

Vícerozměrné statistické metody

Ordinační analýzy – principy redukce dimenzionality

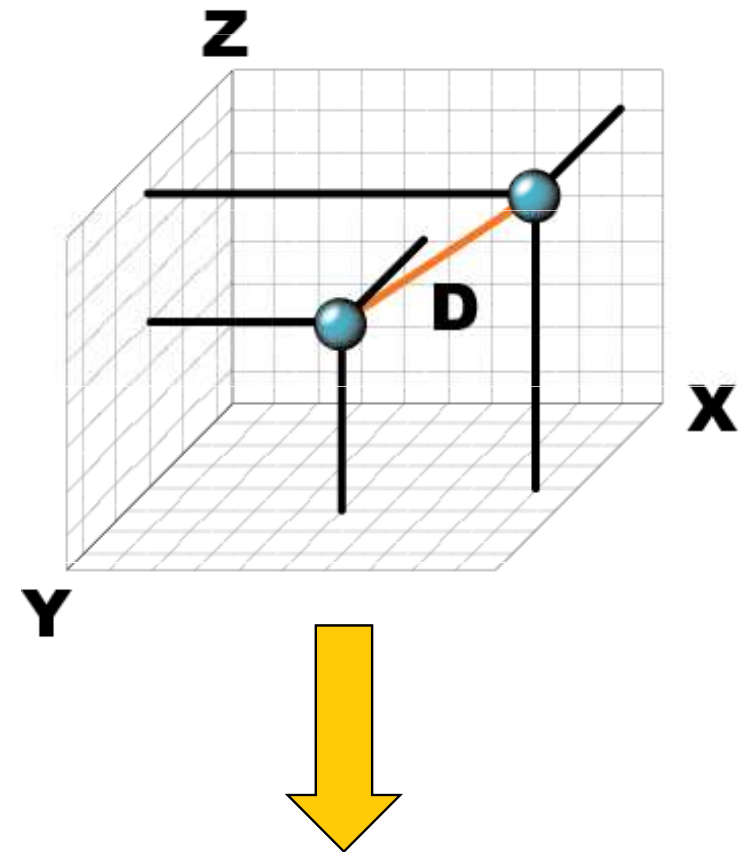
Jiří Jarkovský, Simona Littnerová

Vícerozměrné statistické metody

Ordinační analýza a její cíle

Cíle ordinační analýzy dat

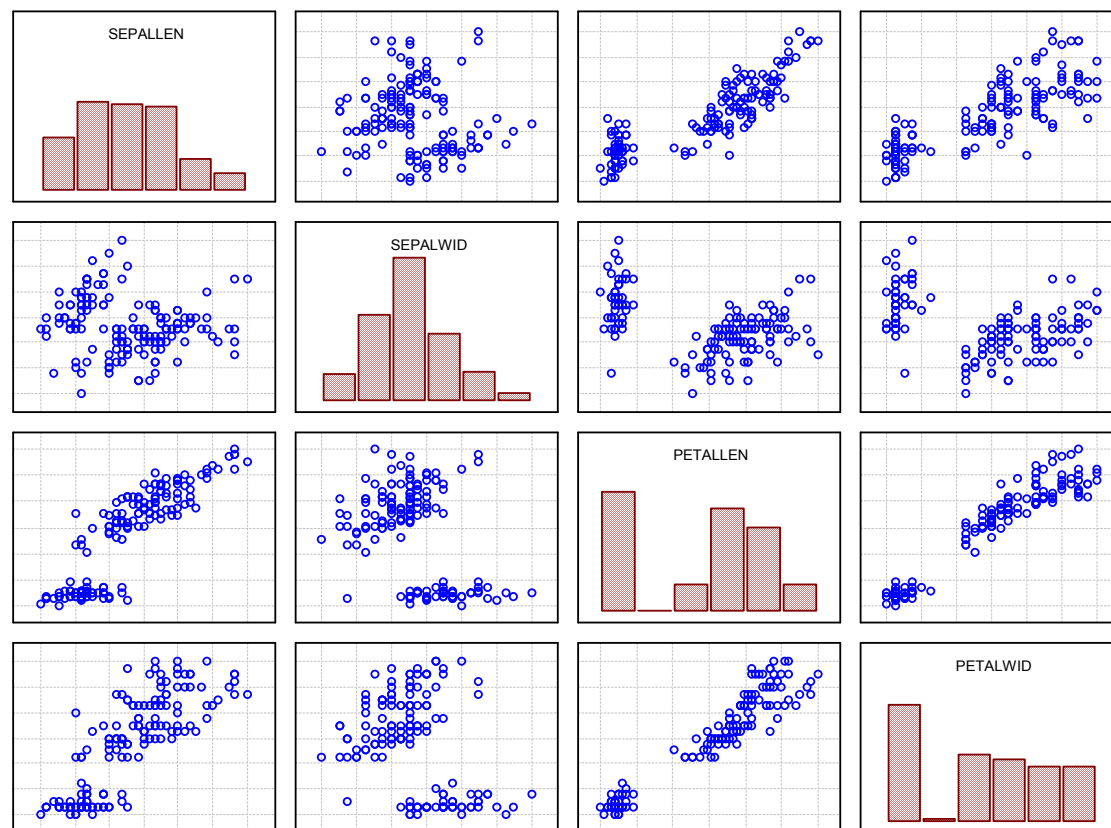
- Každý objekt reálného světa můžeme popsat jeho pozicí v mnohorozměrném prostoru, v extrémním případě jde až o desetitisíce dimenzí
- Více než 3D prostor je pro nás vizuálně neuchopitelný a hledání vztahů ve více než 3 dimenzích je problematické
- Ordinační analýza se tento problém snaží řešit redukcí dimenzionality dat „sloučením“ korelovaných proměnných do menšího počtu „faktorových“ proměnných



Zjednodušení
Interpretace

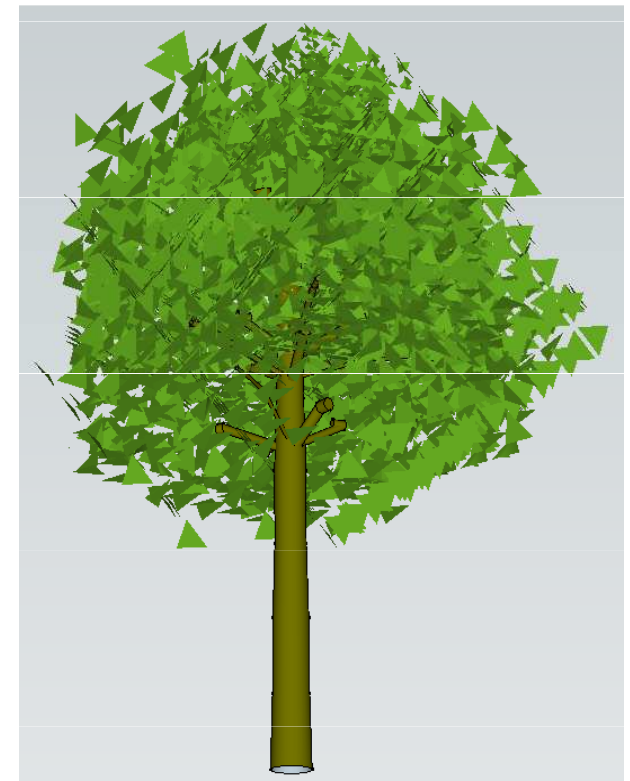
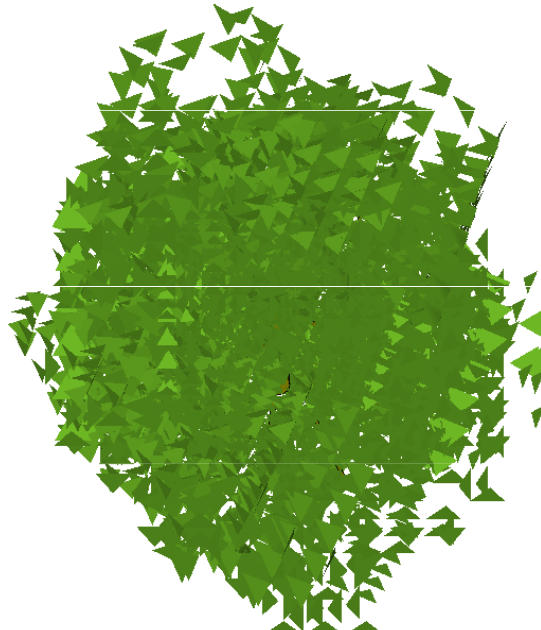
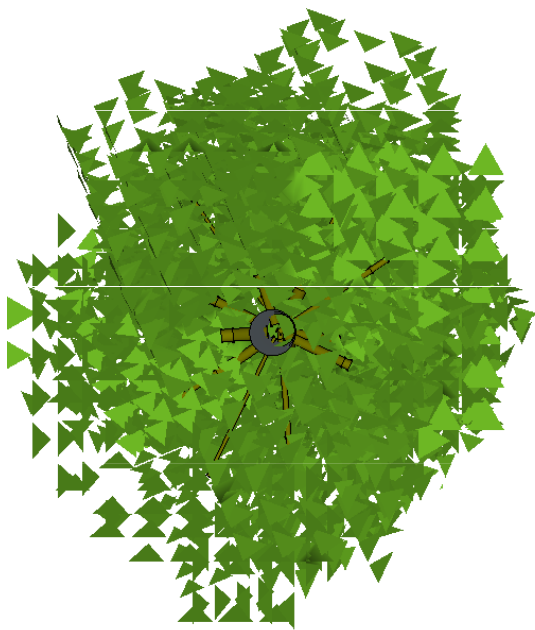
Příklad vícerozměrného popisu objektů a jejich korelací

	Dimenze 1	Dimenze 2	Dimenze 3	Dimenze 4
ID objektu	SEPALLEN	SEPALWID	PETALLEN	PETALWID
SETOSA	5.0	3.3	1.4	0.2
VIRGINIC	6.4	2.8	5.6	2.2
VERSICOL	6.5	2.8	4.6	1.5
VIRGINIC	6.7	3.1	5.6	2.4
VIRGINIC	6.3	2.8	5.1	1.5
SETOSA	4.6	3.4	1.4	0.3
VIRGINIC	6.9	3.1	5.1	2.3
VERSICOL	6.2	2.2	4.5	1.5
VERSICOL	5.9	3.2	4.8	1.8
SETOSA	4.6	3.6	1.0	0.2
...



