Eksploracja Danych - Projekt

Mateusz Supronowicz
Maciej Pietrzak

25 stycznia 2015

1 Wprowadzenie

1.1 Cel projektu

Celem projektu jest przeprowadzenie analizy, grupowania i klasyfikacji na rzeczywistych danych. Nasza grupa otrzymała próbki szkła (plik "szklo_B.mat") z następującymi parametrami fizykochemicznymi:

1. Współczynnik załamania światła
2. Zawartość sodu (Na)
3. Zawartość magnezu (Mg)
4. Zawartość aluminium (Al)
5. Zawartość krzemu (Si)
6. Zawartość potasu (K)
7. Zawartość wapnia (Ca)
8. Zawartość baru (Ba)
9. Zawartość żelaza (Fe)

W celu dogłębnej analizy danych wykorzystane zostaną metody poznane na wykładach, wdrożone za pomocą języka "R".

1.2 Środowisko, narzędzia

System operacyjny: Windows 8.1
IDE: R 3.1.2, RStudio 0.98
Inne narzędzia: Emacs 24.4.1

1.3 Postanowienia ogólne

Początkowym etapem pracy jest poprawne wczytanie danych z pliku i wybranie najistotniejszych o nich informacji.

```
# Wczytanie danych z pliku
file <- readMat("szklo_B.mat")

# Wczytanie macierzy
data.mx <- file$szklo.B

# Liczba wierszy i kolumn - zmienne pomocnicze
data.row <- nrow(data.mx)
data.col <- ncol(data.mx)
```

Dla lepszych obserwacji szeregowo ugrupowanych danych - są one często przedstawione poniżej w postaci macierzy kolumnowej zamiast wektora.

Atrybutom przedstawionym w celach projektu przypisana jest numeracja, za pomocą której będą owe atrybuty będą w tym dokumencie przedstawiane.

2 Zadanie 1

Pierwszym zadaniem było określenie następujących parametrów dotyczących danych t.j.:

- Liczba próbek i atrybutów
- Wartości średnie poszczególnych atrybutów
- Odchylenia standardowe
- Zakresy zmienności atrybutów

Warto spojrzeć na podstawowe parametry danych by lepiej się z nimi zapoznać:

```
> summary(data.mx)

      V1              V2              V3              V4
Min.   :1.511   Min.   :11.02   Min.   :0.000   Min.   :0.290
1st Qu.:1.516   1st Qu.:12.92   1st Qu.:1.845   1st Qu.:1.188
Median :1.518   Median :13.32   Median :3.480   Median :1.360
Mean   :1.518   Mean   :13.43   Mean   :2.650   Mean   :1.438
3rd Qu.:1.519   3rd Qu.:13.87   3rd Qu.:3.600   3rd Qu.:1.570
Max.   :1.534   Max.   :17.38   Max.   :4.490   Max.   :3.500

      V5              V6              V7
Min.   :69.89   Min.   :0.0000   Min.   : 5.430
1st Qu.:72.34   1st Qu.:0.1200   1st Qu.: 8.240
Median :72.78   Median :0.5500   Median : 8.630
Mean   :72.69   Mean   :0.5096   Mean   : 8.952
3rd Qu.:73.10   3rd Qu.:0.6000   3rd Qu.: 9.140
Max.   :75.41   Max.   :6.2100   Max.   :16.190

      V8              V9
Min.   :0.0000   Min.   :0.00000
```

```
 1st Qu.:0.0000    1st Qu.:0.00000
 Median :0.0000    Median :0.00000
 Mean   :0.1545    Mean   :0.05219
 3rd Qu.:0.0000    3rd Qu.:0.09000
 Max.   :2.8800    Max.   :0.37000
```

Jak widać istnieje tu przewaga danych o wartościah `[0, 2]` z wyjątkiem `atrybutu nr.5`, którego wartości znajdują się w przedziale `[69.89, 75.41]` oraz `atrybutów nr.2 [11.02, 17.38]` i `nr.7 [5.43, 16.19]`.

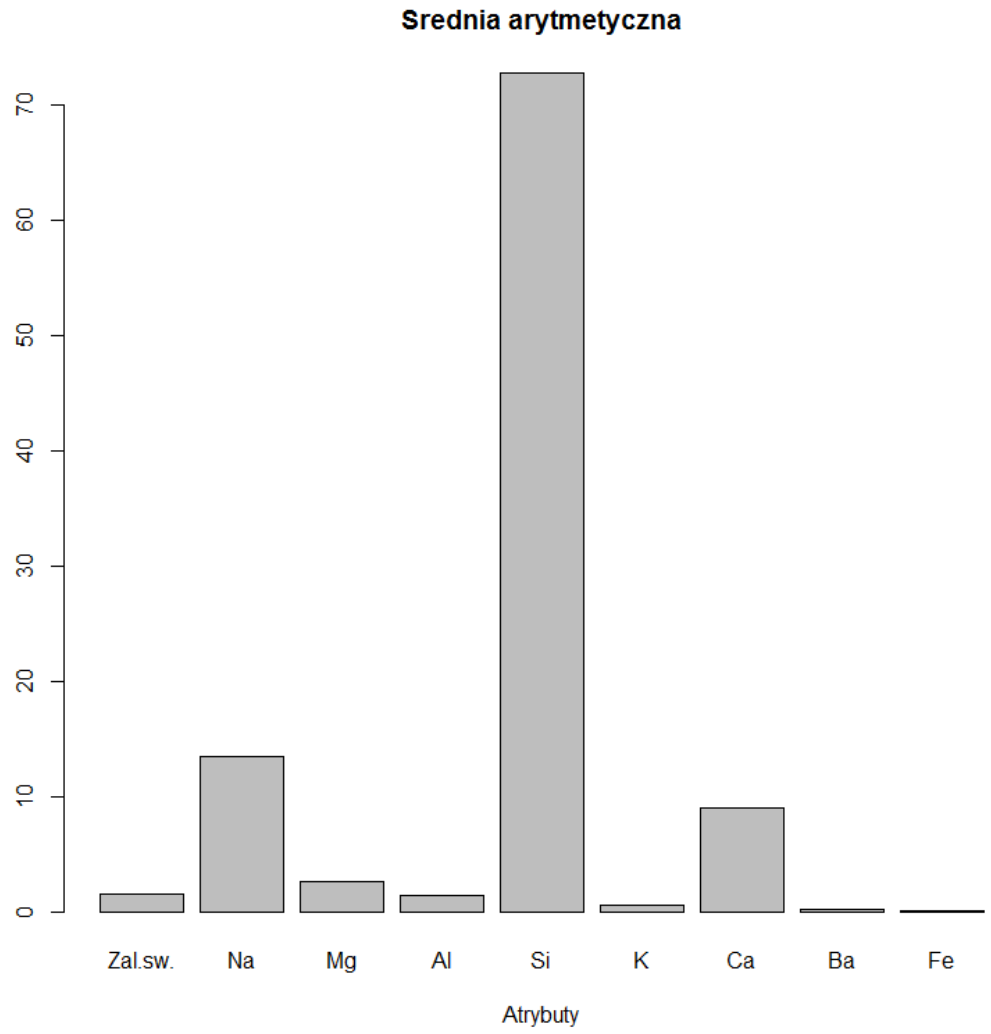
2.1 Liczba próbek i atrybutów

```
# Probki
> data.row
[1] 160

# Atrybuty
> data.col
[1] 9
```

2.2 Średnia

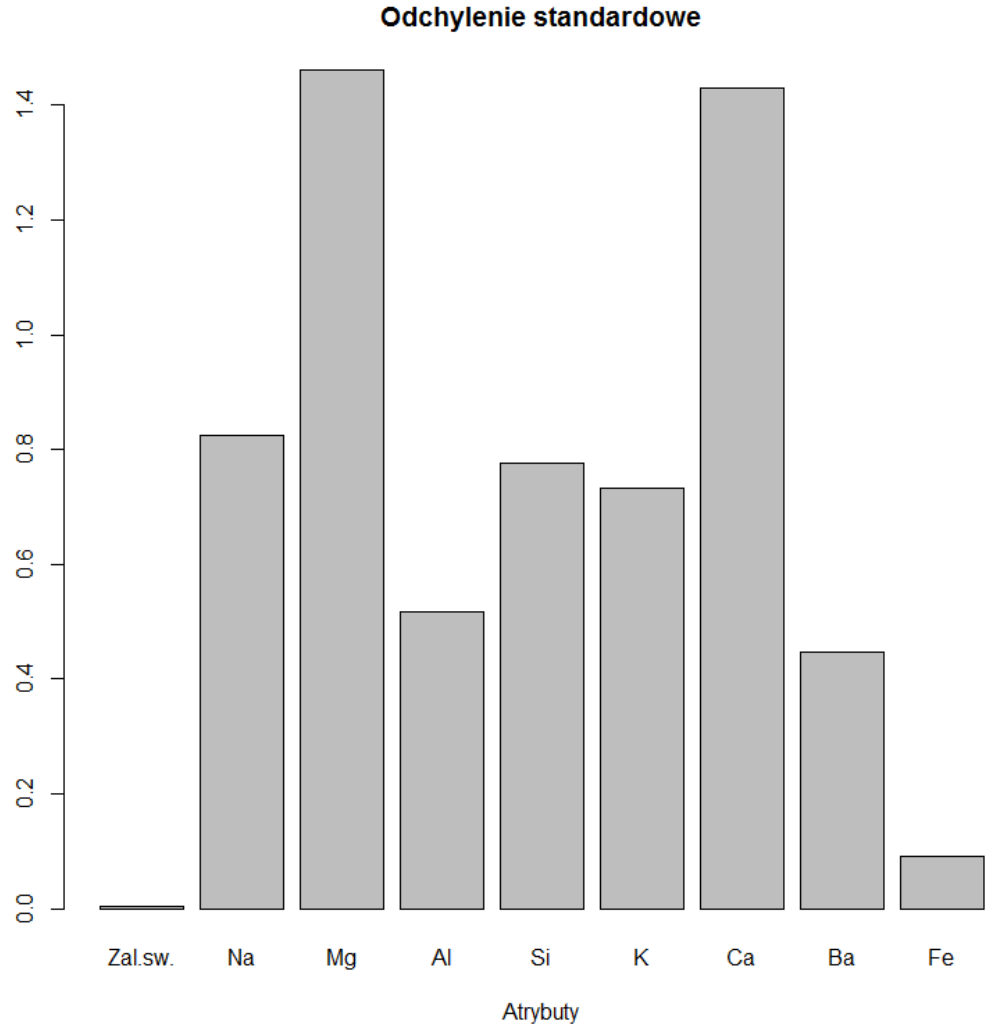
Mimo, że do dalszych obliczeń potrzebna będzie tylko średnia arytmetyczna, pozwoliłem sobie także obliczyć średnią harmoniczną i geometryczną.

```
# Obliczanie srednich - arytmetyczna[,1], harmoniczna[,2], geometryczna[,3]
mean.mx <- matrix( , nrow = data.col, ncol = 3)

for(i in 1 : data.col) {
  mean.mx[i, ] <- c(mean(data.mx[ ,i]), harmonic.mean(data.mx[ ,i]),
      geometric.mean(data.mx[ ,i]))
}

# Otrzymane wartosci
> mean.mx
            [,1]       [,2]       [,3]
[1,]   1.5182619   1.518256   1.518259
[2,]  13.4266250  13.377462  13.401880
[3,]   2.6504375   0.000000   0.000000
[4,]   1.4380625   1.245120   1.347667
[5,]  72.6858125  72.677520  72.681675
[6,]   0.5096250   0.000000   0.000000
[7,]   8.9516875   8.766439   8.853824
[8,]   0.1545000   0.000000   0.000000
[9,]   0.0521875   0.000000   0.000000
```



