main

April 23, 2024

Abgabe von: Mat.Nr.: 9452857 & 1113800

Aufteilung: 9452857: Modell-Definition, Hyperparameter-Optimierung 1113800: Netzwerkar-chitektur, Loss-Funktion und Optimizer, Vergleiche

Before doing anything installing all needed dependencies

1 Software requirements

Version Python version Compiler Build tools cuDNN CUDA tensorflow- $2.16.1\ 3.9$ - $3.12\ Clang\ 17.0.6\ Bazel\ 6.5.0\ 8.9\ 12.3$

```
[]: !pip3 install -U pandas
!pip3 install -U scikit-learn
!pip3 install -U tensorflow==2.16.1
!pip3 install -U keras-tuner
!pip3 install -U matplotlib
!pip3 install -U imblearn
```

2 Aufgabe 1

```
[2]: import os
    os.environ["KERAS_BACKEND"] = "tensorflow"
    import matplotlib.pyplot as plt
    import pandas as pd
    import numpy as np
    from sklearn.model_selection import train_test_split
```

Import data

```
[4]: white_raw
```

```
[4]:
           fixed acidity volatile acidity citric acid residual sugar
                                                                               chlorides
                      7.0
                                                       0.36
                                                                         20.7
                                                                                   0.045
     0
                                         0.27
     1
                      6.3
                                         0.30
                                                       0.34
                                                                          1.6
                                                                                    0.049
     2
                      8.1
                                         0.28
                                                       0.40
                                                                          6.9
                                                                                   0.050
     3
                      7.2
                                                                          8.5
                                         0.23
                                                       0.32
                                                                                   0.058
     4
                      7.2
                                         0.23
                                                       0.32
                                                                          8.5
                                                                                    0.058
                                                                           •••
     4893
                      6.2
                                         0.21
                                                       0.29
                                                                          1.6
                                                                                   0.039
     4894
                                         0.32
                                                       0.36
                                                                          8.0
                                                                                   0.047
                      6.6
     4895
                      6.5
                                         0.24
                                                       0.19
                                                                          1.2
                                                                                    0.041
     4896
                      5.5
                                         0.29
                                                       0.30
                                                                          1.1
                                                                                   0.022
     4897
                      6.0
                                         0.21
                                                       0.38
                                                                          0.8
                                                                                   0.020
           free sulfur dioxide
                                  total sulfur dioxide
                                                                           sulphates \
                                                          density
                                                                      рΗ
     0
                            45.0
                                                                                0.45
                                                   170.0
                                                          1.00100
                                                                    3.00
                            14.0
     1
                                                   132.0 0.99400
                                                                    3.30
                                                                                0.49
     2
                            30.0
                                                    97.0 0.99510
                                                                    3.26
                                                                                0.44
     3
                            47.0
                                                   186.0 0.99560
                                                                    3.19
                                                                                0.40
     4
                            47.0
                                                   186.0 0.99560
                                                                    3.19
                                                                                0.40
     4893
                            24.0
                                                    92.0 0.99114
                                                                    3.27
                                                                                0.50
     4894
                            57.0
                                                   168.0 0.99490
                                                                    3.15
                                                                                0.46
     4895
                            30.0
                                                   111.0 0.99254
                                                                    2.99
                                                                                0.46
     4896
                            20.0
                                                   110.0 0.98869
                                                                    3.34
                                                                                0.38
     4897
                            22.0
                                                    98.0 0.98941
                                                                    3.26
                                                                                0.32
            alcohol quality
                8.8
     0
                            6
                9.5
                            6
     1
     2
               10.1
                            6
     3
                9.9
                            6
     4
                9.9
                            6
     4893
               11.2
                            6
     4894
                9.6
                            5
                9.4
     4895
                            6
                            7
     4896
               12.8
     4897
               11.8
```

[4898 rows x 12 columns]

Split wine in Test and Training Data (80% / 20%)

```
[5]: white_training_Data, white_test_data, white_training_scores, white_test_scores_

□= (train_test_split(white_raw.drop("quality", axis=1),

□white_raw['quality'],test_size=0.2, random_state=39))
```

```
red_training Data, red_test_data, red_training scores, red_test_scores =__
```

