# Raport 4

Eksploracja danych

Mikołaj Langner, Marcin Kostrzewa
nr albumów: 255716, 255749

2021-05-28

## Spis treści



# 1 Wstęp

Niniejszy raport zawiera rozwiązania rozwiązania zadań z listy 4.

W zadaniu pierwszym zastosujemy zaawansowane metody klasyfikacji:

- bagging,
- boosting,
- random forest,
- metodę wektorów nośnych (SVM),

W zadaniu drugim badamy jakość

# 2 Zadanie 1

## 2.1 a)

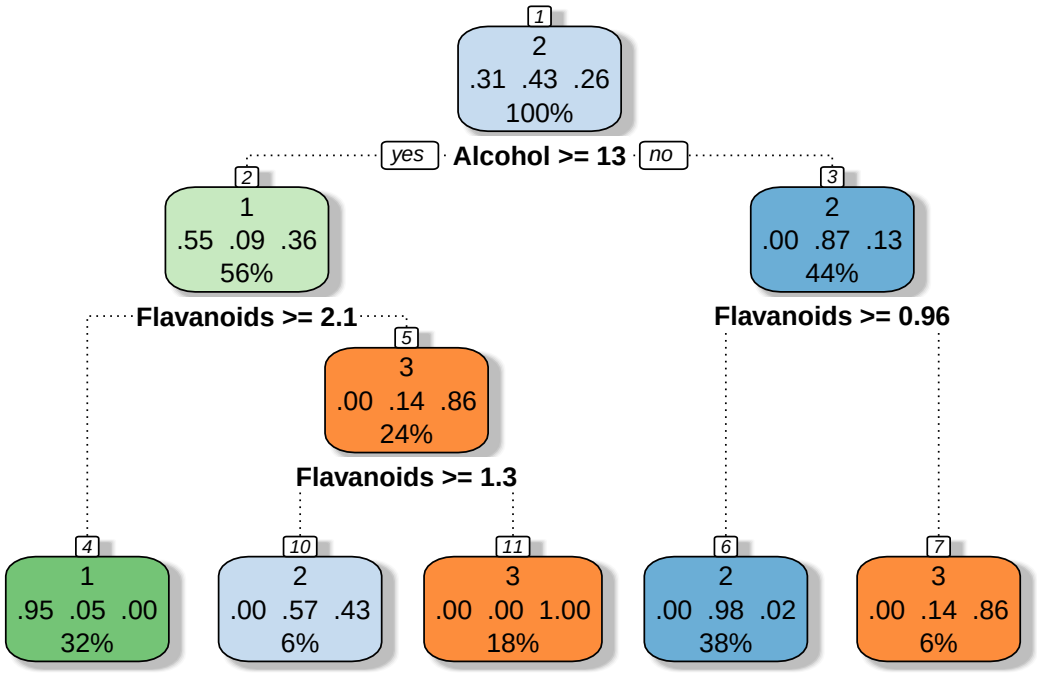
Naszym zadaniem będzie zbadanie tego jak poprawia się jakość klasyfikacji, jeżeli zamiast pojedynczego drzewa decyzyjnego, użyjemy złożonego klasyfikatora.

### 2.1.1 Pojedyncze drzewo decyzyjne

Przypomnijmy najpierw jak radziła sobie metoda drzewa klasyfikacyjnego.

```
tree.model <- rpart(Type ~ ., data = train.subset, cp=0)
```

Wyglądało ono następująco — rysunek (1).



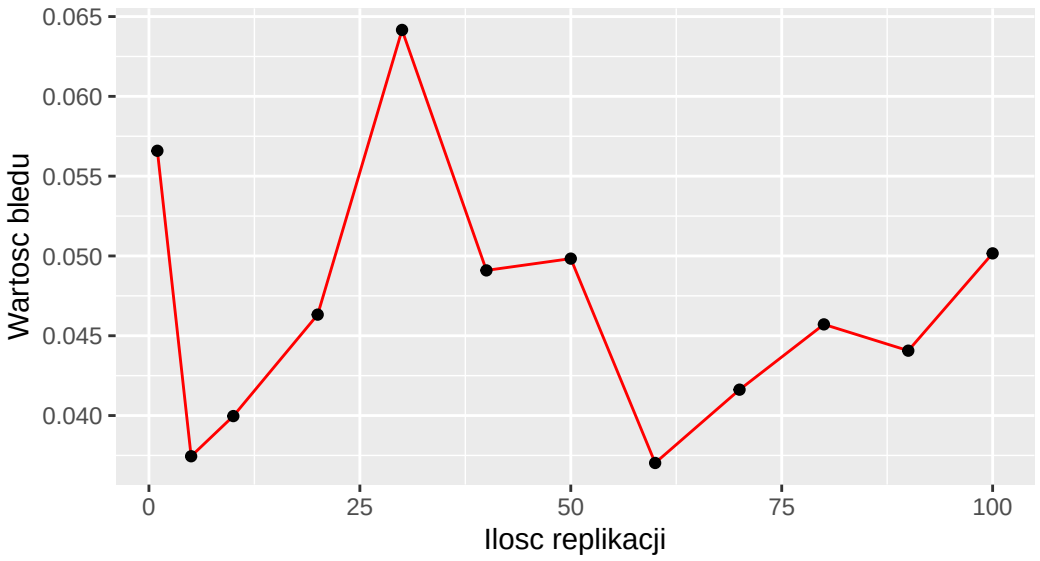

Rysunek 1: Pojedyncze drzewo decyzyjne.

Błędy predykcji wyznaczone za pomocą metod: 5-krotnej walidacji krzyżowej, bootstrap oraz `.632+`, wyniosły kolejno 0.1179775, 0.1180151 oraz 0.1008182.

### 2.1.2 Bagging

Najpierw skorzystamy z algorytmu bagging. Znajdziemy optymalną wartość dla parametru `nbagg`.

```
B.vector <- c(1, 5, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100)
bagging.error.rates <- sapply(B.vector, function(b)
  {errorest(Type~., data=train.data, model=bagging,
            nbagg=b, estimator="632plus",
            est.para=control.errorest(nboot = 20))$error})
choice <- B.vector[which.min(bagging.error.rates)]
```




Rysunek 2: Wplyw ilosci replikacji na blad klasyfikacji.

Jak widać, najlepiej zbudować model dla nbagg równego 60. Parametr złożoności `cp` przyjmujemy równy 0, tak jak w przypadku pojedynczego drzewa.

```
bagging.start <- Sys.time()
bagging.model <- bagging(Type~., data=train.data, nbagg=choice,
                         minsplit=1, cp=0)
bagging.end <- Sys.time()
bagging.train.pred <- predict(bagging.model, train.data)
bagging.test.pred <- predict(bagging.model, test.data)
```

Wyznaczymy dla tego modelu macierze pomyłek i wartości błędów klasyfkacji.

| | 1 | 2 | 3 |
|---|---|---|---|
| 1 | 36 | 0 | 0 |
| 2 | 0 | 51 | 0 |
| 3 | 0 | 0 | 31 |

(a) Zbior uczacy

| | 1 | 2 | 3 |
|---|---|---|---|
| 1 | 21 | 0 | 0 |
| 2 | 2 | 19 | 0 |
| 3 | 0 | 1 | 17 |

(b) Zbior testowy

Tabela 1: Macierze pomylek dla algorytmu bagging.

Błędy klasyfikacji to kolejno 0 i 0.05.

Wyznaczymy teraz dla tego modelu klasyfikacyjnego błędy predykcji podobnie jak dla drzewa decyzyjnego.

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

bagging.predictor <- function(formula, data)
{bagging(formula, data = data, nbagg = choice, cp = 0)}

bagging.error.cv <- errorest(Type~., wine,
                                    model=bagging.predictor,
                                    predict=predictor, estimator="cv",
                                    est.para=control.errorest(k = 5))
bagging.error.boot <- errorest(Type~., wine,
                                      model=bagging.predictor,
                                      predict=predictor, estimator="boot",
                                      est.para=control.errorest(nboot = 25))
bagging.error.632 <- errorest(Type~., wine,
                                      model=bagging.predictor,
                                      predict=predictor, estimator="632plus",
                                      est.para=control.errorest(nboot = 25))
```

Błędy wyniosły kolejno 0.0561798, 0.0561724 oraz 0.0298668.

### 2.1.3 Boosting

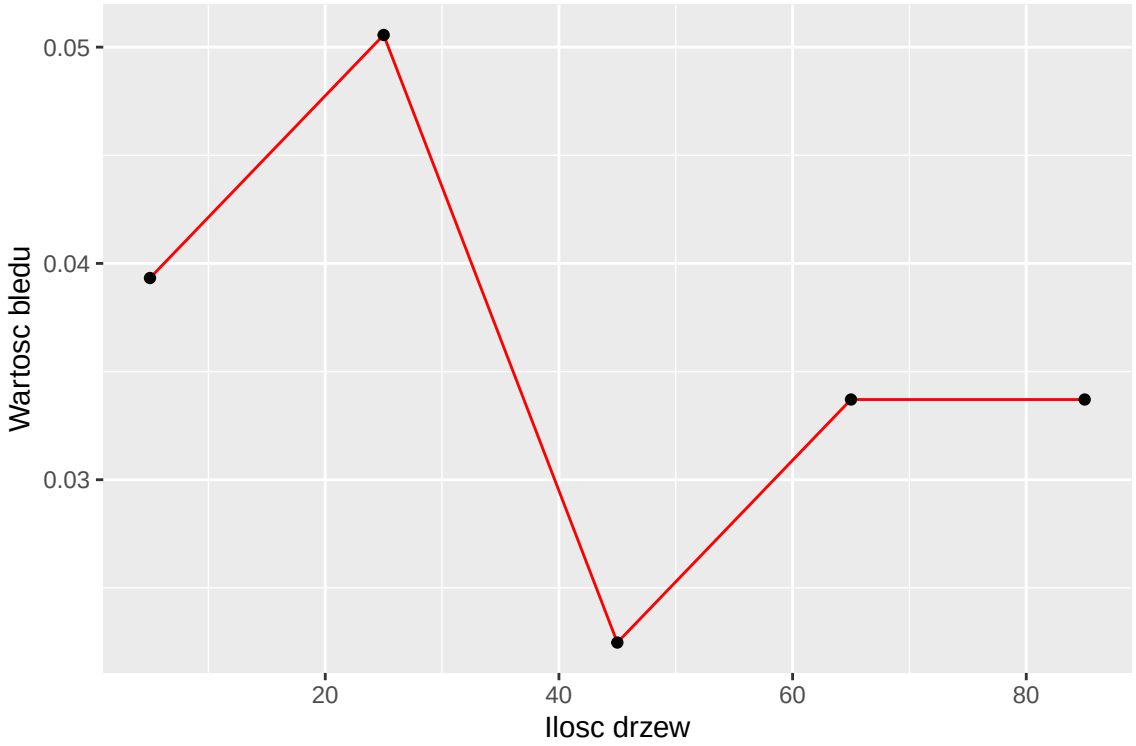
Wykorzystamy teraz algorytm boosting — skorzystamy z funkcji `boosting` z pakietu `adabag`.

Najpierw dobierzemy optymalnie wartość parametru `mfinal` — ilość wykorzystanych przez algorytm drzew.

