

Domača naloga 2

Neža Kržan, Tom Rupnik Medjedovič

1 Cilj naloge

Želiva preučiti 2 različni metodi razvrščanja v skupine. Primerjaval bova metodo voditeljev (*k-means*) in razvrščanje na podlagi modelov. 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

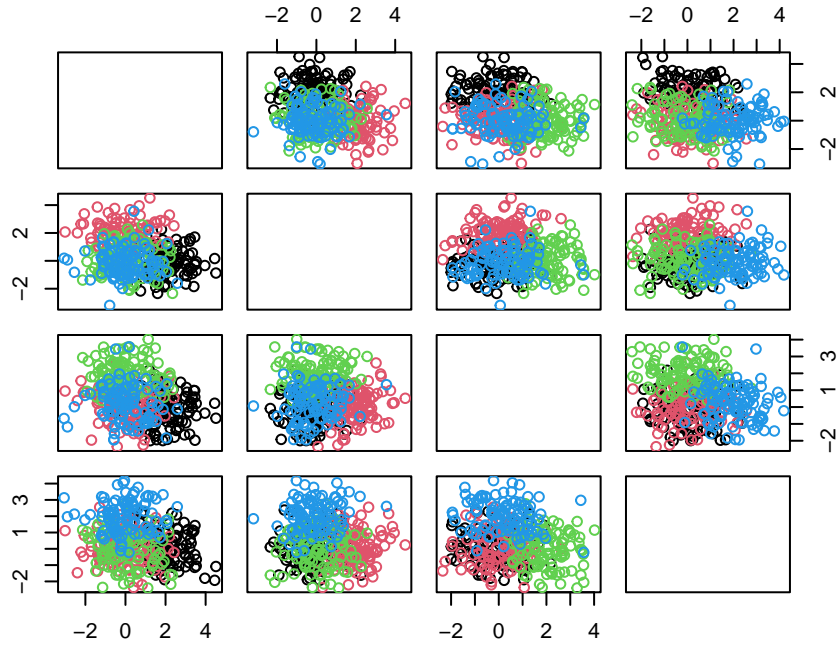
Podatke sva generirala tako, da je njihova porazdelitev bivariatna multivariatna normalna. Zanima naju kako se bodo metode obnesle glede na to kako so si skupine med seboj različne. V ta namen sva si izbrala parameter, ki prilagaja povprečja v skupini, tj. $diff = (1, 2, 4, 10)$. Želiva si, da imava primere, ko so si skupine zelo različne med seboj in ne tako zelo različne. Torej bo pri porazdelitvi povprečja generirana s pomočjo faktorja $diff$ in število skupin, kovariančna matrika pa bo po diagonali vsebovala število spremenljivk.

Faktorji, ki jih bova še spreminjala so:

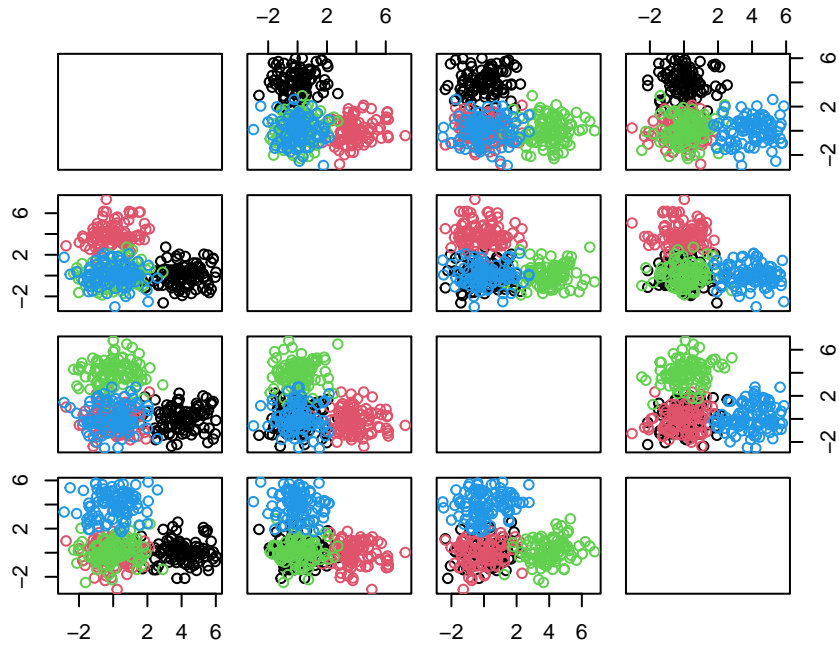
- število skupin, $k = (4, 8, 10)$,
- velikosti skupin, $n = (20, 100, 200)$, pri čemer bodo imele vse skupine vedno enako velikost in
- število spremenljivk, $v = (12, 24, 36)$.

