

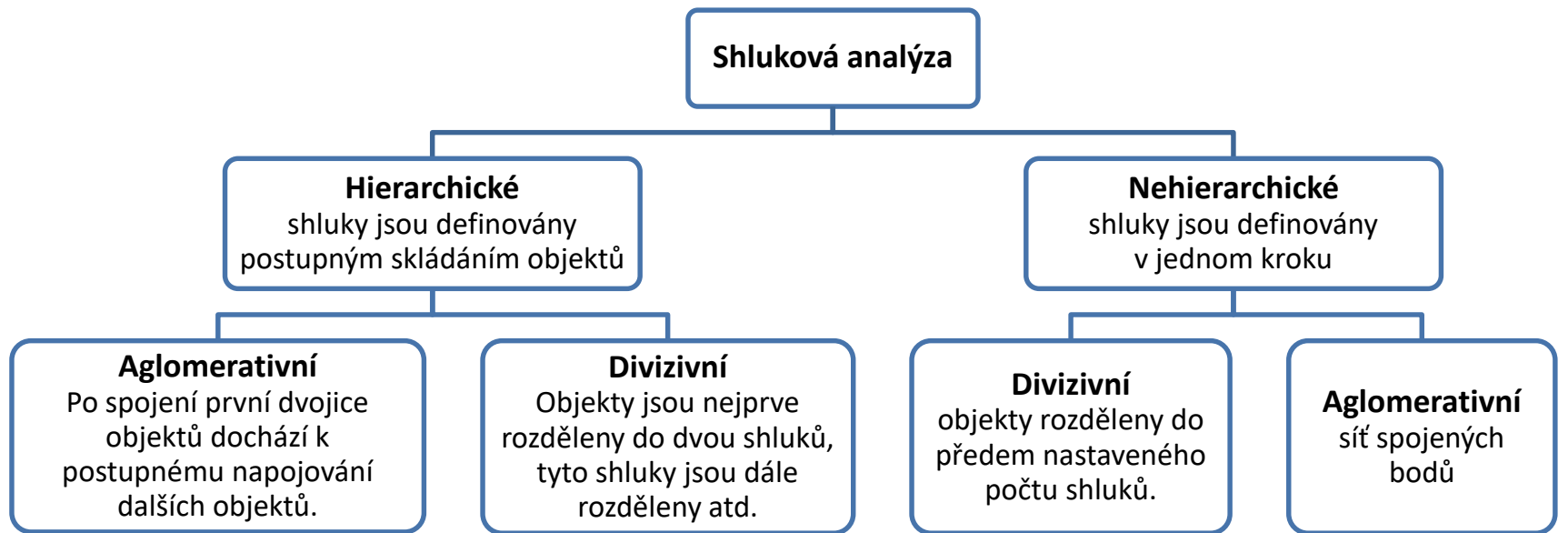
Vícerozměrné metody - cvičení



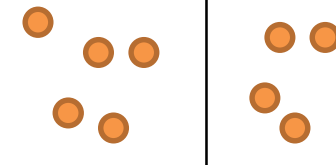
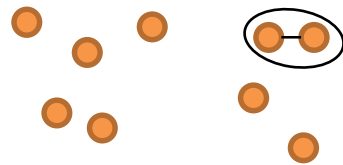
RNDr. Eva Koriťáková, Ph.D.

Podzim 2018

Shluková analýza – typy metod – opakování



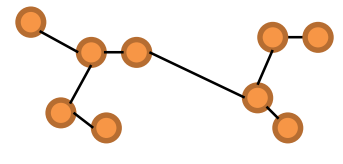
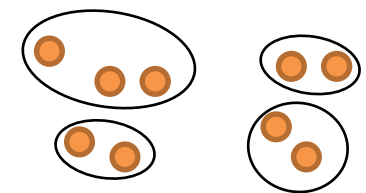
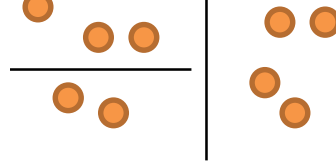
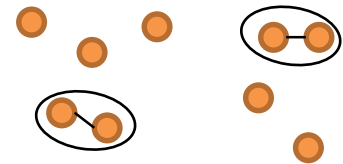
1. Krok



Kolik shluků chceme
definovat? Například 4

Minimum spanning
tree, Prime network

2. Krok



X. Krok

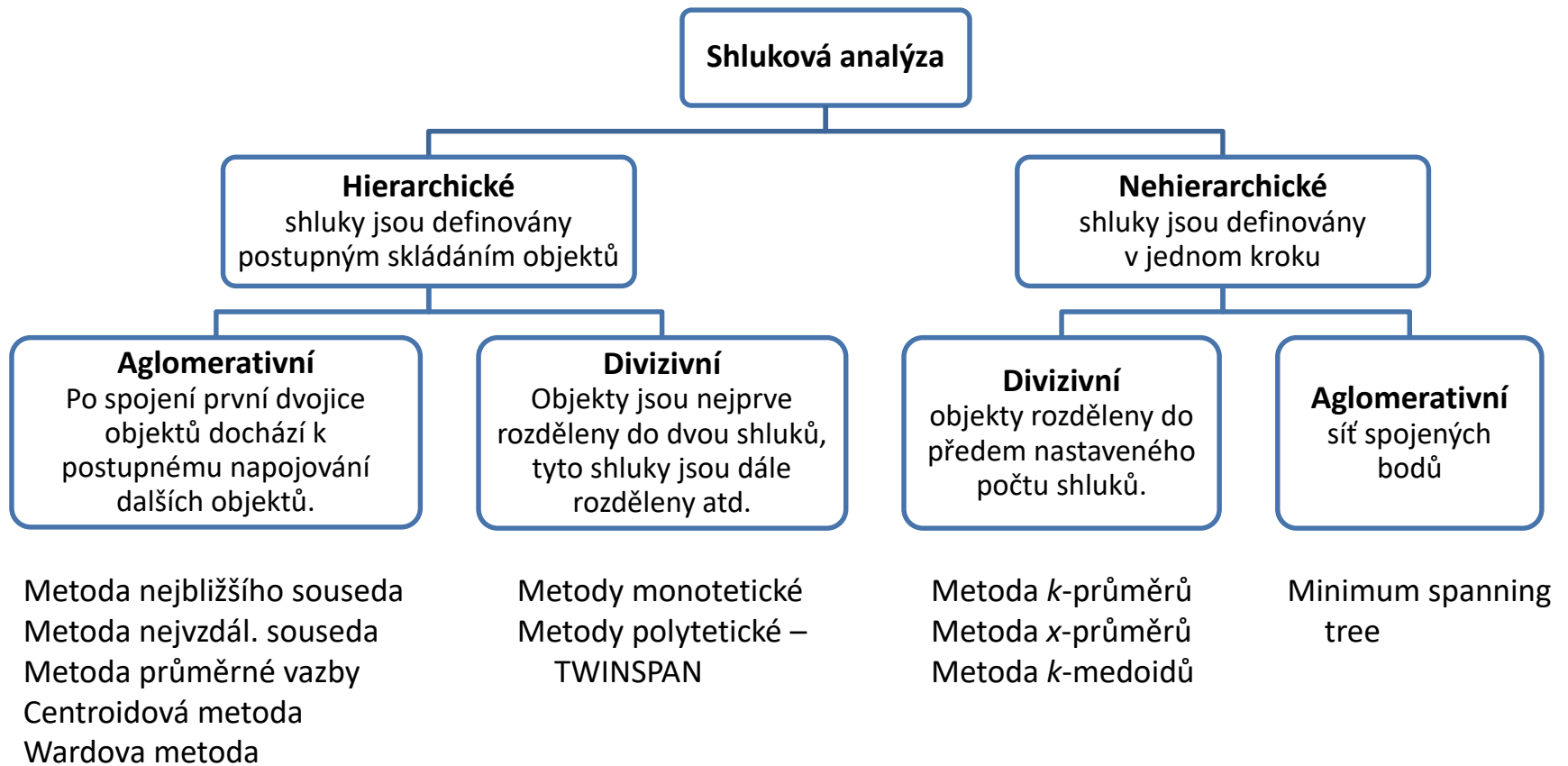
Atd.

Atd.

Výpočet ukončen

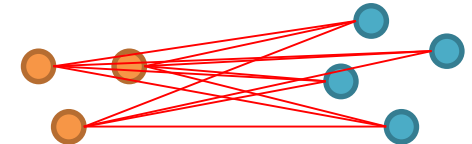
Výpočet ukončen

Shluková analýza – typy metod – opakování



Shlukovací algoritmy hierarchického aglomerativního shlukování

- **Metoda nejbližšího souseda** (jednospojňá metoda, metoda jediné vazby, metoda krátké ruky, *nearest neighbour, simple linkage*) – spojení dle nejmenší vzdálenosti mezi objekty shluků
- **Metoda průměrné vazby** (středospojňá metoda, *average linkage*) – spojení dle průměrné vzdálenosti mezi objekty shluků
 - Nevážená (*unweighted, UPGMA*) – výpočet spojovací vzdálenosti je ovlivněn velikostí spojovaných shluků
 - Vážená (*weighted, WPGMA*) – odstranění vlivu velikosti shluků, shluky bez ohledu na velikost přispívají k výpočtu spojovací vzdálenosti stejnou vahou
- **Centroidová metoda** (centroidní metoda, metoda středospojné vzdálenosti, Gowerova metoda, *centroid method*) – spojení dle vzdálenosti centroidů shluků
 - Nevážená (*unweighted, UPGMC*) – výpočet spojovací vzdálenosti je ovlivněn velikostí spojovaných shluků
 - Vážená (*weighted, WPGMC, mediánová metoda, median method*) – odstranění vlivu velikosti shluků
- **Metoda nejvzdálenějšího souseda** (všespojňá metoda, metoda dlouhé ruky, *furthest neighbour, complete linkage*) – spojení dle největší vzdálenosti mezi objekty shluků



Příklad 1

V experimentu byla u 5 buněčných linií zjišťována kvantita membránových markerů popisujících jejich citlivost k chemoterapii. V přiložené tabulce naleznete změřené hodnoty standardizované na referenční buněčnou linii.

Buněčná linie	Marker 1	Marker 2
A	2	4
B	2	8
C	6	10
D	10	14
E	11	13

Vztahy mezi liniemi jsou vyjádřeny následující asociační maticí:

	A	B	C	D	E
A	0.0	4.0	7.2	12.8	12.7
B	4.0	0.0	4.5	10.0	10.3
C	7.2	4.5	0.0	5.7	5.8
D	12.8	10.0	5.7	0.0	1.4
E	12.7	10.3	5.8	1.4	0.0

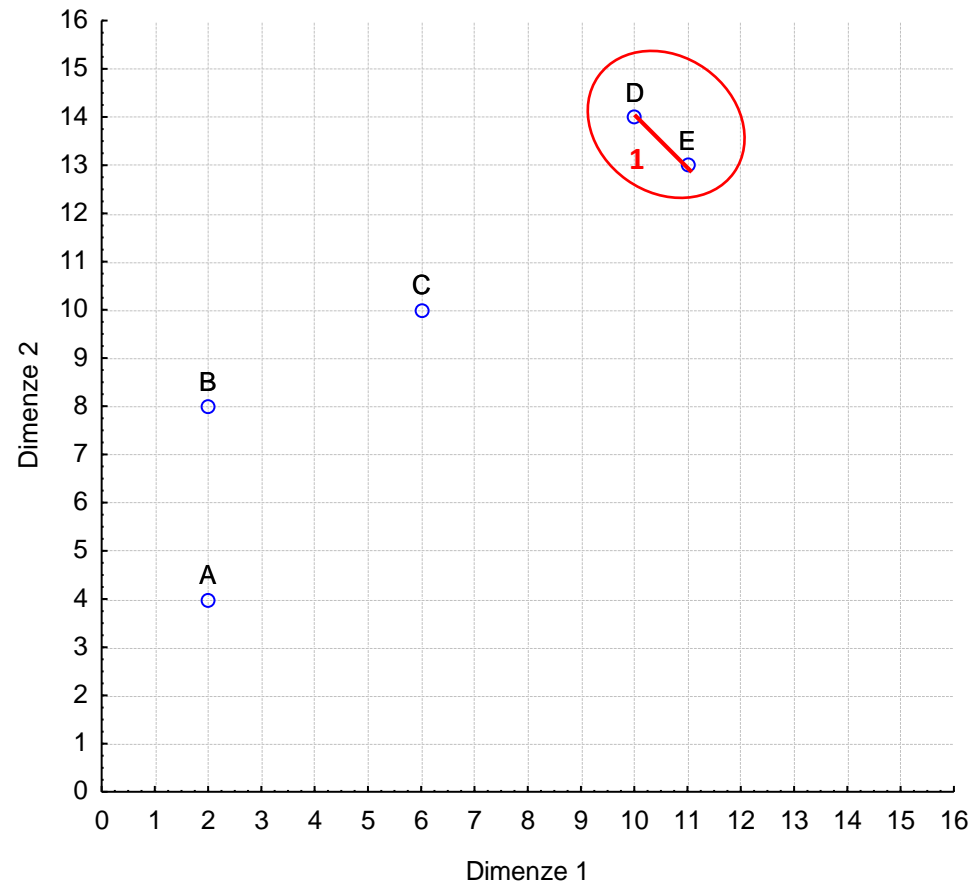
1. Výše uvedená asociační matice vyjadřuje podobnost nebo vzdálenost? A proč?
2. K výpočtu prvků asociační matice byl použit Jaccardův koeficient, Gowerův koeficient, Euklidova metrika nebo Hammingova (manhattanská) metrika?
3. Zdůvodněte vhodnost či nevhodnost použití tohoto koeficientu či metriky v případě těchto dat.
4. Vytvořte dendrogram pomocí algoritmu nejbližšího a nejvzdálenějšího souseda, rozepište jednotlivé kroky výpočtu.

