Clasificación Vinos

Objetivo	1
Paso 1: Análisis Exploratorio EDA	1
Paso 2. Prueba de Algoritmos	5
Paso 3. Entrenamientos de Modelo	8
Support Vector Machine	8
Neural Net (MLPClassifier)	11
Naive Bayes	12
Nearest Neighbors	14
Predicciones de los modelos	16

Objetivo

El objetivo de este documento es registrar los analisis y los procesos realizados para clasificar Vinos, basado en el dataset que se encuentra en https://archive.ics.uci.edu/dataset/109/wine

Los datos en CSV pueden ser accedidos directamente desde:

Datos (CSV): https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/wine/wine.data

Dado que se trata de predecir una categoría en un listado de 3 opciones, usaremos algoritmos de Clasificación donde el objetivo es clasificar los distintos elementos de un conjunto de datos en varias categorías (3). agrupando los datos en función de su similitud. Como los conjuntos de datos tienen características comunes, es más fácil predecir su comportamiento.

Para el proceso se ha creado el libro en Databricks de la siguiente manera

Libro: Pre Analisis Wine Classification

Descripción: Este notebook consigna el codigo realizado para Exploratory Data Analysis y prueba de diferentes algoritmos de clasificación.

URL:

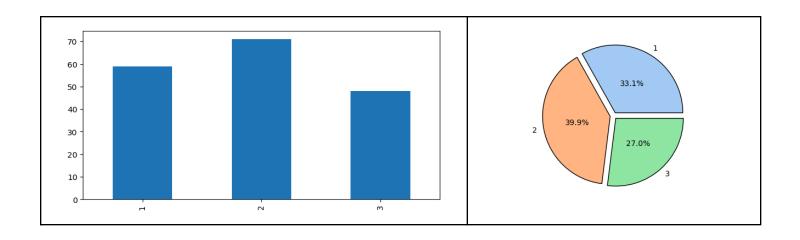
Paso 1: Análisis Exploratorio EDA

El dataset contiene:

Dónde **wine_class** es la variable de categoría (target) que viene en el dataset. Se decide nombrar con ese nombre para tenerla como referencia.

La distribución de la variable basada en la categoría del dataset viene de la siguiente manera

	wine_class
wine_class	
1	59
2	71
3	48

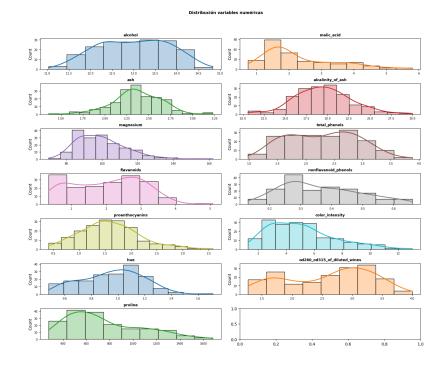


Evaluar Valores faltantes por columna:

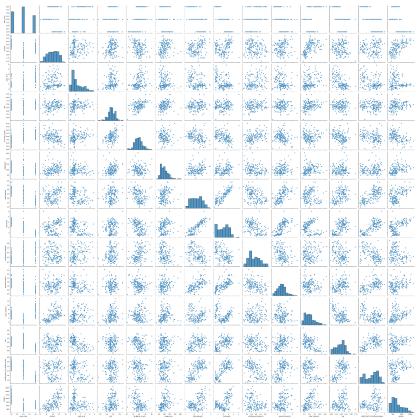
Se crea funcion para validar columna por columna su % de afectación en el dataset El dataset no contiene valores nulos o faltantes.

```
wine_class: 0.0%
alcohol: 0.0%
malic_acid: 0.0%
ash: 0.0%
alcalinity_of_ash: 0.0%
magnesium: 0.0%
total_phenols: 0.0%
flavanoids: 0.0%
nonflavanoid_phenols: 0.0%
proanthocyanins: 0.0%
color_intensity: 0.0%
hue: 0.0%
od280_od315_of_diluted_wines: 0.0%
proline: 0.0%
```

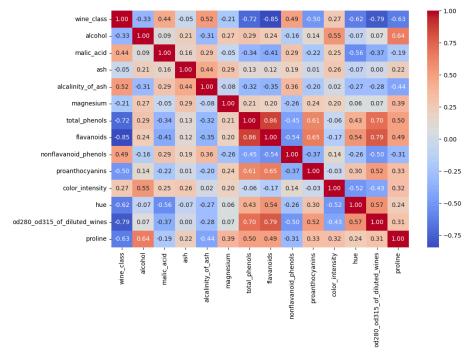
Con el objetivo de conocer la distribución de los valores por cada variable, se crea una grafica por cada variable que muestre la distribución de estas, usando histograma por cada una.



