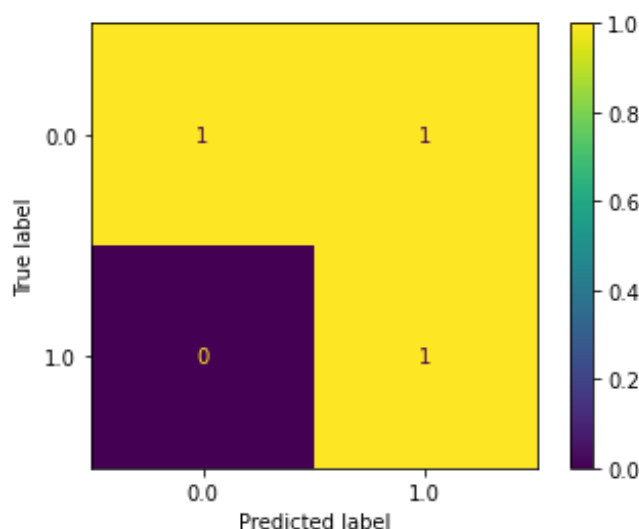


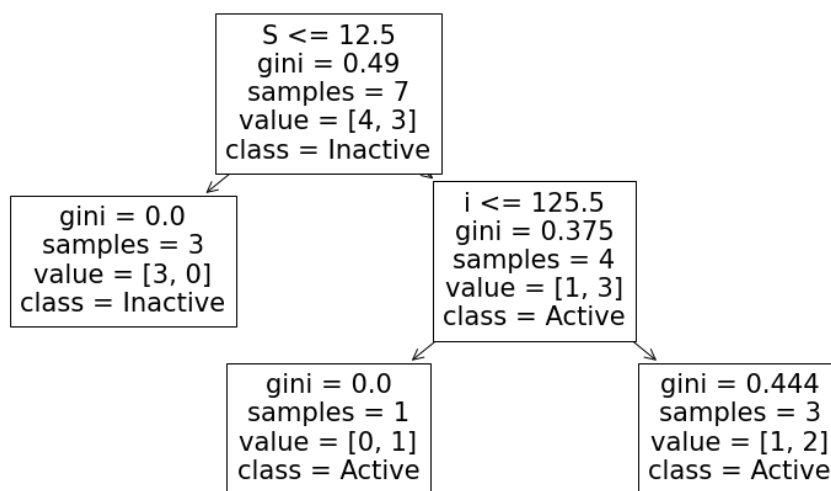
Drzewo decyzyjne – graficzna metoda wspomagania procesu decyzyjnego, stosowana w teorii decyzji. Służą zarówno do rozwiązywania problemów regresyjnych (gdzie zmienną zależną jest cecha ilościowa – ciągła/liczbowa) jak i klasyfikacyjnych (zmienna zależna jakościowa – kategoriowa). Najogólniej, celem analizy z zastosowaniem algorytmu budowy drzew decyzyjnych jest znalezienie zbioru logicznych warunków podziału, typu jeżeli, to, prowadzących do jednoznacznego zaklasyfikowania obiektów.

Dane zawierały informacje dot. karbonylacji białek dla nanomateriałów.

