# PRÁCTICAS (APARTADO III)

## Análisis, Diseño y Procesamiento de Datos Aplicados a las Ciencias y a las Tecnologías(ADP)

Máster Universitario en Inteligencia Computacional e Internet de las Cosas

Universidad de Córdoba, EPSC 2022/2023



#### **Autor:**

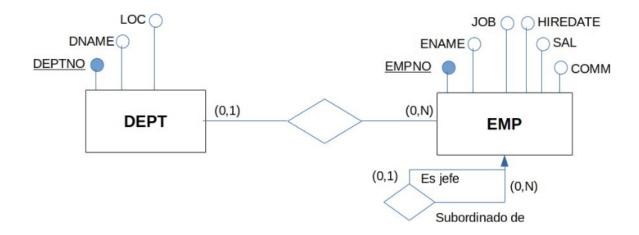
Antonio Gómez Giménez (<u>i72qoqia@uco.es</u>)

## <u>Índice:</u>

FASE 1: SOLUCIÓN NOSQL MONGODB 1. Apartado 1 y 2 - Creación del esquema/Carga de información: 2. Apartado 3 - Consultas a la información:	2 3 7		
		FASE 2: APLICACIONES CIENTÍFICAS Y EMPRESARIALES (I)	11
		2.1. Parte 1:	12
2.2. Parte 2:	14		

### **FASE 1: SOLUCIÓN NOSQL MONGODB**

El objetivo de esta fase es afianzar los conocimientos impartidos en la parte teórica de la asignatura sobre el uso de la solución NoSQL MongoDB. Para ello se pedía realizar el siguiente esquema entidad-interrelación:



Para ello se realizaron los dos siguientes pasos, la creación del esquema y carga de la información, y posteriormente, la realización de diferentes consultas para comprobar el correcto funcionamiento de la misma.

## 1. Apartado 1 y 2 - Creación del esquema/Carga de información:

Para la realización y carga de datos se planificó usar como estructura las siguientes dos colecciones:

La colección departamento donde nos encontraríamos el siguiente documento de ejemplo:

DEPT: id: nº ID

DNAME: "Nombre del Departamento" LOC: "Localización del Departamento"

EMP:

\_id: nº ID

ENAME: "Nombre del Empleado" JOB: "Trabajo del empleado"

HIREDATE: Isodate con la fecha de contratación

SAL: Número con el salario del empleado

COMM: "atributo cuyo valor va a ser siempre temp"

DEPARTAMENTO: id del departamento que pertenece el empleado Es\_JEFE: array con el id de los empleados de los cuales es jefe Es subordinado: id del empleado que es jefe para este empleado

Una vez planteada la estructura general, se realiza el código para la conexión de la bd y creación de ambas colecciones.

En la imagen anterior se puede apreciar que se han creado dos modos de funcionamiento para el programa, el modo 0 para la creación e inserción de datos y el modo 1 para la realización de peticiones para comprobar el funcionamiento del programa.

También se puede apreciar cómo se realiza la conexión con mongo en la nube y se pregunta al usuario si desea eliminar alguna bd, por si quiere crear las colecciones de 0.

```
#añadir salario y comm atributo prescindible

#creo vectores con datos aleatorios

wName = ["I+0+T", "Recursos Humanos", "Relaciones Internacionales", "Gestion Economica", "Secretaria Tecnica", "Marketing"]

vLoc = ["Espiel", "Cordoba", "Belmez", "Pozoblanco", "FuenteOvejuna", "Villanueva del Rey"]

vEName = ["Antonio Gomez Gimenez", "Rafael Hormigo Cabello", "Alejandro Garcia Garcia", "Juanma Gomez Morales", "Imanol Rubio Plata",

"Clara Martinez Rodrigez", "Pilar Grande Romero", "Ana Garcia Fernandez", "Marta Diaz Pedrajas", "Lucia Ruiz Cid"]

vJOB = ["Informatico", "Electricista", "Contable", "Gestor", "Secretario", "Tecnico", "Fontanero", "Director"]

vSAL = [1000, 1500, 2000, 2500, 3000, 4000, 5000, 5500]

vHIREDATE = [datetime.strptime("2014-10-21", '%Y-%m-%d'),datetime.strptime("2017-9-13", '%Y-%m-%d'),datetime.strptime("2022-3-27", '%Y-model")
```

En la imagen anterior se pueden ver una serie de vectores que se han utilizado para la creación aleatoria de datos. Es decir, se crean unos vectores con datos predefinidos y aleatoriamente se accede a dichos datos.

