

Domača naloga 2

Neža Kržan, Tom Rupnik Medjedovič

1 Cilj naloge

Želiva preučiti 2 različni metodi razvrščanja v skupine. Primerjala bova metodo voditeljev (*k-means*) in razvrščanje na podlagi modelov. Za metodo razvrščanje na podlagi modelov sva pustila, da izbere najboljši model na podlagi BIC vrednosti. Število skupin pri kateri se računa BIC vrednost sva določila glede na trenutne nastavitve (**settings**) v iteraciji. Zanima nas katera bo najboljša na podatkih, generiranih iz bivariatne multivariatne normalne porazdelitve.

Zanima naju tudi, kako na metodi vpliva dodajanje nepomembnih spremenljivk, torej tistih, ki imajo enako porazdelitev v vseh skupinah.

Za metodi sva se odločila na podlagi njunih predpostavk, ker so nekatere dokaj podobne, npr. predpostavljata, da so skupine dovolj ločene oz. ni prekomernega prekrivanja med njimi, homogenosti variance znotraj skupine oz. podatki so v skupinah razmeroma homogeno razporejeni in zahtevata vnaprejšnjo določitev števila skupin, poleg tega pri razvrščanju na podlagi modelov zahtevamo v predpostavkah, da so podatki generirani iz multivariatnih normalnih porazdelitev.

2 Generiranje podatkov

Podatke sva generirala tako, da je njihova porazdelitev bivariatna multivariatna normalna. Zanima naju kako se bodo metode obnesle glede na to kako so si skupine med seboj različne. V ta namen sva si izbrala parameter, ki prilagaja povprečja v skupini, tj. $diff = (1, 2, 4, 10)$. Želiva si, da imava primere, ko so si skupine zelo različne med seboj in ne tako zelo različne.

Za lažje razumevanje si pogledjmo primer, kjer je število skupin enako 8, število spremenljivk 12, ter velikost skupin 100.

“Posameznike” želimo razporediti v 8 skupin, zato bo imela vsaka spremenljivka $8 * 100$ vrednosti. Ker je število skupin enako 8 bomo imeli 8 informativnih spremenljivk in 4 neinformativne.

Vrednosti neinformativnih spremenljivk generiramo iz porazdelitve tako da imajo povprečje 0 (torej na podlagi njih ne moremo “posameznike” razvrstiti v skupine). Vrednosti informativnih spremenljivk pa generiramo iz porazdelitve tako da imajo 100 vrednosti s povprečjem enakim **diff**, preostalih $(8 - 1) * 100$ vrednosti pa je generiranih iz porazdelitve s povprečjem 0. Naprimer spremenljivka, ki bo v 2. skupini ima 101.-200. vrednost iz porazdelitve s povprečjem **diff**, vse ostale vrednosti pa iz porazdelitve s povprečjem 0.

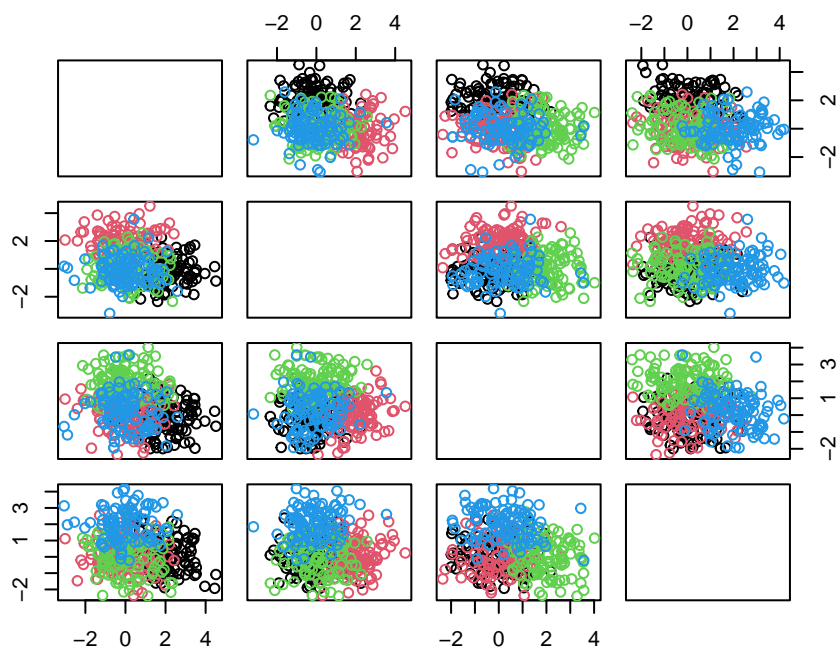
Faktorji, ki jih bova še spreminjala so:

- število skupin, $k = (4, 8, 10)$,
- velikosti skupin, $n = (20, 100, 200)$, pri čemer bodo imele vse skupine vedno enako velikost in
- število spremenljivk, $v = (12, 24, 36)$.

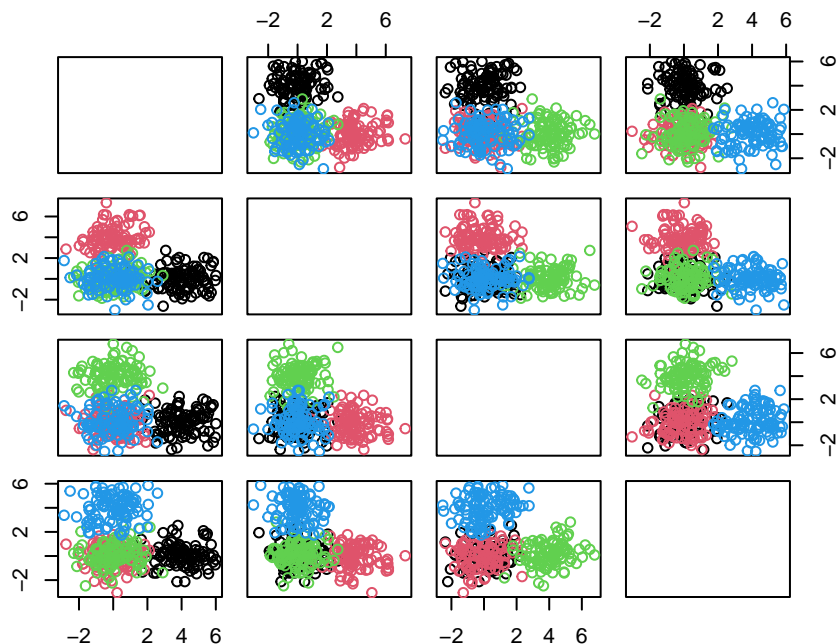
Faktorji so bili izbrani na podlagi tega, da si želiva rezultate, ki bodo dobri in slabi oziroma da bodo za nekatere metode dobri za druge pa slabi.

Pri generiranju podatkov bo število spremenljivk enako številu skupin, vse ostale spremenljivke bodo neinformativne, ker nas zanima tudi kako vpliva dodajanje nepomembnih oz. neinformativnih spremenljivk.

V naslednjih dveh primerih je število vseh spremenljivk enako 12, od tega so 4 pomembne (število skupin je enako 4). Torej razlike so prisotne le glede na te spremenljivke (ena od skupin odstopa od preostalih 3). Zaradi preglednosti so grafi, ki prikazujejo odvisnost od preostalih 8 spremenljivk izpuščeni.



Slika 1: Primer generiranih podatkov za 4 skupine, velikosti $n = 100$, 12 spremenljivk in $\text{diff} = 2$.



Slika 2: Primer generiranih podatkov za 4 skupine, velikosti $n = 100$, 12 spremenljivk in $\text{diff} = 4$.

3 Simulacija

Izvedla sva simulacijo s 100 ponovitvami (za večje število ponovitev se nisva odločila zaradi časovne zahtevnosti) in uporabila t.i. paralelno računanje(angl. *parallel computing*). V simulaciji sva generirala podatke in potem izvedla obe metodi razvrščanja v skupine(*metodo voditeljev* in *razvrščanje na podlagi modelov*).

Za obe metodi sva izračunala mero prilagojeni Randov indeks(*ARI*), ki sva jo uporabila za analizo in primerjavo metod med seboj.

