Raport 3

Eksploracja danych

Mikołaj Langner, Marcin Kostrzewa nr albumów: 255716, 255749

2021-05-28

Spis treści

1	\mathbf{Wstep}	Wstęp									
2	Zadanie 1	Zadanie 1									
	2.1 Wczytanie	e danych i podział na zbiór uczący i testowy	. 2								
		cja klasyfikatora i wyznaczenie prognoz									
	2.3 Ocena jak	rości klasyfikacji	. 4								
	2.4 Zastosowa	anie regresji liniowej do modelu o rozszerzonej ilości cech	. 4								
	2.5 Wnioski		. (
3	Zadanie 2		,								
	3.1 Wczytanie	e i krótka anliza danych									
	•	-najbliższych sąsiadów									
		lasyfikacyjne									
		lasyfikator bayesowski									
	·	owa regresja logistyczna									
		wanie									

1 Wstęp

Raport zawiera rozwiązania listy 3.

W zadaniu pierwszym zbudujemy klasyfikator na bazie metody regresji liniowej i oceniamy jego skuteczność i dokładność.

W zadaniu drugim porównamy ze sobą rezultaty zastosowania następujących metod klasyfikacji:

- metoda k-najblizszych sasiadów (k-Nearest Neighbors),
- drzewa klasyfikacyjne (classification trees),

- naiwny klasyfikator bayesowski (naïve Bayes classifier),
- wieloklasowa regresja logistyczna (multinomial logistic regression).

2 Zadanie 1

2.1 Wczytanie danych i podział na zbiór uczący i testowy

Wczytajmy dane o irysach i podzielmy je na zbiór uczący i testowy w proporcji 1 : 2.

```
data(iris)
n <- dim(iris)[1]

train.set.index <- sample(1:n, 2/3*n)
train.set <- iris %>% slice(train.set.index) %>% arrange(Species)
test.set <- iris %>% slice(-train.set.index) %>% arrange(Species)
```

2.2 Konstrukcja klasyfikatora i wyznaczenie prognoz

Stworzymy teraz macierze eksperymentu i wskaźnikową zarówno dla zbioru uczącego, jak i testowego. W tym celu wykorzystamy funkcję dummyVars z pakietu caret.

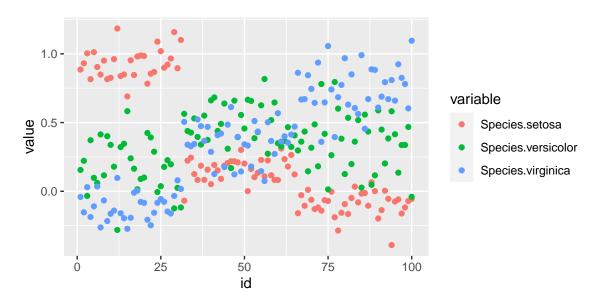
Wykorzystując metodę najmniejszych kwadratów, wyznaczamy przewidywane prognozy klas dla obu zbiorów.

```
Y.hat <- solve(t(train.X) %*% train.X) %*% t(train.X) %*% train.Y

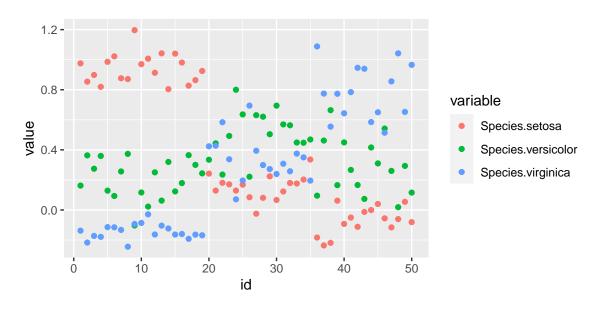
train.proba <- train.X %*% Y.hat

test.proba <- test.X %*% Y.hat
```

Przedstawmy prognozy klas na wykresach.



Rysunek 1: Prognozy klas dla zbioru uczacego.



Rysunek 2: Prognozy klas dla zbioru testowego.

