Flavors

Federico Zamberlan, Ciro Zar y Lucía Bravo

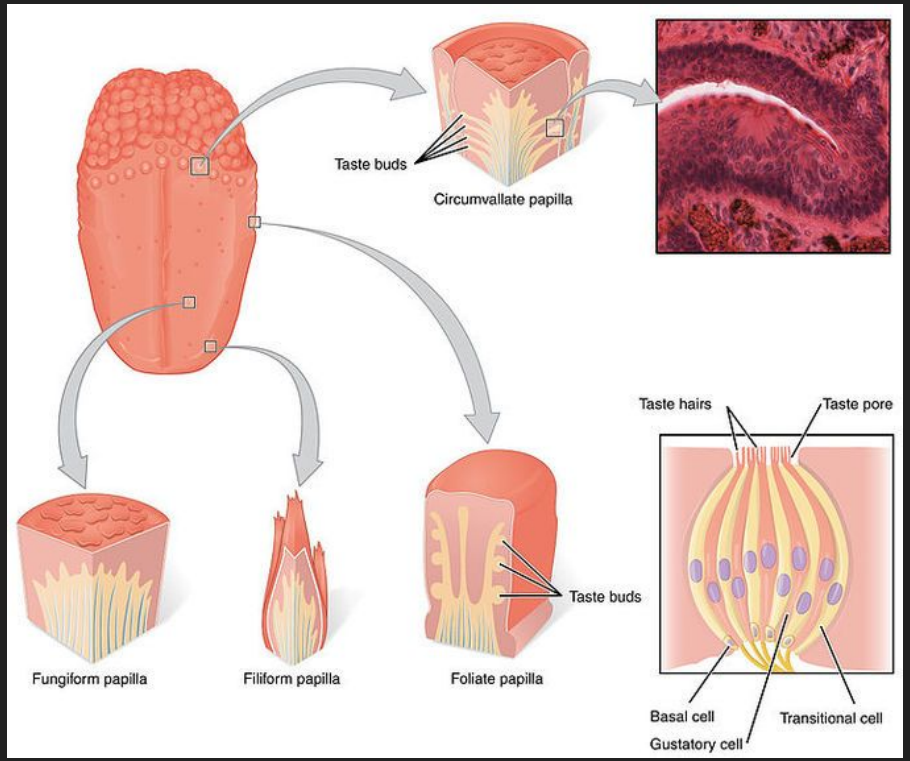
Laboratorio de datos - Cátedra Tagliazucchi - 1er cuatrimestre 2021

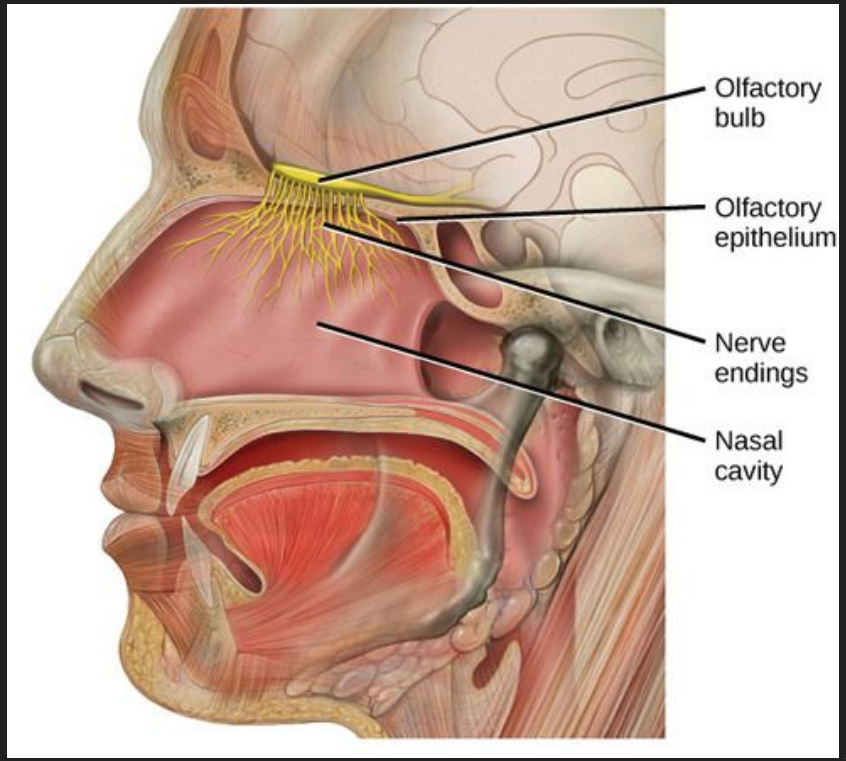
Esquema de la charla

- Motivación
- Visualización y limpieza de datos
- Modelos y resultados
- Conclusiones

Motivación

¿Qué es un flavor? ¿Qué determina la percepción de un flavor?
¿Es posible predecir la percepción que se tendrá de una sustancia?