Prilagojeni Randovi indeksi zavzemajo vrednosti na intervalu $[-1, 1]$ in želimo si, da so čim bližje 1, torej da gre za dobro ujemanje med razvrstitvami, kar je boljše od naključnega (vrednosti blizu 0).

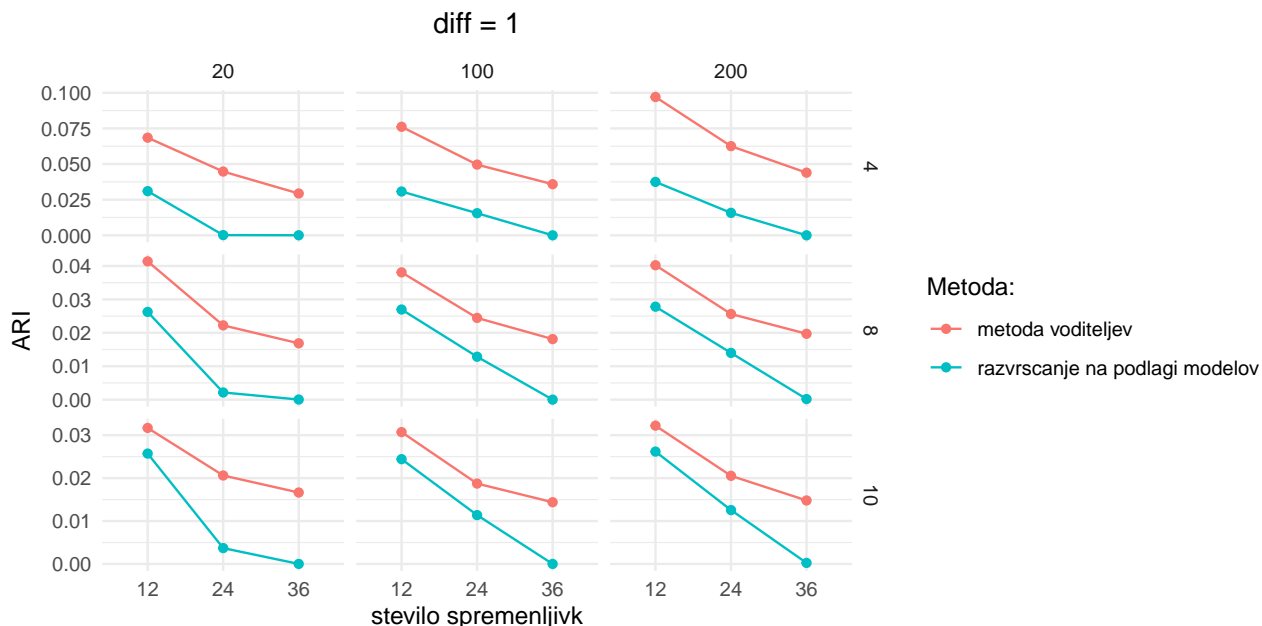
Pri primerjavi metod sva se osredotočala predvsem na prilagojeni Randov indeks(*ARI*), saj so nekatere druge mere kot na primer *WSS* pristranske in jo nekatere metode optimizirajo(ravno metoda *kmeans*).

