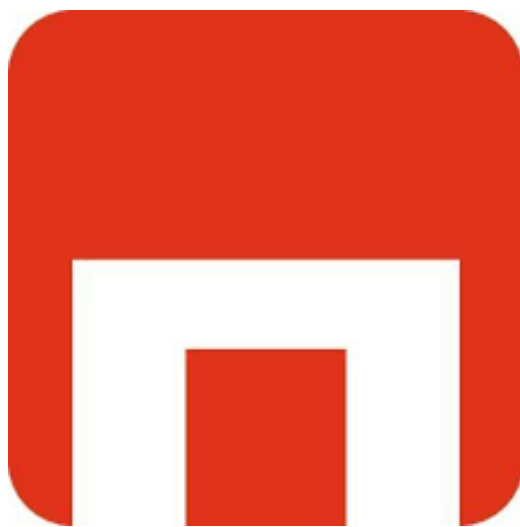


Memoria clasificación aceites de oliva

24 de marzo de 2022



1. Introducción

Para el proyecto he utilizado un dataset con 572 muestras de aceite de oliva obtenido de la web de la comisión europea de consumidores con 9 columnas, 8 con la composición sobre 10.000 ('palmitic', 'palmitoleic', 'stearic', 'oleic', 'linoleic', 'linolenic', 'arachidic', 'eicosenoic') y una mas con el ID de cada muestra.

Se trata de un ejercicio que se realiza de manera real en el cual la empresa certifica que está vendiendo varios tipos de aceite de oliva como por ejemplo, aceite de oliva virgen extra, aceite de oliva virgen, aceite de oliva o aceite de orujo de oliva por ejemplo. Siendo la diferencia de precios notable, la comisión pide un análisis de composición de muestras aleatorias de aceite y comprueba si realmente la composición varía entre grupos y podemos validar los productos de la empresa. Recibiendo en un primer momento el dataset:

	palmitic	palmitoleic	stearic	oleic	linoleic	linolenic	arachidic	eicosenoic
ID								
1	1075	75	226	7823	672	36	60	29
2	1088	73	224	7709	781	31	61	29
3	911	54	246	8113	549	31	63	29
4	966	57	240	7952	619	50	78	35
5	1051	67	259	7771	672	50	80	46

2. Limpieza del Dataset

Observando la tabla de arriba observamos que tenemos variables demasiado diferentes en términos de unidades, esto podría ser un problema si trabajamos en términos de variabilidad de la muestra. Vamos a hacer una descripción de los datos actuales:

	palmitic	palmitoleic	stearic	oleic	linoleic	linolenic	arachidic	eicosenoic
count	572.000000	572.000000	572.000000	572.000000	572.000000	572.000000	572.000000	572.000000
mean	1231.741259	126.094406	228.865385	7311.748252	980.527972	31.888112	58.097902	16.281469
std	168.592264	52.494365	36.744935	405.810222	242.799221	12.968697	22.030250	14.083295
min	610.000000	15.000000	152.000000	6300.000000	448.000000	0.000000	0.000000	1.000000
25%	1095.000000	87.750000	205.000000	7000.000000	770.750000	26.000000	50.000000	2.000000
50%	1201.000000	110.000000	223.000000	7302.500000	1030.000000	33.000000	61.000000	17.000000
75%	1360.000000	169.250000	249.000000	7680.000000	1180.750000	40.250000	70.000000	28.000000
max	1753.000000	280.000000	375.000000	8410.000000	1470.000000	74.000000	105.000000	58.000000

Lo que primero llama la atención de los datos es que no vamos a poder comparar bien unos datos con otros ya que el promedio es demasiado distinto entre unas variables y otras. El ácido Oleico acapara gran parte de la composición (tiene una media de 7312) y concentra gran parte de la variabilidad de la muestra (desviación típica de 405), comparar esta variable con otras como el ácido arachidic que toma como valor máximo 105 y tiene una variabilidad muy pequeña en comparación (desviación típica de 22). Además no recibimos datos negativos y la suma de las composiciones suele estar cerca de los 10.000 con lo cual el fichero está en principio limpio, solo tendremos que tratarlo.

