Pokročilé statistické metody

Alena Černíková

alena.cernikova@ujep.cz

12. května 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

$$\nu = \frac{(\mathrm{Var(X)}/\mathrm{n}_1 + \mathrm{Var(Y)}/\mathrm{n}_2)^2}{\frac{(\mathrm{Var(X)}/\mathrm{n}_1)^2}{n_1 - 1} + \frac{(\mathrm{Var(Y)}/\mathrm{n}_2)^2}{n_2 - 1}}.$$

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

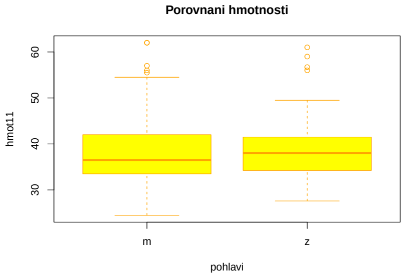
- testová statistika $F = \frac{\text{Var(X)}}{\text{Var(Y)}} = \frac{45.1}{50.6} = 0.89$
- p-hodnota $= 0.56 > \alpha = 0.05$
- nulovou hypotézu nezamítáme
- rozptyly ve skupinách jsou přibližně stejné a můžeme použít dvouvýběrový t-test pro shodné rozptyly

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.

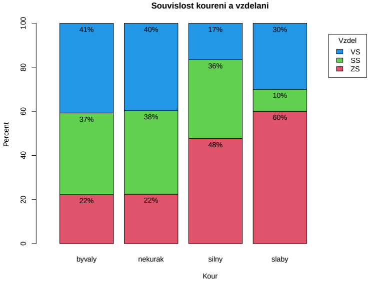
χ^2-test nezávislosti

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

Nepracuje se s jednou proměnnou X, ale s vektorem proměnných $\mathbf{X} = (X_1, X_2, \ldots, X_k)^T$.

Příklady

- 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.
- Zkoumáme chemické složení roztoku a máme zastoupení jednotlivých prvků: železo, sodík, draslík, atd.
- Klient banky vyplní dotazník, tj. odpoví na skupinu otázek

Základní charakteristiky

- střední hodnota
$$\mu = (\mu_1, \dots, \mu_k)^T$$
- varianční matice
$$\Sigma = (\sigma_{ij}) = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1k} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 & \cdots & \sigma_{2k} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \sigma_{k1} & \sigma_{k2} & \cdots & \sigma_k^2 \end{pmatrix}$$
kde $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ je kovariance i-té a j-té složky
- odhad střední hodnoty je vektor průměrů $\overline{\mathbf{X}} = (\overline{X}_1, \dots, \overline{X}_k)^T$
- odhad varianční matice je matice výběrových kovariancí a rozptylů $\mathbf{S} = (\mathbf{s_{ij}})$, 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 **X** a **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

- zobecnění dvouvýběrového testu
- porovnávám střední hodnotu ve dvou nezávislých výběrech
- testované hypotézy
  - H_0 : vektory středních hodnot se rovnají
  - H_1 : vektory středních hodnot se liší
- testová statistika

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

- za platnosti H_0 má Hotellingovo T^2-rozdělení s k a $n_1 + n_2 - 2$ stupni volnosti
- odpovídá F-rozdělení $T^2 \sim \frac{(n_1+n_2-2)k}{n_1+n_2-k-1} F_{k,n_1+n_2-k-1}$

MANOVA

- zobecnění analýzy rozptylu
- porovnávám střední hodnotu ve více nezávislých výběrech
- testované hypotézy
  - H_0 : vektory středních hodnot se rovnají
  - H_1 : vektory středních hodnot se liší
- porovnává se variabilita vysvětlená a nevysvětlená

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

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

- 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**

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

- **Hotellingovo lambda**

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

při porovnání dvou výběrů se všechny zjednoduší na Hotellingův dvouvýběrový test.

Metoda hlavních komponent (PCA)

Principal component analysis

- zjednodušení dat
- využívá se při práci s velkým množstvím proměnných
- proměnné se transformují tak, aby se většina informace soustředila do malého počtu nových veličin
- zjednodušení je podmíněné tím, že vstupní proměnné nejsou nezávislé
- hlavní využití při grafickém zobrazení výstupů

Transformace proměnných

Nově vzniklé proměnné jsou lineární kombinací původních

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

kde

- **X** je centrovavá matice vstupních hodnot (centrování = odečet průměru)
- **Y** je matice cílových/ výstupních proměnných
- **P** je matice transformačních vektorů

Matici **P** získáme pomocí rozkladu korelační matice vstupních dat **C**

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

kde

- Λ je matice vlastních čísel matice **C**
- **P** je matice vlastních vektorů matice **C**

Vsuvka

Vlastní čísla a vlastní vektory matice Buď $\mathbf{A}$ čtvercová matice řádu n

- vlastní, neboli charakteristické číslo matice $\mathbf{A}$ je takové, pro které platí
$$\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = 0$$
- matice řádu n má n vlastních čísel, některé mohou být vícenásobné
- vlastní vektor $\mathbf{v}$ matice $\mathbf{A}$ příslušný k vlastnímu číslo λ splňuje
$$(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{v} = 0$$

Vlastnosti hlavních komponent

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

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

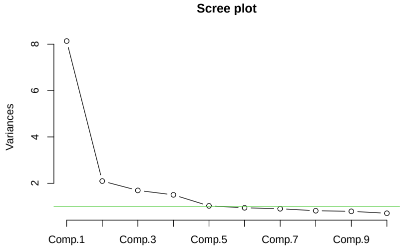
Intuitivní představa PCA

Celý **postup** si můžeme představit následovně

- mějme mnohozměrná data v prostoru
- daty proložíme vektor ve směru s největší variabilitou
- tak získáme první hlavní komponentu
- 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

Optimální počet hlavních komponent

- **počet** hlavních komponent dostačující k reprezentaci informace obsažené ve vstupních datech odpovídá počtu vlastních čísel korelační matice větších než 1
- grafické znázornění tohoto počtu: *Scree plot*



Faktorová analýza

Nevýhodou hlavních komponent je, že nemají přirozenou interpretaci. Pokud 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

- $\mathbf{X}$ je centrovaná matice naměřených dat
- $\mathbf{L}$ jsou tzv. *loadings*
- $\mathbf{F}$ jsou hledané faktory
- ε jsou náhodné chyby

Předpoklady faktorové analýzy

Aby bylo možné faktory odhadnout, musí platit

- $\mathbf{F}$ a ε jsou nezávislé
- $\mathrm{E}(\mathbf{F}) = 0$ a $\mathrm{Cov}(\mathbf{F}) = \mathbf{I}$, kde $\mathbf{I}$ je jednotková matice, tj. faktory mají nulovou střední hodnotu, jednotkový rozptyl a jsou nezávislé
- $\mathrm{E}(\varepsilon) = 0$ a $\mathrm{Cov}(\varepsilon) = \sigma^2\mathbf{I}$, tj. náhodné chyby jsou nezávislé, stejně rozdělené s nulovou střednín hodnotou a konstantním rozptylem σ^2
- $\mathrm{Cov}(\mathbf{X}) = \mathbf{LL}' + \sigma^2\mathbf{I}$, tedy
    - $\mathrm{Var}(\mathrm{X_i}) = \ell_{\mathrm{i1}}^2 + \ell_{\mathrm{i2}}^2 + \ldots + \ell_{\mathrm{im}}^2 + \sigma^2$
    - $\mathrm{Cov}(\mathrm{X_i}, \mathrm{X_j}) = \ell_{\mathrm{i1}}\ell_{\mathrm{j1}} + \ell_{\mathrm{i2}}\ell_{\mathrm{j2}} + \ldots + \ell_{\mathrm{im}}\ell_{\mathrm{jm}}$
- $\mathrm{Cov}(\mathbf{X}, \mathbf{F}) = \mathbf{L}$, tedy $\mathrm{Cov}(\mathrm{X_i}, \mathrm{F_j}) = \ell_{\mathrm{ij}}$ kde ℓ_{ij} jsou prvky matice $\mathbf{L}$

Předpoklady faktorové analýzy

- pokud platí výše uvedené vztahy, pak lze matici loadingů **L** určit jednoznačně až na přenásobení ortogonální maticí **T**
- přenásobení se dá dále využít jako *rotace* k hledání nejlépe interpretovatelných faktorů
- nejčastěji používaná *rotace* je rotace ***varimax*** - ortogonální rotační matice **T**
- výsledné loadingy jsou buď hodně velké nebo hodně malé, podle toho, jak sytí daný faktor

Faktorová analýza

- hodnoty loadingů hledáme obdobně jako hlavní komponenty, tedy rozkladem korelační matice naměřených proměnných **X**
- faktorové skóry jsou odhadnuté hodnoty faktorů přiřazené jednotlivým pozorováním

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

- faktorové skóry dále používáme jako nové "zjednodušující" proměnné

Diskriminační analýza

Příklad. *Uvažujme pacienty s různými nemocemi a mějme ke každému skupinu lékařských testů. Chceme pak najít způsob, jak určit, kterou nemocí pacient trpí jen na základě výsledků testů*

- mějme mnohorozměrná data z několika různých populací
- chceme najít nejlepší možný způsob, jak na základě dat rozlišit populace mezi sebou
- výsledkem mají být pravděpodobnosti příslušnosti k jednotlivým skupinám

Diskriminační analýza

Nabízející se **postup**

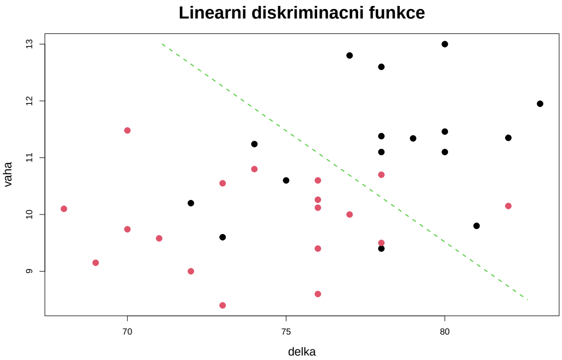
- pro každou populaci spočítáme průměrný vektor
- nového jedince zařadíme do populace, která bude mít svůj průměrný vektor nejblíže k jeho hodnotám

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

- jak dobré je určené rozhodovací pravidlo zjistíme na základě klasifikace
- počet správně přiřazených jednotek a počet špatně přiřazených jednotek

Lineární diskriminační analýza

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



Diskriminační pravidlo pro dvě populace

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 pravidlo pro dvě populace

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: Uvedené rozhodovací pravidlo je možné odvodit také metodou maximální věrohodnosti z hustoty mnohorozměrného normálního rozdělení.

Diskriminační pravidlo pro dvě populace

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

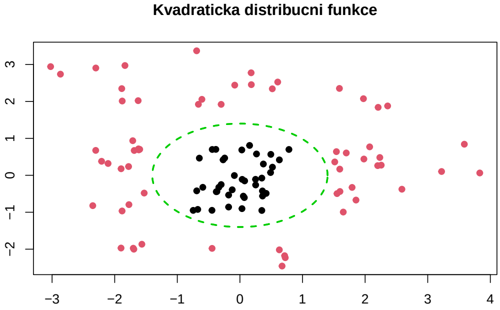
- podmínky na apriorní pravděpodobnosti obou populací, označme je π_1 a π_2
  využíváme, když je výskyt jedné populace výrazně častější než je tomu u populace druhé
- penalizace pro špatné zařazení jednotky, označme
  $c(2|1)$ penalizaci za špatné přířazení jednotky z první populace
  $c(1|2)$ penalizaci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

Rozhodovací pravidlo se změní na

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

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

Hledání skupin v mnohorozměrných datech

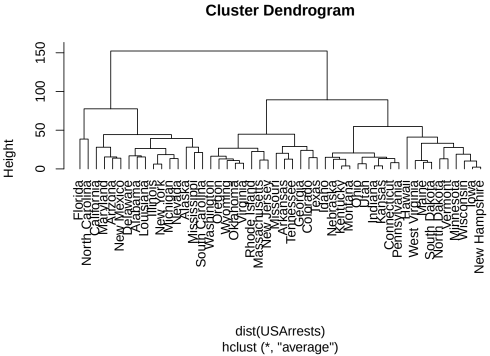
- chceme optimální počet skupin, tak aby
  - rozdíly mezi skupinami byly co možná největší
  - rozdíly v rámci skupin byly co možná nejmenší (homogenní skupiny)
- výsledné skupiny se snažíme popsat, aby se mezi nimi dalo rozlišovat
- základem analýz je měření vzdáleností mezi body

Hierarchické shlukování

- začínáme s množinou bodů. kde každý tvoří jednu skupinu
- postupně slučujeme body do skupin, až tvoří jednu velkou skupinu
- podle způsobu měření vzdálenosti mezi skupinami rozlišujeme
    - **average linkage** – vzdálenost skupin je vzdálenost jejich středů (průměrů)
    - **single linkage** – vzdálenost skupin je vzdálenost nejbližších bodů
    - **complete linkage** – vydálenost skupin je vzdálenost nejvzdálenějších bodů
    - **Wardova metoda** – skupiny jsou určené tak, aby se minimalizovala variabilita v rámci skupin
- Wardova metoda dává většinou "nejlepší výsledky"

Hierarchické shlukování

Grafické znázornění hierarchického shlukování se nazývá **dendrogram**.



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

K-means

Postup shlukování metodou **K-means**

- 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

Srovnání metod

Nevýhody jednotlivých metod

- **hierarchické shlukování** – odlehlé hodnoty zde často tvoří samostatné skupiny
- **K-means** – pokud v datech nejsou jednoznačné 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

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

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

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

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

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 $X_1, \ldots, X_n$ jsou nezávislé. Jejich sdružená hustota je tedy rovna

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

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

Odhad parametru θ získáme maximalizací této funkce přes θ

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

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

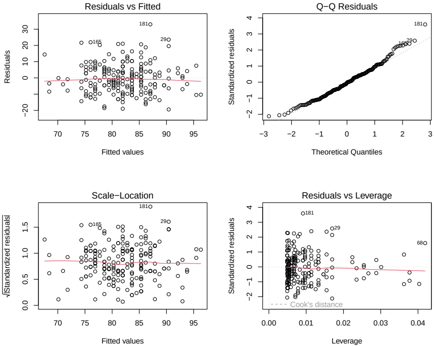
- Y_i jsou hodnoty závisle proměnné
- $X_{1i}, \dots, X_{ki}$ jsou hodnoty nezávisle proměnných $X_1, \dots, X_k$
- $\beta_0, \dots, \beta_k$ jsou regresní koeficienty
- e_i jsou náhodné chyby

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
- $X_1, \dots, X_k$ jsou vzájemně nezávislé proměnné
- mezi závisle proměnnou Y a nezávisle proměnnými X je lineární vztah
- v datech nejsou vlivná pozorování

Testy předpokladů

V R-ku máme k dispozici diagnostické grafy



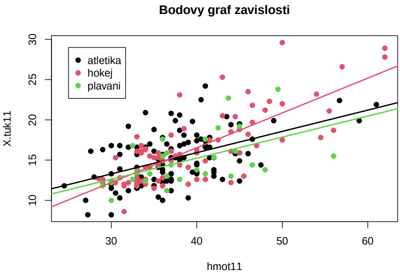
Dále test normality, test homoskedasticity, test nekorelovanosti residuí, test multikolinearity, Cookovu vzdálenost.

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

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 ostatních sportů – interakce

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)

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

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

Interpretace regresních koeficientů

Mnohonásobná lineární regrese
Mějme odhadnutý regresní model

$$\text{průtok vody v řece} = 53 + 2.6 \times \text{srážky} + 3.8 \times \text{pole} + 5.9 \times \text{město}$$

- na jeden díl srážek stoupne průtok vody v průměru o 2.6 na stejném typu půdy
- v polích stoupne průtok vody o 3.8 více než v lese při stejném množství srážek

Logistická regrese
Mějme odhadnutý regresní model

$$\text{logit(přežití)} = -0.07 - 1.34 \times \text{2.třída} - 2.19 \times \text{3.třída} - 1 \times \text{posádka} + 3.2 \times \text{ženy}$$

- cestující ve 3. třídě mají $1/\exp/\{-2.19\} = 8.9$, tj. téměř 9 krát menší šanci na přežití, než cestující v první třídě, při stejném pohlaví
- ženy mají $\exp\{3.2\} = 24.2$ krát větší šanci na přežití než muži cestující ve stejné třídě

Zobecněné lineární modely

- $0 - 1$ závislá proměnná – **Logistická regrese**
- ordinální závislá proměnná – **Ordinální regrese**
- závislá proměnná počet (count data) – **Poissonova regrese**

Ordinální regrese

- kombinace několika logistických regresí
- závislá proměnná v těchto jednotlivých modelech je

$$\begin{aligned} Y &= 0 \ldots X \leq j \\ &= 1 \ldots X > j \end{aligned}$$

- modeluje se šance přechodu do vyšší kategorie
- předpokladem je, že všechny dílčí logistické regrese mají stejný "směr", tedy lineární člen
- absolutní člen je pro každou logistickou regresi individuální

Poissonova regrese

- závisle proměnná je **počet**
- pomocí této regrese je možné modelovat i vztahy v kontingenční tabulce
- model má tvar

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

- předpokladem je, že rozptyl závisle proměnné je stejný jako její střední hodnota (vlastnost Poissonova rozdělení)
- není-li splněno
  - použijte se *dispersion parameter* $\Rightarrow$ **Quasi-Poisson**
  - použije se namísto poissonova rozdělení **negativně binomické rozdělení**

Typy testů

Statistické testy dělíme na

- **Parametrické**
  předpokládají určité rozdělení dat, nejčastěji normální
- **Neparametrické**
  jsou použitelné nezávisle na rozdělení dat
  - Založené na **pořadích**
    namísto původních hodnot pracují s jejich pořadími, nenáročné na výpočet
  - Založené na **přeuspořádání** (resampling)
    pracují přímo s naměřenými hodnotami, které různě přeskupují
    - Permutační
    - Bootstrap

Permutační testy

- počítá se testová statistika
- **princip**: jak si stojí aktuálně naměřená hodnota testové statistiky mezi statistikami, které je možné získat permutací původních hodnot
- **p-hodnota**: je podíl testových statistik v absolutní hodnotě větších než aktuální naměřená hodnota

Permutační testy

Příklad pro dvouvýběrový test

- porovnáváme dva nezávislé výběry s počty pozorování n_1 a n_2
- testujeme
  - H_0 : střední hodnoty jsou stejné
  - H_1 : střední hodnoty se liší
- vypočteme testovou statistiku klasického dvouvýběrového t-testu

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

kde

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

Permutační testy

Příklad pro dvouvýběrový test

- spočítáme velké množství (alespoň $N = 10000$) permutací původních hodnot při neměnných rozsazích výběrů n_1, n_2
- pro každou permutaci spočítáme hodnotu testové statistiky T_i
- vypočteme p-hodnotu

$$p = \frac{\# T_i : |T_i| \geq T}{N}$$

Permutační testy

Vlastnosti permutačních testů

- permutační test lze využít pro libovolnou testovou statistiku
- lze ho využít bez předpokladu na rozdělení dat
- předpokladem je přibližně stejný rozptyl ve výběrech
- je-li příliš malý počet pozorování, je malý i počet různých permutací a tedy i počet možných různých p-hodnot
- pro menší vzorky je možné spočítat *"přesnou"* p-hodnotu
- udržují hladinu významnosti, mnohdy lépe než klasické testy
- výpočetně náročné

Bootstrap

- princip je obdobný jako u permutačních testů
- počítá se testová statistika a její aktuální hodnota se porovnává s hodnotami získanými z náhodných výběrů z dat
- náhodné výběry se ale nezískávají permutováním, ale **náhodným výběrem s vracením**
- bootstrapové náhodné výběry mohou některé původní hodnoty obsahovat víckrát a jiné vůbec
- častěji se používá pro výpočet intervalů spolehlivosti, ale je možné je využít i k testování
- optimální, pokud chceme odhadnout **rozdělení** měřeného parametru

Odhady metodou Jackknife

Jednoduché přeuspořádání původních hodnot používané k odhadům libovolných parametrů

- mějme jeden výběr a potřebujeme odhadnout parametr θ (průměr, rozptyl, medián, šikmost, ...)
- tvoříme náhodné výběry, pro něž vypočteme odhadovaný parametr a výsledky pak zprůměrujeme
- náhodné výběry metodou *Jackknife* vznikají vynecháním jedné hodnoty z původních dat
- pro n pozorování vytvořím n přeuspořádaných výběrů o $n-1$ hodnotách

Odhady metodou Jackknife

Vlastnosti metody *Jackknife*

- výpočetní jednoduchost
- deterministická, tj. nenáhodná metody (vždy dostanu stejný výsledek)
- optimálně pracuje při známém rozdělení dat
- snižuje vychýlení (bias) odhadu
- nedoporučuje se používat při velké variabilitě v datech nebo při příliš komplexních modelech

Bayesovská statistika

- předpokládejme náhodnou veličinu X s hustotou rozdělení $f(x|\theta)$ závislou na parametru θ
- mějme náhodný výběr $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ z rozdělení X
- v klasické (frekvenční) statistice předpokládáme, že θ je konstanta, kterou chceme odhadnout na základě výběru x
- Bayesovská statistika předpokládá, že θ je náhodná veličina s rozdělením/hustotou $g(.)$
- cílem je odhadnout parametry rozdělení g

Bayesovská statistika

- k dispozici máme *apriorní rozdělení* $\pi(\theta)$ – náš předpoklad, jak by se měla náhodná veličina chovat
- a dále náhodný výběr x
- cílem je získat *aposteriorní rozdělení* $\pi(\theta|x)$
- pomocí Bayesovy věty lze odvodit, že

$$\pi(\theta|x) \approx f(x|\theta)\pi(\theta)$$

- nemáme-li žádnou představu o apriorním rozdělení, používá se *neurčité apriorní rozdělení*, tj. rozdělení konstantní
- odhad aposteriorního rozdělení se realizuje pomocí Markov Chain Monte Carlo (MCMC) metod