SBWL Tourismusanalyse und Freizeitmarketing

Vertiefungskurs 4: Multivariate Verfahren 2

Teil 3: Mischmodelle / Modellgestützte Clusteranalyse

Achim Zeileis & Thomas Rusch

Inhalt

Mischmodelle

- Idee
- Latent Class Regression
- EM-Algorithmus
- Beispiel

Idee

Bisher:

- *Hierarchisches Clustern:* Explorative Einteilung in Gruppen basierend auf Distanzen von Objekten und Clustern,
- k*-Means:* Einteilung in Gruppen basierend auf einer einfachen Zielfunktion (Fehlerquadratsumme).

Jetzt: Modell-basiertes Clustern

Dabei werden die Daten in Gruppen eingeteilt, wobei in jeder Gruppe ein Modell mit einer Likelihood unterstellt wird, die dann maximiert werden soll.

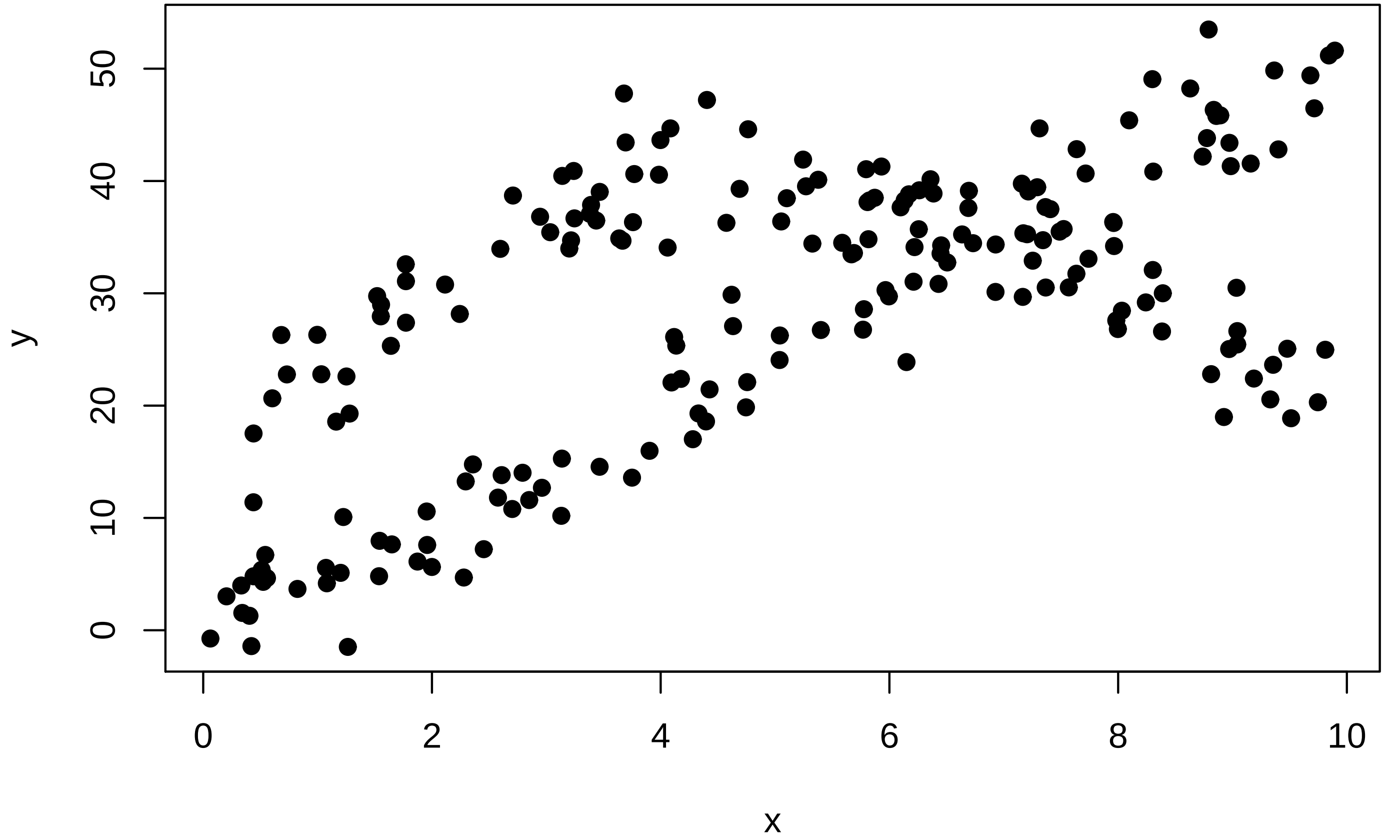
Idee

Beispiel: Es gibt k Cluster, wobei die Beobachtungen innerhalb eines Clusters eine multivariate Normalverteilung haben. Die Mittelwerte und Kovarianzmatrizen unterscheiden sich dann zwischen den Clustern. Hier spricht man von modell-basiertem Clustern.

