Postup analýzy shluků

Poskytuje empirické a objektivní metody
ke klasifikaci objektů

1. krok: Cíle analýzy shluků
2. krok: Formulace úlohy analýzy shluků
3. krok: Předpoklady analýzy shluků
4. krok: Výstavba dendrogramu shluků
5. krok: Interpretace shluků
6. krok: Validace a profilování shluků

1. krok: Cíle analýzy shluků

Rozdělení objektů do shluků dle podobnosti objektů
a dle specifikovaných vlastností - proměnných.

Popis systematiky (taxonomie): empirická klasifikace.
Shluky objektů jsou porovnány s jejich teoretickou typologií.

Zjednodušení dat: zjednodušený pohled na soubor objektů.
Na oddělené shluky objektů se hledí dle jejich vlastností.

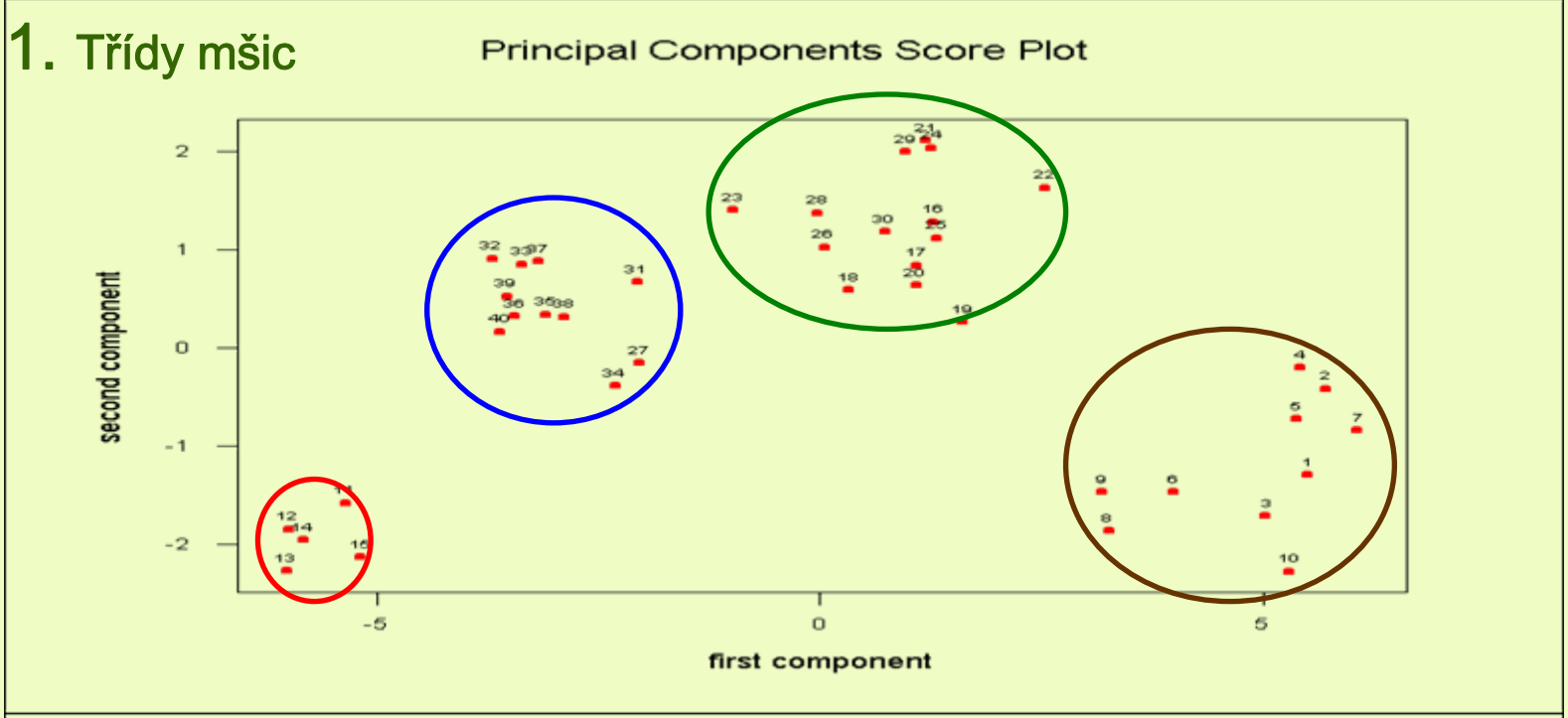
Identifikace vztahu: dle struktury shluků je snadnější odhalit vztahy mezi objekty. Shluky mohou být předmětem dalšího kvalitativního uvažování.

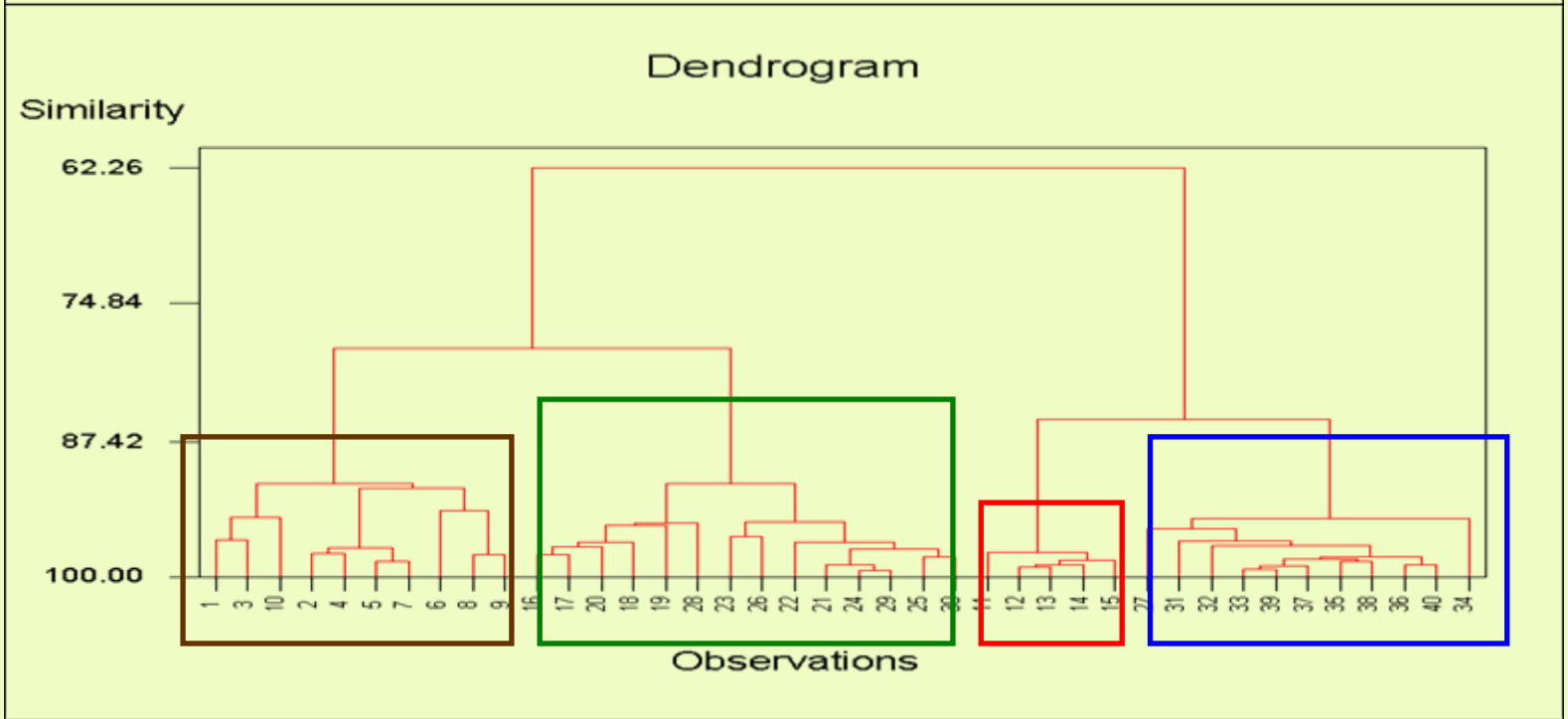
Úloha 1. Klasifikace polétavých mšic (Kompendium B404)

Jeffers (1967)25 studoval 40 jedinců polétavých mšic *(Alate adelges)* : 19 ukazatelů k rozlišení druhů, 14 znaků délky a šířky, 4 znaky se týkají počtu a 1 binární vyjadřuje přítomnost či absenci: x1 délka těla, x2 šířka těla, x3 délka předního křídla, x4 délka zadního křídla, x5 počet průduchů, x6 délka tykadla I, x7 délka tykadla II, x8 délka tykadla III, x9 délka tykadla IV, x10 délka tykadla V, x11 počet tykadlových ostnů, x12 délka posledního článku nohy, x13 délka holeně, tibia, x14 délka stehna, x15 délka sosáku, x16 délka kladélka, x17 počet kladélkových trnů, x18 řitní otvor, x19 počet háčků zadních křídel

x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9	x10	x11	x12	x13	x14	x15	x16	x17	x18	x19
21.2	11	7.5	4.8	5	2	2	2.8	2.8	3.3	3	4.4	4.5	3.6	7	4	8	0	3
20.2	10	7.5	5	5	2.3	2.1	3	3	3.2	5	4.2	4.5	3.5	7.6	4.2	8	0	3
20.2	10	7	4.6	5	1.9	2.1	3	2.5	3.3	1	4.2	4.4	3.3	7	4	6	0	3
22.5	8.8	7.4	4.7	5	2.4	2.1	3	2.7	3.5	5	4.2	4.4	3.6	6.8	4.1	6	0	3
20.6	11	8	4.8	5	2.4	2	2.9	2.7	3	4	4.2	4.7	3.5	6.7	4	6	0	3
19.1	9.2	7	4.5	5	1.8	1.9	2.8	3	3.2	5	4.1	4.3	3.3	5.7	3.8	8	0	3.5
20.8	11.4	7.7	4.9	5	2.5	2.1	3.1	3.1	3.2	4	4.2	4.7	3.6	6.6	4	8	0	3
15.5	8.2	6.3	4.9	5	2	2	2.9	2.4	3	3	3.7	3.8	2.9	6.7	3.5	6	0	3.5
16.7	8.8	6.4	4.5	5	2.1	1.9	2.8	2.7	3.1	3	3.7	3.8	2.8	6.1	3.7	8	0	3
19.7	9.9	8.2	4.7	5	2.2	2	3	3	3.1	0	4.1	4.3	3.3	6	3.8	8	0	3
10.6	5.2	3.9	2.3	4	1.2	1	2	2	2.2	6	2.5	2.5	2	4.5	2.7	4	1	2
9.2	4.5	3.7	2.2	4	1.3	1.2	2	1.6	2.1	5	2.4	2.3	1.8	4.1	2.4	4	1	2
9.6	4.5	3.6	2.3	4	1.3	1	1.9	1.7	2.2	4	2.4	2.3	1.7	4	2.3	4	1	2
8.5	4	3.8	2.2	4	1.3	1.1	1.9	2	2.1	5	2.4	2.4	1.9	4.4	2.3	4	1	2
11	4.7	4.2	2.3	4	1.2	1	1.9	2	2.2	4	2.5	2.5	2	4.5	2.6	4	1	2
18.1	8.2	5.9	3.5	5	1.9	1.9	1.9	2.7	2.8	4	3.5	3.8	2.9	6	4.5	9	1	2
17.6	8.3	6	3.8	5	2	1.9	2	2.2	2.9	3	3.5	3.6	2.8	5.7	4.3	10	1	2
19.2	6.6	6.2	3.4	5	2	1.8	2.2	2.3	2.8	4	3.5	3.4	2.5	5.3	3.8	10	1	2
15.4	7.6	7.1	3.4	5	2	1.9	2.5	2.5	2.9	4	3.3	3.6	2.7	6	4.2	8	1	3
15.1	7.3	6.2	3.8	5	2	1.8	2.1	2.4	2.5	4	3.7	3.7	2.8	6.4	4.3	10	1	2.5
16.1	7.9	5.8	3.7	5	2.1	1.9	2.3	2.6	2.9	5	3.6	3.6	2.7	6	4.5	0	1	2
19.1	8.8	6.4	3.9	5	2.2	2	2.3	2.4	2.9	4	3.8	4	3	6.5	4.5	0	1	2.5
15.3	6.4	5.3	3.3	5	1.7	1.6	2	2.2	2.5	5	3.4	3.4	2.6	5.4	4	0	1	2
14.8	8.1	6.2	3.7	5	2.2	2	2.2	2.4	3.2	5	3.5	3.7	2.7	6	4.1	0	1	2
16.2	7.7	6.9	3.7	5	2	1.8	2.3	2.4	2.8	4	3.8	3.7	2.7	5.7	4.2	0	1	2.5
13.4	6.9	5.7	3.4	5	2	1.8	2.8	2	2.6	4	3.6	3.6	2.6	5.5	3.9	0	1	2
12.9	5.8	4.8	2.6	5	1.6	1.5	1.9	2.1	2.6	5	2.8	3	2.2	5.1	3.6	9	1	3
12	6.5	5.3	3.2	5	1.9	1.9	2.3	2.5	3	5	3.3	3.5	2.6	5.4	4.3	8	1	2
14.1	7	5.5	3.6	5	2.2	2	2.3	2.5	3.1	5	3.6	3.7	2.8	5.8	4.1	0	1	2
16.7	7.2	5.7	3.5	5	1.9	1.9	2.5	2.3	2.8	5	3.4	3.6	2.7	6	4	0	1	2.5
14.1	5.4	5	3	5	1.7	1.6	1.8	2.5	2.4	5	2.7	2.9	2.2	5.3	3.6	8	1	2
10	6	4.2	2.5	5	1.6	1.4	1.4	2	2.7	6	2.8	2.5	1.8	4.8	3.4	8	1	2
11.4	4.5	4.4	2.7	5	1.8	1.5	1.9	1.7	2.5	5	2.7	2.5	1.9	4.7	3.7	8	1	2
12.5	5.5	4.7	2.3	5	1.8	1.4	1.8	2.2	2.4	4	2.8	2.6	2	5.1	3.7	8	0	2
13	5.3	4.7	2.3	5	1.6	1.4	1.8	1.8	2.5	4	2.7	2.7	2.1	5	3.6	8	1	2
12.4	5.2	4.4	2.6	5	1.6	1.4	1.8	2.2	2.2	5	2.7	2.5	2	5	3.2	6	1	2
12	5.4	4.9	3	5	1.7	1.5	1.7	1.9	2.4	5	2.7	2.7	2	4.2	3.7	6	1	2
10.7	5.6	4.5	2.8	5	1.8	1.4	1.8	2.2	2.4	4	2.7	2.6	2	5	3.5	8	1	2
11.1	5.5	4.3	2.6	5	1.7	1.5	1.8	1.9	2.4	5	2.6	2.5	1.9	4.6	3.4	8	1	2
12.8	5.7	4.8	2.8	5	1.6	1.4	1.7	1.9	2.3	5	2.3	2.5	1.9	5	3.1	8	1	2

Úloha 1. Třídy mšic





Volba shlukovacích proměnných či znaků

(shluky vystihují strukturu dat dle nadefinovaných proměnných, znaků)

dle teoretických a praktických hledisek:

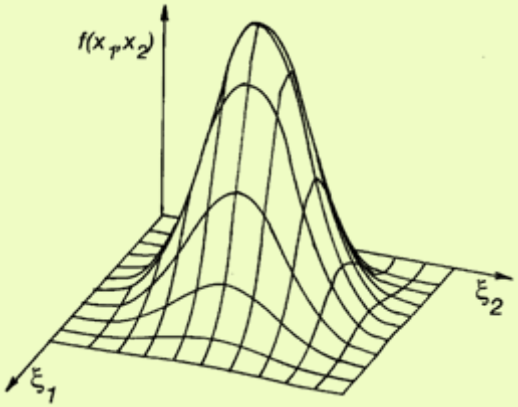
1) Proměnné charakterizují objekty shlukované.

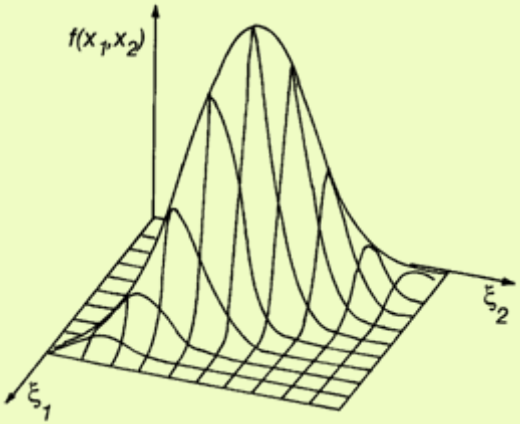
2) Analýza nerozlišuje významné a nevýznamné proměnné.

3) Odlišení shluků za použití všech navržených proměnných.

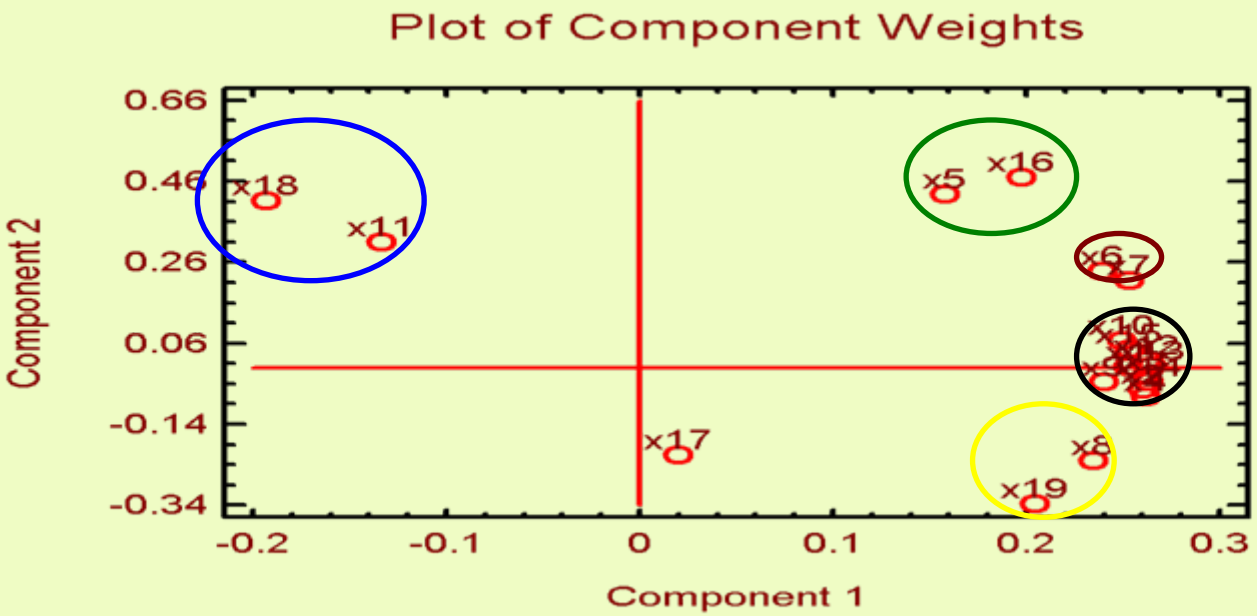
4) Na volbě proměnných závisí nalezení správných shluků.

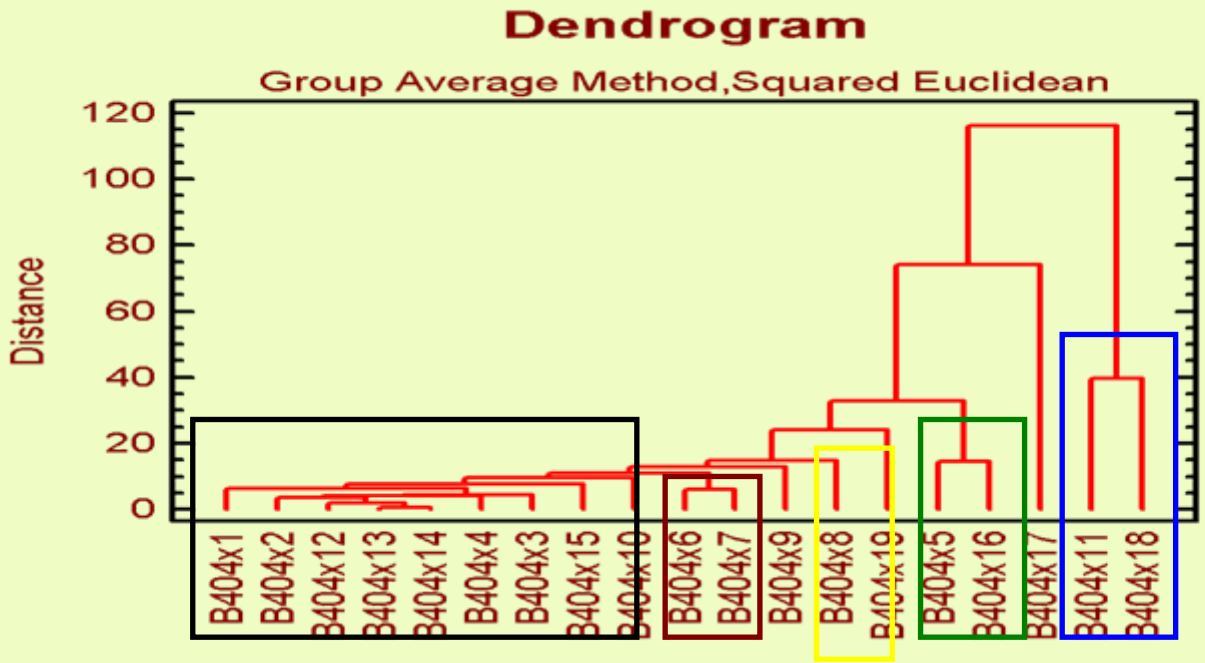
5) Pouze proměnné, které dostatečně rozlišují mezi objekty.





