Wahrscheinlichkeitsrechnung und Statistik für Biologen
Diskriminanzanalyse

Martin Hutzenthaler & Dirk Metzler

http://evol.bio.lmu.de/_statgen

11. Juli 2012

Übersicht

Übersicht

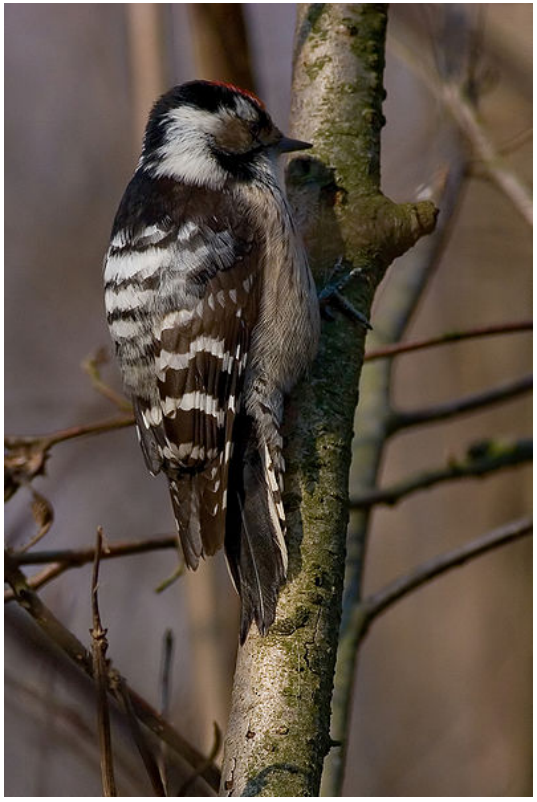


photo (c) Thermos

(Bild zeigt einen Kleinspecht (*Picoides minor*))

Man kann die Geschlechter optisch unterscheiden.

Man kann die Geschlechter optisch unterscheiden.

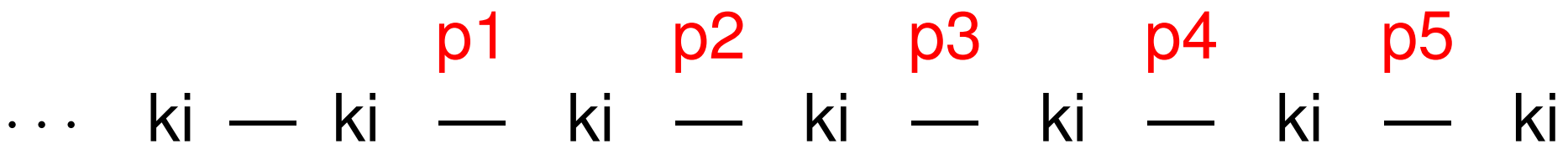
Frage: Geht es auch akustisch?

Ruf des Kleinspechts:

$\cdots$ ki — ki — ki — ki — ki — ki — ki

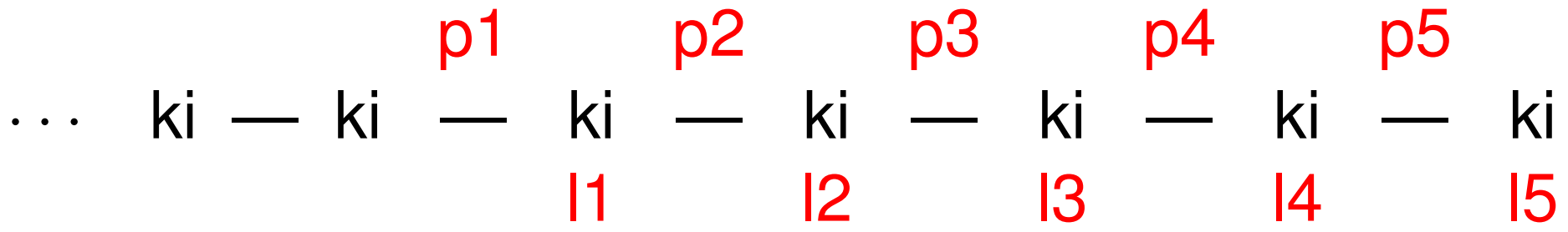
Ruf des Kleinspechts:

Längen der letzten fünf Pausen



Ruf des Kleinspechts:

Längen der letzten fünf Pausen und Laute



Frage:

Frage:

Kann man aus den Längen der Pausen und der Laute

Frage:

Kann man aus den Längen der Pausen
und der Laute

(p1, p2, p3, p4, p5, l1, l2, l3, l4, l5)

Frage:

Kann man aus den Längen der Pausen und der Laute

(p1, p2, p3, p4, p5, l1, l2, l3, l4, l5)

das Geschlecht bestimmen?

Daten: 62 Rufe von Kleinspechten

Daten: 62 Rufe von Kleinspechten

18 Rufe von Männchen

44 Rufe von Weibchen

Daten: 62 Rufe von Kleinspechten

18 Rufe von Männchen

44 Rufe von Weibchen

Daten von Dr. Kerstin Höntsch, Frankfurt
(siehe `http:www.kleinspecht.de`)

aufbereitet von Dr. Brooks Ferebee, Frankfurt

Die Daten in computergerechter Form:

	G	p1	p2	p3	p4	p5	l1	l2	l3	l4	l5
1	1	0.1719	0.1581	0.1726	0.1785	0.1697	0.0740	0.0703	0.0674	0.0725	0.0660
2	1	0.1052	0.1175	0.0986	0.1008	0.1052	0.0957	0.1023	0.0950	0.0957	0.0943
3	1	0.1473	0.1407	0.1393	0.1407	0.1465	0.0754	0.0776	0.0769	0.0725	0.0653
4	1	0.1378	0.1400	0.1552	0.1828	0.1393	0.0718	0.0667	0.0645	0.0754	0.0747
5	1	0.1473	0.1371	0.1284	0.1509	0.1371	0.0740	0.0696	0.0725	0.0718	0.0718
6	1	0.1175	0.1451	0.1393	0.1407	0.1661	0.0740	0.0711	0.0754	0.0689	0.0565
7	1	0.1385	0.1262	0.1487	0.1407	0.1603	0.0653	0.0696	0.0747	0.0776	0.0725
8	1	0.1197	0.1146	0.1204	0.1182	0.1161	0.0783	0.0805	0.0783	0.0878	0.0696
9	1	0.1393	0.1269	0.1458	0.1429	0.1291	0.0761	0.0761	0.0769	0.0856	0.0725
10	1	0.1197	0.1204	0.1124	0.1146	0.1240	0.0754	0.0769	0.0848	0.0798	0.0645
11	1	0.1625	0.1589	0.1385	0.1502	0.1690	0.0638	0.0689	0.0696	0.0645	0.0529
12	1	0.1298	0.1465	0.1349	0.1400	0.1756	0.0812	0.0747	0.0747	0.0689	0.0602
13	1	0.1204	0.1226	0.1306	0.1465	0.1581	0.0761	0.0754	0.0674	0.0631	0.0689
14	1	0.1110	0.1081	0.1233	0.1248	0.1385	0.0732	0.0747	0.0732	0.0660	0.0587
15	1	0.1139	0.1313	0.1371	0.1589	0.1777	0.0689	0.0674	0.0682	0.0682	0.0711
16	1	0.1335	0.1168	0.1248	0.1313	0.1306	0.0718	0.0703	0.0689	0.0682	0.0667
17	1	0.1407	0.1407	0.1284	0.1400	0.1516	0.0725	0.0696	0.0740	0.0667	0.0696
18	1	0.1204	0.1182	0.1204	0.1269	0.1538	0.0805	0.0718	0.0769	0.0696	0.0645
19	2	0.1044	0.1204	0.1298	0.1393	0.1153	0.1110	0.1211	0.1342	0.0972	0.1037
20	2	0.1436	0.1342	0.1248	0.1581	0.1966	0.1451	0.1400	0.1335	0.1371	0.1240
21	2	0.0907	0.0943	0.0936	0.0936	0.1168	0.0921	0.0812	0.0798	0.0761	0.0674
22	2	0.0921	0.0979	0.1015	0.1015	0.1385	0.0827	0.0827	0.0754	0.0696	0.0653
23	2	0.1052	0.1168	0.1161	0.1306	0.1545	0.0776	0.0732	0.0725	0.0711	0.0609
24	2	0.0928	0.0936	0.0943	0.1066	0.1197	0.0819	0.0863	0.0812	0.0819	0.0805
25	2	0.1516	0.1494	0.1603	0.2140	0.1915	0.1414	0.1429	0.1306	0.1385	0.1044

...

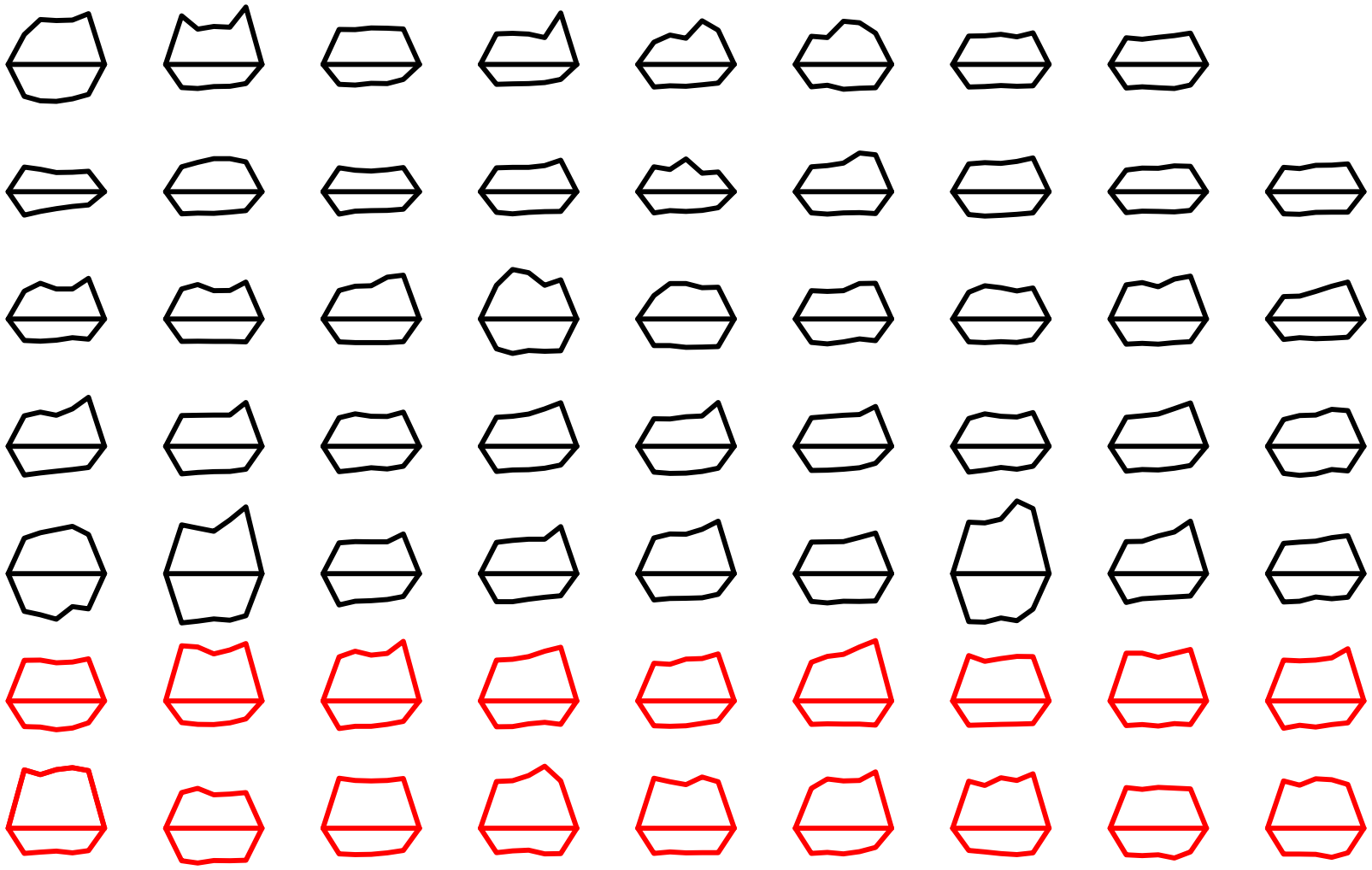
Gesucht:

Gesucht:

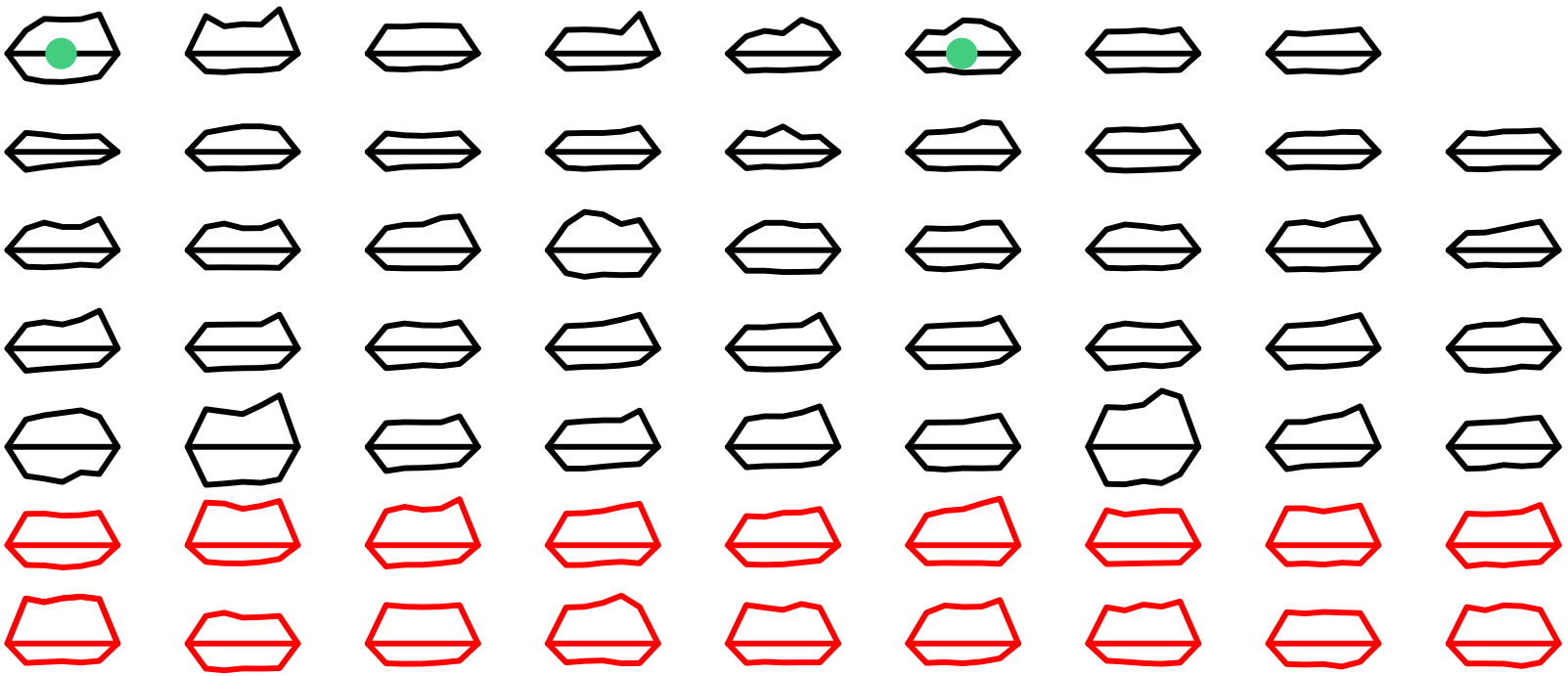
eine dem
menschlichen Gehirn gerechte
Darstellung des Vektors

(p1, p2,p3, p4,p5, l1, l2, l3, l4, l5)

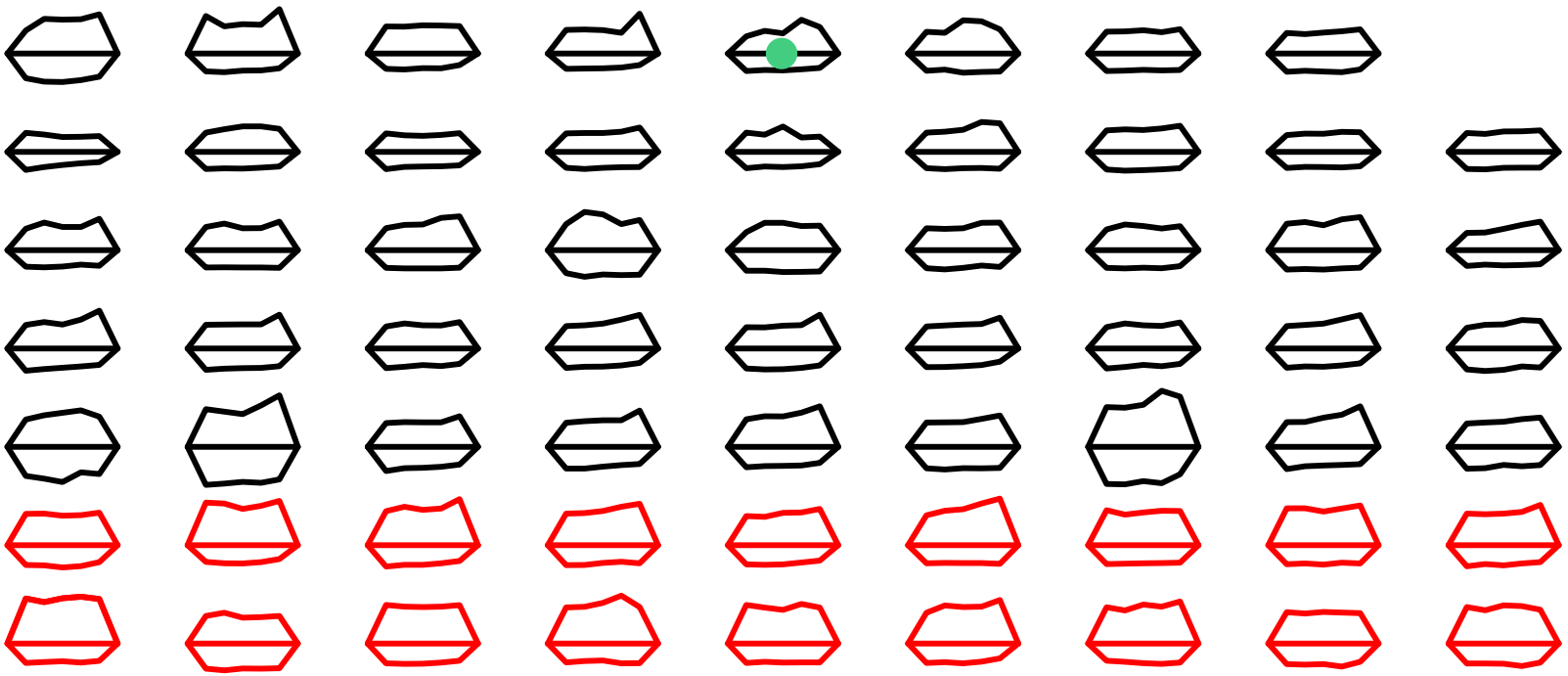
Alle 62 Rufe: rot=Männchen, schwarz=Weibchen



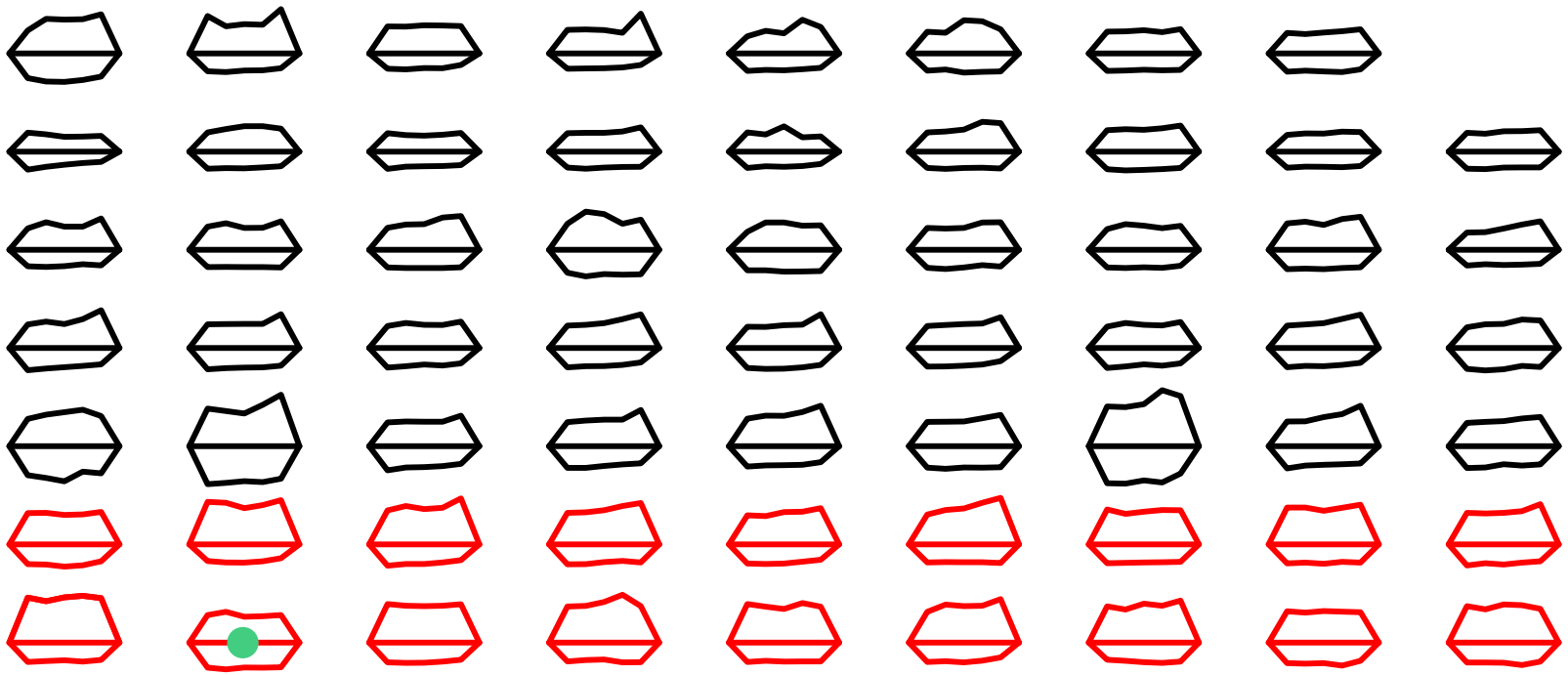
schimpfend



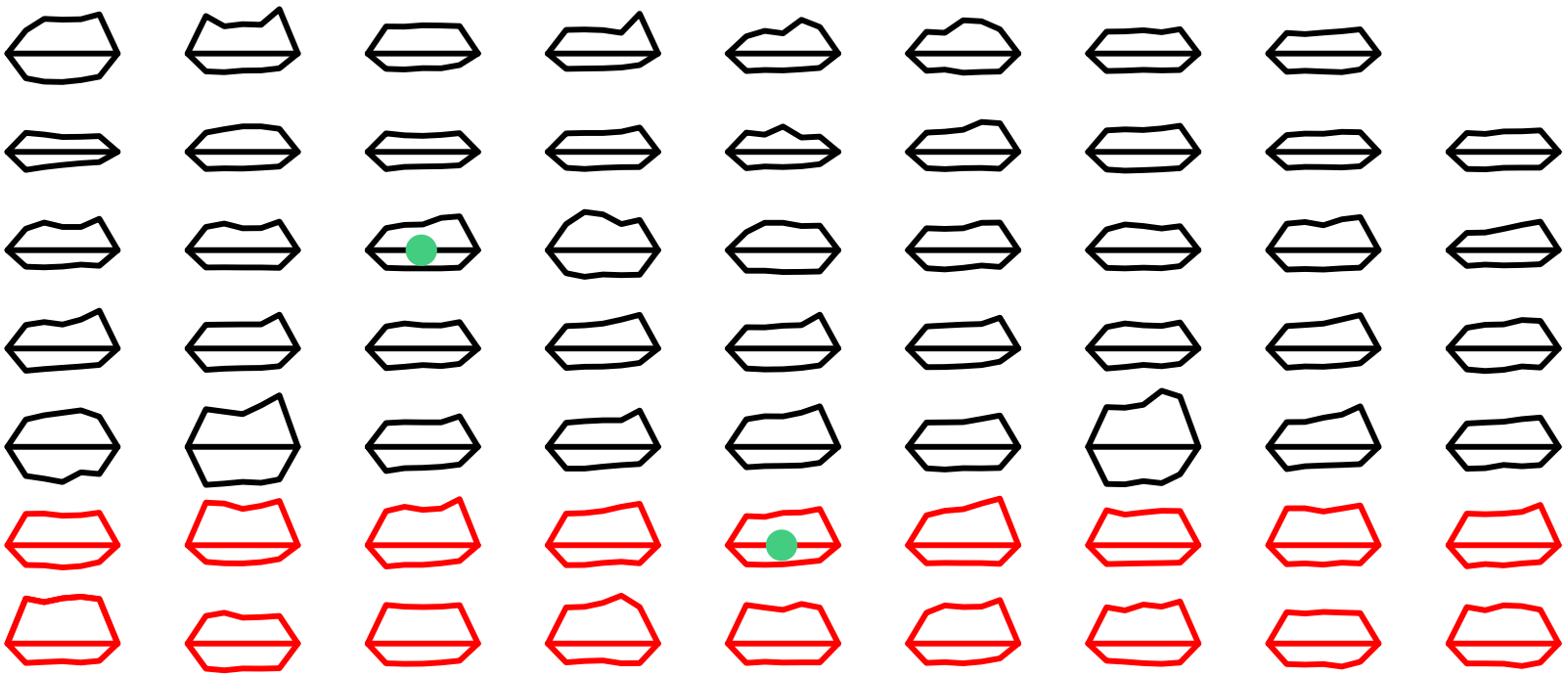
im Duett



im Duett mit seinem Jungvogel



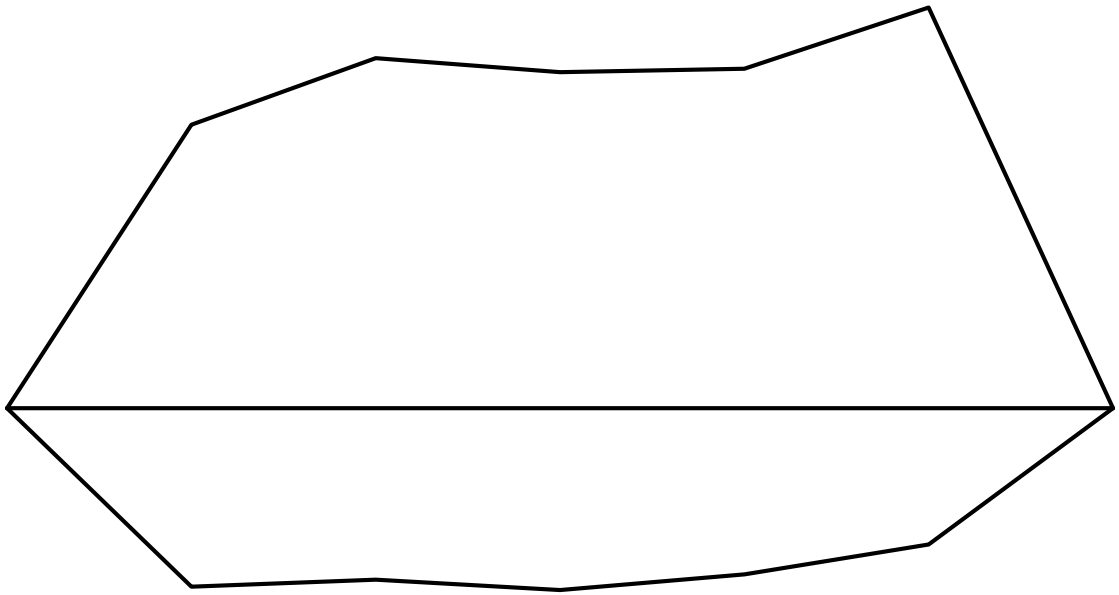
hat auch getrommelt



Partner stand in der Nähe

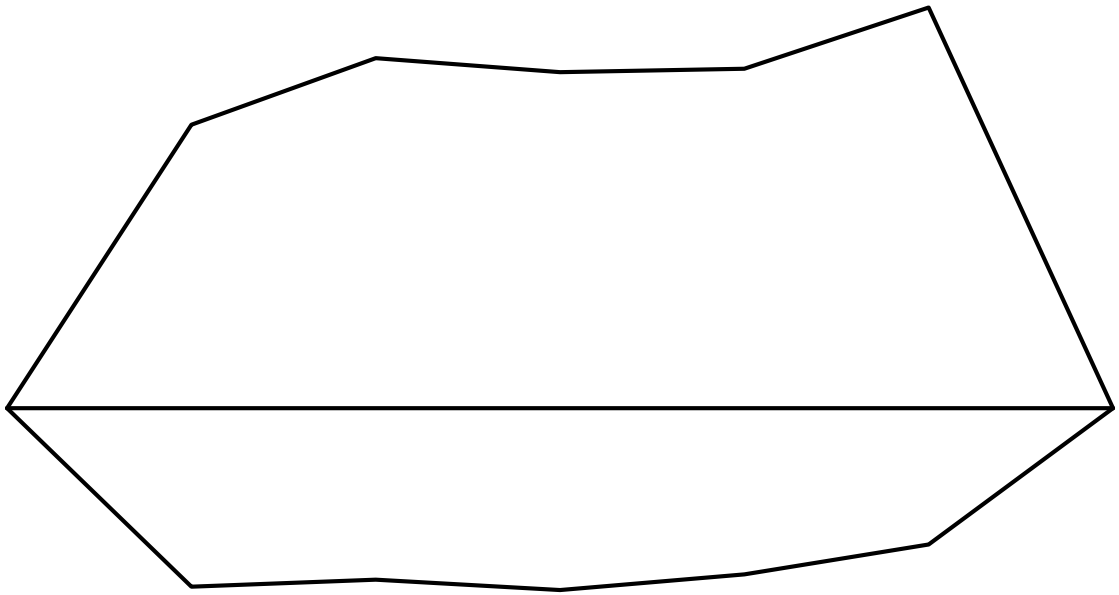
Mit dem Auge kann man Unterschiede erkennen:

Männchen oder Weibchen?

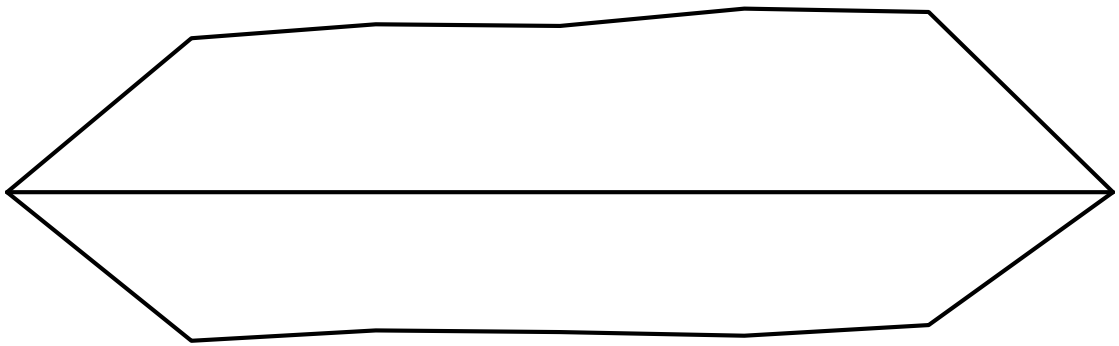


Männchen oder Weibchen?

Typisch Männchen

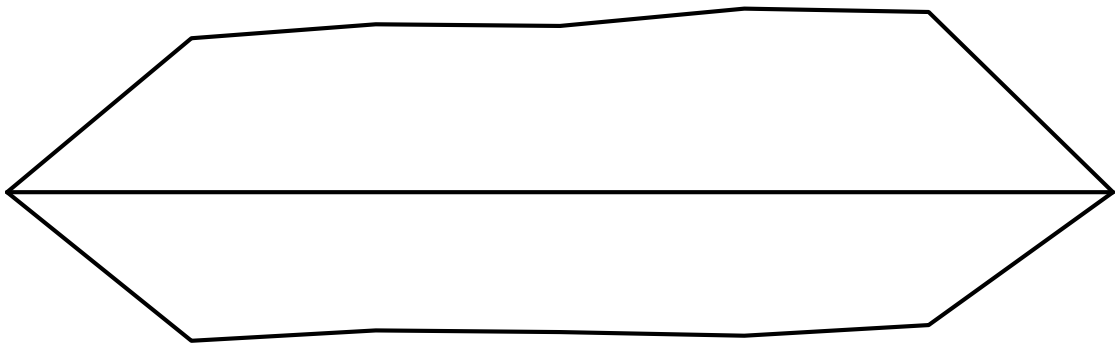


Männchen oder Weibchen?

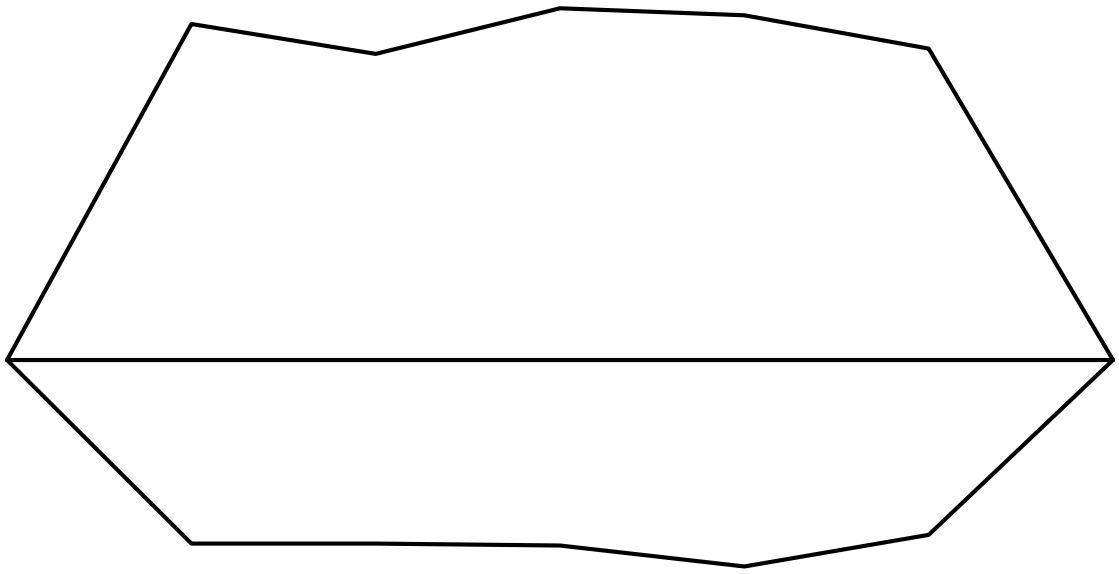


Männchen oder Weibchen?

Typisch Weibchen

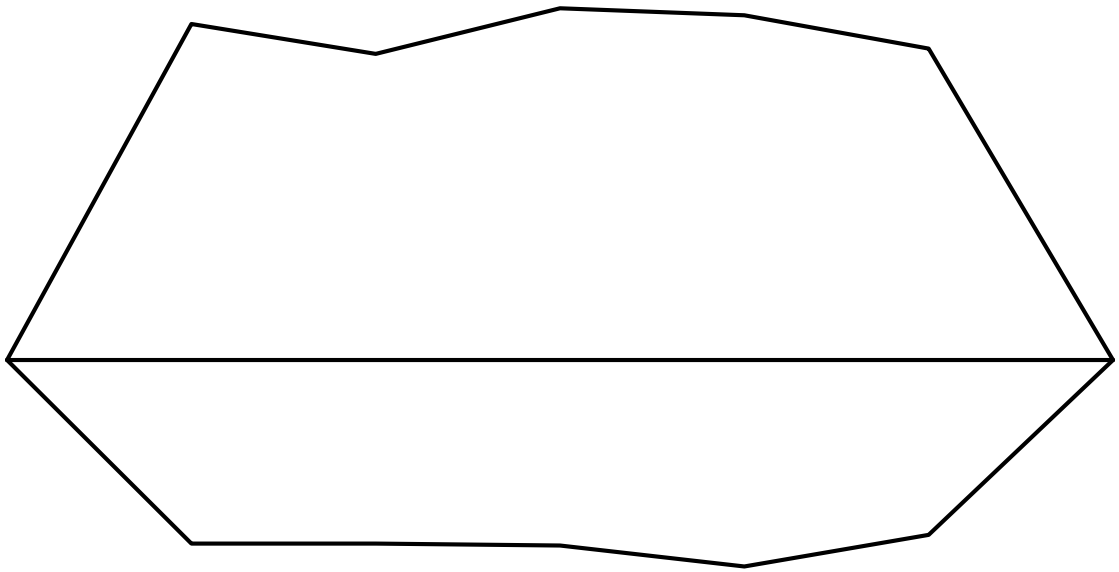


Männchen oder Weibchen?



