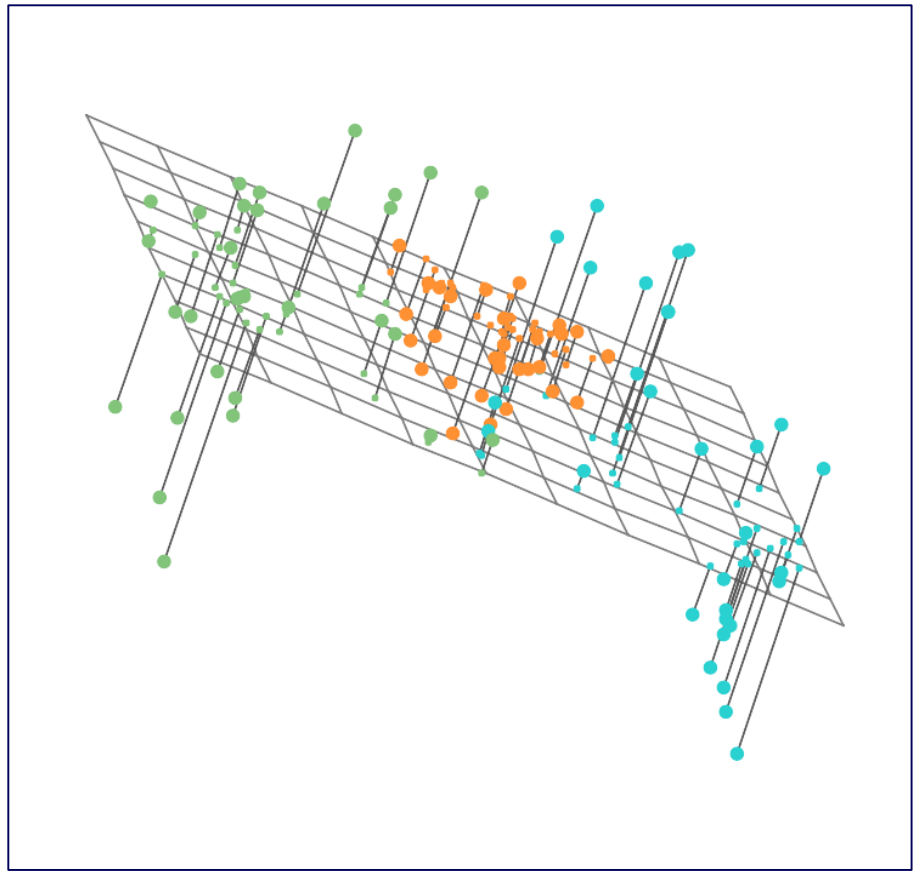
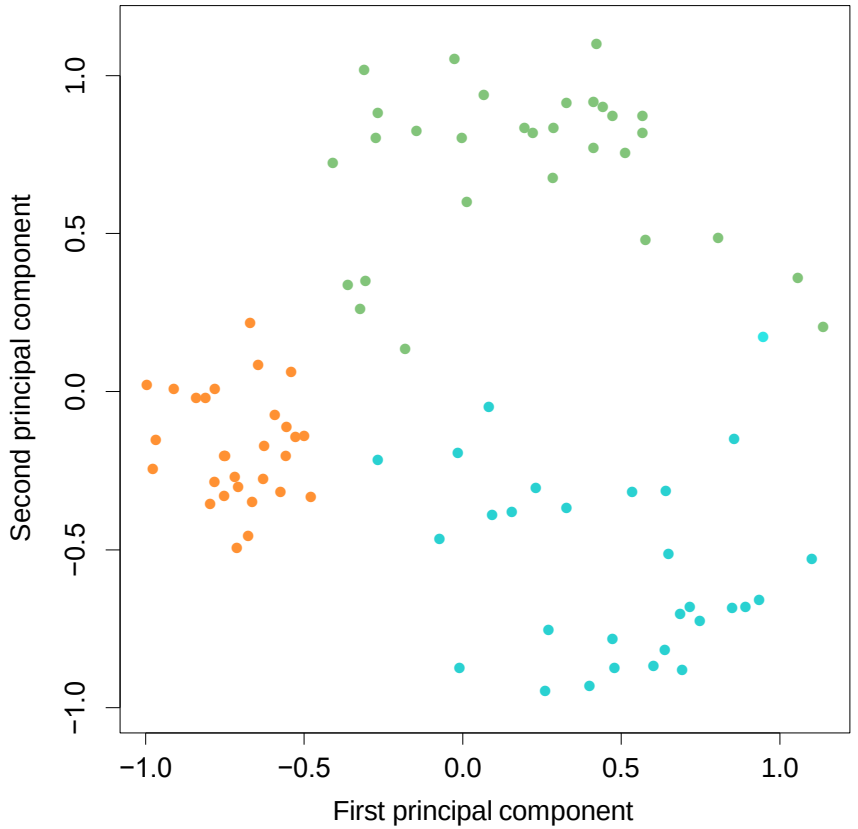
# Phân tích thành phần chính
# Principal Component Analysis (PCA)

Nguyễn Thanh Tùng, **Trần Thị Ngân**
Khoa Công nghệ thông tin – Đại học Thủy lợi
*tungnt@tlu.edu.vn*, ***ngantt@tlu.edu.vn***

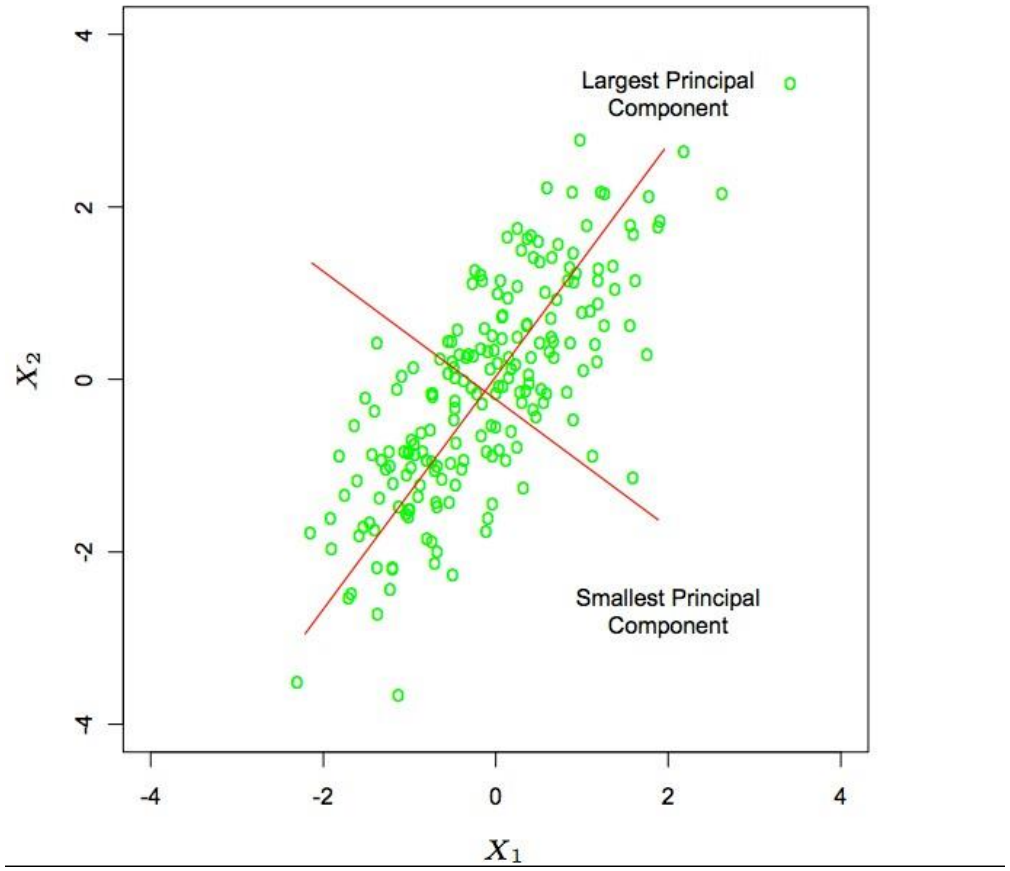
*Các slides ở mục này tham khảo từ bài giảng của GS. Nguyễn Văn Tuấn*

