Modelos Matemáticos e Aplicações
Introdução à Estatística Multivariada

Jorge Cadima

Secção de Matemática (DCEB) - Instituto Superior de Agronomia (UL)

2020-21

Programa

- Alguns conceitos de teoria de matrizes e álgebra linear
- Análise em Componentes Principais (ACP - PCA)
- Análise Discriminante Linear (ADL - LDA)
- Análises Classificatórias (Cluster Analysis) (Prof. Pedro Silva)

Bibliografia

- Johnson, R.A. & Wichern, D.W. (2007) *Applied Multivariate Statistical Analysis*, 6th ed., Pearson Prentice Hall.
- Jolliffe, I.T. (2002) *Principal Component Analysis*, 2d. ed., Springer (Springer Series in Statistics)
- Krzanowski, W.J. (1998) *Principles of Multivariate Analysis: A User's Perspective*, Oxford Science Publications.
- Morrison, D.F. (1990) *Multivariate Statistical Methods*, 3rd.ed., McGraw-Hill.

Multivariada no  :

- Everitt, B. & Hothorn, T. (2011) *An Introduction to Applied Multivariate Analysis with R*. Springer (Use R! Series).
- Zelterman, D. (2015). *Applied Multivariate Statistics with R*. Springer (Statistics for Biology and Health Series).

A matéria prima em ACP e ADL

Matriz de dados $\mathbf{X}_{n\times p}$, com conjuntos de observações:

- de p variáveis quantitativas (colunas);
- em n individuos, ou unidades experimentais (linhas).

Nota: Ao contrário do que sucede na modelação, aqui todas as variáveis estão em pé de igualdade.

Abordaremos a faceta descritiva (geométrica), quer da ACP, quer da ADL, embora em ambos os métodos se possam introduzir conceitos e abordagens probabilísticos.

Objectivo em ACP e ADL

Procuram-se procuram-se novas variáveis, construídas a partir das p variáveis observadas que salientem:

- numa ACP: a variabilidade entre individuos;
- numa ADL: a separação entre subgrupos conhecidos dos individuos.

Em ambos os casos, as novas variáveis são combinações lineares das p variáveis observadas.

Nas Análises Classificatórias (Cluster Analysis) procuram-se identificar subgrupos de indivíduos semelhantes, subgrupos desconhecidos à partida.

Motivação da ACP

Na representação tradicional, à matriz de dados $\mathbf{X}_{n\times p}$ corresponde uma nuvem de n pontos em $\mathbb{R}^p$:

$$\begin{array}{ccc} p \text{ eixos} & \longleftrightarrow & p \text{ variáveis} \\ n \text{ pontos} & \longleftrightarrow & n \text{ individuos} \end{array}$$

Esta nuvem de pontos não é visualizável para $p > 3$.

A ACP pode ser vista como uma técnica de redução "óptima" da dimensionalidade: procuram-se os subespaços de dimensão $k < p$ onde a projecção ortogonal dos dados preserva o máximo de variabilidade (equivalentemente, perde o mínimo de variabilidade).

No caso duma redução para $k = 2$ ou $k = 3$ dimensões, ter-se-á uma aproximação visualizável da nuvem de pontos.

Um exemplo: os lavagantes de Somers

Dados: $p = 13$ variáveis morfométricas sobre $n = 63$ lavagantes

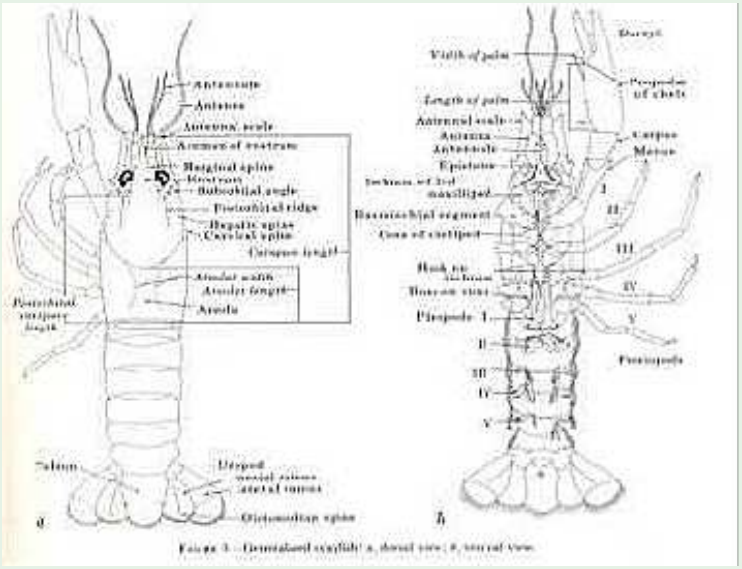
```
> lavagantes
```

	x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9	x10	x11	x12	x13
1	29.42	21.43	14.91	12.58	12.85	10.57	1.76	6.45	6.67	9.14	24.54	10.38	15.37
2	30.06	22.05	14.81	12.54	12.96	10.75	1.73	6.11	7.04	8.76	26.21	11.00	11.92
3	30.30	21.95	15.10	12.97	13.05	11.11	2.05	6.46	7.14	9.35	26.55	11.84	16.50
4	30.75	21.91	15.89	12.85	13.75	10.75	1.71	6.62	6.84	9.53	25.35	11.60	15.47
5	31.06	20.37	15.83	13.15	13.37	11.50	2.15	5.96	7.09	9.15	26.88	11.92	17.24
6	31.27	24.04	17.45	14.49	14.77	12.64	2.06	6.59	7.43	10.75	31.60	14.32	18.95
7	31.39	21.91	15.96	13.41	13.74	11.79	2.03	6.40	6.89	9.82	28.16	12.53	16.90
8	31.51	23.63	15.95	13.14	13.89	11.74	1.94	6.26	6.81	9.36	26.09	11.15	15.48
9	32.12	22.81	16.06	13.29	13.80	12.14	2.02	6.47	7.00	9.70	27.01	11.22	16.65
10	32.40	22.96	16.69	13.82	14.30	12.06	2.03	6.14	7.27	9.53	29.34	12.59	17.90
...													
56	33.44	24.72	17.06	14.25	16.74	12.42	2.04	6.52	7.25	10.21	26.92	11.40	16.23
57	33.48	25.32	17.50	14.15	17.20	12.40	2.17	6.94	7.54	10.37	26.85	11.40	16.34
58	33.57	25.00	16.74	14.10	16.49	12.43	1.95	7.27	7.37	10.15	25.13	11.23	14.98
59	33.74	25.30	17.11	14.26	16.35	12.37	2.26	6.82	7.41	11.14	26.43	10.91	16.02
60	34.37	25.35	17.98	14.49	16.95	12.69	2.02	7.04	7.35	10.33	27.97	11.75	17.19
61	34.66	25.32	18.50	14.16	17.37	12.60	2.32	6.88	7.59	11.00	27.76	11.87	17.58
62	34.93	26.77	18.00	14.13	16.89	12.67	2.04	7.14	7.79	10.36	26.98	11.55	17.20
63	35.73	25.79	18.35	15.06	17.15	13.14	2.15	7.09	7.83	10.59	28.29	12.30	17.45

Estes $13 \times 63 = 819$ valores definem uma nuvem de 63 pontos em $\mathbb{R}^{13}$.

Os lavagantes de Somers (cont.)

Dados `lavagantes`: nomes completos das variáveis



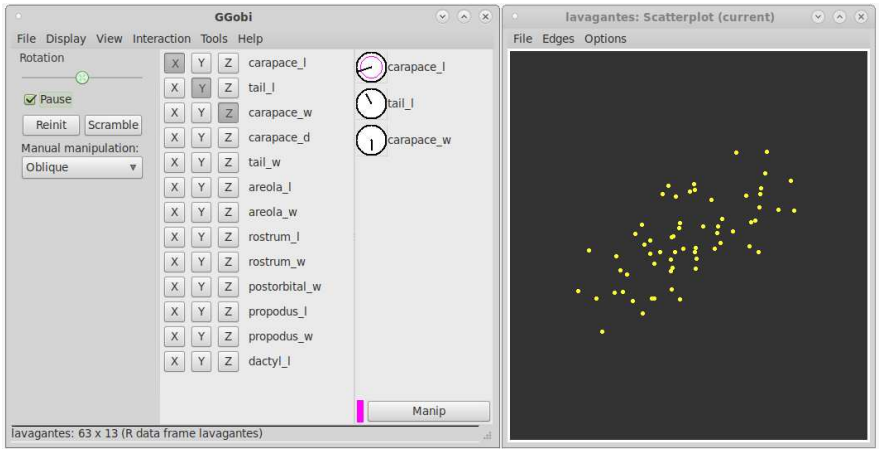
Thoma, Roger F., *A Field Guide to the Crayfishes of Obed Wild and Scenic River*, `www.nps.gov`.

`x1`	`carapace_l`	comprimento da carapaça
`x2`	`tail_l`	comprimento da cauda
`x3`	`carapace_w`	largura da carapaça
`x4`	`carapace_d`	profundidade da carapaça
`x5`	`tail_w`	largura da cauda
`x6`	`areola_l`	comprimento da aréola
`x7`	`areola_w`	largura da aréola
`x8`	`rostrum_l`	comprimento do rostro
`x9`	`rostrum_w`	largura do rostro
`x10`	`postorbital_w`	largura post-orbital
`x11`	`propodus_l`	comprimento da tenaz
`x12`	`propodus_w`	largura da tenaz
`x13`	`dactyl_l`	comprimento dáctil

A representação gráfica de dados multivariados

Até $p = 3$ é possível a representação usual dos dados (cada eixo é uma variável, cada indivíduo observado é um ponto nesse sistema de p eixos), por exemplo com o módulo (package) `rggobi`[1].

```
> library(rggobi)
> ggobi(lavagantes)
```



Continuamos apenas com visões parciais, resultantes de projectar ortogonalmente a nuvem de $n = 63$ pontos em $\mathbb{R}^{13}$ sobre espaços tri-dimensionais coordenados.

[1] O *software* `GGobi`, exterior ao `R`, é gratuito e de código aberto (`www.ggobi.org`)

Projecções ortogonais

Qualquer projecção empobrece a representação: ficamos com uma visão parcial. Distâncias podem ficar camufladas.

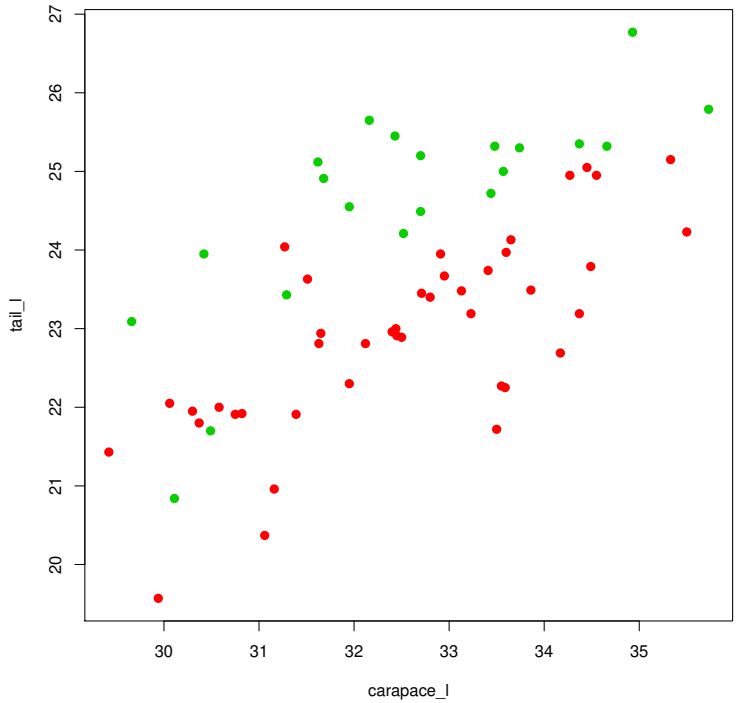
Mas,

- Porquê só projectar sobre (hiper)planos coordenados (definidos pelos eixos das variáveis)? Porque não outros (hiper)planos?
- Qual o (hiper)plano onde a projecção é mais fidedigna?
- Qual o critério de "projecção fidedigna"?

Ideia intuitiva: o subespaço onde se projecta deve preservar, tanto quanto possível, a variabilidade dos pontos. Esta é a abordagem que conduz à Análise em Componentes Principais.

Motivação: Análise Discriminante Linear (ADL)

A ACP trata todos os indivíduos por igual. Os 42 primeiros lavagantes são machos (21 reprodutores e 21 não reprodutores) e os 21 finais são fêmeas, e uma nuvem de pontos nas duas primeiras variáveis indicia que isso pode ser visível nas variáveis.



ADL: identificar a combinação linear das variáveis que melhore separe os dois sexos.

Conceitos de Teoria de Matrizes e Álgebra Linear

A Estatística Multivariada, sobretudo descritiva, precisa de:

- Conceitos de Álgebra Linear, como:
  - Espaços e subespaços lineares (vectoriais);
  - Combinações lineares e independência linear;
  - Bases e dimensões de espaços lineares;
  - Produtos internos e conceitos geométricos associados;
  - Projecções (sobretudo ortogonais) sobre subespaços.
- Conceitos de Teoria de Matrizes, como:
  - Operações sobre matrizes e tipos de matrizes;
  - Transformações lineares e matrizes;
  - Valores e vectores próprios (eigenvalues and eigenvectors);
  - Decomposição espectral de matrizes simétricas;
  - Decomposição em Valores Singulares duma matriz genérica;
  - Problema generalizado de valores próprios.

Matrizes quadradas

Uma matriz diz-se quadrada se tem igual número de linhas e colunas.

Eis alguns tipos importantes de matrizes quadradas, $\mathbf{A}_{p\times p}$:

$\mathbf{A}$ Diagonal	$a_{ij}=0$ se $i\neq j$ (e existe i tal que $a_{ii}\neq 0$)
$\mathbf{I}_p$ Identidade	$\mathbf{A}=\mathbf{I}_p \iff a_{ij}=\begin{cases} 0 & \text{para } i\neq j \\ 1 & \text{para } i=j \end{cases}$
$\mathbf{A}^{-1}$ Inversa de $\mathbf{A}$	$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}=\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}=\mathbf{I}_p$ (nem sempre existe, mas quando existe é única)
$\mathbf{A}$ Simétrica	$\mathbf{A}^t=\mathbf{A} \iff a_{ij}=a_{ji}, \quad \forall i,j$
$\mathbf{A}$ Idempotente	$\mathbf{A}^2=\mathbf{A}\mathbf{A}=\mathbf{A}$
$\mathbf{A}$ Ortogonal	$\mathbf{A}^{-1}=\mathbf{A}^t \iff \mathbf{A}^t\mathbf{A}=\mathbf{A}\mathbf{A}^t=\mathbf{I}_p$

Numa matriz ortogonal, quer as colunas, quer as linhas, formam conjuntos ortonormados (orthonormal) de vectores: vectores $\vec{\mathbf{a}}_i$ de norma um ($\|\vec{\mathbf{a}}_i\|=\sqrt{\vec{\mathbf{a}}_i^t\vec{\mathbf{a}}_i}=1$) e ortogonais entre si ($\vec{\mathbf{a}}_i^t\vec{\mathbf{a}}_j=0$, se $i\neq j$).

Matrizes simétricas

Seja $\mathbf{A}_{p\times p}$ uma matriz simétrica (necessariamente quadrada).

Para qualquer vector $\vec{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^p$, diz-se que $\vec{\mathbf{x}}^t\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}}$ é uma forma quadrática , e tem-se:

A Matriz Definida Positiva	se $\forall \vec{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^p \setminus \{\vec{\mathbf{0}}\}$, $\vec{\mathbf{x}}^t\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}} > 0$
A Matriz Semi-Definida Positiva	se $\forall \vec{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^p \setminus \{\vec{\mathbf{0}}\}$, $\vec{\mathbf{x}}^t\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}} \geq 0$
A Matriz Definida Negativa	se $\forall \vec{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^p \setminus \{\vec{\mathbf{0}}\}$, $\vec{\mathbf{x}}^t\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}} < 0$
A Matriz Semi-Definida Negativa	se $\forall \vec{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^p \setminus \{\vec{\mathbf{0}}\}$, $\vec{\mathbf{x}}^t\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}} \leq 0$
A Matriz Indefinida	se $\vec{\mathbf{x}}^t\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}}$ tem sinais diferentes.

Matrizes como transformações lineares

Qualquer matriz real $\mathbf{A}_{n\times p}$ define uma transformação de vectores de $\mathbb{R}^p$ em vectores de $\mathbb{R}^n$:

$$\mathbf{A}_{n\times p}\vec{\mathbf{x}}_{p\times 1} = \vec{\mathbf{y}}_{n\times 1}$$

As transformações induzidas por matrizes são lineares:

$$\mathbf{A}\left(\alpha\vec{\mathbf{x}}_1 + \beta\vec{\mathbf{x}}_2\right) = \alpha\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}}_1 + \beta\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}}_2 \quad (\vec{\mathbf{x}}_1, \vec{\mathbf{x}}_2 \in \mathbb{R}^p)\ ,$$

ou seja, a imagem duma combinação linear é a combinação linear das imagens (com os mesmos coeficientes).

Quando $\mathbf{A}_{p\times p}$ é uma matriz quadrada, a transformação gera vectores de $\mathbb{R}^p$, a partir de vectores de $\mathbb{R}^p$.

Direcções invariantes na transformação induzida em $\mathbb{R}^p$ por $\mathbf{A}_{p\times p}$ (caso existam) merecem especial atenção: $\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}} = \lambda\vec{\mathbf{x}}$.

Valores e vectores próprios (eigenvalues/vectors)

Definição: Valores e vectores próprios

Dada uma matriz real quadrada $\mathbf{A}_{p\text{x}p}$, um vector não-nulo $\vec{\mathbf{x}} \in \mathbb{C}^p$ diz-se um vector próprio de $\mathbf{A}$, e $\lambda \in \mathbb{C}$ diz-se o valor próprio correspondente se:

$$\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}} = \lambda \vec{\mathbf{x}} \ .$$

Valores e vectores próprios de matrizes simétricas

Se $\mathbf{A}_{p\times p}$ fôr uma matriz simétrica, os seus valores/vectores próprios têm boas propriedades:

- Os valores e vectores próprios são sempre reais.
- Vectores próprios associados a valores próprios diferentes são ortogonais entre si.
- Mesmo que haja valores próprios repetidos, é possível determinar um conjunto ortonormado de p vectores próprios (logo, p valores próprios).

A Decomposição Espectral duma matriz simétrica

Teorema da Decomposição Espectral

Seja $\mathbf{A}_{p\times p}$ uma matriz simétrica. Sejam:

- $\{\vec{\mathbf{v}}_i\}_{i=1}^{p}$ um conjunto ortonormado de vectores próprios; e
- $\{\lambda_i\}_{i=1}^{p}$ os seus p valores próprios correspondentes.

Definindo:

- a matriz diagonal $\mathbf{\Lambda}_{p\times p}$ cujos elementos diagonais são λ_i; e
- a matriz (necessariamente ortogonal) $\mathbf{V}_{p\times p}$, cujas colunas são $\vec{\mathbf{v}}_i$;

tem-se:

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^t \quad \Longleftrightarrow \quad \mathbf{A} = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i \vec{\mathbf{v}}_i \vec{\mathbf{v}}_i^t \ .$$

Os valores e vectores próprios são a essência duma matriz simétrica $\mathbf{A}$.

Notas sobre as decomposiçoes espectrais

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^t \qquad \Longleftrightarrow \qquad \mathbf{A} = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i \vec{\mathbf{v}}_i \vec{\mathbf{v}}_i^t \ .$$

- Se todos os valores próprios forem diferentes, os vectores próprios $\vec{\mathbf{v}}_i$ são únicos, a menos de troca de sinal (tanto se pode usar $\vec{\mathbf{v}}_i$ como $-\vec{\mathbf{v}}_i$).
- Ordenando os elementos diagonais de $\mathbf{\Lambda}$ ($\lambda_1 > \lambda_2 > \ldots > \lambda_p$), a decomposição $\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^t$ é única (a menos de trocas de sinais nas colunas de $\mathbf{V}$).
- Com valores próprios iguais, a decomposição não é única.

  De facto, sejam $\vec{\mathbf{x}}_1$ e $\vec{\mathbf{x}}_2$ vectores próprios de $\mathbf{A}$ com o mesmo valor próprio λ. Como $\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}}_1 = \lambda\vec{\mathbf{x}}_1$ e $\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}}_2 = \lambda\vec{\mathbf{x}}_2$, tem-se:

$$\mathbf{A}(\alpha\vec{\mathbf{x}}_1 + \beta\vec{\mathbf{x}}_2) = \alpha\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}}_1 + \beta\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}}_2 = \alpha\cdot\lambda\vec{\mathbf{x}}_1 + \beta\cdot\lambda\vec{\mathbf{x}}_2 = \lambda\left(\alpha\vec{\mathbf{x}}_1 + \beta\vec{\mathbf{x}}_2\right) ,$$

  logo $\alpha\vec{\mathbf{x}}_1 + \beta\vec{\mathbf{x}}_2$ também é vector próprio de $\mathbf{A}$, associado ao mesmo valor próprio λ. Todos os vectores do subespaço gerado por $\vec{\mathbf{x}}_1$ e $\vec{\mathbf{x}}_2$ são vectores próprios associados a λ.

Valores próprios e formas quadráticas

Os valores próprios duma matriz simétrica determinam o sinal das suas formas quadráticas. De facto,

$$\vec{\mathbf{x}}^t \mathbf{A} \vec{\mathbf{x}} = \vec{\mathbf{x}}^t \left(\sum_{i=1}^{p} \lambda_i \vec{\mathbf{v}}_i \vec{\mathbf{v}}_i^t \right) \vec{\mathbf{x}} = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i (\vec{\mathbf{x}}^t \vec{\mathbf{v}}_i)(\vec{\mathbf{v}}_i^t \vec{\mathbf{x}}) = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i (\vec{\mathbf{x}}^t \vec{\mathbf{v}}_i)^2$$

($\vec{\mathbf{x}}^t \vec{\mathbf{v}}_i$ é 1×1, logo igual à sua transposta $\vec{\mathbf{v}}_i^t \vec{\mathbf{x}}$). Logo,

Teorema

Seja $\mathbf{A}$ uma matriz simétrica, de tipo $p \times p$. Então:

$\mathbf{A}$ definida positiva	$\iff$	$\lambda_i > 0, \quad \forall i$
$\mathbf{A}$ semi-definida positiva	$\iff$	$\lambda_i \geq 0, \quad \forall i$ (pelo menos um zero)
$\mathbf{A}$ definida negativa	$\iff$	$\lambda_i < 0, \quad \forall i$
$\mathbf{A}$ semi-definida negativa	$\iff$	$\lambda_i \leq 0, \quad \forall i$ (pelo menos um zero)
$\mathbf{A}$ é indefinida	$\iff$	$\exists i : \lambda_i < 0, \quad \exists j : \lambda_j > 0.$

Propriedades de matrizes diagonais

Seja **D** uma matriz diagonal, $p \times p$:

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} d_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & d_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & d_p \end{bmatrix}$$

- O produto de duas matrizes diagonais é diagonal , com $\mathbf{CD} = \mathbf{DC}$:

$$\begin{bmatrix} c_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & c_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & c_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & c_p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & d_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & d_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 d_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & c_2 d_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & c_3 d_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & c_p d_p \end{bmatrix}$$

- Para qualquer $k \in \mathbb{N}$, tem-se: $\mathbf{D}^k = \begin{bmatrix} d_1^k & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2^k & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & d_3^k & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & d_p^k \end{bmatrix}$

Produtos duma matriz diagonal e outra genérica

Seja **D** diagonal e **A** uma matriz compatível na multiplicação. Então:

- **DA** é a matriz que resulta de multiplicar cada *linha* de **A** pelo correspondente elemento diagonal de **D**.

$$\begin{bmatrix} d_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & d_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & d_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1p} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2p} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{np} \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} d_1 a_{11} & d_1 a_{12} & d_1 a_{13} & \dots & d_1 a_{1p} \\ d_2 a_{21} & d_2 a_{22} & d_2 a_{23} & \dots & d_2 a_{2p} \\ d_3 a_{31} & d_3 a_{32} & d_3 a_{33} & \dots & d_3 a_{3p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_n a_{n1} & d_n a_{n2} & d_n a_{n3} & \dots & d_n a_{np} \end{bmatrix}$$

- **AD** é a matriz que resulta de multiplicar cada *coluna* de **A** pelo correspondente elemento diagonal de **D**.

Potências de matrizes diagonais

Seja **D** uma matriz diagonal $p \times p$, de elemento diagonal genérico d_i:

- Se nenhum $d_i = 0$, então **D** invertível, e a inversa é dada por:

$$\mathbf{D}^{-1} = \begin{bmatrix} d_1^{-1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2^{-1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & d_3^{-1} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & d_p^{-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{d_1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{d_2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{d_3} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{1}{d_p} \end{bmatrix}$$

- Tem-se $(\mathbf{D}^k)^{-1} = (\mathbf{D}^{-1})^k = \mathbf{D}^{-k} \equiv \left[\frac{1}{d_i^k}\right]$, para qualquer $k \in \mathbb{N}$.
- Se $d_i > 0, \forall\, i$, define-se $\mathbf{D}^k$ para qualquer $k \in \mathbb{R}$, como a matriz diagonal de elemento genérico d_i^k.
- Tem-se: $\mathbf{D}^0 = \mathbf{I}_p$ (matriz identidade).