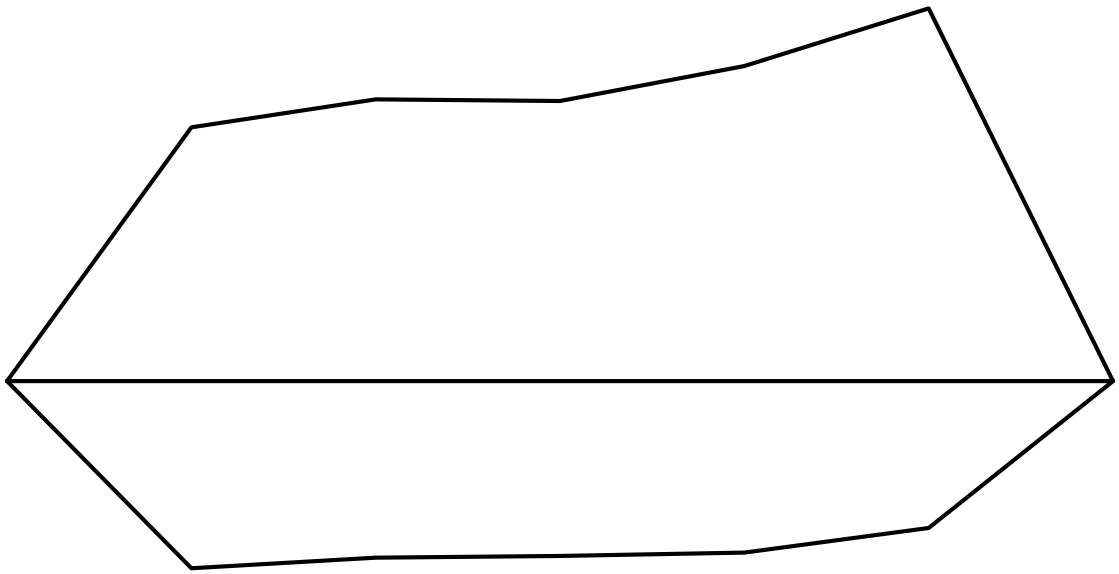
Männchen oder Weibchen?

Männchen



Manchmal ist es schwierig:

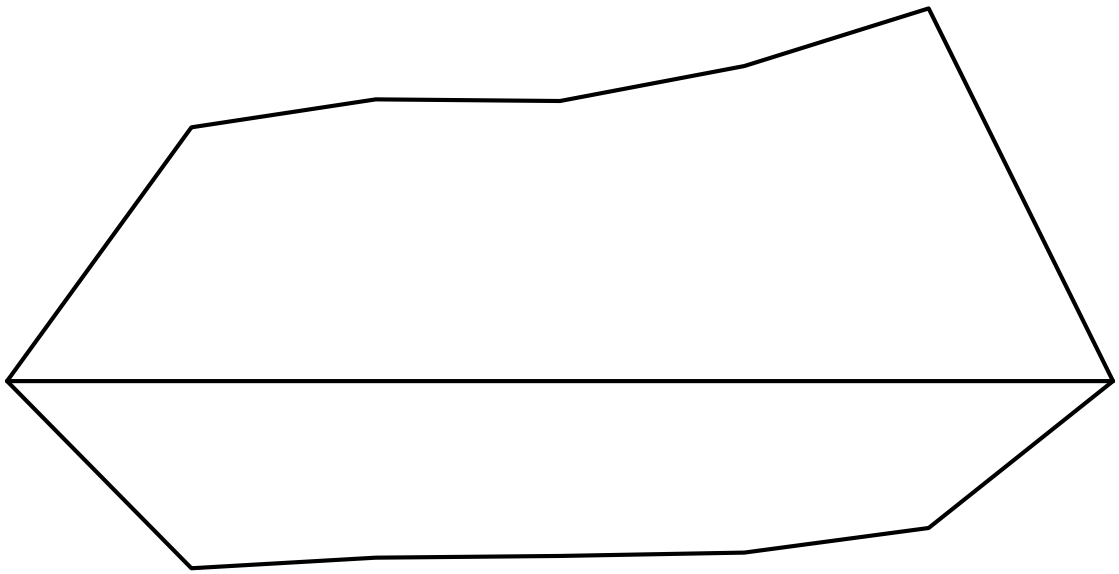
Männchen oder Weibchen?



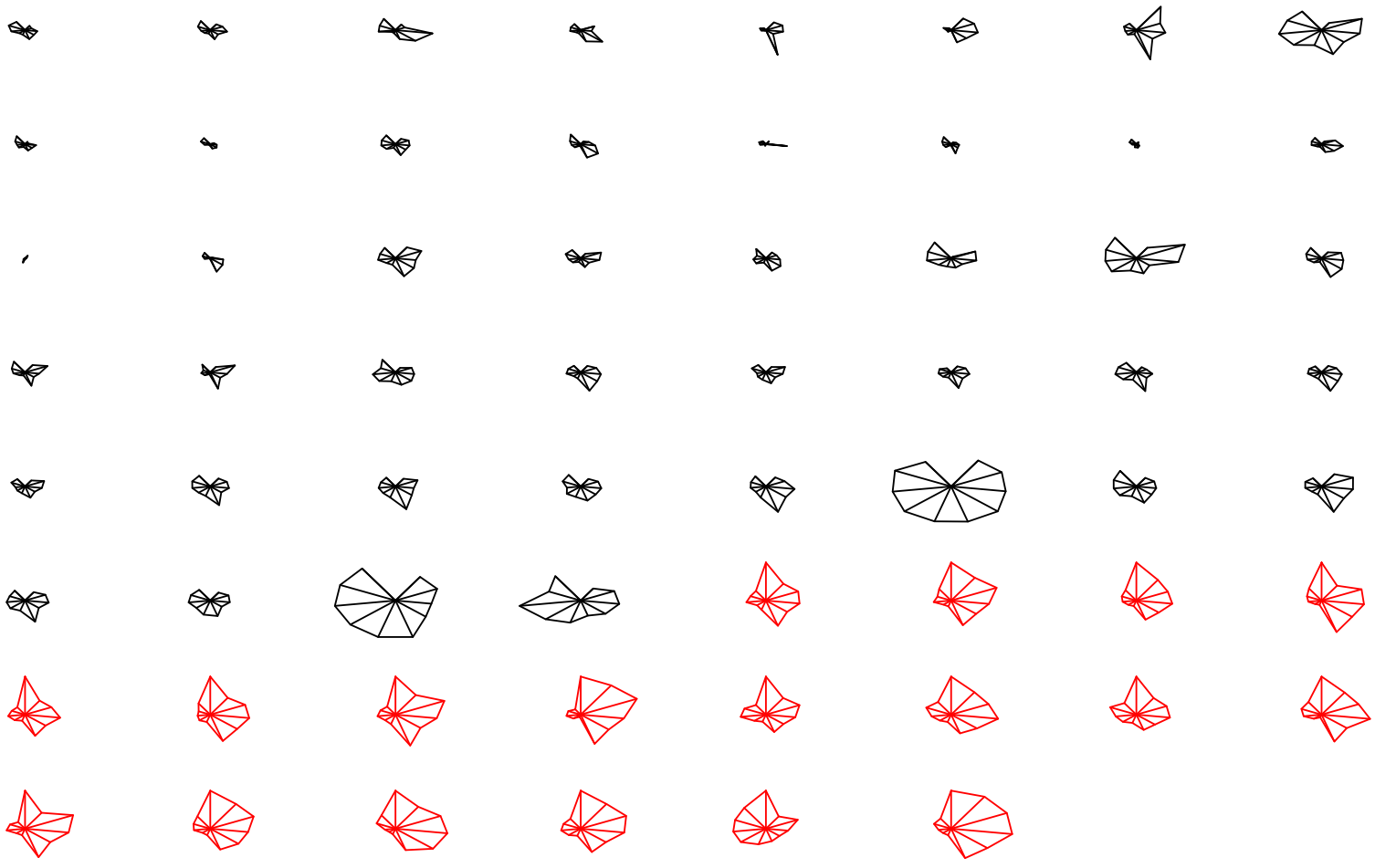
Manchmal ist es schwierig:

Männchen oder Weibchen?

Weibchen (untypisch)



Alternative Darstellungsarten mit R



Alternative Darstellungsarten mit R

```
kiki<-read.table("kiki.txt",header=TRUE)
library(symbols)
symbol(kiki,colout=1)
symbol(kiki,type="face",colout=1,facew=2,
       faceh=3, eyes=4, eyed=5, mouthw=6,
       mouthc=7, brows=8,browp=9, nosel=10,
       nosew=11, ears=2, pupils=3, body=4,
       limb1=5, limb2=6, limb3=7, limb4=8)
```

Das Auge (das Gehirn)
sieht Unterschiede.

Das Auge (das Gehirn)
sieht Unterschiede.

Schafft es der Computer auch?
(mit Hilfe der Mathematik)

Das Auge (das Gehirn)
sieht Unterschiede.

Schafft es der Computer auch?
(mit Hilfe der Mathematik)

bzw. können wir ein **reproduzierbares** Verfahren angeben?

Übersicht

Die 10 Zahlen

(p1, p2,p3, p4,p5, l1, l2, l3, l4, l5)

fassen wir als die Koordinaten eines Punktes im 10-dimensionalen Raum $\mathbb{R}^{10}$ auf.

Die 10 Zahlen

(p1, p2,p3, p4,p5, l1, l2, l3, l4, l5)

fassen wir als die Koordinaten eines Punktes im 10-dimensionalen Raum $\mathbb{R}^{10}$ auf.

Jeder Ruf entspricht einem Zufallspunkt im $\mathbb{R}^{10}$:

Die 10 Zahlen

(p1, p2,p3, p4,p5, l1, l2, l3, l4, l5)

fassen wir als die Koordinaten eines Punktes im 10-dimensionalen Raum $\mathbb{R}^{10}$ auf.

Jeder Ruf entspricht einem Zufallspunkt im $\mathbb{R}^{10}$:

Männchenrufe aus einer Population mit Dichte f_m

Die 10 Zahlen

(p1, p2,p3, p4,p5, l1, l2, l3, l4, l5)

fassen wir als die Koordinaten eines Punktes im 10-dimensionalen Raum $\mathbb{R}^{10}$ auf.

Jeder Ruf entspricht einem Zufallspunkt im $\mathbb{R}^{10}$:

Männchenrufe aus einer Population mit Dichte f_m

Weibchenrufe aus einer Population mit Dichte f_w

Die 10 Zahlen

(p1, p2,p3, p4,p5, l1, l2, l3, l4, l5)

fassen wir als die Koordinaten eines Punktes im 10-dimensionalen Raum $\mathbb{R}^{10}$ auf.

Jeder Ruf entspricht einem Zufallspunkt im $\mathbb{R}^{10}$:

Männchenrufe aus einer Population mit Dichte f_m

Weibchenrufe aus einer Population mit Dichte f_w

Gesucht: Eine Regel, die jeden neuen Punkt

x = (p1, p2,p3, p4,p5, l1, l2, l3, l4, l5)

einer der beiden Populationen zuweist.

Übersicht

Verfahren

1. Schätze f_m und f_w

Verfahren

1. Schätze f_m und f_w
2. Ordne x der Population mit dem größeren f-Wert zu.

Verfahren

1. Schätze f_m und f_w
2. Ordne x der Population mit dem größeren f-Wert zu.

Wir benutzen für f_m und f_w mehrdimensionale Normalverteilungen.

Verfahren

1. Schätze f_m und f_w
2. Ordne x der Population mit dem größeren f-Wert zu.

Wir benutzen für f_m und f_w mehrdimensionale Normalverteilungen.

Vorteil: Leicht anzupassen.

Verfahren

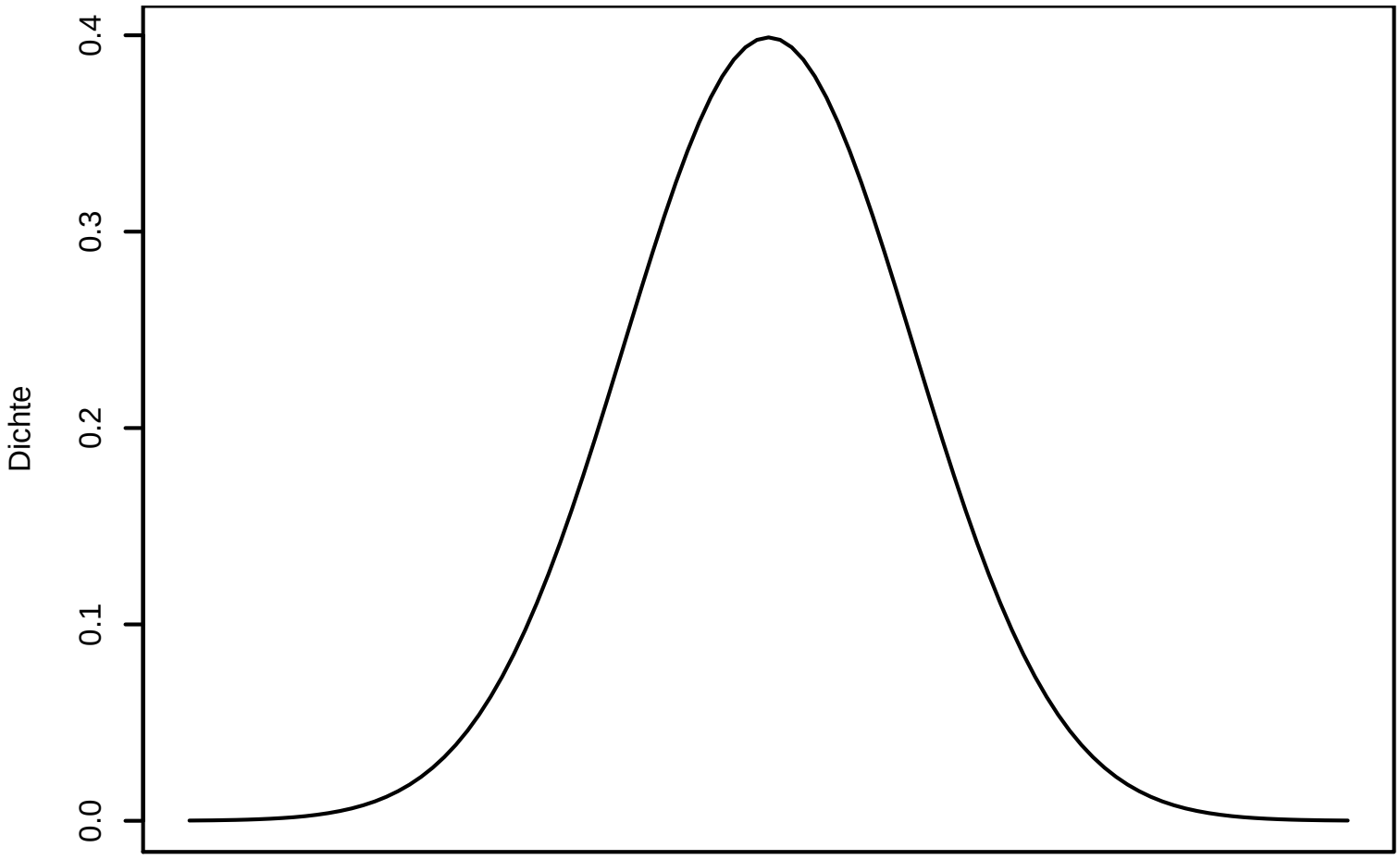
1. Schätze f_m und f_w
2. Ordne x der Population mit dem größeren f-Wert zu.

Wir benutzen für f_m und f_w mehrdimensionale Normalverteilungen.

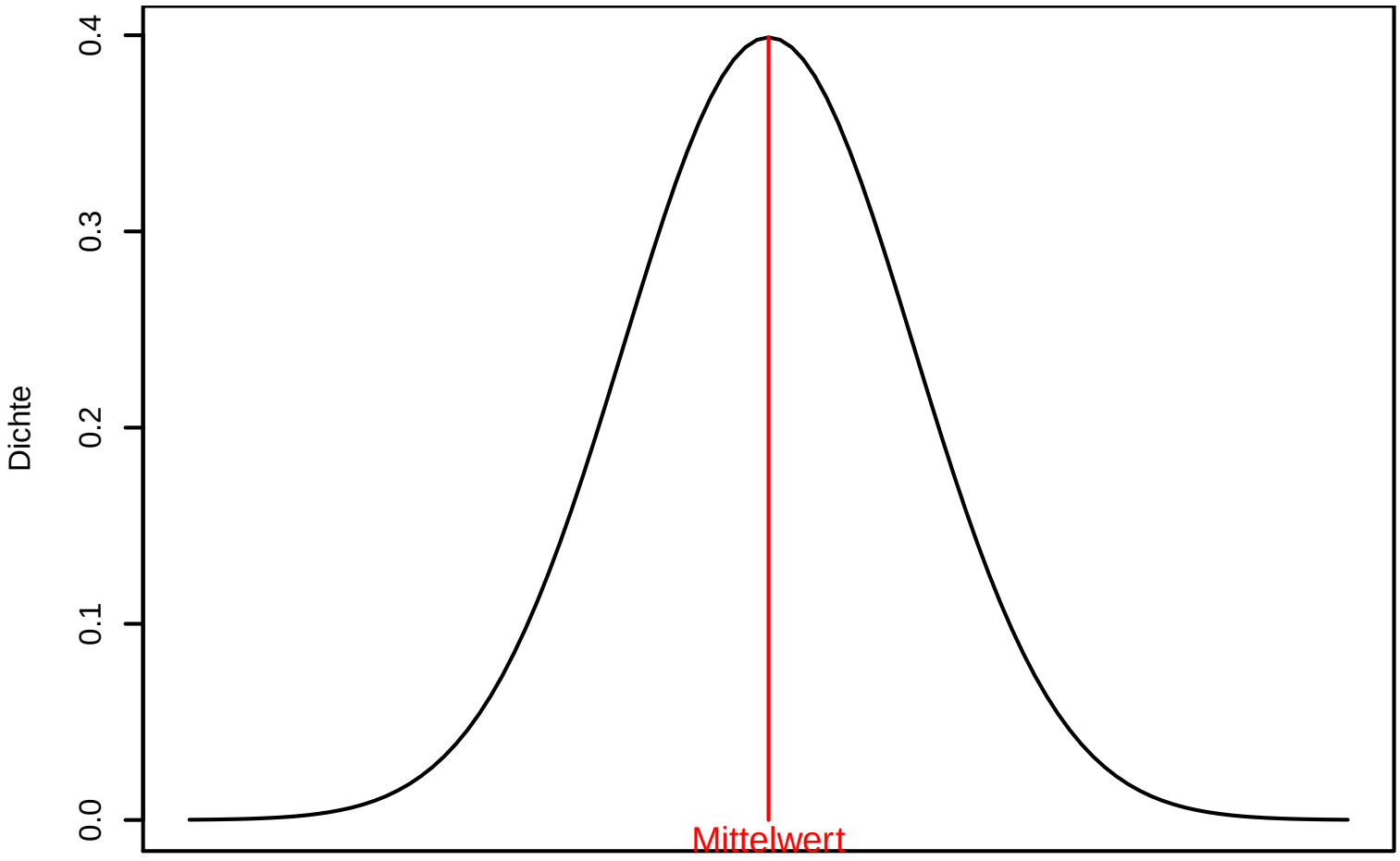
Vorteil: Leicht anzupassen. Wir müssen nur Mittelwert(svektor) und Varianz (mehrdimensional: die Kovarianzmatrix) schätzen.

Übersicht

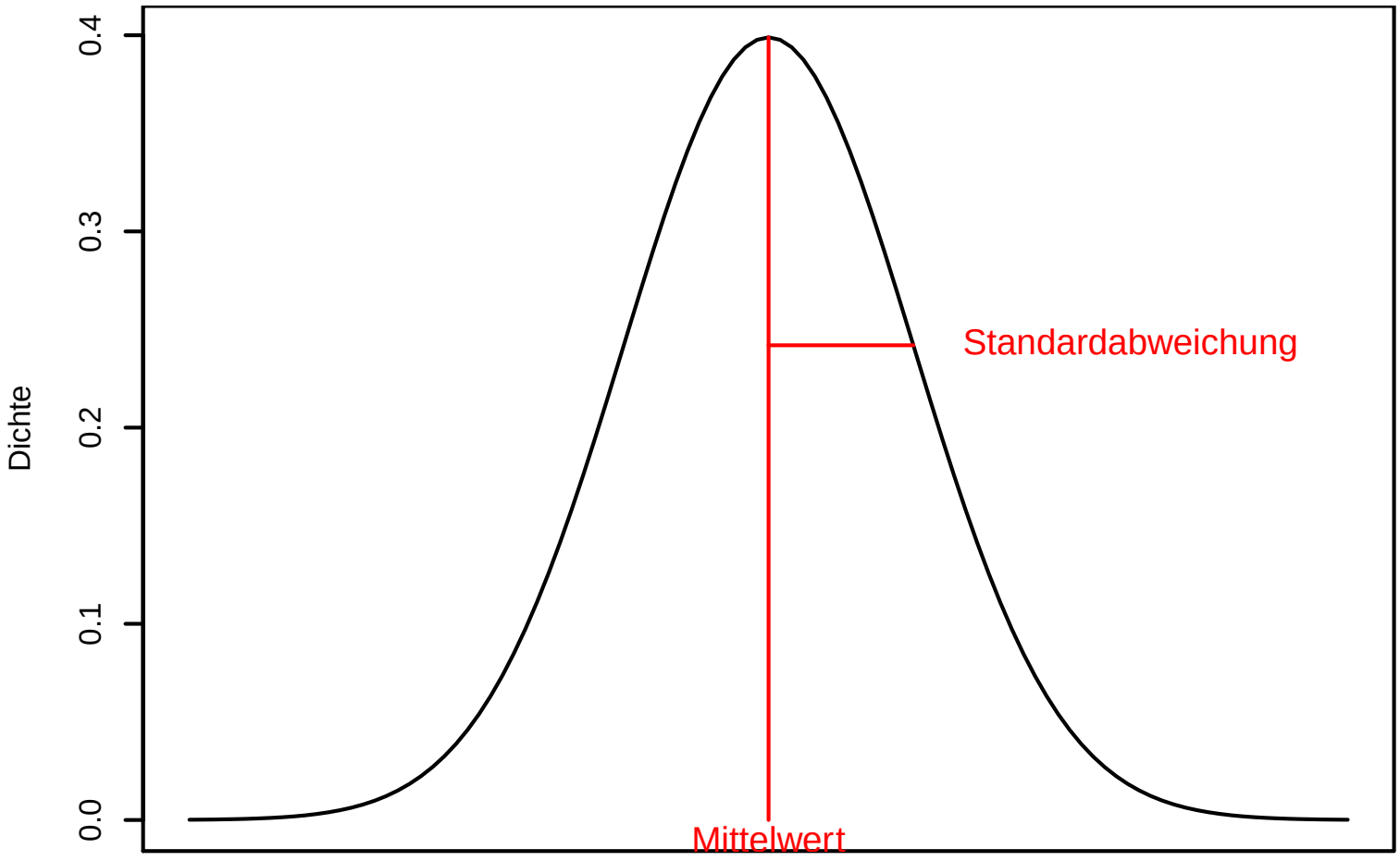
Erinnerung: Eindimensionale Normalverteilung



Erinnerung: Eindimensionale Normalverteilung



Erinnerung: Eindimensionale Normalverteilung



Zur Beschreibung einer mehrdimensionalen Normalverteilung benötigt man

- Einen Mittelwertvektor μ
- Ein Achsenkreuz (die „Hauptachsen“)
- Standardabweichungen in den Achsenrichtungen

Übersicht

In unserem Problem gibt es 10 Dimensionen.

In unserem Problem gibt es 10 Dimensionen.

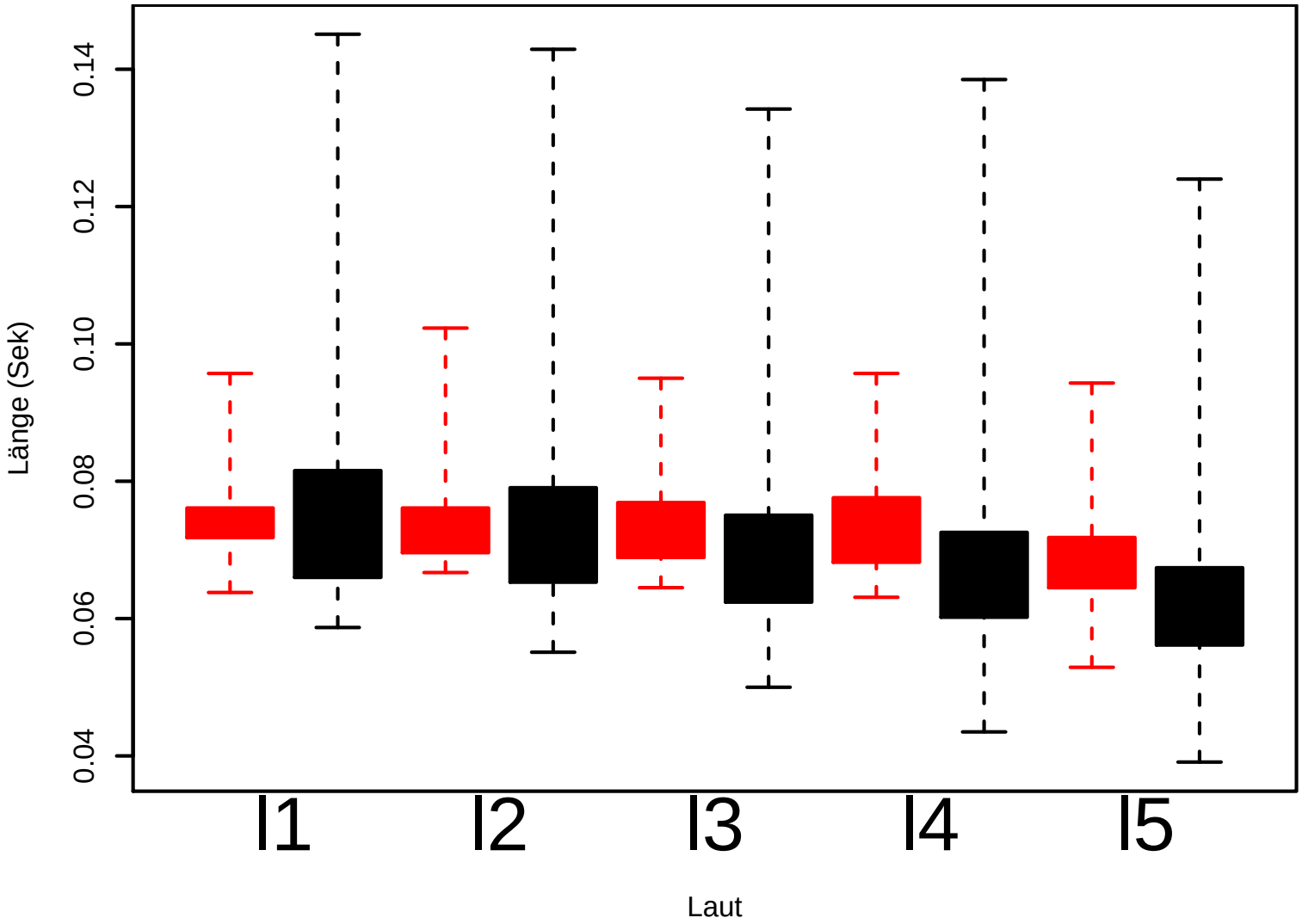
Wir beginnen eindimensional.

In unserem Problem gibt es 10 Dimensionen.

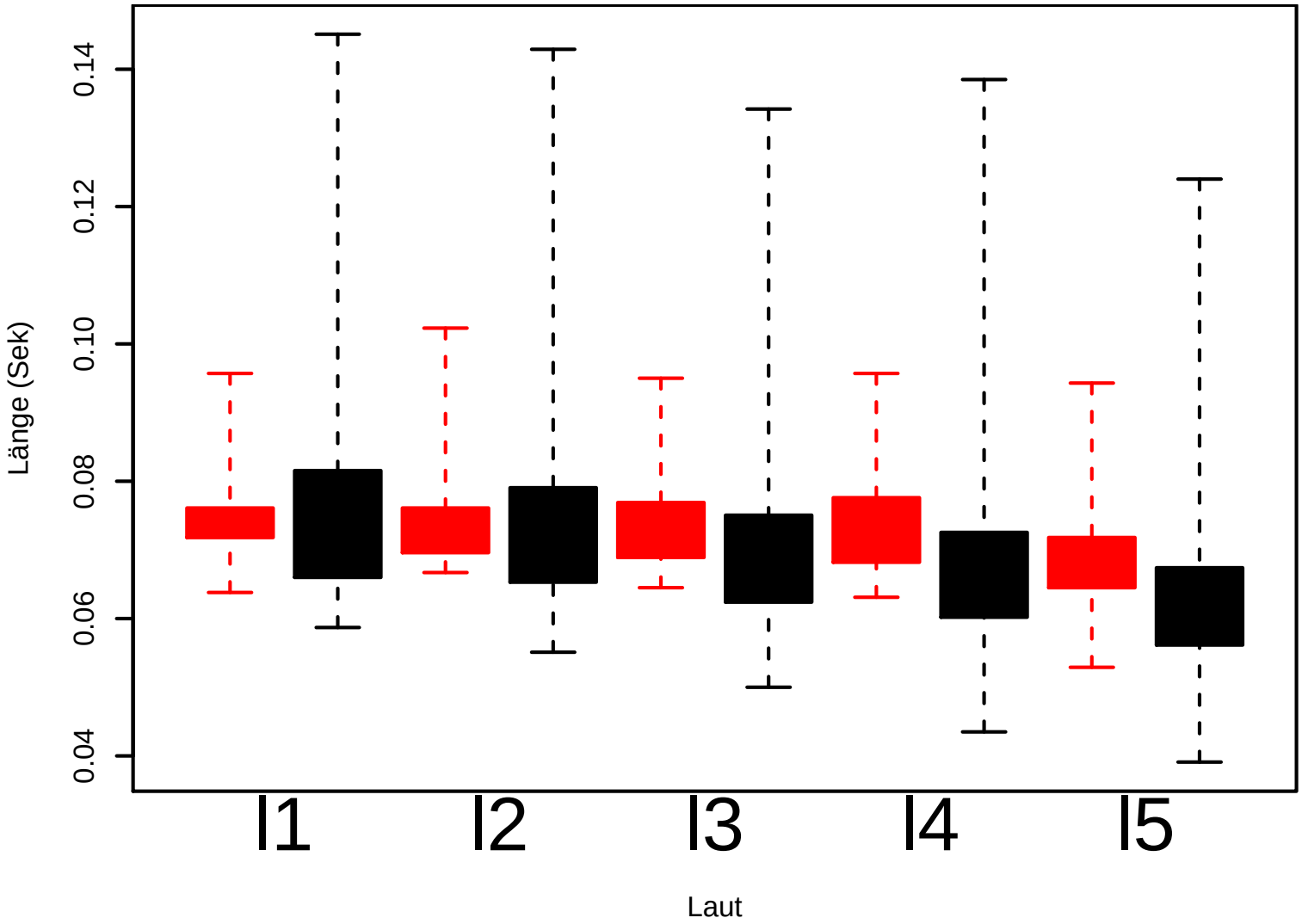
Wir beginnen eindimensional.

Frage: Welche eine der 10 Variablen sollen wir wählen?