Vamos a proceder a tratar el fichero, para ello, le aplicamos una función estrictamente creciente que “compacte” los datos y así reduzca su variación tan desmesurada en algunas variables. Elijo la función logaritmo del fichero sumándole 1 (evitamos los puntos singulares).

$$x \rightarrow \text{Log}(x + 1)$$

Tenemos que sumar una unidad debido a que el cero logaritmo es 1, y $\log(0)$ es $-\infty$. Ahora nuestra data tendrá una forma mas razonable y podemos empezar a realizar un estudio más descriptivo.

	palmitic	palmitoleic	stearic	oleic	linoleic	linolenic	arachidic	eicosenoic
ID								
1	6.981006	4.330733	5.424950	8.964951	6.511745	3.610918	4.110874	3.401197
2	6.993015	4.304065	5.416100	8.950273	6.661855	3.465736	4.127134	3.401197
3	6.815640	4.007333	5.509388	9.001346	6.309918	3.465736	4.158883	3.401197
4	6.874198	4.060443	5.484797	8.981304	6.429719	3.931826	4.369448	3.583519
5	6.958448	4.219508	5.560682	8.958283	6.511745	3.931826	4.394449	3.850148

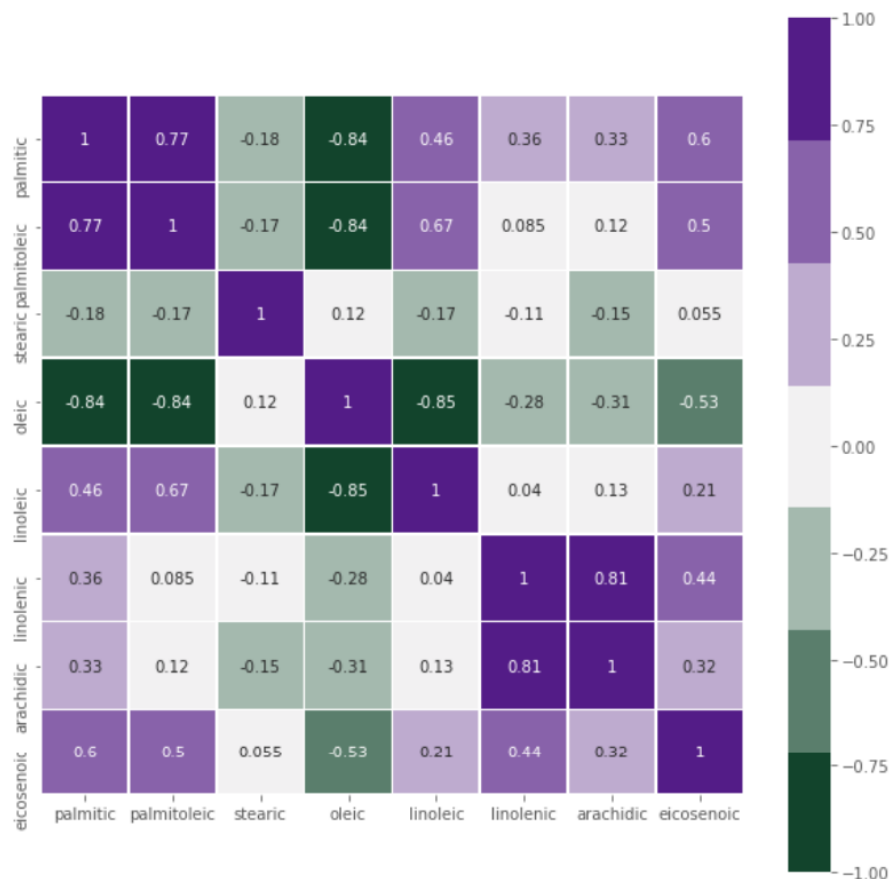
Donde la tabla descriptiva nos queda:

	palmitic	palmitoleic	stearic	oleic	linoleic	linolenic	arachidic	eicosenoic
count	572.000000	572.000000	572.000000	572.000000	572.000000	572.000000	572.000000	572.000000
mean	7.107708	4.752890	5.425494	8.895837	6.855507	3.301672	3.870479	2.321076
std	0.136553	0.445578	0.153238	0.055521	0.266213	0.859640	0.946396	1.150338
min	6.415097	2.772589	5.030438	8.748464	6.107023	0.000000	0.000000	0.693147
25%	6.999422	4.485811	5.327876	8.853808	6.648661	3.295837	3.931826	1.098612
50%	7.091742	4.709530	5.411646	8.896109	6.938284	3.526361	4.127134	2.890372
75%	7.215975	5.137265	5.521461	8.946505	7.074751	3.719596	4.262680	3.367296
max	7.469654	5.638355	5.929589	9.037296	7.293698	4.317488	4.663439	4.077537

