Bi8600: Vícerozměrné metody – cvičení

Vyučující: Mgr. Lucie Brožová

Kontakt: brozova@iba.muni.cz

Vytvořil Institut biostatistiky a analýz, Masarykova univerzita
J. Jarkovský, S. Littnerová, L. Brožová

Průběh výuky

- Obsahem cvičení je praktická aplikace pokročilých statistických metod
  - Zopakování jednorozměrné analýzy dat
  - Investigativní vícerozměrná analýza dat
  - Diskriminační analýza
- Předpoklady úspěšného ukončení cvičení
  - Účast na cvičení (povolena jedna absence)
- Plán cvičení
  - 27. 9. Opakování jednorozměrné analýzy dat
  - 18. 10. Shluková analýza
  - 1. 11. Metoda hlavních komponent (PCA)
  - 15. 11. Ordinační metody (CA, NMDS) + diskriminační analýza

Bi8600: Vícerozměrné metody
1. cvičení – 1. část

Základní popis a práce s daty v softwaru R

Vytvořil Institut biostatistiky a analýz, Masarykova univerzita
J. Jarkovský, S. Littnerová, L. Brožová

Motivace

- Současná statistická analýza se neobejde bez zpracování dat pomocí statistických software. Předpokladem úspěchu je správné uložení dat ve formě „databázové“ tabulky umožňující jejich zpracování v libovolné aplikaci.

- Neméně důležité je věnovat pozornost čištění dat předcházející vlastní analýze. Každá chyba, která vznikne nebo není nalezena ve fázi přípravy dat se promítne do všech dalších kroků a může zapříčinit neplatnost výsledků a nutnost opakování analýzy.

DATA – ukázka uspořádání datového souboru

Parametry (znaky)

Základní jednotka dat

Pacient	Clovek	aLeu	aTy%	aSe%	aNeu%	aLy%	aTy	aSe	aNeu	aLy	aHtc	aCLsk	aCLNeus	aCLOZ	aCLNeuO
		cell.10^6/	%	%	%	%	cell.10^6/	cell.10^6/	cell.10^6/	cell.10^6/	%	mV.s.10^3	mV.s.10^3	mV.s.10^3	mV.s.10^3
3	1	4									33	72		32	
4	2	7,6	8	58	66	24	0,6	4,4	5,0	1,8	33	95	19	48	10
8	3	4	3	52	55	40	0,1	2,1	2,2	1,6	22	77	35	33	15
11	4	6,1	5	59	64	35	0,3	3,6	3,9	2,1	33	103	26	49	13
12	5	6,9	3	85	88	9	0,2	5,9	6,1	0,6	37	81	13	45	7
14	6	5,9	15	55	70	19	0,9	3,3	4,1	1,1	32	137	33	61	15
16	7	8	18	75	93	7	1,4	6,0	7,4	0,6	34	151	20	59	8
20	8	9,6	3	72	75	23	0,3	6,9	7,2	2,2	40	77	11	38	5
21	9	6	10	67	77	19	0,6	4,0	4,6	1,1	32	120	26	52	11
22	10	3,3	4	55	59	39	0,1	1,8	2,0	1,3	28	81	42	24	12
37	11	3,8	10	60	70	30	0,4	2,3	2,7	1,1	32	111	42	29	11
38	12	6,4	2	76	78	17	0,1	4,9	5,0	1,1	25	366	73	115	23
39	13	6,8	1	57	58	39	0,1	3,9	3,9	2,7	20	234	59	71	18
49	14	8,5	7	67	74	26	0,6	5,7	6,3	2,2	30	156	25	108	17
51	15	9,3	7	57	64	35	0,7	5,3	6,0	3,3	35	129	21	23	4
52	16	2,2	10	56	66	34	0,2	1,2	1,5	0,7	33	46	30	12	8
55	17	9,9	3	78	81	10	0,3	7,7	8,0	0,1	30	189	24	140	18
56	18	5	2	80	82	13	0,1	4,0	4,1	0,7	26	101	25	54	13
6	1	8,8	11	72	83	12	1,0	6,3	7,3	1,1	44	268	36,6	145	19,9
9	2	9,2	2	66	68	28	0,2	6,1	6,3	2,6	42	168	26,9	76	12,2
13	3	10,0	7	83	90	8	0,7	8,3	9,0	0,8	54	181	20,1	81	9
15	4	9,6	1	75	76	23	0,1	7,2	7,3	2,2	45	343	47	124	16,9
17	5	6,0									45	40		21	
19	6	7,2	2	78	80	18	0,1	5,6	5,8	1,3	44	103	17,8	63	10,9
24	7	8,2	1	72	73	25	0,1	5,9	6,0	2,1	41	209	34,9	57	9,6
26	8	10,3	1	85	86	3	0,1	8,8	8,9	0,3	41	364	41,1	112	12,6
29	9	5,0	1	74	75	21	0,1	3,7	3,8	1,1	39	83	22,1	32	8,5
30	10	11,9	1	51	52	47	0,1	6,1	6,2	5,6	33	83	13,4	52	8,4
31	11	7,2	3	53	56	29	0,2	3,8	4,0	2,1	28	109	27,1	63	15,5
32	12	10,8	36	50	76	8	3,9	5,4	9,3	0,9	27	146	15,7	106	11,4
33	13	11,8	22	54	76	16	2,6	6,4	9,0	1,9	45	246	27,4	63	7
34	14	17,0	1	82	83	16	0,2	13,9	14,1	2,7	34	440	31,2	119	8,4
40	15	10,0	8	72	80	4	0,8	7,2	8,0	0,4	37	176	22,0	52	6,5

Typy proměnných

Kvalitativní (kategoriální) proměnná

- lze ji řadit do kategorií, ale nelze ji kvantifikovat

  Příklad: ??

Kvantitativní (numerická) proměnná

- můžeme ji přiřadit číselnou hodnotu

  Příklad: ??

Typy proměnných

Kvalitativní (kategoriální) proměnná

- lze ji řadit do kategorií, ale nelze ji kvantifikovat

  Příklad: pohlaví, HIV status, barva vlasů ...

Kvantitativní (numerická) proměnná

- můžeme ji přiřadit číselnou hodnotu

  Příklad: výška, váha, teplota, počet hospitalizací ...

Kvalitativní znaky

- **Binární znaky:** dvě kategorie, obvykle se kódují pomocí číslic 1 (přítomnost sledovaného znaku) a 0 (nepřítomnost sledovaného znaku).

  Příklad: ??

- **Nominální znaky**: několik kategorií (A, B, C), které nelze uspořádat.

  Příklad: ??

- **Ordinální znaky:** několik kategorií, které lze vzájemně seřadit, tedy můžeme se ptát, která je větší/menší (1<2<3).

  Příklad: ??

Kvalitativní znaky

- **Binární znaky:** dvě kategorie, obvykle se kódují pomocí číslic 1 (přítomnost sledovaného znaku) a 0 (nepřítomnost sledovaného znaku).

  Příklady: Diabetes (1-ano, 0-ne), Pohlaví (1-muž, 0-žena).

- **Nominální znaky**: několik kategorií (A, B, C), které nelze uspořádat.

  Příklad: krevní skupiny (A/B/AB/0).

- **Ordinální znaky:** několik kategorií, které lze vzájemně seřadit, tedy můžeme se ptát, která je větší/menší (1<2<3).

  Příklady: stupeň bolesti (mírná/střední/velká), stadium maligního onemocnění (I/II/III/IV).

