Osnova přednášky Lineární diskriminační analýza

1. Motivace

Diskriminační analýza patří k vícerozměrným statistickým metodám a zabývá se klasifikací objektů do $r \geq 2$ skupin na základě znalosti vektorů pozorování těchto objektů.

Zakladatelem DA je R. A. Fisher

Řeší problém, jak získat jednu či více rovnic, které umožní klasifikovat objekty do skupin. Tyto rovnice se nazývají klasifikační neboli diskriminační funkce a kombinují jednotlivé proměnné a jejich váhy tak, aby bylo možné určit skupinu, do které klasifikovaný objekt s největší pravděpodobností patří.

2. Možnosti použití diskriminační analýzy

Technické obory:
Při kontrole jakosti či spolehlivosti lze ve výběrovém souboru výrobků změřit nějaké kvantitativní proměnné (např. rozměry, hmotnost, chemické složení apod.), pak výrobky podrobit zátěži a sledovat, zda tuto zátěž vydrží nebo ne. K predikci chování dalších výrobků při zátěži je skutečné zátěži nemusíme vystavovat, stačí, když provedeme potřebná měření kvantitativních proměnných.

Lékařství
Máme soubor pacientů, u nichž jsou diagnostikovány určité choroby. Pro každého pacienta máme k dispozici výsledky různých laboratorních testů. Pokud existuje souvislost mezi výsledky testů a diagnózou, může se lékař u nových pacientů rozhodovat pro určitou diagnózu (a tedy i způsob léčení) na základě výsledků testů.

Bankovnictví
Banka sleduje ve výběrovém souboru klientů, jak splácejí poskytnutý úvěr a kromě toho řadu dalších ukazatelů (věk, rodinný stav, výši příjmu, …). Následně na tomto základě může vyhodnocovat potenciální žadatele o úvěr jako více či méně důvěryhodné.

Archeologie
Při vykopávkách byly nalézány hroby s kostrami pravěkých lidí. Na základě nějakých charakteristických vlastností (délka určité kosti, úhly kostí na lebce,…) bylo možné další nalezené kostry zařadit k určitému historickému období, kultuře a rase.

3. LDA pro dvě skupiny objektů

3.1. Odvození bayesovského rozhodovacího pravidla

V 1. skupině je n_1 objektů, ve 2. skupině n_2 objektů. Každý objekt je charakterizován p-rozměrným vektorem pozorování $\mathbf{X} = (X_1, \ldots, X_p)'$.

Předpokládáme, že v h-té skupině má náhodný vektor $\mathbf{X}$ hustotu $\varphi_h(\mathbf{x})$, h = 1, 2.

Nechť H_h je jev „objekt patří do h-té skupiny“.

Apriorní pravděpodobnost $P(H_h)$ příslušnosti objektu k h-té skupině označíme π_h, h = 1, 2.

Známe-li u nějakého objektu vektor pozorování **x**, můžeme podle Bayesova vzorce vypočítat aposteriorní pravděpodobnost příslušnosti objektu ke skupině:

$$P\left(H_h / \mathbf{X} = \mathbf{x}\right) = \frac{\pi_h \varphi_h(\mathbf{x})}{\pi_1 \varphi_1(\mathbf{x}) + \pi_2 \varphi_2(\mathbf{x})}, \; h = 1, 2$$

Rozhodovací pravidlo: nový objekt zařadíme do té skupiny, u níž je aposteriorní pravděpodobnost větší.

Objekt s vektorem pozorování **x** zařadíme do 1. skupiny, když $\pi_1\varphi_1(\mathbf{x}) > \pi_2\varphi_2(\mathbf{x})$, jinak ho zařadíme do 2. skupiny.

Součin $\pi_h\varphi_h(\mathbf{x})$ se nazývá diskriminační skór pro h-tou skupinu.

Lze ukázat, že bayesovské rozhodovací pravidlo je optimální v tom smyslu, že minimalizuje celkovou pravděpodobnost mylné klasifikace.

3.2. Fisherova lineární diskriminační funkce pro dvě skupiny objektů

V lineární diskriminační analýze se předpokládá, že hustota v h-té skupině je normální a má parametry $\boldsymbol{\mu}_h$, $\boldsymbol{\Sigma}$, tj.

$$\varphi_h(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\det(2\pi\boldsymbol{\Sigma}_h)}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_h)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_h)\right), \text{ h = 1, 2.}$$

Lze odvodit, že **lineární diskriminační skór** pro h-tou skupinu (tzv. Andersonova diskriminační statistika) - má tvar $\lambda_h(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\mu}_h{}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_h{}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_h + \ln\pi_h$, h = 1, 2.

Objekt s vektorem pozorování **x** tedy zařadíme do 1. skupiny, když $\lambda_1(\mathbf{x}) > \lambda_2(\mathbf{x})$, jinak ho zařadíme do 2. skupiny.

Vzhledem k tomu, že máme jen dvě skupiny objektů, lze rozhodnutí o zařazení objektu do skupiny učinit na základě rozdílu

$$\lambda(\mathbf{x}) = \lambda_1(\mathbf{x}) - \lambda_2(\mathbf{x}) = \left(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2\right)' \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\mu}_1' \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2' \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_2\right) + \ln \pi_1 - \ln \pi_2 .$$

Funkce $\lambda(\mathbf{x})$ se nazývá **Fisherova lineární diskriminační funkce**. Označíme-li

$$\boldsymbol{\beta}' = \left(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2\right)' \boldsymbol{\Sigma}^{-1}, \gamma = -\frac{1}{2}\boldsymbol{\beta}'(\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\mu}_2) + \ln \pi_1 - \ln \pi_2,$$

můžeme Fisherovu lineární diskriminační funkci psát ve tvaru

$$\lambda(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\beta}'\mathbf{x} + \gamma.$$

Znamená to, že jsme našli takovou lineární kombinaci vektoru pozorování $\mathbf{x}$, která nám umožní minimalizovat celkovou pravděpodobnost mylného zařazení objektu do skupiny. Objekt s vektorem pozorování $\mathbf{x}$ tedy zařadíme do 1. skupiny, když $\lambda(\mathbf{x}) > 0$, jinak ho zařadíme do 2. skupiny.

3.3. Modifikace pro případ neznámých parametrů

Při praktickém použití diskriminační analýzy většinou neznáme parametry $\boldsymbol{\mu}_1$, $\boldsymbol{\mu}_2$, $\boldsymbol{\Sigma}$ ani apriorní pravděpodobnosti π_1, π_2. V takovém případě používáme odhady:

$\boldsymbol{\mu}_h \to \mathbf{M}_h$, h = 1, 2

$$\boldsymbol{\Sigma} \to \mathbf{S} = \frac{(n_1 - 1)\mathbf{S}_1 + (n_2 - 1)\mathbf{S}_2}{n_1 + n_2 - 2}$$

$$\pi_h \to \frac{n_h}{n}, \ h = 1, 2.$$

Odhad Fisherovy lineární diskriminační funkce $\lambda(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\beta}'\mathbf{x} + \gamma$:

$L(\mathbf{x}) = \mathbf{b}'\mathbf{x} + g$, kde

$$\mathbf{b}' = (\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2)'\mathbf{S}^{-1}, \ g = -\frac{1}{2}\mathbf{b}'(\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2) + \ln p_1 - \ln p_2.$$

3.4. Posouzení účinnosti diskriminace resubstituční metodou

Resubstituční metoda spočívá v uplatnění zkonstruovaného rozhodovacího pravidla na objekty se známou příslušností ke skupině. Uvažujeme postupně všechny tyto objekty a jejich zařazení podle rozhodovacího pravidla porovnáme se skutečnou příslušností ke skupině. Stanovíme podíl správně a mylně zařazených objektů.

skutečnost	zařazení		součet
	1. skupina	2. skupina	
1. skupina	n_{11}	n_{12}	$n_{1.} = n_1$
2. skupina	n_{21}	n_{22}	$n_{2.} = n_2$
součet	$n_{.1}$	$n_{.2}$	n

Podíl správně zařazených objektů:

$$\frac{n_{11} + n_{22}}{n}$$

Podíl mylně zařazených objektů:

$$\frac{n_{12} + n_{21}}{n}$$

3.5. Postup při lineární diskriminační analýze

1. Vzhledem k povaze úlohy určíme veličiny X_1, ..., X_p a pořídíme $n_1 + n_2$ p-rozměrných pozorování tak, aby n_1 objektů pocházelo z 1. skupiny a n_2 objektů z 2. skupiny.

