Examen Práctico

Annette Pamela Ruiz Abreu - A01423595

La industria vinicola es una de las más importantes en el mundo, sin embargo, la calidad de un vino es subjetiva y depende de los gustos de cada persona. Existen diferentes tipos de vinos, entre ellos se encuentran los vinos tintos y los vinos blancos, los cuales tienen diferentes características que los hacen únicos. Algunas de las características que se buscan en un vino son: acidez, azúcar, cloruros, sulfatos, entre otros componentes químicos. Decidir la calidad de un vino es una tarea complicada, ya que depende de la percepción de cada persona, sin embargo, podemos tentar a resolver esta problematica al estudiar cúmulos de vinos con caracteristicas similares.

La problematica es encontrar cúmulos de vinos con características similares y determinar si existe una relación entre las características de los vinos y su calidad.

Preguntas de Investigación:

1. ¿Cuántos puntos conexos podemos identificar para darnos una idea de la cantidad de clusters que hay?
2. ¿Qué características químicas son las que más influyen en el agrupamiento del vino?
3. ¿Qué características químicas muestran la mayor variabilidad entre los diferentes grupos de vinos identificados?
4. ¿Existen combinaciones particulares de características químicas que tiendan a co-ocurrir en los vinos?
5. ¿Qué agrupaciones naturales de vinos pueden identificarse basándose en sus características químicas?
6. ¿Cómo podemos nombrar o distinguir las agrupaciones? ¿Qué tipos de vinos están en la base de datos?
7. Teniendo las agrupaciones, ¿podemos determinar qué agrupación es "mejor" en términos económicos o de popularidad?

Índice

Metodología

Para resolver esta problemática, se empezó con la preparación de datos en donde se revisaron los datos nulos (no había), los tipos de datos (numéricos), si había datos duplicados y datos atípicos, se normalizaron para facilitar el proceso de análisis y finalmente se proyectaron los datos usando isomap. Isomap es una técnica de reducción de dimensionalidad no lineal que preserva las distancias geodésicas entre puntos en un espacio de alta dimensionalidad. Utiliza el enfoque de vecinos más cercanos para construir un grafo de vecindad y luego calcula las distancias geodésicas en este grafo para obtener una representación de baja dimensionalidad que conserve la estructura subyacente de los datos en el espacio original. Esta proyección facilita la visualización y el análisis de los datos en un espacio de menor dimensión, lo que puede ayudar a identificar patrones y relaciones entre las variables de interés.

En segundo lugar, se hizo un complejo de Rips para ver cuántos puntos conexos se podían identificar para dar una idea de la cantidad de clústeres que se pueden formar con los datos. Además, se usaron las visualizaciones de los complejos de Rips para determinar qué combinación de características químicas era la mejor para poder diferenciar los tipos de vino de la mejor forma. Los complejos de Rips fueron complementados por visualizaciones de homología persistente para poder identificar la cantidad de componentes conexos que persistían en los datos. Para validar la cantidad de clústeres que se podían formar, se usó linkage clustering y PCA. Este método agrupa los puntos de datos según la distancia entre ellos, utilizando técnicas como el enlace simple, completo y promedio. Se comienza con cada punto de datos como un clúster individual y se fusionan gradualmente los clústeres más cercanos. Se realizó un análisis de agrupamiento jerárquico sobre datos escalados y reducidos a tres dimensiones mediante análisis de componentes principales (PCA).

Finalmente, se realizaron diversos mappers con métodos de agrupamiento como Kmeans y DBSCAN para formar los clústeres adecuados, visualizarlos en el espacio y poder analizar cada clúster y concluir sobre los tipos de vinos.

0. Librerías

In [ ]:
```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.patches as mpatches
from matplotlib.collections import PatchCollection
from sklearn.preprocessing import MinMaxScaler
```

```
import seaborn as sns
from scipy.spatial.distance import squareform, pdist
import gudhi
from matplotlib import cm
import tadasets
import ripser
import persim
import plotly.graph_objects as go
from sklearn.manifold import Isomap
from persim import PersistenceImager
from scipy.cluster.hierarchy import linkage, dendrogram
from itertools import combinations
import warnings
from scipy.cluster.hierarchy import fcluster
import kmapper as km
import sklearn
from sklearn.decomposition import PCA
from sklearn.cluster import AgglomerativeClustering
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.metrics import pairwise_distances_argmin_min
from sklearn.manifold import TSNE



warnings.filterwarnings("ignore")
plt.rcParams.update(plt.rcParamsDefault)
np.random.seed(2002)
```

1. Preparación de Datos

La base de datos se obtuvo de la siguiente fuente: https://www.kaggle.com/datasets/harrywang/wine-dataset-for-clustering/data

In [ ]:
```
data = pd.read_csv('wine-clustering.csv')
print("Tamaño de la base de datos: ", data.shape)
data.head()
```

```
Tamaño de la base de datos:  (178, 13)
```

Out[ ]:

	Alcohol	Malic_Acid	Ash	Ash_Alcanity	Magnesium	Total_Phenols	Flavanoids	Nonflavanoid_Ph
0	14.23	1.71	2.43	15.6	127	2.80	3.06	
1	13.20	1.78	2.14	11.2	100	2.65	2.76	
2	13.16	2.36	2.67	18.6	101	2.80	3.24	
3	14.37	1.95	2.50	16.8	113	3.85	3.49	
4	13.24	2.59	2.87	21.0	118	2.80	2.69	

Explicación de Atributos

- Alcohol: La cantidad de alcohol presente en el vino, típicamente expresada en porcentaje de volumen.
- Ácido málico: La cantidad de ácido málico presente en el vino, que afecta la acidez y el sabor.
- Ceniza: La cantidad de ceniza inorgánica presente en el vino después de la combustión.

- Alcalinidad de la ceniza: La medida de la alcalinidad de la ceniza en el vino, que puede afectar el sabor y la estabilidad del vino.
- Magnesio: La cantidad de magnesio presente en el vino, un mineral que puede influir en su sabor y calidad.
- Fenoles totales: La cantidad total de fenoles presentes en el vino, que pueden tener efectos antioxidantes y contribuir al sabor y aroma.
- Flavonoides: Compuestos fenólicos presentes en el vino que pueden influir en el color y el sabor.
- Fenoles no flavonoides: Otros compuestos fenólicos presentes en el vino que pueden tener efectos en el sabor y la calidad.
- Proantocianidinas: Un tipo específico de polifenoles presentes en el vino, asociados con beneficios para la salud y características organolépticas.
- Intensidad del color: La profundidad del color del vino, que puede variar según su composición química.
- Tono: La tonalidad del color del vino, que puede variar desde rojos violáceos hasta amarillos dorados.
- OD280/OD315 de vinos diluidos: Una relación óptica que puede proporcionar información sobre la concentración de compuestos fenólicos en el vino.
- Proline: Un aminoácido que puede estar presente en el vino y que puede influir en su sabor y aroma.

1.1 Datos Nulos

Dado que no hay datos nulos, no se necesita realizar limpieza de datos.

In [ ]:
```
print("Datos Nulos\n", data.isnull().sum())
```

```
Datos Nulos
 Alcohol                 0
Malic_Acid               0
Ash                      0
Ash_Alcanity             0
Magnesium                0
Total_Phenols            0
Flavanoids               0
Nonflavanoid_Phenols     0
Proanthocyanins          0
Color_Intensity          0
Hue                      0
OD280                    0
Proline                  0
dtype: int64
```

1.2 Tipos de Datos

In [ ]:
```
data.dtypes
```

Out[ ]:
```
Alcohol                 float64
Malic_Acid              float64
Ash                     float64
Ash_Alcanity            float64
Magnesium                 int64
Total_Phenols           float64
Flavanoids              float64
Nonflavanoid_Phenols    float64
Proanthocyanins         float64
Color_Intensity         float64
Hue                     float64
OD280                   float64
Proline                   int64
dtype: object
```

In [ ]:
```
data.describe()
```

Out[ ]:

	Alcohol	Malic_Acid	Ash	Ash_Alcanity	Magnesium	Total_Phenols	Flavanoids	I
count	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	
std	0.811827	1.117146	0.274344	3.339564	14.282484	0.625851	0.998859	
min	11.030000	0.740000	1.360000	10.600000	70.000000	0.980000	0.340000	
25%	12.362500	1.602500	2.210000	17.200000	88.000000	1.742500	1.205000	
50%	13.050000	1.865000	2.360000	19.500000	98.000000	2.355000	2.135000	
75%	13.677500	3.082500	2.557500	21.500000	107.000000	2.800000	2.875000	
max	14.830000	5.800000	3.230000	30.000000	162.000000	3.880000	5.080000	

1.3 Datos Duplicados

In [ ]:
```
print("Hay {} duplicados en la base de datos".format(data.duplicated().sum()))
```

```
Hay 0 duplicados en la base de datos
```

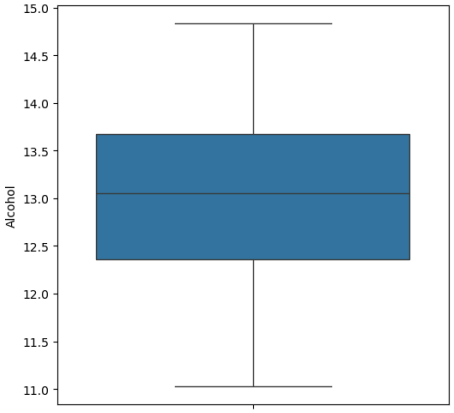
1.4 Datos Atípicos

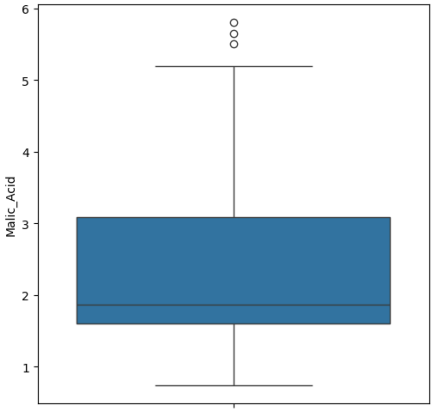
Dado que no hay una cantidad exorbitante de datos atípicos, usaremos la base de datos completa para el análisis.

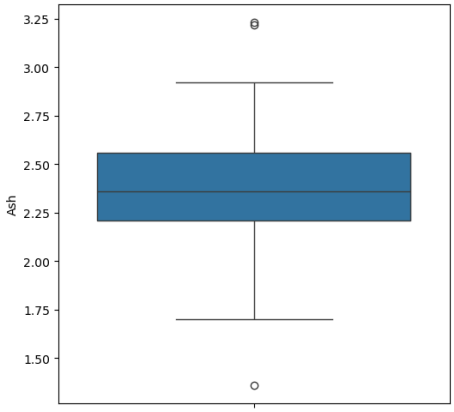
In [ ]:
```
print("DIAGRAMA DE CAJA Y BIGOTE DE LOS DATOS PARA IDENTIFICAR DATOS ATÍPICOS")

# use a loop to itterate through columns and create boxplots. i want there to be 3 per r



fig, ax = plt.subplots(5, 3, figsize=(20, 35))
for variable, subplot in zip(data.columns, ax.flatten()):
    sns.boxplot(data[variable], ax=subplot)
    for label in subplot.get_xticklabels():
        label.set_rotation(90)

plt.show()
```

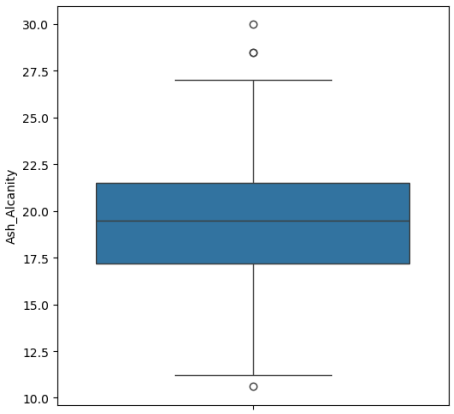
```python
# create a loop to eliminate outliers from the data
no_outliers = data.copy()
for col in no_outliers.columns:
    q1 = no_outliers[col].quantile(0.25)
    q3 = no_outliers[col].quantile(0.75)
    iqr = q3 - q1
    lower_bound = q1 - (1.5 * iqr)
    upper_bound = q3 + (1.5 * iqr)
    no_outliers = no_outliers[(no_outliers[col] > lower_bound) & (no_outliers[col] < upp

print("Tamaño de la base de datos sin datos atípicos: ",no_outliers.shape)
```

