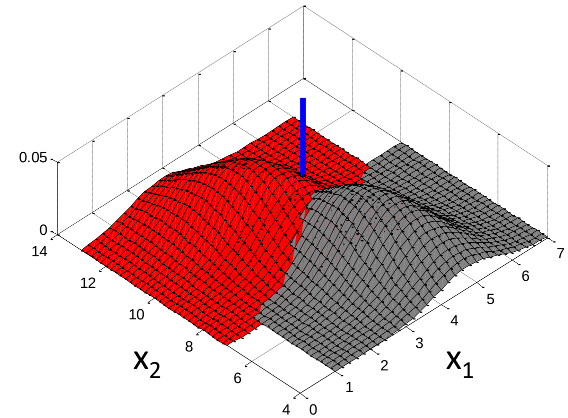
Analýza a klasifikace dat – přednáška 3

RNDr. Eva Koriťáková

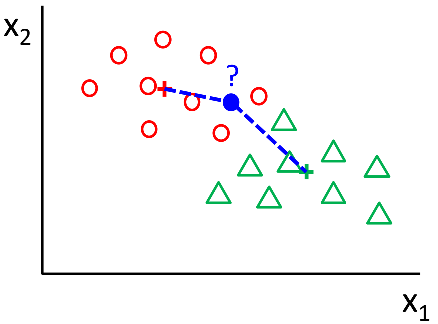
Podzim 2016

Typy klasifikátorů – podle principu klasifikace

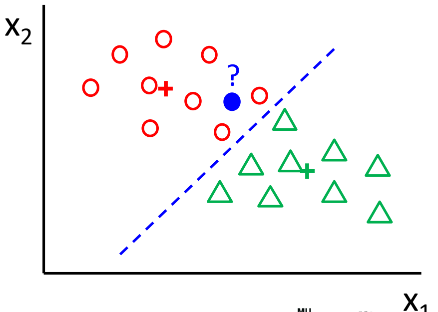
- **klasifikace pomocí diskriminačních funkcí:**
  - diskriminační funkce určují míru příslušnosti k dané klasifikační třídě
  - pro danou třídu má daná diskriminační funkce nejvyšší hodnotu



- **klasifikace pomocí vzdálenosti od etalonů klasif. tříd:**
  - etalon = reprezentativní objekt(y) klasifikační třídy
  - počet etalonů klasif. třídy různý – od jednoho vzorku (např. centroidu) po úplný výčet všech objektů dané třídy (např. u klasif. pomocí metody průměrné vazby)



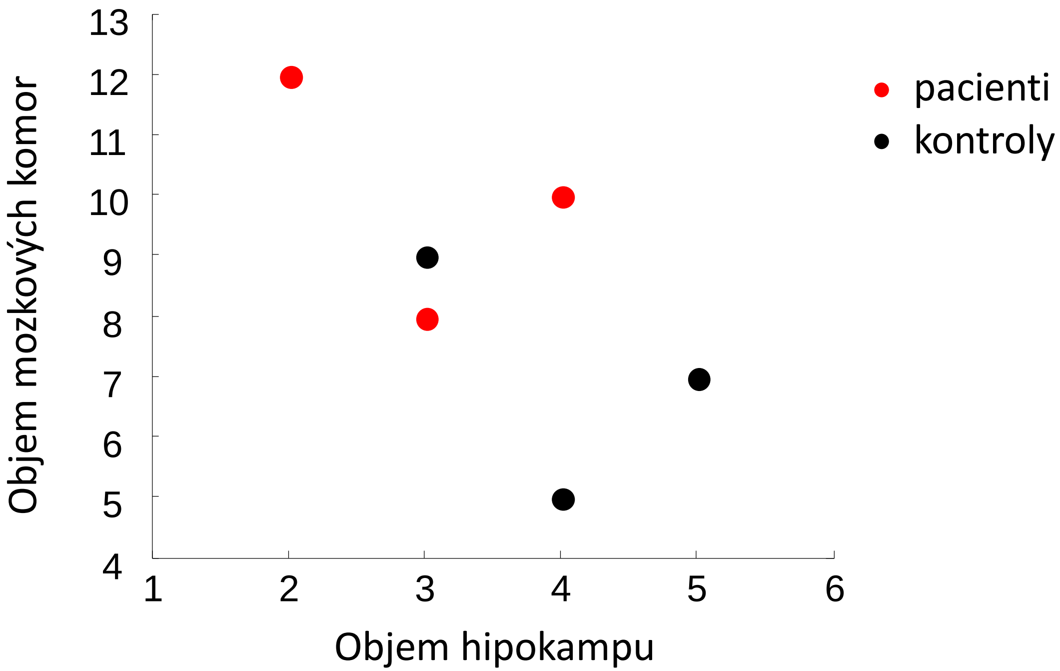
- **klasifikace pomocí hranic v obrazovém prostoru:**
  - stanovení hranic (hraničních ploch) oddělujících klasifikační třídy



Poznámka

- jednotlivé objekty je možno znázornit pomocí bodů v *p*-rozměrném prostoru (*p* je počet proměnných)

$$\mathbf{X}_D = \begin{bmatrix} 2 & 12 \\ 4 & 10 \\ 3 & 8 \end{bmatrix}, \mathbf{X}_H = \begin{bmatrix} 5 & 7 \\ 3 & 9 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}$$



Metrika – vzdálenost

Metrika D na X je funkce D: X × X $\rightarrow$ R, kde R je množina reálných čísel taková, že:

$$\exists D_0 \in \mathrm{R}: -\infty < D_0 \leq D(x,y) < +\infty, \ \forall x,y \in X$$

$$D(x,x) = D_0, \ \forall x \in X$$

a

$$D(x,y) = D(y,x), \ \forall x,y \in X \ \textit{(symetrie)}$$

$$D(x, y) = D_0 \text{ když a jen když } x = y \ \textit{(totožnost)}$$

$$D(x, z) \leq D(x, y) + D(y, z), \ \forall x,y,z \in X \ (\Delta \textit{ nerovnost})$$

Prostor X, ve kterém metrika D definována, nazýváme **metrickým prostorem**.

Vzdálenost je hodnota určená podle metriky.

Poznámka: zpravidla D_0=0.

Metrika – podobnost

Metrická míra podobnosti S na X je funkce S: X × X $\rightarrow$ R, taková, že:

$$\exists\, S_0 \in R: -\infty < S(x,y) \leq S_0 < +\infty,\ \forall x,y \in X$$

$$S(x,x) = S_0,\ \forall x \in X$$

a

$$S(x,y) = S(y,x),\ \forall x,y \in X \textit{ (symetrie)}$$

$$S(x,y) = S_0 \text{ když a jen když } x = y \textit{ (totožnost)}$$

$$S(x,y) \cdot S(y,z) \leq [S(x,y) + S(y,z)] \cdot S(x,z),\ \forall x,y,z \in X$$

Podobnost je hodnota určená podle metrické míry podobnosti.

Poznámka: zpravidla S_0=1 (ale neplatí to vždy, u některých metrik je maximální hodnota podobnosti jiná než 1)

Metriky podobnosti vs. metriky vzdálenosti

Vzdálenostní míry (míry nepodobnosti) mohou být transformovány na podobnostní míry různými transformacemi, např.:

$$S_{ij} = 1/D_{ij}$$

$$S_{ij} = 1/(1+ D_{ij})$$

$$S_{ij} = c - D_{ij},\ c \geq \max D_{ij},\ \forall i,j$$

Typy měr vzdálenosti (podobnosti)

- podle **typu proměnné** (kvalitativní proměnné, kvantitativní proměnné)
- podle **počtu objektů**, jejichž vztah hodnotíme – objekty (vektory), množiny objektů (vektorů)
- **deterministické** (nepravděpodobností) vs. **pravděpodobností míry**

- výběr konkrétní metriky závisí na:
  - výpočetních nárocích
  - charakteru rozložení dat
  - dosažení optimálních výsledků (klasifikační chyba, ztráta,...)

- obecně bohužel není možné dopředu doporučit vhodnou metriku pro danou situaci

- chybný výběr metriky může vést k chybných závěrům analýzy (stejně jako v klasické statistické analýze výběr nevhodného testu)

Typy metrik a konkrétní příklady

MEZI DVĚMA OBJEKTY

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvantitativními proměnnými

Euklidova m., Hammingova (manhattanská) m., Minkovského m., Čebyševova m., Mahalanobisova m., Canberrská m.

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvalitativními proměnnými

Hammingova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvantitativními proměnnými

Skalární součin, m. kosinové podobnosti, Pearsonův korelační koeficient, Tanimotova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvalitativními proměnnými

Tanimotova m., Jaccardův-Tanimotův a.k., Russelův-Raovův a.k., Sokalův-Michenerův a.k., Dicův k., Rogersův-Tanimotův k., Hamanův k.

MEZI DVĚMA SKUPINAMI OBJEKTŮ

Deterministické metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů

Metoda nejbližšího souseda, *k* nejbližších sousedů, nejvzdálenějšího souseda, centroidová metoda, m. průměrné vazby, Wardova metoda

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů používající jejich pravděpodobnostní charakteristiky

Chernoffova m., Bhattacharyyova m. atd.

Metriky pro určení vzdálenosti mezi dvěma objekty

Typy metrik a konkrétní příklady

MEZI DVĚMA OBJEKTY

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvantitativními proměnnými

Euklidova m., Hammingova (manhattanská) m., Minkovského m., Čebyševova m., Mahalanobisova m., Canberrská m.

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvalitativními proměnnými

Hammingova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvantitativními proměnnými

Skalární součin, m. kosinové podobnosti, Pearsonův korelační koeficient, Tanimotova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvalitativními proměnnými

Tanimotova m., Jaccardův-Tanimotův a.k., Russelův-Raovův a.k., Sokalův-Michenerův a.k., Dicův k., Rogersův-Tanimotův k., Hamanův k.

MEZI DVĚMA SKUPINAMI OBJEKTŮ

Deterministické metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů

Metoda nejbližšího souseda, *k* nejbližších sousedů, nejvzdálenějšího souseda, centroidová metoda, m. průměrné vazby, Wardova metoda

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů používající jejich pravděpodobnostní charakteristiky

Chernoffova m., Bhattacharyyova m. atd.

