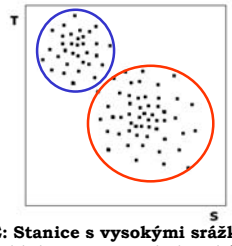
Statistické metody a zpracování dat

Shluková analýza

Petr Dobrovolný

Ilustrativní případ pro m=2

Klimatické poměry n stanic jsou charakterizovány dvěma proměnnými (m=2): Průměrnou roční teplotou vzduchu (T) a ročním úhrnem srážek (S)



INTERPRETACE: Stanice s vysokými srážkami a nízkými teplotami tvoří shluk stanic vysokohorských, stanice s nízkými úhrny srážek a vysokými teplotami tvoří shluk stanic níže položených. Ve většině případů není vymezení shluků takto triviální.

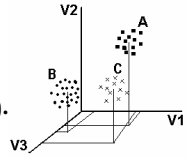
Shluková analýza (Cluster analysis)

Je to skupina metod, jejichž cílem je rozdělení souboru jednotek na několik navzájem vylučujících se relativně stejnorodých podmnožin (shluků = clusters).

Rozdělení jednotek je provedeno tak, aby jednotky patřící do téhož shluku si byly co nejvíce „podobné“, zatímco jednotky pocházející z různých shluků by měly být co nejvíce odlišné.

Charakteristika metody I.

Shluková analýza je vícerozměrnou metodou. K charakterizování jednotek, kterých je obecně *n* využívá většího počtu znaků (*m*>=*2*).



Jednotky představují body v n-rozměrném prostoru, jehož osy tvoří hodnoty jednotlivých znaků (v1, v2, v3).

V takto definovaném prostoru tvoří jednotky s podobnými hodnotami znaků PŘIROZENÉ shluky.

Jednotlivé metody shlukové analýzy řeší problém definice a výpočtu „podobnosti“ či „odlišnosti“ jednotek a jejich PŘÍSLUŠNOST k určitým shlukům.

Charakteristika metody II.

Shluková analýza nesnižuje počet proměnných (jako např. faktorová či komponentní analýza).

Jde jí o shrnutí jednotek do skupin, jejichž počet může nabývat hodnot od 1 do n, kde n je počet výchozích jednotek.

Význam má shlukování pro počet shluků výrazně menší než n. Shlukování může mít vlastnosti hierarchického spojování objektů (skladebnost tříd).

Je-li soubor jednotek postupně pospojován do menšího počtu shluků, jednotky v jednotlivých shlucích jsou si méně „podobné“ a naopak.

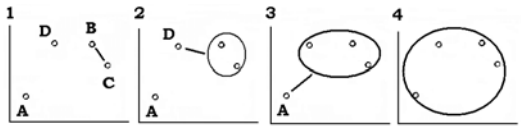
Charakteristika metody III.

Analogicky jako v případě faktorové či komponentní analýzy můžeme spojovat (shlukovat) sloupce (proměnné) a nebo řádky (případy) vstupní matice.

Výsledek shlukové analýzy závisí především na těchto parametrech:

- **na zvolených znacích a na jejich počtu**
- **na zvolené míře „podobnosti“ jednotek**
- **na způsobu shlukování**

Princip shlukování a míry vzdálenosti

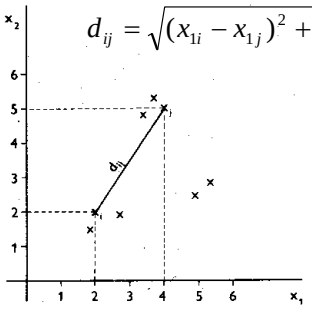


Kritériem víceznakové podobnosti ve shlukové analýze je VZDÁLENOST.

Čím blíže se nacházejí body v m-rozměrném prostoru, tím jsou si podobnější. Nulová vzdálenost znamená identitu – tedy maximální podobnost.