```
mfinal.choice <- 20
mfinal.vector <- seq(5, 100, by=20)
predictor  <- function(model, newdata)
{ as.factor(predict(model, newdata=newdata, type = "class")$class)}
boosting.error.rates <- sapply(mfinal.vector, function(m)
  { errorest(Type~., wine, predict=predictor,
           model=boosting, mfinal=m,
           estimator="cv",
           est.para=control.errorest(k = 5))$error})
mfinal.choice <- mfinal.vector[which.min(boosting.error.rates)]
```

Wybieramy wartość mfinal równą 45.

```
boosting.start <- Sys.time()
boosting.model <- boosting(Type~., data = train.data, boos = TRUE,
```




Rysunek 3: Zaleznosc bledu od ilosci drzew.

```
                                mfinal = mfinal.choice)
boosting.end <- Sys.time()
boosting.test.pred <- predict(boosting.model, test.data)
boosting.train.pred <- predict(boosting.model, train.data)
```

```
test.confusion <- boosting.test.pred$confusion
train.confusion <- boosting.train.pred$confusion

print(xtable(train.confusion), file="boost1.tex", floating=FALSE)
print(xtable(test.confusion), file="boost2.tex", floating=FALSE)
```

| | 1 | 2 | 3 |
|---|---|---|---|
| 1 | 36 | 0 | 0 |
| 2 | 0 | 51 | 0 |
| 3 | 0 | 0 | 31 |

(a) Zbior uczacy

| | 1 | 2 | 3 |
|---|---|---|---|
| 1 | 22 | 0 | 0 |
| 2 | 1 | 19 | 0 |
| 3 | 0 | 1 | 17 |

(b) Zbior testowy

Tabela 2: Macierze pomylek dla algorytmu boosting.

Błędy klasyfikacji to kolejno 0 i 0.0333333.

Wyznaczymy też teraz błędy predykcji (tym razem z racji złożoności obliczeniowej i długiego

czasu wykonania tylko dla metody 5-krotnej walidacji krzyżowej).

```
boosting.predictor <- function(formula, data)
{ boosting(formula, data = data, mfinal=mfinal.choice, boos = TRUE)}

boosting.error.cv <- errorest(Type~., wine,
                                    model=boosting.predictor,
                                    predict=predictor, estimator="cv",
                                    est.para=control.errorest(k = 5))
```

Błąd wyniosł 0.0224719.

### 2.1.4 Random Forest

Teraz wykorzystamy algorytm random forest.

Postaramy się odpowiednio dobrać parametry `ntree` (ilość drzew) i `mtry` (ilość losowo wybieranych cech).

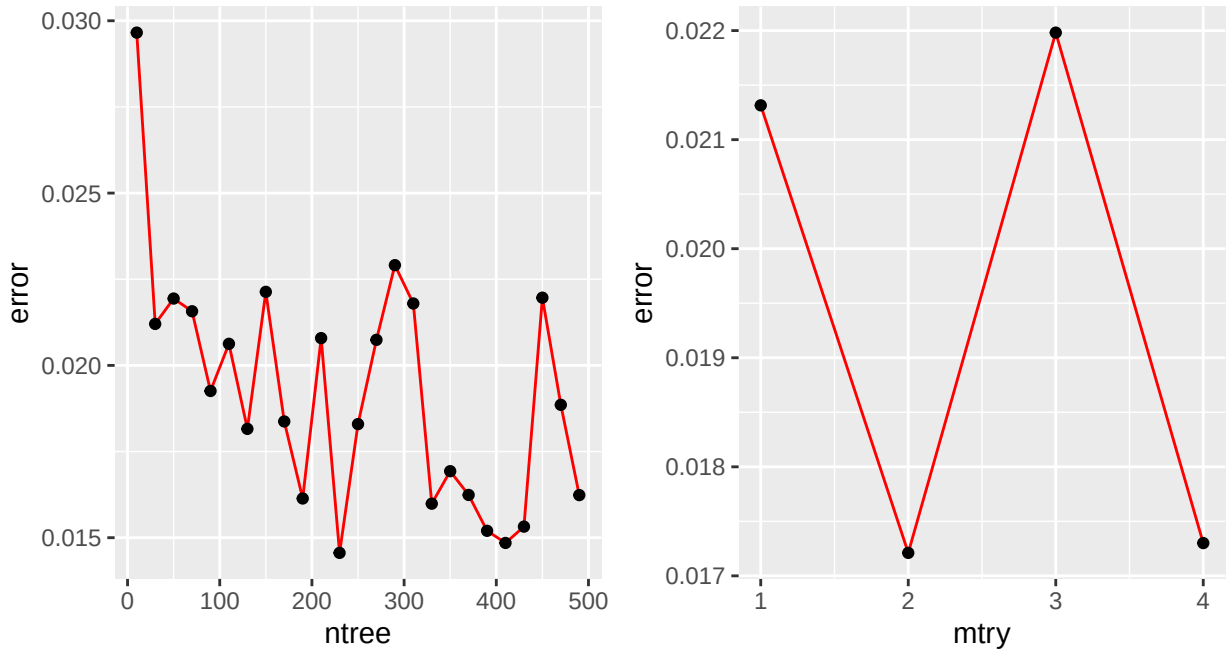
```
ntree.vector <- seq(10, 500, by=20)
ntree.error.rates <- sapply(ntree.vector, function(b)
  {errorest(Type~., data=train.data, model=randomForest,
            ntree=b, estimator="632plus",
            est.para=control.errorest(nboot = 20))$error})
ntree.choice <- ntree.vector[which.min(ntree.error.rates)]

mtry.vector <- seq(1, sqrt(ncol(wine))+1, by=1)
mtry.error.rates <- sapply(mtry.vector, function(m)
  {errorest(Type~., data=train.data, model=randomForest, ntree = ntree.choice,
            mtry=m, estimator="632plus",
            est.para=control.errorest(nboot = 20))$error})
mtry.choice <- mtry.vector[which.min(mtry.error.rates)]
```

Podobnie jak wcześniej wyznaczamy za pomocą modelu etykietki klas i wyznaczamy macierze pomyłek i błędy klasyfikacji.

```
rf.start <- Sys.time()
rf.model <- randomForest(Type~., data = train.data, ntree=ntree.choice,
                         mtry=mtry.choice, importance=TRUE)
rf.end <- Sys.time()
rf.test.pred <- predict(rf.model, test.data)
rf.train.pred <- predict(rf.model, train.data)
```

Błędy klasyfikacji to kolejno 0 i 0.0166667.

Tak jak dla wcześniejszych algorytmów, wyznaczymy teraz błędy predykcji.




Rysunek 4: Wykresy zaleznosci bledu klasyfikacji od parametrow mtry i ntree.

| | 1 | 2 | 3 |
|---|---|---|---|
| 1 | 36 | 0 | 0 |
| 2 | 0 | 51 | 0 |
| 3 | 0 | 0 | 31 |

(a) Zbior uczacy

| | 1 | 2 | 3 |
|---|---|---|---|
| 1 | 23 | 0 | 0 |
| 2 | 0 | 19 | 0 |
| 3 | 0 | 1 | 17 |

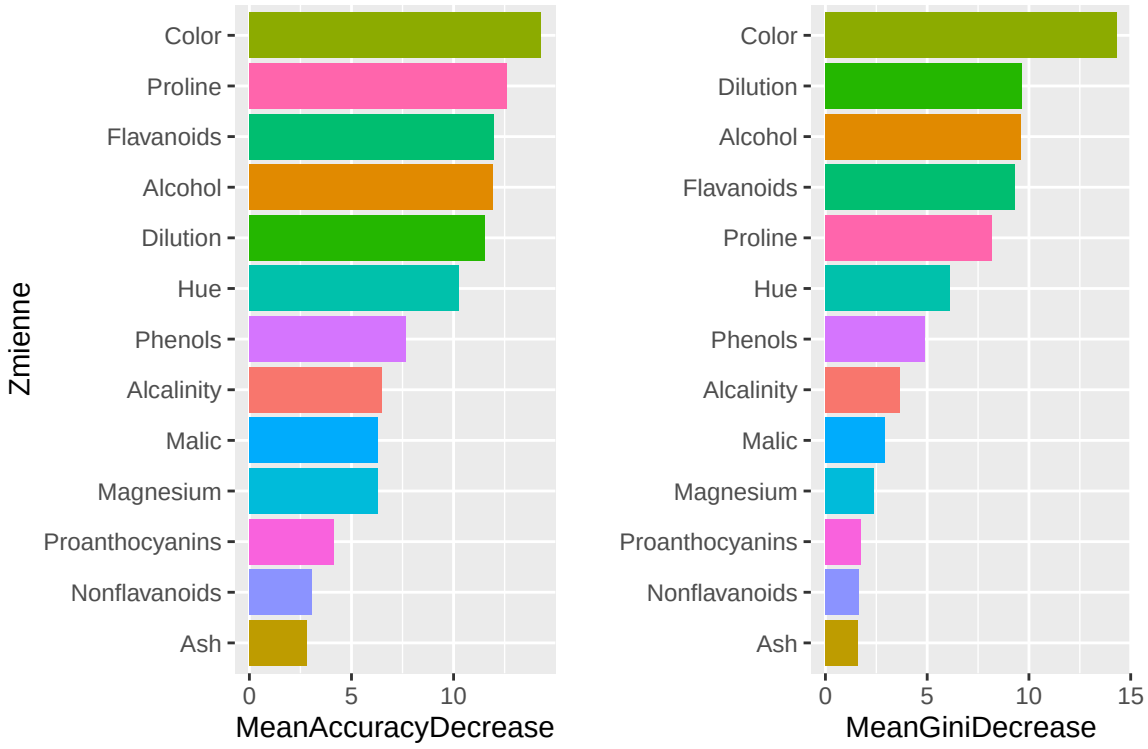
(b) Zbior testowy

Tabela 3: Macierze pomylek dla algorytmu randomForest.

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

rf.predictor <- function(formula, data)
{ randomForest(formula, data = data, ntree = ntree.choice, mtry = mtry.choice)}

rf.error.cv <- errorest(Type~., wine, model=rf.predictor,
                                    predict=predictor, estimator="cv",
                                    est.para=control.errorest(k = 5))
rf.error.boot <- errorest(Type~., wine, model=rf.predictor,
                                      predict=predictor, estimator="boot",
                                      est.para=control.errorest(nboot = 25))
rf.error.632 <- errorest(Type~., wine, model=rf.predictor,
                                      predict=predictor, estimator="632plus",
                                      est.para=control.errorest(nboot = 25))
```

Wyniosły one kolejno 0.0168539, 0.0183539 oraz 0.0106015.

