

AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA im. Stanisława Staszica w Krakowie



WYDZIAŁ ZARZĄDZANIA

Przetwarzanie i Analiza Danych w Pythonie

Autor: Wiktoria Szczypka Tytuł ćwiczenia: Sprawozdanie

Z analizy danych

1 Cel ćwiczenia

Tematem tego ćwiczenia jest analiza danych. Jego celem jest wybranie danych z UCI Machine Learning Repository, przedstawienie ich, a następnie przeprowadzenie na ich podstawie analizy danych. Poruszane zostaną zarówno zagadnienia dotyczące klasyfikacji jak i klasteryzacji.

2 Propozycja rozwiązania zadania

Najpierw należy znaleźć odpowiednie dane w celu wykonania dalszej części zadania. Zostały wybrane dane o nazwie seeds - https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/seeds#. W celu analizy wybranych danych wykorzystano poniższe biblioteki oraz moduły.

```
[1]: #potrzebne biblioteki
import pandas as pd
import seaborn as sns
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn import metrics
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
from sklearn.cluster import KMeans
from sklearn.preprocessing import MinMaxScaler
import random
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
import scipy.cluster.hierarchy as shc
import numpy as np
from sklearn.metrics.pairwise import pairwise_distances
from sklearn.manifold import MDS
```

Sprawozdanie zostało stworzone za pomocą środowiska Jupyter Notebook, a jego wynik przy pomocy systemu LaTex zostanie wyeksportowany do pliku pdf. W celu wyśrodkowania tekstu i wykresów użyto poniższego kodu.

[2]: <IPython.core.display.HTML object>

3 Opis przebiegu ćwiczenia

3.1 Przedstawienie danych

Dane użyte w badaniu, jak już wspomniano powyżej, pochodzą z UCI Machine Learning Repository. Zawierają one informacje na temat 3 odmian ziaren pszenicy: Kama, Rosa oraz Canadian. Za pomocą miękkiego promieniowania rentgenowskiego udało się stworzyć wysokiej jakości wizualizację wewnętrznej struktury ziarna. Jest to metoda niedestrukcyjna oraz znacząco tańsza od bardziej zaawansowanych technik. Badania zostały przeprowadzone w Instytucie Agrofizyki Polskiej Akademii Nauk w Lublinie na ziarnach pszenicy pochodzących z pól doświadczalnych.

Poniżej wczytano dane.

```
[3]: #wczytanie danych

seeds = pd.read_csv('seeds_dataset.txt', sep='\t', lineterminator='\n', \_

→header=None, names=['area', 'perimeter', 'compactness', 'length of \_

→kernel', 'width of kernel', 'asymmetry', 'length of kernel groove', 'type'])
```

Przedstawiono poniżej strukturę danych. Jak widać zbiór danych zawiera 210 obserwacji oraz 8 zmiennych, z czego jedna to typ ziaren.

```
[4]: seeds.info()
```

<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 210 entries, 0 to 209
Data columns (total 8 columns):

#	Column	Non-Null Count	Dtype
0	area	210 non-null	float64
1	perimeter	210 non-null	float64
2	compactness	210 non-null	float64
3	length of kernel	210 non-null	float64
4	width of kernel	210 non-null	float64
5	asymmetry	210 non-null	float64
6	length of kernel groove	210 non-null	float64
7	type	210 non-null	int64

dtypes: float64(7), int64(1)

memory usage: 13.2 KB

Na podstawie wyżej opisanego badania dla każdego ziarna pszenicy zmierzone zostało 7 geometrycznych parametrów:

- area powierzchnia ziarna,
- perimeter obwód ziarna,
- compactness zwięzłość kształtu ziarna, obliczana według wzoru:

$$\frac{4 * \pi * area}{perimeter^2}$$

• length of kernel - długość ziarna,

- width of kernel szerokość ziarna,
- asymmetry coefficient współczynnik asymetrii ziarna,
- length of kernel groove długość żłobienia ziarna.

Wszystkie wyżej wymienione parametry są zmiennymi numerycznymi zmiennoprzecinkowymi. Zmienna *type* to zmienna objaśniana - typ ziarna pszenicy. Przyjmuje ona wartości:

- 1 typ Kama,
- 2 typ Rosa,
- 3 typ Canadian.

Poniżej przedstawiono pierwsze 5 obserwacji.

```
[5]:
     seeds.head()
[5]:
                perimeter
                            compactness
                                           length of kernel
                                                               width of kernel
          area
        15.26
                     14.84
                                  0.8710
                                                       5.763
                                                                          3.312
     1
        14.88
                     14.57
                                  0.8811
                                                       5.554
                                                                          3.333
     2
       14.29
                     14.09
                                  0.9050
                                                       5.291
                                                                          3.337
     3
       13.84
                     13.94
                                  0.8955
                                                       5.324
                                                                          3.379
       16.14
                     14.99
                                  0.9034
                                                       5.658
                                                                          3.562
         asymmetry
                    length of kernel groove
                                                type
     0
             2.221
                                         5.220
                                                    1
     1
             1.018
                                         4.956
                                                    1
     2
             2.699
                                         4.825
                                                    1
     3
             2.259
                                         4.805
                                                    1
     4
                                                    1
             1.355
                                         5.175
```

Poniżej przedstawiono statystyki opisowe atrybutów.