Graficamos luego mediante un diagrama de pares por cada variable, el objetivo es conocer la distribucion de los valores por cada una de estas, respecto a otra variable



Con este paso, buscamos conocer la relación entre las variables y cual de las variables tiene mas relacion con nuestra variable target, wine_class



Podemos ver que la relación más fuerte con la variable wine_class son **total_phenols**, **alcalinity_of_ash** y **nonflavanoid phenols**.

Sin embargo, la relacion mas fuerte entre variables se da entre **total_phenols** y **od280_od315_of_diluted_wines** y **od280_od315_of_diluted_wines** y **flavanoids**.

Paso 2. Prueba de Algoritmos

Con el objetivo de saber que modelo implementar, se realiza la prueba de varios algoritmos de Clasificación, teniendo presente que es un proceso de Multiclase.

Seleccionamos clasificación multiclase sobre clasificación multi etiqueta, dado que el objetivo es asignar instancias a una de varias clases o categorías predefinidas, **donde cada instancia pertenece exactamente a una clase**. Mientras que la clasificación multi etiqueta es una tarea donde cada instancia se puede asociar con **múltiples etiquetas simultáneamente**, lo que permite la asignación de múltiples etiquetas binarias a la instancia.

Dado que se trata de una sola clase a una instancia, evaluamos el proceso como clasificación multiclase.

Aunque lo ideal para algoritmos de clasificación es tener una gran cantidad de datos, por ahora entrenamos los datos que nos da el dataset.

La siguiente es la lista de algoritmos de clasificación que probaremos

- Logistic Regression
- Nearest Neighbors
- Linear SVM
- RBF SVM
- Gaussian Process
- Decision Tree
- Random Forest
- Neural Net
- Naive Bayes

El proceso se prueba de la siguiente manera

Se prueban con set de entrenamiento y pruebas de la siguiente manera:

Test_size toma los siguientes valores: 0.10, 0.15, 0.20, 0.25, 0.30 Donde

```
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=test_size)
```

Se itera sobre la cantidad de test_size que puede tomar, esto con el fin de valorar el accuracy de acuerdo al tamaño del set de entrenamiento y test.

Luego se itera por cada algoritmo y se guarda la información que permite mostrar de manera clara cómo son los valores de accuracy de entrenamiento, accuracy, precision y recall de los datos de test.

Ejemplo de la salida:

 Test Size: 0.1					
Modelo		Accuracy Train			
 Logistic Regression	0.1		1.0	1.0	1.0
Nearest Neighbors	0.1	1.0	1.0	1.0	1.0
Linear SVM	0.1	1.0	1.0	1.0	1.0
RBF SVM	0.1	0.555556	0.555556	0.185185	0.333333
Gaussian Process	0.1	1.0	1.0	1.0	1.0
Decision Tree	0.1	0.888889	0.888889	0.944444	0.833333
Random Forest	0.1	1.0	1.0	1.0	1.0
Neural Net	0.1	1.0	1.0	1.0	1.0
Naive Bayes	0.1	1.0	1.0	1.0	1.0
	+	-+	+	+	++

Test Size: 0.2

+	+				+	
Modelo	Test	Size	Accuracy Train	Accuracy Test	Precision Test	Recall Test
+	+					
Logistic Regression		0.2	0.944444	0.944444	0.939394	0.958333
Nearest Neighbors	1	0.2	0.916667	0.916667	0.914141	0.9375
Linear SVM		0.2	0.944444	0.944444	0.944444	0.958333
RBF SVM		0.2	0.444444	0.444444	0.148148	0.333333
Gaussian Process		0.2	0.944444	0.944444	0.948864	0.945833
Decision Tree		0.2	0.944444	0.944444	0.944444	0.958333
Random Forest		0.2	0.972222	0.972222	0.969697	0.979167
Neural Net		0.2	0.972222	0.972222	0.969697	0.979167
Naive Bayes		0.2	0.972222	0.972222	0.969697	0.979167
+	+				+	

