# 

Taula de contingut

[Format d´entrega 2](#_Toc530526445)

[Exercici 1 4](#_Toc530526446)

[Exercici 2 5](#_Toc530526447)

[Requisits 5](#_Toc530526448)

[Preparació de les dades 6](#_Toc530526449)

[Determinació del nombre de clústers 8](#_Toc530526450)

[Mètode d´agregació *k-means* 12](#_Toc530526451)

[Exercici 3 16](#_Toc530526452)

[Mètode d´agregació *k-medoids* 16](#_Toc530526453)

[Estimació del nombre òptim de clùsters 17](#_Toc530526454)

[Càlcul del mètode PAM 18](#_Toc530526455)

[Bibliografia 22](#_Toc530526456)

# Format d´entrega

Aquest document s´ha realitzat mitjançant **Markdown**[[1]](#footnote-1) amb l´ajuda de l´entorn de desenvolupament **RStudio**[[2]](#footnote-2) 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]](#footnote-3) que es pot utilitzar per a reproduir tots els exemples presentats a la PAC.
* El conjunt de dades utilitzades.



# Exercici 1

# 

# 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 visualitació de resultats d´agregació i que es fonamenta en el paquet ggplot2.[[4]](#footnote-4)

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

|  |  |
| --- | --- |
| **Funció** | **Descripció** |
| dist(fviz\_dist, get\_dist) | Visualització i computació de la matriu de distàncies |
| get\_clust\_tendency | Avaluació de la tendencia d´agregació |
| fviz\_nbclust(fviz\_gap\_stat) | Determinació del nombre òptim de clústers |
| fviz\_dend | Visualització de dendrogrames |
| 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 jerarquic |
| 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"))

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

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

## 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

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)

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:

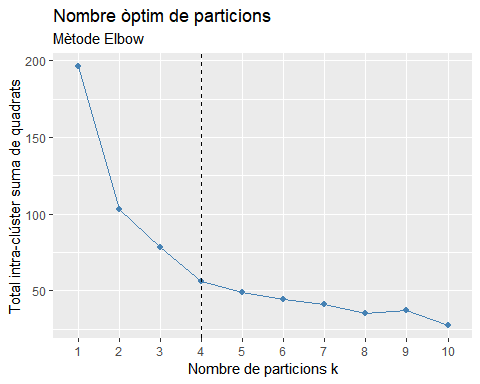
fviz\_nbclust(x, FUNcluster, method = c("silhouette", "wss", "gap\_stat"))

on els arguments són els següents:

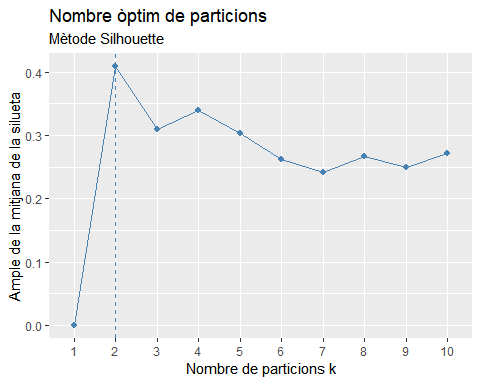
* **x:** matriu o data frame.
* **FUNcluster:** una funció d´agregació. Valors possibles: kmeans, pam, clara i hcut.
* **method:** mètode per a determinar el nombre òptim de clústers. Valors possibles: **Elbow**, **Silhouhette** i **Gap**

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

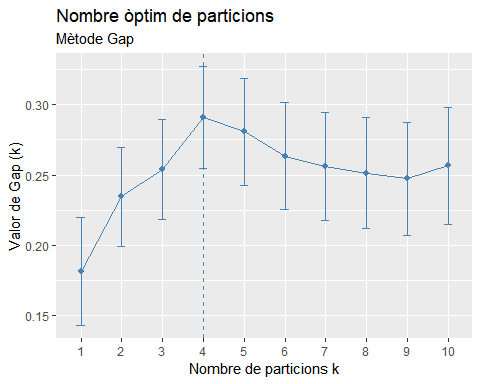
# Mètode elbow  
fviz\_nbclust(df, kmeans, method = "wss") +  
 geom\_vline(xintercept = 4, linetype = 2) +  
 labs(x = "Nombre de particions k", y = "Total intra-clúster suma de quadrats",  
 title = "Nombre òptim de particions",  
 subtitle = "Mètode Elbow") +  
 theme\_gray()