4 Popravljen Randov indeks (ARI)

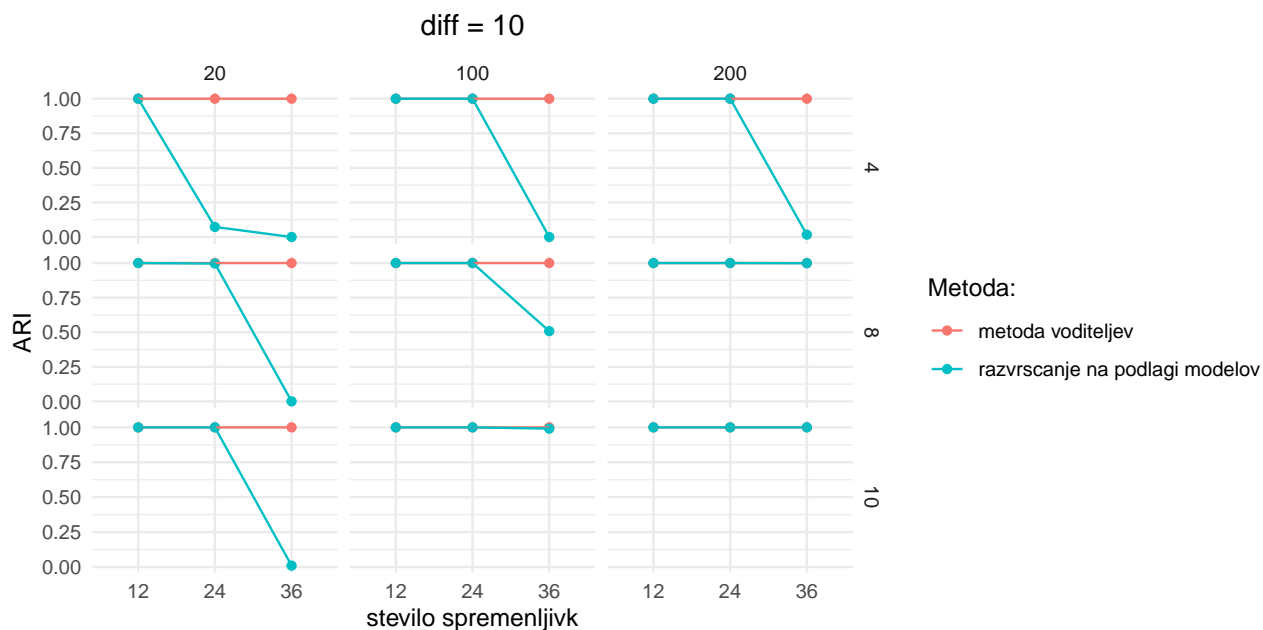
4.1 Spreminjanje faktorja ločljivosti med skupinami

Najprej si pogledjmo, kakšne vrednosti ARI imamo, če spreminjamo ločljivost med skupinami(*diff*). Pričakujeva, da bo metoda voditeljev pri večjih vrednostih *diff* nekoliko boljša, saj dobro deluje v primerih, ko so skupine med seboj dobro ločene.

Sprva si oglejmo grafe pri ekstremnih vrednostih, torej *diff*=1 in *diff*=10



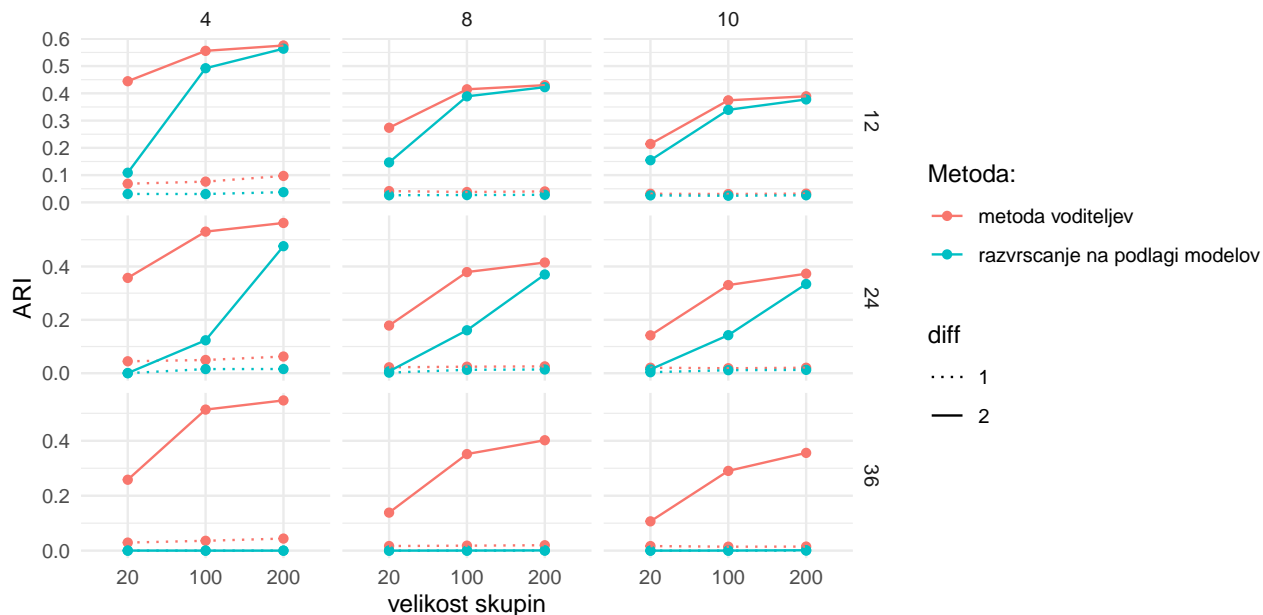
Slika 3: Prikaz ARI vrednosti razdeljen glede na velikost in število skupin (*diff* = 1).



