Многомерный анализ биологических данных на компьютере

Дальневосточный федеральный университет

Кислов Д.Е.

23 ноября 2018 г.

Структура лекционной программы (6 акад. часов)

- общие представления о теории вероятностей (ТВ);
- введение в среду статистического анализа R;
- многомерный анализ данных;

Общие представления о теории вероятностей

- Понятие вероятности, случайной величины, дискретно и непрерывно распределенные случайные величины, функции и плотности распределения вероятности, условные и безусловные вероятности, примеры;
- серия независимых испытаний (модель Бернулли), центральная предельная теорема;
- основные распределения используемые в ТВ;

Статистические оценки и гипотезы

- задача теории вероятностей и математической статистики (примеры), понятие статистической оценки, оценки вероятностей событий в серии независимых испытаний, точечные и интервальные оценки параметров распределений;
- проверка статистических гипоетз, понятия ошибок первого и второго рода, критерии согласия (тесты Колмогорова-Смирнова, χ^2, Шапиро-Уилка и др.), анализ таблиц сопряженности (критерий χ^2, точный тест Фишера);
- корреляционный анализ, метод наименьших квадратов, линейная и нелинейная регрессии (примеры), классический дисперсионный анализ и его обобщения;

Многомерный анализ данных

- задачи классификации многомерных данных, метод k-средних, иерархическая кластеризация, оценка качества кластеризации и сравнение кластерных структур;
- метод главных компонент (PCA), дискриминантный анализ (DA), многомерное шкалирование (MDS, NMDS), анализ соответствий (CA);
- классификация по прецедентам и основные методы решения задачи (k-NN, линейная классификация, машина опорных векторов, деревья решений и случайный лес), оценки качества решения задачи классификации по прецедентам (точность, матрица ошибок, ROC/AUC харатеристика);

Пустая страница

Важные исторические даты

- Х. Гюйгенс (1629–1695): Первая книга по теории вероятностей – "О расчетах в азартной игре". Введено понятие среднего значения — математического ожидания;
- Зарождение статистики: Джон Граунт (1620–1674); Вильям Петти (1623–1687). "Естественные и политические наблюдения над бюллетенями смертности"(Граунт, 1662), "Политическая арифметика"(Петти, 1676);

Рис.: Х. Гюйгенс

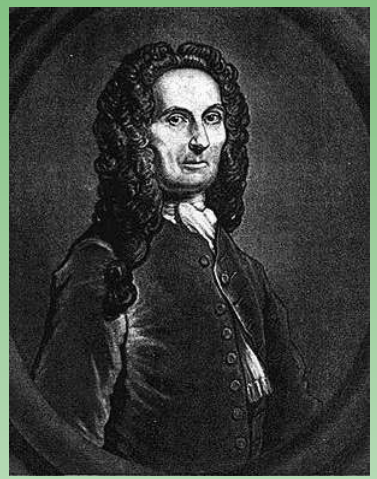


Рис.: А. Муавр

Рис.: Я. Бернулли

Важные исторические даты

- И. Ньютон (1642–1727) — Я. Бернулли (1654–1705); "Искусство предположений"(Бернулли, 1713);
- Абрахам де Муавр (1667–1754): "Учение о случаях"(Муавр, 1733); П.С. Лаплас (1749 – 1827);
- Т. Байес (1702–1761) "Формула Байеса"(Байес, 1763);
- Теория ошибок (конец XVIII) — К.Ф. Гаусс (1777-1855);
- А.Н. Колмогоров (1903–1987) — Аксиоматизация теории вероятностей (Колмогоров, 1933);
- К. Пирсон (1857–1936) — Критерий χ^2; Р.А. Фишер (1890–1962) — метод максимального правдоподобия; Е. Нейман (1894–1977) — статистическая проверка гипотез;

Предпосылки теории вероятностей: комбинаторные задачи

Задача 1

Кодовый замок состоит из 10 кнопок, а открывается при одновременном нажатии 2 кнопок. Охарактеризовать численно его надежность.

