

Examen Resuelto

Ojeda, Zacarías F.

23/03/2020

Construcción del modelo

Para crear el modelo predictivo basado en redes neuronales se ha empleado Tensorflow/Keras, estas librerías pueden usarse tanto desde R como desde Python.

Arquitectura

La arquitectura que se propone es muy sencilla, y se consideran hiperparámetros de la arquitectura :

- el número de capas ocultas
- la cantidad de neuronas por capa

De esta manera, la arquitectura es plana en cuanto a la distribución de neuronas en las capas. Se desea explorar por medio de hiperparámetros qué configuración logra predecir mejor la calidad del vino.

El problema se plantea como una regresión, aunque los niveles observados en los datos son claramente valores de 1 al 5, éstos son cuantitativos y establecen una relación de distancia.

Preprocesamiento de los datos

No se observaron datos faltantes o irregularidades en los mismos. Solamente se procedió a escalar los valores, para que los rangos diferentes en las variables no afecten la distribución de pesos en la red.

Modelo de Red Neuronal

Se realizó a través de un código en Colab, allí se desarrolló un modelo de red en Python con Keras que admitía los parámetros anteriormente mencionados. En esta etapa no se deseaba optimizar los parámetros como el optimizador, learning rates o regularizaciones. Simplemente se deseaba encontrar la arquitectura que mejor resuelva el problema dados los parámetros por defecto del optimizador Adam.

El objetivo a optimizar, es una métrica desarrollada para este problema, que mide el porcentaje de aciertos en predicciones luego de haber redondeado la salida de la red. Si se intentara sumar una capa a la red que haga ese redondeo, se crearía una superficie de error no diferenciable, que podría imposibilitar al algoritmo encontrar el mínimo.

Al ser una regresión se optó por una función de error MSE (Mean Squared Error) y una salida con una capa densa con activación lineal.

```
def aciertos(y_true, y_pred):
    real = tf.dtypes.cast(y_true, tf.int32)
    predicho = tf.dtypes.cast(tf.math.round(y_pred), tf.int32)
    diferencia_abs = tf.math.abs(real - predicho)
    igual = tf.math.reduce_sum(tf.dtypes.cast(diferencia_abs == 0, tf.int32))
    return (igual) * 100 / tf.size(diferencia_abs)

class CalidadDeVinoModelo(Model):
```

```

def __init__(self, nr_ocultas=5, nro_neuronas=32):
    """
        Configurando las variables del modelo
    """
    super(CalidadDeVinoModelo, self).__init__()
    self.nr_ocultas = nr_ocultas
    self.nro_neuronas = nro_neuronas
    self.ocultas = []
    for capa in range(1, nr_ocultas):
        if(capa == 1):
            self.ocultas.append(Dense(nro_neuronas, activation='relu', input_shape=(12,)))
        else:
            self.ocultas.append(Dense(nro_neuronas, activation='relu'))
    self.salida = Dense(1)
    self.compile(
        optimizer = 'adam',
        loss = 'mse',
        metrics = [aciertos]
    )

```

Evaluación de la performance del modelo

Cada configuración es evaluada utilizando K-Fold cross validation, con K=5. De esta manera se mejora la estimación del poder predictivo del modelo, y se limitan las evaluaciones incorrectas debido a la semilla aleatoria utilizada.

```

def train_test_model(hparams):
    nro_ocultas = hparams[HP_NRO_OCULTAS]
    nro_neuronas = hparams[HP_NRO_NEURONAS]
    aciertos_list = []
    for j, (train_idx, val_idx) in enumerate(folds):
        X_train_cv = X_train[train_idx]
        y_train_cv = y_train.values[train_idx]
        X_valid_cv = X_train[val_idx]
        y_valid_cv = y_train.values[val_idx]

        modelo = CalidadDeVinoModelo(nr_ocultas=nro_ocultas, nro_neuronas=nro_neuronas)
        batch_size = 64
        modelo.entrenar(
            x = X_train_cv,
            y = y_train_cv,
            steps_per_epoch=len(X_train_cv)/batch_size,
            validation_data = (X_valid_cv, y_valid_cv),
            epocas=500,
            verbose=0,
        )
        aciertos_j = modelo.evaluate(X_valid_cv, y_valid_cv, verbose=0)[-1]
        aciertos_list.append(aciertos_j)
    media_aciertos = np.average(aciertos_list)
    return media_aciertos