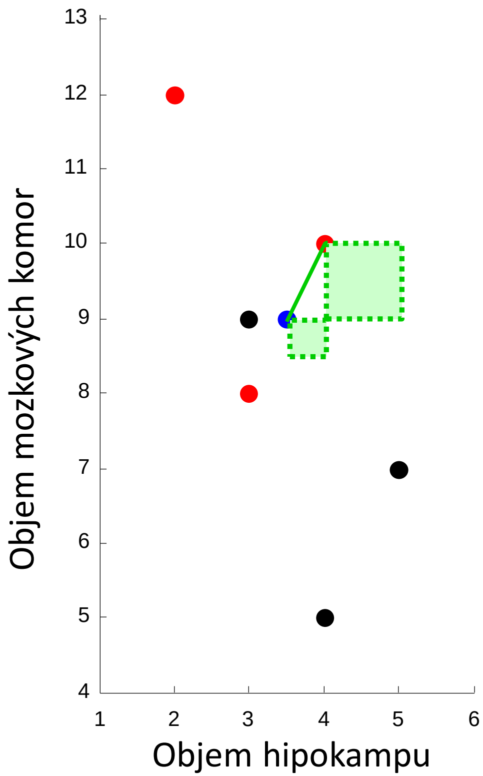
Nejpoužívanější metriky pro určení vzdálenosti mezi dvěma objekty s kvantitativními proměnnými

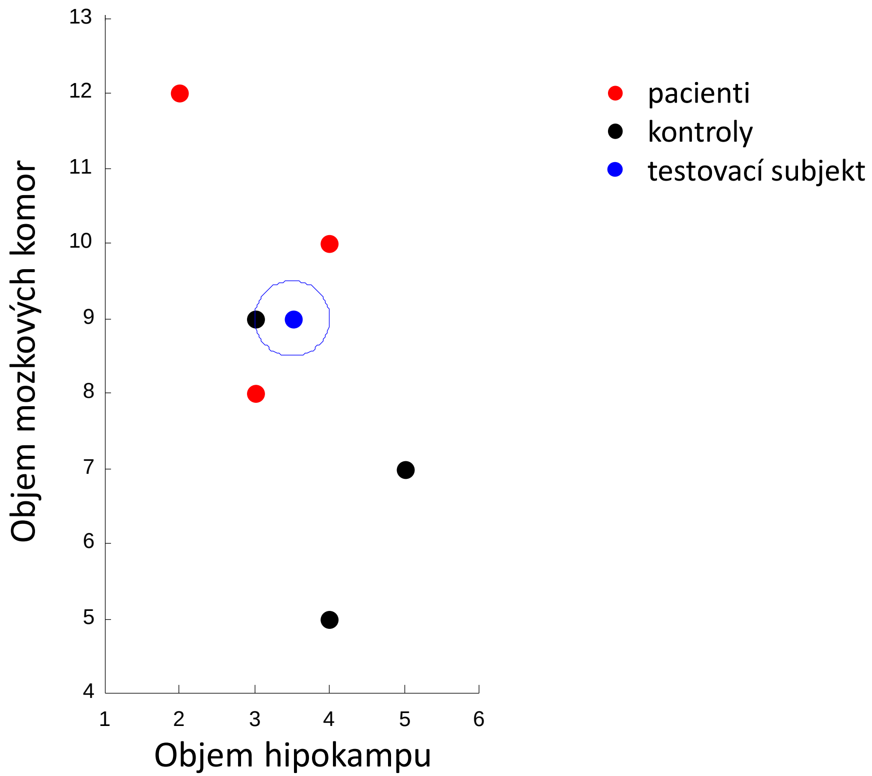
- Euklidova metrika
- Hammingova (manhattanská) metrika
- Minkovského metrika
- Čebyševova metrika
- Mahalanobisova metrika
- Canberrská metrika

Euklidova metrika

- zřejmě nejpoužívanější metrika s velmi názornou geometrickou interpretací

$$D_E(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (\mathrm{x}_{1i} - \mathrm{x}_{2i})^2}$$





Euklidova metrika

- zřejmě nejpoužívanější metrika s velmi názornou geometrickou interpretací

$$D_E(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (\mathrm{x}_{1i} - \mathrm{x}_{2i})^2}$$

- geometrickým místem bodů s toutéž Euklidovou vzdáleností od daného bodu je povrch hyperkoule (ve dvourozměrném prostoru kružnice)

- dává větší důraz na větší rozdíly mezi souřadnicemi

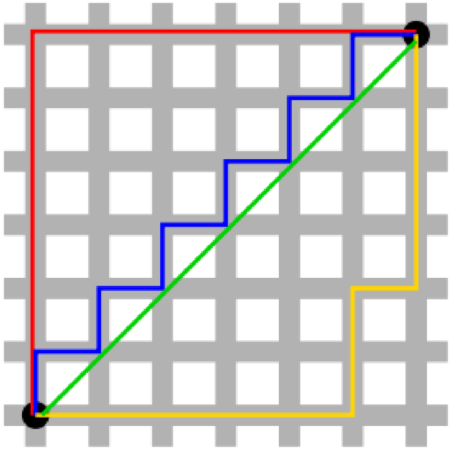
  žádoucí nebo nežádoucí?

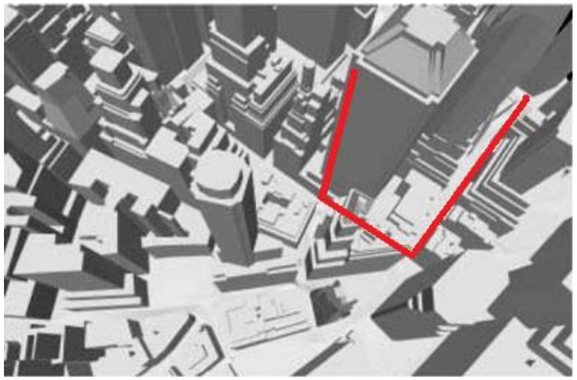
- občas se používá čtverec euklidovské vzdálenosti, protože se lépe počítá než euklidovská vzdálenost (není to ale pravá metrika vzdálenosti)

Hammingova (manhattanská) metrika

- v AJ názvy: Manhattan distance, city-block distance, taxi driver distance

$$D_H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sum_{i=1}^{n} |\mathrm{x}_{1i} - \mathrm{x}_{2i}|$$

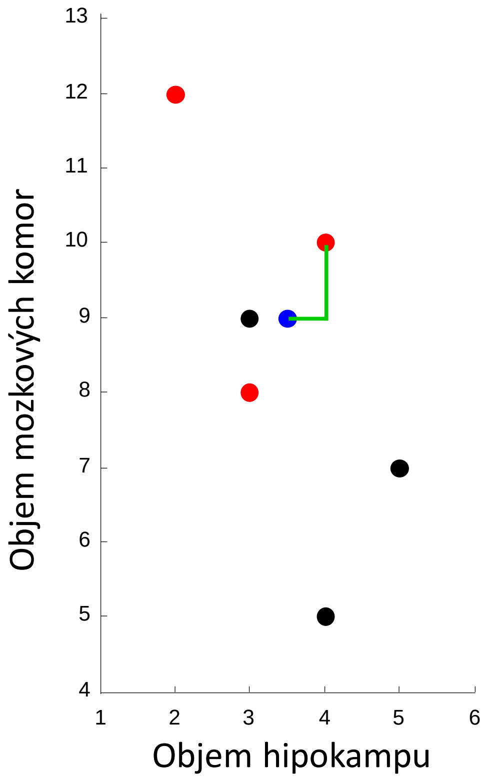


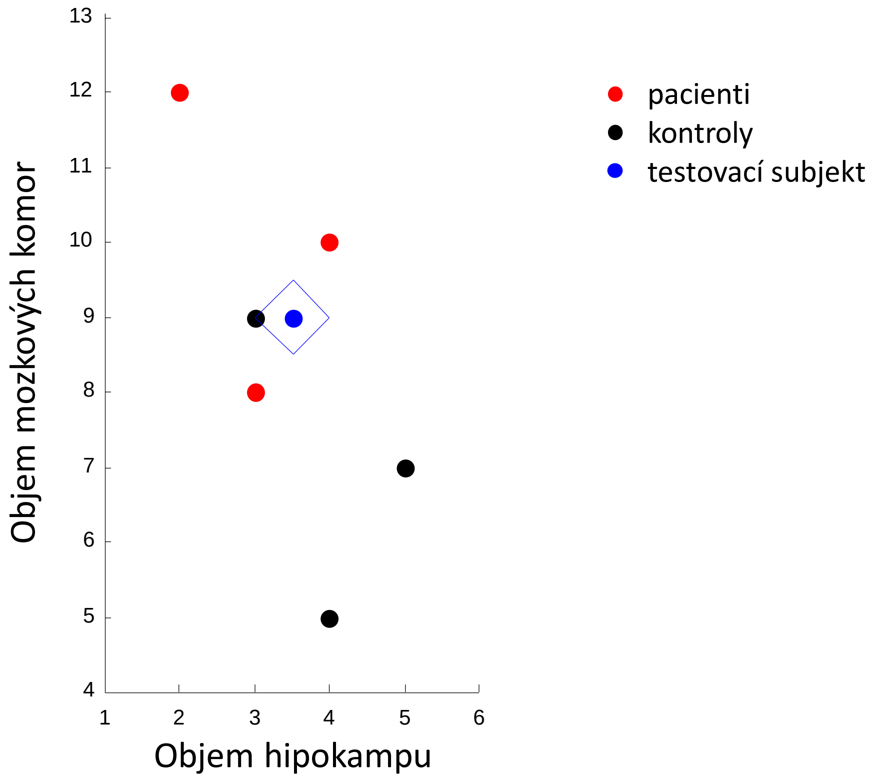


- nižší výpočetní nároky než Euklidova metrika → použití v úlohách s vysokou výpočetní náročností

Hammingova (manhattanská) metrika

$$D_H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sum_{i=1}^{n} |x_{1i} - x_{2i}|$$





- geometrickým místem bodů s toutéž manhattanskou vzdáleností od daného bodu je hyperkrychle (ve dvourozměrném prostoru čtverec)

Minkovského metrika

- zobecněním Euklidovy a Hammingovy (manhattanské) metriky

$$D_M(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \left(\sum_{i=1}^{n} |\mathrm{x}_{1i} - \mathrm{x}_{2i}|^m\right)^{1/m}$$

