Pokročilé metody analýzy dat v neurovědách

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

Blok 7

Klasifikace dat I

Osnova

1. Úvod do klasifikace dat
2. Klasifikace pomocí diskriminačních funkcí:
   - lineární diskriminační funkce
   - Bayesův klasifikátor
3. Klasifikace pomocí minimální vzdálenosti
4. Klasifikace pomocí hranic:
   - Fisherova lineární diskriminační analýza

Úvod do klasifikace dat

Schéma analýzy a klasifikace dat

Data

↓

Předzpracování

↓

Redukce

↓

Klasifikace

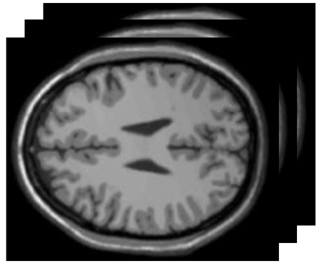
Ukázka - kognitivní data apod.

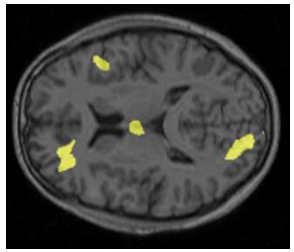
	A	B	C	D	E
1	id	vek	pohlavi	vyska	vaha
2	1	38	Z	164	45
3	2	36	M		90
4	3	26	Z	178	70

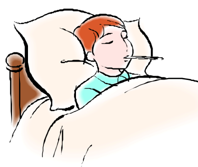
	A	B	C	D	E
1	id	vek	pohlavi	vyska	vaha
2	1	38	Z	164	45
3	2	36	M	167	90
4	3	26	Z	178	70

	A	B	C	D	E
1	id	vek	pohlavi	vyska	vaha
2	1	38	Z	164	45
3	2	36	M	167	90
4	3	26	Z	178	70

Ukázka - obrazová data



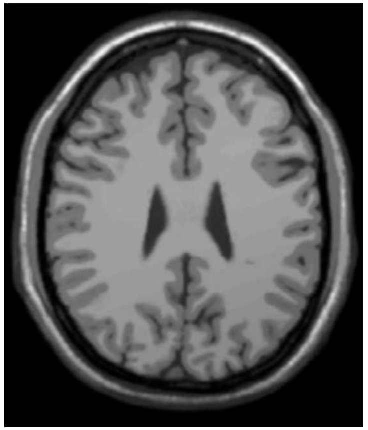


 ? nebo  ?

Proč používat klasifikaci dat?

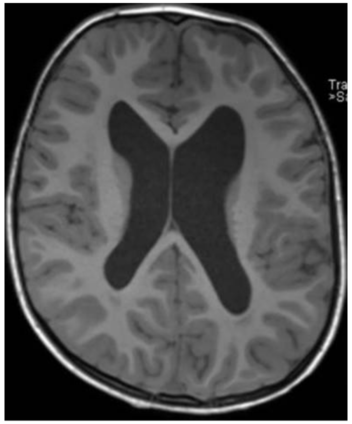
1. Podpora diagnostiky onemocnění mozku (Alzheimerova choroba, schizofrenie atd.):

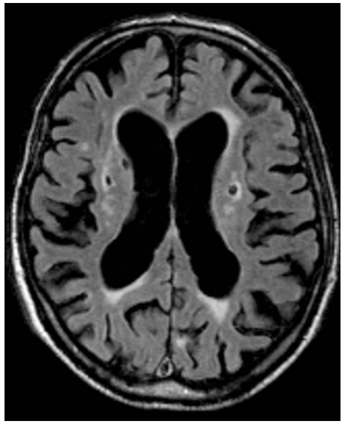
Zdravé subjekty



Nový subjekt

Pacienti



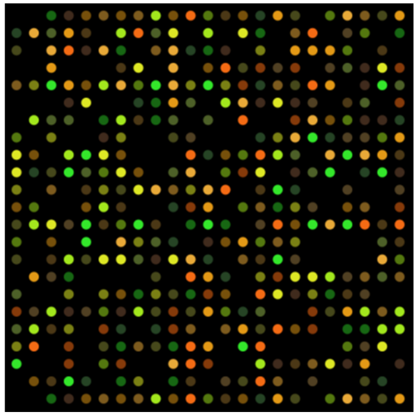


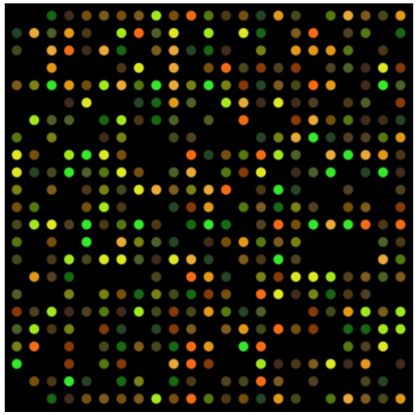
Pacient? x Zdravý?

Proč používat klasifikaci dat?

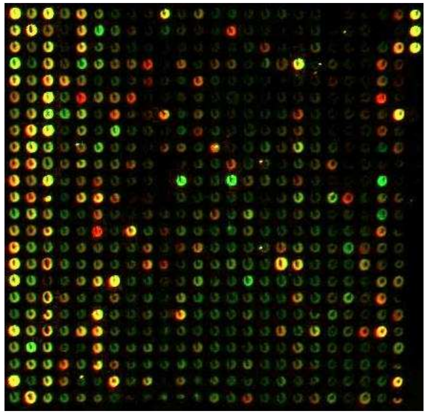
2. Odhalení genetického onemocnění na základě dat s microarray experimentů:

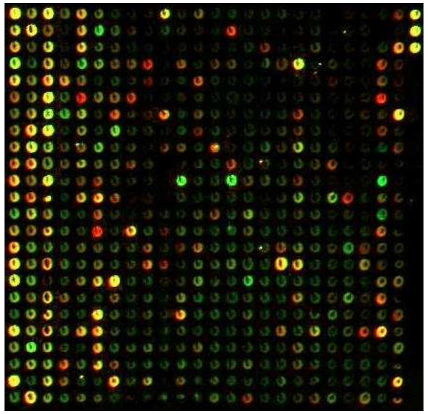
Zdravé subjekty



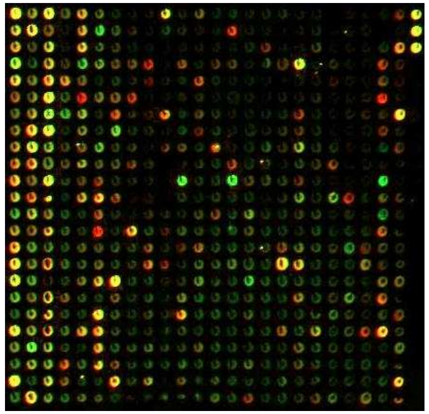


Pacienti





Nový subjekt



Pacient? x Zdravý?

Proč používat klasifikaci dat?

3. Zjištění demence a dalších onemocnění na základě kognitivních testů:

Demence ano? x Demence ne?

Proč používat klasifikaci dat?

4. Rozpoznání hmyzu:

Nejedovaté housenky

Jedovaté housenky

?

Jedovatá nebo nejedovatá housenka?

Proč používat klasifikaci dat?

5. Rozpoznání vadných výrobků:

Matičky bez vady

?

Matičky s vnitřní prasklinou

Matička bez vady nebo s vnitřní prasklinou?

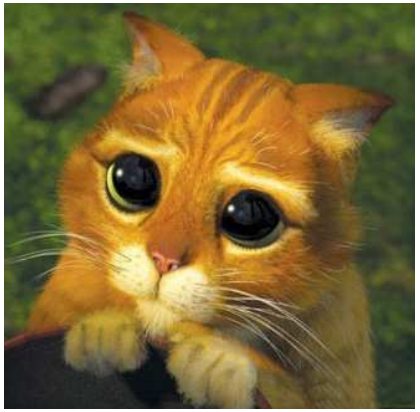
Proč používat klasifikaci dat?

6. Rozpoznání tváře při vstupu do zabezpečené budovy:

Nemá přístup do budovy

?

Má přístup do budovy



Dostane se do budovy: ano? x ne?

Cíle klasifikace dat - shrnutí

- **rozhodnutí o typu či charakteru objektu** – např. že daný člověk může vstoupit do budovy či nikoliv, že zvíře je medvěd hnědý nebo medvěd lední apod. – ***klasifikační,*** resp. ***rozpoznávací úloha***;
- **posouzení kvality stavu analyzovaného objektu** – např. zda je pacient v pořádku, nebo má infarkt myokardu, cirhózu jater, apod. – opět ***klasifikační,*** resp. ***rozpoznávací úloha***;
- **rozhodnutí o budoucnosti objektu** – např. zda lze pacienta léčit a vyléčit, zda les po 20 letech odumře, jaké bude sociální složení obyvatelstva na daném území a v daném čase – ***klasifikační,*** *resp.* ***predikční úloha***

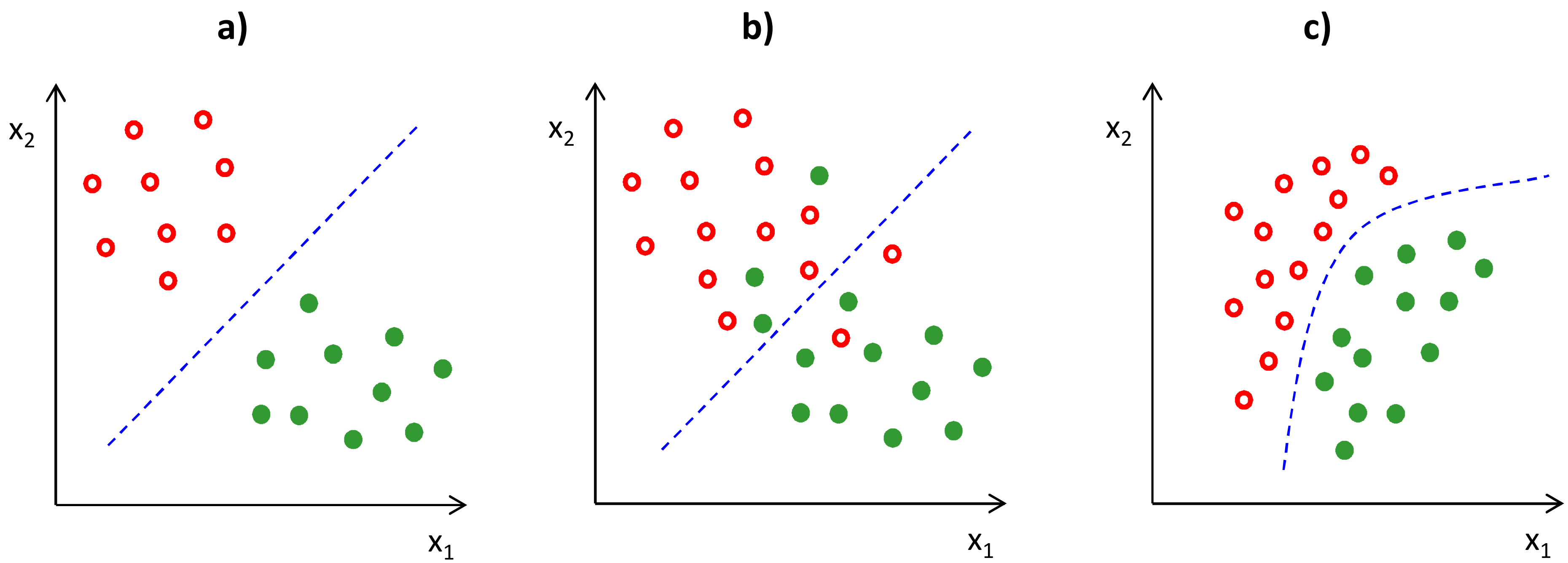
- poznámka: v některých oblastech se pojem predikce a klasifikace rozlišuje:
  – pojem ***klasifikace*** je používán, použije-li se klasifikačního algoritmu pro známá data; pokud jsou data nová, pro která apriori neznáme klasifikační třídu, pak hovoříme o ***predikci*** klasifikační třídy
  – pojem ***klasifikace*** používáme, pokud vybíráme identifikátor klasifikační třídy z určitého diskrétního konečného počtu možných identifikátorů; pokud určujeme (predikujeme) spojitou hodnotu, např. pomocí regrese, pak hovoříme o ***predikci***, i když tento pojem nemá časovou dimenzi

Klasifikace versus diskriminační analýza

- **klasifikace –** rozdělení (konkrétní či teoretické) dané skupiny (množiny) objektů na konečný počet dílčích skupin (podmnožin), v nichž všechny objekty mají dostatečně podobné společné vlastnosti. Předměty (jevy), které mají podobné uvažované vlastnosti tvoří třídu (skupinu).
- **diskriminační analýza –** hledá vztah mezi kategoriální proměnnou a množinou vzájemně vázaných proměnných; je to podskupina klasifikačních metod

- poznámka: analýza a klasifikace dat občas nazývána souhrnně jako:
  - „rozpoznávání obrazů“ (*pattern recognition*) – obraz nejen ve smyslu obraz mozku či obraz sítnice oka, ale ve smyslu popis (tzn. „obraz“) reálného objektu
  - „dolování z dat“ (*data mining*)
  - „strojové učení“ (*machine learning*)

