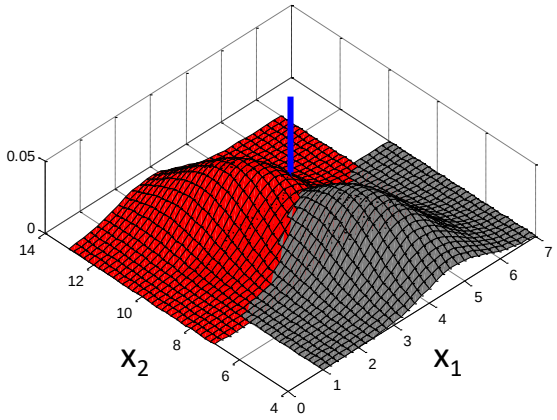
Analýza a klasifikace dat – přednáška 3

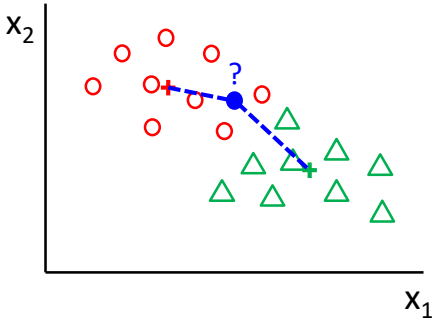
RNDr. Eva Koriťáková, Ph.D.

Typy klasifikátorů – podle principu klasifikace

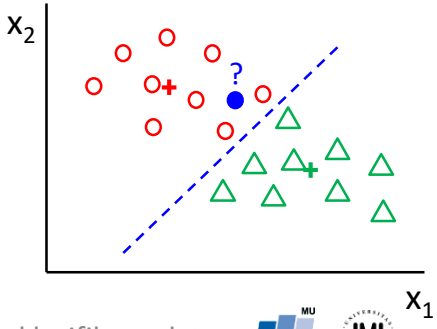
- **klasifikace pomocí diskriminačních funkcí:**
  - diskriminační funkce určují míru příslušnosti k dané klasifikační třídě
  - pro danou třídu má daná diskriminační funkce nejvyšší hodnotu



- **klasifikace pomocí vzdálenosti od etalonů klasif. tříd:**
  - etalon = reprezentativní objekt(y) klasifikační třídy
  - počet etalonů klasif. třídy různý – od jednoho vzorku (např. centroidu) po úplný výčet všech objektů dané třídy (např. u klasif. pomocí metody průměrné vazby)



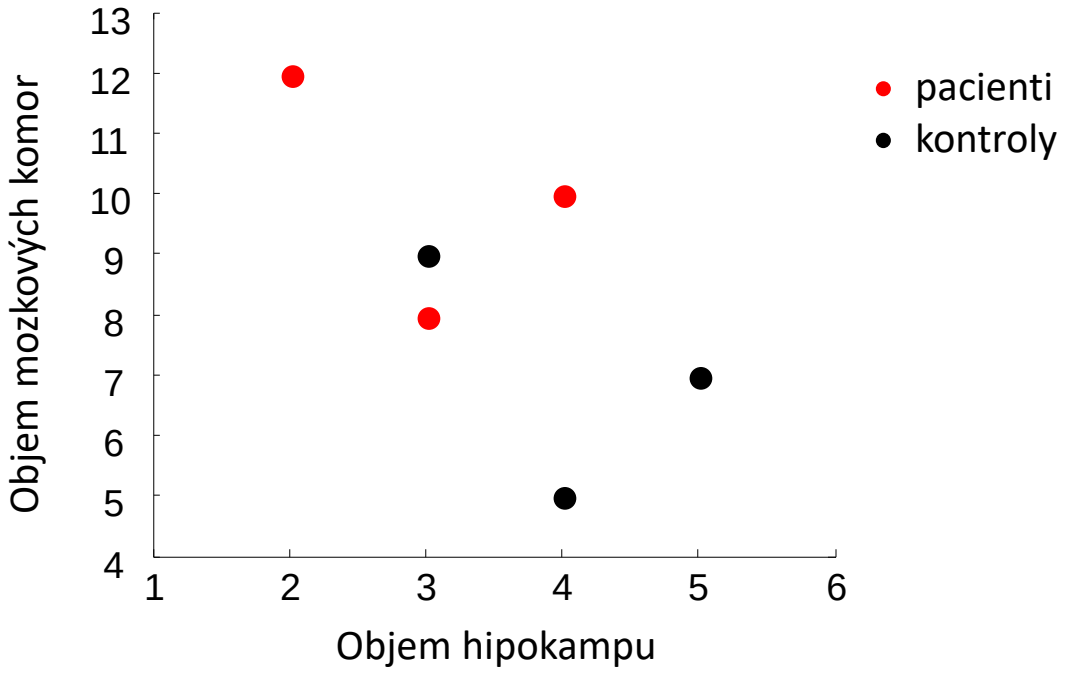
- **klasifikace pomocí hranic v obrazovém prostoru:**
  - stanovení hranic (hraničních ploch) oddělujících klasifikační třídy



Poznámka

- jednotlivé objekty je možno znázornit pomocí bodů v *p*-rozměrném prostoru (*p* je počet proměnných)

$$\mathbf{X}_D = \begin{bmatrix} 2 & 12 \\ 4 & 10 \\ 3 & 8 \end{bmatrix}, \mathbf{X}_H = \begin{bmatrix} 5 & 7 \\ 3 & 9 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}$$



Metrika – vzdálenost

Metrika D na X je funkce D: $X \times X \rightarrow R$, kde R je množina reálných čísel taková, že:

$$\exists D_0 \in R: -\infty < D_0 \leq D(x,y) < +\infty, \forall x,y \in X$$

$$D(x,x) = D_0, \forall x \in X$$

a

$$D(x,y) = D(y,x), \forall x,y \in X \textit{ (symetrie)}$$

$D(x, y) = D_0$ když a jen když x = y *(totožnost)*

$D(x, z) \leq D(x, y) + D(y, z), \forall x,y,z \in X$ *(Δ nerovnost)*

Prostor X, ve kterém metrika D definována, nazýváme **metrickým prostorem**.

Vzdálenost je hodnota určená podle metriky.

Poznámka: zpravidla D_0=0.

Metrika – podobnost

Metrická míra podobnosti S na X je funkce S: X × X → R, taková, že:

$$\exists\, S_0 \in \mathrm{R}: -\infty < S(x,y) \leq S_0 < +\infty,\ \forall x,y \in X$$

$$S(x,x) = S_0,\ \forall x \in X$$

a

$$S(x,y) = S(y,x),\ \forall x,y \in X \textit{ (symetrie)}$$

$$S(x,y) = S_0 \text{ když a jen když } x = y \textit{ (totožnost)}$$

$$S(x,y)\cdot S(y,z) \leq [S(x,y) + S(y,z)]\cdot S(x,z),\ \forall x,y,z \in X$$

Podobnost je hodnota určená podle metrické míry podobnosti.

Poznámka: zpravidla S_0=1 (ale neplatí to vždy, u některých metrik je maximální hodnota podobnosti jiná než 1)

Metriky podobnosti vs. metriky vzdálenosti

Vzdálenostní míry (míry nepodobnosti) mohou být transformovány na podobnostní míry různými transformacemi, např.:

$$S_{ij} = 1/D_{ij}$$

$$S_{ij} = 1/(1+ D_{ij})$$

$$S_{ij} = c - D_{ij},\ c \geq \max D_{ij},\ \forall i,j$$

Obdobně mohou být i podobnostní míry transformovány na vzdálenostní míry (využívá se např. u klasifikací).

Typy měr vzdálenosti (podobnosti)

- podle **typu proměnné** (kvalitativní proměnné, kvantitativní proměnné)
- podle **počtu objektů**, jejichž vztah hodnotíme – objekty (vektory), množiny objektů (vektorů)
- **deterministické** (nepravděpodobností) vs. **pravděpodobností míry**

- výběr konkrétní metriky závisí na:
  - výpočetních nárocích
  - charakteru rozložení dat
  - dosažení optimálních výsledků (klasifikační chyba, ztráta,...)

- obecně bohužel není možné dopředu doporučit vhodnou metriku pro danou situaci

- chybný výběr metriky může vést k chybných závěrům analýzy (stejně jako v klasické statistické analýze výběr nevhodného testu)

Typy metrik a konkrétní příklady

MEZI DVĚMA OBJEKTY

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvantitativními proměnnými

Euklidova m., Hammingova (manhattanská) m., Minkovského m., Čebyševova m., Mahalanobisova m., Canberrská m.

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvalitativními proměnnými

Hammingova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvantitativními proměnnými

Skalární součin, m. kosinové podobnosti, Pearsonův korelační koeficient, Tanimotova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvalitativními proměnnými

Tanimotova m., Jaccardův-Tanimotův a.k., Russelův-Raovův a.k., Sokalův-Michenerův a.k., Dicův k., Rogersův-Tanimotův k., Hamanův k.

MEZI DVĚMA SKUPINAMI OBJEKTŮ

Deterministické metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů

Metoda nejbližšího souseda, *k* nejbližších sousedů, nejvzdálenějšího souseda, centroidová metoda, m. průměrné vazby, Wardova metoda

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů používající jejich pravděpodobnostní charakteristiky

Chernoffova m., Bhattacharyyova m. atd.

Metriky pro určení vzdálenosti mezi dvěma objekty

Typy metrik a konkrétní příklady

MEZI DVĚMA OBJEKTY

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvantitativními proměnnými

Euklidova m., Hammingova (manhattanská) m., Minkovského m., Čebyševova m., Mahalanobisova m., Canberrská m.

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvalitativními proměnnými

Hammingova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvantitativními proměnnými

Skalární součin, m. kosinové podobnosti, Pearsonův korelační koeficient, Tanimotova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvalitativními proměnnými

Tanimotova m., Jaccardův-Tanimotův a.k., Russelův-Raovův a.k., Sokalův-Michenerův a.k., Dicův k., Rogersův-Tanimotův k., Hamanův k.

MEZI DVĚMA SKUPINAMI OBJEKTŮ

Deterministické metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů

Metoda nejbližšího souseda, *k* nejbližších sousedů, nejvzdálenějšího souseda, centroidová metoda, m. průměrné vazby, Wardova metoda

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů používající jejich pravděpodobnostní charakteristiky

Chernoffova m., Bhattacharyyova m. atd.

