Klyngeanalyse

ISTx1003 Statistisk læring og Data Science

Stefanie Muff, Institutt for matematiske fag

November 12, 2021

Anerkjennelse

Disse slides bygger på slides fra Mette Langaas, 2020.

Takk til Mette for at jeg fikk bruke noen av materialene.

Plan for i dag (tema “Klyngeanalyse”)

- Hva er klyngeanalyse
- Læringsmål, pensum og læringsressurser
- Avstandsmål
- K-gjennomsnitt (“K-means”) klyngeanalyse
- Bruk av klyngeanalyse på et bilde (prosjektet fra i fjor)
- Hierarkisk klyngeanalyse
- Informasjon om prosjektet

Eksempel 1: Genaktivitet

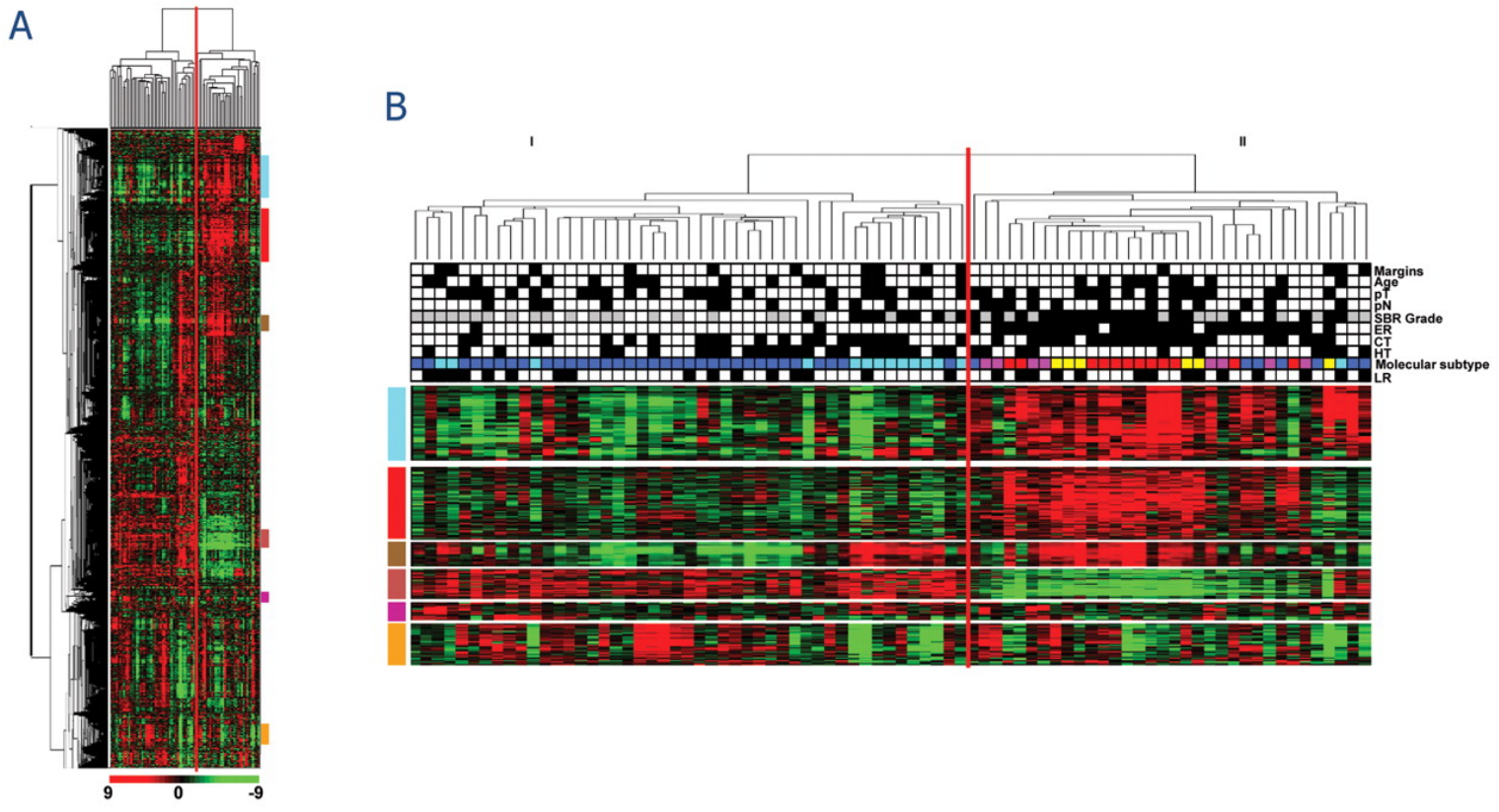
- $n = 81$ celleprøver fra kreftsvulster til ulike pasienter
- Genaktivitet for $p = 12957$ gener

Spørsmål:

Hvilke celleprøver fra brystkreftpasienter ligner hverandre mest?

Kan vi finne ukjente klynger (av celleprøver) i dataene?

Dette kan hjelpe for å forutsi sannsynligheten for en tilbakefall.



$$X = p \times n = \text{gener} \times \text{prøver} \ .$$

Finn ut mer: https://cgp.iiarjournals.org/content/8/4/199

Eksempel 2: Proteininteraksjonsnettwerk

Kan vi finne klynger med relatert funksjon?

