

OBEČNÁ METODA HLAVNÍCH KOMPONENT PC (Principal Component Method)

Metoda hlavních komponent je postup vyvinutý původně jako statistická technika v z psychometrii a sociometrii, kde se uplatňuje jako jedna z metod užitých k výpočtům parametrů **modelu faktorové analýzy**. Jejím hlavním konceptem je transformace proměnných (v lineárním regresním modelu jde o vysvětlující proměnné obsažené v matici plánu X) takovým způsobem, aby v nich obsažená informace byla „rozdělena“ jiným způsobem než v původních proměnných. Je tím míněna jednak vzájemná „nezávislost“ těchto transformovaných proměnných, jednak „ostřejší“ rozdělení informace v nich obsažené (oproti původním proměnným).

V průběhu nasazení metody se konstruuji tzv. **hlavní komponenty**, což jsou **lineární kombinace vysvětlujících proměnných**. Nejprve se sestrojí **první hlavní komponenta** jako taková lineární kombinace vysvětlujících proměnných, která vysvětluje nejvíce variability závisle proměnné. Poté se (ze „zbytku“ informace obsažené v matici X) sestrojí **druhá hlavní komponenta**, která z tohoto zbytku vysvětlí další část variability, poté **třetí hlavní komponenta**, až konečně poslední **k -tá hlavní komponenta**.

Hlavní komponenty jsou ortogonální, tzn. jsou vzájemně naprosto lineárně nezávislé. Lze je navíc znormovat tak, aby byly dokonce **ortonormální**, tzn. aby měly jedničkovou normu. Matematicky to lze uskutečnit tak, že **hlavní komponenty jsou vzaty jako normované hlavní (charakteristické) vektory příslušné momentové matice $X'X$** . *Obvykle se tato matice sestavuje z normovaných vektorů vysvětlujících proměnných (nebo aspoň z matice X , ze které je vynechán první sloupec, protože vektor konstant nemající žádnou variabilitu k vysvětlení rozptylu závisle proměnné přispět nijak nemůže.)*

Převodem na k hlavních komponent získáme v modelu „jinak rozdělenou“, (a to „nerovnoměrněji“) informaci obsaženou ve vysvětlujících proměnných. První hlavní komponenta bude obvykle obsahovat větší část „modelové informace“, než kterýkoliv sloupec matice X uvažovaný samostatně. Představu o rozdělení této informace poskytne nejlépe rozložení hlavních (charakteristických) čísel matice X . Obrazně řečeno, podíl informačního obsahu 1. a 2. hlavní komponenty bude dán podílem příslušných dvou (hodnotami největších) charakteristických čísel, analogicky tomu bude u dalších hlavních komponent.

Výhody nasazení metody hlavních komponent do lineárního regresního modelu jsou:

- a) Omezením se na relativně malý počet r hlavních komponent (cca 2-4) **dosáhneme úspornějšího provedení kvantitativní analýzy regresní rovnice**. Sníží se tak počet „vysvětlujících proměnných“, zcela **se odstraní riziko multikolinearity** (nové proměnné jsou totiž vzájemně ortogonální)
- b) Hlavní komponenty jsou typické individuálním přínosem k vysvětlení závisle proměnné, tzn. **informace v hlavních komponentách se vzájemně „nemísí“**.

Nevýhodou nasazení metody hlavních komponent v lineárním regresním modelu je

- c) **Interpretace obsahu** čistě matematicky zkonstruovaných hlavních **komponent je obvykle problematická a často nelze „obsahově pojmenovat“ ani první hlavní komponentu**. Toto určitě **znesnadňuje analytické zkoumání v rámci přijaté modelové specifikace, ale nemusí to vadit při predikčním uplatnění této metody**.

Metoda hlavních komponent se v ekonometrii uplatňuje ve více oblastech, zejména

- a) při odstranění problému multikolinearity
- b) pokud potřebujeme snížit počet vysvětlujících proměnných modelu, tj. když $K \geq T$.
- c) při aplikaci techniky instrumentálních proměnných, a to jak v jednorovnicovém modelu, tak v simultánní soustavě regresních rovnic.

