EST0133 - Introdução à Modelagem de Big Data

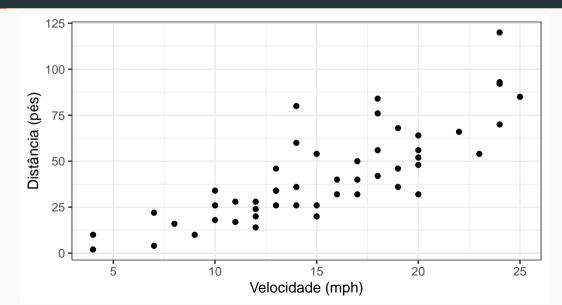
Marcus Nunes https://introbigdata.org/ https://marcusnunes.me/

Universidade Federal do Rio Grande do Norte



- · Já sabemos como visualizar dados no R
- · Os comandos plot e ggplot tem sido satisfatórios para nós
- Por exemplo, é fácil verificar se existe alguma relação entre a velocidade e a distância que os carros presentes no dataset cars levaram para parar

```
> ggplot(cars, aes(x = speed, y = dist)) +
+ geom_point() +
+ labs(x = "Velocidade (mph)", y = "Distância (pés)")
```



- · Motivação: conjunto de dados iris
- · Conjunto de dados muito conhecido
- Carregue-o na memória do R utilizando o comando data(iris)
- · 150 observações de 3 espécies de plantas
- 4 medidas de cada planta: comprimento e largura da pétala, comprimento e largura da sépala



Iris setosa

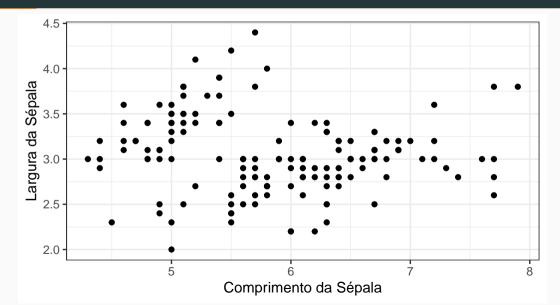


Iris versicolor

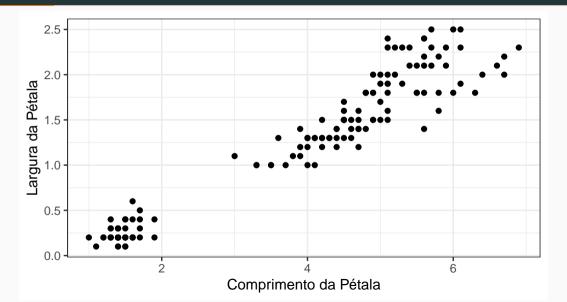


Iris virginica

```
> ggplot(iris, aes(x = Sepal.Length, y = Sepal.Width)) +
+ geom_point() +
+ labs(x = "Comprimento da Sépala", y = "Largura da Sépala")
```



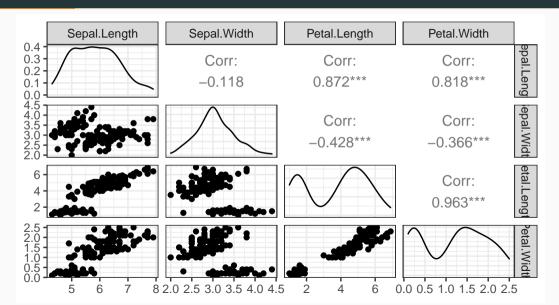
```
> ggplot(iris, aes(x = Petal.Length, y = Petal.Width)) +
+ geom_point() +
+ labs(x = "Comprimento da Pétala", y = "Largura da Pétala")
```



- · Mas são quatro variáveis a serem plotadas
- Se formos plotá-las duas a duas, devemos fazer $\binom{4}{2} = 6$ gráficos
- · Há uma maneira mais direta de fazermos isto

> library(GGally)
> ggpairs(iris[, -5])

11



- As soluções que conhecemos funcionam razoavelmente bem para alguns conjuntos de dados
- · Mas e se tivéssemos mais de 4 variáveis para analisar?
- · E se fossem centenas de variáveis?

