PCA vs LDA

Monika Osiak, Anna Pręgowska, Patrycja Szczepaniak, Rafał Szulejko

15 04 2020

Wstęp

Zadaniem było wykonanie analizy porównawczej metody wizualizacji PCA i LDA. Zadanie zostało wykonane na podstawie zbioru danych dotyczącego problemów z kręgosłupem. Zbiór posiada 2 klasy: normal i abnormal.

```
head(spine)
```

```
##   pelvic_incidence pelvic_tilt lumbar_lordosis_angle sacral_slope pelvic_radius
## 1         63.02782   22.552586              39.60912     40.47523      98.67292
## 2         39.05695   10.060991              25.01538     28.99596     114.40543
## 3         68.83202   22.218482              50.09219     46.61354     105.98514
## 4         69.29701   24.652878              44.31124     44.64413     101.86850
## 5         49.71286    9.652075              28.31741     40.06078     108.16872
## 6         40.25020   13.921907              25.12495     26.32829     130.32787
##   degree_spondylolisthesis pelvic_slope direct_tilt thoracic_slope
## 1                -0.254400    0.7445035     12.5661        14.5386
## 2                 4.564259    0.4151857     12.8874        17.5323
## 3                -3.530317    0.4748892     26.8343        17.4861
## 4                11.211523    0.3693453     23.5603        12.7074
## 5                 7.918501    0.5433605     35.4940        15.9546
## 6                 2.230652    0.7899929     29.3230        12.0036
##   cervical_tilt sacrum_angle scoliosis_slope    class  X
## 1      15.30468   -28.658501         43.5123 Abnormal NA
## 2      16.78486   -25.530607         16.1102 Abnormal NA
## 3      16.65897   -29.031888         19.2221 Abnormal NA
## 4      11.42447   -30.470246         18.8329 Abnormal NA
## 5       8.87237   -16.378376         24.9171 Abnormal NA
## 6      10.40462    -1.512209          9.6548 Abnormal NA
```

PCA

Rozkład PCA dokonywany jest za pomocą metody `prcomp`.

```
spine.pr <- prcomp(spine[c(1:12)],
                   center=TRUE,
                   scale=TRUE)
```

Następnie obliczamy wariancję w dwóch pierwszych składnikach wiodących.

```
pc1_var <- as.double(summary(spine.pr)$importance[,1][2])
pc2_var <- as.double(summary(spine.pr)$importance[,2][2])
print(sprintf('Wariancja danych zawarta w pierwszym składniku wiodącym: %s%%',
              format(round(pc1_var, 2), nsmall = 2)))
```