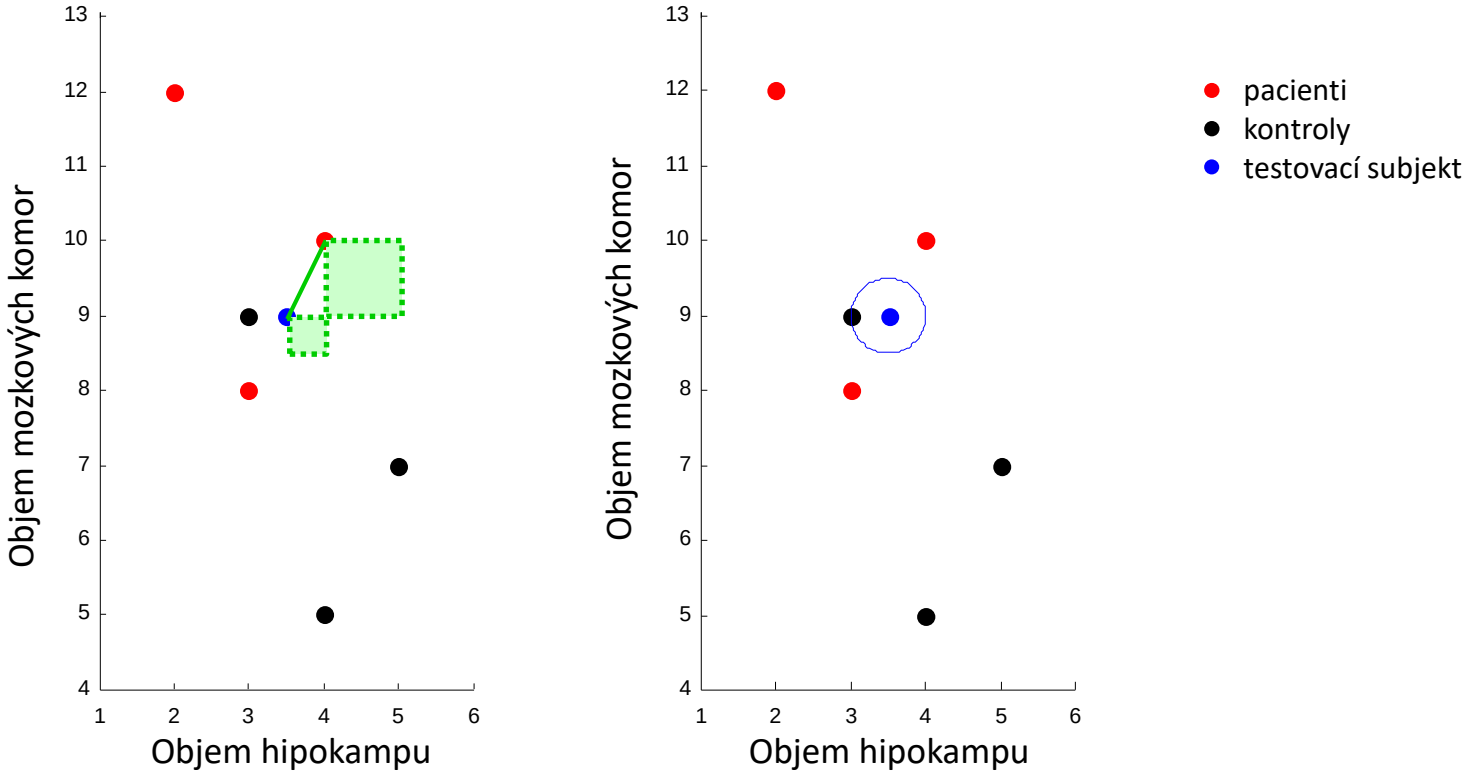
Nejpoužívanější metriky pro určení vzdálenosti mezi dvěma objekty s kvantitativními proměnnými

- Euklidova metrika
- Hammingova (manhattanská) metrika
- Minkovského metrika
- Čebyševova metrika
- Mahalanobisova metrika
- Canberrská metrika

Euklidova metrika

- zřejmě nejpoužívanější metrika s velmi názornou geometrickou interpretací

$$D_E(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (\mathrm{x}_{1i} - \mathrm{x}_{2i})^2}$$



Euklidova metrika

- zřejmě nejpoužívanější metrika s velmi názornou geometrickou interpretací

$$D_E(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (\mathrm{x}_{1i} - \mathrm{x}_{2i})^2}$$

- geometrickým místem bodů s toutéž Euklidovou vzdáleností od daného bodu je povrch hyperkoule (ve dvourozměrném prostoru kružnice)

- dává větší důraz na větší rozdíly mezi souřadnicemi

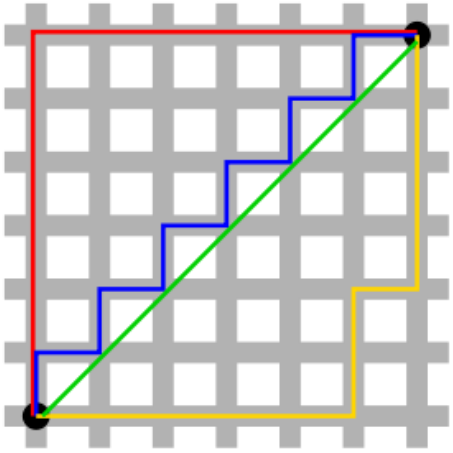
  žádoucí nebo nežádoucí?

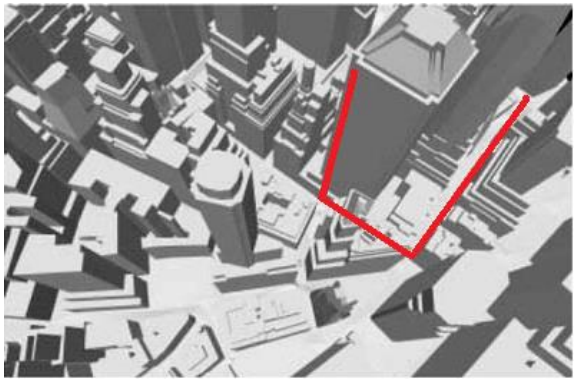
- občas se používá čtverec euklidovské vzdálenosti, protože se lépe počítá než euklidovská vzdálenost (není to ale pravá metrika vzdálenosti)

Hammingova (manhattanská) metrika

- v AJ názvy: Manhattan distance, city-block distance, taxi driver distance

$$D_H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sum_{i=1}^{n} |\mathrm{x}_{1i} - \mathrm{x}_{2i}|$$

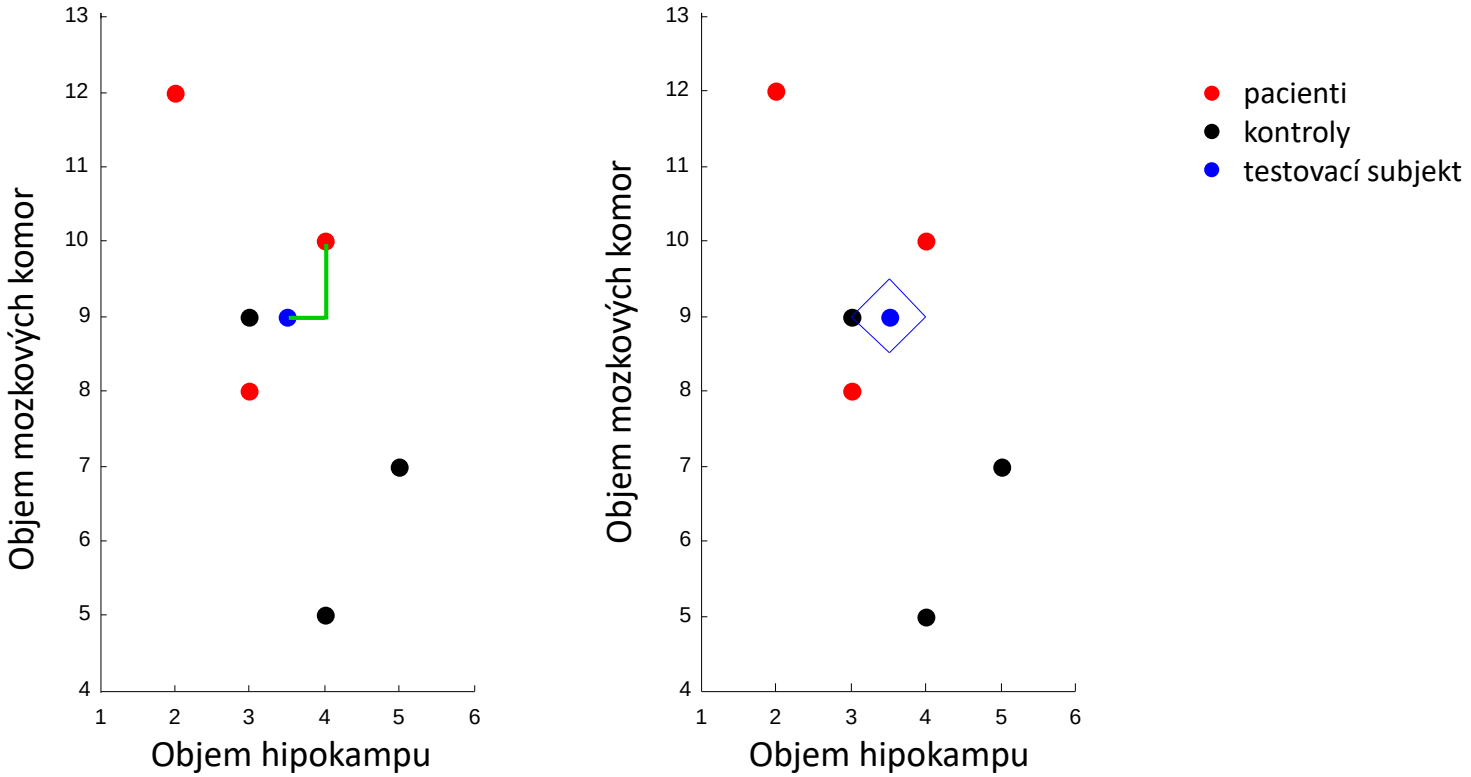




- nižší výpočetní nároky než Euklidova metrika → použití v úlohách s vysokou výpočetní náročností

Hammingova (manhattanská) metrika

$$D_H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sum_{i=1}^{n} |\mathrm{x}_{1i} - \mathrm{x}_{2i}|$$



- geometrickým místem bodů s toutéž manhattanskou vzdáleností od daného bodu je hyperkrychle (ve dvourozměrném prostoru čtverec)

Minkovského metrika

- zobecněním Euklidovy a Hammingovy (manhattanské) metriky

$$D_M(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \left(\sum_{i=1}^{n} |\mathrm{x}_{1i} - \mathrm{x}_{2i}|^m \right)^{1/m}$$