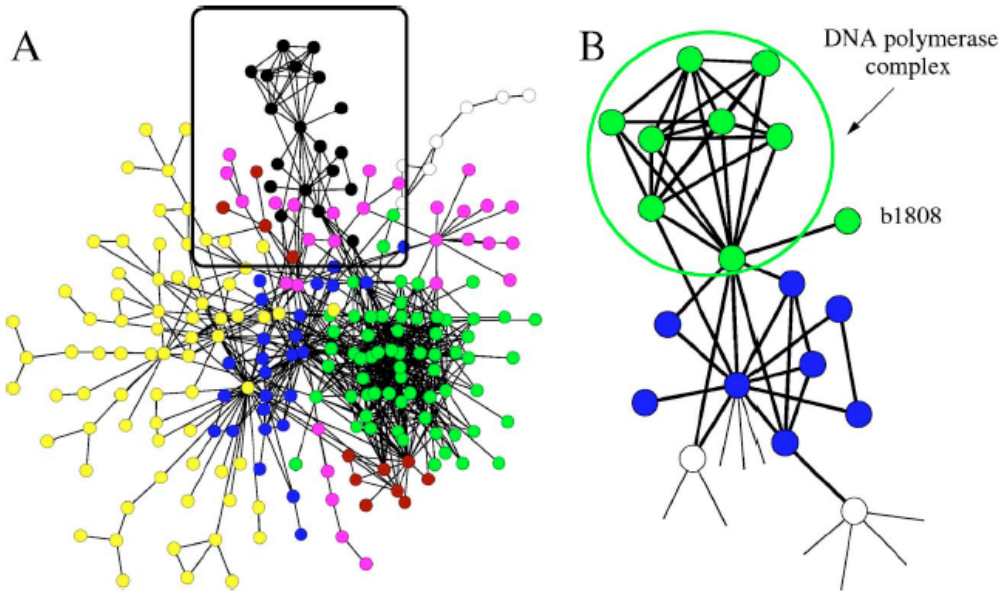


FIG. 4. (Color online) (a) Largest connected component of the PPI of *E. coli*. The colors represent the clusterization found by optimizing modularity. (b) *LQ* clusterization of the black *Q* cluster. The green circle contains proteins belonging to the DNA polymerase complex. The unknown protein b1808 is assigned to this complex according to *LQ* while the complete *Q* cluster is heterogeneous.

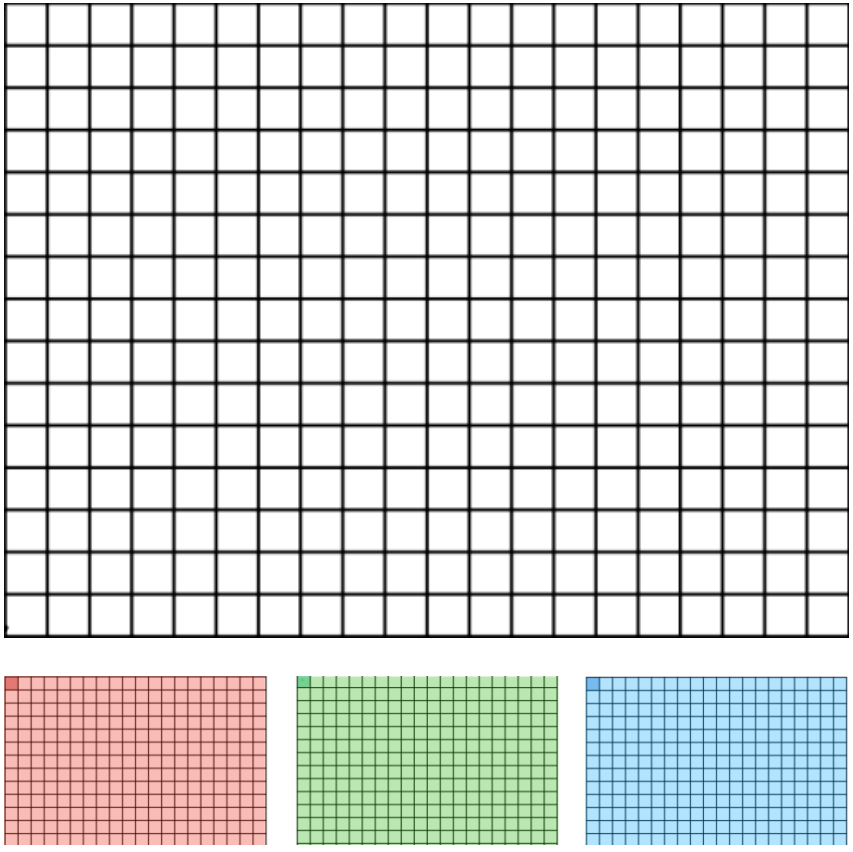
Eksempel 3: Bildanalyse

Det var en prosjektoppgave i fjor.

Mål:

Å bruke klyngeanalyse til å fjerne detaljer og støy - ved å dele pikslene inn i to eller flere klynger.

Hver piksel har en farge som er definert som en blandig av rød, grønn og blå (x, y, z):



Klyngeanalyse: Finn k "typiske farger" som representerer klynger (sentroider) og erstatt hver piksel med sentroidfargen.

Jeg var litt nysgjerrig...

Opprinnelig bilde

Jeg var litt nysgjerrig...

Opprinnelig bilde

Bilde i svart/hvitt

Jeg var litt nysgjerrig...

Opprinnelig bilde

Bilde i svart/hvitt

bilde med 8 klynger

Læringsmål

- Forstå hvorfor det er interessant å gjøre klyngeanalyse
- Kjenne igjen situasjoner der klyngeanalyse vil være en aktuell metode å bruke
- Kjenne begrepene avstandsmål, koblingstype, dendrogram
- Forstå algoritmen for å utføre K-gjennomsnitt-klyngeanalyse og hierarkisk klyngeanalyse
- Forstå hvordan klyngeanalyse utføres i Python
- Kunne besvare oppgave 3 av prosjektoppgaven på en god måte!

Læringsressurser

Tema Klyngeanalyse:

- **Kompendium**: Klyngeanalyse (pdf og html, by Mette Langaas)
- **Korte videoer**: (by Mette Langaas)
  - Klyngeanalyse (8:43 min)
  - Hierarkisk klyngeanalyse (11:26 min)
  - K-gjennomsnitt-klyngeanalyse (8:38 min)
- Denne forelesningen
- **Disse slides** med notater

Som alltid se her:

https://wiki.math.ntnu.no/istx1003/2021h/start

Klyngeanalyse – hva er det?

Vi har data

$$X : n \times p$$

men *ikke* noen respons Y. *Ikke-veiledet = unsupervised*

Mål:

- Finn ukjente klynger i dataene.
- Observasjoner innen hver klynge er mer lik hverandre enn observasjoner fra ulike klynger.

Hva skal vi bruke resultatene fra klyngeanalysen til?

- Bildet: Fjerne støy eller, spare lagringsplass
- Medisin: Finne subgrupper av en sykdom $\rightarrow$ relevant for behandling?

Klyngeanalyse – hva er det?

Generelt: Finne *struktur* i dataene.

Kan vi stole på resultatene? Hvor robuste er de?

