Дискриминантный анализ

Математические методы в зоологии с использованием R

Марина Варфоломеева

1. **Дискриминантный анализ**
2. **I. Дискриминантный анализ на тренировочных и тестовых данных**
3. **II. Дискриминантный анализ с кроссвалидацией**
4. **Условия применимости дискриминантного анализа**
5. **Квадратичный дискриминантный анализ**

Дискриминантный анализ

Вы сможете

- провести линейный и квадратичный дискриминантный анализ с использованием обучающей выборки и проверить качество классификации на тестовых данных или с использованием кроссвалидации
- проверить условия применимости дискриминантного анализа

Дискриминантный анализ

Пример: Морфометрия ирисов

Сверхзадача — научиться классифицировать ирисы по нескольким измерениям цветка

```
data(iris)
head(iris, 10)
```

```
#    Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width Species
# 1           5.1         3.5          1.4         0.2  setosa
# 2           4.9         3.0          1.4         0.2  setosa
# 3           4.7         3.2          1.3         0.2  setosa
# 4           4.6         3.1          1.5         0.2  setosa
# 5           5.0         3.6          1.4         0.2  setosa
# 6           5.4         3.9          1.7         0.4  setosa
# 7           4.6         3.4          1.4         0.3  setosa
# 8           5.0         3.4          1.5         0.2  setosa
# 9           4.4         2.9          1.4         0.2  setosa
# 10          4.9         3.1          1.5         0.1  setosa
```

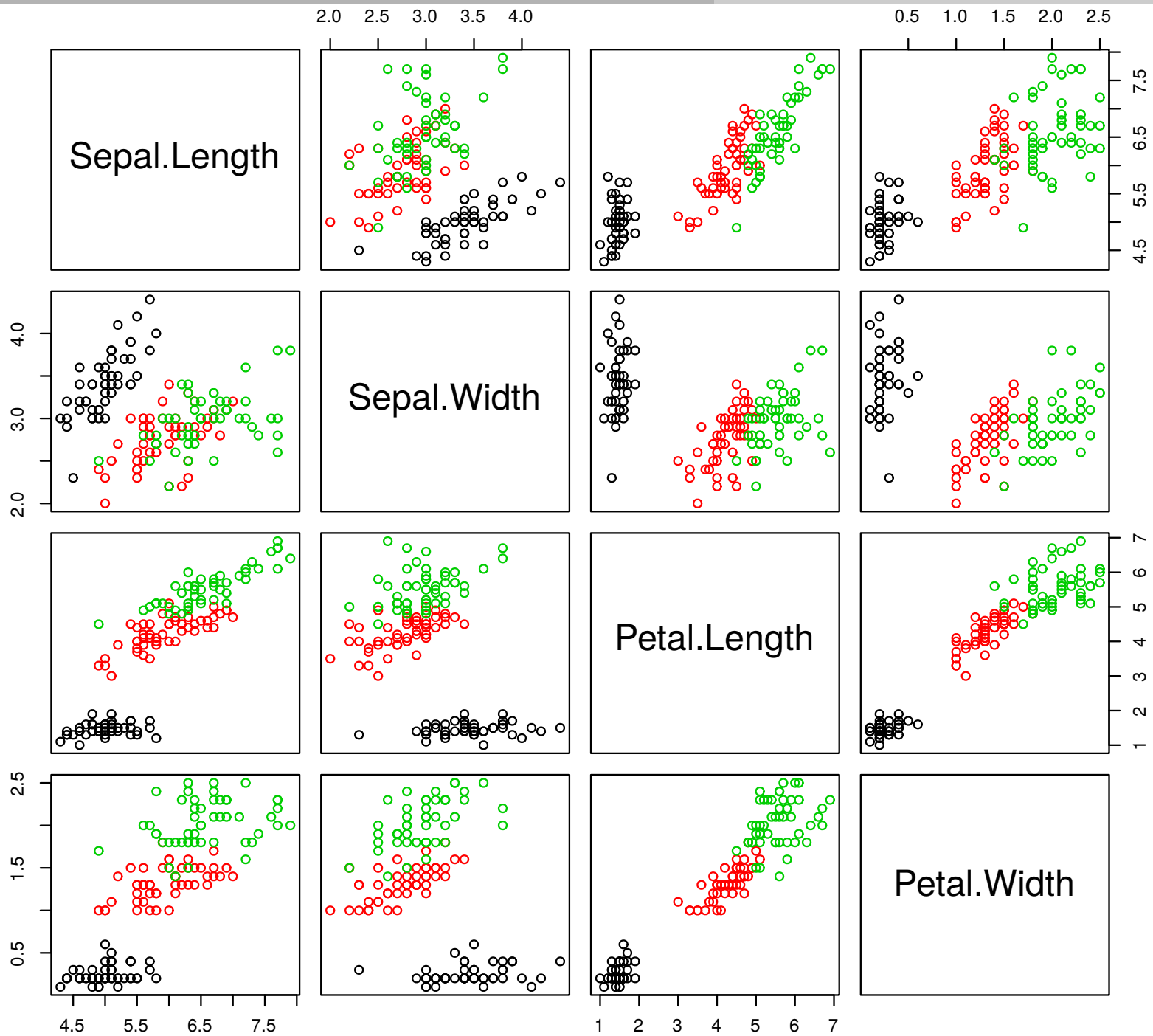
По каким переменным легче всего различить группы?