# Giảm chiều dữ liệu





# Phép chiếu


Largest Principal Component
Smallest Principal Component
$X_1$
$X_2$
-4
-2
0
2
4

# Phân tích thành phần chính là gì

- Đề xướng bởi Pearson (1901) và Hotelling (1933)
- *"PCA là một thuật toán thống kê sử dụng phép biến đổi trực giao để biến đổi một tập hợp dữ liệu từ một không gian nhiều chiều sang một không gian mới ít chiều hơn (2 hoặc 3 chiều) nhằm tối ưu hóa việc thể hiện sự biến thiên của dữ liệu"*
- *"Phân tích thành phần chính là một phương pháp trích xuất các biến quan trọng (dưới dạng các thành phần) từ một tập hợp lớn các biến có sẵn trong một tập dữ liệu với mục đích thu thập càng nhiều thông tin càng tốt"*

# Ưu điểm của PCA

- Giảm số chiều của không gian chứa dữ liệu khi nó có số chiều lớn, không thể thể hiện trong không gian 2 hay 3 chiều.
- Xây dựng những trục tọa độ mới, thay vì giữ lại các trục của không gian cũ, nhưng lại có khả năng biểu diễn dữ liệu tốt tương đương, và đảm bảo độ biến thiên của dữ liệu trên mỗi chiều mới.
- Tạo điều kiện để các liên kết tiềm ẩn của dữ liệu có thể được khám phá trong không gian mới, mà nếu đặt trong không gian cũ thì khó phát hiện vì những liên kết này không thể hiện rõ.
- Đảm bảo các trục tọa độ trong không gian mới luôn trực giao đôi một với nhau, mặc dù trong không gian ban đầu các trục có thể không trực giao.

# Một vài đặc điểm của PCA

- Một số ứng dụng của PCA bao gồm nén dữ liệu (đặc biệt là dữ liệu ảnh), đơn giản hóa dữ liệu để dễ dàng học tập, hình dung.
- Lưu ý rằng kiến thức miền là rất quan trọng trong khi lựa chọn có nên tiếp tục với PCA hay không.
- PCA hữu ích hơn khi xử lý dữ liệu 3 chiều trở lên.
- PCA không phù hợp trong trường hợp dữ liệu bị nhiễu (tất cả các thành phần của PCA đều có độ biến thiên khá cao)

# Phân tích thành phần chính

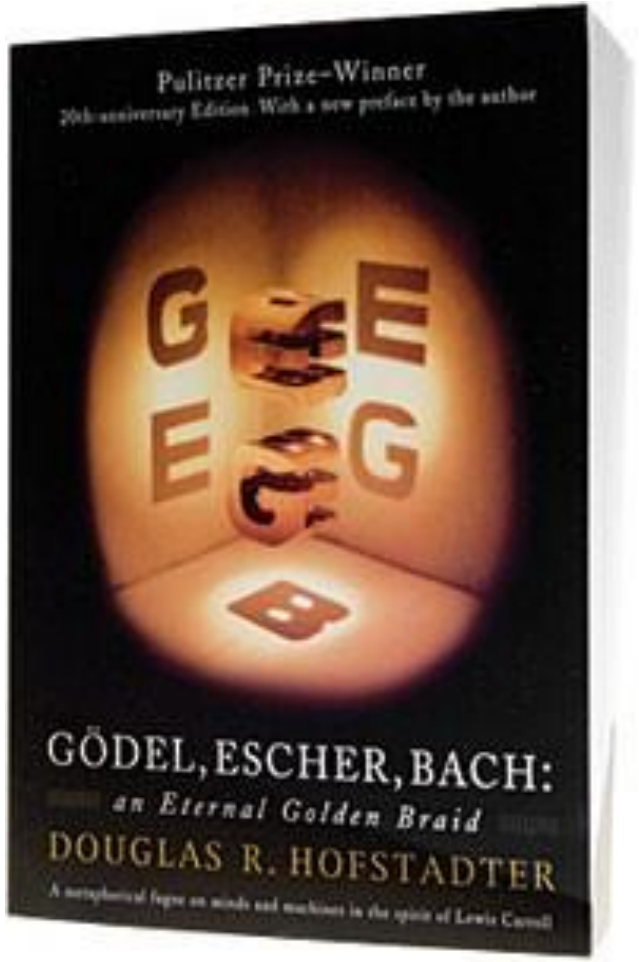
- Nếu hai biến (hay 2 items) có tương quan với nhau
  - Chúng có thể phản ảnh một hiện tượng tiềm ẩn (hay một yếu tố  không quan sát được – latent factor)
  - Nếu chúng phản ảnh một latent variable, thì tổng hợp chúng  thành 1 biến là hợp lí
- Các biến latent variables còn gọi là "**factors**" hay "**principal components**"

# Phân tích thành phần chính

- Trong không gian mới, các liên kết tiềm ẩn của dữ liệu có thể được khám phá
- Ví dụ: Thị trường ta quan tâm có hàng ngàn mã cổ phiếu làm cách nào để khi quan sát dữ liệu từ hàng ngàn cổ phiếu này ta hình dung được xu hướng của toàn thị trường…

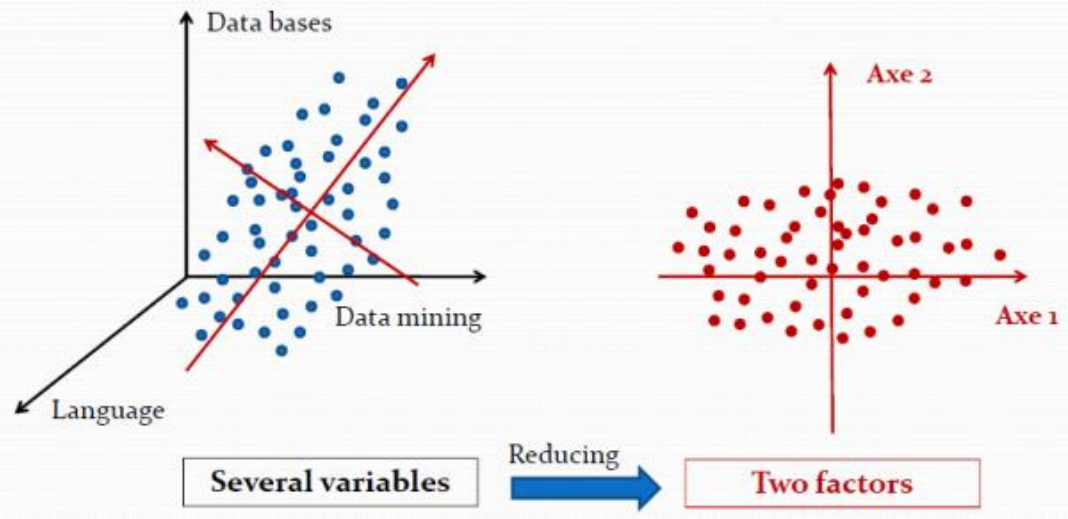
*nguồn: http://phvu.net/*

# Phân tích thành phần chính




Minh họa PCA: phép chiếu lên các trục tọa độ khác nhau có thể cho cách nhìn rất khác nhau về cùng một dữ liệu.

