Bi8600: Vícerozměrné metody
4. cvičení

Opakování

Ordinační metody

Korespondenční analýza

Nemetrické škálování

Diskriminační analýza

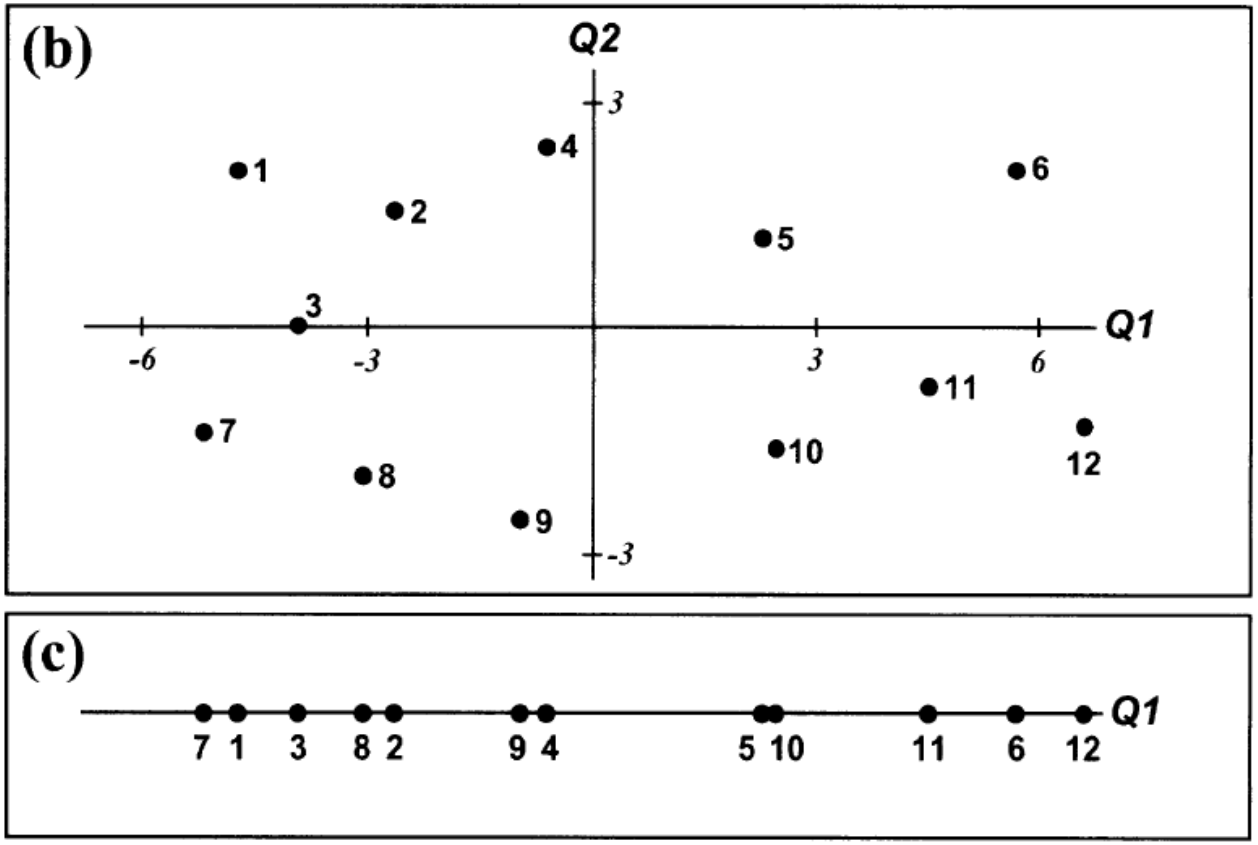
Vytvořil Institut biostatistiky a analýz, Masarykova univerzita
J. Jarkovský, L. Brožová

Opakování I.

- Popiš vícerozměrná data? Jaký je rozdíl mezi jednorozměrnou a vícerozměrnou analýzou?
- V jaké situaci byste před analýzou standardizovali data? Popište, jak byste provedli.
- Jaký je rozdíl mezi standardizací a transformací? Uveďte příklady transformací.
- Jaký je cíl ordinačních metod? Které ordinační metody znáte?
- Jaký vztah mezi sebou mají nové osy z PCA?
- Čemu je roven součet vlastních čísel u PCA (zvlášť pro PCA s kovarianční a korelační maticí na vstupu)?