Slika 4: Prikaz ARI vrednosti razdeljen glede na velikost in število skupin (diff = 10).

Takoj opazimo razliko med majhnim in velikim diff - pri diff = 1 so vrednosti ARI dokaj nizke, pri diff = 10 pa previsoke, kar pomeni, da so skupine preveč ločene in s tem slabi oziroma nerealni rezultati.

Poglejmo si razliko med diff = 1 in diff = 2.

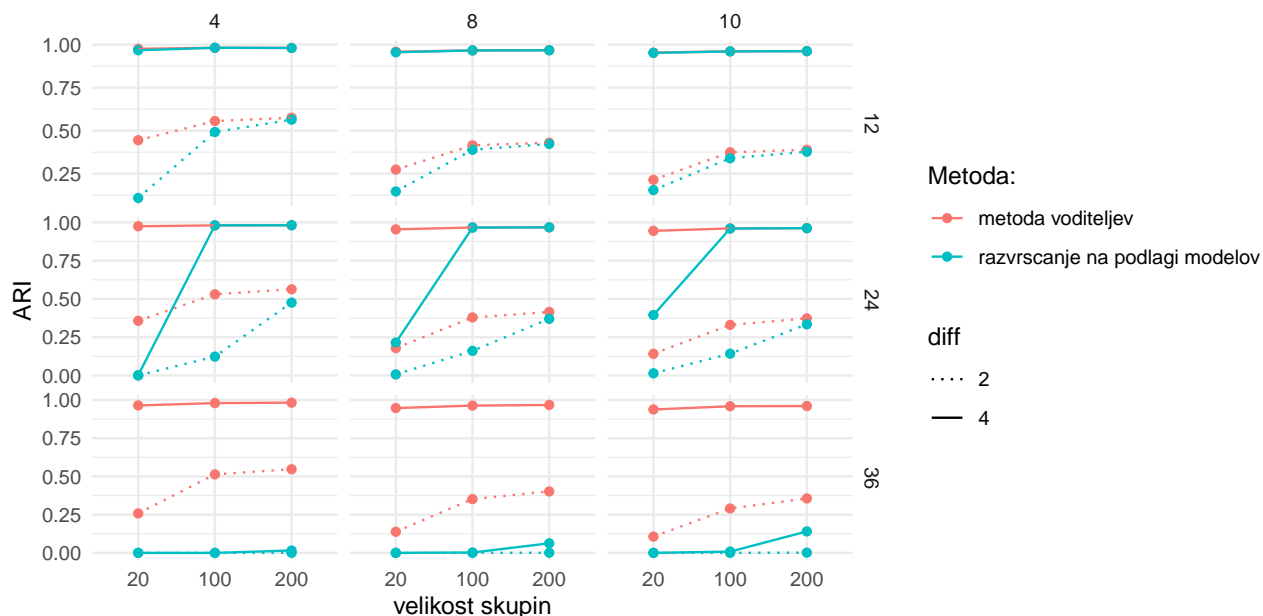


Slika 5: Prikaz ARI vrednosti razdeljen glede na število spremenljivk in število skupin.

Opazno je *metoda voditeljev* boljša od metode *razvrščanja na podlagi modelov*. Z dodajanjem nepomembnih spremenljivk pa se manjša tudi ARI. Lahko bi ocenila, da so rezultati boljši in lažje berljivi za primerjavo metod, če je faktor diff nastavljen na 2, ker pri nastavljeni vrednosti na 1 težko ločimo med metodami,

skupine so si med seboj preveč podobne, kar ne ustreza ravno metodi voditeljev in težko ocenimo katera metoda je boljša.

