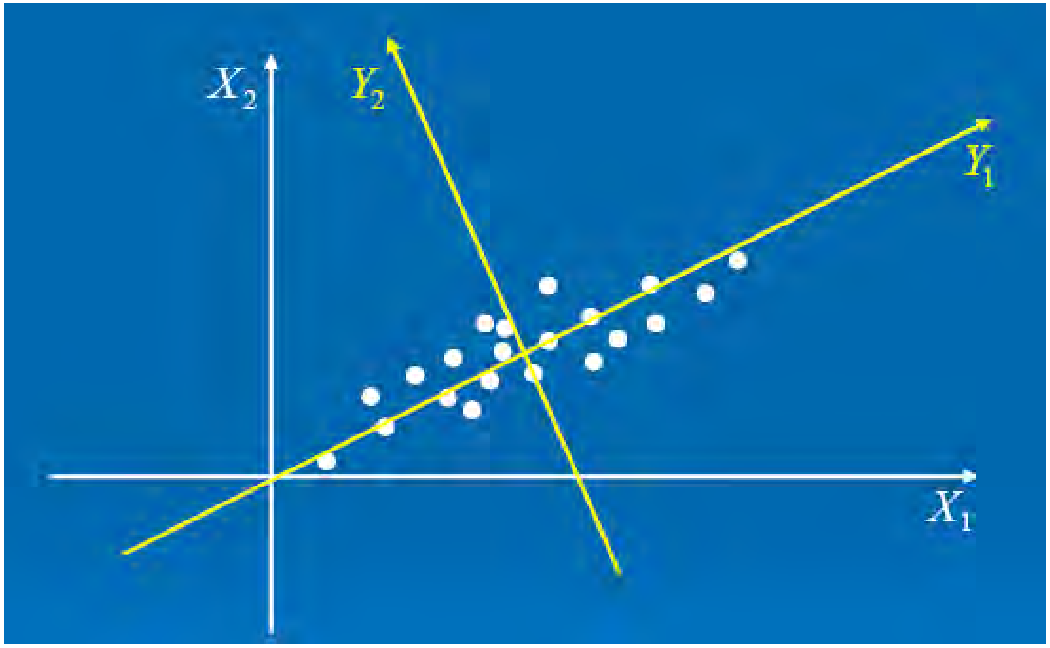
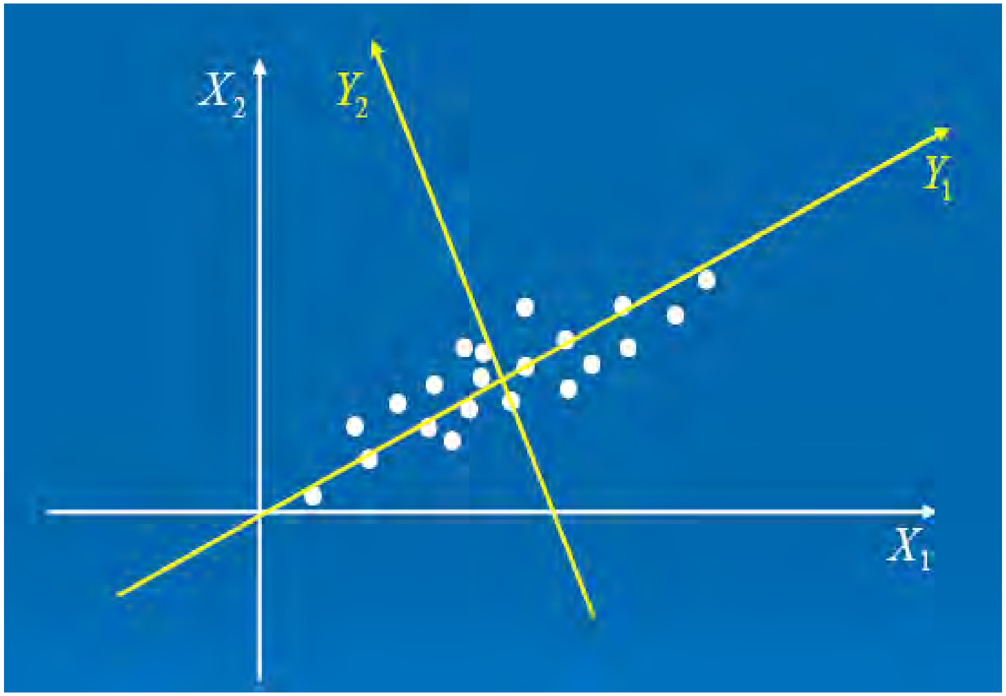
Principal Component Analysis (PCA)

Come evidenziare l'informazione contenuta nei dati



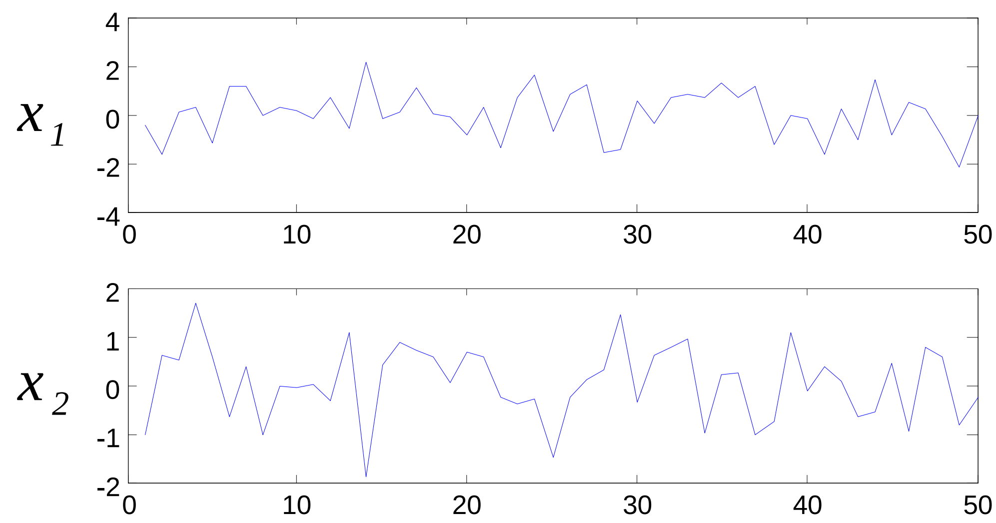
Perche PCA?

- E' un semplice metodo non-parametrico per estrarre informazione rilevante da un insieme di dati "confuso" (ridondante + rumoroso).
- Riesce a eliminare la ***ridondanza*** dell'informazione nei dati, rappresentata dall'***autocorrelazione***
- Geometricamente l'obiettivo della PCA è presentare i dati nel riferimento che evidenza maggiormente la loro struttura (Cambio di riferimento)



Correlazione e ridondanza di informazione

☞ Consideriamo una serie di dati bidimensionali, come in figura



Matrice di covarianza

$$\boxed{\boldsymbol{C} = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \sigma_2^2 \end{bmatrix}}$$

Matrice di correlazione

$$\boxed{\boldsymbol{R} : r_{i,j} = \frac{C_{i,j}}{\sqrt{C_{i,i} \times C_{j,j}}}}$$

☞ Calcolando ***R*** per questi dati si ha

$$\boldsymbol{R} = \begin{bmatrix} 1.0000 & \boxed{-0.2074} \\ -0.2074 & 1.0000 \end{bmatrix}$$

La correlazione fra x_1 e x_2 è circa del 20%. Ciò significa che il 20% dell'informazione di x_1 è contenuta anche in x_2

Ridondanza

Standardizzazione dei dati

☞ Generalmente si preferisce svolgere la PCA su dati standardizzati

Media nulla

Varianza unitaria

$$\begin{cases} E(x) = \bar{x} = 0 \\ \sigma^2(x) = 1 \end{cases}$$

☞ I dati standardizzati si ottengono come

$$\boxed{z = \frac{x - \bar{x}}{\sigma}}$$

☞ Ovviamente per i dati standardizzati la matrice di Covarianza coincide con la matrice di correlazione

$$\boxed{\begin{aligned} &\boldsymbol{C}(x) \neq \boldsymbol{C}(z) \\ &\boldsymbol{R}(x) = \boldsymbol{R}(z) = \boldsymbol{C}(z) \end{aligned}}$$

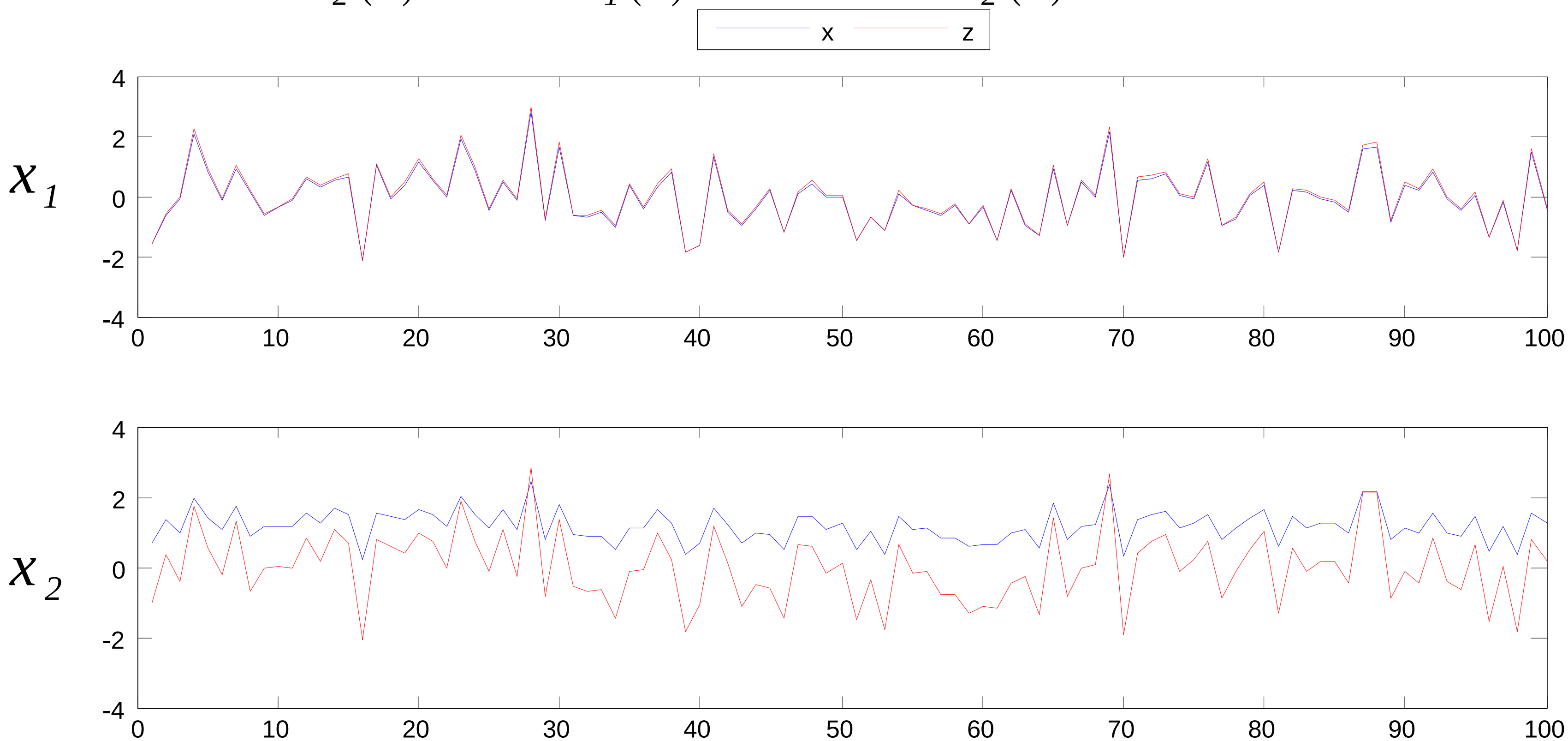
Esempio di dati correlati

☞ Considieriamo il sistema di due variabili *dipendenti* (a parte il rumore ε)

$$x_1(k) = \varepsilon_1(k)$$

$$x_2(k) = 0.4 \times x_1(k) + 1.2 + 0.2 \times \varepsilon_2(k)$$

$$\langle \varepsilon_1(k), \varepsilon_2(k) \rangle = 0$$



Matrici di covarianza e correlazione

Dati originali (x)

$$\boldsymbol{C}_x = \begin{bmatrix} 0.9261 & 0.4000 \\ 0.4000 & 0.2050 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{R}_x = \begin{bmatrix} 1.0000 & 0.9180 \\ 0.9180 & 1.0000 \end{bmatrix}$$

Dati standardizzati (z)

$$\boldsymbol{C}_z = \begin{bmatrix} 1.0000 & 0.9180 \\ 0.9180 & 1.0000 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{R}_z = \begin{bmatrix} 1.0000 & 0.9180 \\ 0.9180 & 1.0000 \end{bmatrix}$$

Autovettori di $\boldsymbol{C_x}$	Autovalori di $\boldsymbol{C_x}$	Autovettori di $\boldsymbol{R_x},\boldsymbol{R_z}$	Autovalori di $\boldsymbol{R_x},\boldsymbol{R_z}$
$\boldsymbol{W}_C = \begin{bmatrix} 0.4065 & -0.9137 \\ -0.9137 & 0.4065 \end{bmatrix}$	$\lambda_1 = 0.0270$ $\lambda_2 = 1.1041$	$\boldsymbol{W}_r = \begin{bmatrix} -0.7071 & 0.7071 \\ 0.7071 & 0.7071 \end{bmatrix}$	$\lambda_1 = 0.0820$ $\lambda_2 = 1.9180$

Riassumendo: su quali dati lavoriamo….

Dataset
$\boldsymbol{X}$

Eliminazione del valor medio

$$\boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{X}_i - \overline{\boldsymbol{X}}_i$$

$$i = 1,\dots,p$$

Standardizzazione

$$x_i^* = \frac{\boldsymbol{X}_i - \overline{\boldsymbol{X}}_i}{\sigma_i}$$

Calcolo della matrice di covarianza

$$\boldsymbol{C} = \frac{1}{n-1}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}$$

$$\boldsymbol{C} \in \Re^{p\times p}$$

Calcolo della matrice di correlazione

$$\boldsymbol{R}_{i,j} = \frac{\boldsymbol{C}_{i,j}}{\sqrt{\boldsymbol{C}_{i,i}\times\boldsymbol{C}_{j,j}}}$$

$$i, j = 1,\dots,p$$

Nota sulla standardizzazione

- La PCA viene normalmente eseguita sulla matrice di Covarianza
  - I dati sono depurati dalla media (PCA su dati a media nulla)
- Se le componenti dei dati hanno ordini di grandezza molto diversi si può ricorrere alla standardizzazione
  - PCA su dati a media nulla e varianza unitaria
  - La matrice di Covarianza coincide con quella di Correlazione $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{R}$
- Le PCA eseguite su C o su R sono radicalmente diverse perché i rispettivi autovalori e autovalori sono diversi e non ottenibili mediante trasformazione ortonormale
  - *Infatti la standardizzazione non è una trasformazione ortogonale*
- *Conclusione: Se le componenti di x sono molto diverse è conveniente la PCA su **R**, tenendo comunque presente che essa sarà diversa da quella ottenuta su **C***

Rappresentazione grafica della covarianza

- Dato un insieme di dati $\boldsymbol{X} \in \Re^{n\times 2}$ si calcola la matrice di covarianza $\boldsymbol{C}$

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{X} - \overline{\boldsymbol{X}}$$

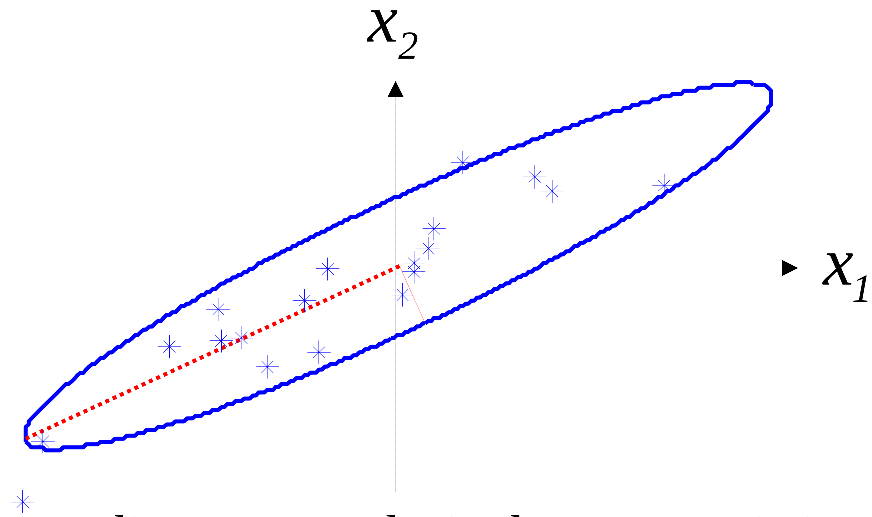
$$\boldsymbol{C} = \frac{1}{n-1}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}$$

- Si calcolano gli autovettori $\boldsymbol{w}$ e gli autovalori $\boldsymbol{\lambda}$
- Fra di essi valgono le relazioni di similitudine

$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{W}\cdot\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{W}^T \qquad \boldsymbol{L} = \boldsymbol{W}^T\cdot\boldsymbol{C}\cdot\boldsymbol{W}$$

con

$$\boldsymbol{W} = [\boldsymbol{w}_1 \,|\, \boldsymbol{w}_2] \qquad \boldsymbol{L} = \begin{bmatrix}\lambda_1 & 0\\ 0 & \lambda_2\end{bmatrix}$$

