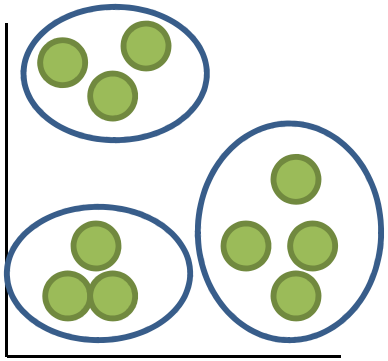
Pokročilé statistické metody
4. cvičení

Shluková analýza

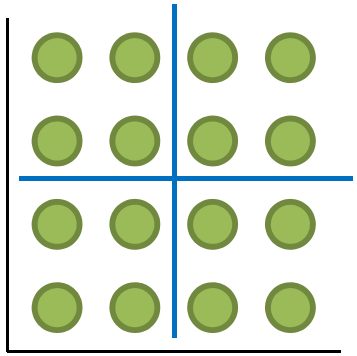
Shluková analýza – jaký je cíl?

Shluková analýza – jaký je cíl?

- Seskupení objektů do shluků podle toho, jak si jsou podobné – chceme co nejpodobnější objekty v rámci shluků a co nejodlišnější mezi shluky.
- Shluková analýza vychází z asociační matice vzdáleností objektů (Q mode) nebo závislosti parametrů (R mode).
- Můžeme provést dvě hlavní chyby: špatný výběr metriky a špatný výběr algoritmu shlukování.
- Smysluplnost výsledků shlukování závisí jednak na objektivní existenci shluků v datech, jednak na arbitrárně nastavených kritériích definice shluků.