Test Size: 0.3

+ Modelo				+ Precision Test	
+	 0.3	1.0	 1.0	+ 1.0	+ 1.0
Nearest Neighbors	0.3	0.925926	0.925926	0.936508	0.939394
Linear SVM	0.3	1.0	1.0	1.0	1.0
RBF SVM	0.3	0.407407	0.407407	0.135802	0.333333
Gaussian Process	0.3	0.944444	0.944444	0.953704	0.933333
Decision Tree	0.3	0.907407	0.907407	0.910234	0.917172
Random Forest	0.3	0.962963	0.962963	0.96633	0.962626
Neural Net	0.3	1.0	1.0	1.0	1.0
Naive Bayes	0.3	0.962963	0.962963	0.964015	0.965241

Notas:

Es posible notar como el accuracy varía con el tamaño del set de entrenamiento.

Podemos notar que se nos da accuracy del 100%, aunque puede parecer un ideal, y dado el set de datos tan pequeño, optamos por trabajar con el 80% para entrenamiento y el 20% para el test.

Nota: Cuando se obtiene una precisión del 100 %, lo más probable es que se trate de una forma de sobreajuste (overfitting), y eso es, en última instancia es un error.

Para evitar esto, se pueden usar técnicas como Cross Validation, sin embargo por temas de ser el ejercicio práctico, veremos eso en otro apartado.

Para más detalle seguir la implementación del libro.

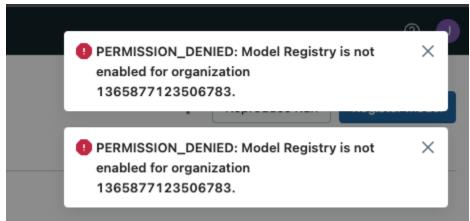
Paso 3. Entrenamientos de Modelo

Para el proceso, se han creado 4 notebooks con el objetivo de probar diferentes algoritmos.

El tamaño del dataset se define en 80% de entrenamiento y 20% para testing.

Basado en el proceso anterior, y teniendo presente que para problemas de Clasificación Multiclase, se seleccionan los siguientes algoritmos para entrenamiento y despliegue del dataset

NOTA: Debido a la versión community de Databricks, los modelos no se pueden registrar para despliegue via Web o usando línea de código más personalizado,



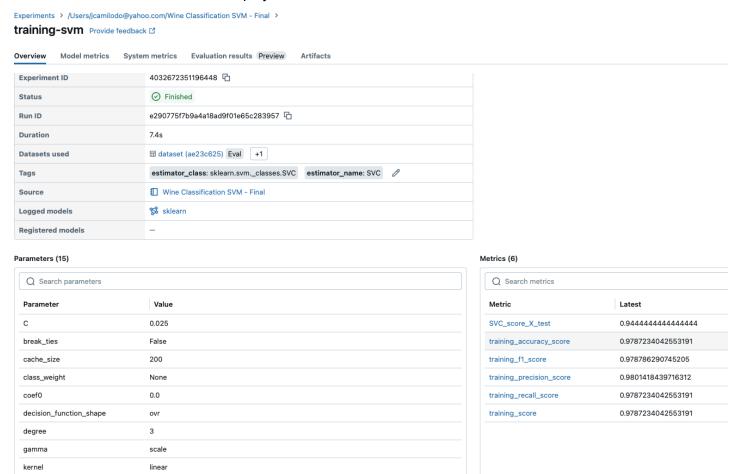
Se puede acceder via Experiment al modelo y ejecutarlo. Por este motivo, se crea un notebook para pruebas el cual puede accederse usando este link.

