

# weinqualitaet

February 2, 2021

## 1 Beispiel: Machine Learning als Sommelier

### 1.1 Datensatz “Weinqualität”

Wir laden den Datensatz *weinqualitaet.csv* in den Speicher:

```
[44]: # Datensatz laden
url = "https://raw.githubusercontent.com/troeschew/datasets/master/
      ↪weinqualitaet.csv"

import pandas as pd
daten = pd.read_csv(url, delimiter=",")
# Löschen von Zeilen mit leeren Einträgen
daten.dropna(inplace=True)
```

### 1.2 Beschreibung des Datensatzes

- **type:** white wine or red wine
- **fixed acidity:** most acids involved with wine or fixed or nonvolatile (do not evaporate readily)
- **volatile acidity:** the amount of acetic acid in wine, which at too high of levels can lead to an unpleasant, vinegar taste
- **citric acid:** found in small quantities, citric acid can add ‘freshness’ and flavor to wines
- **residual sugar:** the amount of sugar remaining after fermentation stops, it’s rare to find wines with less than 1 gram/liter and wines with greater than 45 grams/liter are considered sweet
- **chlorides:** the amount of salt in the wine
- **free sulfur dioxide:** the free form of  $SO_2$  exists in equilibrium between molecular  $SO_2$  (as a dissolved gas) and bisulfite ion; it prevents microbial growth and the oxidation of wine
- **total sulfur:** dioxide amount of free and bound forms of  $SO_2$ ; in low concentrations,  $SO_2$  is mostly undetectable in wine, but at free  $SO_2$  concentrations over 50 ppm,  $SO_2$  becomes evident in the nose and taste of wine
- **density:** the density of water is close to that of water depending on the percent alcohol and sugar content

- **pH:** describes how acidic or basic a wine is on a scale from 0 (very acidic) to 14 (very basic); most wines are between 3-4 on the pH scale
- **sulphates:** a wine additive which can contribute to sulfur dioxide gas ( $SO_2$ ) levels, which acts as an antimicrobial and antioxidant
- **alcohol:** the percent alcohol content of the wine
- **quality:** output variable (based on sensory data, score between 0 and 10)

```
[45]: # Datensatz anzeigen
      daten
```

```
[45]:      type  fixed acidity  volatile acidity  citric acid  residual sugar  \
0    white           7.0           0.270           0.36           20.7
1    white           6.3           0.300           0.34           1.6
2    white           8.1           0.280           0.40           6.9
3    white           7.2           0.230           0.32           8.5
4    white           7.2           0.230           0.32           8.5
...    ...           ...           ...           ...           ...
6491  red             6.8           0.620           0.08           1.9
6492  red             6.2           0.600           0.08           2.0
6494  red             6.3           0.510           0.13           2.3
6495  red             5.9           0.645           0.12           2.0
6496  red             6.0           0.310           0.47           3.6

      chlorides  free sulfur dioxide  total sulfur dioxide  density  pH  \
0           0.045           45.0           170.0  1.00100  3.00
1           0.049           14.0           132.0  0.99400  3.30
2           0.050           30.0           97.0  0.99510  3.26
3           0.058           47.0           186.0  0.99560  3.19
4           0.058           47.0           186.0  0.99560  3.19
...    ...           ...           ...           ...           ...
6491  0.068           28.0           38.0  0.99651  3.42
6492  0.090           32.0           44.0  0.99490  3.45
6494  0.076           29.0           40.0  0.99574  3.42
6495  0.075           32.0           44.0  0.99547  3.57
6496  0.067           18.0           42.0  0.99549  3.39

      sulphates  alcohol  quality
0           0.45      8.8      6
1           0.49      9.5      6
2           0.44     10.1      6
3           0.40      9.9      6
4           0.40      9.9      6
...    ...           ...           ...
6491  0.82      9.5      6
6492  0.58     10.5      5
6494  0.75     11.0      6
```

6495	0.71	10.2	5
6496	0.66	11.0	6

[6463 rows x 13 columns]