Kvantitativní znaky

- **Intervalové znaky:** interpretace rozdílu dvou hodnot (stejný interval mezi jednou a druhou dvojicí hodnot vyjadřuje i stejný rozdíl v intenzitě zkoumané vlastnosti). Společný znak intervalových znaků: nula byla stanovena uměle, tedy pouhou konvencí. *Příklad: teplota měřená ve stupních Celsia, letopočet.*

Den	Teplota	Rozdíl [1]	Podíl [1]
1.	2 °C	-	-
2.	4 °C	+2	2x
3.	6 °C	+2	1.5x

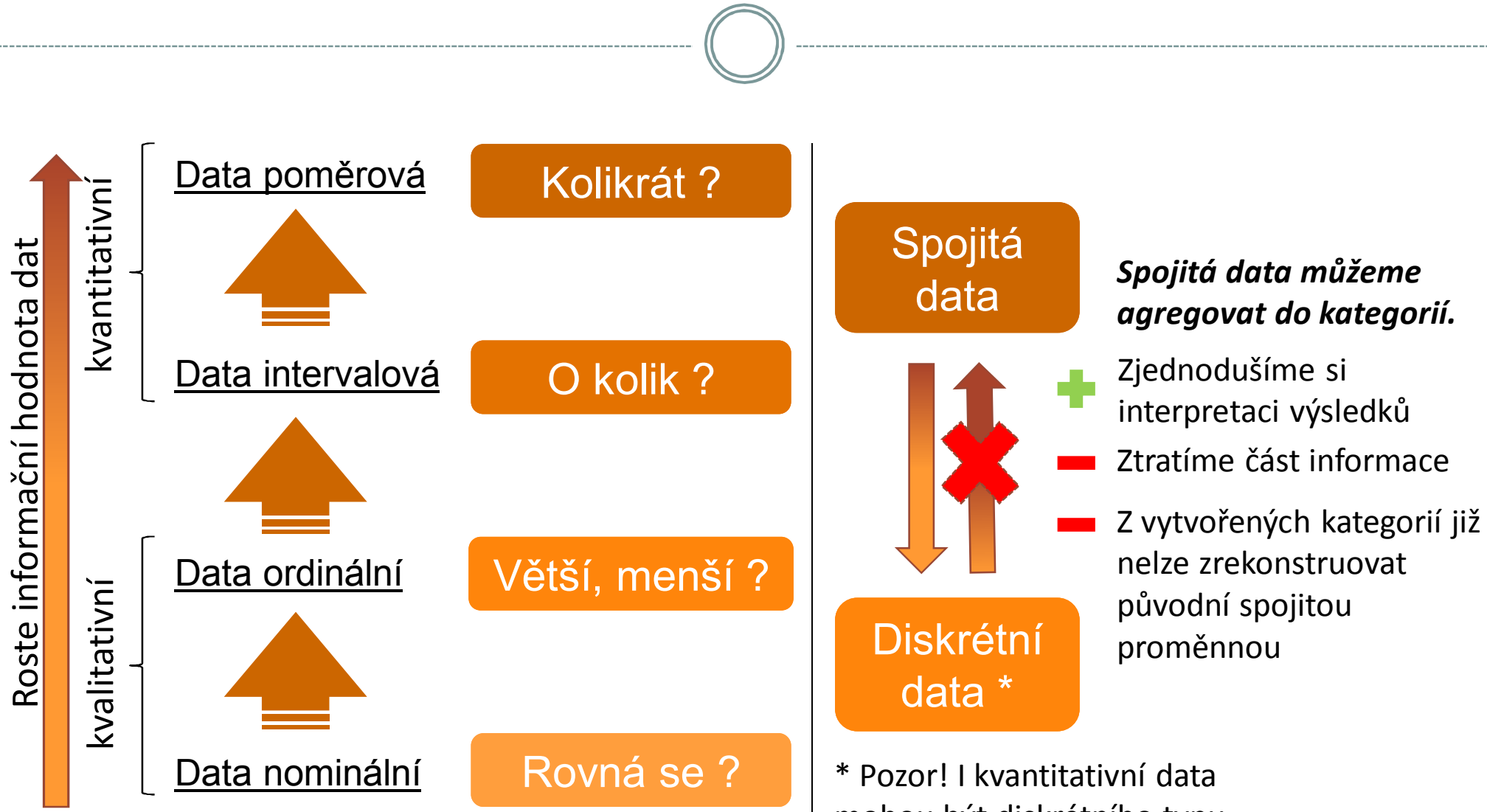
[1] Srovnání s měřením z předchozího dne

← 1.5krát vyšší teplota ve srovnání s 2. dnem, přičemž došlo ke stejnému nárůstu teploty jako při srovnání 2. a 1. dne

- **Poměrové znaky:** kromě rozdílu interpretujeme i podíl dvou hodnot.

  Příklady: výška v cm, váha v kg, ...

Různé typy dat znamenají různou informaci



Popisné statistiky

Charakteristiky polohy (míry střední hodnoty, míry centrální tendence)

- Udávají, kolem jaké hodnoty se data centrují, resp. které hodnoty jsou nejčastější, popis „těžiště“ – míry polohy
- Aritmetický průměr, medián, modus, geometrický průměr

Charakteristiky variability (proměnlivosti)

- Zachycují rozptýlení hodnot v souboru (proměnlivost dat)
- Variační rozpětí, rozptyl, směrodatná odchylka, variační koeficient, střední chyba průměru

Popis kvalitativních dat

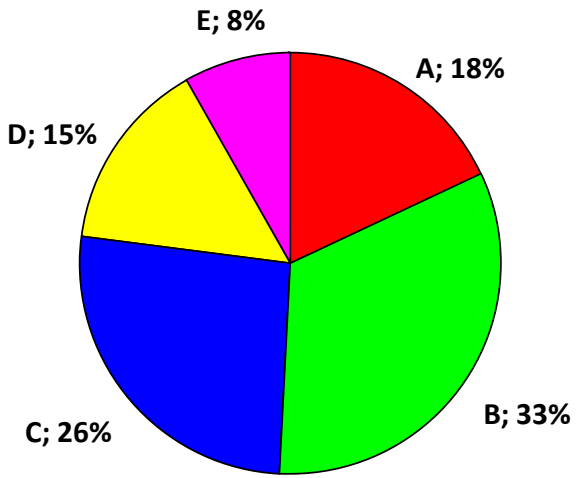
- **Popis kvalitativních dat:**
  - procentuální zastoupení jednotlivých kategorií
  - U ordinálních znaků lze využít α-kvantil.
- **Vizualizace kvalitativních dat:** nejčastěji koláčový nebo sloupcový graf.

Frekvenční tabulka

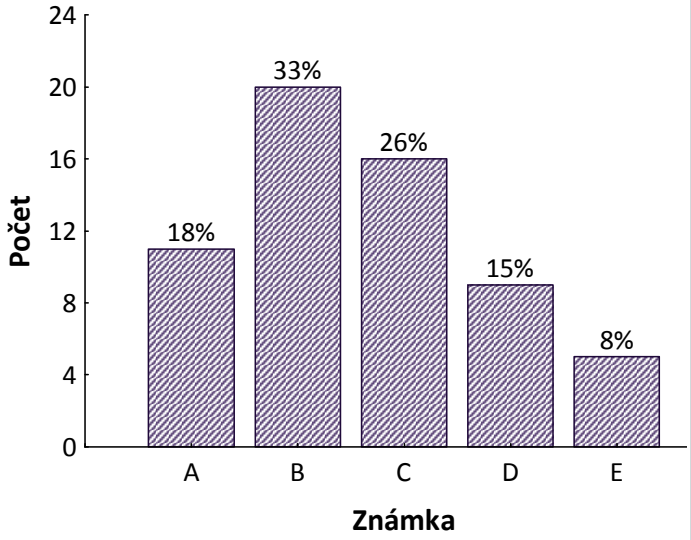
Známka	n	%
A	11	18,0
B	20	32,8
C	16	26,2
D	9	14,8
E	5	8,2
F	0	0,0
Celkem	61	100,0

modus

Koláčový graf



Sloupcový graf



Popis kvantitativních dat – charakteristiky středu

- **Aritmetický průměr**: je definován jako součet všech naměřených údajů (x_i) vydělený jejich počtem (n):

$$\bar{x} = \sum_{i=1}^{n} x_i / n \ .$$

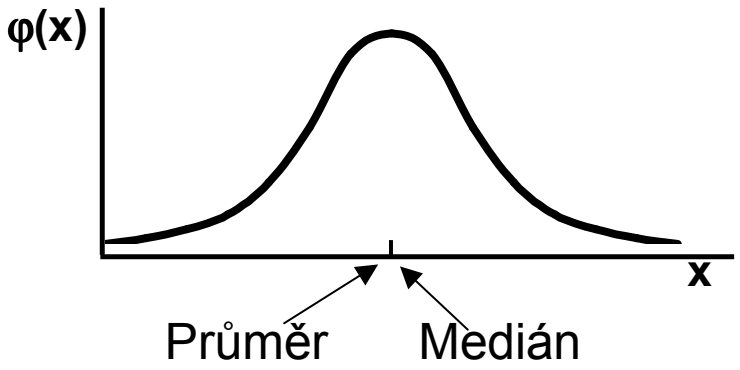
- **Geometrický průměr**: logaritmus geometrického průměru je roven aritmetickému průměru logaritmovaných hodnot souboru.