Ordinační analýza dat = pohled ze správného úhlu

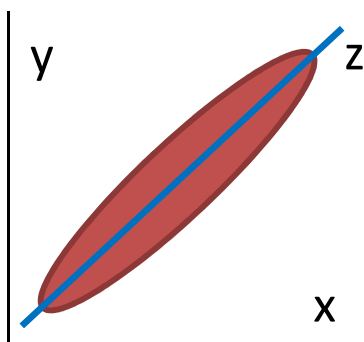
- Vícerozměrná analýza nám pomáhá nalézt v x-dimenzionálním prostoru nejvhodnější pohled na data poskytující maximum informací o analyzovaných objektech



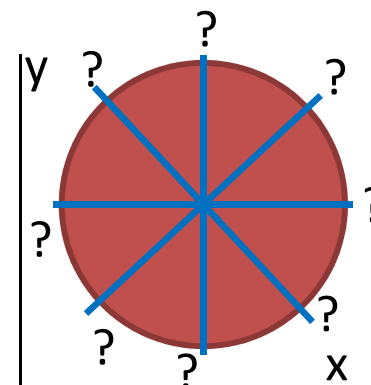
Všechny obrázky ukazují stejný objekt z různých úhlů v 3D prostoru.

Obecný princip redukce dimenzionality dat

- 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
- Všechny tzv. ordinační metody využívají principu identifikace korelovaných dimenzí a jejich sloučení do souhrnných nových dimenzí zastupujících několik dimenzí vstupního souboru
- Pokud mezi dimenzemi vstupního souboru neexistují korelace, nemá smysl hledat zjednodušení vícerozměrné struktury takového souboru !!!



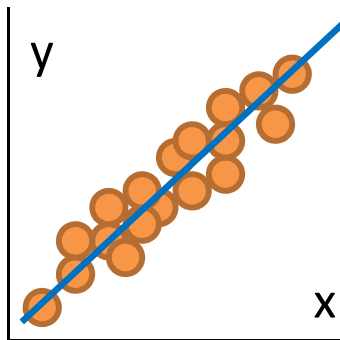
Jednoznačný vztah dimenzí x a y umožňuje jejich nahrazení jedinou novou dimenzí z



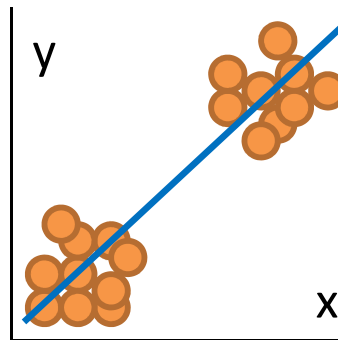
V případě neexistence vztahu mezi x a y nemá smysl definovat nové dimenze – nepřináší žádnou novou informaci oproti x a y

Korelace jako princip výpočtu vícerozměrných analýz

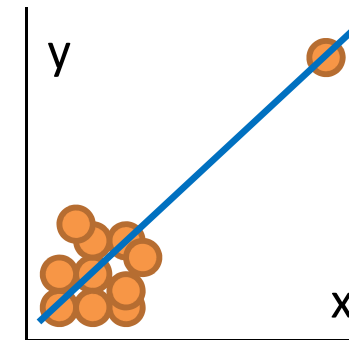
- Kovariance a Pearsonova korelace je základem analýzy hlavních komponent, faktorové analýzy jakož i dalších vícerozměrných analýz pracujících s lineární závislostí proměnných
- Předpokladem výpočtu kovariance a Pearsonovy korelace je:
 - Normalita dat v obou dimenzích
 - Linearita vztahu proměnných
- Pro vícerozměrné analýzy je nejzávažnějším problémem přítomnost odlehlých hodnot



Lineární vztah –
bezproblémové použití
Personovy korelace



Korelace je dána dvěma skupinami
hodnot – vede k identifikaci skupin
objektů v datech



Korelace je dána odlehlou
hodnotu – analýza popisuje
pouze vliv odlehlé hodnoty

Typy ordinační analýzy

- Ordinačních analýz existuje celá řada, některé jsou spjaty s konkrétními metrikami vzdáleností/podobností
- V přehledu jsou uvedeny pouze základní typy analýz, nikoliv jejich různé kombinace hodnotící vztahy dvou a více sad proměnných (CCA, kanonická korelace, RDA, co-coordinate analysis, co-inertia analysis, diskriminační analýza apod.)

Typ analýzy	Vstupní data	Metrika
Analýza hlavních komponent (PCA)	$N \times P$ matice	Korelace, kovariance, Euklidovská
Faktorová analýza (FA)	$N \times P$ matice	Korelace, kovariance, Euklidovská
Korespondenční analýza (CA)	$N \times P$ matice	Chi-square vzdálenost
Analýza hlavních koordinát (PCoA)	Asoc. matice	libovolná
Nemetrické mnohorozměrné škálování (MDS)	Asoc. matice	libovolná

Vícerozměrné statistické metody

Analýza hlavních komponent jako příklad výpočtu redukce dimenzionality pomocí ordinační analýzy

Analýza hlavních komponent

- Analýza hlavních komponent je typickou metodou ze skupiny ordinačních analýz
- Pracuje s asociací proměnných popisujících objekty a snaží se na základě jejich korelací/kovariancí stanovit dimenze zahrnující větší podíl variability než připadá na původní proměnné
- Předpoklady jsou obdobné jako při výpočtu korelací a kovariancí:
 - nepřítomnost odlehlých hodnot (s výjimkou situace kdy analýzu provádíme za účelem identifikace odlehlých hodnot)
 - nepřítomnost více skupin objektů (s výjimkou situace kdy analýzu provádíme za účelem detekce přirozeně existujících shluků spjatých s největší variabilitou souboru)
- Datový soubor musí mít více objektů než proměnných, pro získání stabilních výsledků se doporučuje alespoň 10x tolik objektů než proměnných, ideální je 40-60x více objektů než proměnných
- Cíle analýzy
 - Popis a vizualizace vztahů mezi proměnnými
 - Výběr neredundantních proměnných pro další analýzy
 - Vytvoření zástupných faktorových os pro použití v dalších analýzách
 - Identifikace shluků v datech spjatých s variabilitou dat
 - Identifikace vícerozměrně odlehlých objektů

Výpočet faktorových os

- Výpočetně vychází analýza hlavních komponent z korelační/kovarianční asociační matice (a obdobně i další ordinační analýzy, pouze pomocí jiných asociačních metrik)
- Vlastní výpočet je pak realizován prostřednictvím výpočtu vlastních čísel a vlastních vektorů této matice
- Vlastní vektory a vlastní čísla
 - Existují pro čtvercové matice
 - Vyžadují aby hodnota matice odpovídala jejímu řádu, tedy pouze pro matice v nichž neexistuje lineární závislost. Tento fakt komplikuje (nebo znemožňuje) výpočet při přítomnosti zcela redundantních (lineárně závislých) proměnných
 - Vlastní čísla matice jsou ve vazbě na variabilitu vyčerpanou vytvářenými faktorovými osami
 - Vlastní vektory definují směr nových faktorových os v prostoru původních proměnných
 - Existuje několik možných vyjádření vlastních čísel a vlastních vektorů, proto je před interpretací výstupů nezbytné vědět znát algoritmus použitý v SW