### 1.3 Einige Statistiken zum Datensatz:

```
[46]: daten.describe()
```

```
[46]:
```

	fixed acidity	volatile acidity	citric acid	residual sugar \
count	6463.000000	6463.000000	6463.000000	6463.000000
mean	7.217755	0.339589	0.318758	5.443958
std	1.297913	0.164639	0.145252	4.756852
min	3.800000	0.080000	0.000000	0.600000
25%	6.400000	0.230000	0.250000	1.800000
50%	7.000000	0.290000	0.310000	3.000000
75%	7.700000	0.400000	0.390000	8.100000
max	15.900000	1.580000	1.660000	65.800000

	chlorides	free sulfur dioxide	total sulfur dioxide	density \
count	6463.000000	6463.000000	6463.000000	6463.000000
mean	0.056056	30.516865	115.694492	0.994698
std	0.035076	17.758815	56.526736	0.003001
min	0.009000	1.000000	6.000000	0.987110
25%	0.038000	17.000000	77.000000	0.992330
50%	0.047000	29.000000	118.000000	0.994890
75%	0.065000	41.000000	156.000000	0.997000
max	0.611000	289.000000	440.000000	1.038980

	pH	sulphates	alcohol	quality
count	6463.000000	6463.000000	6463.000000	6463.000000
mean	3.218332	0.531150	10.492825	5.818505
std	0.160650	0.148913	1.193128	0.873286
min	2.720000	0.220000	8.000000	3.000000
25%	3.110000	0.430000	9.500000	5.000000
50%	3.210000	0.510000	10.300000	6.000000
75%	3.320000	0.600000	11.300000	6.000000
max	4.010000	2.000000	14.900000	9.000000

Wie viele Weine haben welche Qualitätsstufe erhalten?

```
[47]: daten["quality"].groupby(daten.quality).count()
```

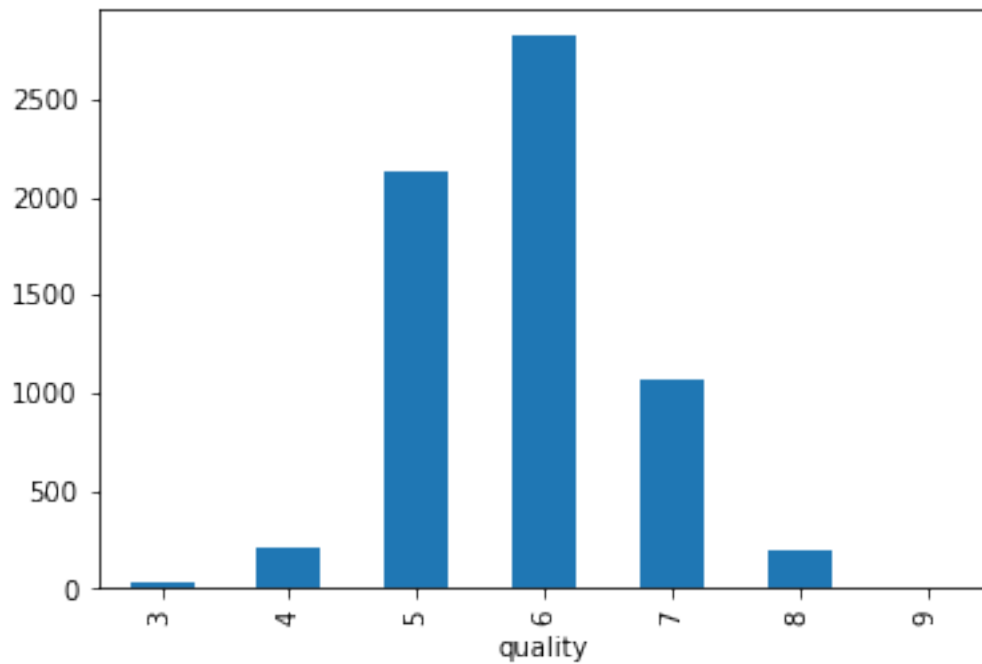
```
[47]: quality
3      30
4     214
5    2128
6    2820
```

```
7    1074
8     192
9         5
Name: quality, dtype: int64
```

Dargestellt als Grafik:

```
[48]: daten["quality"].groupby(daten.quality).count().plot.bar()
```

```
[48]: <AxesSubplot:xlabel='quality'>
```



Gibt es Abhängigkeiten zwischen den Features? Wir berechnen die sog. **Korrelationskoeffizienten**  $r$ , die immer zwischen den Werten -1 und +1 liegen.

