

Descrição e visualização de dados multivariados utilizando a base Iris

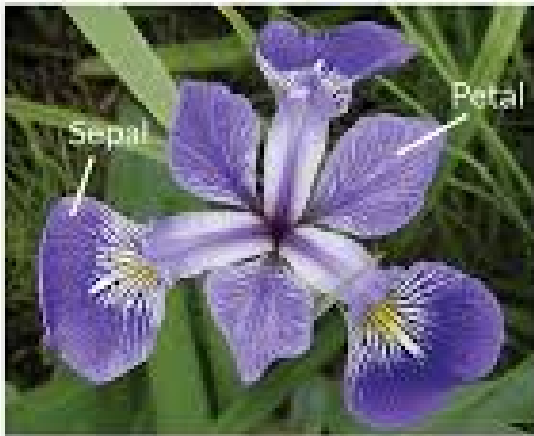
Table of contents

1	Introdução	1
2	Preparação e inspeção dos dados	2
3	Vetor de médias	3
4	Matrizes de covariância e correlação	4
5	Variância generalizada e total	5
6	Matrizes de distância	5
6.1	Distância Euclidiana	5
6.2	Distância de Karl Pearson	6
6.3	Distância de Mahalanobis	6
7	Visualizações básicas	6
7.1	Gráfico de pares por espécie	6
7.2	Correlograma	7
7.3	Heatmap das correlações	8
8	Referências Bibliográficas	9

1 Introdução

A base *iris* (FISHER (1936)) é um dos conjuntos de dados mais clássicos e didáticos da estatística. Ela contém **150 observações** (flores) de **três espécies**, *setosa*, *versicolor* e *virginica*, medidas em **quatro variáveis contínuas**:

- Sepal.Length (cm)
- Sepal.Width (cm)
- Petal.Length (cm)
- Petal.Width (cm)



Iris Versicolor



Iris Setosa



Iris Virginica

Nosso objetivo é revisar **conceitos fundamentais de Estatística Multivariada**:

- Vetor de médias
- Matrizes de covariância e correlação
- Variância total e generalizada
- Matrizes de distância (euclidiana e de Mahalanobis)
- Visualizações (pares, correlograma, heatmaps)

2 Preparação e inspeção dos dados

```
# Pacotes necessários
# install.packages(c("tidyverse", "GGally", "ggcorrplot", "pheatmap", "factoextra", "MatchIt"))

library(tidyverse)
library(GGally)
library(ggcorrplot)
library(pheatmap)
library(factoextra)
library(MatchIt)

# Carregar a base iris
dados <- iris
glimpse(dados)
```

```
Rows: 150
Columns: 5
$ Sepal.Length <dbl> 5.1, 4.9, 4.7, 4.6, 5.0, 5.4, 4.6, 5.0, 4.4, 4.9, 5.4, 4.~
$ Sepal.Width <dbl> 3.5, 3.0, 3.2, 3.1, 3.6, 3.9, 3.4, 3.4, 2.9, 3.1, 3.7, 3.~
$ Petal.Length <dbl> 1.4, 1.4, 1.3, 1.5, 1.4, 1.7, 1.4, 1.5, 1.4, 1.5, 1.5, 1.~
$ Petal.Width <dbl> 0.2, 0.2, 0.2, 0.2, 0.2, 0.4, 0.3, 0.2, 0.2, 0.1, 0.2, 0.~
```

```
$ Species      <fct> setosa, setosa, setosa, setosa, setosa, setosa, setosa, s~
```

```
summary(dados)
```

```
  Sepal.Length  Sepal.Width  Petal.Length  Petal.Width
Min.   :4.300  Min.   :2.000  Min.   :1.000  Min.   :0.100
1st Qu.:5.100  1st Qu.:2.800  1st Qu.:1.600  1st Qu.:0.300
Median :5.800  Median :3.000  Median :4.350  Median :1.300
Mean   :5.843  Mean   :3.057  Mean   :3.758  Mean   :1.199
3rd Qu.:6.400  3rd Qu.:3.300  3rd Qu.:5.100  3rd Qu.:1.800
Max.   :7.900  Max.   :4.400  Max.   :6.900  Max.   :2.500

Species
setosa   :50
versicolor:50
virginica :50
```

```
# Parte numérica e variável categórica
```

```
X <- as_tibble(dados[, 1:4])
```

```
y <- dados$Species
```