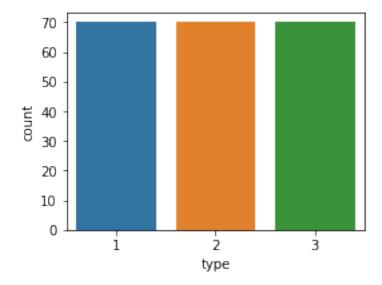
```
[6]:
    seeds.drop('type', axis=1).describe()
[6]:
                                                    length of kernel
                                                                        width of kernel
                   area
                          perimeter
                                      compactness
                         210.000000
                                       210.000000
                                                           210.000000
                                                                             210.000000
     count
            210.000000
     mean
              14.847524
                          14.559286
                                         0.870999
                                                             5.628533
                                                                               3.258605
                                                                               0.377714
     std
               2.909699
                            1.305959
                                         0.023629
                                                             0.443063
     min
              10.590000
                          12.410000
                                         0.808100
                                                             4.899000
                                                                               2.630000
     25%
              12.270000
                          13.450000
                                         0.856900
                                                             5.262250
                                                                               2.944000
     50%
                          14.320000
                                                             5.523500
                                                                               3.237000
              14.355000
                                         0.873450
     75%
              17.305000
                          15.715000
                                                             5.979750
                                         0.887775
                                                                               3.561750
     max
              21.180000
                          17.250000
                                         0.918300
                                                             6.675000
                                                                               4.033000
                         length of kernel groove
              asymmetry
            210.000000
                                       210.000000
     count
               3.700201
                                         5.408071
     mean
               1.503557
                                         0.491480
     std
```

0.765100	4.519000
2.561500	5.045000
3.599000	5.223000
4.768750	5.877000
8.456000	6.550000
	2.561500 3.599000 4.768750

Na podstawie powyższych statystyk można zaobserwować, iż nie wstępują braki w danych. Można również stwierdzić, iż dane są względnie równomiernie rozłożone - na pierwszy rzut oka można się spodziewać braku wartości odstających.

Poniżej wykres przedstawiający ilość obserwacji w poszczególnych typach ziaren.

```
[7]: plt.figure(figsize=(4,3))
    sns.countplot(seeds['type'])
    plt.show()
```

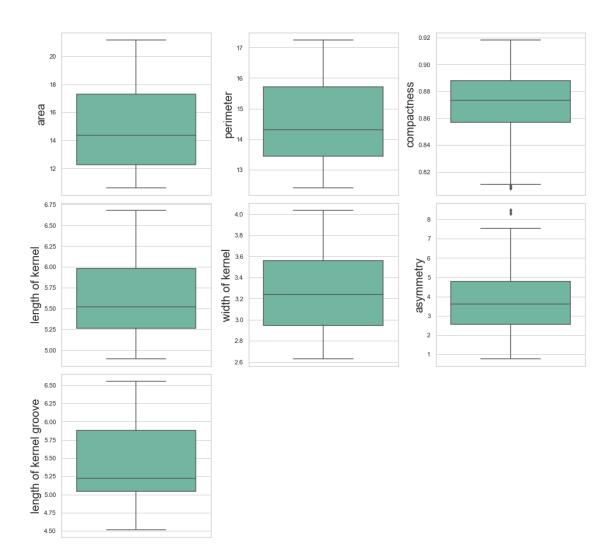


Jak widać dane są równo podzielone - każda z grup posiada 70 obserwacji. Jest to bardzo sprzyjające dalszej części badania, pożądane jest równomierne rozłożenie obserwacji w grupach.

Poniżej, w celu wizualizacji statystyk opisowych atrybutów, przedstawiono ich wykresy pudełkowe.

```
for i, el in enumerate(feature_names):
    sns.boxplot(el,data=seeds, ax=axes.flatten()[i], orient='v', palette="Set2")
    axes.flatten()[i].set_ylabel(el,fontsize=20)
#usunięcie pustych ax
fig.delaxes(axes[2,1])
fig.delaxes(axes[2,2])
plt.tight_layout()
fig.subplots_adjust(top=0.90)
plt.show()
```

Wykresy pudełkowe dla każdej ze zmiennych



Można zaobserwować, iż tylko w przypadku dwóch zmiennych można zaobserwować po 2 dwie

wartości odstające. Nie są to jednak duże róznice. Postanowiono, więc nie pozbywać się ich. Poniżej przedstawiono histogramy dla atrybutów.

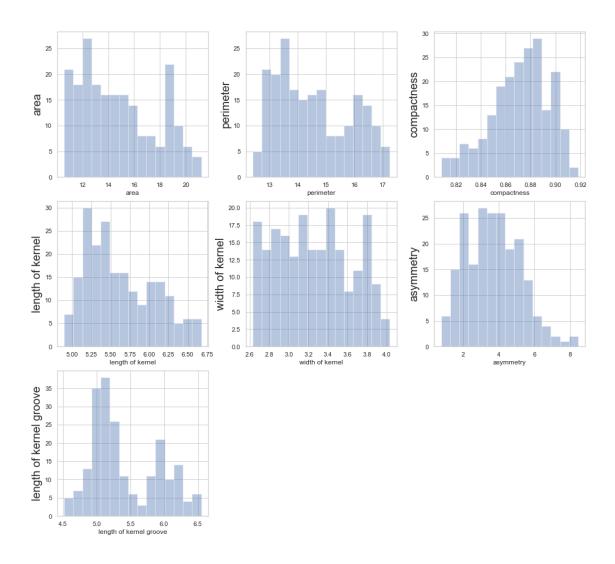
```
[9]: fig, axes = plt.subplots(nrows=3, ncols=3,figsize=(14,14))
    fig.suptitle('Histogramy dla każdej ze zmiennych', fontsize=25)

for i, el in enumerate(feature_names):
        sns.distplot(seeds[el], ax=axes.flatten()[i],bins=15, kde=False)
        axes.flatten()[i].set_ylabel(el,fontsize=20)

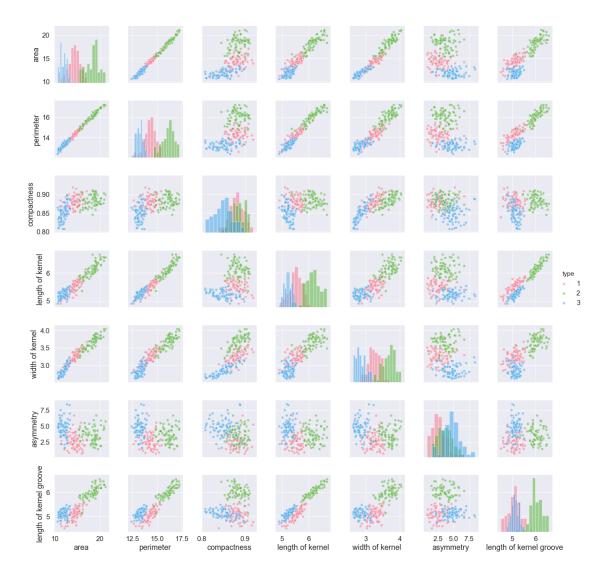
#usunięcie pustych ax
fig.delaxes(axes[2,1])
fig.delaxes(axes[2,2])
plt.tight_layout()
fig.subplots_adjust(top=0.90)

plt.show()
```