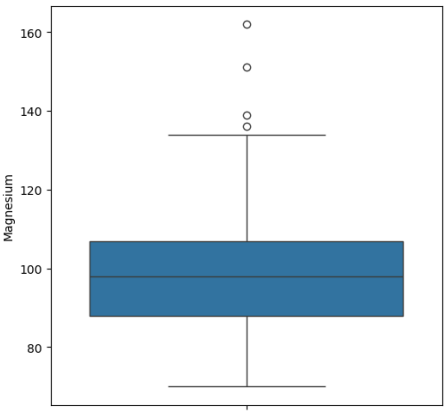
DIAGRAMA DE CAJA Y BIGOTE DE LOS DATOS PARA IDENTIFICAR DATOS ATÍPICOS

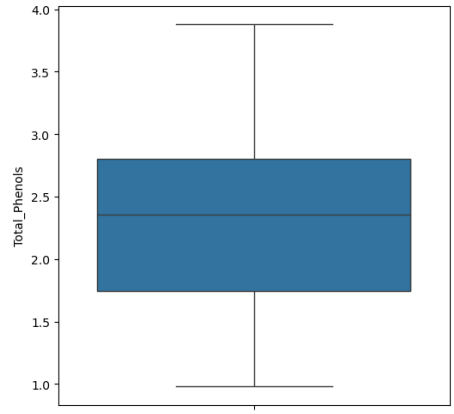

Alcohol

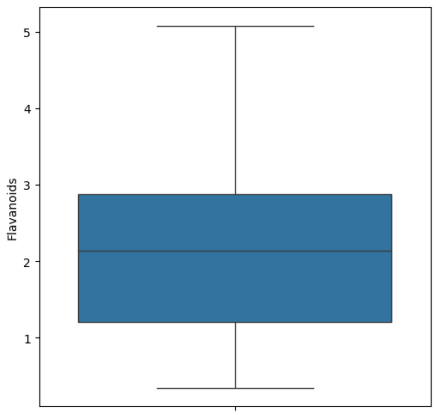

Malic_Acid

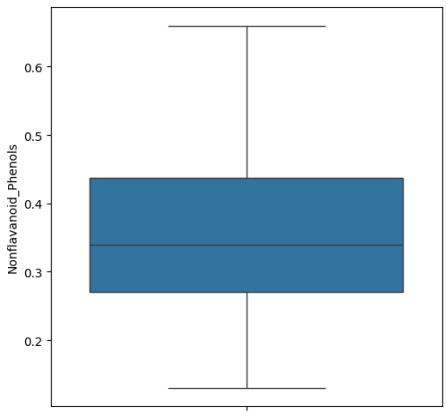

Ash

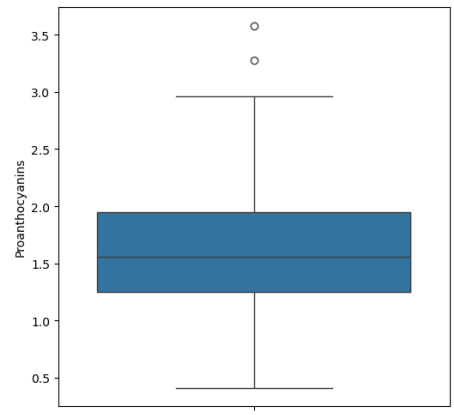

Ash_Alcanity

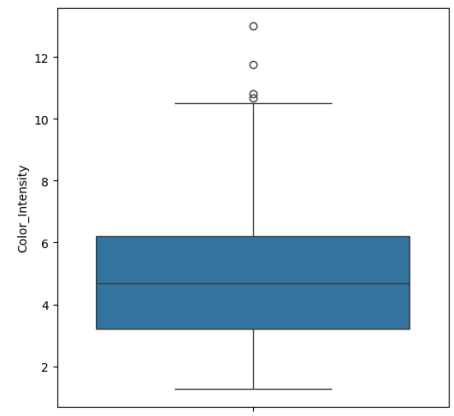

Magnesium

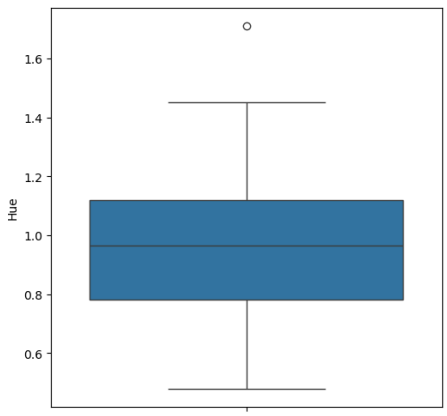

Total_Phenols

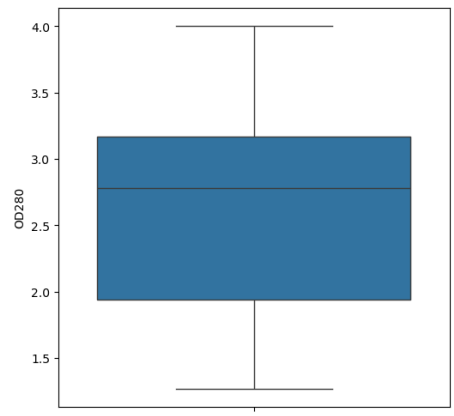

Flavanoids

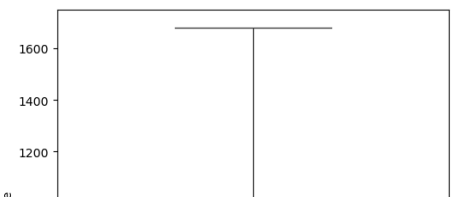

Nonflavanoid_Phenols

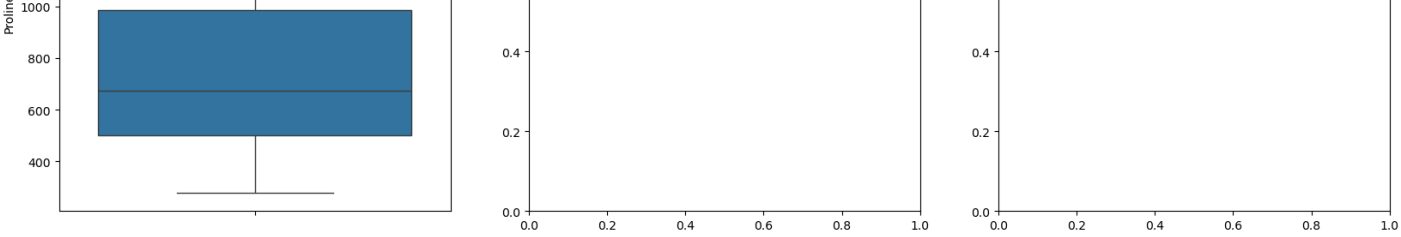

Proanthocyanins


Color_Intensity


Hue


OD280






```
Tamaño de la base de datos sin datos atípicos:  (161, 13)
```

1.5 Normalización de Datos

Dado que los datos están en diferentes escalas, es necesario normalizarlos para que tengan una media de 0 y una desviación estándar de 1. Esto es importante para que los algoritmos de agrupamiento funcionen correctamente.

In [ ]:
```
# normalización de datos

escalador = MinMaxScaler()
datos_normalizados = escalador.fit_transform(data)
datos_normalizados = pd.DataFrame(datos_normalizados, columns=data.columns)
datos_normalizados.describe()
```

Out[ ]:

	Alcohol	Malic_Acid	Ash	Ash_Alcanity	Magnesium	Total_Phenols	Flavanoids	I
count	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	
std	0.213639	0.220780	0.146708	0.172142	0.155244	0.215811	0.210730	
min	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	
50%	0.531579	0.222332	0.534759	0.458763	0.304348	0.474138	0.378692	
75%	0.696711	0.462945	0.640374	0.561856	0.402174	0.627586	0.534810	
max	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	

1.6 Transformación de Datos

Para luego hacer otros análisis utilizando herramientas como el mapper, reduciremos la dimensionalidad de los datos utilizando isomap, que es un método de reducción de dimensionalidad no lineal.

In [ ]:
```
isomap = Isomap(n_components=2)
projection_isomap = isomap.fit_transform(datos_normalizados)
projection_isomap = pd.DataFrame(projection_isomap, columns=['componente_1', 'componente
projection_isomap.head()
```

Out[ ]:

	componente_1	componente_2
0	-1.581466	-0.031019
1	-0.971940	0.430528
2	-1.763644	0.400274
3	-2.113840	0.328434
4	-1.023657	0.193300

2. Análisis de Datos

2.1 Complejo de Rips y Homología Persistente

In [ ]:
```
def plot_rips_complex(data, R, label="data", col=1, maxdim=2):
    tab10 = cm.get_cmap('tab10')

    fig, ax = plt.subplots(figsize=(6, 6))
    ax.set_title(label)
    ax.scatter(
        data[:, 0], data[:, 1], label=label,
        s=8, alpha=0.9, c=np.array(tab10([col] * len(data)))
    )

    for xy in data:
        ax.add_patch(mpatches.Circle(xy, radius=R, fc='none', ec=tab10(col), alpha=0.2))

    for i, xy in enumerate(data):
        if maxdim >=1:
            for j in range(i + 1, len(data)):
                pq = data[j]
                if (xy != pq).all() and (np.linalg.norm(xy - pq) <= R):
                    pts = np.array([xy, pq])
                    ax.plot(pts[:, 0], pts[:, 1], color=tab10(col), alpha=0.6, linewidth
                if maxdim == 2:
                    for k in range(j + 1, len(data)):
                        ab = data[k]
                        if ((ab != pq).all()
                                and (np.linalg.norm(xy - pq) <= R)
                                and (np.linalg.norm(xy - ab) <= R)
                                and (np.linalg.norm(pq - ab) <= R)
                        ):
                            pts = np.array([xy, pq, ab])
                            ax.fill(pts[:, 0], pts[:, 1], facecolor=tab10(col), alpha=0.
                        pass

    plt.axis('equal')
    plt.tight_layout()
    plt.show()
    pass
```

In [ ]:
```
def homologia_persistente(simplex_tree):
    Barcodes_Rips = simplex_tree.persistence()
    gudhi.plot_persistence_diagram(Barcodes_Rips)
    plt.show()
```

```
    # ------------------------------

    comp_conex = [elem for elem in Barcodes_Rips if elem[0] == 0]
    print("Componentes Conexas:\n", comp_conex[:10])
    huecos = [elem for elem in Barcodes_Rips if elem[0] == 1]
    print("Huecos:\n", huecos[:10])
    esferas = [elem for elem in Barcodes_Rips if elem[0] == 2]
    print("Esferas:\n", esferas[:10])



    # ------------------------------


    dgm_X = ripser.ripser(X,maxdim=2)['dgms']
    persim.plot_diagrams(
        dgm_X,
        show=True,
        title="Diagrama de persistencia"
    )


    # ------------------------------

    dmg0=dgm_X[0]
    Comp_Conexas = pd.DataFrame(dmg0, columns=['Birth', 'Death'])
    Comp_Conexas['Life'] = Comp_Conexas['Death'] - Comp_Conexas['Birth']
    Comp_Conexas = Comp_Conexas.sort_values(by='Life', ascending=False)
    s=pd.Series(range(0,1000))
    Comp_Conexas['Componente'] = s


    top_10_componentes = Comp_Conexas.head(10)[1:]
    top_10_componentes.plot.bar(x='Componente', y='Life', rot=0)
    plt.title('Vida de las diez principales componentes conexas')
    plt.xlabel('Componente')
    plt.ylabel('Duración de vida')
    plt.title('Vida de las componentes conexas')
    plt.show()
```

Adicional: Pruebas para visualizar todos los complejos de rips de cada combinación de columnas

In [ ]:
```
# PRUEBAS PARA VISUALIZAR TODOS LOS COMPLEJOS RIPS DE CADA COMBINACIÓN DE COLUMNAS

"""
def pruebas_rips(d):
    dist = pd.DataFrame(squareform(pdist(d), "euclidean"), columns=data.index.values, in
    # Máxima distancia
    print("Distancia máxima: ", dist.values.max())

    # --------------------

    rips_complex = gudhi.RipsComplex(distance_matrix=dist.values, max_edge_length=2.1)
    # Generamos el árbol de complejos simpliciales e imprimimos la información
    simplex_tree = rips_complex.create_simplex_tree(max_dimension=2)
    result_str = 'Rips complex is of dimension ' + repr(simplex_tree.dimension()) + ' -
        repr(simplex_tree.num_simplices()) + ' simplices - ' + \
        repr(simplex_tree.num_vertices()) + ' vertices.'
    print(result_str)
```

```
    # ---------------------

    X=np.array(d)
    plot_rips_complex(X, R=0.18, label="X", maxdim=1)


def iteraciones(data):
    columns = data.columns.tolist()  # Obtener una lista de nombres de columnas
    for dim in range(1, len(columns) + 1):  # Para cada dimensión de 1 a la dimensión to
        for cols in combinations(columns, dim):  # Para cada combinación de columnas
            if len(cols) >= 2:  # Verificar que hay al menos dos columnas
                selected_data = data[list(cols)]  # Seleccionar las columnas por su nomb
                print("Columnas seleccionadas:", cols)
                # Aplicar Isomap
                isomap = Isomap(n_components=2)
                d = isomap.fit_transform(selected_data)
                pruebas_rips(d)

# Llamar a la función iteraciones con el DataFrame datos_normalizados
iteraciones(datos_normalizados)

"""
```

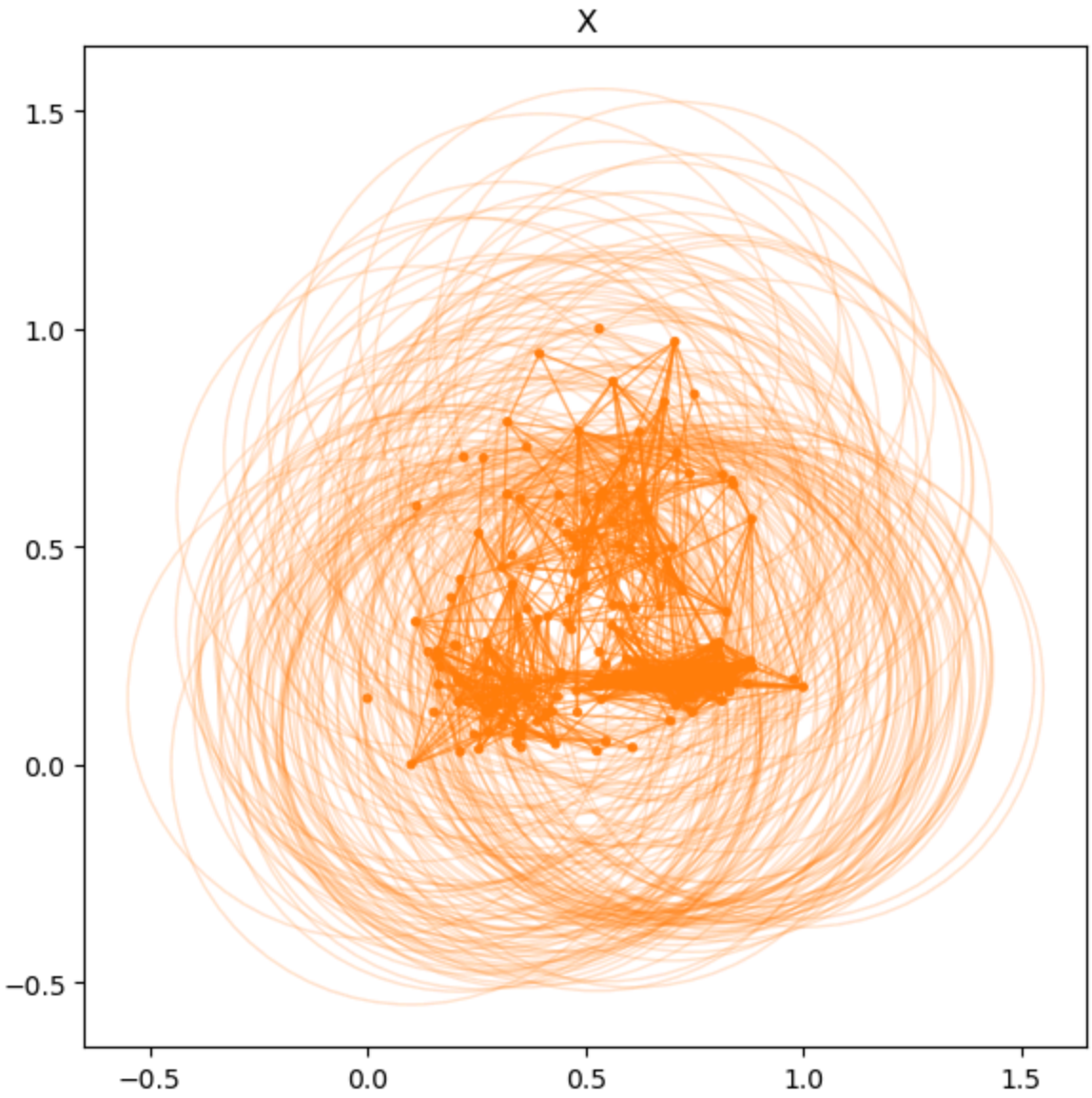
Out[ ]:
```
'\ndef pruebas_rips(d):\n    dist = pd.DataFrame(squareform(pdist(d), "euclidean"), col
umns=data.index.values, index=data.index.values)\n    # Máxima distancia\n    print("Di
stancia máxima: ", dist.values.max())\n\n    # ---------------------\n\n    rips_comple
x = gudhi.RipsComplex(distance_matrix=dist.values, max_edge_length=2.1)\n    # Generamo
s el árbol de complejos simpliciales e imprimimos la información\n    simplex_tree = ri
ps_complex.create_simplex_tree(max_dimension=2)\n    result_str = \'Rips complex is of
dimension \' + repr(simplex_tree.dimension()) + \' - \' +         repr(simplex_tree.num
_simplices()) + \' simplices - \' +         repr(simplex_tree.num_vertices()) + \' vert
ices.\'\n    print(result_str)\n\n    # ---------------------\n\n    X=np.array(d)\n
plot_rips_complex(X, R=0.18, label="X", maxdim=1)\n\n\ndef iteraciones(data):\n    colu
mns = data.columns.tolist()  # Obtener una lista de nombres de columnas\n    for dim in
range(1, len(columns) + 1):  # Para cada dimensión de 1 a la dimensión total\n        f
or cols in combinations(columns, dim):  # Para cada combinación de columnas\n
if len(cols) >= 2:  # Verificar que hay al menos dos columnas\n                selected
_data = data[list(cols)]  # Seleccionar las columnas por su nombre\n                pri
nt("Columnas seleccionadas:", cols)\n                # Aplicar Isomap\n
isomap = Isomap(n_components=2)\n                d = isomap.fit_transform(selected_dat
a)\n                pruebas_rips(d)\n\n# Llamar a la función iteraciones con el DataFra
me datos_normalizados\niteraciones(datos_normalizados)\n\n'
```

2.1.1 Complejo de Rips y Homología Persistente Datos Normalizados

In [ ]:
```
dist = pd.DataFrame(squareform(pdist(datos_normalizados), "euclidean"), columns=data.ind
# Máxima distancia
print("Distancia máxima: ", dist.values.max())

# ---------------------

rips_complex = gudhi.RipsComplex(distance_matrix=dist.values, max_edge_length=2.1)
# Generamos el árbol de complejos simpliciales e imprimimos la información
simplex_tree = rips_complex.create_simplex_tree(max_dimension=2)
result_str = 'Rips complex is of dimension ' + repr(simplex_tree.dimension()) + ' - ' +
    repr(simplex_tree.num_simplices()) + ' simplices - ' + \
    repr(simplex_tree.num_vertices()) + ' vertices.'
print(result_str)

# ---------------------
```