Support Vector Machine

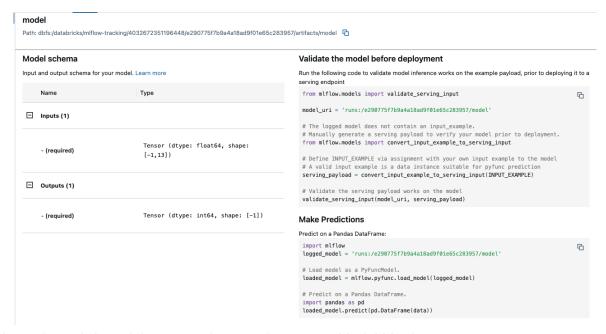
Se define el flujo dentro de MLFlow Se accede al notebook usando el siguiente <u>link</u>.

```
# mlflow.sklearn.autolog() requires mlflow 1.11.0 or above.
mlflow.sklearn.autolog()
# With autolog() enabled, all model parameters, a model score, and the fitted model are automatically logged.
with mlflow.start_run(run_name="training-svm"):
   wine_dataframe = read_data()
   wine_dataframe['wine_class'] = wine_dataframe.wine_class.replace({1: 0, 2: 1, 3: 2})
   X = wine_dataframe.iloc[: , 1:].values
    y = wine_dataframe.iloc[: ,0].values
   X\_train, X\_test, y\_train, y\_test = train\_test\_split(X, y, test\_size=0.2)
   sc=StandardScaler()
   X_train = sc.fit_transform(X_train)
   X_test = sc.fit_transform(X_test)
    run_id = mlflow.active_run().info.run_id
   model = SVC(kernel="linear", C=0.025)
   model.fit(X_train, y_train)
   score = model.score(X_test, y_test)
   y_pred = model.predict(X_test)
    cm = confusion_matrix(y_test,y_pred)
```

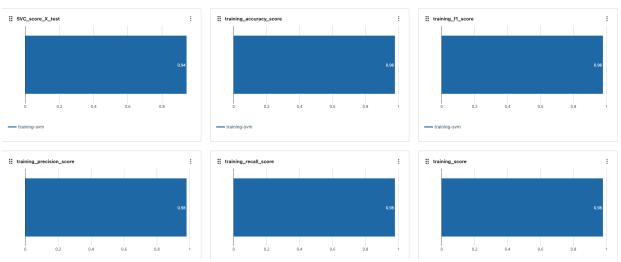
Podemos ver los resultados en el deploy del modelo



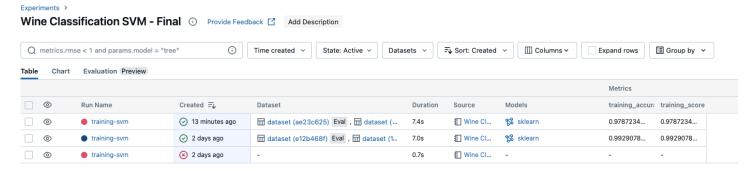
Podemos ver detalles para usar el modelo en la página de Artifacts.



Es posible ver las métricas del entrenamiento en la pestaña Model Metrics



Podemos observar los experimentos ejecutados, accediendo por el menú Experiments, Es posible acceder usando el <u>link</u>.

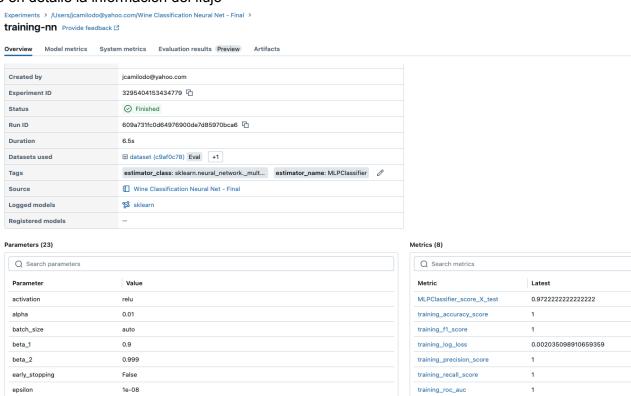


Neural Net (MLPClassifier)

