1

December 19, 2023

[1]:
```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
```

1 Parte 1

1.1 Geração de dados artificiais com as características estatísticas desejadas de covariância.

[2]:
```python
# Gera dados gaussianos com atributos não-correlacionados
# Média teórica do atributo 1
m1 = 5
# Desvio-padrao teorico do atributo 1
sig1 = 1

# Média teórica do atributo 2
m2 = -5
# Desvio-padrao teorico do atributo 2
sig2 = sig1

# Média teórica do atributo 3
m3 = 0
# Desvio-padrao teorico do atributo 3
sig3 = sig1

# Quantidade de observacoes geradas de cada atributo
N = 5000
X1 = np.random.normal(m1, sig1, N)
X2 = np.random.normal(m2, sig2, N)
X3 = np.random.normal(m3, sig3, N)

# Agrupa dados dos atributos em uma unica matriz
Xu = np.vstack((X1, X2, X3))

# Matriz desejada para os dados
Cd = np.array([[1, 1.8, -0.9], [1.8, 4, 0.6], [-0.9, 0.6, 9]])

print(Xu.shape)
```

```
print(Cd.shape)
Cd
```

```
(3, 5000)
(3, 3)
```

[2]:
```
array([[ 1. ,  1.8, -0.9],
       [ 1.8,  4. ,  0.6],
       [-0.9,  0.6,  9. ]])
```

1.2 Método de Choleski para decompor a matriz de covariância desejada e correlacionar os 3 atributos gaussianos inicialmente não correlacionados

[3]:
```
# Decomposicao de Cholesky da matriz Cd
R = np.linalg.cholesky(Cd)

# Gera dados com atributos correlacionados com a matriz COV desejada
Xc = np.dot(R.T, Xu)
print(Xc.shape)
```

```
(3, 5000)
```

2 Parte 2

2.1 (i) Estimar a matriz de covariância Cx associada aos dados sintéticos originais na matrix Xc

[4]:
```
# Aplicacao de PCA aos dados correlacionados gerados no procedimento anterior.
# Estimar a matriz de covariância Cx associada aos dados sintéticos originais na
↪matrix Xc
Cx = np.cov(Xc)
Cx
```

[4]:
```
array([[ 5.15318793, -0.80358358, -1.22901818],
       [-0.80358358,  7.14528013,  3.28759485],
       [-1.22901818,  3.28759485,  1.69327145]])
```

2.2 (ii) Calcular os autovalores e a matriz de autovetores V

[5]:
```
# Calcular os autovalores e a matriz de autovetores V
# L - vetor com os autovalores
# V - matriz onde cada coluna é um autovetor
L, V = np.linalg.eig(Cx)
print('Autovalores: ', L)
print('Matriz autovetor: ', V)
```

```
Autovalores:  [9.0933604  4.86996465 0.02841445]
Matriz autovetor:  [[ 0.30697355 -0.93918279  0.15395758]
```

```
 [-0.84979    -0.34332336 -0.39998253]
 [-0.42851394  0.00804755  0.90349933]]
```

2.3 (iii) Comparar com os autovalores e autovetores calculados pelo código Matlab/Octave fornecido.

octave:52> V2 V2 =

-0.088504 -0.433362 0.896863 0.087134 -0.900313 -0.426431 0.992257 0.040407 0.117442

octave:53> L2 L2 =

9.189616 4.800642 0.028864

octave:54> VEi2 VEi2 =

65.5506 34.2435 0.2059As matrizes de autovalores e autovetores estão bem próximas, indicando que ambos estão convergindo para soluções semelhante.

No python é usado o numpy.conv para calcular a matriz de covariância. Em seguida usa-se o numpy.linalg.eig para obter os autovalores e autovetores. No octave o comando pcacov calcula diretamente os autovetores e autovalores da matriz de covariância.

2.4 (iv) Verificar se a matriz de autovetores é ortonormal de duas maneiras

2.4.1 A primeira é multiplicando ela por sua transposta

[6]:
```
result = np.dot(V, V.T)
print(result)

is_orthogonal_1 = np.allclose(result, np.identity(V.shape[0]))

print('\nVerificação 1 - A matriz de autovetores é ortogonal:', is_orthogonal_1)
```

```
[[ 1.00000000e+00  5.15889961e-17 -7.16199093e-17]
 [ 5.15889961e-17  1.00000000e+00  1.87242730e-16]
 [-7.16199093e-17  1.87242730e-16  1.00000000e+00]]

Verificação 1 - A matriz de autovetores é ortogonal: True
```

Considerando o cálculo da matriz de autovetores pela sua transposta, obtivemos como resultado uma matriz que possui 1 em sua diagonal, mostrando que as colunas da matriz de autovetores correpondem a autovalores distintos. Portanto a matriz é considerada ortogonal.

