Análise de Componentes Principais

Jhessica Letícia Kirch
Universidade de São Paulo

Simpósio de Microbiologia Agrícola
11 de abril de 2023

DEFINIÇÃO DE COMPONENTES PRINCIPAIS

- Descrita por Karl Pearson (1901);

- É um dos métodos multivariados mais utilizados;

- Objetivo: Tomar p variáveis X_1, X_2, ..., X_p e encontrar combinações lineares destas para produzir índices Z_1, Z_2, ..., Z_p que sejam não correlacionados na ordem de sua importância e que descreva toda a variação dos dados;

- A falta de correlação significa que os índices estão medindo diferentes dimensões dos dados.

DEFINIÇÃO DE COMPONENTES PRINCIPAIS

- A ordem é tal que $Var(Z_1) \geq Var(Z_2) \geq \cdots \geq Var(Z_p)$;
- Os índices Z_i são também variáveis e são os Componentes Principais (CP);
- Na ACP, espera-se que a maioria das últimas variâncias sejam baixas, de modo que grande parte da explicação de variabilidade das variáveis originais se concentre em poucos componentes Z_i, resumindo assim o espaço dimensão variável.

DEFINIÇÃO DE COMPONENTES PRINCIPAIS

Desvantagens:

- Ao reduzir o número de variáveis, há perda da informação de variabilidade das variáveis originais.

- A ACP nem sempre funciona! (às vezes mesmo com a redução ainda continua grande). É o caso de variáveis originais pouco correlacionadas.

OBJETIVO: redução dimensional.

DEFINIÇÃO DE COMPONENTES PRINCIPAIS

- Seja $\boldsymbol{X}$ uma matriz de n observações e p variáveis. O primeiro componente principal é uma combinação linear tal que:

$$Z_1 = a_{11}X_1 + a_{12}X_2 + \cdots + a_{1p}X_p$$

em que a_{ij} é o coeficiente associado à importância da j-ésima variável resposta em Z_i.

- A determinação desses coeficientes é feita por meio da técnica de autovalores e autovetores da matriz de covariância $\boldsymbol{C}$ ou correlação $\boldsymbol{R}$.

AUTOVALORES E AUTOVETORES

- A decomposição espectral, técnica matemática que consiste na determinação de autovalores e autovetores, ocupa um lugar central na análise multivariada.

- Considere a matriz quadrada $\boldsymbol{A}$ $(p \times p)$. Se existe um escalar λ e um vetor $\boldsymbol{v}$ não nulo tal que

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v}$$

então o λ é denominado autovalor e $\boldsymbol{v}$ é seu autovetor associado.

AUTOVALORES E AUTOVETORES

- O autovalor é obtido por meio de:

$$\det(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I})$$

- O autovetor associado é obtido por meio de:

$$(\boldsymbol{A} - \lambda_i \boldsymbol{I})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$$

AUTOVALORES E AUTOVETORES

- **Exemplo:**

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -4 & 1 \end{bmatrix}$$

- Primeiro autovalor e autovetor associado:

$$\lambda = 3 \qquad \text{e} \qquad \mathbf{v} = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix}$$

- Verificando que $\boldsymbol{Av} = \lambda \boldsymbol{v}$

AUTOVALORES E AUTOVETORES

- Verificando que $\boldsymbol{Av} = \lambda \boldsymbol{v}$

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -4 & 1 \end{bmatrix}, \qquad \lambda = 3 \qquad \text{e} \qquad \mathbf{v} = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{Av} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ -6 \end{bmatrix}$$

$$\lambda \boldsymbol{v} = 3 \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ -6 \end{bmatrix}$$

AUTOVALORES E AUTOVETORES

- Segundo autovalor e autovetor associado:

$$\lambda = -1 \qquad \text{e} \qquad \mathbf{v} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

- Verificando que $\boldsymbol{Av} = \lambda \boldsymbol{v}$

$$\boldsymbol{Av} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ -2 \end{bmatrix}$$

$$\lambda \boldsymbol{v} = -1 \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ -2 \end{bmatrix}$$

AUTOVALORES E AUTOVETORES NA ACP

- As variâncias dos componentes principais são os autovalores da matriz $\boldsymbol{C}$.
- Isto é $Var(Z_i) = \lambda_i$
- Os coeficientes a_{i1}, a_{i2},..., a_{ip} são os elementos do autovetor associado a λ_i, escalonados de forma que

$$a_{i1}^2 + a_{i2}^2 + \cdots + a_{ip}^2 = 1$$

PROCEDIMENTO PARA UMA ANÁLISE DE C.P.