Задача 2

Какова вероятность из цифр 1, 3, 5, 7, 9 сложить заданное пятизначное число?

Задача 3

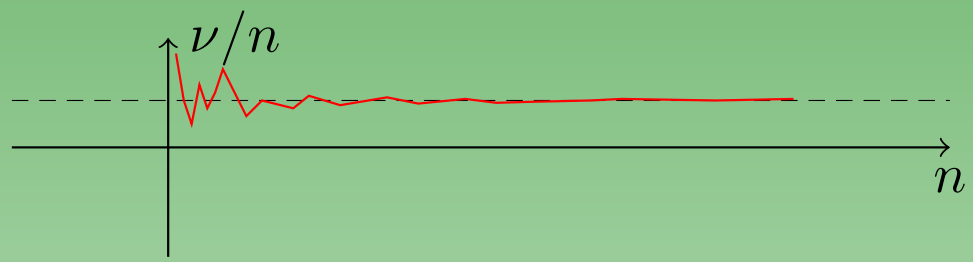
В селе 2500 жителей. Каждый из них примерно 6 раз в месяц (30 дней) ездит в город, выбирая дни поездок по случайным, независящим от других мотивам. Рассчитать минимальную вместительность поезда, обеспечивающую его переполнение не чаще одного раза за 100 дней.

Основания теории вероятностей

Если ν – число осуществлений некоторого события, то $\frac{\nu}{n}$ – его частота реализации (появления).

ОСНОВНОЕ МОДЕЛЬНОЕ ПОЛОЖЕНИЕ

Частота появления события при многократном повторении эксперимента должна проявлять устойчивость: осуществляя колебания, она должна стремиться к определенному значению.



Что такое вероятность?

Под термином "вероятность" события будем понимать некоторое число, характеризующее частоту его реализации при многократном повторении эксперимента.

Теория вероятностей (ТВ) и математическая статистика (МС)

Задача ТВ

Построение математических моделей случайных явлений, *проявляющих свойство статистической устойчивости*.

Задача МС

Формирование выводов на основе данных опыта и представлений теории вероятностей.

Задача

Симметричную монету подбросили 100 раз, из которых 42 раза выпала «решка» и 58 — «орел». Построены 2 модели этого явления: 1) P(«орел»)=1/2, P(«решка»)=1/2; 2) P(«орел»)=2/3, P(«решка»)=1/3. Какую модель следует выбрать?

Таблица: Соответствие вероятностных и теоретико-множественных представлений

Множественное понятие	Понятие теории вероятностей
1. Множество A пусто ($A = \emptyset$).	1. Событие A невозможно.
2. $A \bigcap B = \emptyset$.	2. Два события несовместны.
3. $A_1 \bigcap A_2 \bigcap \ldots \bigcap A_k = X$.	3. Событие X состоит в одновременном наступлении событий $A_1, A_2, \ldots, A_k$.
4. $A_1 \bigcup A_2 \bigcup \ldots \bigcup A_k = X$.	4. Событие X состоит в наступлении одного из событий $A_1, A_2, \ldots, A_k$.
5. Дополнительное множество к A ($\overline{A}$).	5. Событие состоит в ненаступлении события A (в этом случае говорят, что наступило противоположное A событие).
6. $B \subseteq A$.	6. Наступление события B влечет наступление события A.
7. $A = \Omega$.	7. Событие A достоверно.