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.



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 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 3 različne mere, in sicer prilagojeni Randov indeks(*ARI*), vsoto kvadratov

znotraj skupine(WSS) in proporcija vsote kvadratov znotraj skupine($PWSS$).

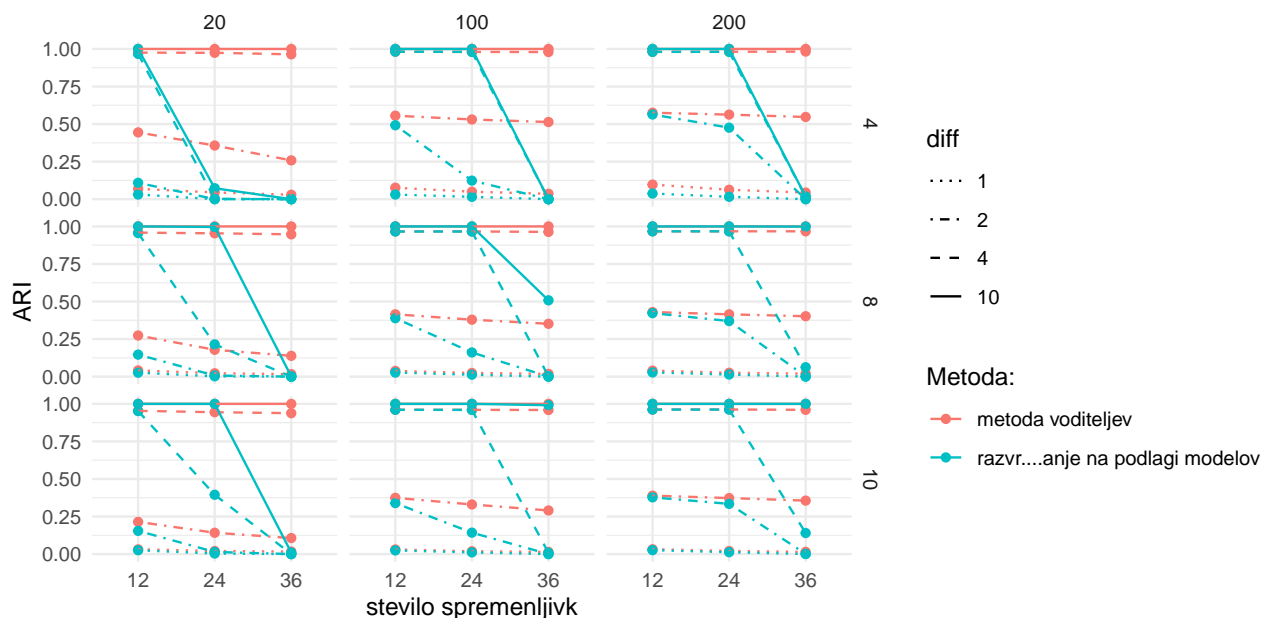
Prilagojeni Randovi indeksi zavzemajo vrednosti na intervalu $[-1, 1]$ in želimo si, da so čim bližje 1, torej da gre za dobro ujemanje med razvrstitvami, kar je boljše od naključnega. Pri meri WSS si želimo majhne vrednosti, saj to pomeni, da so skupine bolj kompaktne in s tem so si točke znotraj skupine bolj podobne. Gre sicer za mero, ki je pristranska in jo nekatere metode optimizirajo(ravno metoda *kmeans*). Mera $PWSS$ pa oceni delež variabilnosti v podatkih, ki ga pojasnjujejo skupine, v primerjavi z celotno variabilnostjo podatkov in višji kot je, boljše je, saj to pomeni, da so skupine dobro definirane in točke znotraj skupin tesno sledijo svojim centroidom.

Pri primerjavi metod se bova na začetku osredotočala predvsem na prilagojeni Randov indeks(ARI), saj je mera WSS pristranska in jo nekatere metode optimizirajo(ravno metoda *kmeans*). Meri WSS in $PWSS$ bosta služili zgolj kot dodaten vpogled.