Definiu-se uma álgebra de potências para matrizes diagonais:

$$\mathbf{D}^k \mathbf{D}^m = \mathbf{D}^{k+m} \quad , \quad \forall\, k, m \in \mathbb{R} \, .$$

Potências de matrizes simétricas

Seja $\mathbf{A}$ uma matriz simétrica com decomposição espectral $\mathbf{A}_{p\times p} = \mathbf{V}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{V}^t$.

- Para qualquer $k \in \mathbb{N}$, tem-se $\mathbf{A}^k = \mathbf{V}\boldsymbol{\Lambda}^k\mathbf{V}^t$, com $\boldsymbol{\Lambda}^k \equiv \left[\lambda_i^k\right]$.

  $\mathbf{A}^2 = \mathbf{A}\mathbf{A} = \left(\mathbf{V}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{V}^t\right)\left(\mathbf{V}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{V}^t\right) = \mathbf{V}\boldsymbol{\Lambda}\underbrace{\mathbf{V}^t\mathbf{V}}_{=\mathbf{I}_p}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{V}^t = \mathbf{V}\boldsymbol{\Lambda}^2\mathbf{V}^t$; $\mathbf{A}^3 = \mathbf{A}^2\mathbf{A} = \left(\mathbf{V}\boldsymbol{\Lambda}^2\mathbf{V}^t\right)\left(\mathbf{V}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{V}^t\right) = \mathbf{V}\boldsymbol{\Lambda}^2\underbrace{\mathbf{V}^t\mathbf{V}}_{=\mathbf{I}_p}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{V}^t = \mathbf{V}\boldsymbol{\Lambda}^3\mathbf{V}^t$, etc.

- define-se $\mathbf{A}^0 = \mathbf{V}\boldsymbol{\Lambda}^0\mathbf{V}^t = \mathbf{V}\mathbf{V}^t = \mathbf{I}_{p\times p}$ ($\mathbf{V}$ é ortogonal);
- $\mathbf{A}$ é idempotente se e só se todos os seus valores próprios são 0 ou 1.

  $\mathbf{A}^2 = \mathbf{A} \Leftrightarrow \mathbf{A}^2 - \mathbf{A} = \mathbf{V}\boldsymbol{\Lambda}^2\mathbf{V}^t - \mathbf{V}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{V}^t = \mathbf{0} \Leftrightarrow \mathbf{V}(\boldsymbol{\Lambda}^2 - \boldsymbol{\Lambda})\mathbf{V}^t = \mathbf{0} \Leftrightarrow \boldsymbol{\Lambda}^2 - \boldsymbol{\Lambda} = \mathbf{V}^t\mathbf{0}\mathbf{V} = \mathbf{0} \Leftrightarrow \lambda_i(\lambda_i - 1) = 0,\ \forall i \Leftrightarrow \lambda_i = 0 \vee \lambda_i = 1\ \forall i$

- Se $\mathbf{A}$ invertível,
  - a inversa é dada por: $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{V}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\mathbf{V}^t$, com $\boldsymbol{\Lambda}^{-1} \equiv \left[\frac{1}{\lambda_i}\right]$;
  - para $k \in \mathbb{N}$, $(\mathbf{A}^{-1})^k = \mathbf{V}\boldsymbol{\Lambda}^{-k}\mathbf{V}^t = (\mathbf{A}^k)^{-1}\left[= \mathbf{A}^{-k}\right]$
- Se $\mathbf{A}$ definida positiva, define-se $\mathbf{A}^k = \mathbf{V}\boldsymbol{\Lambda}^k\mathbf{V}^t$ para qualquer $k \in \mathbb{R}$.

Para os expoentes que faz sentido em cada caso, definiu-se uma álgebra de potências das matrizes simétricas, análoga à dos números reais:

$$\mathbf{A}^k\mathbf{A}^m \quad = \quad \mathbf{A}^{k+m}\,.$$

Traços (de matrizes quadradas)

Seja **A** uma matriz quadrada:

- O traço de **A** define-se como a soma dos elementos diagonais:

$$\mathrm{tr}(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^{p} a_{ii}.$$

- O traço é um operador linear, isto é,

$$\mathrm{tr}(\alpha\,\mathbf{A} + \beta\,\mathbf{B}) \quad = \quad \alpha\,\mathrm{tr}(\mathbf{A}) + \beta\,\mathrm{tr}(\mathbf{B})$$

- Para duas matrizes de igual dimensão, $\mathbf{A}_{n\times p}$ e $\mathbf{B}_{n\times p}$ é dado por:

$$\mathrm{tr}(\mathbf{A}^t\mathbf{B}) \;=\; \sum_{j=1}^{p}(\mathbf{A}^t\mathbf{B})_{jj} \;=\; \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p} a_{ij}b_{ij}\;.$$

Circularidade do traço

Produtos de duas matrizes: $\mathbf{A}_{n\times p}, \mathbf{B}_{p\times n} \implies \operatorname{tr}(\mathbf{AB}) = \operatorname{tr}(\mathbf{BA})$.

(Mesmo que $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$: são ambos $\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p} a_{ij}b_{ji}$)

Produtos de 3 matrizes: $\mathbf{A}_{m\times k}, \mathbf{B}_{k\times p}, \mathbf{C}_{p\times m} \Rightarrow \operatorname{tr}(\mathbf{ABC}) = \operatorname{tr}(\mathbf{BCA})$.

(Aplicar o resultado anterior às duas matrizes **A** e **BC**)

Produtos de *n* matrizes: Se $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \mathbf{A}_3, ..., \mathbf{A}_n$ matrizes de dimensões $(p_0 \times p_1)$, $(p_1 \times p_2)$, $(p_2 \times p_3)$, ..., $(p_{n-1} \times p_0)$, então,

$$\operatorname{tr}(\mathbf{A}_1\mathbf{A}_2\mathbf{A}_3\cdots\mathbf{A}_n) = \operatorname{tr}(\mathbf{A}_2\mathbf{A}_3\cdots\mathbf{A}_n\mathbf{A}_1) \ .$$

(Aplicar resultado inicial às matrizes $\mathbf{A}_1$ e $\mathbf{A}_2\mathbf{A}_3\cdots\mathbf{A}_n$)

Pela Decomposição Espectral, é fácil ver que o traço duma matriz simétrica **A** é também a soma dos seus valores próprios:

$$\operatorname{tr}(\mathbf{A}) = \operatorname{tr}(\mathbf{V}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{V}^t) = \operatorname{tr}(\boldsymbol{\Lambda}\underbrace{\mathbf{V}^t\mathbf{V}}_{=\mathbf{I}_p}) = \operatorname{tr}(\boldsymbol{\Lambda}) = \sum_{i=1}^{p}\lambda_i \ .$$

Matrizes de (co-)variâncias

As matrizes simétricas são importantes em Estatística porque as matrizes de (co)variâncias e de correlações são matrizes simétricas.

As matrizes de (co-)variâncias de conjuntos $n \times p$ de dados são da forma

$$\mathbf{S} = \frac{1}{n-1} \mathbf{X}^{c\,t} \mathbf{X}^{c} \,,$$

onde $\mathbf{X}^{c}$ é a matriz $n \times p$ cujas colunas são os p vectores centrados de observações, $\vec{\mathbf{x}}_j^{\,c}$, ou seja, a matriz de elemento genérico $x_{ij} - \overline{x}_{\cdot j}$:

$$\mathbf{s}_{jk} = \frac{1}{n-1} \left[\mathbf{X}^{c\,t} \mathbf{X}^{c} \right]_{jk} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_{ij} - \overline{x}_{\cdot j})(x_{ik} - \overline{x}_{\cdot k}) = Cov_{\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_k}$$

Seja $\mathbf{X}$ uma matriz $n \times p$ de dados. A correspondente matriz centrada de dados, $\mathbf{X}^{c}$, obtém-se através do produto:

$$\mathbf{X}^{c} = (\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_{\vec{\mathbf{1}}_n}) \mathbf{X} = \mathbf{X} - \mathbf{P}_{\vec{\mathbf{1}}_n} \mathbf{X} \,,$$

sendo $\mathbf{P}_{\vec{\mathbf{1}}_n}$ a matriz $(n \times n)$ de projecção ortogonal sobre o subespaço (de $\mathbb{R}^n$) gerado pelo vector $\vec{\mathbf{1}}_n$ dos n uns: $\mathbf{P}_{\vec{\mathbf{1}}_n} = \vec{\mathbf{1}}_n \underbrace{(\vec{\mathbf{1}}_n^{\,t} \vec{\mathbf{1}}_n)^{-1}}_{=\frac{1}{n}} \vec{\mathbf{1}}_n^{\,t} = \frac{1}{n} \vec{\mathbf{1}}_n \vec{\mathbf{1}}_n^{\,t}$.

Matrizes de (co-)variâncias (cont.)

As matrizes de covariâncias são necessariamente semi-definidas positivas.
Para qualquer vector $\vec{\mathbf{a}} \in \mathbb{R}^p$ e matriz de covariâncias $\mathbf{S} = \frac{1}{n-1}\mathbf{X}^{c\,t}\mathbf{X}^c$:

$$\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{a}} = \frac{1}{n-1}\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{X}^{c\,t}\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}} = \frac{1}{n-1}(\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}})^t\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}} = \frac{1}{n-1}\|\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}\|^2 \geq 0\,.$$

São definidas positivas se e só se as p colunas da matriz $\mathbf{X}^c$ são linearmente independentes (i.e., sse não há multicolinearidade):

$$\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{a}} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \|\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}\|^2 = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}} = \vec{\mathbf{0}}_n \quad \Leftrightarrow \quad \vec{\mathbf{a}} = \vec{\mathbf{0}}_p\,.$$

Assim, os valores próprios de matrizes de (co-)variâncias são sempre não negativos e, desde que não haja multicolinearidade nas variáveis subjacentes, são mesmo positivos.

Variância de combinações lineares de variáveis

Seja **S** a matriz de (co-)variâncias gerada pela matriz de dados **X**.

A variância duma combinação linear das colunas de **X**, $\vec{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\vec{\mathbf{a}}$, é a forma quadrática de **S** definida por $\vec{\mathbf{a}}$:

$$var(\vec{\mathbf{y}}) \;=\; var(\mathbf{X}\vec{\mathbf{a}}) \;=\; \vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{a}}\ .$$

De facto, $\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{a}} \;=\; \frac{1}{n-1}\,\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{X}^{c\,t}\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}} \;=\; \frac{1}{n-1}\,\|\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}\|^2$, e

$$\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}} \;=\; (\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_{\vec{\mathbf{1}}_n})\mathbf{X}\vec{\mathbf{a}} \;=\; \mathbf{X}\vec{\mathbf{a}} - \mathbf{P}_{\vec{\mathbf{1}}_n}\mathbf{X}\vec{\mathbf{a}} \;=\; \vec{\mathbf{y}} - (\overline{y})\vec{\mathbf{1}}_n$$

é o vector centrado da combinação linear $\vec{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\vec{\mathbf{a}}$, de elemento genérico $y_i^c = y_i - \overline{y}$. Logo, $\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{a}}$ é a variância amostral de $\vec{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\vec{\mathbf{a}}$:

$$\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{a}} \;=\; \frac{1}{n-1}\,\|\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}\|^2 \;=\; \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\overline{y})^2 \;=\; var(\vec{\mathbf{y}})\ .$$

A covariância entre diferentes combinações lineares, $\mathbf{X}\vec{\mathbf{a}}$ e $\mathbf{X}\vec{\mathbf{b}}$, é:

$$Cov[\mathbf{X}\vec{\mathbf{a}}, \mathbf{X}\vec{\mathbf{b}}] = \vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{b}}\ .$$

ACP: Uma introdução estatística

Uma introdução frequente à ACP usa conceitos estatísticos.

Seja dada a matriz de dados $\mathbf{X}_{n\times p}$ (cada coluna corresponde a uma variável, e cada linha a um indivíduo observado).

Pretende-se determinar a combinação linear das p variáveis de variância máxima.

Isto é, pretende-se determinar o vector $\vec{\mathbf{v}} = (v_1, v_2, ..., v_p) \in \mathbb{R}^p$ tal que

$$\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}} = v_1\,\vec{\mathbf{x}}_1 + v_2\,\vec{\mathbf{x}}_2 + v_3\,\vec{\mathbf{x}}_3 + ... + v_p\,\vec{\mathbf{x}}_p$$

tenha variância máxima (sendo $\vec{\mathbf{x}}_j \in \mathbb{R}^n$ o vector das observações da variável j, ou seja, a j-ésima coluna de $\mathbf{X}$).

A variância de $\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}$ é dada por $\vec{\mathbf{v}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{v}}$, sendo $\mathbf{S}$ a matriz de (co)variâncias dos dados. Logo, quer-se o vector $\vec{\mathbf{v}}$ que maximize $\vec{\mathbf{v}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{v}}$.

Introdução estatística (cont.)

Sem outras restrições, o problema não tem solução, pois pode escolher-se $\vec{\mathbf{v}}$ de elementos arbitrariamente grandes.

Impõe-se a restrição de apenas considerar vectores de norma 1 (soma dos quadrados dos coeficientes 1), ou seja, vectores da forma $\frac{\vec{\mathbf{v}}}{\|\vec{\mathbf{v}}\|}$ (com $\vec{\mathbf{v}} \neq \vec{\mathbf{0}}$).

Assim, gera-se o problema de maximizar o chamado quociente de Rayleigh-Ritz (Rayleigh-Ritz ratio) de $\mathbf{S}$:

$$\max_{\vec{\mathbf{v}} \in \mathbb{R}^p \setminus \{\vec{\mathbf{0}}\}} \left[\frac{\vec{\mathbf{v}}}{\|\vec{\mathbf{v}}\|}\right]^t \mathbf{S} \frac{\vec{\mathbf{v}}}{\|\vec{\mathbf{v}}\|} = \max_{\vec{\mathbf{v}} \in \mathbb{R}^p \setminus \{\vec{\mathbf{0}}\}} \frac{\vec{\mathbf{v}}^t \mathbf{S} \vec{\mathbf{v}}}{\|\vec{\mathbf{v}}\|^2} = \max_{\vec{\mathbf{v}} \in \mathbb{R}^p \setminus \{\vec{\mathbf{0}}\}} \frac{\vec{\mathbf{v}}^t \mathbf{S} \vec{\mathbf{v}}}{\vec{\mathbf{v}}^t \vec{\mathbf{v}}}$$

A solução é dada pelo vector próprio $\vec{\mathbf{v}}_1$ (de norma 1), associado ao maior valor próprio de $\mathbf{S}$, λ_1.

Teorema de Rayleigh-Ritz

Seja $\mathbf{A}_{p\times p}$ matriz simétrica, com valores próprios por ordem decrescente: $\lambda_{\max} = \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_{p-1} \geq \lambda_p = \lambda_{\min}$.

- O maior valor próprio de $\mathbf{A}$ verifica: $\lambda_{\max} = \max\limits_{\vec{\mathbf{x}}\neq\vec{\mathbf{0}}} \frac{\vec{\mathbf{x}}^t\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}}}{\vec{\mathbf{x}}^t\vec{\mathbf{x}}}$,

  com $\vec{\mathbf{x}} = \vec{\mathbf{v}}_1$, o vector próprio correspondente a λ_{max}.
- O menor valor próprio de $\mathbf{A}$ verifica: $\lambda_{\min} = \min\limits_{\vec{\mathbf{x}}\neq\vec{\mathbf{0}}} \frac{\vec{\mathbf{x}}^t\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}}}{\vec{\mathbf{x}}^t\vec{\mathbf{x}}}$,

  com $\vec{\mathbf{x}} = \vec{\mathbf{v}}_p$, o vector próprio correspondente a λ_{min}.
- Os restantes valores (λ_i)/vectores($\vec{\mathbf{v}}_i$) próprios de $\mathbf{A}$ também são caracterizáveis a partir do quociente de Rayleigh-Ritz de $\mathbf{A}$:

$$\lambda_j = \max_{(\vec{\mathbf{x}}\perp\vec{\mathbf{v}}_1,\vec{\mathbf{v}}_2,\ldots\vec{\mathbf{v}}_{j-1})\wedge(\vec{\mathbf{x}}\neq\vec{\mathbf{0}})} \frac{\vec{\mathbf{x}}^t\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}}}{\vec{\mathbf{x}}^t\vec{\mathbf{x}}}$$

$$\lambda_j = \min_{(\vec{\mathbf{x}}\perp\vec{\mathbf{v}}_{j+1},\vec{\mathbf{v}}_{j+2},\ldots\vec{\mathbf{v}}_p)\wedge(\vec{\mathbf{x}}\neq\vec{\mathbf{0}})} \frac{\vec{\mathbf{x}}^t\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}}}{\vec{\mathbf{x}}^t\vec{\mathbf{x}}}$$

verificando-se as igualdades quando $\vec{\mathbf{x}} = \vec{\mathbf{v}}_j$.

A primeira Componente Principal

A primeira Componente Principal é a combinação linear $\vec{\mathbf{y}}_1 = \mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}_1$, onde $\vec{\mathbf{v}}_1$ é o vector próprio associado ao maior valor próprio de $\mathbf{S}$.

Nota: Se $\vec{\mathbf{v}}$ é vector próprio, $-\vec{\mathbf{v}}$ também é. As soluções do problema definem direcções, mas não definem sentidos.

Tal como o vector próprio $\vec{\mathbf{v}}_1$, também a primeira CP, $\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}_1$, está definida a menos duma multiplicação por -1.

$\vec{\mathbf{v}}_1$ define a direcção no espaço $\mathbb{R}^p$ de variância máxima da nuvem de n pontos definida pelos dados.

O valor próprio λ_1 é a variância desta primeira CP. Quanto maior fôr, mais alongada será a nuvem de pontos na direcção definida por esta primeira CP.

ACP: introdução estatística (cont.)

Fixada a 1a. CP, procura-se nova combinação linear $\vec{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}$, com $\vec{\mathbf{v}}^t\vec{\mathbf{v}} = 1$, de variância máxima, não-correlacionada com a anterior.

Uma correlação nula equivale a uma covariância nula, e a covariânica de duas combinações lineares das colunas duma matriz $\mathbf{X}$, no nosso caso $\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}_1$ e $\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}$, é dada por $\vec{\mathbf{v}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{v}}_1$, sendo $\mathbf{S}$ a matriz de covariâncias associada aos dados em $\mathbf{X}$.

Mas $\vec{\mathbf{v}}_1$ é um vector próprio de $\mathbf{S}$, associado ao valor próprio λ_1. Logo:

$$\text{cov}\left(\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}, \mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}_1\right) = \vec{\mathbf{v}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{v}}_1 = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \lambda_1\vec{\mathbf{v}}^t\vec{\mathbf{v}}_1 = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \vec{\mathbf{v}} \perp \vec{\mathbf{v}}_1 \ .$$

Logo, maximizar a variância de $\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}$ sujeito à não correlação de $\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}$ com $\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}_1$ equivale a maximizar $\frac{\vec{\mathbf{v}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{v}}}{\vec{\mathbf{v}}^t\vec{\mathbf{v}}}$, sujeito a $\vec{\mathbf{v}} \perp \vec{\mathbf{v}}_1$.

É de novo um problema associado aos quocientes de Rayleigh-Ritz.

ACP: introdução estatística (cont.)

Assim, maximizar a variância de $\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}$ sujeito à não correlação de $\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}$ com $\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}_1$ corresponde a tomar $\vec{\mathbf{v}} = \pm\vec{\mathbf{v}}_2$, o vector próprio de $\mathbf{S}$ associado ao seu segundo maior valor próprio, λ_2.

$\vec{\mathbf{y}}_2 = \pm\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}_2$ é a segunda componente principal, com variância λ_2.

Sucessivas CPs são soluções do problema de determinar combinações lineares, não-correlacionadas entre si, de variância máxima.

A j-ésima componente principal é dada por $\vec{\mathbf{y}}_j = \pm\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}_j$, onde $\vec{\mathbf{v}}_j$ é o vector próprio de $\mathbf{S}$ associado ao j-ésimo maior valor próprio λ_j.

A variância da j-ésima CP é o correspondente valor próprio: $var(\vec{\mathbf{y}}_j) = \lambda_j$.

A ACP no R

O comando usual para efectuar uma ACP no `R` é o comando `prcomp`.

O comando `prcomp` tem um único argumento obrigatório: o nome do objecto contendo os dados, que deve ser da classe `data.frame` ou `matrix` (com cada coluna associada a uma variável).

Como noutros comandos `R`, o resultado é um objecto de classe `list`, contendo informação vária sobre o resultado da análise.

Nota: Existe também um comando `princomp`, mas por vária razões (incluindo a precisão numérica no caso de matrizes de (co-)variâncias quase singulares), é preferível a utilização do comando `prcomp`.

O comando prcomp

ACP dos lavagantes

```
> lav.acp <- prcomp(lavagantes)
> lav.acp

Standard deviations (1, .., p=13):
[1] 4.4171243 2.1583124 0.9617894 0.7071970 0.6163559 0.4992560 0.4639879  <- desvios padrões
[8] 0.3848417 0.3362918 0.2500701 0.2060563 0.1770375 0.1405790                  de cada CP

Rotation (n x k) = (13 x 13):
                    PC1         PC2         PC3         PC4          PC5
carapace_l    0.28762060  0.36935786  0.08475822 -0.31404094 -0.454639049   <- cada coluna é um
tail_l        0.10615292  0.61487598 -0.01728674  0.46421995  0.550775374       vector próprio v_j
carapace_w    0.19089393  0.22112280  0.09978650 -0.10987953 -0.186701149       da matriz de
carapace_d    0.13951311  0.14784642  0.13138041  0.01598041  0.105009202       (co)variâncias
tail_w        0.04682070  0.49290700 -0.05172379  0.06592005 -0.405755003       dos dados. Estes
areola_l      0.13858508  0.15588574 -0.03136931 -0.78849399  0.514893584       vectores contêm os
areola_w      0.02862658  0.02088959 -0.05104427 -0.01123927 -0.005062728       coeficientes das
rostrum_l     0.04321132  0.10238463 -0.00534869  0.10538116 -0.015312405       combinações lineares
rostrum_w     0.06381638  0.06445436  0.05636521 -0.02008425 -0.071806372       que definem as CPs.
postorbital_w 0.08947075  0.12850014  0.07576734 -0.01777992  0.021872310
propodus_l    0.70705994 -0.28621233  0.04885310  0.16407517  0.077728529
propodus_w    0.31334632 -0.14849063  0.69820134  0.07580938  0.026674997
dactyl_l      0.46456390 -0.10926197 -0.67839228  0.05350023 -0.040805783
[...]           <- omitidos, por razão de espaço, os restantes vectores de coeficientes.
```

Os coeficientes de cada combinação linear (colunas do objecto `Rotation`) são designados *loadings* em inglês.

Propriedades de CPs

- A soma das variâncias (inércia) das p componentes principais é igual à soma das variâncias das p variáveis originais:

$$\sum_{i=1}^{p} s_i^2 = \text{tr}(\mathbf{S}) = \text{tr}(\mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^t) = \text{tr}(\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^t\mathbf{V}) = \text{tr}(\mathbf{\Lambda}) = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i \ .$$

- Logo, pode afirmar-se que a j-ésima CP explica uma proporção da variabilidade (inércia) total igual a $\pi_j = \frac{\lambda_j}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_i}$.

- Esta medida é extensível a subconjuntos de componentes principais. Às primeiras q CPs corresponde

$$\sum_{i=1}^{q} \pi_i \times 100\% = \frac{\sum_{i=1}^{q} \lambda_i}{\sum_{j=1}^{p} \lambda_j} \times 100\%$$

da variabilidade total (inércia) do conjunto de dados.

O comando `summary`

ACP dos lavagantes

> summary(lav.acp)

```
Importance of components:
            PC1   PC2    PC3    PC4    PC5     PC6     PC7     PC8     PC9    PC10    PC11    PC12    PC13
Std. Dev.  4.417 2.158 0.9618 0.7072 0.6164 0.49926 0.46399 0.38484 0.33629 0.25007 0.20606 0.17704 0.14058
Prop.Var.  0.727 0.173 0.0344 0.0186 0.0141 0.00928 0.00802 0.00551 0.00421 0.00233 0.00158 0.00117 0.00074
Cum.Prop.  0.727 0.900 0.9344 0.9530 0.9672 0.97645 0.98446 0.98998 0.99419 0.99652 0.99810 0.99926 1.00000
```

Na recta associada à primeira componente principal preservamos $72,7\%$ da variabilidade total dos dados.

No plano definido associado às duas primeiras componentes principais preservamos $90,0\%$ da variabilidade total dos dados.

No espaço a 3 dimensões definido pelas três primeiras CPs preservamos $93,4\%$ da variabilidade total.

Apenas não visualizamos na representação tri-dimensional cerca de $6,6\%$ da variabilidade total.