Wykorzystamy teraz algorytm random forest do wyznaczenia rankingu cech (*variable importance*).




Rysunek 5: Wykres waznosci zmiennych.

Przypomnijmy, że na ostatniej liście za zmienne istotne, takie, które dobrze dywersyfikowały klasy ze zbioru `wine`, były `Alcohol` i `Flavanoids`. Tak jak widzimy to na rysunku (5) dokonaliśmy wtedy całkiem dobrej decyzji, ponieważ zmienne te są w czołówce najważniejszych zmiennych. Wykresy wskazują, że najważniejsze są zmienne `Color` i `Proline`, które w trakcie dokonywania wyboru, odrzuciliśmy.

### 2.1.5 Wnioski

Podsumujmy uzyskane rezultaty w tabeli (4).

| Metoda | Drzewa decyzyjne | bagging | boosting | random forest |
|---|---|---|---|---|
| CV | 0.1179775 | 0.0561798 | 0.0224719 | 0.0168539 |
| Bootstrap | 0.1180151 | 0.0561724 | NaN | 0.0183539 |
| 632+ | 0.1008182 | 0.0298668 | NaN | 0.0106015 |

Tabela 4: Wartości błędów predykcji.

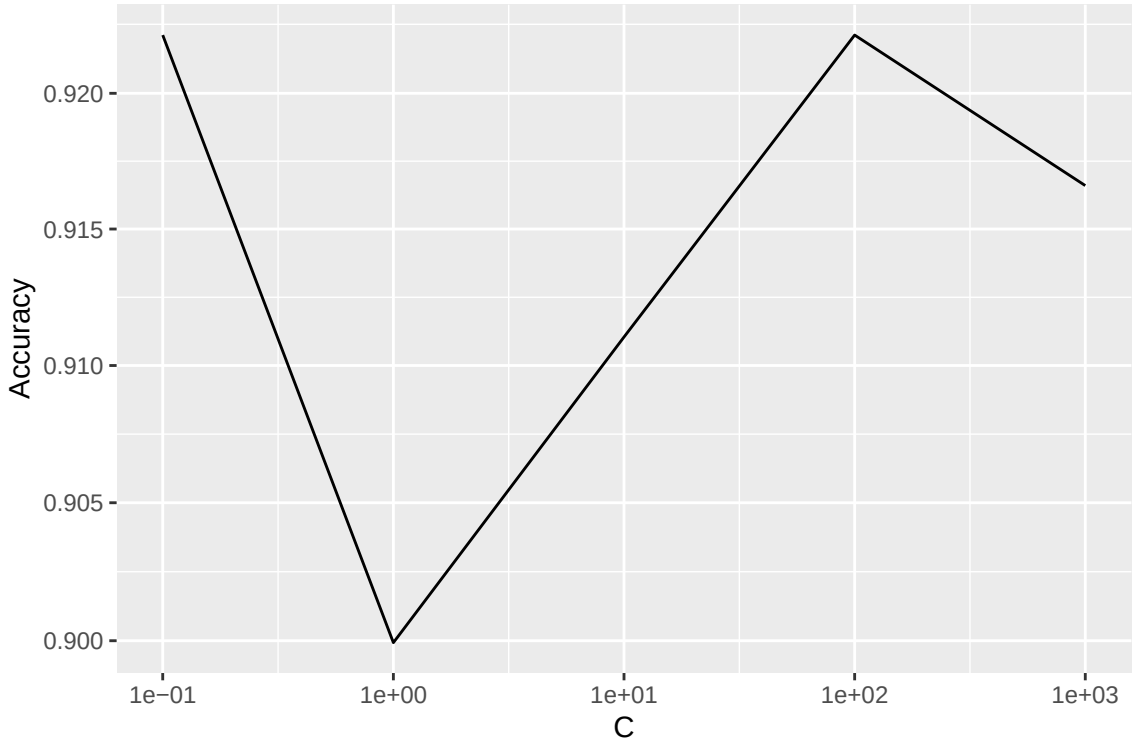
Jak widzimy każda rozpatrywana metoda jest znacząco lepsza od pojedynczego drzewa klasyfikacyjnego. Najlepiej z nich poradził sobie algorytm random forest.

Mieliśmy także porównać czasy potrzebne do zbudowania modelu dla kolejnych metod. Wynosiły one:

- dla bagging 0.51429009437561,
- dla boosting 28.4926550388336,
- dla random forest 0.0565311908721924.

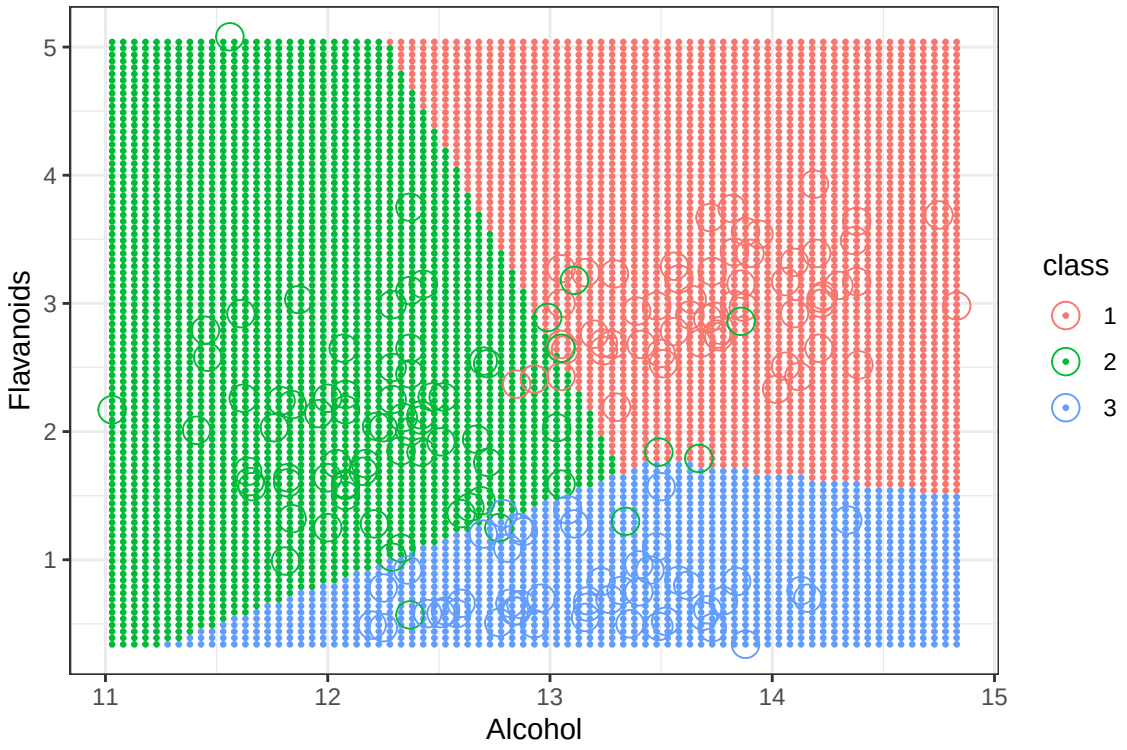
Widać, że algorytm boosting potrzebuje znacznie więcej czasu na stworzenie modelu od pozostałych algorytmów. ## b)

```
wine <- wine %>% select(c(Type, Alcohol, Flavanoids))
```