- Não é possível plotar todas as variáveis simultaneamente no mesmo gráfico
- · Uma possível solução é escolher algumas variáveis para plotar
- Outra é projetar os dados em outras direções e visualizá-los a partir daí

- Diversas áreas do conhecimento apresentam problemas onde muitas variáveis são consideradas simultaneamente
- O conjunto de dados iris é um destes casos
- Mas aplicações assim aparecem em dados do mercado financeiro, em genética, em meteorologia

 Considerando o conjunto de dados iris, suponha que possamos representar as medidas de um dos espécimes i de plantas como um vetor de quatro posições:

$$\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}, x_{i4})$$

ou

$$\mathbf{x}_{i} = \begin{pmatrix} x_{i1} \\ x_{i2} \\ x_{i3} \\ x_{i4} \end{pmatrix}$$

• Em nossa notação, x_i' é o transposto do vetor x_i

• De modo geral, um sujeito i com k medidas pode ser representado como um vetor no espaço \mathbb{R}^k :

$$\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{ik})$$

ou

$$\mathbf{x}_i = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_{i1} \\ \mathbf{x}_{i2} \\ \vdots \\ \mathbf{x}_{ik} \end{pmatrix}$$

 Assim, todos os sujeitos e todas as suas condições podem ser representados como

$$\mathbf{X}_{nk} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n \end{pmatrix}$$

· Uma matriz é um vetor de vetores e também tem uma transposta

$$\mathbf{X}'_{nk} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n \end{pmatrix}' = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n) = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{k1} \\ x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{1n} & x_{2n} & \cdots & x_{kn} \end{pmatrix}'$$

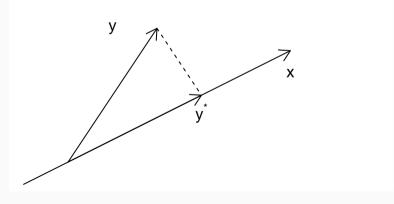
 Os produtos entre duas matrizes ou entre uma matriz e um vetor precisam ser compatíveis:

$$\mathbf{x}'\mathbf{y} = (x_1, x_2, \dots, x_k) \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_k \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^k x_i y_i$$

$$\mathbf{x}\mathbf{y}' = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \end{pmatrix} (y_1, y_2, \dots, y_l) = \begin{pmatrix} x_1 y_1 & x_1 y_2 & \cdots & x_1 y_l \\ x_2 y_1 & x_2 y_2 & \cdots & x_2 y_l \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_k y_1 & x_k y_2 & \cdots & x_k y_l \end{pmatrix}$$

- · Cada sujeito é um vetor de *k* valores, pois consideramos *k* condições
- Imagine cada sujeito como um ponto no espaço euclidiano k—dimensional
- · Distância entre os vetores x e y: $|x-y| = \sqrt{(x-y)'(x-y)}$
- Comprimento de um vetor x: $|x| = \sqrt{x'x}$
- Espaço linear gerado por ${m x}$: pontos de ${m lpha}{m x}$ para todo real ${m lpha}$
- Ângulo entre os vetores x e y: $cos(\theta) = \frac{x'y}{|x||y|}$ (x e y são ortogonais se x'y = 0)

 Projetar o vetor y em x (ou, mais precisamente, projetar y no espaço linear R(x) gerado por x) é encontrar o ponto y* que possui a menor distância para y



· De acordo com a definição do slide anterior,

$$y^* = |y| \cos(\theta) \frac{x}{|x|}$$
$$= |y| \frac{x'y}{|x||y|} \frac{x}{|x|}$$
$$= \left(\frac{x'y}{x'x}\right) x$$

 Agora estamos preparados para entender a Análise de Componentes Principais

 A coleção de sujeitos e condições é uma matriz, onde cada linha é um sujeito e cada coluna é uma condição

$$\mathbf{X}_{nk} = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & \cdots & X_{1k} \\ X_{21} & X_{22} & \cdots & X_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{n1} & X_{n2} & \cdots & X_{nk} \end{pmatrix}$$

- · Há *n* sujeitos e *k* condições
- · Imagine que cada sujeito é um ponto num espaço *k*—dimensional
- · Assim, temos *n* pontos (sujeitos) neste espaço