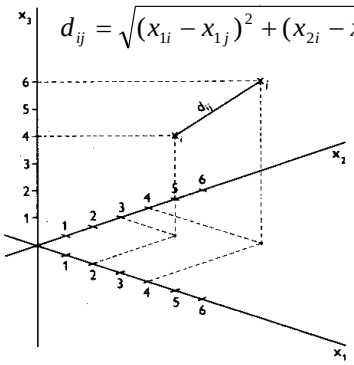
Eukleidovská vzdálenost ve 2D

$$d_{ij} = \sqrt{(x_{1i} - x_{1j})^2 + (x_{2i} - x_{2j})^2}$$



Eukleidovská vzdálenost ve 3D

$$d_{ij} = \sqrt{(x_{1i} - x_{1j})^2 + (x_{2i} - x_{2j})^2 + (x_{3i} - x_{3j})^2}$$



Vzdálenost v m- rozměrném prostoru

Pomocí vlastností eukleidovského metrického prostoru lze tento typ vzdálenosti bodů definovat obecně pro m-rozměrný prostor:

$$d_{ij} = \sqrt{\sum_{k=1}^{m} (x_{ki} - x_{kj})^2}$$

Eukleidovská vzdálenost předpokládá ortogonalitu os definovaného prostoru – to znamená vzájemnou nezávislost použitých znaků.

Jiné typy měr vzdálenosti

Hammingova vzdálenost (městská metrika, Manhattan distance)

$$d_{ij} = \sum_{k=1}^{m} \left| x_{ki} - x_{kj} \right|$$

Jiné typy měr vzdálenosti

Čebyševova vzdálenost – je definována jako maximální hodnota z absolutního rozdílu souřadnic objektů. Je vhodná v případě, kdy dva objekty považujeme za odlišné, jestliže se významně odlišují alespoň v jenom rozměru.

$$d_{ij} = \max \left| x_{ki} - x_{kj} \right|$$

Předpoklady použití shlukové analýzy

1. **Předpoklad vzájemné nezávislosti (nekorelovanosti) proměnných**
2. **Předpoklad nezávislosti na jednotkách měření**
3. **Předpoklad stejné významnosti uvažovaných proměnných**

ad 1) lze zajistit použitím výsledků faktorové či komponentní analýzy

ad 2) lze zajistit standardizací vstupních dat

ad 3) viz. dále

Předpoklady použití shlukové analýzy

Předpoklad stejné významnosti uvažovaných proměnných - řeší se přidáním vah do vzorců pro výpočet vzdáleností.

Váhy slouží ke zdůraznění rozdílů mezi znaky důležitými a k potlačení rozdílů mezi znaky málo důležitými.

Vztah pro výpočet vážených vzdáleností:

$$d_{ij} = \sqrt{\sum_{k=1}^{m} (x_{ki} - x_{kj})^2 \cdot v_k}$$

kde v_k je váha příslušející znaku k.

Algoritmus výpočtu shlukové analýzy

Pro splnění prvních dvou výše uvedených podmínek vychází vlastní shlukování často ne z původních m proměnných ale z tzv. komponentních skóre získaných metodou analýzy hlavních komponent.

Algoritmus výpočtu obsahuje dva základní kroky:

1. **analýzu vzdáleností**
2. **vlastní shlukování**

Ilustrativní příklad - vstupní datový soubor

Tzv. komponentní skóre získaná metodou analýzy hlavních komponent.

První čtyři interpretované hlavní komponenty popisující strukturu zaměstnanosti v 10-ti pražských obvodech (viz. Heřmanová, 1991)

Data: CLU_P1* (4x krát 10!)