Normalize the Data Standard Scaler to Scale around 0 MIN May to Scale this than between 0-1 Some Functionality as tensorflow Normalization Layer

```
[6]: from sklearn.pipeline import Pipeline
     from sklearn.preprocessing import Normalizer, normalize, MinMaxScaler, u
      →StandardScaler
     from imblearn.over_sampling import RandomOverSampler
     ros = RandomOverSampler(random_state=39)
     white_training_Data, white_training_scores = ros.
      →fit_resample(white_training_Data, white_training_scores)
     red_training_Data, red_training_scores = ros.fit_resample(red_training_Data,_
      →red_training_scores)
     pipeline = Pipeline([
         ('scaler1', StandardScaler()),
         ('scaler2', MinMaxScaler())
     ])
     white_training_Data_scaled = np.array(pipeline.

→fit_transform(white_training_Data))
     white_training_scores = np.array(white_training_scores)
     white_test_data_scaled = np.array(pipeline.transform(white_test_data))
     white_test_scores = np.array(white_test_scores)
     red_training Data_scaled = np.array(pipeline.fit_transform(red_training_Data))
     red_training_scores = np.array(red_training_scores)
     red_test_data_scaled = np.array(pipeline.transform (red_test_data))
     red_test_scores = np.array(red_test_scores)
[7]: white_training_Data_scaled
```

```
[7]: array([[0.26923077, 0.2254902, 0.22289157, ..., 0.47272727, 0.20238095,
             0.12903226],
            [0.375
                        , 0.23529412, 0.37349398, ..., 0.37272727, 0.26190476,
             0.14516129],
            [0.23076923, 0.07843137, 0.19277108, ..., 0.45454545, 0.22619048,
             0.48387097],
            [0.50961538, 0.18627451, 0.27108434, ..., 0.43636364, 0.28571429,
             0.387096771.
            [0.31730769, 0.17647059, 0.29518072, ..., 0.59090909, 0.23809524,
             0.79032258,
```

```
[0.26923077, 0.2745098, 0.1746988, ..., 0.62727273, 0.46428571, 0.70967742]])
```

3 Aufgabe 2

3.1 Netzwerkarchitektur:

Die Netzwerkarchitektur basiert auf einem tiefen neuronalen Netzwerk, das mithilfe der Keras-Bibliothek implementiert wurde.

Die Architektur beginnt mit einer Eingabeschicht. Diese umfasst aufgrund der im Datensatz verwendeten 11 chemischen Eigenschaften von Wein bzw. Features eine Anzahl von 11 Neuronen. Aus der Eingabeschicht werden die Daten an die folgenden Schichten weitergeleitet, wo die eigentliche Verarbeitung stattfindet.

Es folgen die verdeckten Schichten, welche jeweils eine bestimmte Anzahl von Neuronen beinhalten. Jedes Neuron berechnet eine gewichtete Summe seiner Eingaben und wendet dann eine Aktivierungsfunktion auf das Ergebnis an. Es wird hier auf die ReLU-Aktivierungsfunktion zurückgegriffen, da die Regression mit einer nichtlinearen Aktivierungsfunktion durchgeführt werden sollte. ReLU zeichnet sich durch die Effizienz und die gute Gradientenverbreitung aus. Die Anzahl der verdeckten Schichten und die Anzahl der Neuronen in jeder Schicht sind Hyperparameter, welche mittels einer Hyperparameter-Optimierung bestimmt werden sollten.

Abschließend folgt eine Ausgabeschicht, welche eine einzige Ausgabe liefert. Diese Ausgabe repräsentiert die Vorhersage des Modells für den Weinscore basierend auf den Eingabedaten.

4 Aufgabe 3

4.1 General Model definition

```
[8]: from math import sqrt
   import keras
   from keras import layers
   from keras.src.models.cloning import clone_model
   import tensorflow as tf

   from sklearn.metrics import mean_squared_error
   from sklearn.metrics import r2_score, mean_absolute_percentage_error
   from sklearn.model_selection import KFold
   import keras_tuner
```

```
[9]: #Check and Print Tensorflow GPU Availability
print("Num GPUs Available: ", len(tf.config.list_physical_devices('GPU')))
```