2.3 Ocena jakości klasyfikacji

Wyznaczmy teraz macierz pomyłek dla zbioru uczącego.

	Species.setosa	Species.versicolor	Species.virginica
setosa	31	0	0
versicolor	0	20	14
virginica	0	3	32

Tabela 1: Macierz pomylek dla zbioru uczacego.

Błąd klasyfikacji to 0.17.

Podobnie, wyznaczymy teraz macierz pomyłek dla zbioru testowego.

	Species.setosa	Species.versicolor	Species.virginica
setosa	19	0	0
versicolor	0	13	3
virginica	0	2	13

Tabela 2: Macierz pomylek dla zbioru testowego.

Bład klasyfikacji wynosi 0.1.

Przypatując się wykresom (1), (2) możemy zauważyć, że zachodzi zjawisko maskowania — klasa versicolor jest przysłaniana.

2.4 Zastosowanie regresji liniowej do modelu o rozszerzonej ilości cech

Najpierw uzupełnijmy dane o irysach o składniki wielomianowe stopnia 2.

Podobnie jak poprzednio podzielimy dane na zbiory: uczący i testowy, a następnie utworzymy macierze: eksperymentu i indykatorów.

```
train.set.index <- sample(1:n, 2/3*n)
train.set <- iris %>% slice(train.set.index) %>% arrange(Species)
test.set <- iris %>% slice(-train.set.index) %>% arrange(Species)
dummies <- dummyVars(" ~ .", data=iris)</pre>
```

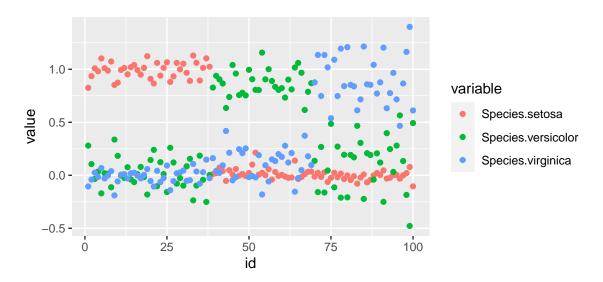
```
train.dummies <- predict(dummies, newdata = train.set)
train.X <- as.matrix(cbind(rep(1, nrow(train.dummies)), train.dummies[, -c(5:7)]))
train.Y <- train.dummies[, 5:7]
test.dummies <- predict(dummies, newdata = test.set)
test.X <- as.matrix(cbind(rep(1, nrow(test.dummies)), test.dummies[, -c(5:7)]))
test.Y <- test.dummies[, 5:7]</pre>
```

Ponownie, wyznaczymy prognozy klas i zwizualizujemy to przypisanie na wykresach.

```
Y.hat <- solve(t(train.X) %*% train.X) %*% t(train.X) %*% train.Y

train.proba <- train.X %*% Y.hat

test.proba <- test.X %*% Y.hat
```



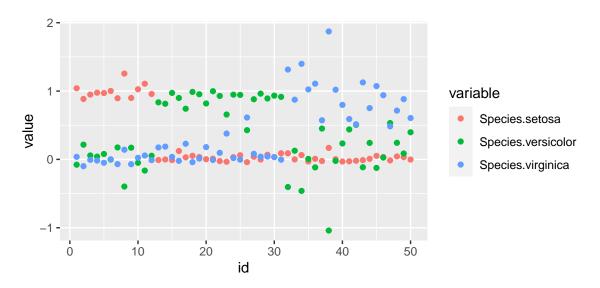
Rysunek 3: Prognozy klas dla zbioru uczacego o rozszerzonej liczbie cech.

Wyznaczymy także macierze pomyłek i błędy klasyfikacji.

	Species.setosa	Species.versicolor	Species.virginica
setosa	38	0	0
versicolor	0	31	0
virginica	0	1	30

Tabela 3: Macierz pomylek dla zbioru uczacego dla przypadku o rozszerzonej liczbie cech.

Błąd klasyfkacji wynosi 0.01.