Postup konstrukce hlavních komponent

Formálně zapsáno $Z_{[T,k]} = X_{[T,k]} \cdot A_{[k,k]}$

$$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & \dots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & \dots & x_{2k} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} & \dots & x_{3k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{T1} & x_{T2} & x_{T3} & \dots & x_{Tk} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2k} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{k1} & a_{k2} & a_{k3} & \dots & a_{kk} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_{11} & z_{12} & z_{13} & \dots & z_{1k} \\ z_{21} & z_{22} & z_{23} & \dots & z_{2k} \\ z_{31} & z_{32} & z_{33} & \dots & z_{3k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ z_{T1} & z_{T2} & z_{T3} & \dots & z_{Tk} \end{pmatrix}$$

přičemž platí $X'X = A \cdot D \cdot A'$, kde

A je matice, jejíž sloupce tvoří **vlastní (charakteristické) vektory** a_j matice $X'X$, pro něž platí

$$A' \cdot A = A \cdot A' = I_k$$

v důsledku **vzájemné ortonormality vlastních vektorů**

D je **diagonální matice**, jejíž diagonální prvky tvoří **charakteristická čísla (kořeny) momentové matice** $X'X$. Obvykle se tato charakteristická čísla uspořádávají sestupně, aby největší bylo první z nich (v levém horním rohu).

$$\begin{pmatrix} \xi_{11} & \xi_{12} & \xi_{13} & \dots & \xi_{1k} \\ \xi_{21} & \xi_{22} & \xi_{23} & \dots & \xi_{2k} \\ \xi_{31} & \xi_{32} & \xi_{33} & \dots & \xi_{3k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \xi_{k1} & \xi_{k2} & \xi_{k3} & \dots & \xi_{kk} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2k} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{k1} & a_{k2} & a_{k3} & \dots & a_{kk} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} & \dots & a_{k1} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} & \dots & a_{k2} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} & \dots & a_{k3} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{1k} & a_{2k} & a_{3k} & \dots & a_{kk} \end{pmatrix}$$

Jako ξ_{ij} jsme označili prvky momentové matice $X'X$. Pro charakteristická čísla na diagonále D platí uspořádání

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \dots \geq \lambda_k$$

„Reparametrizace“ modelu pomocí hlavních komponent

Původní lineární regresní model $y = X\beta + \varepsilon$

Ize takto po transformaci proměnných přepsat do tvaru

$$y = (XA)(A'\beta) + \varepsilon = Z.\delta + \varepsilon \quad , \text{ v němž}$$

$Z = X.A$ je matice s po sloupcích uloženými hlavními komponentami

$\delta' = A'\beta$ je nový (transformovaný) vektor parametrů

Přitom pro součin matice hlavních komponent $Z'Z$ platí :

$$Z'Z = A'X'XA = A'ADA' A = D$$

Jednotlivé hlavní komponenty jsou obsaženy ve *sloupcích* matice Z . Každý *sloupec* matice Z může být vyjádřen jako ortogonální lineární kombinace (obecně všech) sloupců matice X , kde j -tý vlastní vektor z_j určuje váhy v této lineární kombinaci, tj.

$$z_j = X.a_j \quad ,$$

přičemž jednotlivá a_j jsou tvořena prvky *charakteristického vektoru matice* $X'X$.

Poznámka Může se přirozeně stát, že některá z charakteristických čísel budou nulová. Tak tomu bude tehdy, jestliže některé sloupce matice X budou lineárně závislé a jak matice X , tak momentová matice $X'X$ budou singulární. Taková situace odpovídá případu *přesné multikolinearity*

Vlastní čísla na diagonále matice D poskytují informaci o tom, jak je „rozložena“ variabilita proměnných obsažených v matici X . Obvykle k dostatečnému vystižení variability X postačí vzetí 2-4 hlavních komponent, které často obsahují až 98% variability obsažené v matici X .

Výpočetní postup pro určení hlavních komponent

Nalezení hlavních komponent se zpravidla provede nasazením vhodné procedury v matematických softwarových prostředcích – obvykle tato procedura nese v sobě název *eig* nebo *eigen* (*vlastní čísla jsou anglicky eigenvalues a vlastní vektory eigenvectors*).

V MATLABu je syntax této procedury $[V,D] = \text{eig}(X)$, kde

Vstupním polem je matice X , u níž se vlastní čísla a vektory vyčíslují

V je výstupní matice vlastních vektorů (s uložením po sloupcích)

D je diagonální matice vlastních čísel.