Metoda nejblížešího souseada: 1. krok výpočtu

- Je vypočtena asociační matice

	A	B	C	D	E
A	0.0	4.0	7.2	12.8	12.7
B	4.0	0.0	4.5	10.0	10.3
C	7.2	4.5	0.0	5.7	5.8
D	12.8	10.0	5.7	0.0	1.4
E	12.7	10.3	5.8	1.4	0.0

- Je definován shluk dvou nejblížeších objektů
D-E



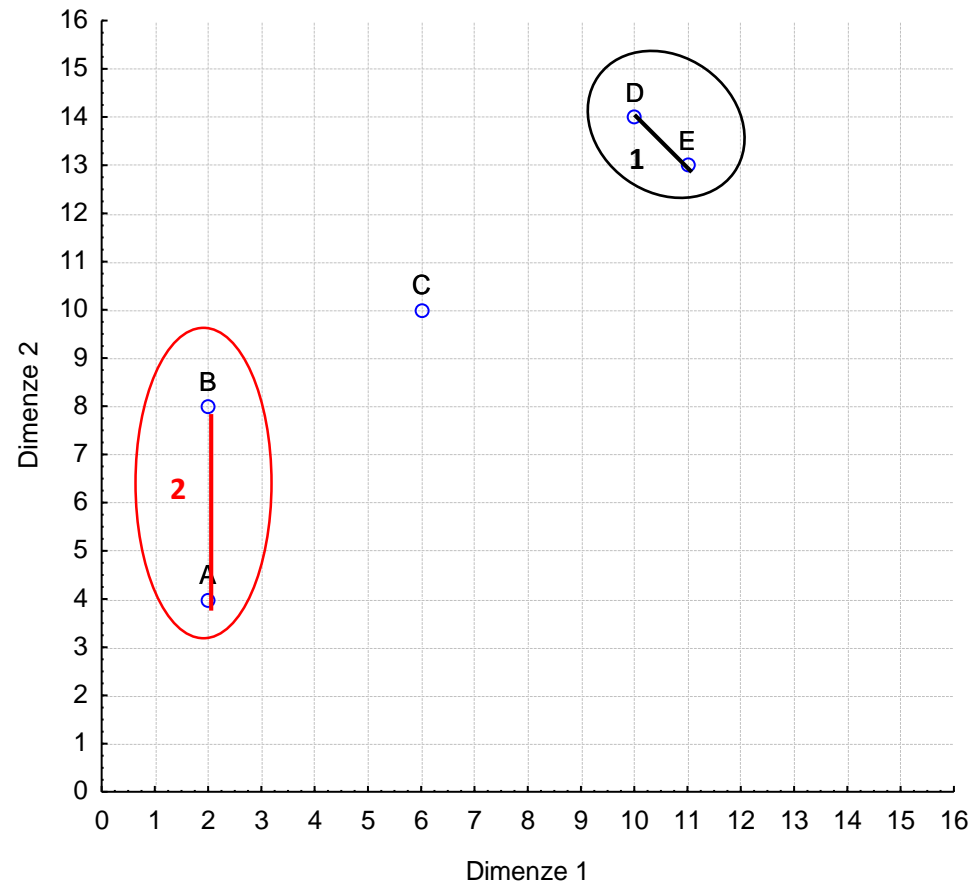
Metoda nejbližšího souseda: 2. krok výpočtu

- Je vypočtena asociační matice, kde objekty D-E již vystupují jako jeden objekt, jehož vzdálenost od ostatních objektů je dána **nejmenší vzdáleností od jeho členů (D, E)**

	A	B	C	D	E
A	0.0	4.0	7.2	12.8	12.7
B	4.0	0.0	4.5	10.0	10.3
C	7.2	4.5	0.0	5.7	5.8
D	12.8	10.0	5.7	0.0	1.4
E	12.7	10.3	5.8	1.4	0.0



	A	B	C	D+E
A	0.0	4.0	7.2	12.7
B	4.0	0.0	4.5	10.0
C	7.2	4.5	0.0	5.7
D+E	12.7	10.0	5.7	0.0



- Je definován shluk dvou nejbližších objektů **A-B**

Metoda nejbližšího souseda: 3. krok výpočtu

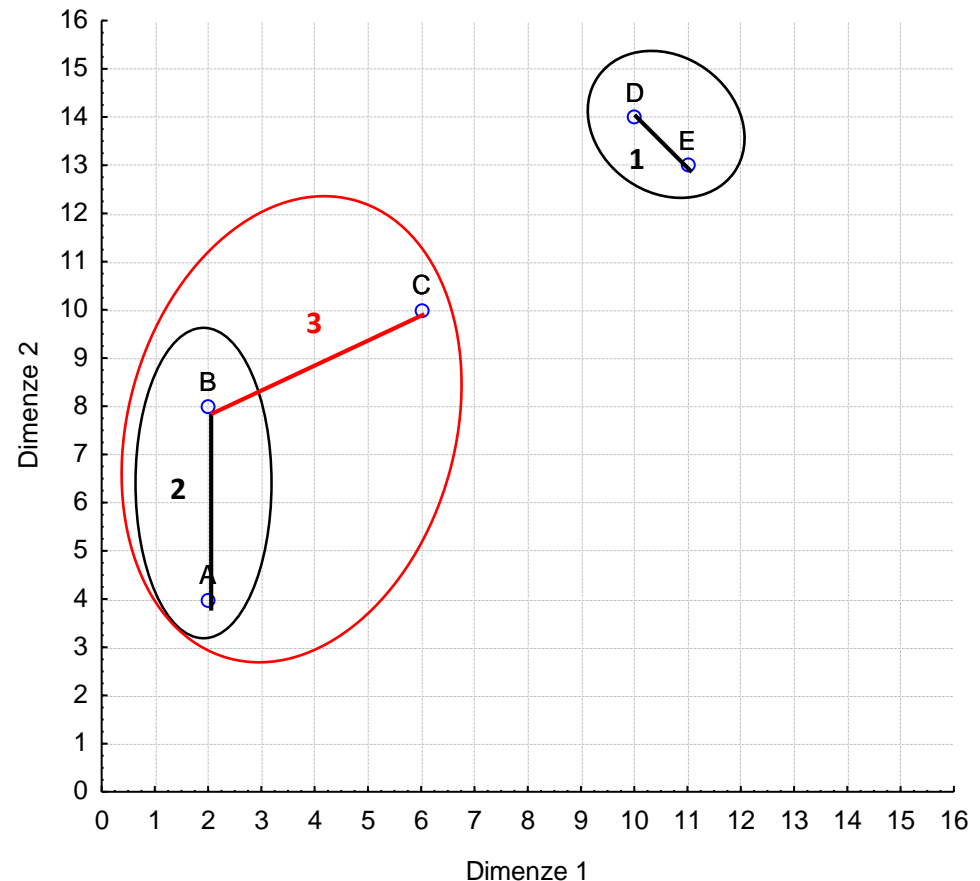
- Je vypočtena asociační matice, kde objekty A-B již vystupují jako jeden objekt, jehož vzdálenost od ostatních objektů je dána **nejmenší vzdáleností od jeho členů (A, B)**

	A	B	C	D+E
A	0.0	4.0	7.2	12.7
B	4.0	0.0	4.5	10.0
C	7.2	4.5	0.0	5.7
D+E	12.7	10.0	5.7	0.0



	A+B	C	D+E
A+B	0.0	4.5	10.0
C	4.5	0.0	5.7
D+E	10.0	5.7	0.0

- Je definován shluk dvou nejbližších objektů (A-B)-C



Metoda nejbližšího souseda: 4. krok výpočtu

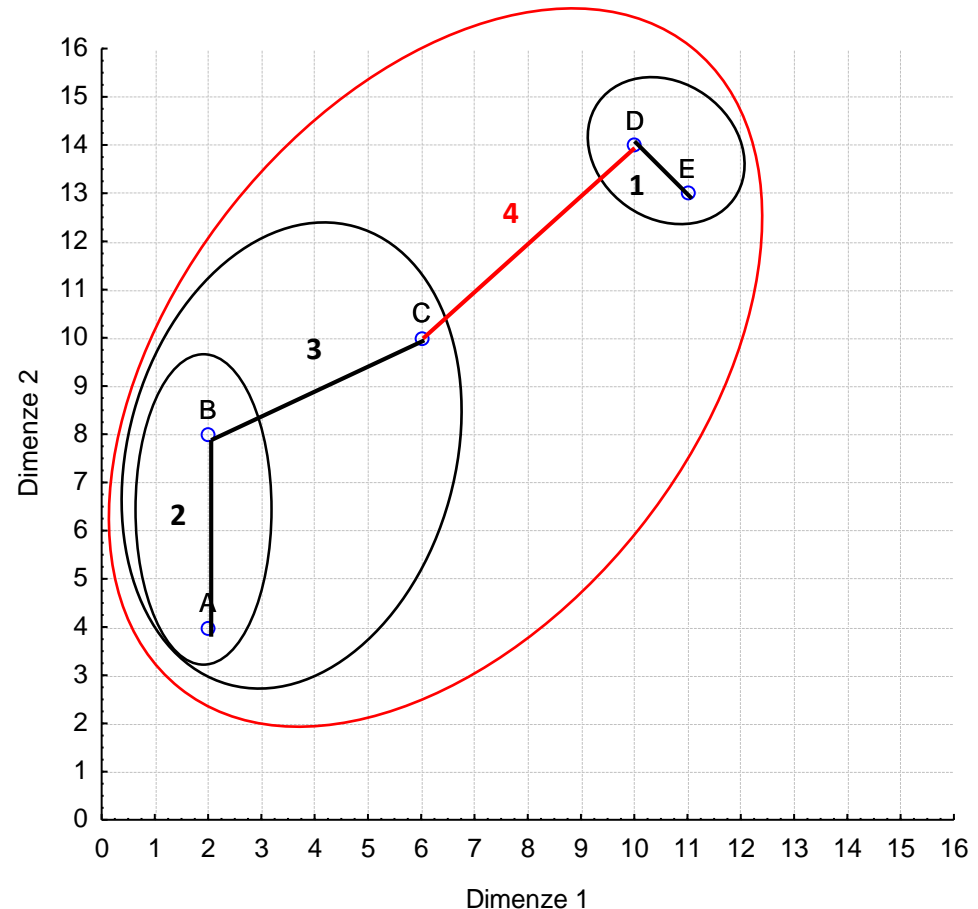
- Je vypočtena asociační matice, kde objekty (A-B)-C již vystupují jako jeden objekt, jehož vzdálenost od ostatních objektů je dána **nejmenší vzdáleností od jeho členů (A, B, C)**

	A+B	C	D+E
A+B	0.0	4.5	10.0
C	4.5	0.0	5.7
D+E	10.0	5.7	0.0



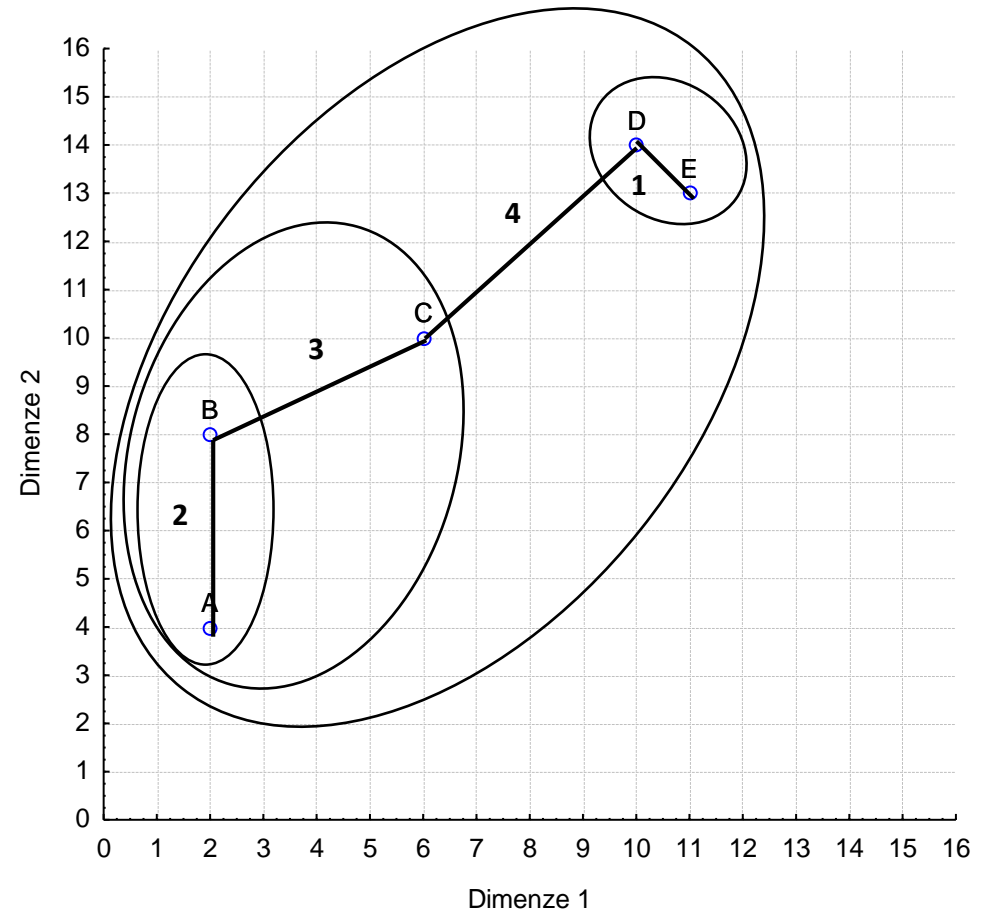
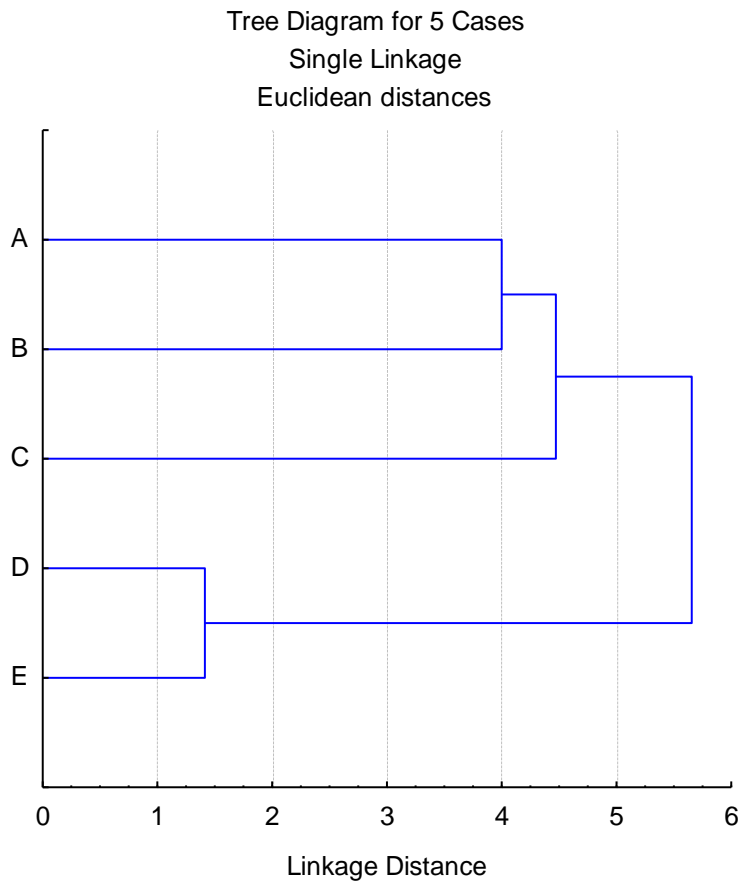
	A+B+C	D+E
A+B+C	0.0	5.7
D+E	5.7	0.0