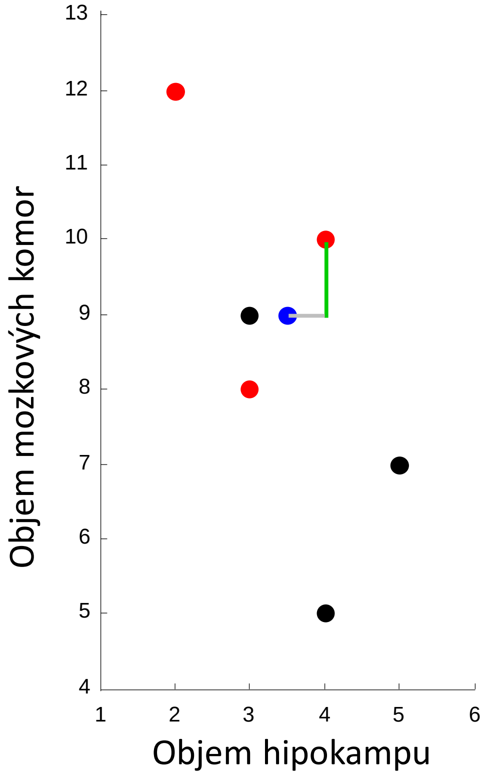
- Euklidova metrika pro $m = 2$, Hammingova (manhattanská) metrika pro $m = 1$
- volba m závisí na tom, jak moc chceme váhovat velké rozdíly mezi proměnnými (čím větší m, tím větší váha na velké rozdíly mezi proměnnými)
- pro $m \to \infty$ metrika konverguje k **Čebyševově metrice**

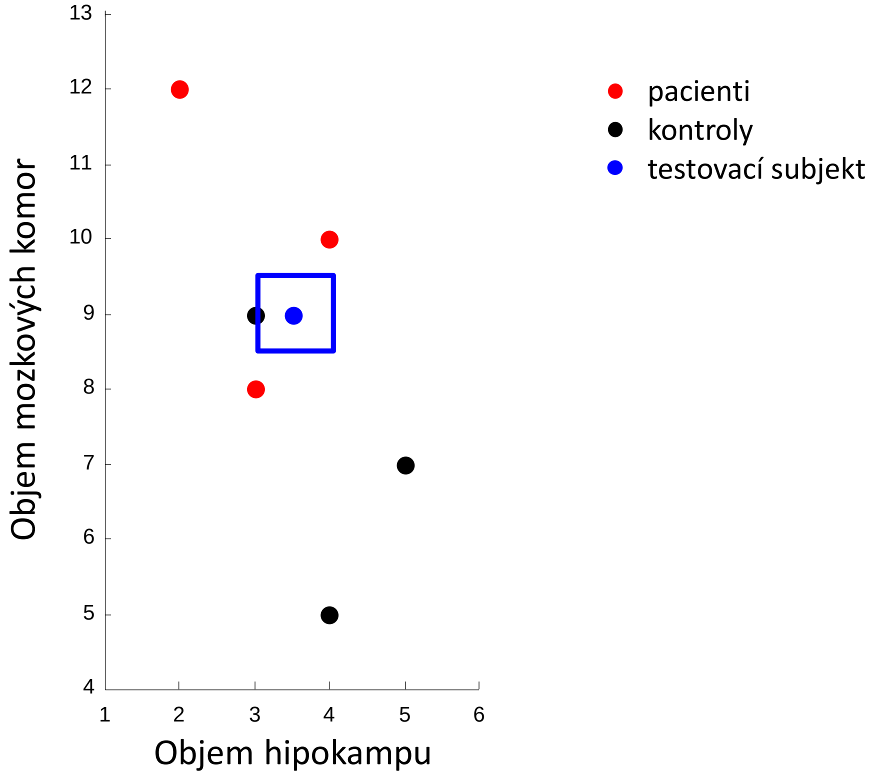
$$D_C(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \lim_{m \to \infty} D_M(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \max_{\forall \boldsymbol{i}} |\mathrm{x}_{1i} - \mathrm{x}_{2i}|$$

Čebyševova metrika

- odvozena z Minkovského metriky pro $m \to \infty$

$$D_C(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \max_{\forall \boldsymbol{i}} |x_{1i} - x_{2i}|$$





Čebyševova metrika

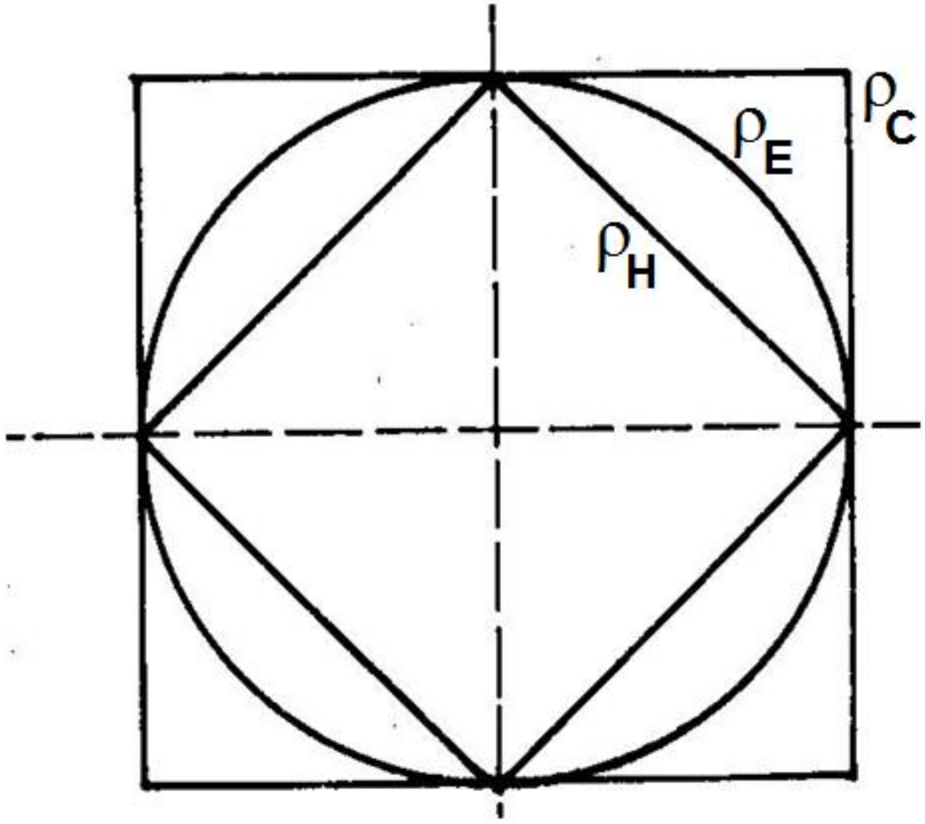
- odvozena z Minkovského metriky pro $m \to \infty$

$$D_C(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \max_{\forall \boldsymbol{i}} |\mathrm{x}_{1i} - \mathrm{x}_{2i}|$$

- používá se ve výpočetně kriticky náročných případech, kdy je pracnost výpočtu pomocí Euklidovy metriky nepřijatelná

- geometrickým místem bodů s toutéž Čebyševovou vzdáleností od daného bodu je hyperkrychle (ve dvourozměrném prostoru čtverec), ale jinak orientovaná než v případě Hammingovy (manhattanské) vzdálenosti

Srovnání metrik



ρ_C ... Čebyševova metrika
ρ_E ... Euklidova metrika
ρ_H ... Hammingova (manhattanská) metrika

Srovnání metrik

- pokud je potřeba použít „euklidovskou“ metriku, ale s nižší výpočetní náročností, používá se v první řadě Hammingova nebo Čebyševova metrika

- případně kombinace obou metrik:

$$D_A(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \max(2D_H/3; D_C)$$

- geometrickým místem bodů s toutéž vzdáleností je pak ve dvourozměrném prostoru osmiúhelník

Nevýhody metrik

- je zpravidla problematické vytvářet součet rozdílů veličin s různým rozsahem
- při začlenění korelovaných veličin se zvyšuje jejich vliv na výslednou hodnotu
- řešení:
  1. transformace proměnných:
     - vztažení k nějakému vyrovnávacímu faktoru (střední hodnotě, směrodatné odchylce, rozpětí Δ_i = $\max_j x_{ij}$ - $\min_j x_{ij}$) či pomocí standardizace $\mathrm{u}_{ij} = \frac{\mathrm{x}_{ij} - \bar{\mathrm{x}}_j}{\sigma_j}$; $i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, p$; kde n je počet subjektů a p je počet proměnných
  2. váhování:
     - např. **Minkovského váhovaná metrika**: $D_{WM}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (\sum_{i=1}^{n} a_i \cdot |\mathrm{x}_{1i} -$
  3. začlenění kovarianční matice do výpočtu:
     - začleněním inverze kovarianční matice získáváme **Mahalanobisovu metriku** (což je Euklidova metrika váhovaná inverzí kovarianční matice): $D_{MA}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sqrt{(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^T \cdot \mathbf{S}^{-1} \cdot (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}$

Canberrská metrika

- relativizovaná varianta Hammingovy (manhattanské) metriky

$$D_{CA}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sum_{i=1}^{n} \frac{|x_{1i} - x_{2i}|}{|x_{1i}| + |x_{2i}|}$$

- vhodná pro proměnné s nezápornými hodnotami
- pokud se vyskytují nulové hodnoty:
  - pokud jsou obě hodnoty x_{1i} a x_{2i} nulové, potom předpokládáme, že hodnota zlomku je nulová
  - je-li jenom jedna hodnota nulová, pak je zlomek roven 1 bez ohledu na velikost druhé hodnoty
  - někdy se nulové hodnoty nahrazují malým kladným číslem (menším než nejmenší naměřené hodnoty)
- velice citlivá na malé změny souřadnic, pokud se oba objekty nacházejí v blízkosti počátku souřadnicové soustavy; naopak méně citlivá na změny hodnot proměnných, pokud jsou tyto hodnoty velké

Příklad 1a

Jsou dány dva vektory $\mathbf{x}_1$ = (0,001; 0,001)^T a $\mathbf{x}_2$ = (0,01; 0,01)^T. Předpokládejme, že se souřadnice prvního vektoru změní na $\mathbf{x}'_1$ = (0,002; 0,001)^T. Jaká je Hammingova (manhattanská) a canberrská vzdálenost v obou případech a jaká je relativní změna vzdáleností, vyvolaná uvedenou modifikací?

