Pokročilé metody analýzy dat v neurovědách

RNDr. Eva Koriťáková, Ph.D.
doc. RNDr. Ladislav Dušek, Dr.

Blok 3

Podobnosti a vzdálenosti ve vícerozměrném prostoru

Osnova

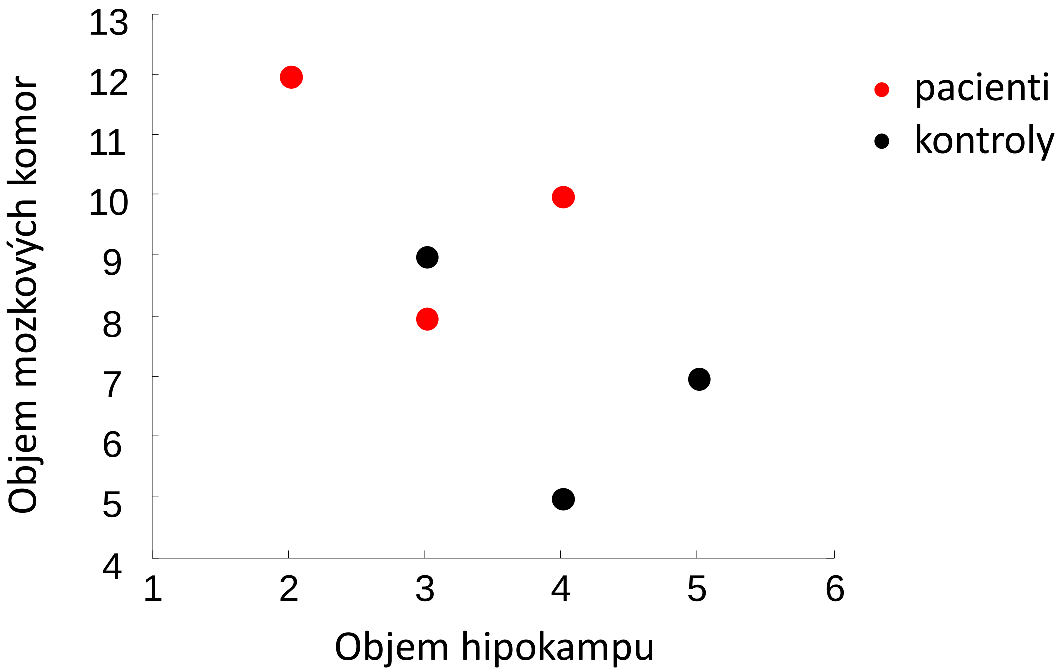
1. Úvod do metrik podobností a vzdáleností
2. Metriky pro určení vzdálenosti mezi dvěma objekty
3. Metriky pro určení podobnosti mezi dvěma objekty
4. Metriky pro určení vzdálenosti mezi dvěma skupinami objektů
5. Asociační matice

Úvod do metrik podobností a vzdáleností

Poznámka

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

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



Metriky podobnosti vs. metriky vzdálenosti

- **Metriky vzdálenosti** objektu $\mathbf{x}_1$ od objektu $\mathbf{x}_2$ – označení: $D(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$
- pozn.: vzdálenost objektu od sebe samého je 0 – tzn. $D(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_1)=0$

- **Metriky podobnosti** objektu $\mathbf{x}_1$ od objektu $\mathbf{x}_2$ – označení: $S(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$
- pozn.: podobnost objektu od sebe samého je maximální hodnota podobnosti pro danou metriku (zpravidla hodnota 1, ale neplatí to vždy)

- Metriky vzdálenosti mohou být různými transformacemi převedeny na metriky podobnosti (a obráceně), např.:

$$S(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) = 1/\ D(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$$

$$S(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) = 1/(1+ D(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j))$$

$$S(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) = c - D(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j),\ c \geq \max D(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j),\ \forall i,j$$

Typy měr vzdálenosti (podobnosti)

- podle **typu proměnné** (kvalitativní proměnné, kvantitativní proměnné)
- podle **objektů**, jejichž vztah hodnotíme – obrazy (vektory), množiny obrazů (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.