Rysunek 4: Prognozy klas dla zbioru uczacego o rozszerzonej liczbie cech.

	Species.setosa	Species.versicolor	Species.virginica
setosa	12	0	0
versicolor	0	18	1
virginica	0	1	18

Tabela 4: Macierz pomylek dla zbioru testowego dla przypadku o rozszerzonej liczbie cech.

Błąd klasyfikacji wynosi 0.04.

Po przeanalizowaniu wykresów (3) i (4) dochodzimy do wniosku, że w tym przypadku zjawisko maskowania klas zostało zniwelowane.

2.5 Wnioski

Przede wszystkim zauważamy, że model oparty na rozszerzonej ilości cech dał znacznie lepsze rezultaty — błędy klasyfikacji były mniejsze zarówno dla zbioru uczącego, jak i testowego. W drugim modelu nie wystąpiło także zjawisko maskowania.

3 Zadanie 2

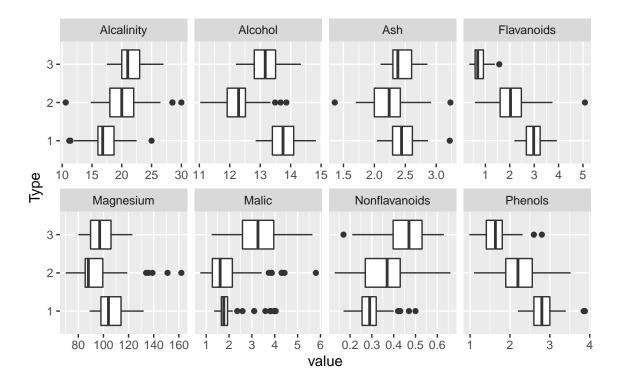
3.1 Wczytanie i krótka anliza danych

Wczytajmy i zapoznajmy się z danymi.

```
data(wine)
n <- dim(wine)[1]
variable.number <- ncol(wine)
observations.number <- nrow(wine)
NaN.number <- sum(is.na(wine))
class.number <- length(unique(wine$Type))</pre>
```

Mamy 14 zmiennych i 178 obserwacji. Są trzy klasy, informację o nich zawiera zmienna Type. Nie występują wartości brakujące (NaN. number = 0).

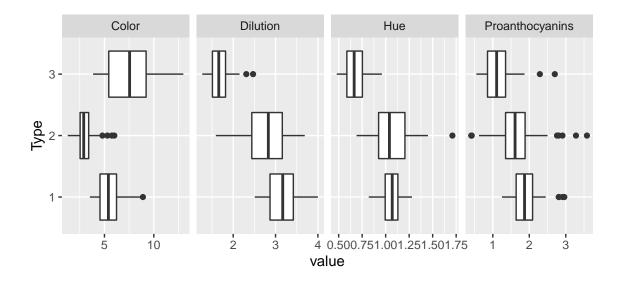
Przyjrzyjmy się naszym danym na wykresach pudełkowych — wykresy (5) i (6).



Rysunek 5: Wykresy pudelkowe naszych danych.

Możemy zauważyć, że zmiennymi, które dobrze dywersyfikują klasy są: Alcohol, Flavanoids i Phenols.

Podzielimy nasze dane na zbiór uczący i testowy w stosunku 2 : 1. Utworzymy także podzbiory, które będą zawierać tylko najlepiej dywersyfikujące cechy.



Rysunek 6: Wykresy pudelkowe naszych danych.

```
set.seed(42)
train.index <- sample(n, 2/3 * n)
train.data <- wine %>% slice(train.index)
test.data <- wine %>% slice(-train.index)
train.subset <- data.frame(train.data[, c(1, 2, 7, 8)])
test.subset <- data.frame(test.data[, c(1, 2, 7, 8)])</pre>
```

Zdefiniujmy też od razu rzeczywiste etykietki klas dla wcześniej utworzonych zbiorów.

```
train.etiquettes <- train.data$Type
test.etiquettes <- test.data$Type
subset.train.etiquettes <- train.subset$Type
subset.test.etiquettes <- test.subset$Type</pre>
```