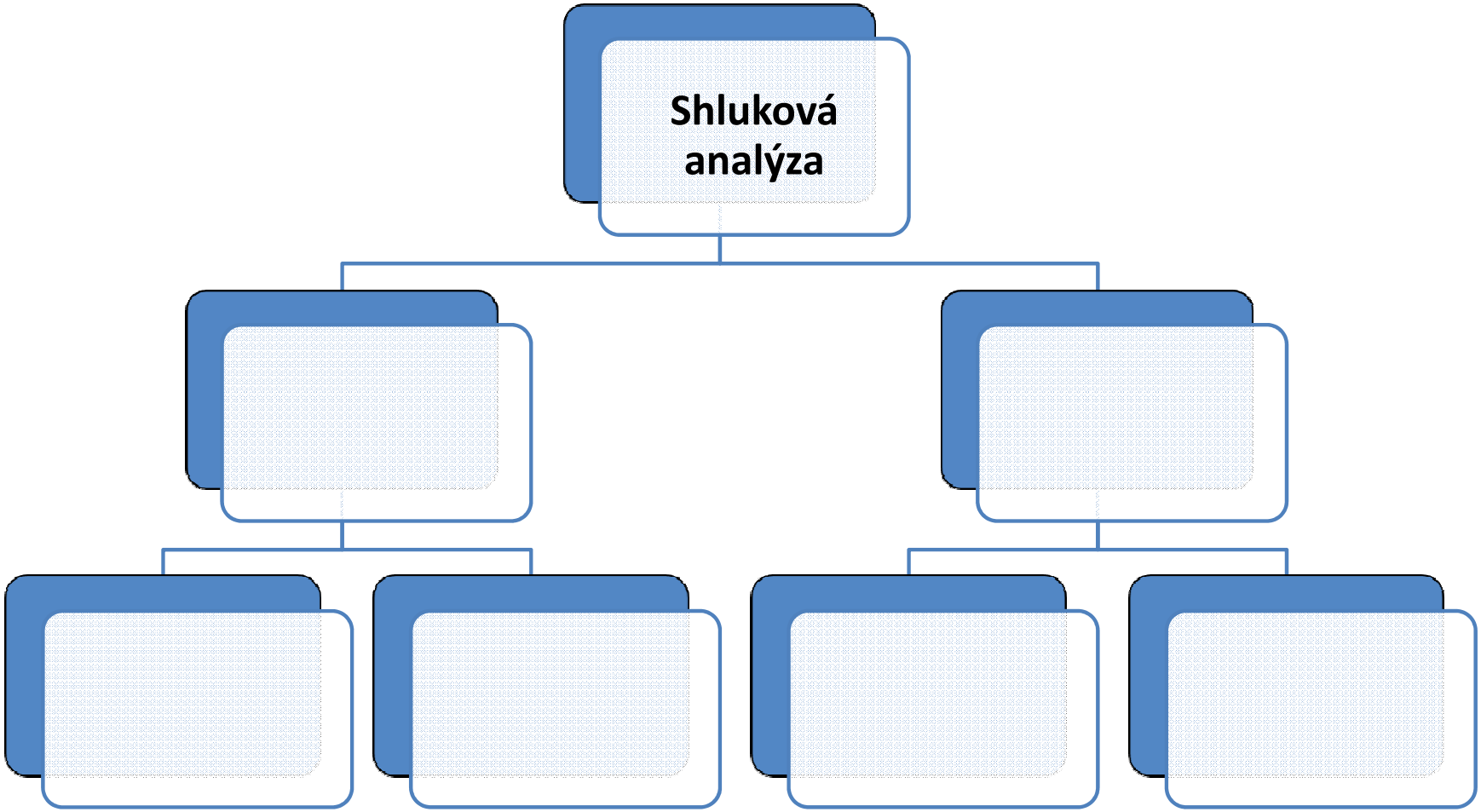


Jednoznačné odlišení existujících shluků v datech

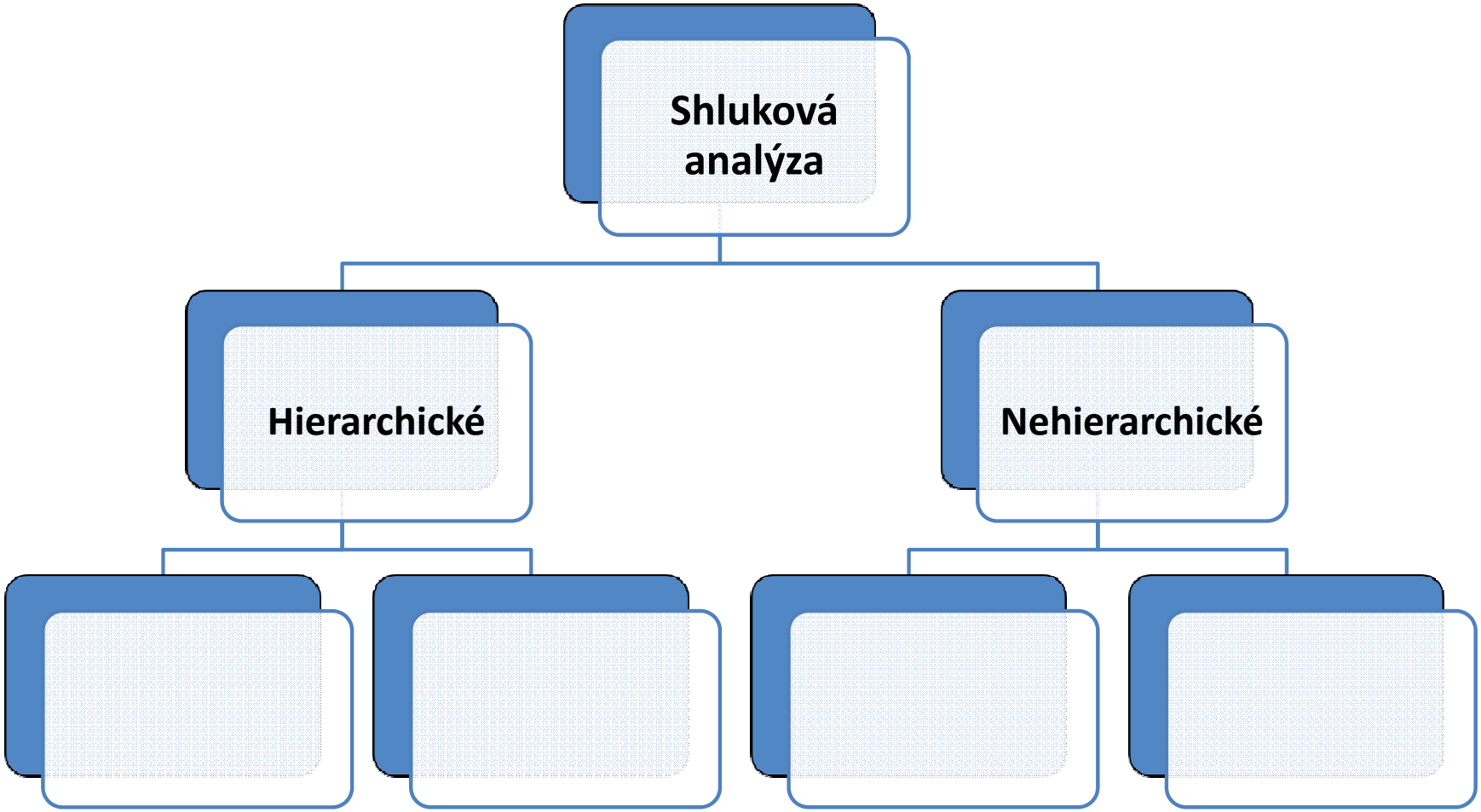


Shlukovou analýzu lze provést i na datech bez objektivní existence shluků

Shluková analýza: typy metod



Shluková analýza: typy metod



Shluková analýza: typy metod

Hierarchické
shluky jsou definovány postupným skládáním objektů

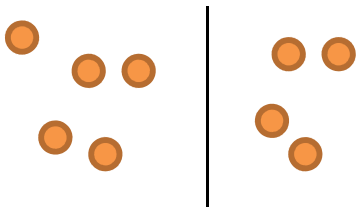
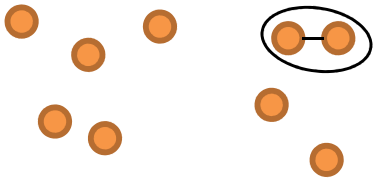