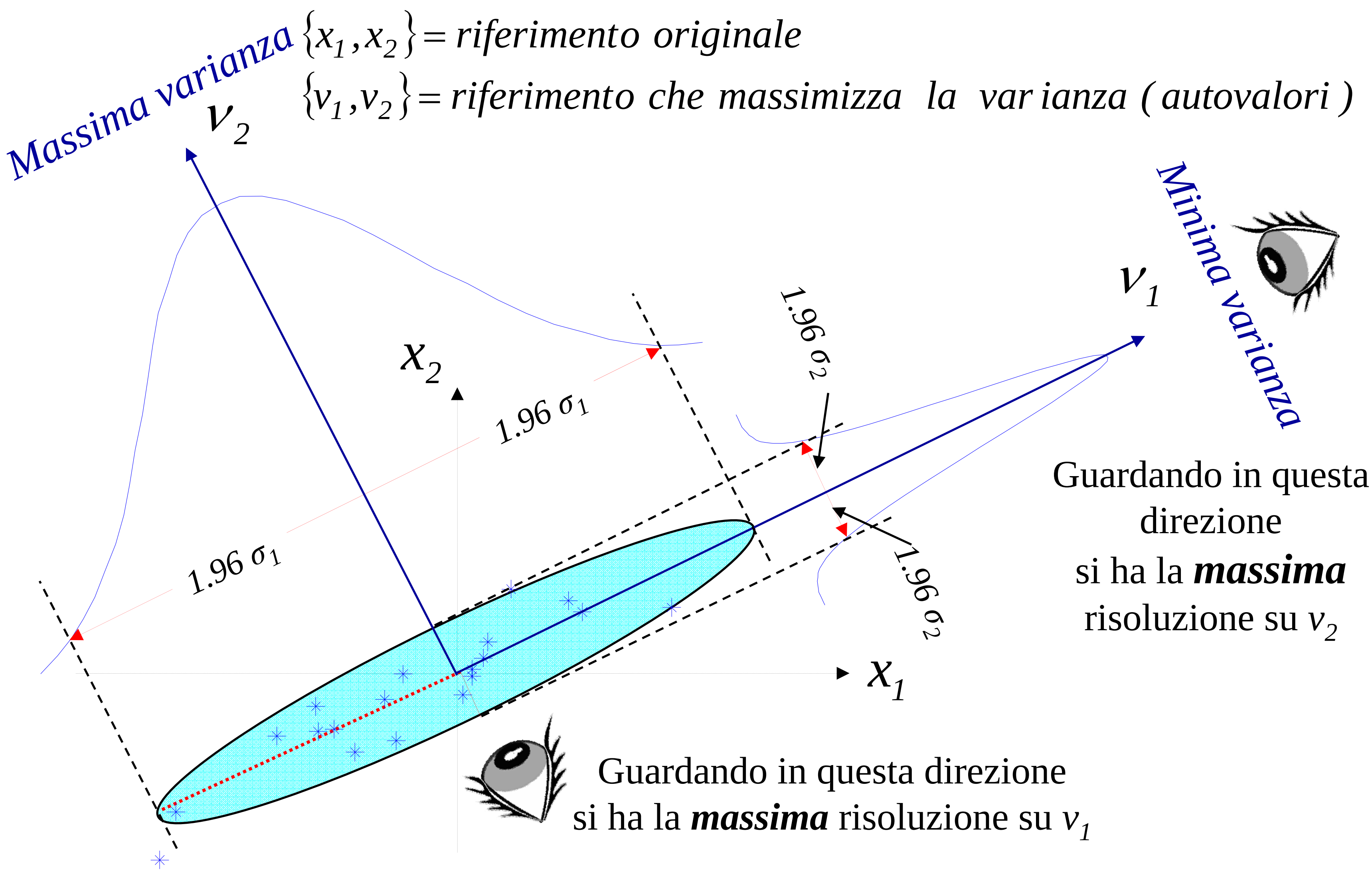


Mediante autovalori ed autovettori si può scrivere l'equazione parametrica dell'ellisse che racchiude il 95% dei dati.

$$\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}w_{11} & w_{12}\\ w_{21} & w_{22}\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}1.96\sqrt{\lambda_1} & 0\\ 0 & 1.96\sqrt{\lambda_2}\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}\cos\varphi\\ -\sin\varphi\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}\bar{x}_1\\ \bar{x}_2\end{bmatrix} \qquad \varphi\in(0,2\pi)$$

Gli autovettori danno le direzioni degli assi dell'ellisse e gli autovettori la loro lunghezza

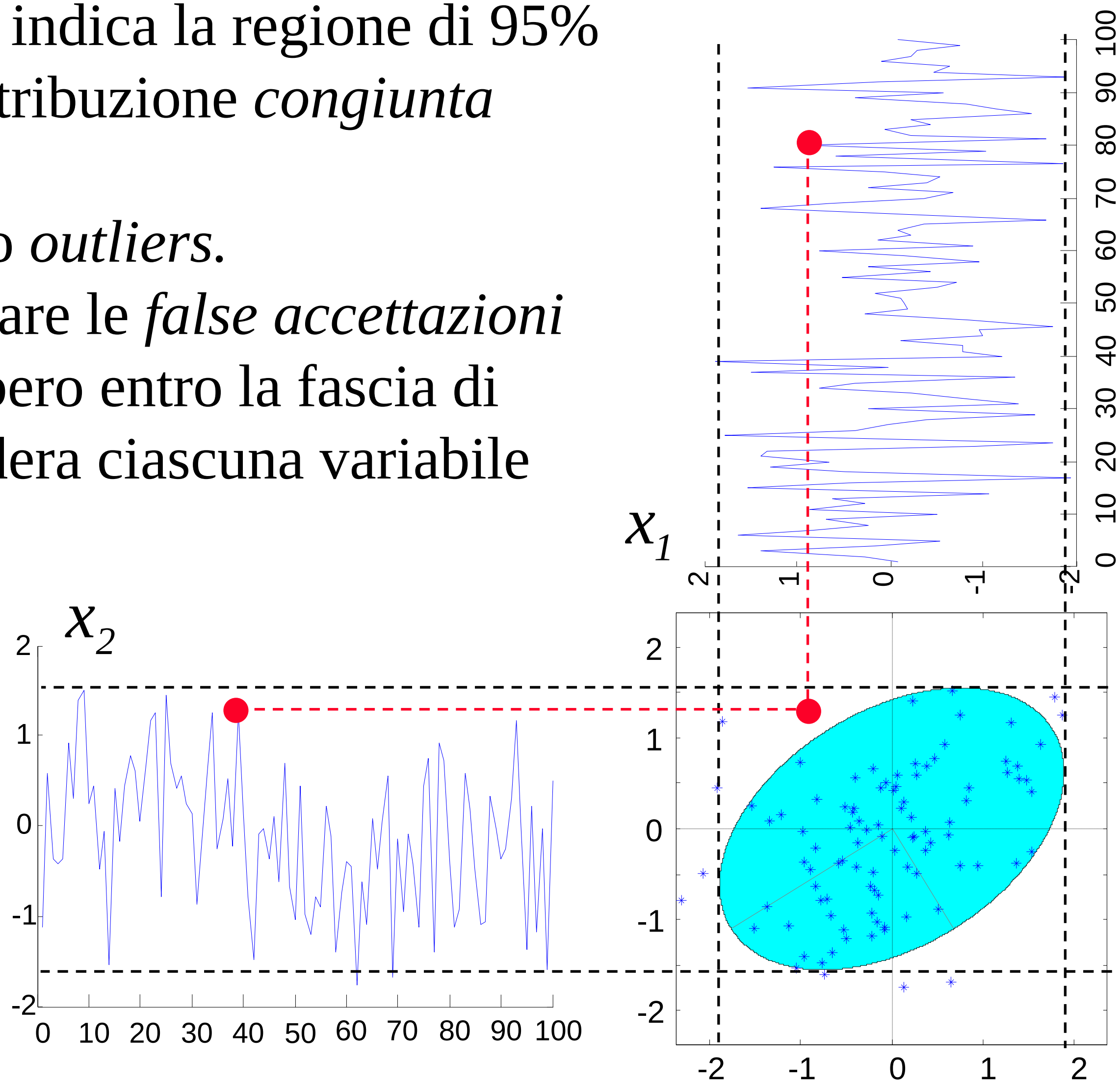
Direzioni principali in funzione della covarianza



Probabilità congiunta e outliers

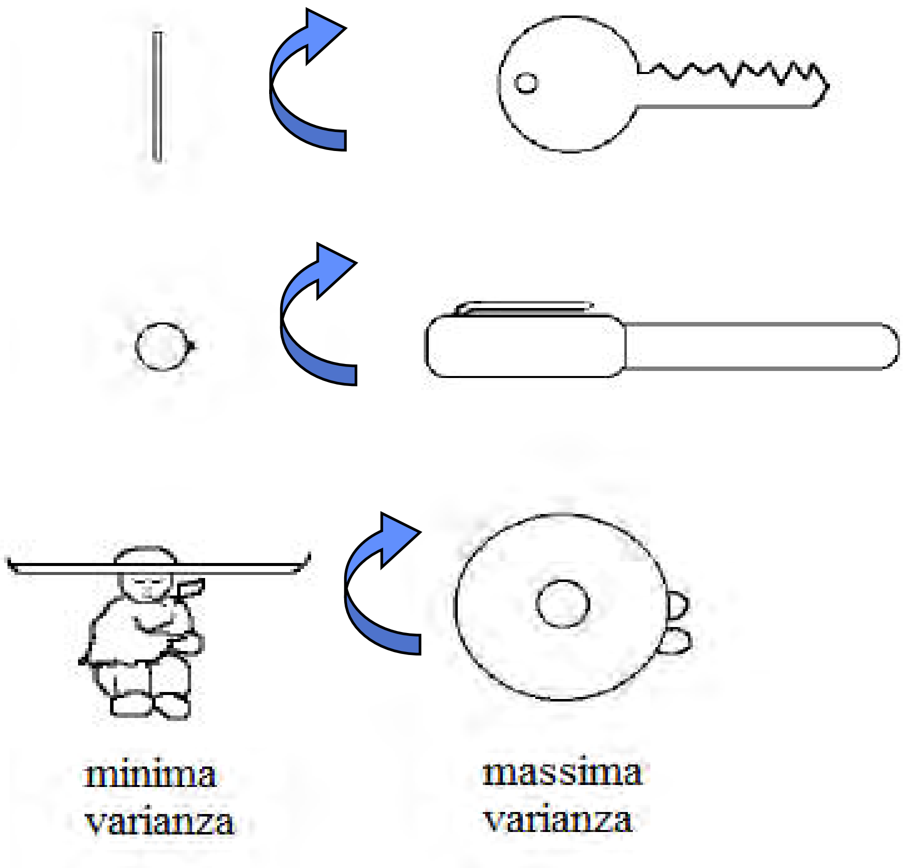
L’ellisse di covarianza indica la regione di 95% di confidenza della distribuzione *congiunta* delle due variabili.
I campioni esterni sono *outliers*.
Perciò permette di evitare le *false accettazioni* di campioni che sarebbero entro la fascia di confidenza se si considera ciascuna variabile *separatamente*.

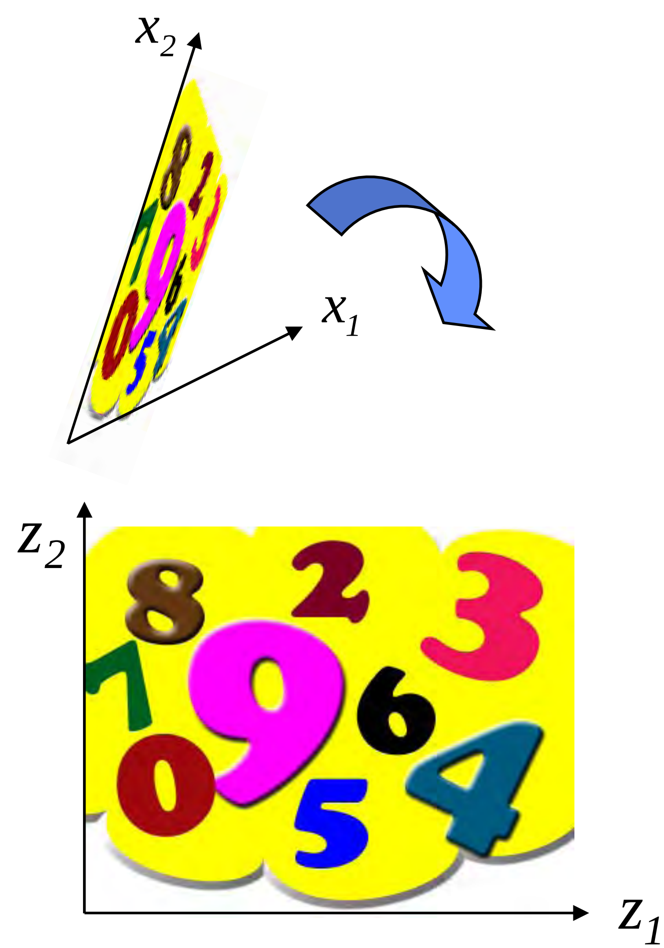
Si vede che il punto rosso ● è fuori solo se si considera la regione di confidenza *bidimensionale*



PCA = migliore visualizzazione

☞ Il cambio di riferimento può essere visto come un cambio di punto di vista che massimizza l'informazione "visibile" nei dati





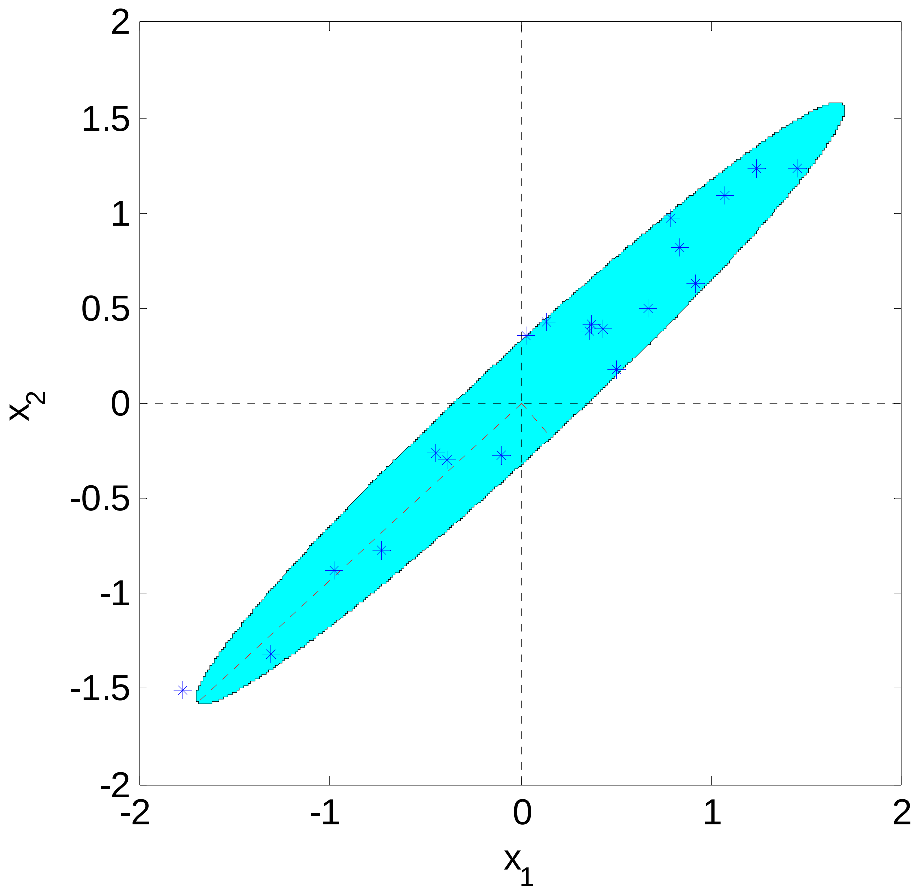
Vantaggi della PCA

- Le PCA forniscono una *spiegazione alternativa della variabilità osservata* con il pregio di descrivere il fenomeno oggetto di studio *mediante dimensioni fra loro non correlate e ordinate* in termini della loro importanza nella spiegazione
- Questo permette (con maggiore o minore successo nei vari casi) di :
  - *interpretare* il fenomeno attraverso il nuovo significato assunto dalle componenti principali che non sono state scartate
  - *ridurre il numero di variabili da considerare*, scartando le ultime componenti principali, che contribuiscono poco alla variabilità osservata

Covarianza fra i dati

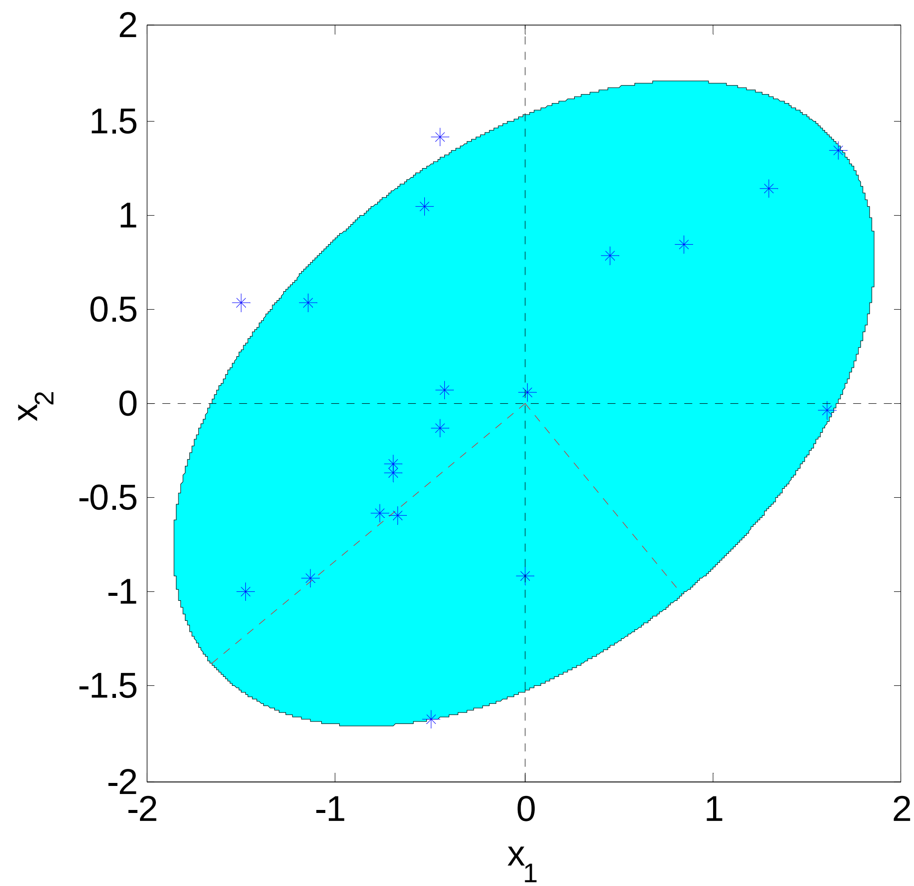
Alta covarianza

$$\begin{cases} x_1 = \varepsilon_1 \\ x_2 = 0.995 x_1 + 0.25\varepsilon_2 \end{cases} \quad \langle \varepsilon_1, \varepsilon_2 \rangle = 0$$