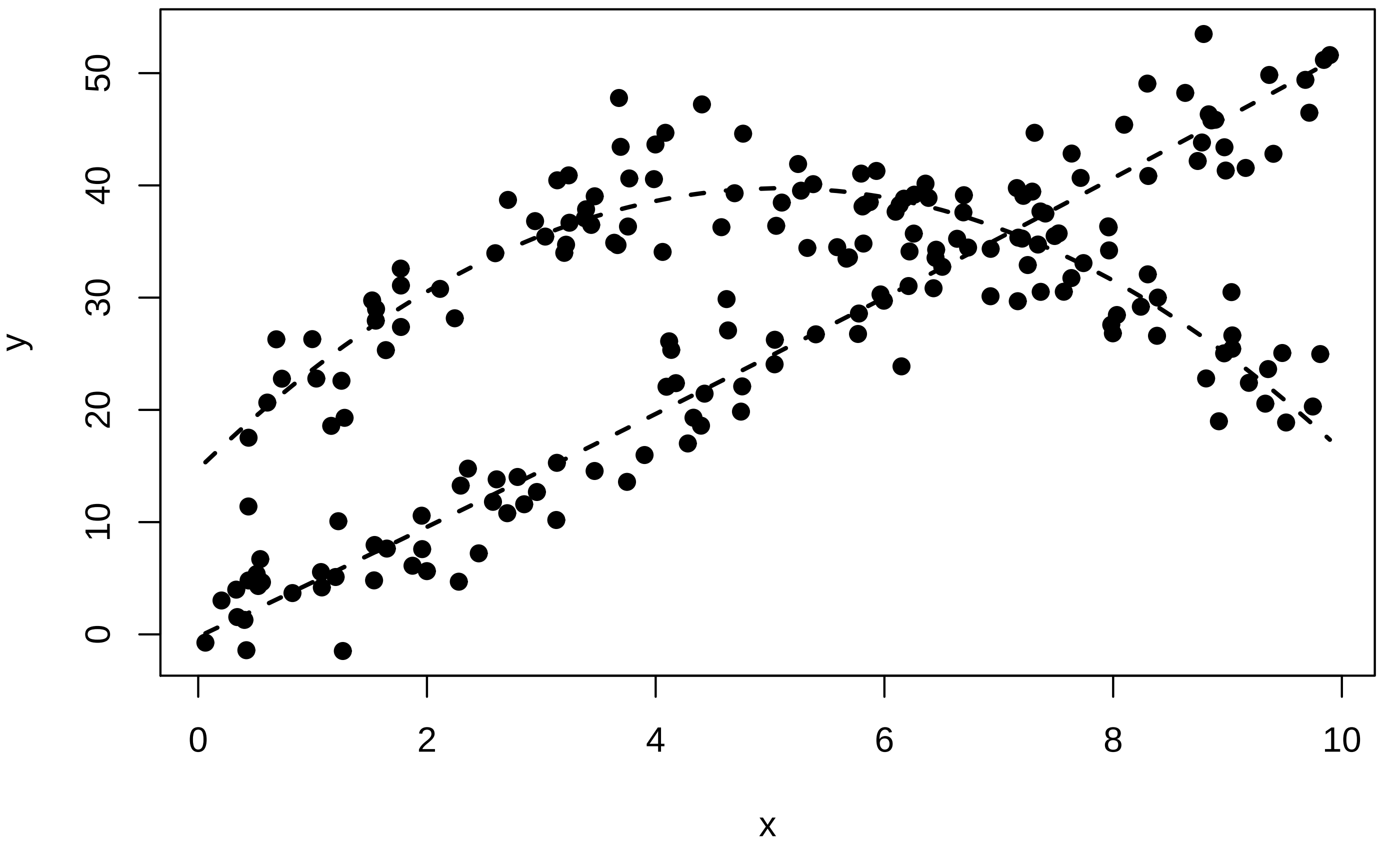
Latent Class Regression

Beispiel: Es gibt k Cluster, wobei für die Beobachtungen innerhalb eines Clusters ein GLM angepaßt wird. Die Cluster- oder Klassen-zugehörigkeit ist dabei unbekannt (oder unbeobachtet oder latent). Dieses Verfahren nennt man daher latent class regression oder auch GLIMMIX Modell.

Latent Class Regression



Latent Class Regression



Latent Class Regression

Wäre die Einteilung in Klassen bekannt und schon in einem Faktor `f` kodiert, dann wäre dies ein ganz einfaches lineares Modell (Kovarianzanalyse), das mit `lm` geschätzt werden kann:

```
lm(y ~ f * (x + I(x^2)))
```

Dieses Modell entspricht dann zwei quadratischen Kurven, die in den durch `f` definierten Klassen angepaßt werden.

EM-Algorithmus

Problem: Die Klasseneinteilung ist unbekannt und muß aus den Daten gelernt werden.

Lösung: Gegeben ein in k Klassen angepaßtes Regressionsmodell wird jede Beobachtung der Klasse zugeordnet, zu deren Regressionsgerade es "besser paßt".

EM-Algorithmus

Damit ergibt sich folgender Schätzalgorithmus:

1. Beginne mit einer Einteilung der Beobachtungen in k Cluster.
2. Passe in jedem Cluster ein Regressionsmodell an.
3. Ordne jede Beobachtung dem Cluster zu, zu dessen Regressionsgerade sie am nächsten liegt.
4. Wiederhole 2. und 3. bis sich die Cluster nicht mehr ändern.

Dieser erzeugt eine harte Partition, wobei jede Beobachtung nur zu genau einem Cluster gehören kann (`f = 1` oder `f = 0`).

EM-Algorithmus

In der Regel schätzt man mit Mischmodellen aber weiche Partitionen, die Variable `f` gibt dabei dann die *Wahrscheinlichkeit* an, daß eine Beobachtung zu der einer bestimmten Klasse gehört.

1. Initialisiere die Wahrscheinlichkeiten der Clusterzugehörigkeiten.
2. Gegeben die Gewichtung durch die Wahrscheinlichkeiten, passe k gewichtete Regressionsmodelle an.
3. Berechne für jede Beobachtung die *a posteriori*-Wahrscheinlichkeit der Zughörigkeit zu Cluster j.
4. Wiederhole 2. und 3. bis die Veränderung der Gesamtlikelihood des Modells unter eine Gewisse schranke fällt.

EM-Algorithmus

Dies ist eine Anwendung des EM-Algorithmus. Dieser ist weniger ein konkreter Algorithmus als eine generelle Strategie zur Schätzung von Modellen mit unbeobachteten/latenten Variablen.

Er trägt seinen Namen, da sich immer

- **E**rwartungsbildung (hier: über a posteriori Wahrscheinlichkeiten, Schritt 3.)
- **M**aximierung (hier: der gewichteten Likelihood, Schritt 2.)

im Modell abwechseln.

EM-Algorithmus

Allgemein kann in einem Mischmodell die Dichtefunktion geschrieben werden als

$$h(y \,|\, x, \pi, \theta) = \sum_{j=1}^{k} \pi_j f(y \,|\, x, \theta_j)$$

also als Mischung von j Clustern, wobei π_j die *a priori*-Wahrscheinlichkeit für Klasse j ist und $f(y \,|\, x, \theta_j)$ die Dichte für die Beobachtungen in dieser Klasse.

In einem normalverteilten GLM wäre f die Dichte der Normalverteilung und θ_j der Vektor der Regressionskoeffizienten.

