vodní hospodářství®

www.vodnihospodarstvi.cz

ročník 57
8
2007

1997-2007 EWA 10 let členství

PITNÁ VODA
3. – 4. października 2006 v Trenčianskych Tepliciach

9. – 11. 10, Trenčianské Teplice Pitná voda – X. ročník
info: Ing. Jana Buchlovičová, tel. +421 2 572 014 28 mobil : +421 903 268 508
e-mail: buchlovicova@hydrotechnologia.sk

PŘÍLOHA VODAŘ

Statistické zpracování vodohospodářských dat

6. Vícerozměrná klasifikace zdrojů pitné vody metodou hlavních komponent PCA a shluků CLU

Milan Meloun

Klíčová slova
PCA - metoda hlavních komponent - shluková analýza - dendrogram - pitná voda - analýza vody - graf komponentního skóre - indexový graf vlastních čísel - graf komponentních vah - korelační matice

Souhrn

Vícerozměrná statistická analýza je založena na latentních proměnných, které jsou lineární kombinací původních proměnných, $y = w_1 x_1 + \ldots + w_m x_m$. Zdrojová matice dat obsahuje proměnné v *m* sloupcích a objekty v *n* řádcích. Data jsou před zpracováním škálována. Cílem je nalézt shluk jako množinu podobných objektů s podobnými proměnnými. Podobnost objektů posuzujeme na základě vzdálenosti (míry) objektů v *m*-rozměrném prostoru: čím je vzdálenost shluků či objektů větší, tím menší je jejich podobnost. Strukturu a vazby mezi proměnnými vystihují metody snížení dimensionality, *metoda hlavních komponent* (*PCA*). Důležitou pomůckou je rozptylový diagram, který zobrazuje objekty, rozptýlené v rovině prvních dvou hlavních komponent. Graf komponentních vah porovnává vzdálenosti mezi proměnnými x_i a x_j, kde krátká vzdálenost značí silnou korelaci. Dvojný graf pak kombinuje oba předchozí grafy. Objekty lze seskupovat do shluků *hierarchicky* dle předem zvoleného způsobu metriky (průměrově, centroidně, nejbližším sousedem, nejvzdálenějším sousedem, medianově, mezi těžišti a průměrnou vazbou) a *nehierarchicky* dle uživatelem vybraných objektů. Výsledkem je vývojový strom čili *dendrogram*. Metoda hlavních komponent a tvorba shluků je demonstrována na typické úloze klasifikace zdrojů pitné vody ve vodohospodářské kontrolní laboratoře.

◆

1 Úvod

Vícerozměrná statistická analýza vychází z koncepce latentních proměnných (faktorů, kanonických proměnných) *y*, které jsou lineární kombinací původních proměnných *x* s vhodně volenými vazbami. Latentní proměnná *y* je kombinací *m*-tice sledovaných (měřených resp. jinak získaných) proměnných $x_1, x_2, \ldots, x_m$ ve tvaru $y = w_1 x_1 + \ldots + w_m x_m$. Jednotlivé vícerozměrné metody využívají různých způsobů stanovení vah $w_1, w_2, \ldots, w_m$.

Zdrojová matice má rozměr $n \times m$, *n* řádků a *m* sloupců. Před vlastní aplikací vhodné metody vícerozměrné statistické analýzy je třeba vždy provést *exploratorní (průzkumovou) analýzu dat*, která umožňuje

(a) posoudit *podobnost objektů* pomocí rozptylových a symbolových grafů,
(b) nalézt *vybočující objekty*, resp. jejich proměnné,
(c) stanovit, zda lze použít předpoklad *lineárních vazeb*,
(d) ověřit *předpoklady o datech* (normalita, nekorelovanost, homogenita).

Jednotlivé techniky k určení vzájemných vazeb se dále dělí podle toho, zda se hledají

(a) *struktura a vazby v proměnných* nebo
(b) *struktura a vazby v objektech*:

(1) Hledání struktury *v proměnných* v metrické škále: *faktorová analýza FA* a *analýza hlavních komponent PCA*.
(2) Hledání struktury *v objektech* v metrické škále: *shluková analýza*.
(3) Hledání struktury *v objektech* v metrické i v nemetrické škále: *vícerozměrné škálování*.
(4) Hledání struktury *v objektech* v nemetrické škále: *korespondenční analýza*.
(5) Většina metod vícerozměrné statistické analýzy umožňuje *zpracování lineárních vícerozměrných modelů*, kde závisle proměnné se uvažují jako lineární kombinace nezávisle proměnných resp. vazby mezi proměnnými jsou lineární. V řadě případů se také uvažuje normalita metrických proměnných.

Určením struktury a vzájemných vazeb mezi proměnnými ale i mezi objekty se zabývají techniky redukce proměnných na latentní proměnné, metoda *analýzy hlavních komponent (PCA)* a *metoda faktorové analýzy (FA)*. Důležitou metodou určení vzájemných vazeb mezi proměnnými je i *kanonická korelační analýza CA*, která se používá ke zkoumání závislosti mezi dvěma skupinami proměnných, přičemž jedna ze skupin se považuje za proměnné nezávislé a druhá za skupinu proměnných závislých.

2 Analýza hlavních komponent (PCA)

2.1 Zaměření metody PCA

Metoda hlavních komponent (PCA) je jedna z nejstarších a nejvíce používaných metod vícerozměrné analýzy. Poprvé byla zavedena Pearsonem již v roce 1901 a nezávisle Hotellingem v roce 1933. Cílem analýzy hlavních komponent je především zjednodušení popisu skupiny vzájemně lineárně závislých čili korelovaných znaků čili rozklad zdrojové matice dat do *matice strukturní* a do *matice šumové*. V analýze hlavních komponent nejsou znaky děleny na závisle a nezávisle proměnné jako v regresi. Techniku lze popsat jako metodu lineární transformace původních znaků na nové, nekorelované proměnné, nazvané *hlavní komponenty*. Každá hlavní komponenta představuje lineární kombinaci původních znaků. Základní charakteristikou každé hlavní komponenty je její míra variability čili *rozptyl*. Hlavní komponenty jsou seřazeny dle důležitosti, tj. dle klesajícího rozptylu, od největšího k nejmenšímu. Většina informace o variabilitě původních dat je přitom soustředěna do první komponenty a nejméně informace je obsaženo v poslední komponentě. Platí pravidlo, že má-li nějaký původní znak malý či dokonce žádný rozptyl, není schopen přispívat k rozlišení mezi objekty.

2.2 Podstata metody PCA

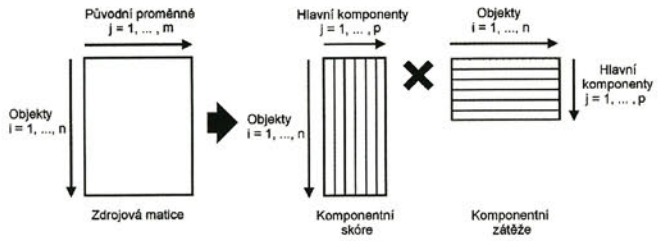
- **Zdrojová matice dat *X*** ($n \times m$): Zdrojová matice dat ***X*** ($n \times m$) obsahuje *n* objektů v řádcích a *m* znaků ve sloupcích. *Objekty* jsou pozorování, vzorky, experimenty, měření, pacienti, rostliny, atd., zatímco *znaky* či proměnné jsou druhy signálu měření, měřená veličina, vlastnosti (sladký, kyselý, hořký, slaný, cholerický, atd.), barva, a pod. Důležitá je zde skutečnost, že každý *znak* je znám pro všech *n* objektů. Správná skladba zdrojové matice ***X*** čili volba, které znaky použít a které objekty zařadit je delikátní úkol silně odvislý od charakteru každé úlohy. Velikou výhodou metody PCA je použití jakéhokoliv počtu proměnných ve zdrojové matici ***X*** k vícerozměrné charakterizaci. Cílem každé vícerozměrné analýzy je zpracovat data tak, aby se zřetelně indikoval model a tak odkryl skrytý jev. Myšlenka sledování rozptylu je velice důležitá, protože je vlastně základním předpokladem vícerozměrné analýzy dat, že „nalezené směry maximálního rozptylu" jsou více či méně spjaty s těmito skrytými jevy. Matematické pozadí metody je detailně popsáno v monografiích [22, 26, 31].
- **Zobrazení objektů v *m* rozměrech**: Zdrojová matice dat ***X*** ($n \times m$) s *m sloupci znaků* a *n řádky objektů* může být zobrazena v *m*-rozměrném eukleidovském prostoru, tj. ortogonálním systému souřadnic rozměru *m*. Osy proměnných jsou *ortogonální* a mají *společný počátek* ale mají *různé měrné jednotky*. Prostorem proměnných rozměru *m* se nazývá *m*-rozměrný systém, jehož rozměr *m* se rovná hodnosti zdrojové matice, což matematicky značí počet *m* nezávislých základních vektorů zdrojové matice a statisticky představuje počet *m* nezávislých zdrojů proměnlivosti zdrojové matice dat. Vícerozměrná analýza dat slouží ke snížení rozměrnosti a tedy k určení efektivní dimensionality. Na začátku však vždy vycházíme z *m* rozměrů. Je snahou využívat 1D-, 2D- a 3D-rozměrný prostor, i když vícerozměrný prostor než 3D- je rovněž možný, ale nedá se jednoduše zobrazit.

2.3 Cíl metody hlavních komponent PCA

Základním cílem PCA je transformace původních znaků x_j, j=1, ..., *m*, do menšího počtu latentních proměnných y_j. Tyto latentní proměnné mají vhodnější vlastnosti: je jich výrazně méně, vystihují téměř celou *proměnlivost původních znaků* a jsou vzájemně nekorelované. Latentní proměnné jsou nazvány *hlavními komponentami* a jsou to lineární kombinace původních proměnných: *první hlavní komponenta* y_1 popisuje největší část proměnlivosti čili rozptylu původních dat, *druhá hlavní komponenta* y_2 zase největší část rozptylu neobsaženého v y_1 atd. Matematicky řečeno, první hlavní komponenta je takovou lineární kombinací vstupních znaků, která pokrývá největší rozptyl mezi všemi ostatními lineárními kombinacemi.