Primero se comprueba si la bd está ya creada y posteriormente se extrae la lista con las colecciones existentes en dicha bd. Posteriormente se comprueba si ya existía en la lista la colección DEPT. Si existe se extrae la colección, sino, se crea la colección con los vectores aleatorios de datos.

```
print("La coleccion EMP existe.");
EMPColeccion = database.get_collection("EMP");
#coleccion EMP
bdpractical.create_collection("EMP")
EMPColeccion = bdpractical.get collection("EMP")
# 3- Insertar datos en las colecciones
   #referencia cambiada por id de la collecion referida #{"$ref": "DEPT", "$_id": random.randint(0,
mydict = {"_id": x, "ENAME": vEName[random.randint(0, 9)], "JOB": vJOB[random.randint(0, 7)], "H
EMPColeccion.insert_one(mydict)
for x in range(100):
    #referencias cambiada por id de la collecion referida #{"$ref": "EMP", "$ id": valoraleatoriox}
    valoraleatorio = random.randint(0, 99)#para subordinado
valoraleatorio2 = random.randint(0, 99)#para jefe
    valoraleatorio3 = random.randint(1, 5)
vecSubordinados = []
     for w in range(valoraleatorio3):
         valoraleatorio4 = random.randint(0, 99)
          while valoraleatorio4 == x:#compruebo que no sea el mismo valoraleatorio4 = random.randint(0, 99)
          vecSubordinados.append(valoraleatorio4)
         if valoraleatorio2 == x:
              mydict = {"$set": {"Es_JEFE": "", "Es_subordinado": ""}}
              mydict = {"$set": {"Es JEFE": valoraleatorio2, "Es subordinado": ""}}
          if valoraleatorio2 == x:
              mydict = {"$set": {"Es_JEFE": "", "Es_subordinado": valoraleatorio2}}
               mydict = {"$set": {"Es_JEFE": vecSubordinados, "Es_subordinado": valoraleatorio2}}
     EMPColeccion.update one(query, mydict)
```

En la imagen anterior el concepto es similar a la imagen de creación de la colección DEPT pero para la colección EMP. La diferencia es que para asignar los id que hacen referencia tanto a otros empleados como el departamento hay que tener en cuenta que no se repita el mismo id para el mismo empleado y que un empleado puede ser jefe de 0 o n empleados. Teniendo todo esto en cuenta, se creó el código anterior.

El resto del código hace referencia al apartado siguiente.

Algunos ejemplos de datos para las dos colecciones son los siguiente:

```
QUERY RESULTS: 1-20 OF MANY
            id: 0
           DNAME: "Relaciones Internacionales"
           LOC: "Belmez"
            id: 1
           DNAME: "Gestion Economica"
           LOC: "Espiel"
            _id: 2
           DNAME: "Secretaria Tecnica"
           LOC: "Belmez"
    < PREVIOUS
                                                                                    1-20 of many results
 ENAME: "Lucia Ruiz Cid"
 JOB: "Contable"
 HIREDATE: 2022-03-27T00:00:00.000+00:00
 SAL: 5000
 COMM: "temp"
DEPARTAMENTO: 44

✓ Es_JEFE: Array
    0: 62
   1: 11
   2: 88
    3: 29
 Es_subordinado: 66
 ENAME: "Juanma Gomez Morales"
 JOB: "Secretario"
 HIREDATE: 2022-03-27T00:00:00.000+00:00
 SAL: 3000
 COMM: "temp"
REVIOUS
                                                                                  1-20 of many results
```