### 1. Macierz błędu



### 2. Model drzewa klasyfikacyjnego



### 3. Obliczone wartości statystyk oceniające zdolności prognostyczne (drzewo klasyfikacyjne)

Czułość: 1

Specyficzność: 0.5

Precyzja: 0.5

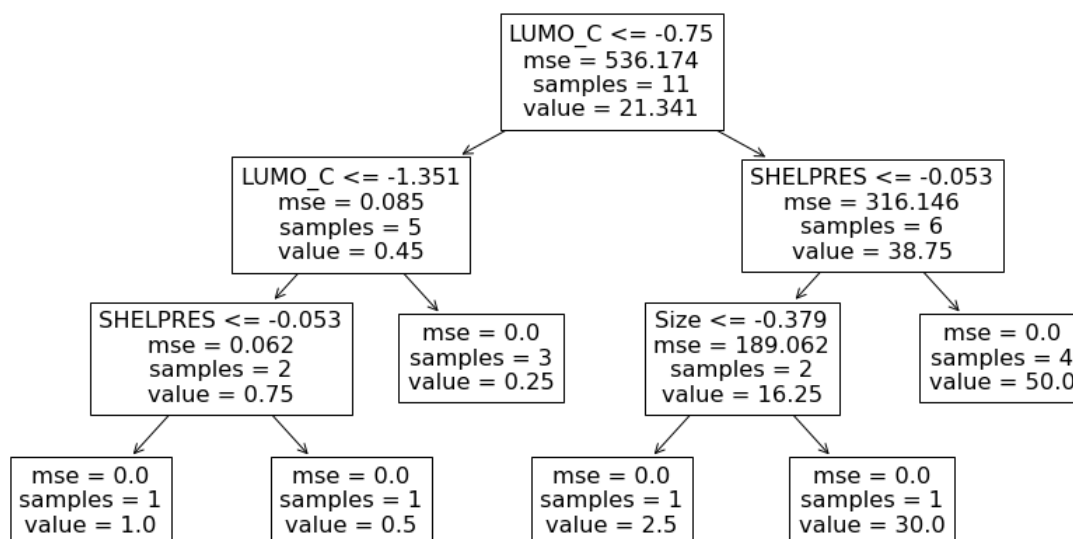
F1: 0.6(6)

Balanced acc: 0.75

Balanced err: 0.25

Za pomocą deskryptorów Size i SSA budujemy model klasyfikacyjnego drzewa decyzyjnego na wiadomych danych, a potem sprawdzamy za pomocą danych ze zbioru walidacyjnego. Obliczamy macierz błędów na podstawie której obliczane są kolejne statystyki dla modelu drzewa. Moduł scikit learn automatycznie wybiera najlepsze deskryptory dla każdego kroku drzewa, minimalizując przy tym indeks Giniego dla każdego węzła/liścia. Dla naszego zestawienia danych specyficzność, precyzja mają wartość 0.5, czułość ma wartość 1, a Balanced accuracy i Balanced error mają odpowiednio wartości 0.75 i 0.25. Statystyka F1 wynosi 0.6(6)

#### 4. Model drzewa regresyjnego



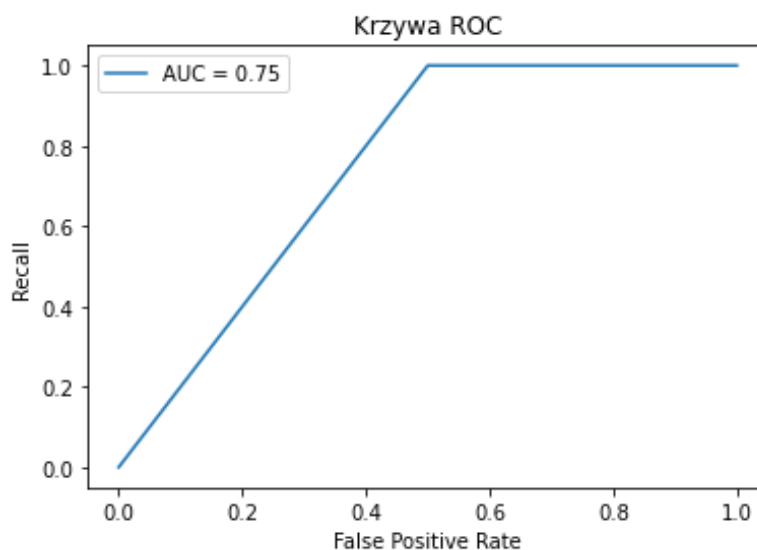
#### 5. Obliczone wartości statystyk oceniające zdolności prognostyczne (drzewo regresyjne)

$$Q^2_{EX} = 0.80$$

$$RMSE_{EX} = 0.63$$

#### 6. Krótka interpretacja

Wartość  $Q^2_{EX}$  odzwierciedla na ogół w miarę przyzwoitym modelu natomiast stosunkowo wysoka wartość  $RMSE_{EX}$  wpływa niekorzystnie na ocenę prognostyczną naszego modelu.



Wartość AUC wynosi 0.75 co oznacza że istnieje duża szansa, że klasyfikator będzie w stanie odróżnić wartości klasy pozytywnej od wartości klasy negatywnej.