Poniżej tworzymy także obiekt trainControl, który wykorzystamy przy przeprowadzaniu 5-krotnej walidacji krzyżowej.

```
cv <- trainControl(method="cv", number=5)</pre>
```

3.2 Metoda k-najbliższych sąsiadów

Na początku wytrenujmy nasz klasyfikator na zbiorze uczącym zawierającym wszystkie cechy (przyjmujemy k = 5).

```
model.knn.basic <- ipredknn(Type ~ ., data = train.data, k=5)
basic.knn.test.pred <- predict(model.knn.basic, test.data, type="class")
basic.knn.train.pred <- predict(model.knn.basic, train.data, type="class")</pre>
```

Wyznaczmy dla niego macierze pomyłek.

	1	2	3			1	2	3
1	32	5	1		1	21	1	2
2	2	39	8		2	0	15	9
3	2	7	22		3	2	4	6
(a) Zbior uczacy					(b)	Zbio	r test	owy

Tabela 5: Macierze pomylek dla metody KNN — wszystkie cechy.

Błędy klasyfikacji to 0.2118644 i 0.3.

Teraz stworzymy klasyfikator na zbiorze uczącym zawierającym wybrane cechy (przyjmujemy k=5).

```
knn.model.subset <- ipredknn(Type ~ ., data = train.subset, k=5)
subset.knn.test.pred <- predict(knn.model.subset, test.subset, type="class")
subset.knn.train.pred <- predict(knn.model.subset, train.subset, type="class")</pre>
```

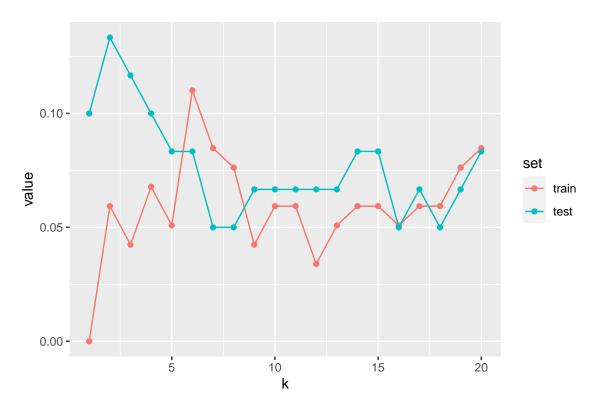
Macierze pomyłek wyglądają następująco:

	1	2	3			1	2	3
1	35	3	0		1	22	2	0
2	1	46	0		2	1	16	0
3	0	2	31		3	0	2	17
(a) Zbior uczacy					(b) Zbic	or test	owy

Tabela 6: Macierze pomylek dla metody KNN — wybrance cechy.

Błędy klasyfikacji to 0.0508475 i 0.0833333.

Widzimy, że klasyfikator wyćwiczony na train.subset poradził sobie lepiej. Zobaczmy więc jak zmienia się błąd klasyfikacji w zależności od parametru k na zbiorze z ograniczoną liczbą cech.



Rysunek 7: Blad klasyfikacji w zaleznosci od parametru k.

Widzimy, że najlepsze rezultaty otrzymujemy dla k = 9.

Wykorzystamy teraz pakiet caret do stworzenia modelu stuningowanego. By taki model powstał, wykorzystamy 5-krotną walidację krzyżową.

```
model <- train(Type ~ ., data = train.subset, method = "knn", trControl = cv)
tuned.knn.test.pred <- predict(model, test.data)
tuned.knn.train.pred <- predict(model, train.data)</pre>
```

Jak się okazuje, model ten również przyjmuje k = 9.

Dla tego klasyfikatora także wyznaczymy macierze pomyłek i błędy klasyfikacji.

