Transizione

Matrice dei dati omogenei di buona qualità

$$\mathbf{X} = \begin{array}{c|cccc} & V_1 & V_2 & V_j & V_m \\ \hline U_1 & x_{11} & x_{12} & x_{1j} & x_{1m} \\ U_2 & x_{21} & x_{22} & x_{21} & x_{2m} \\ U_i & x_{i1} & x_{i2} & x_{ij} & x_{im} \\ U_n & x_{n1} & x_{n2} & x_{in} & x_{nm} \end{array}$$

Matrice dei dati eterogenea o con valori contaminati

Rilevazione diretta della prossimità

$$\Delta = \begin{array}{c|cccc} & U_1 & U_2 & U_i & U_n \\ \hline U_1 & 0 & \delta_{12} & \delta_{1i} & \delta_{1n} \\ U_2 & \delta_{12} & 0 & d_{2i} & \delta_{2n} \\ U_i & \delta_{1i} & \delta_{2i} & 0 & \delta_{in} \\ U_n & \delta_{1n} & \delta_{2n} & \delta_{in} & 0 \end{array}$$

Scala a rapporti o intervallari

Violazione della euclideità

Euclideità

Matrice delle covarianze

$$R = \begin{array}{c|cccc} & V_1 & V_2 & V_i & V_m \\ \hline V_1 & 1 & r_{12} & r_{1i} & r_{1m} \\ V_2 & r_{12} & 1 & r_{2i} & r_{2m} \\ V_i & r_{1i} & r_{2i} & 1 & r_{im} \\ V_m & r_{1m} & r_{2m} & r_{mi} & 1 \end{array}$$

Componenti principali

$$Y = \begin{array}{c|cccc} & Y_1 & Y_2 & Y_j & Y_p \\ \hline U_1 & y_{11} & y_{12} & y_{1j} & y_{1p} \\ U_2 & y_{21} & y_{22} & y_{21} & y_{2p} \\ U_i & y_{i1} & y_{i2} & y_{ij} & y_{ip} \\ U_n & y_{n1} & y_{n2} & y_{in} & x_{np} \end{array}$$

Scaling non metrico

Coordinate principali

$$Y = \begin{array}{c|cccc} & Y_1 & Y_2 & Y_j & Y_p \\ \hline U_1 & y_{11} & y_{12} & y_{1j} & y_{1p} \\ U_2 & y_{21} & y_{22} & y_{21} & y_{2p} \\ U_i & y_{i1} & y_{i2} & y_{ij} & y_{ip} \\ U_n & y_{n1} & y_{n2} & y_{in} & x_{np} \end{array}$$

Scaling delle distance (distance scaling)

Qui la base di partenza è la matrice delle dissimilarità/distanze

$$\Delta = \begin{array}{c|cccc} & U_1 & U_2 & U_i & U_n \\ \hline U_1 & 0 & \delta_{12} & \delta_{1i} & \delta_{1n} \\ U_2 & \delta_{12} & 0 & d_{2i} & \delta_{2n} \\ U_i & \delta_{1i} & \delta_{2i} & 0 & \delta_{in} \\ U_n & \delta_{1n} & \delta_{2n} & \delta_{in} & 0 \end{array}$$

Le dissimilarità δ_{ij} sono rappresentate con punti le cui interdistanze d_{ij} approssimano le dissimilarità originali.

Unità molto simili corrispondono a punti ravvicinati.

Punti molto distanti corrispondono a unità dissimili

Le distanze tra i punti dovrebbero essere almeno concordi in senso ordinale con le dissimilarità osservate fra le unità.

$$d_{ij} \leq d_{rs} \quad se \quad \delta_{ij} \leq \delta_{rs}$$

La rappresentazione geometrica delle dissimilarità dovrebbe avvenire con poche dimensioni: due o, al massimo, tre.

Mappe & distanze

Aveva un bavero color zafferano
e la marsina color ciclamino
veniva a piedi da Lodi a Milano
per incontrare la bella Gigogin.

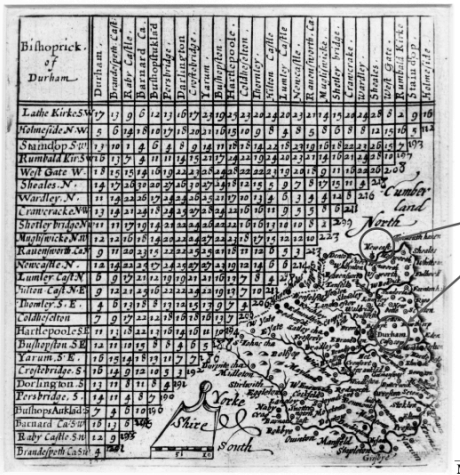
Per andare da Milano a Lodi in macchina si impiegano 43 min.

Napoleone ci mise quasi sette ore a cavallo a passo d'uomo

Lo scaling multidimensionale opera nella direzione opposta. Sono note le distanze e si deve arrivare ad una mappa.

In questa procedura si privilegiano I rapporti ordinali tra le distanze originali e quindi la tecnica è robusta rispetto alla contaminazione dei dati e ai valori remoti

Cenno storico



Map of Durham county

- Cartographer: Jacob van Langren
- Date 1635

Tuttavia, molte introduzioni allo scaling presentano come esempio iniziale una matrice delle intedistanze tra località diverse

Mappe & distanze/3

	ATL	BOS	ORD	DCA	DEN	LAX	MIA	JFK	SEA	SFO	MSY
ATL	0	934	585	542	1209	1942	605	751	2181	2139	424
BOS	934	0	853	392	1769	2601	1252	183	2492	2700	1356
ORD	585	853	0	598	918	1748	1187	720	1736	1857	830
DCA	542	392	598	0	1493	2305	922	209	2328	2442	964
DEN	1209	1769	918	1493	0	836	1723	1636	1023	951	1079
LAX	1942	2601	1748	2305	836	0	2345	2461	957	341	1679
MIA	605	1252	1187	922	1723	2345	0	1092	2733	2594	669
JFK	751	183	720	209	1636	2461	1092	0	2412	2577	1173
SEA	2181	2492	1736	2328	1023	957	2733	2412	0	681	2101
SFO	2139	2700	1857	2442	951	341	2594	2577	681	0	1925
MSY	424	1356	830	964	1079	1679	669	1173	2101	1925	0

Airline distances between 11 US cities

Data set “cities”, package “psych”

Le soluzioni dello scaling metrico sono spesso sottoposte a rotazione per riprodurre la spazialità dei dati

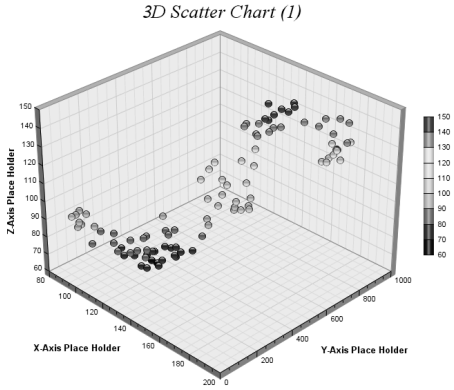
Mappe & distanze/4

Dissimilarità osservate

$$\Delta = \begin{array}{c|cccc} & U_1 & U_2 & U_i & U_n \\ \hline U_1 & 0 & \delta_{12} & \delta_{1i} & \delta_{1n} \\ U_2 & \delta_{12} & 0 & d_{2i} & \delta_{2n} \\ U_i & \delta_{1i} & \delta_{2i} & 0 & \delta_{in} \\ U_n & \delta_{1n} & \delta_{2n} & \delta_{in} & 0 \end{array}$$

Pseudo-coordinate

$$Y = \begin{array}{c|cccc} & Y_1 & Y_2 & Y_j & Y_p \\ \hline U_1 & y_{11} & y_{12} & y_{1j} & y_{1p} \\ U_2 & y_{21} & y_{22} & y_{21} & y_{2p} \\ U_i & y_{i1} & y_{i2} & y_{ij} & y_{ip} \\ U_n & y_{n1} & y_{n2} & y_{in} & x_{np} \end{array}$$



Rappresentazione geometrica con le nuove coordinate

Metodo di scaling

La funzione che lega dissimilarità originali e distanze approssimanti determina il metodo di scaling che si intende adoperare

SCALING METRICO (Procedura di Torgerson, 1950)

$$\delta_{ij} = \beta_0 + \beta_1 d_{ij} + e_{ij}$$

Dove β_0 e β_1 sono due coefficienti incogniti che caratterizzano la relazione .

Se la matrice delle distanze è euclidea allora β_0 =0 e β_1=1; se solo pochi autovalori sono negativi rimanendo piccoli in assoluto allora β_0 e β_1 forniscono la correzione.

SCALING NON METRICO (Procedura di Shepard-Kruskal)

$$\delta_{ij} = f\left(d_{ij}\right) + e_{ij} \qquad dove \begin{cases} \delta_{ij} & \textbf{distanza originale} \\ d_{ij} & \textbf{distanza approssimata} \\ e_{ij} & \textbf{errore} \end{cases}$$

La funzione f deve essere monotona (la derivata prima non cambia di segno).