Lineární separabilita



lineárně separabilní úloha

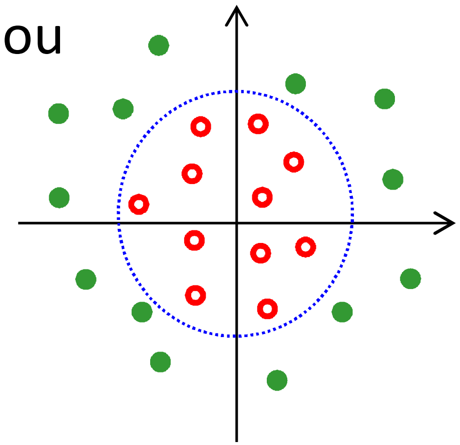
lineárně neseparabilní úloha
lineárně separované klasifikační třídy

nelineárně separabilní úloha

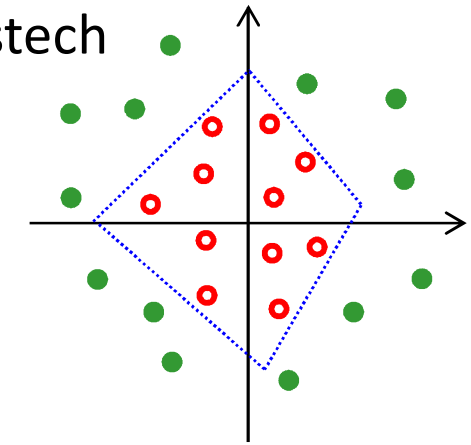
Lineárně neseparabilní třídy – způsoby řešení

1. zachováme původní obrazový prostor a zvolíme nelineární hranici:

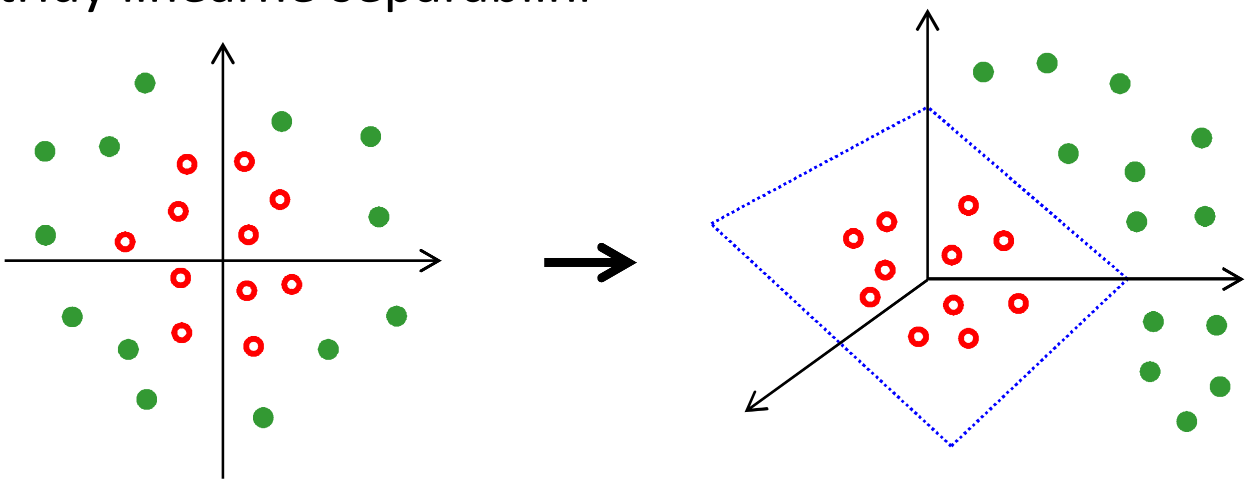
   a) definovanou obecně



   b) složenou po částech z lineárních úseků

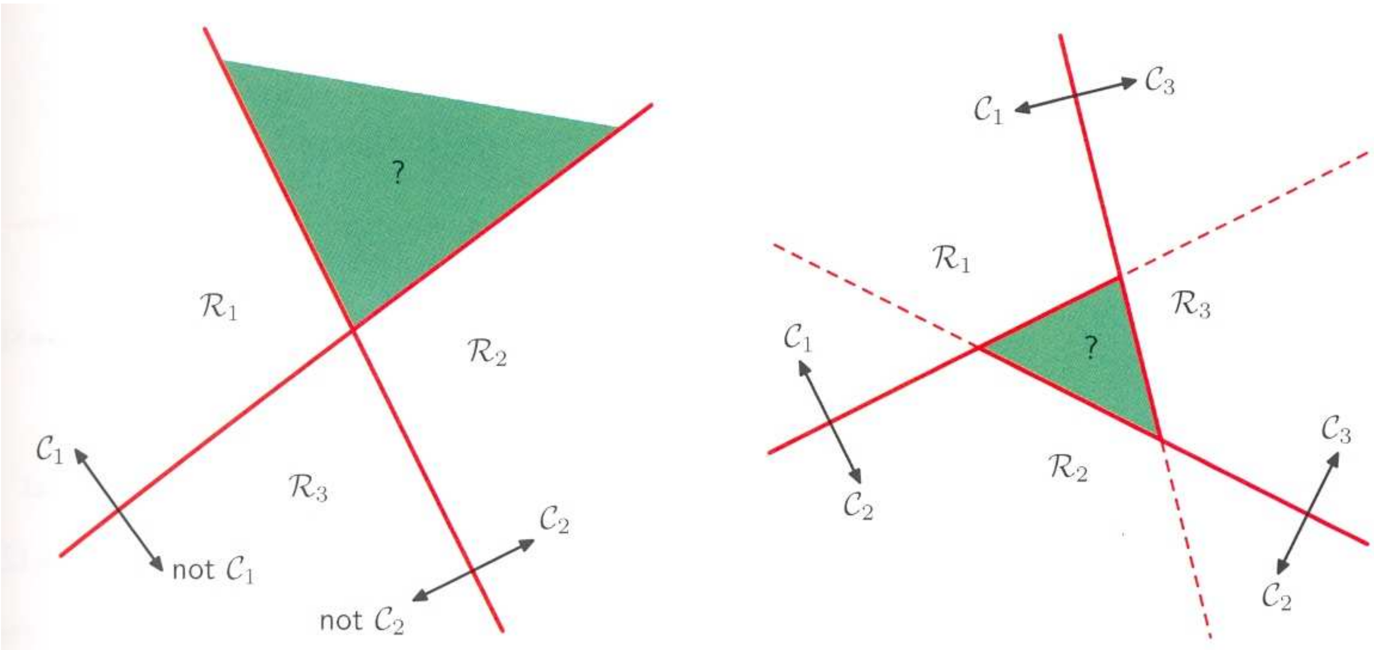


2. zobrazíme původní *p*-rozměrný obrazový prostor nelineární transformací do nového *m*-rozměrného prostoru tak, aby v novém prostoru byly klasifikační třídy lineárně separabilní



Klasifikace s více třídami

1. klasifikace „jedna versus zbytek“
   R-1 hranice oddělí jednu klasifikační třídu od všech dalších
2. klasifikace „jedna versus jedna“
   R(R-1)/2 binárních hranic mezi každými dvěma třídami



- problematickým úsekům se můžeme vyhnout použitím diskriminačních funkcí (do r-té třídy ω_r zařadíme obraz x za předpokladu, že $g_r(\mathbf{x}) > g_s(\mathbf{x})$ pro $\forall\ r \neq s$) → klasifikační hranice je průmět průsečíku $g_r(\mathbf{x}) = g_s(\mathbf{x})$ do obrazového prostoru – takto definovaný klasifikační prostor je vždy spojitý a konvexní

Typy klasifikátorů – podle reprezentace vstupních dat

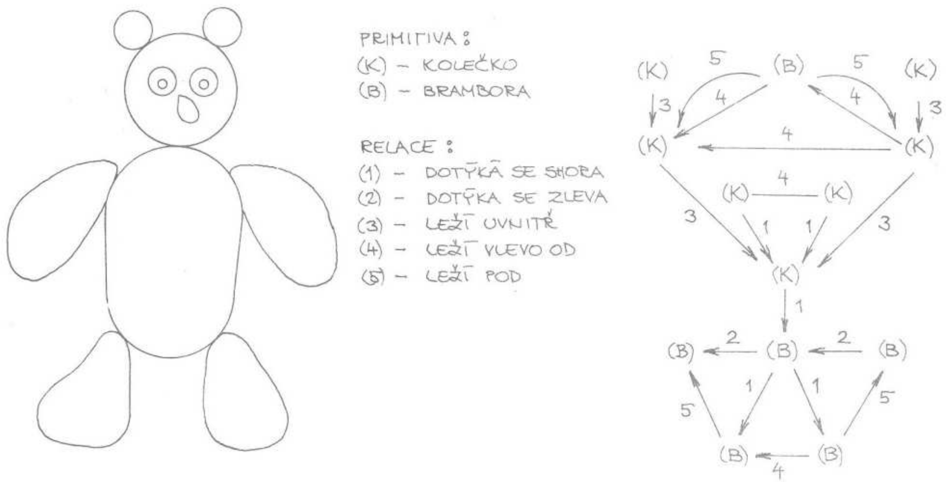
1. **Podle reprezentace vstupních dat:**
   - **příznakové klasifikátory:** paralelní x sekvenční
   - **strukturální (syntaktické) klasifikátory**
   - **kombinované klasifikátory**
2. **Podle jednoznačnosti zařazení do skupin:**
   - **deterministické klasifikátory**
   - **pravděpodobnostní klasifikátory**
3. **Podle typů klasifikačních a učících algoritmů:**
   - **parametrické klasifikátory**
   - **neparametrické klasifikátory**
4. **Podle způsobu učení:**
   - **učení s učitelem:** dokonalým x nedokonalým
   - **učení bez učitele**
5. **Podle principu klasifikace:**
   - **klasifikace pomocí diskriminačních funkcí**
   - **klasifikace pomocí vzdálenosti od etalonů klasifikačních tříd**
   - **klasifikace pomocí hranic v obrazovém prostoru**

Typy klasifikátorů – podle reprezentace vstupních dat

- **příznakové** – vstupní data vyjádřena vektorem hodnot jednotlivých proměnných (příznaků):
  - paralelní – zpracování vektoru jako celku (např. Bayesův klasifikátor)
  - sekvenční – zpracování (občas i měření) proměnných postupně (např. klasifikační stromy)

	A	B	C	D	E
1	id	vek	pohlavi	vyska	vaha
2	1	38	Z	164	45
3	2	36	M	167	90
4	3	26	Z	178	70

- **strukturální (syntaktické)** – vstupní data popsána relačními strukturami



- **kombinované** – jednotlivá primitiva doplněna příznakovým popisem

Typy klasifikátorů – dle jednoznačnosti zařazení do skupin

- **deterministické klasifikátory:**
  - každý objekt musí patřit do nějaké třídy a nemůže být současně ve více třídách
  - pozn. použití termínu „**deterministický klasifikátor**“ v případě, že klasifikátor daná data zpracuje vždy se stejným výsledkem (např. Bayesův klasifikátor) x „**nedeterministický klasifikátor**“, který může při opakovaném zpracování daných dat klasifikovat různě (např. neuronové sítě – záleží na tom, jaká bude inicializace)

- **pravděpodobnostní klasifikátory:**
  - stanoví pravděpodobnost zařazení obrazů do daných klasifikačních tříd
  - např. člověk má s pravděpodobností 0,6 infarkt, s pstí 0,3 má atrofii srdeční komory a s pstí 0,1 je zdravý

Typy klasifikátorů – dle typů klasifikačních a učících algoritmů

- **parametrické klasifikátory:**
  - potřeba nastavit či určit parametry
  - např. prahová klasifikace (potřeba stanovit práh), metoda podpůrných vektorů (potřeba stanovit parametr „C“) atd.

- **neparametrické klasifikátory:**
  - není potřeba nastavovat žádné parametry
  - např. klasifikace podle vzdálenosti od reprezentativního objektu (tzv. „etalonu“) skupin

- pozn. z tohoto pohledu jsou klasifikační stromy parametrické klasifikátory, pokud to však hodnotíme ze statistického pohledu, jsou to neparametrické metody, protože nemají předpoklad normálního rozdělení

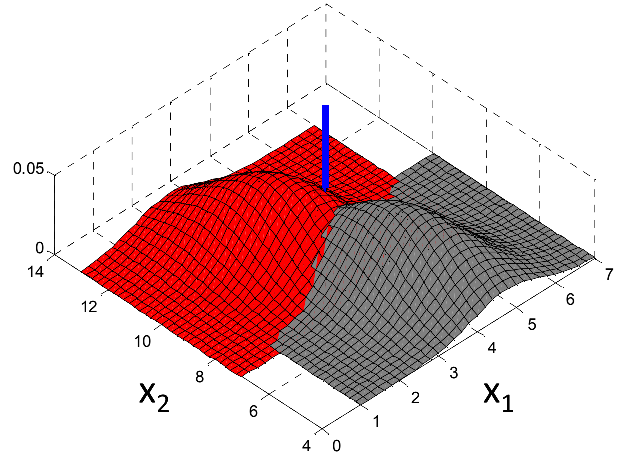
Typy klasifikátorů – podle způsobu učení

- **učení s učitelem** – k dispozici trénovací množina, u níž známe zařazení každého objektu do jednotlivých klasifikačních tříd
  - učení s dokonalým učitelem – učitel se nemůže splést (tzn. předpokládáme, že všechny trénovací objekty jsou správně označené, že patří do dané třídy)
  - učení s nedokonalým učitelem – připouštíme, že v trénovací množině mohou být nesprávně označené subjekty (např. u některých duševních onemocnění se lékař může splést a označit pacienta za schizofrenika, i když trpí bipolární poruchou, což se však prokáže až za několik let, takže v naší trénovací množině je takto špatně zařazený subjekt)

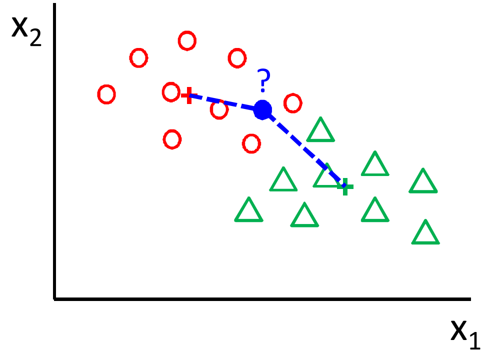
- **učení bez učitele:**
  - trénovací množina není k dispozici a často ani předem neznáme, jaké třídy (skupiny) se v datech budou vyskytovat
  - typickým příkladem je shlukování