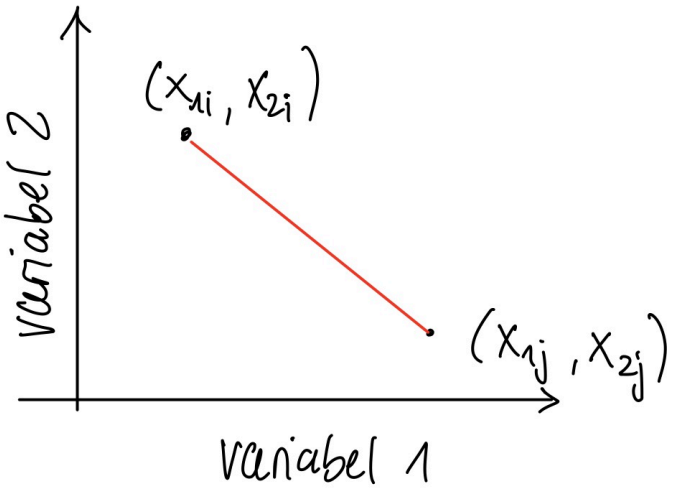
→ Fortsatt et forskningsområde!

Avstandsmål

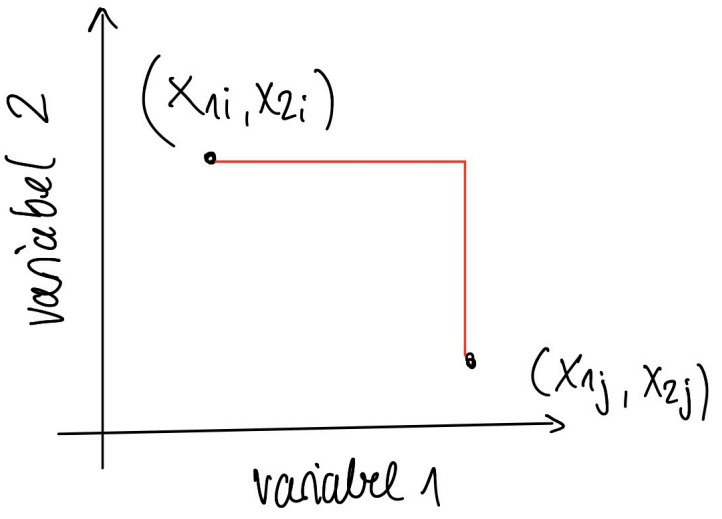
Før en klyngeanalyse må vi først definere en *avstand* mellom to datapoeng.

To populære avstandsmal:

Euklidsk



City-block (=Manhattan)



Euklidsk **City-block (=Manhattan)**

$$D_E(i,i') = \sqrt{\sum_{j=1}^{p}(x_{ji} - x_{ji'})^2} \qquad D_M(i,i') = \sum_{j=1}^{p}|x_{ji} - x_{ji'}|$$

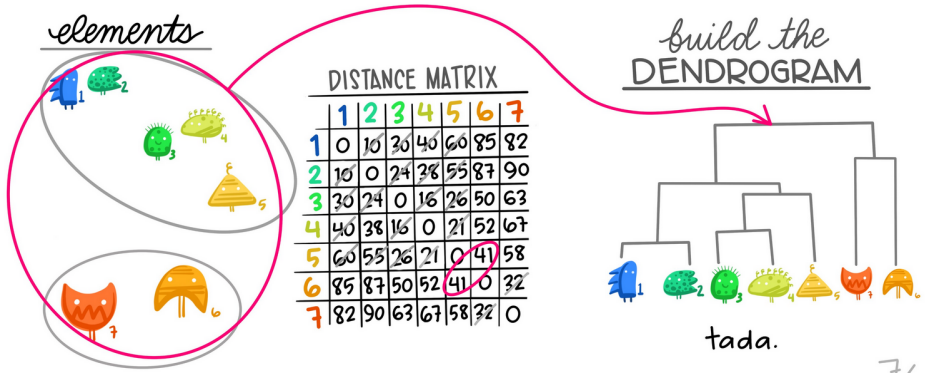
Avstandsmål i mer enn 2 dimensioner: Enkelt å regne, men litt vanskelig å forestille seg.

Metoder for klyngeanalyse

Det finnes ganske mange metoder, men vi ser på to som er (mest?) populær:

K-gjennomsnitt klyngeanalyse

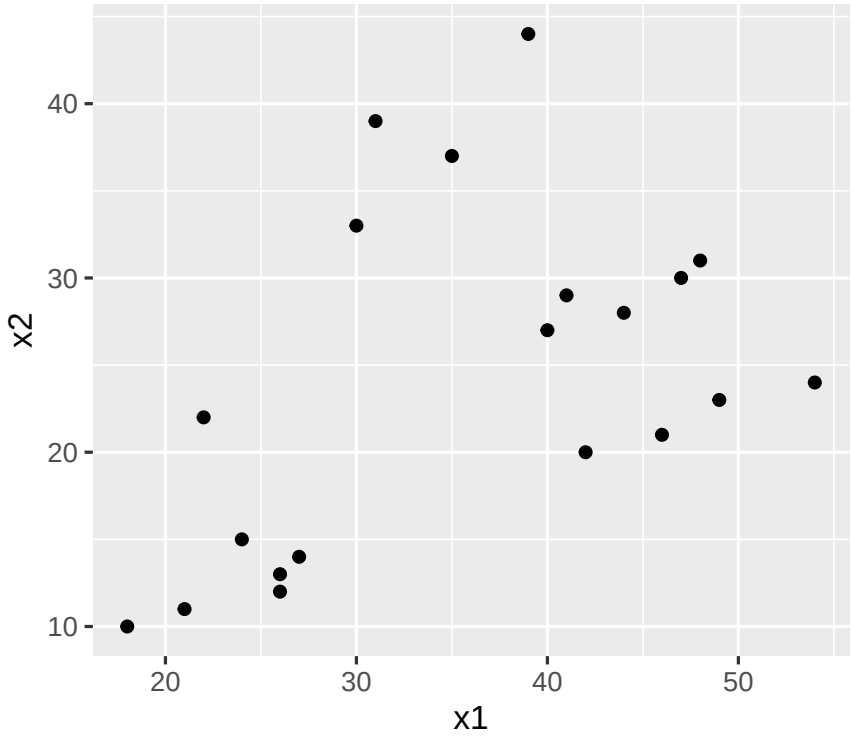
Hierarkisk klyngeanalyse



Artwork by @allison_horst

K-gjennomsnitt klyngeanalyse

- Finn K ukjente klynger i dataene.