Bassa covarianza

$$\begin{cases} x_1 = \varepsilon_1 \\ x_2 = 0.15 x_1 + 0.95\varepsilon_2 \end{cases} \quad \langle \varepsilon_1, \varepsilon_2 \rangle = 0$$



Rappresentazione grafica della correlazione

- Si può ricavare la matrice di correlazione normalizzando le varianze o calcolando la matrice di covarianza sui dati standardizzati

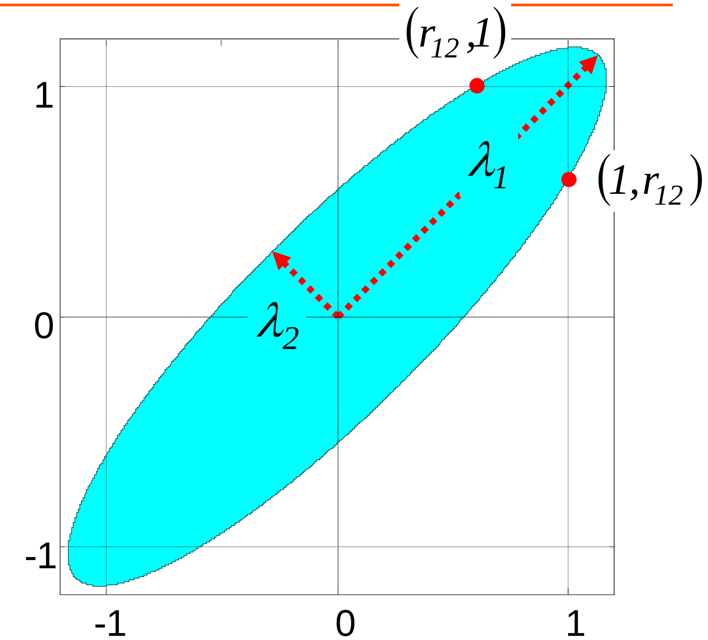
$$\boldsymbol{R}_{i,j} = \frac{\boldsymbol{C}_{i,j}}{\sqrt{\boldsymbol{C}_{i,i} \times \boldsymbol{C}_{j,j}}}$$

- Si ha la matrice simmetrica che nel caso 2x2 è del tipo

$$\boldsymbol{R} = \begin{bmatrix} 1 & r_{12} \\ r_{12} & 1 \end{bmatrix}$$

- Con autovettori e autovalori

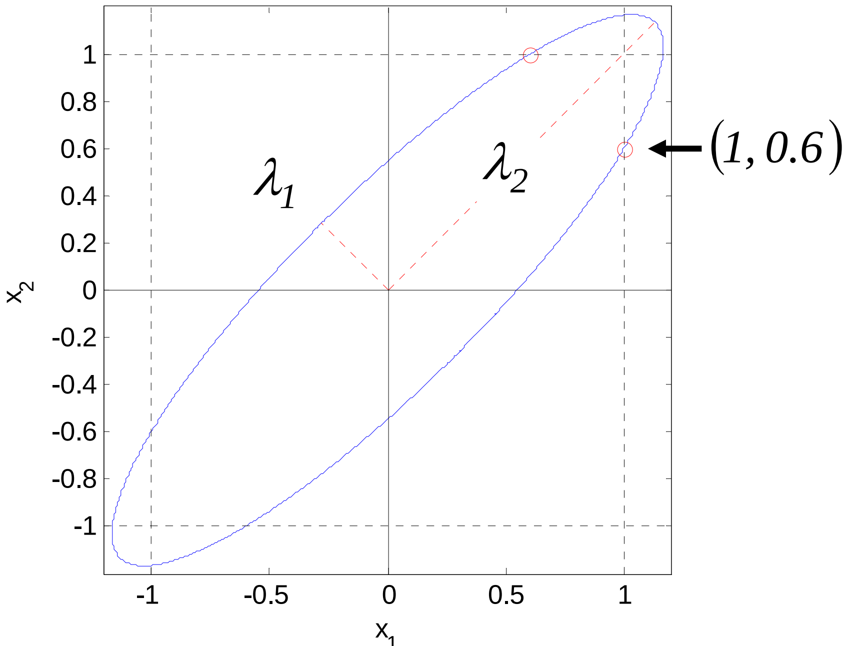
$$\boldsymbol{W} = \begin{bmatrix} -0.7071 & 0.7071 \\ 0.7071 & 0.7071 \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} \lambda_1 = 1 + r_{12} \\ \lambda_2 = 1 - r_{12} \end{matrix}$$

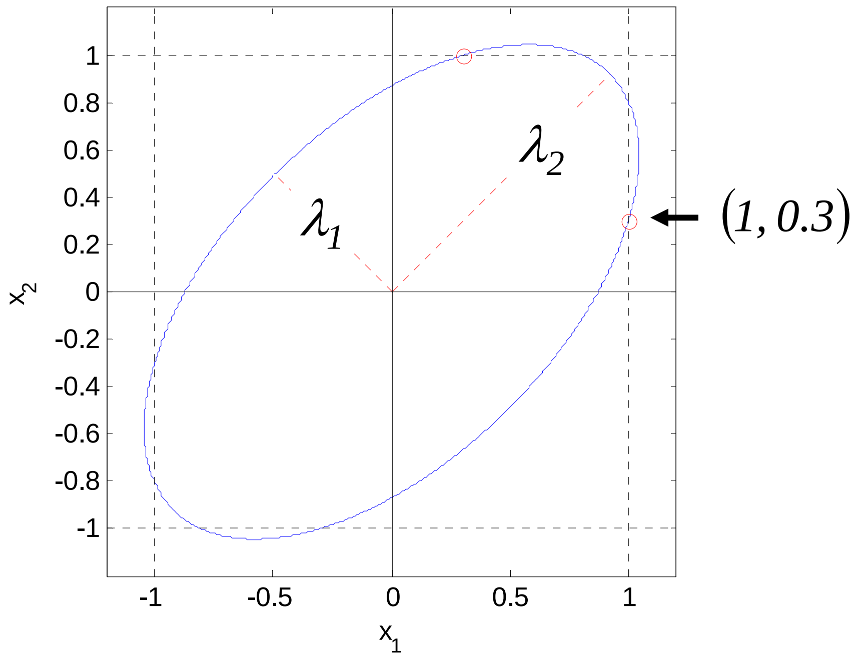


L'equazione dell'ellisse di correlazione, centrata nell'origine è

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} \\ w_{21} & w_{22} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \cos\varphi \\ -\sin\varphi \end{bmatrix}$$

Rappresentazione grafica della correlazione





$$\boldsymbol{R} = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.6 \\ 0.6 & 1.0 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{R} = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.3 \\ 0.3 & 1.0 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{W} = \begin{bmatrix} -0.7071 & 0.7071 \\ 0.7071 & 0.7071 \end{bmatrix} \quad \xleftrightarrow[\textit{autovettori}]{\textit{Uguali}} \quad \boldsymbol{W} = \begin{bmatrix} -0.7071 & 0.7071 \\ 0.7071 & 0.7071 \end{bmatrix}$$

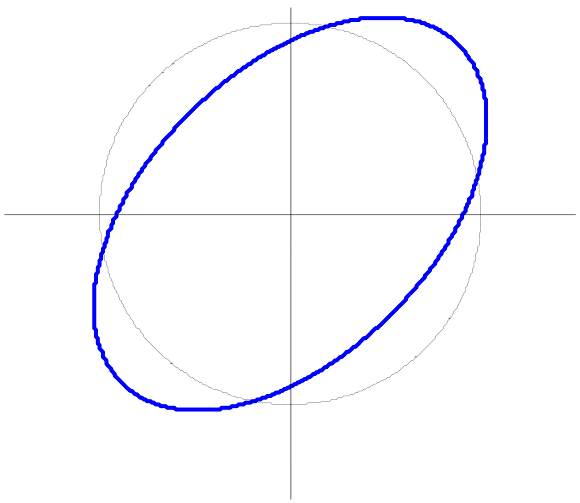
$$\lambda_1 = 0.4 = 1 - r_{12} \qquad \lambda_1 = 0.7 = 1 - r_{12}$$

$$\lambda_2 = 1.6 = 1 + r_{12} \qquad \lambda_2 = 1.3 = 1 + r_{12}$$

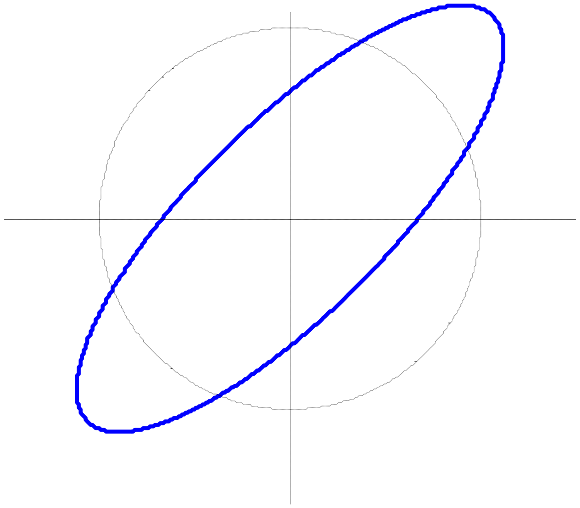
Esempi di ellissi di correlazione

Correlazione = Ridondanza di informazione

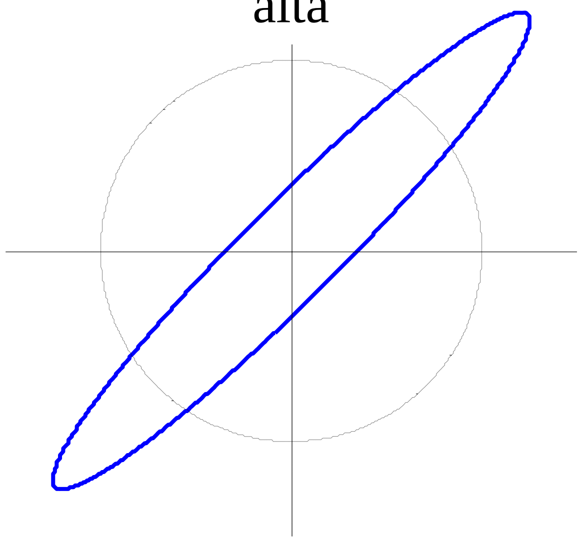
bassa



media



alta



$$\boldsymbol{R} = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.25 \\ 0.25 & 1.0 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{R} = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.5 \\ 0.5 & 1.0 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{R} = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.75 \\ 0.75 & 1.0 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{W} = \begin{bmatrix} -0.7071 & 0.7071 \\ 0.7071 & 0.7071 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{W} = \begin{bmatrix} -0.7071 & 0.7071 \\ 0.7071 & 0.7071 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{W} = \begin{bmatrix} -0.7071 & 0.7071 \\ 0.7071 & 0.7071 \end{bmatrix}$$

$$\lambda_1 = 1 - r_{12} = 0.75 \qquad \lambda_1 = 1 - r_{12} = 0.5 \qquad \lambda_1 = 1 - r_{12} = 0.25$$

$$\lambda_2 = 1 + r_{12} = 1.25 \qquad \lambda_2 = 1 + r_{12} = 1.5 \qquad \lambda_2 = 1 + r_{12} = 1.75$$

Obiettivi della PCA

- ☞ L'obiettivo primario della PCA è determinare la ***base di riferimento*** più significativa per rappresentare i dati e filtrare il rumore nella speranza che questa nuova base filtri il ***rumore*** e riveli ***strutture*** prima invisibili
- ☞ PCA è una trasformazione lineare dei dati che:
  1. Minimizza la ridondanza misurata dalla covarianza
  2. Massimizza l'informazione, misurata dalla varianza.
- ☞ Le *Principal Components* (PC) sono nuove variabili che hanno le seguenti proprietà:
  1. Ogni PC è una combinazione lineare delle variabili originali
  2. Le PC sono fra di loro ortogonali, ovvero sono mutuamente incorrelate, sopprimendo l'informazione ridondante

Idea base della PCA

- **Dataset:** insieme di *n* misure ciascuna composta da *p* attributi

$$
\boldsymbol{x} = \left.\overbrace{\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \dots\dots & x_{2p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots\dots & x_{np} \end{bmatrix}}^{p\ attributi}\right\}\ n\ misure \quad \boldsymbol{x} \in \Re^{n \times p}
$$

- L'intuizione di PCA è di trovare una combinazione lineare delle *m* coordinate dei dati in modo da esprimerli in un nuovo riferimento tale che:
  - Ogni variabile (attributo) sia indipendente da tutti gli altri
  - L'insieme degli attributi sia ordinato secondo la loro importanza relativa

Caratteristiche della PCA

PCA è una trasformazione lineare ortonormale dei dati ***X*** al fine di ottenere due risultati:

- **Feature Selection:** classificare le caratteristiche importanti dei dati ***X***, secondo la loro importanza
  - PCA evidenzia il contenuto informativo mediante una trasformazione lineare delle coordinate di riferimento dei dati (attributi dei dati)
- **Dimension Reduction:** quantificare la perdita di informazione derivante dall'eventuale riduzione della dimensionalità dei dati ***X***.
  - PCA quantifica la percentuale di informazione nelle varie componente ordinate per importanza, in modo da conoscere la perdita di informazione per ciascuna componente esclusa dalla riduzione

Risultato fondamentale della PCA

☞ Se l'obiettivo primario è l'eliminazione della ridondanza

☞ Se la ridondanza è espressa dalle correlazioni

☞ ***Allora la PCA consiste nella diagonalizzazione della matrice di covarianza***

☞ PCA consiste dunque in una trasformazione lineare dalle variabili originali ad altre che esprimono la stessa informazione ma sono fra loro incorrelate (Componenti Principali)

☞ La trasformazione cercata è la similitudine ***W*** fra la matrice di correlazione e la matrice diagonale degli autovalori, tale che

$$\boldsymbol{L} = diag\left(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \ldots, \sigma_p^2\right) = \boldsymbol{W}^T \cdot \boldsymbol{C} \cdot \boldsymbol{W}$$

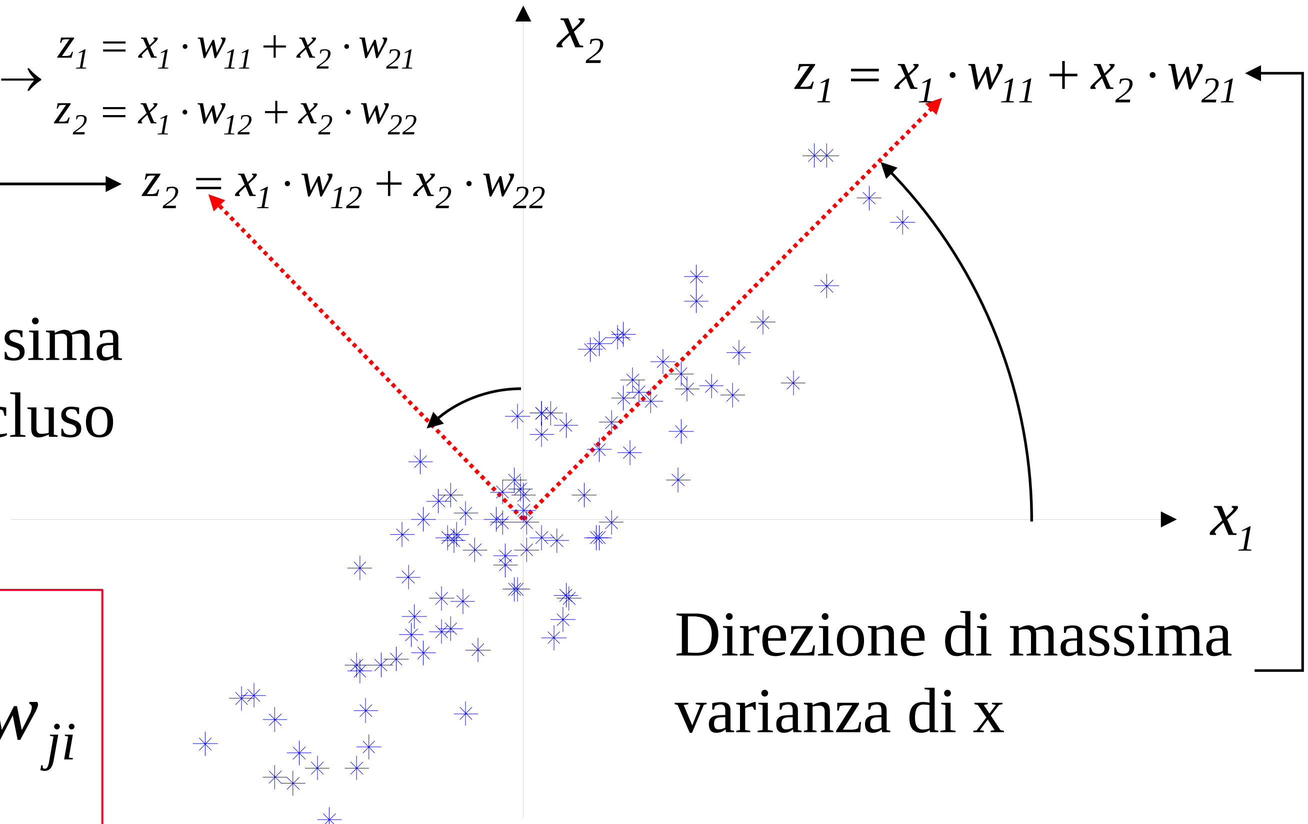
$$\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{X} \cdot \boldsymbol{W}$$

