

Raport - Zaawansowane metody klasyfikacji oraz analiza skupień – algorytmy grupujące i hierarchiczne

Filip Michewicz 282239
Wiktor Niedźwiedzki 258882

10 czerwca 2025 Anno Domini

Spis treści

1	Zaawansowane metody klasyfikacji	4
1.1	Rodziny klasyfikatorów/uczenie zespołowe	4
1.2	Metoda wektorów nośnych (SVM)	5
1.2.1	Jądro liniowe	5
1.2.2	Jądro wielomianowe	6
1.2.3	Jądro radialne	7
1.2.4	Jądro sigmoidalne	9
1.3	Wnioski	11
2	Analiza skupień – algorytmy grupujące i hierarchiczne	12
2.1	Charakterystyka danych	12
2.2	Wyniki grupowania	16
2.2.1	k-średnie	17
2.2.2	Partitioning Around Medoids (PAM)	19
2.2.3	Agglomerative Nesting (AGNES)	21
2.2.4	Divisive clustering (DIANA)	24
2.3	Ocena jakości grupowania i wizualizacja najlepszych wyników	26
2.3.1	Ocena	26
2.3.2	Wizualizacja	29
2.4	Wnioski	35
3	Podsumowanie	35

Spis wykresów

1	Pojedyncze drzewo klasyfikacyjne	4
2	Liczność poszczególnych typów szkła	13
3	Wykres pudełkowy, zmienne bez standaryzacji	14
4	Wykres pudełkowe, po standaryzacji	15
5	Wizualizacja danych, PCA	16
6	PCA, kolory - rzeczywiste, kształt - wyniki	17
7	Wykres RI od Na, aby pokazać gdzie są wyznaczone centra skupień	18
8	coś	19
9	coś, z medoidami	20
10	AGNES: single linkage	22
11	AGNES: complete linkage	23
12	AGNES: average linkage	24
13	AGNES: average linkage	25
14	AGNES: average linkage	26
15	Connectivity	27
16	Dunn	28
17	Silhouette	29
18	PCA, kolory - rzeczywiste, kształt - wyniki, k=2	30
19	Wykres RI od Na, aby pokazać gdzie są wyznaczone centra skupień, k=2	31
20	coś, k=2	32
21	coś, z medoidami, k=2	33
22	AGNES: complete lineage, k=2	34
23	DIANA, k=3	35

Spis tabel

1	Średnia poprawa dokładności klasyfikacji za pomocą drzewa klasyfikacyjnego, z podziałem na algorytmy uczenia zespołowego oraz liczbę replikacji	5
2	Jądro liniowe - bez skalowania	5
3	Jądro liniowe - ze skalowaniem	6
4	Jądro wielomianowe - wielokrotny podział, bez skalowania	6
5	Jądro wielomianowe - wielokrotny podział, ze skalowaniem	6
6	Jądro wielomianowe - cross-validation, bez skalowania	6
7	Jądro wielomianowe - cross-validation, ze skalowaniem	7
8	Jądro wielomianowe - bootstrap, bez skalowania	7

9	Jądro wielomianowe - bootstrap, ze skalowaniem	7
10	Badanie wpływu stopnia wielomianu na dokładność - wielokrotny podział, najbardziej dokładna kombinacja gammy i kary dla opcji default (stopień 3	7
11	Jądro radialne - wielokrotny podział, bez skalowania	8
12	Jądro radialne - wielokrotny podział, ze skalowaniem	8
13	Jądro radialne - cross-validation, bez skalowania	8
14	Jądro radialne - cross-validation, ze skalowaniem	8
15	Jądro radialne - bootstrap, bez skalowania	9
16	Jądro radialne - bootstrap, ze skalowaniem	9
17	Jądro sigmoidalne - wielokrotny podział, bez skalowania	9
18	Jądro sigmoidalne - wielokrotny podział, ze skalowaniem	9
19	Jądro sigmoidalne - cross-validation, bez skalowania	10
20	Jądro sigmoidalne - cross-validation, ze skalowaniem	10
21	Jądro sigmoidalne - bootstrap, bez skalowania	10
22	Jądro sigmoidalne - bootstrap, ze skalowaniem	10
23	Opis zmiennych w zbiorze danych wine	12
24	Macierz błędów; metoda k-średnich	18
25	Dane medoidów, k=6	20
26	Macierz błędów; metoda k-średnich	20
27	Macierz błędów; agnes, najbliższy sąsiad	22
28	Macierz błędów; agnes, najdalszy sąsiad	23
29	Macierz błędów; agnes, średnia odległość	24
30	Macierz błędów; agnes, średnia odległość	25
31	Macierz błędów; agnes, średnia odległość	26
32	Dane medoidów, k=2	33

1 Zaawansowane metody klasyfikacji

W pierwszej części zadania zastosujemy algorytmy *ensemble learning* (bagging, boosting i random forest) w celu poprawy dokładności cech klasyfikacyjnych. W drugiej natomiast poznamy i ocenimy nową metodę klasyfikacji - metodę wektorów nośnych (SVM).

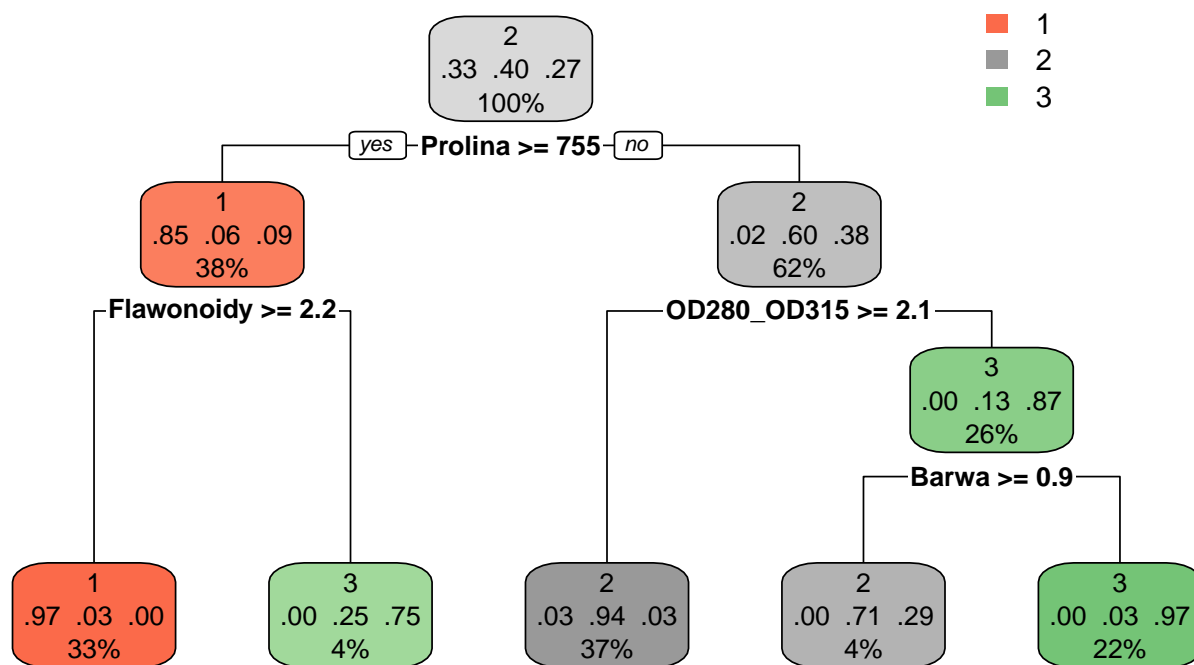
Zadanie zostanie wykonane na zbiorze danych *wine*, którego szczegółowy opis znajduje się w poprzednim raporcie.

1.1 Rodziny klasyfikatorów/uczenie zespołowe

Wyróżniamy trzy algorytmy uczenia zespołowego (ang. ensemble learning):

- **Bagging** - generujemy B-bootstrapowych replikacji zbioru uczącego, na podstawie których tworzymy B klasyfikatorów. Następnie łączymy je w klasyfikator zagregowany, który przydziela dane cechy do klas za pomocą reguły "głosowania większości" (w przypadku remisu wybiera losowo). Każdy klasyfikator powstaje niezależnie (w sensie takim, że wyniki poprzednich nie mają wpływu na generowanie nowych).
- **Boosting** - podobnie jak w bagging, tworzymy klasyfikator zagregowany złożony z wielu pojedynczych klasyfikatorów. Jednak różnica jest taka, że klasyfikatory powstają sekwencyjnie. Na początku każda cecha w zbiorze ma przypisaną taką samą wagę. Z każdą kolejną iteracją natomiast waga zwiększa się dla uprzednio źle sklasyfikowanych przypadków.
- **Random forest** (dla drzew klasyfikacyjnych) - metoda podobna do bagging z tą różnicą, że klasyfikatory powstają na podstawie różnych m-elementowych podzbiorach cech (m mniejsze bądź równe wszystkim cechom).

Na wykresie przedstawiono pojedyncze drzewo klasyfikacyjne.



Wykres 1: Pojedyncze drzewo klasyfikacyjne

Błąd estymowany metodą bootstrap .632+ wynosi 0.0910133. Na jego podstawie określimy poprawę modelu po zastosowaniu metod uczenia zespołowego.

W tej części analizy do oceny wydajności modelu zostanie wykorzystana wyłącznie metoda .632+, ponieważ koryguje ona obciążenie estymatora (bias) i dostarcza bardziej wiarygodnej oceny błędu generalizacji, zwłaszcza przy ryzyku przeuczenia i ograniczonej liczbie próbek.

Tabela 1: Średnia poprawa dokładności klasyfikacji za pomocą drzewa klasyfikacyjnego, z podziałem na algorytmy uczenia zespołowego oraz liczbę replikacji

x
41.52
87.65
72.95

1.2 Metoda wektorów nośnych (SVM)

W tej części przeprowadzona będzie klasyfikacja na podstawie metody wektorów nośnych, z podziałem na różne funkcje jądrowe.

Metoda SVM jest jedną z najczęściej stosowanych technik uczenia maszynowego w zadaniach klasyfikacyjnych. Jej podstawowym celem jest wyznaczenie hiperpłaszczyzny maksymalnie oddzielającej obserwacje należące do różnych klas, przy jednoczesnym maksymalizowaniu marginesu między klasami.

Dzięki zastosowaniu funkcji jądrowych (kernel functions), SVM umożliwia również skuteczną klasyfikację danych nieliniowo separowalnych poprzez odwzorowanie ich do przestrzeni o wyższej liczbie wymiarów. W niniejszej analizie zostaną porównane różne funkcje jądrowe, w tym liniowa, wielomianowa oraz radialna (RBF), w kontekście ich wpływu na jakość klasyfikacji.

1.2.1 Jądro liniowe

Przeanalizowano skuteczność klasyfikacyjną z zastosowaniem **jądra liniowego**, zarówno **bez skalowania danych**, jak i **po ich skalowaniu**.

Porównanie wyników dla obu wariantów (ze skalowaniem i bez) pozwala ocenić wpływ przeskalowania zmiennych na jakość klasyfikacji. Ponieważ SVM opiera się na obliczeniach odległości i iloczynów skalarnych, skalowanie danych może znacząco wpłynąć na działanie algorytmu, szczególnie gdy zmienne wejściowe różnią się skalą lub jednostką.