Vlastní čísla a vlastní vektory

Výpočet vlastních čísel pro matici A

$$|A - \lambda_i I| = 0$$

$$\left| \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 5 \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right| = 0$$

$$\left| \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 5 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{bmatrix} \right| = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\begin{vmatrix} 2 - \lambda & 2 \\ 2 & 5 - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$(2 - \lambda)(5 - \lambda) - 4 = 0$$

$$\lambda^2 - 7\lambda + 6 = 0$$

$$\lambda_1 = 6$$

$$\lambda_2 = 1$$

Výpočet vlastního vektoru l_1 ,
pro l_2 je výpočet obdobný

$$\lambda_1 = 6$$

$$\left(\begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 5 \end{bmatrix} - 6 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} u_{11} \\ u_{21} \end{bmatrix} = 0$$

$$\begin{bmatrix} -4 & 2 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} \\ u_{21} \end{bmatrix} = 0$$

$$-4u_{11} + 2u_{21} = 0$$

$$2u_{11} - 1u_{21} = 0$$

$$u_{11} = 1$$

$$-4 + 2u_{21} = 0$$

$$u_{21} = 2$$

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Příklad výpočtu

Primární data

1	2	3	4	5
SEPALLEN	SEPALWID	PETALLEN	PETALWID	IRISTYPE
5.0	3.3	1.4	0.2	SETOSA
6.4	2.8	5.6	2.2	VIRGINIC
6.5	2.8	4.6	1.5	VERSICO
6.7	3.1	5.6	2.4	VIRGINIC
6.3	2.8	5.1	1.5	VIRGINIC
4.6	3.4	1.4	0.3	SETOSA
6.9	3.1	5.1	2.3	VIRGINIC
6.2	2.2	4.5	1.5	VERSICO
5.9	3.2	4.8	1.8	VERSICO
4.6	3.6	1.0	0.2	SETOSA
6.1	3.0	4.6	1.4	VERSICO
6.0	2.7	5.1	1.6	VERSICO
6.5	3.0	5.2	2.0	VIRGINIC
5.6	2.5	3.9	1.1	VERSICO
6.5	3.0	5.5	1.8	VIRGINIC
5.8	2.7	5.1	1.9	VIRGINIC
6.8	3.2	5.9	2.3	VIRGINIC
5.1	3.3	1.7	0.5	SETOSA
5.7	2.8	4.5	1.3	VERSICO
6.2	3.4	5.4	2.3	VIRGINIC
7.7	3.8	6.7	2.2	VIRGINIC
6.3	3.3	4.7	1.6	VERSICO
6.7	3.3	5.7	2.5	VIRGINIC
7.6	3.0	6.6	2.1	VIRGINIC
4.9	2.5	4.5	1.7	VIRGINIC
5.5	3.5	1.3	0.2	SETOSA
6.7	3.0	5.2	2.3	VIRGINIC
7.0	3.2	4.7	1.4	VERSICO
6.4	3.2	4.5	1.5	VERSICO
6.1	2.8	4.0	1.3	VERSICO
4.8	3.1	1.6	0.2	SETOSA
5.9	3.0	5.1	1.8	VIRGINIC
5.5	2.4	3.8	1.1	VERSICO
6.3	2.5	5.0	1.9	VIRGINIC
6.4	3.2	5.3	2.3	VIRGINIC
5.2	3.4	1.4	0.2	SETOSA
4.9	3.6	1.4	0.1	SETOSA
5.4	3.0	4.5	1.5	VERSICO
7.9	3.8	6.4	2.0	VIRGINIC
4.4	3.2	1.3	0.2	SETOSA
6.7	3.3	5.7	2.1	VIRGINIC
5.0	3.5	1.6	0.6	SETOSA
5.8	2.6	4.0	1.2	VERSICO



Korelační matice

	SEPALLEN	SEPALWID	PETALLEN	PETALWID
SEPALLEN	1.000	-0.118	0.872	0.818
SEPALWID	-0.118	1.000	-0.428	-0.366
PETALLEN	0.872	-0.428	1.000	0.963
PETALWID	0.818	-0.366	0.963	1.000

Kovarianční matice

	SEPALLEN	SEPALWID	PETALLEN	PETALWID
SEPALLEN	0.686	-0.042	1.274	0.516
SEPALWID	-0.042	0.190	-0.330	-0.122
PETALLEN	1.274	-0.330	3.116	1.296
PETALWID	0.516	-0.122	1.296	0.581

Kovarianční nebo korelační matice?

Korelační matice

	SEPALLEN	SEPALWID	PETALLEN	PETALWID
SEPALLEN	1.000	-0.118	0.872	0.818
SEPALWID	-0.118	1.000	-0.428	-0.366
PETALLEN	0.872	-0.428	1.000	0.963
PETALWID	0.818	-0.366	0.963	1.000

- Jednoznačně v případě nesrovnatelných jednotek (např. věk vs. krevní tlak)
- Korelace je vlastně kovariance standardizovaná na variabilitu dat, tedy kovariance na standardizovaných datech = korelace
- Diagonála obsahuje hodnotu 1
 - Úplná korelace proměnné sama se sebou
 - Standardizovaný rozptyl
- Ostatní buňky obsahují vzájemné korelace proměnných

Kovarianční matice

	SEPALLEN	SEPALWID	PETALLEN	PETALWID
SEPALLEN	0.686	-0.042	1.274	0.516
SEPALWID	-0.042	0.190	-0.330	-0.122
PETALLEN	1.274	-0.330	3.116	1.296
PETALWID	0.516	-0.122	1.296	0.581

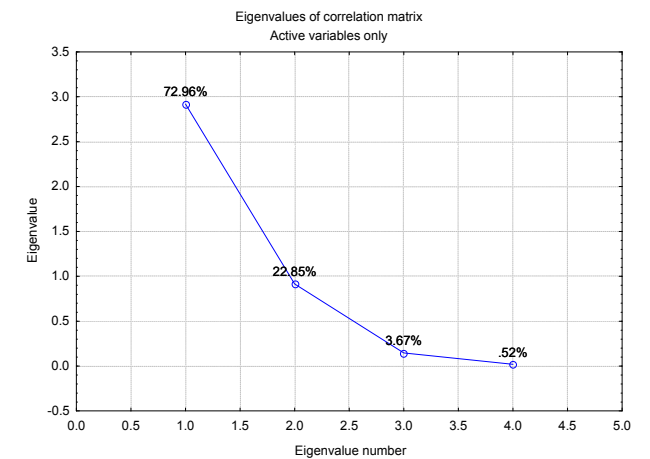
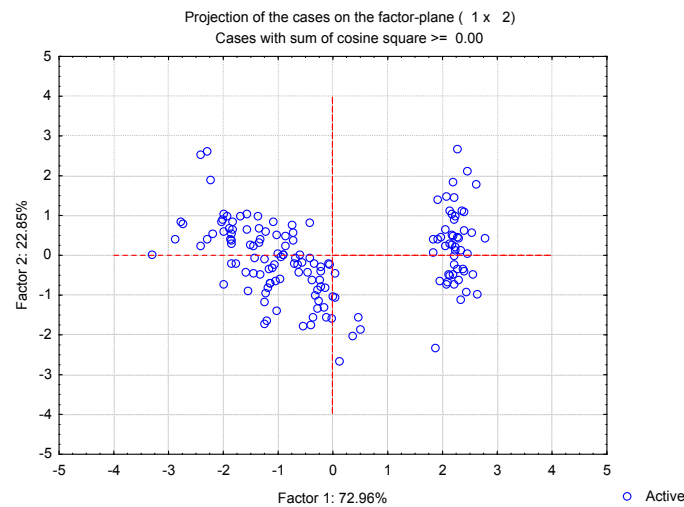
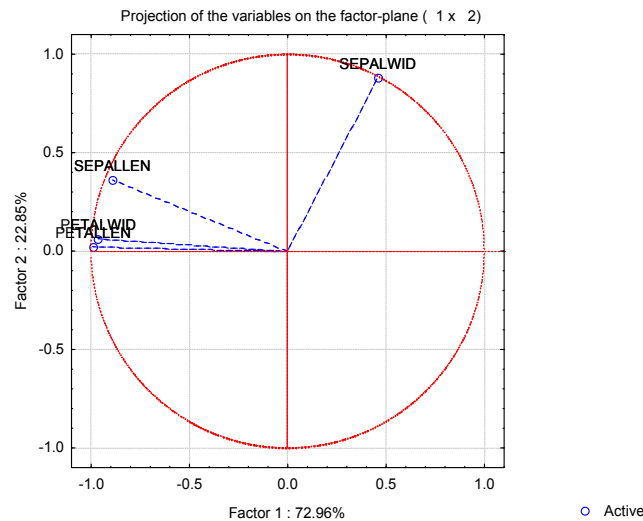
- Lze použít v případě proměnných o stejných jednotkách a podobném významu (např. rozměry objektu)
- Má smysl v případě, že chceme zohlednit absolutní hodnoty a rozsah proměnných
- Diagonála obsahuje hodnotu rozptylu proměnných
- Ostatní buňky obsahují kovarianci (= sdílený rozptyl) proměnných

Výstupy PCA

- Vlastní čísla (eigenvalues)
- Vlastní vektory (eigenvectors)
- Communalities
- Souřadnice objektů
- Scree plot
- Biplot

Eigenvectors of correlation matrix (Irisdat)				
Active variables only				
Variable	Factor 1	Factor 2	Factor 3	Factor 4
SEPALLEN	-0.521066	0.377418	0.719566	-0.261286
SEPALWID	0.269347	0.923296	-0.244382	0.123510
PETALLEN	-0.580413	0.024492	-0.142126	0.801449
PETALWID	-0.564857	0.066942	-0.634273	-0.523597

Eigenvalues of correlation matrix, and related statistics				
Active variables only				
Value number	Eigenvalue	% Total variance	Cumulative Eigenvalue	Cumulative %
1	2.918498	72.96245	2.918498	72.9624
2	0.914030	22.85076	3.832528	95.8132
3	0.146757	3.66892	3.979285	99.4821
4	0.020715	0.51787	4.000000	100.0000



Vlastní čísla (Eigenvalues)

Korelační matice

	SEPALLEN	SEPALWID	PETALLEN	PETALWID
SEPALLEN	1.000	-0.118	0.872	0.818
SEPALWID	-0.118	1.000	-0.428	-0.366
PETALLEN	0.872	-0.428	1.000	0.963
PETALWID	0.818	-0.366	0.963	1.000