Pietre miliari

P. J.F. Groenen,
I. Borg

Years	Main author(s)	Topic
Past		
1958, 1966	Torgerson,Gower	Classical MDS
1962	Shepard	First MDS heuristic
1964	Kruskal	Least-squares MDS through Stress with transformations
1964	Guttman	Facet theory and regional interpretations in MDS
1969, 1970	Horan, Carroll	Three-way MDS models (INDSCAL, IDIOSCAL)
1977-	De Leeuw and others	The majorization algorithm for MDS
Present		
1986-1998	Meulman	Distance-based MVA through MDS
1994	Buja	Constant dissimilarities
1978, 1995-	Various	Local minimum problem
1998	Buja	Smart use of weights in MDS
Future		
1999-,	Heiser, Meulman, Busing	Modern MDS software: Proxscal in SPSS (PASW)
2000	Tenenbaum, et al.	Large scale MDS ISOMAP heuristic
2002	Buja, Swayne, Cook	Dynamic MDS in GGvis (part of GGobi)
2003	Groenen	Dynamic MDS visualization through iMDS
2005-	Groenen, Trosset, Kagie	Large scale MDS through Stress
2002	Dencœux, Masson, Groenen, Winsberg, Diday	Symbolic MDS of interval dissimilarities
2006	Groenen, Winsberg	Symbolic MDS of histograms
2009	De Leeuw, Mair	Smacof package in R

Esempio

Matrice dei punteggi assegnati a 14 zone nel comprensorio di Thurio

Matrice dei dati 14 x 9

	Clima	Abitazioni	Salute	Crimine	Trasporti	Istruzione	Cultura	Spettacolo	Ricchezza
Rondena	0.185	-0.942	-0.899	-1.500	1.356	-0.198	-0.174	1.511	0.879
Righino	-0.217	-1.338	-0.350	-0.397	-0.789	0.774	-0.596	0.580	2.026
Fontanelle	-0.628	0.719	-0.451	0.977	-0.820	-0.856	0.636	-0.941	2.135
Bosco_Mezzano	-0.156	-0.718	0.196	-0.609	-1.139	-0.498	-0.239	0.652	1.617
Andrano	1.692	-0.007	-0.876	-0.591	0.817	0.423	0.661	-1.419	-1.585
Sornieto	-1.078	0.945	0.752	-0.231	0.715	-0.413	1.112	-0.100	0.347
Cozzo_D_Este	0.077	-1.046	-0.673	0.703	-1.647	1.642	-0.700	0.431	-0.640
Santa_Bruna	-0.470	0.347	-0.879	2.520	-0.264	-0.568	0.225	-1.352	-0.201
Pascino	-0.611	-0.995	0.640	0.911	0.355	1.142	1.297	-1.186	0.327
Lago_d_Ora	-1.142	1.451	1.848	-0.995	-0.301	-0.966	-0.006	-0.220	0.005
Torniella	-1.542	1.951	2.348	-1.495	-0.801	-1.466	-0.506	-0.720	0.505
Centrano	-0.111	-0.495	1.140	1.411	0.855	1.642	1.797	-0.686	0.827
San_Maclodio	-0.085	-1.142	-1.099	-1.700	1.156	-0.398	-0.374	1.311	0.679
Selluzzi	-0.102	-0.338	-0.175	-0.196	-0.389	0.372	-0.282	0.290	1.013

I valori in tabella esprimono valori ottenuti dalle zone in base alle diverse variabili.

Gli andamenti non sono tutti concordi: abitazioni e crimine con valori bassi indicano una posizione migliore delle zone con valori alti

Analisi delle componenti principali

I dati sono su scala a rapporti e quindi, in assenza di informazioni sulla loro qualità, dovremmo applicare la tecnica delle componenti principali.

	PC1	PC2	PC3
Clima	-0.493	0.000	0.000
Abitazioni	0.530	0.000	0.000
Salute	0.474	0.000	0.000
Crimine	0.000	0.469	0.493
Trasporti	0.000	0.000	-0.664
Istruzione	-0.413	0.000	0.253
Cultura	0.000	0.535	0.000
Spettacolo	0.000	-0.548	0.000
Ricchezza	0.000	-0.297	0.387

Varimax

	PC1	PC2	PC3
Clima	0.530	0.000	0.000
Abitazioni	0.000	0.469	0.000
Salute	0.000	0.493	0.664
Crimine	0.000	0.000	0.417
Trasporti	0.000	-0.277	0.000
Istruzione	0.000	-0.401	0.259
Cultura	-0.559	0.000	0.000
Spettacolo	0.447	0.000	-0.429
Ricchezza	0.292	-0.468	0.000

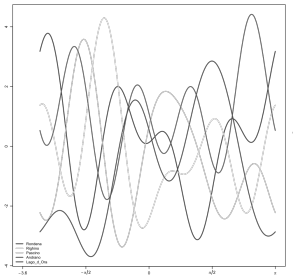
Sono stati riscostrati 5 gruppi

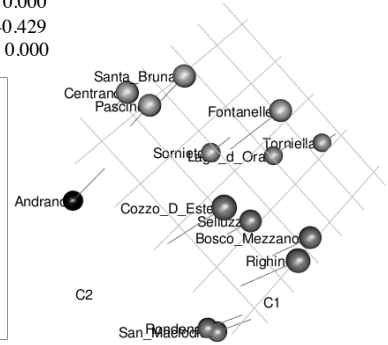
Unità leader

Rondena	**-1.315**	**-1.918**	**-1.230**
Righino	**-0.877**	**-1.549**	**1.676**
Pascino	**-0.224**	**1.885**	**0.801**
Andrano	**-1.378**	**1.611**	**-1.640**
Lago d'Ora	**2.760**	**-0.398**	**-0.658**

Eigv	22.9	15.7	12.5
p.Var.	49.3	23.2	14.7
cum.p. Var	49.3	72.5	87.2

C1= Movida
C2= Benessere
C3= Sicurezza





Scaling metrico delle distanze

Supponiamo che i dati siano contaminati. Adoperiamo una tecnica diversa: lo scaling metrico.

Trasformazione delle informazioni contenute nella matrice dei dati in dissimilarità usando la distanza di Manhattan con variabili standardizzate.

$$\delta_{ij} = \sum_{r=1}^{9} \left| \frac{x_{ir} - x_{rj}}{\sigma_r} \right| \Rightarrow D$$

E' ovvio che si tratta di una matrice euclidea

Matrice delle dissimilarità 14 x 14

	Rondena	Righino	Fontanelle	Bosco_Mezzano	Andrano	Sornieto	Cozzo_D_Este	Santa_Bruna	Pascino	Lago_d_Ora	Torniella	Centrano	San_Maclodio	Selluzzi
Rondena	0.00	8.24	12.91	7.07	11.41	10.77	10.64	12.04	12.15	12.40	14.74	12.34	1.97	6.67
Righino	8.24	0.00	8.69	3.97	13.77	11.85	6.60	12.01	10.37	12.29	13.54	12.01	7.77	3.98
Fontanelle	12.91	8.69	0.00	7.88	12.68	8.24	12.39	6.37	8.92	9.44	10.91	11.06	12.92	8.20
Bosco_Mezzano	7.07	3.97	7.88	0.00	13.63	9.46	8.28	10.45	10.95	9.38	11.29	11.89	6.91	3.84
Andrano	11.41	13.77	12.68	13.63	0.00	11.16	12.84	9.87	10.76	14.24	17.77	12.21	12.14	10.54
Sornieto	10.77	11.85	8.24	9.46	11.16	0.00	13.97	9.28	6.86	5.75	9.64	8.56	10.38	8.23
Cozzo_D_Este	10.64	6.60	12.39	8.28	12.84	13.97	0.00	10.94	10.19	14.00	16.22	11.51	10.37	7.07
Santa_Bruna	12.04	12.01	6.37	10.45	9.87	9.28	10.94	0.00	8.66	9.41	12.94	11.22	11.66	8.65
Pascino	12.15	10.37	8.92	10.95	10.76	6.86	10.19	8.66	0.00	11.55	14.44	4.70	12.07	8.77
Lago_d_Ora	12.40	12.29	9.44	9.38	14.24	5.75	14.00	9.41	11.55	0.00	4.57	13.34	12.02	8.93
Torniella	14.74	13.54	10.91	11.29	17.77	9.64	16.22	12.94	14.44	4.57	0.00	15.95	13.84	11.61
Centrano	12.34	12.01	11.06	11.89	12.21	8.56	11.51	11.22	4.70	13.34	15.95	0.00	12.66	9.17
San_Maclodio	1.97	7.77	12.92	6.91	12.14	10.38	10.37	11.66	12.07	12.02	13.84	12.66	0.00	6.81
Selluzzi	6.67	3.98	8.20	3.84	10.54	8.23	7.07	8.65	8.77	8.93	11.61	9.17	6.81	0.00

Se i dati contengono valori anomali è preferibile evitare la distanza euclidea e la distanza di Mahalanobis.

Scaling metrico delle distanze/2

Lo scaling metrico prevede il doppio centramento della matrice delle distanze

$$\tilde{B} = CHC$$

Dove

$$C = \left(I - \frac{1}{n} uu^t \right) \quad e \quad H = -\frac{1}{2} D^2$$

Seguita dalla scomposizione in valori singolari

P=2 o p=3

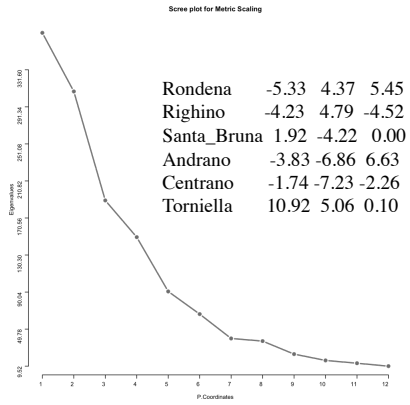
$$\tilde{B} = \sum_{r=1}^{p} \lambda_r v_r v_r^t = VLV, \; con \; V^tV = I_n, \; L = diag\left(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda p\right)$$

Si passa poi alla determinazione delle coordinate principali

$$VL^{0.5} = \tilde{X}$$

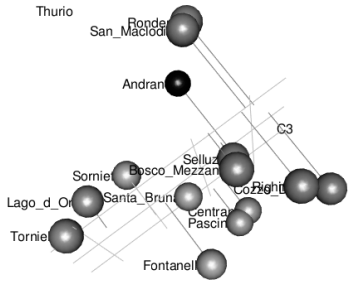
Esempio: comprensorio di Thurio

Lo scarto maggiore si nota a p=3, ma nel complesso le prime tre coordinate principali spiegano i 2/3 della variabilità originale



Rondena	-5.33	4.37	5.45
Righino	-4.23	4.79	-4.52
Santa_Bruna	1.92	-4.22	0.00
Andrano	-3.83	-6.86	6.63
Centrano	-1.74	-7.23	-2.26
Torniella	10.92	5.06	0.10

Sono stati riscostrati 6 gruppi



Percentuale cumulata di variabilità spiegata dalle Princ. Coord.

```
 [1]  28.317  51.780  66.224  77.627
 [5]  84.535  89.570  92.588  95.387
 [9]  97.109  98.308  99.275 100.000
[13] 100.000 100.000
```

La configurazione dei punti in 3d è diversa da quella ottenuta con l'ACP.