Interpretação: A base iris possui 150 observações e 5 variáveis, sendo quatro contínuas, `Sepal.Length`, `Sepal.Width`, `Petal.Length` e `Petal.Width` (em centímetros) e uma categórica, `Species`, com três espécies (`setosa`, `versicolor` e `virginica`). O resumo descritivo da base `iris` indica amostra balanceada por espécie (50 `setosa`, 50 `versicolor`, 50 `virginica`) e sugere padrões distintos entre sépalas e pétalas: `Sepal.Length` (4,3–7,9; Q1=5,1; mediana=5,8; média 5,84) e `Sepal.Width` (2,0–4,4; Q1=2,8; mediana=3,0; média 3,06) mostram variação moderada e distribuição quase simétrica (médias próximas às medianas), enquanto `Petal.Length` (1,0–6,9; Q1=1,6; mediana=4,35; média 3,76) e `Petal.Width` (0,1–2,5; Q1=0,3; mediana=1,3; média 1,20) exibem maior dispersão e assimetria à esquerda, refletindo a presença de muitas pétalas pequenas (típicas de `setosa`) e valores maiores nas demais espécies; isso cria um perfil “bimodal” nas pétalas, que costuma discriminar fortemente as espécies, ao passo que as medidas de sépala contribuem de forma mais moderada para a separação.

3 Vetor de médias

```
# Vetor de médias global
media_global <- colMeans(X)
media_global
```

```
Sepal.Length  Sepal.Width  Petal.Length  Petal.Width
  5.843333      3.057333      3.758000      1.199333
```

```
# Vetor de médias por espécie
media_por_especie <- X %>%
  mutate(Species = y) %>%
  group_by(Species) %>%
  summarise(across(everything(), mean), .groups = "drop")
media_por_especie
```

Species	Sepal.Length	Sepal.Width	Petal.Length	Petal.Width
setosa	5.006	3.428	1.462	0.246
versicolor	5.936	2.770	4.260	1.326
virginica	6.588	2.974	5.552	2.026

Interpretação: o vetor de médias representa o “centro” da nuvem de pontos. Comparar médias por espécie ajuda a perceber separações entre grupos (por exemplo, pétalas maiores em *virginica*). Os valores mostram o padrão clássico da iris: *setosa* tem pétalas bem menores (PL=1,462; PW=0,246) e sépalas relativamente mais largas (SW=3,428), além de menor comprimento de sépala (SL=5,006); *virginica* apresenta as maiores pétalas (PL=5,552; PW=2,026) e o maior comprimento de sépala (SL=6,588), com largura de sépala intermediária (SW=2,974); *versicolor* fica entre as duas em todas as medidas (PL=4,260; PW=1,326) e tem a menor largura de sépala (SW=2,770).

4 Matrizes de covariância e correlação

```
# Matriz de covariâncias
S <- cov(X)
S
```

```
      Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
Sepal.Length  0.6856935 -0.0424340  1.2743154  0.5162707
Sepal.Width   -0.0424340  0.1899794 -0.3296564 -0.1216394
Petal.Length   1.2743154 -0.3296564  3.1162779  1.2956094
Petal.Width    0.5162707 -0.1216394  1.2956094  0.5810063
```

Covariância: mede associação linear nas unidades originais. As variâncias (diagonal) indicam que a maior dispersão está em *Petal.Length* (3.1163), seguida de *Sepal.Length* (0.6857) e *Petal.Width* (0.5810), enquanto *Sepal.Width* varia menos (0.1900). Nos termos cruzados, há covariância positiva forte entre *Petal.Length* e *Petal.Width* (1.2956), e também entre *Sepal.Length* com *Petal.Length* (1.2743) e com *Petal.Width* (0.5163); já *Sepal.Width* apresenta covariâncias negativas com as demais (especialmente com *Petal.Length*: -0.3297).

```
# Matriz de correlações
R <- cor(X)
R
```

```
      Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
Sepal.Length  1.0000000 -0.1175698  0.8717538  0.8179411
Sepal.Width   -0.1175698  1.0000000 -0.4284401 -0.3661259
Petal.Length   0.8717538 -0.4284401  1.0000000  0.9628654
Petal.Width    0.8179411 -0.3661259  0.9628654  1.0000000
```

Correlação: padroniza a covariância (-1 a 1), útil quando variáveis têm escalas diferentes. A matriz de correlações da iris mostra que as medidas de pétala são fortemente associadas: *Petal.Length* e *Petal.Width* têm correlação muito alta (0,963) e ambas se correlacionam bastante com *Sepal.Length* (0,872 e 0,818), indicando forte redundância informacional entre essas variáveis; já *Sepal.Width* se relaciona negativamente com as demais (-0,118 com *Sepal.Length*, -0,428 com *Petal.Length* e -0,366 com *Petal.Width*), sugerindo um padrão em direção oposta. Em síntese, as pétalas dominam a variação e separam melhor as espécies, enquanto *Sepal.Width* adiciona informação complementar (e contrária), com alerta para possível multicolinearidade entre as medidas de pétala.

