
Estatística: Aplicação ao Sensoriamento Remoto

SER 204

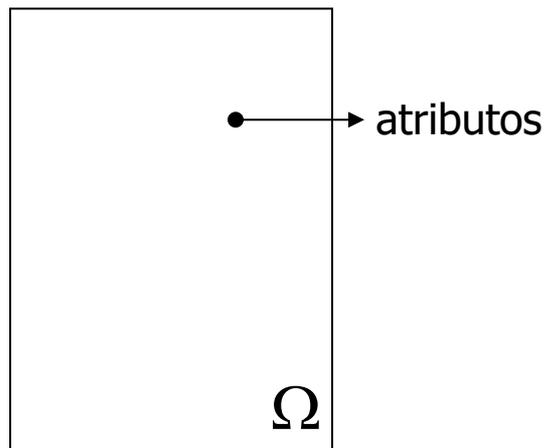
Componentes Principais

Camilo Daleles Rennó

camilo.renno@inpe.br

acesso do conteúdo do curso em [Bibdigital do INPE](#) ou [GitHub](#)

Informação X Redundância



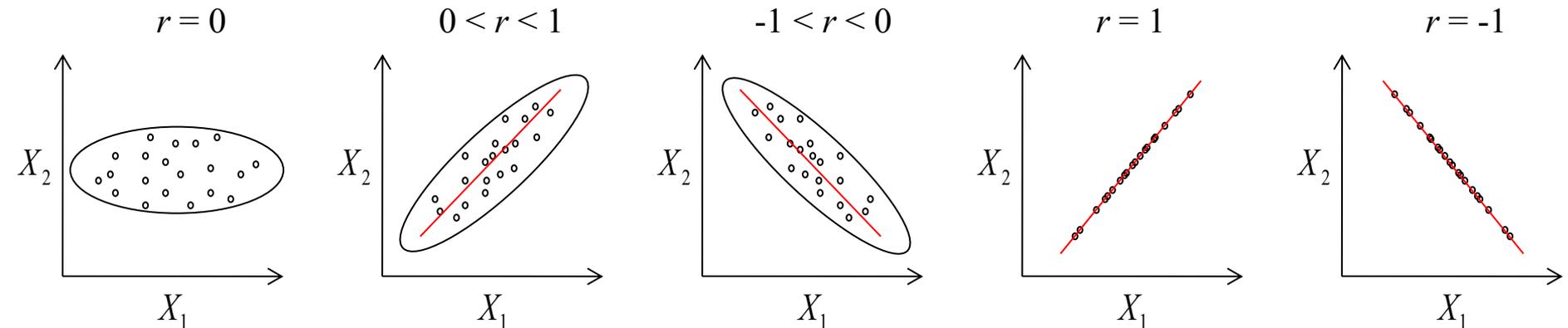
Quando pretendemos estudar uma população qualquer, em geral, coletamos um grande número de dados (atributos) com o intuito de descrever seu comportamento e/ou entender o relacionamento existente entre os diversos aspectos característicos desta população.

Cada atributo (ou variável) traz em si uma informação a respeito de um determinado aspecto da população estudada.

Quanto maior a **variância**, maior é a variabilidade e portanto maior a **informação** contida nesta variável. Num caso extremo, se a variância é zero, a variável não apresenta nenhuma informação a respeito do fenômeno por ela representada.

Informação X Redundância

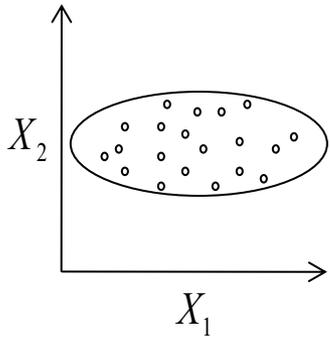
Quando as medidas adquiridas são feitas sobre o mesmo indivíduo (ou mesma posição geográfica), espera-se que possa haver alguma relação entre elas. Essas relações podem ser fortes, fracas ou nem existir.



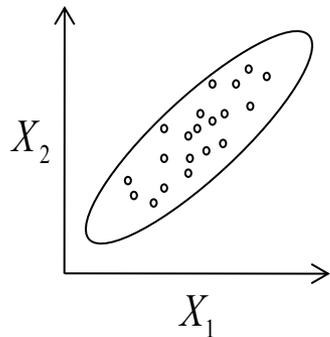
$$r = \frac{\text{Cov}(X_1, X_2)}{\sqrt{\text{Var}(X_1)\text{Var}(X_2)}}$$

Dessa forma, a **covariância** (e a **correlação**) pode ser interpretada como uma **redundância** em análises múltiplas (2 ou mais variáveis), já que a informação contida numa variável está parcialmente representada em outra. Num caso extremo, para que utilizar duas variáveis perfeitamente correlacionadas ($|r| = 1$), uma vez que, conhecendo-se o valor de uma, pode-se inferir com precisão o valor da outra?

