Análise de componentes principais

Patrícia de Siqueira Ramos

UNIFAL-MG, *campus* Varginha

11 de Junho de 2018

ACP via matriz de correlações amostrais

- Os CPs obtidos a partir de **S** são influenciados pelas variáveis de maior variância, sendo pouco úteis quando há grande discrepância entre as variáveis (diferentes escalas)
- Solução: padronizar cada variável pela sua média e desvio padrão, o que equivale a obter CPs a partir da matriz **R**

ACP via matriz de correlações amostrais

- Os CPs são então

$$Y_j = \mathbf{a}_j^T \mathbf{Z} = a_{j1} Z_1 + \cdots + a_{jp} Z_p,$$

em que $Z_i = \dfrac{X_i - \bar{X}_i}{\sqrt{S_{ii}}}$ é a variável padronizada e

$$V(Y_j) = \lambda_j, \qquad Cov(Y_i, Y_j) = 0$$

ACP via matriz de correlações amostrais

- A correlação entre Y_j e Z_i é dada por:

$$r_{Y_j,Z_i} = a_{ji}\sqrt{\lambda_j}$$

- e as variáveis Z_i com maiores coeficientes no CP Y_j são as mais correlacionadas com o CP

ACP via matriz de correlações amostrais

- A correlação entre Y_j e Z_i é dada por:

$$r_{Y_j, Z_i} = a_{ji}\sqrt{\lambda_j}$$

- e as variáveis Z_i com maiores coeficientes no CP Y_j são as mais correlacionadas com o CP
- A variância total de $\mathbf{Z}$ será

$$\text{Variância total}(\mathbf{Z}) = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i = \text{tr}(\mathbf{R}) = p$$

Variação explicada

- A proporção da variância total explicada pelo j-ésimo CP é

$$\frac{V(Y_j)}{\text{V.total de } \mathbf{Z}} = \frac{\lambda_j}{tr(\mathbf{R})} = \frac{\lambda_j}{p}$$

Variação explicada

- A proporção da variância total explicada pelo j-ésimo CP é

$$\frac{V(Y_j)}{\text{V.total de } \mathbf{Z}} = \frac{\lambda_j}{tr(\mathbf{R})} = \frac{\lambda_j}{p}$$

- Geralmente, quando utilizamos **R** no lugar de **S**, precisamos de um número maior de CPs para explicar a mesma quantidade de variação total obtida utilizando-se **S**

Variação explicada

- A proporção da variância total explicada pelo j-ésimo CP é

$$\frac{V(Y_j)}{\text{V.total de } \mathbf{Z}} = \frac{\lambda_j}{tr(\mathbf{R})} = \frac{\lambda_j}{p}$$

- Geralmente, quando utilizamos **R** no lugar de **S**, precisamos de um número maior de CPs para explicar a mesma quantidade de variação total obtida utilizando-se **S**

Obs.: Apesar de estarmos usando a mesma notação, os valores de a_{ij} e λ_j obtidos a partir de **R** não são os mesmos dos obtidos a partir de **S**

Como os CPs predizem $\mathbf{S}$

Seja a matriz $\mathbf{A}$ $p \times p$ formada pelos vetores de coeficientes

$$\mathbf{A} = \left[\begin{array}{cccc} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \dots & \mathbf{a}_p \end{array} \right],$$

que definem os p CPs.

Como os CPs predizem $\mathbf{S}$

Seja a matriz $\mathbf{A}$ $p \times p$ formada pelos vetores de coeficientes

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \dots & \mathbf{a}_p \end{bmatrix},$$

que definem os p CPs.
A matriz de covariâncias amostrais das variáveis $X_1, X_2, \dots, X_p$ é dada por (decomposição espectral de $\mathbf{S}$)

$$\mathbf{S} = \mathbf{A}\mathbf{\Lambda}\mathbf{A}^T,$$

em que

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_p \end{bmatrix}.$$

Obs.: Vimos que $\mathbf{S} = \mathbf{P}\mathbf{\Lambda}\mathbf{P}^T$

Como os CPs predizem $\mathbf{S}$

A matriz de covariâncias amostrais $\mathbf{S}$ pode ser escrita de forma mais simples

$$\mathbf{S} = \mathbf{A}^{*}\mathbf{A}^{*T},$$

em que $\mathbf{a}_i^{*} = \sqrt{\lambda_i}\mathbf{a}_i$

Definir número de CPs

- A variação nas p variáveis originais é totalmente contabilizada por todos os p componentes principais
- Mas, quantos CPs são necessários para resumir adequadamente um conjunto de dados? Há técnicas variadas:

Definir número de CPs

- A variação nas p variáveis originais é totalmente contabilizada por todos os p componentes principais
- Mas, quantos CPs são necessários para resumir adequadamente um conjunto de dados? Há técnicas variadas:
  (i) reter os k primeiros componentes que expliquem grande parte (70 a 80%) da variação total