Vseeno pa si pogledjmo še razliko med $\text{diff} = 2$ in $\text{diff} = 4$.



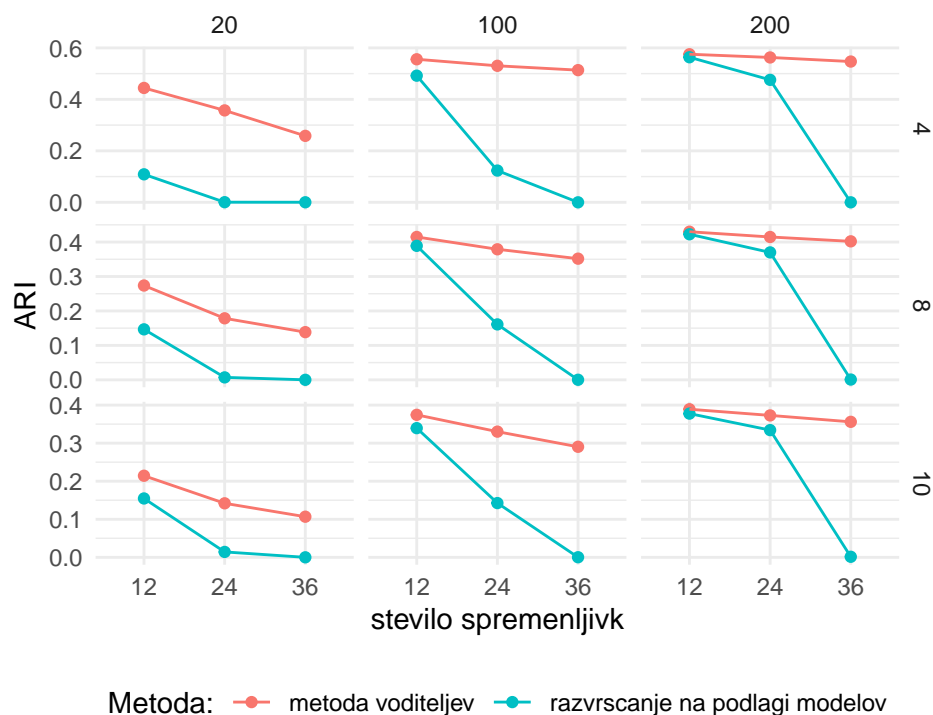
Slika 6: Prikaz ARI vrednosti razdeljen glede na število spremenljivk in število skupin.

Razlika med metodama pri $\text{diff} = 4$ je velika, tudi ARI za metodo voditeljev je previsok, da bi lahko rekli, da so rezultati dobri oziroma realni.

4.2 Analiza na podlagi števila in velikosti skupin ter števila spremenljivk

Poglejmo si, kako se spreminja ARI vrednost v primeru, ko spreminjamo število skupin, število spremenljivk in velikost skupin. Vrstice predstavljajo spremembo števila skupin, stolpci pa spremembo velikosti skupin.