- Je definován shluk dvou nejbližších objektů **((A-B)-C)-(D-E)**
- Všechny objekty jsou spojeny, algoritmus je ukončen



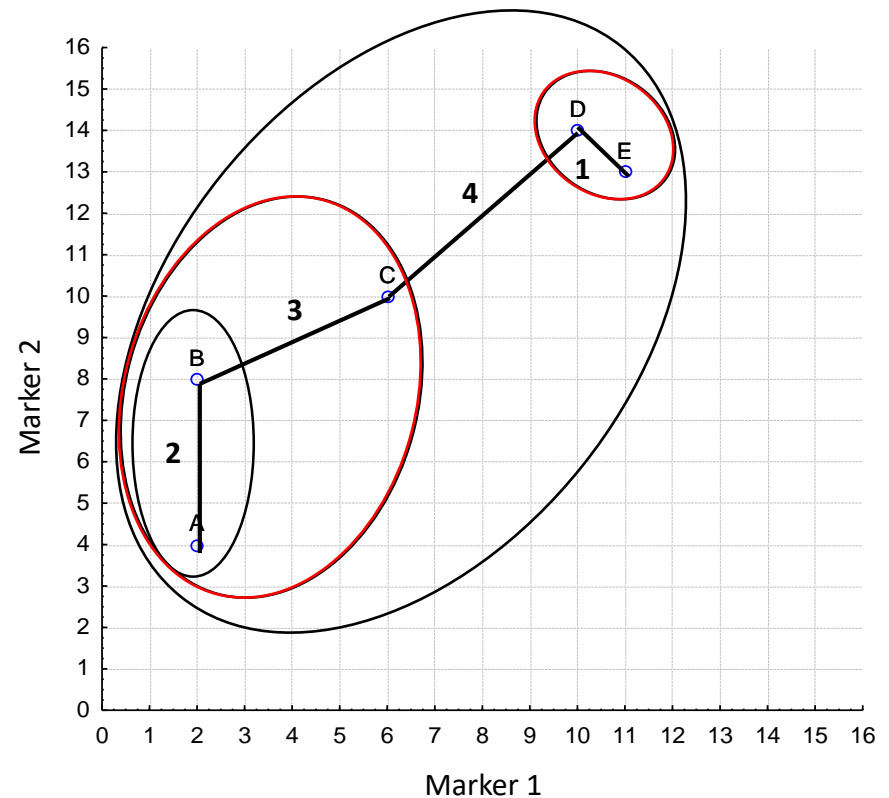
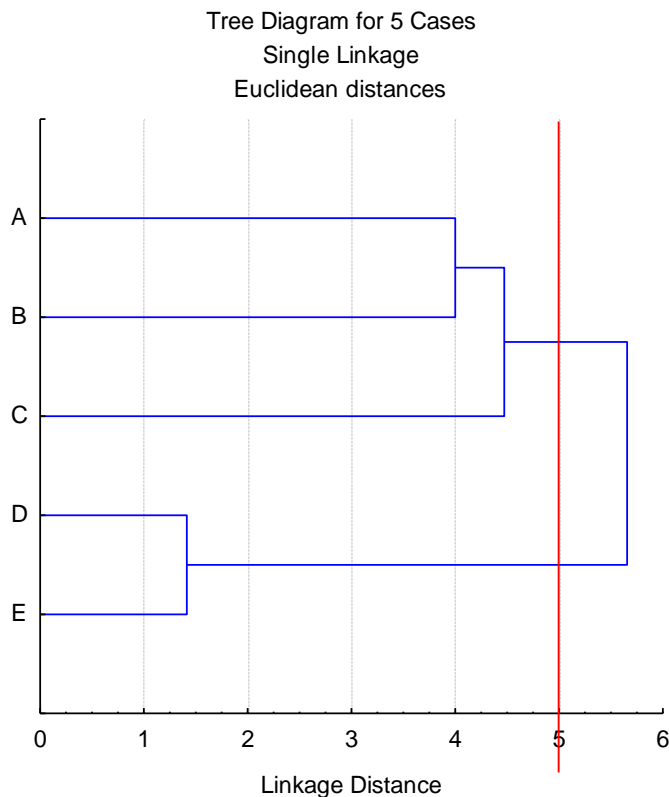
Metoda nejbližšího souseda: výsledek analýzy

- Výsledek analýzy je vizualizován ve formě dendrogramu



Metoda nejbližšího souseda: výsledek analýzy

Pokud bychom v dendrogramu provedli řez na podobnosti/vzdálenosti 5, kolik dostaneme shluků? Které buněčné linie budou v jednotlivých shlucích? Výsledek interpretujte.



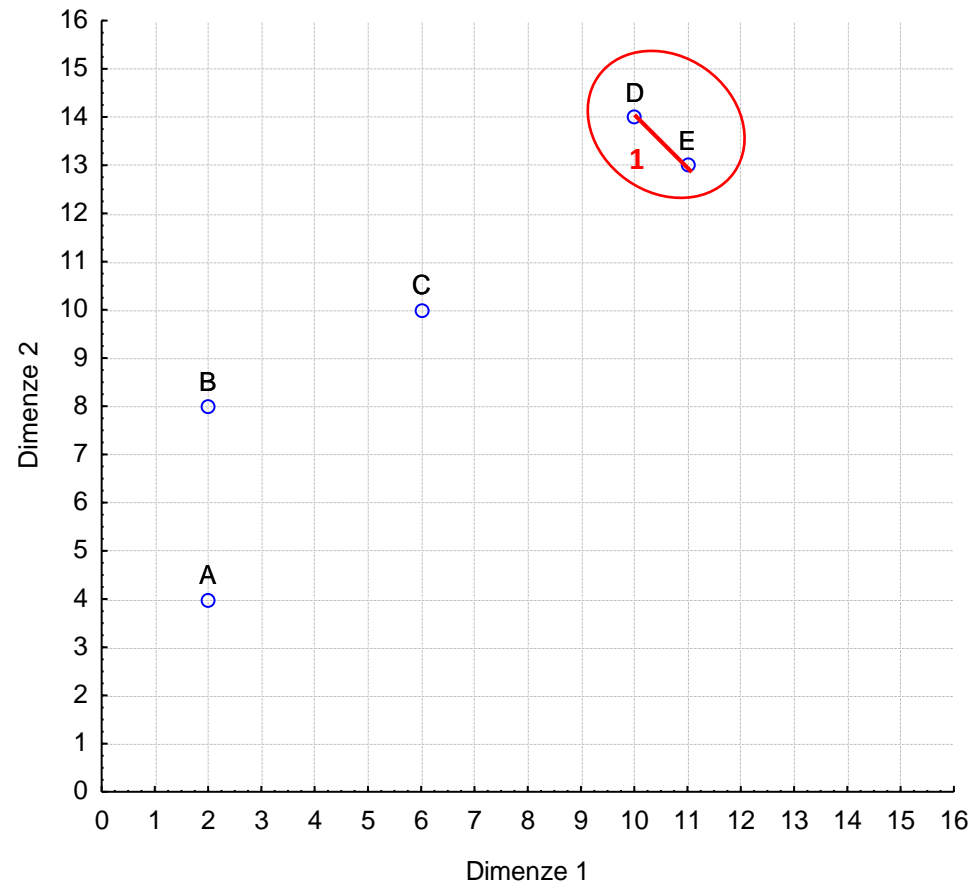
→ dostaneme 2 shluky: (A+B+C) a (D+E); přičemž linie D a E mají mnohem vyšší hodnoty obou markerů než linie A, B a C

Metoda nejvzdálenějšího souseda: 1. krok výpočtu

- Je vypočtena asociační matice

	A	B	C	D	E
A	0.0	4.0	7.2	12.8	12.7
B	4.0	0.0	4.5	10.0	10.3
C	7.2	4.5	0.0	5.7	5.8
D	12.8	10.0	5.7	0.0	1.4
E	12.7	10.3	5.8	1.4	0.0

- Je definován shluk dvou nejblížeších objektů
D-E



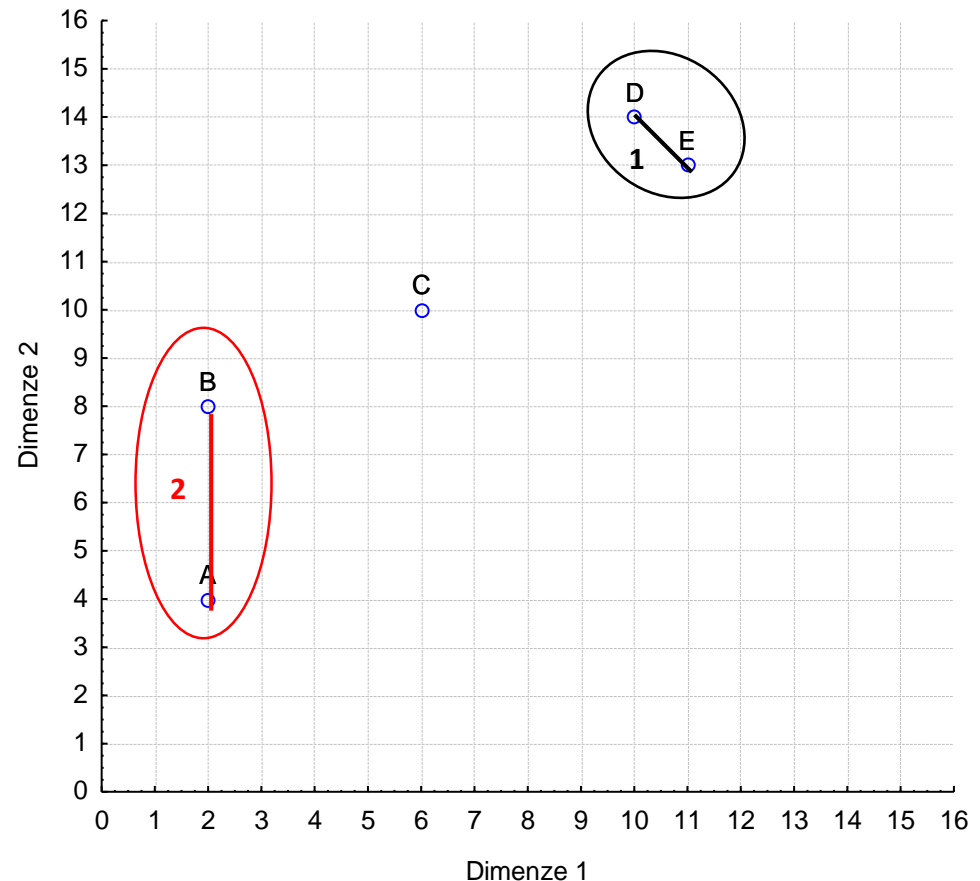
Metoda nejvzdálenějšího souseda: 2. krok výpočtu

- Je vypočtena asociační matice, kde objekty D-E již vystupují jako jeden objekt, jehož vzdálenost od ostatních objektů je dána **největší vzdáleností od jeho členů (D, E)**

	A	B	C	D	E
A	0.0	4.0	7.2	12.8	12.7
B	4.0	0.0	4.5	10.0	10.3
C	7.2	4.5	0.0	5.7	5.8
D	12.8	10.0	5.7	0.0	1.4
E	12.7	10.3	5.8	1.4	0.0



	A	B	C	D+E
A	0.0	4.0	7.2	12.8
B	4.0	0.0	4.5	10.3
C	7.2	4.5	0.0	5.8
D+E	12.8	10.3	5.8	0.0



- Je definován shluk dvou nejblíže objektů

A-B

Metoda nejvzdálenějšího souseda: 3. krok výpočtu

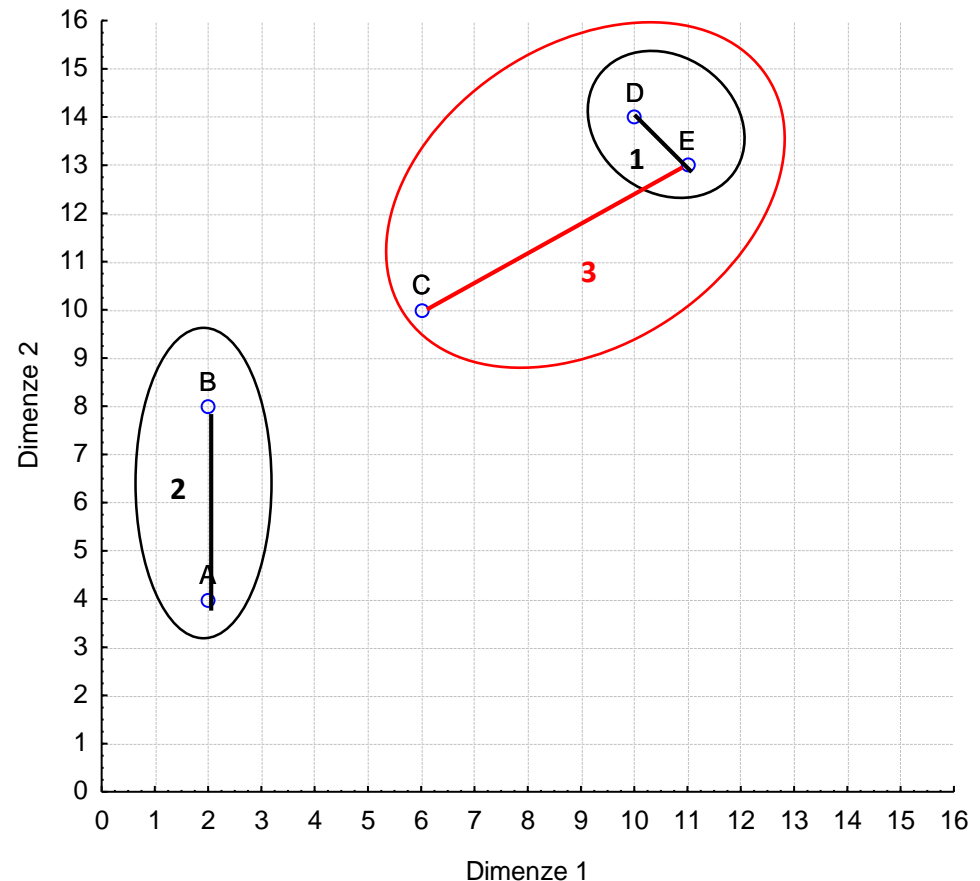
- Je vypočtena asociační matice, kde objekty A-B již vystupují jako jeden objekt, jehož vzdálenost od ostatních objektů je dána **největší vzdáleností od jeho členů (A, B)**