Typy klasifikátorů – podle principu klasifikace

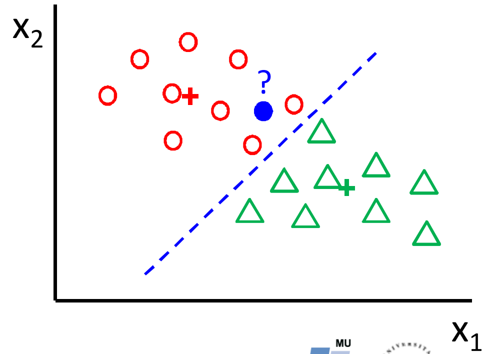
- **klasifikace pomocí diskriminačních funkcí:**
  - diskriminační funkce určují míru příslušnosti k dané klasifikační třídě
  - pro danou třídu má daná diskriminační funkce nejvyšší hodnotu



- **klasifikace pomocí min. 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)



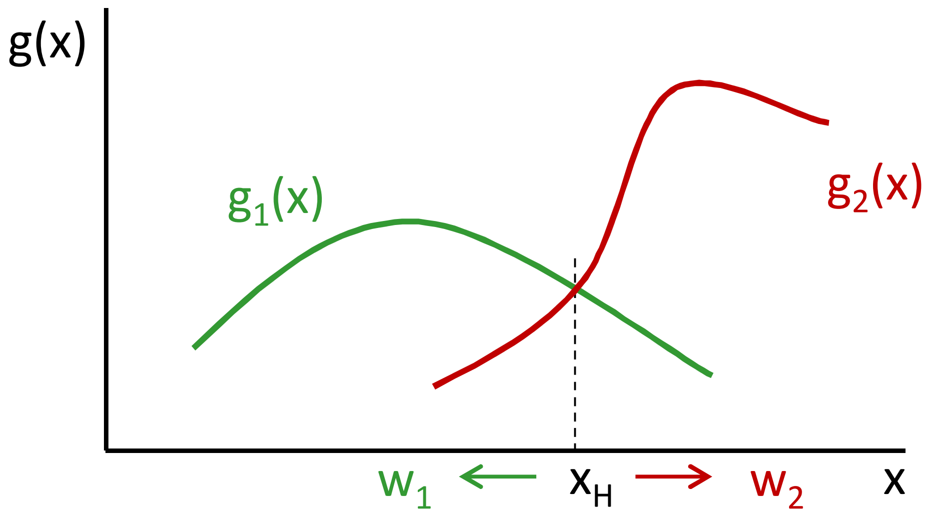
- **klasifikace pomocí hranic v obrazovém prostoru:**
  - stanovení hranic (hraničních ploch) oddělujících klasifikační třídy



Klasifikace pomocí diskriminačních funkcí

Klasifikace pomocí diskriminačních funkcí

- **diskriminační funkce $g_i(x)$** – vyjadřují míru příslušnosti objektu **x** do jednotlivých klasifikačních tříd
- zařadíme **x** do takové třídy ω_i, pro kterou je $g_i(\mathbf{x})$ maximální
- matematicky: pro objekt **x** z třídy ω_r platí, že $g_r(\mathbf{x}) > g_s(\mathbf{x})$ pro s =1,2,…,R a $r \neq s$



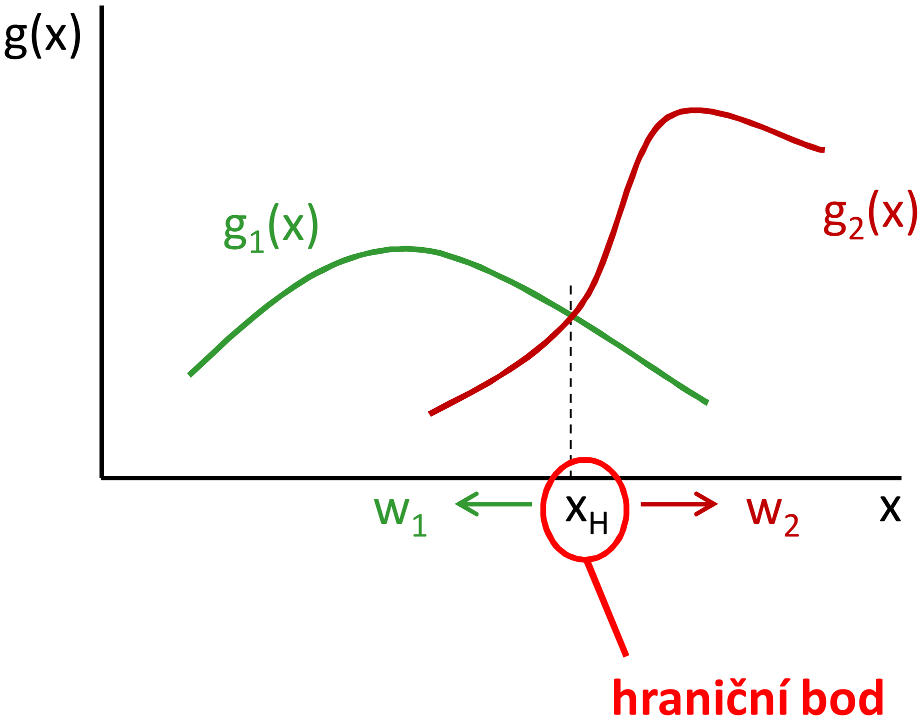
- pro klasifikaci do dvou tříd lze rozhodovací pravidlo klasifikátoru zapsat jako:

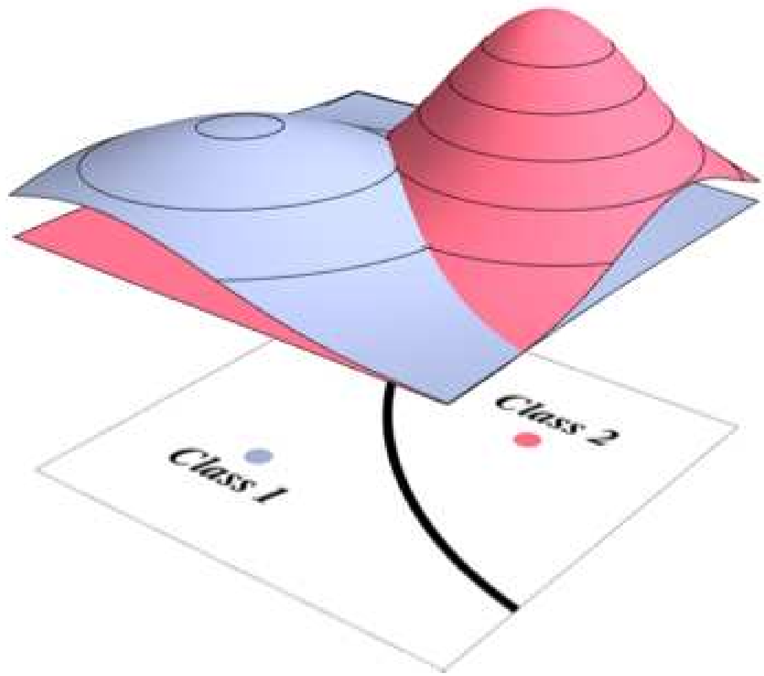
$$\omega_k = d(\mathbf{x}) = \mathrm{sign}(g_1(\mathbf{x}) - g_2(\mathbf{x}))$$

- pokud $d(\mathbf{x}) \geq 0 \rightarrow$ zařazení **x** do třídy ω_1
- pokud $d(\mathbf{x}) < 0 \rightarrow$ zařazení **x** do třídy ω_2

Souvislost klasifikace pomocí diskriminačních funkcí s klasifikací pomocí hranic

Hranice mezi dvěma sousedními třídami ω_1 a ω_2 je určena průmětem průsečíku funkcí $g_r(\mathbf{x})$ a $g_s(\mathbf{x})$, definovaného rovnicí $g_r(\mathbf{x}) = g_s(\mathbf{x})$, do obrazového prostoru.

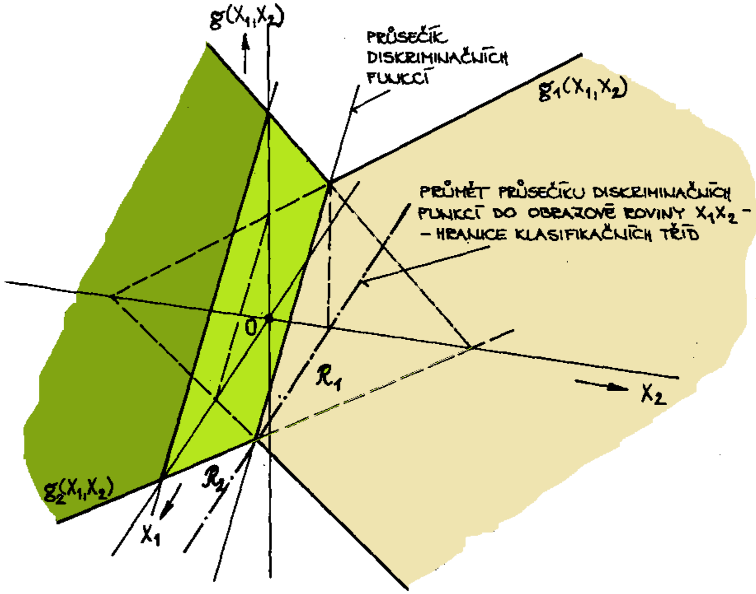




Příklady diskriminačních funkcí

- nejjednodušším tvarem diskriminační funkce je lineární funkce:

$$g_r(\mathbf{x}) = a_{r0} + a_{r1}x_1 + a_{r2}x_2 + \ldots + a_{rp}x_p$$



- diskriminační funkce na základě statistických vlastností množiny objektů:

$$g_r(\mathbf{x}) = P(\omega_r|\mathbf{x})$$

kde $P(\omega_r|\mathbf{x})$ je pravděpodobnost zatřídění **x** do třídy ω_r

→ **Bayesův klasifikátor**

Bayesův klasifikátor

- diskriminační funkce určeny na základě statistických vlastností množiny obrazů
- vyjdeme z **Bayesova vzorce**: $(\quad)\quad \frac{(\quad)\ (\quad)}{(\ )}$, kde
  - $(\quad)$ je aposteriorní podmíněná pravděpodobnost zatřídění obrazu **x** do třídy
  - $(\quad)$ je podmíněná hustota pravděpodobnosti výskytu obrazu ve třídě
  - $(\quad)$ je apriorní pravděpodobnost třídy
  - $(\ )$ je celková hustota pravděpodobnosti rozložení obrazu v celém obrazovém prostoru

Bayesův klasifikátor – kritéria

- Kritérium maximální aposteriorní pravděpodobnosti
- Kritérium minimální střední ztráty

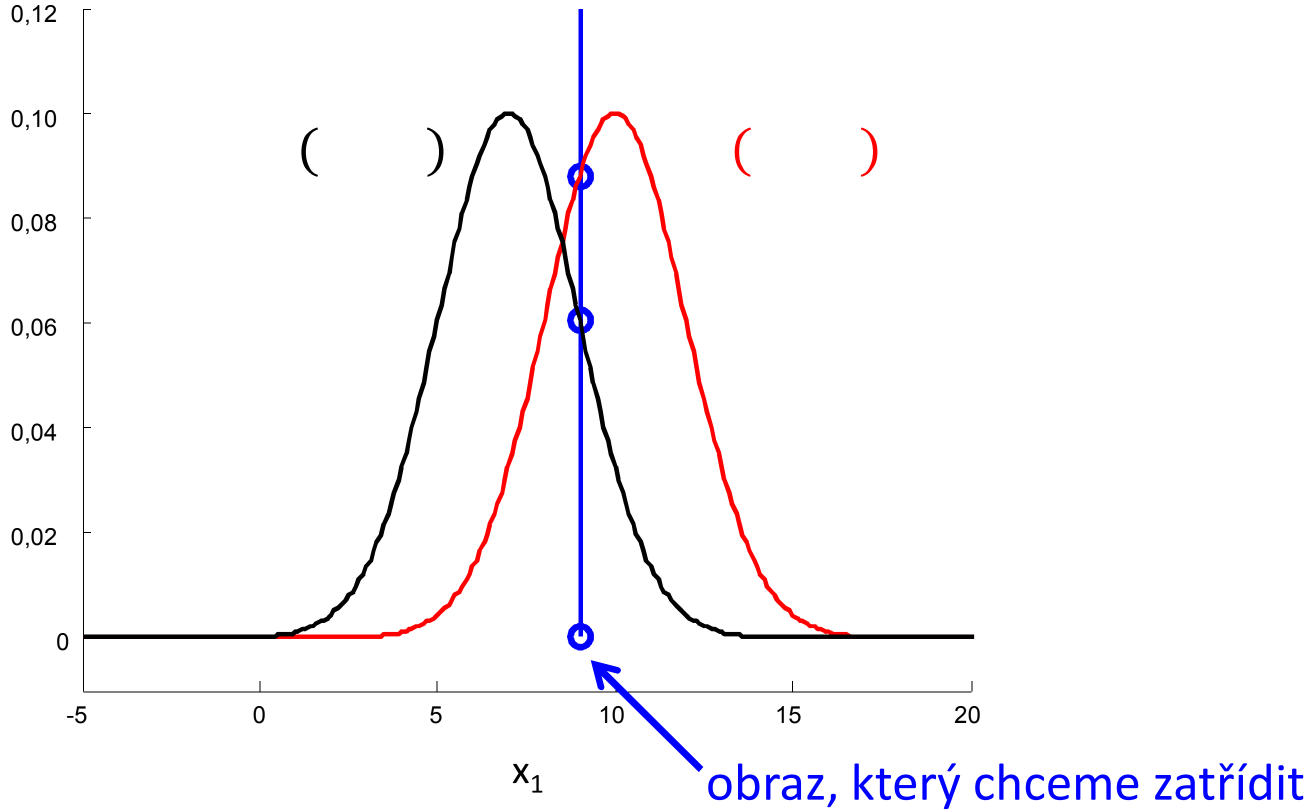
- kritérií existuje více, ale tyto dvě jsou základní a ostatní z nich lze zpravidla odvodit – např.:
  - kritérium minimální pravděpodobnosti chybného rozhodnutí
  - kritérium maximální pravděpodobnosti