Histogramy dla każdej ze zmiennych



Poniżej przedstawiono macierz rozproszenia (scatter matrix) w zależności od typu ziaren pszenicy.



Na podstawie powyższych wykresów można zauważyć zależności między zmiennymi a typem ziarna.

Część zależności jest bardzo logiczna - im większy obwód tym większa powierzchnia, długość, szerokość ziarna itp. Można również zauważyć iż typ 2 (zielone wartości) różnią się bardziej od pozostałych rodzaji ziarna. Ponadto z histogramu zmiennej *asymmetry* można wnioskować, iż zmienna ta niezbyt rozróżnia typy poszczególnych ziaren.

Poniżej przedstawiono średnie wartości atrybutów w każdej z grup.

```
[11]: #średnie w poszczególnych grupach
seeds.groupby('type').mean()

[11]: area perimeter compactness length of kernel width of kernel \
    type
    1 14.334429 14.294286 0.880070 5.508057 3.244629
```

```
2
      18.334286 16.135714
                                0.883517
                                                  6.148029
                                                                    3.677414
                                                                    2.853771
3
      11.873857 13.247857
                                                  5.229514
                                0.849409
      asymmetry length of kernel groove
type
       2.667403
                                 5.087214
1
2
       3.644800
                                 6.020600
3
       4.788400
                                 5.116400
```

Można zauważyć, że niektóre atrybuty w większym stopniu różnią się w zależności od typu ziaren. Paramtery area oraz perimeter rozróżniają grupy, zaś compactness, mimo tego, iż przyjmuje wartości między 0.81, a 0.92, nie za bardzo rozróżnia grupy. 3 kolejne atrybuty również różnią się w zależności od grup, a rozróżnienie w przypadku length of kernel groove nie jest już tak zauważalne - można zauważyć podział między typem 2, a pozostałymi.

3.2 Przygotowanie danych

W celu wizualizacji danych i możliwości porównywania otrzymanych wyników, zdecydowano się użyć skalowania wielowymiarowego (ang. *MultiDimensional Scaling*). Najpierw obliczono macierz odległości między obserwacjami (pominięto typ ziaren), a następnie za pomocą funkcji *MDS* z 7 atrybutów uzyskano wyniki w formie 2 współrzędnych, które przekazują informacje na temat rozmieszczenia obserwacji względem siebie. Poprzez zastosowanie tej metody możliwa jest wizualizaja obserwacji w zależności od typu ziarna. Skalowanie to posłuży w tym badaniu jedynie do wizualizacji. Metody klasyfikacji oraz klasteryzacji danych wykonane zostaną na oryginalnych danych (7 atrybutów).

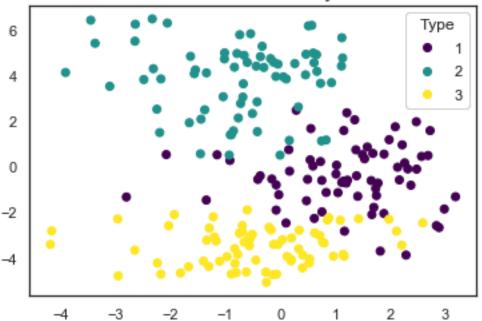
```
[12]: #brak tta w wykresach
sns.set(style="white")

seed=np.random.RandomState(seed=23)

#skalowanie
similarities= pairwise_distances(seeds.drop('type',axis=1), metric="euclidean")
mds = MDS(n_components=2, max_iter = 100, eps=1e-9, random_state=seed,u_dissimilarity="precomputed")
pos = mds.fit(similarities).embedding_

#wykres
fig, ax = plt.subplots()
scatter = ax.scatter(pos[:,0], pos[:,1],c= seeds['type'], cmap='viridis')
legend = ax.legend(*scatter.legend_elements(),loc="upper right", title="Type")
ax.add_artist(legend)
ax.set_title('Dane - skalowanie wielowymiarowe', fontsize=15)
plt.show()
```





Ze względu na różnorodne wartości zmiennych (zmienna *compactness* przyjmuje wartości 0.81-0.92, a *area* 10-21) zdecydowano się na ich unitaryzację - wartości wszystkich zmiennych będą teraz z przedziału od 0 do 1.

```
[13]: # unitaryzacja
scaler = MinMaxScaler()
#utworzenie df x oraz wektora y
X = pd.DataFrame(seeds[feature_names])
y = seeds['type']

X = scaler.fit_transform(X)
```

Badanie zostanie podzielone na dwie części - klasyfikację oraz klasteryzację. Do pierwszej z nich przydatne będzie rozbicie danych na zbiór uczący oraz testowy. 80% danych (168 obserwacji) należeć będzie do zbioru uczącego, a pozostałe 20% (42 obserwacje) do zbioru testowego. Podział ten zostanie wykonany losowo.