# Phân tích thành phần chính




Giả sử tập dữ liệu ban đầu (tập điểm màu xanh) được quan sát trong không gian 3 chiều (trục màu đen) như hình bên trái. Rõ ràng 3 trục này không biểu diễn được tốt nhất mức độ biến thiên của dữ liệu. PCA do đó sẽ tìm hệ trục tọa độ mới (là hệ trục màu đỏ trong hình bên trái). Sau khi tìm được không gian mới, dữ liệu sẽ được chuyển sang không gian này để được biểu diễn như trong hình bên phải. Rõ ràng hình bên phải chỉ cần 2 trục tọa độ nhưng biểu diễn tốt hơn độ biến thiên của dữ liệu so với hệ trục 3 chiều ban đầu.

*nguồn: http://phvu.net/*

| S.Length | S.Width | P.Length | P.Width | Species |
|---|---|---|---|---|
| 5.1 | 3.5 | 1.4 | 0.2 | I.setosa |
| 4.9 | 3 | 1.4 | 0.2 | I.setosa |
| 4.7 | 3.2 | 1.3 | 0.2 | I.setosa |
| 4.6 | 3.1 | 1.5 | 0.2 | I.setosa |
| 5 | 3.6 | 1.4 | 0.2 | I.setosa |
| 5.4 | 3.9 | 1.7 | 0.4 | I.setosa |
| 4.6 | 3.4 | 1.4 | 0.3 | I.setosa |
| 5 | 3.4 | 1.5 | 0.2 | I.setosa |
| 4.4 | 2.9 | 1.4 | 0.2 | I.setosa |
| 5.1 | 3.8 | 1.9 | 0.4 | I.setosa |
| 4.8 | 3 | 1.4 | 0.3 | I.setosa |
| 5.1 | 3.8 | 1.6 | 0.2 | I.setosa |
| 4.6 | 3.2 | 1.4 | 0.2 | I.setosa |
| 5.3 | 3.7 | 1.5 | 0.2 | I.setosa |
| 5 | 3.3 | 1.4 | 0.2 | I.setosa |
| 7 | 3.2 | 4.7 | 1.4 | I.versicolor |
| 6.4 | 3.2 | 4.5 | 1.5 | I.versicolor |
| 6.9 | 3.1 | 4.9 | 1.5 | I.versicolor |
| 5.5 | 2.3 | 4 | 1.3 | I.versicolor |
| 6.5 | 2.8 | 4.6 | 1.5 | I.versicolor |
| 5.7 | 2.8 | 4.5 | 1.3 | I.versicolor |
| 6.3 | 3.3 | 4.7 | 1.6 | I.versicolor |
| 4.9 | 2.4 | 3.3 | 1 | I.versicolor |
| 6.6 | 2.9 | 4.6 | 1.3 | I.versicolor |
| 5.2 | 2.7 | 3.9 | 1.4 | I.versicolor |
| 5 | 2 | 3.5 | 1 | I.versicolor |
| 6.2 | 2.8 | 4.8 | 1.8 | I.virginica |
| 6.1 | 3 | 4.9 | 1.8 | I.virginica |
| 6.4 | 2.8 | 5.6 | 2.1 | I.virginica |
| 7.2 | 3 | 5.8 | 1.6 | I.virginica |
| 7.4 | 2.8 | 6.1 | 1.9 | I.virginica |
| 7.9 | 3.8 | 6.4 | 2 | I.virginica |

# Iris data

# Bối cảnh và dữ liệu

- Bối cảnh: chúng ta có một ma trận dữ liệu gồm *n* hàng và *p* biến số $x_1, x_2, \ldots, x_p$
- PCA tìm cách hoán chuyển các $x_i$ thành $p$ biến mới ($y_i$) nhưng không có liên quan với nhau!

# Khi các biến liên quan đến nhau

- Cách đơn giản nhất là chỉ lưu lại 1 biến duy nhất (bỏ các  biến còn lại) – không hợp lí
- Cho trọng số mỗi biến. Trọng số nào?
- Tiêu chuẩn nào?

# Khi các biến liên quan đến nhau

- Tìm phương pháp hoán chuyển ma trận **X** (*n*x*p*) sao cho

$$Y = \boldsymbol{\delta}^T \mathbf{X} = \delta_1 X_1 + \delta_2 X_2 + .. + \delta_p X_p$$

Trong đó: $\boldsymbol{\delta} = (\delta_1, \delta_2, .., \delta_p)^T$ là cột vector gồm trọng số sao cho:

$$\delta_1^2 + \delta_2^2 + ... + \delta_p^2 = 1$$

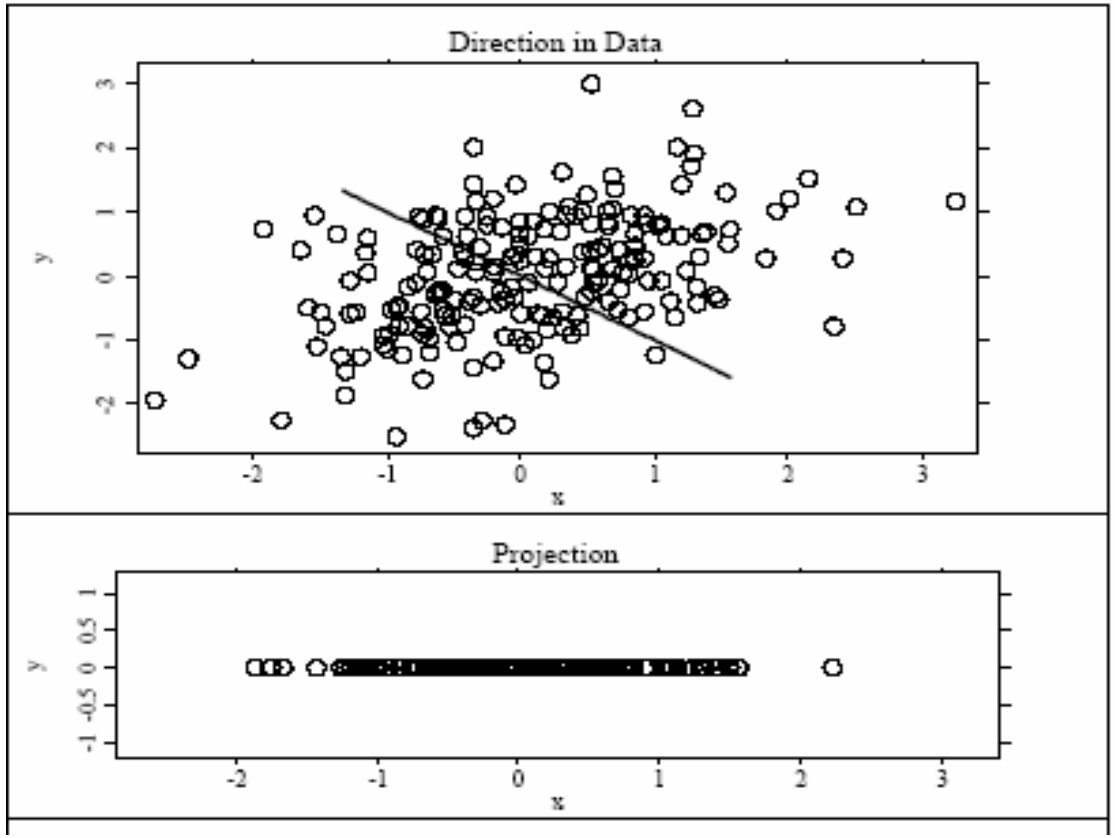
# Tiêu chuẩn

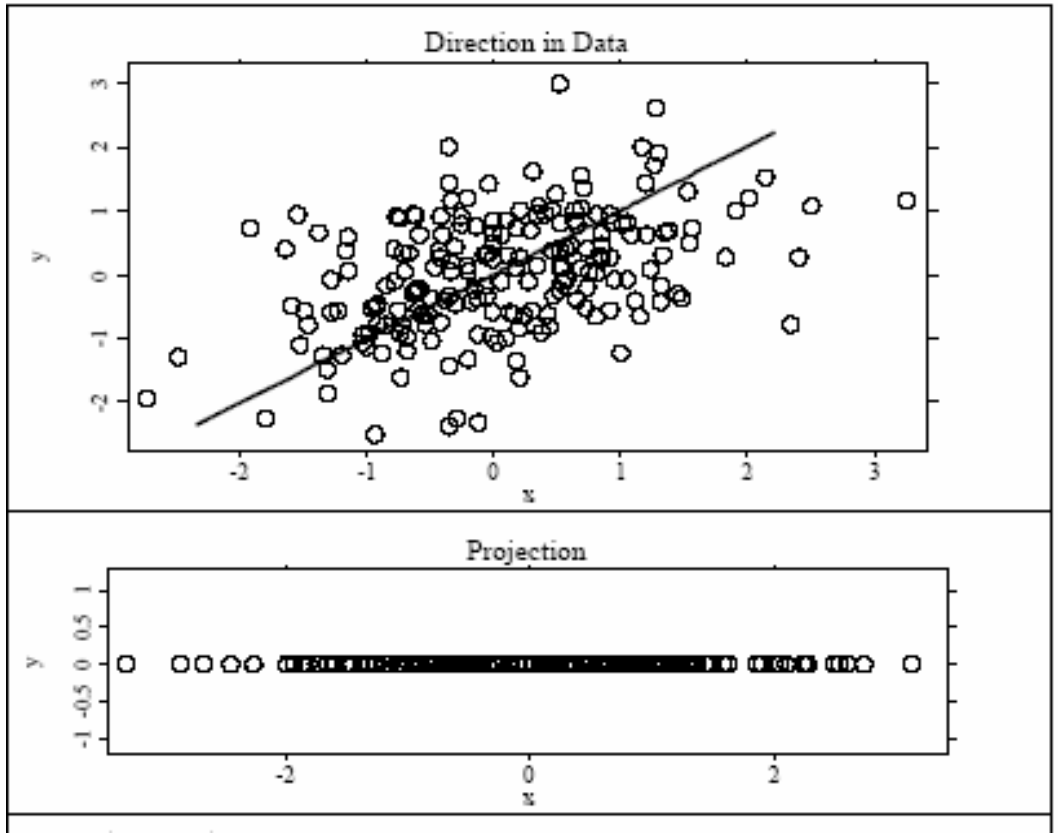
- Tối đa hoá phương sai của dữ liệu dựa trên các biến *Y*
- Tìm $\delta$ sao cho

  $Var(\delta^T \boldsymbol{X}) = \delta^T \boldsymbol{Var(X)}\, \delta$ tối đa

- Ma trận **C = Var(X)** là hiệp biến (covariance) của các biến $X_i$

# Thử tưởng tượng ...



# Variance-covariance matrix

$$\begin{pmatrix} v(x_1)\ c(x_1,x_2)\ \ldots\ldots\ldots c(x_1,x_p) \\ c(x_1,x_2)\ v(x_2)\ \ldots\ldots\ldots c(x_2,x_p) \\ \\ \\ c(x_1,x_p)\ c(x_2,x_p)\ldots\ldots\ldots\ldots v(x_p) \end{pmatrix}$$

# Có nghĩa là chúng ta tìm ...

- Hướng của $\delta$ được xác định bởi véc tơ riêng (vector eigen) $\gamma_1$ tương đương với giá trị riêng (eigen) lớn nhất của ma trận **C**
- Vector thứ 2 cũng trực giao (orthogonal, tức không liên quan) với vector 1
- v.v.

# Do đó, PCA cung cấp

- Một nhóm biến mới ($Y_i$) là hàm số tuyến tính của các biến $X_i$:

$$Y_i = a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \ldots a_{ip}x_p \; ; \; i = 1,2, \ldots p$$

- Biến mới $Y_i$ được tạo ra theo mức độ quan trọng nhưng suy giảm theo độ quan trọng
- Chúng được gọi là "principal components"

# Tính toán eigenvalue và eigenvector

- Giá trị eigen $\lambda_i$ được xác định bằng cách giải phương trình
  - $det(C-\lambda I) = 0$
- Vector eigen là những cột của ma trận A với đặc điểm

$$C=A\,D\,A^T$$

- Trong đó

$$D=\begin{pmatrix} \lambda 1 & 0 & \ldots\ldots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \ldots\ldots & 0 \\ 0 & & & \\ 0 & \ldots\ldots & \ldots\ldots & \lambda_p \end{pmatrix}$$

# Diễn giải PCA

- Những biến mới (Principal Components) có phương sai bằng giá trị eigen:

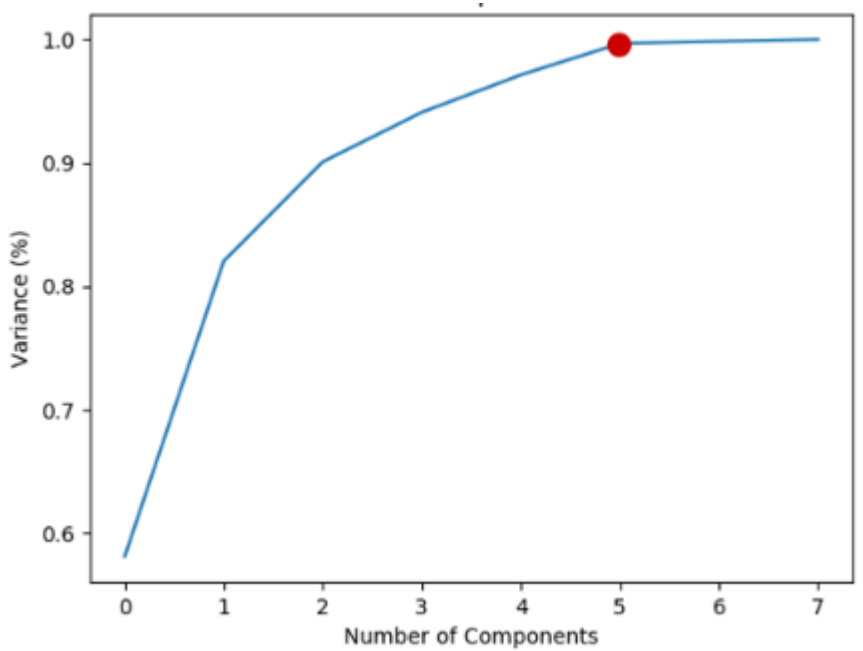
$$Var(Y_i) = \lambda_i \text{ cho tất cả } i = 1, 2, \ldots, p$$

