

Bi8600: Vícerozměrné metody

6. cvičení



Diskriminační analýza (DA)

- kanonická DA
- kanonická lineární DA
- popisná DA
- Fisherova DA

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.



Iris Versicolor

Iris Setosa

Iris Virginica

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).

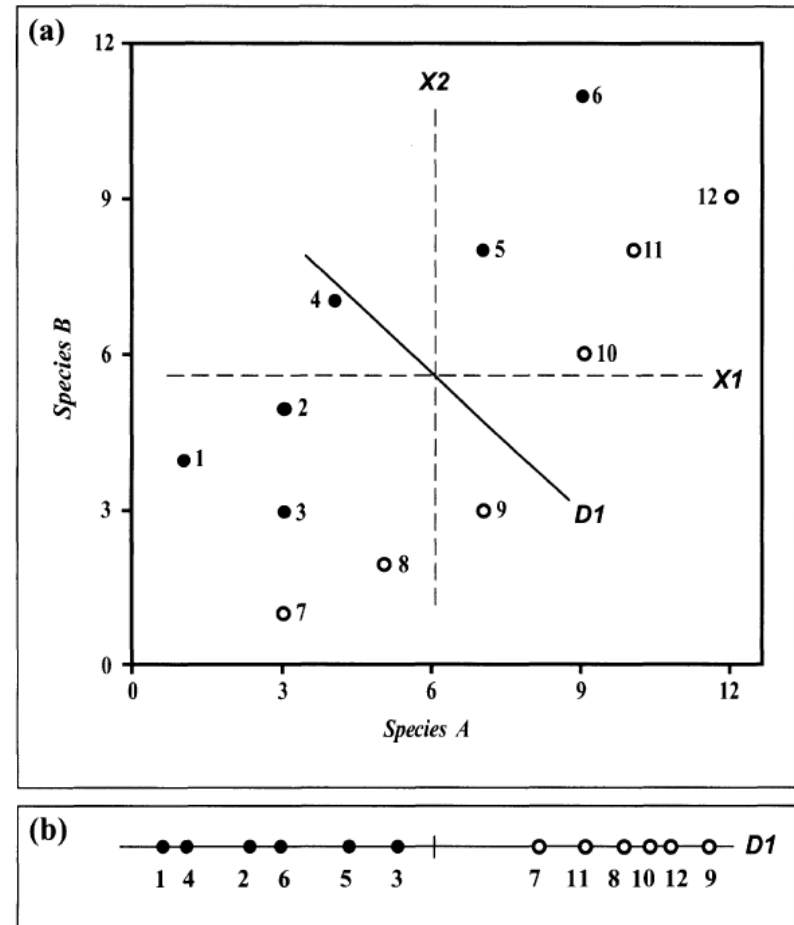
Diskriminační analýza – algoritmus I



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) Posterioční 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,
 - 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 ($1 - \text{tolerance} = R^2$ 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 = $\min(\text{počet skupin, počet proměnných}) - 1$)
 - 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) **Posteriovní 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.