Bayesův kl. – kritérium maximální aposteriorní psti

- zatřídění obrazu **x** do třídy s větší aposteriorní pravděpodobností, tedy:

  když ( ) ≥ ( ) → zařazení **x** do třídy ω_1

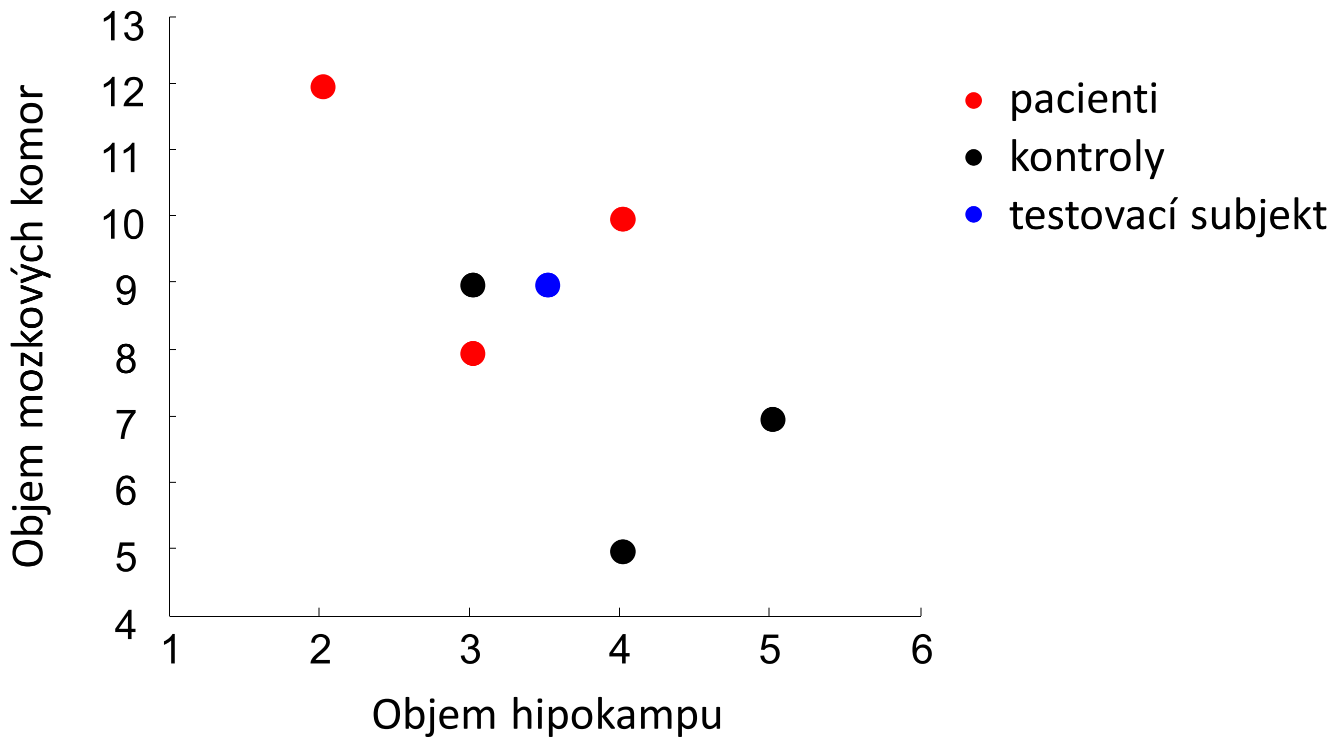
  když ( ) < ( ) → zařazení **x** do třídy ω_2



Bayesův kl. – kritérium maximální aposteriorní psti

Příklad: Bylo provedeno měření objemu hipokampu a mozkových komor (v cm^3) u 3 pacientů se schizofrenií a 3 kontrol: [ ] [ ]

Určete, zda testovací subjekt [ ] patří do skupiny pacientů či kontrolních subjektů pomocí Bayesova klasifikátoru.



Bayesův kl. – kritérium maximální aposteriorní psti

Příklad: Bylo provedeno měření objemu hipokampu a mozkových komor (v cm³) u 3 pacientů se schizofrenií a 3 kontrol:

Určete, zda testovací subjekt [ ] patří do skupiny pacientů či kontrolních subjektů pomocí Bayesova klasifikátoru.

Označení a pomocné výpočty:

; ;

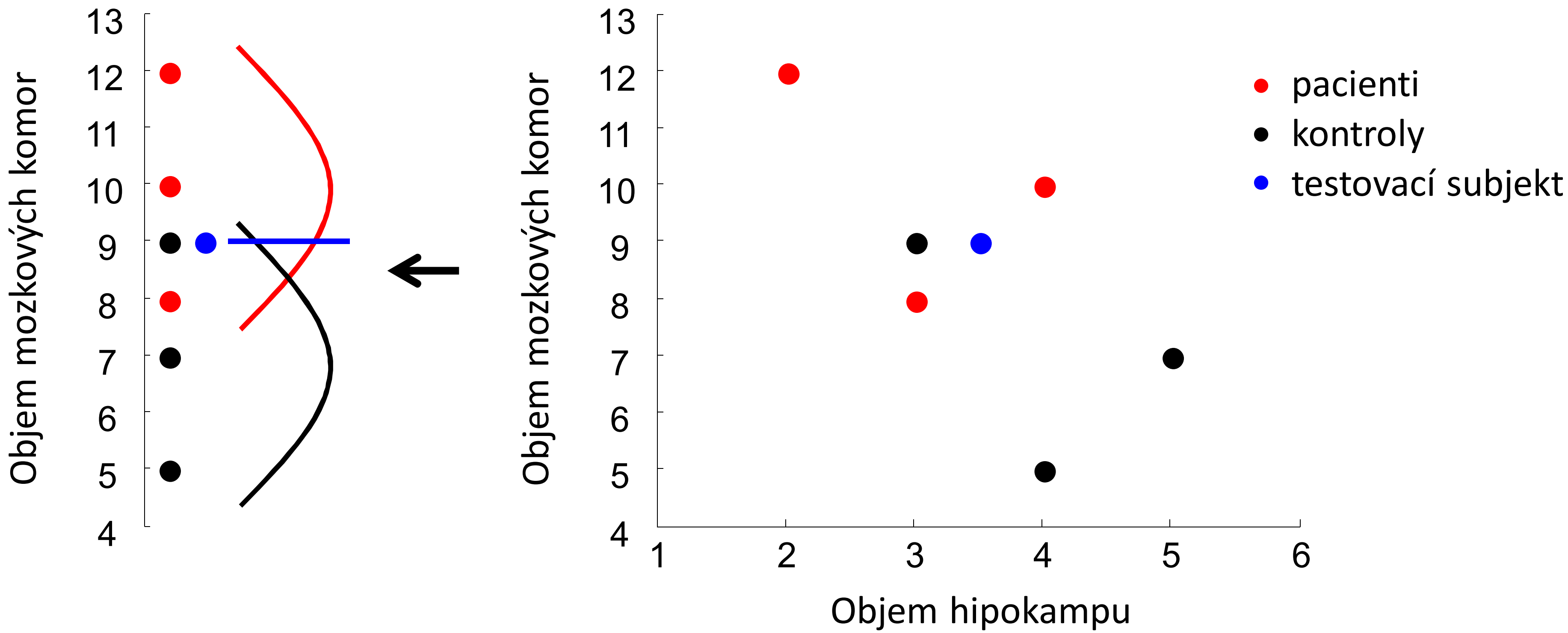
Apriorní psti:

Podmíněné hustoty psti:

Bayesův kl. – kritérium maximální aposteriorní psti

Příklad:

1. Klasifikace podle objemu mozkových komor:



( ) ———

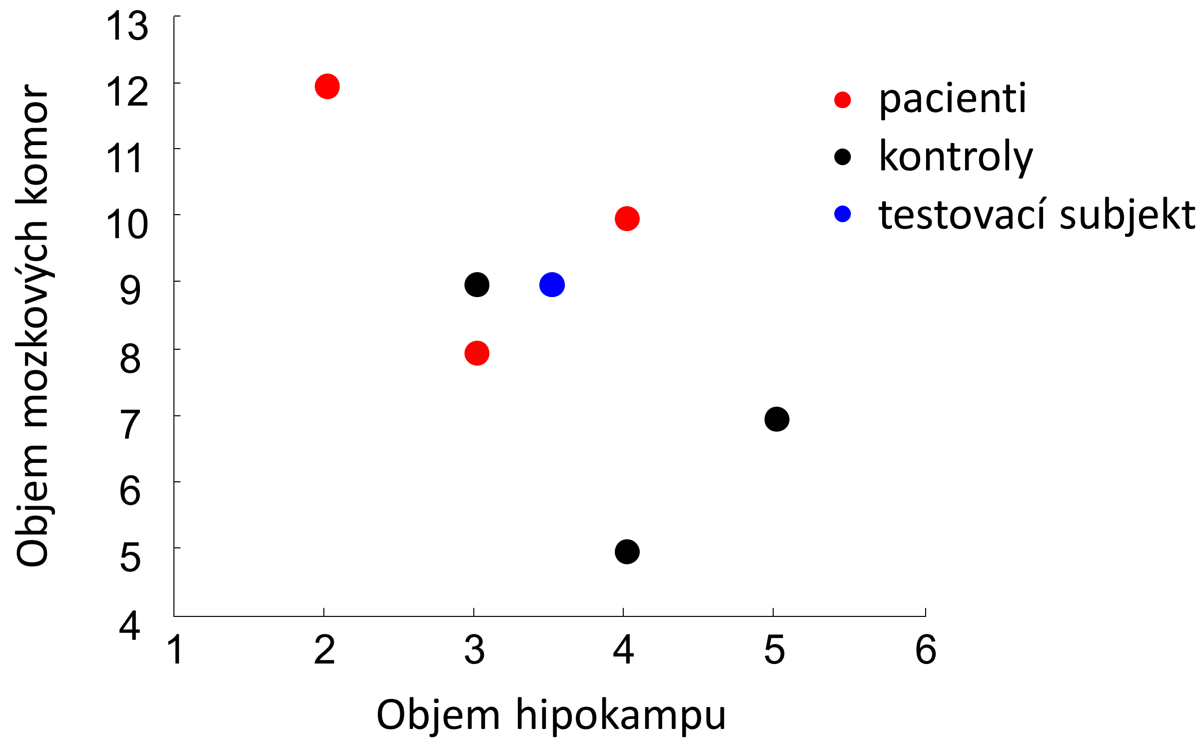
( ) ———

→ subjekt zařazen do třídy pacientů

Bayesův kl. – kritérium maximální aposteriorní psti

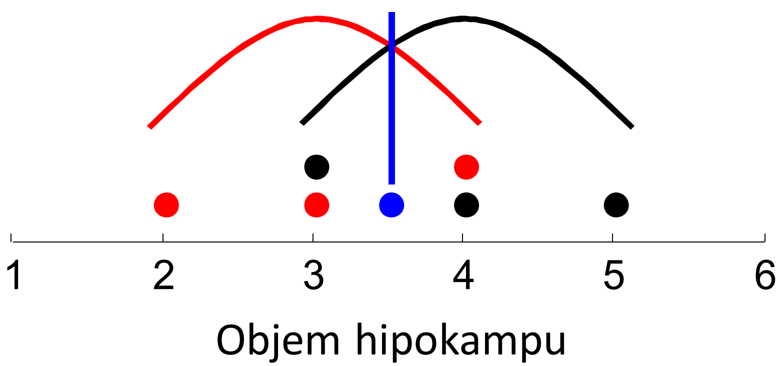
Příklad:

2. Klasifikace podle objemu hipokampu:



( ) ———

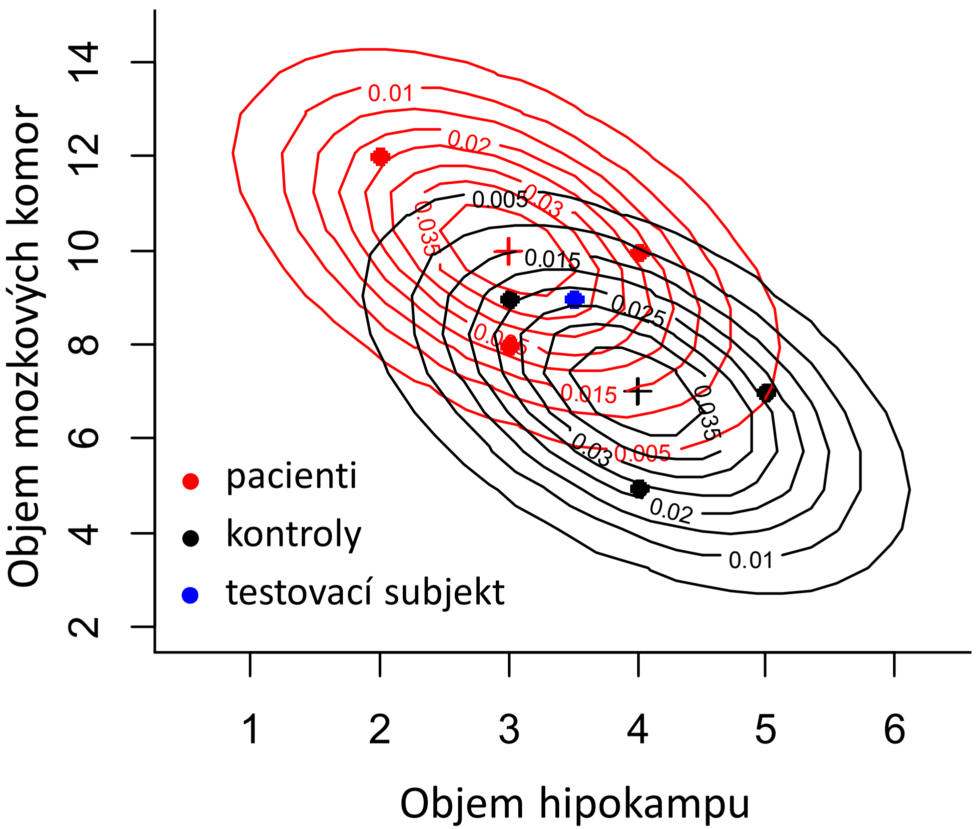
( ) ———

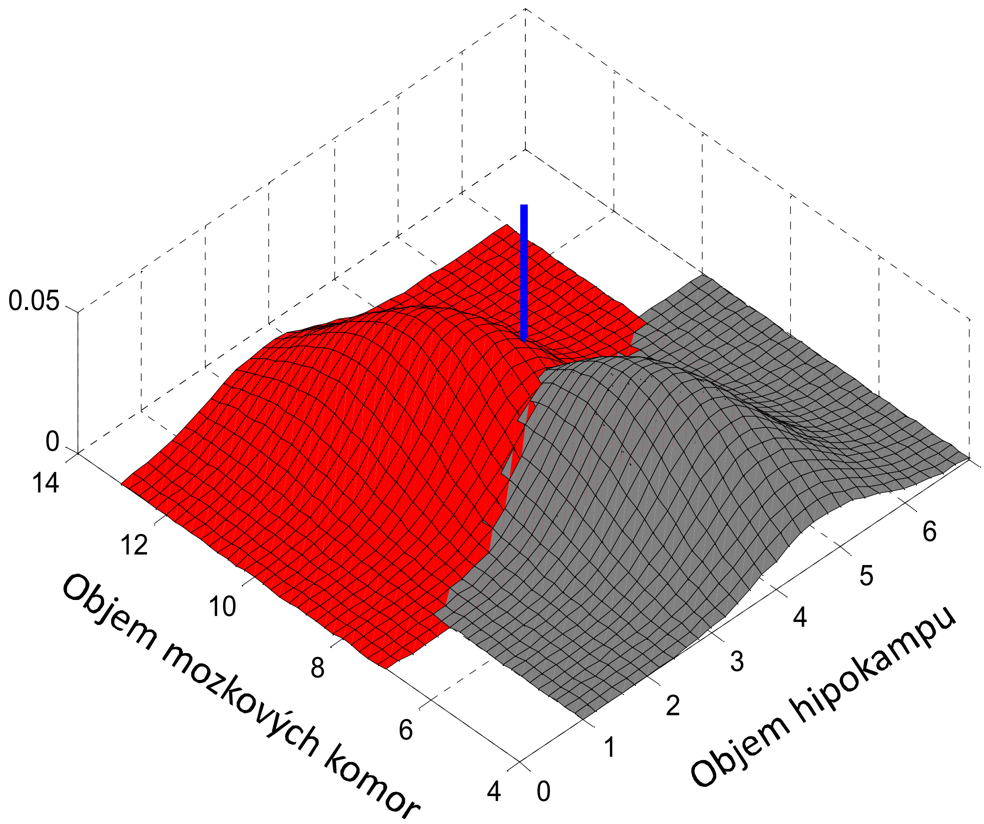


→ nelze jednoznačně určit, kam subjekt zařadíme

Bayesův kl. – kritérium maximální aposteriorní psti

Příklad – klasifikace podle obou proměnných:





( )

( )

→ subjekt zařazen do třídy pacientů

Bayesův kl. – kritérium minimální střední ztráty

- pokud rozepíšeme ( ) $\frac{(\ \ )\ (\ \ )}{(\ )}$ a ( ) $\frac{(\ \ )\ (\ \ )}{(\ )}$, pak kritérium maximální aposteriorní pravděpodobnosti:

  když ( ) ≥ ( ) → zařazení **x** do třídy ω_1

  když ( ) < ( ) → zařazení **x** do třídy ω_2

- můžeme přepsat jako:

  když ( ) ( ) ≥ ( ) ( ) → zařazení **x** do třídy ω_1

  když ( ) ( ) < ( ) ( ) → zařazení **x** do třídy ω_2

- přičemž ( ) můžeme vypustit, protože je v obou zlomcích stejné

- pokud chceme do výpočtů zahrnout ztrátu při chybné klasifikaci obrazu ze třídy do třídy (ztráta definována pomocí **ztrátové funkce** ( )), dostáváme:

  když ( ) ( ) (( ) ( )) ( ) ( ) (( ) ( )) → zař. **x** do ω_1

  když ( ) ( ) (( ) ( )) ( ) ( ) (( ) ( )) → zař. **x** do ω_2

Bayesův kl. – kritérium minimální střední ztráty

- ztrátové funkce ( ) se obvykle zapisují do matice ztrátových funkcí:

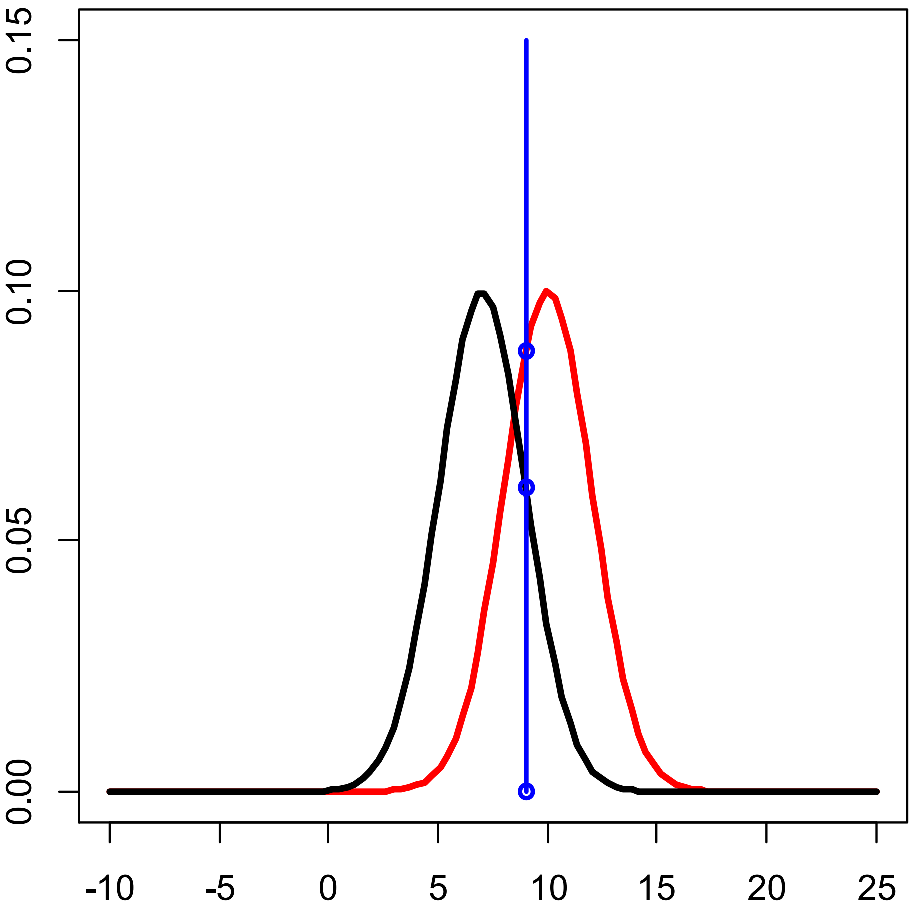
$$\boldsymbol{\lambda} = \begin{bmatrix} \lambda(\omega_1|\omega_1) & \lambda(\omega_1|\omega_2) & \cdots & \lambda(\omega_1|\omega_R) \\ \lambda(\omega_2|\omega_1) & \lambda(\omega_2|\omega_2) & \cdots & \lambda(\omega_2|\omega_R) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda(\omega_R|\omega_1) & \lambda(\omega_R|\omega_2) & \cdots & \lambda(\omega_R|\omega_R) \end{bmatrix}$$

- prvky na diagonále ( ) bývají zpravidla nulové, protože při správném zařazení objektu ze třídy do třídy nevzniká žádná ztráta
- např. [ ] → víc penalizuji, když je pacient nesprávně zařazen do třídy kontrolních subjektů ( ), než když je kontrolní subjekt nesprávně zařazen do třídy pacientů ( )
- např. [ ] → víc penalizuji, když je kontrolní subjekt nesprávně zařazen do třídy pacientů ( ), než když je pacient nesprávně zařazen do třídy kontrolních subjektů ( )

Bayesův klasifikátor – poznámka

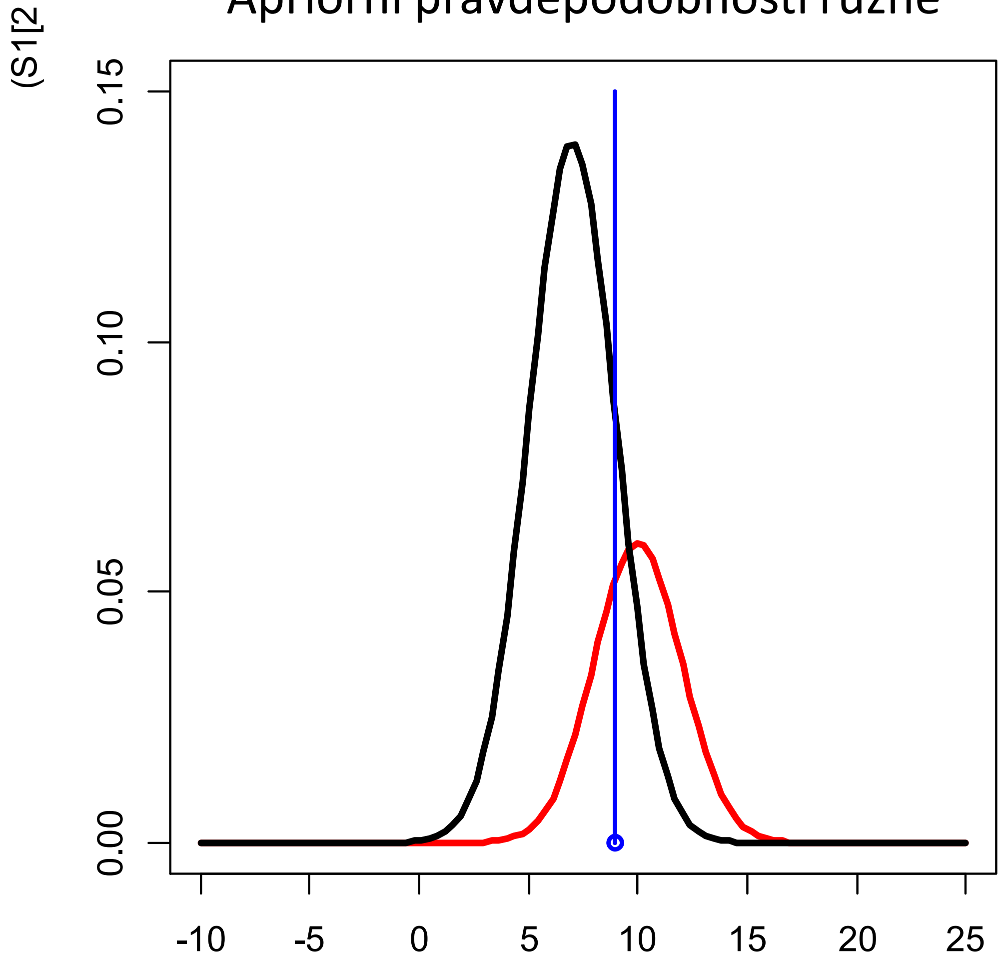
- kromě nastavování ztrát je možné nastavovat i apriorní pravděpodobnosti

Apriorní pravděpodobnosti stejné



→ zařazení objektu do červené třídy

Apriorní pravděpodobnosti různé

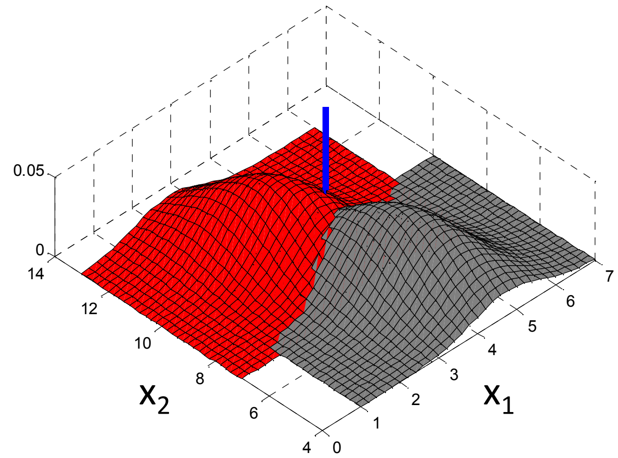


→ zařazení objektu do černé třídy

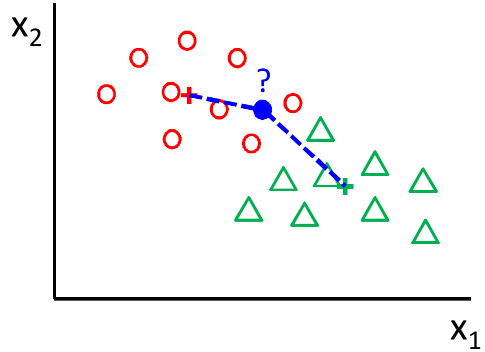
Klasifikace pomocí minimální vzdálenosti

Typy klasifikátorů – podle principu klasifikace

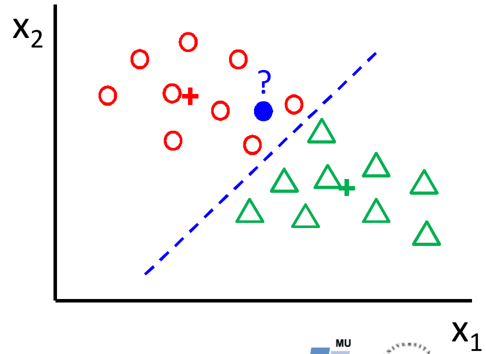
- **klasifikace pomocí diskriminačních funkcí:**
  – diskriminační funkce určují míru příslušnosti k dané klasifikační třídě
  – pro danou třídu má daná diskriminační funkce nejvyšší hodnotu