	1	2	3			1	2	3
1	35	2	0		1	23	2	0
2	1	47	0		2	0	18	2
3	0	2	31		3	0	0	15
(a) Zbior uczacy					(b) Zbio	or test	lowy

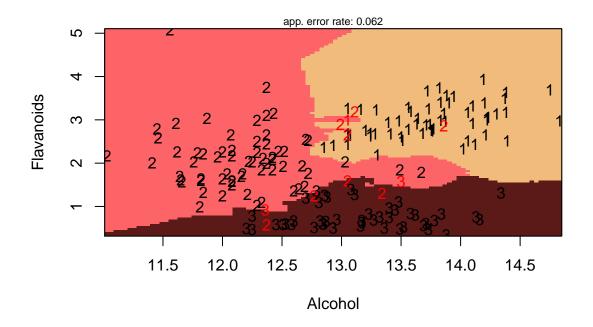
Tabela 7: Macierze pomylek dla metody KNN — stuningowany model.

Błędy klasyfikacji to 0.0423729 i 0.0666667.

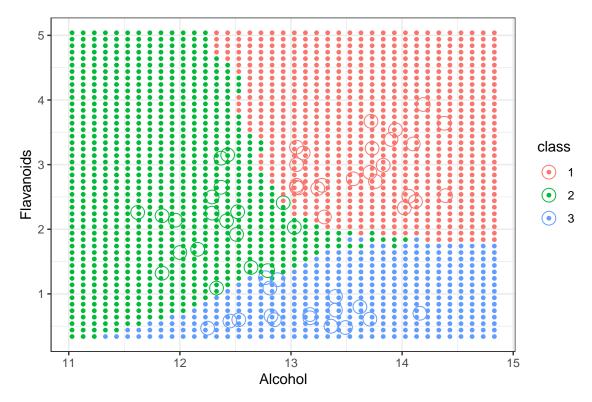
Jak widzimy model stuningowany poradził sobie najlepiej. Wyznaczymy teraz dla niego błąd predykcji — skorzystamy z 5-krotnej walidacji krzyżowej, metody bootstrap oraz .632+.

Błędy wyniosły kolejno 0.0842697, 0.1011415 oraz 0.0822332.

```
library(klaR)
```



```
ggplot() +
  geom_point(aes(x=Alcohol, y=Flavanoids, col = class), data = df1, size = 1) +
  geom_point(aes(x = x, y = y, col = class), data = df2, size = 4.5, shape = 1) +
  theme_bw()
```



3.3 Drzewa klasyfikacyjne

Najpierw wytrenujemy model na zbiorze uczącym zawierającym wszystkie cechy.

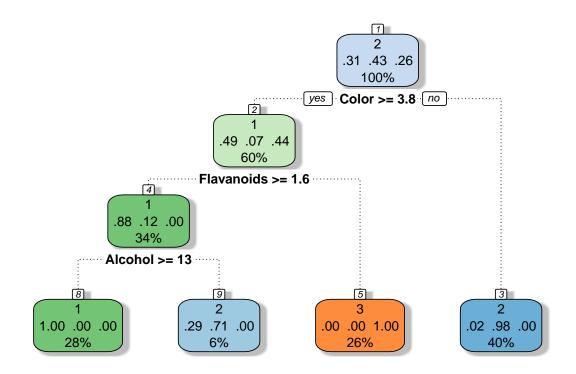
To drzewo klasyfikacyjne wygląda następująco (8).

Wyznaczymy dla tego modelu macierze pomyłek i błędy klasyfikacji.

Błędy klasyfikacji to 0.0254237 i 0.1333333.

Teraz stworzymy model, który wytrenujemy na train.subset.

```
subset.tree.model <- rpart(Type ~ ., data = train.subset)</pre>
```



Rysunek 8: Drzewo decyzyjne — wszystkie cechy.