Procedimento de cálculo:

1. Parte-se da matriz de covariâncias $\boldsymbol{C}$ ou correlação $\boldsymbol{R}$.

2. Calcula-se os p autovalores ($\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$) e os p autovetores ($\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \dots, \boldsymbol{a}_p$) de $\boldsymbol{C}$ ou $\boldsymbol{R}$.

3. Tem-se então que

$$Z_1 = \boldsymbol{X}\boldsymbol{a}_1$$

são os valores (escores) do primeiro componente.

PROCEDIMENTO PARA UMA ANÁLISE DE C.P.

1. Parte-se de um conjunto de n indivíduos e p variáveis.

2. O primeiro CP é:

$$Z_1 = a_{11}X_1 + a_{12}X_2 + \cdots + a_{1p}X_p$$

PROCEDIMENTO PARA UMA ANÁLISE DE C.P.

3. O segundo CP é:

$$Z_2 = a_{21}X_1 + a_{22}X_2 + \cdots + a_{2p}X_P$$

com a condição de que a correlação entre Z_1 e Z_2 seja zero!

PROCEDIMENTO PARA UMA ANÁLISE DE C.P.

4. O terceiro CP é:

$$Z_3 = a_{31}X_1 + a_{32}X_2 + \cdots + a_{3p}X_p$$

com a condição de que a correlação entre (Z_1 e Z_3) e (Z_2 e Z_3) sejam nulas!

E assim por diante até o máximo de p componentes.

PROCEDIMENTO PARA UMA ANÁLISE DE C.P.

4. Descarte os componentes que expliquem pouco da variação total dos dados.

Dizemos que a ACP é bem sucedida quando há uma significativa redução dimensional com o mínimo de perda de informação.

CRITÉRIOS

- Percentual de explicação maior que 80% (sugestão);
- Número de autovalores maiores que 1.

PROCEDIMENTO PARA UMA ANÁLISE DE C.P.

INTERPRETAÇÃO:

- A interpretação dos componentes deve ser feita em termos das magnitudes dos coeficientes associados às variáveis originais

- Portanto, os coeficientes indicam um "peso" da variável original.

Exemplo: Pardais sobreviventes da tempestade

Tabela 1. Correlações entre as cinco medidas do corpo das pardocas.

	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5
X_1	1,000				
X_2	0,735	1,000			
X_3	0,662	0,674	1,000		
X_4	0,645	0,769	0,763	1,000	
X_5	0,605	0,529	0,526	0,607	1,000

DEFINIÇÃO DE COMPONENTES PRINCIPAIS

- X_1 = comprimento total;
- X_2 = extensão alar;
- X_3 = comprimento do bico e cabeça;
- X_4 = comprimento do úmero;
- X_5 = comprimento da quilha do esterno.

DEFINIÇÃO DE COMPONENTES PRINCIPAIS

Exemplo da Tabela 1 em $p = 5$ medidas altamente correlacionadas do corpo de $n = 49$ pardocas temos:

$$var(Z_1) = 3{,}62$$

$$[var(Z_2) = 0{,}53, \quad var(Z_3) = 0{,}39, \quad var(Z_4) = 0{,}30, \quad var(Z_5) = 0{,}16]$$

O primeiro componente é visivelmente o mais importante para representar a variação total das 49 pardocas!

DEFINIÇÃO DE COMPONENTES PRINCIPAIS

$$var(Z_1) = 3{,}62\ (72{,}32\%)$$

$$var(Z_2) = 0{,}53\ (10{,}63\%)$$

$$var(Z_3) = 0{,}39\ (7{,}73\%)$$

$$var(Z_4) = 0{,}30\ (6{,}03\%)$$

$$var(Z_5) = 0{,}16\ (3{,}29\%)$$

DEFINIÇÃO DE COMPONENTES PRINCIPAIS

Com as variáveis X_i padronizadas, temos:

$$Z_1 = 0{,}45(C.\ total) + 0{,}46(Extensão\ alar) + 0{,}45(C.\ bico\ e\ cabeça) + 0{,}47(C.\ do\ úmero) + 0{,}40(C.\ quilha\ do\ esterno)$$

expressando um índice de tamanho.

$$Z_2 = -0{,}05(C.\ total) + 0{,}30(Extensão\ alar) + 0{,}32(C.\ bico\ e\ cabeça) + 0{,}18(C.\ do\ úmero) - 0{,}88(C.\ quilha\ do\ esterno)$$

expressando uma diferença de forma entre as pardocas.