2. Na zvolené hladině významnosti α testujeme hypotézy o normalitě rozložení v obou skupinách a orientačně posoudíme linearitu vztahů mezi sledovanými proměnnými v obou skupinách.

3. Vypočteme odhady $\mathbf{M}_1$, $\mathbf{M}_2$, $\mathbf{S}_1$, $\mathbf{S}_2$, $\mathbf{S}$, p_1, p_2.

4. Na zvolené hladině významnosti α testujeme hypotézy o shodě variančních matic a vektorů středních hodnot v obou skupinách.

5. Vypočteme odhad $L(\mathbf{x})$ Fisherovy lineární diskriminační funkce. Objekt s vektorem pozorování $\mathbf{x}$ přiřadíme k 1. skupině, když $L(\mathbf{x}) > 0$, jinak ho přiřadíme ke 2. skupině.

6. Účinnost diskriminace posoudíme metodou resubstituce.

3.6. Příklad

V souboru 50 rodin byly zjišťovány tyto údaje:

- zda v posledních dvou letech rodina navštívila jistou rekreační oblast (veličina ID, nabývá hodnoty 0 pro odpověď „ne“, hodnoty 1 pro odpověď „ano“)
- roční příjem v tisících dolarů (veličina X_1)
- postoj k cestování (veličina X_2, devítibodová škála, 1 = naprosto odmítavý, 9 = veskrze kladný)
- význam přičítaný rodinné dovolené (veličina X_3, devítibodová škála, 1 = nejnižší, 9 = nejvyšší)
- počet členů rodiny (veličina X_4)
- věk nejstaršího člena rodiny (veličina X_5).

Pro uvedená data sestrojte Fisherovu lineární diskriminační funkci, která pomocí veličin $X_1, \ldots, X_5$ umožní rozlišit rodiny navštěvující uvedenou rekreační oblast od rodin, které do této oblasti nejezdí.

Upozornění: Tato úloha byla řešena v přednášce „Binární logistická regrese“.

Datový soubor:

číslo	ID	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	číslo	ID	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5
1.	0	32,1	5	4	6	58,0	26.	0	48,2	3	5	4	43,0
2.	0	40,0	4	4	3	42,0	27.	0	54,5	7	3	3	37,0
3.	0	36,2	4	3	2	55,0	28.	0	38,2	2	5	3	49,0
4.	0	43,2	2	5	2	57,0	29.	0	41,7	4	2	3	40,0
5.	0	50,4	5	2	4	37,0	30.	1	50,2	5	8	3	43,0
6.	0	45,2	4	4	4	42,0	31.	1	70,3	6	7	4	61,0
7.	0	44,1	6	6	3	42,0	32.	1	62,9	7	5	6	52,0
8.	0	38,3	6	6	2	45,0	33.	1	48,5	7	5	5	36,0
9.	0	55,0	1	5	4	57,0	34.	1	52,7	6	6	4	55,0
10.	0	56,1	3	5	5	51,0	35.	1	75,0	8	7	5	68,0
11.	0	48,2	4	3	6	47,0	36.	1	46,2	5	3	3	62,0
12.	0	35,0	6	4	5	64,0	37.	1	57,0	2	4	6	51,0
13.	0	37,3	2	7	3	54,0	38.	1	64,1	4	5	4	57,0
14.	0	41,8	5	1	5	56,0	39.	1	68,1	4	6	5	45,0
15.	0	57,0	8	3	4	36,0	40.	1	73,4	6	7	5	44,0
16.	0	33,4	6	8	4	50,0	41.	1	71,6	5	8	4	64,0
17.	0	41,5	5	6	3	38,0	42.	1	56,2	1	8	6	54,0
18.	0	39,8	4	5	4	42,0	43.	1	49,3	4	2	3	56,0
19.	0	37,5	3	2	3	48,0	44.	1	62,0	5	6	2	58,0
20.	0	41,3	3	3	2	42,0	45.	1	50,8	4	7	3	45,0
21.	0	35,0	4	3	4	54,0	46.	1	63,6	7	4	7	55,0
22.	0	49,6	5	5	5	39,0	47.	1	54,0	6	7	4	58,0
23.	0	45,5	4	4	4	41,0	48.	1	49,0	5	4	3	60,0
24.	0	39,4	6	5	3	44,0	49.	1	68,0	6	6	6	46,0
25.	0	37,0	2	6	5	51,0	50.	1	62,1	5	6	3	56,0

Řešení:

Testování normality náhodných veličin $X_1, \ldots, X_5$ v daných dvou skupinách rodin pomocí S - W testu:

Pro skupinu rodin, které danou rekreační oblast nenavštěvují:

Proměnná	Testy normality (dovolena.sta) Zhrnout podmínku: ID=0 N	W	p
X1: roční příjem v tisících dolarů	29	0,940188	0,101411
X2: postoj k cestování (škála 9 bodů)	29	0,964071	0,412187
X3: význam rodinné dovolené (škála 9 bodů)	29	0,964432	0,420319
X4: počet členů rodiny	29	0,917696	0,026668
X5: věk nejstaršího člena	29	0,944508	0,131598

Pro skupinu rodin, které danou rekreační oblast navštěvují:

Proměnná	Testy normality (dovolena.sta) Zhrnout podmínku: ID=1 N	W	p
X1: roční příjem v tisících dolarů	21	0,935874	0,180430
X2: postoj k cestování (škála 9 bodů)	21	0,930271	0,139382
X3: význam rodinné dovolené (škála 9 bodů)	21	0,934717	0,171087
X4: počet členů rodiny	21	0,928224	0,126815
X5: věk nejstaršího člena	21	0,967589	0,679311

Na hladině významnosti 0,05 zamítáme hypotézu o normalitě u veličiny X_4 ve skupině rodin, které danou rekreační oblast nenavštěvují.

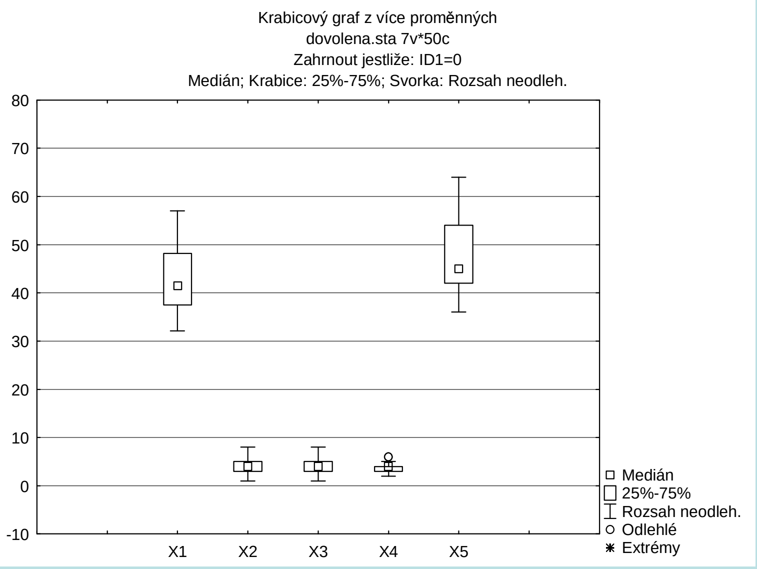
Odhad vektoru středních hodnot $\mathbf{M}_1$:

Proměnná	Popisné statistiky (dovolena.sta) Zhrnout podmínku: ID=0	
	N platných	Průměr
X1	29	42,84483
X2	29	4,24138
X3	29	4,27586
X4	29	3,72414
X5	29	46,93103

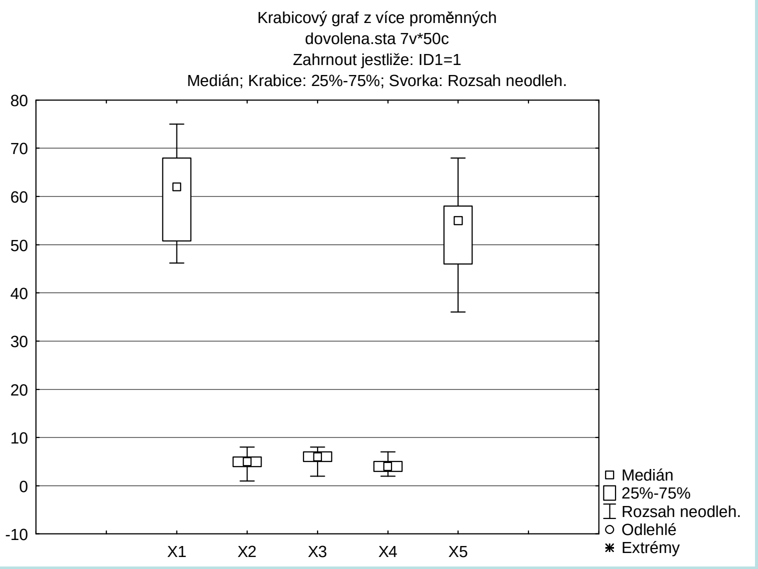
Odhad vektoru středních hodnot $\mathbf{M}_2$:

Proměnná	Popisné statistiky (dovolena.sta) Zhrnout podmínku: ID=1	
	N platných	Průměr
X1	21	59,76190
X2	21	5,14286
X3	21	5,76190
X4	21	4,33333
X5	21	53,61905

Krabicové grafy:



Krabicové grafy:



Odhad varianční matice $\mathbf{S}_1$

Proměnná	Kovariance (dovolena.sta) Zhrnout podmínku: ID=0 X1	X2	X3	X4	X5
X1	49,1947	0,99594	-2,24138	1,094951	-24,1647
X2	0,9959	2,76108	-0,31897	0,140394	-4,7328
X3	-2,2414	-0,31897	2,63547	-0,171182	1,1268
X4	1,0950	0,14039	-0,17118	1,278325	1,9446
X5	-24,1647	-4,73276	1,12685	1,944581	57,2808

Odhad varianční matice $\mathbf{S}_2$

Proměnná	Kovariance (dovolena.sta) Zhrnout podmínku: ID=1 X1	X2	X3	X4	X5
X1	83,59048	4,300714	6,39048	4,70333	16,25476
X2	4,30071	2,728571	0,03571	0,20000	1,05714
X3	6,39048	0,035714	2,79048	0,03333	-1,04524
X4	4,70333	0,200000	0,03333	1,83333	-2,46667
X5	16,25476	1,057143	-1,04524	-2,46667	63,84762

Odhad společné varianční matice $\mathbf{S}$

	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5
X1	63,53	2,37	1,36	2,60	-7,32
X2	2,37	2,75	-0,17	0,17	-2,32
X3	1,36	-0,17	2,70	-0,09	0,22
X4	2,60	0,17	-0,09	1,51	0,11
X5	-7,32	-2,32	0,22	0,11	60,02

Boxův test shody variančních matic:

Statistika M = $(n_1 + n_2 - 2) \ln(\det \mathbf{S}) - (n_1 - 1) \ln(\det \mathbf{S}_1) - (n_2 - 1) \ln(\det \mathbf{S}_2) = 26{,}6179$

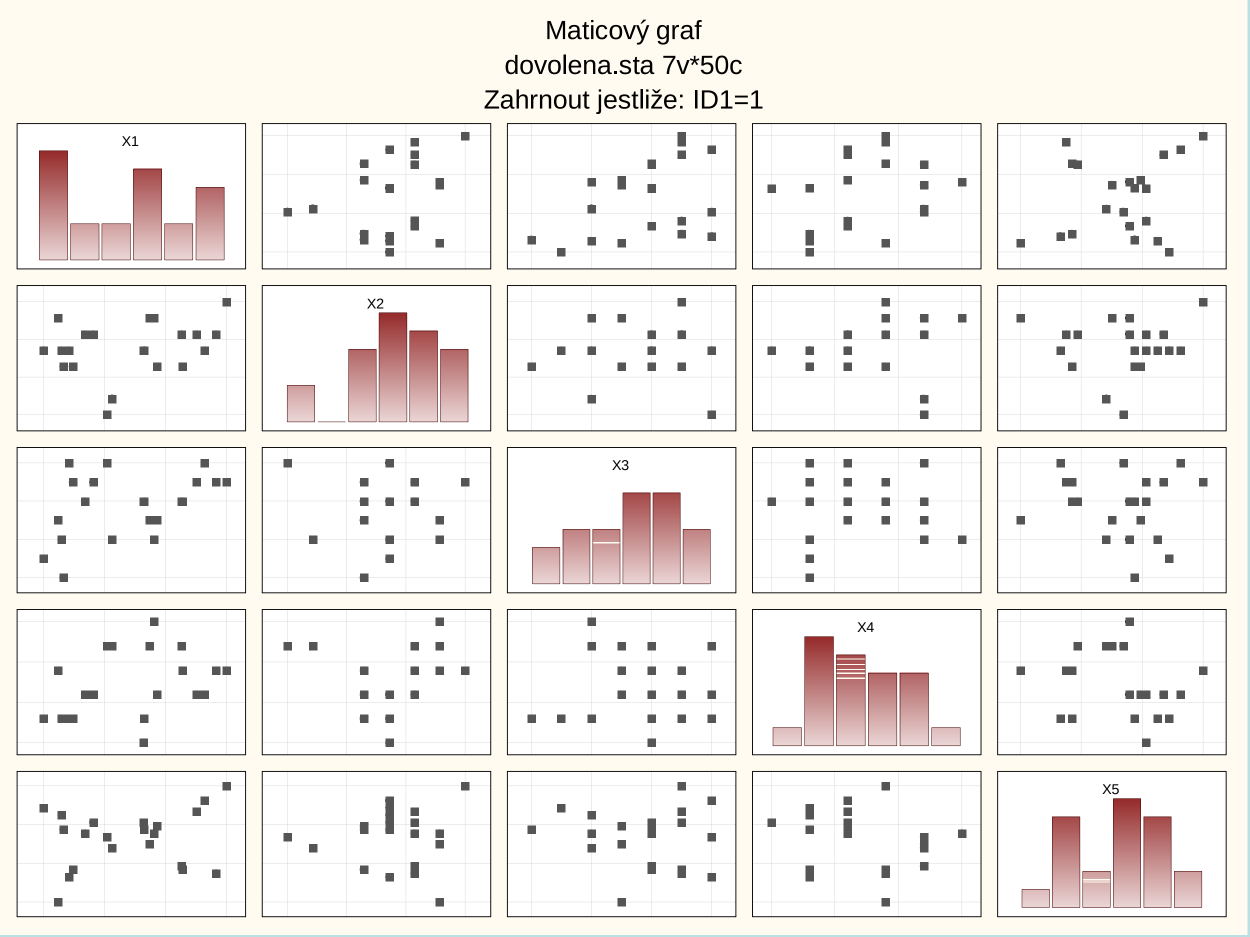
Konstanta zlepšující aproximaci $C_p = 1 - \frac{2p^2 + 3p - 1}{6(p+1)} \left(\frac{1}{n_1 - 1} + \frac{1}{n_2 - 1} - \frac{1}{n_1 + n_2 - 2} \right) = 0{,}8847$