Vectores de *scores*

Por omissão, o comando `prcomp` não mostra os *scores* de cada individuo numa CP, ou seja, o valor de cada individuo na combinação linear $\vec{\mathbf{y}}_j = \mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}_j$.

Os *scores* são guardados num objecto de nome `x`, na lista produzida pelo comando `prcomp`:

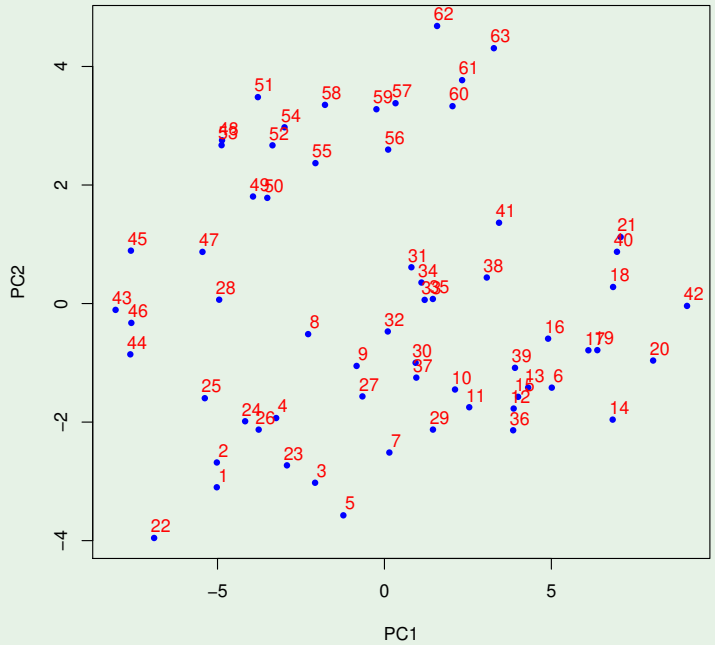
```
> names(lav.acp)

[1] "sdev"     "rotation" "center"   "scale"    "x"

> lav.acp$x

          PC1         PC2         PC3          PC4         PC5          PC6
1  -5.0216041 -3.09975004 -0.93638716  0.590170762  0.34242883 -0.311295721
2  -5.0199046 -2.68138921  1.93090666  0.652936303  0.71306147  2.411219117
3  -2.0772687 -3.02373521 -0.44934354  0.613510708  0.54941375 -0.365822245
[...]
62  1.5767872  4.68339718 -0.49231884  0.246787192 -0.11313707  0.138658304
63  3.2782407  4.30830749  0.15373020 -0.562657698 -0.73379507  0.200035217
[...]
```

São estas as coordenadas das representações gráficas a baixa dimensão que melhor preservam a variabilidade dos dados.

A melhor representação bidimensional

Primeiro plano principal lavagantes

```
> plot(lav.acp$x[,1:2],col="blue", pch=16, cex=0.8)
> text(lav.acp$x[,1:2]+0.2, label=rownames(lavagantes), col="red")
```

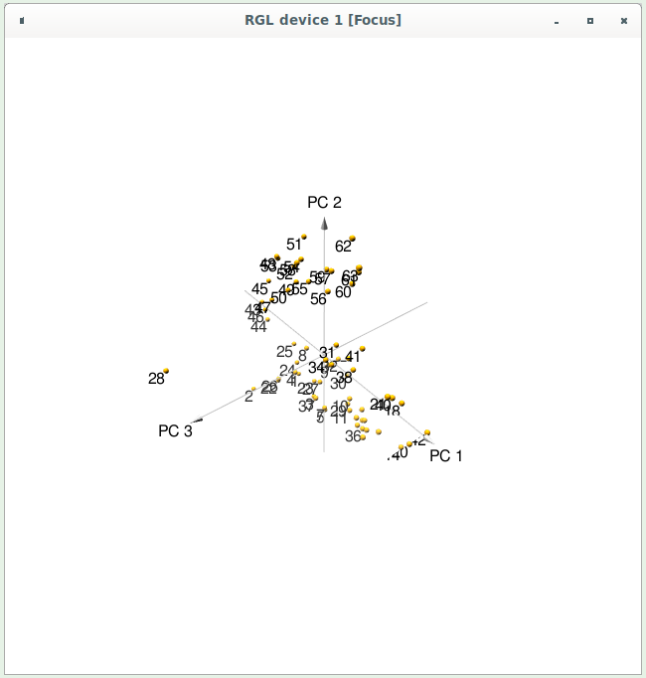


Os individuos 43 a 63 são fêmeas, o resto machos. A ACP não usou essa informação, mas apenas o seu reflexo na variabilidade das variáveis morfométricas.

A melhor representação tridimensional

O módulo (package) `pca3d` permite criar e rodar a nuvem tri-dimensional definida pelos *scores* nas 3 primeiras CPs:

```
> library(pca3d)
> pca3d(lav.acp, show.labels=TRUE)
```



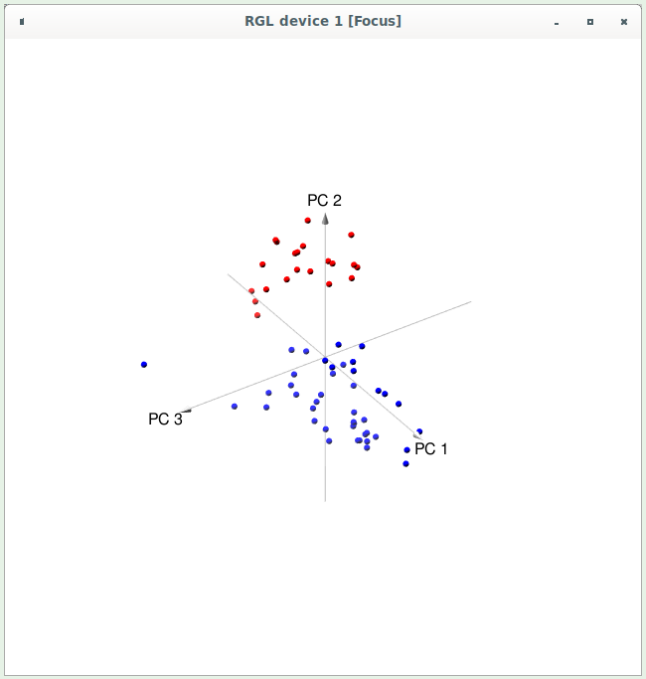
Verifica-se que a terceira CP separa a observação discrepante 28 das restantes.

Havendo *outliers*, podem ser identificados por algumas CPs.

A melhor representação tridimensional

O módulo `pca3d` permite usar cores diferentes nos individuos:

```
> pca3d(lav.acp, col=rep(c("blue","red"),c(42,21)))
```

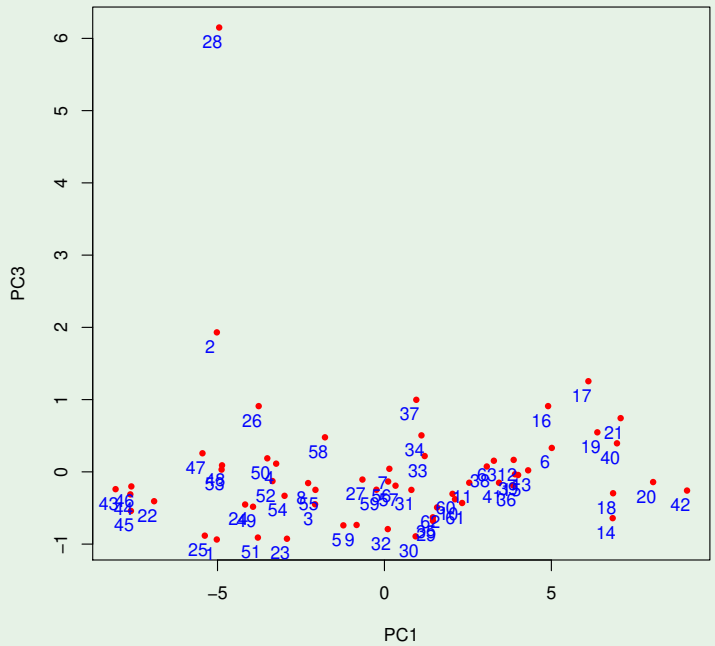


Verifica-se que as duas primeiras CPs separam machos (a azul) e fêmeas (a vermelho).

A observação 28 e a terceira CP

Observação atípica nos lavagantes

```
> plot(lav.acp$x[,c(1,3)],col="red", pch=16, cex=0.8)
> text(lav.acp$x[,c(1,3)]-0.2, label=rownames(lavagantes), col="blue")
```

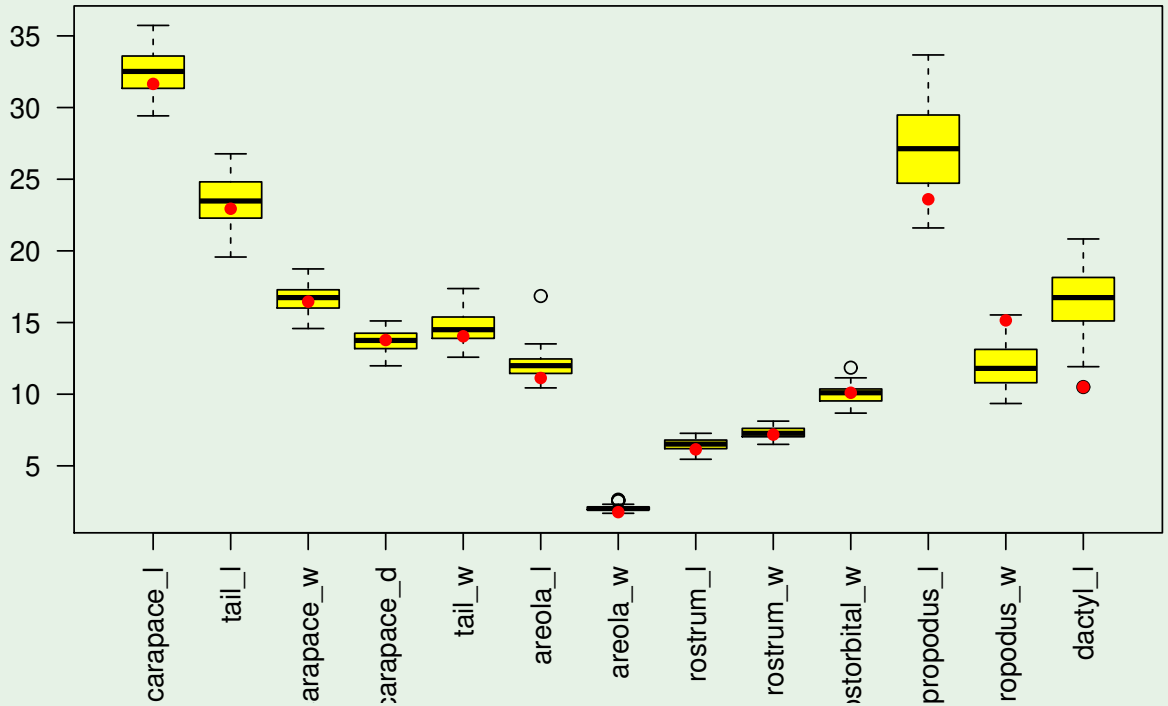


O individuo 28 contribui decisivamente para a terceira direcção ortogonal de maior variabilidade. Porquê? O que tem de diferente o individuo 28?

Revisitando o individuo 28

Observação atípica nos lavagantes

```
> boxplot(lavagantes, col="yellow",las=2)
> points(1:13,lavagantes[28,], pch=16, col="red")
```



O indíviduo 28 tem medições invulgares na tenaz.

Decomposição em valores/vectores próprios

A informação gerada pelo comando `prcomp` poderia ser obtida através da decomposição espectral da matriz de (co-)variâncias dos dados, utilizando o comando `eigen`:

```
> eigen(var(lavagantes))

$values                    <-- valores próprios
[1]  19.51098705  4.65831240  0.92503887  0.50012760  0.37989465  0.24925657
[7]   0.21528474  0.14810313  0.11309220  0.06253506  0.04245919  0.03134228
[13]  0.01976246

$vectors                   <-- vectores próprios
             [,1]        [,2]        [,3]        [,4]         [,5]         [,6]
[1,]  -0.28762060 -0.36935786 -0.08475822  0.31404094 -0.454639049  0.272071976
[2,]  -0.10615292 -0.61487598  0.01728674 -0.46421995  0.550775374  0.088028646
[3,]  -0.19089393 -0.22112280 -0.09978650  0.10987953 -0.186701149 -0.178125878
[4,]  -0.13951311 -0.14784642 -0.13138041 -0.01598041  0.105009202 -0.171612241
[5,]  -0.04682070 -0.49290700  0.05172379 -0.06592005 -0.405755003 -0.046182873
[6,]  -0.13858508 -0.15588574  0.03136931  0.78849399  0.514893584 -0.004876079
[7,]  -0.02862658 -0.02088959  0.05104427  0.01123927 -0.005062728  0.026873555
[8,]  -0.04321132 -0.10238463  0.00534869 -0.10538116 -0.015312405 -0.029408152
[9,]  -0.06381638 -0.06445436 -0.05636521  0.02008425 -0.071806372  0.007891374
[10,] -0.08947075 -0.12850014 -0.07576734  0.01777992  0.021872310 -0.276900583
[11,] -0.70705994  0.28621233 -0.04885310 -0.16407517  0.077728529  0.541197594
[12,] -0.31334632  0.14849063 -0.69820134 -0.07580938  0.026674997 -0.476061633
[13,] -0.46456390  0.10926197  0.67839228 -0.05350023 -0.040805783 -0.506989966
[...]
```

Decomposição em valores/vectores próprios (cont.)

```
> sqrt(eigen(var(lavagantes))$val)

[1] 4.4171243 2.1583124 0.9617894 0.7071970 0.6163559 0.4992560 0.4639879
[8] 0.3848417 0.3362918 0.2500701 0.2060563 0.1770375 0.1405790

> lav.acp$sdev

[1] 4.4171243 2.1583124 0.9617894 0.7071970 0.6163559 0.4992560 0.4639879
[8] 0.3848417 0.3362918 0.2500701 0.2060563 0.1770375 0.1405790

> eigen(var(lavagantes))$vec

            [,1]        [,2]        [,3]        [,4]         [,5]         [,6]
[1,] -0.28762060 -0.36935786 -0.08475822 -0.31404094 -0.454639049 -0.272071976
[2,] -0.10615292 -0.61487598  0.01728674  0.46421995  0.550775374 -0.088028646
[3,] -0.19089393 -0.22112280 -0.09978650 -0.10987953 -0.186701149  0.178125878
[...]

> lav.acp$rot

                   PC1         PC2         PC3         PC4          PC5
carapace_l    0.28762060  0.36935786  0.08475822 -0.31404094 -0.454639049
tail_l        0.10615292  0.61487598 -0.01728674  0.46421995  0.550775374
carapace_w    0.19089393  0.22112280  0.09978650 -0.10987953 -0.186701149
[...]
```

Nota: Repare-se como alguns vectores próprios diferem num factor de -1.

Mais propriedades de CPs

Correlações entre CPs e variáveis

A correlação entre a i-ésima variável $\vec{\mathbf{x}}_i$ e a j-ésima CP $\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}_j$ é:

$$\text{corr}(\vec{\mathbf{x}}_i, \mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}_j) = \sqrt{\lambda_j} \cdot \frac{v_{ij}}{s_i}$$

s_i – desvio padrão da variável $\vec{\mathbf{x}}_i$

v_{ij} – coeficiente (loading) de $\vec{\mathbf{x}}_i$ na CP j

$\sqrt{\lambda_j}$ – desvio padrão da j-ésima CP

Tem-se $\vec{\mathbf{x}}_i = \mathbf{X}\vec{\mathbf{e}}_i$, com $\vec{\mathbf{e}}_i$ o vector cujo único elemento não nulo é um 1 na posição i (i-ésimo vector da base canónica de $\mathbb{R}^p$).

A covariância entre as combinações lineares $\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}_j$ e $\vec{\mathbf{x}}_i = \mathbf{X}\vec{\mathbf{e}}_i$ é dada por $\vec{\mathbf{e}}_i^t \mathbf{S}\vec{\mathbf{v}}_j$, onde $\mathbf{S}$ é a matriz de (co-)variâncias dos dados. Logo,

$$cor(\vec{\mathbf{x}}_i, \mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}_j) = \frac{cov(\mathbf{X}\vec{\mathbf{e}}_i, \mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}_j)}{\sqrt{var(\vec{\mathbf{x}}_i) \cdot var(\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}_j)}} = \frac{\vec{\mathbf{e}}_i^t \mathbf{S}\vec{\mathbf{v}}_j}{s_i \cdot \sqrt{\lambda_j}} = \frac{\lambda_j \vec{\mathbf{e}}_i^t \vec{\mathbf{v}}_j}{s_i \cdot \sqrt{\lambda_j}} = \sqrt{\lambda_j}\frac{v_{ij}}{s_i}.$$

Interpretação de CPs

Correlações entre CPs e variáveis (lavagantes)

As correlações entre variáveis originais e CPs podem ser úteis para interpretar CPs. Pode-se usar a fórmula dada acima, ou o comando:

```
> round(cor(lavagantes, lav.acp$x),d=2)
```

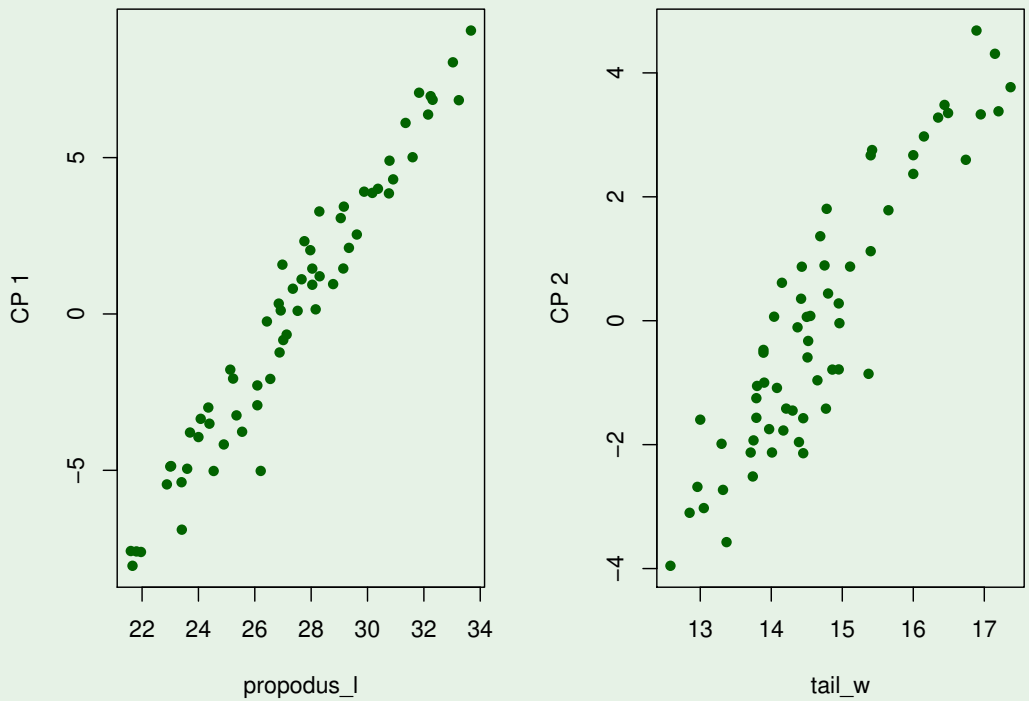
	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5	PC6	PC7	PC8	PC9	PC10	PC11	PC12
carapace_l	0.81	0.51	0.05	-0.14	-0.18	0.09	-0.15	0.06	-0.03	0.02	-0.02	0.01
tail_l	0.31	0.89	-0.01	0.22	0.23	0.03	-0.04	0.06	0.02	-0.01	-0.01	0.00
carapace_w	0.83	0.47	0.09	-0.08	-0.11	-0.09	0.02	-0.02	0.09	-0.14	0.12	0.05
carapace_d	0.78	0.41	0.16	0.01	0.08	-0.11	-0.06	-0.25	-0.33	-0.03	0.03	-0.01
tail_w	0.18	0.91	-0.04	0.04	-0.21	-0.02	0.28	-0.04	0.00	0.02	-0.04	-0.01
areola_l	0.64	0.35	-0.03	-0.58	0.33	0.00	0.11	0.01	0.01	0.03	0.00	0.00
areola_w	0.60	0.21	-0.23	-0.04	-0.01	0.06	0.10	0.09	-0.03	-0.14	0.08	-0.37
rostrum_l	0.50	0.58	-0.01	0.20	-0.02	-0.04	0.03	0.03	0.01	0.49	0.35	0.04
rostrum_w	0.76	0.38	0.15	-0.04	-0.12	0.01	-0.13	-0.03	0.12	-0.02	0.12	-0.40
postorbital_w	0.65	0.45	0.12	-0.02	0.02	-0.23	-0.23	-0.40	0.29	0.08	-0.09	0.01
propodus_l	0.98	-0.19	0.01	0.04	0.01	0.08	0.03	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
propodus_w	0.87	-0.20	0.42	0.03	0.01	-0.15	0.03	0.08	0.00	0.01	-0.02	0.00
dactyl_l	0.94	-0.11	-0.30	0.02	-0.01	-0.12	-0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.00

A primeira CP está muito fortemente correlacionada com as medições da tenaz, em particular `propodus_l`. A segunda CP está fortemente correlacionada com as medições da cauda, em particular `tail_w`.

Correlações entre CPs e variáveis (cont.)

Correlações CP/variáveis nos lavagantes

```
> par(mfrow=c(1,2))            <- cria uma "matriz 1x2  de gráficos"
> plot(lavagantes[,11], lav.acp$x[,1], xlab="propodus_l", ylab="CP 1", pch=16, col="darkgreen")
> plot(lavagantes[,5], lav.acp$x[,2], xlab="tail_w", ylab="CP 2", pch=16, col="darkgreen")
> par(mfrow=c(1,1))            <- re-estabelece a janela gráfica original
```

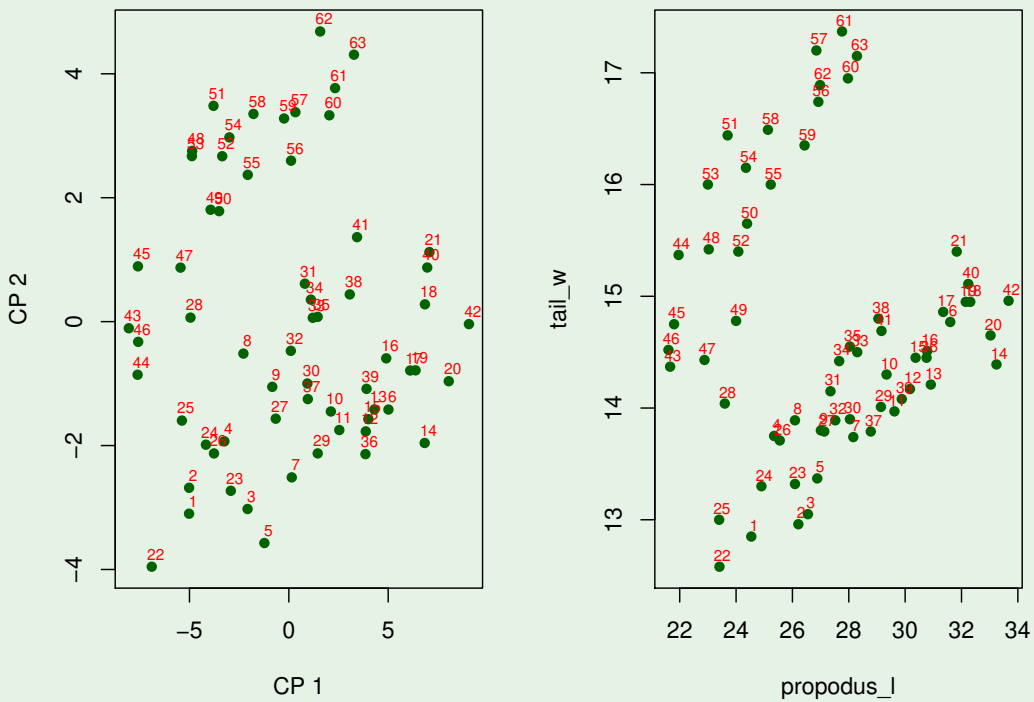


Correlações entre CPs e variáveis (cont.)

Ainda os lavagantes

As fortes correlações sugerem uma nuvem de pontos das duas variáveis originais:

```
> plot(lav.acp$x[,1:2], xlab="CP 1", ylab="CP 2", pch=16, col="darkgreen")
> text(lav.acp$x[,1:2]+0.2, label=rownames(lavagantes), col="red", cex=0.7)
> plot(lavagantes[,c(11,5)], xlab="propodus_l", ylab="tail_w", pch=16, col="darkgreen")
> text(lavagantes[,c(11,5)]+0.1, label=rownames(lavagantes), col="red", cex=0.7)
```



ACP sobre a matriz de correlações

Uma característica pouco simpática da ACP (que a distingue, por exemplo, da regressão linear), é que os resultados duma ACP mudam se houver mudanças de escala diferenciadas nas várias variáveis.