Medidas do corpo de pardocas

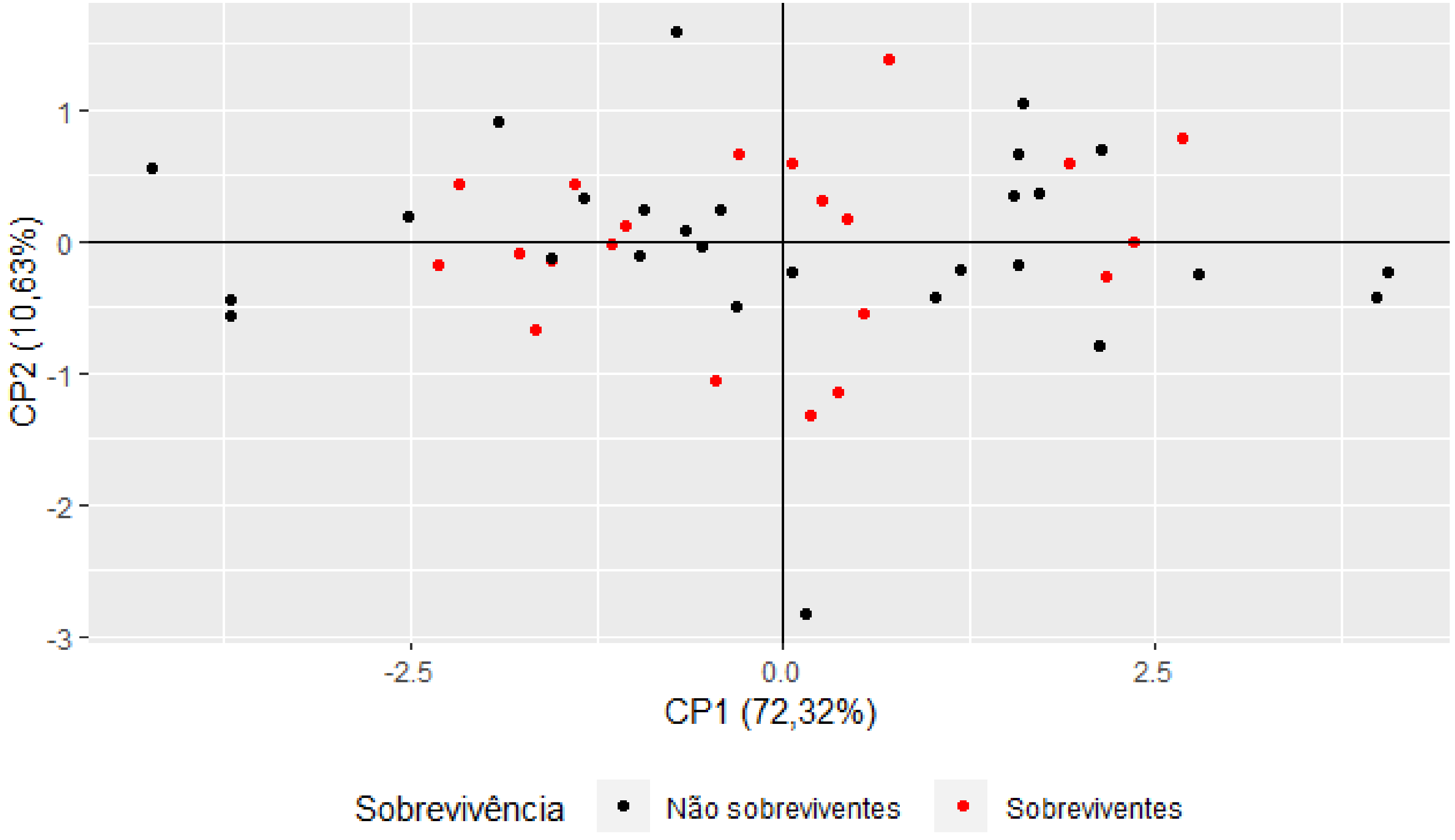
Interpretação dos CP:

- CP1, (Z_1): índice dos tamanhos das pardocas e explica 72% da variância total.

- CP2, (Z_2): representa uma diferença de forma entre as pardocas e explica 10,6% da variância total.

EXEMPLO

Figura 1 Representação de 49 pardocas contra valores para os dois primeiros componentes principais, CP1 e CP2.



EXEMPLO

Obs.:

- Nota-se que os pássaros com valores extremos para o 1º CP não sobreviveram. Isso é sugestivo também para o 2º CP.

- Os valores dos autovetores podem sair com sinais trocados em alguns pacotes computacionais. Isso não é um erro! Ele continua medindo exatamente o mesmo aspecto dos dados, mas na direção oposta. Continua sendo uma base do espaço de vetores.