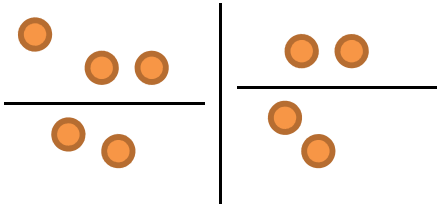
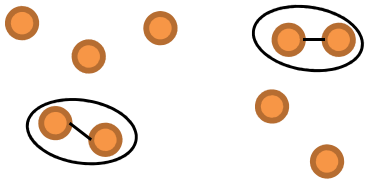
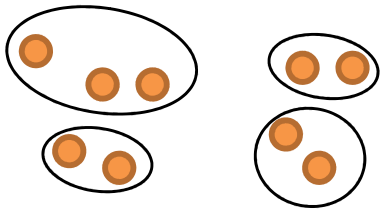
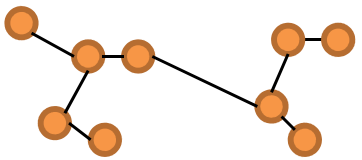
Divizivní
Objekty jsou nejprve rozděleny do dvou shluků, tyto shluky jsou dále rozděleny atd.

Aglomerativní
Po spojení první dvojice objektů dochází k postupnému napojování dalších objektů.

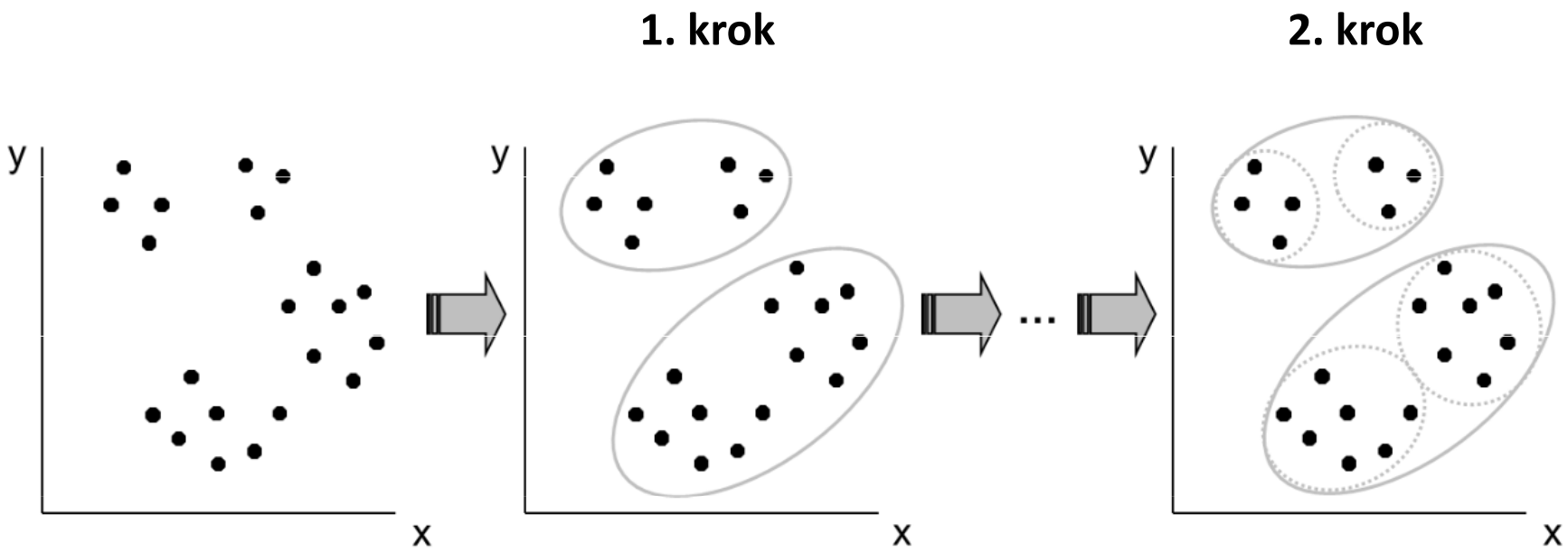
Nehierarchické
Shluky jsou definovány v jednom kroku