	1 SCI	2 SCII	3 SCIII	4 SCVI
P1	7,595	-3,509	0,4	-0,693
P2	3,866	-2,536	-0,717	-0,426
P3	-2,08	-1,203	-2,138	1,894
P4	0,36	2,616	-1,593	-0,878
P5	-5,037	-1,154	2,777	-1,01
P6	10,016	5,089	0,16	0,727
P7	0,368	-1,942	-0,393	0,403
P8	-2,691	1,015	-1,33	0,15
P9	-10,649	0,66	2,703	-0,365
P10	-1,7353	0,964	0,13	0,193

Komponentní skóre poskytují míru vztahu mezi každým pozorováním (případem) a novými komponentami. Jsou důležitá pro interpretaci výsledků v geografii při analýze prostorových struktur. Ukazují do jaké míry je konkrétní pozorování zastoupeno v nových proměnných (komponentách).

Analýza vzdáleností

Spočívá ve výpočtu zvoleného typu vzdálenosti mezi všemi jednotkami a v jejich sestavení do symetrické čtvercové matice, která má na diagonále nuly (tj. maximální podobnost).

Matice vzdáleností

Obvod Prahy	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	0	4,01	10,58	9,68	13,06	9,05	7,51	11,39	18,85	10,38
2	4,01	0	6,67	6,31	9,68	9,90	3,66	7,50	15,25	6,69
3	10,58	6,67	0	5,34	6,43	13,88	3,44	3,00	10,27	3,58
4	9,68	6,31	5,34	0	7,90	10,25	4,88	3,60	11,99	3,35
5	13,06	9,68	6,43	7,90	0	16,60	6,47	5,33	5,93	4,88
6	9,05	9,90	13,88	10,25	16,60	0	11,96	13,44	21,32	12,46
7	7,51	3,66	3,44	4,88	6,47	11,96	0	4,36	11,76	3,63
8	11,39	7,50	3,00	3,60	5,33	13,44	4,36	0	8,94	1,75
9	18,85	15,25	10,27	11,99	5,93	21,32	11,76	8,94	0	9,30
10	10,38	6,69	3,58	3,35	4,88	12,46	3,63	1,75	9,30	0
$\sum d_{ij}$	94,51	69,68	63,18	63,31	76,29	118,85	57,67	59,32	113,61	56,03

Vlastní postup shlukování I.

1. **Zvolení způsobu shlukování. Z řady variant spojování (viz. dále) je zde použita metoda průměrné vzdálenosti.**
2. **V matici vzdáleností nalezneme minimální prvek $\min\{d_{ij}\}$ a matici vzdáleností typu [n,n] redukujeme na typ [n-1,n-1].**
3. **Jednotky, kterým přísluší minimální hodnota vzdálenosti si jsou nejpodobnější.**
4. **Sloučíme odpovídající si jednotky do prvního shluku.**
5. **V dalších krocích se mohou slučovat jednotky se shlukem či dva shluky.**

Vlastní postup shlukování II.

6. **Vypočtou se nové vzdálenosti mezi vzniklým shlukem a zbylými jednotkami (či shluky). Ty se vypočtou v našem případě jako aritmetický průměr vzdáleností mezi jednotkami, které patří do nově agregovaného shluku a zbylými jednotkami.**
7. **Vzdálenosti, kterých se slučování netýká jsou pouze přepsány do nové matice vzdáleností.**
8. **V nové matici se opět hledá prvek** $\min\{d_{ij}\}$
9. **Analyzujeme-li n jednotek, v procesu shlukování je n-1 kroků. V posledním kroku dochází ke sloučení všech jednotek do jednoho shluku.**

1. krok - nalezení minimálního prvku v původní matici

Obvod Prahy	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	0	4,01	10,58	9,68	13,06	9,05	7,51	11,39	18,85	10,38
2	4,01	0	6,67	6,31	9,68	9,90	3,66	7,50	15,25	6,69
3	10,58	6,67	0	5,34	6,43	13,88	3,44	3,00	10,27	3,58
4	9,68	6,31	5,34	0	7,90	10,25	4,88	3,60	11,99	3,35
5	13,06	9,68	6,43	7,90	0	16,60	6,47	5,33	5,93	4,88
6	9,05	9,90	13,88	10,25	16,60	0	11,96	13,44	21,32	12,46
7	7,51	3,66	3,44	4,88	6,47	11,96	0	4,36	11,76	3,63
8	11,39	7,50	3,00	3,60	5,33	13,44	4,36	0	8,94	1,75
9	18,85	15,25	10,27	11,99	5,93	21,32	11,76	8,94	0	9,30
10	10,38	6,69	3,58	3,35	4,88	12,46	3,63	1,75	9,30	0