Si tratta di due modi diversi di analizzare i dati. Entrambi possono essere utili

Distanze vere/Distanze presunte

L'intero p indica il numero di pseudo-coordinate. La matrice delle distanze ricorstruite in base alle coordiate principali è ottenuta da

$$\tilde{D}^2 = \tilde{b}u^t + u\tilde{b}^t - 2\tilde{B}$$

Se p<9 le distanze ricostruite non possono essere esatte, ma solo delle approssimazioni.

$$\begin{cases} \delta_{ij} = \textit{dissimilarità originale} \\ d_{ij}(X) = \textit{distanza approssimata (disparità)} \end{cases}$$

La X in parentesi ci ricorda la dipendenza delle distanze approssimate (qui dette anche disparità) dalle pseudo-coordinate.

Stress

Ci serve subito una misura indicativa di quanto la soluzione ottenuta si discosti da quella originale

$$S_p(X) = \frac{\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}\left[\delta_{ij} - d_{ij}(X)\right]^2}{\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}\delta_{ij}^2}$$

p è il numero di dimensioni o pseudo-coordinate.

Il compito delle δ_{ij} è di dare un ordinamento per le $d_{ij}(X)$

Lo STRESS dipende solo dalla interdistanze (le dissimilarità sono fisse) e quindi è invariante rispetto a rotazioni e traslazioni perché tali sono le sue componenti.

Minore è il valore dello stress maggiore è la qualità della approssimazione.

Valori prossimi all'unità indicano che le dissimilarità stimate (disparità) sono vicine allo zero e quindi non danno alcuna idea della configurazione spaziale delle unità.

Lo stress è nullo se la matrice ricostruita è uguale a quella originale.

SStress

Takane-Young_De Leew (1977) hanno proposto una misura di adattamento ritenuta più consona alla idea dello scaling delle distanze

$$SS_p(X) = \frac{\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}\left[\delta_{ij}^2 - \phi_{ij}(X)\right]^2}{\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}\delta_{ij}^4}$$

La potenza 2 delle dissimilarità originali potrebbe essere sostituita con un altro esponente.

Dove ϕ_{ij} è la approssimazione del quadrato della distanza e non la approssimazione della distanza al quadrato

Stress e Sstress non sono equivalenti. Il secondo privilegia le distanze grandi, sia quelle note che quelle approssimate.

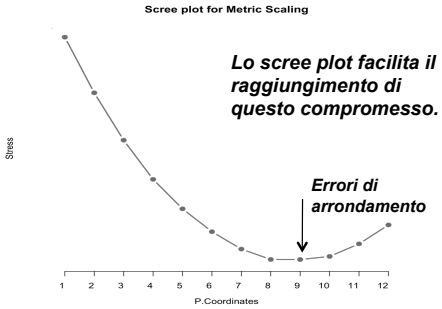
Sarà necessario accertare se il software consente questa opzione.

Scree plot

A parità di condizioni lo STRESS diminuisce all'aumentare del numero di dimensioni su cui sono calcolate le disparità.

Quindi per migliorare la soluzione basterebbe aumentare il numero di coordinate.

Tuttavia, il nostro obiettivo è ottenere il migliore adattamento tra distanze originali e disparità con poche dimensioni perché più facili da interpretare.



Scree plot/2

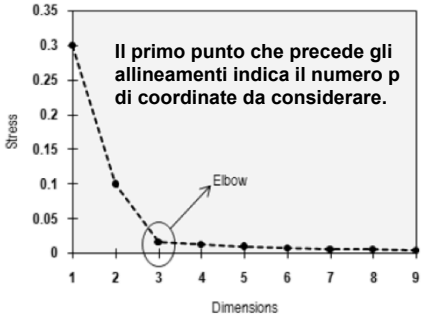
Il grafico scree porta a valutare lo scarto tra valori dello stress per un numero di dimensioni crescenti: $S_k(X)-S_{k+1}(X)$

Il metodo consiste nel trovare il punto in cui la inclinazione dei segmenti diventa quasi costante in modo da presentarsi praticamente come facenti parte di una sola retta.

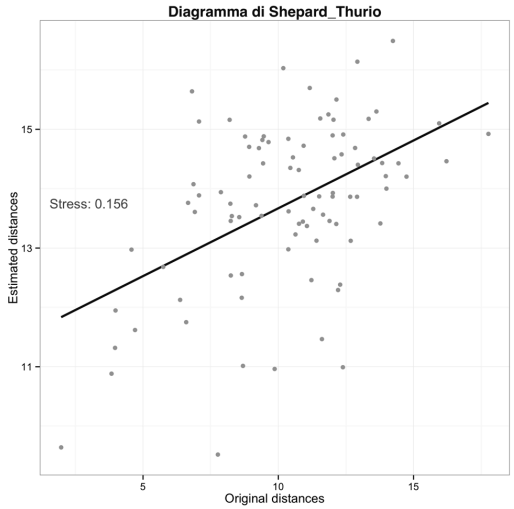
Questo vuol dire che i contributi che possono pervenire da queste dimensioni sono dei disturbi che poco possono contribuire a migliorare la soluzione.

Il difetto del metodo è che in molti casi o non ci sono punti di svolta ben delineati oppure ve ne sono diversi.

In questi casi lo scree plot è di scarsa utilità.



Asseveramento dell'approssimazione



L'adattamento non appare soddisfacente. Presumibilmente la relazione tra distanze stimate e dissimilarità originali non è lineare.

Scaling non metrico
(Ordinamento delle dissimilarità)

Trasformiamo la matrice delle dissimilarità originali sostituendone i valori con il rango ottenuto nella loro graduatoria ascendente.

Le eventuali parità sono gestite attribuendo il rango medio delle posizioni che condividono le unità che sono ex aequo.

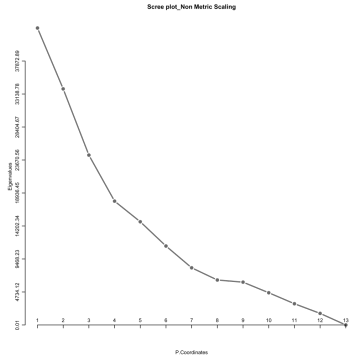
	Rondena	Righino	Fontanelle	Bosco_Mezzano	Andrano	Sornieto	Cozzo_D_Este	Santa_Bruna	Pascino	Lago_d_Ora	Torniella	Centrano	San_Maclodio	Selluzzi
Rondena	0	20	76	15	54	46	44	64	67	72	88	70	1	10
Righino	20	0	26	3	82	59	9	62	39	69	80	61	16	4
Fontanelle	76	26	0	17	74	21	71	8	28	34	47	50	77	18
Bosco_Mezzano	15	3	17	0	81	35	22	42	49	32	53	60	13	2
Andrano	54	82	74	81	0	51	75	37	45	86	91	68	66	43
Sornieto	46	59	21	35	51	0	84	31	12	7	36	23	41	19
Cozzo_D_Este	44	9	71	22	75	84	0	48	38	85	90	55	40	14
Santa_Bruna	64	62	8	42	37	31	48	0	25	33	78	52	58	24
Pascino	67	39	28	49	45	12	38	25	0	56	87	6	65	27
Lago_d_Ora	72	69	34	32	86	7	85	33	56	0	5	79	63	29
Torniella	88	80	47	53	91	36	90	78	87	5	0	89	83	57
Centrano	70	61	50	60	68	23	55	52	6	79	89	0	73	30
San_Maclodio	1	16	77	13	66	41	40	58	65	63	83	73	0	11
Selluzzi	10	4	18	2	43	19	14	24	27	29	57	30	11	0

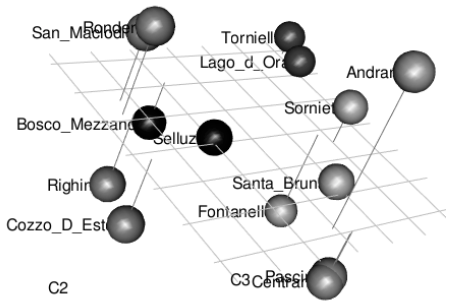
Alle matrici dei ranghi delle dissimilarit applichiamo la procedura di scaling metrico.

Non ci aspettiamo che la matrice sia di tipo euclideo. La correzione con la costante additiva è in preventivo.

Inadeguatezza della strategia

Ancora una volta lo scarto maggiore si nota a p=3, ma nel complesso le prime tre coordinate principali spiegano meno dei 2/3 della variabilità.





Percentuale cumulata di variabilità

[1] 24.36 43.73 57.67 67.83 76.30 82.77 87.47 91.15
[9] 94.67 97.31 99.05 100.00 100.00 100.00

Non sembra ci sia un grande miglioramento passando all'ordinamento delle dissimilarità. I gruppi sono aumentati e la variabilità spiegata si è ridotta.

Inadeguatezza della strategia/2

Sostituire dei ranghi alle dissimilarità originali non può funzionare perché…

Sacrifica una parte delle informazioni (cioè risale dalla scala a rapporti a quella ordinale) senza che sia dimostrata la contaminazione o comunque la poca attendibilità dei dati sulle dissimilarità originali.

La variabilità è un concetto inappropriato per le graduatorie. Infatti tutte le permutazioni di n oggetti hanno tutte la stessa varianza.

L'applicazione dello scaling metrico è poco efficace perché orientato alla massimizzazione della variabilità spiegata dalle nuove coordinate che ha poche possibilità di differenziarsi nel contesto degli ordinamenti.

E' necessario trovare un'altra strategia.

Scaling non metrico

E' possibile seguire una sequenza iterativa di soluzioni che riscalano gradualmente la matrice delle dissimilarità originali.

Si fissa il numero di dimensioni p a partire da valori piccoli: 1,2, 3, … , (n-1)

Per il numero p fissato di coordinate principali si cerca la migliore approssimazione della matrice originale

Si parte da una configurazione iniziale dei punti scelta in modo opportuno

$$X_{ij},\ \ i = 1,2,\ldots,n;\ \ j = 1,2,\ldots,p$$

E si perviene a quella finale con dei passaggi che via via riducono lo scarto tra le distanze geometriche e le dissimilarità tra le unità.

Tra una iterazione e la successiva i punti della configurazione si spostano in base ad un criterio orientato al miglioramento della approssimazione.