Emprego nos países europeus

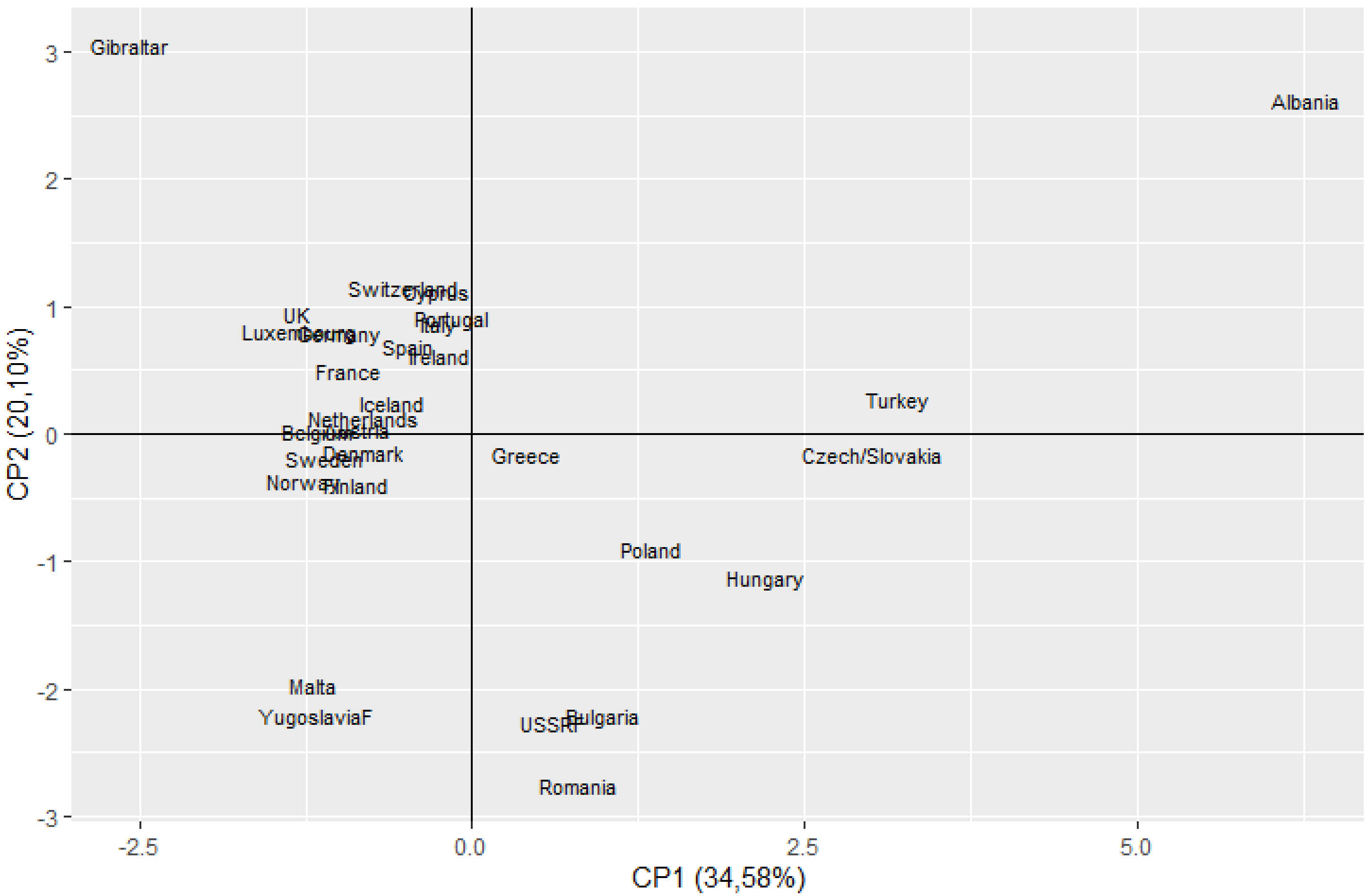
Interpretação dos CP:

Z_1 é um contraste entre os números engajados em AGR (agricultura, florestal e pesca) MIN (mineração e exploração de pedreiras) versus os números engajados em outras ocupações.

Z_2 é o contraste entre os números para MAN (fabricação) e TC (transporte e comunicação) com os números em CON (construção), SER (indústrias e serviços) e FIN (finança)

EXEMPLO 2

Figura 2 Países europeus representados contra os primeiros dois componentes principais para variáveis de emprego.



ACP COM ANÁLISE DE AGRUPAMENTOS

- Alguns algoritmos de análise de agrupamentos começam fazendo uma ACP para reduzir o número de variáveis originais.

- Pode mudar drasticamente os resultados obtidos.

- É uma opção de melhorar a representação gráfica quando os dois primeiros CP's contam por uma alta porcentagem de variação dos dados.