Divizivní
Objekty jsou rozděleny do předem nastaveného počtu shluků.

Aglomerativní
síť spojených bodů

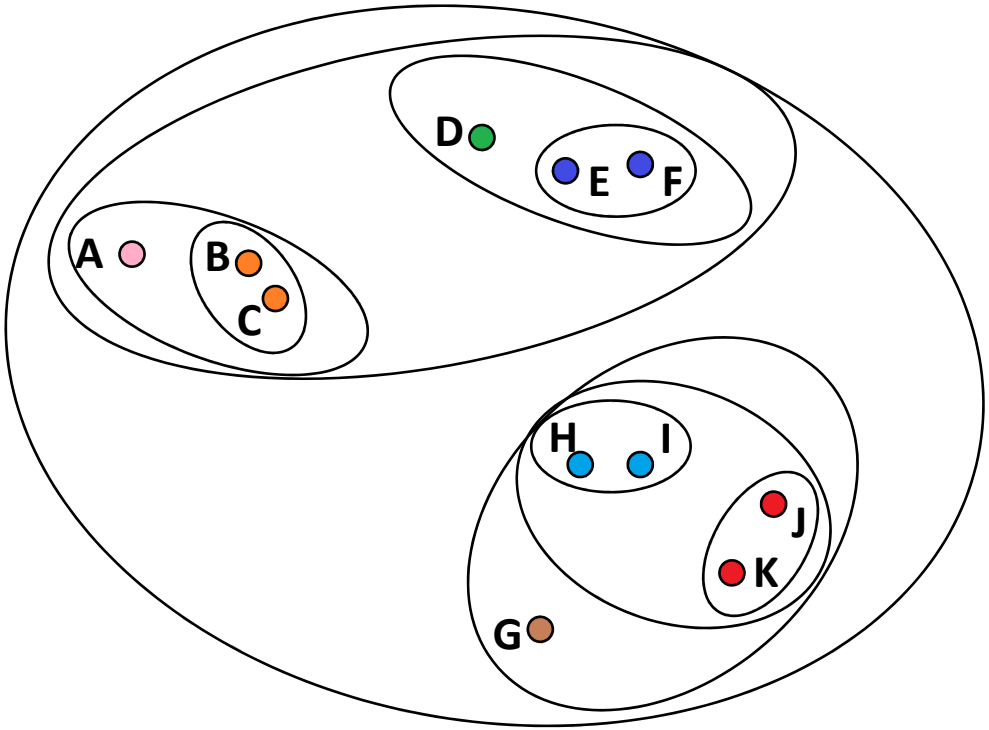
1. Krok			Kolik shluků chceme definovat? Například 4	Minimum spanning tree, Prim network
2. Krok				
X. Krok	Atd.	Atd.	Výpočet ukončen	Výpočet ukončen

