Pokročilé statistické metody
5. cvičení

Analýza hlavních komponent (PCA)

IBA

Analýza hlavních komponent – jaký je cíl?

Analýza hlavních komponent – jaký je cíl?

- V převážné většině případů existují mezi dimenzemi **korelační vztahy**, tedy dimenze se **navzájem vysvětlují** a pro popis kompletní informace v datech **není třeba všech dimenzí vstupního souboru.**

1. Popis a vizualizace vztahů mezi proměnnými
2. Výběr neredundantních proměnných pro další analýzy
3. Vytvoření zástupných faktorových os
4. Identifikace shluků/odlehlých objektů

Analýza hlavních komponent – vstup?

Analýza hlavních komponent – vstup?

- Pracuje s asociační maticí korelací/kovariancí.
- Jaký je vztah mezi kovariancí a korelací?
- Kdy použijeme kterou matici?
- Jaká bude dimenze matic?

Jaký je vztah mezi kovariancí a korelací?

- **Kovariance** popisuje vztah dvou proměnných; její rozsah závisí na variabilitě dat

$$C(x_1,x_2)=\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_1-\bar{x}_1)(x_2-\bar{x}_2)}{n-1};C\in(-\infty;\infty)$$

- **Korelace** = kovariance standardizovaná na rozptyl proměnných.

$$r(x_1,x_2)=\frac{C(x_1,x_2)}{\sqrt{D(x_1)}\sqrt{D(x_2)}};r\in\langle -1;1\rangle$$

- Jaké hodnoty se nachází na diagonále korelační matice?
- Má smysl použít metody redukce dimenzionality dat v situaci, kdy jsou hodnoty kovariance/korelace blízké nule?
- Čemu odpovídá kovariance na standardizovaných datech?

Pokud $D(x_1)=D(x_2)=1 \rightarrow$ kovariance = korelace

Analýza hlavních komponent – předpoklady?

Analýza hlavních komponent – předpoklady?

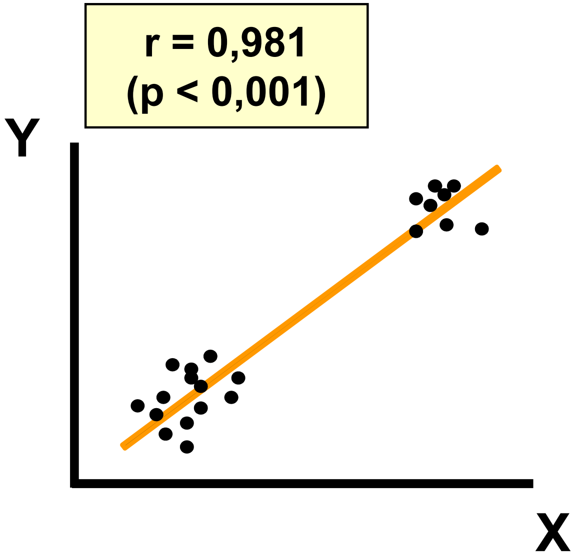
- Více objektů než proměnných (obvykle se uvádí 10x větší počet objektů než proměnných)
- Vícerozměrná technika – 100% vyplněnost dat (jedna chybějící hodnota vede k odstranění celého objektu z analýzy)
- Souvisí s výpočtem asociační matice – korelace/kovariance vyžadují zhruba normální rozdělení proměnných.

ALE! Jaké mohou být výjimky?