Tabela 2: Jądro liniowe - bez skalowania

	0.001	0.01	0.1	1	10	100	1000
Wielokrotny podział	40.00	98.17	97.00	95.50	96.50	96.33	95.67
Cross-validation	45.08	57.14	92.88	93.63	93.63	93.63	93.63
Bootstrap	37.37	95.86	97.21	97.47	95.47	96.75	96.23
Średnio	40.82	83.72	95.70	95.53	95.20	95.57	95.18

Tabela 3: Jądro liniowe - ze skalowaniem

	0.001	0.01	0.1	1	10	100	1000
Wielokrotny podział	38.50	97.50	97.17	96.50	96.00	96.50	96.00
Cross-validation	32.71	50.63	93.26	93.07	93.07	93.07	93.07
Bootstrap	38.65	96.34	97.28	95.46	97.25	96.45	96.80
Średnio	36.62	81.49	95.90	95.01	95.44	95.34	95.29

1.2.2 Jądro wielomianowe

Tabela 4: Jądro wielomianowe - wielokrotny podział, bez skalowania

	0.01	1.12	2.23	3.34	4.45	5.56	6.67	7.78	8.89	10
0.001	36.33	93.17	96.17	95.00	95.00	95.50	94.33	94.00	95.83	95.83
0.01	40.00	97.00	94.67	95.83	94.50	95.17	93.67	95.17	95.33	96.33
0.1	39.50	95.17	92.50	95.50	95.33	95.00	96.33	94.83	94.50	96.00
1	39.17	94.67	97.33	94.17	95.17	95.83	95.67	95.33	94.67	95.67
10	39.83	95.67	94.83	94.50	94.33	95.17	96.00	94.83	96.00	96.00
100	83.33	95.83	96.17	96.17	96.50	95.67	96.83	96.00	94.83	94.33
1000	95.83	95.67	96.00	95.17	96.00	95.00	95.33	94.33	93.67	95.67

Tabela 5: Jądro wielomianowe - wielokrotny podział, ze skalowaniem

	0.01	1.12	2.23	3.34	4.45	5.56	6.67	7.78	8.89	10
0.001	35.33	95.33	96.17	94.17	96.33	94.50	96.00	96.17	96.50	96.33
0.01	36.33	96.50	95.33	95.33	95.17	94.67	95.67	94.17	95.67	95.50
0.1	37.33	96.50	95.00	95.50	94.83	96.17	94.83	96.00	95.67	95.50
1	38.83	96.17	95.67	95.67	95.17	96.17	95.33	96.50	95.00	95.33
10	40.67	96.00	95.83	96.00	95.33	96.33	95.83	95.17	95.50	95.17
100	88.00	95.17	94.67	94.83	95.17	95.17	94.67	95.67	94.33	96.17
1000	95.33	94.00	94.50	95.00	96.00	96.00	94.00	94.17	95.83	95.00

Tabela 6: Jądro wielomianowe - cross-validation, bez skalowania

	0.01	1.12	2.23	3.34	4.45	5.56	6.67	7.78	8.89	10
0.001	39.80	94.93	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35
0.01	39.80	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35
0.1	39.80	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35
1	39.80	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35
10	44.28	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35
100	88.69	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35
1000	94.93	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35	94.35

Tabela 7: Jądro wielomianowe - cross-validation, ze skalowaniem

	0.01	1.12	2.23	3.34	4.45	5.56	6.67	7.78	8.89	10
0.001	39.80	95.52	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67
0.01	39.80	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67
0.1	39.80	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67
1	39.80	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67
10	43.73	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67
100	87.06	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67
1000	96.63	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67	96.67

Tabela 8: Jądro wielomianowe - bootstrap, bez skalowania

	0.01	1.12	2.23	3.34	4.45	5.56	6.67	7.78	8.89	10
0.001	39.17	93.99	94.70	94.28	94.58	94.08	94.64	94.61	93.44	93.52
0.01	34.68	94.06	94.91	92.90	94.17	95.14	93.69	94.03	92.45	93.81
0.1	36.34	95.98	94.19	93.71	93.74	93.68	94.77	94.65	93.36	95.36
1	39.45	95.53	94.11	93.63	93.24	94.75	95.42	92.83	93.78	93.91
10	41.55	93.83	93.23	94.61	95.77	92.71	93.80	94.85	95.23	94.31
100	87.27	94.04	93.04	94.96	93.93	93.38	95.03	95.09	94.76	95.61
1000	94.04	95.09	93.85	93.40	94.63	93.78	93.97	95.72	93.37	94.56

Tabela 9: Jądro wielomianowe - bootstrap, ze skalowaniem

	0.01	1.12	2.23	3.34	4.45	5.56	6.67	7.78	8.89	10
0.001	37.99	92.32	92.90	95.57	94.85	93.88	95.23	94.54	91.80	95.98
0.01	37.83	92.84	92.76	92.69	94.38	94.35	93.98	92.91	94.11	93.42
0.1	38.16	94.86	93.58	94.89	94.22	94.03	94.30	94.85	94.28	95.97
1	35.54	94.72	94.18	94.05	94.75	95.03	93.85	95.29	94.41	95.22
10	40.44	95.11	93.75	93.20	93.50	94.74	93.99	93.61	93.87	93.27
100	89.20	95.34	92.66	95.52	94.58	95.62	95.79	92.88	95.09	94.60
1000	94.43	94.54	94.60	94.56	94.73	95.03	94.82	94.99	95.17	96.20

Najlepsza gamma: **7.78**, najlepsza kara: **1**. Robimy dla danych po standaryzacji, bo tak i chuj.

Badamy tylko na podstawie wielokrotnego podziału, bo tak i chuj również.

Tabela 10: Badanie wpływu stopnia wielomianu na dokładność - wielokrotny podział, najbardziej dokładna kombinacja gammy i kary dla opcji default (stopień 3)

	2	3	4	5	6	7
Dokładność	86.83	95.83	87.83	87.83	76.5	81.67

1.2.3 Jądro radialne

Tabela 11: Jądro radialne - wielokrotny podział, bez skalowania

	0.01	1.12	2.23	3.34	4.45	5.56	6.67	7.78	8.89	10
0.001	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84
0.01	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84
0.1	79.80	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84
1	98.89	57.75	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84
10	97.16	61.67	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84
100	96.05	61.67	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84
1000	96.05	61.67	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84

Tabela 12: Jądro radialne - wielokrotny podział, ze skalowaniem

	0.01	1.12	2.23	3.34	4.45	5.56	6.67	7.78	8.89	10
0.001	39.90	39.90	39.90	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9
0.01	39.90	39.90	39.90	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9
0.1	82.58	39.90	39.90	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9
1	98.30	58.95	39.90	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9
10	97.78	62.32	40.46	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9
100	96.63	62.32	40.46	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9
1000	96.63	62.32	40.46	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9	39.9

Tabela 13: Jądro radialne - cross-validation, bez skalowania

	0.01	1.12	2.23	3.34	4.45	5.56	6.67	7.78	8.89	10
0.001	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87
0.01	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87
0.1	82.55	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87
1	98.33	56.21	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87
10	98.30	61.34	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87
100	97.75	61.34	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87
1000	97.75	61.34	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87	39.87

Tabela 14: Jądro radialne - cross-validation, ze skalowaniem

	0.01	1.12	2.23	3.34	4.45	5.56	6.67	7.78	8.89	10
0.001	40.00	40.00	40	40	40	40	40	40	40	40
0.01	40.00	40.00	40	40	40	40	40	40	40	40
0.1	79.25	40.00	40	40	40	40	40	40	40	40
1	98.89	57.91	40	40	40	40	40	40	40	40
10	97.22	61.27	40	40	40	40	40	40	40	40
100	96.67	61.27	40	40	40	40	40	40	40	40
1000	96.67	61.27	40	40	40	40	40	40	40	40

Tabela 15: Jądro radialne - bootstrap, bez skalowania

	0.01	1.12	2.23	3.34	4.45	5.56	6.67	7.78	8.89	10
0.001	40.82	37.68	34.33	38.18	39.02	36.42	37.85	34.30	34.92	35.34
0.01	33.43	35.49	37.56	35.96	38.23	34.65	39.08	37.99	38.62	36.47
0.1	63.12	36.88	36.58	38.88	36.32	36.84	37.49	37.42	37.43	39.90
1	96.70	46.32	38.24	39.32	33.72	38.79	39.41	38.04	38.75	36.06
10	95.99	54.32	40.76	37.48	36.56	39.59	36.49	37.09	39.41	38.02
100	96.37	50.12	39.14	40.81	36.05	37.33	38.77	36.47	36.03	36.45
1000	97.44	52.29	40.78	36.25	37.65	36.76	39.14	38.06	36.61	39.31

Tabela 16: Jądro radialne - bootstrap, ze skalowaniem

	0.01	1.12	2.23	3.34	4.45	5.56	6.67	7.78	8.89	10
0.001	39.98	30.30	39.33	34.66	35.77	36.13	36.99	36.33	36.23	36.26
0.01	38.18	33.50	38.61	36.13	36.61	35.86	38.84	36.60	37.62	38.94
0.1	56.80	38.34	37.90	37.40	40.68	38.13	36.95	40.13	36.05	38.94
1	96.83	47.19	35.87	41.13	36.81	35.02	38.19	39.70	37.36	39.01
10	96.75	54.60	41.25	41.18	35.95	38.43	40.43	37.50	38.40	36.81
100	96.69	51.39	35.81	37.77	32.92	35.75	38.01	36.43	37.72	39.56
1000	97.60	54.58	36.00	38.14	40.06	37.82	38.28	39.85	38.00	37.31

1.2.4 Jądro sigmoidalne

Tabela 17: Jądro sigmoidalne - wielokrotny podział, bez skalowania

	0.01	1.12	2.23	3.34	4.45	5.56	6.67	7.78	8.89	10
0.001	36.83	31.83	37.33	39.83	41.83	40.00	36.17	39.50	38.83	36.50
0.01	39.33	60.83	57.17	66.67	57.67	57.00	59.33	56.83	63.33	62.83
0.1	41.33	87.67	87.33	89.33	86.33	88.67	88.00	85.67	89.33	86.67
1	97.50	83.00	82.83	80.83	81.33	80.83	81.00	81.67	82.50	79.83
10	98.17	82.00	80.17	81.17	82.00	81.67	83.17	79.00	80.83	81.33
100	96.33	81.33	80.17	80.33	82.17	80.17	81.33	77.67	82.33	78.00
1000	96.17	84.00	79.50	81.83	80.83	80.67	82.33	81.67	77.83	79.50

Tabela 18: Jądro sigmoidalne - wielokrotny podział, ze skalowaniem

	0.01	1.12	2.23	3.34	4.45	5.56	6.67	7.78	8.89	10
0.001	39.83	40.00	37.00	38.50	44.17	43.50	38.50	43.00	38.00	38.33
0.01	36.67	54.83	65.00	56.33	60.83	63.00	65.00	60.50	57.50	58.67
0.1	37.67	86.83	87.67	87.50	85.83	87.33	87.00	84.67	87.00	87.83
1	97.33	83.17	83.67	80.00	81.17	82.33	81.00	82.83	83.33	80.17
10	97.83	83.50	81.67	81.00	79.50	78.50	81.83	81.67	81.00	81.50
100	96.33	81.17	81.33	81.00	79.33	80.50	82.67	77.33	82.17	82.33
1000	96.50	84.17	80.17	80.50	80.50	82.83	81.83	81.33	80.00	82.50