$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^T \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_j^T \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_n^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{1,1} & \cdots & x_{1,i} & \cdots & x_{1,m} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_{j,1} & \cdots & x_{j,i} & \cdots & x_{j,m} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_{n,1} & \cdots & x_{n,i} & \cdots & x_{n,m} \end{bmatrix}$$


Plot of Component Weights
Component 2
Component 1
0.66
0.46
0.26
0.06
-0.14
-0.34
-0.2
-0.1
0
0.1
0.2
0.3
x18
x11
x5
x16
x6
x7
x17
x8
x19


Dendrogram
Group Average Method,Squared Euclidean
Distance
120
100
80
60
40
20
0
B404x1
B404x2
B404x12
B404x13
B404x14
B404x4
B404x3
B404x15
B404x10
B404x6
B404x7
B404x9
B404x8
B404x19
B404x5
B404x16
B404x17
B404x11
B404x18

Postup analýzy shluků

Poskytuje empirické a objektivní metody ke klasifikaci objektů

1. krok: Cíle analýzy shluků
2. krok: Formulace úlohy analýzy shluků
3. krok: Předpoklady analýzy shluků
4. krok: Výstavba dendrogramu shluků
5. krok: Interpretace shluků
6. krok: Validace a profilování shluků

2. krok: Formulace úlohy analýzy shluků

Vyhodnotí všechny možné kombinace shluků,
u 25 objektů a 5 shluků existuje 2.4×10^{15} možných shluků.

Uživatel musí určit jediné správné řešení.

Návrh modelu shluků a použité techniky má větší důležitost
než u ostatních vícerozměrných technik.

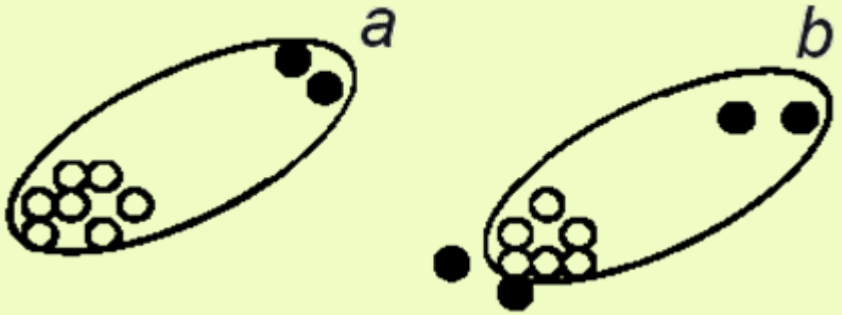
2.1 Odhalení odlehlých objektů, outlierů

Outliery představují
(1) odchýlené objekty, které nejsou představiteli populace,
(2) chybný výběr objektu z dané populace.

Outliery zbortí
(1) strukturu dat,
(2) nalezené shluky nebudou představovat skutečnou strukturu objektů dané populace.

Nalezení outlierů
profilovým diagramem proměnných.

Outliery z dat odstranit
někdy se zbortí aktuální struktura objektů.



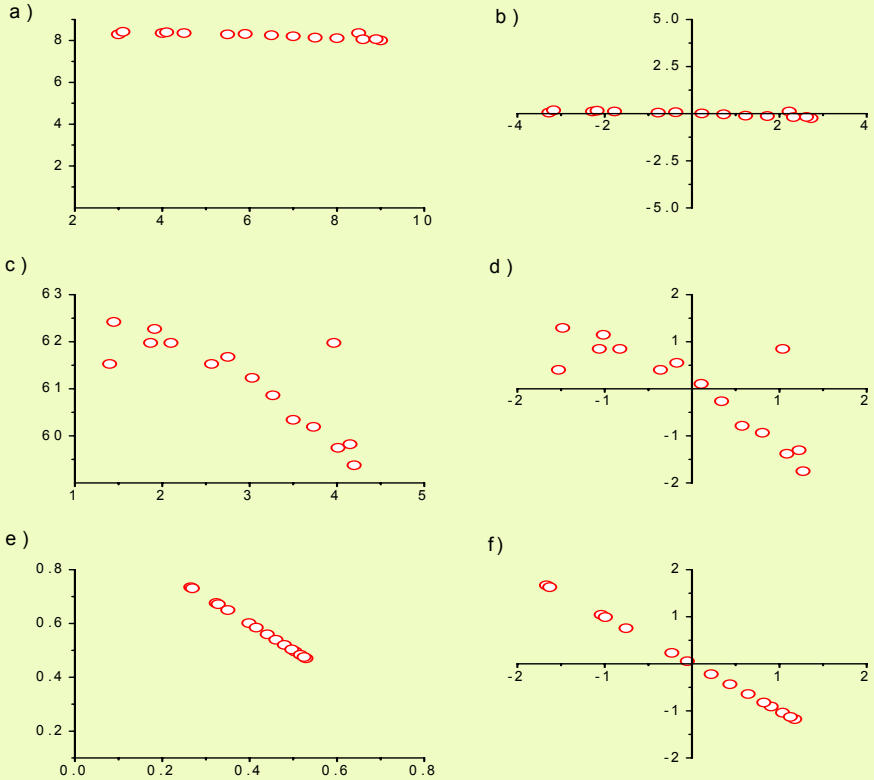
2.2 Standardizace dat

Aplikuje se před analýzou, míry vzdálenosti jsou citlivé na rozličné stupnice nebo na lišící se numerické velikosti proměnných.

Pravidlo: proměnné s větší proměnlivostí (směrodatnou odchylkou) mají větší vliv na míru podobnosti.

Standardizování proměnných

Standardizace je transformace proměnné do svého Z-skóre: (odečtením sloupcového průměru od každé hodnoty ve sloupci a výsledek se podělí sloupcovou směrodatnou odchylkou): Průměr standardizovaných dat je 0 se směrodatnou odchylkou 1.



Efekt škálovacích technik:
(a) Originální data,
(b) sloupcové centrování,
(c) sloupcové standardizování,
(d) autoškálování,
(e) profily,
(f) autoškálované profily

1) ***Sloupcové centrování*** dle $y_{ij} = x_{ij} - \bar{x}_j$.

2) ***Sloupcová standardizace*** dle $y_{ij} = x_{ij} / s_j$.

3) ***Autoškálování*** je tzv. *studentizace* dle $y_{ij} = (x_{ij} - \bar{x}_j) / s_j$ která je analogická *Z*-transformaci pro velké výběry $y_{ij} = (x_{ij} - \mu_j) / \sigma_j$.

4) ***Škálování sloupcovým rozsahem*** $y_{ij} = \dfrac{x_{ij} - \min_j (x_{ij})}{\max_j (x_{ij}) - \min_j (x_{ij})}$.

5) ***Řádkové centrování*** dle $y_{ij} = x_{ij} - \bar{x}_i$.

6) ***Řádková standardizace*** dle $y_{ij} = x_{ij} / s_i$.

7) ***Celkové centrování*** dle $y_{ij} = x_{ij} - \bar{x}$, kde $\bar{x}$ je celkový průměr.

8) ***Celková standardizace*** dle $y_{ij} = x_{ij} / s$, kde *s* je směrodatná odchylka.

9) ***Řádkové profily*** dle $y_{ij} = x_{ij} / (\bar{x}_i \, m)$.

10) ***Sloupcové profily*** dle $y_{ij} = x_{ij} / (\bar{x}_j \, n)$.

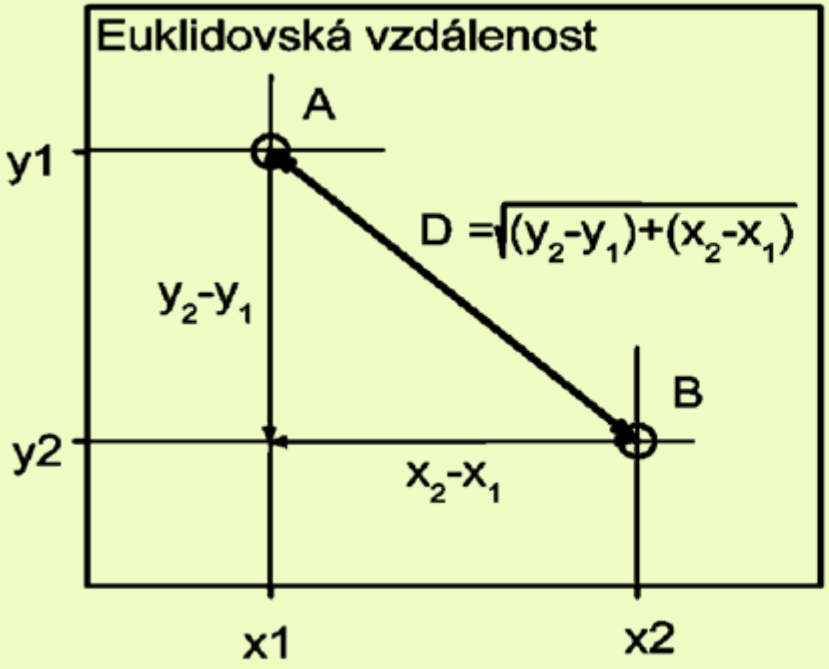
Vlastnosti:

(1) Eliminuje vychýlení, kvůli rozdílu v lišících se proměnných (různé stupnice, různé jednotky).
(2) Proměnné se v jednotné stupnici snadno porovnávají. (Kladné hodnoty jsou nad průměrem a záporné hodnoty jsou pod průměrem).
(3) Změnou stupnice nedojde k rozdílu mezi hodnotami.

2.3 Míry podobnosti

Podobnost je měřena rozličnými způsoby

Míry vzdálenosti: nejčastěji užívané míry podobnosti. Vzdálenost je reciproká hodnota podobnosti. Čím větší hodnota vzdálenosti, tím menší podobnost.



Eukleidovská vzdálenost zvaná také *geometrická metrika*

$$d_E(x_k, x_l) = \sqrt{\sum_{j=1}^{m} (x_{kj} - x_{lj})^2}$$

Manhattanská vzdálenost zvaná také *vzdálenost městských bloků* nebo *Hammingova metrika* je definovaná

$$d_H(x_k, x_l) = \sum_{j=1}^{m} |x_{kj} - x_{lj}|$$

Zobecněná Minkovského metrika

$$d_M(\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{x}_l) = \sqrt[z]{\sum_{j=1}^{m} |x_{kj} - x_{lj}|^z}$$

kde pro $z = 1$ jde o Hammingovu metriku a pro $z = 2$ o Eukleidovu. Čím je z větší, tím více je zdůrazňován rozdíl mezi vzdálenými objekty.

Tětivová vzdálenost (anglicky chord distance) je definovaná

$$d_{CH}(\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{x}_l) = \sqrt{2\left[1 - \frac{\sum_{j=1}^{m} x_{kj} x_{lj}}{\sqrt{\sum_{j=1}^{m} x_{kj}^2 \sum_{j=1}^{m} x_{lj}^2}}\right]}$$

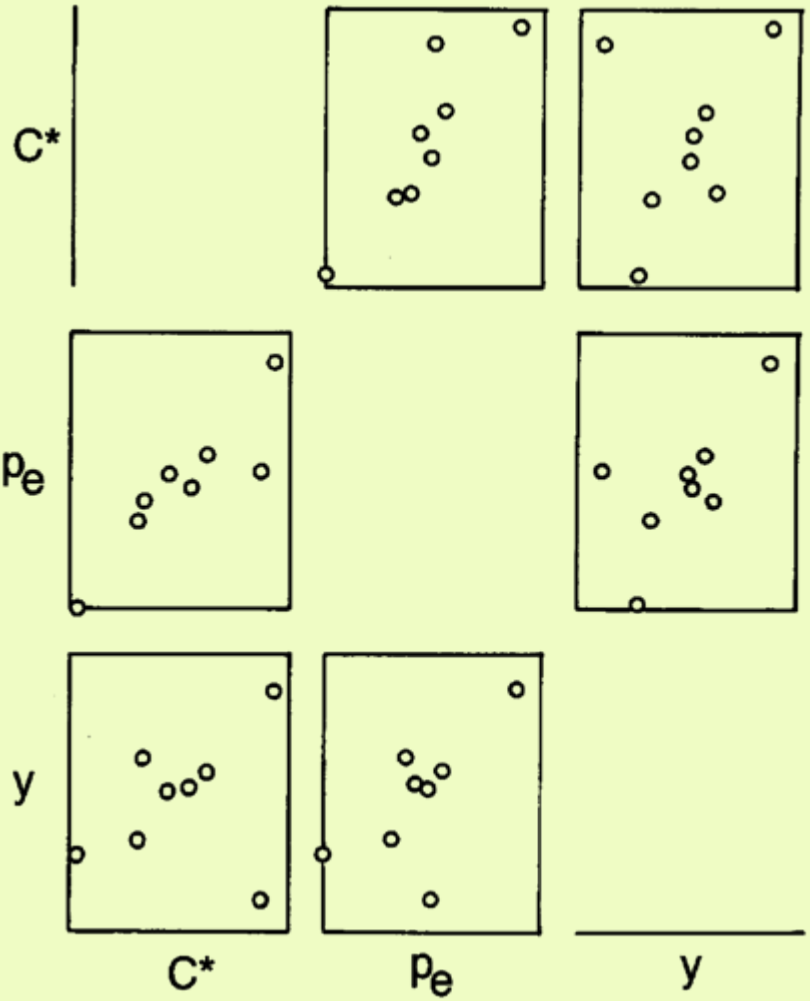
Mahalanobisova metrika pro silně korelované znaky x_k a x_l

$$d_{Ma}(\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{x}_l) = \sqrt{(\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_l)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{C}^{-1} (\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_l)}$$

vyjadřuje vzdálenost bodů v prostoru, jehož osy nemusí být orthogonální.

2.4 Korelační míry

Korelační koeficient r_{ij} mezi párem objektů pro několik proměnných.



Vysoká korelace r_{jk} = 1 značí vysokou podobnost.

Nízká korelace r_{jk} = 0 značí nepodobnost.

2.5 Míry asociace

Slouží k porovnání objektů
když jejich vlastnosti (znaky) jsou nemetrické (tj. nominální nebo ordinální proměnné).

Asociace mezi dvěma objekty O_i a O_j má možné binární odezvy typu 0-1 v kontingenční tabulce

		Objekt O_i	
		1	0
Objekt O_j	1	*a*	*b*
	0	*c*	*d*

Všechny možné kombinace počtu znaků pro dva objekty:

a značí počet znaků, kde mají oba objekty O_j a O_i hodnotu 1 a jde o tzv. pozitivní shodu,
b značí počet znaků, kde má objekt O_j hodnotu 1 a objekt O_i hodnotu 0.
c značí počet znaků, kde má objekt O_j hodnotu 0 a objekt O_i hodnotu 1.
d značí počet znaků, kde ..... O_j a O_i hodnotu 0 a jde o tzv. negativní shodu.

Míry asociace vyjadřují relativní podíly počtu znaků s ohledem na to, zda má smysl uvažovat negativní shodu nebo zda má nulová hodnota znaku u porovnávaných objektů stejnou příčinu.

Sokalův-Michenerův koeficient asociace

(čili *koeficient jednoduché shody*)

$$S_{SM} = \frac{a + d}{a + b + c + d}$$

Russelův-Raoův koeficient asociace

$$S_{RR} = \frac{d}{a + b + c + d}$$

Hamannův koeficient asociace

$$S_H = \frac{a + d - b - c}{a + b + c + d}$$

Korelační koeficient

$$r_B = \frac{a\,d - b\,c}{\sqrt{(a + b)\,(c + d)\,(a + c)\,(b + d)}}$$

Rogersův a Tanimotův koeficient asociace

$$S_{RT} = \frac{a + d}{a + 2b + 2c + d}$$

Sörensenův koeficient asociace

$$S_S = \frac{2a}{2a + b + c}$$

Postup analýzy shluků

Poskytuje empirické a objektivní metody ke klasifikaci objektů

1. krok: Cíle analýzy shluků
2. krok: Formulace úlohy analýzy shluků
3. krok: Předpoklady analýzy shluků
4. krok: Výstavba dendrogramu shluků
5. krok: Interpretace shluků
6. krok: Validace a profilování shluků

3. krok: Předpoklady analýzy shluků

Analýza shluků není charakteru statistického testování.
Objektivní kvantifikace strukturních vlastností souboru objektů.
Nemá požadavky normality, linearity, homoskedasticity.

Existují pouze dva kritické předpoklady:

Reprezentativnost vzorku

Výběr objektů a odvozené shluky představují strukturu populace.
Zvolený výběr dat musí být opravdovým představitelem populace.
Odlehlé objekty zdůrazní divergentní shluky, které zanesou vychýlení do odhadu struktury objektů.
Výběr musí být dostatečně reprezentativní a výsledky zobecnitelné na celou populaci.

Vliv multikolinearity

Multikolineární proměnné jsou implicitně váženy intenzivněji.
Vyšetřit proměnné na přítomnost multikolinearity:

(1) Je třeba zredukovat počet proměnných
(2) Použít Mahalanobisovu vzdálenost.

Postup analýzy shluků

Poskytuje empirické a objektivní metody ke klasifikaci objektů

1. krok: Cíle analýzy shluků
2. krok: Formulace úlohy analýzy shluků
3. krok: Předpoklady analýzy shluků
4. krok: Výstavba dendrogramu shluků
5. krok: Interpretace shluků
6. krok: Validace a profilování shluků

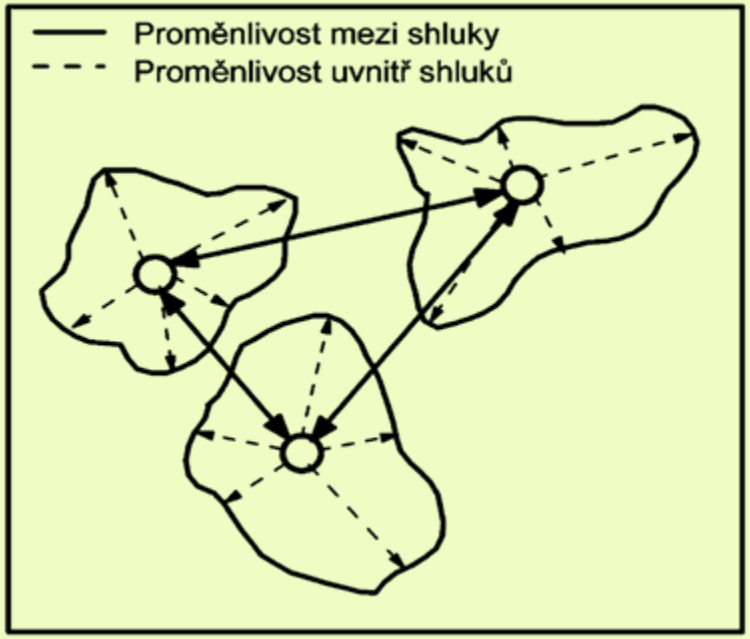
4. krok: Výstavba dendrogramu shluků

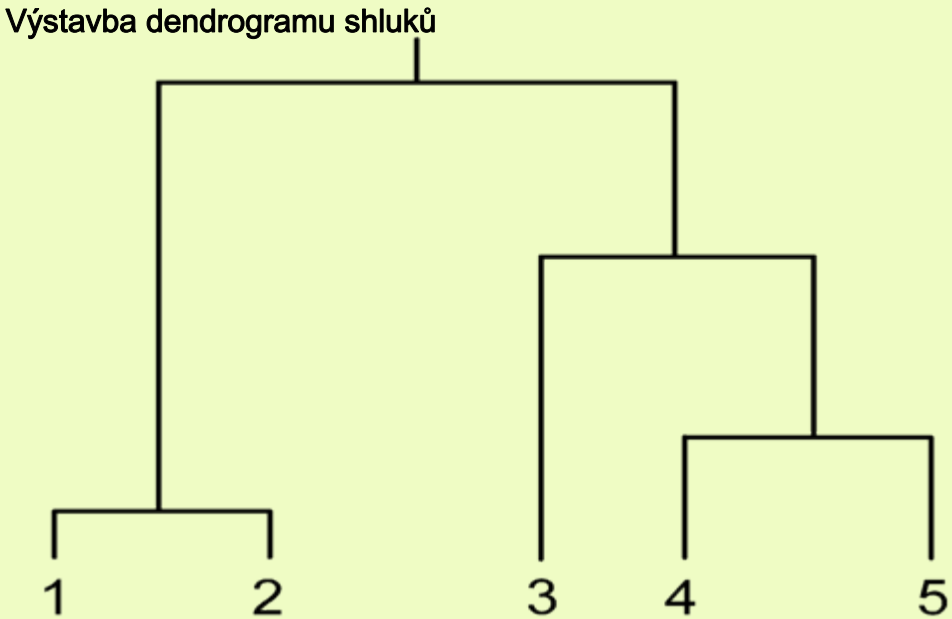
Vedle algoritmu je třeba vybrat i vhodný postup.

Rozlišovací kritérium: maximalizace rozdílů mezi shluky, Proměnlivost mezi shluky vůči proměnlivosti uvnitř shluků.

Test: poměr roztylu mezi shluky vůči průměru rozptylu uvnitř shluků

Algoritmy se dělí: hierarchické a nehierarchické.