Esta sensibilidade da ACP é natural, dadas as características do critério que se pretende optimizar: a variância.

Para tornear este problema, e sendo a generalidade das mudanças de escala transformações lineares, é hábito normalizar os dados antes de efectuar uma ACP:

$$x_{ij} \quad \longrightarrow \quad z_{ij} = \frac{x_{ij} - \overline{x}_{.j}}{s_j} ,$$

onde

- x_{ij} é a observação do individuo i na variável j;
- $\overline{x}_{.j}$ é a média das n observações na variável j;
- s_j é o desvio padrão das n observações na variável j;
- z_{ij} é a observação normalizada do individuo i na variável j.

A centragem, na representação em $\mathbb{R}^p$

Qual o efeito de centrar a matriz $\mathbf{X}$ na nuvem de pontos associada à representação tradicional dos dados, em $\mathbb{R}^p$?

A transformação de $\mathbf{X}$ em $\mathbf{X}^c$ apenas altera a média de cada variável, que passa a ser zero. Geometricamente, o centro de gravidade da nuvem de n pontos em $\mathbb{R}^p$ passa a ser a origem, ou seja, há uma translação do centro de gravidade:

$$(\overline{x_1}, \overline{x_2}, ..., \overline{x_p}) \quad \longrightarrow \quad (0, 0, ..., 0) \ .$$

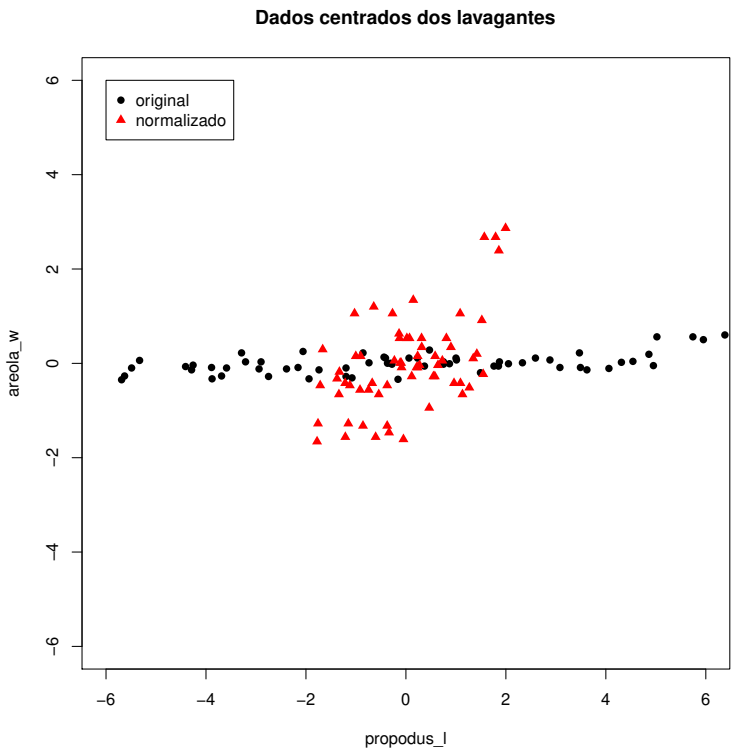
É habitual fazer a representação das CPs em $\mathbb{R}^p$ com esta centragem (ou seja, a nuvem dos *scores* ter centro de gravidade na origem).
Corresponde a considerar a combinação linear das variáveis centradas (com os vectores de *loadings* usuais).

A normalização, na representação em $\mathbb{R}^p$

E qual o efeito de normalizar, ou seja (além de centrar), dividir cada variável pelo seu desvio padrão?

Todas as variáveis passam a ter igual variabilidade (variância 1). Logo, a nuvem de pontos em $\mathbb{R}^p$ tende a ser mais esférica.

Ilustremos com os dados (centrados) dos lavagantes, e apenas as duas variáveis de maior, e menor, variância original:



$$s_7^2 = 0.04409$$
$$s_{11}^2 = 10.24217$$

Mudando a forma da nuvem, mudam também as direcções de variabilidade principal.

ACP sobre a matriz de correlações (cont.)

A matriz de (co)variâncias dos dados normalizados é a matriz de correlações **R** dos dados originais (ou normalizados). Assim, uma ACP sobre os dados normalizados é conhecida por ACP sobre a matriz de correlação.

Numa ACP sobre a matriz de correlação,

- as Componentes Principais são combinações lineares dos dados normalizados;
- Os vectores de coeficientes (*loadings*) das combinações lineares são os sucessivos vectores próprios da matriz de correlações **R**;
- As variâncias de sucessivas CPs são dadas pelos valores próprios de **R**, cuja soma tem de ser $\mathrm{tr}(\mathbf{R}) = p$.

Não há relação directa entre os resultados duma ou outra destas variantes de ACP.

Relação entre **S** e **R**

As matrizes de correlações são análogas, mas usando a matriz **Z** de dados centrados e reduzidos, de elemento genérico $z_{ij} = \frac{x_{ij} - \overline{x}_{.j}}{s_j}$:

$$\mathbf{R} = \frac{1}{n-1}\mathbf{Z}^t\mathbf{Z}\ .$$

Seja $\mathbf{X}^c{}_{n\times p}$ uma matriz de dados centrada. Seja **D** uma matriz diagonal cujos elementos são os recíprocos do desvios-padrão de cada variável ($d_{ii} = \frac{1}{s_i}$). Então (slide 21), a matriz de dados normalizados **Z** surge do produto:

$$\mathbf{Z} = \mathbf{X}^c\mathbf{D} = (\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_{\vec{\mathbf{1}}_n})\mathbf{X}\mathbf{D}.$$

Como qualquer matriz diagonal é simétrica ($\mathbf{D}^t = \mathbf{D}$), tem-se:

$$\mathbf{R} = \frac{1}{n-1}\mathbf{Z}^t\mathbf{Z} = \frac{1}{n-1}(\mathbf{X}^c\mathbf{D})^t\mathbf{X}^c\mathbf{D} = \frac{1}{n-1}\mathbf{D}\mathbf{X}^{c\,t}\mathbf{X}^c\mathbf{D} = \mathbf{D}\mathbf{S}\mathbf{D}\ .$$

ACP sobre a matriz de correlações no R

No R, há duas formas alternativas de efectuar uma ACP sobre **R**.

ACP sobre dados normalizados

```
> prcomp(scale(lavagantes))
> prcomp(lavagantes,scale=TRUE)

Standard deviations:
[1] 2.8298571 1.4518966 0.8481395 0.7315674 0.6117634 0.5371346 0.5119344 0.4730480 0.4106900
[10] 0.3761469 0.3016251 0.2178130 0.1793918

Rotation:
                    PC1          PC2          PC3         PC4          PC5         PC6          PC7
carapace_l    0.3336487 -0.051654918  0.002147496 -0.05337901  0.05903158 -0.25593010  0.13991163
tail_l        0.2328489 -0.455025510 -0.004432513  0.02919494 -0.06389168  0.06642917 -0.32471231
carapace_w    0.3399357 -0.026168964  0.042817387 -0.05649310  0.11876996 -0.18817081  0.02954496
carapace_d    0.3161771 -0.001543245  0.174339992 -0.06927295 -0.01269919  0.02103474 -0.65346959
tail_w        0.1963703 -0.522307992 -0.097172600  0.02943249  0.06817824 -0.29897195 -0.06638706
areola_l      0.2625765  0.014998718 -0.203444780 -0.78727388 -0.41920392  0.00605338  0.19498049
areola_w      0.2320279  0.063340777 -0.813027317  0.19646231  0.26234962  0.17992496 -0.10423247
rostrum_l     0.2559610 -0.260192772  0.122258123  0.50436942 -0.58565962  0.13677260  0.30765231
rostrum_w     0.3122279  0.011301755  0.084409773  0.06116672  0.43328915 -0.24980467  0.49425052
postorbital_w 0.2883485 -0.080276403  0.361940139 -0.14548391  0.36223013  0.71927271  0.11234877
propodus_l    0.2741268  0.405235606  0.006549232  0.13377738 -0.13020525 -0.02606551 -0.05259459
propodus_w    0.2474141  0.398376708  0.281998129  0.09065523  0.00717611 -0.33417966 -0.19598386
dactyl_l      0.2740158  0.339649079 -0.152524450  0.15373369 -0.22361974  0.24824297  0.03271971
[...]
```

As duas variantes de ACP

Os resultados duma e outra ACP não são directamente comparáveis.

As duas variantes da ACP - dados `lavagantes`

```
> lav.acpR <- prcomp(lavagantes,scale=TRUE)
> summary(lav.acpR)

Importance of components:
          PC1    PC2     PC3     PC4     PC5     PC6     PC7     PC8     PC9    PC10   PC11    PC12    PC13
Std.dev 2.830 1.4519 0.84814 0.73157 0.61176 0.53713 0.51193 0.47305 0.41069 0.37615 0.3016 0.21781 0.17939
Prp.Var 0.616 0.1621 0.05533 0.04117 0.02879 0.02219 0.02016 0.01721 0.01297 0.01088 0.0070 0.00365 0.00248
Cum.Prp 0.616 0.7782 0.83350 0.87466 0.90345 0.92565 0.94581 0.96302 0.97599 0.98688 0.9939 0.99752 1.00000

> summary(lav.acp)

Importance of components:
           PC1    PC2     PC3     PC4     PC5     PC6     PC7     PC8     PC9    PC10    PC11    PC12   PC13
Std.dev 4.4171 2.1583 0.96179 0.70720 0.61636 0.49926 0.46399 0.38484 0.33629 0.25007 0.20606 0.17704 0.1406
Prp.Var 0.7265 0.1734 0.03444 0.01862 0.01415 0.00928 0.00802 0.00551 0.00421 0.00233 0.00158 0.00117 0.0007
Cum.Prp 0.7265 0.9000 0.93440 0.95302 0.96716 0.97645 0.98446 0.98998 0.99419 0.99652 0.99810 0.99926 1.0000
```

Em geral, numa ACP sobre a matriz de correlações são precisas mais CPs para alcançar uma mesma proporção da inércia total explicada.

As duas variantes de ACP (cont.)

Mudam também os vectores de *loadings* (vectores próprios de **S** e **R** são diferentes), bem como os vectores de *scores* a que dão origem.

Vejamos as correlações entre os dois tipos de CPs:

As duas variantes da ACP - dados `lavagantes` (cont.)

```
> round(cor(lav.acp$x, lav.acpR$x), d=2)
```

	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5	PC6	PC7	PC8	PC9	PC10	PC11	PC12	PC13
PC1	0.89	0.44	0.00	0.06	-0.07	-0.01	-0.02	-0.09	-0.04	0.04	0.01	0.04	0.03
PC2	0.44	-0.88	-0.03	-0.10	0.05	-0.05	-0.04	-0.01	-0.04	0.03	-0.05	-0.02	-0.04
PC3	0.05	0.05	0.53	-0.09	0.24	-0.42	-0.16	0.56	0.27	0.18	-0.13	0.07	0.07
PC4	-0.04	-0.10	0.19	0.79	0.09	0.11	-0.36	-0.05	-0.25	0.26	0.17	0.06	0.08
PC5	0.00	0.02	-0.03	-0.38	-0.37	0.34	-0.28	0.45	-0.42	0.31	0.21	-0.01	0.08
PC6	-0.05	-0.03	-0.21	0.02	-0.05	-0.26	0.11	0.01	-0.31	-0.05	-0.33	0.48	0.66
PC7	-0.02	-0.06	-0.26	-0.01	-0.26	-0.33	-0.12	-0.10	0.45	0.18	0.64	0.16	0.21
PC8	-0.05	0.04	-0.28	0.14	-0.27	-0.53	0.17	0.04	-0.22	0.45	-0.24	-0.15	-0.44
PC9	0.01	-0.02	0.10	-0.04	0.25	0.29	0.61	-0.08	0.10	0.64	0.08	-0.01	0.21
PC10	0.02	-0.10	0.22	0.27	-0.54	0.21	0.37	0.25	0.20	-0.17	-0.05	0.46	-0.24
PC11	0.05	-0.04	-0.04	0.27	-0.24	-0.05	0.26	0.32	0.04	-0.23	0.03	-0.68	0.40
PC12	-0.07	-0.03	0.33	-0.11	-0.47	0.07	-0.27	-0.45	0.26	0.23	-0.42	-0.18	0.21
PC13	-0.03	-0.02	0.56	-0.16	-0.13	-0.32	0.25	-0.30	-0.46	-0.15	0.38	-0.03	0.00

As duas variantes de ACP (cont.)

Correlações das CPs (dados normalizados) com as variáveis originais:

ACP sobre matriz de correlações - dados `lavagantes`

```
> round(cor(lavagantes, lav.acpR$x), d=2)
```

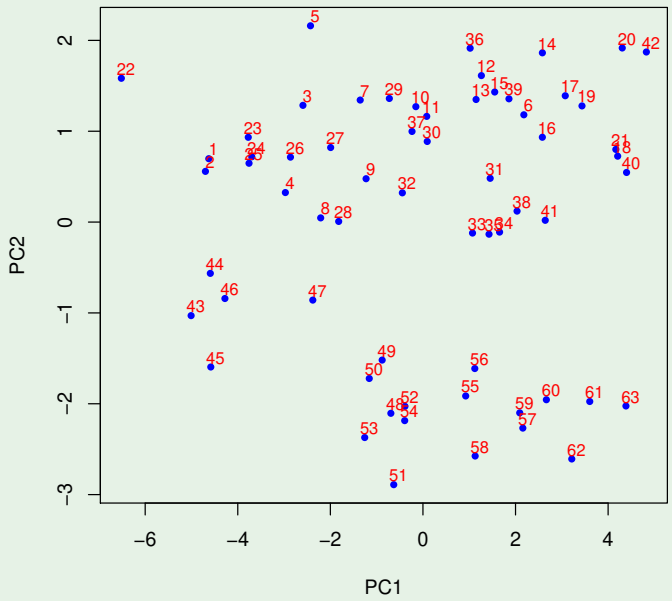
	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5	PC6	PC7	PC8	PC9	PC10	PC11	PC12	PC13
carapace_l	0.94	-0.07	0.00	-0.04	0.04	-0.14	0.07	-0.11	-0.03	-0.06	-0.24	0.05	-0.04
tail_l	0.66	-0.66	0.00	0.02	-0.04	0.04	-0.17	0.05	-0.24	0.19	-0.01	0.00	0.00
carapace_w	0.96	-0.04	0.04	-0.04	0.07	-0.10	0.02	-0.10	0.08	0.07	-0.03	-0.16	0.06
carapace_d	0.89	0.00	0.15	-0.05	-0.01	0.01	-0.33	0.07	-0.02	-0.24	0.02	-0.02	0.00
tail_w	0.56	-0.76	-0.08	0.02	0.04	-0.16	-0.03	-0.18	0.17	0.00	0.12	0.07	-0.01
areola_l	0.74	0.02	-0.17	-0.58	-0.26	0.00	0.10	0.09	0.02	0.01	0.04	0.01	0.00
areola_w	0.66	0.09	-0.69	0.14	0.16	0.10	-0.05	0.14	0.08	0.01	-0.02	0.00	0.00
rostrum_l	0.72	-0.38	0.10	0.37	-0.36	0.07	0.16	0.14	0.07	-0.05	-0.01	-0.01	0.01
rostrum_w	0.88	0.02	0.07	0.04	0.27	-0.13	0.25	0.12	-0.16	-0.09	0.10	0.00	-0.01
postorbital_w	0.82	-0.12	0.31	-0.11	0.22	0.39	0.06	-0.01	0.10	0.04	-0.01	0.03	0.00
propodus_l	0.78	0.59	0.01	0.10	-0.08	-0.01	-0.03	-0.08	-0.05	0.04	0.02	0.10	0.12
propodus_w	0.70	0.58	0.24	0.07	0.00	-0.18	-0.10	0.16	0.12	0.16	0.02	0.02	-0.07
dactyl_l	0.78	0.49	-0.13	0.11	-0.14	0.13	0.02	-0.26	-0.09	-0.01	0.07	-0.03	-0.08

- Em relação à ACP sobre dados originais, não só mudam as correlações entre CPs e variáveis, como também as interpretações possíveis.
- CP1 é agora essencialmente uma medida da dimensão geral do animal.
- CP2, mais difícil de interpretar, mas contrasta dimensões de caudas e tenazes.

Primeiro plano principal – dados normalizados

ACP sobre matriz de correlações - dados `lavagantes` (cont.)

```
> plot(lav.acpR$x[,1:2],col="blue", pch=16, cex=0.8)
> text(lav.acpR$x[,1:2]+0.1, label=rownames(lavagantes), col="red")
```

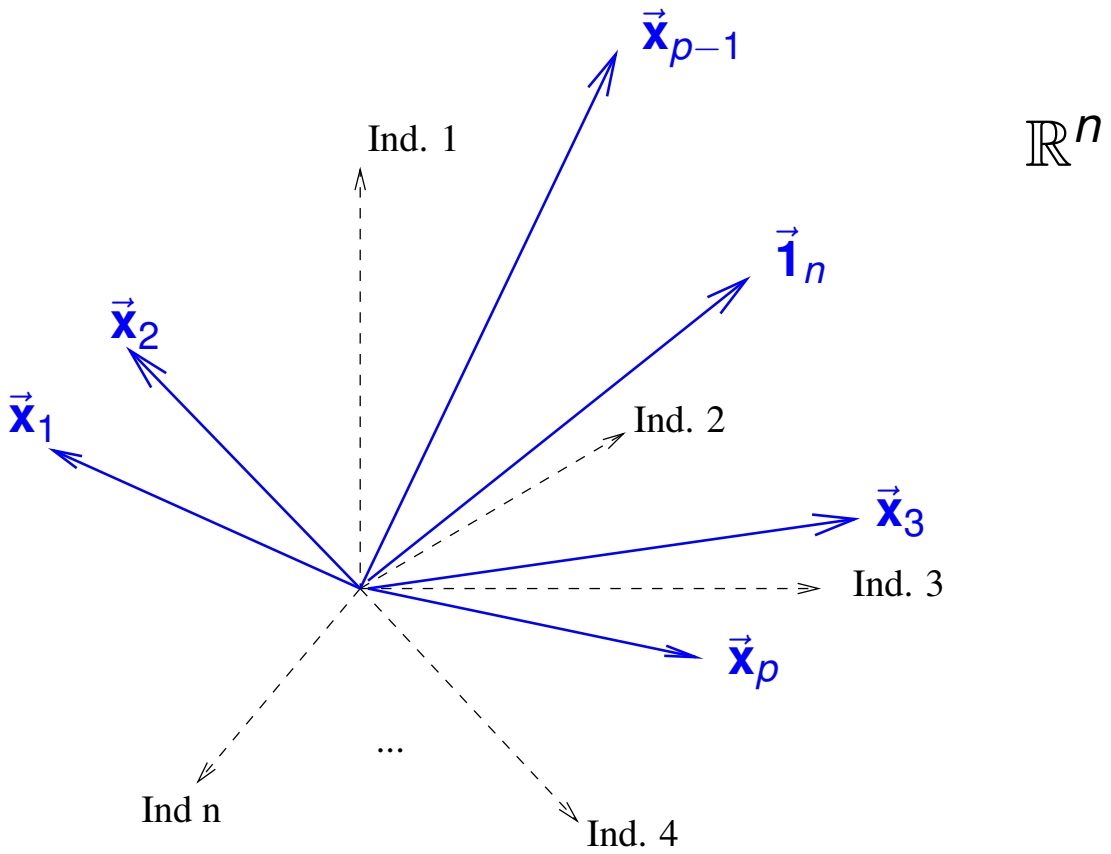


Simplificando: a CP 1 ordena por tamanho geral do organismo, e a CP 2 faz a separação de sexos.

A representação em $\mathbb{R}^n$, o espaço das variáveis

Recordar: Representação alternativa duma matriz de dados $\mathbf{X}$, no espaço das variáveis:

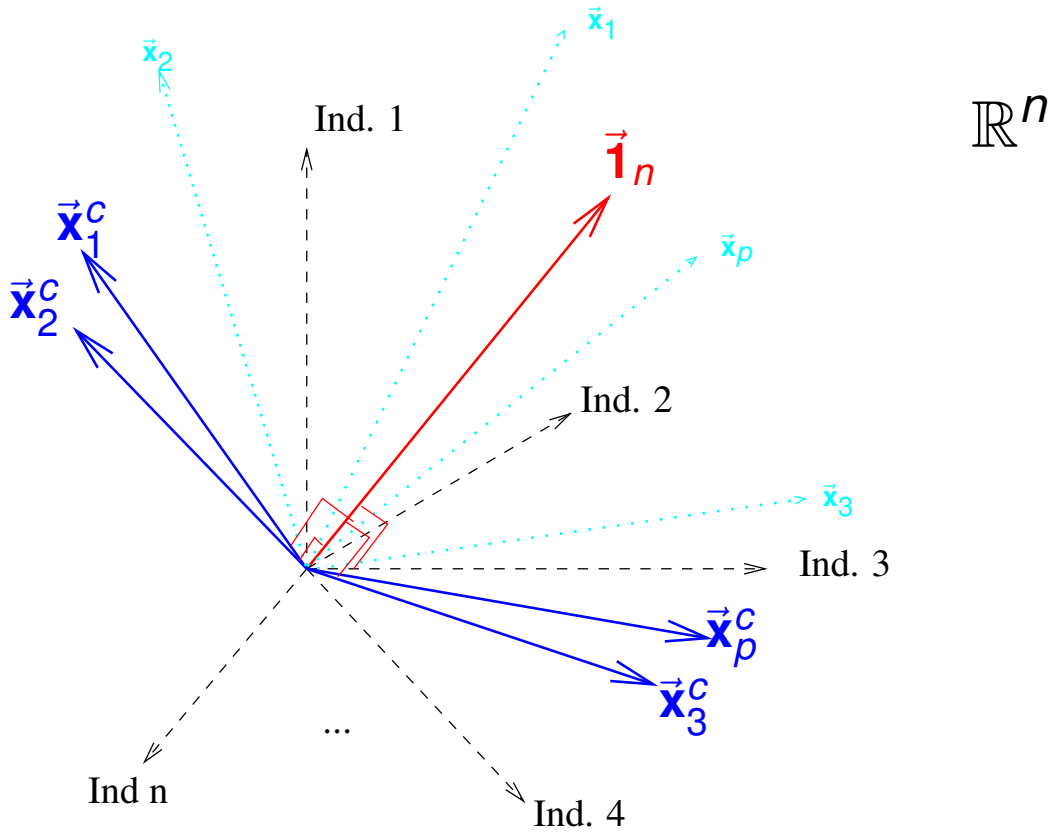
- cada eixo corresponde a um indivíduo observado;
- cada vector corresponde a uma variável.



Variáveis centradas no espaço das variáveis

A representação mais interessante no espaço das variáveis é a das variáveis centradas, porque os conceitos geométricos introduzidos pelo habitual produto interno em $\mathbb{R}^n$ têm interpretações estatísticas.

Centrar as colunas de $\mathbf{X}$ corresponde a tornar os vectores que representam as variáveis ortogonais ao vector $\vec{1}_n$ dos n uns:



Geometria e estatística no espaço das variáveis

O elemento genérico da matriz centrada dos dados, $\mathbf{X}^c$, é:

$$x_{ij}^c = x_{ij} - \overline{x}_{.j} ,$$

- x_{ij} indica a observação do i-ésimo indivíduo na variável j;
- $\overline{x}_{.j}$ indica a média das n observações na variável j.

Logo,

- a norma usual duma coluna $\vec{\mathbf{x}}_j^c$ de $\mathbf{X}^c$ é proporcional ao desvio padrão dessa variável: $\|\vec{\mathbf{x}}_j^c\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_{ij} - \overline{x}_{.j})^2} = \sqrt{n-1}\, s_j$.
- o produto interno usual de duas diferentes colunas de $\mathbf{X}^c$ é proporcional à covariância das respectivas variáveis: $< \vec{\mathbf{x}}_j^c, \vec{\mathbf{x}}_k^c > = (n-1)\,\mathrm{cov}_{i,j}$.
- o cosseno do ângulo entre os vectores representando duas diferentes colunas de $\mathbf{X}^c$ é o coeficiente de correlação das respectivas variáveis: $\cos\theta = \frac{<\vec{\mathbf{x}}_j^c, \vec{\mathbf{x}}_k^c>}{\|\vec{\mathbf{x}}_j^c\| \cdot \|\vec{\mathbf{x}}_k^c\|} = \frac{\cancel{(n-1)} \cdot \mathrm{cov}_{j,k}}{\cancel{\sqrt{n-1}}\, s_j \cdot \cancel{\sqrt{n-1}}\, s_k} = \frac{\mathrm{cov}_{j,k}}{s_j \cdot s_k} = r_{j,k}$
- Vectores centrados ortogonais correspondem a variáveis não correlacionadas.

Intepretação de CPs no espaço das variáveis

A representação dos dados no espaço das variáveis ($\mathbb{R}^n$) associa cada variável a um vector. Combinações lineares de variáveis são combinações lineares de vectores, logo novos vectores. As CPs também são representadas por vectores em $\mathbb{R}^n$.