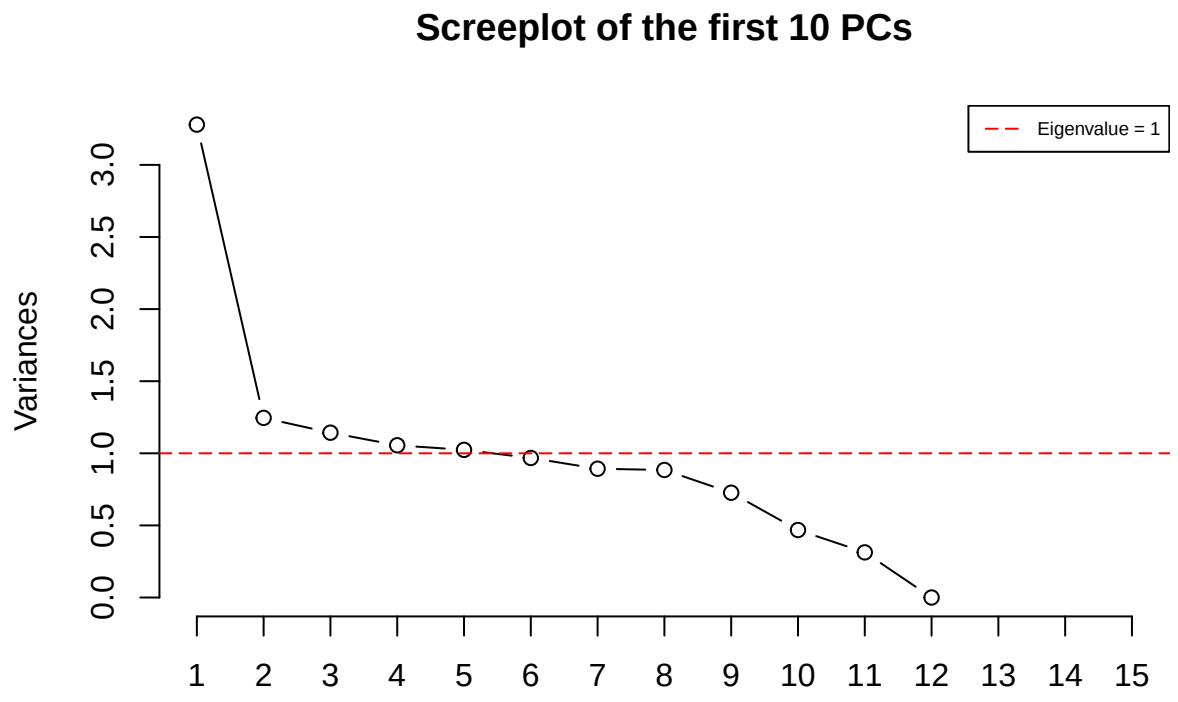
```
## [1] "Wariancja danych zawarta w pierwszym składniku wiodącym: 0.27%"
```

```
print(sprintf('Wariancja danych zawarta w drugim składniku wiodącym: %s%%',
              format(round(pc2_var, 2), nsmall = 2)))
```

```
## [1] "Wariancja danych zawarta w drugim składniku wiodącym: 0.10%"
```

Prezentacja pozostałych składników wiodących:

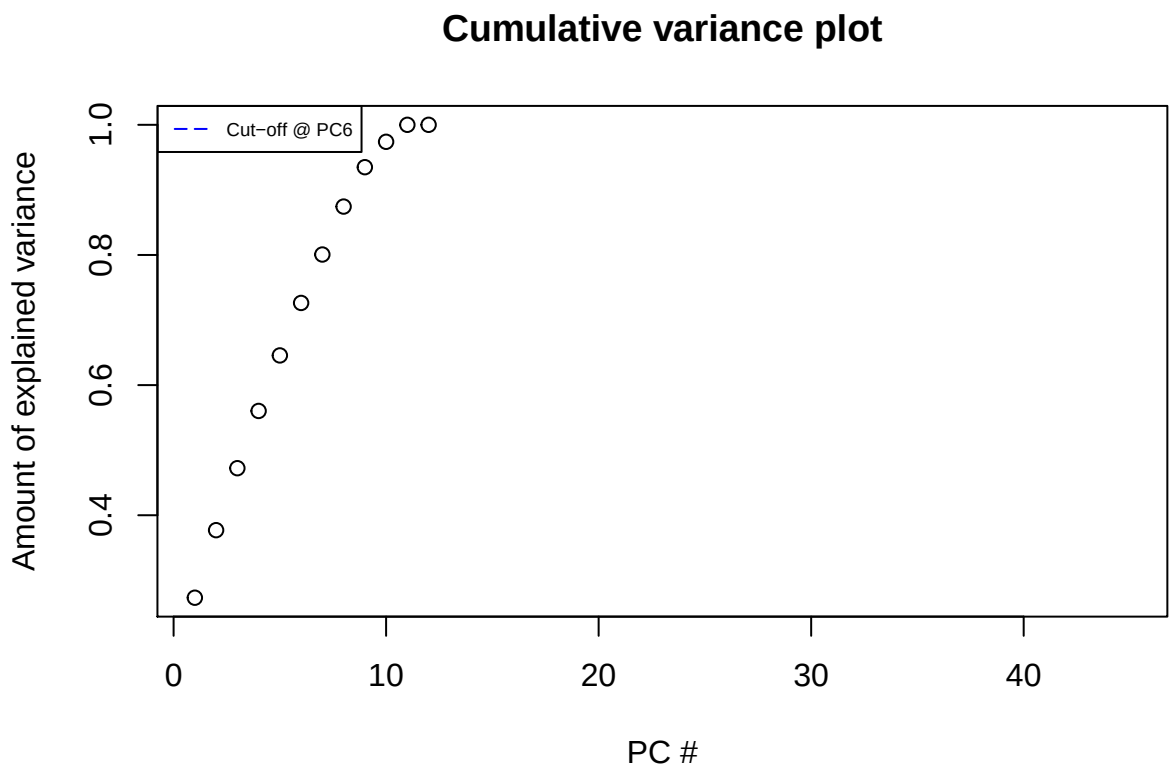
```
screeplot(spine.pr,
          type="l",
          npcs=15,
          main="Screeplot of the first 10 PCs")
abline(h=1,
       col="red",
       lty=5)
legend("topright",
       legend=c("Eigenvalue = 1"),
       col=c("red"),
       lty=5,
       cex=0.6)
```



