FRAGANCE

Modelo preditivo da avaliação de um perfume em parfumo.com

Amanda Rodrigues Cunha*
Caio Cezar Veronezi Macedo†
Renato dos Santos Silva‡
Joao Victor Oliveira Correia de Brito§
Luis Guilherme Redigolo Crosselli¶

15 December, 2024

1 Introdução

Parfumo é um *website* que reúne conhecedores e entusiastas de fragâncias, organizando uma base de dados com pouco mais de 190 mil perfumes, criados por cerca de 12 mil marcas. Segundo palavras registradas na sua página inicial:

> Parfumo is the home for all fragrance connoisseurs & enthusiasts!
> Discover new perfumes, organize your collection, connect with other fragrance lovers and much more!

Ou seja, é também uma rede social em que os participantes compartilham opiniões em *forums* e registram suas avaliações sobre perfumes.

Neste projeto, exploramos o conjunto de dados The Scent of Data (`parfumo`), geradas a partir da base de dados do parfumo.com e publicadas no TidyTuesday (quinquagésima semana). Na sua página de introdução, encontramos algumas perguntas de partida:

> Quais fatores mais influenciam a avaliação de um perfume?
> Há famílias de aromas específicas que dominam o mercado? Como são percebidas pelos usuários?
> A popularidade de certas certas notas de fragâncias mudou ao longo do tempo?

A primeira exige uma abordagem de inferência, porquanto deseja-se encontrar a influência de certas características sobre a avaliação de um perfume. A terceira pede por uma análise exploratória. A segunda, porém, é passível de modelagem preditiva. Dadas certas características de um perfume, incluindo famílias olfativas, estamos interessados em prever sua avaliação. Tal modelo poderia ser usado, por exemplo, como instrumento para a projeção de aceitação de certo perfume em elaboração.

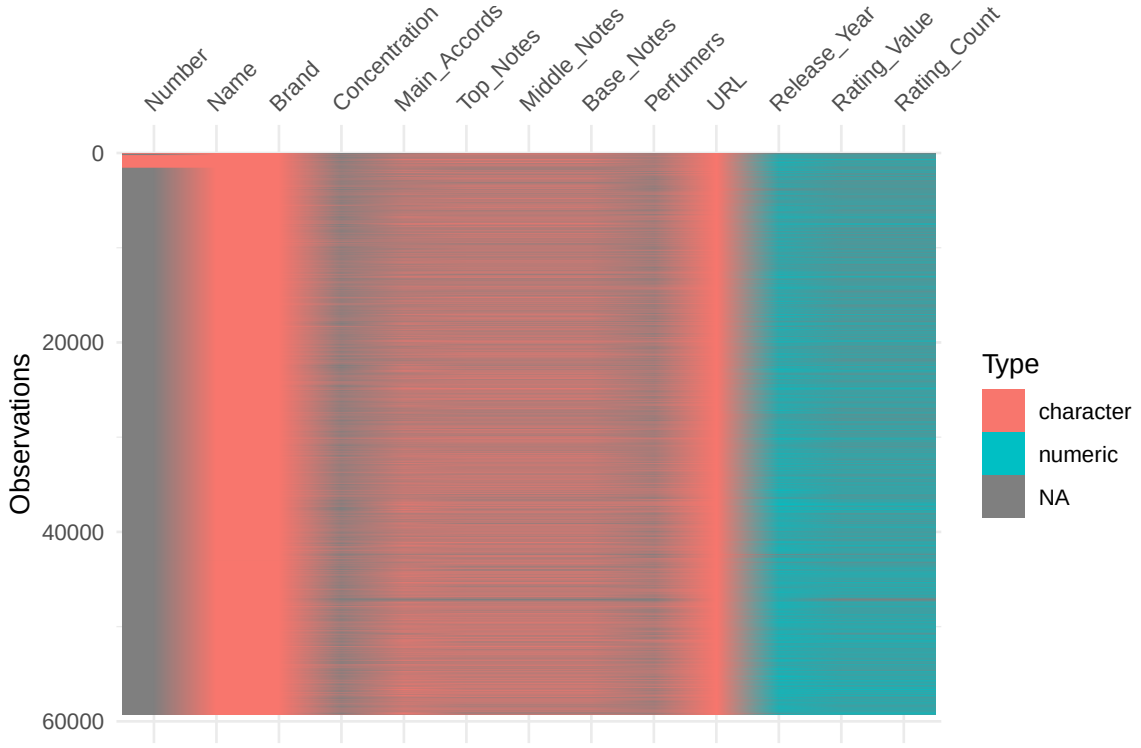
2 Análise e preparação dos dados

2.1 Descrição dos dados

A tabela abaixo lista as variáveis do conjunto de dados `parfumo`, junto de suas classes (R) e descrições:

*amanda.cunha@aluno.ufabc.edu.br
†cezar.veronezi@aluno.ufabc.edu.br
‡renato.santos@aluno.ufabc.edu.br
§brito.joao@aluno.ufabc.edu.br
¶luis.crosselli@aluno.ufabc.edu.br

Variável	Classe	Tipo	Descrição
Number	character	nominal	Identificador único atribuído a cada perfume.
Name	character	nominal	Nome do perfume ou fragrância.
Brand	character	nominal	Marca ou fabricante da fragrância.
Release_Year	double	discreta	Ano em que a fragrância foi lançada.
Concentration	character	ordinal	Concentração da fragrância.
Rating_Value	double	discreta	Pontuação geral atribuída pelos usuários.
Rating_Count	double	discreta	Número de avaliações de usuários para a fragrância.
Main_Accords	character	nominal	Principais características ou acordes olfativos da fragrância.
Top_Notes	character	nominal	Notas iniciais percebidas logo após a aplicação.
Middle_Notes	character	nominal	Notas médias ou de coração da fragrância, que surgem após as notas de topo.
Base_Notes	character	nominal	Notas finais e duradouras que permanecem após a fragrância secar.
Perfumers	character	nominal	Criadores ou perfumistas responsáveis pela composição da fragrância.
URL	character	nominal	Link para a página do produto no Parfumo.com.



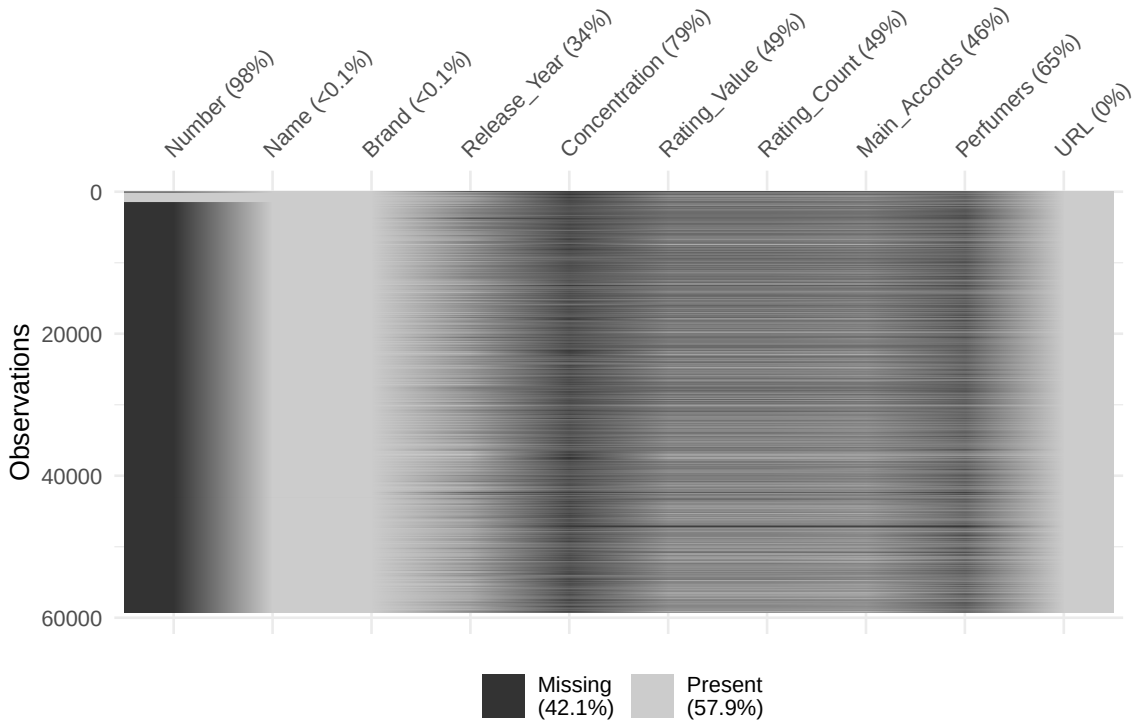
2.2 Análise de *missings* e *data cleaning*