2.3 Odchylenie standardowe

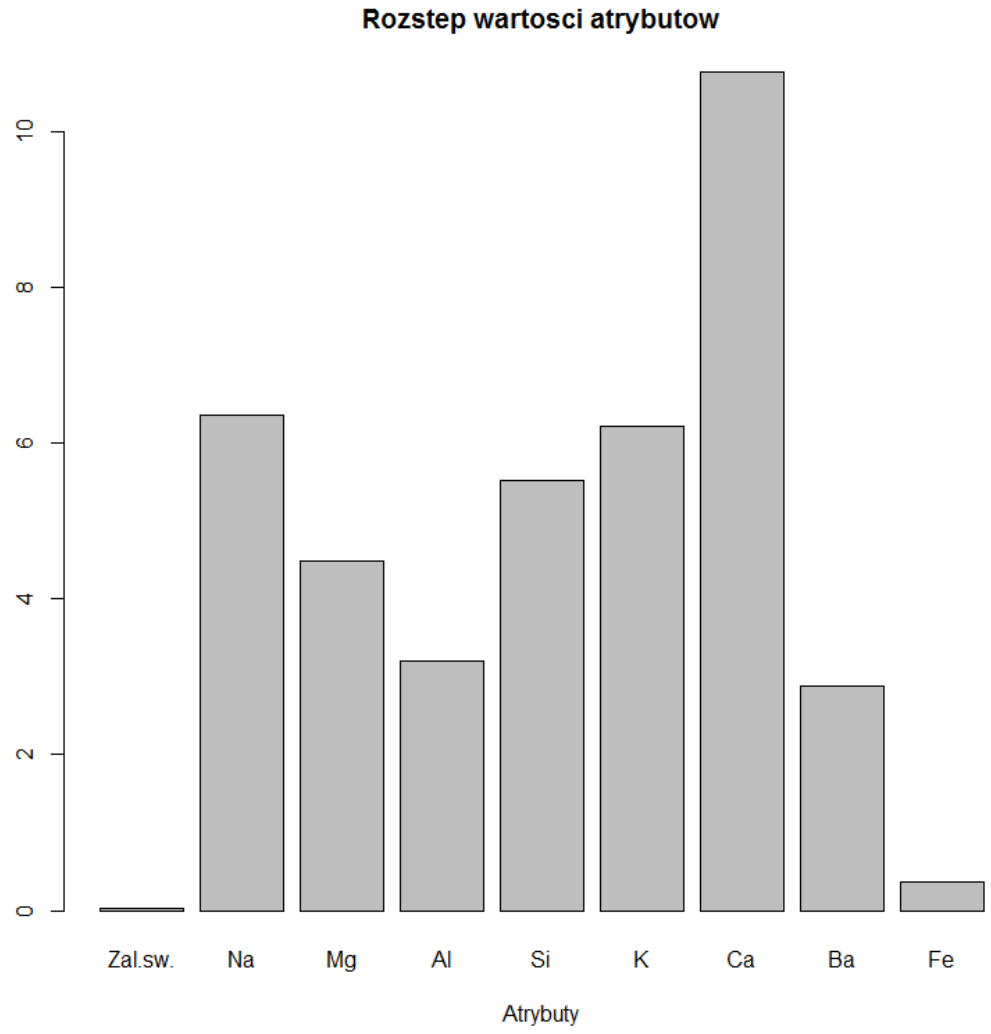
```
# Odchylenie standardowe atrybutow

stddev.mx <- matrix( ,nrow = data.col, ncol = 1)
for(i in 1 : data.col) {
  stddev.mx[i, ] = sd(data.mx[ ,i])
}

> stddev.mx
             [,1]
[1,] 0.002979884
[2,] 0.825376520
[3,] 1.461072815
[4,] 0.516487285
[5,] 0.776487391
[6,] 0.733870490
[7,] 1.430254946
[8,] 0.446910850
[9,] 0.091930189
```



2.4 Rozstęp wartości poszczególnych atrybutów

```
range.mx <- matrix( , nrow = data.col, ncol = 2) # Wartosci min, max
diff.mx <- matrix( , nrow = data.col, ncol = 1)  # Rozstep

for(i in 1 : data.col) {
  range.mx[i, ] <- range(data.mx[ ,i])
  diff.mx[i, ] <- diff(range.mx[i, ])
}

# Wartosci min[,1] i max[,2] poszczegolnych atrybutow
> range.mx
          [,1]     [,2]
[1,]   1.51115  1.53393
[2,]  11.02000 17.38000
[3,]   0.00000  4.49000
[4,]   0.29000  3.50000
[5,]  69.89000 75.41000
[6,]   0.00000  6.21000
[7,]   5.43000 16.19000
[8,]   0.00000  2.88000
[9,]   0.00000  0.37000
```

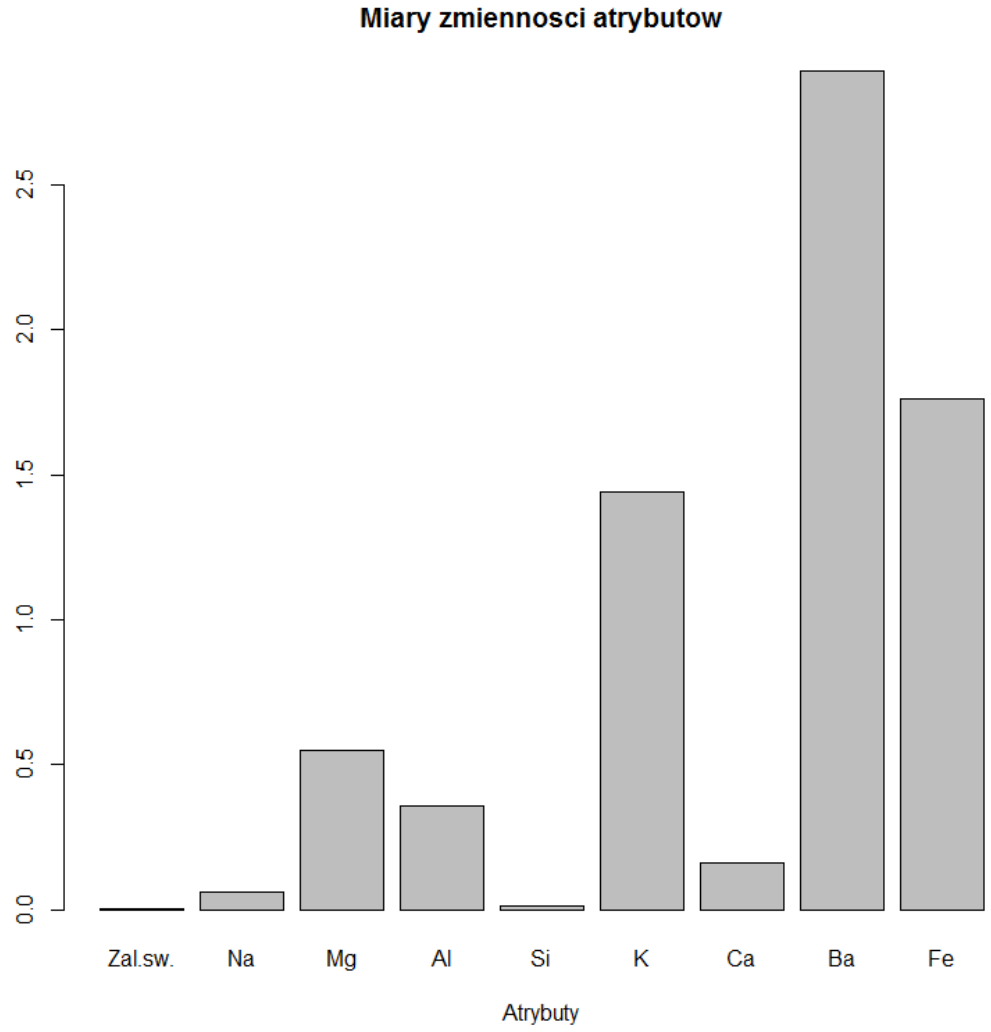
```
# Rozstep dla poszczegolnych atrybutow
> diff.mx
          [,1]
[1,]   0.02278
[2,]   6.36000
[3,]   4.49000
[4,]   3.21000
[5,]   5.52000
[6,]   6.21000
[7,]  10.76000
[8,]   2.88000
[9,]   0.37000
```