Ve výchozí matici je minimální vzdálenost mezi prvky 8 a 10:

$d_{8,10} = 1{,}75$.

Tyto dvě jednotky se sloučí.

Vypočítáme vzdálenosti tohoto nového shluku k stávajícím jednotkám (příklad pro pro jednotku 1):

$$d_{(8+10,1)} = \frac{d_{(8,1)} + d_{(10,1)}}{2} = \frac{11{,}39 + 10{,}38}{2} = 10{,}88$$

Analogicky se vypočtou nové vzdálenosti mezi novým shlukem a zbylými jednotkami, tedy $d_{(8+10,2)}$, $d_{(8+10,3)}$ ..... $d_{(8+10,9)}$

Výsledkem je nová matice vzdáleností.

2. krok - nová matice vzdáleností

	8+10	1	2	3	4	5	6	7	9
8+10	(1,75)	10,88	7,10	3,29	3,48	5,11	12,95	4,00	9,12
1		0	4,01	10,58	9,68	13,06	9,05	7,51	18,85
2			0	6,67	6,31	9,68	9,90	3,66	15,25
3				0	5,34	6,43	13,88	3,44	10,27
4					0	7,90	10,25	4,88	11,99
5						0	16,60	6,47	5,93
6							0	11,96	21,32
7								0	11,76
9									0

Hodnota v závorce vyjadřuje vzdálenost, při které dochází ke sloučení a využívá se ke konstrukci tzv. dendrogramu (viz. dále).

Opět se najde minimální hodnota a celý výpočet se opakuje tak, jak je naznačeno v dále uvedených maticích vzdáleností ...

3. krok

	8+10+3	1	2	4	5	6	7	9
8+10+3	(2,78)	10,78	6,96	4,10	5,55	13,26	3,81	9,50
1		0	4,01	9,68	13,06	9,05	7,51	18,85
2			0	6,31	9,68	9,90	3,66	15,25
4				0	7,90	10,25	4,88	11,99
5					0	16,60	6,47	5,93
6						0	11,96	21,32
7							0	11,76
9								0

4. krok

	8+10+3	2+7	1	4	5	6	9
8+10+3	(2,78)	5,38	10,78	4,10	5,55	13,26	9,50
2+7		(3,66)	5,76	5,60	8,08	10,93	13,50
1			0	9,68	13,06	9,05	18,85
4				0	7,90	10,25	11,99
5					0	16,60	5,93
6						0	21,32
9							0

5. krok

	8+10+3+4	2+7	1	5	6	9
8+10+3+4	(3,44)	5,44	10,51	6,14	12,51	10,12
2+7		(3,66)	5,76	8,08	10,93	13,50
1			0	13,06	9,05	18,85
5				0	16,60	5,93
6					0	21,32
9						0

6. krok

	8+10+3+4+2+7	1	5	6	9
8+10+3+4+2+7	(4,52)	8,92	6,78	11,98	11,25
1		0	13,06	9,05	18,85
5			0	16,60	5,93
6				0	21,32
9					0

7. krok

	8+10+3+4+2+7	5+9	1	6
8+10+3+4+2+7	(4,52)	9,02	8,92	11,98
5+9		(5,93)	15,96	18,96
1			0	9,05
6				0