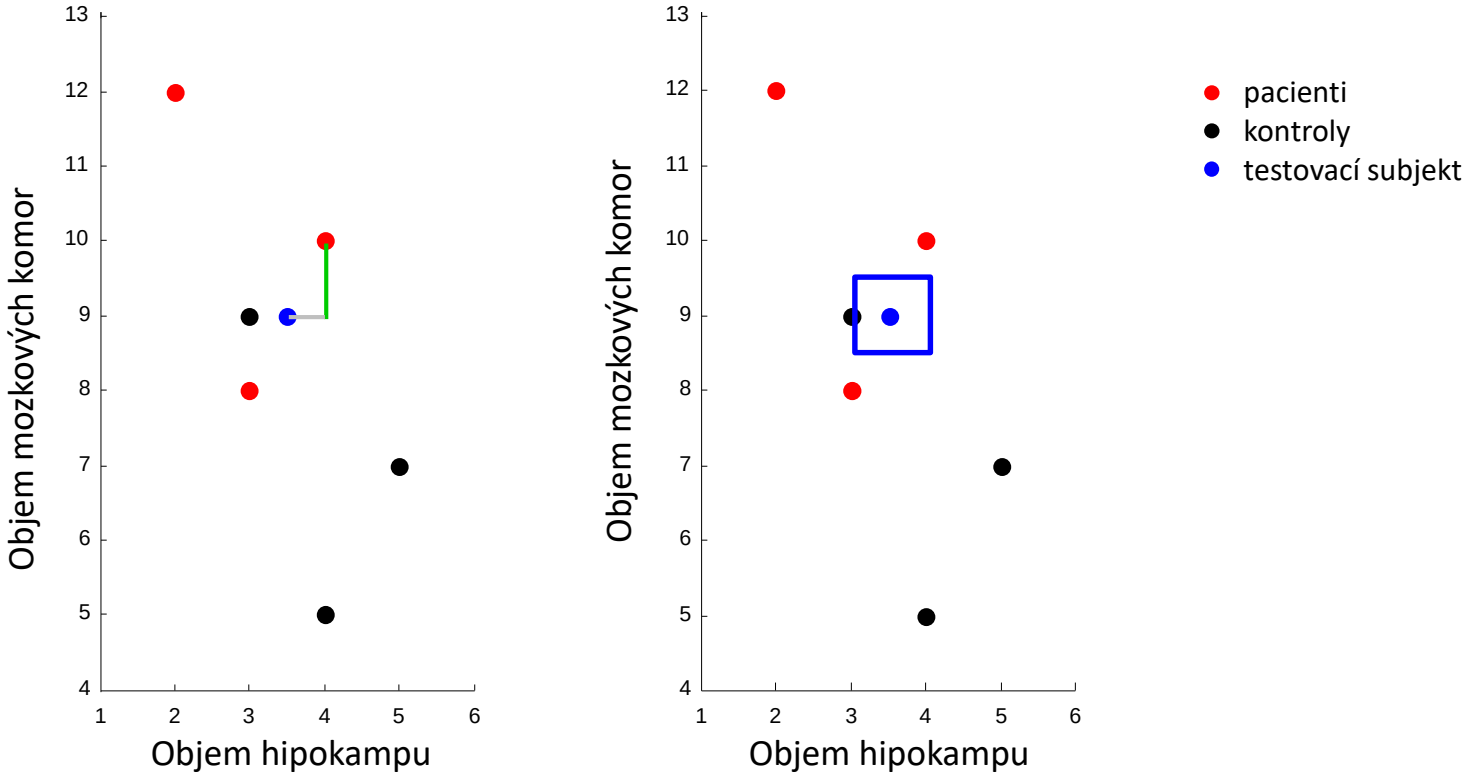
- Euklidova metrika pro $m = 2$, Hammingova (manhattanská) metrika pro $m = 1$
- volba m závisí na tom, jak moc chceme váhovat velké rozdíly mezi proměnnými (čím větší m, tím větší váha na velké rozdíly mezi proměnnými)
- pro $m \to \infty$ metrika konverguje k **Čebyševově metrice**

$$D_C(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \lim_{m \to \infty} D_M(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \max_{\forall \boldsymbol{i}} |\mathrm{x}_{1i} - \mathrm{x}_{2i}|$$

Čebyševova metrika

- odvozena z Minkovského metriky pro $m \to \infty$

$$D_C(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \max_{\forall \boldsymbol{i}} |\mathrm{x}_{1i} - \mathrm{x}_{2i}|$$



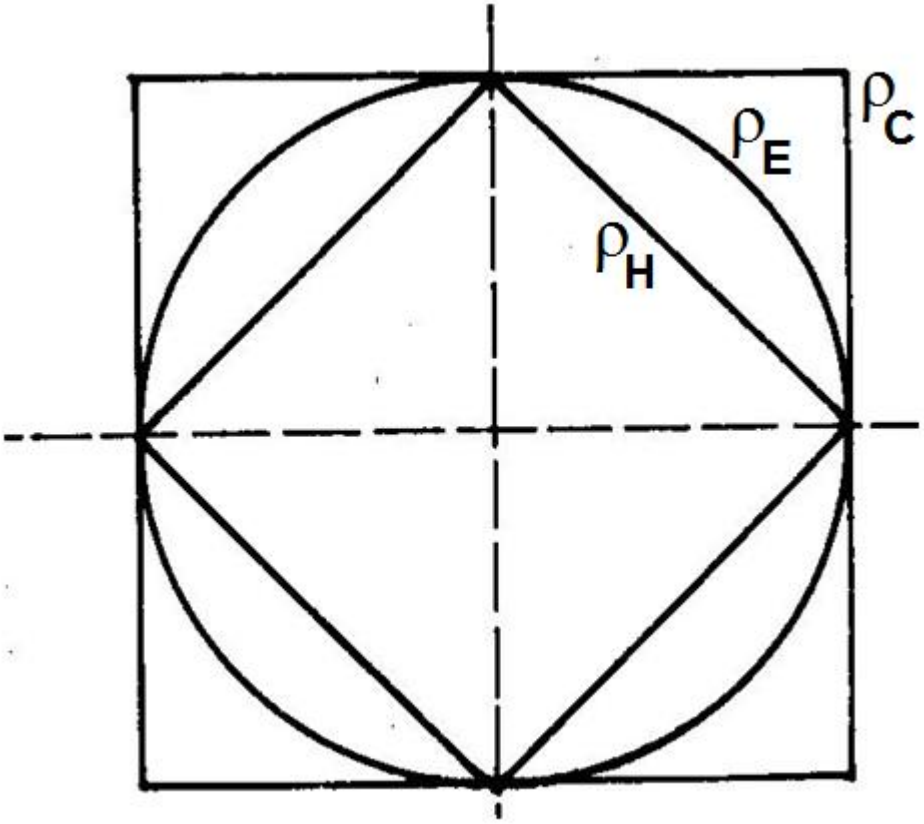
Čebyševova metrika

- odvozena z Minkovského metriky pro $m \to \infty$

$$D_C(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \max_{\forall \boldsymbol{i}} |\mathrm{x}_{1i} - \mathrm{x}_{2i}|$$

- používá se ve výpočetně kriticky náročných případech, kdy je pracnost výpočtu pomocí Euklidovy metriky nepřijatelná
- geometrickým místem bodů s toutéž Čebyševovou vzdáleností od daného bodu je hyperkrychle (ve dvourozměrném prostoru čtverec), ale jinak orientovaná než v případě Hammingovy (manhattanské) vzdálenosti

Srovnání metrik



ρ_C ... Čebyševova metrika
ρ_E ... Euklidova metrika
ρ_H ... Hammingova (manhattanská) metrika

Srovnání metrik

- pokud je potřeba použít „euklidovskou“ metriku, ale s nižší výpočetní náročností, používá se v první řadě Hammingova nebo Čebyševova metrika

- případně kombinace obou metrik:

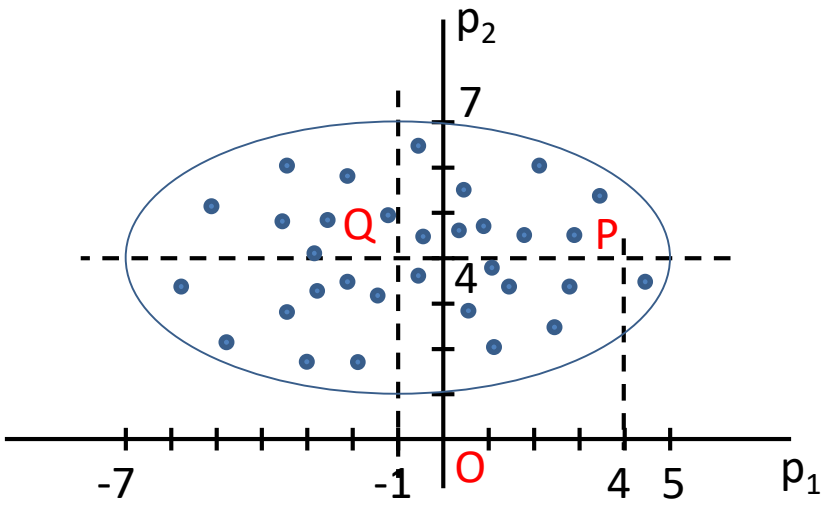
$$D_A(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \max(2D_H/3; D_C)$$

- geometrickým místem bodů s toutéž vzdáleností je pak ve dvourozměrném prostoru osmiúhelník

Problematické situace při výpočtu metrik

- je zpravidla problematické vytvářet součet rozdílů veličin s různým rozsahem
- při začlenění korelovaných veličin se zvyšuje jejich vliv na výslednou hodnotu
- řešení:
  1. transformace proměnných:
     - vztažení k nějakému vyrovnávacímu faktoru (střední hodnotě, směrodatné odchylce, rozpětí Δ_i = $\max_j x_{ij}$ - $\min_j x_{ij}$) či pomocí standardizace $u_{ij} = \frac{x_{ij} - \bar{x}_j}{\sigma_j}$; $i = 1, \ldots, n; j = 1, \ldots, p$; kde n je počet subjektů a p je počet proměnných
  2. váhování:
     - např. **Minkovského váhovaná metrika**: $D_{WM}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (\sum_{i=1}^{n} a_i \cdot |x_{1i} -$
  3. začlenění kovarianční matice do výpočtu:
     - začleněním inverze kovarianční matice získáváme **Mahalanobisovu metriku** (což je Euklidova metrika váhovaná inverzí kovarianční matice): $D_{MA}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sqrt{(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^T \cdot \mathbf{S}^{-1} \cdot (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}$

Ukázka, že Euklidova metrika není vždy vhodná I



Euklidova metrika:

$$D_E(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sqrt{(x_{11} - x_{21})^2 + (x_{12} - x_{22})^2}$$

„Statistická“ metrika:

$$D_S(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sqrt{\frac{(x_{11}-x_{21})^2}{s_{11}} + \frac{(x_{12}-x_{22})^2}{s_{22}}}$$

s_{11} a s_{22} – rozptyly proměnných p_1 a p_2

Který z bodů O či P má kratší vzdálenost k bodu Q?

$$d_E(\mathrm{Q}, \mathrm{O}) = \sqrt{(-1-0)^2 + (4-0)^2} = \sqrt{1+16} \approx 4{,}12$$

$$d_E(\mathrm{Q}, \mathrm{P}) = \sqrt{(-1-4)^2 + (4-4)^2} = \sqrt{25+0} = 5$$

$$d_S(\mathrm{Q}, \mathrm{O}) = \sqrt{\frac{(-1-0)^2}{4} + \frac{(4-0)^2}{1}} = \sqrt{0{,}25+16} \approx 4{,}03$$

$$d_S(\mathrm{Q}, \mathrm{P}) = \sqrt{\frac{(-1-4)^2}{4} + \frac{(4-4)^2}{1}} = \sqrt{\frac{25}{4}+0} = 2{,}5$$

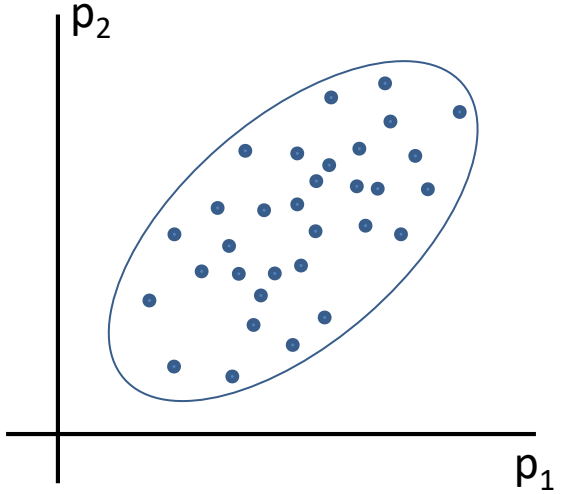
Podle Euklidovy metriky má blíž k bodu Q bod O, ale ten přitom do shluku vůbec nepatří!

Podle „statistické“ metriky má blíž k bodu Q bod P.