$$d_H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = |0{,}001 - 0{,}01| + |0{,}001 - 0{,}01| = 0{,}009 + 0{,}009 = 0{,}018$$
$$d_H(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}_2) = |0{,}002 - 0{,}01| + |0{,}001 - 0{,}01| = 0{,}008 + 0{,}009 = 0{,}017$$

$$d_{CA}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{|0{,}001-0{,}01|}{|0{,}001|+|0{,}01|} + \frac{|0{,}001-0{,}01|}{|0{,}001|+|0{,}01|} = \frac{0{,}009}{0{,}011} + \frac{0{,}009}{0{,}011} = 1{,}6364$$
$$d_{CA}(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}_2) = \frac{|0{,}002-0{,}01|}{|0{,}002|+|0{,}01|} + \frac{|0{,}001-0{,}01|}{|0{,}001|+|0{,}01|} = \frac{0{,}008}{0{,}012} + \frac{0{,}009}{0{,}011} = 1{,}4849$$

Relativní změny vzdáleností, určující citlivost té které metriky, které jsou způsobeny změnou hodnoty první souřadnice, jsou:

$$\Delta d_H = \frac{|d_H(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) - d_H(\mathbf{x}'_1,\mathbf{x}_2)|}{d_H(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)} = \frac{|0{,}018-0{,}017|}{0{,}018} = \frac{0{,}001}{0{,}018} = 0{,}056$$
$$\Delta d_{CA} = \frac{|d_{CA}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) - d_{CA}(\mathbf{x}'_1,\mathbf{x}_2)|}{d_{CA}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)} = \frac{|1{,}6364-1{,}4849|}{1{,}6364} = 0{,}093$$

Ze získaných výsledků je zřejmé, že relativní změna vzdáleností je v případě canberrské metriky pro toto zadání téměř dvakrát větší.

Příklad 1b

Nyní mějme dány dva vektory $\mathbf{x}_1 = (1000; 1000)^T$ a $\mathbf{x}_2 = (100; 100)^T$ a předpokládejme, že se souřadnice prvního vektoru změní na $\mathbf{x}'_1 = (1002; 1000)^T$. Jaká je Hammingova (manhattanská) a canberrská vzdálenost v obou případech a jaká je relativní změna vzdáleností, vyvolaná uvedenou modifikací?

$$d_H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = |1000 - 100| + |1000 - 100| = 900 + 900 = 1800$$
$$d_H(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}_2) = |1002 - 100| + |1000 - 100| = 902 + 900 = 1802$$

$$d_{CA}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{|1000-100|}{|1000|+|100|} + \frac{|1000-100|}{|1000|+|100|} = \frac{900}{1100} + \frac{900}{1100} = 1{,}6364$$
$$d_{CA}(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}_2) = \frac{|1002-100|}{|1002|+|100|} + \frac{|1000-100|}{|1000|+|100|} = \frac{902}{1102} + \frac{900}{1100} = 1{,}6367$$

Relativní změny vzdáleností, určující citlivost té které metriky, které jsou způsobeny změnou hodnoty první souřadnice, jsou:

$$\Delta d_H = \frac{|d_H(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) - d_H(\mathbf{x'}_1,\mathbf{x}_2)|}{d_H(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)} = \frac{|1800-1802|}{1800} = \frac{2}{1800} = 0{,}0011$$
$$\Delta d_{CA} = \frac{|d_{CA}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) - d_{CA}(\mathbf{x'}_1,\mathbf{x}_2)|}{d_{CA}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)} = \frac{|1{,}6364-1{,}6367|}{1{,}6364} = 0{,}00018$$

Ze získaných výsledků je zřejmé, že citlivost canberrské metriky je v tomto případě řádově nižší.

Nelineární metrika

$$\rho_N(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) = \begin{cases} 0 & \text{když } \rho_E(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) < D \\ H & \text{když } \rho_E(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) \geq D \end{cases}$$

- kde D je prahová hodnota a H je nějaká konstanta
- i když existují doporučení, jak volit obě hodnoty na základě statistických vlastností vektorového prostoru (např. pomocí $\mathrm{H} = \frac{\Gamma(n/2)}{D^n\sqrt{\pi^n}}$), výhodnější je volit obě hodnoty na základě expertní analýzy řešeného problému

- ve vztahu může figurovat jakákoliv metrika vzdálenosti, nejen Euklidova metrika

Typy metrik a konkrétní příklady

MEZI DVĚMA OBJEKTY

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvantitativními proměnnými

Euklidova m., Hammingova (manhattanská) m., Minkovského m., Čebyševova m., Mahalanobisova m., Canberrská m.

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvalitativními proměnnými

Hammingova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvantitativními proměnnými

Skalární součin, m. kosinové podobnosti, Pearsonův korelační koeficient, Tanimotova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvalitativními proměnnými

Tanimotova m., Jaccardův-Tanimotův a.k., Russelův-Raovův a.k., Sokalův-Michenerův a.k., Dicův k., Rogersův-Tanimotův k., Hamanův k.

MEZI DVĚMA SKUPINAMI OBJEKTŮ

Deterministické metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů

Metoda nejbližšího souseda, *k* nejbližších sousedů, nejvzdálenějšího souseda, centroidová metoda, m. průměrné vazby, Wardova metoda

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů používající jejich pravděpodobnostní charakteristiky

Chernoffova m., Bhattacharyyova m. atd.

Příklad

Předpokládejme, že množina F obsahuje symboly {0, 1, 2}, tj. $k = 3$ a vektory **x** a **y** jsou následující 6-prvkové vektory (tj. $p = 6$):

$\mathbf{x} = (0, 1, 2, 1, 2, 1)^T$
$\mathbf{y} = (1, 0, 2, 1, 0, 1)^T$

Spočtěte vzdálenost obou vektorů.

Kontingenční matice **A**(**x**,**y**) je:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Součet hodnot všech prvků matice **A**(**x**,**y**) je roven délce *p* obou vektorů, tj. v našem případě:

$$\sum_{i=0}^{2}\sum_{j=0}^{2} a_{ij} = 6$$

Hammingova metrika vzdálenosti

$$D_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=0}^{k-1}\sum_{\substack{j=0\\ i\neq j}}^{k-1} a_{ij}$$

- definována počtem pozic, v nichž se oba vektory liší
- tzn. je dána součtem všech prvků matice **A**, které leží mimo hlavní diagonálu.

Příklad:

x = (0, 1, 2, 1, 2, 1)^T
y = (1, 0, 2, 1, 0, 1)^T

↓

liší se ve 3 souřadnicích

↓

$d_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 3$

$$\mathbf{A}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

↓

3 prvky mimo diagonálu

↓

$d_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 3$

Hammingova metrika vzdálenosti

- pro *k* = 2, kdy jsou hodnoty obou vektorů binární, se definiční vztah Hammingovy vzdálenosti transformuje na:

$$D_{HQB}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{p}(x_i + y_i - 2x_i y_i)$$

kde třetí člen v závorce kompenzuje případ, kdy jsou hodnoty x_i i y_i rovny jedné a součet prvních členů v závorce je tím pádem roven dvěma, nicméně nastává shoda hodnot, která k celkové vzdálenosti nemůže přispět.

- protože x_i a y_i nabývají hodnot pouze 0 a 1, můžeme také psát:

$$D_{HQB}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{p}(x_i^2 + y_i^2 - 2x_i y_i) = \sum_{i=1}^{p}(x_i - y_i)^2$$

- díky speciálnímu případu hodnot x_i a y_i je možná i nejjednodušší forma:

$$D_{HQB}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{p}\left|x_i - y_i\right|$$

Hammingova metrika vzdálenosti – příklad 2

Určete Hammingovu vzdálenost binárních vektorů
x = (0, 1, 1, 0, 1)^T a
y = (1, 0, 0, 0, 1)^T.

Podle definičního principu (tzn. počet pozic, ve kterých se oba vektory liší):

$$d_{HQB}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 3$$

Dle jiného vztahu: $d_{HQB}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{p}(x_i + y_i - 2x_i y_i) =$

$$= (0+1-2\cdot 0\cdot 1) + (1+0-2\cdot 1\cdot 0) + (1+0-2\cdot 1\cdot 0) + (0+0-2\cdot 0\cdot 0) + (1+1-2\cdot 1\cdot 1) = 3$$

Dle dalšího vztahu: $d_{HQB}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{p}(x_i - y_i)^2 =$

$$= (0-1)^2 + (1-0)^2 + (1-0)^2 + (0-0)^2 + (1-1)^2 = 1+1+1+0+0 = 3$$

Dle posledního vztahu: $d_{HQB}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{p}\left|x_i - y_i\right| =$

$$= |0-1| + |1-0| + |1-0| + |0-0| + |1-1| =$$

$$= 1+1+1+0+0 = 3$$

Hammingova metrika vzdálenosti

V případě bipolárních vektorů, kdy jednotlivé složky vektorů nabývají hodnot +1 a -1, je Hammingova vzdálenost určena vztahem:

$$D_{HQP}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{\left(p - \sum_{i=1}^{p} x_i y_i\right)}{2}$$

Příklad 3:

Určete Hammingovu vzdálenost bipolárních vektorů
x = (1, 1, 1, -1, 1)^T a
y = (1, -1, 1, -1, -1)^T.

Podle definičního principu (tzn. počet pozic, ve kterých se liší): $d_{HQP}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 2$

Z kontingenční matice (součet prvků mimo hlavní diagonálu): $\mathbf{A}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

Pomocí vztahu:

$$d_{HQP}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{5-\left((1\cdot 1)+(1\cdot(-1))+(1\cdot 1)+((-1)\cdot(-1))+(1\cdot(-1))\right)}{2} = \frac{5-(1-1+1+1-1)}{2} = \frac{5-1}{2} = 2$$

Metriky pro určení podobnosti mezi dvěma objekty

Typy metrik a konkrétní příklady

MEZI DVĚMA OBJEKTY

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvantitativními proměnnými
Euklidova m., Hammingova (manhattanská) m., Minkovského m., Čebyševova m., Mahalanobisova m., Canberrská m.

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvalitativními proměnnými
Hammingova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvantitativními proměnnými
Skalární součin, m. kosinové podobnosti, Pearsonův korelační koeficient, Tanimotova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvalitativními proměnnými
Tanimotova m., Jaccardův-Tanimotův a.k., Russelův-Raovův a.k., Sokalův-Michenerův a.k., Dicův k., Rogersův-Tanimotův k., Hamanův k.

