Introdução à Classificação de Padrões

Guilherme de Alencar Barreto

gbarreto@ufc.br

Grupo de Aprendizado de Máquinas – GRAMA
Departamento de Engenharia de Teleinformática
Universidade Federal do Ceará – UFC
http://lattes.cnpq.br/8902002461422112

Pré-Requisitos

1. Noções de Álgebra Linear
2. Noções de Geometria Analítica
3. Noções de Funções
4. Noções de Limites

Objetivo Geral

Apresentar vários classificadores baseados em medidas de dissimilaridade e seu amplo uso em reconhecimento de padrões, bem como relações com medidas de similaridade e o conceito de métrica.

Conteúdo dos Slides

1. Classificador do Vizinho Mais Próximo
2. Classificador do Centróide Mais Próximo
3. Medidas de Dissimilaridade
4. Técnicas de Normalização dos Dados
5. Coeficiente de Correlação e Matriz de Covariância
6. Classificador Quadrático

Classificador Vizinho Mais Próximo (NN, sigla em Inglês)

Considere um conjunto de dados de treinamento $\mathcal{X}$ formado por vetores de atributos e seus respectivos rótulos

$$\boxed{\mathcal{X} = \{(\mathbf{x}_n, \omega_n)\}_{n=1}^{N} \subset \mathbb{R}^p \times \Omega} \tag{1}$$

em que

- p é a dimensão do vetor de atributos.
- K é o número de classes.
- $\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_K\}$ é um conjunto finito de K rótulos (não necessariamente numéricos) associados às K classes do problema.
- N é o número de exemplos de treinamento, ou seja, a cardinalidade de $\mathcal{X}$: $\boxed{card(\mathcal{X}) = \sharp\mathcal{X} = N}$

Classificador Vizinho Mais Próximo (NN, sigla em Inglês)

Passo 1 - Armazenar em disco ou memória todo o conjunto $\mathcal{X}$, no formato adequado.

Passo 2 - Para cada novo vetor de atributos $\mathbf{x}$ ainda não-classificado, realizar uma busca em $\mathcal{X}$ pelo índice do vetor de atributos mais próximo de $\mathbf{x}$:

$$\boxed{i^* = \arg \min_{i=1,\ldots,N} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2} \tag{2}$$

em que $\|\mathbf{v}\|$ denota a norma euclidiana do vetor $\mathbf{v}$.

Passo 3 - Atribuir a $\mathbf{x}$ a mesma classe que $\mathbf{x}_{i^*}$.

Classificador Vizinho Mais Próximo (NN, sigla em Inglês)

- Alternativamente, os Passos 2 e 3 pode ser unificados e reescritos como um único passo da seguinte maneira:

  Passo 2 Atribuir a $\mathbf{x}$ a mesma classe que $\mathbf{x}_{i^*}$, se

$$\boxed{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{i^*}\|^2 < \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2, \quad \forall i \neq i^*} \qquad (3)$$

- Nas Expressões (2) e (3) usa-se a norma euclidiana quadrática, por dois motivos: (i) evitar o cálculo da raiz quadrada para ter a norma do vetor argumento. (ii) O valor mínimo (ou máximo) de uma função não se altera se a ela for aplicada uma operação matemática monotônica.
- Por exemplo, o mínimo da função $f(x) = |x|$ é o mesmo que o da função $g(x) = [f(x)]^2$.

Classificador Centróide Mais Próximo (MDC, sigla em Inglês)

Passo 1 - Encontrar o vetor centróide de cada classe:

$$\boxed{\mathbf{m}_i = \frac{1}{N_i} \sum_{\forall \mathbf{x} \in \omega_i} \mathbf{x}} \tag{4}$$

em que N_i é o número de exemplos da i-ésima classe (cujo rótulo é ω_i), $i = 1, ..., K$.

Passo 2 - Atribuir a $\mathbf{x}$ a mesma classe que $\mathbf{m}_{i^*}$, se

$$\boxed{\|\mathbf{x} - \mathbf{m}_{i^*}\|^2 < \|\mathbf{x} - \mathbf{m}_i\|^2, \quad \forall i \neq i^*} \tag{5}$$

em que $\|\mathbf{v}\|$ denota a norma euclidiana do vetor $\mathbf{v}$.

- É possível notar que o cálculo de distâncias é muito importante para os dois classificadores mencionados anteriormente (NN e MDC).
- Em geral, utiliza-se norma euclidiana em seus algoritmos, mas existem várias outras normas que podem ser utilizadas.
- O conhecimento destas normas é de suma importância em reconhecimento de padrões, bem como as suas interpretações geométricas.
- A seguir vamos primeiro definir formalmente uma medida de dissimilaridade (i.e. distância) e suas propriedades, para depois listar algumas que são comumente usadas em classificação e clusterização de dados.

Definição: Medidas de Dissimilaridade

- Se d_{rs} é uma medida de dissimilaridade entre os objetos[a] r e s, então deve satisfar as seguintes condições:

    1. $d_{rs} \geq 0$, para todo r, s.
    2. $d_{rr} = 0$, para todo r.
    3. $d_{rs} = d_{sr}$, para todo r, s.

- A condição 3 (simetria) nem sempre é satisfeita por certas medidas de dissimilaridade usuais (e.g. divergente de Kullback-Liebler).

[a] Tais objetos podem ser vetores, por exemplo. Ou nuvens (distribuições) de pontos.

- **Exemplo**: se a dissimilaridade entre dois lugares em uma cidade é medida pela distância percorrida por carro, então por causa de sistemas de mão única, a distância em um sentido pode ser mais longo do que a percorrida no outro.
- **Medidas de dissimilaridade** são aquelas que quanto mais próximos os objetos, menor são seus valores. Pra encurtar, dizemos que são medidas do tipo quanto menor, mais similar!
- **Medidas de similaridade** são aquelas que quanto mais próximos os objetos, maior são seus valores. Pra encurtar, dizemos que são medidas do tipo quanto maior, mais similar!

Dissimilaridade vs. Similaridade

- Medidas de dissimilaridade podem ser transformadas em medidas de similaridade usando várias transformações.
- Se d_{ij} é uma medida de dissimilaridade entre os objetos i e j, uma medida de similaridade correspondente (s_{ij}) pode ser definida como

$$\boxed{s_{ij} = \frac{1}{1 + d_{ij}}} \quad (6)$$

ou como

$$\boxed{s_{ij} = c - d_{ij}} \quad (7)$$

onde c é uma constante positiva.

Definição: Métrica

- Se além das 3 condições discutidas anteriormente, a medida de dissimilaridade também satisfaz a desigualdade triangular

$$\boxed{d_{rs} \leq d_{rt} + d_{ts}, \quad \forall r, s, t} \tag{8}$$

então a medida de dissimilaridade é uma *métrica* e o termo *distância* é normalmente adotado.
- Em Matemática, métrica é um conceito que generaliza a ideia geométrica de distância.
- Um conjunto em que há uma métrica definida recebe o nome de espaço métrico.

Definição: Distância de Minkowski de Ordem m

- A *distância de Minkwoski* é uma medida de dissimilaridade bem geral, a partir da qual podemos obter algumas das medidas de dissimilaridade mais comuns em RP.
- Sejam dois vetores reais $\mathbf{x} = [x_1\ x_2\ \cdots\ x_p]^T$ e $\mathbf{y} = [y_1\ y_2\ \cdots\ y_p]^T$; ou seja, $\mathbf{x}$, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$.
- A distância de Minkowski de ordem m entre $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ é definida pela seguinte expressão:

$$\boxed{d_M^{(m)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \left(\sum_{j=1}^{p} |x_j - y_j|^m \right)^{\frac{1}{m}}} \tag{9}$$

onde x_j e y_j são as j-ésimas componentes de $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$, respectivamente.