5 Variância generalizada e total

```
# Variância generalizada (determinante de S)
eigen(S)

eigen() decomposition
$values
[1] 4.22824171 0.24267075 0.07820950 0.02383509

$vectors
      [,1]      [,2]      [,3]      [,4]
[1,] 0.36138659 -0.65658877 0.58202985 0.3154872
[2,] -0.08452251 -0.73016143 -0.59791083 -0.3197231
[3,] 0.85667061 0.17337266 -0.07623608 -0.4798390
[4,] 0.35828920 0.07548102 -0.54583143 0.7536574
```

```
VG <- det(S)
VG
```

```
[1] 0.00191273
```

VG (determinante): A variância generalizada 0,00191273 é o determinante da matriz de covariâncias **S** e mede o “volume” da dispersão conjunta; um valor tão pequeno indica forte colinearidade/redundância entre as variáveis, especialmente entre **Petal.Length** e **Petal.Width**, de modo que a nuvem de pontos fica “achatada” em algumas direções (um ou mais autovalores de **S** são pequenos, e o produto deles, o determinante, cai). Em termos práticos, isso sugere que as medidas de pétala carregam informação muito semelhante.

```
# Variância total (traço de S)
VT <- sum(diag(S))
VT
```

```
[1] 4.572957
```

VT (traço): soma das variâncias marginais = dispersão total marginal. Ela mede a dispersão global do conjunto e é dependente de escala; padronizando as variáveis (z-scores), a variância total passaria a ser $p = 4$. Pela decomposição: **Petal.Length** responde por aproximadamente 68,1% da variância total, **Sepal.Length** responde por 15,0%, **Petal.Width** por 12,7% e **Sepal.Width** por 4,2%, confirmando que as medidas de pétala dominam a variabilidade.

6 Matrizes de distância

6.1 Distância Euclidiana

```
D_euclid <- euclidean_dist(data = X)
as.matrix(D_euclid)[1:6, 1:6]
```

```
      1      2      3      4      5      6
1 0.0000000 0.5385165 0.509902 0.6480741 0.1414214 0.6164414
2 0.5385165 0.0000000 0.300000 0.3316625 0.6082763 1.0908712
3 0.5099020 0.3000000 0.000000 0.2449490 0.5099020 1.0862780
4 0.6480741 0.3316625 0.244949 0.0000000 0.6480741 1.1661904
5 0.1414214 0.6082763 0.509902 0.6480741 0.0000000 0.6164414
6 0.6164414 1.0908712 1.086278 1.1661904 0.6164414 0.0000000
```

Distância Euclidiana representa a distância geométrica entre dois pontos.

6.2 Distância de Karl Pearson

```
D_karlP <- scaled_euclidean_dist(data = X)
as.matrix(D_karlP)[1:6, 1:6]
```

	1	2	3	4	5	6
1	0.0000000	1.1722914	0.8427840	1.0999999	0.2592702	1.0349769
2	1.1722914	0.0000000	0.5216255	0.4325508	1.3818560	2.1739229
3	0.8427840	0.5216255	0.0000000	0.2829432	0.9882608	1.8477070
4	1.0999999	0.4325508	0.2829432	0.0000000	1.2459861	2.0937597
5	0.2592702	1.3818560	0.9882608	1.2459861	0.0000000	0.8971079
6	1.0349769	2.1739229	1.8477070	2.0937597	0.8971079	0.0000000

Distância de Karl Pearson leva em conta as diferenças de escala.