	Eigenvalue	% Rozptylu	Kumulativní eigenvalue	Kumulativní % rozptylu
1	2.918	73.0	2.918	73.0
2	0.914	22.9	3.833	95.8
3	0.147	3.7	3.979	99.5
4	0.021	0.5	4.000	100.0

- Spjaty s vytvářenými faktorovými osami
- Suma eigenvalues = počet proměnných (suma standardizovaných rozptylů)
- Hodnota eigenvalue je ve vztahu k variabilitě vztahu proměnných vyčerpané příslušnou faktorovou osou
- Hodnota eigenvalue = kolikrát více vyčerpává faktorová osa variability než by na ni připadalo rovnoměrným rozdělením (eigenvalue=1)

Kovarianční matice

	SEPALLEN	SEPALWID	PETALLEN	PETALWID
SEPALLEN	0.686	-0.042	1.274	0.516
SEPALWID	-0.042	0.190	-0.330	-0.122
PETALLEN	1.274	-0.330	3.116	1.296
PETALWID	0.516	-0.122	1.296	0.581

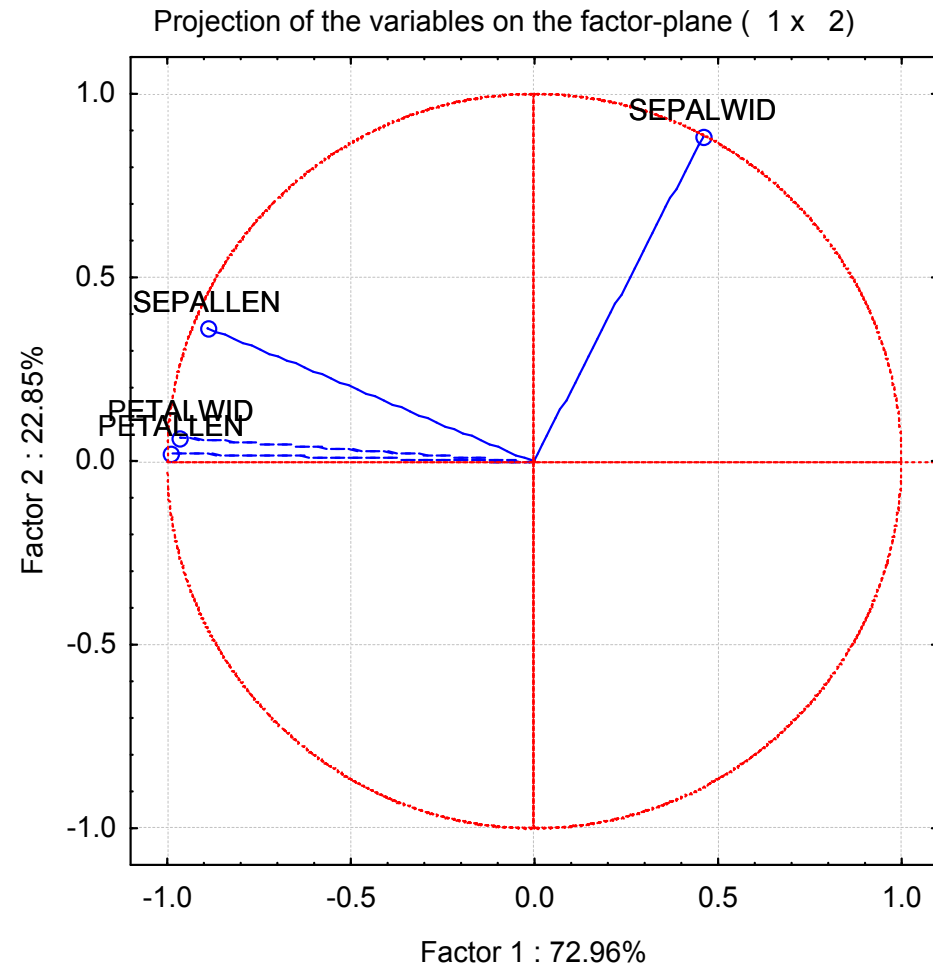


	Eigenvalue	% Rozptylu	Kumulativní eigenvalue	Kumulativní % rozptylu
1	4.228	92.5	4.228	92.5
2	0.243	5.3	4.471	97.8
3	0.078	1.7	4.549	99.5
4	0.024	0.5	4.573	100.0

- Spjaty s vytvářenými faktorovými osami
- Suma eigenvalues = suma rozptylu
- Velikost eigenvalue je ve vztahu k variabilitě vyčerpané příslušnou faktorovou osou
- Hodnota eigenvalue/průměrné eigenvalue = kolikrát více vyčerpává faktorová osa variability než by na ni připadalo rovnoměrným rozdělením

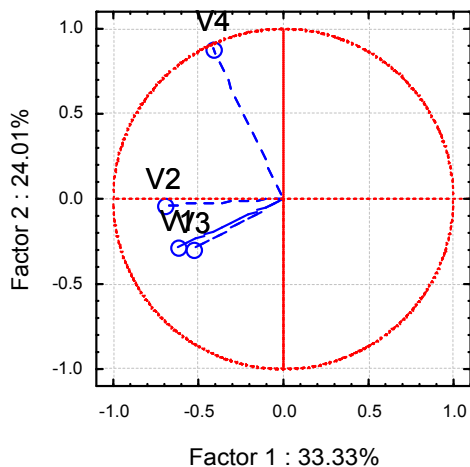
Interpretace vyčerpané variability faktorovými osami

- Variabilita vyčerpaná faktorovými osami je vztažena pouze k použitým proměnným
- Nevypovídá nic o proměnných nezahrnutých do analýzy !!!!
- Orientačně odpovídá počtu (nebo rozptylu) proměnných navázaných na příslušnou osu
- Souvisí i s počtem proměnných v analýze, čím více proměnných, tím spíše bude variabilita vyčerpaná první osou nižší (platí samozřejmě pouze v případě, že nejsou přidávány silně redundantní proměnné)
- V případě silně redundantních proměnných tyto redundantní proměnné zvyšují variabilitu vyčerpanou na příslušné faktorové ose, s níž jsou spjaty



Vyčerpaná variabilita a redundance proměnných

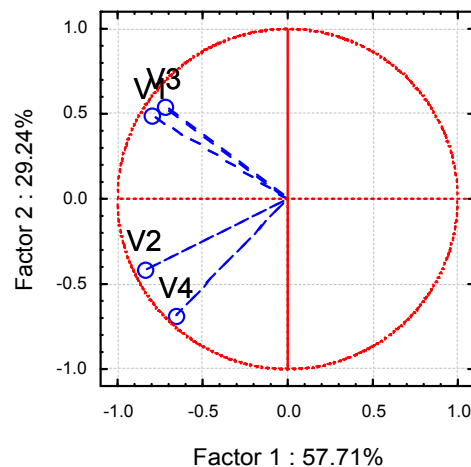
Příklad 1



	V1	V2	V3	V4
V1	1.00	0.19	0.10	0.05
V2	0.19	1.00	0.13	0.11
V3	0.10	0.13	1.00	0.05
V4	0.05	0.11	0.05	1.00

- Slabé korelace mezi proměnnými
- Vyčerpaná variabilita na první ose jen mírně převyšuje 1/4

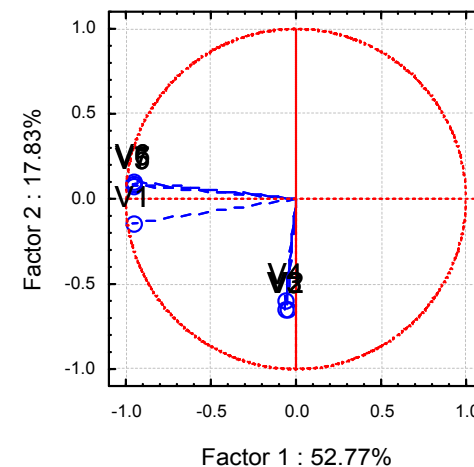
Příklad 2



	V1	V2	V3	V4
V1	1.00	0.52	0.71	0.14
V2	0.52	1.00	0.30	0.72
V3	0.71	0.30	1.00	0.20
V4	0.14	0.72	0.20	1.00

- Silné korelace mezi proměnnými
- Vyčerpaná variabilita na první ose představuje více než polovinu celkové variability

Příklad 3



	V1	V2	V3	V4	V5	V6	V7
V1	1.00	0.19	0.12	0.12	0.90	0.89	0.89
V2	0.19	1.00	0.12	0.09	-0.01	-0.01	-0.03
V3	0.12	0.12	1.00	0.12	0.02	0.02	0.02
V4	0.12	0.09	0.12	1.00	0.02	-0.01	0.03
V5	0.90	-0.01	0.02	0.02	1.00	0.90	0.90
V6	0.89	-0.01	0.02	-0.01	0.90	1.00	0.90
V7	0.89	-0.03	0.02	0.03	0.90	0.90	1.00

- K příkladu 1 přidány proměnné redundantní k V1
- Výsledek PCA se kompletně mění, první osa vyčerpává přes polovinu variability díky redundantním proměnným

Vlastní vektory

Korelační matice

	SEPALLEN	SEPALWID	PETALLEN	PETALWID
SEPALLEN	1.000	-0.118	0.872	0.818
SEPALWID	-0.118	1.000	-0.428	-0.366
PETALLEN	0.872	-0.428	1.000	0.963
PETALWID	0.818	-0.366	0.963	1.000



