Příklad 4

Bylo provedeno měření výšky x_1 (v cm) a váhy x_2 (v kg) u pěti dětí. Naměřené hodnoty byly zaznamenány do matice X:

$$X = \begin{bmatrix} 101 & 16 \\ 105 & 18 \\ 103 & 42 \\ 98 & 23 \\ 93 & 6 \end{bmatrix}$$

U tohoto datového souboru proveďte analýzu hlavních komponent.

Řešení:

U analýzy hlavních komponent potřebujeme nejprve spočítat kovariační matici $S = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{bmatrix}$. Pro výpočet kovariační matice potřebujeme znát průměrnou výšku a váhu u $n = 5$ dětí:

$$\bar{x} = [\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_{i1} \quad \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_{i2}] = [\frac{1}{5}(101 + 105 + 103 + 98 + 93)$$
$$\frac{1}{5}(16 + 18 + 42 + 23 + 6)] = [100\ 21]$$

Jednotlivé prvky kovariační matice poté spočítáme následujícím způsobem:

Rozptyl výšky: $s_{11} = \frac{1}{n-1}((x_{11}-\bar{x}_1)^2+(x_{21}-\bar{x}_1)^2+(x_{31}-\bar{x}_1)^2+(x_{41}-\bar{x}_1)^2+(x_{51}-\bar{x}_1)^2) = \frac{1}{5-1}((101-100)^2 + (105-100)^2 + (103-100)^2 + (98-100)^2 + (93-100)^2)) = \frac{1}{4}(1+25+9+4+49) = \frac{1}{4}.88 = 22$

Rozptyl váhy: $s_{22} = \frac{1}{n-1}((x_{12}-\bar{x}_2^2)+(x_{22}-\bar{x}_2^2)+(x_{32}-\bar{x}_2^2)+(x_{42}-\bar{x}_2^2)+(x_{52}-\bar{x}_2^2)) = \frac{1}{5-1}((16-21)^2 + (18-21)^2 + (42-21)^2 + (23-21)^2 + (6-21)^2) = \frac{1}{4}(25+9+441+4+225) = \frac{1}{4}.704 = 176$

Kovariance výšky a váhy:

$s_{12} = s_{21} = \frac{1}{n-1}((x_{11}-\bar{x}_1)(x_{12}-\bar{x}_2) + (x_{21}-\bar{x}_1)(x_{22}-\bar{x}_2) + (x_{31}-\bar{x}_1)(x_{32}-\bar{x}_2) + (x_{41}-\bar{x}_1)(x_{42}-\bar{x}_2) + (x_{51}-\bar{x}_1)(x_{52}-\bar{x}_2)) = \frac{1}{5-1}((101-100)(16-21)+(105-100)(18-21)+(103-100)(42-21)+(98-100)(23-21) + (93-100)(6-21)) = \frac{1}{4}(-5-15+63-4+105) = \frac{1}{4}.144 = 36$

Kovariančí matice je tedy:

$$S = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 22 & 36 \\ 36 & 176 \end{bmatrix}$$

Nyní spočítáme vlastní čísla a vlastní vektory kovariančí matice - tzn., spočítáme následující determinant:

$$\begin{bmatrix} 22-\lambda & 36 \\ 36 & 176-\lambda \end{bmatrix}$$

Vypočteme charakteristický polynom:

$$(22-\lambda).(176-\lambda) - 36^2 = 3872 - 176\lambda - 22\lambda + \lambda^2 - 1296 = \lambda^2 - 198\lambda + 2576$$

A jeho kořeny, které odpovídají vlastním číslům:

$$\lambda_1 = \frac{198+\sqrt{(-198)^2 - 4.1.2576}}{2.1} = \frac{198+170}{2} = 184$$

$$\lambda_2 = \frac{198-\sqrt{(-198)^2 - 4.1.2576}}{2.1} = \frac{198-170}{2} = 14$$