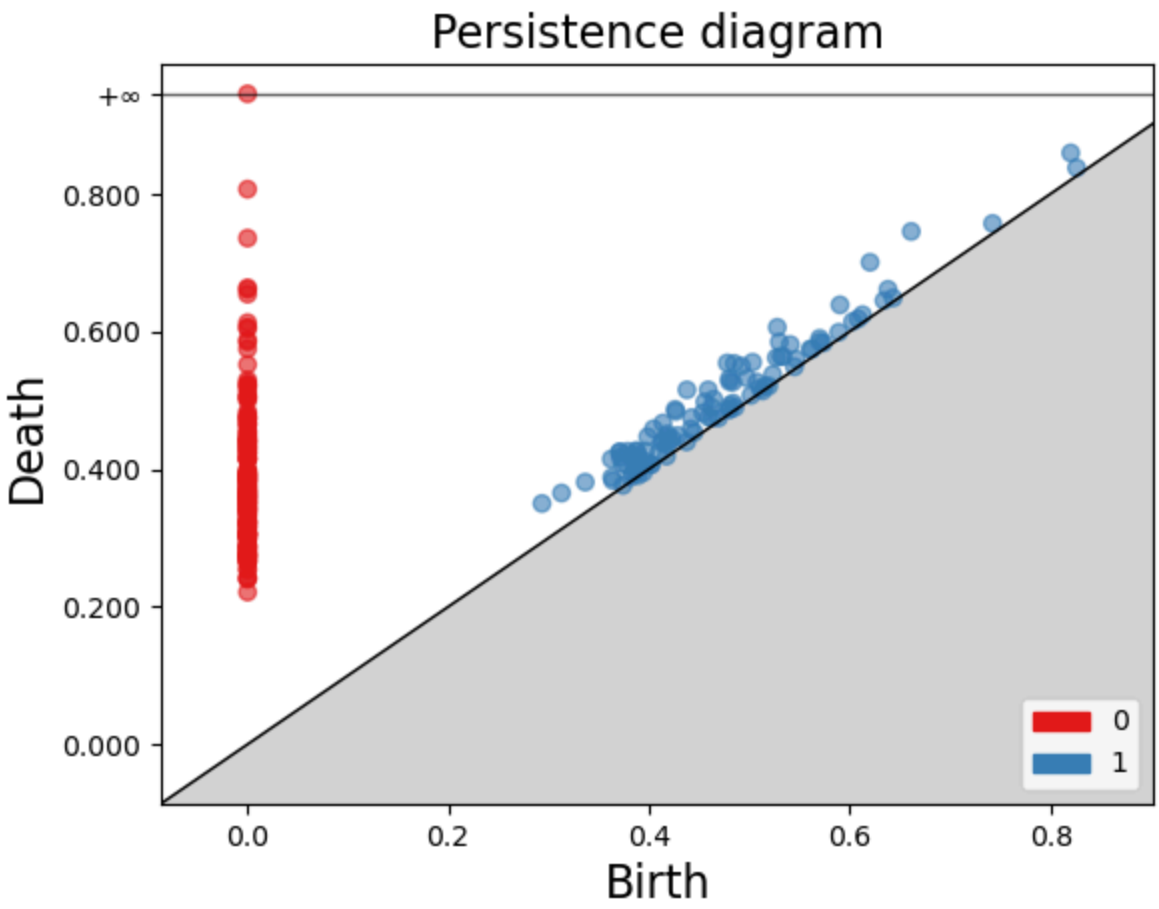
```
X=np.array(datos_normalizados)
plot_rips_complex(X, R=0.55, label="X", maxdim=1)
```

```
Distancia máxima:  2.0180147072512775
Rips complex is of dimension 2 - 940107 simplices - 178 vertices.
```

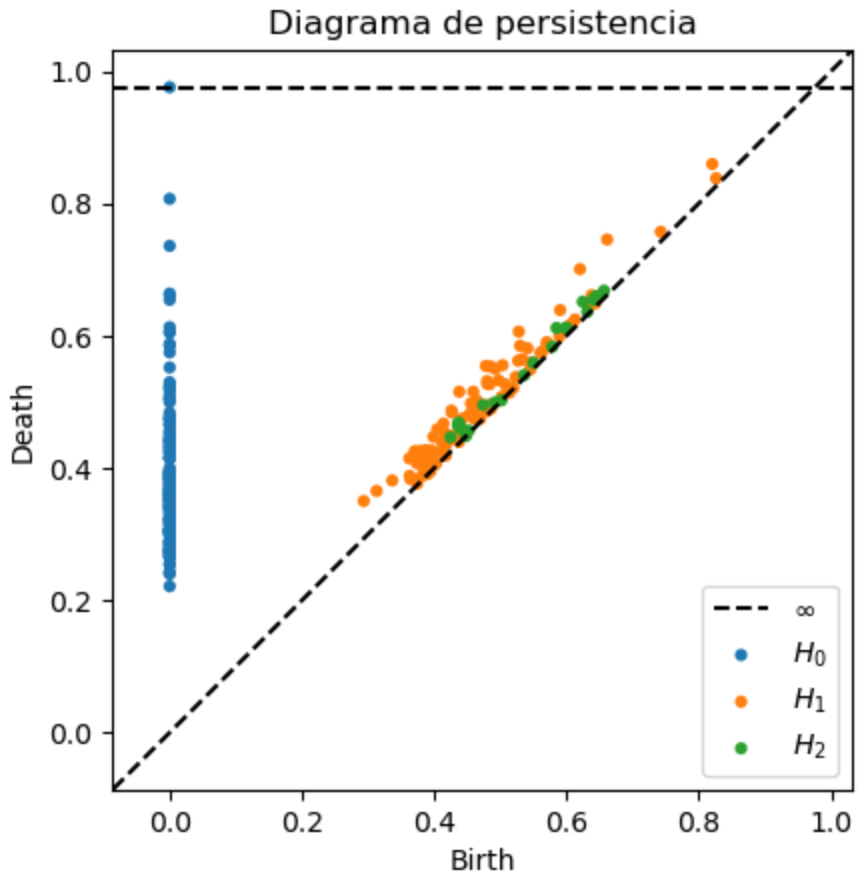


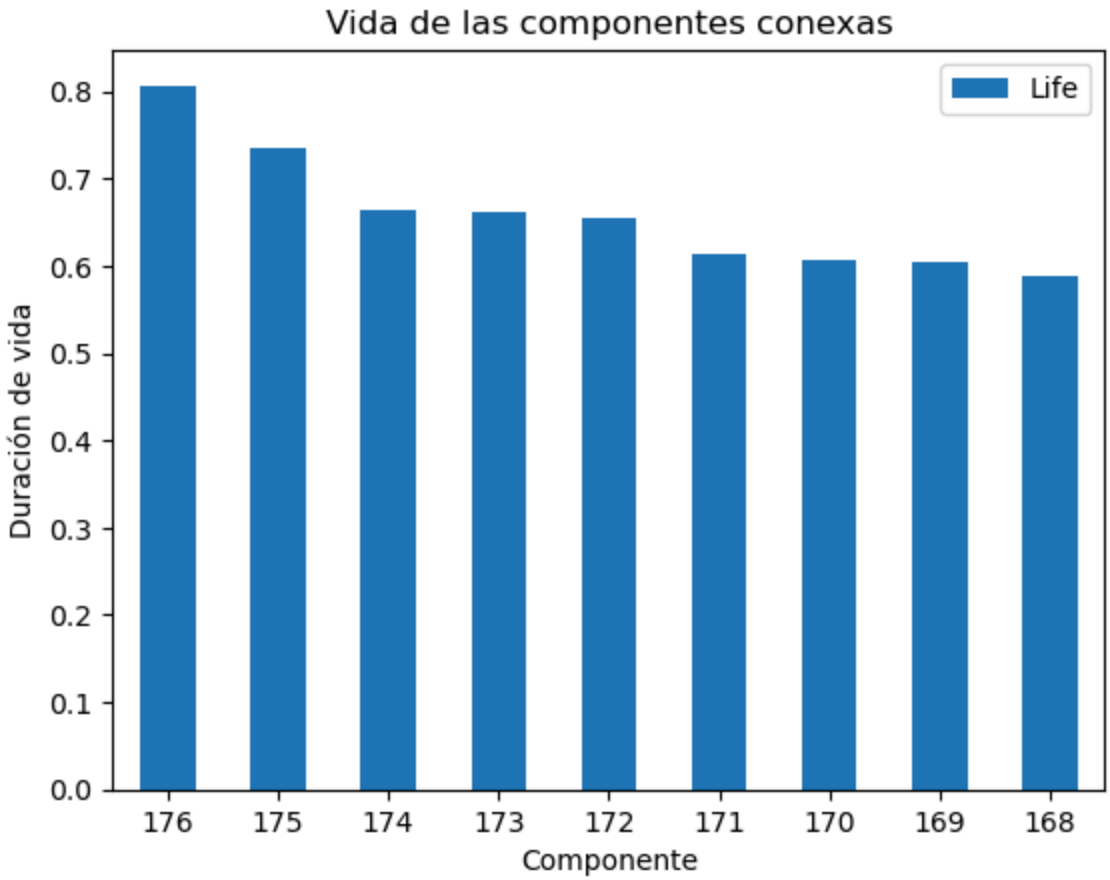
Aunque los datos son multidimensionales, podemos visualizarlos en un espacio de menor dimensión utilizando el complejo de Rips. El complejo de Rips es una forma de visualizar la topología de los datos en un espacio de menor dimensión. Nos permite identificar cúmulos de puntos que están cerca unos de otros en el espacio de datos original. En este caso, parece que podría haber 2 o 3 componentes conexas diferentes, lo que nos lleva a conlcuir que quizá haya 2 o 3 clusters o tipos de vinos diferentes; sin embargo, la visualización no es 100 % clara y en realidad parece como 1 componente conexa gigante (lo cual no nos ayuda porque queremos agrupar los datos).

In [ ]:
```
homologia_persistente(simplex_tree)
```




```
Componentes Conexas:
 [(0, (0.0, inf)), (0, (0.0, 0.8068044841884924)), (0, (0.0, 0.7356595058919788)), (0,
(0.0, 0.6635745737585709)), (0, (0.0, 0.661181215084445)), (0, (0.0, 0.654171500149394
2)), (0, (0.0, 0.6127684505672379)), (0, (0.0, 0.6061535576422159)), (0, (0.0, 0.60453439
00229144)), (0, (0.0, 0.5876886843204362))]
Huecos:
 [(1, (0.661305460776694, 0.7453701168509437)), (1, (0.620261072197103, 0.700541708175866
3)), (1, (0.5278075511991965, 0.6060372308464372)), (1, (0.437785382725661, 0.51520703900
86698)), (1, (0.47794997488887336, 0.5542129824469559)), (1, (0.48499352463969114, 0.5535
392455795356)), (1, (0.4260195046106886, 0.48674419051405005)), (1, (0.492154736554904,
0.5497706868793683)), (1, (0.4267213095232562, 0.4838489669944343)), (1, (0.2933687537551
753, 0.3500093254120985))]
Esferas:
 []
```



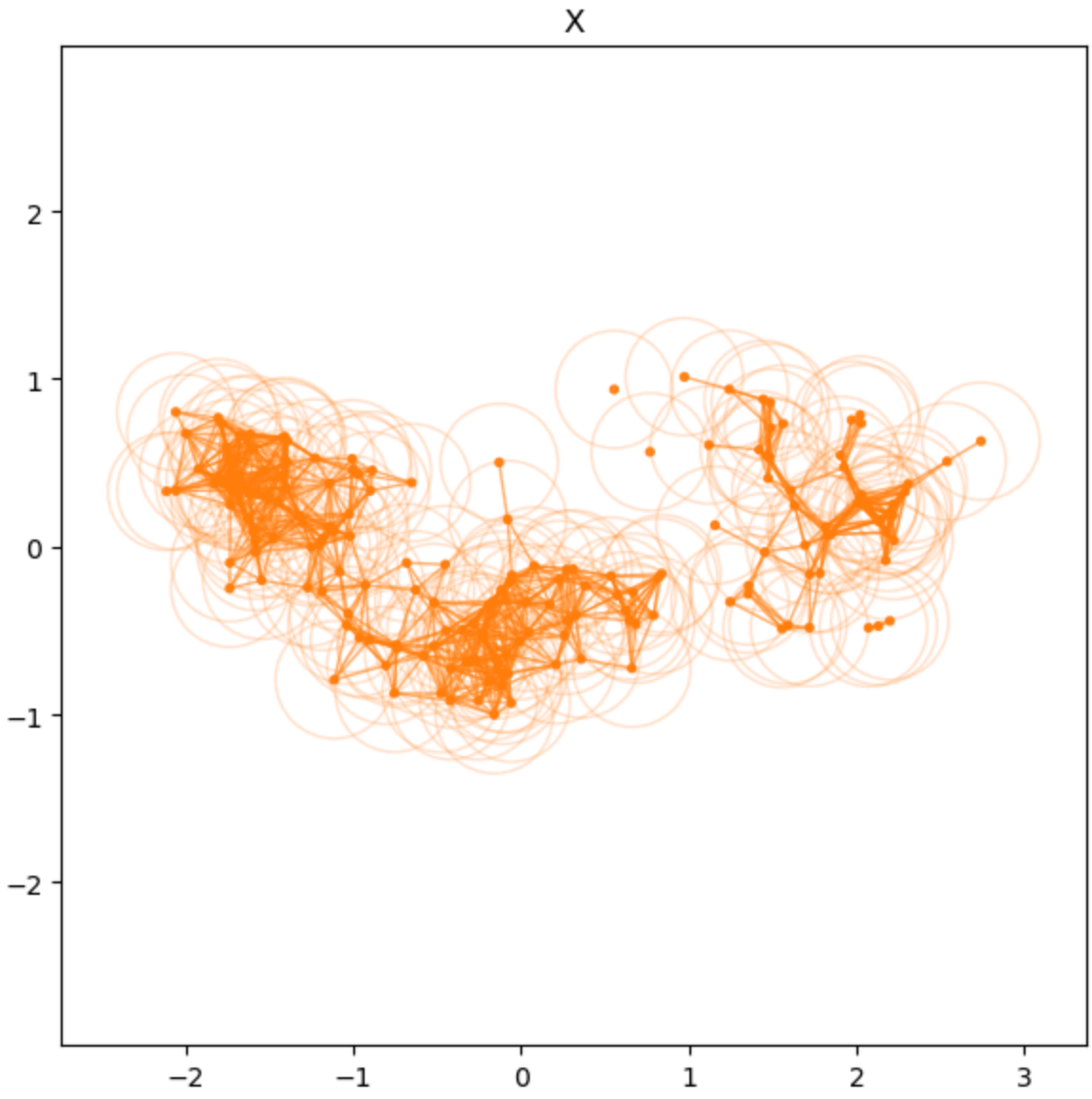


Al graficar la homología persistente podemos observar que no hay huecos ni esferas, solamente componentes conexas. En este caso, al analizar la duración de vida de cada componente (ignorando la infinita) parece que hay 1 componente conexa que persiste más que todas. Esto nos indica que esta forma de hacer el complejo no nos ayuda a distinguir agrupaciones.

2.1.2 Complejo de Rips y Homología Persistente Datos Transformados

In [ ]:
```
dist = pd.DataFrame(squareform(pdist(projection_isomap), "euclidean"), columns=data.inde
# Máxima distancia
print("Distancia máxima: ", dist.values.max())

# ---------------------

rips_complex = gudhi.RipsComplex(distance_matrix=dist.values, max_edge_length=5)
# Generamos el árbol de complejos simpliciales e imprimimos la información
simplex_tree = rips_complex.create_simplex_tree(max_dimension=2)
result_str = 'Rips complex is of dimension ' + repr(simplex_tree.dimension()) + ' - ' +
    repr(simplex_tree.num_simplices()) + ' simplices - ' + \
    repr(simplex_tree.num_vertices()) + ' vertices.'
print(result_str)

# ---------------------

X=np.array(projection_isomap)
plot_rips_complex(X, R=0.35, label="X", maxdim=1)
```

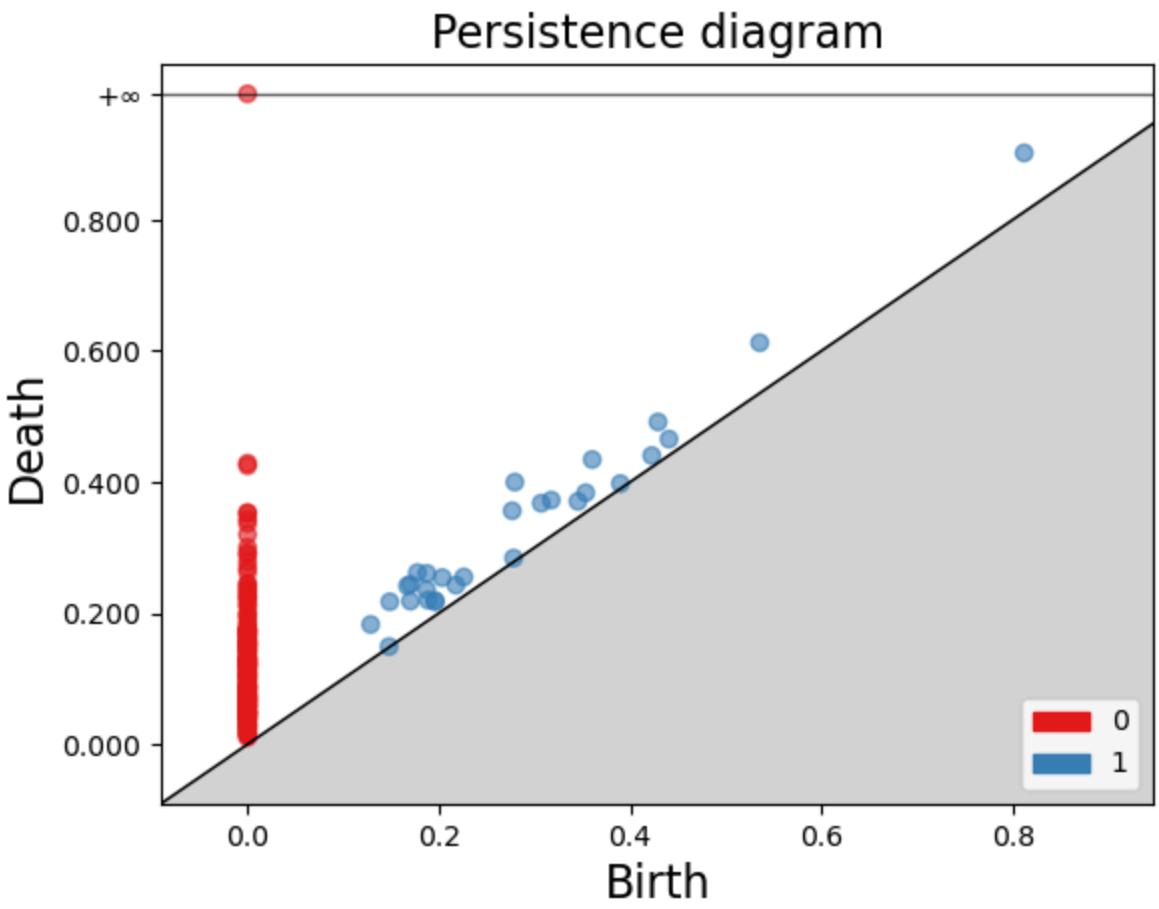
```
Distancia máxima:  4.86517299194306
Rips complex is of dimension 2 - 940107 simplices - 178 vertices.
```