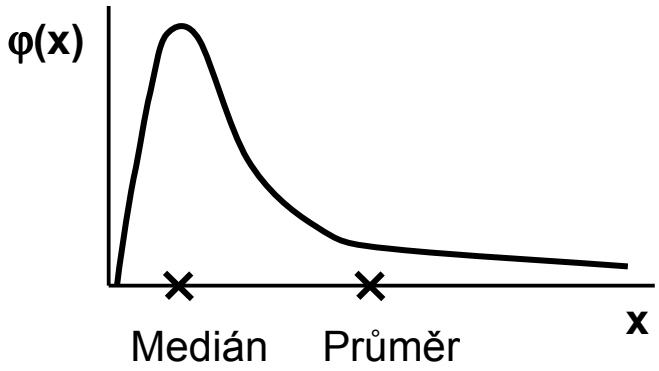
- **Medián:** znamená hodnotu, jež dělí řadu podle velikosti seřazených výsledků na dvě stejně početné poloviny. Jestliže n je sudé číslo, pak $\tilde{x} = (x_{\frac{n}{2}} + x_{\frac{n}{2}+1}) / 2$, jestliže n je liché číslo, pak $\tilde{x} = x_{(n+1)/2}$.

Průměr vs. medián

PAMATUJ:

- **Průměr je silně ovlivněn extrémními hodnotami (tzv. odlehlá pozorování), medián není ovlivněn vybočujícími pozorováními.**
- **Průměr je vhodný ukazatel středu u normálního/symetrického rozložení, medián je vhodnou charakteristikou středu souboru i v případě veličin s neznámým rozdělením.**
- V případě symetrického rozložení jsou jejich hodnoty v podstatě shodné, v případě asymetrického rozložení však nikoliv!





Popis kvantitativních dat – charakteristiky variability

- **Rozptyl (variance)** je ukazatelem šířky rozložení získaný na základě odchylky jednotlivých hodnot od průměru.

$$s^2 = \frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{n - 1}$$

Obdobně jako u průměru je jeho vypovídací schopnost nejvyšší v případě symetrického/normálního rozložení.

- **Směrodatná odchylka (SD – *standard deviation*)** je druhá odmocnina z rozptylu.
- **Koeficient variance** = podíl SD ku průměru, umožňuje porovnat variabilitu několika znaků (často se vyjadřuje v procentech – potom udává, z kolika procent se podílí směrodatná odchylka na aritmetickém průměru).
- **Kvartilové rozpětí (odchylka):** $q = x_{0,75} - x_{0,25}$, kde $x_{0,25}$ = dolní kvartil, $x_{0,75}$ = horní kvartil.

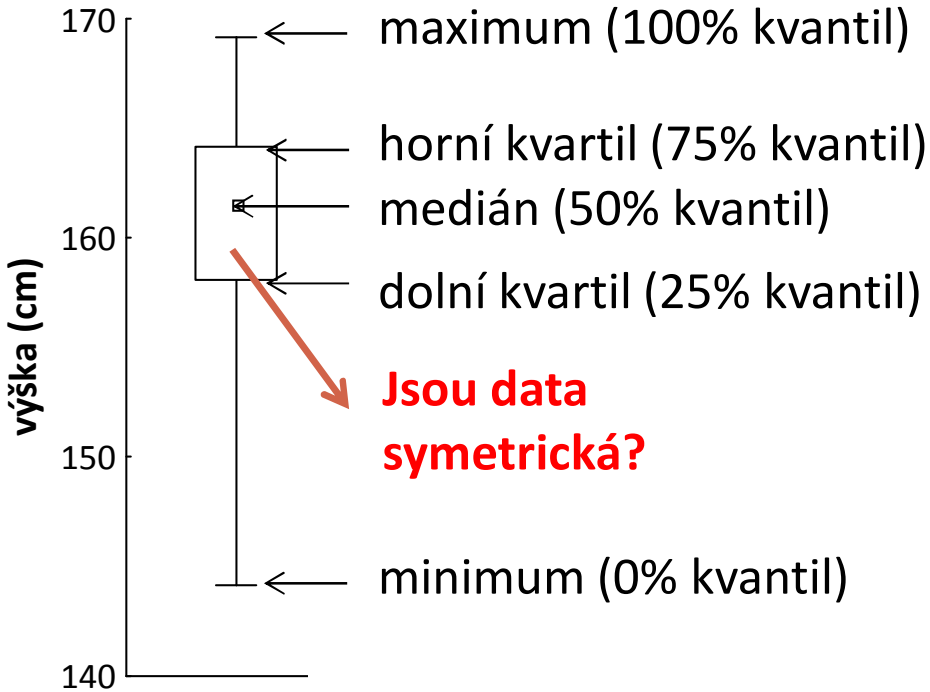
(x_α je číslo, které rozděluje uspořádaný datový soubor na dolní úsek, obsahující aspoň podíl α všech dat a na horní úsek obsahující aspoň podíl 1-α všech dat.)

Ukázka vizualizace kvantitativních dat

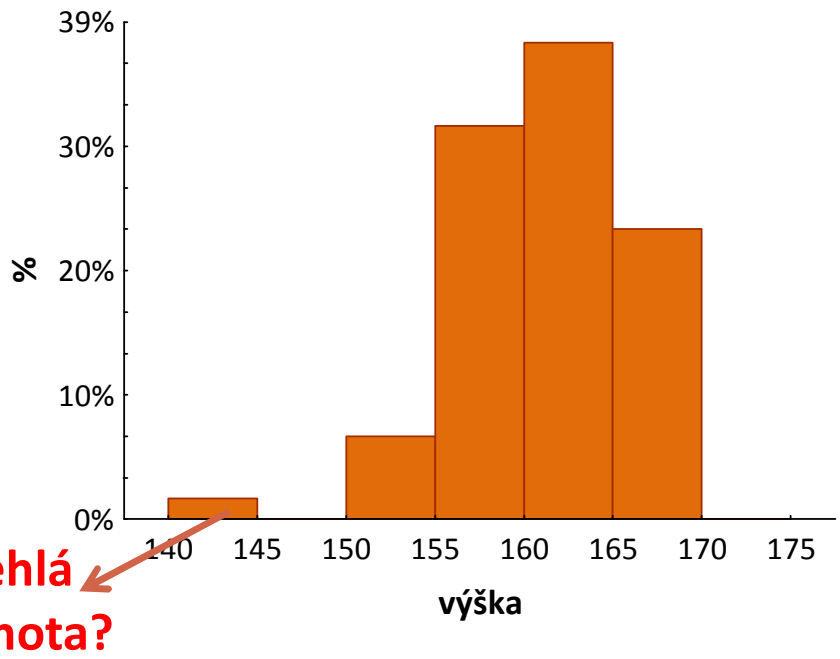
- **Vizualizace kvantitativních dat:** nejčastěji pomocí krabicového grafu nebo histogramu.

Příklad: Popis výšky (cm)

Krabicový graf



Histogram



Ukázka popisu kvantitativních dat

- **Popis kvantitativních dat:** charakteristika středu (průměr, medián aj.), charakteristika variability (rozptyl, rozsah hodnot, kvartilové rozpětí aj.).

