Analiza Wielowymiarowa

Hierarchiczna analiza skupień

Maciej Nasiński, Paweł Strawiński

Zajęcia 10
8 grudnia 2022

Definicja

- Hierarchiczna analiza skupień jest wariantem klasyfikacyjnej analizy danych
- Zakładane jest, że grupy danych nie są niezależne, a są w sobie zagnieżdżone
- Polega na utworzeniu klasyfikacji obiektów takiej, w której grupa wyższego stopnia jest sumą grup niższego stopnia
- Skupienia odzwierciedlające hierarchiczną strukturę tworzone są metodą iteracyjną od dołu do góry albo z góry na dół

Własności

- Cecha charakterystyczną metod hierarchicznych jest fakt, że ustalenie hierarchii między obiektami jest nieodwracalne
- Kaufman i Rousseeuw (1990) zauważają, że „metody hierarchiczne mają wbudowaną wadę, nigdy nie potrafią naprawić błędów popełnionych w poprzednich krokach analizy”

Wnioski

- Jeżeli wejściowy zbiór danych liczy n obserwacji, to uzyskana hierarchia liczy n klasyfikacji składających się odpowiednio z $1, 2, 3, \ldots, n$ klas (analiza z dołu do góry) albo $n, n-1, \ldots, 1$ klas (analiza z góry do dołu)
- Klasyfikacja zawierająca jedna klasę stanowi zbiór wszystkich obserwacji, natomiast złożona z n klas zawiera wyłącznie klasy jednoelementowe.
- Hierarchiczna analiza skupień pozwala na poznawanie własności statystycznych danych dla skupień o różnej liczebności (ang. *granularity*)

Kiedy warto przeprowadzić analizę hierarchiczną

- Niech n będzie liczbą obserwacji w zbiorze
- Niech k będzie liczbą skupień
- Złożoność obliczeniowa metody k-średnich jest proporcjonalna do $n \times k$
- Złożoność obliczeniowa analizy hierarchicznej jest proporcjonalna do n^k (aglomeracja) lub k^n (podział)

