

# Universidade do Minho Mestrado em Matemática e Computação

# Sistemas Baseados em Similaridade Ficha Prática Individual 5

Hugo Filipe de Sá Rocha (PG52250)

8 de novembro de 2023

# Conteúdo

$\mathbf{Co}$	ntextualização
1.1	Aspetos a considerar
$\mathbf{Co}$	ncepção das soluções
2.1	Tarefa 1
2.2	Tarona = (transmission de dados)
	2.2.1 Alínea a)
	2.2.2 Alínea b)
	2.2.3 Alínea c)
	2.2.4 Alínea d)
	2.2.5 Alínea e
	2.2.6 Alínea f Ó
2.3	,
	2.3.1 Alínea a)
	2.3.2 Alínea b)
	2.3.3 Alínea c (
2.4	
	2.4.1 Alínea a)
	2.4.2 Alínea b)
	2.4.3 Alínea c)
	=
0.5	
$\frac{2.5}{2.6}$	Tarefa 5
$\frac{2.0}{2.7}$	Workflow completo para o caso de uma Random Forest (com uso de meta-nodos)

## Capítulo 1

# Contextualização

Uma multinacional na área do retalho possui o histórico de vendas semanais de 17 das suas lojas em diferentes regiões do país, sendo que cada loja contém vários departamentos (desporto, cozinha, produtos alimentícios e higiene pessoal, entre outros). A empresa realiza também vários eventos promocionais ao longo do ano, normalmente precedendo feriados importantes. A empresa pretende agora extrair informação relevante dos datasets e desenvolver um modelo de machine learning que,com base num conjunto relevante de features, permita estimar as vendas mensais de cada uma das suas lojas. A empresa disponibiliza dois datasets para a concepção do modelo onde um deles contém informação sobre cada uma das lojas, incluindo o seu tipo e tamanho, enquanto que o outro contém dados referentes às vendas semanais de cada departamento de cada loja, a data e um boolean indicando se houve um feriado durante essa semana. Com base nisto, o modelo deve estimar as vendas mensais de um terceiro conjunto de dados desconhecido.

#### 1.1 Aspetos a considerar

Com este enunciado prático, pretende-se que seja feito o *tuning* de modelos baseados em árvore, abordando parâmetros nominais e numéricos como a medida de qualidade, o método de *pruning* e o número mínimo de registos por nodo, entre outros.

## Capítulo 2

# Concepção das soluções

#### 2.1 Tarefa 1

• Carregar, no *Knime*, os dois primeiros *datasets*, juntá-los e explorar os dados utilizando vistas gráficas que permitam perceber a análise efetuada;

Como é tradicional, para leitura dos dois datasets de treino utilizei o nodo CSV Reader e o nodo Table Reader, visto que um dos ficheiros está no formato csv e o outro no formato table. Após isso, utilizei o nodo Joiner para juntar os dados pelo atributo Store, fazendo um Inner Join entre as duas tabelas. Além disso, foram aplicados alguns nodos para exploração e análise dos dados, sendo eles: Statistics, Data Explorer, Box Plot e Rank Correlation.

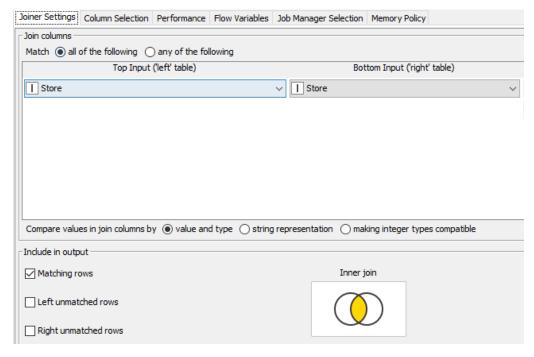


Figura 2.1: Configuração do nodo Joiner.

• No nodo *Statistics* podemos, por exemplo, analisar o *dataset* no que toca a *missing values* ou a estatísticas sobre os atributos. A título de exemplo, nas imagens abaixo podemos ver que o *dataset* não possui *missing values* e que, na análise ao atributo *Weekly\_Sales*, os valores variam entre o mínimo, -1699, e o máximo, 693099.36 obtendo-se uma média de 17320.86.

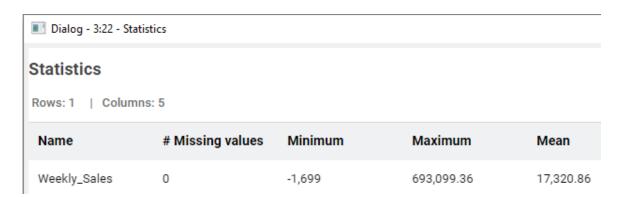


Figura 2.2: Mínimo, máximo e média dos valores de Weekly\_Sales.

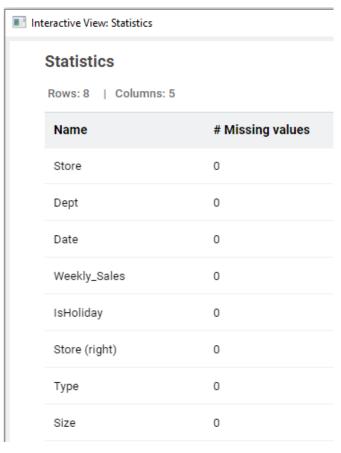


Figura 2.3: Ausência de missing values.

• No nodo **Data Explorer**, assim como no nodo *Statistics*, podemos obter estatísticas sobre os atributos bem como o histograma para cada um deles. A título de exemplo, segue abaixo o histograma do atributo *isHoliday*, onde podemos observar que a esmagadora maioria dos dias não são feriados comparativamente aos que são, como era expectável. Além disso, observa-se também, no histograma do atributo *Type* que os valores **A** e **B** aparecem numa proporção semelhante.