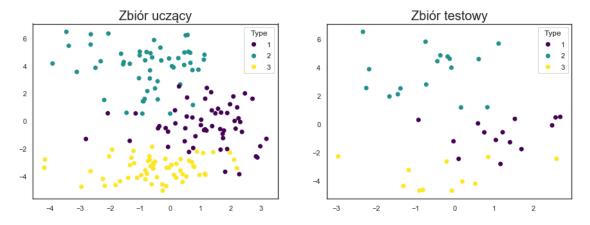
```
[14]: np.random.seed(23)
#podział na zbiór uczący i testowy - 80/20
size = int(0.8*seeds.shape[0])
rnumber = random.sample(range(210), size)
rest = pd.DataFrame(X).index.isin(rnumber)

X_train = X[rnumber]
X_test = X[~rest]
```

```
y_train = y[rnumber]
y_test = y[~rest]
```

Poniżej wizualizacja obydwu zbiorów.

```
[15]: pos_tr = pos[rnumber]
      pos_test = pos[~rest]
      # wykresy
      fig, ax = plt.subplots(ncols = 2, nrows=1, figsize=(15,5))
      #uczący
      scatter = ax[0].scatter(pos_tr[:,0], pos_tr[:,1],c= y_train, cmap='viridis')
      legend1 = ax[0].legend(*scatter.legend_elements(),loc="upper right",__
       →title="Type")
      ax[0].add_artist(legend1)
      ax[0].set_title('Zbiór uczący', fontsize=20)
      #test
      scatter = ax[1].scatter(pos_test[:,0], pos_test[:,1],c= y_test, cmap='viridis')
      legend2 = ax[1].legend(*scatter.legend_elements(),loc="upper right",__
       →title="Type")
      ax[1].add_artist(legend2)
      ax[1].set_title('Zbiór testowy', fontsize=20)
      plt.show()
```



3.3 Klasyfikacja

Klasyfikacja to przykład uczenia z nadzorem (ang. *supervised learning*). Posiadamy obserwacje oraz przypisaną im grupę. Celem jest stworzenie modelu, który będzie poprawnie klasyfikował dane. Model zostanie stworzony na podstawie danych trenigowych, następnie zostanie porównana jego skuteczność zarówno dla danych testowych jak i treningowych. Bardzo duża skuteczność modelu dla danych treningowych, a słaba na zbiorze testowym może świadczyć o przeuczeniu modelu.

Przedstawione zostaną dwie metody klasyfikacji: regresja logistyczna oraz drzewo klasyfikacyjne. Następnie metody te zostaną porównane.

3.3.1 Regresja logistyczna

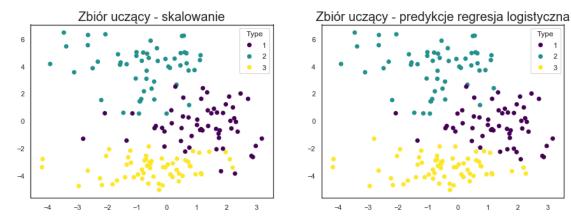
Poniżej został stworzony model oraz predykcje zarówno dla zbioru uczącego jak i testowego

```
[16]: #model
  logmodel = LogisticRegression()
  logmodel.fit(X_train,y_train)

  #predykcja testowy
  predictions_test = logmodel.predict(X_test)
  #predykcja uczący
  predictions_tr = logmodel.predict(X_train)
```

Poniżej została przedstawiana wizualizacja zbioru uczącego oraz jego predykcji.

```
[17]: # wykresy
      fig, ax = plt.subplots(ncols = 2, nrows=1, figsize=(15,5))
      #uczący - rzeczywiste
      scatter = ax[0].scatter(pos_tr[:,0], pos_tr[:,1],c= y_train, cmap='viridis')
      legend1 = ax[0].legend(*scatter.legend_elements(),loc="upper right",_
       →title="Type")
      ax[0].add_artist(legend1)
      ax[0].set_title('Zbiór uczący - skalowanie', fontsize=20)
      #uczący - predykcje
      scatter = ax[1].scatter(pos_tr[:,0], pos_tr[:,1],c= predictions_tr,__
       →cmap='viridis')
      legend2 = ax[1].legend(*scatter.legend_elements(),loc="upper right",_
       →title="Type")
      ax[1].add_artist(legend2)
      ax[1].set_title('Zbiór uczący - predykcje regresja logistyczna', fontsize=20)
      plt.show()
```



Na podstawie wykresów można spodziewać się, iż model w znacznym stopniu dobrze sklasyfikował dane. Poniżej przedstawiono macierz pomyłek (ang. *confusion matrix*), która przedstawia ile obserwacji należących do typu 1, zostało przypisane do typu 1, 2 oraz 3. Analogiczne wartości są przedstawione dla obserwacji należących do typu 2 i 3.

```
[18]: cnf_matrix = metrics.confusion_matrix(y_train, predictions_tr)
print(cnf_matrix)
```

```
[[49 2 5]
[ 1 52 0]
[ 3 0 56]]
```

Warto też przedstawić następujące pojęcia związane z tym czy predykcja jest poprawna czy nie:

- TN (True Negative) obserwacja nie należy do danej klasy (jest negatywna) i nie została do niej zakwalifikowana,
- TP (True Positive) obserwacja należy do danej klasy (jest pozytywna) i została tam zakwalifikowana,
- FN (False Negative) obserwacja należy do danej klasy (jest pozytywna) i nie została tam zakwalifikowana,
- FP (False Positive) obserwacja nie należy do danej klasy (jest negatywna) i została do niej zakwalifikowana.