- Para a ACP funcionar satisfatoriamente, devemos realocar a origem das coordenadas para o centro dos dados
- · Além disso, as condições devem ter a mesma variância
- Determinamos um conjunto de *k* direções ortogonais, ordenadas em termos da variabilidade dos dados
- É feita uma rotação dos dados originais
- Se procura a melhor maneira de visualizar os dados de acordo com a variabilidade das variáveis

- Assim, a ACP serve para encontrar as direções com maior variabilidade
- Os dados são projetados nessas direções, nos dando uma reconstrução em menor dimensão dos perfis dos sujeitos

- · Como encontrar essas direções?
- i) Encontre $v_1 = \arg\max_{|v_1|=1} Var(v_1'x)$
- ii) Calcule $\mathbf{x}_{-1} = \mathbf{x} \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1' \mathbf{x}$
- iii) Encontre $v_2 = \text{arg max}_{|\mathbf{v}_2|=1} \text{Var}(\mathbf{v}_2' \mathbf{x}_{-1})$
- iv) Calcule $\mathbf{x}_{-1-2} = \mathbf{x}_{-1} \mathbf{v}_2 \mathbf{v}_2' \mathbf{x}_{-1}$
- v) Repita estes passos para encontrar outras direções

- Podemos mostrar que este método é equivalente a encontrar a Decomposição em Valores Singulares da matriz X
- Isto é, $X = U\Sigma V$, em que $V = (v_1, v_2, \dots, v_k)$ são as direções de variabilidade
- É importante notar que $V = (v_1, v_2, \dots, v_k)$ é uma matriz unitária, *i.e.*, $v_i'v_i = 1$ e $v_i'v_j = 0$, se $i \neq j$ (ou seja, as colunas de V são padronizadas e ortogonais)

- \cdot Pela Decomposição em Valores Singulares, $\emph{X} = \emph{U}\Sigma\emph{V}$
- $V_{k \times k}$ é unitária e $V'V = I_{k \times k}$

$$\boldsymbol{\cdot} \; \boldsymbol{\Sigma}_{k \times k} = \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1(n-1)} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda_2(n-1)} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sqrt{\lambda_k(n-1)} \end{pmatrix},$$

em que λ_i mede a escala (ou variância) das direções correspondentes

• $U_{n \times k}$ são os "novos dados" reescalados e projetados nas novas coordenadas, tal que $U'U = I_{k \times k}$

• Dado $X = U\Sigma V$, temos que

$$X'X = (V\Sigma'U')(U\Sigma V') = V\Sigma^2 V'$$

• Se X for centrado, defina

$$Cov(X) = \frac{1}{n-1}X'X,$$

chamada matriz de variância-covariância

· Essa matriz mede a variabilidade e a covariabilidade dos dados

· Essa matriz é dada por

$$Cov(X) = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1k} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 & \cdots & \sigma_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{k2} & \sigma_{k2} & \cdots & \sigma_k^2 \end{pmatrix}$$
$$= V'\Lambda V = V' \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_k \end{pmatrix} V,$$

em que $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_k \geq 0$ mede a variância dos dados em cada direção de ${\bf V}$

 Para obtermos os dados nas novas coordenadas, usamos a transformação linear

$$X^* = XV$$

• Ou seja, para cada sujeito i sob a condição j, $x_{ij}^* = \sum_{l=1}^k x_{il} v_{jl}$

$$Cov(X^*) = \frac{1}{n-1}(X^*X^*) = \frac{1}{n}V'X'XV = VV'\Lambda V'V\Lambda$$

- $V = (v_1, v_2, \cdots, v_k)$ são os autovetores da matriz Cov(X)
- $\Lambda = diag(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_k)$ são os autovalores desta matriz

- Depois de obtidas as direções principais da variabilidade dos dados, temos as seguintes opções:
 - Reduzir a dimensionalidade dos dados
 - · Capturar padrões básicos na amostra
 - · Limpar o ruído dos dados
 - · Compressão de informação