6.3 Distância de Mahalanobis

```
D_mahal <- mahalanobis_dist(data = X)
as.matrix(D_mahal)[1:6, 1:6]
```

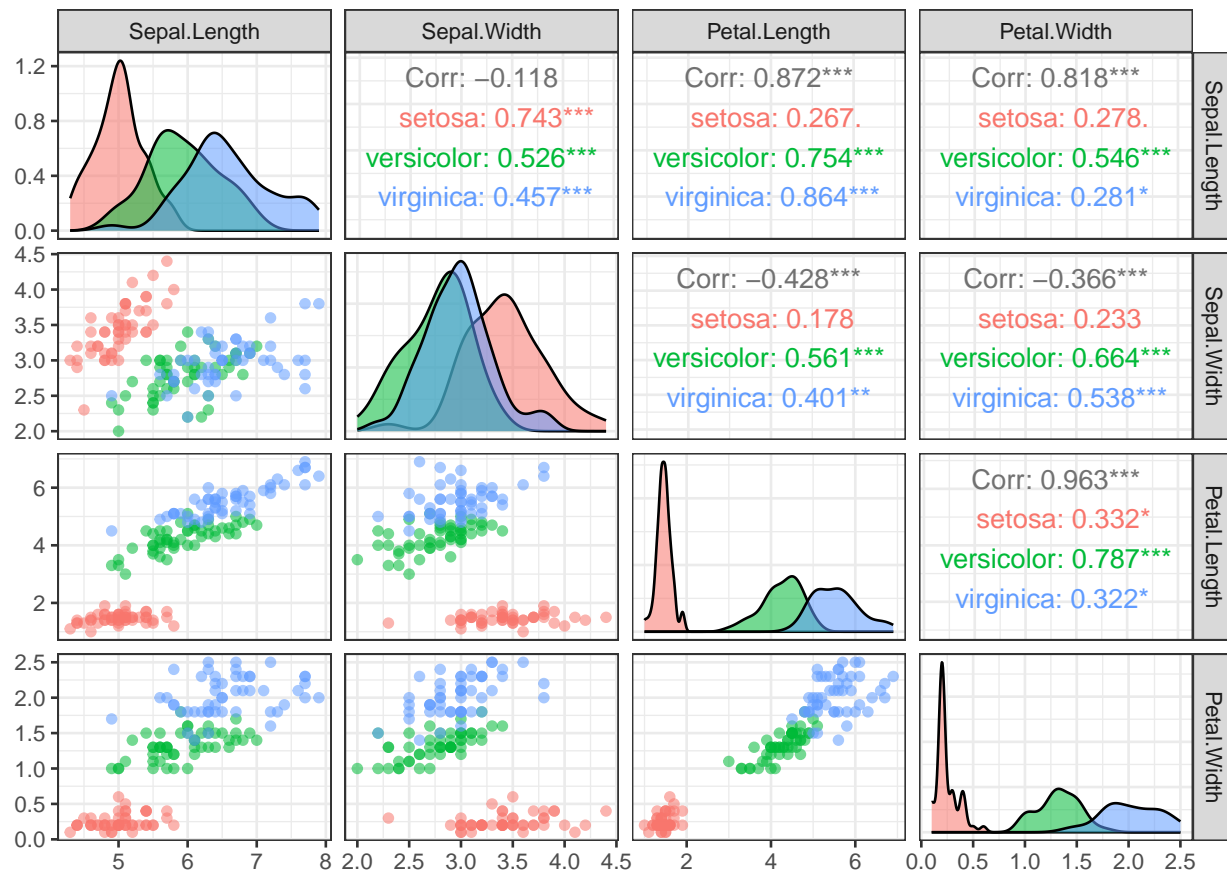
	1	2	3	4	5	6
1	0.0000000	1.3544572	0.9687298	1.4057253	0.5899110	1.1382566
2	1.3544572	0.0000000	0.9697905	1.4527546	1.8106890	2.4484066
3	0.9687298	0.9697905	0.0000000	0.7170009	1.1253440	1.9227214
4	1.4057253	1.4527546	0.7170009	0.0000000	1.3293220	2.2425573
5	0.5899110	1.8106890	1.1253440	1.3293220	0.0000000	0.9446158
6	1.1382566	2.4484066	1.9227214	2.2425573	0.9446158	0.0000000

Distância de Mahalanobis leva em conta correlações entre variáveis e diferenças de escala.