Informação X Redundância



Quando a relação entre variáveis não é o objetivo da pesquisa em si, o ideal é trabalharmos com variáveis independentes pois assim cada variável trará uma informação nova a respeito da população estudada.

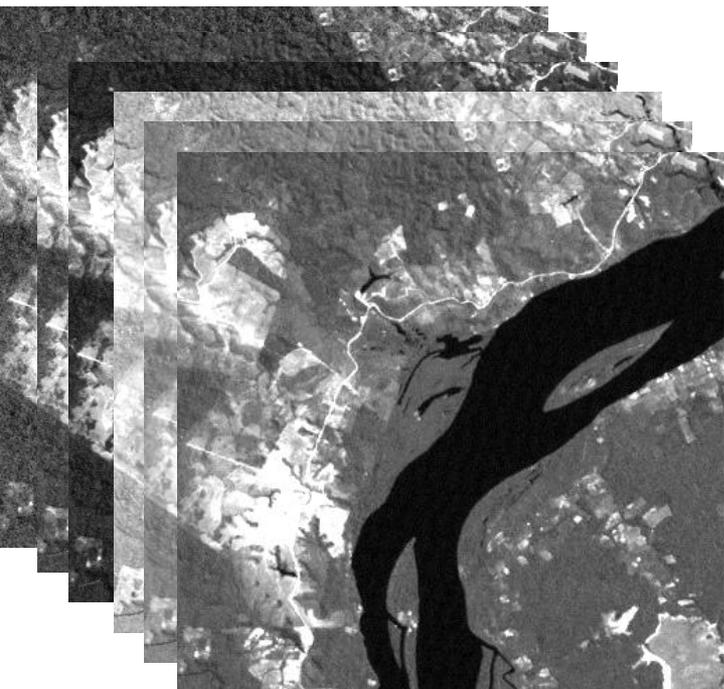


Se as variáveis guardam alguma relação em entre si, podemos pensar que parte do esforço de coleta de uma segunda medida está sendo desperdiçada pois a "nova informação" já está parcialmente representada na primeira medida.



Por exemplo, para estudar a biomassa de uma vegetação, obtém-se a altura e diâmetro do tronco de várias árvores. Mas já não é esperado que árvores mais grossas sejam também as mais altas?

Informação X Redundância



TM/LANDSAT (Bandas 1 a 5 e 7)
228/63 08/07/1999

Numa classificação de uso e cobertura do solo, a utilização de muitas bandas espectrais pode prejudicar o desempenho do classificador devido ao volume de dados analisados

Imagens hiperespectrais podem conter centenas de bandas!

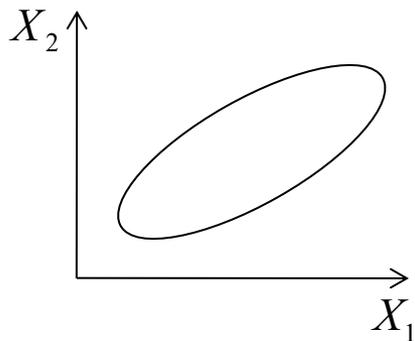
Será mesmo necessário processar todos esses dados para extrair a informação necessária?

É possível reduzir a redundância de informação e “condensar” esta informação num menor volume de dados?

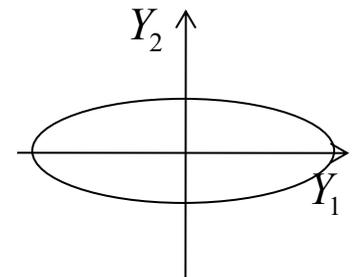
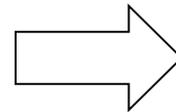
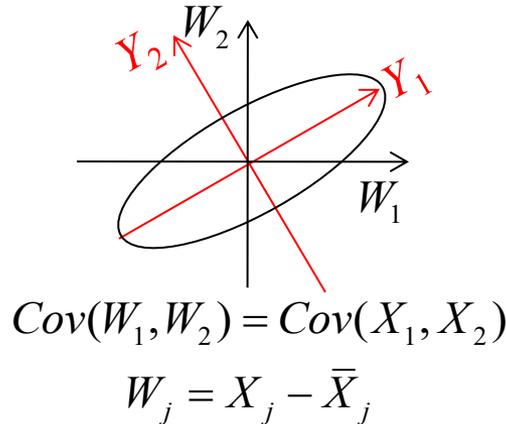
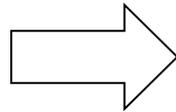
<< Transformação por Componentes Principais >>

Transformação por Componentes Principais (exemplo 2D)

Como poderíamos eliminar a redundância entre X_1 e X_2 ?