Rozdíl mezi souřadnicemi objektů v původních znacích a v hlavních komponentách čili ztráta informace projekcí do menšího počtu rozměrů se nazývá *mírou těsnosti proložení modelu PCA* nebo také *chybou modelu PCA*. Na **obr. 1.** je tato situace schematicky znázorněna spolu s použitým označením.

I při velkém počtu původních znaků *m* může být *k* velmi malé, běžně 2 až 5. Volba počtu užitých komponent *k* vede k *modelu hlavních komponent PCA*. Vysvětlení užitých hlavních komponent, jejich pojmenování a vysvětlení vztahu původních znaků x_j, j = 1, ..., *m*, k hlavním komponentám y_j, j = 1, ..., *k*, tvoří dominantní součásti analýzy modelu hlavních komponent PCA.

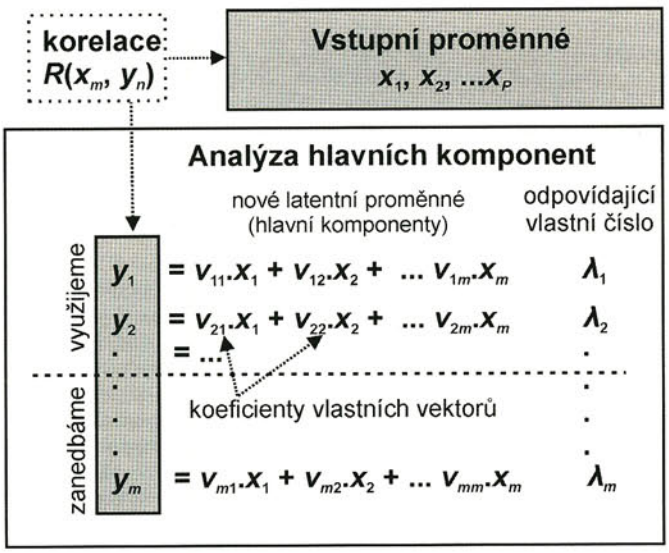


Obr. 1. Rozklad zdrojové matice dat metodou hlavních komponent PCA.

Z **obr. 1.** je zřejmé, že zdrojová centrovaná matice $\boldsymbol{X}_c$ se rozkládá na matici komponentních skóre $\boldsymbol{T}$ rozměru $n \times k$ a matici komponentních zátěží $\boldsymbol{P}^T$ rozměru $k \times m$.

Model PCA odpovídá *aproximaci* zdrojové matice dat $\boldsymbol{X}$, který užijeme místo původní zdrojové matice dat $\boldsymbol{X}$. Aproximace má řadu výhod v interpretaci dat. Nejde zde pouze o změnu systému souřadnic, ale především o nalezení a vypuštění šumu. PCA má proto dvojí cíl: transformace do nového systému os a snížení rozměrnosti úlohy užitím několika prvních hlavních komponent, které vystihují strukturu v datech. Problémem zůstává, kolik hlavních komponent je nutno použít. Statistická analýza metody je detailně popsána v monografii [26].

- **Maximální počet hlavních komponent:** Existuje horní mez počtu hlavních komponent, které mohou být odvozeny ze zdrojové matice dat $\boldsymbol{X}$. Největší počet hlavních komponent se buď rovná číslu $n - 1$ nebo m v závislosti na tom, které z těchto dvou čísel je menší. Je-li $\boldsymbol{X}$ složena například $n = 40$ spekter měřených při $m = 2000$ vlnových délek, bude maximální počet hlavních komponent 39. Počet efektivních hlavních komponent se rovná *hodnosti zdrojové matice* $\boldsymbol{X}$.
- **$\boldsymbol{X}$ = Struktura + šum:** Všechny hlavní komponenty jsou vzájemně ortogonální a souvisí postupně se snižující hodnotu rozptylu objektů. Poslední hlavní komponenta souvisí s nejmenším rozptylem, tj. *stochastickým rozptylem*. Vyšší hlavní komponenty (obvykle vyšší než 3) se často týkají pouze šumu. Dochází k rozdělení původní zdrojové matice $\boldsymbol{X}$ na *část struktury* (první hlavní komponenty) a *část šumu* (ostatní zbývající hlavní komponenty, **obr. 2.**).



Obr. 2. Schéma maticových výpočtů v metodě hlavních komponent PCA.

Model hlavních komponent má pak tvar $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{T}\boldsymbol{P}^T + \boldsymbol{E} =$ *struktura dat + šum*. Zdrojovou matici dat $\boldsymbol{X}$ je třeba nejprve centrovat $x_{ik} = x_{ik} - \bar{x}_k$. V metodě hlavních komponent pracujeme za předpokladu, že zdrojová matice $\boldsymbol{X}$ je rozložena na součin matic $\boldsymbol{T}\boldsymbol{P}^T$ a na matici reziduí $\boldsymbol{E}$, kde matice $\boldsymbol{T}$ je matice komponentního skóre a $\boldsymbol{P}^T$ je transponovaná matice komponentních vah, $\boldsymbol{E}$ je matice reziduí. Cílem metody hlavních komponent je místo $\boldsymbol{X}$ využívat dále jenom součin $\boldsymbol{T}\boldsymbol{P}^T$ a tak oddělit šum od struktury dat $\boldsymbol{T}\boldsymbol{P}^T$. Matici $\boldsymbol{E}$ se nazývá *matice reziduí*, která není objasněna modelem hlavních komponent PCA. Matice $\boldsymbol{E}$ souvisí s „těsností proložení" a ukazuje, jak dobře jsou objekty proloženy modelem hlavních komponent. Rovnici je možno rozepsat do tvaru

$$\mathbf{X} = t_1 p_1^T + t_2 p_2^T + \ldots + t_A p_A^T + E$$

Každý sčítanec $\boldsymbol{t}_1 \boldsymbol{p}_1^T$ je matice rozměru $n \times m$, která má hodnost 1. Postupný výpočet hlavních komponent se rozkládá do těchto kroků:

1. Vyčíslí se $\boldsymbol{t}_1$ a $\boldsymbol{p}_1^T$ z matice $\boldsymbol{X}$ například s využitím SVD a dostane se $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{t}_1 \boldsymbol{p}_1^T + \boldsymbol{E}_1$.
2. Odečte se příspěvek první hlavní komponenty *PC*1 od $\boldsymbol{X}$ dle rovnice $\boldsymbol{E}_1 = \boldsymbol{X} - \boldsymbol{t}_1 \boldsymbol{p}_1^T$.
3. Vyčíslí se $\boldsymbol{t}_2$ a $\boldsymbol{p}_2^T$ z matice $\boldsymbol{E}_1$ a dostane se $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{t}_1 \boldsymbol{p}_1^T + \boldsymbol{t}_2 \boldsymbol{p}_2^T + \boldsymbol{E}_2$.
4. Odečte se příspěvek druhé hlavní komponenty *PC*2 od $\boldsymbol{E}_2$ dle rovnice $\boldsymbol{E}_1 = \boldsymbol{E}_2 - \boldsymbol{t}_2 \boldsymbol{p}_2^T$.
5. Podobně se pokračuje, až se vyčíslí dostatečný počet *A* hlavních komponent.

- **Střed modelu:** Hlavní komponenty mají společný počátek, který odpovídá *průměrnému objektu* čili těžišti celého shluku objektů. Postup se nazývá *centrování*. Tento bod je pouhou abstrakcí stejně jako latentní proměnné hlavní komponenty.
- **Komponentní váhy, zátěže - vztah mezi $\boldsymbol{X}$ a *PC*:** Hlavní komponenty *PC* jsou vhodně škálované vektory v prostoru znaků. Kterákoliv hlavní komponenta představuje *lineární kombinaci všech m* vektorů v prostoru znaků, tj. jednotkové vektory podél každé osy původního znaku v *m* rozměrném prostoru. Lineární kombinace v každé hlavní komponentě bude obsahovat *m* koeficientů p_{ka}, kde *k* je index *m*-tého znaku a *a* je index směru hlavní komponenty. Například p_{23} znamená koeficient pro druhý znak v lineární kombinaci, která vytvoří *PC*3. Tyto koeficienty se nazývají *komponentní váhy*. Váhy pro všechny hlavní komponenty tvoří matici $\boldsymbol{P}$. Tato matice je vlastně *transformační maticí*, která převádí původní znaky zdrojové matice $\boldsymbol{X}$ do nových latentních proměnných, tj. hlavních komponent. *Vektory vah* čili sloupce v matici $\boldsymbol{P}$ jsou ortogonální.

Váhy informují o vztahu mezi původními *m* znaky a hlavními komponentami. Tvoří tak most mezi prostorem původních znaků a prostorem hlavních komponent. Váhy souvisejí se směrovými kosiny každé hlavní komponenty vzhledem k systému os původních znaků.

Na *grafu komponentních vah* $\boldsymbol{p}$ pro *PC*1 a *PC*2 jsou místo objektů jejich znaky. Tak lze vyšetřovat závislosti a podobnosti mezi znaky. Tento graf rovněž ukazuje jak každý původní znak přispívá do každé hlavní komponenty. Je třeba si uvědomit, že hlavní komponenty představují lineární kombinace jednotkových vektorů původních znaků. Komponentní váhy představují koeficienty v těchto lineárních kombinacích. Každý původní znak může přispívat do více než jedné hlavní komponenty. Na *x*-ové ose je patrné jak jednotlivé původní znaky přispívají do první hlavní komponenty. Analogicky na *y*-ové ose je vidět jak jednotlivé znaky přispívají do druhé hlavní komponenty. Některé znaky zobrazují *kladnou váhu*, pak jde o kladné koeficienty v lineárních kombinacích zatímco jiné znaky zobrazují *zápornou váhu*. Jsou-li v grafu komponentních vah znaky blízko sebe, znamená to, že spolu *silně korelují*. Jsou-li naopak daleko od sebe, nekorelují.