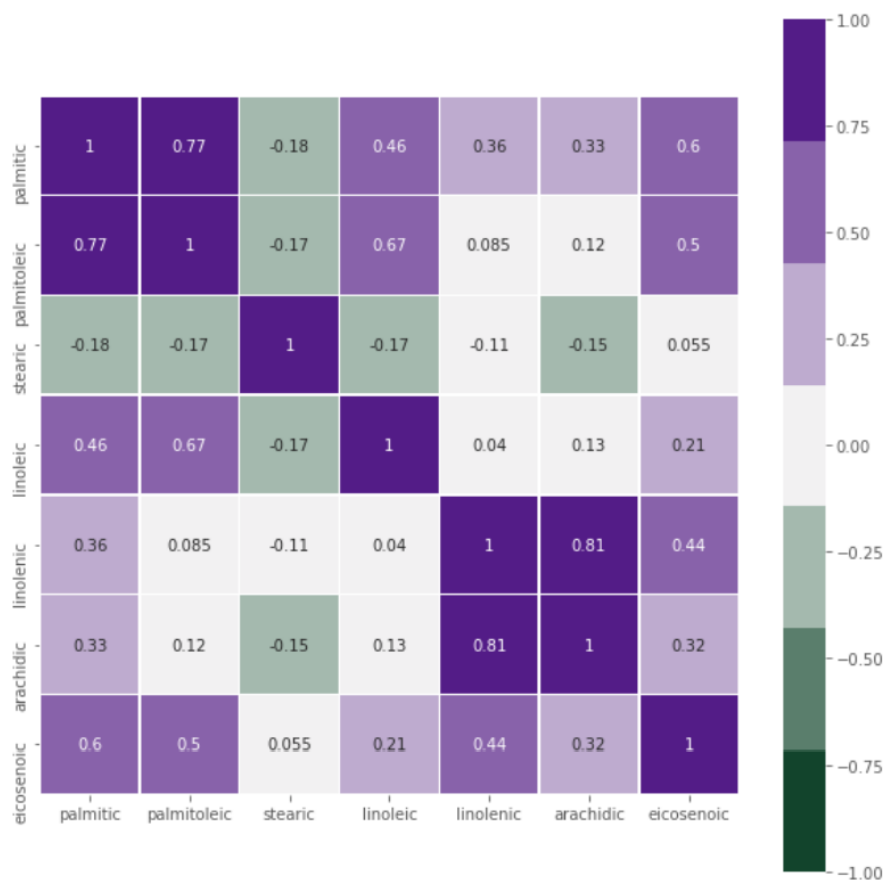
El cambio en el fichero es mas que notable, la variable que presumiblemente nos podía dar mas problemas, el ácido oleico, pasa de ser la variable que acumula mayor variabilidad de la muestra a ser la que menos. Además, al “compactar” la muestra variables como arachidic en valores absolutos y relativos no se aleja tanto de los datos del ácido oleico, el mayor valor de arachidic pasa de ser 63 veces menor que el menor dato de oleico a ser la mitad.

3. Análisis dimensional

Comenzaremos con el analisis más típico a la par que útil observando si existen correlación lineal entre variables con los coeficientes de Pearson, de manera gráfica:

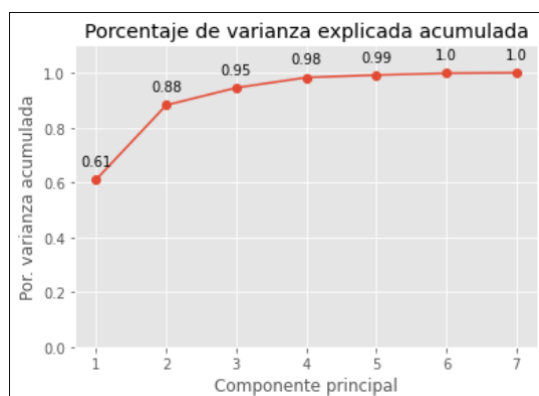


Observamos que existen variables con un alto nivel de correlación, sin embargo queremos ser cautos y solo eliminaríamos de forma tajante si el coeficiente está por encima de 0.9. Sin embargo como la variable 'Oleic' está relacionada fuertemente con 3 variables a la vez (-0.84,-0.84,-0.85) procederemos a eliminarla del dataset y repetiremos el coeficiente de Pearson:

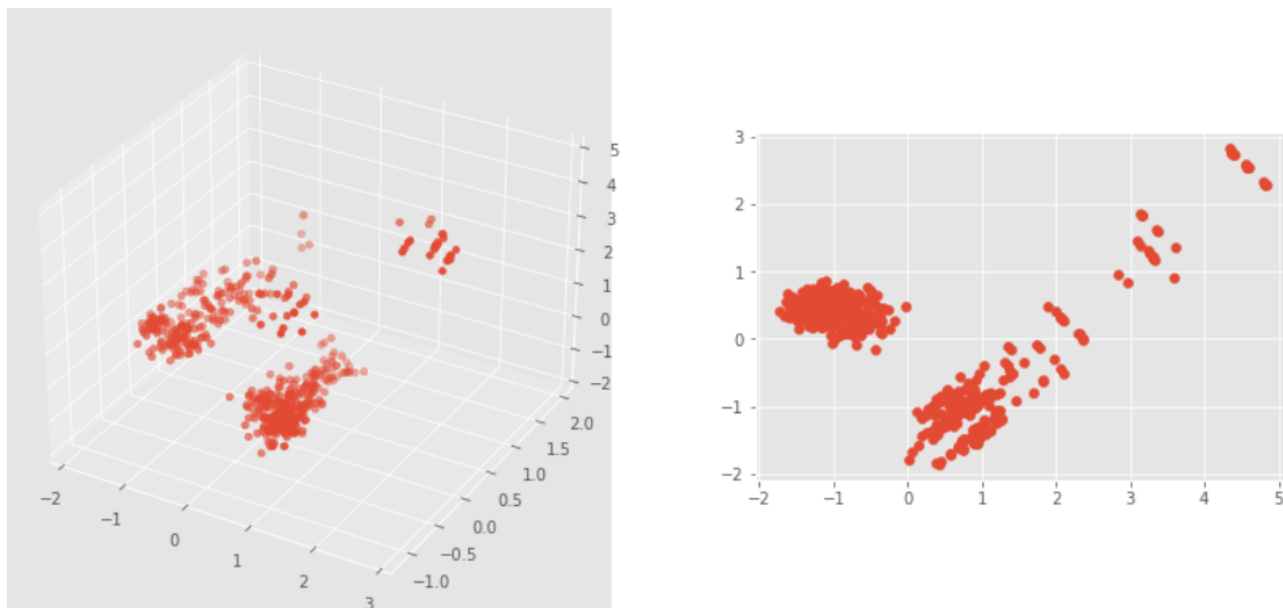


Vemos como la eliminación de la variable ha estabilizado linealmente el DataSet, siendo ahora la única correlación fuerte la de 'arachidic' con 'linoleic', pero como ya dijimos antes, ni es por encima del 0.9 en valor absoluto, ni sabríamos cual de las dos nos beneficia eliminar, con lo cual el análisis por Pearson finaliza aquí.

Gracias a que hemos normalizado la data con una transformación podemos realizar un analisis de la variacion con componentes principales para no solo acabar de pulir nuestro dataset quedándonos con las variables mas importantes, si no que podríamos incluso visualizar un criterio en el mejor de los casos. Una vez realizado el criterio con las 7 componentes principales de nuestro espacio en los datos, pasamos a escoger con cuantas nos vamos a quedar, para ello vemos la cantidad de variabilidad explicada:

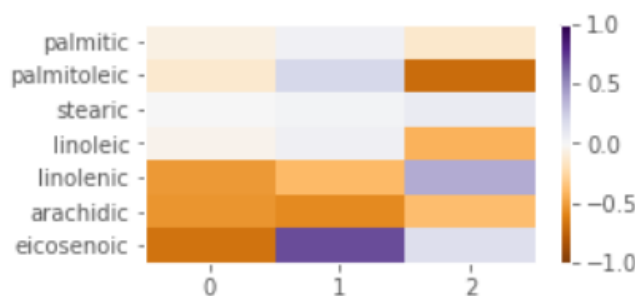


Con 2 componentes principales explicamos el 88 % de la muestra con lo cual trabajaremos de manera 2-dimensional, por mera curiosidad graficaremos nuestros datos también en la tercera componente. Vamos a proyectar nuestros puntos para poder observar como se comportan:



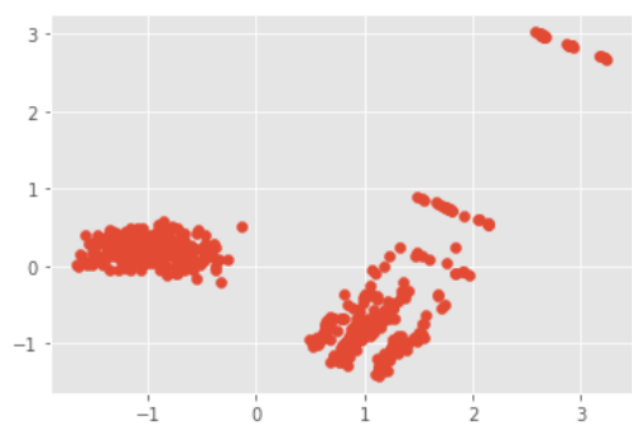
Desde luego, la conclusión empieza a ser favorable a la empresa de aceite, como mínimo tiene sentido hablar de 2 grupos muy claramente diferenciados de aceite, aunque quizás podamos extenderlo incluso a 3 o 4 grupos. En un futuro trabajaremos con 2 dimensiones y con la hipótesis de si tiene sentido 3 o 4 grupos de aceite de oliva.

