13 Analiza składowych głównych

13.1 Przykład

Przykład. Zbiór danych USArrests zawiera informacje dotyczące liczby morderstw, napadów, gwałtów przypadających na 100,000 osób w poszczególnych stanach USA w roku 1973 oraz procent ludności mieszkającej w miastach. Chcielibyśmy się dowiedzieć, czy stany są do siebie w pewien sposób zbliżone oraz spróbować zwizualizować je na płaszczyźnie.

head(USArrests)

##		Murder	Assault	UrbanPop	Rape
##	Alabama	13.2	236	58	21.2
##	Alaska	10.0	263	48	44.5
##	Arizona	8.1	294	80	31.0
##	Arkansas	8.8	190	50	19.5
##	California	9.0	276	91	40.6
##	Colorado	7.9	204	78	38.7

dim(USArrests)

```
## [1] 50 4
```

przygotowanie danych do analizy składowych głównych

```
# sprawdzamy czy wariancje (,,zmienności'') zmiennych są bardzo zróżnicowane var(USArrests)
```

```
## Murder
             18.970465 291.0624
                                   4.386204 22.99141
## Assault 291.062367 6945.1657 312.275102 519.26906
             4.386204 312.2751 209.518776 55.76808
## UrbanPop
## Rape
             22.991412 519.2691 55.768082 87.72916
# tak są, więc centrujemy i skalujemy funkcją scale
USArrests_scale <- scale(USArrests)</pre>
var(USArrests scale)
                         Assault
                                   UrbanPop
##
                Murder
                                                  Rape
## Murder
            1.00000000 0.8018733 0.06957262 0.5635788
## Assault 0.80187331 1.0000000 0.25887170 0.6652412
## UrbanPop 0.06957262 0.2588717 1.00000000 0.4113412
## Rape
            0.56357883 0.6652412 0.41134124 1.0000000

    model analizy składowych głównych w R i procent wyjaśnianej wariancji zmiennych

  oryginalnych przez poszczególne składowe główne
pca <- prcomp(USArrests, scale = TRUE)</pre>
# Lub
# pca <- prcomp(USArrests_scale)</pre>
рса
## Standard deviations (1, .., p=4):
## [1] 1.5748783 0.9948694 0.5971291 0.4164494
##
## Rotation (n \times k) = (4 \times 4):
                   PC1
##
                              PC2
                                         PC3
                                                      PC4
## Murder
          -0.5358995 0.4181809 -0.3412327 0.64922780
## Assault -0.5831836 0.1879856 -0.2681484 -0.74340748
## UrbanPop -0.2781909 -0.8728062 -0.3780158 0.13387773
## Rape
            -0.5434321 -0.1673186 0.8177779 0.08902432
```

##

Murder

Assault

UrbanPop

Rape

```
# bez skalowania
prcomp(USArrests)
```

```
## Standard deviations (1, .., p=4):
## [1] 83.732400 14.212402 6.489426 2.482790
##
## Rotation (n x k) = (4 x 4):
## PC1 PC2 PC3 PC4
## Murder 0.04170432 -0.04482166 0.07989066 -0.99492173
## Assault 0.99522128 -0.05876003 -0.06756974 0.03893830
## UrbanPop 0.04633575 0.97685748 -0.20054629 -0.05816914
## Rape 0.07515550 0.20071807 0.97408059 0.07232502
```

summary(pca)

```
## Importance of components:

## PC1 PC2 PC3 PC4

## Standard deviation 1.5749 0.9949 0.59713 0.41645

## Proportion of Variance 0.6201 0.2474 0.08914 0.04336

## Cumulative Proportion 0.6201 0.8675 0.95664 1.00000
```

 wyniki (ang. scores) - współrzędne obserwacji w nowym układzie współrzędnych utworzonym przez składowe główne (to one najczęściej podlegają wizualizacji)

head(pca\$x)

```
##
                    PC1
                               PC2
                                           PC3
                                                        PC4
             -0.9756604 1.1220012 -0.43980366 0.154696581
## Alabama
## Alaska
             -1.9305379 1.0624269 2.01950027 -0.434175454
## Arizona
             -1.7454429 -0.7384595 0.05423025 -0.826264240
## Arkansas
              0.1399989 1.1085423 0.11342217 -0.180973554
## California -2.4986128 -1.5274267 0.59254100 -0.338559240
## Colorado
             -1.4993407 -0.9776297 1.08400162 0.001450164
```