→ při různém rozptylu proměnných může Euklidova metrika vést ke zkreslujícím výsledkům

Ukázka, že Euklidova metrika není vždy vhodná II

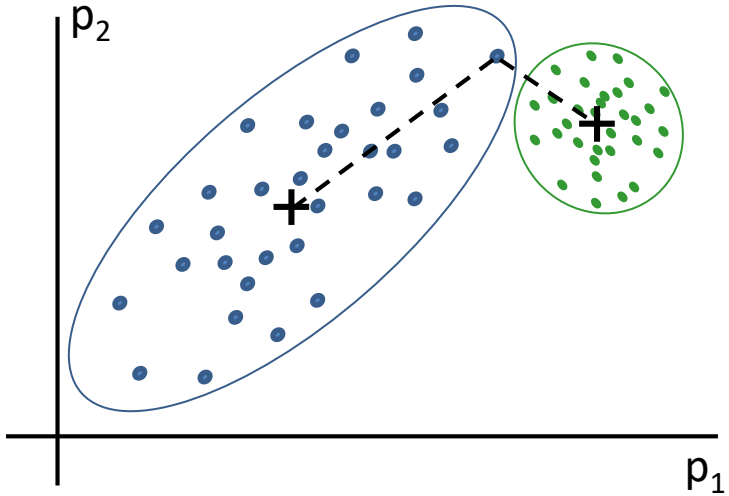
Může nastat ještě komplikovanější situace, kdy mají proměnné nejen různý rozptyl, ale proměnné jsou korelované:



→ **pak je vhodné použít Mahalanobisovu metriku** (což je Euklidova metrika váhovaná inverzí kovarianční matice):

$$D_{MA}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sqrt{(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^T \cdot \mathbf{S}^{-1} \cdot (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}$$

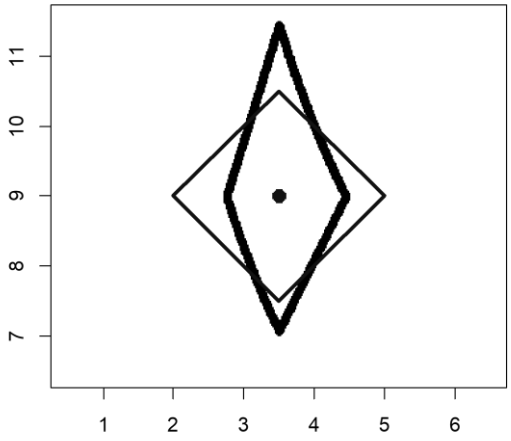
Ukázka, kdy by Euklidova metrika určila, že daný bod patří do zeleného shluku, přitom ale patří do modrého shluku:



Canberrská metrika

- relativizovaná varianta Hammingovy (manhattanské) metriky

$$D_{CA}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sum_{i=1}^{n} \frac{|\mathrm{x}_{1i} - \mathrm{x}_{2i}|}{|\mathrm{x}_{1i}| + |\mathrm{x}_{2i}|}$$



- vhodná pro proměnné s nezápornými hodnotami
- pokud se vyskytují nulové hodnoty:
  - pokud jsou obě hodnoty x_{1i} a x_{2i} nulové, potom předpokládáme, že hodnota zlomku je nulová
  - je-li jenom jedna hodnota nulová, pak je zlomek roven 1 bez ohledu na velikost druhé hodnoty
  - někdy se nulové hodnoty nahrazují malým kladným číslem (menším než nejmenší naměřené hodnoty)
- velice citlivá na malé změny souřadnic, pokud se oba objekty nacházejí v blízkosti počátku souřadnicové soustavy; naopak méně citlivá na změny hodnot proměnných, pokud jsou tyto hodnoty velké

Příklad 1a

Jsou dány dva vektory $\mathbf{x}_1 = (0{,}001; 0{,}001)^T$ a $\mathbf{x}_2 = (0{,}01; 0{,}01)^T$. Předpokládejme, že se souřadnice prvního vektoru změní na $\mathbf{x}'_1 = (0{,}002; 0{,}001)^T$. Jaká je Hammingova (manhattanská) a canberrská vzdálenost v obou případech a jaká je relativní změna vzdáleností, vyvolaná uvedenou modifikací?

$$d_H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = |0{,}001 - 0{,}01| + |0{,}001 - 0{,}01| = 0{,}009 + 0{,}009 = 0{,}018$$
$$d_H(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}_2) = |0{,}002 - 0{,}01| + |0{,}001 - 0{,}01| = 0{,}008 + 0{,}009 = 0{,}017$$

$$d_{CA}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{|0{,}001-0{,}01|}{|0{,}001|+|0{,}01|} + \frac{|0{,}001-0{,}01|}{|0{,}001|+|0{,}01|} = \frac{0{,}009}{0{,}011} + \frac{0{,}009}{0{,}011} = 1{,}6364$$
$$d_{CA}(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}_2) = \frac{|0{,}002-0{,}01|}{|0{,}002|+|0{,}01|} + \frac{|0{,}001-0{,}01|}{|0{,}001|+|0{,}01|} = \frac{0{,}008}{0{,}012} + \frac{0{,}009}{0{,}011} = 1{,}4849$$

Relativní změny vzdáleností, určující citlivost té které metriky, které jsou způsobeny změnou hodnoty první souřadnice, jsou:

$$\Delta d_H = \frac{|d_H(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) - d_H(\mathbf{x}'_1,\mathbf{x}_2)|}{d_H(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)} = \frac{|0{,}018-0{,}017|}{0{,}018} = \frac{0{,}001}{0{,}018} = 0{,}056$$
$$\Delta d_{CA} = \frac{|d_{CA}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) - d_{CA}(\mathbf{x}'_1,\mathbf{x}_2)|}{d_{CA}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)} = \frac{|1{,}6364-1{,}4849|}{1{,}6364} = 0{,}093$$

Ze získaných výsledků je zřejmé, že relativní změna vzdáleností je v případě canberrské metriky pro toto zadání téměř dvakrát větší.

Příklad 1b

Nyní mějme dány dva vektory $\mathbf{x}_1 = (1000; 1000)^T$ a $\mathbf{x}_2 = (100; 100)^T$ a předpokládejme, že se souřadnice prvního vektoru změní na $\mathbf{x}'_1 = (1002; 1000)^T$. Jaká je Hammingova (manhattanská) a canberrská vzdálenost v obou případech a jaká je relativní změna vzdáleností, vyvolaná uvedenou modifikací?

$$d_H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = |1000 - 100| + |1000 - 100| = 900 + 900 = 1800$$
$$d_H(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}_2) = |1002 - 100| + |1000 - 100| = 902 + 900 = 1802$$

$$d_{CA}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{|1000-100|}{|1000|+|100|} + \frac{|1000-100|}{|1000|+|100|} = \frac{900}{1100} + \frac{900}{1100} = 1{,}6364$$
$$d_{CA}(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}_2) = \frac{|1002-100|}{|1002|+|100|} + \frac{|1000-100|}{|1000|+|100|} = \frac{902}{1102} + \frac{900}{1100} = 1{,}6367$$

Relativní změny vzdáleností, určující citlivost té které metriky, které jsou způsobeny změnou hodnoty první souřadnice, jsou:

$$\Delta d_H = \frac{|d_H(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) - d_H(\mathbf{x}'_1,\mathbf{x}_2)|}{d_H(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)} = \frac{|1800-1802|}{1800} = \frac{2}{1800} = 0{,}0011$$
$$\Delta d_{CA} = \frac{|d_{CA}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) - d_{CA}(\mathbf{x}'_1,\mathbf{x}_2)|}{d_{CA}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)} = \frac{|1{,}6364-1{,}6367|}{1{,}6364} = 0{,}00018$$

Ze získaných výsledků je zřejmé, že citlivost canberrské metriky je v tomto případě řádově nižší.

Nelineární metrika

$$\rho_N(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)=\begin{cases}0 & \text{když } \rho_E(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)<D\\ H & \text{když } \rho_E(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\geq D\end{cases}$$

- kde D je prahová hodnota a H je nějaká konstanta
- i když existují doporučení, jak volit obě hodnoty na základě statistických vlastností vektorového prostoru (např. pomocí $H=\frac{\Gamma(n/2)}{D^n\sqrt{\pi^n}}$), výhodnější je volit obě hodnoty na základě expertní analýzy řešeného problému

- ve vztahu může figurovat jakákoliv metrika vzdálenosti, nejen Euklidova metrika

Typy metrik a konkrétní příklady

MEZI DVĚMA OBJEKTY

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvantitativními proměnnými

Euklidova m., Hammingova (manhattanská) m., Minkovského m., Čebyševova m., Mahalanobisova m., Canberrská m.

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvalitativními proměnnými

Hammingova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvantitativními proměnnými

Skalární součin, m. kosinové podobnosti, Pearsonův korelační koeficient, Tanimotova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvalitativními proměnnými

Tanimotova m., Jaccardův-Tanimotův a.k., Russelův-Raovův a.k., Sokalův-Michenerův a.k., Dicův k., Rogersův-Tanimotův k., Hamanův k.

MEZI DVĚMA SKUPINAMI OBJEKTŮ

Deterministické metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů

Metoda nejbližšího souseda, *k* nejbližších sousedů, nejvzdálenějšího souseda, centroidová metoda, m. průměrné vazby, Wardova metoda

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů používající jejich pravděpodobnostní charakteristiky

Chernoffova m., Bhattacharyyova m. atd.

Příklad

Předpokládejme, že množina F obsahuje symboly {0, 1, 2}, tj. $k = 3$ a vektory **x** a **y** jsou následující 6-prvkové vektory (tj. $p = 6$):

$\mathbf{x} = (0, 1, 2, 1, 2, 1)^T$
$\mathbf{y} = (1, 0, 2, 1, 0, 1)^T$

Spočtěte vzdálenost obou vektorů.

Kontingenční matice **A**(**x**,**y**) je:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Součet hodnot všech prvků matice **A**(**x**,**y**) je roven délce *p* obou vektorů, tj. v našem případě:

$$\sum_{i=0}^{2}\sum_{j=0}^{2} a_{ij} = 6$$

Hammingova metrika vzdálenosti

$$D_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=0}^{k-1} \sum_{\substack{j=0 \\ i \neq j}}^{k-1} a_{ij}$$

- definována počtem pozic, v nichž se oba vektory liší
- tzn. je dána součtem všech prvků matice **A**, které leží mimo hlavní diagonálu.

Příklad:

$\mathbf{x} = (0, 1, 2, 1, 2, 1)^T$
$\mathbf{y} = (1, 0, 2, 1, 0, 1)^T$

↓

liší se ve 3 souřadnicích

↓

$d_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 3$

$$\mathbf{A}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

↓

3 prvky mimo diagonálu

↓

$d_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 3$

Hammingova metrika vzdálenosti

- pro *k* = 2, kdy jsou hodnoty obou vektorů binární, se definiční vztah Hammingovy vzdálenosti transformuje na:

$$D_{HQB}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{p}(x_i + y_i - 2x_i y_i)$$

kde třetí člen v závorce kompenzuje případ, kdy jsou hodnoty x_i i y_i rovny jedné a součet prvních členů v závorce je tím pádem roven dvěma, nicméně nastává shoda hodnot, která k celkové vzdálenosti nemůže přispět.

- protože x_i a y_i nabývají hodnot pouze 0 a 1, můžeme také psát:

$$D_{HQB}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{p}(x_i^2 + y_i^2 - 2x_i y_i) = \sum_{i=1}^{p}(x_i - y_i)^2$$

- díky speciálnímu případu hodnot x_i a y_i je možná i nejjednodušší forma:

$$D_{HQB}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{p}|x_i - y_i|$$

Hammingova metrika vzdálenosti – příklad 2

Určete Hammingovu vzdálenost binárních vektorů
x = $(0, 1, 1, 0, 1)^T$ a
y = $(1, 0, 0, 0, 1)^T$.