Se $m = 1 \Rightarrow$ Distância Quarteirão

- Se fizermos $m = 1$ na Equação (9) obtemos a expressão da distância quarteirão (*city block*, em Inglês):

$$
\begin{aligned}
d_{cb}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= |\mathbf{x} - \mathbf{y}| && (10) \\
&= \sum_{j=1}^{p} |x_j - y_j| && (11) \\
&= |x_1 - y_1| + \cdots + |x_p - y_p| && (12)
\end{aligned}
$$

Se $m = 2 \Rightarrow$ Distância Euclidiana

- Se fizermos $m = 2$ na Equação (9) obtemos a conhecida expressão da distância euclidiana:

$$
\begin{aligned}
d_e(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| && (13)\\
&= \left(\sum_{j=1}^{p} |x_j - y_j|^2 \right)^{\frac{1}{2}} && (14)\\
&= \sqrt{\sum_{j=1}^{p} |x_j - y_j|^2} && (15)\\
&= \sqrt{|x_1 - y_1|^2 + \cdots + |x_p - y_p|^2} && (16)
\end{aligned}
$$

Se $m \to \infty \Rightarrow$ Distância de Chebyshev

- Se fizermos $m \to \infty$ na Equação (9) obtemos a expressão da distância de Chebyshev:

$$
\begin{aligned}
d_{ch}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \lim_{m \to \infty} \left(\sum_{j=1}^{p} |x_j - y_j|^m \right)^{\frac{1}{m}} && (17) \\
&= \max\{|x_1 - y_1|, \ldots, |x_p - y_p|\} && (18) \\
&= \max_i |x_i - y_i| && (19)
\end{aligned}
$$

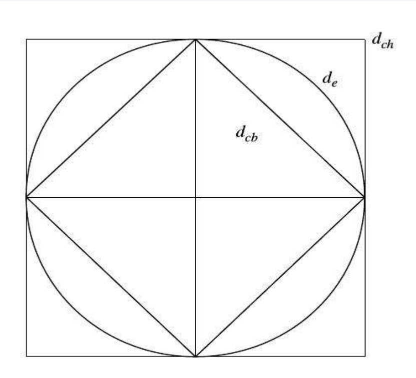
Desafio!

Demonstrar a passagem da expressão mostrada na Equação (15) para a da Equação (16), tanto computacionalmente quanto matematicamente.

Por que tantas medidas de dissimilaridade?

- Como vimos, existem muitas medidas de dissimilaridade e continuam sendo propostas novas a cada momento.
- A escolha de uma métrica particular depende da aplicação.
- Para fins de seleção/extração de atributos deve-se escolher a métrica que leva ao melhor desempenho do classificador.
- Caso as métricas conduzam a desempenhos semelhantes, a escolha de qual usar pode ser feita com base no custo computacional para sua implementação.

- A escolha da métrica deve levar em conta também a organização espacial (i.e. distribuição) dos dados.
- A figura abaixo ilustra as curvas de contorno geradas para as distâncias quarteirão, euclidiana e de Chebyshev.



Distância Quadrática

- A distância quadrática, também chamada de distância de Mahalanobis, é outra medida de dissimilaridade muito utilizada em RP.
- Sua expressão geral é dada por

$$
\begin{aligned}
d_q(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \sqrt{(\mathbf{x}-\mathbf{y})^T \mathbf{Q} (\mathbf{x}-\mathbf{y})} && (20) \\
&= \sqrt{\sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{p} (x_i - y_i) Q_{ij} (x_j - y_j)} && (21)
\end{aligned}
$$

onde $\mathbf{Q} = [Q_{ij}]_{p \times p}$ é uma matriz $p \times p$ positiva definida.

Por que a distância quadrática tem esse nome?

- Vamos considerar que os vetores $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ tem dimensão $p = 2$, podendo ser representados como

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} \tag{22}$$

- Vamos também precisar definir a matriz $\mathbf{Q}$ como

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}, \tag{23}$$

em que a, b, c e d são números reais.

Por que a distância quadrática tem esse nome? (cont.)

Assim, substituindo na Eq. (20), temos

$$\begin{aligned} d_q(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \sqrt{\begin{bmatrix} x_1 - y_1 & x_2 - y_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 - y_1 \\ x_2 - y_2 \end{bmatrix}}, \\ &= \sqrt{\begin{bmatrix} x_1 - y_1 & x_2 - y_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a(x_1 - y_1) + b(x_2 - y_2) \\ c(x_1 - y_1) + d(x_2 - y_2) \end{bmatrix}}, \end{aligned} \tag{24}$$

que resulta na seguinte expressão:

$$d_q(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sqrt{a(x_1 - y_1)^2 + (b + c)(x_1 - y_1)(x_2 - y_2) + d(x_2 - y_2)^2}$$

onde se observa a presença de termos elevados ao quadrado.

Distância quadrática vs. distância euclidiana

- Se fizermos $\mathbf{Q} = \mathbf{I}_p$ na Eq. (20), obtemos a seguinte expressão:

$$
\begin{aligned}
d_q(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \sqrt{(\mathbf{x}-\mathbf{y})^T \mathbf{I}_p (\mathbf{x}-\mathbf{y})} && (25)\\
&= \sqrt{(\mathbf{x}-\mathbf{y})^T (\mathbf{x}-\mathbf{y})} && (26)\\
&= \sqrt{\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|^2} && (27)\\
&= \|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|. && (28)
\end{aligned}
$$

- De onde podemos concluir que, neste caso particular, a distância quadrática reduz-se à distância euclidiana.

Parte I

Normalização dos Dados

Objetivos

Objetivo: Entender a necessidade de equalizar as ordens de grandeza dos atributos usados em um problema de classificação/clusterização.

- **Método 1:** Manter constante a norma dos vetores.
- **Método 2:** Mudança da escala original para os intervalos [0, 1] ou [-1,+1].
- **Método 3:** Padronização dos dados (i.e. média=0, variância=1).

Método 1: Norma Constante

- Uma das técnicas mais simples de normalização consiste em manter constantes e iguais a 1 as normas dos vetores de atributos $\mathbf{x}$ e dos centróides $\mathbf{m}_i$.
- Este procedimento deve ser aplicado a todos os vetores de atributos e todas os centróides.
- Para isso, basta dividir cada vetor por sua respectiva norma euclidiana:

$$\boxed{\mathbf{x} = \frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|}} \quad \text{e} \quad \boxed{\mathbf{m}_i = \frac{\mathbf{m}_i}{\|\mathbf{m}_i\|}} \tag{29}$$

Método 1: Norma Constante

- Por exemplo, considere o seguinte vetor, que não possui norma unitária:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \sqrt{3} \\ 3 \\ -2 \end{bmatrix} \tag{30}$$

- A norma deste vetor é calculada como

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{(\sqrt{3})^2 + (3)^2 + (-2)^2} = \sqrt{16} = 4. \tag{31}$$

- Assim, a versão normalizada do vetor $\mathbf{x}$ é dada por

$$\mathbf{x}^* = \frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|} = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} \sqrt{3} \\ 3 \\ -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}/4 \\ 3/4 \\ -1/2 \end{bmatrix} \tag{32}$$

Propriedades do Método 1: Norma Constante

- A normalização descrita no slide anterior não altera a direção do vetor, apenas muda seu comprimento.
- Em outras palavras, o vetor resultante é um múltiplo do vetor original conforme pode ser visto na operação a seguir.

$$\mathbf{x}^* = \frac{1}{\|\mathbf{x}\|}\mathbf{x} = \alpha\mathbf{x}, \tag{33}$$

  em que $\alpha = 1/\|\mathbf{x}\|$ é uma constante positiva.
- Note que a normalização assim realizada depende apenas dos valores das componentes do vetor sendo normalizado.
- Assim, chamaremos este tipo de procedimento de <u>*normalização local*</u>.

Método 2: Mudança de escala

- A normalização pelo Método 1 é particularmente útil para o classificador de máxima correlação.
- Para classificadores baseados em distância euclidiana, uma normalização que promove uma mudança na escala das variáveis, é mais comum.
- Este procedimento é realizado variável a variável e requer a determinação do valor mínimo (x_{min}) e do valor máximo (x_{max}) da variável sendo normalizada.
- Por isso, chamaremos este procedimento de *normalização global*.

Método 2: Mudança de escala para o intervalo [0,1]

$$\boxed{x^* = \frac{x - x_{min}}{x_{max} - x_{min}}} \tag{34}$$

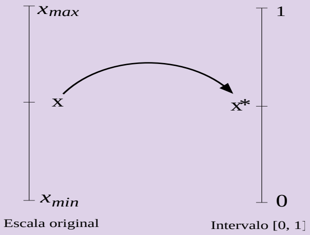


Figura : Mudança da escala original de x para o intervalo [0,1].