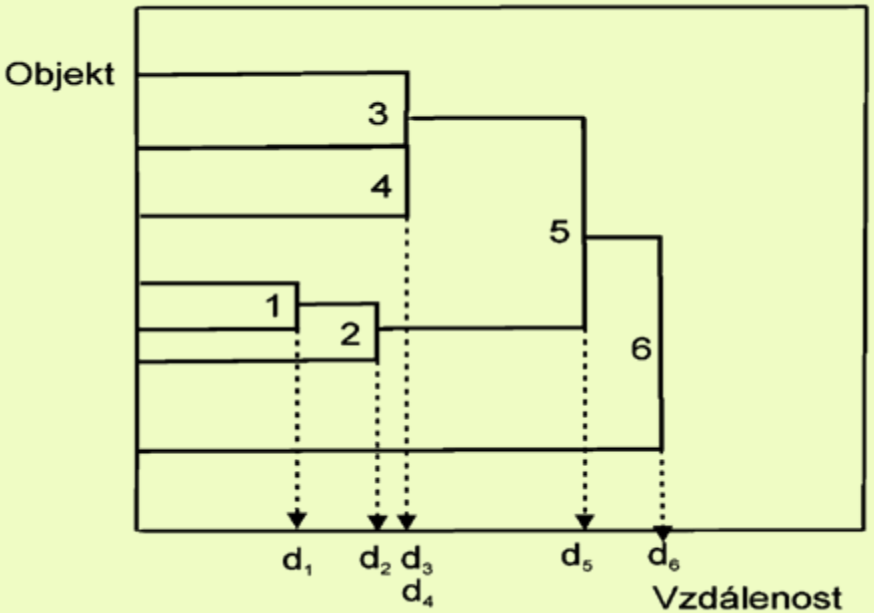
Hierarchické shlukování

konstrukce stromovité struktury, dendrogramu

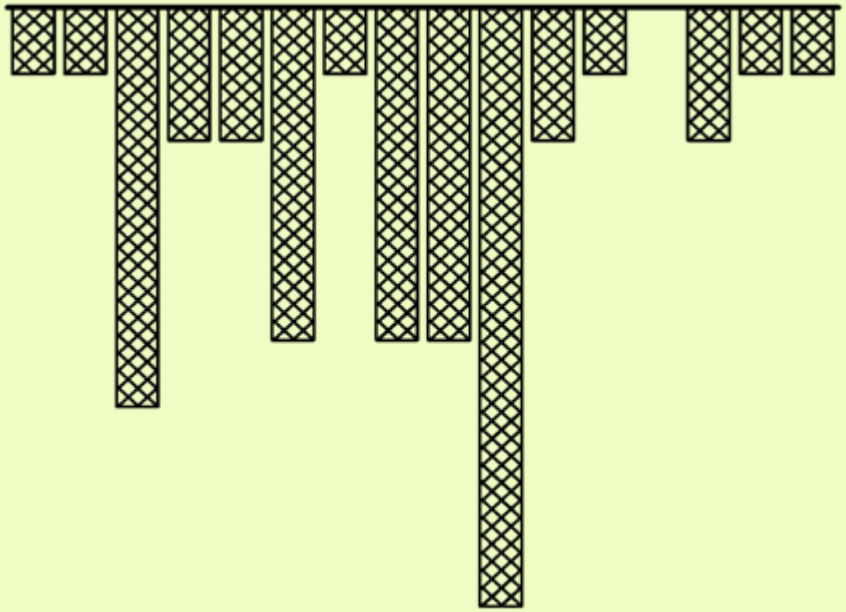
Způsoby hierarchického shlukování: aglomerační a divizní,

Aglomerační způsob: nejprve se spojí dva nejbližší objekty v jediný shluk, pak se připojí třetí objekt k prvním dvěma objektům a vznikne společný shluk. Tak se seskupí všechny objekty do jednoho velikého shluku.

1) růstový strom (dendrogram),



2) vertikální krápníkovitý diagram,



Aglomerační způsoby (algoritmy) výstavby dendrogramu shluků:

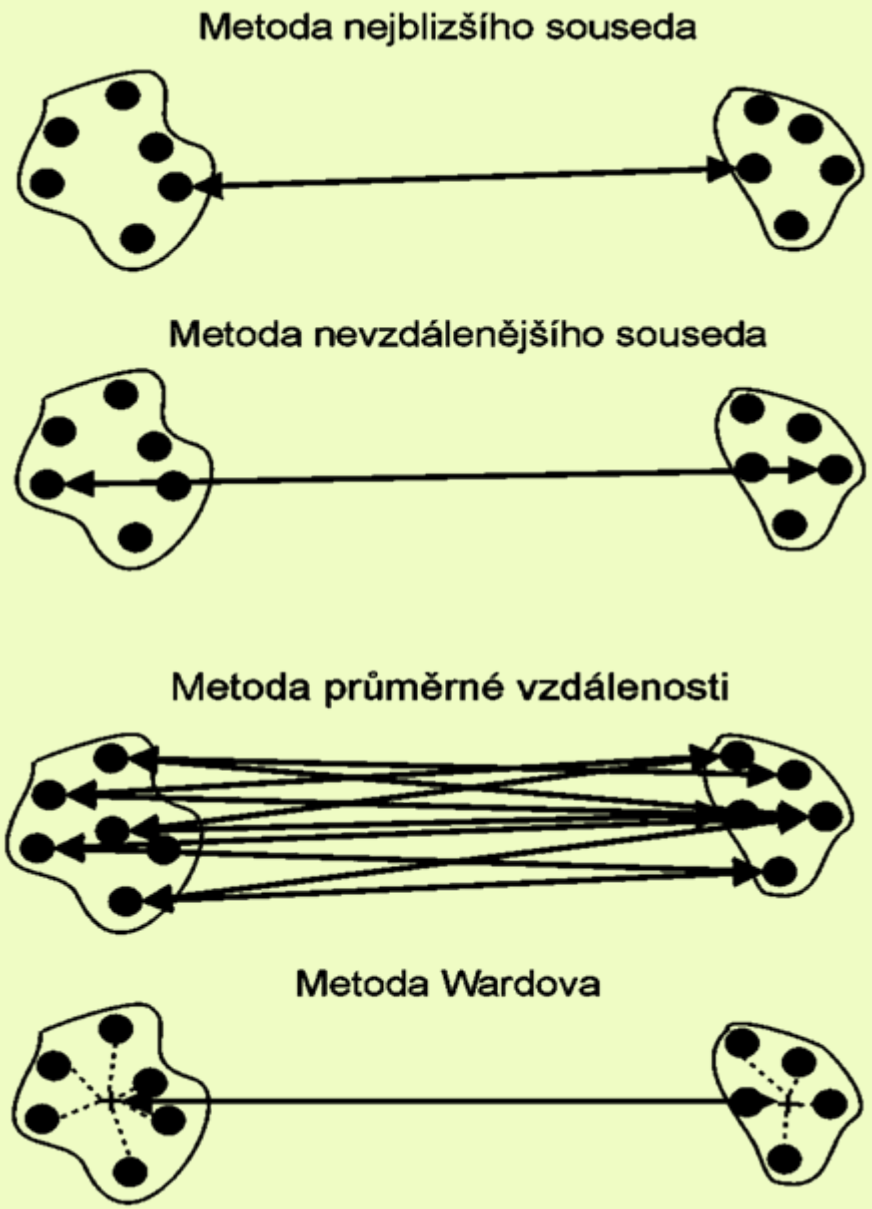
Metoda nejbližšího souseda: je postavena na minimální vzdálenosti objektů.

Metoda nejvzdálenějšího souseda: je postavena nikoliv na minimální ale na maximální vzdálenosti.

Metoda průměrového linkování: kritériem je průměrná vzdálenost všech objektů v jednom shluku ke všem objektům ve druhém shluku.

Wardova metoda: vzdálenost mezi dvěma shluky je tvořena na základě sumy čtverců přes všechny proměnné mezi dvěma shluky.

Metoda těžiště: vzdálenost těžišť shluků spojených Euklidovskou vzdáleností nebo čtvercem Euklidovské vzdálenosti. Těžiště shluku je průměrná hodnota objektů v proměnných, vyjádřená ve shlukových proměnných.



Míra věrohodnosti“nejlepšího dendrogramu”

1. kritérium těsnost proložení:

kofenetický korelační koeficient CC

- nejlépe odpovídá struktuře objektů a znaků mezi objekty,
- je to Pearsonův korelační koeficient mezi skutečnou a predikovanou vzdáleností, založenou na dendrogramu.

2. kritérium těsnosti proložení:

kritérium delta Δ

- měří stupeň přetvoření struktury dat,
- je žádoucí, aby hodnoty *delta* byly blízké nule,
- je definováno

$$\Delta_A = \left[\frac{\sum_{j<k}^{N} \left| d_{jk} - d^*_{jk} \right|^{1/A}}{\sum_{j<k}^{N} \left(d^*_{jk} \right)^{1/A}} \right]^A$$

kde A = 0.5 nebo 1, d_{ij} je vzdálenost v původní matici vzdáleností a d^*_{ij} je vzdálenost získaná z dendrogramu.

Úloha 2. Vytvoření dendrogramu objektů neuroleptika (Kompendium B402)

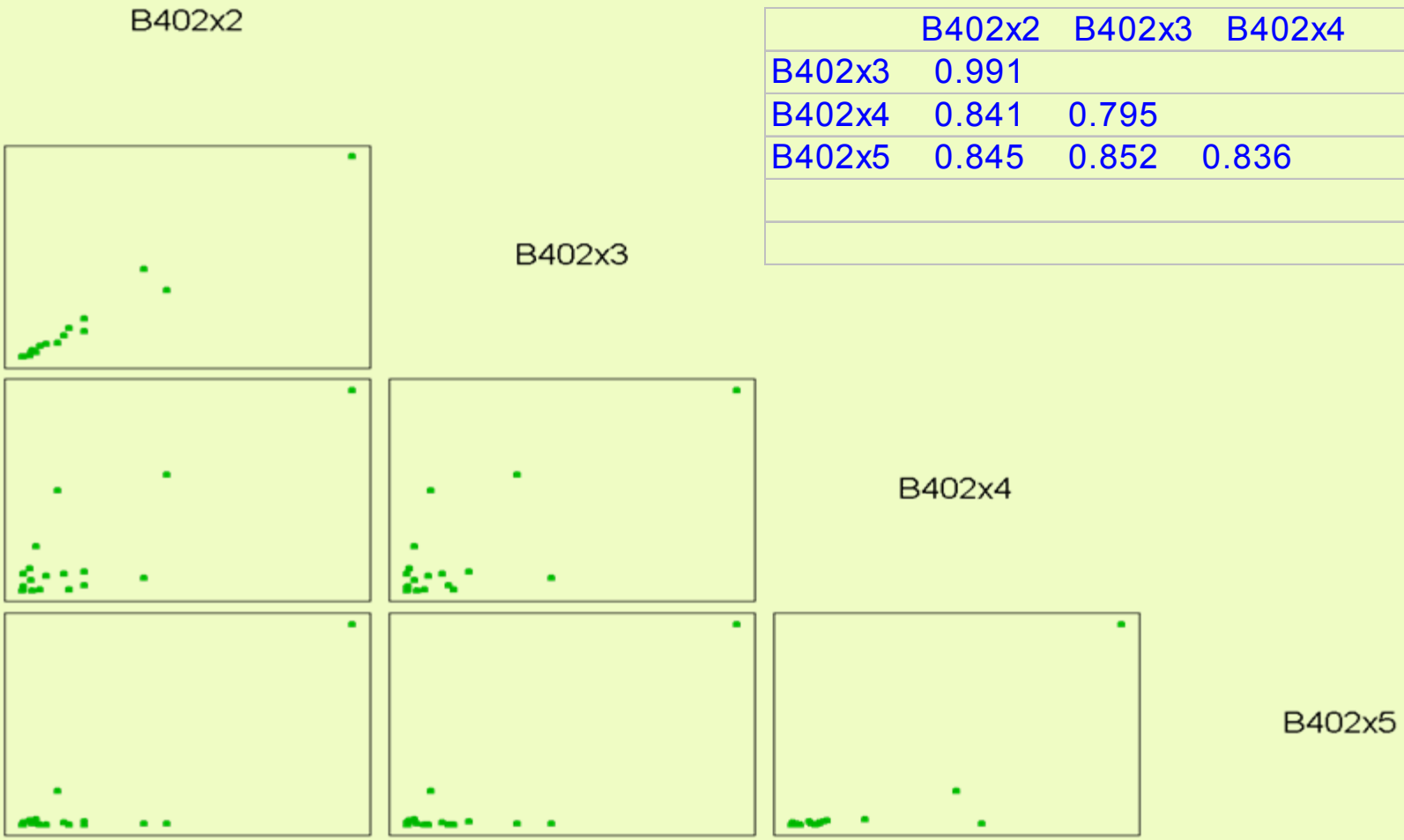
Liší se v účincích: potlačují nervozitu, záchvaty, třes, ospalost, parkinsonismus, vynechávání menstruace, vyrážky, zvýšené slinění. Provedeme klasifikaci neuroleptik do shluků podobných účinků s ohledem na 4 znaky.

Data: Charakter proměnných (převrácená hodnota mediánové účinné dávky 1/ED50 [kg/mg]): B402x1 značí název neuroleptika, B402x2 je pro potlačení nervozity, B402x3 značí potlačení stereotypního chování, B402x4 je pro potlačení záchvatu a třesu, a B402x5 znamená dávku smrtícího účinku.

B402x1	B402x2	B402x3	B402x4	B402x5
1 Chlorphromazine	3.846	3.333	1.111	1.923
2 Promazine	0.323	0.213	0.108	1.429
3 Trifluperazine	27.027	17.857	0.562	0.14
4 Fluphenazine	17.857	15.385	1.695	1.075
5 Perphenazine	27.027	27.027	1.961	2.083
6 Thioridazine	0.244	0.185	0.093	1.333
7 Pifluthixol	142.857	142.857	20.408	163.934
8 Thiothixene	4.348	4.348	0.047	0.345
9 Chorprothixene	5.882	2.941	4.545	4.167
10 Spiperone	62.5	47.619	11.765	0.847
11 Haloperidol	52.632	62.5	1.282	0.568
12 Azaperone	2.941	1.282	2.222	3.03
13 Pipamperone	0.327	0.187	1.724	0.397
14 Pimozide	20.408	20.408	0.107	0.025
15 Metitepine	15.385	10.204	10.204	27.027
16 Clozapine	0.161	0.093	0.327	0.323
17 Perlapine	0.323	0.323	0.37	0.067
18 Sulpiride	0.047	0.047	0.003	0.001
19 Butaclamol	10.204	9.091	1.471	0.025
20 Molindone	7.692	7.692	0.14	0.006

Diagram korelační matice

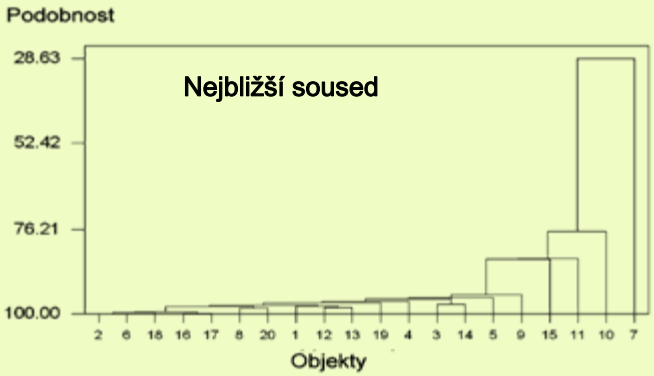
a statistická významnost korelace pomocí Pearsonových párových korelačních koeficientů

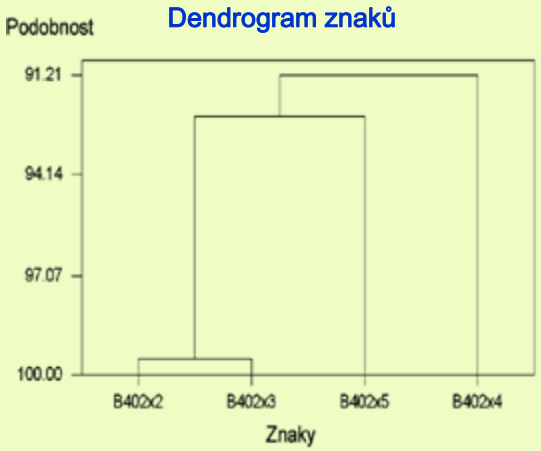


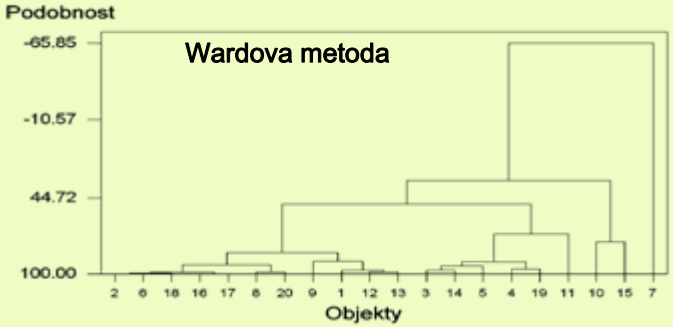
Matice párových korelačních koeficientů:

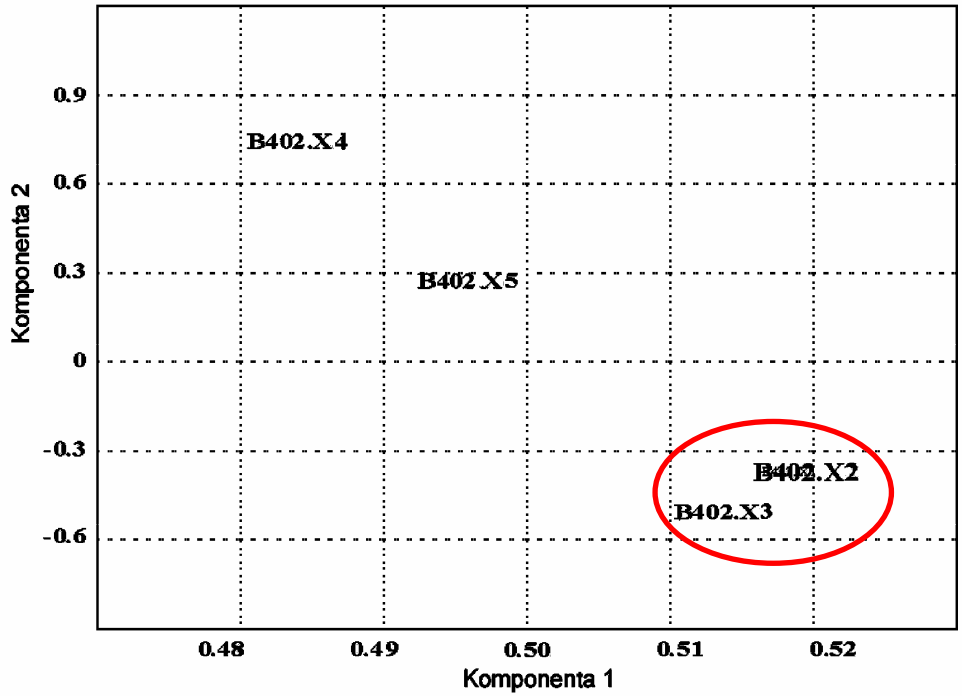
	B402x2	B402x3	B402x4
B402x3	0.991		
B402x4	0.841	0.795	
B402x5	0.845	0.852	0.836

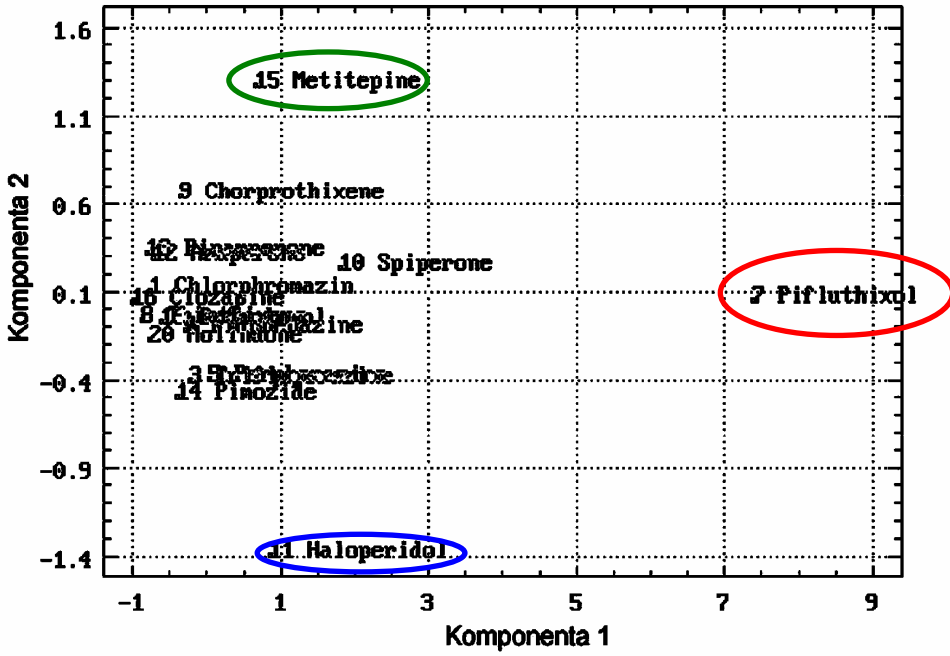
1. Metoda shlukování: Skupinový průměr, *Typ vzdálenosti:* Eucleid., směrodatná odchylka, *Kofenetická korelace:* 0.987356, *Delta(0.5):* 0.137455, *Delta(1.0):* 0.125290;
2. Metoda shlukování: Jednoduchý průměr, *Typ vzdálenosti:* Eucleid., směrodatná odchylka, *Kofenetická korelace:* 0.988876, *Delta(0.5):* 0.177810, *Delta(1.0):* 0.188781;
3. Metoda shlukování: Těžiště, *Typ vzdálenosti:* Eucleid., směrodatná odchylka, *Kofenetická korelace:* 0.984750, *Delta(0.5):* 0.175238, *Delta(1.0):* 0.166599;
4. Metoda shlukování: Nejbližšího souseda, *Typ vzdálenosti:* Eucleid., směrodatná odchylka, *Kofenetická korelace:* 0.988598, *Delta(0.5):* 0.474238, *Delta(1.0):* 0.391993;
5. Metoda shlukování: Median, *Typ vzdálenosti:* Eucleid., směrodatná odchylka, *Kofenetická korelace:* 0.984215, *Delta(0.5):* 0.452308, *Delta(1.0):* 0.428346;
6. Metoda shlukování: Wardova metoda, *Typ vzdálenosti:* Eucleid., směrodatná odchylka, *Kofenetická korelace:* 0.979285, *Delta(0.5):* 0.549394, *Delta(1.0):* 0.492716.