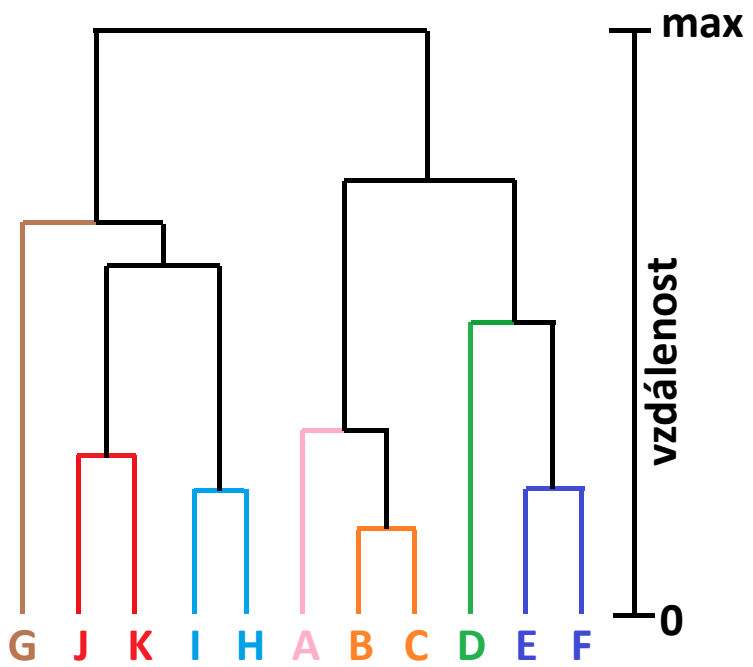
Pojmenujte shlukovací algoritmus I



http://portal.matematickabiologie.cz/

Hierarchické aglomerativní algoritmy

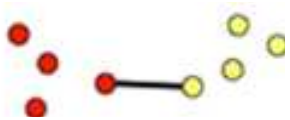




Shlukovací algoritmy

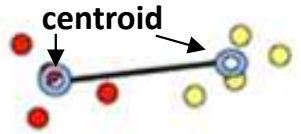
1) Metoda nejbližšího souseda („single linkage“)

- spojení na základě nejmenší minimální vzdálenosti dvou objektů



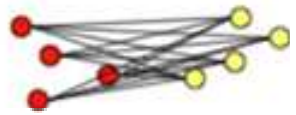
2) Metoda středospojná/centroidní („centroids“)

- spojení na základě minimální vzdálenosti centroidů (= průměrů) shluků



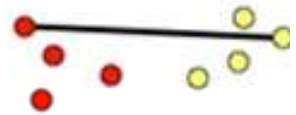
3) Metoda průměrné vzdálenosti („average linkage“)

- spojení na základě minimální průměrné vzdálenosti všech párů objektů dvou shluků



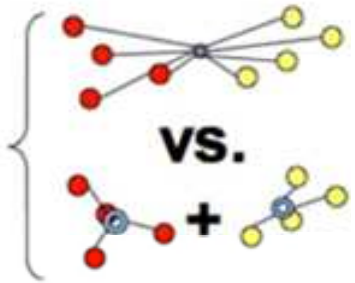
4) Metoda nejvzdálenějšího souseda („complete linkage“)

- spojení na základě nejmenší maximální vzdálenosti dvou objektů



5) Wardova metoda („Ward’s method“)

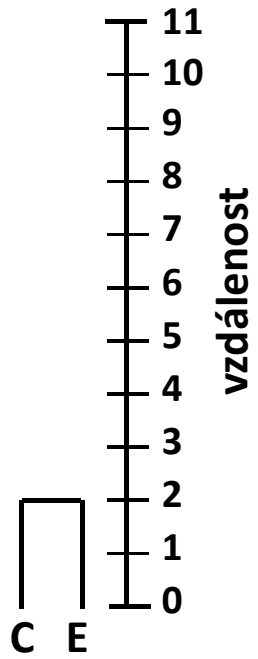
- shluky jsou vytvářeny tak, aby nově vzniklý shluk přispíval co nejméně k sumě čtverců vzdáleností objektů od centroidů jejich shluků
- vstupem je čtverec Euklidovy vzdálenosti



Úkol č. 1

- Na základě asociační matice sestrojte dendrogram pomocí algoritmu nejvzdálenějšího souseda:
  1) Jaká je minimální vzdálenost dvou objektů?
  2) Vykreslete spojení objektů v dendrogramu a přepočítejte asociační matici.

1. krok



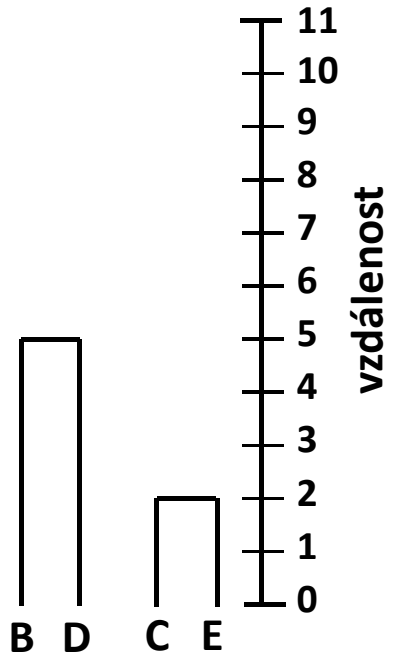
2. krok

	A	B	D	C+E
A	0			
B	9	0		
D	6	5	0	
C+E	11	10	9	0

Úkol č. 1

- Na základě asociační matice sestrojte dendrogram pomocí algoritmu nejvzdálenějšího souseda
  1) Jaká je minimální vzdálenost dvou objektů?
  2) Vykreslete spojení objektů v dendrogramu a přepočítejte asociační matici.