Num GPUs Available: 0

```
[10]: from sklearn.metrics import confusion matrix, ConfusionMatrixDisplay
      def plot_loss(keras_regressor_model):
        plt.plot(keras_regressor_model.history['loss'], label='loss')
       plt.plot(keras_regressor_model.history['val_loss'], label='val_loss')
       plt.ylim([0, 2])
       plt.xlabel('Epoch')
       plt.ylabel('Mean Squared Error [Wine Quality Score]')
       plt.legend()
       plt.grid(True)
       plt.show()
      def plot_metrics(test_scores, test_predictions):
          a = plt.axes(aspect='equal')
          plt.scatter(test_scores, test_predictions)
          plt.xlabel('True Values [winequality-white]')
          plt.ylabel('Predictions [winequality-white]')
          lims = [0, 10]
          plt.xlim(lims)
          plt.ylim(lims)
          _ = plt.plot(lims, lims)
          plt.show()
          cm = confusion_matrix(test_scores, test_predictions.round(), labels=[0,_
       41,2,3,4,5,6,7,8,9,10
          cm_disp = ConfusionMatrixDisplay(cm)
          cm_disp.plot()
[11]: def create_model_tuner(hp, learning_rate):
          # Konfiguriere die Verteilungsstrategie
          input_layer = layers.Input(shape=(11,))
```

```
def create_model_tuner(hp, learning_rate):
    # Konfiguriere die Verteilungsstrategie
    input_layer = layers.Input(shape=(11,))
    model = keras.Sequential([
        input_layer
])

for i in range(hp.Int("num_layers", 1, 3)):
    model.add(
        layers.Dense(
            # Tune number of units separately.
            units=hp.Int(f"units_{i}", min_value=2, max_value=330, step=2),
            activation='relu',
        )
    )
    model.add(layers.Dropout(rate=0.2))
    model.add(layers.Dense(1))#output

model.compile(loss=keras.losses.mean_squared_error,
```

```
optimizer=keras.optimizers.Adam(learning_rate=learning_rate),_

metrics=[keras.metrics.R2Score])

return model
```

```
[12]: import concurrent.futures
      def fit_and_evaluate_model(model: keras.Sequential, x_train, y_train, x_test,__

y_test, **kwargs):
          model_history = model.fit(x_train, y_train, batch_size=64, epochs=500, u
       →validation_data=(x_test, y_test), verbose=0, **kwargs)
          return model history
      def evaluate model_cv(learning_rate, model, training_data, training_scores,_
       →**kwargs):
          cv scores = []
          models_history = []
          kfold = KFold(n_splits=5, shuffle=True) #Cross Validation cv=5
          for i, (train_index, test_index) in enumerate(kfold.split(training_data,_
       →training_scores)):
              local_model = clone_model(model)
              #model needs recompiling after clones - recompiled with same parameters
              local_model.compile(
                  loss=keras.losses.mean_squared_error,
                  optimizer=keras.optimizers.Adam(learning rate=learning rate),
                  metrics=[keras.metrics.R2Score])
              model_history = fit_and_evaluate_model(local_model,__
       straining_data[train_index], training_scores[train_index],
       -training_data[test_index], training_scores[test_index], **kwargs)
              score = model_history.history['val_r2_score'][-1]
              print(score)
              cv_scores.append(score)
          cv_scores = np.array(cv_scores)
          cv_score_mean = np.mean(cv_scores)
          return cv_score_mean
      def evaluate_model_cv_print(hp, training_data, training_scores, valid_data,_
       →valid_scores, **kwargs):
          cv scores = []
          models_history = []
          kfold = KFold(n_splits=5, shuffle=True) #Cross Validation cv=5
```

```
for i, (train_index, test_index) in enumerate(kfold.split(training_data,__
→training_scores)):
      local_model = HyperRegressor().build(hp)
      model_history = local_model.fit(training_data[train_index],__
straining scores[train index], batch size=64, epochs=512,
avalidation_data=(training_data[test_index], training_scores[test_index]),u
→verbose=0, **kwargs)
      cv_scores.append(model_history.history['val_r2_score'][-1])
      models_history.append((local_model, model_history))
  cv scores = np.array(cv scores)
  print('\r\nCross Validation')
  print(f'- R^2: {cv_scores}')
  print(f'- R^2 Durchschnittlicher: {np.mean(cv_scores):.4f}')
  print(f'- R^2 Standardabweichung: {np.std(cv_scores):.4f}')
  print('\r\n')
  #qet best model
  best_model_index = np.argmax(cv_scores) #qet best r2 score model
  optimal_model = models_history[best_model_index]
  predicted_test_scores = optimal_model[0].predict(valid_data)
  r2_score_test = r2_score(valid_scores, predicted_test_scores)
  rmse test = sqrt(mean squared error(valid scores, predicted test scores))
  mape_test = mean_absolute_percentage_error(valid_scores,__
⇔predicted_test_scores)
  print('Test:')
  print(f'- R^2: {r2_score_test:.4f}')
  print(f'- RMSE: {rmse_test:.2f}')
  print(f'- MAPE: {mape_test:.2%}')
  plot_loss(optimal_model[1])
  plot_metrics(valid_scores, predicted_test_scores)
  return cv_scores, optimal_model
```