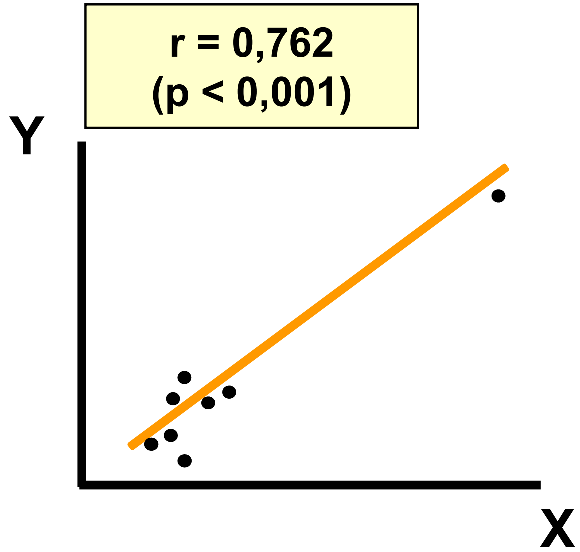
Problémy s výpočtem korelačního koeficientu

- Výjimkou jsou situace, kdy provádíme analýzu za účelem identifikace shluků / odlehlých hodnot.

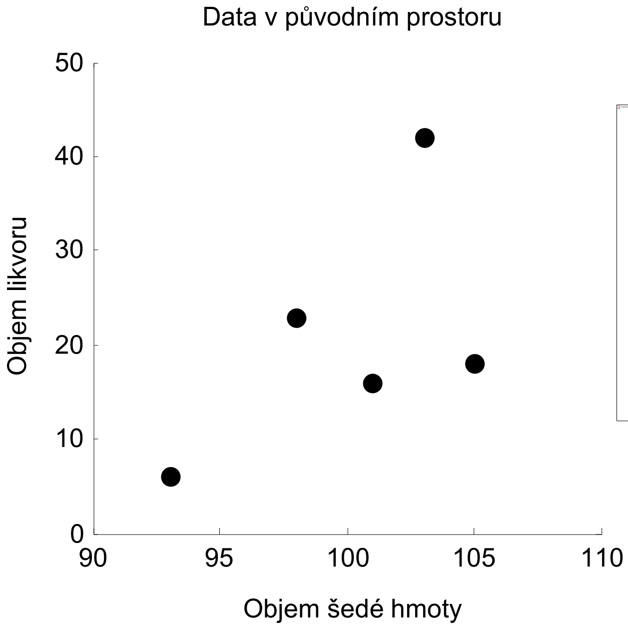
Identifikace shluků



Identifikace odlehlých hodnot



Popis výstupů - příklad



- Jelikož jsou vstupní data měřena ve stejných jednotkách, analýza bude provedena na kovarianční matici, vstupní data jsou centrována průměrem →

Popis výstupů - příklad

→ % rozptylu, které popisuje osa: 184/(184+14) *100 = 92.9 %

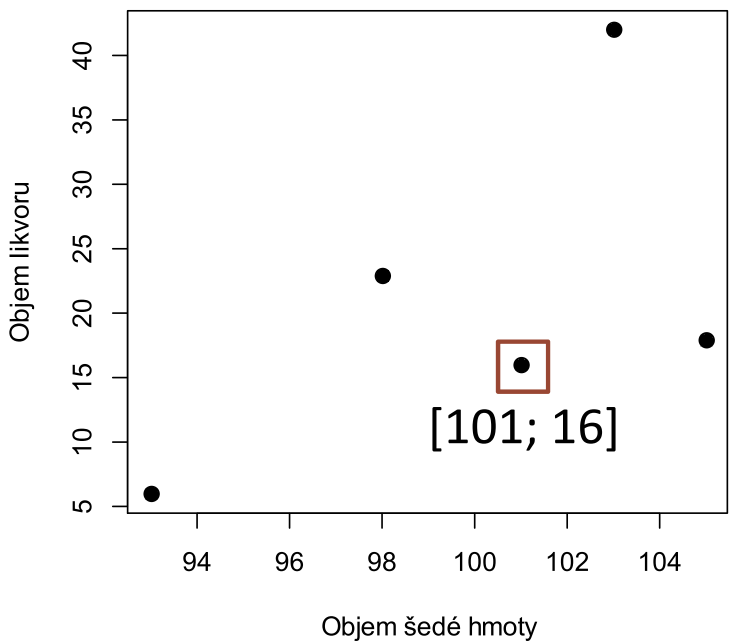
→ % rozptylu, které popisuje osa: 14/(184+14) *100 = 7.1 %

