

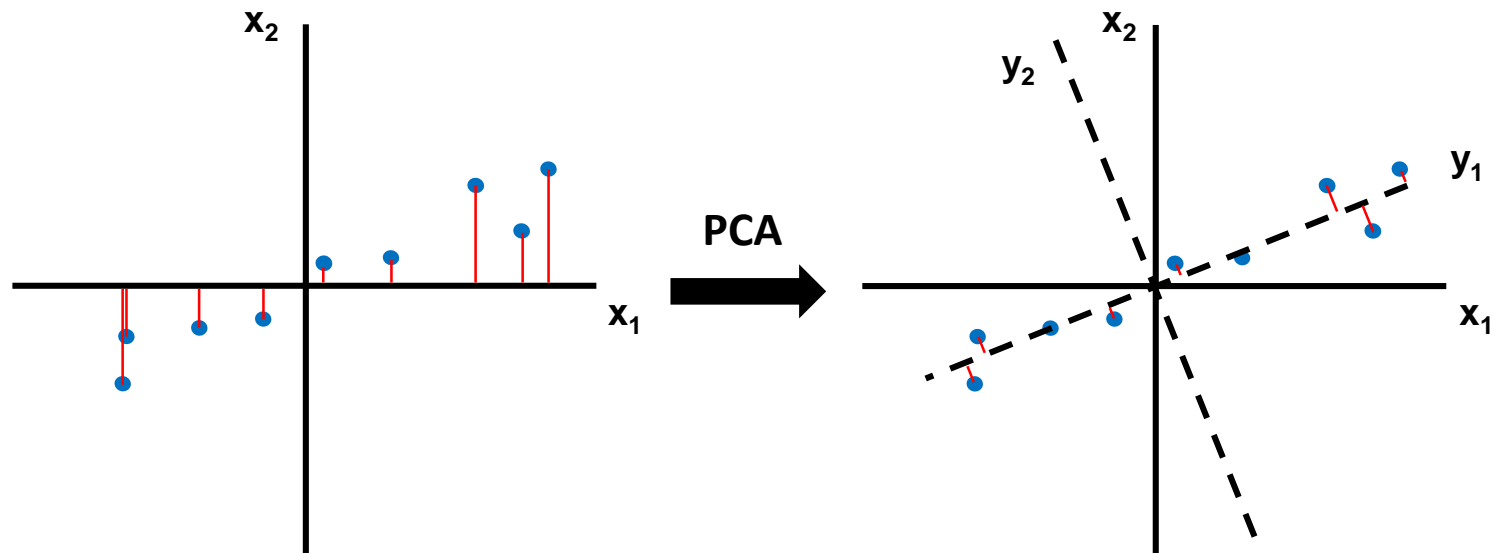
Vícerozměrné metody – cvičení



RNDr. Eva Koriťáková, Ph.D.

Analýza hlavních komponent – opakování

- anglicky Principal component analysis (PCA)
- snaha redukovat počet proměnných nalezením nových latentních proměnných (hlavních komponent) vysvětlujících co nejvíce variability původních proměnných
- nové proměnné ($\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2$) lineární kombinací původních proměnných ($\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$)



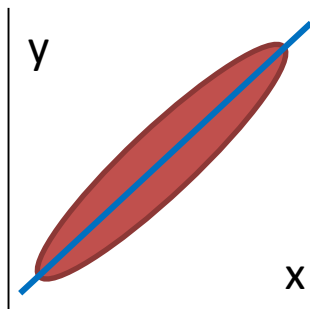
Analýza hlavních komponent – opakování II

- **vstup do PCA?**
 - kovarianční matice
 - matice korelačních koeficientů
- **hlavní komponenty odpovídají čemu?**
 - souřadnicím subjektů v novém prostoru s osami určenými vlastními vektory kovarianční matice (či matice korelačních koef.)
- **variabilita vysvětlená příslušnou komponentou odpovídá čemu?**
 - vlastním číslům
- **vlastní vektory seřazeny jak?**
 - podle vlastních hodnot (sestupně) \Rightarrow vybráno prvních m komponent vyčerpávajících nejvíce variability původních dat
- **předpoklady?**
 - kvantitativní proměnné s normálním rozdělením

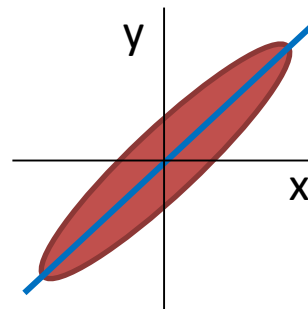
Analýza hlavních komponent – volba asociační matice

- **kovarianční (disperzní) matice** – data centrována (od každé příznakové proměnné odečtena její střední hodnota) – zohledňován rozptyl původních dat
- **matice korelačních koeficientů** – data standardizována (odečtení středních hodnot a podělení směrodatnými odchylkami)

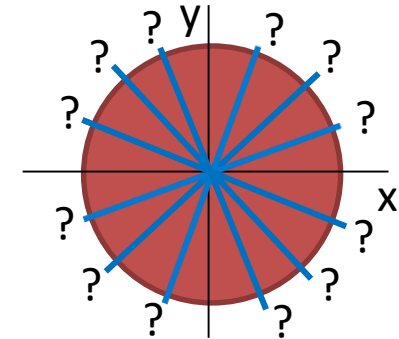
původní data



kovarianční matice
(odečten průměr)



matice korelačních koeficientů
(odečten průměr a podělení SD)