Poniżej przedstawiono raport z miarami klasyfikacji:

- precision = TP/(TP+FP) jaki procent predykcji był poprawnie przypisany, dokładność pozytywnych predykcji
- recall = TP/(TP+FN) jaki procent obserwacji należących do danego typu został poprawnie przypisany, ułamek pozytywnych predykcji poprawnie przypisany,
- f1-score = 2(*Recall* Precision) / (Recall + Precision) ważona średnia harmoniczna *precision* oraz *recall*.

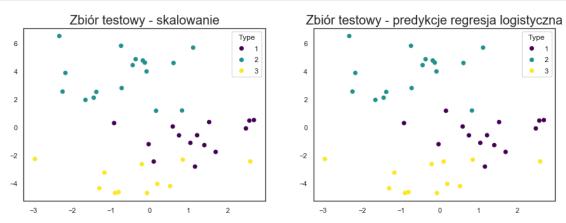
Wszystkie te miary zostały przedstawione ogólnie oraz dla każdej klasy (typu ziarna).

[19]: print(metrics.classification_report(y_train, predictions_tr))

	precision	recall	f1-score	support
1	0.92	0.88	0.90	56
2	0.96	0.98	0.97	53
3	0.92	0.95	0.93	59
accuracy			0.93	168
macro avg	0.94	0.94	0.93	168
weighted avg	0.93	0.93	0.93	168

Na podstawie macierzy pomyłek i powyższych wartości można stwierdzić, iż model dobrze klasyfikuje zbiór uczący. Pora przeprowadzić analogiczne testy dla zbioru testowego. Poniżej przedstawiono wykres predykcji.

```
[20]: # wykresy
      fig, ax = plt.subplots(ncols = 2, nrows=1, figsize=(15,5))
      #testowy - rzeczywiste
      scatter = ax[0].scatter(pos_test[:,0], pos_test[:,1],c= y_test, cmap='viridis')
      legend1 = ax[0].legend(*scatter.legend_elements(),loc="upper right",__
      →title="Type")
      ax[0].add_artist(legend1)
      ax[0].set_title('Zbiór testowy - skalowanie', fontsize=20)
      #testowy - predykcje
      scatter = ax[1].scatter(pos_test[:,0], pos_test[:,1],c= predictions_test,__
      legend2 = ax[1].legend(*scatter.legend_elements(),loc="upper right",_
      →title="Type")
      ax[1].add_artist(legend2)
      ax[1].set_title('Zbiór testowy - predykcje regresja logistyczna',fontsize=20)
      plt.show()
```



Analogicznie przedstawiona została macierz pomyłek oraz raport klasyfikacji.

1	0.93	0.93	0.93	14
2	1.00	0.94	0.97	17
3	0.92	1.00	0.96	11
accuracy			0.95	42
macro avg	0.95	0.96	0.95	42
weighted avg	0.95	0.95	0.95	42

Model ten sprawuje się gorzej dla zbioru testowego niż uczącego. Jednakże otrzymane wyniki dalej są na zadawalającym poziomie.

3.3.2 Drzewo klasyfikacyjne

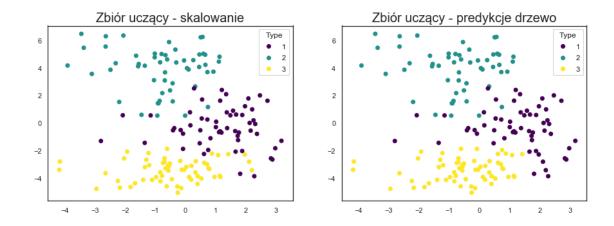
Drugim badanym modelem jest drzewo klasyfikacyjne. Poniżej stworzono model, jako maksymalną głebokość drzewa ustalono liczbę 4, powinno to ograniczyć za duże dopasowanie drzewa do zbioru uczącego. Następnie dokonano predykcje dla zbioru uczącego i testowego.

```
[23]: #Tworzenie drzewa
dtree = DecisionTreeClassifier(max_depth =4)
dtree.fit(X_train,y_train)

#predykcja testowy
predictions_test = dtree.predict(X_test)
#predykcja uczący
predictions_tr = dtree.predict(X_train)
```

Analogicznie do powyższej analizy, poniżej przedstawiono wykres predykcji dla zbioru uczącego.

```
[24]: # wykresy
     fig, ax = plt.subplots(ncols = 2, nrows=1, figsize=(15,5))
     #uczący - rzeczywiste
     scatter = ax[0].scatter(pos_tr[:,0], pos_tr[:,1],c= y_train, cmap='viridis')
     legend1 = ax[0].legend(*scatter.legend_elements(),loc="upper right",__
      →title="Type")
     ax[0].add_artist(legend1)
     ax[0].set_title('Zbiór uczący - skalowanie', fontsize=20)
      #uczący - predykcje
     scatter = ax[1].scatter(pos_tr[:,0], pos_tr[:,1],c= predictions_tr,_
      legend2 = ax[1].legend(*scatter.legend_elements(),loc="upper right",_
      →title="Type")
     ax[1].add_artist(legend2)
     ax[1].set_title('Zbiór uczący - predykcje drzewo', fontsize=20)
     plt.show()
```



Na podstawie powyższych wykresów można spodziewać się dobrej oceny modelu.

Poniżej macierz pomyłek i raport klasyfikacji.

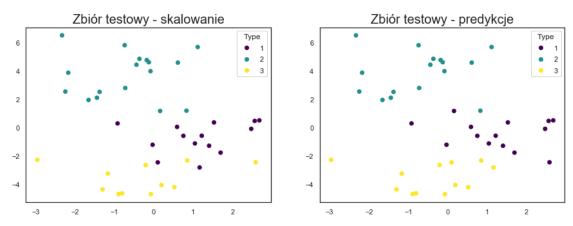
```
[25]: cnf_matrix = metrics.confusion_matrix(y_train, predictions_tr)
  print(cnf_matrix)

[[53      0     3]
      [      0     53     0]
      [      3     0     56]]
```

[26]: print(metrics.classification_report(y_train, predictions_tr))

	precision	recall	f1-score	support
1	0.95	0.95	0.95	56
2	1.00	1.00	1.00	53
3	0.95	0.95	0.95	59
accuracy			0.96	168
macro avg	0.97	0.97	0.97	168
weighted avg	0.96	0.96	0.96	168

Jak widać model prawie idealnie przypisuje odpowiednie klasy zmiennym. Pora teraz zbadać jego wyniki dla danych testowych. Poniżej wykres wizualizujący predykcje dla danych testowych.