Comici italiani: varie forme di umorismo

Matrice delle dissimilarità

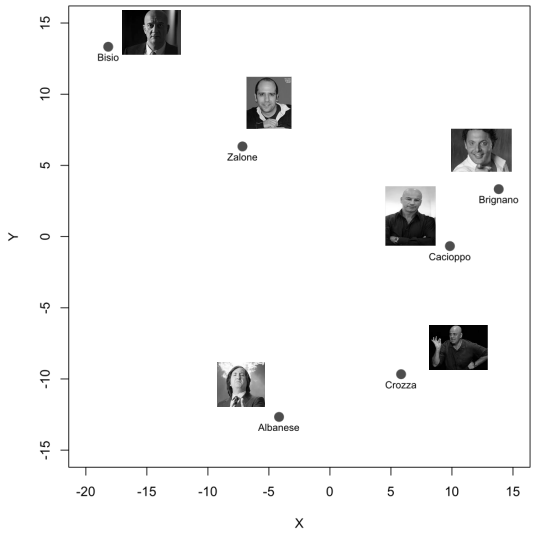
	Albanese	Bisio	Brignano	Cacioppo	Crozza	Zalone
Albanese	0	8	20	10	25	15
Bisio	8	0	12	16	2	28
Brignano	20	12	0	40	22	6
Cacioppo	10	16	40	0	5	4
Crozza	25	2	22	5	0	30
Zalone	15	28	6	4	30	0

Matrice dei ranghi delle dissimilarità

Questo percorso però non porta lontano

	Albanese	Bisio	Brignano	Cacioppo	Crozza	Zalone
Albanese	0	5	11	7	13	9
Bisio	5	0	8	10	1	14
Brignano	11	8	0	16	12	4
Cacioppo	7	10	16	0	3	2
Crozza	13	1	12	3	0	15
Zalone	9	14	4	2	15	0

Esempio introduttivo



Generiamo a caso 6 coppie di valori compresi tra 1 e 40 e calcoliamo le distanze euclidee tra i punti così ottenuti.

Confronti	Vd	Vdap	Mag	Dir
Bri-Cac	40	5.66	34.34	1
Cac-Cro	5	9.85	4.85	-1
Alb-Cro	25	10.44	14.56	1
Bis-Zal	28	13.04	14.96	1
Bri-Cro	22	15.26	6.74	1
Cac-Zal	4	18.38	14.38	-1
Alb-Cac	10	18.44	8.44	-1
Alb-Zal	15	19.24	4.24	-1
Cro_Zal	30	20.62	9.38	1
Bri-Zal	6	21.21	15.21	-1
Alb-Bri	20	24.08	4.08	-1
Alb-Bis	8	29.53	21.53	-1
Bis-Cac	16	31.30	15.30	-1
Bis-Cro	2	33.24	31.24	-1
Bis-Bri	12	33.53	21.53	-1

Gli scarti tra le coordinate dei punti sono elevati. Per ridurli dobbiamo spostarli: Bisio e Albanese debbono essere più vicini, ma Bisio deve anche essere allontanato da Zalone

Distanze approssimate (disparità)

Confronti	Vd	Vdap	Mag	Dir	Stress Num	Stress Den
Bis-Cro	2	33.24	31.24	-1	976.03	4
Cac-Zal	4	18.38	14.38	-1	206.92	16
Cac-Cro	5	9.85	4.85	-1	23.51	25
Bri-Zal	6	21.21	15.21	-1	231.44	36
Alb-Bis	8	29.53	21.53	-1	463.53	64
Alb-Cac	10	18.44	8.44	-1	71.22	100
Bis-Bri	12	33.53	21.53	-1	463.37	144
Alb-Zal	15	19.24	4.24	-1	17.94	225
Bis-Cac	16	31.30	15.30	-1	234.24	256
Alb-Bri	20	24.08	4.08	-1	16.67	400
Bri-Cro	22	15.26	6.74	1	45.37	484
Alb-Cro	25	10.44	14.56	1	211.98	625
Bis-Zal	28	13.04	14.96	1	223.85	784
Cro_Zal	30	20.62	9.38	1	88.07	900
Bri-Cac	40	5.66	34.34	1	1179.45	1600
					4453.60	5663

STRESS= 0.786

N.B. Qui si è usata la distanza euclidea, ma ogni altra metrica di Minkowski sarebbe legittima.

Si conferma che la configurazione con punti scelti a caso è insoddisfacente dato che lo STRESS è molto alto (valori accettabili sono sotto 0.15. Cominciano ad essere buoni se inferiori a 0.10).

La scelta random delle configurazione iniziale è fonte di criticità nei metodi di MDS

Distanze approssimate/2

Perché ricostruire le dissimilarità in base alle distanze euclidee? Non potrebbe essere utile una delle metrich di Minowski?

$$d_{ij}(X) = \left[\sum_{r=1}^{p} \left|x_{ir} - x_{jr}\right|^{\alpha}\right]^{1/\alpha} \qquad \alpha \geq 1$$

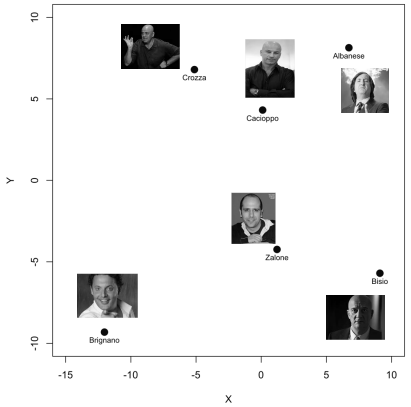
In particolare la city-block (α=1) ha mostrato di essere la candidata ideale se si vuole ridurre l'enfasi sulle dissimilarità più grandi

Una prima ragione per privilegiare la distanza eulidea (α=2) è la relazione che sussiste tra tale norma al quadrato ed il prodotto scalare tra vettori.

Le distanze euclidee sono invarianti rispetto alle rotazioni ortogonali. Lo stesso non si può dire delle altre metriche.

Infine, la distanza euclidea costituisce una buona approssimazione delle altre distanze.

Trasformazione Guttman



Il riallineamento dei punti si realizza con la formula ricorsiva detta trasformazione Guttman

$$x_{ir}^{(q+1)} = x_{ir}^{(q)} + \frac{\alpha}{n-1} \sum_{j=1, j\neq r}^{n} \left(1 - \frac{d_{ij}^{(q)}}{\delta_{ij}}\right)\left[x_{jr}^{(q)} - x_{ir}^{(q)}\right]$$

$$r = 1,2,\ldots,p$$

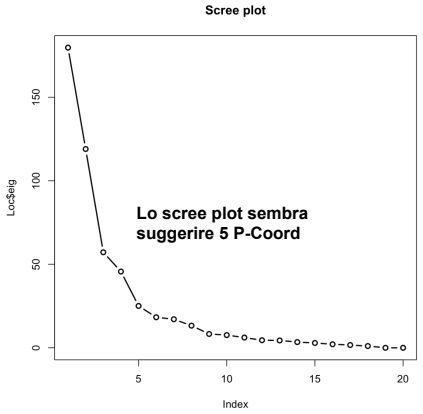
La costante α è molto importante per la convergenza della procedura. Di solito $0.2 \leq \alpha \leq 4$.

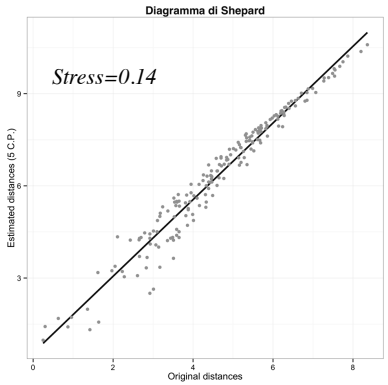
Dopo il primo spostamento, lo stress si è ridotto a 0.34, ma altre iterazioni lo possono migliorare ulteriormente.

Applicazione: Persuasive Strategies

D. R. Roskos-Ewoldsen e B. Roskos-Ewoldsen (2007) presentano una matrice di dissimilarità tra 20 diverse strategie di persuasione.

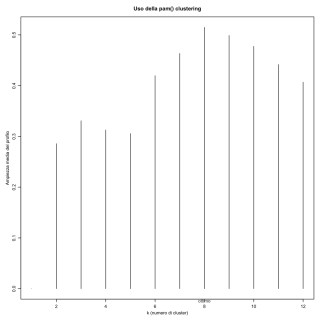
La matrice risulta non euclidea. Tentiamo comunque lo scaling metrico con il trucco della costante additiva.

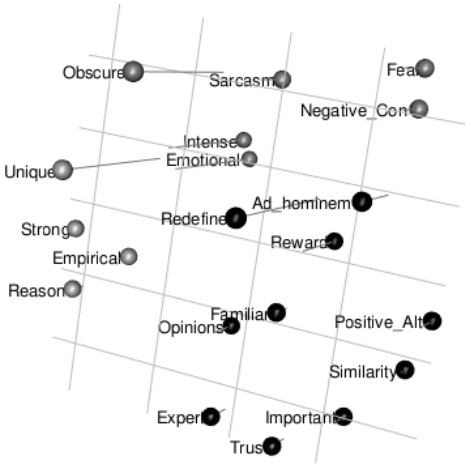




Applicazione: Persuasive Strategies/2

Per la PAM scegliamo k=3



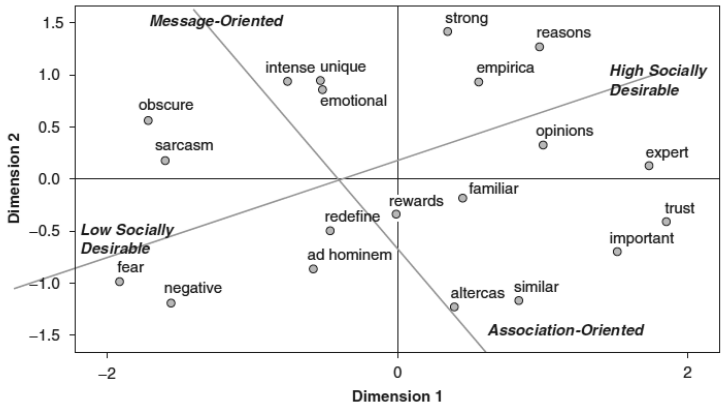


La trasformazione Guttman mantiene il centramento delle pseudo-coordinate

La soluzione trovata con una sequenza di trasformazioni Guttman costituisce la base per il raggruppamento delle unità. Qui si è usata la PAM.