- Uma boa redução dos dados ocorre quando a variabilidade "útil" dos dados é capturada dentre as componentes selecionadas
- Existem diversas maneiras de escolhermos as componentes importantes
- i) Manter uma certa proporção (digamos 80%) da variância nos dados
- ii) Manter as componentes cujo λ está acima de algum valor (a média, por exemplo)
- iii) Criar um cutoff a partir da área plana do gráfico
- iv) Testar a significância de uma direção
- v) Métodos de reamostragem para atingir a estabilidade das direções

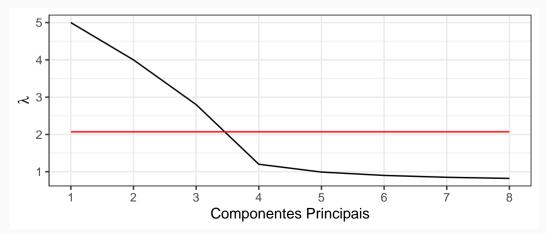
- i) Considere a proporção da variabilidade explicada e mantenha tantas direções quanto necessárias para explicar uma certa proporção
- Esta é boa maneira de reduzir a dimensionalidade ocorre quando a variabilidade "útil" dos dados é capturada entre as componentes selecionadas
- · Seja λ_i a variabilidade da no i—ésimo componente \mathbf{v}_i e que os \mathbf{v}_i são ortogonais, temos

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_k = \text{variância total}$$

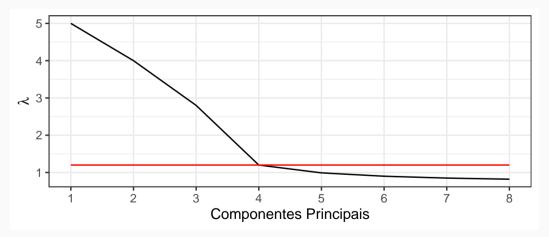
· Selecione direções v_1, v_2, \cdots, v_r tais que

$$\frac{\sum_{i=1}^{r} \lambda_i}{\sum_{i=1}^{k} \lambda_i} \ge 0.80$$

ii) Manter as componentes cujo λ está acima de algum valor (a média, por exemplo)



3. Criar um cutoff a partir da área plana do gráfico



iv) Para testar as componentes importantes, é possível realizar uma sequência de testes que determina quantos dos r últimos autovalores são estatisticamente iguais, desde que os dados sejam normais Este teste é baseado numa estatística χ^2 , desde que n seja grande o suficiente

$$H_0: \lambda_{k-r+1} = \lambda_{k-r+2} = \cdots = \lambda_k$$

 H_1 : algum λ_i listado acima é diferente dos demais

Sob H_0 ,

$$\left(n - \frac{2k - 11}{6}\right) \left(r \log(\overline{\lambda}) - \sum_{i=k-r+1}^{k} \log(\lambda_i)\right) \sim \chi^2 \left(\frac{1}{2}(r - 1)(r + 2)\right)$$

- v) Alternativamente, é possível realizar reamostragens ou permutações e checar o quão persistentes são as componentes principais Reamostragem
 - Bootstrap em um subconjunto de sujeitos
 - · Deletar aleatoriamente alguns sujeitos

Permutação

- · Permutar as colunas da matriz
- · Permutar os sujeitos dentro das colunas
- · Permutar a tabela inteira

- Selecionar componentes principais leva, inevitavelmente, à perda de informação
- · Usando o método i), uma porcentagem fixa da variabilidade é perdida
- Usando os métodos ii), iii) e iv), uma parte desconhecida da variabilidade é perdida
- · Usando os métodos i) e ii), variabilidade informativa pode ser perdida
- Mesmo que a variabilidade de cada direção seja pequena, a soma de todas elas pode ser grande
- Uma perda de 2% n\u00e3o gera preocupa\u00f3\u00f3es; uma perda de 20% deve ser tratada com cuidado

- Esta característica da PCA permite utilizá-la como método de seleção de variáveis
- Podemos manter apenas p < k componentes principais e fazer nossas análises a partir deles

- É possível retornar os dados transformados para recuperar os dados originais, desde que nada seja jogado fora
- Para transformar os dados de volta para as coordenadas originais, usamos