Testová statistika $MC_p = 23{,}5468$

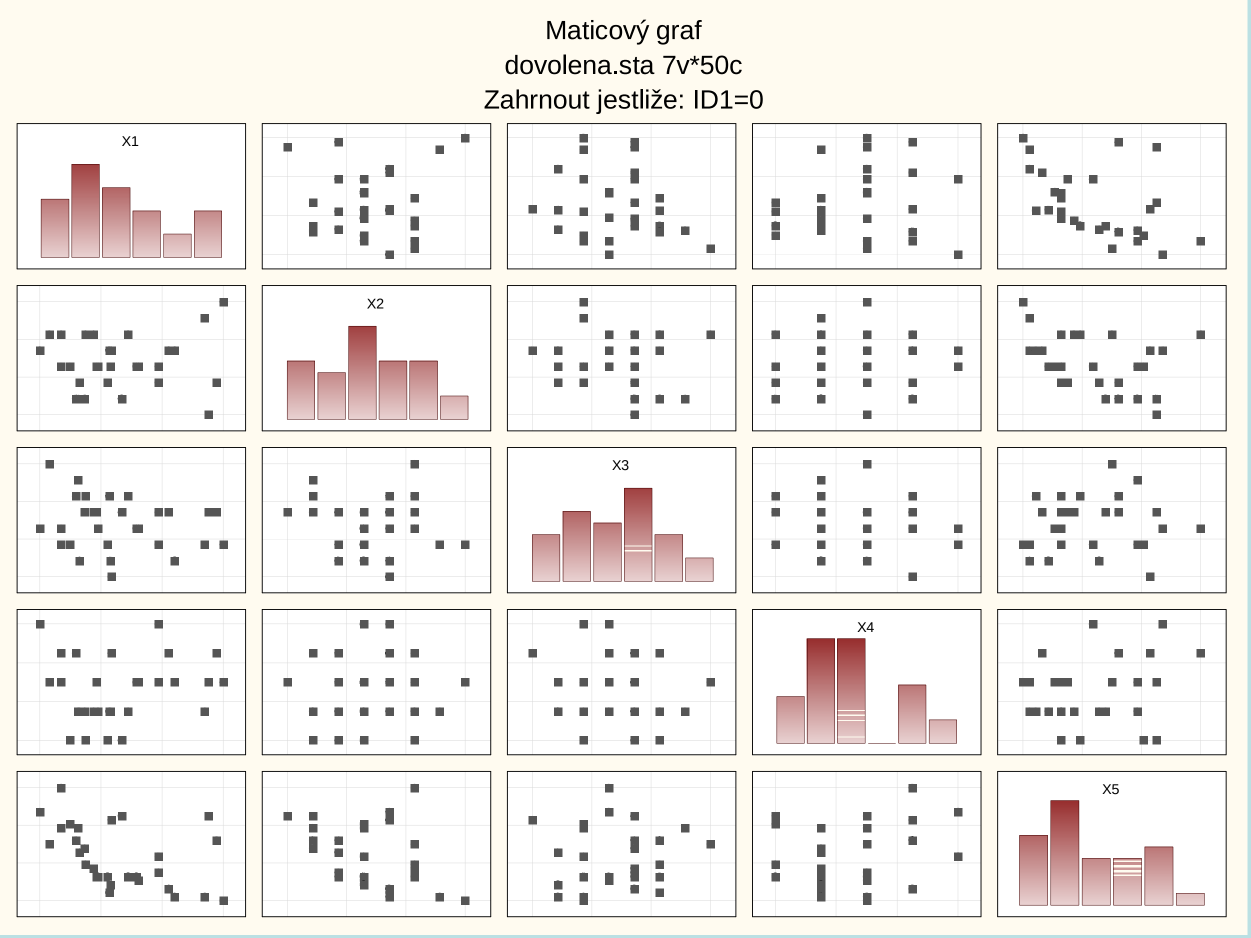
Kritický obor: $W = \left\langle \chi^2_{1-\alpha}\left(\frac{p(p+1)}{2}\right), \infty \right) = \left\langle \chi^2_{0,95}(10), \infty \right) = \left\langle 24{,}9958, \infty \right)$.

Protože testová statistika neleží v kritickém oboru, nezamítáme na asymptotické hladině významnosti 0,05 hypotézu o shodě variančních matic $\mathbf{\Sigma}_1$, $\mathbf{\Sigma}_2$.

Linearita vztahů mezi proměnnými ve skupině rodin navštěvujících danou oblast



Linearita vztahů mezi proměnnými ve skupině rodin nenavštěvujících danou oblast



Test shody vektorů středních hodnot (Hotellingův T2 test):

Testová statistika $\frac{n_1 + n_2 - p - 1}{p(n_1 + n_2 - 2)} \cdot \frac{n_1 n_2}{n_1 + n_2} (\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2)' \mathbf{S}^{-1} (\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2) = 14{,}2194$

Kvantil $F_{1-\alpha}(p, n_1+n_2-p-1) = F_{0,95}(5,44) = 2{,}427$

Protože testová statistika se realizuje v kritickém oboru, zamítáme na hladině významnosti 0,05 hypotézu o shodě vektorů středních hodnot $\boldsymbol{\mu}_1$, $\boldsymbol{\mu}_2$.

Význam jednotlivých proměnných v modelu

N=50	Wilk. Lambda	Parc. Lambda	F na vyj (1,44)	p-hodn.	Toler.	1-toler. R^2
	Výsledky diskriminační funkční analýzy (dovolena.sta) Počet prom. v modelu: 5; grupovací: ID1 (2 skup) Wilk. lambda: ,38229 přibliž F (5,44)=14,219 p< ,0000					
X1	0,627513	0,609207	28,22504	0,000003	0,879866	0,120134
X2	0,388609	0,983729	0,72778	0,398223	0,934715	0,065285
X3	0,400086	0,955507	2,04884	0,159388	0,977164	0,022836
X4	0,382565	0,999270	0,03215	0,858527	0,921303	0,078697
X5	0,439319	0,870177	6,56444	0,013904	0,956782	0,043218

V záhlaví této tabulky je uvedena Wilksova Lambda (na škále od 0 – nejlepší diskriminace do 1 – žádná diskriminace) a její přepočet na testovou statistiku F pro Hotellingův test shody vektorů středních hodnot (14,219) a odpovídající p-hodnota (je blízká 0).
V 1. sloupci (Wilk. Lambda) jsou hodnoty Wilksovy Lambdy při vyřazení dané proměnné z modelu (vyšší hodnoty jsou lepší).
2. sloupec (Parc. Lambda) obsahuje unikátní příspěvky proměnných k diskriminaci.
Ve 3. sloupci jsou přepočty parciálních Lambda na testové statistiky a ve 4. sloupci pak odpovídající p-hodnoty. Podle p-hodnot u jednotlivých proměnných soudíme, že pro diskriminaci jsou významné proměnné X_1 a X_5.
5. sloupec (Tolerance) udává unikátní variabilitu proměnné nevysvětlenou ostatními proměnnými v modelu.
6. sloupec (1-toler., R^2) udává variabilitu proměnné vysvětlenou ostatními proměnnými.

Mahalanobisova vzdálenost v diskriminační analýze

Používá se pro popis vzájemných vzdáleností centroidů jednotlivých skupin.

Vzdálenosti mezi skupinami:

ID1	Mahalanobisovy vzdálenosti^2 (dovolena.sta) návštěva ne	návštěva ano
návštěva ne	0,000000	6,367867
návštěva ano	6,367867	0,000000

p-hodnoty pro testy hypotéz, že vzdálenosti jsou nulové:

ID1	p-hodnot (dovolena.sta) návštěva ne	návštěva ano
návštěva ne		0,000000
návštěva ano	0,000000	

Lze také získat Mahalanobisovy vzdálenosti jednotlivých objektů od centroidů skupin, zde jsou uvedeny tyto vzdálenosti pro prvních 6 rodin:

Případ	Mahalanobisovy vzdálenosti (dovolena.sta) Nesprávná klasifikace je označena * Pozorova Klasif.	návštěva ne p=,58000	návštěva ano p=,42000
1	návštěva ne	9,18363	18,11825
2	návštěva ne	0,88533	10,53314
3	návštěva ne	3,90372	12,30937
4	návštěva ne	5,35649	8,74744
5	návštěva ne	4,41397	11,30806
6	návštěva ne	0,62136	7,62423

Stanovení odhadu Fisherovy lineární diskriminační funkce:

$$L(\mathbf{x}) = \mathbf{b}'\mathbf{x} + g, \text{ kde } \mathbf{b}' = (\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2)'\mathbf{S}^{-1},\ g = -\frac{1}{2}\mathbf{b}'(\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2) + \ln p_1 - \ln p_2.$$

Odhad vektoru středních hodnot v 1. skupině:

Proměnná	Popisné statistiky (dovolena.sta) Zhrnout podmínku: ID=0 N platných	Průměr
X1	29	42,84483
X2	29	4,24138
X3	29	4,27586
X4	29	3,72414
X5	29	46,93103

Odhad vektoru středních hodnot ve 2. skupině:

Proměnná	Popisné statistiky (dovolena.sta) Zhrnout podmínku: ID=1 N platných	Průměr
X1	21	59,76190
X2	21	5,14286
X3	21	5,76190
X4	21	4,33333
X5	21	53,61905

Odhad společné varianční matice **S**:

	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5
X1	63,53	2,37	1,36	2,60	-7,32
X2	2,37	2,75	-0,17	0,17	-2,32
X3	1,36	-0,17	2,70	-0,09	0,22
X4	2,60	0,17	-0,09	1,51	0,11
X5	-7,32	-2,32	0,22	0,11	60,02

Odhady apriorních pravděpodobností:

$$p_1 = \frac{n_1}{n} = \frac{29}{50} = 0{,}58,\ p_2 = \frac{n_2}{n} = \frac{21}{50} = 0{,}42$$

Po dosazení dostaneme:

$\mathbf{b}' = (\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2)'\mathbf{S}^{-1} = (-0{,}2865\ \ -0{,}2556\ \ -0{,}4169\ \ 0{,}0736\ \ -0{,}1527)$

$g = -\frac{1}{2}\mathbf{b}'(\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2) + \ln p_1 - \ln p_2 = 24{,}7666$

$L(\mathbf{x}) = \mathbf{b}'\mathbf{x} + g = -0{,}2685X_1 - 0{,}2556X_2 - 0{,}4169X_3 + 0{,}0736X_4 - 0{,}1527X_5 + 24{,}7666$

Klasifikace nového případu

Předpokládejme nyní, že jsme prozkoumali další rodinu, která

má roční příjem $X_1 = 51{,}8$ tisíc dolarů,

k cestování zaujímá postoj ohodnocený $X_2 = 6$ body,

rodinné dovolené přičítá význam ohodnocený $X_3 = 7$ body,

má $X_4 = 4$ členy

a nejstaršímu členovi je $X_5 = 51$ let.