Método 2: Exemplo 1

- Considere o atributo X_1 (teor alcoólico) do conjunto de dados `wine.dat`.
- Para esta variável temos $x_{1,min} = 11,03$ e $x_{1,max} = 14,83$.
- Assim, a função de normalização é dada por

$$x_1^* = \frac{x_1 - x_{1,min}}{x_{1,max} - x_{1,min}} = \frac{x_1 - 11,03}{14,83 - 11,03} = \frac{x_1 - 11,03}{3,80} \quad (35)$$

- Assim, a observação $x_1 = 13,50$ na escala original, terá o seguinte valor no intervalo [0, 1]:

$$x_1^* = \frac{13,50 - 11,03}{3,80} = 0,65. \quad (36)$$

Método 2: Mudança de escala para o intervalo [-1,+1]

$$\boxed{x^* = 2\left(\frac{x - x_{min}}{x_{max} - x_{min}}\right) - 1} \quad (37)$$

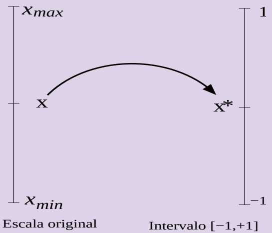


Figura : Mudança da escala original de x para o intervalo [-1,+1].

Método 2: Exemplo 2

- Considere o atributo X_1 (teor alcoólico) do conjunto de dados `wine.dat`.
- Para esta variável temos $x_{1,min} = 11,03$ e $x_{1,max} = 14,83$.
- Assim, a função de normalização é dada por

$$x_1^* = 2\left(\frac{x_1 - x_{1,min}}{x_{1,max} - x_{1,min}}\right) - 1 = 2\left(\frac{x_1 - 11,03}{3,80}\right) - 1 \quad (38)$$

- Assim, a observação $x_1 = 13,50$ na escala original, terá o seguinte valor no intervalo [-1,+1]:

$$x_1^* = 2\left(\frac{13,50 - 11,03}{3,80}\right) - 1 = 0,30. \quad (39)$$

Método 3: Padronização da variável (média=0, variância=1)

- Assim como as normalizações descritas no Método 2, devemos aplicar a padronização às variáveis do problema, uma a uma.
- Este tipo de normalização requer o cálculo da média ($\bar{x}$) e do desvio-padrão (σ_x) da variável x.
- Por isso, a padronização também pode ser chamada de normalização estatística.
- Este procedimento também é um tipo de *normalização global*.

Método 3: Padronização da variável (média=0, variância=1)

- A normalização estatística é dada por

$$\boxed{x^* = \frac{x - \bar{x}}{\sigma_x}} \qquad (40)$$

com a média e desvio-padrão amostrais de x calculados como

$$\boxed{\bar{x} = \frac{\sum_{n=1}^{N} x(n)}{N}} \quad \text{e} \quad \boxed{\sigma_x = \sqrt{\left(\frac{\sum_{n=1}^{N}(x(n) - \bar{x})^2}{N-1}\right)}} \qquad (41)$$

tal que $x(n)$ é a n-ésima observação de x e N é o número total de observações de x.

Algumas Propriedades dos Métodos 2 e 3

- As normalizações descritas nos Métodos 2 e 3 não alteram o “formato” da distribuição da variável normalizada em relação à variável original não-normalizada.
- Em outras palavras, o histograma da variável permanece o mesmo.
- Como estas técnicas de normalização só utilizam estatísticas descritivas (min, max, média e desvio-padrão) das variáveis, tomadas individualmente, a correlação entre duas variáveis quaisquer permanece a mesma antes e depois da normalização.
- A variável normalizada pelo Método 2, tem a mesma unidade da variável original. Se for normalizada pelo Método 3, a variável será adimensional.

Implementação do Método 3 no Excel e LibreOffice Calc

- Dadas N observações conjuntas de um atributo qualquer, a normalização estatística (ou padronização) podem ser facilmente implementada em planilhas numéricas.
    - No Excel, usar os comandos `PADRONIZAR` ou `NORMALIZAR`.
    - No LibreOffice Calc, usar o comando `PADRONIZAR`.

Método 3: Exemplo

- Usando o atributo X_1 (teor alcoólico) do conjunto de dados `wine.dat`.
- Para esta variável temos $\bar{x} = 13,00$ e $\sigma_1 = 0,81$.
- Assim, a função de normalização é dada por

$$x_1^* = \frac{x_1 - 13,00}{0,81} \tag{42}$$

- Assim, a observação $x_1 = 13,50$ na escala original, terá o seguinte valor padronizado:

$$x_1^* = \frac{13,50 - 13,00}{0,81} = 0,617. \tag{43}$$

Parte II

Coeficiente de Correlação

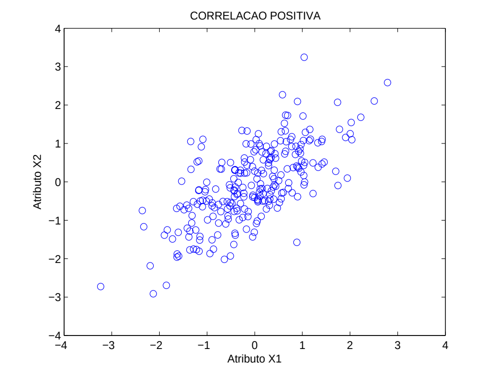
Objetivos

Objetivo: Entender como duas variáveis estão interrelacionadas do ponto de vista estatístico.

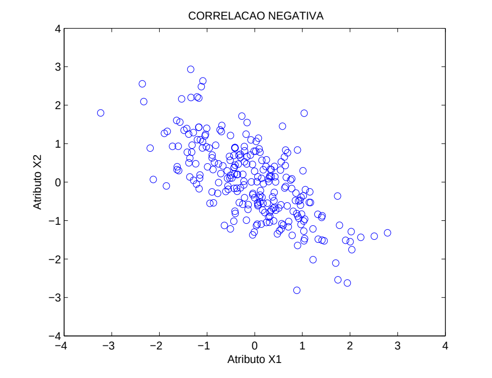
- **Método 1:** Gráfico de dispersão (qualitativo).
- **Método 2:** Coeficiente de Correlação (quantitativo).

Objetivo: Discutir relação como modelo de regressão linear simples.

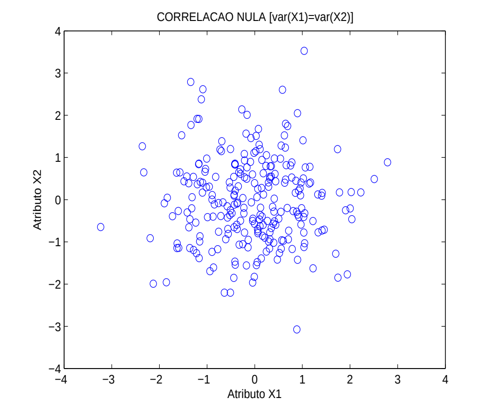
- **Correlação Positiva**: ocorre quando um atributo tende a aumentar, o outro também tende a aumentar.



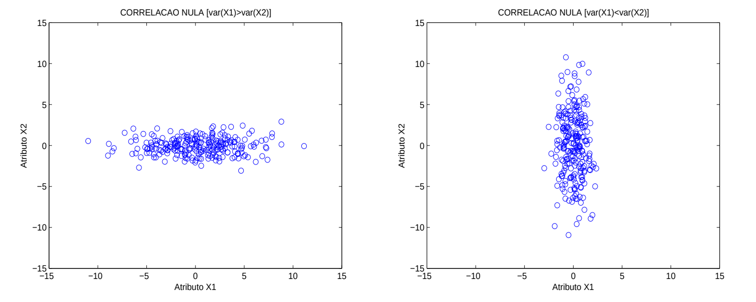
- **Correlação Negativa**: ocorre quando um atributo tende a aumentar, o outro também tende a aumentar.



- **Correlação Nula [Caso 1: var(X1)=var(X2)]**: não há um padrão definido de tendência.



- **Correlação Nula [Caso 2: var(X1) $\neq$ var(X2)]**: também ocorre quando ao aumentar um atributo não há mudança significativa nos valores do outro atributo.