- **Komponentní skóre - souřadnice objektů v prostoru hlavních komponent:** Souřadnice každého objektu na osách hlavních komponent nazýváme *skóre*. Projekce *i*-tého objektu na první hlavní komponentu *PC*1 značí skóre t_{i1}. Projekce téhož objektu na druhou hlavní komponentu *PC*2 značí skóre t_{i2}, ...atd. Každý objekt má svůj soubor komponentních skóre $t_{i1}, t_{i2}, \ldots, t_{ip-1}$. Hodnot skóre je stejný počet jako hlavních komponent.

Matice všech skóre pro všechny objekty se nazývá *matice skóre* $\boldsymbol{T}$. Skóre pro jeden objekt v této matici tvoří jeden řádek. Sloupce v této matici jsou ortogonální. *Vektor skóre* je sloupec v matici $\boldsymbol{T}$ a obsahuje skóre pro jednu hlavní komponentu.

Jedním z nejdůležitějších grafů metody hlavních komponent je *graf komponentního skóre*. Jde o zobrazení dvou skórových vektorů vynesených v systému kartézských os jeden proti druhému. Skórové vektory zde představují znázornění objektů na hlavních komponentách. Vynesení skórových vektorů odpovídá vynesení objektů v prostoru hlavních komponent. Nejužívanějším grafem ve vícerozměrné analýze dat je vektor skóre *PC*1 proti skóre *PC*2. Je snadno k pochopení, protože jde o dva směry, podél kterých shluk objektů vykazuje největší (*PC*1) a druhé největší (*PC*2) rozptýlení.

Graf komponentního skóre t_1 proti t_2 se obvykle vyšetřuje jako první. Do tohoto grafu lze vynášet libovolný pár hlavních komponent. Otázkou však zůstává, které hlavní komponenty jsou ty nejdůležitější. Je-li počet znaků *m* menší než počet objektů *n*, lze vynést $m(m - 1)/2$ možných 2D-grafů komponentního skóre. Počet možných grafů se tak stává nekontrolovatelným a není možné vyšetřovat všechny grafy. Uvedeme si pravidlo k volbě grafů komponentního skóre:

1. Na *x*-ové ose užijeme vždy stejnou hlavní komponentu (obvykle první) u všech grafů komponentního skóre: t_1 proti t_2, t_1 proti t_3, t_1 proti t_4, t_1 proti t_5, ... atd., takže budeme vyšetřovat ostatní hlavní komponenty proti stále stejné, první. To nejlépe pomůže získat požadovaný přehled o hledané struktuře dat.
2. Užijeme tu hlavní komponentu, která vykazuje největší hodnotu rozptýlení pro vyšetřovanou úlohu a vyneseme ji na *x*-ovou osu. U mnoha úloh se ukáže, že jde o *PC*1. Obecně lze říci, že *PC*1 popisuje největší strukturní změnu v libovolném souboru dat. Korelace však není totožná s kauzalitou.

Obě pravidla jsou velmi obecná a mají řadu výjimek. Existuje také

řada úloh, kdy konkrétní informace je skryta v řadě ostatních hlavních komponent. Konkrétní informace pak lze odhalit v jedné či několika prostředních hlavních komponentách.

- **Rezidua objektů:** Metoda hlavních komponent PCA přináší mnoho výhod v analýze zdrojové matice dat $\boldsymbol{X}$ při nahrazení m původních znaků objektů skóry hlavních komponent. Velikost projekční vzdálenosti e_i představuje určitou „ztrátu informace" vlivem aproximace původního souboru dat. Vzdálenost e_i se nazývá *reziduum* a všechna rezidua objektů jsou obsažena v *matici reziduí* $\boldsymbol{E}$. Velikosti reziduí jsou v přímé návaznosti na využitý počet hlavních komponent A stejně jako na podíl odhalené struktury v datech. „Velká rezidua" ukazují, že proložení objekty není nejlepší a model nedostatečně popisuje data. „Malá rezidua" značí dobrý model. Existuje mnoho statistických kritérií k posouzení těsnosti proložení technikou statistické analýzy reziduí. Platí obecné pravidlo: malá hodnota A čili málo využitelných hlavních komponent značí hodně zbývajícího šumu v matici $\boldsymbol{E}$, velká hodnota A méně ponechaného šumu v matici $\boldsymbol{E}$.

Matice $\boldsymbol{E}$ obsahuje jak malá tak i velká rezidua. Vyhodnocení $\boldsymbol{E}$ je vždy relativní vůči celkovému rozptylu. Na základě průměru každého znaku se určí počátek dat, společný všem hlavním komponentám (0, 0, ..., 0), který se nazývá *nulová hlavní komponenta*, a který vlastně popisuje *průměrný objekt*.

Odečtením průměrného objektu od zdrojové matice $\boldsymbol{X}$ je stejné, jako centrování zdrojové matice dat. Pro $A = 0$ je matice reziduí $\boldsymbol{E}_0$ a bude rovna centrované matici $\boldsymbol{X}_c$. Matice $\boldsymbol{E}_0$ hraje důležitou referenční roli při kvantitativním posouzení relativní velikosti $\boldsymbol{E}$.

Rezidua se budou měnit při přidávání dalších hlavních komponent. Index i u písmene $\boldsymbol{E}_i$ bude vždy značit počet hlavních komponent vyčíslených v modelu hlavních komponent PCA. Výsledná rezidua se porovnávají s rezidui matice $\boldsymbol{E}_0$. Pro $A = 0$ bude $\boldsymbol{E}_0$ představovat 100%. *Reziduálový rozptyl* bude pak 100% a *modelem objasněný rozptyl* bude 0%. Velikost $\boldsymbol{E}$ je charakterizována čtverci reziduí čili rozptyly. Existují dva způsoby jak sčítat prvky matice $\boldsymbol{E}$: buď v řádku a obdržet rezidua každého objektu, nebo ve sloupci a obdržet rezidua každého znaku.

2.4 Grafické diagnostiky metody hlavních komponent

Graficky lze výsledek analýzy hlavních komponent zobrazit v několika grafech hlavních komponent následujícím způsobem:

(a) **Cattelův indexový graf úpatí vlastních čísel** (Scree Plot) je vlastně sloupcový diagram vlastních čísel nebo reziduálního rozptylu proti stoupající hodnotě indexu, pořadového čísla A (**obr. 5.**). Zobrazuje relativní velikost jednotlivých vlastních čísel. Řada autorů ho s oblibou využívá k určení počtu A „užitečných" hlavních komponent. Cattel vysvětluje scree jako úpatí mořského útesu čili zlomové místo mezi kolmou stěnou a vodorovným dnem. Vybrané „užitečné" hlavní komponenty (nebo také faktory) pak tvoří kolmou stěnu útesu a „neužitečné" hlavní komponenty (nebo faktory) představují vodorovné mořské dno. Užitečné komponenty jsou tak odděleny zřetelným zlomovým místem a souřadnice x tohoto zlomu je hledaná hodnota indexu. Jiným, hrubším kritériem je *Kaiserovo pravidlo*, podle kterého využíváme ty hlavní komponenty, jejichž vlastní číslo je větší než jedna. Pravidlo vychází z myšlenky, že není třeba uvažovat komponenty, jejichž rozptyl je menší než jednotkový rozptyl každého normovaného znaku. Graf úpatí se však jeví objektivnějším a praktičtějším.

(b) **Graf komponentních vah, zátěží** (Plot Components Weights) zobrazí komponentní váhy pro první dvě hlavní komponenty (**obr. 6. – 8.**). V tomto grafu se porovnávají vzdálenosti mezi znaky. Krátká vzdálenost mezi dvěma znaky znamená silnou korelaci. Lze nalézt i shluk podobných znaků, jež spolu korelují. Tento graf můžeme považovat za most mezi znaky a hlavními komponentami, protože ukazuje, jakou měrou přispívají jednotlivé znaky do hlavních komponent. Někdy se podaří hlavní komponenty y_1, y_2, ... pojmenovat, vysvětlit a přidělit jim fyzikální, chemický nebo biologický význam. Pak lze názorně vysvětlit, jak jednotlivé znaky x_j, $j = 1,\ldots, m$, přispívají do první hlavní komponenty y_1 nebo do druhé hlavní komponenty y_2. Některé znaky x_j přispívají kladnou vahou, některé zápornou. Bývá zajímavé sledovat kovarianci znaků x_j v prostorovém 3D grafu komponentních vah y_1, y_2 a y_3. Jsou-li znaky x_j, $j = 1,\ldots, m$, blízko sebe v prostorovém shluku, jde o silnou pozitivní kovarianci. Kovariance však nemusí ještě nutně znamenat korelaci. Výklad grafu komponentních vah lze obecně shrnout do následujících bodů:

1. *Důležitost znaků* x_j, $j = 1,\ldots, m$: znaky x_j s vysokou mírou proměnlivosti v datech objektů mají vysoké hodnoty komponentní váhy. Ve 2D-diagramu prvních dvou hlavních komponent pak leží hodně daleko od počátku. Znaky s malou důležitostí leží blízko počátku. Když určíme *důležitost znaků*, určíme tím také proměnlivost znaků: jestliže například y_1 objasňuje 70 % proměnlivosti a y_2 jenom 5 % (přečteno z indexového grafu úpatí vlastních čísel), jsou znaky x_j, $j = 1,\ldots, m$, s vysokou vahou v y_1 tím pádem mnohem důležitější než znaky x_j s vysokou vahou v y_2. Znaky s úhlem 0° mezi průvodiči jsou zcela pozitivně korelované, znaky s úhlem 90° jsou zcela nekorelované zatímco znaky s úhlem 180° jsou negativně korelované.

2. *Korelace a kovariance:* znaky x_j, $j = 1,\ldots, m$, jsou blízko sebe, anebo znaky x_j s malým úhlem mezi svými průvodiči znaků a na stejné straně vůči počátku mají vysokou kladnou kovarianci a vysokou kladnou korelaci. Naopak, znaky x_j daleko od sebe, anebo s velikým úhlem mezi průvodiči znaků, jsou negativně korelovány.