#### 2. Apartado 3 - Consultas a la información:

En este apartado, se creó el modo 1 para realizar distintas consultas y comprobar los resultados para ver si la bd funcionaba correctamente. Las consultas son las siguientes:

Primeramente se realizaron tres peticiones usando find\_one, donde la primera petición nos da el primer encuentro. La segunda petición devuelve el primer encuentro con recursos humanos y devuelve todo menos la localidad. La tercera petición devuelve el primer encuentro con el id 47 dando la localidad. Los resultados son los siguientes:

```
antoniogg@antoniogg-SATELLITE-L50D-C:~/Escritorio/adp/Practica1$ python3.8 ./Pra
ctica1.py -m1
Consultas a la informacion
{'_id': 0, 'DNAME': 'Relaciones Internacionales', 'LOC': 'Belmez'}
{'_id': 3, 'DNAME': 'Recursos Humanos'}
{'_id': 47, 'LOC': 'FuenteOvejuna'}
```

Posteriormente se realizaron las siguientes consultas:

La primera devuelve los resultados que coinciden con el id 24 o 11 y la segunda, devuelve los resultados cuyo localidad es Espiel y su id está entre 40 y 10. Los resultados son los siguientes:

```
{'_id': 11, 'DNAME': 'Secretaria Tecnica', 'LOC': 'Villanueva del Rey'}
{'_id': 24, 'DNAME': 'Relaciones Internacionales', 'LOC': 'Villanueva del Rey'}

{'_id': 12, 'DNAME': 'Recursos Humanos', 'LOC': 'Espiel'}
{'_id': 14, 'DNAME': 'Secretaria Tecnica', 'LOC': 'Espiel'}
{'_id': 18, 'DNAME': 'Marketing', 'LOC': 'Espiel'}
{'_id': 20, 'DNAME': 'Recursos Humanos', 'LOC': 'Espiel'}
{'_id': 21, 'DNAME': 'Relaciones Internacionales', 'LOC': 'Espiel'}
{'_id': 25, 'DNAME': 'I+D+I', 'LOC': 'Espiel'}
```

Posteriormente se realizaron las siguientes consultas:

La primera devuelve los resultados cuyo nombre es Relaciones Internacionales y no se encuentran en Espiel y la segunda, devuelve de la colección empleados, las personas que se llaman Juanma o son gestores o contables y devuelvo solo el id. Los resultados son los siguientes:

```
{'_id': 0, 'DNAME': 'Relaciones Internacionales', 'LOC': 'Belmez'}
{'_id': 15, 'DNAME': 'Relaciones Internacionales', 'LOC': 'Cordoba'}
{'_id': 24, 'DNAME': 'Relaciones Internacionales', 'LOC': 'Villanueva del Rey'}
{'_id': 41, 'DNAME': 'Relaciones Internacionales', 'LOC': 'Belmez'}
{'_id': 49, 'DNAME': 'Relaciones Internacionales', 'LOC': 'Pozoblanco'}
```

Para la primera colección.

```
5}
': 8}
 : 12}
': 13}
': 15}
': 16}
': 19}
': 31}
': 32}
': 34}
': 36}
': 40}
': 47}
': 48}
: 50}
   56}
   58}
   591
```

Para la segunda colección, cabe destacar que hay aún más id que coinciden con esta búsqueda.

Finalmente, se realizó la última consulta:

En esta consulta se busca la información de todas las personas que se llaman Marta Díaz Pedrajas y su trabajo comienza por G. El resultado es el siguiente:

```
{'_id': 0, 'ENAME': 'Marta Diaz Pedrajas', 'JOB': 'Gestor', 'HIREDATE': datetime .datetime(2017, 9, 13, 0, 0), 'SAL': 4000, 'COMM': 'temp', 'DEPARTAMENTO': 4, 'E s_JEFE': [98, 7, 3, 65], 'Es_subordinado': 34} {'_id': 62, 'ENAME': 'Marta Diaz Pedrajas', 'JOB': 'Gestor', 'HIREDATE': datetim e.datetime(2023, 1, 17, 0, 0), 'SAL': 1000, 'COMM': 'temp', 'DEPARTAMENTO': 27, 'Es_JEFE': [38], 'Es_subordinado': 96}
```