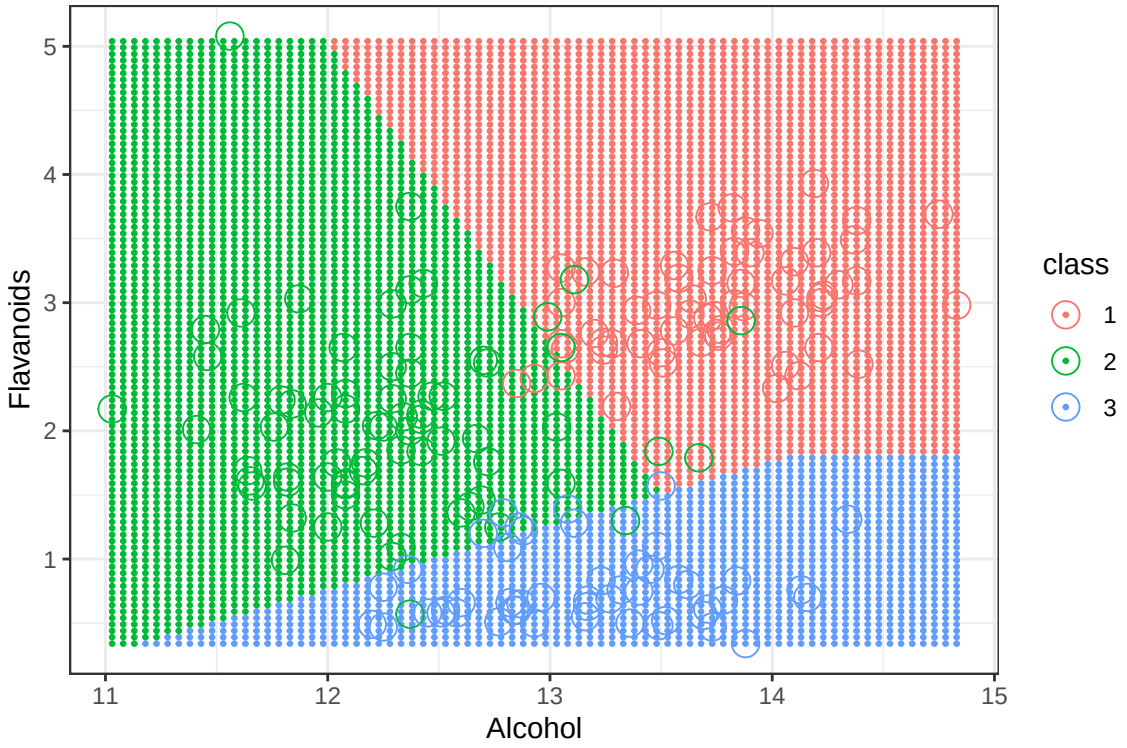



Rysunek 6: Dokładność klasyfikatora od parametru kosztu

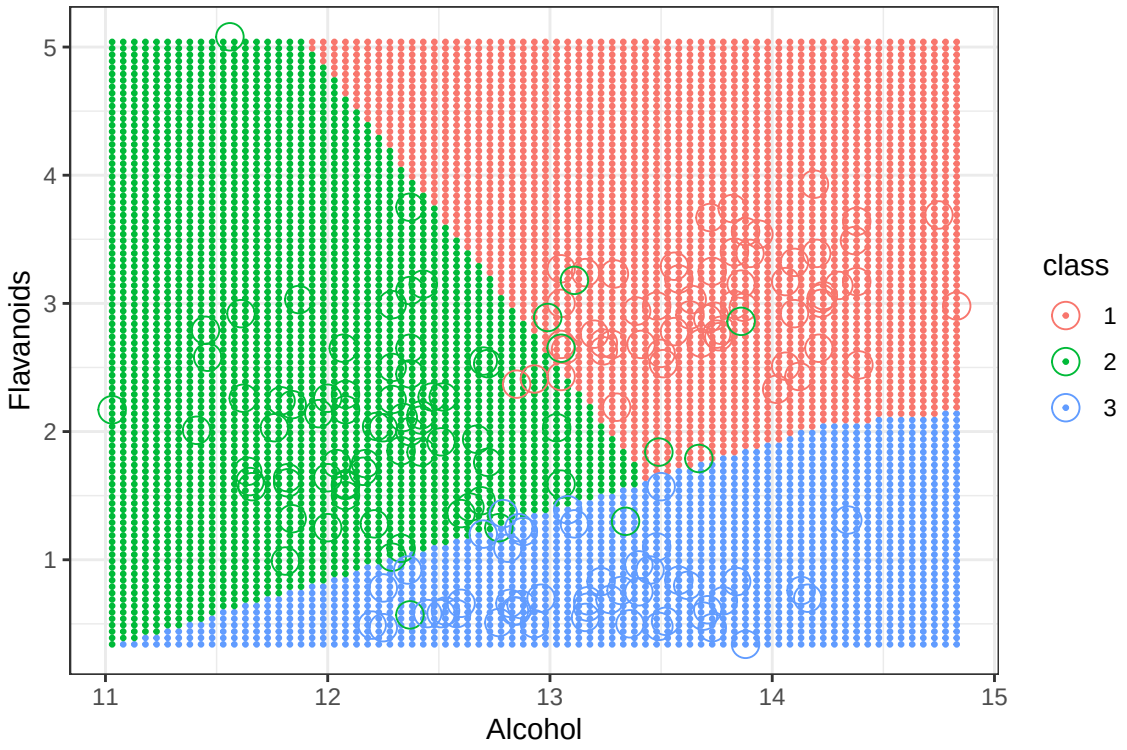
```
##  Setting default kernel parameters
##  Setting default kernel parameters
##  Setting default kernel parameters
##  Setting default kernel parameters
##  Setting default kernel parameters
```



