Wprowadzenie Ogólna charakterystyka Klasyczna analiza czynnikowa Analiza składowych głównych – PCA Porównanie FA i PCA

Metody czynnikowe

Maciej Nasiński, Paweł Strawiński, Dorota Celińska-Kopczyńska

Uniwersytet Warszawski

10 grudnia 2022

- Wprowadzenie
- Ogólna charakterystyka
 - Obszar zastosowań
 - Podział metod czynnikowych
- 3 Klasyczna analiza czynnikowa
 - Formalny zapis modelu i metody estymacji
 - Rotacja czynników
 - Wybór optymalnej liczby czynników
 - Interpretacja i ocena jakości
- 4 Analiza składowych głównych PCA
 - Ogólna charakterystyka
 - Metoda
- Porównanie FA i PCA



Wprowadzenie

- Metody czynnikowe stanowią zbiór metod i procedur statystycznych pozwalających na redukcję dużej liczby zmiennych do kilku wzajemnie nieskorelowanych czynników.
- Za ich pomocą można zachować stosunkowo duża część informacji zawartych w zmiennych pierwotnych.
- Jednocześnie każda z tych metod niesie inne treści merytoryczne.

Cele

- Redukcja liczby zmiennych bez istotnej straty zawartych w nich informacji
- Transformacja układu zmiennych w nowy układ czynników głównych
- Tworzenie skal i miar z kilku zmiennych
- Ustalanie wag określających znaczenie, jakie należy przypisać poszczególnym zmiennym podczas analizy
- Ortogonalizacja przestrzeni, w której rozpatrywane są obiekty będące przedmiotem analizy
- Wykrywanie ukrytych związków między zmiennymi
- Opis zjawisk za pomocą nowych kategorii zdefiniowanych przez czynniki



Przykłady zastosowań

- Kiedy interesuje nas eksploracja i rozpoznanie struktury zbioru danych.
- Gdy nie posiadamy modelu "głębokiej" struktury czynników wyjaśniających związki między danymi.
- Gdy potrzebujemy zredukować zbiór zmiennych skorelowanych ze sobą do wykorzystania ich w postaci zagregowanej w późniejszych etapach analizy.
- Gdy chcemy stworzyć skalę, indeks, miernik ukrytego zjawiska i jednoznacznie wyliczyć jego wartość.

Przykładowe pytania i zagadnienia badawcze

- Stworzenie indeksu kapitału społecznego (FA)
- Wypowiedzenie się na temat postawy respondentów w oparciu o wiele stwierdzeń dotyczących jednego zagadnienia (np. zadowolenia ze spędzania czasu wolnego) (FA lub PCA)
- Stworzenie agregatowej zmiennej z wartości pomiarów potrzebnej do dalszej analizy (PCA)
- Stworzenie zmiennej opisującej objawy depresji, do wykorzystania w regresji liniowej, celem uniknięcia silnego skorelowania zmiennych (PCA)

Dwa modele metod czynnikowych

- Model klasyczny, w którym wariancję całkowitą zmiennych dzieli się na wariancję wspólną i wariancję specyficzną (klasyczna analiza czynnikowa).
- Model komponentowy, w którym nie uwzględnia się struktury wariancji (metoda składowych głównych).

Ogólna charakterystyka metody

- Klasyczna analiza czynnikowa (factor analysis (FA) służy do znajdowania ukrytych czynników, które określają związki pomiędzy zmiennymi pierwotnymi (obserwowalnymi).
- Zbiór zmiennych pierwotnych dzieli się na podzbiory, które są silnie determinowane przez określoną grupę czynników (ukrytych) a słabiej przez pozostałe.
- Jest to metoda modelowania liniowego zakłada się, że zmienne można przedstawić za pomocą liniowej funkcji zmiennych ukrytych (czynników)
- Nie ma podziału na zmienne objaśniające i objaśniane.

Formalny zapis modelu i metody estymacj Rotacja czynników Wybór optymalnej liczby czynników Interpretacja i ocena jakości

Obszar zastosowania analizy czynnikowej

- Analiza wyjaśniająca (eksploracyjna)
 - Czynniki są opisywane przez grupowanie w zbiory zmiennych najsilniej ze sobą skorelowanych;
 - Technika ma za zadanie wykryć zależności pomiędzy zmiennymi pierwotnymi, a zmiennymi ukrytymi bez wstępnych założeń dotyczących kierunku tych powiązań;
- Analiza potwierdzająca
 - Za jej pomocą potwierdzamy hipotezy badawcze o występowaniu pewnych nieobserwowalnych zjawisk
 - Technika ta testuje określoną strukturę czynników, w której zmienne pierwotne zależą od domniemanych lub znanych badaczowi zmiennych ukrytych

Zależność funkcyjna

$$X_i = f(F_1, F_2, \ldots, F_p) + \varepsilon_i$$

- p liczba zmiennych ukrytych
- k − liczba zmiennych pierwotnych
- X_i zmienna wyjściowa, o której zakłada się, że ma rozkład normalny (i = 1, ..., k)
- F_j zmienna ukryta, czynnik j = 1, 2, ..., p, gdzie $p \leqslant k$
- ε_i czynnik losowy, zakłada się, że jest to zmienna losowa o rozkładzie normalnym.

Zależność funkcyjna cd.

$$X_i = \lambda_{i1} f_1 + \lambda_{i2} f_2 + \dots + \lambda_{ip} f_p + \varepsilon_i$$
$$X = \Lambda f + \varepsilon$$

• λ_i – waga stojąca przy j-tej zmiennej ukrytej dla i-tej zmiennej pierwotnej, inaczej ładunek czynnikowy

Założenia dotyczące wariancji

$$\sigma_{i} = \lambda_{i1}^{2} + \lambda_{i2}^{2} + \dots + \lambda_{ip}^{2} + \varphi = \sum_{j=1}^{p} \lambda_{ij}^{2} + \varphi$$

$$Cov(X_{i}, X_{j}) = \lambda_{i1}\lambda_{j1} + \dots + \lambda_{ip}\lambda_{jp}$$

$$\sum_{j=1}^{p} \lambda_{ij}^{2} + \varphi$$

- σ_i wariancja zmiennej wyjściowej X_i
- $\sum_{j=1}^{p} \lambda_{ij}^2$ zmienność wspólna zmiennej wyjściowej X_i
- ullet φ zmienność swoista zmiennej wyjściowej X_i
- Σ macierz kowariancji, Φ to macierz z wartościami swoistymi na przekątnej (estymowana za pomocą macierzy kowariancji lub korelacji z próby)

Założenia dodatkowe

- Czynniki wspólne nie są skorelowane ze sobą
- Czynniki swoiste (inaczej specyficzne) nie są skorelowane ze sobą
- Czynniki wspólne i swoiste nie są ze sobą skorelowane
- Czynniki wspólne są zestandaryzowane: $E(F_j) = 0$ i $Var(F_j) = 1$

Algorytm

- Szukamy oszacowań ładunków dla czynników oraz dla części wspólnej wariancji
- Po określeniu rozwiązania początkowego w następnym kroku można dokonać rotacji czynników w celu łatwiejszej interpretacji
- Rozwiązujemy względem $\hat{\Lambda}$ i $\hat{\Phi}$ ograniczenie:

$$S = \hat{\Lambda} \hat{\Lambda}' + \hat{\Phi}$$

Metoda osi głównych

- Metodę osi głównych stosuje się przy wyznaczaniu współczynników głównych składowych
- Jedyna różnica, w stosunku do procedury stosowanej w analizie głównych składowych, polega na wykorzystaniu zredukowanej macierzy korelacji zamiast pełnej macierzy korelacji
- Na głównej przekątnej zredukowanej macierzy korelacji zamiast jedynek znajdują się wartości zasobów zmienności wspólnej kolejnych zmiennych pierwotnych

Metoda centroidalna

- Opiera się na geometrycznym podejściu do analizy czynnikowej
- Kolumny macierzy danych wejściowych można interpretować jako konfigurację m wektorów zmiennych w n wymiarowej przestrzeni euklidesowej R_n. Wzajemny układ wektorów, reprezentujących zmienne, określa korelacje pomiędzy zmiennymi, tzn. cosinusy kątów między wektorami są równe współczynnikom korelacji pomiędzy zmiennymi
- Zakłada się, że osie poszczególnych czynników przechodzą przez środki ciężkości (centroidy) konfiguracji wektorów
- Kolejne czynniki wyjaśniają maksymalną część zmienności wspólnej zmiennych pierwotnych
- Wartości ładunków czynnikowych to współrzędne punktów reprezentujących zmienne w nowym, ortogonalnym układzie odniesienia

Metoda największej wiarygodności

- W przeciwieństwie do innych metod, tutaj określamy liczbę czynników wspólnych, którą chcemy uzyskać przed przystąpieniem do analizy
- Założenie: dane wejściowe, zmienne wyjściowe, składnik losowy oraz funkcje zmiennych ukrytych pochodzą z próby o wielowymiarowym rozkładzie normalnym
- Postać funkcji wiarygodności:

$$L = -\frac{1}{2}n\{\ln|\Lambda\Lambda' + \Phi| + tr(S|\Lambda\Lambda' + \Phi|^{-1})\}$$

Rotacja czynników

- Uzyskana macierz ładunków czynnikowych nie jest jedynym możliwym rozwiązaniem analizy czynnikowej
- Można wygenerować nieskończenie wiele różnych macierzy ładunków poprzez obrót układu wzajemnie ortogonalnych osi
- Rotacja ma pomóc w znalezieniu układu, który będzie prostszy w interpretacji
- Istnieją dwie grupy metod rotacji: ortogonalne i ukośne

Rotacje ortogonalne

- Polegają na znalezieniu ortogonalnej macierzy transformacji
- Najbardziej znane metody to varimax i quartimax
- Varimax minimalizuje liczbę zmiennych potrzebnych do wyjaśnienia danego czynnika
- Quartimax minimalizuje liczbę czynników potrzebnych do wyjaśnienia danej zmiennej

Rotacje ukośne

- Macierz ładunków staje się macierzą wzorców zachowań
- Do wyznaczenia korelacji czynników wykorzystuje się wagi nadane poszczególnym czynnikom F

Metody wyboru liczby czynników

Do wyboru optymalnej liczby czynników można stosować następujące metody:

- Metodę procentu wariancji tłumaczonej przez czynniki
- Metodę wartości własnych większych od jedności
- Metodę testu osypiska

Ale i tak ostateczna decyzja jest subiektywnym wyborem badacza

Metoda wartości własnej większej od jedności

- Jest to najczęściej spotykana metoda: każdy czynnik powinien wyjaśniać zmienność co najmniej jednej zmiennej pierwotnej
- Polecana, jeśli liczba zmiennych jest większa niż 20
- W przypadku analiz na mniejszych zbiorach danych, metoda ta ma tendencję do wybierania zbyt małej liczby czynników

Metoda procentu wariancji tłumaczonej

- Liczbę wybranych czynników ustala się na podstawie procentu wariancji przez nie tłumaczonej
- Dążymy do odtworzenia co najmniej 70% wariancji (niższe wartości w przypadku dużych zbiorów danych)
- Zaden następny czynnik poza wybranymi przez nas nie tłumaczy więcej niż 5% wariancji.

Metoda testu osypiska

- Najpierw sporządzamy wykres, na którym na osi poziomej umieszczamy kolejne czynniki, natomiast na osi pionowej ich wartości własne
- Szukamy punktów załamania, w których zmienia się kąt załamania krzywej (zaczynają się kolejne rumowiska)
- Miejsce punktu załamania określa maksymalną liczbę czynników kwalifikujących się do dalszej analizy
- Metoda ta pozwala włączyć do analizy większą liczbę czynników niż metoda wartości własnych większych od 1

Formalny zapis modelu i metody estymacj Rotacja czynników Wybór optymalnej liczby czynników Interpretacja i ocena jakości

Nazwy czynników

- Dla każdego czynnika wybieramy kilka zmiennych o najwyższych ładunkach czynnikowych
- Następnie spróbować nadać wspólną nazwę w oparciu o te zmienne danemu czynnikowi
- Mając nazwy czynników spróbować znaleźć ich odniesienie do danego, głębszego wymiaru, ich związek z badaną zmienną ukrytą

Wskaźnik Kaisera-Mayera-Olkina (KMO)

- Informuje, czy istnieją podstawy do stosowania analizy czynnikowej
- Indeks o wartościach [0,1] porównuje cząstkowe współczynniki korelacji z dwuzmiennowymi współczynnikami korelacji

$$KMO = \frac{\sum_{i \neq j} \sum_{j \neq i} r_{ij}^2}{\sum_{i \neq j} \sum_{j \neq i} r_{ij}^2 + \sum_{i \neq j} \sum_{j \neq i} a_{ij}^2}$$