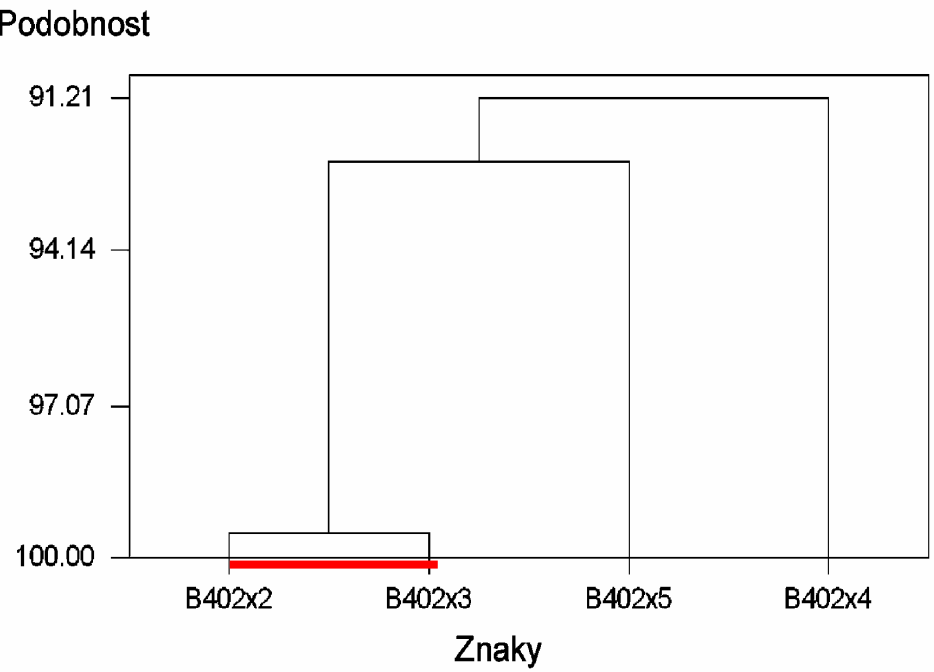


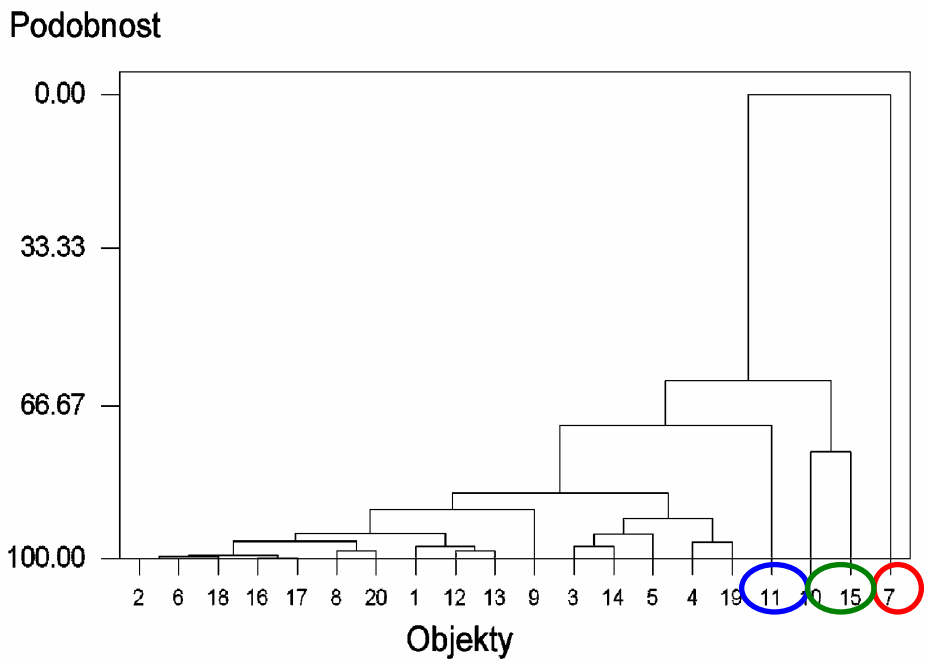





B402.X4
B402.X5
B402.X2
B402.X3
Komponenta 2
Komponenta 1
0.9
0.6
0.3
0
-0.3
-0.6
0.48
0.49
0.50
0.51
0.52


15 Metitepine
9 Chorprothixene
10 Spiperone
1 Chlorpromazin
7 Pifluthixol
14 Pimozide
11 Haloperidol
Komponenta 2
Komponenta 1
1.6
1.1
0.6
0.1
-0.4
-0.9
-1.4
-1
1
3
5
7
9


Podobnost
91.21
94.14
97.07
100.00
B402x2
B402x3
B402x5
B402x4
Znaky


Podobnost
0.00
33.33
66.67
100.00
2 6 18 16 17 8 20 1 12 13 9 3 14 5 4 19 11 10 15 7
Objekty

Nehierarchické shlukování

netýká se výstavby stromu, objekty se přidělují do shluků, když je počet shluků předem zadán.

Postup:

1. krok: Zadání zárodku shluku (= počátečního středu shluku).

2. krok: Objekty uvnitř zadané vzdálenosti budou do shluku zařazeny.

3. krok: Zvolen zárodek jiného shluku a zařazování pokračuje.

4. krok: Existuje několik postupů K-means shlukování (nejbližších středů, těžišť):

(a) Sekvenční práh: začíná volbou jednoho zárodku a zahrnuje všechny objekty uvnitř předspecifikované vzdálenosti. Když jsou všechny zahrnuty, je vybrán zárodek druhého shluku, atd.

(b) Paralelní práh: vybírá několik zárodků současně (paralelně) a zařazuje objekty uvnitř prahové vzdálenosti do nejbližšího zárodku.

(c) Optimalizace: dovoluje znovuzařazení objektů. Když se objekt octne blíže jinému shluku, než se právě nachází, optimalizační postup ho přeřadí do jiného, bližšího shluku.

Volba zárodků shluků v nehierarchickém shlukování

Sekvenční prahový postup je ukázkou pro velké datové soubory.

Postup: zadá se počet shluků a začnou se vybírat zárodky shluků dle kroků:

1. Prvním zárodkem je první úplný objekt zdrojové matice dat,

2. Druhým zárodkem je další úplný objekt, který je oddělen od prvního zadanou minimální vzdáleností.

3. Po zadání všech zárodků začně zařazování objektů.

4. Klíčovým problémem zůstává volba shlukových zárodků.

Hierachické nebo nehierarchické metody?

(1) Užívání hierarchických metod:

a) Hierarchické metody mají výhodu, že jsou rychlé.
b) Hierarchické metody mohou být klamné, pro nežádoucí předešlé shluky setrvávající v průběhu analýzy.
c) Působení odlehlých objektů, proto vypouštět jen velmi opatrně.
d) Hierarchické metody nejsou stavěné na analýzu velmi velikých výběrů.

(2) Užívání nehierarchických metod:

a) V poslední době se nehierarchické metody využívají stále více.
b) Použití nehierarchické metody závisí na schopnosti uživatele, jeho praktických zkušenostech a objektivní teorii jak vybrat zárodkové body.
c) Výsledky nehierarchické metody jsou méně ovlivněny odlehlými body.
d) U nehierarchické metody se užívají vzdálenostní míry a lze užít i nepodstatné proměnné.
e) U nehierarchické metody lze pouze za použití nenáhodných zárodkových bodů.

(3) Kombinace obou metod, hierarchických a nehierarchických:

a) Nejprve hierarchickou metodou určíme: počet shluků, profily shlukovaných center a zřetelné odlehlé body.
b) Po odstranění odlehlých bodů: zbývající objekty shlukovány nehierarchicky se zárodky z výsledků hierarchické metody.

Počet vytvářených shluků

Terminační kritérium provádí vyšetření podobnosti mezi shluky po každém kroku, a to když míra podobnosti překročí předdefinovanou velikost nebo když následné hodnoty se skokově změní.

Doporučení: určí se rozličný počet shluků např. 2, 3 a 4 a na základě praktického úsudku se pak rozhodne.

Postup analýzy shluků

Poskytuje empirické a objektivní metody ke klasifikaci objektů

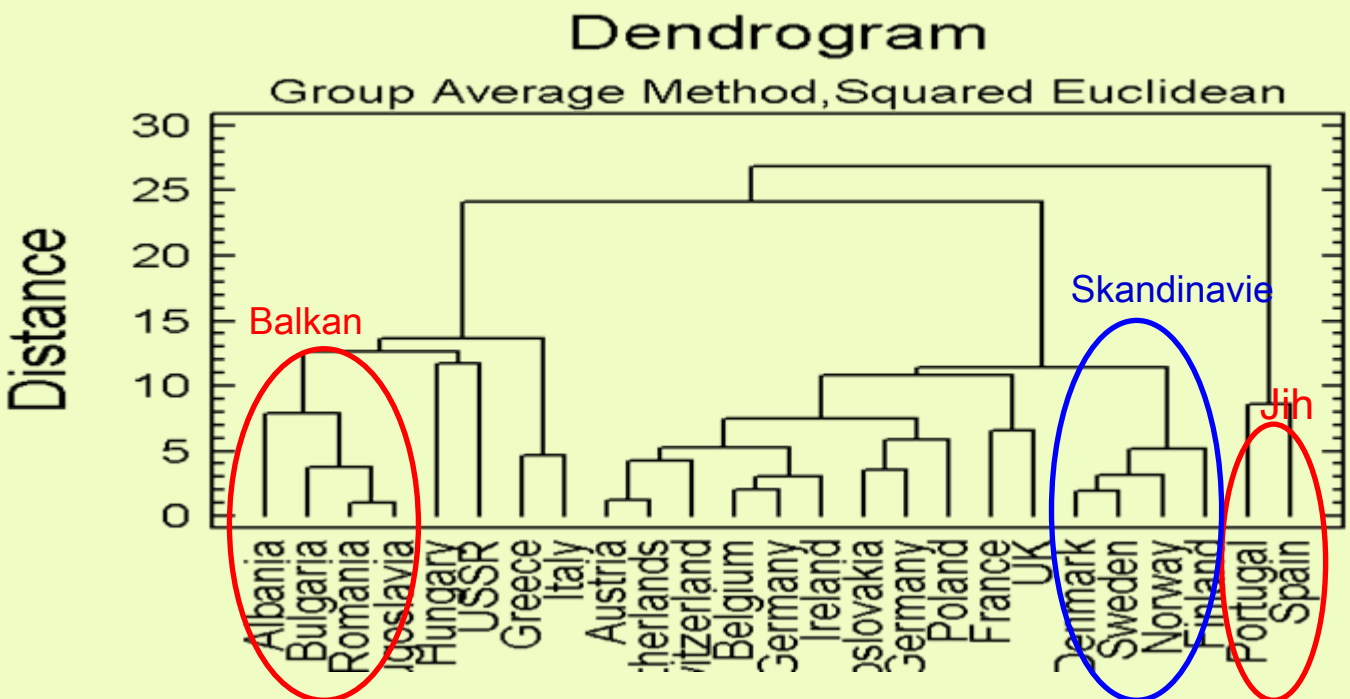
1. krok: Cíle analýzy shluků
2. krok: Formulace úlohy analýzy shluků
3. krok: Předpoklady analýzy shluků
4. krok: Výstavba dendrogramu shluků
5. krok: Interpretace shluků
6. krok: Validace a profilování shluků

5. krok: Interpretace shluků

(a) Vyšetření každého shluku v pojmech shlukových proměnných.
(b) Pojmenování shluků nebo jeho označení, které vystihuje jeho podstatu a povahu.

Profilování a interpretace shluků:

(a) Prokazuje popis.
(b) Přidělení korespondence ke shlukům předvídaným z teorie.
(c) V konfirmatorním modu profily přidělují shlukům korespondenci.
(d) Při hledání korespondence nebo praktické významnosti by se měly porovnávat odvozené shluky s předem vytvořenou typologií.



Postup analýzy shluků

Poskytuje empirické a objektivní metody ke klasifikaci objektů

1. krok: Cíle analýzy shluků
2. krok: Formulace úlohy analýzy shluků
3. krok: Předpoklady analýzy shluků
4. krok: Výstavba dendrogramu shluků
5. krok: Interpretace shluků
6. krok: Validace a profilování shluků

6. krok: Validace a profilování shluků

Existuje subjektivní charakter hledání optimálního shlukového řešení.
Neexistuje jednoduchá metoda, která by zajišťovala validitu a praktický význam.

Validování shluků: znamená, že nalezené shlukové řešení
(a) je reprezentativní,
(b) je zobecnitelné na ostatní objekty v celém původním souboru,
(c) je stabilní i v čase.

Postup: - analyzovat oddělené výběry,
- porovnat nalezená shluková řešení a
- odhadnout shodu výsledků.

Rozdělení výběru dat na dva vzorky: každý vzorek je podroben analýze shluků odděleně a výsledky jsou porovnány:
(1) Modifikovanou formu rozdělení výběru, kdy v prvním vzorku získáme středy shluků a využijeme je k definování shluků ve druhém vzorku objektů a výsledky porovnáme,
(2) Přímá forma vzájemného porovnání (cross-validation).

Způsob vytyčení kritéria: Užijeme takové proměnné, které sice nejsou užity k vytvoření shluků, ale mění se dostatečně od shluku ke shluku.

Úloha 3. Sledování spotřeby proteinů v Evropě (Kompendium B418)

Sledovaná spotřeba proteinů v 25 zemích formou spotřeby 9 druhů potravin je předmětem vyšetření.

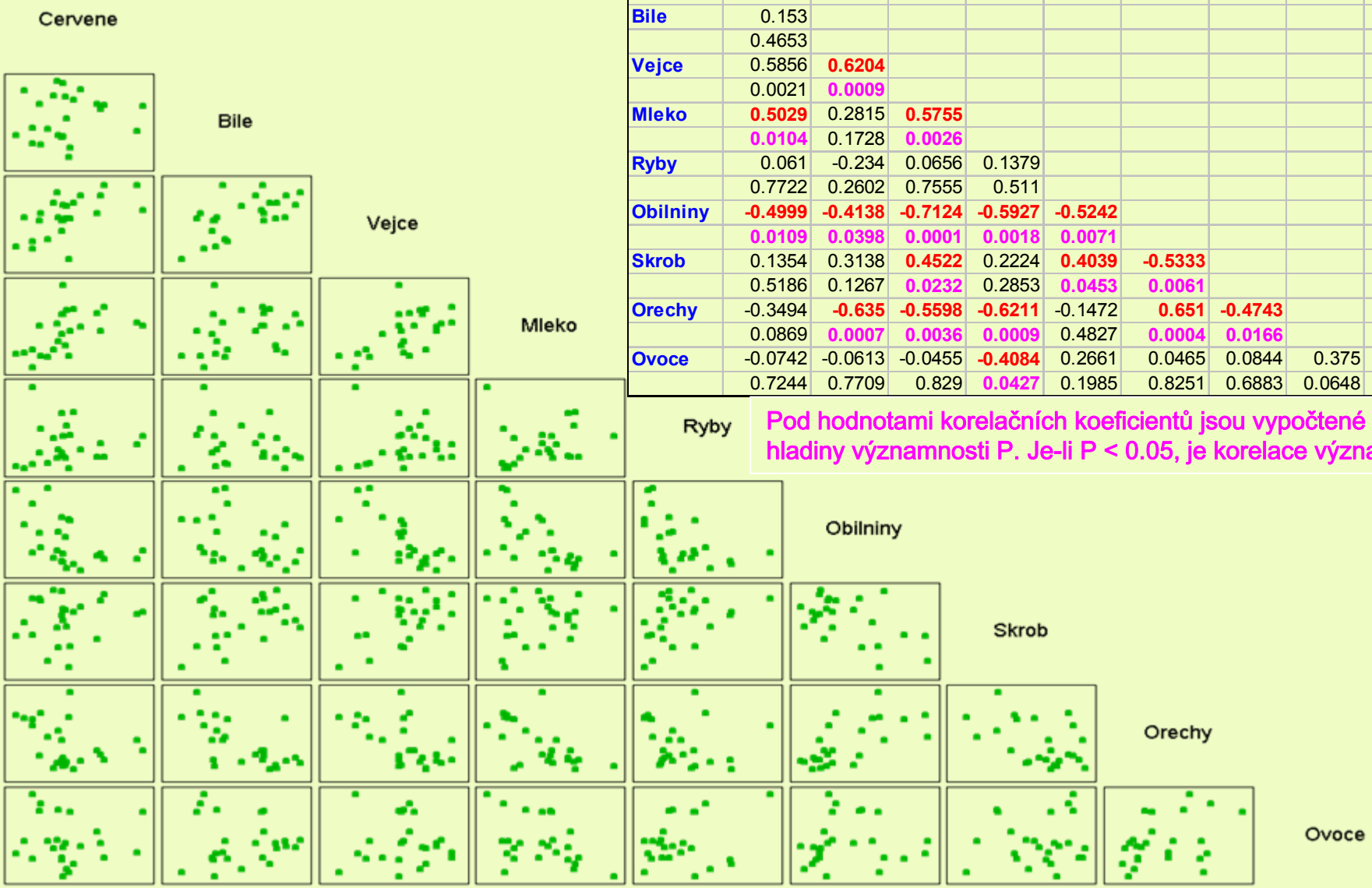
Data: *i* značí index, *Cervene* udává červené maso, Bile maso, Vejce, Mleko, Ryby, Obilniny, Skrob, Orechy, Ovoce a zelenina

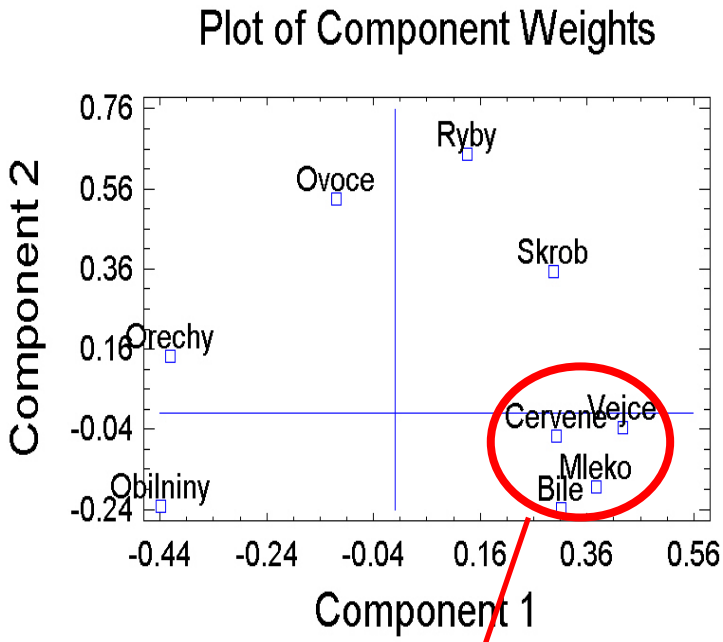
	Objekty	Proměnné								
i	Stát	Cervene	Bile	Vejce	Mleko	Ryby	Obilniny	Skrob	Orechy	Ovoce
1	Albania	10.1	1.4	0.5	8.9	0.2	42.3	0.6	5.5	1.7
2	Austria	8.9	14	4.3	19.9	2.1	28	3.6	1.3	4.3
3	Belgium	13.5	9.3	4.1	17.5	4.5	26.6	5.7	2.1	4
4	Bulgaria	7.8	6	1.6	8.3	1.2	56.7	1.1	3.7	4.2
5	Czechoslov.	9.7	11.4	2.8	12.5	2	34.3	5	1.1	4
6	Denmark	10.6	10.8	3.7	25	9.9	21.9	4.8	0.7	2.4
7	E Germany	8.4	11.6	3.7	11.1	5.4	24.6	6.5	0.8	3.6
8	Finland	9.5	4.9	2.7	33.7	5.8	26.3	5.1	1	1.4
9	France	18	9.9	3.3	19.5	5.7	28.1	4.8	2.4	6.5
10	Greece	10.2	3	2.8	17.6	5.9	41.7	2.2	7.8	6.5
11	Hungary	5.3	12.4	2.9	9.7	0.3	40.1	4	5.4	4.2
12	Ireland	13.9	10	4.7	25.8	2.2	24	6.2	1.6	2.9
13	Italy	9	5.1	2.9	13.7	3.4	36.8	2.1	4.3	6.7
14	Netherlands	9.5	13.6	3.6	23.4	2.5	22.4	4.2	1.8	3.7
15	Norway	9.4	4.7	2.7	23.3	9.7	23	4.6	1.6	2.7
16	Poland	6.9	10.2	2.7	19.3	3	36.1	5.9	2	6.6
17	Portugal	6.2	3.7	1.1	4.9	14.2	27	5.9	4.7	7.9
18	Romania	6.2	6.3	1.5	11.1	1	49.6	3.1	5.3	2.8
19	Spain	7.1	3.4	3.1	8.6	7	29.2	5.7	5.9	7.2
20	Sweden	9.9	7.8	3.5	24.7	7.5	19.5	3.7	1.4	2
21	Switzerland	13.1	10.1	3.1	23.8	2.3	25.6	2.8	2.4	4.9
22	UK	17.4	5.7	4.7	20.6	4.3	24.3	4.7	3.4	3.3
23	USSR	9.3	4.6	2.1	16.6	3	43.6	6.4	3.4	2.9
24	W Germany	11.4	12.5	4.1	18.8	3.4	18.6	5.2	1.5	3.8
25	Yugoslavia	4.4	5	1.2	9.5	0.6	55.9	3	5.7	3.2