7 Visualizações básicas

7.1 Gráfico de pares por espécie

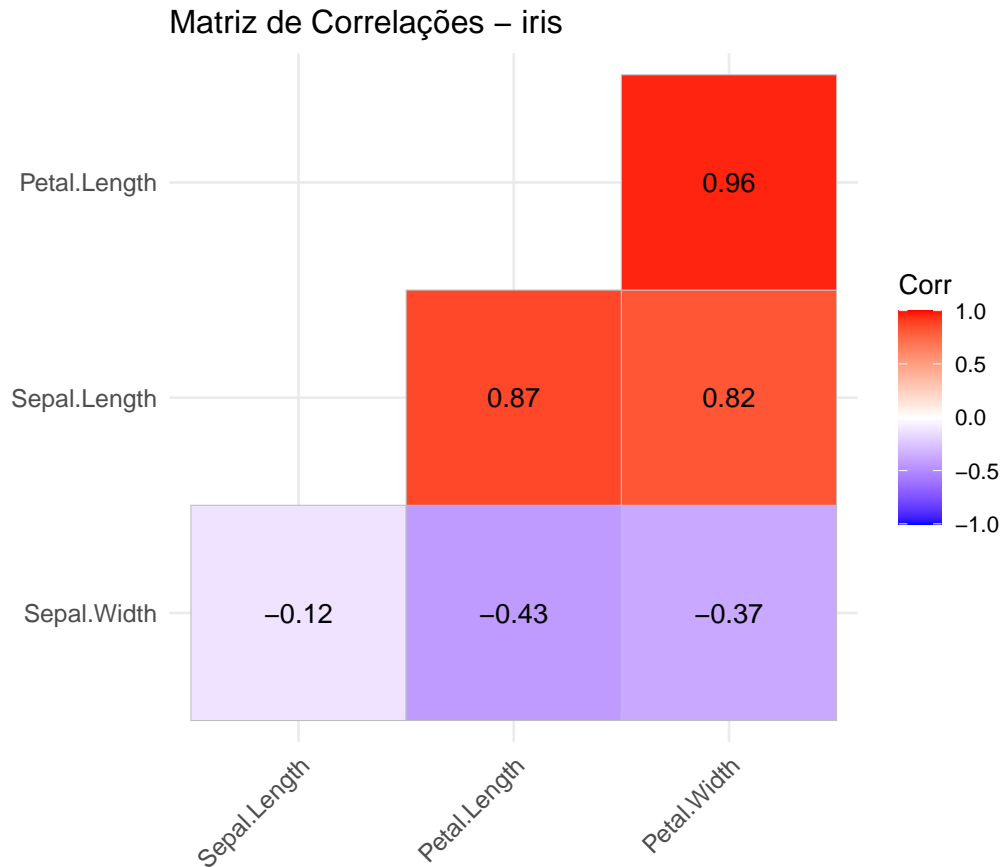
```
GGally::ggpairs(bind_cols(X, Species = y),
                 columns = 1:4, aes(color = Species, alpha = 0.8)) + theme_bw()
```



Interpretação: O “pairs plot” da iris mostra que *setosa* tem pétalas muito pequenas e sépalas mais largas, enquanto *versicolor* e *virginica* apresentam pétalas maiores (com alguma sobreposição), e em *Sepal.Width* a espécie *setosa* desloca-se à direita, *versicolor* à esquerda e *virginica* fica intermediária. As correlações globais destacam *Petal.Length* *vs.* *Petal.Width* como fortíssima (0,96) e *Sepal.Length* bem associado às pétalas; já *Sepal.Width* aparece negativamente correlacionado no agregado. Contudo, por espécie as relações com *Sepal.Width* tendem a ser positivas, e os dispersogramas envolvendo medidas de pétala exibem a melhor separação entre espécies. Em síntese, as pétalas dominam a estrutura e a discriminação, com *Sepal.Width* fornecendo informação complementar.