Länge der Laute bei Männchen (rot) und Weibchen (schwarz)

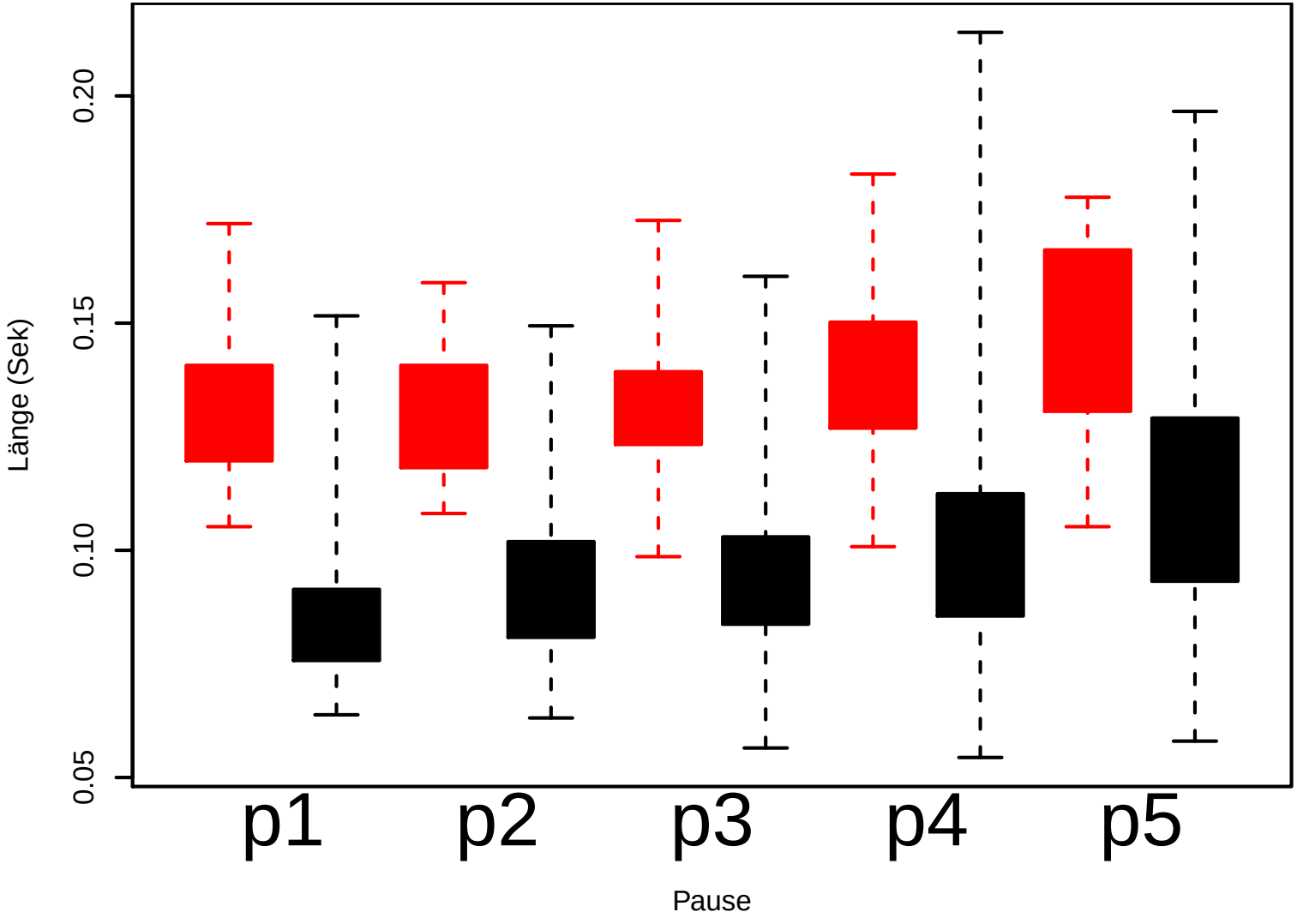


Länge der Laute bei Männchen (rot) und Weibchen (schwarz)

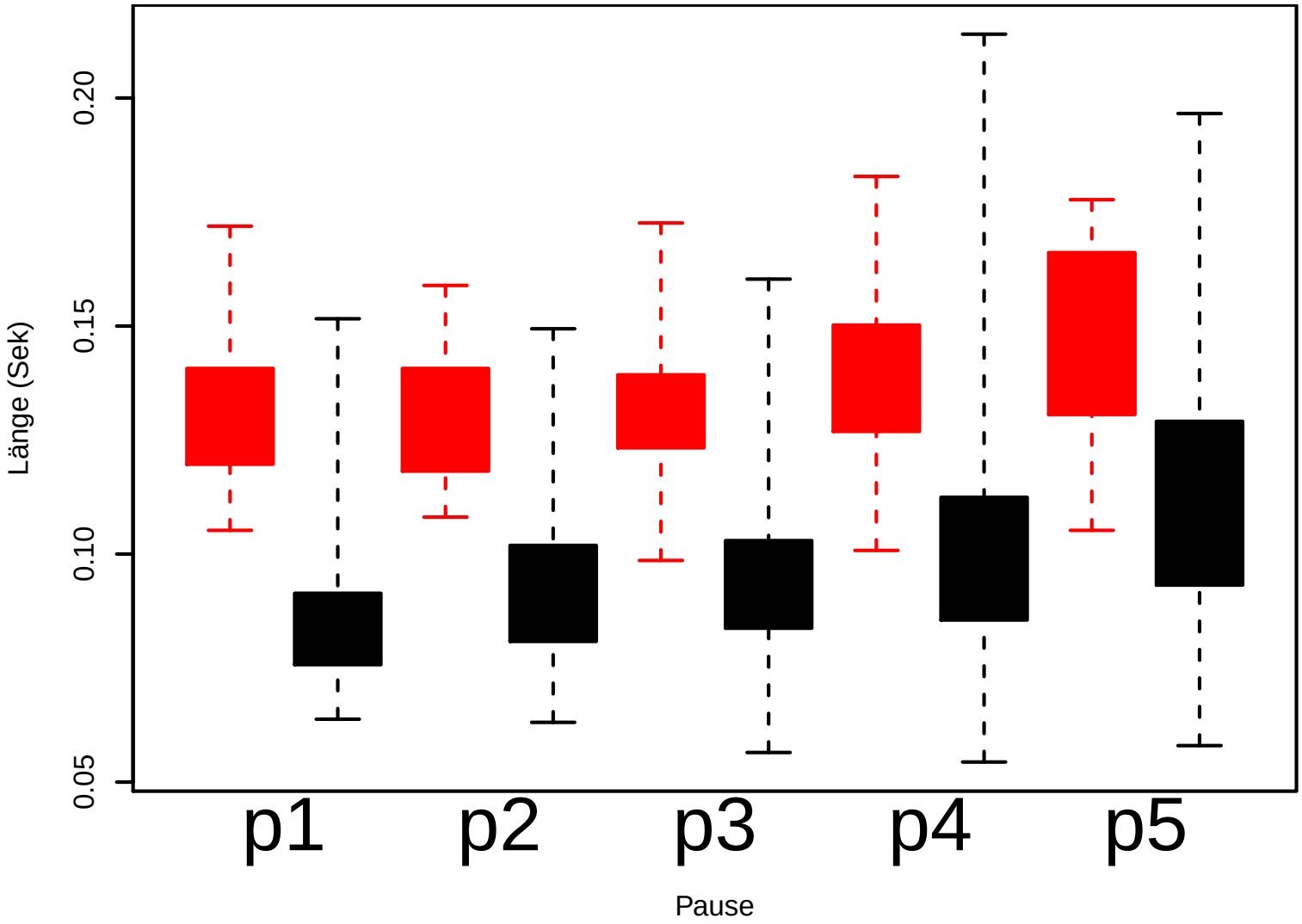


Keine gute Trennung der Geschlechter

Länge der Pausen bei Männchen (rot) und Weibchen (schwarz)



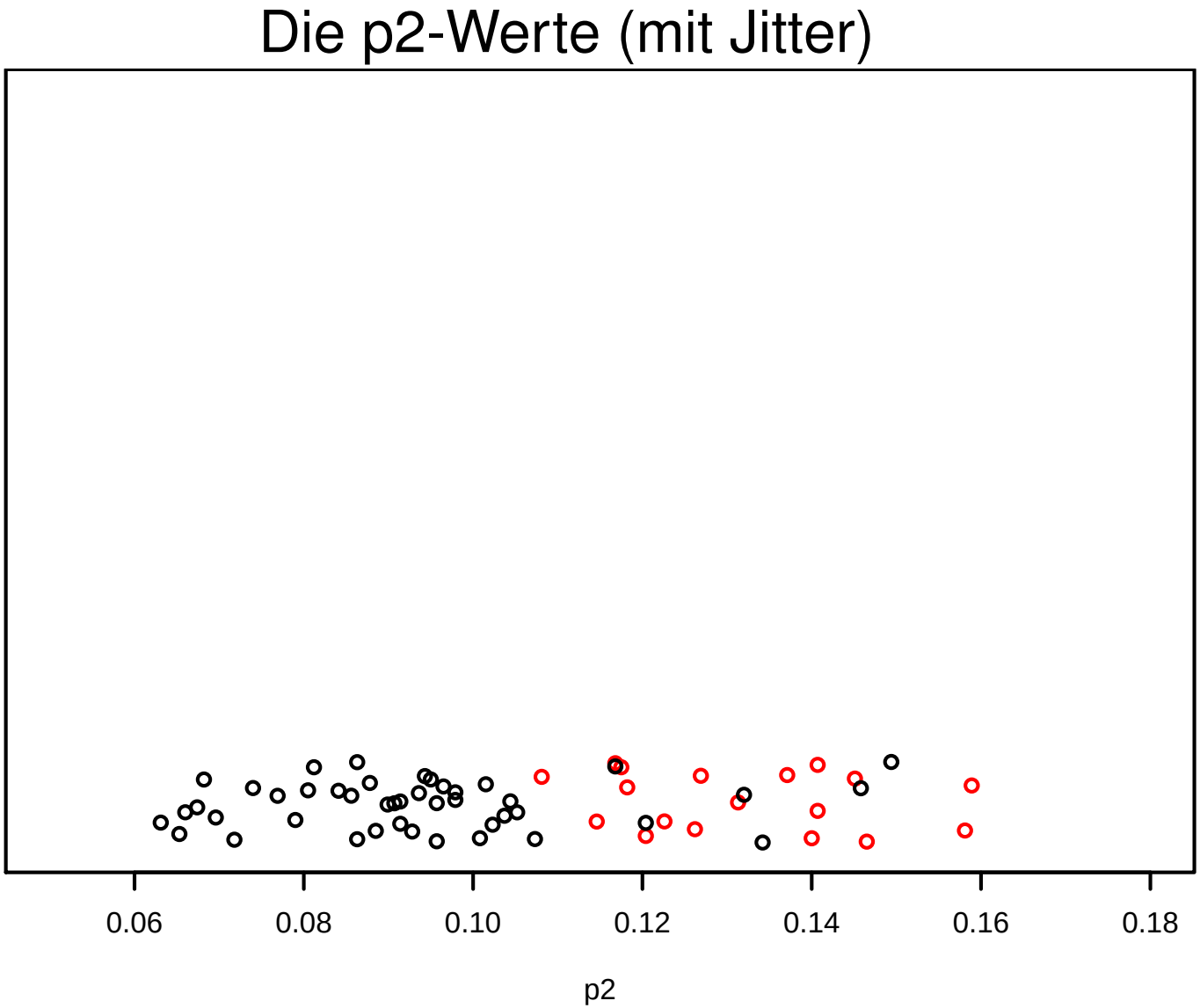
Länge der Pausen bei Männchen (rot) und Weibchen (schwarz)

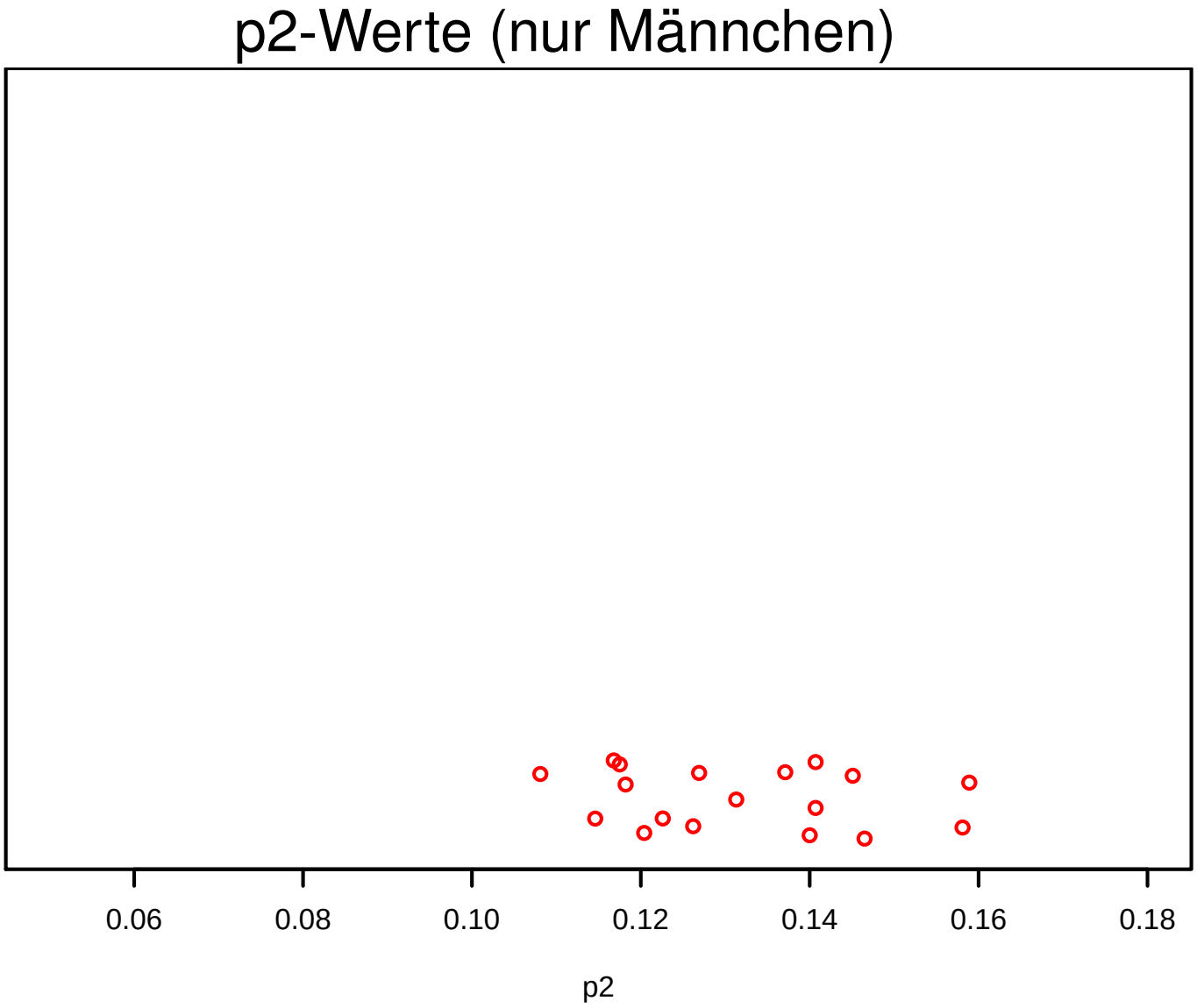


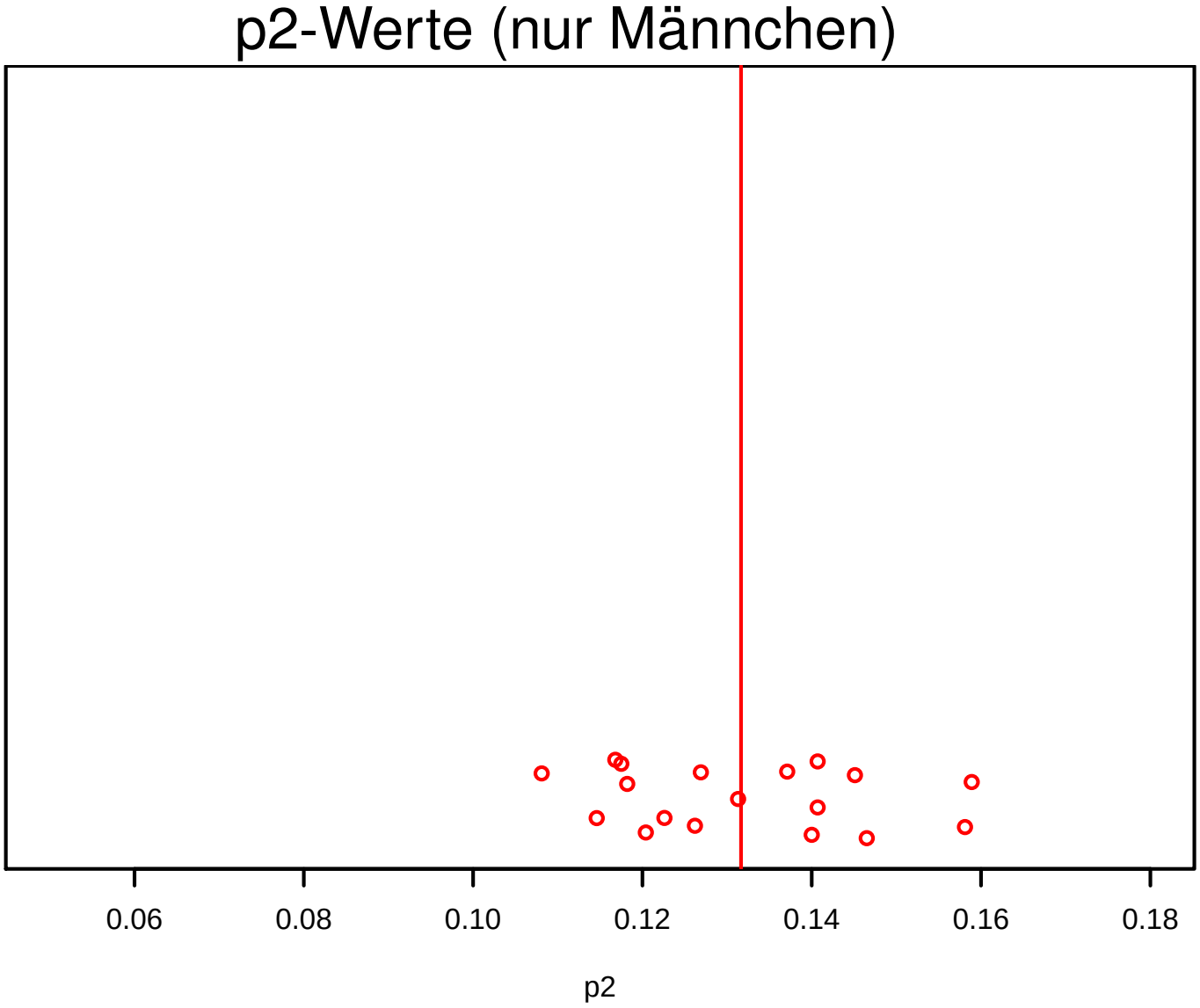
Bei den Männchen sind die Pausen typischerweise länger

Übersicht

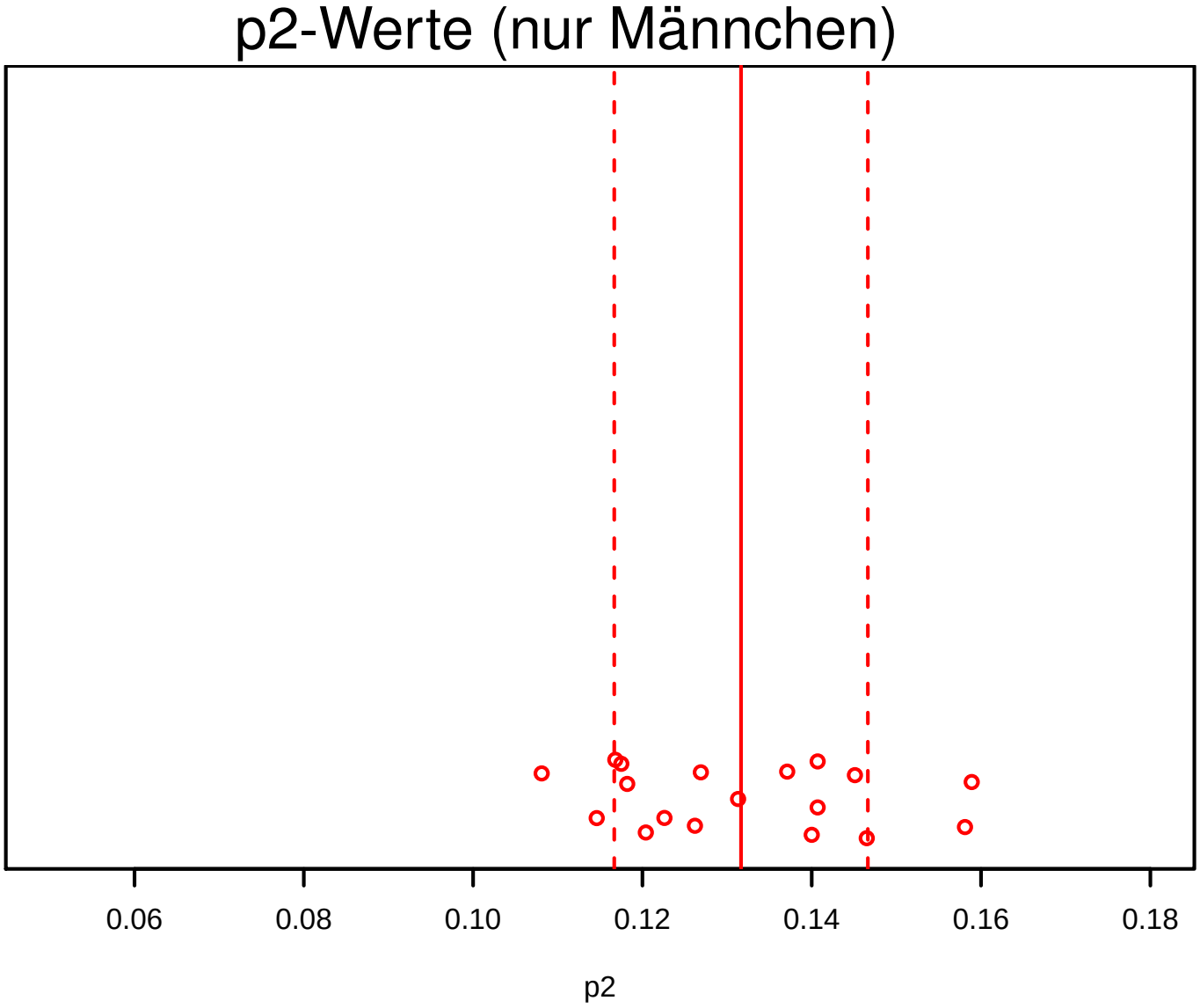
Wie gut läßt sich das Geschlecht anhand von p2, der Länge der zweiten Pause, bestimmen?


Die p2-Werte (mit Jitter)
0.06
0.08
0.10
0.12
0.14
0.16
0.18
p2


p2-Werte (nur Männchen)
0.06
0.08
0.10
0.12
0.14
0.16
0.18
p2



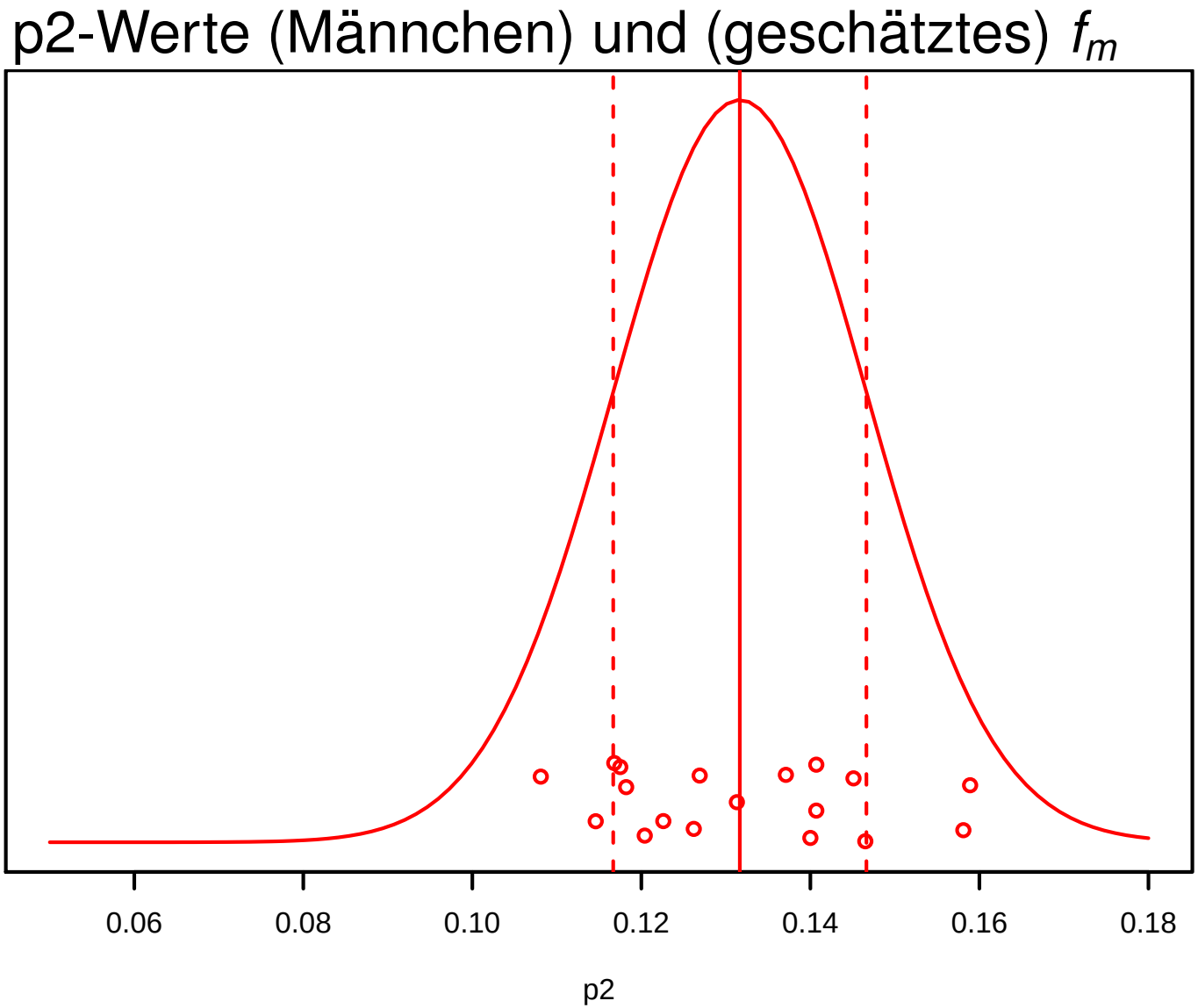
Mittelwert $\mu_m = 0{,}1316$

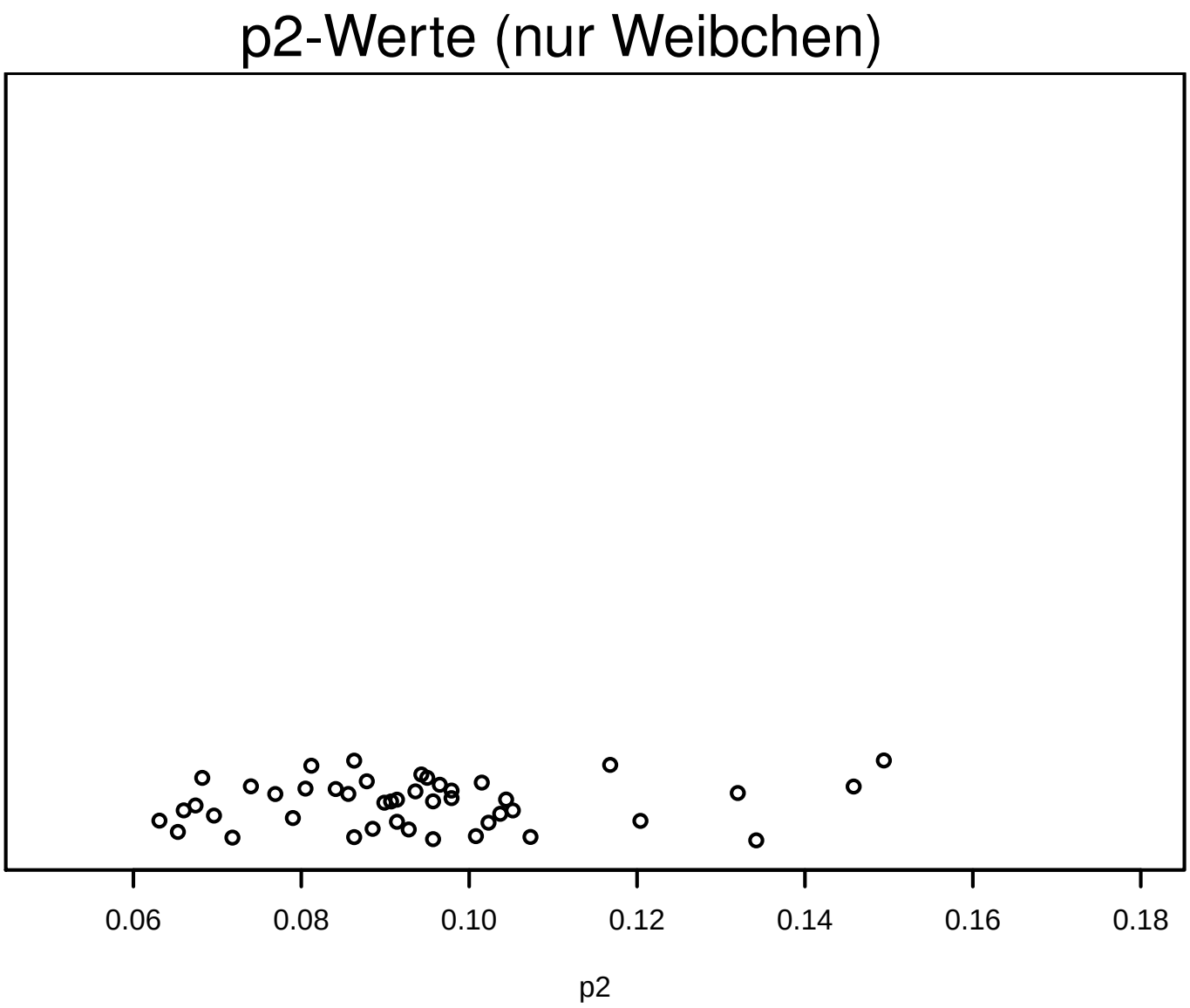


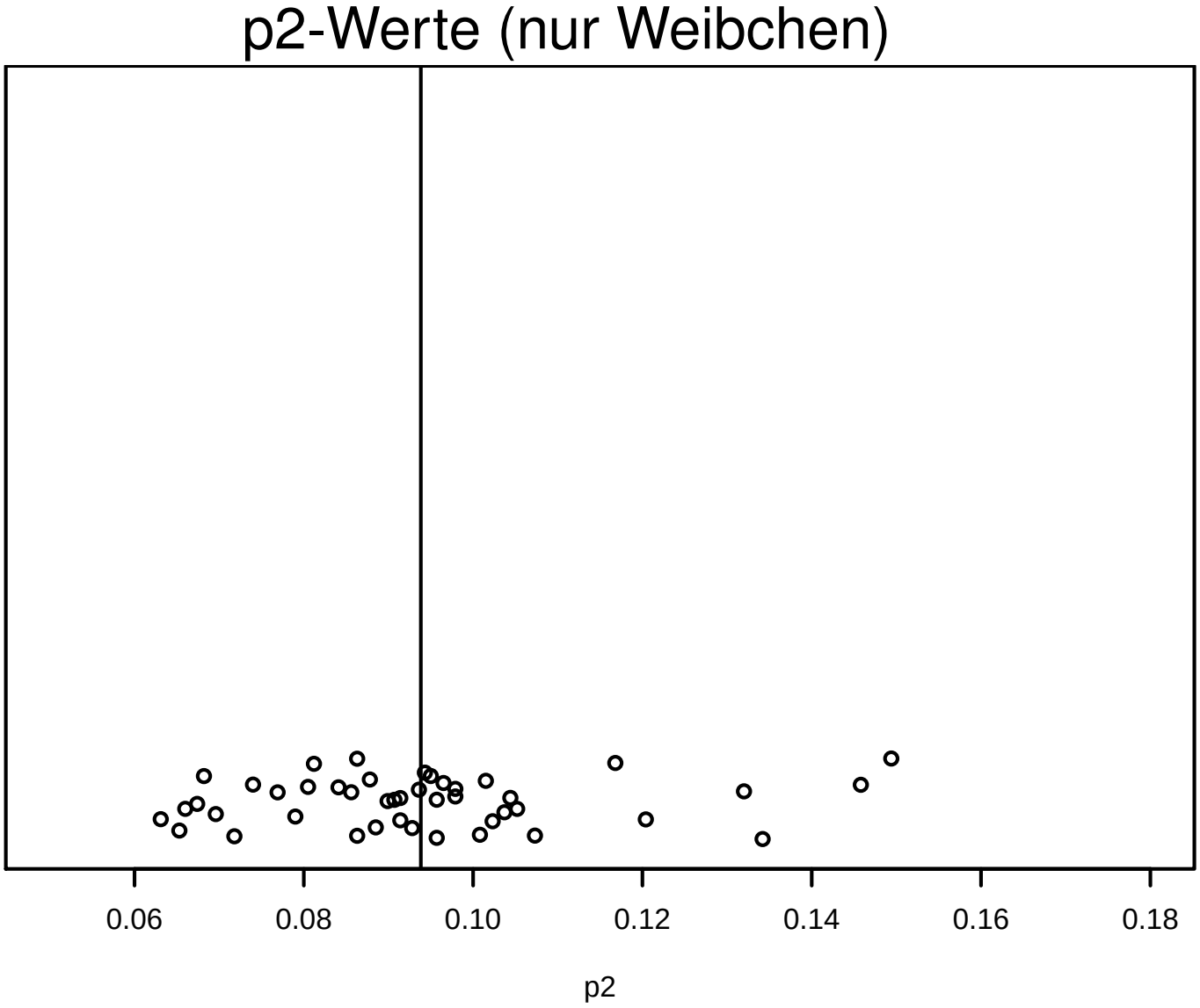
Mittelwert $\mu_m = 0{,}1316$, Standardabweichung $\sigma_m = 0{,}0150$

Wir approximieren f_m durch die Normalverteilung mit Mittelwert μ_m und Standardabweichung σ_m

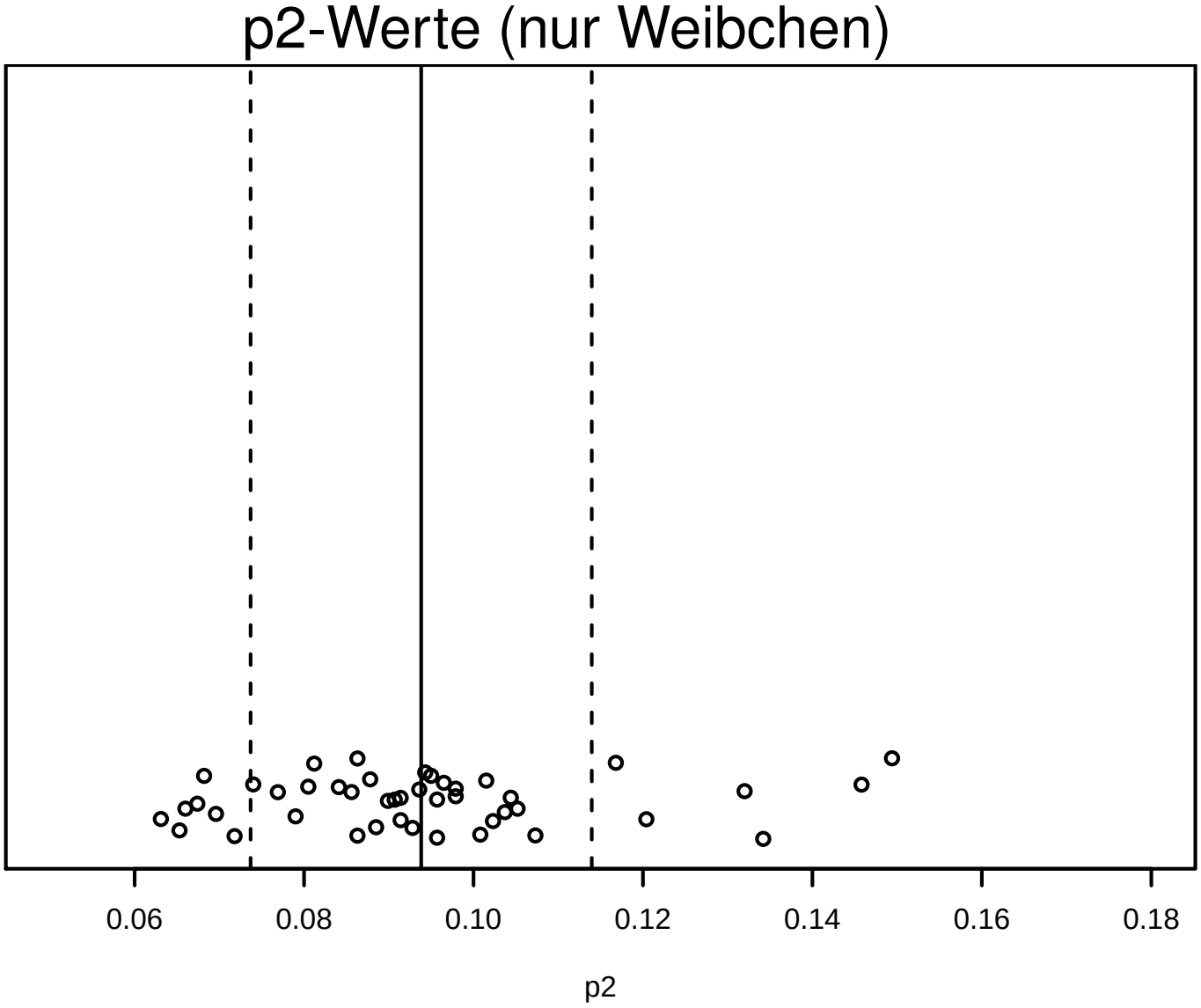
Wir approximieren f_m durch die Normalverteilung mit Mittelwert μ_m und Standardabweichung σ_m




p2-Werte (nur Weibchen)
0.06
0.08
0.10
0.12
0.14
0.16
0.18
p2



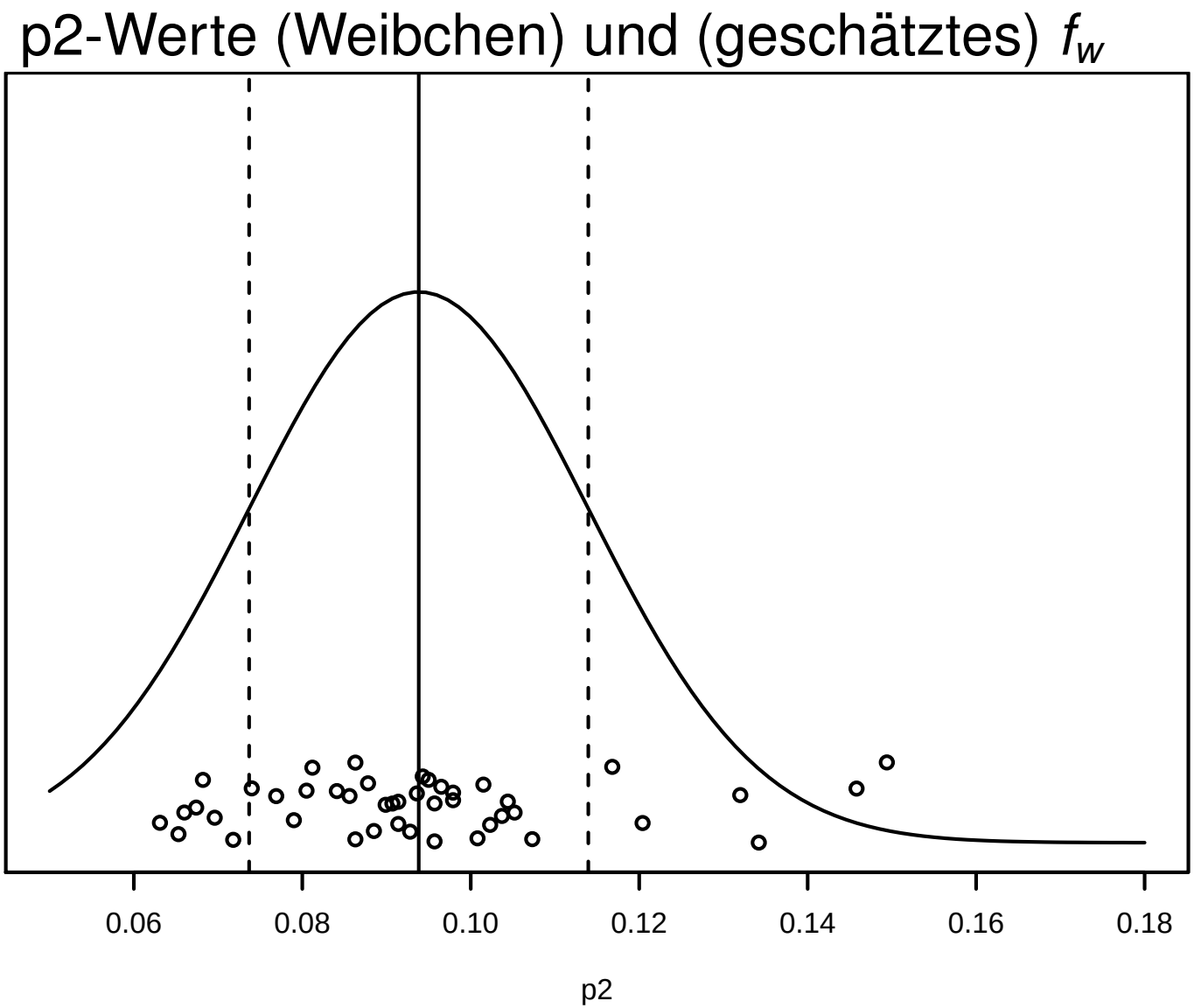
Mittelwert $\mu_w = 0{,}0938$



Mittelwert $\mu_w = 0{,}0938$, Standardabweichung $\sigma_m = 0{,}0201$

Wir approximieren f_w durch die Normalverteilung mit Mittelwert μ_w und Standardabweichung σ_w

