

4. Tutorium Multivariate Verfahren

- Clusteranalyse -

Andreas Hölzl:

26.05.14 und 02.06.14

Shuai Shao:

05.06.14

Institut für Statistik, LMU München

Gliederung

- 1 Idee der Clusteranalyse
- 2 Distanzmaße
- 3 Hierarchische Klassifikationsverfahren
- 4 Nichthierarchische Verfahren

Gliederung

- 1 Idee der Clusteranalyse
- 2 Distanzmaße
- 3 Hierarchische Klassifikationsverfahren
- 4 Nichthierarchische Verfahren

Problemstellung

- Einteilung einer Menge von n Individuen $\{a_1, \dots, a_n\}$ in Teilmengen, sogenannte **Cluster**!
- Die Einteilung soll so erfolgen, dass
 - sich die Individuen innerhalb eines Clusters möglichst ähnlich sind (Homogenität innerhalb der Cluster)
 - sich die Cluster untereinander möglichst unterscheiden (Heterogenität über die Cluster hinweg)
- **Beachte:** Die Klassen/Gruppen sind vorab nicht bekannt und werden gesucht! (im Gegensatz zur Diskriminanzanalyse)

Datensituation

- Gegeben sind n Individuen mit zugehörigen Merkmalsvektoren $\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, n$
- $\mathfrak{C} = \{C_1, \dots, C_k\}$ sei eine Partition der Individuen in k Cluster
- Gesucht ist eine disjunkte Zerlegung $\{C_1, \dots, C_k\}$ mit folgenden Eigenschaften:
 - a) $\bigcup_{i=1}^k C_i = \{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n\}$
 - b) $C_i \cap C_j = \emptyset \quad \forall i \neq j$

Gliederung

- 1 Idee der Clusteranalyse
- 2 Distanzmaße**
- 3 Hierarchische Klassifikationsverfahren
- 4 Nichthierarchische Verfahren

Distanz zwischen den Individuen

- Für Distanzmaße $d : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ postuliert man:
 - $d(a_i, a_j) = d(a_j, a_i)$
 - $d(a_i, a_i) = 0$
 - $d(a_i, a_j) \geq 0 \quad \forall i, j$
 - $d(a_i, a_j) \leq d(a_i, a_r) + d(a_r, a_j)$ (Dreiecksungleichung)
- **Typische Distanzmaße:**
 - $d_q(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \sqrt[q]{\sum_{l=1}^p (x_{il} - x_{jl})^q}$ (L_q -Metrik)
 - $d_2(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \sqrt{\sum_{l=1}^p (x_{il} - x_{jl})^2}$ (euklidische Distanz)
 - $d_1(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \sum_{l=1}^p |x_{il} - x_{jl}|$ (Manhattan-Metrik)

Gliederung

- 1 Idee der Clusteranalyse
- 2 Distanzmaße
- 3 Hierarchische Klassifikationsverfahren**
- 4 Nichthierarchische Verfahren

Grundstruktur

- Konstruktion einer Hierarchie von Partitionen
 $\mathcal{C} = \{C_1, \dots, C_k\}$. Die Anzahl der Cluster variiert dabei von 1 bis zur Anzahl der Individuen!
- **Agglomerative** Verfahren: zu Beginn bildet jedes Individuum einen eigenen Cluster
- **Divisive** Verfahren: zu Beginn ein großer Cluster, der alle Individuen enthält
- **Merke:** Die Hierarchie enthält das Klassifikationsergebnis für jede mögliche Anzahl an Clustern (beliebig wählbar)
- Hierarchischen Klassifikationen erfordern Definition der
 - Distanz zwischen Individuen (vgl. Metriken Folie 7)
 - Distanz zwischen Clustern → **Linkage**

Linkage-Methoden

- C_r, C_s : Cluster
- **Single Linkage:** $D(C_r, C_s) = \min_{a_i \in C_r, a_j \in C_s} d(a_i, a_j)$
- **Complete Linkage:** $D(C_r, C_s) = \max_{a_i \in C_r, a_j \in C_s} d(a_i, a_j)$
- **Average Linkage:** $D(C_r, C_s) = \frac{1}{|C_r||C_s|} \sum_{a_i \in C_r, a_j \in C_s} d(a_i, a_j)$
- **Zentroid-Verfahren:** $D(C_r, C_s) = \|\bar{\mathbf{x}}_r - \bar{\mathbf{x}}_s\|^2$
- **Ward:** $D(C_r, C_s) = \frac{|C_r||C_s|}{|C_r|+|C_s|} \|\bar{\mathbf{x}}_r - \bar{\mathbf{x}}_s\|^2,$
 $\bar{\mathbf{x}}_r, \bar{\mathbf{x}}_s$: Mittelwert der Individuen in Cluster C_r, C_s