Primeiramente, vamos analisar os possíveis valores para as variáveis olfativas, ou seja, quantas notas distintas podem ocorrer em cada uma:

Type	#Notes
Main_Accords	22
Top_Notes	2430
Middle_Notes	2629
Base_Notes	1835

Com exceção de `Main_Accords`, com 22 notas de fragância, as variáveis olfativas possuem um domínio de notas na casa de 10^3 possibilidades. Com isso, vamos restringir nosso modelo às características principais de cada perfume.

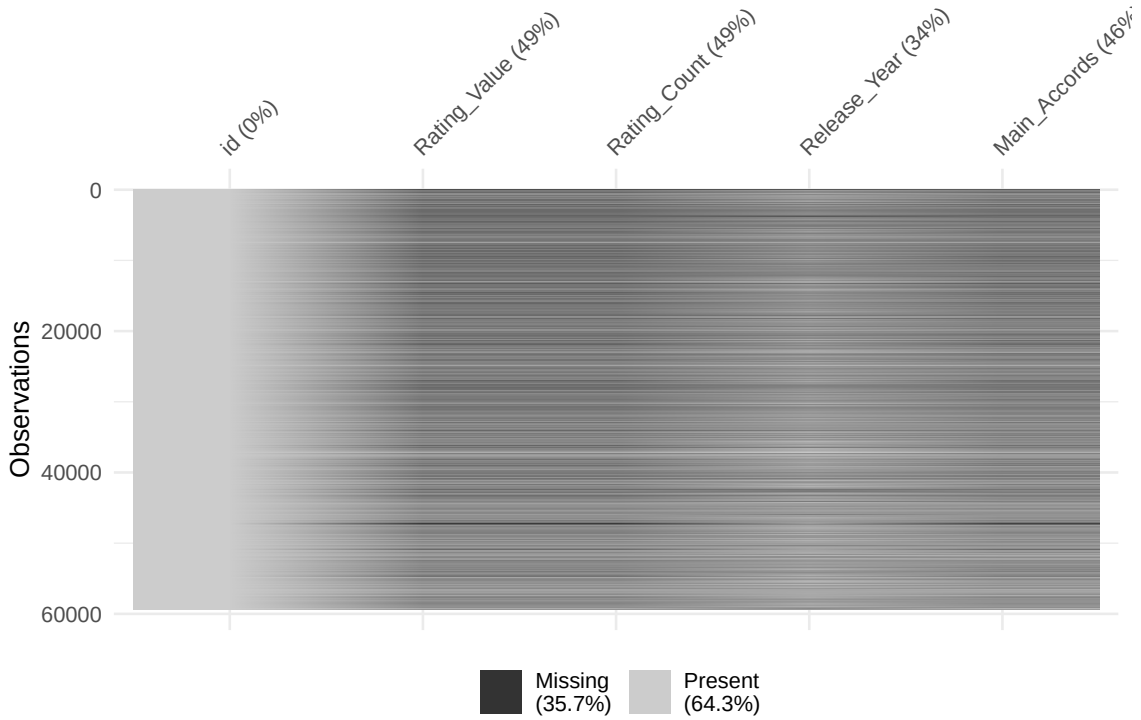
O gráficos abaixo resumem a ocorrência de *missings* no conjunto de dados:



Note que `Main_Accords` ocorre apenas em 54% dos dados. Além disso, `Concentration` está ausente em 79% deles, e `Perfumers` em 65%. Apenas `Release_Year`, `Rating_Count`, `Rating_Value` e `Brand` possuem presença que talvez não seja limitante à `Main_Notes` (Note que `Number` é irrelevante).