Definição

- O coeficiente de correlação entre duas variáveis aleatórias quaisquer é dado pela seguinte expressão:

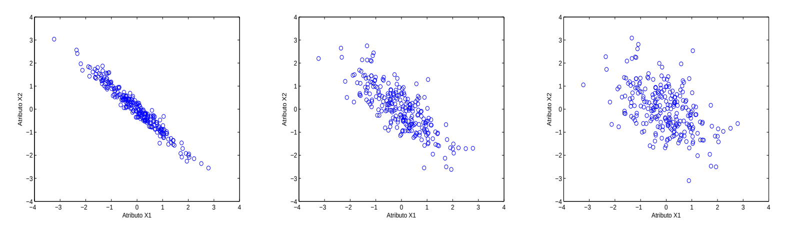
$$\boxed{\rho_{12} = \frac{\mathrm{cov}(X_1, X_2)}{\mathrm{dp}(X_1) \cdot \mathrm{dp}(X_2)} = \frac{\sigma_{12}}{\sigma_1 \cdot \sigma_2}} \tag{44}$$

em que

$$\begin{aligned}
\sigma_{12} &= \mathrm{cov}(X1, X2) = \text{covariância entre } X_1 \text{ e } X_2. \\
\sigma_1 &= \mathrm{dp}(X_1) = \text{desvio-padrão de } X_1 = \sqrt{\mathrm{var}(X_1)} \\
\sigma_2 &= \mathrm{dp}(X_2) = \text{desvio-padrão de } X_2 = \sqrt{\mathrm{var}(X_2)}
\end{aligned}$$

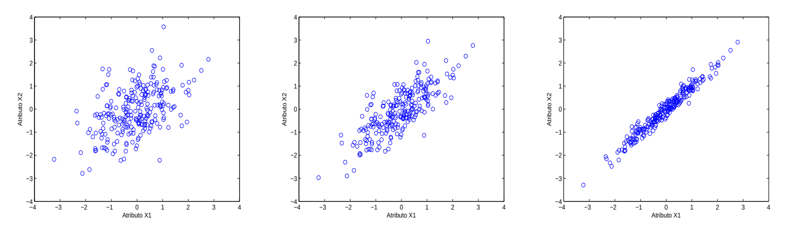
- Note que: $-1 \leq \rho(X_1, X_2) \leq 1$.

- Se $-1 < \rho_{12} < 0$, então X_1 e X_2 estão **negativamente** correlacionadas.
- Quanto mais próximo ρ_{12} estiver de -1, maior é a correlação negativa entre X_1 e X_2.



$\rho_{12} = -0.98$ $\rho_{12} = -0.8$ $\rho_{12} = -0.5$

- Se $0 < \rho_{12} \leq 1$, então X_1 e X_2 estão **positivamente** correlacionadas.
- Quanto mais próximo ρ_{12} estiver de 1, maior é a correlação positiva entre X_1 e X_2.



$\rho_{12} = 0.5$ $\rho_{12} = 0.8$ $\rho_{12} = 0.98$

- A variância de uma variável aleatória é uma medida de sua dispersão (i.e. espalhamento) em torno de seu valor médio.
- Para um conjunto de N observações de X qualquer, sua variância amostral é dada por

$$\boxed{\sigma_x^2 = \frac{\sum_{n=1}^{N}(x(n) - \bar{x})^2}{N-1}} \tag{45}$$

em que $x(n)$ é a n-ésima observação de X e $\bar{x}$ é a média amostral de X calculada como

$$\boxed{\bar{x} = \frac{\sum_{n=1}^{N} x(n)}{N}} \tag{46}$$

- O desvio padrão de X é definido como $\sigma_x = \sqrt{\sigma_x^2}$.

- A covariância entre atributos é a média dos produtos dos desvios de cada atributo em relação às suas respectivas médias.
- Para N observações conjuntas de (X_1, X_2), a covariância amostral entre X_1 e X_2 é dada por

$$\boxed{\sigma_{12} = \frac{\sum_{n=1}^{N}(x_1(n) - \bar{x}_1)(x_2(n) - \bar{x}_2)}{N-1}} \tag{47}$$

em que $x_1(n)$ e $x_2(n)$ denotam as n-ésimas observações de X_1 e X_2, respectivamente; enquanto $\bar{x}_1$ e $\bar{x}_2$ são as médias amostrais correspondentes.
- Note que se $X_1 = X_2$, temos que $\sigma_{12} = \sigma_1^2 = \sigma_2^2$. Ou seja, covariância reduz-se à variância, se $X_1 = X_2$.

Implementação

- Dadas N observações conjuntas de (X_1, X_2), a covariância entre X_1 e X_2 e os desvios-padrão de X_1 e X_2 podem ser facilmente calculados em diferentes softwares.
  - No Matlab/Octave, usar os comandos `cov` e `std`.
  - No Excel[a], usar os comandos `COVAR` e `DESVPAD`.
  - No LibreOffice Calc, usar os comandos `COVAR` e `DESVPAD`.

[a] www.bertolo.pro.br/matematica/Disciplinas/3ano/Estatistica/Bimestre2/EstatisticaAplicada3.pdf

Implementação

- Dadas N observações conjuntas de (X_1, X_2), o coeficiente de correlação (ρ_{12}) também pode ser calculado diretamente em vários pacotes de software.

  - No Matlab/Octave, usar os comandos `corrcoef`.
  - No Excel[a], usar o comando `CORREL`.
  - No LibreOffice Calc, usar o comando `CORREL`.

[a] www.bertolo.pro.br/matematica/Disciplinas/3ano/Estatistica/Bimestre2/EstatisticaAplicada3.pdf

- Uma interessante relação teórica entre o gráfico de espalhamento e o coeficiente de correlação pode ser verificada através da inclinação da reta de regressão linear (ou linha de tendência)

$$y = ax + b \qquad (\text{ou } x_2 = ax_1 + b), \tag{48}$$

ajustada aos dados pelo método dos mínimos quadrados.

- As constante a e b são chamadas, respectivamente, de inclinação e intercepto da reta de tendência, sendo calculados como

$$\boxed{a = \left(\frac{\sigma_2}{\sigma_1}\right)\rho_{12}} \qquad \text{e} \qquad \boxed{b = \bar{x}_2 - a\bar{x}_1}. \tag{49}$$

- Note que no slide anterior escrevemos a inclinação da reta de regressão como sendo diretamente proporcional ao coeficiente de correlação das variáveis X_1 e X_2, ou seja

$$\boxed{a = k \cdot \rho_{12}}, \qquad (50)$$

em que a constante de proporcionalidade é dada pela razão entre os desvios-padrão de X_2 e X_1:

$$\boxed{k = \frac{\sigma_2}{\sigma_1}}. \qquad (51)$$

- Se os desvios-padrão forem o mesmo para as duas variáveis, temos que a inclinação será igual ao coeficiente de correlação: $a = \rho_{12}$, se $\sigma_1 = \sigma_2$.

Implementação

- Dadas N observações conjuntas de (X_1, X_2), a inclinação da linha de tendência ajustada a este conjunto de observações pode ser facilmente calculada em planilhas numéricas.
  - No Excel e no LibreOffice Calc, usar o comando `INCLINAÇÃO`.

Parte III

Classificador Quadrático

- Costuma-se dispor as covariâncias entre todas as variáveis, tomadas duas a duas, σ_{ij}, $i, j = 1, ..., p$, em uma *matriz de covariância*, $\mathbf{C_x} = [\sigma_{ij}]_{p \times p}$:

$$\mathbf{C_x} = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1p} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{p1} & \cdots & \cdots & \sigma_p^2 \end{bmatrix}$$

- Os elementos da diagonal principal desta matriz são as variâncias dos p atributos envolvidas no problema.
- Enquanto fora da diagonal principal tem-se as covariâncias das variáveis X_i e X_j, para $i \neq j$.

- A matriz de covariância também pode ser escrita como

$$\mathbf{C}_{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \rho_{12}\sigma_1\sigma_2 & \cdots & \rho_{1p}\sigma_1\sigma_p \\ \rho_{21}\sigma_2\sigma_1 & \sigma_2^2 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{p1}\sigma_p\sigma_1 & \cdots & \cdots & \sigma_p^2 \end{bmatrix}$$

se lembrarmos que o coeficiente de correlação entre X_i e X_j é dado por

$$\boxed{\rho_{ij} = \frac{\sigma_{ij}}{\sigma_i \cdot \sigma_j}} \tag{52}$$

de onde tiramos que a covariância entre X_i e X_j pode ser expressa como

$$\boxed{\sigma_{ij} = \rho_{ij}\sigma_i\sigma_j} \tag{53}$$

Caso particular: $\rho_{ij} = 0$

- Quando as correlações entre os atributos são todas nulas (i.e. $\rho_{ij} = 0, \forall i, j$), a matriz de covariância correspondente é diagonal:

$$\mathbf{C_x} = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_p^2 \end{bmatrix}_{p \times p} = \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, ..., \sigma_p^2)$$

Caso particular: $\rho_{ij} = 0$

- Para este caso particular, o determinante da matriz é facilmente calculado pelo produto dos elementos da diagonal principal:

$$|\mathbf{C}_{\mathbf{x}}| = \sigma_1^2 \cdot \sigma_2^2 \cdots \sigma_p^2 = \prod_{i=1}^{p} \sigma_i^2 \tag{54}$$

- A inversa de tal matriz também é facilmente calculada

$$\mathbf{C}_{\mathbf{x}}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1^2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sigma_2^2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{\sigma_p^2} \end{bmatrix}_{p\times p} = \mathrm{diag}\left(\frac{1}{\sigma_1^2}, \frac{1}{\sigma_2^2}, \ldots, \frac{1}{\sigma_p^2}\right)$$

Propriedades da Matriz de Covariância

1. A matriz $\mathbf{C_x}$ é *simétrica*, pois $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$:

$$\mathbf{C_x} = \mathbf{C_x}^T$$

2. A matriz $\mathbf{C_x}$ é *definida positiva*:

$$\mathbf{x}^T\mathbf{C}\mathbf{x} > 0,$$

para qualquer vetor $\mathbf{x}$ real e não-nulo.