Wir approximieren f_w durch die Normalverteilung mit Mittelwert μ_w und Standardabweichung σ_w



Klassifikationsregel:

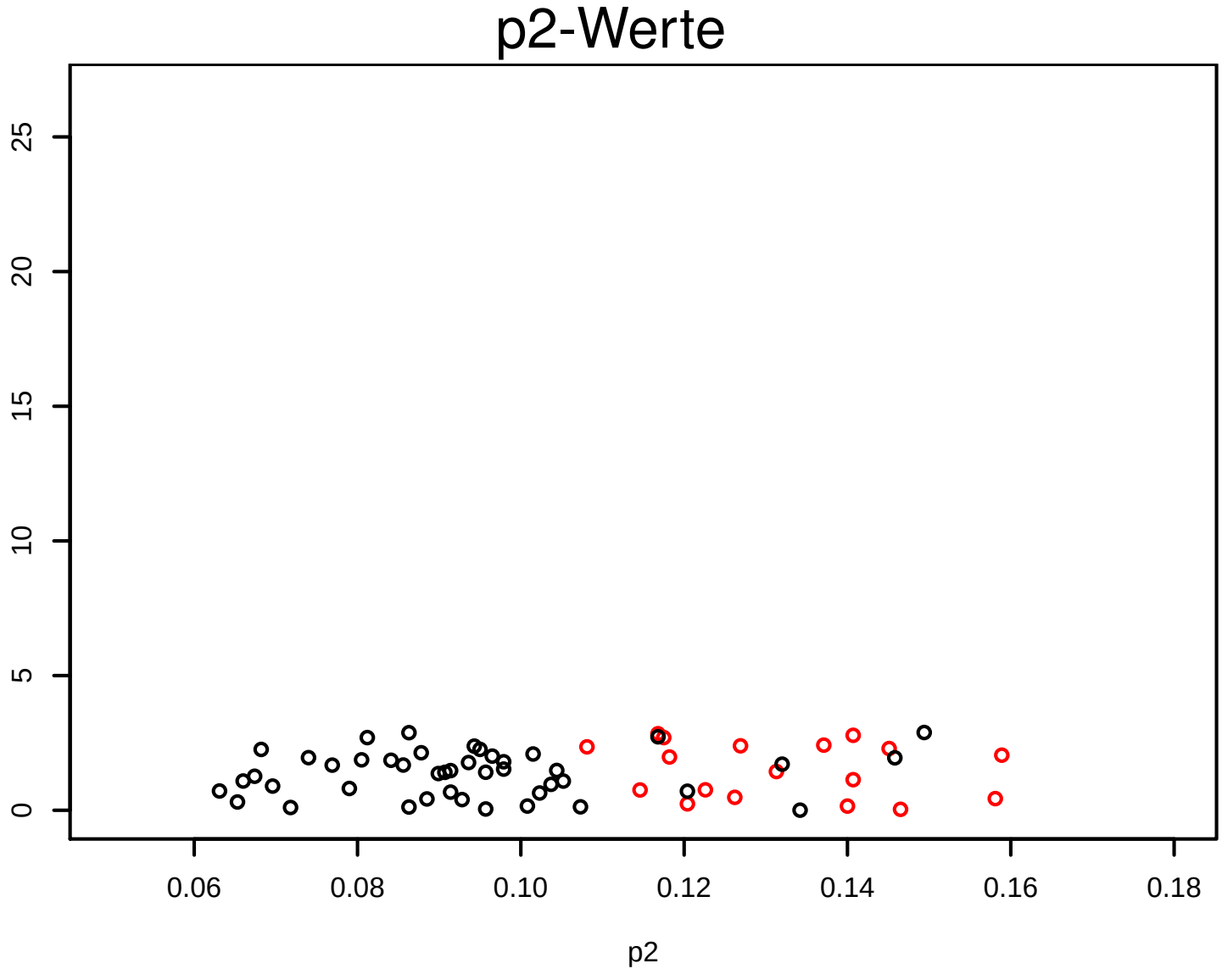
Klassifikationsregel:

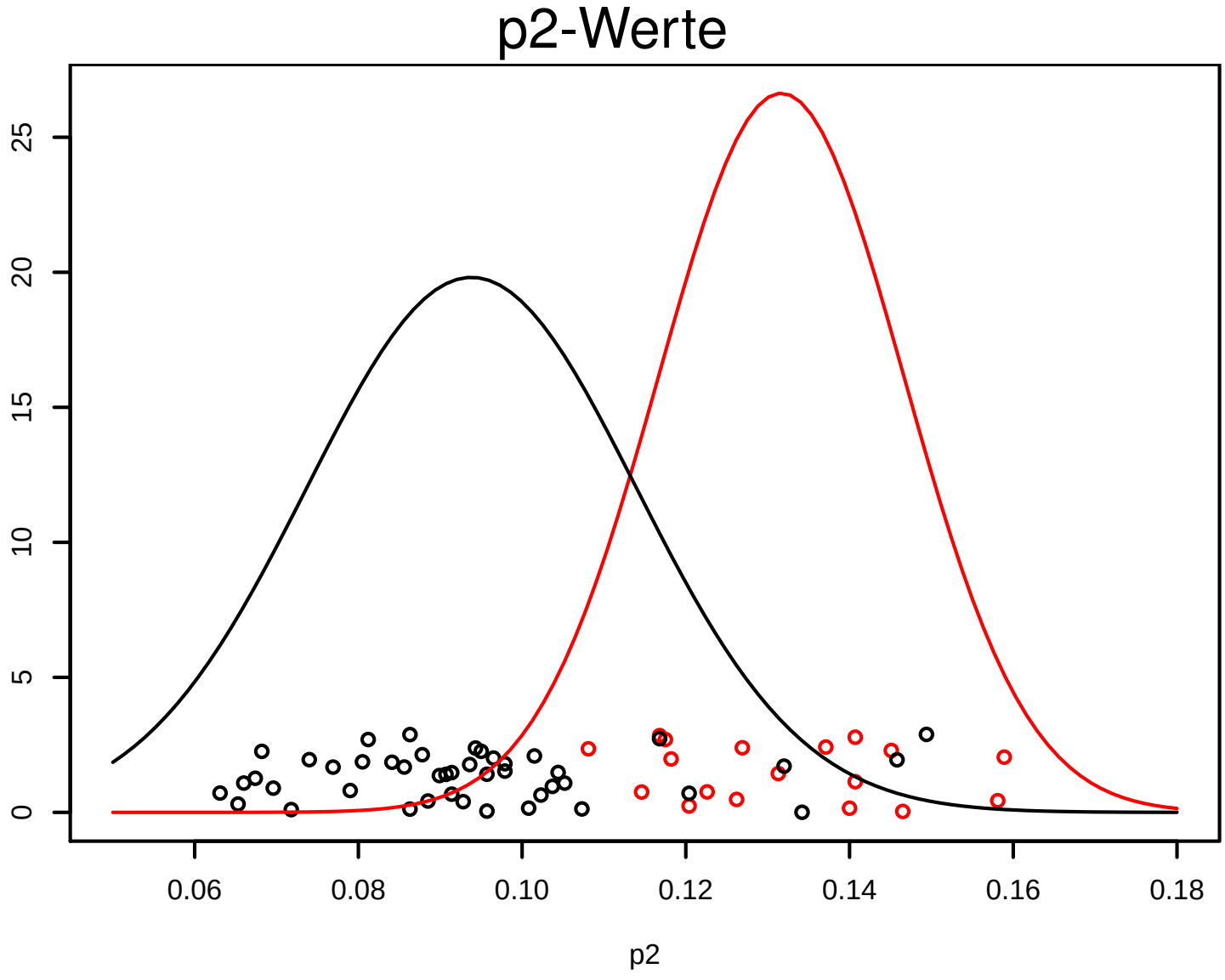
f_m größer $\longrightarrow$ „Männchen“

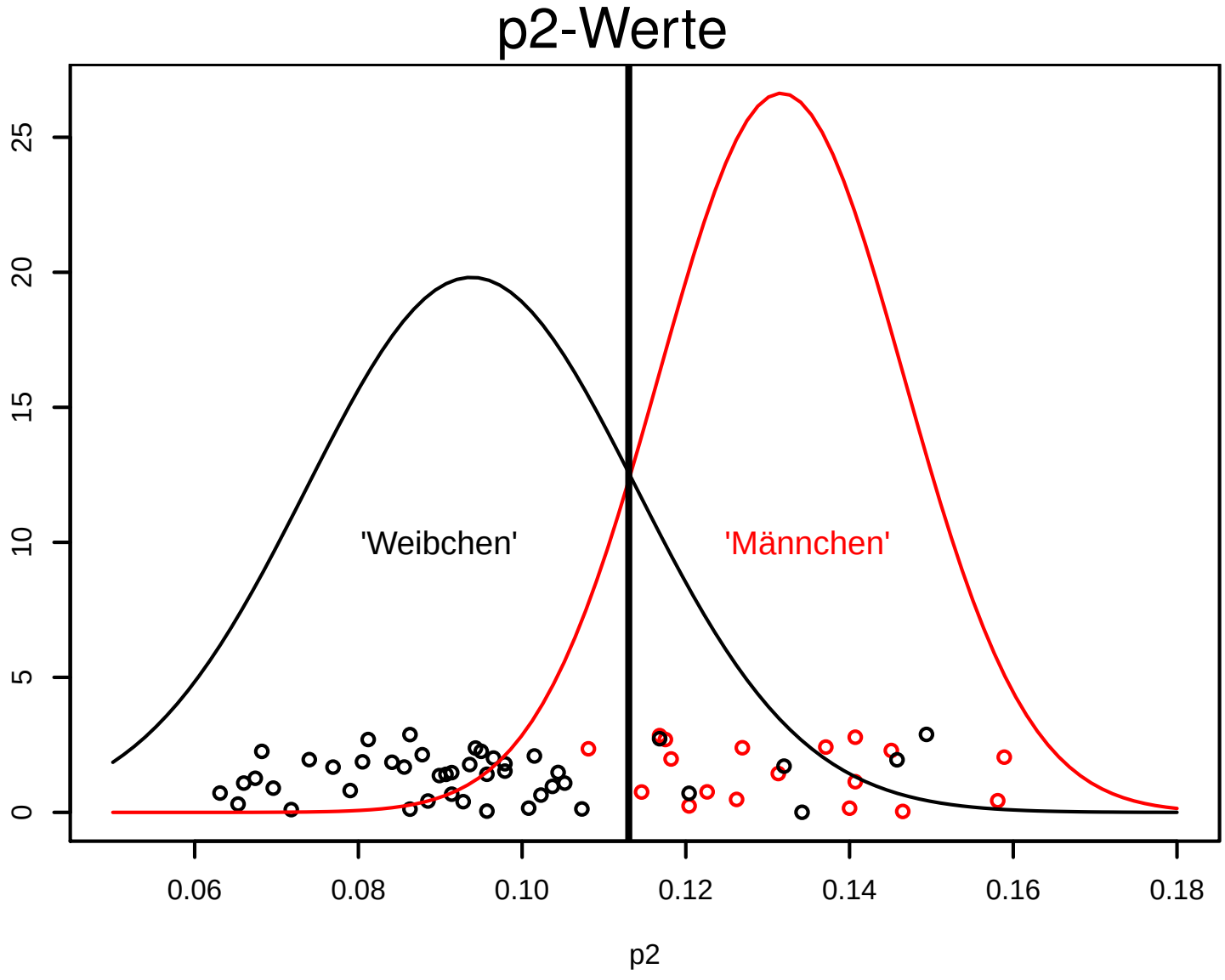
Klassifikationsregel:

f_m größer $\longrightarrow$ „Männchen“

f_w größer $\longrightarrow$ „Weibchen“


p2-Werte
0
5
10
15
20
25
0.06
0.08
0.10
0.12
0.14
0.16
0.18
p2

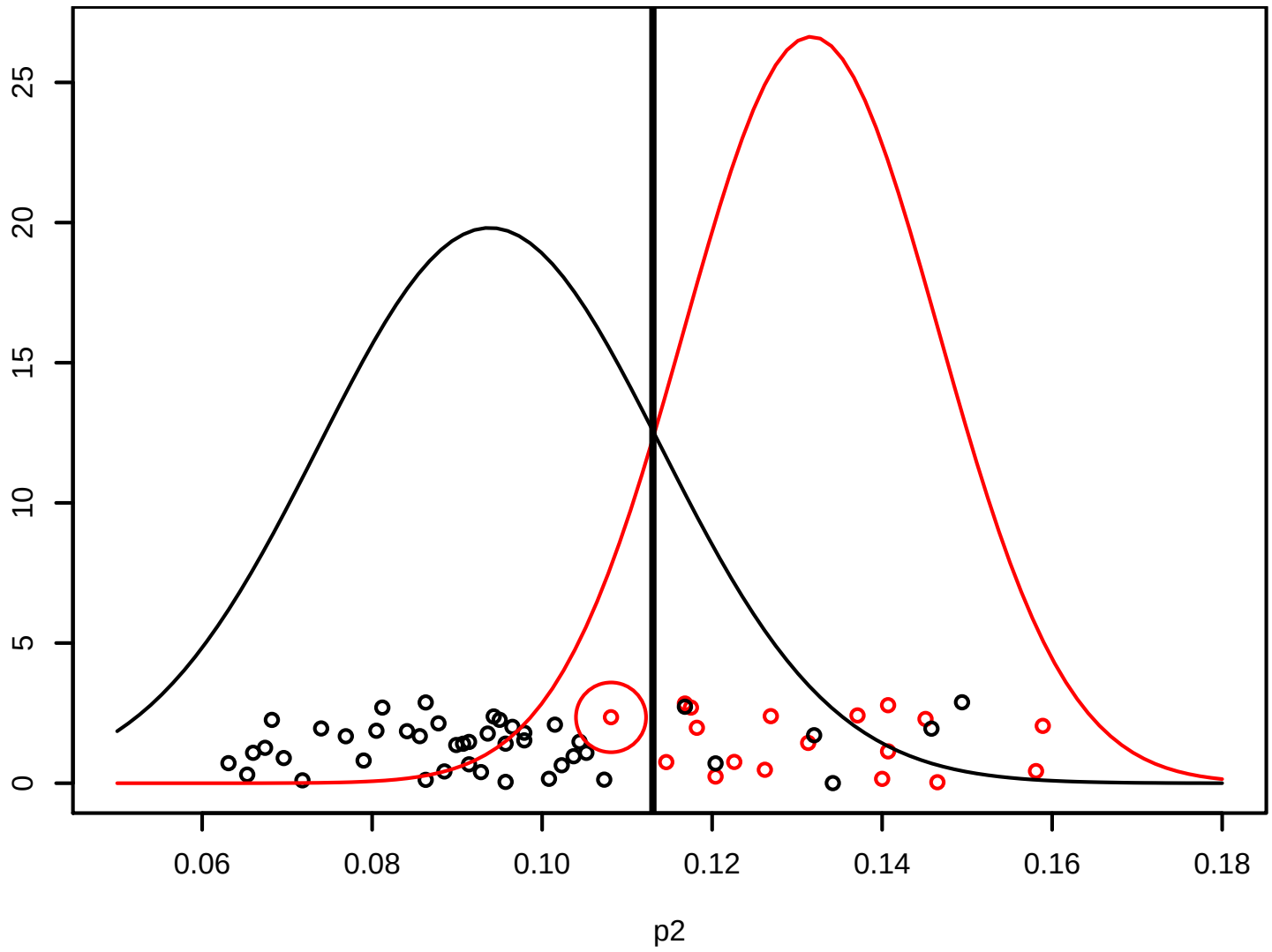

p2-Werte
0
5
10
15
20
25
0.06
0.08
0.10
0.12
0.14
0.16
0.18
p2


p2-Werte
'Weibchen'
'Männchen'
0
5
10
15
20
25
0.06
0.08
0.10
0.12
0.14
0.16
0.18
p2

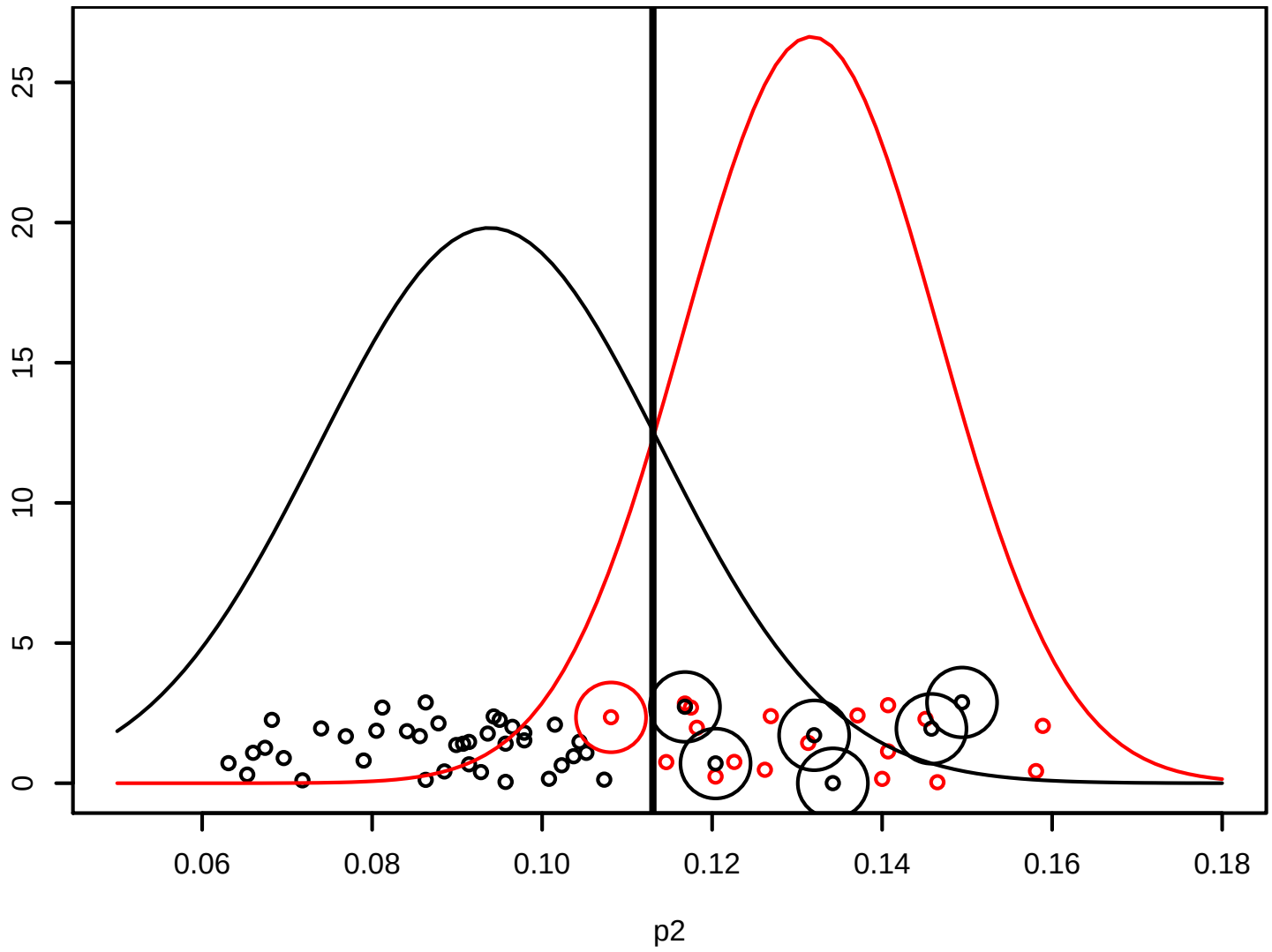
Falsch klassifiziert:

Falsch klassifiziert:

1 Männchen



Falsch klassifiziert:
1 Männchen 6 Weibchen



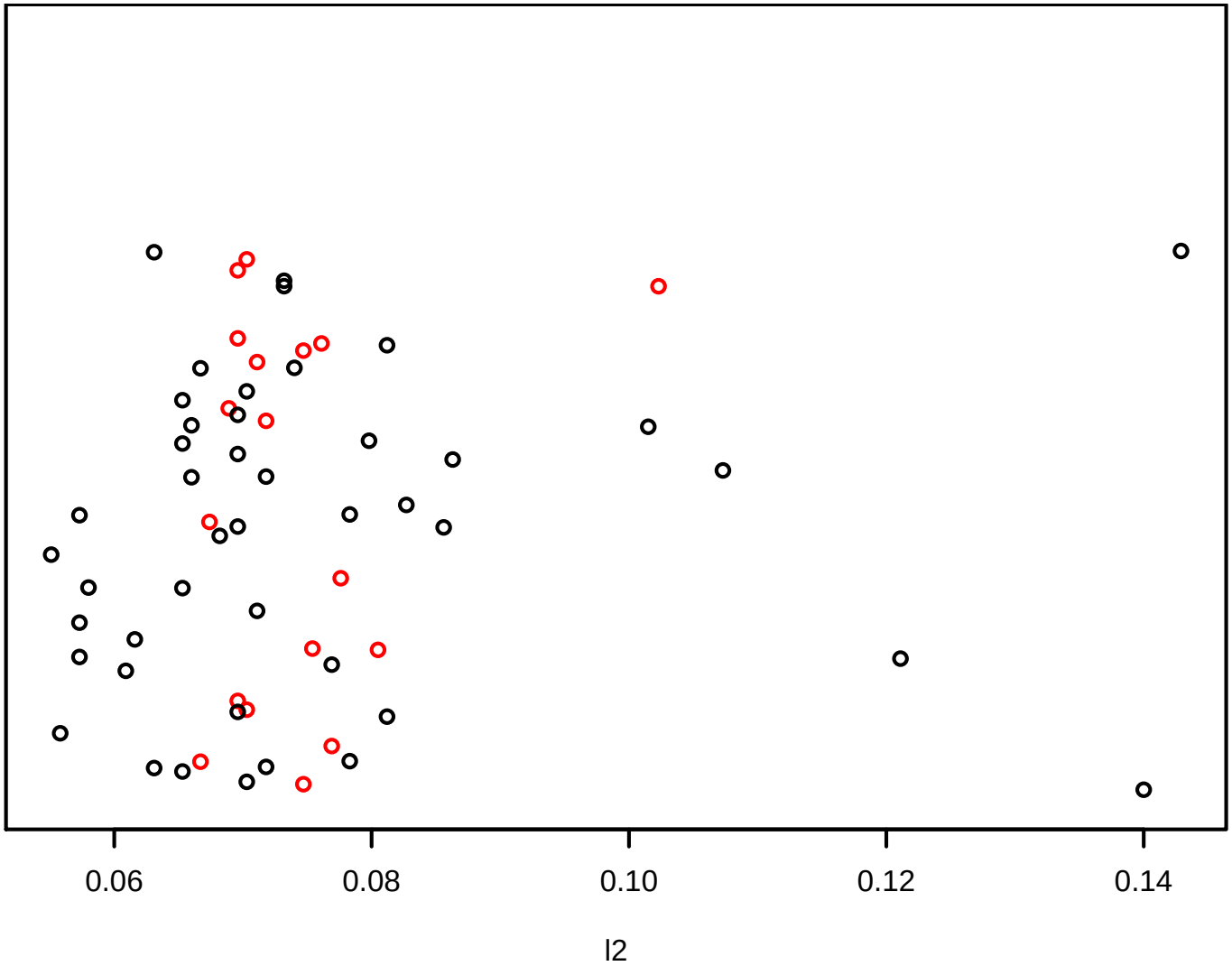
Übersicht

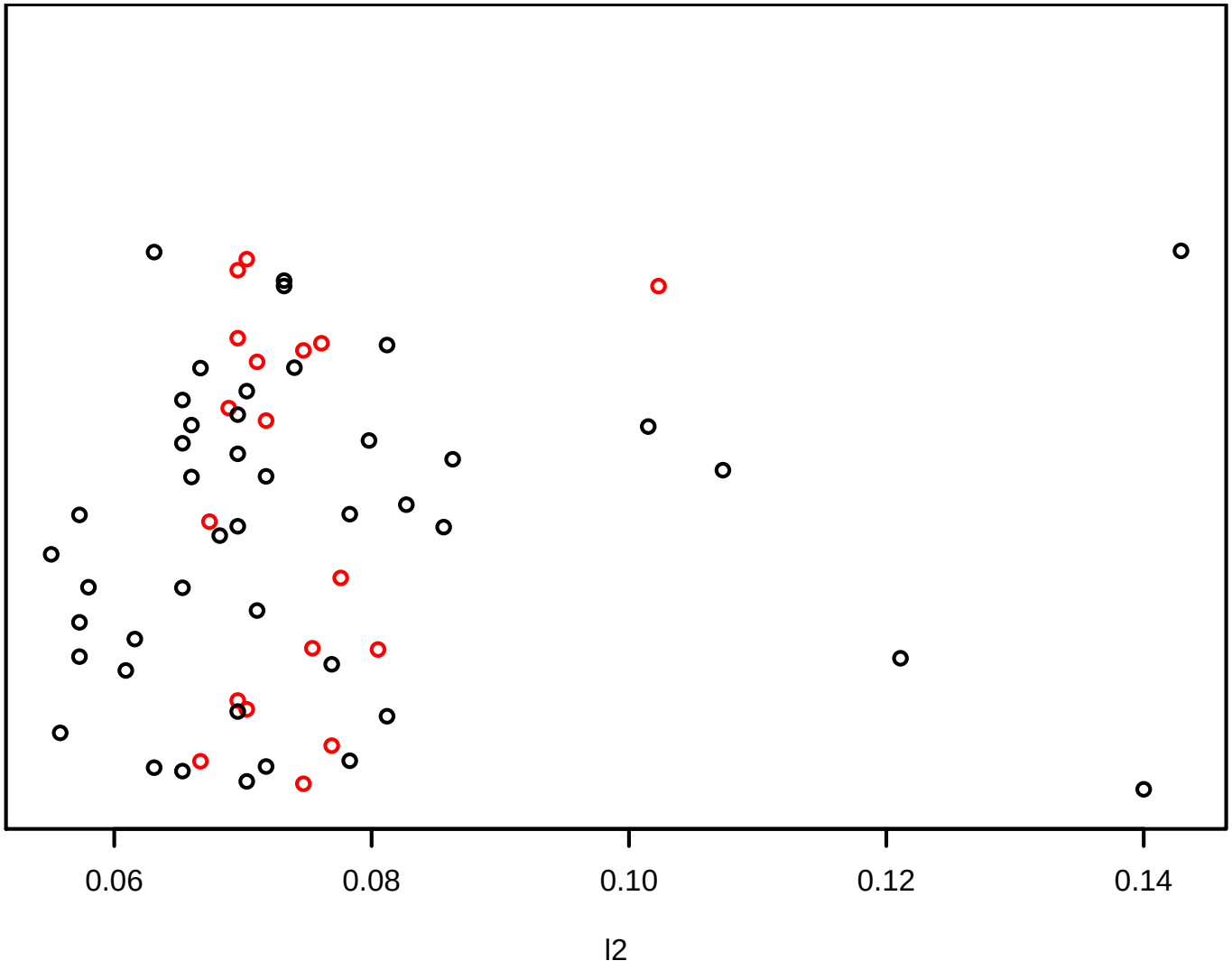
Zur Verbesserung der Klassifikation nehmen wir mehr Information hinzu, z.B. eine weitere Variable.

Zur Verbesserung der Klassifikation nehmen wir mehr Information hinzu, z.B. eine weitere Variable.

Wir betrachten:

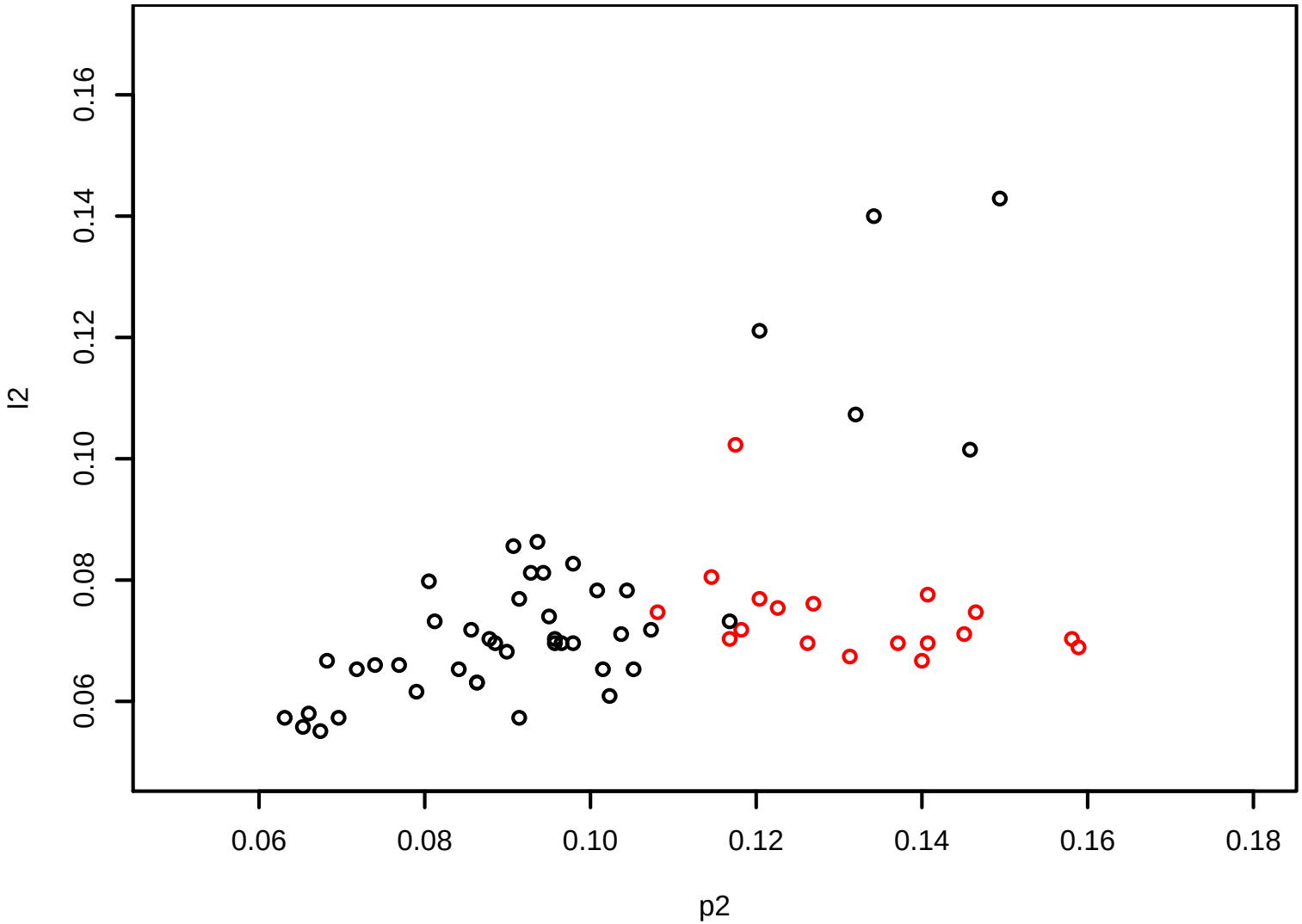
Erste Variable = p2
Zweite Variable = l2


0.06
0.08
0.10
0.12
0.14
l2

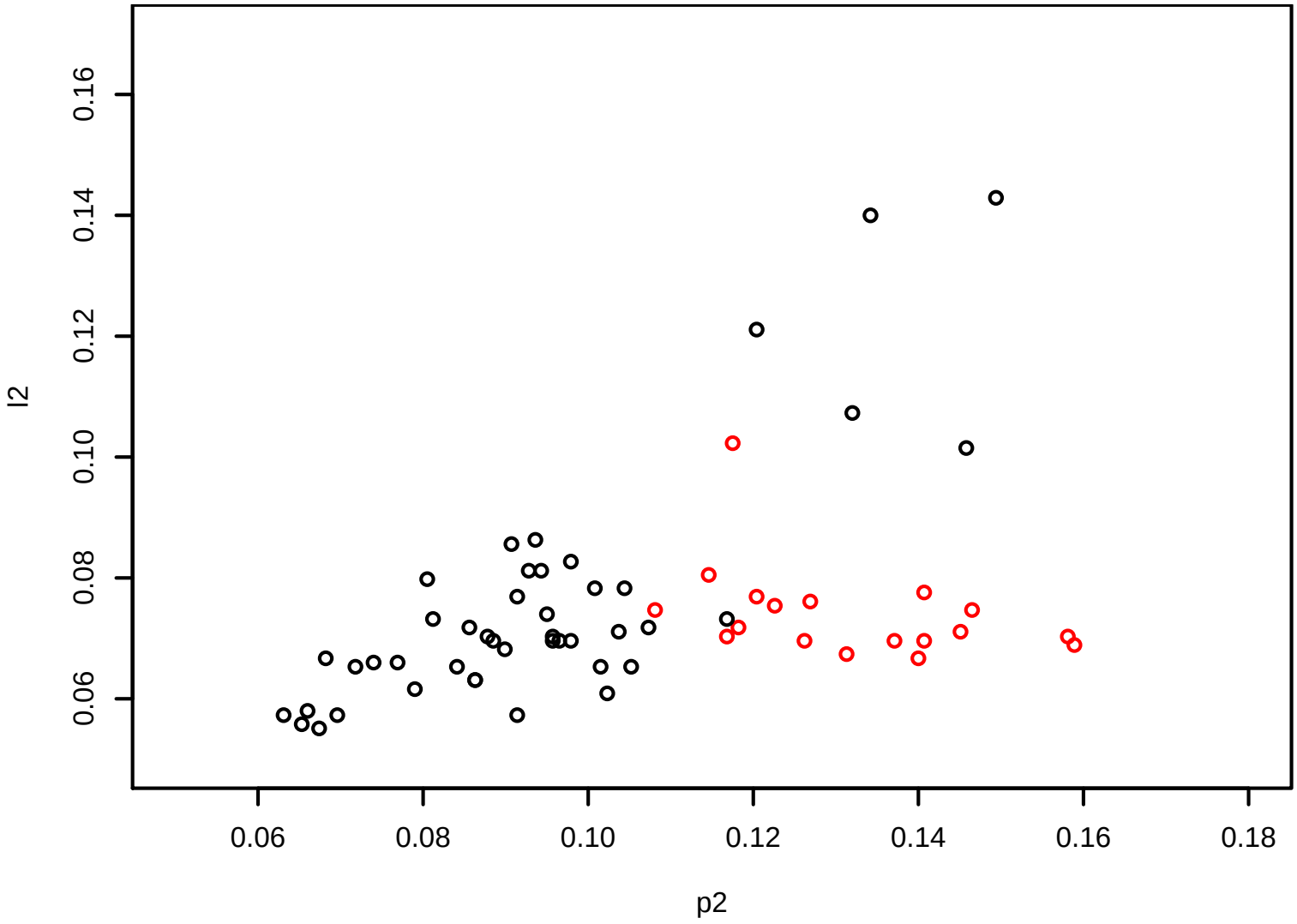


Beobachtung: l2 allein trennt die Geschlechter sehr schlecht.