Opakování II.

- Na kterém obrázku dochází k redukci vícerozměrného prostoru – 4b nebo 4c? Bude v tomto prostoru možné odlišit objekty 4 a 9?



Kenkel et al. (2002)

Korespondenční analýza - otázky

- Korespondenční analýza je nástroj pro hodnocení vztahů mezi … a … datové matice.
- Co popisuje vlastní číslo v korespondenční analýze?
- Co značí vysoká hodnota inercie? V jaké situaci bude hodnota inercie nízká?
- Vyberte, co lze interpretovat z biplotu korespondenční analýzy:

  1) vztah objektů

  2) vztah proměnných

  3) vztah objektů a proměnných
- Jaký maximální počet nových os může vzniknout?

Korespondenční analýza

- Analogie k PCA
- Vstupní data = agregované údaje objektů/vzorků (průměry, počty)
- Výpočet = analýza vlastních čísel na matici chi-kvadrát hodnot.

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{n} [X_{ij} - E_{ij}]^2 / E_{ij}$$

- CA přerozděluje inercii, vysoká inercie – silná vazba mezi řádky a sloupci
- Využití: nejčastěji data abundancí (ekologii), dotazníkové studie
- Nevýhoda: upřednostňuje unikátní málo četné kombinace

R packages

- *CA*() [*FactoMineR* package],
- *ca*() [*ca* package],
- *dudi.coa*() [*ade4* package],
- *corresp*() [*MASS* package],
- and *epCA*() [*ExPosition* package]

Korespondenční analýza – interpretace biplotu I.

- Pozice objektů (vzorky, v obrázku plná kolečka) a proměnných (druhy, prázdné čtverečky) v biplotu korespondenční analýzy interpretujeme následujícím způsobem:

Druhy, které se vyskytovaly spolu ve vzorcích, budou v ordinačním diagramu umístěny poblíž sebe (C, D).

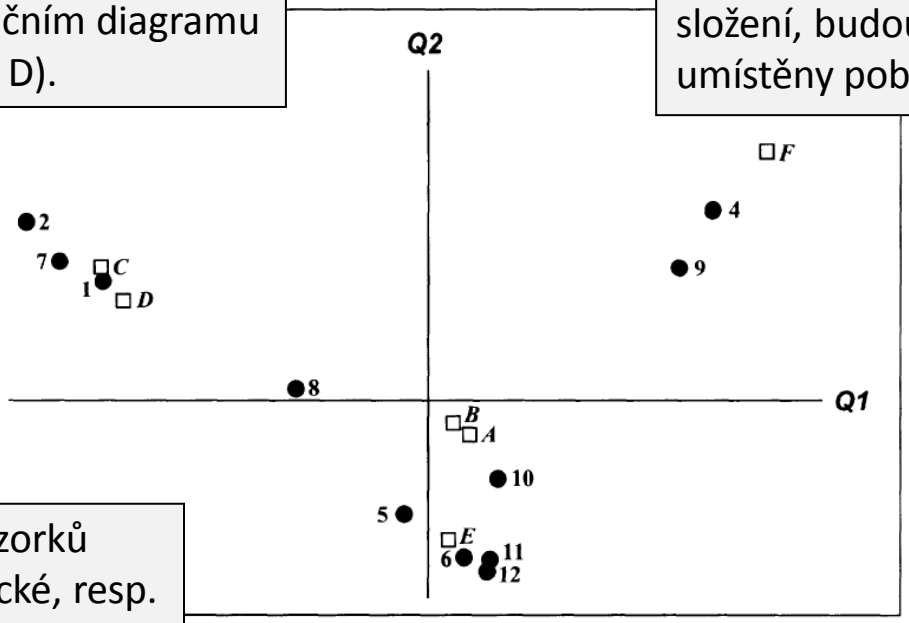
2.