EM-Algorithmus

Die a priori-Wahrscheinlichkeiten müssen sich zu 1 addieren, d.h.

$$\pi_j \geq 0, \quad \sum_{j=1}^{k} \pi_j = 1$$

Und damit kann dann die a posteriori-Wahrscheinlichkeit, daß eine bestimmte Beobachtung aus Cluster i stammt, formuliert werden als

$$P(i|x, y, \pi, \theta) = \frac{\pi_i f(y|x, \theta_i)}{\sum_j \pi_j f(y|x, \theta_j)}$$

EM-Algorithmus

Gegeben n Beobachtungen $\{(y_1, x_1), \ldots, (x_n, y_n)\}$ ist dann die Likelihood der Parameter π und θ:

$$\log L(\pi, \theta) = \sum_{i=1}^{n} \log h(y_i \,|\, x_i, \pi, \theta) = \sum_{i=1}^{n} \log \left(\sum_{j=1}^{k} \pi_j f(y_i \,|\, x_i, \theta_j) \right)$$

Diese muß nun bzgl. der Parameter maximiert werden. In der Regel ist dies nicht analytisch möglich und auch numerisch schwierig.

Deshalb wird die Optimierung in zwei Teile zerlegt

- E-Schritt: Schätzung von π gegeben θ,
- M-Schritt: Schätzung von θ gegeben π,

und dann iteriert.

EM-Algorithmus

E-Schritt:

Berechne a posteriori Wahrscheinlichkeit, daß Beobachtung i aus Cluster j ist:

$$\hat{p}_{ij} = P(j \,|\, x_i, y_i, \hat{\pi}, \hat{\theta})$$

und mittele dann für die Klassenwahrscheinlichkeiten:

$$\hat{\pi}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \hat{p}_{ij}$$

EM-Algorithmus

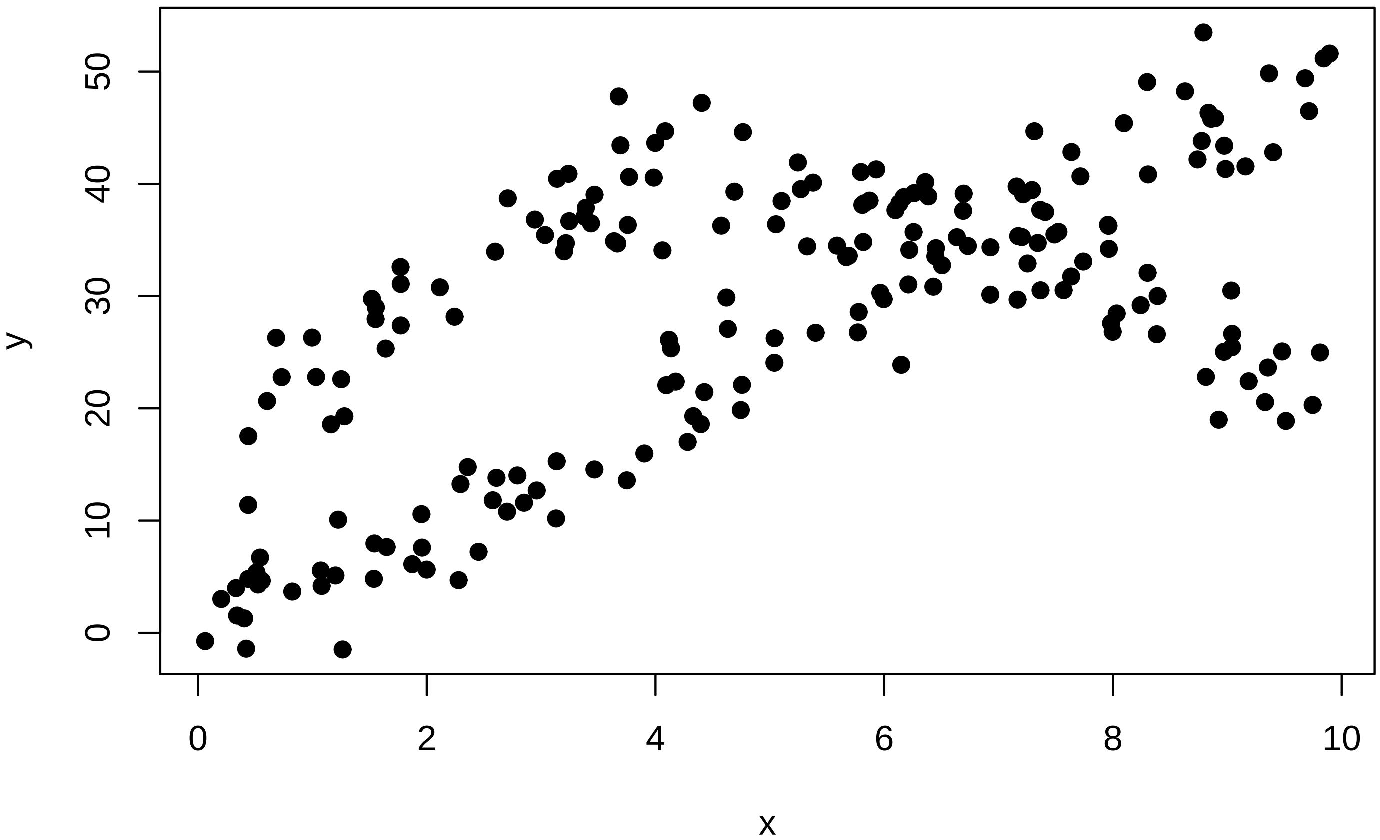
M-Schritt:

Führe eine gewichtete ML-Schätzung separat für jede Komponente durch. Der Schätzer $\hat{\theta}_j$ wird dann als Maximalstelle von