IsHoliday	0	2	FALSE, TRUE	
Туре	0	2	B, A	

Figura 2.4: Histograma de isHoliday e de Type.

• No nodo **Box Plot**, o objetivo passou por procurar **outliers** nos dados. Na imagem abaixo, podemos observar dois ou três **outliers** relativos ao atributo **Weekly\_Sales**, onde optei por não os remover do dataset.

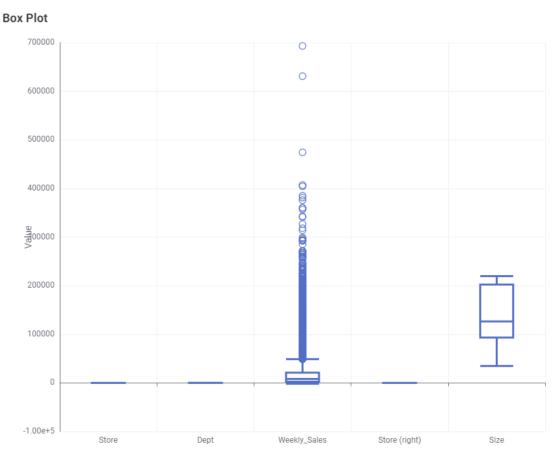


Figura 2.5: Deteção de outliers.

• No nodo *Rank Correlation*, procurou-se explorar a correlação entre todos os atributos (dois a dois) e percebe-se que os atributos *Type* e *Size* têm uma correlação negativa forte de -0.8672. Visto que foi feito um *Inner Join* entre as tabelas pelo atributo *Store*, como é de expectar, o atributo *Store* proveniente da primeira tabela tem uma correlação de 1 com o atributo *Store* (*right*) que é proveniente da segunda tabela.

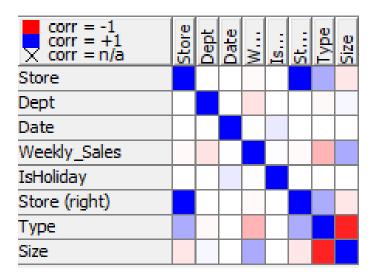


Figura 2.6: Correlação entre atributos.

#### 2.2 Tarefa 2 (tratamento de dados)

#### 2.2.1 Alínea a)

• Fazer label encoding à feature isHoliday (1 deve corresponder ao valor True);

Antes de mais, comecei por remover o atributo *Store (right)* visto ter os mesmos valores do atributo *Store*, através do nodo *Column Filter*. Para fazer *label encoding* à feature *isHoliday* utilizei dois nodos: *String Manipulation* e *String to Number*, onde no primeiro fiz uso da função *replace* de forma a passar as *strings* 'FALSE' e 'TRUE' para as *strings* '0' e '1', respetivamente. Já no nodo *String to Number*, o objetivo passou por associar as *strings* '0' e '1' aos inteiros 0 e 1, respetivamente.

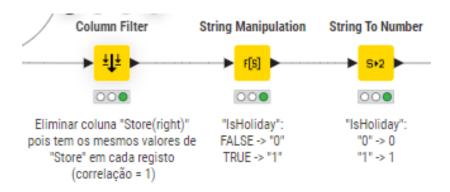


Figura 2.7: Workflow relativo à alínea a).

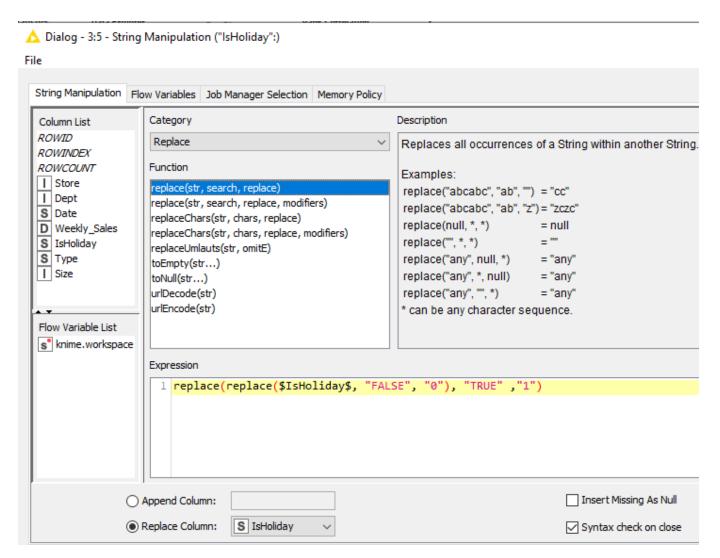


Figura 2.8: Configuração do nodo String Manipulation.

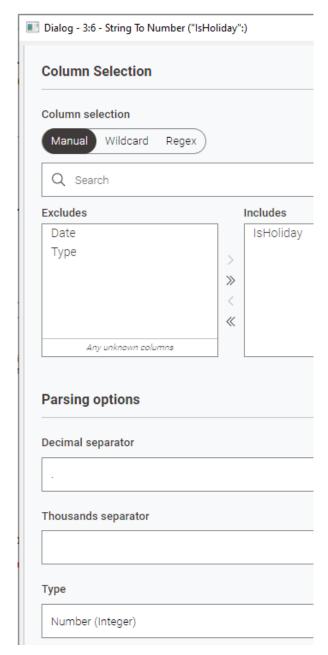


Figura 2.9: Configuração do nodo String to Number.