Аксиомы теории вероятностей (А.Н. Колмогоров)

Вероятностная модель явления построена, если:

- Задано множество элементарных исходов эксперимента (Ω) и возможных событий ($\mathcal{F}$);
- Каждому событию $A \in \mathcal{F}$ сопоставляется действительное число $P(A) \in [0, 1]$, именуемое его вероятностью;
- $P(\Omega) = 1$;
- Для любых двух событий A и B, таких что $A \cap B = \emptyset$, выполнено $P(A \cup B) = P(A) + P(B)$;

Аксиомы теории вероятностей (А.Н. Колмогоров)

Вероятностная модель явления построена, если:

- Задано множество элементарных исходов эксперимента (Ω) и возможных событий ($\mathcal{F}$);
- Каждому событию $A \in \mathcal{F}$ сопоставляется действительное число $P(A) \in [0, 1]$, именуемое его вероятностью;
- $P(\Omega) = 1$;
- Для любых двух событий A и B, таких что $A \cap B = \emptyset$, выполнено $P(A \cup B) = P(A) + P(B)$;

Пример

В эксперименте с подбрасыванием монеты: $\Omega = \{$«Орел», «Решка»$\}$; В качестве $\mathcal{F}$ можно выбрать $\{\Omega$, «Орел», «Решка», $\emptyset\}$, или $\mathcal{F}=\{\Omega, \emptyset\}$, и положить: $P($«Орел»$)=p$, $P($«Решка»$)=1-p$, $p < 1$.

Схема Бернулли

Задача 4

Эксперимент состоит в n–кратном повторении опыта с двумя исходами. Вероятность «успеха» в опыте равна p, вероятность «неудачи» — q $(p+q=1)$. Определить вероятность k успехов при выполнении эксперимента.

Решение

Рассмотрим событие, состоящее в том, что первые k испытаний окончились «успехом», а остальные $n-k$ — «неудачей». Вероятность такого события — $p^k \cdot q^{n-k}$. Общее число подобных событий в эксперименте, отличающихся порядком «успехов» и «неудач» равно количеству k–элементных подмножеств n–элементного множества, т. е. C_n^k. Следовательно, искомая вероятность определяется выражением: $C_n^k p^k q^{n-k}$. $C_n^k = n!/(k!(n-k)!)$

Типовые задачи

Задача 5

При посадке тиса приживаемость составляет 10%. Какова вероятность, что из 10 посаженных образцов приживется хотя бы один.

Типовые задачи

Задача 6

При посадке тиса приживаемость составляет 10%. Какова вероятность, что из 10 посаженных образцов приживется хотя бы один.

Решение

- $(1/10)^{10}$ – не приживется ни один, $1 - (1/10)^{10}$ – приживется хотябы один.

Типовые задачи

Задача 7

При посадке тиса приживаемость составляет 10%. Какова вероятность, что из 10 посаженных образцов приживется хотя бы один.

Решение

- $(1/10)^{10}$ – не приживется ни один, $1-(1/10)^{10}$ – приживется хотябы один.
- $\sum\limits_{k=1}^{10} C_{10}^{k}(1/10)^{k}(9/10)^{n-k}$

Типовые задачи

Задача 8

При посадке тиса приживаемость составляет 10%. Какова вероятность, что из 10 посаженных образцов приживется хотя бы один.

Решение

- $(1/10)^{10}$ – не приживется ни один, $1 - (1/10)^{10}$ – приживется хотябы один.
- $\sum_{k=1}^{10} C_{10}^{k} (1/10)^{k} (9/10)^{n-k}$

Задача 9

При высаживании непикированной рассады помидоров только 80% растений приживаются. Найдите вероятность того, что из десяти посаженных кустов приживется не менее 7.

Схема Бернулли. Планирование эксперимента.

Задача 10

Приживаемость саженцев составляет в среднем 30%. Каков должен быть минимальный объём посадок, чтобы можно было гарантировать выживаемость 50 экземпляров с доверительной вероятностью не меньшей 90%?

Схема Бернулли. Планирование эксперимента.

Задача 11

Приживаемость саженцев составляет в среднем 30%. Каков должен быть минимальный объём посадок, чтобы можно было гарантировать выживаемость 50 экземпляров с доверительной вероятностью не меньшей 90%?

Решение

$$\min_N \sum_{k=50}^{N} C_n^k 0.3^k 0.7^{n-k} \geq 0.9$$

Схема Бернулли. Планирование эксперимента.

Задача 12

Приживаемость саженцев составляет в среднем 30%. Каков должен быть минимальный объём посадок, чтобы можно было гарантировать выживаемость 50 экземпляров с доверительной вероятностью не меньшей 90%?