8. krok

	8+10+3+4+2+7+1	5+9	6
8+10+3+4+2+7+1	(5,78)	10,01	11,56
5+9		(5,93)	18,96
6			0

9. krok

	8+10+3+4+2+7+1+5+9	6
8+10+3+4+2+7+1+5+9	(7,43)	13,20
6		0

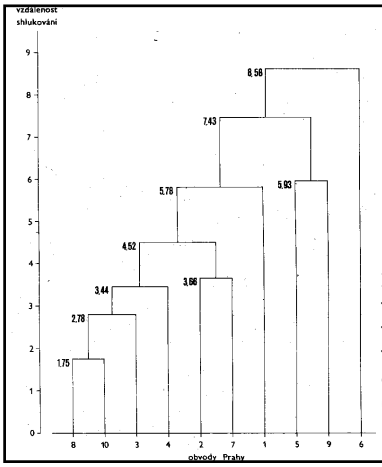
Ukončení shlukování a prezentace jeho průběhu

V posledním kroku dochází ke sloučení všech jednotek do jednoho shluku na vzdálenosti 8,58.

To je průměrná vzdálenost mezi dvěma jednotkami.

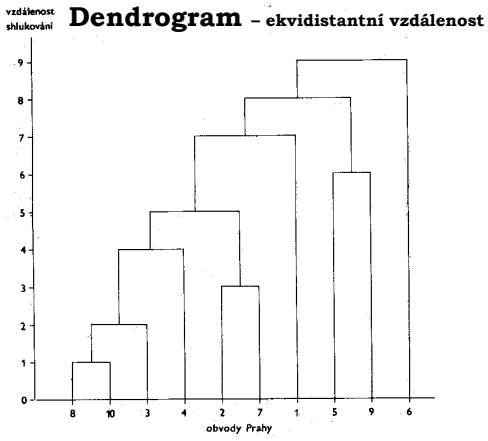
Průběh shlukování se obvykle zaznamenává do tzv. dendrogramů – hierarchicky uspořádaných „stromů“).

Dendrogram



Na svislé ose lze vynášet skutečné vzdálenosti a nebo vzdálenosti ekvidistantní (jednotkové).

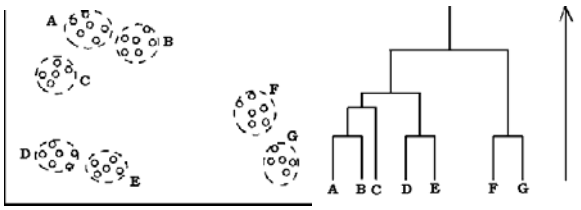
Dendrogram – ekvidistantní vzdálenost



Charakteristiky dendrogramu

Rozdělíme-li dendrogram na jakékoliv úrovni pomyslným řezem, vždy dostaneme homogenní shluky.

Čím později ho rozdělíme, tím méně podobné jednotky jsou spojeny v jednom shluku. Šipka značí pokles míry podobnosti jednotek ve shlucích



Charakteristiky procesu shlukování

- **Koeficient ztráty informace**
- **Index grupování**
- **Graf ztráty informace**

Slouží ke stanovení optimálního rozdělení souboru na skupiny.

Při každém kroku shlukování dochází ke ztrátě informace o výchozím souboru tím, že používáme jistá generalizující vyjádření shlukovaných jednotek (např. průměrná vzdálenost v uvedeném příkladě).

Tedy při rozdělení na *n* jednotek (na počátku shlukování) je ztráta informace nulová, při spojení do jedné jednotky (na konci) je ztráta maximální (100%).