2.5 Miara zmienności poszczególnych atrybutów

```
# Miara zmiennosci poszczegolnych atrybutow
cov.mx <- matrix( , nrow = data.col, ncol = 1)

for(i in 1 : data.col) {
  cov.mx[i, ] <- stddev.mx[i, ] / mean.mx[i,1]
}
```

```
> cov.mx
              [,1]
[1,] 0.001962694
[2,] 0.061473119
[3,] 0.551257222
[4,] 0.359154964
[5,] 0.010682792
[6,] 1.440020584
[7,] 0.159774897
[8,] 2.892626863
[9,] 1.761536550
```



2.6 Analiza danych

Zgodnie z miarami rozstępu i odchylenia standardowego najmniejszą zmienność wykazuje `atrybut nr.1` (Załamanie światła) - `stddev[1,1] = 0.002979884, diff.mx[1,1] = 0.02278]`. Przemawia także za tym pomocnicza miara zmienności `cov.mx[1,1] = 0.001962694`.

Największą zmiennością jednakże wykazuje się `atrybut nr.7 - stddev.mx[7,1] = 1.430254946, diff.mx[7,1] = 10.76000`. Co ciekawe obliczona miara zmienności poka-

zuje zupełnie co innego - największą zmienność wykazuje `atrybut nr.8`. Przyglądając się jednak bliżej wartościom, stwierdzamy, że główną przyczyną oceny są punkty oddalone, które znacząco wpływają na nasz wynik. Tym właśnie punktom poświęcimy więcej czasu w zadaniu 2.

3 Zadanie 2

Zadanie drugie to znalezienie punktów oddalonych w poszczególnych atrybutach. Jak określiliśmy w podsumowaniu zadania 1, w niektórych przypadkach znacząco zakłócają one oczekiwany wynik (`Atrybut nr.6,8,9`).

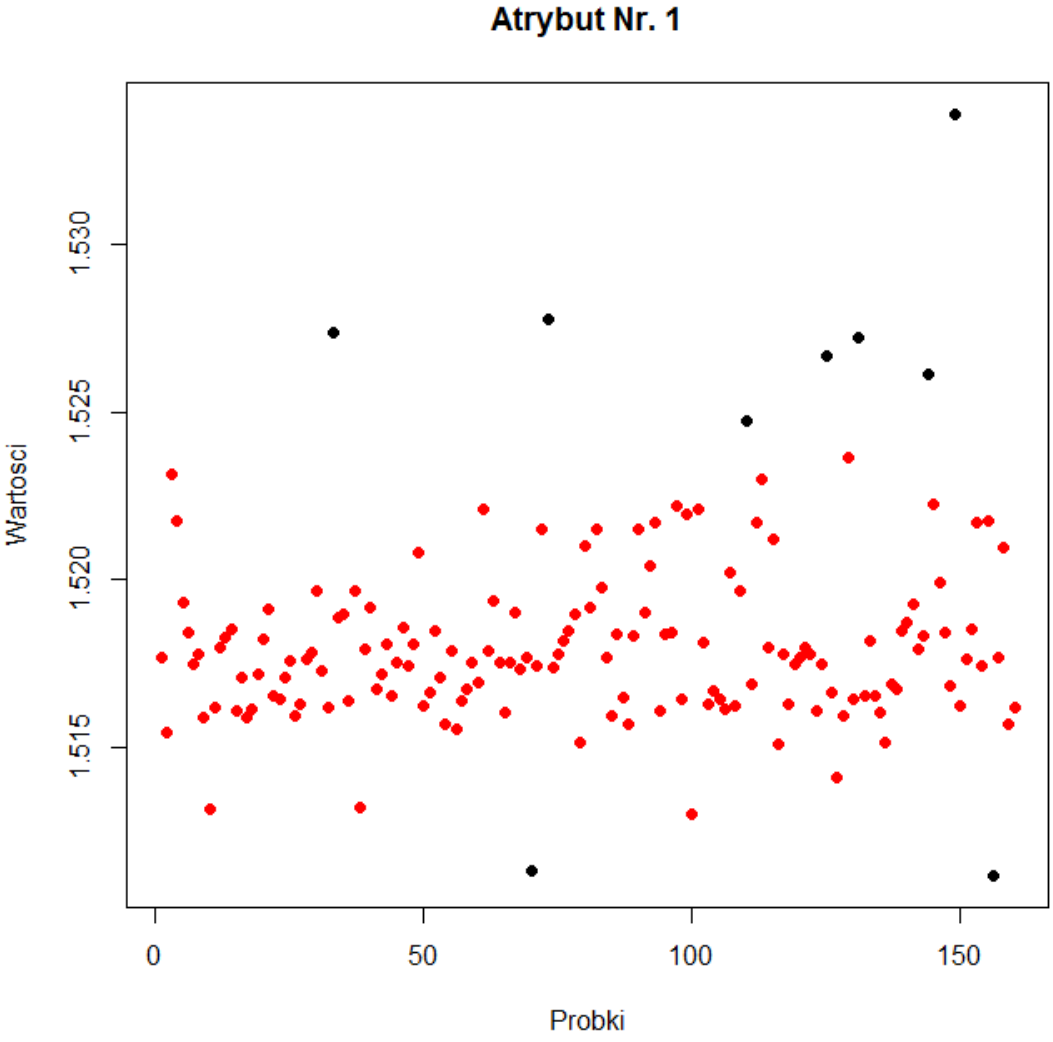
3.1 Obliczenia

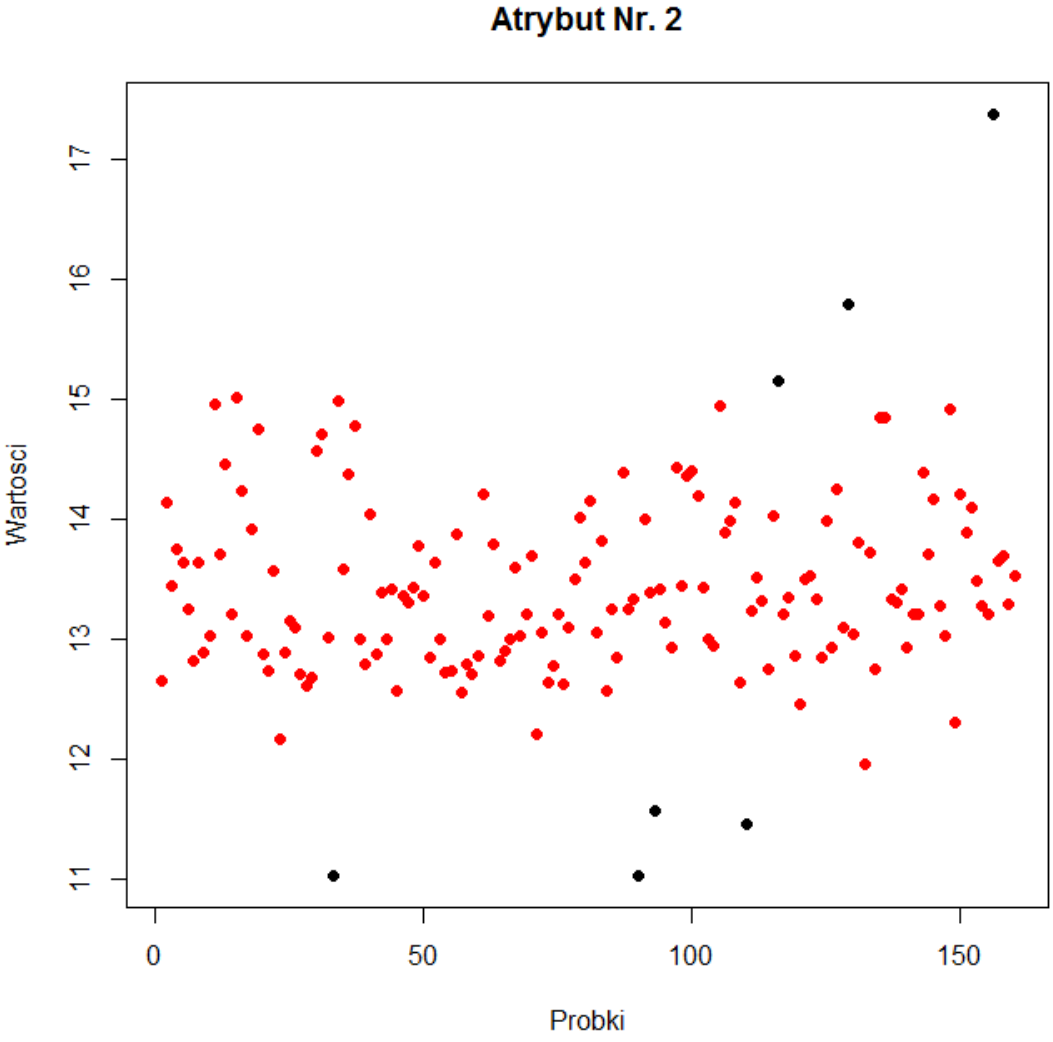
Obliczmy zatem punkty oddalone i przedstawmy je graficznie. Za punkty oddalone uznajemy te, których odległość od średniej arytmetycznej jest większa niż dwukrotność odchylenia standardowego.