	A	B	C	D+E
A	0.0	4.0	7.2	12.8
B	4.0	0.0	4.5	10.3
C	7.2	4.5	0.0	5.8
D+E	12.8	10.3	5.8	0.0



	A+B	C	D+E
A+B	0.0	7.2	12.8
C	7.2	0.0	5.8
D+E	12.8	5.8	0.0

- Je definován shluk dvou nejblížeších objektů **(D-E)-C**



Metoda nejvzdálenějšího souseda: 4. krok výpočtu

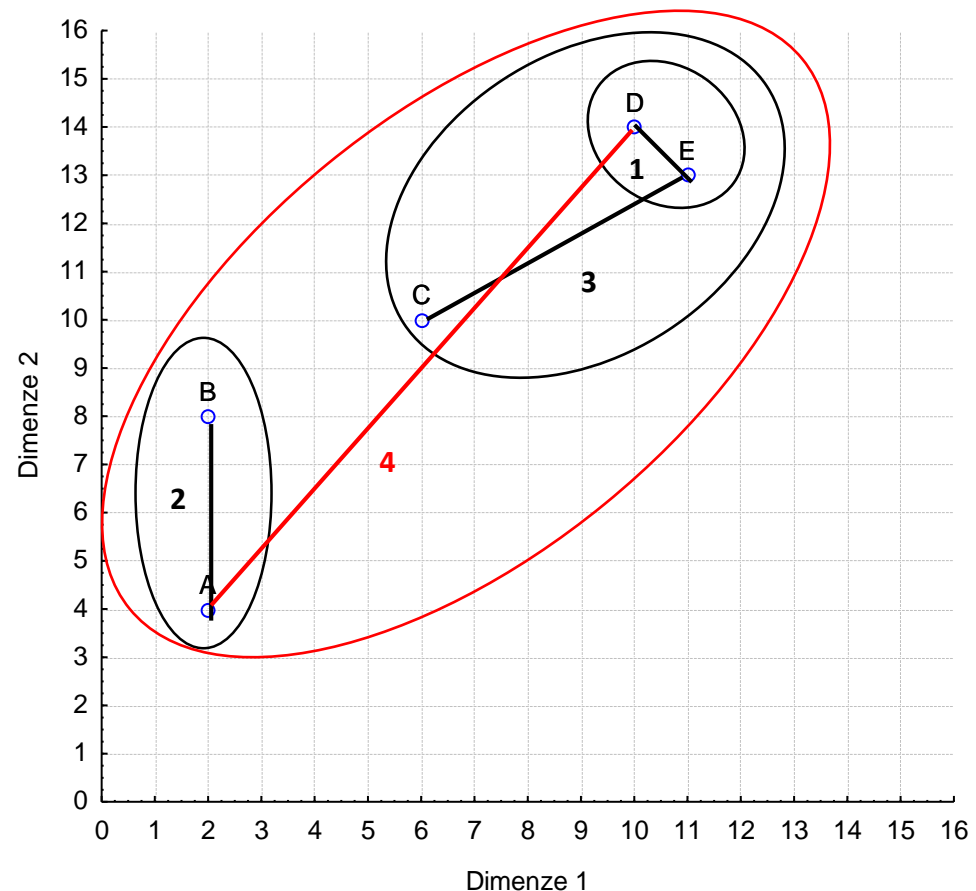
- Je vypočtena asociační matice, kde objekty (D-E)-C již vystupují jako jeden objekt, jehož vzdálenost od ostatních objektů je dána **největší vzdáleností od jeho členů (D, E, C)**

	A+B	C	D+E
A+B	0.0	7.2	12.8
C	7.2	0.0	5.8
D+E	12.8	5.8	0.0



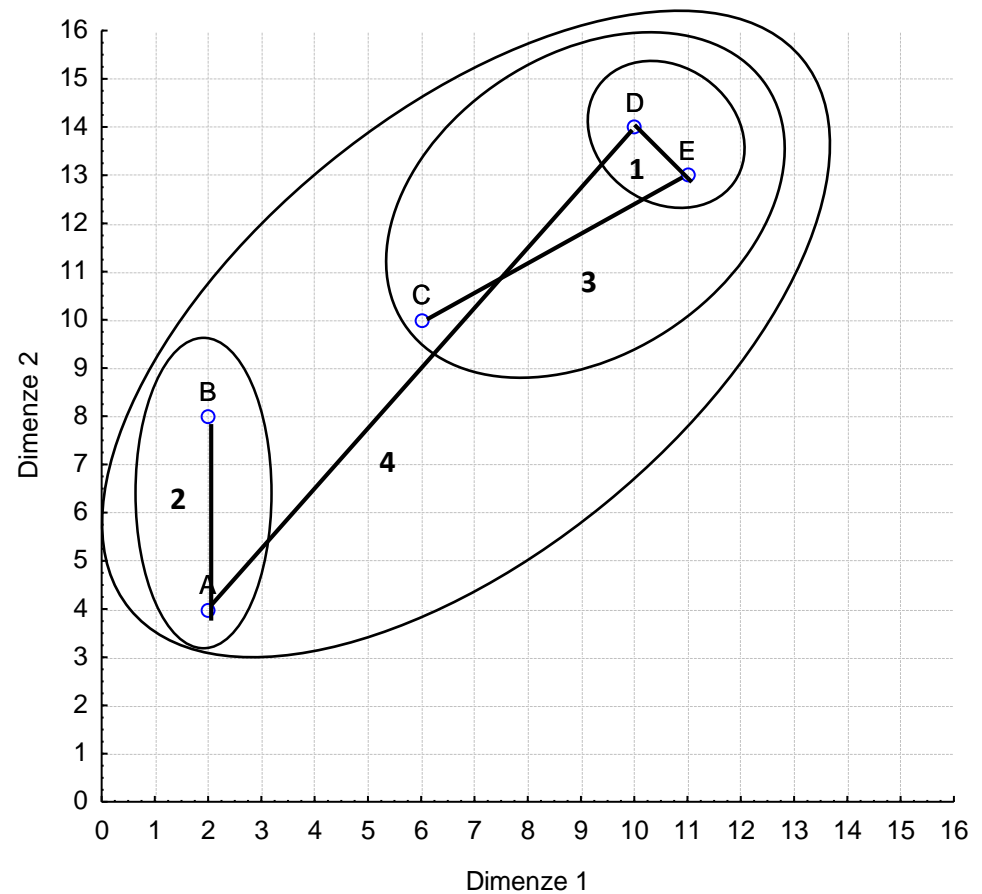
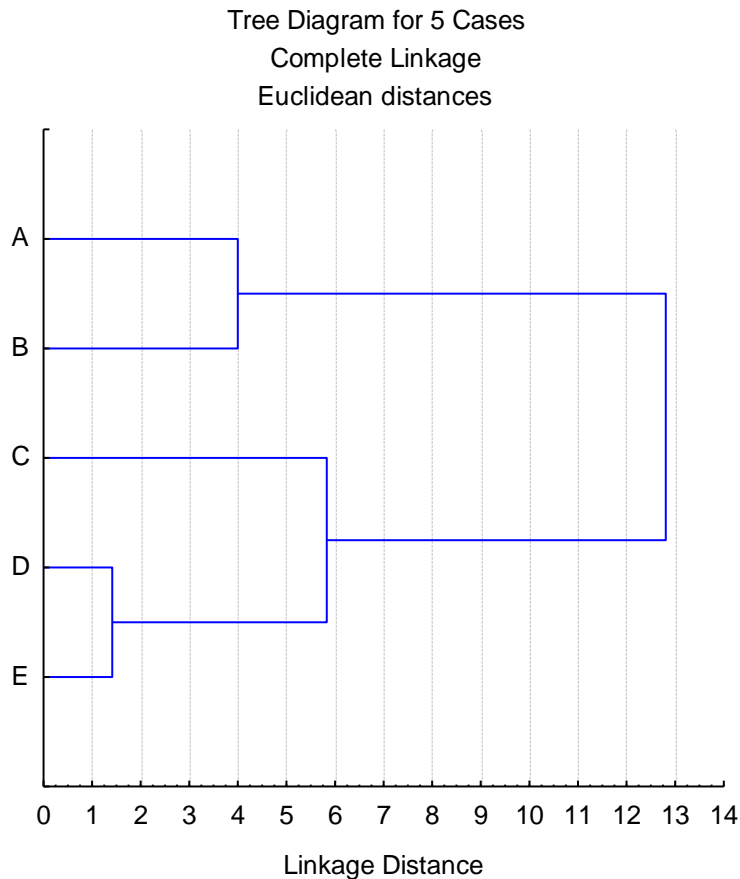
	A+B	D+E+C
A+B	0.0	12.8
D+E+C	12.8	0.0

- Je definován shluk dvou nejblíže objektů **((D-E)-C)-(A-B)**
- Všechny objekty jsou spojeny, algoritmus je ukončen



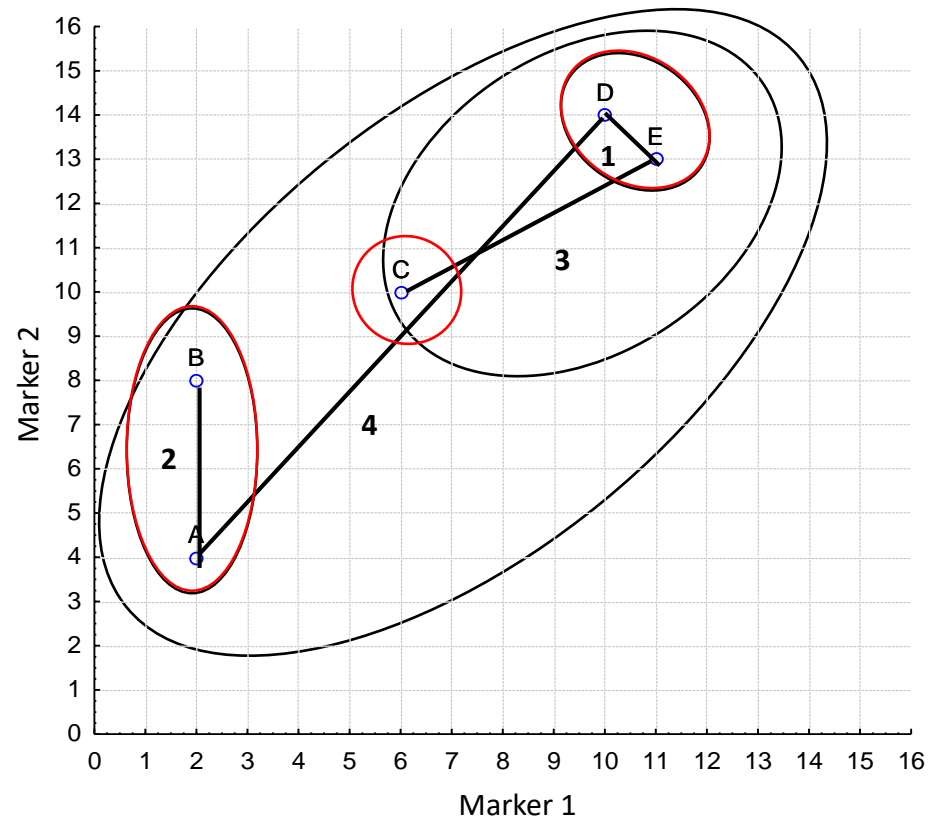
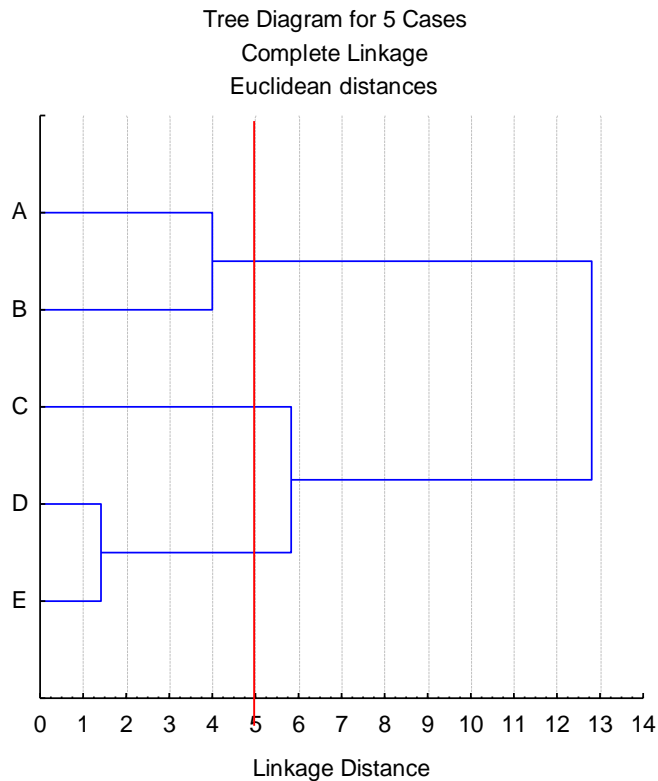
Metoda nejvzdálenějšího souseda: výsledek analýzy

- Výsledek analýzy je vizualizován ve formě dendrogramu



Metoda nejvzdálenějšího souseda: výsledek analýzy

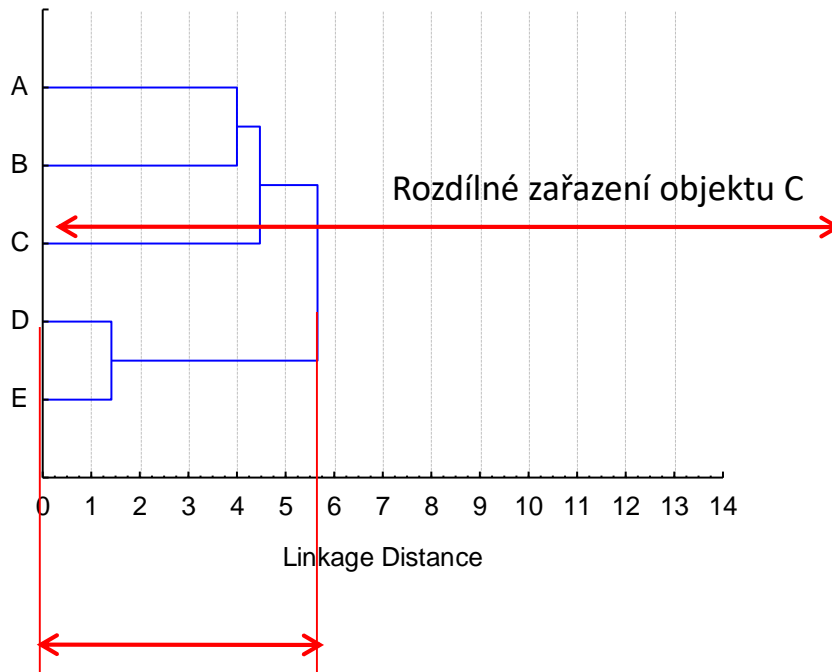
Pokud bychom v dendrogramu provedli řez na podobnosti/vzdálenosti 5, kolik dostaneme shluků? Které buněčné linie budou v jednotlivých shlucích? Výsledek interpretujte.