Příklad: Popis výšky (cm) pacientů

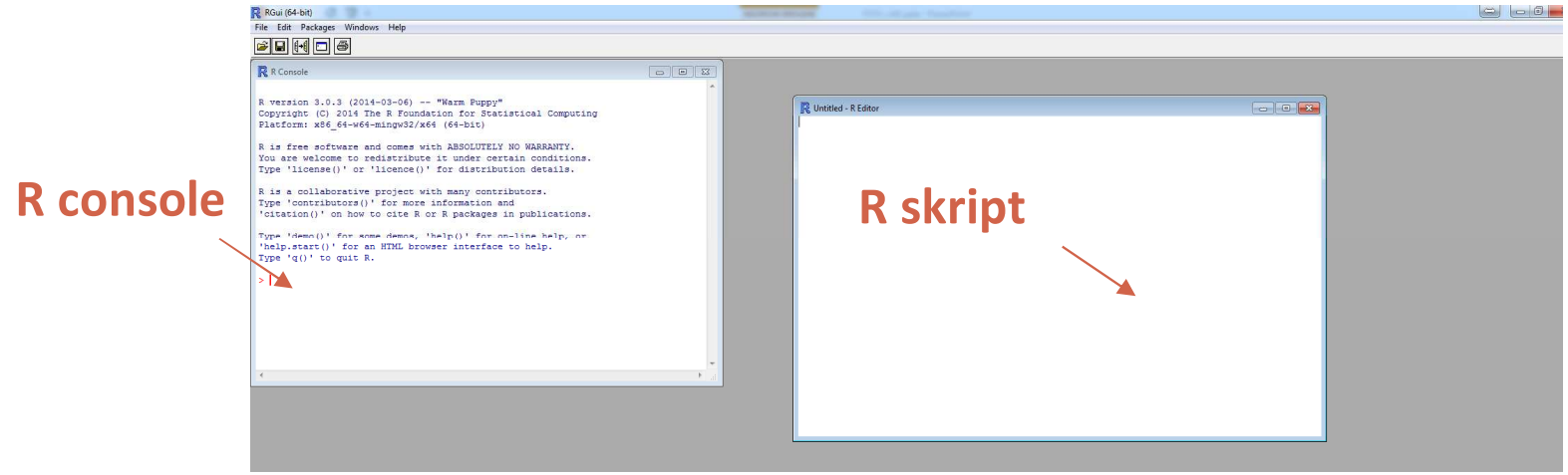
Popisné statistiky

Charakteristika	
N	61
Průměr (cm)	161,0
Medián (cm)	161,5
sm. odchylka (cm)	4,7
Rozptyl (cm^2)	22,2
min-max (cm)	144,1-169,2
dolní-horní kvartil (cm)	158,1-164,2

Průměr a medián se téměř shodují. Co nám to říká?

Software R / RStudio

- Volně dostupný software (https://www.r-project.org/).
- Pro pokročilé analýzy je nutné načíst balíček, kde jsou naprogramovány funkce.
- Každý má možnost implementovat svůj balíček – R nezaručuje správnost kódu.
- Nevidíme datovou tabulku – nutné kontrolovat provedení výpočtu.
- R console – zápis skriptu + enter spustí skript (alternativou je vytvořit si R script, který umožní kompletní uchování syntaxu, který je spouštěn pomocí Ctrl+R).



- Nápověda: help(funkce), ?funkce, http://rseek.org/, www.google.cz.

Bi8600: Vícerozměrné metody
1. cvičení – 2. část

Základy testování hypotéz
Přehled a aplikace statistických testů

Vytvořil Institut biostatistiky a analýz, Masarykova univerzita
J. Jarkovský, S. Littnerová, L. Brožová

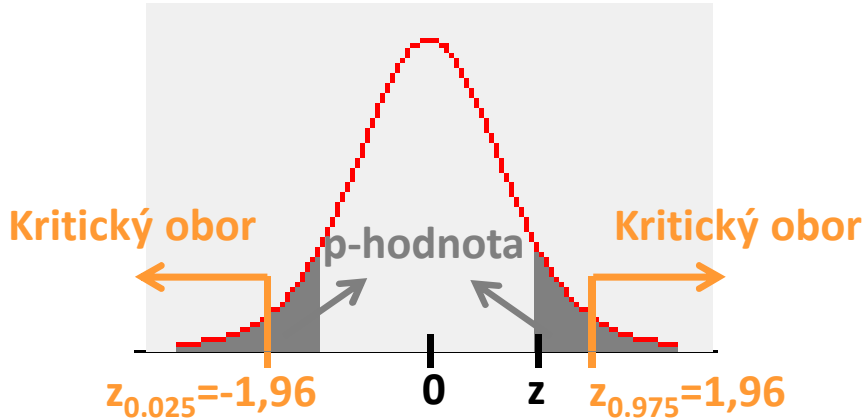
Statistické testování – základní pojmy

- **Nulová hypotéza H_0**: sledovaný efekt je nulový
- **Alternativní hypotéza H_A:** sledovaný efekt je různý mezi skupinami
- **Testová statistika:**

$$\frac{\text{Pozorovaná hodnota} - \text{Očekávaná hodnota}}{\text{Variabilita dat}} * \sqrt{\text{Velikost vzorku}}$$

- **Vyhodnocení statistické významnosti**

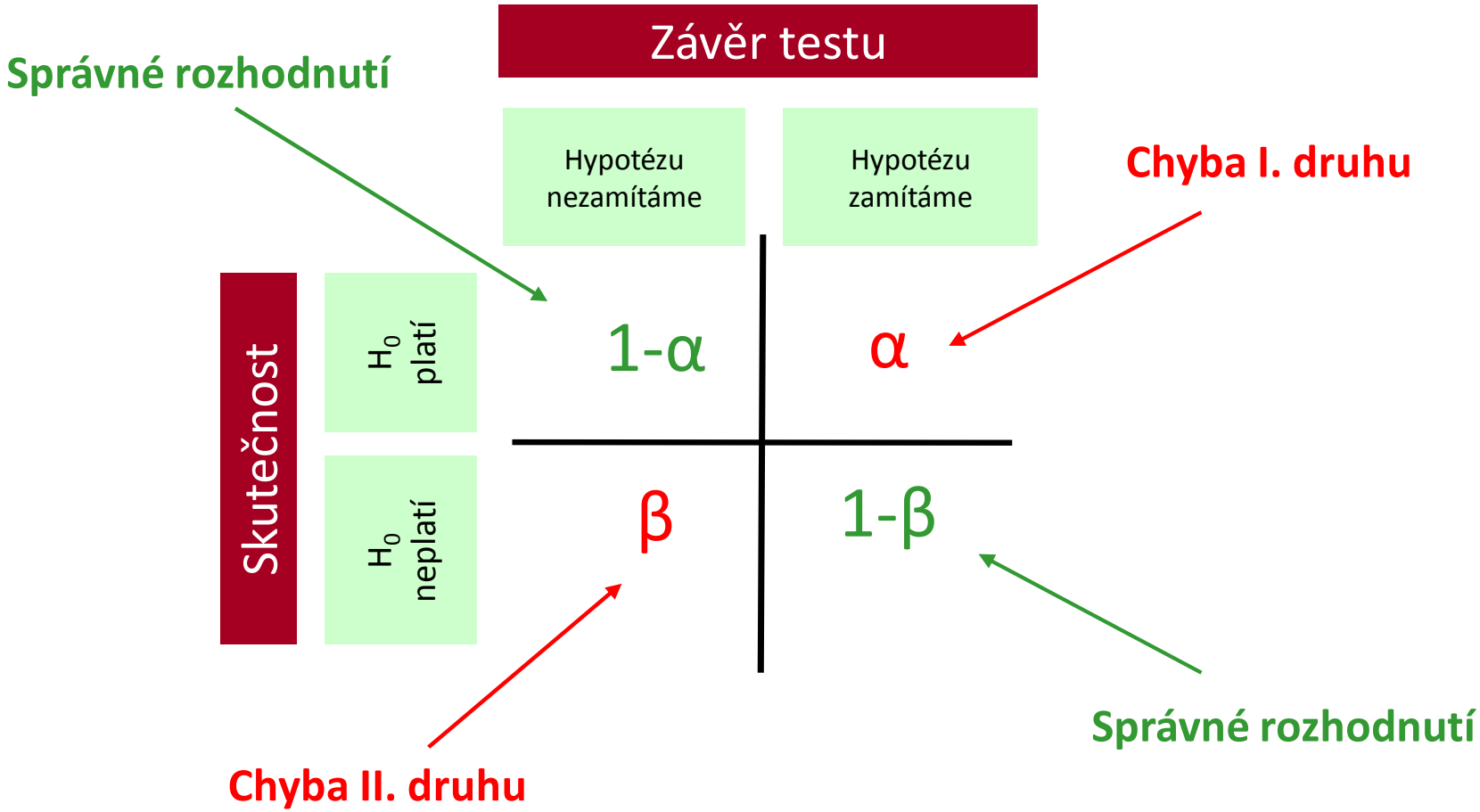
Rozložení testové statistiky (z) za předpokladu platnosti nulové hypotézy