 ładunki (ang. *loadings*) - współczynniki pokazujące wkład poszczególnych zmiennych bazowych w tworzenie składowych głównych (im wartość bezwzględna z ładunku jest większa, tym zmienna ma większy wkład w budowę składowej głównej)

pca\$rotation

```
## Murder -0.5358995 0.4181809 -0.3412327 0.64922780

## Assault -0.5831836 0.1879856 -0.2681484 -0.74340748

## UrbanPop -0.2781909 -0.8728062 -0.3780158 0.13387773

## Rape -0.5434321 -0.1673186 0.8177779 0.08902432
```

 wykres osypiska (piargowy, ang. scree plot) - wykres wariancji poszczególnych składowych głównych

```
pca$sdev^2
```

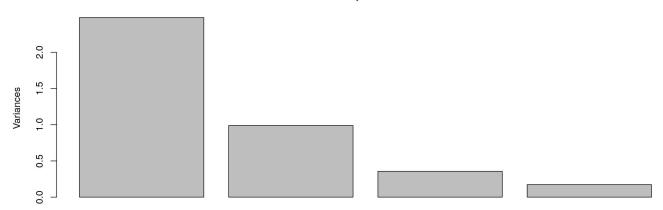
```
## [1] 2.4802416 0.9897652 0.3565632 0.1734301
```

```
apply(pca$x, 2, var)
```

```
## PC1 PC2 PC3 PC4
## 2.4802416 0.9897652 0.3565632 0.1734301
```

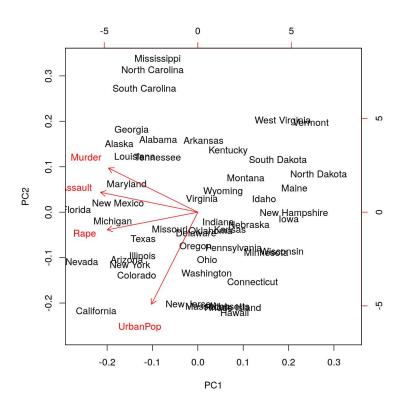
plot(pca)





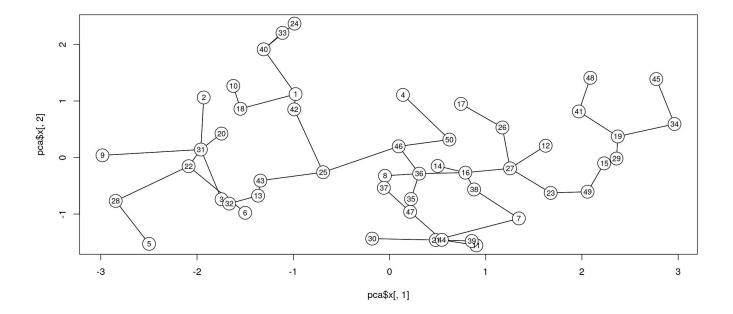
• biplot (ang. biplot) - wykres, na którym punkty przedstawiają poszczególne obserwacje w nowym układzie dwóch pierwszych składowych głównych, a strzałki oznaczają zmienne. Kierunek strzałek pokazuje wpływ tych zmiennych odpowiednio na pierwszą i drugą składową główną. Kąt przecięcia strzałek jest proporcjonalny do zależności pomiędzy zmiennymi, a ich długość odzwierciedla odchylenie standardowe.

biplot(pca)



 Żeby stwierdzić, czy taki wykres jest adekwatnym odzwierciedleniem położenia oryginalnych punktów, można na niego nanieść minimalne drzewo rozpinające (MST).
 MST to graf, którego wierzchołkami są obserwacje, dwa punkty połączone są dokładnie jedną ścieżką, a suma krawędzi jest minimalna. Punkty połączone krawędziami powinny być blisko siebie na wykresie.

```
library(ape)
plot(mst(dist(USArrests_scale)), x1 = pca$x[, 1], x2 = pca$x[, 2])
```



```
# odczytywanie nazw obserwacji
row.names(USArrests_scale[c(24, 33),])
## [1] "Mississippi" "North Carolina"
```