4 Popravljen Randov indeks (ARI)

4.1 Spreminjanje faktorja ločljivosti med skupinami

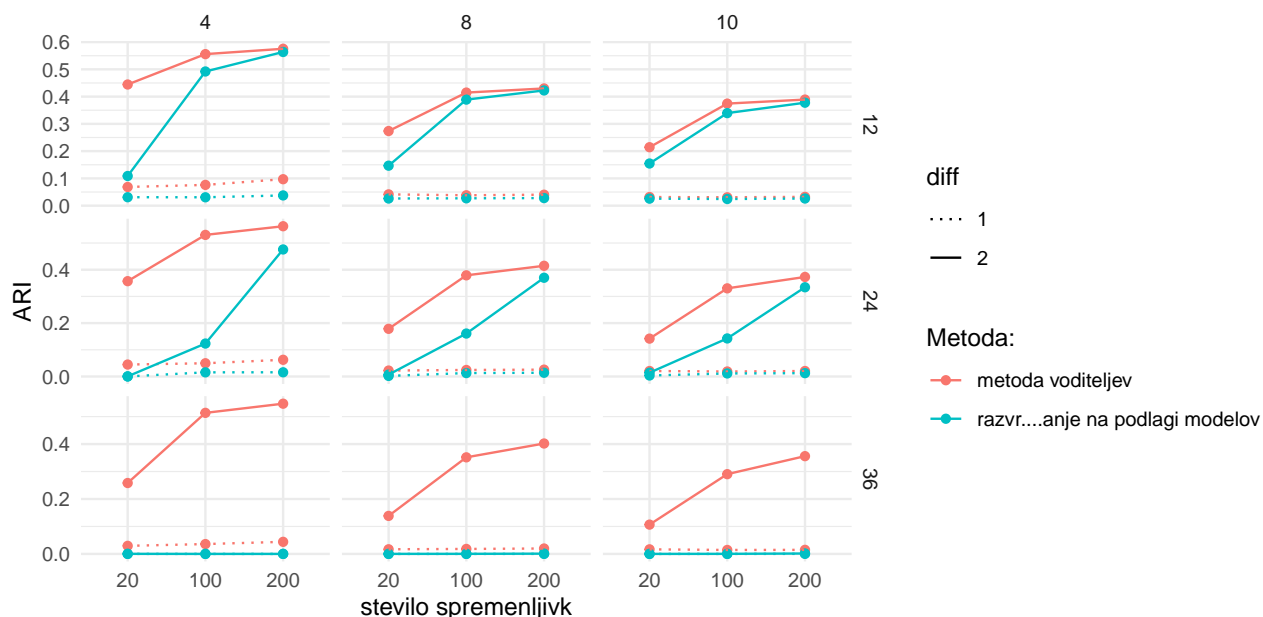
Najprej si pogledjmo, kakšne vrednosti ARI imamo, če spreminjamo ločljivost med skupinami($diff$). Pričakujeva, da bo metoda voditeljev pri večjih vrednostih $diff$ nekoliko boljša, saj dobro deluje v primerih, ko so skupine med seboj dobro ločene.



Slika 3: Prikaz ARI vrednosti razdeljen glede na velikost in število skupin.

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.

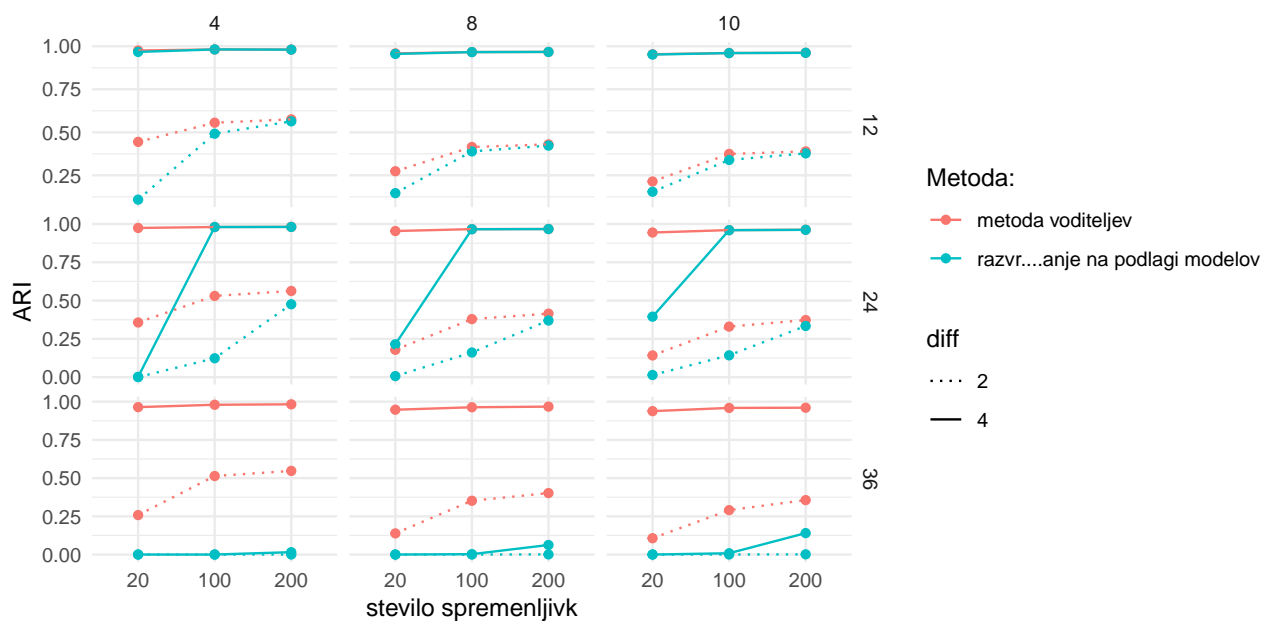
Poglejmo si razliko med $diff = 1$ in $diff = 2$.