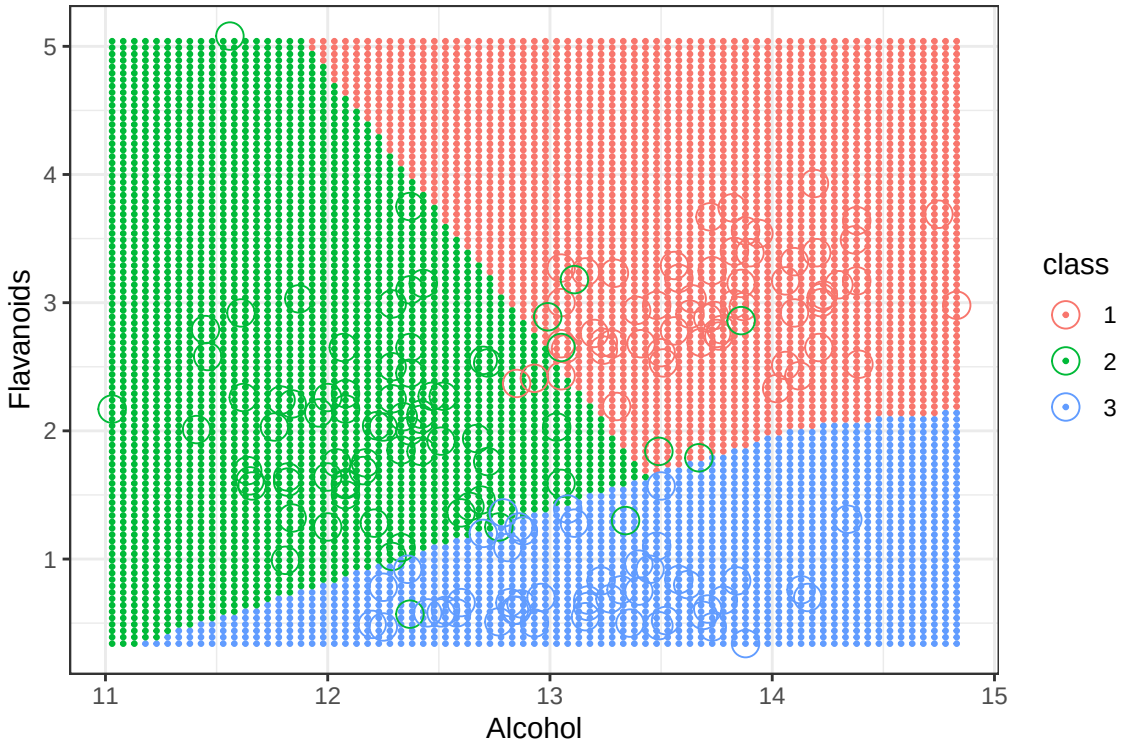

Rysunek 7: Obszary decyzyjne dla $C = 0.1$



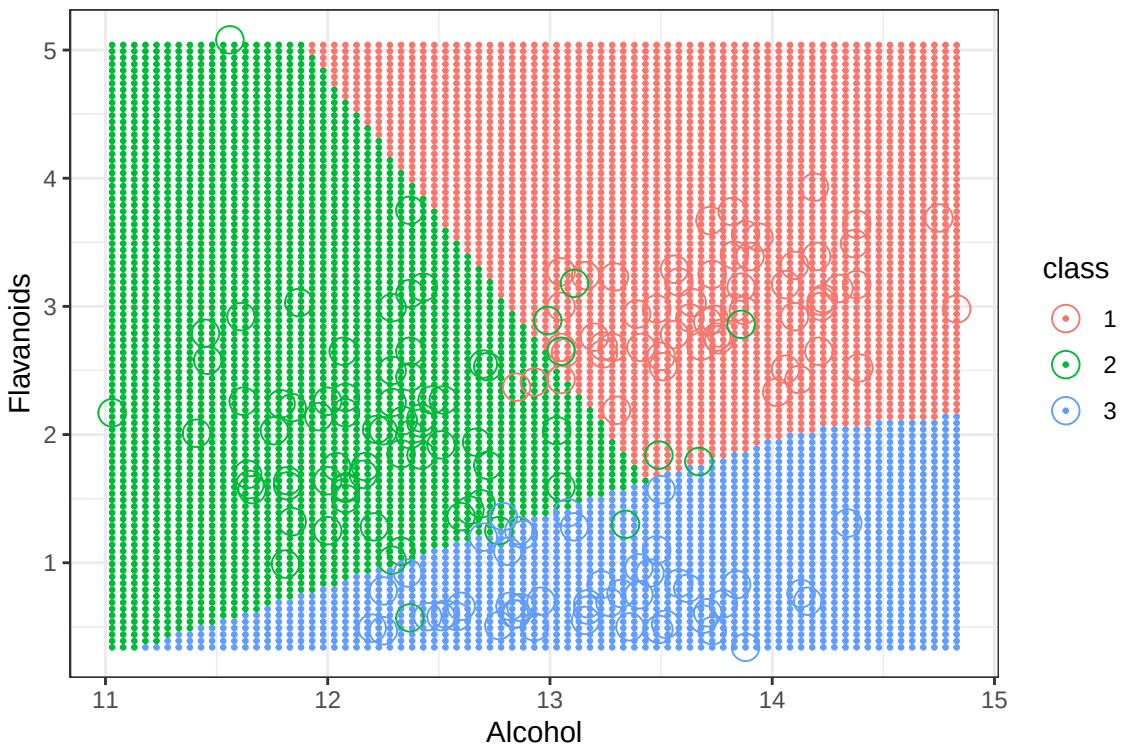

Rysunek 8: Obszary decyzyjne dla $C = 1$



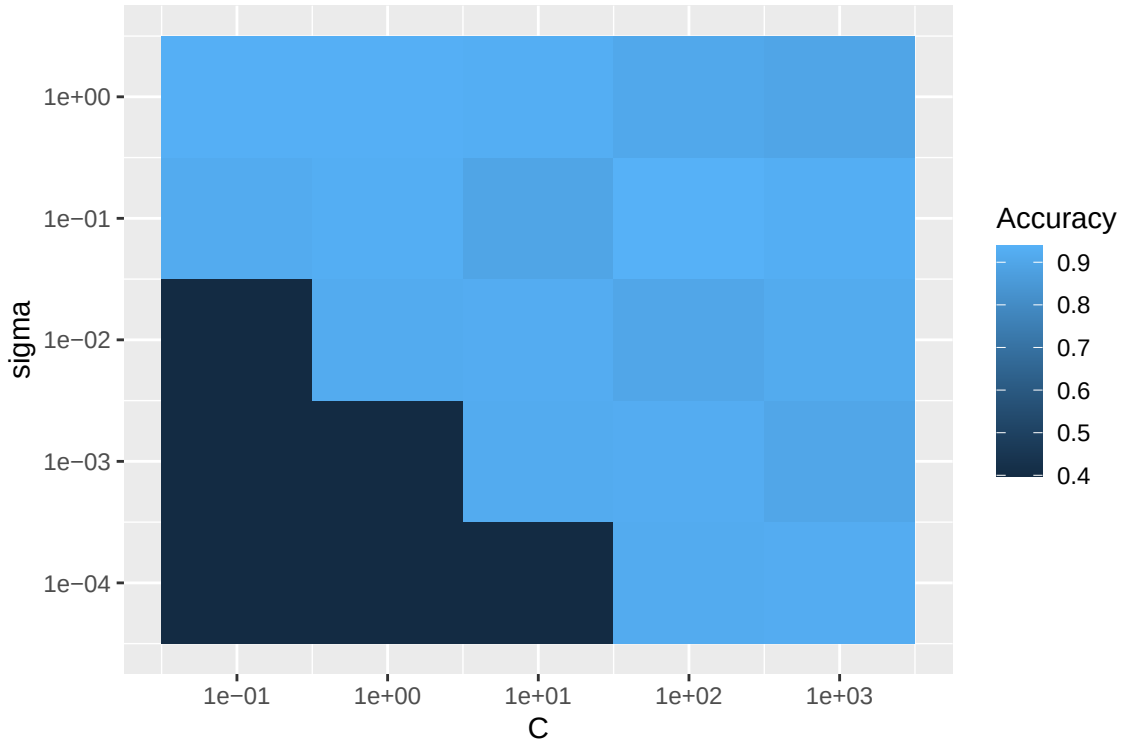

Rysunek 9: Obszary decyzyjne dla $C = 10$




Rysunek 10: Obszary decyzyjne dla $C = 100$




Rysunek 11: Obszary decyzyjne dla $C = 1000$




Rysunek 12: Mapa ciepła dokładności klasyfikatora

| linear | polynomial | radial |
|---|---|---|
| 0.928 | 0.938 | 0.933 |

Tabela 5: Porównanie klasyfikatorów dla różnych jąder

| sigma | C |
|---|---|
| 0.10 | 100.00 |

Tabela 6: Parametry dla najlepszego klasyfikatora

# 3 Zadanie 2

W tym zadaniu zastosujemy algorytmy analizy skupień do wyznaczenia klastrów dla zbioru `wine`, ocenimy ich skuteczność i porównamy je ze sobą. Sięgniemy po dwa algorytmy: PAM i AGNES.

## 3.1 Wizualizacja wyników grupowania ($K = 3$)

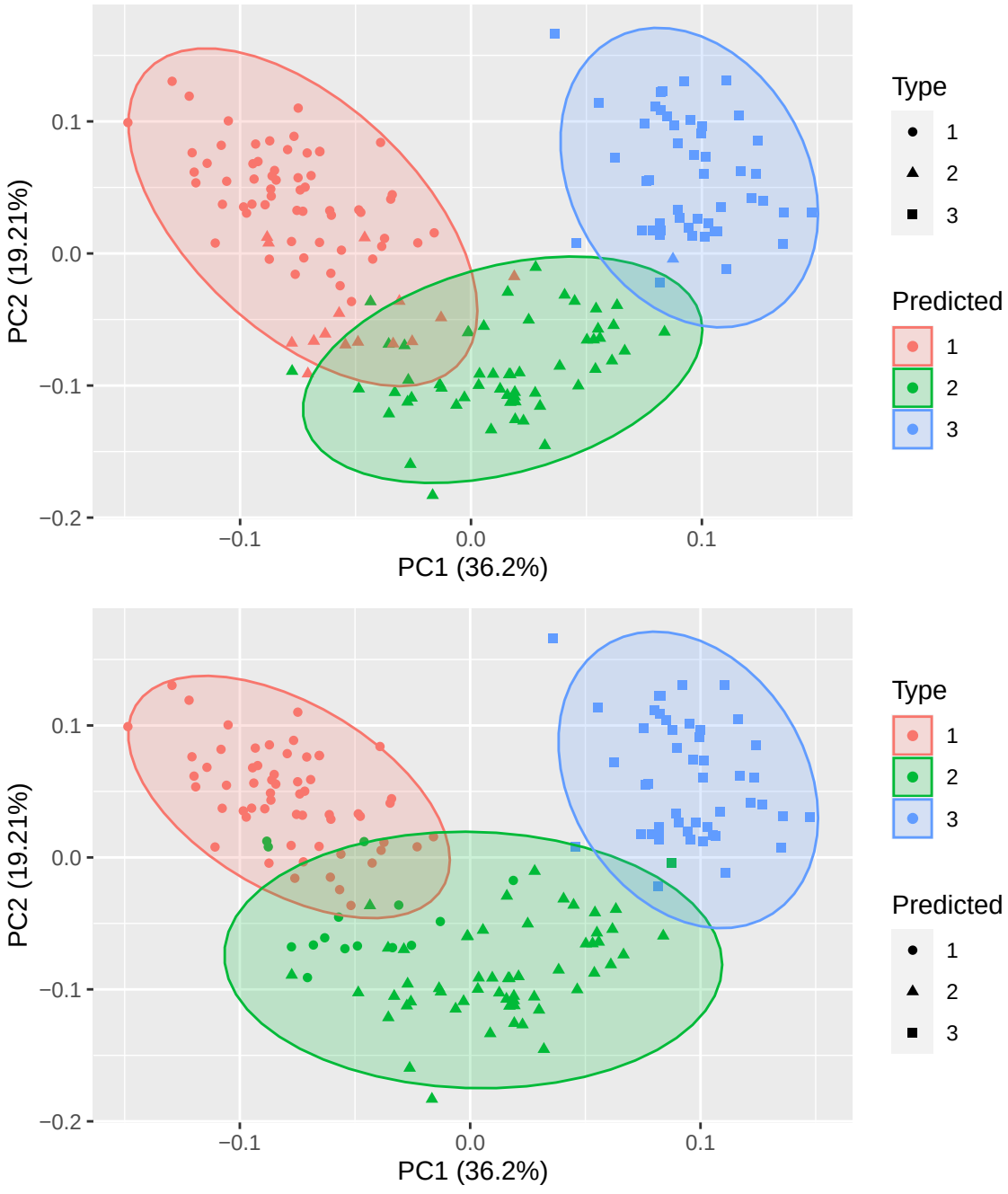
Najpierw wyznaczymy macierz niepodobieństwa dla naszych danych.

```
data(wine)
wine.subset = wine[, -1]
diss.matrix <- daisy(wine.subset, stand=TRUE) %>% as.matrix
group.colors <- as.numeric(wine$Type)
```

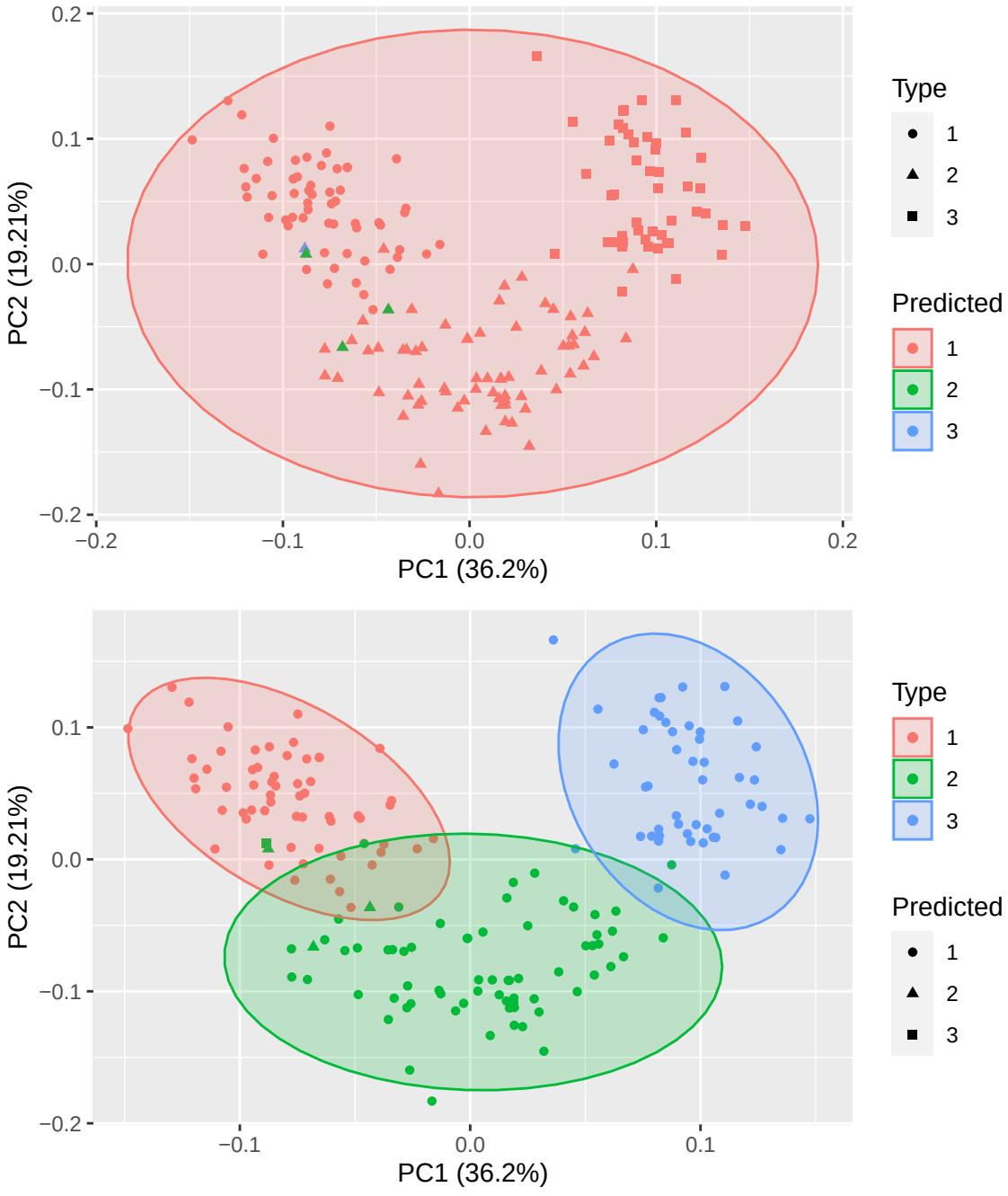
Przyjrzyjmy się najpierw jakie wyniki daje nam zastosowanie algorytmu PAM.

