Clustering con K-means - Catado de cafe

Se tiene un conjunto de datos con los resultados de diferentes catados de múltiples muestras de café.

Se desea realizar un agrupamiento de éstas muestras según sus métricas estadísticas. Entre ellas se encuentra la calificación promedio del catador certificado y niveles de sabor: Vainilla, floral, cereral, cocoa, alcohol, fermentado, tostado, oscuro, amargo, entre otros.

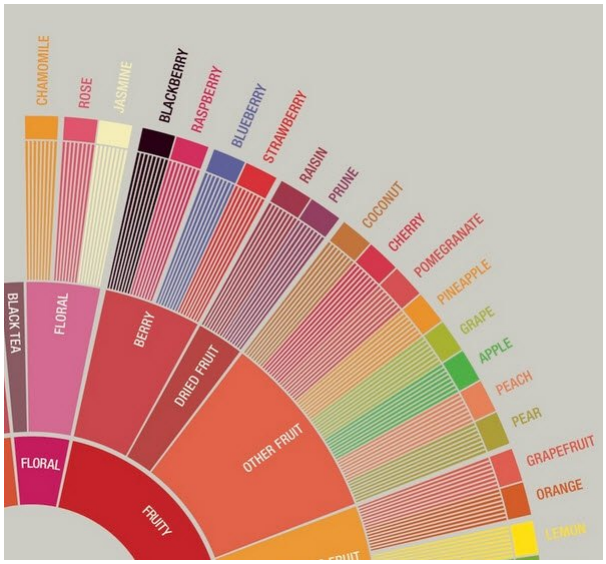
En este caso se hace uso del algoritmo KMeans, que se explica más adelante.

In [1]:
```
# Imports

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.cluster import KMeans
import pandas as pd

%matplotlib inline
```

Importando Dataset y visualizando sus Características

In [2]:
```
cafes = pd.read_csv('../datasets/catacafe.csv',engine='python')
cafes.info()
```

```
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 178 entries, 0 to 177
Data columns (total 14 columns):
 #   Column                 Non-Null Count  Dtype
---  ------                 --------------  -----
 0   Cafe                   178 non-null    int64
 1   Dulce                  178 non-null    float64
 2   Floral                 178 non-null    float64
 3   Especias               178 non-null    float64
 4   Tostado                178 non-null    float64
 5   Frutal                 178 non-null    int64
 6   Fermentado             178 non-null    float64
 7   Vegetal                178 non-null    float64
 8   Otro                   178 non-null    float64
 9   Cocoa                  178 non-null    float64
 10  Cereal                 178 non-null    float64
 11  Vainilla               178 non-null    float64
 12  Picante                178 non-null    float64
 13  Calificacion promedio  178 non-null    int64
dtypes: float64(11), int64(3)
memory usage: 19.6 KB
```



Mostrar las primeras filas para una previsualización del orden de los datos

In [3]:
```
cafes.head()
```

Out[3]:

	Cafe	Dulce	Floral	Especias	Tostado	Frutal	Fermentado	Vegetal	Otro	Cocoa	Cereal	Vainilla	Picante	Calificacion promedio
0	1	14.23	1.71	2.43	15.6	127	2.80	3.06	0.28	2.29	5.64	1.04	3.92	1065
1	2	13.20	1.78	2.14	11.2	100	2.65	2.76	0.26	1.28	4.38	1.05	3.40	1050
2	3	13.16	2.36	2.67	18.6	101	2.80	3.24	0.30	2.81	5.68	1.03	3.17	1185
3	4	14.37	1.95	2.50	16.8	113	3.85	3.49	0.24	2.18	7.80	0.86	3.45	1480
4	5	13.24	2.59	2.87	21.0	118	2.80	2.69	0.39	1.82	4.32	1.04	2.93	735

Se puede ver que la columna "Cafe" es el índice numérico de la muestra, pero que ya se ha enumerado con el método de lectura, por ello, se procede a eliminarla.