```

The screenshot shows the TensorBoard interface with the 'Table View' selected. On the left, there are filters for 'Hyperparameters' (nro_ocultas, nro_neuronas) and 'Metrics' (aciertos). The main table displays trial data with columns for Trial ID, Show Metrics, nro_ocultas, nro_neuronas, and aciertos. The trials are sorted by 'aciertos' in descending order.

Trial ID	Show Metrics	nro_ocultas	nro_neuronas	aciertos
9107cda6d73dfec...	<input type="checkbox"/>	7.0000	80.000	91.124
5bee1a9afb20d4...	<input type="checkbox"/>	6.0000	80.000	90.619
afa61af6e1da094...	<input type="checkbox"/>	7.0000	60.000	89.991
a39604ca23e6ce2...	<input type="checkbox"/>	5.0000	80.000	89.725
8c0f4fa41c517cc...	<input type="checkbox"/>	7.0000	40.000	89.544
04d4e4f2700e584...	<input type="checkbox"/>	6.0000	60.000	89.334
5b0f5f0068d86c4...	<input type="checkbox"/>	5.0000	60.000	88.532
bcd0cbac3bc8113...	<input type="checkbox"/>	6.0000	40.000	88.363
e1ccbb23b92924...	<input type="checkbox"/>	3.0000	80.000	87.081
dde4070a17bfab0...	<input type="checkbox"/>	3.0000	60.000	86.205
699e4b81ea56c5e...	<input type="checkbox"/>	5.0000	40.000	86.125
00fbd86db807634...	<input type="checkbox"/>	3.0000	40.000	86.071
dd23dae69d9a09...	<input type="checkbox"/>	7.0000	20.000	84.872
368c417ce3c4eb5...	<input type="checkbox"/>	5.0000	20.000	84.116
bb50aebb779058...	<input type="checkbox"/>	3.0000	20.000	84.105

Figure 1: Table View

Optimización de hiperparámetros

Se ha realizado un grid search sobre configuraciones posibles, con el fin de obtener una aproximación de los límites para ambos parámetros

```
# grid search
HP_NRO_OCULTAS = hp.HParam('nro_ocultas', hp.Discrete([3, 5, 7]))
HP_NRO_NEURONAS = hp.HParam('nro_neuronas', hp.Discrete([100, 200, 400]))

for nro_ocultas in HP_NRO_OCULTAS.domain.values:
    for nro_neuronas in HP_NRO_NEURONAS.domain.values:
        hparams = {
            HP_NRO_OCULTAS: nro_ocultas,
            HP_NRO_NEURONAS: nro_neuronas
        }
        aciertos_list = []
        parametros = ({h.name: hparams[h] for h in hparams})
        ejecucion_nombre = '-'.join(['{}_{}'.format(k,v) for k,v in parametros.items()])
        start = timer()
        media_aciertos = run('logs/hparam_tuning/' + ejecucion_nombre, hparams)
        end = timer()
        print('media_aciertos: ', media_aciertos, 'nro_ocultas: ', nro_ocultas, 'nro_neuronas: ', nro_neuronas)
```

Se guardan la métrica a observar en la carpeta logs y se emplea Tensorboard para visualizar y ordenar las salidas de las métricas durante el entrenamiento

Se resalta en este caso la configuración que ha tenido mejor performance en esta corrida.

Evaluación de la capacidad de generalizar del modelo.

Con el procedimiento anterior, se tiene una buena estimación de la capacidad predictiva de la arquitectura seleccionada. La matriz de confusión se obtendrá desde R. El objetivo aquí es crear el mismo modelo que se desarrolló en colab, pero localmente y evaluarlo mediante una separación simple Train/Test y obtener.