Na základě těchto údajů se pokusíme pomocí Fisherovy lineární diskriminační funkce zařadit tu-to rodinu do skupiny rodin, které buď navštěvují nebo nenavštěvují danou rekreační oblast:

$$L(\mathbf{x}) = -0{,}2685X_1 - 0{,}2556X_2 - 0{,}4169X_3 + 0{,}0736X_4 - 0{,}1527X_5 + 24{,}7666 =$$

$$= -0{,}2685*51{,}8 - 0{,}2556*6 - 0{,}4169*7 + 0{,}0736*4 - 0{,}1527*51 + 24{,}7666 = -1{,}0836.$$

Protože $L(\mathbf{x}) < 0$, zařadíme tuto rodinu do skupiny rodin, které navštěvují danou rekreační oblast.

Posouzení účinnosti diskriminace resubstituční metodou:

Klasifikační matice:

Skup.	Klasifikační matice (dovolena) Řádky: pozorované klasifikace Sloupce: předpovězené klasifikace % správných	návštěva ne p=,58000	návštěva ano p=,42000
návštěva ne	93,10345	27	2
návštěva ano	76,19048	5	16
Celkem	86,00000	32	18

Podíl správně zařazených objektů:

$$\frac{n_{11} + n_{22}}{n} = \frac{27 + 16}{50} = 0{,}86$$

Podíl mylně zařazených objektů:

$$\frac{n_{12} + n_{21}}{n} = \frac{5 + 2}{50} = 0{,}14$$

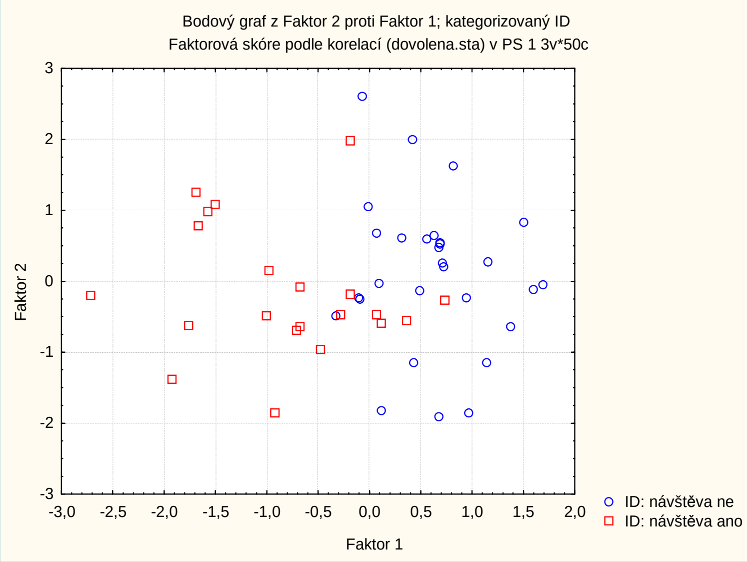
Pro určení chybně zařazených případů zvolíme na záložce Klasifikace možnost Klasifikace případů. Zjistíme, že v 1. skupině došlo k mylnému zařazení u rodin č. 9 a 10, ve 2. skupině u rodin číslo 30, 33, 36, 43, 45.

Porovnání s náhodnou klasifikací

Kdybychom zařazovali rodiny do skupin náhodně, pouze s ohledem na apriorní pravděpodobnosti π_1, π_2, tak bychom s pravděpodobností π_1 našli rodinu patřící do 1. skupiny, avšak s pravděpodobností π_2 bychom ji mylně zařadili do 2. skupiny. Naopak s pravděpodobností π_2 najdeme rodinu patřící do 2. skupiny, kterou s pravděpodobností π_1 mylně zařadíme do 1. skupiny. Celková pravděpodobnost mylné klasifikace je tedy: $\pi_1\pi_2 + \pi_2\pi_1 = 2\pi_1(1- \pi_1)$. Nahradíme-li apriorní pravděpodobnosti π_1, π_2 jejich odhady p_1, p_2 , dostaneme odhad celkové pravděpodobnosti mylné klasifikace $2p_1(1- p_1) = 2\cdot\frac{29}{50}\cdot\frac{21}{50} = 0,4872$.

Použitím diskriminační analýzy jsme tedy dosáhli výrazného zlepšení, pravděpodobnost mylné klasifikace klesla na 0,14.

Grafické znázornění případů na ploše prvních dvou hlavních komponent



4. Výběr proměnných pro klasifikaci krokovou metodou

Kroková metoda postupně vyhledává nejvhodnější soubor proměnných pro diskriminaci. Používá se buď jako dopředná nebo jako zpětná.

Význam jednotlivých proměnných pro diskriminaci se k každém kroku zkoumá pomocí zaváděcího a odstraňovacího kritéria.
Vybírání proměnných či jejich odstraňování skončí, když žádné další proměnné nesplňují zaváděcí nebo odstraňovací kritérium.

Upozornění: Před zařazením j-té proměnné do modelu se stanoví její tolerance $1-R_j^2$ (R_j^2 je čtverec vícenásobného koeficientu korelace, tj. koeficientu, který měří těsnost lineární závislosti veličiny X_j na ostatních veličinách). Tolerance je implicitně nastavená na 0,01.

Příklad: Použijte krokovou dopřednou (a poté zpětnou) metodu pro zařazování rodin do dvou skupin.

Řešení:

Výsledky dopředné metody:

N=50	Výsledky diskriminační funkční analýzy (dovolena.sta) krok 3, poč. prom. v modelu: 3; grupovací: ID1 (2 skup) Wilk. lambda: ,38880 přibliž F (3,46)=24,104 p< ,0000					
	Wilk. Lambda	Parc. Lambda	F na vyj (1,46)	p-hodn.	Toler.	1-toler. R^2
X1	0,719493	0,540386	39,12429	0,000000	0,974791	0,025209
X5	0,441811	0,880024	6,27128	0,015879	0,985042	0,014958
X3	0,405987	0,957678	2,03285	0,160683	0,988398	0,011602

Výsledky zpětné metody:

N=50	Výsledky diskriminační funkční analýzy (dovolena.sta) krok 4, poč. prom. v modelu: 1; grupovací: ID1 (2 skup) Wilk. lambda: ,46660 přibliž F (1,48)=54,871 p< ,0000					
	Wilk. Lambda	Parc. Lambda	F na vyj (1,48)	p-hodn.	Toler.	1-toler. R^2
X1	1,000000	0,466603	54,87122	0,000000	1,000000	0,00

Vidíme, že dopředná metoda skončila po třech krocích a vybrala proměnné X_1, X_5 a X_3.

Odhad Fisherovy lineární diskriminační funkce:

$L(\mathbf{x}) = -0{,}2743*X1 - 0{,}1434*X5 - 0{,}4009*X3 + 23{,}617$

Klasifikační matice je stejná jako v případě diskriminace podle všech proměnných (úspěšnost klasifikace je 86 %) a chybně zařazené případy jsou také stejné.

Použijeme-li krokovou zpětnou metodu, je po 4 krocích vybrána pouze proměnná X_1:
Odhad Fisherovy lineární diskriminační funkce:

$L(\mathbf{x}) = -0{,}2663*X1 + 13{,}9849$

Účinnost diskriminace poklesla na 80 %.

5. Lineární diskriminační analýza pro $r \geq 3$ skupin

5.1. Pravidlo pro zařazení objektu do skupiny

Opět předpokládáme, že ve všech r skupinách se vektory pozorování řídí p-rozměrným normálním rozložením, varianční matice jednotlivých skupin jsou shodné a vztahy mezi sledovanými p proměnnými jsou přibližně lineární.

