



Fakulta chemicko-technologická
Katedra analytické chemie

3.1 Matematické principy analýzy vícerozměrných dat

Vypracoval: Ing. Tomáš Nekola

Studium: licenční

Datum: 23. 1. 2008

Otázka 1.

Najděte vlastní (charakteristická) čísla a vlastní vektory, determinant, stopu a odmocninu od této jednoduché matice:

$$A = \begin{vmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 8 & 2 \\ 3 & 2 & 10 \end{vmatrix}$$

Určení vlastních čísel lze provést pouze u matice symetrické. Zadaná matice vede k výpočtu rovnice kubické, Vlastní čísla matice jsou právě kořeny charakteristické rovnice.

Rovnice $\det(A - \lambda E) = 0$ se nazývá charakteristická rovnice matice A. Je-li číslo λ_0 vlastní číslo, pak vlastní vektory jsou řešením soustavy rovnic $(A - \lambda_0 E) = 0$. Je-li $\lambda = a + bi$ vlastní číslo reálné matice A s vlastním vektorem $u = u_1 + iu_2$, pak $\bar{\lambda} = a - bi$ je taky vlastní číslo s vlastním vektorem $\bar{u} = u_1 - iu_2$.

Výpočet:

$$\begin{vmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 8 & 2 \\ 3 & 2 & 10 \end{vmatrix} - \lambda \cdot \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = 0$$

Charakteristický polynom matice A je:

$$P(\lambda) = \det(A - \lambda E) = \det \begin{vmatrix} 1-\lambda & 2 & 3 \\ 2 & 8-\lambda & 2 \\ 3 & 2 & 10-\lambda \end{vmatrix} = (1-\lambda)(8-\lambda)(10-\lambda) + 12 + 12 -$$

$$9(8-\lambda) - 4(1-\lambda) - 4(10-\lambda) = \lambda^3 - 19\lambda^2 + 81\lambda + 12$$

Vlastní čísla matice A jsou $\lambda_1 = 12,3776$, $\lambda_2 = 6,7657$, $\lambda_3 = -0,1433$.

Vlastní vektor příslušný vlastnímu číslu λ a matici A nazýváme každý nenulový vektor \vec{v} , který vyhovuje rovnici $A\vec{v} = \lambda\vec{v}$.

$$\vec{v}(A - \lambda E) = 0$$

Pro vlastní číslo matice s hodnotou 12,3776:

$$\vec{v}_1 = c(0,3019, 0,5069, 0,8074), c \in \mathbb{R}, c \neq 0$$

Pro vlastní číslo matice s hodnotou 6,7657:

$$\vec{v}_2 = c(0,0143, 0,8444, -0,5355), c \in \mathbb{R}, c \neq 0$$

Pro vlastní číslo matice s hodnotou 6,7657:

$$\vec{v}_3 = c(0,9532, -0,1733, -0,2478), c \in \mathbb{R}, c \neq 0$$

Determinant matice $A = -12$.

Stopa matice je součet diagonálních prvků $= (1 + 8 + 10) = 19$, nebo součet vlastních čísel $(12,3776 + 6,7657 - 0,1433) = 19$.

Odmocnina matice v oboru reálných čísel nemá řešení (jeden záporný kořen).

Otázka 2.

Pro typická data z vašeho pracoviště, minimálně 4-rozměrná, určete projekci do prvních dvou komponent, dvojný graf a diskutujte jeho význam.

Příklad:

U třech vybraných závad na dvou rádií byla sledována četnost výskytu chyby v čase. Vícerozměrnou analýzou dat (metodou hlavních komponent) prověříme případné vzájemné vnitřní závislosti jednotlivých vad a rádií.

Chyby na IPTE

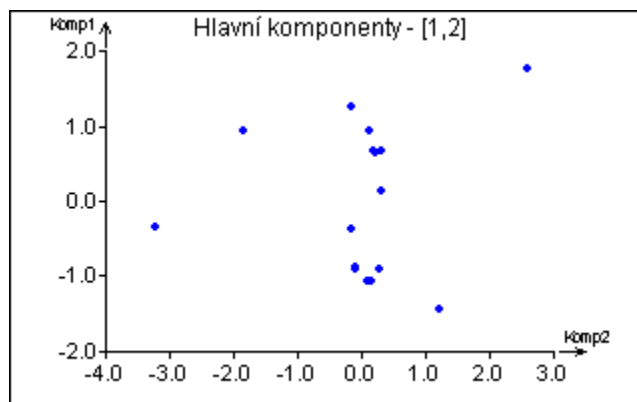
| | BMW RCD 114 REFERENCE VAL. FM FL | BMW RCD 121 REFERENCE VAL. FM FL | BMW RCD 114 PROCESS DATA START | BMW RCD 121 PROCESS DATA START | BMW RCD 114 DIFF. F L/R | BMW RCD 121 DIFF. F L/R |
|---------|---|---|--------------------------------------|--------------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| 40/2007 | 0 | 3 | 1 | 2 | 1 | 0 |
| 41/2007 | 1 | 1 | 7 | 1 | 0 | 1 |
| 42/2007 | 0 | 2 | 1 | 0 | 1 | 3 |
| 43/2007 | 1 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 44/2007 | 2 | 4 | 3 | 2 | 0 | 0 |
| 45/2007 | 3 | 2 | 1 | 2 | 0 | 1 |
| 46/2007 | 1 | 6 | 5 | 2 | 0 | 2 |
| 47/2007 | 1 | 2 | 3 | 1 | 1 | 0 |
| 48/2007 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 49/2007 | 3 | 31 | 2 | 0 | 0 | 13 |
| 50/2007 | 3 | 5 | 1 | 0 | 3 | 0 |
| 51/2007 | 2 | 2 | 5 | 0 | 0 | 3 |
| 52/2007 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1/2008 | 53 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 2/2008 | 3 | 4 | 22 | 0 | 15 | 1 |
| 3/2008 | 1 | 14 | 7 | 1 | 0 | 15 |