Platí, že ve spektroskopických datech je 1-rozměrný graf komponentních vah často nejvhodnější. I zde platí pravidlo, že vysoké komponentní váhy představují vysokou důležitost vlnových délek x_j (znaků).

(c) **Rozptylový diagram komponentního skóre** (Scatterplot) zobrazuje *komponentní skóre* čili hodnoty obyčejně prvních dvou hlavních komponent u všech objektů (**obr. 9. – 11.**). Lze snadno nalézt shluk vzájemně podobných objektů a dále objekty odlehlé a silně odlišné od ostatních. Diagram komponentního skóre však může být prostorový ve třech hlavních komponentách a v rovinném grafu se pak sleduje pouze jeho průmět. Tento diagram se užívá k identifikaci odlehlých objektů, identifikaci trendů, tříd, shluků objektů, k objasnění podobnosti objektů atd. Je často nemožné analyzovat všechny diagramy, protože jich je velmi mnoho: pro $m = 10$ znaků existuje $m(m-1)/2 = 45$ diagramů, pro $m = 11$ pak 55 diagramů, pro $m = 12$ pak 66 diagramů, atd. Obvykle vybíráme diagramy y_1 vs. y_2, y_1 vs. y_3, y_1 vs. y_4 atd. Držíme se první hlavní komponenty y_1, protože objasňuje největší míru proměnlivosti v datech. Interpretace rozptylového diagramu komponentního skore lze shrnout do těchto bodů:

1. Umístění objektů. Objekty daleko od počátku jsou extrémy. Objekty nejblíže počátku jsou nejtypičtější.

2. Podobnost objektů. Objekty blízko sebe si jsou podobné, objekty daleko od sebe jsou si nepodobné.

3. Objekty v shluku. Objekty umístěné zřetelně v jednom shluku jsou si podobné a přitom nepodobné objektům v ostatních shlucích. Dobře oddělené shluky prozrazují, že lze nalézt vlastní model pro samotný shluk. Jsou-li shluky blízko sebe, znamená to značnou podobnost objektů.

4. Osamělé objekty. Izolované objekty mohou být odlehlé objekty, které jsou silně nepodobné ostatním objektům. To platí jen v případech, kdy se nejedná o zdánlivou nehomogenitu danou sešikmením dat a odstranitelnou transformací znaků.

5. Odlehlé objekty. V ideálním případě bývají objekty rozptýlené po celé ploše diagramu. V opačném případě je něco špatného v modelu, obyčejně je přítomen silně odlehlý objekt. Odlehlé objekty jsou totiž schopny zbortit celý diagram, ve srovnání se silně vybočujícím objektem jsou ostatní objekty nakumulovány do jediného úzkého shluku. Po odstranění vybočujícího objektu se ostatní objekty roztřídí po celé ploše diagramu a teprve vypovídají o existujících shlucích.

6. Pojmenování objektů. Výstižná jména objektů slouží k hledání hlubších souvislostí mezi objekty a mezi pojmenovanými hlavními komponentami. Snadno obkroužíme shluky podobných objektů nebo nakreslením spojky mezi objekty vystihneme jejich fyzikální či biologickou podobnost.

7. Vysvětlení místa objektu. Umístění objektu na ploše v diagramu může být porovnáváno s komponentními vahami znaků ve dvojném grafu a pomocí znaků pak i vysvětleno.

(d) **Dvojný graf** (Biplot) kombinuje předchozí dva grafy. Úhel mezi průvodiči dvou znaků x_j a x_k je nepřímo úměrný velikosti korelace mezi těmito dvěma znaky. čím je menší úhel, tím je větší korelace. Každý průvodič má své souřadnice na první a na druhé hlavní komponentě. Délka této souřadnice je úměrná příspěvku původní znaky x_j do hlavní komponety, čili je úměrná komponentní váze. Kombinace obou grafů v jediném přináší cenné srovnání, jeden graf působí zde doplňkově vůči druhému. Když se ve dvojném grafu nachází objekt v blízkosti určitého znaku x_j, znamená to, že tento objekt „obsahuje" hodně právě tohoto znaku a je s ním v interakci. Interakce znaků a objektů umožňuje také vysvětlit umístění objektů vpravo od nuly na ose první hlavní komponenty y_1 (či vlevo od nuly) pomocí pozice znaků v tomto grafu, resp. umístění nahoře od nuly (či dole od nuly) na ose druhé hlavní komponenty y_2.

2.5 Diagnostika metody hlavních komponent

Maticový graf rozptylových diagramů znaků (**obr. 4.**) slouží k získání počáteční informace o datech. Odhalí, zda data potřebují škálování. Při prvním seznámení s daty se v rámci exploratorní analýzy použije standardní metoda hlavních komponent PCA. Data je obvykle potřeba škálovat nebo alespoň centrovat. Lze vyzkoušet i ostatní formy předúpravy dat. V tomto stadiu se vždy vyčíslují všechny hlavní komponenty. První diagramy komponentního skóre slouží k odhalení odlehlých hodnot, tříd, shluků a trendů. Jsou-li objekty roztříděny do dobře oddělených shluků, je třeba určit způsob, jak je z dat oddělit a shluky pak analyzovat odděleně. V této fázi není vhodné odstraňovat odlehlé znaky, mohlo by pak dojít k odstranění cenné informace. Po redukci dat na několik podvýběrů, kdy jsou shluky modelovány odděleně, se znovu aplikuje metoda hlavních komponent PCA na jednotlivé dílčí výběry, kdy postupně provádíme:

1. Vyšetření indexového grafu úpatí vlastních čísel -z hrany úpatí v tomto diagramu se určí vhodný počet hlavních komponent.

2. Výpočet vlastních vektorů - vedle číselných hodnot se užívá i názorný

čárový diagram hodnot vlastních vektorů, který přehledně informuje o relativním zastoupení původních znaků x_j, j = 1, ..., m, v hlavních komponentách.

3. Výpočet komponentních vah - matice párových korelačních koeficientů obsahující korelace původních znaků s hlavními komponentami. čárový diagram názorně vysvětluje korelační strukturu mezi oběma druhy znaků. Uživatel nyní vybere pouze prvních k hlavních komponent a vytvoří tak model PCA.

4. Vyšetření grafu komponentních vah.

5. Vyšetření rozptylového diagramu komponentního skóre.

6. Vyšetření dvojného grafu.

7. Vyšetření reziduí - rezidua objektů a rezidua proměnných by měla prokazovat dostatečnou těsnost proložení. Není-li tomu tak, je třeba se vrátit k předúpravě dat a celý výpočet PCA opakovat.

8. Určení významných znaků - v některých případech je výhodné vyhledávat také významné znaky, protože klasická metoda PCA umožňuje sice redukci počtu hlavních komponent, ale každá komponenta zůstává stále kombinací všech původních znaků. Nalezení podmnožiny znaků, které obsahují téměř všechny informace jako původní znaky, je poměrně zajímavé v řadě praktických aplikací.

2.6 Řešení častých problémů v PCA

V analýze hlavních komponent se často můžeme setkat s těmito problémy:

1. Data neobsahují předpokládanou informaci. Vysvětlení grafů a diagramů metody PCA nemá smysl, protože data neobsahují informaci popisující studovaný problém.

2. Užito příliš málo hlavních komponent. V modelu PCA bylo použito příliš málo hlavních komponent. Nedostatečné vysvětlení dat vede ke ztrátě informace. Problém se může vyřešit opětovným rozborem grafu úpatí vlastních čísel.

3. Užito příliš mnoho hlavních komponent. V modelu PCA bylo zahrnuto příliš mnoho hlavních komponent, což může vyvolat vážnou chybu, protože šum je zahrnut do modelu.

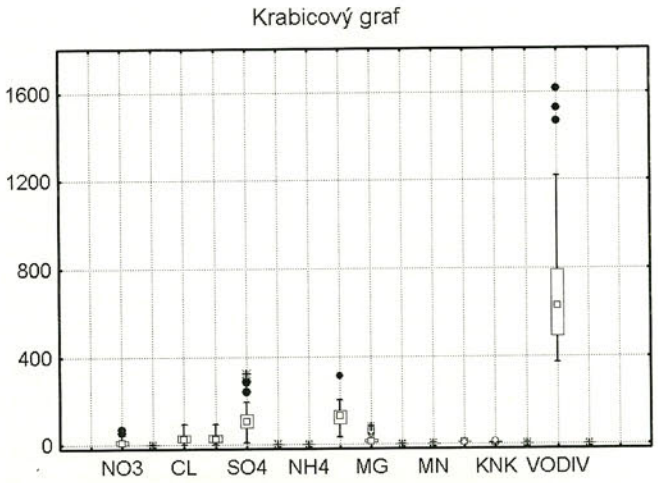
4. Neodstranění odlehlých objektů. Odlehlé objekty mohou být důvodem hrubých chyb v datech. Do modelu jsou vtahovány spíše hrubé chyby než zajímavé proměnlivosti v datech.

5. Odstraněné odlehlé objekty obsahovaly důležitou informaci. Ztrátou určitých objektů se vytratila důležitá informace z dat a nalezený model je proto zkreslený.