Podle definičního principu (tzn. počet pozic, ve kterých se oba vektory liší):

$$d_{HQB}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 3$$

Dle jiného vztahu: $d_{HQB}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{p}(x_i + y_i - 2x_i y_i) =$

$$= (0+1-2\cdot 0\cdot 1) + (1+0-2\cdot 1\cdot 0) + (1+0-2\cdot 1\cdot 0) + (0+0-2\cdot 0\cdot 0) + (1+1-2\cdot 1\cdot 1) = 3$$

Dle dalšího vztahu: $d_{HQB}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{p}(x_i - y_i)^2 =$

$$= (0-1)^2 + (1-0)^2 + (1-0)^2 + (0-0)^2 + (1-1)^2 = 1+1+1+0+0 = 3$$

Dle posledního vztahu: $d_{HQB}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{p}|x_i - y_i| =$

$$= |0-1| + |1-0| + |1-0| + |0-0| + |1-1| =$$
$$= 1+1+1+0+0 = 3$$

Hammingova metrika vzdálenosti

V případě bipolárních vektorů, kdy jednotlivé složky vektorů nabývají hodnot +1 a -1, je Hammingova vzdálenost určena vztahem:

$$D_{HQP}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{\left(p - \sum_{i=1}^{p} x_i y_i\right)}{2}$$

Příklad 3:

Určete Hammingovu vzdálenost bipolárních vektorů
x = $(1, 1, 1, -1, 1)^T$ a
y = $(1, -1, 1, -1, -1)^T$.

Podle definičního principu (tzn. počet pozic, ve kterých se liší): $d_{HQP}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 2$

Z kontingenční matice (součet prvků mimo hlavní diagonálu): $\mathbf{A}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

Pomocí vztahu:

$$d_{HQP}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{5 - \left((1\cdot 1) + (1\cdot(-1)) + (1\cdot 1) + ((-1)\cdot(-1)) + (1\cdot(-1))\right)}{2} = \frac{5 - (1-1+1+1-1)}{2} = \frac{5-1}{2} = 2$$

Metriky pro určení podobnosti mezi dvěma objekty

Typy metrik a konkrétní příklady

MEZI DVĚMA OBJEKTY

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvantitativními proměnnými

Euklidova m., Hammingova (manhattanská) m., Minkovského m., Čebyševova m., Mahalanobisova m., Canberrská m.

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvalitativními proměnnými

Hammingova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvantitativními proměnnými

Skalární součin, m. kosinové podobnosti, Pearsonův korelační koeficient, Tanimotova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvalitativními proměnnými

Tanimotova m., Jaccardův-Tanimotův a.k., Russelův-Raovův a.k., Sokalův-Michenerův a.k., Dicův k., Rogersův-Tanimotův k., Hamanův k.

MEZI DVĚMA SKUPINAMI OBJEKTŮ

Deterministické metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů

Metoda nejbližšího souseda, *k* nejbližších sousedů, nejvzdálenějšího souseda, centroidová metoda, m. průměrné vazby, Wardova metoda

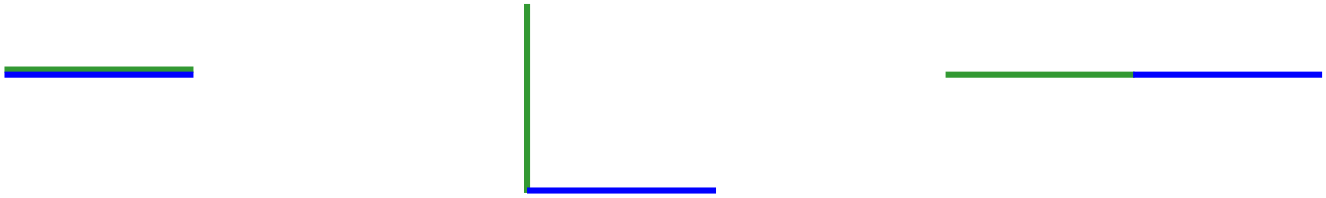
Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů používající jejich pravděpodobnostní charakteristiky

Chernoffova m., Bhattacharyyova m. atd.

Skalární součin

$$S_{ss}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \mathbf{x}_1^T . \mathbf{x}_2 = \sum_{i=1}^{n} x_{1i} x_{2i}$$

Většinou pro vektory $\mathbf{x}_1$ a $\mathbf{x}_2$ o stejné délce (např. a); záleží na úhlu, který svírají:



úhel 0°
$S_{ss} = a^2$

úhel 90°
$S_{ss} = 0$

úhel 180°
$S_{ss} = -a^2$

- skalární součin invariantní vůči rotaci – absolutní orientace nepodstatná, důležitý pouze úhel
- skalární součin není invariantní vůči lineární transformaci (tzn. závisí na délce vektorů)

odvození metriky vzdálenosti:

$$D_{ss}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = a^2 - S_{ss}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$$

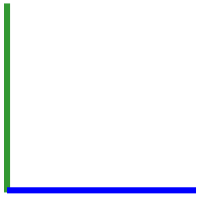
Metrika kosinové podobnosti

$$S_{\cos}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{\mathbf{x}_1^T . \mathbf{x}_2}{\|\mathbf{x}_1\| . \|\mathbf{x}_2\|}$$

kde $\|x_i\|$ je norma (délka) vektoru $\mathbf{x}_i$
= skalární součin vektorů o jednotkové délce

- vhodná v případě, pokud je informativní pouze relativní hodnota příznaků
- hodnoty $\sigma_{cos}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ jsou rovny kosinu úhlu mezi oběma vektory

úhel 0°
$S_{cos} = 1$



úhel 90°
$S_{cos} = 0$

úhel 180°
$S_{cos} = -1$

Pearsonův korelační koeficient

Pearsonův korelační koeficient

$$S_{PC}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{\mathbf{x}_{d1}^T . \mathbf{x}_{d2}}{\|\mathbf{x}_{d1}\| . \|\mathbf{x}_{d2}\|}$$

Metrika kosinové podobnosti

$$S_{\cos}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{\mathbf{x}_1^T . \mathbf{x}_2}{\|\mathbf{x}_1\| . \|\mathbf{x}_2\|}$$

kde $\mathbf{x}_{di} = \left(x_{i1} - \bar{x}_i, x_{i2} - \bar{x}_i, \ldots, x_{ip} - \bar{x}_i\right)^T$

$\mathbf{x}_{di}$ jsou tzv. diferenční vektory

také nabývá hodnot z intervalu ⟨-1;1⟩

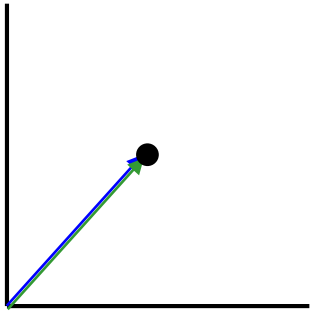
odvození metriky vzdálenosti:

$$D_{PC}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1 - S_{PC}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)}{2}$$

→ hodnoty se (díky dělení dvěma) vyskytují v intervalu ⟨0;1⟩

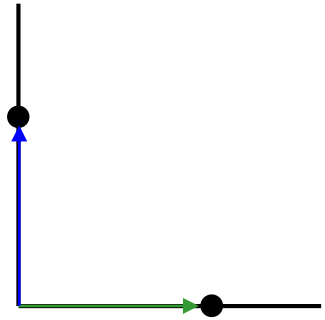
→ používá se např. při analýze dat genové exprese

Ilustrace



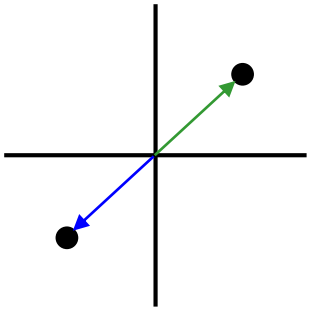
Podobnost objektu od sebe sama → vektory svírají úhel 0°

$S_{cos} = S_{PC} = 1$



2 zcela nepodobné objekty → vektory svírají úhel 90°

$S_{cos} = S_{PC} = 0$

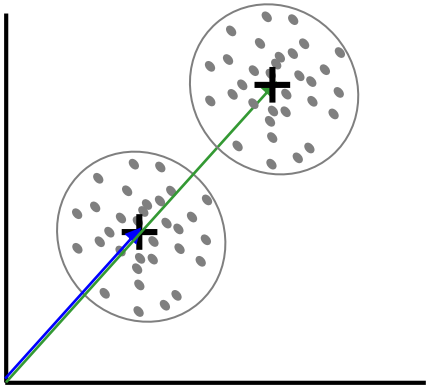


2 objekty se souřadnicemi zcela opačnými → vektory svírají úhel 180°

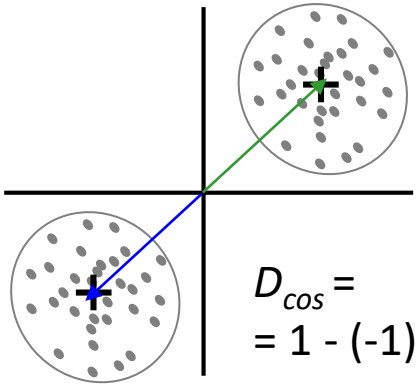
$S_{cos} = S_{PC} = -1$

Pozor! V tomto případě bude podobnost centroidů 1, tzn. po převedení na vzdálenost dostaneme 0!

$D_{cos} = 1 - S_{cos} = 1 - 1 = 0$



je vhodné data centrovat



$D_{cos} =$
$= 1 - (-1) = 2$

Tanimotova metrika podobnosti

$$S_T(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{\mathbf{x}_1^T \mathbf{x}_2}{\|\mathbf{x}_1\|^2 + \|\mathbf{x}_2\|^2 - \mathbf{x}_1^T \mathbf{x}_2}$$

Přičteme-li a odečteme-li ve jmenovateli výraz $\mathbf{x}_1^T\mathbf{x}_2$ a podělíme-li čitatele i jmenovatele zlomku toutéž hodnotou, dostaneme

$$S_T(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{1 + \frac{(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^T (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}{\mathbf{x}_1^T \mathbf{x}_2}}$$

Tanimotova podobnost vektorů $\mathbf{x}_1$ a $\mathbf{x}_2$ je nepřímo úměrná kvadrátu Euklidovy vzdálenosti vektorů $\mathbf{x}_1$ a $\mathbf{x}_2$ vztažené k jejich skalárnímu součinu. Pokud skalární součin považujeme za míru korelace obou vektorů, můžeme formulovat výše uvedený vztah tak, že $S_T(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$ je nepřímo úměrná kvadrátu Euklidovy vzdálenosti podělené velikostí jejich korelace, což znamená, že je korelaci, jako míře podobnosti přímo úměrná.

„Bezejmenná“ metrika podobnosti

$$S_C(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = 1 - \frac{D_E(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)}{\|\mathbf{x}_1\| + \|\mathbf{x}_2\|}$$

Vzdálenost podle metriky je rovna jedné,

když $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2$

a svého minima (tj. $S_C(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = -1$) nabývá,

když $\mathbf{x}_1 = -\mathbf{x}_2$.

Typy metrik a konkrétní příklady

MEZI DVĚMA OBJEKTY

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvantitativními proměnnými

Euklidova m., Hammingova (manhattanská) m., Minkovského m., Čebyševova m., Mahalanobisova m., Canberrská m.