Można zauważyć, iż w 'granicznych' przypadkach model niepoprawnie przypisał klasy, jednak ogólnie można spodziewać się dobrego wyniku. Poniżej macierz pomyłek oraz raport klasyfikacji.

```
[28]: cnf_matrix = metrics.confusion_matrix(y_test, predictions_test)
print(cnf_matrix)
```

[[12 0 2] [1 16 0] [1 0 10]]

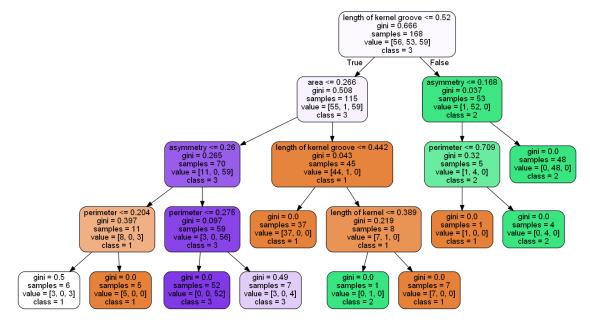
[29]: print(metrics.classification_report(y_test, predictions_test))

	precision	recall	II-score	support
1	0.86	0.86	0.86	14
2	1.00	0.94	0.97	17
3	0.83	0.91	0.87	11
accuracy	7		0.90	42
macro avg	g 0.90	0.90	0.90	42
weighted ava	g 0.91	0.90	0.91	42

nrociaion

Widać, iż model jest mniej skuteczny dla danych testowych, jednak wyniki dalej są dobre.

Poniżej przedstawiono wizualizacje drzewa - przedstawione są poszczególne podziały oraz końcowe przypisanie do klasy.



3.3.3 Porównanie oraz wnioski

Obydwa modele lepiej sprawdziły się dla danych uczących niż dla testowych. Wyniki obydwu metod są bardzo do siebie podobne. Nie można stwierdzić, iż jeden model okazał się być dużo lepszy od drugiego. Jednakże skłaniałabym się, by wybrać drzewo klasyfikacyjne, jest to bardziej złożony algorytm i możliwe jest dopasowanie parametrów drzewa (np. maksymalną głębokość) w inny sposób poprawiając jego wyniki. Można również zostosować bardziej złożone algorytmy tworzenia drzew np. Random Forest

3.4 Klasteryzacja

Klasteryzacja to przykład uczenia bez nadzoru (ang. unsupervised learning). Posiadamy obserwacje, lecz nie posiadamy przypisanej do niej klasy. Celem klasteryzacji jest pogrupowanie danych na podstawie ich podobieństwa, bez znajomości ich klas. Nie ma sensu więc tworzyć macierzy pomyłek oraz nie ma potrzeby podziału danych na testowe oraz treningowe. Istnieją metody, które pomagają wybrać odpowiednią ilość klastrów dla danych.

Dla danych użytych do badania mamy przypisane już klasy - wiadomo więc jaką ilość klastrów należy stworzyć. Badanie zostanie przeprowadzone dla danych wykluczając zmienną *type*. Następnie zwizualizowane zostaną przypisane klastry oraz rzeczywiste klasy danych.

Przedstawione zostaną dwie metody klasteryzacji: grupowanie hierarchiczne oraz metoda k-średnich.

3.4.1 Grupowanie hierarchiczne

Jest to metoda, która ma na celu zbudowanie hierarchii klastrów. Służy do dzielenia obserwacji na grupy bazując na podobieństwach między nimi. W metodzie tej na wstępie nie jest konieczne określenie liczby tworzonych klastrów. Jednak w tym przypadku liczba ta jest znana - wynosi 3.

Najpierw zostanie obliczona macierz odległości między zmiennymi - w badaniu zostanie obliczona odległość Euklidesowa. Następnie należy wybrać metodę połączenia, określa ona jak definiowana jest odległość między dwoma klastrami. W zależnośći od jej wyboru przypisanie do poszczególnych grup różni się. W badaniu zostaną przedstawione 4 metody:

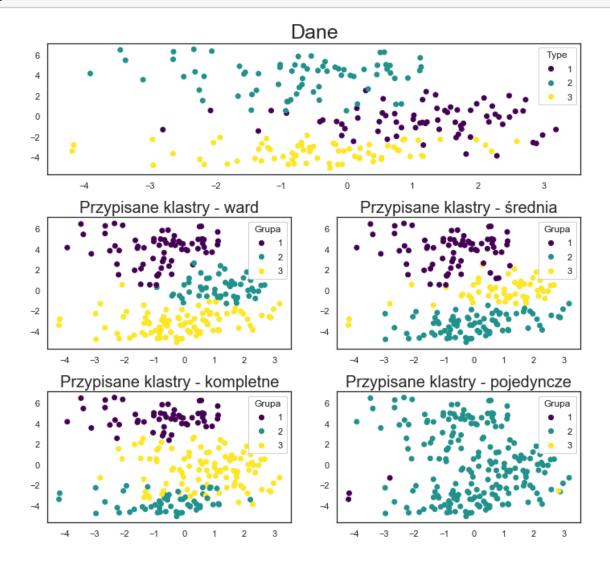
- Warda Odległość między dwoma klastrami jest sumą kwadratów odchyleń od punktów do centroidów. Ten sposób dąży do zminimalizowania sumy kwadratów wewnątrz klastra.
- Pojedyncze połączenie Odległość między dwoma klastrami jest minimalną odległością między obserwacją w jednym klastrze a obserwacją w innym klastrze. Sprawdza się, gdy klastry są wyraźnie oddzielone.
- Średnie połączenie Odległość między dwoma klastrami jest średnią odległością między obserwacją w jednym klastrze a obserwacją w innym klastrze.
- Kompletne połączenie Odległość między dwoma klastrami jest maksymalną odległością między obserwacją w jednym klastrze a obserwacją w innym klastrze. Może być wrażliwy na występowanie outlierów.