2. krok



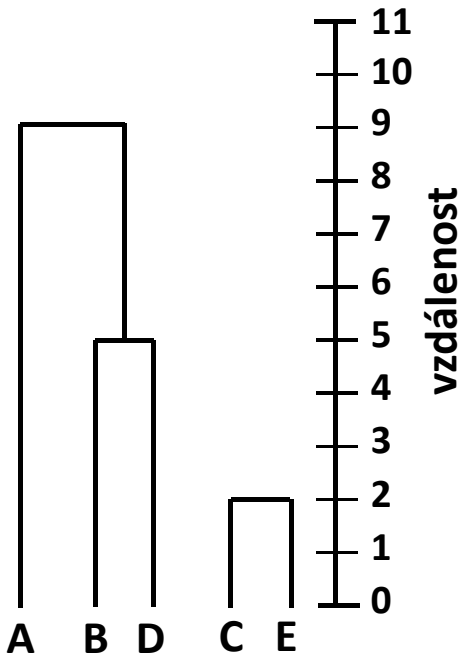
3. krok

	A	B+D	C+E
A	0		
B+D	9	0	
C+E	11	10	0

Úkol č. 1

- Na základě asociační matice sestrojte dendrogram pomocí algoritmu nejvzdálenějšího souseda
  1) Jaká je minimální vzdálenost dvou objektů?
  2) Vykreslete spojení objektů v dendrogramu a přepočítejte asociační matici.

3. krok



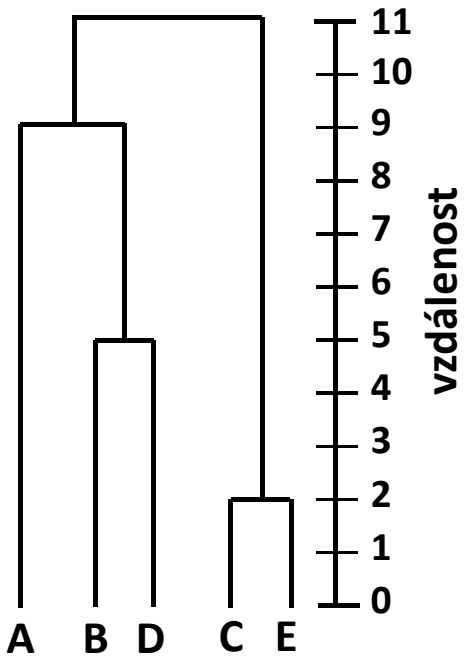
4. krok

	A+B+D	C+E
A+B+D	0	
C+E	11	0

Úkol č. 1

- Na základě asociační matice sestrojte dendrogram pomocí algoritmu nejvzdálenějšího souseda
  1) Jaká je minimální vzdálenost dvou objektů?
  2) Vykreslete spojení objektů v dendrogramu a přepočítejte asociační matici.