Zgodnie z oczekiwaniami, łączna wariancja kolejnych składników zbliża się do jedności.

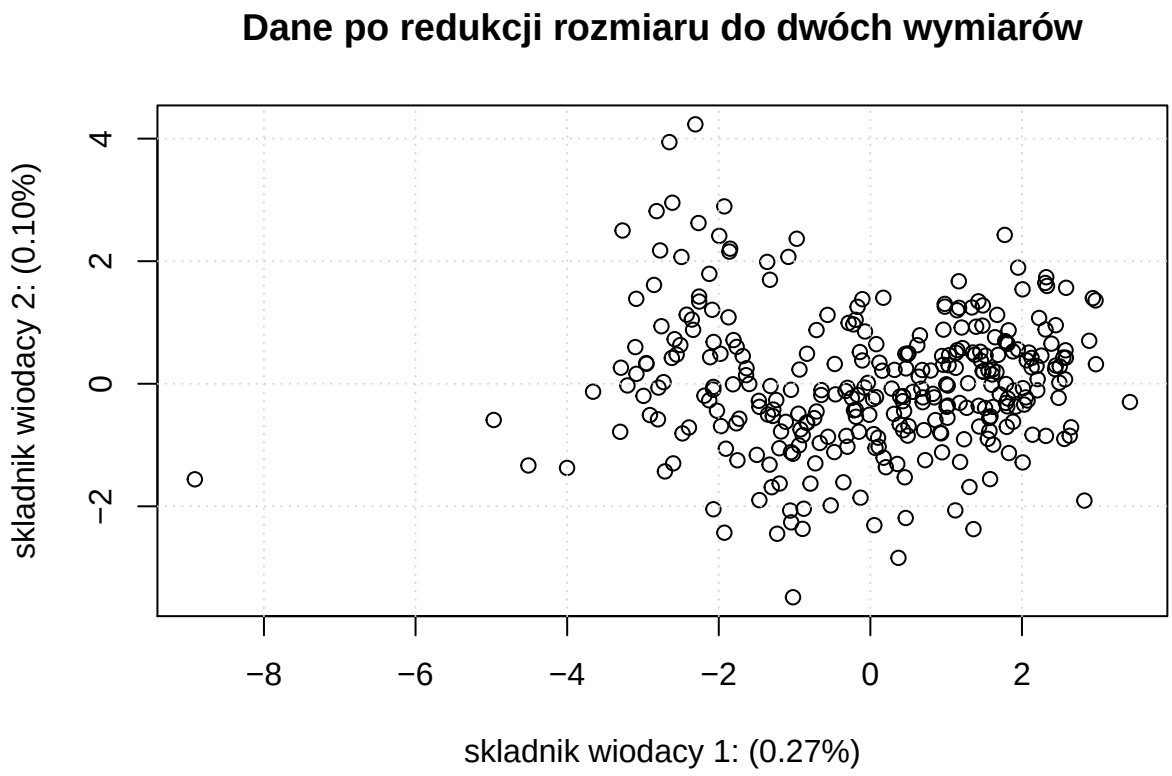
```
cumpro <- cumsum(spine.pr$sdev^2 / sum(spine.pr$sdev^2))
plot(cumpro[0:45],
     xlab="PC #",
     ylab="Amount of explained variance",
     main="Cumulative variance plot")
legend("topleft",
```

```
       legend=c("Cut-off @ PC6"),
       col=c("blue"),
       lty=5,
       cex=0.6)
```