Vamos usar `Name`, `Brand` e `URL` como chave primária, e filtrar `Concentration` e `Perfumers` dos dados. (Lembrando que `Brand` possui domínio da ordem de 10^3 possibilidades, vamos ignorá-la porquanto pode fragmentar excessivamente os dados):

Agora, temos o seguinte gráfico de *missings*:



Vamos alterar `Release_Year` para `Years_Older` por ser mais intuitivo:

```
df_years <- df_cleaned %>%
  mutate(Years_Older = as.integer(format(Sys.Date(), "%Y")) - Release_Year) %>%
  select(-Release_Year)
```

Ao filtrarmos os *missings* e transformarmos `Main_Accords` desdobrando-a em variáveis binárias, uma para cada nota olfativa via *one-hot encoding*, temos o seguinte resultado resumido:

Table 3: Data summary

Name	input_table
Number of rows	23389
Number of columns	26
Column type frequency:	
numeric	26
Group variables	None

Variable type: numeric

skim_variable	n_missing	complete_rate	mean	sd	p0	p25	p50	p75	p100	hist
id	0	1	31911.82	16812.12	1.0	17941.0	33030.0	46659.0	59286	
Note_Floral	0	1	0.58	0.49	0.0	0.0	1.0	1.0	1	
Note_Fresh	0	1	0.49	0.50	0.0	0.0	0.0	1.0	1	
Note_Fruity	0	1	0.38	0.48	0.0	0.0	0.0	1.0	1	
Note_Green	0	1	0.26	0.44	0.0	0.0	0.0	1.0	1	
Note_Spicy	0	1	0.54	0.50	0.0	0.0	1.0	1.0	1	
Note_Citrus	0	1	0.26	0.44	0.0	0.0	0.0	1.0	1	

skim_variable	n_missing	complete_rate	mean	sd	p0	p25	p50	p75	p100	hist
Note_Earthy	0	1	0.06	0.23	0.0	0.0	0.0	0.0	1	
Note_Smoky	0	1	0.09	0.28	0.0	0.0	0.0	0.0	1	
Note_Woody	0	1	0.49	0.50	0.0	0.0	0.0	1.0	1	
Note_Aquatic	0	1	0.09	0.28	0.0	0.0	0.0	0.0	1	
Note_Creamy	0	1	0.13	0.33	0.0	0.0	0.0	0.0	1	
Note_Sweet	0	1	0.53	0.50	0.0	0.0	1.0	1.0	1	
Note_Synthetic	0	1	0.20	0.40	0.0	0.0	0.0	0.0	1	
Note_Animal	0	1	0.05	0.22	0.0	0.0	0.0	0.0	1	
Note_Oriental	0	1	0.17	0.37	0.0	0.0	0.0	0.0	1	
Note_Resinous	0	1	0.11	0.31	0.0	0.0	0.0	0.0	1	
Note_Leathery	0	1	0.07	0.26	0.0	0.0	0.0	0.0	1	
Note_Powdery	0	1	0.23	0.42	0.0	0.0	0.0	0.0	1	
Note_Gourmand	0	1	0.12	0.32	0.0	0.0	0.0	0.0	1	
Note_Chypre	0	1	0.04	0.19	0.0	0.0	0.0	0.0	1	
Note_Fougère	0	1	0.02	0.12	0.0	0.0	0.0	0.0	1	
Rating_Value	0	1	7.32	0.85	0.9	6.9	7.4	7.9	10	
Rating_Count	0	1	73.36	129.51	2.0	9.0	27.0	79.0	2732	
Years_Older	0	1	14.45	16.41	0.0	6.0	10.0	17.0	315	
Note_Count	0	1	4.87	0.52	1.0	5.0	5.0	5.0	5	