Antes de ponernos a clasificar, acabaremos este análisis dimensional sobre la data original viendo que variables tienen importancia sobre estas 3 componentes principales y eliminando aquellas que no aporten nada a la variabilidad de la muestra, de manera gráfica:



Observamos como la variable 'stearic' apenas tiene ninguna importancia en las 3 componentes principales por lo tanto la eliminamos de facto de nuestro análisis, y en las dos primeras las variables importantes que forman gran parte de la variabilidad son 'linolenic', 'arachidic' y 'eicosenoic'. Quizás en una futura clasificación copen toda la importancia.

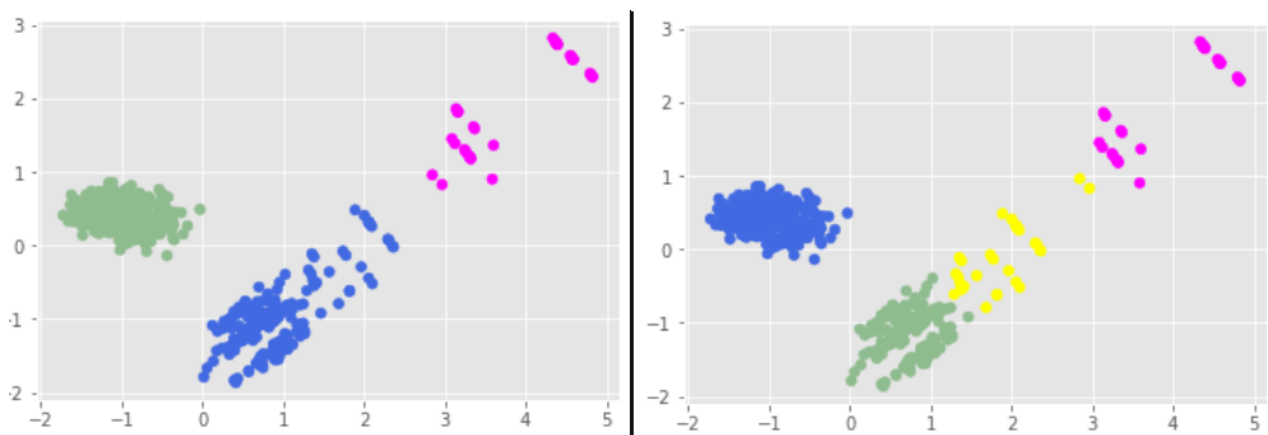
Con nuestra nueva data sin la variable 'stearic' volvemos a hacer componentes principales saliéndonos igual que antes pero ahora ya solo trabajaremos con la data limpia:



Observar que ahora que hemos quitado una variable residual, se diferencian incluso mejor nuestros tipos de aceites.