Standardizace na délku 1

	Factor 1	Factor 2	Factor 3	Factor 4
SEPALLEN	-0.521	0.377	0.720	-0.261
SEPALWID	0.269	0.923	-0.244	0.124
PETALLEN	-0.580	0.024	-0.142	0.801
PETALWID	-0.565	0.067	-0.634	-0.524

Kovarianční matice

	SEPALLEN	SEPALWID	PETALLEN	PETALWID
SEPALLEN	0.686	-0.042	1.274	0.516
SEPALWID	-0.042	0.190	-0.330	-0.122
PETALLEN	1.274	-0.330	3.116	1.296
PETALWID	0.516	-0.122	1.296	0.581



	Factor 1	Factor 2	Factor 3	Factor 4
SEPALLEN	-0.361	0.657	0.582	-0.315
SEPALWID	0.085	0.730	-0.598	0.320
PETALLEN	-0.857	-0.173	-0.076	0.480
PETALWID	-0.358	-0.075	-0.546	-0.754

Standardizace na délku druhé odmocniny eigenvalue (směrodatná odchylka)

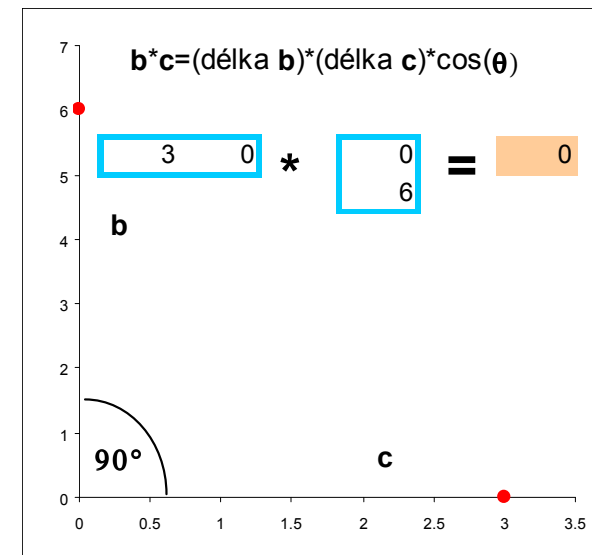
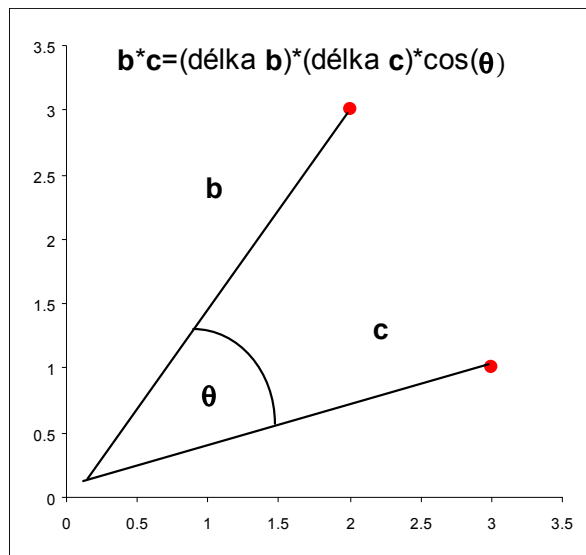
	Factor 1	Factor 2	Factor 3	Factor 4
SEPALLEN	-0.890	0.361	0.276	-0.038
SEPALWID	0.460	0.883	-0.094	0.018
PETALLEN	-0.992	0.023	-0.054	0.115
PETALWID	-0.965	0.064	-0.243	-0.075

	Factor 1	Factor 2	Factor 3	Factor 4
SEPALLEN	-0.743	0.323	0.163	-0.049
SEPALWID	0.174	0.360	-0.167	0.049
PETALLEN	-1.762	-0.085	-0.021	0.074
PETALWID	-0.737	-0.037	-0.153	-0.116

- Vlastní vektory popisují směr kterým v prostoru původních proměnných směřují faktorové osy
- Eigenvektory mohou být různým způsobem standardizovány a vizualizovány; interpretace výstupů (tzv. biplotů) se liší podle použité standardizace

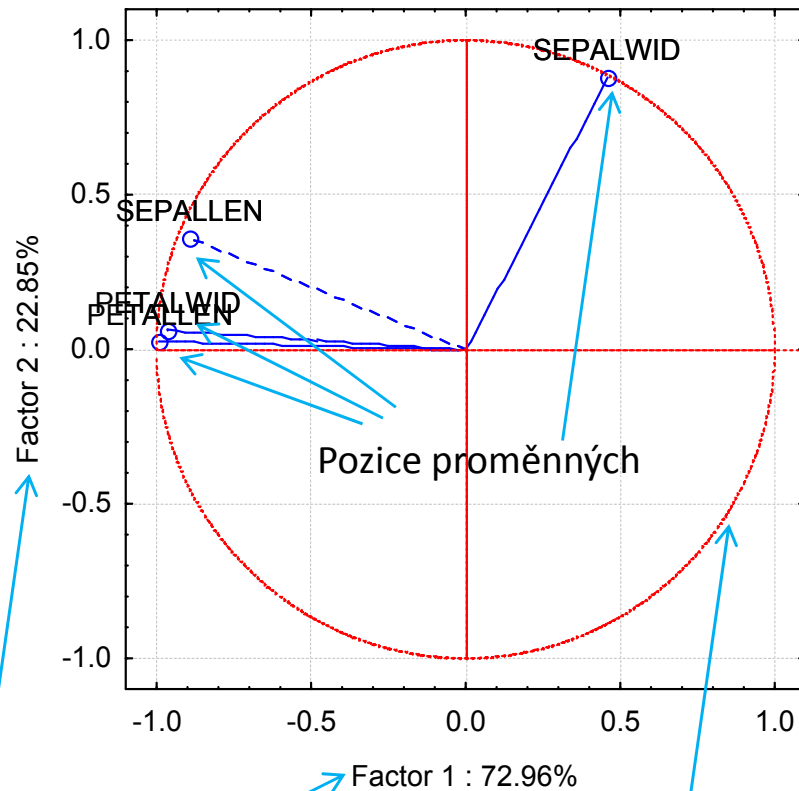
Vlastnosti vlastních vektorů

- Vlastní vektory jsou navzájem ortogonální (nezávislé, svírající úhel 90°)
- Z hlediska interpretace definují nezávislé proměnné, tedy nesoucí **zcela unikátní informaci** o objektech
- Definují směr nových faktorových os v prostoru původních proměnných a umožňují počítat pozici objektů na nových faktorových osách
- **Geometrie součinu vektorů** - Součin vektorů lze spočítat jako součin jejich délek násobený cosinem úhlu, který svírají. Pokud 2 vektory svírají pravý úhel je jejich součin 0 a nazývají se **orthogonální vektory**. Matice, jejíž sloupcové vektory navzájem svírají pravý úhel se nazývá **orthogonální matice**.



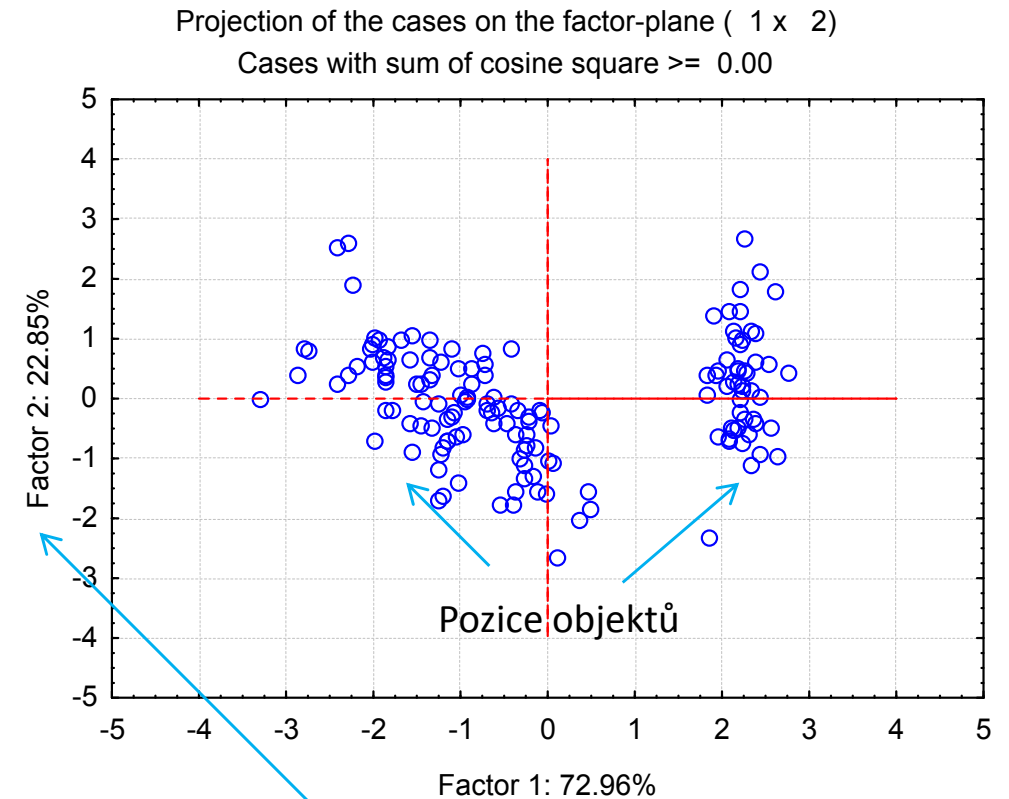
Biplot

- Biplot – současná vizualizace pozice proměnných a objektů
- Několik typů biplotů s různou interpretací
- Pro zjednodušení interpretace je možné hodnoty na osách násobit konstantou