- **každou úpravou původních dat přicházíme o určitou informaci !!!**

Analýza hlavních komponent – postup

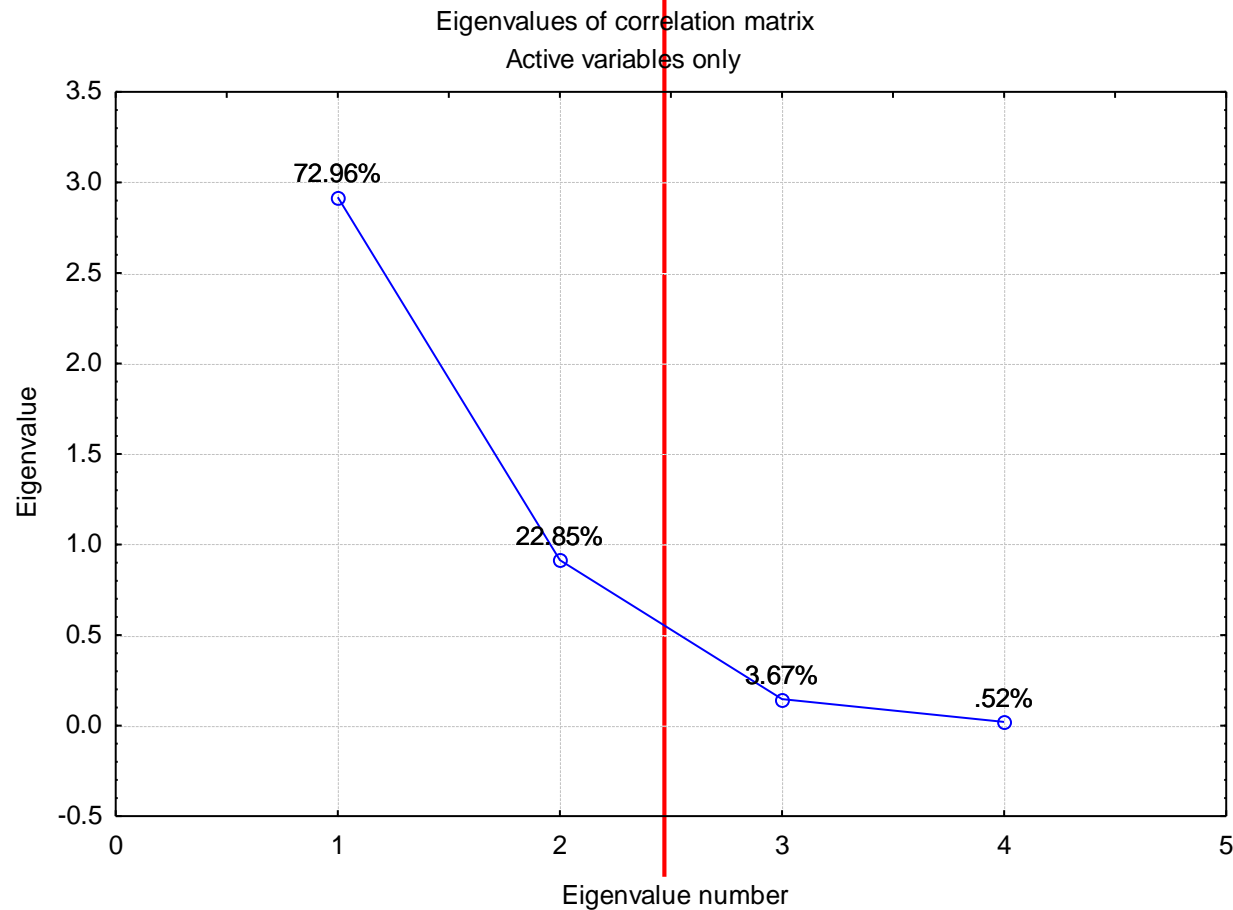
1. Volba asociační matice (kovarianční m. nebo m. korelačních koeficientů)
2. Výpočet vlastních čísel a vlastních vektorů asociační matice:
 - vlastní vektory definují směr nových faktorových os (hlavních komponent) v prostoru
 - vlastní čísla odrážejí variabilitu vysvětlenou příslušnou komponentou
3. Seřazení vlastních vektorů podle hodnot jim odpovídajících vlastních čísel (sestupně)
4. Výběr prvních m komponent vyčerpávajících nejvíce variability původních dat

Identifikace optimálního počtu hlavních komponent pro další analýzu

- pokud je cílem ordinační analýzy vizualizace dat, snažíme se vybrat 2-3 komponenty
- pokud je cílem ordinační analýzy výběr menšího počtu dimenzí pro další analýzu, můžeme ponechat více komponent (např. u analýzy obrazů MRI je úspěchem redukce z milionu voxelů na desítky)
- kritéria pro výběr počtu komponent:
 1. Kaiser Guttmanovo kritérium:
 - pro další analýzu jsou vybrány osy s vlastním číslem >1 (při analýze matice korelačních koeficientů) nebo větším než průměrná hodnota vlastních čísel (při analýze kovarianční matice)
 - logika je vybírat osy, které přispívají k vysvětlení variability dat více, než připadá rovnoměrným rozdělením variability
 2. Sutinový graf (scree plot)
 - grafický nástroj hledající zlom ve vztahu počtu os a vyčerpané variability
 3. Sheppardův diagram
 - grafická analýza vztahu mezi vzdálenostmi objektů v původním prostoru a redukovaném prostoru o daném počtu dimenzí