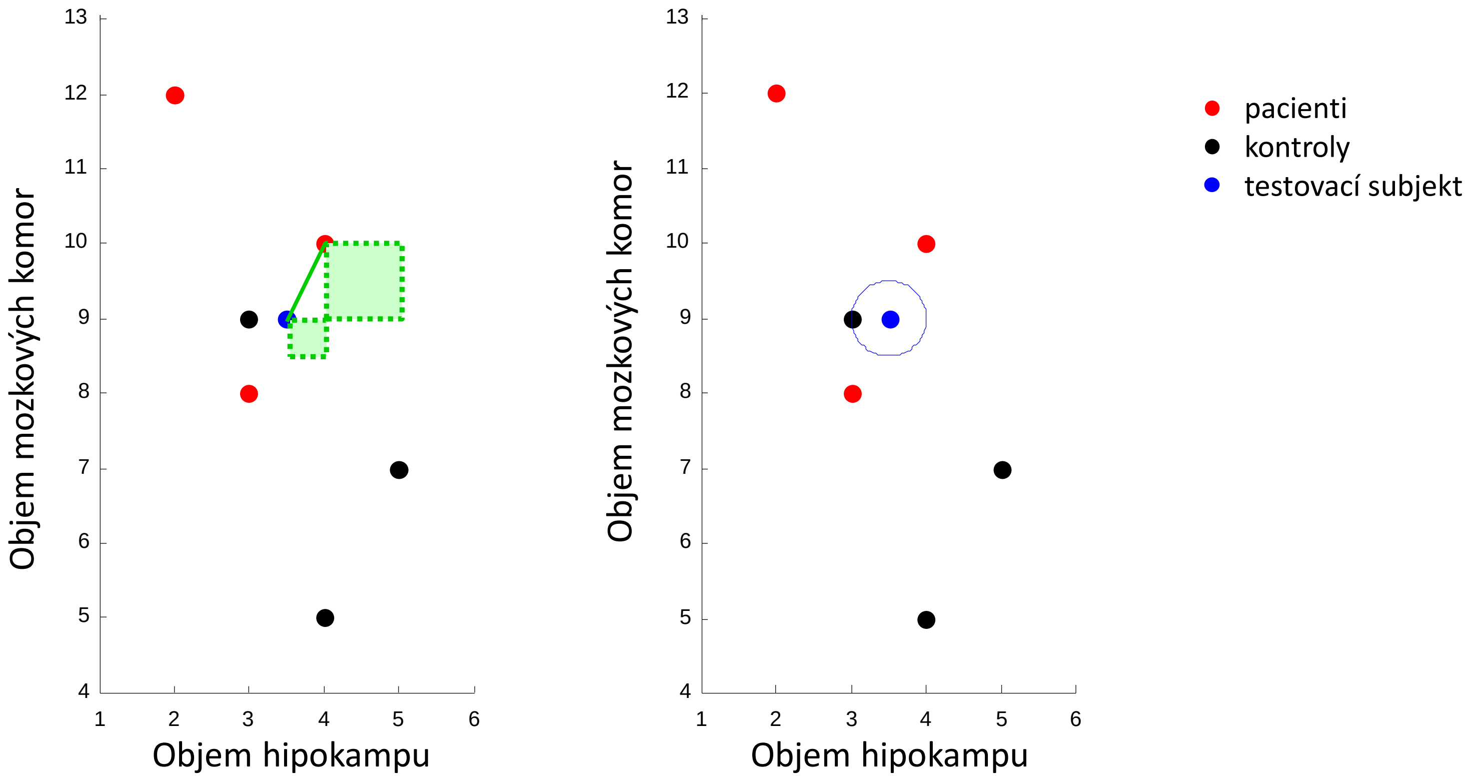
Nejpoužívanější metriky pro určení vzdálenosti mezi dvěma obrazy s kvantitativními proměnnými

- 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

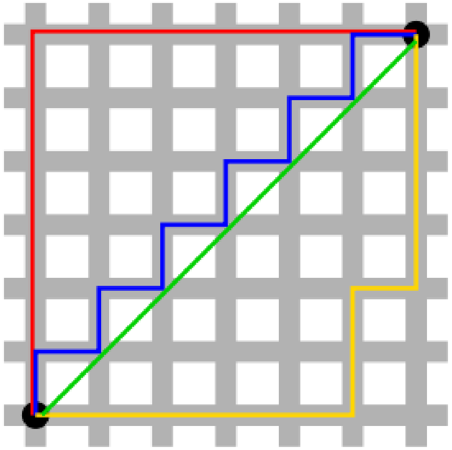
žádoucí nebo nežádoucí?

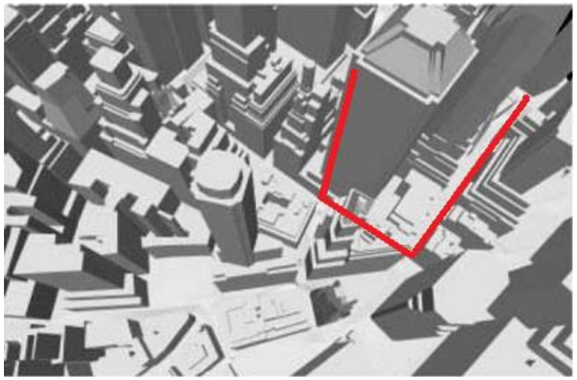
- občas se používá čtverec euklidovské vzdálenosti, protože se lépe počítá než euklidovská vzdálenost (není to ale pravá metrika vzdálenosti)