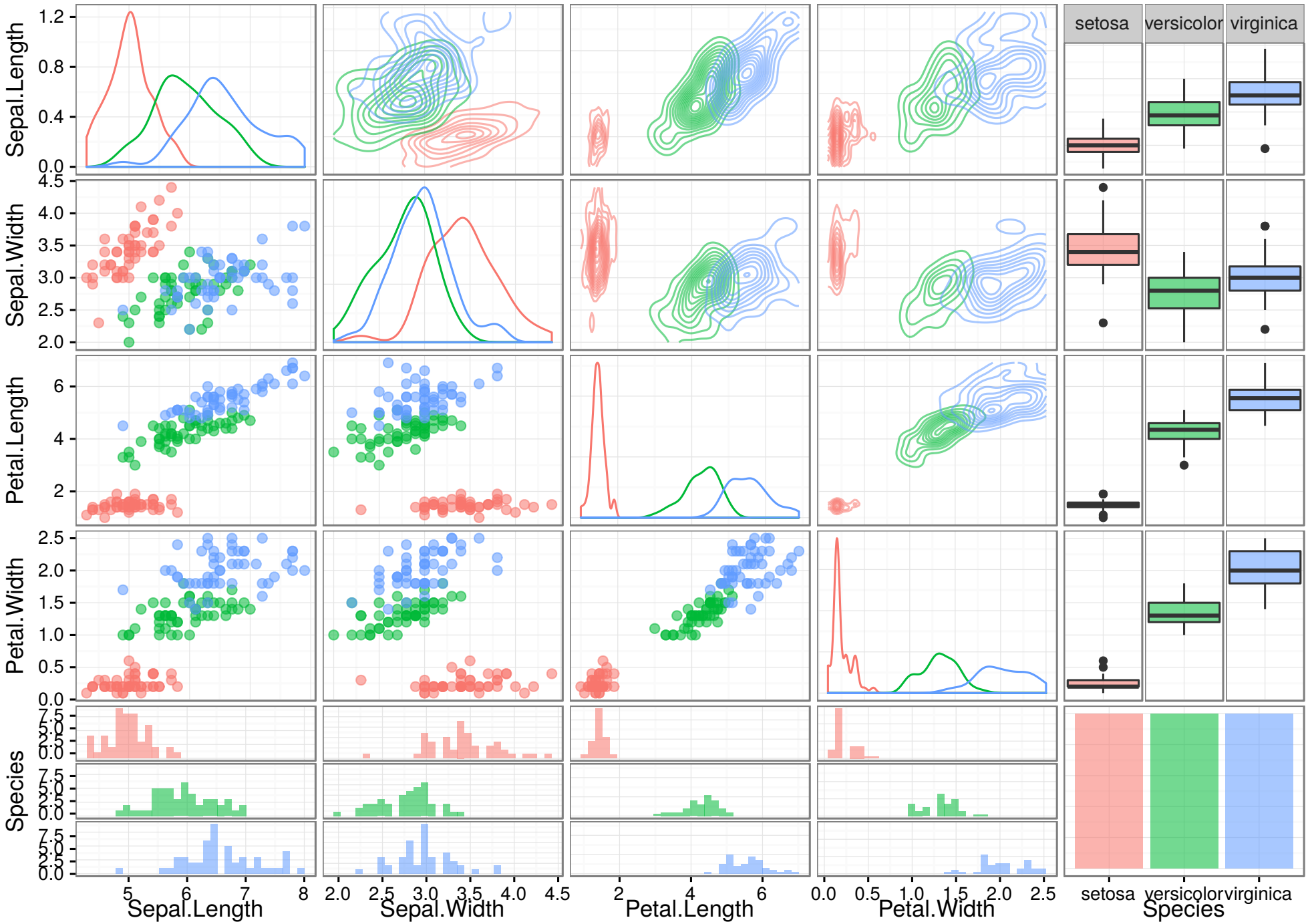
Чтобы это узнать, построим графики всех пар переменных при помощи функции `pairs()` из базового пакета

```
pairs(iris[, -5], col = iris$Species)
```