7.2 Correlograma

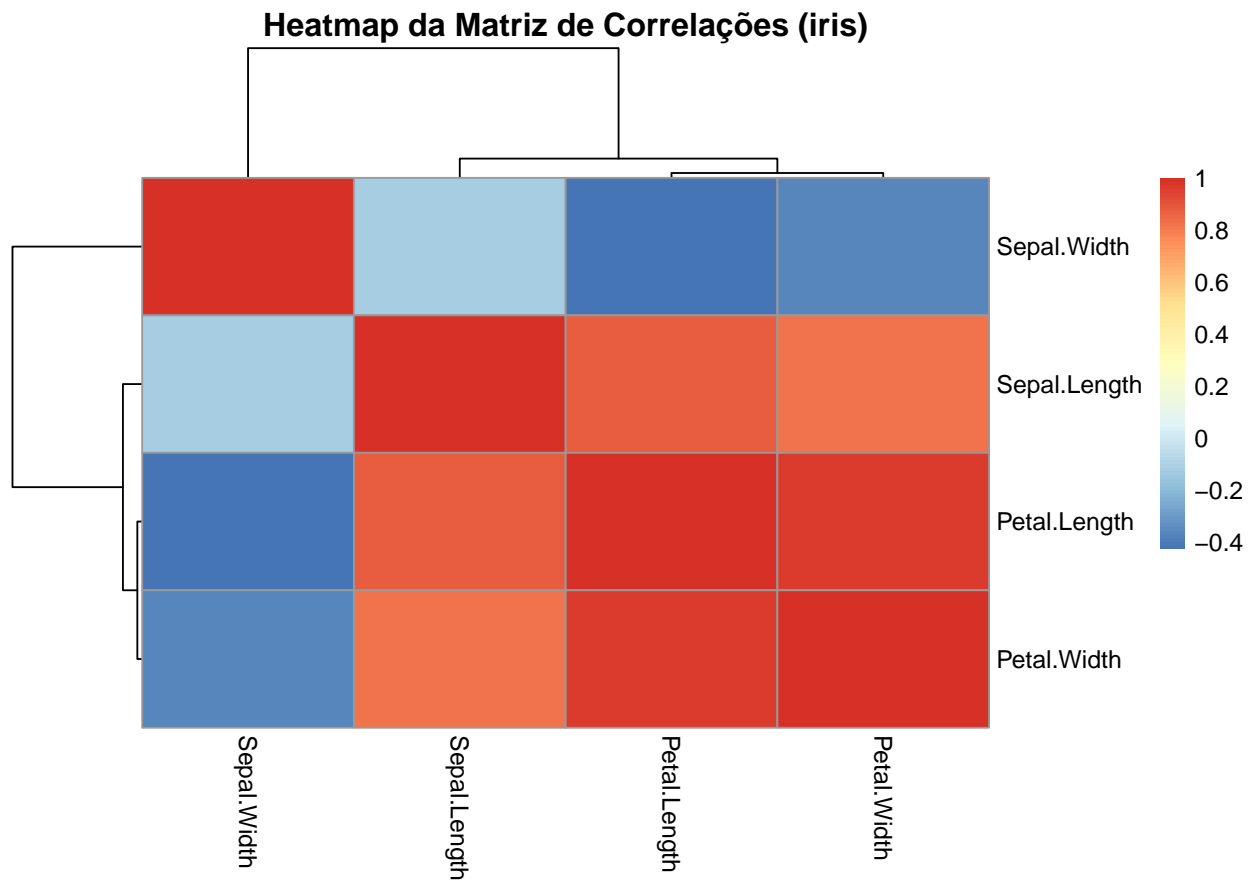
```
ggcorrplot(R, hc.order = TRUE, type = "lower",
  lab = TRUE, tl.cex = 10,
  title = "Matriz de Correlações - iris")
```



Interpretação: O mapa de correlações da iris evidencia três padrões centrais: (1) forte associação positiva entre as medidas de pétala: *Petal.Length* vs. *Petal.Width* 0,96 e também de *Sepal.Length* com as pétalas (0,87 e 0,82), indicando redundância informacional e provável multicolinearidade; (2) *Sepal.Width* apresenta correlações negativas com as demais variáveis ($-0,12$ com *Sepal.Length*, $-0,43$ com *Petal.Length* e $-0,37$ com *Petal.Width*), sugerindo um eixo de variação em sentido oposto ao das pétalas; e (3) como consequência, em tarefas de PCA ou classificação, as pétalas tendem a dominar a separação entre espécies, enquanto *Sepal.Width* adiciona sinal complementar.

7.3 Heatmap das correlações

```
pheatmap(R, cluster_rows = TRUE, cluster_cols = TRUE,
  main = "Heatmap da Matriz de Correlações (iris)")
```

Interpretação: O heatmap das correlações da iris confirma dois blocos de variáveis: (i) `Petal.Length` e `Petal.Width` fortemente positivas entre si (vermelho intenso) e também bem alinhadas com `Sepal.Length` (vermelho), formando um grupo altamente correlacionado que indica redundância e tende a dominar a variação; (ii) `Sepal.Width` aparece em azul frente às demais, mostrando correlação negativa moderada, o que a isola no dendrograma e sugere um eixo complementar de informação. Em termos práticos, as pétalas são as melhores para discriminar espécies (e podem sofrer multicolinearidade), enquanto `Sepal.Width` acrescenta sinal em direção oposta.

8 Referências Bibliográficas

FISHER, R. A. 1936. "THE USE OF MULTIPLE MEASUREMENTS IN TAXONOMIC PROBLEMS." *Annals of Eugenics* 7 (2): 179–88. <https://doi.org/10.1111/j.1469-1809.1936.tb02137.x>.