Статистика

Лекция 5. Дискриминантный и факторный анализ

нетология

Алексей Кузьмин

Директор разработки в ДомКлик.ру

О спикере:

- Руковожу направлением работы с данными и Data Science
- Преподаю в Нетологии
- Работаю в IT с 2010 года (ABBYY, ДомКлик)
- Окончил МехМат МГУ в 2012 году

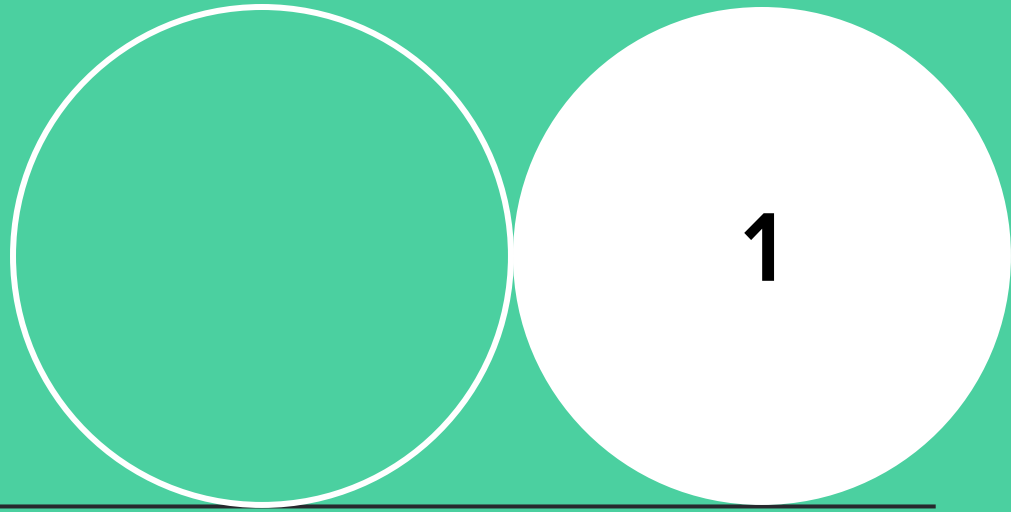
Я в Слаке:

@Alexey Kuzmin

Сегодня на лекции

1. Дискриминантный анализ
2. Кластерный анализ

Дискриминантный анализ



Алексей Кузьмин

Статистика

нетология

Выбираем метод анализа

Зависимая переменная	Независимая переменная	Метод
Непрерывная	Непрерывная	Регрессионный анализ
Категориальная	Непрерывная	Дискриминантный анализ

Дискриминантный анализ

Задача:

По значениям дискриминантных переменных для объектов получить значения классифицирующей переменной, то есть определить классы, в которые попадают эти объекты.

На основании некоторых признаков (независимых переменных) объект может быть причислен к одной из **заранее** заданных групп.

Примеры

- Определить класс цветка на основе его характеристик (ширина и длина чашелистника и лепестка)
- Понять категорию заемщика - надежный или нет
- ...

Входные данные

Класс (label)	X1 (petal_length)	X2 (petal_width)	X3 (sepal_length)	X4 (sepal_width)
Setosa	2.43	1.17	4.32	2.35
Setosa	1.42	5.23	2.32	3.31
Versicolor	2.12	3.12	4.87	4.34
...	...	...	...	...
Virginica	4.21	3.21	5.53	3.42
Virginica	5.65	5.34	4.32	2.23

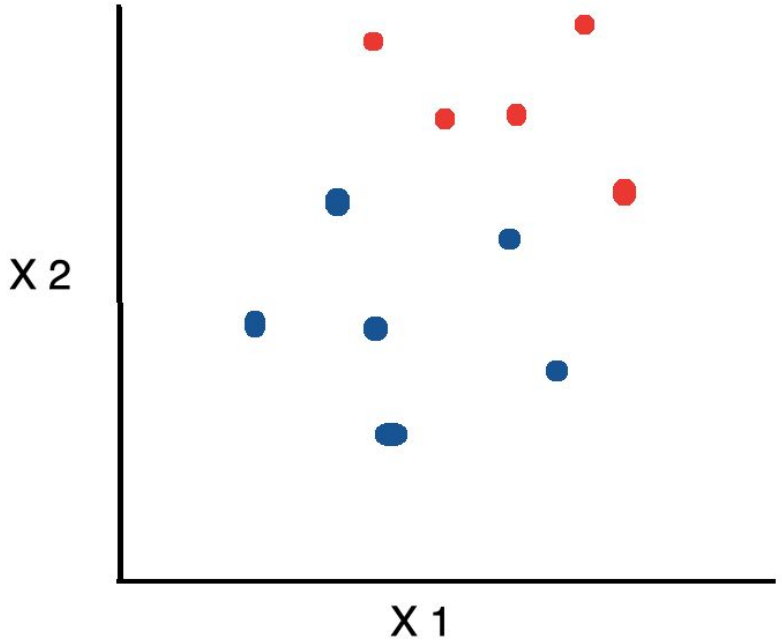
Дискриминантная функция

$$z=b0+b1*x1 + b2*x2 + ... + bn*xn$$

Задача - определить коэффициенты b, чтобы по значениям дискриминантной функции можно было с максимальной точностью провести разделение по группам.

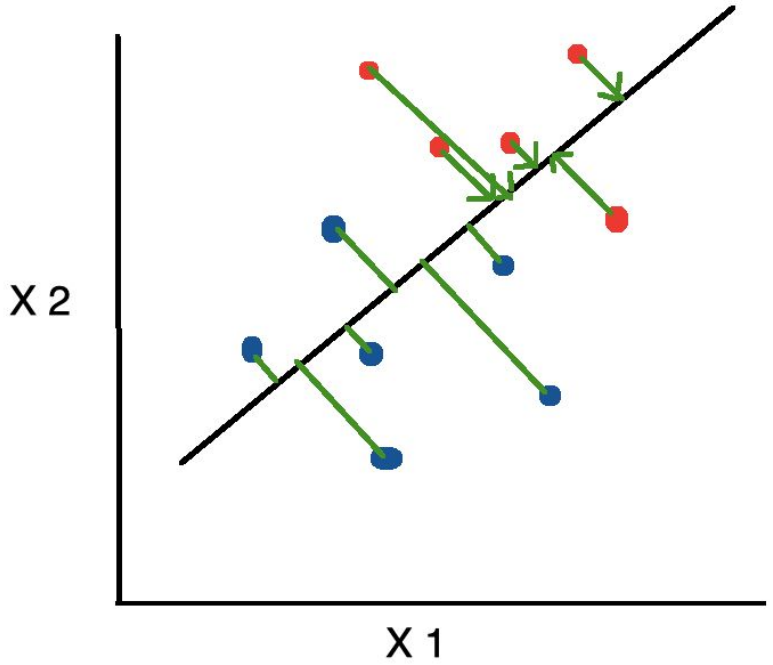
Пример для двух классов

Хотим разделить красные и синие точки (классы) в зависимости от значений двух независимых переменных (x1 и x2)



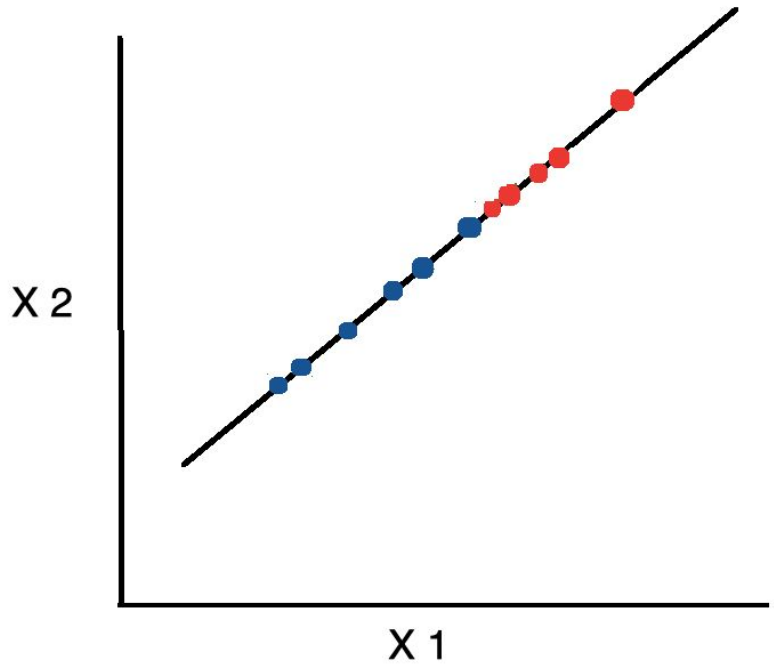
Пример для двух классов

LDA строит линию, и проецирует на нее точки из нашей выборки



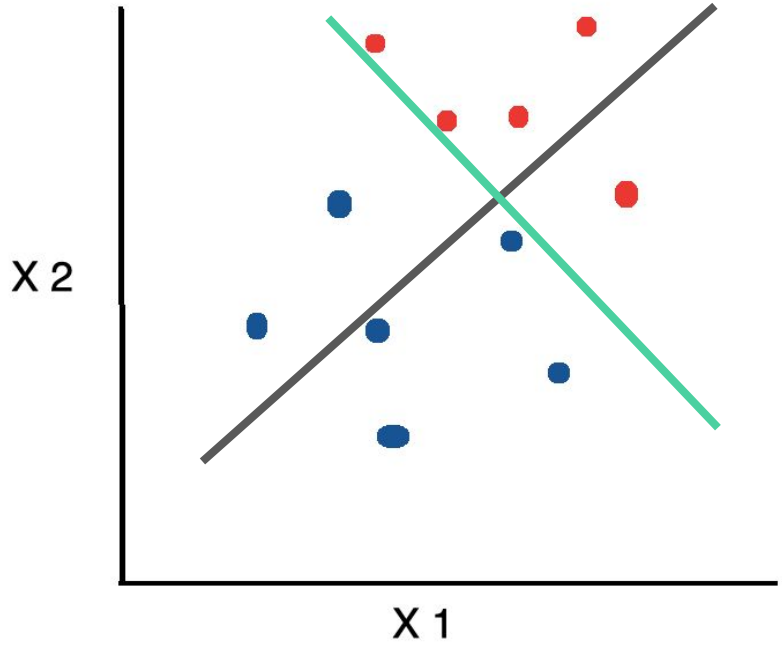
Пример для двух классов

Эта линия строится специальным образом, чтобы “центр” области красных точек был максимально отдален от “центра” области синих точек



Пример для двух классов

Дискриминантной функцией в данном случае будет перпендикуляр к этой линии



Пример для двух классов

Более формально:

Z = b0 + b1*x1 + b2*x2

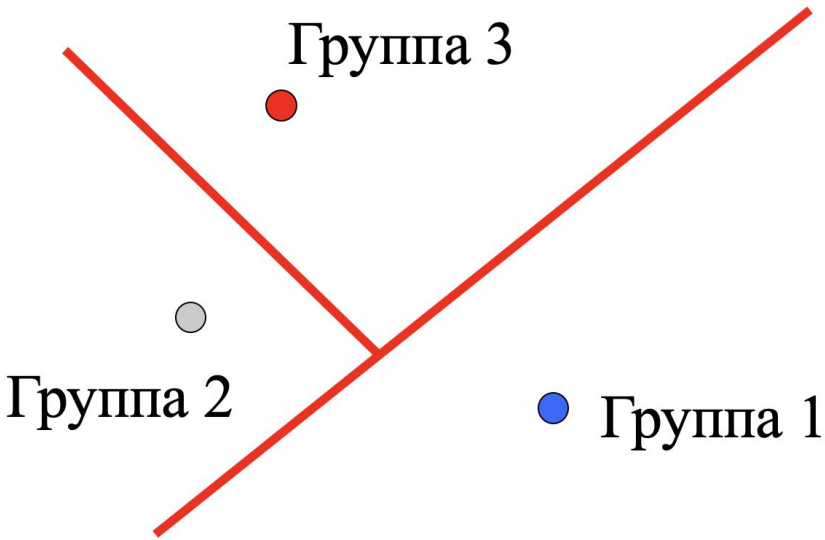
Пусть **Z1** и **Z2** - средние значения дискриминантной функции для синих и красных точек

Задача - подобрать такие коэффициенты **b0**, **b1**, **b2**, чтобы максимизировать **|Z1 - Z2|**

После этого можно найти **Zкр = (Z1 - Z2)/2** и построить решающее правило для нового образца (**Zn**): если **Zn - Zкр >= 0**, то точка синяя, иначе - красная

Если классов больше 2-х:

Если классов больше двух - то нужна не одна дискриминантная функция, а несколько



Предположения

- **Нормальное распределение.** Предполагается, что анализируемые переменные представляют выборку из многомерного нормального распределения. Отступление обычно не является критичным.
- **Однородность дисперсий/ковариаций.** Предполагается, что матрицы дисперсий/ковариаций переменных однородны. Как и ранее, малые отклонения не фатальны
- **Слабая скоррелированность признаков**

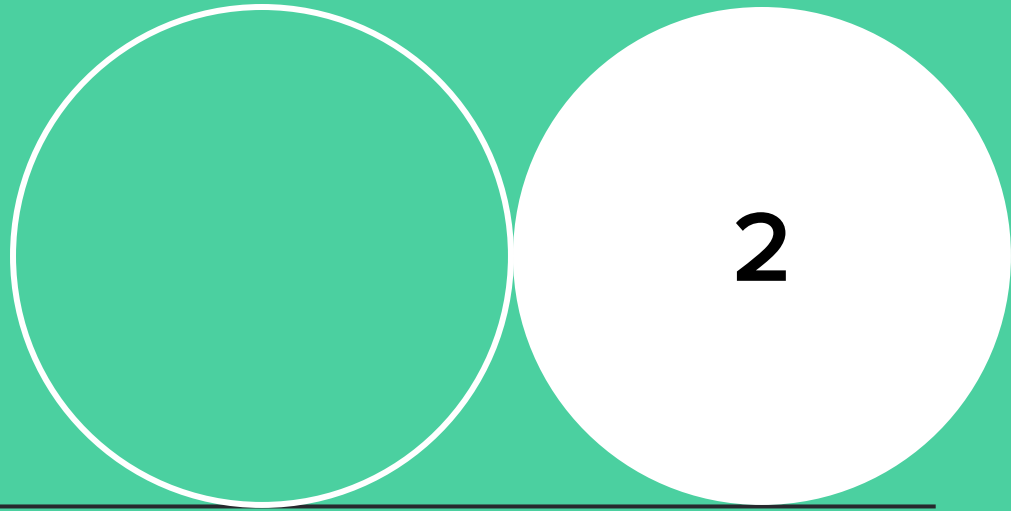
Другие виды анализа

- С отбором признаков
  - Позволяет включать самые важные признаки
  - Позволяет исключать наименее информативные признаки
- Квадратичный дискриминантный анализ
  - В случае различия матриц ковариаций
- Логистическая регрессия
  - Еще один способ разделить данные

Практика

1. Загрузим датасет по качеству вин
2. Применим к нему линейный дискриминантный анализ и посмотрим качество предсказания на отложенной выборке
3. Оставим два признака в данных - ash и flavanoids и два класса - 0 и 2
4. Попробуем еще раз применить LDA на такой ограниченной выборке
5. Посмотрим визуально как выглядит линия разделения классов

Кластерный анализ



Алексей Кузьмин

Статистика

нетология

Цель

Цель кластерного анализа – нахождение групп схожих объектов в выборке данных. Эти группы удобно называть кластерами.

Пример:

У нас есть список клиентов с характеристиками, которые у нас заказывали те или иные товары. Попробуем выделить в них группы (кластера) на основе признаков для проведения микротаргетинга.

Отличие от других задач

- Отсутствие “правильных” ответов. Задача кластерного анализа - открытая по своей природе
- Сложность оценки качества

Основные методы кластерного анализа

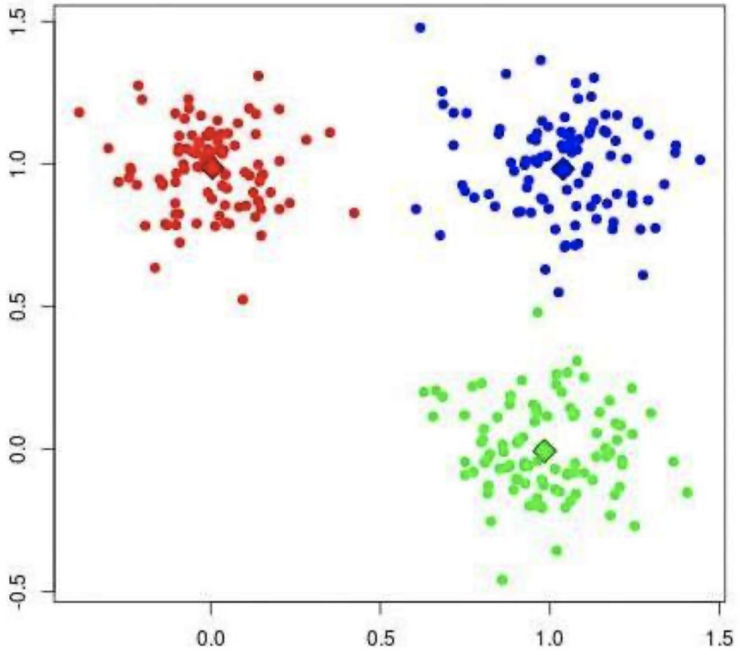
- Иерархический
- K-средних


K-средних

Метод K-средних

Итеративный метод, который работает непосредственно с объектами

Нужно заранее указать число кластеров

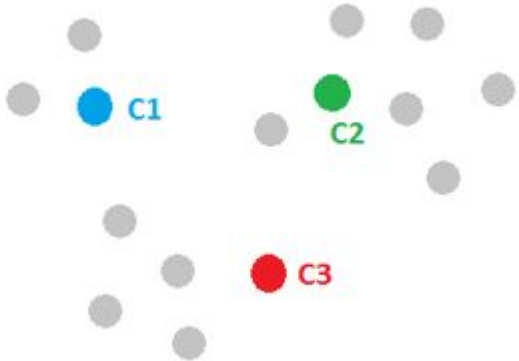


Пошаговый пример

1. Нам дан набор объектов с их характеристиками

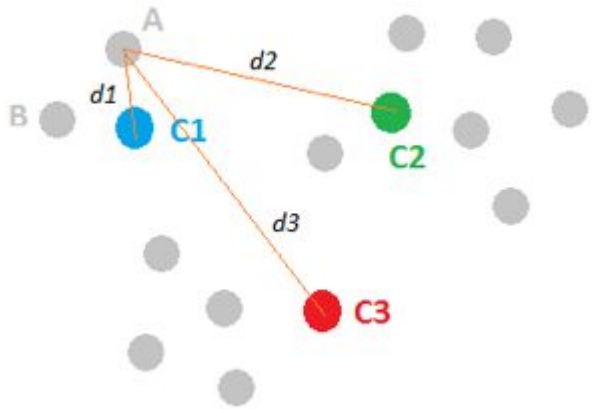
Пошаговый пример

2. Выбираем количество кластеров (например, 3) и случайно располагаем их среди наших точек



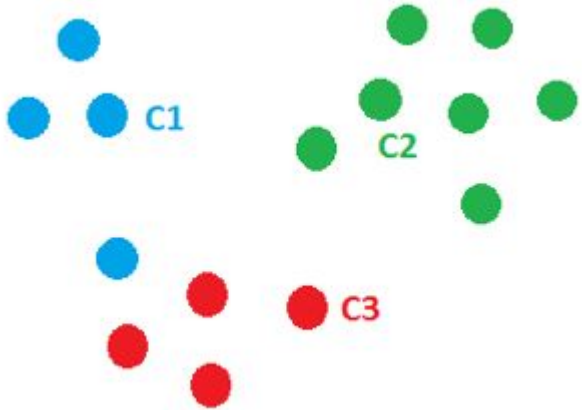
Пошаговый пример

3. Берем одну точку из имеющихся у нас и считаем расстояние до каждого из центров. Относим точку к тому кластеру, расстояние до которого - минимально.



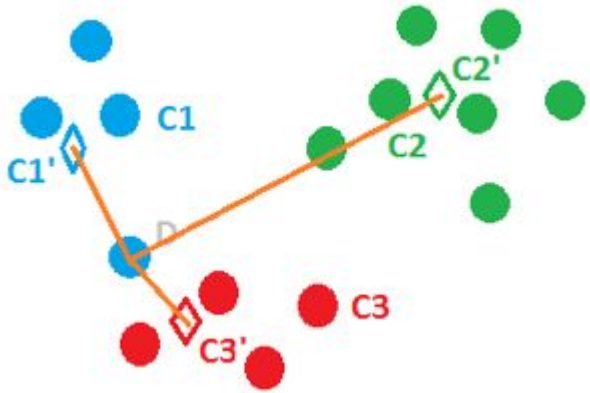
Пошаговый пример

4. Таким образом относим все точки к одному из кластеров.



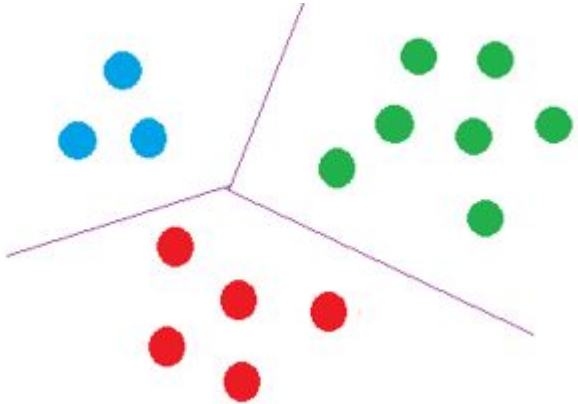
Пошаговый пример

5. Передвигаем центры кластеров в центры точек. И запускаем шаги 3-5 заново.



Пошаговый пример

6. После стабилизации алгоритма получаем готовую кластеризацию.



Более формально

Алгоритм пытается минимизировать сумму внутриклассовых отличий от центра:

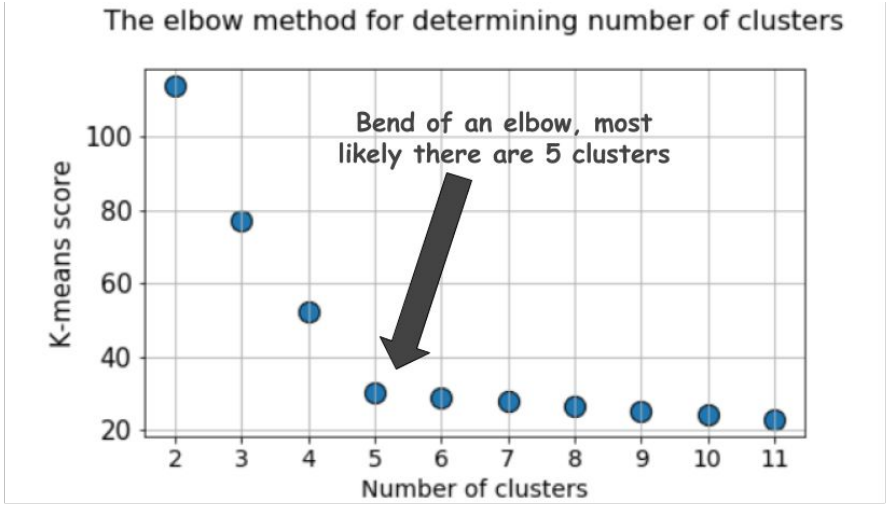
$$\sum_{i=0}^{n} \min_{\mu_j}(\|x_i - \mu_j\|)^2$$

Неявно предполагает выпуклость и однородность кластеров

Выбор количества кластеров

Метод локтя:

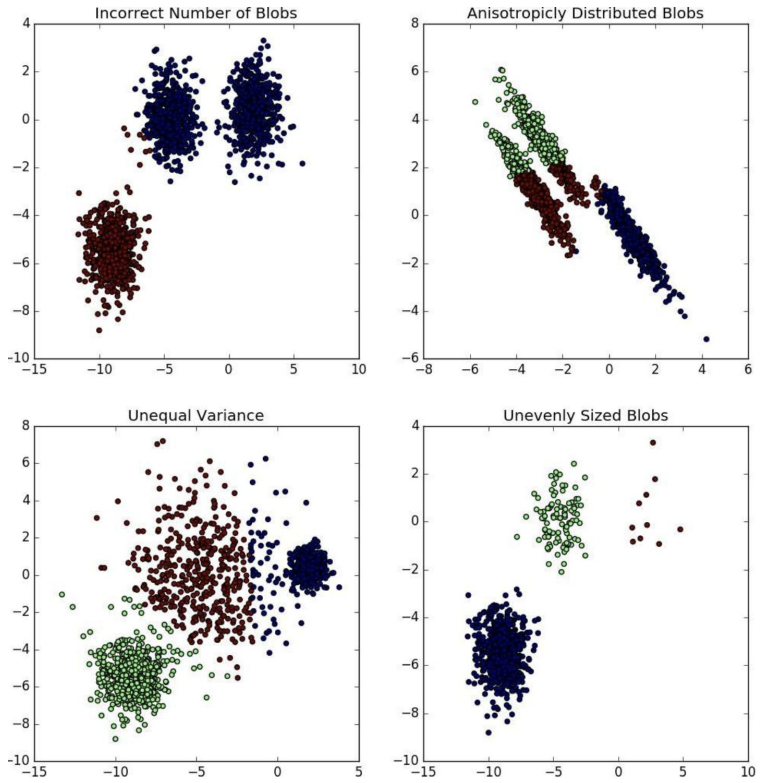
Смотрим на зависимость суммы внутриклассовых отличий от центра (в sklearn - inertia). Останавливаемся, когда при увеличении количества кластеров метрика перестает значимо улучшаться



Ограничения

Алгоритм может выдавать контринтуитивные результаты, если:

1. Вы выбрали не то число кластеров
2. Кластеры - не выпуклые и близко расположены
3. Кластера обладают разной дисперсией



Особенности работы

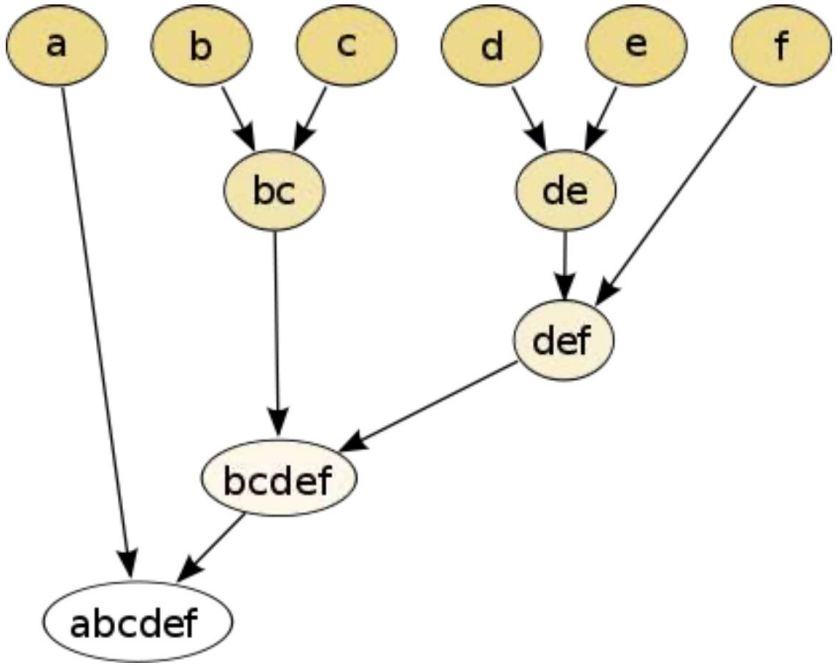
- Алгоритм k-средних сходится к локальному оптимуму. Следовательно, результат, полученный с помощью K-средних, не обязательно является самым оптимальным.
- Инициализация центров крайне важна для качества найденного решения. По умолчанию - используйте k-means++.
- Крайне чувствителен к масштабу признаков (будет дальше в лекции).

Иерархический алгоритм

Иерархический алгоритм

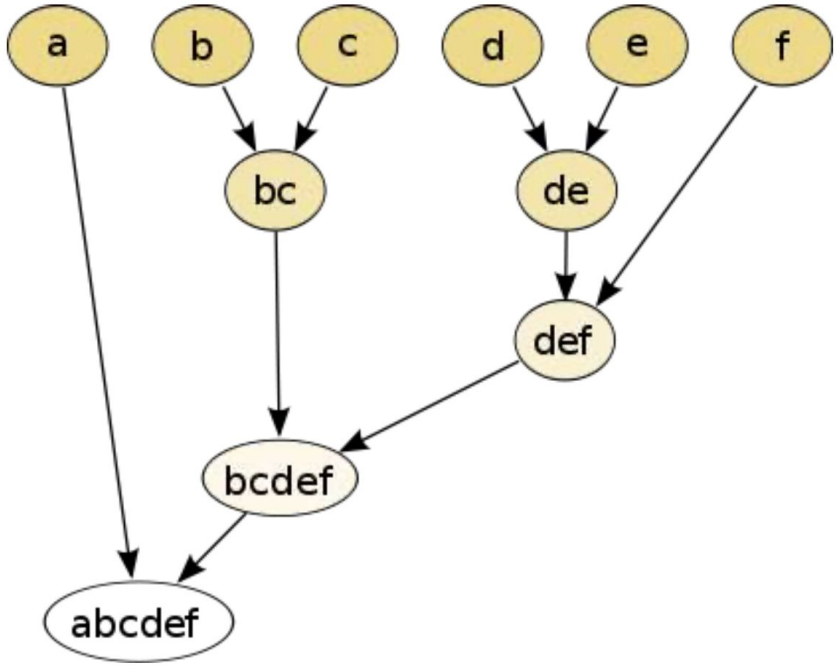
В иерархических методах происходит последовательное объединение наиболее близких объектов в один кластер.

Процесс объединения можно показать визуально в виде дендрограммы (дерева объединения).



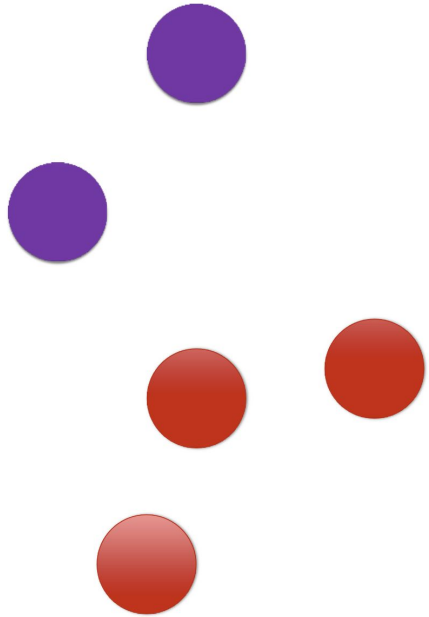
Алгоритм

1. Все объекты - отдельные кластера
2. Повторять, пока у нас больше чем один кластер:
    a. Соединить два ближайших кластера в один



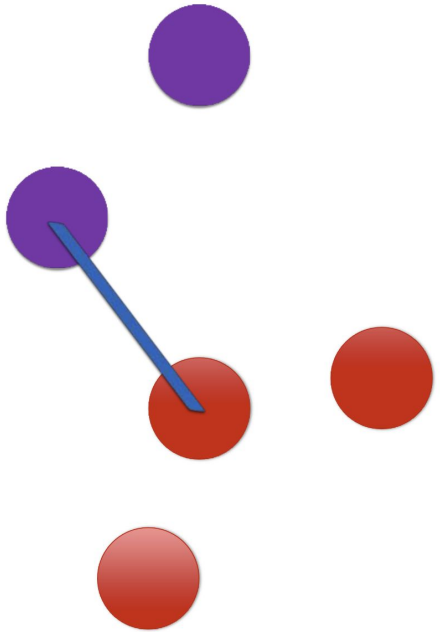
Расстояние между кластерами

- Ближнего соседа
- Дальнего соседа
- Групповое среднее
- Расстояние между центрами
- Расстояние Уорда



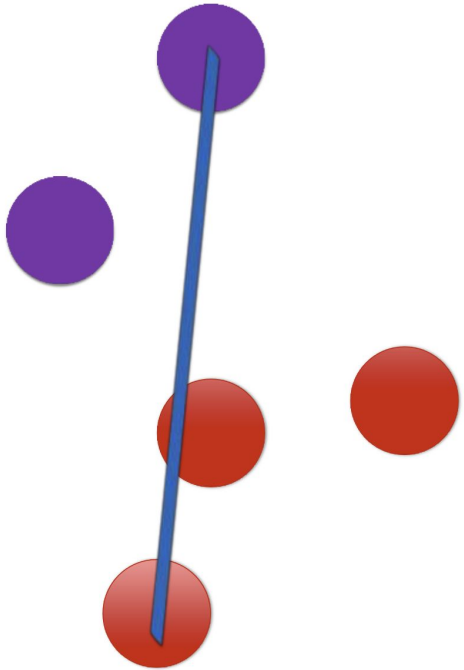
Расстояние между кластерами

- **Ближнего соседа**
- Дальнего соседа
- Групповое среднее
- Расстояние между центрами
- Расстояние Уорда



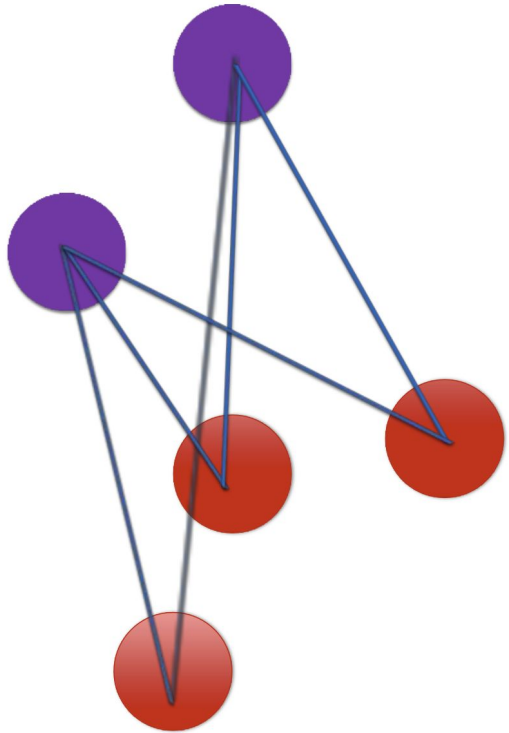
Расстояние между кластерами

- Ближнего соседа
- **Дальнего соседа**
- Групповое среднее
- Расстояние между центрами
- Расстояние Уорда



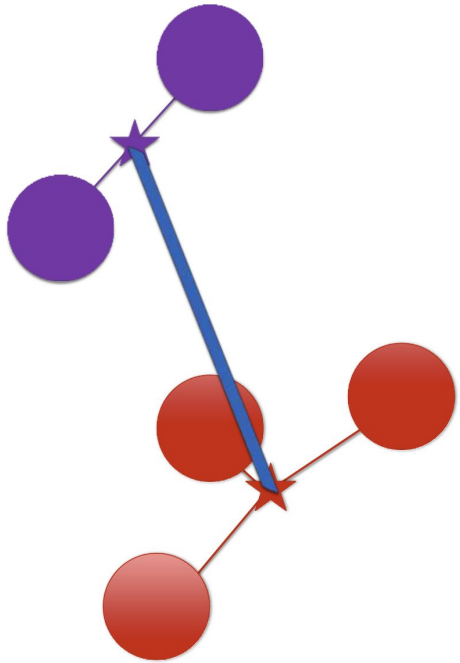
Расстояние между кластерами

- Ближнего соседа
- Дальнего соседа
- **Групповое среднее**
- Расстояние между центрами
- Расстояние Уорда



Расстояние между кластерами

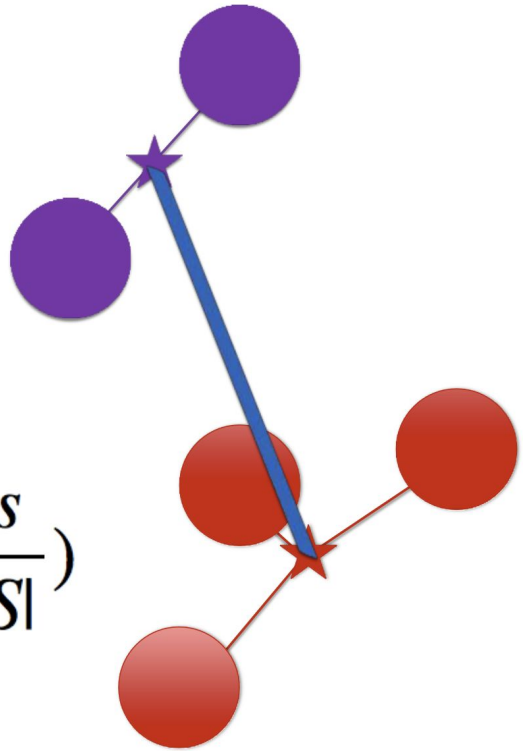
- Ближнего соседа
- Дальнего соседа
- Групповое среднее
- **Расстояние между центрами**
- Расстояние Уорда



Расстояние между кластерами

- Ближнего соседа
- Дальнего соседа
- Групповое среднее
- Расстояние между центрами
- **Расстояние Уорда**

$$R^{y}(W,S) = \frac{|W| * |S|}{|W| + |S|}\rho^{2}(\sum_{w}\frac{w}{|W|}, \sum_{s}\frac{s}{|S|})$$



Рекомендуемое расстояние

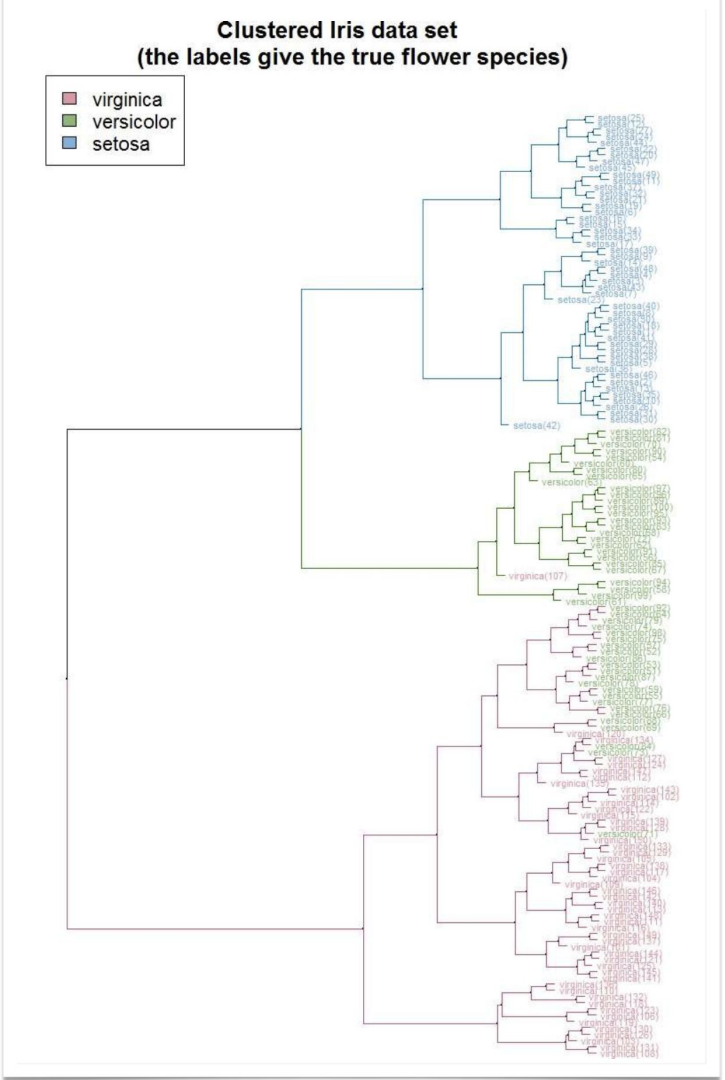
Используйте по умолчанию метод Уорда.

Причины:

- При каждом слиянии расстояние между кластерами растет
- Основано на центра кластеров
- При каждом оъединении минимизирует внутрикластерную дисперсию

Пример

Кластеризация цветков Ириса



О подсчете расстояний

Подсчет расстояний

Все алгоритмы кластеризации завязаны на подсчет расстояния между точками.

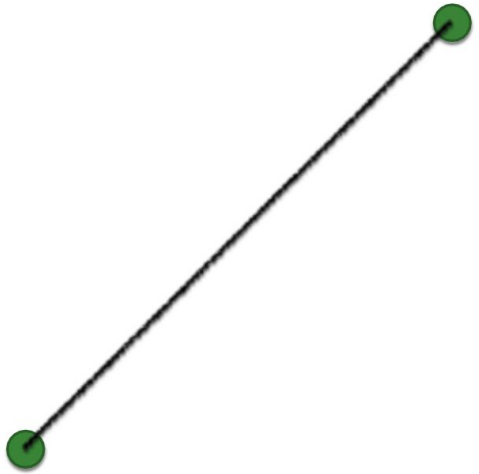
Расстояние между точками - это способ трактовать “похожесть” объектов в выборке.

Делать это можно различными способами. Рецепта как выбрать правильное расстояние - нет. Надо экспериментировать с учетом имеющихся данных и природы задачи.

Евклидово

$$d(p,q) = \sqrt{(p_1 - q_1)^2 + (p_2 - q_2)^2 + \cdots + (p_n - q_n)^2} = \sqrt{\sum_{k=1}^{n} (p_k - q_k)^2}$$

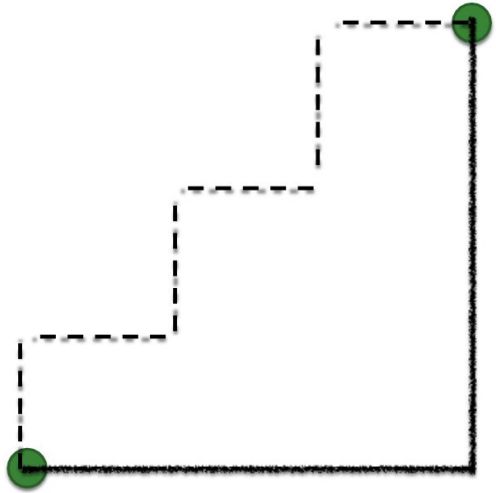
- Обычно мы все понимаем под расстоянием именно его
- Расстояние по прямой от точки А до точки Б



Манхеттенское

$$d_1(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \|\mathbf{p} - \mathbf{q}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |p_i - q_i|$$

- Другое название - расстояние городских кварталов



Другие

- Расстояние Чебышева
- Косинусное расстояние
- Расстояние Минковского
- 1 - коэффициент корреляции
- ...

Нормализация данных

При выполнении кластерного анализа все признаки обычно приводят к единому масштабу, чтобы каждый фактор играл одинаковую роль при определении сходства объектов

Выборка:

Человек	Рост (мм)	Вес (тонны)	Рост (см)	Вес (кг)
1	1800	0.085	180	85
2	1620	0.085	162	85
3	1800	0.093	180	93

Евклидово расстояние от 1 до 2 и 3:

	Мм и тонны	См и кг
2	180	18
3	0.008	8

Нормализация данных

$$Z = \frac{x_i - \bar{x}}{s}$$

Из каждого признака вычитаем среднее по этому признаку и делим на стандартное отклонение признака.

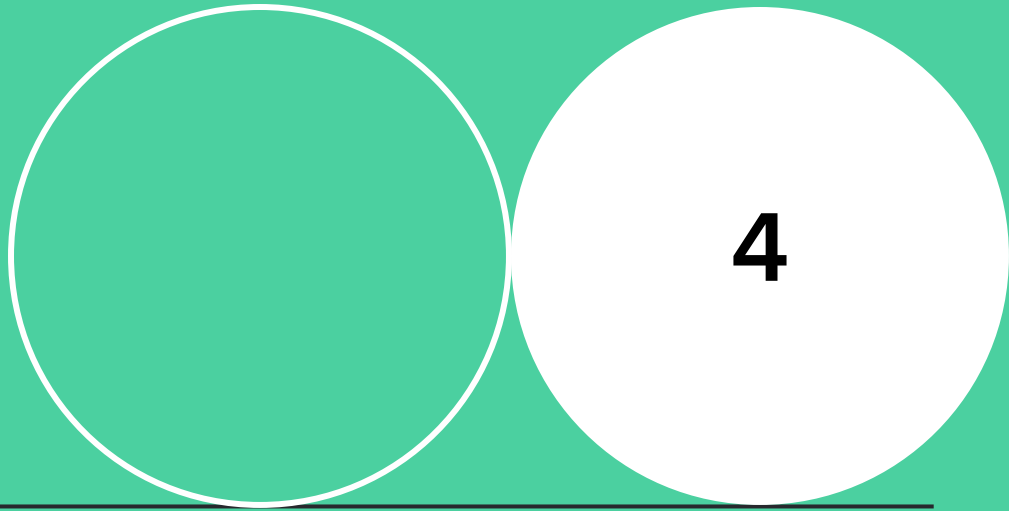
Практика

1. Создадим датасет при помощи функции make_blobs
2. Проведем кластеризацию методом k-средних и подберем оптимальное количество кластеров
3. Построим дендрограмму для иерархической кластеризации

Важно помнить!

1. Большая часть методов кластерного анализа - набор эвристических правил
2. Не существует адекватного способа оценки “качества” кластеризации
3. Разные методы кластерного анализа и даже разные “настройки” одного и того же метода порождают разные результаты кластеризации

Итоги



Алексей Кузьмин

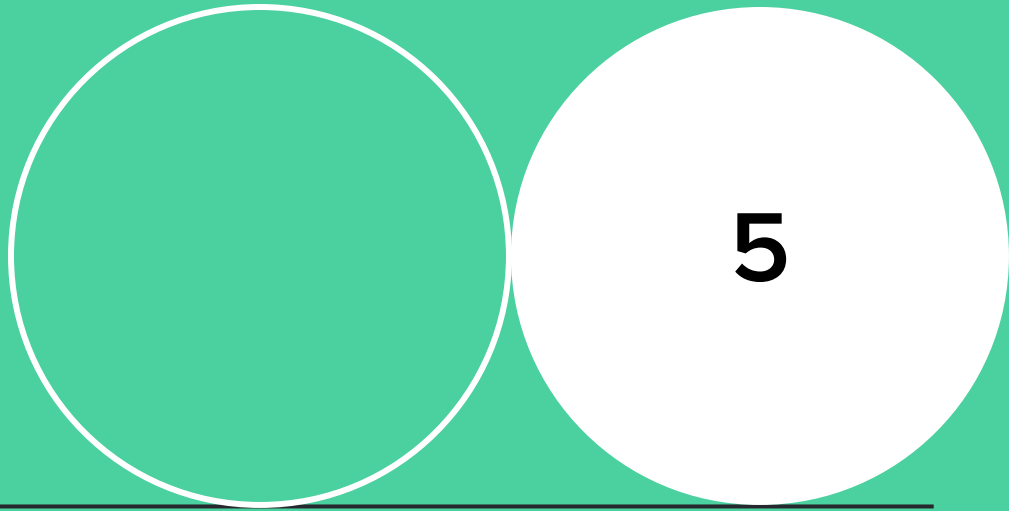
Аналитическое мышление

нетология

Что мы узнали сегодня

- Разделять данные на категории при помощи дискриминантного анализа
- Искать кластера похожих объектов в выборке при помощи кластерного анализа

Домашнее задание



Алексей Кузьмин

Аналитическое мышление

нетология

Домашнее задание

1. Возьмите датасет с цветками iris’a (функция load_iris из библиотеки sklearn)
2. Оставьте два признака - sepal_length и sepal_width и целевую переменную - variety
3. Разделите данные на выборку для обучения и тестирования
4. Постройте модель LDA
5. Визуализируйте предсказания для тестовой выборки и центры классов
6. Отбросьте целевую переменную и оставьте только два признака - sepal_length и sepal_width
7. Подберите оптимальное число кластеров для алгоритма kmeans и визуализируйте полученную кластеризацию

Спасибо за внимание

Алексей
Кузьмин

нетология