Následně spočítáme vlastní vektor v_1 odpovídající prvnímu vlastnímu číslu $\lambda_1 = 184$:

$$\begin{bmatrix} 22-184 & 36 \\ 36 & 176-184 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} -162 & 36 \\ 36 & -8 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} -162 & 36 \\ -162 & 36 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} -4,5 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$v_{12} = a$; $(-4,5)v_{11} + v_{12} = 0 \rightarrow v_{11} = \frac{a}{4,5}$; např. pro $a = 4,5$ pak dostáváme: $v_1 = [1 \quad 4,5]$, který je po normalizaci roven $v_1 = \left[\frac{1}{\sqrt{4,5^2+1^2}} \frac{4,5}{\sqrt{1^2+4,5^2}}\right] = [0,2169 \quad 0,9762]$. Kontrola, že vektor má jednotkovou délku: $(0,9762)^2 + (0,2169)^2 = 1$.

Spočítáme vlastní vektor v_2 odpovídající druhému vlastnímu číslu $\lambda_2 = 14$:

$$\begin{bmatrix} 22-14 & 36 \\ 36 & 176-14 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 8 & 36 \\ 36 & 162 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 36 & 162 \\ 36 & 162 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 1 & 4,5 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$v_{22} = b$; $v_{21} + 4,5.v_{22} = 0 \rightarrow v_{21} = -4,5b$; např. pro $b = 1$ pak dostáváme: $v_2 = [-4,5 \quad 1]$, který je po normalizaci roven $v_2 = \left[\frac{-4,5}{\sqrt{(-4,5)^2+1^2}} \frac{1}{\sqrt{(-4,5)^2+1^2)}}\right] = [(-0,9762 \quad 0,2169)]$. Kontrola, že vektor má jednotkovou délku: $(-0,9762)^2 + (0,2169)^2 = 1$.

Vlastní vektory můžeme uspořádat do matice $V = [\mathbf{v_1^T} \ \mathbf{v_2^T}] = \begin{bmatrix} 0,2169 & -0,9762 \\ 0,9762 & 0,2169 \end{bmatrix}$, přičemž pořadí vlastních vektorů odpovídá pořadí vlastních čísel seřazených od největšího k nejmenšímu.

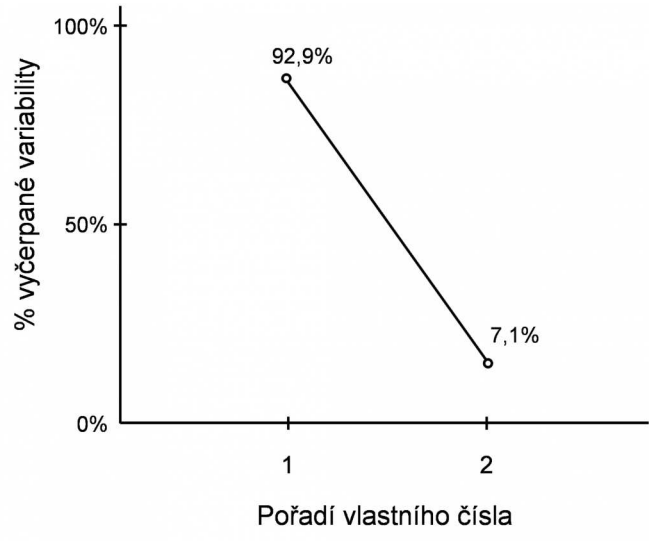
Nyní vyjádříme hlavní komponenty odpovídající vlastním číslům seřazeným od největšího k nejmenšímu - hlavní komponenty jsou lineární kombinace původních proměnných, přičemž koeficienty jsou souřadnice příslušného vlastního vektoru:

1. hlavní komponenta: $y_1 = 0,2169x_1 + 0,9762x_2$ (pro $\lambda_1 = 184$)
2. hlavní komponenta: $y_2 = -0,9762x_1 + 0,2169x_2$ (pro $\lambda_2 = 14$)

Výpočet procent vyčerpané variability:

1. hlavní komponenta vyčerpává: $\frac{\lambda_1}{\lambda_1+\lambda_2} = \frac{184}{14+184} = 0,9293$ (tzn., 92,93% variability v datech)
2. hlavní komponenta vyčerpává: $\frac{\lambda_2}{\lambda_1+\lambda_2} = \frac{14}{14+184} = 0,0707$ (tzn., 7,07% variability v datech)