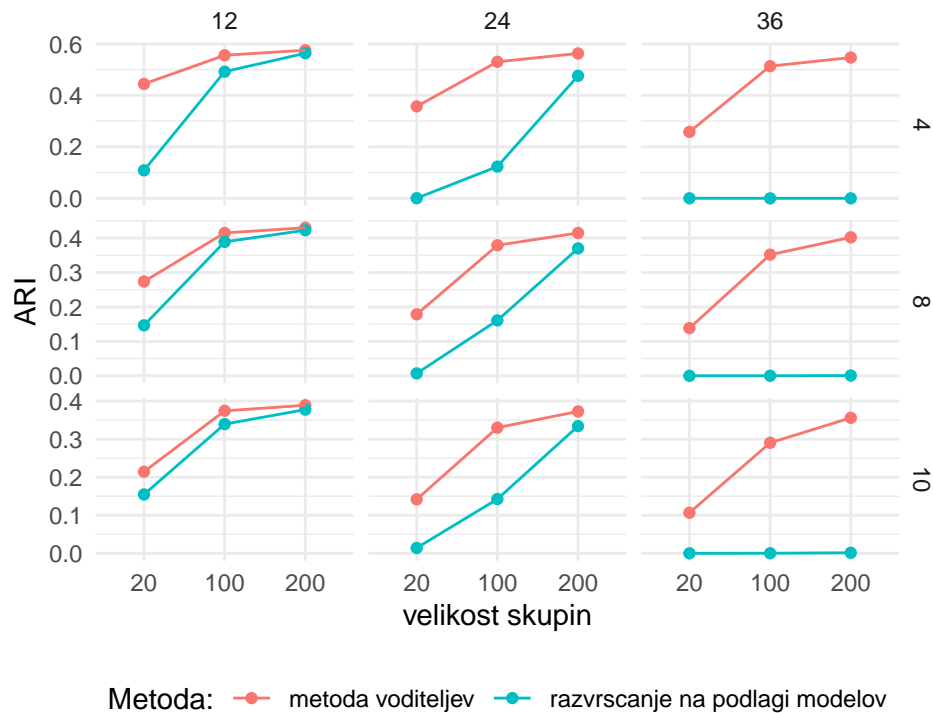
Pričakujeva, da bo pri večjih velikostih skupin indeks večji, saj se ponavadi pri večjih vzorcih moč za razlikovanje skupin običajno poveča. Z večanjem števila skupin pa pričakujeva, da se bo indeks manjšal, ker postane razvrščanje težje, saj pri več skupinah obstaja več kombinacij za razvrščanje, zato je večja verjetnost napačnih ujemanj.



Slika 7: Prikaz ARI vrednosti razdeljen glede na velikost skupin in število skupin.

Vidimo, da je v vseh kombinacijah števila skupin in velikosti skupin trend ARI vrednosti podajoč, ko povečujemo število spremenljivk. Tudi znotraj posamezne velikosti skupin se vrednost manjša z večanjem števila skupin, čeprav je ta razlika dokaj majhna. Vseeno pa lahko opazimo, da ima metoda **k-means** v vseh primerih večjo ali enako ARI vrednost kot metoda **mclust** in je manj občutljiva na povečao števila spremenljivk.

Prikažimo vrednosti še tako, da vrstice predstavljajo spremembo števila skupin, stolpci pa spremembo števila spremenljivk.



Slika 8: Prikaz ARI vrednosti razdeljen glede na število spremenljivk in število skupin.

Jasno se vidi, kako se z večanjem skupin viša tudi ARI, kar sva pričakovala. Na zgornjem grafu pa lahko bolje opazimo očitno razliko med metodama pri večjem številu spremenljivk. Metoda *razvrščanje na podlagi modelov* ima zelo nizke vrednosti indeksa, še posebej pri 4 skupinah in 36 spremenljivkah (tudi za velike skupine). Pri manjšem številu spremenljivk (npr. 12) pa je razlika med metodama zelo majhna, še posebej pri velikih skupinah (npr. velikost skupin je 200).

Več spremenljivk naj bi pomagalo izboljšati ARI, vendar samo, če te spremenljivke dejansko prispevajo k razlikovanju skupin. Ker pa sva dodajala t.i. nepomembne spremenljivke (spremenljivke, ki imajo enako porazdelitev v vseh skupinah) pa se indeks neboljša, pri metodi *razvrščanje na podlagi modelov* se celo manjša.

5 ANOVA

S pomočjo ANOVA testa bova med seboj primerjala metodi za razvrščanja v skupine. Najprej si bova ogledala in med seboj primerjala statistično značilnost spremenljivk (faktorji) in njihove kombinacije, nato pa še modela med seboj.

Glede na zgornjo analizo pričakujemo, da bo boljša *metoda voditeljev* in bomo z njo imeli manj variabilnosti, ki je z modelom ne uspemo pojasniti. Pričakujemo tudi, da bodo spremenljivke (faktorji) in interakcije med njimi statistično značilne pri obeh metodah, saj sva opazila pri zgornji analizi, da vplivajo na ARI.