- Alle observasjoner skal være medlem i akkurat *én* klynge.
- Variasjonen innen hver klynge skal være så liten som mulig.

Variasjon innen en klynge k

- K klynger $C_1, \ldots, C_k, \ldots, C_K$.
- Antall observasjoner i klynge k: $|C_k|$.
- Variasjon in klynge k:

$$\frac{1}{|C_k|} \sum_{i,i' \in C_k} \sum_{j=1}^{p} (x_{ij} - x_{i'j})^2$$

Optimeringsproblem

Vi vil *minimere* variasjon over *alle klynger*:

$$\sum_{k=1}^{K} \frac{1}{|C_k|} \sum_{i,i' \in C_k} \sum_{j=1}^{p} (x_{ij} - x_{i'j})^2$$

Nyttig sammenhang som er grunnlag for k-gjennomsnitt algoritme

$$\sum_{k=1}^{K} \frac{1}{|C_k|} \sum_{i,i' \in C_k} \sum_{j=1}^{p} (x_{ij} - x_{i'j})^2$$

$$= \sum_{k=1}^{K} 2 \sum_{i \in C_k} \sum_{j=1}^{p} (x_{ij} - \overline{x}_{kj})^2 \ ,$$

med *klyngesentroide* i klynge k: $\overline{x}_k = (\overline{x}_{k1}, \ldots, \overline{x}_{kp})$.

K-gjennomsnitt algoritme

- Start med å velge antall klynker K.
- Tilordne hver observasjon til en klynge
  - Mange muligheter
    - å tilfeldig velge ut K observasjoner og sette disse som klyngesentroider, og deretter tilordne de resterende observasjonene til klyngen med nærmeste klyngesentroide.
    - tilfeldig klynger
- Repeter (iterativt) *til ingen observasjoner endrer klyngemedlemskap*:
  1. For hver klynge regn ut klyngesentroiden
  2. Tilordne hver observasjon til klyngen til nærmeste klyngesentroide

Illustrasjon av K-gjennomsnitt algoritme ($K = 3$)

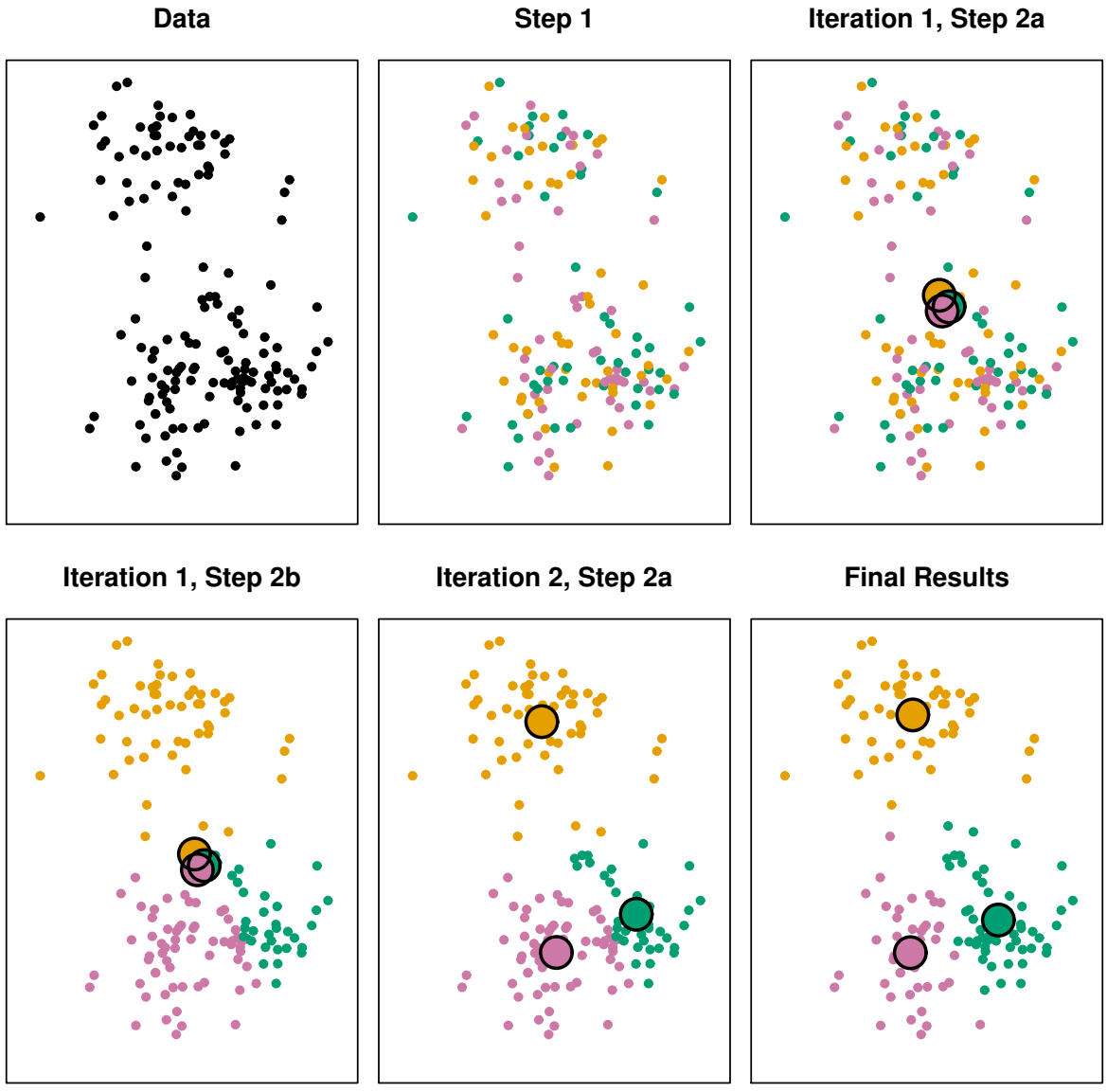


Fig. 10.6 fra "An Introduction to Statistical Learning with Applications in R", James et al 2013.