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvalitativními proměnnými

Hammingova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvantitativními proměnnými

Skalární součin, m. kosinové podobnosti, Pearsonův korelační koeficient, Tanimotova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvalitativními proměnnými

Tanimotova m., Jaccardův-Tanimotův a.k., Russelův-Raovův a.k., Sokalův-Michenerův a.k., Dicův k., Rogersův-Tanimotův k., Hamanův k.

MEZI DVĚMA SKUPINAMI OBJEKTŮ

Deterministické metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů

Metoda nejbližšího souseda, *k* nejbližších sousedů, nejvzdálenějšího souseda, centroidová metoda, m. průměrné vazby, Wardova metoda

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů používající jejich pravděpodobnostní charakteristiky

Chernoffova m., Bhattacharyyova m. atd.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvalitativními prom.

1. případy obecné
2. případy s dichotomickými příznaky, pro které je definována celá řady tzv. ***asociačních koeficientů***.

   (Asociační koeficienty až na výjimky nabývají hodnot z intervalu $\langle 0, 1 \rangle$, hodnoty 1 v případě shody vektorů, 0 pro případ nepodobnosti.)

Obecné metriky – Hammingova metrika podobnosti

$$S_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = p - D_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y})$$

Příklad:

$\mathbf{x} = (0, 1, 2, 1, 2, 1)^T$
$\mathbf{y} = (1, 0, 2, 1, 0, 1)^T$

↓

liší se ve 3 souřadnicích

↓

$d_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 3$

↓

shoda ve 3 souřadnicích

↓

$s_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 6 - 3 = 3$

$$\mathbf{A}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

↓

3 prvky mimo diagonálu

↓

$d_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 3$

↓

součet prvků na diagonále roven 3

↓

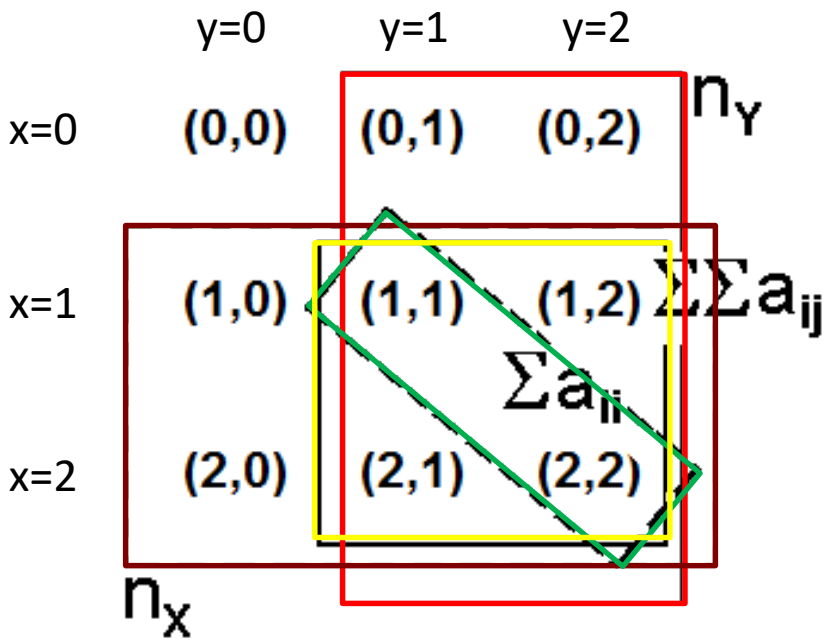
$s_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 6 - 3 = 3$

Obecné metriky – Tanimotova metrika

$$S_{TQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{n_{X\cap Y}}{n_X + n_Y - n_{X\cap Y}} = \frac{\sum_{i=1}^{k-1} a_{ii}}{n_x + n_y - \sum_{i=1}^{k-1}\sum_{j=1}^{k-1} a_{ij}}$$

$$n_x = \sum_{i=1}^{k-1}\sum_{j=0}^{k-1} a_{ij} \qquad n_y = \sum_{i=0}^{k-1}\sum_{j=1}^{k-1} a_{ij}$$

Pro výpočet Tanimotovy podobnosti dvou vektorů s kvalitativními příznaky jsou použity všechny páry složek srovnávaných vektorů, kromě těch, jejichž hodnoty jsou obě nulové.



Obecné metriky – Tanimotova metrika – příklad

Určete hodnoty Tanimotových podobností $s_{TQ}(\mathbf{x},\mathbf{x})$, $s_{TQ}(\mathbf{x},\mathbf{y})$ a $s_{TQ}(\mathbf{x},\mathbf{z})$, když:
$\mathbf{x} = (0, 1, 2, 1, 2, 1)^T$ a
$\mathbf{y} = (1, 0, 2, 1, 0, 1)^T$ a
$\mathbf{z} = (2, 0, 0, 0, 0, 2)^T$.
Ze zadání je množina symbolů F = {0, 1, 2}, $k = 3$, $p = 6$.

Kontingenční tabulky jsou:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x},\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{A}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{A}(\mathbf{x},\mathbf{z}) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$s_{TQ}(\mathbf{x},\mathbf{x}) = \frac{5}{5+5-5} = 1 \qquad s_{TQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{3}{5+4-3} = 0{,}5 \qquad s_{TQ}(\mathbf{x},\mathbf{z}) = \frac{0}{5+2-1} = 0$$

Další obecné metriky

- definovány pomocí různých prvků kontingenční matice **A**(**x**,**y**)

- některé z nich používají pouze počet shodných pozic v obou vektorech (ovšem s nenulovými hodnotami):

$$S_1(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{\sum_{i=1}^{k-1} a_{ii}}{p} \qquad S_2(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{\sum_{i=1}^{k-1} a_{ii}}{p - a_{00}}$$

- některé z nich používají i shodu s nulovými hodnotami:

$$S_3(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{\sum_{i=0}^{k-1} a_{ii}}{p}$$

Asociační koeficienty

		$\mathbf{x}_j$	
		false/0	true/1
$\mathbf{x}_i$	false/0	D	C
	true/1	B	A

A - u obou objektů sledovaný jev nastal (obě odpovídající si proměnné mají hodnotu true, resp.1) – ***pozitivní shoda***;

B - u objektu $\mathbf{x}_i$ jev nastal (x_{ik} = true), zatímco u objektu $\mathbf{x}_j$ nikoliv (x_{jk} = false, resp.0);

C - u objektu $\mathbf{x}_i$ jev nenastal (x_{ik} = false), zatímco u objektu $\mathbf{x}_j$ ano (x_{jk} = true);

D - sledovaný jev nenastal ani u jednoho z objektů (obě odpovídající si proměnné mají hodnotu false, resp. 0) – ***negativní shoda***.

Při výpočtu podobnosti dvou objektů sledujeme, kolikrát pro všechny souřadnice obou vektorů $\mathbf{x}_j$ a $\mathbf{x}_j$ nastaly případy shody či neshody:

- A+D určuje celkový počet shod
- B+C celkový počet neshod
- A+B+C+D = *p* (tj. celk. počet souřadnic obou vektorů – tzn. počet proměnných)

Jaccardův – Tanimotův asociační koeficient

$$S_{JT}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{A}{A+B+C}$$

		$\mathbf{x}_j$	
		false/0	true/1
$\mathbf{x}_i$	false/0	D	C
	true/1	B	A

což je díky zjednodušení i dichotomická varianta metriky podle vztahu:

$$S_{TQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{\sum_{i=1}^{k-1} a_{ii}}{n_x + n_y - \sum_{i=1}^{k-1}\sum_{i=1}^{k-1} a_{ij}}$$

Tento vztah se dominantně používá v ekologických studiích.

Další asociační koeficienty I

		x_j	
		false/0	true/1
x_i	false/0	D	C
	true/1	B	A

Russelův – Raoův asociační koeficient

$$S_{RR}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{A}{A+B+C+D}$$

dichotomická varianta metriky:

$$S_1(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{\sum_{i=1}^{k-1} a_{ii}}{p}$$

Sokalův – Michenerův asociační koeficient

$$S_{SM}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{A+D}{A+B+C+D}$$

dichotomická varianta metriky:

$$S_3(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{\sum_{i=0}^{k-1} a_{ii}}{p}$$

Další asociační koeficienty II

		$\mathbf{x}_j$	
		false/0	true/1
$\mathbf{x}_i$	false/0	D	C
	true/1	B	A

Diceův (Czekanowského) asociační koeficient

$$S_{DC}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{2A}{2A+B+C} = \frac{2A}{(A+B)+(A+C)}$$

V případě Jaccardova a Diceova koeficientu pokud nastane úplná negativní shoda (tzn. A = B = C =0), pak často: $S_{JT}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = S_{DC}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 1$.

Rogersův – Tanimotův asociační koeficient

$$S_{RT}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{A+D}{A+D+2\cdot(B+C)} = \frac{A+D}{(B+C)+(A+B+C+D)}$$

Hamanův asociační koeficient

$$S_{HA}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{A+D-(B+C)}{A+B+C+D}$$

nabývá na rozdíl od všech dříve uvedených koeficientů hodnot z intervalu ⟨-1, 1⟩. Hodnoty -1, pokud se příznaky pouze neshodují; hodnoty 0, když je počet shod a neshod v rovnováze; +1 v případě úplné shody všech příznaků

Asociační koeficienty – poznámka

		x_j	
		false/0	true/1
x_i	false/0	D	C
	true/1	B	A

Na základě četností A až D lze pro případ binárních příznaků vytvářet i zajímavé vztahy pro již dříve uvedené míry:

Hammingova metrika

$$D_H(\mathbf{x},\mathbf{y}) = B + C$$

Euklidova metrika

$$D_H(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sqrt{B + C}$$

Pearsonův korelační koeficient

$$S_{PC}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{A \cdot D - B \cdot C}{\sqrt{(A+B)\cdot(C+D)\cdot(A+C)\cdot(B+D)}}$$

Výpočet vzdáleností z asociačních koeficientů

Z asociačních koeficientů, které vyjadřují míru podobnosti, lze jednoduše odvodit i míry nepodobnosti (vzdálenosti) pomocí:

$$D_X(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 1 - S_X(\mathbf{x},\mathbf{y})$$

Výpočet vzdáleností v Matlabu

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

Výpočet vzdáleností v R

Funkce *dist* na výpočet vzdáleností objektů (či subjektů) s výběrem metrik:

- „euclidean“ – Euklidovska metrika
- „maximum“ – Čebyševova metrika
- „manhattan“ – Hammingova (manhattanská) metrika
- „canberra“ – Canberrská metrika
- „minkowski“ – Minkovského metrika

Metriky pro určení vzdálenosti mezi dvěma skupinami objektů

Vzdálenost mezi skupinami objektů

- vzdálenost mezi skupinami dána:
  - „vzdáleností“ jednoho objektu s jedním či více objekty jedné skupiny (třídy) – použitelné při klasifikaci
  - „vzdáleností“ skupin (třídy, shluku) objektů či „vzdáleností“ jednoho objektu z každé skupiny – použitelné při shlukování

- zavedeme funkci, která ke každé dvojici skupin objektů (C_i, C_j) přiřazuje číslo D(C_i, C_j), které podobně jako míry podobnosti či nepodobnosti (metriky) jednotlivých objektů musí splňovat minimálně podmínky:

  (S1) $D(C_i, C_j) \geq 0$

  (S2) $D(C_i, C_j) = D(C_j, C_i)$

  (S3) $D(C_i, C_i) = \max_{i,j} D(C_i, C_j)$ (pro míry podobnosti)

  (S3') $D(C_i, C_i) = 0$ pro všechna i (pro míry vzdálenosti)

Typy metrik a konkrétní příklady

MEZI DVĚMA OBJEKTY

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvantitativními proměnnými

Euklidova m., Hammingova (manhattanská) m., Minkovského m., Čebyševova m., Mahalanobisova m., Canberrská m.