13.2 Zadania

Zadanie 1. W powyższym przykładzie do analizy składowych głównych zostały wykorzystane wszystkie zmienne. Jednak jedna z nich jest bardzo słabo skorelowana z pozostałymi. Ustal tę zmienną, a następnie wykonaj poniższe polecenia bez jej uzwględnienia:

1. Dokonaj analizy składowych głównych.

```
## Standard deviations (1, .., p=3):
## [1] 1.5357670 0.6767949 0.4282154
##
## Rotation (n x k) = (3 x 3):
## PC1 PC2 PC3
## Murder -0.5826006 0.5339532 -0.6127565
## Assault -0.6079818 0.2140236 0.7645600
## Rape -0.5393836 -0.8179779 -0.1999436
```

2. Jaki procent wariancji tłumaczony jest przez poszczególne składowe?

```
## Importance of components:

## PC1 PC2 PC3

## Standard deviation 1.5358 0.6768 0.42822

## Proportion of Variance 0.7862 0.1527 0.06112

## Cumulative Proportion 0.7862 0.9389 1.00000
```

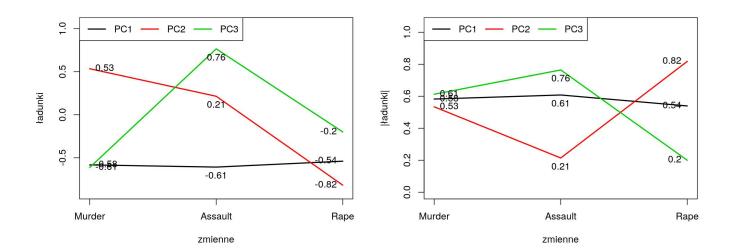
3. Wyznacz współrzędne obserwacji w nowym układzie współrzędnych utworzonym przez składowe główne.

```
## Alabama -1.1980278 0.8338118 -0.16217848
## Alaska -2.3087473 -1.5239622 0.03833574
## Arizona -1.5033307 -0.4983038 0.87822311
## Arkansas -0.1759894 0.3247326 0.07111174
## California -2.0452358 -1.2725770 0.38153933
## Colorado -1.2634133 -1.4264063 -0.08369314
```

...

4. Dokonaj interpretacji ładunków i zilustruj je na wykresie.

```
## PC1 PC2 PC3
## Murder -0.5826006 0.5339532 -0.6127565
## Assault -0.6079818 0.2140236 0.7645600
## Rape -0.5393836 -0.8179779 -0.1999436
```

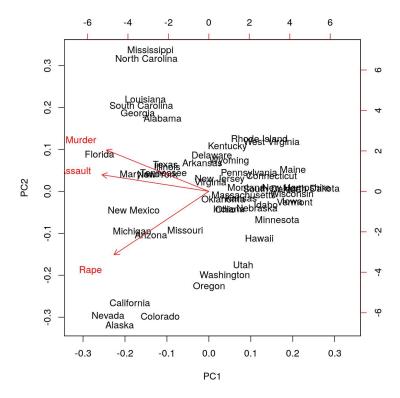


5. Narysuj wykres osypiska i zaproponuj optymalną liczbę składowych głównych w oparciu o trzy kryteria.

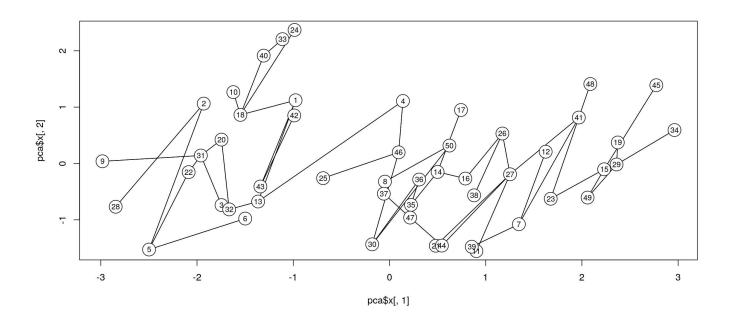


1 lub 2

6. Przedstaw stany w układzie dwóch pierwszych składowych głównych (dokładniej narysuj biplot i dokonaj jego interpretacji).