Slika 4: Prikaz ARI vrednosti razdeljen glede na število spremenljivk in število skupin.

Opazno je *metoda voditeljev* boljša od metode *razvrščanja na podlagi modelov*. Opazimo tudi, da je razlika v metodah večja s povečanjem faktorja *diff* in z manjšimi velikostmi skupin. 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 *diff* = 2 in *diff* = 4.



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

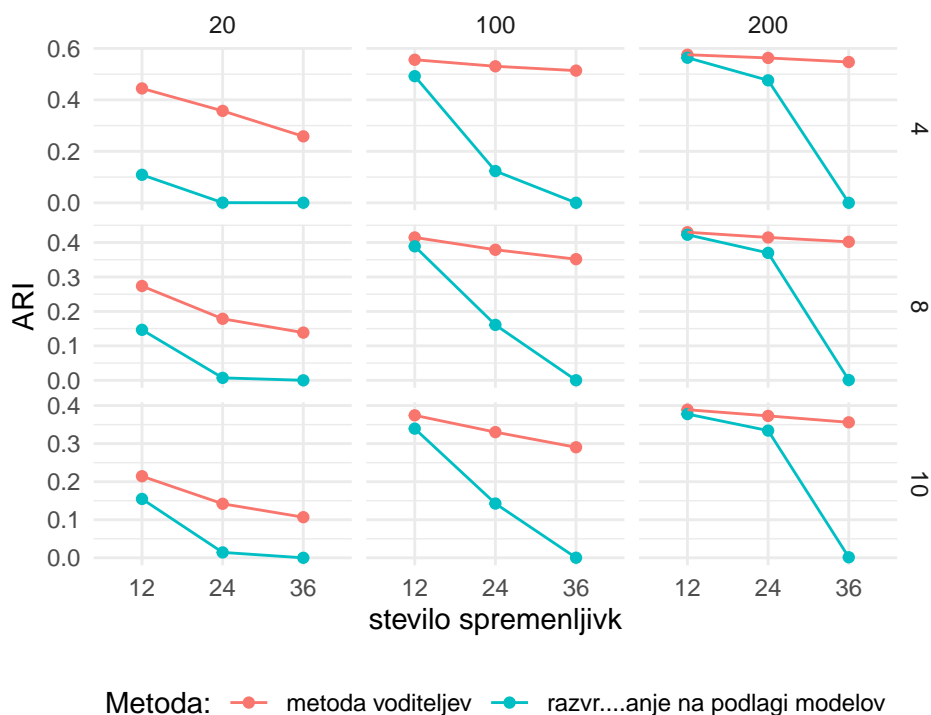
Razlika med metodama pri $\text{diff} = 4$ je velika, tudi ARI za metodo voditeljev je previsok, da bi lahko rekli, da so rezultati dobri oziroma realni.

Na podlagi zgornje analize se odločiva, da je primerna ločljivost med skupinama nastaljena na $\text{diff} = 2$ za ustrezno primerjavo med metodama.

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, pri tem pa ne upoštevamo, kako so si skupine med seboj različne (diff). Vrstice predstavljajo spremembo števila skupin, stolpci pa spremembo velikosti skupin.