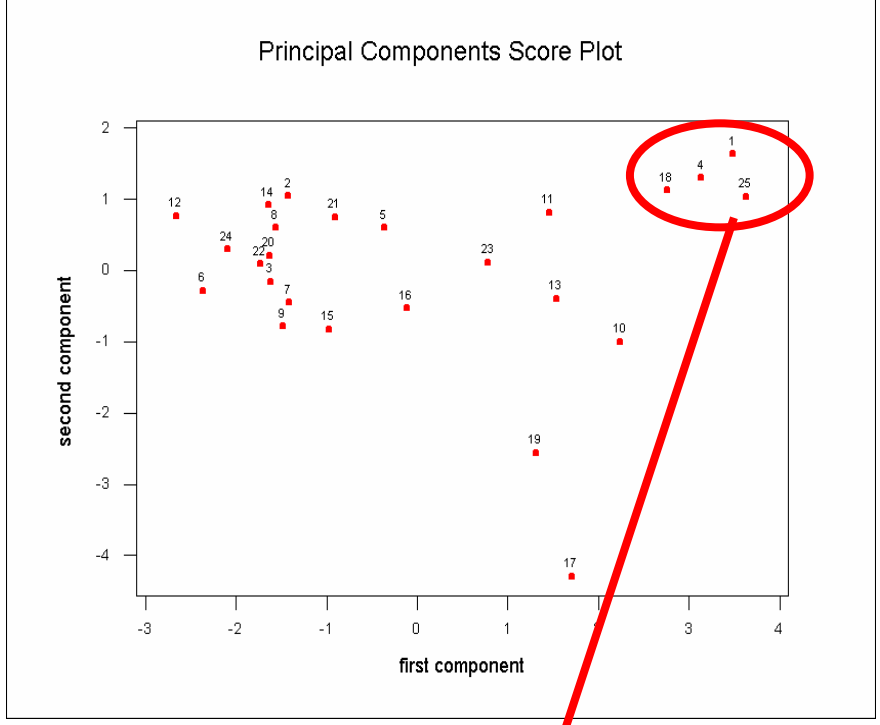
Test významnosti korelace v korelační matici

	Cervene	Bile	Vejce	Mleko	Ryby	Obilniny	Skrob	Orechy	Ovoce
Cervene									
Bile	0.153								
	0.4653								
Vejce	0.5856	**0.6204**							
	0.0021	**0.0009**							
Mleko	**0.5029**	0.2815	**0.5755**						
	0.0104	0.1728	**0.0026**						
Ryby	0.061	-0.234	0.0656	0.1379					
	0.7722	0.2602	0.7555	0.511					
Obilniny	**-0.4999**	**-0.4138**	**-0.7124**	**-0.5927**	**-0.5242**				
	0.0109	**0.0398**	**0.0001**	**0.0018**	**0.0071**				
Skrob	0.1354	0.3138	**0.4522**	0.2224	**0.4039**	**-0.5333**			
	0.5186	0.1267	**0.0232**	0.2853	**0.0453**	**0.0061**			
Orechy	-0.3494	**-0.635**	**-0.5598**	**-0.6211**	-0.1472	**0.651**	**-0.4743**		
	0.0869	**0.0007**	**0.0036**	**0.0009**	0.4827	**0.0004**	**0.0166**		
Ovoce	-0.0742	-0.0613	-0.0455	**-0.4084**	0.2661	0.0465	0.0844	0.375	
	0.7244	0.7709	0.829	**0.0427**	0.1985	0.8251	0.6883	0.0648	

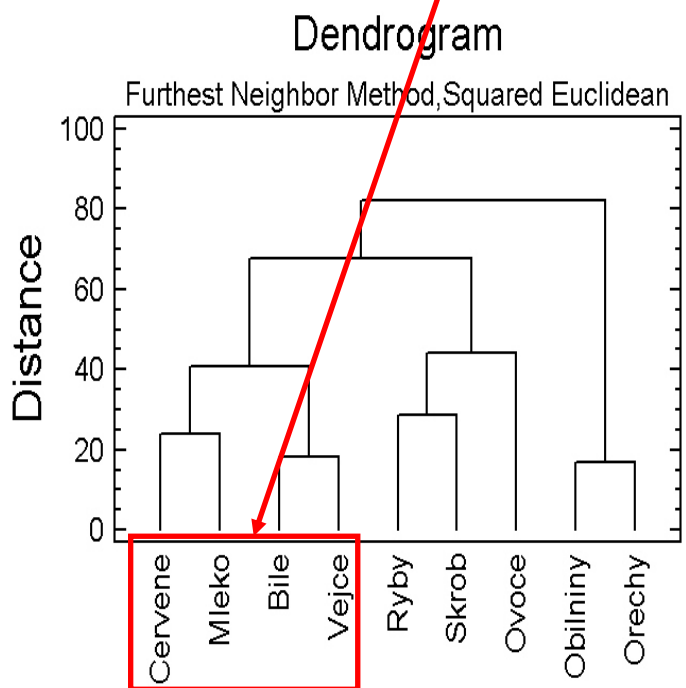
Pod hodnotami korelačních koeficientů jsou vypočtené hladiny významnosti P. Je-li P < 0.05, je korelace významná.

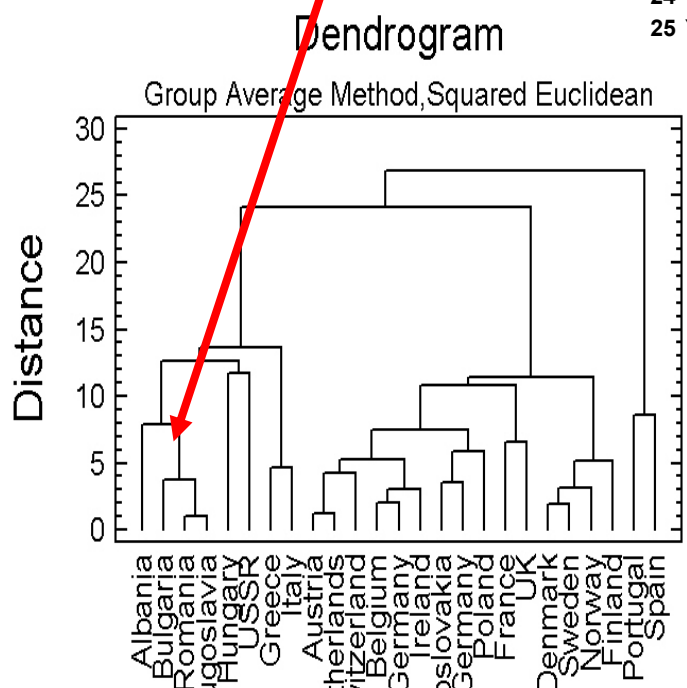


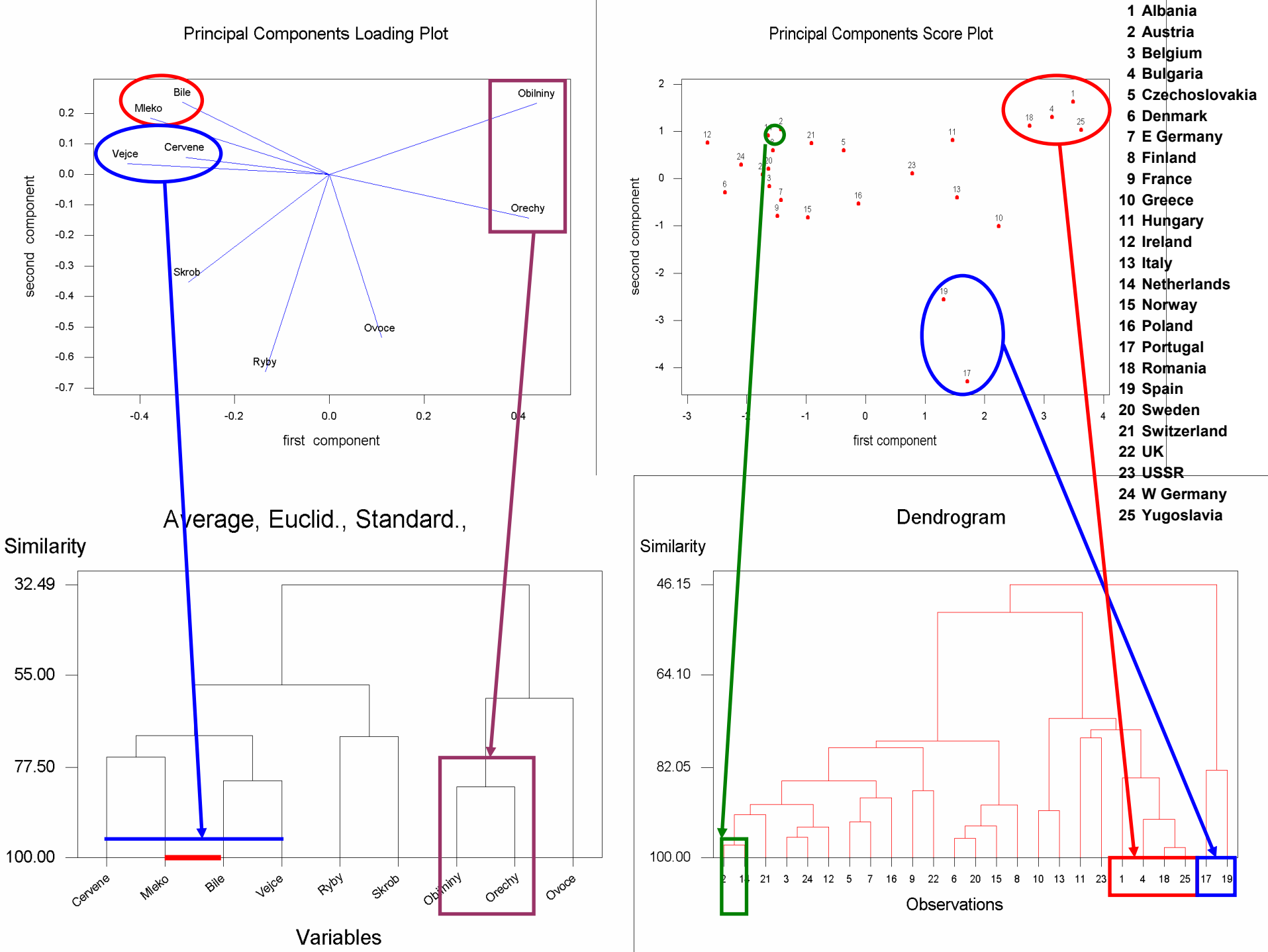




1 Albania
2 Austria
3 Belgium
4 Bulgaria
5 Czechoslovakia
6 Denmark
7 E Germany
8 Finland
9 France
10 Greece
11 Hungary
12 Ireland
13 Italy
14 Netherlands
15 Norway
16 Poland
17 Portugal
18 Romania
19 Spain
20 Sweden
21 Switzerland
22 UK
23 USSR
24 W Germany
25 Yugoslavia



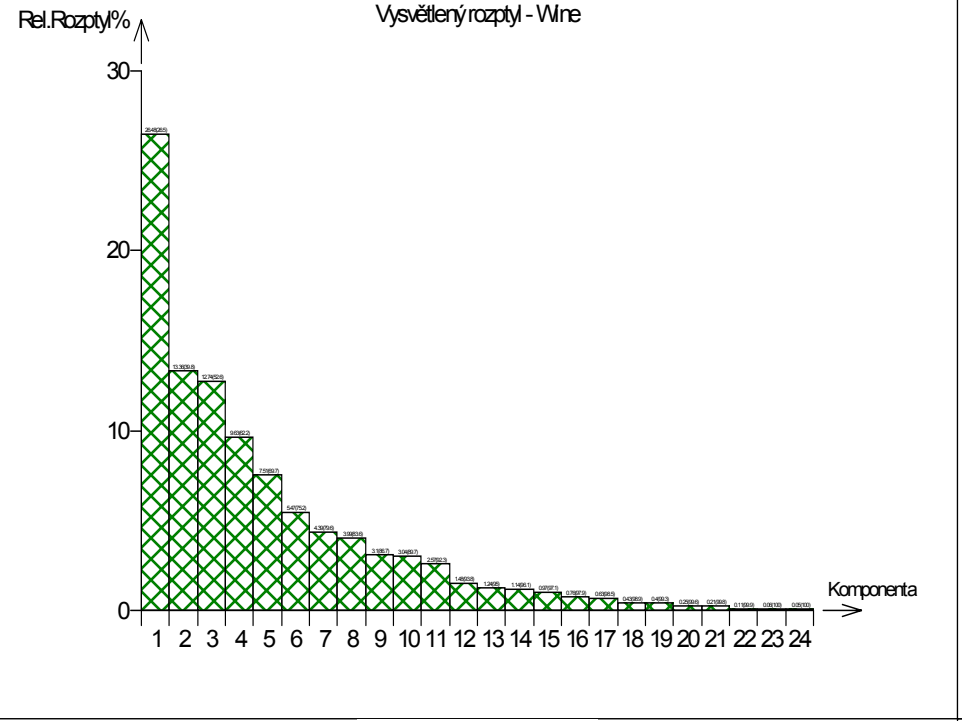


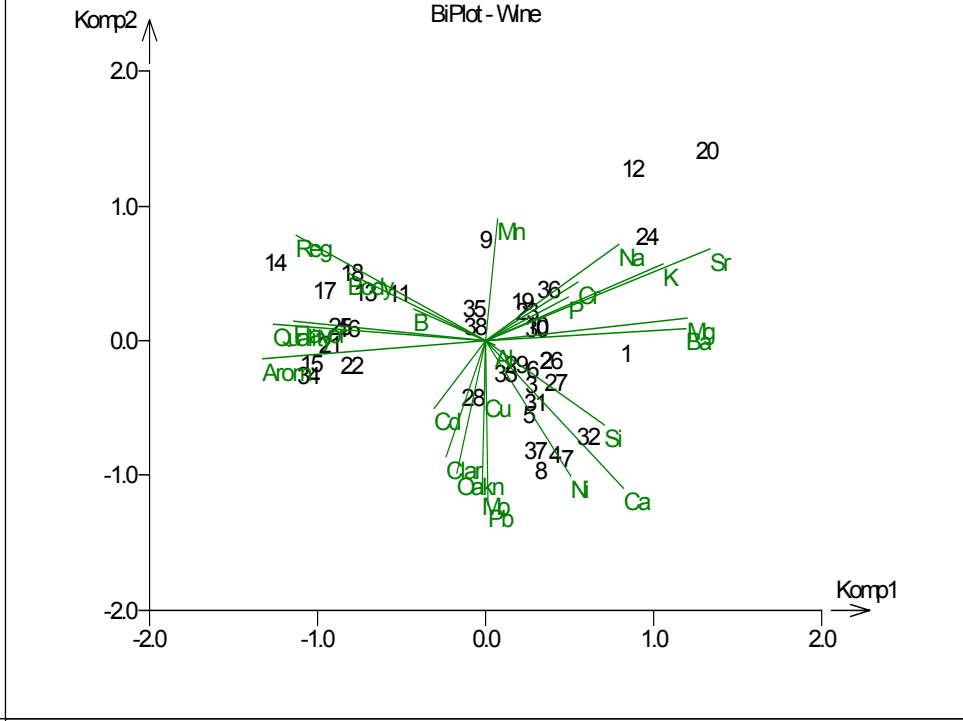

Principal Components Loading Plot
Bile
Mleko
Vejce
Cervene
Obilniny
Orechy
Skrob
Ovoce
Ryby
second component
first component
Principal Components Score Plot
second component
first component
1 Albania
2 Austria
3 Belgium
4 Bulgaria
5 Czechoslovakia
6 Denmark
7 E Germany
8 Finland
9 France
10 Greece
11 Hungary
12 Ireland
13 Italy
14 Netherlands
15 Norway
16 Poland
17 Portugal
18 Romania
19 Spain
20 Sweden
21 Switzerland
22 UK
23 USSR
24 W Germany
25 Yugoslavia
Average, Euclid., Standard.,
Similarity
32.49
55.00
77.50
100.00
Cervene
Mleko
Bile
Vejce
Ryby
Skrob
Obilniny
Orechy
Ovoce
Variables
Dendrogram
Similarity
46.15
64.10
82.05
100.00
Observations

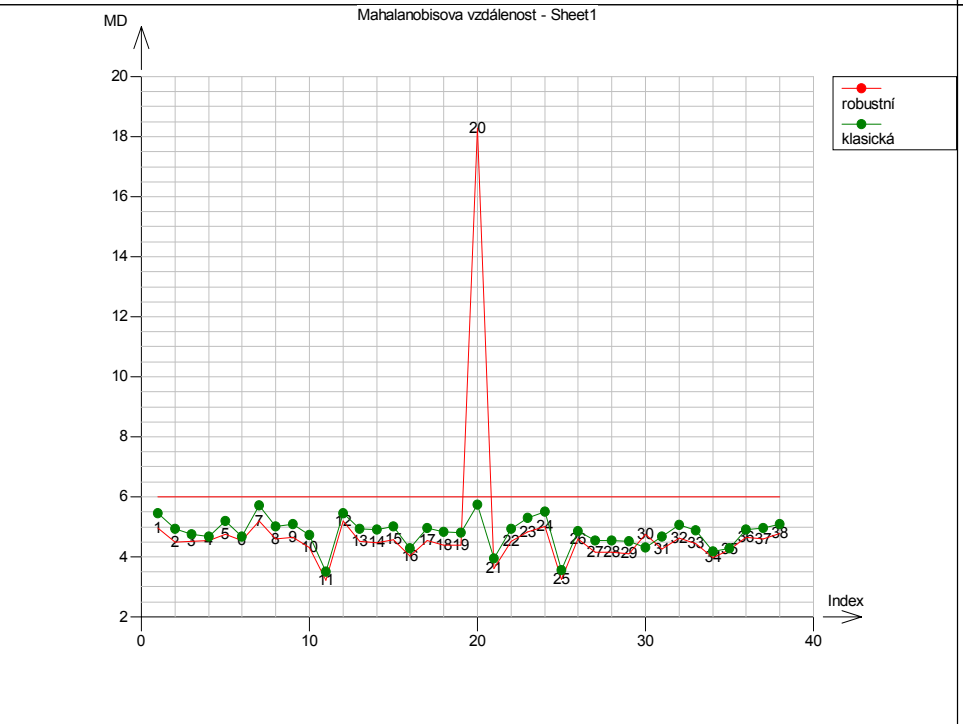
Úloha 4. Faktorová analýza při klasifikaci vzorků vín (Kompendium E408)

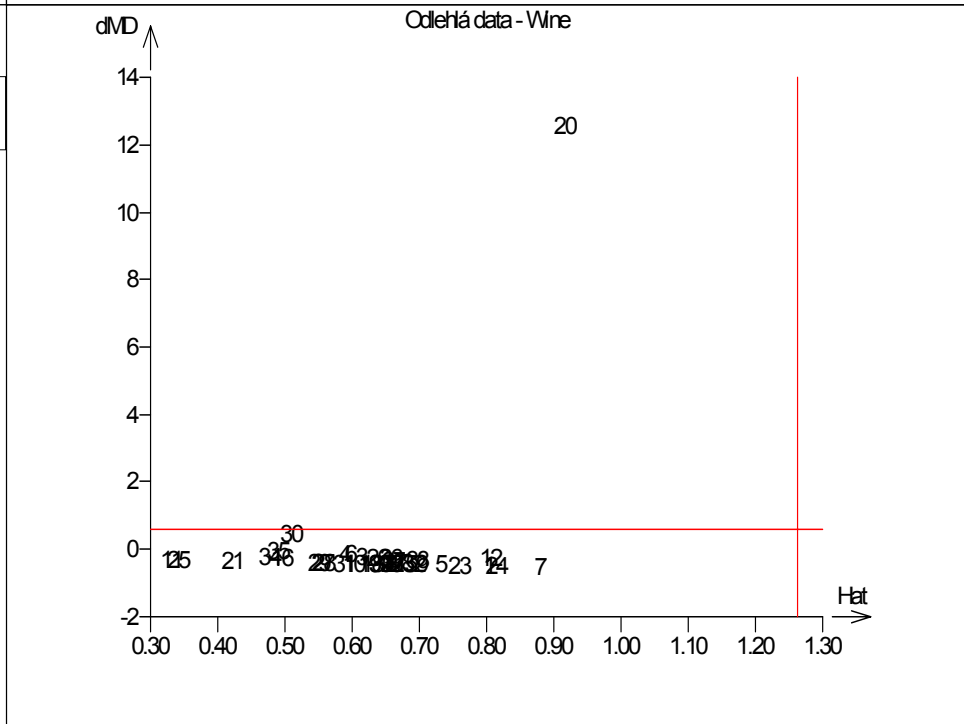
Pro 38 vzorků vín bylo nalezeno 24 analytických obsahů stopových prvků a charakteristických fyzikálně-chemických vlastností. Utvořte shluky podobných vlastností a dále shluky podobných vín.