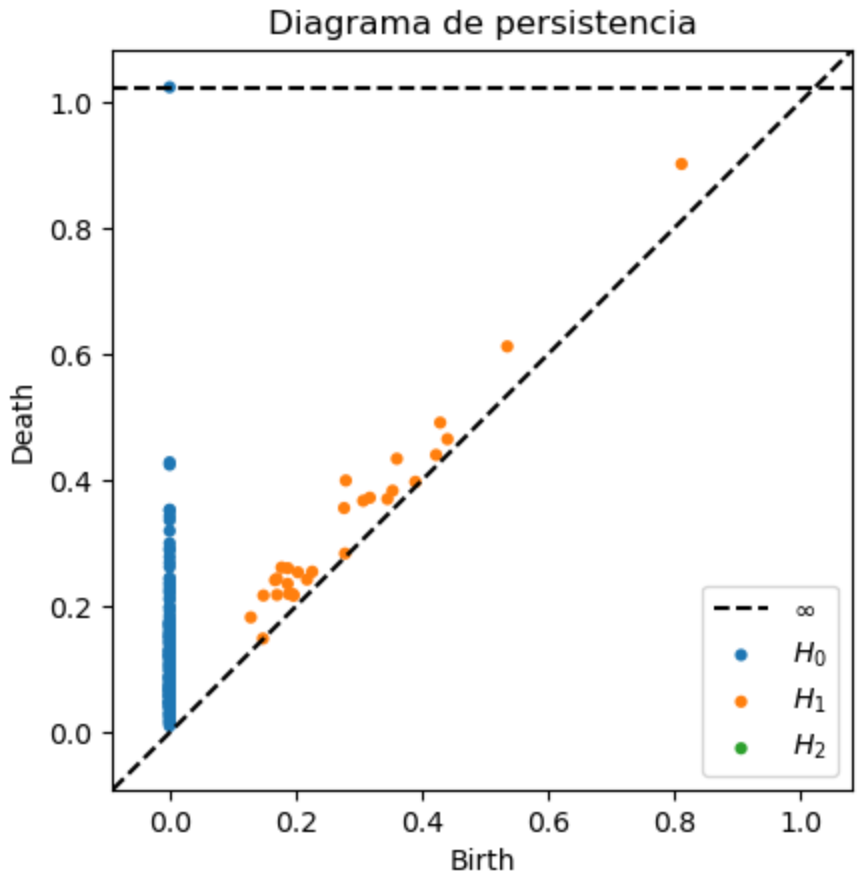
Al hacer el complejo de Rips con los datos transformados utilizando isomap, es muchísimo más evidente que hay 3 componentes conexas diferentes, indicando que hay 3 clusters distintos en los

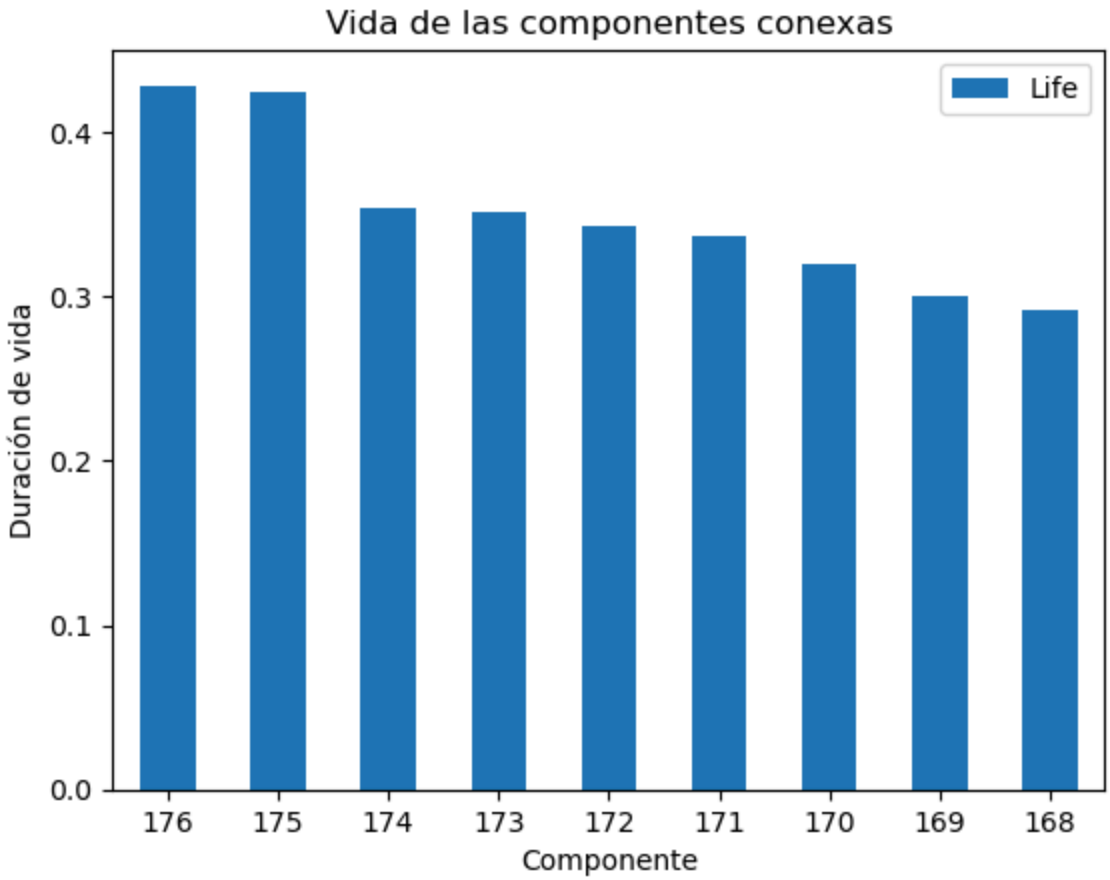
datos. Y también podemos ver que hay 2 clusters que están mucho más cerca uno del otro que el tercero y pueden llegar a conectarse dependiendo del epsilon que se elija para graficar.

In [ ]:
```
homologia_persistente(simplex_tree)
```




```
Componentes Conexas:
 [(0, (0.0, inf)), (0, (0.0, 0.4286700594589208)), (0, (0.0, 0.4247811079510015)), (0,
(0.0, 0.3534974603295659)), (0, (0.0, 0.3520967409588928)), (0, (0.0, 0.343267884105683
3)), (0, (0.0, 0.3366893022756843)), (0, (0.0, 0.31988394113404367)), (0, (0.0, 0.3003997
353288952)), (0, (0.0, 0.2922939111720161))]
Huecos:
 [(1, (0.2794320019787642, 0.39976283709414334)), (1, (0.8119209456866113, 0.901788882076
4883)), (1, (0.17755125717274464, 0.2617812987203591)), (1, (0.27669370816603167, 0.35608
414182711584)), (1, (0.5354601954442721, 0.6123668557959178)), (1, (0.16722090097832487,
0.24162523364566113)), (1, (0.3603491294087246, 0.43425823653389106)), (1, (0.17021746313
075195, 0.24408464689263776)), (1, (0.18747888683033376, 0.2606261726860474)), (1, (0.148
74632295360268, 0.21737438975827864))]
Esferas:
 []
```





Al hacer los diagramas de persistencia del complejo de rips con los datos transformados, la vida de los componentes disminuye, pero ya podemos observar que hay 3 componentes que tienen vidas casi iguales, mientras que en el complejo de rips con los datos originales, había 2 componentes con vidas casi iguales. Esto nos permite visualizar mejor que sí hay 3 clusters distintos.

Al hacer varias pruebas con diferentes columnas y valores de epsilon, se encontró que los mejores resultados se obtienen usando las siguientes columnas:

- Alcohol
- Malic Acid
- Flavanoids
- OD280
- Ash_Alcanity
- Hue
- Magnesium
- Color_Intensity
- Proline

Esto significa que estas columnas son las que más influyen en el agrupamiento de los vinos. Al hacer el complejo de Rips con estas columnas, se observa que hay 3 componentes conexas distintas, lo que nos indica que hay 3 clusters diferentes en los datos.

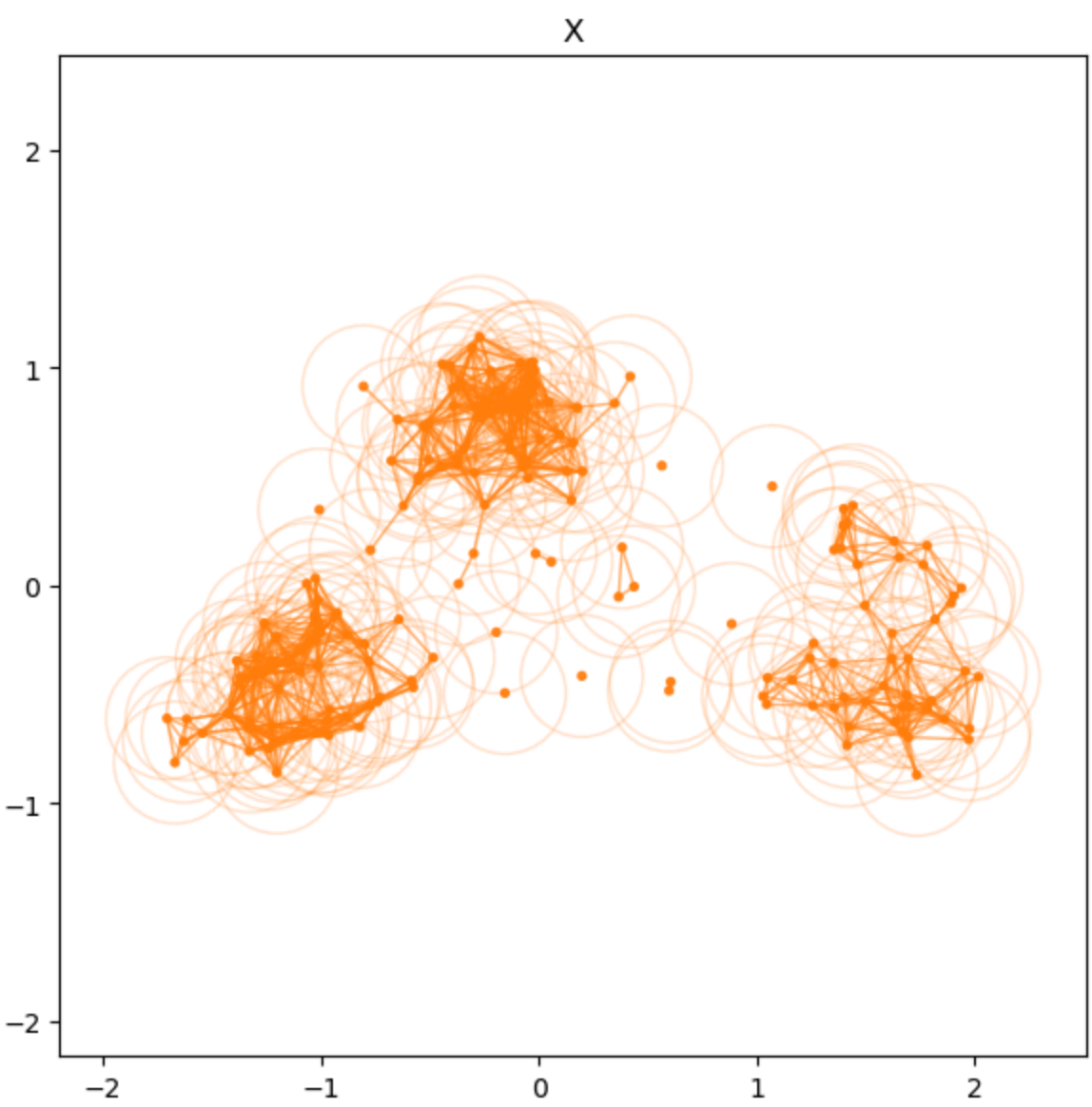
Los datos que empeoraban las visualizaciones y hacían que la distinción de grupos no fuera clara eran:

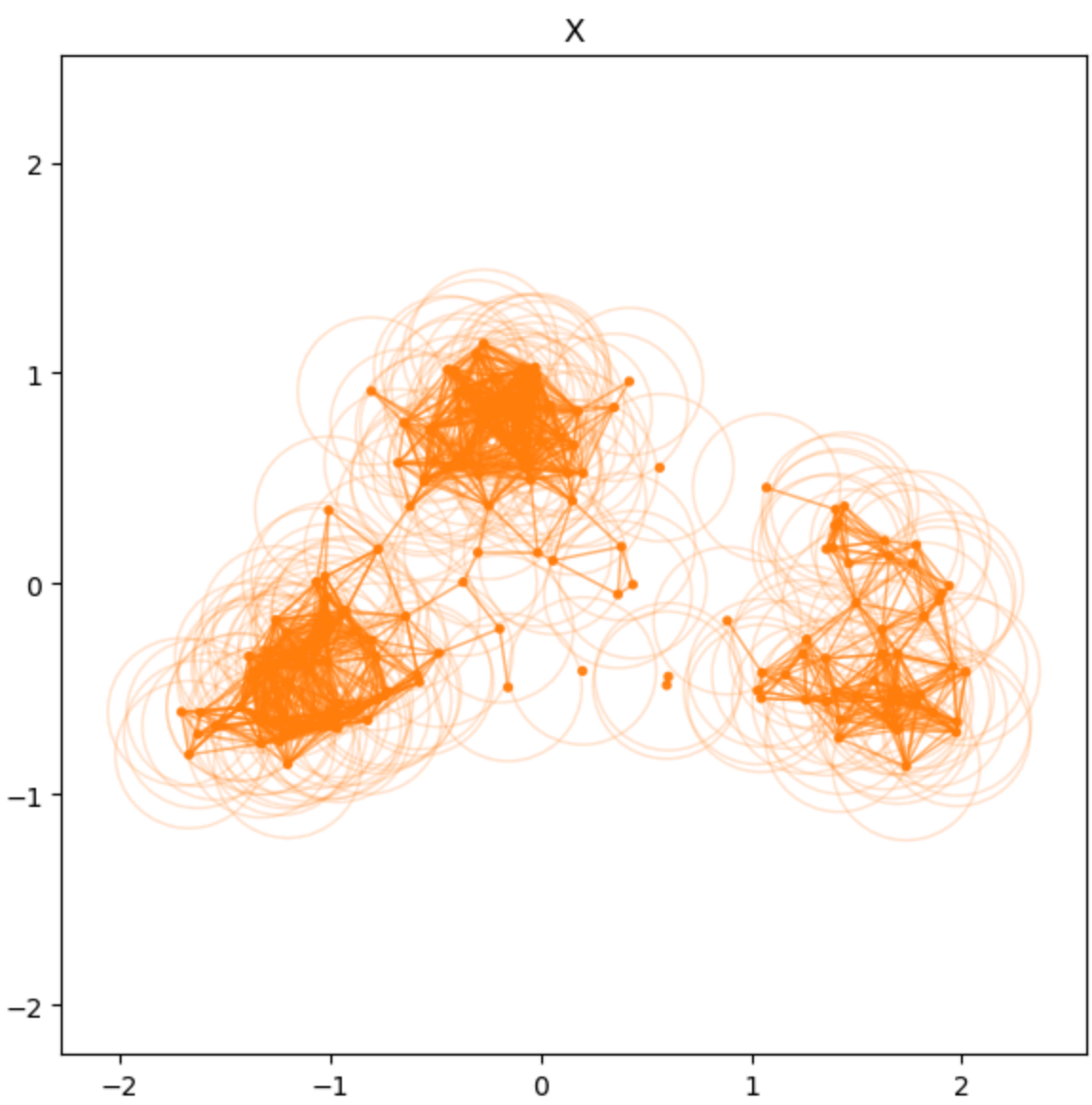
- Nonflavanoid_Phenols
- Ash
- Total_Phenols
- Proanthocyanins

Es por ello que no utilizaremos estas columnas y nos quedaremos con la proyección de isomap que solo utiliza los componentes químicos clave.