2.4.2 A outra é invertendo-a usando uma função de cálculo de matriz inversa (no Python) e comparando com a transposta de V

[7]:
```
V_inv = np.linalg.inv(V)

print('\nInversa de V:')
print(V_inv)
print('\nTransposta de V:')
```

```
print(V.T)

is_orthogonal_2 = np.allclose(V_inv, V.T)

print('\nVerificação 2 - A matriz de autovetores é ortogonal:', is_orthogonal_2)
```

```
Inversa de V:
[[ 0.30697355 -0.84979    -0.42851394]
 [-0.93918279 -0.34332336  0.00804755]
 [ 0.15395758 -0.39998253  0.90349933]]

Transposta de V:
[[ 0.30697355 -0.84979    -0.42851394]
 [-0.93918279 -0.34332336  0.00804755]
 [ 0.15395758 -0.39998253  0.90349933]]

Verificação 2 - A matriz de autovetores é ortogonal: True
```

Verificamos que a matriz inversa dos autovetores é igual a matriz transposta dos autovetores, confirmando sua ortogonalidade.

2.5 (v) Calcular a variância explicada por cada autovalor (VEi) e fazer o gráfico da variância explicada acumulativa (VEq)

[8]:

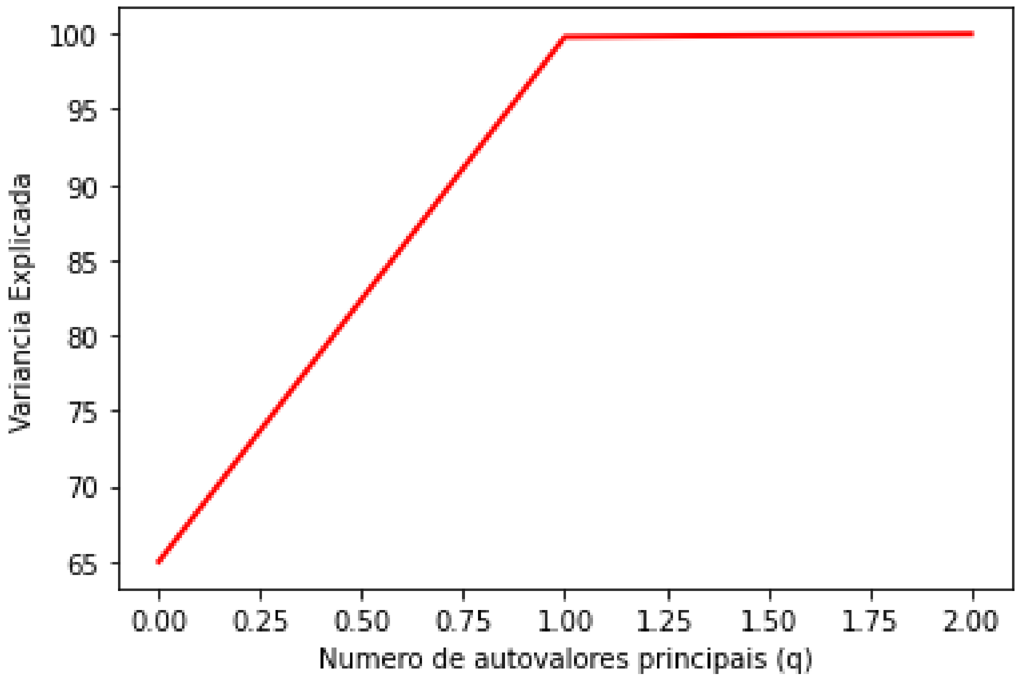
```
sorted_indices = np.argsort(L)[::-1]
L_sorted = L[sorted_indices]
V = V[:, sorted_indices]
VEi = 100 * L_sorted / np.sum(L_sorted)
VEq = 100 * np.cumsum(L_sorted) / np.sum(L_sorted)

print('\nVariancia explicada pelo i-esimo autovalor:')
print(VEi)
print('\nVariancia explicada pelos q primeiros autovalores:')
print(VEq)

plt.figure()
plt.plot(VEq, 'r-', linewidth=2)
plt.xlabel('Numero de autovalores principais (q)')
plt.ylabel('Variancia Explicada')
plt.show()
```

```
Variancia explicada pelo i-esimo autovalor:
[64.99092125 34.80599855  0.2030802 ]

Variancia explicada pelos q primeiros autovalores:
[ 64.99092125  99.7969198  100.        ]
```



3 Parte 3

3.1 Comparar os resultados do PCA implementado passo-a-passo na Parte 2 com o método usando a decomposição em valores singulares (SVD, na sigla em Inglês)