Aber: l2 zusammen mit p2 gibt zusätzliche Information:

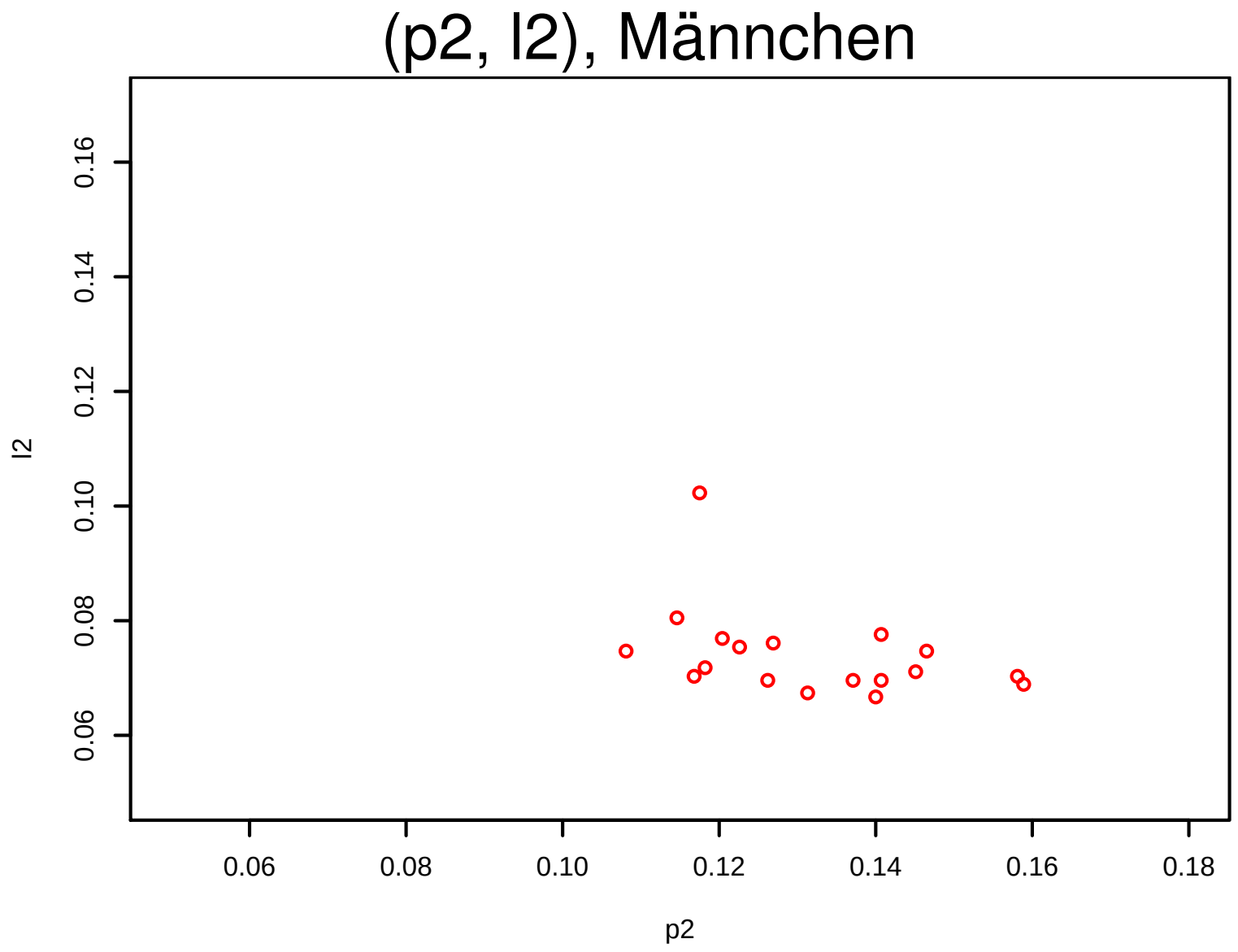


Aber: l2 zusammen mit p2 gibt zusätzliche Information:



Beispielsweise zeigt die Hinzunahme von l2, dass die 5 Punkte oben rechts besser zu den Weibchen passen.

Wir approximieren
die Verteilungen
von (p2, l2) bei Männchen und bei Weibchen
durch
zweidimensionale
Normalverteilungen.

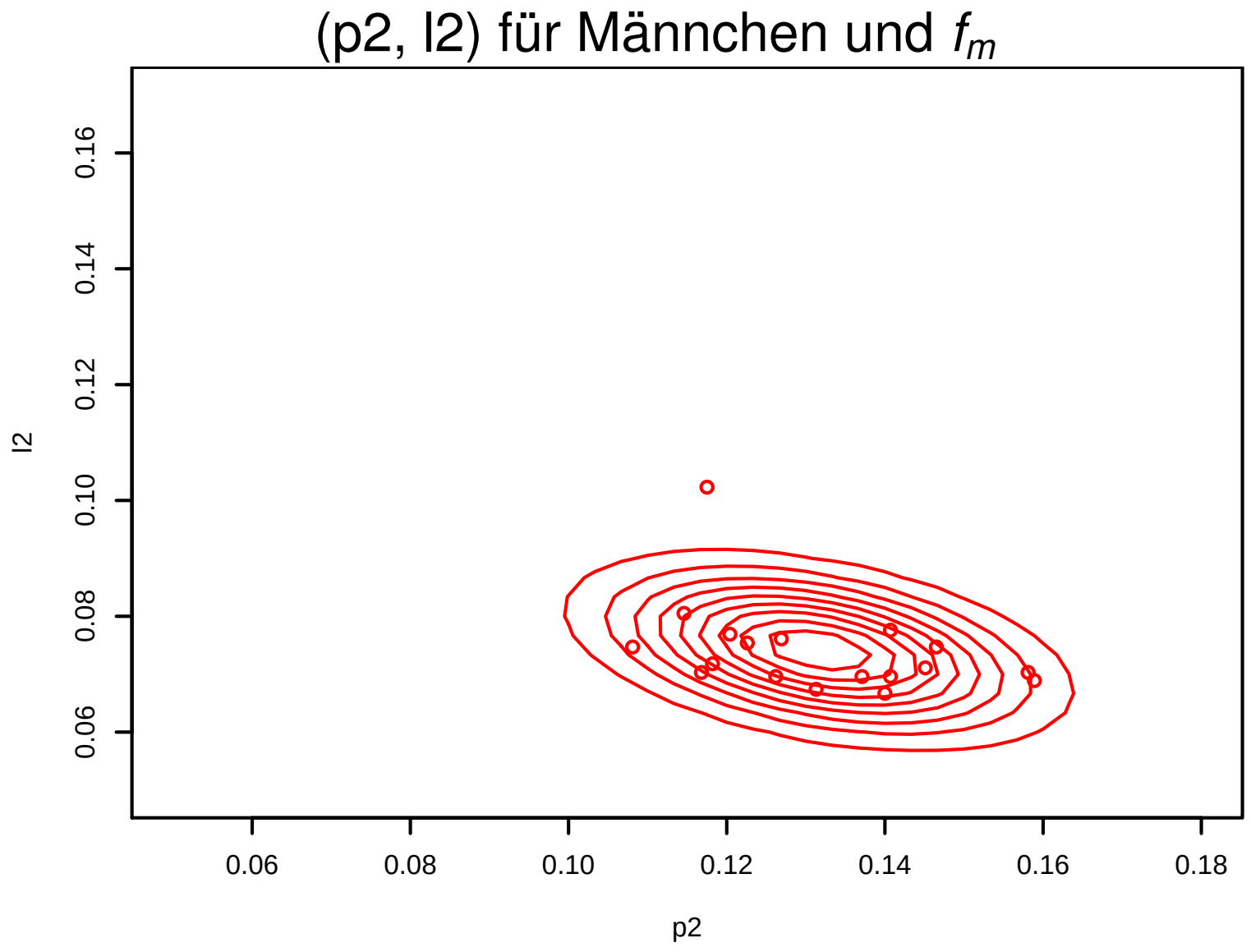

(p2, l2), Männchen
l2
0.06
0.08
0.10
0.12
0.14
0.16
p2
0.06
0.08
0.10
0.12
0.14
0.16
0.18

Wie im eindimensionalen Fall schätzen wir den (zweidimensionalen) Mittelwert

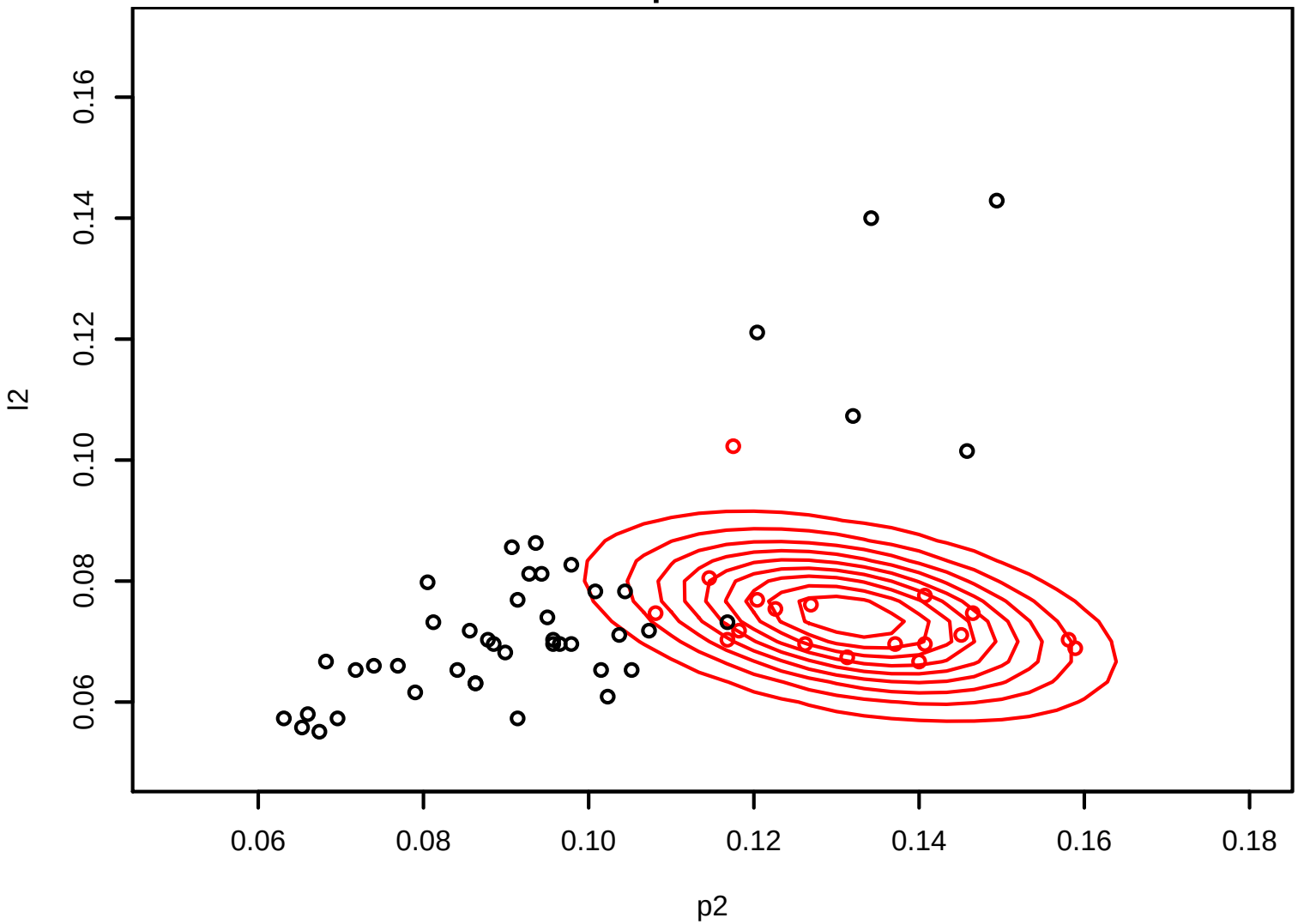
Wie im eindimensionalen Fall schätzen wir den (zweidimensionalen) Mittelwert und die (zweidimensionale) Varianz (d.h. die sog. Kovarianzmatrix)

Wie im eindimensionalen Fall schätzen wir
den (zweidimensionalen) Mittelwert
und die (zweidimensionale) Varianz
(d.h. die sog. Kovarianzmatrix)

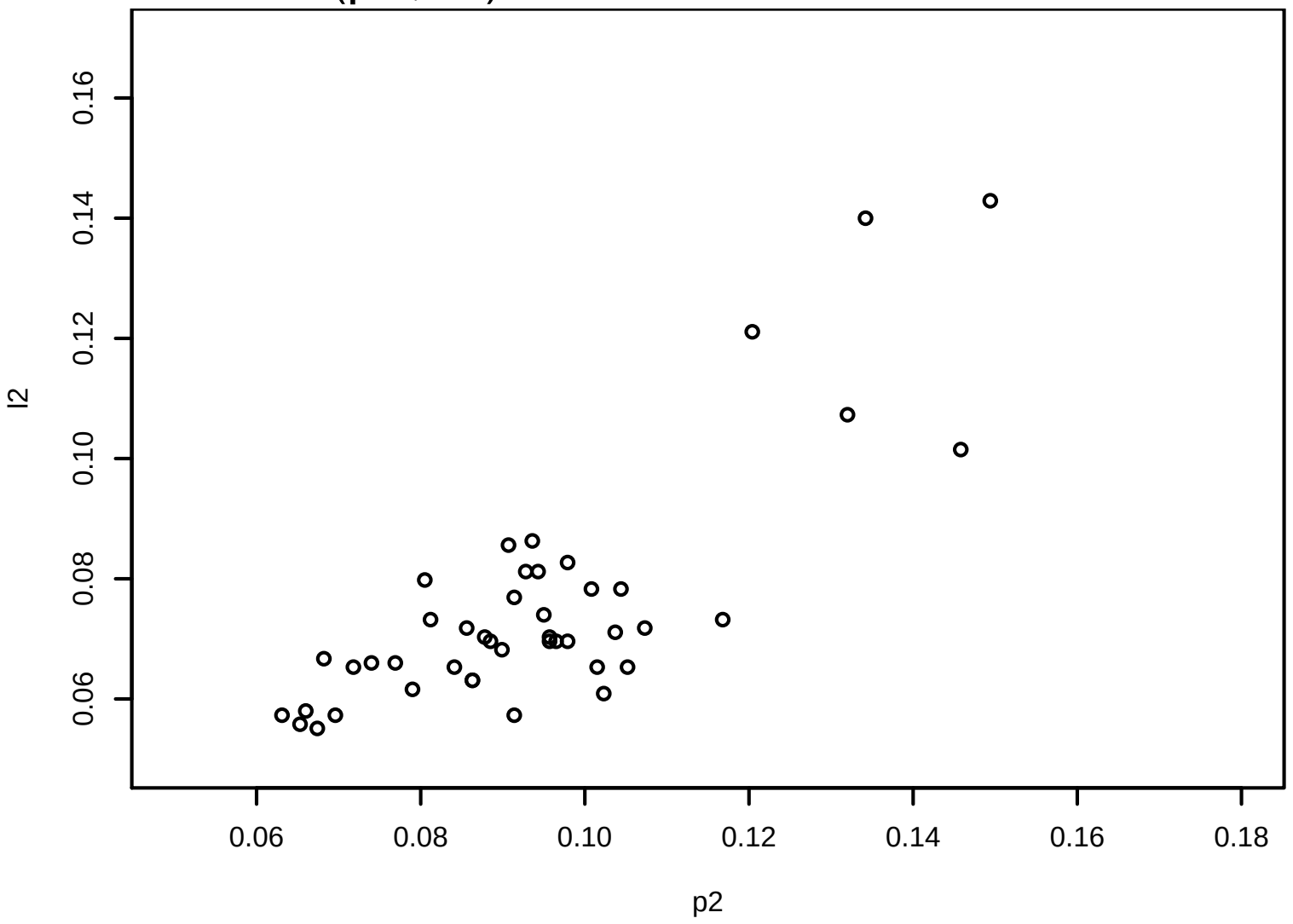
und approximieren f_m durch eine
zweidimensionale Normalverteilung
mit dem geschätzten Mittelwert
und der geschätzten Varianz.


(p2, l2) für Männchen und f_m
l2
0.06
0.08
0.10
0.12
0.14
0.16
p2
0.06
0.08
0.10
0.12
0.14
0.16
0.18

Viele der Weibchen passen schlecht zu f_m:

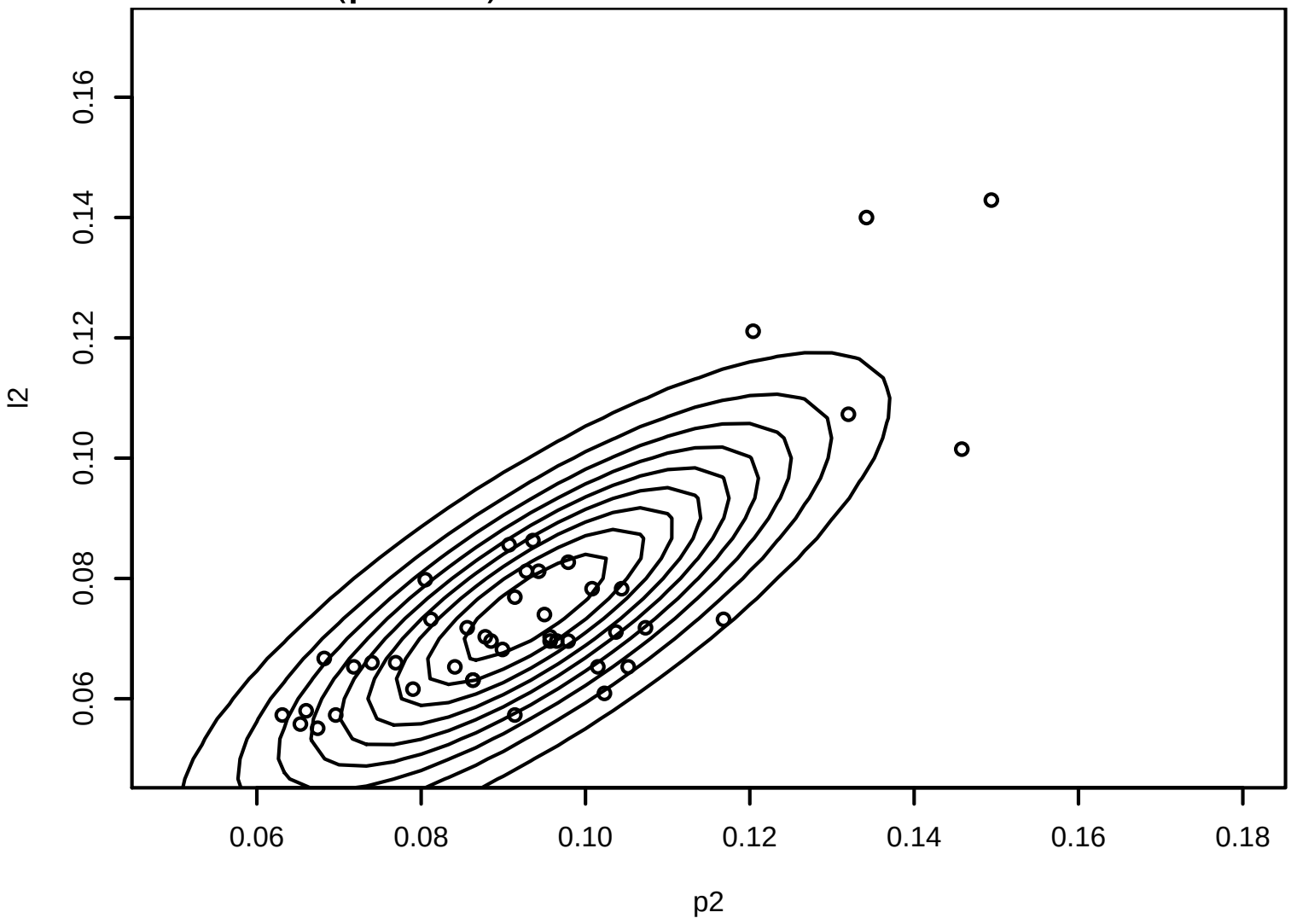


Analog für die Weibchen:

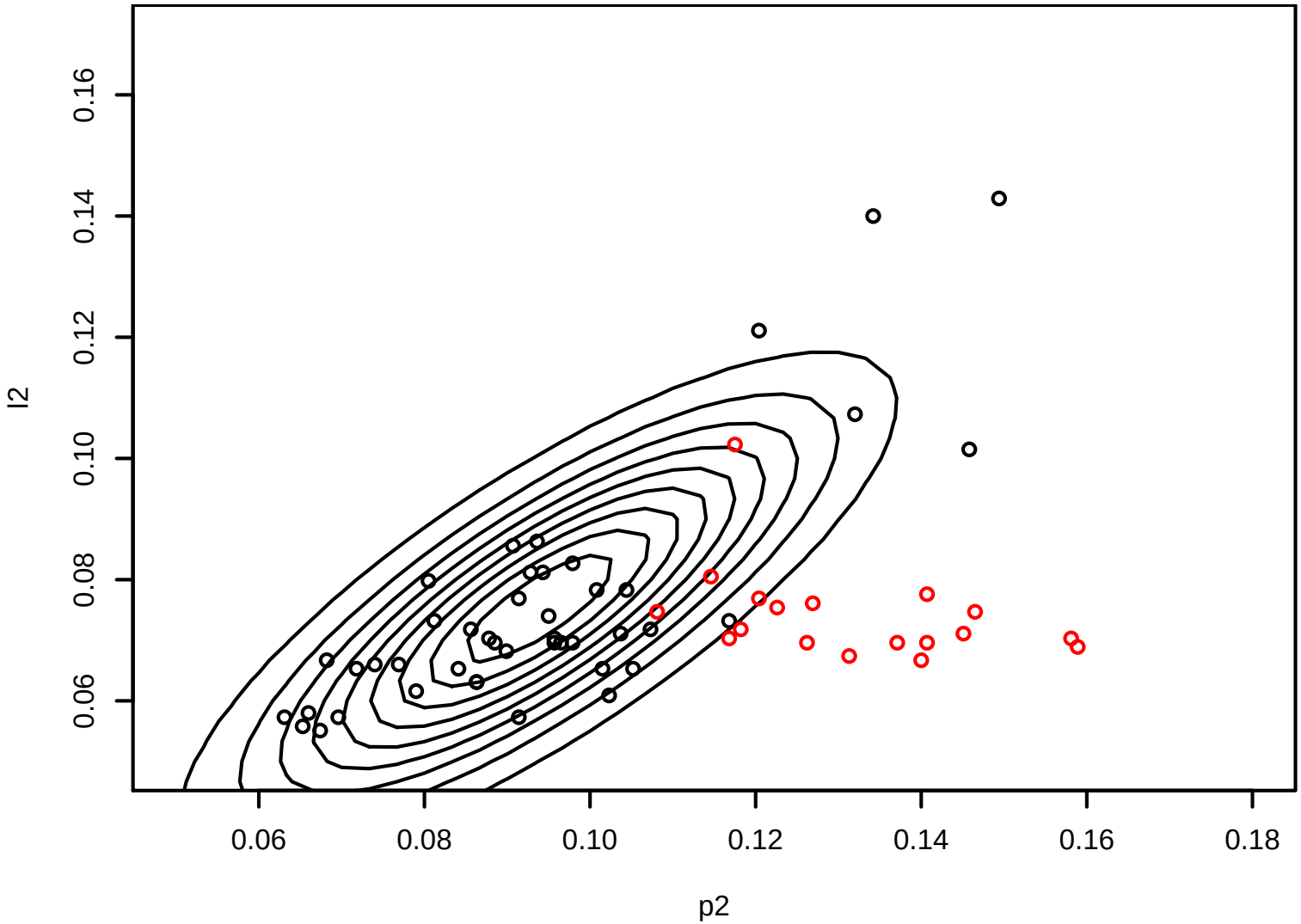


Analog für die Weibchen:

(p2, l2) für Weibchen und f_w



Viele der Männchen passen schlecht zu f_w:

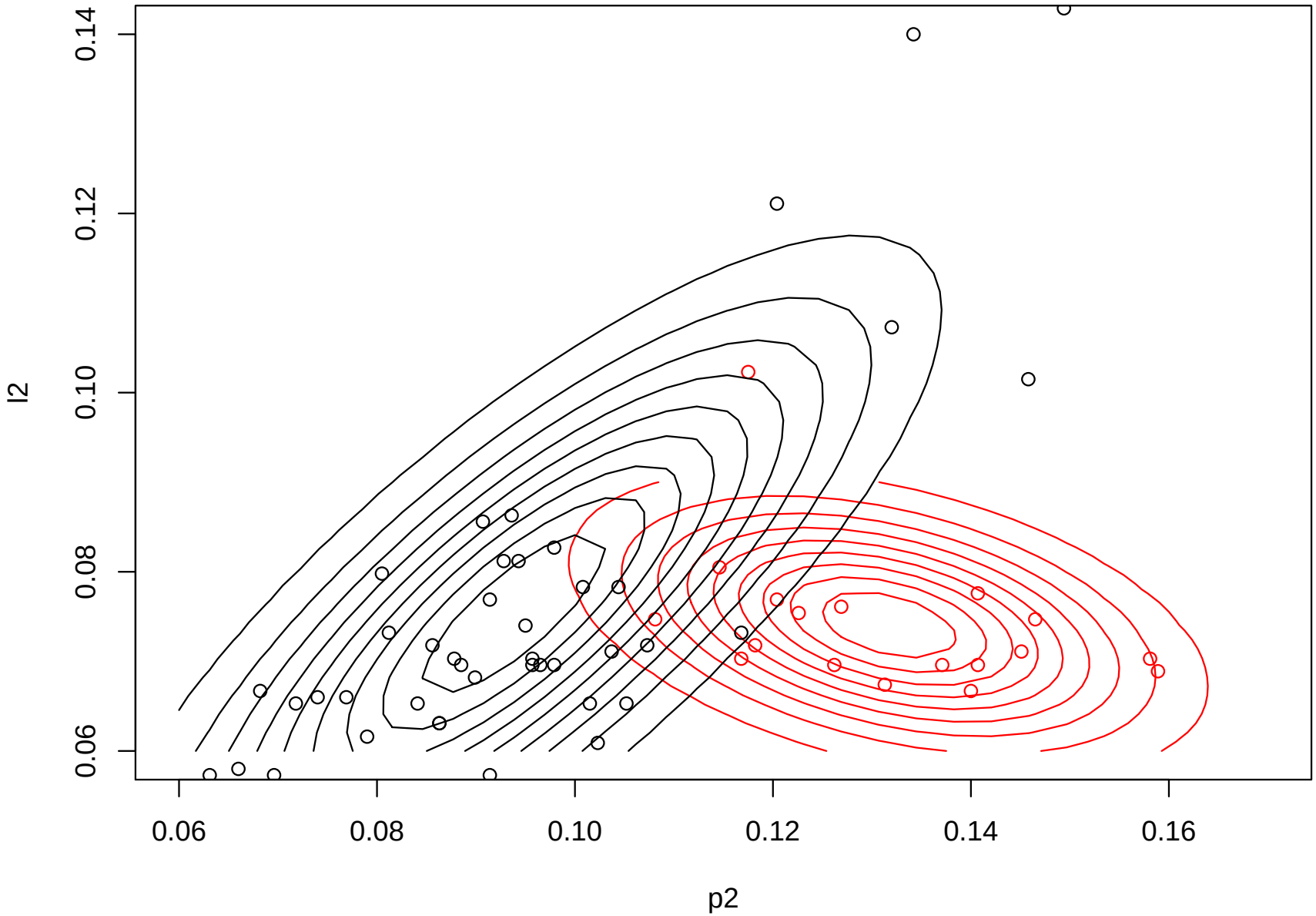


Klassifikation:

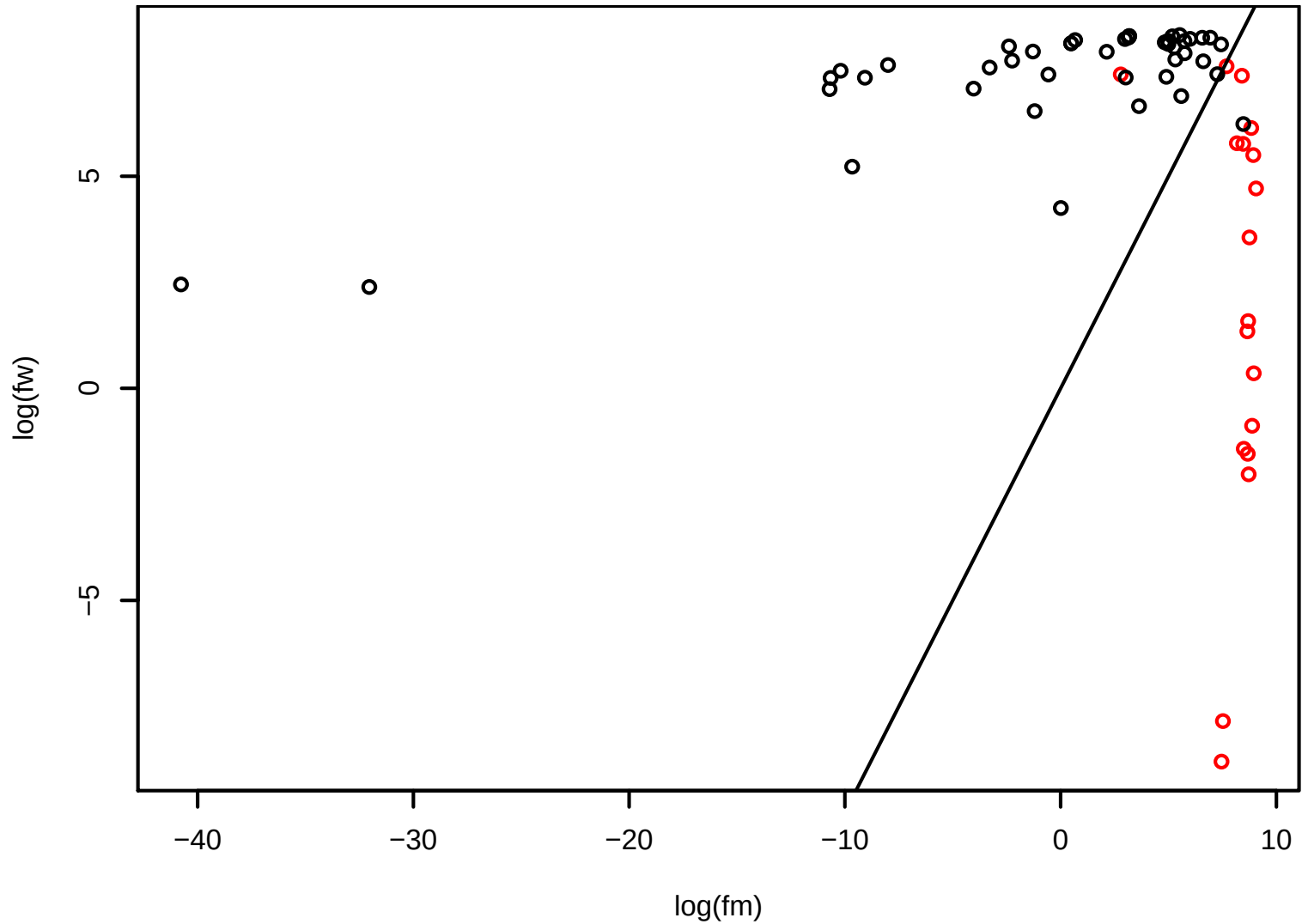
Für jeden Punkt berechnen wir $f_m(x)$ und $f_w(x)$.