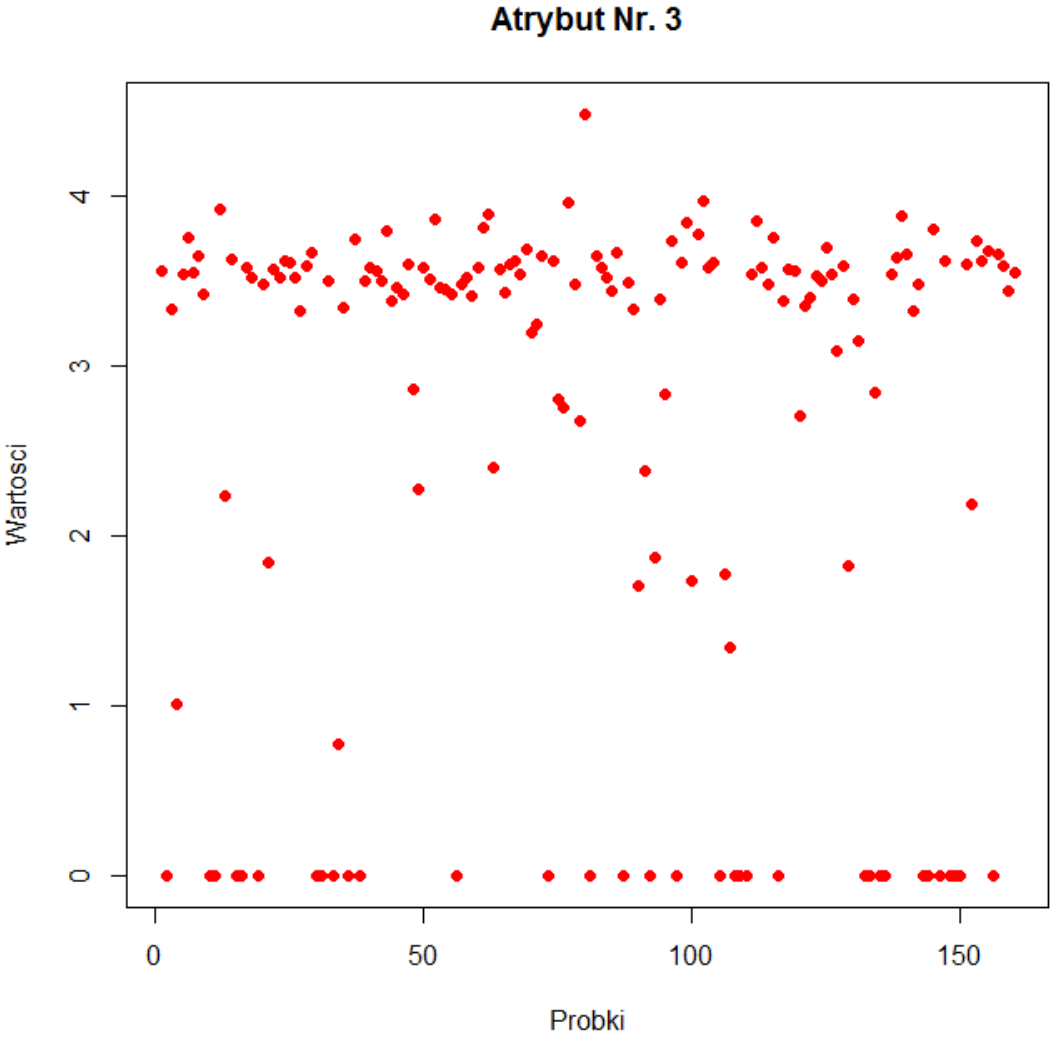
```
# Macierz klasyfikujaca obiekty oddalone
pts.odd.mx <- matrix( , nrow = data.row, ncol = data.col)

for(i in 1 : data.col) {
  # Wzor klasyfikujacy
  pts.odd.mx[ ,i] <- abs(data.mx[ ,i] - mean.mx[i,1]) < (2 * stddev.mx[i
      ,1])

  plot(seq(1, data.row, by = 1),
       data.mx[ ,i],
       pch = 16,
       xlab = "Probki",
       ylab = "Wartosci",
       col = pts.odd.mx[ ,i] + 1,
        main = paste("Atrybut Nr.", toString(i)))
}
```