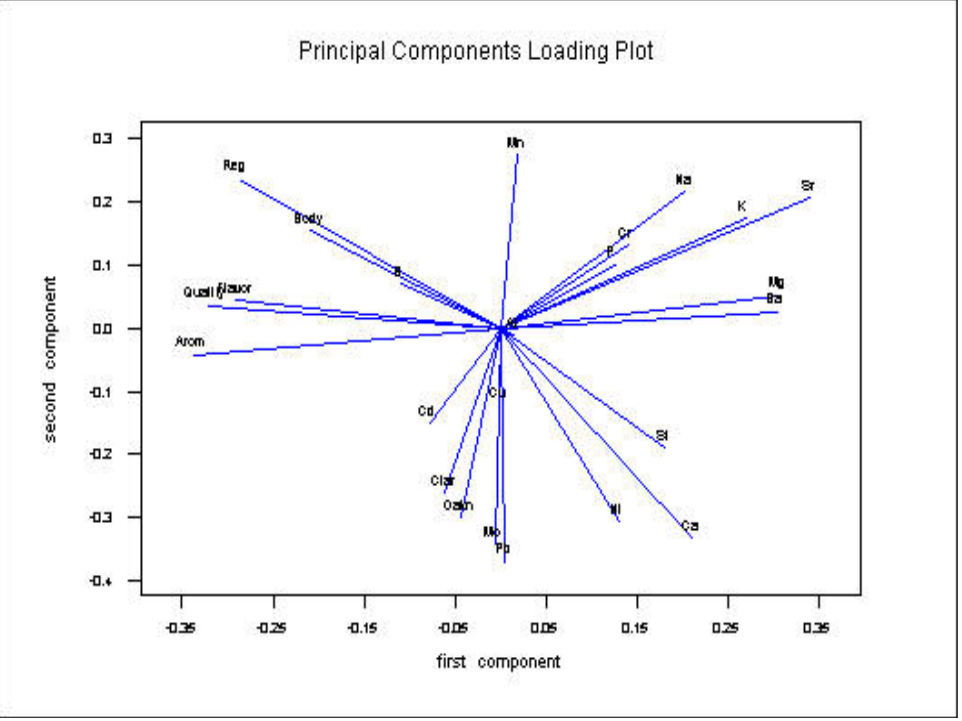
Index	Cd	Mo	Mn	Ni	Cu	Al	Ba	Cr	Sr	Pb	B	Mg	Si	Na	Ca	P	K	Arom	Clar	Body	Flavor	Oakn	Quality	Reg
1	0.005	0.044	1.51	0.122	0.83	0.982	0.387	0.029	1.23	0.561	2.63	128	17.3	66.8	80.5	150	1130	3.3	1	2.8	3.1	4.1	9.8	1
2	0.055	0.16	1.16	0.149	0.066	1.02	0.312	0.038	0.975	0.697	6.21	193	19.7	53.3	75	118	1010	4.4	1	4.9	3.5	3.9	12.6	1
3	0.056	0.146	1.1	0.088	0.643	1.29	0.308	0.035	1.14	0.73	3.05	127	15.8	35.4	91	161	1160	3.9	1	5.3	4.8	4.7	11.9	1
4	0.063	0.191	0.959	0.38	0.133	1.05	0.165	0.036	0.927	0.796	2.57	112	13.4	27.5	93.6	120	924	3.9	1	2.6	3.1	3.6	11.1	1
5	0.011	0.363	1.38	0.16	0.051	1.32	0.38	0.059	1.13	1.73	3.07	138	16.7	76.6	84.6	164	1090	5.6	1	5.1	5.5	5.1	13.3	1
6	0.05	0.106	1.25	0.114	0.055	1.27	0.275	0.019	1.05	0.491	6.56	172	18.7	15.7	112	137	1290	4.6	1	4.7	5	4.1	12.8	1
7	0.025	0.479	1.07	0.168	0.753	0.715	0.164	0.062	0.823	2.06	4.57	179	17.8	98.5	122	184	1170	4.8	1	4.8	4.8	3.3	12.8	1
8	0.024	0.234	0.906	0.466	0.102	0.811	0.271	0.044	0.963	1.09	3.18	145	14.3	10.5	91.9	187	1020	5.3	1	4.5	4.3	5.2	12	1
9	0.009	0.058	1.84	0.042	0.17	1.8	0.225	0.022	1.13	0.048	6.13	113	13	54.4	70.2	158	1240	4.3	1	4.3	3.9	2.9	13.6	3
10	0.033	0.074	1.28	0.098	0.053	1.35	0.329	0.03	1.07	0.552	3.3	140	16.3	70.5	74.7	159	1100	4.3	1	3.9	4.7	3.9	13.9	1
11	0.039	0.071	1.19	0.043	0.163	0.971	0.105	0.028	0.491	0.31	6.56	103	9.5	45.3	67.9	133	1090	5.1	1	4.3	4.5	3.6	14.4	3
12	0.045	0.147	2.76	0.071	0.074	0.483	0.301	0.087	2.14	0.546	3.5	199	9.2	80.4	66.3	212	1470	3.3	0.5	5.4	4.3	3.6	12.3	2
13	0.06	0.116	1.15	0.055	0.18	0.912	0.166	0.041	0.578	0.518	6.43	111	11.1	59.7	83.8	139	1120	5.9	0.8	5.7	7	4.1	16.1	3
14	0.067	0.166	1.53	0.041	0.043	0.512	0.132	0.026	0.229	0.699	7.27	107	6	55.2	44.9	148	854	7.7	0.7	6.6	6.7	3.7	16.1	3
15	0.077	0.261	1.65	0.073	0.285	0.596	0.078	0.063	0.156	1.02	5.04	94.6	6.3	10.4	54.9	132	899	7.1	1	4.4	5.8	4.1	15.5	3
16	0.064	0.191	1.78	0.067	0.552	0.633	0.085	0.063	0.192	0.777	5.56	110	7	13.6	64.1	167	976	5.5	0.9	5.6	5.6	4.4	15.5	3
17	0.025	0.009	1.57	0.041	0.081	0.655	0.072	0.021	0.172	0.232	3.79	75.9	6.4	11.6	48.1	132	995	6.3	1	5.4	4.8	4.6	13.8	3
18	0.02	0.027	1.74	0.046	0.153	1.15	0.094	0.021	0.358	0.025	4.24	80.9	7.9	38.9	57.6	136	876	5	1	5.5	5.5	4.1	13.8	3
19	0.034	0.05	1.15	0.058	0.058	1.35	0.294	0.006	1.12	0.206	2.71	120	14.7	68.1	64.8	133	1050	4.6	1	4.1	4.3	3.1	11.3	1
20	0.013	0.03	2.82	0.058	0.05	0.623	0.349	0.082	2.91	0.171	3.54	208	9.3	79.2	66.4	266	1430	3.4	0.9	5	3.4	3.4	7.9	2
21	0.043	0.268	2.32	0.066	0.314	0.627	0.099	0.045	0.36	1.28	5.68	98.4	9.1	19.5	64.3	176	945	6.4	0.9	5.4	6.6	4.8	15.1	3
22	0.061	0.245	1.61	0.07	0.172	2.07	0.071	0.053	0.186	1.19	4.42	87.6	7.6	11.6	70.6	156	820	5.5	1	5.3	5.3	3.8	13.5	3
23	0.047	0.161	1.47	0.154	0.082	0.546	0.181	0.06	0.898	0.747	8.11	160	19.3	12.5	82.1	218	1220	4.7	0.7	4.1	5	3.7	10.8	2
24	0.048	0.146	1.85	0.092	0.09	0.889	0.328	0.1	1.32	0.604	6.42	134	19.3	125	83.2	173	1810	4.1	0.7	4	4.1	4	9.5	2
25	0.049	0.155	1.73	0.051	0.158	0.653	0.081	0.037	0.164	0.767	4.91	86.5	6.5	11.5	53.9	172	1020	6	1	5.4	5.7	4.7	12.7	3
26	0.042	0.126	1.7	0.112	0.21	0.508	0.299	0.054	0.995	0.686	6.94	129	43.6	45	85.9	165	1330	4.3	1	4.6	4.7	4.9	11.6	2
27	0.058	0.184	1.28	0.095	0.058	1.3	0.346	0.037	1.17	1.28	3.29	145	16.7	65.8	72.8	175	1140	3.9	1	4	5.1	5.1	11.7	1
28	0.065	0.211	1.65	0.102	0.055	0.308	0.206	0.028	0.72	1.02	6.12	99.3	27.1	20.5	95.2	194	1260	5.1	1	4.9	5	5.1	11.9	2
29	0.065	0.129	1.56	0.166	0.151	0.373	0.281	0.034	0.889	0.638	7.28	139	22.2	13.3	84.2	164	1200	3.9	1	4.4	5	4.4	10.8	2
30	0.068	0.166	3.14	0.104	0.053	0.368	0.292	0.039	1.11	0.831	4.71	125	17.6	13.9	59.5	141	1030	4.5	1	3.7	2.9	3.9	8.5	2
31	0.067	0.199	1.65	0.119	0.163	0.447	0.292	0.058	0.927	1.02	6.97	131	38.3	42.9	85.9	164	1390	5.2	1	4.3	5	6	10.7	2
32	0.084	0.266	1.28	0.087	0.071	1.14	0.158	0.049	0.794	1.3	3.77	143	19.7	39.1	128	146	1230	4.2	0.8	3.8	3	4.7	9.1	1
33	0.069	0.183	1.94	0.07	0.095	0.465	0.225	0.037	1.19	0.915	2	123	4.6	7.5	69.4	123	943	3.3	1	3.5	4.3	4.5	12.1	1
34	0.087	0.208	1.76	0.061	0.099	0.683	0.087	0.042	0.168	1.33	5.04	92.9	7	12	56.3	157	949	6.8	1	5	6	5.2	14.9	3
35	0.074	0.142	2.44	0.051	0.052	0.737	0.408	0.022	1.16	0.745	3.94	143	6.8	36.8	67.6	82	1170	5	0.8	5.7	5.5	4.8	13.5	1
36	0.084	0.171	1.85	0.088	0.038	1.21	0.263	0.072	1.35	0.899	2.38	130	6.2	101	64.4	99	1070	3.5	0.8	4.7	4.2	3.3	12.2	1
37	0.106	0.307	1.15	0.063	0.051	0.643	0.29	0.031	0.885	1.61	4.4	151	17.4	7.3	103	177	1100	4.3	0.8	5.5	3.5	5.8	10.3	1
38	0.102	0.342	4.08	0.065	0.077	0.752	0.366	0.048	1.08	1.77	3.37	145	5.3	33.1	58.3	117	1010	5.2	0.8	4.8	5.7	3.5	13.2	1

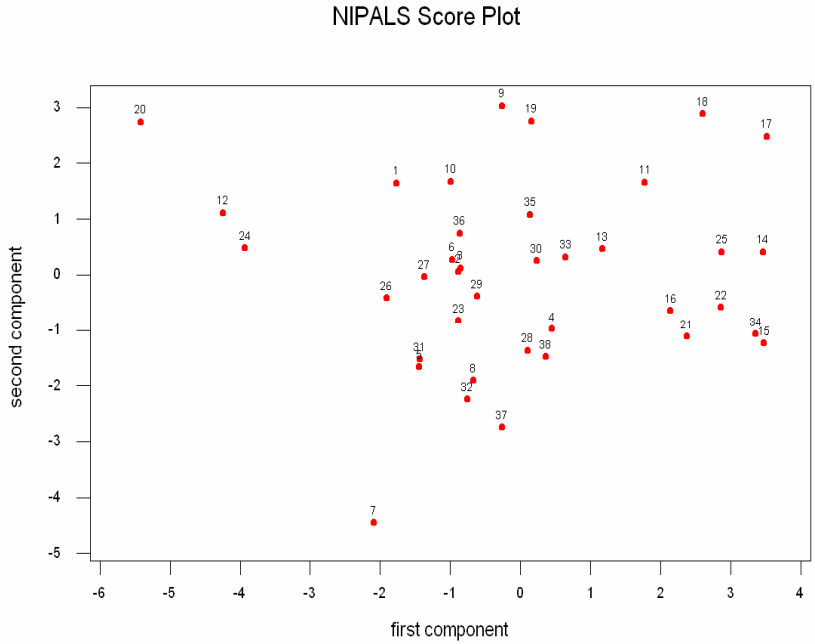

Vysvětlený rozptyl - Wine
Rel.Rozptyl%
Komponenta

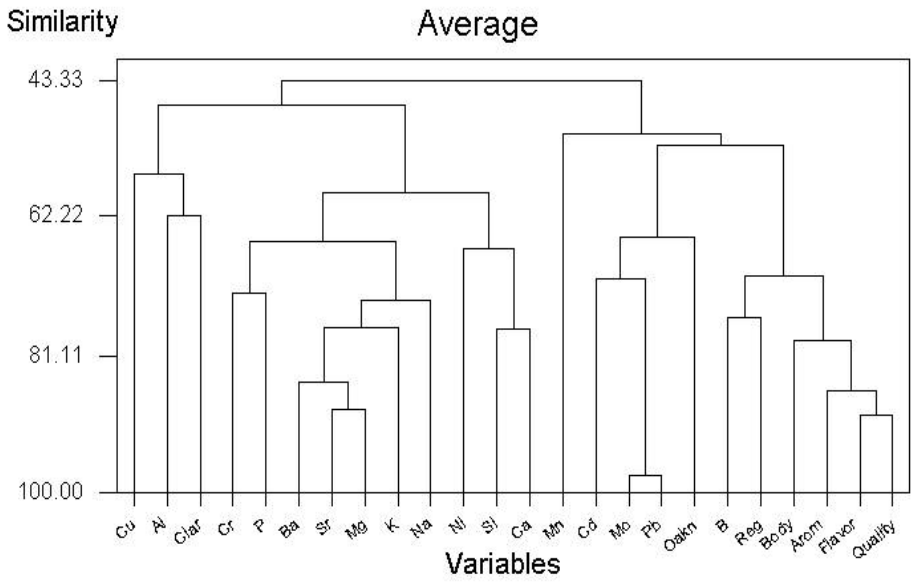

BiPlot - Wine
Komp2
Komp1
Mn
Reg
Na
Sr
K
Cr
P
Mg
Ba
B
Cd
Cu
Si
Ni
Ca
Clar
Calcn
Mo
Pb
Arom

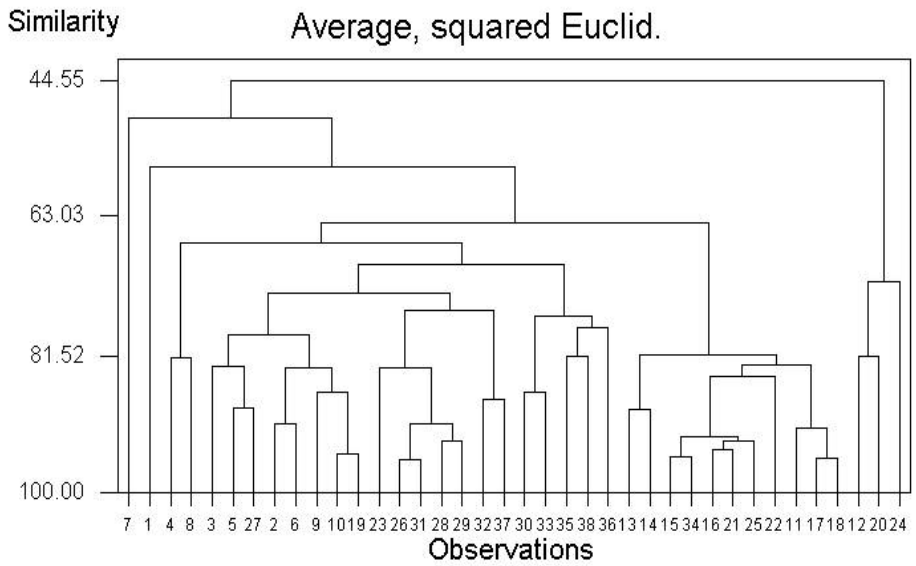

Mahalanobisova vzdálenost - Sheet1
MD
robustní
klasická
Index


Odlehlá data - Wine
dMD
Hat

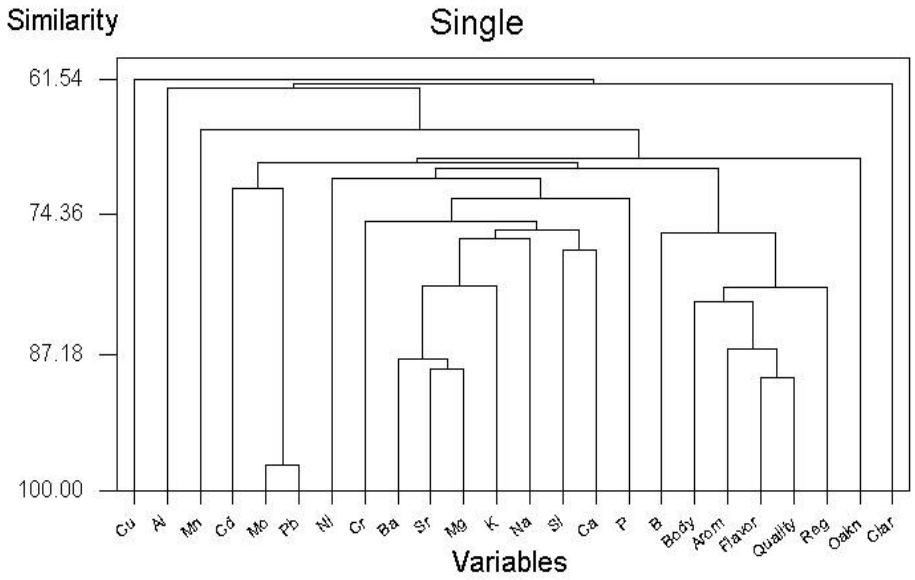

Principal Components Loading Plot
second component
first component
Mn
Reg
Body
Na
K
Sr
Cr
P
B
Quality
Flavor
Mg
Ba
Arom
Cd
Cu
Si
Clar
Oakn
Ni
Ca
Mo
Pb

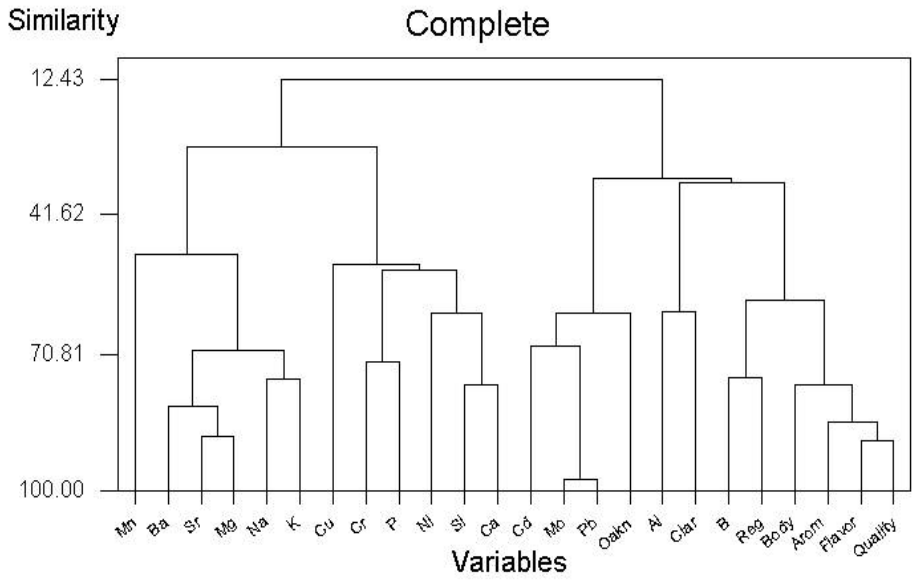

NIPALS Score Plot
second component
first component

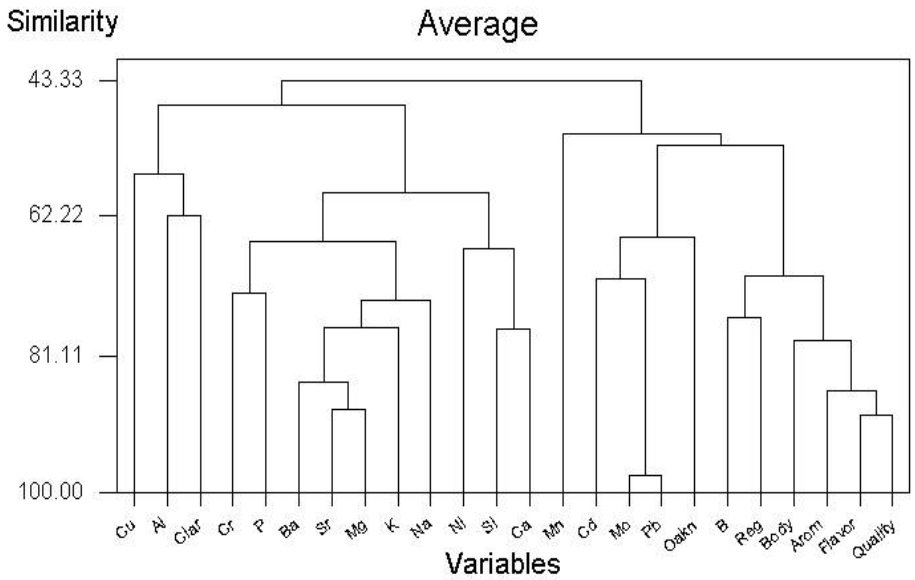

Similarity
Average
43.33
62.22
81.11
100.00
Cu Al Clar Cr P Ba Sr Mg K Na Ni Si Ca Mn Cd Mo Pb Oakn B Reg Body Arom Flavor Quality
Variables

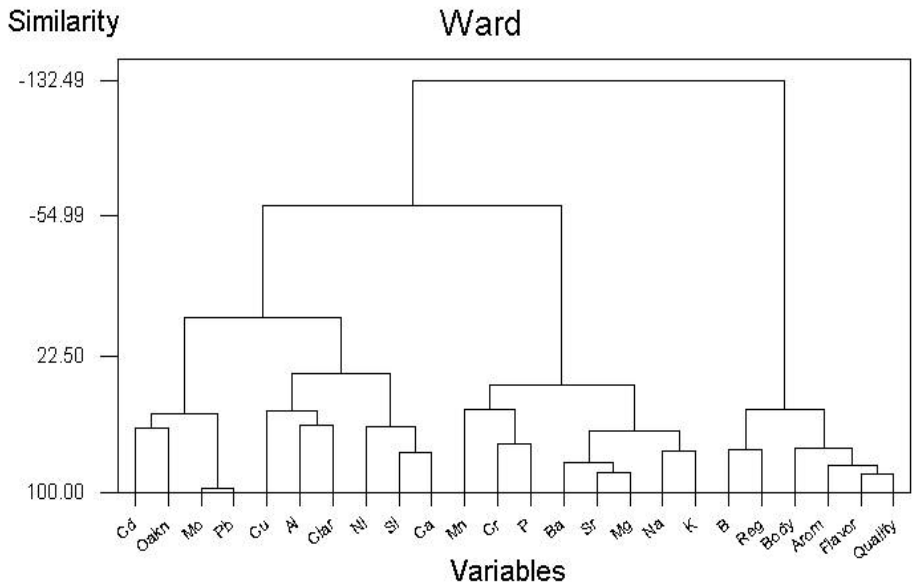

Similarity
Average, squared Euclid.
44.55
63.03
81.52
100.00
7 1 4 8 3 5 27 2 6 9 10 19 23 26 31 28 29 32 37 30 33 35 38 36 13 14 15 34 16 21 25 22 11 17 18 12 20 24
Observations

Hledání nejlepší metody dle kofenetického korelačního koeficientu a kritéria delta.