→ dostaneme 3 shluky: (A+B), (C) a (D+E); přičemž linie D a E mají vysoké hodnoty obou markerů, A a B mají nízké hodnoty obou markerů a linie C má střední hodnoty markerů

Metoda nejbližšího a nejvzdálenějšího souseda – interpretace výsledků

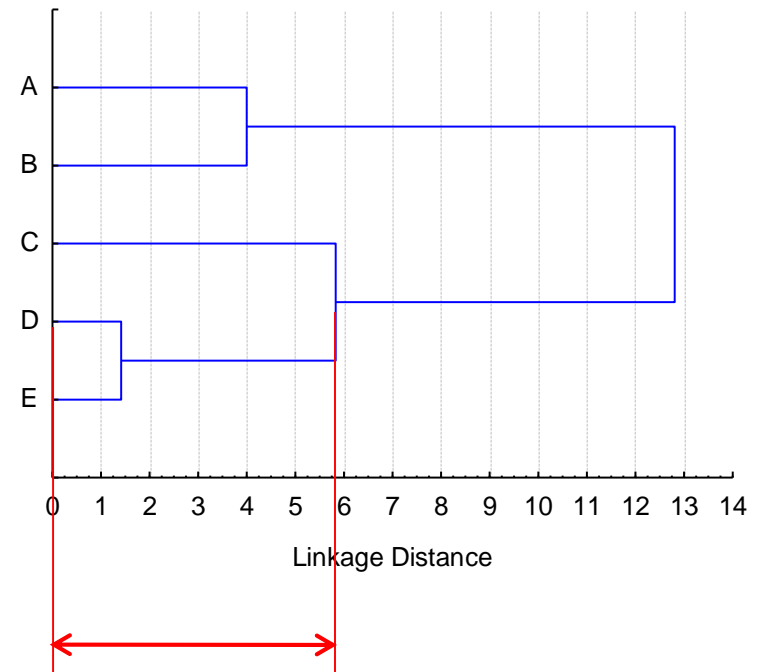
Metoda nejbližšího souseda



Vzdálenost, na níž došlo ke spojení shluku:

- u metody nejbližšího souseda znamená nejmenší vzdálenost objektů shluku, tedy ve shluku mohou existovat objekty s větší vzdáleností

Metoda nejvzdálenějšího souseda



Vzdálenost, na níž došlo ke spojení shluku:

- u metody nejvzdálenějšího souseda znamená největší vzdálenost objektů shluku, tedy objekty ve shluku už mohou být k sobě pouze blíže nebo stejně vzdálené jako je tato vzdálenost

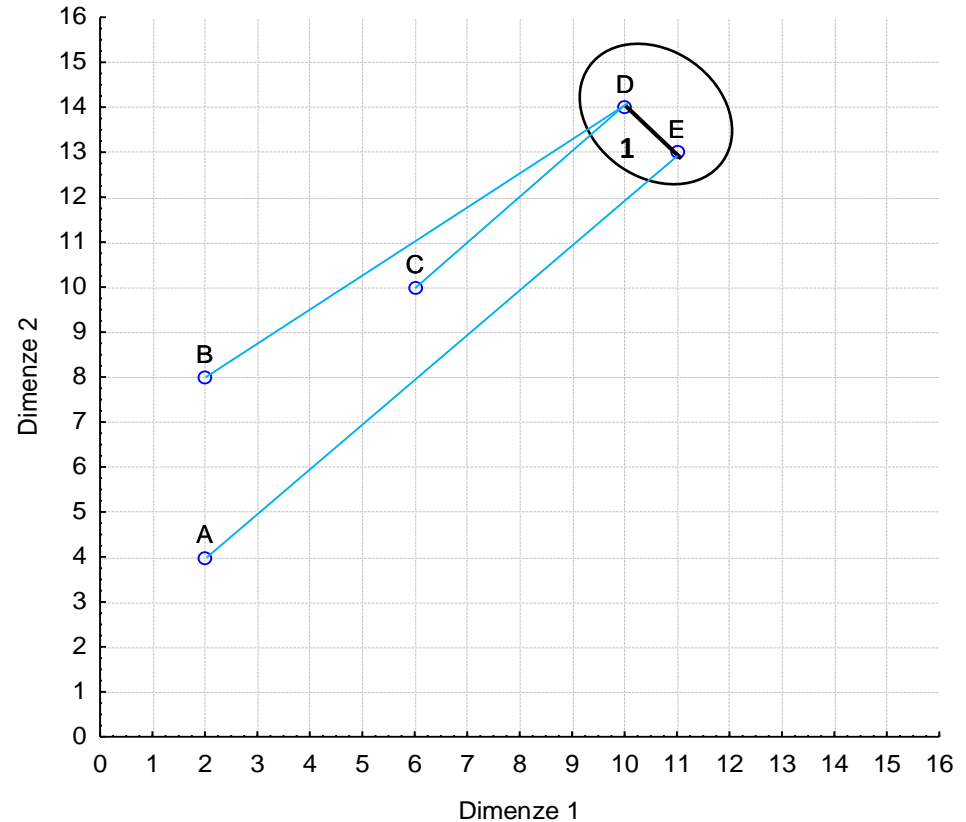
Metoda nejbližšího souseda – doplnění

- Je vypočtena asociační matice, kde objekty D-E již vystupují jako jeden objekt, jehož vzdálenost od ostatních objektů je dána **nejmenší vzdáleností od jeho členů (D, E)**

	A	B	C	D	E
A	0.0	4.0	7.2	12.8	12.7
B	4.0	0.0	4.5	10.0	10.3
C	7.2	4.5	0.0	5.7	5.8
D	12.8	10.0	5.7	0.0	1.4
E	12.7	10.3	5.8	1.4	0.0



	A	B	C	D+E
A	0.0	4.0	7.2	12.7
B	4.0	0.0	4.5	10.0
C	7.2	4.5	0.0	5.7
D+E	12.7	10.0	5.7	0.0



- vzdálenost A od shluku D+E je dána vzdáleností A od E, protože je menší než vzdálenost A od D
- vzdálenost B od shluku D+E je dána vzdáleností B od D, protože je menší než vzdálenost B od E
- vzdálenost C od shluku D+E je dána vzdáleností C od D, protože je menší než vzdálenost C od E

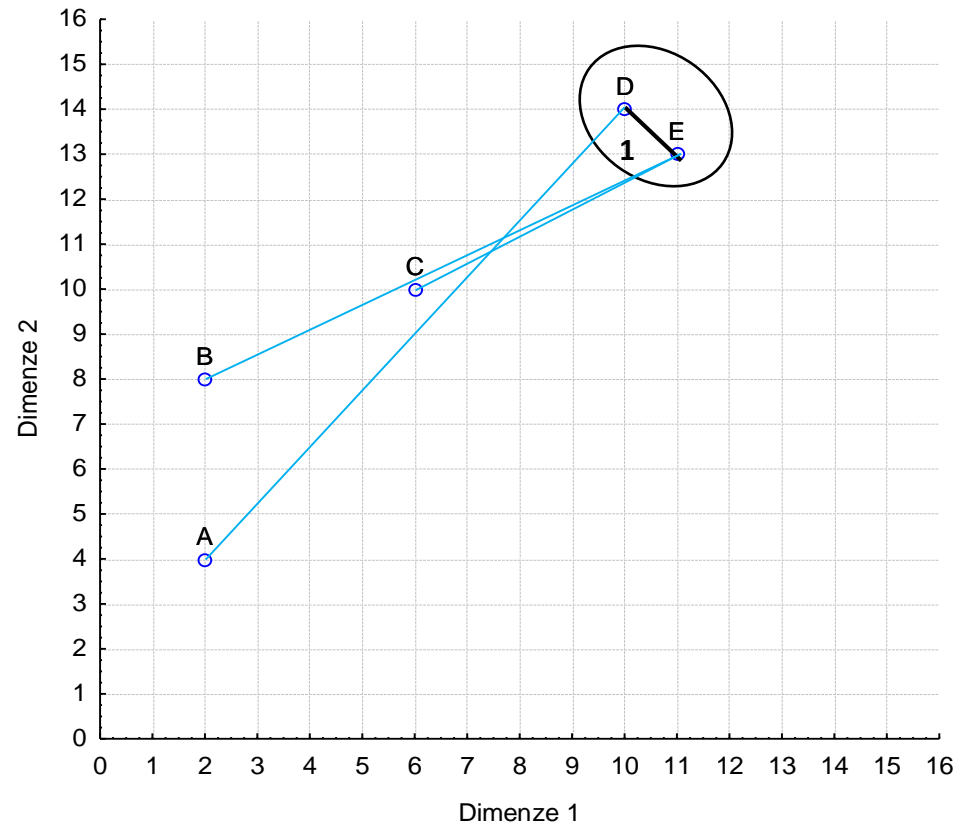
Metoda nejvzdálenějšího souseda – doplnění

- Je vypočtena asociační matice, kde objekty D-E již vystupují jako jeden objekt, jehož vzdálenost od ostatních objektů je dána **největší vzdáleností od jeho členů (D, E)**

	A	B	C	D	E
A	0.0	4.0	7.2	12.8	12.7
B	4.0	0.0	4.5	10.0	10.3
C	7.2	4.5	0.0	5.7	5.8
D	12.8	10.0	5.7	0.0	1.4
E	12.7	10.3	5.8	1.4	0.0



	A	B	C	D+E
A	0.0	4.0	7.2	12.8
B	4.0	0.0	4.5	10.3
C	7.2	4.5	0.0	5.8
D+E	12.8	10.3	5.8	0.0



- vzdálenost A od shluku D+E je dána vzdáleností A od D, protože je větší než vzdálenost A od E
- vzdálenost B od shluku D+E je dána vzdáleností B od E, protože je větší než vzdálenost B od D
- vzdálenost C od shluku D+E je dána vzdáleností C od E, protože je větší než vzdálenost C od D

Příklad 2

Bylo provedeno měření objemu hipokampu a mozkových komor (v cm³) u 5 pacientů se schizofrenií. Naměřené hodnoty objemu hipokampu a mozkových komor byly zaznamenány do matice \mathbf{X}_D :

$$\mathbf{X}_D = \begin{bmatrix} 4,6 & 3,4 \\ 6,1 & 3,0 \\ 6,7 & 3,1 \\ 6,2 & 2,3 \\ 6,9 & 3,1 \end{bmatrix}.$$

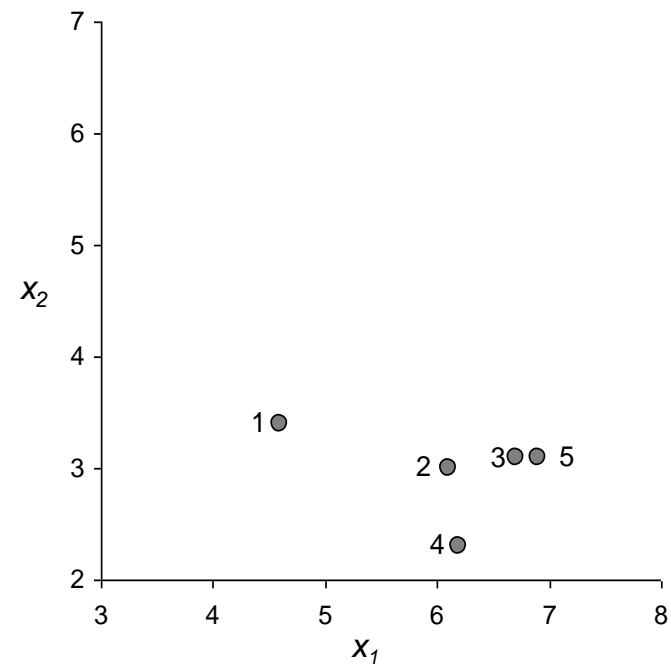
Určete podobnost pěti pacientů na základě naměřených charakteristik pomocí hierarchické shlukové analýzy, použijte metodu nejbližšího a nejvzdálenějšího souseda.

Příklad 2 – asociační matice

Nejprve vypočteme matici vzdáleností mezi objekty založenou na Euklidovské vzdálenosti:

	1	2	3	4	5
1	0,0	1,6	2,1	1,9	2,3
2	1,6	0,0	0,6	0,7	0,8
3	2,1	0,6	0,0	0,9	0,2
4	1,9	0,7	0,9	0,0	1,1
5	2,3	0,8	0,2	1,1	0,0

Pro snadnější představu postupu výpočtu si jednotlivé objekty vykreslíme do jednoduchého xy grafu.