- Giá trị $\lambda_i$ nhỏ ⇔ phương sai thấp ⇔ dữ liệu thay đổi nhỏ về hướng của $Y_i$
- Mức độ quan trọng của mỗi PC given by $\lambda_i / \Sigma \lambda_i$

# Cần bao nhiêu PC?

- Số PCs sao cho tỉ lệ phương sai giải thích được >90%
- Kaiser criterion: giữ PCs với eigenvalues >1
- Scree plot: thể hiện khả năng PC giải thích phương sai của dữ liệu

Số mẫu: 17898
Số biến: 9
Số PC = 5, khả năng giải thích phương sai xấp xỉ 99%



# Diễn giải ý nghĩa của PC

- Trọng số của biến số trong mỗi PC:
- Nếu $Y_1 = 0.89\,X_1 + 0.15X_2 - 0.77X_3 + 0.51X_4$
- Thì $X_1$ và $X_3$ có trọng số cao nhất, và là biến quan trọng nhất
- Xem mối tương quan giữa các biến $X_i$ và PC

# Các bước phân tích

1. Chuẩn bị dữ liệu (chuẩn hoá dữ liệu)
2. Tính ma trận covariance hoặc correlation
3. Tính eigenvalues của ma trận covariance
4. Chọn components

# Dữ liệu của Fisher

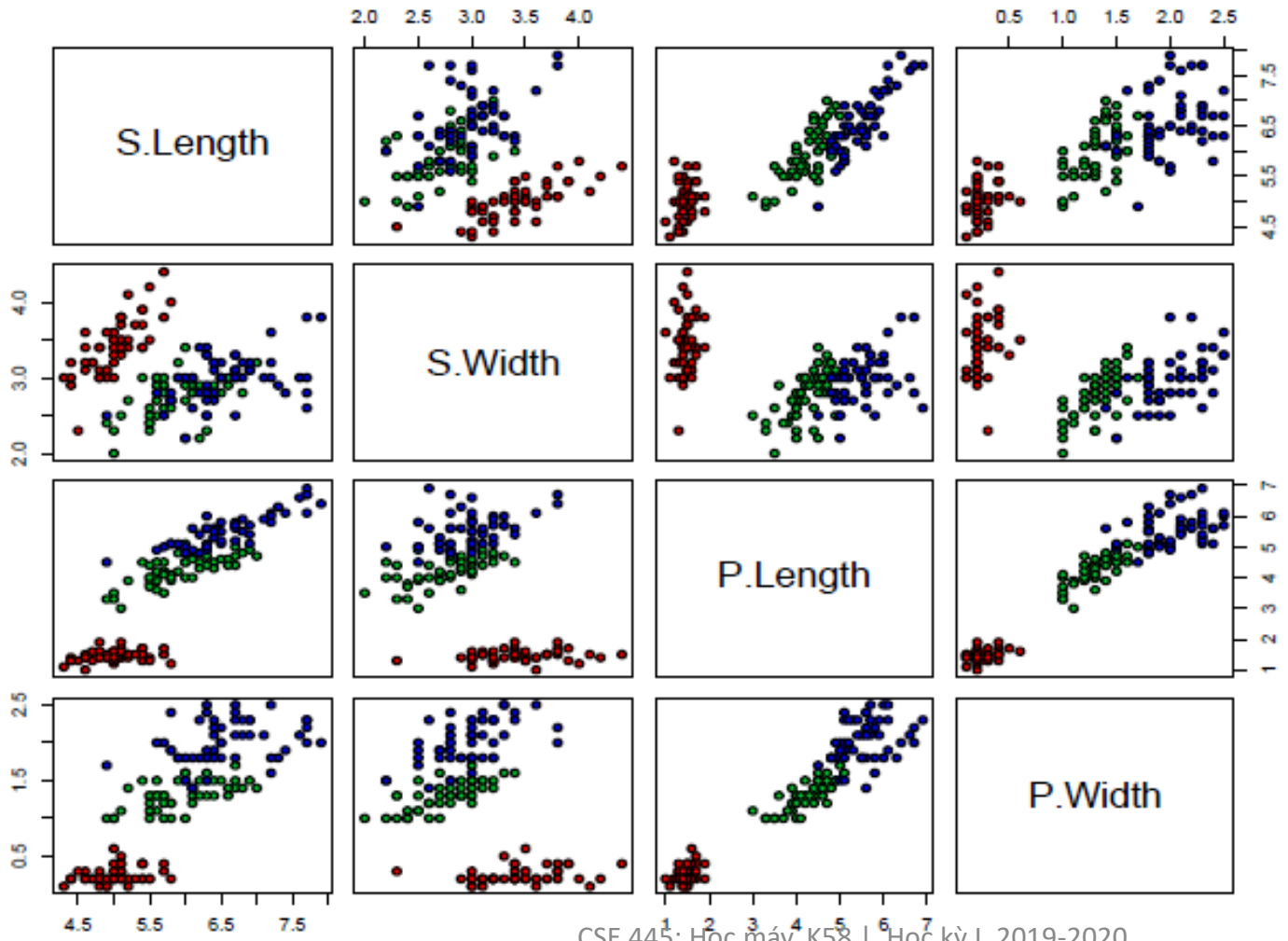
| S.Length | S.Width | P.Length | P.Width | Species |
|---|---|---|---|---|
| 5.1 | 3.5 | 1.4 | 0.2 | I.setosa |
| 4.9 | 3 | 1.4 | 0.2 | I.setosa |
| 4.7 | 3.2 | 1.3 | 0.2 | I.setosa |
| 4.6 | 3.1 | 1.5 | 0.2 | I.setosa |
| 5 | 3.6 | 1.4 | 0.2 | I.setosa |
| 5.1 | 3.8 | 1.9 | 0.4 | I.setosa |
| 4.8 | 3 | 1.4 | 0.3 | I.setosa |
| 5 | 3.3 | 1.4 | 0.2 | I.setosa |
| 7 | 3.2 | 4.7 | 1.4 | I.versicolor |
| 6.4 | 3.2 | 4.5 | 1.5 | I.versicolor |
| 6.9 | 3.1 | 4.9 | 1.5 | I.versicolor |
| 4.9 | 2.4 | 3.3 | 1 | I.versicolor |
| 6.6 | 2.9 | 4.6 | 1.3 | I.versicolor |
| 5.2 | 2.7 | 3.9 | 1.4 | I.versicolor |
| 5 | 2 | 3.5 | 1 | I.versicolor |
| 6.2 | 2.8 | 4.8 | 1.8 | I.virginica |
| 6.1 | 3 | 4.9 | 1.8 | I.virginica |
| 6.4 | 2.8 | 5.6 | 2.1 | I.virginica |
| 7.2 | 3 | 5.8 | 1.6 | I.virginica |
| 7.4 | 2.8 | 6.1 | 1.9 | I.virginica |
| 7.9 | 3.8 | 6.4 | 2 | I.virginica |

```
data(iris)
head(iris)
```

```
  S.Length S.Width P.Length P.Width  Species
1      5.1     3.5      1.4     0.2 I.setosa
2      4.9     3.0      1.4     0.2 I.setosa
3      4.7     3.2      1.3     0.2 I.setosa
4      4.6     3.1      1.5     0.2 I.setosa
5      5.0     3.6      1.4     0.2 I.setosa
6      5.4     3.9      1.7     0.4 I.setosa
```