Para vectores centrados, o quadrado do comprimento do vector é proporcional à variância da variável respectiva.

O critério da ACP (maximizar variância) corresponde a procurar combinações lineares dos vectores de comprimento máximo (com soma 1 de quadrados dos coeficientes).

É geometricamente intuitivo que variáveis com variância muito maior que as restantes tenham grande influência na definição da primeira CP ("dominam a primeira CP").

ACP é sensível a mudanças (diferenciadas) de escala

Qualquer transformação linear (afim) duma variável ($x \to a + b\,x$), como são a maioria das mudanças de unidades de medida, re-escala o vector centrado que a representa, mantendo a direcção:

- constantes aditivas a desaparecem na centragem, logo não alteram o vector centrado correspondente em $\mathbb{R}^n$.
- constantes multiplicativas b:
  - preservam a direcção do vector representativo $(\vec{\mathbf{x}}_j \to b\vec{\mathbf{x}}_j)$;
  - mudam o sentido se $b < 0$;
  - esticam o vector se $|b| > 1$, pois $\|b\vec{\mathbf{x}}_j\| = |b|\,\|\vec{\mathbf{x}}_j\|$;
  - encolhem o vector se $|b| < 1$.

Logo, o critério da ACP é sensível a mudanças de escalas diferenciadas nas p variáveis.

Interpretação de CPs em $\mathbb{R}^n$ (cont.)

E qual o efeito de normalizar as variáveis na representação em $\mathbb{R}^n$?

A normalização dos dados (ACP sobre a matriz de correlações) torna igual o tamanho de todos os vectores representativos das variáveis centradas.

Logo,

- deixa de ser possível que haja vectores mais compridos do que outros, a condicionar as primeiras CPs;
- o que vai ser fundamental para determinar a direcção de maior comprimento é o padrão de correlações entre as variáveis, ou seja, a sua posição angular relativa;
- grupos de variáveis fortemente correlacionadas entre si tendem a "atrair" a primeira CP sobre os dados normalizados.

Ainda a ACP sobre matriz de correlações

Em termos geométricos, a normalização das variáveis:

- Em $\mathbb{R}^n$, re-dimensiona cada um dos p vectores, que ficam com comprimento (norma) comum.
- Em $\mathbb{R}^p$, estica ou contrai cada eixo, com factores de alteração das escalas diferenciados para cada eixo. Muda a forma da nuvem de pontos.

Observações:

- A variabilidade total é $\mathrm{tr}(\mathbf{R}) = p$ (o número de variáveis).
- A correlação entre a variável $\vec{\mathbf{x}}_i$ e a j-ésima CP é agora $\sqrt{\lambda_j^R}\, v_{ij}^R$.
- Por vezes, os coeficientes das componentes numa ACP sobre a matriz de correlações são re-escalados de forma a que $\vec{\mathbf{v}}_j^t \vec{\mathbf{v}}_j = \lambda_j$. Nesse caso, os coeficientes da combinação linear são as correlações entre a variável e a CP.

Advertências sobre ACPs (em geral)

- A redução da dimensionalidade associada à ACP não significa redução no número de variáveis originais com que se trabalha: cada CP é combinação linear de todas as variáveis observadas.
- É frequente procurar interpretar cada CP ignorando as variáveis cujos coeficientes (*loadings*) na combinação linear que define a CP são "próximos de zero". Isto pode induzir em erro, e convém utilizar informação complementar para validar as interpretações baseadas nos coeficientes.
- Outra prática frequente, mas discutível, em ACP é a rotação das CPs: modificam-se os coeficientes da combinação linear para os aproximar de zero ou um, visando "simplificar a interpretação". Mas esse objectivo pode ser ilusório (como vimos) e sacrifica a optimalidade das soluções.
- Alguns autores também chamam componentes principais aos vectores próprios de **S** ou **R** (vectores de *loadings*), gerando confusão.
- Não faz sentido que qualquer das variáveis originais seja uma variável *qualitativa* (*categórica*).

Um critério alternativo

As CPs da matriz de correlações são também solução óptima de outro problema: determinar a combinação linear que maximiza a soma de quadrados das p correlações com cada variável original.

O vector de correlações entre cada variável $\vec{\mathbf{x}}_j = \mathbf{X}\vec{\mathbf{e}}_j$ e uma qualquer combinação linear $\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}$ é:

$$\vec{\mathbf{r}} \equiv \left[\frac{cov(\mathbf{X}\vec{\mathbf{e}}_j, \mathbf{X}\vec{\mathbf{v}})}{\sqrt{var(\mathbf{X}\vec{\mathbf{e}}_j)}\cdot\sqrt{var(\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}})}}\right] = \left[\frac{\vec{\mathbf{e}}_j^{\,t}\mathbf{S}\vec{\mathbf{v}}}{s_j\cdot\sqrt{\vec{\mathbf{v}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{v}}}}\right] \Leftrightarrow \vec{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{\vec{\mathbf{v}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{v}}}}\mathbf{D}\mathbf{S}\vec{\mathbf{v}}\ ,$$

onde $\mathbf{D} \equiv diag[\frac{1}{s_j}]$, a matriz diagonal dos recíprocos dos desvios padrão.

A soma de quadrados destas p correlações é ($\mathbf{D}$ e $\mathbf{S}$ são simétricas):

$$\|\vec{\mathbf{r}}\|^2 = \vec{\mathbf{r}}^t\vec{\mathbf{r}} = \frac{(\mathbf{D}\mathbf{S}\vec{\mathbf{v}})^t}{\sqrt{\vec{\mathbf{v}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{v}}}}\cdot\frac{\mathbf{D}\mathbf{S}\vec{\mathbf{v}}}{\sqrt{\vec{\mathbf{v}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{v}}}} = \frac{\vec{\mathbf{v}}^t\mathbf{S}\mathbf{D}\cdot\mathbf{D}\mathbf{S}\vec{\mathbf{v}}}{\vec{\mathbf{v}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{v}}}$$

Ora, $\mathbf{R} = \mathbf{D}\mathbf{S}\mathbf{D}$, pelo que tomando $\vec{\mathbf{b}} = \mathbf{D}^{-1}\vec{\mathbf{v}} \Leftrightarrow \vec{\mathbf{v}} = \mathbf{D}\vec{\mathbf{b}}$, tem-se:

$$\|\vec{\mathbf{r}}\|^2 = \frac{(\vec{\mathbf{b}}^t\mathbf{D})\mathbf{S}\mathbf{D}\cdot\mathbf{D}\mathbf{S}(\mathbf{D}\vec{\mathbf{b}})}{(\vec{\mathbf{b}}^t\mathbf{D})\mathbf{S}(\mathbf{D}\vec{\mathbf{b}})} = \frac{\vec{\mathbf{b}}^t\mathbf{R}^2\vec{\mathbf{b}}}{\vec{\mathbf{b}}^t\mathbf{R}\vec{\mathbf{b}}}\ .$$

Problema generalizado de valores próprios

Teorema (Problema generalizado de valores próprios)

Seja $\mathbf{A}_{p\times p}$ uma matriz simétrica, e $\mathbf{B}_{p\times p}$ uma matriz definida positiva.

- A maximização do quociente

$$\frac{\vec{\mathbf{x}}^t\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}}}{\vec{\mathbf{x}}^t\mathbf{B}\vec{\mathbf{x}}}$$

  está associada ao primeiro par próprio da matriz $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}$, $(\lambda_1, \vec{\mathbf{x}}_1)$.

- Sucessivos pares de valores/vectores próprios de $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}$ estão associados a sucessivos máximos do quociente $\frac{\vec{\mathbf{x}}^t\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}}}{\vec{\mathbf{x}}^t\mathbf{B}\vec{\mathbf{x}}}$, sujeitos à exigência de $\mathbf{B}$-ortogonalidade de sucessivos vectores, isto é, $\vec{\mathbf{x}}_i^t\mathbf{B}\vec{\mathbf{x}}_j = 0$, se $i \neq j$ e $\vec{\mathbf{x}}_i^t\mathbf{B}\vec{\mathbf{x}}_j = 1$ se $i = j$.

Nota: O produto de matrizes simétricas não é, em geral, simétrica, pelo que os valores/vectores próprios podem ser complexos. Mas no contexto deste Teorema os valores/vectores próprios são reais.

Generalized eigenvalue problem (cont.)

If matrix $\mathbf{B}$ is positive semi-definite, it has spectral decomposition $\mathbf{B} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^t$ with positive eigenvalues (diagonal elements of matrix $\mathbf{\Lambda}$).

We can define matrix $\mathbf{B}^{\frac{1}{2}} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\mathbf{V}^t$ and its inverse $\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{V}^t$ (slide 23).

Defining $\vec{\mathbf{y}} = \mathbf{B}^{\frac{1}{2}}\vec{\mathbf{x}}$ (equivalent to $\vec{\mathbf{x}} = \mathbf{B}^{-\frac{1}{2}}\vec{\mathbf{y}}$), we have:

$$\frac{\vec{\mathbf{x}}^t\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}}}{\vec{\mathbf{x}}^t\mathbf{B}\vec{\mathbf{x}}} = \frac{\vec{\mathbf{y}}^t\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}}\vec{\mathbf{y}}}{\vec{\mathbf{y}}^t\vec{\mathbf{y}}}.$$

Since $\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}}$ is symmetric, the Rayleigh-Ritz ratio (slide 31) guarantees the successive extremal values of the ratio are given by the (real) eigenvalues of $\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}}$ and their associated orthonormal eigenvectors $\vec{\mathbf{y}}$.

Generalized eigenvalue problem (cont.)

Let $\{\vec{\mathbf{y}}_j\}_j$ be the orthonormal eigenvectors of $\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}}$, and $\{\lambda_j\}_j$ their corresponding eigenvalues. By definition,

$$\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}}\vec{\mathbf{y}}_j = \lambda_j\vec{\mathbf{y}}_j \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}}\vec{\mathbf{y}}_j = \lambda_j\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}}\vec{\mathbf{y}}_j \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}\vec{\mathbf{x}}_j = \lambda_j\vec{\mathbf{x}}_j \ ,$$

with $\vec{\mathbf{x}}_j = \mathbf{B}^{-\frac{1}{2}}\vec{\mathbf{y}}_j$.

$(\lambda_j, \vec{\mathbf{x}}_j)$ are the eigenpairs of $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}$ and, since the $\vec{\mathbf{y}}_j$ form an orthonormal set,

$$\vec{\mathbf{y}}_i^t\vec{\mathbf{y}}_j = \left(\mathbf{B}^{\frac{1}{2}}\vec{\mathbf{x}}_i\right)^t\mathbf{B}^{\frac{1}{2}}\vec{\mathbf{x}}_j = \vec{\mathbf{x}}_i^t\mathbf{B}^{\frac{1}{2}}\cdot\mathbf{B}^{\frac{1}{2}}\vec{\mathbf{x}}_j = \vec{\mathbf{x}}_i^t\mathbf{B}\vec{\mathbf{x}}_j \ ,$$

which will be 0 if $i \neq j$ and 1 if $i = j$. The eigenvectors $\vec{\mathbf{x}}_j$ of $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}$ are B-orthonormal.

De novo o critério alternativo

Vimos que a combinação linear $\mathbf{X}\vec{\mathbf{v}}$ "globalmente mais correlacionada com as p variáveis originais" maximiza o quociente $\|\vec{\mathbf{r}}\|^2 = \frac{\vec{\mathbf{b}}^t\mathbf{R}^2\vec{\mathbf{b}}}{\vec{\mathbf{b}}^t\mathbf{R}\vec{\mathbf{b}}}$ com $\vec{\mathbf{v}} = \mathbf{D}\vec{\mathbf{b}}$ (sendo $\mathbf{R} = \mathbf{DSD}$ a matriz de correlações das p variáveis).

A solução é gerada pelo primeiro par próprio de $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{R}^2 = \mathbf{R}$, o par $(\lambda_1, \vec{\mathbf{b}}_1)$: $\vec{\mathbf{y}}_1 = \mathbf{X}\vec{\mathbf{v}} = \mathbf{XD}\vec{\mathbf{b}}_1$. Mas esta é a primeira CP sobre a matriz de correlações de $\mathbf{X}$, a matriz $\mathbf{R}$.

A soma de quadrados das correlações entre esta nova variável e as p variáveis originais é o valor próprio λ_1 associado ao vector próprio $\vec{\mathbf{b}}_1$.

As restantes CPs da matriz de correlações são as combinações lineares que sucessivamente maximizam o quociente, sujeitas às restrições de ortogonalidade (usual) com todas as soluções anteriores.

O critério alternativo (cont.)

O critério é invariante a mudanças lineares de escala nas variáveis, porque as correlações não dependem das unidades de medida das variáveis originais.

Interpretação geométrica do novo critério, em $\mathbb{R}^n$: procuram-se as combinações lineares das vectores (variáveis) que maximizam a soma dos quadrados dos cossenos dos ângulos com os vectores das variáveis originais. Como transformações lineares das variáveis não alteram esses ângulos, o critério fica invariante.

Resumo: As combinações lineares centradas das variáveis reduzidas $\mathbf{X}^c\mathbf{D}\vec{\mathbf{b}}$ (onde $\vec{\mathbf{b}}$ é vector próprio de $\mathbf{R}$):

- só são componentes principais das variáveis reduzidas;
- mas são as combinações lineares sucessivamente "globalmente mais correlacionadas com as variáveis originais", independentemente das unidades de medida originais.

Outra introdução à ACP

A Análise em Componentes Principais pode ainda ser introduzida através do que é provavelmente o resultado fundamental da Teoria de Matrizes: a Decomposição em Valores (e Vectores) Singulares.

Tal como a Decomposição Espectral, a DVS envolve a factorização duma matriz no produto de 3 matrizes, das quais a central é uma matriz diagonal e as outras duas têm colunas ortonormadas. Mas:

- Enquanto a Decomposição Espectral apenas é válida para matrizes simétricas, a DVS é válida para qualquer matriz, incluindo matrizes rectangulares.
- As três matrizes envolvidas na DVS são diferentes e têm, em geral, dimensões diferentes.
- A DVS e a Decomposição Espectral coincidem no caso de matrizes (simétricas) semi-definidas positivas.

Decomposição em Valores Singulares

Decomposição em Valores Singulares (DVS)

Seja $\mathbf{Y}_{n\times p}$ $(n \geq p)$ uma matriz genérica. É sempre possível factorizar $\mathbf{Y}$ da seguinte forma:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{W}\boldsymbol{\Delta}\mathbf{V}^t \iff \mathbf{Y} = \sum_{i=1}^{p} \delta_i \vec{\mathbf{w}}_i \vec{\mathbf{v}}_i^t \ ,$$

onde

- $\boldsymbol{\Delta}_{p\text{x}p}$ matriz diagonal
- $\mathbf{V}_{p\text{x}p}$ matriz com colunas ortonormadas $(\mathbf{V}^t\mathbf{V} = \mathbf{I}_p)$
- $\mathbf{W}_{n\text{x}p}$ matriz com colunas ortonormadas $(\mathbf{W}^t\mathbf{W} = \mathbf{I}_p)$
- δ_i elementos diagonais de $\boldsymbol{\Delta}$ (valores singulares de $\mathbf{Y}$)
- $\vec{\mathbf{w}}_i$ colunas de $\mathbf{W}$ (vectores singulares esquerdos de $\mathbf{Y}$)
- $\vec{\mathbf{v}}_i$ colunas de $\mathbf{V}$ (vectores singulares direitos de $\mathbf{Y}$)

Admite-se que os valores singulares δ_i estão por ordem decrescente.

Observações sobre a DVS $\mathbf{Y} = \mathbf{W}\mathbf{\Delta}\mathbf{V}^t$

- $\mathbf{Y}^t$ tem Decomposição em Valores Singulares $\mathbf{Y}^t = \mathbf{V}\mathbf{\Delta}\mathbf{W}^t$.
- $\mathbf{Y}^t\mathbf{Y} = \mathbf{V}\mathbf{\Delta}^2\mathbf{V}^t$ é uma Decomposição Espectral de $\mathbf{Y}^t\mathbf{Y}$. Logo, $\mathbf{V}$ é matriz cujas colunas são conjunto o.n. de vectores próprios de $\mathbf{Y}^t\mathbf{Y}$.
- $\mathbf{W}$ é a matriz análoga, de vectores próprios de $\mathbf{Y}\mathbf{Y}^t = \mathbf{W}\mathbf{\Delta}^2\mathbf{W}^t$.
- $\mathbf{\Delta}$ é a matriz das raízes quadradas dos valores próprios de $\mathbf{Y}^t\mathbf{Y}$ (iguais aos valores próprios não-nulos de $\mathbf{Y}\mathbf{Y}^t$).
- A DVS duma matriz é sempre possível, mas não é única (pelo menos a troca de sinal nos pares de vectores).
- Se $\mathbf{Y}$ é de característica (número máximo de colunas linearmente independentes) $r < p$, tem-se $\delta_i = 0$ para $i > r$.
- Se $\mathbf{Y}$ é de característica $r < p$, as $p-r$ parcelas finais no somatório $\mathbf{Y} = \sum_{i=1}^{p} \delta_i \vec{\mathbf{w}}_i \vec{\mathbf{v}}_i^t$ são matrizes nulas. Corresponde a ignorar as $p-r$ colunas finais de $\mathbf{V}$ e $\mathbf{W}$, e as $p-r$ linhas e colunas finais de $\mathbf{\Delta}$.

  A DVS assim definida é designada Thin SVD em inglês.

A DVS e a ACP

A ACP é uma Decomposição em Valores Singulares da matriz centrada dos dados $\mathbf{X}^c$, a dividir por $\sqrt{n-1}$, (ou $\sqrt{n}$, consoante a convenção usada para criar a matriz de covariâncias):

$$\frac{1}{\sqrt{n-1}}\mathbf{X}^c = \mathbf{U}\mathbf{\Delta}\mathbf{V}^t ,$$

porque:

- $\mathbf{V}$ - matriz cujas colunas são os vectores próprios de $\mathbf{S} = \frac{1}{n-1}\mathbf{X}^{c\,t}\mathbf{X}^c$, ou seja, os *loadings* das CPs.
- $\mathbf{\Delta}$ - matriz cujos elementos diagonais são as raízes quadradas dos valores próprios de $\mathbf{S}$, ou seja, os desvios padrão das CPs;
- $\mathbf{X}^c\mathbf{V} = \sqrt{n-1}\mathbf{U}\mathbf{\Delta}$ - matriz cujas colunas são os *scores* centrados de cada individuo em cada CP.
- $\mathbf{U} = \frac{1}{\sqrt{n-1}}\mathbf{X}^c\mathbf{V}\Delta^{-1}$ - matriz dos vectores singulares esquerdos, que corresponde aos vectores de *scores* normalizados.

DVS e ACP (cont.)

Confirmamos, efectuando a DVS da matriz $\frac{1}{\sqrt{n-1}}\mathbf{X}^c$ no R, para os dados `lavagantes`.

A centragem duma matriz de dados pode fazer-se da seguinte forma:

```
> lav.centrado <- scale(lavagantes, scale=FALSE)
```

O comando `scale` pode fazer simultaneamente a centragem (subtracção da média) e divisão pelo desvio padrão das colunas duma matriz.

Cada uma destas operações é controlada por um argumento, respectivamente `center` e `scale`.

Por omissão, estes argumentos são `TRUE`. Qualquer das operações pode ser omitida dando ao correspondente argumento o valor `FALSE`.

No R uma Decomposição em Valores Singulares obtém-se com o comando `svd`.

ACP e DVS (cont.)

DVS com os lavagantes

```
> svd(lav.centrado/sqrt(62))

$d
[1] 4.4171243 2.1583124 0.9617894 0.7071970 0.6163559 0.4992560 0.4639879
[8] 0.3848417 0.3362918 0.2500701 0.2060563 0.1770375 0.1405790

$u
              [,1]          [,2]          [,3]          [,4]          [,5]
[1,] -0.144379990 -0.182396510 -0.123645871  0.1059842750  0.070557452
[2,] -0.144331125 -0.157779185  0.254967864  0.1172558607  0.146926297
[3,] -0.059725146 -0.177923620 -0.059333869  0.1101757182  0.113206688
[4,] -0.093246935 -0.113657051  0.014976742  0.0804924915 -0.069971697
[5,] -0.035380664 -0.210254166 -0.097758921 -0.1206499751 -0.146049537
[...]

$v
            [,1]        [,2]        [,3]        [,4]         [,5]         [,6]
[1,] 0.28762060  0.36935786  0.08475822 -0.31404094 -0.454639049  0.272071976
[2,] 0.10615292  0.61487598 -0.01728674  0.46421995  0.550775374  0.088028646
[3,] 0.19089393  0.22112280  0.09978650 -0.10987953 -0.186701149 -0.178125878
[4,] 0.13951311  0.14784642  0.13138041  0.01598041  0.105009202 -0.171612241
[5,] 0.04682070  0.49290700 -0.05172379  0.06592005 -0.405755003 -0.046182873
[...]
```

Atenção: As componentes `$u` e `$v` são, respectivamente, as matrizes **U** e **V**.

A componente `$d` é um vector, com os elementos diagonais da matriz **Δ**.

ACP e DVS (cont.)

SVD nos lavagantes (cont.)

```
> DVS <- svd(lav.centrado/sqrt(62))
> U <- DVS$u
> D <- diag(DVS$d)    <- creates a diagonal matrix from vector DVS$d
> U %*% D * sqrt(62)
```

```
           [,1]        [,2]        [,3]         [,4]        [,5]         [,6]
[1,]  -5.0216041 -3.09975004 -0.93638716  0.590170762  0.34242883 -0.311295721
[2,]  -5.0199046 -2.68138921  1.93090666  0.652936303  0.71306147  2.411219117
[3,]  -2.0772687 -3.02373521 -0.44934354  0.613510708  0.54941375 -0.365822245
[...]
[62,]  1.5767872  4.68339718 -0.49231884  0.246787192 -0.11313707  0.138658304
[63,]  3.2782407  4.30830749  0.15373020 -0.562657698 -0.73379507  0.200035217
[...]
```

O comando `prcomp` usa a DVS:

```
> prcomp(lavagantes)$x
```

```
         PC1         PC2         PC3          PC4         PC5          PC6
1  -5.0216041 -3.09975004 -0.93638716  0.590170762  0.34242883 -0.311295721
2  -5.0199046 -2.68138921  1.93090666  0.652936303  0.71306147  2.411219117
3  -2.0772687 -3.02373521 -0.44934354  0.613510708  0.54941375 -0.365822245
[...]
62  1.5767872  4.68339718 -0.49231884  0.246787192 -0.11313707  0.138658304
63  3.2782407  4.30830749  0.15373020 -0.562657698 -0.73379507  0.200035217
[...]
```

Relação ACP e DVS

Uma matriz de dados $\mathbf{X}_{n\times p}$ é representada por uma nuvem de n pontos em $\mathbb{R}^p$ ou, equivalentemente, um feixe de p vectores em $\mathbb{R}^n$.

Se $\mathbf{Y}_{n\times p}$ fôr matriz de igual dimensão, mas característica (rank) $r < p$, a nuvem de n pontos correspondente estará num subespaço de dimensão r de $\mathbb{R}^p$. Analogamente, o seu feixe de p vectores gera um subespaço de dimensão r em $\mathbb{R}^n$.

Problema: identificar a matriz $\mathbf{Y}_{n\times p}$, de característica r, tal que os respectivos n pontos em $\mathbb{R}^p$ minimizem a soma de quadrados das distâncias em relação aos n pontos associados à matriz de dados original $\mathbf{X}_{n\times p}$:

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}\left(x_{ij}-y_{ij}\right)^2 \ .$$

O critério acima minimiza igualmente a soma de quadrados dos elementos das p colunas de $\mathbf{X}$ e $\mathbf{Y}$, pelo que simultaneamente o feixe de p vectores de $\mathbf{Y}$ estará "globalmente mais próximo" dos p vectores de $\mathbf{X}$.

Teorema de Eckart-Young

Teorema (Eckart-Young)

Seja $\mathbf{X}_{nxp}$ uma matriz de característica p. A matriz $\mathbf{Y}_{nxp}$ de característica $r < p$ que minimiza a distância matricial usual $\|\mathbf{X}-\mathbf{Y}\| = \sqrt{\sum_i \sum_j (x_{ij}-y_{ij})^2}$, obtem-se da seguinte forma:

- Seja $\mathbf{X} = \mathbf{W}\mathbf{\Delta}\mathbf{V}^t$ uma decomposição em valores singulares de $\mathbf{X}$.
- Sejam $\mathbf{W}_r$, $\mathbf{V}_r$, as matrizes constituídas pelas r colunas de $\mathbf{W}$ e $\mathbf{V}$, respectivamente, associadas aos maiores valores singulares.
- Seja $\mathbf{\Delta}_r$ a matriz diagonal de tipo $r \times r$ resultante de reter apenas as linhas e colunas de $\mathbf{\Delta}$ associadas aos r maiores valores singulares.
- Então $\mathbf{Y} = \mathbf{W}_r\mathbf{\Delta}_r\mathbf{V}_r^t$ (e esta é uma DVS de $\mathbf{Y}$).