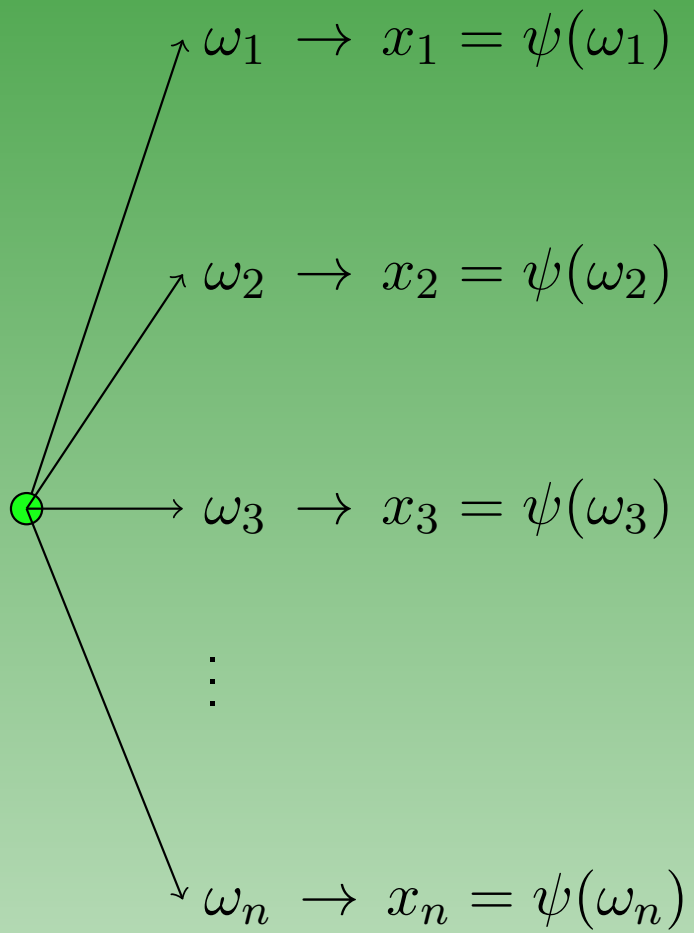
Решение

$$\min_N \sum_{k=50}^{N} C_n^k 0.3^k 0.7^{n-k} \geq 0.9$$

Решить такую задачу можно численно, используя язык программирования.

Случайные величины и их распределения

Эксперимент $\omega_i \in \Omega$:



Определение

Если $P(\omega_i) = p_i$ определены, то преобразование ψ совместно с p_i и Ω определяют дискретную случайную величину ξ: $P(\xi = x_i) = p_i$.
Множество $\{(x_i, p_i)\}$ образуют закон распределения случайной величины ξ.

Пример

Количество очков, выпавшее при подбрасывании игральной кости, — дискретная случайная величина.

Функция распределения случайной величины

Определение

Функция $F_\xi(x) = P(\xi < x)$, где $x \in \mathbb{R}$, называется функцией распределения случайной величины ξ.

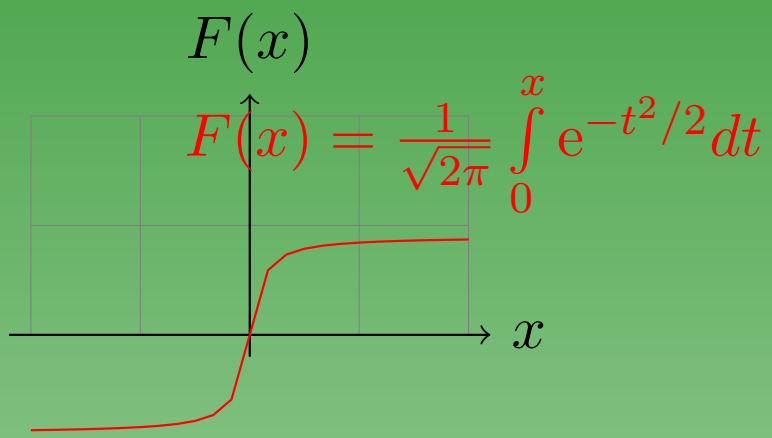
Замечание

Случайная величина называется *распределенной непрерывно*, если соответствующая функция распределения является *непрерывной*.