Applicazione: Persuasive Strategies/3

La soluzione in due dimensioni trovata dagli autori prevede quattro variabili latenti secono le quali ragionare per qualificare e strategie.

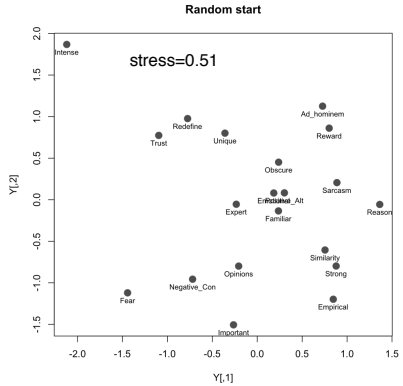


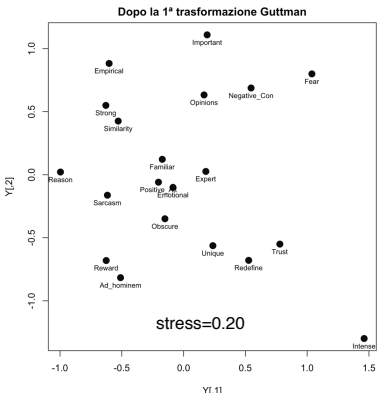
La interpretazione delle coordinate principali costruire con l'MDS è la fase veramente difficile di una analisi.

Scaling non metrico - Avvio

Per due dimensioni generiamo due vettori di valori dalla gaussiana standardizzata con media zero e varianza uno.

I valori così ottenuti sono comunque centrati per avere media zero esatta nel campione





La prima trasformazione Guttman ha ridotto lo stress. Ma il livello non è ancora buono.

Smacof (Scaling by majorizing a convex function)

Lo stress può essere riscritto come:

Sviluppo del quadrato

$$S(X)=\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}\left[\delta_{ij}-d_{ij}(X)\right]^2=\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}\delta_{ij}^2+\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}d_{ij}^2(X)-2\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}\delta_{ij}d_{ij}(X)$$

$$=\tau+\eta^2(X)-2\theta(X)\ \ dove\begin{cases}\eta^2(X)=\left(\frac{1}{2}\right)\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}d_{ij}^2(X)\\ \theta^2(X)=\left(\frac{1}{2}\right)\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}\delta_{ij}d_{ij}(X)\\ \tau=\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}\delta_{ij}^2\end{cases}$$

La somma delle dissimilarità al quadrato è prefissata e non dipende dalle pseudo-coordinate X. Il denominatore dello stress può essere accantonato.

Smacof /2

Il secondo addendo è legato alla traccia della matrice dei prodotti incrociati

$$d_{ij}^2(X)=\left(x_i-x_j\right)^t\left(x_i-x_j\right)=Traccia\left[X^tA_{ij}X\right]\ \ dove\ \ A_{ij}=\left(e_i-j_j\right)\left(e_i-j_j\right)^t$$

A_{ij} è data dal prodotto esterno della differenza tra due vettori coordinate cioè vettori di zeri tranne un uno nella posizione indicata.

$$e_3-e_5=\begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\\0\\0\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\\1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\\-1\\0\end{bmatrix};\ (e_3-e_5)(e_3-e_5)^t=\begin{bmatrix}0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0\\0&0&1&0&-1&0\\0&0&0&0&0&0\\0&0&-1&0&1&0\\0&0&0&0&0&0\end{bmatrix}$$

La matrice V non ha rango pieno e la matrice inversa tradizionale non esiste.

A questo punto abbiamo

$$\eta^2(X)=Traccia\left[X^tVX\right]\ \ con\ \ V=\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}A_{ij}\qquad v_{ij}=\begin{cases}-1 & se\ \ i\neq j\\ (n-1) & se\ \ i=j\end{cases}$$

Notare che le matrici A_{ij} hanno somma zero sulle righe e sulle colonne

Smacof /3

Per gestire il terzo addendo possiamo usare le disparità e definire

$$Q(X)=\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}q_{ij}(X)A_{ij}\qquad q_{ij}(X)=\begin{cases}\frac{1}{d_{ij}(X)} & se\ \ d_{ij}(X)>0\\ 0 & se\ \ d_{ij}(X)=0\end{cases}$$

Le disparità confluiscono in una unica funzione

$$\theta(X)=Traccia\left[X^tQ(X)X\right]$$

Lo stress corrisponde quindi a

$$S(X)=\tau+Traccia\left[X^tVX\right]-2Traccia\left[X^tQ(X)X\right]$$

Smacof /4

Consideriamo ancora la terza componente e modifichiamo il suo elemento centrale in base alla trasformazione Guttman.

$$Q(Y)=\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}q_{ij}(Y)A_{ij}\ \ con\ \ q_{ij}(Y)=\begin{cases}-\left[\frac{\delta_{ij}}{d_{ij}(Y)}\right] & se\ \ i\neq j\ \ e\ \ d_{ij}(Y)>0\\ 0 & se\ \ i\neq j\ \ e\ \ d_{ij}(Y)=0\\ -\sum_{\substack{r=1\\ r\neq i}}^{n}q_{ij} & se\ \ i=j\end{cases}$$

Le Y sono le pseudo-coordinate aggiornate

La disuguaglianza di Cauchy-Schwartz implica che

$$Traccia\left[X^tQ(Y)Y\right]\leq Traccia\left[X^tQ(X)X\right]$$

Da cui consegue la relazione

$$S(X)=\tau+Traccia\left[X^tVX\right]-2Traccia\left[X^tQ(X)X\right]$$

Le Y riducono lo stress rispetto alle X

$$\leq\tau+Traccia\left[X^tVX\right]-2Traccia\left[X^tQ(Y)Y\right]$$

Smacof/5

Lo stress può essere visto come una funzione di X per Y fissato

$$S(X,Y) = \tau + Traccia\left[X^t V X\right] - 2Traccia\left[X^t Q(Y) Y\right]$$

La derivazione della funzione scalare S rispetto alla matrice X comporta

$$\frac{\partial\left[S(X,Y)\right]}{\partial X} = 2VX - 2Q(Y)Y = 0$$

La soluzione del sistema si ottiene con $VX = Q(Y)Y \Rightarrow X = V^{+}Q(Y)Y$

Dove la matrice V^{+} è la matrice inversa di Moore-Penrose

$$V^{+} = \left[V + \left(\frac{1}{n}\right)uu^t\right]^{-1} - \left(\frac{1}{n}\right)uu^t \Rightarrow V^{+}V = I$$

U è un vettore di uno, n è la dimensine della matrice e I è la matrice identità

Algoritmo di De Leew (smacof)

La minimizzazione dello stress diventa uno schema iterativo:

1) Si determina una configurazione iniziale dei punti X_0 nel numero di dimensioni già prefissato (2,3,…).

Di solito si parte da una generazione di punti casuali. Usare lo scaling metrico come base di partenza si può, ma è dispendioso.

2) Si valuta lo stress della configurazione. Se è soddisfacente lo schema di ferma altrimenti si continua purché non si sia superato il numero massimo consentito di iterazioni.

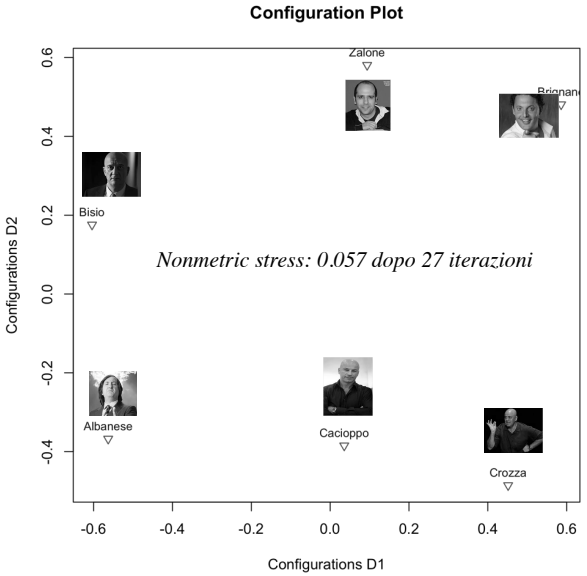
3) Si modifica la configurazione con la trasformazione Guttman

$$X_{r+1} = V^{+}\left[Q(X_r)\right]X_r, \quad V^{+} = \left(\frac{1}{n}\right)\left[I - \left(\frac{1}{n}\right)uu^t\right]$$

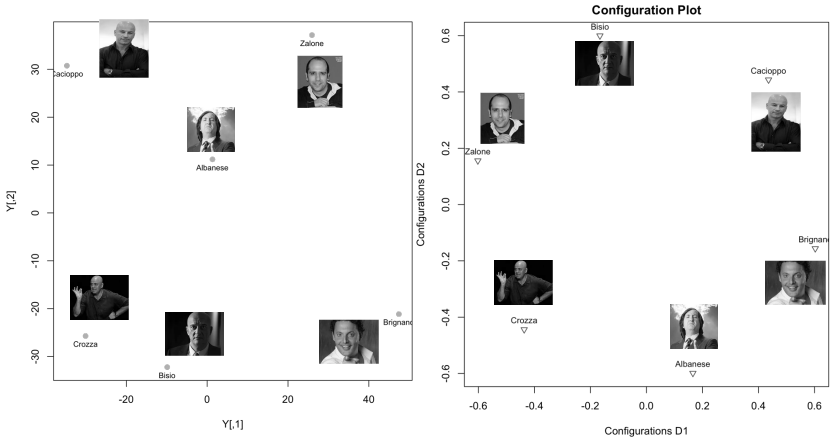
Per poi tornare al punto 2.

Lo schema di De Leew è tale che ad ogni iterazione lo stress diminuisce ovvero diminuisce una funzione che è superiore allo stress (maggiorazione).