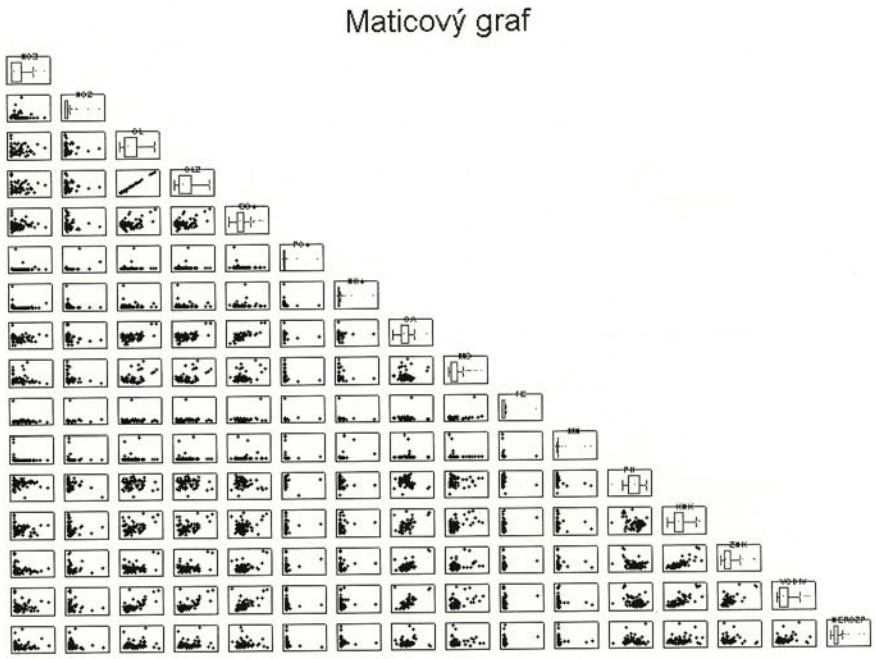
6. Komponentní skóre je nedostatečně analyzováno. Nedostatečným rozborem rozptylového diagramu byly zanedbány důležité rysy v datech.

7. Vysvětlení komponentních vah se špatným počtem hlavních komponent. Může vést k vážnému zkreslení interpretace. Může totiž dojít k vyjmutí důležitých znaků, protože se zdají být odlehlými.

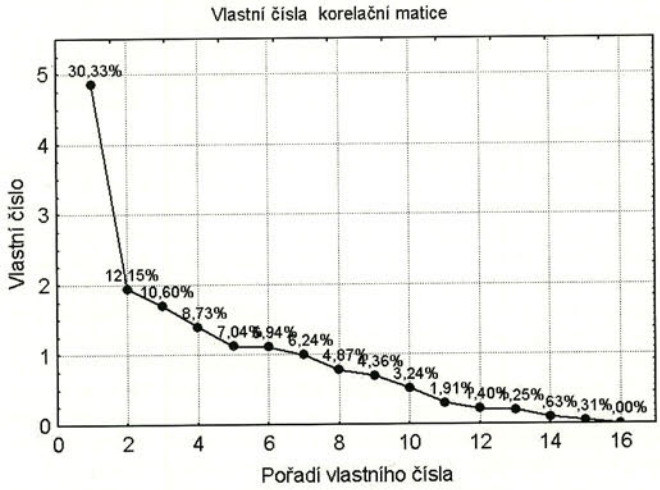
8. Přecenění standardních diagnostik. Je třeba hodně rozvažovat a přemýšlet o úloze samé a specifickém problému řešeném před pohodlným přebíráním počítačových výsledků.



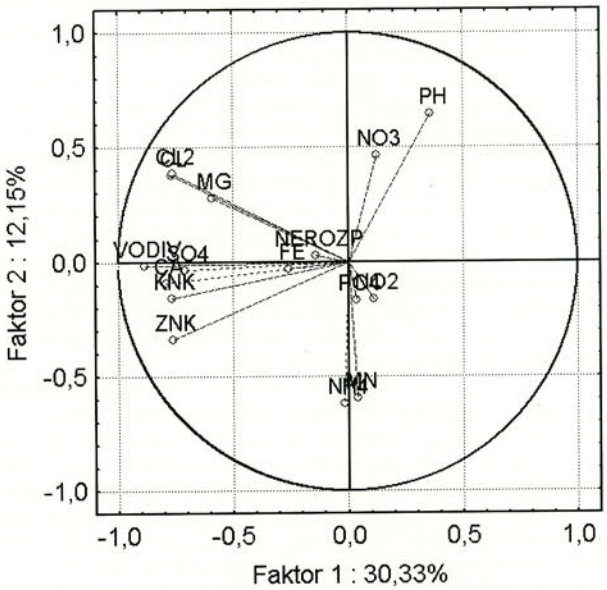
Obr. 3. Krabicový graf proměnlivosti znaků, STATISTICA.



Obr. 4. Diagram korelační matice dvojic znaků, STATISTICA.

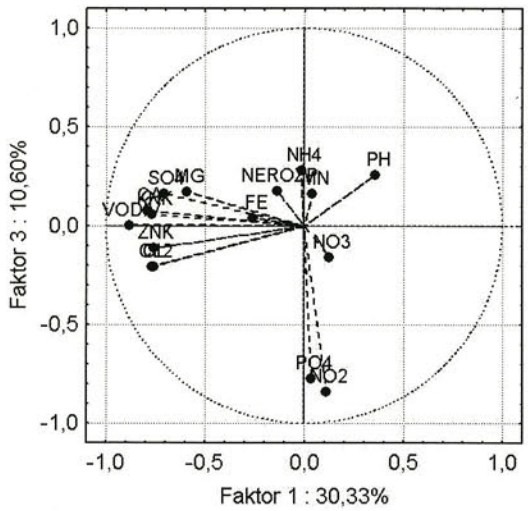


Obr. 5. Cattelův indexový graf úpatí vlastních čísel pro 62 zdrojů vody a 16 znaků, STATISTICA.

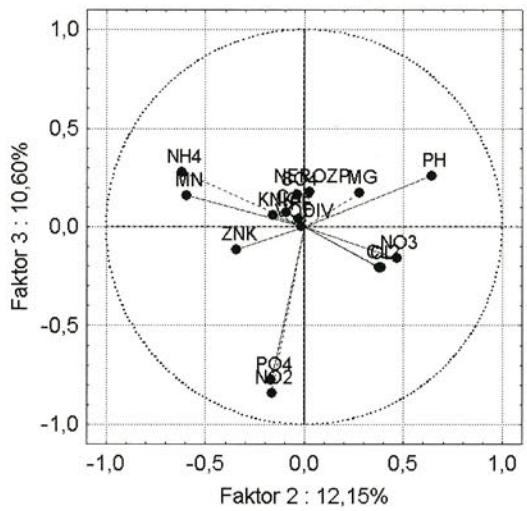


Obr. 6. Graf komponentních vah 1. a 2. hlavní komponenty, STATISTICA.