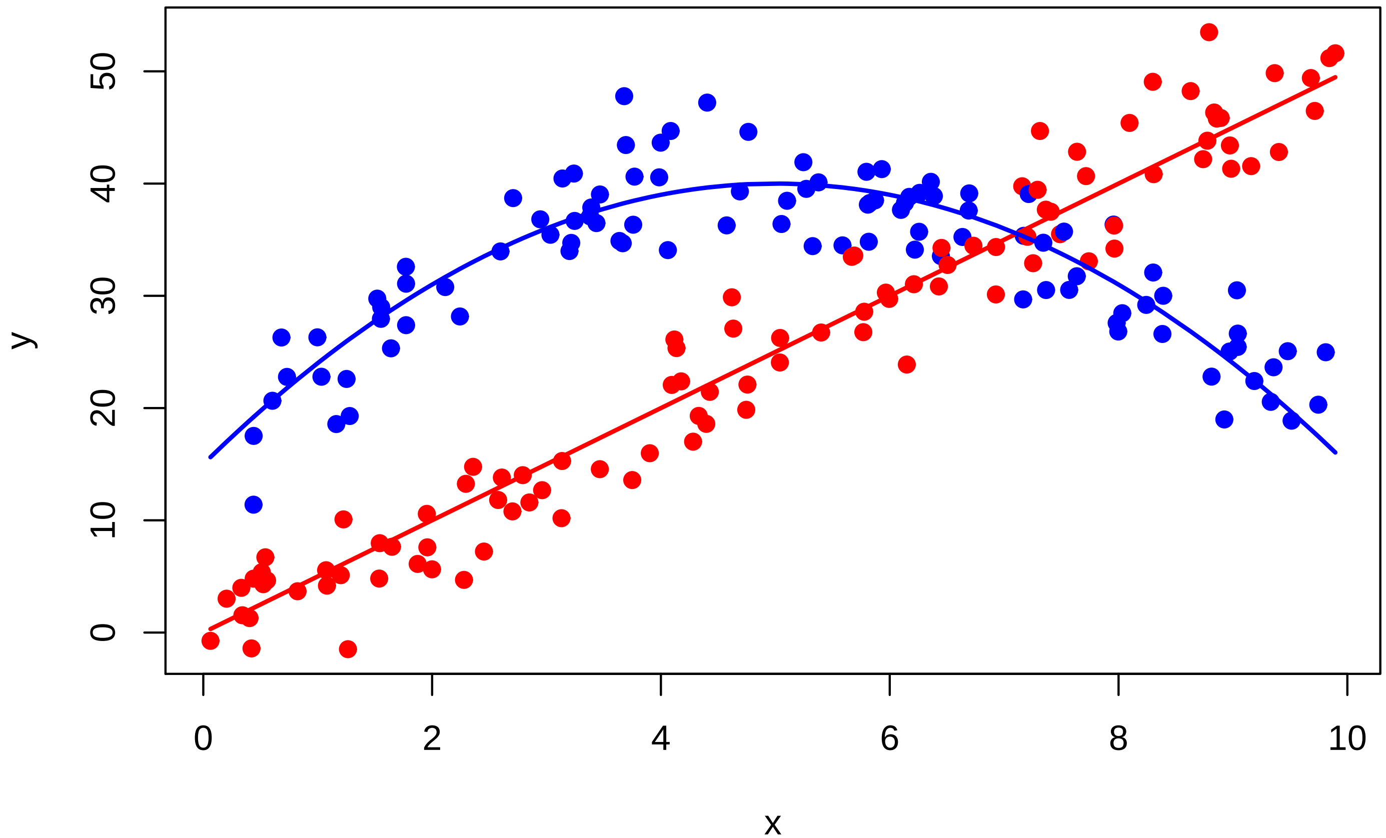
$$\max_{\theta_j} \sum_{i=1}^{n} \hat{p}_{ij} \log f(y_i \,|\, x_i, \theta_j)$$

ermittelt.