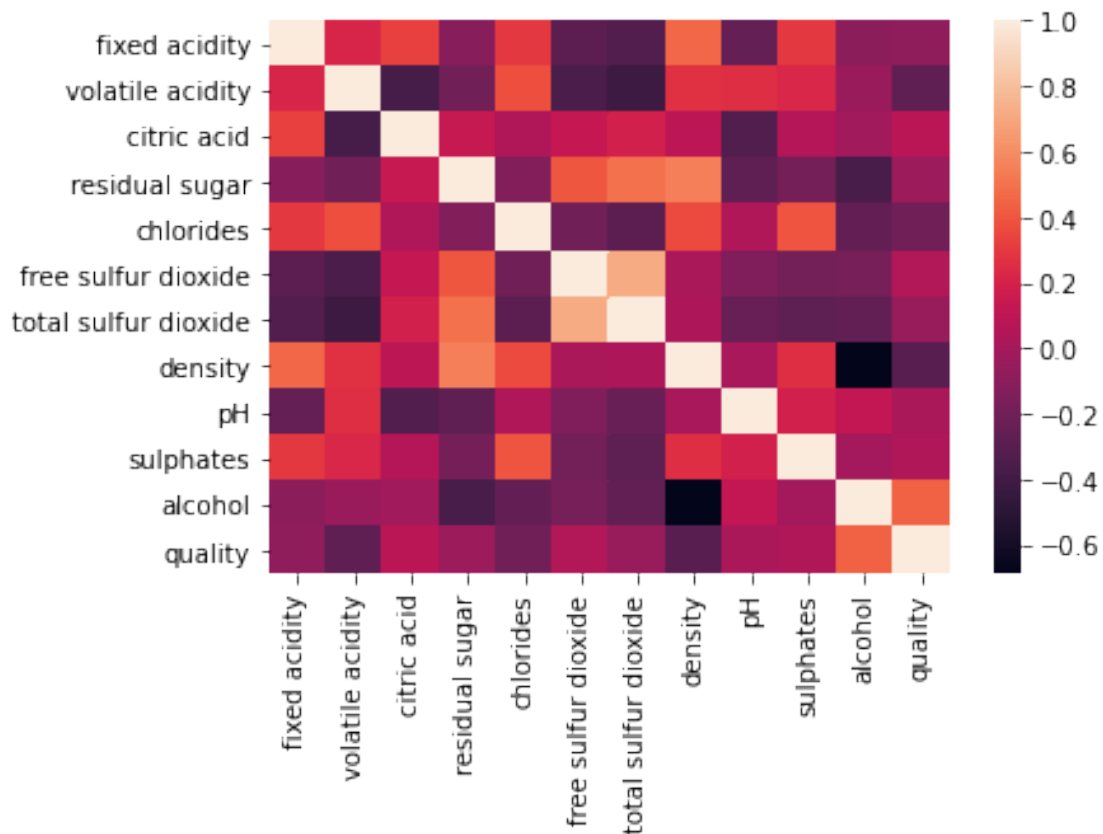
- Nahe -1: Hohe negative Korrelation
- Nahe +1: Hohe positive Korrelation
- Nahe 0: Keine Korrelation

$$r = \frac{Cov_{x,y}}{s_x s_y}$$

```
[49]: corrs = daten.corr()

import seaborn as sn
sn.heatmap(corrs)
```