Python kodechunk kmeans (K-gjennomsnitt-algoritmen)

- Package:
```
from sklearn.cluster import KMeans
```

- Steg 1: Antall klynger
```
antall_klynger = 10
```

- Steg 2: Initaliser k-means algoritmen
```
kmeans = KMeans(n_clusters = antall_klynger,
random_state = 1)
```

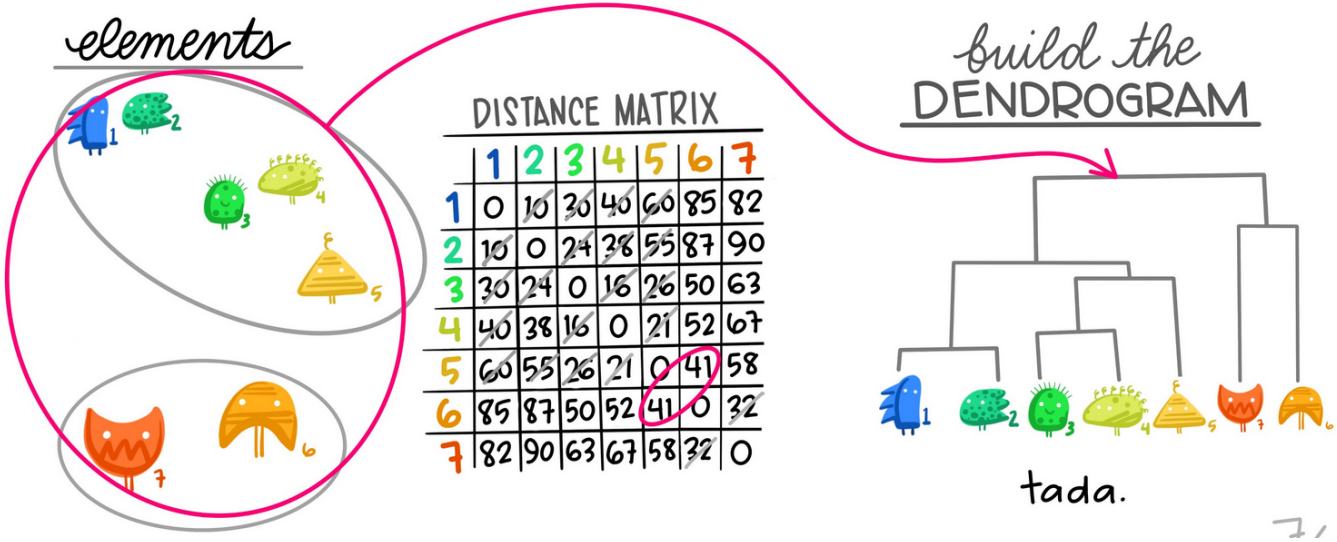
- Steg 3: Tilpass modellen
```
kmeans.fit(images)
```

- Sentroidene
```
sentroider = kmeans.cluster_centers_
```

Prosjektoppgaven

Vi kan se sammen på prosjektoppgaven.

Hierarkisk klyngeanalyse



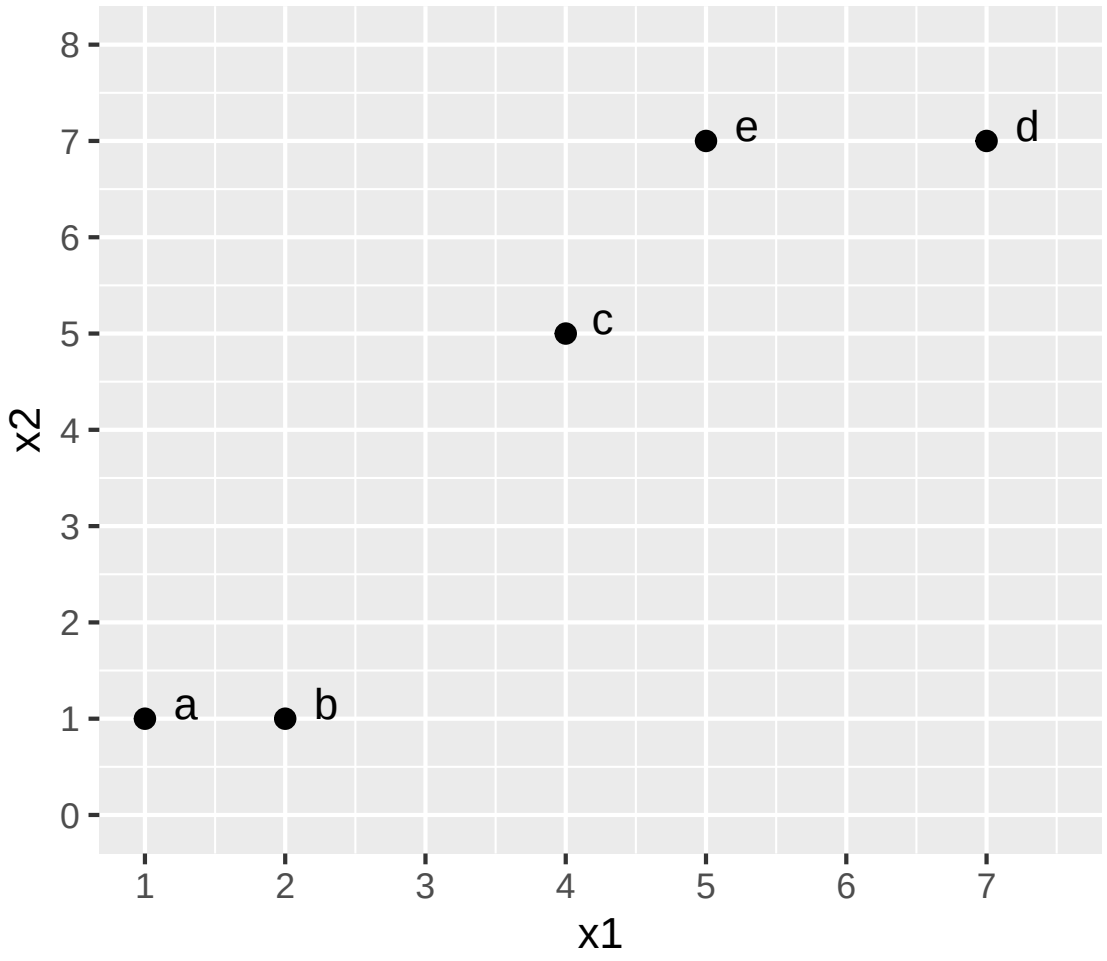
	1	2	3	4	5	6	7
1	0	10	30	40	60	85	82
2	10	0	24	38	55	87	90
3	30	24	0	16	26	50	63
4	40	38	16	0	21	52	67
5	60	55	26	21	0	41	58
6	85	87	50	52	41	0	32
7	82	90	63	67	58	32	0