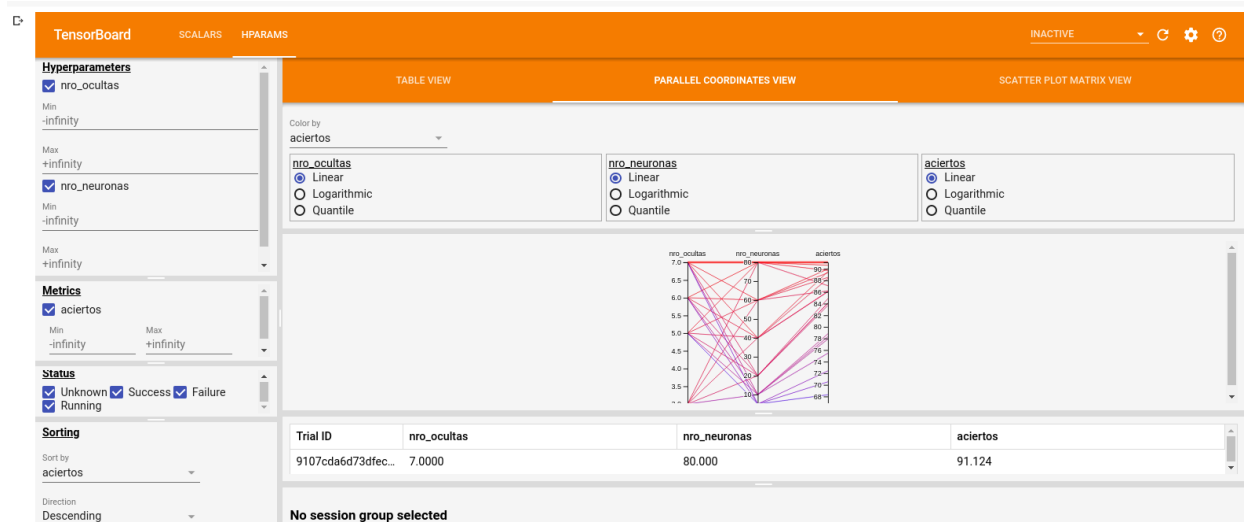


Figure 2: Parallel View

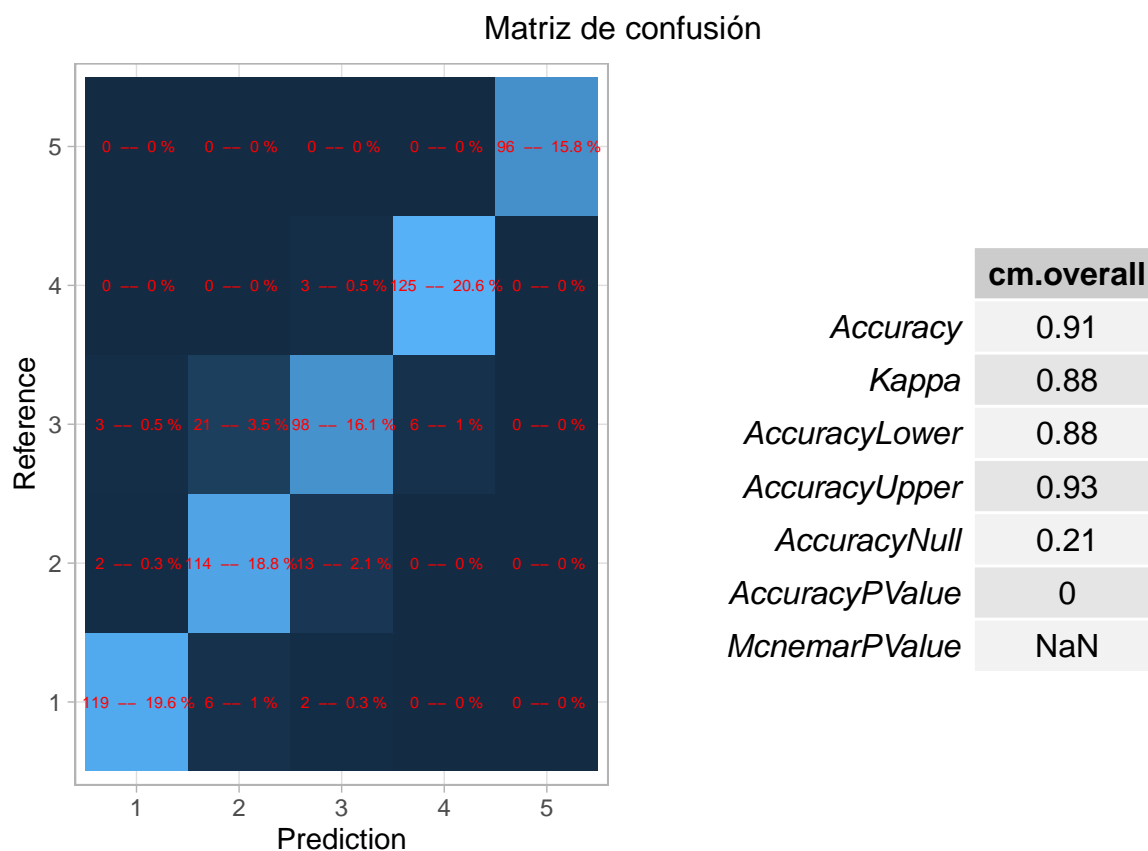
Carga de datos:

```
winequality <- read_csv("data/winequality.csv")
# Se configura la semilla aleatoria para hacer repetible los resultados
set.seed(1)

# Creando particiones de datos para training y testing
inTraining <- createDataPartition(winequality$quality, p = .75, list = FALSE)
training <- winequality[ inTraining,]
testing <- winequality[~inTraining,]
```

```
calidadVinoModelo <- function(nro_capas, nro_neuronas) {
  modelo <- keras_model_sequential()
  for(i in seq(nro_capas)) {
    if(i==1) {
      layer_dense(modelo, units = nro_neuronas, activation='relu', input_shape=c(12))
    } else {
      layer_dense(modelo, units = nro_neuronas, activation='relu')
    }
  }
  modelo %>% layer_dense(units = 1)
  modelo %>% compile(
    loss = 'mse',
    optimizer = 'adam',
    metrics = c('accuracy')
  )
  modelo
}
```

```
# reshape
x_train <- array_reshape(unlist(training %>% select(-quality) %>% scale), c(nrow(training), 12))
y_train <- array_reshape(training$quality, c(nrow(training), 1))
x_test <- array_reshape(unlist(testing %>% select(-quality) %>% scale), c(nrow(testing), 12))