Lineární diskriminační skór pro h-tou skupinu (Andersonova diskriminační statistika) má tvar:

$$\lambda_h(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\mu}_h^{'}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_h^{'}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_h + \ln \pi_h, \ h = 1, \ldots, r$$

Její odhad získáme dosazením $\mathbf{M}_h$, $\mathbf{S}$ a p_h:

$$L_h(\mathbf{x}) = \mathbf{M}_h^{'}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}\mathbf{M}_h^{'}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{M}_h + \ln p_h$$

Objekt neznámého původu, jehož vektor pozorování je **x**, bude zařazen do skupiny s nejvyšší hodnotou $L_h(\mathbf{x})$.

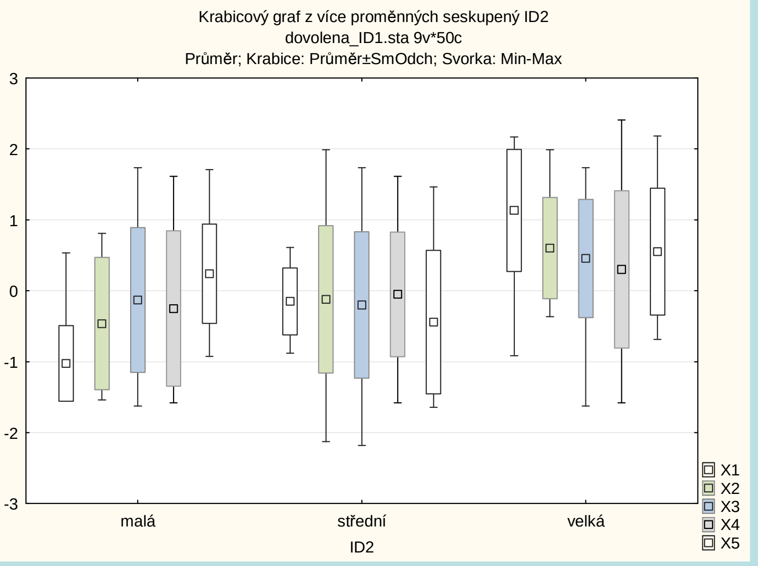
5.2. Příklad

Soubor rodin nyní roztřiďte do tří skupin podle proměnné ID2, tj. podle toho, jak velkou částku je rodina ochotna vydat z dovolenou (varianty „malá“, „střední“, „velká“).

Řešení:

Posouzení úrovně a variability proměnných X_1, …, X_5 v daných třech skupinách

Proměnná	ID2	N platných	Průměr	Sm.odch.
X1	malá	12	38,1	6,16
X2	malá	12	3,8	1,59
X3	malá	12	4,7	1,83
X4	malá	12	3,7	1,37
X5	malá	12	51,8	5,85
X1	střední	24	48,2	5,46
X2	střední	24	4,4	1,77
X3	střední	24	4,5	1,84
X4	střední	24	3,9	1,10
X5	střední	24	46,0	8,46
X1	velká	14	63,0	9,94
X2	velká	14	5,6	1,22
X3	velká	14	5,7	1,49
X4	velká	14	4,4	1,39
X5	velká	14	54,4	7,48



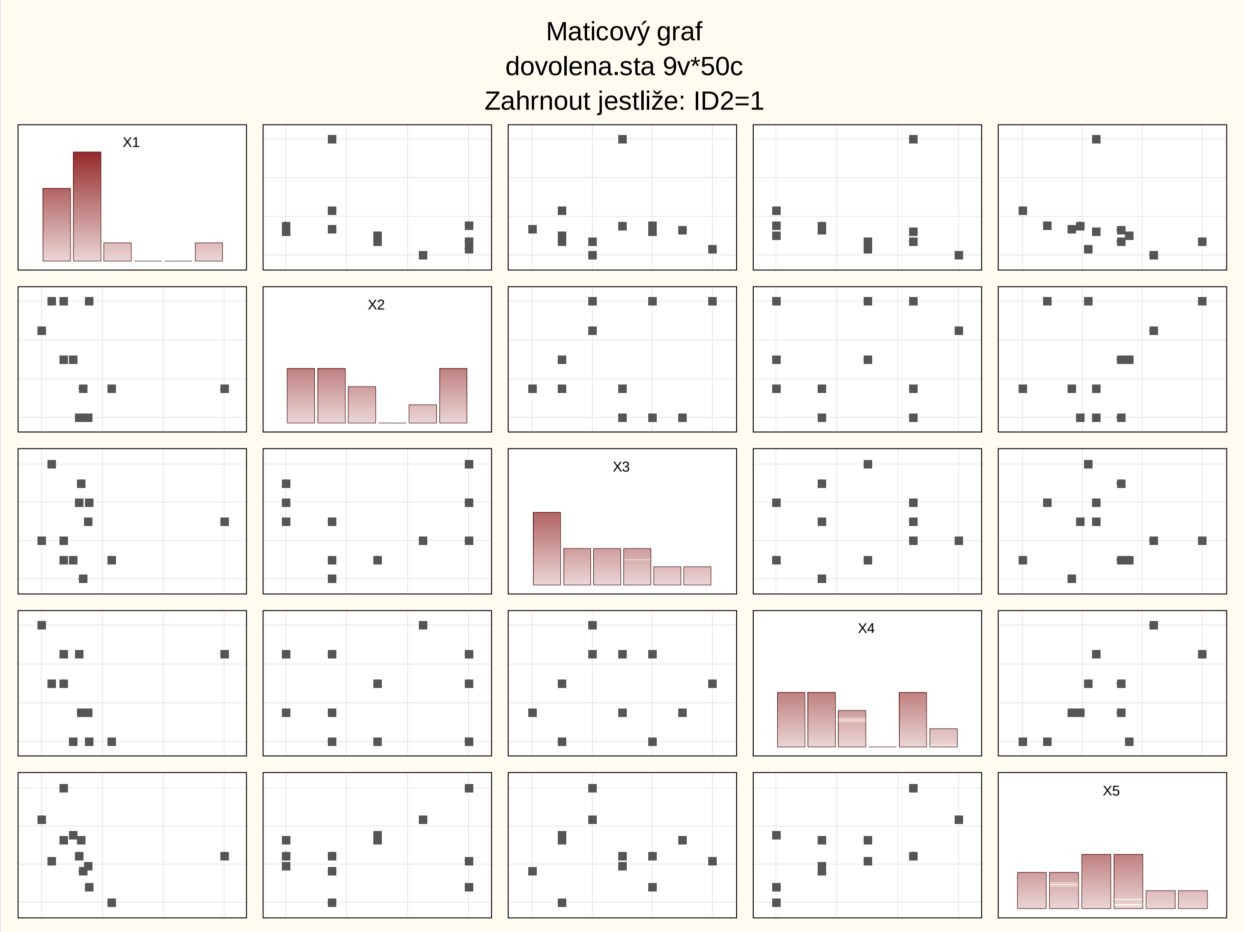
Ověření normality proměnných $X_1, \ldots, X_5$ v daných třech skupinách

Proměnná	Souhrnné výsledky Testy normality (dovolena.sta) ID2	N	W	p
X1: roční příjem v tisících dolarů	malá	12	0,706875	0,000982
X2: postoj k cestování (škála 9 bodů)	malá	12	0,867375	0,060535
X3: význam rodinné dovolené (škála 9 bodů)	malá	12	0,955130	0,712720
X4: počet členů rodiny	malá	12	0,907871	0,200341
X5: věk nejstaršího člena	malá	12	0,976999	0,968796
X1: roční příjem v tisících dolarů	střední	24	0,947240	0,235912
X2: postoj k cestování (škála 9 bodů)	střední	24	0,943681	0,196939
X3: význam rodinné dovolené (škála 9 bodů)	střední	24	0,962008	0,480070
X4: počet členů rodiny	střední	24	0,877051	0,007252
X5: věk nejstaršího člena	střední	24	0,882154	0,009185
X1: roční příjem v tisících dolarů	velká	14	0,897737	0,104575
X2: postoj k cestování (škála 9 bodů)	velká	14	0,922488	0,238745
X3: význam rodinné dovolené (škála 9 bodů)	velká	14	0,909165	0,153244
X4: počet členů rodiny	velká	14	0,958259	0,694341
X5: věk nejstaršího člena	velká	14	0,933244	0,338619