#### 2.2.2 Alínea b)

• Adicionar, a cada registo, as features ano e mês;

Para este exercício utilizei dois nodos: *String to DateTime* e *Extract DateTime fields*. O primeiro serviu para passar o atributo *Date* de *String* para *Date*, passando a estar no formato YYYY-MM-DD. Após isso, o nodo *Extract DateTime fields* serviu para extrair o ano e o mês do atributo *Date*, criando dois novos atributos: *Year* e *Month (number)*.

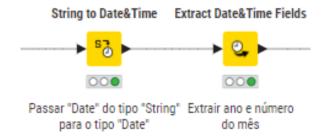


Figura 2.10: Workflow relativo à alínea b).

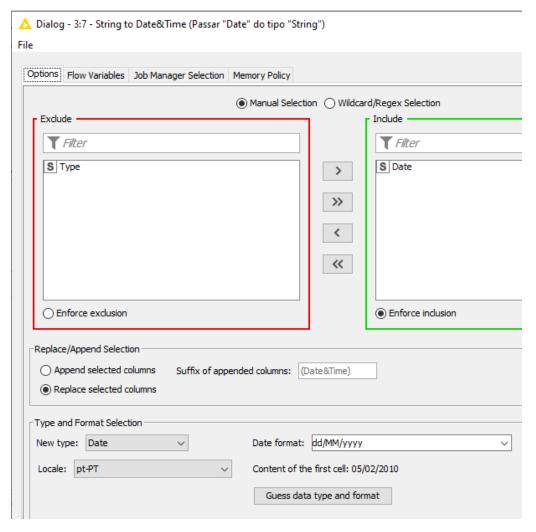


Figura 2.11: Configuração do nodo String to DateTime.

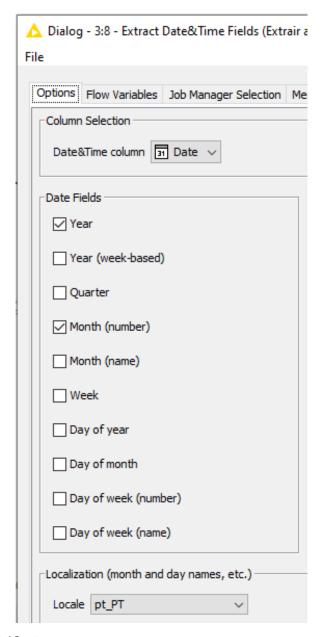
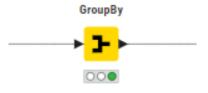


Figura 2.12: Configuração do nodo Extract DateTime Fields.

#### 2.2.3 Alínea c)

 Agrupar os registos por loja, tipo, tamanho, ano e mês, agregando de forma a obter o somatório das vendas semanais de cada loja e a indicação da existência de feriados nesse mês;

Para este exercício, fiz uso do nodo *GroupBy* configurado de forma a que os dados sejam agrupados pelas *features Store*, *Type*, *Size*, *Year* e *Month (number)* no sentido de obter o somatório das vendas semanais de cada loja e a indicação da existência de feriados nesse mês.



Por loja, tipo, tamanho, ano e mês: I Somatório das vendas semanais; Indicação da existência de feriados

Figura 2.13: Nodo *GroupBy*.

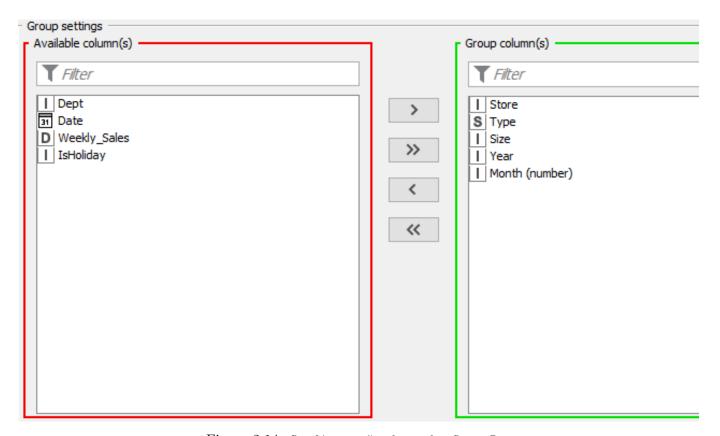


Figura 2.14: Configuração do nodo *GroupBy*.

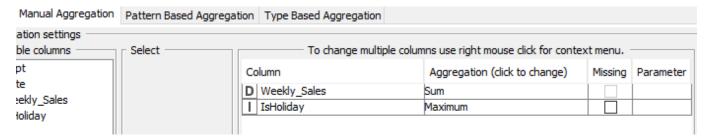


Figura 2.15: Configuração do nodo GroupBy.

#### 2.2.4 Alínea d)

• Normalizar o somatório das vendas semanais utilizando a transformação linear Min-Max entre 0 e 1;

Para normalizar o somatório das vendas semanais utilizando a transformação linear *Min-Max* entre 0 e 1, bastou usar o nodo *Normalizer* para o atributo  $Sum(Weekly\_Sales)$  com a transformação linear pedida.

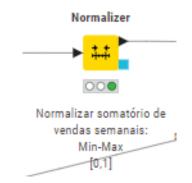


Figura 2.16: Nodo Normalizer.