Hammingova (manhattanská) metrika

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

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

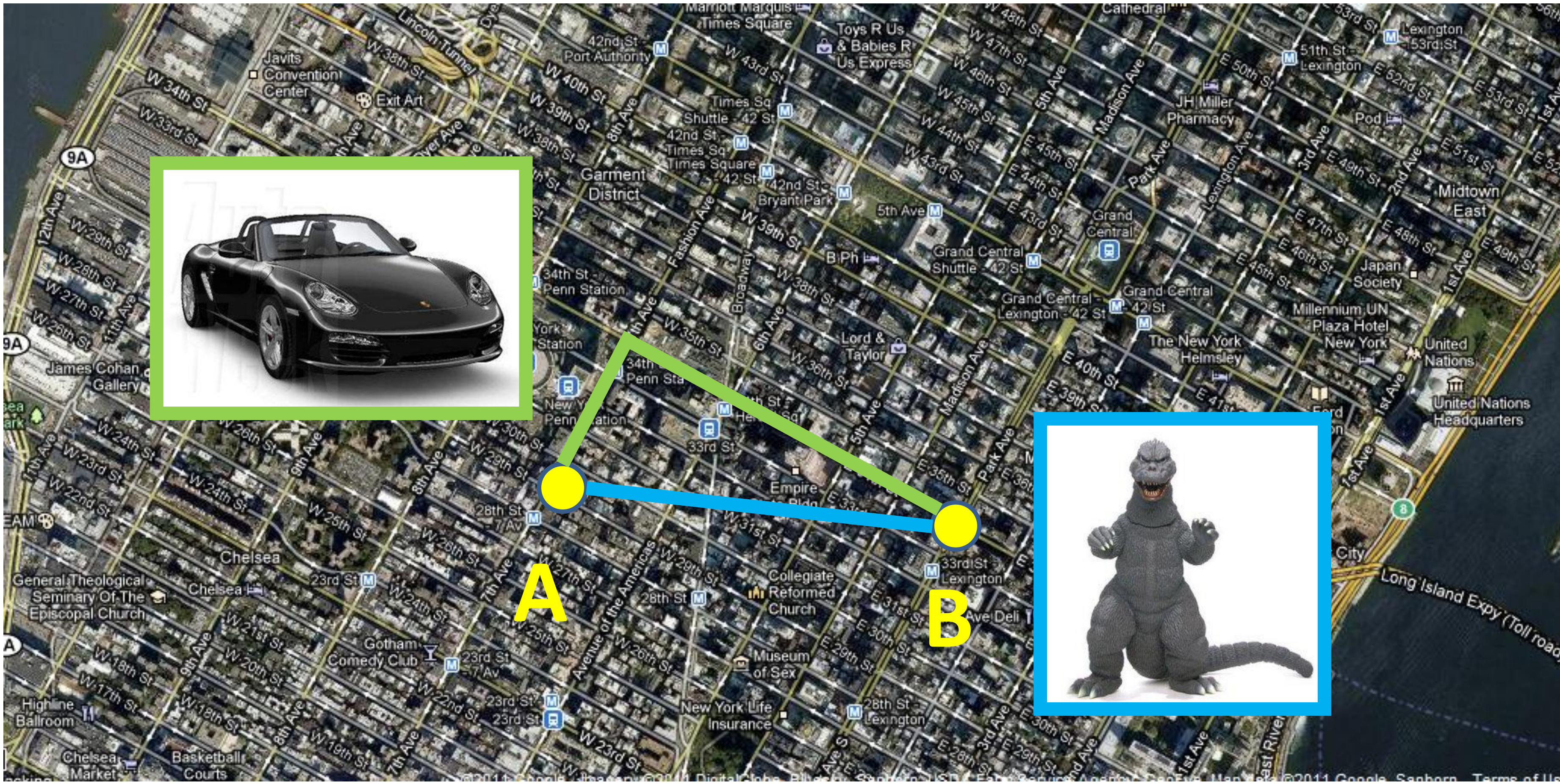




- nižší výpočetní nároky než Euklidova metrika → použití v úlohách s vysokou výpočetní náročností

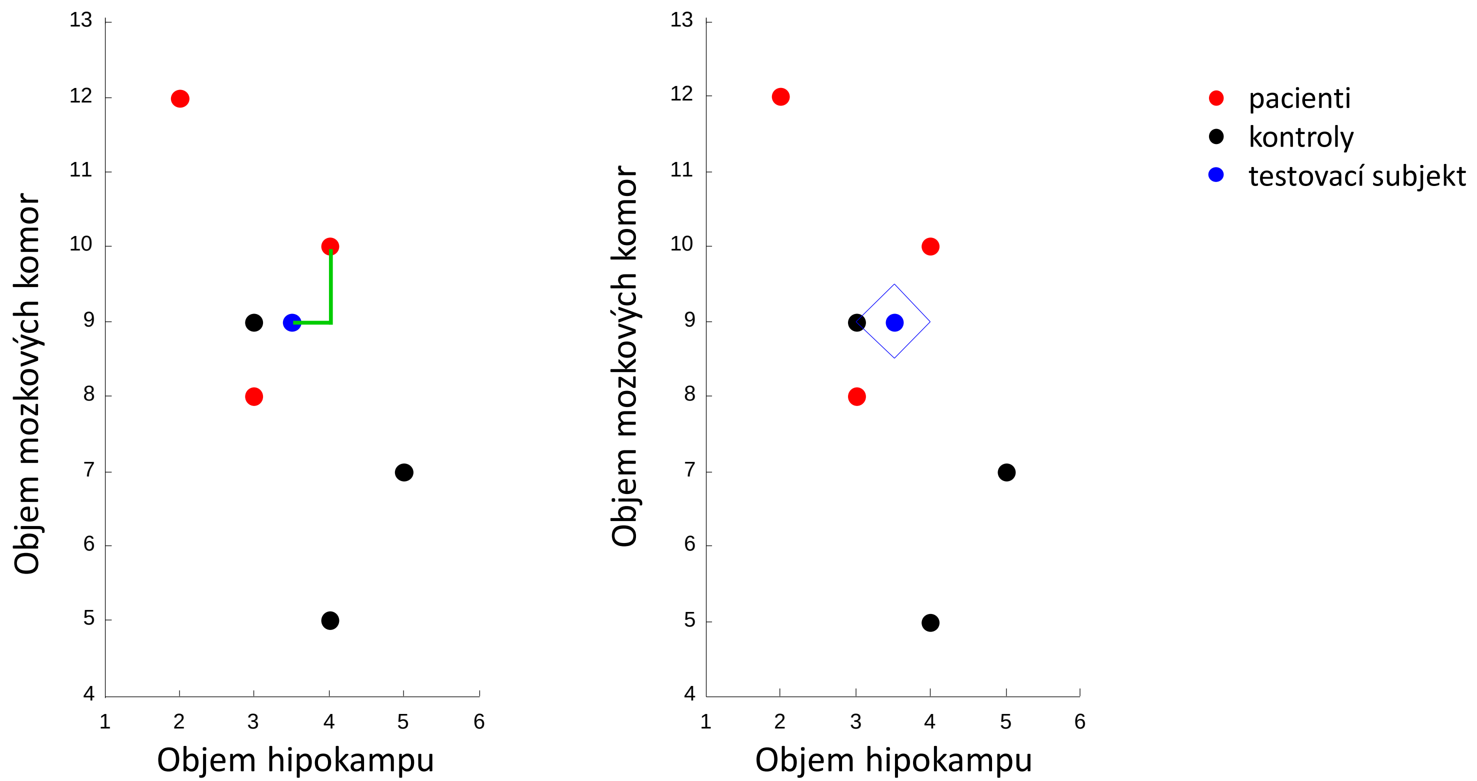
Hammingova (manhattanská) metrika

- srovnání Hammingovy (manhattanské) metriky a Euklidovy metriky



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)

