Universidade de Brasília

DEPARTAMENTO DE ESTATÍSTICA

05 maio 2023

Entrega 3 - Lista 4

Prof. Dr. George von Borries

Análise Multivariada 1

Aluno: Bruno Gondim Toledo | Matrícula: 15/0167636

6. Exercício 32 da Lista 4 Suponha que um pesquisador padronizou os dados de um estudo através da transformação de Mahalanobis ($\mathbf{Z} = \mathbf{X}\mathbf{S}^{-1/2}$), em que $\mathbf{S}$ é a matriz de variância-covariâncias amostrais. Seria razoável aplicar componentes principais nos dados transformados? Justifique sua resposta.

Como a transformação considera a matriz $\mathbf{S}^{-1/2}$, que é a decomposição da matriz de variância-covariâncias amostrais $\mathbf{S}$ em sua forma de autovalores e autovetores; calculanda a matriz de transformação que multiplica cada vetor de dados pelo inverso da raiz quadrada dos autovalores, a informação acaba se concentrando nos primeiros autovalores. Neste caso, obteríamos uma matriz similar a matriz identidade, ou seja, com valores concentrados na diagonal principal, e valores zero ou tendendo a zero fora dela. Com isso, não teríamos um bom material para aplicar componentes principais, visto que na prática isso inviabilizaria a redução da dimensionalidade, pois cada dimensão teria uma variação mais ou menos constante, impedido assim de eliminar dimensões sem perda de informação, que é justamente o objetivo de componentes principais.

Além disso, dado que temos a matriz $\mathbf{S}$, em muitos casos será apropriado utilizar ela própria para a análise de componentes principais, e realizar esta transformação seria simplesmente um gasto desnecessário de poder computacional.

Portanto, concluímos que não seria razoável aplicar a transformação de Mahalanobis numa matriz com a intenção de posteriormente aplicar componentes principais nesta.

7. Exercício 37 da Lista 4 - Johnson e Wichern - Exercício 8.12. Dados no arquivo Air Pollution (T1-5.DAT). Os dados correspondem a 42 medidas de poluição do ar observadas na área de Los Angeles em um mesmo horário.

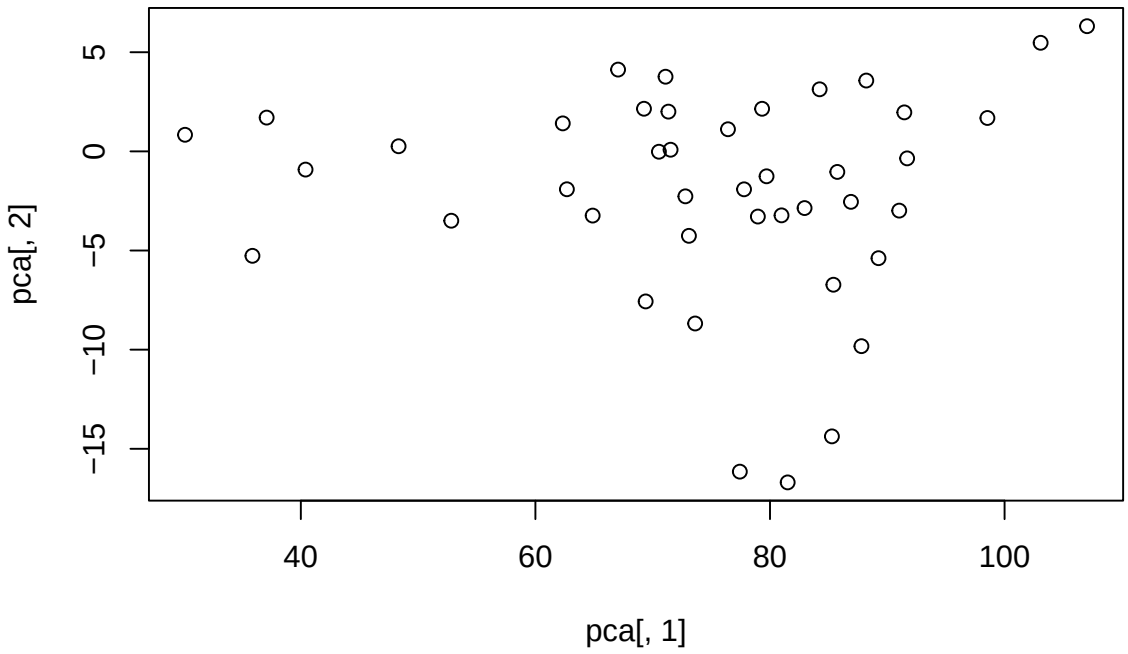
(a) Resumir os dados em em menos de 7 dimensões (se possível) através de análise de componentes principais utilizando a matrix de covariâncias $\mathbf{S}$ e apresentar suas conclusões.

```
## $values
## [1] 304.2578640  28.2761046  11.4644830   2.5243296   1.2795247   0.5287288
## [7]   0.2096157
```

```
## Importance of components:
##                             PC1      PC2     PC3     PC4     PC5    PC6
## Standard deviation     112.3046 10.45775 3.95060 0.96324 0.29277 0.1172
## Proportion of Variance   0.9901  0.00859 0.00123 0.00007 0.00001 0.0000
## Cumulative Proportion    0.9901  0.99869 0.99992 0.99999 1.00000 1.0000
##                              PC7
## Standard deviation     6.043e-17
## Proportion of Variance 0.000e+00
## Cumulative Proportion  1.000e+00
```