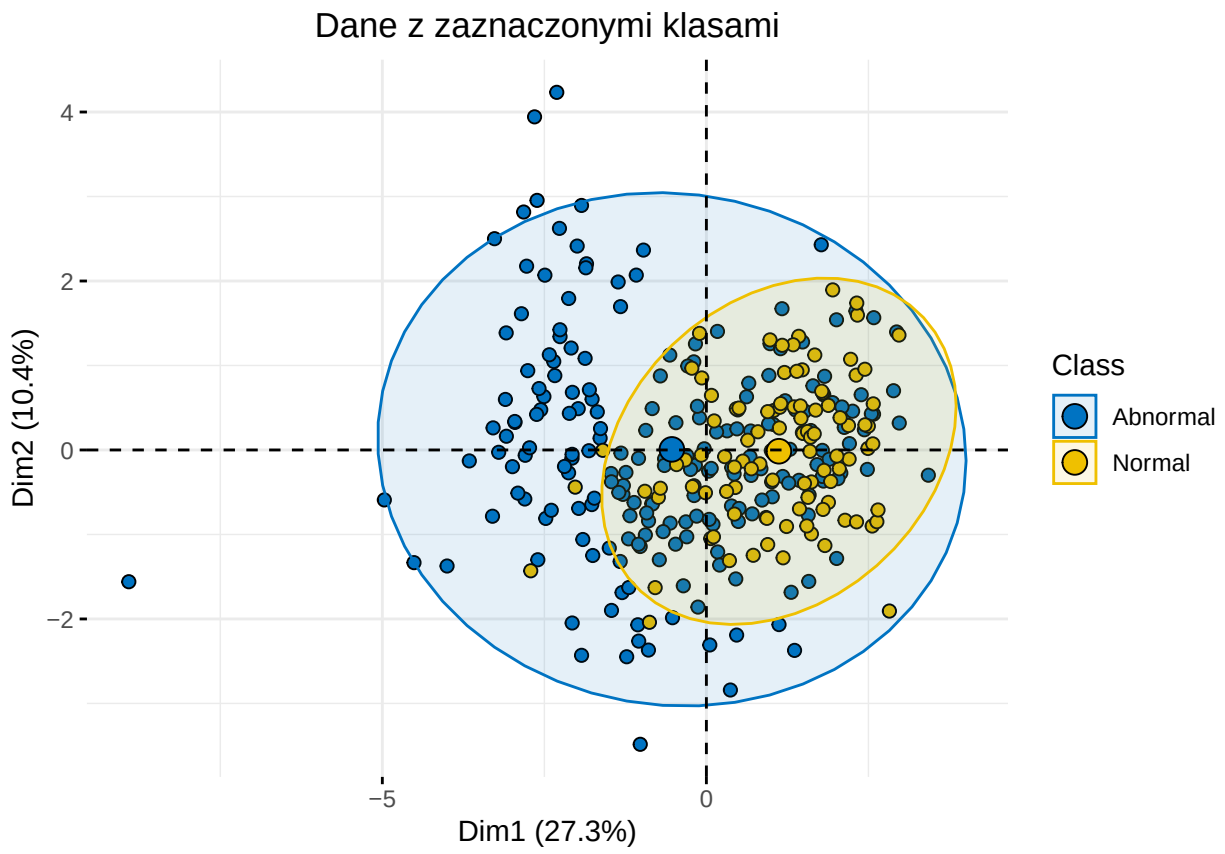
Po zredukowaniu danych do dwóch wymiarów otrzymujemy poniższy wykres:

```
x_label <- sprintf('składnik wiodący 1: (%s%%)', format(round(pc1_var, 2), nsmall = 2))
y_label <- sprintf('składnik wiodący 2: (%s%%)', format(round(pc2_var, 2), nsmall = 2))
plot_title <- 'Dane po redukcji rozmiaru do dwóch wymiarów'
plot(spine.pr$x[,1],
     spine.pr$x[,2],
     xlab=x_label,
     ylab=y_label,
     main=plot_title)
grid(nx=NULL,
     ny=NULL,
     col="lightgray",
     lty="dotted")
```