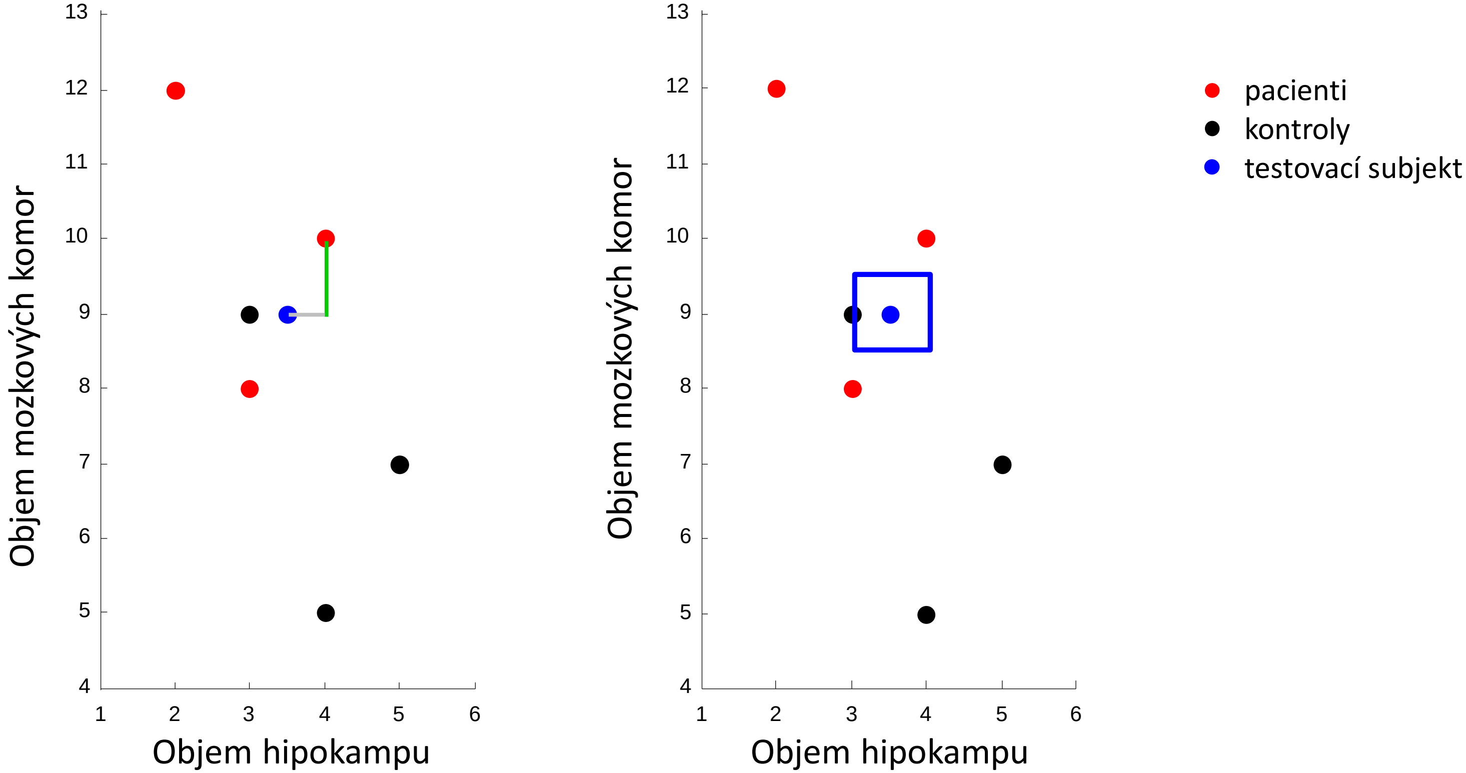
- pro $m \to \infty$ metrika konverguje k **Čebyševově metrice**