184+14=22+176 → PCA přerozděluje rozptyl původních dat

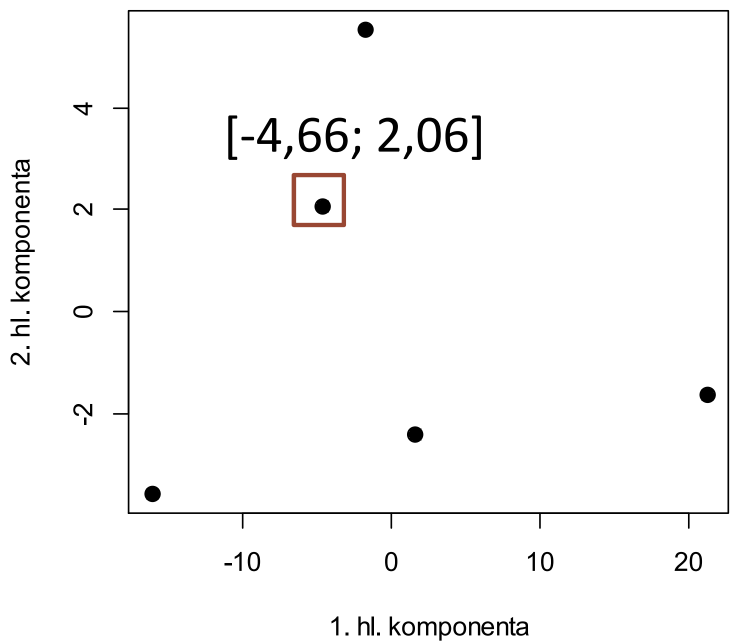
Popis výstupů - příklad

- Nové osy (**y_1**, **y_2**) jsou lineární kombinací původních proměnných:

Data v původním prostoru



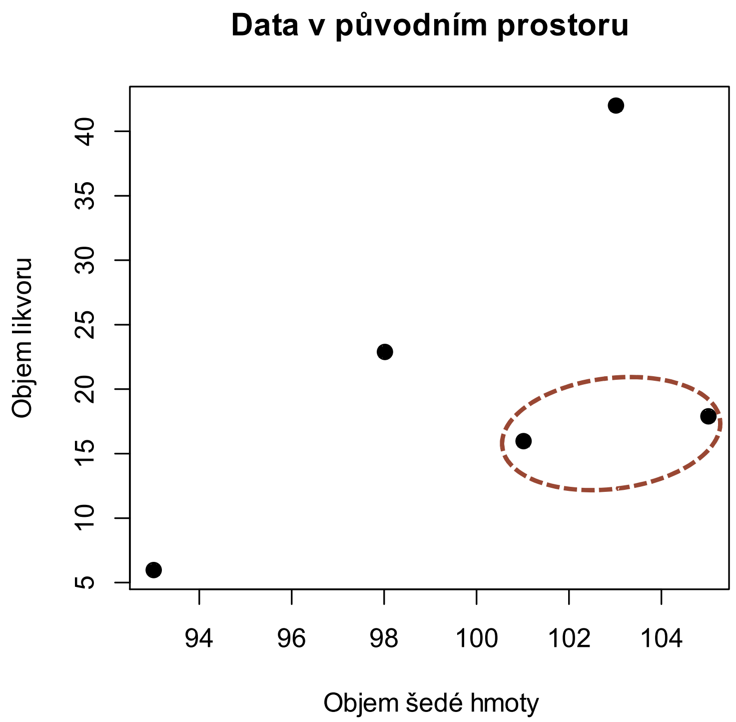
Data v prostoru nových os z PCA

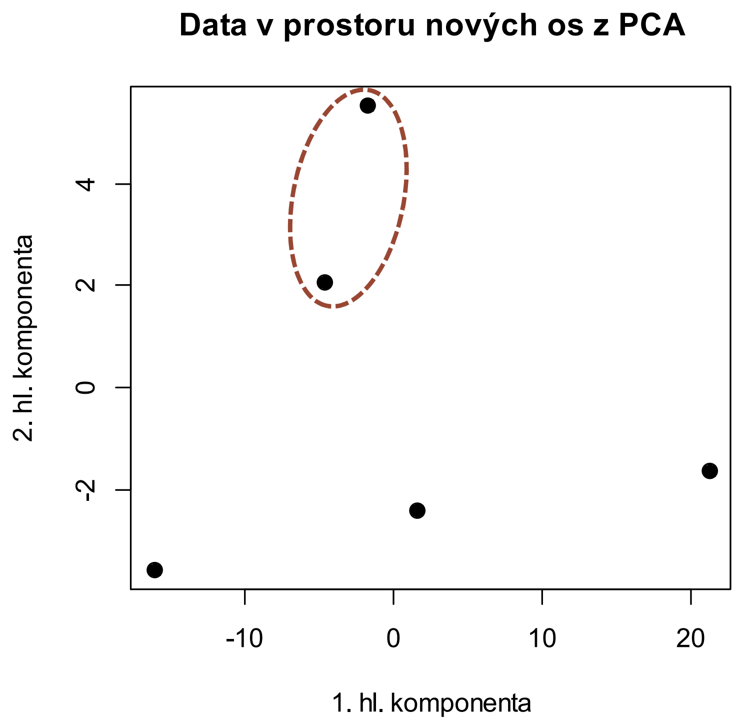


- PCA natočí datový prostor a vytvoří nové osy tak, aby popisovaly maximum variability původních dat.

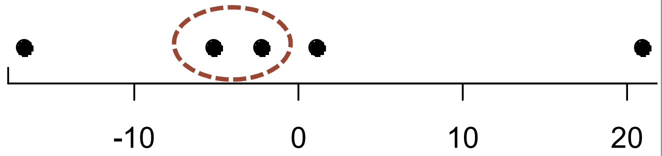
Popis výstupů - příklad

- Každá další osa popisuje rozptyl, který nebyl popsán osami předchozími – každá další osa je nezávislá = kolmá na osy předchozí.