Esempio comici italiani random start

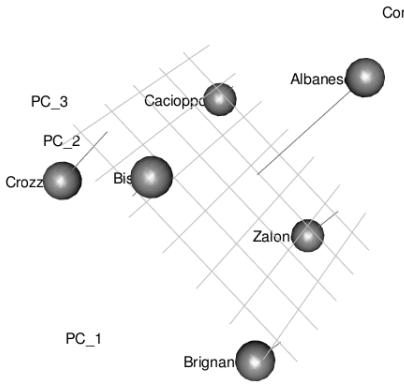


Esempio comici italiani: metric scaling solution



Nonmetric stress: 0.07 dopo 43 iterazioni

Esempio comici italiani/2



Le P.Coord hanno poca importanza ai fini interpretativi dell'MDS

Contano molto di più le contrapposizionin tra gruppi di punti.

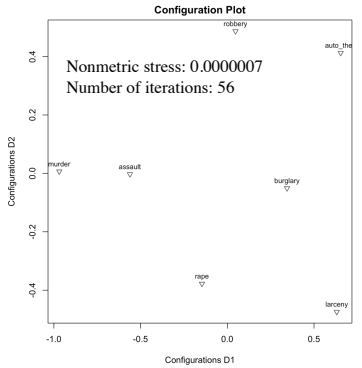
Si deve poi cercare ciò che unisce i punti nei gruppi e ciò che divide i gruppi tra di loro.

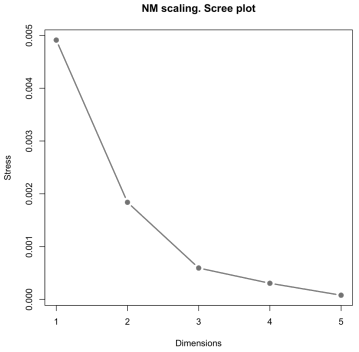
Nonmetric stress: 0.00000009
Number of iterations: 16

Applicazione_1: crime

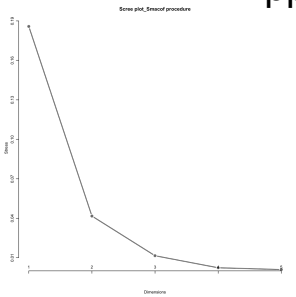
crime	murder	rape	robbery	assault	burglary	larceny	auto_theft
murder	1.00	0.52	0.34	0.81	0.28	0.06	0.11
rape	0.52	1.00	0.55	0.70	0.68	0.60	0.44
robbery	0.34	0.55	1.00	0.56	0.62	0.44	0.62
assault	0.81	0.70	0.56	1.00	0.52	0.32	0.33
burglary	0.28	0.68	0.62	0.52	1.00	0.80	0.70
larceny	0.06	0.60	0.44	0.32	0.80	1.00	0.55
auto_theft	0.11	0.44	0.62	0.33	0.70	0.55	1.00

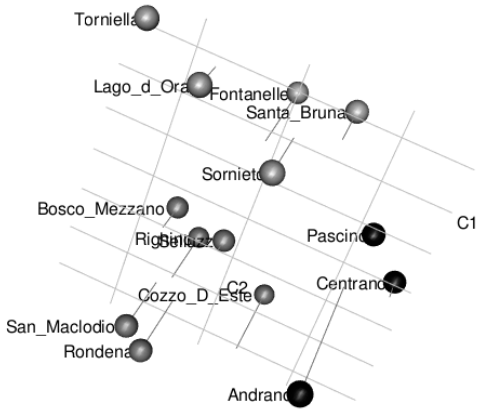
$$D = \sqrt{2(1-R)}$$





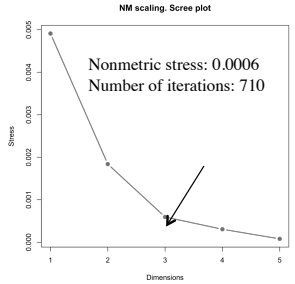
Applicazione_2: Thurio

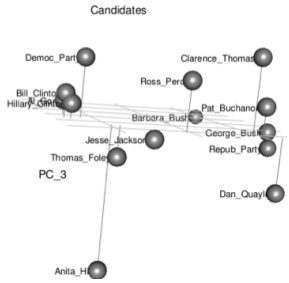




Applicazione 3: candidates

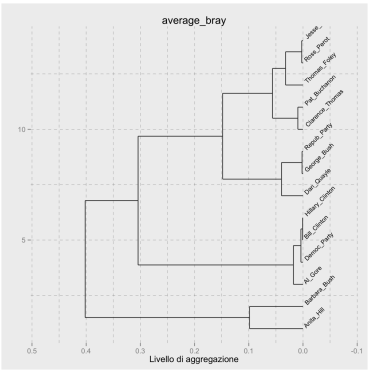
Dati ripresi da W.G. Jacoby (2012)





La clustering gerarchica è più appropriata se si trattano poche unità.

I gruppi son piuttoso chiari e autoesplicativi.



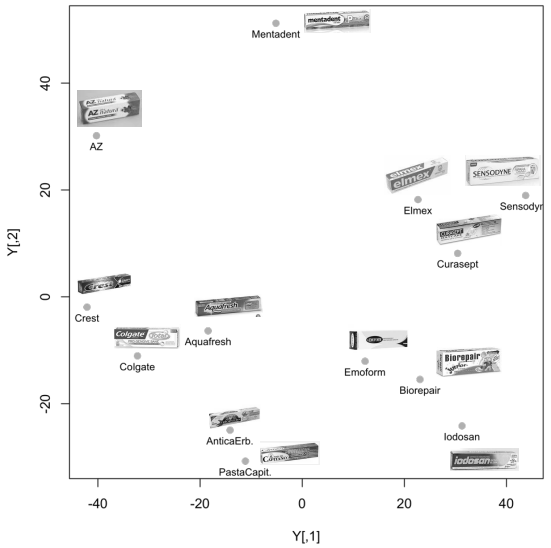
Applicazione 4: dentifrici

L'elicitazione del gradimento di un prodotto o di un servizio è una scienza a parte. Nel caso dei dentifrici abbiamo trovato la tabella che segue

	AnticaErb.	Aquafresh	Az	Biorepair	Colgate	Crest	Curasept	Elmex	Emoform	Iodosan	Mentadent	PastaCapit.	Sensodyne
AnticaErb.	31												
Aquafresh	23	31											
AZ	21	22	31										
Biorepair	30	28	9	31									
Colgate	25	27	18	15	31								
Crest	28	26	26	12	27	31							
Curasept	17	17	8	28	10	6	31						
Elmex	23	18	13	29	9	4	24	31					
Emoform	30	28	2	26	5	21	21	14	31				
Iodosan	29	21	1	25	8	2	17	17	18	31			
Mentadent	18	25	30	11	7	16	14	29	25	11	31		
PastaCapit.	28	23	25	19	13	19	12	26	26	21	1	31	
Sensodyne	3	5	6	27	7	8	28	26	22	29	15	6	31
AnticaErb.	0												
Aquafresh	8	0											
AZ	10	9	0										
Biorepair	1	3	22	0									
Colgate	6	4	13	16	0								
Crest	3	5	5	19	4	0							
Curasept	14	14	23	3	21	25	0						
Elmex	8	13	18	2	22	27	7	0					
Emoform	1	3	29	5	26	10	10	17	0				
Iodosan	2	10	30	6	23	29	14	14	13	0			
Mentadent	13	6	1	20	24	15	17	2	6	20	0		
PastaCapit.	3	8	6	12	18	12	19	5	5	10	30	0	
Sensodyne	28	26	25	4	24	23	3	5	9	2	16	25	0

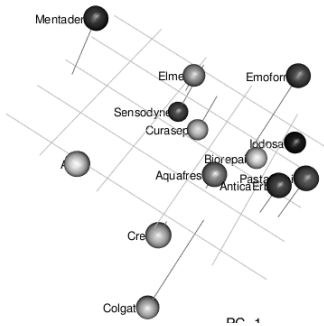
Dalla graduazione delle preferenze medie si passa alle dissimilarità come complemento a 31.

Dentifrici: scaling metrico

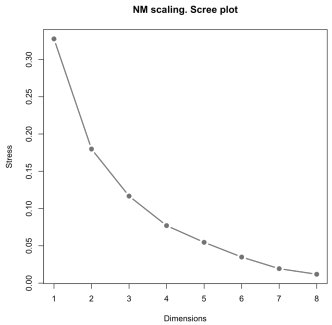


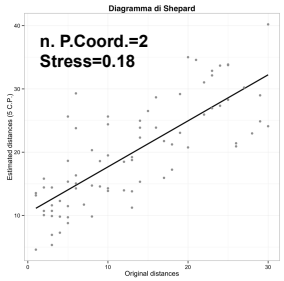
Le prime due P. Coord spiegano il 34% e quindi la mappa percettiva non è esplicativa.

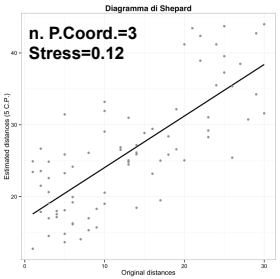
L'aggiunta della 3ª porta al 46% che è ancora poco soddisfacente



Dentifrici: scaling non metrico



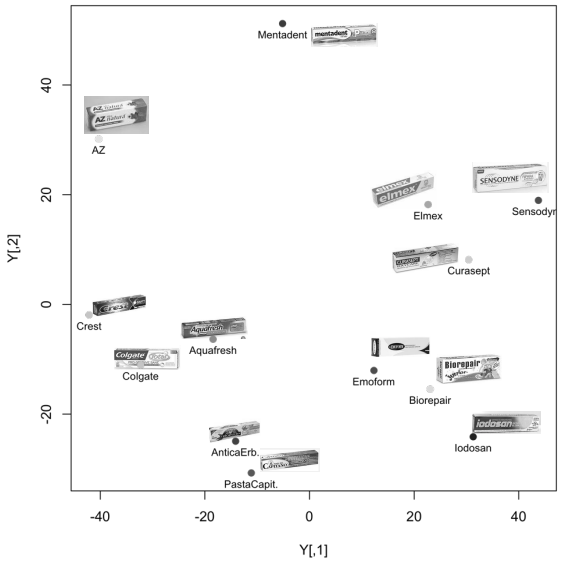




Il numero di P.Coord. necessario per una rappresentazione accurata è superiore a 3. Quindi, mappe percettive di dubbia efficacia.