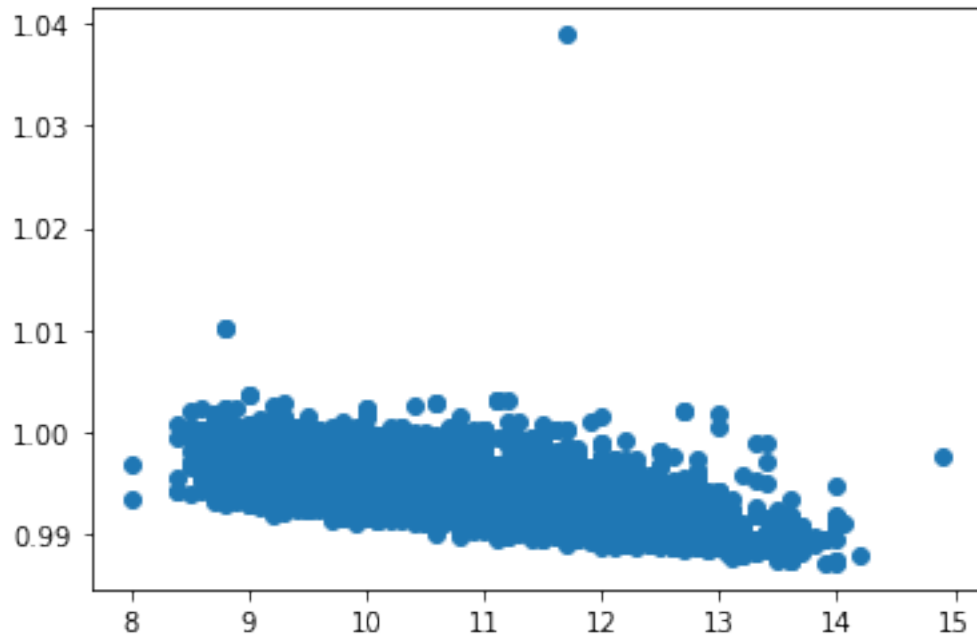
```
[49]: <AxesSubplot:>
```



```
[50]: %matplotlib inline
import matplotlib.pyplot as plt

plt.scatter(daten.alcohol, daten.density)
```

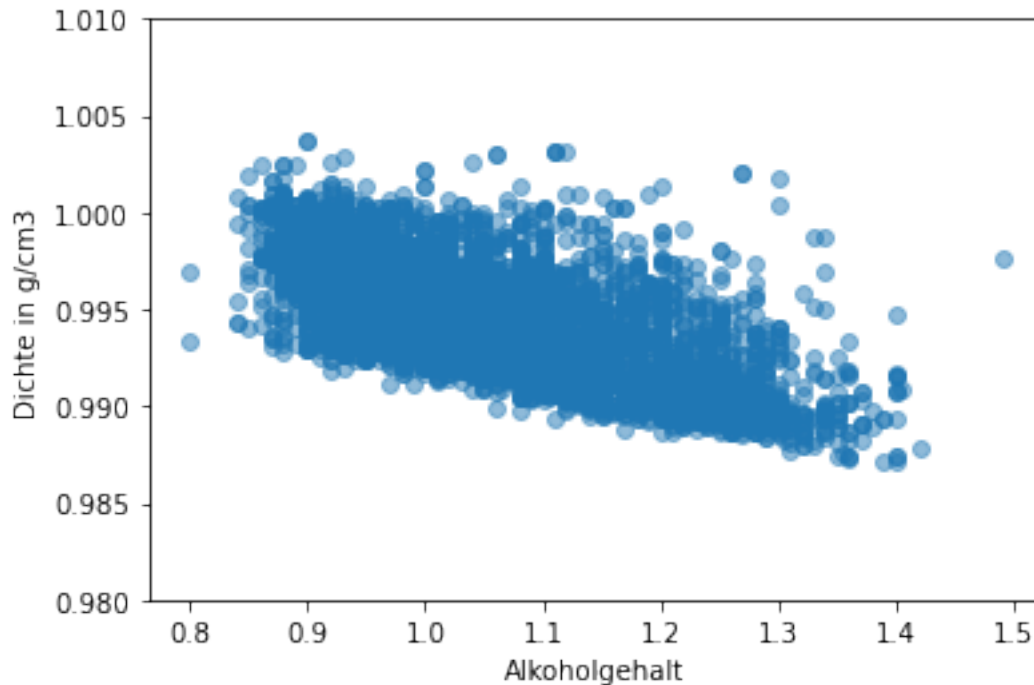
```
[50]: <matplotlib.collections.PathCollection at 0x15fded0c370>
```