Aqui, notamos que a maior parte da informação está concentrada na primeira dimensão. As dimensões 2 e 3 também são relevantes. Da quarta em diante, apenas uma fração da informação está contida.

Irei então trabalhar com 3 dimensões.



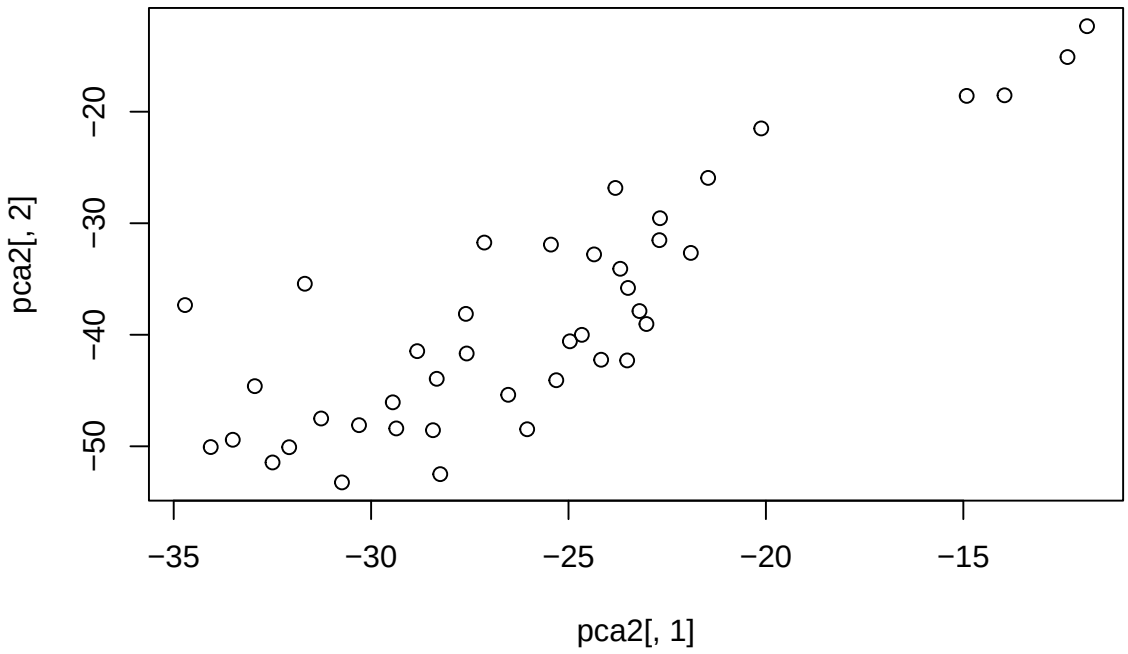
Notamos pelo gráfico acima que aparenta haver um *cluster* formado no primeiro quadrante quando analisamos as duas primeiras componentes. Apesar disso, nota-se pontos em praticamente todo o gráfico, exceto no terceiro quadrante, o que indica que estas duas componentes estão conseguindo explicar bem a variabilidade dos dados.

(b) Resumir os dados em em menos de 7 dimensões (se possível) através de análise de componentes principais utilizando a matrix de correlações **R** e apresentar suas conclusões.

```
## $values
## [1] 2.3367826 1.3860007 1.2040659 0.7270865 0.6534765 0.5366888 0.1558989
```

```
## Importance of components:
##                           PC1    PC2    PC3     PC4     PC5     PC6       PC7
## Standard deviation     0.6917 0.5651 0.3594 0.28096 0.24289 0.11917 4.985e-18
## Proportion of Variance 0.4434 0.2959 0.1197 0.07315 0.05467 0.01316 0.000e+00
## Cumulative Proportion  0.4434 0.7393 0.8590 0.93217 0.98684 1.00000 1.000e+00
```

Utilizando a matriz de correlações, notamos que agora a informação está mais espalhada entre as dimensões. Portanto, provavelmente não será possível diminuir tanto o número de dimensões utilizando esta técnica em detrimento da técnica utilizada anteriormente.