y_test <- array_reshape(testing$quality, c(nrow(testing), 1))
```



Modelo Final

El modelo final se obtendrá entrenando con *TODOS* los datos disponibles, con el fin de ser lo más precisos posible

```
meanWineQuality <- mean(unlist(winequality %>% select(-quality)))
sdWineQuality <- sd(unlist(winequality %>% select(-quality)))

x_total <- array_reshape(unlist(winequality %>% select(-quality) %>% scale), c(nrow(winequality), 12))
y_total <- array_reshape(winequality$quality, c(nrow(winequality), 1))
modeloFinal <- calidadVinoModelo(10, 120)

modeloFinal %>% fit(
  x_total, y_total,
  epochs = 500,
  batch_size = 64,
  verbose = 0
)

json_config <- model_to_json(modeloFinal)
writeLines(json_config, "modeloFinal.json")
```

La predicción puede encontrarse en el archivo predicción_test.csv

```
winequalityTestEscalado = (winequalityTest - meanWineQuality) / sdWineQuality
x_test_escalado = array_reshape(unlist(winequalityTestEscalado), c(nrow(winequalityTestEscalado), 12))
prediccionTest <- modeloFinal %>% predict(x_test_escalado) %>% round()
data.frame(prediccion = prediccionTest) %>% write_csv("prediccion_test.csv")
```