Artwork by @allison_horst

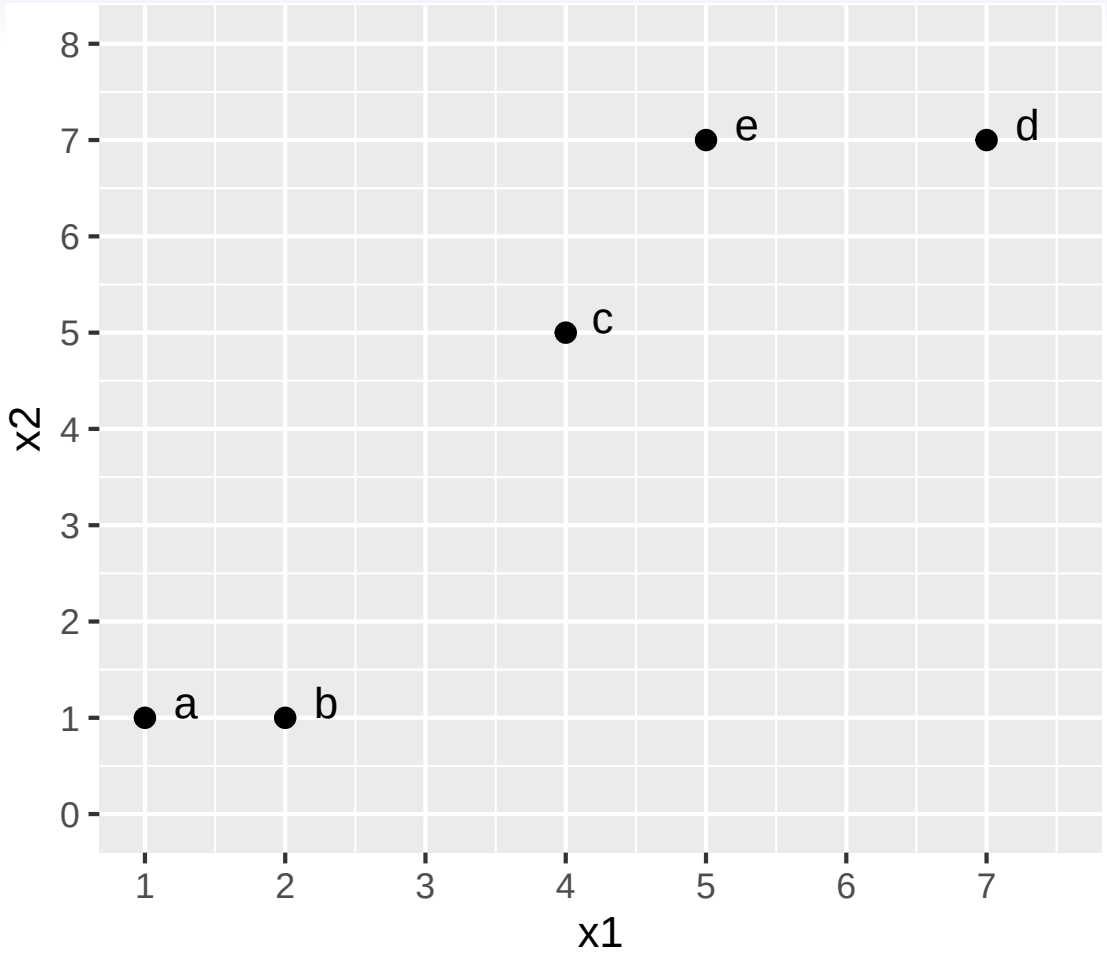
Eksempel

$n = 5, p = 2$

x1	x2	name
1	1	a
2	1	b
4	5	c
7	7	d
5	7	e

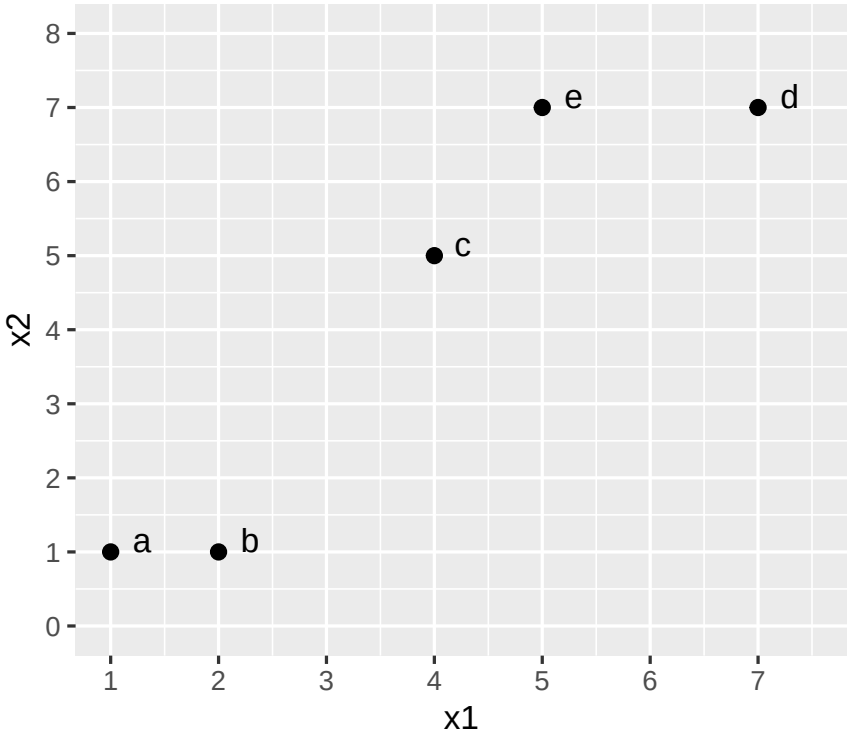


x1	x2	name
1	1	a
2	1	b
4	5	c
7	7	d
5	7	e



1) Velg avstandsmål.
2) Regn ut avstanden mellom alle par av observasjoner.
3) Plasser avstandene inn i en $n \times n$ matrise.