Variabilita vyčerpaná faktorovými osami

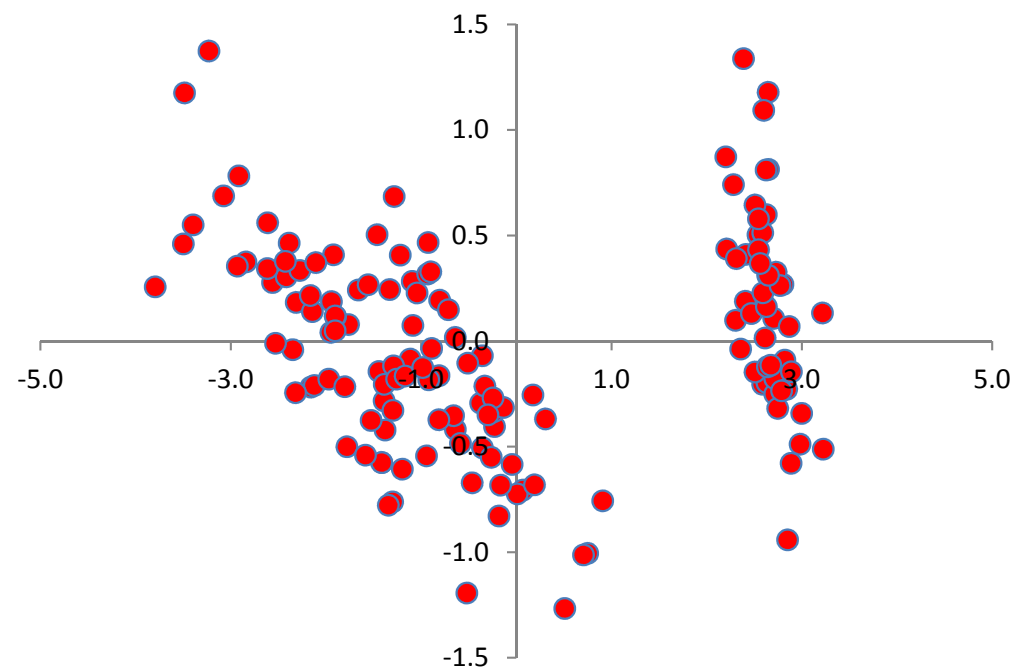
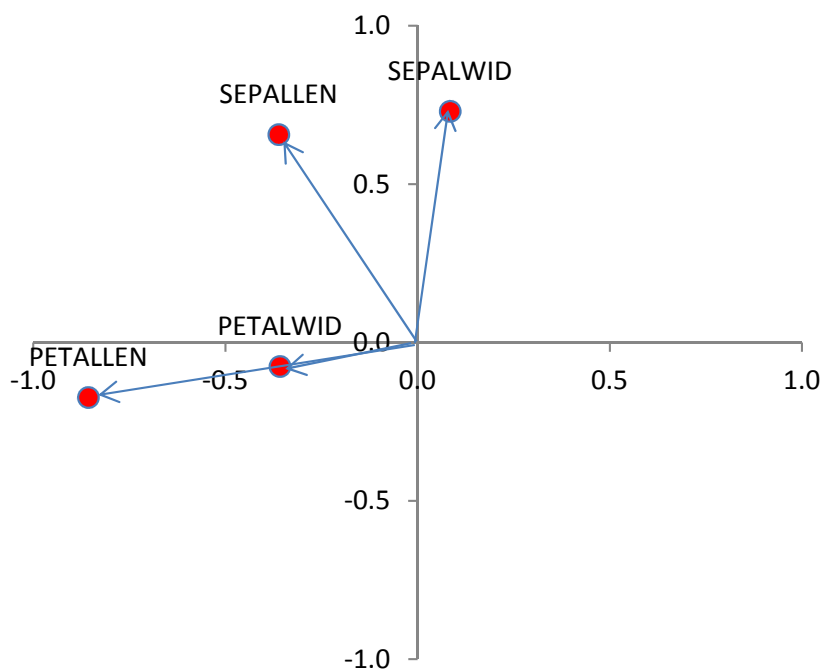
Jednotková kružnice -
Hranice příspěvku k
definici faktorové osy



Variabilita vyčerpaná faktorovými osami

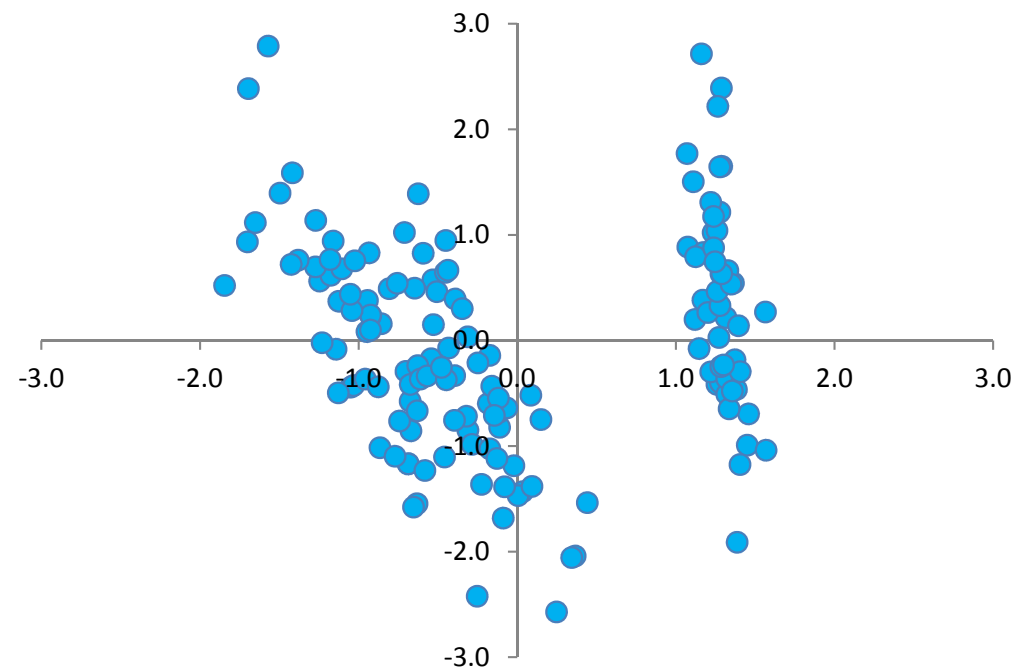
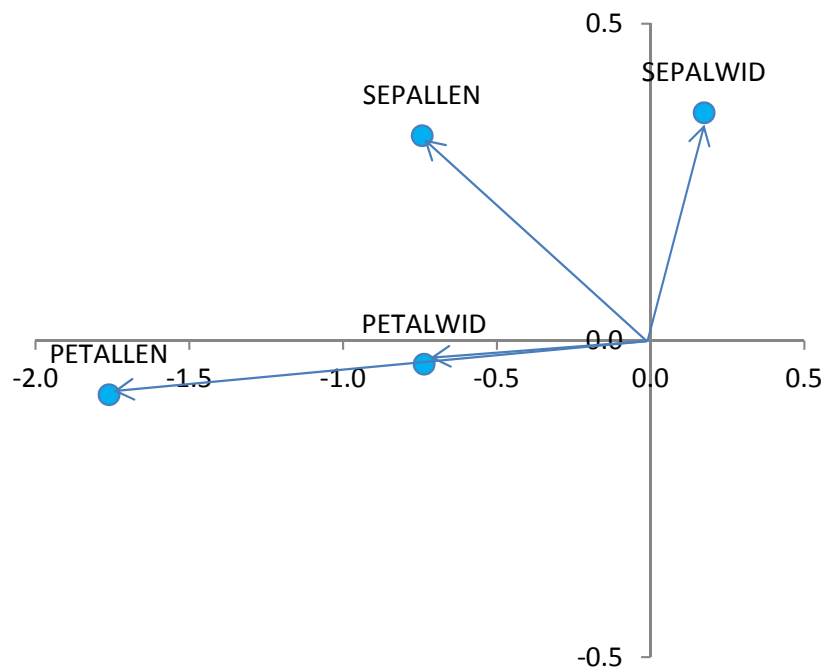
Standardizace eigenvektorů a její interpretace I

- Standardizace délky eigenvektorů na jednotkovou délku
 - Při vizualizaci vede na tzv. Biplot vzdáleností (distance biplot)
 - Pozice objektů na faktorových osách mají rozptyl= příslušné eigenvalue
 - Interpretace biplotu
 - Umožňuje interpretovat euklidovské vzdálenosti objektů v prostoru PCA (jsou aproximací euklidovských vzdáleností v původním prostoru)
 - Projekce objektu v pravém uhlu na původní proměnnou aproximuje pozici objektu na této původní proměnné
 - Délka projekce jednotlivých původních proměnných v prostoru faktorových os popisuje jejich příspěvek k definici daného faktorového prostoru
 - Úhly mezi původními proměnnými ve faktorovém prostoru nemají žádnou interpretaci