	1	2	3			1	2	3
1	33	0	0		1	17	1	0
2	3	51	0		2	6	18	0
3	0	0	31		3	0	1	17
(a) Zbior uczacy					(b)) Zbic	or test	owy

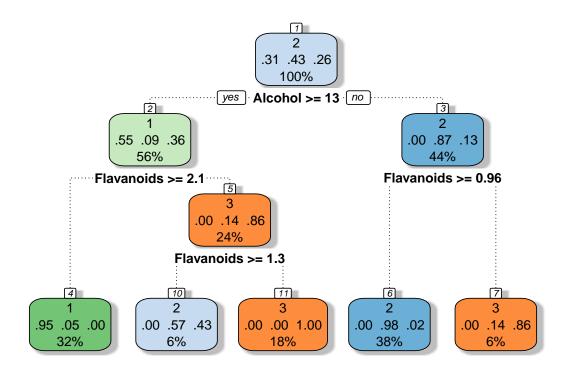
Tabela 8: Macierze pomylek dla metody drzew klasyfikacyjnych — wszystkie cechy.

To drzewo decyzyjne wygląda następująco (9).

Podobnie jak wczęśniej, wyznaczymy dla niego macierze pomyłek i błędy klasyfikacji.

Błędy klasyfikacji to 0.059322 i 0.0666667.

Ponownie stworzymy stuningowany model, zmieniając parametr cp, przy pomocy 5-krotnej walidacji krzyżowej.



Rysunek 9: Drzewo decyzyjne — wybrane cechy.

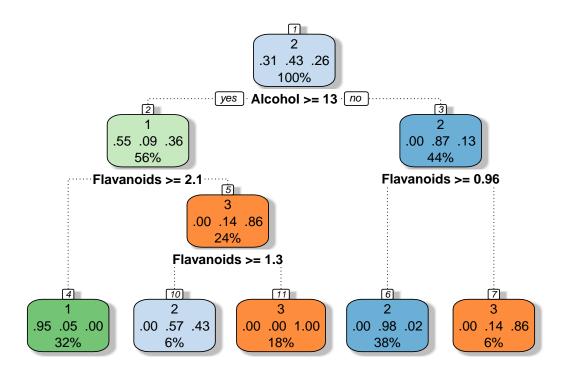
	1	2	3			1	2	3
1	36	2	0		1	23	2	0
2	0	48	4		2	0	17	1
3	0	1	27		3	0	1	16
(a) Zbior uczacy					(b) Zbio	or test	towy

Tabela 9: Macierze pomylek dla metody drzew klasyfikacyjnych — wybrane cechy.

Błędy klasyfikacji to 0.059322 i 0.0666667.

Zobaczmy jak wpłynie na model wytrenowany na train.subset zmiana parametrów drzewa — tabela (11).

```
search_grid <- expand.grid(cp=seq(0,0.1,0.001))
best.model.tree <- train(Type ~., data = train.subset, method = "rpart",</pre>
```



Rysunek 10: Drzewo decyzyjne — stunigowany model.

	1	2	3			1	2	3
1	36	2	0		1	23	2	0
2	0	48	4		2	0	17	1
3	0	1	27		3	0	1	16
(a) Zbior uczacy					(b) Zbic	or test	owy

Tabela 10: Macierze pomylek dla metody drzew klasyfikacyjnych — stuningowany model.

```
trControl = cv, tuneGrid = search_grid)
a <- best.model.tree$results %>% top_n(5, wt = Accuracy) %>%
arrange(desc(Accuracy))
```

	cp	Accuracy	Kappa	AccuracySD	KappaSD
1	0.000	0.859	0.789	0.147	0.218
2	0.001	0.859	0.789	0.147	0.218
3	0.002	0.859	0.789	0.147	0.218
4	0.003	0.859	0.789	0.147	0.218
5	0.004	0.859	0.789	0.147	0.218

Tabela 11: 5 najlepszych modeli drzewa decyzyjnego.

Widzimy, że najlepsze reultaty otrzymujemy dla cp = 0 — drzewa nie trzeba w ogóle przycinać.