- P-hodnota vyjadřuje pravděpodobnost, že testová statistika nabyde stejné nebo extrémnější hodnoty za předpokladu, že nulová hypotéza platí.
- **Statistické testování odpovídá na otázku, zda je pozorovaný rozdíl náhodný či nikoliv.**

Možné chyby při testování hypotéz

- I přes dostatečnou velikost vzorku a kvalitní design experimentu se můžeme při rozhodnutí o zamítnutí/nezamítnutí nulové hypotézy dopustit chyby.



Význam chyb při testování hypotéz

Pravděpodobnost chyby 1. druhu

α → Pravděpodobnost nesprávného zamítnutí nulové hypotézy, **hladina významnosti**

Pravděpodobnost chyby 2. druhu

β → Pravděpodobnost nerozpoznání neplatné nulové hypotézy

Síla testu

$1-\beta$ → Pravděpodobnostně vyjádřená schopnost rozpoznat neplatnost hypotézy

P-hodnota

- Významnost hypotézy hodnotíme dle získané tzv. ***p-hodnoty***, která vyjadřuje pravděpodobnost, s jakou číselné realizace výběru podporují H_0, je-li pravdivá.
- P-hodnotu porovnáme s α (***hladina významnosti***, stanovujeme ji na 0,05, tzn., že připouštíme 5% chybu testu, tedy, že zamítneme H_0, ačkoliv ve skutečnosti platí).
- P-hodnotu získáme při testování hypotéz ve statistickém softwaru.

- Je-li p-hodnota $\leq \alpha$, pak H_0 zamítáme na hladině významnosti α a přijímáme H_A.
- Je-li p-hodnota $> \alpha$, pak H_0 nezamítáme na hladině významnosti α.

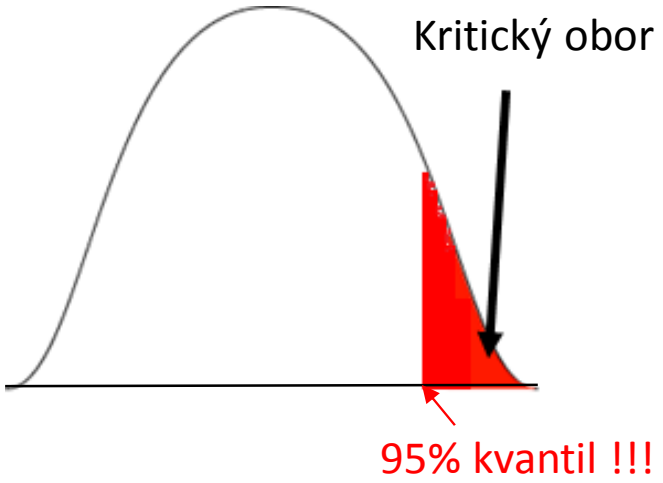
One-tailed vs. two-tailed testy

Jednostranné testy (one–tailed)

- Hypotéza testu je postavena asymetricky, tedy ptáme se na větší než / menší.

$H_0: \tilde{x} \geq c$ $H_A: \tilde{x} < c$

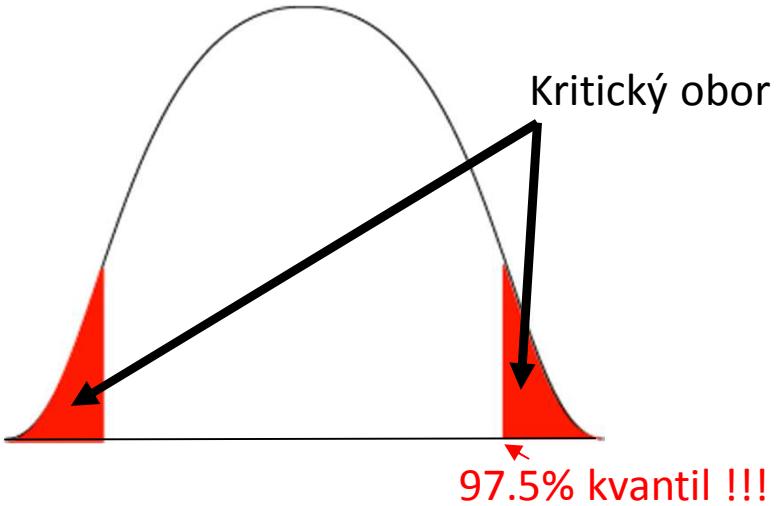
$H_0: \tilde{x} \leq c$ $H_A: \tilde{x} > c$



Oboustranné testy (two–tailed)

- Hypotéza testu se ptá na otázku rovná se / nerovná se.

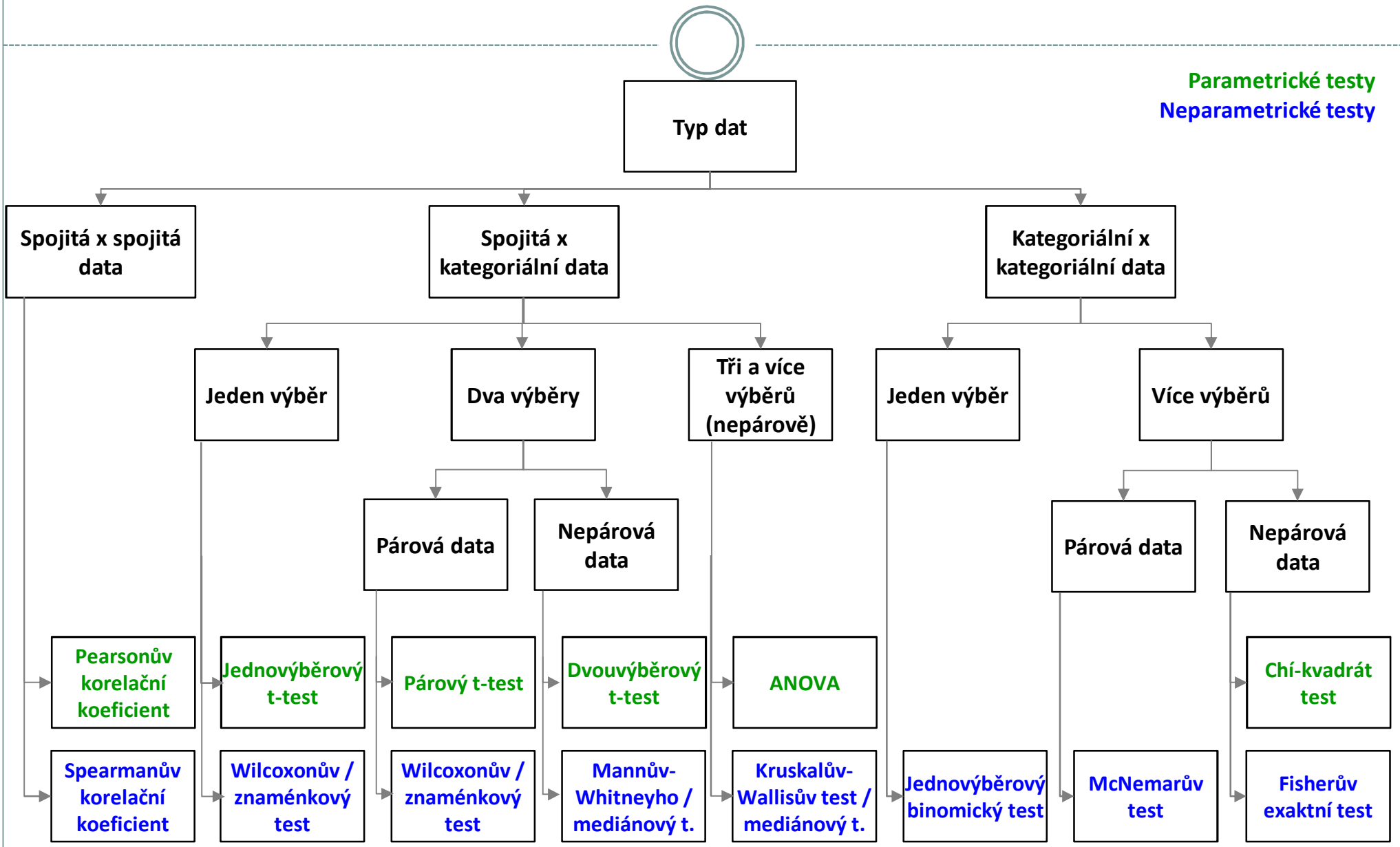
$H_0: \tilde{x} = c$ $H_A: \tilde{x} \neq c$