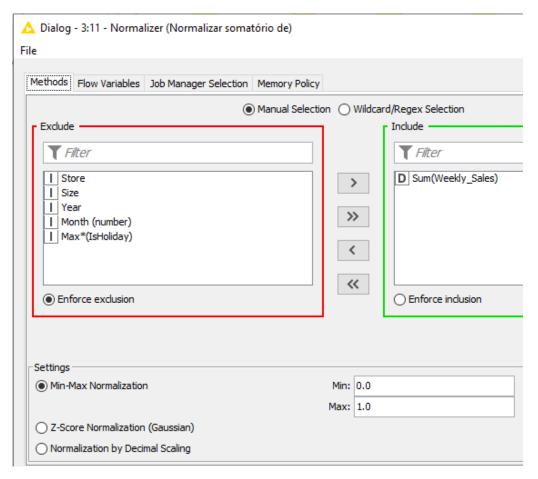


Figura 2.17: Configuração do nodo Normalizer.

#### 2.2.5 Alínea e)

• Criar 4 bins de igual frequência sobre o valor normalizado no passo anterior (ligando a opção replace  $target\ column(s)$ );

Para criar 4 bins de igual frequência sobre o atributo  $Sum(Weekly\_Sales)$ , utilizei o nodo Auto-Binner configurado como pedido no enunciado, nomeando também os bins como  $Bin\ 1$ ,  $Bin\ 2$ ,  $Bin\ 3$  e  $Bin\ 4$ .

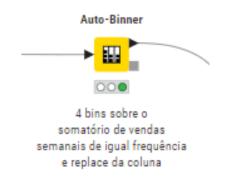


Figura 2.18: Nodo Auto-Binner.

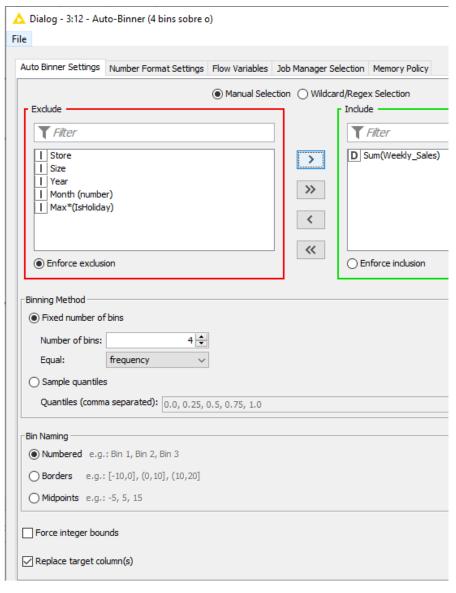


Figura 2.19: Configuração do nodo Auto-Binner.

#### 2.2.6 Alínea f)

• Renomear cada bin de forma a que o primeiro corresponda a Low, o segundo a Medium, o terceiro a High e o quarto a Very High.

Para renomear cada um dos bins em Low, Medium, High e Very High pela respetiva ordem, utilizei o nodo String Manipulation utilizando a função replace de forma recursiva para o efeito.

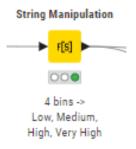


Figura 2.20: Nodo String Manipulation.

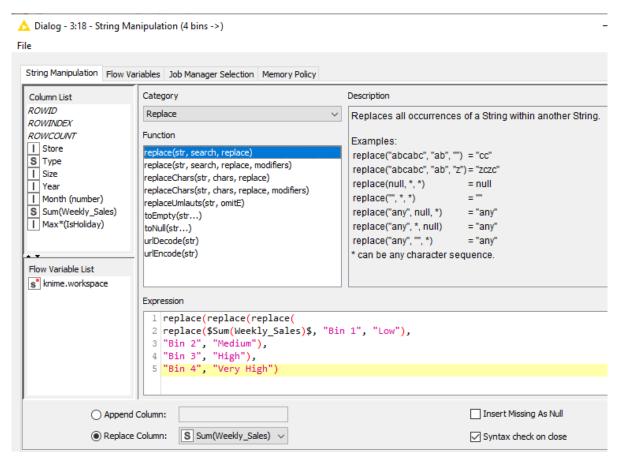


Figura 2.21: Configuração do nodo String Manipulation.

#### 2.3 Tarefa 3

#### 2.3.1 Alínea a)

#### • Treinar uma árvore de decisão;

Para treinar uma árvore de decisão utilizei o nodo *Decision Tree Learner* sobre os dados já tratados na tarefa anterior. Os parâmetros da atual árvore estão visíveis na imagem abaixo.

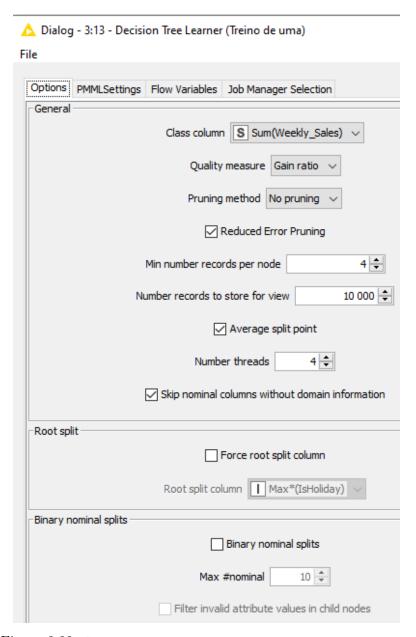


Figura 2.22: Configuração do nodo Decision Tree Learner.

# Treino de uma Árvore de Decisão

Figura 2.23: Nodo Decision Tree Learner.

#### 2.3.2 Alínea b)

• Carregar o dataset de teste e prever o valor de vendas de cada mês para cada uma das 17 lojas;

Neste exercício, como pedido, comecei por ler o dataset de teste através do nodo CSV Reader. Para prever o valor de vendas de cada mês para cada uma das 17 lojas, apliquei o nodo Decision Tree Predictor sobre os dados de teste com base no modelo treinado anteriormente.