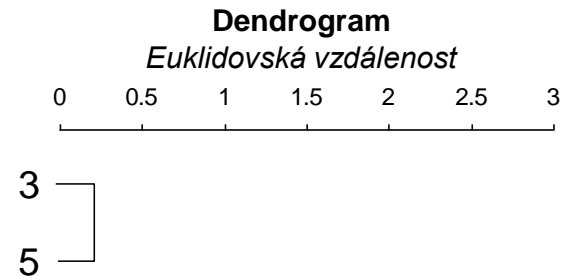
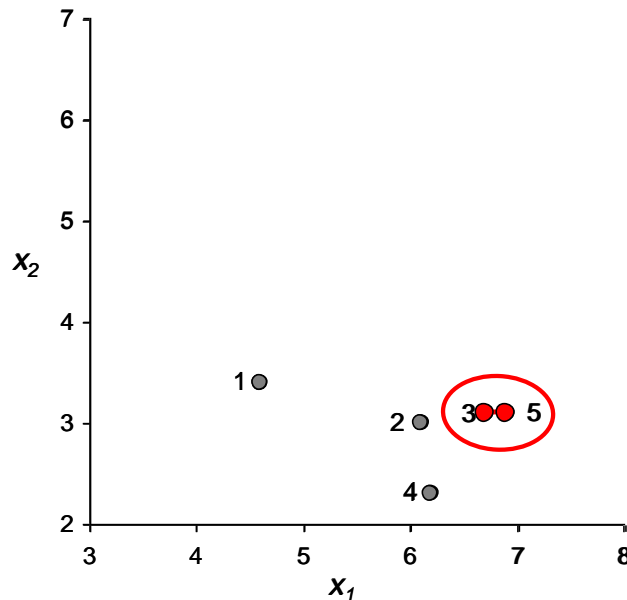


Metoda nejbližšího souseda – krok 1

	1	2	3	4	5
1	0,0	1,6	2,1	1,9	2,3
2	1,6	0,0	0,6	0,7	0,8
3	2,1	0,6	0,0	0,9	0,2
4	1,9	0,7	0,9	0,0	1,1
5	2,3	0,8	0,2	1,1	0,0



	1	2	3+5	4
1	0,0	1,6	2,1	1,9
2	1,6	0,0	0,6	0,7
3+5	2,1	0,6	0,0	0,9
4	1,9	0,7	0,9	0,0

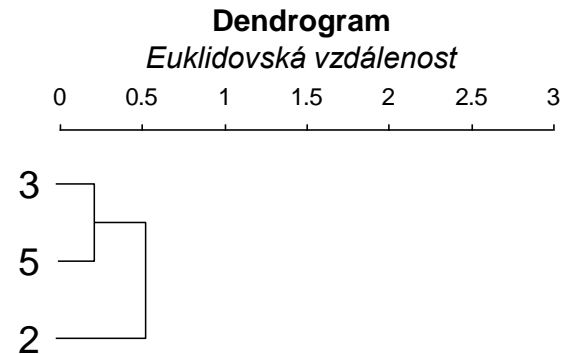
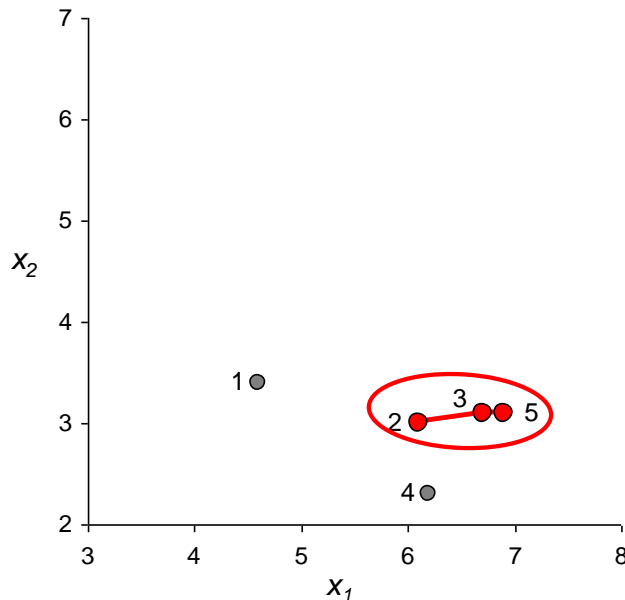


Metoda nejbližšího souseda – krok 2

	1	2	3+5	4
1	0,0	1,6	2,1	1,9
2	1,6	0,0	0,6	0,7
3+5	2,1	0,6	0,0	0,9
4	1,9	0,7	0,9	0,0



	1	2+3+5	4
1	0,0	1,6	1,9
2+3+5	1,6	0,0	0,7
4	1,9	0,7	0,0

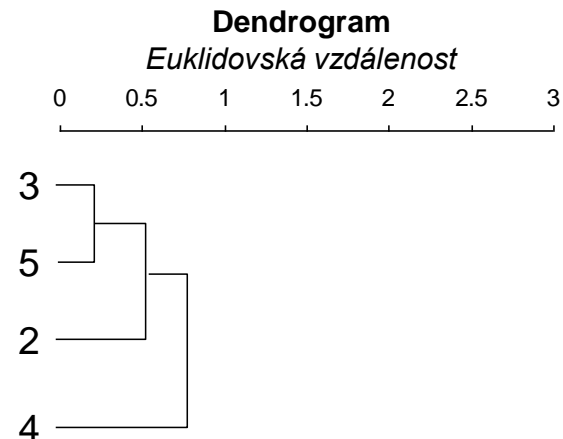
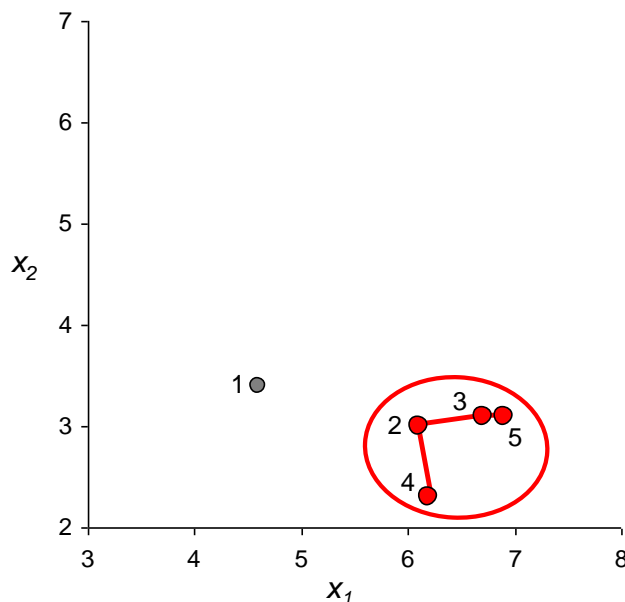


Metoda nejbližšího souseda – krok 3

	1	2+3+5	4
1	0,0	1,6	1,9
2+3+5	1,6	0,0	0,7
4	1,9	0,7	0,0

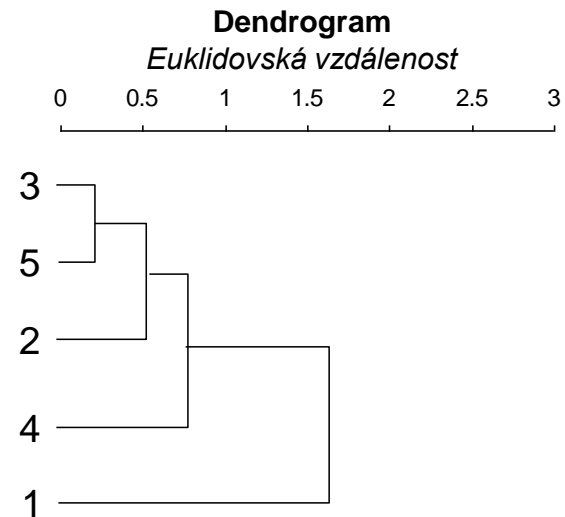
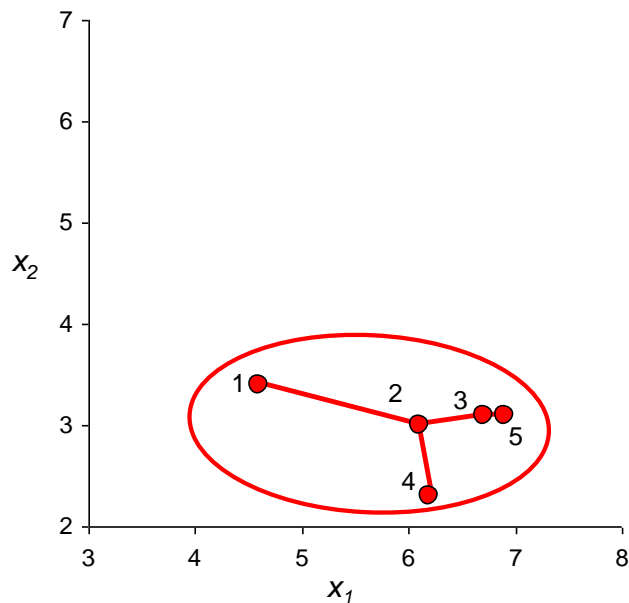


	1	4+2+3+5
1	0,0	1,6
4+2+3+5	1,6	0,0



Metoda nejbližšího souseda – krok 4

	1	4+2+3+5
1	0,0	1,6
4+2+3+5	1,6	0,0

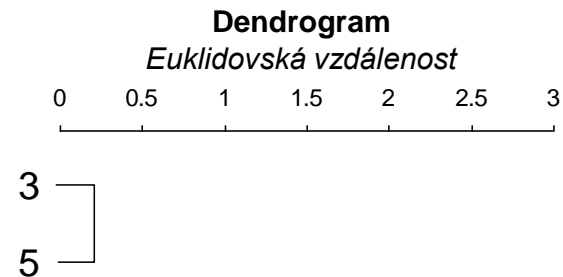
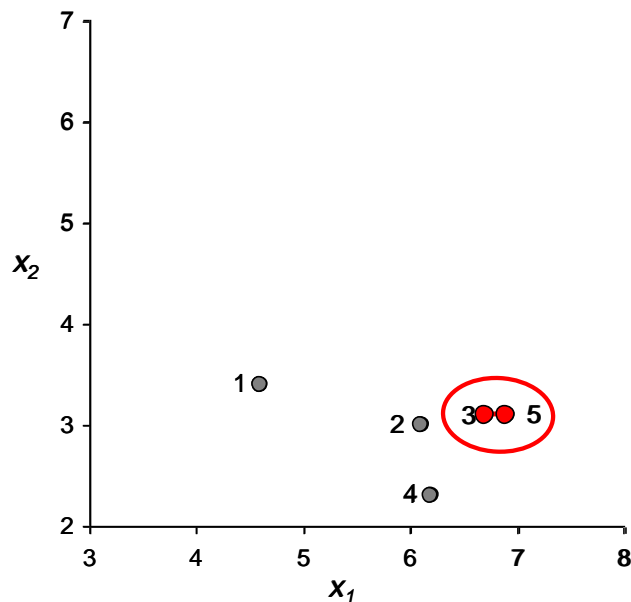


Metoda nejvzdálenějšího souseda – krok 1

	1	2	3	4	5
1	0,0	1,6	2,1	1,9	2,3
2	1,6	0,0	0,6	0,7	0,8
3	2,1	0,6	0,0	0,9	0,2
4	1,9	0,7	0,9	0,0	1,1
5	2,3	0,8	0,2	1,1	0,0



	1	2	3+5	4
1	0,0	1,6	2,3	1,9
2	1,6	0,0	0,8	0,7
3+5	2,3	0,8	0,0	1,1
4	1,9	0,7	1,1	0,0

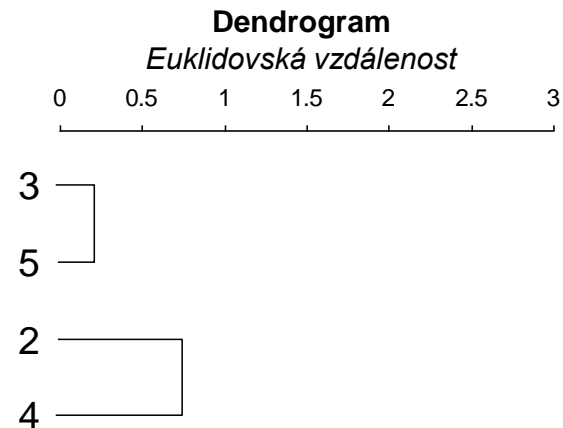
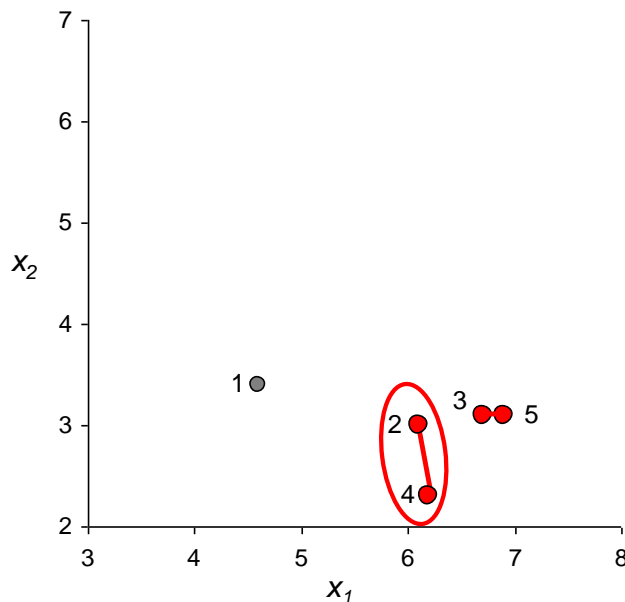


Metoda nejvzdálenějšího souseda – krok 2

	1	2	3+5	4
1	0,0	1,6	2,3	1,9
2	1,6	0,0	0,8	0,7
3+5	2,3	0,8	0,0	1,1
4	1,9	0,7	1,1	0,0



	1	2+4	3+5
1	0,0	1,9	2,3
2+4	1,9	0,0	1,1
3+5	2,3	1,1	0,0

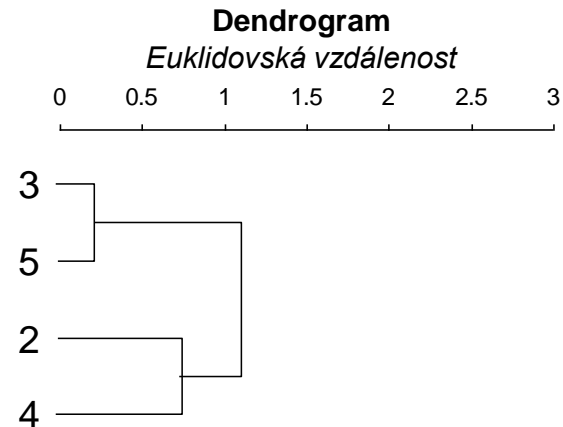
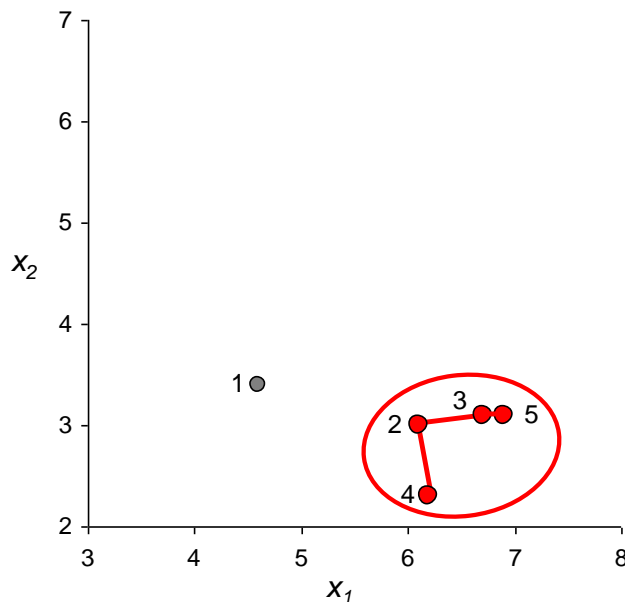