3. Os autovalores λ_i de $\mathbf{C_x}$ são sempre positivos.
4. O determinante de $\mathbf{C_x}$ é sempre positivo.

Exercício Resolvido 1 (Matriz de Covariância)

- Dada a seguinte matriz:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0,8 \\ 0,8 & 4 \end{bmatrix}$$

- Pede-se determinar se ela pode ser candidata a matriz de covariância.
- **Solução:**
  1. Logo de cara vemos que a matriz é simétrica!
  2. Seu determinante é positivo: $\det(\mathbf{A}) = 3{,}36$.
  3. E seus autovalores são positivos: $\lambda_1 = 0{,}8$ e $\lambda_2 = 4{,}2$.
- Logo, concluímos que a matriz **A** pode de fato ser uma matriz de covariância.

Matriz de Covariância no Matalb/Octave e no Excel

- Dadas N observações conjuntas de p atributos, a matriz de covariância pode ser facilmente calculada em vários ambientes de programação científica (Matlab/Octave) e em planilhas numéricas.
  - No Matlab/Octave, usar o comando `COV`.
  - No Excel, faz-se necessário adicionar um plugin de análise de dados. O tutorial abaixo disponível na internet ensina como fazê-lo.

    `www.youtube.com/watch?v=5fEdfQ03g4c`

Classificador Quadrático

Passo 1 - Determinar o vetor centróide de cada classe:

$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{N_i} \sum_{\forall \mathbf{x} \in \omega_i} \mathbf{x} \qquad (55)$$

onde N_i é o número de exemplos da classe ω_i, $i = 1, ..., K$.

Passo 2 - Determinar a matriz de covariância de cada classe:

$$\mathbf{C}_i = \frac{1}{N_i} \sum_{\forall \mathbf{x} \in \omega_i} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)(\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)^T \qquad (56)$$

Passo 3 - Atribuir a $\mathbf{x}$ a mesma classe que $\mathbf{m}_{i^*}$, se

$$(\mathbf{x} - \mathbf{m}_{i^*})^T \mathbf{C}_{i^*}^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_{i^*}) < (\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)^T \mathbf{C}_i^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_i), \quad \forall i \neq i^* \qquad (57)$$

Distância Quadrática em Classificação e Normalização

- Ao usar da distância quadrática em classificação, não é necessário normalizar os dados previamente.
- Isto é feito automaticamente pela matriz $\mathbf{C}_i^{-1}$.
- A título de exemplo, vamos usar apenas 2 atributos.
- Para simplificar, usaremos uma única matriz de covariância para todas as classes:

$$\mathbf{C}_i = \mathbf{C}_\mathbf{x} = \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2) = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 \end{bmatrix}. \tag{58}$$

- Deste modo, a matriz inversa é dada por como

$$\mathbf{Q} = \mathbf{C}_\mathbf{x}^{-1} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sigma_2^2} \end{bmatrix} \tag{59}$$

Distância Quadrática em Classificação e Normalização

- Podemos então determinar a distância quadrática de um vetor de atributos $\mathbf{x}$ para o centróide da i-ésima classe:

$$
\begin{aligned}
d_q(\mathbf{x},\mathbf{m}_i) &= \sqrt{[(x_1-m_{i1}) \quad (x_2-m_{i2})]\begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sigma_2^2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} (x_1-m_{i1}) \\ (x_2-m_{i2}) \end{bmatrix}} \\
&= \sqrt{[(x_1-m_{i1}) \quad (x_2-m_{i2})]\begin{bmatrix} \frac{(x_1-m_{i1})}{\sigma_1^2} \\ \\ \frac{(x_2-m_{i2})}{\sigma_2^2} \end{bmatrix}},
\end{aligned}
$$

Distância Quadrática em Classificação e Normalização

- Que resulta na seguinte expressão:

$$d_q(\mathbf{x}, \mathbf{m}_i) = \sqrt{\left(\frac{x_1 - m_{i1}}{\sigma_1}\right)^2 + \left(\frac{x_2 - m_{i2}}{\sigma_2}\right)^2} \tag{60}$$

- De onde concluímos que, ao usar a distância quadrática, os atributos x_1 e x_2 acabam sendo automaticamente normalizados pelos seus respectivos desvios-padrão!
- Compare os termos da expressão (60) com a expressão da normalização estatística em (40), repetida abaixo:

$$\boxed{x^* = \frac{x - \bar{x}}{\sigma_x}} \tag{61}$$

Parte IV

Estimação da Matriz de Covariâcia

Estimação do Vetor de Médias e da Matriz de Correlação

- Seja um conjunto de N observações do vetor aleatório $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$:
$$\{\mathbf{x}(1), \mathbf{x}(2), ..., \mathbf{x}(N)\}$$
- O vetor de médias é estimado pela seguinte expressão:
$$\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}(i) \quad (62)$$
- A matriz de correlação $\mathbf{R_x}$ é estimada pela seguinte expressão:
$$\hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{x}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}(i)\mathbf{x}^T(i) \quad (63)$$

Estimação da Matriz de Correlação - Forma Matricial

- Considere que os N vetores aleatórios estão organizados como sendo as colunas de uma matriz $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{p \times N}$:

$$\mathbf{X} = [\mathbf{x}(1) \,|\, \mathbf{x}(2) \,|\, \cdots \,|\, \mathbf{x}(N)] \tag{64}$$

- Desta forma, a matriz de correlação pode ser estimada por meio da seguinte expressão:

$$\hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{x}} = \frac{1}{N}\mathbf{X}\mathbf{X}^T \tag{65}$$

- Esta última expressão é particularmente útil na economia de notação matemática e para implementação em ambientes de computação numérica, tais como Matlab, Octave e Scilab.

Estimação da Matriz de Covariância - Forma Vetorial

- A matriz de covariância pode ser estimada diretamente por meio da seguinte expressão:

$$\hat{\mathbf{C}}_{\mathbf{x}} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}[\mathbf{x}(i) - \bar{\mathbf{x}}][\mathbf{x}(i) - \bar{\mathbf{x}}]^T \tag{66}$$

- Ou então, através da seguinte expressão:

$$\hat{\mathbf{C}}_{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{x}} - \bar{\mathbf{x}}\bar{\mathbf{x}}^T \tag{67}$$

Estimação da Matriz de Covariância - Forma Matricial

- Usando a definição da matriz de dados $\mathbf{X}$, dada em (64), a matriz de covariância pode ainda ser estimada por meio da seguinte expressão:

$$\hat{\mathbf{C}}_{\mathbf{x}} = \frac{1}{N}[\mathbf{X} - \mathbf{M}][\mathbf{X} - \mathbf{M}]^T \tag{68}$$

em que $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{p \times N}$ é uma matriz cujas colunas são formadas pelo vetor médio $\bar{\mathbf{x}}$, repetido N vezes, ou seja:

$$\mathbf{M} = [\bar{\mathbf{x}} \,|\, \bar{\mathbf{x}} \,|\, \cdots \,|\, \bar{\mathbf{x}}] \tag{69}$$

Estimação do Vetor de Médias - Forma Recursiva

- A Equação (62) utiliza todos os vetores aleatórios de uma só vez na estimação do vetor $\bar{\mathbf{X}}$.
- Em muitos casos, os vetores só estão disponíveis um-a-um, de forma seqüencial. Assim, deve-se estimar tal vetor recursivamente. Por exemplo:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{X}}(n) &= \frac{n-1}{n}\bar{\mathbf{X}}(n-1) + \frac{1}{n}\mathbf{x}(n) \\ &= \alpha\bar{\mathbf{X}}(n-1) + (1-\alpha)\mathbf{x}(n) \end{aligned} \tag{70}$$

  em que n é a iteração atual, $\mathbf{x}(n)$ é o vetor sendo observado e $0 < \alpha < 1$ denota uma constante.
- Em $n = 0$, faz-se $\bar{\mathbf{X}}(0) = \mathbf{0}_p$ = vetor-nulo de dimensão $p \times 1$.