Le rappresentazioni grafiche per il 4D sono possibili con 3D e forme diverse o colori diversi, ma con 4 coordinel lo stress sarebbe ancora a 0.08

Dentifrici: scaling non metrico



Il risultato è identico a quello ottenuto con lo scaling non metrico, ma almeno non si è intervenuti per "curare" la mancanza di euclideità nella matrice delle dissimilarità.

La disposizione sulle ascisse sembra alludere al luogo d'acquisto. Sulle ordinate verosimilmente c'è un affioramento del costo dei prodotti.

Dipendenza dalla configurazione iniziale

Se la prima disposizione dei punti è ottenuta generando casualmente le loro coordinate si corre il rischio che la soluzione ottenuta non sia quella ottimale.

Le trasformazioni Guttman convergono, ma non necessariamente verso la configurazione migliore.

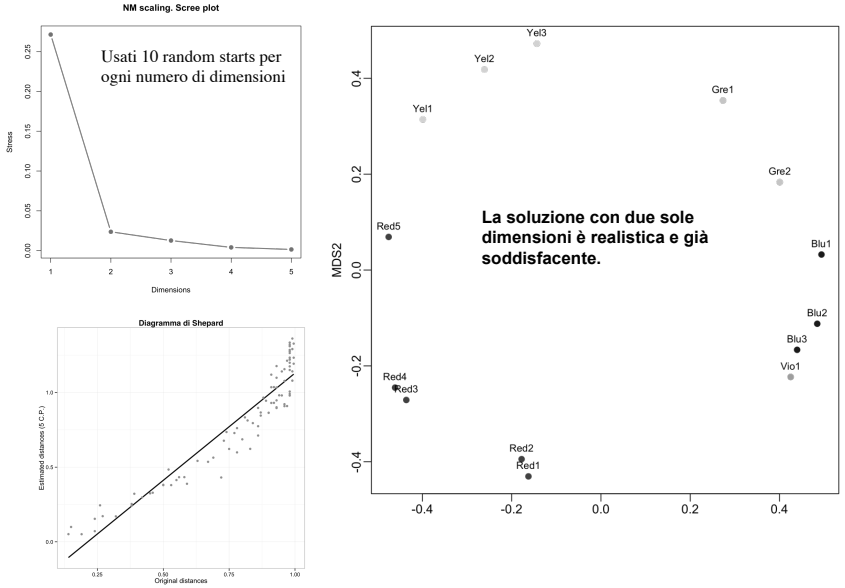
E' possibile avviare le schema della trasformazione Guttman dalla soluzione fornita dallo scaling metrico, magari corretta con la costante additiva ovvero ottenuta con un numero di dimensioni corrispondenti agli autovalori positivi. E' onerosa, ma l'efficacia non è garantita.

Un'altra strategia è di ripetere il ciclo iterativo un certo numero di volte:

100, 1000, 2000

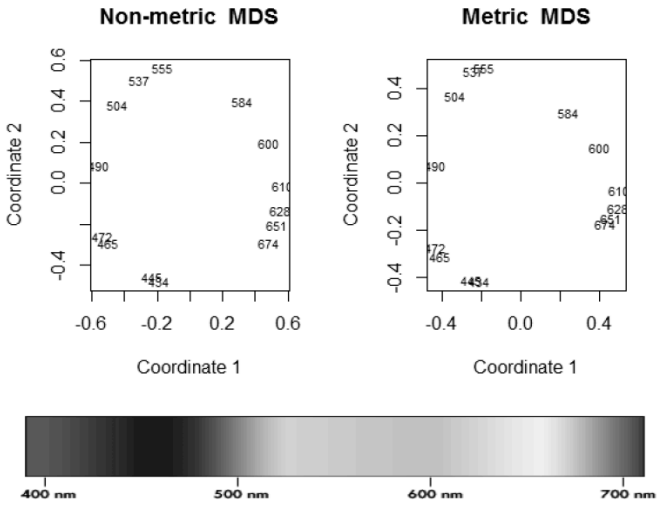
Tenuto conto del numero di unità e delle risorse di calcolo disponibili

Esempio: Ekman dat (colors)

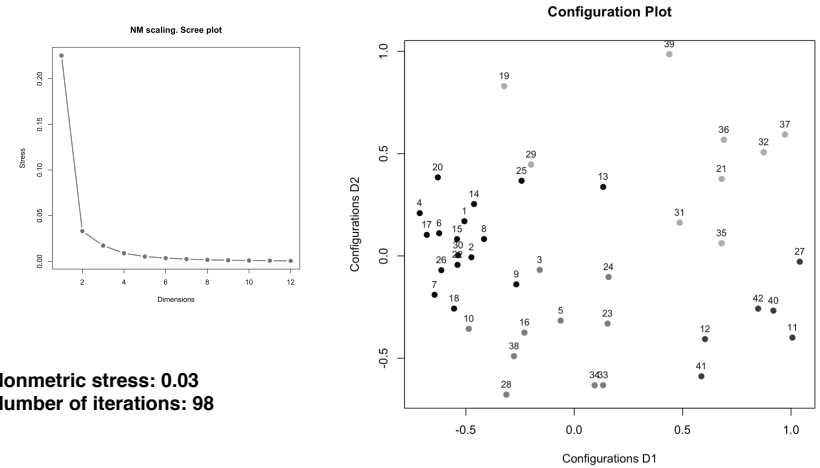


Esempio: Ekman dat (colors)/2

MDS reproduces the well-known two-dimensional *color circle*.



Applicazione_4: breakfast

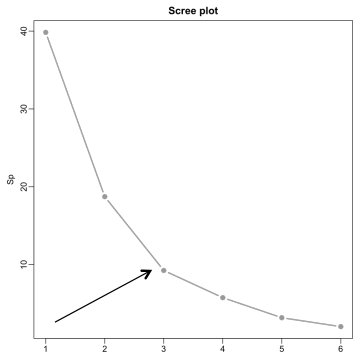


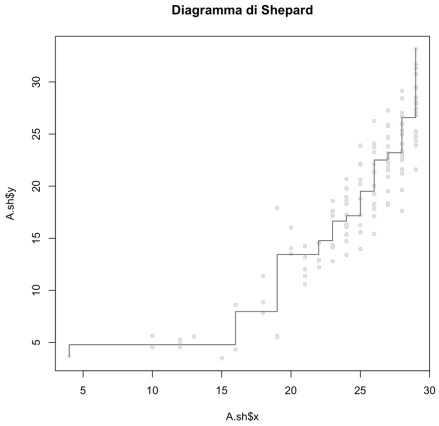
Nonmetric stress: 0.03
Number of iterations: 98

La clustering ottenuta con la PAM si è basata sulle prime due pseudo coordinate ottenute con l'MD.

L'interpretazione dei gruppi può e deve spesso usare informazioni esterne

Applicazione_5: Sounds (isoMDS)

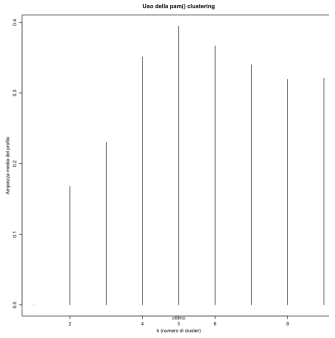


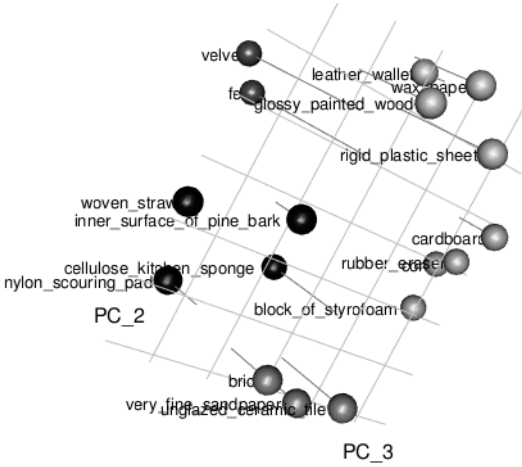


Questo algoritmo di MDS consente di stabilire l'esponente della metrica di Minkowski usata per ricostruire le distanze.

Il numero di dimensioni sembra essere tre.

Applicazione_5: Sounds /2





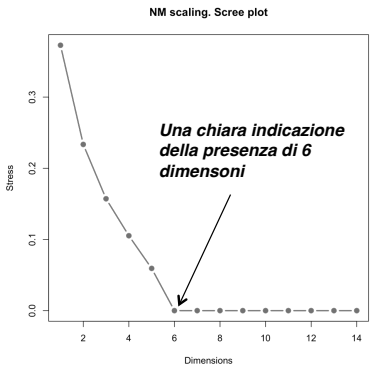
I gruppi di suoni ottenuti con il PAM sono ben strutturati e di semplice interpretazione, almeno per gli esperti del settore

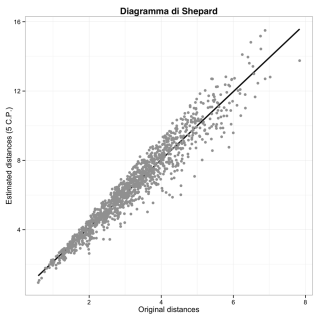
Applicazione_6: cereals

M.Shum (2004) employed a household-level scanner dataset which tracks the cereal purchases of 1,010 households in 6 supermarkets in the Chicago metropolitan area on a weekly basis from June 1991 to December 1992.4

Sono state rilevate 8 variabili di cui 6 metriche e due categoriali su 50 +1 differenti confezioni di cereali

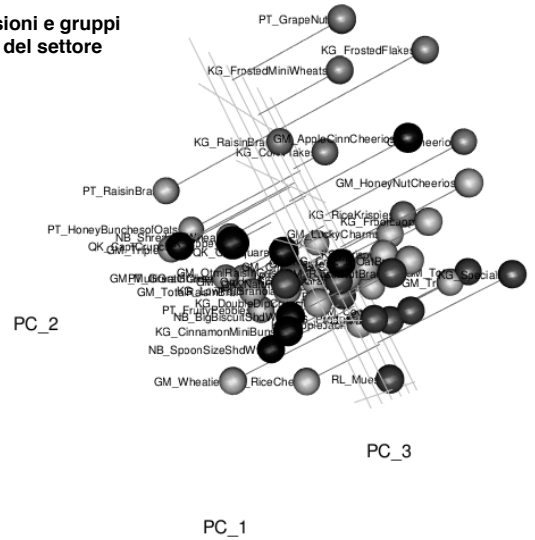
Una marca è solo virtuale perché include tutte le altre non indicate. Poiché è risultata anomala è stata esclusa dalla nostra analisi.