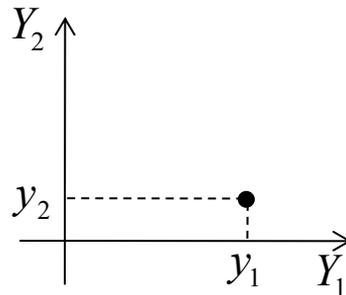
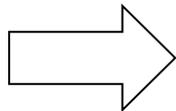
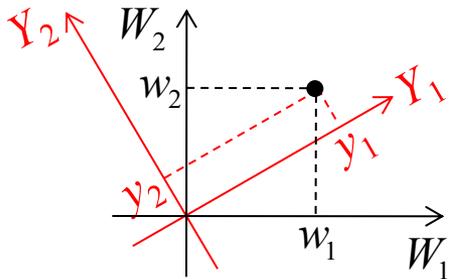


$$\text{Cov}(X_1, X_2) > 0$$



$$\text{Cov}(Y_1, Y_2) = 0$$

rotação com preservação da ortogonalidade dos eixos



$$Y_1 = \alpha_{11}W_1 + \alpha_{12}W_2 \quad \text{Var}(Y_1) = \lambda_1$$

1ª CP

α são chamados de autovetores

$$Y_2 = \alpha_{21}W_1 + \alpha_{22}W_2 \quad \text{Var}(Y_2) = \lambda_2$$

2ª CP

λ são chamados de autovalores ($\lambda_1 > \lambda_2$)

$$\text{Var}(X_1) + \text{Var}(X_2) = \lambda_1 + \lambda_2$$

informação total é preservada

Autovalores e Autovetores

Os autovetores representam as transformações lineares aplicadas em m variáveis correlacionadas de modo a obter m variáveis não correlacionadas e podem ser representados na forma de uma matriz α ($m \times m$):

$$\alpha = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{21} & \cdots & \alpha_{m1} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} & \cdots & \alpha_{m2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_{1m} & \alpha_{2m} & \cdots & \alpha_{mm} \end{bmatrix}$$

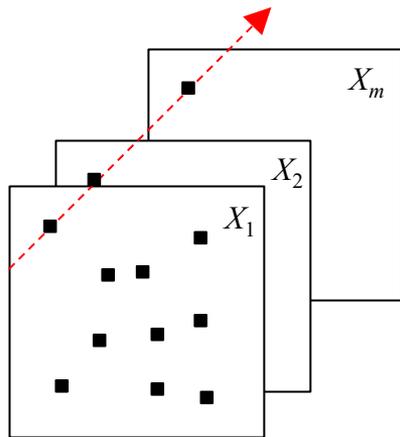
Nesta matriz, os autovetores estão organizados em colunas, ou seja, o 1º autovetor está na 1ª coluna, o 2º autovetor está na 2ª coluna e assim por diante.

Os autovalores representam a variância de cada componente (variável transformada) e podem ser representadas na forma de uma matriz diagonal λ ($m \times m$):

$$\lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_m \end{bmatrix} \quad (\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_m)$$

Por ser uma matriz diagonal, usualmente os autovalores são apresentados como um vetor
Mas como são calculados os autovalores e autovetores?

Relacionamento entre Variáveis



Amostra	X_1	X_2
1	3,5	18,9
2	7,5	31,5
3	4,4	22,2
4	1,1	8,7
5	4,4	19,2
6	4,7	21,3
7	7,2	27,0
8	3,6	16,8
9	9,2	33,6
10	3,1	15,9

X_m
143,2
138,6
142,7
145,5
...
143,7
141,2
141,5
145,1
139,0
145,3

← mesma posição geográfica

Supondo que n amostras sejam avaliadas segundo m variáveis diferentes (atributos), podemos representar o conjunto de valores observados por um matriz \mathbf{X} , onde cada elemento x_{ij} representa o valor da i -ésima amostra para a j -ésima variável.

