Eksploracyjna Analiza Danych.

Metoda geometryczna

Andrzej Dąbrowski

1 stycznia 2019

Eksploracyjna Analiza Danych.

Metoda geometryczna

Andrzej Dąbrowski

1 stycznia 2019

1 Wstęp

Dane są jak ludzie. Wystarczy je trochę pomęczyć a powiedzą całą prawdę. [Ronald Coase]

2 Macierz danych

Definicja 2.1 Macierz danych jest tablicą o wymiarach $n \times p$

$$X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X^1 & X^2 & \cdots & X^p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_1^T \\ X_2^T \\ \vdots \\ X_n^T \end{bmatrix}$$

Macierz danych przedstawia zbiór n przypadków, każdy z nich opisany jest przez p zmiennych (cech). Kolumny $X^1, X^2, \ldots, X^p$ są n - wymiarowymi wektorami cech. Wiersze $X_1, X_2, \ldots, X_n$ są p - wymiarowymi wektorami przypadków. Zazwyczaj macierz danych (dla $p = 2$) jest przedstawiana jako 2-wymiarowy wykres n punktów (*wykres rozrzutu*)

Definicja 2.2 Macierzą klonów wektora $A \in \mathbf{R}^p$ jest tablica o wymiarach nxp

$$A^n = \begin{bmatrix} A^T \\ A^T \\ \vdots \\ A^T \end{bmatrix}$$

Na przykład, jeżeli $\mathbf{a}$ jest liczbą to $\mathbf{a}^n$ jest n - wymiarowym wektorem

$$\begin{bmatrix} a \\ a \\ \vdots \\ a \end{bmatrix}$$

Wektory w macierzy X są zapisane w standardowym, kartezjańskim układzie współrzędnych o początku w punkcie $\mathbf{0}$. Dla dowolnych wektorów A, B, symbol AB oznacza wektor o początku w punkcie A i końcu w punkcie B.

Definicja 2.3 Środkiem ciężkości macierzy danych X jest punkt G, spełniający równanie

$$\sum_{i=1}^{n} GX_i = \mathbf{0}$$

Twierdzenie 2.1 Każda macierz ma jedyny środek ciężkości. Oznaczymy go $G = g(X)$. Co więcej,

$$g(X) = \frac{1}{n} X^T \mathbf{1}^n$$

Dla macierzy danych X naturalny jest układ współrzędnych o centrum w środku ciężkości $g(X)$. Taka operacja nazywa się **centrowaniem** X i oznacza symbolem X^0. Mamy więc:

$$X^0 = X - g(X)^n$$

Definicja 2.4 Macierz wariancji/kowariancji.
Niech X i Y będą macierzami o wymiarach odpowiednio $n \times p$ i $n \times q$.
Macierzą kowariancji między X i Y jest macierz o wymiarach pxq

$$V(X, Y) = \frac{1}{n} \left(X^0\right)^T Y^0$$

Macierzą wariancji dla X nazywamy macierz kwadratową o wymiarach px p: $V(X) \stackrel{def}{=} V(X, X)$

Definicja 2.5 Standaryzacja macierzy danych
Niech

$$X^0 = [\, Z^1 \quad Z^2 \quad \cdots \quad Z^p \,]$$

Standaryzacją macierzy X jest tablica:

$$S(X)= \left[\frac{Z^1}{||Z^1||} \quad \frac{Z^2}{||Z^2||} \quad \cdots \quad \frac{Z^p}{||Z^p||} \right]$$

Symbol $||A||$ oznacza długość wektora A

Definicja 2.6 Macierzą korelacji macierzy X i Y o wymiarach odpowiednio $n \times p$ i $n \times q$ jest macierz $R(X,Y) \stackrel{def}{=} V(S(X),S(Y))$ $R(X) \stackrel{def}{=} R(X,X)$.

Definicja 2.7 Odległość Frobeniusa macierzy X i Y o tych samych wymiarach $n \times p$ jest liczba

$$d^2(X,Y) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{p} (x_{ij} - y_{ij})^2 =$$

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} ||X_i - Y_i||^2 =$$

$$\frac{1}{n} \sum_{j=1}^{p} ||X^j - Y^j||^2$$

Definicja 2.8 Bezwładność macierzy X o wymiarach $n \times p$ jest liczba

$$J(X)= d^2(X, g(X)^n)$$

Propozycja 2.1

$$J(X)= Tr(V(X))$$

3 Model liniowy

Definicja 3.1 Hiperpłaszczyzna H wymiaru $d \geq 0$ w przestrzeni $\mathbf{R}^p$ o kierunku podprzestrzeni U i przechodząca przez punkt $A \in \mathbf{R}^p$

$$H = H(U, A) \stackrel{def}{=} U + A,$$
$$dim(U) = d$$

Przykład 3.1 Gdy $U = \{\mathbf{0}\}$ to hiperpłaszczyzna przechodząca przez A jest punktem A. Przyjmiemy, ze wymiar takiej hiperpłaszczyzny jest równy 0.
Gdy U jest jednowymiarową podprzestrzenią $\mathbf{R}^p$ o wektorze bazowym B to hiperpłaszczyzna wymiaru 1 przechodząca przez A jest prostą o kierunku wektora B przechodzącą przez punkt A

Dla macierzy X i hiperpłaszczyzny H Oznaczenie $X \subset H$ jest równoważne spełnieniu warunku

$$X_i \in H \;\; i = 1, 2, \ldots, n$$

Definicja 3.2 Model liniowy
Niech X macierz danych $n \times p$. Modelem liniowym macierzy X o wymiarze d jest macierz $Y \subset H$ wymiaru $n \times p$, dla pewnej hiperpłaszczyzny H wymiaru $0 \leq d \leq p$.
Definicja 3.3 Najlepszy model liniowy wymiaru d
Niech Y będzie dowolnym modelem liniowym macierzy X o wymiarze d.
Model Y^* jest najlepszym modelem liniowym macierzy X o wymiarze d gdy spełnia warunek

$$d^2(X, Y^*) \leq d^2(X, Y) \;\; \forall Y$$

Twierdzenie 3.1 Twierdzenie Pitagorasa dla punktu

$$\forall A \in \mathbf{R}^p \ d^2(X, A^n) = d^2(X, g(X)^n) + d^2(A^n, g(X)^n) = J(X) + ||g(X) - A||^2$$

Wniosek 3.1

$$\forall A \in \mathbf{R}^p \ d^2(X, g(X)^n) \leq d^2(X, A^n)$$
$$J(X) \leq d^2(X, A^n)$$

Wniosek 3.2 Najlepszym modelem 0-wymiarowym macierzy X jest $g(X)^n$
Najlepszym modelem p-wymiarowym macierzy X jest X