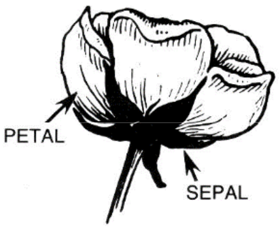




- Výběrem faktorových os přicházíme o určité % variability původních dat

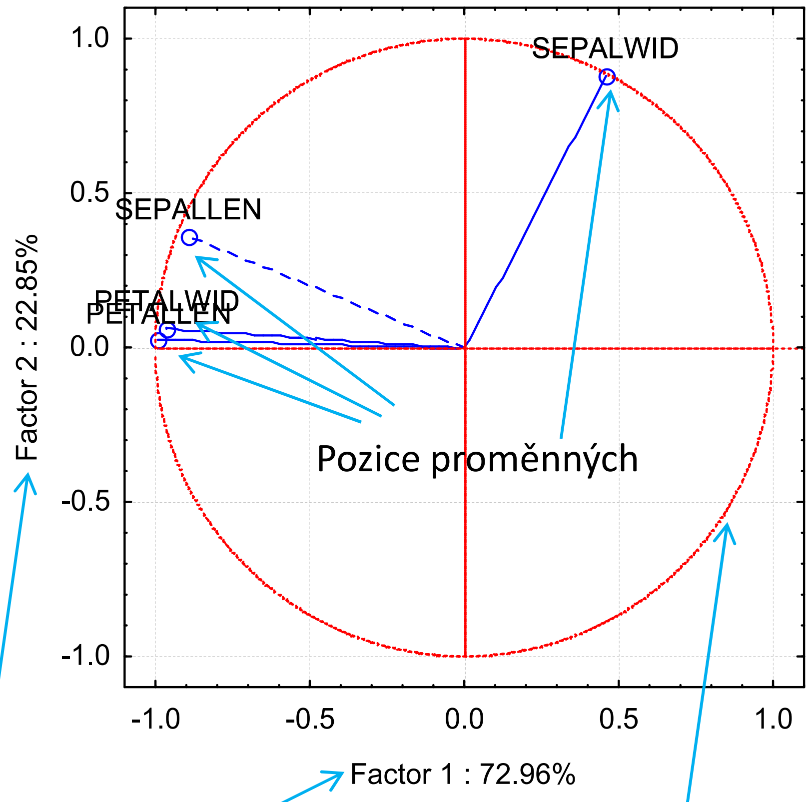


IBA
MU



Grafické výstupy

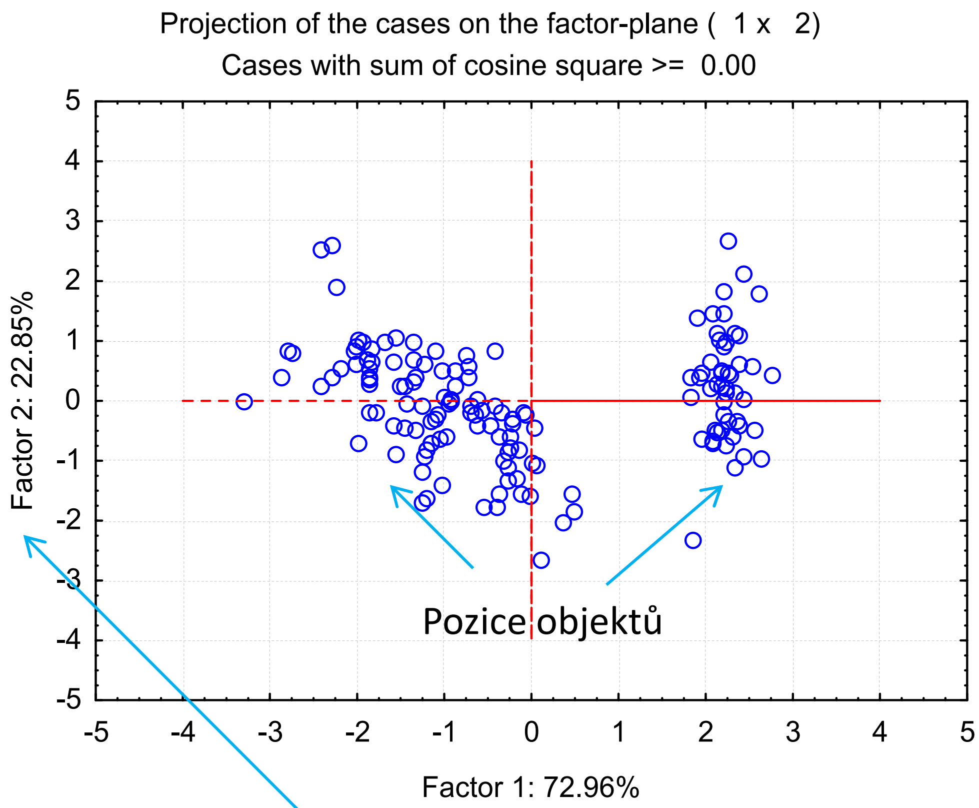
Biplot korelací



Variabilita vyčerpaná faktorovými osami

Jednotková kružnice - Hranice příspěvku k definici faktorové osy

Biplot vzdáleností



Variabilita vyčerpaná faktorovými osami

Jaký počet os popisuje dostatečně datový soubor?

Jaký počet os popisuje dostatečně datový soubor?