# Quan sát dữ liệu

```
pairs(iris[1:4], pch = 21, bg = c("red", "green3", "blue")
 [unclass(iris$Species)])
```



# Bước 1: Chuẩn hoá data

```
s.iris = scale(iris[1:4], center = TRUE, scale = TRUE)
```

```
head(s.iris)
```

```
        S.Length     S.Width  P.Length   P.Width
[1,] -0.8976739  1.01560199 -1.335752 -1.311052
[2,] -1.1392005 -0.13153881 -1.335752 -1.311052
[3,] -1.3807271  0.32731751 -1.392399 -1.311052
[4,] -1.5014904  0.09788935 -1.279104 -1.311052
[5,] -1.0184372  1.24503015 -1.335752 -1.311052
[6,] -0.5353840  1.93331463 -1.165809 -1.048667
```

# Bước 2: Tính toán hệ số tương quan

```
s.corr = cor(s.iris)
round(s.corr, 2)
```

```
          S.Length S.Width P.Length P.Width
S.Length      1.00   -0.12     0.87    0.82
S.Width      -0.12    1.00    -0.43   -0.37
P.Length      0.87   -0.43     1.00    0.96
P.Width       0.82   -0.37     0.96    1.00
```

# Bước 3: Tính toán eigenvalues

```
eigen = eigen(s.corr)
  eigen

$values
[1] 2.91849782 0.91403047 0.14675688 0.02071484

$vectors
           [,1]        [,2]       [,3]       [,4]
[1,]  0.5210659 -0.37741762  0.7195664  0.2612863
[2,] -0.2693474 -0.92329566 -0.2443818 -0.1235096
[3,]  0.5804131 -0.02449161 -0.1421264 -0.8014492
[4,]  0.5648565 -0.06694199 -0.6342727  0.5235971
```

# Bước 4: Phân tích với prcomp

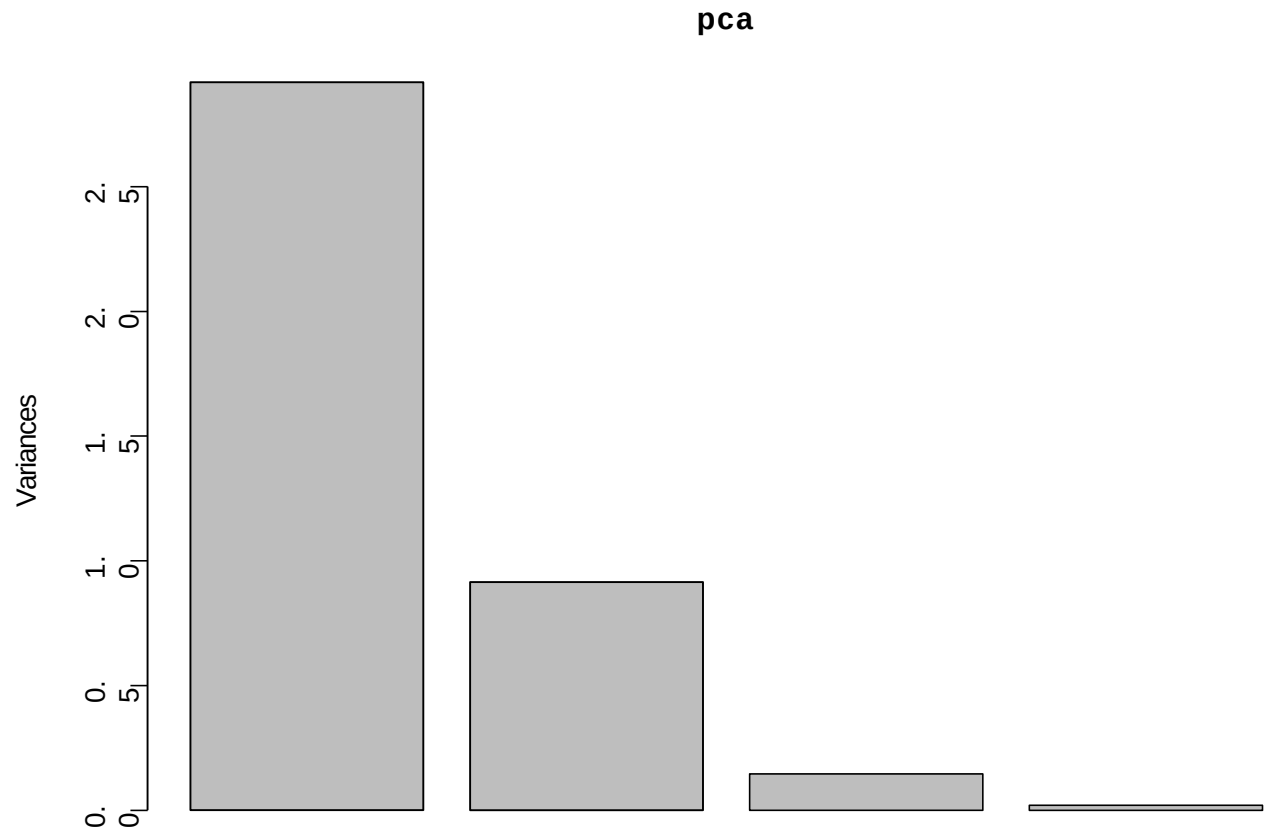
```
pca =prcomp(iris[1:4],center=T,scale=T)
Pca


Standard deviations:
[1] 1.7083611 0.9560494 0.3830886 0.1439265


Rotation:
                PC1         PC2        PC3         PC4
S.Length  0.5210659 -0.37741762  0.7195664  0.2612863
S.Width  -0.2693474 -0.92329566 -0.2443818 -0.1235096
P.Length  0.5804131 -0.02449161 -0.1421264 -0.8014492
P.Width   0.5648565 -0.06694199 -0.6342727  0.5235971
```