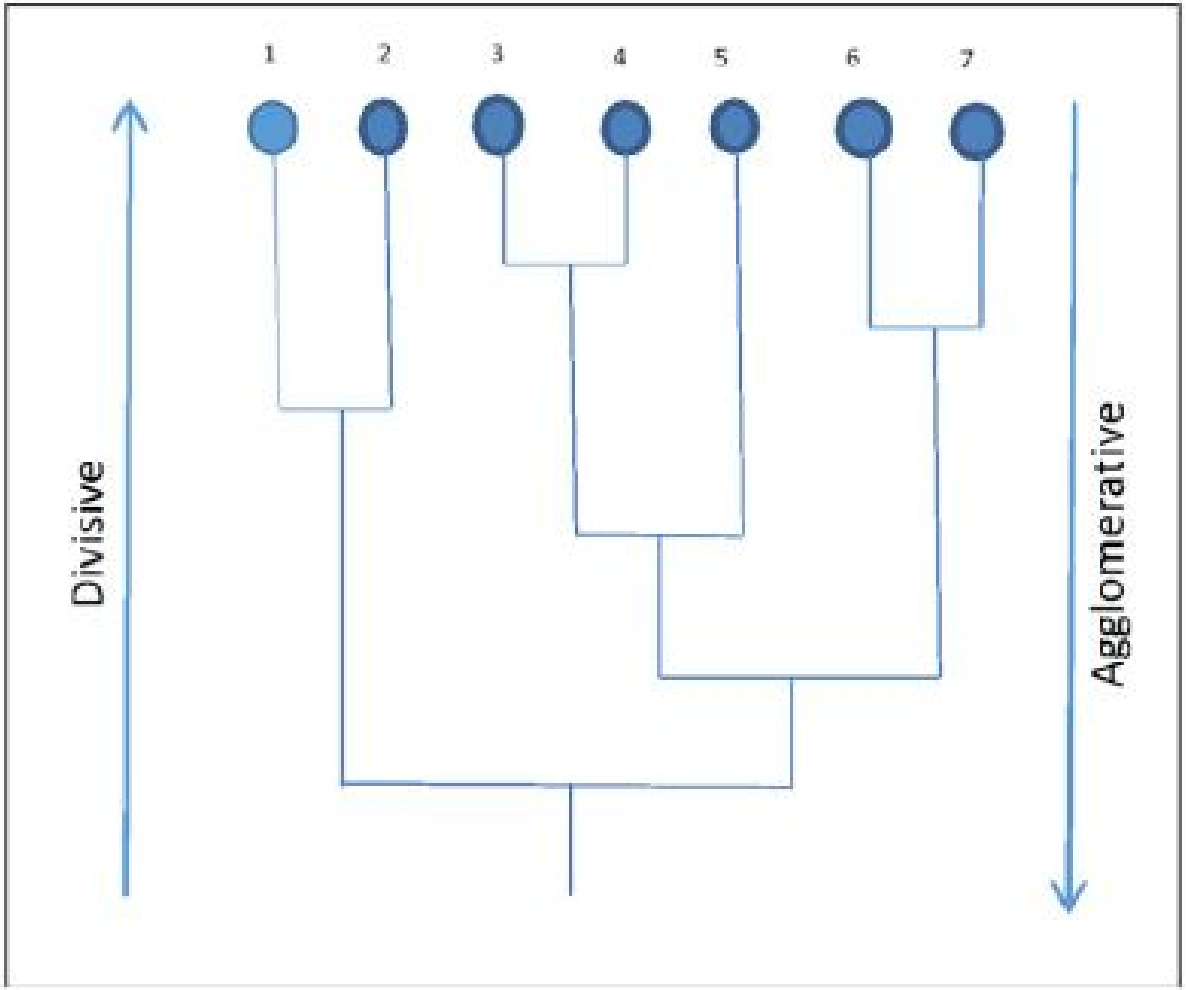
Sposób analizy

- W odróżnieniu od metod niehierarchicznych nie jest wymagane określenie liczby grup, na które zbiór będzie dzielony
- Liczba grup jest rezultatem interpretacji wyników zastosowania algorytmu
- Utworzone grupy powinny być homogeniczne i odseparowane
- Typ analizy zależy od dwóch wyborów
  - miary odległości
  - metody tworzenia skupień

Metody skupień

- Metody analizy hierarchcznej w zależności od punktu początkowego analizy można podzielić na:
  - od dołu do góry nazywane metodami aglomeracyjnymi. Punktem początkowym analizy jest n zbiorów jednoelementowych. W każdym kroku łączone są skupienia powstałe w poprzednich krokach, aż do uzyskania kryterium stopu lub jednego zbioru.
  - od góry do dołui nazywane metodami podziału. Punktem początkowym analizy jest jeden zbiór n elementowy. Wykorzystując miary (nie)podobieństwa (formalnie metryki lub semi-metryki) zbiór jest w kolejnych krokach dzielony, do momentu uzyskania kryterium stopu lub zbiorów jednoelementowych

Metody skupień



Źródło: Ezugwu et al. (2022)

Metody skupień

- W hierarchicznej analizie skupień aglomeracja (łączenie) lub podział podzbioru punktów dokonywane jest na podstawie uogólnienia pojęcia odległości między punktami do odległości pomiędzy dwoma (pod)zbiorami
- Na podstawie odległości między podzbiorami dla każdego podziału konstruowana jest macierz odległości