Ostateczny wynik uzyskujemy po podziale na klasy.

```
fviz_pca_ind(spine.pr,
             geom.ind="point",
             pointshape=21,
             pointsize=2,
             fill.ind=spine$class,
             col.ind="black",
             palette="jco",
             addEllipses=TRUE,
             label="var",
             col.var="black",
             repel=TRUE,
             legend.title="Class") +
               ggtitle("Dane z zaznaczonymi klasami") +
               theme(plot.title=element_text(hjust=0.5))
```



LDA

Rozkład LDA dokonywany jest za pomocą metody `lda`.

Dane zostały już wcześniej wczytane. Dlatego zaczynamy od podziału zbioru na treningowy (80%) i testowy (20%).

```
set.seed(123)
training.samples <- spine$class %>%
  createDataPartition(p = 0.8, list = FALSE)

train.data <- spine[training.samples, ]
test.data <- spine[-training.samples, ]
```

Estymacja parametrów preprocesowania:

```
preproc.param <- train.data %>%
  preProcess(method = c("center", "scale"))
```

Transformacja danych przy użyciu estymowanych parametrów:

```
train.transformed <- preproc.param %>% predict(train.data)
test.transformed <- preproc.param %>% predict(test.data)
```

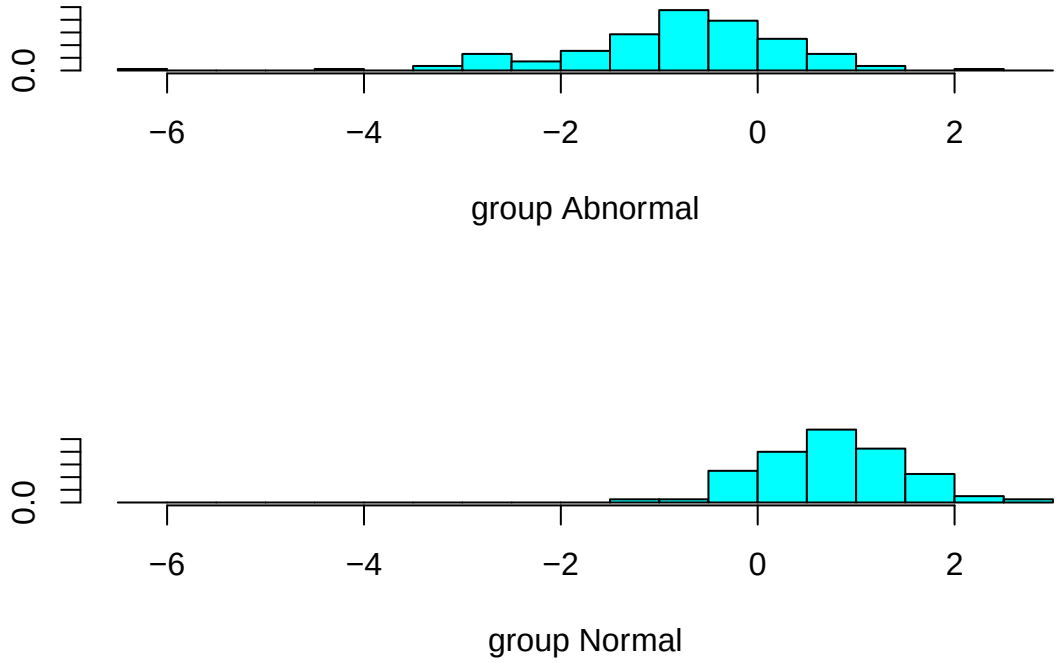
Dopasowanie modelu:

```
model <- lda(formula=class~., data=train.transformed)
```

```
## Warning in lda.default(x, grouping, ...): variables are collinear
```