In [4]:
```
cafes = cafes.drop(['Cafe'],axis=1)
cafes.head()
```

Out[4]:

	Dulce	Floral	Especias	Tostado	Frutal	Fermentado	Vegetal	Otro	Cocoa	Cereal	Vainilla	Picante	Calificacion promedio
0	14.23	1.71	2.43	15.6	127	2.80	3.06	0.28	2.29	5.64	1.04	3.92	1065
1	13.20	1.78	2.14	11.2	100	2.65	2.76	0.26	1.28	4.38	1.05	3.40	1050
2	13.16	2.36	2.67	18.6	101	2.80	3.24	0.30	2.81	5.68	1.03	3.17	1185
3	14.37	1.95	2.50	16.8	113	3.85	3.49	0.24	2.18	7.80	0.86	3.45	1480
4	13.24	2.59	2.87	21.0	118	2.80	2.69	0.39	1.82	4.32	1.04	2.93	735

Se obtienen las variables estadísticas de los datos por columna.

In [5]:
```
cafes.describe()
```

Out[5]:

	Dulce	Floral	Especias	Tostado	Frutal	Fermentado	Vegetal	Otro	Cocoa	Cereal	Vainilla	Picante	Calificacion promedio
count	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000
mean	13.000618	2.336348	2.366517	19.494944	99.741573	2.295112	2.029270	0.361854	1.590899	5.058090	0.957449	2.611685	746.893258
std	0.811827	1.117146	0.274344	3.339564	14.282484	0.625851	0.998859	0.124453	0.572359	2.318286	0.228572	0.709990	314.907474
min	11.030000	0.740000	1.360000	10.600000	70.000000	0.980000	0.340000	0.130000	0.410000	1.280000	0.480000	1.270000	278.000000
25%	12.362500	1.602500	2.210000	17.200000	88.000000	1.742500	1.205000	0.270000	1.250000	3.220000	0.782500	1.937500	500.500000
50%	13.050000	1.865000	2.360000	19.500000	98.000000	2.355000	2.135000	0.340000	1.555000	4.690000	0.965000	2.780000	673.500000
75%	13.677500	3.082500	2.557500	21.500000	107.000000	2.800000	2.875000	0.437500	1.950000	6.200000	1.120000	3.170000	985.000000
max	14.830000	5.800000	3.230000	30.000000	162.000000	3.880000	5.080000	0.660000	3.580000	13.000000	1.710000	4.000000	1680.000000

Se normalizan los datos en un rango adecuado y se vuelven a obtener sus métricas

In [6]:
```
cafes_normalizado = (cafes - cafes.min())/(cafes.max()-cafes.min())
cafes_normalizado.describe()
```

Out[6]:

	Dulce	Floral	Especias	Tostado	Frutal	Fermentado	Vegetal	Otro	Cocoa	Cereal	Vainilla	Picante	Calificacion promedio
count	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000	178.000000
mean	0.518584	0.315484	0.538244	0.458502	0.323278	0.453487	0.356386	0.437460	0.372523	0.322363	0.388170	0.491460	0.334446
std	0.213639	0.220780	0.146708	0.172142	0.155244	0.215811	0.210730	0.234818	0.180555	0.197806	0.185831	0.260070	0.224613
min	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
25%	0.350658	0.170455	0.454545	0.340206	0.195652	0.262931	0.182489	0.264151	0.264984	0.165529	0.245935	0.244505	0.158702
50%	0.531579	0.222332	0.534759	0.458763	0.304348	0.474138	0.378692	0.396226	0.361199	0.290956	0.394309	0.553114	0.282097
75%	0.696711	0.462945	0.640374	0.561856	0.402174	0.627586	0.534810	0.580189	0.485804	0.419795	0.520325	0.695971	0.504280
max	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000

Se puede observar que ahora los datos tienen valores entre cero y uno, max y min.