Tabela 19: Jądro sigmoidalne - cross-validation, bez skalowania

	0.01	1.12	2.23	3.34	4.45	5.56	6.67	7.78	8.89	10
0.001	39.90	39.90	39.90	39.90	39.90	39.90	39.90	39.90	39.90	39.90
0.01	39.90	78.59	78.59	79.15	78.59	79.15	79.15	79.15	79.15	79.15
0.1	42.71	87.09	86.57	85.42	86.54	86.54	87.09	87.09	87.09	85.98
1	97.75	79.74	79.71	80.85	77.45	75.75	75.85	73.56	74.74	75.85
10	97.75	80.88	80.36	81.99	78.59	78.04	76.37	75.26	74.71	75.85
100	95.46	82.55	80.95	80.29	79.74	80.29	77.52	76.44	75.88	76.44
1000	96.05	79.22	80.95	81.41	79.74	81.96	79.74	76.41	76.47	78.14

Tabela 20: Jądro sigmoidalne - cross-validation, ze skalowaniem

	0.01	1.12	2.23	3.34	4.45	5.56	6.67	7.78	8.89	10
0.001	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84	39.84
0.01	39.84	82.68	83.27	83.27	83.27	83.27	83.27	83.27	83.27	83.27
0.1	42.09	87.61	85.95	85.36	85.92	85.36	85.92	86.47	86.47	86.47
1	98.89	82.03	77.55	76.96	76.41	77.52	73.07	75.33	74.71	74.71
10	97.16	79.80	81.44	78.07	79.22	77.55	78.10	79.25	78.07	78.07
100	95.46	79.77	83.10	79.77	76.99	77.52	77.55	79.25	78.66	78.66
1000	96.01	78.66	83.66	79.77	79.80	78.10	75.29	79.22	77.52	78.10

Tabela 21: Jądro sigmoidalne - bootstrap, bez skalowania

	0.01	1.12	2.23	3.34	4.45	5.56	6.67	7.78	8.89	10
0.001	39.28	35.26	35.19	38.34	37.50	40.17	36.51	35.34	36.49	37.89
0.01	39.08	65.94	63.59	57.18	61.98	58.70	55.16	63.59	61.90	64.92
0.1	36.36	87.56	84.88	86.91	83.69	87.60	84.29	86.37	84.18	83.47
1	97.26	79.91	80.61	82.12	80.90	82.45	81.10	81.12	78.30	78.86
10	96.40	80.51	79.50	77.76	80.29	79.04	81.37	84.14	78.88	80.50
100	96.24	79.28	78.46	81.51	79.92	79.94	79.04	79.34	79.69	80.90
1000	96.39	82.88	77.45	80.09	81.36	78.23	80.24	81.02	82.08	80.70

Tabela 22: Jądro sigmoidalne - bootstrap, ze skalowaniem

	0.01	1.12	2.23	3.34	4.45	5.56	6.67	7.78	8.89	10
0.001	38.35	35.36	40.41	34.11	35.09	38.37	32.98	36.73	36.71	36.73
0.01	36.35	64.19	57.76	59.33	62.70	58.73	62.30	61.89	63.67	57.05
0.1	34.90	85.27	86.89	86.38	84.98	86.02	83.63	85.47	86.99	84.66
1	97.61	80.99	79.75	80.34	80.10	82.19	80.91	78.29	80.93	83.12
10	97.37	77.79	81.62	81.61	79.83	80.22	78.69	83.38	79.43	78.62
100	96.85	77.92	80.59	79.81	77.49	77.49	77.22	80.88	77.63	80.57
1000	96.07	78.06	79.02	79.51	82.15	82.44	77.72	78.57	82.14	80.14

1.3 Wnioski

e

2 Analiza skupień – algorytmy grupujące i hierarchiczne

W tym zadaniu zastosujemy i porównamy ze sobą metody analizy skupień - k-średnich i PAM jako algorytmy grupujące, oraz AGNES - algorytm hierarchiczny.

Zadanie zostanie wykonane na zbiorze danych *wine*, którego szczegółowy opis znajduje się w poprzednim raporcie.

To zadanie zostanie wykonane już na innym danych, którymi będzie zbiór *glass*.

2.1 Charakterystyka danych

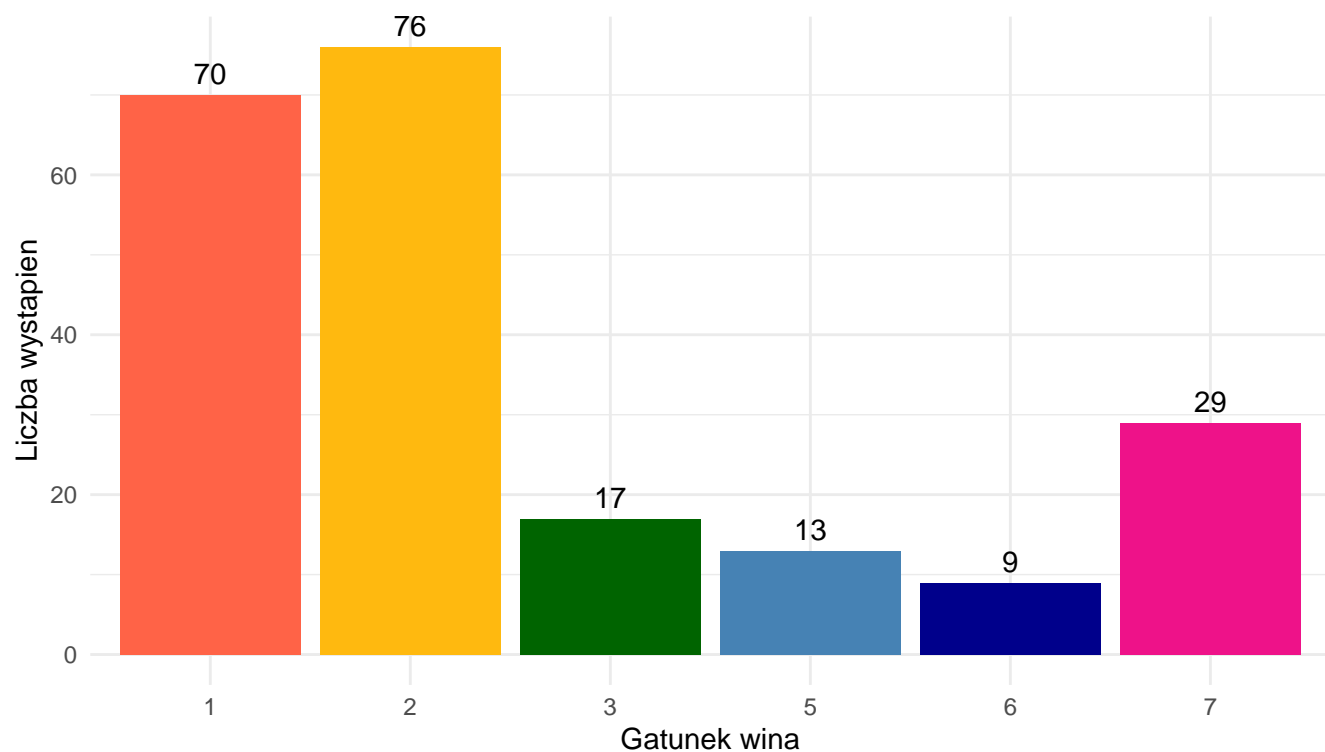
Zbiór danych *glass* zawiera **214** przypadków sześciu rodzajów szkła oraz **10** cech. Liczba brakujących danych wynosi **0**.

Znaczenie poszczególnych cech oraz ich typ przedstawiono w tabeli 23.

Tabela 23: Opis zmiennych w zbiorze danych *wine*

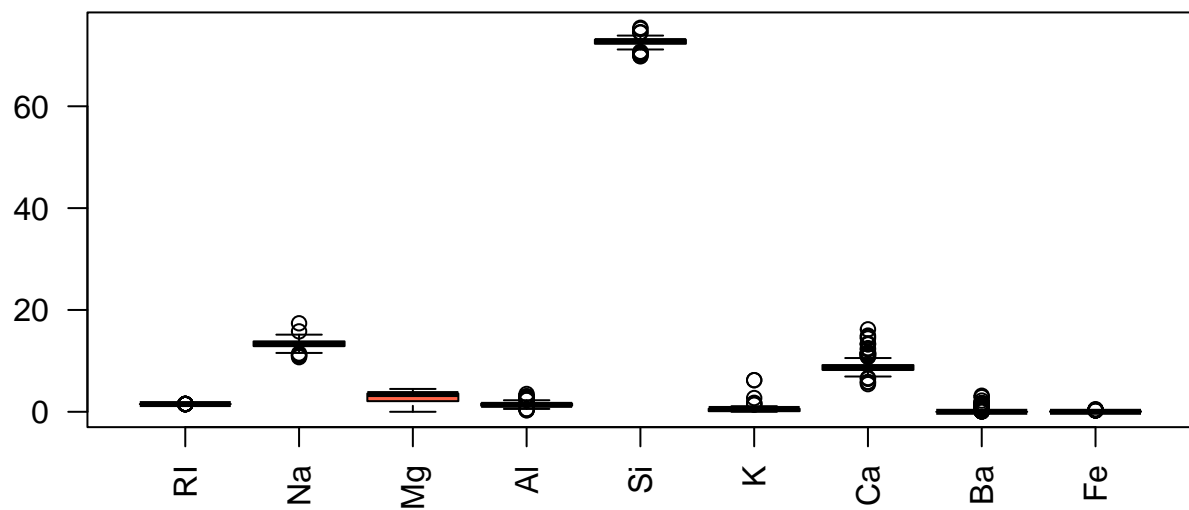
Zmienna	Typ	Opis
RI	numeric	Współczynnik załamania światła
Na	numeric	Zawartość azotu (procent wagowy w odpowiednim tlenku, podobnie jak atrybuty 3-9)
Mg	numeric	Zawartość magnezu
Al	numeric	Zawartość aluminium
Si	numeric	Zawartość krzemu
K	numeric	Zawartość potasu
Ca	numeric	Zawartość wapnia
Ba	numeric	Zawartość baru
Fe	numeric	Zawartość żelaza
Type	factor	Klasa (typ szkła: 1, 2, 3, 5, 6, 7)

W poszczególnych przypadkach sumy procentów wagowych znajdują się w zakresie 99.02-100.1. Nadmiar spowodowany jest najprawdopodobniej przez błędy przy zaokrąglaniu do dwóch miejsc po przecinku. Nie-
domiar natomiast może być spowodowany przez zawartość innych pierwiastków chemicznych, niezawartych w zbiorze.