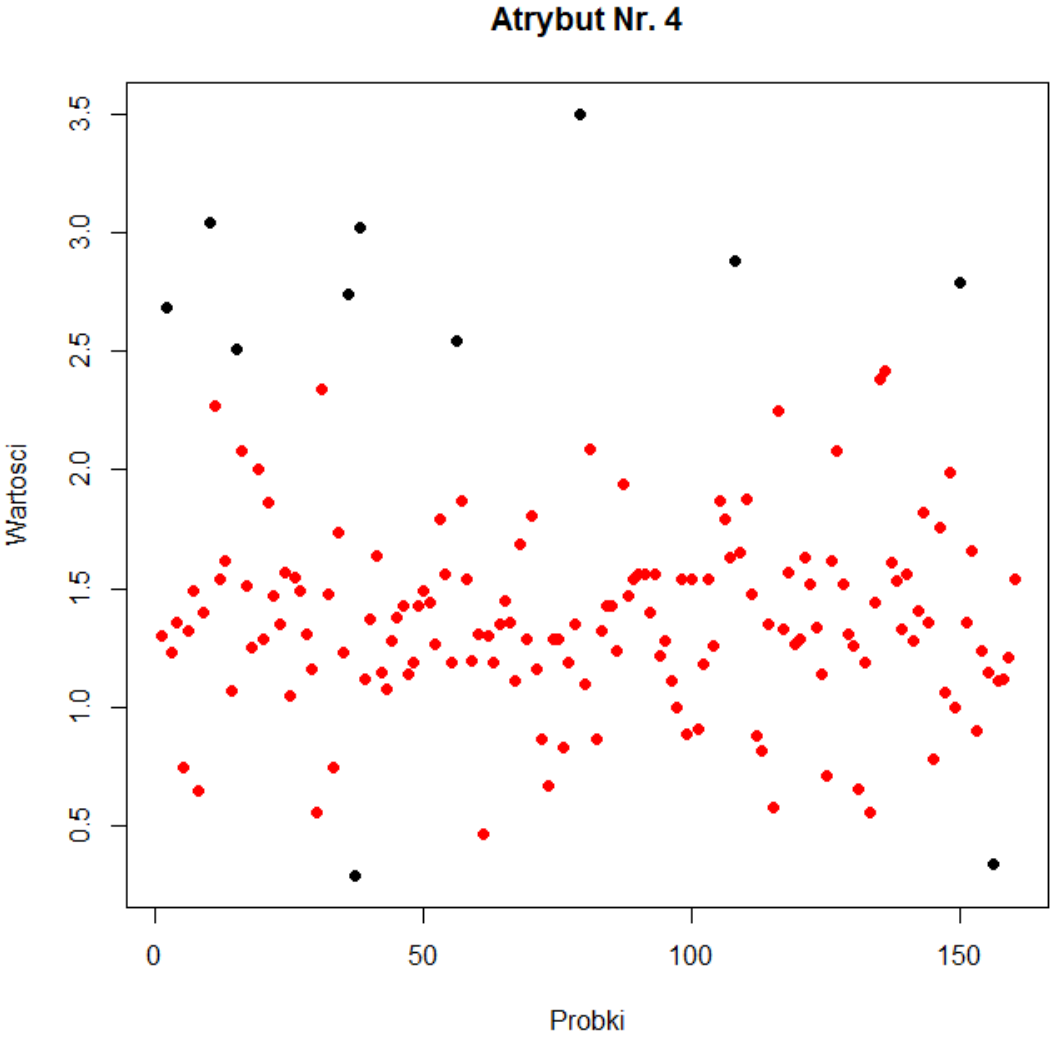
3.2 Wykresy

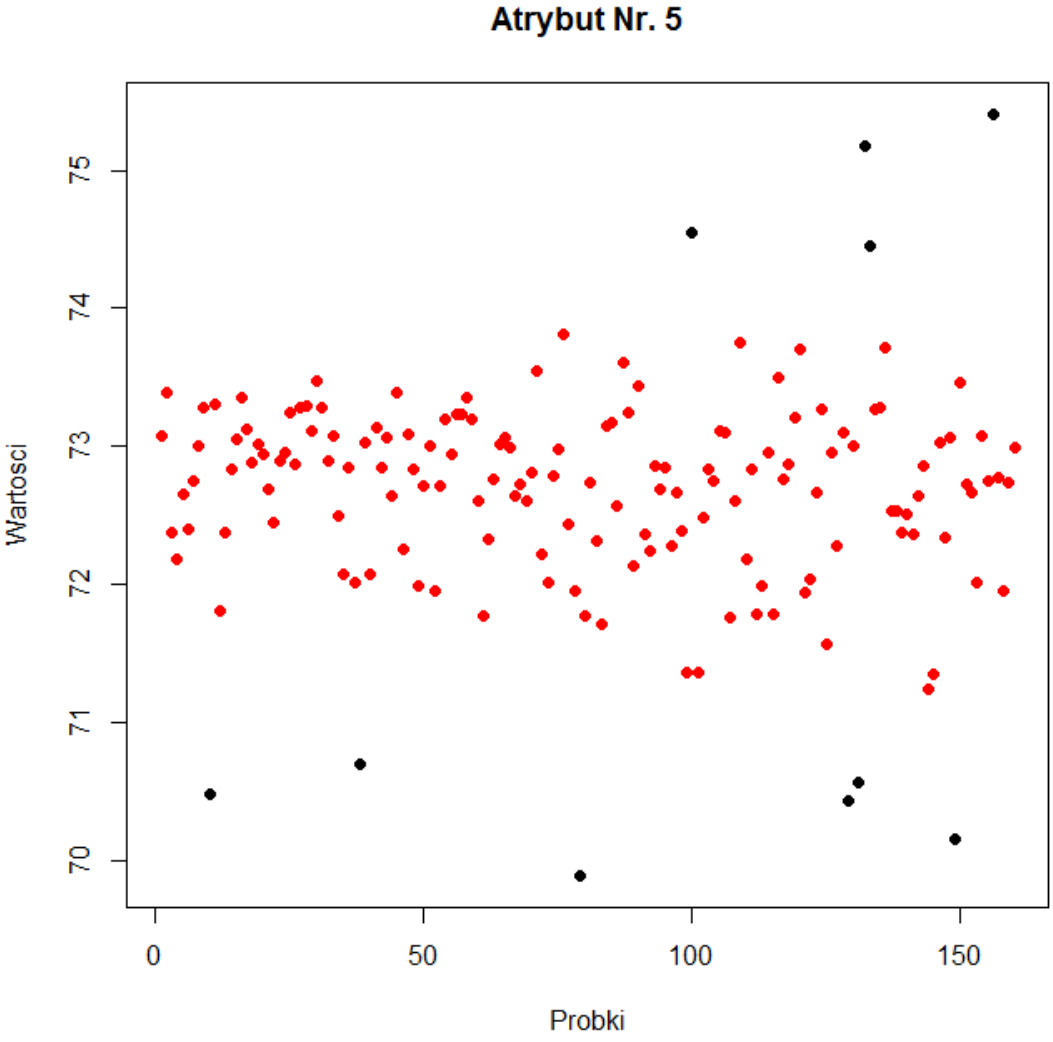
Na wykresach czarne punkty odpowiadają punktom oddalonym. Numeracja atrybutów jest identyczna z tą, przedstawioną w celach projektu.