7. Przedstaw stany za pomocą minimalnego drzewa rozpinającego.



Zadanie 2. Zbiór danych mtcars zawiera informacje na temat 32 samochodów z roku 1974.

 Dokonaj analizy składowych głównych biorąc pod uwagę cechy: mpg , disp , hp , drat , wt , qsec .

```
## Standard deviations (1, .., p=6):
## [1] 2.0463129 1.0714999 0.5773705 0.3928874 0.3532648 0.2279872
##
## Rotation (n \times k) = (6 \times 6):
          PC1
                   PC2
                           PC3
                                   PC4
                                          PC5
##
                                                   PC<sub>6</sub>
     ## mpg
## disp 0.4660354 -0.06065296 0.09688406 0.60001871 0.2946297 0.56825752
      ## hp
## drat -0.3670963   0.43652537   0.80049152   0.02259258   0.1437714   0.11277675
## wt
      0.4386179 -0.29953457
                      0.41776208 0.10438337 0.2301541 -0.69246040
```

2. Jaki procent wariancji tłumaczony jest przez poszczególne składowe?

```
## Importance of components:

## PC1 PC2 PC3 PC4 PC5 PC6

## Standard deviation 2.0463 1.0715 0.57737 0.39289 0.3533 0.22799

## Proportion of Variance 0.6979 0.1913 0.05556 0.02573 0.0208 0.00866
```

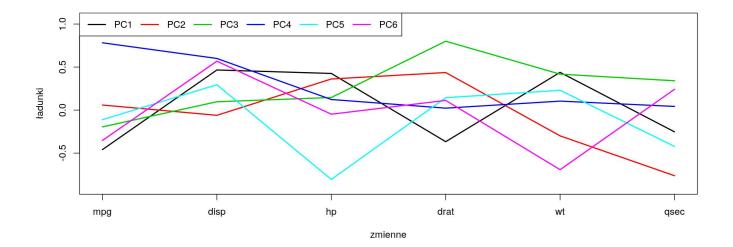
Cumulative Proportion 0.6979 0.8892 0.94481 0.97054 0.9913 1.00000

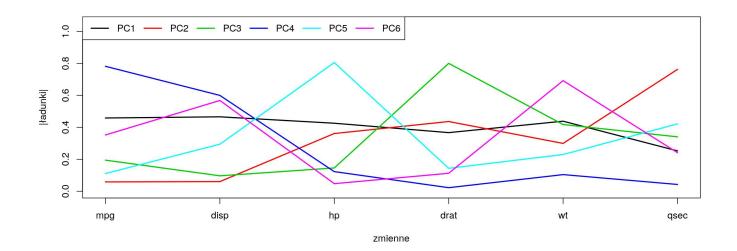
3. Wyznacz współrzędne obserwacji w nowym układzie współrzędnych utworzonym przez składowe główne.

```
PC2
##
                          PC1
                                                 PC3
                                                           PC4
## Mazda RX4
                    ## Mazda RX4 Wag
                   -0.8075041   0.556341552   -0.0126678   -0.3336931
## Datsun 710
                   -1.6850448 -0.040006569 -0.1564937 -0.4057157
## Hornet 4 Drive
                   -0.0964443 -1.294377904 -0.5702297 0.2520788
## Hornet Sportabout 1.2915096 -0.006516693 -0.5250741 0.4813192
                    0.2187309 -2.005957905 -0.7258399 -0.3136170
## Valiant
##
                           PC5
                                      PC6
## Mazda RX4
                    0.51522641 -0.05293884
## Mazda RX4 Wag
                   0.44299870 -0.15771326
## Datsun 710
                   -0.03340433 0.10756126
## Hornet 4 Drive
                   -0.04326023 0.18173489
## Hornet Sportabout 0.12822104 0.29051949
## Valiant
                    -0.21465335 0.09145688
```