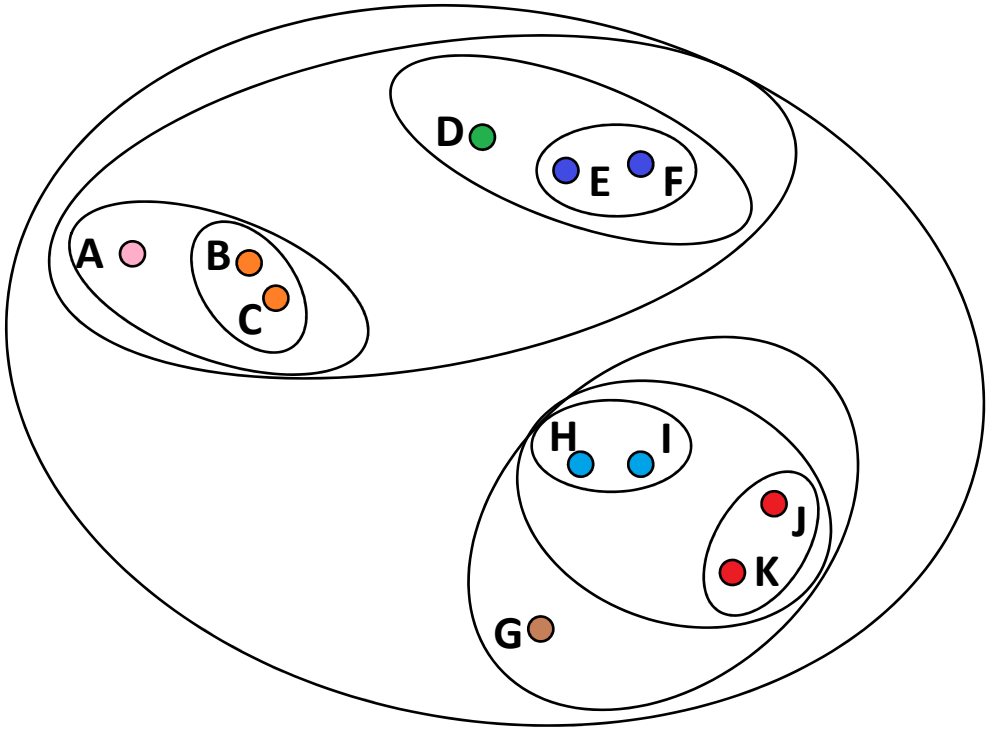
4. krok

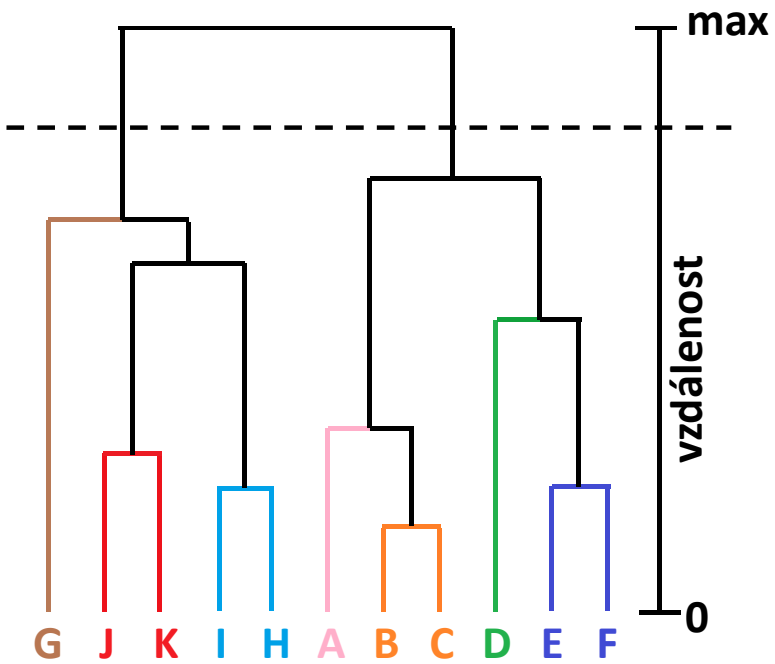


Všechny objekty jsou spojeny do jednoho shluku → již není co spojovat.

Shluková analýza – rozhodovací proces

1) Výpočet **asociační matice** (pozor na správný výběr metriky vzdálenosti / podobnosti).
2) Výběr shlukovacího **algoritmu**.
3) Volba **počtu shluků**.



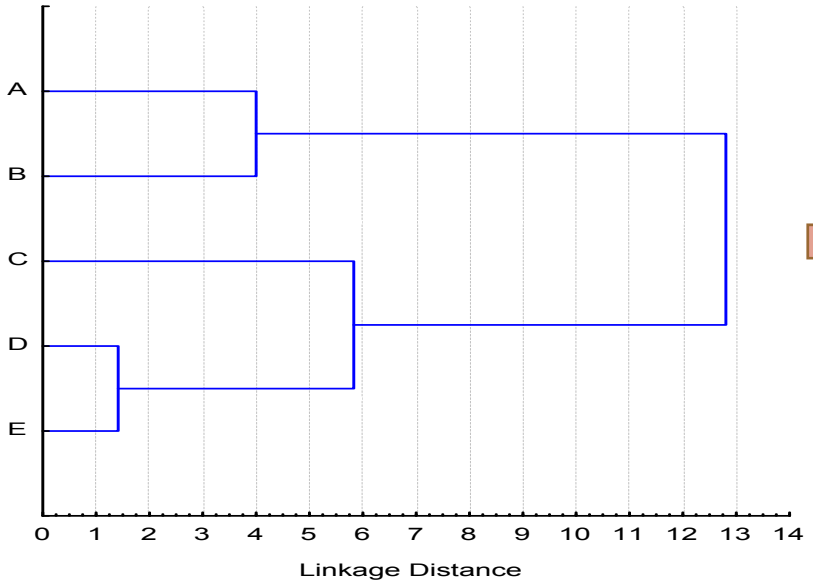


Výběr vhodného algoritmu

Kofenetická matice

- Matice dimenze n x n (n = počet objektů) popisující vzdálenost, kdy byly objekty poprvé spojeny do jednoho shluku.
- Hodnoty kofenetické matice závisí na typu algoritmu shlukování.