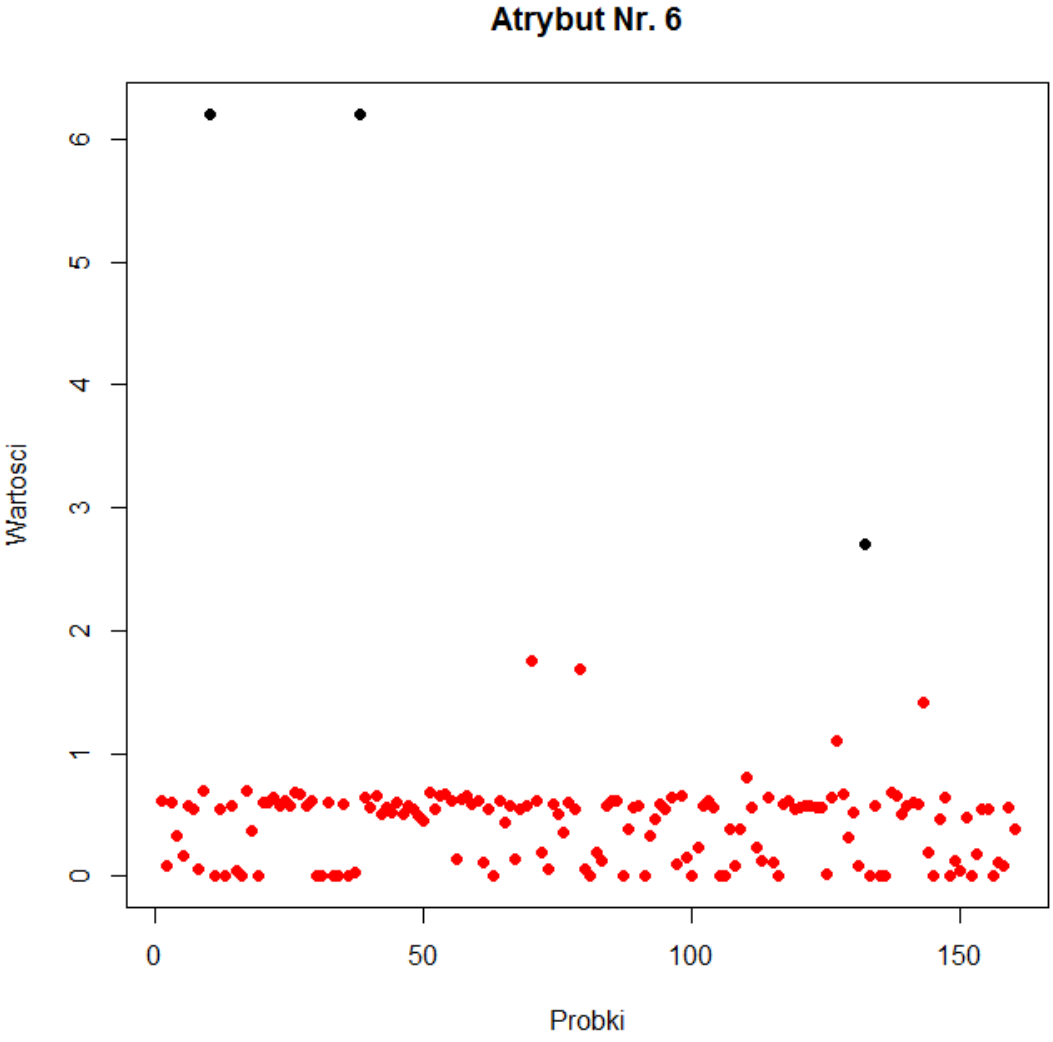

Atrybut Nr. 1
Wartosci
1.515
1.520
1.525
1.530
0
50
100
150
Probki

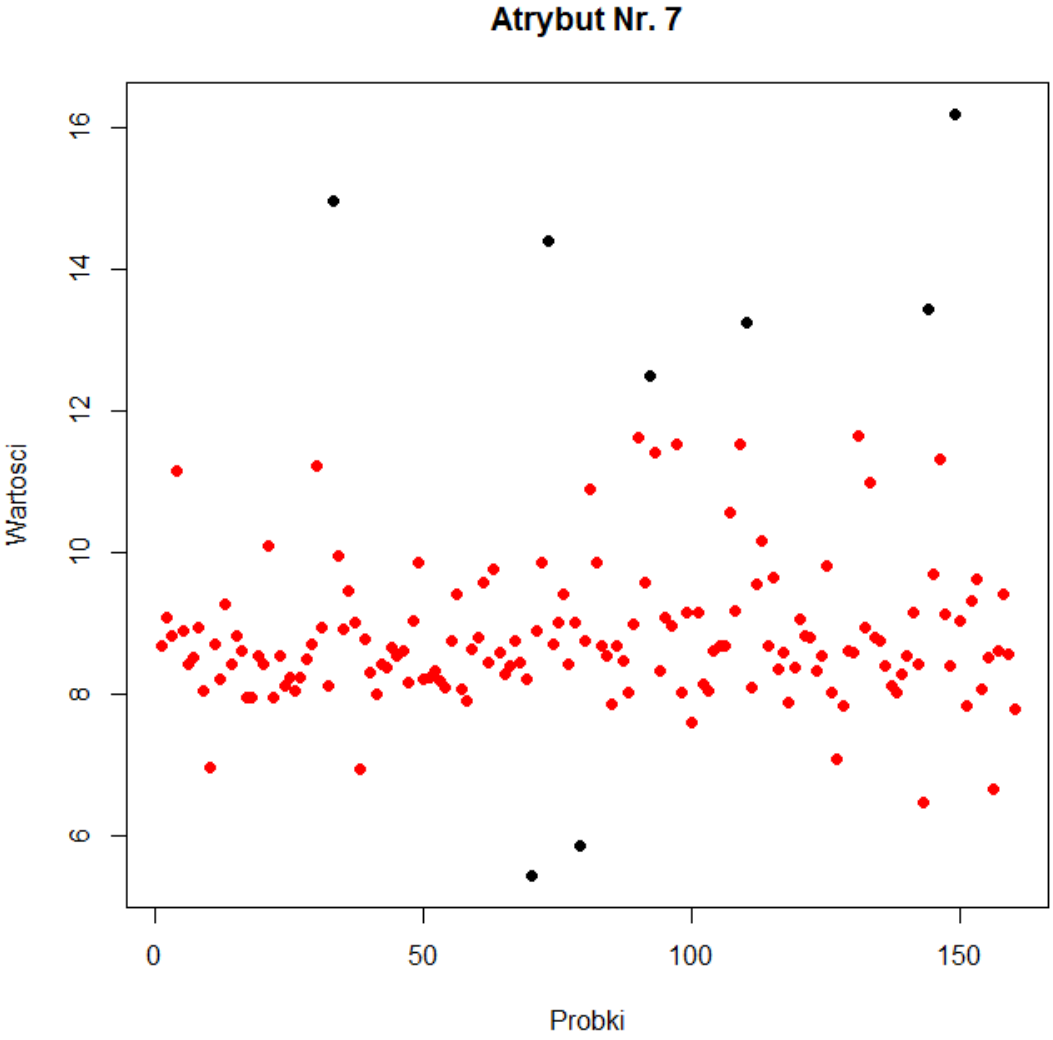

Atrybut Nr. 2
Wartosci
Probki
11
12
13
14
15
16
17
0
50
100
150

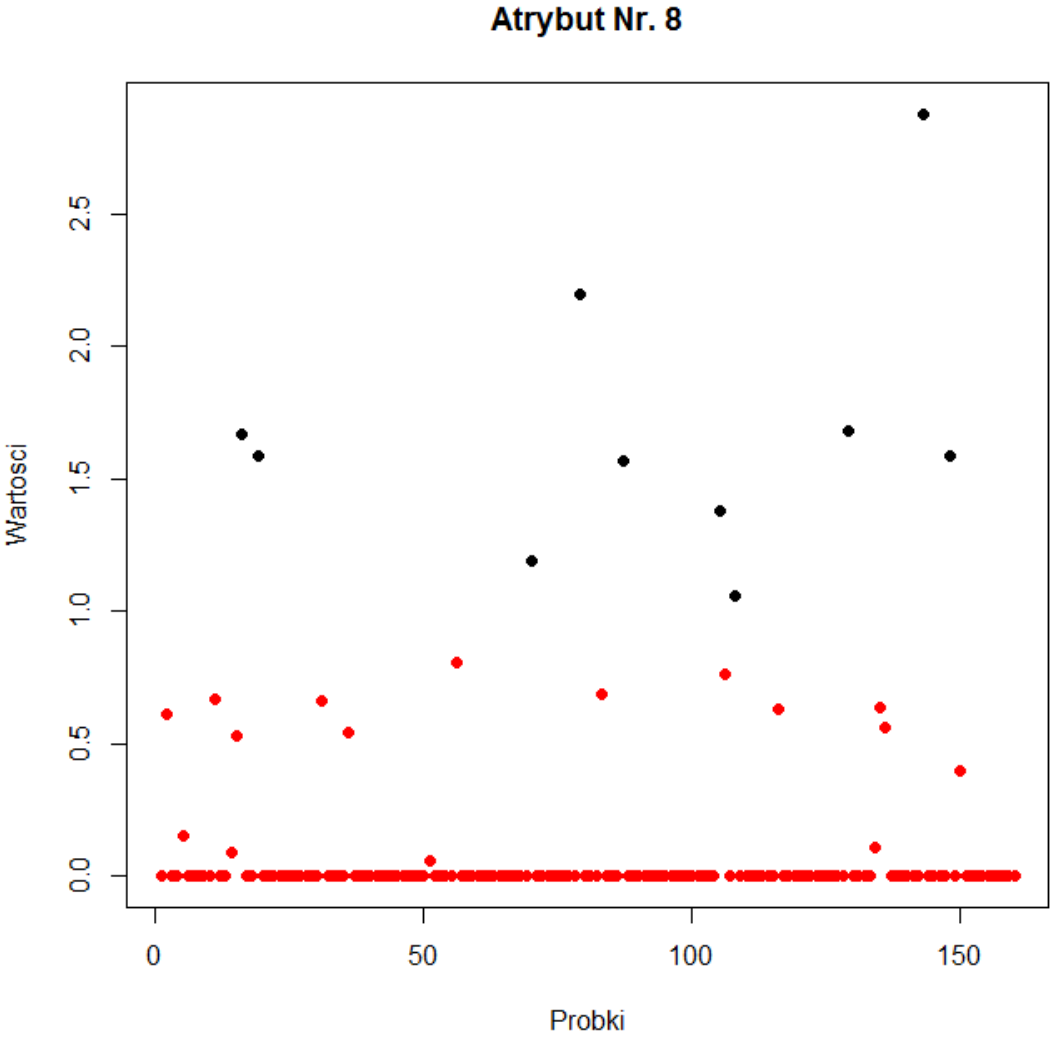

Atrybut Nr. 3
Wartosci
0
1
2
3
4
0
50
100
150
Probki

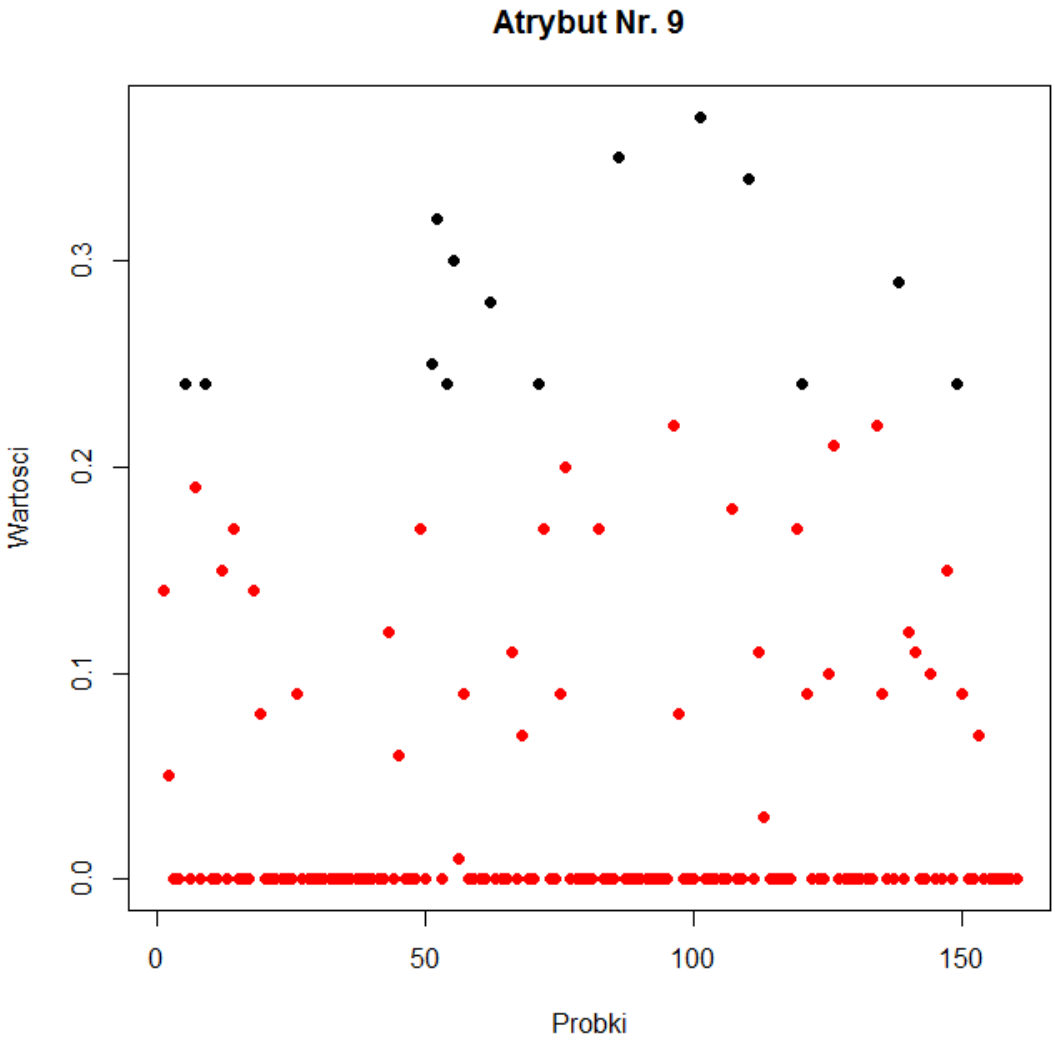

Atrybut Nr. 4
Wartosci
0.5
1.0
1.5
2.0
2.5
3.0
3.5
0
50
100
150
Probki


Atrybut Nr. 5
Wartosci
70
71
72
73
74
75
0
50
100
150
Probki


Atrybut Nr. 6
Wartosci
0
1
2
3
4
5
6
0
50
100
150
Probki


Atrybut Nr. 7
Wartosci
6
8
10
12
14
16
0
50
100
150
Probki


Atrybut Nr. 8
Wartosci
0.0
0.5
1.0
1.5
2.0
2.5
0
50
100
150
Probki



3.3 Analiza

Wykresy potwierdzają założenia, że punkty oddalone mogą znacznie zakłócić wynik. Wszystkie atrybuty, oprócz nr.3, posiadają owe punkty. Przyczynia się do tego nie tylko ich duża ilość np. jak w przypadku `atrybutu nr.9` (gdybyśmy uznali za punkty oddalone większe niż jednokrotność odchylenia standardowego, ich ilość byłaby znacznie większa), ale także ich duża odległość od średniej arytmetycznej - `atrybuty nr.2`, `nr.6` (Nawet wartość powyżej `6.0` przy średniej `0.5096250`), `nr.8, nr.9`.

Co ciekawe `atrybut nr.3` nie posiada punktów odległych. Jest zatem idealnym kandydatem, na którym można efektywnie stosować metody eksploracyjne.