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvalitativními proměnnými

Hammingova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvantitativními proměnnými

Skalární součin, m. kosinové podobnosti, Pearsonův korelační koeficient, Tanimotova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvalitativními proměnnými

Tanimotova m., Jaccardův-Tanimotův a.k., Russelův-Raovův a.k., Sokalův-Michenerův a.k., Dicův k., Rogersův-Tanimotův k., Hamanův k.

MEZI DVĚMA SKUPINAMI OBJEKTŮ

Deterministické metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů

Metoda nejbližšího souseda, *k* nejbližších sousedů, nejvzdálenějšího souseda, centroidová metoda, m. průměrné vazby, Wardova metoda

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů používající jejich pravděpodobnostní charakteristiky

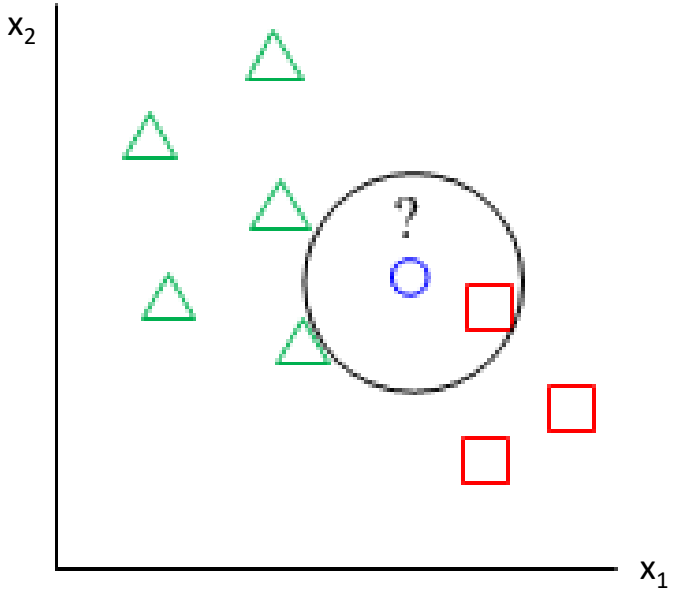
Chernoffova m., Bhattacharyyova m. atd.

Nejpoužívanější metriky pro určení vzdálenosti mezi dvěma množinami objektů

- Metoda nejbližšího souseda
- Metoda *k* nejbližších sousedů
- Metoda nejvzdálenějšího souseda
- Metoda průměrné vazby
- Wardova metoda

Metoda nejbližšího souseda

- je-li *d* libovolná míra nepodobnosti (vzdálenosti) dvou objektů a ω_i a ω_j jsou libovolné skupiny objektů, potom metoda nejbližšího souseda definuje mezi skupinami ω_i a ω_j vzdálenost $D_{NN}(\omega_i, \omega_j) = \min_{\substack{x_p \in \omega_i \\ x_q \in \omega_j}} d(x_p, x_q)$



pacienti
kontroly
testovací subjekt

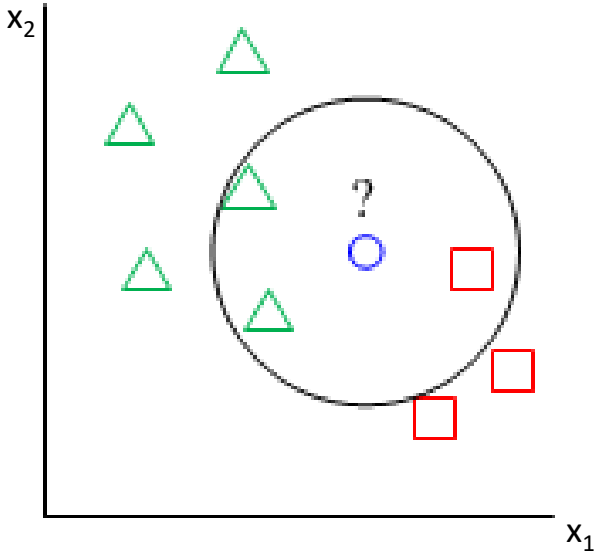
→ testovací subjekt zařadíme do třídy, ze které je jeho nejbližší soused

- výhody a nevýhody použití této metody pro klasifikaci:
  - \+ žádné předpoklady o rozložení
  - \- citlivé na odlehlé hodnoty
  - \- zpravidla nevhodné při nevyvážených počtech objektů ve skupinách

Metoda *k* nejbližších sousedů

- zobecněním metody nebližšího souseda
- definována vztahem $D_{NNk}(\omega_i, \omega_j) = \min_{\substack{x_p \in \omega_i \\ x_q \in \omega_j}} \sum^{k} d(x_p, x_q)$, tzn. vzdálenost dvou

  shluků je definována součtem nejkratších vzdáleností mezi objekty obou skupin



pacienti
kontroly
testovací subjekt

→ testovací subjekt zařadíme do třídy, která převažuje mezi jeho *k* nejbližšími sousedy

- výhody a nevýhody použití této metody pro klasifikaci:
  + žádné předpoklady o rozložení
  + méně citlivé na odlehlé hodnoty
  - zpravidla nevhodné při nevyvážených počtech objektů ve skupinách

Metoda nejvzdálenějšího souseda

- opačný princip než metoda nejbližšího souseda: $D_{FN}(C_i, C_i) = \max_{\substack{x_p \in C_i \\ x_q \in C_j}} d(x_p, x_q)$

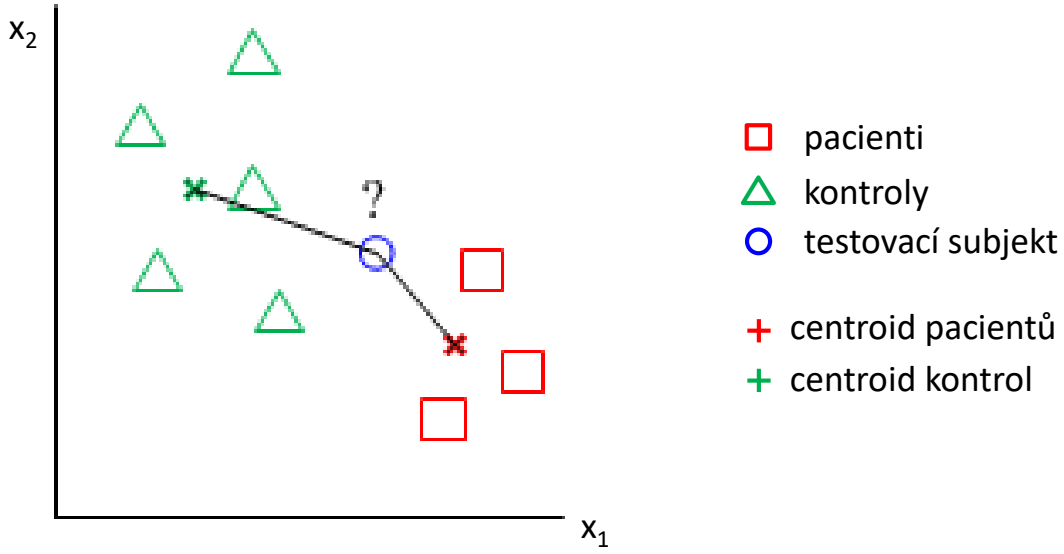
- pozn.: pro klasifikaci je obtížně použitelná

- pozn. 2: je možné zobecnění i pro více nejvzdálenějších sousedů

$$D_{FNk}(C_i, C_i) = \max_{\substack{x_p \in C_i \\ x_q \in C_j}} \sum^{k} d(x_p, x_q),$$

Centroidová metoda

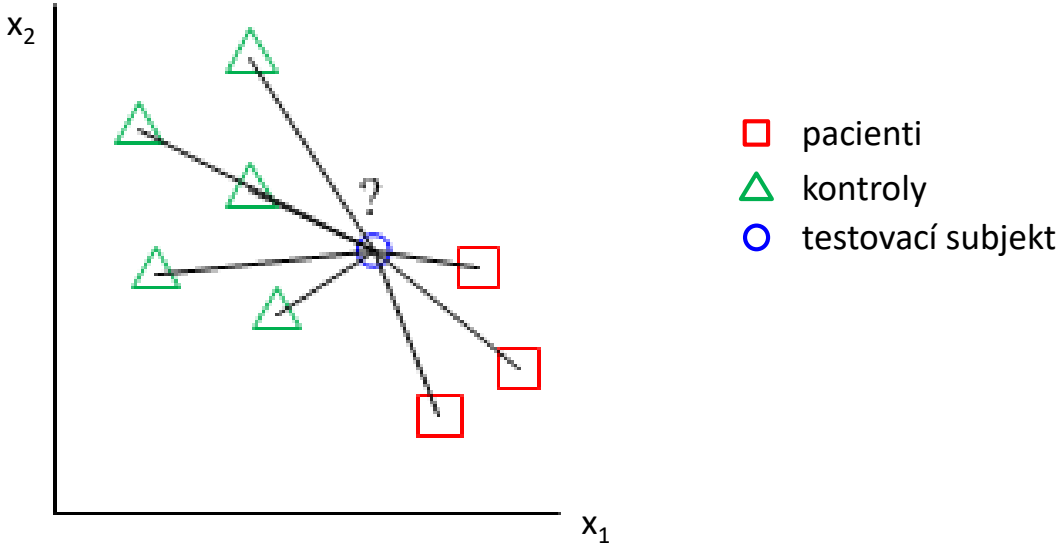
- vychází z výpočtu centroidů pro jednotlivé skupiny
- při klasifikaci: zařazení objektu do skupiny s nejbližším centroidem



- výhody a nevýhody použití této metody pro klasifikaci:
  + žádné předpoklady o rozložení (pokud je však centroid počítán jako vícerozměrný průměr, může nenormalita působit trochu problémy)
  + méně citlivé na odlehlé hodnoty než metoda nejbližšího souseda
  + nebývá problém při nevyvážených počtech objektů ve skupinách

Metoda průměrné vazby

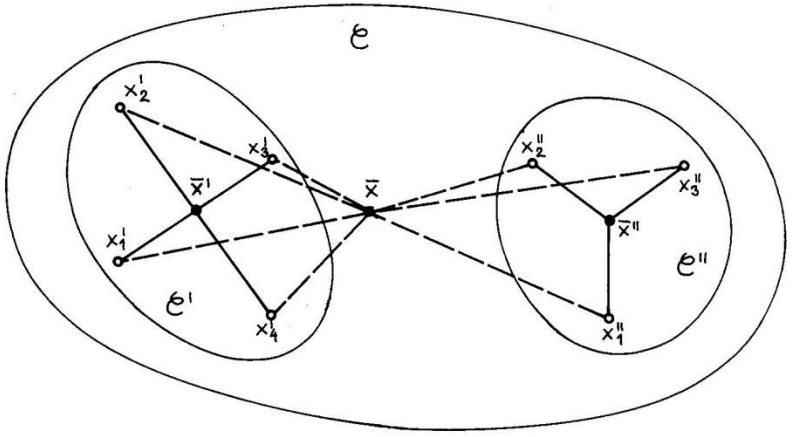
- vzdálenost dvou tříd je průměrná vzdálenost mezi všemi objekty těchto tříd
- při klasifikaci: zařazení subjektu do skupiny s nejmenší průměrnou vzdálenosti od všech objektů dané skupiny