Etwas deutlicher zeigt sich der Zusammenhang, wenn wir die Ausreißer entfernen:

```
[51]: plt.scatter(daten[daten.density<1.01].alcohol/10, daten[daten.density<1.01].  
      ↪density,alpha=.5)  
plt.ylim(.98,1.01)  
plt.xlabel("Alkoholgehalt")  
plt.ylabel("Dichte in g/cm3")  
plt.plot()
```

```
[51]: []
```



## 1.4 Vorhersage-Modell erstellen

Wir wollen anhand der Daten die Weinqualität vorhersagen! Dazu teilen wir den Datensatz in Trainings- und Testdaten auf. Mit 70% der Daten trainieren wir das Modell, mit 30% testen wir das Modell.

```
[52]: from sklearn.model_selection import train_test_split
```

```
X = daten.iloc[:, 0: 12]
X = pd.DataFrame(X, columns = daten.columns[0:12])
X = pd.get_dummies(X)
y = daten.iloc[:, 12]
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.3,
↪shuffle=True, random_state=0, stratify=y)
```

Jetzt erstellen wir das Modell mit den Trainings-Daten. Als Modell verwenden wir einen Entscheidungsbaum für Klassifizierung:

```
[53]: from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
model = DecisionTreeClassifier(random_state=0, criterion="entropy", max_depth=6)
model = model.fit(X_train, y_train)
```

Wir sagen mit Hilfe des Modells die Weinqualität voraus und verwenden hierfür den Test-Datensatz:

```
[54]: pred = model.predict(X_test)
```

Wir vergleichen die vorhergesagte Weinqualität mit der tatsächlichen Weinqualität und stellen dies in einer Tabelle dar:

```
[55]: pd.crosstab(y_test, pred, rownames=["REFERENZ"], colnames=["VORHERGESAGT"])
```

```
[55]: VORHERGESAGT  3  4    5    6    7  8
REFERENZ
3              1  0    4    4    0  0
4              0  2   33   29    0  0
5              0  2  390  239    6  1
6              0  4  194  578   70  0
7              0  0   18  190  114  0
8              0  0    4   22   26  6
9              0  0    1    0    1  0
```

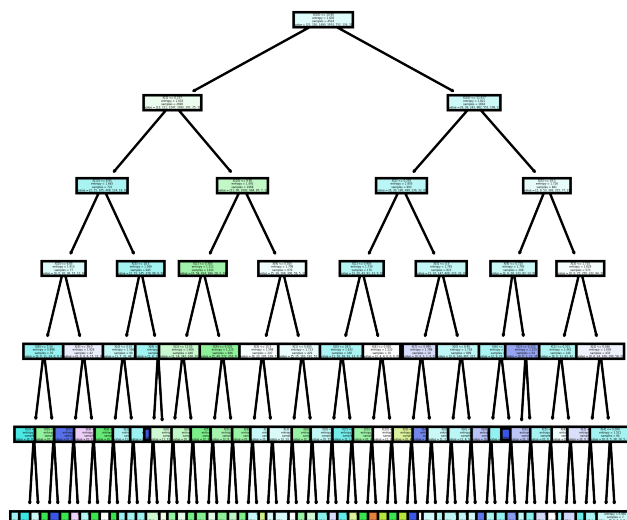
Wir setzen die richtig vorhergesagten Werte (die Diagonale in der obigen Tabelle) mit der Gesamtzahl der vorhergesagten Werte ins Verhältnis. Dies gibt die Genauigkeit unseres Modells an, die sog. **Accuracy**:

```
[56]: from sklearn.metrics import accuracy_score
accuracy_score(y_test, pred)
```

```
[56]: 0.5626611655492522
```

Wir erstellen eine Grafik des Baumes (dauert ein paar Sekunden!):

```
[57]: %matplotlib inline
from sklearn import tree
fig, axes = plt.subplots(nrows = 1,ncols = 1,figsize = (4,4), dpi=600)
_=tree.plot_tree(model, filled=True)
```