Druhy, které se vyskytovaly v jiných vzorcích, budou v diagramu umístěny dále od sebe (E, F).

Vzorky, které mají podobné druhové složení, budou v ordinačním diagramu umístěny poblíž sebe (4, 9).

1.

Vzorky, které nemají společné druhy, budou v ordinačním diagramu umístěny dále od sebe (1, 9).



Kenkel et al. (2002)

Druhy umístěny poblíž vzorků byly pro tyto vzorky typické, resp. se vyskytovaly pouze v nich (1-C).

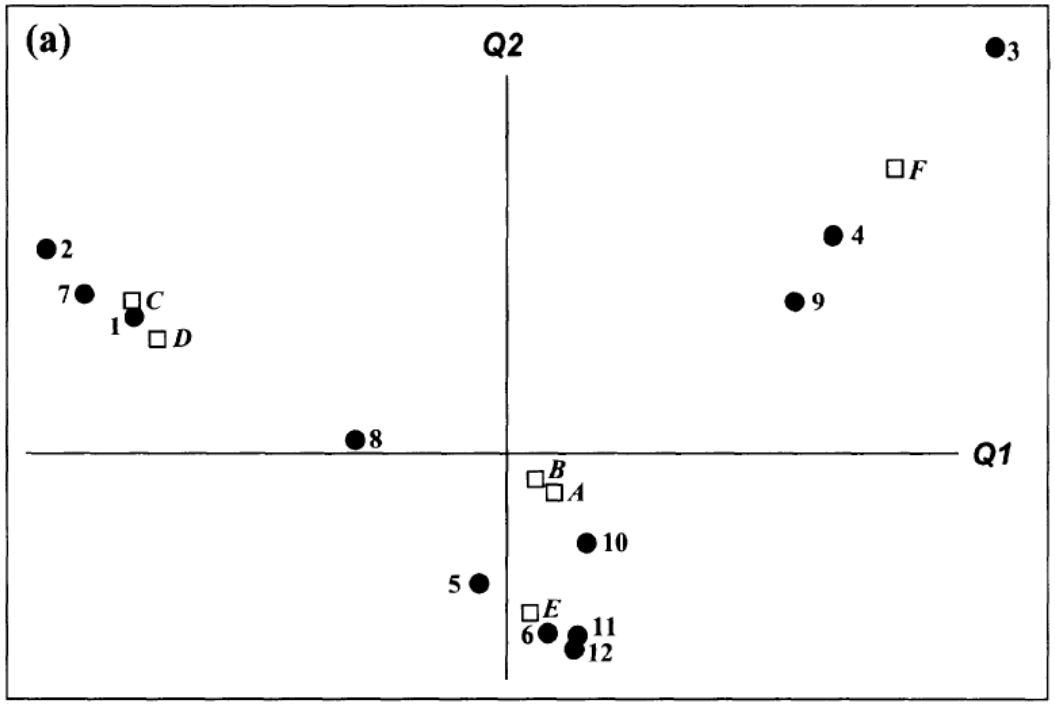
3.

Když se druh v daném vzorku nevyskytoval, budou od sebe druh a vzorek v ordinačním diagramu vzdáleny (1-F).

Body poblíž středu ordinačního diagramu nemají výrazný profil (B, A).

Korespondenční analýza – interpretace biplotu II.

- Interpretujte biplot z korespondenční analýzy:
  a) Vztah vzorku 2 vs. 7 a 2 vs. 9.
  b) Které druhy se vyskytovaly ve stejných a které v odlišných vzorcích?
  c) Ve kterém vzorku je nejvíce přítomný druh E a C?



Kenkel et al. (2002)

Nemetrické škálování (NMDS)

- Jaký je princip a základní výstup ne/metrického škálování?
- Jaký je rozdíl mezi metrickým a nemetrickým škálováním?
- Jaké jsou předpoklady NMDS?

Diskriminační analýza – proč?

- Jak se liší diskriminační analýza od shlukové analýzy? („unsupervised“ vs. „supervised“)
- Doplňte: „Nové osy diskriminační analýzy jsou tvořeny tak, aby … “
- Co vyjadřuje vlastní číslo osy diskriminační analýzy?
- Jaké jsou předpoklady diskriminační analýzy?