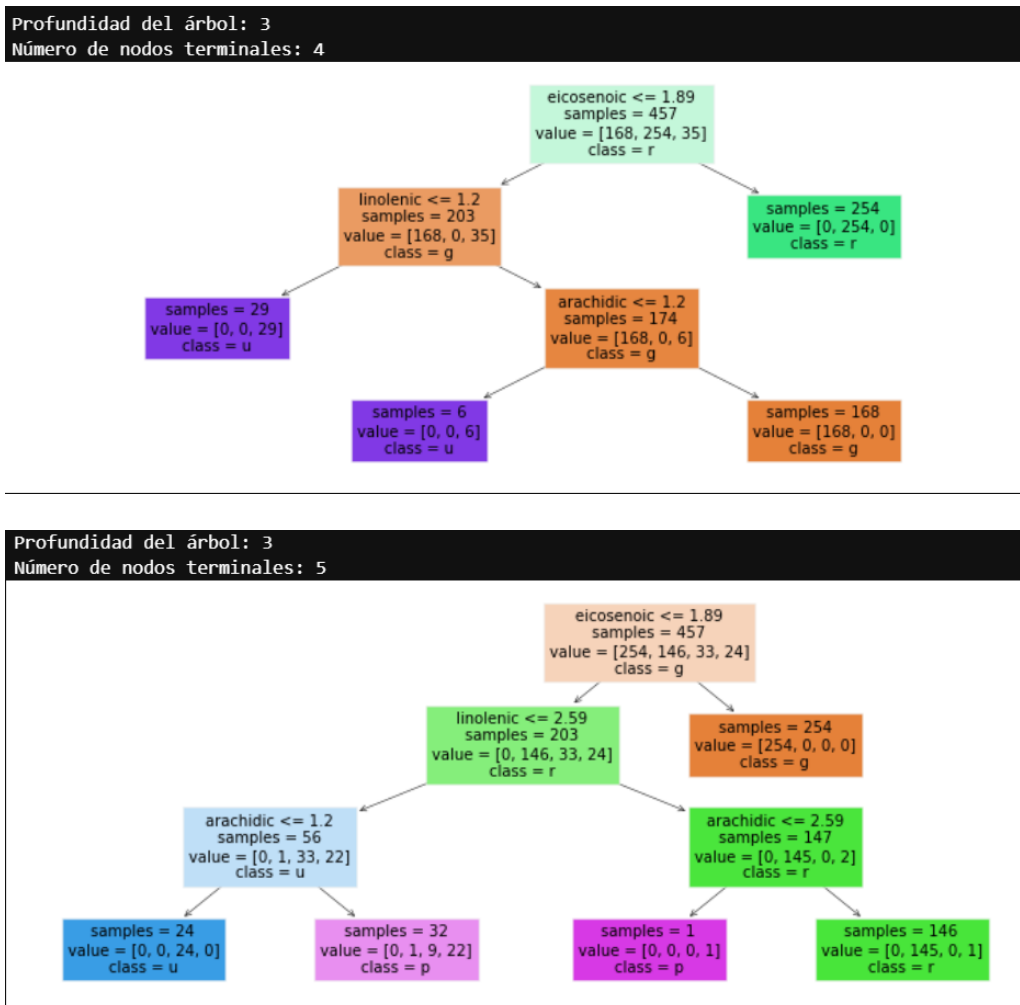
4. Clasificación

Tras la gráfica anteriormente planteada donde proyectamos en dos dimensiones nuestros datos, nos surgió la duda de si podríamos hacer 3 o 4 grupos y sería correcto en el análisis. Para ello vamos a realizar una agrupación en 3 o 4 grupos con un algoritmo k-means basado en la distancia euclídea puesto que nuestros datos están normalizados:



El método lo que hace es clasificar en n-grupos preseleccionados dependiendo de la distancia euclídea entre puntos.

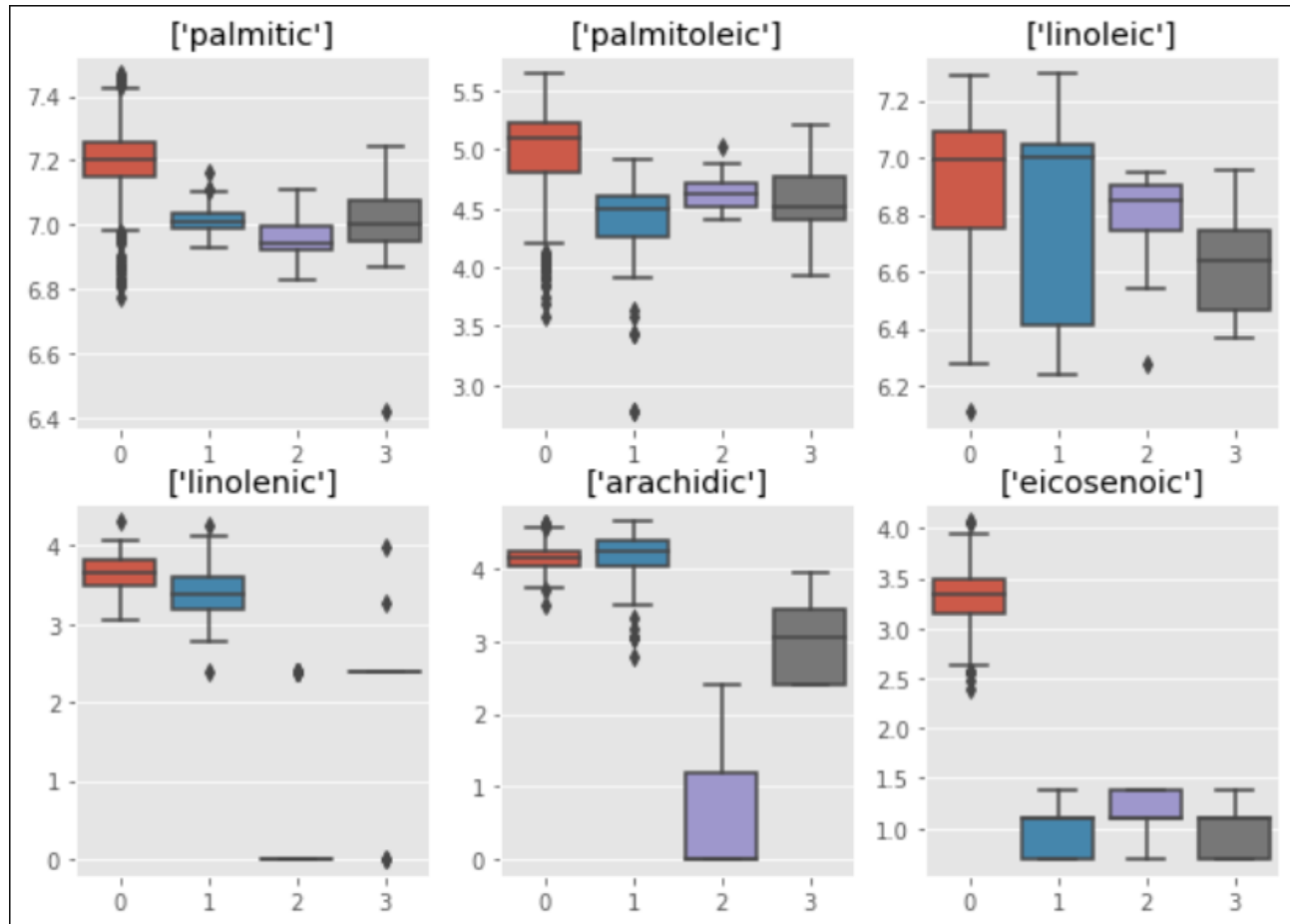
Lo que tenemos que hacer es testear si tienen sentido estas divisiones, para ello guardaremos estas clasificaciones y sobre la data limpia (No sobre las proyecciones) si un árbol de decisión por ejemplo puede clasificar de manera correcta los distintos tipos de muestras. Para ello dividiremos la data limpia en muestra de entrenamiento y muestra test y realizaremos arboles de regresión en estos dos grupos midiendo su capacidad de acierto:



Para el primer grupo, llegamos a un acierto del 100 % con un árbol de profundidad 3, igual que para el segundo. Por lo tanto la conclusión es clara, tiene sentido separar tanto en 3 como en 4 grupos, sin embargo la lógica dice que a igualdad de coste, tomaremos 4 grupos ya que si es tan fácil visualizar 3 como 4 grupos, será porque realmente existe un grupo más que 3.

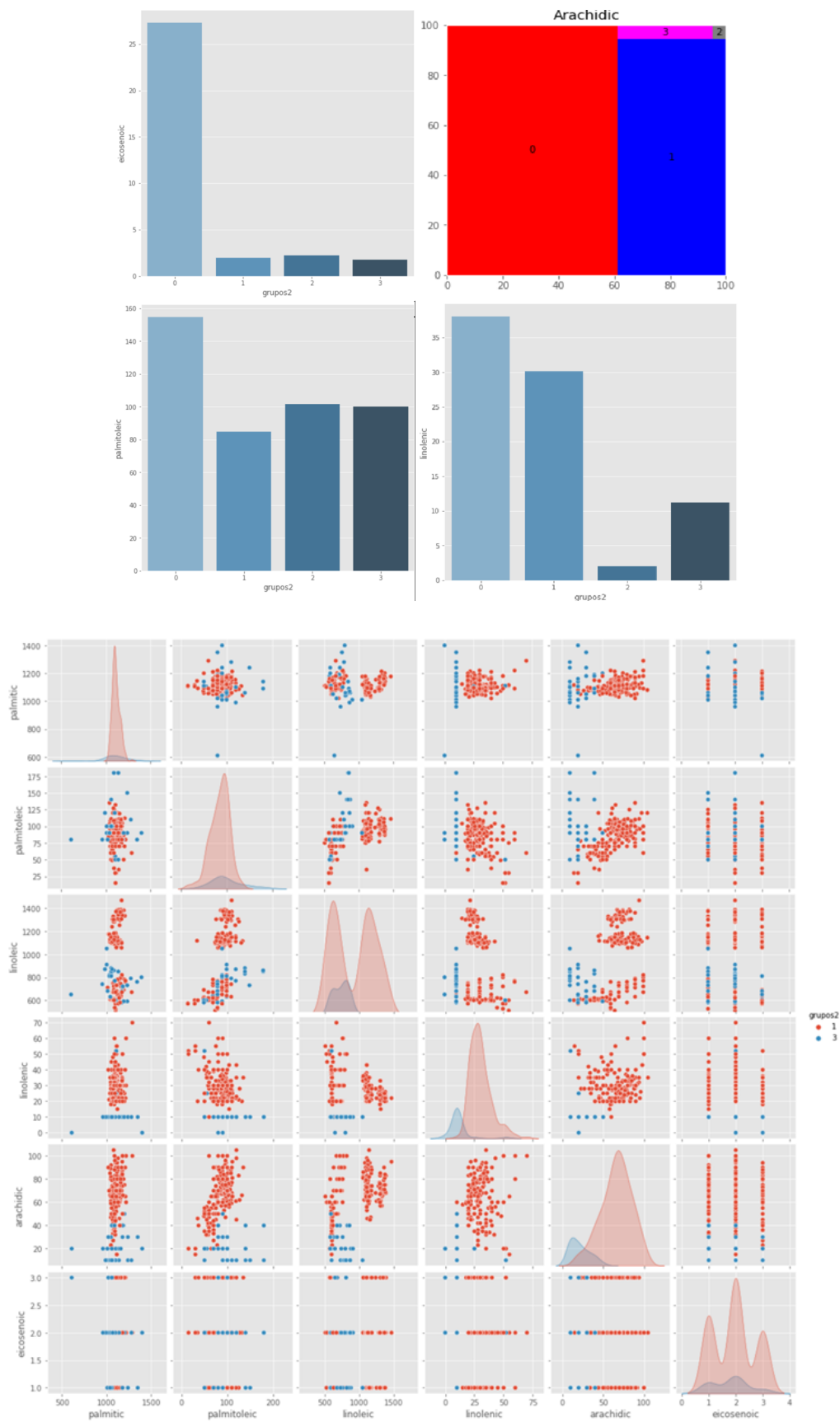
5. Caracterización de las clases de aceite