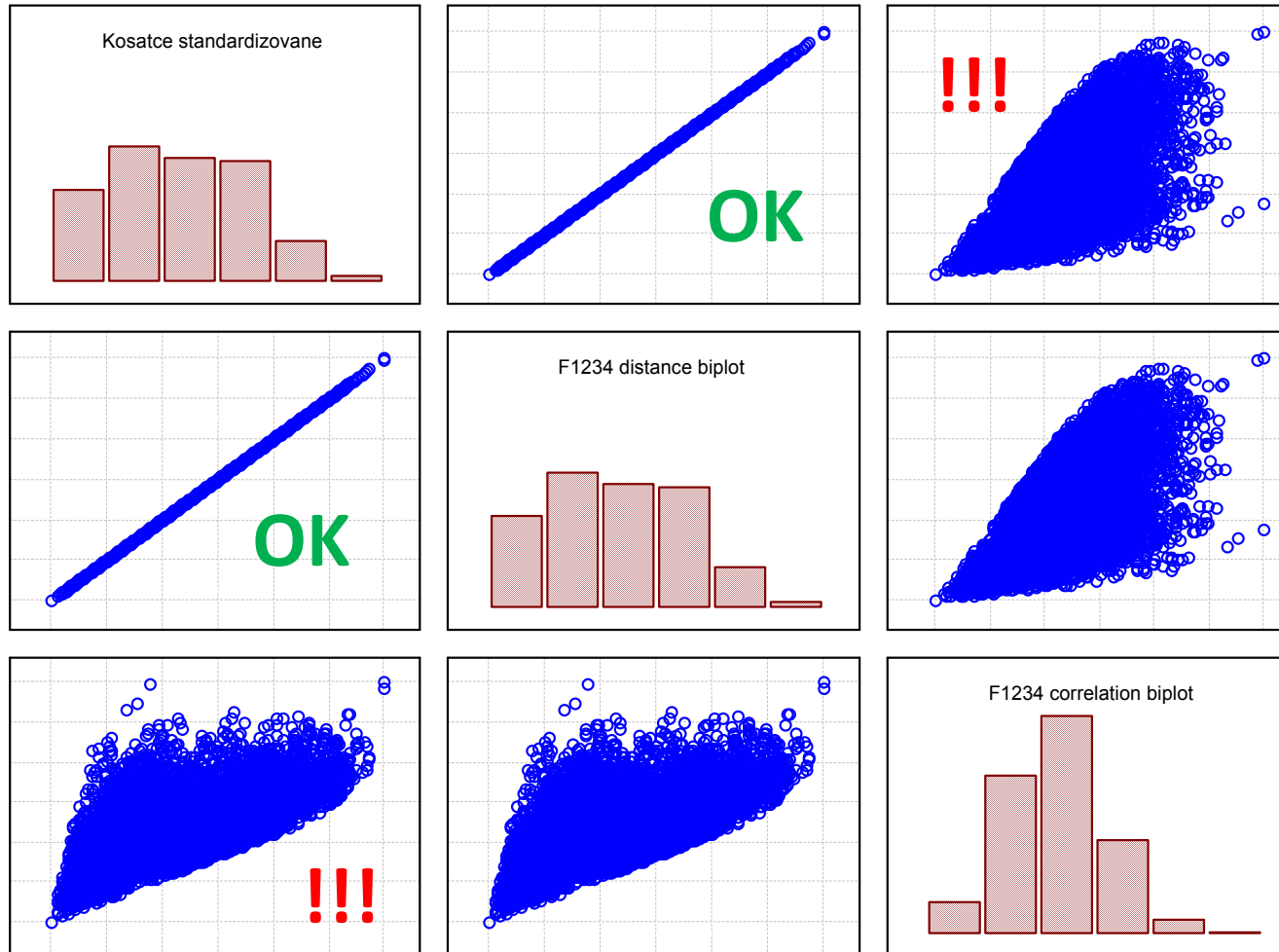
Standardizace eigenvektorů a její interpretace II

- Standardizace délky eigenvektorů na druhou odmocninu z eigenvalue
 - Při vizualizaci vede na tzv. Biplot korelací (correlation biplot)
 - Pozice objektů na faktorových osách mají jednotkový rozptyl
 - Interpretace biplotu
 - euklidovské vzdálenosti objektů v prostoru PCA nejsou aproximací euklidovských vzdáleností v původním prostoru
 - Projekce objektu v pravém uhlu na původní proměnnou aproximuje pozici objektu na této původní proměnné
 - Délka projekce jednotlivých původních proměnných v prostoru faktorových os popisuje jejich směrodatnou odchylku
 - Úhly mezi původními proměnnými ve faktorovém prostoru souvisí s jejich korelací
 - Není vhodný pokud má smysl interpretovat vzdálenosti (vzájemné vztahy) mezi objekty



Zachování vzdáleností objektů v původním prostoru vzhledem k různým typům biplotu

- Pouze distance biplot zachovává vzdálenostní vztahy mezi objekty, v případě korelačního biplotu není možná interpretace těchto vzdáleností



Standardizace eigenvektorů a její vliv na projekci původních proměnných: shrnutí

	Kovarianční matice		Korelační matice	
Původní proměnná (centrovaná)	Standardizace eigenvektoru			
	$\sqrt{\lambda_k}$	1	$\sqrt{\lambda_k}$	1
Celková délka	s_j	1	1	1
Úhly proměnných v redukovaném prostoru	Projekce kovariancí (korelací)	90° rotace systému os	Projekce korelací	90° rotace systému os
Hranice příspěvku k definici faktorové osy	$s_j \sqrt{d/p}$	$\sqrt{d/p}$	$\sqrt{d/p}$	$\sqrt{d/p}$
Projekce na faktorovou osu k	$u_{jk} \sqrt{\lambda_k}$ Kovariance s k	u_{jk} Proporcionální kovarianci s k	$u_{jk} \sqrt{\lambda_k}$ Korelace s k	u_{jk} Proporcionální korelaci s k
Korelace s faktorovou osou k	$\frac{u_{jk} \sqrt{\lambda_k}}{s_j}$	$\frac{u_{jk} \sqrt{\lambda_k}}{s_j}$	$u_{jk} \sqrt{\lambda_k}$	$u_{jk} \sqrt{\lambda_k}$

λ_k Eigenvalue faktorové osy k

d Počet původních proměnných

u_{jk} Hodnota eigenvektoru faktorové osy k pro původní proměnnou j

s_j Směrodatná odchylka původní proměnné j

p Počet faktorových os

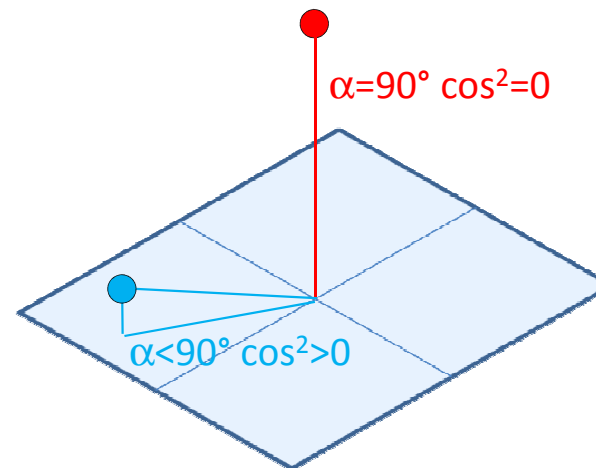
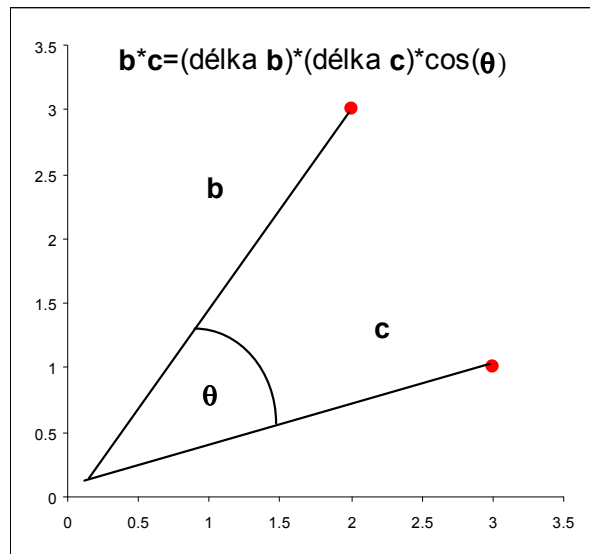
Communalities

- Jde o podíl variability sdílené s jinými proměnnými, zde s postupně se zvyšujícím počtem faktorových os

	From 1	From 2	From 3	From 4
SEPALLEN	0.792	0.923	0.999	1.000
SEPALWID	0.212	0.991	1.000	1.000
PETALLEN	0.983	0.984	0.987	1.000
PETALWID	0.931	0.935	0.994	1.000

Cosinus²

- Souvisí s geometrickým významem cosinu při násobení vektorů, kdy $\cos=0$ znamená ortogonální vztah vektorů
- V PCA se používá jako filtr pro zobrazení objektů v biplotu, kdy objekty s $\cos^2 \sim 0$ jsou umístěny kolmo k rovině definované vybranými faktorovými osami a tedy nejsou v tomto pohledu interpretovatelné