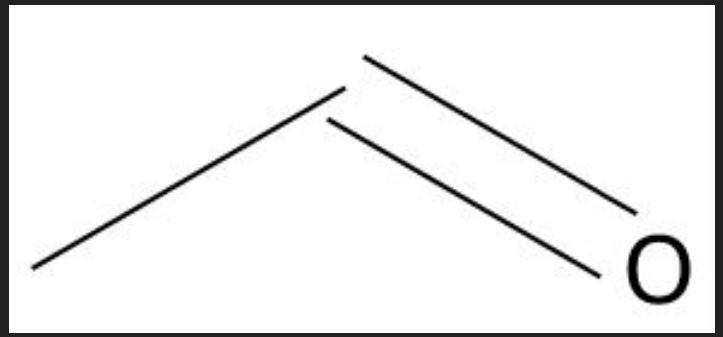
La base de datos empleada fue extraída de FlavorDB

FlavorDB es un repositorio que ofrece información acerca del origen, los flavors, las propiedades fisicoquímicas, entre otras cosas, de moléculas.

Es una herramienta útil para la industria alimenticia.

Tiene 25595 moléculas de flavor, de las cuales 2254 están asociadas a 936 ingredientes naturales.

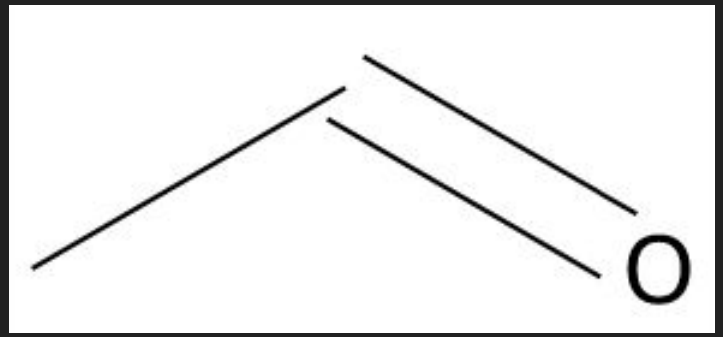
Acetaldehído



Tags

- Ethereal
- Ether
- Whiskey
- Pungent
- Fruity
- Aldehydic

Acetaldehído



Tags

- Ethereal
- Ether
- Whiskey
- Pungent
- Fruity
- Aldehydic

Visualización y limpieza de datos

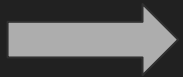
Citric

- Citric
- Citric peel
- Citrus
- Citrus peel

Milk

- Milk
- Milky
- Dairy
- Hot milk

25595 moléculas
700 flavors

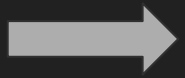


25106 moléculas
523 flavors

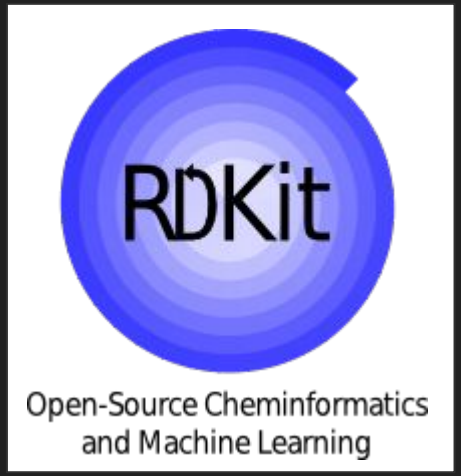
Se eliminaron flavors menos frecuentes:

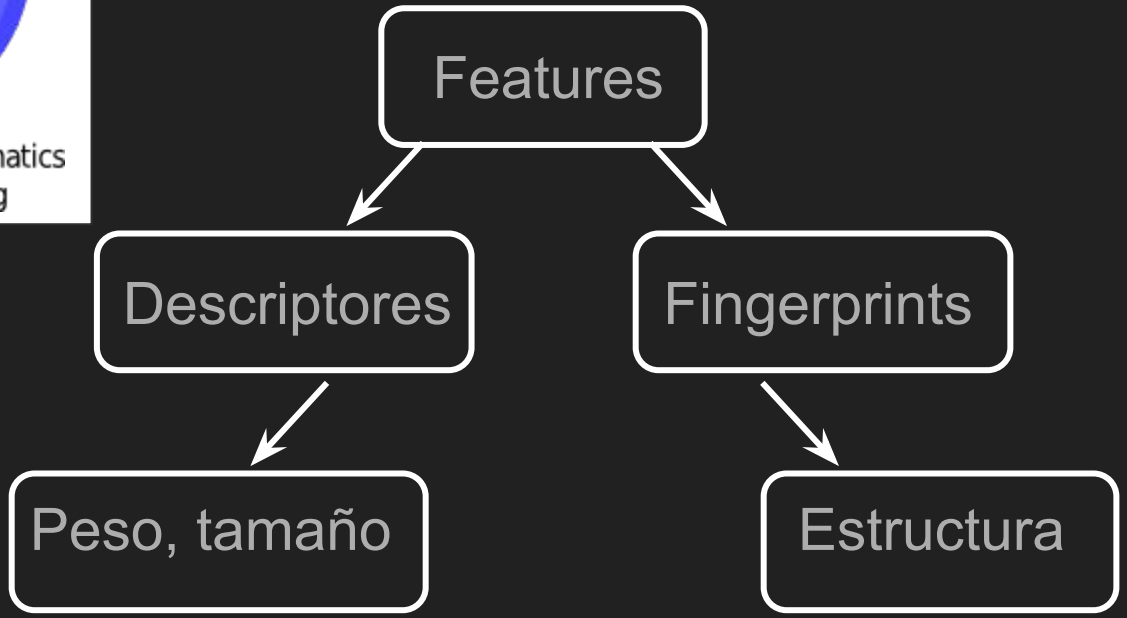
163 flavors aparecían una sola vez, 70 flavors dos veces, etc