[9]:
```
# PCA a partir da SVD
U3, L3, V3 = np.linalg.svd(Cx)
Q = V3

print('\nPCA tradicional:')
print(V)
print('\nPCA SVD:')
print(V3)

# Comparação dos autovetores
are_proportional = np.allclose(V, V3)
print("\nOs autovetores são proporcionais:", are_proportional)

sorted_indices_L3 = np.argsort(L3)[::-1]
L3_sorted = L3[sorted_indices_L3]

# Comparação dos autovalores
are_eigenvalues_close = np.allclose(L_sorted, L3_sorted)
```

```python
print("Os autovalores são aproximadamente iguais:", are_eigenvalues_close)
```

```
PCA tradicional:
[[ 0.30697355 -0.93918279  0.15395758]
 [-0.84979    -0.34332336 -0.39998253]
 [-0.42851394  0.00804755  0.90349933]]

PCA SVD:
[[-0.30697355  0.84979     0.42851394]
 [-0.93918279 -0.34332336  0.00804755]
 [ 0.15395758 -0.39998253  0.90349933]]

Os autovetores são proporcionais: False
Os autovalores são aproximadamente iguais: True
```

Os autovetores são proporcionais: False Indica que os autovetores obtidos pelos dois métodos não são diretamente proporcionais entre si. Os autovalores são aproximadamente iguais: True Indica que ambos os métodos estão capturando quantidade semelhante de variância de dados.

Comparando ambos os métodos, observamos que embora existam diferenças nos autovetores, a consistência nos autovalores sugere que ambos os métodos estão fornecendo informações úteis sobre a estrutura dos dados.

4 Parte 4

4.1 Gerar os dados transformados; ou seja, gerar a matriz de dados Z.

[10]:
```python
# Gera dados via PCA (descorrelaciona matriz dos dados)
Z = np.dot(Q, Xc)
```

4.2 Verificar as propriedades esperadas para os dados transformados Z. Primeiro, numericamente, ao estimar a matriz de covariância Cz. Esta matriz é diagonal?

[11]:
```python
# Matriz de covariancia empirica dos dados transformados via PCA
Cz = np.cov(Z)
print(Cz)

# Verificação se a matriz é diagonal
is_diagonal = np.allclose(Cz, np.diag(np.diagonal(Cz)))

print("A matriz é diagonal:", is_diagonal)
```

```
[[ 9.09336040e+00  4.44178045e-17 -1.58396112e-15]
 [ 4.44178045e-17  4.86996465e+00  3.47036307e-16]
 [-1.58396112e-15  3.47036307e-16  2.84144525e-02]]
A matriz é diagonal: True
```

O código acima mostra que a matriz é diagonal devido aos elementos fora da diagonal principal serem muito próximos de zero e os elementos da diagonal serem diferentes de zero.

4.3 Que elementos estão na diagonal principal de Cz?

[12]:
```
# Obter elementos da diagonal principal
diagonal_elements = np.diagonal(Cz)

print("Elementos da diagonal principal de Cz:", diagonal_elements)
```

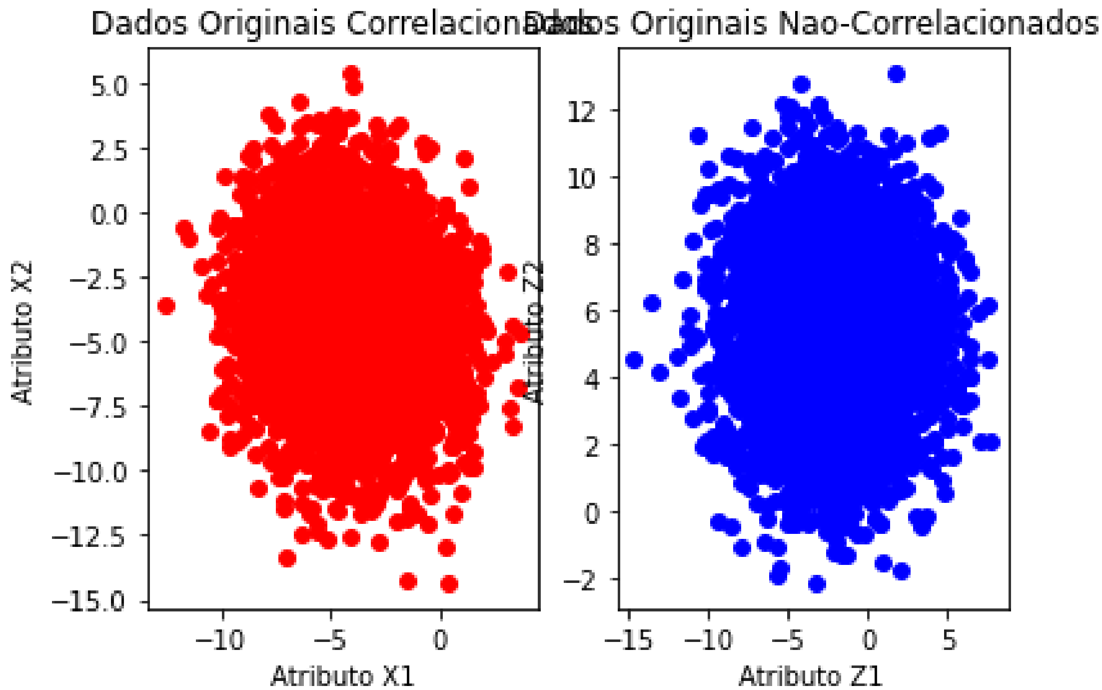
```
Elementos da diagonal principal de Cz: [9.0933604  4.86996465 0.02841445]
```