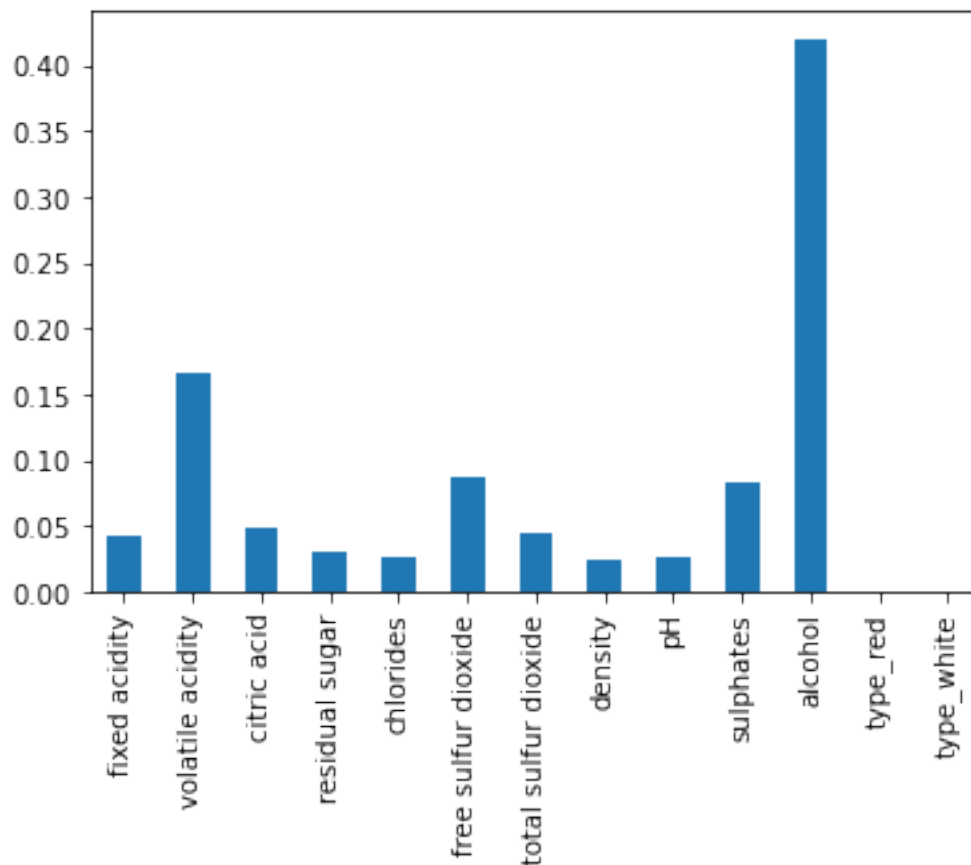




Welches Feature (=Spalte) hat welche Wichtigkeit auf die Vorhersage?

```
[58]: pd.Series(model.feature_importances_, index=X.columns).plot.bar()
```

```
[58]: <AxesSubplot:>
```



## 1.5 Random Forest

Statt nur einen Baum, erstellen wir jetzt gleich eine ganze Menge, genauer gesagt: 500! Für jeden Baum werden zufällig Beobachtungen und Features (Spalten der Tabelle) ausgewählt und jeder Baum für sich trainiert! Somit entscheidet jeder Baum für sich, um welche Weinqualität es sich handelt. Am Ende erfolgt eine “Mehrheitsentscheidung”.

Zuerst erstellen wir einen **Random Forest** mit 500 Bäumen.

```
[59]: from sklearn.model_selection import train_test_split
      from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
```

```
model2 = RandomForestClassifier(n_estimators=500)
model2.fit(X_train, y_train)
```

[59]: RandomForestClassifier(n\_estimators=500)

Jetzt testen wir wieder unser Modell, indem wir eine Vorhersage mit dem Test-Datensatz durchführen:

[60]: `pred2 = model2.predict(X_test)`

Nun stellen wir wieder die vorhergesagte Weinqualität mit der tatsächlichen in einer Tabelle gegenüber:

[61]: `pd.crosstab(y_test, pred2, rownames=["PREDICTED"], colnames=["REFERENCE"])`

```
[61]: REFERENCE  3  4   5   6   7   8
      PREDICTED
3           0  0   3   6   0   0
4           1  8  33  21   1   0
5           0  1 450 183   4   0
6           0  1 121 693  30   1
7           0  0   5 156 161   0
8           0  0   1  20   9  28
9           0  0   0   0   2   0
```

Wir berechnen wieder die Accuracy:

[62]: `accuracy_score(y_test, pred2)`

[62]: 0.6910778751933987

Unser Modell hat nun eine deutlich höhere Accuracy! Ein Random Forest scheint als Modell also besser zu sein als nur ein einzelner Baum!