Definicja 3.4 Kwadratowy błąd względny modelu
Niech Y będzie modelem liniowym macierzy X. Kwadratowy błąd względny modelu to liczba

$$RSE(Y) = \frac{d^2(X, Y)}{J(X)}$$

Twierdzenie 3.2 Niech Y_1 i Y_2 będą najlepszymi modelami liniowymi macierzy X o wymiarach $0 \leq d_1 \leq d_2 \leq p$. Wtedy

$$0 \leq RSE(Y_2) \leq RSE(Y_1) \leq 1$$

Definicja 3.5 Rzut prostopadły na hiperpłaszczyznę
Niech $H = H(U, A)$ będzie hiperpłaszczyzną o kierunku podprzestrzeni U o wymiarze $d > 0$ i przechodzącą przez punkt $A \in \mathbf{R}^p$. Rzutem punktu $Q \in \mathbf{R}^p$ na H jest punkt

$$P_H(Q) = P_U(Q - A) + A = P_U(Q) + (A - P_U(A))$$

gdzie $P_U()$ jest rzutem prostopadłym na podprzestrzeń U

Wniosek 3.3 P_H jest operatorem liniowym $\Leftrightarrow$ H jest podprzestrzenią liniową

Wniosek 3.4 Dla $n \times p$ macierzy W

$$P_H(W) = W \Leftrightarrow W \subset H$$

Twierdzenie 3.3 Twierdzenie Pitagorasa dla hiperpłaszczyzn
Niech H będzie hiperpłaszczyzną wymiaru $0 < d \leq p$, X, Y macierzami danych wymiaru $n \times p$, $Y \subset H$

$$d^2(X,Y) = d^2(X, P_H(X)) + d^2(P_H(X), Y)$$

Wniosek 3.5 Niech Y^* będzie najlepszym modelem liniowym wymiaru d dla macierzy X, $Y^* \subset H^*$.
Wtedy

$$Y^* = P_{H^*}(X)$$

> Z ostatniego wniosku wynika, że budowanie najlepszego modelu Y^* jest równoważne szukaniu najlepszej hiperpłaszczyzny rzutu H^*
> Dlatego wymiennie można używać jako synonimu modelu macierzy danych Y^* i hiperpłaszczyzny rzutu H^*

Wniosek 3.6

$$RSE(X, P_{H^*}(X)) = 1 - \frac{J(P_{H^*}(X))}{J(X)}$$

Definicja 3.6 Współczynnik determinacji najlepszego modelu liniowego wymiaru d

$$r^2(P_{H^*}(X)) \stackrel{def}{=} \frac{J(P_{H^*}(X))}{J(X)}$$

Twierdzenie 3.4

$$H^* = U^* + g(X)$$

dla pewnej podprzestrzeni $U^* \subset \mathbf{R}^p$

> Budowanie najlepszego modelu wymiaru d mozna ograniczyć do szukania najlepszej *podprzestrzeni* wymiaru d.

Twierdzenie 3.5 Najlepszy model d wymiarowy $H^* = U^* + g(X)$ dla macierzy danych X spełnia jeden z dwóch warunków;

$$J(P_{U^*+g(X)}(X)) \geq J(P_{U+g(X)}(X))$$
$$Tr(V(P_{U^*}(X^0))) \geq J(P_U(X^0))$$

dla dowolnej podprzestrzeni U wymiaru d

Dla zadanego układu współrzędnych operator rzutu na podprzestrzeń d-wymiarową można utożsamić z macierzą C wymiaru $d \times p$, której wiersze są wektorami bazy (ortonormalnej) przestrzeni rzutu U:

$$C = \begin{bmatrix} C_1^T \\ C_2^T \\ \vdots \\ C_d^T \end{bmatrix}$$

Twierdzenie 3.6 Macierz C^* odpowiadająca rzutowi na optymalną podprzestrzeń dla macierzy X o macierzy wariancji $V = V(X)$ spełnia warunek:

$$C^* = argmax(Tr(CVC^T))$$

z warunkiem ubocznym

$$||C_i|| = 1,\ i = 1, 2, \ldots, d$$

Korzystając z metody mnożników Lagrange'a zadanie maksymalizacji z poprzedniego twierdzenia może być przedstawione jako zagadnienie maksymalizacji funkcji, gdzie zmienną jest macierz C wymiaru $d \times p$

$$Tr(CVC^T) - Tr(C^T \Lambda C)$$

Macierz $\Lambda = diag(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_d)$ jest diagonalna. Wartości λ_i muszą

być tak dobrane, aby spełniony był warunek $||C_i||= 1,\ i = 1, 2, \ldots, d$

Skorzystamy tu z warunku dostatecznego na istnienie ekstremum funkcji rzeczywistej z argumentem macierzowym (uogólnienie pojecia gradientu).

Definicja 3.7 Pochodna macierzowa funkcji rzeczywistej macierzy D rozmiaru $d \times p$ jest macierzą rozmiaru $d \times p$:

$$\left[\frac{\partial f}{\partial D}(D)\right]_{ij} = \frac{\partial f(D)}{\partial D_{ij}}$$

Twierdzenie 3.7 Jeżeli funkcja $f(D)$ ma ekstremum dla macierzy D_0 to

$$\left.\frac{\partial f}{\partial D}(D)\right|_{D=D_0} = 0$$

Lemat 3.1 Dla symetrycznej macierzy W

$$\frac{\partial Tr(A^T W A)}{\partial A} = 2WA$$
$$\frac{\partial Tr(BWB^T)}{\partial B} = 2BW$$

Twierdzenie 3.8 Macierz C odpowiadająca rzutowi na optymalną podprzestrzeń dla macierzy X o macierzy wariancji $V = V(X)$ (twierdzenie 3.6) spełnia równanie

$$CV = \Lambda C$$

Wniosek 3.7 Wiersze macierzy C (**składowe główne**) są wektorami własnymi macierzy V, odpowiadającymi jej d największym wartościom własnym $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_d$

Wniosek 3.8 Współczynnik determinacji najlepszego modelu d-wymiarowego wyraża się wzorem;

$$r^2 = \frac{\sum_{i=1}^{d} \lambda_i}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_i}$$

3.1 Reifikacja modelu

Składowe główne są zbiorem nowych cech w d-wymiarowej przestrzeni najbliższej w sensie odległości Frobeniusa danym z macierzy X. Interesujące jest uzyskanie praktycznej interpretacji tych nowych cech. Taki proces nazywa się **reifikacją** modelu.
Zazwyczaj wszystkie analizy prowadzi się dla danych scentrowanych X^0, to znaczy w układzie współrzędnych, którego początek umieszcza się w środku ciężkości X.
Model danych X w przestrzeni składowych głównych (ang. *PCA scores*) jest macierzą $Y = X^0 C^T$.
O związku między kolumnami X^0 i Y świadczy macierz korelacji $R(X, Y)$

Propozycja 3.1 Niech $V = V(X) = [v_{ij}]$ będzie macierzą wariancji X, $C = [c_{ij}]$ macierzą, której wiersze są składowymi głównymi

$$r_{ij} \stackrel{def}{=} [R(X, Y)]_{ij} = \sqrt{\frac{\lambda_j}{v_{ii}}} c_{ij}$$

Propozycja 3.2

$$\sum_{j=1}^{p} r_{ij}^2 = 1$$

Liczba r_{ij} jest korelacją między X^i a Y^j, czyli cosinusem kąta miedzy nimi. Im ten kąt mniejszy (a więc korelacja większa) tym bardziej nowa zmienna Y^j jest związana z X^i. Propozycja 3.2, mówi że wektor $[r_{i1}, r_{i2}, \ldots, r_{ip}]$, reprezentujący zmienną X^i leży na sferze jednostkowej

w układzie współrzędnych korelacyjnych między X^i a $Y^1, Y^2, \ldots, Y^p$.
Wykres w układzie dwóch pierwszych składowych korelacyjnych nazywa się *kołem korelacyjnym*. Pokazuje on jak "stare" zmienne są związane z dwiema najważniejszymi składowymi głównymi.