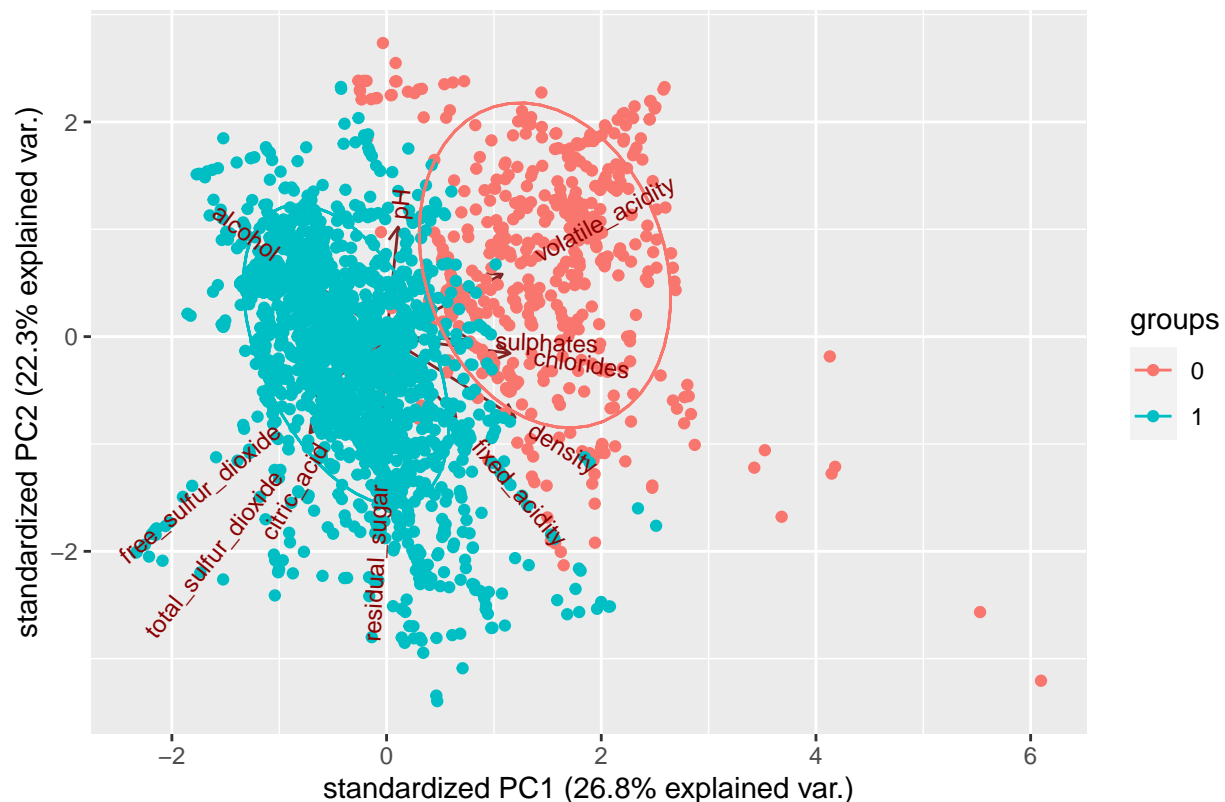
Vino tinto como target

Se recurrirá a hacer un análisis de componentes principales para saber si son separables dichos grupos

```
sinQuality <- winequality %>%
  select(-quality)

sinQuality.pca <- prcomp(sinQuality %>% select(-white_wine), center = TRUE, scale. = TRUE)

ggbiplot::ggbiplot(sinQuality.pca, groups = factor(winequality$white_wine), ellipse = TRUE)
```



> Se observa que dichos grupos son separables, es decir que hay componentes o combinaciones de ellos que distinguen a los vinos blancos de los tintos.

Debido a lo expuesto, la variable *white_wine* puede ser expresada como combinación lineal de las variables fisicoquímicas. Por lo que no sería necesario incluirla en el modelo predictivo. Sin embargo, la presencia de componentes fisicoquímicos correspondientes a vinos tintos en vinos blancos, puede llegar a tener impacto en la calidad del vino. Este análisis debería realizarse por separado.