Das Modell ist schlechter als es den Anschein hat: Die Qualitätsstufen sind sehr fein gegliedert, immerhin 10 Kategorien! Selbst sehr gute “menschliche” Sommeliers wären sich bzgl. der Klassifizierung eines Weines sicherlich nicht immer einig. Außerdem haben wir bei den sehr schlechten und sehr guten Weinen relativ wenige Daten, wodurch eine gute Prognose noch schwieriger macht. Wir wollen daher unsere Weine in 3 Qualitätsstufen einstufen: Schlechte Weine, mittlere und gute Weine und damit unser Modell “Random Forest” nochmals trainieren.

Wir fügen zuerst eine Spalte mit den neuen Kategorien 0, 1 und 2 hinzu.

[63]: `y_train_qualitaetsgruppen = pd.cut(y_train, 3, labels=[1,2,3])`  
`y_test_qualitaetsgruppen = pd.cut(y_test, 3, labels=[1,2,3])`

Nun erstellen wir ein neues Modell, erstellen eine Prognose und stellen die Ergebnisse wieder in einer Confusion Matrix gegenüber.

[64]: `model3 = RandomForestClassifier(n_estimators=500).fit(X_train,   
↳ y_train_qualitaetsgruppen)`

```
pred3 = model3.predict(X_test)
pd.crosstab(y_test_qualitaetsgruppen, pred3, rownames=["PREDICTED"],
            colnames=["REFERENCE"])
```

```
[64]: REFERENCE    1    2    3
      PREDICTED
      1         507   204    0
      2         121  1047    0
      3           1    32   27
```

Berechnen wir noch die Accuracy unseres neuen Modells:

```
[65]: accuracy_score(y_test_qualitaetsgruppen, pred3)
```

```
[65]: 0.815368746776689
```

Wir wollen nun ein anderes Feature vorhersagen: Handelt es sich um einen Rot- oder um einen Weißwein? Unser Datensatz enthält hierfür ein entsprechendes Feature: **type\_red** bzw. **type\_white**.

```
[66]: X
```

```
[66]:    fixed acidity  volatile acidity  citric acid  residual sugar  chlorides \
0              7.0              0.270          0.36             20.7        0.045
1              6.3              0.300          0.34             1.6        0.049
2              8.1              0.280          0.40             6.9        0.050
3              7.2              0.230          0.32             8.5        0.058
4              7.2              0.230          0.32             8.5        0.058
...
6491            6.8              0.620          0.08             1.9        0.068
6492            6.2              0.600          0.08             2.0        0.090
6494            6.3              0.510          0.13             2.3        0.076
6495            5.9              0.645          0.12             2.0        0.075
6496            6.0              0.310          0.47             3.6        0.067
```

```
    free sulfur dioxide  total sulfur dioxide  density    pH  sulphates \
0                   45.0                170.0  1.00100  3.00        0.45
1                   14.0                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
...
6491                28.0                 38.0  0.99651  3.42        0.82
6492                32.0                 44.0  0.99490  3.45        0.58
6494                29.0                 40.0  0.99574  3.42        0.75
6495                32.0                 44.0  0.99547  3.57        0.71
6496                18.0                 42.0  0.99549  3.39        0.66
```

	alcohol	type_red	type_white
0	8.8	0	1
1	9.5	0	1
2	10.1	0	1
3	9.9	0	1
4	9.9	0	1
...	...	...	...
6491	9.5	1	0
6492	10.5	1	0
6494	11.0	1	0
6495	10.2	1	0
6496	11.0	1	0

[6463 rows x 13 columns]