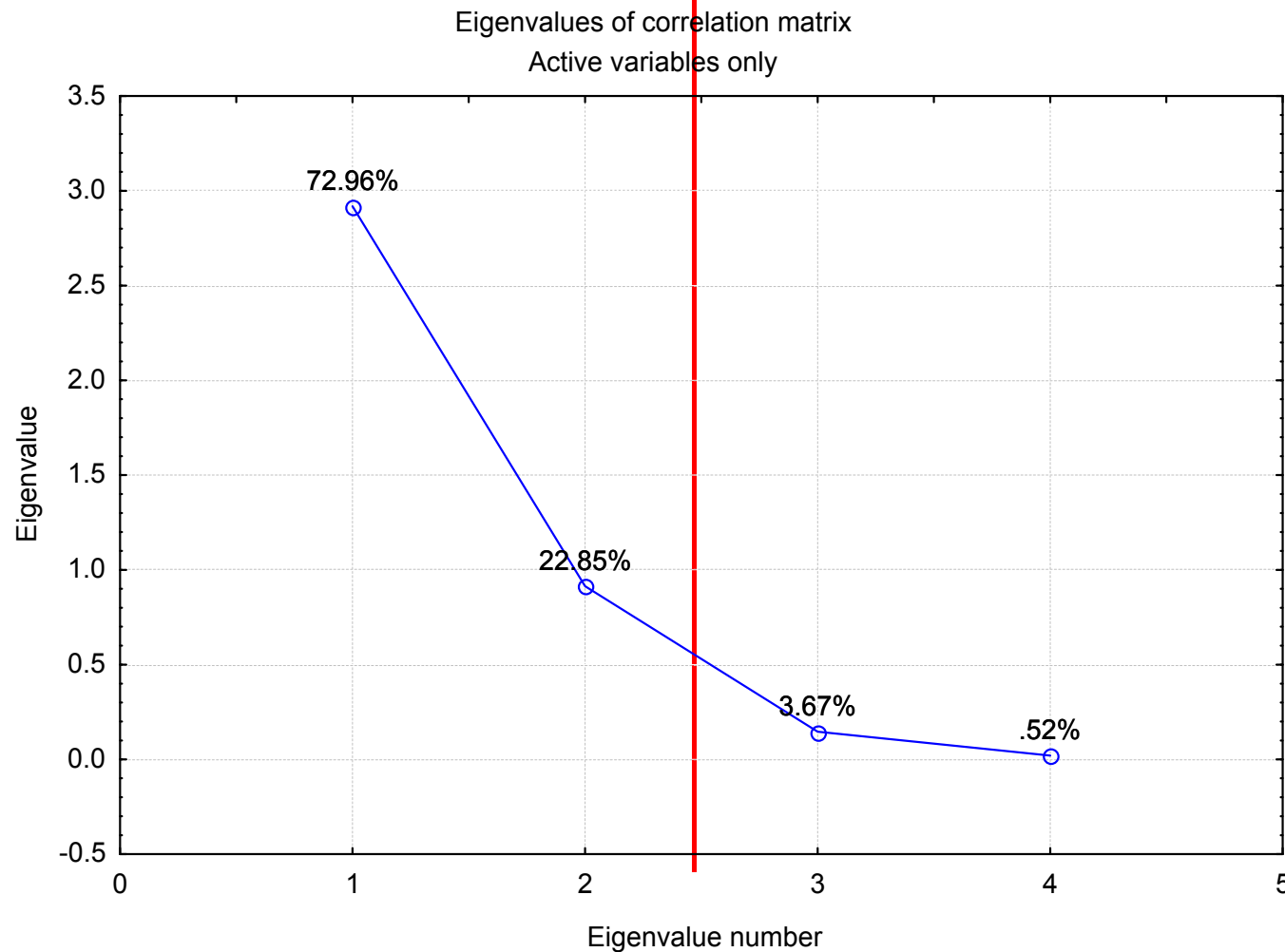


Identifikace optimálního počtu faktorových os pro další analýzu

- Jedním z cílů ordinační analýzy je výběr menšího počtu dimenzí pro další analýzu
- Řada pravidel pro výběr optimálního počtu dimenzí, optimální je samozřejmě skončit s výběrem dvou, maximálně tří dimenzí (s výjimkou speciálních aplikací typu analýzy obrazů MRI, kde je úspěchem redukce z milionu dimenzi na desítky)
- Kaiser Guttmanovo 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
- Scree plot
 - Grafický nástroj hledající zlom ve vztahu počtu os a vyčerpané variability
- Sheppard diagram
 - Grafická analýza vztahu mezi vzdálenostmi objektů v původním prostoru a redukovaném prostoru o daném počtu dimenzí

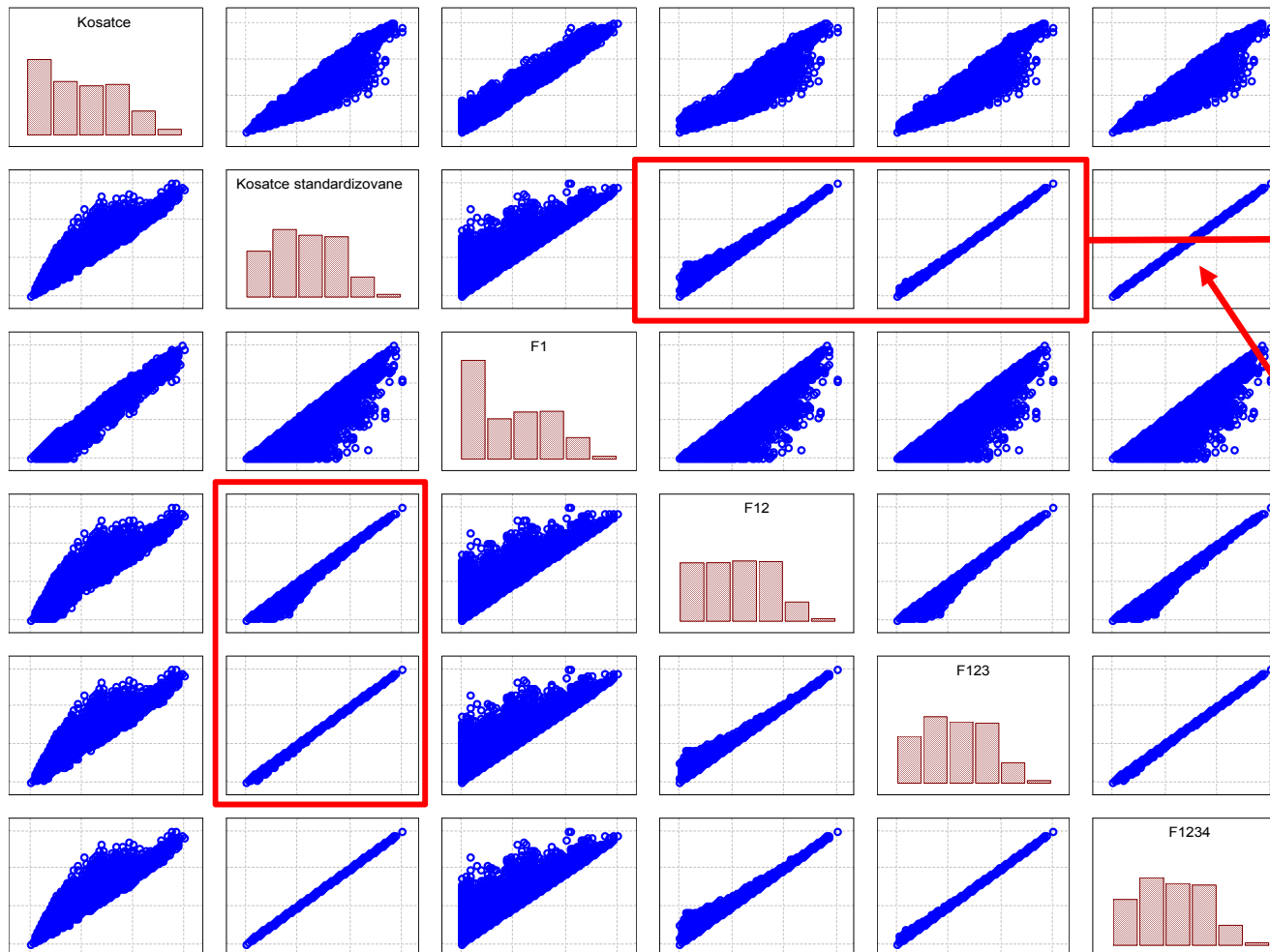
Scree plot

Zlom ve vztahu mezi počtem eigenvalue a jimy vyčepanou variabilitou – pro další analýzu použity první dvě faktorové osy



Sheppard 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

Shrnutí

- Analýza hlavních komponent je základním nástrojem pro analýzu variability spojitých proměnných a jejich vztahů
- Kromě spojitých proměnných mohou být vstupem i binární proměnné (popřípadě kategoriální data ve formě tzv. dummies), ale je třeba mít na paměti jednak omezení vyplývající z double zero problému, jednak omezení týkající se poměru počtu proměnných a objektů
- Při výpočtu je nezbytné mít na paměti omezení výpočtu vyplývající z předpokladů analýzy korelací a kovariancí
- Analýza hlavních komponent může být počítána za různým účelem, tomu je třeba přizpůsobit výběr použitého algoritmu a výběr výstupů pro další interpretaci
- Při interpretaci výstupů analýzy hlavních komponent je třeba zvažovat
 - Použitý algoritmus a jeho implementace v použitém SW
 - Typ výstupu PCA a omezení jeho interpretace (standardizace eigenvektorů, typy biplotů apod.)
 - Praktická interpretace výstupů a vliv artefaktů dat (redundantní proměnné, několik metod měření jednoho parametru apod.)