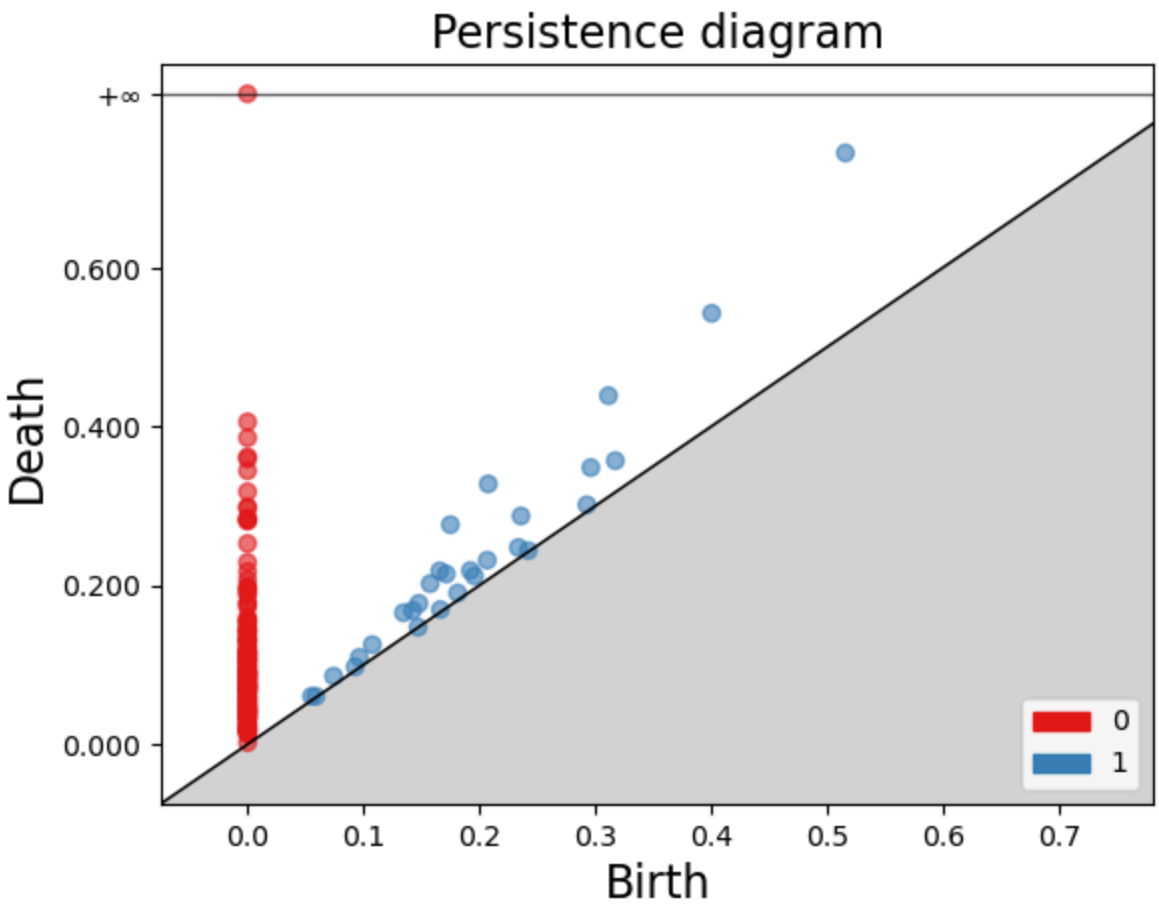
In [ ]:
```
projection_isomap_perfecto = isomap.fit_transform(datos_normalizados[["Alcohol", "Malic_


dist = pd.DataFrame(squareform(pdist(projection_isomap_perfecto), "euclidean"), columns=
# Máxima distancia
print("Distancia máxima: ", dist.values.max())

# ---------------------

rips_complex = gudhi.RipsComplex(distance_matrix=dist.values, max_edge_length=5)
# Generamos el árbol de complejos simpliciales e imprimimos la información
simplex_tree = rips_complex.create_simplex_tree(max_dimension=2)
result_str = 'Rips complex is of dimension ' + repr(simplex_tree.dimension()) + ' - ' +
    repr(simplex_tree.num_simplices()) + ' simplices - ' + \
    repr(simplex_tree.num_vertices()) + ' vertices.'
print(result_str)

# ---------------------

X=np.array(projection_isomap_perfecto)
plot_rips_complex(X, R=0.28, label="X", maxdim=1)
plot_rips_complex(X, R=0.35, label="X", maxdim=1)
```

```
Distancia máxima:  3.730985493774503
Rips complex is of dimension 2 - 940107 simplices - 178 vertices.
```

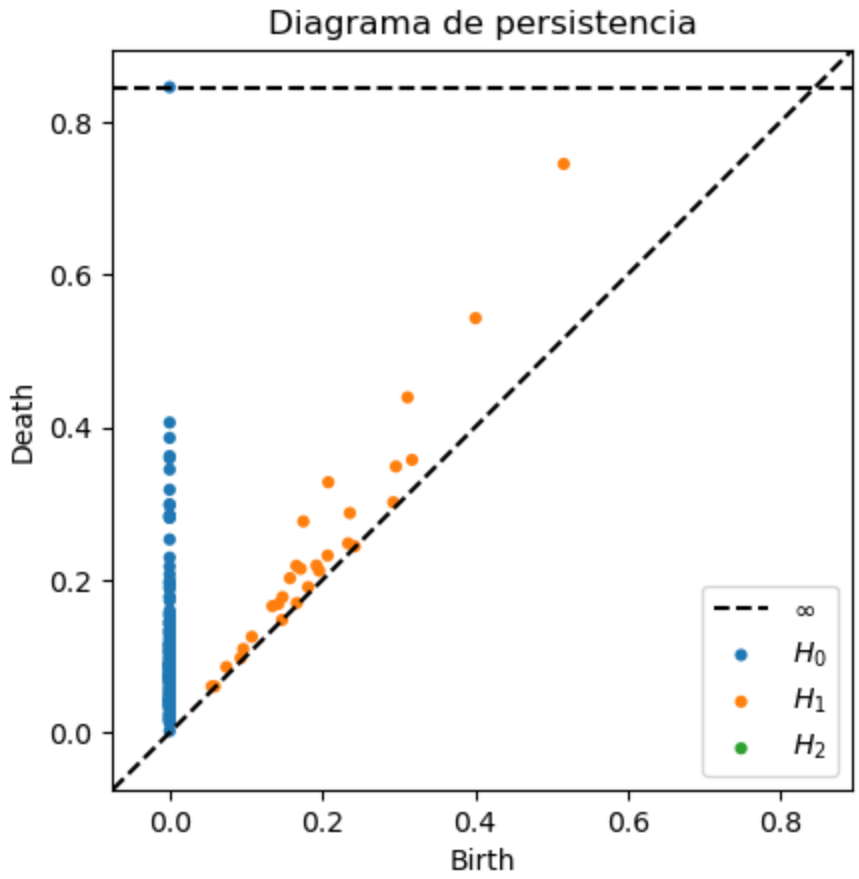

X
2
1
0
−1
−2
−2
−1
0
1
2

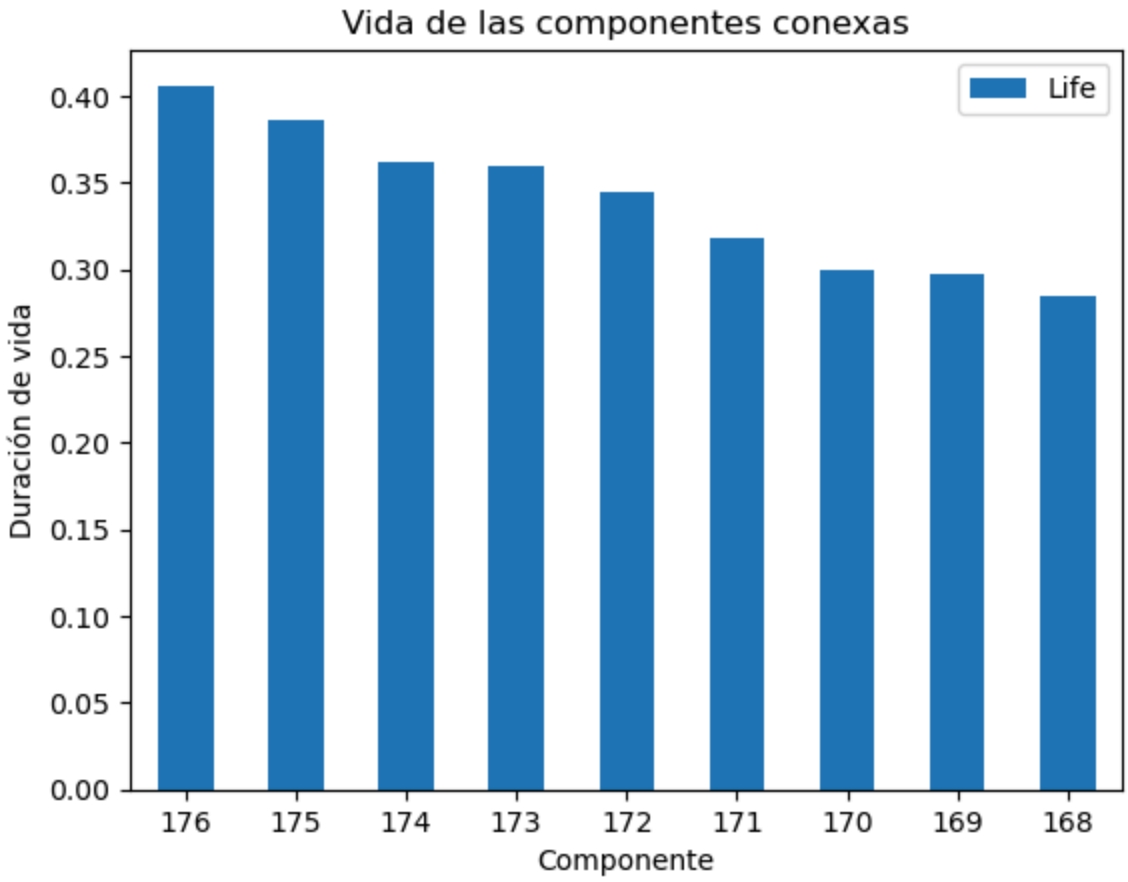


In [ ]:
```
homologia_persistente(simplex_tree)
```




```
Componentes Conexas:
 [(0, (0.0, inf)), (0, (0.0, 0.40591824807010896)), (0, (0.0, 0.3858343331341422)), (0,
(0.0, 0.36204028836550417)), (0, (0.0, 0.3592825741015627)), (0, (0.0, 0.3443944989321265
4)), (0, (0.0, 0.3179474494162272)), (0, (0.0, 0.2989712629166907)), (0, (0.0, 0.29749206
610547796)), (0, (0.0, 0.2842090488175854))]
Huecos:
 [(1, (0.5160005692348906, 0.7445088273714137)), (1, (0.4006224328741842, 0.5426424753221
69)), (1, (0.31154231503809504, 0.43894527215096324)), (1, (0.207744611081558, 0.32782829
50052686)), (1, (0.17507138824555993, 0.27649218472344217)), (1, (0.16590637916630124, 0.
21836117143355632)), (1, (0.29628641253700083, 0.3483727955172791)), (1, (0.2359668038476
738, 0.28743870823337736)), (1, (0.15759723962761948, 0.2022452515330251)), (1, (0.171472
28255588814, 0.21445525309237093))]
Esferas:
 []
```

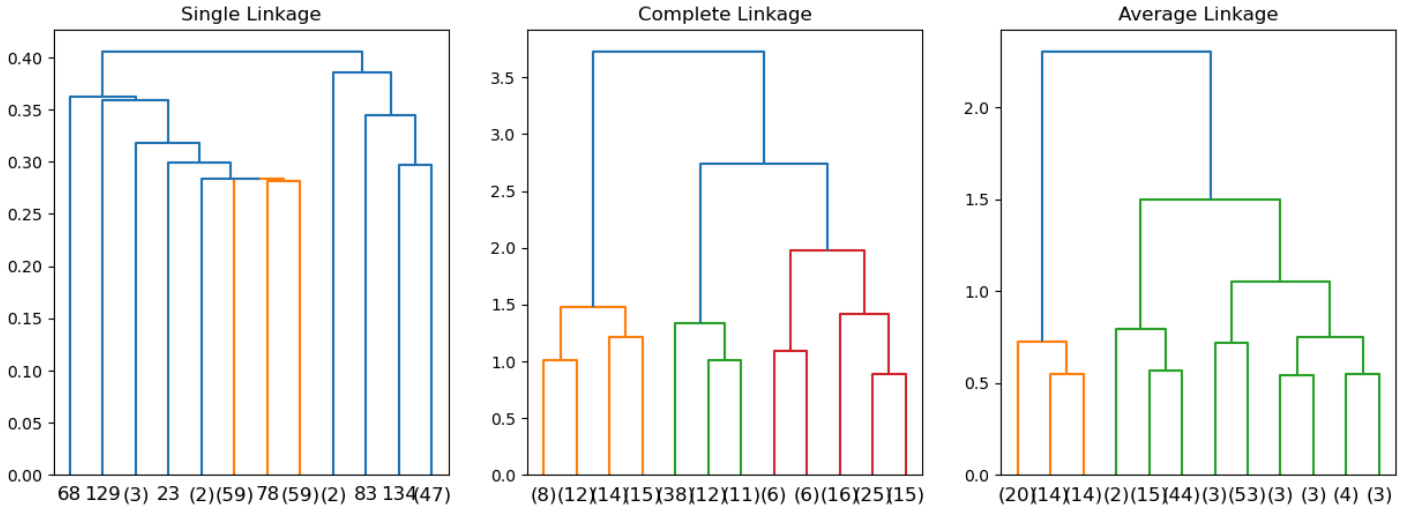




2.2 Linkage Clustering

In [ ]:
```
# Perform single linkage clustering
Z_single = linkage(X, method='single')
```

```
# Perform complete linkage clustering
Z_complete = linkage(X, method='complete')

# Perform average linkage clustering
Z_average = linkage(X, method='average')

# Plot dendrograms for different linkage methods
plt.figure(figsize=(15, 5))

plt.subplot(1, 3, 1)
dendrogram(Z_single, truncate_mode='lastp', p=12)
plt.title('Single Linkage')

plt.subplot(1, 3, 2)
dendrogram(Z_complete, truncate_mode='lastp', p=12)
plt.title('Complete Linkage')

plt.subplot(1, 3, 3)
dendrogram(Z_average, truncate_mode='lastp', p=12)
plt.title('Average Linkage')

plt.show()
```



In [ ]:

```
# ------- Single Linkage -------
# Definir un umbral de distancia
threshold = 0.4  # Ajusta este umbral según el dendrograma
# Asignar etiquetas de cluster utilizando fcluster
clusters = fcluster(Z_single, t=threshold, criterion='distance')
# Imprimir información sobre los clusters
num_clusters = len(set(clusters))
print(f"Número de clusters encontrados en Single Linkage: {num_clusters}")


# ------- Complete Linkage -------
# Definir un umbral de distancia
threshold = 2.5  # Ajusta este umbral según el dendrograma
# Asignar etiquetas de cluster utilizando fcluster
clusters = fcluster(Z_complete, t=threshold, criterion='distance')
# Imprimir información sobre los clusters
num_clusters = len(set(clusters))
print(f"Número de clusters encontrados en Complete Linkage: {num_clusters}")


# ------- Average Linkage -------
# Definir un umbral de distancia
threshold = 1.5  # Ajusta este umbral según el dendrograma
```

```
# Asignar etiquetas de cluster utilizando fcluster
clusters = fcluster(Z_average, t=threshold, criterion='distance')
# Imprimir información sobre los clusters
num_clusters = len(set(clusters))
print(f"Número de clusters encontrados en Average Linkage: {num_clusters}")
```

```
Número de clusters encontrados en Single Linkage: 2
Número de clusters encontrados en Complete Linkage: 3
Número de clusters encontrados en Average Linkage: 3
```

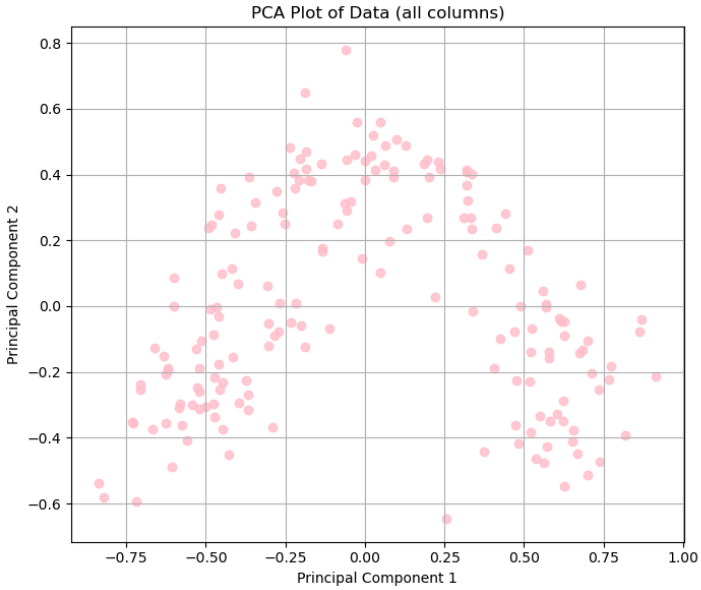
Al realizar métodos de clustering jerárquicos como el linkage clustering, se observa que cada método devuelve resultados de agrupaciones un poco distintas debido a que cada uno tiene un criterio diferente para unir los clusters: el enlace único utiliza la distancia más corta entre puntos de distintos clusters, el enlace completo la más larga, y el enlace promedio promedia todas las distancias entre los puntos.