$\boldsymbol{W}$ è $\perp: \boldsymbol{W}^{-1} = \boldsymbol{W}^T$

PCA come ricerca delle direzioni privilegiate

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{21} \\ w_{12} & w_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{aligned} z_1 &= x_1 \cdot w_{11} + x_2 \cdot w_{21} \\ z_2 &= x_1 \cdot w_{12} + x_2 \cdot w_{22} \end{aligned}$$

$$\mathbf{z}^T = \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X}^T$$



Direzione di massima varianza di x, escluso x_1

Direzione di massima varianza di x

$$\boxed{z_i = \sum_{j=1}^{p} x_j \cdot w_{ji}}$$

PCA consiste dunque nella ricerca di direzioni privilegiate che massimizzano la variazioni dei dati ed eliminano le correlazioni

PCA in sintesi

Dataset
$\boldsymbol{X}$

$\Downarrow$

Matrice di covarianza
$$\boldsymbol{C} = \frac{1}{n-1}\left(\boldsymbol{X} - \overline{\boldsymbol{X}}\right)^T\left(\boldsymbol{X} - \overline{\boldsymbol{X}}\right)$$

$\Downarrow$

$$\boldsymbol{W} = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & \dots & w_{1p} \\ w_{21} & w_{22} & \dots & w_{2p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ w_{p1} & w_{p2} & \dots & w_{pp} \end{bmatrix}$$
$$\begin{array}{cccc} \uparrow & \uparrow & & \uparrow \\ \lambda_1 & > \lambda_2 & > \dots > & \lambda_p \end{array}$$

Matrice degli autovettori ordinata secondo autovalori decrescenti

La matrice ***W*** formata dagli autovettori ordinati per autovalori decrescenti indicano le direzioni di massima varianza. La similitudine fra ***C*** e ***L*** è data da ***W*.**

Nota che essendo ortonormale $\boldsymbol{W}^{\boldsymbol{T}} = \boldsymbol{W}^{-1}$

$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{W} \cdot \boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{W}^T$$

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{W}^T \cdot \boldsymbol{C} \cdot \boldsymbol{W}$$

La matrice ***L*** (diagonale) degli riporta i valori delle varianze nel nuovo riferimento PCA

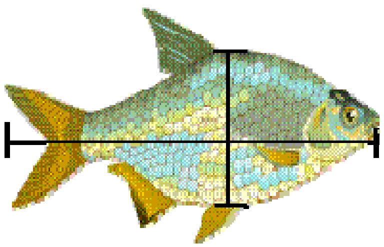
$$\boldsymbol{L} = diag\left(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_p^2\right)$$

La trasformazione dei dati ***X*** nelle componenti principali ***Z*** è

$$\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{X} \cdot \boldsymbol{W} \leftrightarrow \boldsymbol{X} = \boldsymbol{Z} \cdot \boldsymbol{W}^T$$

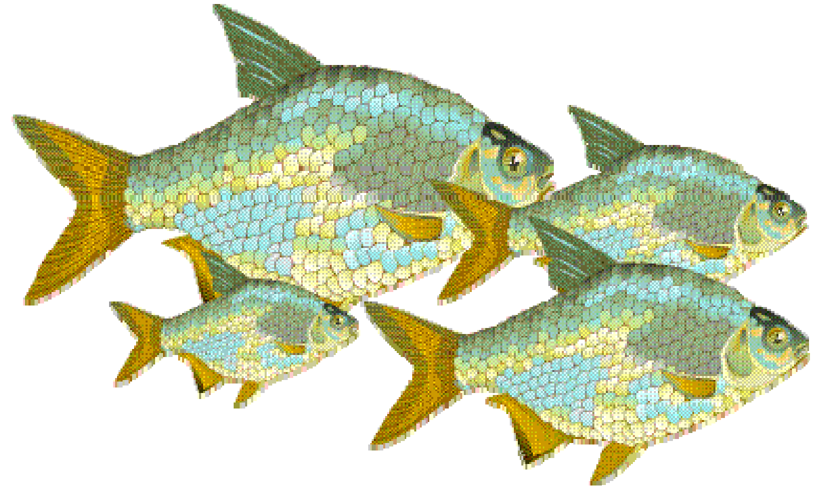
Un semplice esempio

- Ogni pesce può essere definito dalle sue misure di lunghezza ed larghezza

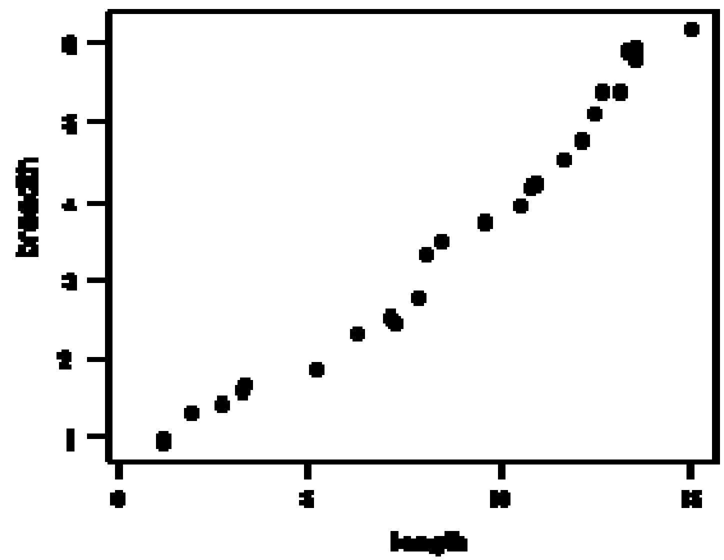


breadth

length



- Riportando in grafico i dati degli individui del branco di pesci, si ottiene →

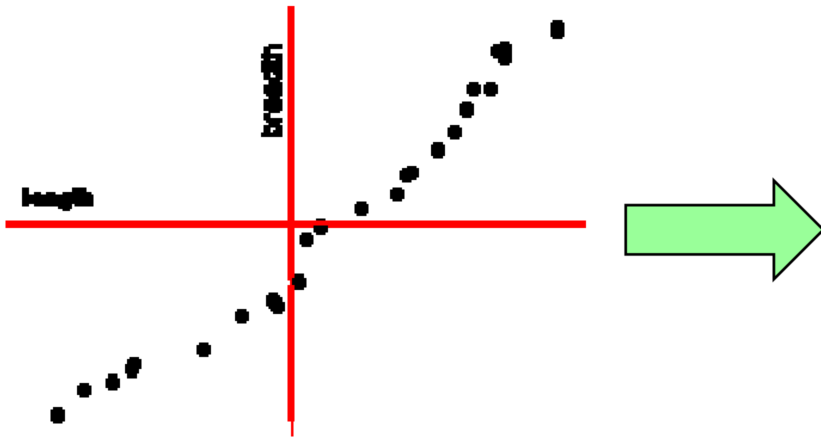


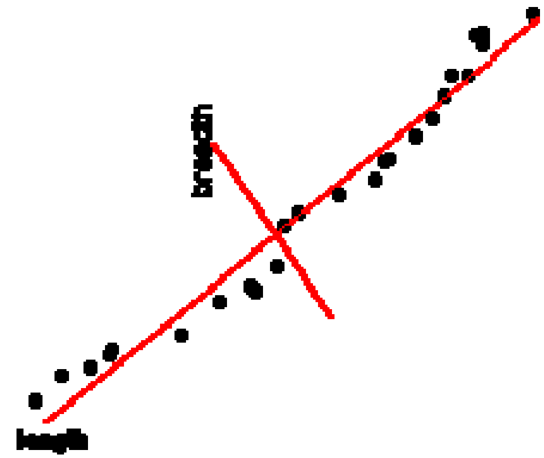
- Domanda1: Esiste una relazione fra le due misure?

- Domanda 2: Esiste un *singolo* parametro per definire la taglia di ciascun pesce?

PCA sui dati dei pesci

- Scegliamo dei nuovi assi centrati nell'insieme dei dati
- Poi ruotiamo gli assi per disporli lungo la direzione principale dei dati





- Possiamo allora definire una nuova variabile: **size = length + breadth**
- Ma dato che **length** e **breadth** non sono ugualmente importanti (vedi grafico) esse dovranno essere "pesate" diversamente, perciò

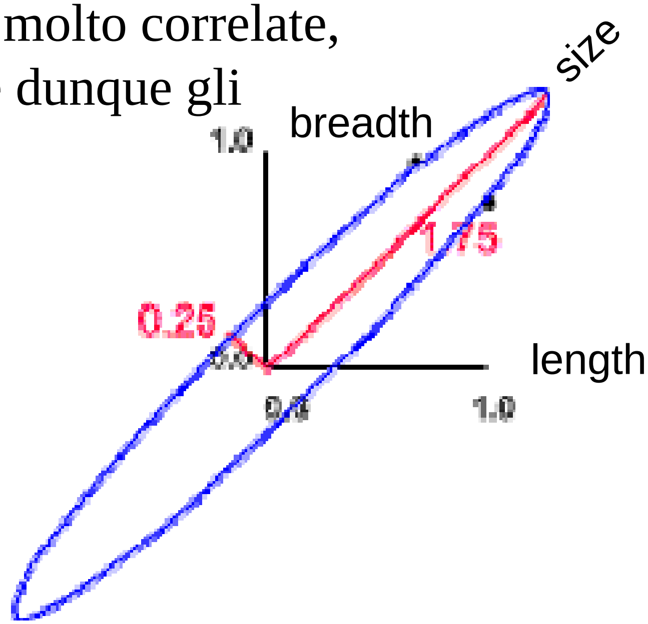
$$\textbf{size} = v_1\,\textbf{length} + v_2\,\textbf{breadth}$$

- I pesi v_1 e v_2 sono gli autovettori della matrice di correlazione

Risultato: si è ottenuta una riduzione della dimensione dei dati

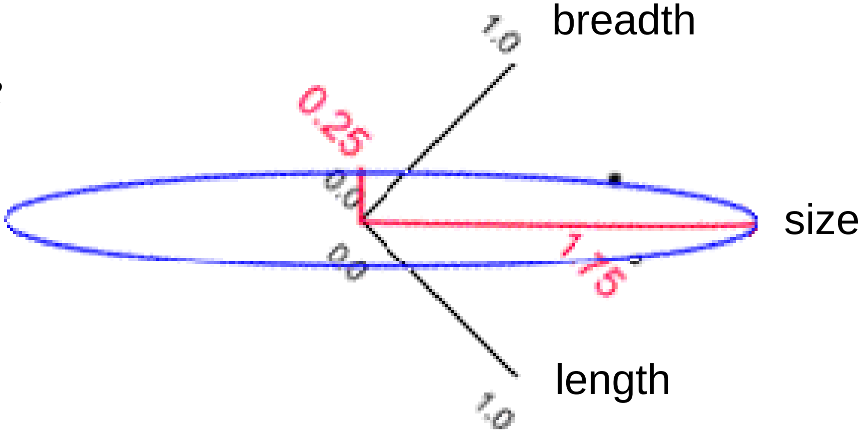
Cosa si perde nella riduzione

- Dato che ***length*** e ***breadth*** sono chiaramente molto correlate, la matrice di correlazione è molto allungata e dunque gli autovalori sono molto diversi.



- Supponiamo che essi valgano $\lambda_1 = 1.75$ e $\lambda_2 = 0.25$ nel riferimento originale l'ellisse sarà

- Dopo la rotazione dovuta al cambio di riferimento sarà data dall'orientamento degli autovettori e dalla grandezza degli autovalori



- Se si ritiene solamente la variabile ***size*** si conserva solamente 87.5% della variabilità originale. Infatti

$$\frac{\lambda_1}{\lambda_1 + \lambda_2} = \frac{1.75}{1.72 + 0.25} = 87.5\%$$

PCA in Matlab

- Le funzioni PCA sono contenute nella Statistics Toolbox
- Si può effettuare la PCA partendo dai dati (X) o dalla matrice di covarianza (C)
- dai dati: **`[W,score,L] = princomp(X)`**
  - **`W`** è la matrice degli autovettori, detta matrice dei ***Loadings***
    - E' ordinata per autovalori decrescenti
  - **`Scores`** sono le osservazioni Z trasformate delle X nel riferimento PCA
  - **`L`** sono gli autovalori, ordinati in ordine decrescente
- dalla matrice di covarianza: **`[W,L,expl] = pcacov(C)`**
  - **`W`** è la matrice degli autovettori
    - E' ordinata per autovalori decrescenti
  - **`L`** sono gli autovalori, ordinati in ordine decrescente
  - **`expl`** è un vettore che contiene la percentuale di varianza spiegata da ciascuna componente principale (la somma fa 100)

Un esempio: Employee Satisfaction

- Un sondaggio fra 9147 impiegati di una grande azienda ha rilevato i seguenti parametri di soddisfazione
  - Lavoro (SJ)
  - Formazione (SJT)
  - Condizioni di lavoro (SWC)
  - Assicurazione medica (SMC)
  - Assicurazione Dentistica (SDC)
- Il sondaggio ha prodotto la seguente matrice di correlazione

$$\boldsymbol{R} = \begin{bmatrix} 1.000 & 0.451 & 0.511 & 0.197 & 0.162 \\ 0.451 & 1.000 & 0.445 & 0.252 & 0.238 \\ 0.511 & 0.445 & 1.000 & 0.301 & 0.227 \\ 0.197 & 0.252 & 0.301 & 1.000 & 0.620 \\ 0.162 & 0.238 & 0.227 & 0.620 & 1.000 \end{bmatrix}$$

Un esempio: Employee Satisfaction

- Si ricava la matrice delle PCA ordinata per autovalori decrescenti

$$W = \begin{bmatrix} 0.442 & 0.443 & 0.301 & -0.716 & 0.074 \\ 0.457 & 0.290 & -0.832 & 0.114 & 0.034 \\ 0.479 & 0.308 & 0.454 & 0.658 & -0.185 \\ 0.443 & -0.531 & 0.095 & 0.060 & 0.714 \\ 0.412 & -0.586 & 0.032 & -0.191 & -0.670 \end{bmatrix}$$

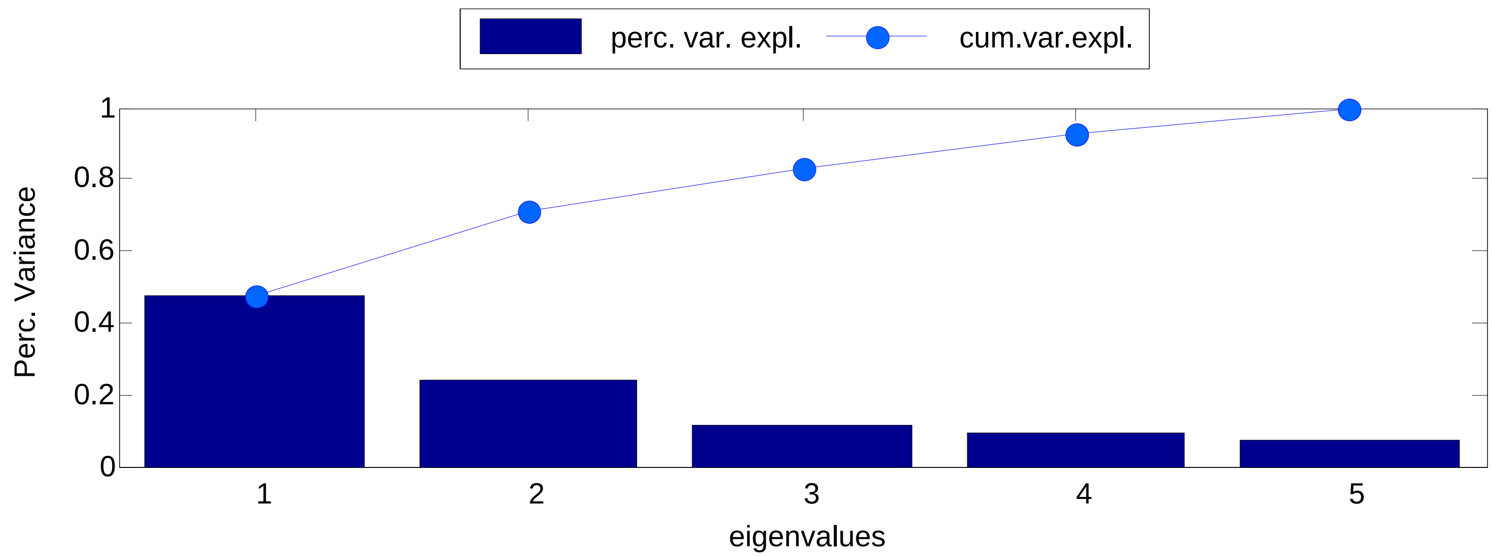
Verifica: la somma dei quadrati degli elementi di ciascuna colonna somma a 1

$$L = \begin{bmatrix} 2.370 & 1.202 & 0.573 & 0.484 & 0.373 \end{bmatrix}$$

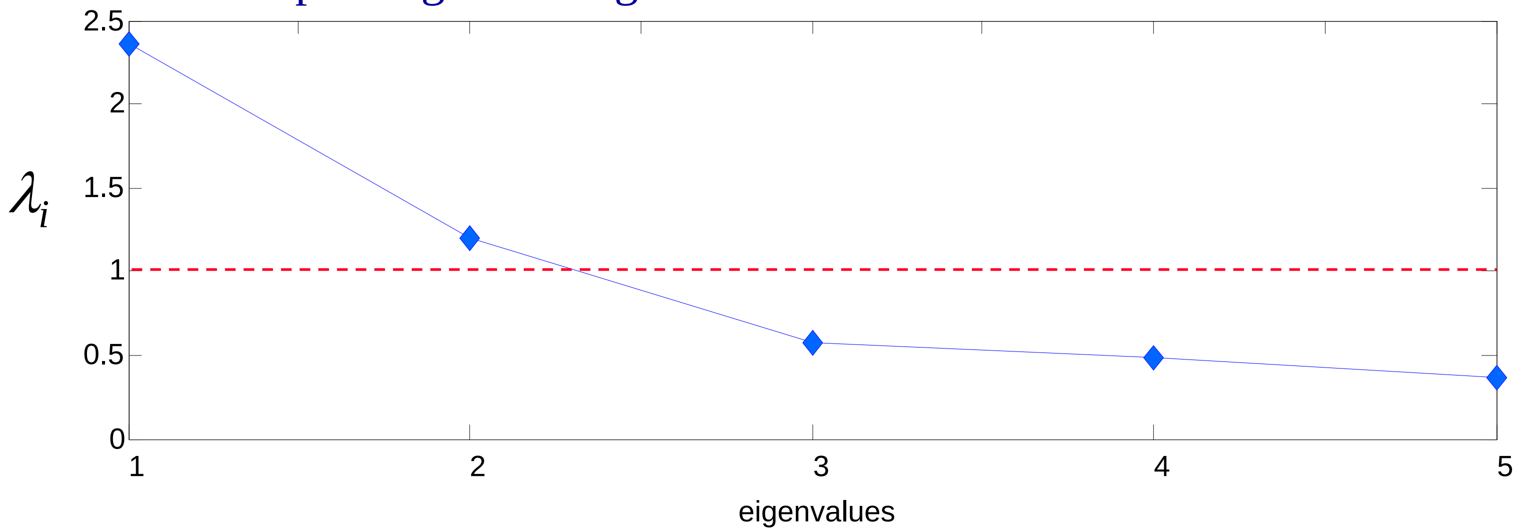
- La prima PC spiega il 47.3% della varianza totale

$$\frac{\lambda_1}{\sum_{i=1}^{5} \lambda_i} = \frac{2.370}{2.370 + 1.202 + 0.573 + 0.484 + 0.373} = \frac{2.370}{5} = 0.473$$