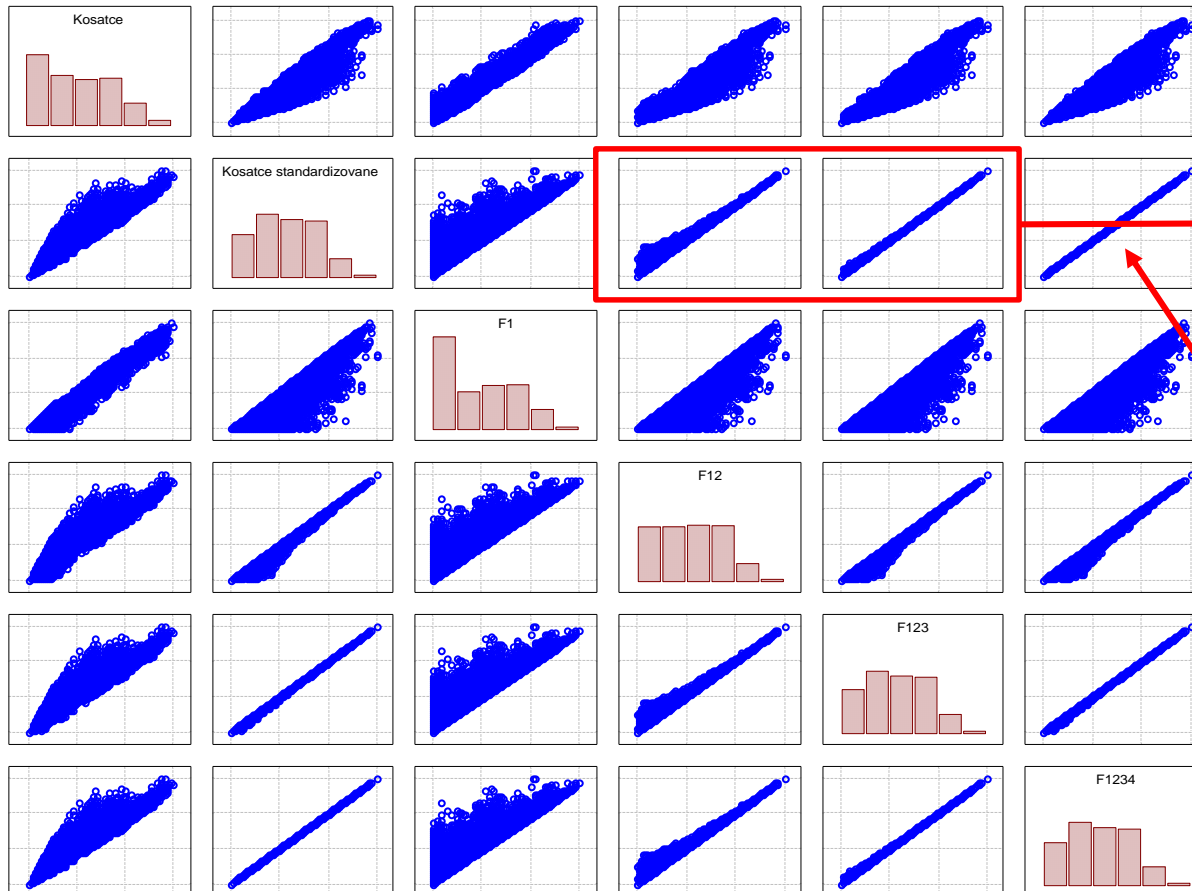
Sutinový graf (scree plot)

Zlom ve vztahu mezi počtem vlastních čísel a jimi vyčerpanou variabilitou – pro další analýzu použity první dvě faktorové osy



Sheppardův diagram

- Vztahuje vzdálenosti v prostoru původních proměnných ke vzdálenostem v prostoru vytvořeném PCA
- Je třeba brát ohled na typ PCA (korelace vs. kovariance)
- Obecná metoda určení optimálního počtu dimenzí v ordinační analýze (třeba respektovat použitou asociační metriku)



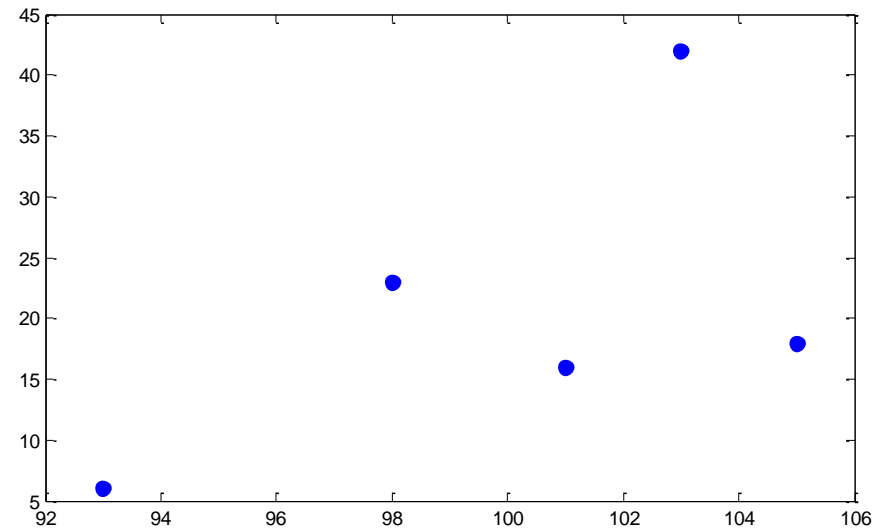
Za optimální z hlediska zachování vzdáleností objektů lze považovat dvě nebo tři dimenze