3.2 Przykład

Dane są związane z wynikami zawodów olimpijskich w Seulu (1988) w siedmioboju kobiet.
System punktowy przelicza wyniki 7 dyscyplin na punkty. Porównamy ten system punktów z modelem składowych głównych.

Słowniczek
hurdles = 100 m płotki
shot = pchnięcie kulą
javelin = oszczep

```
load("siedmioboj.Rda")
hm <- as.matrix(siedmioboj[,1:7])
knitr::kable(
  hm[1:5,], booktabs = TRUE,
  caption = 'Wyniki 5 najlepszych zawodniczek.'
)
```

Tabela 3.1 Wyniki 5 najlepszych zawodniczek.

	hurdles	highjump	shot	run200m	longjump	javelin	run800r
Joyner-Kersee (USA)	12.69	1.86	15.80	22.56	7.27	45.66	128.5
John (GDR)	12.85	1.80	16.23	23.65	6.71	42.56	126.1
Behmer (GDR)	13.20	1.83	14.20	23.10	6.68	44.54	124.2
Sablovskaite (URS)	13.61	1.80	15.23	23.92	6.25	42.78	132.2
Choubenkova (URS)	13.51	1.74	14.76	23.93	6.32	47.46	127.9

```
kor <- round(cor(hm), 2)
knitr::kable(
  kor, booktabs = TRUE,
  caption = 'Korelacje między zmiennymi'
)
```

Tabela 3.2 Korelacje między zmiennymi

	hurdles	highjump	shot	run200m	longjump	javelin	run800m
hurdles	1.00	-0.81	-0.65	0.77	-0.91	-0.01	0.78
highjump	-0.81	1.00	0.44	-0.49	0.78	0.00	-0.59
shot	-0.65	0.44	1.00	-0.68	0.74	0.27	-0.42
run200m	0.77	-0.49	-0.68	1.00	-0.82	-0.33	0.62
longjump	-0.91	0.78	0.74	-0.82	1.00	0.07	-0.70
javelin	-0.01	0.00	0.27	-0.33	0.07	1.00	0.02
run800m	0.78	-0.59	-0.42	0.62	-0.70	0.02	1.00

```
siedmioboj_pca <- prcomp(hm, scale = TRUE)
knitr::kable(
  siedmioboj_pca$rotation, booktabs = TRUE, digits=4,
  caption = 'Składowe główne'
)
```

Tabela 3.3 Składowe główne

	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5	PC6	PC7
hurdles	0.4529	-0.1579	-0.0451	0.0265	-0.0949	-0.7833	-0.3802
highjump	-0.3772	0.2481	0.3678	-0.6800	-0.0188	-0.0994	-0.4339
shot	-0.3631	-0.2894	-0.6762	-0.1243	-0.5117	0.0509	-0.2176
run200m	0.4079	0.2604	0.0836	-0.3611	-0.6498	0.0250	0.4534
longjump	-0.4562	0.0559	-0.1393	-0.1113	0.1843	-0.5902	0.6121
javelin	-0.0754	-0.8417	0.4716	-0.1208	-0.1351	0.0272	0.1729
run800m	0.3750	-0.2245	-0.3959	-0.6034	0.5043	0.1556	0.0983

> E oznacza, że używam y danych tandaryzowanych scale=TRUE

```
lambdy <- siedmioboj_pca$sdev^2
lmb_tab <- data.frame(lambda=round(lambdy,4),r2=round(cumsum(lamb
lmb_tab <- t(lmb_tab)
```

```
colnames(lmb_tab) <- 1:7
knitr::kable(
  lmb_tab, booktabs = TRUE,
  caption = 'Lambdy i współczynniki determinacji jako funkcja wym
)
```

Tabela 3.4 Lambdy i współczynniki determinacji jako funkcja wymiaru modelu d

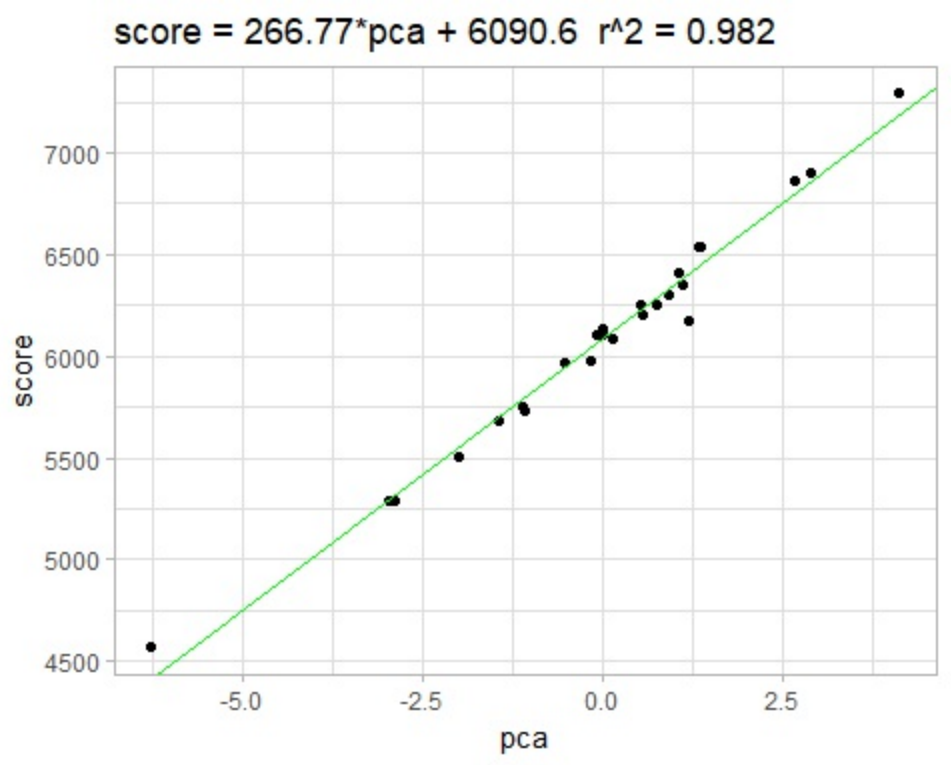
	1	2	3	4	5	6	7
lambda	4.4603	1.1943	0.521	0.4572	0.2453	0.073	0.049
r2	0.6400	0.8100	0.880	0.9500	0.9800	0.990	1.000

```
punkty_pca <- -predict(siedmioboj_pca)[,1]
pca_sco <- data.frame(score=siedmioboj$score,pca=punkty_pca)
rownames(pca_sco) <- rownames(siedmioboj)
knitr::kable(
  t(pca_sco[1:5,]), booktabs = TRUE,digits = 2,
  caption = 'Porównanie punktów siedmioboju i punktów z pca dla 5
)
```