MEZI DVĚMA SKUPINAMI OBJEKTŮ

Deterministické metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů
Metoda nejbližšího souseda, *k* nejbližších sousedů, nejvzdálenějšího souseda, centroidová metoda, m. průměrné vazby, Wardova metoda

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů používající jejich pravděpodobnostní charakteristiky
Chernoffova m., Bhattacharyyova m. atd.

Skalární součin

$$S_{ss}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \mathbf{x}_1^T . \mathbf{x}_2 = \sum_{i=1}^{n} x_{1i} x_{2i}$$

Většinou pro vektory $\mathbf{x}_1$ a $\mathbf{x}_2$ o stejné délce (např. *a*); záleží na úhlu, který svírají:

úhel 0°
$S_{ss} = a^2$

úhel 90°
$S_{ss} = 0$

úhel 180°
$S_{ss} = -a^2$

- skalární součin invariantní vůči rotaci – absolutní orientace nepodstatná, důležitý pouze úhel
- skalární součin není invariantní vůči lineární transformaci (tzn. závisí na délce vektorů)

odvození metriky vzdálenosti:

$$D_{ss}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = a^2 - S_{ss}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$$

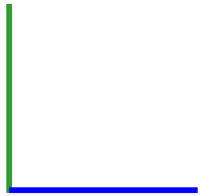
Metrika kosinové podobnosti

$$S_{\cos}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{\mathbf{x}_1^T . \mathbf{x}_2}{\|\mathbf{x}_1\| . \|\mathbf{x}_2\|}$$

kde $\|x_i\|$ je norma (délka) vektoru $\mathbf{x}_i$
= skalární součin vektorů o jednotkové délce

- vhodná v případě, pokud je informativní pouze relativní hodnota příznaků
- hodnoty $\sigma_{cos}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ jsou rovny kosinu úhlu mezi oběma vektory

úhel 0°
$S_{cos} = 1$



úhel 90°
$S_{cos} = 0$

úhel 180°
$S_{cos} = -1$

Pearsonův korelační koeficient

Pearsonův korelační koeficient

$$S_{PC}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{\mathbf{x}_{d1}^T . \mathbf{x}_{d2}}{\left\| \mathbf{x}_{d1} \right\| . \left\| \mathbf{x}_{d2} \right\|}$$

Metrika kosinové podobnosti

$$S_{\cos}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{\mathbf{x}_1^T . \mathbf{x}_2}{\left\| \mathbf{x}_1 \right\| . \left\| \mathbf{x}_2 \right\|}$$

kde $\mathbf{x}_{di} = \left(\mathrm{x}_{i1} - \bar{\mathrm{x}}_i, \mathrm{x}_{i2} - \bar{\mathrm{x}}_i, \dots, \mathrm{x}_{ip} - \bar{\mathrm{x}}_i \right)^T$

$\mathbf{x}_{di}$ jsou tzv. diferenční vektory

také nabývá hodnot z intervalu ⟨-1;1⟩

odvození metriky vzdálenosti:

$$D_{PC}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1 - S_{PC}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)}{2}$$

→ hodnoty se (díky dělení dvěma) vyskytují v intervalu ⟨0;1⟩
→ používá se např. při analýze dat genové exprese

Tanimotova metrika podobnosti

$$S_T(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) = \frac{\mathbf{x}_1^T\mathbf{x}_2}{\|\mathbf{x}_1\|^2 + \|\mathbf{x}_2\|^2 - \mathbf{x}_1^T\mathbf{x}_2}$$

Přičteme-li a odečteme-li ve jmenovateli výraz $\mathbf{x}_1^T\mathbf{x}_2$ a podělíme-li čitatele i jmenovatele zlomku toutéž hodnotou, dostaneme

$$S_T(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) = \frac{1}{1 + \frac{(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^T(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}{\mathbf{x}_1^T\mathbf{x}_2}}$$

Tanimotova podobnost vektorů $\mathbf{x}_1$ a $\mathbf{x}_2$ je nepřímo úměrná kvadrátu Euklidovy vzdálenosti vektorů $\mathbf{x}_1$ a $\mathbf{x}_2$ vztažené k jejich skalárnímu součinu. Pokud skalární součin považujeme za míru korelace obou vektorů, můžeme formulovat výše uvedený vztah tak, že $S_T(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$ je nepřímo úměrná kvadrátu Euklidovy vzdálenosti podělené velikostí jejich korelace, což znamená, že je korelaci, jako míře podobnosti přímo úměrná.

„Bezejmenná“ metrika podobnosti

$$S_C(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = 1 - \frac{D_E(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)}{\|\mathbf{x}_1\| + \|\mathbf{x}_2\|}$$

Vzdálenost podle metriky je rovna jedné,

když $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2$

a svého minima (tj. $S_C(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = -1$) nabývá,

když $\mathbf{x}_1 = -\mathbf{x}_2$.

Typy metrik a konkrétní příklady

MEZI DVĚMA OBJEKTY

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvantitativními proměnnými

Euklidova m., Hammingova (manhattanská) m., Minkovského m., Čebyševova m., Mahalanobisova m., Canberrská m.

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvalitativními proměnnými

Hammingova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvantitativními proměnnými

Skalární součin, m. kosinové podobnosti, Pearsonův korelační koeficient, Tanimotova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvalitativními proměnnými

Tanimotova m., Jaccardův-Tanimotův a.k., Russelův-Raovův a.k., Sokalův-Michenerův a.k., Dicův k., Rogersův-Tanimotův k., Hamanův k.

MEZI DVĚMA SKUPINAMI OBJEKTŮ

Deterministické metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů

Metoda nejbližšího souseda, *k* nejbližších sousedů, nejvzdálenějšího souseda, centroidová metoda, m. průměrné vazby, Wardova metoda

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů používající jejich pravděpodobnostní charakteristiky

Chernoffova m., Bhattacharyyova m. atd.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvalitativními prom.

1. případy obecné
2. případy s dichotomickými příznaky, pro které je definována celá řady tzv. ***asociačních koeficientů***.

    (Asociační koeficienty až na výjimky nabývají hodnot z intervalu ⟨0, 1⟩, hodnoty 1 v případě shody vektorů, 0 pro případ nepodobnosti.)

Obecné metriky – Hammingova metrika podobnosti

$$S_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = p - D_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y})$$

Příklad:

$\mathbf{x} = (0, 1, 2, 1, 2, 1)^T$
$\mathbf{y} = (1, 0, 2, 1, 0, 1)^T$

↓

liší se ve 3 souřadnicích

↓

$d_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 3$

↓

shoda ve 3 souřadnicích

↓

$s_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 6 - 3 = 3$

$$\mathbf{A}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

↓

3 prvky mimo diagonálu

↓

$d_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 3$

↓

součet prvků na diagonále roven 3

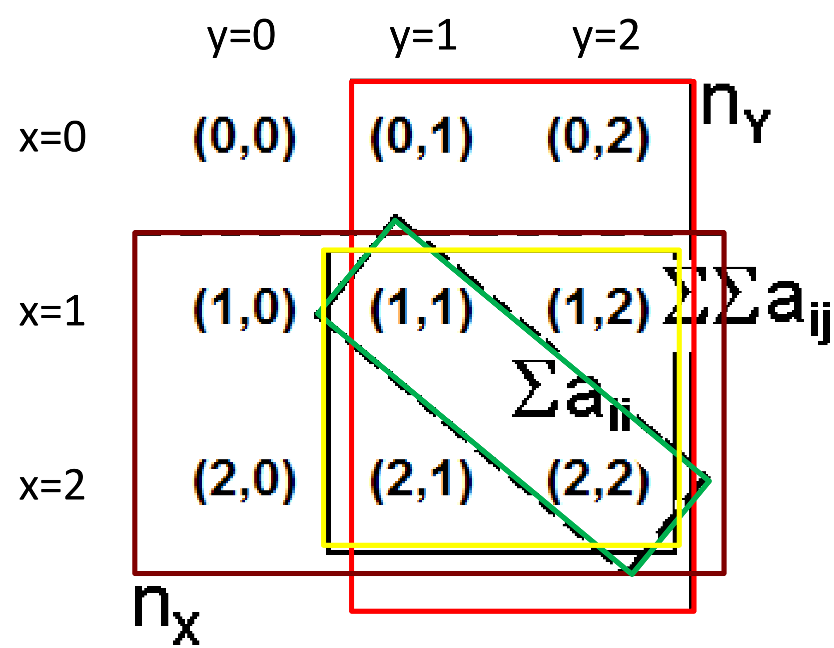
↓

$s_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 6 - 3 = 3$

Obecné metriky – Tanimotova metrika

$$S_{TQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{n_{\mathcal{X}\cap\mathcal{Y}}}{n_{\mathcal{X}} + n_{\mathcal{Y}} - n_{\mathcal{X}\cap\mathcal{Y}}} = \frac{\boxed{\sum_{i=1}^{k-1} a_{ii}}}{\boxed{n_x} + \boxed{n_y} - \boxed{\sum_{i=1}^{k-1}\sum_{j=1}^{k-1} a_{ij}}}$$

$$\boxed{n_x = \sum_{i=1}^{k-1}\sum_{j=0}^{k-1} a_{ij}} \qquad \boxed{n_y = \sum_{i=0}^{k-1}\sum_{j=1}^{k-1} a_{ij}}$$



Pro výpočet Tanimotovy podobnosti dvou vektorů s kvalitativními příznaky jsou použity všechny páry složek srovnávaných vektorů, kromě těch, jejichž hodnoty jsou obě nulové.

Obecné metriky – Tanimotova metrika – příklad

Určete hodnoty Tanimotových podobností $s_{TQ}(\mathbf{x},\mathbf{x})$, $s_{TQ}(\mathbf{x},\mathbf{y})$ a $s_{TQ}(\mathbf{x},\mathbf{z})$, když:

$\mathbf{x}$ = (0, 1, 2, 1, 2, 1)^T a

$\mathbf{y}$ = (1, 0, 2, 1, 0, 1)^T a

$\mathbf{z}$ = (2, 0, 0, 0, 0, 2)^T.

Ze zadání je množina symbolů F = {0, 1, 2}, k = 3, p = 6.