Při použití všech dimenzí jsou vzdálenosti perfektně zachovány

PCA – příklad

- data:

A	101	16
B	105	18
C	103	42
D	98	23
E	93	6



PCA – příklad – ruční počítání I

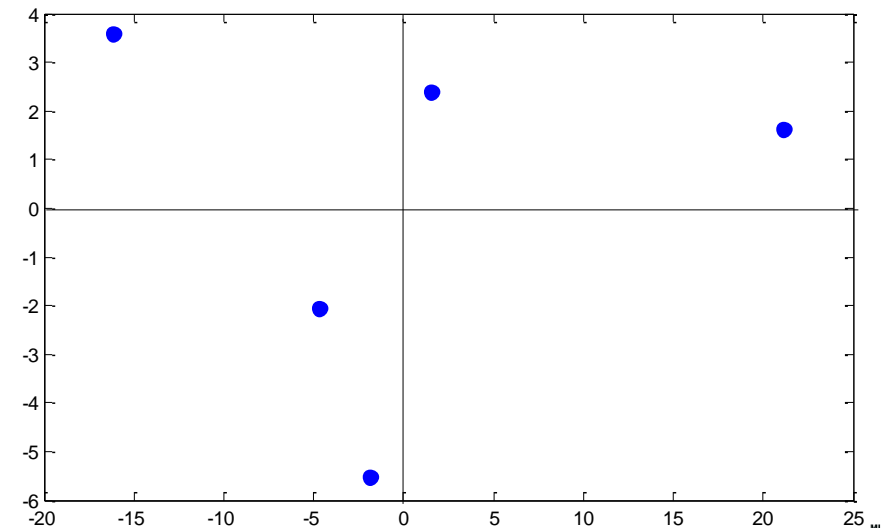
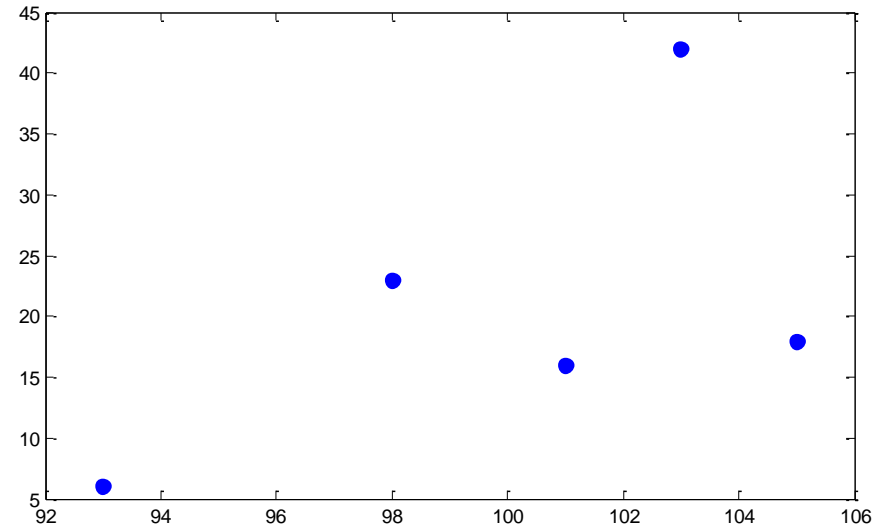
- data:

A	101	16
B	105	18
C	103	42
D	98	23
E	93	6

PCA – příklad – ruční počítání II

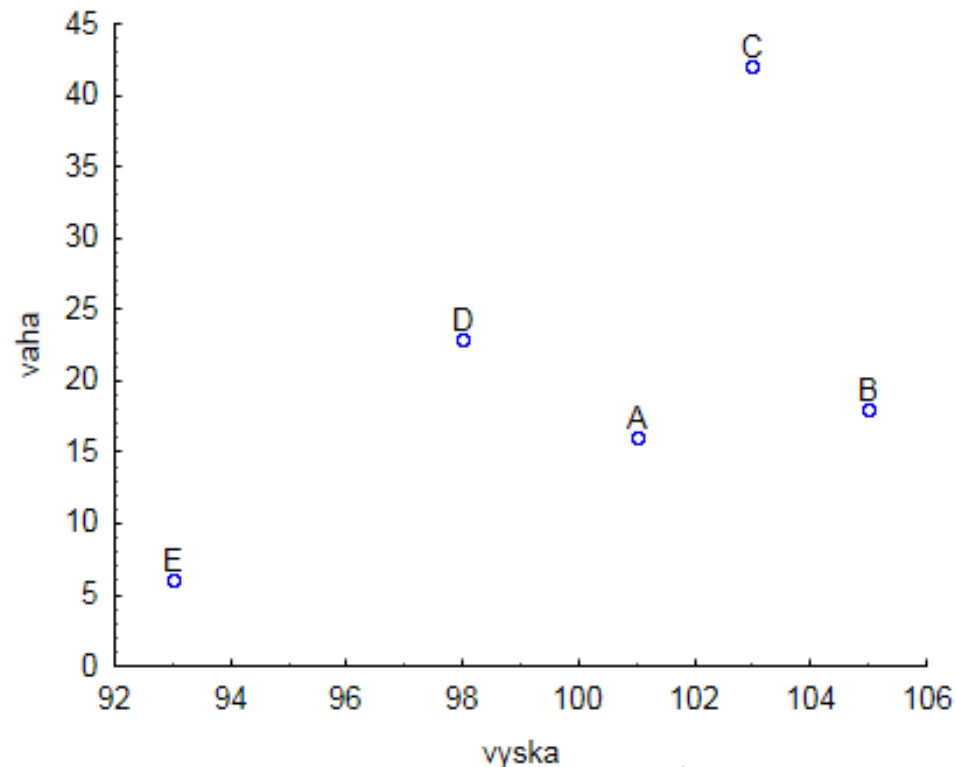
- data:

A	101	16
B	105	18
C	103	42
D	98	23
E	93	6



PCA – příklad – řešení v softwaru Statistica I

- vykreslení datového souboru včetně textových popisků:
Graphs – Scatterplot – zvolit proměnné (výška jako X, váha jako Y) – OK – vypnout zatržení „Fit type“ Linear – na záložce Options 1 zatrhnout „Display case labels“ – Case labels ze Spreadsheet změnit na Variable a vybrat proměnnou id – OK



PCA – příklad – řešení v softwaru Statistica II

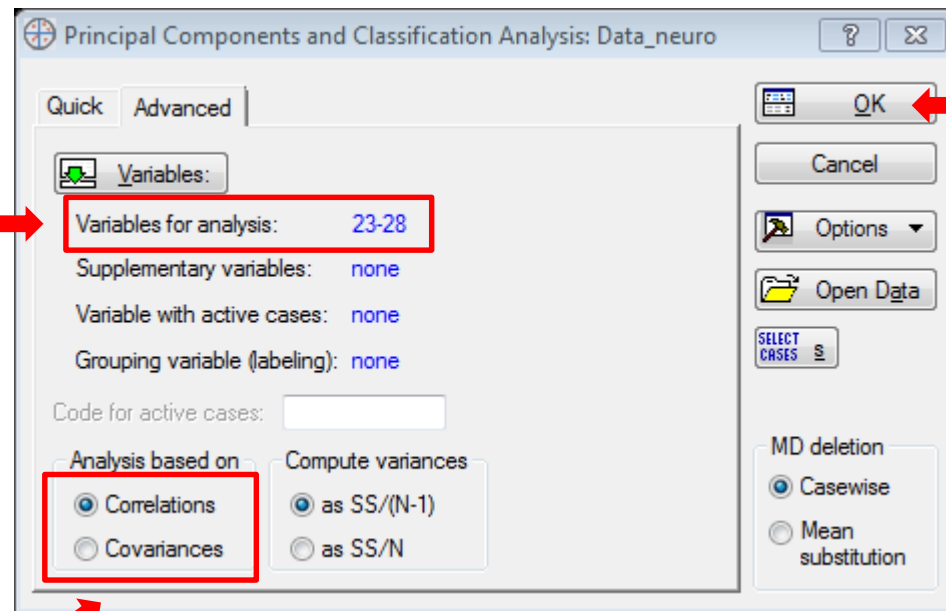
Výpočet PCA – postup:

- Statistics – Mult/Exploratory – Principal Components & Classification – zvolit proměnné jako “Variables for analysis” , na záložce Advanced zvolit „Correlations“ nebo “Covariances” – OK
- záložka Descriptives – „Covariance matrix“
- záložka Variables:
 - “Eigenvectors” (vlastní vektory), “Eigenvalues” (vlastní čísla včetně procenta vyčerpané variability), “Scree plot” (sutinový graf)
 - “Factor & variable correlations” (korelace nových faktorových os s původními proměnnými)
 - “Factor coordinates of variables” jsou souřadnice vlastních vektorů, kterým odpovídá graf “Plot var. factor coordinates, 2D” (čím menší úhel svírá původní proměnná s novou faktorovou osou, tím větší vztah má nová faktorová osa s původní proměnnou)
- záložka Cases:
 - „Factor coordinates of cases“ (souřadnice dat v novém prostoru – data jsou centrována), „Plot case factor coordinates, 2D“ (vykreslení dat)

PCA – příklad 2 – řešení v softwaru Statistica I

- **Zadání:** Proveďte PCA na objemech 6 mozkových struktur u 833 subjektů.
- **Řešení:** Statistics – Mult/Exploratory – Principal Components & Classification

vybrat proměnné



zvolit, zda se má počítat
kovarianční či korelační
matice

PCA – příklad 2 – řešení v softwaru Statistica II

Principal Components and Classification Analysis Results: Data_neuro

No. of active vars: 6 No. of supplementary vars: 0
 No. of active cases: 833 No. of supplementary cases: 0

Eigenvalues: 1,65764 1,05575 ,980953 ,959919 ,816125 ...