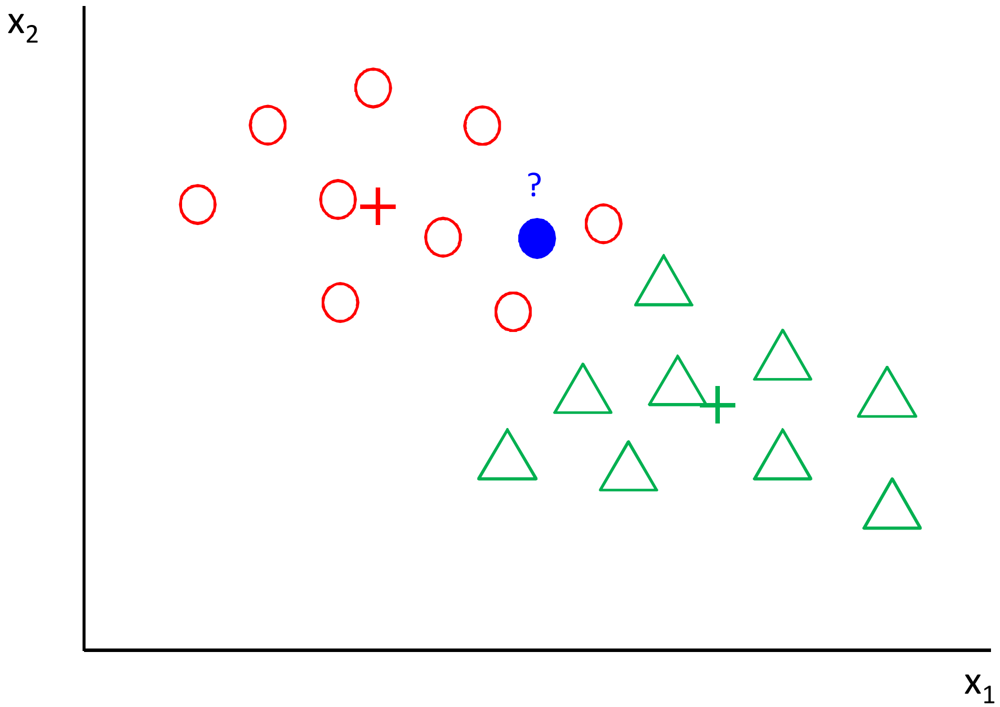
- **klasifikace pomocí min. vzdálenosti od etalonů klasif. tříd:**
  – etalon = reprezentativní objekt(y) klasifikační třídy
  – počet etalonů klasif. třídy různý – od jednoho vzorku (např. centroidu) po úplný výčet všech objektů dané třídy (např. u klasif. pomocí metody průměrné vazby)



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



Klasifikace pomocí minimální vzdálenosti



- nutno zvolit metriku vzdálenosti či podobnosti:
  1. mezi jednotlivými objekty
  2. mezi množinami objektů

Typy metrik a konkrétní příklady – opakování

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 podobnosti 2 objektů s kvantitativními proměnnými

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

Metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 objekty s kvalitativními proměnnými

Hammingova 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 MNOŽINAMI OBJEKTŮ

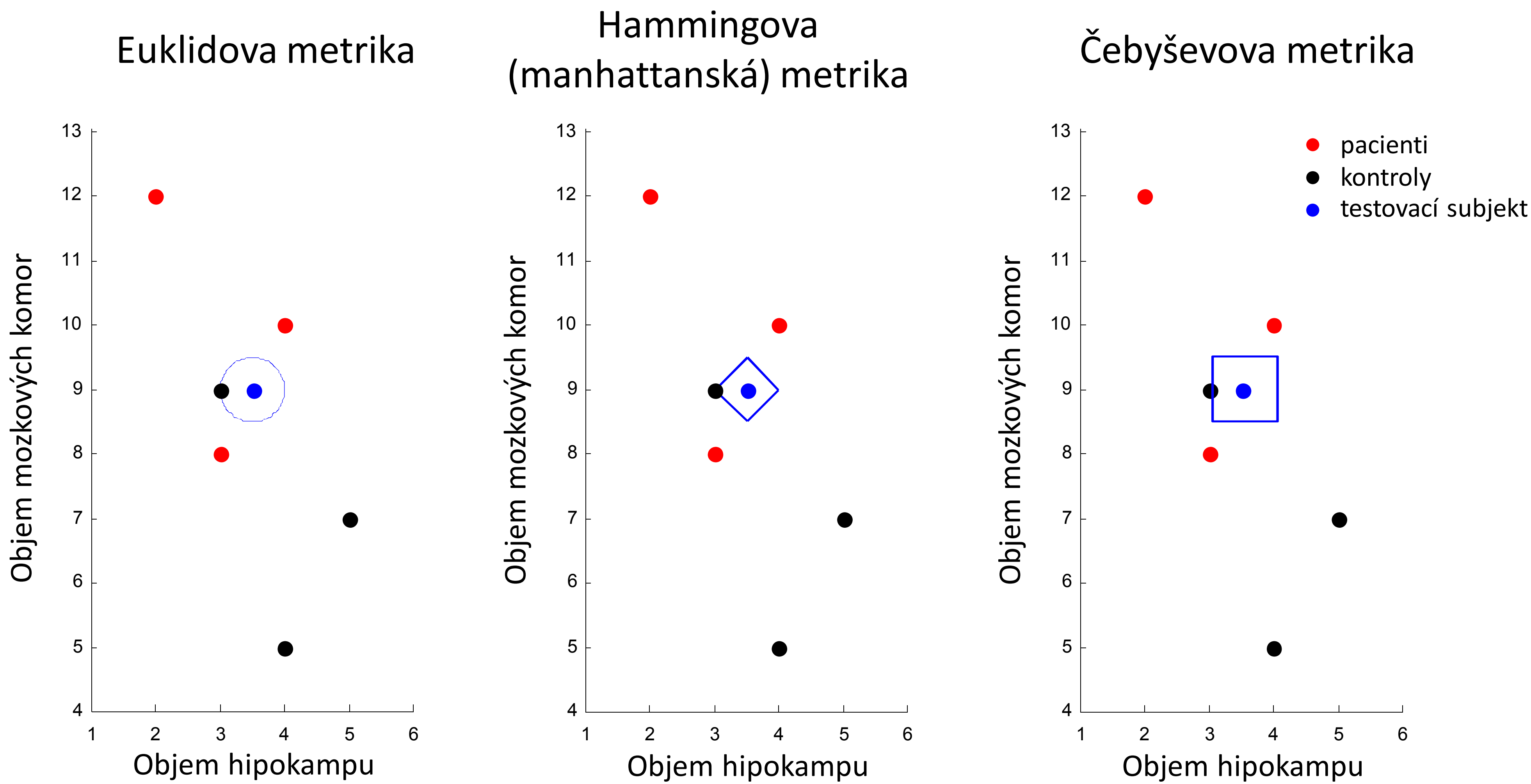
Deterministické metriky pro určení vzdálenosti mezi 2 množinami objektů

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

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

Chernoffova m., Bhattacharyyova m. atd.

Euklidova, Hammingova (manhattanská), Čebyševova metrika – opakování



- zobecnění těchto 3 metrik: **Minkovského metrika**
- začleněním inverze kovarianční matice získáváme **Mahalanobisovu metriku**

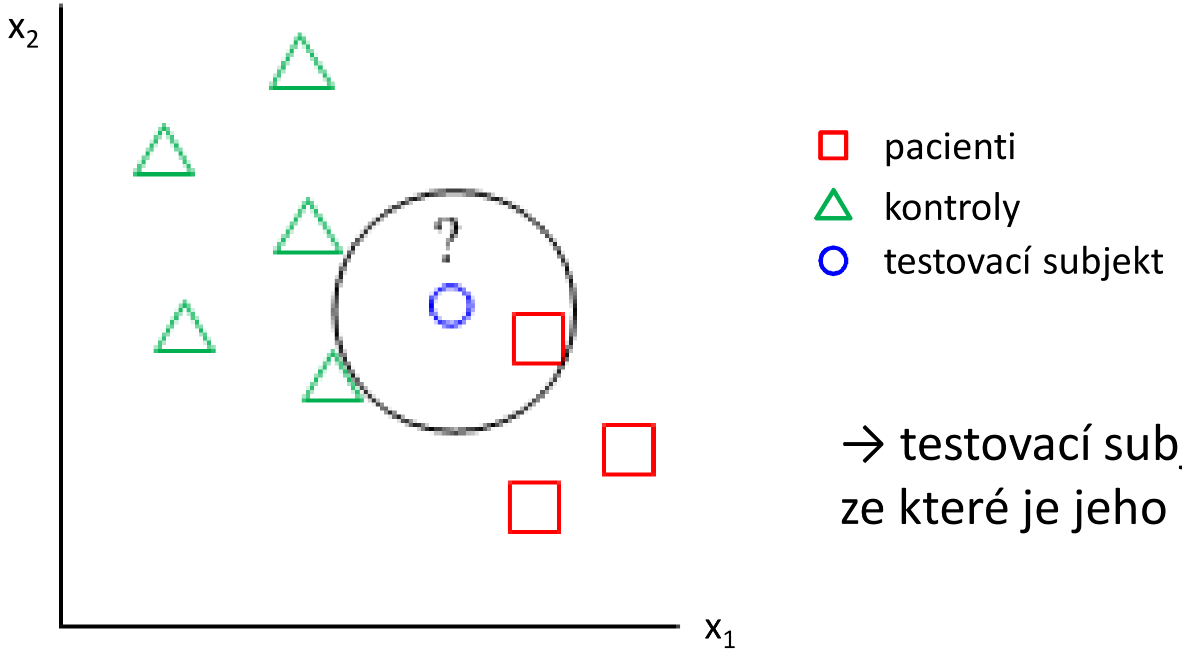
Nejpoužívanější metriky pro určení vzdálenosti mezi dvěma množinami obrazů – opakování

- Metoda nejbližšího souseda
- Metoda *k* nejbližších sousedů
- Metoda nejvzdálenějšího souseda – obtížně použitelná pro klasifikaci
- Centroidová metoda
- Metoda průměrné vazby
- Wardova metoda – zřídka používaná pro klasifikaci

- poznámka: podobnost (resp. vzdálenost) mezi třídami dána:
  - „podobností“ jednoho obrazu s jedním či více obrazy jedné třídy (skupin, shluků) – použitelné při klasifikaci
  - „podobností“ skupin obrazů či „podobností“ jednoho obrazu z každé skupiny – použitelné při shlukování

Metoda nejbližšího souseda

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

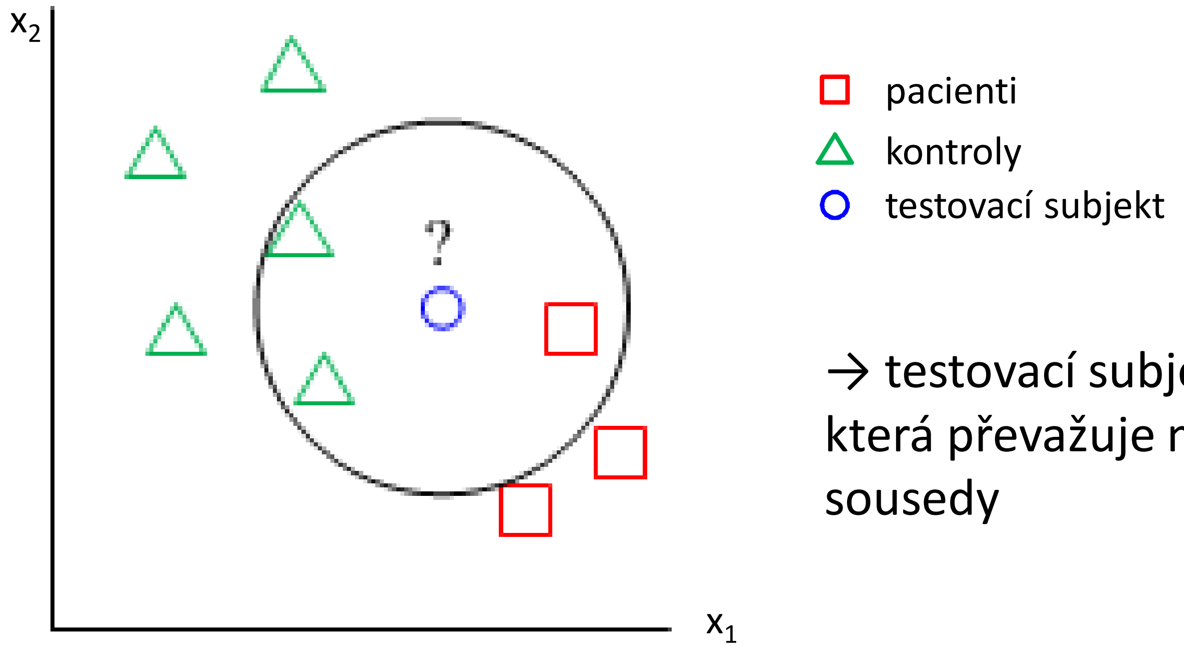


→ testovací subjekt zařadíme do třídy, ze které je jeho nejbližší soused

- 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

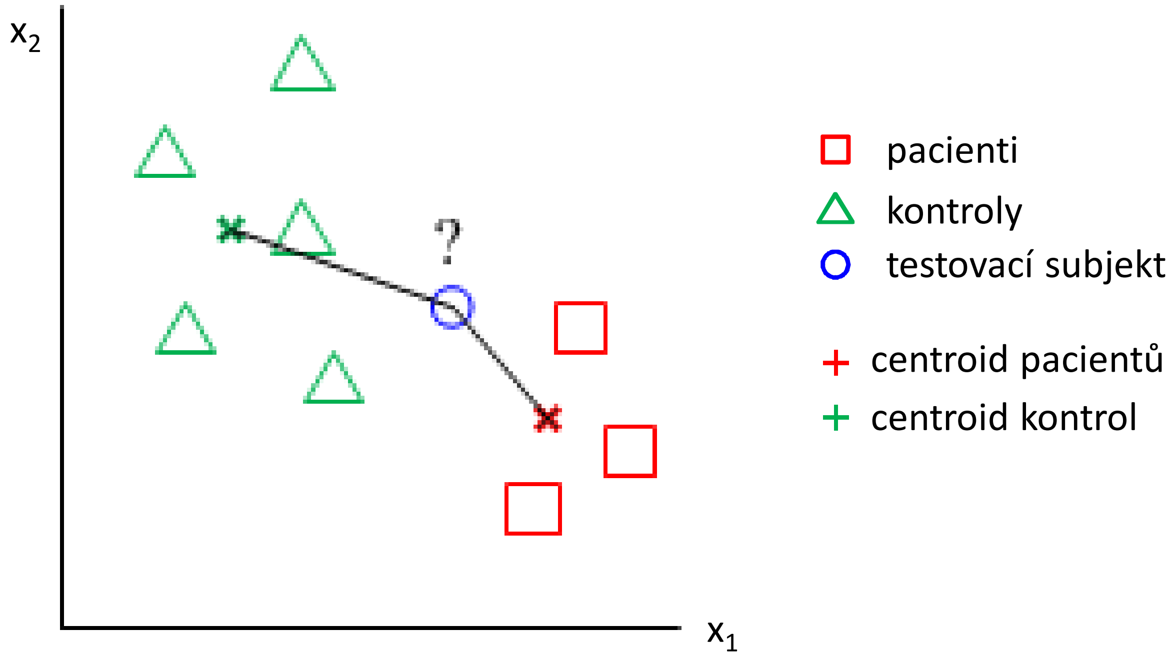


→ testovací subjekt zařadíme do třídy, která převažuje mezi jeho *k* nejbližšími sousedy