Kontingenční tabulky jsou:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x},\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{A}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{A}(\mathbf{x},\mathbf{z}) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$s_{TQ}(\mathbf{x},\mathbf{x}) = \frac{\boxed{5}}{\boxed{5}+\boxed{5}-\boxed{5}} = 1 \qquad s_{TQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{3}{5+4-3} = 0{,}5 \qquad s_{TQ}(\mathbf{x},\mathbf{z}) = \frac{0}{5+2-1} = 0$$

Další obecné metriky

- definovány pomocí různých prvků kontingenční matice **A**(**x**,**y**)

- některé z nich používají pouze počet shodných pozic v obou vektorech (ovšem s nenulovými hodnotami):

$$S_1(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{\sum_{i=1}^{k-1} a_{ii}}{p} \qquad S_2(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{\sum_{i=1}^{k-1} a_{ii}}{p - a_{00}}$$

- některé z nich používají i shodu s nulovými hodnotami:

$$S_3(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{\sum_{i=0}^{k-1} a_{ii}}{p}$$

Asociační koeficienty

		$\mathbf{x}_j$	
		false/0	true/1
$\mathbf{x}_i$	false/0	D	C
	true/1	B	A

A - u obou objektů sledovaný jev nastal (obě odpovídající si proměnné mají hodnotu true, resp.1) – ***pozitivní shoda***;

B - u objektu $\mathbf{x}_i$ jev nastal (x_{ik} = true), zatímco u objektu $\mathbf{x}_j$ nikoliv (x_{jk} = false, resp.0);

C - u objektu $\mathbf{x}_i$ jev nenastal (x_{ik} = false), zatímco u objektu $\mathbf{x}_j$ ano (x_{jk} = true);

D - sledovaný jev nenastal ani u jednoho z objektů (obě odpovídající si proměnné mají hodnotu false, resp. 0) – ***negativní shoda***.

Při výpočtu podobnosti dvou objektů sledujeme, kolikrát pro všechny souřadnice obou vektorů $\mathbf{x}_j$ a $\mathbf{x}_j$ nastaly případy shody či neshody:

- A+D určuje celkový počet shod
- B+C celkový počet neshod
- A+B+C+D = *p* (tj. celk. počet souřadnic obou vektorů – tzn. počet proměnných)

Jaccardův – Tanimotův asociační koeficient

$$S_{JT}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{A}{A+B+C}$$

		$\mathbf{x}_j$	
		false/0	true/1
$\mathbf{x}_i$	false/0	D	C
	true/1	B	A

což je díky zjednodušení i dichotomická varianta metriky podle vztahu:

$$S_{TQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{\boxed{\sum_{i=1}^{k-1} a_{ii}}}{\boxed{n_x} + \boxed{n_y} - \boxed{\sum_{i=1}^{k-1}\sum_{i=1}^{k-1} a_{ij}}}$$

Tento vztah se dominantně používá v ekologických studiích.

Další asociační koeficienty I

		$\mathbf{x}_j$	
		false/0	true/1
$\mathbf{x}_i$	false/0	D	C
	true/1	B	A

Russelův – Raoův asociační koeficient

$$S_{RR}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{A}{A+B+C+D}$$

dichotomická varianta metriky:

$$S_1(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{\sum_{i=1}^{k-1} a_{ii}}{p}$$

Sokalův – Michenerův asociační koeficient

$$S_{SM}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{A+D}{A+B+C+D}$$

dichotomická varianta metriky:

$$S_3(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{\sum_{i=0}^{k-1} a_{ii}}{p}$$

Další asociační koeficienty II

		$\mathbf{x}_j$	
		false/0	true/1
$\mathbf{x}_i$	false/0	D	C
	true/1	B	A

Diceův (Czekanowského) asociační koeficient

$$S_{DC}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{2A}{2A+B+C} = \frac{2A}{(A+B)+(A+C)}$$

V případě Jaccardova a Diceova koeficientu pokud nastane úplná negativní shoda (tzn. A = B = C =0), pak často: $S_{JT}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = S_{DC}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 1$.

Rogersův – Tanimotův asociační koeficient

$$S_{RT}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{A+D}{A+D+2\cdot(B+C)} = \frac{A+D}{(B+C)+(A+B+C+D)}$$

Hamanův asociační koeficient

$$S_{HA}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{A+D-(B+C)}{A+B+C+D}$$

nabývá na rozdíl od všech dříve uvedených koeficientů hodnot z intervalu $\langle -1, 1\rangle$. Hodnoty -1, pokud se příznaky pouze neshodují; hodnoty 0, když je počet shod a neshod v rovnováze; +1 v případě úplné shody všech příznaků

Asociační koeficienty – poznámka

		$\mathbf{x}_j$	
		false/0	true/1
$\mathbf{x}_i$	false/0	D	C
	true/1	B	A

Na základě četností A až D lze pro případ binárních příznaků vytvářet i zajímavé vztahy pro již dříve uvedené míry:

Hammingova metrika

$$D_H(\mathbf{x},\mathbf{y}) = B + C$$

Euklidova metrika

$$D_H(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sqrt{B + C}$$

Pearsonův korelační koeficient

$$S_{PC}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{A \cdot D - B \cdot C}{\sqrt{(A+B)\cdot(C+D)\cdot(A+C)\cdot(B+D)}}$$

Výpočet vzdáleností z asociačních koeficientů

Z asociačních koeficientů, které vyjadřují míru podobnosti, lze jednoduše odvodit i míry nepodobnosti (vzdálenosti) pomocí:

$$D_X(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 1 - S_X(\mathbf{x}, \mathbf{y})$$

Výpočet vzdáleností v Matlabu

Funkce:

- pdist (vzdálenost mezi páry objektů matice X či páry proměnných matice X^T)
- pdist2 (vzdálenost mezi maticemi X a Y)

Výběr metrik vzdáleností u obou těchto funkcí:

- ‘euclidean’ – Euklidova metrika vzdálenosti
- ‘squaredeuclidean’ – čtverec Euklidovy metriky vzdálenosti
- ‘seuclidean’ – standardizovaná Euklidova metrika vzdálenosti
- ‘cityblock’ – Hammingova (manhattanská) metrika vzdálenosti
- ‘minkowski’ – Minkovského metrika vzdálenosti
- ‘chebychev’ – Čebyševova metrika vzdálenosti
- ‘mahalanobis’ – Mahalanobisova metrika vzdálenosti
- ‘cosine’ – 1 mínus kosinová podobnost
- ‘correlation’ – 1 mínus Pearsonův korelační koeficient
- ‘spearman’ – 1 mínus Spearmanův korelační koeficient
- ‘hamming’ – Hamminova vzdálenost (pro kvalitativní proměnné)
- ‘jaccard’ – 1 mínus Jaccardův koeficient
- lze případně nadefinovat i jinou metriku

Metriky pro určení vzdálenosti mezi dvěma skupinami objektů

Vzdálenost mezi skupinami objektů

- vzdálenost mezi skupinami dána:
  - „vzdáleností“ jednoho objektu s jedním či více objekty jedné skupiny (třídy) – použitelné při klasifikaci
  - „vzdáleností“ skupin (třídy, shluku) objektů či „vzdáleností“ jednoho objektu z každé skupiny – použitelné při shlukování

- zavedeme funkci, která ke každé dvojici skupin objektů ($\mathcal{C}_i$, $\mathcal{C}_j$) přiřazuje číslo D($\mathcal{C}_i$, $\mathcal{C}_j$), které podobně jako míry podobnosti či nepodobnosti (metriky) jednotlivých objektů musí splňovat minimálně podmínky:

(S1) $D(\mathcal{C}_i, \mathcal{C}_j) \geq 0$

(S2) $D(\mathcal{C}_i, \mathcal{C}_j) = D(\mathcal{C}_j, \mathcal{C}_i)$

(S3) $D(\mathcal{C}_i, \mathcal{C}_i) = \max_{i,j} D(\mathcal{C}_i, \mathcal{C}_j)$ (pro míry podobnosti)

(S3’) $D(\mathcal{C}_i, \mathcal{C}_i) = 0$ pro všechna i (pro míry vzdálenosti)

Typy metrik a konkrétní příklady

MEZI DVĚMA OBJEKTY

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvantitativními proměnnými

Euklidova m., Hammingova (manhattanská) m., Minkovského m., Čebyševova m., Mahalanobisova m., Canberrská m.

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvalitativními proměnnými

Hammingova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvantitativními proměnnými

Skalární součin, m. kosinové podobnosti, Pearsonův korelační koeficient, Tanimotova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvalitativními proměnnými

Tanimotova m., Jaccardův-Tanimotův a.k., Russelův-Raovův a.k., Sokalův-Michenerův a.k., Dicův k., Rogersův-Tanimotův k., Hamanův k.

MEZI DVĚMA SKUPINAMI OBJEKTŮ

Deterministické metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů

Metoda nejbližšího souseda, *k* nejbližších sousedů, nejvzdálenějšího souseda, centroidová metoda, m. průměrné vazby, Wardova metoda

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů používající jejich pravděpodobnostní charakteristiky

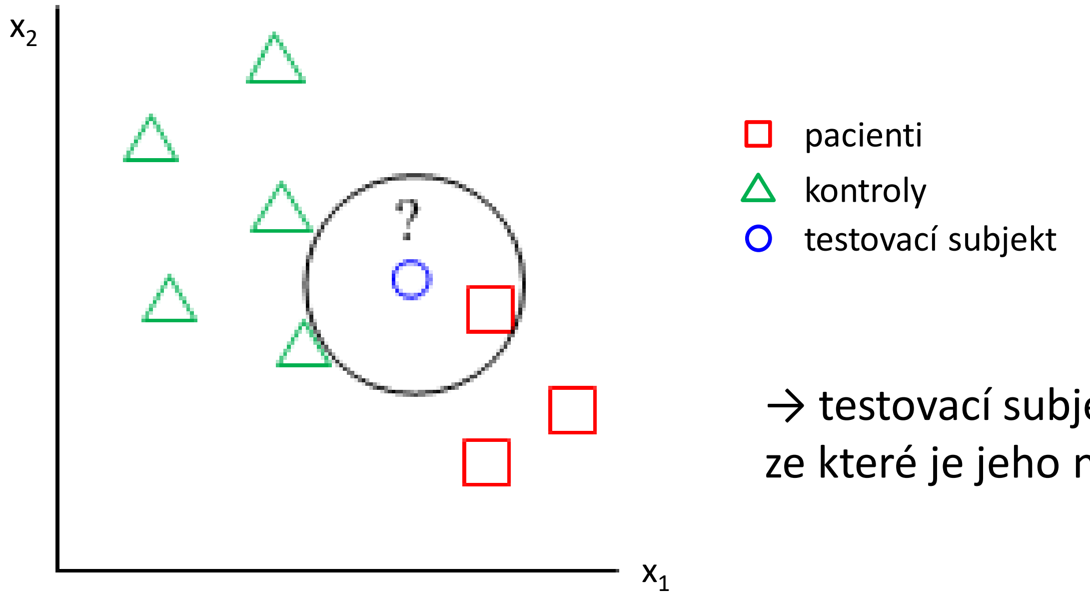
Chernoffova m., Bhattacharyyova m. atd.