Jak widzimy model stuningowany poradził sobie najlepiej. Wyznaczymy teraz dla niego błąd predykcji — skorzystamy ponownie z 5-krotnej walidacji krzyżowej, metody bootstrap oraz .632+.

```
predictor <- function(model, newdata)</pre>
{ predict(model, newdata=newdata, type = "class") }
decision.tree.predictor <- function(formula, data)</pre>
{ rpart(formula, data = data, cp = 0)}
decision.tree.error.cv <- errorest(Type~., wine[, c(1, 2, 7, 8)],
                                   model=decision.tree.predictor,
                                   predict=predictor, estimator="cv",
                                    est.para=control.errorest(k = 5))
decision.tree.error.boot <- errorest(Type~., wine[, c(1, 2, 7, 8)],
                                     model=decision.tree.predictor,
                                     predict=predictor, estimator="boot",
                                     est.para=control.errorest(nboot = 25))
decision.tree.error.632 <- errorest(Type~., wine[, c(1, 2, 7, 8)],
                                     model=decision.tree.predictor,
                                     predict=predictor, estimator="632plus",
                                      est.para=control.errorest(nboot = 25))
```

Błędy wyniosły kolejno 0.1067416, 0.1119916 oraz 0.0940631.

3.4 Naiwny klasyfikator bayesowski

Najpierw wytrenujemy model na zbiorze uczącym zawierającym wszystkie zmienne.

```
bayes.model.basic <- naiveBayes(Type ~ ., data = train.data)
basic.bayes.train.pred <- predict(bayes.model.basic, train.data)
basic.bayes.test.pred <- predict(bayes.model.basic, test.data)</pre>
```

Wyznaczmy dla tego modelu macierze pomyłek i wartości błędów klasyfikacji.

Błędy klasyfikacji to kolejno 0.0084746 i 0.0333333.

Powtórzmy teraz powyższe dla wybranego podzbioru naszych danych.

```
bayes.model.subset <- naiveBayes(Type ~ ., data = train.subset)
bayes.subset.train.pred <- predict(bayes.model.subset, train.subset)
bayes.subset.test.pred <- predict(bayes.model.subset, test.subset)</pre>
```

	1	2	3		1	2	3
1	36	0	0	1	22	1	0
2	0	50	1	2	0	19	1
3	0	0	31	3	0	0	17
(a) Zbior uczacy				(b) Zbic	or test	towy

Tabela 12: Macierze pomylek dla klasyfikatora bayesowskiego — wszystkie cechy.

	1	2	3		1	2	3
1	34	2	0	1	20	3	0
2	2	47	2	2	2	17	1
3	0	1	30	3	0	0	17
(a) Zbior uczacy				(b) Zbio	or test	towy

Tabela 13: Macierze pomylek dla klasyfikatora bayesowskiego — wybrane cechy.

Błędy klasyfikacji to kolejno 0.059322 i 0.1.

Ponownie skorzystamy z pakietu caret, by stworzyć model stunigowany, wytrenowany na wsszystkich cechach. Wyznaczymy dla niego macierze pomyłek i błędy klasyfikacji.

	1	2	3			1	2	3
1	36	0	0		1	22	1	0
2	0	50	1		2	0	19	1
3	0	0	31		3	0	0	17
(a	(a) Zbior uczacy				(b) Zbio	or test	owy

Tabela 14: Macierze pomylek dla klasyfikatora bayesowskiego — model stuningowany.

Błędy klasyfikacji w tym przypadku to kolejno 0.0084746 i 0.0333333.

Widzimy, że poradził on sobie najlepiej z trzech rozważanych modeli.

Powtórzymy teraz ocenę klasyfikacji, podobnie jak dla wcześniej, dla stuningowanego klasyfikatora bayesowskiego.

```
predictor <- function(model, newdata)
{ predict(model, newdata=newdata) }

naiveBayes.predictor <- function(formula, data)
{ train(formula, data = data, method = "naive_bayes", trControl = cv)}</pre>
```

Błędy predykcji wyniosły kolejno 0.0337079, 0.0276237 oraz 0.0195704.

3.5 Wieloklasowa regresja logistyczna

Najpierw wytrenujemy model na zbiorze uczącym zawierającym wszystkie zmienne.

```
mlr.model.basic <- multinom(Type ~ ., data = train.data)
basic.mlr.train.pred <- predict(mlr.model.basic, newdata = train.data, type = "class")
basic.mlr.test.pred <- predict(mlr.model.basic, newdata = test.data, type = "class")</pre>
```

Wyznaczmy dla tego modelu macierze pomyłek i wartości błedów klasyfikacji.