Ablauf Hyperparameter optimierung: Fitting 5 folds for each of x candidates totalling 5x fits Select best model based on r2 score mean (valid)

```
[13]: class HyperRegressor(keras_tuner.HyperModel):
    def build(self, hp):
```

```
learning_rate = hp.Float("lr", min_value=1e-4, max_value=1e-2,__
⇔sampling="log")
      return create_model_tuner(hp, learning_rate)
  def fit(self, hp, model, x, y, **kwargs):
      # Return a single float to maximize
      processes = []
      cv_scores = []
      kfold = KFold(n_splits=5, shuffle=True) #Cross Validation cv=5
      for i, (train_index, test_index) in enumerate(kfold.split(x, y)):
          local_model = self.build(hp)
          model_history = fit_and_evaluate_model(local_model, x[train_index],_

y[train_index], x[test_index], y[test_index], **kwargs)

          score = model_history.history['val_r2_score'][-1]
          cv_scores.append(score)
      cv_scores = np.array(cv_scores)
      cv_score_mean = np.mean(cv_scores)
      return cv_score_mean
```

4.2 White Wine

Reloading Tuner from wine_score_training\white\tuner0.json

Following cell could be disabled if values should just be loaded

```
Results summary
Results in wine_score_training\white
Showing 10 best trials
Objective(name="", direction="max")
```

Trial 092 summary Hyperparameters:

lr: 0.0012332982197502966

num_layers: 2
units_0: 220
units 1: 206

Score: 0.9653748989105224

Trial 18 summary Hyperparameters:

lr: 0.0011664940321518

num_layers: 2
units_0: 220
units_1: 220

Score: 0.9648572564125061

Trial 072 summary Hyperparameters:

lr: 0.0012215599200960591

num_layers: 2
units_0: 220
units_1: 198

Score: 0.9643449425697327

Trial 053 summary Hyperparameters:

lr: 0.0011583836811043184

num_layers: 2
units_0: 220
units_1: 206

Score: 0.9642662286758423

Trial 49 summary Hyperparameters:

lr: 0.0013140019210284941

num_layers: 2
units_0: 220
units_1: 190

Score: 0.9642589569091797

Trial 17 summary Hyperparameters:

lr: 0.0012659952144362654

num_layers: 2
units_0: 220
units_1: 202

Score: 0.9640674471855164

Trial 090 summary Hyperparameters:

lr: 0.0012370253610342911

num_layers: 2
units_0: 220
units 1: 202

Score: 0.9640587329864502

Trial 080 summary Hyperparameters:

lr: 0.001226023179296953

num_layers: 2
units_0: 220
units_1: 204

Score: 0.9638802289962769

Trial 076 summary Hyperparameters:

lr: 0.0012284187466688754

num_layers: 2
units_0: 220
units_1: 200

Score: 0.9637610912322998

Trial 26 summary Hyperparameters:

lr: 0.0012590367667134458

num_layers: 2
units_0: 220
units_1: 208

Score: 0.963724958896637

Note: the Input layer is there implicitly, but it is not considered a layer proper and it does not show up in model.summary()

```
[16]: best_model = tuner.get_best_models()[0]
best_model.summary()
```

WARNING:tensorflow:From C:\GitClones\TINF21C_Maschinelles-Lernen\Programmierabgabe 2\venv\Lib\sitepackages\keras\src\backend\common\global_state.py:74: The name tf.reset_default_graph is deprecated. Please use tf.compat.v1.reset_default_graph instead.