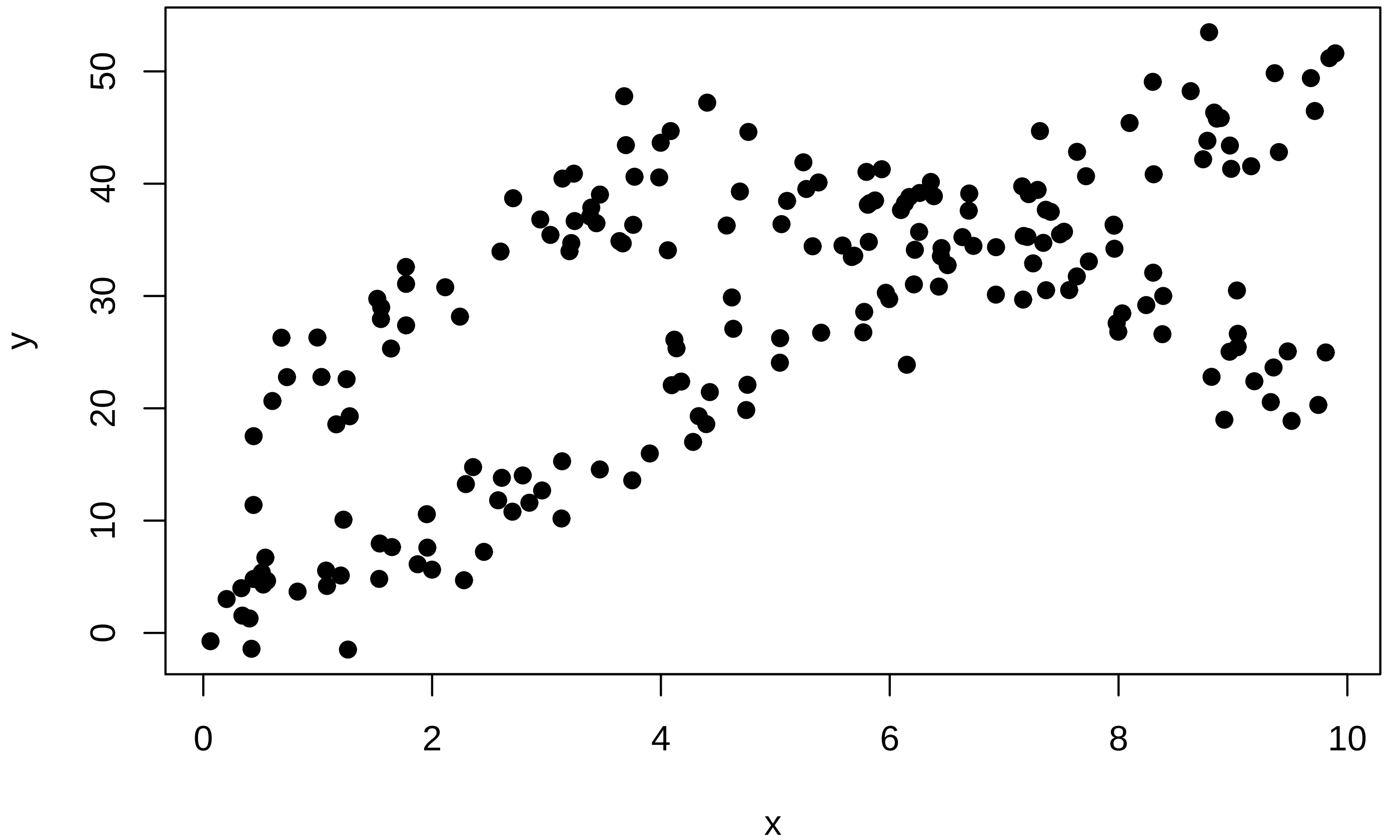
EM-Algorithmus



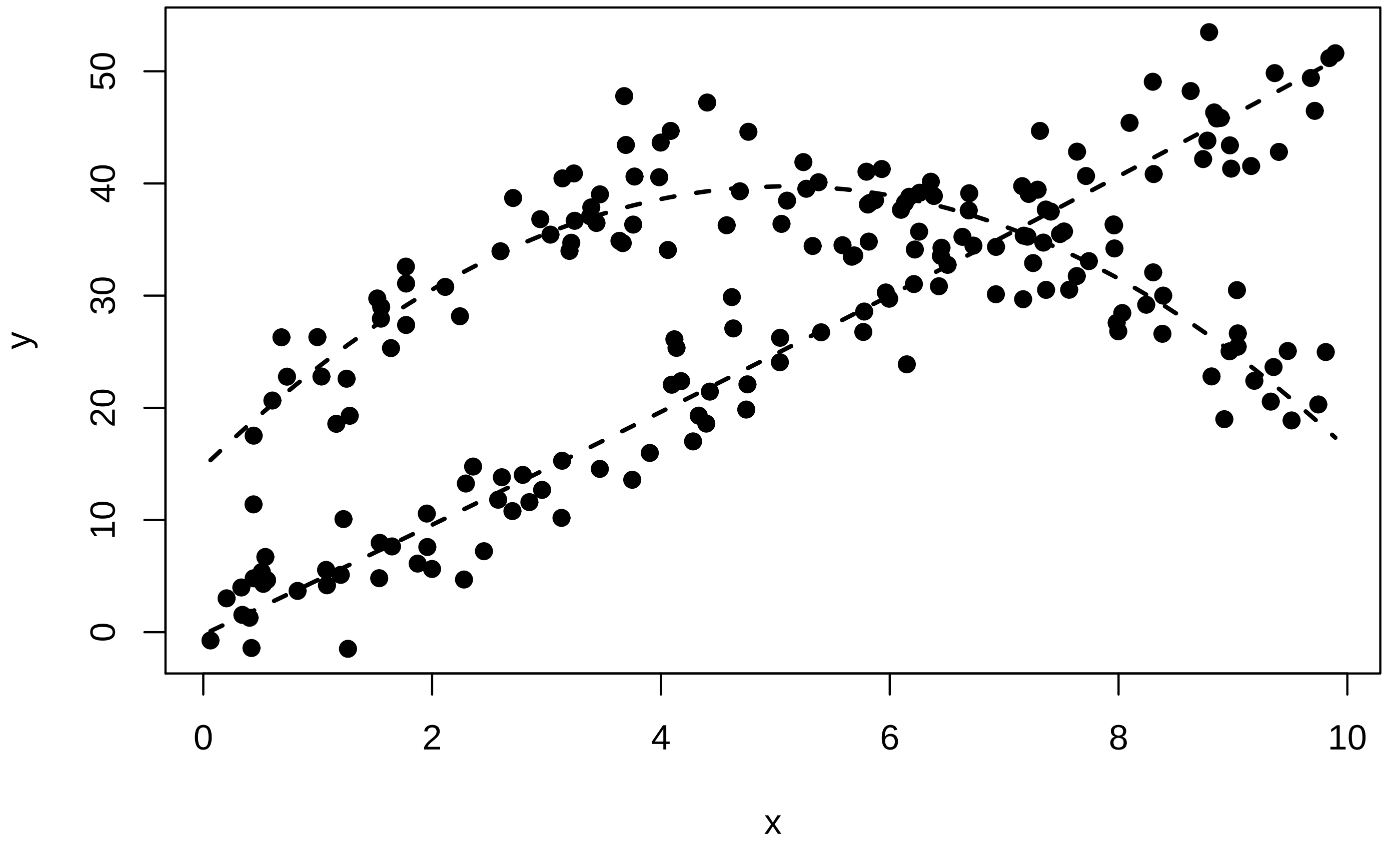
EM-Algorithmus



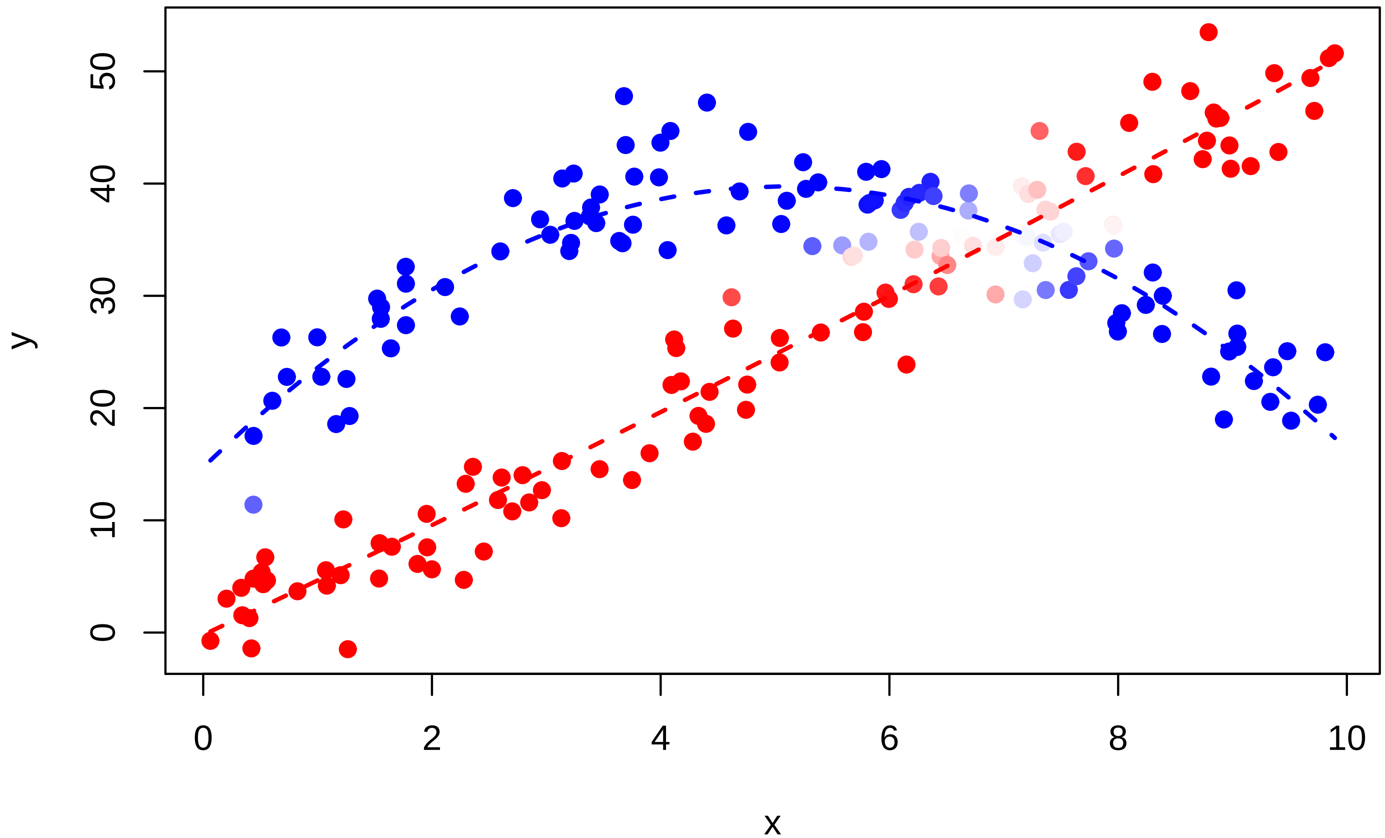
EM-Algorithmus



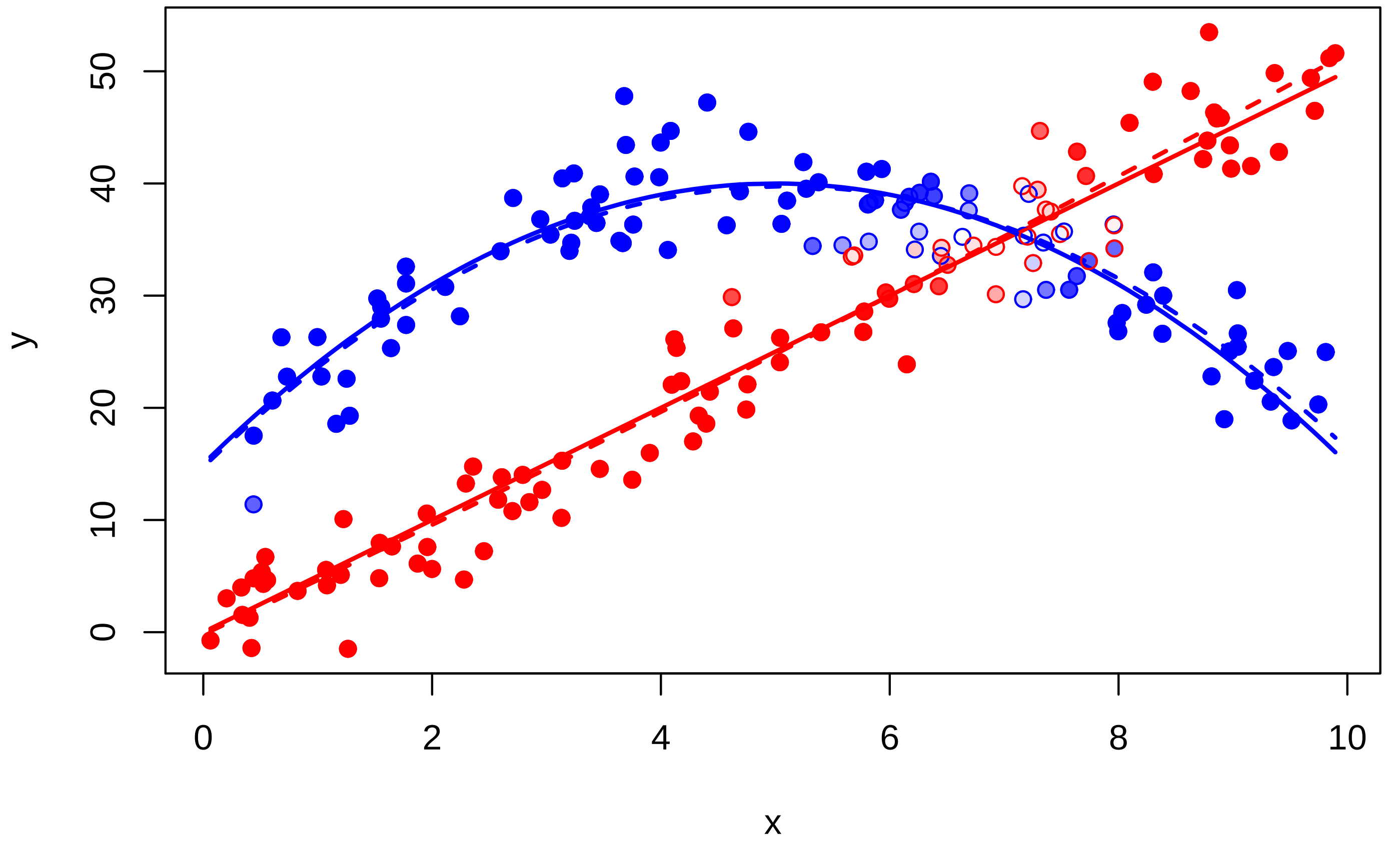
EM-Algorithmus