Poniżej wizualizacja przypisanych grup dla wyżej wymienionych metod.

```
[31]: fig = plt.figure(figsize=(15,15))
ax1 = plt.subplot2grid((5,3), (0,0), colspan=2)
scatter = ax1.scatter(pos[:,0], pos[:,1],c= seeds['type'], cmap='viridis')
legend = ax1.legend(*scatter.legend_elements(),loc="upper right", title="Type")
ax1.add_artist(legend)
ax1.set_title('Dane', fontsize=25)
ax2 = plt.subplot2grid((5,3), (1,0))
```

```
#tworzenie macierzy odległości 'ward'
distance_matrix_ward = shc.linkage(X, 'ward')
#3 klasy
predicted_cluster = shc.fcluster(distance_matrix_ward, 3, criterion='maxclust')
scatter = ax2.scatter(pos[:,0], pos[:,1],c= predicted_cluster, cmap='viridis')
legend2 = ax2.legend(*scatter.legend_elements(),loc="upper right", title="Grupa")
ax2.add_artist(legend2)
ax2.set_title('Przypisane klastry - ward', fontsize=20)
ax3 = plt.subplot2grid((5,3), (1,1))
#tworzenie macierzy odległości 'average'
distance_matrix_average = shc.linkage(X, 'average')
#3 klasy
predicted_cluster = shc.fcluster(distance_matrix_average, 3,__
 scatter = ax3.scatter(pos[:,0], pos[:,1],c= predicted_cluster, cmap='viridis')
legend2 = ax3.legend(*scatter.legend_elements(),loc="upper right", title="Grupa")
ax3.add_artist(legend2)
ax3.set_title('Przypisane klastry - średnia', fontsize=20)
ax4 = plt.subplot2grid((5,3), (2,0))
#tworzenie macierzy odległości 'complete'
distance_matrix_complete = shc.linkage(X, 'complete')
#3 klasy
predicted_cluster = shc.fcluster(distance_matrix_complete, 3,__
 scatter = ax4.scatter(pos[:,0], pos[:,1],c= predicted_cluster, cmap='viridis')
legend2 = ax4.legend(*scatter.legend_elements(),loc="upper right", title="Grupa")
ax4.add_artist(legend2)
ax4.set_title('Przypisane klastry - kompletne', fontsize=20)
ax5 = plt.subplot2grid((5,3), (2,1))
#tworzenie macierzy odległości 'single'
distance_matrix_single = shc.linkage(X, 'single')
#3 klasy
predicted_cluster = shc.fcluster(distance_matrix_single, 3, criterion='maxclust')
scatter = ax5.scatter(pos[:,0], pos[:,1],c= predicted_cluster, cmap='viridis')
legend2 = ax5.legend(*scatter.legend_elements(),loc="upper right", title="Grupa")
ax5.add_artist(legend2)
ax5.set_title('Przypisane klastry - pojedyncze', fontsize=20)
fig.tight_layout()
```

plt.show()



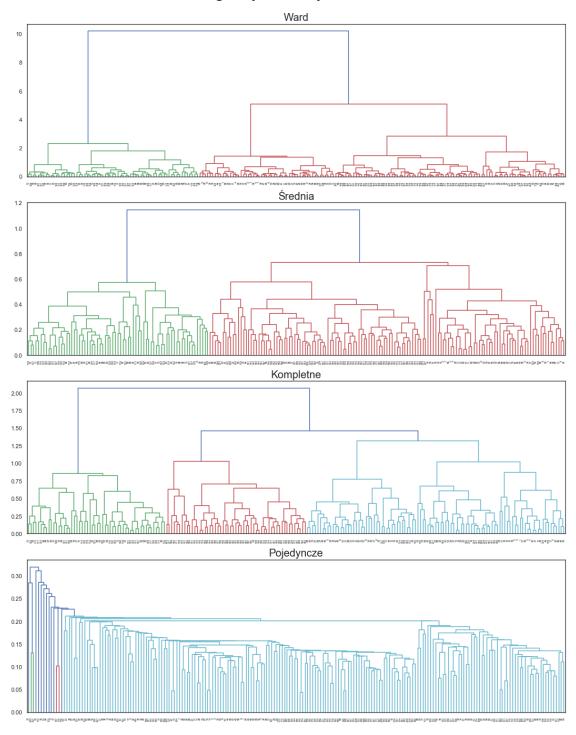
Należy być świadomym, iż nazwy grup na tym wykresie nie są istotne - grupa 1 nie musi odpowiadać wartości 1 dla typu. Wizualnie można jednoznacznie stwierdzić iż, metoda oparta na pojedynczym połączeniu najgorzej pogrupowała dane. Metoda Ward'a oraz ta oparta na średniej poradziły sobie najlepiej. Można zauważyć niewielkie różnice.