Definir número de CPs

- A variação nas p variáveis originais é totalmente contabilizada por todos os p componentes principais
- Mas, quantos CPs são necessários para resumir adequadamente um conjunto de dados? Há técnicas variadas:
  (i) reter os k primeiros componentes que expliquem grande parte (70 a 80%) da variação total
  (ii) se a matriz **R** for usada, ficar apenas com os componentes com valores de $\lambda > 1$ (KAISER, 1958). Outros autores optam por $\lambda > 0,7$ (JOLLIFE, 1972)

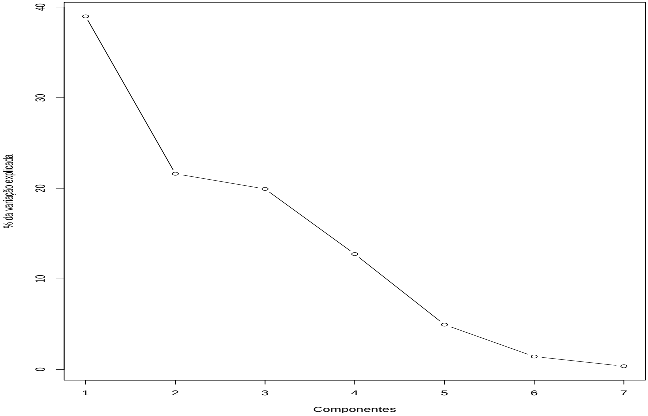
Definir número de CPs

- A variação nas p variáveis originais é totalmente contabilizada por todos os p componentes principais
- Mas, quantos CPs são necessários para resumir adequadamente um conjunto de dados? Há técnicas variadas:
  (i) reter os k primeiros componentes que expliquem grande parte (70 a 80%) da variação total
  (ii) se a matriz **R** for usada, ficar apenas com os componentes com valores de $\lambda > 1$ (KAISER, 1958). Outros autores optam por $\lambda > 0,7$ (JOLLIFE, 1972)
  (iii) analisar um *scree plot* (gráfico de $\lambda \times$ número de componentes). Devemos procurar pelo "cotovelo", que é o ponto depois do qual os λ_i diminuem mais lentamente

Definir número de CPs

- A variação nas p variáveis originais é totalmente contabilizada por todos os p componentes principais
- Mas, quantos CPs são necessários para resumir adequadamente um conjunto de dados? Há técnicas variadas:
  (i) reter os k primeiros componentes que expliquem grande parte (70 a 80%) da variação total
  (ii) se a matriz **R** for usada, ficar apenas com os componentes com valores de $\lambda > 1$ (KAISER, 1958). Outros autores optam por $\lambda > 0,7$ (JOLLIFE, 1972)
  (iii) analisar um *scree plot* (gráfico de $\lambda \times$ número de componentes). Devemos procurar pelo "cotovelo", que é o ponto depois do qual os λ_i diminuem mais lentamente
  (iv) verificar se o componente tem interpretação razoável e útil

Scree plot



Calcular os escores - a partir da matriz **S**

- Há algumas formas de calcular o escore de um componente em uma observação (a partir da matriz **S**). Uma forma muito comum é:

  - Fazer o produto coeficiente·(valor da variável), somando com os valores de todas as p variáveis (o valor da variável estará padronizado no caso de se usar a matriz **R**)

Ex.: ACP a partir da matriz **S**

a) Obter os CPs a partir da matriz **S** para os dados das 12 empresas lembrando que:
- as variáveis são: B, L e P (ganhos bruto e líquido e patrimônio)
- $n = 12$ empresas

A decomposição espectral de **S** resultou em :

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} 41474392 & 0 & 0 \\ 0 & 2539507 & 0 \\ 0 & 0 & 21093 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 0,43 & 0,90 & 0,10 \\ 0,03 & 0,10 & -0,99 \\ 0,90 & -0,43 & -0,02 \end{bmatrix}.$$

Ex.: Verificar que $\mathbf{S} = \mathbf{A\Lambda A}^T$

b) Verificar que $\mathbf{S} = \mathbf{A\Lambda A}^T$. A matriz $\mathbf{A}$ é a matriz de coeficientes dos CPs (igual à $\mathbf{P}$).
Para conferir:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} 9550608,6 & 706121,06 & 14978232,5 \\ 706121,1 & 76269,52 & 933915,1 \\ 14978232,5 & 933915,06 & 34408113,0 \end{bmatrix}.$$

Ex.: ACP para a matriz $\mathbf{R}$

c) Obter os CPs a partir da matriz $\mathbf{R}$, sabendo que a decomposição espectral resultou em

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} 2,49 & 0 & 0 \\ 0 & 0,42 & 0 \\ 0 & 0 & 0,08 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 0,62 & -0,001 & 0,79 \\ 0,56 & -0,71 & -0,44 \\ 0,56 & 0,71 & -0,43 \end{bmatrix}.$$

Ex.: Verificar que $\mathbf{R} = \mathbf{A\Lambda A}^T$

d) Verificar que $\mathbf{R} = \mathbf{A\Lambda A}^T$.
Para conferir:

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} 1 & 0,83 & 0,83 \\ 0,83 & 1 & 0,58 \\ 0,83 & 0,58 & 1 \end{bmatrix}.$$