# Mètode Silhouette  
fviz\_nbclust(df, kmeans, method = "silhouette")+  
 labs(x = "Nombre de particions k", y = "Ample de la mitjana de la silueta",  
 title = "Nombre òptim de particions",   
 subtitle = "Mètode Silhouette") +  
 theme\_gray()



# Mètode Gap  
set.seed(123)  
fviz\_nbclust(df, kmeans, nstart = 25, method = "gap\_stat", nboot = 500)+  
 labs(x = "Nombre de particions k", y = "Valor de Gap (k)",  
 title = "Nombre òptim de particions",  
 subtitle = "Mètode Gap") +  
 theme\_gray()



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 aleatoriament, es recomanable fer ús de la funció set.seed() a l´efecte de conseguir resultats reproduibles. 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)

Podem mostrar per pantalla els resultats amb la següent línea 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   
## 4 3 3 4 3   
## Colorado Connecticut Delaware Florida Georgia   
## 3 2 2 3 4   
## Hawaii Idaho Illinois Indiana Iowa   
## 2 1 3 2 1   
## Kansas Kentucky Louisiana Maine Maryland   
## 2 1 4 1 3   
## Massachusetts Michigan Minnesota Mississippi Missouri   
## 2 3 1 4 3   
## Montana Nebraska Nevada New Hampshire New Jersey   
## 1 1 3 1 2   
## New Mexico New York North Carolina North Dakota Ohio   
## 3 3 4 1 2   
## Oklahoma Oregon Pennsylvania Rhode Island South Carolina   
## 2 2 2 2 4   
## South Dakota Tennessee Texas Utah Vermont   
## 1 4 3 2 1   
## Virginia Washington West Virginia Wisconsin Wyoming   
## 2 2 1 1 2   
##   
## Within cluster sum of squares by cluster:  
## [1] 11.952463 16.212213 19.922437 8.316061  
## (between\_SS / total\_SS = 71.2 %)  
##   
## Available components:  
##   
## [1] "cluster" "centers" "totss" "withinss"   
## [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.

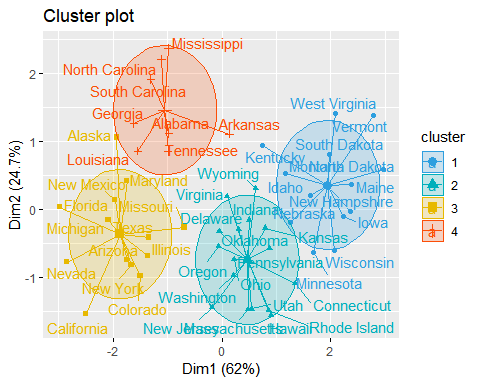
Una possible opció és visualitzar les dades en un diagrama de dispersió acolorint cada observació d’acord al grup assignat.

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

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 resultats del model i el conjunt de dades original:

# Visualitzem els clústers  
fviz\_cluster(kmeansFit, data = df,  
 palette = c("#2E9FDF", "#00AFBB", "#E7B800", "#FC4E07"),  
 ellipse.type = "euclid", # Agrupacions en elipses  
 star.plot = TRUE, # Afegeix rectes des de els centroides a les observacions  
 repel = TRUE,   
 ggtheme = theme\_gray()  
)



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 disimilituds (entre parells de punts) en comptes d’una suma de distàncies euclidianas quadrades.

Un **medoid** pot ser definit com l’objecte d’un grup on la seva disimilitud mitjana a tots els objectes en el grup és mínima. És el punt situat més cap al centre en tot el grup.[[5]](#footnote-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:

pam(x, k, metric = "euclidean", stand = FALSE)

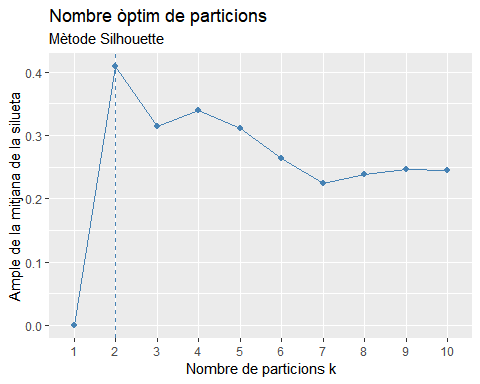
on els arguments són els següents:

* **x:** on x pot ser:
  + Una matriu o data frame de tipus numéric: cada fila correspon a una observació i cada columna a una variable.
  + Una matriu de disimilituds: en aquest cas x es normalment la sortida o bé de la funció daisy() o bé de dist().
* **K:** el nombre de clusters.
* **metric:** la mesura de similitud. O bé “euclidean” o bé “manhattan”.
* **stand:** un valor de tipus lògic; si es TRUE, les variables en x són estandaritzades.

### Estimació del nombre òptim de clùsters

Per a estimar el nombre òptim de clùsters 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():

# Obtenció de k utilitzant la mètrica Silhoutte  
fviz\_nbclust(df, pam, method = "silhouette")+  
 labs(x = "Nombre de particions k", y = "Ample de la mitjana de la silueta",  
 title = "Nombre òptim de particions",   
 subtitle = "Mètode Silhouette") +  
 theme\_gray()



Segons el gràfic, el nombre òptim de clústers és 2. En la següent secció, agruparem els objectes en 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)

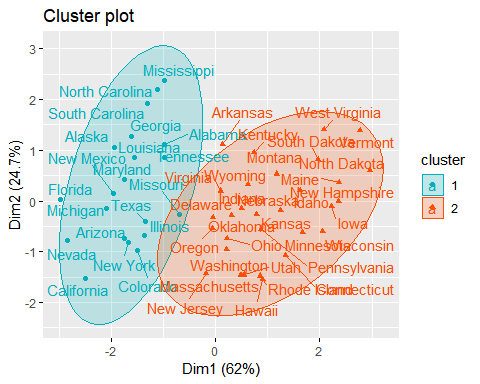
## Medoids:  
## ID Murder Assault UrbanPop Rape  
## New Mexico 31 0.8292944 1.3708088 0.3081225 1.1603196  
## Nebraska 27 -0.8008247 -0.8250772 -0.2445636 -0.5052109  
## Clustering vector:  
## Alabama Alaska Arizona Arkansas California   
## 1 1 1 2 1   
## Colorado Connecticut Delaware Florida Georgia   
## 1 2 2 1 1   
## Hawaii Idaho Illinois Indiana Iowa   
## 2 2 1 2 2   
## Kansas Kentucky Louisiana Maine Maryland   
## 2 2 1 2 1   
## Massachusetts Michigan Minnesota Mississippi Missouri   
## 2 1 2 1 1   
## Montana Nebraska Nevada New Hampshire New Jersey   
## 2 2 1 2 2   
## New Mexico New York North Carolina North Dakota Ohio   
## 1 1 1 2 2   
## Oklahoma Oregon Pennsylvania Rhode Island South Carolina   
## 2 2 2 2 1   
## South Dakota Tennessee Texas Utah Vermont   
## 2 1 1 2 2   
## Virginia Washington West Virginia Wisconsin Wyoming   
## 2 2 2 2 2   
## Objective function:  
## build swap   
## 1.441358 1.368969   
##   
## Available components:  
## [1] "medoids" "id.med" "clustering" "objective" "isolation"   
## [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,  
 palette = c("#00AFBB", "#FC4E07"),   
 ellipse.type = "t",   
 repel = TRUE,   
 ggtheme = theme\_gray()  
)



# 

# 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. 3º Edition. USA, Editorial Elsevier, 2012, ISBN 978-0-12-381479-1

1. La documentació oficial es pot trobar a: <http://www.sthda.com/english/rpkgs/factoextra>. [↑](#footnote-ref-1)
2. Per a més informació: <https://es.wikipedia.org/wiki/K-medoids> [↑](#footnote-ref-2)
3. <https://rmarkdown.rstudio.com/> [↑](#footnote-ref-3)
4. La documentació oficial es pot trobar a: <http://www.sthda.com/english/rpkgs/factoextra>. [↑](#footnote-ref-4)
5. Per a més informació: <https://es.wikipedia.org/wiki/K-medoids> [↑](#footnote-ref-5)