25106 moléculas
523 flavors

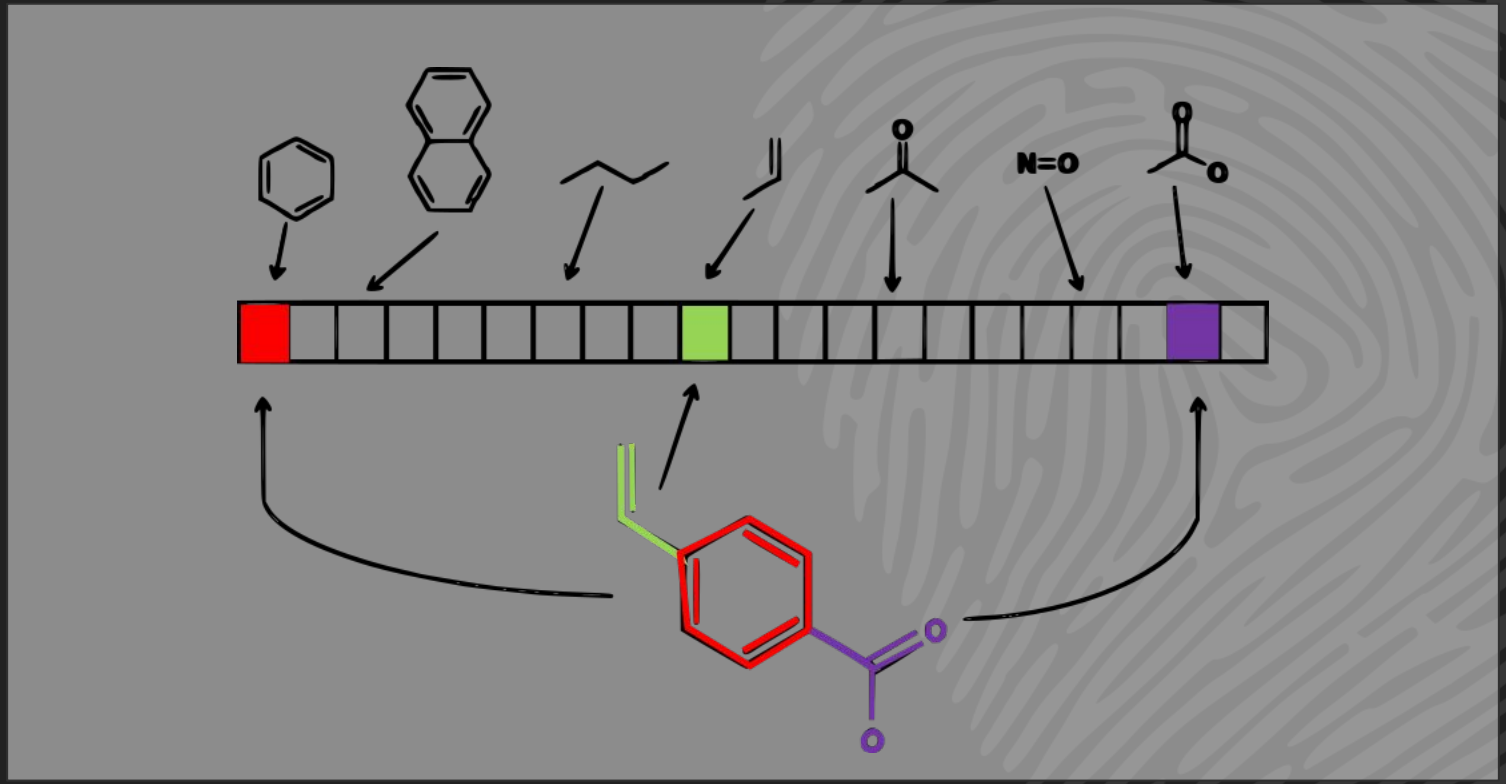


25106 moléculas
135 flavors

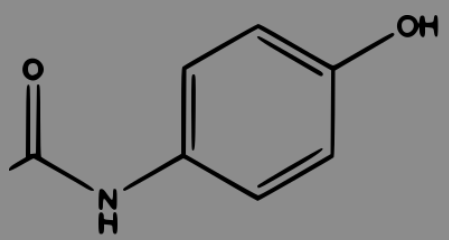

RDKit
Open-Source Cheminformatics
and Machine Learning


Features
Descriptores
Fingerprints
Peso, tamaño
Estructura

Molecular Fingerprint



Molecular Fingerprint



paracetamol

(0,0,1,0,1,0,0,...,0,1,0,0)