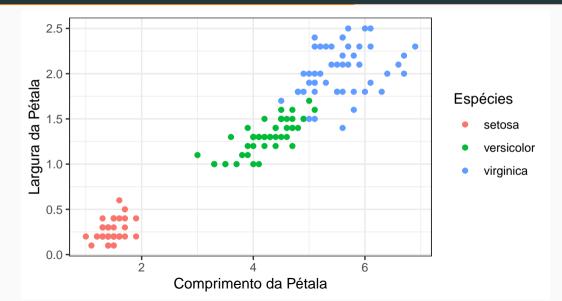
$$X^0=(X,0)V'$$

- O número de componentes principais não significa nada além de "padrões básicos"
- · A ACP não se importa com a ordem natural dos dados



```
> iris.pca <- prcomp(iris[, -5], center = TRUE,</pre>
+ scale. = TRUE)
> names(iris.pca)
## [1] "sdev" "rotation" "center" "scale"
                                                 " x "
> head(iris.pca$x)
##
             PC1
                    PC2
                                    PC3
                                                 PC4
## [1,] -2.257141 -0.4784238 0.12727962 0.024087508
## [2.] -2.074013 0.6718827 0.23382552 0.102662845
## [3,] -2.356335  0.3407664 -0.04405390  0.028282305
## [4,] -2.291707 0.5953999 -0.09098530 -0.065735340
## [5.] -2.381863 -0.6446757 -0.01568565 -0.035802870
## [6.] -2.068701 -1.4842053 -0.02687825 0.006586116
```

```
> ggplot(iris, aes(x = Petal.Length, y = Petal.Width)) +
+ geom_point(aes(colour = Species)) +
+ labs(x = "Comprimento da Pétala", y = "Largura da Pétala",
+ colour = "Espécies")
```



```
> summary(iris.pca)

## Importance of components:
## PC1 PC2 PC3 PC4

## Standard deviation 1.7084 0.9560 0.38309 0.14393

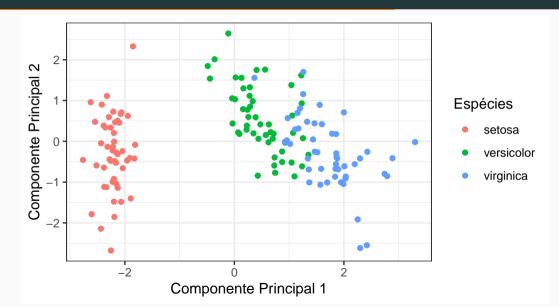
## Proportion of Variance 0.7296 0.2285 0.03669 0.00518

## Cumulative Proportion 0.7296 0.9581 0.99482 1.00000
```

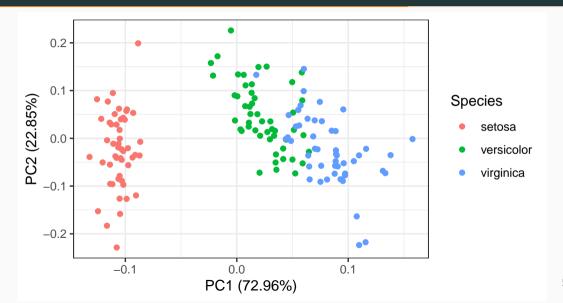
> plot(iris.pca)



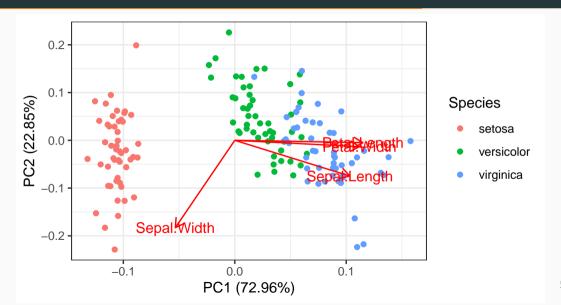
- > iris.transformado <- data.frame(iris.pca\$x,
 + Species = iris\$Species)
 > head(iris.transformado)
- ## PC1 PC2 PC3 PC4 Species 1 -2.257141 -0.4784238 0.12727962 0.024087508 setosa 2 -2.074013 0.6718827 0.23382552 0.102662845 setosa 3 -2.356335 0.3407664 -0.04405390 0.028282305 setosa 4 -2.291707 0.5953999 -0.09098530 -0.065735340 setosa 5 -2.381863 -0.6446757 -0.01568565 -0.035802870 setosa ## 6 -2.068701 -1.4842053 -0.02687825 0.006586116 setosa



```
> library(ggfortify)
> autoplot(iris.pca, data = iris, colour = "Species")
```



```
> autoplot(iris.pca, data = iris, colour = "Species",
+ loadings = TRUE, loadings.label = TRUE)
```