Vyčerpanou variabilitu můžeme znázornit i pomocí sutinového grafu:



Dále spočítáme korelace hlavních komponent s původními proměnnými:

$$R(x_1, y_1) = \frac{v_{11}.\sqrt{\lambda_1}}{\sqrt{s_{11}}} = \frac{0,2169.\sqrt{184}}{\sqrt{22}} = 0,6274$$

$$R(x_2, y_1) = \frac{v_{12}.\sqrt{\lambda_1}}{\sqrt{s_{22}}} = \frac{0,9762.\sqrt{184}}{\sqrt{176}} = 0,9981$$

$$R(x_1, y_2) = \frac{v_{21}.\sqrt{\lambda_2}}{\sqrt{s_{11}}} = \frac{-0,9762.\sqrt{14}}{\sqrt{22}} = -0,7787$$

$$R(x_2, y_2) = \frac{v_{22}.\sqrt{\lambda_2}}{\sqrt{s_{22}}} = \frac{0,2169.\sqrt{14}}{\sqrt{176}} = 0,0612$$

První hlavní je vysoce korelována s váhou a středně korelována s výškou. Druhá hlavní komponenta je středně záporně korelována s výškou.

Na závěr vypočítáme nové souřadnice původních bodů po transformaci pomocí obou hlavních komponent spočítaných pomocí PCA:

$$Y = X.V = \begin{bmatrix} 101 & 16 \\ 105 & 18 \\ 103 & 42 \\ 98 & 23 \\ 93 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0,2169 & -0,9762 \\ 0,9762 & 0,2169 \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} 101.0,2169 + 16.0,9762 & 101.(-0,9762) + 16.0,2169 \\ 105.0,2169 + 18.0,9762 & 105.(-0,9762) + 18.0,2169 \\ 103.0,2169 + 42.0,9762 & 103.(-0,9762) + 42.0,2169 \\ 98.0,2169 + 23.0,9762 & 98.(-0,9762) + 23.0,2169 \\ 93.0,2169 + 6.0,9762 & 93.(-0,9762) + 6.0,2169 \end{bmatrix} =$$

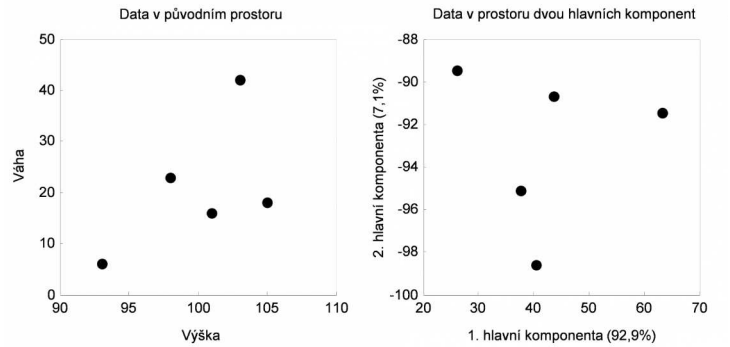
$$\begin{bmatrix} 37,5 & -95,1 \\ 40,3 & -98,6 \\ 63,3 & -91,4 \\ 43,7 & -90,8 \\ 26,0 & -89,5 \end{bmatrix}$$

Souřadnice subjektů můžeme přímo získat i z hlavních komponent - např. pro první subjekt:

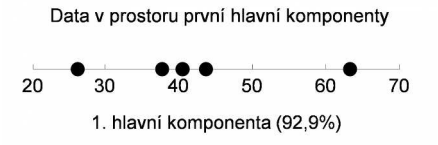
$$y_1 = 0,2169.x_1 + 0,9762x_2 = 0,2169.101 + 0,9762.16 = 37,5$$

$$y_2 = -0,9762x_1 + 0,2169x_2 = -0,9762.101 + 0,2169.16 = -95,1$$

Původní data i data po transformaci pomocí PCA si znázorníme:



Pokud bychom k transformaci použili pouze první vlastní vektor, získáváme data v prostoru první hlavní komponenty:



vytvořil Institut biostatistiky a analýz Lékařské fakulty Masarykovy univerzity