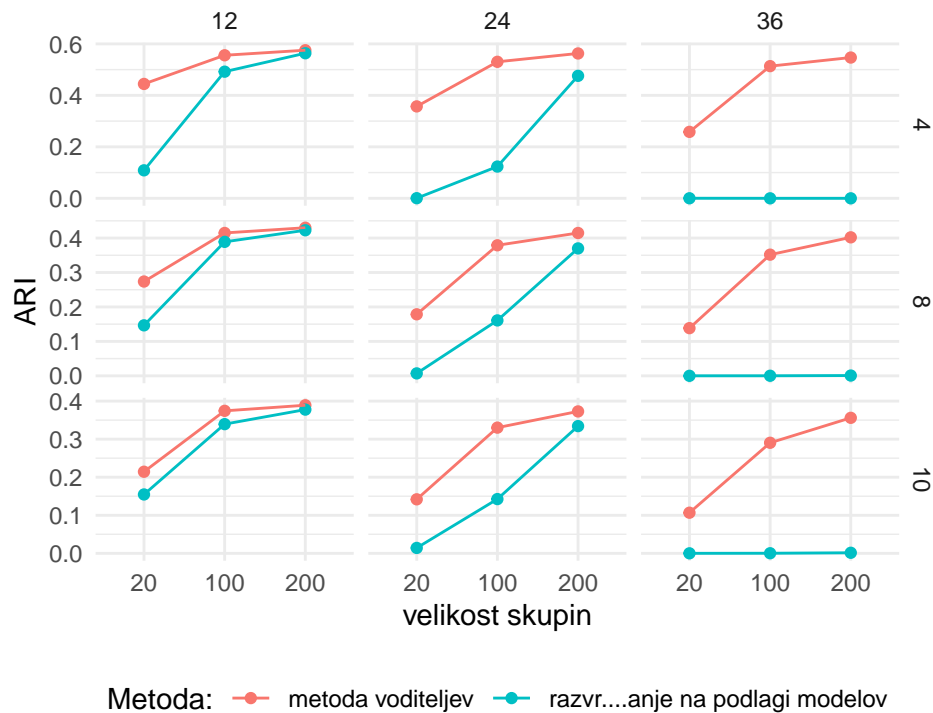
Pričakujeva, da bo pri večjih velikostih skupin indeks večji, saj se ponavadi pri večjih vzorcih moč za razlikovanje skupin običajno poveča. Z večanjem števila skupin pa pričakujeva, da se bo indeks manjšal, ker postane razvrščanje težje, saj pri več skupinah obstaja več kombinacij za razvrščanje, zato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



Slika 6: 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 7: Prikaz ARI vrednosti razdeljen glede na število spremenljivk in število skupin.

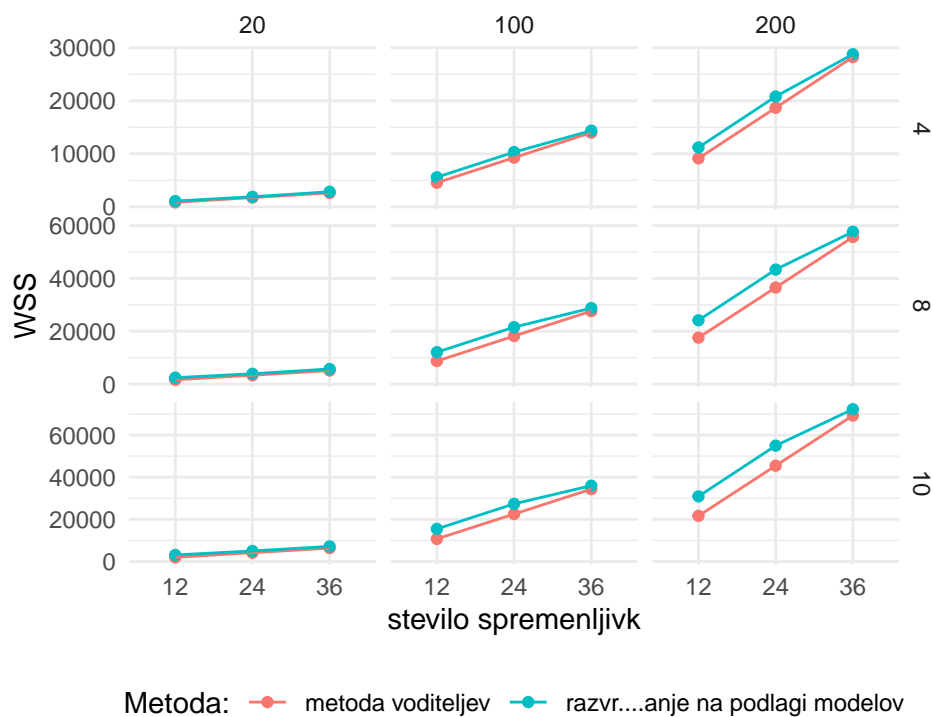
Jasno se vidi, kako se z večanjem skupin viša tudi ARI, kar sva pričakovala. Na zgornjem grafu pa lahko bolje opazimo očitno razliko med metodama pri večjem številu spremenljivk. Metoda *razvrščanje na podlagi modelov* ima zelo nizke vrednosti indeksa, še posebej pri 4 skupinah in 36 spremenljivkah (tudi 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 Meri WSS in PWSS