Prezentacja modelu z podziałem na klasy.

```
plot(model)
```



Wykonanie predykcji:

```
predictions <- model %>% predict(train.transformed)
```

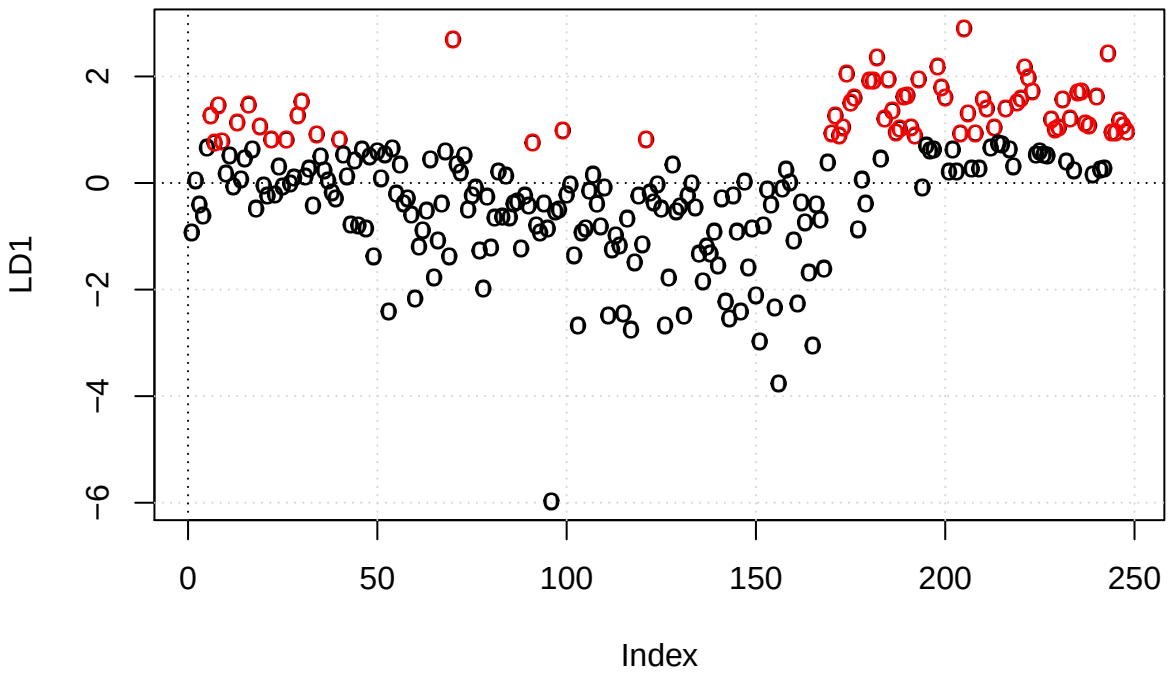
Wyznaczenie precyzji predykcji modelu:

```
mean(predictions$class==test.transformed$class)
```

```
## [1] 0.6330645
```