# FASE 2: APLICACIONES CIENTÍFICAS Y EMPRESARIALES (I)

Para la realización de dicha práctica se ha dividido el trabajo en dos partes. La primera parte realiza la obtención de los datos de la bd que se encuentra en la nube de Atlas y realiza el procesamiento necesario para la creación de un fichero de texto con los datos necesarios, y la segunda parte, realiza toda la parte relacionada con la creación y desarrollo del modelo.

El objetivo de dicha práctica es utilizar las bases de datos de compuestos del ejemplo práctico desarrollado en la parte teórica de la asignatura, implementar el código python necesario para predecir(clasificación) el tipo de actividad biológica (Active/Inactive).

#### 2.1. Parte 1:

Para la realización de la primera parte, primeramente se han subido a mongo Atlas las dos bases de datos de prueba. En la siguiente imagen se pueden apreciar las dos bases de datos:



Una vez realizada la subida de los datos a la nube, es necesario extraer los datos de la bd que vamos a utilizar, para ello se creó el fichero GenerarCsv.py que genera un fichero donde se encuentran los datos a utilizar. Principalmente se crea un fichero Dataset.csv porque a la hora de trabajar sobre los datos de la bd, los tiempos de trabajo son demasiado grandes, aparte es necesario que la matriz con la estructura de los datos sea int8, ya que sino, la memoria del programa aumenta de tal forma que el proceso es parado por el propio sistema operativo.

El código es el siguiente:

En la imagen anterior se realiza la conexión con la bd y la creación de dos matrices donde se almacenará un matriz de input para el modelo y de outputs. Siendo los inputs una matriz de tamaño, la cantidad de documentos por 1024, con valores 0 o 1, dependiendo de la molécula. Respecto a los outputs, es una columna de tamaño, la cantidad de documentos, almacenando 0 si la molécula es inactiva y 1 si es activa.

Para la creación del Dataset final que se almacena y la creación de dichas matrices, se realizó el siguiente código:

```
print(pdEntrada.shape)

iterador = 0

result = db.molecules.find({},{"_id": 0, "mfp.bits": 1, "class":1})

for i in result:
    for posicion in i['mfp']['bits']:
    pdEntrada[posicion][iterador] = 1
    if i['class'] == "Active":
    pdSalida[0][iterador] = 1
    iterador = iterador + 1
    result = []

dataset = pd.concat([pdEntrada, pdSalida], axis=1)

dataset.to_csv('Dataset.csv',index=False)
#eliminar linea de index que se genera

client.close();
```

Como podemos ver en la imagen, se realiza la petición find y sobre la propia petición, se almacenan los 1 en los lugares donde se nos indique en la petición. Una vez tenemos las dos matrices, se concatenan en una sola y se guardan en Dataset.csv.

Cabe destacar que en dicho fichero se genera una línea de índice, es necesario eliminarla para que en el fichero encargado del modelo funcione correctamente.

#### 2.2. Parte 2:

Para la realización de la segunda parte, se creó el fichero modelo.py, que almacena los mejores modelos entrenados, genera unos ficheros de información de cada modelo durante el entrenamiento con los resultados de cada combinación de parámetros, y comenta cual es el mejor modelo para el fichero Dataset.csv.

Para la realización del código, se decidió utilizar tres tipos de modelos:

- **SVM**. Máquinas de Vectores soporte, muy buenos para problemas de clasificación de solo dos tipos de resultado, en nuestro caso, si o no.
- Árboles de decisión. Buenos para problemas de clasificación de dos clases o más, se decidió usar dicho modelo por su fácil entendimiento.
- Random Forest. Un ensemble de árboles de decisión, se introdujo este modelo para comprobar si, a mayor número de árboles, se realiza una mejora sobre el modelo resultante.