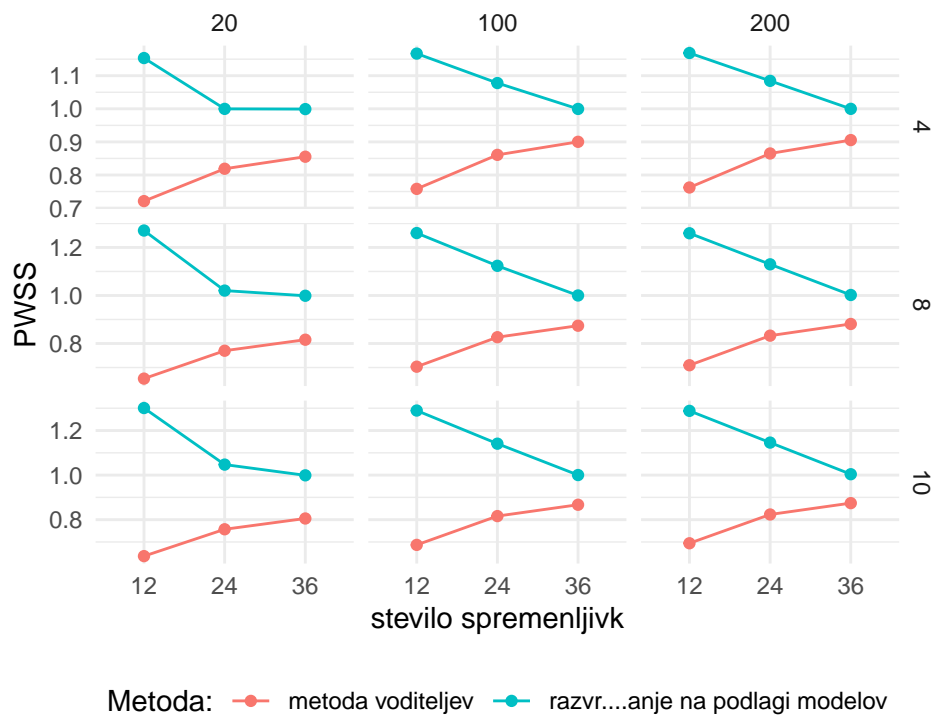
Kot sva že zgoraj omenila, je za glavno analizo med metodama služila mera popravljen Randov indeks (ARI), bova pa še pogledala primerjavo metod za meri *WSS* in *PWSS*. Tudi tokrat bova uporabila le primer, ko velja $\text{diff} = 2$.

Pri meri *WSS* si želimo majhne vrednosti, saj to pomeni, da so skupine bolj kompaktne in s tem so si točke znotraj skupine bolj podobne. Vendar pa gre v našem primeru za pristransko mero, saj je to ravno mera, ki jo *metoda voditeljev* optimizira. Torej pričakujemo, da bo imela metoda *razvrščanje na podlagi modelov* nekoliko višje vrednosti. Poglejmo si razlike med vrednostmi in zakaj ta mera je oz. ni "dobra".



Slika 8: Prikaz WSS vrednosti razdeljen glede na velikost skupin in število skupin.

Glede na zgornji prikaz lahko res opazimo da ima metoda *razvrščanje na podlagi modelov* nekoliko višje vrednosti, predvsem ko je imamo velikost skupin enako 200. V primeru velikosti skupin 20 bi celo težko govorili o razlikam med vrednostmi, saj je te skoraj popolnoma prekrivajo.



Slika 9: Prikaz WSS vrednosti razdeljen glede na velikost skupin in število skupin.