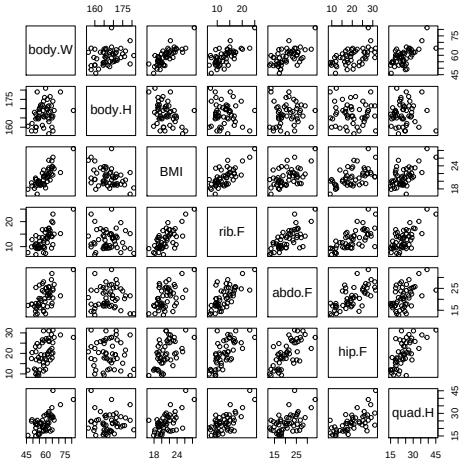
10 Analýza hlavních komponent (PCA)

Příklad 1. V souboru mlrm-fat.txt máme k dispozici antropometrická data mladých zdravých dospělých žen (převážně studentek vysokých škol z Brna): tělesnou hmotnost (proměnná body.W, v kg), tělesnou výšku (proměnná body.H, v cm), BMI (proměnná BMI, v kg/m^2), tloušťku kožní řasy ve výši 10. žebra (proměnná rib.F, v mm), tloušťku kožní řasy na břiše (proměnná abdo.F, v mm), tloušťku kožní řasy na boku (proměnná hip.F, v mm) a tloušťku kožní řasy nad čtyřhlavým svalem stehenním (proměnná quad.H, v mm).

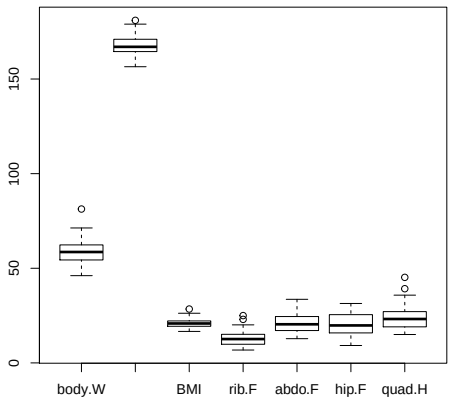
Načteme datový soubor a posoudíme vazby mezi proměnnými pomocí bodových diagramů.

```
fat <- read.table('DATA/mlrm-fat.txt', header=T)
plot(fat)
```



Data znázorníme pomocí krabicových diagramů.

```
boxplot(fat)
```



Podíváme se na korelační matici.

```
R <- cor(fat)
R
```

```
##           body.W       body.H        BMI       rib.F     abdo.F
## body.W 1.0000000  0.284939369  0.7899114  0.69037471 0.58028551
## body.H 0.2849394  1.000000000 -0.3588399 -0.08726129 0.03318397
## BMI    0.7899114 -0.358839858  1.0000000  0.72745544 0.53489013
## rib.F  0.6903747 -0.087261293  0.7274554  1.00000000 0.70532553
## abdo.F 0.5802855  0.033183970  0.5348901  0.70532553 1.00000000
## hip.F  0.5327246 -0.053201429  0.5416473  0.68277901 0.69316107
## quad.H 0.6207775  0.007551012  0.6024704  0.68879439 0.50761994
##              hip.F      quad.H
## body.W  0.53272456 0.620777543
## body.H -0.05320143 0.007551012
## BMI     0.54164729 0.602470351
## rib.F   0.68277901 0.688794385
## abdo.F  0.69316107 0.507619937
## hip.F   1.00000000 0.656692703
## quad.H  0.65669270 1.000000000
```

Vidíme, že korelační koeficienty mezi některými proměnnými jsou v absolutní hodnotě dostatečně velké, má tedy smysl přistoupit k analýze hlavních komponent. Provedeme Bartlettův test o úplné nezávislosti proměnných.

```
n <- nrow(fat)
k <- 7 #pocet promennych

( test.stat <- -n*log(det(R))*(1- (2*k+11)/(6*n)) )

## [1] 407.9905

( kvantil <- qchisq(0.95, df=k*(k-1)/2) )

## [1] 32.67057
```

Hodnota testovací statistiky .....
Kritický obor .....
Závěr .....

K provedení analýzy hlavních komponent použijeme funkci prcomp(), protože máme proměnné v různých jednotkách, nastavíme argumenty center=T, scale.=T, abychom pracovali s korelační maticí:

```
fat.PCA <- prcomp(fat, center=T, scale.=T)
fat.PCA

## Standard deviations (1, .., p=7):
## [1] 2.04761717 1.10336637 0.80357610 0.68875541 0.51374229 0.45148562
## [7] 0.04424491
##
## Rotation (n x k) = (7 x 7):
##                PC1          PC2          PC3         PC4          PC5
## body.W  0.40951111 -0.285871559 -0.508568602 -0.17057416  0.242304902
```

```
## body.H -0.02344427 -0.903889345 -0.038432845  0.01241701  0.003333954
## BMI     0.41202400  0.298452358 -0.486269446 -0.16308369  0.211789814
## rib.F   0.44004864  0.049959964  0.034830865 -0.06621216 -0.569614937
## abdo.F  0.39004710 -0.087292192  0.466719822 -0.55059136 -0.234828665
## hip.F   0.39892312  0.007004983  0.533241456  0.18444630  0.664115894
## quad.H  0.39631811 -0.044974425 -0.005990611  0.77627227 -0.275257507
##                PC6          PC7
## body.W -0.03769926  0.634592494
## body.H  0.09074296 -0.415400713
## BMI    -0.09423121 -0.651439719
## rib.F   0.68829736  0.007037453
## abdo.F -0.51389332 -0.005852338
## hip.F   0.28495337 -0.014001572
## quad.H -0.40302226  0.009004806
```

Ve výpisu vidíme směrodatné odchylky komponent, které souvisí s vlastními čísly korelační matice, konkrétně se jedná o odmocninu vlastních čísel. Můžeme si to ověřit tak, že vypočítáme vlastní čísla korelační matice pomocí funkce eigen() a srovnáme je s druhou mocninou směrodatných odchylek, které nám poskytuje funkce prcomp():

```
(vl.cisla <- eigen(R)$values)

## [1] 4.192736088 1.217417336 0.645734546 0.474384014 0.263931143 0.203839262
## [7] 0.001957612

(vl.cisla.pca <- fat.PCA$sdev^2)

## [1] 4.192736088 1.217417336 0.645734546 0.474384014 0.263931143 0.203839262
## [7] 0.001957612
```

Ve výpisu dále vidíme vlastní vektory neboli hlavní komponenty, pokud bychom s nimi dále chtěli pracovat, můžeme si je uložit samostatně:

```
pc <- fat.PCA$rotation
```

Funkce summary() vypíše pro jednotlivé komponenty jejich směrodatnou odchylku, podíl vysvětleného rozptylu a kumulativní podíl vysvětleného rozptylu.

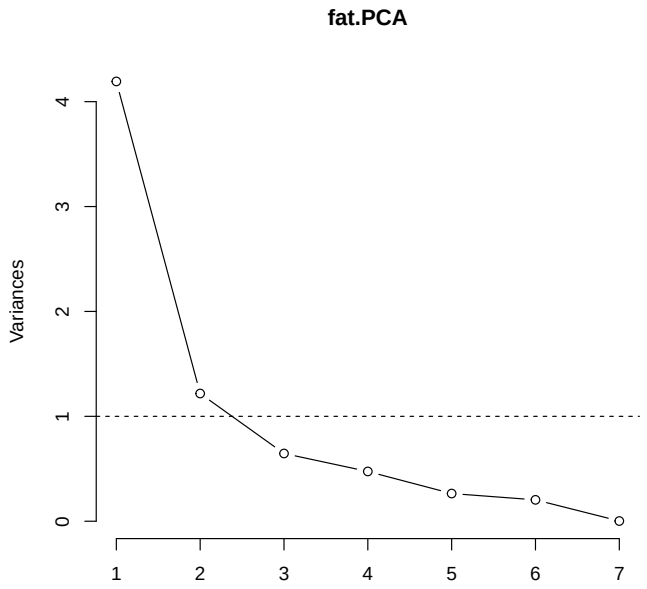
```
summary(fat.PCA)

## Importance of components%s:
##                           PC1    PC2     PC3     PC4    PC5     PC6     PC7
## Standard deviation     2.048 1.1034 0.80358 0.68876 0.5137 0.45149 0.04424
## Proportion of Variance 0.599 0.1739 0.09225 0.06777 0.0377 0.02912 0.00028
## Cumulative Proportion  0.599 0.7729 0.86513 0.93290 0.9706 0.99972 1.00000
```

Vidíme, že první komponenta vysvětluje .....% variability, druhá komponenta .....% variability a třetí vysvětluje .....% variability. Dohromady vysvětlují ..... % variability.