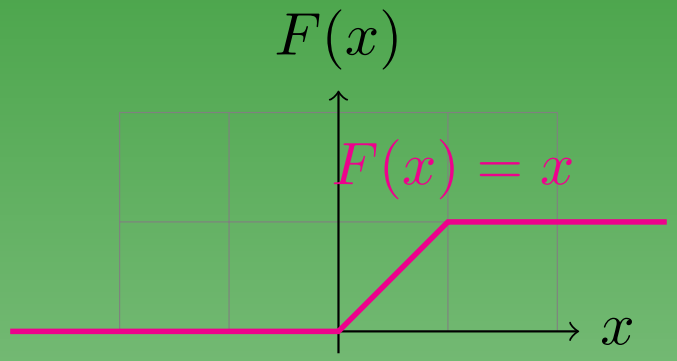
Замечание

Для случайных величин, имеющих дискретное распределение, функция распределения терпит разрывы. Аксиомы теории вероятностей определяют основные свойства функции распределения.

Примеры непрерывных и разрывной функций распределения

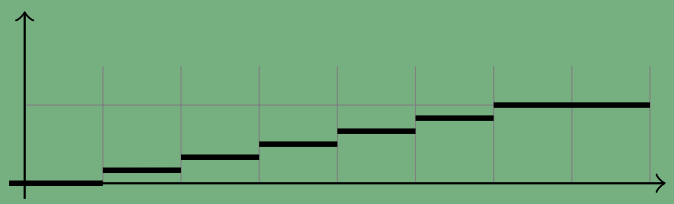


Стандартная нормальная функция распределения.



Функция распределения случайной величины равномерно распределенной на интервале [0,1].

Разрывная функция распределения



Функция распределения случайной величины — числа очков при подбрасывании кубика.

Плотность распределения случайной величины

Определение

Плотностью распределения ($f_\xi(x)$) случайной величины ξ называется производная по x(если таковая существует) от функции распределения $F_\xi(x)$:

$$f_\xi(x) = \frac{dF_\xi(x)}{dx}.$$

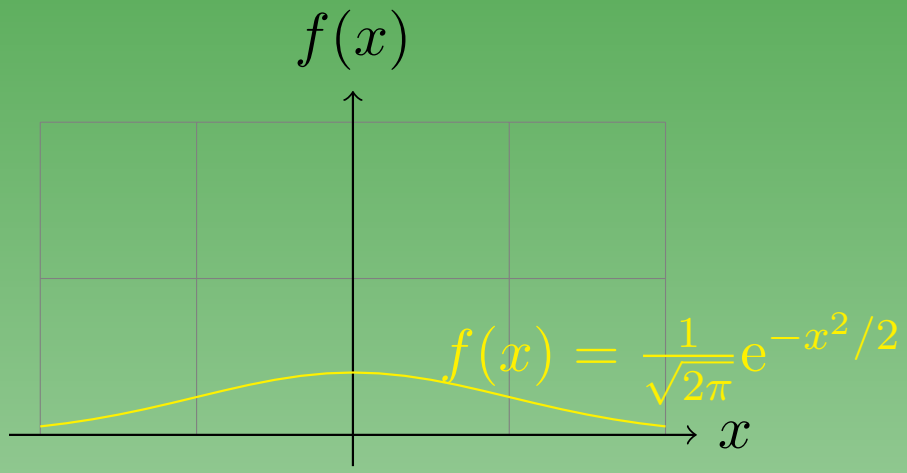
Замечание

Плотность распределения — скорость изменения вероятности события $\{\xi < x\}$, зависящая от x.