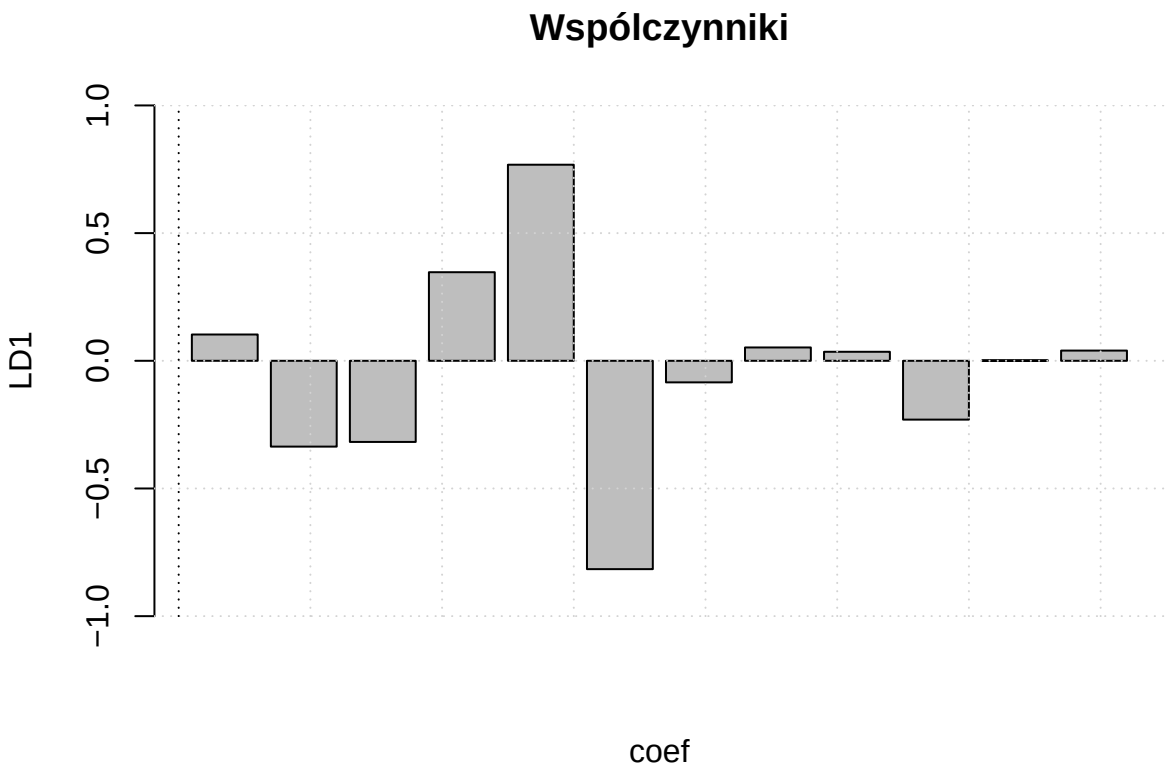
Wizualizacja funkcji dyskryminacji:

```
plot_title <- ''
plot(predictions$x[,1],
     ylab="LD1",
     main=plot_title)
grid(nx=NULL,
     ny=NULL,
     col="lightgray",
     lty="dotted")
text(predictions$x[,1], label="o", col=c(as.numeric(predictions$class)))
abline(v=0, lty="dotted")
abline(h=0, lty="dotted")
```



Wizualizacja współczynników modelu:

```
plot_title <- 'Współczynniki'
barplot(c(coef(model)), main=plot_title, xlab = "coef", ylab = "LD1", ylim=c(-1,1))
grid(nx=NULL,
     ny=NULL,
     col="lightgray",
     lty="dotted")
abline(v=0, lty="dotted", col=c(as.numeric(predictions$class)))
```



Wnioski

1. Podstawową różnicą między omawianymi metodami jest to, że LDA jest metodą nadzorowaną (występuje wstępny podział na klasy), natomiast PCA jest nienadzorowana (nie posiada wstępnego podziału).
2. Algorytm PCA opiera się na jednej macierzy kowariancji, natomiat LDA korzysta z macierzy opisujących zmienność wewnątrzgrupową i międzygrupową.
3. Wybraliśmy niestety zbiór, który okazał się trudny do skutecznej liniowej eliminacji wymiarów, jednak dla naszego modelu LDA lepiej sklasyfikowało dane.
4. LDA zapewnia lepszą separację klas niż PCA. Dzieje się tak dlatego, że PCA skupia się przede wszystkim na śledzeniu wariancji danych, natomiast LDA na wariancjach międzyklasowych.
5. LDA wymaga wcześniejszego przeprocesowania danych, przez co jest trudniejsze w użyciu. Równocześnie ze względu na jednowymiarowość wyników jest metodą trudną w prezentacji dla niewielkiej ilości klas.
6. Dla metody LDA największy wpływ na klasyfikację miały atrybuty pelvic_radius oraz degree_spondylolisthesis.
7. Przypuszczamy, że w większości sytuacji metoda LDA powinna dawać lepsze wyniki, jednakże wszystko zależy od omawianego przypadku i do każdego należy podejść indywidualnie.