Iz tabele lahko razberemo, da se statistična značilnost posameznih spremenljivk in njihovih kombinacij skoraj ne razlikuje glede na metodo. Pri metodi *razvrščanje na podlagi modelov* dobimo statistično statistično značilnost ($\alpha = 0.05$) v vseh primerih. Prav tako to velja za *metodo voditeljev*, z izjemo interakcije `velikost.skupin:stevilo.skupin`, ki ni statistično značilna.

6 Linearni mešani modeli

Primerjajmo metodi za razvrščanje v skupine še s pomočjo linearnih mešanih modelov, kjer pričakujeva podobne rezultate kot zgoraj pri ANOVA testu.

Tabela 1: Prikaz statistične značilnosti spremenljivk za obe metodi.

faktorji	metoda voditeljev	razvrščanje na podlagi modelov
stevilo.spremenljivk	0.0000000	0
velikost.skupin	0.0000000	0
stevilo.skupin	0.0000000	0
diff	0.0000000	0
stevilo.spremenljivk:velikost.skupin	0.0000000	0
stevilo.spremenljivk:stevilo.skupin	0.0000001	0
velikost.skupin:stevilo.skupin	0.7376437	0
stevilo.spremenljivk:diff	0.0000000	0
velikost.skupin:diff	0.0000000	0
stevilo.skupin:diff	0.0000000	0
stevilo.spremenljivk:velikost.skupin:stevilo.skupin	0.0000000	0
stevilo.spremenljivk:velikost.skupin:diff	0.0000000	0
stevilo.spremenljivk:stevilo.skupin:diff	0.0000000	0
velikost.skupin:stevilo.skupin:diff	0.0000000	0
stevilo.spremenljivk:velikost.skupin:stevilo.skupin:diff	0.0000000	0

Iz tabele lahko razberemo, da se statistična značilnost posameznih spremenljivk in njihovih kombinacij skoraj ne razlikuje glede na metodo. Rezultati so podobni kot v zgornjem razdelku. Pri metodi *razvrščanje na podlagi modelov* dobimo statistično statistično značilnost ($\alpha = 0.05$) v vseh primerih. Prav tako to velja za metodo *voditeljev*, z izjemo interakcije **velikost.skupin:stevilo.skupin**, ki ni statistično značilna.

7 Zaključek

Pri primerjavi dveh metod za razvrščanje v skupine, *metoda voditeljev* ter *razvrščanje na podlagi modelov*, na podlagi mere prilagojeni Randov indeks (ARI) sva ugotovila, da na vrednost ARI pa ne vpliva negativno samo število nepomembnih spremenljivk (tistih, ki imajo enako porazdelitev v vseh skupinah), ampak tudi število skupin v katere želimo razporediti posamezne točke. S tem sva potrdila tudi najno predvidevanje, da se bo z večanjem števila skupin indeks ARI manjšal, ker postane razvrščanje težje, saj pri več skupinah obstaja več kombinacij za razvrščanje, zato je večja verjetnost napačnih ujemanj. V primeru, da je število skupin veliko in so te blizu skupaj, je verjetnost za napačno razporeditev velika.

Torej na 'kvaliteto' razporeditve v skupine vpliva tudi ločljivost med skupinami (**diff**). V primeru, da so skupine blizu skupaj, metodi slabo razlikujeta posameznimi skupinami. To pa se z večanjem števila vseh spremenljivk še poslabša. Večja kot je ločljivost med skupinami, bolje lahko razlikujemo med skupinami. Vendar pa ko **diff** dosega velike vrednosti (npr. že pri **diff** = 4), je primerjava med metodami skoraj nemogoča, saj ne glede na metodo, je *ARI* vrednost visoka oz. blizu 1.

Z večanjem velikosti skupin pa se pričakovano povečuje vrednost indeksa.

Vseeno pa se je glede na analizo izkazalo, da *metoda voditeljev* nekoliko bolje razlikuje med skupinami kot metoda *razvrščanje na podlagi modelov*. Prva je imela v vseh kombinacijah spremenljivk (faktorjev), ki sva jih spreminjala, višje ali enake vrednosti, kot smo jih dobili pri metodi *razvrščanje na podlagi modelov*. S pomočjo ANOVA testa in linearnih mešanih modelov pa se pokaže, da je model, ki smo ga oblikovali na podlagi metode *voditeljev* primernejši (pojasnimo več variabilnosti).