EM-Algorithmus



EM-Algorithmus



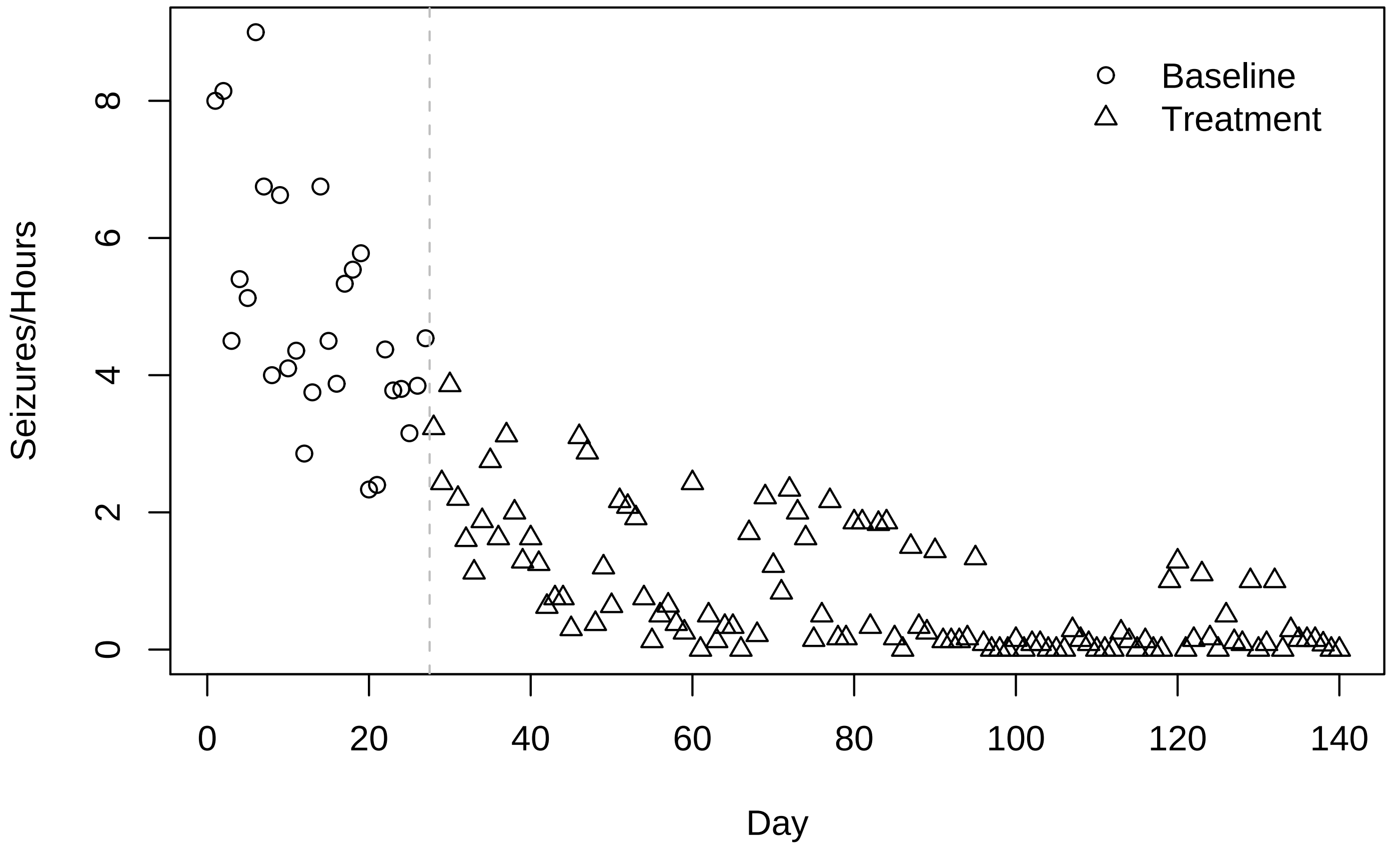
Beispiel

Beispiel: Behandlung eines epileptischen Patienten über 140 Tage hinweg.

Mit zunehmender Dauer der Betreuung nimmt die Anzahl der epileptischen Anfälle ab. Dieser