Estimação da Matriz de Correlação - Forma Recursiva

- As técnicas anteriores utilizam todos os vetores aleatórios de uma única vez na estimação das matrizes $\mathbf{C_x}$ e $\mathbf{R_x}$.
- Em muitos casos, os vetores só estão disponíveis um-a-um, de forma seqüencial. Assim, deve-se estimar tais matrizes recursivamente. Por exemplo:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{x}}(n) &= \frac{n-1}{n}\hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{x}}(n-1) + \frac{1}{n}\mathbf{x}(n)\mathbf{x}^T(n) \\ &= \alpha\hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{x}}(n-1) + (1-\alpha)\mathbf{x}(n)\mathbf{x}^T(n) \end{aligned} \qquad (71)$$

  em que n é a iteração atual, $\mathbf{x}(n)$ é o vetor sendo observado e $0 < \alpha < 1$ denota uma constante.
- Em $n = 0$, faz-se $\hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{x}}(0) = \mathbf{I}_p$ = matriz identidade $p \times p$.

Exemplo no Matlab: Funções nativas `mean()` e `cov()`

- Os comandos a seguir ilustram como determinar o vetor de médias e a matriz de covariância para um conjunto de N observações de um vetor aleatório gaussiano de dimensão 2:

```
» p=2;     % dim.  vetor aleatorio
» N=5000;     % total de observacoes
» X=randn(N, p); % gera vetores aleatorios
» M=mean(X)
   M = 0.0097     -0.0027
» Cx=cov(X)
   Cx = 1.0224     -0.0124
       -0.0124      0.9887
```

Exemplo no Matlab: Função `mcovar()`

- A Eq. (66) pode ser implementada pela seguinte rotina:

```
function C=mcovar(X)

[N p]=size(X);
soma=zeros(p);
[N p]=size(X);
M=sum(X)/N; % vetor de medias
for i=1:N,
   soma = soma + (X(i,:)-M)'*(X(i,:)-M);
end
C=soma/N; % Matriz de covariancia
```

- Para executar no Matlab: » `Cx = mcovar(X);`

Estimando a Matriz de Covariância pela Função `mcovar()`

- A matriz estimada pela rotina `mcovar` é dada por:

```
» Cx=mcovar(X) % Funcao criada no Matlab
    Cx = 1.0222     -0.0124
        -0.0124      0.9885
```

Exercício Computacional Proposto

- Implementar a Eq. (67) como uma rotina do Matlab chamada `mcovar2` e comparar o resultado com o gerado pela função pronta `cov` e pela rotina `mcovar`.

Parte V

Distribuição Gaussiana Bivariada

FDP Gaussiana Bivariada

- Considerando $p = 2$, o vetor aleatório e o vetor de médias passam a ser representados como:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix} \tag{72}$$

- Logo, a matriz de covariância $\mathbf{C_x}$ reduz-se a uma matriz quadrada de ordem 2:

$$\mathbf{C_x} = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} \\ \sigma_{12} & \sigma_2^2 \end{bmatrix}_{2\times 2}$$

FDP Gaussiana Bivariada (cont.-1)

- Uma forma alternativa da matriz de covariância para o caso bidimensional é dada por:

$$\mathbf{C_x} = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 \\ \rho\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 \end{bmatrix} \quad (73)$$

em que ρ é chamado de *Coeficiente de Correlação* entre x_1 e x_2:

$$\boxed{\rho = \frac{\sigma_{12}}{\sigma_1\sigma_2}} \quad (74)$$

em que σ_1 e σ_2 são os desvios-padrões de x_1 e x_2, respectivamente.

FDP Gaussiana Bivariada (cont.-2)

- Assim, o determinante da matriz de covariância é dado por:

$$\begin{aligned} |\mathbf{C}_\mathbf{x}| &= \begin{vmatrix} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 \\ \rho\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 \end{vmatrix} \\ &= \sigma_1^2\sigma_2^2 - (\rho\sigma_1\sigma_2)(\rho\sigma_1\sigma_2) \\ &= (1-\rho^2)\sigma_1^2\sigma_2^2 \end{aligned} \tag{75}$$

- E a inversa da matriz de covariância é dada por:

$$\mathbf{C}_\mathbf{x}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{\sigma_2^2}{|\mathbf{C}_\mathbf{x}|} & -\frac{\rho\sigma_1\sigma_2}{|\mathbf{C}_\mathbf{x}|} \\ -\frac{\rho\sigma_1\sigma_2}{|\mathbf{C}_\mathbf{x}|} & \frac{\sigma_1^2}{|\mathbf{C}_\mathbf{x}|} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{(1-\rho^2)\sigma_1^2} & \frac{-\rho}{(1-\rho^2)\sigma_1^2\sigma_2^2} \\ \frac{-\rho}{(1-\rho^2)\sigma_1^2\sigma_2^2} & \frac{1}{(1-\rho^2)\sigma_2^2} \end{bmatrix}$$

FDP Gaussiana Bivariada (cont.-3)

- Finalmente, podemos escrever a FDP gaussiana bivariada como:

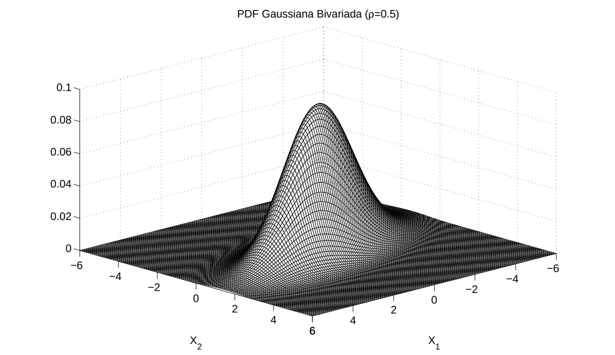
$$f_{\mathbf{x}}(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2\sqrt{1-\rho^2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}Q(x_1, x_2)\right\}, \quad (76)$$

em que

$$\boxed{Q(x_1, x_2) = \frac{1}{(1-\rho^2)}\left[\frac{(x_1-\mu_1)^2}{\sigma_1^2} - \frac{2\rho(x_1-\mu_1)(x_2-\mu_2)}{\sigma_1\sigma_2} + \frac{(x_2-\mu_2)^2}{\sigma_2^2}\right]}$$

FDP Gaussiana Bivariada (cont.-4)

- Parâmetros: $\mu_1 = \mu_2 = 0$, $\sigma_1 = 1$, $\sigma_2 = 2$ e $\rho = 0{,}5$.



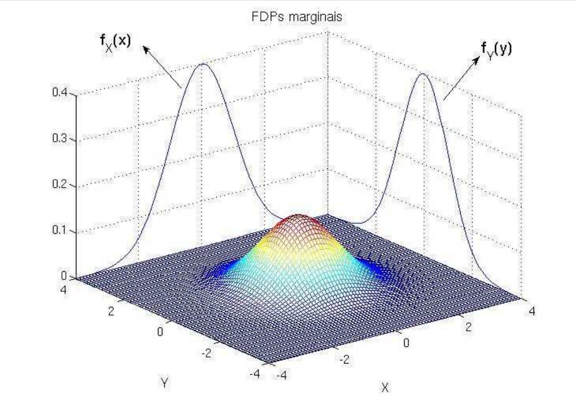
FDPs Marginais da FDP Gaussiana Bivariada

- As PDF gaussianas marginais de X_1 e X_2 são dadas pelas seguintes expressões (Demonstrar!):

$$\begin{aligned} f_{X_1}(x_1) &= \int_{-\infty}^{\infty} f_{\mathbf{x}}(x_1, x_2) dx_2 \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} \exp\left\{ -\frac{(x_1 - \mu_1)^2}{2\sigma_1^2} \right\} \\ f_{X_2}(x_2) &= \int_{-\infty}^{\infty} f_{\mathbf{x}}(x_1, x_2) dx_1 \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} \exp\left\{ -\frac{(x_2 - \mu_2)^2}{2\sigma_2^2} \right\} \end{aligned}$$

FDPs Marginais da FDP Gaussiana Bivariada (cont.-1)

- Parâmetros: $\mu_1 = \mu_2 = 0$, $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$ e $\rho = 0$.



FDP Gaussiana Bivariada com $\rho = 0$.