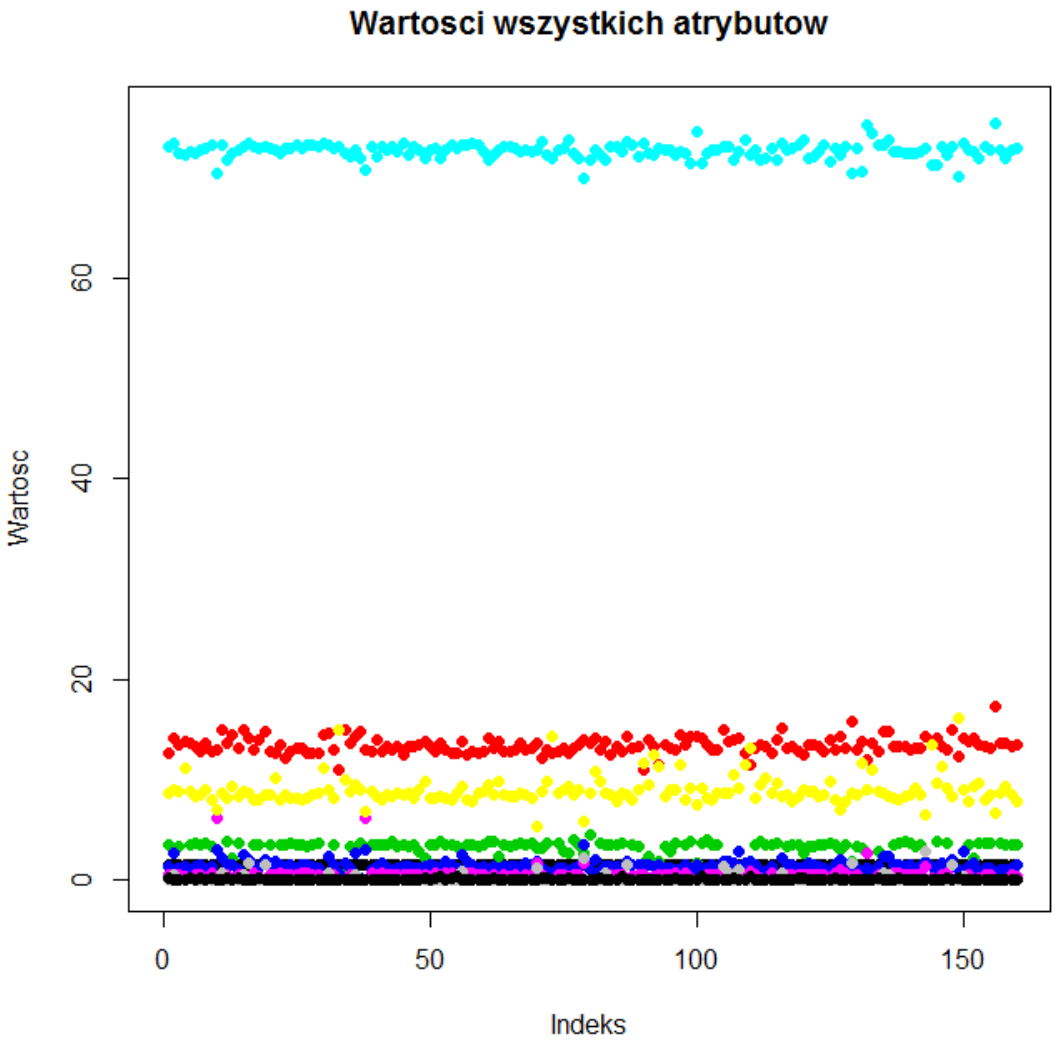
4 Zadanie 3

Kolejny etap naszej pracy to próba podzielenia próbek na grupy.

4.1 Wartości

Na początek umieściliśmy wartości wszystkich naszych atrybutów na jednym wykresie.

```
# Pokazanie wszystkich danych na wykresie
plot(data.mx[ ,1],
     pch = 16,
     col = 1,
     xlim = c(0, data.row), # Liczba probek
     ylim = c(min(data.mx), max(data.mx)),  # [min,max]
     xlab = "Indeks",
     ylab = "Wartosc",
     main = "Wartosci wszystkich atrybutow")

for(i in 2 : data.col) {
  points(data.mx[ ,i], pch = 16, col = i)
}
```



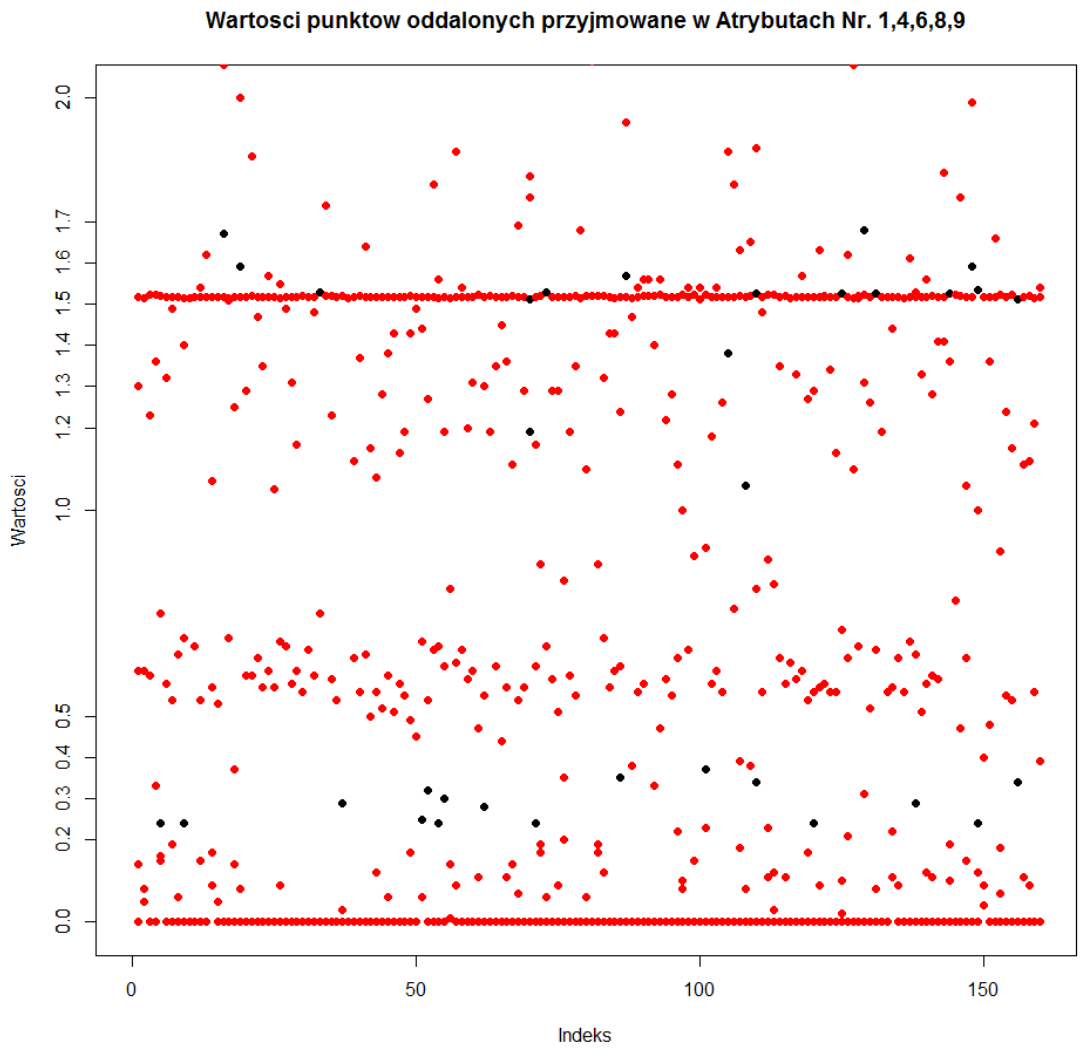
Po przeanalizowaniu wykresu można stwierdzić że ze względu na przyjmowane wartości dane te dzielą się na 3 kategorie:

1. Dane, które przyjmują wartości najnizsze `[0, 8]` - `Atrybuty nr: 1,3,4,6,8,9`
2. Dane o wartościach nieco wyższych `[8, 10]` - `Atrybuty nr: 2,7`
3. Dane, o wartościach najwyższych `[70, 76]` - `Atrybut nr.5`

4.2 Punkty oddalone

Warto także poddać analizie pełniącym dużą rolę punktom oddalonym. Badane zostaną `atrybuty nr.1,4,6,8,9`.

```
# Rozpoznanie przedzialow w ktorych wystepuja punkty oddalone
# w atrybutach nr. 1,4,6,8,9
plot(data.mx[ ,1],
     pch = 16,
     col = pts.odd.mx[ ,1] + 1,
     xlim = c(0, data.row),
     ylim = c(0, 2),
     xlab = "Indeks",
     ylab = "Wartosci",
     main = "Wartosci punktow oddalonych przyjmowane w Atrybutach Nr.
        1,4,6,8,9")
points(data.mx[ ,9], pch = 16, col = pts.odd.mx[ ,9] + 1,
       xlim = c(0, data.row), ylim = c(0, 2))
points(data.mx[ ,8], pch = 16, col = pts.odd.mx[ ,8] + 1,
       xlim = c(0, data.row), ylim = c(0, 2))
points(data.mx[ ,6], pch = 16, col = pts.odd.mx[ ,6] + 1,
       xlim = c(0, data.row), ylim = c(0, 2))
points(data.mx[ ,4], pch = 16, col = pts.odd.mx[ ,4] + 1,
       xlim = c(0, data.row), ylim = c(0, 2))

axis(2, at = c(0.0, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 1.0,
     1.2, 1.3, 1.4, 1.5, 1.6, 1.7, 2.0))
```



Na przedstawionym wyżej wykresie czarnym kolorem zostały oznaczone punkty oddalone. Można zauważyć pewien schemat. Otóż wartosci te ulokowane są:

- W przedziale `[0.2, 0.4]` - stanowiąc pierwszą wyłaniającą się grupę punktów oddalonych.
- W przedziale `[1.4, 1.7]` - grupę drugą.