Nota 1: Como $\mathbf{X} = \sum_{i=1}^{p} \delta_i \vec{\mathbf{w}}_i \vec{\mathbf{v}}_i^t$ é a DVS de $\mathbf{X}$, $\mathbf{Y}$ é a matriz que se obtém retendo apenas as r primeiras parcelas da DVS de $\mathbf{X}$: $\mathbf{Y} = \sum_{i=1}^{r} \delta_i \vec{\mathbf{w}}_i \vec{\mathbf{v}}_i^t$.

Nota 2: O critério usado minimiza, simultaneamente, a distância entre colunas correspondentes, e entre linhas correspondentes, das matrizes $\mathbf{X}$ e $\mathbf{Y}$.

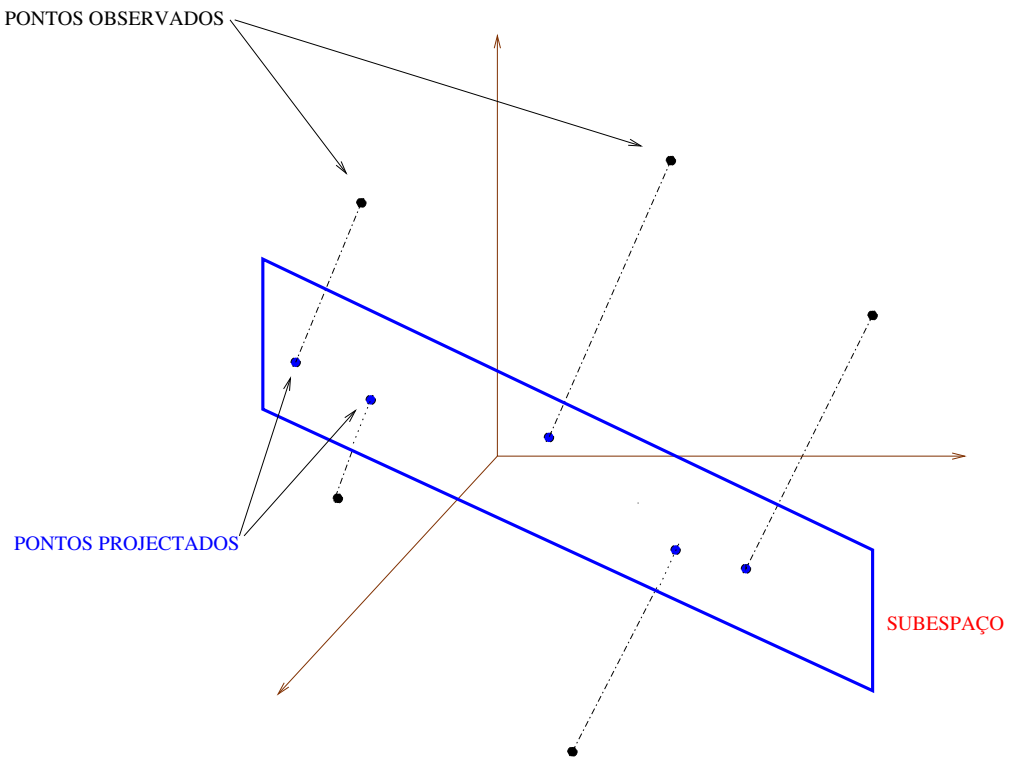
Teorema de Eckart-Young (cont.)

Aplicando o Teorema de Eckart-Young às matrizes de dados centradas $\mathbf{X}^c$:

- para qualquer r ($1 \leq r \leq car(\mathbf{X}^c)$), a matriz $\mathbf{X}^c_{(r)}$ que resulta de reter apenas as parcelas na DVS de $\mathbf{X}^c$ com os r maiores valores singulares, é a matriz $n \times p$ de característica r, globalmente mais próxima de $\mathbf{X}$.
- Estes subespaços são gerados pelos r vectores singulares esquerdos (em $\mathbb{R}^n$) e direitos (em $\mathbb{R}^p$), associados aos r maiores valores singulares. Ou seja, são gerados pelas r primeiras CPs (em $\mathbb{R}^n$) e respectivos vectores de *loadings* (em $\mathbb{R}^p$).
- Assim, a ACP (a DVS de $\mathbf{X}^c$) identifica, simultaneamente em $\mathbb{R}^p$ e em $\mathbb{R}^n$, os subespaços de dimensão r onde a representação dos dados originais é o mais fidedigna possível, no sentido de ser globalmente mais próxima dos valores originais.

As projecções em $\mathbb{R}^p$ e em $\mathbb{R}^n$

Para ambas as representações dos dados em $\mathbf{X}^c$, a ACP é a solução do problema de determinar o subespaço de dimensão r tal que a projecção ortogonal dos dados esse subespaço minimiza a soma de quadrados das distâncias (na perpendicular) entre pontos originais e pontos projectados.



Biplots

- Intimamente relacionada com a Decomposição em Valores Singulares duma matriz centrada de dados (logo, com uma ACP).
- Ideia fundamental do *biplot*: obter uma boa representação simultânea (aproximada) dos indivíduos e das variáveis (daí o prefixo *bi-*), em baixa dimensão.
- Nessa representação simultânea as principais características estatísticas duma ACP serão visíveis em termos geométricos.

Biplots (cont.)

- Seja $\mathbf{X}^c$ matriz centrada de dados, com SVD: $\frac{1}{\sqrt{n-1}}\mathbf{X}^c = \mathbf{U}\mathbf{\Delta}\mathbf{V}^t$.
- Definindo:

$$\begin{aligned} \mathbf{G} &= \mathbf{U} \\ \mathbf{H} &= \mathbf{V}\mathbf{\Delta} \end{aligned}$$

  tem-se: $\frac{1}{\sqrt{n-1}}\mathbf{X}^c = \mathbf{G}\mathbf{H}^t$.
- Se $\mathbf{X}^c$ é de característica (rank) p,
  - $\mathbf{G}$ é $n \times p$, e existe correspondência entre linhas de $\mathbf{G}$ e indivíduos.
  - $\mathbf{H}$ é $p \times p$, e existe correspondência entre linhas de $\mathbf{H}$ e variáveis.
- As linhas de $\mathbf{G}$ ($g_{[i]}^t$) e de $\mathbf{H}$ ($h_{[j]}^t$) são marcadores de, respectivamente, indivíduos e variáveis, mas vivem no mesmo espaço ($\mathbb{R}^p$) e podem ser representadas em simultâneo.
- O produto interno do marcador do indivíduo i e da variável j é o valor desse indivíduo nessa variável (centrada e a dividir por $\sqrt{n-1}$):

$$g_{[i]}^t h_{[j]} = \frac{1}{\sqrt{n-1}} x_{ij}^c \ .$$

Os marcadores de variáveis

Consideremos as propriedades dos marcadores de variáveis, que são vectores de $\mathbb{R}^p$. Os produtos internos de marcadores de variáveis são:

$$\mathbf{H}\mathbf{H}^t = (\mathbf{V}\boldsymbol{\Delta})(\mathbf{V}\boldsymbol{\Delta})^t = \mathbf{V}\boldsymbol{\Delta}^2\mathbf{V}^t = \mathbf{S},$$

pois $\mathbf{S} = \frac{1}{n-1}\mathbf{X}^{c\,t}\mathbf{X}^c = (\mathbf{U}\boldsymbol{\Delta}\mathbf{V}^t)^t(\mathbf{U}\boldsymbol{\Delta}\mathbf{V}^t) = \mathbf{V}\boldsymbol{\Delta}\mathbf{U}^t\mathbf{U}\boldsymbol{\Delta}\mathbf{V}^t = \mathbf{V}\boldsymbol{\Delta}^2\mathbf{V}^t$.

Tendo em conta que as linhas de $\mathbf{H}$ são vectores de $\mathbb{R}^p$, marcadores de variáveis, tem-se:

- O produto interno entre cada par de marcadores de variáveis é a covariância entre as variáveis correspondentes.
- A norma de cada marcador de variável é o desvio padrão da variável correspondente.
- O cosseno do ângulo entre cada par de marcadores de variáveis é o coeficiente de correlação entre as variáveis correspondentes.

Distâncias de Mahalanobis

Para compreender a leitura dos marcadores de pontos, é necessário o conceito de distância (ao quadrado) de Mahalanobis.

Distâncias de Mahalanobis

Seja $\mathbf{X}_{n\times p}$ uma matriz de dados, com matriz de covariâncias associada $\mathbf{S}$, linha genérica $\vec{\mathbf{x}}_{[i]}$ e centro de gravidade $\vec{\mathbf{m}}$. Define-se:

- Distância de Mahalanobis do indivíduo i ao centro:

$$\|\vec{\mathbf{x}}_{[i]} - \vec{\mathbf{m}}\|^2_{\mathbf{S}^{-1}} = (\vec{\mathbf{x}}_{[i]} - \vec{\mathbf{m}})^t \mathbf{S}^{-1} (\vec{\mathbf{x}}_{[i]} - \vec{\mathbf{m}}) \ .$$

- Distância de Mahalanobis entre os indivíduos i e j:

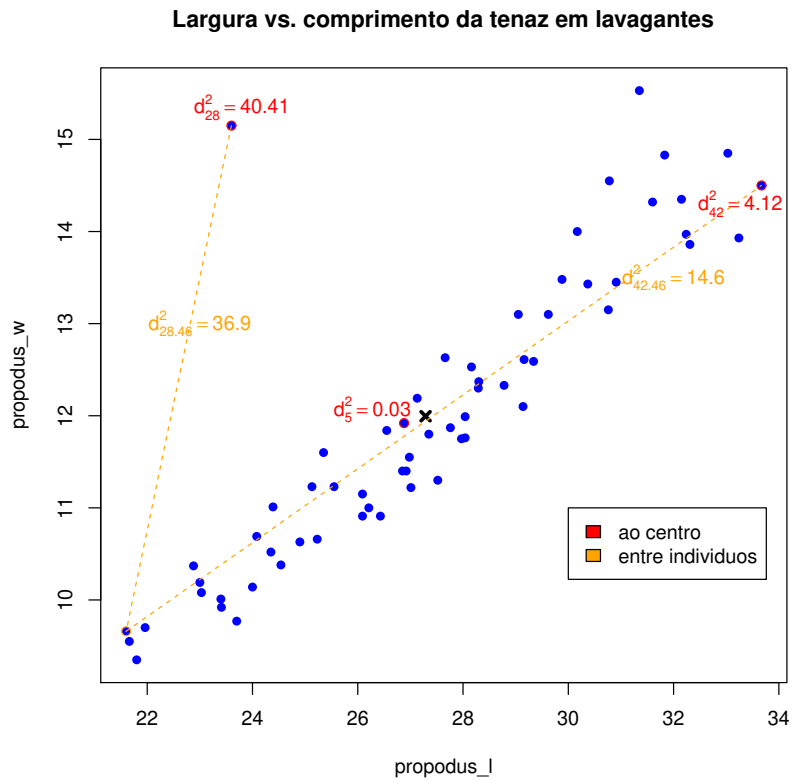
$$\|\vec{\mathbf{x}}_{[i]} - \vec{\mathbf{x}}_{[j]}\|^2_{\mathbf{S}^{-1}} = (\vec{\mathbf{x}}_{[i]} - \vec{\mathbf{x}}_{[j]})^t \mathbf{S}^{-1} (\vec{\mathbf{x}}_{[i]} - \vec{\mathbf{x}}_{[j]}) \ .$$

Nas distâncias de Mahalanobis, a matriz $\mathbf{S}^{-1}$ substitui a matriz identidade.

Distâncias de Mahalanobis (cont.)

As distâncias (ao quadrado) de Mahalanobis levam em conta o padrão de covariâncias entre variáveis. São úteis para identificar *outliers* multivariados.

Eis a nuvem em $\mathbb{R}^2$ apenas das variáveis `propodus_l` e `propodus_w`:



Os valores numéricos são distâncias de Mahalanobis.

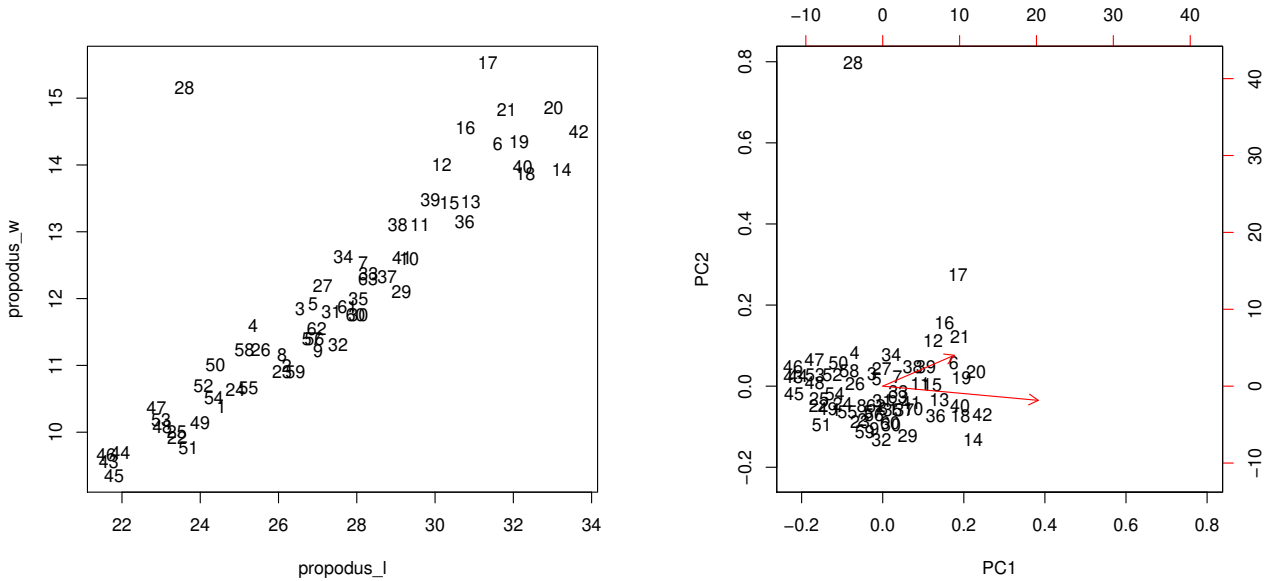
Num *biplot, a distância euclidiana entre marcadores de pontos é igual à distância de Mahalanobis entre indivíduos*.

Os marcadores de indivíduos

- A distância euclidiana entre cada par de linhas de **G** é proporcional à distância de Mahalanobis entre os indivíduos correspondentes:

$$\|\vec{\mathbf{g}}_{[i]} - \vec{\mathbf{g}}_{[j]}\|^2 = (\vec{\mathbf{x}}_{[i]} - \vec{\mathbf{x}}_{[j]})^t \mathbf{S}^{-1} (\vec{\mathbf{x}}_{[i]} - \vec{\mathbf{x}}_{[j]}) = \|\vec{\mathbf{x}}_{[i]} - \vec{\mathbf{x}}_{[j]}\|^2_{\mathbf{S}^{-1}} .$$

Eis a nuvem só com as variáveis `propodus_l` e `propodus_w` e o seu *biplot* (exacto):



No *biplot, a distância euclidiana entre pontos é a distância de Mahalanobis entre indivíduos*.

Biplots (cont.)

A visualização dum *biplot* exige que se reduza a representação a um espaço a $k = 2$ ou $k = 3$ dimensões.

Tal é feito retendo apenas as coordenadas dos marcadores associadas às duas (ou três) primeiras dimensões:

- $\mathbf{G}^{(k)}$ submatriz $n \times k$ com as k primeiras colunas de $\mathbf{G}$.
- $\mathbf{H}^{(k)}$ submatriz $p \times k$ com as k primeiras colunas de $\mathbf{H}$.

As linhas de $\mathbf{G}^{(k)}$ e $\mathbf{H}^{(k)}$ são marcadores de individuos e variáveis e:

$$\frac{1}{\sqrt{n-1}}\tilde{\mathbf{X}}^{c} = \mathbf{G}^{(k)}\mathbf{H}^{(k)\,t}$$

é a melhor aproximação, de caracteristica k, a $\frac{1}{\sqrt{n-1}}\mathbf{X}^{c}$ (Teorema de Eckart-Young).

Biplots (cont.)

Tomando $k = 2$, obtemos representação gráfica bidimensional, com

- marcadores de individuos representados por pontos; e
- marcadores de variáveis representados por vectores.

Tem-se, aproximadamente:

- o cosseno do ângulo entre marcadores de variáveis é o coeficiente de correlação entre as variáveis;
- o comprimento do marcador de cada variável é proporcional ao seu desvio padrão;
- a distância euclidiana entre marcadores de individuos é a distância de Mahalanobis entre esses individuos:

$$M_{ij} = (\vec{\mathbf{x}}_{[i]} - \vec{\mathbf{x}}_{[j]})^t \mathbf{S}^{-1} (\vec{\mathbf{x}}_{[i]} - \vec{\mathbf{x}}_{[j]}) \ ,$$

A qualidade da aproximação mede-se como na ACP.

Biplots (cont.)

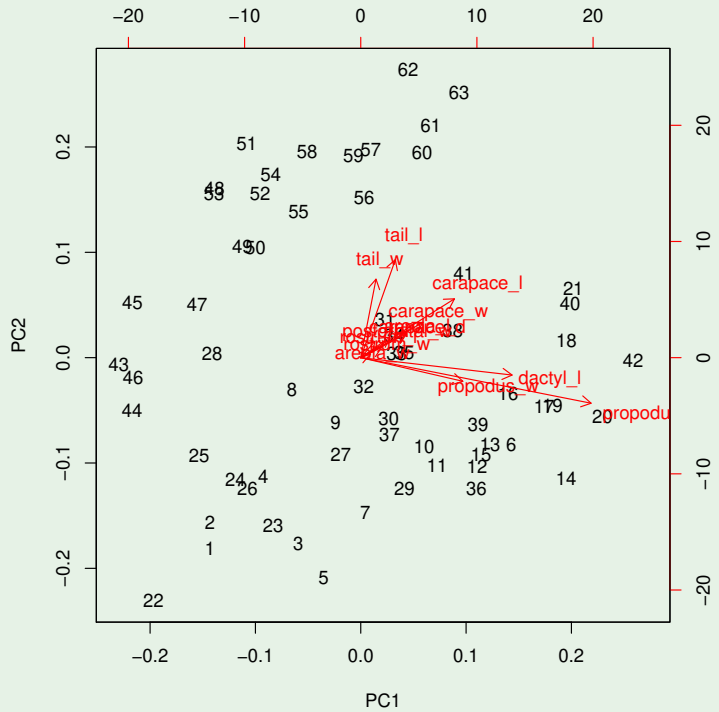
Verificam-se ainda as seguintes propriedades aproximadas (por ser a $k = 2$ dimensões):

- o cosseno do ângulo entre cada vector e o eixo horizontal é aproximadamente o coeficiente de correlação entre a respectiva variável e a CP 1;
- o cosseno do ângulo entre cada vector e o eixo vertical é aproximadamente o coeficiente de correlação entre a respectiva variável e a CP 2;
- A projecção ortogonal de cada ponto sobre a direcção definida por um vector é aproximadamente o valor do respectivo individuo na variável correspondente.

Os *biplots* no R

Função `biplot` nos lavagantes

```
> biplot(lav.acp)
```



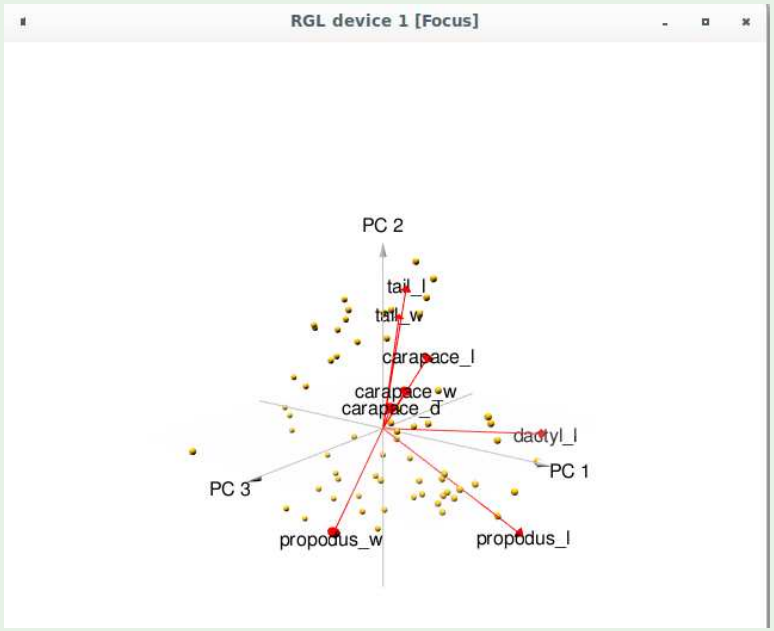
Os individuos do grupo 43-63 (fêmeas) têm tenazes mais pequenas e caudas maiores do que os machos.

Biplots 3*D* com `pca3d`

Biplots a três dimensões com o módulo `pca3d`

Acrescentando ao comando `pca3d` o argumento `biplot=TRUE`:

```
> library(pca3d)
> pca3d(lav.acp, biplot=TRUE)
```

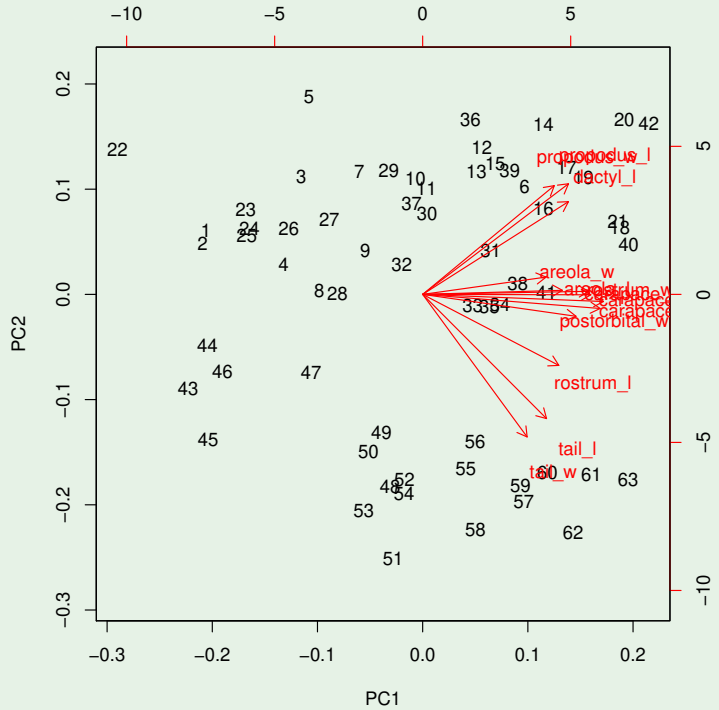


A imagem congela um momento da rotação. Por omissão a função não mostra todos os vectores marcadores de variáveis.

Os *biplots* no R (cont.)

Função `biplot` nos lavagantes (dados normalizados)

```
> biplot(lav.acpR)
```

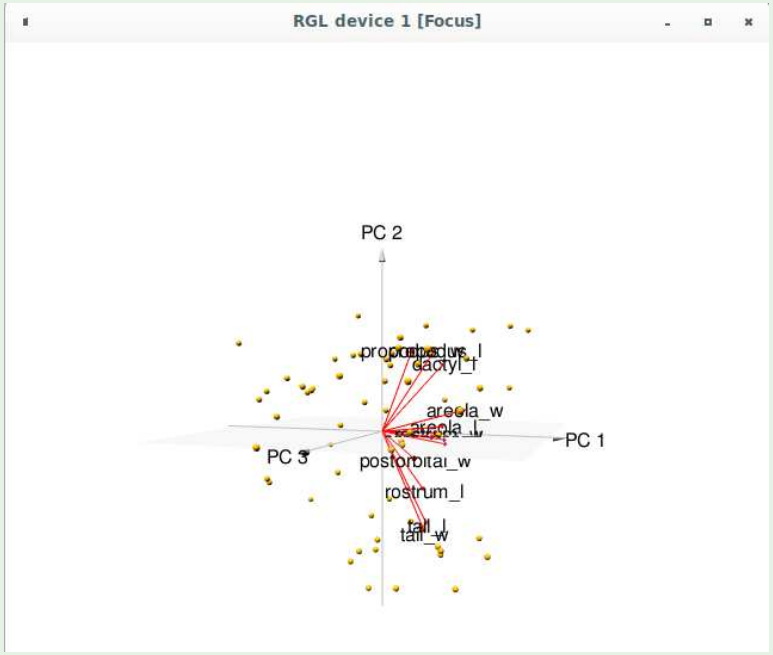


A separação machos/fêmeas continua a ser visível. A primeira CP aponta agora na direcção dum grupo de variáveis altamente correlacionadas entre si (tamanho?).

Biplots 3*D* com `pca3d`

Biplots a três dimensões com o módulo `pca3d`

```
> pca3d(lav.acpR, biplot=TRUE, biplot.vars=13)
```



O argumento `biplot.vars` permite controlar os marcadores de variáveis mostrados.