- Quando $\rho = 0$, tem-se as seguintes conseqüências para a matriz de covariância, seu determinante e sua inversa:

$$\mathbf{C_x} = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad |\mathbf{C_x}| = \sigma_1^2\sigma_2^2$$

$$\mathbf{C_x}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sigma_2^2} \end{bmatrix}$$

FDP Gaussiana Bivariada com $\rho = 0$. (cont.-1)

- Note que com $\rho = 0$, podemos escrever a FDP gaussiana bivariada como:

$$f_{\mathbf{x}}(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{(x_1-\mu_1)^2}{\sigma_1^2} + \frac{(x_2-\mu_2)^2}{\sigma_2^2}\right]\right\}$$

- Ou seja, podemos escrever:

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{x}}(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} e^{\left\{-\frac{(x_1-\mu_1)^2}{2\sigma_1^2}\right\}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} e^{\left\{-\frac{(x_2-\mu_2)^2}{2\sigma_2^2}\right\}} \\ &= f_{X_1}(x_1) \cdot f_{X_2}(x_2) \qquad (77) \end{aligned}$$

Não-Correlação e Independência

- **Regra Geral**:

  Se variáveis aleatórias são independentes, então elas também são não-correlacionadas!

- O raciocínio inverso não é válido:

  Se variáveis aleatórias são não-correlacionadas, isto **não** *implica que elas sejam independentes!*

- A Eq. (77) revela uma importante exceção à regra geral:

  Variáveis aleatórias gaussianas não-correlacionadas são **sempre** *independentes!!*

Parte VI

Contornos da Gaussiana Bivariada

Contornos da FDP Gaussiana Bivariada

- Vimos que o gráfico da FDP gaussiana bivariada consiste em uma superfície tridimensional.
- Na prática, não há necessidade de desenhar esta superfície toda vez que o interesse for a análise **qualitativa** da correlação entre duas variáveis aleatórias x_i e x_j.
- Esta análise, pode ser feita numericamente através do coeficiente de correlação ρ_{ij}, ou através das **Curvas de Contorno**.

Contornos da FDP Gaussiana Bivariada

- Uma curva de contorno é a curva formada pelo **lugar geométrico** dos pontos (x_1, x_2) que satisfazem a equação $f_{\mathbf{x}}(x_1, x_2) = C$, em que $C > 0$ é uma constante.
- Matematicamente, isto é o mesmo que escrever:

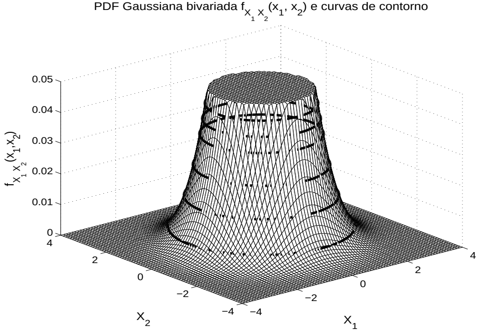
$$f_{\mathbf{x}}(x_1, x_2) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2}Q(x_1, x_2)\right\} = C, \tag{78}$$

em que

$$\boxed{Q(x_1, x_2) = \frac{1}{(1-\rho^2)}\left[\frac{(x_1-\mu_1)^2}{\sigma_1^2} - \frac{2\rho(x_1-\mu_1)(x_2-\mu_2)}{\sigma_1\sigma_2} + \frac{(x_2-\mu_2)^2}{\sigma_2^2}\right]}$$

Contornos da FDP Gaussiana Bivariada (cont.-1)

- Geometricamente,uma curva de contorno é a curva fechada constituída pelo perfil resultante de um corte transversal da superfície $f_{\mathbf{x}}(x_1, x_2)$ a uma altura C.



Contornos da FDP Gaussiana Bivariada (cont.-2)

- Após alguma manipulação algébrica chega-se à seguinte expressão:

$$\frac{(x_1-\mu_1)^2}{\sigma_1^2} - \frac{2\rho(x_1-\mu_1)(x_2-\mu_2)}{\sigma_1\sigma_2} + \frac{(x_2-\mu_2)^2}{\sigma_2^2} = C \quad (79)$$

- A forma da curva da Eq. (79) depende dos valores de ρ, σ_1 e σ_2.
- Dois casos de interesse serão estudados a seguir, a saber:

1. **Variáveis Não-Correlacionadas** ($\rho = 0$)
2. **Variáveis Correlacionadas** ($\rho \neq 0$)

Contornos da FDP Gaussiana Bivariada ($\rho = 0$)

- Neste caso, a Eq. (79) reduz-se à seguinte expressão:

$$\frac{(x_1 - \mu_1)^2}{\sigma_1^2} + \frac{(x_2 - \mu_2)^2}{\sigma_2^2} = C \tag{80}$$

a partir da qual, após dividir ambos os lados por C, chega-se à *forma canônica* da elipse:

$$\boxed{\frac{(x_1 - \mu_1)^2}{(\sqrt{C}\sigma_1)^2} + \frac{(x_2 - \mu_2)^2}{(\sqrt{C}\sigma_2)^2} = 1} \tag{81}$$

- Esta elipse tem centro na coordenada (μ_1, μ_2) e os comprimentos dos semi-eixos são dados por $\sqrt{C}\sigma_1$ e $\sqrt{C}\sigma_2$.

Contornos da FDP Gaussiana Bivariada ($\rho = 0$) (cont.-1)

- Temos 3 casos a considerar:

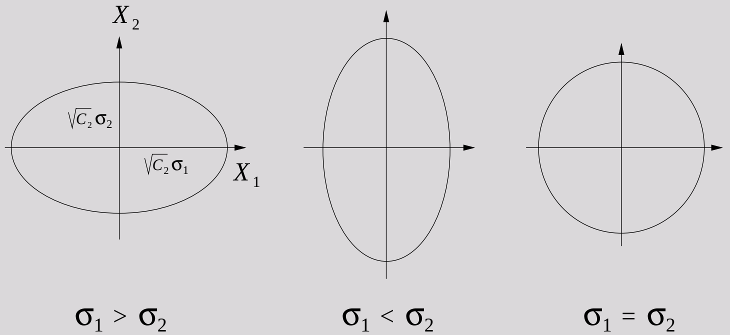
  $\sigma_1 > \sigma_2$ - Elipse com eixo maior ao longo da reta $x_2 = 0$, ou seja, mais alongada na horizontal.

  $\sigma_1 < \sigma_2$ - Elipse com eixo maior ao longo da reta $x_1 = 0$, ou seja, mais alongada na vertical.

  $\sigma_1 = \sigma_2$ - Elipse degenerada em uma circunferência.

- A figura no slide a seguir ilustra os três casos supracitados.

Contornos da FDP Gaussiana Bivariada ($\rho = 0$) (cont.-2)



Contornos da FDP Gaussiana Bivariada ($\rho \neq 0$)

- Neste caso, a Eq. (79), continua representando uma curva de contorno em forma de elipse.
- Contudo, torna-se importante conhecer o efeito introduzido pelo termo

$$-\frac{2\rho(x_1-\mu_1)(x_2-\mu_2)}{\sigma_1\sigma_2}, \tag{82}$$

no desenho da elipse.
- Para facilitar a análise, vamos assumir $\mu_1 = \mu_2 = 0$ e $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$.
- Assim, a Eq. (79) passa a ser escrita da seguinte maneira:

$$x_1^2 - 2\rho x_1 x_2 + x_2^2 = C \tag{83}$$

Contornos da FDP Gaussiana Bivariada ($\rho \neq 0$) (cont.-1)

- A Eq. (83) pode ser reorganizada de tal modo a representar uma equação do segundo grau em x_2:

$$a x_2^2 + b x_2 + c = 0 \tag{84}$$

em que $a = 1$, $b = -2\rho x_1$ e $c = x_1^2 - C_2$.

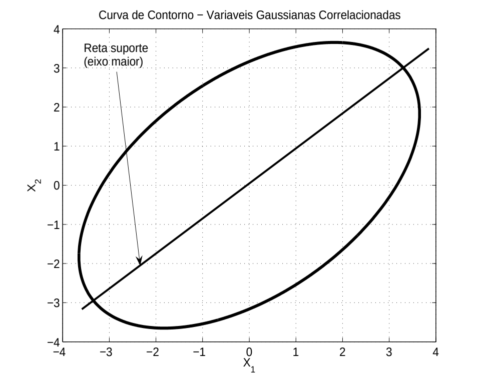
- As raízes desta equação são calculadas pela seguinte expressão:

$$x_2 = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \tag{85}$$

- Usando a Eq. (84), define-se primeiramente uma faixa de valores para x_1 e, em seguida, os valores de x_2 são calculados para cada valor de x_1 usando a Eq. (85).