Nejpoužívanější metriky pro určení vzdálenosti mezi dvěma množinami objektů

- Metoda nejbližšího souseda
- Metoda *k* nejbližších sousedů
- Metoda nejvzdálenějšího souseda
- Metoda průměrné vazby
- Wardova metoda

Metoda nejbližšího souseda

- je-li *d* libovolná míra nepodobnosti (vzdálenosti) dvou objektů a ω_i a ω_j jsou libovolné skupiny objektů, potom metoda nejbližšího souseda definuje mezi skupinami ω_i a ω_j vzdálenost $D_{NN}(\omega_i,\omega_j)=\min_{\substack{x_p\in\omega_i \\ x_q\in\omega_j}} d(x_p,x_q)$

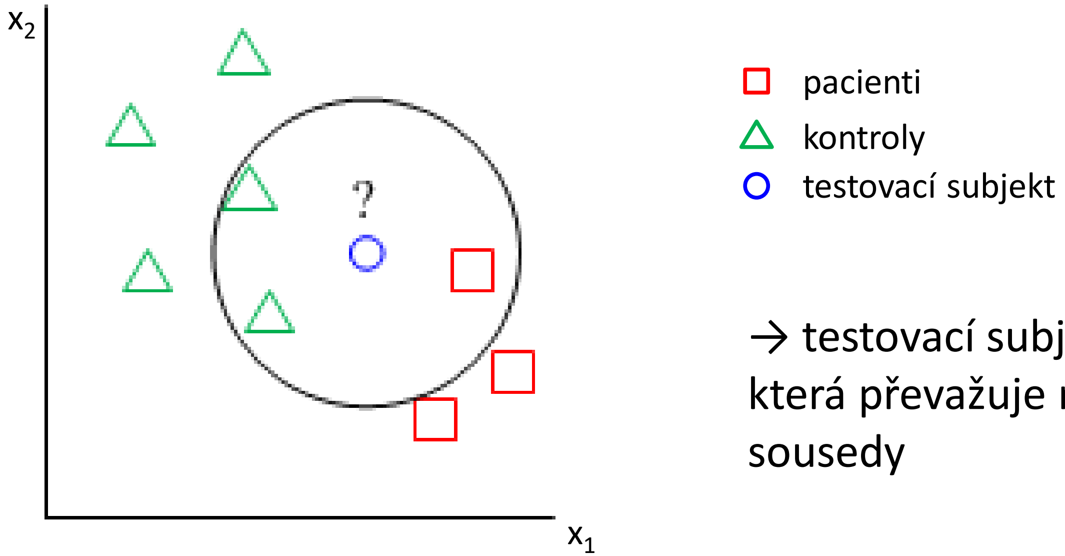


→ testovací subjekt zařadíme do třídy, ze které je jeho nejbližší soused

- výhody a nevýhody použití této metody pro klasifikaci:
  + žádné předpoklady o rozložení
  - citlivé na odlehlé hodnoty
  - zpravidla nevhodné při nevyvážených počtech objektů ve skupinách

Metoda *k* nejbližších sousedů

- zobecněním metody nebližšího souseda
- definována vztahem $D_{NNk}(\omega_i, \omega_j) = \min_{\substack{x_p \in \omega_i \\ x_q \in \omega_j}} \sum^{k} d(x_p, x_q)$, tzn. vzdálenost dvou shluků je definována součtem nejkratších vzdáleností mezi objekty obou skupin



→ testovací subjekt zařadíme do třídy, která převažuje mezi jeho *k* nejbližšími sousedy

- výhody a nevýhody použití této metody pro klasifikaci:
  + žádné předpoklady o rozložení
  + méně citlivé na odlehlé hodnoty
  - zpravidla nevhodné při nevyvážených počtech objektů ve skupinách

Metoda nejvzdálenějšího souseda

- opačný princip než metoda nejbližšího souseda: $D_{FN}(C_i, C_i) = \max\limits_{\substack{x_p \in C_i \\ x_q \in C_j}} d(x_p, x_q)$

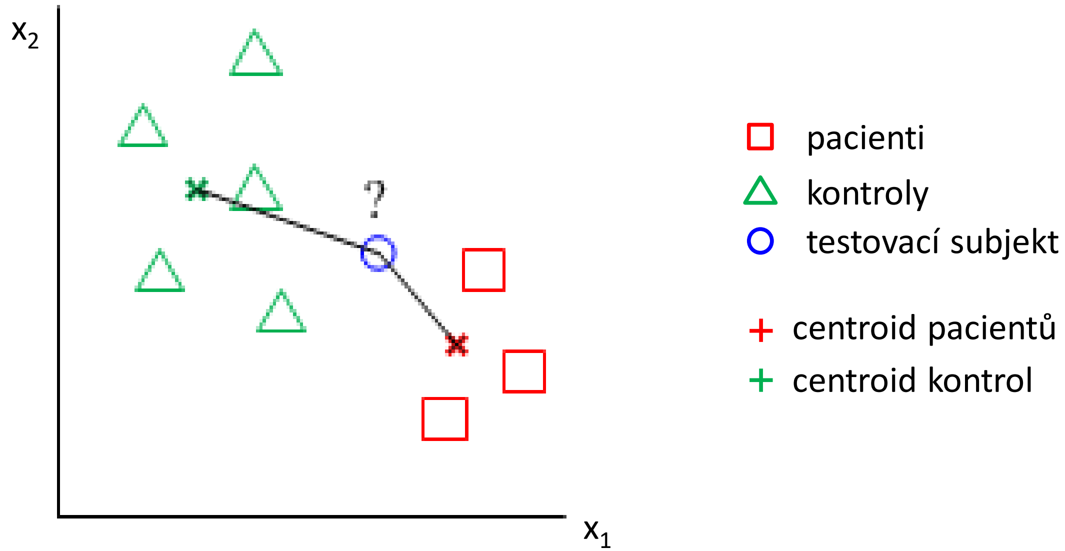
- pozn.: pro klasifikaci je obtížně použitelná

- pozn. 2: je možné zobecnění i pro více nejvzdálenějších sousedů

$$D_{FNk}(C_i, C_i) = \max_{\substack{x_p \in C_i \\ x_q \in C_j}} \sum^{k} d(x_p, x_q),$$

Centroidová metoda

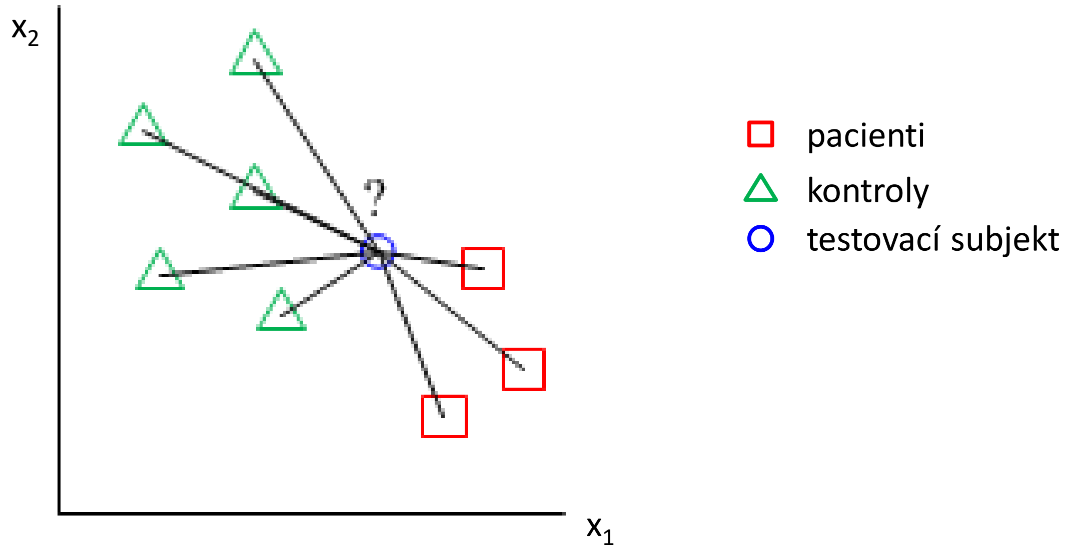
- vychází z výpočtu centroidů pro jednotlivé skupiny
- při klasifikaci: zařazení objektu do skupiny s nejbližším centroidem



- výhody a nevýhody použití této metody pro klasifikaci:
  - + žádné předpoklady o rozložení (pokud je však centroid počítán jako vícerozměrný průměr, může nenormalita působit trochu problémy)
  - + méně citlivé na odlehlé hodnoty než metoda nejbližšího souseda
  - + nebývá problém při nevyvážených počtech objektů ve skupinách

Metoda průměrné vazby

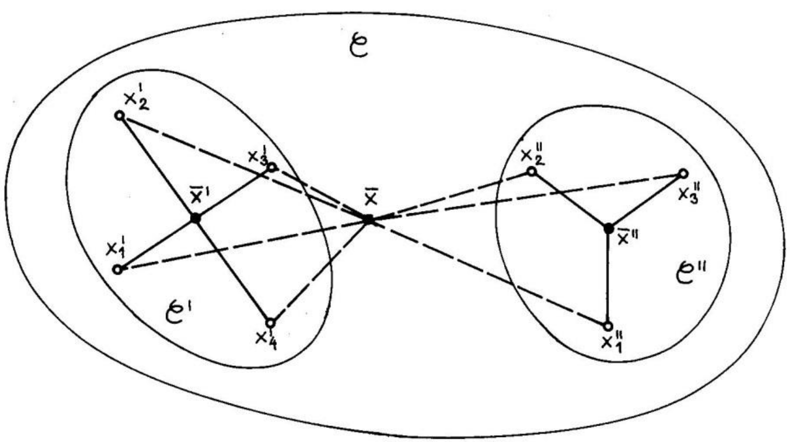
- vzdálenost dvou tříd je průměrná vzdálenost mezi všemi objekty těchto tříd
- při klasifikaci: zařazení subjektu do skupiny s nejmenší průměrnou vzdálenosti od všech objektů dané skupiny