Aplicação

- · Heptatlo é uma competição de atletismo composta por sete provas
- · É disputado apenas por mulheres; homens disputam o decatlo
- São dois dias de competição e a vencedora é determinada por uma pontuação específica

- · As provas do heptatlo são
 - 1. 100 metros com barreiras
 - 2. Salto em altura
 - 3. Arremesso de peso
 - 4. 200 metros rasos
 - 5. Salto em distância
 - 6. Lançamento de dardo
 - 7. 800 metros rasos

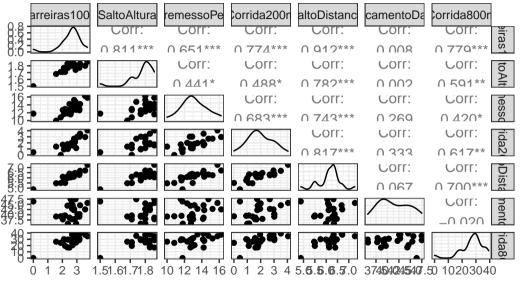
- Vamos analisar os resultados do heptatlo da Olimpíada de 1988, em Seul
- A Análise de Componentes Principais será realizada em cima dos resultados de 25 melhores colocadas na prova
- · Queremos procurar padrões e relações interessantes nestes dados

```
> library(dplyr)
> library(ggplot2)
> library(GGally)
> library(corrplot)
>
> heptatlo <- read.csv(file = "heptatlo.csv")</pre>
>
> names(heptatlo)
                          "Barreiras100m"
                                              "SaltoAltura"
## [1] "Nome"
## [4] "ArremessoPeso"
                          "Corrida200m"
                                              "SaltoDistancia"
## [7] "LancamentoDardo" "Corrida800m"
                                              "Pontos"
```

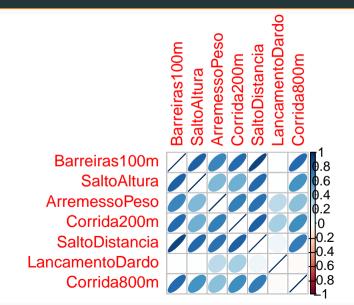
```
> transformacao <- function(x){</pre>
   return(max(x) - x)
+ }
>
 heptatlo <- heptatlo %>%
   mutate(Barreiras100m = transformacao(Barreiras100m)) %>%
   mutate(Corrida200m = transformacao(Corrida200m)) %>%
   mutate(Corrida800m = transformacao(Corrida800m))
>
> heptatlo.novo <- heptatlo %>%
   select(-c(Nome. Pontos))
```

> ggpairs(heptatlo.novo)

Aplicação - Hontatlo

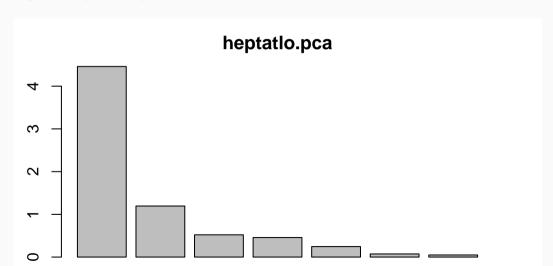


```
> corrplot(cor(heptatlo.novo), method = "ellipse")
```