Diskriminační analýza - cíle

1. **Vytvoření zástupných proměnných**, které nejlépe odliší skupiny objektů.
2. **Vytvoření pravidla pro klasifikaci** objektů do skupin.
   a) Identifikace proměnných diskriminujících mezi předem danými skupinami objektů.
   b) Vyhodnocení klasifikace pro objekty, u kterých známe zařazení do skupin.
3. **Klasifikace** nových objektů do skupin.

Využití:

- v antropologii pro klasifikaci koster,
- v medicíně k určení rizikovosti pacientů,
- ve finančnictví k předvídání krachů firem,
- v biologii ke klasifikaci rostlin,
- v sociologii u psychologických testů.

Výběr proměnných do modelu

- Výběr provádíme na základě:

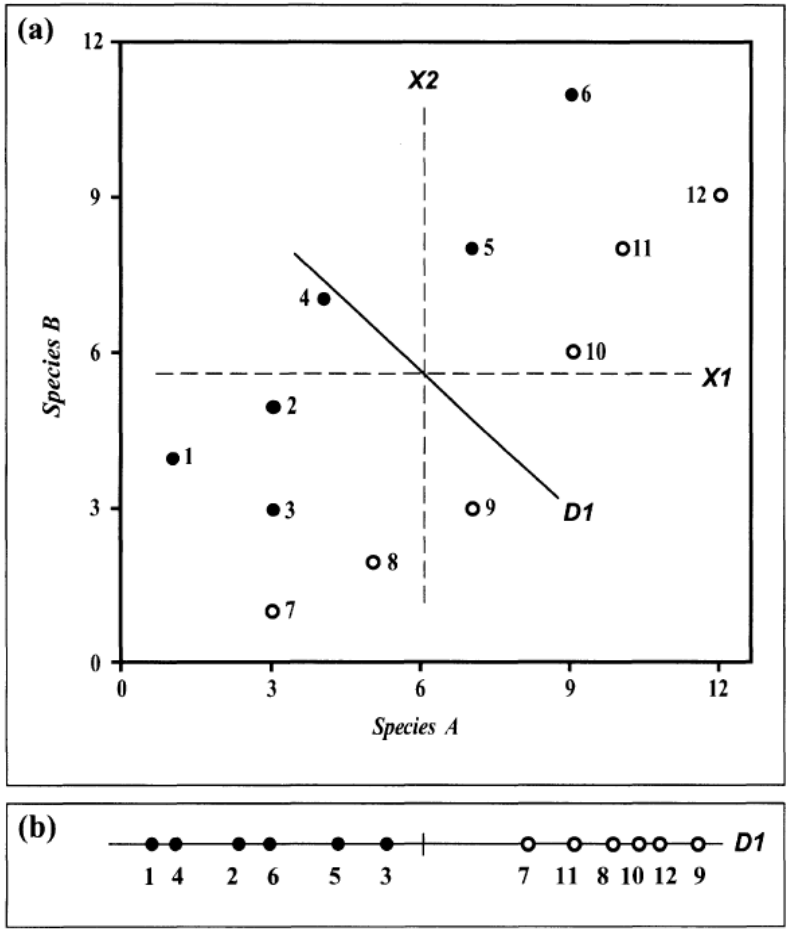
    1. Expertní znalosti proměnných (zohledňujeme např. finanční zátěž, chybovost měření, vyplněnost).
    2. Pozorovaných dat (hodnotíme korelace proměnných, přínos unikátní informace - % rozptylu, které popisuje, příspěvek k diskriminaci, atd.).
    3. Dopředné/zpětné eliminace (proměnné jsou postupně přidávány/odebírány tak, aby došlo k významnému „zlepšení“ modelu).

Diskriminační analýza – algoritmus I

2 fáze výpočtu:

1. Vytvoření kanonických os

   - Z původně vysokého počtu parametrů vytvoříme nové osy, které odliší shluky v datech.
   - Pomocí vlastních čísel opět vybíráme počet os, které nejlépe popisují rozdíl mezi skupinami.
   - Osy nejsou v prostoru původních proměnných ortogonální (jako tomu bylo u PCA).
   - Maximální počet os je roven počtu skupin mínus jedna.