Zobaczmy teraz, jak poradził sobie algorytm AGNES z single-linkage.

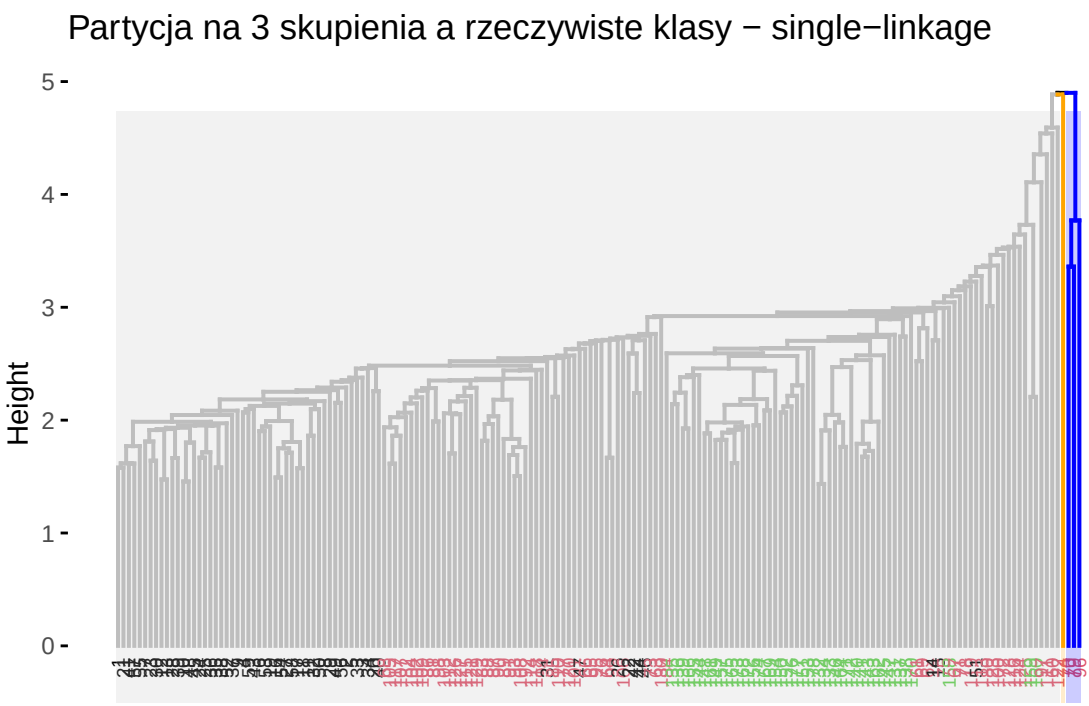
Zobaczmy jak wygląda dendrogram dla tego modelu.




Rysunek 13: Skupienia dla metody PAM




Rysunek 14: Skupienia dla metody AGNES z single-linkage




Poniżej wyniki dla algorytmu AGNES z complete-linkage.

Zobaczmy jak wygląda dendrogram w tym przypadku.

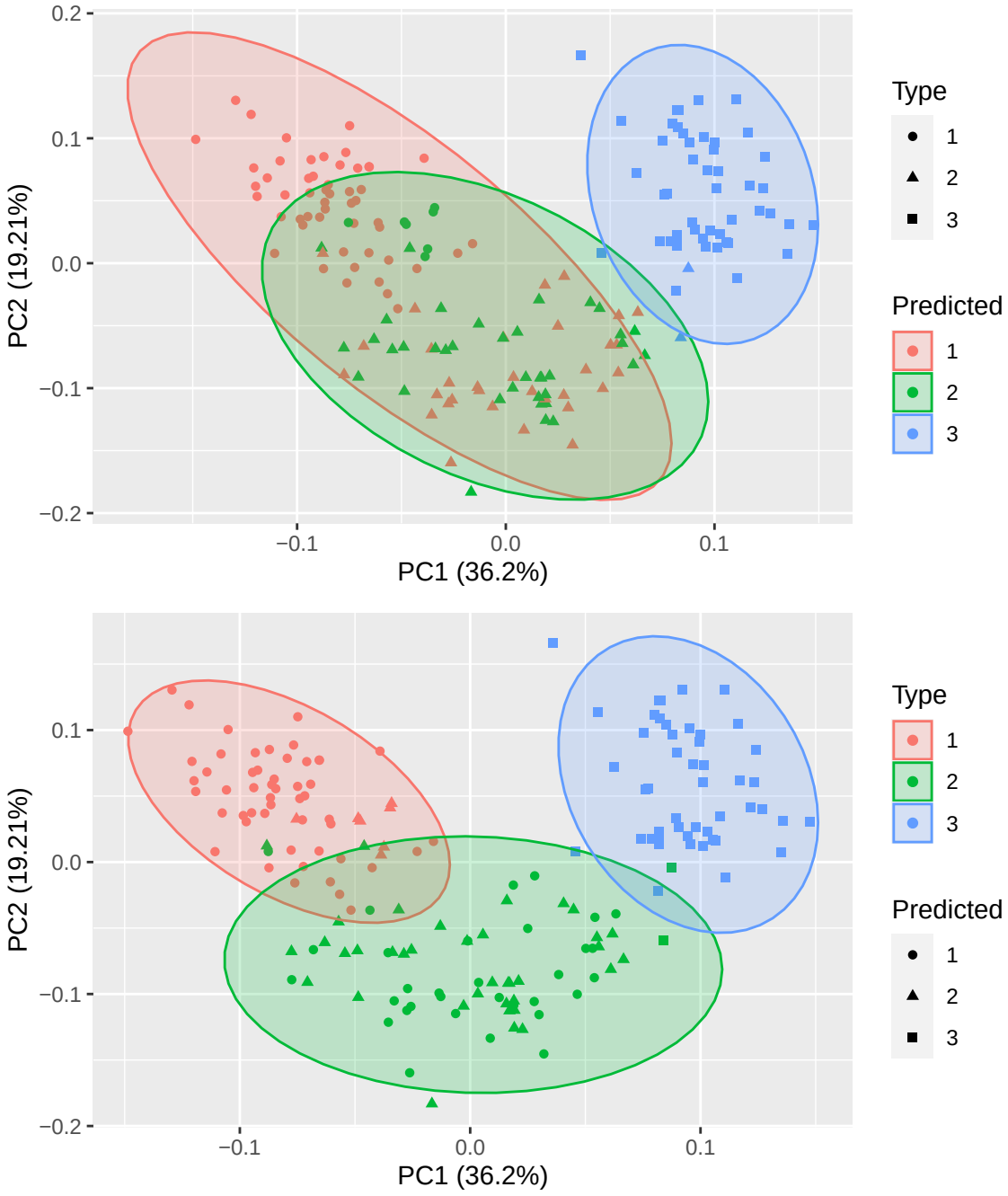
## 3.2 Ocena jakości grupowania

W tej części zadania, porównamy ze sobą algorytmy, jakość uzyskanego dzięk nim grupowania w zależności od przyjętej ilości skupień. Wykorzystamy wskaźniki wewnętrzne, jak i zewnętrzne.

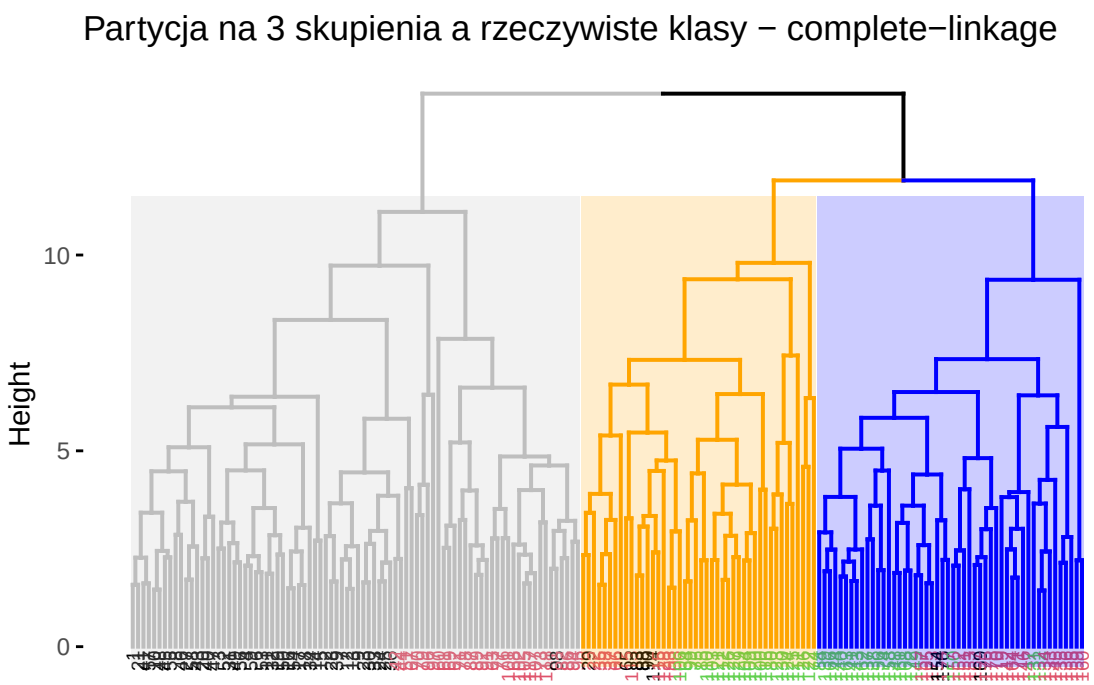
### 3.2.1 Wkaźniki wewnętrzne

| | K = 2 | K = 3 | K = 4 | K = 5 | K = 6 | K = 7 | K = 8 | K = 9 | K = 10 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 1.93 |
| 2 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 1.93 | 1.75 |
| 3 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 1.93 | 1.75 | 1.75 |
| 4 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 1.64 | 1.75 | 1.75 | 2.05 |
| 5 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 1.64 | 1.64 | 1.75 | 1.94 | 2.03 |
| 6 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 1.64 | 1.64 | 1.66 | 1.94 | 1.94 | 2.17 |
| 7 | 0.00 | 0.00 | 1.64 | 1.64 | 1.71 | 1.94 | 1.94 | 2.35 | 1.93 |
| 8 | 0.00 | 2.21 | 1.64 | 1.71 | 1.71 | 2.35 | 2.35 | 1.93 | 2.03 |
| 9 | 2.15 | 2.14 | 2.21 | 1.71 | 1.93 | 1.93 | 1.93 | 4.36 | 4.90 |
| 10 | 2.15 | 2.14 | 2.76 | 2.76 | 1.93 | 1.93 | 1.93 | 1.93 | 1.93 |