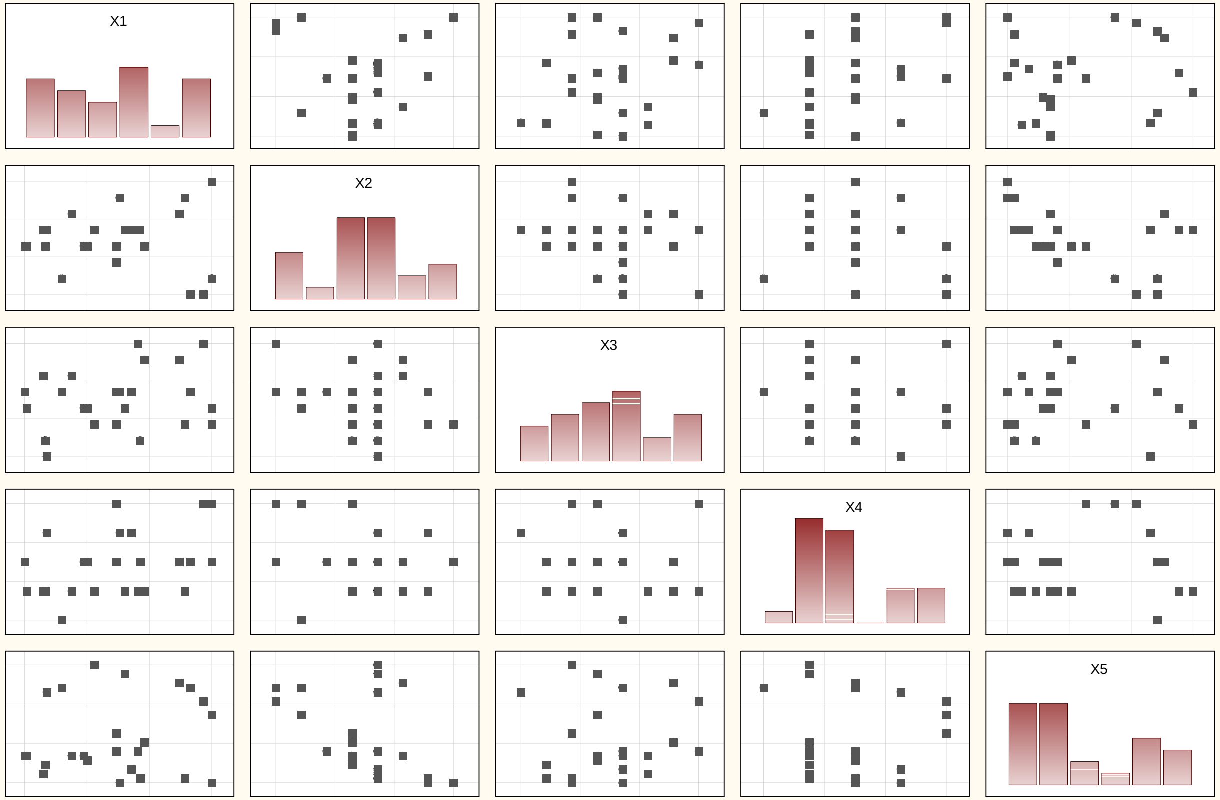
Boxův test shody variančních matic

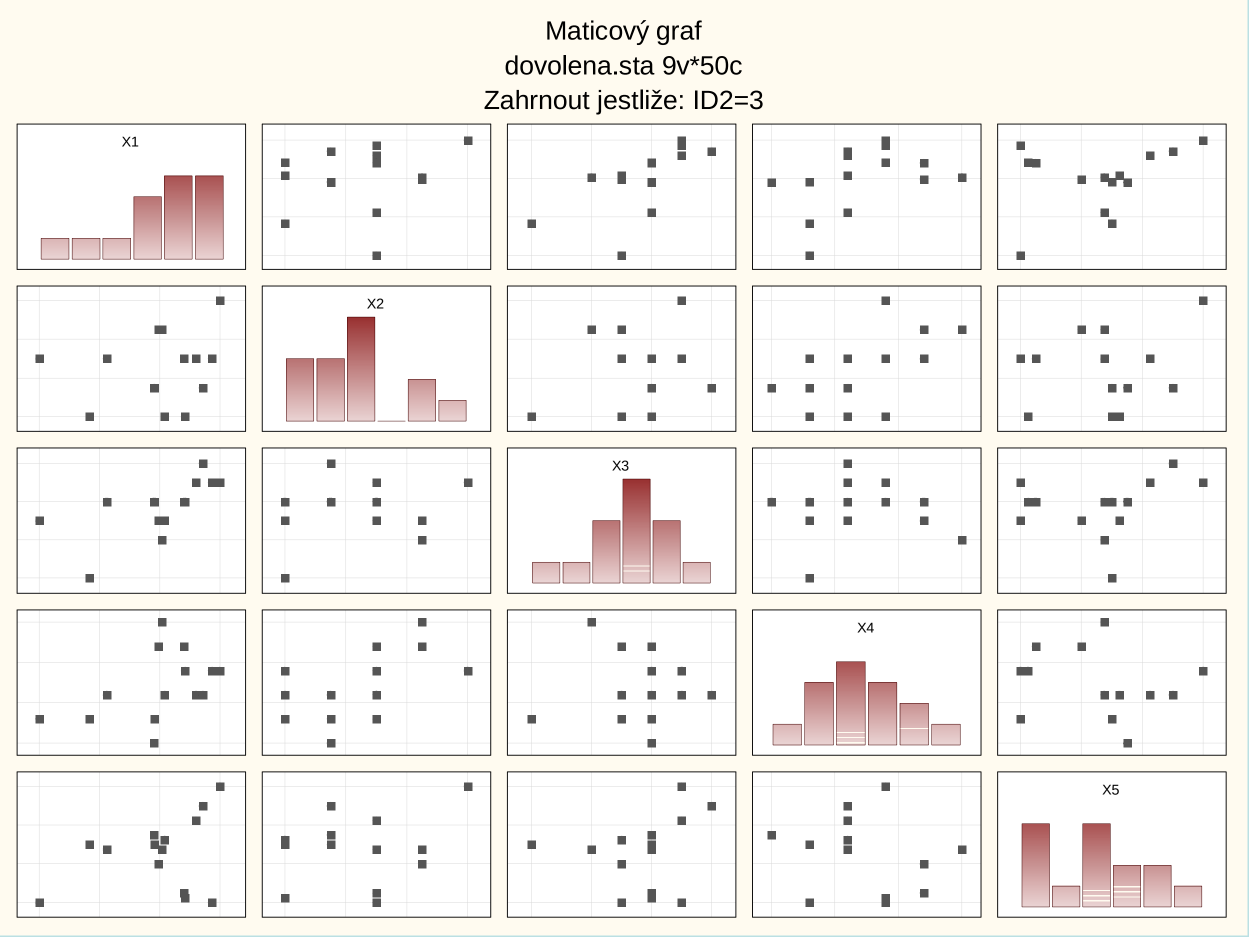
	Boxův M test (dovolena.sta) Efekt: "ID2" (Vypočteno pro všechny proměnné) Boxovo M	Chí-kv.	SV	p
Boxovo M	51,55790	42,84879	30	0,060418

Linearita vztahů proměnných $X_1, \ldots, X_5$ v daných třech skupinách



Maticový graf
dovolena.sta 9v*50c
Zahrnout jestliže: ID2=2




Maticový graf
dovolena.sta 9v*50c
Zahrnout jestliže: ID2=3
X1
X2
X3
X4
X5

Testování hypotézy o shodě vektorů středních hodnot pomocí MANOVY

Efekt	Vícerozměrné testy významnosti. (dovolena.sta) Sigma-omezená parametrizace Dekompozice efektivní hypotézy Test	Hodnota	F	Efekt SV	Chyba SV	p
Abs. člen	Wilksův	0,01010	842,8765	5	43	0,000000
	Pillaiův	0,98990	842,8765	5	43	0,000000
	Hotellng	98,00890	842,8765	5	43	0,000000
	Royův	98,00890	842,8765	5	43	0,000000
"ID2"	Wilksův	0,26322	8,1626	10	86	0,000000
	Pillaiův	0,86784	6,7455	10	88	0,000000
	Hotellng	2,30122	9,6651	10	84	0,000000
	Royův	2,05945	18,1231	5	44	0,000000

Odlišnost vektorů středních hodnot ve sledovaných třech skupinách je prokázána na hladině významnosti 0,05.

Nyní provedeme simultánní testy o složkách vektorů středních hodnot.