Varianza spiegata e scree plot



scree plot = grafico degli autovalori ordinati in senso decrescente



Un esempio: Employee Satisfaction

☞ La prima PC z_1 si ottiene come

$$z_1 = 0.442 \cdot SJ + 0.457 \cdot SJT + 0.479 \cdot SWC + 0.443 \cdot SMC + 0.412 \cdot SDC$$

essendo i pesi tutti positivi e dello stesso ordine, z_1 si può interpretare come un indice di soddisfazione generale

☞ La seconda PC z_2 è

$$z_2 = 0.443 \cdot SJ + 0.290 \cdot SJT + 0.308 \cdot SWC - 0.531 \cdot SMC - 0.586 \cdot SDC$$

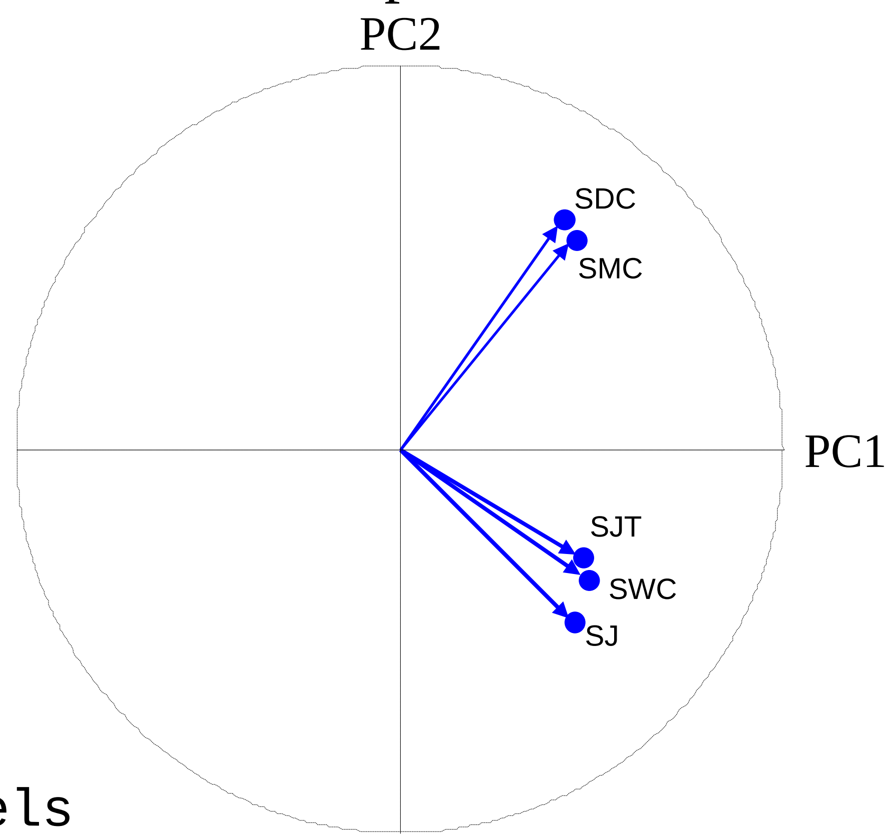
dato che le prime tre variabili sono associate positivamente a fattori di soddisfazione del lavoro, mentre gli ultimi due sono associati all'assistenza medica e sono negativi, z_2 può essere vista come un contrasto fra la soddisfazione del lavoro e l'insoddisfazione dell'assistenza medica.

Il Biplot come visualizzazione dei contributi

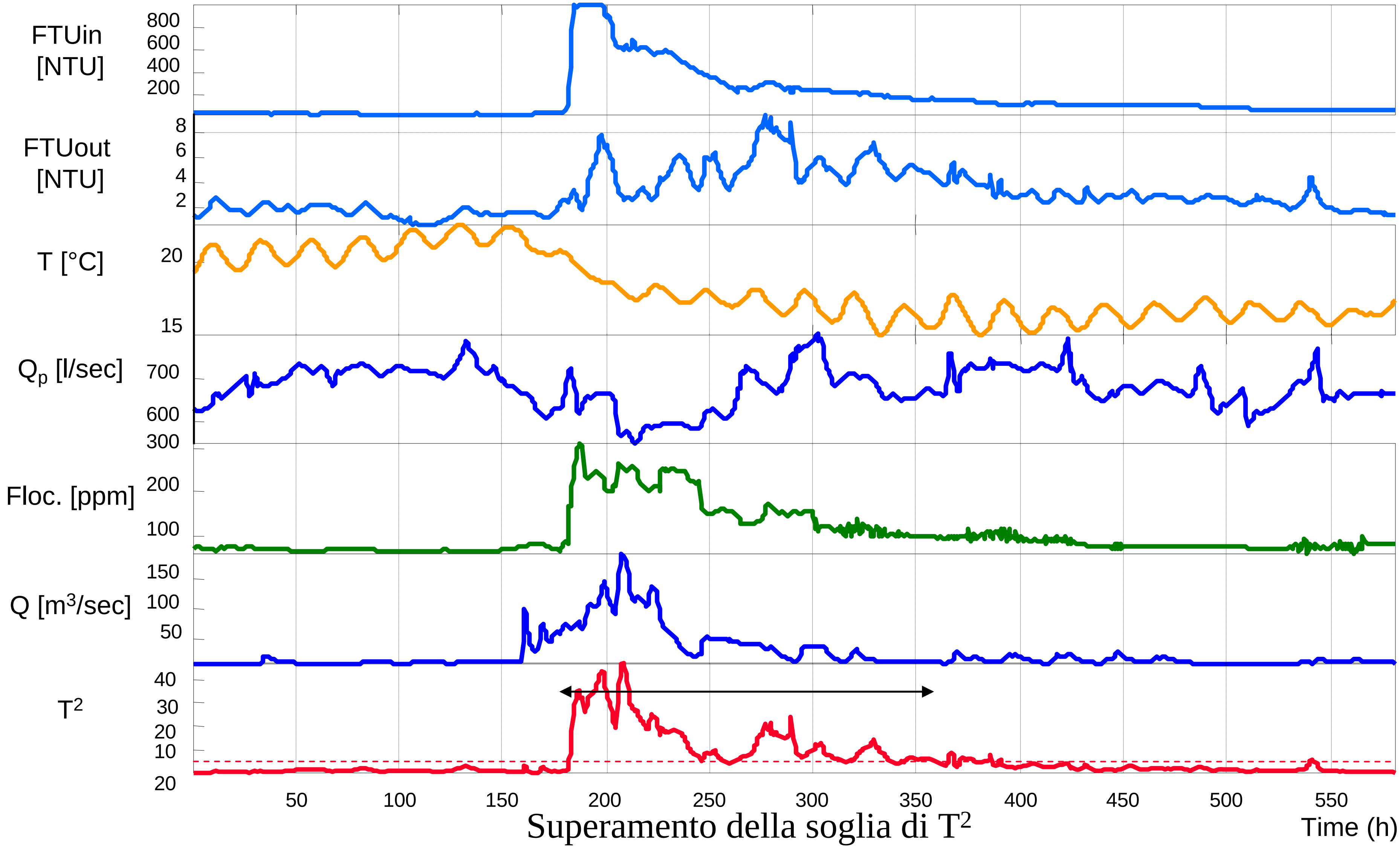
- Per visualizzare in che misura ogni variabile originaria contribuisce alle PC, si plottano le componenti dei *loadings* delle prime 2 colonne della matrice W, corrispondenti alle prime PC, le più importanti
- Si possono anche avere biplot tridimensionali
- La sintassi del comando Matlab è

```
biplot(coefs, ...,
'Scores', scores,
'ObsLabels', obslabs)
```

dove `coefs` sono le prime 2 o 3 colonne di W, `Scores` sono i dati trasformati (se presenti) e `ObsLabels` sono le etichette che identificano ciascuna variabile

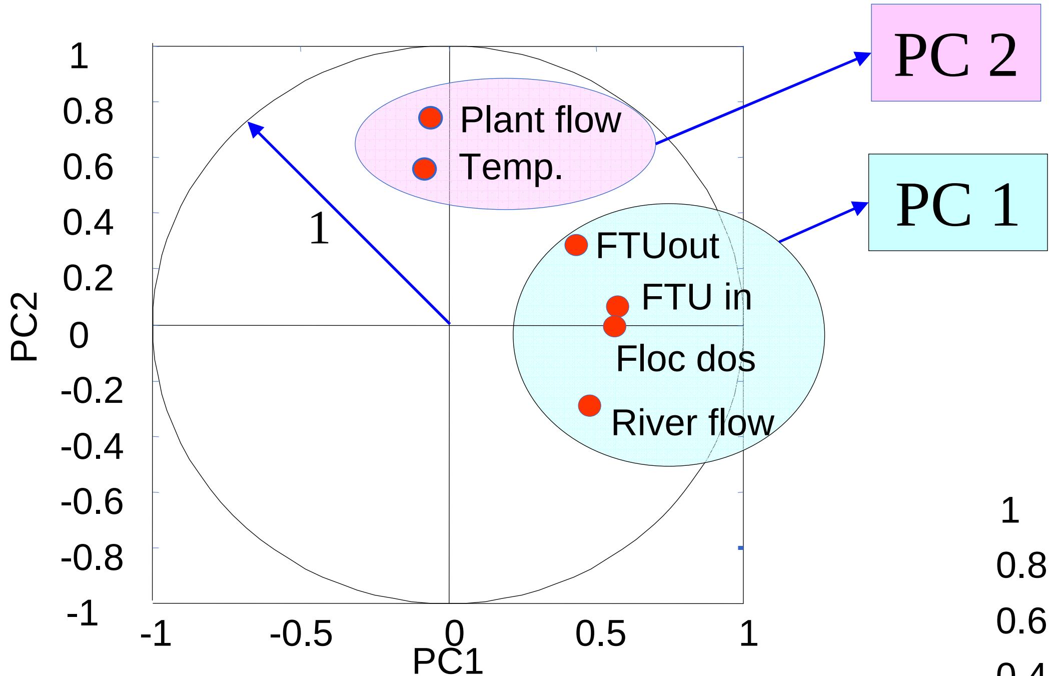


Analisi di un episodio di torbidità



Superamento della soglia di T^2

Biplot come zone di influenza delle PC

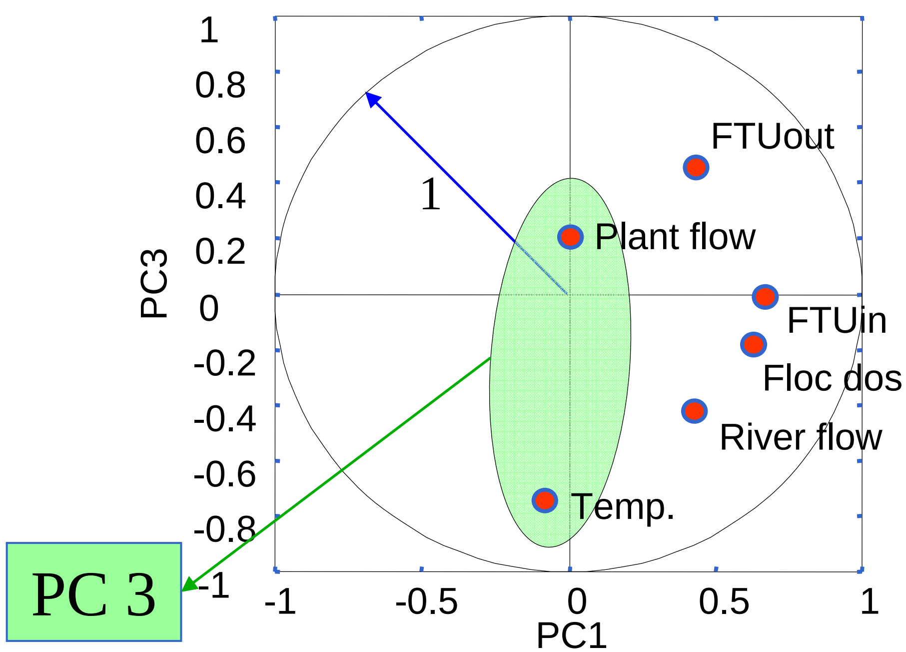


Biplot indica quanto ciascuna variabile contribuisca a ciascuna PC. Si ottiene plottando i *loadings* (componenti degli autovettori) nel piano di due PC si ha un'idea di

Il ***Biplot*** più comune è quello PC1/PC2

In questo caso si nota che le componenti *FTUin* e *Floc dos* contribuiscono fortemente a PC1 e quasi niente a PC2.

Al contrario *Plant flow* e *Temp* sono molto rappresentate in PC2 e PC3



PCA con Covarianza o Correlazione?

Le PCA ottenute nei due casi sono molto diverse e non facilmente riconducibili l'una all'altra perché i loro autovalori e autovettori non sono legati da una semplice relazione

Covarianza

- Riflette le reali proporzioni fra variabili
- E' sensibile alle unità di misura, enfatizzando l'importanza delle variabili più grandi

Correlazione

- Indipendenti dalle unità di misura operando su dati standardizzati
- I risultati di diverse analisi sono comparabili

Esempio: Supponendo di effettuare una PCA su misure di lunghezza (x_1) e peso (x_2), a seconda che x_1 sia espresso in cm (a) o in mm (b), mentre x_2 è sempre espresso in grammi, si ha nei due casi una PCA molto diversa. Nel secondo caso la dominanza di x_1 è totale

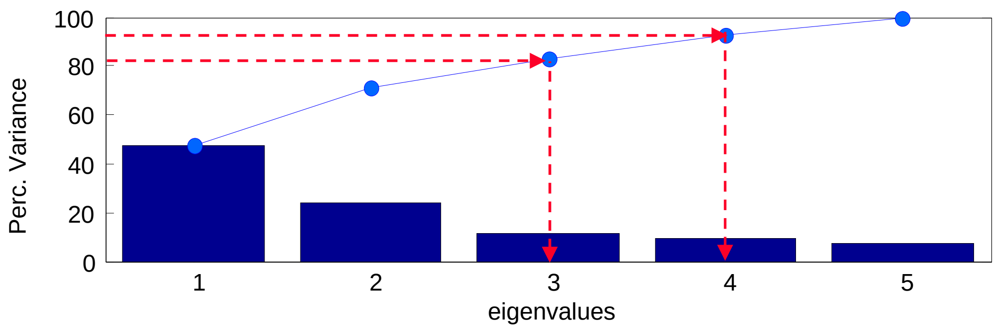
$$\boldsymbol{C}_a = \begin{bmatrix} 80 & 44 \\ 44 & 80 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{C}_b = \begin{bmatrix} 8000 & 44 \\ 44 & 80 \end{bmatrix} \Rightarrow$$

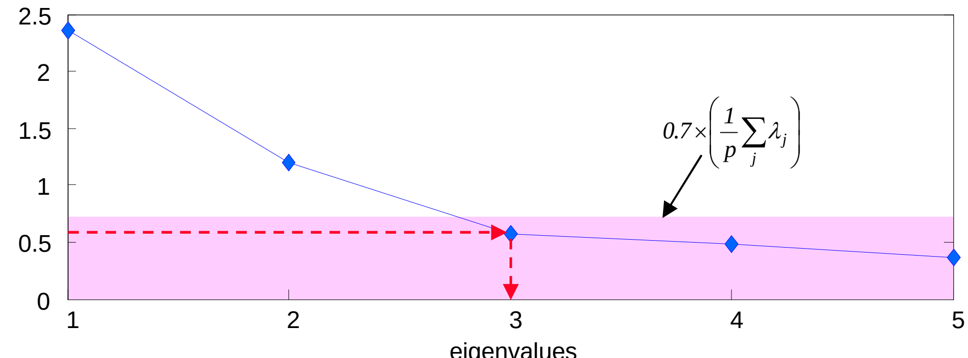
$$z_1^{(a)} = 0.707 \cdot x_1 + 0.707 \cdot x_2$$

$$z_1^{(b)} = \boxed{0.998} \cdot x_1 + 0.055 \cdot x_2$$

Come ridurre l'ordine della PCA

- Ci si basa sulla quantità di varianza spiegata: si trattengono le componenti che forniscono una varianza totale spiegata fra il 70% e il 90%
  - Ovviamente si arrotonda all'intero più vicino
- Alternativamente (o insieme) si "taglia" all'autovalore un po' inferiore ad 1
  - Nel caso di matrice di correlazione si taglia intorno a $\lambda \cong 0.7$
  - Nel caso di matrice di covarianza si taglia intorno a circa 0.7 della media degli autovalori