i	NO3	NO2	Cl	Cl2	SO4	PO4	NH4	Ca	Mg	Fe	Mn	pH	KNK	ZNK	Vodiv.	Nerozp.
1	2,2	0,00	6	6,00	103,50	0,03	0,02	181	17	0,016	0,050	7,08	8,10	3,40	855	0,09
2	1,9	0,01	18	18,00	127,00	0,03	0,06	161	19	0,016	0,050	7,22	6,00	1,80	706	0,08
3	1,3	0,01	1	1,00	93,50	0,03	0,04	175	14	0,016	0,050	7,16	9,30	2,10	625	0,56
4	1,5	0,02	80	80,00	291,00	0,03	0,02	310	38	0,016	0,050	7,07	9,70	5,05	1465	0,06
5	1,7	0,01	93	93,00	321,00	0,03	0,02	316	51	0,016	0,050	7,13	10,50	4,85	1526	0,03
6	11,8	0,11	51	51,00	127,00	0,03	0,02	129	24	0,016	0,100	7,21	4,70	1,35	752	0,07
7	1,6	0,05	28	28,00	281,00	0,04	0,02	179	65	1,050	0,100	7,21	8,10	2,45	1081	0,27
8	2,5	0,10	11	11,00	49,00	0,19	0,22	83	10	0,016	0,110	7,21	4,60	0,55	437	0,2
9	4,8	0,11	12	12,00	51,00	0,04	0,06	47	22	0,071	0,140	7,74	3,70	0,60	380	0,10
10	8,4	0,04	13	13,00	84,00	0,03	0,02	94	5	0,016	0,050	7,51	3,70	0,55	414	0,32
11	1,0	0,01	7	7,00	150,00	0,03	1,89	159	13	0,016	0,670	7,29	6,60	2,05	686	0,13
12	11,4	0,56	23	23,00	132,00	0,03	0,05	85	13	0,016	0,070	7,32	3,50	0,45	464	0,12
13	9,0	0,11	14	14,00	79,50	0,16	0,02	88	24	0,016	0,070	7,42	5,10	0,75	475	0,13
14	27,7	0,03	57	57,00	168,00	0,06	0,02	200	13	0,016	0,080	7,37	6,60	1,25	920	0,26
15	54,2	0,02	52	52,00	139,00	0,10	0,03	190	7	0,038	0,060	7,36	6,90	1,15	982	0,36
16	69,9	0,04	38	38,00	72,00	0,10	0,44	171	2	0,016	0,050	7,29	6,80	1,70	913	0,13
17	3,5	0,08	13	13,00	110,50	0,15	0,02	88	12	0,016	0,050	7,41	3,30	0,65	491	0,15
18	1,0	0,02	16	7,16	7,31	0,10	0,20	34	19	0,038	0,170	7,12	9,60	2,90	1614	0,19
19	1,0	0,00	87	87,00	144,00	0,03	0,31	145	45	0,053	0,050	7,62	7,80	1,10	924	0,15
20	13,2	0,01	15	15,00	50,00	0,14	0,06	94	5	0,016	0,060	7,72	4,80	0,70	491	0,17
21	1,0	0,04	45	45,00	68,00	0,08	0,28	122	3	0,018	3,660	7,19	3,40	0,85	541	0,11
22	18,4	0,02	24	24,00	127,00	0,03	0,02	137	5	0,016	0,090	7,49	5,30	1,40	610	0,10
23	12,8	0,00	15	15,00	124,00	0,03	0,02	120	6	0,016	0,050	7,59	4,50	0,55	518	0,18
24	19,9	0,03	43	43,00	187,00	0,03	0,02	183	2	0,025	0,050	7,48	5,10	1,60	882	0,11
25	33,7	0,03	9	9,00	101,00	0,03	0,02	96	6	0,016	0,050	7,65	2,70	0,75	429	0,09
26	1,3	0,05	23	23,00	243,00	0,03	0,23	161	13	0,064	1,050	7,18	2,80	1,10	686	0,12
27	1,0	0,00	16	16,00	137,00	0,03	0,02	147	7	0,016	0,260	7,51	5,70	1,30	648	0,10
28	2,1	0,03	16	16,00	130,00	0,03	0,04	155	6	0,016	0,320	7,53	5,70	1,05	660	0,10
29	1,0	0,02	7	7,00	163,00	0,03	0,78	149	9	0,025	3,050	7,31	6,10	2,20	637	0,09
30	1,0	0,00	4	4,00	72,00	0,03	0,21	88	9	0,016	0,180	7,62	4,30	0,55	414	0,11
31	1,3	0,00	57	57,00	116,00	0,04	0,13	130	58	0,066	0,050	7,48	10,90	2,05	908	0,21
32	1,0	0,00	30	30,00	48,00	0,39	0,02	168	5	0,054	0,050	8,03	7,60	1,75	672	0,09
33	1,4	0,00	46	46,00	94,00	0,03	0,02	86	54	0,066	0,050	7,79	5,50	1,10	711	0,23
34	22,6	0,00	53	53,00	58,00	0,03	0,02	105	58	0,061	0,050	7,55	6,50	1,85	729	0,11
35	21,2	0,00	45	45,00	106,00	0,03	0,02	100	72	0,064	0,050	7,72	6,80	1,40	790	0,09
36	30,2	0,00	59	59,00	238,00	0,03	0,02	154	83	0,084	0,050	7,70	6,30	1,30	1101	0,09
37	39,0	0,00	22	22,00	90,00	0,04	0,02	88	11	0,061	0,050	7,72	3,80	1,05	432	0,09
38	11,0	0,00	11	11,00	82,00	0,03	0,02	90	22	0,056	0,050	7,71	7,00	1,60	629	0,05
39	25,0	0,00	20	20,00	96,50	0,03	0,03	90	35	0,016	0,050	7,65	5,80	1,15	551	0,15
40	2,2	0,00	34	34,00	82,00	0,03	0,10	130	12	0,016	0,050	7,84	5,70	1,15	575	0,08
41	33,6	0,01	45	45,00	115,00	0,03	0,02	160	6	0,028	0,120	7,77	4,10	1,05	679	0,07
42	46,5	0,01	11	11,00	81,50	0,54	0,10	80	9	0,016	0,050	7,73	3,10	0,75	432	0,06
43	39,3	0,04	28	28,00	130,50	0,03	0,19	144	15	0,031	0,080	7,68	5,50	1,15	615	0,11
44	14,7	0,00	29	29,00	92,50	0,03	0,02	122	24	0,084	0,050	7,78	6,10	1,05	575	0,07
45	17,6	0,00	33	33,00	132,00	0,03	0,02	128	18	0,036	0,070	7,81	4,10	0,60	551	0,04
46	42,8	0,15	25	25,00	149,00	0,03	0,02	152	6	0,076	0,120	7,64	3,80	0,95	665	0,05
47	18,4	0,27	15	15,00	45,50	0,03	0,02	70	5	0,089	0,080	7,50	3,20	0,95	369	0,07
48	7,4	0,01	14	14,00	195,00	0,03	0,02	148	9	0,051	0,130	7,46	3,90	1,30	657	0,08
49	22,1	0,19	52	52,00	180,00	0,03	0,02	154	15	0,048	0,060	7,73	5,60	1,60	803	0,07
50	1,9	0,00	11	11,00	58,00	0,03	0,02	146	11	0,028	0,050	7,84	4,30	1,00	425	0,08
51	18,3	0,00	7	7,00	65,50	0,03	0,02	98	12	0,043	0,050	7,59	4,30	1,25	398	0,07
52	20,8	0,29	36	36,00	65,50	0,03	0,03	120	18	0,084	0,050	7,50	5,70	1,70	592	0,07
53	9,0	0,00	24	24,00	125,00	0,03	0,02	122	7	0,079	0,050	7,77	4,40	1,50	511	0,07
54	19,4	0,00	22	22,00	108,00	0,03	0,02	120	5	0,041	0,050	7,95	5,10	1,65	548	0,03
55	1,8	0,00	3	3,00	92,00	0,03	0,02	118	15	0,056	0,050	7,84	6,40	1,90	504	0,06
56	31,1	0,01	1	1,00	125,00	0,03	0,02	138	24	0,097	0,050	7,71	6,20	1,60	628	0,06
57	21,9	0,83	31	31,00	76,00	1,74	0,02	104	4	0,102	0,090	6,67	5,70	1,55	613	0,06
58	6,9	0,31	36	36,00	50,50	4,42	0,02	120	7	0,079	0,220	7,69	6,20	3,10	635	0,03
59	13,9	0,15	60	60,00	81,00	0,11	0,02	151	9	0,066	0,050	7,96	5,40	0,85	1217	0,66
60	7,4	0,17	56	56,00	151,00	0,18	0,02	149	19	0,016	0,180	7,61	5,60	0,85	790	0,13
61	1,0	0,07	29	29,00	68,50	0,16	0,02	81	11	0,041	0,050	7,62	4,50	0,75	441	0
62	32,8	0,01	25	25,00	115,50	0,05	0,02	102	12	0,016	0,050	7,69	2,60	0,65	436	0,05



Obr. 7. Graf komponentních vah 1. a 3. hlavní komponenty, STATISTICA.



Obr. 8. Graf komponentních vah 2. a 3. hlavní komponenty, STATISTICA.

9. Užití špatného předzpracování dat. Chybná předúprava dat (ve škálování centrování nebo standardizaci, popř. transformaci logaritmické, mocninné či Boxově - Coxově atd.) může vést ke zkresleným závěrům a neporozumění úloze. Způsob předúpravy dat je obecně dán typem úlohy a druhem instrumentálních dat a může vést ke zkreslení informace.

Vzorová úloha 1. *Klasifikace zdrojů pitné vody* (E404 v ref. [31])

Na 62 vzorcích zdrojů pitné vody bylo stanoveno 16 proměnných kvality vody. Je třeba vyšetřit, zda krabicový graf ukazuje nutnost data standardizovat, zda lze nalézt vybočující objekty, resp. jejich proměnné, zda existuje korelace mezi proměnnými, zda ukazuje graf komponentních vah na korelující proměnné, zda jsou některé proměnné redundandní, zda lze odhalit v rozptylovém diagramu komponentního skóre odlehlé objekty, zda lze posoudit podobnost objektů shlukovou analýzou klasifikaci zdrojů.

Data: i index vzorku, **NO3** obsah dusičnanů [mg/l], **NO2** obsah dusitanů [mg/l], **Cl** obsah chloridů [mg/l], **Cl2** obsah celkového chloru [mg/l], **SO4** obsah síranů [mg/l], **PO4** obsah fosforečnanů [mg/l], **NH4** obsah amonných solí [mg/l], **Ca** obsah vápníku [mg/l], **Mg** obsah hořčíku [mg/l], **Fe** obsah železa (celkového) [mg/l], **Mn** obsah manganu [mg/l], **pH** je pH roztoku, **KNK**, **ZNK**, **Vodiv.** vodivost roztoku, **Nerozp.** nerozpuštěné látky [mg/l].

Řešení: Na začátku každé vícerozměrné analýzy dat je třeba provést exploratorní analýzu a vyšetřit znaky co do jejich proměnlivosti a vzájemné korelace. Krabicový graf všech znaků na **obr. 3.** přehledně zobrazuje proměnlivost jednotlivých znaků. Je zřejmé, že data bude třeba předem standardizovat, protože se vyskytují v rozličných rozměrech i řádově se lišících hodnotách. Platí zde totiž pravidlo, že čím větší proměnlivost znaku, tím více znak přispívá k formulaci hlavních komponent.

Maticový diagram na **obr. 4.** ukazuje rozptylové diagramy dvojic znaků. Je zřejmé, že vysoké hodnoty korelačního koeficientu R vedou ke zřetelné lineární (přímkové) závislosti, zatímco nízké hodnoty R ukazují, že znaky nejsou v diagramu zobrazeny na přímce ale spíše v chaotickém mraku bodů.

1 Metoda hlavních komponent PCA

Na začátku analýzy metodou hlavních komponent je třeba určit vhodný počet hlavních komponent, který co nejlépe popisuje proměnlivost v datech.

1.1 Vyšetření indexového grafu úpatí vlastních čísel:

Počet užitečných komponent je v Cattelově indexovém grafu na **obr. 5.** oddělen zřetelným zlomovým místem, a x-ová souřadnice tohoto zlomu je pak hledaná hodnota tohoto počtu a zde je rovna 2.

1.2 Vyšetření grafu komponentních vah:

Vyšetření se provede porovnáním vzdáleností mezi proměnnými a dospěje se k závěru, že krátká vzdálenost mezi dvěma proměnnými znamená silnou korelaci.

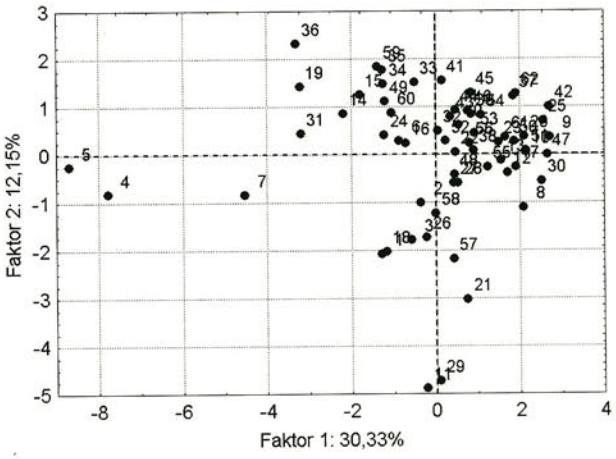
Grafy na **obr. 6., 7.** a **8.** ukazují, jakou měrou přispívají jednotlivé původní proměnné do hlavních komponent. Lze názorně vysvětlit, jak jednotlivé původní proměnné x_j, j= 1,..., 16, přispívají do první hlavní komponenty y_1 nebo do druhé hlavní komponenty y_2. Některé původní proměnné x_j přispívají kladnou vahou, jiné zápornou. Původní proměnné x_j, j= 1,..., 16, blízko sebe a nebo proměnné x_j s malým úhlem mezi svými průvodiči proměnných a na stejné straně vůči počátku mají vysokou kladnou kovarianci, a tím také vysokou kladnou korelaci. Naopak, původní proměnné x_j daleko od sebe anebo s velikým úhlem mezi průvodiči proměnných jsou negativně korelovány. Ukazuje se užitečné, aby původní proměnné, které spolu silně korelují byly z dat odstraněny, aby se tak snížil počet původních znaků..