Kenkel et al. (2002)

Diskriminační analýza – algoritmus II

2 fáze výpočtu:

2. Klasifikace objektů do skupin.
   - Na vstupu definujeme apriorní pravděpodobnosti zařazení objektů do skupin.
   - Pro každý objekt je spočítána vzdálenost od centroidu dané skupiny.
   - Kombinací apriorní pravděpodobnosti a Mahalanobisovy vzdálenosti jsou spočítány posteriorní pravděpodobnosti zařazení objektu do dané skupiny.
   - Pro každou ze skupin je definována diskriminační funkce. Při klasifikaci nových objektů zařadíme objekt do té skupiny, kde diskriminační funkce nabývá maxima.

Výstup diskriminační analýzy

- **Popis významu proměnných v modelu:**
  a) Wilksovo lambda modelu,
  b) Wilksovo lambda proměnných,
  c) Parciální lambda,
  d) Tolerance.

- **Kanonická analýza:**
  a) Vlastní vektory,
  b) Vlastní čísla.

- **Klasifikace objektů:**
  a) Apriorní pravděpodobnost,
  b) Mahalanobisova vzdálenost,
  c) Diskriminační funkce,
  d) Posteriorní pravděpodobnost.

Výstup diskriminační analýzy

- **Popis významu proměnných v modelu:**
  a) Wilksovo lambda modelu - analogické s ANOVA – hodnotí podíl vnitroskupinového a celkového rozptylu (rozsah: 0–1; hodnoty blízké nule značí dobrou diskriminaci skupin),
  b) Wilksovo lambda proměnných,
  c) Parciální lambda,
  d) Tolerance.

- **Kanonická analýza:**
  a) Vlastní vektory,
  b) Vlastní čísla.

- **Klasifikace objektů:**
  a) Apriorní pravděpodobnost,
  b) Mahalanobisova vzdálenost,
  c) Diskriminační funkce,
  d) Posteriorní pravděpodobnost.

Výstup diskriminační analýzy

- **Popis významu proměnných v modelu**
  a) Wilksovo lambda modelu,
  b) Wilksovo lambda proměnných - wilksovo lambda celého modelu při vyřazení dané proměnné (naopak: čím větší, tím je proměnná důležitější pro diskriminaci),
  c) Parciální lambda,
  d) Tolerance.

- **Kanonická analýza:**
  a) Vlastní vektory,
  b) Vlastní čísla.

- **Klasifikace objektů:**
  a) Apriorní pravděpodobnost,
  b) Mahalanobisova vzdálenost,
  c) Diskriminační funkce,
  d) Posteriorní pravděpodobnost.

Výstup diskriminační analýzy

- **Popis významu proměnných v modelu:**
  a) Wilksovo lambda modelu,
  b) Wilksovo lambda proměnných,
  c) Parciální lambda: unikátní příspěvek dané proměnné k diskriminaci (čím nižší je hodnota, tím větší unikátní diskriminační sílu prediktor nese),
  d) Tolerance.

- **Kanonická analýza:**
  a) Vlastní vektory,
  b) Vlastní čísla.

- **Klasifikace objektů:**
  a) Apriorní pravděpodobnost,
  b) Mahalanobisova vzdálenost,
  c) Diskriminační funkce,
  d) Posteriorní pravděpodobnost.

Výstup diskriminační analýzy

- **Popis významu proměnných v modelu:**
  a) Wilksovo lambda modelu,
  b) Wilksovo lambda proměnných,
  c) Parciální lambda,
  d) Tolerance: unikátní variabilita proměnné nevysvětlená ostatními proměnnými v modelu (1 - tolerance = R^2 variabilita proměnné, kterou lze vysvětlit kombinací ostatních proměnných).

- **Kanonická analýza:**
  a) Vlastní vektory,
  b) Vlastní čísla.

- **Klasifikace objektů:**
  a) Apriorní pravděpodobnost,
  b) Mahalanobisova vzdálenost,
  c) Diskriminační funkce,
  d) Posteriorní pravděpodobnost.