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

Čebyševova metrika

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

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



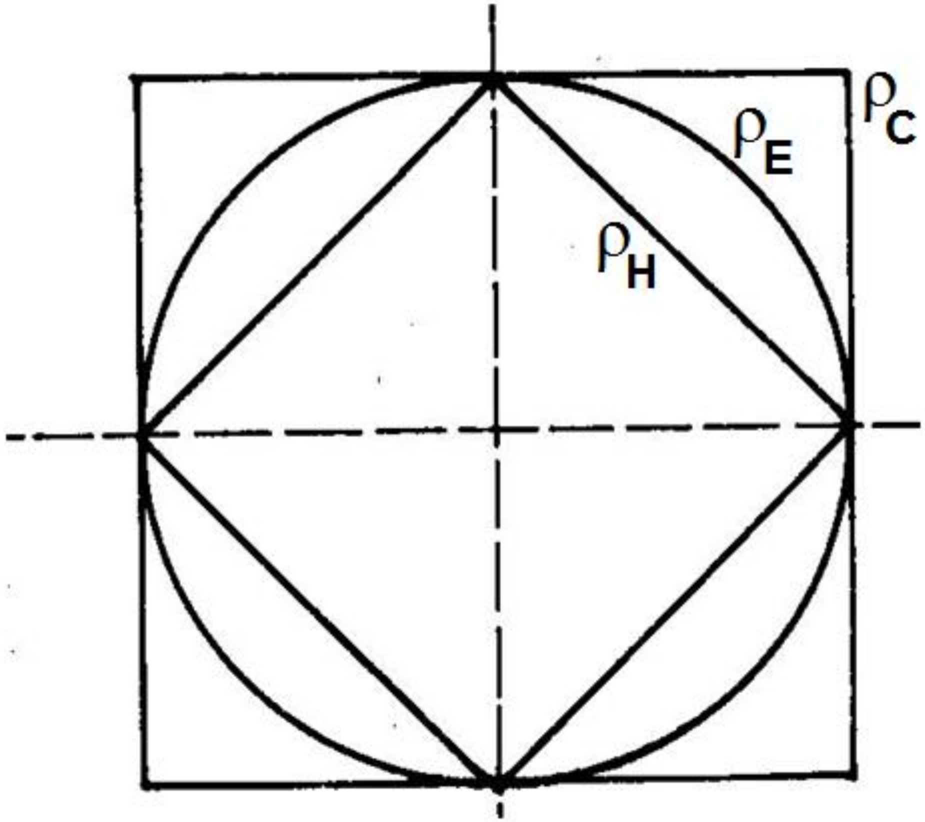
Čebyševova metrika

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

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

- 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

Canberrská metrika

- relativizovaná varianta Hammingovy (manhattanské) metriky

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

- je 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 obrazy nacházejí v blízkosti počátku souřadnicové soustavy; naopak méně citlivá na změny hodnot proměnných, pokud jsou tyto hodnoty velké

Nevýhody metrik

- je nesmyslné vytvářet součet rozdílů veličin s různým fyzikálním rozměrem, a tudíž často s velmi rozdílným 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): $D_{MA}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sqrt{(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^T \cdot \mathbf{S}^{-1} \cdot (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}$

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
- obě hodnoty se zpravidla volí 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:

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

↓

liší se ve 3 souřadnicích

↓

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

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

↓

3 prvky mimo diagonálu

↓

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

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

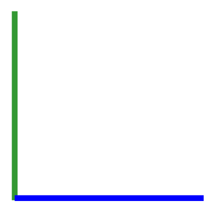
$$S_{\cos}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{\mathbf{x}_1^T . \mathbf{x}_2}{\|\mathbf{x}_1\| . \|\mathbf{x}_2\|}$$

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

$\mathbf{x}_{di}$ 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

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 $\langle 0, 1 \rangle$, 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:

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

↓

lliší 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

↓

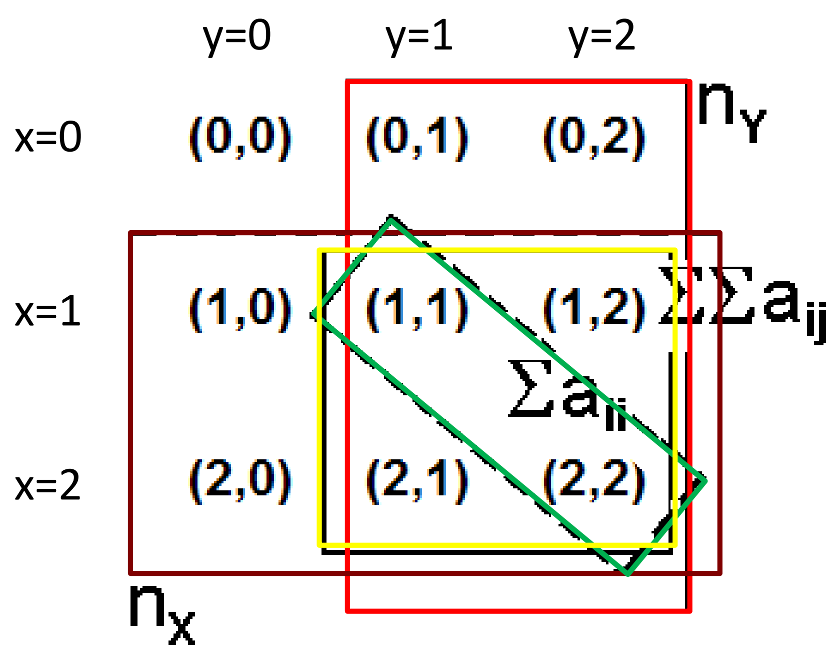
$s_{HQ}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 6 - 3 = 3$

Obecné metriky – Tanimotova metrika

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

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

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



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 <u>true</u>, resp.1) – ***pozitivní shoda***;

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

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

D - sledovaný jev nenastal ani u jednoho z objektů (obě odpovídající si proměnné mají hodnotu <u>false</u>, 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 ⟨-1, 1⟩. 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 vzdálenost
- ‘squaredeuclidean’ – čtverec Euklidovy vzdálenosti
- ‘seuclidean’ – standardizovaná Euklidova vzdálenost
- ‘cityblock’ – Hammingova (manhattanská) vzdálenost
- ‘minkowski’ – Minkovského vzdálenost
- ‘chebychev’ – Čebyševova vzdálenost
- ‘mahalanobis’ – Mahalanobisova vzdálenost
- ‘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

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.