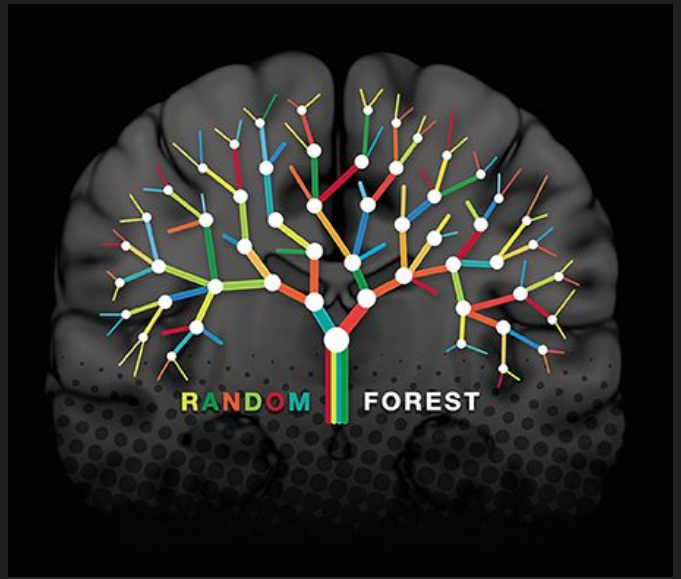
Modelo I - Random Forest Classifier

Tag: Bitter

Folds: 10 (Stratified)

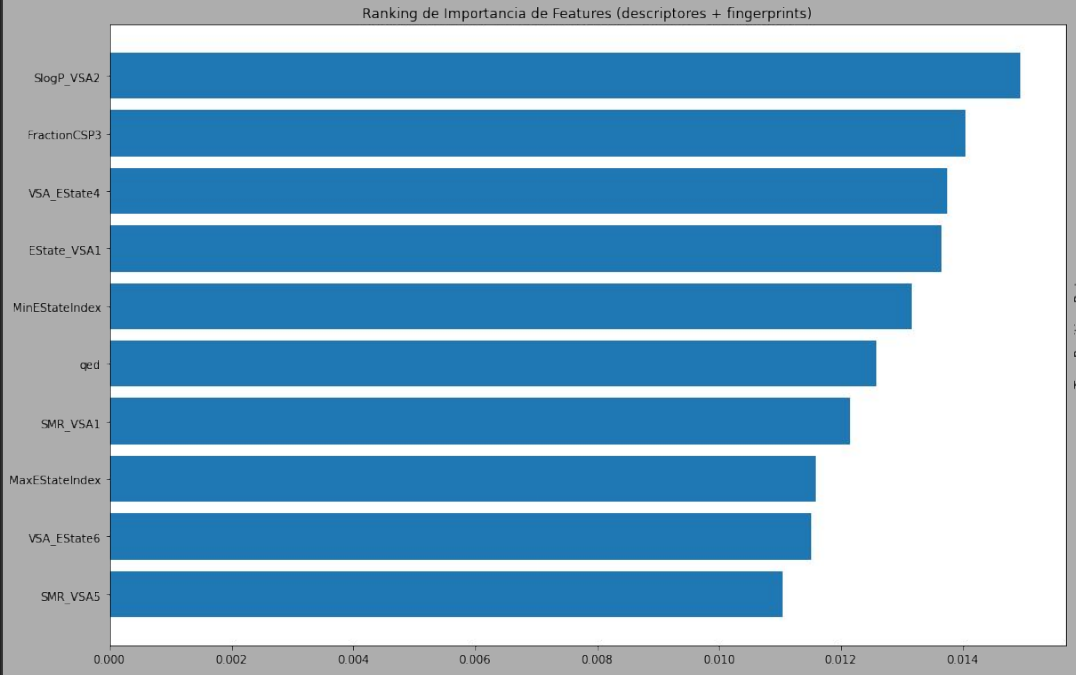
Features:

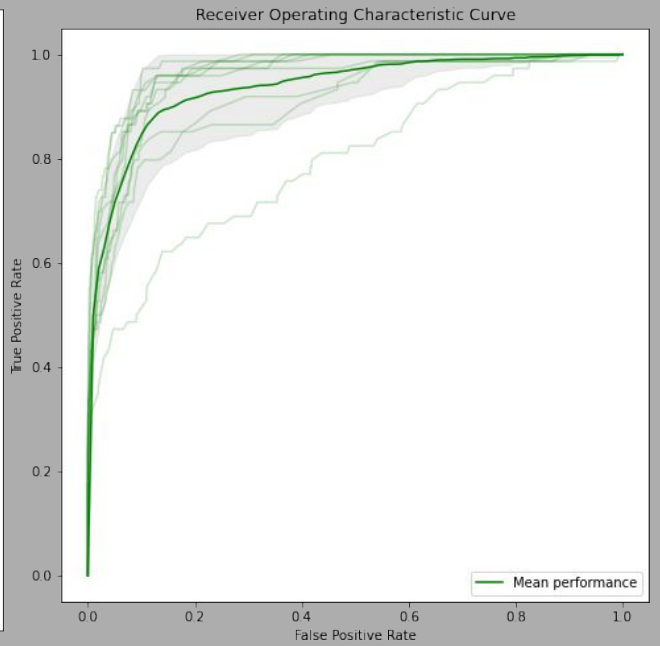
- Fingerprints & Descriptores combinados
- Solo Descriptores
- Solo Fingerprints