Tabela 3.5 Porównanie punktów siedmioboju i punktów z pca dla 5 zawodniczek

	Joyner-Kersee (USA)	John (GDR)	Behmer (GDR)	Sablovskaite (URS)	Choubenkova (URS)
score	7291.00	6897.00	6858.00	6540.00	6540.00
pca	4.12	2.88	2.65	1.34	1.36

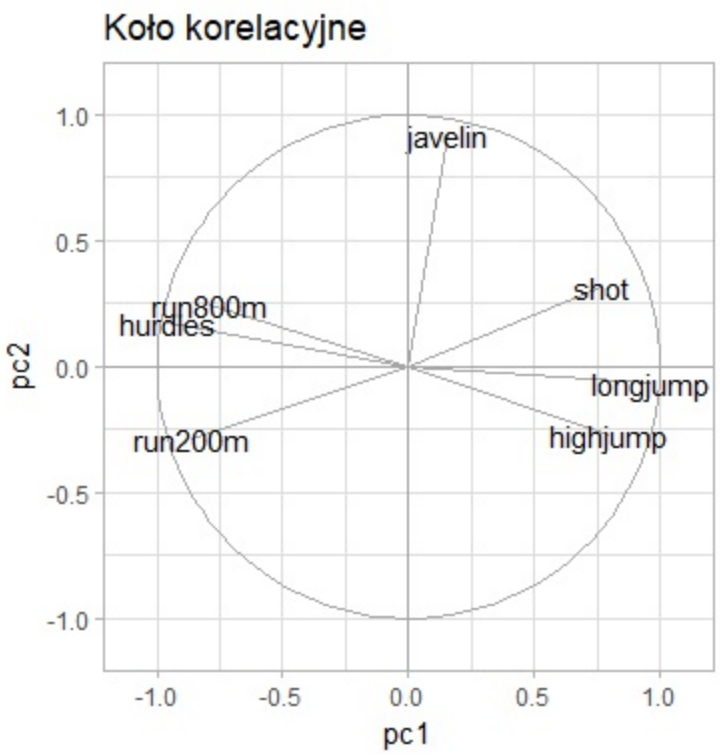
Znak "-" przy predict(siedmioboj_pca)[,1] został wybrany tak, aby zwrot wektora pca i score był taki sam




```
require(FactoMineR)
pca.FM  <- PCA(hm, graph = FALSE)
knitr::kable(
  pca.FM$var$coord, booktabs = TRUE,digits = 2,
  caption = 'Korelacje zmiennych oryginalnych ze składowymi główn
)
```

Tabela 3.6 Korelacje zmiennych oryginalnych ze składowymi głównymi

	Dim.1	Dim.2	Dim.3	Dim.4	Dim.5
hurdles	-0.96	0.17	0.03	-0.02	0.05
highjump	0.80	-0.27	-0.27	0.46	0.01
shot	0.77	0.32	0.49	0.08	0.25
run200m	-0.86	-0.28	-0.06	0.24	0.32
longjump	0.96	-0.06	0.10	0.08	-0.09
javelin	0.16	0.92	-0.34	0.08	0.07
run800m	-0.79	0.25	0.29	0.41	-0.25



Składowa główna pc1 jest dodatnio i silnie skorelowana ze sportami siłowymi i z prędkościami (z czasem biegu ujemnie!). Jedynym niepasującym sportem jest rzut oszczepem, związanym z drugą składową główną. Czyli punktacja, silnie związana ze składową 1 *nie uwzględnia w istocie rzutu oszczepem*.

4 Grupowanie - analiza skupień

4.1 Podział macierzy danych na klasy

Definicja 4.1 Podział macierzy danych X na k klas wyznaczony jest przez podział indeksów wierszy na rozłączne zbiory $I_1, I_2, \ldots, I_k$. Wyznaczone są w ten sposób podmacierze

$$X_{[j]} = \begin{bmatrix} X_{i_1} \\ X_{i_2} \\ \vdots \\ X_{i_{n_j}} \end{bmatrix}$$

gdzie

$$I_j = \{i_1, i_2, \ldots, i_{n_j}\}$$

Macierz X można zapisać:[1]

$$X = \begin{bmatrix} X_{[1]} \\ X_{[2]} \\ \vdots \\ X_{[k]} \end{bmatrix}$$

Definicja 4.2 Centroidem G_j j_tej klasy podziału $\mathscr{P}$ nazywamy środek ciężkości $X_{[j]}$:

$$G_j = g\left(X_{[j]}\right)$$

Macierz

$$G_{\mathscr{P}} = \begin{bmatrix} G_1^{n_1} \\ G_1^{n_2} \\ \vdots \\ G_1^{n_k} \end{bmatrix}$$

nazywamy **macierzą centroidów podziału** $\mathscr{P}$
Lemat 4.1 Niech $G_1, G_2, \ldots, G_k$ będą centroidami podziału, $G = g(X)$.
1. G jest wypukłą kombinacją G_j:

$$G = \sum_{i=1}^{k} p_j G_j,\ p_j = \frac{n_j}{n},\ \sum_{i=1}^{k} p_j = 1$$

2. G jest środkiem ciężkości $G_{\mathscr{P}}$.

Dobry podział charakteryzuje się dwiema cechami:

1. Dane w podmacierzach $X_{[1]}, X_{[2]}, \ldots, X_{[k]}$ są maksymalnie zwarte[2]
2. Centroidy podziału są maksymalnie odległe[3]

Realizacją postulatu 1. jest aby bezwładności $J\left(X_{[j]}\right)$ były małe, zaś postulatu 2. - aby bezwładność $J\left(G_{\mathscr{P}}\right)$ była jak największa.
Zazwyczaj trudno jest zrealizować jednocześnie tak dwa sprzeczne cele. Okaże się, że (twierdzenie 4.1) wystarczy realizować jeden z tych postulatów

Definicja 4.3 Bezwładność wewnątrzklasowa podziału $\mathscr{P}$ jest liczbą

$$J_W\left(\mathscr{P}\right) = \sum_{j=1}^{k} p_j J\left(X_{[j]}\right)$$

Bezwładność międzyklasowa podziału $\mathscr{P}$ jest liczbą $J_M\left(\mathscr{P}\right) = J\left(G_{\mathscr{P}}\right)$
Twierdzenie 4.1 Twierdzenie Pitagorasa dla podziału Dla każdego podziału $\mathscr{P}$

$$J(X) = J_W\left(\mathscr{P}\right) + J_M\left(\mathscr{P}\right)$$

Wniosek 4.1 $J_W\left(\mathscr{P}\right)$ maleje wtedy i tylko wtedy gdy $J_M\left(\mathscr{P}\right)$ rośnie
Definicja 4.4 Porządek między podziałami

$$\mathcal{P} \succ \mathcal{Q} \iff J_M\left(\mathcal{P}\right) > J_M\left(\mathcal{Q}\right)$$
$$\mathcal{P} \succeq \mathcal{Q} \iff J_M\left(\mathcal{P}\right) \geq J_M\left(\mathcal{Q}\right)$$