Number of factors : 6 Quality of representation : 100,0 %

Quick | Variables | Cases | Descriptives

Factor coordinates of variables Plot var. factor coordinates, 2D
 Factor coordinates of cases Plot case factor coordinates, 2D
 Eigenvalues Scree plot

Matrice vlastních vektorů

Factor coordinates of the variables, based on correlations (Data_neuro)

Variable	Factor 1	Factor 2	Factor 3	Factor 4	Factor 5	Factor 6
Hippocampus_volume (mm3)	-22,5292	-331,381	12,852	-24,9019	-62,1764	-56,1444
Amygdala_volume (mm3)	-19,8762	139,756	25,334	60,1821	174,1211	20,4766
Thalamus_volume (mm3)	0,6579	-37,303	-261,504	20,9163	4,3841	12,7030
Pallidum_volume (mm3)	-7,6336	-20,868	27,707	184,5947	-73,9145	34,4372
Putamen_volume (mm3)	-14,6603	-86,934	15,376	-55,5188	-27,4129	166,7655
Nucl_caud_volume (mm3)	634,4294	-18,367	2,210	1,9177	1,7198	2,9026

Vlastní čísla

Eigenvalues of covariance matrix
Active variables only

Value number	Eigenvalue	% Total variance
1	403677,0	55,45440
2	139067,1	19,10409
3	70200,2	9,64363
4	41840,7	5,74779
5	40421,1	5,55277
6	32737,9	4,49732

Souřadnice subjektů v novém prostoru

Factor coordinates of cases, based on covariances (Data_neuro)

Case	Factor 1	Factor 2	Factor 3	Factor 4	Factor 5	Factor 6
1	-541,68	-322,060	-90,545	94,230	-249,661	-27,353
2	-306,11	-508,246	423,531	-204,078	-40,595	-148,339
3	218,03	-473,620	-192,820	-163,206	-82,362	128,077
4	-492,70	-535,503	267,883	-74,278	-56,033	-351,386
5	-346,39	-240,774	312,983	-106,921	-5,006	32,832
6	-123,10	-749,883	315,002	-241,681	63,288	-46,083
7	-1179,78	-76,816	150,773	321,967	-182,452	162,240
8	-321,21	-8,941	255,254	151,791	-36,504	192,658

PCA – příklad 2 – řešení v softwaru Statistica III

Normalizace vlastních vektorů:

- zkopírovat do Excelu („Copy with headers“)
- použití vzorce: =B3/ODMOCNINA(SUMA.ČTVERCŮ(B\$3:B\$8))

	A	B	C	D	E	F	G
1		Factor coordinates of the variables, based on correlations (Data_neuro)					
2	Variable	Factor 1	Factor 2	Factor 3	Factor 4	Factor 5	Factor 6
3	Hippocamp	-22,5292	-331,381	12,852	-24,9019	-62,1764	-56,1444
4	Amygdala	-19,8762	-139,756	25,334	60,1821	174,1211	20,4766
5	Thalamus	0,6579	-37,303	-261,504	20,9163	4,3841	12,7030
6	Pallidum_v	-7,6336	-20,868	27,707	184,5947	-73,9145	34,4372
7	Putamen_v	-14,6603	-86,934	15,376	-55,5188	-27,4129	166,7655
8	Nucl_caud	634,4294	-18,367	2,210	1,9177	1,7198	2,9026
9							
10		-0,035459125	-0,88862	0,048506	-0,12174	-0,30926	-0,3103
11		-0,031283533	-0,37477	0,095616	0,294217	0,866059	0,11317
12		0,001035499	-0,10003	-0,98698	0,102255	0,021806	0,070207
13		-0,01201473	-0,05596	0,104572	0,902443	-0,36764	0,190328
14		-0,023074151	-0,23312	0,058032	-0,27142	-0,13635	0,921681
15		0,998542011	-0,04925	0,008341	0,009375	0,008554	0,016042

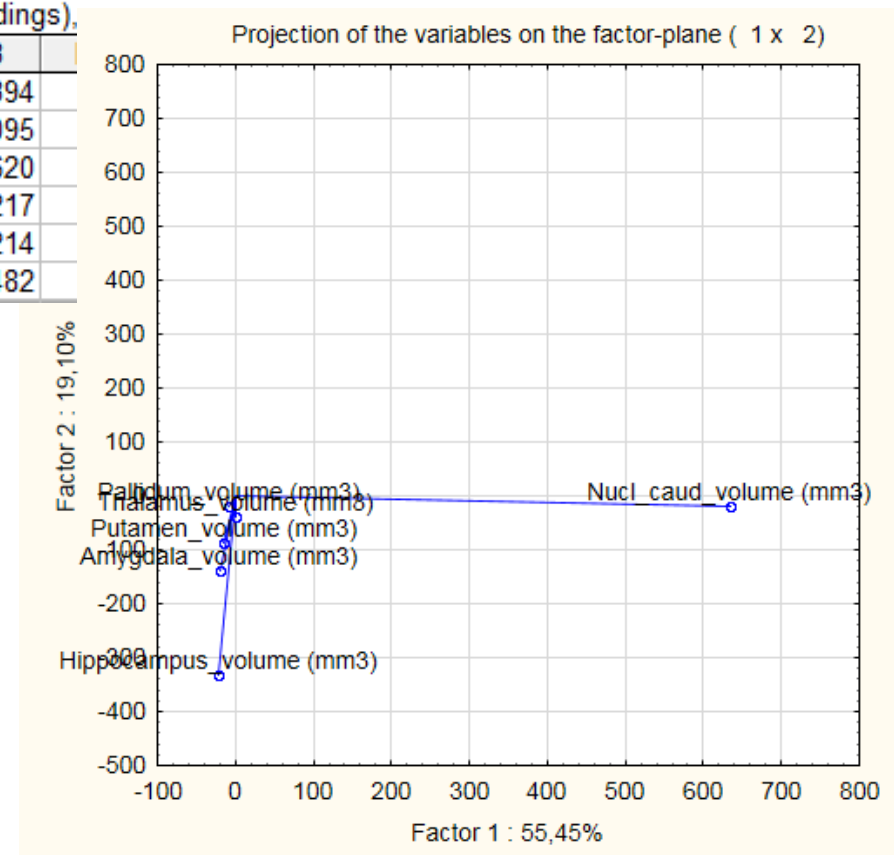
PCA – příklad 2 – řešení v softwaru Statistica IV

