 0.3081225 1.1603196</pre>
```



## Nebraska 27 -		250772 -0.244563	6 -0.5052109	
## Clustering vect ## Alabama	cor: Alaska	Arizona	Arkansas	
California				
## 1	1	1	2	
1				
## Colorado Georgia	Connecticut	Delaware	Florida	
## 1	2	2	1	
1	2	2	1	
## Hawaii	Idaho	Illinois	Indiana	
Iowa				
## 2	2	1	2	
2				
## Kansas	Kentucky	Louisiana	Maine	
Maryland	-			
## 2	2	1	2	
1				
## Massachusetts Missouri	Michigan	Minnesota	Mississippi	
	1	2	1	
## 2 1	1	2	1	
## Montana	Nobnacka	Novada	Nov Hampshipa	
	Nebraska	Nevada	New Hampshire	
New Jersey	2	1	2	
## 2	2	1	2	
2 ## New Mexico	New York	North Carolina	North Dakota	
Ohio				
## 1	1	1	2	
2				
## Oklahoma	Oregon	Pennsylvania	Rhode Island	Sou
th Carolina	31 3031			
## 2	2	2	2	
1	_	_	_	
## South Dakota	Tennessee	Texas	Utah	
Vermont	remiessee	TCAUS	ocan	
## 2	1	1	2	
2	1	1	2	
	Machinetan	Wost Vinginia	Micconsin	
## Virginia	Mazurugron	West Virginia	Wisconsin	
Wyoming ##	2	2	2	
## 2	2	2	2	



```
## Objective function:
## build swap
## 1.441358 1.368969
##
## Available components:
## [1] "medoids" "id.med" "clustering" "objective" "isola tion"
## [6] "clusinfo" "silinfo" "diss" "call" "data"
```

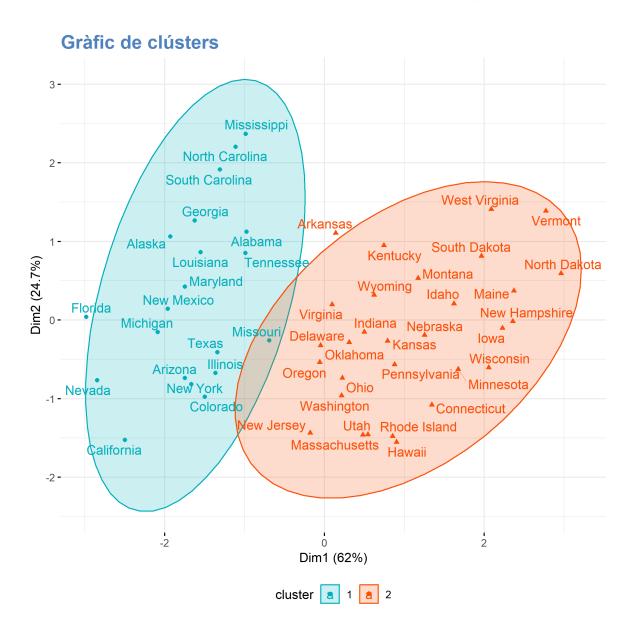
Podem observar en la sortida el següent:

- Els grups medoids: una matriu, on les files són els medoids i les columnes són les variables.
- El vector de particions: un vector d´enters (de 1:k) que indica el clúster on cada observació ha sigut agrupada.

Igual com hem fet en l'exercici anterior utilitzarem la funció fviz_cluster() del paquet factoextra per a visualitzar les particions:

```
# Visualitzem els clústers
fviz_cluster(pamFit,
    main = "Gràfic de clústers",
    palette = c("#00AFBB", "#FC4E07"),
    ellipse.type = "t",
    repel = TRUE,
    ggtheme = theme_minimal()) +
    theme(legend.position = "bottom",
        plot.title = element_text(color="#4F81BD", size=16, face="bold")
)
```







El mètode aglomeradors AGNES

En el mètode de *k-means* sempre es comença per un nombre fix de grups coneguts *a priori*. Això fa que sigui útil quan tenim alguna idea de quants grups hi ha en realitat.

Ara bé, hi ha situacions en què el nostre desconeixement del domini d'aplicació és encara més gran. Per tant, ni tan sols és possible fixar una quantitat k de punts inicials entorn dels quals anar formant els grups.

En aquest cas, cal reflectir aquest desconeixement adoptant una actitud neutra respecte a les dades. Una de les maneres de resoldre el problema és mitjançant els *mètodes aglomeradors*.

Els **mètodes aglomeradors** (en àngles, *Agglomerative Nesting*) comencen considerant que cada objecte forma un grup per si mateix (un grup d'un sol element) i llavors avaluen les distàncies entre grups (o objectes, en el primer pas) i creen per aglomeració els diversos grups finals.

Mesures de similitud

Amb la finalitat de decidir quins objectes han de ser agrupats i quins clústers dividits, hem de fer ús de les mesures de similitud entre els elements.

Tal com s´ha estudiat en l'apartat 3 dels apunts de l´assignatura existeixen diferents mètodes per a calcular la di(similitud), com per exemple les distancies Euclidià i *Hamming*.



Podem calcular les distancies entre cada par d'elements amb l'ajuda de la funció `dist():

```
# Calcula la matriu de disimilitud
matrixDist <- dist(df, method = "euclidean")</pre>
```

El resultat de la línia de codi anterior és la matriu de distàncies o dissimilituds. Per defecte, la funció dist() calcula la distància Euclidià, no obstant podem indicar altres mètriques passant-les a l'argument method.

Càlcul de l'arbre jeràrquic

Així doncs, donada una matriu de distàncies calculada amb la funció dist(), podem crear un arbre jeràrquic amb l'ajuda de la funció hclust():

```
hcFit <- hclust(d = matrixDist, method = "ward.D2")</pre>
```

Cal fer una especial referència, als diferents tipus de mètodes aglomeratius. Tot seguit, es mostren els més habituals:

- Maximum o *complete linkage*: La distància entre dos clústers es defineix com el màxim valor de totes les distàncies de cada par d´elements entre els elements del clúster 1 i els elements del clúster 2. Aquest mètode tendeix a produir particions compactes.
- Minium o single linkage: La distància entre dos clústers es defineix com el mínim valor de totes les distàncies de cada par d'elements entre els elements del clúster 1 i els elements del clúster 2. Aquest mètode tendeix a produir particions molt grans.



- Mean o *average linkage*: La distància entre dos clústers es defineix com la distància mitjana entre els elements de la partició 1 i els elements de la partició 2.
- *Centroid linkage*: La distància entre dos clústers es defineix com la distància entre el centroide de la particio 1 i el centroide de la partició 2.
- *Ward´s minium variance method*: Aquest mètode minimitza la variància intra-clústers.

Convé destacar que, es recomanable utilitzar el mètode *Ward´s* o *complete linkage*.

Tallar el dendograma en diferents grups

Un dels problemes amb el clustering jeràrquic és que com no proporcionem el nombre de clústers *a priori*, no sabem on tallar l'arbre per a formar clústers.

Podem fer ús de la funció cutree() per a tallar un arbre passant el nombre de particions o l'altura de l'arbre:

```
# Talla l'argre en 4 groups
grp <- cutree(hcFit, k = 4)
head(grp, n = 4)