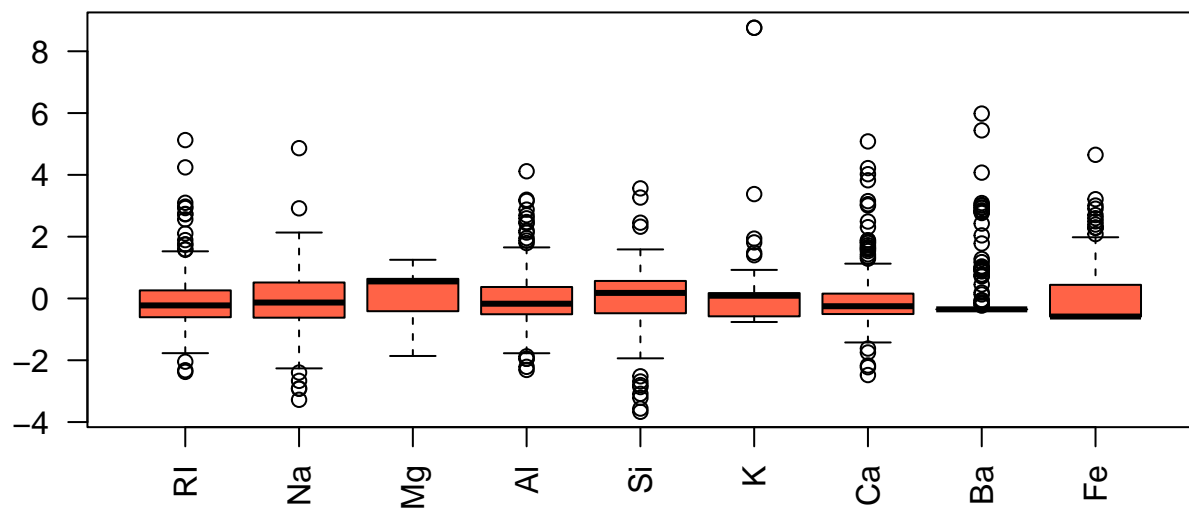
Wykres 2: Liczność poszczególnych typów szkła

Z Wykresu 1. można odczytać, że liczba obserwacji poszczególnych klas w zbiorze danych jest bardzo zróżnicowana. Siedemdziesiąt obserwacji lub więcej posiadają typy 1. oraz 2. (co stanowi 68.22% danych), reszta już po mniej niż 30 obserwacji.



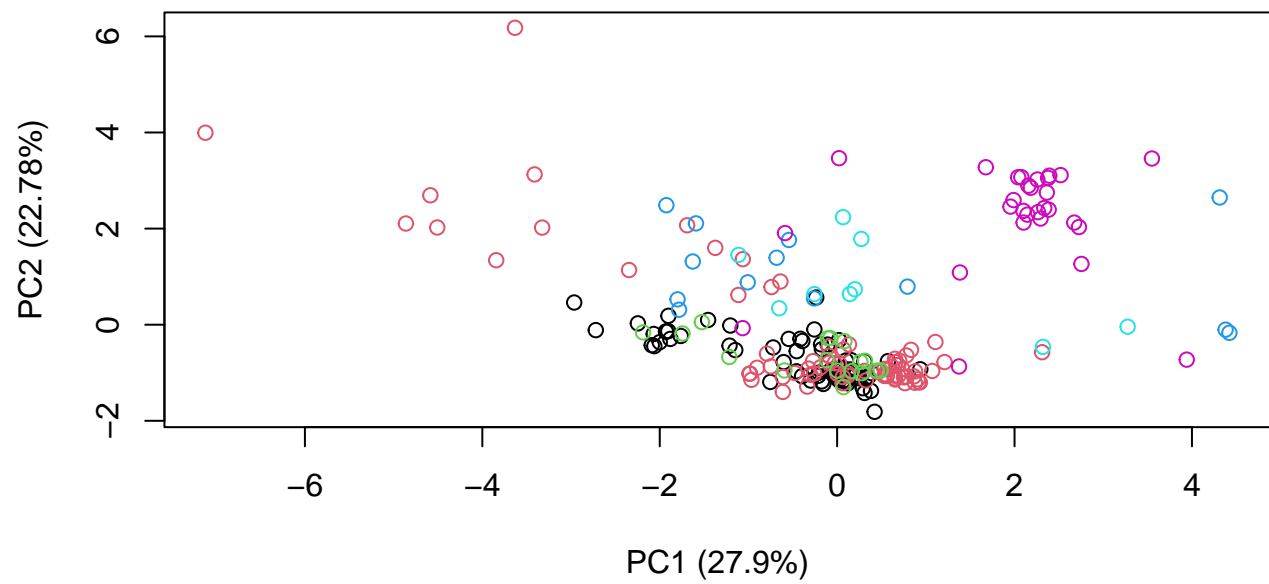
Wykres 3: Wykres pudełkowy, zmienne bez standaryzacji

KURWA STANDARYZACJA MACHEN



Wykres 4: Wykres pudełkowe, po standaryzacji

Teraz jest zajebicie



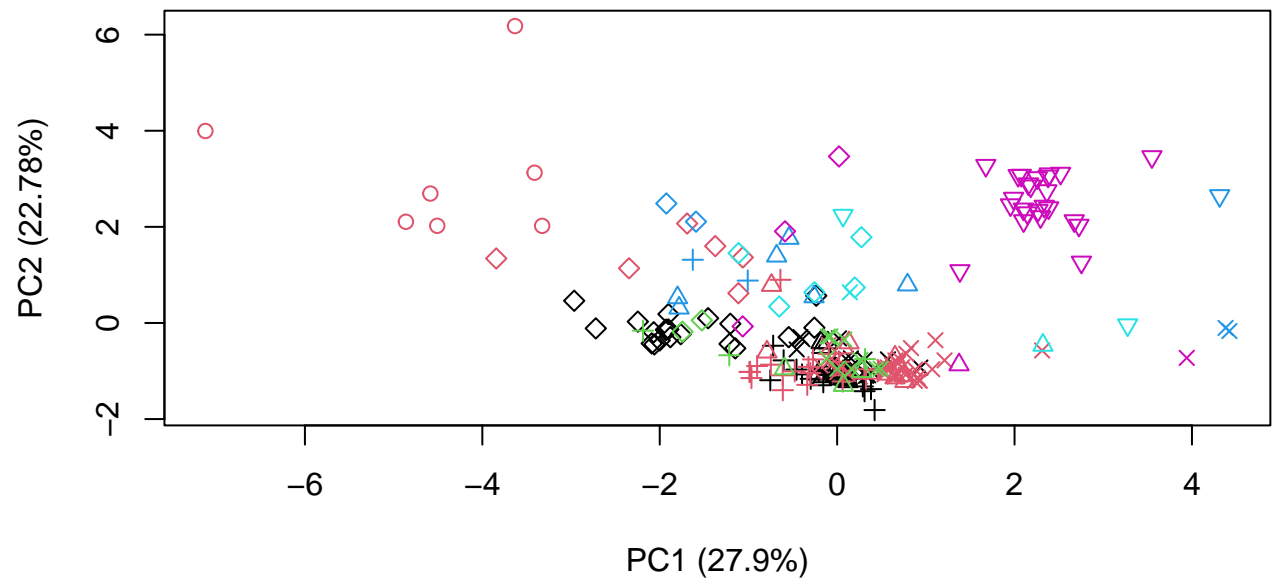
Wykres 5: Wizualizacja danych, PCA

Chuja widać, ciekawe kto wybrał ten zbiór?

2.2 Wyniki grupowania

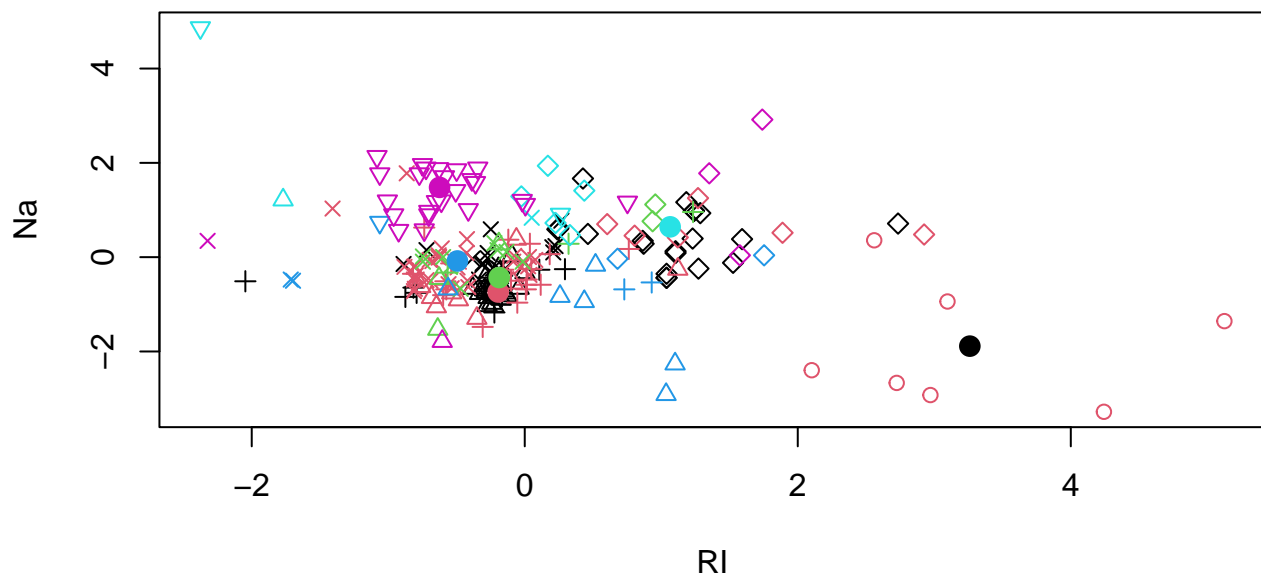
Przeprowadzamy dla rzeczywistej liczby etykiet, która wynosi **6**.

2.2.1 k-średnie



Wykres 6: PCA, kolory - rzeczywiste, kształt - wyniki

Gównianie mu poszło



Wykres 7: Wykres RI od Na, aby pokazać gdzie są wyznaczone centra skupień

Centra wywalone w kosmos, ale fajnie

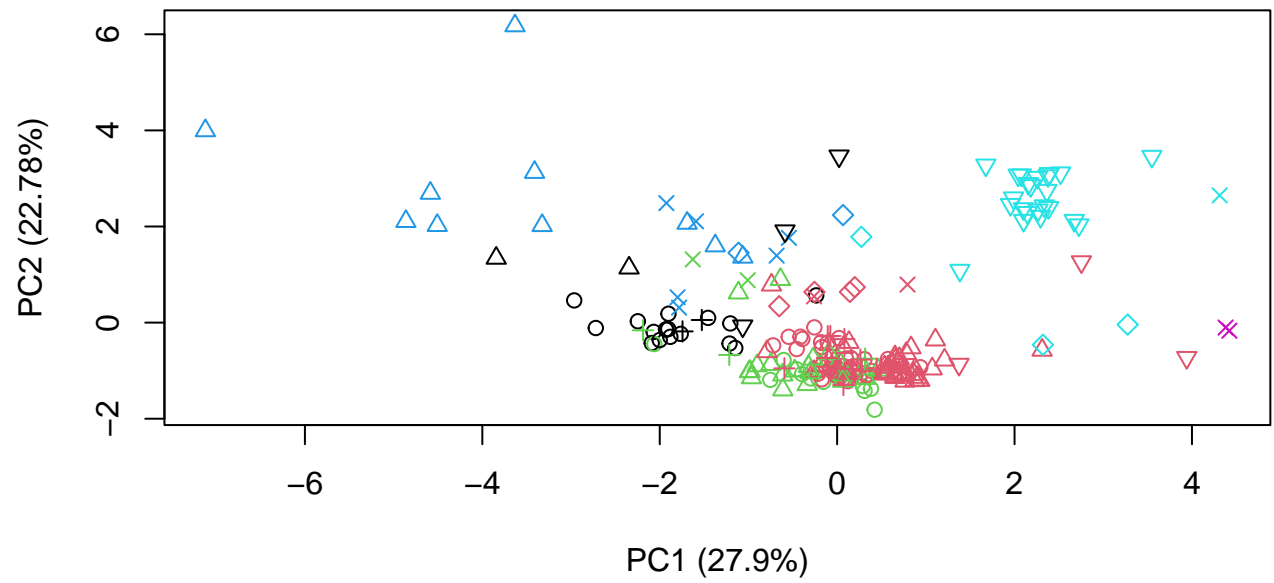
Tabela 24: Macierz błędów; metoda k-średnich

	1	2	3	5	6	7
1	20	6	2	2	5	3
2	17	34	9	2	1	1
3	13	20	3	2	0	0
5	20	9	3	6	1	1
6	0	7	0	0	0	0
7	0	0	0	1	2	24

Dokładność (macierz): 40.65%.