Důležité poznámky k testování hypotéz

- **Nezamítnutí nulové hypotézy neznamená automaticky její přijetí!** Může se jednat o situaci, kdy pro zamítnutí nulové hypotézy nemáme dostatečné množství informace.
- **Dosažená hladina významnosti testu** (ať už 5 %, 1 % nebo 10 %) **nesmí být slepě brána jako hranice pro existenci / neexistenci testovaného efektu.**
- **Malá p-hodnota nemusí znamenat velký efekt.** Hodnota testové statistiky a p-hodnota mohou být ovlivněny velkou velikostí vzorku a malou variabilitou pozorovaných dat.
- **Na výsledky testování musí být nahlíženo kriticky** – jedná se o závěr založeny „pouze“ na jednom výběrovém souboru.
- **Statistická významnost** indikuje, že pozorovaný rozdíl není náhodný, ale nemusí znamenat, že je významný i ve skutečnosti. Důležitá je i **praktická (klinická) významnost.**

Základní rozhodování o výběru statistických testů



Vytvořil Institut biostatistiky a analýz, Masarykova univerzita
J. Jarkovský, S. Littnerová, L. Brožová

Shrnutí statistických testů

Typ srovnání	Nulová hypotéza	Parametrický test	Neparametrický test
1 výběr dat vs. referenční hodnota	Střední hodnota je rovna zvolené referenční hodnotě.	jednovýběrový t-test / z-test	Wilcoxonův test; znaménkový test
2 nezávislé skupiny dat (test shody středních hodnot)	Střední hodnoty/rozdělení se mezi skupinami neliší.	nepárový t-test	Mannův-Whitneův U test / mediánový test
2 nezávislé skupin dat (test shody rozptylů = homoskedasticity)	Rozptyl obou skupin je shodný.	F-test	Levenův test
2 párově závislé výběry dat	Střední hodnota rozdílů (diferencí) párových hodnot je rovna zvolené referenční hodnotě (nejčastěji nule).	párový t-test	Wilcoxonův test; znaménkový test
Shoda rozdělení výběru s teoretickým rozdělením	Rozdělení dat odpovídá teoretickému (vybranému) rozdělení.	test dobré shody (χ^2 test)	Shapirův-Wilkův test; Kolmogorovův-Smirnovův test; Lilieforsův test
3 a více skupin nepárově (test shody středních hodnot)	Střední hodnoty/rozdělení se mezi skupinami neliší.	ANOVA	Kruskalův-Wallisův test / mediánový test
Korelace	Neexistuje vztah mezi hodnotami dvou výběrů.	Pearsonův korelační koeficient	Spearmanův korelační koeficient

Parametrické vs. neparametrické testy

Parametrické testy

- Mají předpoklady o rozložení vstupujících dat (např. normální rozložení)
- Při stejném N a dodržení předpokladů mají vyšší sílu testu než testy neparametrické
- Pokud nejsou dodrženy předpoklady parametrických testů, potom jejich síla testu prudce klesá a výsledek testu může být zcela chybný a nesmyslný

Neparametrické testy

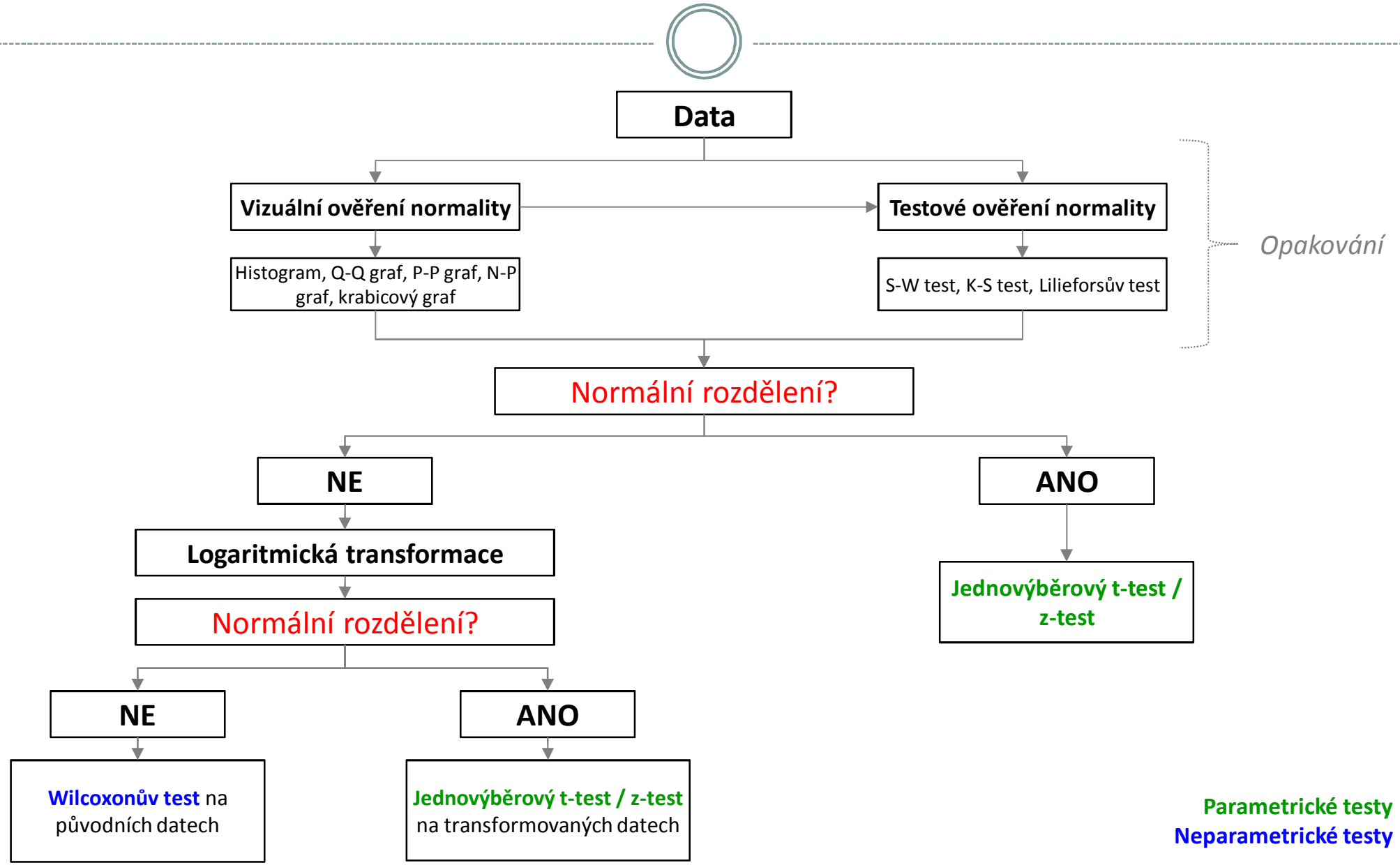
- Vyžadují méně předpokladů o rozložení vstupujících dat, lze je tedy použít i při asymetrickém rozložení, odlehlých hodnotách, či nedetekovatelném rozložení
- Snížená síla těchto testů je způsobena redukcí informační hodnoty původních dat, kdy neparametrické testy nevyužívají původní hodnoty, ale nejčastěji pouze jejich pořadí
- Souvisí s malou velikostí souboru (nejsme schopni normalitu dat ověřit)

Proč nemusí parametrický a neparametrický test vyjít stejně?