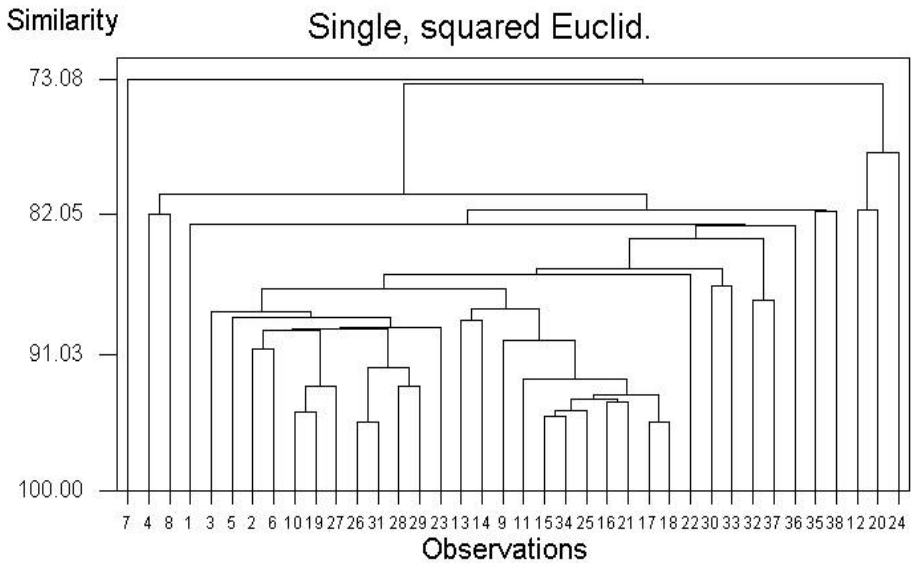


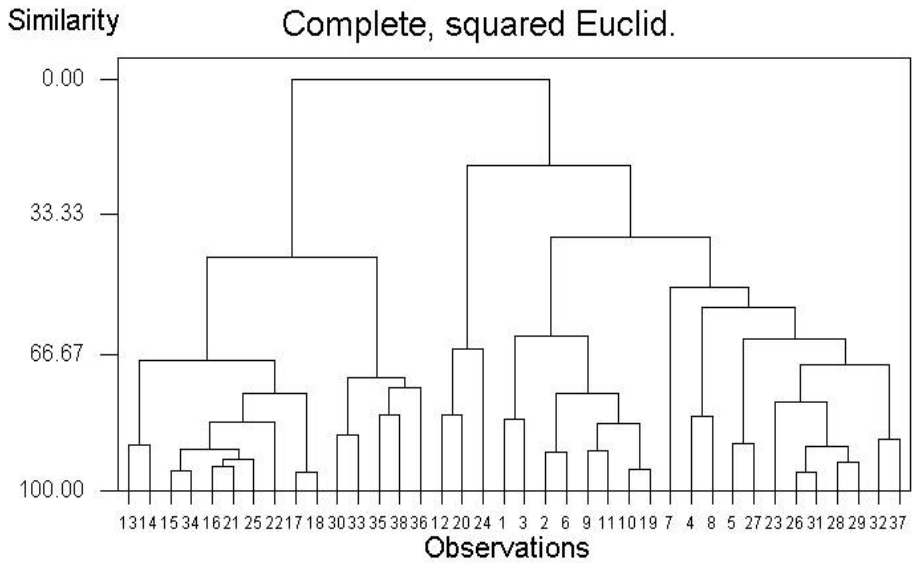


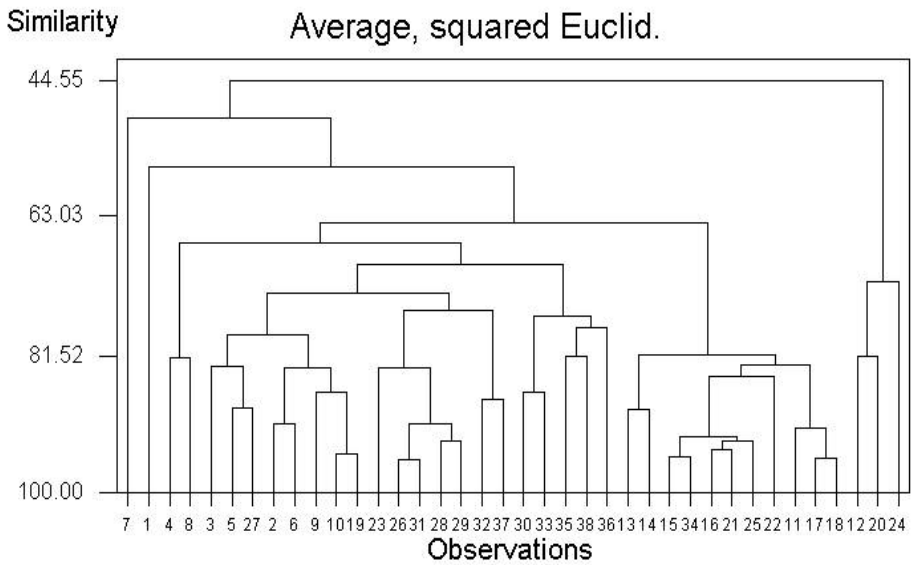


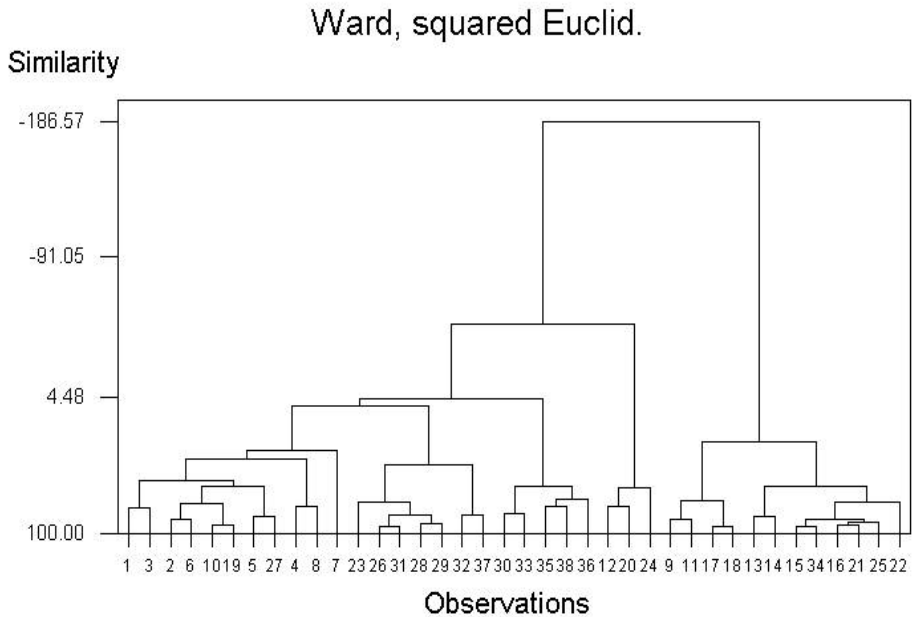


Hledání nejlepší metody dle kofenetického korelačního koeficientu a kritéria delta.





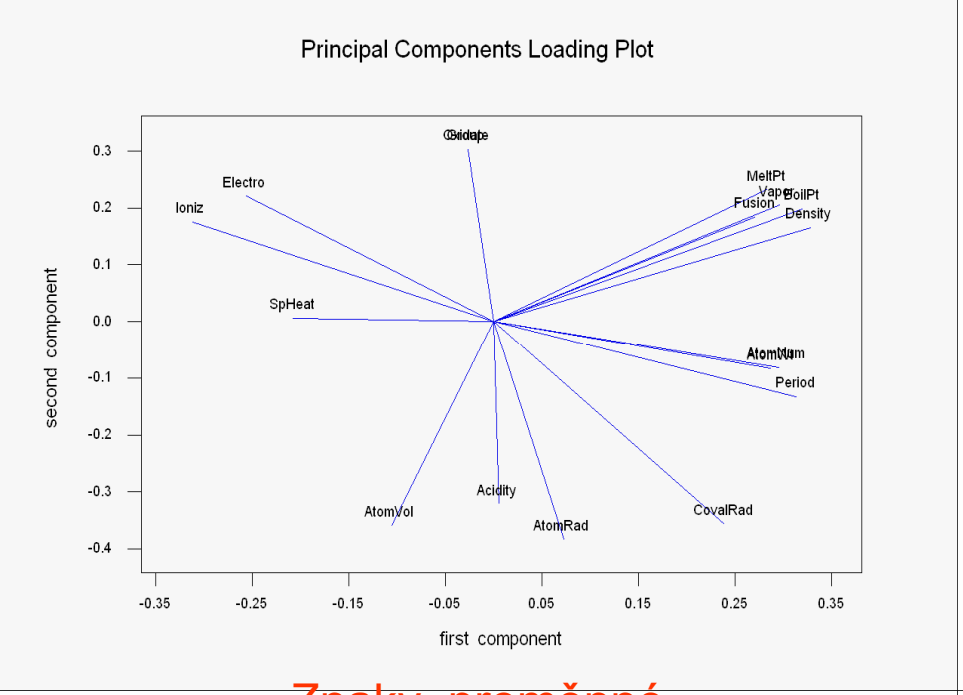


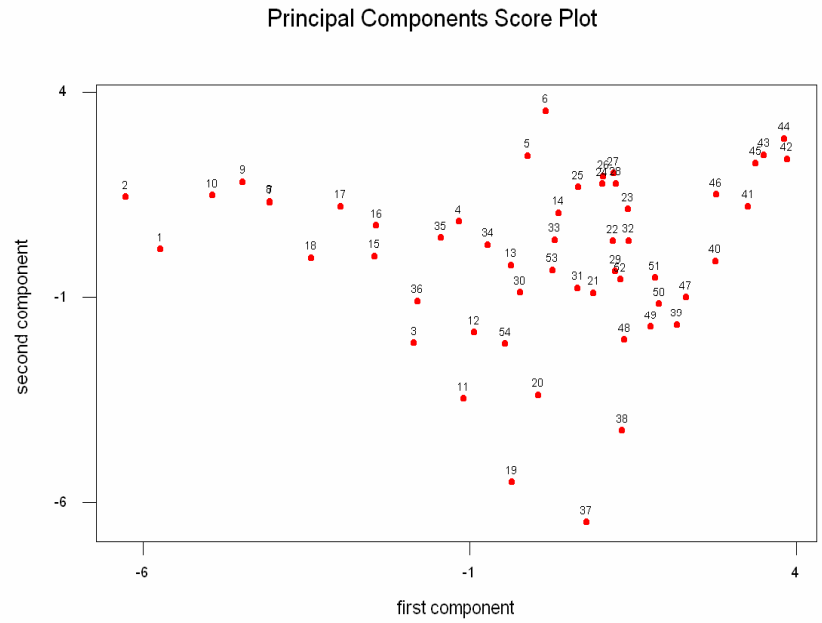


Úloha 5. Klasifikace prvků periodické tabulky do shluků

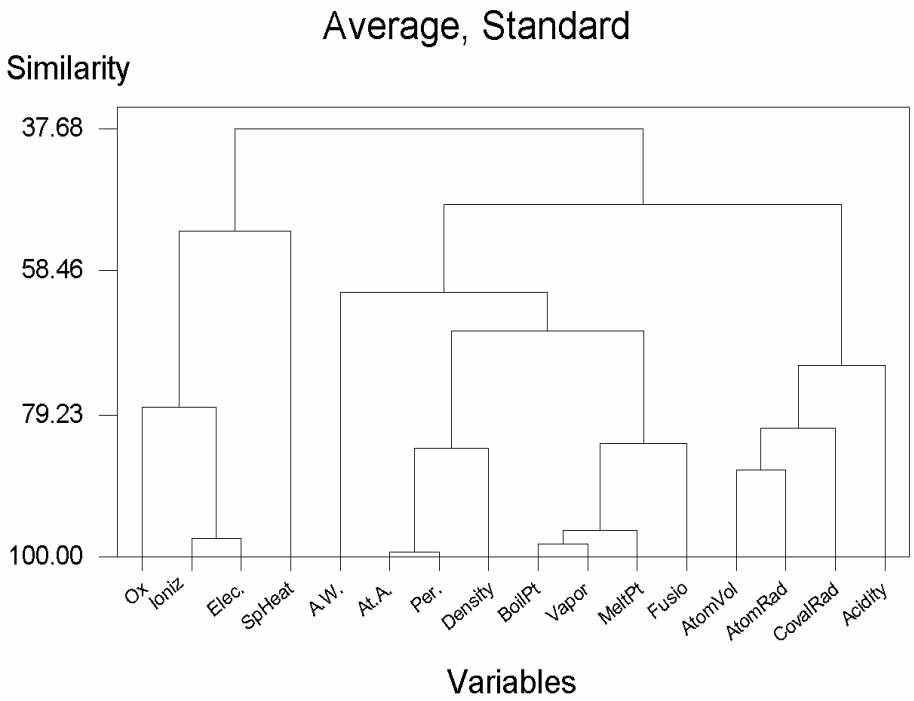
Pro 54 prvků periodické tabulky bylo použito 18 rozličných fyzikálně-chemických vlastností. Nalezněte shluky podobných vlastností a shluky podobných prvků.

Row	Elem	At.A.	Per.	A.W.	Ox	Ioniz	Elec.	BoilPt	MeltPt	Vapor	Fusio	SpHeat	AtomVol	CovalRad	AtomRad	Density	Acidity
1	H	1	1	1	1	313	2.1	20	14	0.11	0.01	3.45	14.1	0.32	0.99	0.07	3
2	He	2	1	4	8	567	5	4	3	0.02	0.01	1.25	31.8	0.93	1.3	0.13	3
3	Li	3	2	6.9	1	124	1	1603	454	32.5	0.72	0.79	13.1	1.23	1.55	0.53	5
4	Be	4	2	9	2	215	1.5	3043	1550	73.9	2.8	0.45	5	0.9	1.12	1.85	3
5	B	5	2	11	3	191	2	4198	2303	128	5.3	0.309	4.6	0.82	0.98	2.34	2
6	C	6	2	12	4	260	2.5	5103	4000	172	2.6	0.165	5.3	0.77	0.91	2.26	2
7	N	7	2	14	5	336	3	77	63	0.67	0.09	0.247	17.3	0.75	0.92	0.81	1
8	O	8	2	16	6	314	3.5	90	54	0.82	0.05	0.218	14	0.73	0.84	1.14	3
9	F	9	2	19	7	402	4	85	54	0.76	0.06	0.18	17.1	0.72	0.81	1.5	3
10	Ne	10	2	20	8	497	5	31	25	0.42	0.08	0.2	16.8	0.71	1.76	1.2	3
11	Na	11	3	23	1	119	0.9	1165	371	24.1	0.62	0.295	23.7	1.54	1.9	0.97	5
12	Mg	12	3	24	2	176	1.2	1380	923	32.5	2.14	0.25	14	1.36	1.6	1.74	5
13	Al	13	3	27	3	138	1.5	2723	933	67.9	2.55	0.215	10	1.18	1.43	2.7	3
14	Si	14	3	28	4	188	1.8	2953	1683	40.6	11.1	0.162	12.1	1.11	1.32	2.33	3
15	P	15	3	31	5	254	2.1	553	317	2.97	0.15	0.177	17	1.06	1.28	1.82	2
16	S	16	3	32	6	239	2.5	718	392	3.01	0.34	0.175	15.5	1.02	1.27	2.07	1
17	Cl	17	3	36	7	300	3	238	172	2.44	0.77	0.116	18.7	0.99	1.09	1.56	1
18	Ar	18	3	40	8	363	4	87	84	1.56	0.28	0.125	24.2	0.98	2.11	1.4	3
19	K	19	4	39	1	100	0.8	1033	337	18.9	0.55	0.177	45.3	2.03	2.35	0.86	5
20	Ca	20	4	40	2	141	1	1713	1111	36.7	2.1	0.149	29.9	1.74	1.97	1.55	5
21	Sc	21	4	45	3	151	1.3	3003	1812	81	3.8	0.13	15	1.44	1.62	3	4
22	Ti	22	4	48	4	158	1.5	3533	1941	107	3.7	0.126	10.6	1.32	1.47	4.51	3
23	V	23	4	51	5	156	1.6	3723	2173	106	4.2	0.12	8.4	1.22	1.34	6.1	3
24	Cr	24	4	52	6	156	1.6	2938	2148	73	3.3	0.11	7.2	1.18	1.3	7.19	1
25	Mn	25	4	55	7	171	1.5	2423	1518	53.7	3.5	0.115	7.4	1.17	1.35	7.43	1
26	Fe	26	4	56	8	182	1.8	3273	1809	84.6	3.67	0.11	7.1	1.17	1.26	7.86	3
27	Co	27	4	59	8	181	1.8	3173	1768	93	3.64	0.099	6.7	1.16	1.25	8.9	3
28	Ni	28	4	59	8	176	1.8	3003	1726	91	4.21	0.105	6.6	1.15	1.24	8.9	4
29	Cu	29	5	64	1	178	1.9	2868	1356	72.8	3.11	0.092	7.1	1.17	1.28	8.96	4
30	Zn	30	5	65	2	216	1.6	1179	693	27.4	1.76	0.91	9.2	1.25	1.38	7.14	3
31	Ga	31	5	70	3	138	1.6	2510	303	70.7	1.34	0.079	11.8	1.26	1.41	5.91	3
32	Ge	32	5	73	4	187	1.8	3103	1211	68	7.6	0.073	13.6	1.22	1.37	5.32	3
33	As	33	5	75	5	231	2	886	1090	7.75	6.62	0.083	13.1	1.2	1.39	5.72	2
34	Se	34	5	79	6	225	2.4	958	490	3.34	1.25	0.084	16.5	1.16	1.4	4.79	1
35	Br	35	5	80	7	273	2.8	331	266	3.58	1.26	0.07	23.5	1.14	1.24	3.12	1
36	Kr	36	5	84	8	323	3	121	116	2.16	0.39	0.08	32.2	1.12	2.16	2.6	3
37	Rb	37	6	86	1	96	0.8	961	312	18.1	0.55	0.08	55.9	2.16	2.48	1.53	5
38	Sr	38	6	88	2	131	1	1653	1041	33.8	2.1	0.055	33.7	1.91	2.15	2.6	5
39	Y	39	6	89	3	152	1.3	3200	1782	93	2.7	0.071	19.4	1.62	1.78	4.47	4
40	Zr	40	6	91	4	160	1.4	3853	2125	120	4	0.066	14.1	1.45	1.6	6.49	3
41	Nb	41	6	93	5	156	1.6	3573	2741	125	6.4	0.065	10.8	1.34	1.46	8.4	2
42	Mo	42	6	96	6	166	1.8	5833	2883	128	6.6	0.061	9.4	1.3	1.39	10.2	1
43	Tc	43	6	98	7	167	1.9	5273	2413	120	5.5	0.06	9	1.27	1.36	11.5	1
44	Ru	44	6	1	1.1	8	173	2.2	5173	2773	148	6.1	0.057	8.3	1.25	1.34	12.2	2
45	Rh	45	6	1	2.9	8	178	2.2	4773	2239	127	5.2	0.059	8.3	1.25	1.34	12.4	3
46	Pd	46	6	1	6.4	8	192	2.2	4253	1825	90	4	0.058	8.9	1.28	1.37	12	4
47	Ag	47	7	1	7.9	1	175	1.9	2483	1234	60.7	2.7	0.056	10.3	1.34	1.44	10.5	3
48	Cd	48	7	1	12	2	207	1.7	1038	594	23.9	1.46	0.055	13.1	1.48	1.54	8.65	4
49	In	49	7	1	15	3	133	1.7	2273	429	53.7	0.78	0.057	15.7	1.44	1.66	7.31	3
50	Sn	50	7	1	19	4	169	1.8	2543	505	70	1.72	0.054	16.3	1.41	1.62	7.3	3
51	Sb	51	7	1	22	5	199	1.9	1653	904	46.6	4.74	0.049	18.4	1.4	1.59	6.62	2
52	Te	52	7	1	28	6	208	2.1	1263	723	11.9	4.28	0.047	20.5	1.36	1.6	6.24	2
53	I	53	7	1	27	7	241	2.5	456	387	5.2	1.87	0.052	25.7	1.33	1.44	4.94	1
54	Xe	54	7	1	31	8	280	3	165	161	3.02	0.55	0.05	42.9	1.31	2.27	3.06	3