	1	2	3		1	2	3
1	36	0	0	1	22	0	1
2	0	51	0	2	1	18	1
3	0	0	31	3	0	0	17
(a) Zbior uczacy				(b) Zbic	or test	owy

Tabela 15: Macierze pomylek dla regresji wieloklasowej — wszystkie cechy.

Błędy klasyfikacji to kolejno 0 i 0.05.

Powtórzmy teraz powyższe dla wybranego podzbioru naszych danych.

```
mlr.model.subset <- multinom(Type ~ ., data = train.subset)
mlr.subset.train.pred <- predict(mlr.model.subset, train.subset, type = "class")
mlr.subset.test.pred <- predict(mlr.model.subset, test.subset, type = "class")</pre>
```

Błędy klasyfikacji to kolejno 0.0847458 i 0.1.

Ponownie skorzystamy z pakietu caret, by stworzyć model stunigowany. Wyznaczymy dla niego macierze pomyłek i błędy klasyfikacji.

	1	2	3			1	2	3
1	34	2	0		1	19	4	0
2	3	45	3		2	1	19	0
3	0	2	29		3	0	1	16
(a	(a) Zbior uczacy				(b) Zbio	or test	owy

Tabela 16: Macierze pomylek dla wieloklasowej regresji — wybrane cechy.

	1	2	3			1	2	3
1	35	1	0		1	22	1	0
2	0	51	0		2	1	18	1
3	0	0	31		3	0	0	17
(a	(a) Zbior uczacy				(b) Zbio	or test	owy

Tabela 17: Macierze pomylek dla klasyfikatora regresji wieloklasowej — model stuningowany.

Błędy klasyfikacji w tym przypadku to kolejno 0.0084746 i 0.05.

Powtórzymy teraz podobną jak wcześniej ocenę klasyfikacji dla stuningowanego modelu regresji wieloklasowej.

Błędy predykcji wyniosły 0.0898876, 0.1018866 oraz 0.0934978.

3.6 Podsumowanie

Porównaliśmy ze sobą 4 klasyfikatory. Dla każdego z nich badaliśmy jaki wpływ na dokładność ich predykcji ma zmiana charaktrystycznych dla nich parametrów czy zmiany w zbiorze uczącym (klasyfikatory trenowliśmy na zbiorach, które albo zawierały wszystkie zmienne, albo te wybrane przez nas, które wprowadzły najlepszy podział na zmienne).

- Dla metody k najbliższych sąsiadów najlepsze rezultaty otrzymaliśmy dla k=9 i zbioru uczącego o zawężonej liczbie cech.
- Dla metody drzew decyzyjnych najlepszy okazała się wartość parametru cp=0 i wyuczenie modelu na zbiorze z wybranymi przez nas cechami.
- Dla naiwnego klasyfikatora bayesowskiego najlepsze efekty otrzymaliśmy, gdy wyuczyliśmy model na zbiorze uczącym zawierającym wszystkie zmienne.
- Dla wieloklasowej regresji logistycznej najefektywniejsze okazało się wyuczenie modelu na zbiorze zawierającym wszystkie zmienne.

Błędy predykacji dla 5-krotnej walidacji krzyżowej, metody bootstrap oraz .632+ wyglądają następująco — patrz tabela.

Metoda	KNN	Drzewa decyzyjne	Naiwny klasyfikator bayesowski	Wieloklasowa regresja logistyczna
CV	0.0842697	0.1067416	0.0337079	0.0898876
Bootstrap	0.1011415	0.1119916	0.0276237	0.1018866
632 +	0.0822332	0.0940631	0.0195704	0.0934978

Tabela 18: Wartości błędów predykcji.

Możemy zauważyć, że najlepszą metodą okazał się naiwny klasyfikator bayesowski. Najgorzej natomiast poradziły sobie drzewa decyzyjne.