Jednovýběrové testy (one sample)

- Jednovýběrové statistické testy **srovnávají popisnou statistiku vzorku s jediným číslem**, jehož význam je ze statistického hlediska hodnota cílové populace.
- Otázka položená v testu může být vztažena k průměru, rozptylu, podílu hodnot i dalším statistickým parametrům popisujícím vzorek.

Schéma při testování pomocí jednovýběrových testů

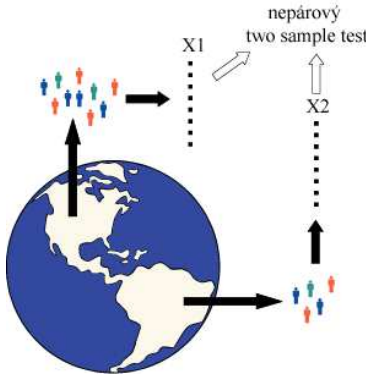


Dvouvýběrové testy: nepárový vs. párový design

- **Srovnávají navzájem dva vzorky (two sample, dvouvýběrové testy)**

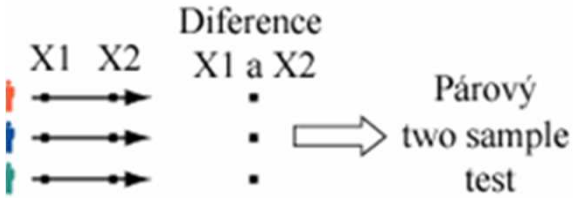
Nepárový design

- Skupiny srovnávaných dat jsou na **sobě zcela nezávislé** (též nezávislý, independent design), např. lidé z různých zemí, nezávislé skupiny pacientů s odlišnou léčbou atd.
- Při výpočtu je nezbytné brát v úvahu charakteristiky obou skupin dat.



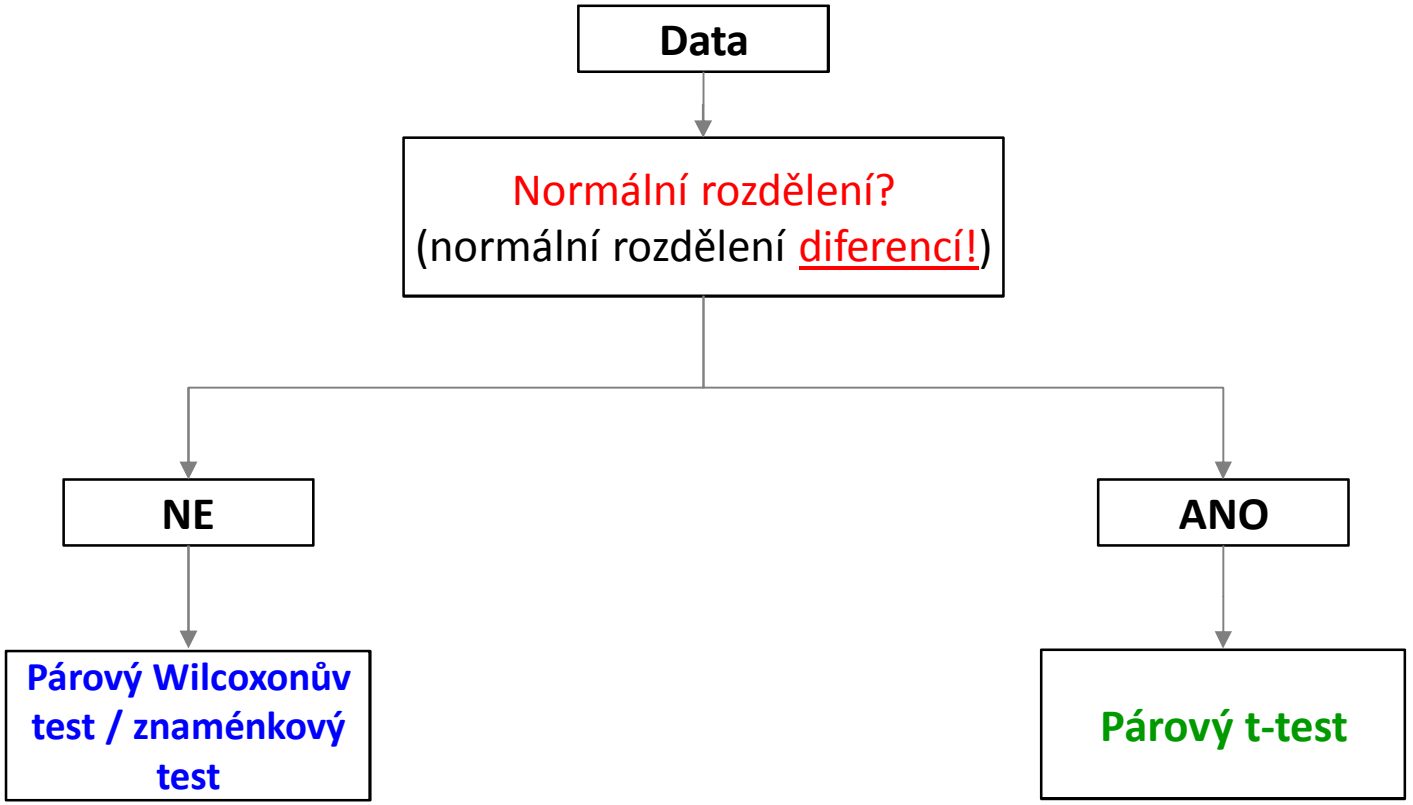
Párový design

- Mezi objekty v srovnávaných skupinách **existuje vazba**, daná např. člověkem před a po operaci, před a po dietě atd.
- Oba soubory musí mít **shodný počet hodnot**, protože všechna měření v jednom souboru musí být spárována s měřením v druhém souboru.
- Test je prováděn na diferencích skupin, nikoliv na jejich původních datech.