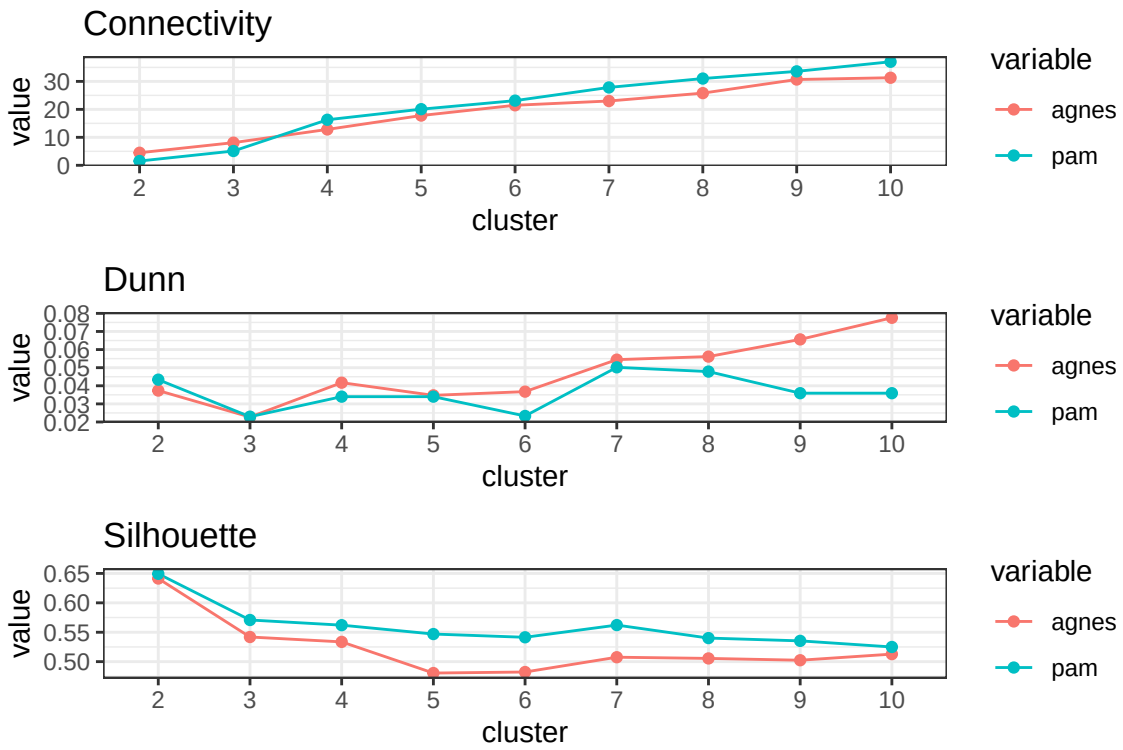
Tabela 7: Seperacja w skupiskach




Rysunek 15: Skupienia dla metody AGNES z complete-linkage




Rysunek 16: Dendrogram dla complete-linkage.




Rysunek 17: Wskaźniki wewnętrzne dla PAM i AGNES z complete-linkage

| | K = 2 | K = 3 | K = 4 | K = 5 | K = 6 | K = 7 | K = 8 | K = 9 | K = 10 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 5.02 |
| 2 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 5.02 | 6.35 |
| 3 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 8.87 | 6.35 | 7.08 |
| 4 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 9.16 | 6.35 | 8.22 | 9.80 |
| 5 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 9.16 | 9.52 | 8.22 | 6.57 | 8.91 |
| 6 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 9.16 | 9.46 | 9.85 | 6.57 | 8.91 | 7.64 |
| 7 | 0.00 | 0.00 | 9.16 | 9.86 | 10.44 | 6.57 | 9.85 | 6.87 | 7.12 |
| 8 | 0.00 | 11.26 | 9.86 | 10.44 | 7.64 | 6.87 | 6.87 | 7.12 | 4.49 |
| 9 | 11.37 | 10.90 | 10.90 | 7.64 | 7.12 | 7.12 | 7.12 | 7.06 | 4.13 |
| 10 | 11.17 | 9.03 | 9.03 | 9.37 | 7.98 | 7.98 | 7.98 | 7.98 | 7.98 |

Tabela 8: Srednice skupisk

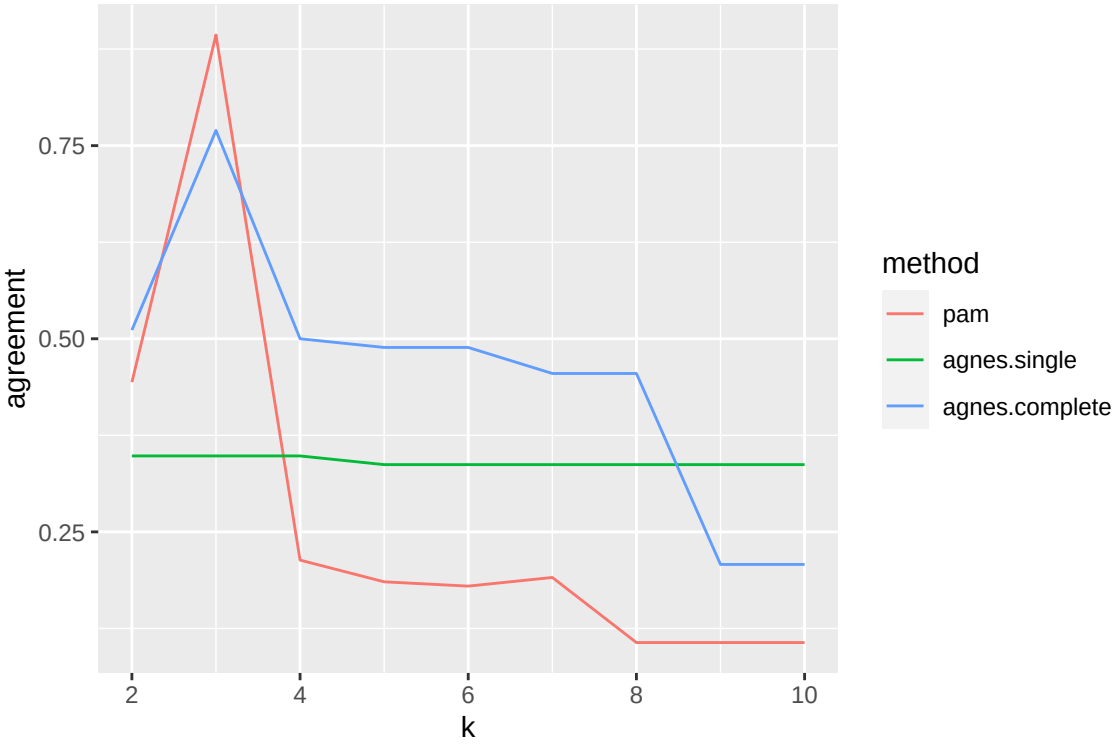
| | K = 2 | K = 3 | K = 4 | K = 5 | K = 6 | K = 7 | K = 8 | K = 9 | K = 10 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 19.00 |
| 2 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 19.00 | 20.00 |
| 3 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 22.00 | 20.00 | 23.00 |
| 4 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 32.00 | 20.00 | 24.00 | 12.00 |
| 5 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 32.00 | 33.00 | 24.00 | 24.00 | 16.00 |
| 6 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 32.00 | 29.00 | 20.00 | 24.00 | 18.00 | 19.00 |
| 7 | 0.00 | 0.00 | 32.00 | 31.00 | 41.00 | 24.00 | 19.00 | 16.00 | 23.00 |
| 8 | 0.00 | 75.00 | 40.00 | 41.00 | 22.00 | 16.00 | 16.00 | 22.00 | 12.00 |
| 9 | 111.00 | 54.00 | 58.00 | 25.00 | 23.00 | 22.00 | 22.00 | 4.00 | 3.00 |
| 10 | 67.00 | 49.00 | 48.00 | 49.00 | 31.00 | 31.00 | 31.00 | 31.00 | 31.00 |

Tabela 9: Rozmiary skupisk

### 3.2.2 Wskaźniki zewnętrzne

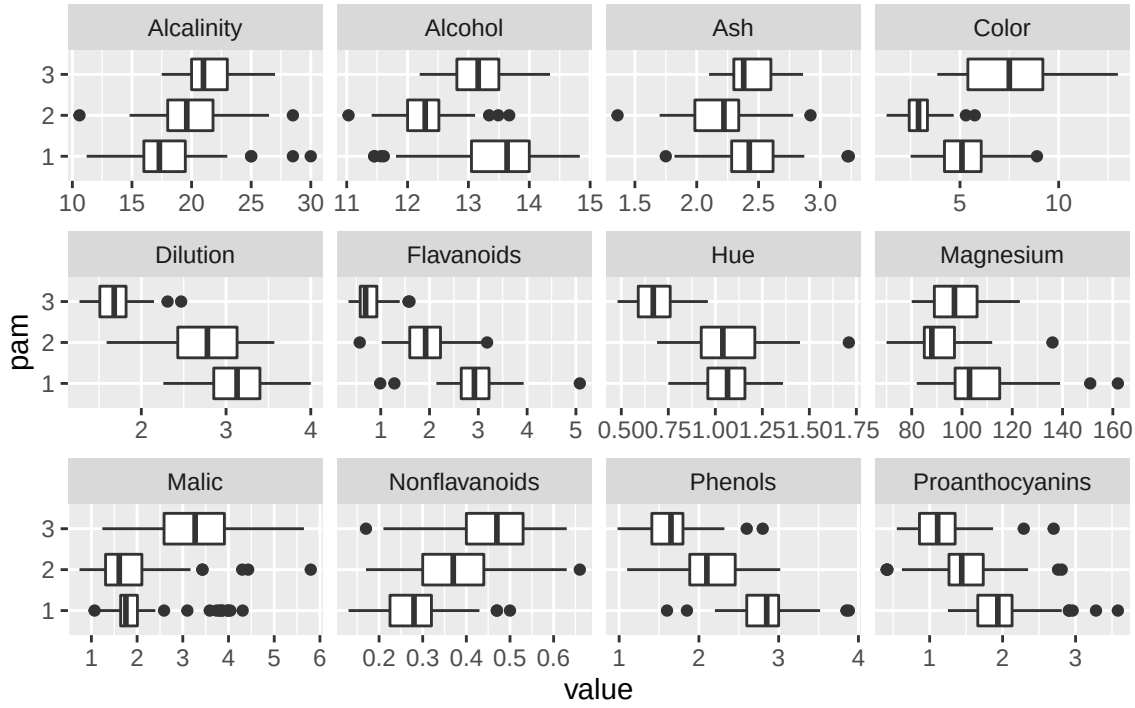
```
## Cases in matched pairs: 80.9 %
```

```
## 1 2 3
## 1 2 3
```