Propozycja 4.1

$$J_M\left(\mathcal{P}\right) = \sum_{j=1}^{k} p_j ||G_j - G||^2$$

$$J_W\left(\mathcal{P}\right) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{k} \sum_{i \in I_j} ||X_i - G_j||^2$$

4.1.1 Przykład

4.1.1.1 Użyteczne funkcje w R

```
SrodekCiezkosci <- function(dane){
  g <- apply(dane,MARGIN = 2,mean)
  return(list(g = g,n = nrow(dane)))
}
```

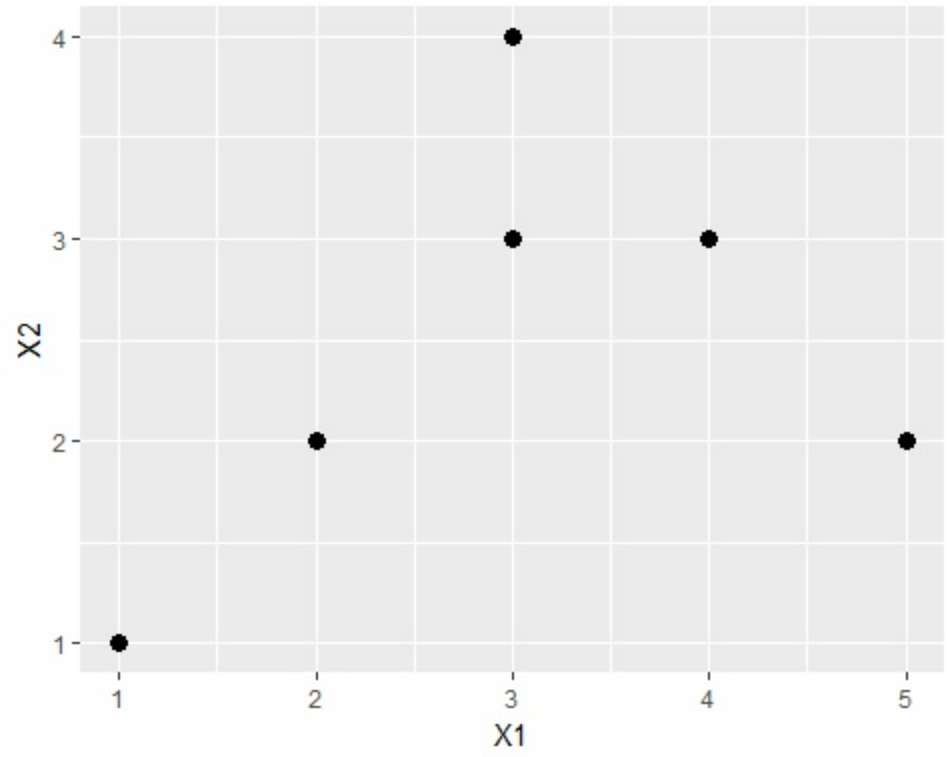
```
srodki_ciezkosci <- function(dane, podzial){
require(dplyr)
 k <- length(levels(podzial))
 nc <- ncol(dane)
 gg <- numeric(k*(nc+1))
 gg <- array(gg,dim=c(k,nc+1))
 gg <- as.data.frame(gg)
```

```
 colnames(gg) <- c(colnames(dane),"n")

 for (i in 1:k) {
   dane %>%
   as.data.frame()  %>%
   filter(podzial == i) %>%
   SrodekCiezkosci() -> gg_rob
   gg[i,1:nc] <- gg_rob$g
   gg[i,(nc+1)] <- gg_rob$n
 }
 return(gg)
}


JM <- function(dane, podzial){
  gg <- srodki_ciezkosci(dane, podzial)
  g <- SrodekCiezkosci(dane)$g
  jm <- 0
  for (j in 1: (ncol(gg)-1))
      jm <- jm + gg$n %*%(gg[,j]-g[j])^2
  jm <- as.numeric(jm/nrow(dane))
  return(jm)
}
```

4.1.1.2 Dane

```
##   X1 X2
## 1  1  1
## 2  2  2
## 3  3  3
## 4  3  4
## 5  4  3
## 6  5  2
```

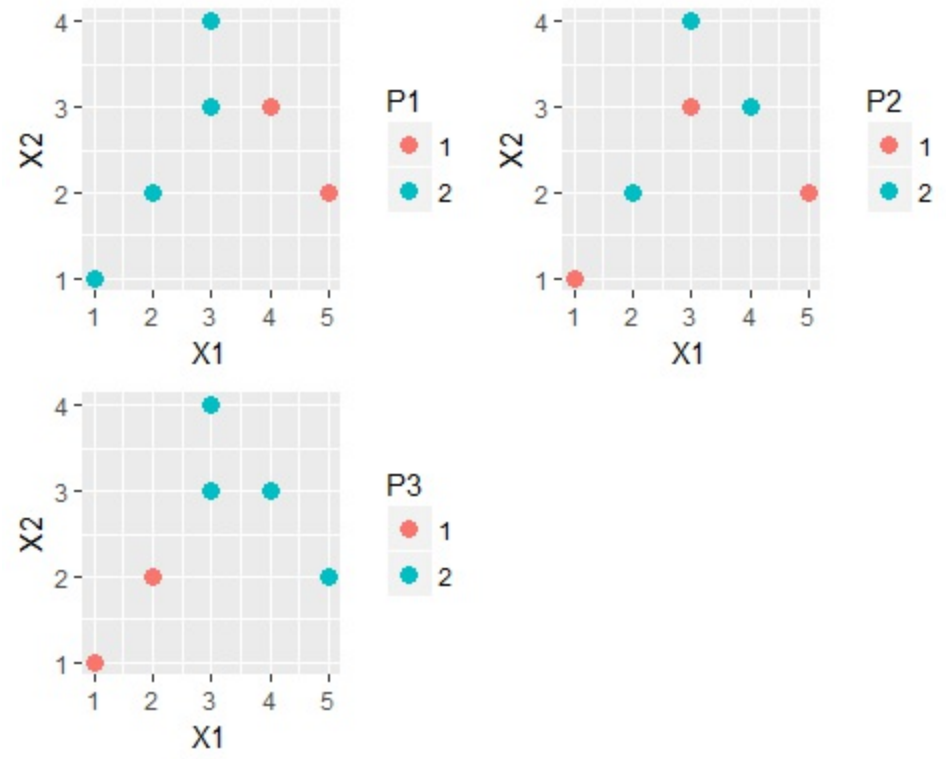
```
ggplot(X,aes(X1,X2)) + geom_point(size=3)
```



4.1.1.3 Porównanie podziałów

```
##   X1 X2 P1 P2 P3
## 1  1  1  2  1  1
## 2  2  2  2  2  1
## 3  3  3  2  1  2
## 4  3  4  2  2  2
## 5  4  3  1  2  2
## 6  5  2  1  1  2
```

```
p1_plot <- ggplot(XP,aes(X1,X2)) + geom_point(size=3,aes(color=P1
p2_plot <- ggplot(XP,aes(X1,X2)) + geom_point(size=3,aes(color=P2
p3_plot <- ggplot(XP,aes(X1,X2)) + geom_point(size=3,aes(color=P3
grid.arrange(p1_plot,p2_plot,p3_plot,nrow=2)
```