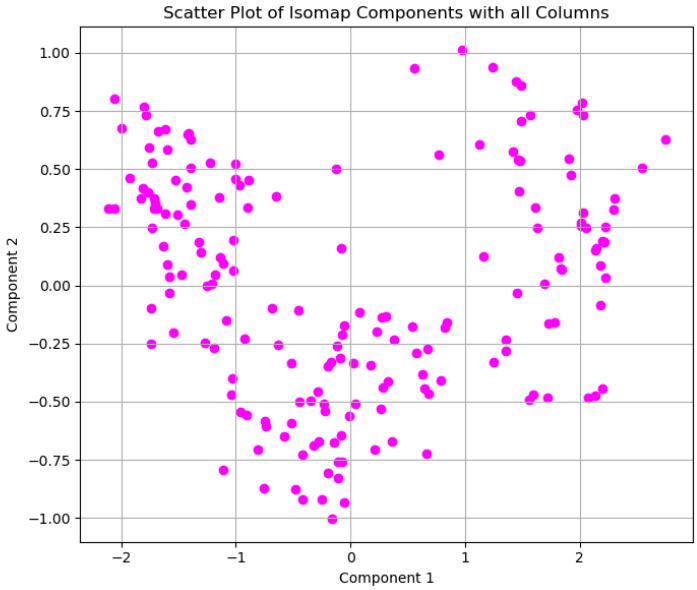
Sin embargo, los tres métodos confirman la hipótesis inicial de que hay entre 2 y 3 clusters, en donde dos clusters están cercanos y pueden llegar a unirse (como se muestra en el Complete Linkage)

Nuevamente, podemos concluir que hay 3 clusters distintos en los datos.

2.3 Gráficas de Dispersión

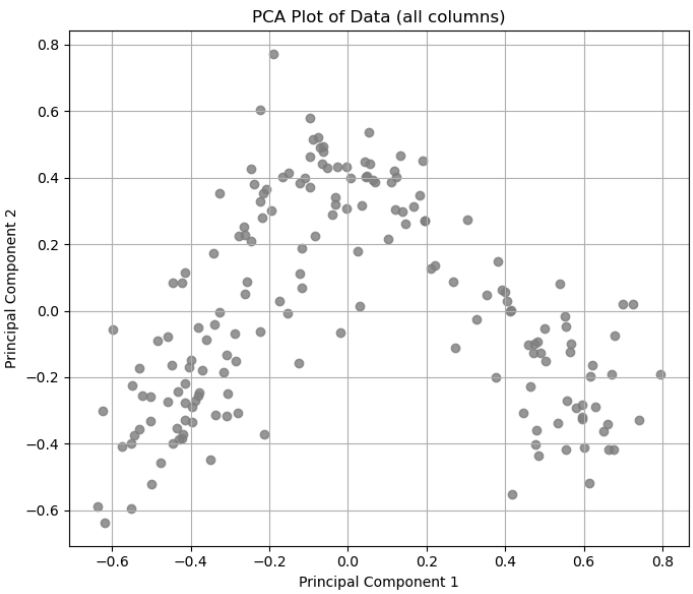
In [ ]:
```
pca = PCA(n_components=2)
X_pca = pca.fit_transform(datos_normalizados)

# Scatter plot of PCA
plt.figure(figsize=(14, 6))  # Adjust the figure size as needed
plt.subplot(1, 2, 1)  # Create subplot 1 in a 1x2 grid
plt.scatter(X_pca[:, 0], X_pca[:, 1], alpha=0.8, color="pink")
plt.title('PCA Plot of Data (all columns)')
plt.xlabel('Principal Component 1')
plt.ylabel('Principal Component 2')
plt.grid(True)

# Scatter plot of Isomap
X = np.array(projection_isomap)
plt.subplot(1, 2, 2)  # Create subplot 2 in a 1x2 grid
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], color='magenta')
plt.title('Scatter Plot of Isomap Components with all Columns')
plt.xlabel('Component 1')
plt.ylabel('Component 2')
plt.grid(True)

plt.tight_layout()  # Adjust subplot parameters to give specified padding
plt.show()
```

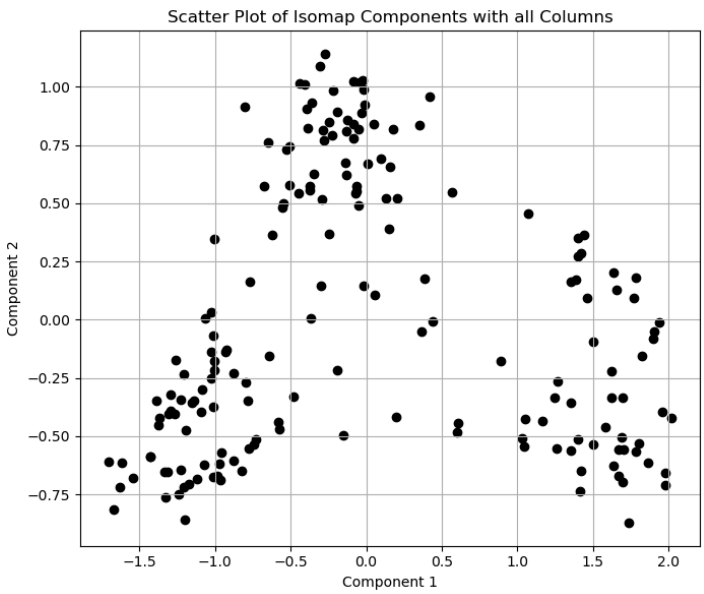




In [ ]:

```
pca = PCA(n_components=2)
datos_normalizados_perfectos = datos_normalizados[["Alcohol", "Malic_Acid", "Flavanoids"


X_pca = pca.fit_transform(datos_normalizados_perfectos)



# Scatter plot of PCA
plt.figure(figsize=(14, 6))  # Adjust the figure size as needed
plt.subplot(1, 2, 1)  # Create subplot 1 in a 1x2 grid
plt.scatter(X_pca[:, 0], X_pca[:, 1], alpha=0.8, color="gray")
plt.title('PCA Plot of Data (all columns)')
plt.xlabel('Principal Component 1')
plt.ylabel('Principal Component 2')
plt.grid(True)

# Scatter plot of Isomap
X = np.array(projection_isomap_perfecto)
plt.subplot(1, 2, 2)  # Create subplot 2 in a 1x2 grid
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], color='black')
plt.title('Scatter Plot of Isomap Components with all Columns')
plt.xlabel('Component 1')
plt.ylabel('Component 2')
plt.grid(True)

plt.tight_layout()  # Adjust subplot parameters to give specified padding
plt.show()
```



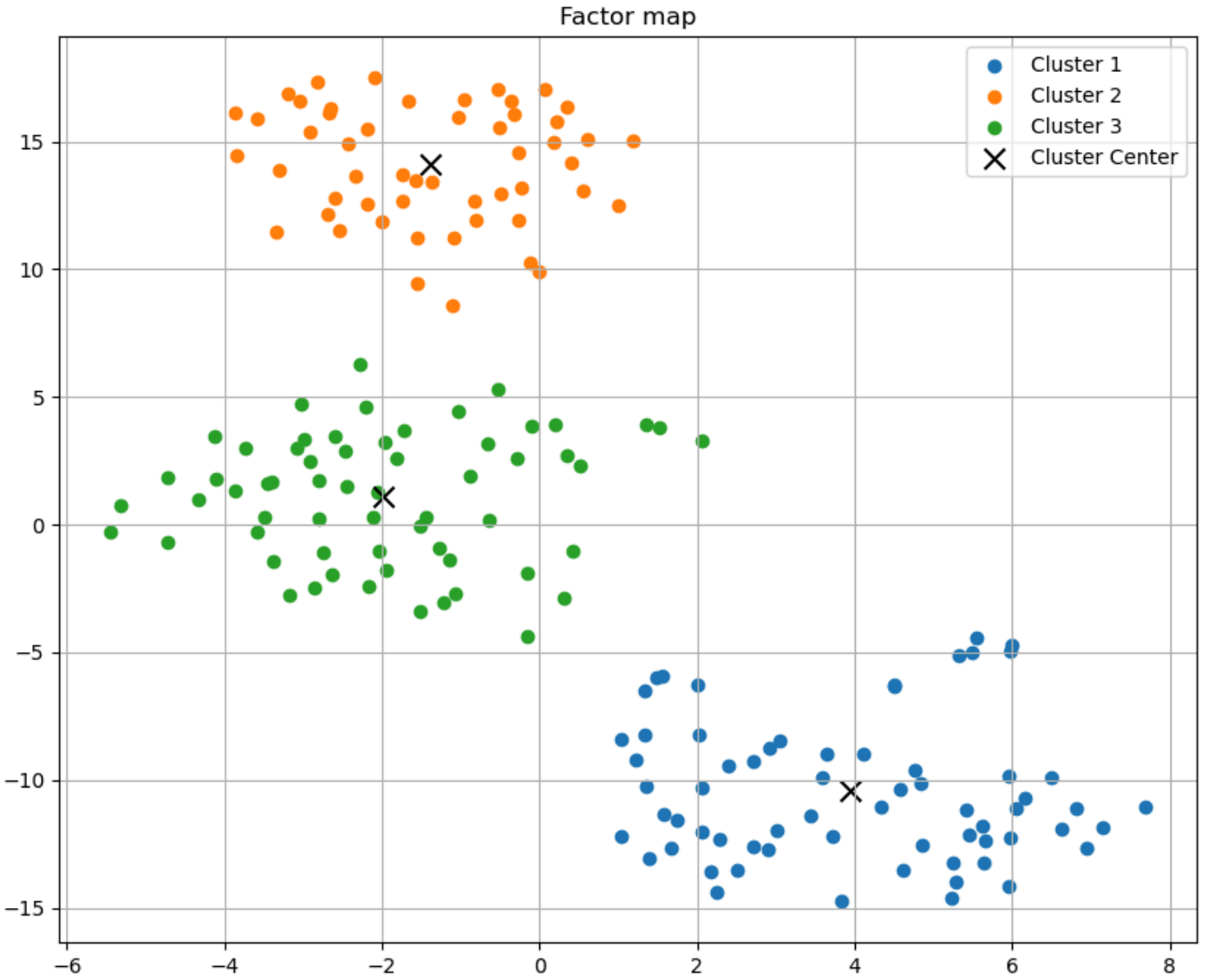


2.4 PCA

Se realizará un análisis de agrupamiento jerárquico sobre datos escalados y reducidos a tres dimensiones mediante análisis de componentes principales (PCA). Posteriormente, se visualizarán los clusters en un mapa bidimensional utilizando t-SNE para reducción adicional de dimensionalidad. Esta representación permitirá interpretar la distribución de las muestras y los centroides de los clusters, así como la relación entre los clusters y las muestras individuales.

In [ ]:
```
# Scale your data
scaler = StandardScaler()
datos_normalizados_perfectos_scaled = scaler.fit_transform(datos_normalizados_perfectos)

# PCA
pca = PCA(n_components=3)
pca_result = pca.fit_transform(datos_normalizados_perfectos_scaled)

# Hierarchical Clustering
hc = AgglomerativeClustering(n_clusters=3, linkage='ward')
hc_result = hc.fit_predict(pca_result)

# Plotting
plt.figure(figsize=(10, 8))

# Using TSNE for better visualization
tsne = TSNE(n_components=2)
tsne_result = tsne.fit_transform(pca_result)

# Plotting clusters
for i in range(len(np.unique(hc_result))):
    cluster_points = tsne_result[hc_result == i]
    plt.scatter(cluster_points[:, 0], cluster_points[:, 1], label=f'Cluster {i+1}')

# Plotting cluster centers
cluster_centers = []
for i in range(len(np.unique(hc_result))):
    cluster_points = tsne_result[hc_result == i]
    cluster_center = cluster_points.mean(axis=0)
    cluster_centers.append(cluster_center)
cluster_centers = np.array(cluster_centers)
```

```
plt.scatter(cluster_centers[:, 0], cluster_centers[:, 1], marker='x', color='black', s=1

plt.title('Factor map')
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()
```



2.5 Mapper

Realizaremos el mapper con los datos que solo tienen las columnas que más influyen en el agrupamiento de los vinos.

2.5.1 Mapper con KMeans

In [ ]:
```
projection_isomap_perfecto = isomap.fit_transform(datos_normalizados_perfectos)
X = np.array(projection_isomap_perfecto)
```

In [ ]:
```
mapper = km.KeplerMapper(verbose=1)
projected_data = mapper.fit_transform(X, projection=[0, 1])
```

```
KeplerMapper(verbose=1)
..Composing projection pipeline of length 1:
        Projections: [0, 1]
        Distance matrices: False
        Scalers: MinMaxScaler()
..Projecting on data shaped (178, 2)

..Projecting data using: [0, 1]

..Scaling with: MinMaxScaler()
```

In [ ]:
```
covering=km.Cover(n_cubes=7,perc_overlap=0.4)
covering
```

Out[ ]:
```
Cover(n_cubes=7, perc_overlap=0.4, limits=None, verbose=0)
```

In [ ]:
```
G = mapper.map(X, datos_normalizados_perfectos, clusterer=sklearn.cluster.KMeans(n_clust
```

```
Mapping on data shaped (178, 9) using lens shaped (178, 2)

Creating 49 hypercubes.

Created 243 edges and 108 nodes in 0:00:00.070634.
```

In [ ]:
```
mapper.visualize(G,
                 title='Mapper Vino',
                 #custom_tooltips = performance_data['gender'].to_numpy(),
                 color_values = datos_normalizados_perfectos["Alcohol"]+datos_normalizado
                 color_function_name = 'Alcohol+Flavanoids+OD280+Proline',
                 node_color_function=np.array(['average','std','sum','max','min']),
                 path_html="mapper_vino_kmeans_preliminar.html")
print("")
```

```
Wrote visualization to: mapper_vino_kmeans_preliminar.html
```

Al realizar el mapper anterior, se observa que hay 2 componentes conexas distintas; sin embargo, hay un solo punto o nodo que conecta a dos espacios que de lo contrario se considerarían componentes conexas distintas, lo cual haría que hubiera 3 clusters diferentes. Esto se debe a la conclusión anterior en donde habíamos visto que dos clusters eran muy cercanos y dependiendo de la epsilon se pueden juntar en 1 sola componente conexa. Para arreglar esto se dedició eliminar ese punto que conectaba las componentes (este nodo solo tenía dos elementos del dataframe).