Záložka Variables:

Factor & variable correlations

Plot var. factor coordinates, 2D

Variable	Factor-variable correlations (factor loadings)		
	Factor 1	Factor 2	Factor 3
Hippocampus_volume (mm3)	-0,065550	-0,964180	0,037394
Amygdala_volume (mm3)	-0,084808	-0,596314	0,108095
Thalamus_volume (mm3)	0,002480	-0,140597	-0,985620
Pallidum_volume (mm3)	-0,037255	-0,101845	0,135217
Putamen_volume (mm3)	-0,073621	-0,436566	0,077214
Nucl_caud_volume (mm3)	0,999556	-0,028938	0,003482



Z výsledků vyplývá, že:

- 1. hlavní komponenta je nevíce korelovaná s objemem Nucleus caudatus
- 2. hlavní komponenta je korelovaná s objemem hipokampu a také s objemem amygdaly a putamenu

PCA – příklad 2 – řešení v softwaru SPSS

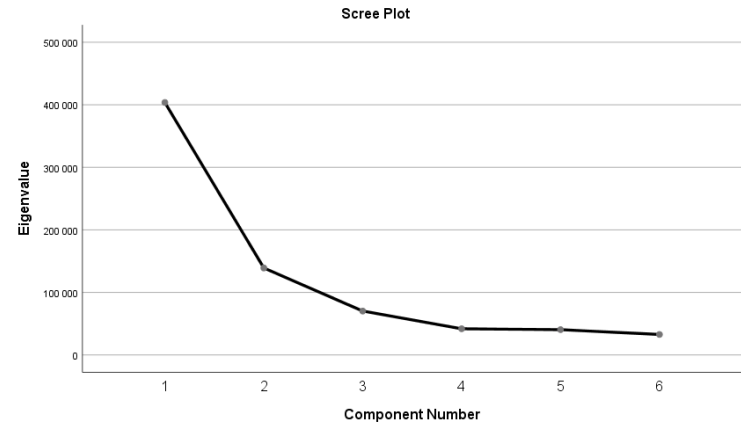
- **Zadání:** Proveďte PCA na objemech 6 mozkových struktur u 833 subjektů.
- **Řešení:** SPSS: Analyze – Dimension Reduction – Factor...
 - záložka Extraction:
 - volba metody (ponechat Principal components)
 - volba Correlation matrix či Covariance matrix (pozor, Correlation matrix je defaultní! tzn. přepnout na Covariance matrix)
 - možnost zatrhnout vykreslení Scree plotu
 - volba, kolik hlavních komponent se vytvoří (přepnout na Fixed number... a zvolit 6, když mám 6 vstupních proměnných)
 - záložka Rotation – ponechám zatržené „None“
 - záložka Scores... – zatrhnout „Save as variable“ a případně i zatrhnout „Display factor score coefficient matrix“

PCA – příklad 2 – řešení v softwaru SPSS

Vlastní čísla

		Total Variance Explained		
		Initial Eigenvalues ^a		
	Component	Total	% of Variance	Cumulative %
Raw	1	403676,975	55,454	55,454
	2	139067,087	19,104	74,558
	3	70200,250	9,644	84,202
	4	41840,703	5,748	89,950
	5	40421,085	5,553	95,503
	6	32737,942	4,497	100,000

Sutinový graf



Matice vlastních vektorů *

	Component Matrix ^a					
	Raw Component					
	1	2	3	4	5	6
Hippocampus_volume (mm3)	-.22,529	.331,381	-.12,852	-.24,902	-.62,176	-.56,144
Amygdala_volume (mm3)	-.19,876	.139,756	-.25,334	.60,182	.174,121	.20,477
Thalamus_volume (mm3)	.0658	.37,303	.261,504	.20,916	.4,384	.12,703
Pallidum_volume (mm3)	-.7,634	.20,868	-.27,707	.184,595	-.73,914	.34,437
Putamen_volume (mm3)	-.14,660	.86,934	-.15,376	-.55,519	-.27,413	.166,766
Nucl_caud_volume (mm3)	.634,429	.18,367	-.2,210	.1,918	.1,720	.2,903

Extraction Method: Principal Component Analysis.

a. 6 components extracted.