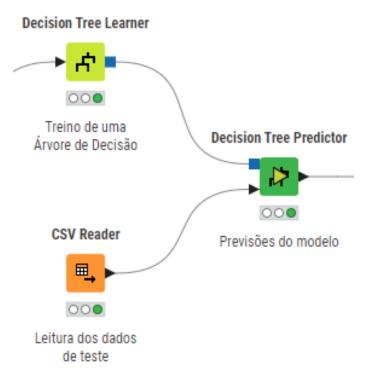


Figura 2.24: Workflow relativo à alínea b).

Month (number) Number (integer)	Sum(Weekly_Sales	) Prediction (Sum(Weekly_Sales))  String
6	Very High	High
7	High	High
8	Very High	High
9	High	High
10	High	High

Figura 2.25: Previsões relativas à loja Store = 1 (para o ano de 2012).

#### 2.3.3 Alínea c)

• Mostrar, graficamente, uma tabela com a matriz de confusão do modelo.

Para obter a matriz de confusão do modelo, fiz uso do nodo **Scorer** configurado de tal forma que a primeira coluna corresponde aos valores reais das vendas de cada loja em cada mês e a segunda coluna às previsões desses mesmos valores.

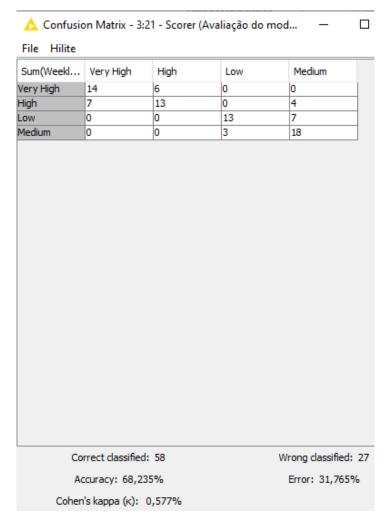


Figura 2.26: Matriz de confusão do modelo.

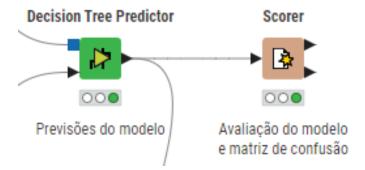


Figura 2.27: Workflow relativo à alínea c).

#### 2.4 Tarefa 4 (tuning do modelo criado)

#### 2.4.1 Alínea a)

• Experimentar todos os valores, entre 2 e 10, para o número mínimo de registos por nodo;

Neste exercício utilizei dois nodos, sendo eles: Parameter Optimization Loop Start e Parameter Optimization Loop End, onde, no primeiro, criei uma variável de fluxo minRegistos que vai percorrendo os valores inteiros de 2 a 10 e que está associada ao parâmetro minNumberRecords-PerNode do Decision Tree Learner. No final do loop, é possível ver a accuracy registada para cada valor do parâmetro, com os valores 3, 4, 5 e 6 a registarem a maior accuracy.

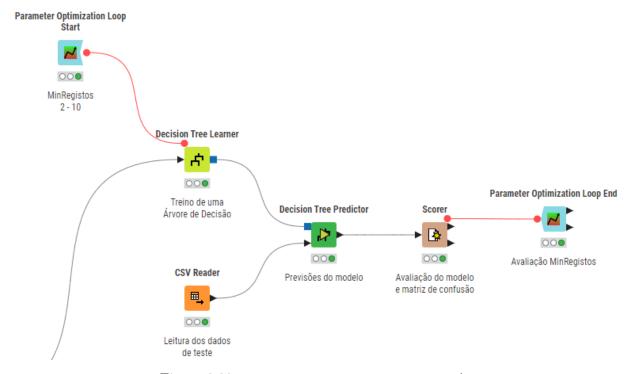
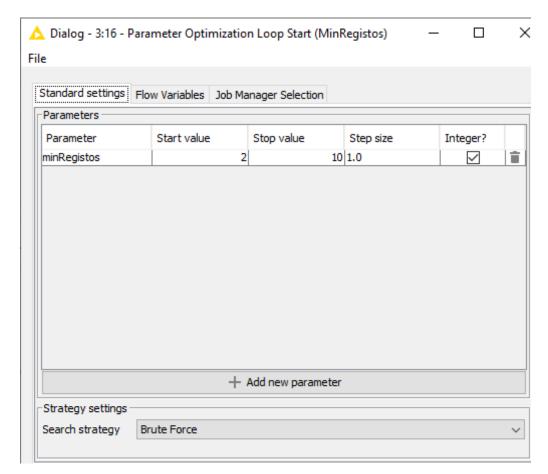


Figura 2.28: Workflow relativo à alínea a).



 $\label{eq:Figura 2.29: Configuração do nodo \textit{Parameter Optimization Loop Start.}$ 

Row	minRegistos Number (integer)	~	Objective value ↓ Number (double)
Row1	3		0.682
Row2	4		0.682
Row3	5		0.682
Row4	6		0.682
Row5	7		0.671
Row6	8		0.671
Row8	10		0.659
Row0	2		0.647
Row7	9		0.647

Figura 2.30: Accuracy para cada valor do pârametro.

#### 2.4.2 Alínea b)

#### • Experimentar todas as possibilidades para a medida de qualidade;

Para a realização deste exercício deste exercício decidi manter o valor do pârametro minNumberRe-cordsPerNode a 4 visto ter sido um dos valores com maior accuracy na alínea anterior. Após isso, utilizei o nodo  $Table\ Creator$  para criar uma tabela que associa à  $string\ qualityMeasure$  os valores  $Gain\ Ratio\ e\ Gini\ Index$ . Depois, utilizei o nodo  $Table\ Row\ to\ Variable\ Loop\ Start$  para criar a variável de fluxo com base na tabela definida anteriormente e associei-a ao parâmetro  $split\ Quality-Measure$  no  $Decision\ Tree\ Learner$ . No final do loop, é possível ver a accuracy registada para cada valor do parâmetro, com ambos os valores a registarem a mesma accuracy.