Koeficient ztráty informace

krok shlukování	shlukované jednotky	∑ vzdáleností	kumulované ∑ vzdáleností	% ztráty informace
1	8,10	1,75	1,75	0,452
2	8,10+3	6,58	8,33	2,156
3	8,10,3+4	12,30	20,63	5,340
4	2,7	3,66	24,29	6,288
5	8,10,3,4+2,7	43,48	67,77	17,547
6	8,10,3,4,2,7+1	53,55	121,32	31,413
7	5,9	5,93	127,25	32,949
8	8,10,3,4,2,7,1+5,9	140,12	267,37	69,228
9	8,10,3,4,2,7,1,5,9+6	118,85	386,22	100,000

Koeficient ztráty informace se počítá po každém kroku jako součet vzdáleností právě agregovaných jednotek v původní matici [n,n]. Potom stav shlukování před krokem, kterému přísluší maximální hodnota koeficientu představuje optimální dělení souboru.

Index grupování

Součin hodnot, vyjadřujících počty jednotek v právě agregovaných shlucích. Největší „skok“ v řadě kumulovaných hodnot indexu grupování indikuje okamžik optimálního rozdělení souboru z hlediska zachování relativního maxima informace.

krok shlukování	počet jednotek v agregovaných skupinách	index grupování		
		absolutní	kumulovaný	relativní
1	/1/ /1/	1	1	2,22
2	/1/ /2/	2	3	6,67
3	/1/ /1/	1	4	8,89
4	/1/ /3/	3	7	15,56
5	/2/ /4/	8	15	33,33
6	/1/ /1/	1	16	35,56
7	/1/ /6/	6	22	48,89
8	/2/ /7/	14	36	80,00
9	/1/ /9/	9	45	100,00

Graf ztráty informace

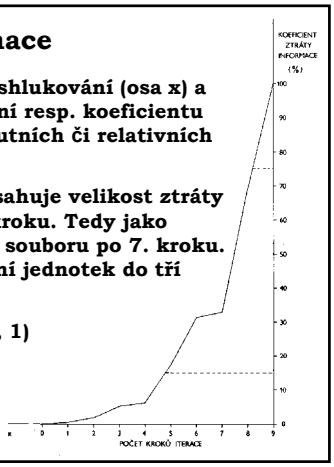
Znázorňuje počet kroků shlukování (osa x) a hodnotu indexu grupování resp. koeficientu ztráty informace v absolutních či relativních hodnotách (osa y).

V uvedeném příkladě dosahuje velikost ztráty informace maxima v 8. kroku. Tedy jako optimální se jeví členění souboru po 7. kroku. Výsledkem je tedy členění jednotek do tří shluků:

1: (8, 10, 3, 4, 2, 7, 1)

2: (5, 9)

3: (6)



Metody (varianty) shlukování

Metoda průměrné vzdálenosti – dva shluky se spojí do jednoho, je-li mezi nimi minimální průměrná vzdálenost

Jednotka se spojí se shlukem má-li k jednotkám, které k němu náležejí nejmenší průměrnou vzdálenost

$$d_{S_hS_k} = \frac{1}{n_h n_k} \sum_{x_i \in S_h} \sum_{x_j \in S_k} d(x_i, x_j)$$

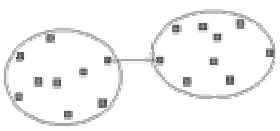
d_{ShSk} – průměrná vzdálenost mezi shluky S_h a S_k

n_h, n_k – počet jednotek ve shluku S_h a S_k

Metoda nejbližšího souseda

Do jednoho shluku jsou spojeny jednotky (resp. shluky) mezi nimiž je minimální vzdálenost mezi jejich nejbližšími jednotkami

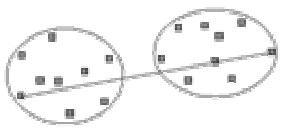
$$d_{S_hS_k} = \min\{d(x_i, x_j)\}$$



Metoda nejvzdálenějšího souseda

Do jednoho shluku jsou spojeny jednotky (resp. shluky) mezi nimiž je minimální vzdálenost mezi jejich nejvzdálenějšími jednotkami.

$$d_{S_hS_k} = \max\{d(x_i, x_j)\}$$



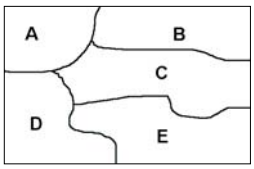
Vymezování homogenních regionů metodou shlukové analýzy

Klasické použití shlukové analýzy umožňuje provádět **TYPOLOGII** – tedy podobné skupiny bez uvažování kritéria sousedství spojovaných jednotek, výsledkem jsou většinou **územně nesouvislé** oblasti.