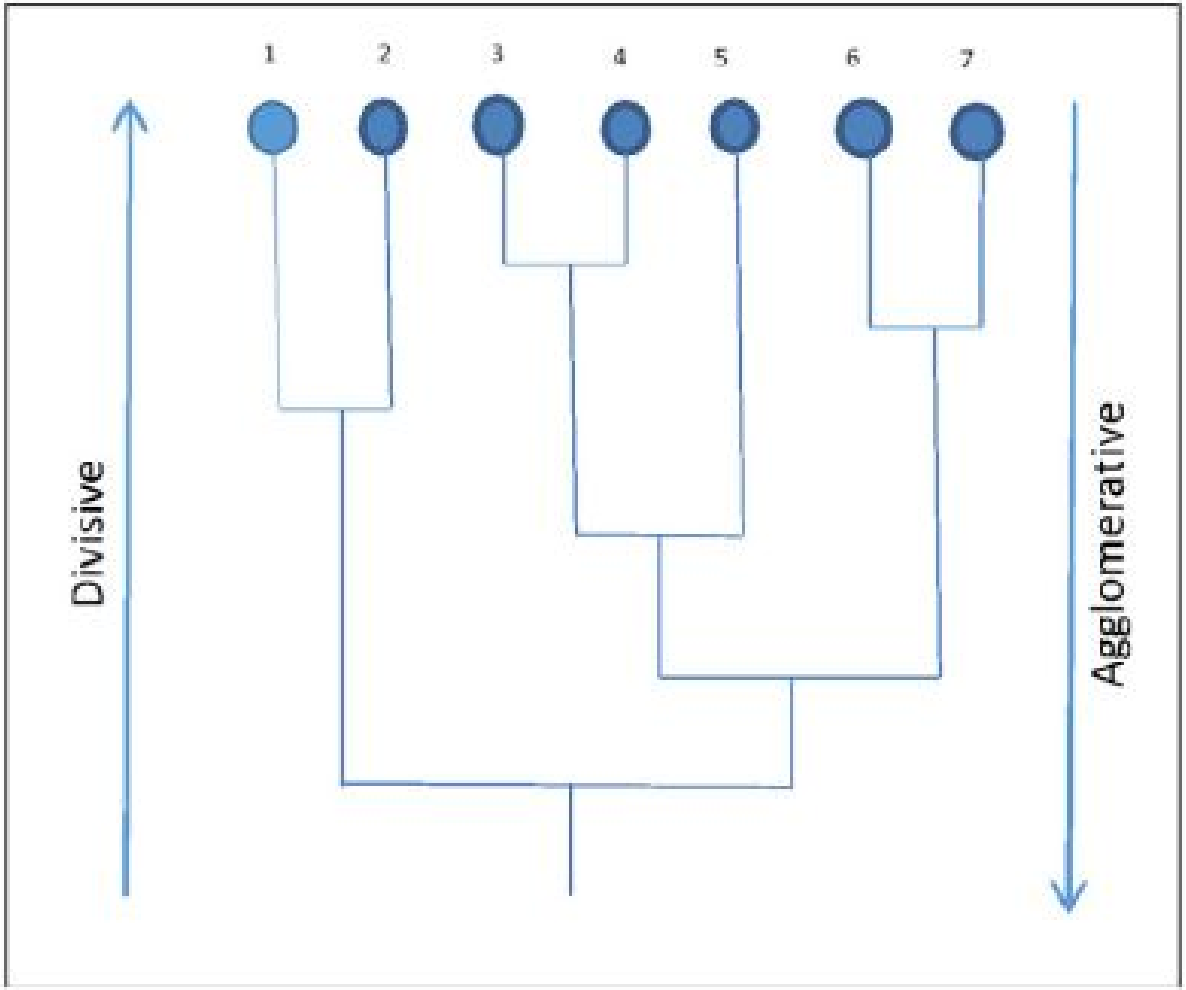
Metody aglomeracyjne

- Załóżmy, że zbiór liczy n obserwacji
- Obliczana jest macierz odległości o wymiarze $n \times n$
- Początkowo każda obserwacja tworzy osobną klasę
- Algorytm:
  1. Szukana jest para klas, miedzy którymi odległość jest najmniejsza (podobieństwo jest największe).
  2. Klasy są łączone w jedną
  3. Modyfikowana jest macierz odległości
  4. Kroki (1)-(3) są powtarzane do uzyskania 1 klasy

Dendrogram

- Graficzną ilustracją działania algorytmu jest dendrogram
- Jest to drzewo binarne, którego węzły reprezentują skupienia, a liście obiekty.
- Liście są na poziomie zerowym
- Węzły znajdują się na wysokości odpowiadającej wartości miary braku podobieństwa pomiędzy skupieniami reprezentowanymi przez oddzielne węzły

Dendrogram



Źródło: Ezugwu et al. (2022)

Metody podziału

- Załóżmy, że zbiór liczy n obserwacji
- Obliczana jest macierz odległości o wymiarze $n \times n$
- Początkowo wszystkie obserwacje tworzą jedną klasę
- Algorytm:
  1. Szukany jest taki podział jednej klasy na dwie klasy, aby odległość między nimi była największa.
  2. Klasy są dzielone
  3. Modyfikowana jest macierz odległości
  4. Kroki (1)-(3) są powtarzane do uzyskania n klas

Algorytm DIANA

- DIANA jest metodą hierarchiczną która tworzy skupienia w odwrotnym porządku
- Jest to algorytm odwrotny do algorytmu aglomeracyjnego.
- Na początku jest jeden n elementowy zbiór
- W każdym kroku jest dzielony na dwa zbiory
- Zbudowanie hierarchii zajmuje $n - 1$ kroków.
- Ale w pierwszym kroku są rozpatrywane wszystkie możliwe dzielenia zbioru na dwie części. Liczba możliwych różnych podziałów wynosi $2^{n-1} - 1$.