Avstandsmatrise (Euklidsk avstand)

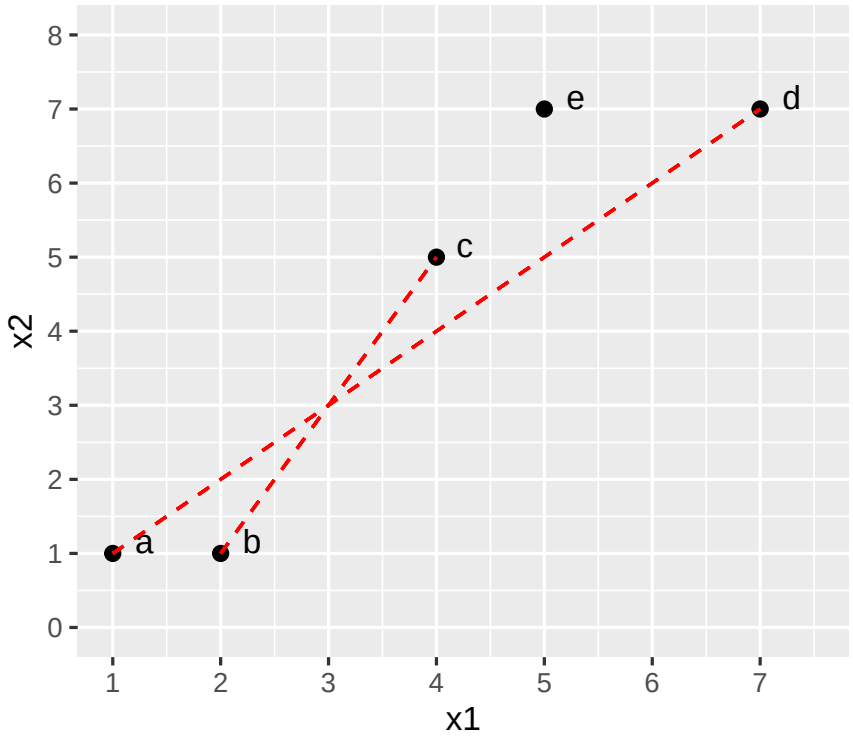


name	a	b	c	d	e
a	0.0	1.0	5.0	8.5	7.2
b	1.0	0.0	4.5	7.8	6.7
c	5.0	4.5	0.0	3.6	2.2
d	8.5	7.8	3.6	0.0	2.0
e	7.2	6.7	2.2	2.0	0.0

Avstand mellom klynger?

Tre populære typer avstandsmål:

- **Singel kobling**: minimal avstand
- **Komplett kobling**: maksimal avstand
- **Gjennomsnittskobling**: gjennomsnittlig avstand



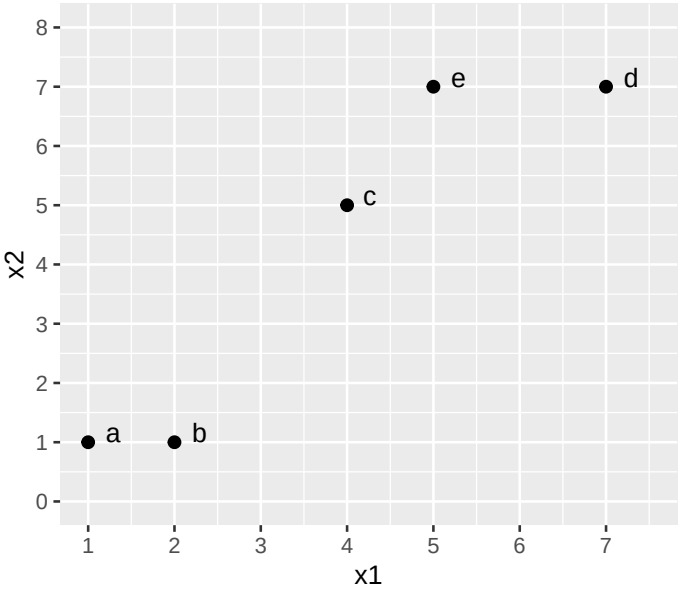
Algoritme for hierarkisk klyngeanalyse - I

Før algoritmen starter man bestemme seg for

- hvilket avstandsmål skal brukes (f.eks: euklidsk, city block, korrelasjon,...)
- hvilken koblingtype skal brukes (f.eks: singel, komplett, gjennomsnitt, sentroide,...)

og regne ut avstandsmatrisen mellom alle observasjoner.

name	a	b	c	d	e
a	0.0	1.0	5.0	8.5	7.2
b	1.0	0.0	4.5	7.8	6.7
c	5.0	4.5	0.0	3.6	2.2
d	8.5	7.8	3.6	0.0	2.0
e	7.2	6.7	2.2	2.0	0.0



Algoritme for hierarkisk klyngeanalyse – II

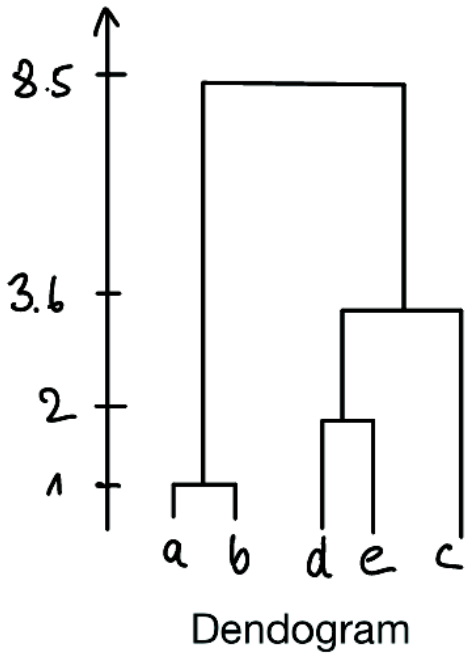
Behandle hver observasjon som om den var sin egen klynge (det er da n klynger).