Počet m hlavních komponent můžeme volit na základě několika pravidel. Pokud bychom požadovali, aby m hlavních komponent vysvětlovalo alespoň 70 % variability, vybrali bychom ..... hlavní komponenty.

Další kritéria si můžeme zobrazit graficky v tzv. sutinovém grafu. Pokud do něj přidáme vodovonou čáru ve výšce 1, můžeme tak zhodnotit zároveň i Kaiserovo kritérium:

```r
plot(fat.PCA, type='l')
abline(h=1, lty=2)
```



Počet hlavních komponent na základě Kaiserova kritéria: .....
Počet hlavních komponent na základě zploštění v sutinovém grafu: .....

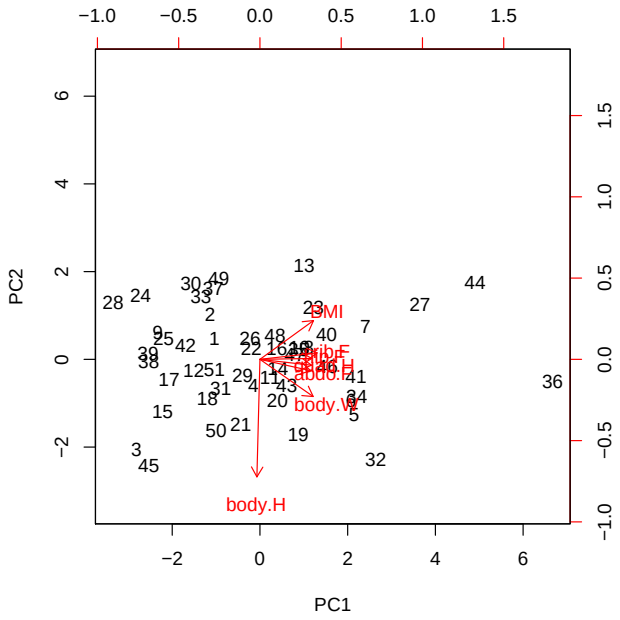
Omezíme se na dvě hlavní komponenty.
Abychom mohli první dvě komponenty interpretovat, vypočítáme si korelace pozorování v původních proměnných a v souřadnicích vybraného počtu hlavních komponent.

```r
fat.in.pc <- fat.PCA$x #pozorovani v souradnicich hlavnich komponentach
cor(fat,fat.in.pc[,1:2])
```

```
##                PC1          PC2
## body.W  0.83852198 -0.315421063
## body.H -0.04800489 -0.997321101
## BMI     0.84366741  0.329302293
## rib.F   0.90105116  0.055124143
## abdo.F  0.79866714 -0.096315268
## hip.F   0.81684182  0.007729063
## quad.H  0.81150777 -0.049623267
```

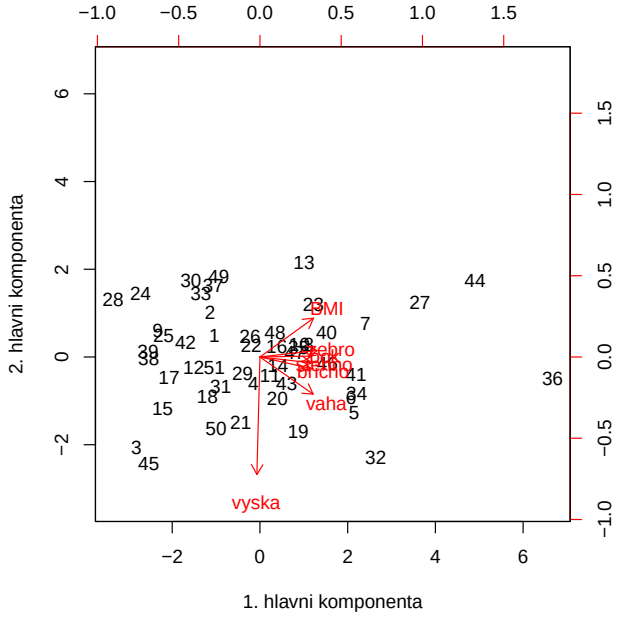
První komponenta má vysoké korelace s tělesnou vahou, BMI, a tloušťkou kožní řasy na žebru, břiše, boku i stehně, které byly i v původním souboru mezi sebou vysoce korelované. Druhá komponenta má vysokou korelaci s tělesnou výškou, bude tedy odlišovat sledované jedince na základě výšky.
Pozorování si můžeme vykreslit v rovině prvních dvou komponent pomocí funkce biplot(), která nám zároveň vykreslí i původní proměnné v rovině prvních svou komponent.

```r
biplot(fat.PCA, scale=0)
```