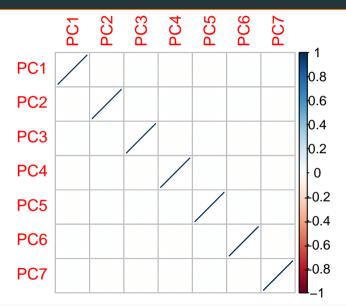


```
> heptatlo.pca <- prcomp(heptatlo.novo,
   center = TRUE, scale. = TRUE)
> summarv(heptatlo.pca)
  Importance of components:
##
                             PC1
                                    PC2
                                            PC3
                                                    PC4
## Standard deviation
                         2,1119 1,0928 0,72181 0,67614
## Proportion of Variance 0.6372 0.1706 0.07443 0.06531
## Cumulative Proportion 0.6372 0.8078 0.88223 0.94754
##
                              PC5
                                     PC6
                                             PC7
  Standard deviation
                          0.49524 0.27010 0.2214
## Proportion of Variance 0.03504 0.01042 0.0070
## Cumulative Proportion 0.98258 0.99300 1.0000
```

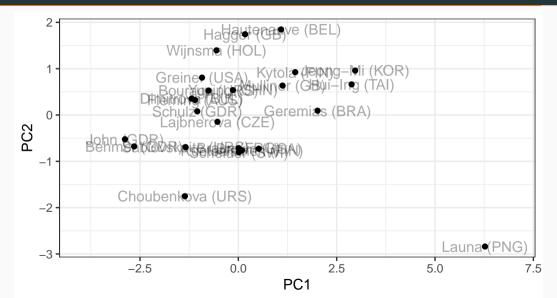
> plot(heptatlo.pca)



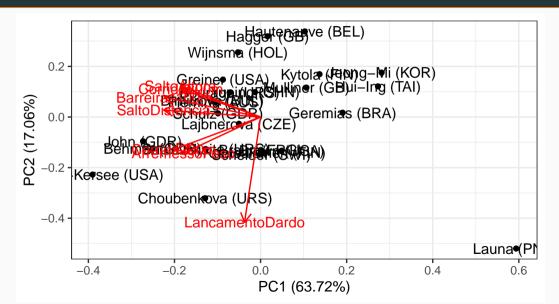
```
> corrplot(cor(heptatlo.pca$x), method = "ellipse")
```



```
> heptatlo.transformado <- data.frame(heptatlo.pca$x,
+ Nome = heptatlo$Nome)
> ggplot(heptatlo.transformado, aes(x = PC1, y = PC2)) +
+ geom_point() +
+ geom_text(aes(label = Nome), alpha = 0.35) +
+ xlim(-4, 7)
```



```
> rownames(heptatlo.novo) <- heptatlo$Nome
>
> autoplot(heptatlo.pca, data = heptatlo.novo,
+ label = TRUE, loadings = TRUE, loadings.label = TRUE)
```



- 1. Refaça a PCA do conjunto de dados iris, mas escolha três combinações de componentes principais diferentes de PC1 e PC2 para construir seu gráfico. O que é possível perceber?
- 2. Aplique a função **autoplot** do pacote **ggfortify** na PCA do conjunto iris e interprete o resultado
- 3. Utilize o nome das espécies para identificar cada ponto no gráfico de dispersão das duas primeiras componentes principais

- 4. O arquivo **AlimentacaoReinoUnido.txt** mostra o consumo de diversos alimentos no Reino Unido em 1997. Importe este conjunto de dados para o **R**.
- 5. Faça a PCA deste conjunto de dados.
- 6. Quantas componentes principais são necessárias para que 95% da variância seja explicada?
- 7. Faça o gráfico de barras das contribuições das variâncias para confirmar sua resposta para o item anterior.

- 8. Faça um gráfico de dispersão com as duas primeiras componentes principais, identificando cada alimento por seu nome. O que é possível perceber?
- 9. Explique o que ocorre quando utilizamos o comando **autoplot** do pacote **ggfortify** para analisar a PCA.
- 10. Refaça a análise para o conjunto de dados presente no arquivo AlimentacaoReinoUnido.txt, mas utilize a transposta da matriz original de dados. O que mudou? O que é possível perceber com esta nova análise?

EST0133 - Introdução à Modelagem de Big Data

Marcus Nunes https://introbigdata.org/ https://marcusnunes.me/

Universidade Federal do Rio Grande do Norte