Fingerprints + Descriptores

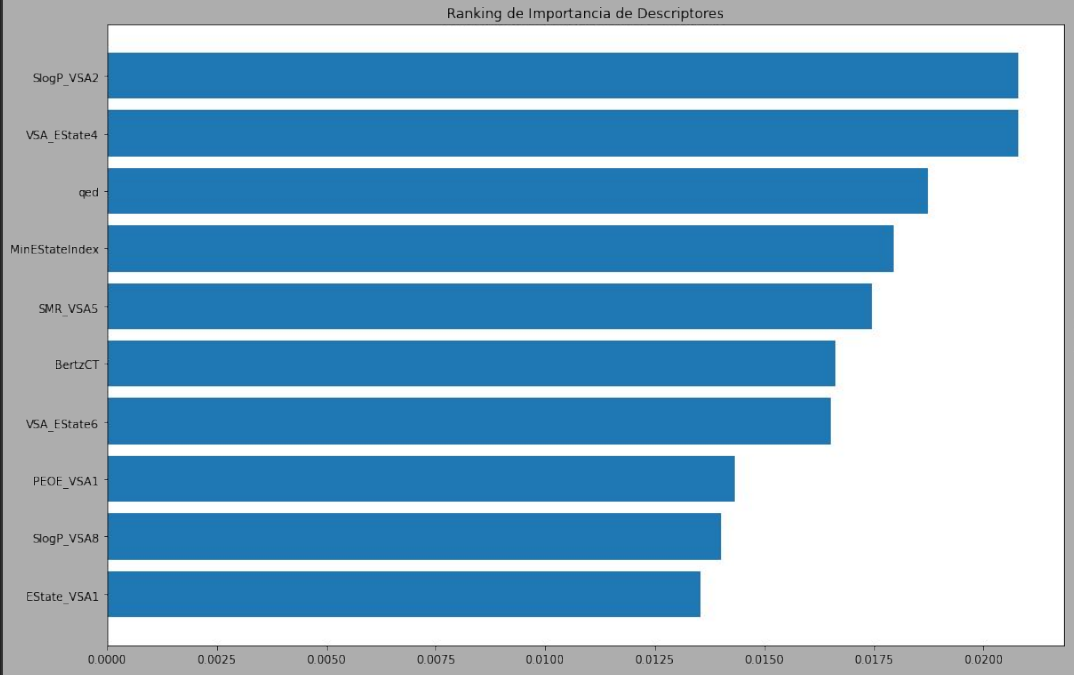
AUC promedio= 0.936

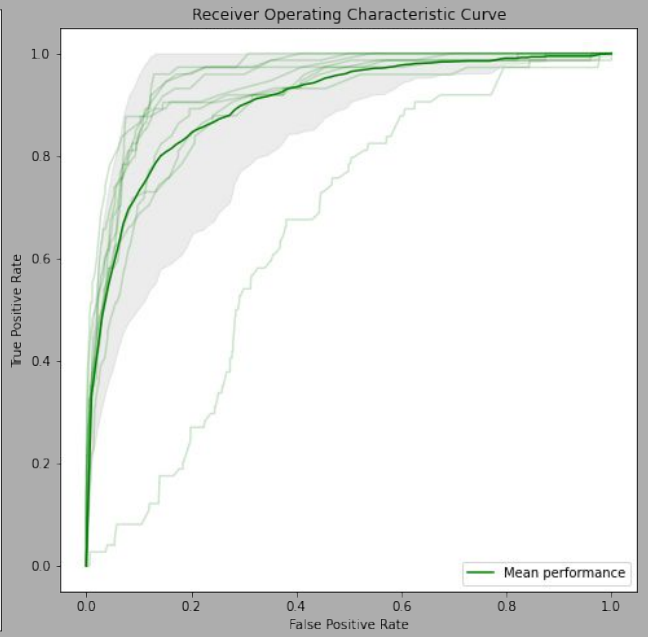




Descriptores

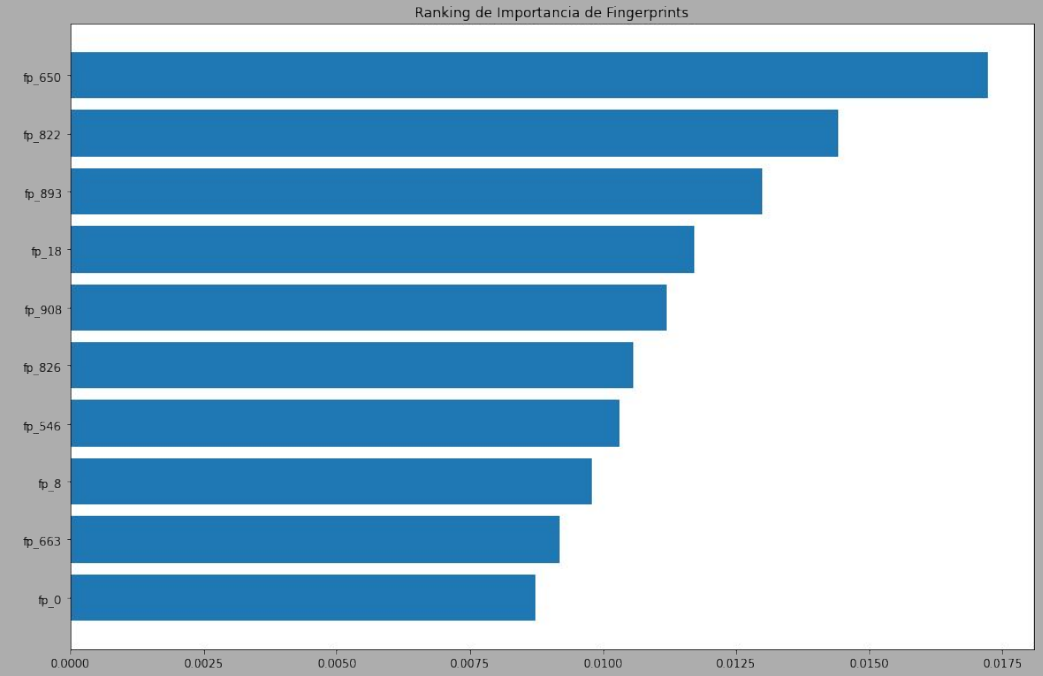
AUC promedio= 0.901

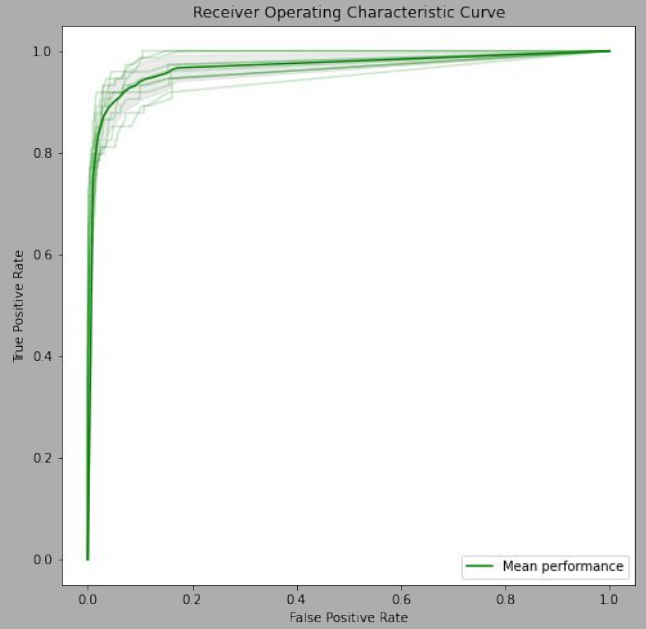




Fingerprints

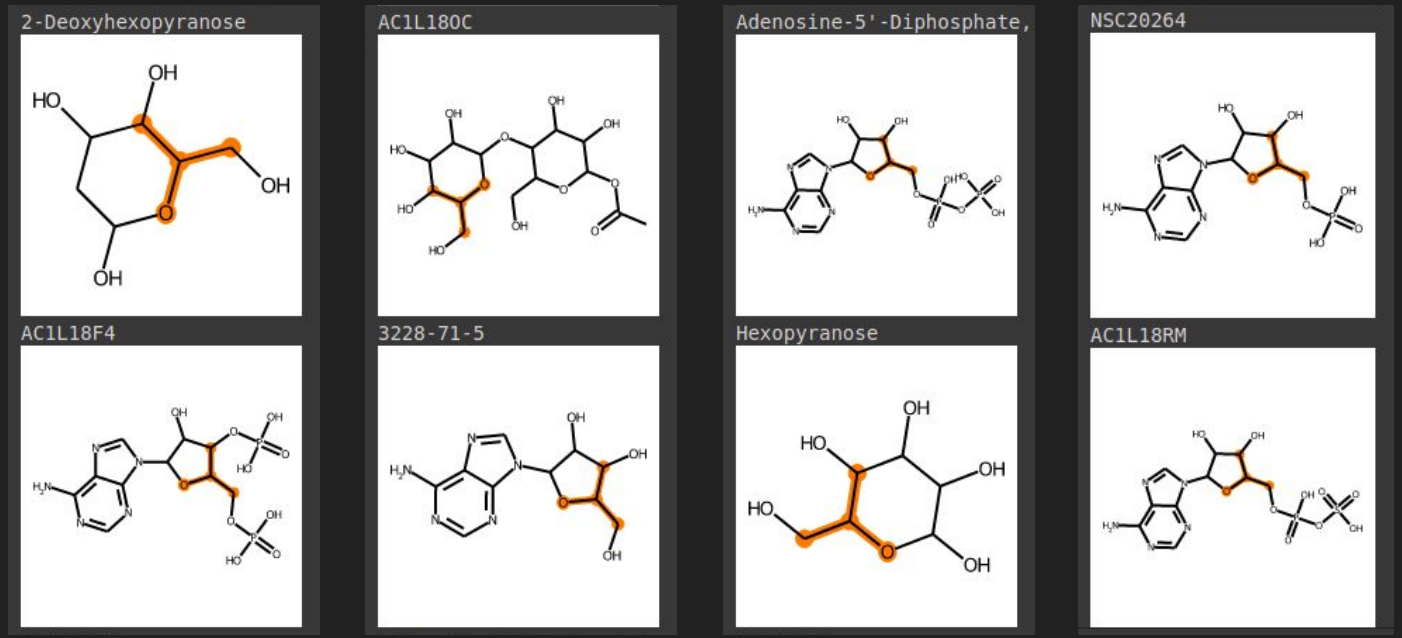
AUC promedio= 0.96955





Visualización - Fingerprints

Para bitter ⟶ fingerprint 650



Modelo II - Clustering

Clusters: 4

Método: PCA (100 componentes) + KMeans

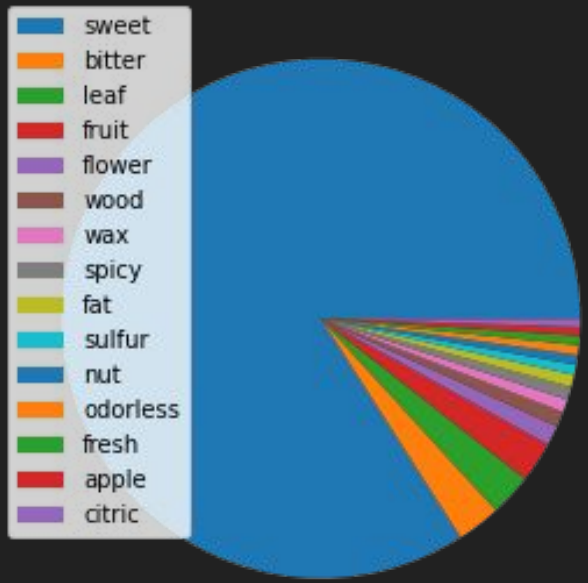
Features: Fingerprints & Descriptores combinados