Второй вариант — получить похожий график при помощи ggplot2, и с большим числом настроек

```
library(GGally)
theme_set(theme_bw() + theme(legend.key = element_blank()))
update_geom_defaults("point", list(shape = 19, size = 2))
ggpairs(iris, aes(colour = Species, alpha = 0.5),
        upper = list(continuous = "density", combo = "box"))
```


Sepal.Length
Sepal.Width
Petal.Length
Petal.Width
2.0 2.5 3.0 3.5 4.0
0.5 1.0 1.5 2.0 2.5
4.5 5.5 6.5 7.5
2.0 3.0 4.0
4.5 5.5 6.5 7.5
1 2 3 4 5 6 7
0.5 1.5 2.5
1 2 3 4 5 6 7


setosa
versicolor
virginica
Sepal.Length
Sepal.Width
Petal.Length
Petal.Width
Species

Дискриминантный анализ

Дискриминантный анализ

- метод классификации объектов с учителем (**supervised learning**), т.е. применяется, когда принадлежность объектов к группе заранее известна.

Задачи дискриминантного анализа:

- выяснить, какие признаки лучше всего позволяют классифицировать объекты
- выяснить правило классификации существующих объектов
- классификация новых объектов неизвестной принадлежности по этому правилу

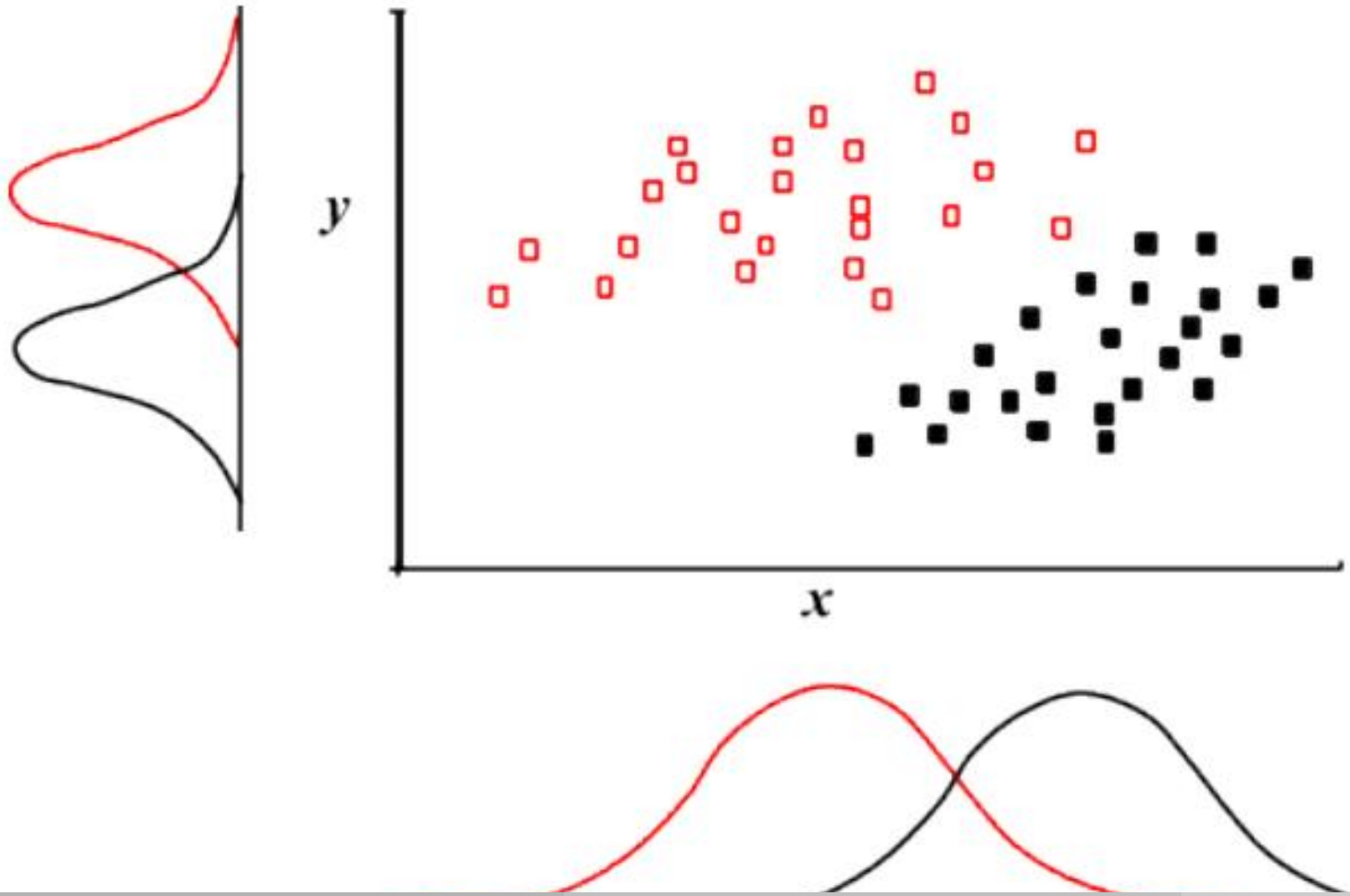
Требования к данным для дискриминантного анализа

- групп 2 или больше
- в каждой группе 2 и больше признаков
- число объектов должно быть больше, чем число признаков, лучше в несколько раз (в 4, например).
- признаки измерены в интервальной шкале

Дискриминантный анализ

Нужно найти такую ось, вдоль которой группы различаются лучше всего, с минимальным перекрыванием.