Agora, vamos realizar uma regressão linear para verificar a importância das variáveis:

```
data <- input_table %>%
  select(-id)

linear_model <- lm(Rating_Value ~ ., data = data)
print(tidy(linear_model), n = Inf)
```

```
## # A tibble: 25 x 5
##    term            estimate std.error statistic  p.value
##    <chr>              <dbl>     <dbl>     <dbl>    <dbl>
##  1 (Intercept)     7.12     0.0476      150.    0
##  2 Note_Floral     0.0591   0.0871        0.678 4.98e- 1
##  3 Note_Fresh     -0.0772   0.0870       -0.887 3.75e- 1
##  4 Note_Fruity    -0.0522   0.0870       -0.600 5.49e- 1
##  5 Note_Green      0.134    0.0870        1.54  1.24e- 1
##  6 Note_Spicy      0.123    0.0870        1.41  1.57e- 1
##  7 Note_Citrus     0.0644   0.0870        0.740 4.59e- 1
##  8 Note_Earthy     0.0785   0.0892        0.880 3.79e- 1
##  9 Note_Smoky      0.120    0.0882        1.36  1.73e- 1
## 10 Note_Woody      0.100    0.0869        1.15  2.48e- 1
## 11 Note_Aquatic   -0.101    0.0881       -1.14  2.53e- 1
## 12 Note_Creamy     0.391    0.0874        4.47  7.76e- 6
## 13 Note_Sweet      0.0450   0.0869        0.518 6.05e- 1
## 14 Note_Synthetic -0.520    0.0870       -5.97  2.35e- 9
## 15 Note_Animal     0.224    0.0893        2.51  1.21e- 2
## 16 Note_Oriental   0.256    0.0873        2.93  3.36e- 3
## 17 Note_Resinous   0.184    0.0877        2.10  3.56e- 2
## 18 Note_Leathery   0.223    0.0886        2.51  1.20e- 2
## 19 Note_Powdery    0.0934   0.0872        1.07  2.84e- 1
## 20 Note_Gourmand   0.0702   0.0880        0.797 4.25e- 1
## 21 Note_Chypre     0.421    0.0905        4.65  3.31e- 6
```

```
## 22 Note_Fougère    0.170    0.0943        1.81  7.07e- 2
## 23 Rating_Count    0.000575 0.0000391    14.7   1.01e-48
## 24 Years_Older     0.000982 0.000325      3.02  2.53e- 3
## 25 Note_Count     -0.0239   0.0868       -0.276 7.83e- 1
```

3 Modelagem

Nosso objetivo é encontrar $\hat{y} := f(X) + \epsilon$, em que $\hat{y}$ é a predição para $y \in [0, 10] \subseteq \mathbb{R}$, a avaliação de um perfume. Logo, temos um problema de **regressão**. Para isso, vamos usar **Elastic Net**, **Gradient Boosting** e **Support Vector Machines**.

Para reprodutibilidade, vamos fixar a semente usada para geração de números pseudoaleatórios:

```
seed <- 42
set.seed(seed)
```

Os dados são divididos em conjuntos de treinamento e teste com:

```
data <- input_table %>%
  select(-id)

data_split <- initial_split(data, prop = 0.8)
train_data <- training(data_split)
test_data <- testing(data_split)
```

Os dados precisam ser normalizados. Neste caso, apenas as variáveis numéricas não binárias:

```
recipe_spec <- recipe(Rating_Value ~ ., data = data) %>%
  # step_normalize(Rating_Count, Years_Older, Note_Count)
  step_normalize(all_predictors())
```

Para comparação, usamos o modelos **Naive Mean** e **Naive Median**, dados a seguir:

```
# Calculate naive mean
naive_mean <- train_data %>%
  summarise(naive_mean = mean(Rating_Value))

print(naive_mean)
```

```
## # A tibble: 1 x 1
##   naive_mean
##        <dbl>
## 1       7.32
```

```
# Calculate naive median
naive_median <- train_data %>%
  summarise(naive_median = median(Rating_Value))

print(naive_median)
```

```
## # A tibble: 1 x 1
##   naive_median
##          <dbl>
## 1          7.4
```

```
rmse_mean <- test_data %>%
  summarise(rmse_mean = sqrt(mean((Rating_Value - naive_mean$naive_mean)^2)))
```

```r
# Calculate RMSE for naive median model
rmse_median <- test_data %>%
  summarise(rmse_median = sqrt(mean((Rating_Value - naive_median$naive_median)^2)))

print(rmse_mean)
```

```
## # A tibble: 1 x 1
##   rmse_mean
##       <dbl>
## 1     0.845
```

```r
print(rmse_median)
```

```
## # A tibble: 1 x 1
##   rmse_median
##         <dbl>
## 1       0.849
```