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) obrazů či „vzdáleností“ jednoho obrazu z každé skupiny – použitelné při shlukování

- jednotlivé deterministické metriky pro určení vzdálenosti mezi dvěma množinami objektů si probereme v rámci shlukové analýzy na příští přednášce

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

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

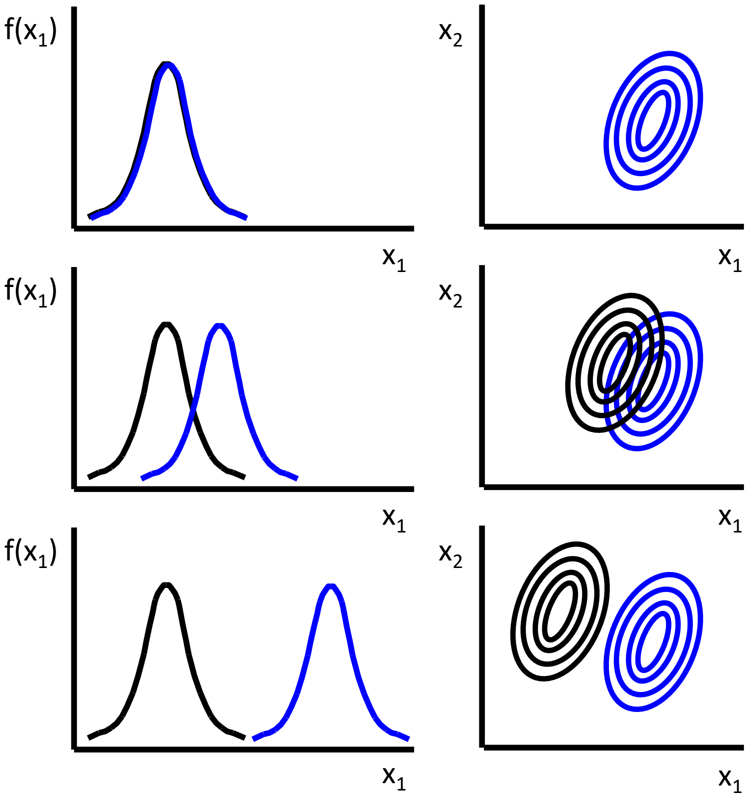
Tzn. tyto metriky splňují následující vlastnosti:

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

2. $J > 0$

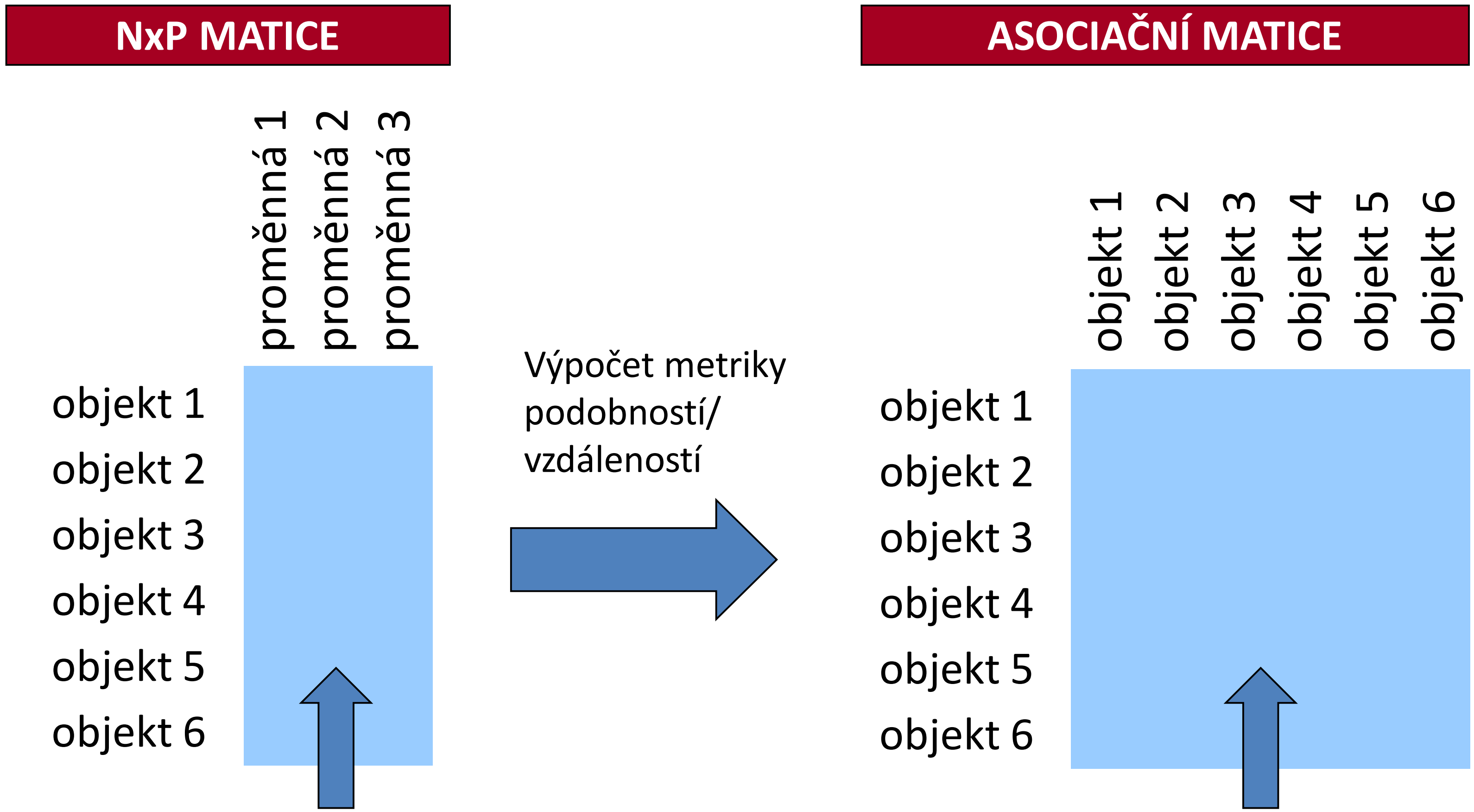
3. J nabývá maxima, pokud jsou obě množiny disjunktní, tj. když