Rys. 4.1 Trzy podziały tych samych danych

Środki ciężkości

```
data.frame(
  Podzial=c("P1 K1","P1 K2","P2 K1","P2 K2","P3 K1","P3 K2"),
  rbind(
    srodki_ciezkosci(X,P1),
    srodki_ciezkosci(X,P2),
    srodki_ciezkosci(X,P3)
  )
)
```

```
##   Podzial   X1  X2 n
## 1   P1 K1 4.50 2.5 2
## 2   P1 K2 2.25 2.5 4
## 3   P2 K1 3.00 2.0 3
## 4   P2 K2 3.00 3.0 3
## 5   P3 K1 1.50 1.5 2
## 6   P3 K2 3.75 3.0 4
```

Bezwładność międzyklasowa i wewnątrzklasowa

```
jm1 <- JM(X,P1)
jm2 <- JM(X,P2)
jm3 <- JM(X,P3)
(J <- sum(diag(cov(X))))
```

```
## [1] 3.1
```

```
bzwl <- rbind(
  c(jm1,J-jm1),
  c(jm2,J-jm2),
  c(jm3,J-jm3)
)
colnames(bzwl) <- c("JM","JW")
rownames(bzwl) <- c("P1","P2","P3")
bzwl
```

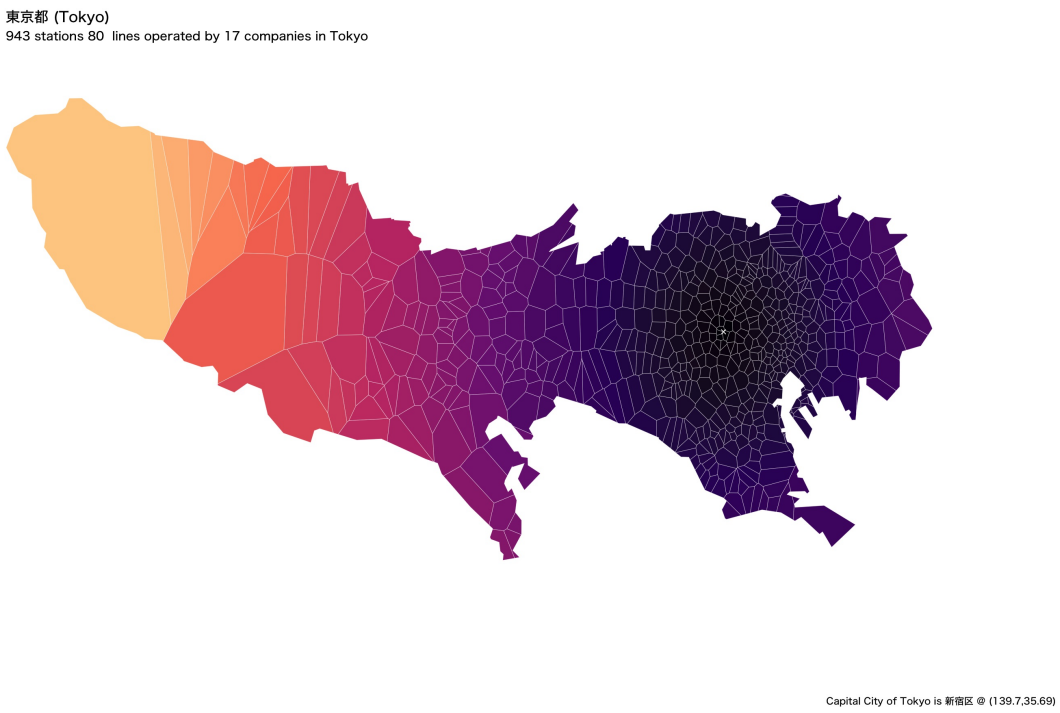
```
##       JM    JW
## P1 1.125 1.975
## P2 0.250 2.850
## P3 1.625 1.475
```

$$P3 \succ P1 \succ P2$$

4.2 Podział Woronoja

Definicja 4.5 Podziałem Woronoja przestrzeni $\mathbf{R}^p$ o centrach $C_1, C_2, \ldots, C_k$ jest rodzina podzbiorów $\mathbf{R}^p$:

$$W_j^* = \{P \in \mathbf{R}^p : ||P - C_j|| = min\{||P - C_r||,\ r = 1, 2, \ldots, k\}\}$$



Rys. 4.2 Mapa Tokio z podziałem Woronoja. Centrami są stacje kolejowe. Kolor zależy od odległości od stacji Shinjuku - centralnej stacji w Tokio (biały krzyżyk)

Źródło: https://chichacha.netlify.com/2018/11/10/voronoi-diagram-with-ggvoronoi-package-with-train-station-data/

Zbiory W_j^* nie są rozłączne (mają wspólne granice). Można je skonstruować tak, aby uzyskały rozłączność:

$$W_j = W_j^* - \bigcup_{r=1}^{j-1} W_r^*$$

Definicja 4.6 Podziałem Woronoja macierzy danych X o centrach $C_1, C_2, \ldots, C_k$ jest rodzina macierzy $X_{[j]}$ taka, że

$$I_j = \{i : X_i \in W_j\}$$

Twierdzenie 4.2 Niech $\mathscr{P}$ będzie podziałem macierzy X na k klas $X_{[1]}, X_{[2]}, \ldots, X_{[k]}$, $g(X_{[j]}) = G_j \ (j = 1, 2, \ldots, k)$ - centroidami

podziału $\mathscr{P}$. Niech $\mathscr{Q}$ będzie podziałem Woronoja o centrach $G_1, G_2, \ldots, G_k$. Wtedy $\mathscr{Q} \succcurlyeq \mathscr{P}$.

4.2.1 Przykład (cd)

Korzystając z twierdzenia 4.2 znajdziemy dla każdego z podziałów $P1, P2, P3$ maksymalnie najlepszy podział

4.2.1.1 Użyteczne funkcje w R

```
deuc <- function(x,y){ # odleglosc euklidesowa
  sum((x-y)^2)
}

odSc <- function(x,sc){ #odleglosc x od centroidów sc
  apply(sc,1,function(y) deuc(x,y))
}

prox <- function(x,sc){ # podaje numer centroidu najblizszego pun
  which.min(odSc(x,sc))
}

proxV <- function(dane,sc){# podaje numery centroidow najblizszyc
  as.factor(apply(dane,1,function(x) prox(x,sc)))
}
```

```
proxVpod <- function(dane,podzial){# podaje numery klas najblizsz
  nc <- ncol(dane)
  sc <- srodki_ciezkosci(dane,podzial)[,1:nc]
  proxV(dane,sc)
}

proxWyn <- function(dane,podzial){# sprawdza czy nowy podzial lep
  w <- proxVpod(dane,podzial)
  rowne <- all.equal.factor(podzial,w)
  return(list(stare=podzial,nowe=w,rowne=rowne))
}
```