Metoda nejvzdálenějšího souseda – krok 3

	1	2+4	3+5
1	0,0	1,9	2,3
2+4	1,9	0,0	1,1
3+5	2,3	1,1	0,0

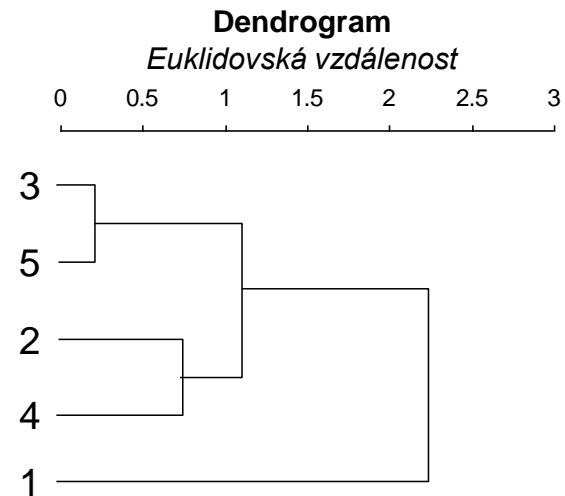
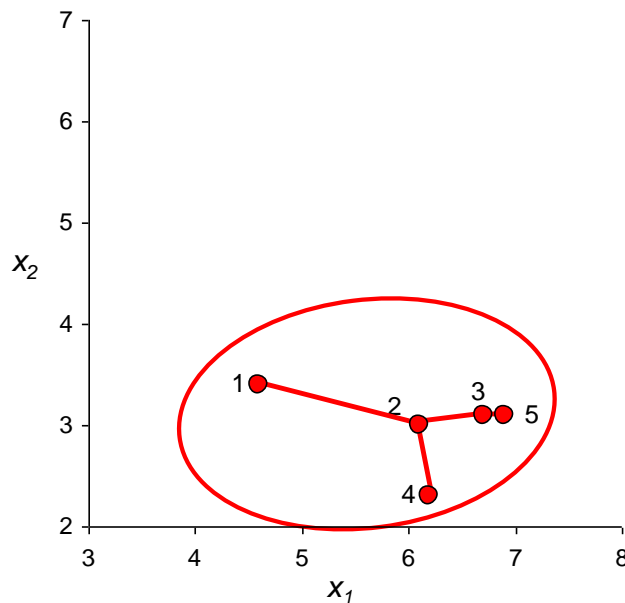


	1	4+2+3+5
1	0,0	2,3
4+2+3+5	2,3	0,0

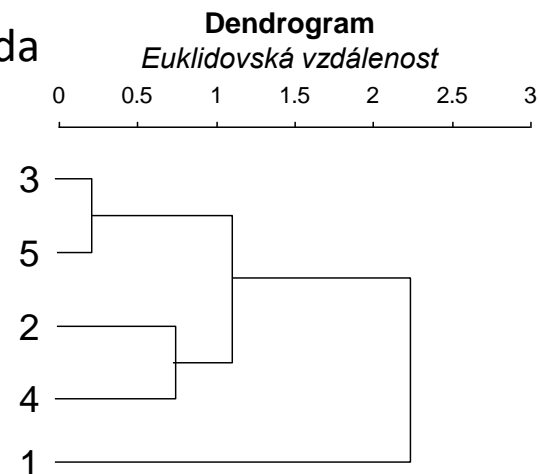
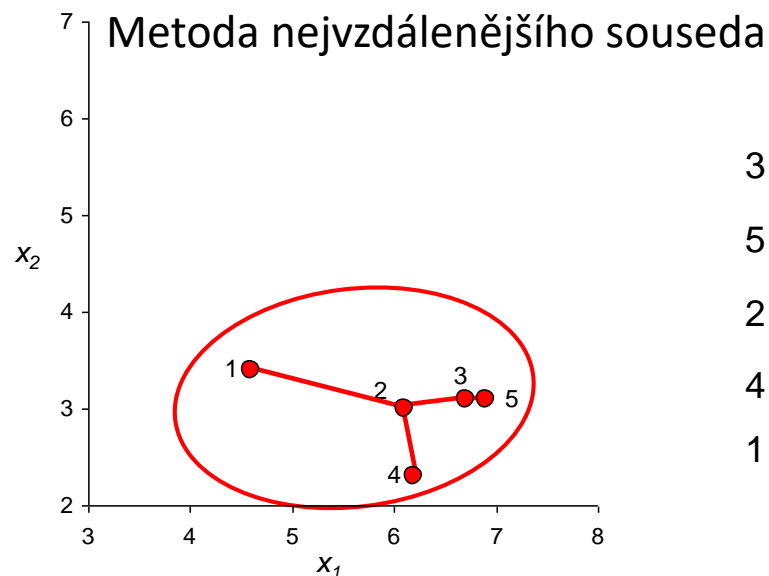
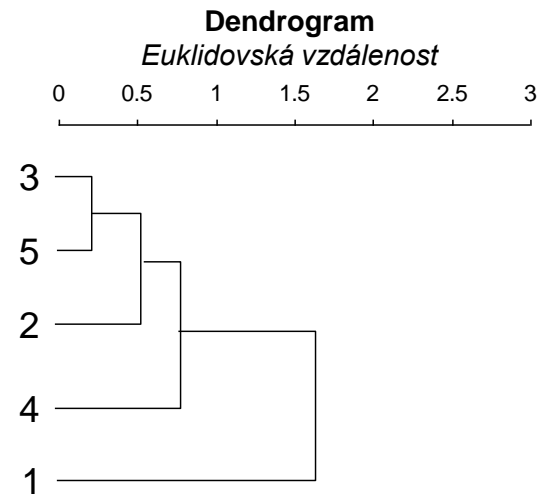
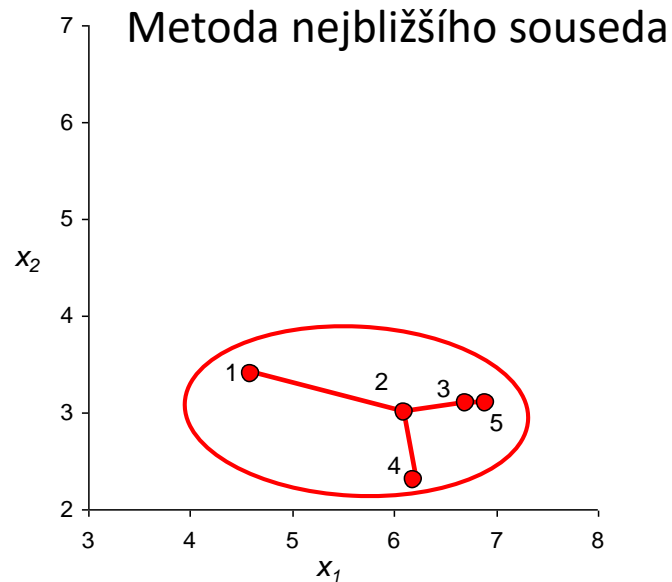


Metoda nejvzdálenějšího souseda – krok 4

	1	4+2+3+5
1	0,0	2,3
4+2+3+5	2,3	0,0



Srovnání metody nejbližšího a nejvzdálenějšího souseda



→ metoda nejbližšího souseda má tendenci vytvářet protáhlé shluky

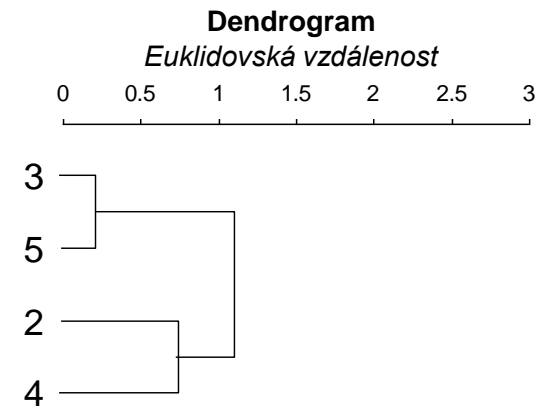
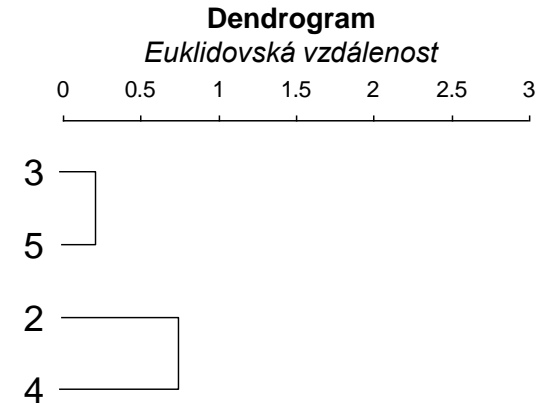
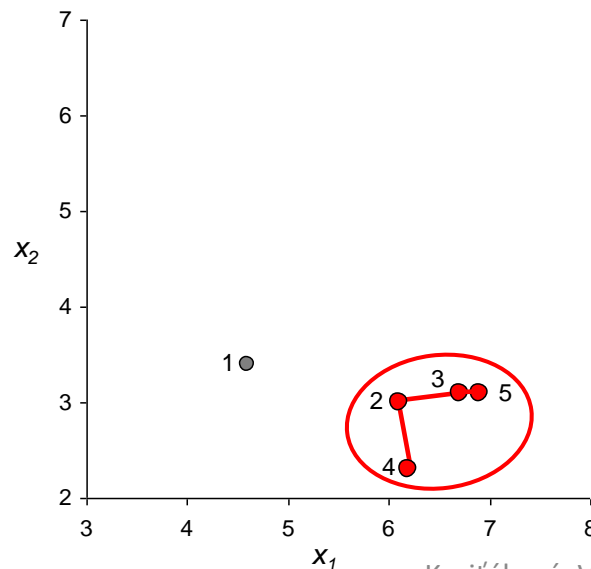
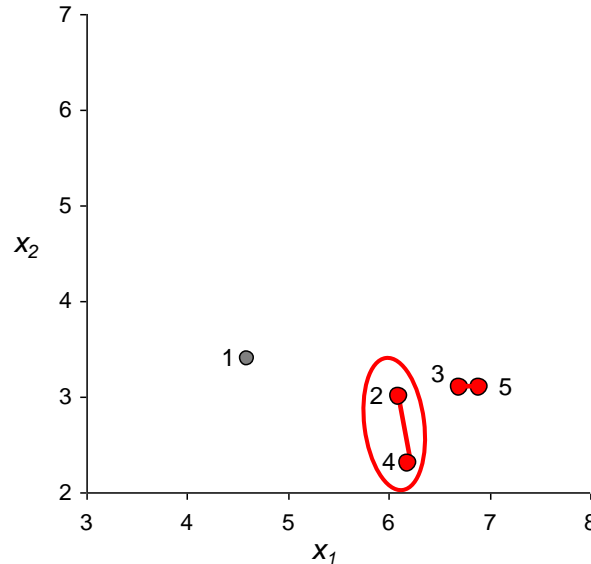
Metoda nejvzdálenějšího souseda – doplnění

	1	2+4	3+5
1	0,0	1,9	2,3
2+4	1,9	0,0	1,1
3+5	2,3	1,1	0,0



	1	4+2+3+5
1	0,0	2,3
4+2+3+5	2,3	0,0

→ došlo ke spojení shluku 2+4 a 3+5 na vzdálenosti 1,1, což je vzdálenost subjektu 4 a subjektu 5, protože tato vzdálenost je ze všech vzdáleností 4→5, 2→5, 4→3, 2→3 největší



Příklad 3

Ve studii byl u 6 osob zjišťován systolický tlak a hladina celkového cholesterolu v krvi:

Pac	Systolický tlak (mmHg)	Celkový cholesterol (mmol/l)
A	165	4,5
B	125	4,7
C	160	7,5
D	170	7,0
E	130	4,0
F	165	6,5

Vztahy mezi pacienty jsou vyjádřeny následujícími asociačními maticemi:

A) Asociační matice počítaná na původních datech

	A	B	C	D	E	F
A	0	40,00	5,83	5,59	35,00	2,00
B	40,00	0	35,11	45,06	5,05	40,04
C	5,83	35,11	0	10,01	30,20	5,10
D	5,59	45,06	10,01	0	40,11	5,02
E	35,00	5,05	30,20	40,11	0	35,09
F	2,00	40,04	5,10	5,02	35,09	0

B) Asociační matice počítaná na standardizovaných datech

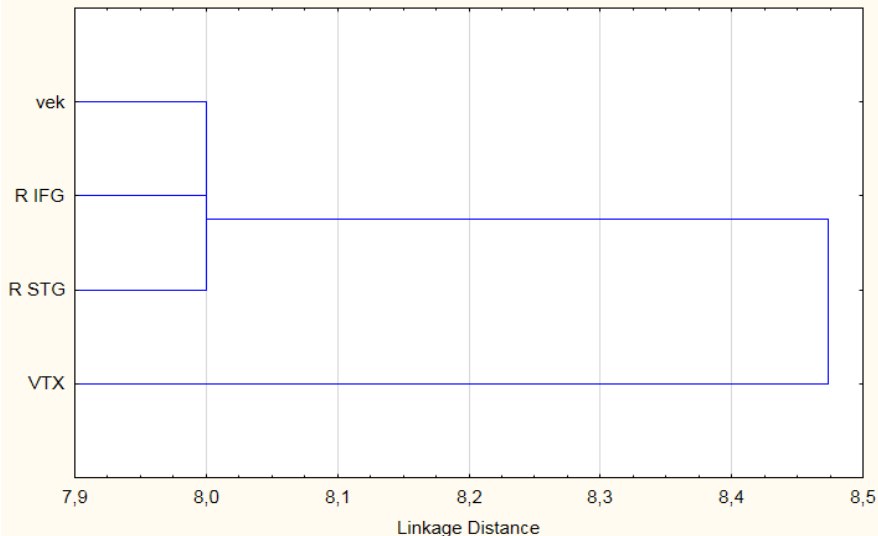
	A	B	C	D	E	F
A	0	2,04	2,05	1,71	1,81	1,35
B	2,04	0	2,60	2,77	0,54	2,37
C	2,05	2,60	0	0,61	2,82	0,72
D	1,71	2,77	0,61	0	2,87	0,42
E	1,81	0,54	2,82	2,87	0	2,46
F	1,35	2,37	0,72	0,42	2,46	0

1. Výše uvedené asociační matice vyjadřují podobnost nebo vzdálenost?
2. Jakou z uvedených asociačních matic byste pro shlukování použili a proč?
3. Pokud bychom chtěli rozdělit osoby do několika shluků jednoho řádu, jakou metodu bychom použili?
4. Pokud bychom chtěli rozdělit osoby do několika skupin s podskupinami nižších řádů tak, že vzdálenost mezi shluky bude minimální vzdáleností mezi zástupci, jakou metodu bychom použili?