$f_m(x)$ größer $\longrightarrow$ „Männchen“

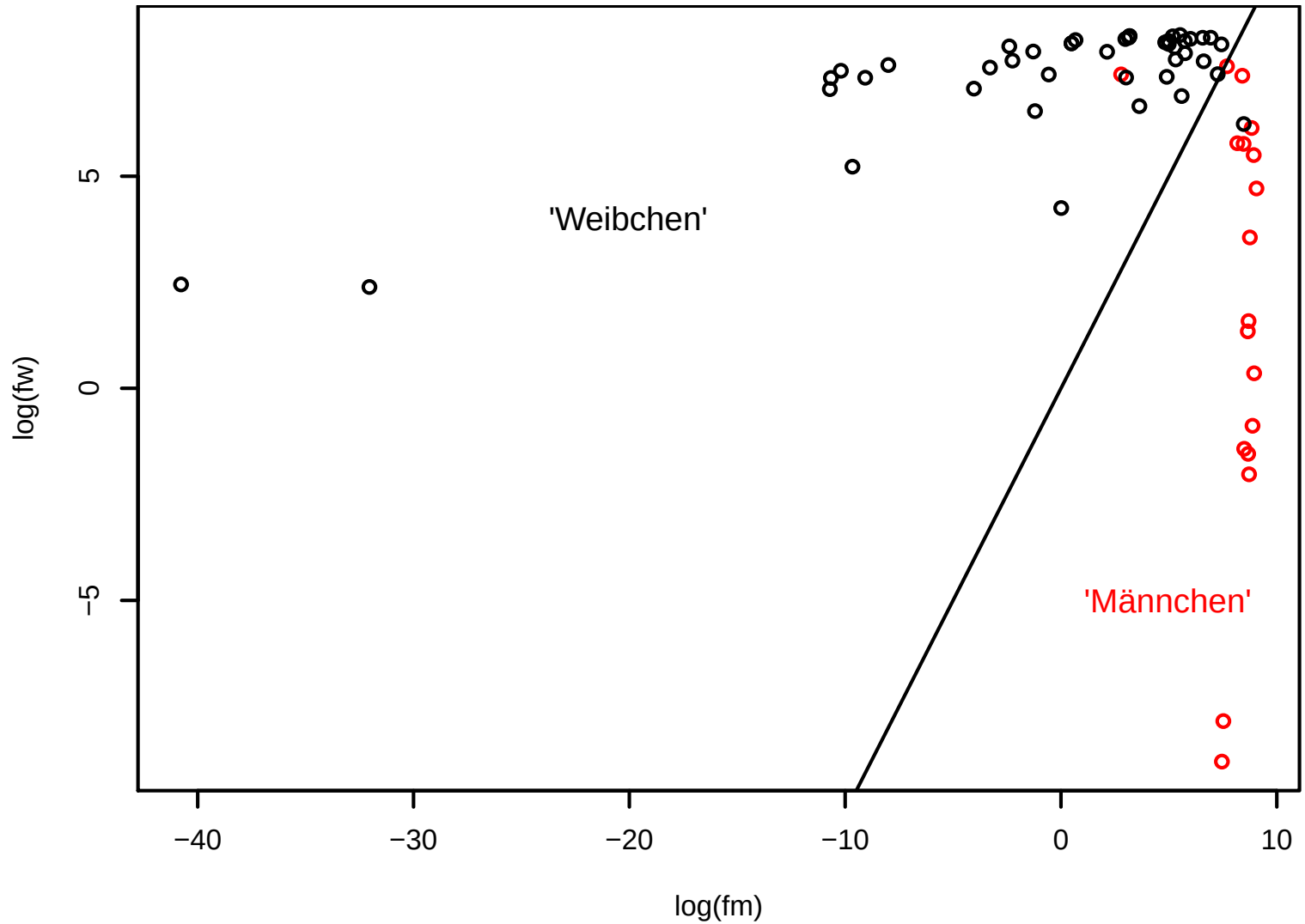
$f_w(x)$ größer $\longrightarrow$ „Weibchen“


l2
0.06
0.08
0.10
0.12
0.14
0.06
0.08
0.10
0.12
0.14
0.16
p2

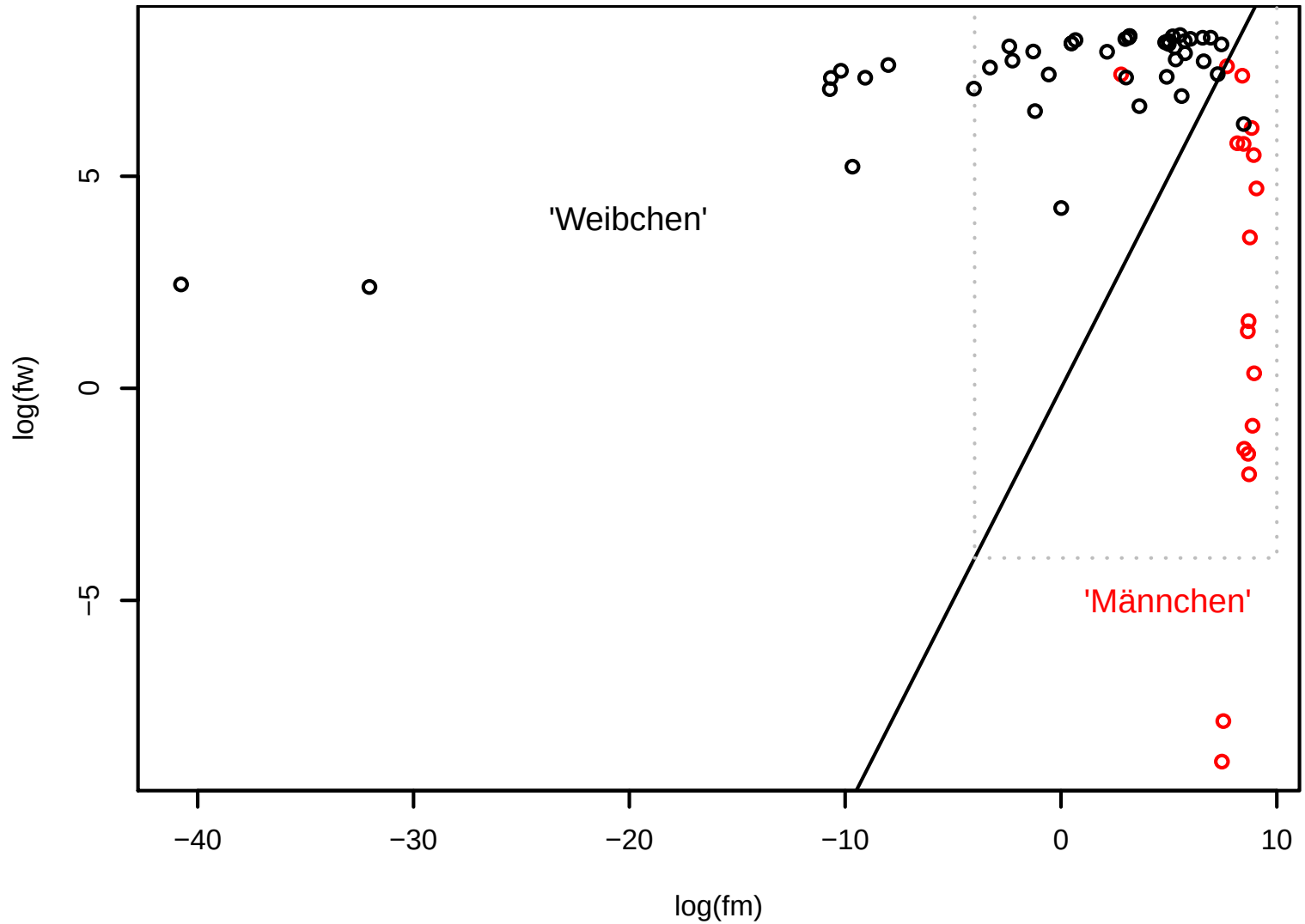
$\log(f_w)$ gegen $\log(f_m)$ und Diagonale:



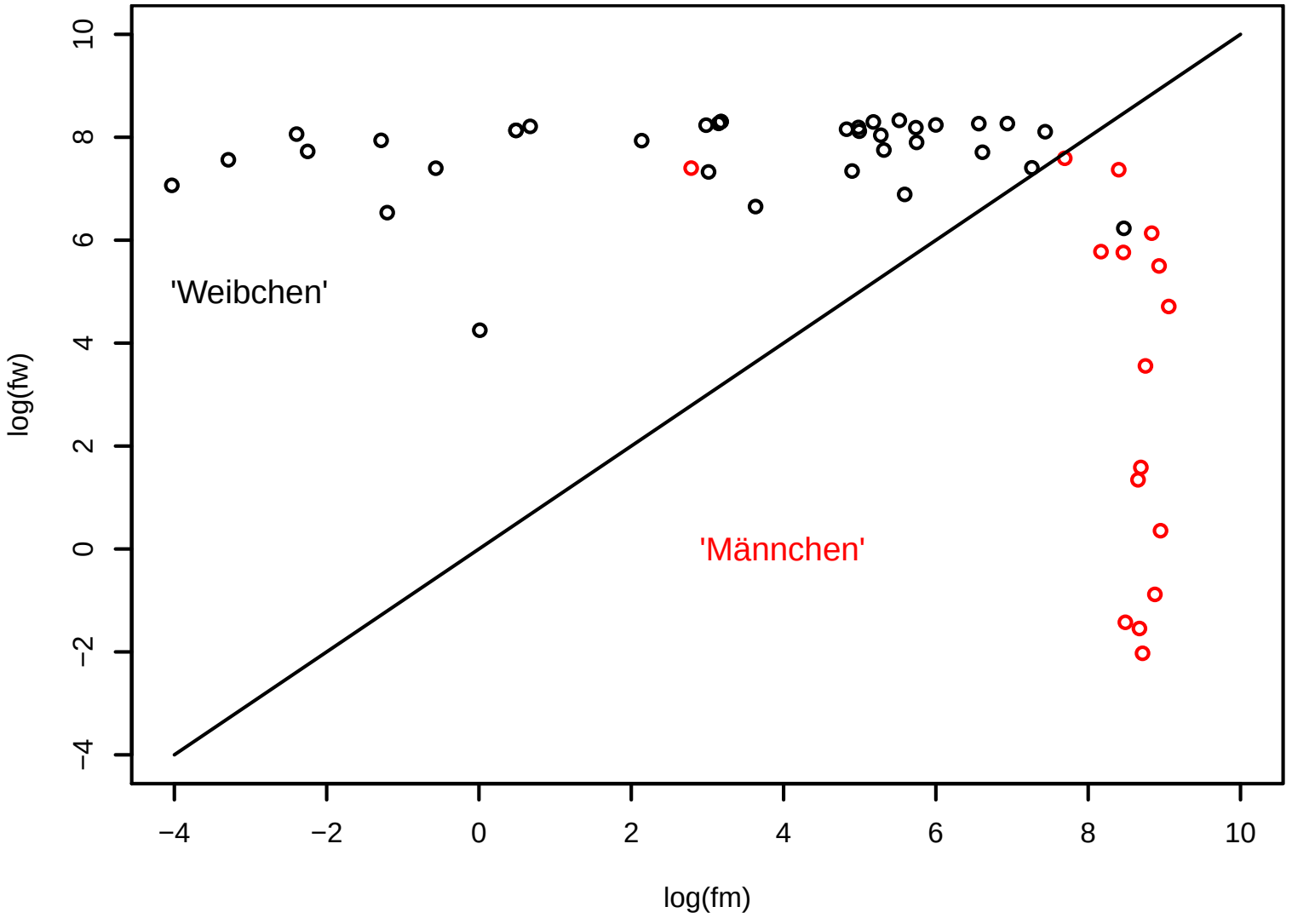
$\log(f_w)$ gegen $\log(f_m)$ und Diagonale:



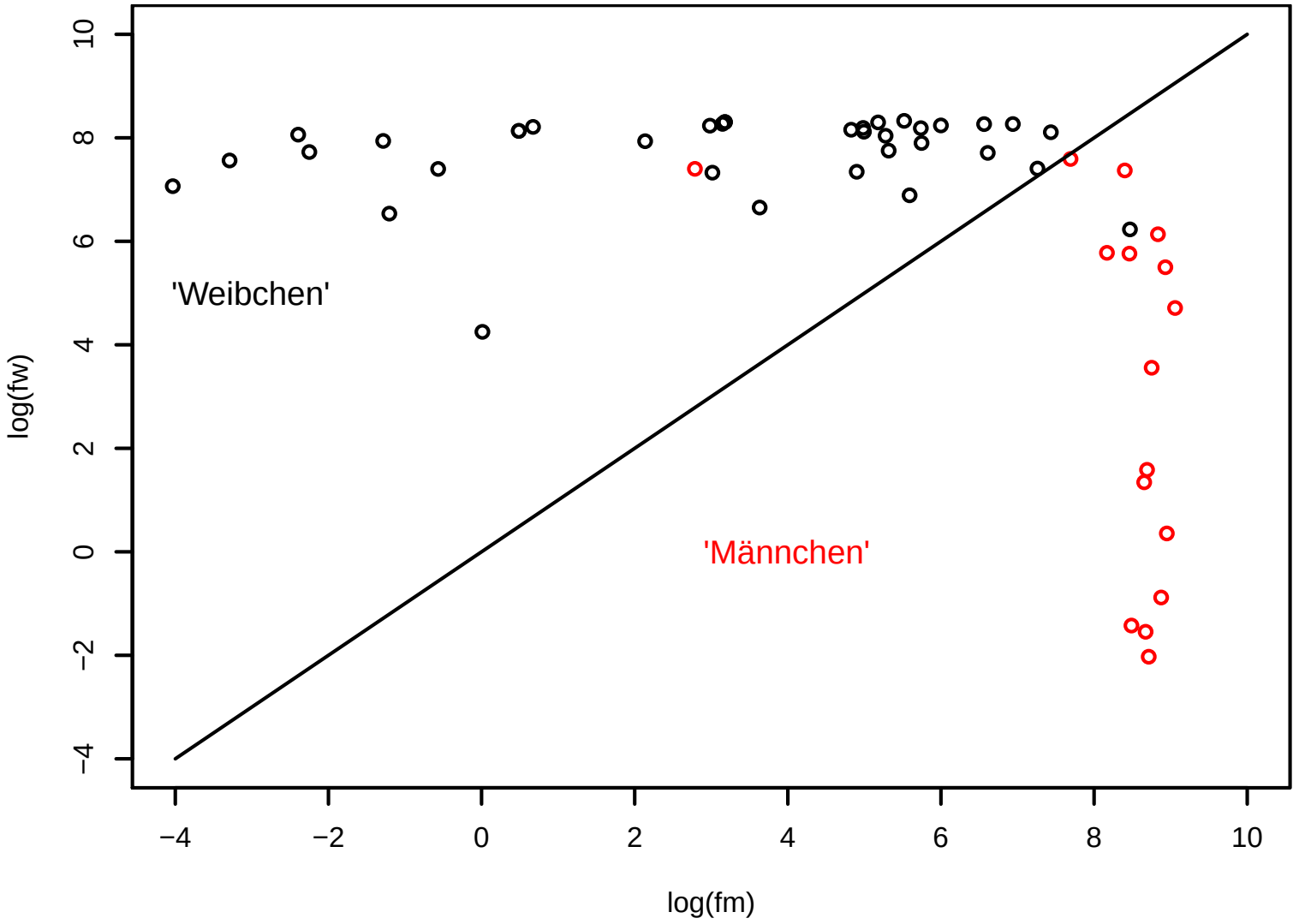
$\log(f_w)$ gegen $\log(f_m)$ und Diagonale:



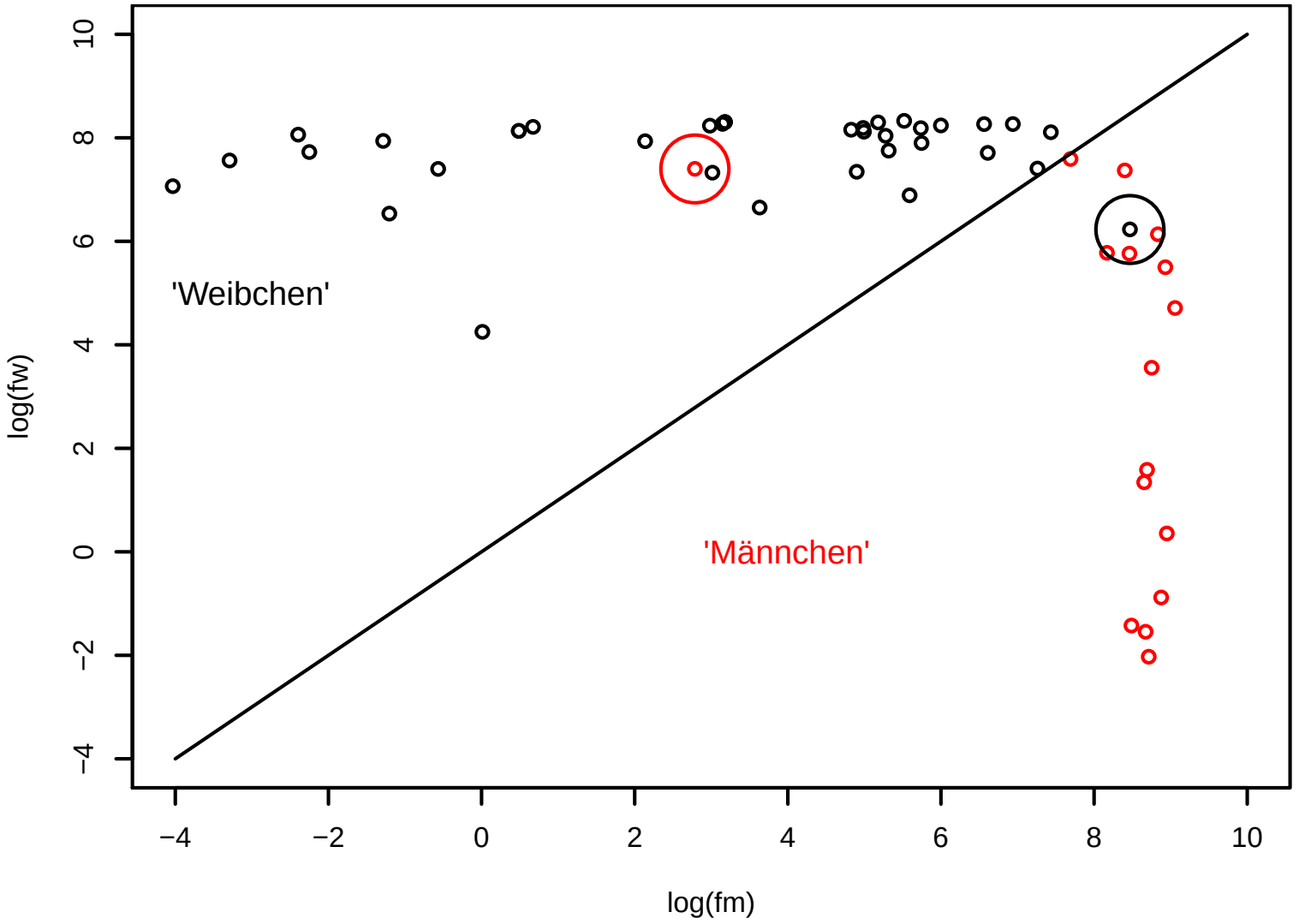
$\log(f_w)$ gegen $\log(f_m)$ und Diagonale, Ausschnittvergrößerung:



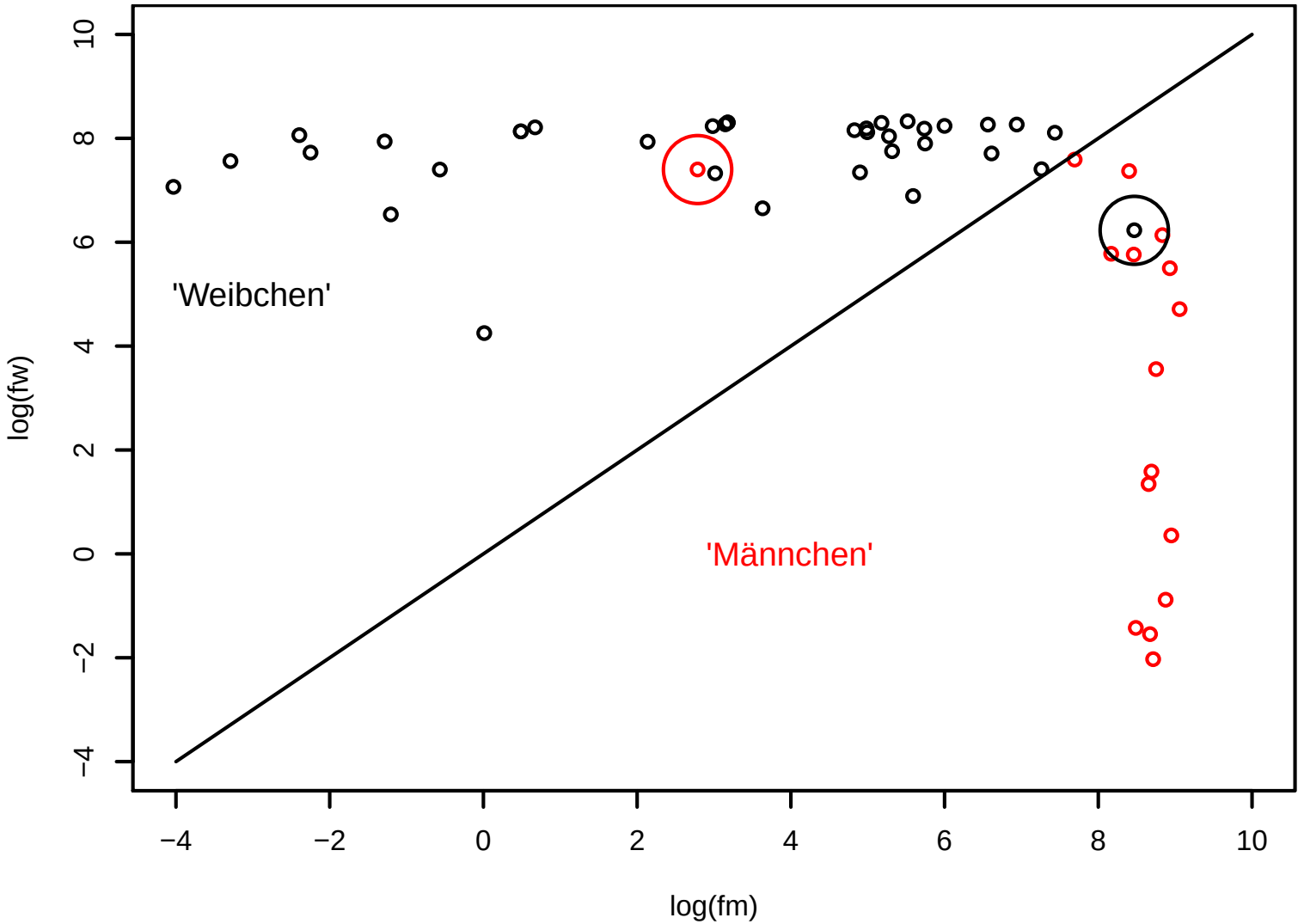
Falsch klassifiziert:



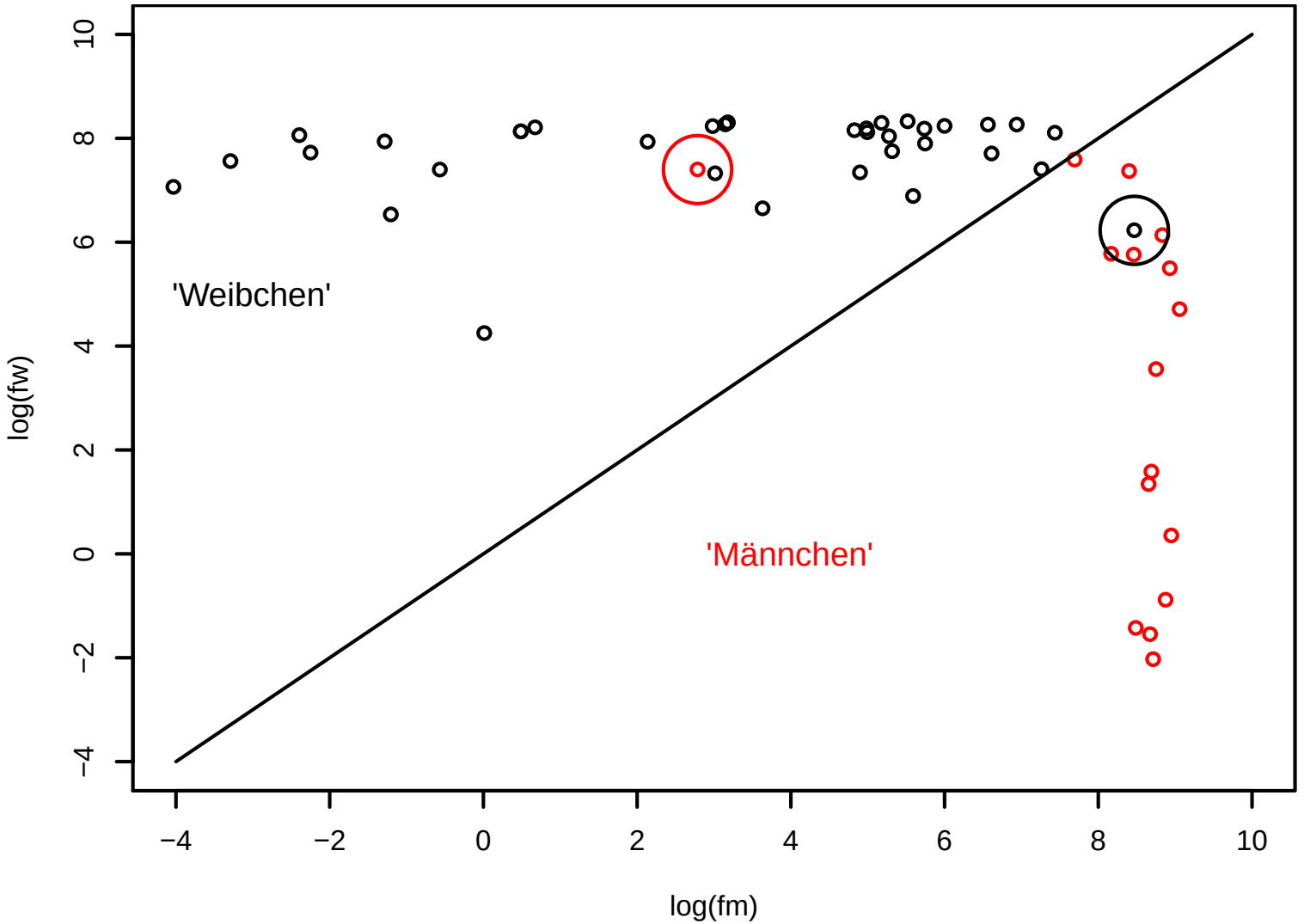
Falsch klassifiziert: 1 Männchen



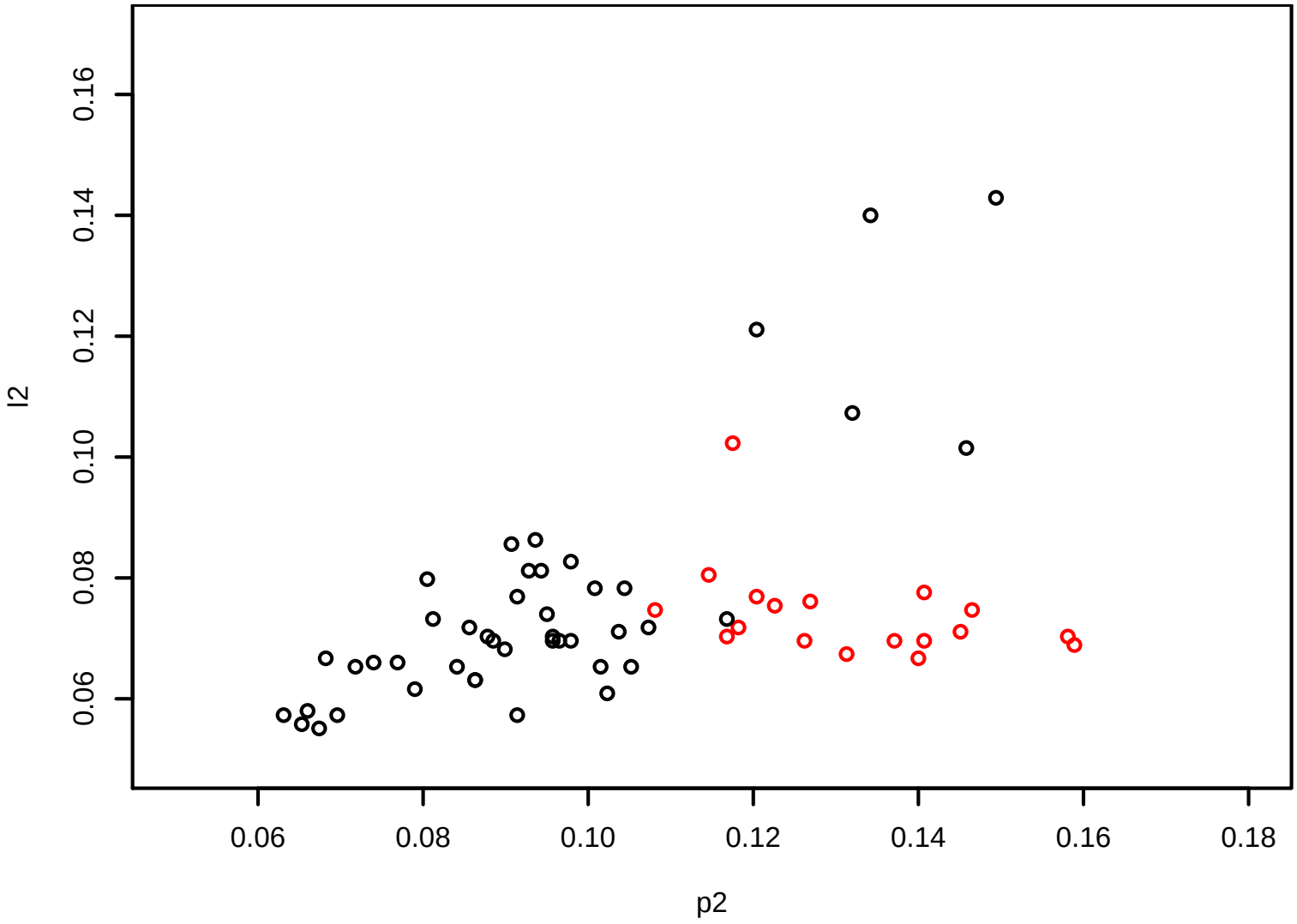
Falsch klassifiziert: 1 Männchen, 1 Weibchen



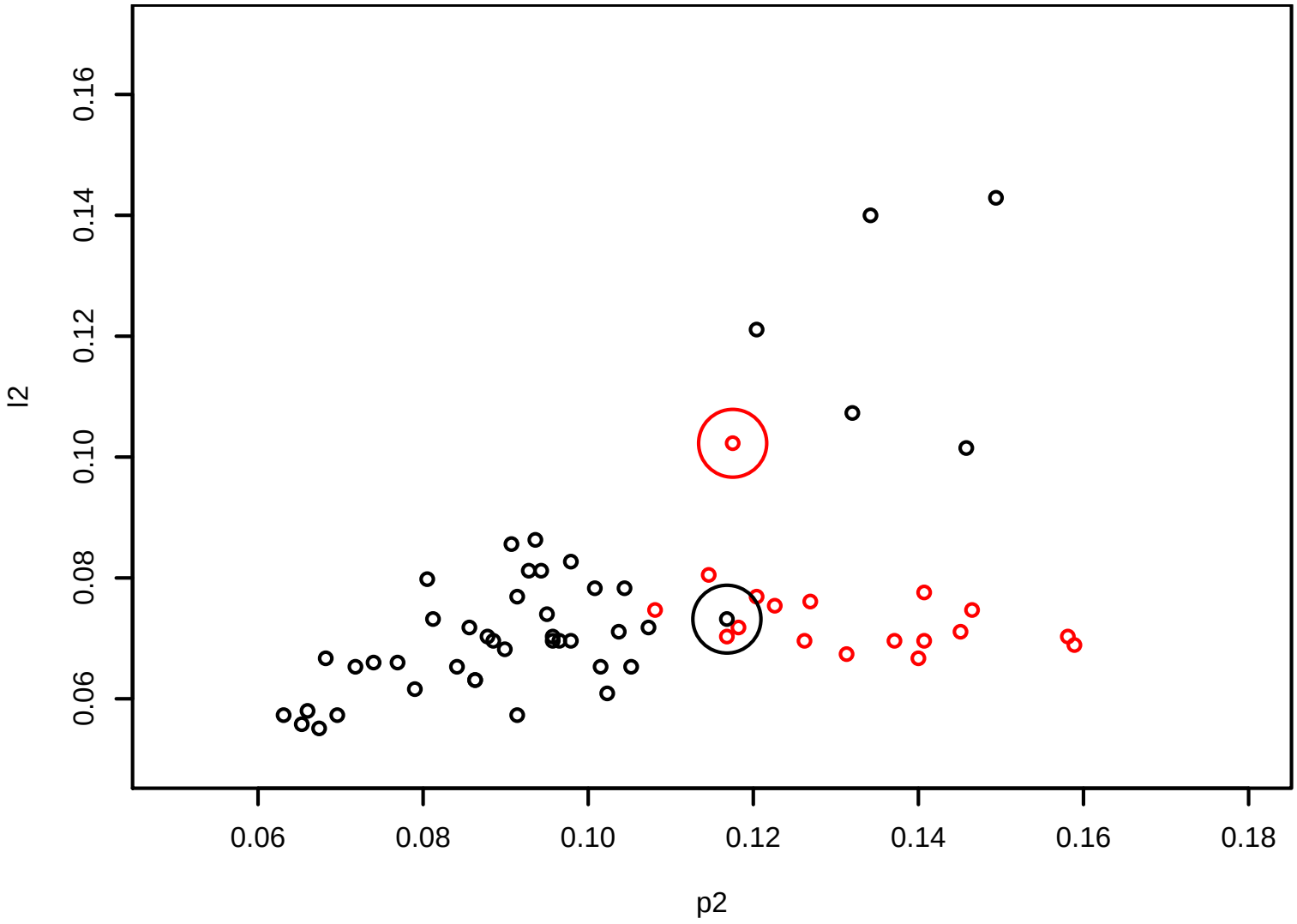
Falsch klassifiziert: 1 Männchen, 1 Weibchen (und eigentlich 2 „unentschieden“)



Welche Fälle wurden falsch zugeordnet?



Welche Fälle wurden falsch zugeordnet?



Wenn man nur p2 und l2 kennt, ist es sehr verständlich, dass diese Fälle falsch klassifiziert werden.

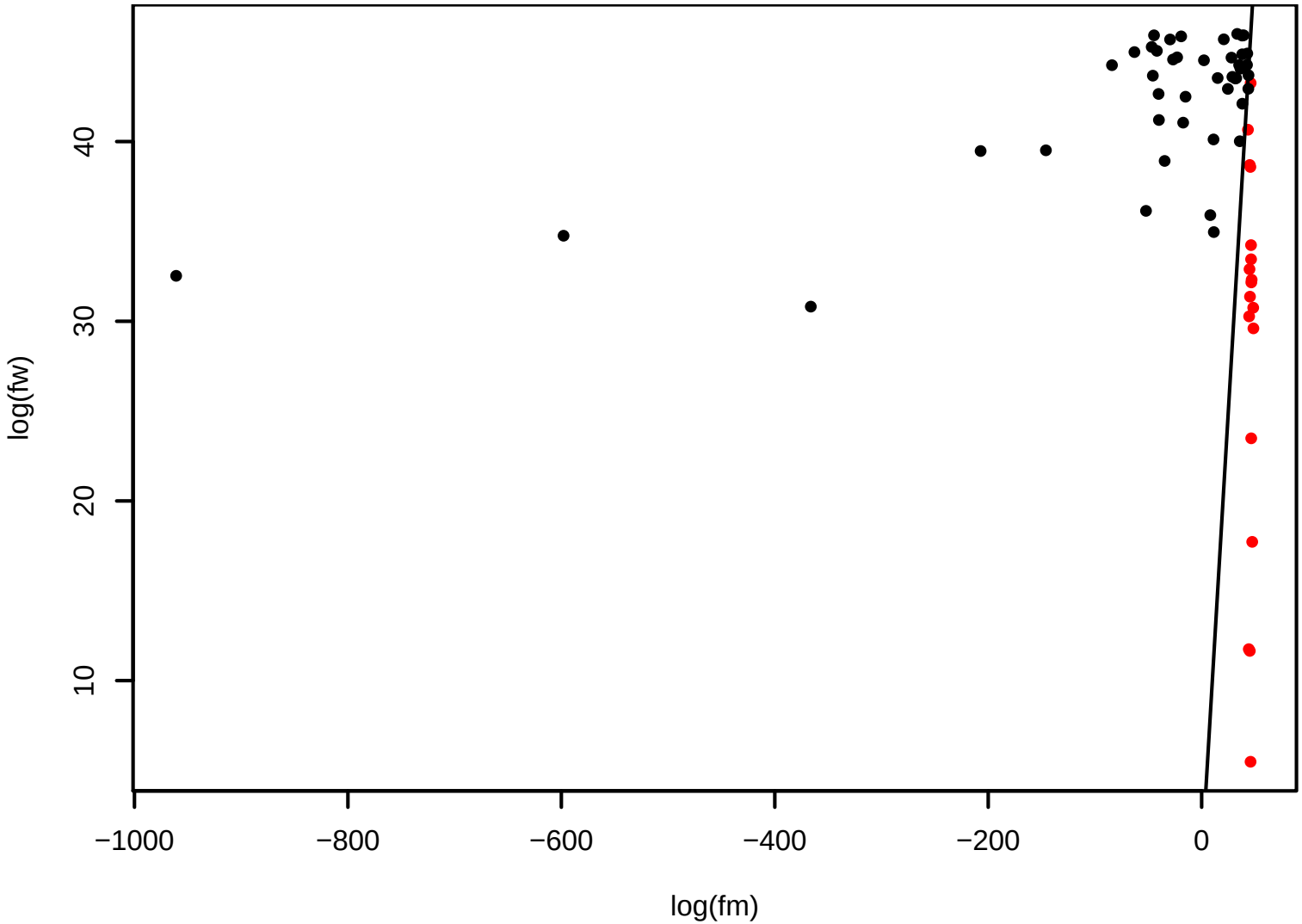
Übersicht

Wir verfahren genause mit allen Variablen (p1, p2, p3, p4, p5, l1, l2, l3, l4, l5) gemeinsam

Wir verfahren genause mit allen Variablen (p1, p2, p3, p4, p5, l1, l2, l3, l4, l5) gemeinsam — mathematisch analog, allerdings geometrisch sehr schwierig darzustellen.