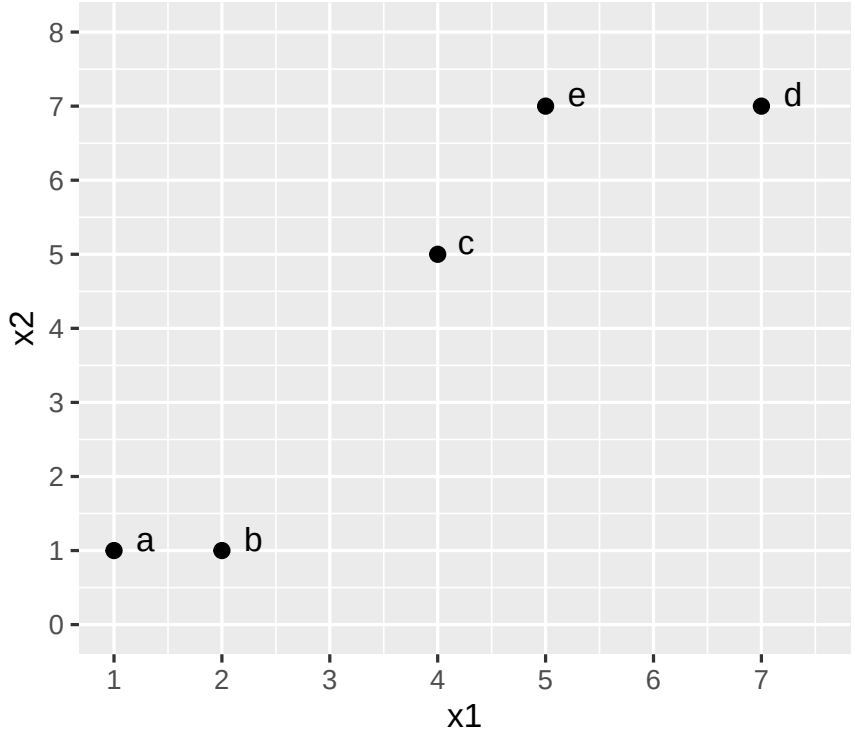
1. **Slå sammen**
   Finn de to klyngene som er nærmest hverandre og slå dem sammen til en klynge.
2. **Beregn avstander**
   Beregn nye parvise avstander mellom alle klynger ved bruk av valgt avstandsmål og koblingstype.

Repeterer til alle observasjonene er i samme klynge.

Resultat fra vår eksempel (dendogram)

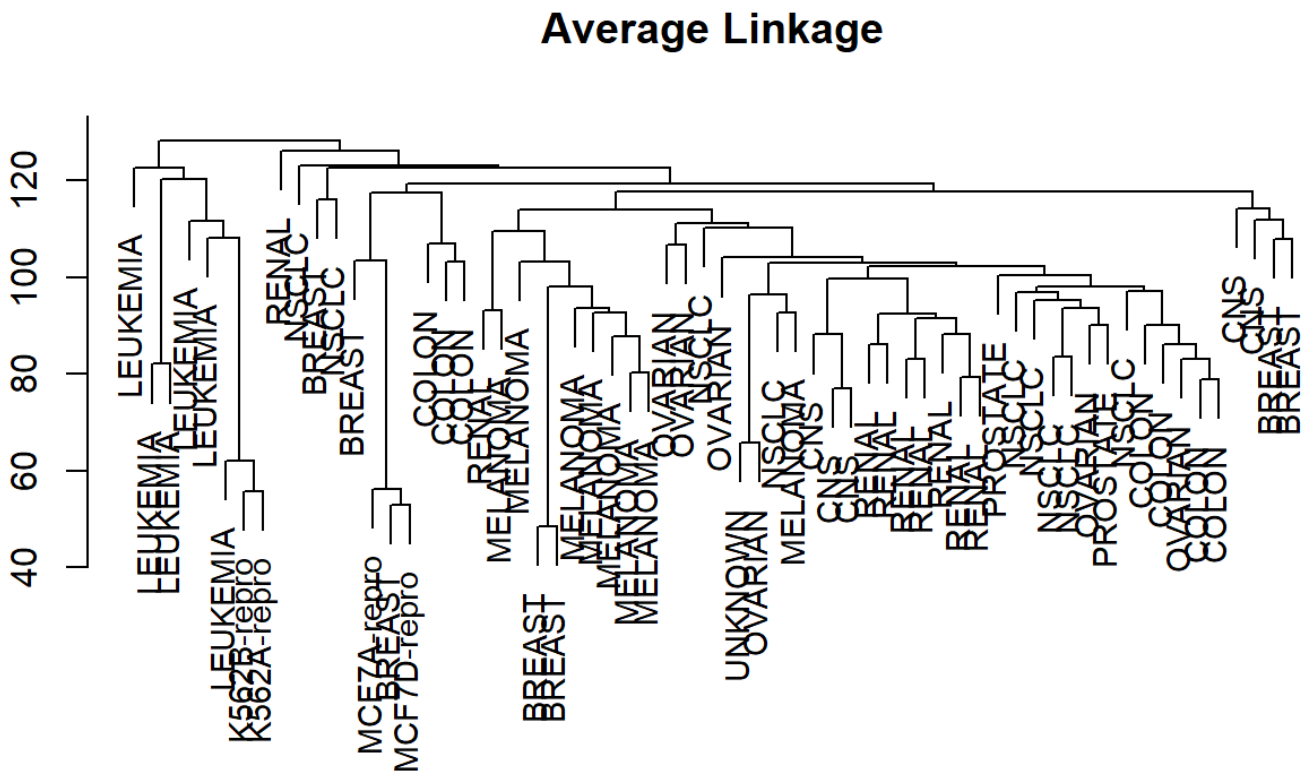
Ved bruk av komplett kobling (maksimal avstand):





Eksempel: Genaktivitet

- n=64 celleprøver fra kreftsvulster til ulike pasienter.
- genaktivitet for $p = 6830$ gener.



https://bookdown.org/aurora_tumminello/statistics_lab/nci60-data-example.html#clustering-the-nci60-observations

Prosjektoppgaven 3

- Hva er hovedforskjellene mellom K-gjennomsnitt-klyngeanalyse og hierarkisk klyngeanalyse?
- Hva er parameteren/parametrene på K-gjennomsnitt? På hierakisk klyngeanalyse?
- Hvorfor har vi ikke brukt trenigns-, validerings- og testsett her?

Videre de neste to ukene

- Hvis dere ikke har gjort det: Se på de korte videoene for hvert tema.
- Jobb med prosjektoppgaven. Husk at frist for innlevering av prosjektet til Inspera er **mandag 29.november kl 09.00**.
- Vi har 5 timer digital veiledning via Whereby (www.whereby.com) begge uker. Se her: https://wiki.math.ntnu.no/istx1003/2021h/start
- Husk også mattelab forumet – men bare for korte spørsmål. Lange spørsmål fungerer best med direkt interaksjon.