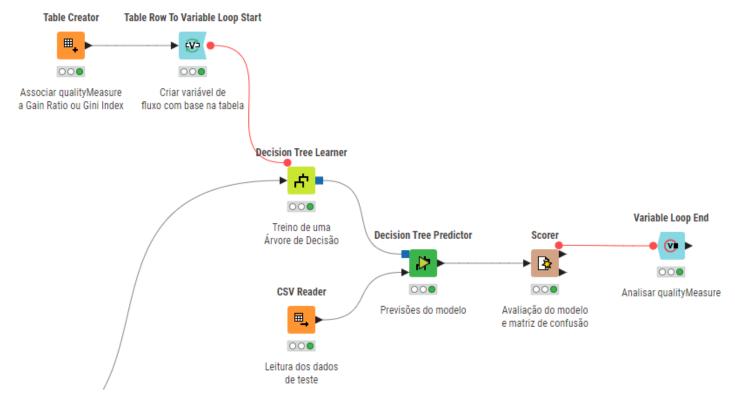


Figura 2.31: Workflow relativo à alínea b).

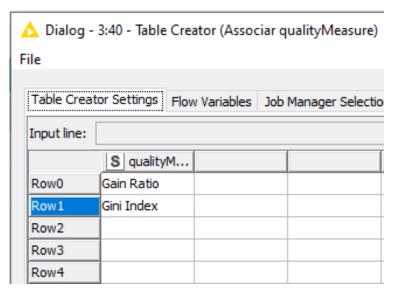


Figura 2.32: Configuração do nodo Table Creator.

Accuracy Number (double)	~	qualityMeasure String
0.682		Gain Ratio
0.682		Gini Index

Figura 2.33: Accuracy para cada valor do parâmetro.

#### 2.4.3 Alínea c)

#### • Experimentar todas as possibilidades para o método de pruning;

Para a realização deste exercício deste exercício decidi manter o valor do pârametro minNumberRe-cordsPerNode a 4 e a medida de qualidade como  $Gain\ Ratio$ , visto serem alguns dos parâmetros que registaram maior accuracy nas alíneas anteriores. Após isso, utilizei o nodo  $Table\ Creator$  para criar uma tabela que associa à  $string\ pruningMethod$  os valores  $No\ pruning$  e MDL. Depois, utilizei o nodo  $Table\ Row\ to\ Variable\ Loop\ Start$  para criar a variável de fluxo com base na tabela definida anteriormente e associei-a ao parâmetro pruningMethod no  $Decision\ Tree\ Learner$ . No final do loop, é possível ver a accuracy registada para cada valor do parâmetro, com o valor MDL a registar uma accuracy superior.

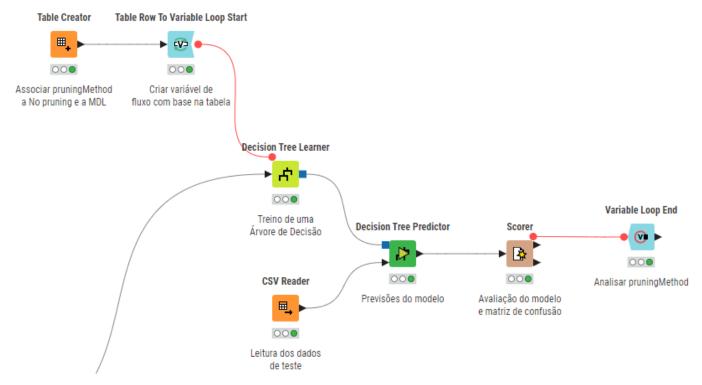


Figura 2.34: Workflow relativo à alínea c).

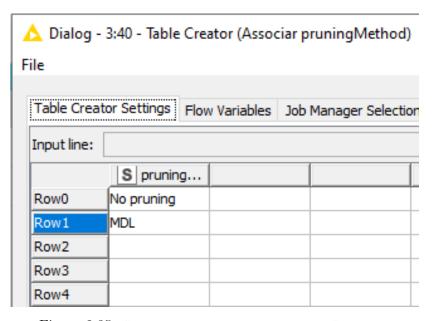


Figura 2.35: Configuração do nodo Table Creator.

Accuracy ↓ Number (double)	~	pruningMethod String
0.706		MDL
0.682		No pruning

Figura 2.36: Accuracy para cada valor do parâmetro.

#### 2.4.4 Alínea d)

• Fazer o tuning dos parâmetros anteriores num único workflow. Guardar e analisar todos os resultados obtidos para cada combinação de hiper-parâmetros. Qual a combinação que oferece melhor performance? Existem grandes discrepâncias?

Para fazer o tuning completo dos parâmetros anteriores num único workflow, utilizei o nodo Table Creator onde expus em cada linha da tabela uma combinação possível dos parâmetros, onde, no final, obtive todas as 36 combinações possíveis dos 3 parâmetros anteriores. De lembrar que isto apenas é possível, sem grande trabalho, visto que não temos um número muito grande de combinações possíveis, caso contrário, seria boa ideia utilizar antes loops de loops. Após isso, criei 3 variáveis de fluxo com base nessa tabela que vão alterando o seu valor a cada iteração do loop e associei-as ao respetivos parâmetros no Decision Tree Learner. No final, é possível observar a accuracy de todas as combinações de hiper-parâmetros, onde, neste caso, o maior valor para a accuracy foi 0.706 que aparece em 6 combinações diferentes, todas com um denominador comum: método de pruning MDL e número mínimo de registos por nodo entre 2 e 4. A combinação com pior accuracy registou um valor 0.647, cerca de 6 pontos percentuais abaixo da combinação com melhor accuracy, havendo uma pequena variação mas não extremamente grande.