3.1 Elastic Net

```r
elastic_net_spec <-
  linear_reg(penalty = tune(), mixture = tune()) %>%
  set_engine("glmnet") %>%
  set_mode("regression")
```

```r
workflow_spec <- workflow() %>%
  add_recipe(recipe_spec) %>%
  add_model(elastic_net_spec)
```

```r
# Define a grid of hyperparameters to tune
grid_spec <- grid_regular(
  penalty(range = c(-5, 5)),    # Range for lambda (penalty)
  mixture(range = c(0, 1)),      # Range for alpha (mixture)
  levels = 10                    # 5 levels for each parameter
)

# Perform cross-validation for hyperparameter tuning
cv_folds <- vfold_cv(train_data, v = 5)  # 5-fold cross-validation

# Tune the model using the grid of hyperparameters
tuned_results <- tune_grid(
  workflow_spec,
  resamples = cv_folds,
  grid = grid_spec,
  metrics = metric_set(rmse)
)
```

```r
# View the best hyperparameters
best_params <- tuned_results %>%
  select_best()

print(best_params)
```

```
## # A tibble: 1 x 3
##   penalty mixture .config
```

```
##     <dbl>   <dbl> <chr>
## 1 0.00001   0.111 Preprocessor1_Model011
```

```
# Finalize the workflow with the best parameters
final_workflow <- workflow_spec %>%
  finalize_workflow(best_params)

# Fit the final model on the full training data
final_model <- fit(final_workflow, data = train_data)

# Evaluate the model on the test set
test_results <- predict(final_model, test_data) %>%
  bind_cols(test_data %>% select(Rating_Value)) %>%
  metrics(truth = Rating_Value, estimate = .pred)

print(test_results)
```

```
## # A tibble: 3 x 3
##   .metric .estimator .estimate
##   <chr>   <chr>          <dbl>
## 1 rmse    standard       0.741
## 2 rsq     standard       0.230
## 3 mae     standard       0.543
```

3.2 Gradient Boosting

```
# Define the Gradient Boosting model specification
boosting_spec <- boost_tree(
  trees = tune(),          # Number of trees
  learn_rate = tune(),     # Learning rate
  tree_depth = tune(),     # Maximum tree depth
  min_n = tune(),          # Minimum number of observations in a node
  loss_reduction = tune()  # Minimum loss reduction (gamma in xgboost)
) %>%
  set_engine("xgboost") %>%
  set_mode("regression")
```

```
# Define the workflow
workflow_spec <- workflow() %>%
  add_recipe(recipe_spec) %>%
  add_model(boosting_spec)
```

```
# Define a grid of hyperparameters to tune
grid_spec <- grid_random(
  trees(range = c(50, 500)),            # Number of trees
  learn_rate(range = c(0.01, 0.3)),     # Learning rate
  tree_depth(range = c(3, 10)),         # Maximum tree depth
  min_n(range = c(2, 20)),              # Minimum number of observations in a node
  loss_reduction(range = c(0, 10)),     # Minimum loss reduction
  size = 2                             # Number of random combinations
)

# Create cross-validation folds
cv_folds <- vfold_cv(train_data, v = 5)  # 5-fold cross-validation
```

```r
# Tune the model using the hyperparameter grid
tuned_results <- tune_grid(
  workflow_spec,
  resamples = cv_folds,
  grid = grid_spec,
  metrics = metric_set(rmse)  # Use RMSE as the evaluation metric
)

# View the tuning results
tuned_results
```

```
## # Tuning results
## # 5-fold cross-validation
## # A tibble: 5 x 4
##   splits               id    .metrics          .notes
##   <list>               <chr> <list>            <list>
## 1 <split [14968/3743]> Fold1 <tibble [2 x 9]> <tibble [0 x 3]>
## 2 <split [14969/3742]> Fold2 <tibble [2 x 9]> <tibble [0 x 3]>
## 3 <split [14969/3742]> Fold3 <tibble [2 x 9]> <tibble [0 x 3]>
## 4 <split [14969/3742]> Fold4 <tibble [2 x 9]> <tibble [0 x 3]>
## 5 <split [14969/3742]> Fold5 <tibble [2 x 9]> <tibble [0 x 3]>
```

```r
# View the best hyperparameters
best_params <- tuned_results %>%
  select_best()

print(best_params)
```

```
## # A tibble: 1 x 6
##   trees min_n tree_depth learn_rate loss_reduction .config
##   <int> <int>      <int>      <dbl>          <dbl> <chr>
## 1   379    15          8       1.15          4365. Preprocessor1_Model1
```

```r
# Finalize the workflow with the best parameters
final_workflow <- workflow_spec %>%
  finalize_workflow(best_params)

# Fit the final model on the full training data
final_model <- fit(final_workflow, data = train_data)

# Evaluate the model on the test set
test_results <- predict(final_model, test_data) %>%
  bind_cols(test_data %>% select(Rating_Value)) %>%
  metrics(truth = Rating_Value, estimate = .pred)

print(test_results)
```

```
## # A tibble: 3 x 3
##   .metric .estimator .estimate
##   <chr>   <chr>          <dbl>
## 1 rmse    standard       0.845
## 2 rsq     standard      NA
## 3 mae     standard       0.630
```

