Pokročilé statistické metody

Alena Černíková

alena.cernikova@ujep.cz

24. února 2025

Realizace výuky

- **Výuku** realizují 2 vyučující
  - Alena Černíková
  - prof. Sergii Babichev
- **Zkoušku** a **zápočty** má na starosti jeden vyučující
  - Alena Černíková :(

Podmínky zápočtu a zkoušky

- **Zápočet**
  - dva až tři domácí úkoly – vyzkoušíte si příklady ze cvičení
  - seminární práce – vypracování komplexního statistického úkolu, kde výstupem je souvislý text
- **Zkouška** – ústní u počítačů
  - vylosujete si metodu, kterou předvedete na příkladu a vysvětlíte
  - jedna otázka na mnohorozměrnou statistiku
  - jedna otázka na regresní modely
  - v případě nerozhodnosti známky doplňující otázka jedno ze tří témat:
    - fuzzy modely
    - Bayesovské sítě
    - věcná významnost

Obsah kurzu

- Teorie testování hypotéz – AČ
- Věcná významnost a metaanalýza – AČ
- Mnohonásobná lineární regrese – SB
- Zobecněné lineární modely – SB
- Nelineární modely – SB
- Fuzzy logika a fuzzy modelování – SB
- Bayesovské metody – SB
- Mnohorozměrné statistické metody – AČ
- Dodatky k regresním modelům – AČ
- Praktické úkoly na výše zmíněné – AČ

Základy testování hypotéz

Testuje se platnost tvrzení

- Nový lék je lepší než stávající.
- Náhodná veličina má normální rozdělení.
- Průměrná výška lidí se za posledních 50 let zvýšila.
- Výnosy z jednotlivých druhů jabloní se liší.
- Krevní tlak závisí na hmotnosti.

Vždy se testují **populační charakteristiky**. Jejich výběrové ekvivalenty se používají jen pro sestrojení testových kritérií.

Testované hypotézy

Při statistickém rozhodování testujeme proti sobě 2 hypotézy

- Nulovou hypotézu – značíme H_0
  - obsahuje vždy jen jednu možnost
  - v případě testu nezávislosti sem patří **nezávislost**
  - v případě porovnání výběrů sem patří konkrétní velikost rozdílu (většinou nulová)
    výběry jsou stejné
- Alternativní hypotézu – značíme H_1
  - obsahuje více možností (např. interval)
  - patří sem to, co chci prokázat
  - v případě testu nezávislosti sem patří **závislost**
  - v případě porovnání výběrů sem patří obecný popis rozdílu
    výběry se liší

Výsledek testu

Na základě statistického testu uděláme jedno ze dvou rozhodnutí

- Zamítneme nulovou hypotézu
  – tím jsme prokázali platnost alternativy
- Nezamítneme nulovou hypotézu
  – tím jsme neprokázali nic
  – interpretace závisí na formulaci testovaných hypotéz
    - *neprokázala se platnost alternativy*
    - *nulová hypotéza může platit*

Jiný závěr udělat nemohu!

Chyby testu

Při rozhodování můžeme udělat chybu

- chyba prvního druhu – zamítneme H_0, přestože platí
  – značí se α, a jmenuje se **hladina významnosti**
  – závažnější z obou chyb
- chyba druhého druhu – nezamítneme H_0, přestože platí H_1
  – značí se β a hodnota $1 - \beta$ se nazývá **síla testu**
  – za dané hladiny významnosti chceme test co nejsilnější

	Nezamítáme H_0	Zamítáme H_0
Skutečně platí H_0	OK	Chyba I. druhu α
Skutečně platí H_1	Chyba II. druhu β	OK síla testu

Rozhodnutí

Výsledek testu získáme

- porovnáním **testové statistiky** (T) a kritické hodnoty (c, jsou tabelovány)
- porovnáním ***p*-hodnoty** a hladiny významnosti (α)

Platí, že

- absolutní hodnota testové statistiky $|T| \geq c$ nebo p-hodnota $\leq \alpha$ potom ZAMÍTÁME H_0
- absolutní hodnota testové statistiky $|T| < c$ nebo p-hodnota $> \alpha$ potom NEZAMÍTÁME H_0

P-hodnota

Co je to *p*-hodnota

- aktuální dosažená hladina testu
- pravděpodobnost, že za platnosti H_0
  nastane výsledek, jaký nastal,
  nebo jakýkoliv jiný, který ještě více odpovídá alternativě
- definice *p*-hodnoty se týká testové statistiky

(Ne)zamítnout H_0 nestačí, tento výsledek je třeba interpretovat vzhledem k položené otázce.

Vybrané testy

- **Testy rozdělení**
  – nejčastěji testujeme normalitu
  – př. Shapiro-Wilkův test, χ^2-test dobré shody atd.
- **Parametrické testy**
  – testová statistika se počítá přímo z naměřených hodnot
  – testuje se hodnota parametru, nejčastěji střední hodnoty
  – předpokladem bývá konkrétní rozdělení, většinou normální
  – př. dvouvýběrový t-test, ANOVA, Waldův test, Bartlettův test atd.
- **Neparametrické testy**
  – testová statistika je založena většinou na pořadích, ne přímo na naměřených hodnotách
  – jedná se o robustní metody nevyžadující konkrétní rozdělení dat
  – př. Wilcoxonův test, Spearmanův korelační koeficient atd.
- **Simulační testy**
  – nutnost využití počítačů
  – na základě daného výběru se simulují další a počítá se p-hodnota
  – př. permutační test, atd.

Vybrané testy

- Test o střední hodnotě jednoho výběru
  – normální data – jednovýběrový t-test
  – nenormální data – znaménkový test, jednovýběrový Wilcoxonův test
- Test o střední hodnotě rozdílu dvou závislých výběrů
  – normální data – párový t-test
  – nenormální data – párový Wilcoxonův test
- Test o stř. hodnotě rozdílu dvou nezávislých výběrů
  – normální rozdělení, shodné rozptyly – dvouvýběrový t-test pro shodné rozptyly
  – normální rozdělení, různé rozpytyly – dvouvýběrový Welchův test (t-test pro různé rozptyly)
  – nenormální rozdělení – dvouvýběrový Wilcoxonův test
- Porovnání stř. hodnot více závislých výběrů
  – normální data – ANOVA pro opakovaná měření
  – nenormální data – Friedmanův test
- Porovnání stř. hodnot více nezávislých výběrů
  – normální rozdělení, shodné rozptyly – klasická ANOVA pro shodné rozptyly
  – normální rozdělení, různé rozpytyly – klasická ANOVA pro různé rozptyly
  – nenormální rozdělení – Kruskall-Wallisův test
- Test o nezávislosti dvou číselných proměnných
  – normální rozdělení – Pearsonův korelační koeficient
  – nenormální rozdělení – Spearmanův korelační koeficient
- Test o vztahu dvou kategorických proměnných
  – závislé proměnné, test symetrie – Mc Nemmarův test
  – test nezávislosti pro velká data – Chí-kvadrát test
  – test nezávislosti pro malá data – Fisherův test
  – test nezávislosti pro ordinální proměnné – Kendallův korelační koeficient

Dvouvýběrový test

Porovnává střední hodnotu dvou **nezávislých** výběrů

Testované hypozézy

- H_0 : střední hodnota X – střední hodnota $Y = 0$
- H_1 : střední hodnota X – střední hodnota $Y \neq 0, < 0, > 0$

Kontrolují se zde 2 předpoklady

- normalitu dat
- shodu rozptylů

A vybíráme jeden ze tří testů

- Dvouvýběrový t-test pro normální data a shodné rozptyly
- Welchův dvouvýběrový test pro normální data a různé rozptyly
- Wilcoxonův dvouvýběrový test pro data, která nemají normální rozdělení

Test shody dvou rozptylů

Test shody rozptylů se vyhodnocuje i u nenormálních dat.
Testované hypotézy

- H_0 : rozptyly se ve výběrech neliší
- H_1 : rozptyly se ve výběrech liší.

Testová statistika testu je

$$F = \frac{\mathrm{Var(X)}}{\mathrm{Var(Y)}} \sim F_{n_1-1, n_2-1}$$

a za platnosti H_0 má F-rozdělení o $n_1 - 1$ a $n_2 - 1$ stupních volnosti.

Dvouvýběrový t-test pro shodné rozptyly

Testová statistika tohoto testu má tvar

$$T = \frac{\overline{X} - \overline{Y} - \mu_0}{S} \sqrt{\frac{n_1 n_2}{n_1 + n_2}}$$

kde

$$S = \frac{1}{n_1 + n_2 - 2} \left(\sum_{i=1}^{n_1} (X_i - \overline{X})^2 + \sum_{i=1}^{n_2} (Y_i - \overline{Y})^2 \right)$$

a n_1, n_2 je rozsah výběru X, respektive Y. Za platnosti nulové hypotézy má tato statistika t-rozdělení o $n_1 + n_2 - 2$ stupních volnosti.

Welchův test

Testová statistika tohoto testu má tvar

$$T = \frac{\overline{X} - \overline{Y} - \mu_0}{\sqrt{\frac{\mathrm{Var(X)}}{n_1} + \frac{\mathrm{Var(Y)}}{n_2}}}$$

a za platnosti nulové hypotézy má t-rozdělení o ν stupních volnosti, kde

$$\nu = \frac{(\mathrm{Var(X)/n_1} + \mathrm{Var(Y)/n_2})^2}{\frac{(\mathrm{Var(X)/n_1})^2}{n_1 - 1} + \frac{(\mathrm{Var(Y)/n_2})^2}{n_2 - 1}}.$$

kritické hodnoty je možno odvodit, přestože ν není celé číslo.

Dvouvýběrový t-test

Příklad. *Ve výběru mám 222 jedenáctiletých dětí, z toho 159 hochů a 63 dívek. Průměrná hmotnost hochů vyšla 38.1 kg a u dívek 39.1. Směrodatná odchylka pro hochy vyšla 6.7 kg a pro dívky 7.1. Je hmotnost jedenáctiletých dětí v průměru stejná pro hochy jako pro dívky? Předpokládejme přibližně normální rozdělení dat.*

Test shody rozptylů

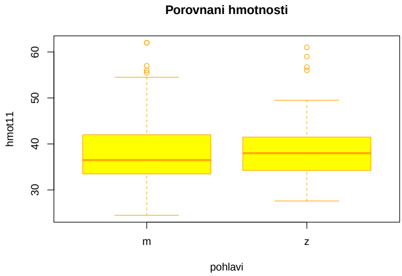
- testová statistika $F = \frac{\text{Var(X)}}{\text{Var(Y)}} = \frac{45.1}{50.6} = 0.89$
- p-hodnota $= 0.56 > \alpha = 0.05$
- nulovou hypotézu nezamítáme
- rozptyly ve skupinách jsou přibližně stejné a můžeme použít dvouvýběrový t-test pro shodné rozptyly

Dvouvýběrový t-test

Testujeme

- H_0 : hmotnost hochů a hmotnost dívek se neliší
  hmotnost hochů – hmotnost dívek = 0
- H_1 : hmotnost hochů a dívek se liší
  hmotnost hochů – hmotnost dívek $\neq$ 0

Grafické porovnání



Dvouvýběrový t-test

- testová statistika

$$T = \frac{\overline{X} - \overline{Y} - \mu_0}{S}\sqrt{\frac{n_1 n_2}{n_1 + n_2}} = \frac{38.1 - 39.1}{6.83}\sqrt{\frac{159 \times 63}{159 + 63}} = -1.001$$

- porovnáváme s kvantilem t-rozdělení $t_{220}(1 - 0.025) = 1.97$ (kvantil pro oboustrannou alternativu)
- testová statistika je v absolutní hodnotě menší než tento kvantil, tak nulovou hypotézu nezamítám.
- p-hodnota $= 0.3151 > \alpha = 0.05$
- **Závěr:** Na hladině významnosti 5% jsem neprokázala, že by se hmotnost jedenáctiletých hochů a dívek lišila.

Wilcoxonův dvouvýběrový test

Používá se pro porovnání dvou nezávislých výběrů, které nesplňují předpoklad normality.
Test je založen na pořadích hodnot sdruženého výběru.

Postup

- oba výběry se spojí do jednoho sdruženého
- sdružený výběr se uspořádá podle velikosti a každé pozorování dostane své pořadí
- pro oba výběry se vypočte součet pořadí a následně i průměrné pořadí
- pokud jsou si průměrná pořadí podobná, výběry se mezi sebou významně neliší

Wilcoxonův dvouvýběrový test

Technický výpočet: označme T_1, T_2 součet pořadí v prvním, respektive druhém výběru. Dále vypočteme

$$U_1 = n_1 n_2 + \frac{n_1(n_1+1)}{2} - T_1, U_2 = n_1 n_2 + \frac{n_2(n_2+1)}{2} - T_2,$$

kde n_1, n_2 jsou rozsahy jednotlivých výběrů. Přesný test porovnává hodnotu $min(U_1, U_2)$ s kritickou hodnotou. Asymptoticky platí, že

$$U_0 = \frac{U_1 - \frac{1}{2} n_1 n_2}{\sqrt{\frac{n_1 n_2}{12}(n_1 + n_2 + 1)}}$$

má za platnosti H_0 $N(0,1)$ rozdělení.

Wilcoxonův dvouvýběrový test

Příklad. *Chceme porovnat výsledky testů studentů v Ústí nad Labem a v Liberci. Studenti v Ústí dostali bodová ohodnocení 45, 79, 81, 56, 53, 77. Studenti v Liberci získali ohodnocení 76, 62, 84, 80, 41, 79, 66. Testujeme*

- H_0 : *Studenti v Ústí a v Liberci jsou stejní*
- H_1 : *Studenti v Ústí a v Liberci se liší.*

- *V prvním kroku srovnám všechny hodnoty do řady*
  41, 45, 53, 56, 62, 66, 76, 77, 79, 79, 80, 81, 84
- *následně jim přiřadím pořadí*
  1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9.5, 9.5, 11, 12, 13
- *pak vypočtu*
  $T_1 = 38.5$, $T_2 = 52.5$, $U_1 = 24.5$, $U_2 = 17.5$, $U_0 = 0.5$, $p = 0.6678$

P-hodnota $> \alpha$ *a tedy nezamítám nulovou hypotézu, neprokázal se rozdíl mezi studenty v Ústí a v Liberci.*

Chí-kvadrát test nezávislosti

Vztah dvou kategorických proměnných popisujeme **tabulkou absolutních četností.** Označme

- $X_1, \ldots, X_k$ hodnoty jedné kategorické proměnné
- $Y_1, \ldots, Y_l$ hodnoty druhé kategorické proměnné
- $n_{i,j}$ četnost současného výskytu znaků X_i, Y_j
- $n_{i.}$ marginální četnost znaku X_i
- $n_{.j}$ marginální četnost znaku Y_j
- n celkový počet pozorování

χ^2-test nezávislosti

Kontingenční tabulka absolutních četností má tvar

$$
\begin{array}{c|ccc|c}
 & Y_1 & \dots & Y_l & \\
\hline
X_1 & n_{1,1} & \dots & n_{1,l} & n_{1.} \\
\vdots & & \ddots & & \vdots \\
X_k & n_{k,1} & \dots & n_{k,l} & n_{k.} \\
\hline
 & n_{.1} & \dots & n_{.l} & n
\end{array}
$$

χ^2-test nezávislosti

Testované hypotézy

- H_0 : proměnné na sobě nezávisí
- H_1 : proměnné na sobě závisí

Test je založen na porovnání

- pozorovaných četností n_{ij}
- očekávaných četností $n_{i.}n_{.j}/n$
  vychází z definice nezávislosti $P(A \cap B) = P(A)P(B)$

Testová statistika

$$X^2 = \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{l}\frac{(pozorovane_{i,j} - ocekavane_{i,j})^2}{ocekavane_{i,j}} = \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{l}\frac{(n_{i,j} - n_{i.}n_{.j}/n)^2}{n_{i.}n_{.j}/n}$$

za platnosti H_0 má χ^2-rozdělení o $(k-1)(l-1)$ stupních volnosti.

Fisherův exaktní test

Test nezávislosti pro malá data

- když není splněn předpoklad χ^2-testu, tj. některá očekávaná četnost je menší než 5
- počítá přímo p-hodnotu ke konkrétní tabulce
- známý též jako **Fisherův faktoriálový test**

Pro čtyřpolní tabulku

	Y_1	Y_2	
X_1	n_{11}	n_{12}	$n_{1.}$
X_2	n_{21}	n_{22}	$n_{2.}$
	$n_{.1}$	$n_{.2}$	n

se p-hodnota vypočítá následujícím způsobem

$$p = \frac{n_{1.}!n_{2.}!n_{.1}!n_{.2}!}{n!n_{11}!n_{12}!n_{21}!n_{22}!}$$

Pro větší tabulky je test složitější.

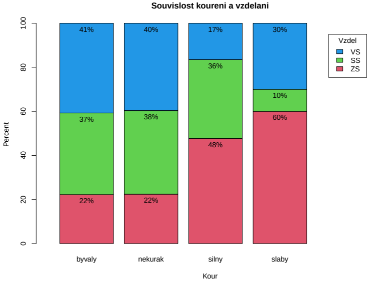
χ^2-test nezávislosti

Příklad. *U 204 mužů s jedním rizikovým faktorem ischemické choroby srdeční bylo zjišťováno vzdělání a kategorie kouření. Výsledky jsou shrnuty v následující tabulce absolutních četností. Souvisí spolu tyto dvě veličiny?*

	ZŠ	SŠ	VŠ
bývalý kuřák	6	10	11
nekuřák	13	22	23
slabý kuřák	52	39	18
silný kuřák	6	1	3

χ^2-test nezávislosti

Vztah dvou kategorických proměnných se zobrazuje pomocí sloupcového grafu



Můžeme zobrazovat pomocí řádkových nebo sloupcových procent.

χ^2-test nezávislosti

Testované hypotézy

- H_0 : kouření se vzděláním nesouvisí
- H_1 : kouření se vzděláním souvisí

Výsledky testu

- testová statistika χ^2 testu 21.286 $>$ 12.59, kvantil χ^2-rozdělení s 6 stupni volnosti
- p-hodnota 0.00163 $< \alpha =$ 0.05
- p-hodnotu Fisherova exaktního testu 0.00084 $< \alpha =$ 0.05
- některé očekávané četnosti jsou menší než 5 (není splněn předpoklad χ^2 testu)
- na základě Fisherova testu zamítáme nulovou hypotézu

Závěr: Prokázali jsme, že kouření se vzděláním souvisí.

Poměr šancí

Uvažujme dvouhodnotovou veličinu ve dvou populacích.

- např. sledujeme výskyt chřipky ve městě a na venkově

.

	Chřipku má	Chřipku nemá	
Město	n_{11}	n_{12}	$n_{1.}$
Venkov	n_{21}	n_{22}	$n_{2.}$
	$n_{.1}$	$n_{.2}$	n

Rozdíl mezi populacemi je možné popsat **poměrem šancí.**

- **šance** "mít chřipku proti nemít chřipku"

$$Odds = \frac{P(\text{má chřipku})}{P(\text{nemá chřipku})}$$

- poměr šancí je podíl šancí v obou populacích.

Poměr šancí

Definice **poměru šancí**

$$OR = \frac{n_{11}n_{22}}{n_{12}n_{21}}$$

Interpretace tohoto poměru říká, kolikrát je větší šance na chřipku ve městě než na venkově.

Testované hypotézy

- $H_0 : OR = 1$, šance jsou stejné
- $H_1 : OR \neq 1$, šance se v populacích liší

Testová statistika je rovna

$$Z = \frac{\ln(OR)}{\sqrt{\frac{1}{n_{11}} + \frac{1}{n_{12}} + \frac{1}{n_{21}} + \frac{1}{n_{22}}}}$$

a za platnosti nulové hypotézy má $N(0,1)$ rozdělení.

Poměr šancí

Příklad. *Uvažujme následující čtyřpolní tabulku*

	Chřipku má	*Chřipku nemá*	
Město	58	17	75
Venkov	32	30	62
	90	47	137

- *šance mít chřipku ve městě vychází* $58/17 = 3.41$
- *šance mít chřipku na venkově vychází* $32/30 = 1.07$
- *poměr šancí ve městě vs. na venkově vychází* $3.41/1.07 = 3.2$
  Ve městě je více než třikrát větší šance mít chřipku než na venkově.
- *testová statistika* $3.27 > 1.96$ *kritická hodnota*
- *p-hodnota* $0.001 < \alpha = 0.05$
- *zamítáme nulovou hypotézu*

Závěr: *Ve městě je významně větší šance dostat chřipku než na venkově.*

Statistický test

Výše uvedené testy měří statistickou významnost. Je ale tato významnost i skutečně zajímavá?

- p-hodnota statistického testu závisí na počtu pozorování
- málo pozorování dává "velkou" p-hodnotu
- hodně pozorování dává "malou" p-hodnotu
- statistické testy dobře fungují pro počet pozorování kolem 100 hodnot

Odhad počtu pozorování

Existuje vztah mezi počtem pozorování, hladinou významnosti a sílou testu.

Zvolme

- hladinu významnosti $\alpha = 0.05$
- sílu testu $1 - \beta = 0.9$
- typ testu: dvouvýběrový t-test
- minimální zajímavý rozdíl mezi skupinami $|\mu_1 - \mu_2| = 2$
- očekávanou variabilitu $\sigma = 5$

Optimální počet pozorování v každé skupině

$$n_1 = 2\left(\frac{z(1-\alpha) + z(1-\beta)}{\frac{|\mu_1 - \mu_2|}{\sigma}}\right)^2 = 2\left(\frac{1.96 + 1.28}{2/5}\right)^2 = 131.4$$

Odhad počtu pozorování

- optimální je stejný počet pozorování v obou skupinách
- pokud očekáváte, že budete používat Wilcoxonův dvouvýběrový test, přidejte navíc 15% pozorování
- počet pozorování je možné odhadnout i pro požadovanou délku intervalu spolehlivosti

Tabulka analýzy rozptylu

- používá se pro porovnání variability vysvětlené a variability nevysvětlené
- nejčastěji v ANOVě (porovnání střední hodnoty v několika nezávislých výběrech)
- označme

$$
\begin{aligned}
SST &= \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_i} (X_{ij} - \overline{X}_{..})^2 \\
SSA &= \sum_{i=1}^{k} n_i (\overline{X}_{i.} - \overline{X}_{..})^2 \\
SSe &= \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_i} (X_{ij} - \overline{X}_{i.})^2
\end{aligned}
$$

Tabulka analýzy rozptylu

	Součty čtverců	Stupně volnosti	Průměrné čtverce	Testová statistika	p-hodnota
Faktor A	SSA	$dfA = k - 1$	$MSA = \frac{SSA}{dfA}$	$F = MSA/MSe$	p
Chyba e	SSe	$dfe = n - k$	$MSe = \frac{SSe}{dfe}$		
Celkem	SST	$dft = n - 1$			

Za platnosti nulové hypotézy má testová statistika F-rozdělení o $k - 1$ a $n - k$ stupních volnosti.

Věcná významnost

Pro posouzení věcné významnosti jsou vytvořeny ukazatele, které pomohou určit, zda zjištěná statistická významnost je skutečně zajímavá. Tyto ukazatele se převážně používají u velkých vzorků dat.

Velké vzorky můžeme získat např. v rámci metaanalýzy, tj. kombinace několika výzkumů na stejné téma.

Porovnání dvou výběrů

- **Cohenovo** d

$$d = \frac{\overline{X} - \overline{Y}}{\sqrt{S^2}}, \qquad S^2 = \frac{n_1 S_1^2 + n_2 S_2^2}{n_1 + n_2}$$

  do 0.5 malý efekt, 0.5-0.8 střední efekt, nad 0.8 velký efekt

- **Hedgesovo** g

$$g = \frac{\overline{X} - \overline{Y}}{\sqrt{MSe}},$$

  MSe jsou residuální "průměrné čtverce" z tabulky analýzy rozptylu
  do 0.5 malý efekt, 0.5-0.8 střední efekt, nad 0.8 velký efekt

- **Glassovo** δ

$$\delta = \frac{\overline{X} - \overline{Y}}{\sqrt{S_k^2}}$$

  S_k^2 je rozptyl kontrolní skupiny
  do 0.5 malý efekt, 0.5-0.8 střední efekt, nad 0.8 velký efekt

Porovnání více výběrů

- **Fisherovo** η^2

$$\eta^2 = \frac{SSA}{SST}$$

  kde SSA a SST jsou součty čtverců z tabulky analýzy rozptylu
  procento vysvětlené variability

- **Haysova** ω^2

$$\omega^2 = \frac{SSA - (k-1)MSe}{SST + MSe}$$

  kde SSA, SST a MSe jsou součty čtverců/průměrné čtverce z tabulky analýzy rozptylu
  procento vysvětlené variability

Vztah dvou kategorických proměnných

- **Cramerovo** ϕ

$$\phi = \sqrt{\frac{\chi^2}{n}} = \sqrt{\sum_{i=1}^{k} \frac{(p_i - p_{0i})^2}{p_{0i}}}$$

kde χ^2 je testová statistika χ^2-testu
do 0.29 malý efekt, 0.3-0.49 střední efekt, nad 0.5 velký efekt

- **Cramerovo** V

$$V = \sqrt{\frac{\chi^2}{n(k-1)}}$$

hodnota od 0 do 1 chovající se přibližně jako korelační koeficient

Vztah dvou číselných proměnných

- **korelační koeficient** r

$$\mathrm{Cor}(X,Y) = \frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})(Y_i - \overline{Y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2 \sum_{i=1}^{n}(Y_i - \overline{Y})^2}}$$

do 0.3 malý efekt, 0.3-0.7 střední efekt, nad 0.7 velký efekt

- **koeficient determinace** R^2

$$R^2 = \mathrm{Cor}^2(X,Y) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \widehat{Y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \overline{Y}_i)^2}$$

do 0.01 malý efekt, 0.01-0.25 střední efekt, nad 0.25 velký efekt
procento variability vysvětlené modelem

Základy mnohorozměrné statistiky

Většinu základních statistických metod lze zobecnit na mnohorozměrnou situaci.
Předpokládejme, že nemáme jednu proměnnou X, ale vektor proměnných $\mathbf{X} = (X_1, X_2, \ldots, X_k)^T$.

Příklad. *Měříme několik fyzických parametrů jedince: výška, váha, krevní tlak, vitální kapacitu plic, atd. Každý žák na vysvědčení dostane známku z několika předmětů: čeština, matematika, zeměpis, přírodopis, atd.*

- Namísto jedné střední hodnoty μ a jednoho rozptylu σ^2 máme vektor středních hodnot $\mu = (\mu_1, \ldots, \mu_k)^T$ a varianční matici $\Sigma = (\sigma_{ij})$
- odhadujeme je pomocí vektoru průměrů $\overline{\mathbf{X}} = (\overline{X}_1, \ldots, \overline{X}_k)^T$ a maticí $\mathbf{S} = (\mathbf{s_{ij}})$, kde $s_{ij} = \mathrm{cov}(X_i, X_j)$ pro $i \neq j$ a $s_{ii} = \mathrm{Var}(X_i)$

Měření vzdálenosti

- **Eukleidovská vzdálenost:**

$$d(\mathbf{X},\mathbf{Y}) = ||\mathbf{X}_i - \mathbf{Y}_i|| = \sqrt{(\mathbf{X}-\mathbf{Y})^T(\mathbf{X}-\mathbf{Y})} = \sqrt{\sum_{i=1}^{k}(X_i - Y_i)^2}$$

nevýhoda: všechny složky přispívají do vzdálenosti stejnou měrou a není zohledněn jejich vzájemný vztah

- **Mahalanobisova vzdálenost:**

$$d(\mathbf{X},\mathbf{Y}) = \sqrt{(\mathbf{X}-\mathbf{Y})^T\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{X}-\mathbf{Y})}$$

pro nezávislé vektory dostáváme

$$d(\mathbf{X},\mathbf{Y}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{k}\frac{(X_i - Y_i)^2}{s_{ii}^2}}$$

kde $\mathbf{S} = \mathrm{cov}(\mathbf{X},\mathbf{Y})$ je kovarianční matice vektorů $\mathbf{X}$ a $\mathbf{Y}$

Zobecnění jednorozměrných metod

- Dvouvýběrový test $\Rightarrow$ **Hotellingův test**
- Analýza rozptylu (ANOVA) $\Rightarrow$ **MANOVA**
- Korelační koeficient $\Rightarrow$ **Kanonické korelace**
- Lineární regrese $\Rightarrow$ **Mnohorozměrná lineární regrese**, kde závisle proměnná má více složek.

Hotellingův test

Porovnávám střední hodnotu náhodného vektoru ve dvou populacích. Předpokládám nezávislá měření. Testuji

- H_0 : vektory středních hodnot se rovnají
- H_1 : vektory středních hodnot se liší

Testová statistika má tvar

$$\begin{aligned} T^2 &= \frac{n_1 n_2}{n_1 + n_2}(\overline{\mathbf{X}} - \overline{\mathbf{Y}})^T \mathbf{S}^{-1}(\overline{\mathbf{X}} - \overline{\mathbf{Y}}) \\ \mathbf{S} &= \frac{(n_1 - 1)\mathbf{S}_1 + (n_2 - 1)\mathbf{S}_2}{n_1 + n_2 - 2} \end{aligned}$$

Testová statistika má za platnosti H_0 Hotellingovo T^2-rozdělení s k a $n_1 + n_2 - 2$ stupni volnosti. Toto lze převést na F-rozdělení: $T^2 \sim \frac{(n-1)k}{n-k} F_{k,n-k}$.
Obdobně lze zkonstruovat i testovou statistiku pro jednovýběrový test.

MANOVA

Při srovnání více nezávislých výběrů se opět testují hypotézy

- H_0 : vektory středních hodnot se rovnají
- H_1 : vektory středních hodnot se liší

Stejně jako u jednorozměrné analýzy rozptylu, i ve vícerozměrné verzi je vyhodnocení hypotéz založeno na porovnání variability vysvětlené a nevysvětlené. Existuje několik testových statistik, kde všechny pracují s maticemi

$$\mathbf{W} = \sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{n_i} (\mathbf{Y}_{ij} - \overline{\mathbf{Y}}_i)^T (\mathbf{Y}_{ij} - \overline{\mathbf{Y}}_i)$$

$$\mathbf{B} = \sum_{i=1}^{p} n_i (\overline{\mathbf{Y}}_i - \overline{\mathbf{Y}})^T (\overline{\mathbf{Y}}_i - \overline{\mathbf{Y}})$$

kde p značí počet výběrů a $\overline{\mathbf{Y}}_i$ průměr i-tého výběru.

MANOVA

Testové statistiky pro MANOVu.

- **Wilkovo lambda**

$$\Lambda_W = \det\left(\frac{\mathbf{W}}{\mathbf{W}+\mathbf{B}}\right)$$

- **Pillayova stopa**

$$\Lambda_P = \mathbf{tr}\left(\frac{\mathbf{B}}{\mathbf{W}+\mathbf{B}}\right)$$

- **Hotellingovo lambda**

$$\Lambda_H = \mathbf{tr}\left(\frac{\mathbf{B}}{\mathbf{W}}\right)$$

při porovnání dvou výběrů se všechny tyto statistiky smrští na Hotellingův dvouvýběrový test.

Metoda hlavních komponent (PCA)

Při různých výzkumech bývá často zjišťováno velké množství proměnných, ze kterých má být následně zjištěna nějaká informace. Často bývají mnohé z nich vzájemně korelované a dávají tedy informaci podobnou, ne-li totožnou. Aby bylo možné nějakou informaci z proměnných získat, je často potřeba snížit jejich počet a zabývat se jen těmi skutečně zásadními.

Metoda hlavních komponent (PCA)

Principal Component Analysis transformuje vstupní data tak, aby bylo možné snížit jejich dimenzi / počet. Využívá se přepočet

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}^T\mathbf{P}$$

kde $\mathbf{X}$ je centrovavá matice vstupních hodnot (centrování = odečet průměru), $\mathbf{Y}$ je výstupní - cílová matice a $\mathbf{P}$ je matice transformačních vektorů. Matici $\mathbf{P}$ získáme pomocí rozkladu korelační matice vstupních dat $\mathbf{C}$

$$\mathbf{C} = \mathbf{P}\Lambda\mathbf{P}^T$$

Λ je pak matice vlastních čísel matice $\mathbf{C}$ a matice $\mathbf{P}$ pak obsahuje vlastní vektory matice $\mathbf{P}$.

Metoda hlavních komponent (PCA)

Výsledná matice hlavních komponent **Y** má následující vlastnosti

- její vektory jsou vzájemně kolmé (nezávislé)
- součet koeficientů lineárních transformací u každé komponenty je 1
- řadí se podle variability: od vektoru s největší variabilitou k vektoru s nejnižší variabilitou
- obsahuje veškerou informaci, kterou obsahovala původní data

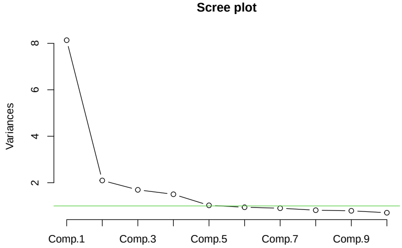
Intuitivní představa PCA

Celý postup si můžeme představit následovně

- představíme si mnohozměrná data v prostoru
- daty proložíme vektor ve směru s největší variabilitou
- tak získáme první hlavní komponentu (PC)
- hledáme vektor, který by byl k prvnímu kolmý a opět byl ve směru s největší variabilitou
- získáme druhou hlavní komponentu
- hledáme vektor, který by byl kolmý k prvním dvěma a byl ve směru s největší variabilitou
- získáme třetí hlavní komponentu
- poslední dva kroky opakujeme, dokud máme body ve volném prostoru

Metoda hlavních komponent (PCA)

Vstupní data poté reprezentujeme menším množstvím nových proměnných (**hlavních komponent**) tak, abychom ztratili co nejméně informace / variability. Jejich optimální počet je počet vlastních čísel korelační matice větších než 1. Graficky znázorněno pomocí tzv. "*Scree plot*".



Graf zobrazující hodnoty pro prvních 10 hlavních komponent získaných z původních 24 proměnných. Optimální počet hlavních komponent je 5.

Faktorová analýza

Nevýhodou hlavních komponent je, že nemají přirozenou interpretaci. Pokud tedy chceme získat menší počet proměnných, které jsou interpretovatelné, používá se **faktorová analýza**.

Hlavní myšlenka faktorové analýzy pochází z psychologie:

- na každého působí k neměřitelných faktorů
- podle toho, jak na nás působí, my reagujeme
- podle reakcí na p podnětů se snažíme identifikovat původní faktory

Faktorová analýza

Příklad. *Děti nosí ze školy vysvědčení. Podle známek, pak lze identifikovat dvě skupiny studentů, jedna z nich má dobré známky v předmětech matematika, fyzika, přírodopis, zeměpis, chemie, druhá má dobré známky v předmětech čeština, angličtina, dějepis, občanská výchova. Faktory, které na ně působí jsou pak přírodní vědy a humanitní obory.*

Faktorová analýza

Vycházíme z rovnice obdobné jako u analýzy hlavních komponent

$$\mathbf{X} = \mathbf{LF} + \varepsilon$$

kde **X** je centrovaná matice naměřených dat, **L** jsou tzv. *loadings*, **F** jsou hledané faktory a ε jsou náhodné chyby.

Pro faktory musí platit

- **F** a ε jsou nezávislé
- $\mathrm{E}(\mathbf{F}) = 0$ a $\mathrm{Cov}(\mathbf{F}) = \mathbf{I}$, kde **I** je jednotková matice, tedy jednotlivé faktory mají nulovou střední hodnotu, jednotkový rozptyl a jsou nezávislé
- $\mathrm{E}(\varepsilon) = 0$ a $\mathrm{Cov}(\varepsilon) = \sigma^2\mathbf{I}$,
tedy náhodné chyby jsou nezávislé, stejně rozdělené s nulovou střednín hodnotou a konstantním rozptylem σ^2

Faktorová analýza

Dále musí platit

- $\mathrm{Cov}(\mathbf{X}) = \mathbf{L}\mathbf{L}' + \sigma^2\mathbf{I}$, tedy
  - $\mathrm{Var}(X_i) = \ell_{i1}^2 + \ell_{i2}^2 + \ldots + \ell_{im}^2 + \sigma^2$
  - $\mathrm{Cov}(X_i, X_j) = \ell_{i1}\ell_{j1} + \ell_{i2}\ell_{j2} + \ldots + \ell_{im}\ell_{jm}$
- $\mathrm{Cov}(\mathbf{X}, \mathbf{F}) = \mathbf{L}$, tedy $\mathrm{Cov}(X_i, F_j) = \ell_{ij}$

kde ℓ_{ij} jsou prvky matice **L**.
Na základě výše uvedených vztahů lze matici loadingů **L** určit jednoznačně až na přenásobení ortogonální maticí **T**. Toto přenásobení se dá dále využít jako *rotace* k hledání nejlépe interpretovatelných faktorů.

Faktorová analýza

Hodnoty loadingů hledáme obdobně jako hlavní komponenty, tedy rozkladem korelační matice naměřených proměnných $\mathbf{X}$. Abychom dostali interpretovatelné faktory, využívá se varimax rotace, což je taková ortogonální rotační matice $\mathbf{T}$ která dá jednotlivým proměnným co možná nejrozdílnější loadings. Pro další zpracování se používají i tzv. faktorové skóry, což jsou odhadnuté hodnoty faktorů přiřazené jednotlivým pozorováním. Ty můžeme spočítat např. pomocí násedujícího vztahu

$$\hat{\mathbf{f}}_j = (\hat{\mathbf{L}}(\hat{\sigma}^2\mathbf{I})^{-1}\hat{\mathbf{L}})^{-1}\hat{\mathbf{L}}'(\hat{\sigma}^2\mathbf{I})^{-1}(x_j - \overline{x})$$

Diskriminační analýza

Máme mnohorozměrná data z několika různých populací a chceme najít nejlepší možný způsob, jak na základě dat rozlišit populace mezi sebou.

Příklad. *Uvažujme pacienty s různými nemocemi a mějme ke každému skupinu lékařských testů. Chceme pak najít způsob, jak zařadit pacienta do skupiny jen na základě výsledků testů*

Nabízející se **postup**

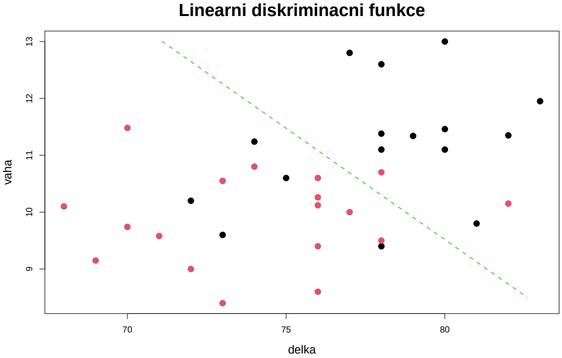
- pro každou populaci spočítáme průměrný vektor
- nového jedince zařadíme do populace, která bude mít svůj průměrný vektor nejblíže k jeho hodnotám

Jak dobré je určené rozhodovací pravidlo zjistíme na základě klasifikace, tj. zjištění, kolik jednotek jsme přiřadili správně a kolik chybně.

Diskriminační analýza

Výše uvedený "nabízející se"postup vede na **lineární diskriminační analýzu**.

Uvažujme dvě populace ve dvourozměrném případě. Lineádní diskriminační analýza je odděluje přímkou



Diskriminační analýza

Diskriminační pravidlo pro dvě populace a obecný počet proměnných.

Označme průměrné vektory v populacích $\overline{\mathbf{X}}_{1,n}, \overline{\mathbf{X}}_{2,n}$. Pro měření vzdáleností využijeme Mahalanobisovu vzdálenost $d^2(\mathbf{X}, \mathbf{Y})$. Rozhodovací pravidlo pak zní. Pokud

$$d^2(\mathbf{X}, \overline{\mathbf{X}}_{1,n}) < d^2(\mathbf{X}, \overline{\mathbf{X}}_{2,n}),$$

přiřadíme pozorování k první populaci, v opačném případě ke druhé. Aritmetickými operacemi lze získat vektor

$$\mathbf{b} = \mathbf{S}^{-1}(\overline{\mathbf{X}}_{1,n} - \overline{\mathbf{X}}_{2,n}),$$

kde $\mathbf{S}$ je kombinovaná výběrová varianční matice obou populací

$$\mathbf{S} = \frac{n_1 - 1}{(n_1 - 1) + (n_2 - 1)}\mathbf{S}_1 + \frac{n_2 - 1}{(n_1 - 1) + (n_2 - 1)}\mathbf{S}_2$$

a n_1, n_2 jsou velikosti výběrů z obou populací a $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2$ jsou výběrové varianční matice obou populací.

Diskriminační analýza

Rozhodovací pravidlo potom zní: pokud

$$\mathbf{b}^T\mathbf{X} - \mathbf{b}^T\frac{\overline{\mathbf{X}}_{1,n} + \overline{\mathbf{X}}_{2,n}}{2} > 0$$

pak pozorování patří do první populace, v opačném případě do druhé. Toto pravidlo je možné také přepsat v nevektorové podobě jako

$$\sum_{i=1}^{k} c_i X_i - c_0 > 0$$

kde koeficienty c_0, c_i lze jednoznačně odvodit z vektoru **b**. Z tohoto zápisu je také zřejmé, že rozhodovací pravidlo je v tomto případě přímka.

Poznámka: Výše uvedené rozhodovací pravidlo je možné odvodit také metodou maximální věrohodnosti z hustoty mnohorozměrného normálního rozdělení

Diskriminační analýza

Vzniklou přímku je možné dále "posouvat" přidáním dalších podmínek:

- podmínky na apriorní pravděpodobnosti obou populací, označme je π_1 a π_2
  využíváme, když je výskyt jedné populace je výrazně častější než je tomu u populace druhé
- penalizace pro špatné zařazení jednotky, označme
  $c(2|1)$ penalizaci za špatné přířazení jednotky z první populace
  $c(1|2)$ penalizaci za špatné přířazení jednotky z druhé populace

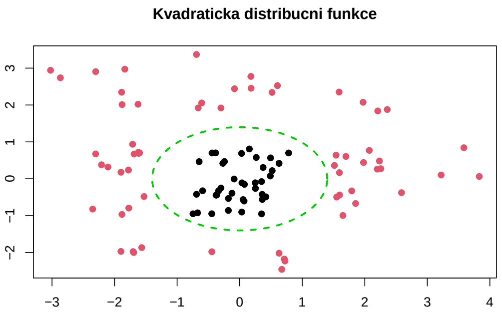
Rozhodovací pravidlo se změní na

$$\mathbf{b}^T\mathbf{X} - \mathbf{b}^T\frac{\overline{\mathbf{X}}_{1,n} + \overline{\mathbf{X}}_{2,n}}{2} + \ln\left(\frac{c(2|1)}{c(1|2)}\frac{\pi_1}{\pi_2}\right) > 0$$

Diskriminační analýza

Kvadratická diskriminační analýza

Někdy přímka pro oddělení populací nestačí a je potřeba použít křivku



Diskriminační analýza

Diskriminační pravidlo pro dvě populace pak vypadá následovně. Pokud

$$\frac{1}{2}\mathbf{X}'(\mathbf{S}_1^{-1} - \mathbf{S}_2^{-1})\mathbf{X} - (\overline{\mathbf{X}}_{1,n}\mathbf{S}_1^{-1} - \overline{\mathbf{X}}_{2,n}\mathbf{S}_2^{-1})\mathbf{X} + k + \ln\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\frac{\pi_2}{\pi_1}\right) \leq 0$$

kde

$$k = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{|\mathbf{S}_1|}{|\mathbf{S}_2|}\right) + \frac{1}{2}(\overline{\mathbf{X}}'_{1,n}\mathbf{S}_1^{-1}\overline{\mathbf{X}}_{1,n} - \overline{\mathbf{X}}'_{2,n}\mathbf{S}_2^{-1}\overline{\mathbf{X}}_{2,n})$$

pak nového jedince přiřadíme k první populaci, v opačném případě ke druhé

Shluková analýza – hierarchické metody

Mějme mnohorozměrná data a snažme se v nich najít podobnosti, abychom identifikovali různé skupiny pozorování v datech. Cílem je

- najít optimální počet skupin, tak aby mezi nimi byly rozdíly co možná největší, a v rámci skupiny, aby byly hodnoty co nejpodobnější,
- popsat skupiny tak, aby se mezi nimi dalo rozlišovat

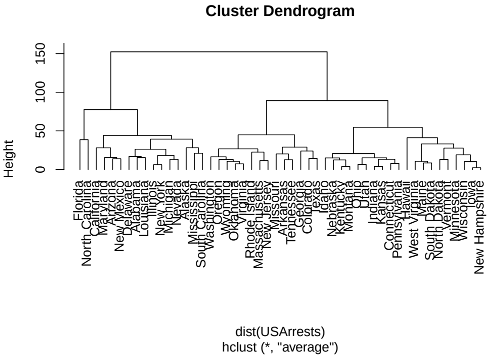
Hierarchické shlukování měří vzdálenosti mezi jednotlivými pozorováními např. euklidovskou vzdáleností a shlukuje k sobě jednotky, co jsou si nejblíže. Vzdálenost skupin se dá měřit trojím způsobem

- vzdálenost středů (průměrů) – **average linkage**
- vzdálenost nejbližších bodů – **single linkage**
- vzdálenost nejvzdálenějších bodů – **complete linkage**

Complete linkage dává většinou nejlepší výsledky.

Shluková analýza – hierarchické metody

V této analýze nejprve považujeme každé jedno pozorování za samostatnou skupinu a postupně tyto skupiny spojujeme. Graficky se tento proces znázorňuje pomocí **dendrogramu**.



Opticky pak hledáme, kde ukončit shlukování, tj. kolik skupin je optimálních

Shluková analýza – K-means

Nevýhodou hierarchické metody je, že odlehlé hodnoty v ní často tvoří samostatné skupiny. Alternativou je použít tzv. **K-means** shlukování. Postup je následující

- nejprve se zvolí počet skupin p
- náhodně vybereme p bodů v mnohorozměrném prostoru jako středy těchto skupin
- zařadíme prvek, který je nejbližší nějakému středu k této skupině
- středy se přepočítají
- poslední dva body se opakují, dokud nejsou rozřazeny všechny prvky

Nevýhodou tohoto postupu je, že pokud v datech nejsou ednoznačné skupiny, pak rozřazování dopadne jinak při jiné volbě náhodných středů.

Kanonické korelace

Máme dvě skupiny proměnných $\mathbf{X}$ a $\mathbf{Y}$ měřených na stejných jedincích a chceme zjistit, zda mezi těmito skupinami je nějaký vztah, případně jaký.

Příklad. *Uvažujme dvě různé skupiny lékařských vyšetření a hodnotíme, zda obě tyto skupiny měří to samé, nebo ne.*

Pro každou skupinu proměnných pak hledáme jejich vhodnou lineární kombinaci

$$U = \mathbf{a}^T\mathbf{X}, \qquad V = \mathbf{b}^T\mathbf{Y}$$

takovou, že má mezi sebou maximální korelaci.

Kanonické korelace

Označme

$$\begin{aligned} E(\mathbf{X}) = & \quad \mu_1, \qquad & \mathrm{Cov}(\mathbf{X}) &= \Sigma_{11} \\ E(\mathbf{Y}) = & \quad \mu_2, \qquad & \mathrm{Cov}(\mathbf{Y}) &= \Sigma_{22} \\ \mathrm{Cov}(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) = & \quad \Sigma_{12} = \Sigma_{21}' \end{aligned}$$

Pak víme, že

$$\begin{aligned} \mathrm{Var}(U) &= \mathbf{a}'\Sigma_{11}\mathbf{a} \\ \mathrm{Var}(V) &= \mathbf{b}'\Sigma_{22}\mathbf{b} \\ \mathrm{Cov}(U, V) &= \mathbf{a}'\Sigma_{12}\mathbf{b} \\ \mathrm{Cor}(U, V) &= \frac{\mathbf{a}'\Sigma_{12}\mathbf{b}}{\sqrt{\mathbf{a}'\Sigma_{11}\mathbf{a}}\sqrt{\mathbf{b}'\Sigma_{22}\mathbf{b}}} \end{aligned}$$

Kanonické korelace

Hledejme k dvojic proměnných U_i, V_i, kde k je počet proměnných v menší skupině. Pro tyto proměnné nechť platí

- proměnné U_1, V_1 mají obě rozptyl roven jedné a maximalizují vzájemnou korelaci
- proměnné U_2, V_2 mají obě rozptyl roven jedné, jsou nekorelované s proměnnými U_1, V_1 a maximalizují vzájemnou korelaci
- $\dots$
- proměnné U_k, V_k mají obě rozptyl roven jedné, jsou nekorelované s proměnnými $U_1, \dots, U_{k-1}, V_1, \dots, V_{k-1}$ a maximalizují vzájemnou korelaci.

Takovéto páry proměnných U_i, V_i se nazývají kanonické proměnné a jejich vzájemné korelace potom **kanonické korelace**.
Platí

$$\mathrm{Cor}(\mathrm{U}_1, \mathrm{V}_) \geq \mathrm{Cor}(\mathrm{U}_2, \mathrm{V}_2) \geq \cdots \geq \mathrm{Cor}(\mathrm{U}_\mathrm{k}, \mathrm{V}_\mathrm{k})$$

Kanonické korelace

Matematická konstrukce kanonických proměnných. Lineární koeficienty **a** a **b** lze určit jako

- $\mathbf{a} = \mathbf{e}\mathbf{S}_{11}^{-1/2}$, kde **e** jsou vlastní vektory matice $\mathbf{S}_{11}^{-1/2}\mathbf{S}_{12}\mathbf{S}_{22}^{-1}\mathbf{S}_{21}\mathbf{S}_{11}^{-1/2}$
- $\mathbf{b} = \mathbf{f}\mathbf{S}_{22}^{-1/2}$, kde **f** jsou vlastní vektory matice $\mathbf{S}_{22}^{-1/2}\mathbf{S}_{21}\mathbf{S}_{11}^{-1}\mathbf{S}_{12}\mathbf{S}_{22}^{-1/2}$
- matice **S** jsou odhady matic Σ.

Kanonické korelace

Pokud jsou skupiny proměnných **X** a **Y** nezávislé, pak jejich teoretické kovarianční matice Σ_{12} a Σ_{21} jsou nulové. Jak však pomocí kanonických korelací tuto nezávislost otestovat? Můžeme testovat několik různých hypotéz

- H_0 : všechny kanonické korelace jsou nulové, tedy $\Sigma_{12} = 0$
- H_0 : druhá a další kanonické korelace jsou nulové a první je nenulová, tedy $\rho_2 = \cdots = \rho_k = 0$
- H_0 : třetí a další kanonické korelace jsou nulové a první dvě jsou nenulové, tedy $\rho_3 = \cdots = \rho_k = 0$
- atd.

kde ρ_i je i-tá kanonická korelace.

Kanonické korelace

Testová statistika první nulové hypotézy má tvar

$$n \ln \left(\frac{|\mathbf{S}_{11}||\mathbf{S}_{22}|}{|\mathbf{S}|} \right) = -n \ln \prod_{i=1}^{k} (1 - \hat{\rho}_i^2)$$

kde $\mathbf{S}$ je matice složená z $\mathbf{S}_{11}, \mathbf{S}_{12}, \mathbf{S}_{21}, \mathbf{S}_{22}$. Tato statistika má za platnosti H_0 asymptoticky χ^2 rozdělení o kp stupních volnosti, kde p je počet proměnných ve větší skupině.

Testová statistika dalších testů má tvar

$$-(n - 1 - \frac{1}{2}(k + p + 1)) \ln \prod_{i=m+1}^{k} (1 - \hat{\rho}_i^2)$$

a za platnosti H_0 má asymptoticky χ^2 rozdělení o $(k - m)(p - m)$ stupních volnosti. m je zde počet kanonických korelací, které nechceme testovat.

Metoda maximální věrohodnosti

Způsob odhadu parametru určitého rozdělení.

- označme odhadovaný parmetr θ
- mějme naměřené hodnoty $X_1, X_2 \ldots, X_n$ z rozdělení s hustotou $f(x, \theta)$
- chceme takové $\hat{\theta}$, aby pravděpodobnost, že hodnoty X_i pochází z rozdělení $f(x, \hat{\theta})$, byla maximální
- potřebujeme konkrétní specifikaci pravděpodobnostního rozdělení $f(x, \theta)$

Metoda maximální věrohodnosti

Naměřené hodnoty $X_1, \dots, X_n$ jsou nezávislé. Jejich sdružená hustota je tedy rovna

$$f(x_1, \dots, x_n|\theta) = \prod_{i=1}^{n} f(x_i|\theta)$$

větší hodnota této funkce vyjadřuje větší shodu pozorovaných hodnot s předpokládaným rozdělením.

Odhad parametru θ získáme maximalizací této funkce přes θ

$$\hat{\theta} = \arg\max_{\theta \in \Theta} f(x_1, \dots, x_n|\theta)$$

kde Θ je prostor všech možných hodnot parametru.

Metoda maximální věrohodnosti

Uvažujeme-li tuto funkci jako funkci parametru θ, nazýváme ji **věrohodnostní funkce** a $\hat{\theta}$ **maximálně věrohodným odhadem.**
Častěji se pracuje s logaritmickou věrohodnostní funkcí

$$\ell(\theta|x_1, \dots, x_n) = \ln L(\theta|x_1, \dots, x_n) = \ln \prod_{i=1}^{n} f(x_i|\theta) = \sum_{i=1}^{n} \ln f(x_i|\theta)$$

Tuto funkci pad derivujeme podle θ a položíme rovnu nule.

Metoda používaná pro odhad parametrů v zobecněné lineární a nelineární regresi.

Metoda maximální věrohodnosti

Příklad. *Hledejme maximálně věrohodný odhad parametru λ z poissonova rozdělení, které má hustotu $f(x|\lambda) = \frac{e^{-\lambda}\lambda^{x_i}}{x_i!}$. Logaritmus věrohodnostní funkce pak má tvar*

$$
\begin{aligned}
\ell(\theta|x_1,\ldots,x_n) &= \ln\prod_{i=1}^{n}\frac{e^{-\lambda}\lambda^{x_i}}{x_i!} = \ln\frac{e^{-\lambda}\lambda^{\sum_{i=1}^{n}x_i}}{\prod_{i=1}^{n}x_i!} \\
&= \sum_{i=1}^{n}x_i\ln\lambda - n\lambda - \ln(\prod_{i=1}^{n}x_i!)
\end{aligned}
$$

derivací podle λ dostanu

$$\frac{d\ell}{d\lambda} = \frac{\sum_{i=1}^{n}x_i}{\lambda} - n$$

a tedy $\hat{\lambda} = \frac{\sum_{i=1}^{n}x_i}{n}$

Dodatky k regresním modelům

Uvažujme model lineární regrese

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \cdots + \beta_k X_{ki} + e_i$$

kde

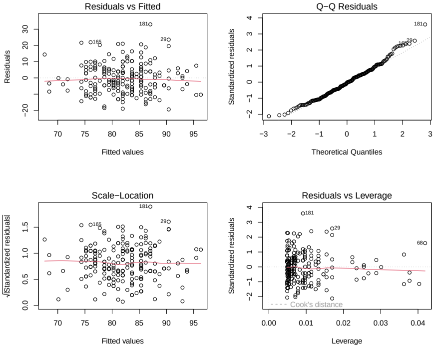
- Y_i jsou hodnoty závisle proměnné
- $X_{1i}, \ldots, X_{ki}$ jsou hodnoty nezávisle proměnných $X_1, \ldots, X_k$
- $\beta_0, \ldots, \beta_k$ jsou regresní koeficienty
- e_i jsou náhodné chyby

Předpoklady modelu lineární regrese

- $e_i \sim iid\ \mathrm{N}(0, \sigma^2)$ jsou nezávislé, stejně rozdělené náhodné veličiny s normálním rozdělením, nulovou střední hodnotou a konstantním rozptylem
- $X_1, \ldots, X_k$ jsou vzájemně nezávislé proměnné
- mezi závisle proměnnou Y a nezávisle proměnnými X je lineární vztah
- v datech nejsou vlivná pozorování

Dodatky k regresním modelům

V R-ku máme k dispozici diagnostické grafy



Dále test normality, test homoskedasticity, test nekorelovanosti residuí, test multikolinearity, Cookovu vzdálenost.

Dodatky k regresním modelům

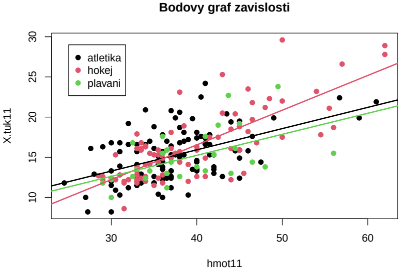
Závislost na kategorické proměnné

- do modelu lze vkládat i kategorické regresory
- závislost na nich se modeluje pomocí dummy variables
  - $Z_1 = 1 \ldots$ když nastane 1. kategorie a $Z_1 = 0 \ldots$ jinak
  - $Z_2 = 1 \ldots$ když nastane 2. kategorie a $Z_1 = 0 \ldots$ jinak
  - $\vdots$
  - $Z_{k-1} = 1 \ldots$ když nastane (k-1). kategorie a $Z_1 = 0 \ldots$ jinak
    kde k je počet kategorií
  - proč chybí k-tá proměnná?
- v modelu se testuje, jak se která kategorie liší od referenční

Dodatky k regresním modelům

Interakce

Jak se nezávisle proměnné ovlivňují při současném vlivu na proměnnou závislou



- závislost procenta tuku na hmotnosti je stejná u atletiky a plavání – není interakce
- závislost procenta tuku na hmotnosti se u hokejistů liší od

Dodatky k regresním modelům

Kroková regrese

Hledáme optimální regresní model

- backward – udělá se co nejsložitější model a postupně se z něj ubírají nevýznamné proměnné
  vždy se ubere proměnná s nejmenším vlivem (nejvyšší p-hodnotou, která optimalizuje AIC)
  končím, když mám v modelu jen významné proměnné
- forward – do modelu bez nezávislých proměnných se postupně po jedné přidávají
  vždy se přidá proměnná s největším vlivem (nejnižší p-hodnotou, která optimalizuje AIC)
  končím, když nemohu přidat žádnou významnou proměnnou
- both sided – kombinuje obě výše zmíněné
  v každém kroku zkusím jednu proměnnou přidat, ale také ubrat (optimalizace AIC)

Dodatky k regresním modelům

Intervaly spolehlivosti

- pro regresní koeficienty

$$b_j \pm \text{s.e.}(b_j) t_{n-k-1}(1-\alpha/2)$$

- pro odhad

$$b_0 + b_1 x_0 \pm sd(x_0) t_{n-k-1}(1-\alpha/2)$$

- pro předpověď

$$b_0 + b_1 x_0 \pm s\sqrt{1 + d^2(x_0)}\, t_{n-k-1}(1-\alpha/2)$$

- kde s je střední chyba residuí a

$$d^2(x_0) = \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \overline{x})^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2}$$

Bayesovské sítě

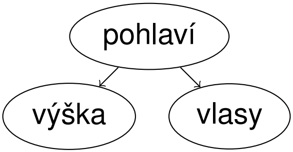
Pro kombinovanou formu studia

Bayesovské sítě

- grafické vyjádření závislosti mezi jevy
- mírou závislosti je podmíněná pravděpodobnost
- *Příklad.* Uvažujme tři proměnné, každou se dvěma úrovněmi
  - pohlaví: muž × žena
  - výška: vyšší × nižší
  - délka vlasů: kratší × delší

  Mezi těmito proměnnými existují následující vztahy
  - Muž je spíše vyšší a žena spíše nižší
  - Muž má spíše kratší vlasy a žena spíše delší vlasy

  Jaká je pravděpodobnost, že když potkám vyššího člověka s kratšími vlasy, že to bude muž?



Bayesovské sítě

Bayesovká síť je orientovaný acyklický graf

- vrcholy jsou náhodné proměnné s konečně mnoha navzájem disjunktními stavy
- hrany/šipky vedou od rodiče k následovníkovi
- hrany jsou ohodnoceny podmíněnými pravděpodobnostmi P(následovník | rodič)
- pro rodiče bývají určeny apriorní pravděpodobnosti

Bayesovské sítě

Základní stavební kameny

- Podmíněná pravděpodobnost

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$$
$$P(A|B,C) = \frac{P(A \cap B|C)}{P(B|C)}$$

- Nezávislost jevů
jevy A a B jsou nezávislé, když

$$P(A \cap B) = P(A)P(B)$$
$$P(A|B) = P(A)$$

- $P(A)$ se nazývá apriorní pravděpodobnost
$P(A|B)$ se nazývá aposteriorní pravděpodobnost

Bayesovské sítě

Základní stavební kameny

- Věta o úplné pravděpodobnosti
  Nechť $B_1, \ldots, B_n$ jsou jevy takové, že $\forall i, P(B_i) > 0, \forall i \neq j, B_i \cap B_j = \emptyset, \sum_{i=1}^{n} B_i = 1$. Pak
$$P(A) = \sum_{i=1}^{n} P(A \cap B_i) = \sum_{i=1}^{n} P(A|B_i)P(B_i)$$
- Bayesova věta
$$P(B_k|A) = \frac{P(A|B_k)P(B_k)}{\sum_{i=1}^{n} P(A|B_i)P(B_i)}$$
- Věta o násobení pravděpodobností
  Nechť $P(A_1, \ldots, A_{n-1}) > 0$
$$P(A_1 \cap A_2 \cap \cdots \cap A_n) = P(A_1)P(A_2|A_1)P(A_3|A_1, A_2) \ldots P(A_n|A_1, \ldots, A_{n-1})$$

Bayesovské sítě

Příklad využití Bayesovy věty

V morseově abecedě jsou znaky *tečka* a *řárka* v poměru 5:3. Pro přenos signálu platí:

- pokud je vyslána *tečka*, je přijata *tečka* s pstí 3/5
- pokud je vyslána *čárka*, je přijata *čárka* s pstí 2/3

Přijata byla tečka, jaká je pravděpodobnost, že byla vyslána tečka?

Řešení:
Označme

- A – jev, že byla přijata tečka
- B_1 – jev, že byla vyslána tečka
- B_2 – jev, že byla vyslána čárka

$$P(B_1) = 5/8, \qquad P(B_2) = 3/8, \qquad P(A|B_1) = 3/5, \qquad P(A|B_2) = 1/3$$

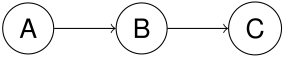
Použití Bayesovy věty

$$P(B_1|A) = \frac{P(A|B_1)P(B_1)}{P(A|B_1)P(B_1) + P(A|B_2)P(B_2)} = \frac{3/5 \cdot 5/8}{3/5 \cdot 5/8 + 1/3 \cdot 3/5} = \frac{3/8}{4/8} = \frac{3}{4}$$

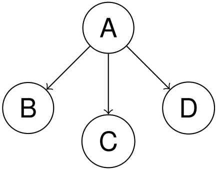
Bayesovské sítě

V Bayesovkých sítích kombinujeme **tři typy propojení**

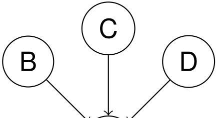
- sériové



- divergentní



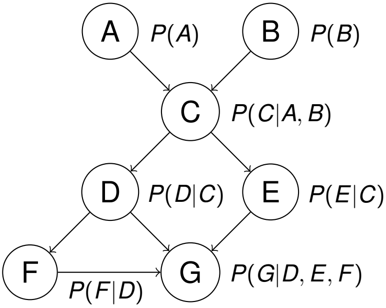
- konvergentní



Bayesovské sítě

Počítání pravděpodobností v Bayesovské síti

Příklad Bayesovské sítě s uvedenými pravděpodobnostmi



Sdružené rozdělení se pak počítá jsko součin podmíněných pravděpodobností

$$P(A \cap B \cap \cdots \cap G) = P(A)P(B)P(C|A,B)P(D|C)P(E|C)P(F|D)P(G|D,E,F)$$

Bayesovské sítě

Při práci s Bayesovskou sítí musíme

- navrhnout strukturu sítě, tj. uzly a orientované hrany
- navrhnout výchozí pravděpodobnosti
- provést výpočty

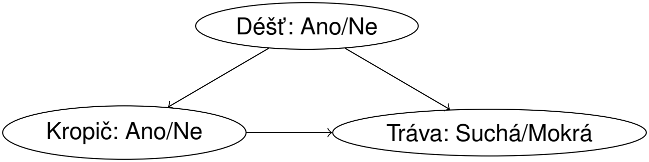
Pozorovaná hodnota určité proměnné se nazývá **evidence**

- provádíme výpočty za podmínky pozorovaných evidencí

Bayesovské sítě

Příklad: V určité lokalitě prší s pravděpodobností 0.2. V závislosti na tom, zda prší, se spustí kropič v zahradě. Pokud prší, spustí se s pravděpodobností 0.01, pokud neprší, spustí se s pravděpodobností 0.4. V závislosti na dešti a kropení je tráva v zahradě buďto suchá nebo mokrá (viz. tabulka níže). Z okna vidíme mokrou trávu. Jaká je pravděpodobnost, že prší?

Návrh Bayesovské sítě



Bayesovské sítě

Příklad: známé pravděpodobnosti

Déšť	
Ano	Ne
0.2	0.8

Déšť	Kropič: Ano	Kropič: Ne
Ano	0.01	0.99
Ne	0.4	0.6

Déšť	Kropič	Tráva: Mokrá	Tráva: Suchá
Ano	Ano	0.99	0.01
Ano	Ne	0.9	0.1
Ne	Ano	0.8	0.2
Ne	Ne	0.0	1.0

Víme, že sdružená pravděpodobnost je

$$P(D \cap K \cap T) = P(D)P(K|D)P(T|D,K)$$

Chceme

$$\begin{aligned} P(D = A|T = M) &= \frac{P(D = A \cap T = M)}{T = M} = \\ &= \frac{\sum_{x \in \{A,N\}} P(T = M \cap K = x \cap D = A)}{\sum_{x,y \in \{A,N\}} P(T - M \cap K = x \cap D = y)} \end{aligned}$$

Bayesovské sítě

Příklad: Konkrétní výpočet

$$
\begin{aligned}
P(T = M \cap K &= A \cap D = A) = \\
&= P(D = A)P(K = A|D = A)P(T = M|D = A, K = A) = \\
&= 0.99 \times 0.01 \times 0.2 = 0.00198
\end{aligned}
$$

A celá podmíněná pravděpodobnost vychází

$$
\begin{aligned}
P(D = A|T = M) &= \frac{0.00198_{MAA} + 0.1584_{MNA}}{0.00198_{MAA} + 0.1584_{MNA} + 0.288_{MAN} + 0.0_{MNN}} = \\
&= \frac{891}{2491} = 0.3577
\end{aligned}
$$