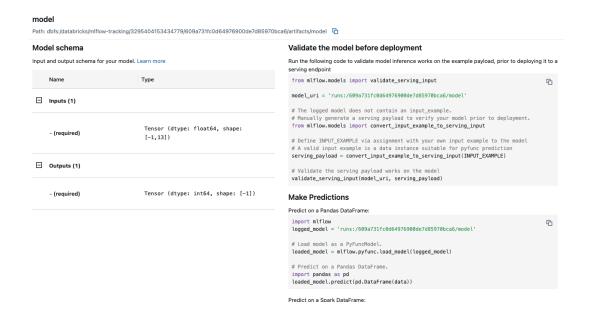
Se define el flujo dentro de MLFlow Se accede al notebook usando el siguiente <u>link</u>.

```
▶ ✓ ✓ 1 minute ago (7s)
      # mlflow.sklearn.autolog() requires mlflow 1.11.0 or above.
       mlflow.sklearn.autolog()
       # With autolog() enabled, all model parameters, a model score, and the fitted model are automatically logged.
       with mlflow.start_run(run_name="training-nn"):
           wine dataframe = read data()
           #Asignacion de la clase de acuerdo al enunciado.
           wine_dataframe('wine_class') = wine_dataframe.wine_class.replace({1: 0, 2: 1, 3: 2})
           X = wine_dataframe.iloc[: , 1:].values
           y = wine_dataframe.iloc[: ,0].values
           X_train,X_test,y_train,y_test = train_test_split(X,y,test_size=0.20)
  10
  11
  12
           sc=StandardScaler()
  13
           X_train = sc.fit_transform(X_train)
           X_test = sc.fit_transform(X_test)
  14
  15
  16
            run_id = mlflow.active_run().info.run_id
  17
           #se definene las capas de las neuronas, 150 de entrada, 100 y 50 en los hidden layers y 10 al final.
  18
           model = MLPClassifier(hidden_layer_sizes=(150,100,50, 10), alpha=0.01, max_iter=1000)
  19
  20
            model.fit(X_train, y_train)
  21
           score = model.score(X_test, y_test)
           y_pred = model.predict(X_test)
  22
  23
           cm=confusion_matrix(y_test,y_pred)
  24
```

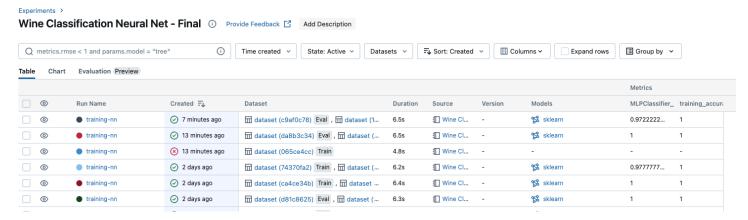
Viendo en detalle la información del flujo



Podemos ver la información para invocar el modelo



Puede acceder a la lista de experimentos desde el link.



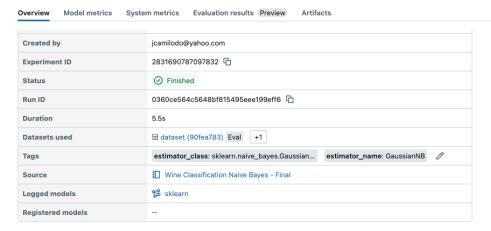
Naive Bayes

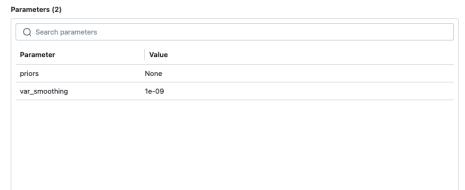
Se define el flujo dentro de MLFlow Se accede al notebook usando el siguiente <u>link</u>.

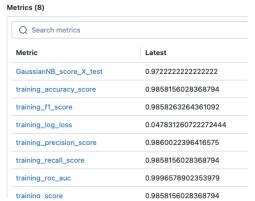
```
# mlflow.sklearn.autolog() requires mlflow 1.11.0 or above.
    mlflow.sklearn.autolog()
    # With autolog() enabled, all model parameters, a model score, and the fitted model are automatically logged.
     with mlflow.start_run(run_name="training-nb"):
 5
         wine_dataframe = read_data()
         wine_dataframe['wine_class'] = wine_dataframe.wine_class.replace({1: 0, 2: 1, 3: 2})
         X = wine_dataframe.iloc[: , 1:].values
         y = wine_dataframe.iloc[: ,0].values
 8
         X_train,X_test,y_train,y_test = train_test_split(X,y,test_size=0.25)
10
11
         sc=StandardScaler()
12
         X_train = sc.fit_transform(X_train)
13
         X_test = sc.fit_transform(X_test)
14
         run_id = mlflow.active_run().info.run_id
15
16
17
         model = GaussianNB()
18
         model.fit(X_train, y_train)
19
         score = model.score(X_test, y_test)
20
         y_pred = model.predict(X_test)
21
         cm=confusion_matrix(y_test,y_pred)
22
```