Agglomerative Verfahren

- **Algorithmus:**

- ① **Start:** Feinste Partition: Jedes Individuum bildet einen eigenen Cluster: $\mathcal{C} = \{\{a_1\}, \dots, \{a_n\}\}$
- ② Vereinige im ν -ten Schritt zwei Cluster C_r, C_s mit dem kleinsten Abstand und berechne den Homogenitätsindex:
$$h_\nu = \min_{r \neq s} D(C_r, C_s).$$
- ③ Wiederhole 2. bis ein großer Cluster entsteht, der alle Individuen enthält: $\mathcal{C} = \{a_1, \dots, a_n\}$

- Die Distanzen der Individuen werden durch die festgelegte *Metrik*, die Distanzen der Cluster durch die festgelegte *Linkage-Methode* bestimmt!

Divisive Verfahren

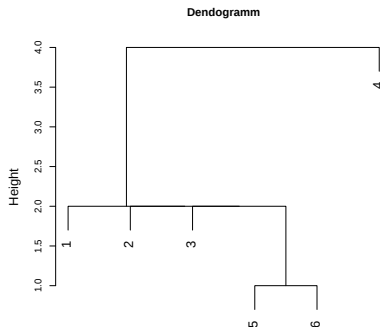
- **Algorithmus:**

- 1 **Start:** Größte Partition: Ein großer Cluster, der alle Individuen enthält: $\mathcal{C} = \{a_1, \dots, a_n\}$.
- 2 Sukzessive Unterteilung der Partition bis die feinste Partition entsteht: $\mathcal{C} = \{\{a_1\}, \dots, \{a_n\}\}$

- **Beachte:** $2^n - 1$ Möglichkeiten zu splitten
⇒ Für großes n ist agglomerativ einfacher!

Dendrogramm

- Graphische Darstellung einer hierarchischen Clusterung
- y-Achse: Homogenitätsmaß h
→ je kleiner h , desto homogener ist der Cluster!
- Sukzessives Zusammenfassen bzw. sukzessive Aufteilung im Plot erkennbar.



Gliederung

- 1 Idee der Clusteranalyse
- 2 Distanzmaße
- 3 Hierarchische Klassifikationsverfahren
- 4 Nichthierarchische Verfahren**

Grundprinzip

- **Ziel:** Finde die Partition $\mathfrak{C} = \{C_1, \dots, C_k\}$ bestehend aus k Clustern, die bezüglich eines Gütekriteriums optimal ist!
- Man betrachtet für jede Partition ein **Optimalitätskriterium**, das die Heterogenität erfasst:

$$H(\mathfrak{C}_{opt}) = \min_{\mathfrak{C}} H(\mathfrak{C})$$

- **Austauschverfahren:**
 - ① Wähle eine zufällige Ausgangspartition aus k Individuen
 - ② Prüfe in der Partition $\mathfrak{C}^{alt}$, ob die Zuordnung jeweils eines Individuums in einen anderen Cluster, das betrachtete Optimalitätskriterium minimiert.
- **Beachte:**
 - Die Anzahl der Cluster k muss vom Anwender fest vorgegeben werden!
 - Je nach gewählter Ausgangspartition, können unterschiedliche Cluster entstehen.

Optimalitätskriterien

① Varianzkriterium

$$H(\mathcal{C}) = \sum_{r=1}^k \sum_{\mathbf{x}_i \in C_r} \|\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}_r\|^2 \quad \triangleq \text{„k-means clustering“}$$

② Determinantenkriterium

$$H(\mathcal{C}) = |\mathbf{W}(\mathcal{C})| \xrightarrow{\mathcal{C}} \min$$

③ Verallgemeinertes Determinantenkriterium

$$H(\mathcal{C}) = \sum_{r=1}^k n_r \log \left(\frac{1}{n_r} \mathbf{W}(\mathcal{C}_r) \right) \xrightarrow{\mathcal{C}} \min$$

Merke: Die Determinante entspricht einer verallgemeinerten Varianzmatrix!

k-means clustering

Vorgehen:

- 1 Wähle zufällig k Individuen bzw. die zugehörigen Merkmalsvektoren $\mathbf{x}$ als Clusterschwerpunkte $Z_r, r = 1, \dots, k$. Die Clusteranzahl k ist fest!
- 2 Ordne jedes Individuum dem Clusterzentrum zu, zu dem die geringste Distanz $d_r, r = 1, \dots, k$ besteht.
- 3 Berechne neue Clusterschwerpunkte $Z_r, r = 1, \dots, k$ als Mittelwertsvektoren der Merkmalsvektoren der Individuen im Cluster!
- 4 Wiederhole 2. und 3. bis zur Konvergenz.