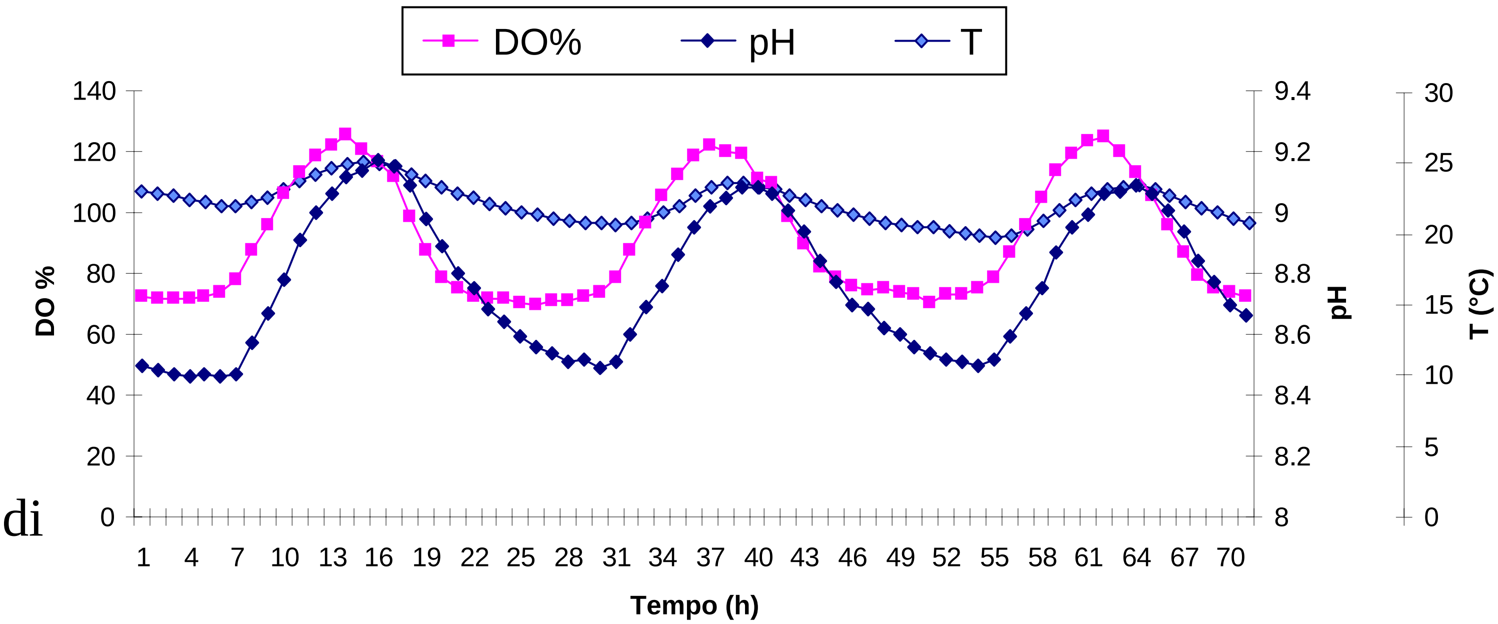




$$\lambda_{min} \cong 0.7 \times \left(\frac{1}{p} \sum_j \lambda_j \right) = 0.7 \times \bar{\lambda}$$

Esempio di dati correlati

Dati di qualità dell'acqua del fiume Arno

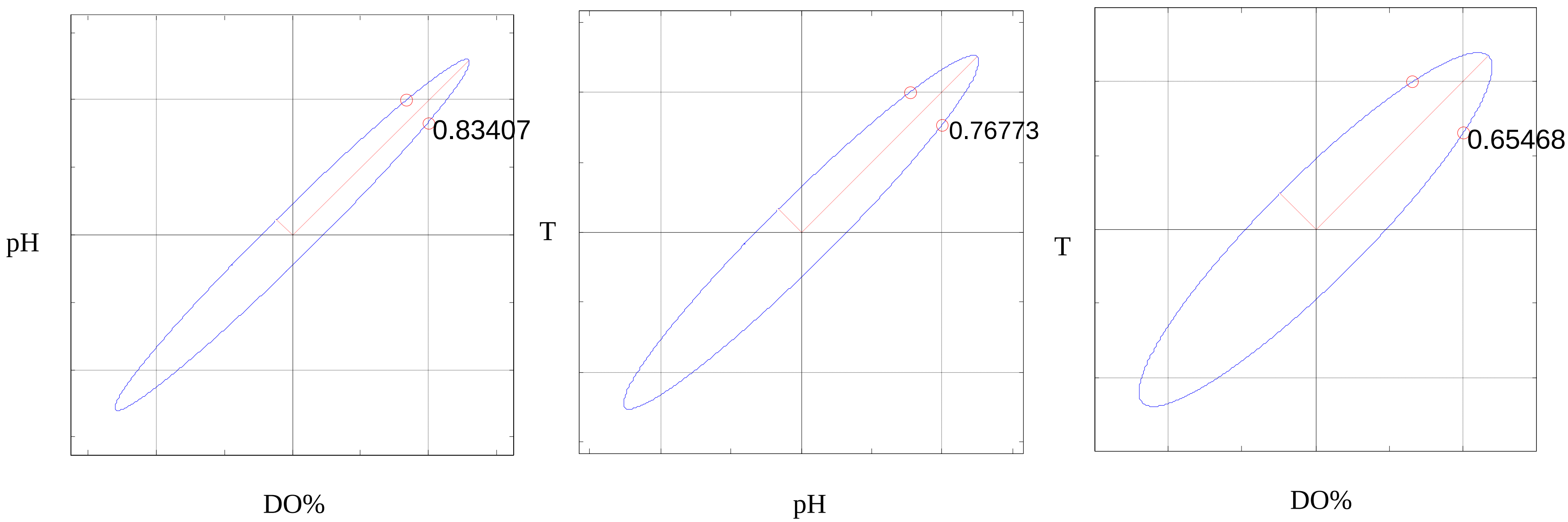


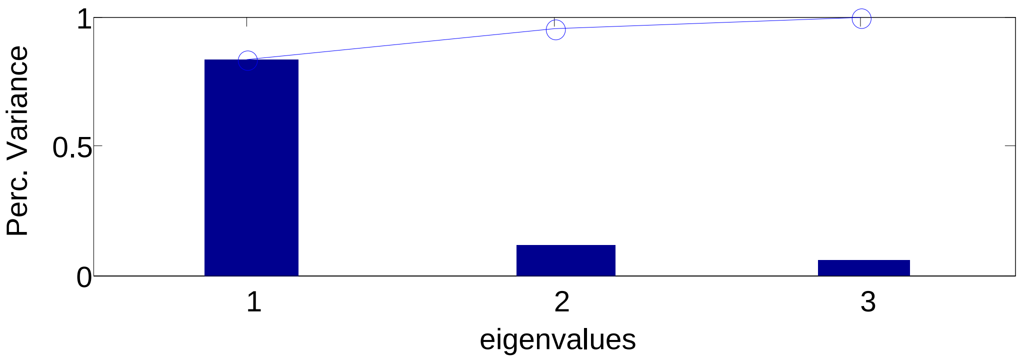
Centralina di Rosano

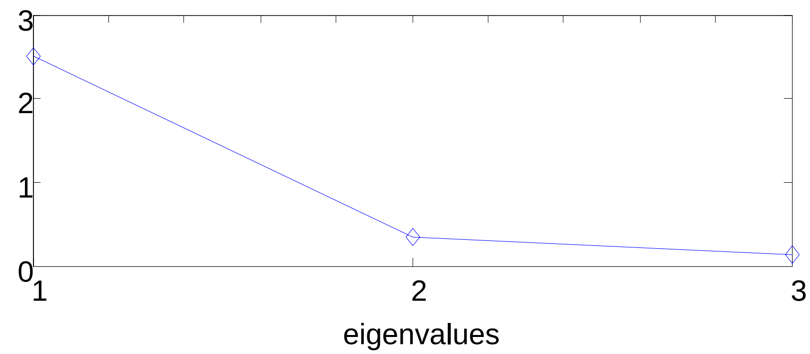
5 -7 Settembre 2004

- Le tre variabili seguono tutte il ritmo circadiano, pilotato dalla luce solare. La correlazione fra di esse è evidente.
- L'ossigeno disciolto è il più pronto, seguito dalla temperatura a 2 h e dal pH a 3 h di ritardo.
- L'aumento del pH è dovuto al consumo di CO_2 a seguito della fotosintesi

Correlazioni e autovalori







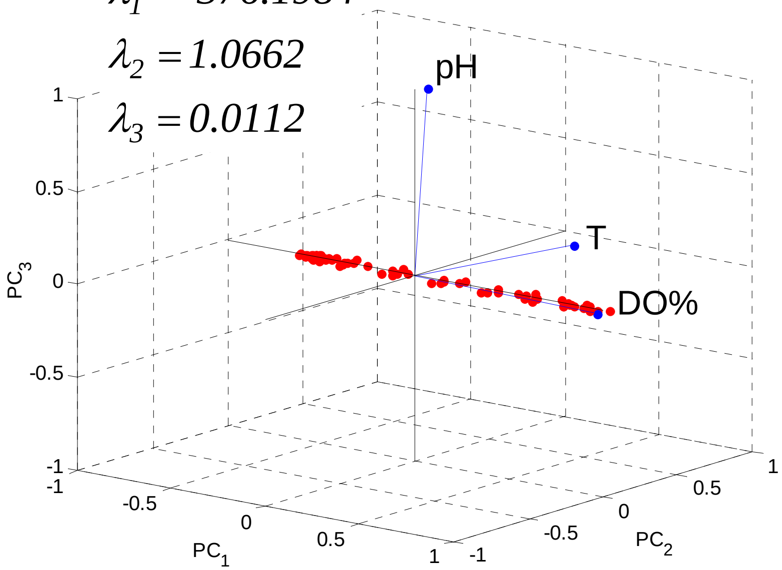
La forte correlazione fra le prime due cariabili, fa sì che PC1 spieghi circa 83% della variabilità totale. Analogamente il primo autovalore è dominante rispetto agli altri due.

Meglio l'analisi di correlazione

$\lambda_1 = 376.1984$

$\lambda_2 = 1.0662$

$\lambda_3 = 0.0112$



$$\boldsymbol{C} = \begin{bmatrix} 375.3621 & 3.6624 & 17.3091 \\ 3.6624 & 0.0514 & 0.2374 \\ 17.3091 & 0.2374 & 1.8623 \end{bmatrix}$$

$$PC_{dati} = \begin{bmatrix} 0.9989 & 0.0467 & -0.0067 \\ 0.0098 & -0.0646 & 0.9979 \\ 0.0462 & -0.9968 & -0.0650 \end{bmatrix}$$

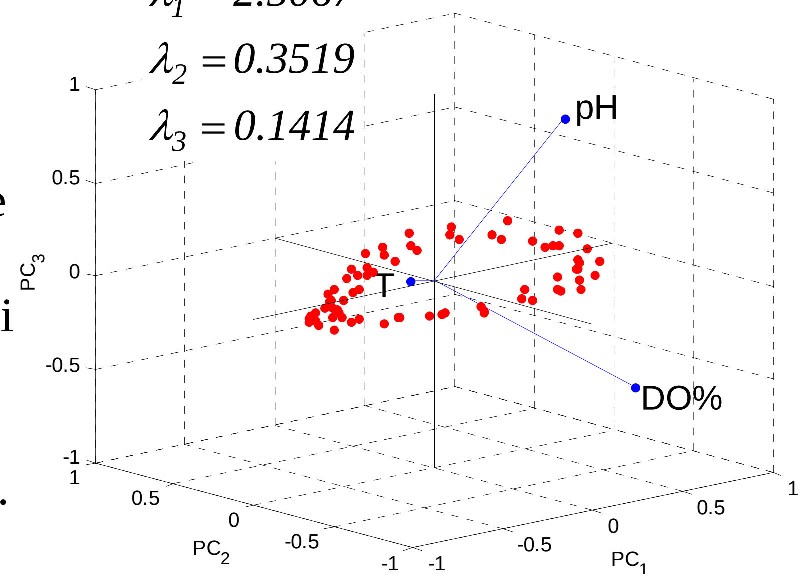
L'analisi di covarianza tende ad enfatizzare le dipendenze fra le variabili ed a mantenere solo la prima.

L'analisi di correlazione evidenzia il legame delle tre, pur mantenendo il carattere dominante di DO%

$\lambda_1 = 2.5067$

$\lambda_2 = 0.3519$

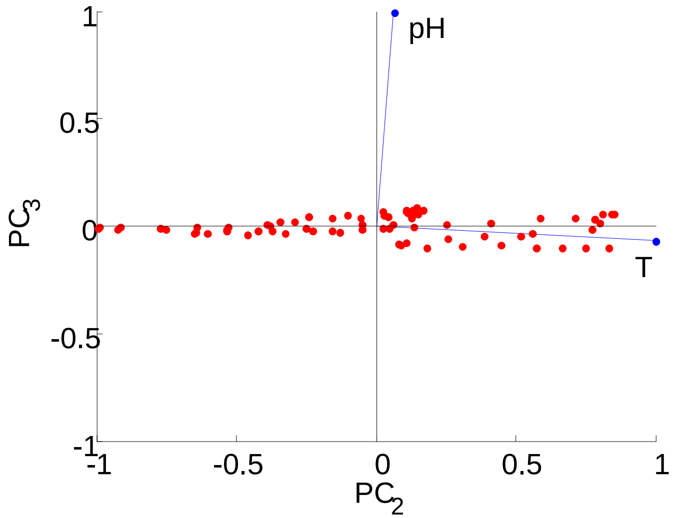
$\lambda_3 = 0.1414$

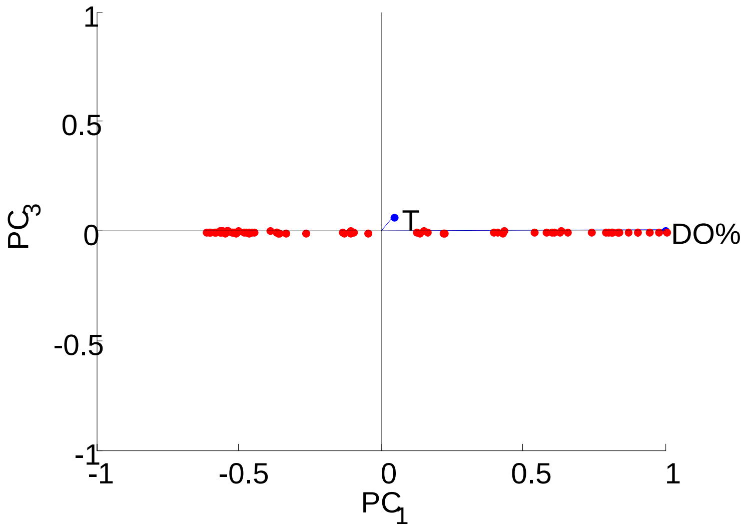


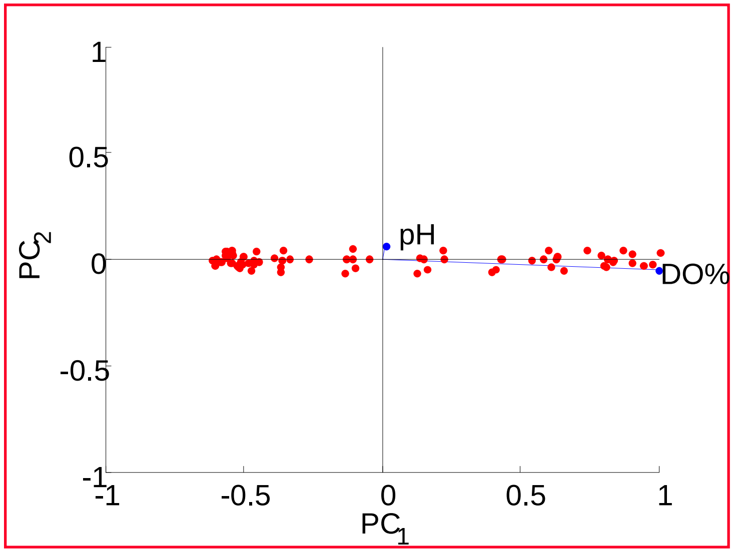
$$\boldsymbol{R} = \begin{bmatrix} 1.0000 & 0.8341 & 0.6547 \\ 0.8341 & 1.0000 & 0.7677 \\ 0.6547 & 0.7677 & 1.0000 \end{bmatrix}$$

$$PC_{R} = \begin{bmatrix} 0.5743 & 0.6111 & -0.5448 \\ 0.6011 & 0.1371 & 0.7873 \\ 0.5558 & -0.7796 & -0.2886 \end{bmatrix}$$