Aqui, tentando analisar as duas primeiras componentes, notamos não só uma clusterização no terceiro quadrante, como uma menor dispersão dos dados no gráfico. O que leva a interpretação que estas duas dimensões provavelmente não estão sendo suficientes para explicar a variabilidade desse conjunto de dados.

(c) A escolha da matriz para análise faz alguma diferença? Explique.

Sim; conforme citado anteriormente, no caso da matriz de covariâncias, a informação acabou se concentrando melhor nas primeiras dimensões, permitindo assim uma redução maior sem muita perda de informação da variabilidade dos dados. No caso da matriz de correlações, a informação acabou ficando pulverizada entre as dimensões, não sendo possível por exemplo analisar visualmente com o gráfico a dispersão dos dados com fidedignidade.

Porém, é importante notar se esta concentração está se dando por legitimamente a variabilidade estar concentrada em menos dimensões para o caso da matriz **S** em relação à matriz **R**, pois se estiverem em escalas diferentes, podemos estar sendo levados a um erro. Irei abordar essa possibilidade nos itens subsequentes.

(d) Os dados podem ser resumidos em 3 ou menos dimensões?

Utilizando o comando *prcomp*, obtemos o seguinte resultado:

```
## Importance of components:
##                           PC1     PC2     PC3     PC4     PC5     PC6    PC7
## Standard deviation     17.443 5.31753 3.38592 1.58881 1.13116 0.72714 0.4578
## Proportion of Variance  0.873 0.08113 0.03289 0.00724 0.00367 0.00152 0.0006
## Cumulative Proportion   0.873 0.95408 0.98697 0.99421 0.99788 0.99940 1.0000
```

Onde vemos que 87.3% da variância está contida apenas na primeira componente. Conforme elucidado pelo Prof. von Borries em aula, não existe um valor exato para se alcançar na redução, mas levando ao limite, este valor (87.3%) já é um valor excelente, em outras palavras, a depender do tipo de análise, é possível trabalhar com apenas uma componente neste exemplo: A primeira!

Sendo um pouco mais conservador, ao manter a segunda componente, já temos 95.4% da variância explicada, então para quase qualquer análise esta seria uma redução perfeitamente aceitável.

É possível ainda trabalhar com métodos mais formalizados, sem ter de recorrer ao empirismo, como por exemplo o método de elbow, ou então decidindo por manter as dimensões cujo valor observado estejam acima da média das componentes.

Poderíamos parar por aqui e ficar com um trabalho mediano, porém se formos atentos e analisarmos o conjunto de dados

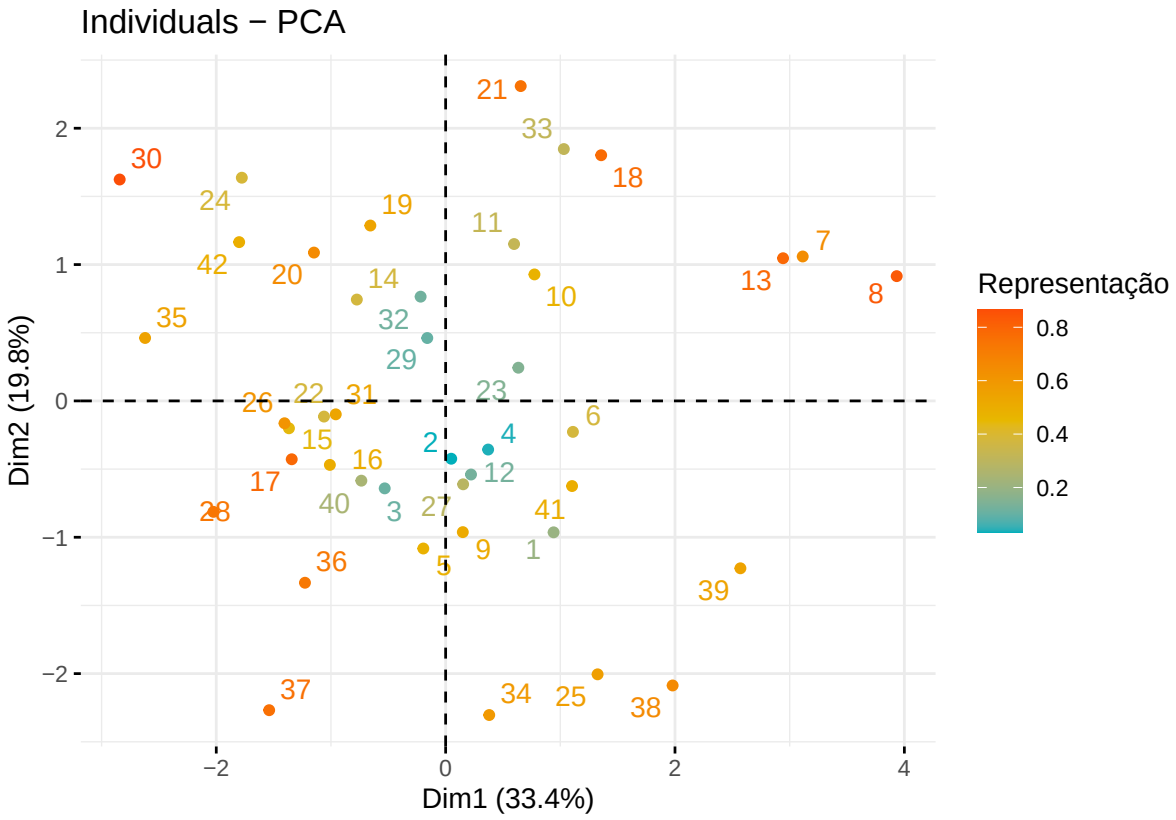
```
## # A tibble: 6 x 7
##      X1    X2    X3    X4    X5    X6    X7
##   <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl>
## 1     8    98     7     2    12     8     2
## 2     7   107     4     3     9     5     3
## 3     7   103     4     3     5     6     3
## 4    10    88     5     2     8    15     4
## 5     6    91     4     2     8    10     3
## 6     8    90     5     2    12    12     4
```