Matice **E** reziduální variability

Efekt	Matice SSCP (Z' Z) reziduí (dovolena.sta) Sigma-omezená parametrizace Dekompozice efektivní hypotézy					
Efekt	proměnné	X1	X2	X3	X4	X5
Chyba	X1	2386,662	-7,821	174,1762	134,0548	313,738
	X2	-7,821	118,714	-7,5119	5,9524	-103,131
	X3	174,176	-7,512	143,4821	1,1786	52,887
	X4	134,055	5,952	1,1786	73,7143	32,298
	X5	313,738	-103,131	52,8869	32,2976	2750,423

Matice **T** celkové variability

	Matice SSCP (Z' Z) odchylek (dovolena.sta) Matice SSCP (Z' Z) odchylek vektorů matice v matici schématu X				
Efekt	Sloup.4 X1	Sloup.5 X2	Sloup.6 X3	Sloup.7 X4	Sloup.8 X5
X1	6535,025	299,6500	371,2500	250,2500	1026,550
X2	299,650	141,7800	8,1000	14,6200	-37,940
X3	371,250	8,1000	156,5000	6,9000	131,700
X4	250,250	14,6200	6,9000	76,9800	54,740
X5	1026,550	-37,9400	131,7000	54,7400	3425,620

Hodnoty testových statistik K1 až K5 a kritický obor:

	1 K1	2 K2	3 K3	4 K4	5 K5	6 kvantil
1	45,3276196	7,99016946	3,90805746	1,95069769	9,87874916	18,3070381

Na hladině významnosti 0,05 se prokázalo, že rozdíl mezi skupinami způsobuje X1.

Test shody vektorů středních hodnot a posouzení významu proměnných můžeme ve STATISTICE provést přímo v Diskriminační analýze.
Při zadávání proměnných zvolíme jako grupovací proměnnou ID2. Zvolíme-li Výpočet: proměnné v modelu, dostaneme tabulku:

	Výsledky diskriminační funkční analýzy (dovolena.sta) Počet prom. v modelu: 5; grupovací: ID2 (3 skup) Wilk. lambda: ,26322 přibliž F (10,86)=8,1626 p< ,0000					
N=50	Wilk. Lambda	Parc. Lambda	F na vyj (2,43)	p-hodn.	Toler.	1-toler. R^2
X1	0,602832	0,436636	27,74006	0,000000	0,805704	0,194297
X2	0,289522	0,909148	2,14852	0,129016	0,959666	0,040334
X3	0,270302	0,973794	0,57859	0,564991	0,899531	0,100469
X4	0,269947	0,975075	0,54960	0,581183	0,883696	0,116304
X5	0,319480	0,823896	4,59552	0,015533	0,948842	0,051158

V záhlaví této tabulky je uvedena testová statistika pro Wilksův test shody vektorů středních hodnot (8,1626) a odpovídající p-hodnota (je blízká 0).
Podle p-hodnot u jednotlivých proměnných soudíme, že pro diskriminaci jsou významné proměnné X_1 a X_5.

Klasifikační funkce:

Proměnná	Klasifikační funkce; grupovací : ID2 (dovolena.sta) malá p=,24000	střední p=,48000	velká p=,28000
X1	0,5525	0,8026	1,0981
X2	2,3285	2,4727	3,1155
X3	0,6466	0,3530	0,3648
X4	0,7459	0,4926	0,1242
X5	0,8874	0,7754	0,9120
Konstant	-42,2581	-45,1663	-70,7708

Zde jsou uvedeny koeficienty pro odhady Andersonových diskriminačních skórů pro 1., 2. a 3. skupinu:

$L_1(\mathbf{x}) = 0,5525*X1 + 2,3285*X2 + 0,6466*X3 + 0,7459*X4 + 0,8874*X5 – 42,2581$
$L_2(\mathbf{x}) = 0,8026*X1 + 2,4727*X2 + 0,3530*X3 + 0,4926*X4 + 0,7754*X5 – 45,1663$
$L_3(\mathbf{x}) = 1,0981*X1 + 3,1155*X2 + 0,3648*X3 + 0,1242*X4 + 0,9120*X5 – 70,7708$

Klasifikační matice:

Skup.	% správnýc	malá p=,24000	střední p=,48000	velká p=,28000
	Klasifikační matice (dovolena.sta) Řádky: pozorované klasifikace Sloupce: předpovězené klasifikace			
malá	66,66666	8	4	0
střední	91,66666	1	22	1
velká	78,57143	0	3	11
Celkem	82,00000	9	29	12

Správně zařazeno bylo $\frac{8+22+11}{50}\cdot 100\% = 82\%$ případů, chybně 18 % případů.

V 1. skupině rodin byly chybně zařazeny případy 8, 10, 19, 20 ($\frac{4}{12} = 33{,}3\%$), ve 2. skupině případy 4, 47 ($\frac{2}{24} = 8{,}3\%$) a ve 3. skupině případy 24, 34, 43 ($\frac{3}{14} = 21{,}4\%$)

Zařazení nového případu

Nyní podle těchto skórů zařadíme do jedné ze tří skupin rodinu, která

má roční příjem X_1 = 51,8 tisíc dolarů,

k cestování zaujímá postoj ohodnocený X_2 = 6 body,

rodinné dovolené přičítá význam ohodnocený X_3 = 7 body,

má X_4 = 4 členy

a nejstaršímu členovi je X_5 = 51 let.

Andersonovy diskriminační skóry:

	1 X1	2 X2	3 X3	4 X4	5 X5	6 L1	7 L2	8 L3
1	51,8	6	7	4	51	53,0996	55,23138	54,36618

Největší hodnotu má skór ve 2. skupině, tedy zkoumaná rodina vydá za dovolenou střední částku.

Dále v LDA použijeme pro výběr proměnných krokovou metodu.

Výsledky pro krokovou dopřednou metodu

Proměnné obsažené v modelu

N=50	Výsledky diskriminační funkční analýzy (dovolena.sta) krok 3, poč. prom. v modelu: 3; grupovací: ID2 (3 skup) Wilk. lambda: ,27663 přibliž F (6,90)=13,519 p< ,0000					
	Wilk. Lambda	Parc. Lambda	F na vyj (2,45)	p-hodn.	Toler.	1-toler. R^2
X1	0,652311	0,424084	30,55552	0,000000	0,984948	0,015052
X5	0,338537	0,817147	5,03482	0,010635	0,953070	0,046930
X2	0,303098	0,912692	2,15236	0,128024	0,967370	0,032630

Klasifikační funkce

Proměnná	Klasifikační funkce; grupovací : ID2 (dovolena.sta)		
	malá p=,24000	střední p=,48000	velká p=,28000
X1	0,6401	0,8551	1,1311
X5	0,8991	0,7824	0,9163
X2	2,3409	2,4846	3,1046
Konstant	-41,3768	-44,8553	-70,5840

Klasifikační matice

Skup.	Klasifikační matice (dovolena.sta) Řádky: pozorované klasifikace Sloupce: předpovězené klasifikace			
	% správnýc	malá p=,24000	střední p=,48000	velká p=,28000
malá	75,00000	9	3	0
střední	83,33334	3	20	1
velká	78,57143	0	3	11
Celkem	80,00000	12	26	12

Úspěšnost klasifikace poklesla z 82 % na 80 %.

Výsledky pro krokovou zpětnou metodu

Proměnné obsažené v modelu

N=50	Výsledky diskriminační funkční analýzy (dovolena.sta) krok 4, poč. prom. v modelu: 1; grupovací: ID2 (3 skup) Wilk. lambda: ,36521 přibliž F (2,47)=40,846 p< ,0000					
	Wilk. Lambda	Parc. Lambda	F na vyj (2,47)	p-hodn.	Toler.	1-toler. R^2
X1	1,000000	0,365211	40,84639	0,000000	1,000000	0,00

Klasifikační funkce

Proměnná	Klasifikační funkce; grupovací : ID2 (dovolena.sta)		
	malá p=,24000	střední p=,48000	velká p=,28000
X1	0,7506	0,9498	1,2413
Konstant	-15,7327	-23,6411	-40,3976

Klasifikační matice

Skup.	Klasifikační matice (dovolena.sta) Řádky: pozorované klasifikace Sloupce: předpovězené klasifikace			
	% správnýc	malá p=,24000	střední p=,48000	velká p=,28000
malá	83,3333	10	2	0
střední	100,0000	0	24	0
velká	78,5714	1	2	11
Celkem	90,0000	11	28	11

Je-li ke klasifikaci rodin do skupin použita pouze proměnná X_1, je úspěšnost klasifikace nejvyšší, a to 90 %.
Aplikujeme-li toto klasifikační pravidlo na rodinu s vektorem pozorování (51,8 6 7 4 51)’, dostaneme výsledek

	1 X1	2 X2	3 X3	4 X4	5 X5	6 L1	7 L2	8 L3
1	51,8	6	7	4	51	23,14838	25,55854	23,90174