C:\GitClones\TINF21C_Maschinelles-Lernen\Programmierabgabe 2\venv\Lib\site-packages\keras\src\saving\saving_lib.py:418: UserWarning: Skipping variable loading for optimizer 'adam', because it has 2 variables whereas the saved

```
optimizer has 14 variables.
  trackable.load_own_variables(weights_store.get(inner_path))
```

Model: "sequential"

Layer (type)	Output Shape	Param #
dense (Dense)	(None, 220)	2,640
dropout (Dropout)	(None, 220)	0
dense_1 (Dense)	(None, 206)	45,526
<pre>dropout_1 (Dropout)</pre>	(None, 206)	0
dense_2 (Dense)	(None, 1)	207

Total params: 48,373 (188.96 KB)

Trainable params: 48,373 (188.96 KB)

Non-trainable params: 0 (0.00 B)

Cross Validation

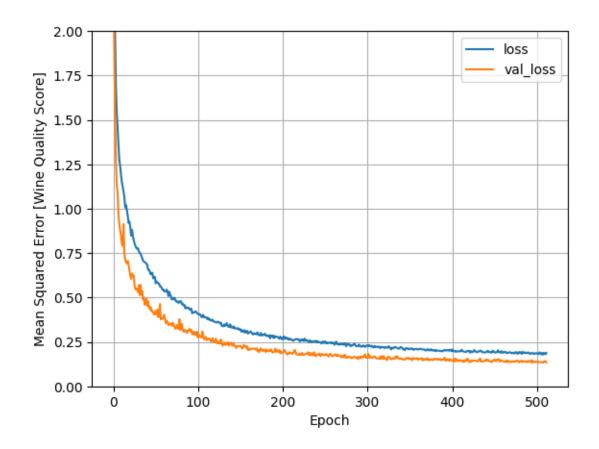
- R^2: [0.96634668 0.96371055 0.96036386 0.96369731 0.96622843]

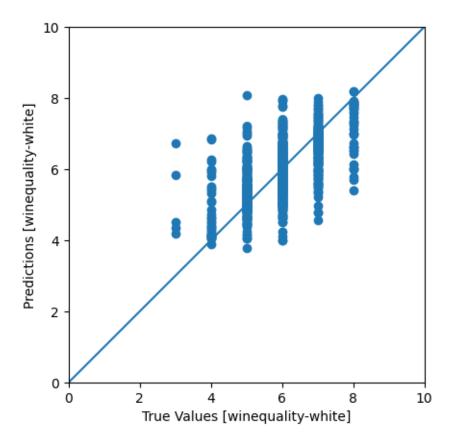
- R^2 Durchschnittlicher: 0.9641 - R^2 Standardabweichung: 0.0022

31/31 0s 1ms/step

Test:

- R^2: 0.3414 - RMSE: 0.73 - MAPE: 9.36%





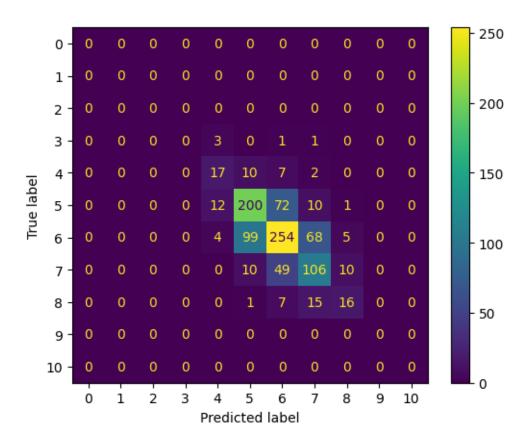
CPU times: total: 2min 22s

Wall time: 7min 25s

[17]: (array([0.96634668, 0.96371055, 0.96036386, 0.96369731, 0.96622843]),

(<Sequential name=sequential_1, built=True>,

<keras.src.callbacks.history.History at 0x14939b93b50>))



```
[18]: best_hp.values

[18]: {'lr': 0.0012332982197502966, 'num_layers': 2, 'units_0': 220, 'units_1': 206}
```

4.3 RED Wine

Reloading Tuner from wine_score_training\red\tuner0.json

red_tuner.results_summary()

Results summary
Results in wine_score_training\red
Showing 10 best trials
Objective(name="", direction="max")