Para comprobar el entrenamiento de los modelos y la validez de los mismos, se usó el CCR (Correct Classification Rate), que nos da como valor, cuantos valores ha predicho correctamente el modelo frente a los que realmente son.

Para poder validar los modelos es necesario que dichos datos no se utilicen en el entrenamiento, ya que sería algo similar a hacer trampa, que el propio modelo conoce los resultados que deberían dar al haber entrenado con dichos datos.

Para dar mayor robustez a los modelos se realizó un k-fold de 5 para permitir entrenar con 5 conjuntos de datos distintos y almacenar la media del conjunto.

Para la realización de dicho código, se realizaron las siguientes funciones de ayuda:

#### Función read data:

La función anterior, dado un fichero, realiza la lectura del mismo y la división de los datos en un conjunto de train y test (con sus respectivos inputs y outputs). Cabe destacar, que la división de los datos se realiza de forma estratificada para evitar que algún conjunto sólo esté formado por valores activos o inactivos (y decaiga la eficiencia del modelo a entrenar o la validación del mismo).

#### Función guardar modelo:

Función sencilla que dado un modelo y un nombre para guardarlo, guarda el modelo en formato .pickle (por si se desea comprobar el funcionamiento del modelo).

#### Función entrenarSVR:

```
def entrenarSVR(train inputs, train outputs, test inputs, test outputs, input, output):
    mejor_mse = 9999999
mejor_C = 9999999
    mejor Gamma = 999999
    skf= StratifiedKFold(n splits=5)
    mejorconf=0
    for C in vector: #entrenamos probando distintas c v gammas
        for Gamma in vector:
            contador = 0
            media = 0
            print("C=%f y Gamma=%f" % (C, Gamma))
            for train_index, test_index in skf.split(train_inputs, test_inputs):
    entrada_train, entrada_test = input[train_index], input[test_index]
                 salida train, salida test = output[train index], output[test index]
                modelo = svm.SVC(kernel='rbf',C=C, gamma=Gamma)
                 modelo.fit(entrada train, salida train)
                 y_pred=modelo.predict(entrada_test)
                 test_ccr = (precision_score(salida_test, y_pred, average='micro'))*100
                 contador = contador + test ccr
             media = contador/5
             f.write("CCR Final con C=%f y G=%f: \t%f\n" % (C, Gamma, media))#lo vamos almacenando en un fichero
             if media > mejorconf:#se va guardando la mejor combinacion de parametros
                 mejorconf=media
                 mejor_C = C
                 mejor Gamma = Gamma
```

Esta función es similar a entrenarArbolDecision y entrenarRandomForest, ya que todas tienen la misma estructura pero con la diferencia de los parámetros de las funciones que utilizan los diferentes modelos.

Como podemos ver en las imágenes anteriores, se realiza la configuración de parámetros que se van a probar para la función del modelo, y se realiza un k-fold de 5 para dar mayor robustez. Para cada caso se realiza el entrenamiento, predicción y comprobar si ha sido el que ha dado el mejor resultado. Una vez se realizan todas las pruebas, se comprueba la validez del resultado que ha dado mejor CCR con los datos de test. Finalmente, se devuelve dicho resultado.

Cabe destacar, que en paralelo se van almacenando en un fichero los resultados de cada prueba y del mejor valor.

#### Función entrenarArbolDecision:

Similar al caso anterior.

#### Función entrenarRandomForest:

```
if media > mejorconf:#se va guardando la mejor combinacion de parametros

mejorconf=media
mejor_nestimators = n_estimators
mejor_min_samples_split = min_samples_split
mejor_min_samples leaf = min_samples_leaf
mejor_max_features = max_features

#Se realiza la validación del modelo
modelo = ensemble.RandomForestClassifier(min_weight_fraction_leaf=0.2, max_samples= 0.5, n_estimators=mejor_n_estimators, m
modelo.fit(train_inputs, test_inputs)
y_pred = modelo.predict(train_outputs)
test_ccr = (precision_score(test_outputs, y_pred, average='micro'))*100

#se almacena el modelo
guardar_modelo(modelo, "RandomForest")

f.write("Los mejores parametros para el random forest es n_estimators->"+ str(mejor_n_estimators) + "max_features->"+ str(mejor_n_estimators) + "max_fea
```

Similar al caso anterior.