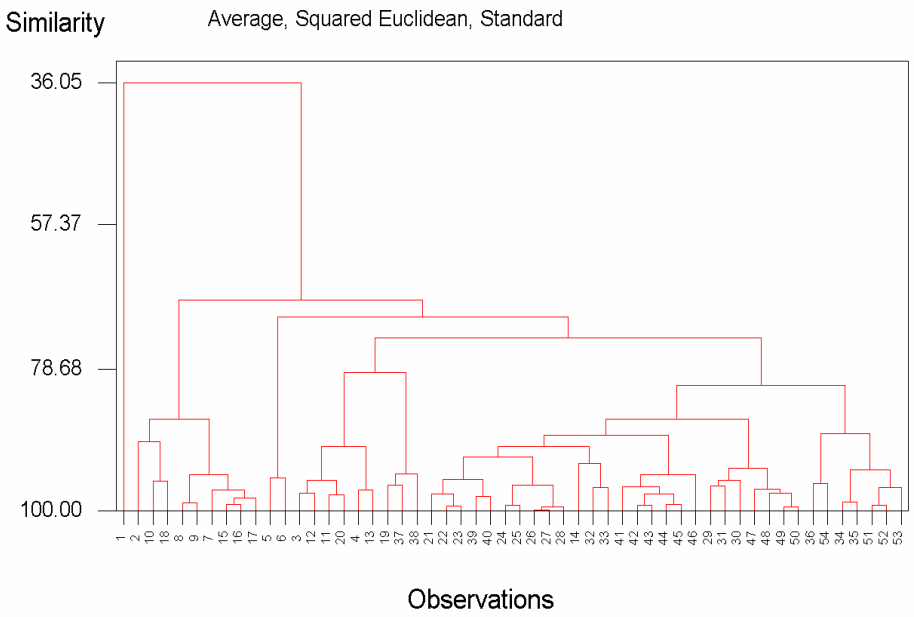




Znaky, proměnné



Objekty

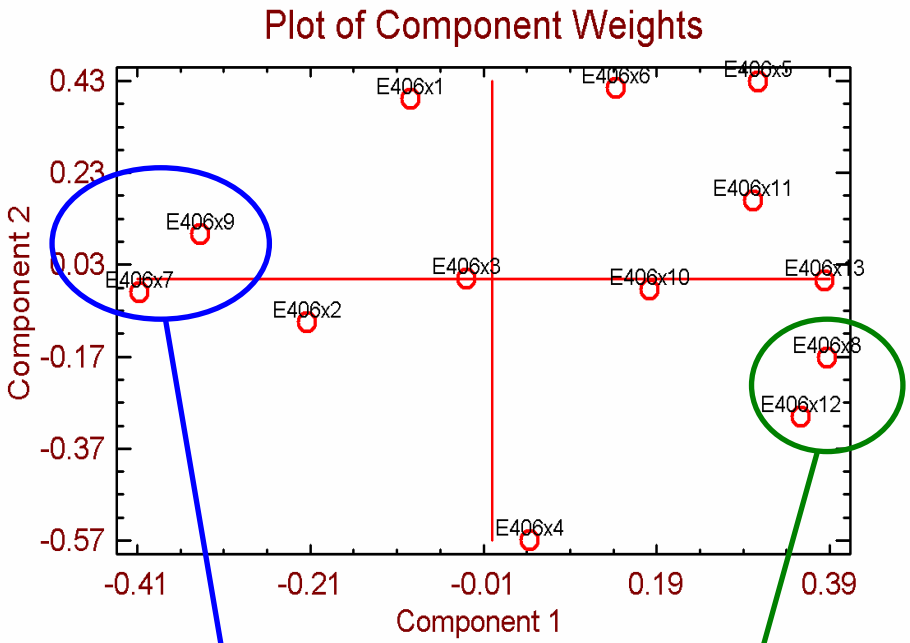


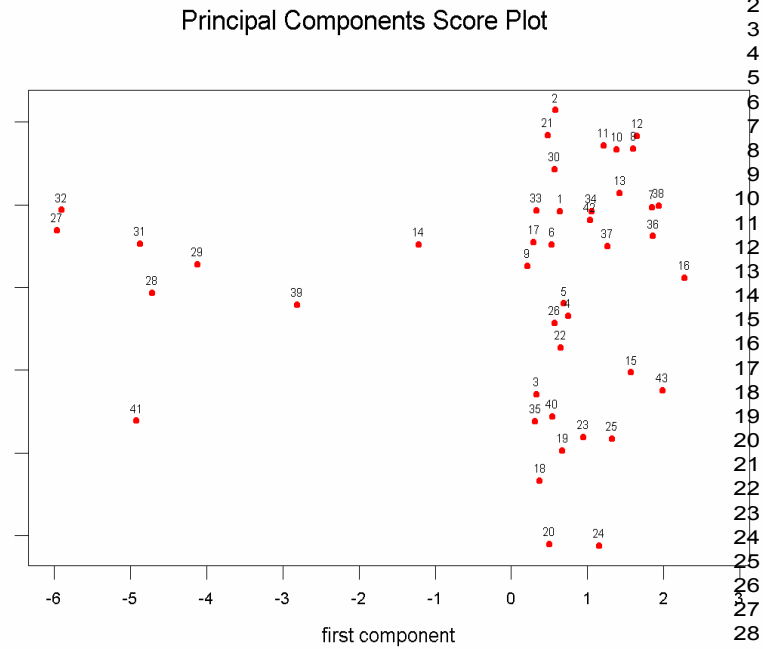
Úloha 6. Klasifikace vlastností rozličných druhů kávy (Kompendium E406)

U 43 vzorků kávy ze 30 zemí byly změřeny chemické a fyzikální vlastnosti. Nalezněte shluky podobných vlastností a shluky podobných prvků.

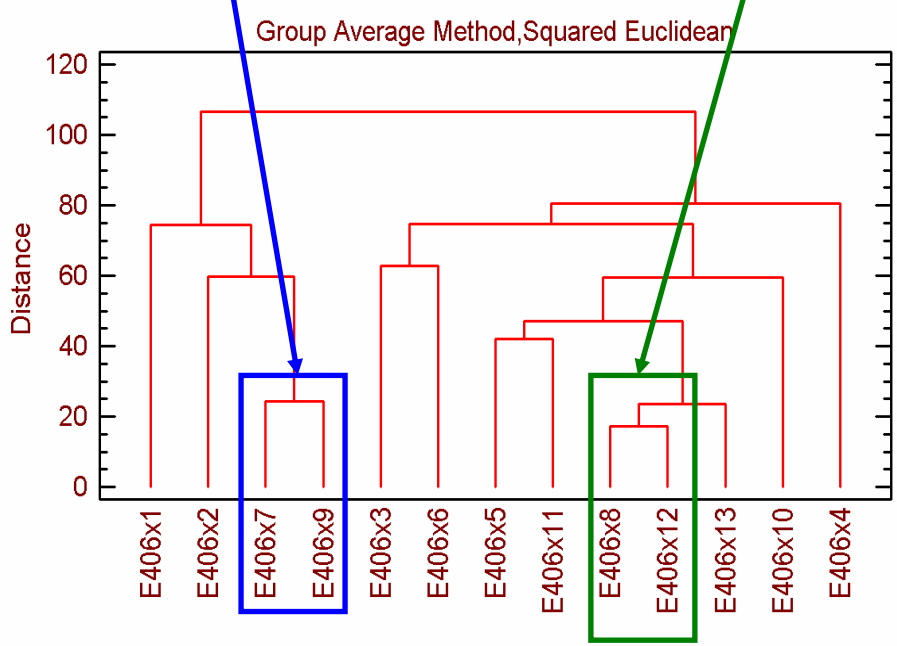
Data: 13 proměnných (sloupce): i index kávy, j je původ kávy, x1 obsah vody, x2 hmotnost zrn, x3 extrakt, x4 pH, x5 volná acidita, x6 obsah minerálů, x7 tuky, x8 kofein, x9 trinonelin, x10 kyselina chlorogeniková, x11 kyselina neochlorogeniková, x12 kyseliny isochlorogeniková, x13 suma kyselin chlorogenikových.

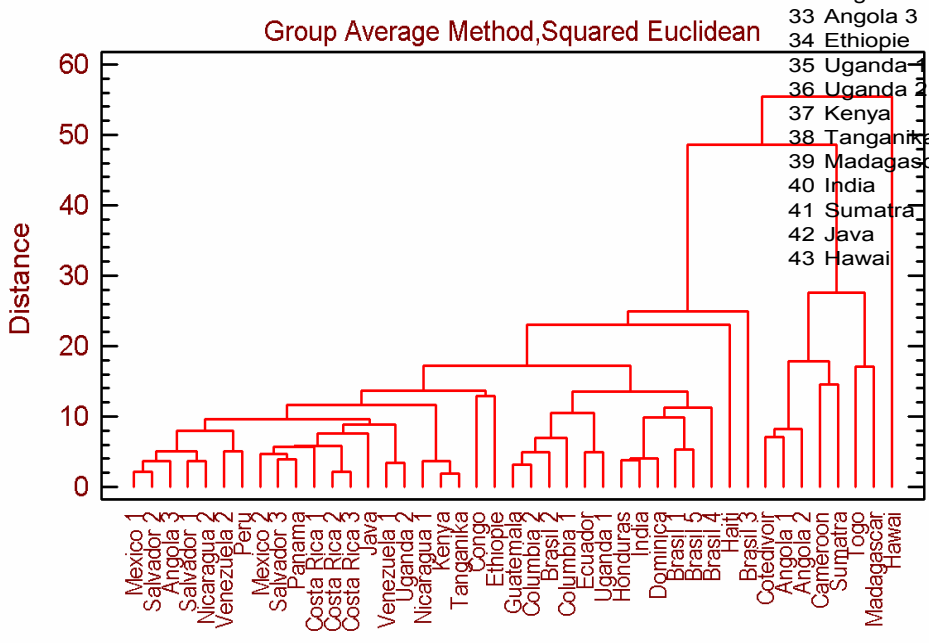
i	ii	x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9	x10	x11	x12	x13
1	Mexico 1	8.9	156.6	33.5	5.8	32.7	3.8	15.2	1.1	1	5.4	0.4	0.8	6.6
2	Mexico 2	7.4	157.3	32.1	5.8	30.8	3.7	15	1.3	1	5.1	0.3	1	6.4
3	Guatemala	9.7	152.9	33.1	5.3	36.7	4.2	16.1	1.2	1	5.9	0.2	0.8	6.9
4	Honduras	10.4	174	31.5	5.6	34.2	3.9	15.8	1.1	0.9	5.9	0.4	0.6	6.8
5	Salvador 1	10.5	145.1	35.2	5.8	31.8	4.1	15.2	1.1	1	5.1	0.5	0.7	6.3
6	Salvador 2	10	156.4	34.5	5.8	32.6	3.9	15.4	1.2	0.8	5.3	0.4	0.7	6.4
7	Salvador 3	8.2	155.2	32.4	5.6	29.7	3.8	15.6	1.3	1.2	4.8	0.3	0.7	5.9
8	Nicaragua 1	9.2	167.8	30.6	5.9	28.9	3.8	15.1	1.3	1	5	0.3	0.7	5.9
9	Nicaragua 2	9.3	165.4	35.3	5.8	32.6	4.2	14.3	1.2	1	5.5	0.4	0.8	6.7
10	Costa Rica 1	7.1	180.3	33	5.8	29.3	4	15.1	1.3	1	5.1	0.3	0.7	6.1
11	Costa Rica 2	7.6	153.2	36	5.9	30.5	3.9	16.8	1.4	1.1	5.3	0.3	0.7	6.3
12	Costa Rica 3	7.3	159.6	35	5.8	29.9	3.7	16.5	1.2	1.2	5.5	0.3	0.7	6.5
13	Panama	9.3	161.8	32.4	5.8	31	3.7	15.5	1.3	1.2	5.6	0.3	0.6	6.6
14	Haiti	8.3	160.8	35.7	5.9	30	4.4	13	1.3	1	6.1	0.6	0.8	7.5
15	Dominica	11.6	174.8	32.5	5.4	35.2	3.7	14.5	1	1	5.7	0.3	0.5	6.5
16	Venezuela 1	9.7	169.1	34	5.8	31.6	4	15.7	1.3	1.3	5.1	0.3	0.3	6.2
17	Venezuela 2	10.6	163.7	35	5.8	35	3.8	15.8	1.2	1.1	6.1	0.3	0.9	7.3
18	Columbia 1	12	178.8	32.9	5.3	36.2	4.4	15.6	1.3	1	5.6	0.4	0.7	6.7
19	Columbia 2	10.6	169.1	33	5.3	37.5	4.4	15.1	1.2	1	6.1	0.1	0.6	6.9
20	Ecuador	11.6	148.5	34.6	5.3	39.4	4.2	14.6	1	1.1	5.7	0.5	0.4	6.6
21	Peru	10.1	153.7	34.5	6	28.4	3.7	15.9	1.3	1.1	6.1	0.4	0.8	7.3
22	Brasil 1	10.7	134.5	29.8	5.4	34.1	3.7	15.8	1.2	0.9	5.4	0.4	0.6	6.4
23	Brasil 2	9.7	160.7	33.8	5.3	37.2	4.2	15.2	1.1	0.9	5.4	0.3	0.5	6.2
24	Brasil 3	10.8	133.2	35	5.2	34.7	4.5	15.1	1.2	1.4	5	0.5	0.5	6
25	Brasil 4	11.1	131.7	29.8	5.4	33	4.1	15.8	1.1	1.2	5.1	0.5	0.5	6
26	Brasil 5	10.1	121.6	33.6	5.4	34.7	3.5	15.4	1.1	0.9	5.5	0.4	0.6	6.5
27	Cotedivoir	8	141.8	33.7	5.8	41.9	4.2	11	2	0.5	6.4	0.6	1.5	8.5
28	Togo	9	144.6	29.9	5.6	38	3.9	7.5	1.9	0.3	5.4	0.8	0.9	7.1
29	Cameroon	10.3	119.2	35.5	6.1	41.7	4.1	9.8	1.8	0.8	6	0.5	1.1	7.6
30	Congo	10	143.2	31.7	6.1	29.3	4.1	17	1.2	0.6	5.4	0.3	0.7	6.4
31	Angola 1	9.2	150.4	31.5	5.7	36.4	4.2	8.5	1.9	0.6	5.9	0.6	1.4	7.9
32	Angola 2	9.6	136.6	33.9	5.6	38.2	4	7.2	2.2	0.5	6.2	0.4	1.6	8.3
33	Angola 3	9.5	136.5	32	5.8	31.2	3.8	14.6	1.3	1	5.2	0.4	0.8	6.4
34	Ethiopie	9.3	124.2	35.6	5.8	31.8	3.8	15.7	0.9	0.9	5.5	0.2	0.8	6.5
35	Uganda 1	10.5	132.9	36.2	5.4	36.7	4	15.6	1	1	5.9	0.4	0.6	6.9
36	Uganda 2	10.7	181.2	33.1	5.8	30.7	3.9	15.8	1.3	1.1	5.3	0.3	0.6	6.2
37	Kenya	10.5	159.1	30.3	5.6	31.5	3.7	15.2	1.3	0.9	5.1	0.3	0.7	6
38	Tanganika	9.9	169.4	29	5.6	30.2	3.7	16.5	1.3	0.9	5	0.2	0.7	5.9
39	Madagascar	5	152	30.6	5.3	40.5	3.9	9.6	1.6	0.7	5.3	0.6	0.8	6.7
40	India	11.5	156.8	30.8	5.5	37.5	3.9	14.3	1.2	1	5.8	0.4	0.4	6.6
41	Sumatra	8.4	110.8	31.6	5.7	43.4	4.5	10.1	1.7	0.8	6.3	0.7	0.9	7.9
42	Java	5.6	163.1	34.5	5.5	33.3	4	16	1.2	1.1	5.1	0.3	0.8	6.3
43	Hawai	9.7	191.2	35.1	5.6	34.6	4.2	14.2	1.1	0.9	0.7	0.5	0.3	6.5





1 Mexico 1
2 Mexico 2
3 Guatemala
4 Honduras
5 Salvador 1
6 Salvador 2
7 Salvador 3
8 Nicaragua 1
9 Nicaragua 2
10 Costa Rica 1
11 Costa Rica 2
12 Costa Rica 3
13 Panama
14 Haiti
15 Dominica
16 Venezuela 1
17 Venezuela 2
18 Columbia 1
19 Columbia 2
20 Ecuador
21 Peru
22 Brasil 1
23 Brasil 2
24 Brasil 3
25 Brasil 4
26 Brasil 5
27 Cotedivoir
28 Togo
29 Cameroon
30 Congo
31 Angola 1
32 Angola 2
33 Angola 3
34 Ethiopie
35 Uganda 1
36 Uganda 2
37 Kenya
38 Tanganika
39 Madagascar
40 India
41 Sumatra
42 Java
43 Hawai





Postup analýzy vícerozměrných dat

1. Standardizace: analýze vždy předchází standardizace čili škálování proměnných.

2. Odhady parametrů polohy, rozptýlení, tvaru a intenzita vztahu mezi proměnnými:
Vyčíslení výběrové střední hodnoty každé proměnné.

Odhad kovarianční matice S a její normované podoby - korelační matice R.

Odhadu vícerozměrné šikmosti a vícerozměrné špičatosti.

Matice R obsahuje Pearsonovy párové korelační koeficienty, které se diskutují.

3. Exploratorní analýza dat EDA:

(a) Hledání podobnosti objektů vizuálními rozptylovými diagramy typu casement plot, draftsman plot, dále symbolových a profilových grafů (hvězdičky, sluníčka, obličeje, křivky, stromy),

(b) Nalezení vybočujících objektů nebo vybočujících proměnných, mnohdy nevhodných k analýze,

(c) Testy předpokladů lineárních vazeb,

(d) Testy předpokladů o datech (normalitu, nekorelovanost, homogenitu).
Ověřování normality založené na vícerozměrné šikmosti a vícerozměrné špičatosti.

4. Určení vhodného počtu latentních proměnných:

a) Matice S nebo R se rozloží na vlastní čísla a vlastní vektory.

b) Indexový graf úpatí vlastních čísel (Scree plot): určí vhodný počet latentních proměnných, které ještě dostatečně popisují proměnlivost v datech.

c) Když se latentní proměnné podaří pojmenovat a dát jim i fyzikální, biologický či jiný věcný význam, jedná se o faktory. Jinak jde o hlavní komponenty.

5. Určení struktury v proměnných (PCA a FA):

a) Graf komponentních vah (Plot of components weights, loadings): hledání struktury a vzájemných vazeb (korelace) proměnných se provede v grafu

b) Rozptylový diagram komponentního skóre (Scatterplot): hledání struktury v objektech a třídění objektů do shluků.

c) Dvojný graf (Biplot) je přehledným spojením obou předešlých grafů a ukáže interakci objektů a proměnných.

6. Určení struktury a vzájemných vazeb v objektech:

a) Klasifikační postupy zařadí analyzovaný objekt do jednoho již existujícího a předem zadaného shluku.

b) Neutříděnou skupinu objektů lze uspořádat do shluků a výsledek třídění zobrazit dendrogramem v analýze shluků. V hierarchickém postupu je třeba k vytvoření shluků vybrat vzdálenost mezi objekty (Eukleidovskou, Manhattanovskou, Mahalanobisovu) a jednu z nabídnutých metod: průměrovou, centroidní, nejbližšího souseda, nejvzdálenějšího souseda, mediánovou, Wardovu.

c) Nehierarchické postupy rozdělí objekty do shluků, v nichž jsou předem umístěni typičtí reprezentanti.

7. Vysvětlení souladu nalezené struktury objektů a vzájemných vazeb v dendrogramu a PCA (či FA) grafech:

a) Vyšetřit a vysvětlit nalezenou strukturu a vazby jednotlivých proměnných nalezenou jednak v PCA (či FA) a jednak v dendrogramu podobnosti proměnných analýzou vzniklých shluků.

b) Vysvětlit strukturu a vazby klasifikovaných objektů nalezenou v PCA a v dendrogramu podobnosti objektů.

Doporučená literatura:

[1] Siotani M., Hayakawa T., Fujikoshi Y.: Modern Multivariate Statistical Analysis, A Graduate Course and Handbook. American Science Press, Columbia 1985.

[2] Johnson R.A., Wichern D.W.: Applied Multivariate Statistical Analysis, Prentice Hall, 1998.

[3] Meloun M., Militký J. , Forina M.: Chemometrics for Analytical Chemistry, Volume 1. PC-Aided Statistical Data Analysis, Ellis Horwood, Chichester 1992.

[4] Brereton R. G. Multivariate Pattern Recognition in Chemometrics, Illustrated by Case Studies, Elsevier 1992.

[5] Krzanowski W. J.: Principles of Multivariate Analysis, A User's Perspective, Oxford Science Publications, 1988.

[6] Meloun M. , Militký J.: Statistické zpracování experimentálních dat, Plus Praha 1994, Academia Praha 2004 (v tisku).

[7] Everitt B. S., Dunn G.: Applied Multivariate Data Analysis, Arnold, London 2001.

[8] Meloun M. , Militký J.: Kompendium statistického zpracování dat, Academia Praha 2002.

Děkuji za pozornost!

http://meloun.upce.cz