In [ ]:
```
datos_normalizados_perfectos.loc[G['nodes']['cube15_cluster2']]
```

Out[ ]:

	Alcohol	Malic_Acid	Flavanoids	OD280	Ash_Alcanity	Hue	Magnesium	Color_Intensi
71	0.744737	0.152174	0.531646	0.692308	0.742268	0.715447	0.173913	0.1791
76	0.526316	0.031621	0.356540	0.443223	0.278351	0.577236	0.173913	0.2832
101	0.413158	0.118577	0.215190	0.549451	0.407216	0.455285	0.195652	0.0998

In [ ]:
```
datos_normalizados_2 = datos_normalizados_perfectos.drop([69, 96]).reset_index(drop=True
```

In [ ]:
```
projection_isomap_2 = isomap.fit_transform(datos_normalizados_2)
X_2 = np.array(projection_isomap_2)
```

In [ ]:
```
mapper = km.KeplerMapper(verbose=1)
projected_data = mapper.fit_transform(X_2, projection=[0, 1])
```

```
KeplerMapper(verbose=1)
..Composing projection pipeline of length 1:
        Projections: [0, 1]
        Distance matrices: False
        Scalers: MinMaxScaler()
..Projecting on data shaped (176, 2)

..Projecting data using: [0, 1]

..Scaling with: MinMaxScaler()
```

In [ ]:
```
covering=km.Cover(n_cubes=6,perc_overlap=0.34)
```

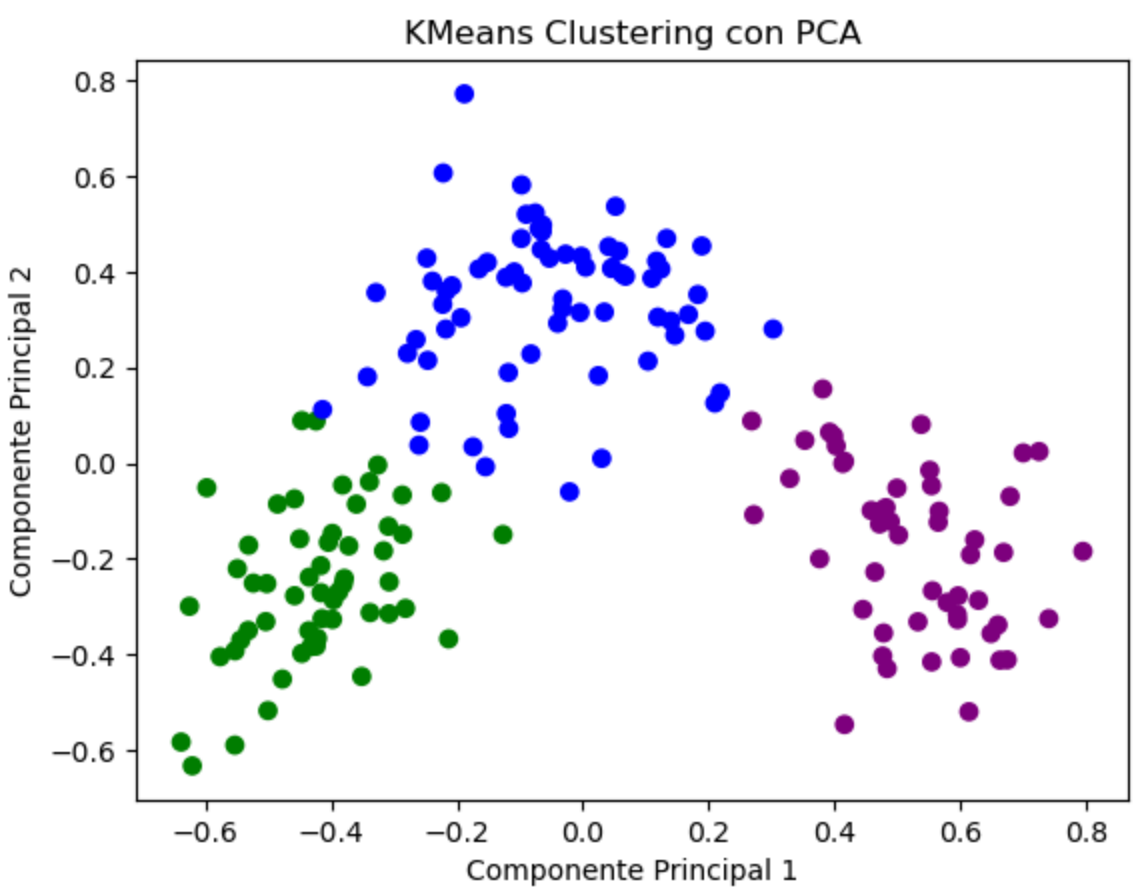
In [ ]:
```
G2 = mapper.map(X_2, datos_normalizados_2, clusterer=sklearn.cluster.KMeans(n_clusters=3
```

```
Mapping on data shaped (176, 9) using lens shaped (176, 2)

Creating 36 hypercubes.

Created 161 edges and 84 nodes in 0:00:00.160992.
```

In [ ]:
```
mapper.visualize(G2,
                 title='Mapper Vino',
                 #custom_tooltips = performance_data['gender'].to_numpy(),
                 color_values = datos_normalizados_2["Alcohol"]+datos_normalizados_2["Fla
                 color_function_name = 'Alcohol+Flavanoids+OD280+Proline',
                 node_color_function=np.array(['average']),
                 path_html="mapper_vino_kmeans_final.html")
print("")
```

```
Wrote visualization to: mapper_vino_kmeans_final.html
```

In [ ]:
```
pca = PCA(n_components=2)
pca.fit(datos_normalizados_2)
datos_pca = pca.transform(datos_normalizados_2)

# colores
cluster_colors = {0: 'purple', 1: 'blue', 2: 'green'}

# Inicializa y ajusta el modelo KMeans
kmeans = sklearn.cluster.KMeans(n_clusters=3)
y = kmeans.fit_predict(datos_normalizados_2)

# Grafica los datos con colores correspondientes a los clusters
# add color legend


plt.scatter(datos_pca[:, 0], datos_pca[:, 1], c=[cluster_colors[cluster] for cluster in
plt.xlabel('Componente Principal 1')
plt.ylabel('Componente Principal 2')
plt.title('KMeans Clustering con PCA')
plt.show()
```



Con el código anterior, pudimos obtener un mapper y una gráfica del agrupamiento de los vinos. Para poder identificar qué tipos de vinos pertenecen a cada cluster, analizaremos cada cluster por separado.

In [ ]:
```
grupo1 = ["cube17_cluster1", "cube24_cluster2", "cube18_cluster1", "cube23_cluster1", "c
          , "cube22_cluster2", "cube27_cluster1", "cube23_cluster0", "cube28_cluster0",
          , "cube29_cluster2", "cube30_cluster2", "cube24_cluster0", "cube29_cluster1",
          , "cube24_cluster1", "cube25_cluster0"]


lista_grupo1 = []

for i in grupo1:
    lista_grupo1.append(datos_normalizados.loc[G2['nodes'][i]])

grupo1 = pd.concat(lista_grupo1, ignore_index=True)
grupo1["cluster"] = "1"
```

In [ ]:
```
print("Cantidad de nodos en el grupo 1:", grupo1.shape[0])
grupo1.describe()
```

```
Cantidad de nodos en el grupo 1: 91
```

Out[ ]:

	Alcohol	Malic_Acid	Ash	Ash_Alcanity	Magnesium	Total_Phenols	Flavanoids	Nor
count	91.000000	91.000000	91.000000	91.000000	91.000000	91.000000	91.000000	
mean	0.527791	0.483886	0.580772	0.559080	0.314740	0.262903	0.111212	
std	0.155018	0.238083	0.107364	0.124314	0.126406	0.138317	0.075280	
min	0.207895	0.039526	0.336898	0.329897	0.086957	0.000000	0.000000	
25%	0.401316	0.333004	0.513369	0.458763	0.206522	0.172414	0.050633	
50%	0.507895	0.498024	0.545455	0.536082	0.304348	0.231034	0.097046	
75%	0.647368	0.622530	0.671123	0.690722	0.396739	0.344828	0.160338	
max	0.871053	0.970356	0.802139	0.845361	0.576087	0.627586	0.297468	

In [ ]:
```
grupo2 = ["cube12_cluster2", "cube19_cluster2", "cube13_cluster0", "cube8_cluster0", "cu
          , "cube20_cluster2", "cube9_cluster2", "cube7_cluster1", "cube14_cluster0", "c
          , "cube21_cluster0", "cube8_cluster2", "cube9_cluster0", "cube15_cluster1", "c
          , "cube12_cluster1", "cube20_cluster1", "cube21_cluster2"]


lista_grupo2 = []

for i in grupo2:
    lista_grupo2.append(datos_normalizados.loc[G2['nodes'][i]])

grupo2 = pd.concat(lista_grupo2, ignore_index=True)
grupo2["cluster"] = "2"
```

In [ ]:
```
print("Cantidad de nodos en el grupo 2:", grupo2.shape[0])
grupo2.describe()
```

```
Cantidad de nodos en el grupo 2: 90
```

Out[ ]:

	Alcohol	Malic_Acid	Ash	Ash_Alcanity	Magnesium	Total_Phenols	Flavanoids	No
count	90.000000	90.000000	90.000000	90.000000	90.000000	90.000000	90.000000	
mean	0.336023	0.209113	0.498039	0.489118	0.263647	0.487395	0.414323	
std	0.133744	0.179088	0.167026	0.142142	0.171140	0.203017	0.154475	
min	0.100000	0.000000	0.181818	0.216495	0.000000	0.137931	0.137131	
25%	0.247368	0.084980	0.407754	0.407216	0.173913	0.334483	0.316983	
50%	0.348684	0.154150	0.497326	0.484536	0.206522	0.496552	0.387131	
75%	0.392105	0.272727	0.588235	0.561856	0.312500	0.637931	0.487342	
max	0.744737	1.000000	1.000000	0.922680	1.000000	0.875862	1.000000	

In [ ]:
```
grupo3 = ["cube1_cluster2", "cube2_cluster2", "cube6_cluster0", "cube7_cluster0", "cube5

          , "cube13_cluster2", "cube7_cluster2", "cube2_cluster0", "cube6_cluster1", "cu
          , "cube2_cluster1", "cube6_cluster2", "cube1_cluster0", "cube0_cluster2", "cub
          , "cube10_cluster1", "cube4_cluster1", "cube11_cluster1", "cube0_cluster0"]


lista_grupo3 = []
```

```
for i in grupo3:
    lista_grupo3.append(datos_normalizados.loc[G2['nodes'][i]])

grupo3 = pd.concat(lista_grupo3, ignore_index=True)
grupo3["cluster"] = "3"
```

In [ ]:
```
print("Cantidad de nodos en el grupo 3:", grupo3.shape[0])
grupo3.describe()
```

```
Cantidad de nodos en el grupo 3: 125
```

Out[ ]:

	Alcohol	Malic_Acid	Ash	Ash_Alcanity	Magnesium	Total_Phenols	Flavanoids
count	125.000000	125.000000	125.000000	125.000000	125.000000	125.000000	125.000000
mean	0.674042	0.269043	0.563850	0.343464	0.387913	0.621793	0.537333
std	0.165697	0.159332	0.136610	0.138893	0.125136	0.142752	0.101543
min	0.110526	0.049407	0.181818	0.030928	0.086957	0.041379	0.143460
25%	0.592105	0.183794	0.475936	0.278351	0.293478	0.558621	0.493671
50%	0.686842	0.203557	0.550802	0.329897	0.358696	0.627586	0.548523
75%	0.797368	0.258893	0.657754	0.422680	0.489130	0.696552	0.601266
max	1.000000	0.652174	0.994652	0.742268	0.717391	1.000000	0.757384

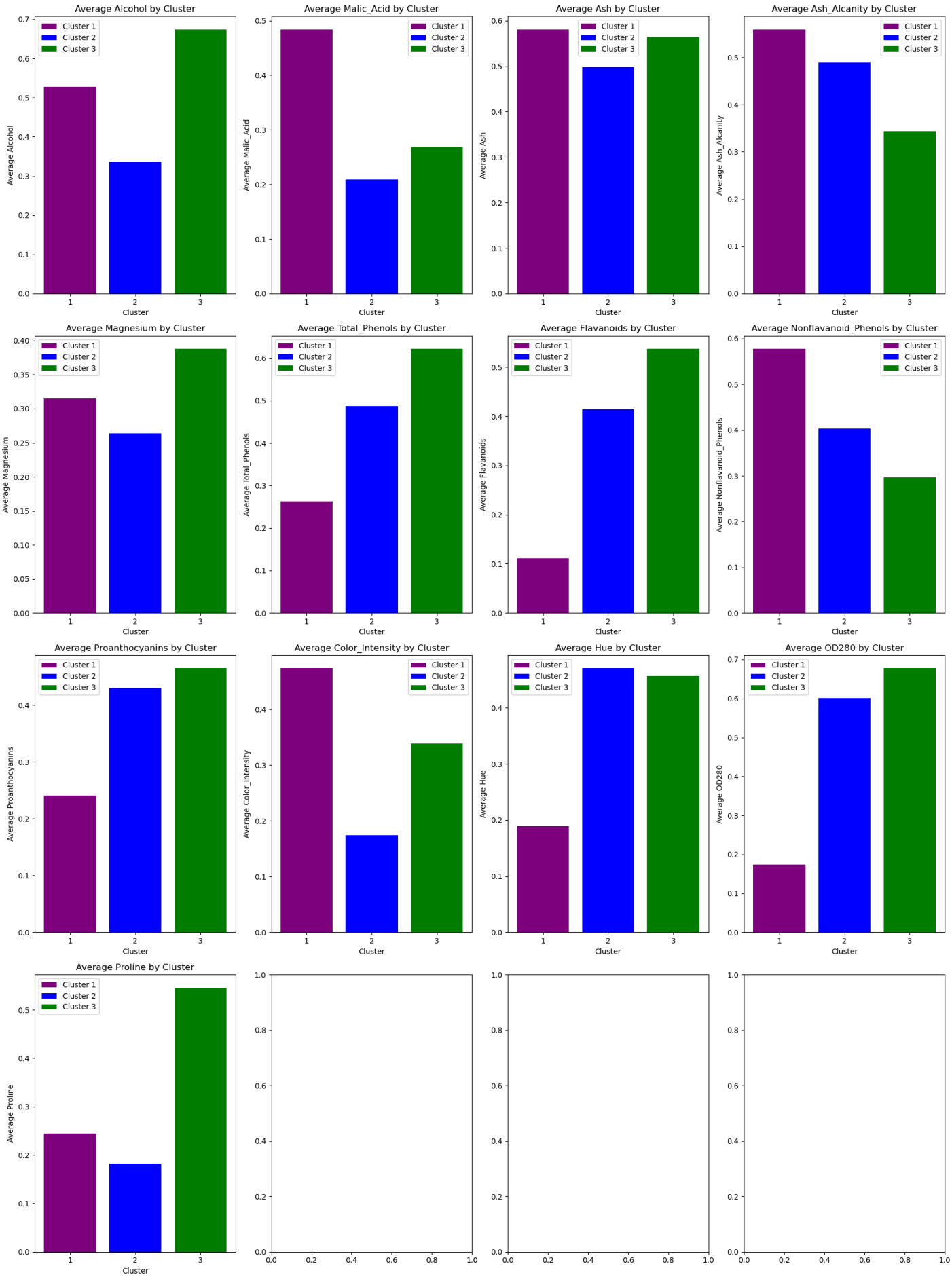
In [ ]:
```
all_data = pd.concat([grupo1, grupo2, grupo3], ignore_index=True)
all_data.describe()
```

Out[ ]:

	Alcohol	Malic_Acid	Ash	Ash_Alcanity	Magnesium	Total_Phenols	Flavanoids
count	306.000000	306.000000	306.000000	306.000000	306.000000	306.000000	306.000000
mean	0.531132	0.315308	0.549526	0.450424	0.329604	0.475535	0.374431
std	0.207556	0.221563	0.142432	0.164170	0.149569	0.219671	0.211766
min	0.100000	0.000000	0.181818	0.030928	0.000000	0.000000	0.000000
25%	0.352632	0.168478	0.465241	0.329897	0.206522	0.282759	0.191983
50%	0.543421	0.215415	0.540107	0.432990	0.304348	0.506897	0.407173
75%	0.683553	0.477767	0.641711	0.536082	0.413043	0.644828	0.548523
max	1.000000	1.000000	1.000000	0.922680	1.000000	1.000000	1.000000

In [ ]:
```
# Get unique clusters
clusters = all_data['cluster'].unique()

# Get the number of columns for subplots
num_columns = len(all_data.columns) - 1  # Excluding 'cluster' column
num_rows = -(-num_columns // 4)  # Ceiling division to get the number of rows needed

# colors
cluster_colors = {'Cluster 1': 'purple', 'Cluster 2': 'blue', 'Cluster 3': 'green'}

# Create subplots
fig, axes = plt.subplots(num_rows, 4, figsize=(18, 6*num_rows))

# Flatten axes if only one row
if num_rows == 1:
```

```
    axes = [axes]

# Iterate over each column (excluding 'cluster') and create separate bar plots for each
for idx, column in enumerate(all_data.columns):
    if column != 'cluster':
        # Calculate subplot position
        row_idx = idx // 4
        col_idx = idx % 4

        # Iterate over each cluster
        for cluster in clusters:
            # Filter data for the current cluster
            cluster_data = all_data[all_data['cluster'] == cluster]

            # Calculate the average value of the current column within the cluster
            avg_value = cluster_data[column].mean()

            # Plot the average value for the current cluster
            axes[row_idx][col_idx].bar(cluster, avg_value, label=f'Cluster {cluster}', c

        # Add labels and title for the subplot
        axes[row_idx][col_idx].set_xlabel('Cluster')
        axes[row_idx][col_idx].set_ylabel('Average ' + column)
        axes[row_idx][col_idx].set_title(f'Average {column} by Cluster')
        axes[row_idx][col_idx].legend()

# Adjust layout
plt.tight_layout()
# Show plots
plt.show()
```