Als vorherzusagendes Feature verwenden wir **type\_red**: 1 bedeutet Rotwein, 0 bedeutet dann zwangsläufig Weißwein. Wir entfernen daher das Feature **type\_white** aus dem Test- und Trainingsdatensatz:

```
[67]: X = daten.iloc[:, 1: 13]
X = pd.DataFrame(X, columns = daten.columns[1:13])
y = daten.iloc[:, 0]
y = pd.get_dummies(y)["red"]
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.4,
↳shuffle=True, random_state=0, stratify=y)
```

```
[68]: from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
model4 = DecisionTreeClassifier(random_state=0, criterion="entropy",
↳max_depth=6)
model4 = model.fit(X_train, y_train)
```

Wir machen wieder eine Vorhersage anhand des Modells:

```
[69]: pred4 = model4.predict(X_test)
```

Und geben das Ergebnis im Vergleich zur Realität in einer Tabelle aus:

```
[70]: pd.crosstab(y_test, pred4, rownames=["PREDICTED"], colnames=["REFERENCE"])
```

```
[70]: REFERENCE    0    1
PREDICTED
0          1929   20
1           27  610
```

Und berechnen die Accuracy:

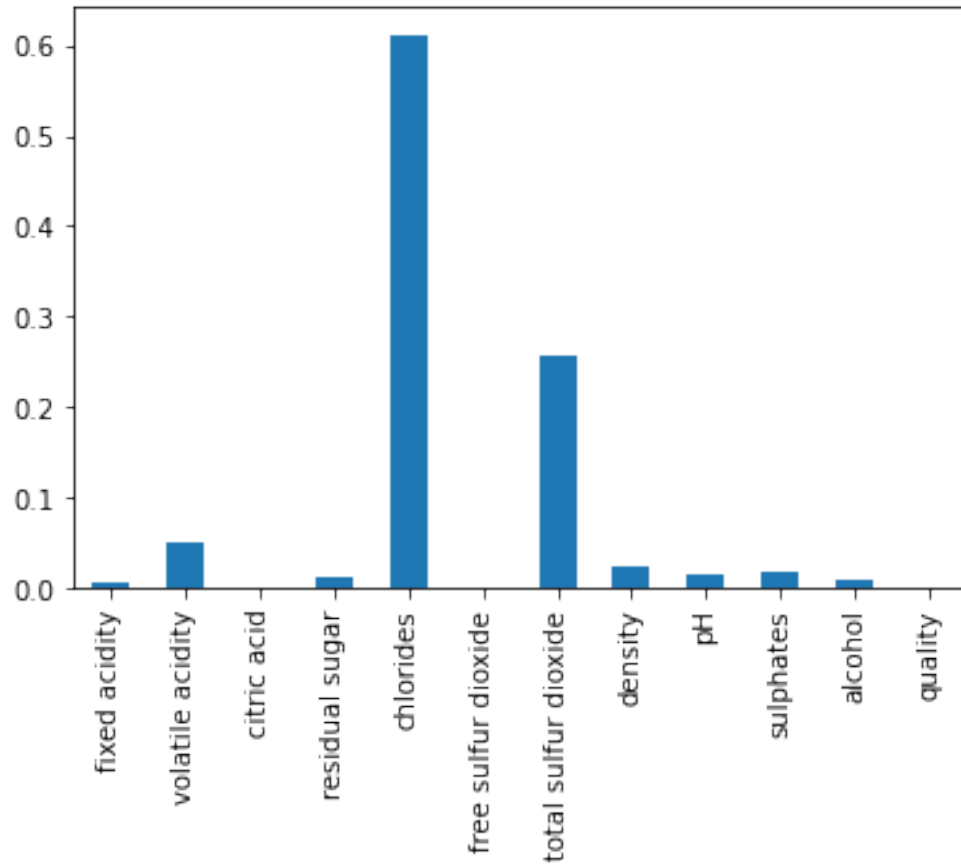
```
[71]: accuracy_score(y_test, pred4)
```

[71]: 0.9818252126836814

Welches Feature (=Spalte) hat welche Wichtigkeit auf die Vorhersage?

```
[72]: pd.Series(model4.feature_importances_, index=X.columns).plot.bar(y)
```

[72]: <AxesSubplot:>



[ ]: