

# Занятие 11

Многомерное шкалирование,  
кластерный анализ.

Generalized linear models и  
логистическая регрессия.

## Многомерные методы анализа

Мы рассмотрели способы получения новых переменных (и их интерпретации) на основе взаимосвязей (матриц ковариаций или корреляций) **между переменными** (размера  $p \times p$ ) – **R-mode analysis**.

Существует альтернативный способ получения новых переменных: построить матрицу **дистанций между объектами** (размера  $n \times n$ ) в пространстве исходных переменных, и получить новые переменные на основе этой матрицы - **Q-mode analysis**.

**Дистанция** – это просто сходство между объектами по исходным переменным.

# Многомерное шкалирование (*Multidimensional scaling*)

У нас в руках:  
 $p$  переменных  
 $n$  объектов

**Цель:** уменьшить число исходных переменных с минимальными потерями информации.

*(Мы уже встречали такую цель!)*

Новые переменные получаются на основе **матрицы дистанций** между объектами так, чтобы **дистанции** в пространстве новых переменных **изменились как можно меньше**.

*То, что было «похожим», должно остаться похожим;  
большие исходные различия должны остаться большими.*

# Многомерное шкалирование

Пример:

Исходные переменные – масса тела и рост

Новая переменная – «упитанность»



© Страна Мастеров

Различия  
большие

Масса – большая  
Рост - маленький

Различия  
большие

Масса – маленькая  
Рост - большой



Упитанность большая

Упитанность низкая

## Многомерное шкалирование

Можно по-разному померить различия между объектами:

- Евклидовы дистанции – просто расстояния в пространстве переменных, как в геометрии;

$$\sqrt{\sum_{j=1}^p (y_{1j} - y_{2j})^2}$$

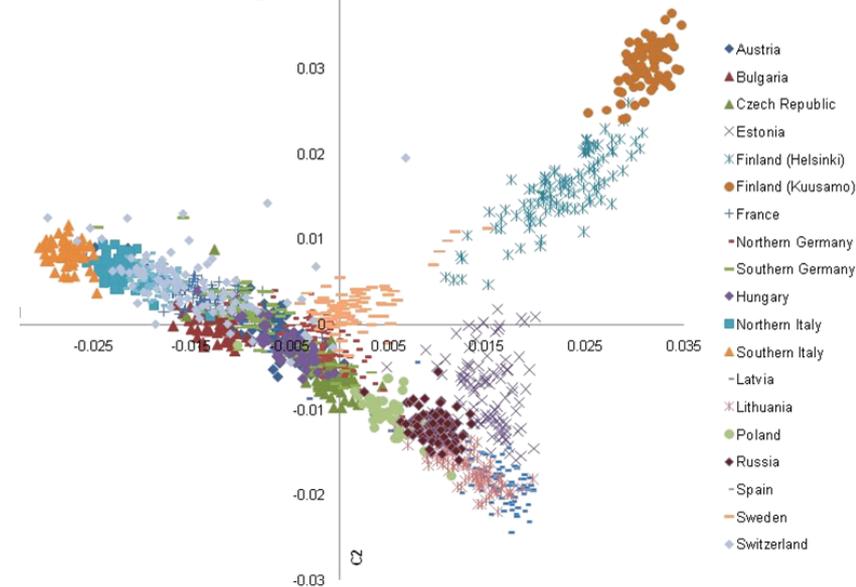
- Квадрат евклидова расстояния (увеличивает вес больших разностей);

- Манхэттенское расстояние

(Manhattan увеличивает вес больших разностей).

$$\sum_{j=1}^p |y_{1j} - y_{2j}|$$

Многомерное шкалирование м.б. основано на **любых показателях различий** (напр., генетических расстояниях)!



## Многомерное шкалирование

*Пример:*

Мы наблюдаем поведение молодых сурков. У нас есть 15 переменных, описывающих социальное поведение - частоты контактов разных типов (погони, обнюхивания, игра...).

Мы хотим из 15 переменных получить 2-3, которые бы хорошо объясняли изменчивость в выборке (т.е., чтобы сурки, которые ведут себя по-разному, в пространстве новых переменных оказались далеко друг от друга).



### 1 этап. Подготовительный.

- а) трансформируем данные (если между переменными нелинейные связи) и стандартизируем их (если переменные измерены в принципиально разных шкалах);
- б) получаем  $n \times n$  матрицу дистанций между объектами (сурками);
- в) определяем, сколько новых переменных (измерений) мы будем получать ( $k$ );

Если исходная матрица различий содержит Евклидовы дистанции, и данные по всем переменным центрированы так что среднее = 0, взаиморасположение объектов будет таким же, как и в PCA в пространстве новых компонент.

Т.е., **classical scaling** – обобщённый вариант PCA.

## 2 этап. Получение новых переменных.

а) из матрицы дистанций получаем **новые переменные** (так же, как и в R-mode analysis, у этих переменных есть eigenvalues и eigenvectors). Первая переменная описывает максимум различий между объектами.

б) объекты помещаются в пространство  $k$  новых переменных (первых, самых лучших) и многократно **поворачиваются** там, **приближая дистанции** между объектами в новом пространстве ( $d\text{-hat}$ ) **к реальным** различиям между объектами ( $d$ ).

*Т.е., это итеративная процедура, новые переменные получаются не одним действием из матриц, а они постепенно подгоняются к данным.*



*Примечание про проблему сходимости (convergence problem)*

### Этап 3. оценка качества модели.

- а) считается простой показатель того, насколько хорошо модель описывает реальные различия между объектами – **stress**. Чем он меньше, тем лучше: >0.3 – недопустимо, <0.2 – приемлемо, <0.1 – идеально;
- б) Картинка, показывающая качество модели – **диаграмма Шепарда**
- в) если стресс большой, **повторяем процедуру**, увеличив число измерений – новых переменных.

Стресс оценивается на основе residuals в регрессионной модели «дистанции в модели - реальные различия»

$$\sqrt{\frac{\sum (d_{hi}^{\sim} - \hat{d}_{hi}^{\sim})^2}{\sum d_{hi}^{\sim 2}}}$$

### Этап 4. Интерпретация результатов.

- а) существенный недостаток метода: готового способа выяснить, какие исходные переменные вносят вклад в новые и коррелируют с новыми, **НЕТ!**
- б) это потому, что новые переменные НЕ являются линейной комбинацией исходных, они получены вообще не из них а из дистанций.
- в) Допустимо проанализировать обычные **корреляции** исходных переменных с новыми измерениями.
- д) теперь можно получить для каждого объекта значения новых переменных и использовать их в дальнейшем анализе (например, для сравнения групп).

Стресс оценивается на основе residuals в регрессионной модели «дистанции в модели - реальные различия»

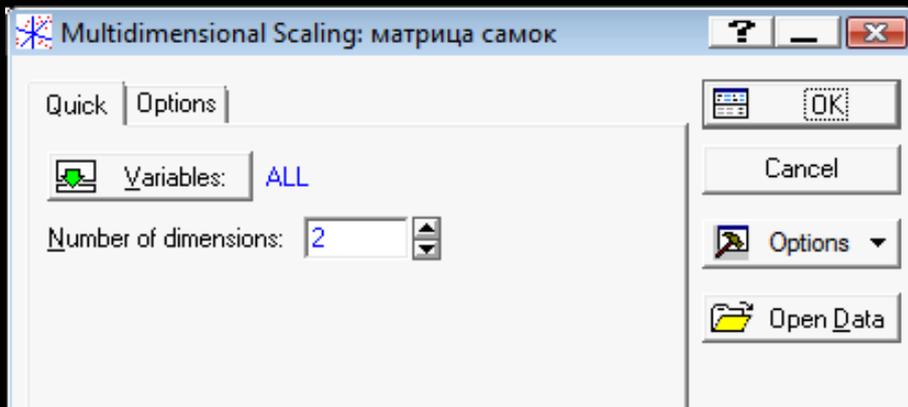
$$\sqrt{\frac{\sum (d_{hi}^{\sim} - \hat{d}_{hi}^{\sim})^2}{\sum d_{hi}^{\sim 2}}}$$

Данные для анализа должны быть представлены **матрицей дистанций** (получается в модуле кластерного анализа)

The screenshot displays the STATISTICA software interface. In the background, a window titled "Data: матрица самок.smx (24v by 28c)" shows a distance matrix for "поведение самок" (female behavior). The matrix is lower triangular, with the diagonal elements all being 0.00000. The first row of data (C\_1) contains values: 7,26493, 5,98124, 5,89343, 5,42090, 4,30431, 4,55420. The second row (C\_2) contains: 0,00000, 5,22473, 4,38381, 2,80742, 7,32318, 4,54300. The third row (C\_3) contains: 0,00000, 1,62363, 0,00000, 3,40424, 3,97040, 1,85300. The fourth row (C\_4) contains: 0,00000, 0,00000, 3,10151, 5,06964, 4,17629, 1,62890. The fifth row (C\_5) contains: 0,00000, 0,00000, 0,00000, 0,00000, 3,28407, 3,28407. The sixth row (C\_6) contains: 0,00000, 0,00000, 0,00000, 0,00000, 0,00000, 0,00000. The seventh row (C\_7) contains: 0,00000, 0,00000, 0,00000, 0,00000, 0,00000, 0,00000. The main menu is open, and the "Multivariate Exploratory Techniques" option is selected, with a sub-menu showing "Multidimensional Scaling" highlighted.

		поведение самок						
		1	2	3	4	5	6	7
		C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	C_6	C_7
C_1		0,00000	7,26493	5,98124	5,89343	5,42090	4,30431	4,55420
C_2		7,26493	0,00000	5,22473	4,38381	2,80742	7,32318	4,54300
C_3		0,00000	5,22473	0,00000	1,62363	3,40424	3,97040	1,85300
C_4		0,00000	1,62363	0,00000	0,00000	3,10151	4,17629	1,62890
C_5		0,00000	3,40424	3,10151	0,00000	0,00000	5,06964	2,49790
C_6		0,00000	3,97040	4,17629	5,06964	0,00000	0,00000	3,28407
C_7		0,00000	1,85300	1,62892	2,49790	3,28407	0,00000	0,00000
C_8		4,08888	3,82849	2,38734	4,31209	2,93780	2,93780	2,93780
C_9		3,17115	3,33272	2,07027	4,67842	2,90060	2,90060	2,90060
C_10		3,80924	3,60398	2,71061	4,37663	3,28360	3,28360	3,28360
C_11		3,72209	2,76385	1,67436	5,11905	2,76120	2,76120	2,76120
C_12		5,45880	5,54498	4,31679	4,75471	4,37610	4,37610	4,37610
C_13		4,92639	5,54671	6,45181	5,27952	4,78070	4,78070	4,78070
C_14		5,73749	4,84322	3,23147	7,64504	4,97870	4,97870	4,97870
C_15		5,73749	4,84322	3,23147	7,64504	4,97870	4,97870	4,97870

Выбрали число новых переменных



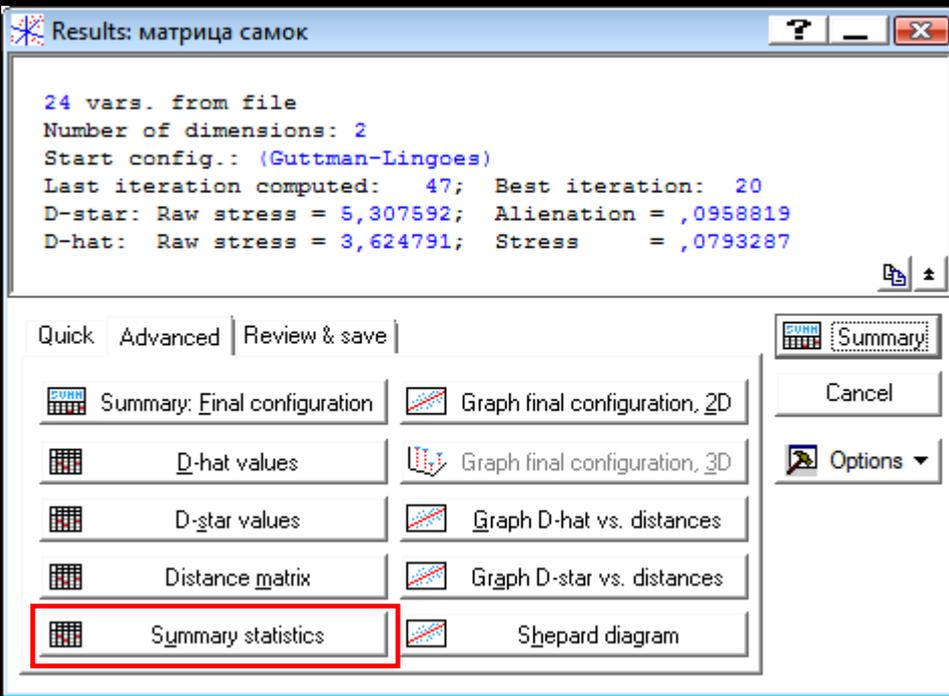
Parameter Estimation: матрица самок

iter.	[dim=2]	D-star	D-star	D-hat	d-hat
s: t:	cosin step	raw stress	alienation	raw stress	stress
10 2	,164	,042	5,212052	,0955580	
10 2			5,215549	,0950488	
11 1		,042	5,203372	,0954777	
11 2	,124	,042	5,203166	,0954758	
11 2			5,211751	,0950143	
12 1		,042	5,199743	,0954441	
12 2	,098	,042	5,199611	,0954428	
12 2			5,210221	,0950004	
12 0				3,853914	,0817974
13 1		,042		3,763040	,0808273
14 1	,952	,139		3,699651	,0801437
15 1	-,138	,062		3,673769	,0798628
16 1	,638	,069		3,662280	,0797378
17 1	,968	,174		3,639087	,0794850
18 1	,874	,170		3,627860	,0793623
19 1	,522	,081		3,625927	,0793411
20 1	,709	,086		3,624791	,0793287
20 *			5,307592	,0958819	,0793287
10 1		,042	5,212386	,0955611	

Estimation procedure converged

Buttons: Cancel, OK

Программа вращает объекты в пространстве так, чтобы расстояния между ними в модели лучше всего соответствовали исходным расстояниям между объектами (чем больше измерений в модели, тем лучше модель будет отражать реальность, но тем она будет сложнее)



Мы получили итоговую конфигурацию. Посмотрим, насколько она хороша.

Configuration (матрица самок)

Final Configuration (матрица самок)  
 D-star: Raw stress = 5,307592; Alienation = ,0958819  
 D-hat: Raw stress = 3,624791; Stress = ,0793287

	Distance	D-star	D-hat
D(22,15)	0,000243	0,000074	0,000163
D(15,14)	0,000087	0,000083	0,000163
D(22,16)	0,000328	0,000085	0,000163
D(19,14)	0,000083	0,000087	0,000163
D(22,19)	0,000074	0,000156	0,000163
D(19,16)	0,000254	0,000169	0,000167
D(22,14)	0,000156	0,000172	0,000167
D(16,14)	0,000172	0,000243	0,000167
D(19,15)	0,000169	0,000254	0,000167
D(16,15)	0,000085	0,000328	0,000167
D(21,2)	0,077300	0,077300	0,077300
D(16,2)	0,179191	0,099765	0,179191
D(15,2)	0,179237	0,115304	0,179237
D(22,2)	0,179369	0,122014	0,179328
D(14,2)	0,179287	0,160012	0,179328
D(19,2)	0,179330	0,160621	0,179330
D(24,5)	0,214672	0,179066	0,198856
D(22,21)	0,239922	0,179191	0,198856
D(21,15)	0,239840	0,179237	0,198856
D(21,19)	0,239898	0,179287	0,198856
D(21,14)	0,239872	0,179330	0,198856
D(21,16)	0,239812	0,179369	0,198856
D(17,7)	0,115304	0,214672	0,198856
D(24,11)	0,099765	0,239812	0,198856
D(20,11)	0,160621	0,239840	0,198856

D-star и D-hat – смоделированные дистанции между измерениями (по-разному рассчитанные); расстояния упорядочены по ним.

Distance – реальные дистанции; чем лучше они выстроены по возрастанию, тем лучше модель.

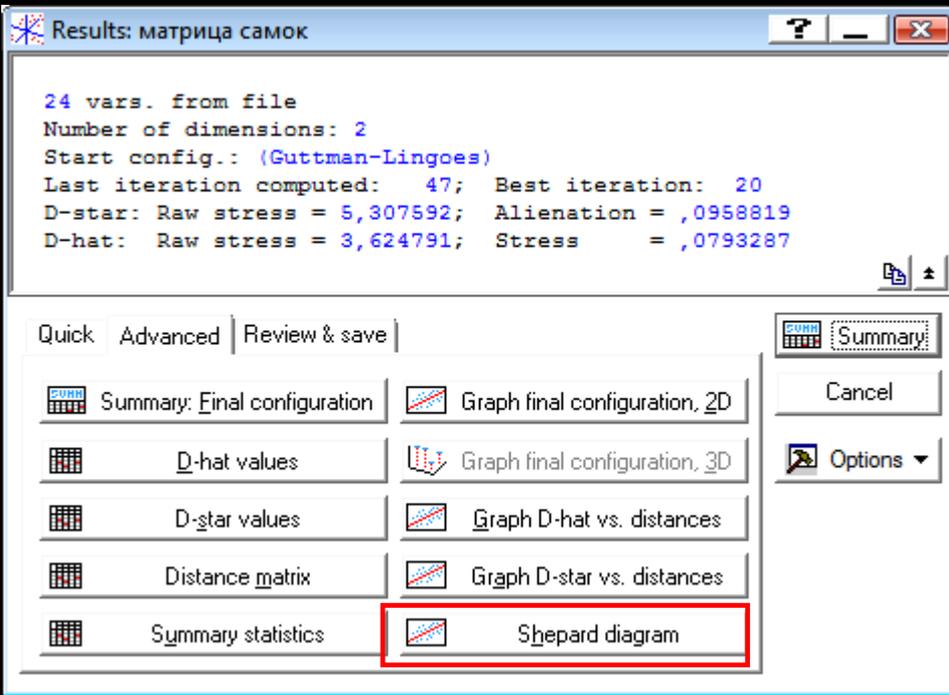
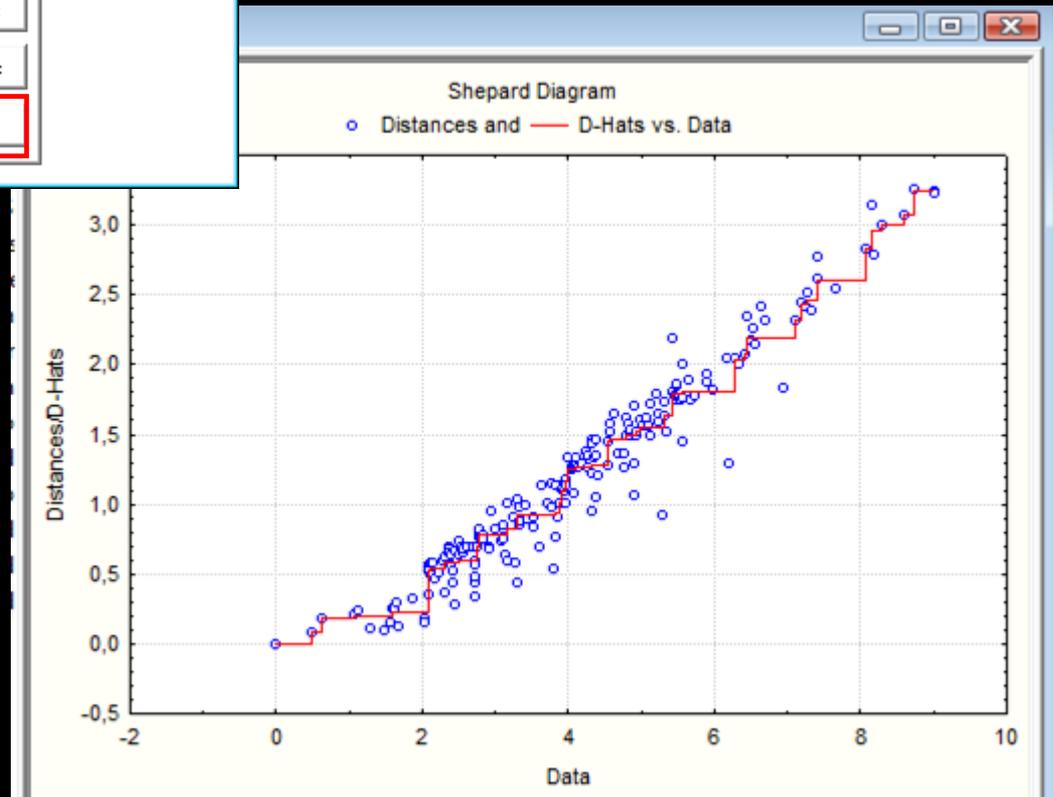


Диаграмма Шепарда тоже показывает, хорошо ли модель согласуется с исходными данными: чем ближе точки к красной линии, тем лучше.



Results: матрица самок

24 vars. from file  
 Number of dimensions: 2  
 Start config.: (Guttman-Lingoes)  
 Last iteration computed: 47; Best iteration: 20  
 D-star: Raw stress = 5,307592; Alienation = ,0958819  
 D-hat: Raw stress = 3,624791; Stress = ,0793287

Quick | Advanced | Review & save

Summary: Final configuration | **Graph final configuration, 2D** | Cancel

D-hat values | Graph final configuration, 3D | Options ▾

D-star values | Graph D-hat vs. distances

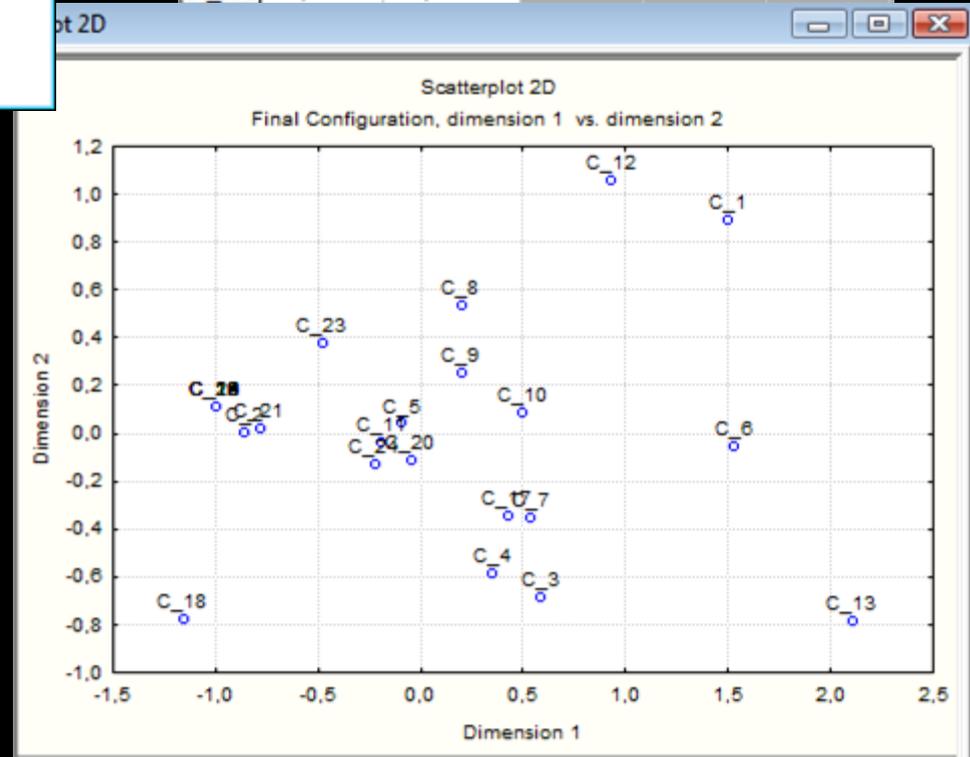
Distance matrix | Graph D-star vs. distances

Summary statistics | Shepard diagram

Configuration (матрица самок)

Final Configuration (матрица самок)  
 D-star: Raw stress = 5,307592; Alienation = ,0958819  
 D-hat: Raw stress = 3,624791; Stress = ,0793287

	DIM. 1	DIM. 2
C 1	1,50164	0,895796
C 2	-0,86021	0,007414
C 3	0,58356	-0,680463
C 4	0,34854	-0,587312
C 5	-0,09315	0,042218
C 6	1,53148	-0,056726
C 7	0,53722	-0,354419
C 8	0,19641	0,537737
C 9	0,19735	0,252446
C 10	0,49544	0,085739



Наконец, получаем значения новых переменных для объектов; строим картинку, где они расположены в пространстве этих переменных

Дальнейший анализ с меньшим числом переменных

## Для публикаций

**В методы:** для упрощения структуры данных и графической визуализации различий между объектами использовали метод многомерного шкалирования.



**В результаты:**

- ✓ количество новых переменных;
- ✓ Stress;
- ✓ корреляции (Пирсона или Спирмана) новых переменных с исходными;
- ✓ картинка расположения объектов в пространстве новых переменных.

## Требования к выборкам для проведения MDS

1. В качестве исходных данных можно взять любую матрицу дистанций – **никаких ограничений и требований** к выборке!
2. Для интерпретации новых переменных желательно, чтобы связь переменных была **линейной** (диагностика - осмотр скаттерплотов; при необходимости - трансформация);
3. Желательно исключить **аутлаеры**, если они меняют результат;
4. Если переменные измерены в **разных шкалах**, их следует **стандартизировать**.
5. Следует исключить переменные, сильно коррелирующие с другими.

*MDS – аналог метода главных компонент, не имеющий ограничений PCA, но его возможности крайне ограничены (в сравнении с PCA); лучше пользоваться им лишь в крайнем случае.*

# Кластерный анализ

У нас в руках:  
 $p$  переменных  
 $n$  объектов

**Цель** – объединить эти объекты в **группы**, внутри которых они будут более сходными, чем объекты из разных групп.

Результат – получение **дендрограммы** (иерархического дерева)  
– только картинка, никакой проверки гипотез и пр..

*Можно выявить внутри вида группы,  
различающиеся по морфологии, экологии,  
поведению, физиологическим характеристикам.  
Сгруппировать пробы по химическому составу.  
Разделить местообитания по видовому составу.*

Поведенческие тактики самцов сусликов:  
активные и пассивные самцы



## Кластерный анализ

Основа кластерного анализа – **матрица дистанций** между объектами (в пространстве  $p$  переменных). Дистанции могут быть любыми, как и в MDS.

Результат - **объединение сходных объектов** в группы (кластеры).

### Кластерный анализ

```
graph TD; A[Кластерный анализ] --> B[Иерархический]; A --> C[Не иерархический];
```

#### Иерархический

Объекты по одному присоединяются к кластеру и он становится всё больше и больше

#### Не иерархический

Объекты присоединяются по одному, но кластеры перегруппировываются в процессе анализа

*Переменные, измеренные в разных шкалах, должны быть **стандартизированы***

## Кластерный анализ

Иерархический метод:

**Накопительное группирование** (agglomerative hierarchical clustering).

Начинает с того, что **каждый объект** – отдельная группа, заканчивает одной группой со всеми объектами.

- a) Получается матрица дистанций между объектами;
- b) Пара самых «похожих» объектов объединяется в первый кластер;
- c) Пересчитывается матрица дистанций, как будто новый кластер – это один объект;
- d) Получается второй кластер
- e) ...

*Много разных показателей дистанций:*

- Евклидовы дистанции;
- Квадрат евклидова расстояния (увеличивает вес больших разностей);
- Манхэттенское расстояние;
- ... (Quinn, Keough, 2002)

### Как мерить расстояние между кластерами?

- ✓ Метод **ближайшего соседа** (Single linkage = nearest neighbor) - расстояние между кластерами = расстоянию между **ближайшими** объектами в них;
- ✓ Полная связь (**complete linkage**); расстояние между кластерами = расстоянию между самыми удалёнными объектами в них (не годится, если кластеры формируют цепочки);
- ✓ **Average linkage** – меряют среднее расстояние между объектами в кластерах (unweighted pair-group average).



Есть ещё **Divisive hierarchical clustering**, когда, наоборот, от одного большого кластера по одному отделяются объекты.

## Кластерный анализ

*Пример:*

Учёные анализируют численность разных животных вокруг деревень в Африке; у них 24 трансекта (это **объекты**) и 6 категорий животных (человекообразные обезьяны, птицы, слоны, копытные, мартышки, грызуны – это **переменные**).

Попробуем выявить, не образуют ли объекты (трансекты) **группы** в пространстве этих 6-и переменных.



(трансекты проложены в нацпарках, на вырубках и на прочих территориях)

Koerner SE, Poulsen JR, Blanchard E, Okouyi J, Clark CJ (2016) Data from: Vertebrate community composition and diversity declines along a defaunation gradient radiating from rural villages in Gabon. Dryad Digital Repository. <http://dx.doi.org/10.5061/dryad.vs97g>

# Кластерный анализ

species diversity.sta (26v by 24c)

D:\Nina\statistica\datasets\Копия IvindoData\_DryadVersion.xlsx : Data

	RA_Apes	RA_Birds	RA_Elephant	RA_Monkeys	RA_Rodent	RA_Ungulate
Neither	0	85,02835	0,287088	9,086342	3,739324	1,858896
Logging	0	72,986541	0,363769	23,121135	3,266642	0,261913
Neither	0	57,820337	0	37,745098	3,191974	1,037392
				35,130475	2,092195	2,563513
				27,707992	3,640998	1,037684
				39,404145	1,252159	1,373057
				21,456161	5,407493	0
				38,430185	2,969605	3,051124
				54,118587	1,287058	8,121782
				23,937286	3,974826	8,7667
				34,954971	1,924775	4,167402
				25,580767	4,051864	1,877364

Statistics Data Mining Graphs Tools Data Window Help Scorecard PROCEED

Resume... Ctrl+R

Add to Report Add to MS Word Add to Workspa

Basic Statistics/Tables  
 Multiple Regression  
 ANOVA  
 Nonparametrics  
 Distribution Fitting  
 Distributions & Simulation

Advanced Linear/Nonlinear Models  
**Multivariate Exploratory Techniques**  
 Industrial Statistics & Six Sigma  
 Power Analysis  
 Automated Neural Networks  
 PLS, PCA, Multivariate/Batch SPC  
 Variance Estimation and Precision

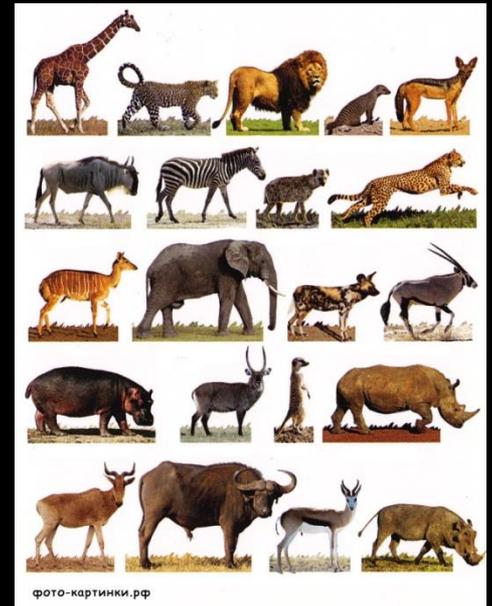
Statistics of Block Data  
 STATISTICA Visual Basic  
 Batch (ByGroup) Analysis  
 Probability Calculator

Cluster Analysis  
 Factor Analysis  
 Principal Components & Classification Analysis  
 Canonical Analysis  
 Reliability/Item Analysis  
 Classification Trees  
 Correspondence Analysis  
 Multidimensional Scaling  
 Discriminant Analysis  
 General Discriminant Analysis Models

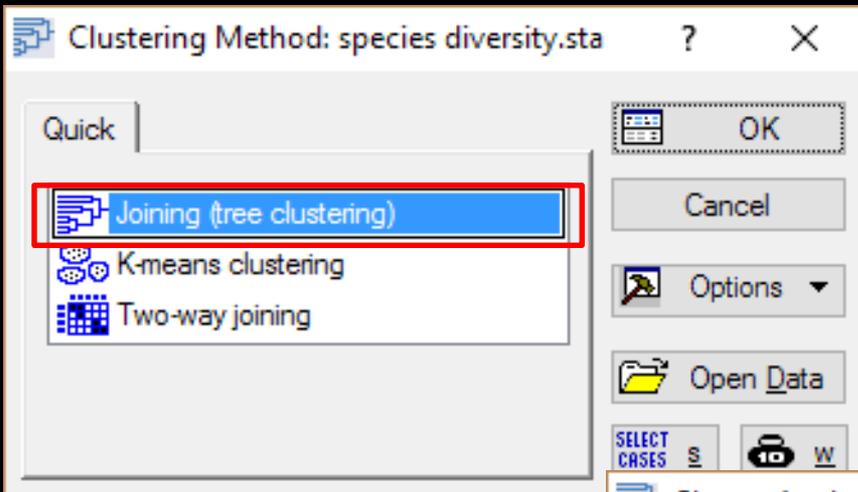
(26v by 24c)

Nina\statistica\datasets\Копия IvindoData\_D

Apes RA Birds RA Elephant RA

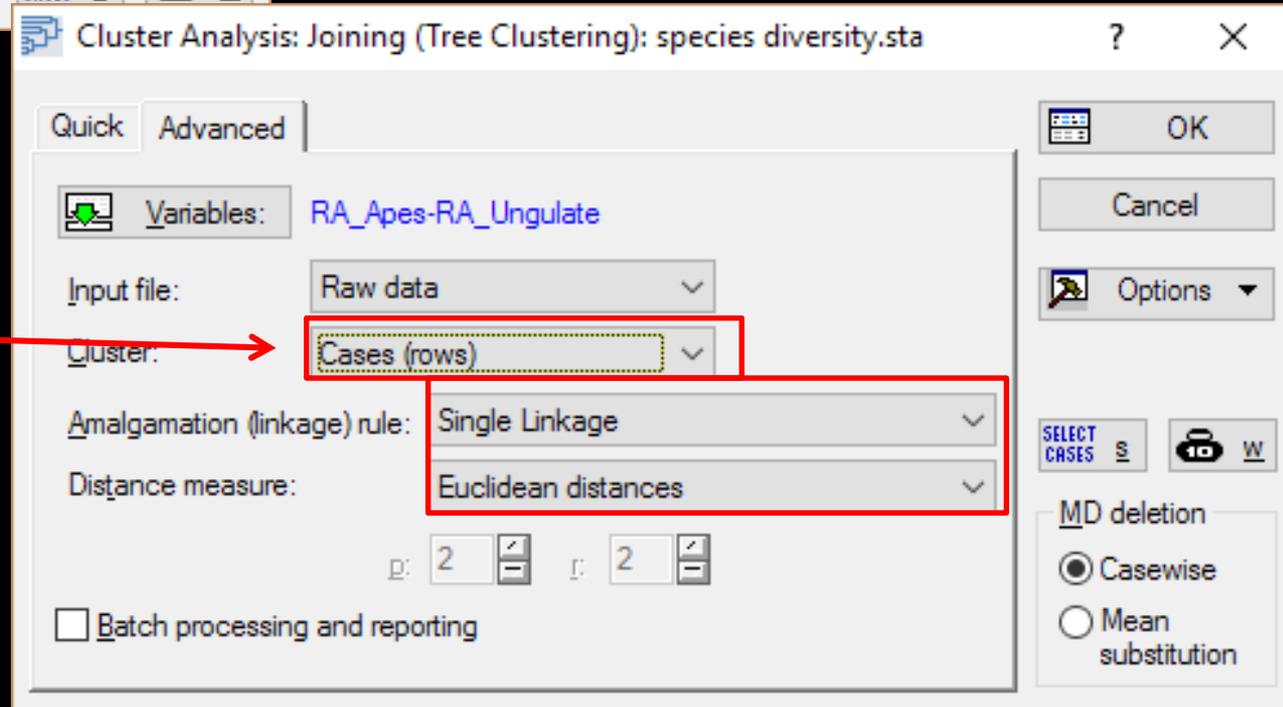


# Кластерный анализ: иерархический метод



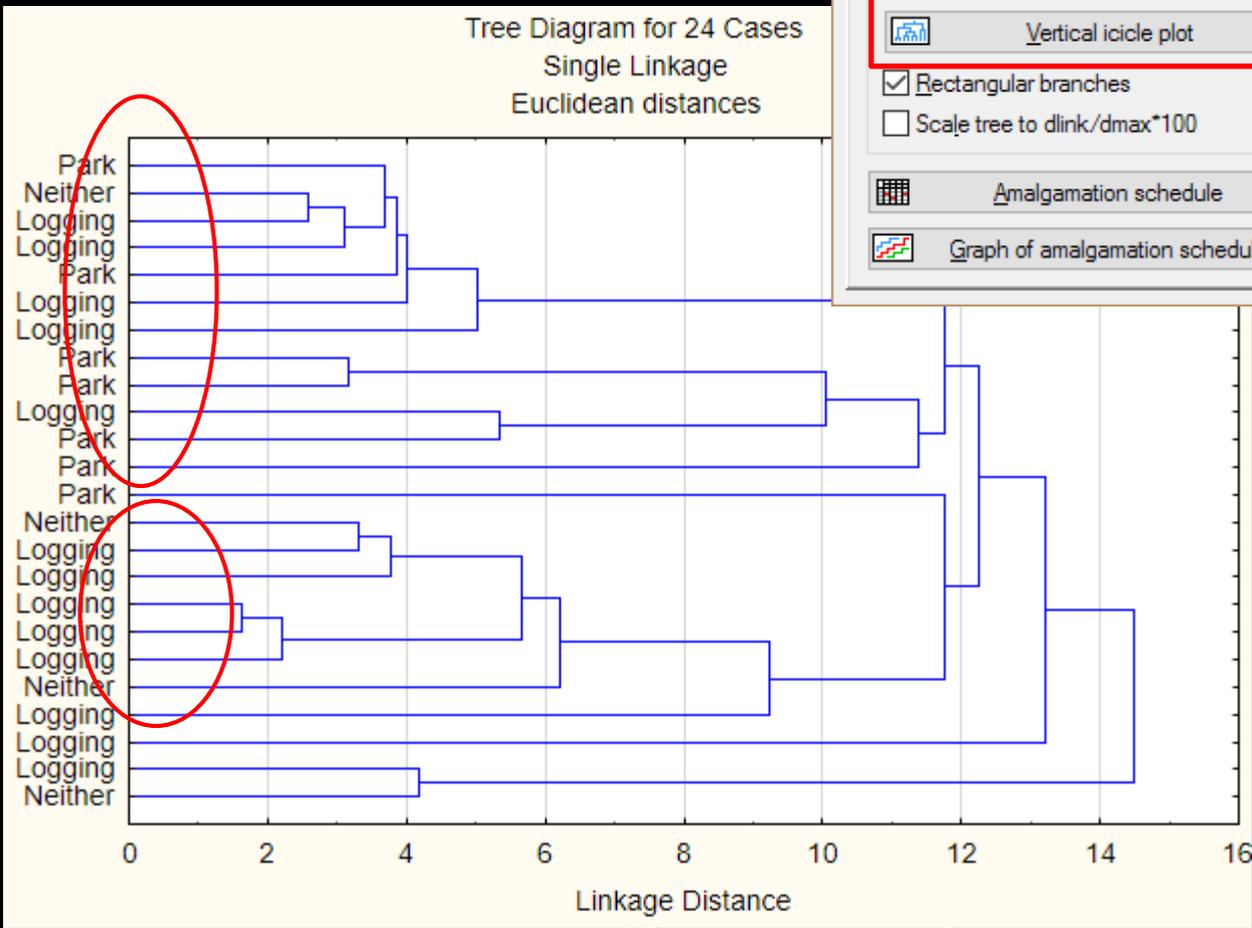
Задаем переменные, способ вычисления дистанций и метод объединения объектов в кластеры

Здесь важно выставить строки, а не столбцы



# Кластерный анализ

Получаем картинки с деревьями и смотрим, на каких уровнях выделяются кластеры (чтобы у объектов появились обозначения, надо копировать столбец с ними в названия строк)



Joining Results: species diversity.sta

Number of variables: 6  
Number of cases: 24  
Joining of cases  
Missing data were casewise deleted  
Amalgamation (joining) rule: Single Linkage  
Distance metric is: Euclidean distances (non-standardized)

Quick | Advanced

- Horizontal hierarchical tree plot
- Vertical icicle plot
- Rectangular branches
- Scale tree to dlink/dmax\*100
- Amalgamation schedule
- Graph of amalgamation schedule
- Distance matrix
- Descriptive statistics
- Matrix
- Save classifications
- Sort by cluster membership

Summary | Cancel | Options | By Group

Можно получить матрицу дистанций между наблюдениями (например, для многомерного шкалирования)

# Кластерный анализ

Можно посмотреть, на каких дистанциях какие трансекты объединяются в кластеры

Amalgamation Schedule (species diversity.sta) Single Linkage Euclidean distances									
linkage distance	Obj. No. 1	Obj. No. 2	Obj. No. 3	Obj. No. 4	Obj. No. 5	Obj. No. 6	Obj. No. 7	Obj. No. 8	Obj. No. 9
1,634135	Logging	Logging							
2,219885	Logging	Logging	Logging						
2,578872	Neither	Logging							
3,119694	Neither	Logging	Logging						
3,162199	Park	Park							
3,316061	Neither	Logging							
3,688090	Park	Neither	Logging	Logging					
3,769812	Neither	Logging	Logging						
3,870564	Park	Neither	Logging	Logging	Park				
4,010718	Park	Neither	Logging	Logging	Park	Logging			
4,178964	Logging	Neither							
5,022119	Park	Neither	Logging	Logging	Park	Logging	Logging		
5,339507	Logging	Park							
5,650817	Neither	Logging	Logging	Logging	Logging	Logging	Logging		
6,222314	Neither	Logging	Logging	Logging	Logging	Logging	Logging	Neither	
9,235194	Neither	Logging	Logging	Logging	Logging	Logging	Logging	Neither	Log
10,04474	Park	Park	Logging	Park					
11,39306	Park	Park	Logging	Park	Park				
11,76157	Park	Neither	Logging	Logging	Park	Logging	Logging	Logging	
11,76466	Park	Neither	Logging	Logging	Logging	Logging	Logging	Logging	Ne
12,26400	Park	Neither	Logging	Logging	Park	Logging	Logging	Logging	
13,19922	Park	Neither	Logging	Logging	Park	Logging	Logging	Logging	
14,49395	Park	Neither	Logging	Logging	Park	Logging	Logging	Logging	

Joining Results: species diversity.sta

Number of variables: 6  
Number of cases: 24  
Joining of cases  
Missing data were casewise deleted  
Amalgamation (joining) rule: Single Linkage  
Distance metric is: Euclidean distances (non-standardized)

Quick | Advanced

- Horizontal hierarchical tree plot
- Vertical icicle plot
- Rectangular branches
- Scale tree to dlink/dmax\*100
- Amalgamation schedule
- Graph of amalgamation schedule

- Distance matrix
- Descriptive statistics
- Matrix
- Save classifications
- Sort by cluster membership

Summary

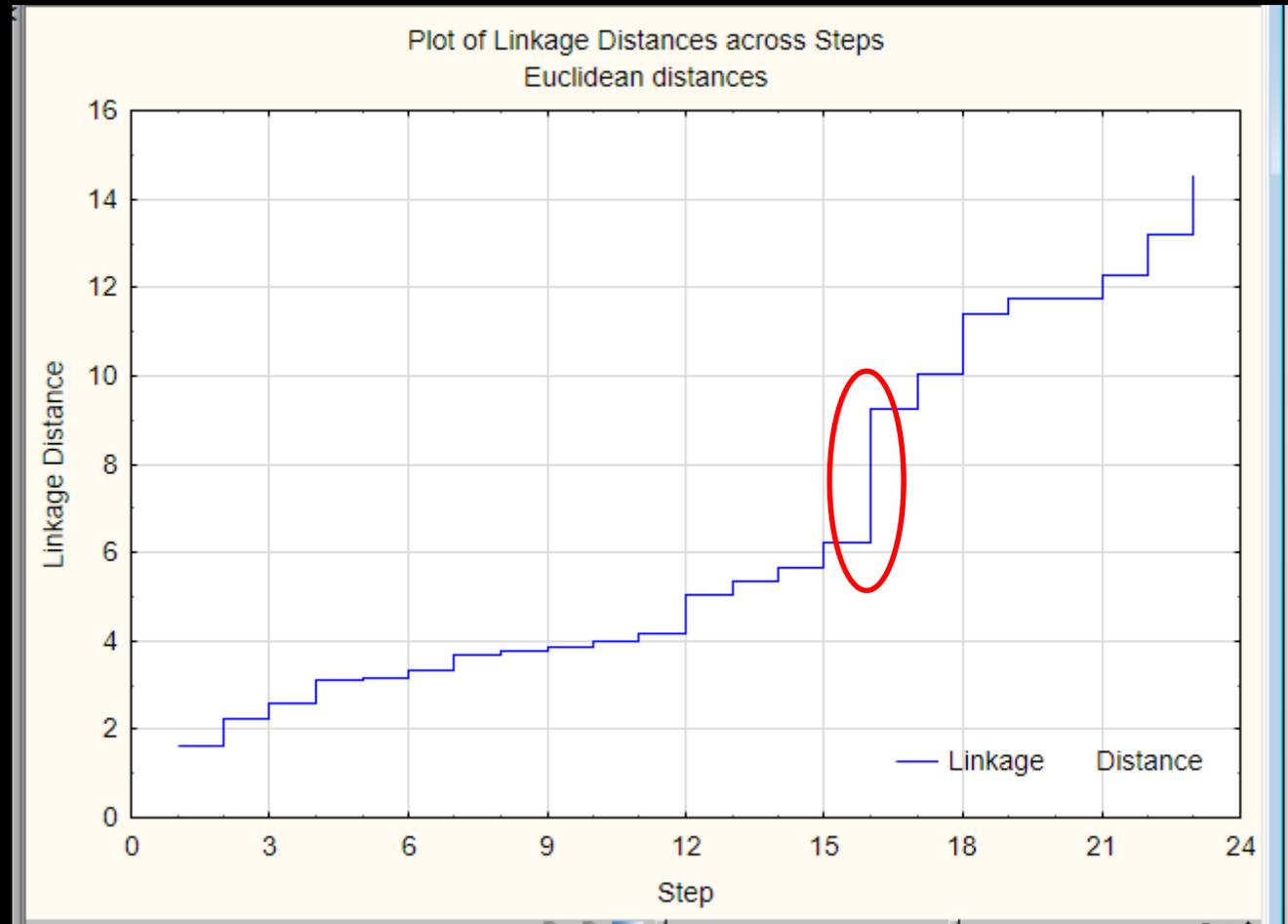
Cancel

Options

By Group



# Кластерный анализ



По этому графику можно посмотреть, на каком расстоянии происходят скачки в дистанциях присоединения. Если такие скачки есть, значит, есть и кластеры.

## Кластерный анализ

**Неиерархический метод: метод K-средних (k-means clustering)**

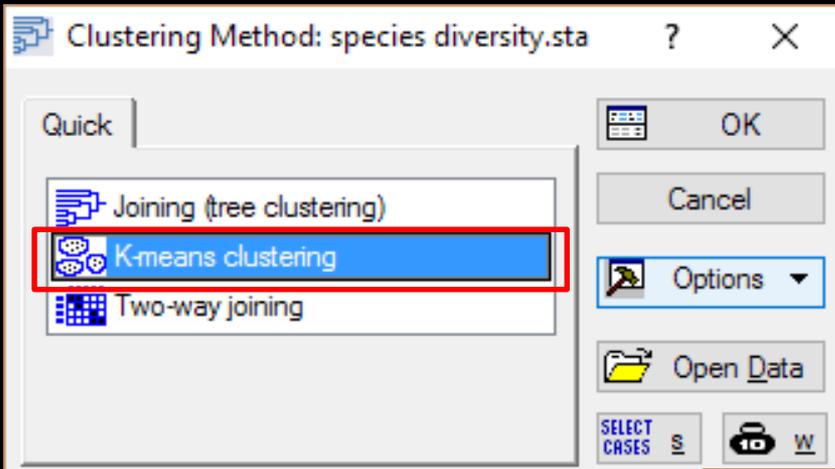
– начинает с одиночных объектов, но в процессе объединения объекты могут быть **перегруппированы**. Они организуются в **заданное число групп (k)**.

Объекты перераспределяются в кластеры в ходе нескольких итераций, так, чтобы кластеры различались как можно сильнее.

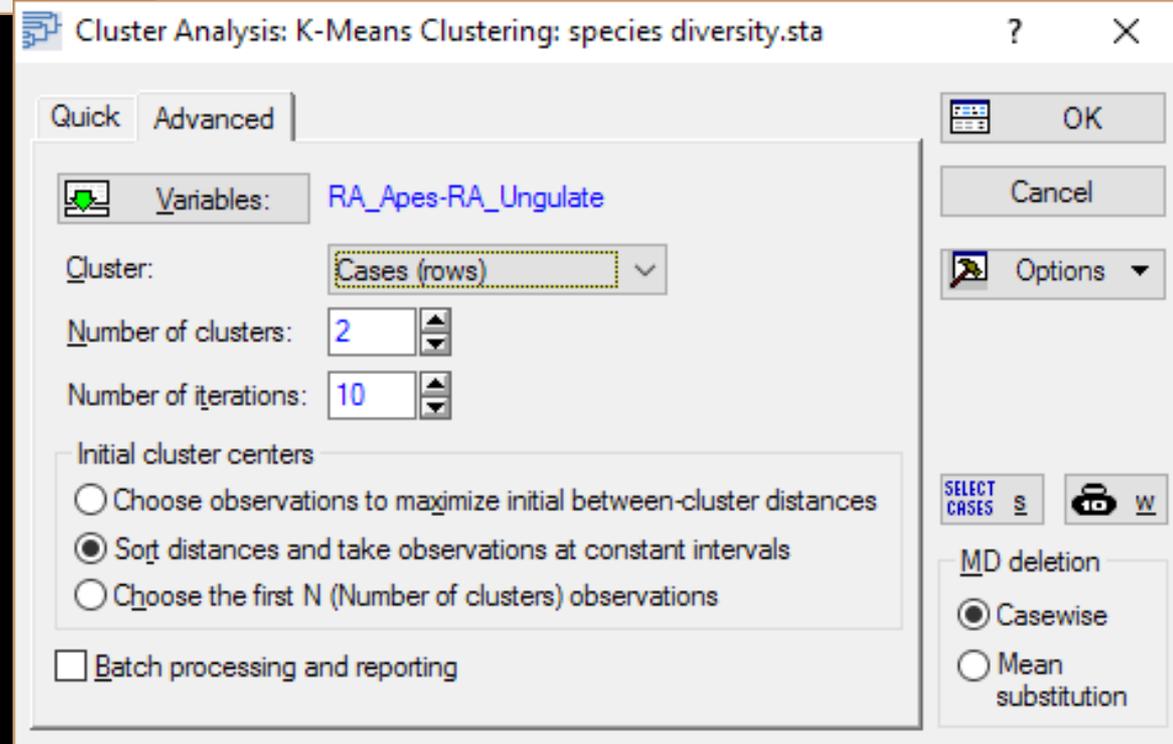
*Можно выбирать метод, который даёт лучший результат.*

Разобьём трансекты из Африки на 2 кластера

# Кластерный анализ



Выбираем переменные и задаем число групп



# Кластерный анализ

Variable	Cluster Means (species	
	Cluster No. 1	Cluster No. 2
RA_Apes	2,16302	1,90510
RA_Birds	48,10677	71,09298
RA_Elephant	0,54106	0,55071
RA_Monkeys	40,70191	20,17682
RA_Rodent	2,51893	4,17513
RA_Ungulate	5,95253	2,05563

k - Means Clustering Results: species diversity.sta

Number of variables: 6  
Number of cases: 24  
K-means clustering of cases  
Missing data were casewise deleted  
Number of clusters: 2  
Solution was obtained after 1 iterations

Quick | Advanced

Summary: Cluster means & Euclidean distances  
Analysis of variance  
Graph of means  
Descriptive statistics for each cluster  
Members of each cluster & distances  
Save classifications and distances

Cancel  
Options  
By Group

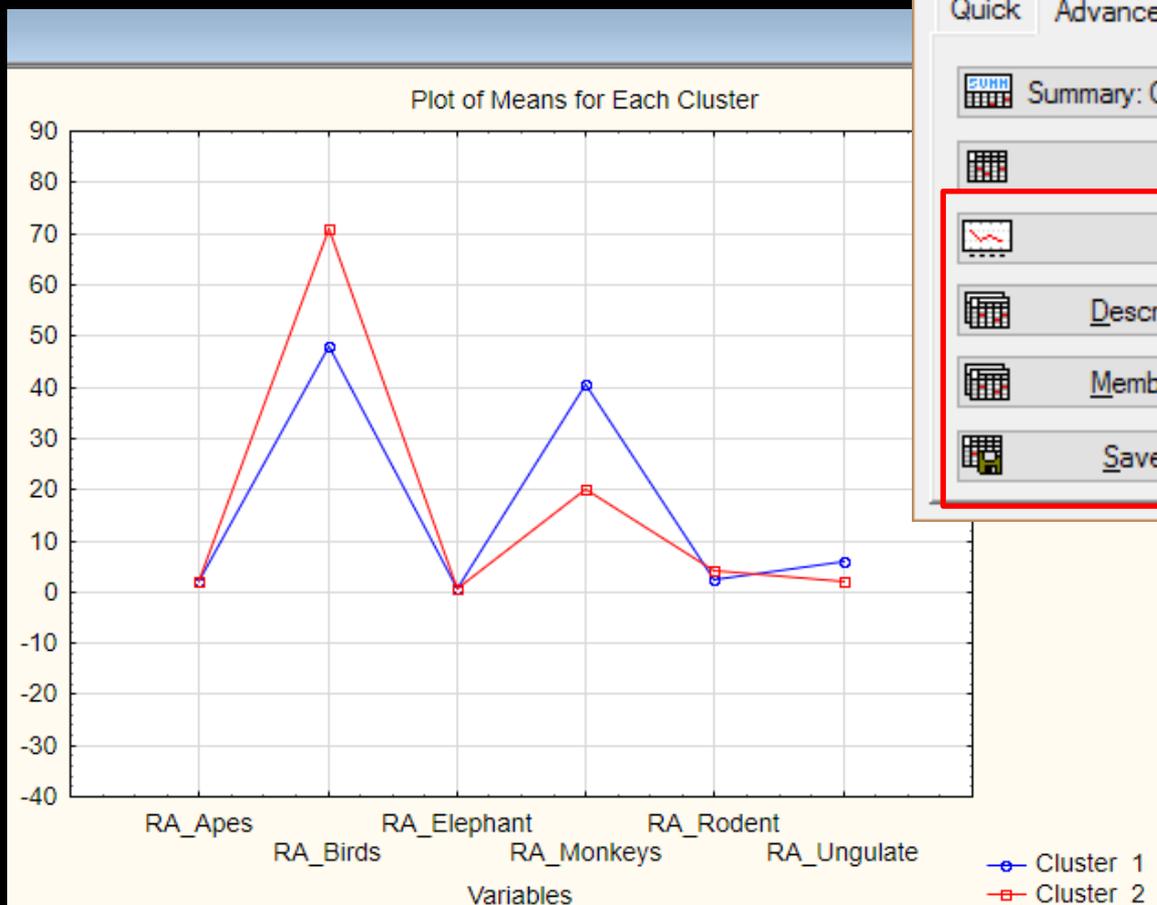
Программа получила 2 кластера; посмотрим, какие переменные принимают в них какие значения

Variable	Analysis of Variance (species diversity.sta)					
	Between SS	df	Within SS	df	F	signif. p
RA_Apes	0,396	1	211,348	22	0,04126	0,840905
RA_Birds	3148,179	1	1828,676	22	37,87437	0,000003
RA_Elephant	0,001	1	10,426	22	0,00117	0,973006
RA_Monkeys	2510,123	1	1012,611	22	54,53497	0,000000
RA_Rodent	16,344	1	33,430	22	10,75572	0,003424
RA_Ungulate	90,482	1	337,412	22	5,89964	0,023768

Можно посмотреть, по каким переменным различия между кластерами достоверны

# Кластерный анализ

Видно, по каким переменным различаются кластеры



k - Means Clustering Results: species diversity.sta

Number of variables: 6  
Number of cases: 24  
K-means clustering of cases  
Missing data were casewise deleted  
Number of clusters: 2  
Solution was obtained after 1 iterations

Quick | Advanced

Summary

Cancel

Options

By Group

Summary: Cluster means & Euclidean distances

Analysis of variance

Graph of means

Descriptive statistics for each cluster

Members of each cluster & distances

Save classifications and distances

Можно сохранить в новый файл классификацию объектов в кластеры

## Кластерный анализ

Members of Cluster Number 1 (species diversity and Distances from Respective Cluster Center Cluster contains 13 cases)	
linkage	Distance
Park	2,558751
Park	6,103410
Park	5,562892
Park	2,495944
Park	5,131427
Park	3,461835
Logging	7,147769
Neither	4,702465
Logging	4,744735
Logging	4,592163
Logging	3,515239
Park	8,829162
<b>Logging</b>	<b>3,827867</b>

Можно посмотреть, какие объекты попали в какой кластер



Members of Cluster Number 2 (species diversity and Distances from Respective Cluster Center Cluster contains 11 cases)	
linkage	Distance
<b>Logging</b>	<b>6,635179</b>
Neither	1,483423
Logging	8,245093
Logging	1,617373
Logging	3,301316
Neither	7,315745
Logging	1,823993
Logging	3,570219
Neither	1,887791
Logging	4,862472
Logging	2,595359

Здесь в первом кластере оказались все трансекты из нацпарков



**В методы:** если переменные были стандартизированы – написать; для метода К-средних – написать, какие переменные использовались и сколько кластеров получали.

*“To classify males according to their behavioral tactics during the mating season, we performed K-means clustering with three variables (the date of spring emergence, home range size and the number of potential female mates) and two clusters. All variables were standardized before clustering.”*

### **В результаты:**

- ✓ Для иерархического метода главный результат – картинка с деревом; в подписи – информация о том, какие дистанции использовали, как измеряли расстояния между кластерами.
- ✓ Для метода К-средних – результаты ANOVA сравнения групп; можно – картинку средних в группах; описать состав групп.

## Требования к выборкам для проведения кластерного анализа

1. В качестве исходных данных можно взять любую матрицу дистанций – **никаких ограничений и требований** к выборке!
2. Нет необходимости исключать **аутлаеры**;
3. Если переменные измерены в **разных шкалах**, их следует **стандартизировать**.

*Кластеры, полученные методом K-средних, можно использовать в дальнейшем анализе (принадлежность к кластеру – группирующая переменная)*

## Дискриминантный анализ

У нас есть *исходно существующие группы*. Мы ищем переменные, которые лучше всего их разделяют.



## Кластерный анализ

У нас есть несколько *переменных*. Мы на основе них хотим классифицировать выборку – проверить, не объединяются ли наблюдения в группы.



# Обобщённые линейные модели (Generalized linear models, GLM)

## и логистическая регрессия

В **GLM** мы анализировали действие разных (непрерывных и категориальных) предикторов на зависимую переменную.

### Зависимая переменная:

- ✓ одна;
- ✓ количественная;
- ✓ распределена нормально.

Но бывают задачи, когда зависимая переменная **качественная** или по своей сути не может иметь нормального распределения.

*GLM придуманы для анализа действия разных предикторов на зависимую переменную, имеющую строго определённое, но не обязательно нормальное распределение.*

## Generalized linear model

Варианты **зависимой переменной** (основные):

- ✓ **бинарная** (биномиальное распределение);
- ✓ дискретная количественная (распределение Пуассона);
- ✓ нормальное распределение (тоже можно использовать).

*Примеры с **бинарной** переменной:*

- ✓ Как от массы тела, возраста, социального положения, показателей крови матери зависит пол ребёнка?
- ✓ Как масса тела и количество сибсов влияют на вероятность дожить до года у детёныша (переменная выжил/не выжил).
- ✓ Как местообитание, плотность популяции, пол, возраст влияют на заболеваемость Болезнью X? (есть/нет антитела X)

*Примеры с распределением **Пуассона**:*

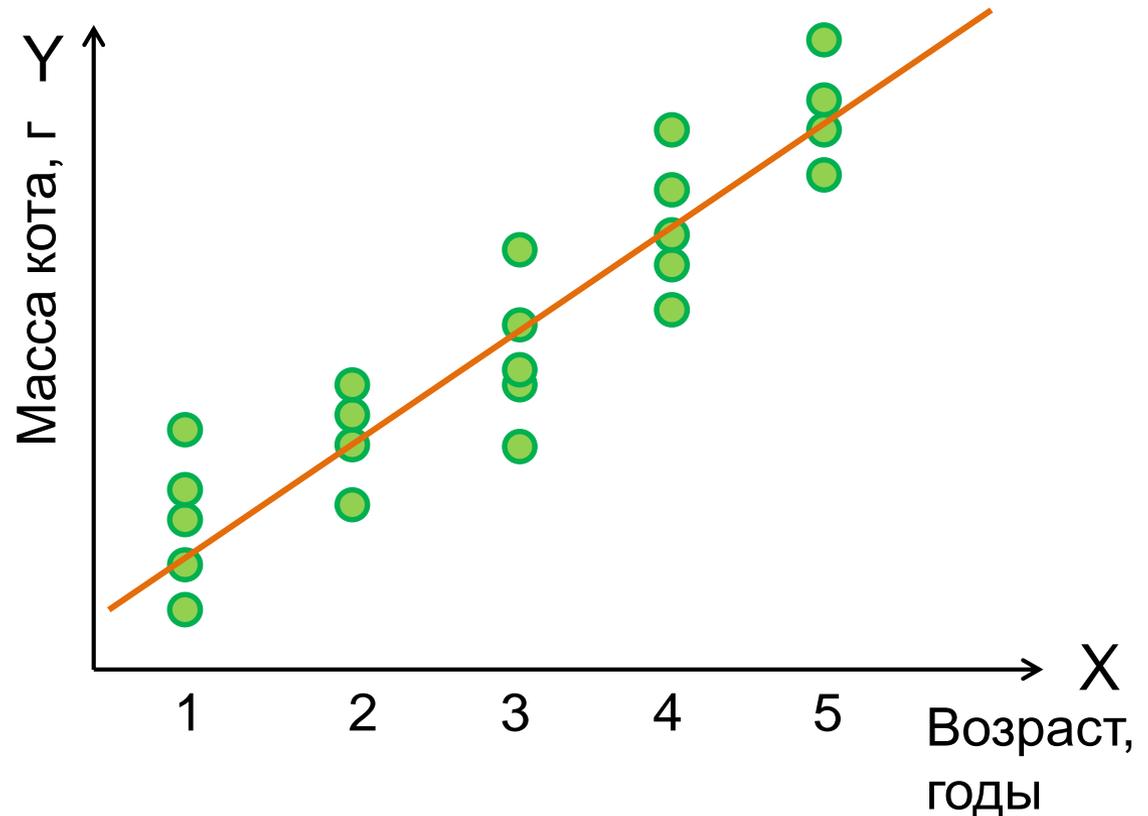
- ✓ Как от pH, освещённости, концентрации разных ионов зависит количество зелёных водорослей в пробе воды?
- ✓ Как тип субстрата влияет на число норок пескожила на 1 м<sup>2</sup>?



# Generalized linear model

Модель GLM:

$$Y = a + bX + e$$



Нормальная линейная связь.

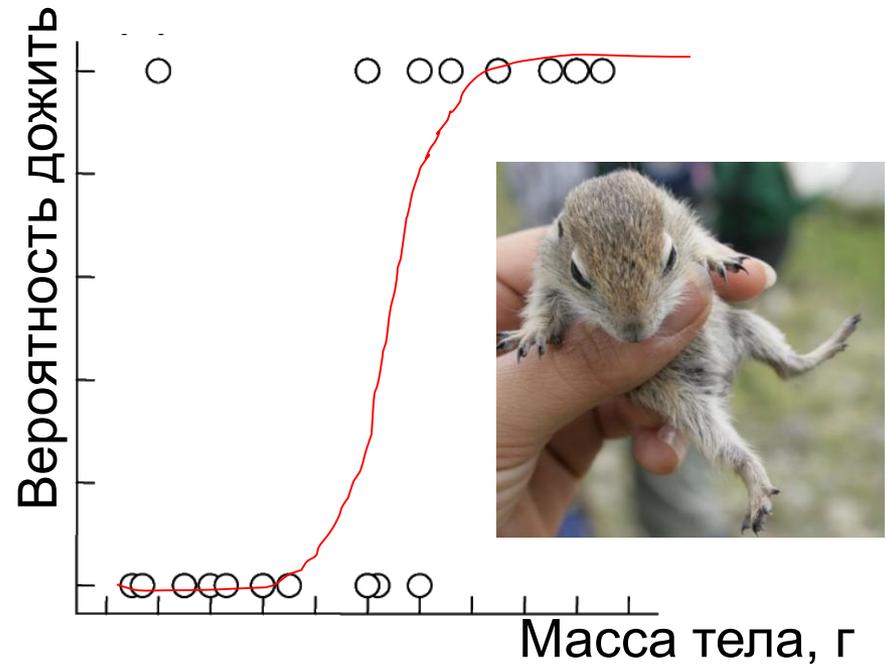
2 составляющие: **зависимая переменная + предикторы** (количественные и категориальные).

# Generalized linear model

## Модель GLZ

**Пример:** проверим, как масса детёныша суслика (в конце лактации) влияет на вероятность дожить до расселения? (умер – 0, дожил - 1)

$$f(Y) = a + bX + e$$



Связь переменных явно **не линейная**.

**3 составляющие:** зависимая переменная + предикторы (количественные и категориальные) + **ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ФУНКЦИЯ** (связующая = link function).

Связующая функция нужна чтобы выправить эту кривую зависимость, сделать её линейной (можно было бы просто построить нелинейную зависимость, но анализировать её намного сложнее).

## Generalized linear model

### Link functions:

Для **нормального** распределения – не нужна (в модели выбирается identity link).

**Бинарная** переменная (биномиальное распределение) – logit link.  $f(Y) = \log(Y/(1-Y))$ , где  $Y$  – вероятность 1.

Дискретная переменная (распределение **Пуассона**) – log link,  $f(Y) = \log(Y)$

В результате получается **ЛИНЕЙНАЯ** модель, в которой нужно оценить **коэффициенты** при  $X$  (предикторах).

Оценка коэффициентов итеративным путем.

# Generalized linear model

Предикторов может быть много.

Тестирование гипотез о коэффициентах -

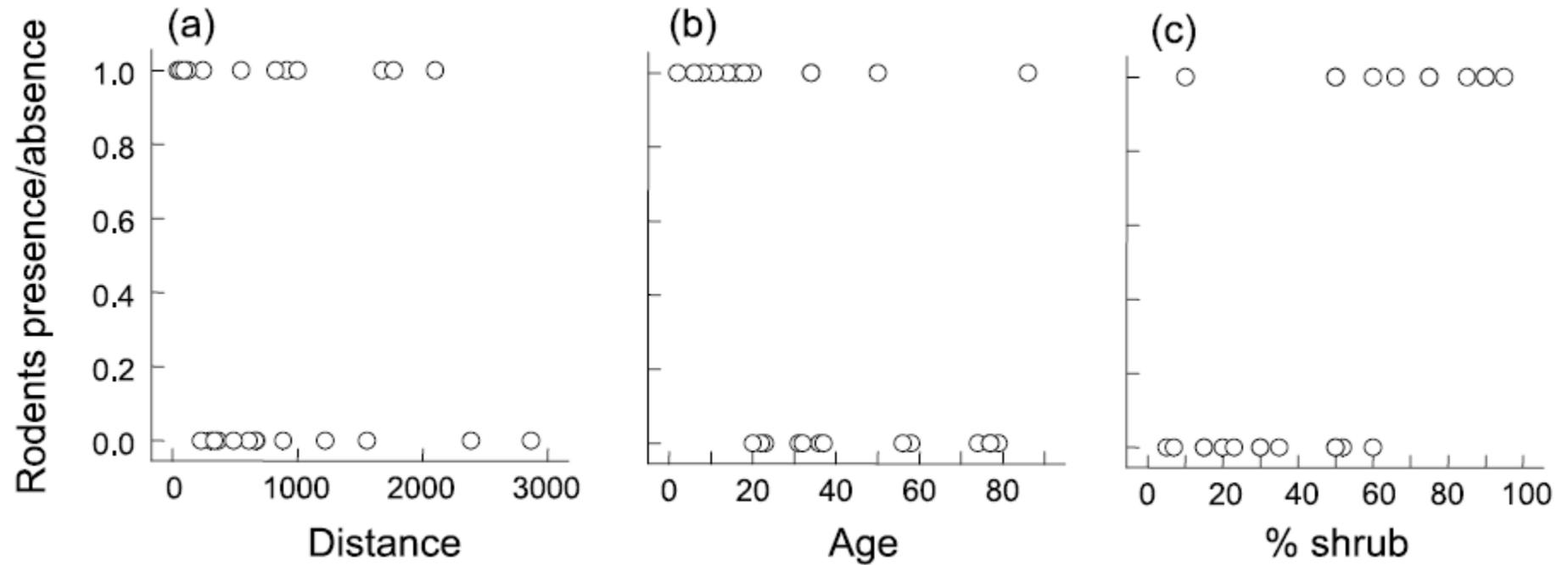
$$\begin{aligned} H_0: \beta &= 0 \\ H_1: \beta &\neq 0 \end{aligned}$$

1. **Тест Вальда** (Wald statistics) – аналог т-теста, основанный на методах максимального правдоподобия.

$$\frac{b_1}{s_{b_1}}$$

2. **Сравнение качества** полной модели и редуцированной (без соответствующего предиктора) на основе residuals (как в линейных моделях) – likelihood ratio test = **G<sup>2</sup> test**, **статистика хи-квадрат** (тоже методами максимального правдоподобия)

## Generalized linear model



В этой модели проверялось влияние расстояния до другого подходящего местообитания, возраста, доли кустарников на присутствие грызунов на данной территории.

Достоверна только связь с)



## Generalized linear model

### Информационные критерии –

Позволяют выбрать **лучшую модель** из нескольких моделей (например, из всех возможных сочетаний предикторов).

**Лучшая модель** та, которая:

- ✓ наилучшим образом описывает изменчивость зависимой переменной;
- ✓ включает наименьшее число факторов.

**Критерий Акаике (AIC)** – позволяет выбрать лучшую модель: у лучшей модели значение AIC минимально.

# Generalized linear model

Как выживание яйца ящерицы зависит от его массы, даты кладки и местообитания?  
Зависимая переменная - бинарная

The screenshot shows the Statistica software interface. The 'Advanced Linear/Nonlinear Models' menu is open, with 'Generalized Linear/Nonlinear Models' selected. Below the menu, a data table is visible with columns 'Maternal ID' and 'Egg'.

Maternal ID	Egg
1	62

The dialog box for 'Generalized Linear/Nonlinear Models' is shown. The 'Type of analysis' list includes 'General custom designs'. The 'Specification method' is 'Quick specs dialog'. The 'Distribution' is set to 'Binomial' (highlighted with a red box). The 'Link functions' list includes 'Logit' (highlighted with a red box). The 'Dispersion Param' is 0, 'Index Param' is 1.5, and 'Power parameter' is 2.



# Generalized linear model

## Выбор переменных

GLZ General custom design: Lizards Pearson Warner dataset (Biol Lett- fi... ? X

Quick | Advanced

Variables

Dependent variable: Egg Survival  
Count variable: none  
Categorical factors: Habitat  
Continuous predictors: 3 6

Response codes: N : code for occurring the event (typically 1); Y...

Factor codes: selected

Between effects: "Oviposition Julian date" + "Egg Mass (g)" + "Habitat"

OK  
Cancel  
Options  
Syntax editor

GLZ -- Results: Analysis 1: L... ? X

Summary | Resid.1 | Resid.2 | Means | Report

Summary of all effects

Type 1 LR test  
Type 3 LR test  
Cell statistics  
Design term  
V-C matrix  
Corr. matrix

Estimates  
Conf. intervals  
Iter. results

Sign. lev: .05  
Conf. limit: 95

Sample  
Analysis | Cross-validation | Both

Warner dataset (Biol Lett- final).sta

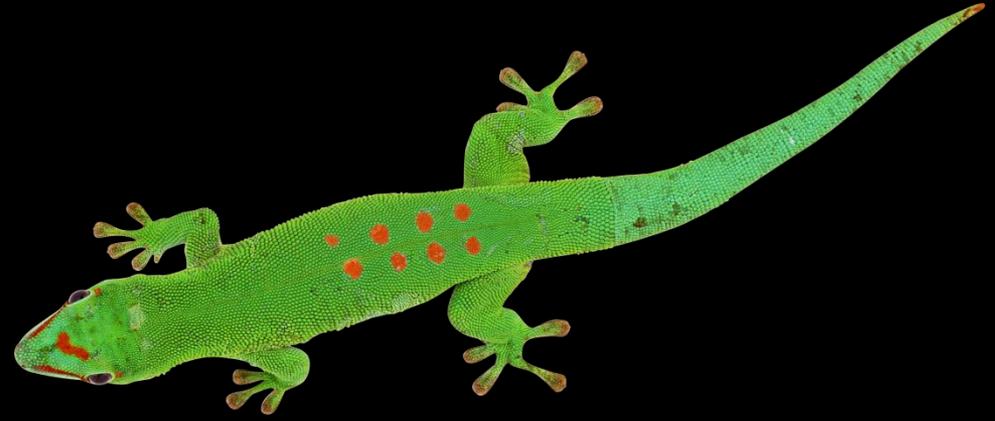
В статью – оценки коэффициентов, их ошибки, значения статистики Вальда и  $p$

Egg Survival - Parameter estimates (Lizards Pearson Warner dataset (Biol Lett- final).sta)  
Distribution : BINOMIAL, Link function: LOGIT  
Modeled probability that Egg Survival = N

Effect	Level of Effect	Column	Estimate	Standard Error	Wald Stat.	Lower CL 95,0%	Upper CL 95,0%	p
Intercept		1	115,9495	243,8906	0,226020	-362,067	593,9664	0,634490
Oviposition Julian date		2	-0,0086	0,0184	0,218952	-0,045	0,0274	0,639840
Egg Mass (g)		3	-20,1080	10,3138	3,800994	-40,323	0,1067	0,051222
Habitat	Shade	4	-0,0099	0,2580	0,001463	-0,515	0,4957	0,969484
Scale			1,0000	0,0000		1,000	1,0000	

# Generalized linear model

Likelihood ratio test – альтернатива статистике Вальда.  
Предпочтителен для малых выборок! Имеет большую мощность.



GLZ -- Results: Analysis 1: L... ?

Summary | Resid.1 | Resid.2 | Means | Report

Summary of all effects

- Type 1 LR test
- Type 3 LR test
- Cell statistics
- Design term
- V-C matrix
- Corr. matrix
- Estimates
- Conf. intervals
- Iter. results

Sign. lev: .05

Conf. limit: 95

Sample

Analysis  Cross-validation  Both

Goodness of fit

HL Groups: 10

Aggregation

Raw data

Overdispersion

Pearson Chi<sup>2</sup>

Deviance

Modify Close

By Group Options

Egg Survival - Likelihood Type 1 Test (Lizards Pears  
Distribution : BINOMIAL, Link function: LOGIT  
Modeled probability that Egg Survival = N

Effect	Degr. of Freedom	Log-Likelihood	Chi-Square	p
Intercept	1	-51,7499		
Oviposition Julian date	1	-51,7469	0,005887	0,938841
Egg Mass (g)	1	-49,6094	4,275175	0,038673
Habitat	1	-49,6086	0,001464	0,969480

# Generalized linear model

## Критерий Акаике и выбор лучшей модели

GLZ General custom design: Lizards Pearson Warner dataset (Biol Lett- fi... ? X

Quick: **Advanced**

Parametrization  
 Sigma-restricted  Overparameterized  Ref  Set reference level

Estimation  
 No intercept  
 User-def. start values  
Sweep delta: 1.E-7  
Max. iterations: 100  
Converge: 1.E-7

Model building  
 All effects  
 Forward stepwise  
 Backward stepwise  
 Forward entry  
 Backward removal  
 Best subsets

p1, enter:   
p2, remove:   
Max. steps:   
Max. subsets: 200  
 Likelihood score  
 Likelihood  
 Akaike IC

Offset: none Cross-validation: off

OK Cancel Options Syntax editor

GLZ -- Results: Analysis 2: L... ? X

Summary Resid.1 Resid.2 Means Report

**Results for model building**  
**Model building**

Results for all effects  
Summary of all effects

Type 1 LR test Estimates  
Type 3 LR test Conf. intervals  
Cell statistics Iter. results  
Corr. matrix Sign. lev: .05  
V-C matrix Conf. limit: 95

Sample  
 Analysis  Cross-validation  Both

Goodness of fit Raw data  
L Groups: 10  
Aggregation  
Overdispersion  
Pearson Chi<sup>2</sup>  
Deviance

Modify Close  
By Group Options

Egg Survival - Model building results (Lizards Pearson Warner dataset (Biol Lett- final).sta)  
Distribution : BINOMIAL, Link function: LOGIT  
Modeled probability that Egg Survival = N (Analysis sample)

	Var. 1	Var. 2	Var. 3	Degr. of Freedom	AIC	L.Ratio Chi?	p
1	Egg Mass (g)			1	103,436662	4,063113	0,043830
2	Oviposition Julian date	Egg Mass (g)		2	105,218713	4,281062	0,117592
3	Egg Mass (g)	Habitat		2	105,436362	4,063412	0,131112
4	Oviposition Julian date	Egg Mass (g)	Habitat	3	107,217249	4,282526	0,232528
5	Habitat			1	107,364633	0,135142	0,713159
6	Oviposition Julian date			1	107,493888	0,005887	0,938841
7	Oviposition Julian date	Habitat		2	109,362798	0,136977	0,933804

В лучшую модель вошла только масса яйца. В статью – вся табличка



**В методы:** использовали обобщённые линейные модели для оценки влияния А на Б. Значимость эффектов оценивалась на основе статистики Вальда (или теста отношения правдоподобия, Likelihood ratio test). Выбор лучшей модели осуществлялся с помощью информационного критерия Акаике.

### **В результаты:**

- ✓ Можно привести просто коэффициенты, их ошибки, статистику Вальда (или хи-квадрат из Likelihood ratio test) и  $p$ .
- ✓ Если проводим процедуру выбора лучшей модели, приводим табличку с моделями, значениями минимального АИС и для каждой модели – разницы ее АИС с минимальным;  $df$ ;  $p$  не обязательно.

## Требования к выборкам для проведения GLZ

1. Нельзя брать какую попало зависимую переменную, её распределение должно быть известно. (проще всего с бинарными и нормально распределенными)
2. Следует исключить предикторы, сильно коррелирующие с другими.
3. Размер выборок: как и для АНОВы, в группах не должно быть меньше 10 измерений. Чем больше количественных переменных, тем больше выборка.

## *К практическому занятию*

MDS – Cars

Cluster – Cars

GLZ - Crabs