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(\mathbf{x}|\omega_1) \cdot p(\mathbf{x}|\omega_2) d\mathbf{x} = 0$$



Asociační matice

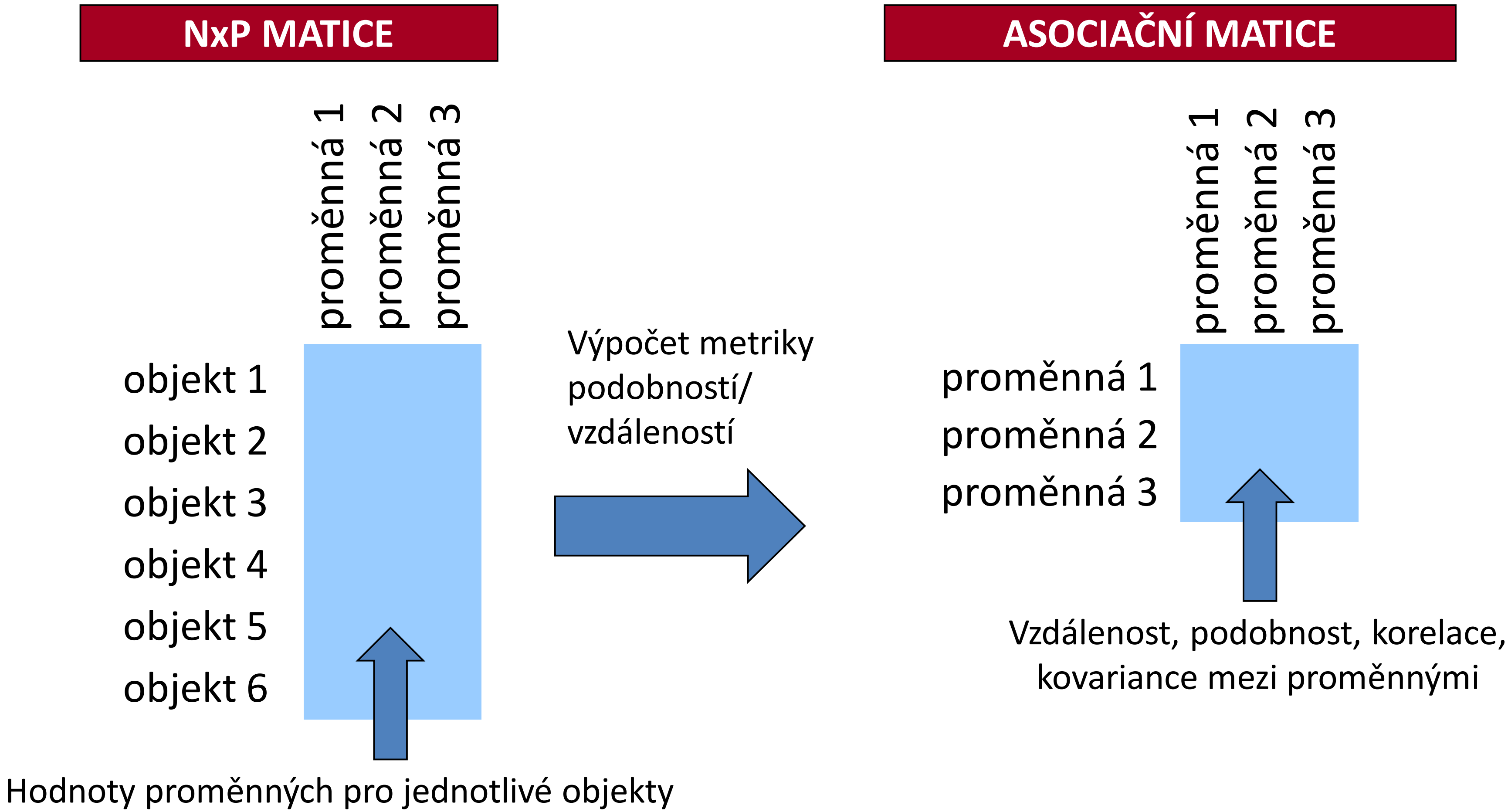
Asociační matice – Q mode analýza



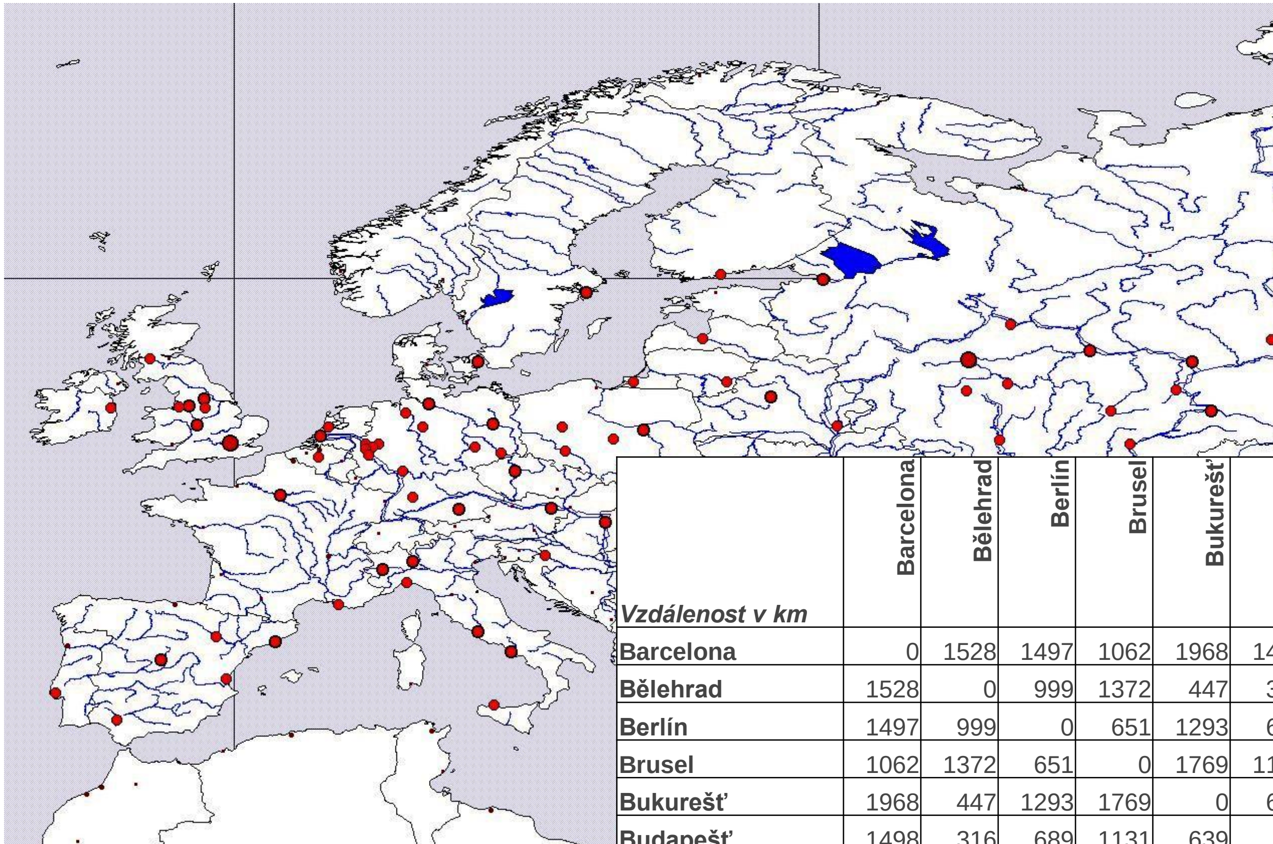
Hodnoty proměnných pro jednotlivé objekty

Vzdálenost, podobnost, korelace, kovariance mezi objekty

Asociační matice – R mode analýza



Asociační matice – ukázka



Vzdálenost měst v mapě není ničím jiným než maticí vzdálenosti v 2D prostoru

Vzdálenost v km	Barcelona	Bělehrad	Berlín	Brusel	Bukurešť	Budapešť	Kodaň	Dublin	Hamburg	Istanbul	Kiev	Londýn	Madrid
Barcelona	0	1528	1497	1062	1968	1498	1757	1469	1471	2230	2391	1137	504
Bělehrad	1528	0	999	1372	447	316	1327	2145	1229	809	976	1688	2026
Berlín	1497	999	0	651	1293	689	354	1315	254	1735	1204	929	1867
Brusel	1062	1372	651	0	1769	1131	766	773	489	2178	1836	318	1314
Bukurešť	1968	447	1293	1769	0	639	1571	2534	1544	445	744	2088	2469
Budapešť	1498	316	689	1131	639	0	1011	1894	927	1064	894	1450	1975
Kodaň	1757	1327	354	766	1571	1011	0	1238	287	2017	1326	955	2071
Dublin	1469	2145	1315	773	2534	1894	1238	0	1073	2950	2513	462	1449
Hamburg	1471	1229	254	489	1544	927	287	1073	0	1983	1440	720	1785