Ahora que tenemos nuestra data definitiva y con los tipos de aceite que hemos definido, vamos a caracterizar de manera gráfica cada uno de ellos, para dar un juicio sobre cada grupo. En primer lugar vamos a graficar el conjunto de todos los datos:



De aquí ya podemos extraer muchas conclusiones, el grupo 1 tiene la mayor tasa de ácido palmítico sin embargo tiene algunos outliers, lo que si está claro es que es el que mayor ácido eicosenoico tiene y por tanto será su distinción mas clara del resto de grupos. Podemos afirmar que el grupo 3 se diferenciaba del grupo 1 por su composición de ácido linolenico, aparte del arachidico. La diferencia entre el grupo 2 y el resto es que no contiene muy poco ácido arachidico.

Con estas observaciones sumado a unos gráficos en la presentación tomaremos conclusiones que relataré en la descripción:



6. Conclusiones

Tiene sentido adoptar 4 clases de aceite que en este orden las conclusiones son:

Una primera clase cuya característica principal es un alto contenido en ácido eicosenoico en comparación al resto. Es un ácido que se suele encontrar mucho en cacahuets no sabemos por que tiene mucha mas concentración que el resto debería ser investigado, además tiene mucho ácido araquídico el cual es tóxico en altas cantidades y la calidad del aceite en gran parte se mide por una baja concentración en el, incluso es el que más tiene en ácido palmítico teniendo una composición parecida al aceite de palma, es el de peor calidad, pese a que en la gráfica muestra bastantes outliers por debajo así que no se debe tener muy en cuenta.

Una segunda clase cuya característica principal es que contiene menos ácido palmitoleico que el resto de media, sin embargo rivaliza con el primer aceite en arachidico.

Estos dos tienen un alto contenido en acido linolénico un compuesto que se encuentra más en aceite de girasol que de oliva el cual apenas debería tener para cumplir los requisitos del aceite de oliva y araquídico que reduce considerablemente su calidad.

Una tercera clase cuya principal característica es su excaso contenido en ácido araquídico, a la par que linolenico, por lo tanto hablamos del aceite de mayor calidad.

Una cuarta clase con características parecidas a la segunda pero con menos concentración en ácido linolenico y arachídico, con lo que nos da entender que es un tipo de aceite ligeramente superior en calidad al primer aceite puesto que el ácido linolenico es mas común en el aceite de girasol que en el de oliva.

7. Librerías utilizadas

```
# Gráficos
# =====
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.font_manager
from matplotlib import style
style.use('ggplot') or plt.style.use('ggplot')
import pylab as pl

# Preprocesado y modelado
# =====
from sklearn.metrics import pairwise_distances
from sklearn.preprocessing import scale
from sklearn.cluster import KMeans
from sklearn.decomposition import PCA
from sklearn.pipeline import make_pipeline
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.preprocessing import scale
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
from sklearn.tree import plot_tree

# Configuración warnings
# =====
import warnings
warnings.filterwarnings('ignore')
import pandas as pd
import numpy as np
import seaborn as sns
```