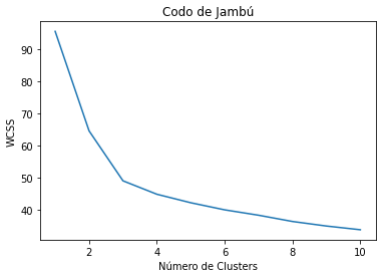
Ahora con este preprocesamiento se tienen datos ordenados, numéricos y normalizados, listos para un agrupamiento óptimo.

El método de KMeans presenta gran efectividad y velocidad para datos no tan amplios, sin embargo, su principal debilidad es la selección de parámetros de entrada, entiéndase número de clusters a realizar. Como este valor no se conoce, se debe usar algún método para óptimizar su implementación, en este caso se utilizará el método del codo de Jambú para encontrar un número de clusters óptimo:

Obtención del gráfico del Codo de Jambú

Se desean que los clusteres sean lo más separados entre sí y que sus elementos sean lo más cercanos entre sí. para ello se utiliza la medida WCSS: suma de los cuadrados de las distancias de cada punto de datos, en todos los grupos a sus respectivos centroides, es decir, es una medida de similitud. La idea es minimizar esta suma. Para ello se obtiene la inercia de cada clustering realizado con KMeans para un cierto número de grupos, desde 1 hasta uno deseado (n+1 en este caso), estos valores obtenidos en cada iteración se almacena en WCSS, donde luego se imprimen en una gráfica para su análisis.

In [7]:
```
num_clusters = 10
wcss = []
for i in range(1,num_clusters+1):
    kmeans_model = KMeans(n_clusters=i,max_iter=300)
    kmeans_model.fit(cafes_normalizado)
    wcss.append(kmeans_model.inertia_)

## Ahora se grafican los resultados:

plt.plot(range(1,num_clusters+1),wcss)
plt.title("Codo de Jambú")
plt.xlabel("Número de Clusters")
plt.ylabel("WCSS")
plt.show()
```



Se observa que le número de clusteres óptimo es 3, para este método y este dataset. Ahora se procede a utilizar el método Kmeans con este parametro. Igual que anteriormente, se crea el modelo de clustering y luego se aplica con .fit

In [8]:
```
agrupamiento =  KMeans(n_clusters=3, max_iter=300)
agrupamiento.fit(cafes_normalizado)
```

Out[8]:
```
KMeans(n_clusters=3)
```

Este método crea un atributo label_ dentro del modelo clustering generado. Se agrega esta calificacion al archivo original del Dataset. Finalmente los datos procesados obtenidos se muestran:

In [9]:
```
cafes['KMeans_clusters'] = agrupamiento.labels_
cafes.head()
```

Out[9]:

	Dulce	Floral	Especias	Tostado	Frutal	Fermentado	Vegetal	Otro	Cocoa	Cereal	Vainilla	Picante	Calificacion promedio	KMeans_clusters
0	14.23	1.71	2.43	15.6	127	2.80	3.06	0.28	2.29	5.64	1.04	3.92	1065	2
1	13.20	1.78	2.14	11.2	100	2.65	2.76	0.26	1.28	4.38	1.05	3.40	1050	2
2	13.16	2.36	2.67	18.6	101	2.80	3.24	0.30	2.81	5.68	1.03	3.17	1185	2
3	14.37	1.95	2.50	16.8	113	3.85	3.49	0.24	2.18	7.80	0.86	3.45	1480	2
4	13.24	2.59	2.87	21.0	118	2.80	2.69	0.39	1.82	4.32	1.04	2.93	735	2

Visualización de los clusters Generados

Los datos tienen múltiples variables que los caracterizan, en este caso se desea visualizar un gráfico lo mayor resumido posible, y en la naturaleza humana se alcanzan a visualizar hasta tres dimensiones.

Para efectos didácticos, se mostraran en dos dimensiones ¿Cuales? se seleccionan las variables que mejor caractericen a todos los datos, para ello se hace uso del Análisis de Componentes Principales (PCA) para reducir el número de variables a analizar, en este caso a visualizar. Se hace uso del paquete descomposition de sklearn y se crea un dataframe a partir de estos componentes para graficarlo.