Tzv. **regionální shlukování** – uvažuje se nejen vzájemná podobnost vlastních znaků popisujících jednotky, ale též jejich vzájemná poloha – jde tedy o shlukování podobných a územně souvislých jednotek. Takovýto přístup potom dovoluje provádět **REGIONALIZACI**.

Regionalizace metodou shlukové analýzy

Informace o poloze jednotek může do shlukování vstupovat v podobě **binární matice sousedství**.

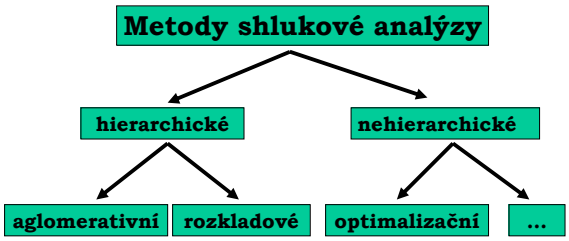


	A	B	C	D	E
A	0	1	1	1	0
B	1	0	1	0	0
C	1	1	0	1	1
D	1	0	1	0	1
E	0	0	1	1	0

Matice obsahuje jedničky resp. nuly podle toho, zda dvě jednotky spolu sousedí (mají společnou hranici) či nikoli.

Vzdálenost jednotek se vypočítává pouze pro ta políčka, která obsahují jedničky. Dále je postup shlukování stejný.

Rozdělení metod shlukové analýzy



Hierarchické metody shlukové analýzy

Výše uvedený text prezentuje postupy aglomerativní hierarchické (jednotky se postupně spojují do shluků

Hierarchické metody rozkladové naopak postupně dělí vstupní soubor do 2, 3, 4, ... skupin.

Nehierarchické metody shlukové analýzy (optimalizační)

Hledají takový rozklad množiny objektů, který je optimální podle vhodně zvoleného kritéria.

Mohou být založeny na předem daném (přibližném) počtu shluků a jejich postupném „zlepšování“ převodem vybraných jednotek mezi shluky, na eventuelním spojování či rozdělování shluků.

Výpočty využívají iteračního počtu.

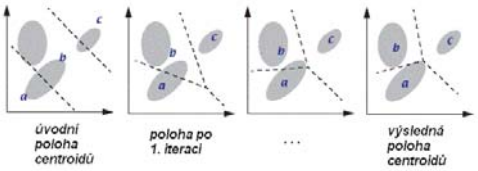
Shluková analýza metodou k- průměrů (k-means) jako příklad nehierarchického třídění

Algoritmus předpokládá, že dopředu známe počet shluků, do kterého si přejeme rozdělit vstupní soubor.

Výpočet začne s k náhodnými shluky. Jednotky se poté postupně přesouvají mezi jednotlivými shluky a to tak, aby:

1) **minimalizovaly variabilitu mezi jednotkami uvnitř jednoho shluku**
2) **Maximalizovaly variabilitu mezi jednotlivými shluky**

Postup shlukování metodou k- průměrů



1. Definování požadovaného počtu výsledných shluků.
2. Určení počáteční polohy středu shluku (centroidu) pro každý shluk (a, b, c).
3. Postupné přiřazení všech jednotek ke shluku, k němuž mají v analyzovaném prostoru nejblíže.
4. Výpočet nové polohy centroidu pro každý shluk na základě přiřazených jednotek.
5. Opakování kroku 3 a 4 do té doby, dokud se poloha shluku či počet jednotek zařazených do shluku výrazně nemění (tzv. stabilní shluky).