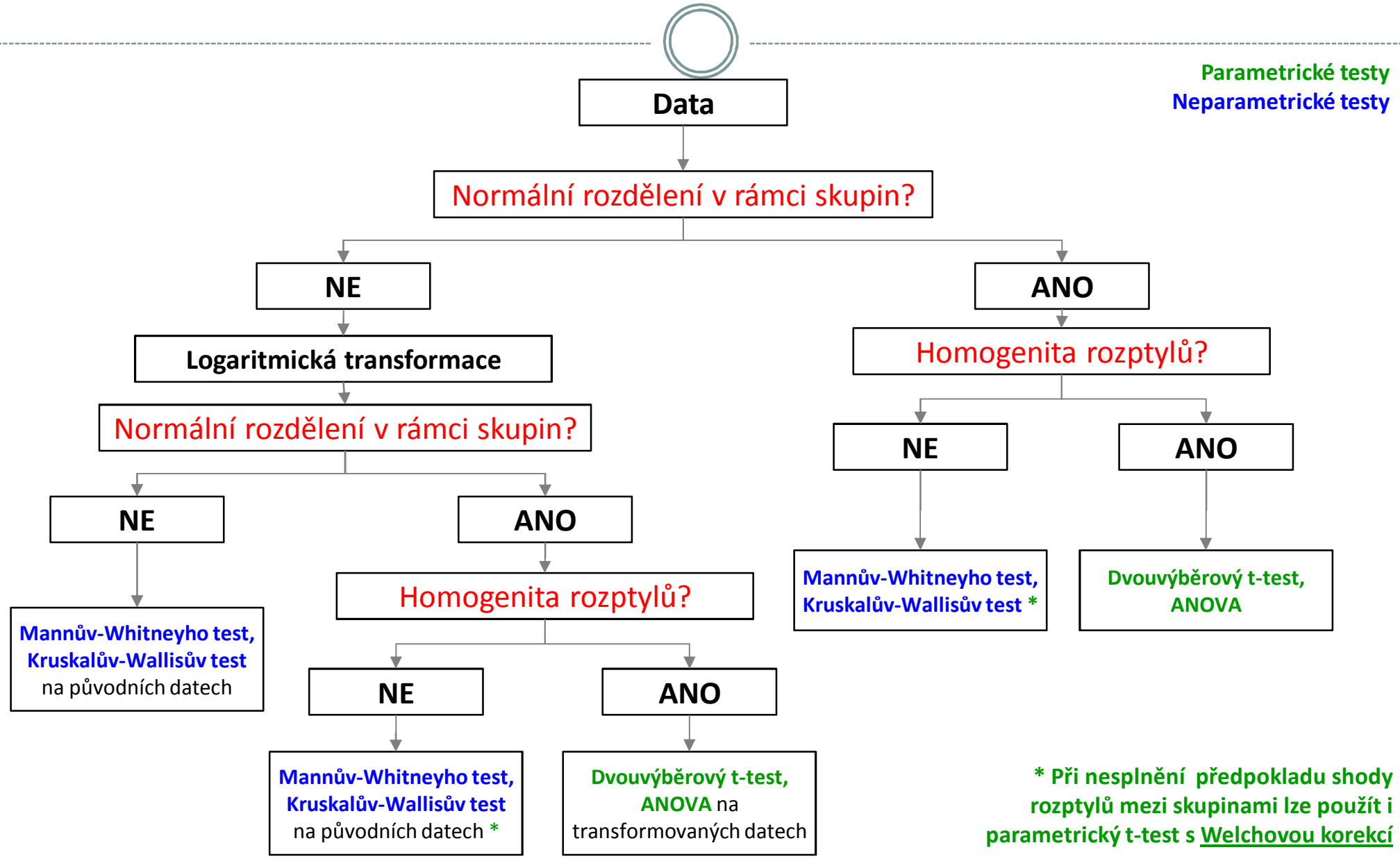
- **Pro srovnání tří a více vzorků nezávislých dat použijeme analýzu rozptylu – ANOVA (případně neparametrickou variantu Kruskalův-Wallisův test)**

Schéma při testování pomocí párových testů



Parametrické testy
Neparametrické testy

Schéma při testování 2 a více skupin



Vytvořil Institut biostatistiky a analýz, Masarykova univerzita
J. Jarkovský, S. Littnerová, L. Brožová

Korelační a regresní analýza

- **Korelační analýza** je využívána pro vyhodnocení míry vztahu dvou spojitých proměnných. Obdobně jako jiné statistické metody, i korelace mohou být parametrické nebo neparametrické.

- **Regresní analýza** vytváří model vztahu dvou nebo více proměnných, tedy jakým způsobem jedna proměnná (vysvětlovaná) závisí na jiných proměnných (prediktorech). Regresní analýza je obdobně jako ANOVA nástrojem pro vysvětlení variability hodnocené proměnné.

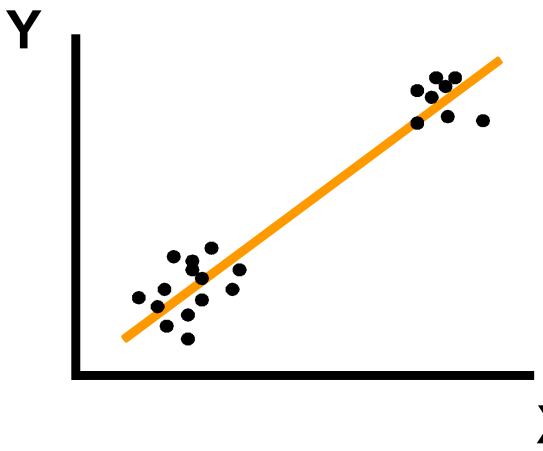
Korelační koeficienty

- **Korelační koeficient** (r) – kvantifikuje míru vztahu mezi dvěma spojitými veličinami (X a Y).
  - **Pearsonův korelační koeficient –** parametrický, hodnotí míru lineární závislosti mezi 2 spojitými proměnnými.
  - **Spearmanův korelační koeficient –** neparametrický, hodnotí míru pořadové závislosti mezi 2 spojitými proměnnými.
  - Hodnota r je kladná, když vyšší hodnoty X souvisí s vyššími hodnotami Y, naopak hodnota r je záporná, když nižší hodnoty X souvisí s vyššími hodnotami Y.
  - Nabývá hodnot od -1 do 1:

    $r = 0 \rightarrow$ nekorelované
    $r > 0 \rightarrow$ kladně korelované
    $r < 0 \rightarrow$ záporně korelované

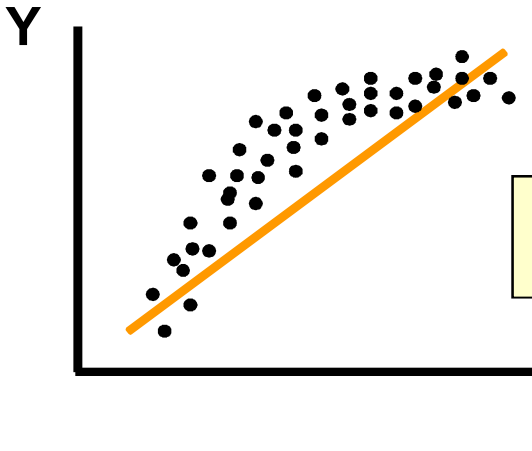
Problémy s výpočtem korelačního koeficientu

Problém více skupin



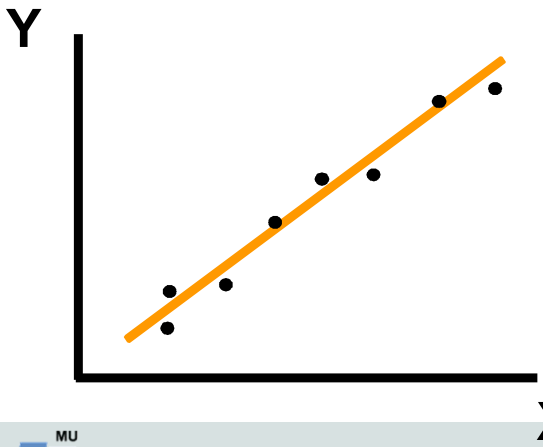
r = 0,981
(p < 0,001)

Nelineární vztah

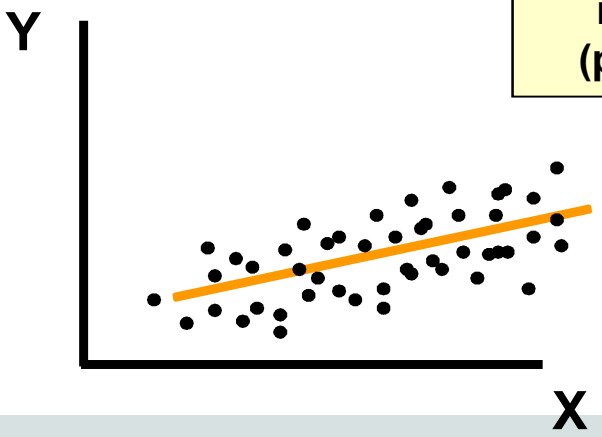


r = 0,761
(p = 0,032)

Problém velikosti výběru



r = 0,891
(p = 0,214)



r = 0,212
(p = 0,008)