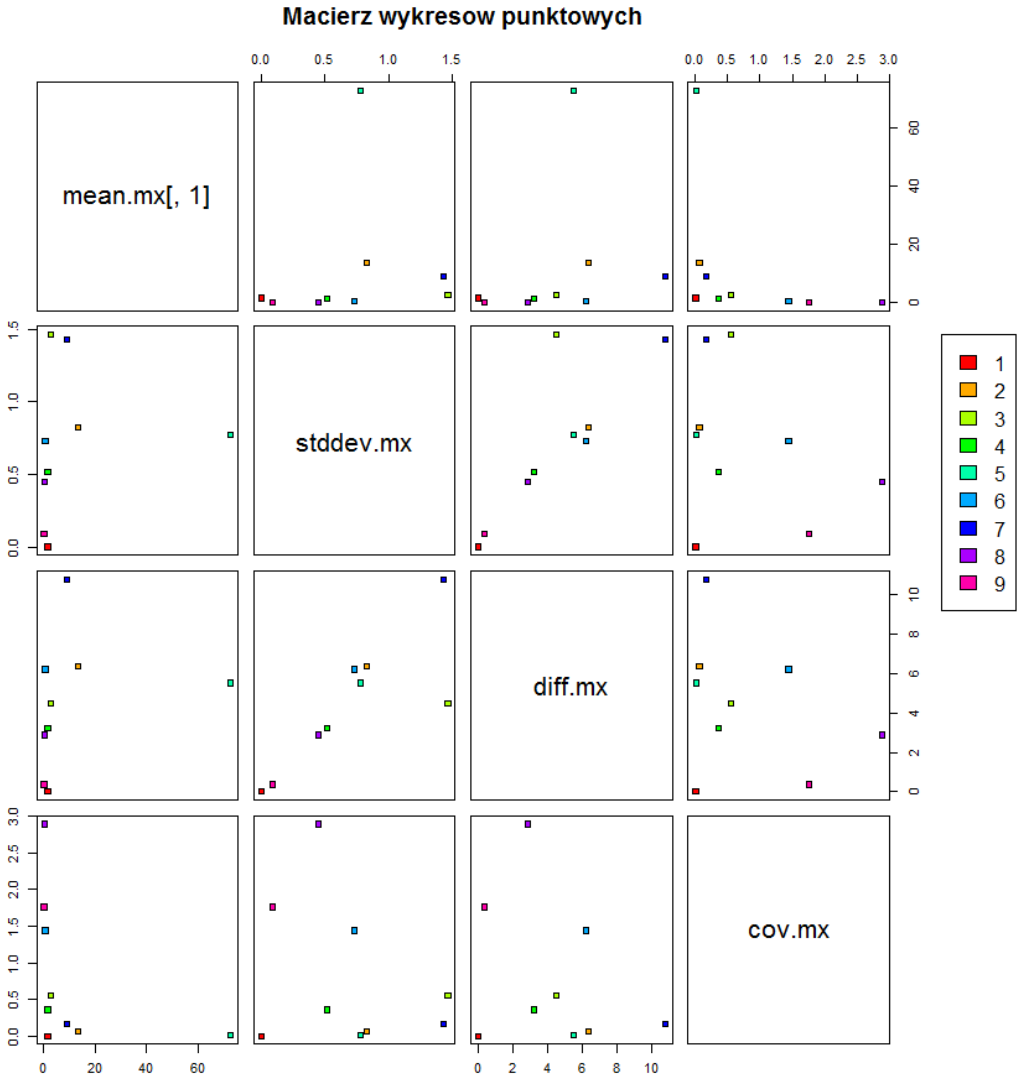
2 punkty w środkowej części wykresu wykluczamy z procesu grupowania.

4.3 Macierz wykresów punktowych

Przy procesie grupowania istotnym narzędziem jest macierz wykresów punktowych. Umieścilismy na niej średnią, odchylenie standardowe, rozstęp danych i miarę zmienności dla poszczególnych atrybutów.

```
# Macierz wykresow punktowych
pairs(~mean.mx[ ,1] + stddev.mx + diff.mx + cov.mx,
      pch = 22,
      bg = rainbow(9),
           oma = c(4,4,6,12),
           main = "Macierz wykresow punktowych")
```

```
par(xpd = TRUE)

# Numery atrybutow i odpowiadajace im kolory
legend(0.9, 0.7, c("1","2","3","4","5","6","7","8","9"), fill = rainbow(9))
```



Analizując powyższy schemat zauważamy pewne grupowania wśród atrybutów:

1. mean / stddev
    - 1,9
    - 2,4,6,8
    - 3,7
    - bez grupy: 5
2. mean / diff
    - 1,9
    - 2,3,4,6,8

- bez grupy: 5,7

3. mean / cov
    - 1,2,3,4,7
    - 6,9
    - bez grupy: 5,8
4. stddev / diff
    - 1,9
    - 4,8
    - 2,5,6
    - bez grupy: 3,7
5. stddev / cov
    - 2,4,5
    - 3,7
    - bez grupy: 1,6,8,9
6. diff / cov
    - 2,3,4,5
    - bez grupy: 1,6,7,8,9

Skróty:

- `1,2,3...` - numery odpowiadających im atrybutów
- `mean.mx[,1]` - średnia arytmetyczna
- `stddev.mx` - odchylenie standardowe
- `diff.mx` - rozstęp
- `cov.mx` - miara zmienności

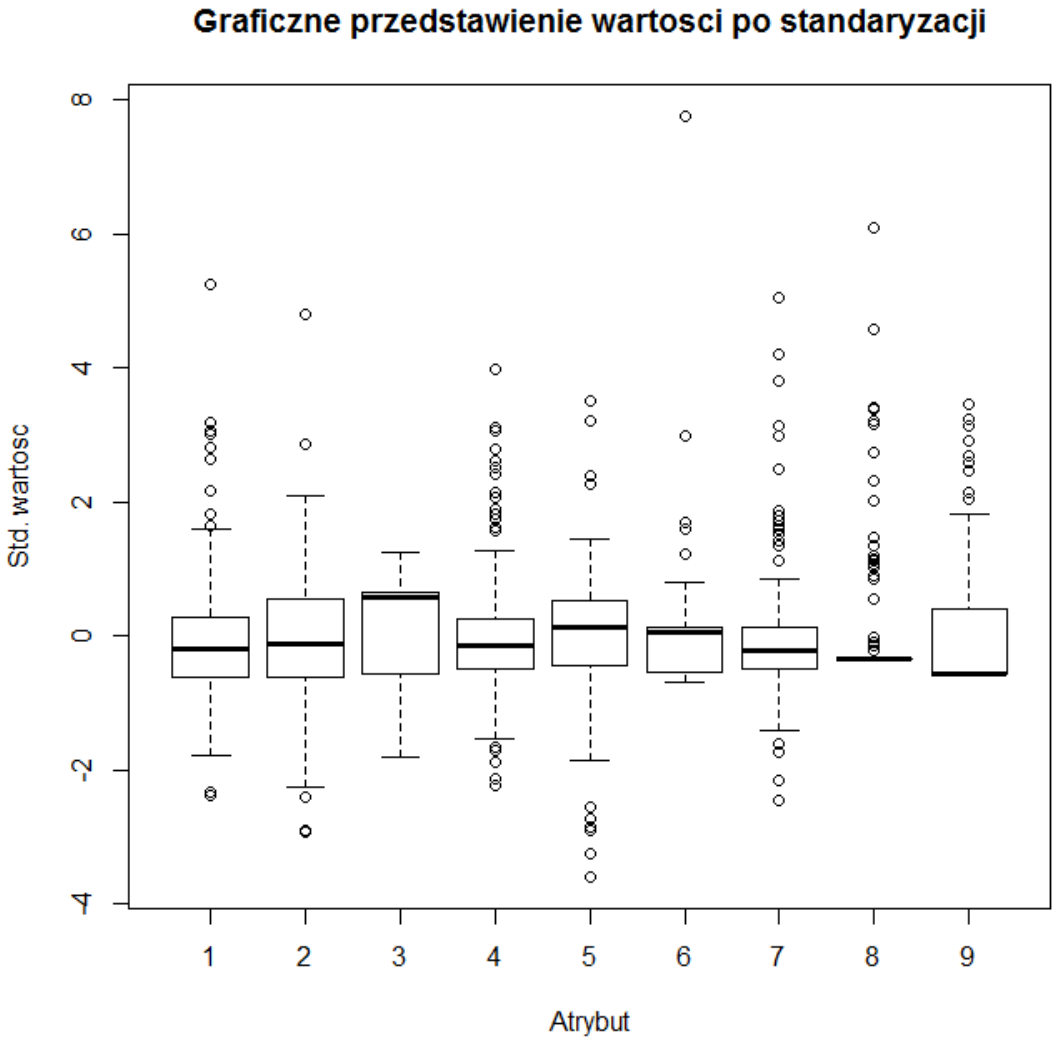
5 Zadanie 4

W związku z faktem, że nasze dane nie są współmierne, gdyż zakresy zmiennosci atrybutów znacznie się różnią (patrz "Zadanie 1"), warto poddać je przekształceniom, które pozwoliłyby nam lepiej je porównać.

Wykresy z Zadania 2 pokazują, że w danych występuje dużo punktów oddalonych (pomijając atrybut nr.3). Logicznym posunięciem będzie więc modyfikacja danych za pomocą procesu **standaryzacji** - metodą znacznie mniej podatną na owe punkty oddalone.

Tym sposobem znacznie lepiej określimy bliskość poszczególnych wartości do wartości średniej. Po standaryzacji otrzymujemy zakres zmiennosci `[-1, 1]`., gdzie znak określa czy dana jest mniejsza/wieksza od średniej, a liczba o ile.

```
# Standaryzacja
data.std.mx <- matrix( , nrow = data.row, ncol = data.col)

for(i in 1 : data.row) {
  for(j in 1 : data.col) {
    data.std.mx[i,j] <- (data.mx[i,j] - mean.mx[j,1]) / stddev.mx[j,1]
  }
}

# Graficzne przedstawienie danych std. za pomoca wykresu pudelkowego
dev.new()
boxplot(data.std.mx,
        xlab = "Atrybut",
        ylab = "Std. wartosc",
        main = "Graficzne przedstawienie wartosci po standaryzacji")
}
```



Na wykresie widzimy, że dane nie mieszczą się w zakresie `[-1, 1]`. Wpływają na to liczne punkty oddalone. Jednak po procesie standaryzacji, mamy znacznie lepszą możliwość porównania danych.

6 Podsumowanie