Examinamos el experimento del proceso

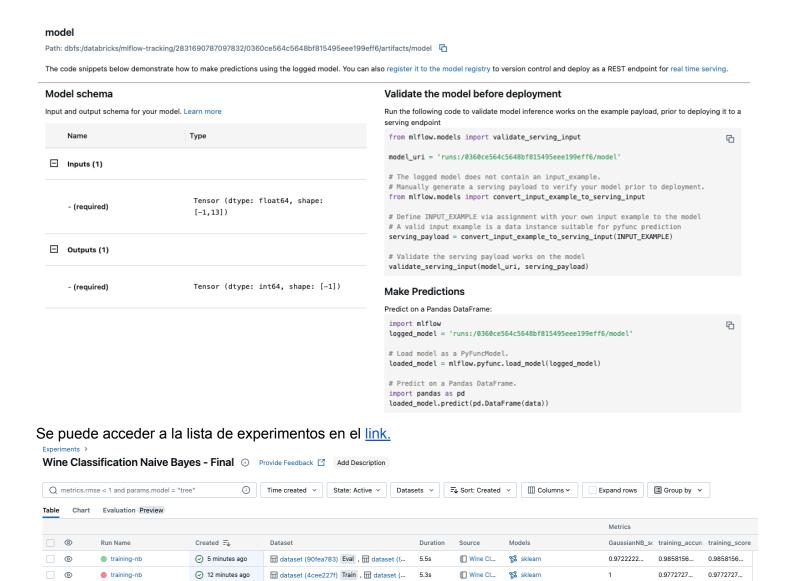
Experiments > /Users/jcamilodo@yahoo.com/Wine Classification Naive Bayes - Final > training-nb Provide feedback [2]







Evaluando información para llamar al model



Nearest Neighbors

Se define el flujo dentro de MLFlow Se accede al notebook usando el siguiente <u>link.</u>

13 minutes ago

₩ine Cl...

0.9555555...

0.9848484...

0.9848484...

```
▶ ✓ ✓ 4 minutes ago (7s)
       # mlflow.sklearn.autolog() requires mlflow 1.11.0 or above.
       mlflow.sklearn.autolog()
       # With autolog() enabled, all model parameters, a model score, and the fitted model are automatically logged.
   3
        with mlflow.start_run(run_name="training-knn"):
           wine_dataframe = read_data()
           #Asignación de la nueva clase, se reemplazan los valores
   6
           wine_dataframe['wine_class'] = wine_dataframe.wine_class.replace({1: 0, 2: 1, 3: 2})
   8
           X = wine_dataframe.iloc[: , 1:].values
           y = wine_dataframe.iloc[: ,0].values
           X_train,X_test,y_train,y_test = train_test_split(X,y,test_size=0.20)
   10
  12
           sc=StandardScaler()
           X_train = sc.fit_transform(X_train)
   13
   14
           X_test = sc.fit_transform(X_test)
  15
           run_id = mlflow.active_run().info.run_id
  17
           model = KNeighborsClassifier(n_neighbors=7)
   18
  19
           model.fit(X_train, y_train)
           score = model.score(X_test, y_test)
  20
  21
           y_pred = model.predict(X_test)
  22
           cm = confusion_matrix(y_test,y_pred)
```

El valor para los n_neighbors se seleccionó basado en el Análisis realizado en el libro Pre Analisis Wine Classification.

Examinamos el experimento del proceso Experiments > /Users/jcamilodo@yahoo.com/Wine Classification KNN - Final >

training-knn Provide feedback [3]

Parameters (8)

 Overview
 Model metrics
 System metrics
 Evaluation results
 Preview
 Artifacts

 Created by
 jcamilodo@yahoo.com

 Experiment ID
 4032672351196456 ℃

 Status
 ② Finished

 Run ID
 10b19d02e6274e7c954b43806e008013 ℃

 Duration
 6.6s

 Datasets used
 ☑ dataset (27077e32) Train +1

 Tags
 estimator_class: sklearn.neighbors_classificat...