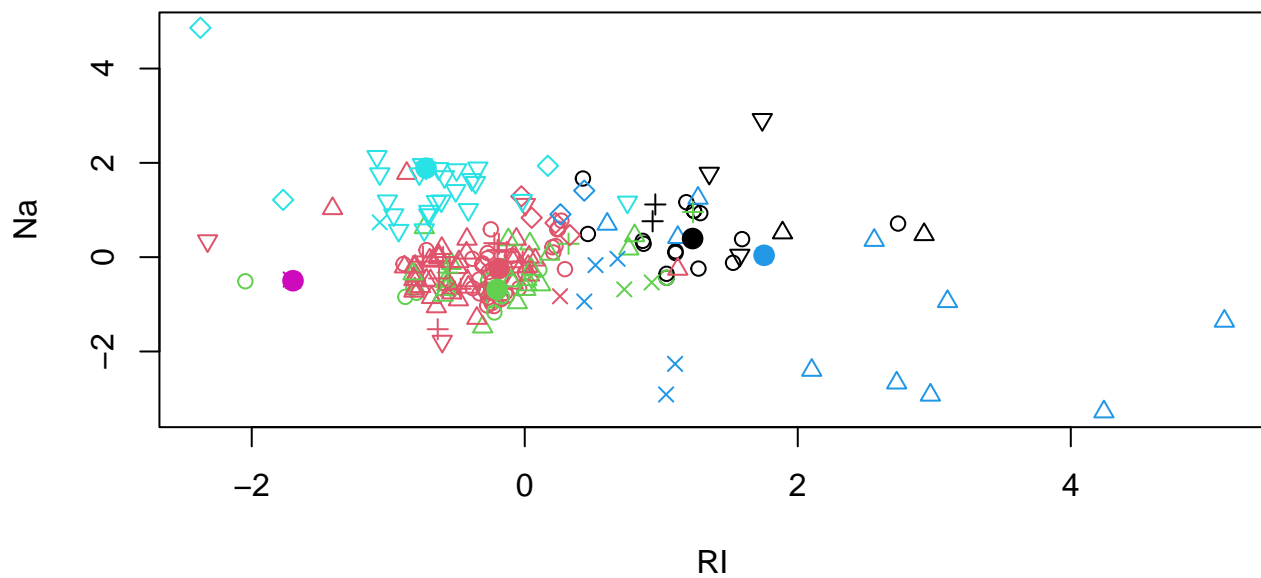
Dokładność (matchClasses, "exact"): 40.65%.

2.2.2 Partitioning Around Medoids (PAM)



Wykres 8: coś

Też słabo



Wykres 9: coś, z medoidami

Meh

Tabela 25: Dane medoidów, k=6

	RI	Na	Mg	Al	Si	K	Ca	Ba	Fe	Type	PAM
44	1.52210	13.73	3.84	0.72	71.76	0.17	9.74	0.00	0.00	1	1
43	1.51779	13.21	3.39	1.33	72.76	0.59	8.59	0.00	0.00	1	2
33	1.51775	12.85	3.48	1.23	72.97	0.61	8.56	0.09	0.22	1	3
171	1.52369	13.44	0.00	1.58	72.22	0.32	12.24	0.00	0.00	5	4
205	1.51617	14.95	0.00	2.27	73.30	0.00	8.71	0.67	0.00	7	5
173	1.51321	13.00	0.00	3.02	70.70	6.21	6.93	0.00	0.00	5	6

Tabela 26: Macierz błędów; metoda k-średnich

	1	2	3	5	6	7
1	17	2	2	0	0	3
2	40	43	12	2	4	3
3	13	21	3	2	0	0
5	0	10	0	6	2	0
6	0	0	0	1	3	23
7	0	0	0	2	0	0

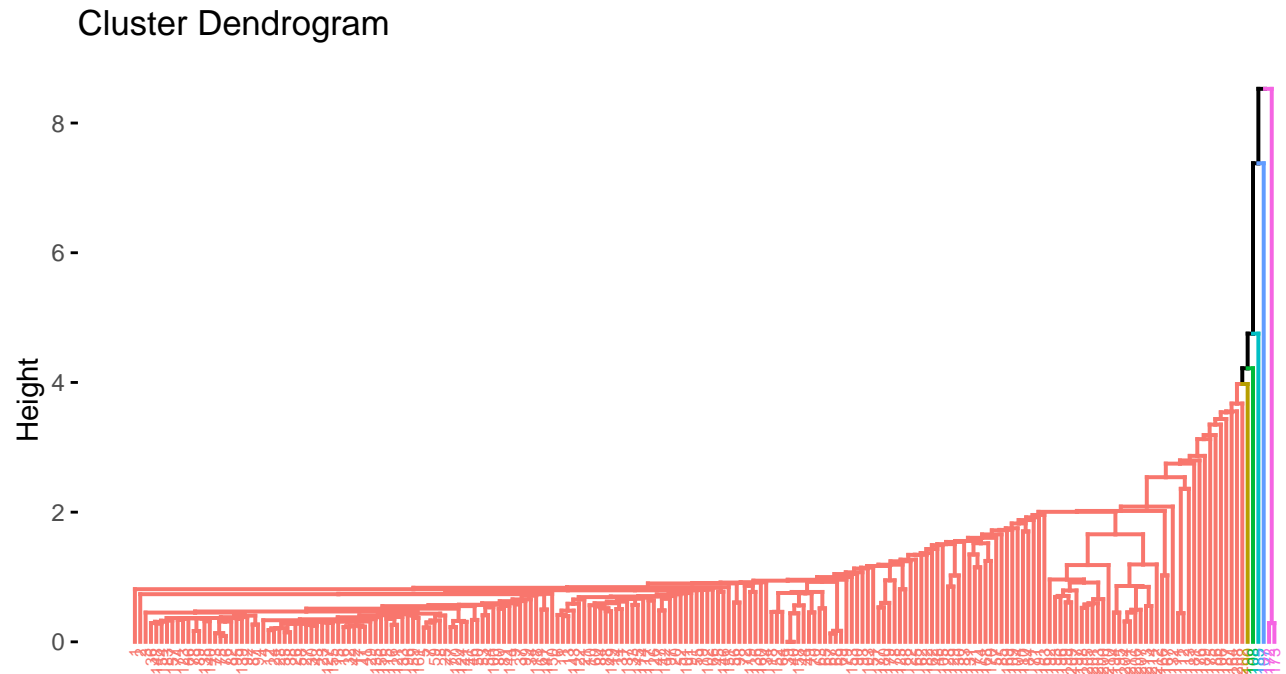
Dokładność: 33.64%.

Dokładność (matchClasses, “exact”): 42.99%.

Gorzej niż k-średnie *shocked emoji*.

2.2.3 Agglomerative Nesting (AGNES)

2.2.3.1 Najbliższy sąsiad



Wykres 10: AGNES: single linkage

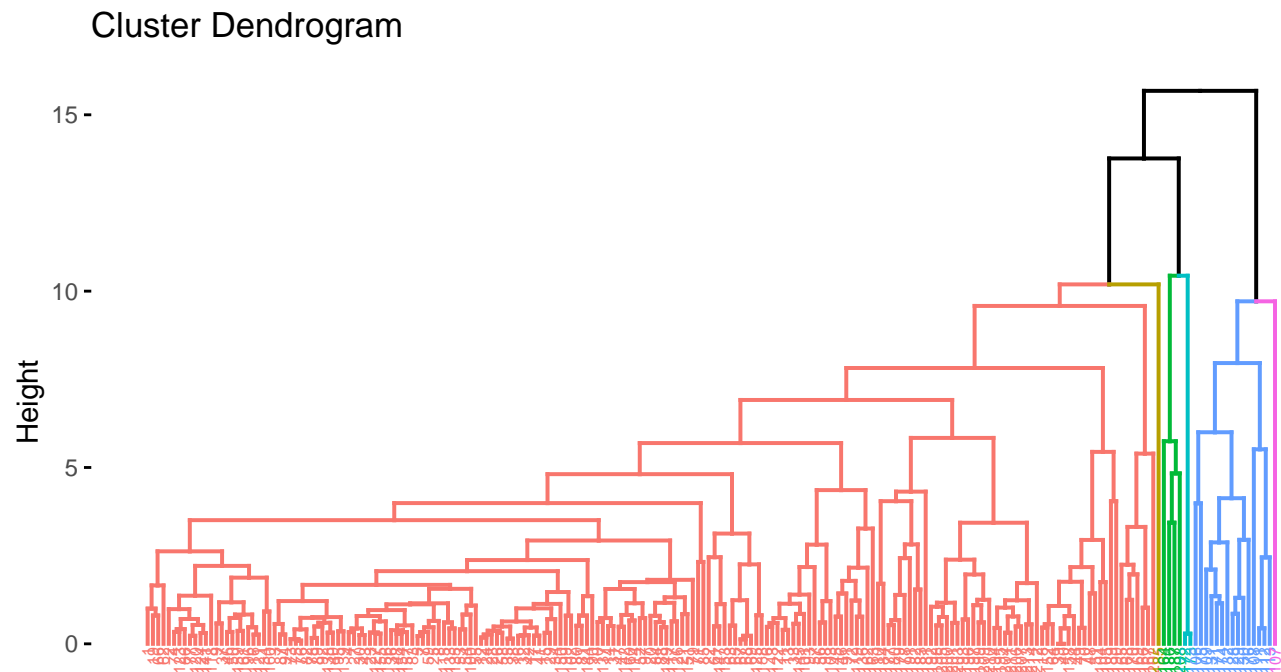
Tabela 27: Macierz błędów; agnes, najbliższy sąsiad

	1	2	3	5	6	7
1	70	74	17	11	8	28
2	0	1	0	0	0	0
3	0	1	0	0	0	0
5	0	0	0	2	0	0
6	0	0	0	0	1	0
7	0	0	0	0	0	1

Dokładność: 35.05%.

Dokładność (matchClasses, “exact”): 36.45%.