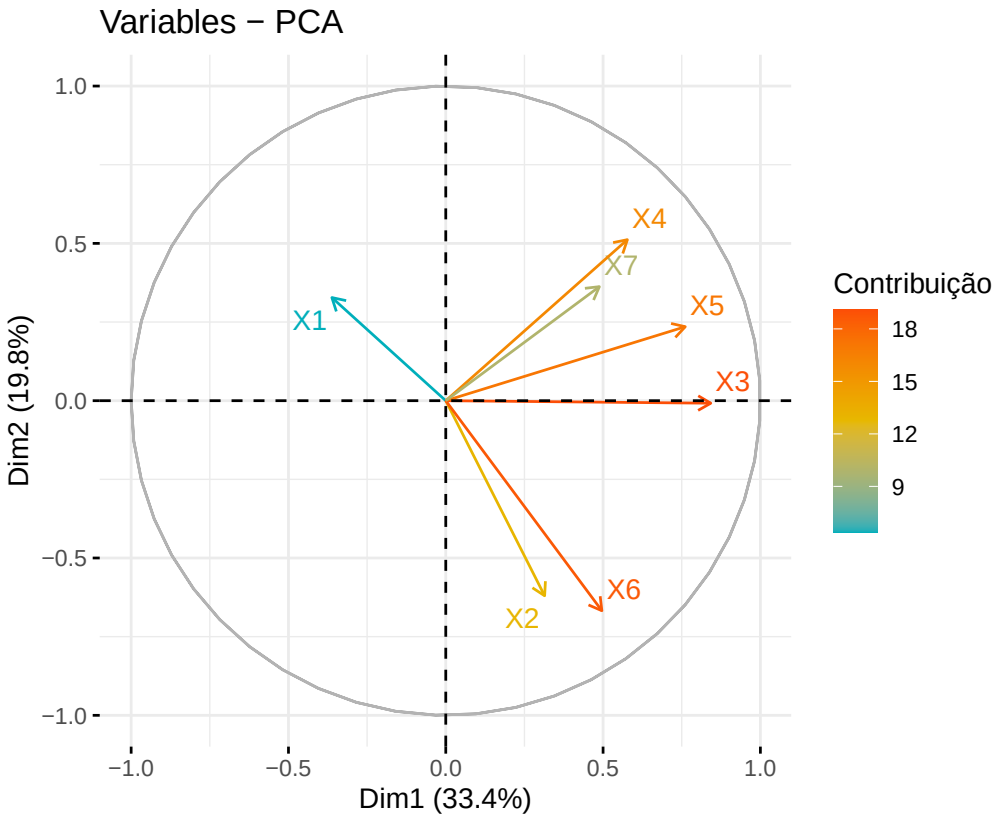
Notamos que os dados aparentam estar em escalas diferentes. Portanto, iremos utilizar a matriz de correlações, com a variável padronizada.