4. Dokonaj interpretacji ładunków i zilustruj je na wykresie.

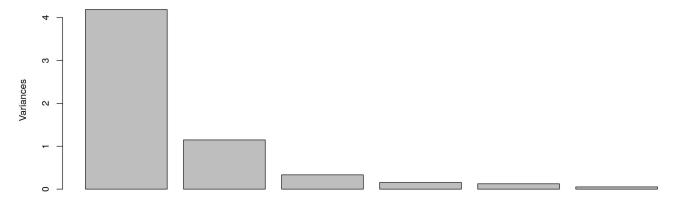
```
PC1
                           PC2
                                       PC3
                                                   PC4
                                                              PC5
                                                                          PC6
##
## mpg
                    0.05867609 -0.19479235 0.78205878 -0.1111533 -0.35249327
## disp
         0.4660354 -0.06065296
                                0.09688406 0.60001871
                                                        0.2946297
         0.4258534
                    0.36147576
                                0.14613554 0.12301873 -0.8057408 -0.04771555
## hp
## drat -0.3670963
                    0.43652537
                                0.80049152 0.02259258
                                                       0.1437714
                                                                   0.11277675
         0.4386179 -0.29953457
                                0.41776208 0.10438337
                                                        0.2301541 -0.69246040
## qsec -0.2528320 -0.76284877
                                0.34059066 0.04268124 -0.4218755
```





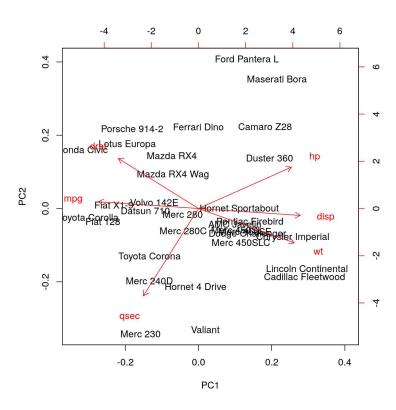
5. Narysuj wykres osypiska i zaproponuj optymalną liczbę składowych głównych w oparciu o trzy kryteria.



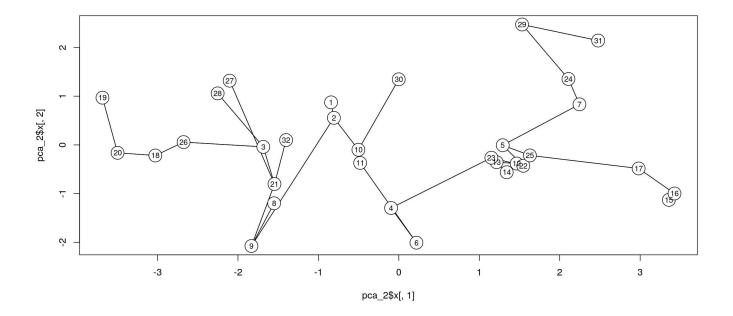


2 lub 3

6. Przedstaw samochody w układzie dwóch pierwszych składowych głównych (dokładniej narysuj biplot i dokonaj jego interpretacji).



7. Przedstaw samochody za pomocą minimalnego drzewa rozpinającego.



8. Jak bardzo będą różniły się wyniki, jeśli nie wykonamy skalowania danych?

Ad. 1

```
## Standard deviations (1, .., p=6):
## [1] 310.0207637 40.8471739 15.7168252 2.1068823
                                          0.3894500
                                                   0.2969505
##
## Rotation (n \times k) = (6 \times 6):
           PC1
                     PC2
                              PC3
                                       PC4
                                                 PC5
##
     ## mpg
## disp -0.85253108 -0.522102198 -0.00915689 0.022137483 0.001587345
      -0.01067910 0.001369032 -0.04162846 -0.192177061 0.129755288
## wt
## qsec -0.05132793 0.059700171 -0.53199901 -0.817945952 -0.113215907
             PC6
##
      0.0794678281
## mpg
## disp -0.0048593900
      -0.0003699391
## hp
## drat -0.1426655136
      0.9717935462
## qsec -0.1700734209
```