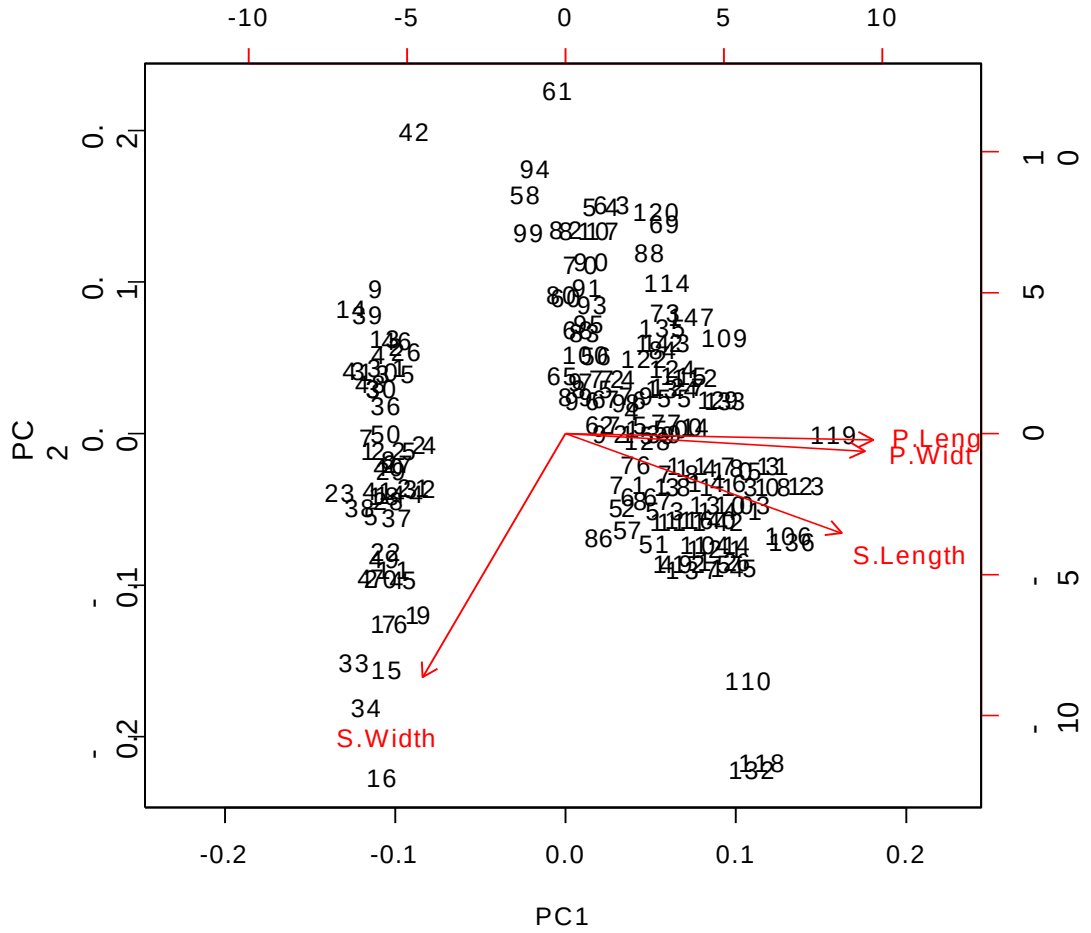
# Bước 4: Phân tích với prcomp

```
plot(pca)
```



# Bước 4: Phân tích với prcomp

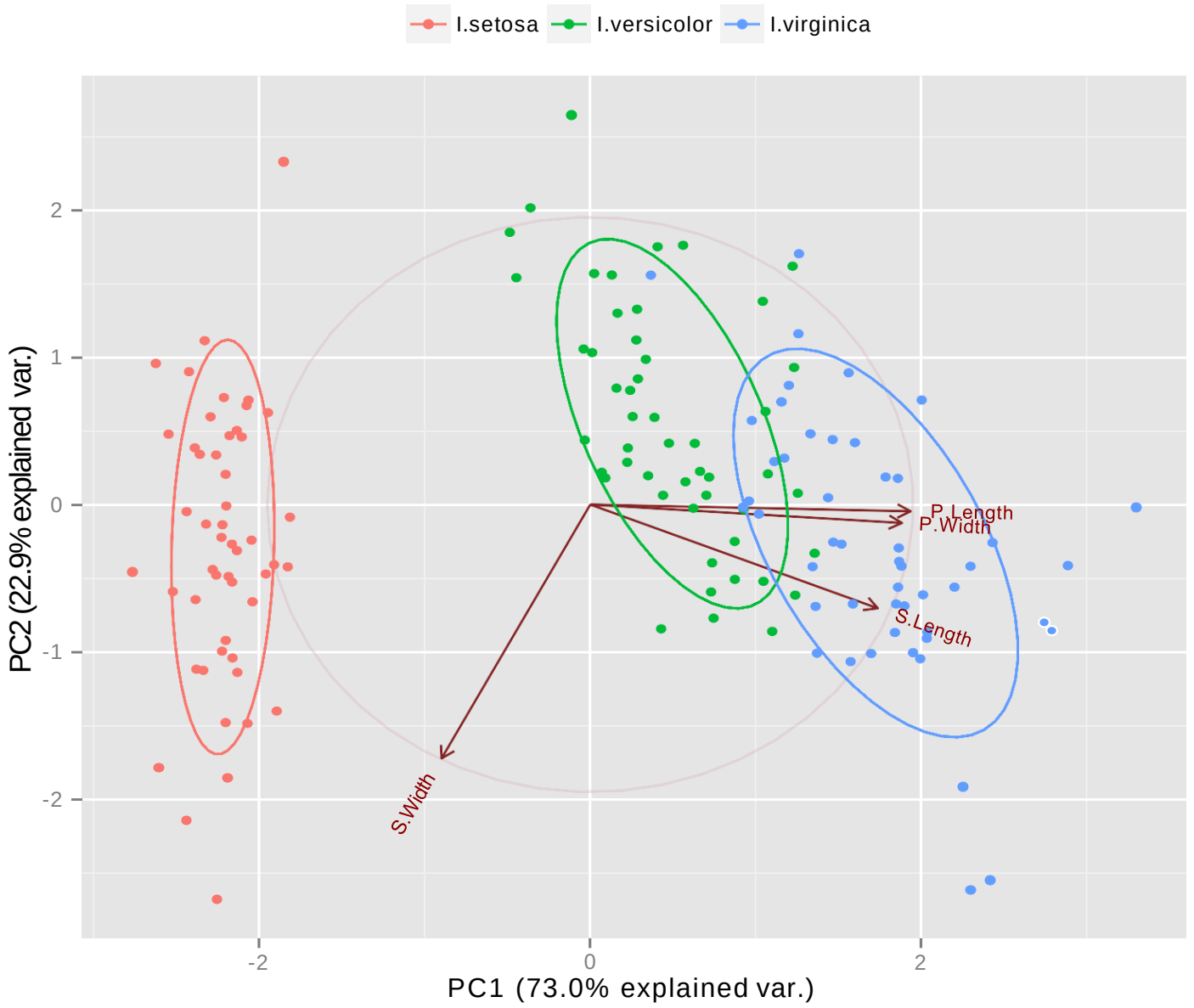
```
biplot(pca)
```



# Bước 4: Phân tích với prcomp

```
summary(pca)
Importance of components:
                          PC1     PC2     PC3     PC4
  Standard deviation     1.7084  0.9560  0.38309 0.14393
   Proportion of Variance 0.7296  0.2285  0.03669 0.00518
  Cumulative Proportion  0.7296  0.9581  0.99482 1.00000
```

```
library(devtools)
install_github("vqv/ggbiplot")
library(ggbiplot)
ggbiplot(pca, obs.scale = 1, var.scale = 1, groups=iris
$Species, ellipse=T, circle=T) +
scale_color_discrete(name='') + theme(legend.direction =
'horizontal', legend.position="top")
```


I.setosa
I.versicolor
I.virginica
PC2 (22.9% explained var.)
PC1 (73.0% explained var.)
2
1
0
-1
-2
-2
0
2
P.Length
P.Width
S.Length
S.Width

# Mô tả dữ liệu mtcars

*mgp: Tiêu thụ nhiên liệu (Miles per (US) gallon)

*cyl: Số lượng xi lanh

*disp: thể tích kết hợp của các xi lanh của động cơ

*hp: Tổng mã lực

*drat: Tỷ lệ trục sau.