Istanbul	2230	809	1735	2178	445	1064	2017	2950	1983	0	1052	2496	2734
Kiev	2391	976	1204	1836	744	894	1326	2513	1440	1052	0	2131	2859
Londýn	1137	1688	929	318	2088	1450	955	462	720	2496	2131	0	1263
Madrid	504	2026	1867	1314	2469	1975	2071	1449	1785	2734	2859	1263	0

Asociační matice – shrnutí

- Typická asociační matice je čtvercová matice
- Typická asociační matice je symetrická kolem diagonály
  - Ve speciálních případech existují i asymetrické asociační matice
- Diagonála obsahuje:
  - 0 (v případě vzdáleností)
  - identitu objektu se sebou samým (v případě podobnosti, obvykle 1 nebo 100%)
- Asociační matice může být spočtena mezi objekty (Q mode analýza) nebo mezi proměnnými (R mode analýza)
- Asociační matice mohou být jak vstupem do vícerozměrných analýz, tak vstupem pro klasické jednorozměrné statistické výpočty, kdy základní jednotkou není jeden objekt, ale podobnost/vzdálenost dvojice objektů

Poděkování

Příprava výukových materiálů předmětu
„DSAN02 Pokročilé metody analýzy dat v neurovědách“
byla finančně podporována prostředky projektu FRMU
č. MUNI/FR/0260/2014 „Pokročilé metody analýzy dat
v neurovědách jako nový předmět na LF MU“