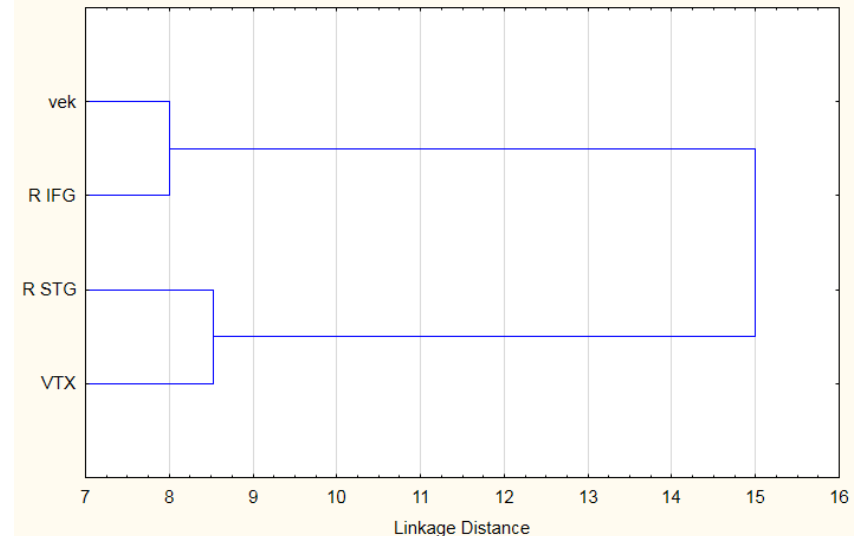
Doplnění - co se stane, když jsou v datech stejné vzdálenosti

	1 vek	2 R IFG	3 R STG	4 VTX
vek	0,00000	8,00000	8,00000	15,00000
R IFG	8,00000	0,00000	9,00000	8,47351
R STG	8,00000	9,00000	0,00000	8,52360
VTX	15,00000	8,47351	8,52360	0,00000
Means	71,03563	0,13179	0,56080	0,24312
Std.Dev.	7,26298	1,00000	1,00000	0,99999
No.Cases	34,00000			
Matrix	3,00000			

Tree Diagram for 4 Variables
Single Linkage
Dissimilarities from matrix



Tree Diagram for 4 Variables
Complete Linkage
Dissimilarities from matrix

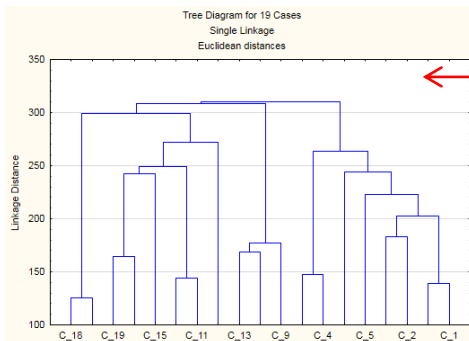
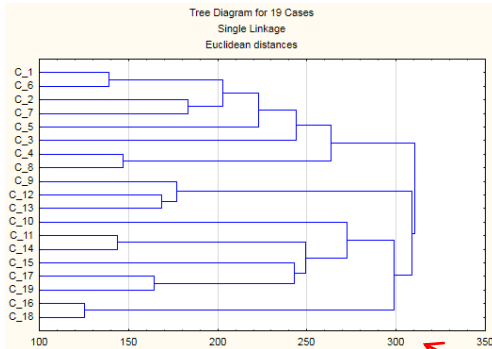


Výpočet shlukové analýzy v softwarech

STATISTICA – hierarchické aglomerativní shlukování

- Statistics – Mult/Exploratory – Cluster – Joining (tree clustering) – OK – přepnout se na záložku Advanced
- Variables: výběr proměnných (např. objem hipokampu, amygdaly a pallida)
- Cluster: zvolit, zda chceme shlukovat proměnné (Variables (columns)) či subjekty (Cases (rows))
- Amalgamation (linkage) rule = volba shlukovacího algoritmu:
 - Single Linkage – metoda nejbližšího souseda
 - Complete Linkage – metoda nejvzdálenějšího souseda
 - Unweighted pair-group average – metoda průměrné vazby (nevážená)
 - Weighted pair-group average – metoda průměrné vazby (vážená)
 - Unweighted pair-group centroid – centroidová metoda (nevážená)
 - Weighted pair-group centroid (median) – centroidová metoda (vážená) = mediánová metoda
 - Ward's method – Wardova metoda
- Distance measure = volba metrik vzdáleností objektů (subjektů):
 - Squared Euclidean distances – čtverec Euklidovy vzdálenosti
 - Euclidean distances – Euklidova metrika
 - City-block (Manhattan) distances – Hammingova (manhattanská) metrika
 - Chebychev distance metric – Čebyševova metrika
 - Power: $\text{SUM}(\text{ABS}(x-y)**p)**1/r$ – pokud $r=p$, jde o Minkovského metriku
 - Percent disagreement
 - 1-Pearson r – jedna mínus Pearsonův korelační koeficient

STATISTICA – hierarch. aglom. shluk. – pokračování



Joining Results: Data_neuro_shlukovky

Number of variables: 3
 Number of cases: 19
 Joining of cases
 Missing data were casewise deleted
 Amalgamation (joining) rule: Single Linkage
 Distance metric is: Euclidean distances (non-standardized)

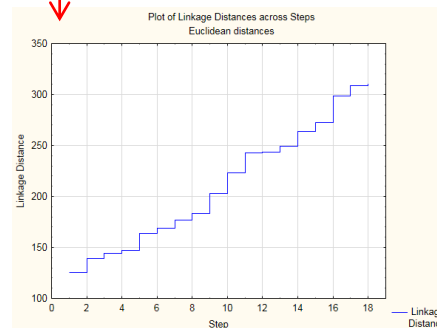
Quick | Advanced

- Horizontal hierarchical tree plot
- Vertical icicle plot
- Rectangular branches
- Scale tree to dlink/dmax*100
- Amalgamation schedule
- Graph of amalgamation schedule
- Distance matrix
- Descriptive statistics
- Matrix
- Save classifications
- Sort by cluster membership

Summary | Cancel | Options | By Group

Amalgamation Schedule (Data_neuro_shlukovky)
 Single Linkage
 Euclidean distances

linkage distance	Obj. No. 1	Obj. No. 2	Obj. No. 3	Obj. No. 4	Obj. No. 5	O
125.1972	C_16	C_18				
139.2640	C_1	C_6				
143.9270	C_11	C_14				
147.0873	C_4	C_8				
164.1363	C_17	C_19				
168.6528	C_12	C_13				
176.9954	C_9	C_12	C_13			
183.2707	C_2	C_7				
202.7584	C_1	C_6	C_2	C_7		
223.0460	C_1	C_6	C_2	C_7	C_5	
249.7229	C_1	C_6	C_2	C_7	C_5	C_9



asociační matice Euklidových vzdáleností

Euclidean distances (Data_neuro_shlukovky)

Case No.	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	C_6	C
C_1	0	291	299	490	271	139	
C_2	291	0	244	264	454	251	
C_3	299	244	0	500	527	311	
C_4	490	264	500	0	535	410	
C_5	271	454	527	535	0	223	
C_6	139	251	311	410	223	0	
C_7	307	183	262	328	399	203	
C_9	574	297	619	447	554	479	

STATISTICA – nehierarchické shlukování

- Statistics – Mult/Exploratory – Cluster – K-means clustering – OK – přepnout se na záložku Advanced
- Variables: výběr proměnných (např. objem hipokampu, amygdaly a pallida)
- Cluster: zvolit, zda chceme shlukovat proměnné (Variables (columns)) či subjekty (Cases (rows))
- Number of clusters: zvolit počet shluků (např. 3)
- Number of iterations: volba počtu iterací (metoda k -průměrů je iterativní metoda)
- Initial cluster centers: volba počátečních středů shluků

- příslušnost jednotlivých subjektů do shluků nalezneme na záložce Advanced v „Members of each cluster & distances“

SPSS – hierarchické aglomerativní shlukování

- Analyze – Classify – Hierarchical Cluster...
- Cluster: zvolit, zda chceme shlukovat proměnné (Variables) či subjekty (Cases)
- Statistics...: zatrhnout Proximity matrix (= asociační matice vzdáleností či podobností)
- Plots...: zatrhnout Dendrogram (možnost volby Vertical či Horizontal)
- Method...:
 - Cluster Method = volba shlukovacího algoritmu:
 - Between-groups linkage – metoda průměrné vazby mezi skupinami
 - Within-groups linkage – metoda průměrné vazby uvnitř skupin
 - Nearest neighbor – metoda nejbližšího souseda
 - Furthest neighbor – metoda nejvzdálenějšího souseda
 - Centroid clustering – centroidová metoda (nevážená)
 - Median clustering – centroidová metoda (vážená) = mediánová metoda
 - Ward's method – Wardova metoda
 - Distance measure: volba metrik vzdáleností objektů (subjektů):
 - Euclidean distance – Euklidova metrika
 - Squared Euclidean distance – čtverec Euklidovy vzdálenosti
 - Cosine – kosinová metrika
 - Pearson correlation – Pearsonův korelační koeficient
 - Chebychev – Čebyševova metrika
 - Block – Hammingova (manhattanská) metrika
 - Minkowski – Minkovského metrika
 - Customized – výpočet pomocí $\text{SUM}(\text{ABS}(x-y)**p)**1/r$
 - Transform Values, Transform Measure – je možno transformovat původní data nebo vypočtené vzdálenosti
- **Pozor! Při vykreslování dendrogramu SPSS nezachovává původní vzdálenosti, ale přeškálovává je na škálu od 0 do 25!!!**

SPSS – nehierarchické shlukování

- Analyze – Classify – K-Means Cluster...
- Variables: výběr proměnných (např. objem hipokampu, amygdaly a pallida)
- Number of clusters: zvolit počet shluků (např. 3)
- Method: přepnout na „Classify only“ v případě, že známe středy shluků, které můžeme načíst pomocí „Read initial“
- Iterate... – Maximum Iterations (volba počtu iterací – metoda k -průměrů je iterativní metoda)
- Options... – zatrhnout „Cluster information for each case“, abychom získali tabulku, do kterého shluku patří který subjekt

Software R – hierarchické aglomerativní shlukování

- funkce *dist* na výpočet vzdáleností objektů (či subjektů) :
 - „euclidean“ – Euklidovská metrika
 - „maximum“ – Čebyševova metrika
 - „manhattan“ – Hammingova (manhattanská) metrika
 - „canberra“ – Canberrská metrika
 - „minkowski“ – Minkovského metrika
- funkce *hclust* na výpočet shlukové analýzy:
 - „ward.D“ a „ward.D2“ – dva algoritmy pro Wardovu metodu
 - „single“ – metoda nejbližšího souseda (single linkage)
 - „complete“ – metoda nejvzdálenějšího souseda (complete linkage)
 - „average“ – metoda průměrné vazby (nevážená) (average linkage)
 - „mcquitty“ – metoda průměrné vazby (vážená)
 - „median“ – centroidová metoda (vážená) = mediánová metoda
 - „centroid“ – centroidová metoda (nevážená)
- podrobná ukázka v souboru Shlukovky_skript.R

Software R – nehierarchické shlukování

- funkce *kmeans*
- ukázka:

```
cl <- kmeans(data.vyber, 3) # provedeni shlukove analyzy  
table(cl$cluster,groupCodes) # zjisteni, kolik subjektu bylo spatne zarazenych
```

Matlab – výpočet vzdáleností

Funkce:

- pdist (vzdálenost mezi páry objektů matice X či páry proměnných matice X^T)
- pdist2 (vzdálenost mezi maticemi X a Y)

Výběr metrik vzdáleností u obou těchto funkcí:

- 'euclidean' – Euklidova metrika vzdálenosti
- 'squaredeuclidean' – čtverec Euklidovy metriky vzdálenosti
- 'seuclidean' – standardizovaná Euklidova metrika vzdálenosti
- 'cityblock' – Hammingova (manhattanská) metrika vzdálenosti
- 'minkowski' – Minkovského metrika vzdálenosti
- 'chebychev' – Čebyševova metrika vzdálenosti
- 'mahalanobis' – Mahalanobisova metrika vzdálenosti
- 'cosine' – 1 mínus kosinová podobnost
- 'correlation' – 1 mínus Pearsonův korelační koeficient
- 'spearman' – 1 mínus Spearmanův korelační koeficient
- 'hamming' – Hamminova vzdálenost (pro kvalitativní proměnné)
- 'jaccard' – 1 mínus Jaccardův koeficient
- lze případně nadefinovat i jinou metriku

Matlab – hierarchické aglomerativní shlukování

- funkce *linkage*, která umožňuje volbu shlukovacího algoritmu i volbu metriky vzdálenosti mezi objekty (subjekty)
- volba shlukovacího algoritmu:
 - „average“ – metoda průměrné vazby (nevážená) (average linkage)
 - „centroid“ – centroidová metoda (nevážená)
 - „complete“ – metoda nejvzdálenějšího souseda (complete linkage)
 - „median“ – centroidová metoda (vážená) = mediánová metoda
 - „single“ – metoda nejbližšího souseda (single linkage)
 - „ward“ – Wardova metoda
 - „weighted“ – metoda průměrné vazby (vážená)
- volba metriky vzdáleností – stejná nabídka jako u funkce *pdist*
- ukázka:

```
[num, txt] = xlsread('Data_neuro_shlukovky.xlsx',1);  
data=num(:,[23,24,26]);
```

```
Z=linkage(data,'complete','euclidean'); % provedeni shlukove analyzy  
dendrogram(Z) % vykresleni dendrogramu
```

```
c=cluster(Z,'maxclust',3); % vytvoreni definovaneho poctu shluku  
crosstab(c,num(:,3)) % zjistení, kolik subjektu bylo spatne zarazenych
```

Matlab – nehierarchické shlukování

- funkce *kmeans*
- ukázka:

```
[idx,C]=kmeans(data,3); % provedeni shlukove analyzy (matice C – centroidy skupin)  
crosstab(idx,num(:,3)) % zjisteni, kolik subjektu bylo spatne zarazenych
```

- funkce *kmedoids*
- bohužel není ve starých verzích Matlabu
- ukázka:

```
[idx,C]=kmedoids(data,3); % provedeni shlukove analyzy (matice C – medoidy skupin)  
crosstab(idx,num(:,3)) % zjisteni, kolik subjektu bylo spatne zarazenych
```