- 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

Centroidová metoda

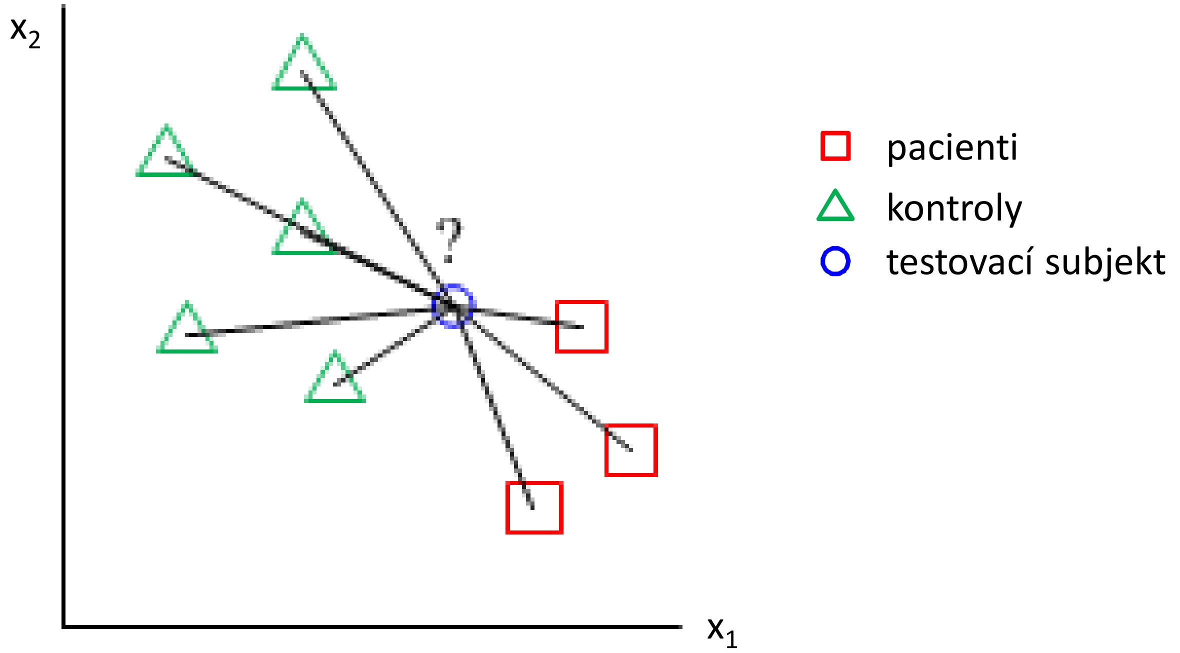
- vychází z výpočtu centroidů pro jednotlivé třídy a
- při klasifikaci: zařazení subjektu do třídy s nejbližším centroidem



- 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

Metoda průměrné vazby

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

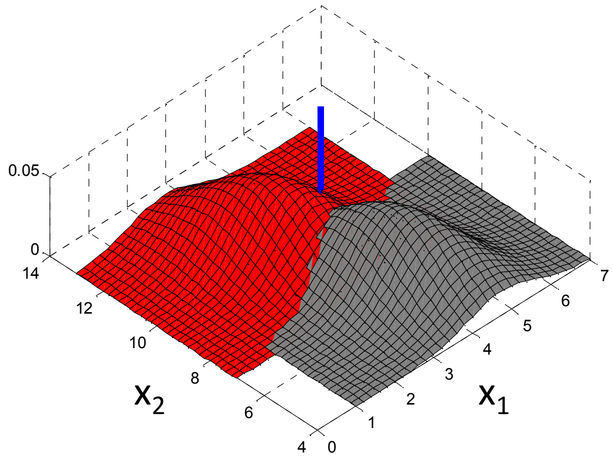


- výhody a nevýhody použití této metody pro klasifikaci:
  - \+ žádné předpoklady o rozložení
  - \+ méně citlivé na odlehlé hodnoty než metoda nejbližšího souseda
  - \+ nebývá problém při nevyvážených počtech objektů ve skupinách
  - \- časově náročnější než centroidová metoda při větším počtu objektů

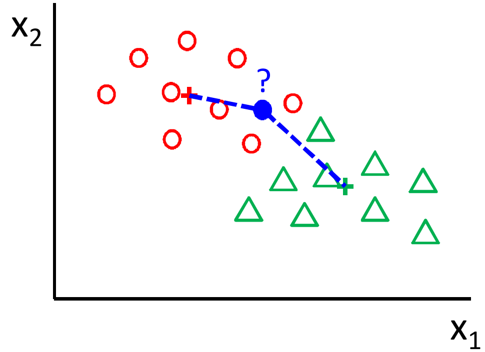
Klasifikace pomocí hranic

Typy klasifikátorů – podle principu klasifikace

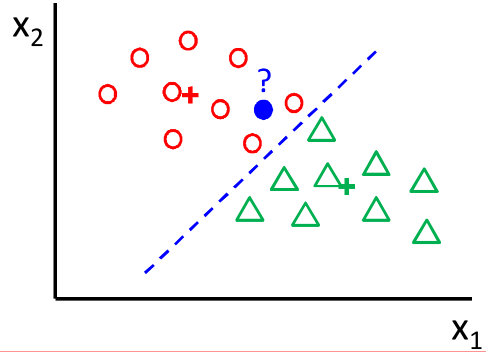
- **klasifikace pomocí diskriminačních funkcí:**
  - diskriminační funkce určují míru příslušnosti k dané klasifikační třídě
  - pro danou třídu má daná diskriminační funkce nejvyšší hodnotu



- **klasifikace pomocí min. 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)

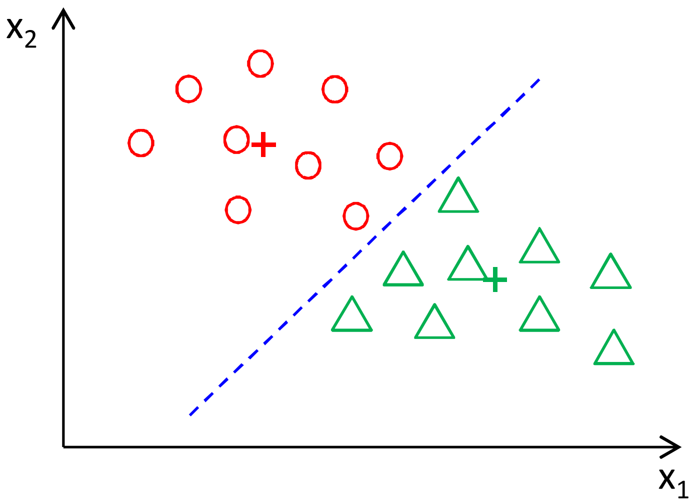


- **klasifikace pomocí hranic v obrazovém prostoru:**
  - stanovení hranic (hraničních ploch) oddělujících klasifikační třídy

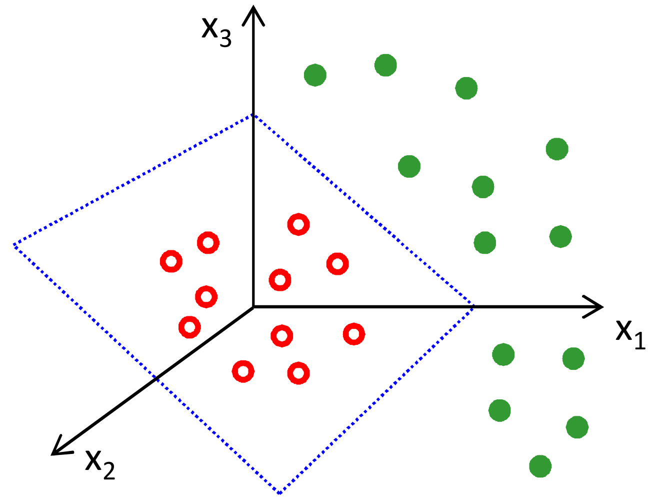


Motivace

2-rozměrný prostor



3-rozměrný prostor



Hranice je nadplocha o rozměru o jedna menší než je rozměr prostoru

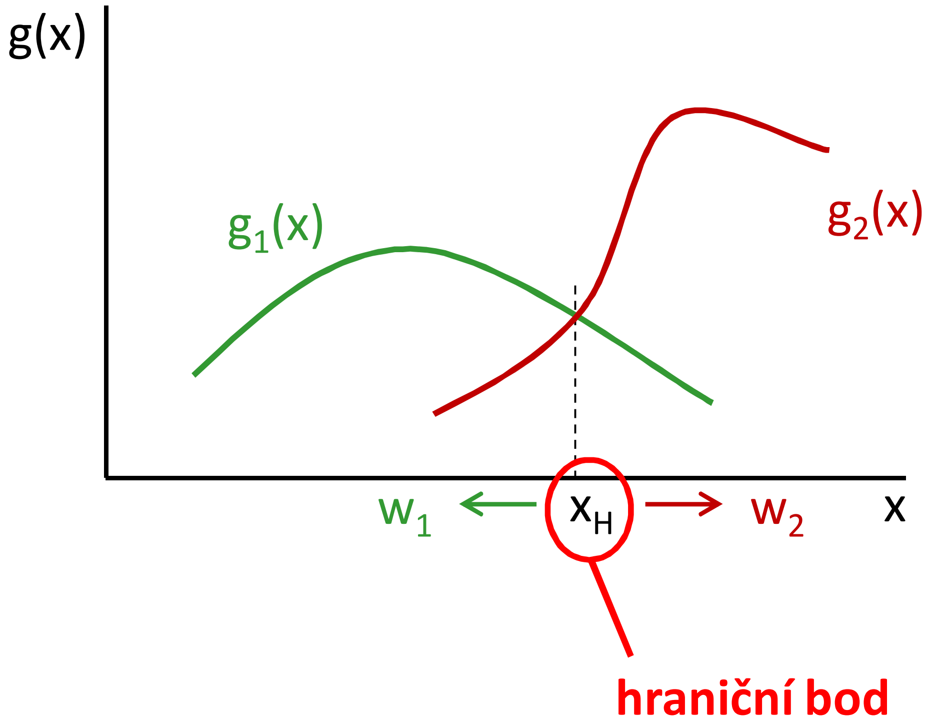
- ve 2-rozměrném prostoru je hranicí křivka (v lineárním případě přímka)
- v 3-rozměrném prostoru plocha (v lineárním případě rovina)

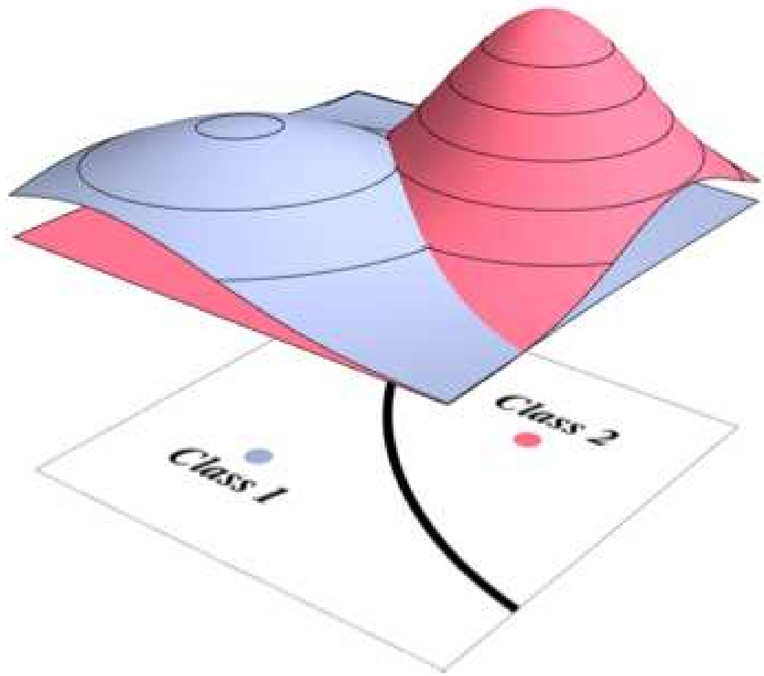
Hranice je tedy dána rovnicí: ( )

Výpočet hranice různými metodami (např. Fisherova LDA, SVM, perceptron, metoda nejmenších čtverců apod.)