4.2.1.2 Poprawianie podziałów

```
(P11 <- proxWyn(X,P1))
```

```
## $stare
## [1] 2 2 2 2 1 1
## Levels: 1 2
##
## $nowe
## [1] 2 2 2 2 1 1
## Levels: 1 2
##
## $rowne
## [1] TRUE
```

Podział $P1$ jest podziałem Woronoja

```
(P21 <- proxWyn(X,P2))
```

```
## $stare
## [1] 1 2 1 2 2 1
## Levels: 1 2
##
## $nowe
## [1] 1 1 2 2 2 1
## Levels: 1 2
##
## $rowne
## [1] "2 string mismatches"
```

```
(P22 <- proxWyn(X,P21$nowe))
```

```
## $stare
## [1] 1 1 2 2 2 1
## Levels: 1 2
##
## $nowe
## [1] 1 1 2 2 2 2
## Levels: 1 2
##
## $rowne
```

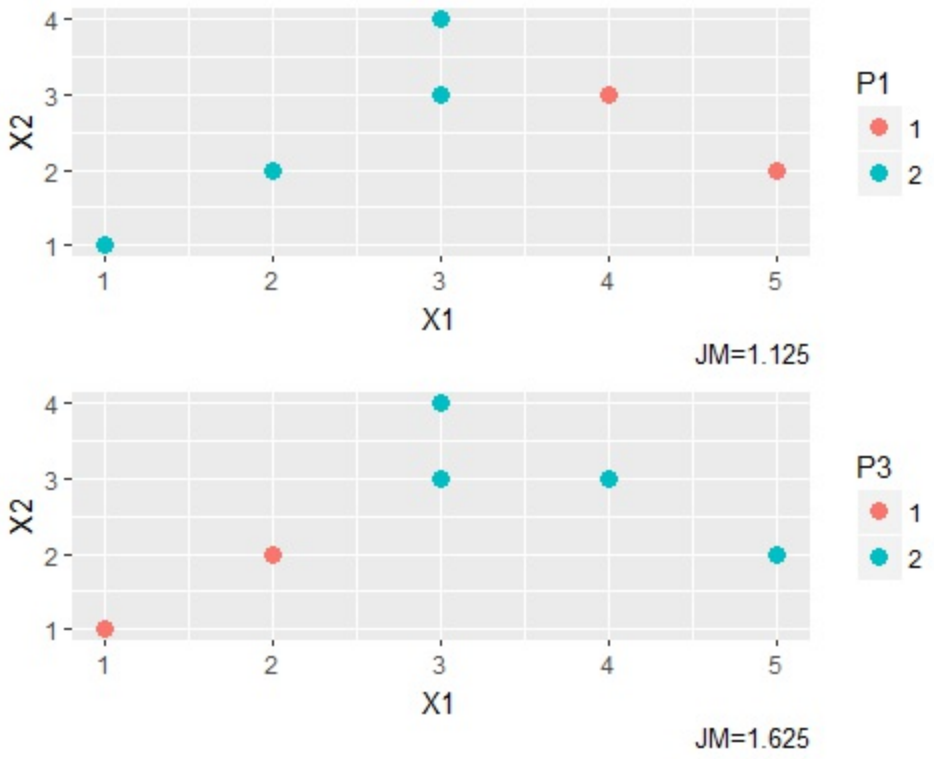
```
## [1] "1 string mismatch"
```

```
(P23 <- proxWyn(X,P22$nowe))
```

```
## $stare
## [1] 1 1 2 2 2 2
## Levels: 1 2
##
## $nowe
## [1] 1 1 2 2 2 2
## Levels: 1 2
##
## $rowne
## [1] TRUE
```

Podział $P22\$nowe = 112222$ jest lepszy podziału $P2 = 121221$ i jest równy podziałowi $P3$. Z tego wynika, że $P3$ jest podziałem Woronoja. Nie wiadomo, czy są inne podziały Woronoja dla tych danych

```
p1_plot <- ggplot(XP,aes(X1,X2)) + geom_point(size=3,aes(color=P1
p3_plot <- ggplot(XP,aes(X1,X2)) + geom_point(size=3,aes(color=P3
grid.arrange(p1_plot,p3_plot,nrow=2)
```



Rys. 4.3 Podziały Woronoja dla danych X

Z tych dwóch podziałów Woronoja podział $P3$ jest lepszy.

---

1. po odpowiednim przestawieniu wierszy↩
2. Dane wewnątrz klas są do siebie podobne↩
3. Klasy są do siebie niepodobne↩

5 Dyskryminacja (klasyfikacja z nauczycielem)

Zakładamy, że zadany jest podział $\mathscr{P}$ macierzy danych X rozmiaru $n \times p$. Podział ten odzwierciedla stan naszej wiedzy o zebranych (historycznych) danych i ich podziale na klasy. Przykładem takiej sytuacji jest medycyna, gdzie X jest macierzą p objawów zgromadzonych wśród n pacjentów, zaś podział odzwierciedla klasyfikację na k jednostek chorobowych. Zadaniem dyskryminacji jest opracowanie prostych reguł zakwalifikowania do jednej z klas obiektu $x \in \mathbf{R}^p$ nie odwołujących się do macierzy X.[1] W tym rozdziale zajmiemy się **dyskryminacją liniową**, w której reguły dyskryminacji oparte są na operatorach liniowych w $\mathbf{R}^p$.

Definicja 5.1 Niech podmacierzami podziału $\mathscr{P}$ będą $X_{[1]}, X_{[2]}, \ldots, X_{[k]}$, $G_1, G_2, \ldots, G_k$ - centroidami podziału, $G_{\mathscr{P}}$ - macierzą centroidów. **Macierzą wariancji wewnątrzklasowej (odp. międzyklasowej)** nazywamy macierz

$$V_W \stackrel{def}{=} V_W(X, \mathcal{P}) = \sum_{j=1}^{k} p_j V\left(X_{[j]}\right)$$

$$V_M \stackrel{def}{=} V_M(X, \mathcal{P}) = V\left(G_{\mathcal{P}}\right)$$

Twierdzenie 5.1 Twierdzenie Pitagorasa o macierzach wariancji podziału

Dla każdego podziału $\mathscr{P}$ zachodzi

$$V(X) = V_W(X, \mathscr{P}) + V_M(X, \mathscr{P})$$

Propozycja 5.1

$$V_M = \sum_{j=1}^{k} p_j (G_j - G)(G_j - G)^T$$

$$rz\left(V_M\right) \leq k - 1$$

5.1 Zmienne dyskryminacyjne

Podobnie jak w przypadku wyboru najlepszego modelu liniowego, szukamy macierzy przekształcenia liniowego wymiaru $d \times p$ ($d \leq p$):

$$U = \begin{bmatrix} U_1^T \\ U_2^T \\ \vdots \\ U_d^T \end{bmatrix}$$

której wiersze stanowią zmienne dyskryminacyjne.