2.2.3.2 Najdalszy sąsiad



Wykres 11: AGNES: complete linkage

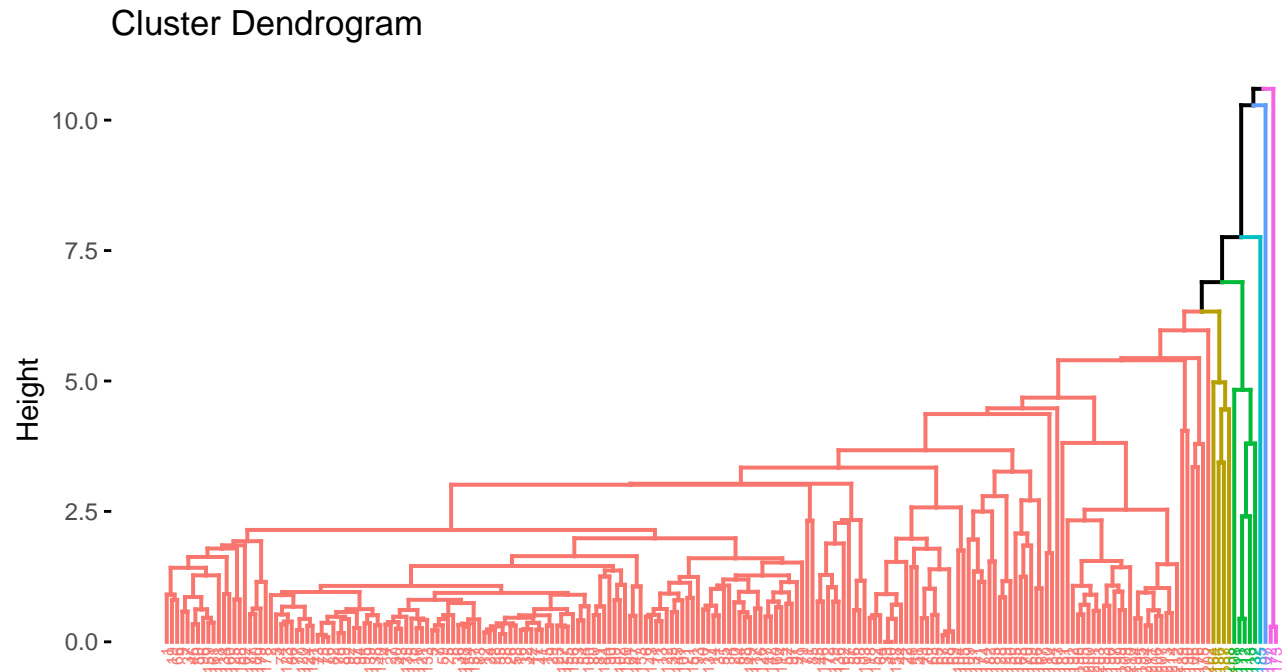
Tabela 28: Macierz błędów; agnes, najdalszy sąsiad

	1	2	3	5	6	7
1	70	64	17	6	8	26
2	0	11	0	4	0	0
3	0	1	0	0	0	0
5	0	0	0	1	0	3
6	0	0	0	2	0	0
7	0	0	0	0	1	0

Dokładność: 38.32%.

Dokładność (matchClasses, “exact”): 40.65%.

2.2.3.3 Średnia odległość



Wykres 12: AGNES: average linkage

Tabela 29: Macierz błędów; agnes, średnia odległość

	1	2	3	5	6	7
1	70	70	17	10	8	26
2	0	1	0	0	0	0
3	0	5	0	0	0	0
5	0	0	0	1	0	3
6	0	0	0	2	0	0
7	0	0	0	0	1	0

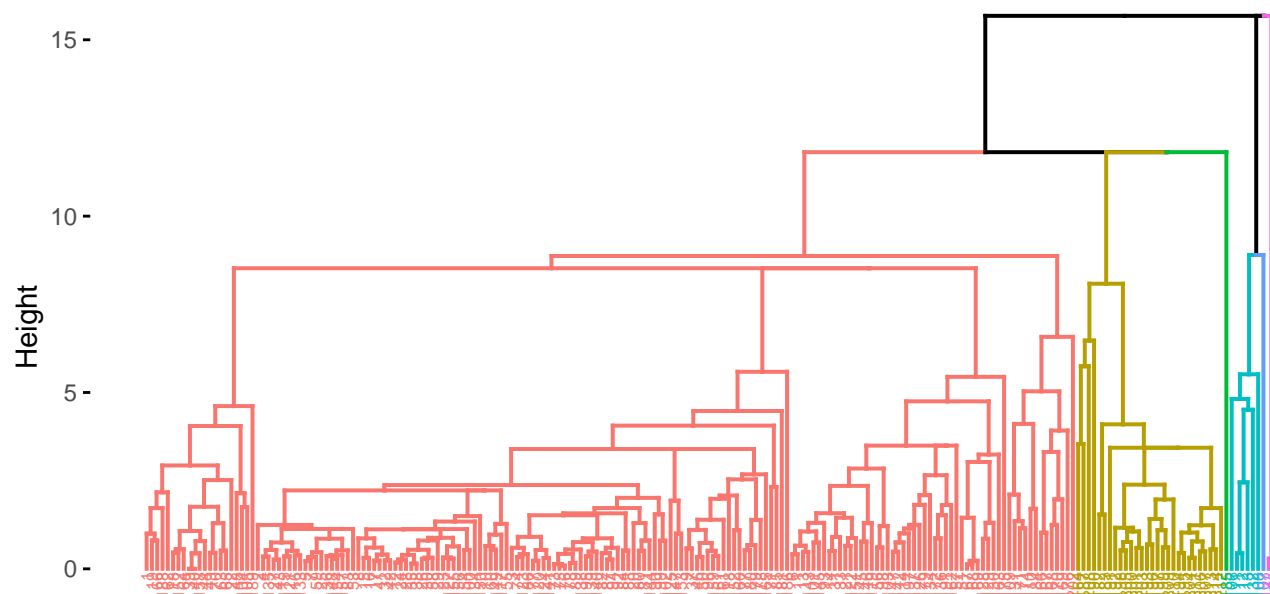
Dokładność: 33.64%.

Dokładność (matchClasses, “exact”): 37.85%.

2.2.4 Divisive clustering (DIANA)

2.2.4.1 Odległość euklidesowa

Cluster Dendrogram



Wykres 13: AGNES: average linkage

Tabela 30: Macierz błędów; agnes, średnia odległość

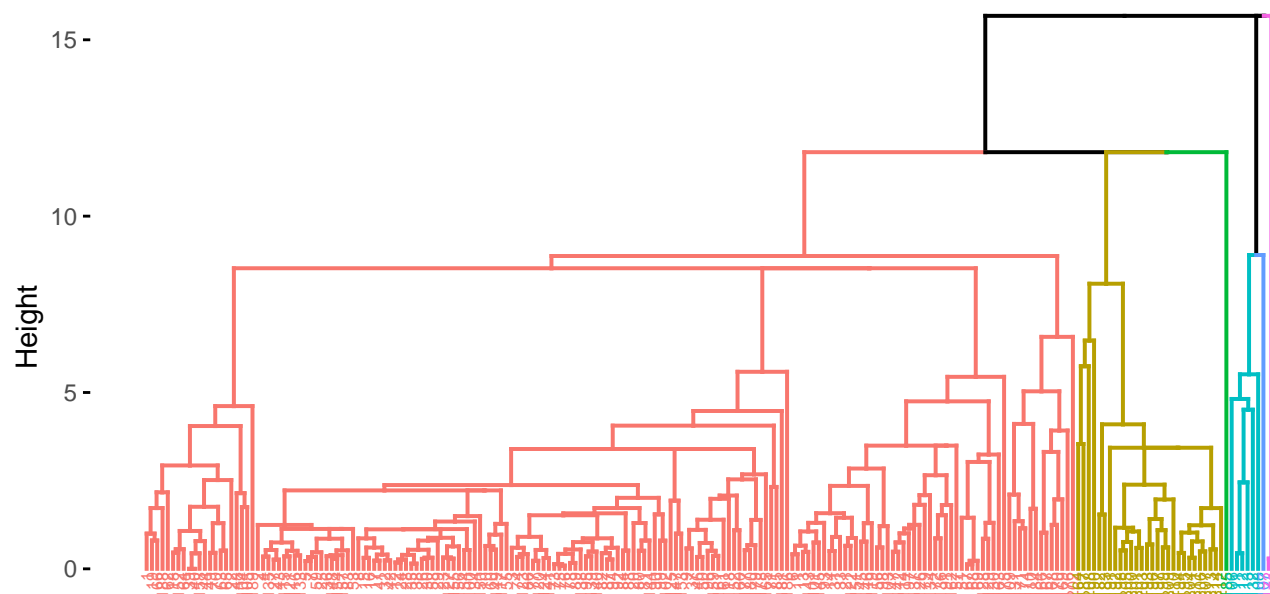
	1	2	3	5	6	7
1	70	69	17	10	6	4
2	0	6	0	0	0	0
3	0	1	0	0	0	0
5	0	0	0	1	2	25
6	0	0	0	2	0	0
7	0	0	0	0	1	0

Dokładność: 35.98%.

Dokładność (matchClasses, “exact”): 48.6%.

2.2.4.2 Odległość Manhattan (taksówkowa)

Cluster Dendrogram



Wykres 14: AGNES: average linkage

Tabela 31: Macierz błędów; agnes, średnia odległość

	1	2	3	5	6	7
1	70	69	17	10	6	4
2	0	6	0	0	0	0
3	0	1	0	0	0	0
5	0	0	0	1	2	25
6	0	0	0	2	0	0
7	0	0	0	0	1	0

Dokładność: 35.98%.

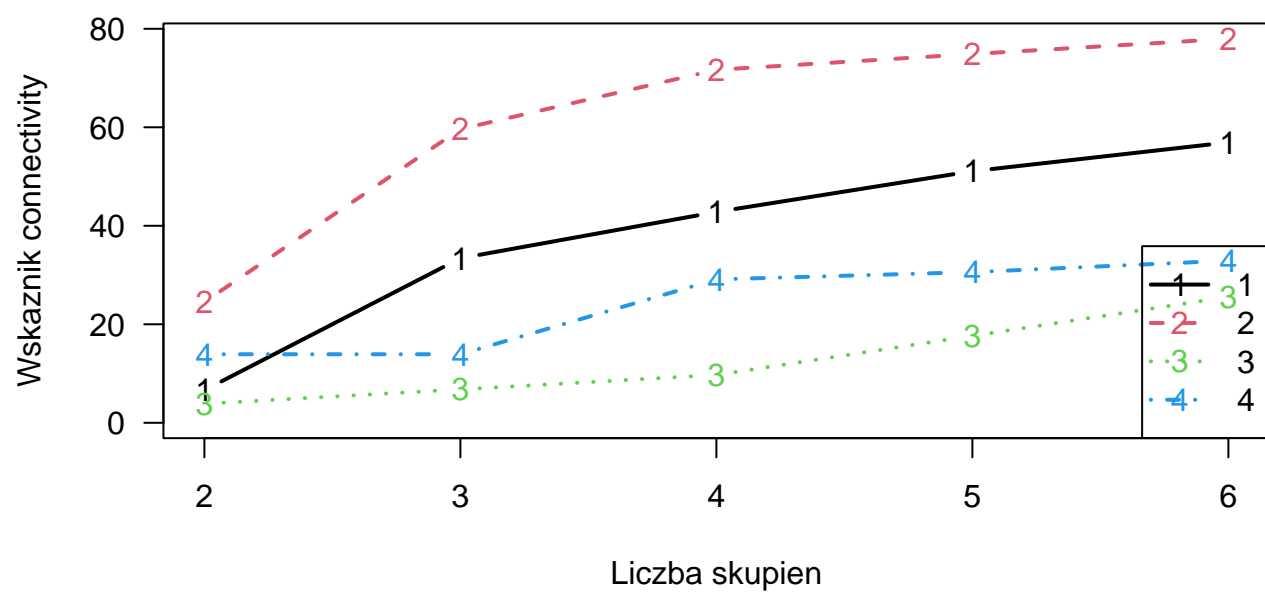
Dokładność (matchClasses, "exact"): 48.6%.