2.5.2 Mapper con DBSCAN

In [ ]:
```
G = mapper.map(X, datos_normalizados_perfectos, clusterer=sklearn.cluster.DBSCAN(eps=0.4
```

```
Mapping on data shaped (178, 9) using lens shaped (178, 2)

Creating 36 hypercubes.

Created 41 edges and 21 nodes in 0:00:00.064148.
```

In [ ]:
```
mapper.visualize(G,
                 title='Mapper Vino',
                 #custom_tooltips = performance_data['gender'].to_numpy(),
                 color_values = datos_normalizados_perfectos["Alcohol"]+datos_normalizado
                 color_function_name = 'Alcohol+Flavanoids+OD280+Proline',
                 node_color_function=np.array(['average','std','sum','max','min']),
                 path_html="mapper_vino_dbscan_final.html")
print("")
```

```
Wrote visualization to: mapper_vino_dbscan_final.html
```

In [ ]:
```
grupo1 = ["cube25_cluster0", "cube30_cluster0", "cube24_cluster0", "cube29_cluster0", "c
        , "cube23_cluster0", "cube27_cluster0", "cube22_cluster0"]


lista_grupo1 = []

for i in grupo1:
    lista_grupo1.append(datos_normalizados.loc[G2['nodes'][i]])

grupo1 = pd.concat(lista_grupo1, ignore_index=True)
grupo1["cluster"] = "1"
```

In [ ]:
```
print("Cantidad de nodos en el grupo 1:", grupo1.shape[0])
grupo1.describe()
```

```
Cantidad de nodos en el grupo 1: 33
```

Out[ ]:

	Alcohol	Malic_Acid	Ash	Ash_Alcanity	Magnesium	Total_Phenols	Flavanoids	No
count	33.000000	33.000000	33.000000	33.000000	33.000000	33.000000	33.000000	
mean	0.542185	0.483830	0.602009	0.570447	0.297760	0.292999	0.109960	
std	0.152927	0.234863	0.101929	0.123211	0.125146	0.126825	0.077837	
min	0.265789	0.077075	0.443850	0.355670	0.086957	0.110345	0.027426	
25%	0.394737	0.363636	0.529412	0.484536	0.195652	0.196552	0.046414	
50%	0.602632	0.494071	0.614973	0.536082	0.282609	0.282759	0.097046	
75%	0.655263	0.624506	0.684492	0.690722	0.380435	0.351724	0.160338	
max	0.871053	0.942688	0.802139	0.768041	0.576087	0.627586	0.297468	

In [ ]:
```
grupo2 = ["cube9_cluster0", "cube15_cluster0", "cube14_cluster0", "cube20_cluster0", "cu


lista_grupo2 = []

for i in grupo2:
    lista_grupo2.append(datos_normalizados.loc[G['nodes'][i]])

grupo2 = pd.concat(lista_grupo2, ignore_index=True)
grupo2["cluster"] = "2"
```

In [ ]:
```
print("Cantidad de nodos en el grupo 2:", grupo2.shape[0])
grupo2.describe()
```

```
Cantidad de nodos en el grupo 2: 100
```

Out[ ]:

	Alcohol	Malic_Acid	Ash	Ash_Alcanity	Magnesium	Total_Phenols	Flavanoids
count	100.000000	100.000000	100.000000	100.000000	100.000000	100.000000	100.000000
mean	0.323789	0.179012	0.451390	0.482629	0.202609	0.442138	0.379578
std	0.108805	0.129139	0.135605	0.129137	0.088931	0.181930	0.111300
min	0.100000	0.000000	0.181818	0.226804	0.000000	0.137931	0.191983
25%	0.255263	0.083004	0.340909	0.386598	0.160326	0.331897	0.297468
50%	0.331579	0.156126	0.465241	0.463918	0.184783	0.420690	0.357595
75%	0.373684	0.225296	0.509358	0.563144	0.260870	0.541379	0.445148
max	0.647368	0.703557	0.834225	0.922680	0.456522	0.875862	0.719409

In [ ]:
```
grupo3 = ["cube2_cluster0", "cube6_cluster0", "cube5_cluster0", "cube1_cluster0", "cube4


lista_grupo3 = []

for i in grupo3:
    lista_grupo3.append(datos_normalizados.loc[G['nodes'][i]])

grupo3 = pd.concat(lista_grupo3, ignore_index=True)
grupo3["cluster"] = "3"
```

In [ ]:
```
print("Cantidad de nodos en el grupo 3:", grupo3.shape[0])
grupo3.describe()
```

```
Cantidad de nodos en el grupo 3: 112
```

Out[ ]:

	Alcohol	Malic_Acid	Ash	Ash_Alcanity	Magnesium	Total_Phenols	Flavanoids	N
count	112.000000	112.000000	112.000000	112.000000	112.000000	112.000000	112.000000	
mean	0.708059	0.261205	0.575201	0.339286	0.394798	0.643565	0.556265	
std	0.117200	0.145648	0.123069	0.131987	0.114988	0.115119	0.080794	
min	0.500000	0.120553	0.363636	0.030928	0.206522	0.420690	0.390295	
25%	0.615132	0.185771	0.491979	0.278351	0.304348	0.561207	0.493671	
50%	0.706579	0.202569	0.564171	0.324742	0.364130	0.644828	0.556962	
75%	0.797368	0.243083	0.668449	0.423969	0.491848	0.696552	0.611814	
max	1.000000	0.652174	0.994652	0.742268	0.673913	1.000000	0.757384	

In [ ]:
```
all_data = pd.concat([grupo1, grupo2, grupo3], ignore_index=True)
all_data.describe()
```

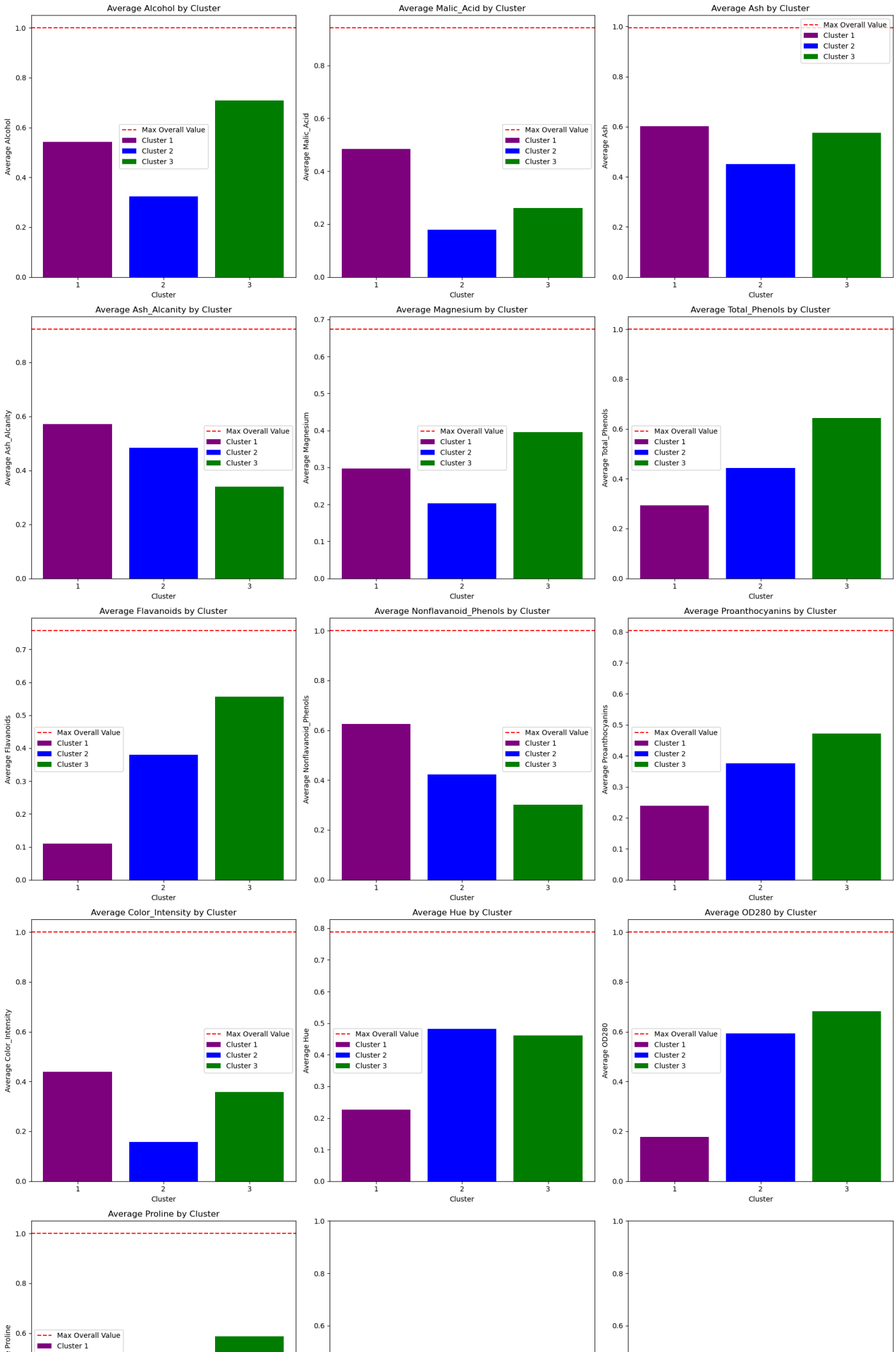
Out[ ]:

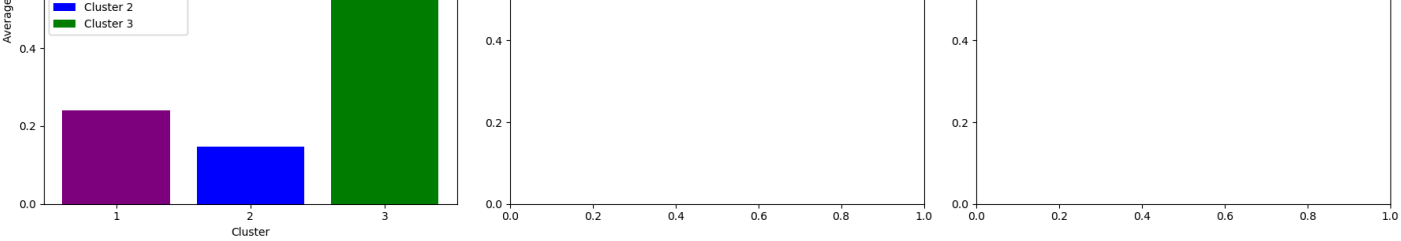
	Alcohol	Malic_Acid	Ash	Ash_Alcanity	Magnesium	Total_Phenols	Flavanoids
count	245.000000	245.000000	245.000000	245.000000	245.000000	245.000000	245.000000
mean	0.528872	0.257643	0.528277	0.428929	0.303283	0.514131	0.424033
std	0.214752	0.181961	0.141005	0.155760	0.138853	0.194923	0.175975
min	0.100000	0.000000	0.181818	0.030928	0.000000	0.110345	0.027426
25%	0.352632	0.156126	0.443850	0.319588	0.195652	0.386207	0.316456
50%	0.547368	0.195652	0.513369	0.427835	0.293478	0.524138	0.457806
75%	0.697368	0.320158	0.631016	0.536082	0.402174	0.655172	0.561181
max	1.000000	0.942688	0.994652	0.922680	0.673913	1.000000	0.757384

In [ ]:

```
# Get unique clusters
clusters = all_data['cluster'].unique()

# Get the number of columns for subplots
num_columns = len(all_data.columns) - 1  # Excluding 'cluster' column
num_rows = -(-num_columns // 3)  # Ceiling division to get the number of rows needed

# colors
cluster_colors = {'Cluster 1': 'purple', 'Cluster 2': 'blue', 'Cluster 3': 'green'}

# Create subplots
fig, axes = plt.subplots(num_rows, 3, figsize=(18, 6*num_rows))

# Flatten axes if only one row
if num_rows == 1:
    axes = [axes]

# Iterate over each column (excluding 'cluster') and create separate bar plots for each
for idx, column in enumerate(all_data.columns):
    if column != 'cluster':
        # Calculate subplot position
        row_idx = idx // 3
        col_idx = idx % 3

        # Iterate over each cluster
        for cluster in clusters:
            # Filter data for the current cluster
            cluster_data = all_data[all_data['cluster'] == cluster]

            # Calculate the average value of the current column within the cluster
            avg_value = cluster_data[column].mean()

            # Plot the average value for the current cluster
            axes[row_idx][col_idx].bar(cluster, avg_value, label=f'Cluster {cluster}', c

        # Add labels and title for the subplot
        axes[row_idx][col_idx].set_xlabel('Cluster')
        axes[row_idx][col_idx].set_ylabel('Average ' + column)
        axes[row_idx][col_idx].set_title(f'Average {column} by Cluster')
        axes[row_idx][col_idx].legend()


        # Add horizontal line for maximum overall value
        max_value = all_data[column].max()
        axes[row_idx][col_idx].axhline(max_value, color='red', linestyle='--', label='Ma
```

```
        axes[row_idx][col_idx].legend()

# Adjust layout
plt.tight_layout()
# Show plots
plt.show()
```


Average Alcohol by Cluster
Average Alcohol
Cluster
Max Overall Value
Cluster 1
Cluster 2
Cluster 3
Average Malic_Acid by Cluster
Average Malic_Acid
Average Ash by Cluster
Average Ash
Average Ash_Alcanity by Cluster
Average Ash_Alcanity
Average Magnesium by Cluster
Average Magnesium
Average Total_Phenols by Cluster
Average Total_Phenols
Average Flavanoids by Cluster
Average Flavanoids
Average Nonflavanoid_Phenols by Cluster
Average Nonflavanoid_Phenols
Average Proanthocyanins by Cluster
Average Proanthocyanins
Average Color_Intensity by Cluster
Average Color_Intensity
Average Hue by Cluster
Average Hue
Average OD280 by Cluster
Average OD280
Average Proline by Cluster
Average Proline



3. Conclusiones y Resultados Finales

Basándonos en las características de los vinos y las observaciones de los centroides de los clusters, podemos hacer las siguientes conclusiones:

- **Cluster 1:** Este cluster exhibe un nivel medio de alcohol y un alto contenido de ácido málico, pero bajos niveles de fenoles totales, flavonoides y proantocianidinas. Estas características sugieren una posible composición de vinos blancos de clima frío, como Riesling o Sauvignon Blanc, que tienden a tener una acidez más alta y un perfil más ligero en compuestos fenólicos. Aunque el nivel medio de alcohol y la intensidad de color podrían incluir una variedad de vinos tintos jóvenes y frescos.

- **Cluster 2:** Este cluster exhibe características como bajo contenido de alcohol, ácido málico y proantocianidinas, y niveles moderados de fenoles totales y flavonoides, junto con baja intensidad de color y bajo nivel de prolina. Es probable que esté compuesto principalmente por vinos blancos ligeros como Pinot Noir, Riesling u otros blancos de características similares. La baja intensidad de color y la ausencia de prolina indican un perfil sensorial más fresco y menos astringente, típico de muchos vinos blancos.

- **Cluster 3:** Este cluster está compuesto principalmente por vinos tintos como el Cabernet Sauvignon, el Merlot y el Syrah. Tiene vinos con un alto contenido de alcohol, un cuerpo completo y robusto, y niveles bajos de ácido málico, lo que resulta en una menor acidez, típica de vinos tintos de climas cálidos. Con un contenido alto de fenoles totales y flavonoides, estos vinos presentan intensidad de color y sabor. Las proantocianidinas se encuentran en un nivel medio, común en muchos vinos tintos de este grupo. Además, tienen un alto contenido de proline, lo que aumenta la dulzura y el sabor a frutos rojos.

En cuanto a la calidad del vino, podemos inferir que el cluster 3 probablemente tiene la mejor calidad, ya que está compuesto por vinos tintos robustos y envejecidos como Cabernet Sauvignon, Syrah y Merlot. Estos son populares y son conocidos por su calidad. Basándonos en las características de los vinos en este cluster, podemos identificar las características que pueden asegurar la calidad del vino, como un alto contenido de alcohol, bajo contenido de ácido málico, alto contenido de fenoles totales, nivel medio de flavonoides, alto valor de OD280 y alto nivel de proline.

4. Referencias

https://www.ttb.gov/regulated-commodities/beverage-alcohol/wine/labeling-wine/wine-labeling-alcohol-content

https://www.infowine.com/es/noticias/importancia_de_los_aminoacidos_en_el_gusto_del_vino_tinto_sc_20

https://winefolly.com/deep-dive/the-10-most-popular-wines-in-the-world/

https://ve.scielo.org/scielo.php?pid=S0378-78182009000300005&script=sci_arttext