Souřadnice subjektů v novém prostoru (jsou standardizované)

	FAC1_1	FAC2_1	FAC3_1	FAC4_1	FAC5_1	FAC6_1
	-.85256	.86362	.34174	.46067	-1,24179	-.15117
	-.48179	1,36289	-1,59851	-.99769	-.20191	-.81984
	.34317	1,27004	.72775	-.79788	-.40966	.70786
	-.77548	1,43599	-1,01106	-.36313	-.27870	-1,94204
	-.54519	.64565	-1,18128	-.52272	-.02490	.18146
	-.19375	2,01086	-1,18890	-1,18152	.31479	-.25469

* normalizace vl. vektorů by se provedla v exelu (viz. slide 16)

PCA – příklad 2 – řešení v softwaru R

- **Zadání:** Proveďte PCA na objemech 6 mozkových struktur u 833 subjektů.

- **Řešení:**

```
library(readxl)
```

```
data <- read_excel('Data_neuro.xlsx',sheet="data")
```

```
data <- data[,24:29] # vyber 6 promennych s objemy mozkovych struktur
```

```
pca <- prcomp(data) # vypocet PCA s kovariancni matici; tzn. pouzito defaultni center=TRUE a scale=FALSE; pro m. korel. koef. – prcomp(data,scale=TRUE)
```

```
pca$sdev^2 # vlastni cisla [1] 403676.97 139067.09 70200.25 41840.70 40421.08 32737.94
```

```
pca$rotation # vlastni vektory (ve sloupcich, serazene podle vlastnich cisel)
```

```
> pca$rotation
```

	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5	PC6
Hippocampus_volume (mm3)	-0.035459125	0.88861834	-0.048506362	0.121740139	0.309258675	-0.31029927
Amygdala_volume (mm3)	-0.031283533	0.37476563	-0.095616471	-0.294217081	-0.866059128	0.11317002
Thalamus_volume (mm3)	0.001035499	0.10003061	0.986981343	-0.102255212	-0.021806247	0.07020677
Pallidum_volume (mm3)	-0.012014730	0.05596007	-0.104571564	-0.902442907	0.367642426	0.19032801
Putamen_volume (mm3)	-0.023074151	0.23311937	-0.058031628	0.271419287	0.136348899	0.92168098
Nucl_caud_volume (mm3)	0.998542011	0.04925323	-0.008340823	-0.009374972	-0.008553979	0.01604185

```
pca$x # hlavni komponenty (tj. souradnice subjektu v novem prostoru)
```

```
> pca$x
```

	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5	PC6
[1,]	-5.416758e+02	322.0603857	90.54458062	-94.2298142	249.66114452	-27.3528609
[2,]	-3.061072e+02	508.2458732	-423.53056436	204.0784644	40.59484197	-148.3389455
[3,]	2.180346e+02	473.6196500	192.81995921	163.2061839	82.36173899	128.0769292
[4,]	-4.927048e+02	535.5032528	-267.88271465	74.2783108	56.03257012	-351.3861289
[5,]	-3.463904e+02	240.7736931	-312.98274680	106.9214737	5.00591406	32.8322655

PCA – příklad 2 – řešení v Matlabu

- Zadání: Provedte PCA na objemech 6 mozkových struktur u 833 subjektů.


- Řešení:

```
[num, txt, raw] = xlsread('Data_neuro.xlsx',1);
```

```
data = num(:,23:28); % vyber 6 promennych s objemy mozkovych struktur
```

```
[coeff,score,latent] = pca(data);
```


Souřadnice subjektů v novém prostoru



	1	2	3	4	5	6
1	-541.6758	322.0604	90.5446	94.2298	-249.6611	-27.3529
2	-306.1072	508.2459	-423.5306	-204.0785	-40.5948	-148.3389
3	218.0346	473.6196	192.8200	-163.2062	-82.3617	128.0769
4	-492.7048	535.5033	-267.8827	-74.2783	-56.0326	-351.3861
5	-346.3904	240.7737	-312.9827	-106.9215	-5.0059	32.8323
6	-123.1009	749.8831	-315.0017	-241.6806	63.2878	-46.0834
7	-1.1798e+03	76.8159	-150.7726	321.9671	-182.4523	162.2400
8	-321.2074	8.9410	-255.2537	151.7913	-36.5035	192.6580
9	-345.8090	464.1571	-374.4555	11.8603	-5.8649	91.6828
10	-1.4653e+03	697.7425	-380.2903	267.2337	-19.2383	-81.4055

hlavní komponenty jsou ve sloupcích (jsou seřazené podle vlastních čísel);
v řádcích jsou subjekty

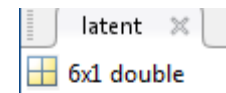
Matice vlastních vektorů



	1	2	3	4	5	6
1	-0.0355	0.8886	-0.0485	-0.1217	-0.3093	-0.3103
2	-0.0313	0.3748	-0.0956	0.2942	0.8661	0.1132
3	0.0010	0.1000	0.9870	0.1023	0.0218	0.0702
4	-0.0120	0.0560	-0.1046	0.9024	-0.3676	0.1903
5	-0.0231	0.2331	-0.0580	-0.2714	-0.1363	0.9217
6	0.9985	0.0493	-0.0083	0.0094	0.0086	0.0160

vlastní vektory jsou ve sloupcích (jsou seřazené podle vlastních čísel)

Vlastní čísla



	1
1	4.0368e+05
2	1.3907e+05
3	7.0200e+04
4	4.1841e+04
5	4.0421e+04
6	3.2738e+04