Výstup diskriminační analýzy

- **Popis významu proměnných v modelu:**
  a) Wilksovo lambda modelu,
  b) Wilksovo lambda proměnných,
  c) Parciální lambda,
  d) Tolerance.

- **Kanonická analýza:** vytváří nové osy tak, aby jejich diskriminační funkce byla co největší (počet nových os = min(počet skupin, počet proměnných) -1)
  a) Vlastní vektory: určují směr nových os (definovány jako lineární kombinace proměnných v modelu).
  b) Vlastní čísla: popisují podíl variability mezi a v rámci skupin objektů na nových osách. Osy s nízkou hodnotou vlastního čísla nepřispívají k popisu rozdílu mezi skupinami.

- **Klasifikace objektů:**
  a) Apriorní pravděpodobnost,
  b) Mahalanobisova vzdálenost,
  c) Diskriminační funkce,
  d) Posteriorní pravděpodobnost.

Výstup diskriminační analýzy

- **Popis významu proměnných v modelu:**
  a) Wilksovo lambda modelu,
  b) Wilksovo lambda proměnných,
  c) Parciální lambda,
  d) Tolerance.

- **Kanonická analýza:**
  a) Vlastní vektory,
  b) Vlastní čísla.

- **Klasifikace objektů:**
  a) Apriorní pravděpodobnost: pravděpodobnost výskytu objektu ve shluku (rovnoměrná/proporcionální/nastavená uživatelem na základě znalostí dané problematiky)
  b) Mahalanobisova vzdálenost,
  c) Diskriminační funkce,
  d) Posteriorní pravděpodobnost.

Výstup diskriminační analýzy

- **Popis významu proměnných v modelu:**
  a) Wilksovo lambda modelu,
  b) Wilksovo lambda proměnných,
  c) Parciální lambda,
  d) Tolerance.

- **Kanonická analýza:**
  a) Vlastní vektory,
  b) Vlastní čísla.

- **Klasifikace objektů:**
  a) Apriorní pravděpodobnost,
  b) Mahalanobisova vzdálenost: Používána pro popis vzdáleností objektů od centroidů skupin a následně pro výpočet posteriorních pravděpodobností,
  c) Diskriminační funkce,
  d) Posteriorní pravděpodobnost.

Výstup diskriminační analýzy

- **Popis významu proměnných v modelu:**
  a) Wilksovo lambda modelu,
  b) Wilksovo lambda proměnných,
  c) Parciální lambda,
  d) Tolerance.

- **Kanonická analýza:**
  a) Vlastní vektory,
  b) Vlastní čísla.

- **Klasifikace objektů:**
  a) Apriorní pravděpodobnost,
  b) Mahalanobisova vzdálenost,
  c) Diskriminační funkce: pro každou skupinu jedna rovnice, objekt je zařazen do skupiny s maximální hodnotou klasifikační funkce.
  d) Posteriorní pravděpodobnost.

Výstup diskriminační analýzy

- **Popis významu proměnných v modelu:**
  a) Wilksovo lambda modelu,
  b) Wilksovo lambda proměnných,
  c) Parciální lambda,
  d) Tolerance.

- **Kanonická analýza:**
  a) Vlastní vektory,
  b) Vlastní čísla.

- **Klasifikace objektů:**
  a) Apriorní pravděpodobnost,
  b) Mahalanobisova vzdálenost,
  c) Diskriminační funkce,
  d) Posteriorní pravděpodobnost: pravděpodobnost klasifikace objektu do dané skupiny (kombinace Mahalanobisových vzdáleností objektů od centroidů shluků s apriorní pravděpodobností).

Validace modelu

- Maximální predikční síla vs. minimální složitost
- Ideálně na nezávislém datovém souboru, na kterém nebyl model vyvinut. Může se stát, že na naše data bude model sedět perfektně a na jiném souboru zcela selže (bude přetrénovaný).
- Pokud nemáme takový další datový soubor, lze využít validačních technik:
    a) Krosvalidace,
    b) „Leave one out“,
    c) Permutační metody.