Złożoność algortymu DIANA

- Załóżmy, że dysponujemy zbiorem 100 obserwacji
- Złożoność obliczeniowa algorytmu aglomeracji wynosi $\frac{n(n-1)}{2} \propto n^2$
- Złożoność obliczeniowa algorytmu podziału wynosi $2^{n-1} - 1 \propto 2^n$
- Ze względu na nieakceptowalną złożoność obliczeniową algorytmów podziału w pakietach statystycznych (R, Stata) w wersji optymalnej są dostępne wyłącznie algorytmy aglomeracji
- W innych pakietach np. R algorytm podziału jest dostępny, lecz w wersji suboptymalnej. Optymalizowany jest jeden krok

Mierzenie odległości między skupieniami (1)

- Metoda pojedynczego wiązania, nazywana również metodą najbliższego sąsiedztwa (ang. *single linkage clustering*). Odległość między dwoma skupieniami jest określona przez odległość między dwoma najbliższymi obiektami (najbliższymi sąsiadami) należącymi do różnych skupień
- Metoda ma tendencje do przyłączania obserwacji do istniejących grup, a nie tworzenia nowych
- Wykorzystanie tej odległości prowadzi do tworzenia wydłużonych skupień, tzw. „łańcuchów".
- Pozwalają one na wykrycie obserwacji odstających, nie należących do żadnej z grup. Jest to powód, dla którego warto przeprowadzić początkową klasyfikację za jej pomocą, aby wyeliminować z analizy takie obserwacje

Mierzenie odległości między skupieniami (2)

- Metoda pełnego wiązania, nazywana również metodą najdalszego sąsiedztwa (ang. *complete linkage clustering*). Odległość między skupieniami jest determinowana przez największą z odległości między dwoma dowolnymi obiektami należącymi do różnych skupień (tzn. „najdalszymi sąsiadami")
- Metoda ta zwykle daje dobre rezultaty w tych przypadkach, w których obiekty faktycznie formują naturalnie oddzielone „kępki"
- Metoda prowadzi do tworzenia zwartych skupień
- Metoda ta nie jest odpowiednia, jeśli skupienia są „wydłużone" względem jednej lub kilku cech

Mierzenie odległości między skupieniami (3)

- Metoda średniego wiązania (ang. *average linkage clustering*). Odległość między dwoma skupieniami jest to średnią odległość między wszystkimi parami obiektów należących do dwóch różnych skupień
- Nazywana jest również wiązaniem o najmniejszej wariancji
- Metoda ta jest efektywna, gdy obiekty formują naturalnie oddzielone „kępki", jednocześnie pozwala uzyskać dobry wynik w przypadku skupień wydłużonych, mających charakter „łańcucha"
- Metoda ta jest swoistym kompromisem pomiędzy metodami pojedynczego i pełnego wiązania. Ma ona jednak zasadniczą wadę. W odróżnieniu od dwóch poprzednich wykorzystywana miara niepodobieństwa nie jest niezmiennicza ze względu na monotoniczne przekształcenia miar niepodobieństwa pomiędzy obiektami

Mierzenie odległości między skupieniami (4)

- Metoda Warda. Do oszacowania odległości między skupieniami wykorzystuje podejście analizy wariancji. Minimalizowana jest suma kwadratów odchyleń dowolnych dwóch skupień, które mogą zostać uformowane na każdym etapie
- Metoda jest traktowana jako efektywna, tworzy skupienia o niewielkim zróżnicowaniu, ale również o małej liczbie obiektów
- Mimo wszystko, często nie jest w stanie zidentyfikować grup o dużym zakresie zmienności poszczególnych cech oraz grup o niewielkiej liczebności

Własności metod hierarchicznych

- Nie istnieje jedna, najlepsza metoda
- Są przydatne gdy dane nie są niezależne, a mają zagnieżdżoną strukturę
- Efektywność poszczególnych metod zależy od statystycznych własności zbioru danych
- Wyniki symulacji pokazują, że najlepsze wyniki daje metoda Warda, następnie metoda średnich połączeń oraz metoda najdalszego sąsiedztwa
- Metody hierarchiczne mają dobre własności w próbach o niewielkiej liczbie obserwacji. Ich efektywność maleje wraz ze wzrostem liczby obserwacji
- Nie zawierają mechanizmu korekty utworzonych skupień. Błędne przypisanie obiektu do skupienia nie może zostać skorygowane w kolejnym kroku analizy