- výhody a nevýhody použití této metody pro klasifikaci:
  + žádné předpoklady o rozložení
  + méně citlivé na odlehlé hodnoty než metoda nejbližšího souseda
  + nebývá problém při nevyvážených počtech objektů ve skupinách
  - časově náročnější než centroidová metoda při větším počtu objektů

Wardova metoda

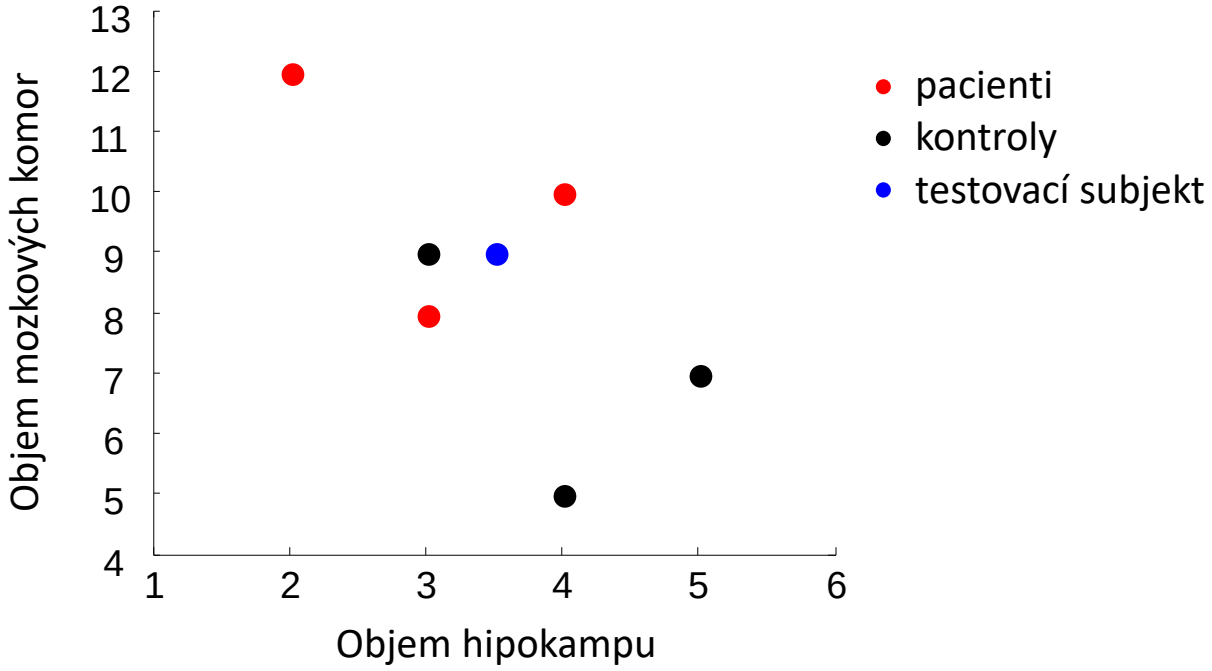
- vzdálenost mezi třídami (shluky) je definována přírůstkem součtu čtverců odchylek mezi těžištěm a objekty shluku vytvořeného z obou uvažovaných shluků C_i a C_j oproti součtu čtverců odchylek mezi objekty a těžišti v obou shlucích C_i a C_j.
- pozn. (při použití Wardovy metody pro shlukování): Metoda má tendenci vytvářet shluky zhruba stejné velikosti, tedy odstraňovat shluky malé, resp. velké.
- pozn. 2: pro klasifikaci se používá zřídka



Příklad 2

Bylo provedeno měření objemu hipokampu a mozkových komor (v cm^3) u 3 pacientů se schizofrenií a 3 kontrol: $\mathbf{X}_D = \begin{bmatrix} 2 & 12 \\ 4 & 10 \\ 3 & 8 \end{bmatrix}$, $\mathbf{X}_H = \begin{bmatrix} 5 & 7 \\ 3 & 9 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}$.

Určete, zda testovací subjekt $\mathbf{x} = [3{,}5 \quad 9]$ patří do skupiny pacientů či kontrolních subjektů pomocí různých metod klasifikace podle minimální vzdálenosti.



Typy metrik a konkrétní příklady

MEZI DVĚMA OBJEKTY

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvantitativními proměnnými

Euklidova m., Hammingova (manhattanská) m., Minkovského m., Čebyševova m., Mahalanobisova m., Canberrská m.

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvalitativními proměnnými

Hammingova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvantitativními proměnnými

Skalární součin, m. kosinové podobnosti, Pearsonův korelační koeficient, Tanimotova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvalitativními proměnnými

Tanimotova m., Jaccardův-Tanimotův a.k., Russelův-Raovův a.k., Sokalův-Michenerův a.k., Dicův k., Rogersův-Tanimotův k., Hamanův k.

MEZI DVĚMA SKUPINAMI OBJEKTŮ

Deterministické metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů

Metoda nejbližšího souseda, *k* nejbližších sousedů, nejvzdálenějšího souseda, centroidová metoda, m. průměrné vazby, Wardova metoda

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů používající jejich pravděpodobnostní charakteristiky

Chernoffova m., Bhattacharyyova m. atd.

Metriky založené na pstních charakteristikách

Klasifikační třídy (množiny objektů se společnými charakteristikami) nemusí být definovány jen výčtem objektů, ale i vymezením obecnějších vlastností:

- definicí hranic oddělujících část obrazového prostoru náležející dané klasifikační třídě
- diskriminační funkcí
- **pravděpodobnostními charakteristikami výskytu objektů v dané třídě**
- atd.

Metriky založené na pstních charakteristikách

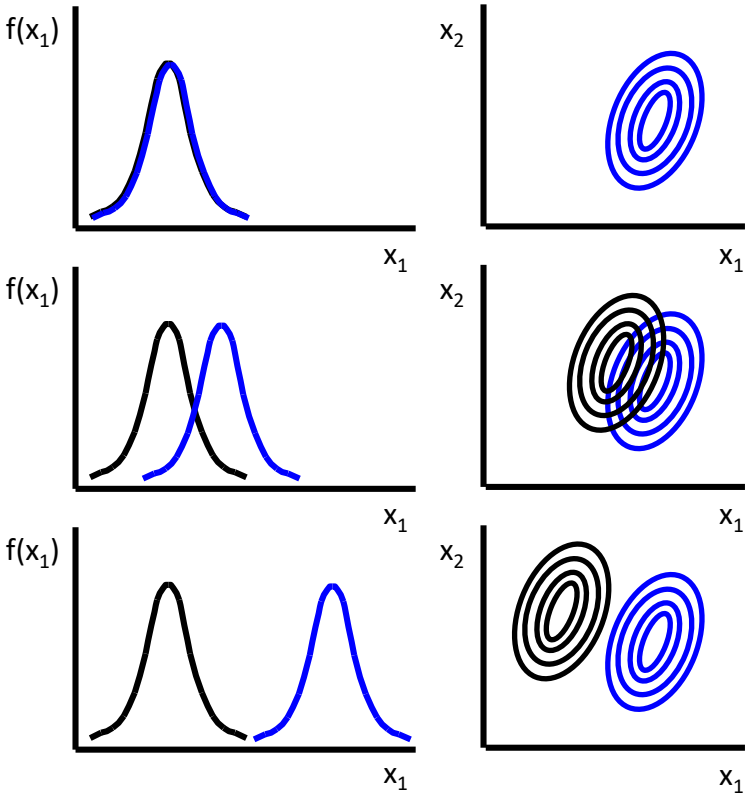
Základní myšlenkou je využití pravděpodobnosti způsobené chyby při klasifikaci (tzn. zařazení objektu do skupiny). Čím více se hustoty pravděpodobnosti výskytu objektů **x** v jednotlivých množinách překrývají, tím je větší pravděpodobnost chyby.

Tzn. tyto metriky splňují následující vlastnosti:

1. J = 0, pokud jsou hustoty pravděpodobnosti obou množin identické, tj. když
$p(\mathbf{x}|\omega_1) = p(\mathbf{x}|\omega_2)$

2. J > 0

3. J nabývá maxima, pokud jsou obě množiny disjunktní, tj. když $\int_{-\infty}^{\infty} p(\mathbf{x}|\omega_1) \cdot p(\mathbf{x}|\omega_2) d\mathbf{x} = 0$



(Jak vidíme, není mezi vlastnostmi pravděpodobnostních metrik uvedena trojúhelníková nerovnost, jejíž splnění by se zajišťovalo obtížně.)

Metriky založené na pstních charakteristikách

Vycházejí z výpočtu celkové pravděpodobnosti chybného rozhodnutí:

$$P_e = 1 - \int_X \left| p(\mathbf{x}|\omega_1).P(\omega_1) - p(\mathbf{x}|\omega_2).P(\omega_2) \right| d\mathbf{x}$$

Příklady metrik založených na pstních charakteristikách:

- Chernoffova metrika

$$J_C(\omega_1, \omega_2) = -\ln \int p^s(\mathbf{x}|\omega_1).p^{1-s}(\mathbf{x}|\omega_2).d\mathbf{x},\ s \in \langle 0; 1 \rangle$$

- Bhattacharyyova metrika

$$J_B(\omega_1, \omega_2) = -\ln \int [p(\mathbf{x}|\omega_1).p(\mathbf{x}|\omega_2)]^{0,5}.d\mathbf{x}$$

- zprůměrněná Chernoffova metrika

$$J_{AC}(\omega_1, \omega_2) = -\ln \int [p(\mathbf{x}|\omega_1).P(\omega_1)]^s.[p(\mathbf{x}|\omega_2).P(\omega_2)]^{1-s1}.d\mathbf{x},.\ s \in \langle 0; 1 \rangle$$

- zprůměrněná Bhattacharyyova metrika

$$J_{AB}(\omega_1, \omega_2) = -\ln \int [p(\mathbf{x}|\omega_1).P(\omega_1).p(\mathbf{x}|\omega_2).P(\omega_2)]^{0,5}.d\mathbf{x}$$

Typy metrik a konkrétní příklady

MEZI DVĚMA OBJEKTY

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvantitativními proměnnými

Euklidova m., Hammingova (manhattanská) m., Minkovského m., Čebyševova m., Mahalanobisova m., Canberrská m.

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvalitativními proměnnými

Hammingova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvantitativními proměnnými

Skalární součin, m. kosinové podobnosti, Pearsonův korelační koeficient, Tanimotova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvalitativními proměnnými

Tanimotova m., Jaccardův-Tanimotův a.k., Russelův-Raovův a.k., Sokalův-Michenerův a.k., Dicův k., Rogersův-Tanimotův k., Hamanův k.

MEZI DVĚMA SKUPINAMI OBJEKTŮ

Deterministické metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů

Metoda nejbližšího souseda, *k* nejbližších sousedů, nejvzdálenějšího souseda, centroidová metoda, m. průměrné vazby, Wardova metoda

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů používající jejich pravděpodobnostní charakteristiky

Chernoffova m., Bhattacharyyova m. atd.

Příprava nových učebních materiálů pro obor Matematická biologie

je podporována projektem OPVK

č. CZ.1.07/2.2.00/28.0043

„Interdisciplinární rozvoj studijního oboru Matematická biologie“

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