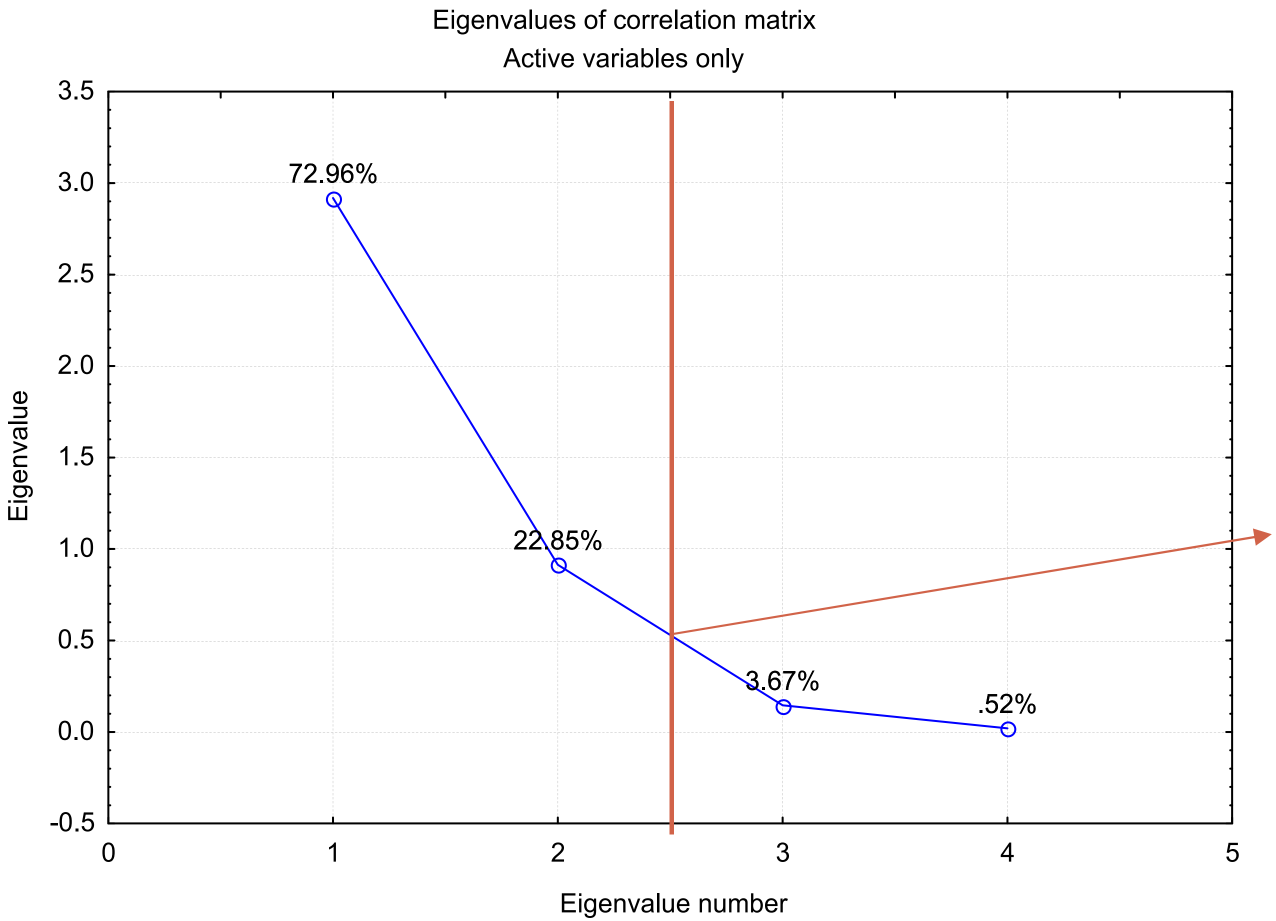
- Ideálně 2-3 osy, je však potřeba brát ohled na % rozptylu původních dat, který vybranými osami popíšeme.