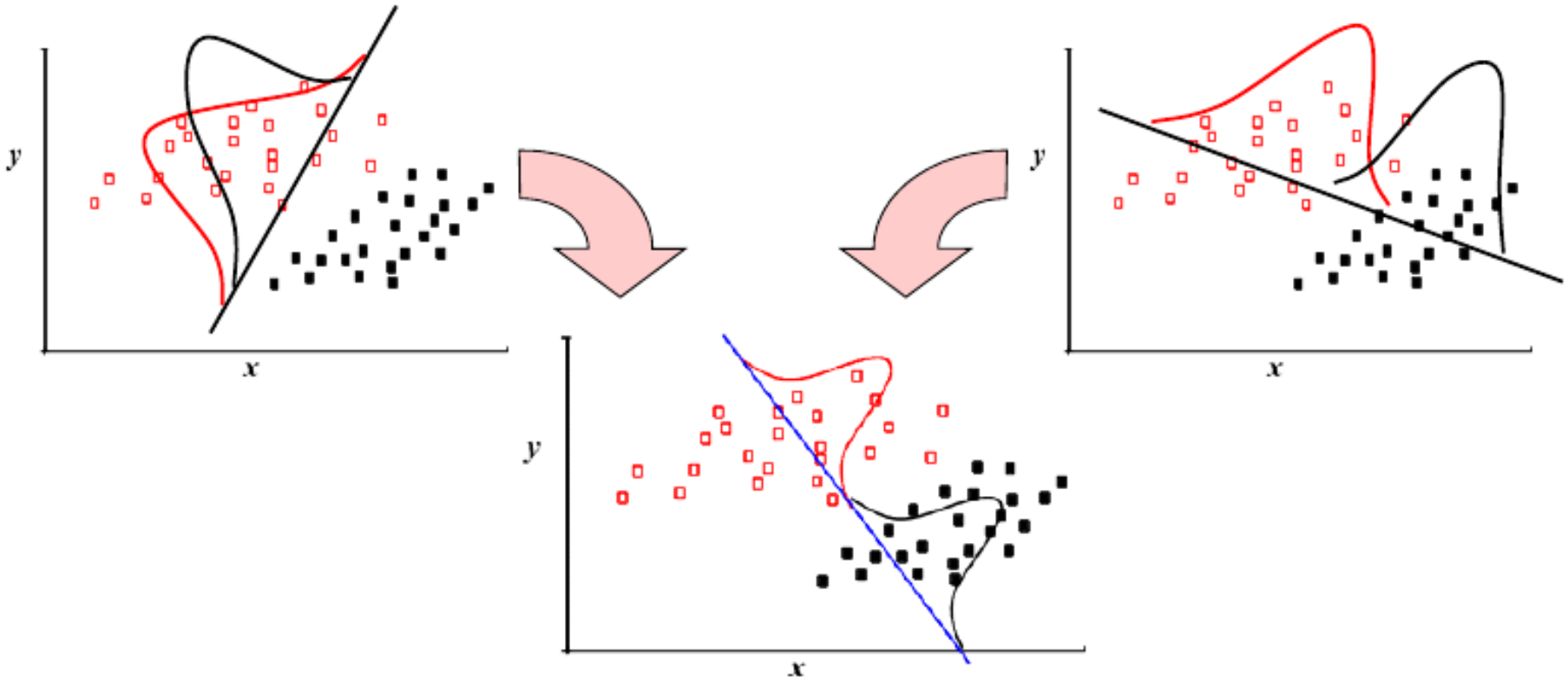
Как она может проходить?