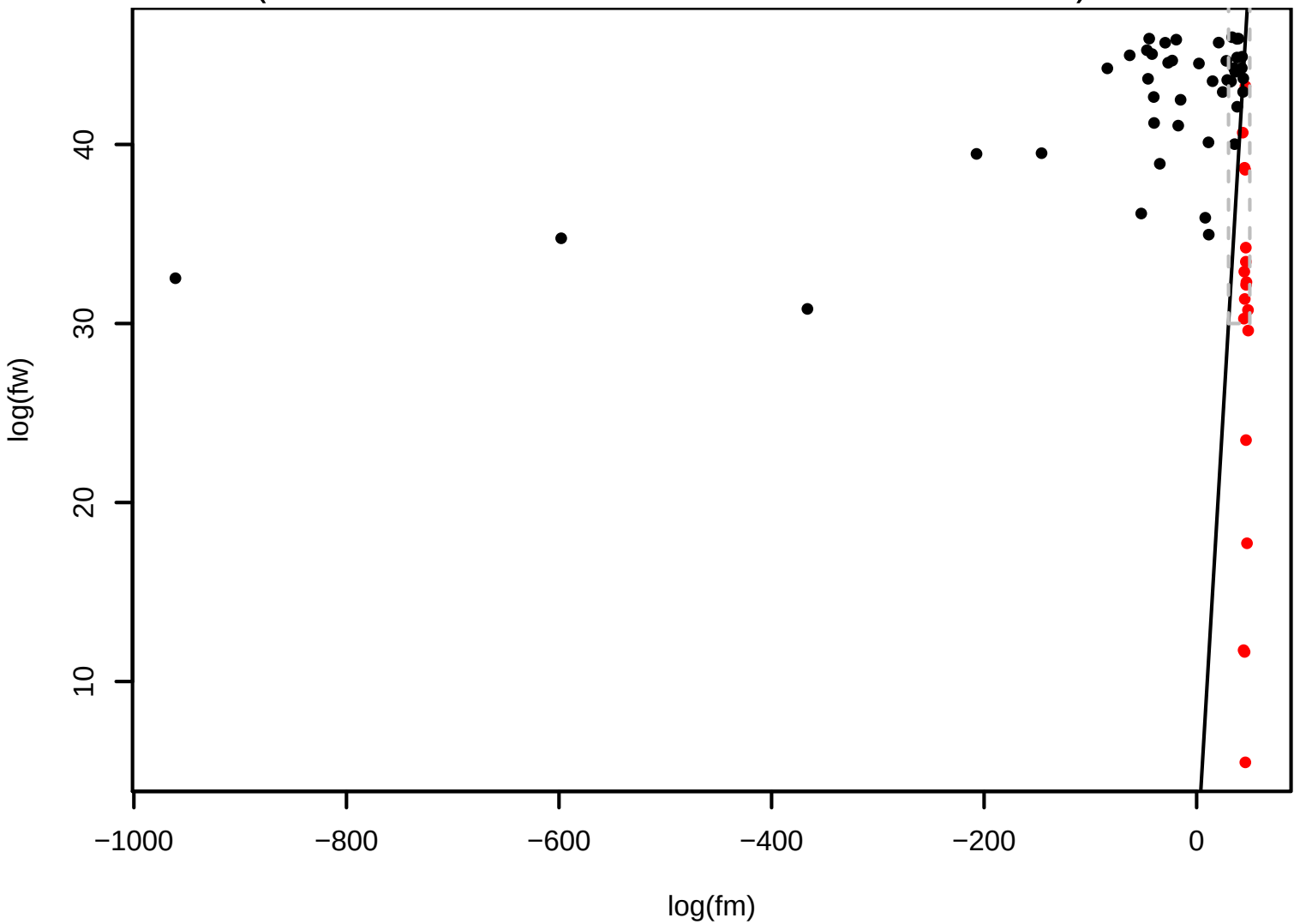
Ergebnis:

$\log(f_w)$ gegen $\log(f_m)$ und Diagonale (basierend auf allen 10 Variablen):

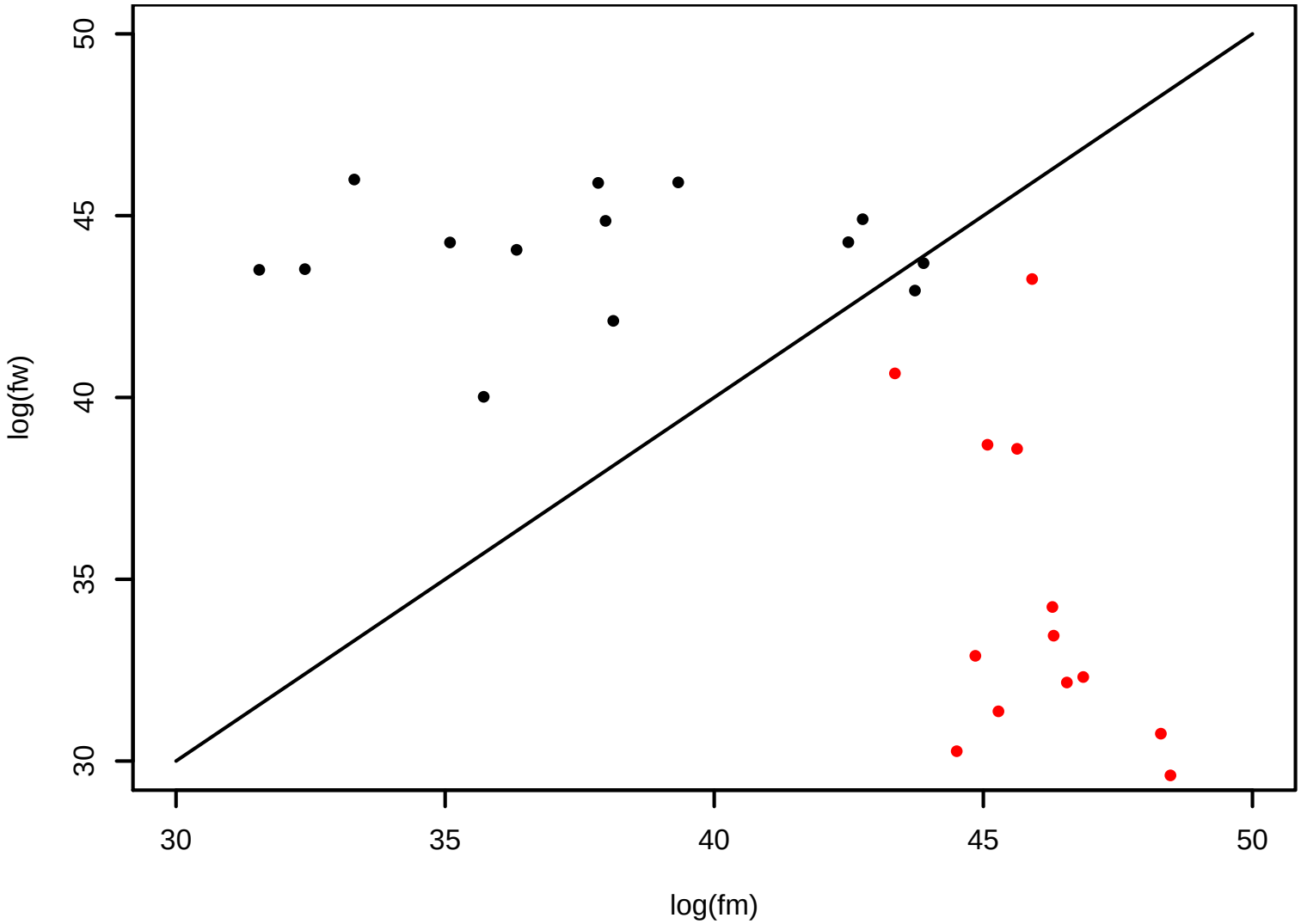


Ergebnis:

$\log(f_w)$ gegen $\log(f_m)$ und Diagonale (basierend auf allen 10 Variablen):



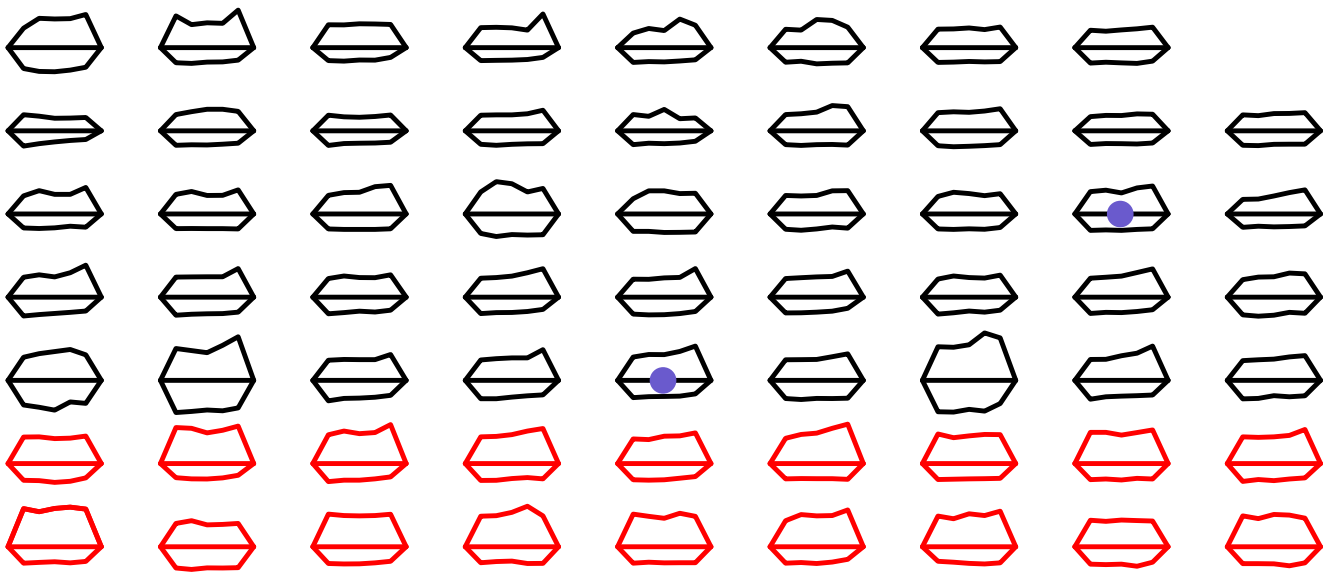
$\log(f_w)$ gegen $\log(f_m)$ und Diagonale (basierend auf allen 10 Variablen, Ausschnittvergrößerung):



$\log(f_w)$ gegen $\log(f_m)$ und Diagonale
(basierend auf allen 10 Variablen, Ausschnittvergrößerung):
Die zwei mit (p2,l2) falsch klassifizierten Fälle wurden nun richtig klassifiziert.

$\log(f_w)$ gegen $\log(f_m)$ und Diagonale
(basierend auf allen 10 Variablen, Ausschnittvergrößerung):
Die zwei mit (p2,l2) falsch klassifizierten Fälle wurden nun richtig klassifiziert.
Allerdings wurden zwei Weibchen (knapp) falsch klassifiziert.

Falsch klassifiziert



Die beiden falsch klassifierten Rufe: sie sehen ziemlich „männlich“ aus.

Warnhinweis

Der Anteil der falsch klassifizierten wurde hier nur für Daten geschätzt, die auch für die Anpassung der Klassifizierung verwendet wurden.

Warnhinweis

Der Anteil der falsch klassifizierten wurde hier nur für Daten geschätzt, die auch für die Anpassung der Klassifizierung verwendet wurden.

- Der Klassifikationsfehler könnte zu optimistisch geschätzt werden.

Warnhinweis

Der Anteil der falsch klassifizierten wurde hier nur für Daten geschätzt, die auch für die Anpassung der Klassifizierung verwendet wurden.

- Der Klassifikationsfehler könnte zu optimistisch geschätzt werden.
- Mögliche Lösungen: Schätze Klassifikationsfehler auf unabhängigen Daten oder Kreuzvalidierung.

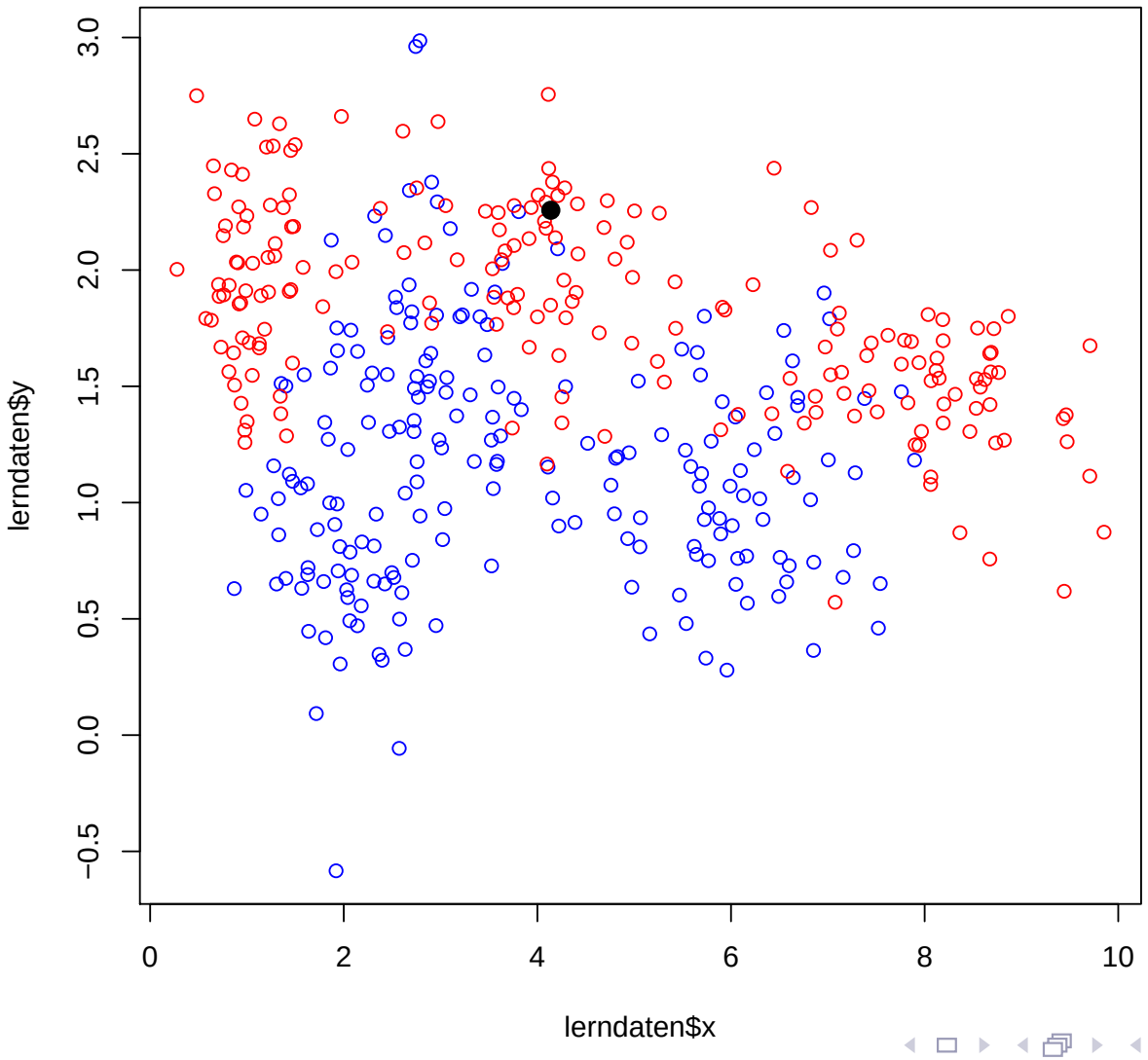
Warnhinweis

Der Anteil der falsch klassifizierten wurde hier nur für Daten geschätzt, die auch für die Anpassung der Klassifizierung verwendet wurden.

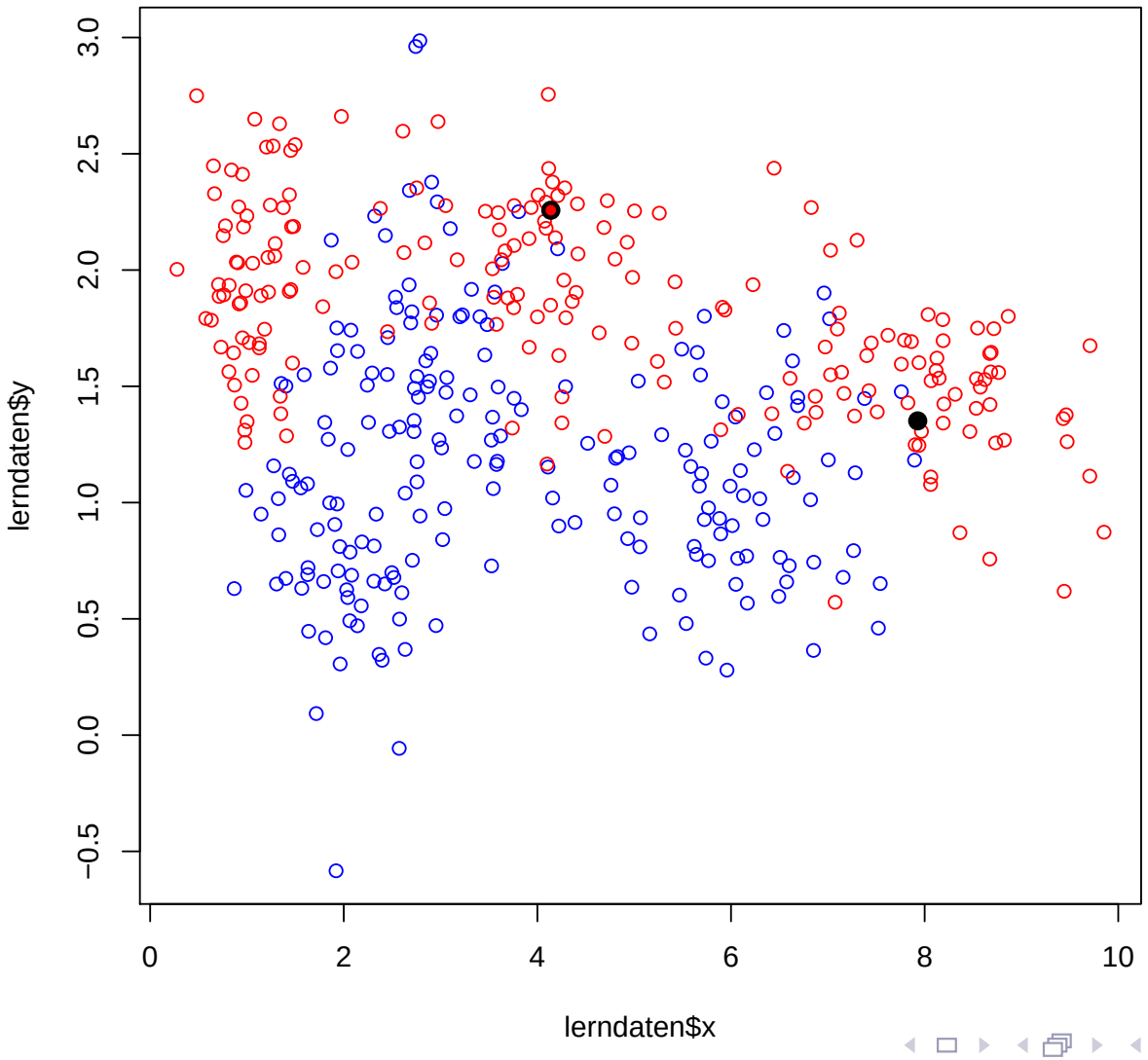
- Der Klassifikationsfehler könnte zu optimistisch geschätzt werden.
- Mögliche Lösungen: Schätze Klassifikationsfehler auf unabhängigen Daten oder Kreuzvalidierung.
- Dieser Effekt ist umso größer je mehr Variablen für die Klassifikation verwendet werden wegen Überanpassung, engl. *overfitting*.