2.3 Ocena jakości grupowania i wizualizacja najlepszych wyników

2.3.1 Ocena

Legenda:

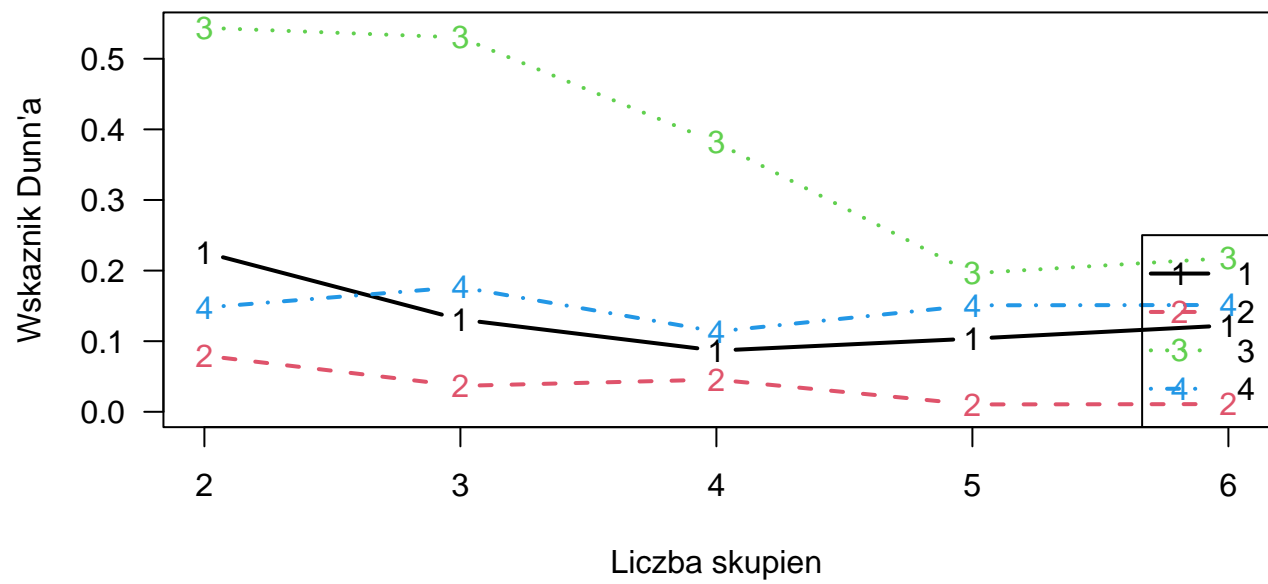
- 1 - kmeans,
- 2 - PAM,
- 3 - AGNES,
- 4 - DIANA.



Wykres 15: Connectivity

Connectivity - im mniejszy, tym lepszy:

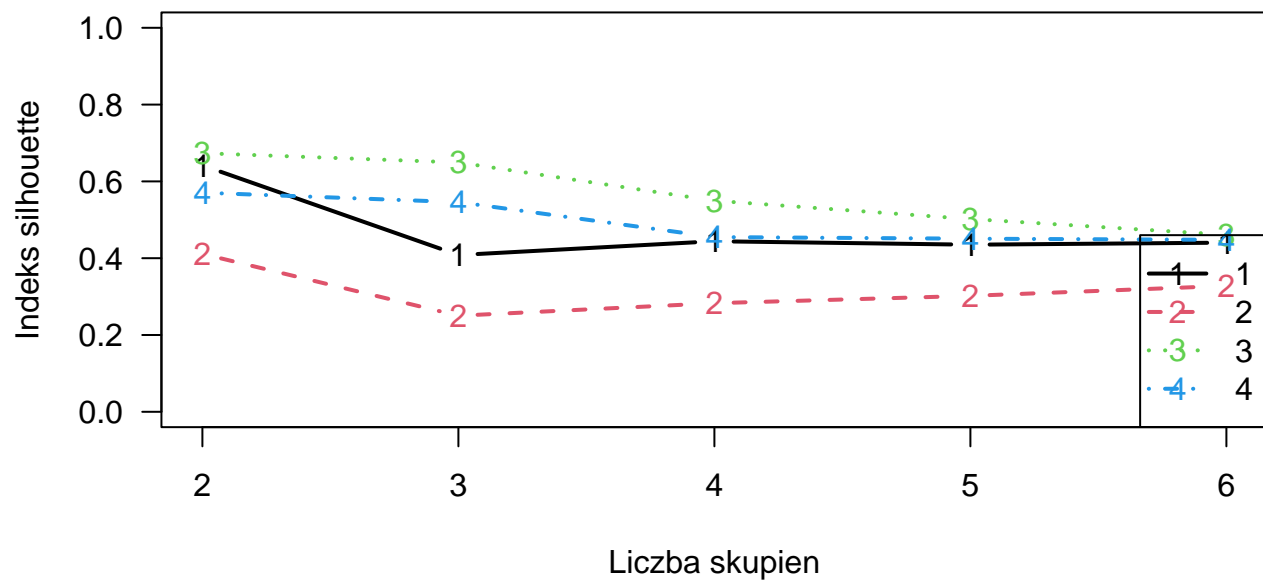
- kmeans - 2,
- PAM - 2,
- AGNES - 2 (najlepszy),
- DIANA - 3.



Wykres 16: Dunn

Dunn - im większy, tym lepszy:

- kmeans - 2,
- PAM - 2,
- AGNES - 2 (najlepszy),
- DIANA - 3.



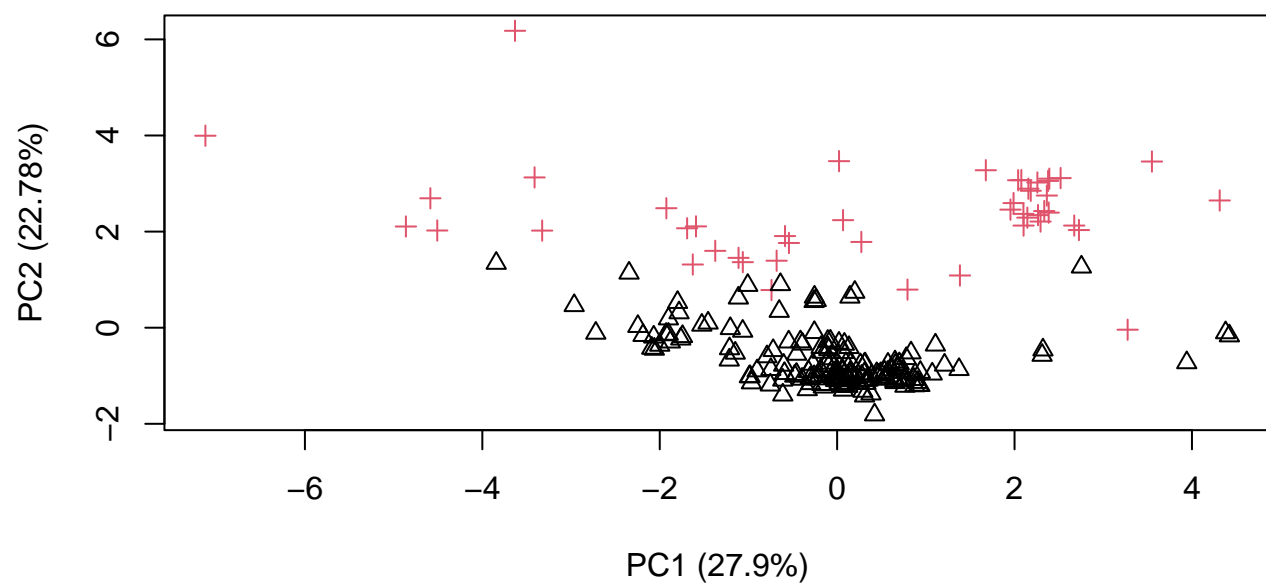
Wykres 17: Silhouette

Dunn - im większy, tym lepszy:

- kmeans - 2,
- PAM - 2,
- AGNES - 2 (najlepszy),
- DIANA - 2.