I z tohoto grafu vidíme, že proměnná tělesná výška není příliš korelovaná s ostatními proměnnými. Pozn.: Pokud by naše pozorování měla nějaká jména/značky, můžeme je v biplot() nastavit pomocí argumentu xlabs=. Stejně tak lze změnit jména proměnných pomocí argumentu ylabs=. Popisky os lze změnit klasickým způsobem.

```
biplot(fat.PCA, scale=0, ylabs=c('vaha', 'vyska', 'BMI', 'zebro', 'bricho', 'bok', 'stehno'),
       xlab='1. hlavni komponenta', ylab='2. hlavni komponenta' )
```



Dále je možné si vybrat dvojici komponent, v kterých chceme vykreslovat, pomocí argumentu choices=, Pokud by nás zajímala například 1. a 3. komponenta, nastavili bychom choices=c(1,3).

Podíváme se ještě na reprodukovanou korelační matici a reziduální korelační matici.

```
(R.reproduced <- pc[,1:2] %*% diag(vl.cisla.pca[1:2]) %*% t(pc[,1:2]))
```

```
##           body.W      body.H        BMI       rib.F     abdo.F       hip.F
## body.W 0.8026096  0.27432292  0.6035648  0.73816389 0.70007982  0.68250192
## body.H 0.2743229  0.99695385 -0.3689203 -0.09823134 0.05771732 -0.04692076
## BMI    0.6035648 -0.36892029  0.8202147  0.77834000 0.64209260  0.69168802
## rib.F  0.7381639 -0.09823134  0.7783400  0.81493186 0.71433065  0.73644233
## abdo.F 0.7000798  0.05771732  0.6420926  0.71433065 0.64714583  0.65164029
## hip.F  0.6825019 -0.04692076  0.6916880  0.73644233 0.65164029  0.66729030
## quad.H 0.6961193  0.01053399  0.6683016  0.72847457 0.65290406  0.66248994
##            quad.H
## body.W 0.69611933
## body.H 0.01053399
## BMI    0.66830160
## rib.F  0.72847457
## abdo.F 0.65290406
## hip.F  0.66248994
## quad.H 0.66100733
```

```
(R.residual <- R - R.reproduced)
```

```
##             body.W       body.H         BMI        rib.F       abdo.F
## body.W  0.19739044  0.010616447  0.18634658 -0.047789179 -0.119794303
## body.H  0.01061645  0.003046151  0.01008043  0.010970044 -0.024533348
## BMI     0.18634658  0.010080433  0.17978530 -0.050884566 -0.107202467
## rib.F  -0.04778918  0.010970044 -0.05088457  0.185068141 -0.009005123
## abdo.F -0.11979430 -0.024533348 -0.10720247 -0.009005123  0.352854172
## hip.F  -0.14977736 -0.006280666 -0.15004073 -0.053663318  0.041520776
## quad.H -0.07534178 -0.002982975 -0.06583125 -0.039680188 -0.145284128
##               hip.F       quad.H
## body.W -0.149777355 -0.075341783
## body.H -0.006280666 -0.002982975
## BMI    -0.150040730 -0.065831249
## rib.F  -0.053663318 -0.039680188
## abdo.F  0.041520776 -0.145284128
## hip.F   0.332709699 -0.005797239
## quad.H -0.005797239  0.338992674
```

V reziduální korelační matici vidíme hodnoty v absolutní hodnotě menší než 0.2.