Übersicht

knn: frag die *k* nächste Nachbarn

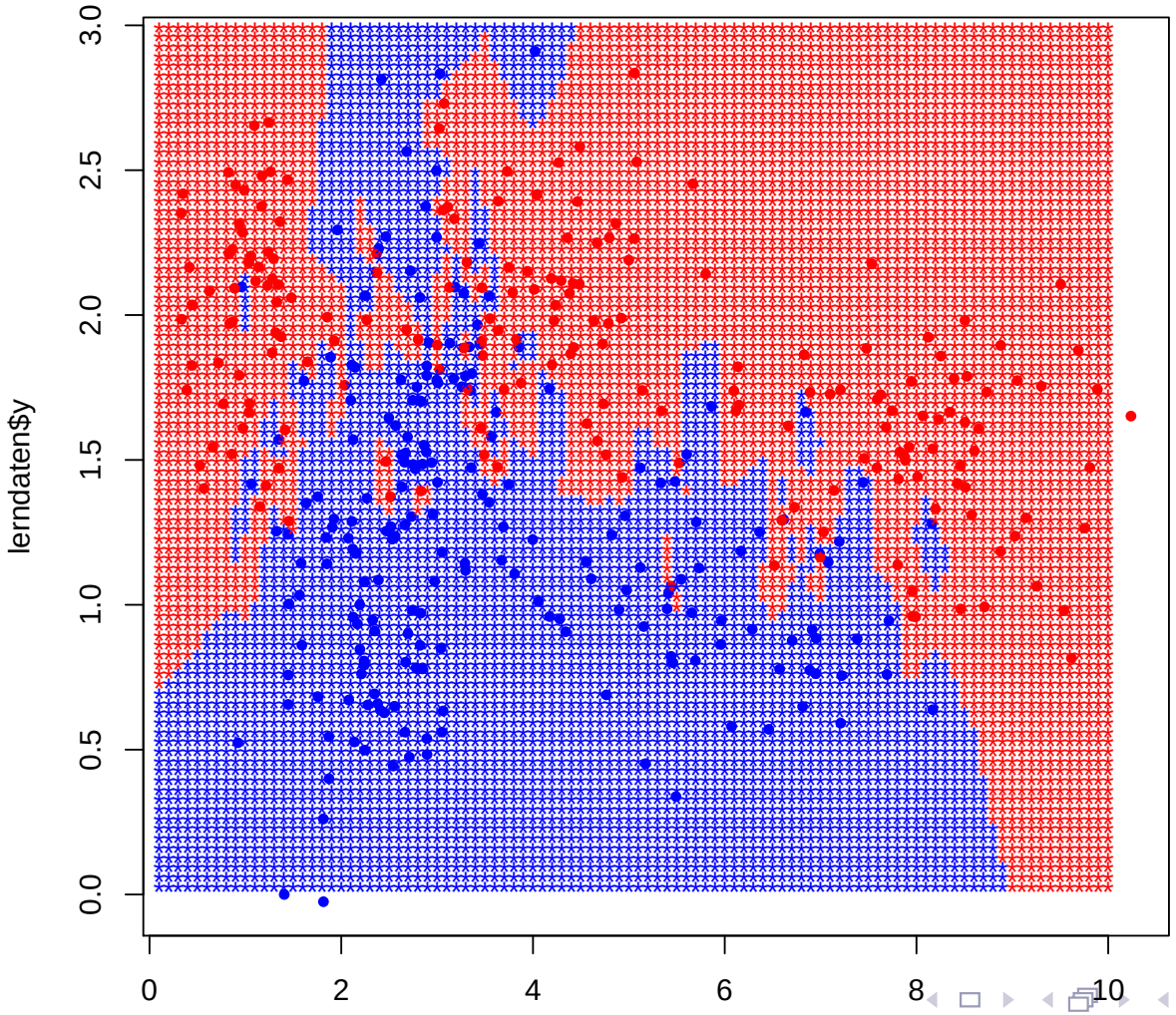


knn: frag die *k* nächste Nachbarn



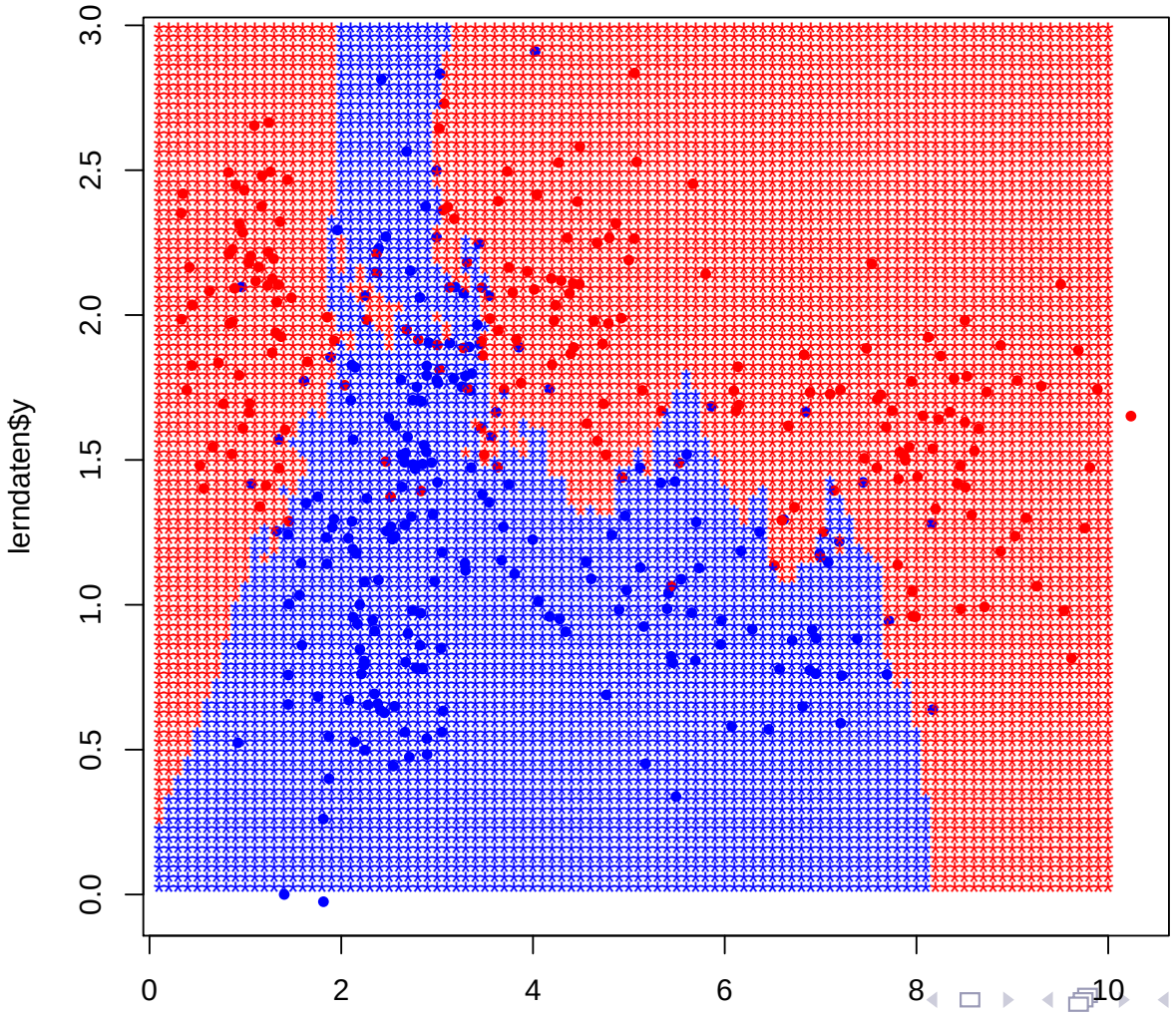
knn: frag die *k* nächste Nachbarn

1 Nachbar



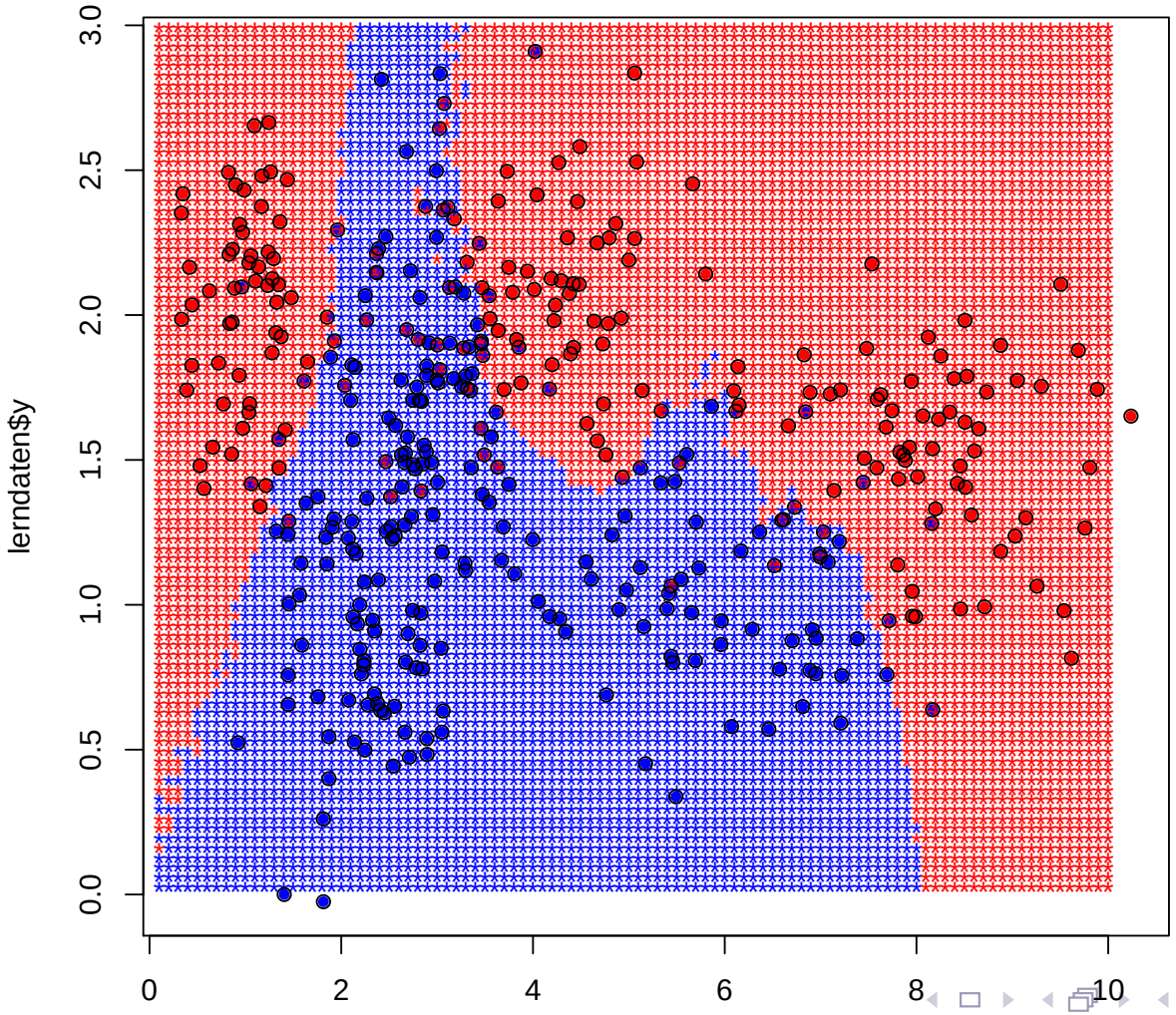
knn: frag die *k* nächste Nachbarn

5 Nachbarn



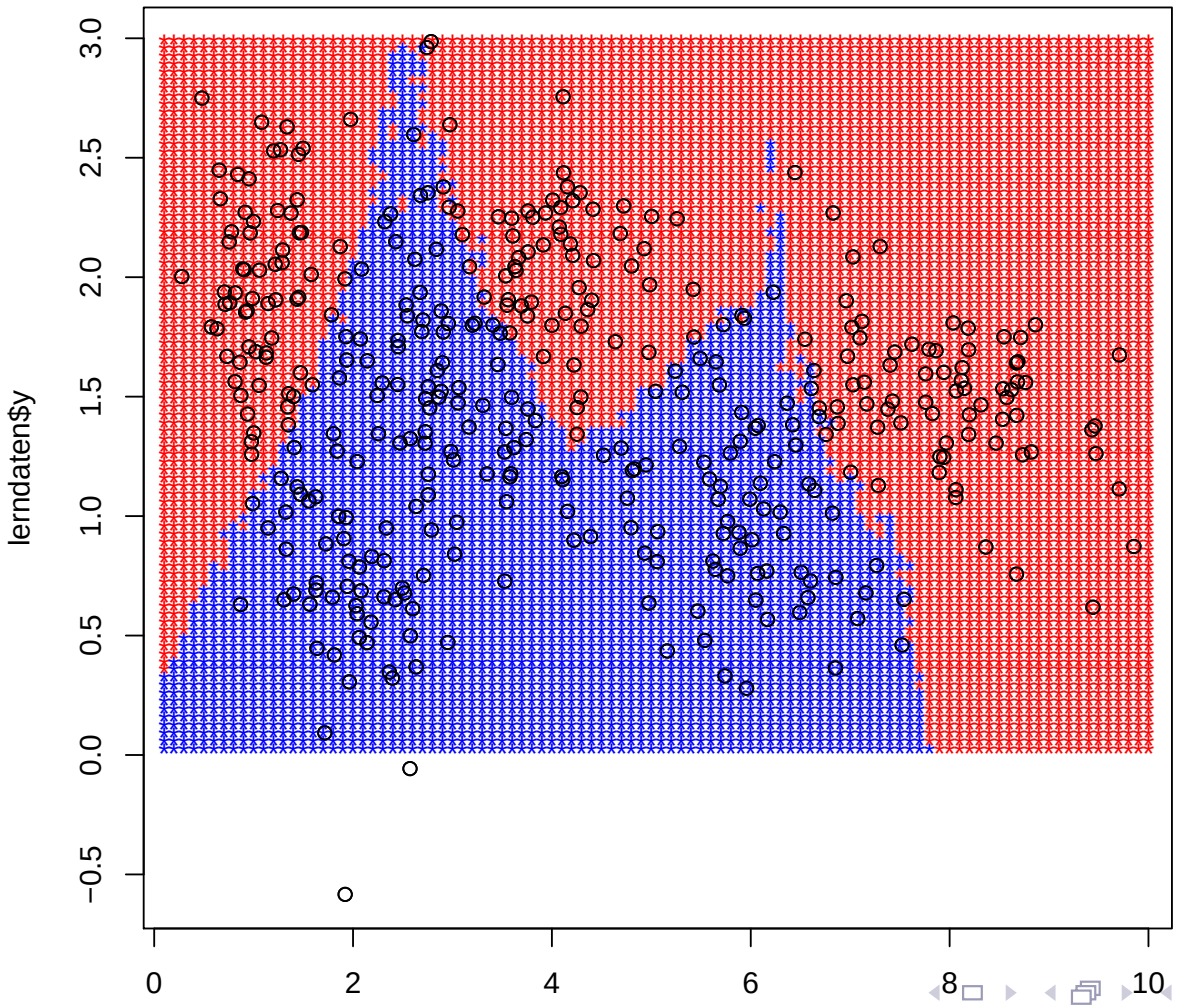
knn: frag die *k* nächste Nachbarn

12 Nachbarn

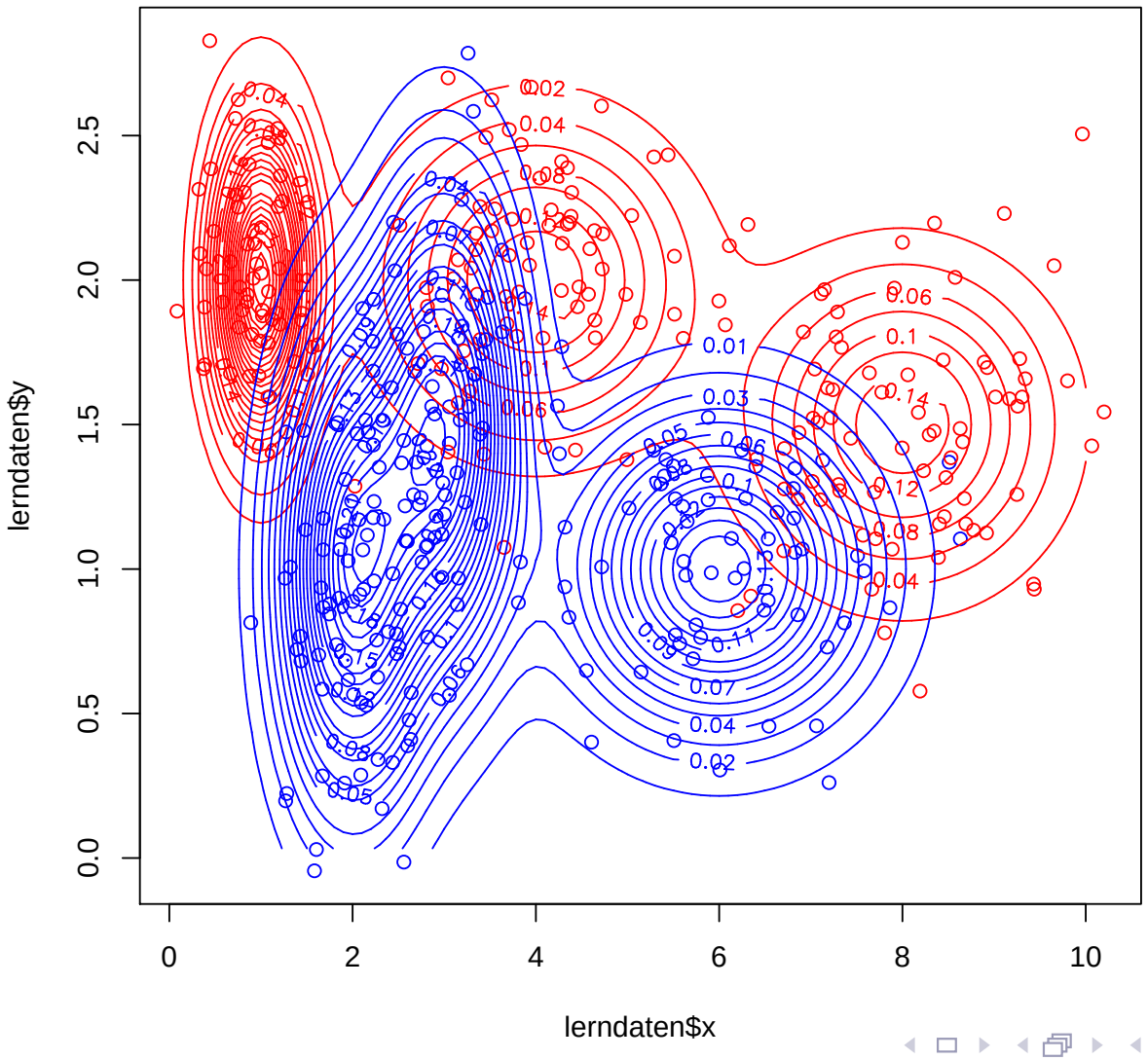


knn: frag die *k* nächste Nachbarn

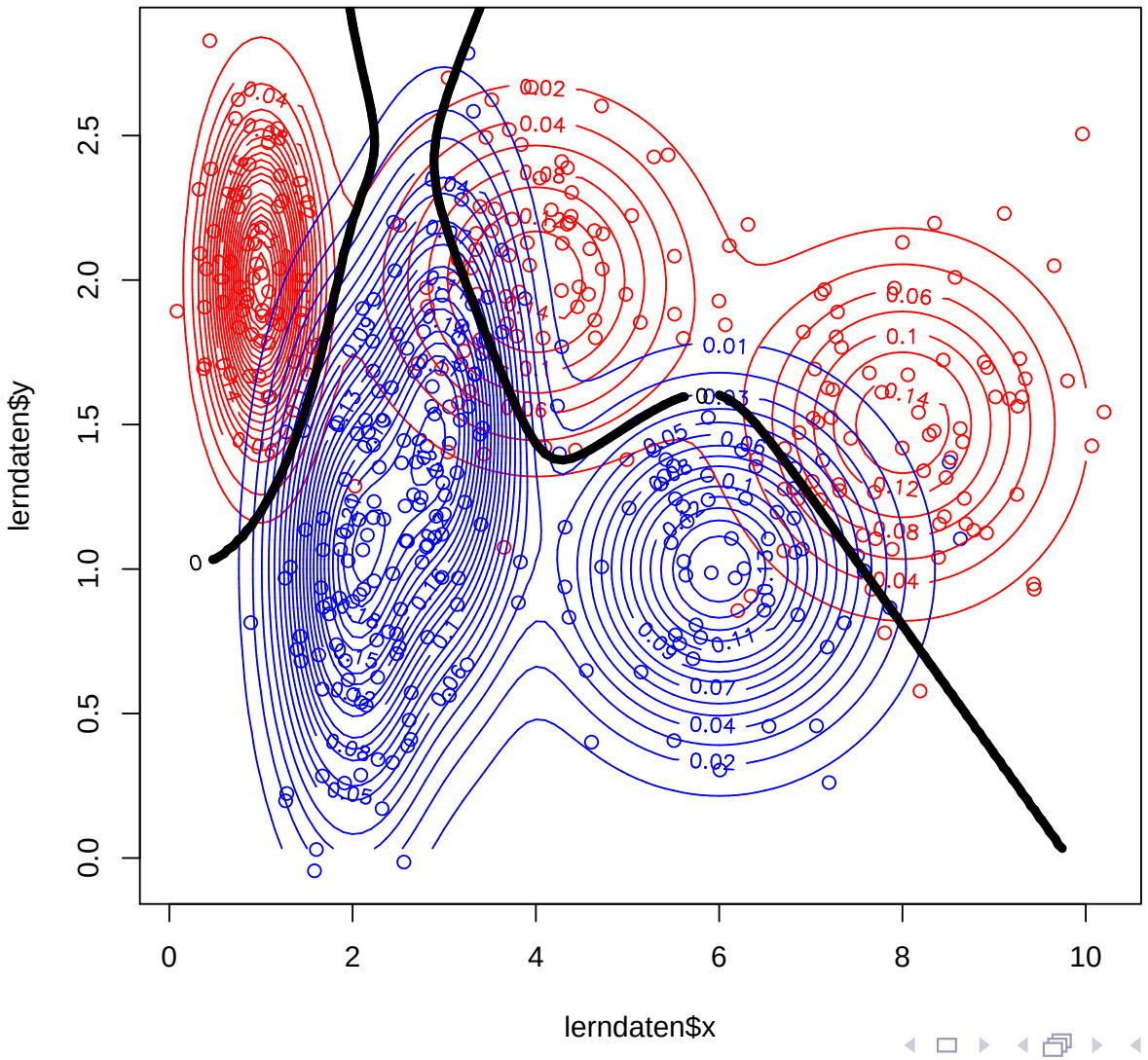
20 Nachbarn



knn: frag die *k* nächste Nachbarn



knn: frag die *k* nächste Nachbarn



Also: Fragt man zu viele Nachbarn, verliert man Auflösung, fragt man zu wenige, droht *overfitting*.

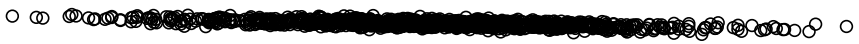
Übersicht

Wir wollen multi-dimensionale Daten visualisieren,
um gewisse Muster zu finden.

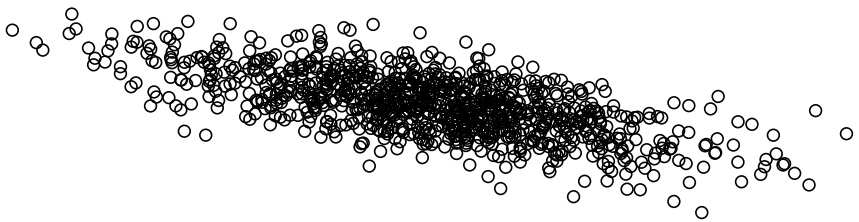
Wir wollen multi-dimensionale Daten visualisieren,
um gewisse Muster zu finden.

Wie visualisieren wir, welche multi-dimensionale Datenpunke nah bei einander liegen?

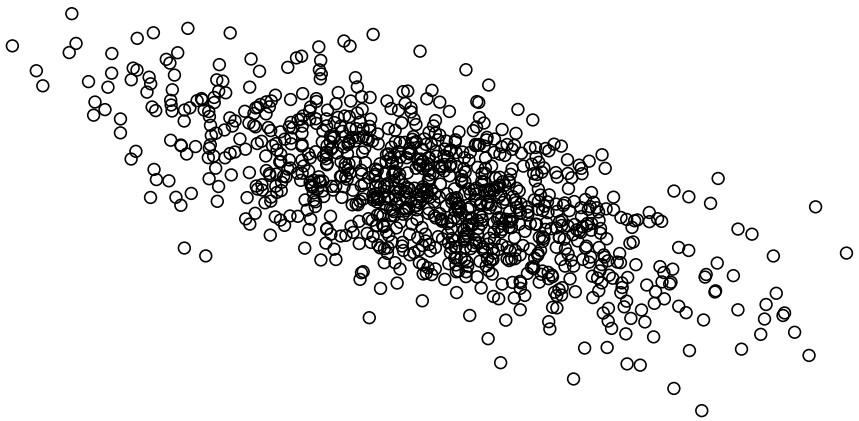
Beispiel: 2-dimensionale Daten in 3 Dimensionen (Vorstellung: Wolke rotiert in 3 Dimensionen)



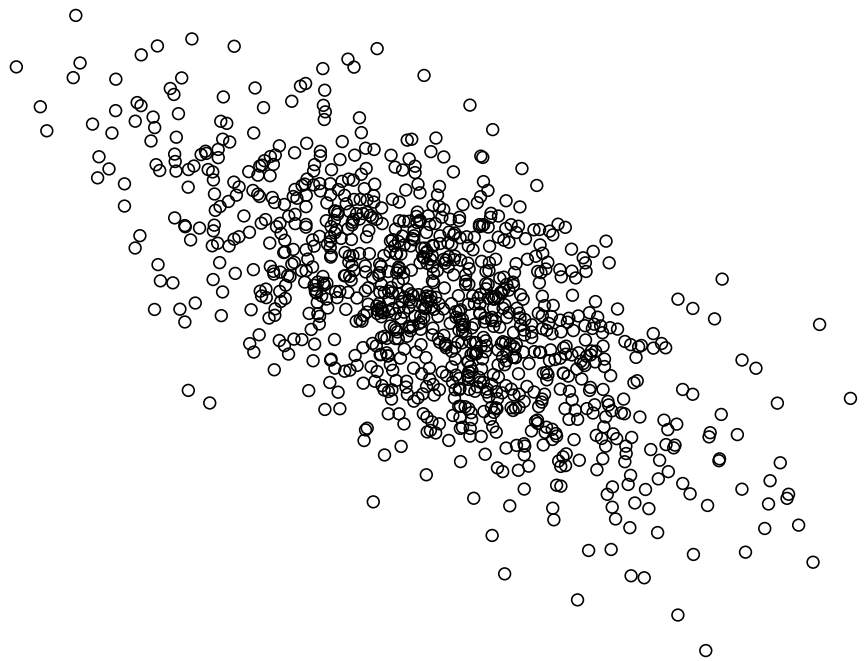
Beispiel: 2-dimensionale Daten in 3 Dimensionen (Vorstellung: Wolke rotiert in 3 Dimensionen)



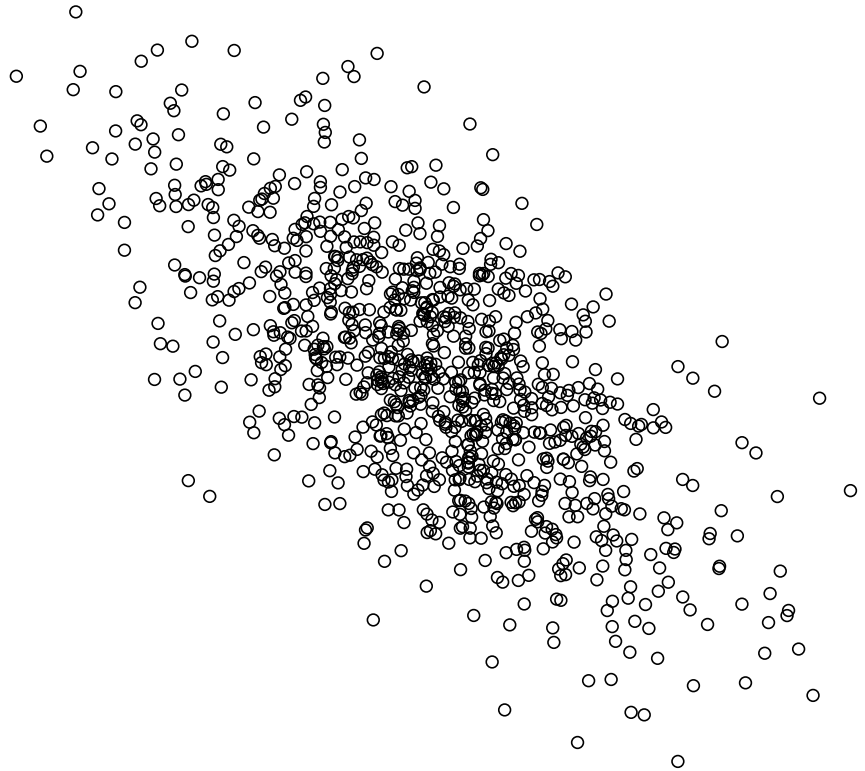
Beispiel: 2-dimensionale Daten in 3 Dimensionen (Vorstellung: Wolke rotiert in 3 Dimensionen)



Beispiel: 2-dimensionale Daten in 3 Dimensionen (Vorstellung: Wolke rotiert in 3 Dimensionen)



Beispiel: 2-dimensionale Daten in 3 Dimensionen (Vorstellung: Wolke rotiert in 3 Dimensionen)



Um einen guten Blick auf die Daten zu haben
wollen wir die Komponenten darstellen,
die die meiste Variation beitragen.

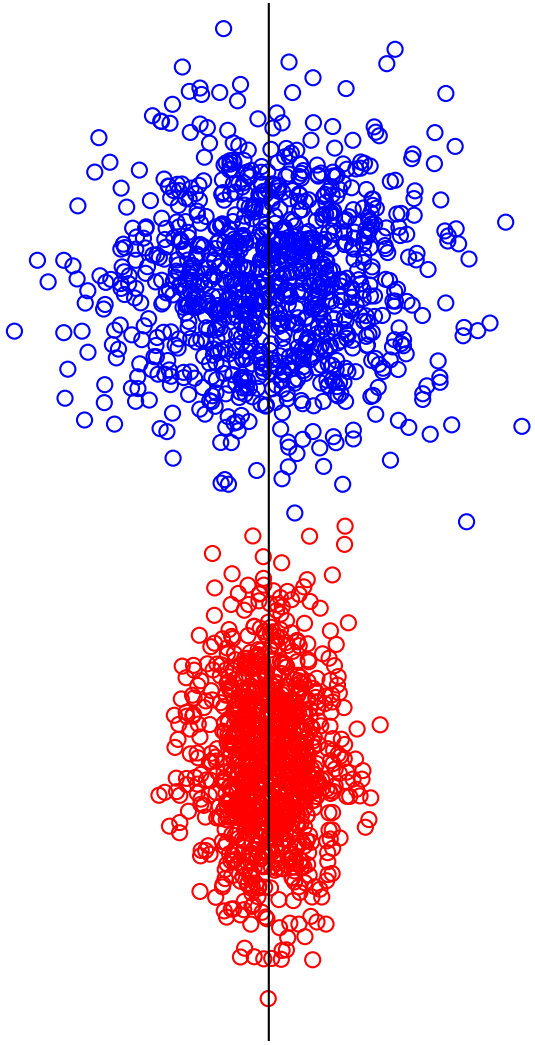
Um einen guten Blick auf die Daten zu haben
wollen wir die Komponenten darstellen,
die die meiste Variation beitragen.

Die Achse mit der größten Variation
wird in die x-Achse rotiert,

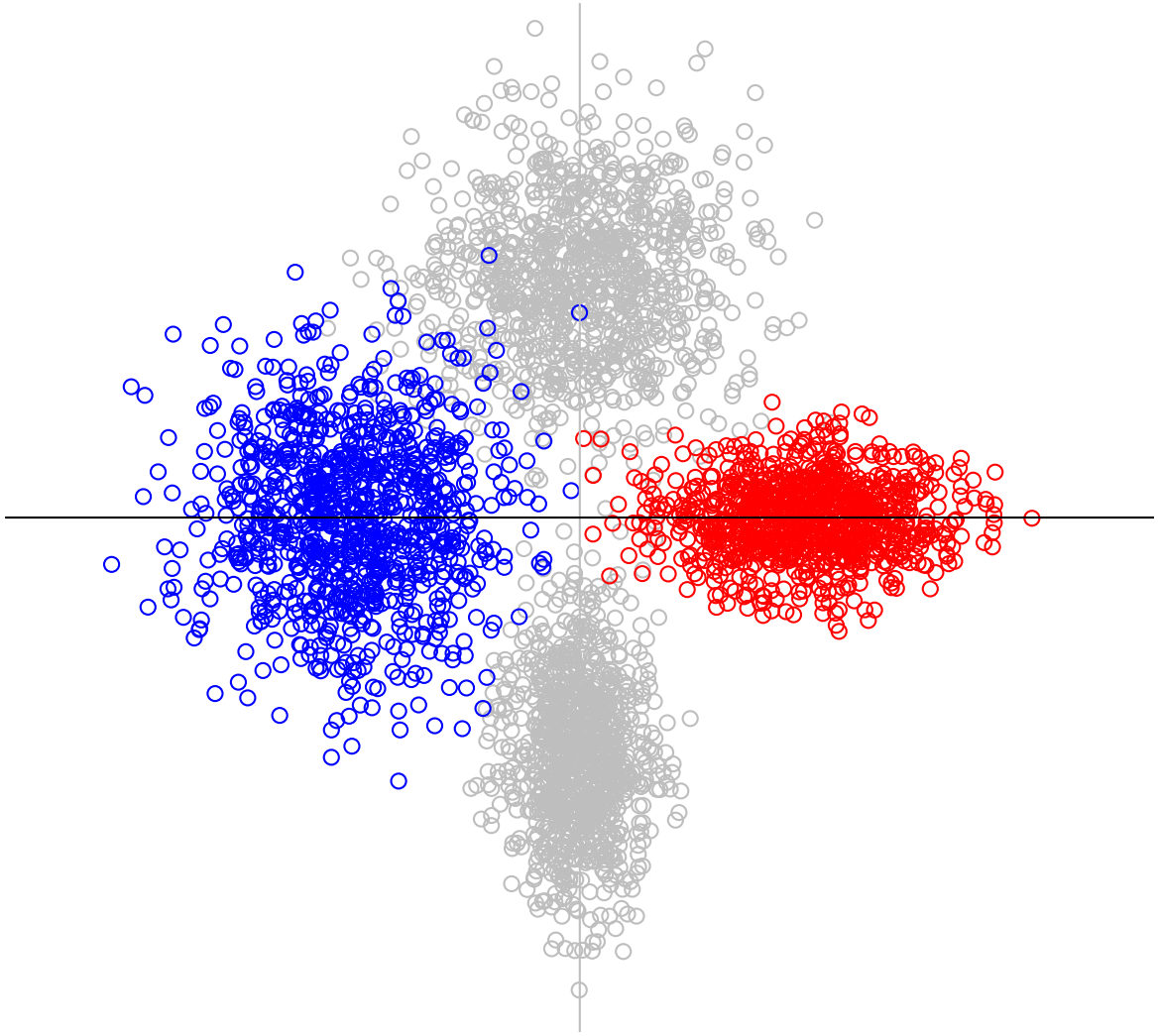
Um einen guten Blick auf die Daten zu haben
wollen wir die Komponenten darstellen,
die die meiste Variation beitragen.

Die Achse mit der größten Variation
wird in die x-Achse rotiert,
die Achse mit der zweit größten Variation
wird in die y-Achse rotiert.

Beispiel: 2-dimensionale Daten

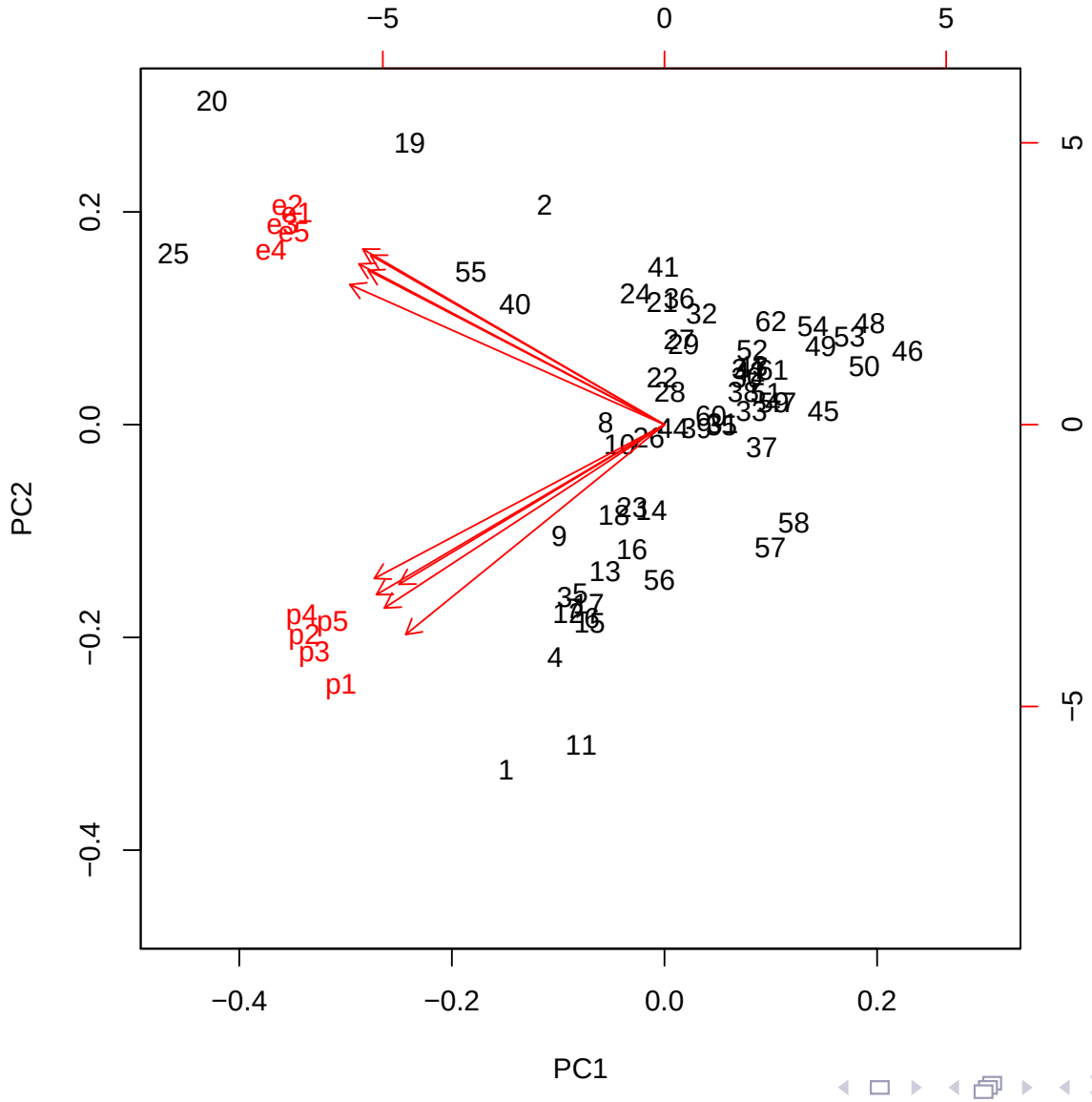


Beispiel: 2-dimensionale Daten

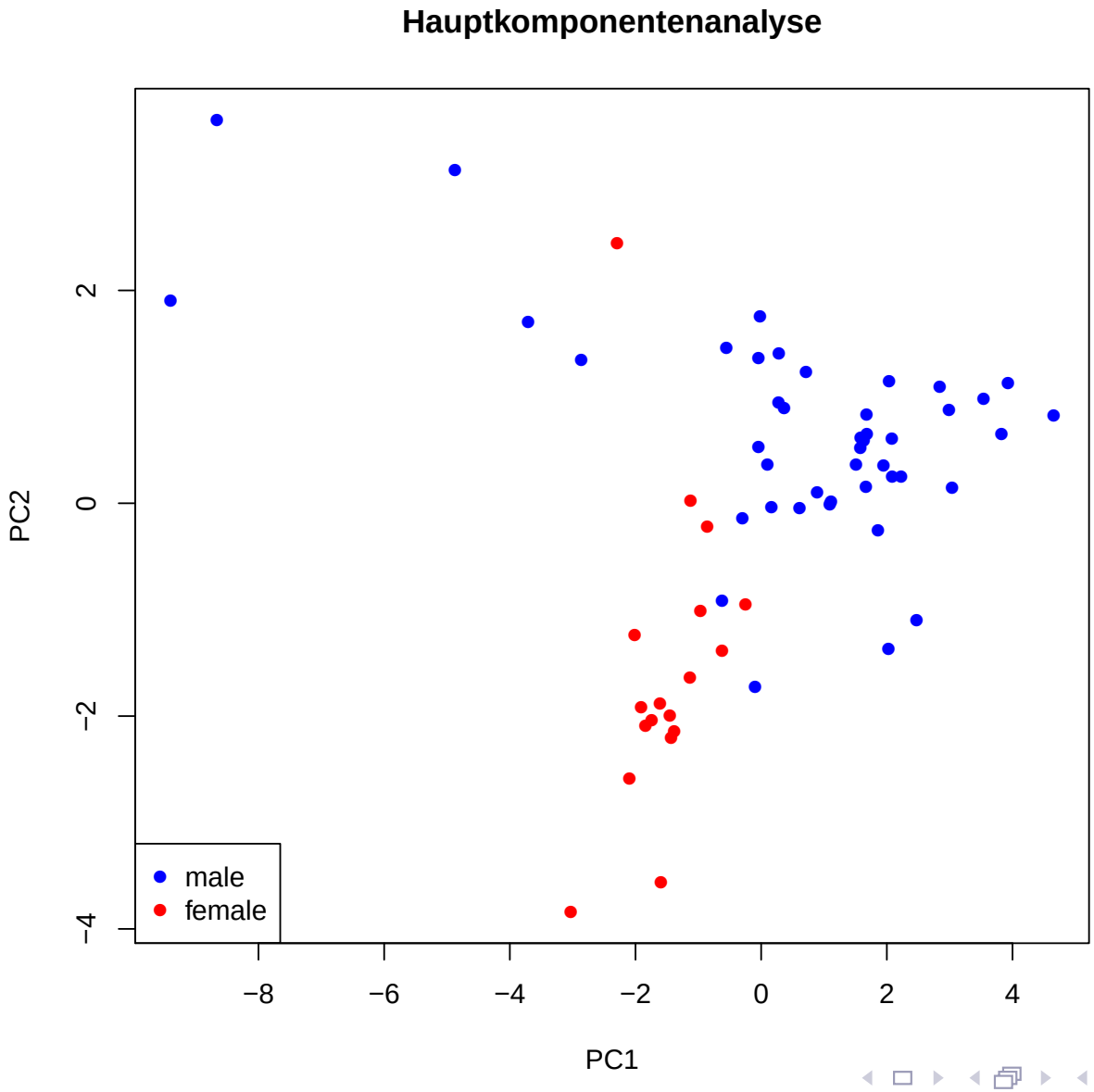


Die Hauptkomponentenanalyse
(engl. principal component analysis, PCA)
findet die Achse mit dem größten Beitrag
zur gesamten Variation.

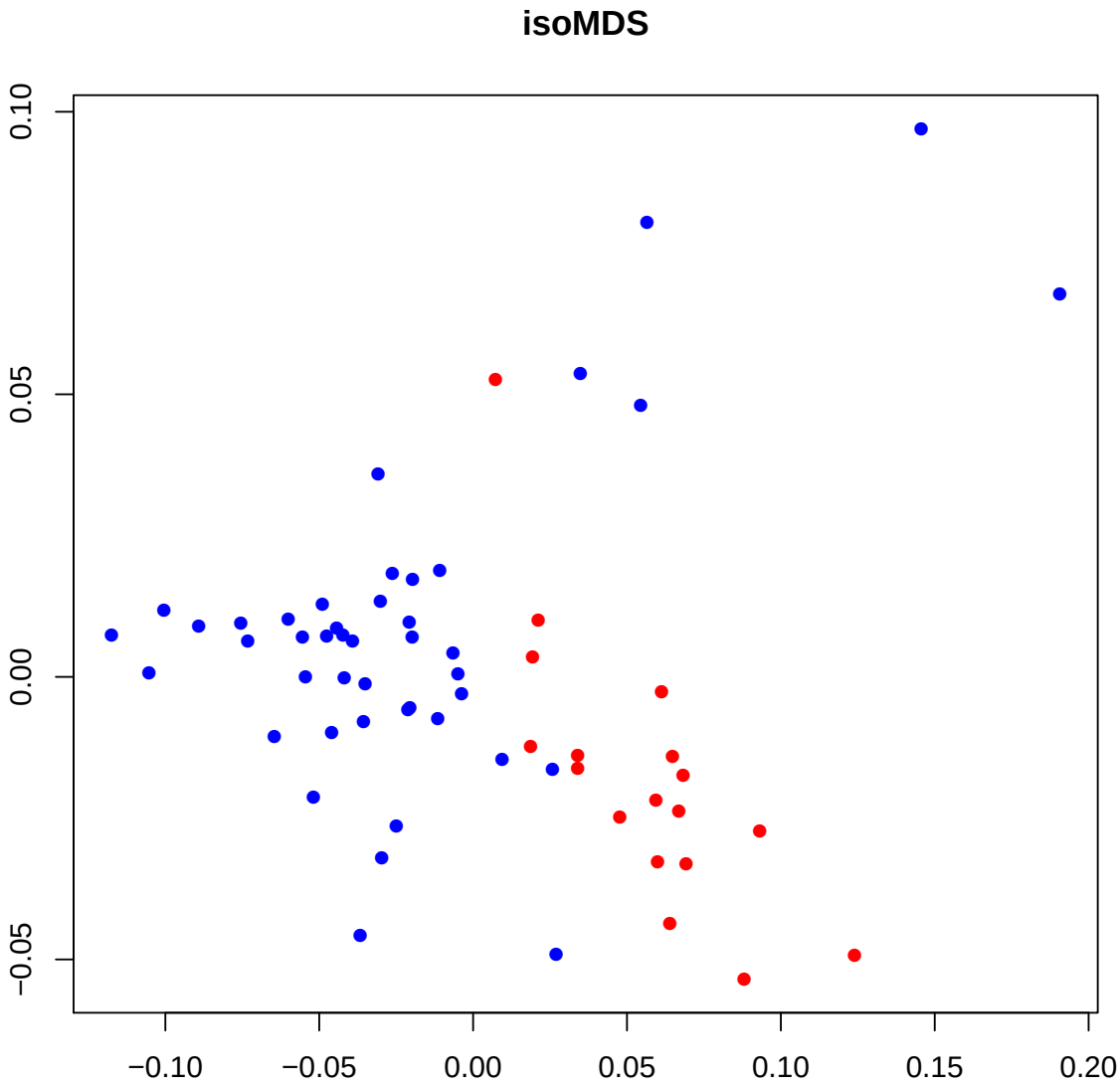
PCA für die Kleinspechtrufe



PCA für die Kleinspechtrufe



Alternative: Multidimensionale Skalierung



PCA vs. MDS

- PCA ist eine lineare Transformation, d.h. die Hauptkomponenten sind Linearkombinationen der ursprünglichen Variablen.

PCA vs. MDS

- PCA ist eine lineare Transformation, d.h. die Hauptkomponenten sind Linearkombinationen der ursprünglichen Variablen.
- MDS ist eine nichtlineare Transformation.

PCA vs. MDS

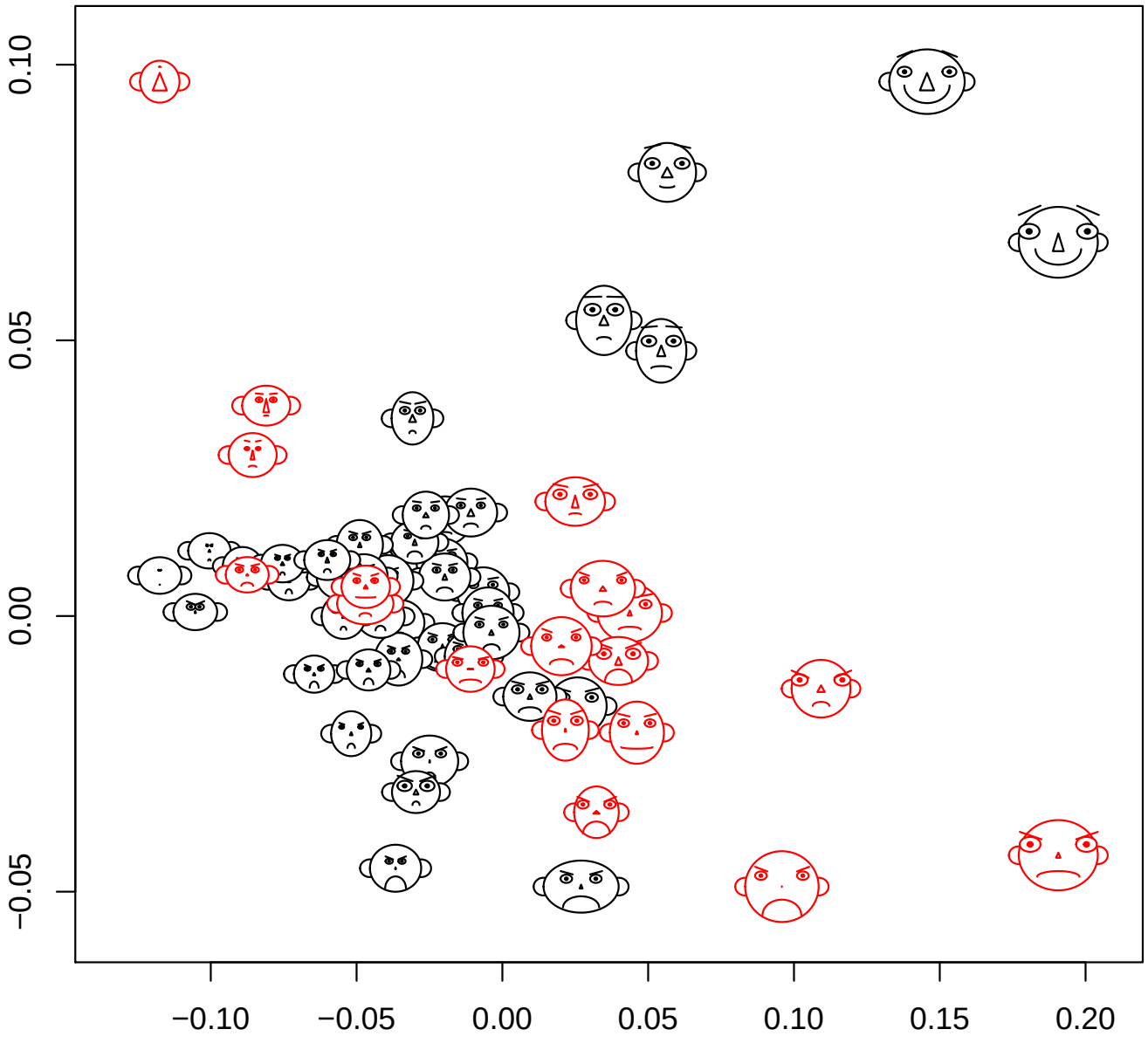
- PCA ist eine lineare Transformation, d.h. die Hauptkomponenten sind Linearkombinationen der ursprünglichen Variablen.
- MDS ist eine nichtlineare Transformation.
- Dadurch kann MDS in der Ebene Punkte finden, deren Abstände die Abstände im hochdimensionalen Parameterraum besser widerspiegeln.

PCA vs. MDS

- PCA ist eine lineare Transformation, d.h. die Hauptkomponenten sind Linearkombinationen der ursprünglichen Variablen.
- MDS ist eine nichtlineare Transformation.
- Dadurch kann MDS in der Ebene Punkte finden, deren Abstände die Abstände im hochdimensionalen Parameterraum besser widerspiegeln.
- Bei PCA lassen sich die Hauptkomponenten aber besser interpretieren und für nachfolgende Analysen verwenden (z.B. lineare Regression).

```
kiki <- read.table("kiki.bb62",h=T)
str(kiki)
pca <- prcomp( ~ p1+p2+p3+p4+p5+e1+e2+e3+e4+e5,
                 data=kiki,scale.=TRUE)
biplot(pca)
plot(pca$x[,"PC1"],pca$x[,"PC2"],col=2*as.numeric(kiki$G)
     pch=16,xlab="PC1",ylab="PC2",
     main="Hauptkomponentenanalyse")
legend("bottomleft",col=c("blue","red"),pch=16,
       legend=c("male","female"))

library(MASS)
D <- dist(as.matrix(kiki[4:13]))
mds <- isoMDS(D)
plot(mds$points,pch=16,col=2*as.numeric(kiki$G),
     xlab="",ylab="",main="isoMDS")
```


0.10
0.05
0.00
−0.05
−0.10
−0.05
0.00
0.05
0.10
0.15
0.20