**Ćwiczenie 4. Analiza głównych składowych**

1. **Cel ćwiczenia:**

Celem ćwiczenia jest nabycie umiejętności poprawnego wykonania analizy głównych składowych oraz zinterpretowanie uzyskanych wyników.

1. **Zagadnienia do samodzielnego opracowania:**

Przygotowanie danych do analizy głównych składowych. Zasada działania metody. Kryteria wyboru optymalnej liczby głównych składowych (kryterium poglądowości, minimalnej wartości własnej, kryterium osypiska). Macierz ładunków i interpretacja głównych składowych. Wartości czynnikowe oraz sporządzanie mapy liniowej obiektów w przestrzeni głównych składowych. Rotacje typu Varimax.

1. **Przebieg ćwiczenia:**

Wykorzystując dane z ćwiczenia 3. <http://www.chem.univ.gda.pl/pchs/dane/cw_3b.ods> proszę wykonać następujące zadania:

1. Metodą PCA proszę wyodrębnić główne składowe opisujące kongenery PCN emitowane do środowiska z tych samych źródeł. Jaką część ogólnej zmienności w danych wyjaśniają wyodrębione główne składowe? Jakie kryterium/kryteria należy zastosować przy wyodrębnianiu istotnych głównych składowych?
	1. Korzystając z funkcji **eigen**, wyznacz wektory własne i odpowiadające tym wektorom wartości własne.
	2. Narysuj, korzystając z funkcji **plot,** wykres wartości własnych w funkcji numeru tego elementu.
	3. W oparciu o odpowienie kryteria odetnij nieistotne wektory własne, korzystając z funkcji **eigen$vectors[, 1:n]**
	4. Jaką część ogólnej zmienności w danych wyjaśniają wyodrębione główne składowe?
2. Sporządzić wykres ładunków czynnikowych, korzystając z funkcji **plot** i na jego podstawie przypisz interpretację wyodrębionym głównym składowym.
3. Obliczyć wartości czynnikowe. Sporządzić mapę liniową i na jej podstawie proszę porównać profile zanieczyszczeń w poszczególnych próbkach. W których próbkach występują kongenery pochodzące ze źródeł termicznych, a w których z preparatów technicznych? Które z tych źródeł dominuje?
4. **Sprawozdanie:**
	* + 1. Wyniki uzyskane na zajęciach wraz z interpretacją.
5. **Literatura**
	* + 1. A. Łomnicki, „Wprowadzenie do statystyki dla przyrodników”, Wydanie trzecie uzupełnione, Wyd. Naukowe PWN, Warszawa, 2005
			2. A. Mazerski, „Podstawy chemometrii”, Wydawnictwo Politechniki Gdańskiej, Gdańsk, 2000