Poniżej przedstawione zostaną dendrogramy, tj. łączenie danych. Zakładając, iż nie wiemy jaka powinna być liczba klastrów za pomocą tych wykresów można wizualnie stwierdzić jaka liczba będzie pożądana. Dendrogramy przedstawione zostaną dla każdej z metod.

```
[32]: # wykresy dendrogramy
fig, ax = plt.subplots(ncols = 1, nrows=4, figsize=(15,20))
fig.suptitle('Dendrogramy dla wszystkich metod', fontsize=30)
shc.dendrogram(distance_matrix_ward, ax=ax[0])
```

```
ax[0].set_title('Ward', fontsize=20)
shc.dendrogram(distance_matrix_average, ax=ax[1])
ax[1].set_title('Średnia', fontsize=20)
shc.dendrogram(distance_matrix_complete, ax=ax[2])
ax[2].set_title('Kompletne', fontsize=20)
shc.dendrogram(distance_matrix_single, ax=ax[3])
ax[3].set_title('Pojedyncze', fontsize=20)
plt.tight_layout()
fig.subplots_adjust(top=0.93)
plt.show()
```

Dendrogramy dla wszystkich metod



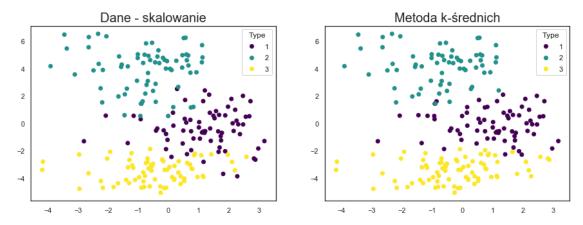
Z powyższych dendrogramów można wywnioskować, iż metoda średniej oraz Warda sugerują podział na 2 grupy. Można jednak zaobserwować w jaki sposób łączone są dane. Ponownie można stwierdzić iż metoda opierająca się na pojedynczym połączeniu jest najgorsza.

3.4.2 Metoda k-średnich

Jest to metoda należaca do grupy algorytmów analizy skupień tj. analizy polegającej na szukaniu i wyodrębnianiu grup obiektów podobnych (skupień). Reprezentuje ona grupę algorytmów niehierarchicznych. Konieczne jest wcześniejsze podanie liczby grup. Przy pomocy metody kśrednich zostanie utworzonych k różnych możliwie odmiennych skupień. Algorytm ten polega na przenoszeniu obiektów ze skupienia do skupienia tak długo aż zostaną zoptymalizowane zmienności wewnątrz skupień oraz pomiędzy skupieniami. Podobieństwo w skupieniu powinno być jak największe, zaś osobne skupienia powinny się maksymalnie od siebie różnić.

Poniżej przedstawiono wykres wizualizujący przypisanie do grup.

```
[33]: # metoda k-średnich
      cluster = KMeans(n_clusters=3, random_state=14)
      #dodano 1, bo metoda przydziela klastry od 0
      cluster_labels = cluster.fit_predict(X)+1
      # wykresy
      fig, ax = plt.subplots(ncols = 2, nrows=1, figsize=(15,5))
      #rzeczywiste
      scatter = ax[0].scatter(pos[:,0],pos[:,1],c= y, cmap='viridis')
      legend1 = ax[0].legend(*scatter.legend_elements(),loc="upper right",__
       →title="Type")
      ax[0].add_artist(legend1)
      ax[0].set_title('Dane - skalowanie', fontsize=20)
      #wyniki k-średnich
      scatter = ax[1].scatter(pos[:,0],pos[:,1], c=cluster_labels, cmap='viridis')
      legend2 = ax[1].legend(*scatter.legend_elements(),loc="upper right",__
       →title="Type")
      ax[1].add_artist(legend2)
      ax[1].set_title('Metoda k-średnich', fontsize=20)
      plt.show()
```



Można ocenić, iż metoda ta bardzo dobrze utworzyła 3 grupy, jedynie na podstawie danych. W

cześci poświęconej przedstawieniu danych zostały przedstawione średnie wartości parametrów w zależności od typu ziarna. Można było wtedy zauważyć, iż rozróżnienie w grupach jest widoczne. Dzięki temu metoda ta dobrze się sprawdziła.

Poniżej przedstawiono ponownie średnie w grupach dla danych po unitaryzacji oraz centroidy klastrów dla metody k-średnich.

```
[34]: pd.DataFrame(X).groupby(y).mean()
                   0
[34]:
                              1
                                        2
                                                  3
                                                            4
                                                                       5
                                                                                 6
      type
      1
            0.353582 0.389315
                                0.653085
                                           0.342938
                                                     0.438082
                                                               0.247345
                                                                          0.279771
      2
            0.731283 0.769776
                                0.684366
                                           0.703282
                                                     0.746553
                                                               0.374430
                                                                          0.739340
      3
            0.121233 0.173111
                                0.374851
                                           0.186100
                                                     0.159495
                                                               0.523125
                                                                         0.294141
[35]: s = pd.Series([1, 2, 3])
      pd.DataFrame(cluster.cluster_centers_).set_index(s)
[35]:
                                                                    5
         0.383490
                   0.419841
                             0.671204
                                        0.364685
                                                  0.468499
                                                            0.264177
                                                                      0.318384
      1
                   0.793744
                             0.694192
                                        0.730038
                                                  0.769501
         0.757333
                                                            0.367576
                                                                      0.757093
         0.123334
                   0.175137 0.378179
                                       0.186710
                                                  0.162527
                                                            0.498569
                                                                      0.279288
```

Można zauważyć, iż wartości te są zblizone do siebie.

3.5 Podsumowanie

Ciężko jest porównać ze sobą klasyfikację oraz klasteryzację - są to metody, które różnią się w podstawowych założeniach. Zostały przedstawione 2 metody klasyfikacji oraz 2 metody klasteryzacji. Nie jest możliwe wyłonienie najgorszej oraz najlepszej z nich. Jednakże za pomocą wszystkich z nich osiągnięto dość dobre wyniki.

W powyższym sprawozdaniu został osiągnięty jego cel - wybrano dane oraz wykonana została ich analiza.