Effekt kann durch Injektionen von Gamma-Globulin ab dem 28. Tag noch verstärkt werden.

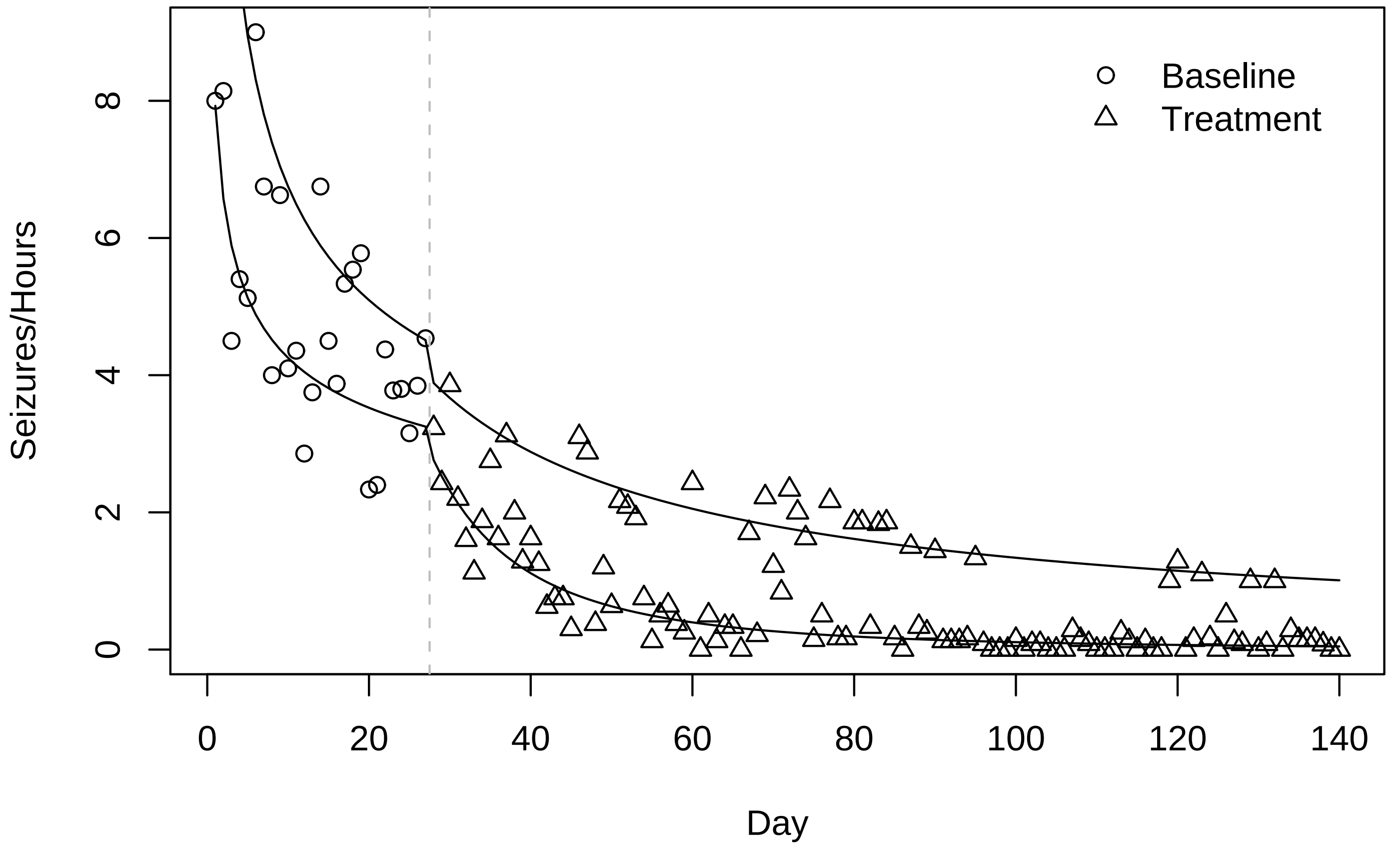
Ein Mischmodell ist deshalb nötig, weil es salopp gesprochen “gute” und “schlechte” Tage des Patienten gibt.