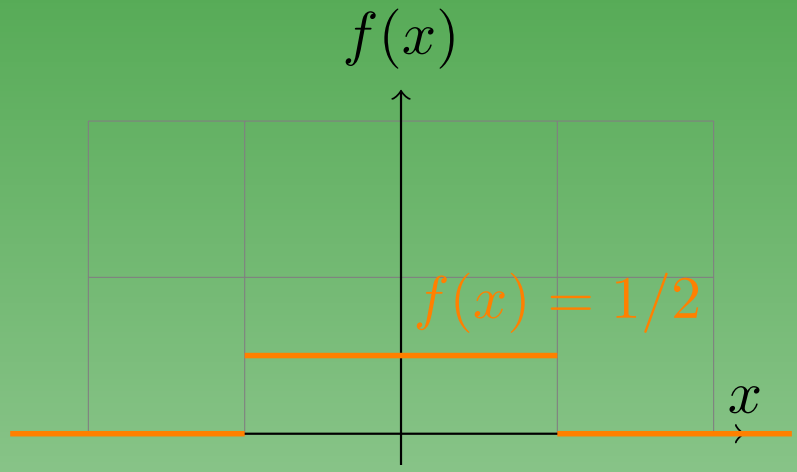
Замечание

Плотность распределения в точке x характеризует вероятность принадлежности случайной величины достаточно малой окрестности, содержащей точку x.

Примеры плотностей распределения случайных величин



Плотность стандартного нормального распределения.



Плотность случайной величины ξ, распределенной равномерно на интервале [-1, 1].

Свойства плотности распределения

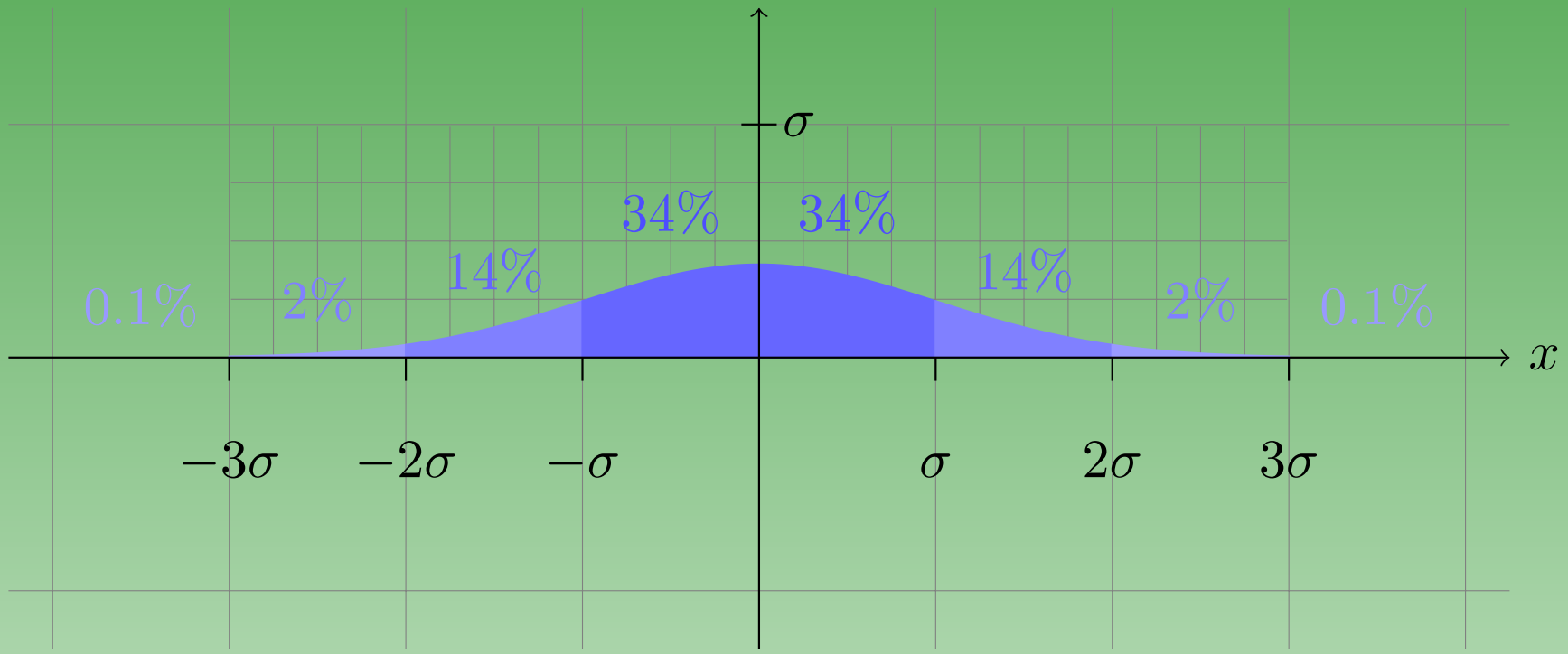
Утверждение

Если $f_\xi(x)$ плотность распределения случайной величины ξ, то

- $F_\xi(x) = \int\limits_{-\infty}^{x} f_\xi(\tau)d\tau;$
- $\lim\limits_{x\to\pm\infty} f_\xi(x) = 0;$
- $\int\limits_{-\infty}^{\infty} f_\xi(x) = 1;$
- $P(a \le \xi < b) = \int\limits_{a}^{b} f_\xi(x)dx, a, b \in \mathbb{R}.$

Доверительные интервалы нормального распределения

$$\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left(\frac{-x^2}{2\sigma^2}\right)$$



Несмещенное нормальное распределение с дисперсией σ^2.

Многомерное нормальное распределение

Определение

Пусть $\Upsilon = (\eta_1, \ldots, \eta_n) \in \mathcal{N}(0,1)$ – независимы в совокупности случайные величины; тогда $\Xi = A\Upsilon + b$, где $A = A_{n\times n}$, $\dim b = n$, имеет многомерное нормальное распределение.

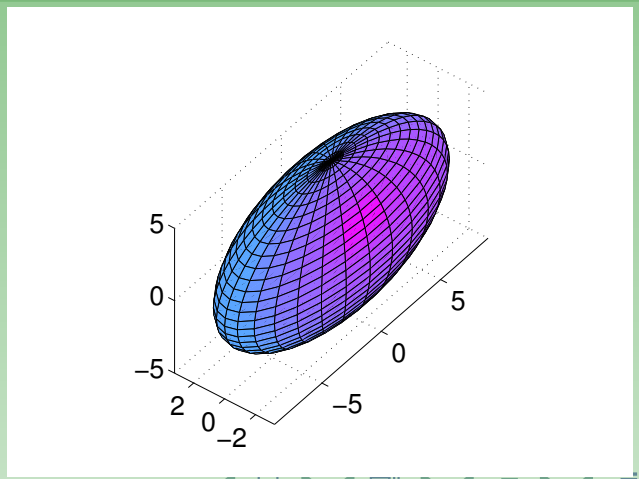
Утверждение

Если матрица A невырождена, то Ξ имеет плотность

$$f_\Xi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}\sqrt{\det(A^TA)}} \mathrm{e}^{-(x-b)^T(A^TA)^{-1}(x-b)/2}.$$

Геометрическая интерпретация

Пример многомерного нормального распределения с диагональной матрицей A;



Вычислительные среды для анализа данных

- R, `http://r-project.org` + Packages (`https://cran.r-project.org/`)
- Python, `http://python.org`
  - Pandas, `http://pandas.pydata.org`
  - SciPy+NumPy, `http://scipy.org`
  - Matplotlib, `http://matplotlib.org/`
  - Scikit-learn, `http://scikit-learn.org/`
  - ... Packages
- Statistica, `http://statsoft.com`
- MatLab, `http://www.mathworks.org`

Интерактивные среды

RStudio Server

www.rstudio.com

Jupiter Notebook

ipython.org/notebook.html