*wt: Trọng lượng

*qsec: tốc độ và gia tốc của xe

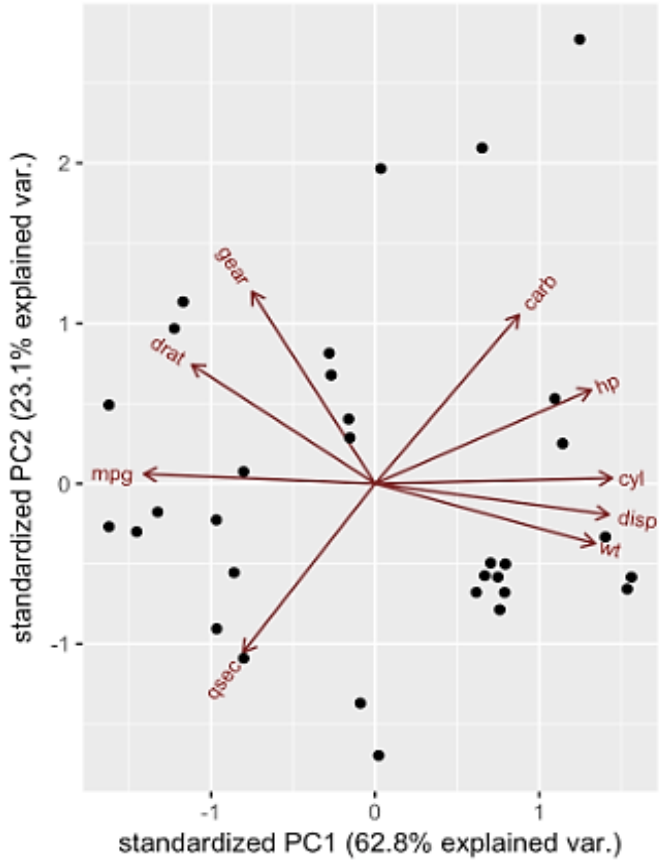
*vs: Khối động cơ.

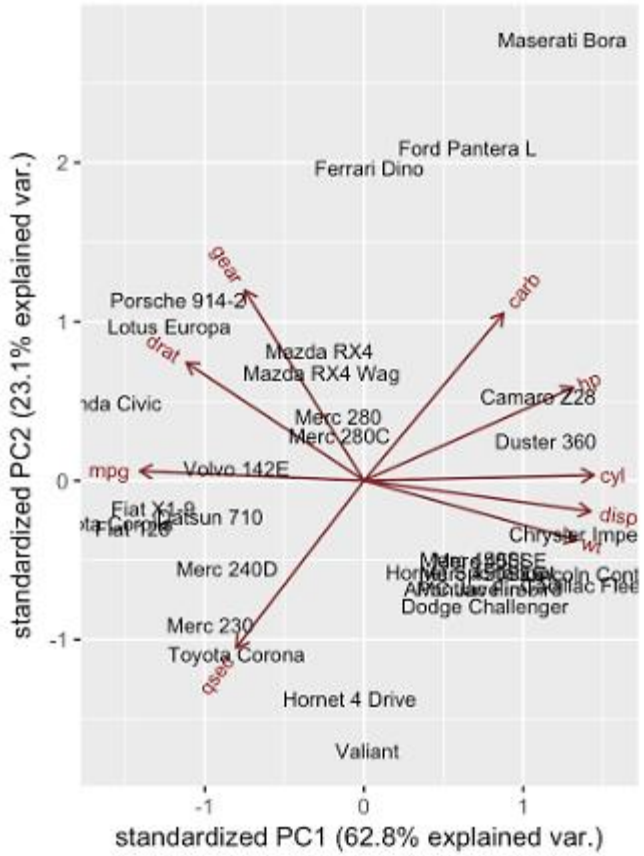
*am: Hộp số (tự động - 0 hay bằng tay -1).

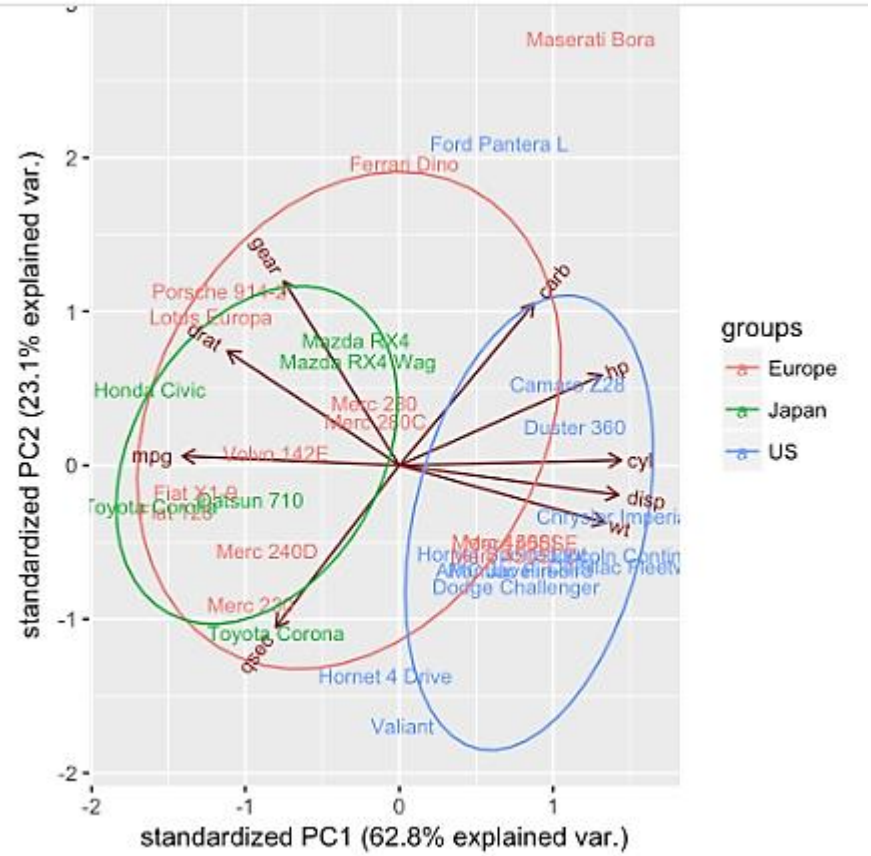
*gear: Số bánh răng phía trước.

*carb:  Số lượng bộ chế hòa khí

# Kết quả


standardized PC2 (23.1% explained var.)
standardized PC1 (62.8% explained var.)
gear
carb
drat
hp
mpg
cyl
disp
wt
qsec


Maserati Bora
Ford Pantera L
Ferrari Dino
Porsche 914-2
Lotus Europa
Mazda RX4
Mazda RX4 Wag
Merc 280
Merc 280C
Camaro Z28
Duster 360
Volvo 142E
Fiat X1-9
Datsun 710
Merc 240D
Merc 230
Toyota Corona
Dodge Challenger
Hornet 4 Drive
Valiant
standardized PC2 (23.1% explained var.)
standardized PC1 (62.8% explained var.)


Maserati Bora
Ford Pantera L
Ferrari Dino
Porsche 914-2
Lotus Europa
Mazda RX4
Mazda RX4 Wag
Honda Civic
Merc 280
Merc 280C
Camaro Z28
Duster 360
Volvo 142E
Fiat X1-9
Datsun 710
Merc 240D
Toyota Corona
Dodge Challenger
Hornet 4 Drive
Valiant
standardized PC2 (23.1% explained var.)
standardized PC1 (62.8% explained var.)
groups
Europe
Japan
US

# Tóm tắt

- PCA là một phương pháp giảm độ liên quan đa chiều của dữ liệu
- Ý tưởng: tìm các biến số mới (PC) là hàm số của các biến số gốc sao cho các PC không tương quan với nhau (orthogonal)
- PC đầu tiên giải thích nhiều phương sai nhất; PC 2 giải thích tỉ lệ phương sai ít hơn PC 1, v.v.

# Questions?