Дискриминантные оси

Дискриминантные оси

- задаются дискриминантными функциями
- вдоль них минимальное перекрывание групп
- дискриминантных осей всего на одну меньше чем групп (или столько же, сколько признаков, если признаков меньше, чем групп)



Дискриминантные функции

Дискриминантные функции

- описывают положение дискриминантных осей

$$LD_j = d_{1j}X_1 + d_{2i}X_2 + ... + d_pX_p$$

- LD — линейная дискриминантная функция
- d — коэффициенты линейной дискриминантной функции
- X — переменные-признаки
- j = 1, … min(k–1, p) — число дискриминантных функций
- p — число признаков
- k — число классов

Дискриминантные функции

Дискриминантные функции

- описывают положение дискриминантных осей

$$LD_j = d_{1j}X_1 + d_{2i}X_2 + \ldots + d_pX_p$$

- LD — линейная дискриминантная функция
- d — коэффициенты линейной дискриминантной функции
- X — переменные-признаки
- j = 1, … min(k–1, p) — число дискриминантных функций
- p — число признаков
- k — число классов

Стандартизованные коэффициенты дискриминантной функции

- используются для сравнения переменных, измеренных в разных шкалах используются стандартизованные коэффициенты дискриминантной функции
- большое абсолютное значение — большая дискриминирующая способность

Классификация объектов

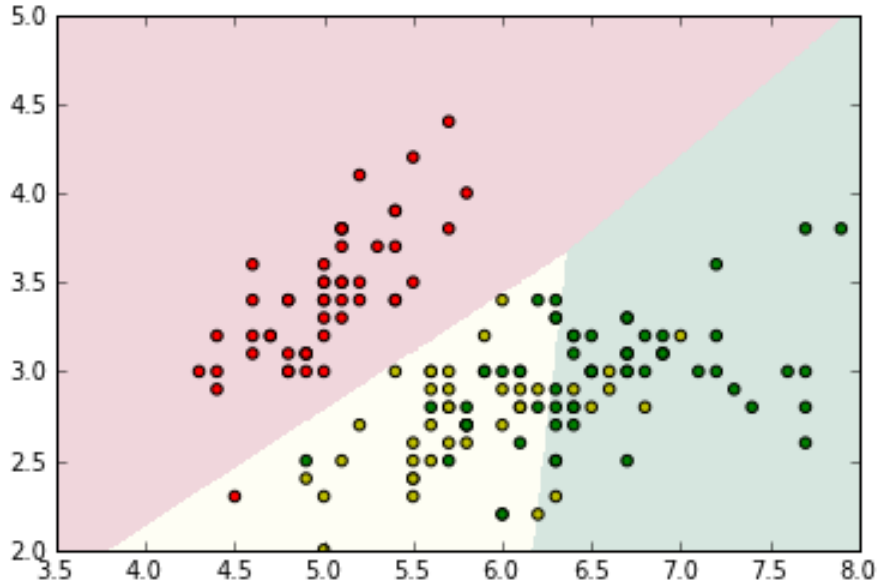
Функции классификации

- Описывают вероятность принадлежности объекта к группе согласно построенной классификации.
- Таких функций столько же, сколько групп

$$C_j = c_{j0} + c_{j1}X_1 + \ldots + c_{jp}X_p$$

- C — функция классификации
- c — коэффициенты функций классификации
- X — переменные-признаки
- j = 1, …, k — число групп
- p — число признаков

Для каждого (в том числе, нового) объекта можно вычислить значение всех функций классификации. Какое значение больше — к такой группе и надо отнести объект.



Пример расположения областей принятия решений в линейном дискриминантном анализе с тремя группами

Рис. с сайта http://statweb.stanford.edu/ jtaylo/courses/stats202/lda.html

Оценка качества классификации

Таблица классификации

- число верно или неверно классифицированных объектов (**confusion matrix**)

Было / Стало	Класс А	Класс Б
Класс А	верно	неверно (Б вместо А)
Класс Б	неверно (А вместо Б)	верно

Проблема: как оценить качество классификации, чтобы можно было экстраполировать результаты?

Если оценить качество классификации на тех же данных, что были использованы для ее построения — оценка неадекватная для классификации новых данных из-за "**переобучения**" (overfitting).

Возможные решения проблемы переобучения

1. Разделить данные на **тренировочное и тестовое подмножества**:
   - тренировочные данные — для подбора классификации (для обучения)
   - независимые тестовые данные — для определения качества классификации
2. **Кроссвалидация** — разделение на тренировочное и тестовое подмножество повторяют многократно и усредняют оценки качества классификации между повторами.

I. Дискриминантный анализ на тренировочных и тестовых данных

1) Разделяем на тренировочные и тестовые данные

```
# доля от объема выборки, которая пойдет в тренировочный датасет
smp_size <- floor(0.80 * nrow(iris))
# устанавливаем зерно для воспроизводимости результатов
set.seed(982)
# индексы строк, которые пойдут в тренировочный датасет
in_train <- sample(sample(1:nrow(iris), size = smp_size))
```

2) На тренировочных данных получаем стандартизованные коэффициенты дискриминантных функций

```
library(MASS)
lda_tr_scaled <- lda(scale(iris[in_train, -5]), iris$Species[in_train])
# коэффициенты дискриминантных функций
lda_tr_scaled$scaling
```

```
#                     LD1         LD2
# Sepal.Length  0.6519385 -0.02737872
# Sepal.Width   0.7433480  0.82887139
# Petal.Length -3.7654694 -2.28038588
# Petal.Width  -2.3034593  2.78626682
```

3) На тренировочных данных получаем функции классификации

```
lda_tr <- lda.class(iris[in_train, -5], iris$Species[in_train])
# Коэф. функций классификации
lda_tr$class.funs
```

```
#                setosa versicolor virginica
# constant     -85.93751 -69.983829 -99.85668
# Sepal.Length  21.68238  13.979471  10.80913
# Sepal.Width   26.90529   7.832079   3.63867
# Petal.Length -16.12914   6.595690  13.38425
# Petal.Width  -20.77742   5.006140  22.04759
```

4) Оцениваем качество классификации на тренировочных данных

```
lda_tr_pred <- predict(lda_tr)
table(lda_tr_pred$class, iris$Species[in_train])
```

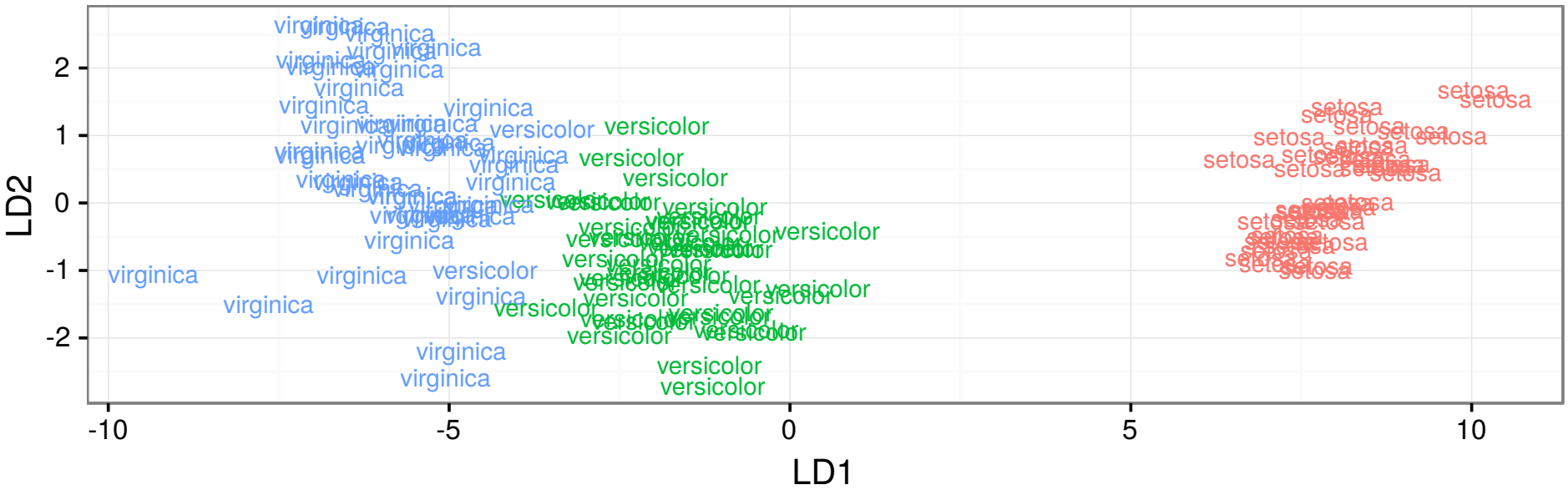
```
#
#              setosa versicolor virginica
#   setosa         38          0         0
#   versicolor      0         39         0
#   virginica       0          2        41
```

- Какова доля неправильно классифицированных случаев?

5) График классификации тренировочных данных

Один из вариантов представления — текстом обозначить правильные группы, а цветом — результат работы классификации

```
class_df <- data.frame(lda_tr_pred$x,
                       gr = lda_tr_pred$class,
                       real_gr = iris$Species[in_train])
ggplot(data = class_df, aes(x = LD1, y = LD2, colour = gr)) +
  geom_text(size = 3, aes(label = real_gr)) +
  theme(legend.position = "none")
```



6) Оценка качества классификации на тестовых данных

Самое важное, если мы хотим использовать классификацию для прогноза

```
lda_test_pred <- predict(lda_tr, iris[-in_train, -5])
table(lda_test_pred$class, iris$Species[-in_train])
```

```
#
#              setosa versicolor virginica
#   setosa         12          0         0
#   versicolor      0          9         1
#   virginica       0          0         8
```

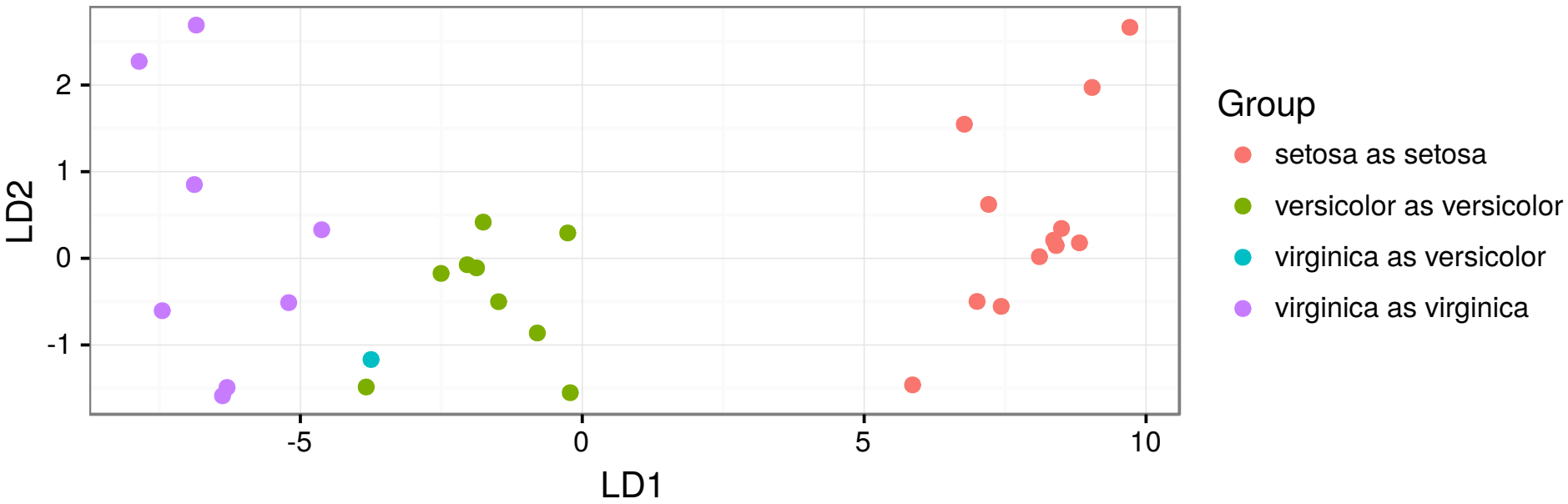
- Какова доля неправильно классифицированных случаев?

7) График классификации тестовых данных

Второй вариант представления графиков — отметить неправильно классифицированные случаи своим цветом

```
class_df <- data.frame(lda_test_pred$x,
                       new = lda_test_pred$class,
                       real = iris$Species[-in_train])
class_df$Group <- factor(paste(class_df$real, class_df$new, sep = " as "))

ggplot(data = class_df, aes(x = LD1, y = LD2)) +
  geom_point(aes(colour = Group))
```



II. Дискриминантный анализ с кроссвалидацией

Кроссвалидация

```
lda_cv <- lda(iris[, -5], iris$Species, CV = TRUE)
names(lda_cv)
```

```
# [1] ”class”     ”posterior” ”call”
```

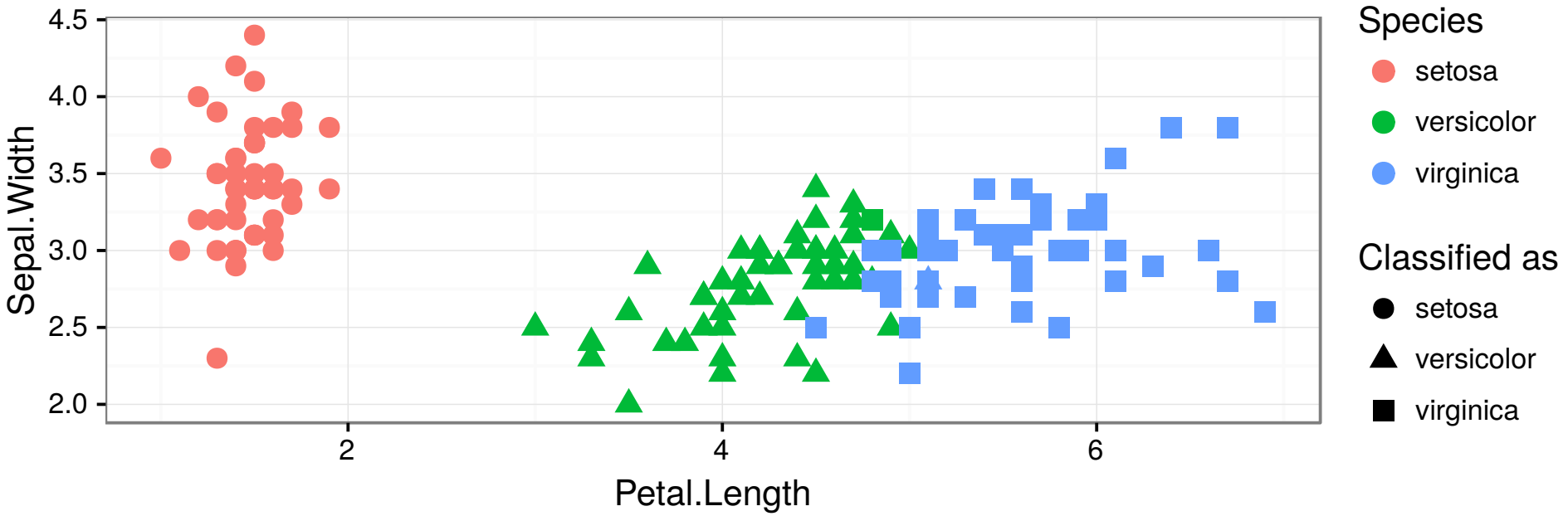
```
table(iris$Species, lda_cv$class)
```

```
#
#              setosa versicolor virginica
#   setosa         50          0         0
#   versicolor      0         48         2
#   virginica       0          1        49
```

`lda_cv$class` — показывает, как классифицированы строки, если классификация обучена по остальным данным

График классификации

```
ggplot(data = iris, aes(x = Petal.Length,
                        y = Sepal.Width,
                        colour = Species,
                        shape = lda_cv$class)) +
  geom_point(size = 3) +
  scale_shape_discrete("Classified as")
```



Условия применимости дискриминантного анализа

Условия применимости дискриминантного анализа

- **признаки независимы друг от друга** (чтобы не было избыточности, чтобы можно было инвертировать матрицы). Именно поэтому дискр. анализ часто применяется после анализа главных компонент.
- внутригрупповые ковариации приблизительно равны
- распределение признаков — многомерное нормальное

Условия применимости дискриминантного анализа

- **признаки независимы друг от друга** (чтобы не было избыточности, чтобы можно было инвертировать матрицы). Именно поэтому дискр. анализ часто применяется после анализа главных компонент.
- внутригрупповые ковариации приблизительно равны
- распределение признаков — многомерное нормальное

Если условия применимости нарушены:

- В некоторых случаях, дискриминантный анализ дает хорошо работающие классификации.
- Возможно, другие методы, с менее жесткими требованиями, дадут классификации лучшего качества (например, квадратичный дискриминантный анализ — quadratic discriminant analysis, дискриминантный анализ с использованием ядер — kernel discriminant analysis)

Проверка условий применимости

В данном случае, как и во многих других, они не выполняются, но мы уже убедились, что классификация работает…

Многомерная нормальность

```
x <- as.matrix(iris[, -5])
d <- mahalanobis(x, colMeans(x), cov(x))
qqplot(qchisq(ppoints(nrow(x)), df = ncol(x)), d,
  main="QQ график для оценки многомерной нормальности",
  ylab="Расстояние Махаланобиса")
abline(a = 0, b = 1)
```

Гомогенность ковариационных матриц

```
source("BoxMTest.R")
BoxMTest(as.matrix(iris[, -5]), iris$Species)
```

```
# ------------------------------------------------
#  MBox Chi-sqr. df P
# ------------------------------------------------
#   146.6632   140.9430          20       0.0000
# ------------------------------------------------
# Covariance matrices are significantly different.

# $MBox
#   setosa
# 146.6632
#
# $ChiSq
#  setosa
# 140.943
#
# $df
# [1] 20
#
# $pValue
#       setosa
# 3.352034e-20
```

Квадратичный дискриминантный анализ

Квадратичный дискриминантный анализ

```
qda_tr <- qda(iris[in_train, -5], iris$Species[in_train])
qda_tr_pred <- predict(qda_tr)
table(qda_tr_pred$class, iris$Species[in_train])
```

```
#
#              setosa versicolor virginica
#   setosa         38          0         0
#   versicolor      0         39         0
#   virginica       0          2        41
```

```
qda_test_pred <- predict(qda_tr, iris[-in_train, -5])
table(qda_test_pred$class, iris$Species[-in_train])
```

```
#
#              setosa versicolor virginica
#   setosa         12          0         0
#   versicolor      0          9         1
#   virginica       0          0         8
```

Take home messages

- Дискриминантный анализ — метод классификации объектов по правилам, выработанным на выборке объектов с заранее известной принадлежностью
- Качество классификации можно оценить по числу неверно классифицированных объектов. Чтобы не было “переобучения” можно:
- Подобрать классификацию на тренировочных данных и проверить на тестовых
- Использовать кроссвалидацию — классификацию объектов по правилам полученным по остальным данным (без учета этих объектов)
- Для дискриминантного анализа нужно отбирать признаки, независимые друг от друга или создавать синтетические признаки при помощи анализа главных компонент.
- Если внутригрупповые ковариации признаков различаются, лучше применять квадратичный дискриминантный анализ.

Дополнительные ресурсы

- Quinn, Keough, 2002, pp. 435–441