In [10]:
```
from sklearn.decomposition import PCA

pca = PCA(n_components=2)                       # Dos componentes principales
pca_cafes = pca.fit_transform(cafes_normalizado)
pca_cafes_df = pd.DataFrame(data= pca_cafes, columns=['Componente_1', 'Componente_2'])
pca_names_cafes = pd.concat([pca_cafes_df, cafes[['KMeans_clusters']]], axis=1)

# veamos el resultado de los datos procesados:
pca_names_cafes
```

Out[10]:

	Componente_1	Componente_2	KMeans_clusters
0	-0.706336	-0.253193	2
1	-0.484977	-0.008823	2
2	-0.521172	-0.189187	2
3	-0.821644	-0.580906	2
4	-0.202546	-0.059467	2
...	...	...	...
173	0.739510	-0.471901	1
174	0.581781	-0.348366	1
175	0.626313	-0.546857	1
176	0.572991	-0.425516	1

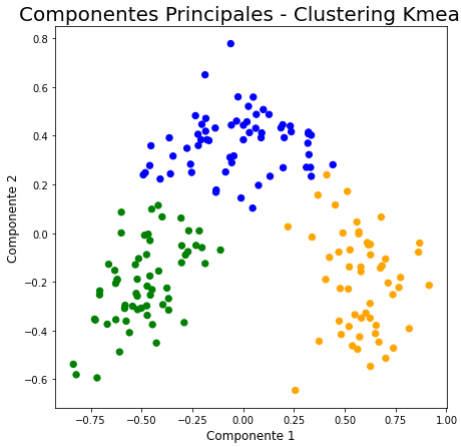
	Componente_1	Componente_2	KMeans_clusters
177	0.701764	-0.513505	1

178 rows × 3 columns

Graficar el dataframe procesado

Ahora se configura la figura plot a mostrar con estos datos obtenidos

In [11]:
```
# Configurando la figura plot
fig = plt.figure(figsize= (7,7))                                        # área del gráfico
grafico = fig.add_subplot(1,1,1)                                        # Se delimita el área subplot a una sola figura
grafico.set_xlabel('Componente 1',fontsize = 12 )                       # Etiqueta de eje X y tamaño de letra
grafico.set_ylabel('Componente 2',fontsize = 12 )                       # Etiqueta de eje Y y tamaño de letra
grafico.set_title('Componentes Principales - Clustering Kmeans',fontsize = 20 )    # Setear el título de la figura
Colores = np.array(["blue", "orange", "green"])                         # Vector de nombres de colores a llamar. Deben haber tantos colores como clusters(etiquetas) generados
grafico.scatter(x=pca_names_cafes.Componente_1, y=pca_names_cafes.Componente_2, c=Colores[pca_names_cafes.KMeans_clusters], s=40)   #Llamado al método de figura de puntos de dispersión.
plt.show()                                                              # Graficar
```



Guardar los datos generados

Se procede a guardar el dataframe en formato csv:

In [12]:
```
# Se crea un archivo csv en la carpeta Results
cafes.to_csv('../Results/cafe-kmeans.csv')
```

Ejercicios/ Experimentos propuestos

1. Elija un valor aleatorio para el número de clusters a implementar, suponiendo que no conoce el resultado del método Codo de Jambú. ¿Cómo cambia el resultado? ¿Qu+e se nota?

2. ¿Qué sucede al aumentar o disminuir el número de clusters a implementar en la llamada a KMeans? ¿Por qué?

3. ¿Qué sucede con los clusters al aumentar o disminuir significativamente el número de iteraciones máximo (seteado en 300) al usar el metodo del Codo de Jambú y en la llamada a KMeans? ¿Por qué?

4. Explique las ventajas y desventajas que tiene el algoritmo KMeans. Puede investigar diferentes fuentes.

5. Aumente el número de PCA a 3 componentes y grafíquelo en 3 Dimensiones. ¿Qué es lo que cambió y qué se está añadiendo?