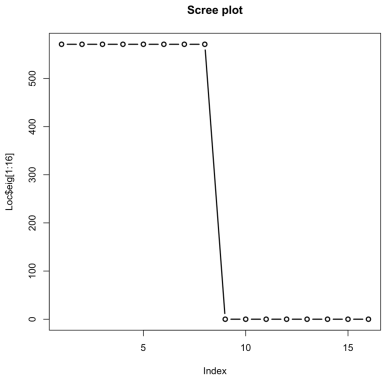


Applicazione_6: cereals/2

La narrazione fatta da dimensioni e gruppi richiede un ascolto di esperti del settore



Confronto MS/NMS large data set



The olive oil data consists of the percentage composition of 8 fatty acids (palmitic, palmitoleic, stearic, oleic, linoleic, linolenic, arachidic, eicosenoic) found in the lipid fraction of 572 Italian olive oils.

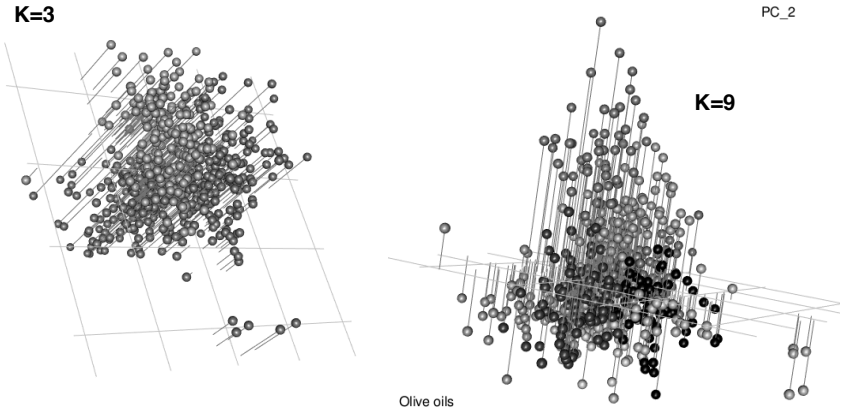
There are 9 collection areas, 4 from southern Italy (North and South Apulia, Calabria, Sicily), two from Sardinia (Inland and Coastal) and 3 from northern Italy (Umbria, East and West Liguria).

Dalla matrice dei dati siamo passati alle dissimilarità usando la distanza di Mahalanobis.

Sono necessarie 8 pseudo-coordinate. Tante erano anche le variabili del data set. Infatti c'è poca correlazione nella matrice dei dati originali.

Niente semplificazione.

Confronto MS/NMS large data set/2

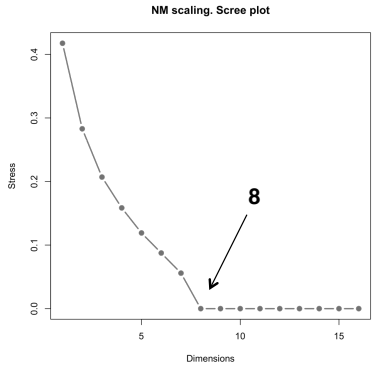


aRand.index: 0.37 rispetto alla regione di provenienza

aRand.index: 0.24 rispetto alle aree di provenienza

I risultano non risponde bene alle esigenze di classificazione.

Confronto MS/NMS large data set/3



Con lo scaling non metrico si ottiene

K=3, ARI=0.15 e K=9, ARI=0.29

Sui dati completi originali si ha invece

K=3, ARI=0.71 e K=9, ARI=0.63

In questo caso, l'uso delle pseudo-variabili ha disperso informazioni importanti.

Dai dati non si è potuto estrarre tutto quello che serviva.

Sammon Mapping

E' una tecnica che converte un vettore in uno spazio m-dimensionale in un piano cartesiano oppure in 3D.

L'idea guida è riorganizzare tutte le osservazioni in modo che le distanze nel piano siano quanto più possibile prossime alle distanze originali.

La funzione obiettivo da minimizzare proposta da Sammon (1969) è

$$S = \left(\frac{1}{\tau}\right)\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}\frac{\left[\delta_{ij} - d_{ij}\right]^2}{\delta_{ij}}$$

Disparità o distanze approssimate

$$\tau = \sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}\delta_{ij}^2, \qquad d_{ij} = \sqrt{\left(x_{1i} - x_{1j}\right)^2 + \left(x_{2i} - x_{2j}\right)^2}$$

La procedura è di tipo non lineare e riesce a conservare abbastanza bene la struttura delle interdistanze nella matrice originale.

Sammon Mapping/2

Si parte da una configurazione iniziale (di solito random) nel piano (p=2) o nello spazio (p=3) e si calcolano le distanze euclidee dei punti virtuali generati (disparità)

Si valuta la funzione obiettivo $SE_2(X)$ e si controlla chelo scarto tra le dissimilarità originali non abbia raggiunto uno livello minimo accettabile rispetto alle disparità

In caso contrario si aggiorna la configurazione

$$x_{ij}^{(q+1)} = x_{ij}^{(q)} - \alpha \Delta_{ij}^{(q)} \quad con \quad 0.3 \le \alpha \le 0.4$$

$$\Delta_{ij}^{(q)} = \frac{\dfrac{\partial S^{(q)}}{\partial x_{ij}^{(q)}}}{\dfrac{\partial^2 S^{(q)}}{\partial \left[x_{ij}^{(q)}\right]^2}}$$

Questo è il gradiente della funzione obiettivo

Sammon Mapping/3

$$\begin{cases} \dfrac{\partial S^{(q)}}{\partial x_{ij}^{(q)}} = \dfrac{-2}{\tau} \displaystyle\sum_{r=1, s \neq i}^{n} \left(\frac{\delta_{ij} - d_{ij}^{(q)}}{\delta_{ij} d_{ij}^{(q)}} \right) \left[x_{ij}^{(q)} - x_{rj}^{(q)} \right] \\ \dfrac{\partial^2 S^{(q)}}{\partial \left[x_{ij}^{(q)}\right]^2} = \dfrac{-2}{\tau} \displaystyle\sum_{r=1, s \neq i}^{n} \frac{1}{\delta_{ij} d_{ij}^{(q)}} \left[\left(\delta_{ij} - d_{ij}^{(q)} \right) - \frac{\left(x_{ij}^{(q)} - x_{rj}^{(q)} \right)^2}{d_{ij}^{(q)}} \left(1 + \frac{\delta_{ij} - d_{ij}^{(q)}}{d_{ij}^{(q)}} \right) \right] \end{cases}$$

La convergenza della procedura è lenta e comunque sensibile al numero magico α. Può essere applicata con tranquillità solo quando il numero di unità non è troppo grande.

Non sono ammessi gli zeri fuori diagonale né nella matrice originale che in quella approssimante.

D'altra parte le mappe di Sammon sono strettamente legate alla procedura di MDS

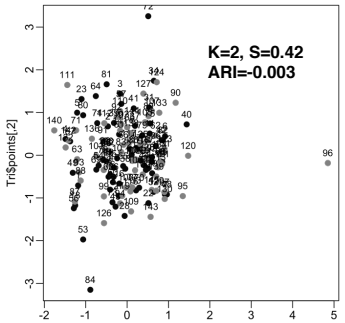
Esempio: diabetes

Partiamo da un data set nella usuale forma di matrice dei dati: 145 unità e cinque variabili divisi in k=3 cluster.

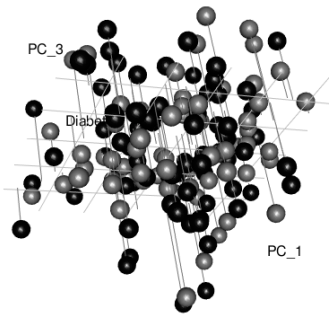
La dissimilarità è misurata con la distanza di Mahalanobis che è euclidea per costruzione.

Tentiamo di riscalare la matrice in due o tre dimensioni.

La configurazione iniziale per l'avvio di Sammon è ottenuta dalla comando runifpointx del pacchetto spatstat.



K=3, S=0.38
ARI=0.009

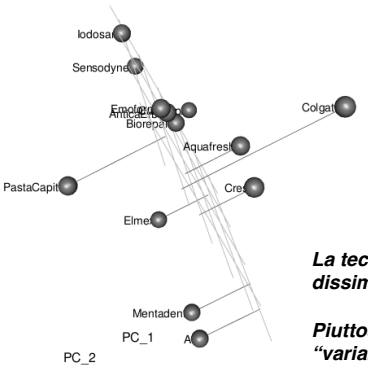


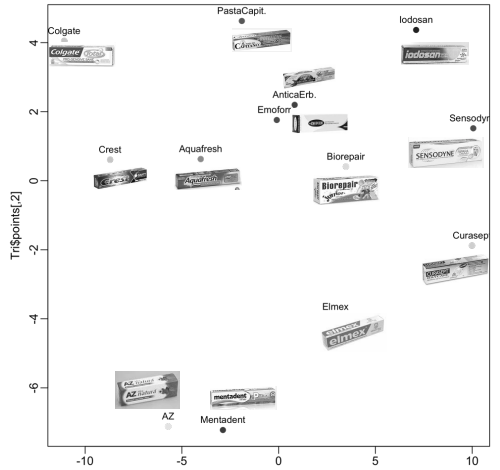
Sammon Mapping/4

Qualcosa è cambiato rispetto agli scaling già fatti.

La circolarità della formazione è tipica del metodo Sammon.

Il 3D rivela l'isolamento del colgate e della pasta del capitano





La tecnica non ha come obiettivo la mappatura delle dissimilarità originali.

Piuttosto si tenta di ottenere un nuovo data set con meno "variabili" di quelle originali, ma con struttura simile.