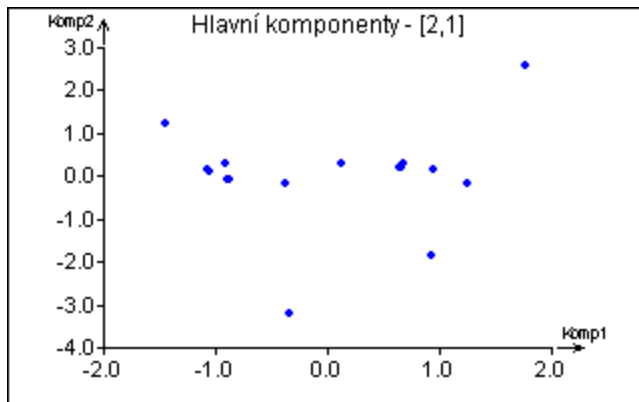
Korelační matice (QC.Expert)

| Korelační matice | | | | | | |
|----------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|-------------------------|-------------------------|
| Proměnná | BMW RCD 114 REFERENCE VAL. FM FL | BMW RCD 121 REFERENCE VAL. FM FL | BMW RCD 114 PROCESS DATA START | BMW RCD 121 PROCESS DATA START | BMW RCD 114 DIFF. F L/R | BMW RCD 121 DIFF. F L/R |
| BMW RCD 114 REFERENCE VAL. FM FL | 1 | -0,0773957 | -0,11025451 | -0,22024389 | -0,06183138 | -0,1291533 |
| BMW RCD 121 REFERENCE VAL. FM FL | -0,077395703 | 1 | 0,042452736 | -0,08664635 | -0,05666611 | 0,836898213 |
| BMW RCD 114 PROCESS DATA START | -0,110254511 | 0,042452736 | 1 | -0,06025301 | 0,858908526 | 0,113883519 |
| BMW RCD 121 PROCESS DATA START | -0,220243894 | -0,08664635 | -0,06025301 | 1 | -0,23368903 | -0,07906323 |
| BMW RCD 114 DIFF. F L/R | -0,061831385 | -0,05666611 | 0,858908526 | -0,23368903 | 1 | -0,12741387 |
| BMW RCD 121 DIFF. F L/R | -0,129153299 | 0,836898213 | 0,113883519 | -0,07906323 | -0,12741387 | 1 |

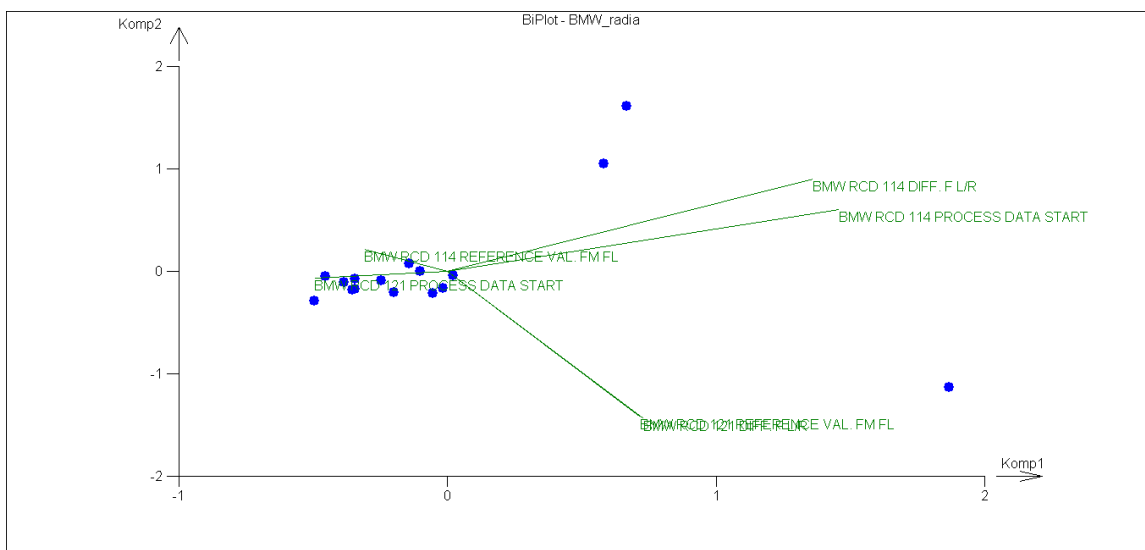
Korelační matice ukazuje silnou závislost mezi chybou BMW RCD 114 PROCESS DATA START a BMW RCD 114 DIFF. F L/R, dále mezi BMW RCD 121 REFERENCE VAL. FM FL a BMW RCD 121 DIFF. F L/R, dále mezi BMW RCD 121 DIFF. F L/R a BMW RCD 121 REFERENCE VAL. FM FL a mezi BMW RCD 114 DIFF. F L/R a BMW RCD 114 PROCESS DATA START.

Projekce do dvou komponent:





Z projekce dvou hlavních komponent jsou patrné 2 shluky. Vysvětlení nám přináší dvojný graf (Biplot z programu QC.Expert):



Závěr:

Hodnoty blízko u sebe spolu korelují a ukazují nám skryté závislosti uvedených dat. Graf BiPlot odhaluje 3 dvojice chyb, které spolu souvisí.