Trial 50 summary Hyperparameters:

lr: 0.0017062317635702748

num_layers: 2
units_0: 158
units_1: 220

Score: 0.9500704526901245

Trial 64 summary Hyperparameters:

lr: 0.0017259004301463411

num_layers: 2
units_0: 158
units_1: 220

Score: 0.949598515033722

Trial 33 summary Hyperparameters:

lr: 0.0018243901560444126

num_layers: 2
units_0: 144
units_1: 168

Score: 0.9494137525558471

Trial 53 summary Hyperparameters:

lr: 0.0031383175335364445

num_layers: 2
units_0: 186
units_1: 120

Score: 0.9489416718482971

Trial 31 summary Hyperparameters:

lr: 0.0017178158788675895

num_layers: 2
units_0: 146
units_1: 174

Score: 0.9488247871398926

Trial 46 summary Hyperparameters: lr: 0.0016562356416230438 num_layers: 2 units_0: 166 units_1: 220 Score: 0.9487973213195801 Trial 39 summary Hyperparameters: lr: 0.0014408426585621583 num_layers: 2 units_0: 180 units_1: 220 Score: 0.948509418964386 Trial 47 summary Hyperparameters: lr: 0.0016876126455504555 num layers: 2 units_0: 164 units 1: 220 Score: 0.9484629273414612 Trial 44 summary Hyperparameters: lr: 0.0017255680321120448 num_layers: 2 units_0: 158 units_1: 220 Score: 0.9480587005615234 Trial 35 summary Hyperparameters: lr: 0.0011981217425369548 num layers: 2 units_0: 186 units_1: 220 Score: 0.9477508664131165 [21]: best red model = red tuner.get best models()[0] best_red_model.summary()

C:\GitClones\TINF21C_Maschinelles-Lernen\Programmierabgabe 2\venv\Lib\site-

packages\keras\src\saving\saving_lib.py:418: UserWarning: Skipping variable loading for optimizer 'adam', because it has 2 variables whereas the saved optimizer has 14 variables.

trackable.load_own_variables(weights_store.get(inner_path))

Model: "sequential"

Layer (type)	Output Shape	Param #
dense (Dense)	(None, 158)	1,896
dropout (Dropout)	(None, 158)	0
dense_1 (Dense)	(None, 220)	34,980
dropout_1 (Dropout)	(None, 220)	0
dense_2 (Dense)	(None, 1)	221

Total params: 37,097 (144.91 KB)

Trainable params: 37,097 (144.91 KB)

Non-trainable params: 0 (0.00 B)

[22]: %%time #Retrain best Model best_red_hp = red_tuner.get_best_hyperparameters()[0] best_red_model_history = evaluate_model_cv_print(best_hp,__ ored_training_Data_scaled, red_training_scores, red_test_data_scaled,__ ored_test_scores)

Cross Validation

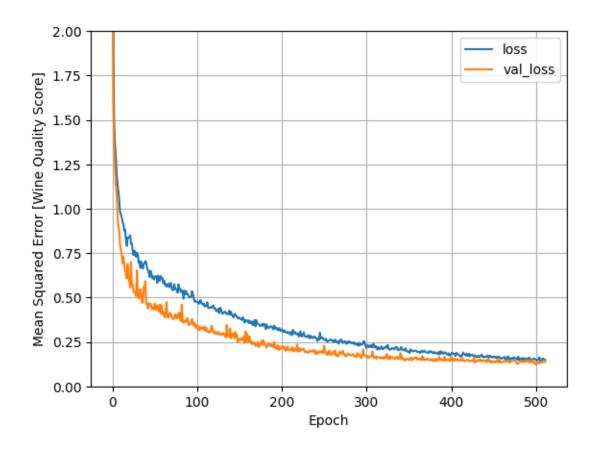
best_red_model_history

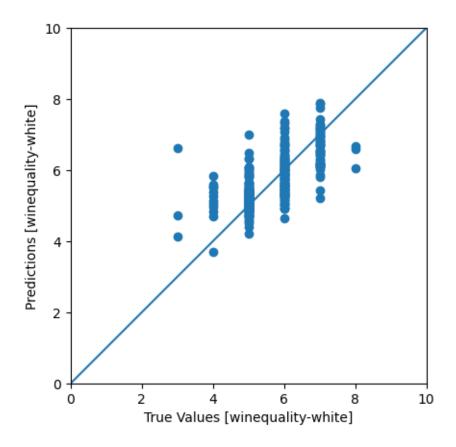
- R^2: [0.9545325 0.93041742 0.94608009 0.94791126 0.95237571]