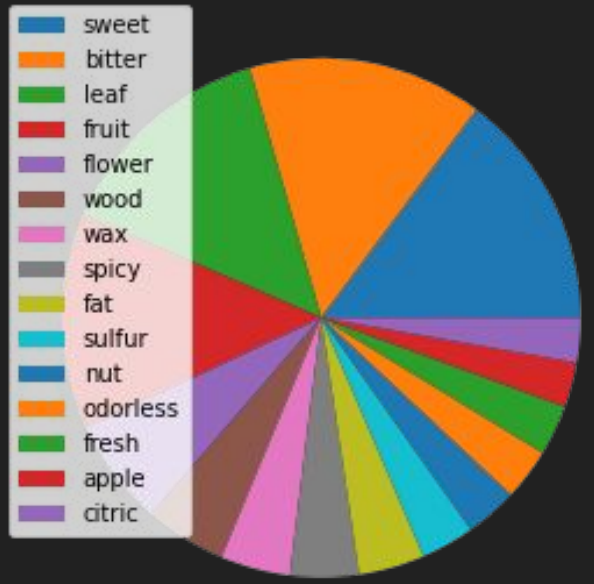
Modelo II - Clustering

Modelo II - Clustering

Modelo II - Clustering

Se removieron moléculas cuyo único tag era sweet

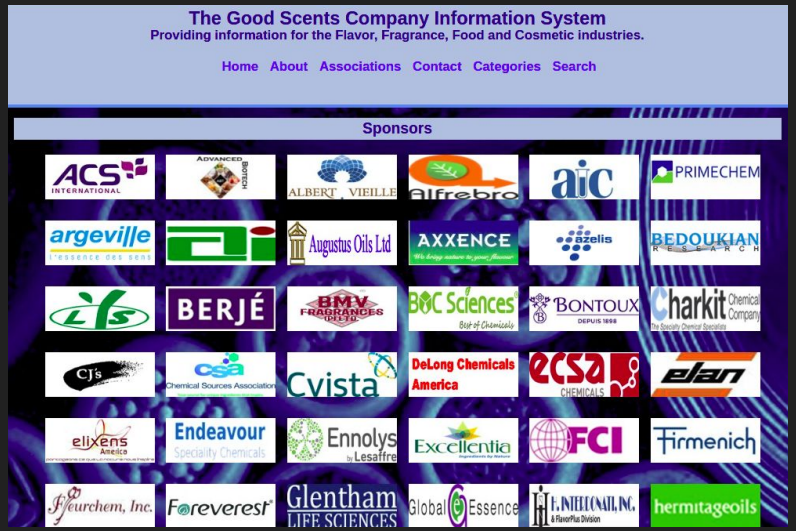


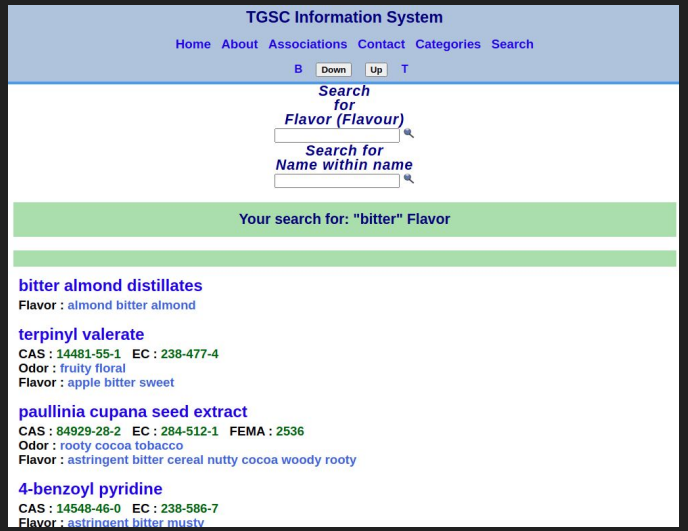


Word2Vec

Criterio para analizar la cercanía entre elementos de un clusters y entre clusters:

Se empleó la base de datos The Good Scent Company creada en 1994.





Se entrenó un modelo Word2Vec para calcular la cercanía entre cada uno de esos tags, tomando sólo los que nos interesan.

Citric
- Acetato: 0.882
- Linalyl: 0.88
- Orange: 0.866
- Grapefruit: 0.856
- Tangerine: 0.855

Wax
- Soap: 0.885
- Oil: 0.823
- Fat: 0.806
- Tallow: 0.799
- Lard: 0.735

Modelo II - Clustering

C = Similaridad en el cluster / Similaridad entre clusters.

Si C < 1 los clusters son muy similares entre sí. (0.54 en primera aproximación)