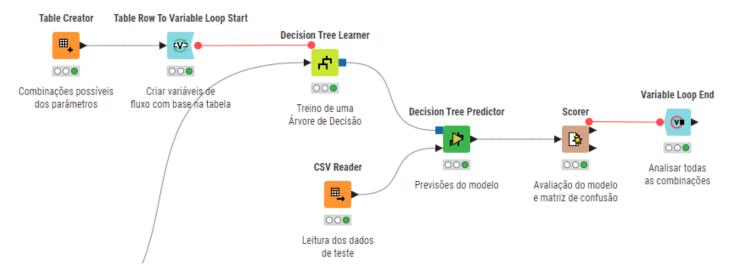


Figura 2.37: Workflow relativo à alínea d).

	minRegis	S qualityM	S pruning		
Row0	2	Gain Ratio	No pruning		
Row1	2	Gain Ratio	MDL		
Row2	2	Gini Index	No pruning		
Row3	2	Gini Index	MDL		
Row4	3	Gain Ratio	No pruning		
Row5	3	Gain Ratio	MDL		
Row6	3	Gini Index	No pruning		
Row7	3	Gini Index	MDL		
Row8	4	Gain Ratio	No pruning		
Row9	4	Gain Ratio	MDL		
Row 10	4	Gini Index	No pruning		
Row11	4	Gini Index	MDL		
Row12	5	Gain Ratio	No pruning		
Row13	5	Gain Ratio	MDL		
Row14	5	Gini Index	No pruning		
Row15	5	Gini Index	MDL		
Row16	6	Gain Ratio	No pruning		
Row17	6	Gain Ratio	MDL		
Row 18	6	Gini Index	No pruning		
Row19	6	Gini Index	MDL		
Row20	7	Gain Ratio	No pruning		
Row21	7	Gain Ratio	MDL		
Row22	7	Gini Index	No pruning		

Figura 2.38: Algumas das combinações no nodo Table Creator.

Accuracy ↓ Number (double)	~	minRegistos Number (integer)	~	qualityMeasure String	~	pruningMethod String
0.706		2		Gain Ratio		MDL
0.706		2		Gini Index		MDL
0.706		3		Gain Ratio		MDL
0.706		3		Gini Index		MDL
0.706		4		Gain Ratio		MDL
0.706		4		Gini Index		MDL
0.682		3		Gain Ratio		No pruning

Figura 2.39: Combinações com melhor accuracy.

#### 2.5 Tarefa 5

• Treinar e fazer o *tuning* de uma *Random Forest*. Guardar e analisar todos os resultados obtidos para cada combinação de hiper-parâmetros;

No que diz respeito a treinar uma Random Forest, utilizei o nodo Random Forest Learner nos dados já tratados e conectei o modelo desenvolvido ao nodo Random Forest Predictor que por sua vez está associado aos dados de teste, que são os dados que queremos prever. Para fazer o turing da Random Forest, utilizei o nodo **Table Creator** onde criei uma coluna que associa a string splitCriterion aos 3 valores possíveis que este parâmetro pode ter na configuração da Random Forest (Information Gain, Information Gain Ratio e Gini Index), onde, neste caso, coloquei os valores sem espaços e relativamente ao valor Gini Index, coloquei apenas Gini. Depois, através do nodo Table Row to Variable Loop Start, criei uma variável de fluxo que percorrerá estes 3 possíveis valores. Relativamente aos parâmetros numéricos, utilizei o loop Parameter Optimization composto pelos nodos Parameter Optimization Loop Start e Parameter Optimization Loop End, onde, no primeiro, adicionei 3 variáveis de fluxo: nTrees (inteiro que varia de 1 a 20), nLevels (inteiro que varia de 1 a 20) e minNodeSize (inteiro que varia de 2 a 10) que controlam os parâmetros da Random Forest: Number of models, Limit number of levels (tree depth) e Minimum node size, respetivamente. Depois, no nodo Parameter Optimization Loop End, é possível observar a accuracy que teve qualquer combinação dos parâmetros numéricos e através do nodo Table Row to Variable transformamos a combinação de paramêtros numéricos que teve melhor accuracy em variáveis de fluxo que serão depois iteradas com os diferentes valores do parâmetro nominal. Após isso, no nodo Variable Loop End, conseguimos ver qual a combinação hiper-parâmetro que obteve melhor accuracy que neste caso foi de **0.718**.

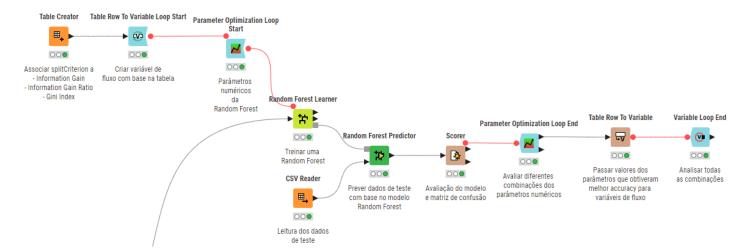


Figura 2.40: Workflow relativo à Tarefa 5.