- r_{ij} element macierzy korelacji R
- a_{ij} współczynnik korelacji cząstkowej
- Im wartość wskaźnika bliższa 1, tym silniejsze podstawy do zastosowania analizy czynnikowej

Test Bartletta o sferyczności

- H_0 : R = I (macierz korelacji jest macierzą jednostkową)
- H_1 : $R \neq I$ (macierz korelacji nie jest macierzą jednostkową)
- Dążymy do odrzucenia H₀

Analiza składowych głównych (PCA)

- Stanowi metodę transformacji zmiennych pierwotnych we wzajemnie ortogonalne nowe zmienne, tzw. składowe główne
- Służy redukcji wymiaru przestrzeni cech oraz pogrupowaniu ich w podzbiory
- Dzięki niej można graficznie zaprezentować konfigurację porównywanych zmiennych

Ogólna charakterystyka – cd.

- Zmienne pierwotne poddaje się standaryzacji, więc ich wariancje są sobie równe
- Nowa agregatowa zmienna powinna wyjaśniać maksymalną ilość wariancji zmiennych pierwotnych
- Wariancja nowej zmiennej agregatowej jest nazywana wartością własną (eigenvalue)
- Zbiór danych powinien być jednorodny (brak obserwacji odstających)

Zapis formalny modelu

$$PC_{i} = w_{i1}X_{1} + w_{i2}X_{2} + \dots + w_{ik}X_{k}$$

$$\sum_{j=1}^{k} w_{ij}^{2} = 1$$

- Współczynniki w przy zmiennych X stanowią wagi, jakie przypisuje się zmiennym w tworzeniu głównej składowej
- Zakładamy, że poszukiwane czynniki są niezależne i mają wystandaryzowany rozkład normalny

Wyznaczanie współczynników

- Wartości wektora w są tak dobierane, żeby maksymalizować wariancję PC
- Szukamy wartości własnych następującego równania:

$$|R - \lambda I| = 0$$

- R macierz korelacji k zmiennych wyjściowych
- Λ wektor zawierający wartości własne o wymiarach kxk
- Wariancją i-tej składowej jest i-ta wartość własna

Wyznaczanie współczynników – cd

 Każdej wartości własnej możemy przypisać wektor własny macierzy o postaci:

$$Rw_i = \lambda_i w_i$$

- w_i wektor własny macierzy korelacji
- Wartości składowe tego wektora stanowią wartości współczynników stojących przy zmiennych pierwotnych; ich kombinacja tworzy nowe zmienne: składowe główne
- Pułapka: utworzona kombinacja liniowa jest zależna od jednostek miary i rzędów wielkości poszczególnych zmiennych (należy standaryzować zmienne!)

Wybór optymalnej liczby składowych głównych

- Dążymy do odtworzenia maksymalnej ilości informacji z pierwotnego zbioru zmiennych
- W praktyce wybieramy liczbę składowych, które łącznie wyjaśniają powyżej 70% zmienności zmiennych pierwotnych
- Nie uwzględniamy tych składowych, dla których wartości własne są niższe od średniej
- Można opuścić główne składowe, dla których wartości własne są niższe od 1 (symulacje wskazują, że lepszym progiem jest 0,7)
- Opuszczamy składowe, które mają mniejszy udział w wariancji niż 5%

Wybór właściwego modelu

- Wybór między PCA a FA zależy przede wszystkim od celu analizy
- W klasycznej analizie czynnikowej mała liczba czynników pozwala wyjaśniać zależności pomiędzy zmiennymi obserwowalnymi; chcemy zidentyfikować zmienne ukryte
- W analizie składowych głównych dążymy do zachowania jak największej ilości informacji przy jak najmniejszej liczbie nowych zmiennych; chcemy uprościć strukturę danych
- FA to analiza modelowa, PCA to technika eksploracyjna, pomocnicza

FA i PCA - różnice

- Wariancja FA obejmuje pewną część wariancji, zwaną wariancją wspólną; PCA obejmuje wariancję całkowitą zmiennych
- Punkt wyjścia dla FA to zredukowana macierz korelacji; dla PCA zwykła macierz korelacji
- Zmienne pierwotne w FA zmienna pierwotna jest funkcją czynników wspólnych i swoistych; w PCA główna składowa jest funkcją zmiennych pierwotnych
- Zależność w FA czynniki mogą być skorelowane; w PCA główne składowe są zawsze niezależne