#### Código principal:

El código principal, simplemente va llamando a las funciones creadas anteriormente y muestra el como resultado, aquel modelo que ha proporcionado un CCR con el mayor valor.

Para comprobar el funcionamiento de dicho programa, se muestran a continuación los ficheros generados y el resultado obtenido.

Los fichero generados son los siguientes:



Como podemos observar, se han generado los ficheros .pickle que almacenan los tres modelos y los ficheros con los resultados de las distintas configuraciones.

Y respecto al resultado del programa:

Si quisiéramos obtener mayor información del modelo, por ejemplo, SVM, miraríamos el fichero ResultadosParametrosSVR donde encontraríamos:

```
CCR Final con C=0.100000 y G=0.100000:
CCR Final con C=0.100000 y G=1.000000:
                                                76.382938
CCR Final con C=0.100000 y G=10.000000:
                                                      76.382938
                                                     76.382938
CCR Final con C=0.100000 y G=100.000000:
CCR Final con C=1.000000 y G=0.100000: 76.151241 CCR Final con C=1.000000 y G=1.000000: 76.418588
CCR Final con C=1.000000 y G=10.000000:
                                                      76.418588
CCR Final con C=1.0000000 y G=100.0000000:
                                                     76.418588
CCR Final con C=10.000000 y G=0.100000:
                                                      75.153388
CCR Final con C=10.000000 y G=1.000000:
                                                     76.400779
CCR Final con C=10.000000 y G=10.000000:
                                                     76.418588
CCR Final con C=10.0000000 y G=100.0000000:
                                                     76.418588
CCR Final con C=100.0000000 y G=0.100000:
                                                      75.153388
CCR Final con C=100.000000 y G=1.0000000:
                                                     76.400779
CCR Final con C=100.000000 y G=10.000000:
                                                      76.418588
CCR Final con C=100.000000 y G=100.000000: 76.418588
Los mejores parametros son C:1.0 y Gamma:1.0 con un CCR de 80.399144689950
```

Como podemos ver, se nos muestran los resultados obtenidos para cada combinación de parámetros, y el resultado de la mejor combinación probando su funcionamiento con los datos de test en la validación.

Tanto entrenarArbolDecision como entrenarRandomForest, generaban el mismo CCR de 76.3829. Esto se debe a que daban igual la configuración de parámetros introducidos al modelo, generaban los mismo resultados. Es decir, que un árbol de decisión para este dataset de datos generaba los mismos resultados y el ensemble al ser una agrupación de los mismos, arrastraba dicho problema.

Por lo tanto para este Dataset, no se recomienda el uso de estos dos modelos, se recomienda mejor el modelo SVR que genera un resultado mejor para este Dataset.

Cabe destacar que se intentó realizar un plot sobre svm. Pero al tener 1024 dimensiones de entrada sería difícil comprobar su funcionamiento, se suele usar estos plot para bd sintéticas con dos parámetros de entrada permitiendo observar en un plano 2d como se genera la línea que diferencia las dos clases. Ya que al incrementar el número de parámetros de entrada, entran en juego mayor número de planos. Si acaso se podría haber realizado un plot que compare los resultados generados por el modelo (svr ya que los otros carece de sentido) frente a los resultados reales por el test, pero con el propio CCR ya obtenemos el porcentaje de acierto del modelo, como mucho serviría para ver dónde ha fallado exactamente.

Como breve conclusión tras lanzar este programa, podemos decir que para el Dataset obtenido de la bd, podemos conseguir un modelo SVR con una tasa de acierto del 80.39%, teniendo en cuenta que con una tasa de entrenamiento mayor (mayor cantidad de pruebas y parámetros) o diferentes modelos, se podría obtener un resultado mayor, lógicamente sin llegar al sobre-entrenamiento.