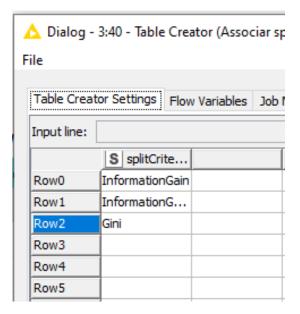


Figura 2.41: Configuração do nodo Table Creator.

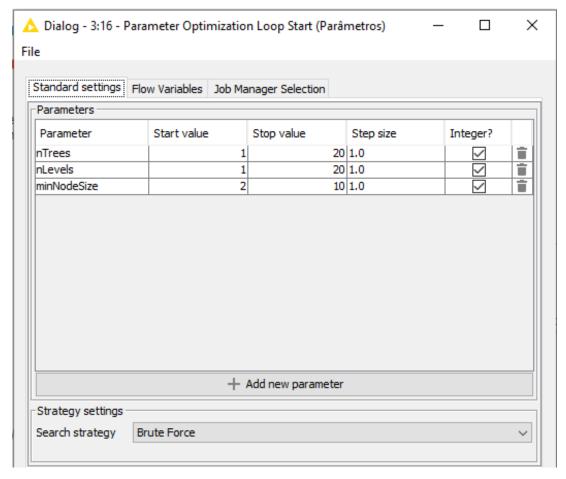


Figura 2.42: Configuração do nodo Parameter Optimization Loop Start.

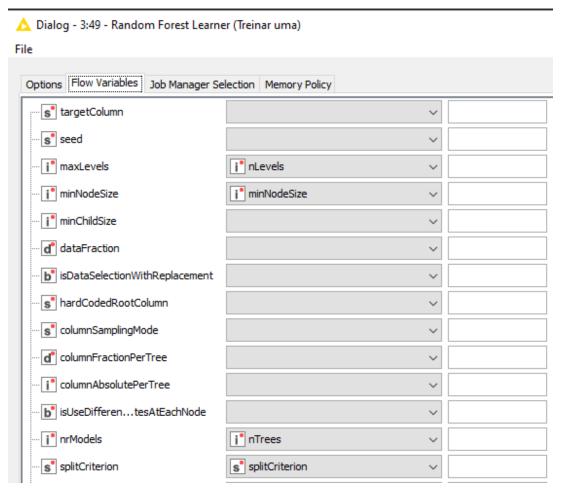


Figura 2.43: Uso das variáveis de fluxo no nodo Random Forest Learner.

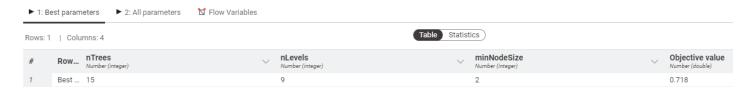


Figura 2.44: Melhor combinação de parâmetros numéricos.

<b>nTrees</b> Number (integer)	v nLevels Number (integer)	winNodeSize Number (integer)	Objective value ↓ Number (double)	splitCriterion String
8	7	2	0.718	InformationGainRatio
15	9	2	0.718	Gini
8	7	2	0.706	InformationGain

Figura 2.45: Melhores combinações de todos os parâmetros.

#### 2.6 Tarefa 6

Analisar e comparar as performances dos modelos treinados na Tarefa 4 e na Tarefa
5. Que conclusões se podem tirar?

Comparando as duas performances dos dois modelos, percebemos que há um ganho de accuracy muitíssimo pequeno no modelo de  $Random\ Forest$  comparativamente ao modelo de  $Decision\ Tree$ . No primeiro, uma das melhores combinações de valores hiper-parâmetro foi:

- Número mínimo de registos por nodo: 7;
- Medida de qualidade: *Gain Ratio*;
- Método de pruning: **MDL**;
- Accuracy: 70,6%.

Já no modelo de Random Forest, uma das melhores combinações de valores hiper-parâmetro foi:

- Número de modelos: 15;
- Número máximo de níveis (tree depth): 9;
- Tamanho mínimo do nodo: 2;
- Critério de divisão: Gini Index;
- Accuracy: 71,8%.

Como frisado anteriormente, a accuracy obtida no modelo de  $Random\ Forest$  é superior, mas o ganho é muito ligeiro.

# 2.7 Workflow completo para o caso de uma Random Forest (com uso de meta-nodos)

De notar que, no meta-nodo **Leitura e tratamento de dados**, estão presentes todas as tarefas até à Tarefa 2 (inclusivamente), exceto os nodos referentes às vistas gráficas para análise dos dados, como pedido na Tarefa 1, que estão no meta-nodo **Exploração dos dados**. No que toca a treino e *tuning* de um modelo, está ilustrada a parte relativa à *Random Forest*, visto ter sido realizada com ciclos de ciclos (ao contrário da *Decision Tree*) e de ter registado uma *accuracy*, após o *tuning* hiper-parâmetro, ligeiramente superior.

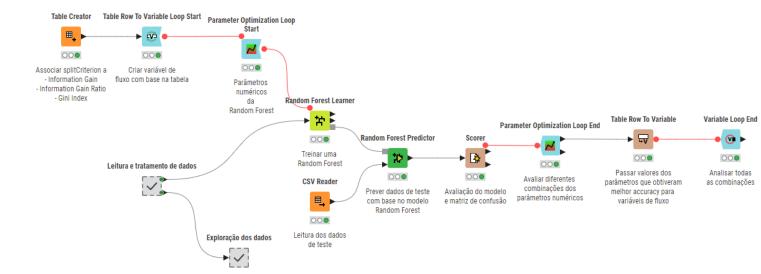


Figura 2.46: Workflow completo com tuning de uma Random Forest.