Importance of components:

PC1 PC2 PC3 PC4 PC5 PC6

Standard deviation 310.0208 40.84717 15.71683 2.10688 0.3895 0.297

Proportion of Variance 0.9804 0.01702 0.00252 0.00005 0.0000 0.000

Cumulative Proportion 0.9804 0.99743 0.99995 1.00000 1.0000 1.0000

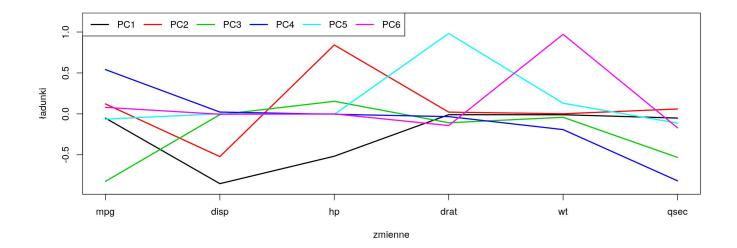
Ad. 3.

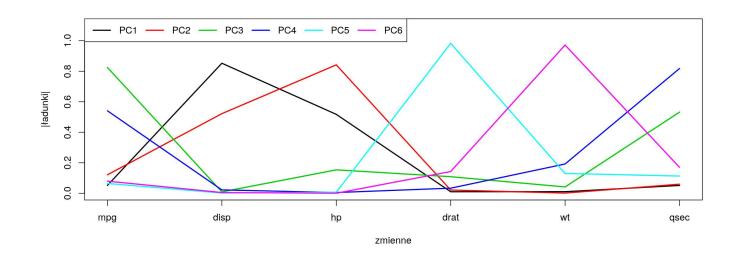
PC1 PC2 PC3 PC4 PC5 ## Mazda RX4 -195.3155 12.68122 -11.170400 0.2509678 0.46472555 -195.3469 12.71500 -11.478935 -0.2560871 0.43441224 ## Mazda RX4 Wag ## Datsun 710 -142.3892 25.86447 -15.915699 -1.5412826 0.05036709 ## Hornet 4 Drive -279.0353 -38.27504 -13.918563 0.1123864 -0.47164240 ## Hornet Sportabout -399.3594 -37.28023 -1.370742 2.5199166 -0.20567766 ## Valiant -248.1831 -25.61490 -12.054118 -3.0519863 -0.64870858 ## PC6 ## Mazda RX4 0.04092377 ## Mazda RX4 Wag 0.19349001 ## Datsun 710 -0.20711953 ## Hornet 4 Drive -0.21512523 ## Hornet Sportabout -0.32914754 ## Valiant -0.16407438

...

Ad. 4.

PC1 PC2 PC3 PC4 PC5 ## ## mpg -0.05193468 0.121255352 -0.82446804 0.540735371 -0.064362234 ## disp -0.85253108 -0.522102198 -0.00915689 0.022137483 0.001587345 -0.01067910 0.001369032 -0.04162846 -0.192177061 0.129755288 ## qsec -0.05132793 0.059700171 -0.53199901 -0.817945952 -0.113215907 ## PC6 ## mpg 0.0794678281 ## disp -0.0048593900 -0.0003699391 ## hp ## drat -0.1426655136 0.9717935462 ## wt ## qsec -0.1700734209



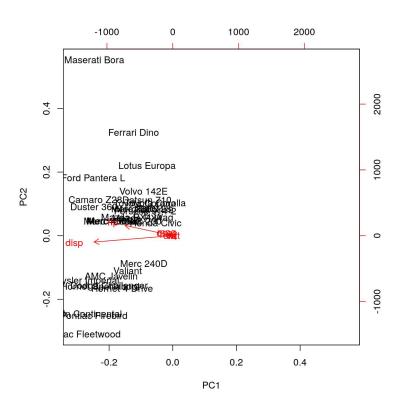






1

Ad. 6.



Ad. 7.