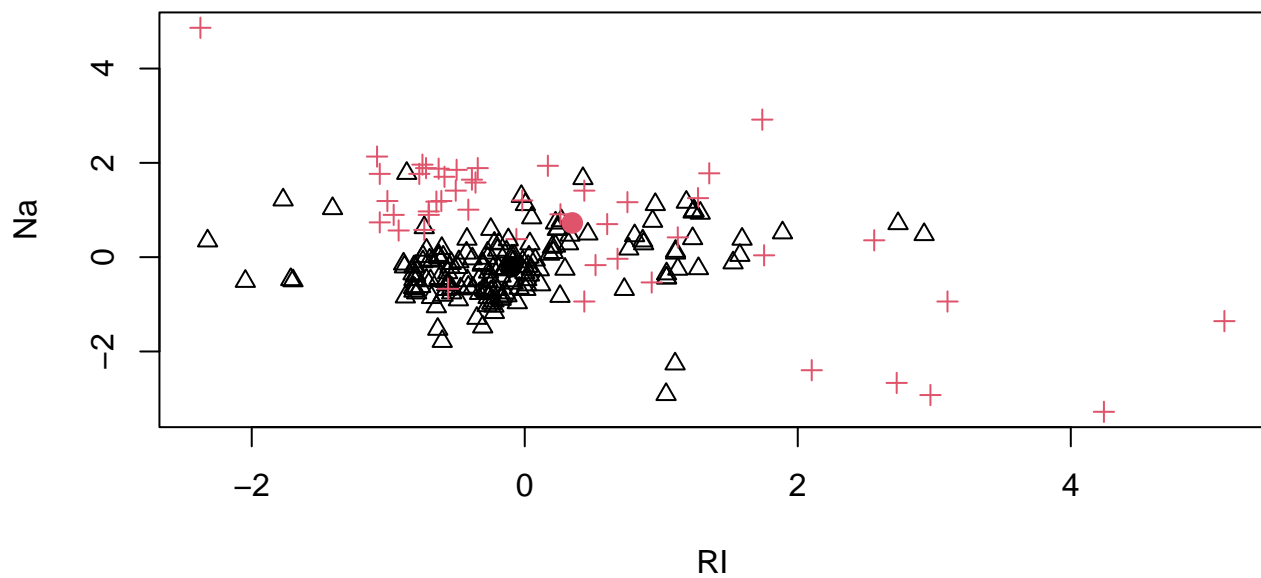
2.3.2 Wizualizacja

2.3.2.1 k-średnie



Wykres 18: PCA, kolory - rzeczywiste, kształt - wyniki, $k=2$

Gównianie mu poszło

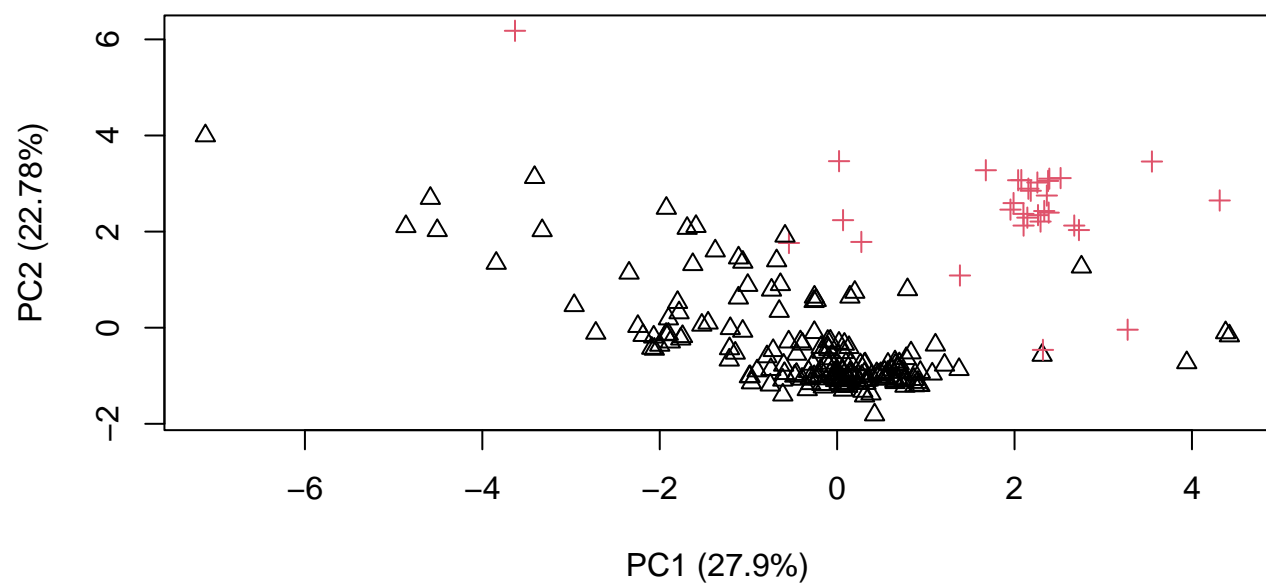


Wykres 19: Wykres RI od Na, aby pokazać gdzie są wyznaczone centra skupień, $k=2$

Centra wywalone w kosmos, ale fajnie

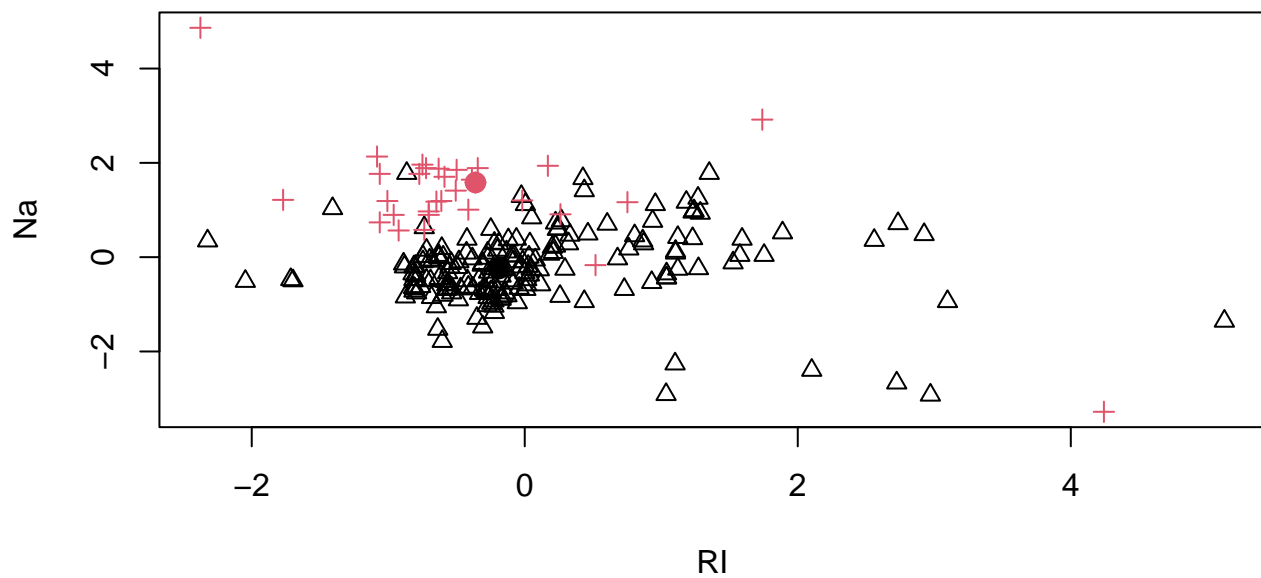
Dokładność (matchedClasses): 95.96%.

2.3.2.2 PAM



Wykres 20: coś, $k=2$

Też słabo



Wykres 21: coś, z medoidami, k=2

Meh

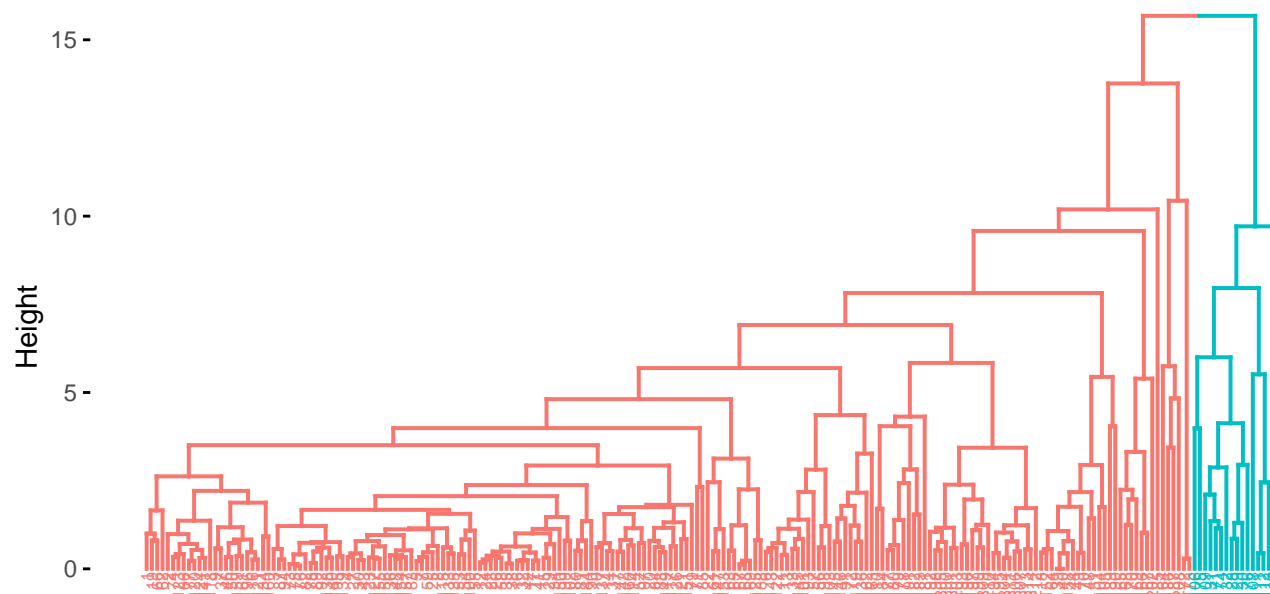
Dokładność (matchedClasses): 94.29%.

Tabela 32: Dane medoidów, k=2

	RI	Na	Mg	Al	Si	K	Ca	Ba	Fe	Type	PAM
43	1.51779	13.21	3.39	1.33	72.76	0.59	8.59	0.00	0	1	1
198	1.51727	14.70	0.00	2.34	73.28	0.00	8.95	0.66	0	7	2

2.3.2.3 AGNES

Cluster Dendrogram



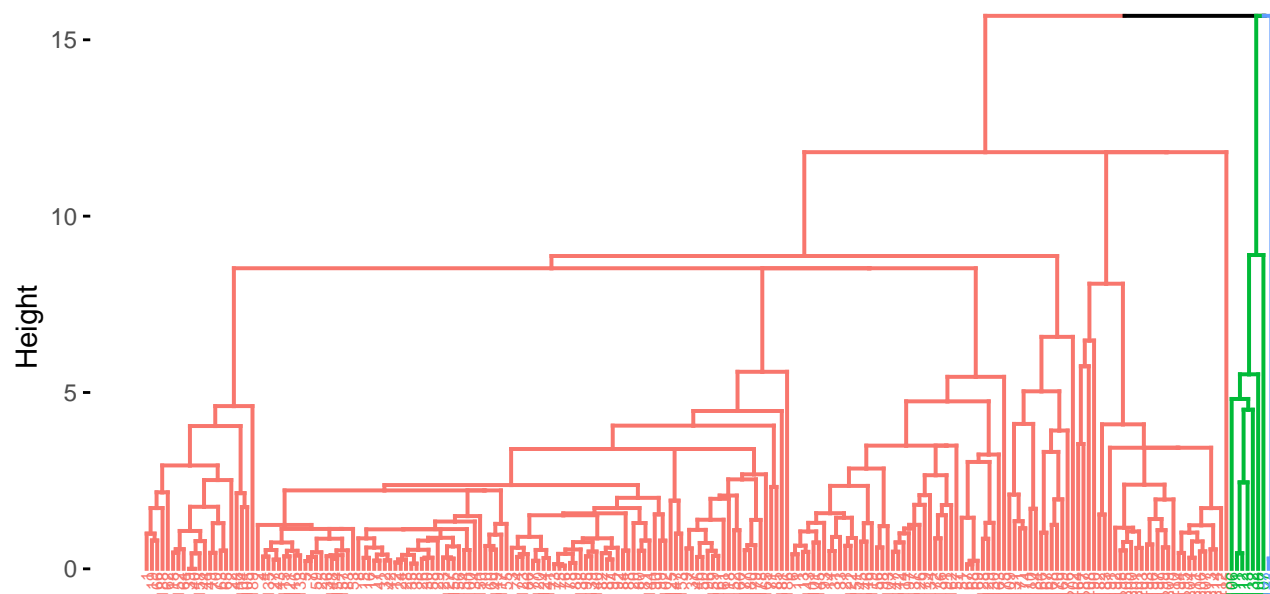
Wykres 22: AGNES: complete lineage, k=2

Tylko dla najdalszych sąsiadów, bo dał najlepsze wyniki.

Dokładność (matchedClasses): 87.64%.

2.3.2.4 DIANA

Cluster Dendrogram



Wykres 23: DIANA, $k=3$

Dokładność (matchedClasses): 49.69%.

2.4 Wnioski

3 Podsumowanie

PS. Czas wykonywania kodu wynosi 10 minut i 28 sekund.