Beispiel

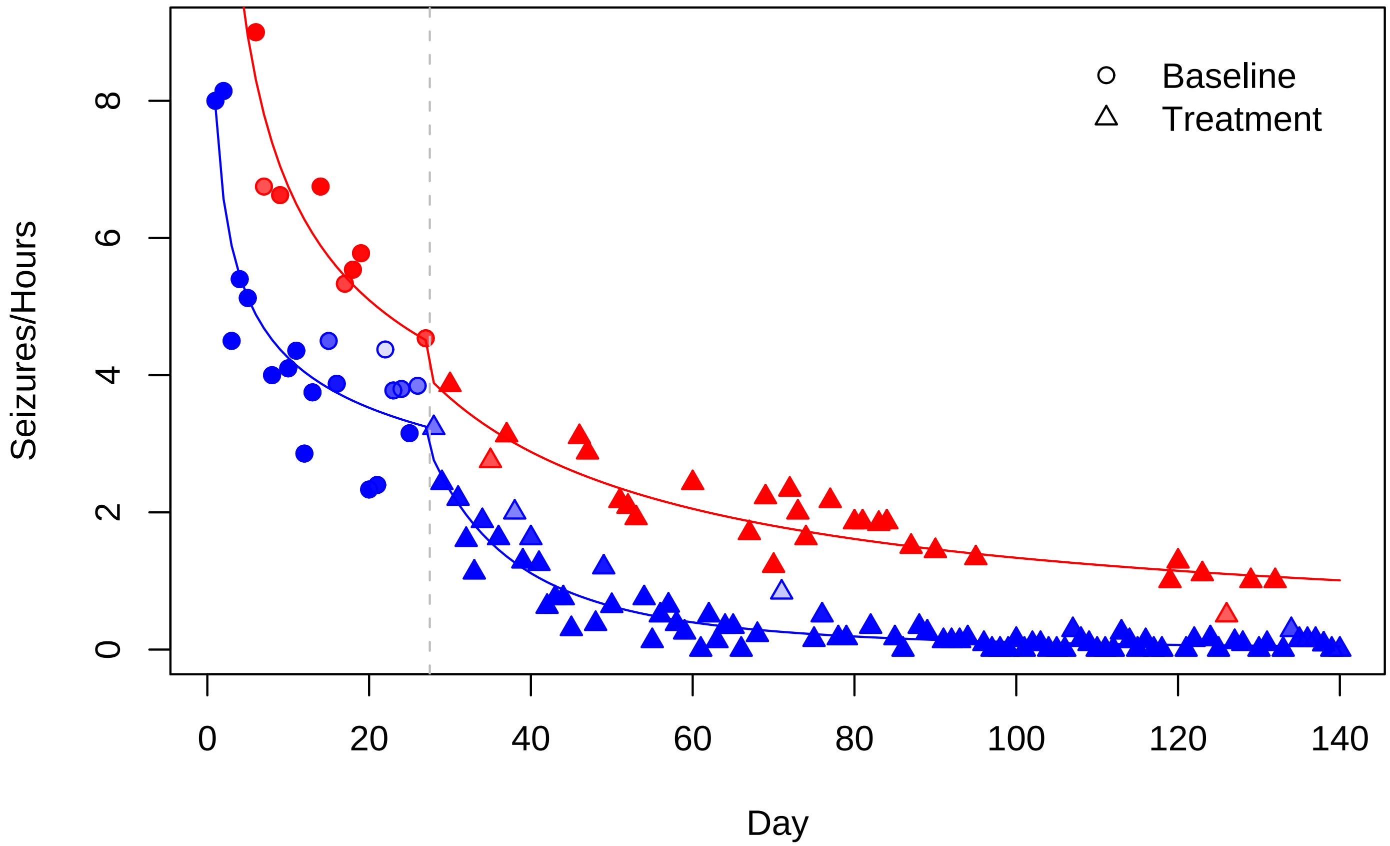


Baseline
Treatment
Seizures/Hours
Day
0
2
4
6
8
0
20
40
60
80
100
120
140

Beispiel


Baseline
Treatment
Seizures/Hours
0
2
4
6
8
0
20
40
60
80
100
120
140
Day

Beispiel



Baseline
Treatment
Seizures/Hours
Day
0
2
4
6
8
0
20
40
60
80
100
120
140

Tutorium

Mischmodelle in R (*FlexMix.pdf*)