## Alabama Alaska Arizona Arkansas
## 1 2 2 3</pre>
```

Podem conèixer el nombre d'elements en cada partició com es mostra a continuació:

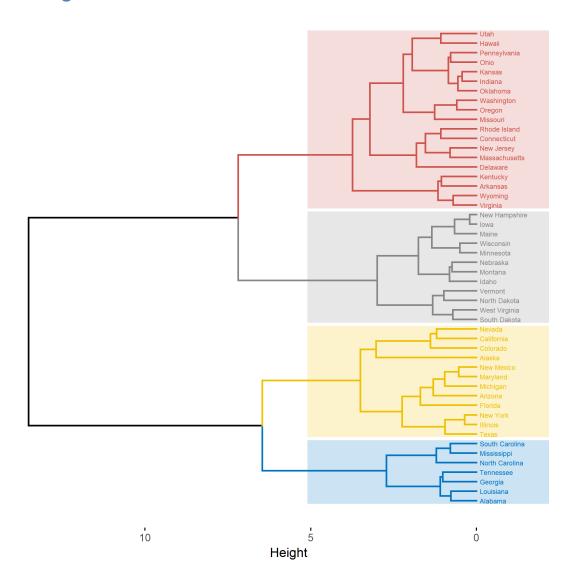


```
# Nombre de elements en cada partició
table(grp)
## grp
## 1 2 3 4
## 7 12 19 12
```

A continuació, es mostra la representació gràfica de l'arbre jeràrquic. Aquest gràfic es coneix com a dendrograma:

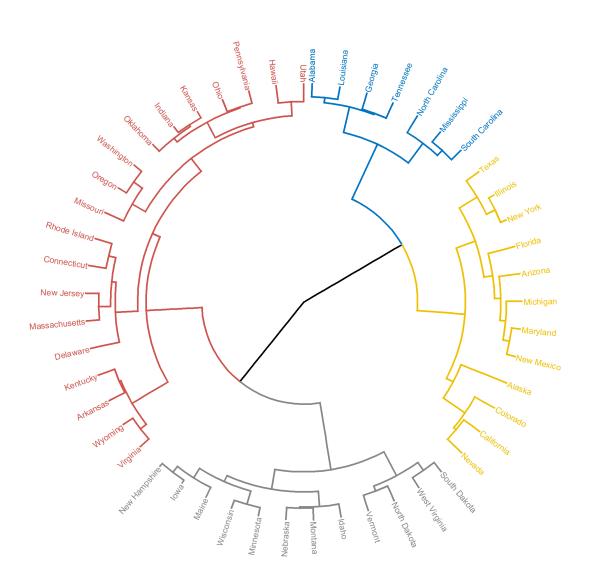


Dendograma de clústers



També, podem obtindre un dendrograma circular mitjançant la opció type = "circular":





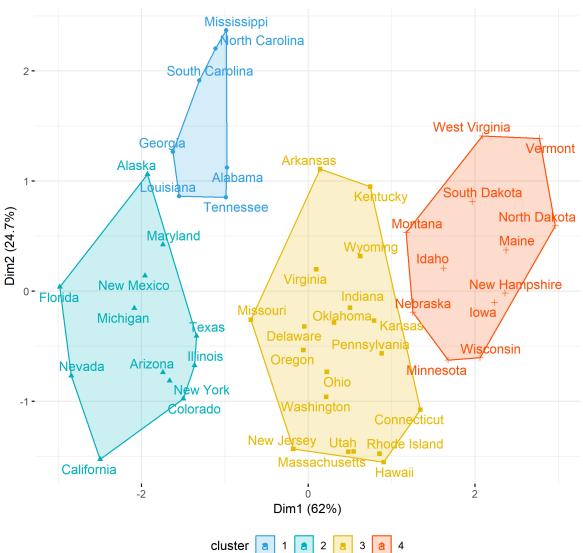


Amb l'ajuda de la funció **fviz_cluster()**, podem visualitzar el resultat en un diagrama de dispersió. Els elements són representats mitjançant punts, a més s'utilitza PCA:

```
# Diagrama de clústers
fviz_cluster(list(data = df, cluster = grp),
    main = "Gràfic de clústers",
    palette = c("#2E9FDF", "#00AFBB", "#E7B800", "#FC4E07"),
    ellipse.type = "convex",
    repel = TRUE,
    show.clust.cent = FALSE, ggtheme = theme_minimal()) +
    theme(legend.position = "bottom",
        plot.title = element_text(color="#4F81BD", size=16, face="bold"))
```









Comparació dels mètodes d´agrupació

Recollint tot el que s´ha dit, farem ús de la funció clValid() del paquet clValid per a comparar els diferents mètodes d´agrupació.

El prototip de la funció és el següent:

```
clValid(obj, nClust, clMethods = "hierarchical",
validation = "stability", maxitems = 600,
metric = "euclidean", method = "average")
```

on els arguments són:

- **obj**: Una matriu o data frame numèric. Les files son els elements que s´han d´agrupar i les columnes són les observacions.
- **nClust**: Un vector numèric especificant el nombre de particions que s´han d´avaluar.
- validation: El tipus de mètrica de validació. Possibles valors són "internal", "stability", and "biological. També, permet escollir varies mètriques a la vegada.
- maxitems: El nombre màxim d´elements (files en la matriu) que han de ser agrupades.
- **metric**: La mètrica utilitzada per a determinar la matriu de distàncies. Possibles valors són "euclidean", "correlation", i "manhattan".
- **method**: Per a agrupacions jeràrquiques, el mètode d'aglomeració a utilitzar. Les opcions disponibles són "ward", "single", "complete" i "average".



Per exemple, considerant el conjunt de dades **USArrests** que hem estat utilitzant per a il·lustrar els diferents mètodes d'aglomeració, podem utilitzar la funció clValid() com es mostra tot seguit per a calcular les diferents mètriques internes:

```
# comparació dels mètodes d'agrupació
clmethods <- c("hierarchical", "kmeans", "pam")</pre>
intern <- clValid(df, nClust = 2:6,</pre>
          clMethods = clmethods, validation = "internal")
# Resúm
summary(intern)
##
## Clustering Methods:
## hierarchical kmeans pam
## Cluster sizes:
## 2 3 4 5 6
##
## Validation Measures:
##
                                   2
                                           3
                                                   4
                                                           5
6
##
## hierarchical Connectivity 6.6437 9.5615 13.9563 22.5782 31.2
873
##
               Dunn
                              0.2214 0.2214 0.2224 0.2046 0.2
126
##
               Silhouette
                             0.4085 0.3486 0.3637 0.3213 0.2
720
## kmeans
               Connectivity 6.6437 13.6484 16.2413 24.6639 33.7
194
##
               Dunn
                              0.2214 0.2224 0.2224 0.1983 0.2
231
##
               Silhouette 0.4085 0.3668 0.3573 0.3377 0.3
079
               Connectivity 6.6437 13.8302 20.4421 29.5726 38.2
## pam
643
##
               Dunn
                              0.2214 0.1376 0.1849 0.1849 0.2
019
               Silhouette
##
                              0.4085 0.3144 0.3390 0.3105 0.2
```



```
##
## Optimal Scores:
##
## Score Method Clusters
## Connectivity 6.6437 hierarchical 2
## Dunn 0.2231 kmeans 6
## Silhouette 0.4085 hierarchical 2
```

Com es pot observar el métode jerárquic amb dos clústers obté valors òptims en les métriques *Connectivity* i *Silhouette* . Per altra banda, el mètode k-means obté una bona puntuació en la mètrica *Dunn* amb un valor òptim de k = 6.



Bibliografia

- [1] Daniel T. Larouse, Chantal D. Larouse: Data Mininig and Predictive Analytics.USA, John Wiley & Sons, 2015, ISBN 978-1-118-11619-7
- [2] Jordi Gironés Roig, Jordi Casas Roma, Julià Minguillón Alfonso, Ramon Caihuelas Quiles: Minería de Datos: Modelos y Algoritmos. Barcelona, Editorial UOC, 2017, ISBN: 978-84-9116-904-8.
- [3] Jiawe Han, Michellie Chamber & Jian Pei: Data mining: concepts and techniques. 3° Edition. USA, Editorial Elsevier, 2012, ISBN 978-0-12-381479-1