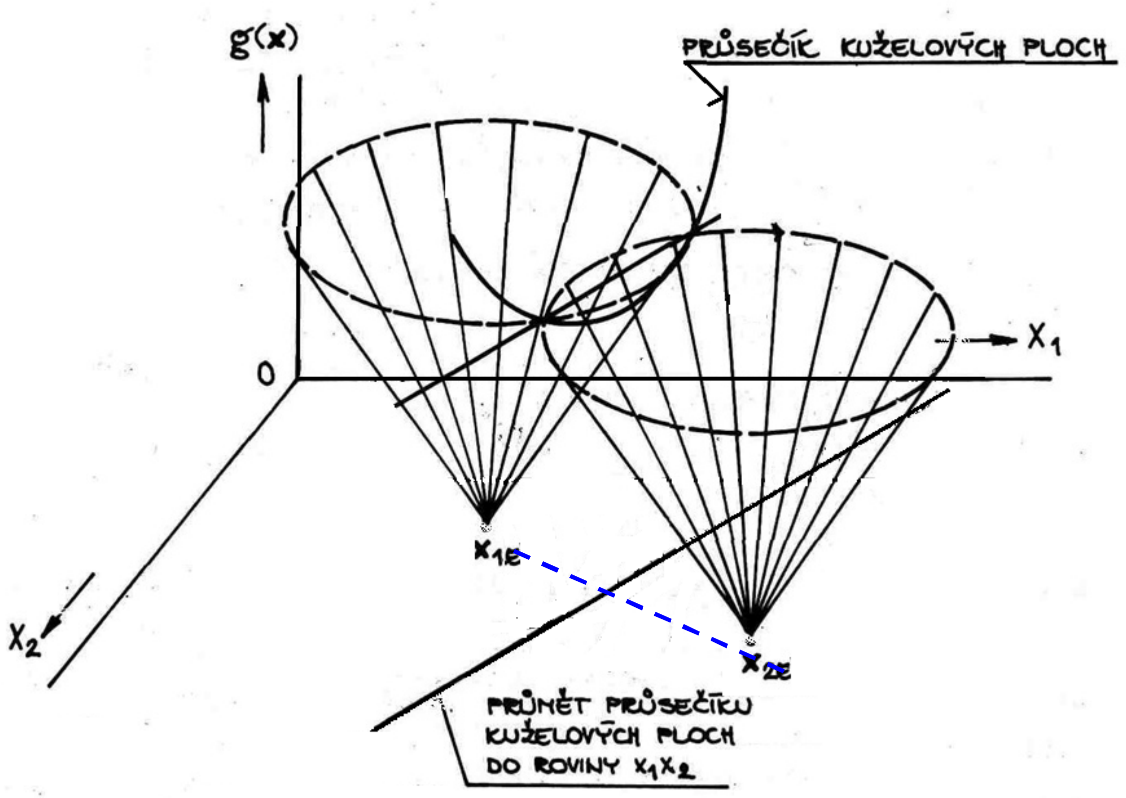
Souvislost klasifikace pomocí diskriminačních funkcí s klasifikací pomocí hranic

Hranice mezi dvěma sousedními třídami ω_1 a ω_2 je určena průmětem průsečíku funkcí $g_r(\mathbf{x})$ a $g_s(\mathbf{x})$, definovaného rovnicí $g_r(\mathbf{x}) = g_s(\mathbf{x})$, do obrazového prostoru, tzn. ( ) $g_1(\mathbf{x}) - g_2(\mathbf{x}) = 0$





Souvislost klasifikace podle minimální vzdálenosti s klasifikací pomocí hranic



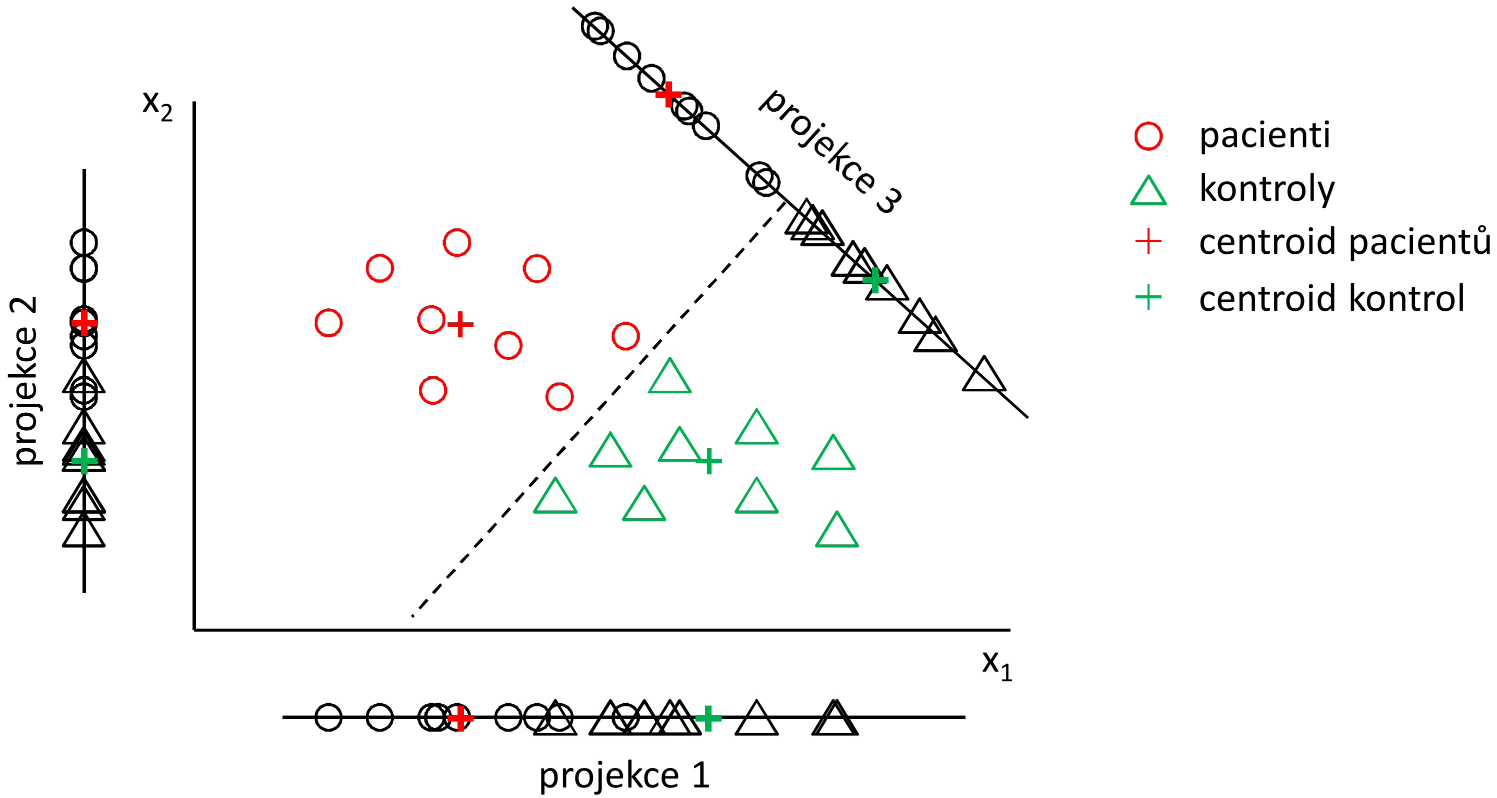
- body se stejnou vzdáleností od etalonů leží na kuželových plochách, které se protínají v parabole, jejíž průmět do obrazové roviny je přímka
- tato hraniční přímka mezi klasifikačními třídami je vždy kolmá na spojnici obou etalonů a tuto spojnici půlí

Souvislost jednotlivých principů klasifikace - shrnutí

- Hranice mezi klasifikačními třídami jsou dány průmětem diskriminačních funkcí do obrazového prostoru.
- Klasifikace podle minimální vzdálenosti definuje hranici, která je kolmá na spojnici etalonů klasifikačních tříd a půlí ji.
- Princip klasifikace dle minimální vzdálenosti vede buď přímo, nebo prostřednictvím využití metrik podobnosti k definici diskriminačních funkcí a ty dle prvního ze zde uvedených pravidel k určení hranic mezi klasifikačními třídami.

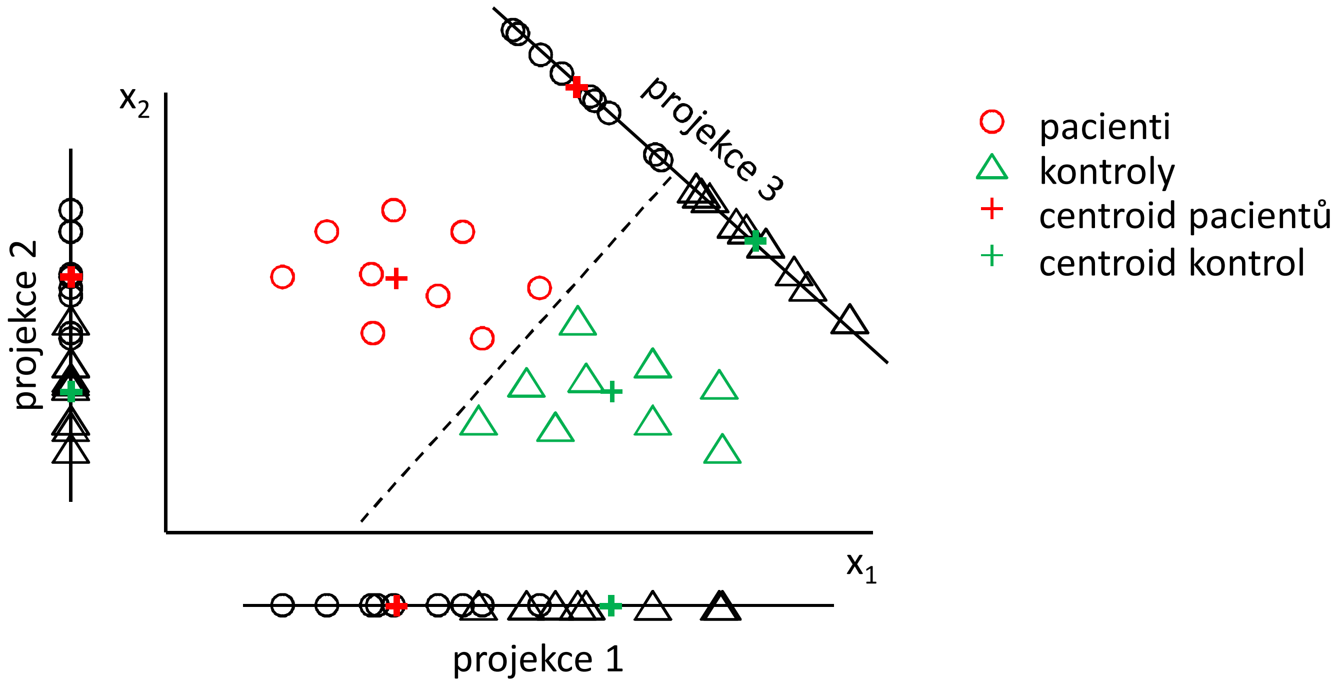
Fisherova lineární diskriminace

- jiný název: Fisherova lineární diskriminační analýza (FLDA)
- použití pro lineární klasifikaci
- princip: transformace do jednorozměrného prostoru tak, aby se třídy od sebe maximálně oddělily



- předpoklad: vícerozměrné normální rozdělení u jednotlivých skupin

Fisherova lineární diskriminace – princip



- podstatou FLDA tedy projekce do 1-D prostoru tak, že chceme:
  - maximalizovat vzdálenost skupin
  - minimalizovat variabilitu uvnitř skupin
- Fisherovo diskriminační kritérium je tedy ve tvaru: ( ) $\frac{(\qquad)}{\qquad}$

kde a jsou rozptyly uvnitř třídy pacientů resp. kontrol po projekci do 1-D prostoru a a jsou projekce centroidu třídy pacientů resp. kontrol

Fisherovo diskriminační kritérium – úpravy, výpočet

- Fisherovo diskriminační kritérium: ( ) ( )
- Fisher. diskr. kritérium lze rovněž vyjádřit jako: ( ) ( ) , kde:
  - je suma čtverců variability mezi skupinami
  - je suma čtverců variability uvnitř skupin
  - je váhový vektor udávající směr 1-D prostoru, do něhož promítáme
- z čehož po úpravách vypočteme váhový vektor jako: ( )
- hranice je pak dána: , kde je průmět hraničního bodu v 1-D prostoru a lze ho vypočítat jako:
- pokud chceme zařadit nový subjekt do jedné z daných tříd, jeho průmět do 1-D prostoru ( ) srovnáme s průmětem hraničního bodu :
  - Pokud (přičemž), subjekt zařadíme do skupiny kontrolních subjektů
  - Pokud (přičemž), subjekt zařadíme do skupiny pacientů

Souvislost lineární diskriminační analýzy s logistickou regresí

- stejně jako lineární diskriminační analýzu lze i logistickou regresi použít pro zařazení objektů/subjektů do hodnocených skupin
- hlavním cílem logistické regrese je ale identifikace vztahů mezi spojitými či binárními prediktory a binárním endpointem (výskyt onemocnění, úmrtí, komplikace atd.) a jejich popis pomocí poměru šancí (odds ratio)
- logistická regrese patří do skupiny zobecněných lineárních modelů
- výstupy logistické regrese:

Model Summary

Step	-2 Log likelihood	Cox & Snell R Square	Nagelkerke R Square
1	64,211[a]	,525	,700

a. Estimation terminated at iteration number 7 because parameter estimates changed by less than .001.

Hosmer and Lemeshow Test

Step	Chi-square	df	Sig.
1	6,832	8	,555

Classification Table[a]

Observed			Predicted		
			VERSICOL		Percentage Correct
			,00000000	1,00000000	
Step 1	VERSICOL	,00000000	45	5	90,0
		1,00000000	6	44	88,0
	Overall Percentage				89,0

a. The cut value is .500

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“