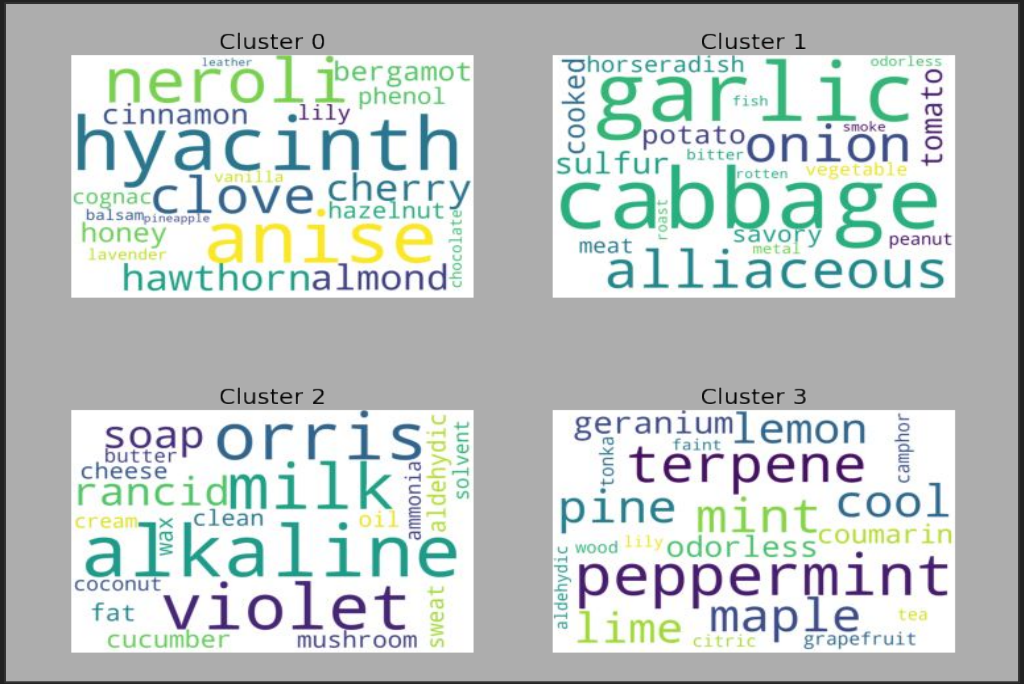
Es importante obtener C > 1.

Clusters - Dataframe Balanceado

Cluster 1: 0.768

0 vs 2: 0.034

C = 3.69



Conclusiones

En cuanto a lo realizado:

- Es posible identificar fragmentos de moléculas importantes para clasificar.

- Se mejoró la clusterización de los tags.

- Se pudo construir un modelo predictivo que lograra entender la experiencia subjetiva basado en características de las moléculas.

Conclusiones

Algunas ideas de lo que es posible hacer

- Ver si para tags como “aldehídico” el feature importance muestra en la estructura el grupo funcional aldehído.

- Ampliar la base de datos y analizar además de flavors, toxicidad de las moléculas.

- Intentar predecir el gusto final de una comida a partir de los ingredientes individuales de la receta

¡Gracias!