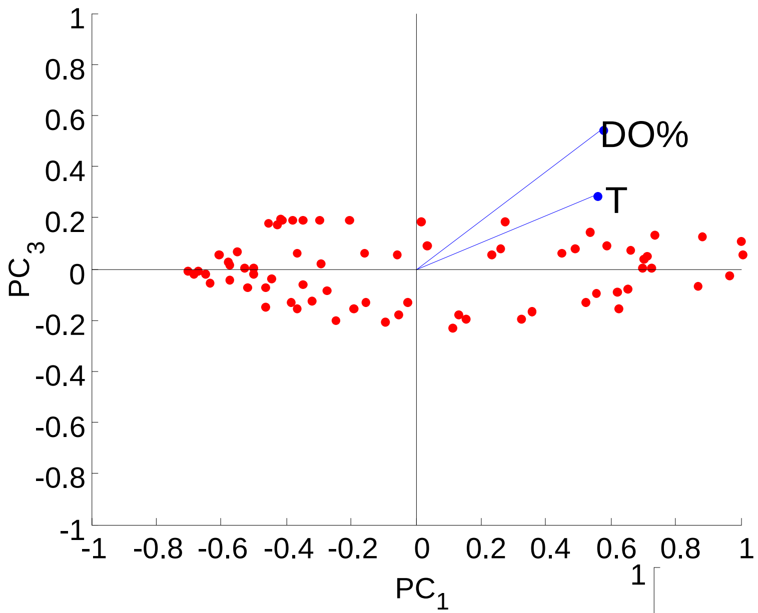
Biplot proiettato sulle tre PC (cov)

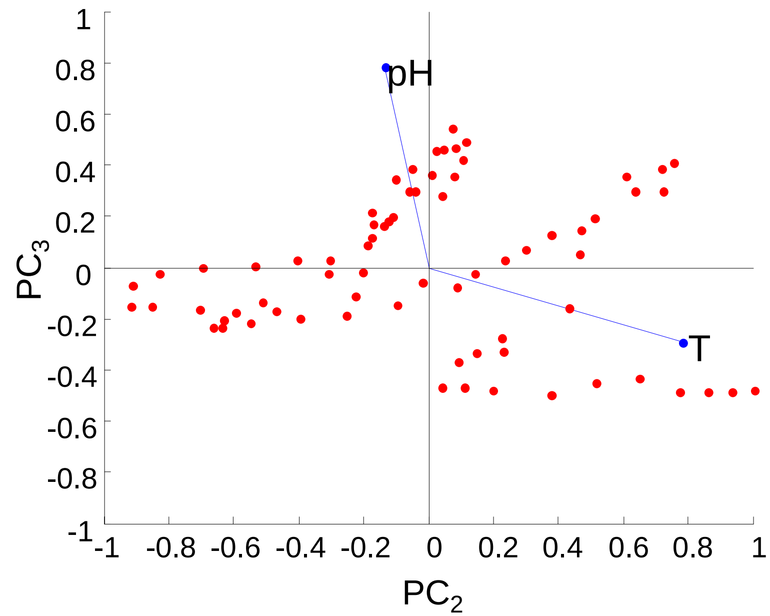


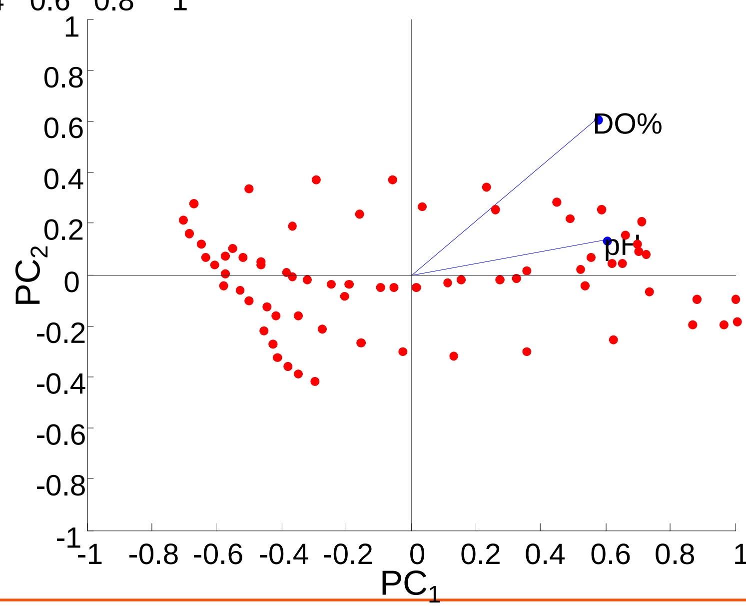




Biplot proiettato sulle tre PC (corr)







Test di consistenza

- Le componenti principali non avendo un significato immediato devono essere spiegate con statistiche di sintesi:
- ***Hotelling's T^2***

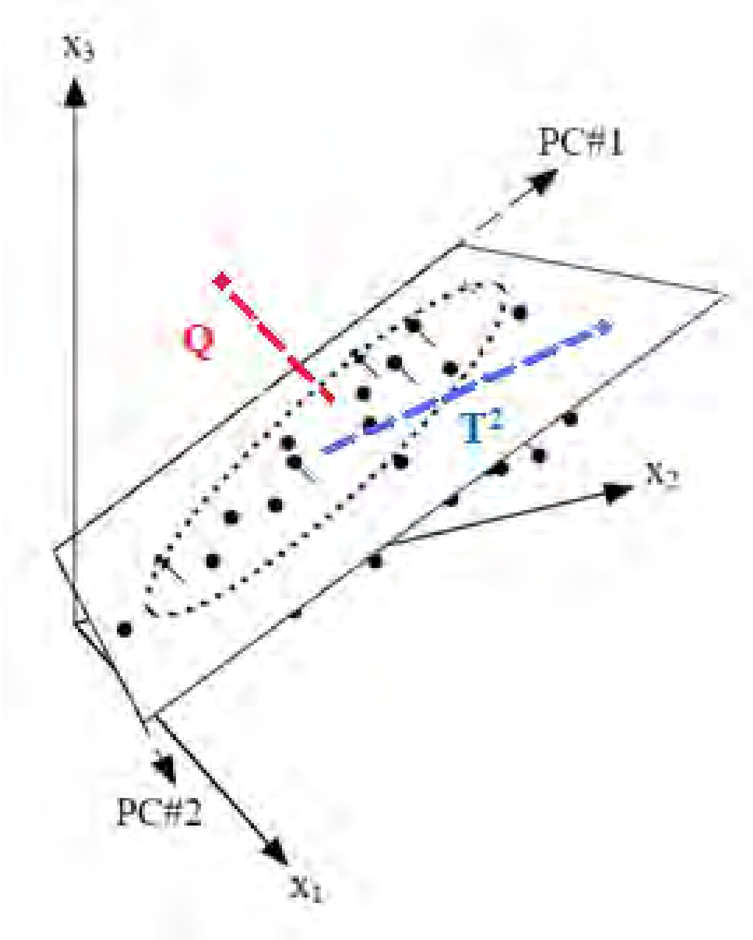
$$T^2 = \boldsymbol{Z}^T \boldsymbol{L}^{-1} \boldsymbol{Z} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{W} \boldsymbol{L}^{-1} \boldsymbol{W}^T \boldsymbol{X}$$

coglie la variazione delle componenti all'interno del modello di riferimento (spazio delle PC)

- ***Statistica Q***

$$Q = \boldsymbol{X}^T \left(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^T \right) \boldsymbol{X}$$

misura la variazione non considerata dal modello
(spazio ortogonale alle PC)



La statistica Hotelling T^2

- E' un'estensione multivariabile della statistica Student *t*.
- Data una matrice di misure $\boldsymbol{X} \in \Re^{n \times p}$ e $\boldsymbol{W}$ la loro matrice di covarianza, la statistica Hotelling T^2 è data da

$$T^2 = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{W}^{-1} \boldsymbol{X}$$

- Inoltre, volendola usare come limite di accettabilità (hypothesis testing) si può definire un valore limite di T^2 in funzione della statistica F di cui T^2 rappresenta una realizzazione

$$T^2_{lim} = \frac{p(n-1)}{n-p} F^{\alpha}_{n-p,p}$$

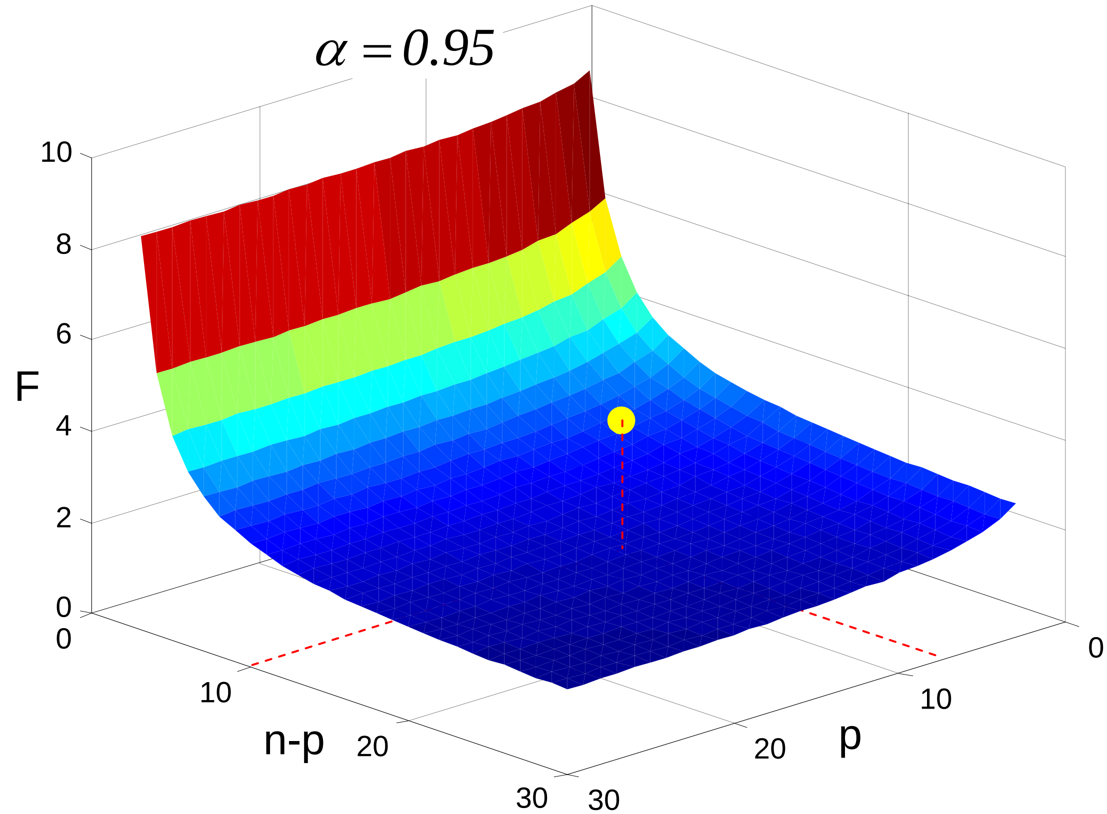
  - Dove n è il numero di misure e p le variabili di ciascuna misura, mentre α è il limite di confidenza fissato (generalmente $\alpha = 0.05$, corrispondente ad una confidenza del 95%)

Andamento della statistica F

Esempio:
Il valore limite di T^2 al 95% per un campione di n = 18 misure di p = 8 variabili ciascuna è

```
x = finv(0.95,8,18-8)

x =  3.0717
```

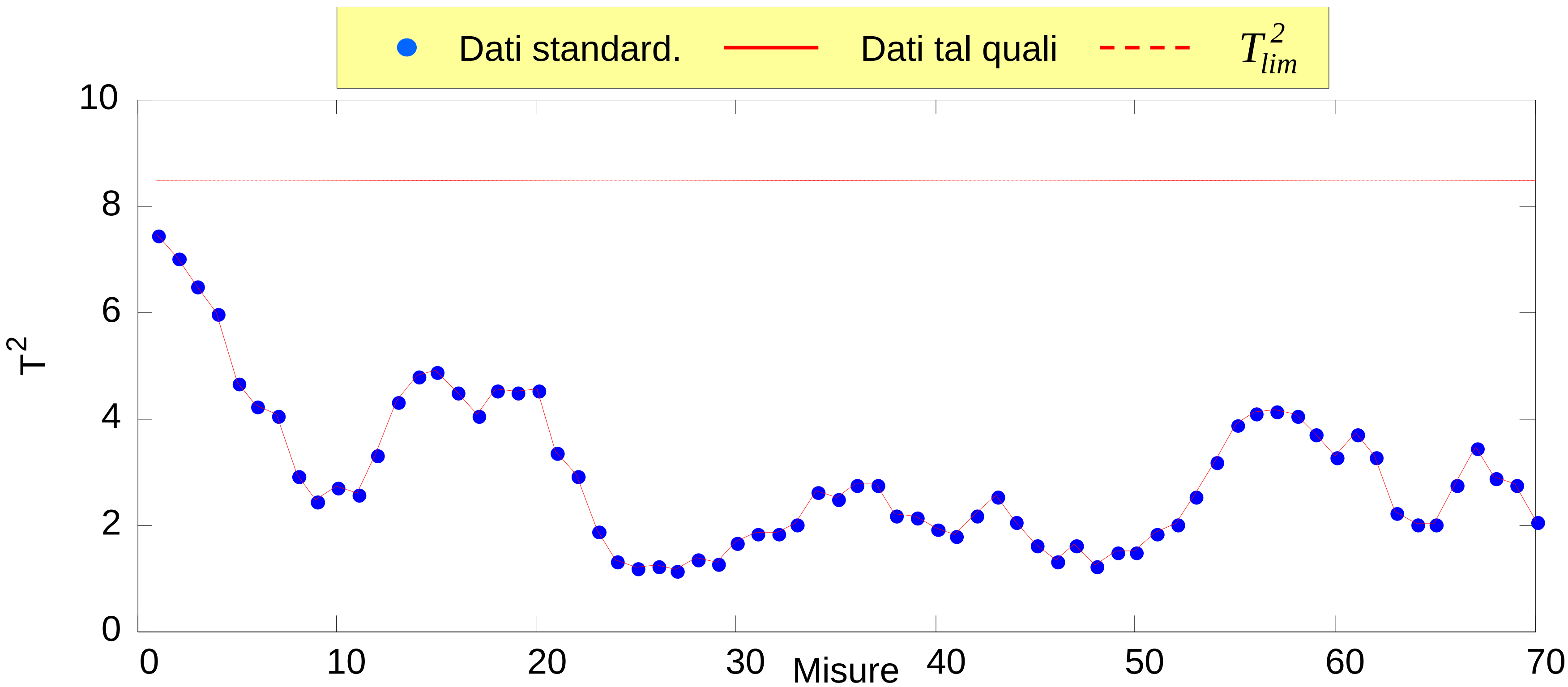


Ciò significa che si può osservare per puro caso un valore di F superiore a 4.3468 solamente nel 5% dei casi
In questo caso il T^2_{lim} sarebbe

$$T_{lim}^2 = \frac{8(18-1)}{18-8} 3.0717 = 0.41775$$

Applicazione del T^2 ai dati di qualità

- L'indice Hotelling's T^2 è lo stesso sia per i dati originali che per quelli standardizzati
- Ovviamente l'indice per ogni dato è inferiore a T^2_{lim} perché sono gli stessi dati usati per determinare le PC



Riduzione della dimensionalità

- Se alcune PC non sono molto importanti (vedi scree plot) si può ridurre la dimensionalità dell'analisi trattenendo solamente le prime $a < p$ PC

- La matrice di trasformazione è la sotto matrice di $\boldsymbol{W}$ che ritiene i primi a autovettori

$$\boldsymbol{W} = \begin{array}{c} \overbrace{\hphantom{w_{11} \quad w_{12} \quad \dots w_{1a}}}^{a} \; \overbrace{\hphantom{\dots w_{1p}}}^{p-a} \\ \left[\begin{array}{cccc|c} w_{11} & w_{12} & \dots & w_{1a} & \dots w_{1p} \\ w_{21} & w_{22} & \dots & w_{2a} & \dots w_{2p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ w_{p1} & w_{p2} & \dots & w_{pa} & \dots w_{pp} \end{array}\right] \end{array} \qquad \boldsymbol{W}_a = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & \dots & w_{1a} \\ w_{21} & w_{22} & \dots & w_{2a} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ w_{p1} & w_{p2} & \dots & w_{pa} \end{bmatrix} \in \Re^{n \times a}$$

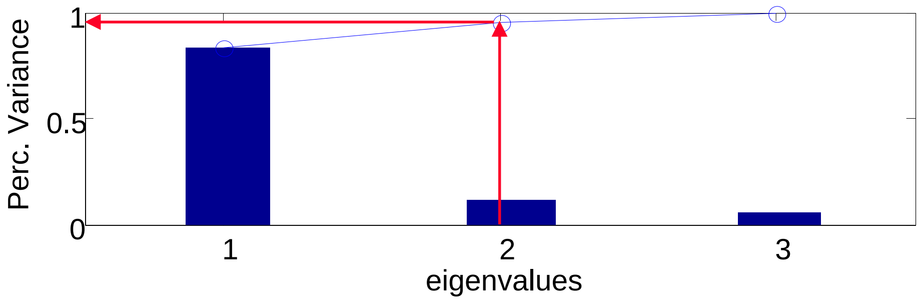
- La trasformazione PCA ridotta diviene

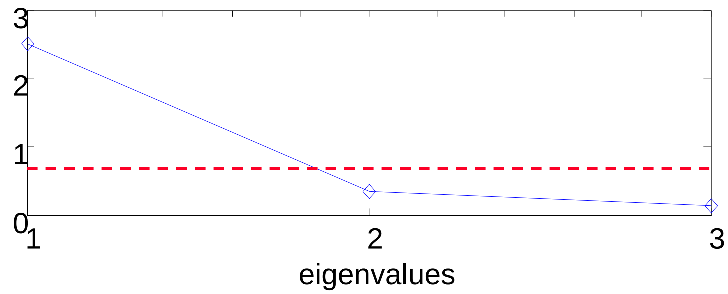
$$\boldsymbol{Z}_a = \boldsymbol{X} \cdot \boldsymbol{W}_a \in \Re^{n \times a}$$

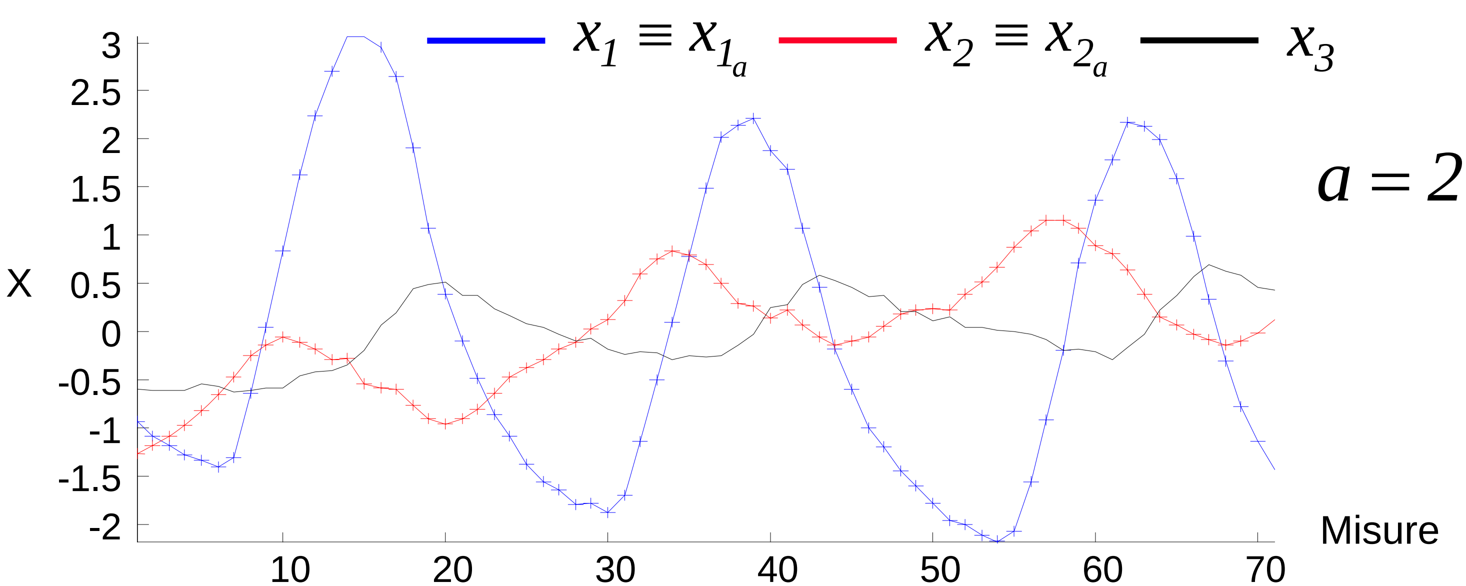
ovvero i dati $\boldsymbol{X}$ vengono proiettati nelle prime a componenti di $\boldsymbol{Z}$

Decomposizione parziale

La PCA ridotta contiene solo le prime due componenti (vedi scree plot) che comunque spiegano 83% della variabilità totale.