- **Kaiser-Gutmanovo kritérium**

  ✓ Pro další analýzu jsou vybrány osy s vlastním číslem >1 (korelace) nebo větším než je průměrné eigenvalue (kovariance)
  ✓ Logika je vybírat osy, které přispívají k vysvětlení variability dat více než připadá rovnoměrným rozdělením variability

Jaký počet os popisuje dostatečně datový soubor?

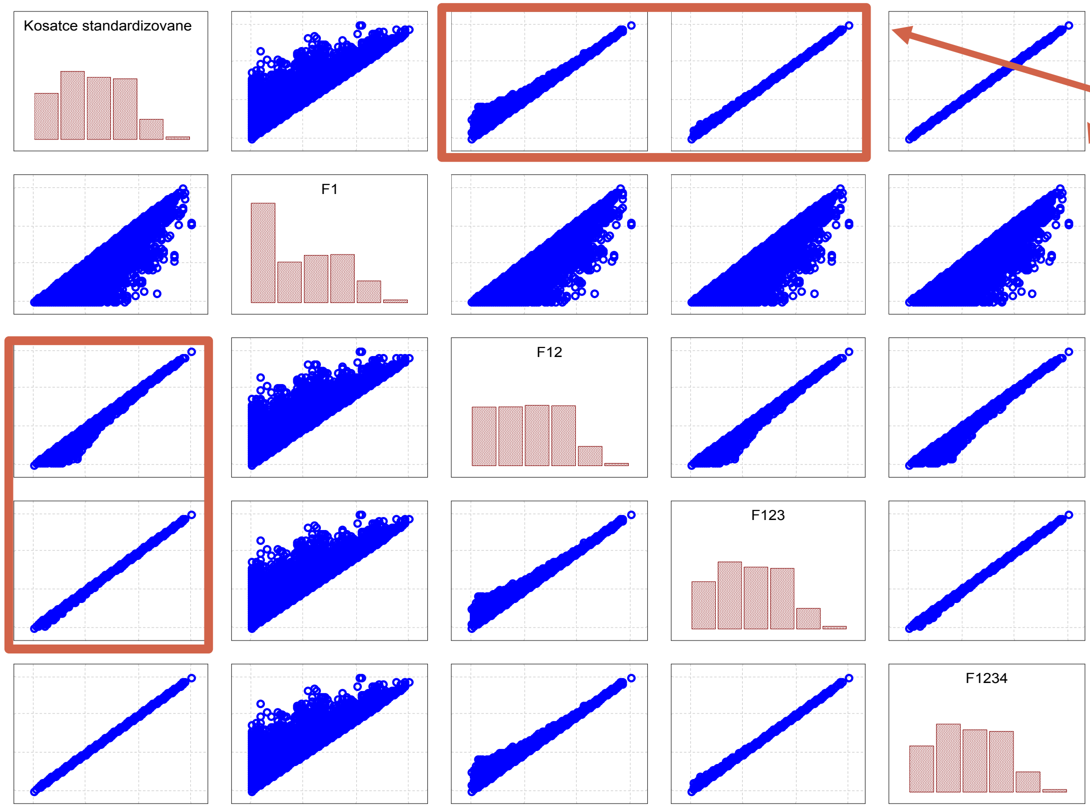
- **Scree plot**
  - ✓ Grafický nástroj hledající zlom ve vztahu počtu os a vyčerpané variability



- Zlom ve vztahu mezi počtem nových os a popsanou variabilitou – pro další analýzu budou použity první dvě faktorové osy.
- Tyto osy popisují téměř 96 % rozptylu původních dat.

Jaký počet os popisuje dostatečně datový soubor?

- **Shepardův diagram**
  - ✓ Vykresluje vzdálenosti v prostoru původních proměnných proti vzdálenostem na nových osách



Za optimální z hlediska zachování vzdáleností objektů lze považovat dvě nebo tři dimenze.

Při použití všech dimenzí jsou vzdálenosti perfektně zachovány.