 Source
 ① Wine Classification KNN - Final

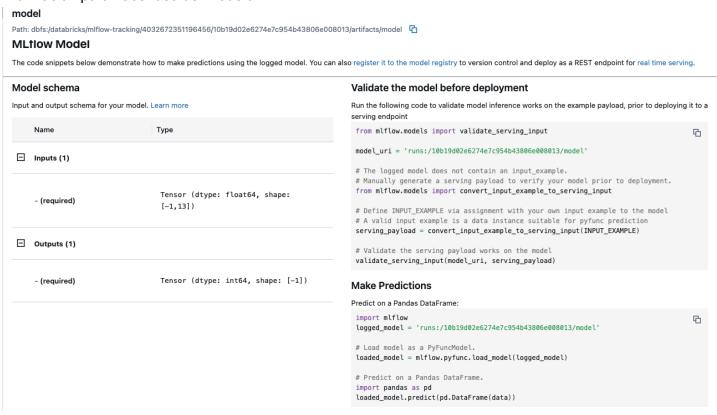
 Logged models
 ⑤ sklearn

 Registered models
 —

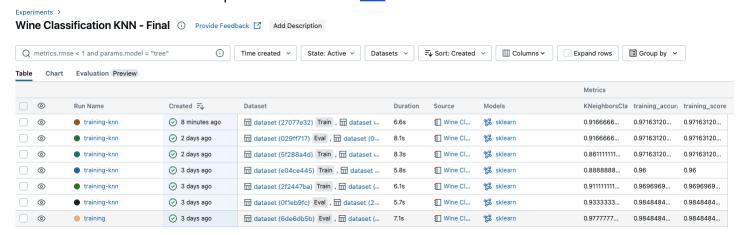
Parameter	Value	
algorithm	auto	
eaf_size	30	
metric	minkowski	
metric_params	None	
n_jobs	None	
n_neighbors	7	
p	2	

Q Search metrics	
Metric	Latest
KNeighborsClassifier_score_X_test	0.916666666666666
training_accuracy_score	0.9716312056737588
training_f1_score	0.9713958687675833
training_log_loss	0.10447452607181591
training_precision_score	0.972885979268958
training_recall_score	0.9716312056737588
training_roc_auc	0.998211667265313

Información para hacer uso del modelo



Podemos ver el detalle de los experimentos desde el link.



Predicciones de los modelos

Se crea el un libro para usar los modelos anteriormente creados, esto con el objetivo de probar los diferentes algoritmos. No es posible registrar el modelo y usarlo externamente en la versión community.

Puede acceder al libro mediante el siguiente link.



Nota:

El código de los libros puede encontrarlo en el repositorio.

Usar GANs para generar nuevos datos.

Dado la poca cantidad de datos que encontramos en el dataset origina, es posible pensar en emplear datos sintéticos para mejorar el rendimiento de los modelos de machine learning.

Se entregan 2 libros creados en Colab para la generación de los datos Sinteticos.

Las redes generativas antagónicas, o GAN, por sus siglas en inglés, son un tipo de modelo de inteligencia artificial que puede crear nuevos datos que se parecen a los datos que ha visto antes.

En este caso, queremos crear nuevos datos que se parezcan al conjunto de datos del datasert Wine. Este conjunto de datos es bastante simple. Tiene información sobre las categorias basado en sus caracteristicas en 13 columnas.

Una buena opción para esta tarea sería un tipo especial de GAN llamado GAN condicional, o cGAN para abreviar. La parte "condicional" significa que le damos al modelo información adicional para ayudarlo en su tarea. En este caso, le damos la categoria actualdel vino a la GAN.

Entonces, cuando la cGAN crea nuevos datos, no solo realiza mediciones de la categoria aleatorias; realiza mediciones correspondientes al tipo de categoria que le dijimos que hiciera. Y cuando la cGAN verifica si ha hecho un buen trabajo, también considera el tipo de categoria.

El primero libro, Tabular Generator Tensorflow.ipynb, consiste en generar los datos de una manera mas de proceso creando nuestro propio GAN, significa que se crean dos objetos generator y discriminator.

El segundo libro, se usara la libreria Synthetic Data Vault (SDV).

En lugar de crear GAN, se usara Synthetic Data Vault (SDV), que es una biblioteca de generación de datos tabulares sintéticos de código abierto. El libro utiliza el conjunto de datos de clasificación de Wine, entrena un CTGANSynthesizer con los datos reales, genera datos sintéticos y, por último, compara las distribuciones de datos de los conjuntos de datos reales y sintéticos mediante histogramas.

Comparaciones

Generando los datos sinteticos usando un GAN propio, genera datos sinteticos demasiado dispersos de los datos originales, vs la generacion con SDV, que son datos mas parecidos a los datos reales. Esto puede ser porque se deben hacer ajustes de hiperparametros para que llegue a nuestros datos deseados. Otro punto es el tiempo de entrenamiento. Usando una GAN propia, el tiempo de entrenamiento, puede tomar minutos incluso horas, mientras usando SDV es cuestion de minutos.

Grafica comparativa

	1
CAN mania	ODV
GAN propia	I SDV