- R^2 Durchschnittlicher: 0.9463 - R^2 Standardabweichung: 0.0085

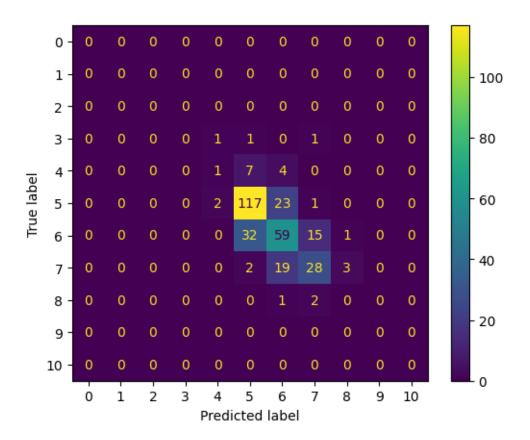
Test:

- R^2: 0.4229 - RMSE: 0.66 - MAPE: 8.93%





CPU times: total: 54 s Wall time: 2min 52s



```
[23]: best_red_hp.values
```

[23]: {'lr': 0.0017062317635702748, 'num_layers': 2, 'units_0': 158, 'units_1': 220}

5 Aufgabe 4

5.1 Loss-Fkt und Optimizer:

Auf Basis der Aufgabenstellung wurden die Mean Squared Error (MSE) Loss-Funktion und der Adam-Optimizer ausgewählt.

Die MSE Loss-Funktion ist eine häufig verwendete Loss-Funktion, da sie die Genauigkeit der Vorhersagen quantifiziert und das Modell dadurch anregt, möglichst nahe an den tatsächlichen Werten zu liegen.

Der Adam-Optimierer ist einer der beliebtesten Optimierer und bietet eine adaptive Lernrate. Er überzeugt durch seine Effizienz und minimale Speicheranforderungen und ist auch für Probleme mit großen Datensets gut geeignet. Durch die adaptive Skalierung seiner Lernraten eignet sich Adam gut für Modelle mit verrauschten Daten.

Einer der wichtigsten Hyperparameter für die Nutzung des Adam-Optimizers ist die Learning-Rate, welche mittels Hyperparameter-Optimierung bestimmt wird.

6 Aufgabe 5

6.1 Vergleich Roter und Weißer Wein

Für den weißen Wein ergab die Cross-Validation einen durchschnittlichen R2-Score von 0,9632 mit einer geringen Standardabweichung von 0,0024. Dies deutet darauf hin, dass das Modell konsistente und präzise Vorhersagen für verschiedene Teilmengen der Daten liefert.

Der R2-Score des Testsets lässt jedoch mit seinem niedrigen Wert von 0,3183 darauf schließen, dass das Modell Schwierigkeiten hatte auf unbekannten Daten zu schließen.

Für den roten Wein ergab die Cross-Validation aufgrund des kleineren Datensets einen etwas niedrigeren R2-Wert von 0,9497 und eine etwas höhere Standardabweichung (0,0045 vs 0,0024).

Auf den Testdaten wurde hier jedoch ein R2-Score von 0.4133 erzielt, was gegenüber dem weißen Datenset mit 0.3183 eine bessere Vorhersagegenauigkeit bedeutet.

Zusammenfassend wurde hier also trotz des kleineren Datensets eine bessere Genauigkeit für die Vorhersage des roten Weins erzielt, obwohl der weiße Wein bei der Cross-Validation eine höhere Genauigkeit aufwies.

6.2 Vergleich klassischer Ansatz vs Deep Learning

Der klassische Ansatz lässt sich im Vergleich zum Deep Learning schneller implementieren. Des weiteren sticht Deep Learning durch deutlich längere Trainingszeiten (1 Minute klassisch vs. 10 Minuten Deep Learning) heraus.

Im Vergleich der Scores auf den Testdaten liefert der klassische Ansatz auf dem größeren Datensatz (weißer Wein) einen besseren R2-Score (0.4862 klassich, 0.3183 Deep Learning). Bei einem kleineren Datenset (roter Wein) liefern beide Ansätze eine nahezu identische Performance (0,3914 klassisch, 0,4133 Deep Learning).