Po przekształceniu U obrazem macierzy X będzie macierz $Y = XU^T$ o wymiarze $n \times d$. Z twierdzenia 5.1 wiemy, że

$$V(Y) = V_W(Y, \mathcal{P}) + V_M(Y, \mathcal{P})$$

Należy wybrać takie przekształcenie U, aby zdolność rozróżnienia klas była jak największa czyli bezwładność międzyklasowa

$$J_M(Y, \mathscr{P}) = Tr\left(V_M(Y, \mathscr{P})\right)$$

była jak największa.

Propozycja 5.2

$$V_M(Y, \mathscr{P}) = UV_M(X, \mathscr{P})U^T$$

Ponieważ zarówno macierz X jak i podział $\mathscr{P}$ są ustalone, przyjmiemy oznaczenia:

$$V \stackrel{def}{=} V(X),\ V_M \stackrel{def}{=} V_M(X, \mathscr{P})$$

Twierdzenie 5.2 Optymalna macierz zmiennych dyskryminacyjnych spełnia warunek

$$U^* = argmax(Tr(UV_MU^T))$$

z warunkiem ubocznym

$$||Y_i|| = 1,\ i = 1, 2, \ldots, d$$

Korzystając z z metody mnożników Lagrange'a zadanie to mozna sprowadzić do maksymalizacji funkcji zmiennej macierzowej U:

$$Tr\left(UV_MU^T\right) - Tr\left(\Lambda UVU^T\right)$$

Macierz Λ jest przekątniową macierzą rozmiaru $d \times d$ współczynników Lagrange'a tak dobranych by $||Y_i|| = 1,\ i = 1, 2, \ldots, d$.

Twierdzenie 5.3 Wiersze optymalnej macierzy zmiennych dyskryminacyjnych U^* są wektorami własnymi macierzy $V^{-1}V_M$ odpowiadającymi $min(d, k-1)$ największym wartościom własnym.[2] Wektory U_i mają długości spełniajace warunki $U_i^T V U_i = 1$

5.2 Podział dychotomiczny

Często w praktyce występuje podział na dwie klasy. Jest on o tyle interesujący, że jak wynika z twierdzenia 5.3, jest tylko jedna zmienna dyskryminacyjna, a więc kryterium dyskryminacyjne jest oparte na iloczynie skalarnym tej zmiennej z wektorem x mającym być obiektem klasyfikacji

Propozycja 5.3 W przypadku podziału dychotomicznego, w którym frakcja

przypadków próby uczacej, należących do klasy 1 jest równa p_1 a należących do klasy 2 $p_2 = 1 - p_1$, $G_j,\ j = 1, 2$ są centroidami klas

$$V_M = p_1 p_2 (G_1 - G_2)(G_1 - G_2)^T$$
$$u_0 = V^{-1}(G_1 - G_2)$$

u_0 jest równoległy do wektora dyskryminacyjnego
Propozycja 5.4 Kryterium przynależności do klasy 1

$$u_0^T x \geq c \stackrel{def}{=} \frac{u_0^T (G_1 + G_2)}{2}$$

Jeżeli próg c jest różny od 0, to wygodnie jest przyjąć ustaloną z góry (niezależnie od zadania dyskryminacji) wartość progu, równą c^*.[3]

Propozycja 5.5 Kryterium przynależności do klasy 1 dla uniwersalnego progu.

Niech $\alpha = \frac{c^*}{c}$, $u_* = \alpha u_0$

$$\begin{cases} u_*^T x \geq c^* & \text{gdy } \alpha > 0 \\ u_*^T x \leq c^* & \text{gdy } \alpha < 0 \end{cases}$$

5.2.1 Przykład

Badano zmiany zawartej w plazmie krwi stężenia glukozy [%] (zmienna 1) i wolnego kwasu tłuszczowego [mEq/l] u 12 schizofreników (grupa 1) i 13 zdrowych ochotników (grupa 2) po domięśniowym wstrzyknięciu insuliny.

Dane

Środki ciężkości

```
##                    G1     G2
## glukoza [%]     -25.60 -31.10
```

```
## tluszcz [mEq/l]  -0.06  -0.15
```

Macierze kowariancji

```
##          [,1]   [,2]
## [1,] 278.0830 0.8291
## [2,]   0.8291 0.0092
```

```
##          [,1]    [,2]
## [1,] 269.9230 -0.2493
## [2,]  -0.2493  0.0067
```

Obliczenia

```
p1 <- 12/25
p2 <- 13/25
g <- p1*g1+p2*g2
g
```

```
## [1] -28.4600  -0.1068
```

```
VW <- p1*V1+p2*V2
VW
```

```
##            [,1]     [,2]
## [1,] 273.839800 0.268332
## [2,]   0.268332 0.007900
```

```
VM <- p1*p2*(g1-g2)%*%t(g1-g2)
VM
```

```
##          [,1]       [,2]
## [1,] 7.550400 0.12355200
## [2,] 0.123552 0.00202176
```

```
V <- VW+VM
V
```

```
##            [,1]       [,2]
## [1,] 281.390200 0.39188400
```

```
## [2,]   0.391884 0.00992176
```

```
Vinv <- solve(V)
Vinv
```

```
##               [,1]        [,2]
## [1,]  0.003760646  -0.1485358
## [2,] -0.148535828 106.6553529
```

```
u0 <- Vinv %*% (g1-g2)
u0
```

```
##              [,1]
## [1,] 0.007315326
## [2,] 8.782034709
```

Punkt podziału

```
c <- 0.5 * sum(t(u0) * (g1+g2))
c
```

```
## [1] -1.129503
```

Reguła 100

```
ug <- 100*u0/c
ug
```

```
##               [,1]
## [1,]   -0.6476588
## [2,] -777.5130830
```

Dyskryminacja

```
x <- c(-30,-0.1)
x
```

```
## [1] -30.0  -0.1
```

```
sum(t(ug) * x)
```

```
## [1] 97.18107
```

Chory

```
x <- c(-20,-0.2)
x
```

```
## [1] -20.0  -0.2
```

```
sum(t(ug) * x)
```

```
## [1] 168.4558
```

Zdrowy

---

1. Może to być macierz gigantycznych rozmiarów↩
2. a więc wektorów dyskryminacyjnych jest na ogół mało↩
3. Ja (AD) przyjmuję wartość 100↩

6 Literatura

1. Le Roux, B., Ruanet, H. , Geometric data analysis: from correspondence analysis to structured data analysis, Kluwer
2. Du Toit, S.H.C., Steyn, A.G.W., Stumpf, R.H., Graphical Exploratory Data Analysis, Springer 1986
3. Gnanadesikan, R., Statistical Data Analysis, Lecture Notes for AMS, 1982, Proc. of Symposia in Applied Mathematics vol. 28, 1983
4. Hoaglin, D.C., Mosteller, F., Tukey J.W., Understanding Robust and Exploratory Data Analysis, Wiley 2000
5. Hoaglin, D.C., Mosteller, F., Tukey J.W., Exploring Data Tables Trends and Shapes, Wiley 2000
6. Krzanowski., W.J., Principles of Multivariate Analysis, A User's Perspective, Oxford University Press, 2000
7. Tukey, J.W., Exploratory Data Analysis, Reading 1977