3.3 Support Vector Machines

```
# Define the SVM model specification
svm_spec <- svm_rbf(
  cost = tune(),   # Cost (regularization parameter)
  rbf_sigma = tune() # Sigma (kernel parameter for RBF)
) %>%
  set_engine("kernlab") %>%
  set_mode("regression")
```

```
# Define the workflow
workflow_spec <- workflow() %>%
  add_recipe(recipe_spec) %>%
  add_model(svm_spec)
```

```
# Define a grid of hyperparameters to tune
grid_spec <- grid_regular(
  cost(range = c(-2, 2)),     # Cost range (log scale)
  rbf_sigma(range = c(-2, 2)), # Sigma range (log scale)
  levels = 1                  # Number of levels for each parameter
)

# Create cross-validation folds
cv_folds <- vfold_cv(train_data, v = 5)  # 5-fold cross-validation

# Tune the model using the hyperparameter grid
tuned_results <- tune_grid(
  workflow_spec,
  resamples = cv_folds,
  grid = grid_spec,
  metrics = metric_set(rmse)  # Use RMSE as the evaluation metric
)

# View the tuning results
tuned_results
```

```
## # Tuning results
## # 5-fold cross-validation
## # A tibble: 5 x 4
##   splits               id    .metrics         .notes
##   <list>               <chr> <list>           <list>
## 1 <split [14968/3743]> Fold1 <tibble [1 x 6]> <tibble [0 x 3]>
## 2 <split [14969/3742]> Fold2 <tibble [1 x 6]> <tibble [0 x 3]>
## 3 <split [14969/3742]> Fold3 <tibble [1 x 6]> <tibble [0 x 3]>
## 4 <split [14969/3742]> Fold4 <tibble [1 x 6]> <tibble [0 x 3]>
## 5 <split [14969/3742]> Fold5 <tibble [1 x 6]> <tibble [0 x 3]>
```

```
# View the best hyperparameters
best_params <- tuned_results %>%
  select_best()

print(best_params)
```

```
## # A tibble: 1 x 3
##    cost rbf_sigma .config
##   <dbl>     <dbl> <chr>
```

```
## 1  0.25      0.01 Preprocessor1_Model1
```

```r
# Finalize the workflow with the best parameters
final_workflow <- workflow_spec %>%
  finalize_workflow(best_params)

# Fit the final model on the full training data
final_model <- fit(final_workflow, data = train_data)

# Evaluate the model on the test set
test_results <- predict(final_model, test_data) %>%
  bind_cols(test_data %>% select(Rating_Value)) %>%
  metrics(truth = Rating_Value, estimate = .pred)

print(test_results)
```

```
## # A tibble: 3 x 3
##   .metric .estimator .estimate
##   <chr>   <chr>          <dbl>
## 1 rmse    standard       0.726
## 2 rsq     standard       0.269
## 3 mae     standard       0.525
```

4 Análise dos resultados

5 Conclusões

6 Anexos