1.3 Vyšetření rozptylového diagramu komponentního skóre:

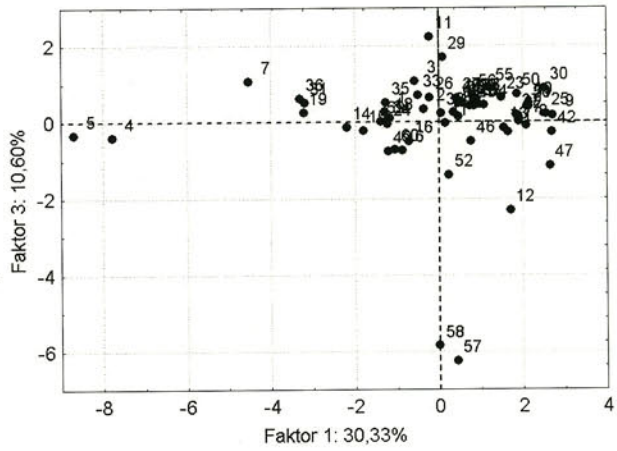
Nejdůležitější diagram metody hlavních komponent ukazuje celou vyšetřovanou strukturu objektů, tzn. shluky objektů, izolované objekty, odlehlé objekty, anomálie, atd. (**obr. 9., 10.** a **11.**).

Objekty mohou být označeny textovým popisem nebo jako na **obr. 9 – 11.** číselně indexem. Analýzou lze dospět k těmto závěrům:

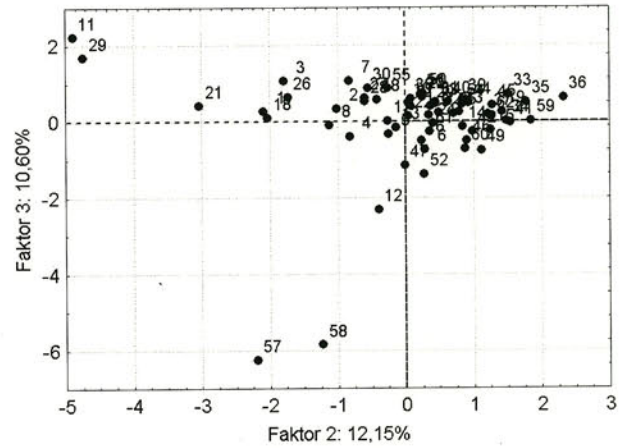
1. Umístění objektů: objekty daleko od počátku (4, 5, 7, 11, 12, 29, 58, 59, atd.) jsou extrémy. Objekty nejblíže počátku (22, 52, 53, 54, 45, atd.) jsou typičtější.
2. Podobnost objektů: objekty blízko sebe (např. 53 a 54 a 44 a 45) si jsou podobné, objekty daleko od sebe (např. 5 a 45, 4 a 30, atd) jsou si nepodobné.
3. Objekty v shluku: objekty umístěné zřetelně v jednom shluku (např. 12, 13, 17, 55, 23, 61, 50, 20, atd) jsou si podobné a přitom nepodobné objektům v ostatních shlucích (např. 14, 15, 24, 49, atd.). Dobře oddělené shluky prozrazují, že lze nalézt vlastní model pro samotný shluk. Jsou-li shluky blízko sebe, znamená to značnou podobnost objektů.
4. Osamělé objekty: izolované objekty (4, 5, 7) mohou být odlehlé objekty, které jsou silně nepodobné ostatním objektům.
5. Odlehlé objekty: v ideálním případě bývají objekty rozptýlené po celé ploše diagramu. V opačném případě je něco špatného v modelu, obyčejně je přítomen silně odlehlý objekt (4, 5, 11, 29, 57 a 58). Odlehlé objekty jsou totiž schopny zbortit celý diagram, ve srovnání se silně vybočujícím objektem jsou ostatní objekty nakumulovány do jediného úzkého shluku. Po odstranění vybočujícího objektu se ostatní objekty roztřídí po celé ploše diagramu a teprve vypovídají o existujících shlucích.



Obr. 9. Rozptylový diagram komponentního skóre 1. a 2. hlavní komponenty, STATISTICA.



Obr. 10. Rozptylový diagram komponentního skóre 1. a 3. hlavní komponenty, STATISTICA.



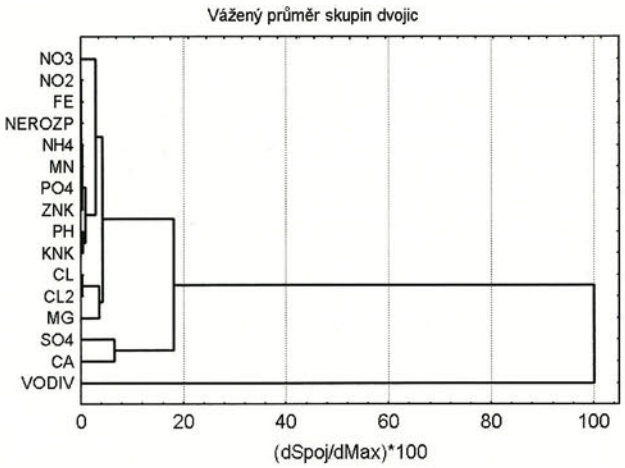
Obr. 11. Rozptylový diagram komponentního skóre 2. a 3. hlavní komponenty, STATISTICA.

2 Klasifikace metodou shluků

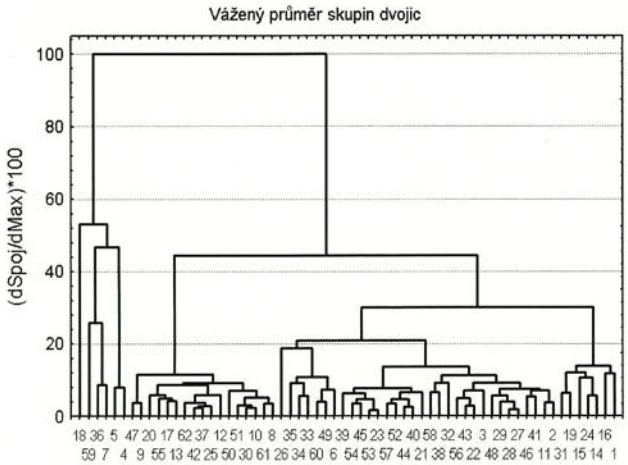
V prvém kroku se postaví dendrogram znaků a v druhém kroku dendrogram objektů.

2.1 Dendrogram podobnosti znaků

V prvém stádiu se vyšetřuje podobnost proměnných, a tím se také odhalí jejich silná korelace. Vyšetří se, která původní proměnná (znak) je nadbytečná a kterou lze vynechat a nahradit jinou. čím nižší je spojka dvou objektů, tím jsou si objekty podobnější.



Obr. 12. Dendrogram proměnných (znaků) metodou váženého průměru skupin dvojic, STATISTICA.



Obr. 13. Dendrogram objektů (zdrojů vody) metodou váženého průměru skupin dvojic, STATISTICA.

Metodou váženého průměru skupin dvojic nebo metodou nejbližšího souseda lze nalézt řadu dvojic velice si podobných znaků. Nejvíce jsou si podobné znaky v následujícím shluku: *NO2-FE-NEROZP-NH4-MN-PO4*. Dále pak ve shluku *KNK-pH-ZNK* a konečně *SO4-CA*. Poněkud ménějsou si podobné proměnné ve shluku *NO3* vůči *KNK-pH-ZNK*. Výjimečné postavení má proměnná VODIV, která si není podobná s žádnou jinou proměnnou. Metoda odhalila řadu shluků, dvojic podobných proměnných. Dospěla k podobným závěrům jako metoda nejbližšího souseda nebo metoda Wardova.

2.2 Dendrogram podobnosti objektů

V druhém stádiu klasifikace tvorbou shluků se vyšetřuje podobnost objektů čili zdrojů pitné vody, jež patří vlastně k nejdůležitější část klasifikační analýzy. Jde o odhalení vybočujících zdrojů, které jsou silně nepodobné ostatním, které mají anomální hodnoty znaků. Z **obr. 13.** je zřejmé, že zdroje pitné vody lze na základě 16 znaků rozdělit do šesti zřetelně odlišných shluků.

3 Závěry

Standardním využitím PCA je snížení dimenze úlohy čili redukce počtu znaků bez velké ztráty informace, a to užitím pouze prvních několika hlavních komponent. Toto snížení dimenze úlohy se netýká počtu původních znaků. Je výhodné především pro možnost zobrazení vícerozměrných dat. Předpokládá se, že nevyužité hlavní komponenty obsahují malé množství informace, protože jejich rozptyl je příliš malý. Tato metoda je atraktivní především z důvodu, že hlavní komponenty jsou nekorelované. Namísto vyšetřování velkého počtu původních znaků s komplexními vnitřními vazbami analyzuje uživatel pouze malý počet nekorelovaných hlavních komponent. Dále lze vybrané hlavní komponenty využít také k testu vícerozměrné normality. Analýza hlavních komponent je rovněž součástí průzkumové analýzy dat. Snížení rozměrnosti je často využíváno při konstrukci komplexních ukazatelů jako lineárních kombinací původních znaků. Například první hlavní komponenta je vlastně vhodným ukazatelem jakosti, pokud původní znaky charakterizují její složky. Využití první hlavní komponenty jako komplexního ukazatele je běžné v oblasti ekonomie, sociologie a medicíny. První dvě respektive první tři hlavní komponenty se využívají především jako techniky zobrazení vícerozměrných dat v projekci do roviny nebo do prostoru. Výhodou je, že tato projekce zachovává vzdálenosti a úhly mezi jednotlivými objekty. V řadě případů jsou hlavní komponenty pouze jednou z fází komplexnější analýzy. Oblíbené je také použití hlavních komponent v oblasti řízení jakosti.