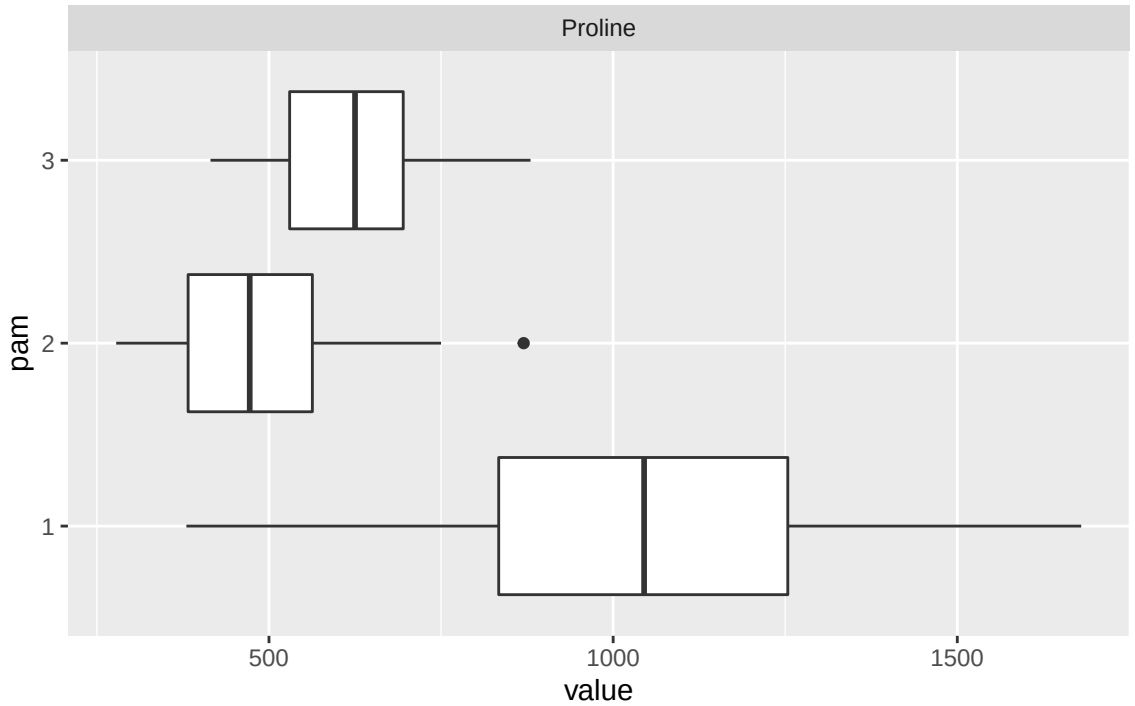



Rysunek 18: Porównanie wskaźników zewnętrznych

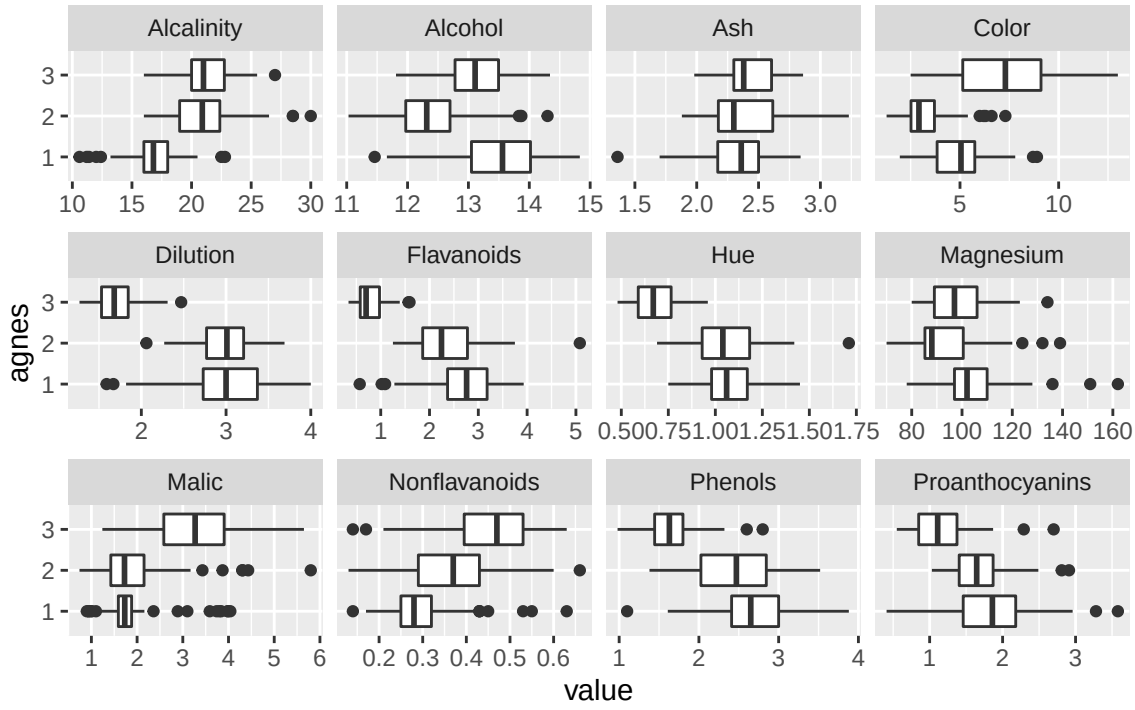
### 3.2.3 Ocena otrzymanych rezultatów



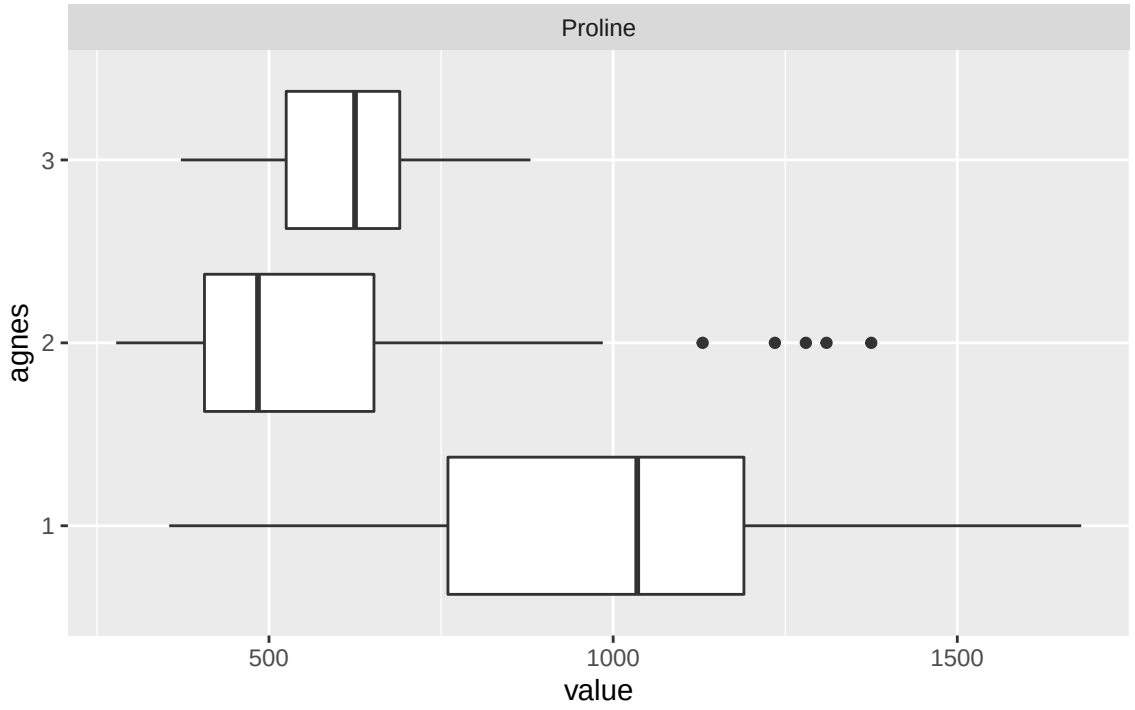

Page 1




Page 2


Alcalinity
Alcohol
Ash
Color
Dilution
Flavanoids
Hue
Magnesium
Malic
Nonflavanoids
Phenols
Proanthocyanins
agnes
value

Page 1


Proline
agnes
value

Page 2

| | 1 | 2 | 3 |
|---|---|---|---|
| Alcohol | 0.59 | -0.92 | 0.39 |
| Malic | -0.47 | -0.54 | 0.81 |
| Ash | 0.16 | -0.90 | 0.05 |
| Alcalinity | 0.30 | -0.15 | 0.60 |
| Magnesium | 0.02 | -1.38 | -0.54 |
| Phenols | 0.65 | -1.03 | -0.58 |
| Flavanoids | 0.95 | 0.00 | -1.27 |
| Nonflavanoids | -0.82 | 0.07 | 0.71 |
| Proanthocyanins | 0.47 | 0.07 | -0.60 |
| Color | 0.02 | -0.72 | 1.45 |
| Hue | 0.36 | 0.19 | -1.78 |
| Dilution | 1.21 | 0.79 | -1.40 |
| Proline | 0.55 | -0.75 | -0.31 |

Tabela 10: Medoidy dla metody PAM przy K=3