Dendrogram



Kofenetická matice

	A	B	C	D	E
A	0	4.0	12.7	12.7	12.7
B		0	12.7	12.7	12.7
C			0	5.7	5.7
D				0	1.4
E					0

Matice je symetrická podél diagonály

Vzdálenost, kdy došlo k prvnímu spojení D+C

Kofenetický index

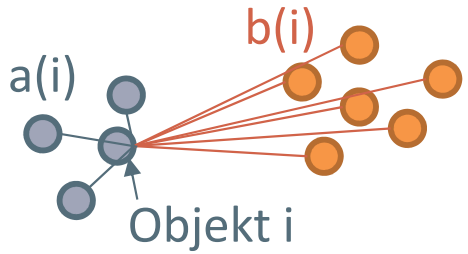
- Korelace kofenetické matice s původní maticí vzdáleností. Čím vyšší korelace, tím lepší algoritmus (algoritmus lépe popisuje realitu).

Určení optimálního počtu shluků I

- **Subjektivní** rozhodování podle:
  1) počtu objektů ve shluku,
  2) vzdálenosti shluků,
  3) na základě charakteru dat.

- **Objektivní** např. pomocí **Silhouette indexu**, kde *a(i)* je průměrná vzdálenost objektu ke všem ostatním objektům v daném shluku a *b(i)* je nejmenší průměrná vzdálenost objektu *i* k objektům ostatních shluků (odkazuje tedy na vzdálenost k sousednímu shluku).

$$s(i) = \frac{b(i) - a(i)}{\max\{b(i), a(i)\}}$$



- Platí: -1 ≤ s(i) ≤ 1.
- s(i) blízké -1 značí špatné zařazení do shluku, blízké 1 správné zařazení do shluku, hodnoty blízké 0 značí, že objekt leží na hranici dvou shluků.
- Počítá se průměr *s(i)* v rámci shluků a do grafu vykreslujeme průměr *s(i)* pro všechny shluky. Počet shluků s nejvyšší hodnotou celkového *s(i)* odkazuje na nejlepší dělení souboru.

Nakonec ale stejně může vyhrát naše subjektivní rozhodnutí ☺

Určení optimálního počtu shluků II

- Objektivní pomocí **Mantelova testu.**
- Hodnotíme korelaci původní asociační matice vzdáleností a asociační matice (vypočítanou pomocí Gowerova indexu), která obsahuje 1, pokud jsou spolu objekty ve shluku a 0 pokud nejsou. R si matici určující současný výskyt ve shluku převede na vzdálenosti – tedy 0 pokud jsou spolu objekty ve shluku a 1 pokud nejsou.

shluky A, B+C, D+E

	A	B	C	D	E
A	1	0	0	0	0
B	0	1	1	0	0
C	0	1	1	0	0
D	0	0	0	1	1
E	0	0	0	1	1

matice vzdáleností

	A	B	C	D	E
A	0	1	1	1	1
B	1	0	0	1	1
C	1	0	0	1	1
D	1	1	1	0	0
E	1	1	1	0	0

vs.

asociační matice

	A	B	C	D	E
A	0	5.0	6.2	11.8	11.7
B	5.0	0	3.5	11.0	9.3
C	6.2	3.5	0	4.0	4.8
D	11.8	11.0	4.0	0	2.4
E	11.7	9.3	4.8	2.4	0

- **Kladná korelace (nízká vzdálenost → objekty jsou spolu ve shluku) nám říká, že objekty sobě podobné leží spolu ve shluku.**
- Počet shluků s nejvyšší hodnotou korelace odkazuje na nejlepší dělení souboru.

Úkol č. 1

- Na základě asociační matice sestrojte dendrogram pomocí algoritmu nejvzdálenějšího souseda.
  1) Jaká je minimální vzdálenost dvou objektů?
  2) Vykreslete spojení objektů v dendrogramu a přepočítejte asociační matici.

	A	B	C	D	E
A	0		*Matice je symetrická podél*		
B	9	0			*diagonály*
C	3	7	0		
D	6	5	9	0	
E	11	10	2	8	0

Funkce v R – shluková analýza

`cluster<-hclust(dist(data), method='single')`= provede shlukovou analýzu

`plot(cluster)`= vykreslí dendrogram

`cutree(cluster,k=3)`= klasifikuje objekty do 3 skupin podle vzdáleností v dendrogramu

`cutree(cluster,h=3)`= klasifikuje objekty do skupin na vzdálenosti 3 v dendrogramu