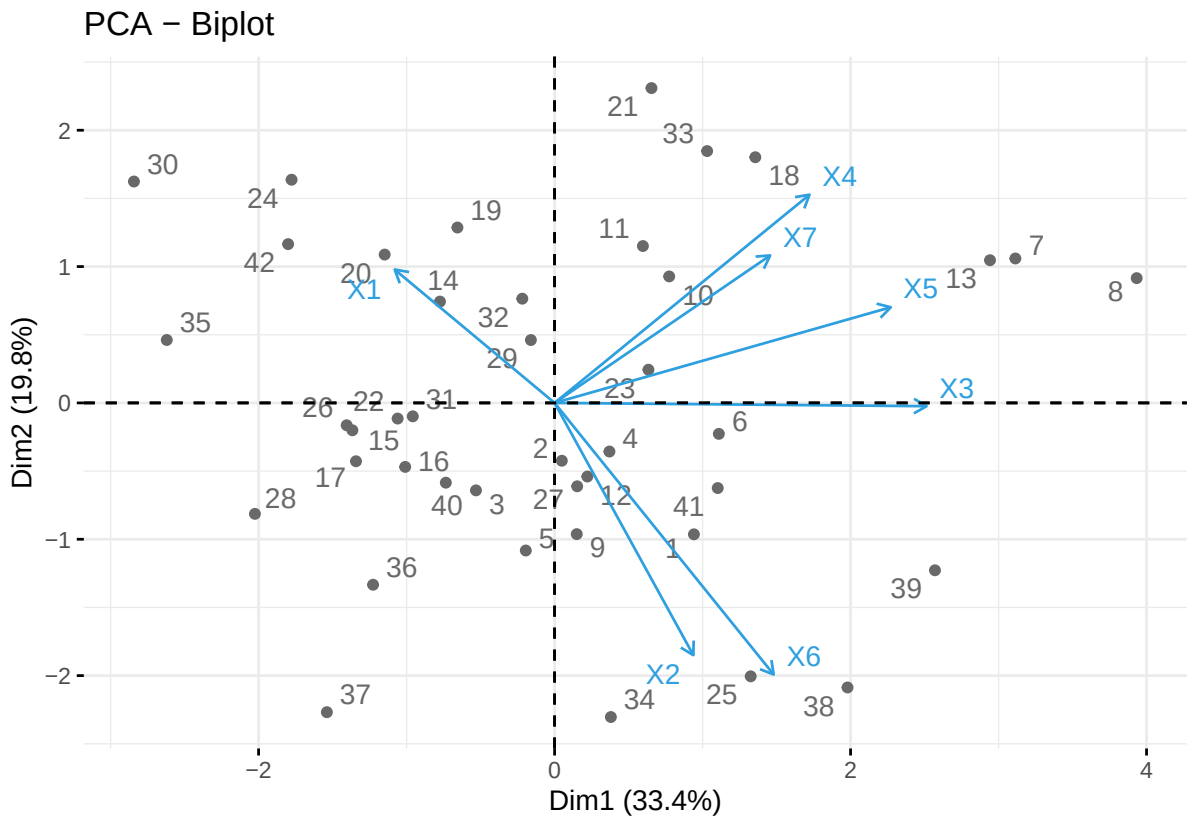
```
## Importance of components:
##                           PC1    PC2    PC3    PC4     PC5     PC6     PC7
## Standard deviation     1.5287 1.1773 1.0973 0.8527 0.80838 0.73259 0.39484
## Proportion of Variance 0.3338 0.1980 0.1720 0.1039 0.09335 0.07667 0.02227
## Cumulative Proportion  0.3338 0.5318 0.7038 0.8077 0.90106 0.97773 1.00000
```

Por esta análise, notamos que até a terceira componente, acumulamos 70,38% da variação do conjunto. Portanto, notamos que na realidade, utilizar 3 ou menos dimensões iremos perder muito mais informação do que especulado anteriormente. Ainda assim, a dependender da análise, este valor (70,38%) ainda pode ser excelente para algumas análises.

Abaixo algumas representações visuais desta análise [1]


Individuals − PCA
Dim2 (19.8%)
Dim1 (33.4%)
Representação
0.8
0.6
0.4
0.2


Variables − PCA
Dim2 (19.8%)
Dim1 (33.4%)
Contribuição
18
15
12
9
X1
X2
X3
X4
X5
X6
X7



Referências:

[1] SILVA, Adilane Ribeiro da. Análise de Componentes Principais (PCA): cálculo e aplicação no R. dezembro 17, 2020. Disponível em: https://site.statplace.com.br/blog/analise-de-componentes-principais-pca-calculo-e-aplicacao-no-r/