- výhody a nevýhody použití této metody pro klasifikaci:
  + žádné předpoklady o rozložení
  + méně citlivé na odlehlé hodnoty než metoda nejbližšího souseda
  + nebývá problém při nevyvážených počtech objektů ve skupinách
  - časově náročnější než centroidová metoda při větším počtu objektů

Wardova metoda

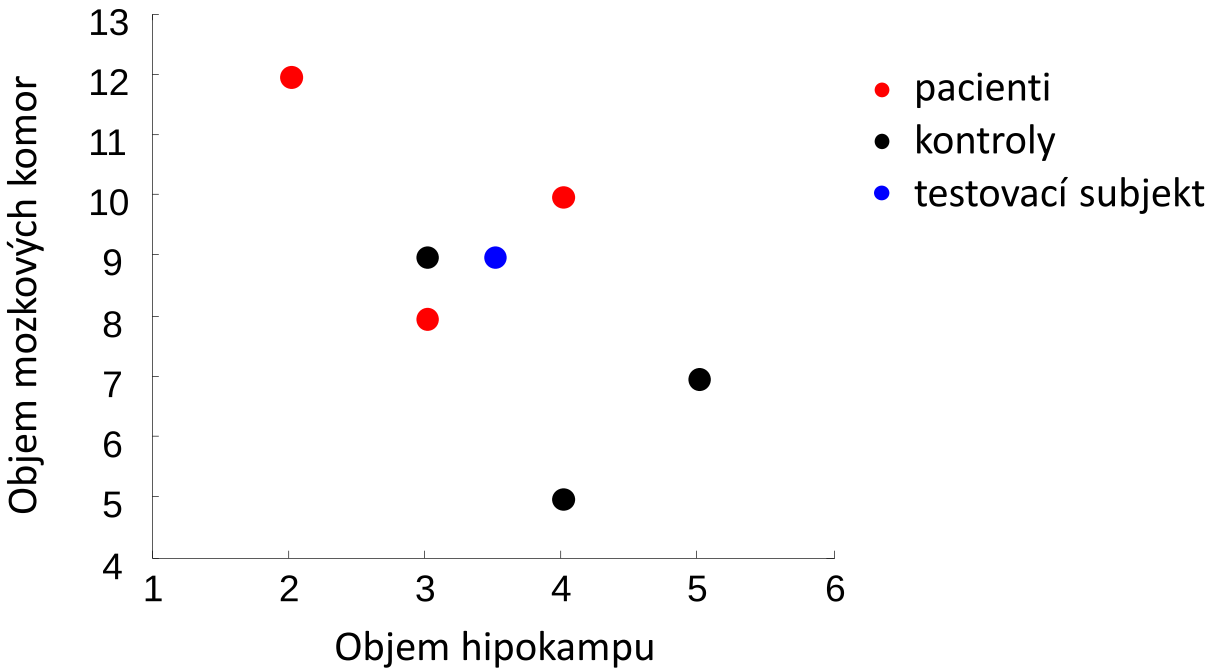
- vzdálenost mezi třídami (shluky) je definována přírůstkem součtu čtverců odchylek mezi těžištěm a objekty shluku vytvořeného z obou uvažovaných shluků C_i a C_j oproti součtu čtverců odchylek mezi objekty a těžišti v obou shlucích C_i a C_j.
- pozn. (při použití Wardovy metody pro shlukování): Metoda má tendenci vytvářet shluky zhruba stejné velikosti, tedy odstraňovat shluky malé, resp. velké.
- pozn. 2: pro klasifikaci se používá zřídka



Příklad 2

Bylo provedeno měření objemu hipokampu a mozkových komor (v cm^3) u 3 pacientů se schizofrenií a 3 kontrol: $\mathbf{X}_D = \begin{bmatrix} 2 & 12 \\ 4 & 10 \\ 3 & 8 \end{bmatrix}$, $\mathbf{X}_H = \begin{bmatrix} 5 & 7 \\ 3 & 9 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}$.

Určete, zda testovací subjekt $\mathbf{x} = [3{,}5 \quad 9]$ patří do skupiny pacientů či kontrolních subjektů pomocí různých metod klasifikace podle minimální vzdálenosti.



Typy metrik a konkrétní příklady

MEZI DVĚMA OBJEKTY

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvantitativními proměnnými

Euklidova m., Hammingova (manhattanská) m., Minkovského m., Čebyševova m., Mahalanobisova m., Canberrská m.

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvalitativními proměnnými

Hammingova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvantitativními proměnnými

Skalární součin, m. kosinové podobnosti, Pearsonův korelační koeficient, Tanimotova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvalitativními proměnnými

Tanimotova m., Jaccardův-Tanimotův a.k., Russelův-Raovův a.k., Sokalův-Michenerův a.k., Dicův k., Rogersův-Tanimotův k., Hamanův k.

MEZI DVĚMA SKUPINAMI OBJEKTŮ

Deterministické metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů

Metoda nejbližšího souseda, *k* nejbližších sousedů, nejvzdálenějšího souseda, centroidová metoda, m. průměrné vazby, Wardova metoda

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů používající jejich pravděpodobnostní charakteristiky

Chernoffova m., Bhattacharyyova m. atd.

Metriky založené na pstních charakteristikách

Klasifikační třídy (množiny objektů se společnými charakteristikami) nemusí být definovány jen výčtem objektů, ale i vymezením obecnějších vlastností:

- definicí hranic oddělujících část obrazového prostoru náležející dané klasifikační třídě
- diskriminační funkcí
- **pravděpodobnostními charakteristikami výskytu objektů v dané třídě**
- atd.

Metriky založené na pstních charakteristikách

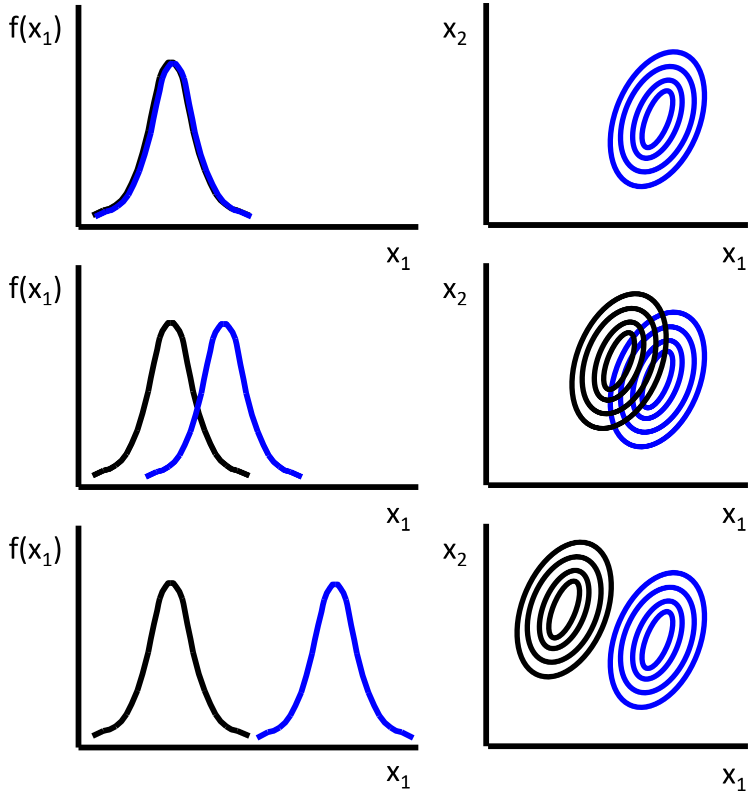
Základní myšlenkou je využití pravděpodobnosti způsobené chyby při klasifikaci (tzn. zařazení objektu do skupiny). Čím více se hustoty pravděpodobnosti výskytu objektů **x** v jednotlivých množinách překrývají, tím je větší pravděpodobnost chyby.

Tzn. tyto metriky splňují následující vlastnosti:

1. $J = 0$, pokud jsou hustoty pravděpodobnosti obou množin identické, tj. když $p(\mathbf{x}|\omega_1) = p(\mathbf{x}|\omega_2)$

2. $J > 0$

3. J nabývá maxima, pokud jsou obě množiny disjunktní, tj. když $\int_{-\infty}^{\infty} p(\mathbf{x}|\omega_1) \cdot p(\mathbf{x}|\omega_2) d\mathbf{x} = 0$



(Jak vidíme, není mezi vlastnostmi pravděpodobnostních metrik uvedena trojúhelníková nerovnost, jejíž splnění by se zajišťovalo obtížně.)

Typy metrik a konkrétní příklady

MEZI DVĚMA OBJEKTY

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvantitativními proměnnými

Euklidova m., Hammingova (manhattanská) m., Minkovského m., Čebyševova m., Mahalanobisova m., Canberrská m.

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvalitativními proměnnými

Hammingova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvantitativními proměnnými

Skalární součin, m. kosinové podobnosti, Pearsonův korelační koeficient, Tanimotova m.

Metriky pro určení podobnosti 2 objektů s kvalitativními proměnnými

Tanimotova m., Jaccardův-Tanimotův a.k., Russelův-Raovův a.k., Sokalův-Michenerův a.k., Dicův k., Rogersův-Tanimotův k., Hamanův k.

MEZI DVĚMA SKUPINAMI OBJEKTŮ

Deterministické metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů

Metoda nejbližšího souseda, *k* nejbližších sousedů, nejvzdálenějšího souseda, centroidová metoda, m. průměrné vazby, Wardova metoda

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů používající jejich pravděpodobnostní charakteristiky

Chernoffova m., Bhattacharyyova m. atd.

Příprava nových učebních materiálů pro obor Matematická biologie

je podporována projektem OPVK

č. CZ.1.07/2.2.00/28.0043

„Interdisciplinární rozvoj studijního oboru Matematická biologie“

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