Análise Discriminante Linear

Análises Discriminantes

Conjunto de técnicas multivariadas em que:

- Parte-se do conhecimento de que n indivíduos observados pertencem a k subgrupos ou classes.
- Procura-se determinar funções das p variáveis observadas que melhor permitam distinguir ou discriminar esses subgrupos.

Análise Discriminante Linear (ou de Fisher):

Procuram-se combinações lineares das p variáveis observadas que melhor permitam distinguir ou discriminar esses subgrupos.

NOTA: Só trabalharemos num contexto descritivo, embora muitas vezes as Análises Discriminantes apareçam associadas a conceitos probabilísticos.

Análise Discriminante Linear (cont.)

Ponto de partida: uma matriz de dados, $\mathbf{X}_{n\times p}$.

Os n individuos (linhas de $\mathbf{X}$) definem uma partição em k subgrupos, que é conhecida. Podem ser vistos como k níveis dum factor.

Objectivo informal: determinar a melhor combinação linear $\mathbf{X}\vec{\mathbf{a}}$ das variáveis observadas, para assegurar que:

- indivíduos duma mesma classe tenham valores próximos, e
- individuos de classes diferentes tenham valores diferentes.

Soluções: combinações lineares $\mathbf{X}\vec{\mathbf{a}}$, chamadas eixos discriminantes (ou variáveis canónicas).

A solução vai envolver projecções ortogonais sobre o subespaço de $\mathbb{R}^n$ gerado pelas indicatrizes da constituição de cada subgrupo.

A matriz da classificação

Matriz da classificação **G**, cuja coluna *i* é indicatriz do subgrupo *i*:

$$\mathbf{G}_{n\times k} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -- & -- & -- & -- & -- \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -- & -- & -- & -- & -- \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -- & -- & -- & -- & -- \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

Semelhante à matriz do modelo na ANOVA a um factor, mas na 1a. coluna indicatriz do nível 1 do factor. O subespaço de $\mathbb{R}^n$ gerado pelas duas matrizes é igual.

Há relação estreita entre ADL e ANOVA a um factor, mas só usaremos conceitos descritivos na definição da ADL.

A matriz da classificação (cont.)

Os vectores do espaço das colunas da matriz $\mathbf{G}$ têm valor igual nos elementos de cada subgrupo, isto é, $\vec{\mathbf{z}} \in \mathscr{C}(\mathbf{G})$ são da forma:

$$\vec{\mathbf{z}}^t = [\underbrace{z_1 \ z_1 \ \ldots \ z_1}_{n_1 \text{ vezes}} \mid \underbrace{z_2 \ z_2 \ \ldots \ z_2}_{n_2 \text{ vezes}} \mid \cdots \mid \underbrace{z_k \ z_k \ \ldots \ z_k}_{n_k \text{ vezes}}]$$

Logo, vectores em $\mathscr{C}(\mathbf{G})$ são homogéneos no seio das classes.

Mas não necessariamente heterogéneos entre classes: $\mathscr{C}(\mathbf{G})$ inclui também o vector $\vec{\mathbf{1}}_n$, que não discrimina subgrupos.

Maximizar a heterogeneidade entre classes significa maximizar a variabilidade dos k valores $\{z_j\}_{j=1}^{k}$.

É desejável que a combinação linear esteja o mais longe possível de $\mathscr{C}(\vec{\mathbf{1}}_n) \subset \mathscr{C}(\mathbf{G})$, ou seja, que seja ortogonal ao vector $\vec{\mathbf{1}}_n$.

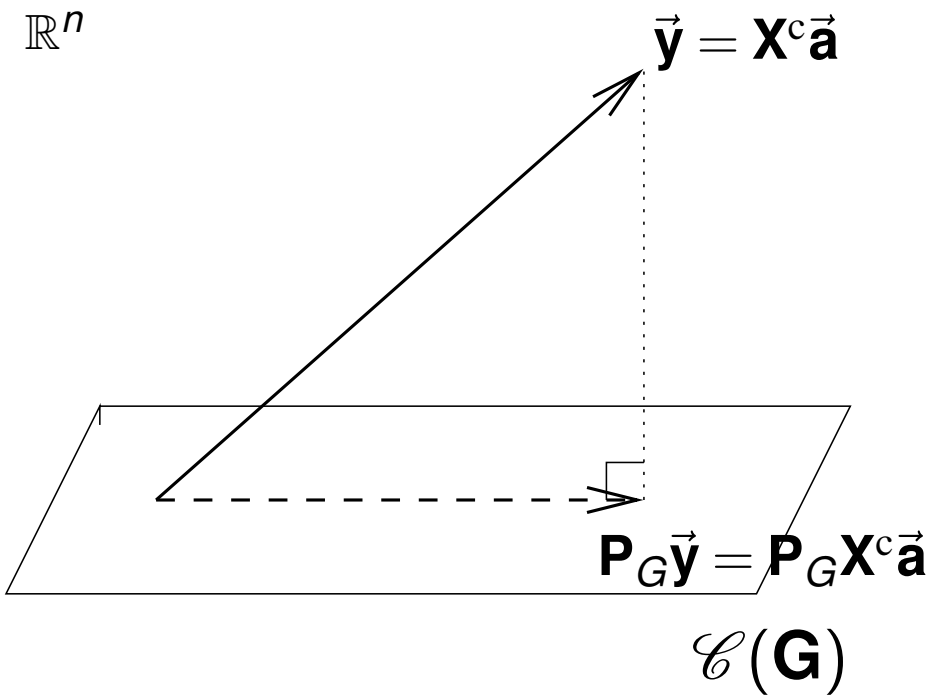
Formulação do problema

Os vectores ortogonais ao vector $\vec{1}_n$ são os vectores centrados.

Consideremos apenas as combinações lineares centradas: $\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}$

A projecção ortogonal de qualquer combinação linear centrada no espaço das colunas da matriz de classificação é dada por $\mathbf{P}_G\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}$, onde $\mathbf{P}_G = \mathbf{G}(\mathbf{G}^t\mathbf{G})^{-1}\mathbf{G}^t$.

A projecção ortogonal cria um triângulo rectângulo:



De novo Pitágoras

Pelo Teorema de Pitágoras, e como $\mathbf{P}_G$ e $\mathbf{I}_n$ são simétricas e idempotentes, tem-se:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}\|^2 &= \|\mathbf{P}_G\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}\|^2 + \|(\mathbf{I}_n-\mathbf{P}_G)\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}\|^2 \\ \Leftrightarrow \quad \vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{X}^{c\,t}\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}} &= \vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{X}^{c\,t}\mathbf{P}_G\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}} + \vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{X}^{c\,t}(\mathbf{I}_n-\mathbf{P}_G)\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}} \end{aligned}$$

O membro esquerdo é $\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{X}^{c\,t}\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}} = (n-1)\cdot\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{a}}$, ou seja, $n-1$ vezes a variância da combinação linear $\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}$.

A combinação linear $\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}$ desejável é a que, nesta decomposição, maximiza (em termos relativos) a primeira parcela do lado direito: como veremos, corresponde a maximizar a variabilidade dos valores z_j de cada grupo.

A matriz de projecções ortogonais $\mathbf{P_G}$

Vimos que $\mathbf{G}_{n\times k}$ tem nas suas colunas as variáveis indicatrizes de pertença a cada grupo (nível do factor classificador).

A matriz $\mathbf{G}^t\mathbf{G}$ tem dimensão $k \times k$. É diagonal (o produto interno de indicatrizes diferentes é nulo). Os elementos diagonais são o número de elementos em cada subgrupo:

$$\mathbf{G}^t\mathbf{G} = \begin{bmatrix} n_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & n_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & n_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & n_k \end{bmatrix}$$

A sua inversa, $(\mathbf{G}^t\mathbf{G})^{-1}$, é a matriz diagonal dos recíprocos $\frac{1}{n_i}$.

Em $\mathbf{P}_G = \mathbf{G}(\mathbf{G}^t\mathbf{G})^{-1}\mathbf{G}^t$, as matrizes das pontas reproduzem cada recíproco $\frac{1}{n_i}$ numa submatriz diagonal de tamanho $n_i \times n_i$.

A matriz de projecções ortogonais $\mathbf{P_G}$ (cont.)

$$\mathbf{P}_G = \mathbf{G}(\mathbf{G}^t\mathbf{G})^{-1}\mathbf{G}^t = \left[\begin{array}{c|c|c|c} \frac{1}{n_1}\ \frac{1}{n_1}\ \cdots\ \frac{1}{n_1} \\ \vdots\ \vdots\ \ddots\ \vdots \\ \frac{1}{n_1}\ \frac{1}{n_1}\ \cdots\ \frac{1}{n_1} & \mathbf{0}_{n_1 \text{x} n_2} & \cdots & \mathbf{0}_{n_1 \text{x} n_k} \\ \hline & \frac{1}{n_2}\ \frac{1}{n_2}\ \cdots\ \frac{1}{n_2} & & \\ \mathbf{0}_{n_2 \text{x} n_1} & \vdots\ \vdots\ \ddots\ \vdots & \cdots & \mathbf{0}_{n_2 \text{x} n_k} \\ & \frac{1}{n_2}\ \frac{1}{n_2}\ \cdots\ \frac{1}{n_2} & & \\ \hline \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hline & & & \frac{1}{n_k}\ \frac{1}{n_k}\ \cdots\ \frac{1}{n_k} \\ \mathbf{0}_{n_k \text{x} n_1} & \mathbf{0}_{n_k \text{x} n_2} & \cdots & \vdots\ \vdots\ \ddots\ \vdots \\ & & & \frac{1}{n_k}\ \frac{1}{n_k}\ \cdots\ \frac{1}{n_k} \end{array}\right]$$

A matriz $\mathbf{P}_G$ é uma matriz diagonal por blocos, com cada bloco diagonal tendo todos os valores comuns: $\frac{1}{n_i}$.

Ao pré-multiplicar qualquer vector por $\mathbf{P}_G$, cada elemento do vector é substituído pela sua média de grupo.

Os vectores projectados $\mathbf{P}_G\vec{\mathbf{y}}$

Consideremos qualquer vector $\vec{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^n$, representado com dupla indexação i, j, sendo i subgrupo e j repetição. Considere-se também a sua projecção ortogonal sobre $\mathscr{C}(\mathbf{G})$:

$$\vec{\mathbf{y}} = \begin{bmatrix} y_{11} \\ \vdots \\ y_{1\,n_1} \\ \hline y_{21} \\ \vdots \\ y_{2\,n_2} \\ \hline \vdots \\ \hline y_{k1} \\ \vdots \\ y_{k\,n_k} \end{bmatrix} \qquad \mathbf{P}_G\vec{\mathbf{y}} = \begin{bmatrix} \overline{y}_{1.} \\ \vdots \\ \overline{y}_{1.} \\ \hline \overline{y}_{2.} \\ \vdots \\ \overline{y}_{2.} \\ \hline \vdots \\ \hline \overline{y}_{k.} \\ \vdots \\ \overline{y}_{k.} \end{bmatrix}$$

Os vectores centrados projectados $\mathbf{P}_G\vec{\mathbf{y}}^c$

Consideremos agora um vector previamente centrado:

$$\vec{\mathbf{y}}^c = \begin{bmatrix} y_{11} - \overline{y}_{..} \\ \vdots \\ y_{1\,n_1} - \overline{y}_{..} \\ \hline y_{21} - \overline{y}_{..} \\ \vdots \\ y_{2\,n_2} - \overline{y}_{..} \\ \hline \vdots \\ \hline y_{k1} - \overline{y}_{..} \\ \vdots \\ y_{k\,n_k} - \overline{y}_{..} \end{bmatrix} \qquad \mathbf{P}_G\vec{\mathbf{y}}^c = \begin{bmatrix} \overline{y}_{1.} - \overline{y}_{..} \\ \vdots \\ \overline{y}_{1.} - \overline{y}_{..} \\ \hline \overline{y}_{2.} - \overline{y}_{..} \\ \vdots \\ \overline{y}_{2.} - \overline{y}_{..} \\ \hline \vdots \\ \hline \overline{y}_{k.} - \overline{y}_{..} \\ \vdots \\ \overline{y}_{k.} - \overline{y}_{..} \end{bmatrix}$$

$\|\mathbf{P}_G\vec{\mathbf{y}}^c\|^2 = \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{n_i}(\overline{y}_{i.} - \overline{y}_{..})^2$ mede a dispersão das médias de cada classe em torno da média geral $\overline{y}_{..}$. Corresponde a *SQF* na ANOVA de $\vec{\mathbf{y}}$ sobre o factor que define os grupos. É a variabilidade inter-classes, e convém ser grande: reflecte heterogeneidade entre classes.

Os vectores $(\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_G)\vec{\mathbf{y}}$

Para qualquer vector $\vec{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^n$, incluíndo vectores centrados $\vec{\mathbf{y}}^c$:

$$\vec{\mathbf{y}} - \mathbf{P}_G\vec{\mathbf{y}} = (\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_G)\vec{\mathbf{y}} = \begin{bmatrix} y_{11} - \overline{y}_{1.} \\ \vdots \\ y_{1n_1} - \overline{y}_{1.} \\ \hline y_{21} - \overline{y}_{2.} \\ \vdots \\ y_{2n_2} - \overline{y}_{2.} \\ \hline \vdots \\ \hline y_{k1} - \overline{y}_{k.} \\ \vdots \\ y_{kn_k} - \overline{y}_{k.} \end{bmatrix} \qquad (\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_G)\vec{\mathbf{y}}^c = \begin{bmatrix} y_{11} - \overline{y}_{1.} \\ \vdots \\ y_{1n_1} - \overline{y}_{1.} \\ \hline y_{21} - \overline{y}_{2.} \\ \vdots \\ y_{2n_2} - \overline{y}_{2.} \\ \hline \vdots \\ \hline y_{k1} - \overline{y}_{k.} \\ \vdots \\ y_{kn_k} - \overline{y}_{k.} \end{bmatrix}$$

$\|(\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_G)\vec{\mathbf{y}}^c\|^2 = \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{n_i}(y_{ij} - \overline{y}_{i.})^2$ mede a dispersão das observações individuais em torno da respectiva média de nível. Corresponde a *SQRE* na ANOVA de $\vec{\mathbf{y}}$ sobre o factor que define os grupos. É a variabilidade intra-classes, e convém ser pequena: mede homogeneidade das classes.

De novo a equação resultante de Pitágoras

A equação final do acetato 104 simplifica definindo as matrizes:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{n-1}\mathbf{X}^{c\,t}\mathbf{X}^{c} \qquad \text{Matriz de variâncias-covariâncias de } \mathbf{X}$$
$$\mathbf{B} = \frac{1}{n-1}\mathbf{X}^{c\,t}\mathbf{P}_G\mathbf{X}^{c} \qquad \text{Matriz da variabilidade inter-classes}$$
$$\mathbf{W} = \frac{1}{n-1}\mathbf{X}^{c\,t}(\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_G)\mathbf{X}^{c} \qquad \text{Matriz da variabilidade intra-classes}$$

Tem-se:

$$\vec{\mathbf{a}}^{t}\ \underbrace{\mathbf{X}^{c\,t}\mathbf{X}^{c}}_{=(n-1)\cdot\mathbf{S}}\ \vec{\mathbf{a}} = \vec{\mathbf{a}}^{t}\underbrace{\mathbf{X}^{c\,t}\mathbf{P}_G\mathbf{X}^{c}}_{=(n-1)\cdot\mathbf{B}}\vec{\mathbf{a}} + \vec{\mathbf{a}}^{t}\underbrace{\mathbf{X}^{c\,t}(\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_G)\mathbf{X}^{c}}_{=(n-1)\cdot\mathbf{W}}\vec{\mathbf{a}}$$

$$\Longleftrightarrow \qquad \vec{\mathbf{a}}^{t}\mathbf{S}\vec{\mathbf{a}} = \vec{\mathbf{a}}^{t}\mathbf{B}\vec{\mathbf{a}} + \vec{\mathbf{a}}^{t}\mathbf{W}\vec{\mathbf{a}}$$

Quer-se a maximização relativa da primeira parcela do lado direito.

Formulação de Fisher

Uma formulação do problema (de Fisher): de entre as combinações lineares $\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}$, escolher a que maximiza:

$$\frac{\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{B}\vec{\mathbf{a}}}{\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{W}\vec{\mathbf{a}}}$$

Essa será a primeira função discriminante.

Solução: Se $\mathbf{W}$ fôr definida positiva, usar o resultado associado ao problema de valores/vectores próprios generalizados (acetato 70):

Tomar $\vec{\mathbf{a}}=\vec{\mathbf{a}}_1$, o vector próprio do maior valor próprio de $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$.

O valor próprio $\lambda_1 = \frac{\vec{\mathbf{a}}_1^t\mathbf{B}\vec{\mathbf{a}}_1}{\vec{\mathbf{a}}_1^t\mathbf{W}\vec{\mathbf{a}}_1}$ é a capacidade discriminante do eixo: razão entre as variabilidades entre- e intra-grupos nesse eixo (ratio of between-group and within-group variability).

Formulação de Fisher (cont.)

Se o número de valores próprios não nulos de $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$ fôr maior do que 1, podem procurar-se novas combinações lineares discriminantes.

Pelo Teorema do problema de valores próprios generalizados (acetato 70), sucessivas soluções são as combinações lineares $\mathbf{X}\vec{\mathbf{a}}_j$ com $\vec{\mathbf{a}}_j$ os restantes vectores próprios da matriz $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$ associados a valores próprios não-nulos.

A capacidade discriminante destes novos eixos é dada pelo valor próprio $\lambda_j = \frac{\vec{\mathbf{a}}_j^t \mathbf{B} \vec{\mathbf{a}}_j}{\vec{\mathbf{a}}_j^t \mathbf{W} \vec{\mathbf{a}}_j}$ associado.

Sucessivos eixos discriminantes são não correlacionados entre si, embora os vectores de coeficientes (*loadings*) $\vec{\mathbf{a}}_j$ que os definem não sejam ortogonais entre si (apenas $\mathbf{W}$-ortogonais: $\vec{\mathbf{a}}_i^t \mathbf{W} \vec{\mathbf{a}}_j = 0$, se $i \neq j$).

Existência de $\mathbf{W}^{-1}$

$\mathbf{W}_{p\times p}$ é invertível se fôr de característica plena p.

Resultado geral em matrizes: $car(\mathbf{AB}) \leq \min\{car(\mathbf{A}), car(\mathbf{B})\}$.

Como $\mathbf{W} = \frac{1}{n-1}\mathbf{X}^{c\,t}(\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_G)\mathbf{X}^c$, e $car(\mathbf{A}) = car(\mathbf{A}^t)$, tem-se:

$$car(\mathbf{W}) \leq \min\{car(\mathbf{X}^c), car(\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_G)\} \ .$$

Admitindo que não há dependência linear (multicolinearidade) nas colunas de $\mathbf{X}^c$, e que $n > p$, tem-se $car(\mathbf{X}^c) = p$.

A característica duma matriz de projecção ortogonal (como $\mathbf{P}_G$ e $\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_G$) é a dimensão do subespaço sobre o qual projecta. Logo $car(\mathbf{P}_G) = k$ e $car(\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_G) = n - k$. Assim,

$$car(\mathbf{W}) \leq \min\{p, n-k\} \ .$$

Se $k > n-p$, $\mathbf{W}$ não é invertível. Em geral, se $k \leq n-p$ há invertibilidade.

Observações

- As matrizes usadas na ADL verificam a relação $\mathbf{S} = \mathbf{B} + \mathbf{W}$.

  De facto,

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_n = \mathbf{P}_G + (\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_G) \quad &\Rightarrow \quad \mathbf{X}^{c\,t}\mathbf{I}_n\mathbf{X}^c = \mathbf{X}^{c\,t}\mathbf{P}_G\mathbf{X}^c + \mathbf{X}^{c\,t}(\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_G)\mathbf{X}^c \\ &\Leftrightarrow \quad \mathbf{S} = \mathbf{B} + \mathbf{W} \end{aligned}$$

- Sucessivos eixos discriminantes são não correlacionados entre si.

  Diferentes eixos discriminantes são da forma $\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}_i$ e $\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}_j$, sendo $\vec{\mathbf{a}}_i$ e $\vec{\mathbf{a}}_j$ dois diferentes vectores próprios da matriz $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$. Sabemos ainda que $\vec{\mathbf{a}}_i$ e $\vec{\mathbf{a}}_j$ são $\mathbf{W}$-ortogonais. Logo, se $i \neq j$:

$$\begin{aligned} \mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}\vec{\mathbf{a}}_j = \lambda_j\vec{\mathbf{a}}_j \quad &\Rightarrow \quad \mathbf{B}\vec{\mathbf{a}}_j = \lambda_j\mathbf{W}\vec{\mathbf{a}}_j \\ &\Rightarrow \quad \mathbf{W}\vec{\mathbf{a}}_j + \mathbf{B}\vec{\mathbf{a}}_j = \mathbf{W}\vec{\mathbf{a}}_j + \lambda_j\mathbf{W}\vec{\mathbf{a}}_j \\ &\Rightarrow \quad \mathbf{S}\vec{\mathbf{a}}_j = (1+\lambda_j)\mathbf{W}\vec{\mathbf{a}}_j \\ &\Rightarrow \quad Cov(\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}_i, \mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}_j) = \vec{\mathbf{a}}_i^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{a}}_j = (1+\lambda_j)\vec{\mathbf{a}}_i^t\mathbf{W}\vec{\mathbf{a}}_j = 0 \end{aligned}$$

Observações (cont.)

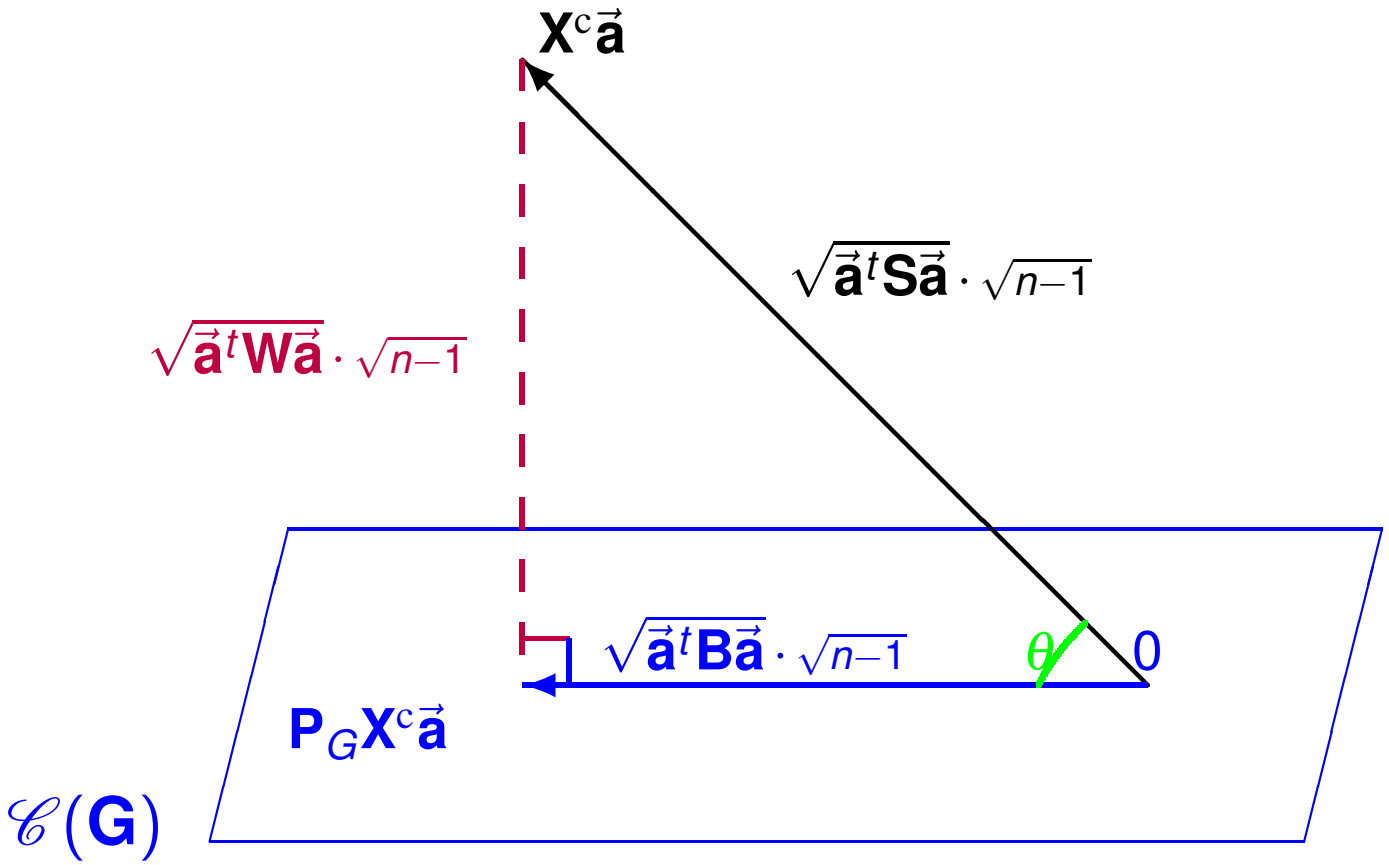
- Contrariamente à ACP, eixos discriminantes $\mathbf{X}\vec{\mathbf{a}}_j$ não-correlacionados não significa vectores de coeficientes $\vec{\mathbf{a}}_j$ ortogonais em $\mathbb{R}^p$ (são $\mathbf{W}$-ortogonais).
- $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$ não pode ter mais de $k-1$ valores próprios não-nulos:

$$car(\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}) \leq car(\mathbf{B}) = car(\mathbf{X}^{c\,t}\mathbf{P}_G\mathbf{X}^c) \leq car(\mathbf{P}_G) = k\ .$$

  Mas como o vector projectado é centrado (ortogonal a $\vec{\mathbf{1}}_n \in \mathscr{C}(\mathbf{G})$), perde-se mais uma dimensão: $k-1$ é o número máximo de eixos discriminantes.