Poděkování:
Autoři vyslovují svůj dík za finační podporu vědeckého záměru č. MSM0021627502.

Doporučená literatura

[1] Siotani M., Hayakawa T., Fujikoshi Y.: Modern Multivariate Statistical Analysis, A Graduate Course and Handbook. American Science Press, Columbia 1985.
[2] Kendall M. G., Stuart A.: *The Advanced Theory of Statistics*, Vol. III. New York 1966.
[3] James W., Stein C.: *Estimation with Quadratic Loss*, Proceed. 4th Berkeley Symp. on Math. Statist., p. 361, 1961.
[4] Guanadeskian R., Kettenring J. R.: *Biometrics* **28**, 80 (1972).
[5] Campbell N. A.: *Appl. Statist.*, 29, 231 (1980).
[6] Hu J., Skrabal P., Zollinger H.: *Dyes and Pigments*, **8**, 189 (1987).
[7] Chambers J. M., Cleveland W. S., Kleiner B., Tukey P. A.: *Graphical Methods for Data Analysis*. Duxburg Press, Belmont, California 1983.
[8] Barnett V., (Edit.): *Interpreting Multivariate Data*. Wiley, Chichester 1981, kap. 6.
[9] Jolliffe I. T.: *Principal Component Analysis*. Springer Verlag, New York 1986.
[10] Barnett V., (Edit.): *Interpreting Multivariate Data*. Wiley, Chichester 1981, kap. 12.
[11] Everitt B. S.: *Graphical Techniques for Multivariate Data*. London 1978.
[12] Andrews D. F.: *Biometrics*, **28**, 125 (1972).
[13] Kulkarni S. R., Paranjape S. R.: *Commun. Statist.*, **13**, 2511 (1984).
[14] Guanadeskian R.: *Methods for Statistical Data Analysis of Multivariate Observations*. Wiley, New York 1977.
[15] Kleiner B., Hartigan J. A., *J. Amer. Statist. Assoc.*, **76**, 260 (1981).
[16] Kres H.: *Statistical Tables for Multivariate Analysis*. Springer, New York 1983.
[17] Seber G. A. F.: *Multivariate Observations*. Wiley, New York 1984.
[18] Stryjewska E., Rubel S., Henrion A., Henrion G.: *Z. Anal. Chem.*, **327**, 679 (1987).
[19] Mudholkar G. S., Trivedi M. S., Lin T. C.: *Technometrics*, **24**, 139 (1982).
[20] Johnson R.A., Wichern D.W.: *Applied Multivariate Statistical Analysis*, Prentice Hall, 1982

[21] Ajvjazin S., Bežajeva Z., Staroverov O.: *Metody vícerozměrné analýzy*, SNTL Praha 1981
[22] Meloun M., Militký J. , Forina M.: *Chemometrics for Analytical Chemistry, Volume 1. PC-Aided Statistical Data Analysis*, Ellis Horwood, Chichester 1992.
[23] Brereton R. G. *Multivariate Pattern Recognition in Chemometrics, Illustrated by Case Studies*, Elsevier 1992,
[24] Krzanowski W. J.: *Principles of Multivariate Analysis, A User=s Perspective*, Oxford Science Publications 1988,
[25] Jeffers J. N. R., *Applied Statistician*, **16**, 225 (1967).
[26] Meloun M. , Militký J., *Statistické zpracování experimentálních dat*, Plus Praha 1994, Academia Praha 2004.
[27] Martens H., Naes T., *Multivariate calibration*, Wiley (1989) Chichester.
[28] Thomas E. V., *Anal. Chem.*, **66** (1994) 795A-804A.
[29] Malinowski F., Howery D., *Factor Analysis in Chemistry*, Wiley (1980) New York.
[30] Meloun M. , Militký J., Sbírka úloh - Statistické zpracování experimentálních dat, Univerzita Pardubice, 1996.
[31] Meloun M. , Militký J., Kompendium statistického zpracování dat, Academia Praha 2002, Academia Praha 2006.

Prof. RNDr. Milan Meloun, DrSc.
Katedra analytické chemie
Chemickotechnologická fakulta
Univerzita Pardubice,
nám. Čs. Legií 565
532 10 Pardubice,
http: //meloun.upce.cz
email: milan.meloun@upce.cz,
telefon: 466037026, fax: 466037068,
ICQ: 224-001-003

Computer-Assisted Statistical Data Analysis. 6. Multivariate Classification of Various Sources of Drinkable Water using Principal Component Analysis and Cluster Analysis (Meloun, M.)

Key Words
PCA - Principal Components Analysis - Cluster Analysis - Dendrogram - Drinkable Water - Water analysis - Potable water - Scatterplot - Scree Plot - Components Weight Plot - Correlation matrix.

Multivariate statistical analysis is based on the latent variables which are formed as the linear combination of original variables $y = w_1 x_1 + ... + w_m x_m$. Data matrix contains objects in *n* rows and *m* columns. Before data treatment the data are scaled. Similarity of objects and variables is considered on base on Mahalonobis distance or Euclidean distance in the *m*-dimensional space. The principal components analysis reduces dimensionality and presents objects in two or three dimensions. The plot of components weight shows hidden structure among variables while the scatterplot shows the hidden structure of objects. The cluster analysis leads to clusters which may be plotted in dendrogram. There are two dendrograms available, the dendrogram of variables and the dendrogram of objects. Both statistical techniques are demonstrated on the analysis and classification of various sources of a drinkable water.

Široká nabídka odlučovačů lehkých kapalin AS-TOP

FIREMNÍ PREZENTACE

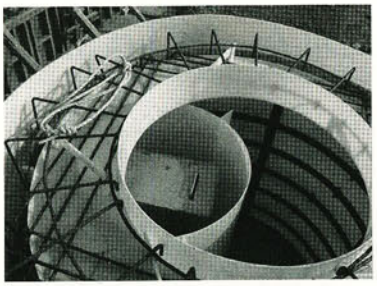
Jedním ze stěžejních produktů firmy ASIO spol. s r.o. jsou objekty odlučovačů lehkých kapalin (OLK), se kterými má již dlouholeté zkušenosti. Za dobu více než 13 let prošla typová řada AS-TOP mnohými inovacemi, které byly zaměřeny jak na kvalitu separace, tak i na statickou únosnost a v neposlední řadě i na jednoduchost a kvalitu výstavby. V současné době firma ASIO nabízí mnoho typových řad odlišujících se:

- dle průtoku - od 1 do 150 l/s,
- dle technologie čištění – koalescence, sorpce,
- dle tvaru a typu nádrže – kruhové, hranaté, samonosné, ...

U všech typových řad jsou optimalizovány parametry tak, aby minimalizovaly investiční náklady při dodržení návrhových parametrů dle českých i evropských norem, zejména pak ČSN EN 858 – Odlučovače lehkých kapalin. Všechny typové řady AS-TOP loni prošly autorizovanou zkušebnou, kde získaly Evropskou značku shody CE, která je v současnosti dle legislativy povinná. Ovšem z hlediska dodavatele se v praxi neustále potýkáme s dvojicí základních problémů:

- z jakých ploch a jak velké průtoky mají být čištěny,
- jaká koncentrace na výstupu bude požadována.

Vodítkem pro rozhodnutí, o jaký typ vody ze zpevněných ploch se jedná, může být existující vyjádření výkladové komise Ministerstva zemědělst ví: „... voda odtékající z komunikace a parkovišť je voda povrchová...". I v tomto vyjádření je nakonec poznámka, že konečné rozhodnutí je však věcí vodohospodářského orgánu. Z důvodu neexistující centrální oficiální metodiky si tak mnohé vodohospodářské orgány stanovily jakési vnitřní standardy. Některé rozhodovací postupy jsou založeny na množství parkujících vozidel, některé na velikosti plochy apod. Logické je např. posuzování podle množství vozidel, která se na parkovišti vyskytnou, nebo podle typu vozidel, druhu a četnosti manipulace apod.



Obr. 1. Pohled na dvouplášťový OLK před betonáží

Druhou nedořešenou otázkou je stanovení výstupních koncentrací, přičemž by, dle mého názoru, vyřešení této otázky pomohlo nejen projektantům, úřadům, dodavatelům, ale hlavně samotnému toku. Přemrštěné požadavky na emisní výstupy rovnající se téměř hodnotám imisním přispívají k tomu, že OLK se musí navrhnout se sorpcí. Protože se investiční náklady těchto zařízení vyšplhají do závratných čísel, přistoupí se k tomu, že je čištěna pouze pětina průtoku, a to ještě v tom lepším případě. Anebo nastává tzv. „hraniční zázrak", kdy identický OLK při přechodu našich hranic rázem místo 5 mg NEL /l deklarované pro zahraničí čistí na 0,2 mg NEL /l.

Obr. 2. Betonáž OLK na stavbě

Přesto věřím, že v odborné veřejnosti převažuje společný zájem na dořešení těchto otázek, a tak nebudeme čekat, že tento problém bude vyřešen přístupem k Schengenské dohodě a zrušením hranic. Předpokládám, že tak jako v zahraničí se budou nakonec dimenzovat OLK jako plnoprůtokové s tím, že ve většině případů se bude požadovat „pouze" 5 mg NEL /l a bude se dbát na kontrolu a údržbu. Protože, jak nám praxe ukazuje, u investičně náročnějších OLK se sorpcí je ekonomicky náročný i provoz, a tak tato zařízení nejsou ve většině případech udržována. Tak se stává, že dobrý úmysl má velmi negativní vliv na výslednou kvalitu čištěných vod.

Asio®
čištění odpadních vod

Ing. Milan Uher
ASIO, spol s r.o.
www.asio.cz