4.4 Em seguida, comparar o gráfico de dispersão (scatterplot) dos atributos X1 e X2 dos dados originais (correlacionados) e com o gráfico de Z1 e Z2 dos dados transformados (não correlacionados)

[13]:
```
plt.figure()
plt.subplot(1, 2, 1)
plt.plot(Xc[0, 0:5000], Xc[1, 0:5000], 'ro', linewidth=2)
plt.xlabel('Atributo X1')
plt.ylabel('Atributo X2')
plt.title('Dados Originais Correlacionados')

plt.subplot(1, 2, 2)
plt.plot(Z[0, 0:5000], Z[1, 0:5000], 'bo', linewidth=2)
plt.xlabel('Atributo Z1')
plt.ylabel('Atributo Z2')
plt.title('Dados Originais Nao-Correlacionados')
```

[13]:
```
Text(0.5, 1.0, 'Dados Originais Nao-Correlacionados')
```



5 Parte 5

5.1 Projete os dados Xc em duas dimensões escolhendo apenas duas componentes (i.e.colunas da matriz de autovetores V).

[14]:
```
print('Cx.shape', Cx.shape)
print('V.shape', V.shape)
V_2d = V[:, :2].T
print('V_2d.shape', V_2d.shape)
print('Xc.shape', Xc.shape)

# Dados em duas dimensões
DoisD = V_2d @ Xc

# Imprimir os dados projetados
print("\nDados Projetados em Duas Dimensões:")
print('DoisD.shape', DoisD.shape)
```

```
Cx.shape (3, 3)
V.shape (3, 3)
V_2d.shape (2, 3)
Xc.shape (3, 5000)

Dados Projetados em Duas Dimensões:
```

```
DoisD.shape (2, 5000)
```

5.2 Em seguida, use a transposta da matriz Q para gerar a matriz de dados Xr, que é a matriz de reconstrução dos dados originais

[15]:
```python
Xr = np.dot(Q.T, Z)
print(Xr.shape)
Xr
```

```
(3, 5000)
```

[15]:
```
array([[-2.69758955, -7.00278786, -5.5184589 , ..., -6.63574456,
        -4.42264796, -5.217896  ],
       [-4.46579167, -1.43670205,  1.87290387, ..., -2.6474745 ,
        -3.47901428, -2.53620977],
       [ 0.04488538,  2.07218147,  2.93011411, ...,  1.22493319,
         0.86102522,  0.97332183]])
```

5.3 (i) Mostre as 4 primeiras colunas de Xr e compare com as 4 primeiras colunas de Xc. Os valores são próximos?

[16]:
```python
print(Xr[:, :4])
print('\n')
print(Xc[:, :4])
```

```
[[-2.69758955 -7.00278786 -5.5184589  -4.19800587]
 [-4.46579167 -1.43670205  1.87290387 -7.82940507]
 [ 0.04488538  2.07218147  2.93011411 -1.47290475]]


[[-2.69758955 -7.00278786 -5.5184589  -4.19800587]
 [-4.46579167 -1.43670205  1.87290387 -7.82940507]
 [ 0.04488538  2.07218147  2.93011411 -1.47290475]]
```

5.4 (ii) Calcule a norma quadrática de Frobenius da matriz de erro E= Xc − Xr.

[17]:
```python
E = Xc - Xr  # Vetor erro de reconstrucao
NormaE2 = np.linalg.norm(E, 'fro')**2  # Norma de Frobenius para calcular o erro.
print(NormaE2)
```

```
3.4424205156205444e-26
```

5.5 (iii) Vetorize a matriz E e calcule a soma dos erros quadráticos. Os valores de (i) e (ii) devem ser iguais.

[18]:
```
E = E.flatten()  # Vetoriza matriz de erro
SSE = np.sum(E**2)  # Soma dos erros quadraticos de reconstrucao
SSE
```

[18]:
```
3.4424205156205444e-26
```