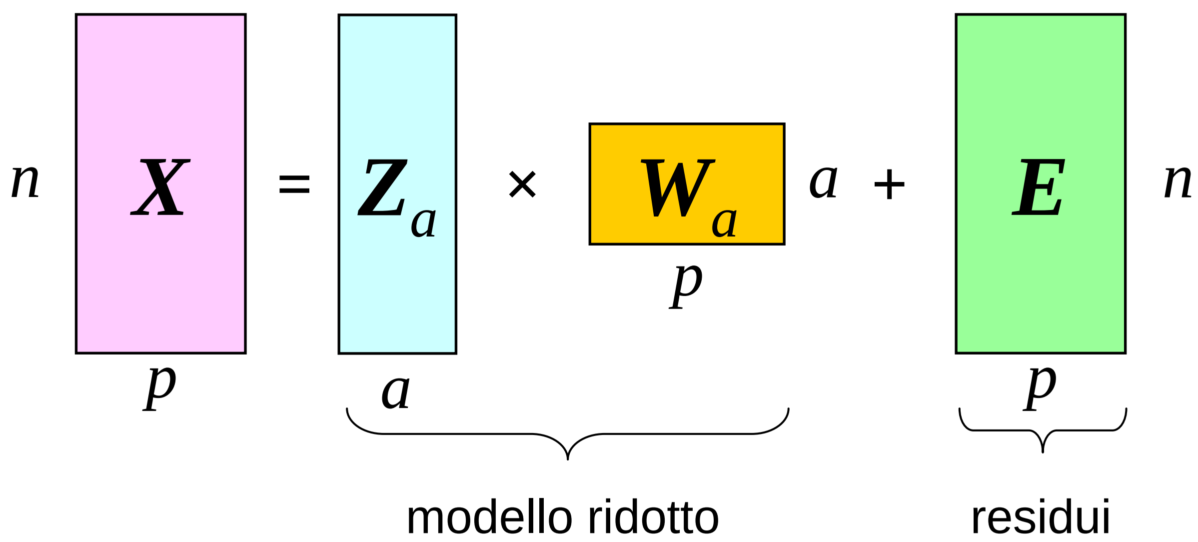






Ricostruzione da PCA ridotta

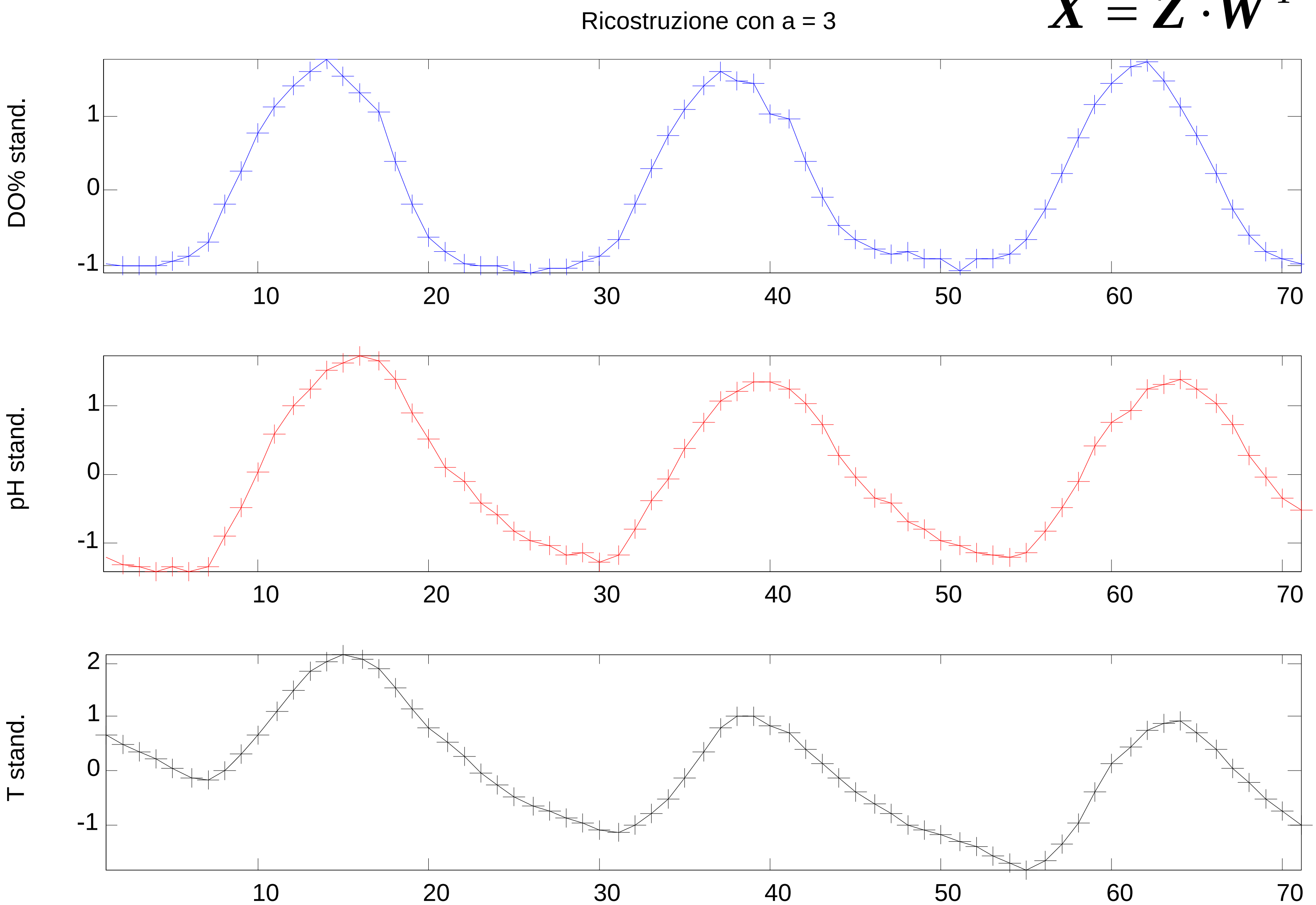
- La ricostruzione delle variabili originali dalla PCA ridotta contiene ovviamente degli errori
- Se la mappa inversa completa era $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Z} \cdot \boldsymbol{W}^T$
- nel caso ridotto sarà $\boldsymbol{X}_a = \boldsymbol{Z}_a \cdot \boldsymbol{W}_a^T \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{X} = \boldsymbol{Z}_a \cdot \boldsymbol{W}_a^T + \boldsymbol{E}$
- La matrice $\boldsymbol{E}$ contiene gli errori di ricostruzione



- Matlab: `[residuals,reconstructed]=pcares(X,a);`

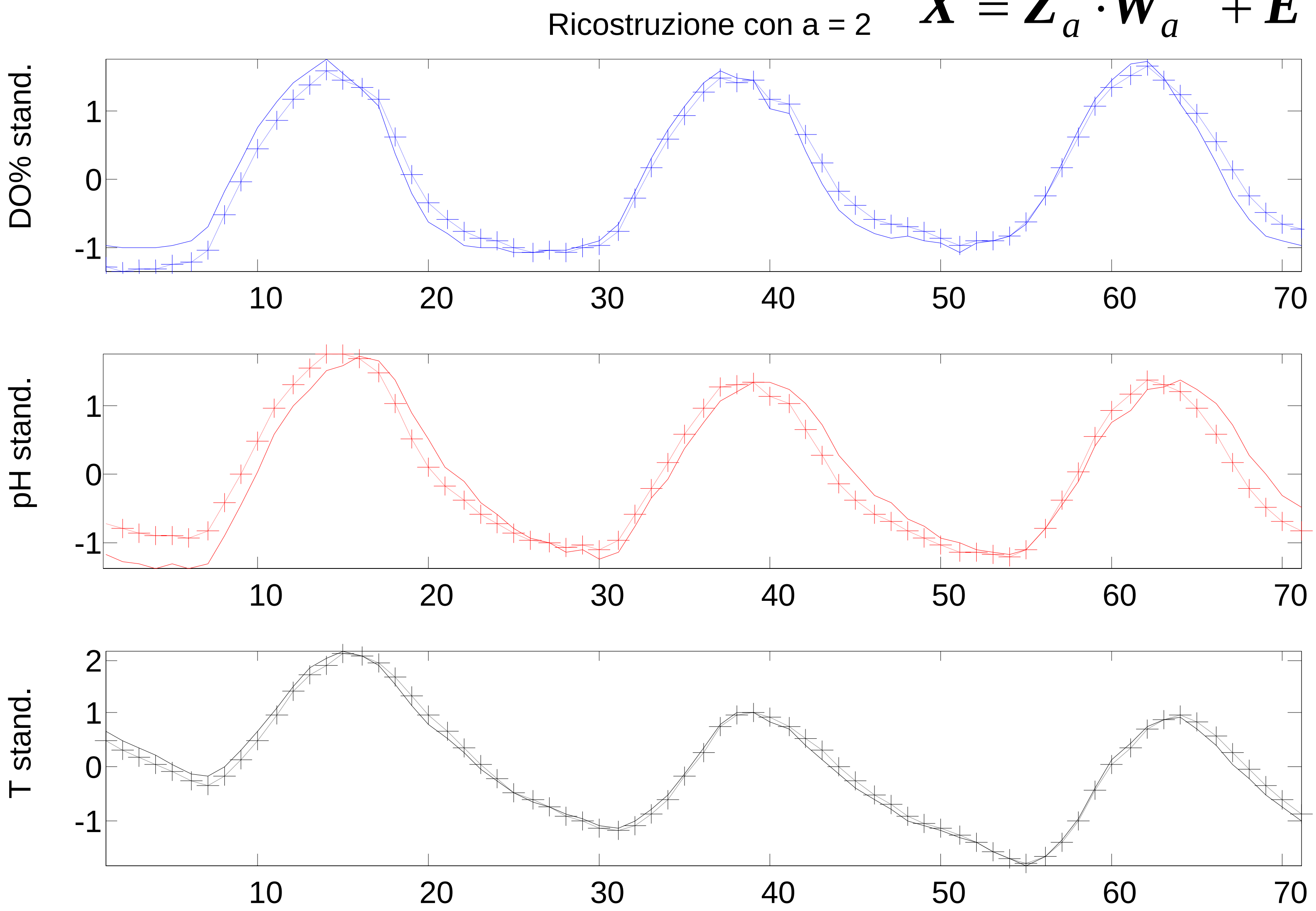
Ricostruzione da PCA completa

$$X = Z \cdot W^T$$



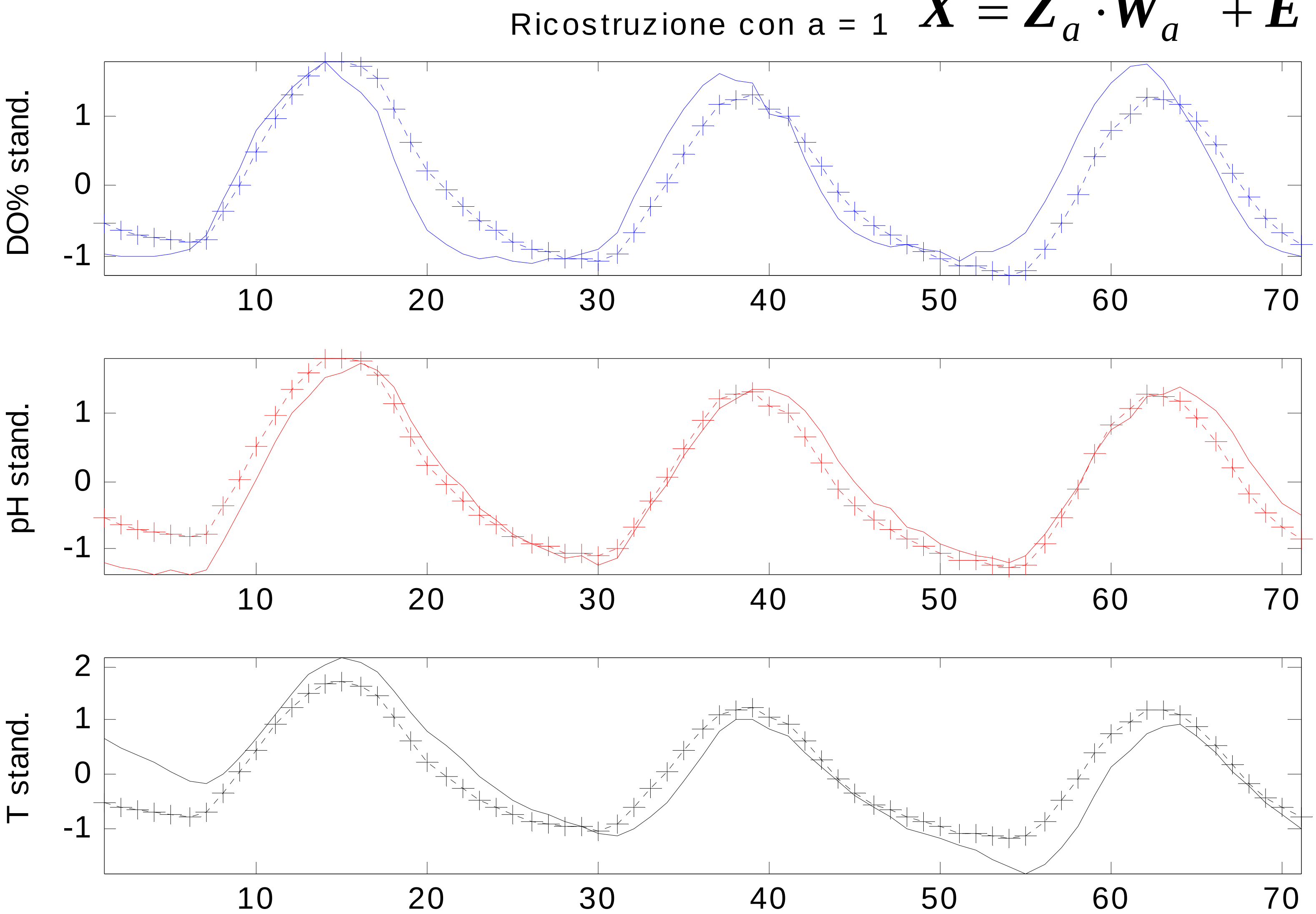
Ricostruzione da PCA ridotta

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Z}_a \cdot \boldsymbol{W}_a^{\,T} + \boldsymbol{E}$$



Ricostruzione da PCA ridotta

$$X = Z_a \cdot W_a^T + E$$



La statistica Q

- ☞ Valuta l'importanza delle PC escluse dall'analisi
- ☞ Ha significato solo quando si esegue una riduzione ($a < p$)
- ☞ Il valore limite della statistica Q per il quantile c_α=1-α è dato da

$$Q_{lim} = \vartheta_1 \left[1 + \frac{h_o c_\alpha \sqrt{2\vartheta_2}}{\vartheta_1} + \frac{\vartheta_2 h_o (h_o - 1)}{\vartheta_1^{\,2}} \right]^{\frac{1}{h_o}}$$

$$\vartheta_1 = \sum_{i=a+1}^{p} \lambda_i \qquad \vartheta_2 = \sum_{i=a+1}^{p} \lambda_i^2$$

$$\vartheta_3 = \sum_{i=a+1}^{p} \lambda_i^3 \qquad h_o = 1 - 2\frac{\vartheta_1 \vartheta_2}{3\vartheta_3^2}$$