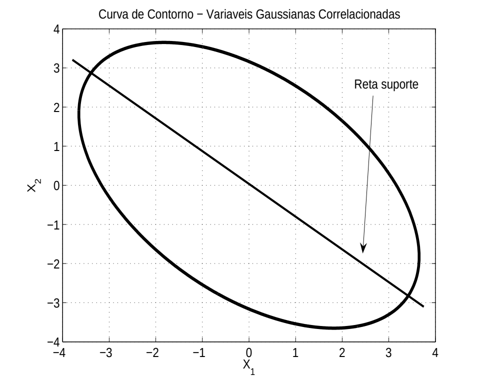
Contornos da FDP Gaussiana Bivariada ($\rho \neq 0$) (cont.-2)

- A figura abaixo ilustra uma curva de contorno para variáveis aleatórias x_1 e x_2 correlacionadas positivamente ($\rho = 0{,}5$).



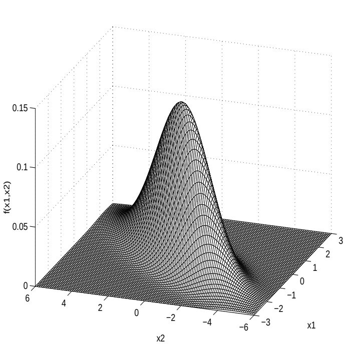
Contornos da FDP Gaussiana Bivariada ($\rho \neq 0$) (cont.-3)

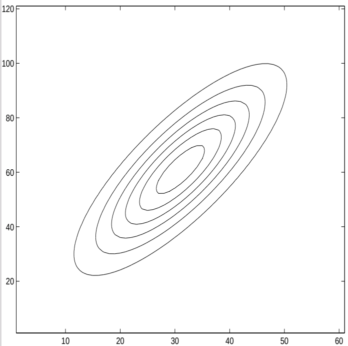
- A figura abaixo ilustra uma curva de contorno para variáveis aleatórias x_1 e x_2 correlacionadas negativamente ($\rho =$ -0,5).



Contornos da FDP Gaussiana Bivariada ($\rho = 0{,}8$) (cont.-4)

- Parâmetros: $\mu_1 = \mu_2 = 0$, $\sigma_1 = 1$ e $\sigma_2 = 2$.





Geração de Vetores Aleatórios Gaussianos Correlacionados

Passo 1 - Gerar vetores aleatórios gaussianos não -correlacionados:

```
» X=randn(p,N);
```

Passo 2 - Especificar a matriz de covariância desejada $\mathbf{C}_d$:

```
» Cd=[1 0.79;0.79 4];
```

Passo 3 - Aplicar a Decomposição de Cholesky à matriz $\mathbf{C}_d$:

```
» A=chol(Cd)';
```

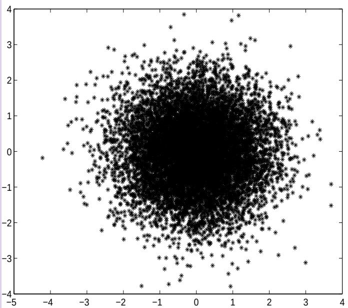
Passo 4 - Aplicar transformação linear aos dados originais:

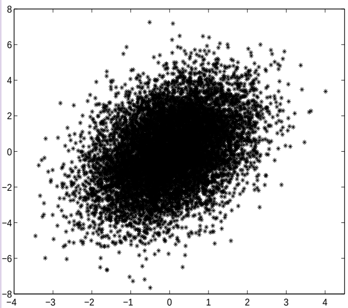
```
» Y=A*X;
```

Passo 5 - Conferir se a matriz de covariância estimada $\hat{\mathbf{C}}_d$ está de acordo com a matriz teórica $\mathbf{C}_d$.

Resultados da Aplicação do Algoritmo do Slide Anterior (cont.-1)

- Não-correlacionados (esquerda) e Correlacionados (direita).





Resultados da Aplicação do Algoritmo do Slide Anterior (cont.-2)

- Para este problema a matriz de covariância estimada $\hat{\mathbf{C}}_d$ resultante foi:

```
» Cd=cov(Y)
    Cd = 0.9983      0.7836
         0.7836      3.9609
```

- O coeficiente de correlação ρ teórico é dado por:

$$\rho\sigma_1\sigma_2 = 0,79 \quad \Rightarrow \quad \rho = \frac{0,79}{\sqrt{1}\sqrt{4}} = 0,395$$

- O coeficiente de correlação $\hat{\rho}$ estimado é dado por:

$$\hat{\rho}\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2 = 0,7836 \quad \Rightarrow \quad \hat{\rho} = \frac{0,7836}{\sqrt{0,9983}\sqrt{3,9609}} = 0,3941$$

Parte VII

Classificação Binária

Definição

Classificação binária é a tarefa de categorizar os elementos de um dado conjunto de objetos em *dois* grupos apenas.

Aplicações Típicas

- Diagnóstico médico: determinar se um dado indivíduo possui uma doença ou não.
- Controle de qualidade na indústria: decidir se um dado produto é bom o suficiente para ser vendido ou deve ser descartado.
- Detecção de falhas: decidir se um dado equipamento está operando normalmente ou não.

Conceituação

Em um teste de hipóteses estatístico, o usuário define inicialmente uma *hipótese nula* (H_0) e uma *hipótese alternativa* (H_1). Em seguida, realiza um experimento e então decide se rejeita H_0 em favor de H_1.

Resultados Possíveis

- *Falso Positivo* (erro Tipo I): rejeitar a hipótese nula, quando ela é verdadeira.
- *Verdadeiro Positivo*: rejeitar a hipótese nula, quando ela é falsa.
- *Falso Negativo* (erro Tipo II): aceitar a hipótese nula, quando ela é falsa.
- *Verdadeiro Negativo*: aceitar a hipótese nula, quando ela é verdadeira.

Conceituação

- Digamos que se queira avaliar pacientes sobre a presença de uma determinada doença ou patologia.
- **Verdadeiros Positivos** (VP): Pacientes que têm a doença e seus exames acusam corretamente a presença da doença, ou seja, dão positivo.
- **Falsos Negativos** (FN): Pacientes que têm a doença, porém seus exames não acusam a presença da doença, ou seja, dão negativo.
- **Verdadeiros Negativos** (VN): Pacientes que não têm a doença e seus exames também não acusam a presença da doença.
- **Falsos Positivos** (FP): Pacientes que não têm a doença, porém seus exames acusam a presença da mesma.

Conceituação

- A **especificidade** é a probabilidade que o exame dê negativo, dado que o paciente não está doente.
- Ou seja, é a razão entre pacientes cujos exames dão negativo (VN) pelo número total de pacientes que são verdadeiramente negativos (VN+FP).
- Quanto maior a especificidade, menor o número de pacientes saudáveis que são classificados com doentes.

Especificidade (*True Negative Ratio*)

$$\text{Especificidade} = \frac{VN}{VN + FP} \tag{86}$$

Conceituação

- A **sensibilidade** é a probabilidade que o exame dê positivo, dado que o paciente está doente.
- Ou seja, é a razão entre pacientes cujos exames dão positivo (VP) pelo número total de pacientes que são verdadeiramente positivos (VP+FN).
- Quanto maior a sensibilidade, menor é o número de casos de pacientes doentes que não são detectados.

Sensibilidade (*True Positive Ratio*)

$$\text{Sensibilidade} = \frac{VP}{VP + FN} \tag{87}$$

Exemplo

- Testes químicos de gravidez usam uma medida indireta (marcador) para detectar se uma mulher está grávida.
- Tais testes usam a gonadotrofina coriônica (hCG) presente na urina de mulheres grávidas.
- Como a hCG pode ser produzida também por um tumor, a especificidade de um teste moderno de gravidez não pode ser 100%, ou seja, podem ocorrer falsos positivos.
- Além disso, como a hCG está presente em pequenas concentrações após a fertilização e no início da embriogênese, a sensibilidade do teste de gravidez também não pode ser 100%, ou seja, podem ocorrer falsos negativos.

Conceituação

- Em problemas de classificação binária, a *matriz de confusão* é uma tabela com duas linhas e duas colunas que reporta o número de Verdadeiros Negativos, Falsos Positivos, Falsos Negativos e Verdadeiros Positivos.

Matriz de Confusão para Classificação Binária

		Resultado ou Condição Real	
		Positivo	**Negativo**
Saída Predita	**Positivo**	VP	FP (erro tipo I, valor p)
	Negativo	FN (erro tipo II)	VN