- as soluções duma Análise Discriminante são invariantes a transformações lineares das escalas das variáveis.

ADL - Resumo



Maximizar $\frac{\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{B}\vec{\mathbf{a}}}{\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{W}\vec{\mathbf{a}}}$ é maximizar $\mathrm{ctg}^2(\theta)$. Em cada eixo, $\lambda_j = \mathrm{ctg}^2(\theta_j)$.

Ainda a geometria duma ADL

Maximizar a cotangente do ângulo θ quer dizer minimizar θ.

Na ADL procuramos a combinação linear $\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}$ das variáveis centradas (colunas de $\mathbf{X}^c$) que forma o menor ângulo (θ) com o espaço gerado pelas indicatrizes de subgrupos (colunas de $\mathbf{G}$).

Esse ângulo θ é o menor ângulo entre dois subespaços de $\mathbb{R}^n$:

- o subespaço gerado pelas indicatrizes, $\mathscr{C}(\mathbf{G})$; e
- o subespaço gerado pelas variáveis centradas, $\mathscr{C}(\mathbf{X}^c)$.

A capacidade discriminante das variáveis depende do menor ângulo entre $\mathscr{C}(\mathbf{X}^c)$ e $\mathscr{C}(\mathbf{G})$, ou seja, da posição angular desses dois subespaços de $\mathbb{R}^n$.

Formulações alternativas

Formulações alternativas que minimizam o ângulo θ:

1. Minimizar o quadrado do seno de θ.

   i.e., minimizar a proporção da variabilidade total da combinação linear $\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}$ que corresponde à variabilidade intra-classes

$$\frac{\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{W}\vec{\mathbf{a}}}{\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{a}}}$$

2. Maximizar o quadrado do cosseno do ângulo θ

   ou seja, maximizar a proporção da variabilidade total da combinação linear $\mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}$ que corresponde à variabilidade inter-classes

$$\frac{\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{B}\vec{\mathbf{a}}}{\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{S}\vec{\mathbf{a}}}$$

Relações entre formulações alternativas

Mas problema igual (minimizar θ) $\Rightarrow$ solução igual.

É fácil de verificar que são iguais:

- Vectores próprios de $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$;
- Vectores próprios de $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{W}$;
- Vectores próprios de $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{B}$;

Logo, as combinações lineares $\mathbf{X}^{c}\vec{\mathbf{a}}$ obtidas com as formulações alternativas são iguais.

Os correspondentes valores próprios não são iguais porque correspondem às diferentes funções trigonométricas. Mas, seja $\vec{\mathbf{a}}$ vector próprio comum às três matrizes.

- Se λ é o valor próprio associado em $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$;
- $\frac{1}{\lambda+1}$ é o valor próprio em $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{W}$ (queremos minimizar);
- $\frac{\lambda}{\lambda+1}$ é o valor próprio em $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{B}$ (queremos maximizar).

ADL e ANOVA

Considere-se:

- uma ANOVA a um factor com as k classes;
- a variável resposta $\vec{\mathbf{y}} = \mathbf{X}^c\vec{\mathbf{a}}$.

O critério que define ADL equivale a pedir $\vec{\mathbf{a}}$ tal que a estatística do teste F da ANOVA aos efeitos do factor seja máxima:

$$F = \frac{QMF}{QMRE} = \frac{SQF}{SQRE}\cdot\frac{n-k}{k-1} = \frac{\|\mathbf{P}_G\vec{\mathbf{y}}\|^2}{\|(\mathbf{I}_n-\mathbf{P}_G)\vec{\mathbf{y}}\|^2}\cdot\frac{n-k}{k-1} = \frac{\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{B}\vec{\mathbf{a}}}{\vec{\mathbf{a}}^t\mathbf{W}\vec{\mathbf{a}}}\cdot\frac{n-k}{k-1}.$$

Os eixos discriminantes são as sucessivas combinações lineares, não correlacionadas, das p variáveis observadas que maximizam a separação entre as observações dos diversos níveis do factor.

Classificação de novos individuos num eixo

Podemos classificar novos indivíduos, de "filiação" desconhecida.

Seja $\vec{\mathbf{x}}$ vector de observações de novo individuo nas p variáveis.
O respectivo valor (*score*) no eixo discriminante 1 é $y^* = \vec{\mathbf{x}}^t \vec{\mathbf{a}}_1$.
Comparando este valor com as k médias de classe nesse eixo, $\overline{y}^{(1)}, \overline{y}^{(2)}, \ldots, \overline{y}^{(k)}$, podemos classificar na classe cujo centro de gravidade:

- lhe está mais próxima, na habitual distância euclidiana:

  fica na classe i se $|y^* - \overline{y}^{(i)}| < |y^* - \overline{y}^{(j)}|, \quad \forall j \neq i.$

- lhe está mais próxima, numa distância euclidiana inversamente ponderada pelo desvio padrão da classe:

  fica na classe i se $\frac{|y^* - \overline{y}^{(i)}|}{s_y^{(i)}} < \frac{|y^* - \overline{y}^{(j)}|}{s_y^{(j)}}, \quad \forall j \neq i,$

  onde $s_y^{(i)}$ indica o desvio padrão dos *scores* do grupo i.

Classificação em q eixos

Com q eixos discriminantes, um indivíduo tem vector de *scores*: $\vec{\mathbf{y}}^* = \vec{\mathbf{x}}^t \mathbf{A}_q$, com $\mathbf{A}_q$ matriz $p \times q$ cujas colunas são os vectores $\vec{\mathbf{a}}_1, ..., \vec{\mathbf{a}}_q$.

Pode-se classificar o indívíduo na classe cujo centro de gravidade $\vec{\mathbf{m}}_{(i)}$:

- esteja mais próximo de $\vec{\mathbf{y}}^*$, na habitual distância euclidiana:
  associar à classe i se $\|\vec{\mathbf{y}}^* - \vec{\mathbf{m}}_{(i)}\| < \|\vec{\mathbf{y}}^* - \vec{\mathbf{m}}_{(j)}\|, \quad \forall j \neq i$

- esteja mais próximo de $\vec{\mathbf{y}}^*$ na distância de Mahalanobis usual:
  classe i se $\|\vec{\mathbf{y}}^* - \vec{\mathbf{m}}_{(i)}\|_{\mathbf{S}^{-1}} < \|\vec{\mathbf{y}}^* - \vec{\mathbf{m}}_{(j)}\|_{\mathbf{S}^{-1}}, \quad \forall j \neq i,$
  onde $\mathbf{S}$ é matriz de (co)variâncias dos *scores* das n observações.

- esteja mais próximo de $\vec{\mathbf{y}}^*$ na distância de Mahalanobis definida pela matriz de variâncias-covariâncias das observações dessa classe:
  classe i se $\|\vec{\mathbf{y}}^* - \vec{\mathbf{m}}_{(i)}\|_{\mathbf{S}_i^{-1}} < \|\vec{\mathbf{y}}^* - \vec{\mathbf{m}}_{(j)}\|_{\mathbf{S}_j^{-1}}, \forall j \neq i,$
  onde $\mathbf{S}_i$ é matriz de (co)variâncias dos *scores* do grupo i.

ADL no R - a função lda

A função lda, do módulo MASS, fornece a informação básica para uma Análise Discriminante Linear (de Fisher).

A função lda foi concebida pensando num contexto inferencial (que não é o nosso e não é necessário para uma ADL). No entanto fornece a informação necessária para um contexto descritivo.

Exemplifiquemos com os dados dos lavagantes, em que as 21 primeiras observações são de machos reprodutores (grupo MR); as 21 seguintes de machos não-reprodutores (grupo MN); e as 21 observações finais são de fêmeas (grupo F).

É necessário construir o factor dos grupos e carregar o módulo MASS:

```
> lav.grupos <- factor(rep(c("MR","MN","F"),c(21,21,21)))
> library(MASS)
```

O exemplo dos lavagantes

ADL dos lavagantes com função `lda`

Na fórmula do comando `lda` o factor dos grupos é a variável resposta.

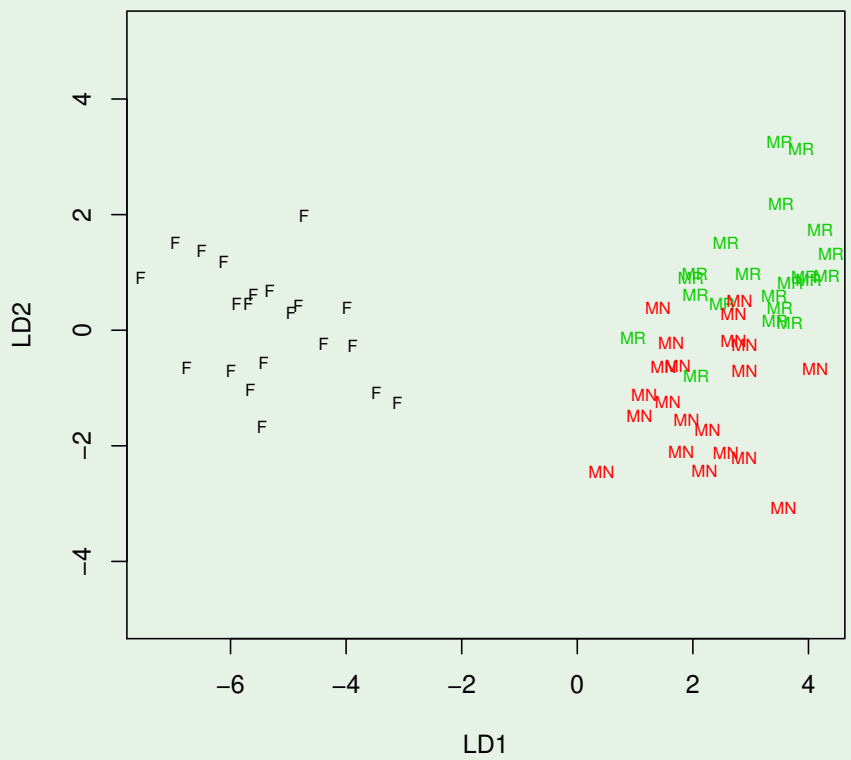
```
> lav.lda <- lda(lav.grupos ~ . , data=as.data.frame(lavagantes))
> lav.lda

Coefficients of linear discriminants:                    <- vectores de loadings
                        LD1         LD2
carapace_l    -0.0005163473 -1.19955746
tail_l        -0.1736612417  0.33191555
carapace_w     0.1866238904 -0.90101141
carapace_d    -0.3521185558 -0.23124418
tail_w        -2.6055856004  1.28663805
areola_l       0.3588957427 -0.06043209
areola_w      -2.1123185437 -0.03550332
rostrum_l      1.2415578489  1.22874815
rostrum_w     -0.3314912527  1.39715849
postorbital_w  0.1940959791 -1.59005854
propodus_l     0.6321803333  0.17783018
propodus_w     0.4297842346  0.71193763
dactyl_l      -0.0850563760  0.36615202

Proportion of trace:          <- proporção dos valores próprios não nulos de inv(W)B
   LD1    LD2
0.9501 0.0499             <-  não são os valores do critério (razão de variâncias), definidos acima
```

Exemplos dos lavagantes (cont.)

Existe um método `plot` para objectos da classe `lda`, produzidos pelo comando `lda`:

ADL dos lavagantes

```
> plot(lav.lda, col=as.numeric(lav.grupos))
```



Exemplos dos lavagantes (cont.)

Os vectores de *scores* usados para construir o gráfico podem ser obtidos com o comando `predict`, estando no argumento de saída `x`.

ADL dos lavagantes

```
> predict(lav.lda)$x

           LD1         LD2
1   2.9590031   0.9654792
2   3.6848954   0.8131683
3   3.5259200   2.1811447
4   2.0462745   0.6083346
[...]
60 -4.9547011   0.2934347
61 -6.7592582 -0.6571673
62 -5.6927267   0.4566755
63 -5.4276951 -0.5692571
```

O comando `predict` pode ser usado para determinar as coordenadas nos eixos discriminantes de um novo indivíduo, de forma semelhante ao que foi visto para os modelos lineares.

Exemplo dos lavagantes (cont.)

ADL dos lavagantes

Definamos 3 novos indivíduos com valores iguais aos máximos de cada variável em cada subgrupo, e coloquemo-los nos novos eixos discriminantes:

```
> lxm1 <- apply(lavagantes[1:21,],2,max)
> lxm2 <- apply(lavagantes[22:42,],2,max)
> lxm3 <- apply(lavagantes[43:63,],2,max)
> novos <- as.data.frame(rbind(lxm1,lxm2,lxm3))
> novos
```

```
     carapace_l tail_l carapace_w carapace_d tail_w areola_l areola_w rostrum_l
lxm1      35.33  25.15       18.36       14.57  15.40    13.26     2.60      7.06
lxm2      35.50  25.05       18.74       15.11  15.11    16.85     2.64      7.05
lxm3      35.73  26.77       18.50       15.06  17.37    13.14     2.32      7.27
     rostrum_w postorbital_w propodus_l propodus_w dactyl_l
lxm1      8.12          10.76      33.24      15.53    20.71
lxm2      7.74          11.85      33.67      15.15    20.83
lxm3      7.83          11.14      28.29      12.30    17.58
```

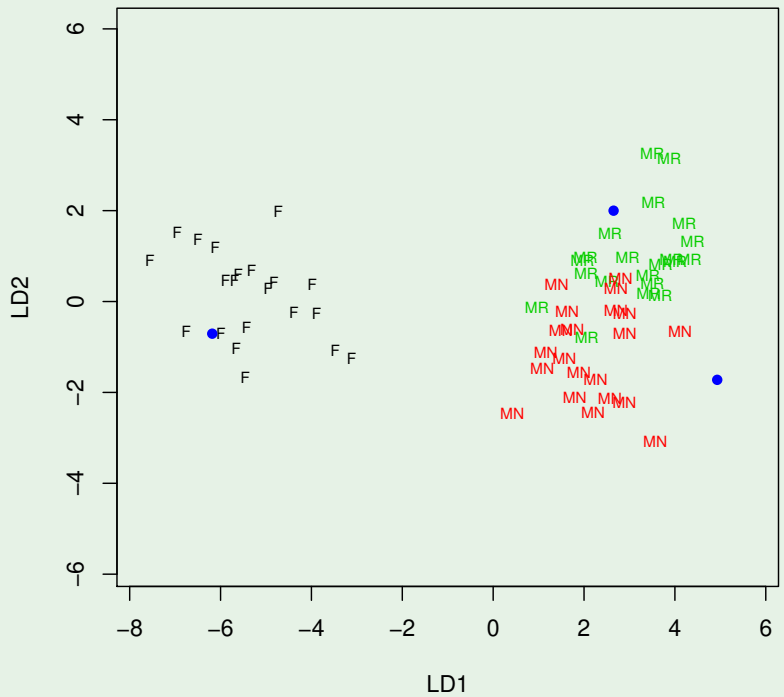
```
> predict(lav.lda, new=novos)$x
```

```
           LD1        LD2
lxm1  2.650187  1.9990716        <- coordenadas do primeiro individuo nos EDs
lxm2  4.931230 -1.7232999        <- coordenadas do segundo individuo nos EDs
lxm3 -6.183037 -0.7078646        <- coordenadas do terceiro individuo nos EDs
```

Exemplos dos lavagantes (cont.)

ADL dos lavagantes

```
> lxmp <- predict(lav.lda, new=novos)$x
> plot(lav.lda, col=as.numeric(lav.grupos), xlim=c(-8,6))
> points(lxmp, col="blue", pch=16)
```



Observações sobre a função `lda` do `MASS`

Atenção: Na função `lda`,

- a matriz $\mathbf{W}$ é definida como $\mathbf{W} = \frac{1}{n-k}\mathbf{X}^{c\,t}(\mathbf{I}_n - \mathbf{P}_G)\mathbf{X}^c$;
- a matriz $\mathbf{B}$ é definida como $\mathbf{B} = \frac{1}{k-1}\mathbf{X}^{c\,t}\mathbf{P}_G\mathbf{X}^c$;
- deixa de ser válida a decomposição $\mathbf{S} = \mathbf{W} + \mathbf{B}$.
- os valores próprios de $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$ com a função `lda` são $\frac{n-k}{k-1}$ vezes os da nossa definição. É o valor da estatística do teste F na ANOVA de cada eixo discriminante sobre o factor;
- a componente `svd` dum objecto de classe `lda` dá as raízes quadradas dos valores próprios de $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$ (definidos à moda de `lda`).

Qualidade dos eixos discriminantes

ADL dos lavagantes

```
> lav.lda$svd
[1] 21.345129  4.890076
> lav.lda$svd^2  <- Valores proprios (e valores da estatistica F)
[1] 455.61455  23.91285

> summary(aov(predict(lav.lda)$x[,1] ~ lav.grupos))
             Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
lav.grupos    2  911.2   455.6   455.6 <2e-16
Residuals    60   60.0     1.0

> summary(aov(predict(lav.lda)$x[,2] ~ lav.grupos))
             Df Sum Sq Mean Sq F value   Pr(>F)
lav.grupos    2  47.83   23.91   23.91 2.31e-08
Residuals    60  60.00    1.00
```

Qualidade de eixos discriminantes

É possível obter os valores próprios da definição original de Fisher, multiplicando os valores próprios da função `lda` por $\frac{k-1}{n-k}$.

ADL dos lavagantes

```
> lav.lda$svd^2*2/60  <- Valores próprios com W e B "à nossa moda"
[1] 15.1871516  0.7970949
```

A capacidade discriminante do primeiro eixo é 15.187, ou seja, a variabilidade entre os três grupos nesse eixo é 15.187 vezes maior que a variabilidade intra-grupo.

A capacidade discriminante do segundo eixo é fraca: 0.797, ou seja, a variabilidade entre os três grupos é, nesse eixo, menor que a variabilidade intra-grupo.

Observações sobre a função `lda` (cont.)

- as proporções (dadas na listagem) de cada valor próprio não são afectadas pelas diferentes definições.

```
> val <- lav.lda$svd^2
> val/sum(val)
[1] 0.95013247 0.04986753
> val2 <- lav.lda$svd^2*2/60
> val2/sum(val2)
[1] 0.95013247 0.04986753
```

- a **W**-ortogonalidade dos *loadings* dados na listagem também é preservada (embora a norma ao quadrado dos vectores de *loadings* seja afectada, sendo $\frac{n-k}{n-1}$ quando medida com a norma da matriz **W** definida no acetato 111).

A classificação de novos indivíduos

O método `predict` da função `lda` classifica indivíduos nos grupos, com critérios baseados em conceitos inferenciais, mas próximos da classificação pelas distâncias de Mahalanobis. As classificações são guardadas no objecto `class`.

Classificação dos lavagantes pela LDA

```
> predict(lav.lda)$class

[1] MR MR MR MR MR MR MR MN MN MR MR MR MR MR MR MR MR MR MR MR MR MN MR MN MN
[26] MN MR MN MN MN MN MN MN MN MN MN MN MN MR MN MN MN F  F  F  F  F  F  F  F
[51] F  F  F  F  F  F  F  F  F  F  F  F  F

> predict(lav.lda, new=novos)$class

[1] MR MN F
```

Tabelas de classificações

Tabelas de classificação podem ser criadas com a função `table`.

Tabelas de classificação da LDA lavagantes

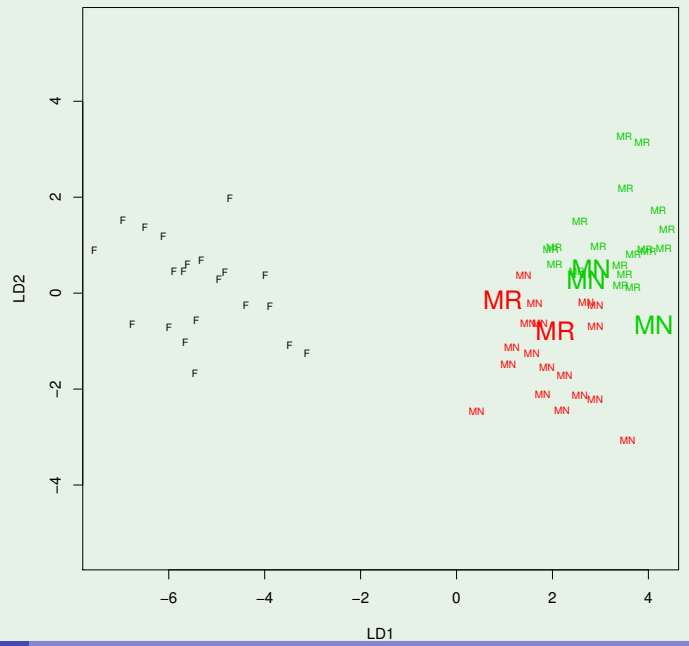
```
> lav.pred <- predict(lav.lda)$class
> table(lav.pred, lav.grupos)
        lav.grupos
lav.pred  F MN MR
      F  21  0  0
      MN  0 18  2
      MR  0  3 19
```

- Todas as fêmeas foram bem classificadas.
- Três machos não reprodutores foram incorrectamente classificados como reprodutores.
- Dois machos reprodutores foram incorrectamente classificados como não reprodutores.

Classificações erradas

Classificações erradas na LDA dos lavagantes

```
> (lav.grupos != predict(lav.lda)$class)

 [1] FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE  TRUE  TRUE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE
[17] FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE  TRUE FALSE FALSE FALSE  TRUE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE
[33] FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE  TRUE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE
[49] FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE

> lav.mal <- (lav.grupos != predict(lav.lda)$class)
> plot(lav.lda, col=as.numeric(predict(lav.lda)$class), cex=0.7+lav.mal)
```



O potencial do R: uma outra função para ADL

Exercício 17: a nossa função `adl`

```
> adl <- function(X,grupos){      <- argumentos de entrada dados (X) e classes (grupos)
grupos <- as.factor(grupos)       <- garante que 'grupos' seja factor
X <- as.matrix(X)                 <- garante que 'X' seja matriz
k <- length(levels(grupos))       <- k: número de grupos
n <- dim(X)[1]                    <- n: número de indivíduos
p <- dim(X)[2]                    <- p: número de variáveis
Ind <- model.matrix(aov(X[,1] ~ -1 + grupos))  <- cria a matriz G indicada nos acetatos
PG <- Ind %*% solve(t(Ind)%*%Ind) %*% t(Ind)   <- matriz de projecção P_G
Xc <- scale(X, scale=F)           <- matriz centrada dos dados
B <- (t(Xc) %*% PG %*% Xc)/(n-1)  <- matriz B de variabilidade entre grupos
W <- (t(Xc) %*% (diag(n)-PG) %*% Xc)/(n-1)      <- matriz W de variabilidade intra-grupos
valvec <- eigen(solve(W)%*%B)     <- valores e vectores próprios de inv(W)B
val <- Re(valvec$val)[1:(k-1)]    <- valores próprios de inv(W)B
loadings <- Re(valvec$vec)[,1:(k-1)]   <- vectores próprios de inv(W)B
if (k>2) rownames(loadings) <- colnames(X)   <- nomes de objectos de saída
else if (k==2) names(loadings) <- colnames(X)
rownames(B) <- colnames(X)
colnames(B) <- colnames(X)
rownames(W) <- colnames(X)
colnames(W) <- colnames(X)
if (k>2) colnames(loadings) <- paste("ED",1:(k-1),sep=)
scores <- Xc %*% loadings
rownames(scores) <- rownames(X)
list(B=B,W=W,val=val,loadings=loadings,scores=scores)  <- objecto (lista) de saída
    }
```

A função `adl` em acção

```
> adl(lavagantes, lav.grupos)$val
[1] 15.1871516  0.7970949        <- comparar com valores anteriores

> adl(lavagantes, lav.grupos)$loadings      <- de norma 1, W-ortogonais

                    ED1         ED2
carapace_l     0.000138748 -0.36607521
tail_l         0.046664632  0.10129240
carapace_w    -0.050147834 -0.27496636
carapace_d     0.094618019 -0.07056999
tail_w         0.700148699  0.39265005
areola_l      -0.096439122 -0.01844238
areola_w       0.567602569 -0.01083473
rostrum_l     -0.333619864  0.37498349
rostrum_w      0.089075243  0.42637815
postorbital_w -0.052155664 -0.48524647
propodus_l    -0.169873612  0.05426936
propodus_w    -0.115487617  0.21726572
dactyl_l       0.022855557  0.11174052
```