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} X_1 & X_2 & \cdots & X_m \\ x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{nm} & \cdots & x_{nm} \end{bmatrix}$$

Matriz de Variância-Covariância

A variância de cada variável e as covariâncias entre todos os pares de variáveis podem ser representadas através da matriz de variância-covariância Σ_X ($m \times m$):

$$\Sigma_X = \begin{matrix} & \begin{matrix} X_1 & X_2 & \dots & X_m \end{matrix} \\ \begin{matrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_m \end{matrix} & \begin{bmatrix} Var(X_1) & Cov(X_1, X_2) & \dots & Cov(X_1, X_m) \\ Cov(X_1, X_2) & Var(X_2) & \dots & Cov(X_2, X_m) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Cov(X_1, X_m) & Cov(X_2, X_m) & \dots & Var(X_m) \end{bmatrix} \end{matrix}$$

$$Cov(X_1, X_2) = \frac{\sum_{i=1}^n (X_{1i} - \bar{X}_1)(X_{2i} - \bar{X}_2)}{n-1}$$

$$Cov(X_k, X_l) = Cov(X_l, X_k)$$

$$Cov(X_k, X_k) = Var(X_k)$$

Cálculo dos Autovalores e Autovetores

Os autovalores (λ) e autovetores (α) são obtidos de modo a satisfazer a seguintes condições:

$$\Sigma_{\mathbf{X}}\alpha = \lambda\alpha \quad \text{ou} \quad (\Sigma_{\mathbf{X}} - \lambda\mathbf{I})\alpha = \mathbf{0} \quad \text{sendo} \quad \alpha'\alpha = \mathbf{I} \quad (\text{autovetores ortogonais})$$

Como os autovetores α são não nulos, então

$$|\Sigma_{\mathbf{X}} - \lambda\mathbf{I}| = 0 \quad \text{gera um polinômio de grau } m \text{ cujas raízes representam os } m \text{ autovalores } \lambda$$

Ordenam-se os autovalores do maior para o menor e para cada autovalor λ_k , calcula-se o autovetor α_k de modo que:

$$(\Sigma_{\mathbf{X}} - \lambda_k\mathbf{I})\alpha_k = 0$$

Assim, os valores transformados para a componente principal k são calculados a partir da matriz \mathbf{X} :

$$\mathbf{Y}_k = \alpha_k' \mathbf{X}'$$

Exemplo

Suponha que $\Sigma_x = \begin{bmatrix} 3,4 & -1,1 & 0,3 \\ -1,1 & 5,2 & -0,3 \\ 0,3 & -0,3 & 0,5 \end{bmatrix}$

Então $|\Sigma_x - \lambda \mathbf{I}| = 0$

$$\begin{aligned} \Sigma_x - \lambda \mathbf{I} &= \begin{bmatrix} 3,4 & -1,1 & 0,3 \\ -1,1 & 5,2 & -0,3 \\ 0,3 & -0,3 & 0,5 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 3,4 - \lambda & -1,1 & 0,3 \\ -1,1 & 5,2 - \lambda & -0,3 \\ 0,3 & -0,3 & 0,5 - \lambda \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |\Sigma_x - \lambda \mathbf{I}| &= (3,4 - \lambda)(5,2 - \lambda)(0,5 - \lambda) + 2(-1,1)(-0,3)(0,3) - (3,4 - \lambda)(-0,3)^2 - (5,2 - \lambda)(0,3)^2 - (0,5 - \lambda)(-1,1)^2 \\ &= (3,4 - \lambda)(5,2 - \lambda)(0,5 - \lambda) + 0,198 - 0,306 + 0,09\lambda - 0,468 + 0,09\lambda - 0,605 + 1,21\lambda \\ &= (3,4 - \lambda)(5,2 - \lambda)(0,5 - \lambda) + 1,39\lambda - 1,181 \\ &= (17,68 - 8,6\lambda + \lambda^2)(0,5 - \lambda) + 1,39\lambda - 1,181 \\ &= -\lambda^3 + 9,1\lambda^2 - 20,59\lambda + 7,659 = 0 \end{aligned}$$

Encontrando as raízes do polinômio, tem-se

$$\lambda_1 = 5,7517 \quad \lambda_2 = 2,8871 \quad \lambda_3 = 0,4612$$

Exemplo

Agora, para cada autovalor, calcula-se o autovetor correspondente de modo que $\Sigma_X \alpha = \lambda \alpha$
Demonstrando para o primeiro autovalor $\lambda_1 = 5,7517$

$$\begin{bmatrix} 3,4 & -1,1 & 0,3 \\ -1,1 & 5,2 & -0,3 \\ 0,3 & -0,3 & 0,5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{11} \\ \alpha_{12} \\ \alpha_{13} \end{bmatrix} = 5,7517 \begin{bmatrix} \alpha_{11} \\ \alpha_{12} \\ \alpha_{13} \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} -2,3517\alpha_{11} - 1,1\alpha_{12} + 0,3\alpha_{13} &= 0 \\ -1,1\alpha_{11} - 0,5517\alpha_{12} - 0,3\alpha_{13} &= 0 \\ 0,3\alpha_{11} - 0,3\alpha_{12} - 5,2517\alpha_{13} &= 0 \end{aligned} \quad \begin{aligned} \alpha_{11} &= 5,6657\alpha_{13} \\ \alpha_{12} &= -11,8400\alpha_{13} \end{aligned}$$

Repetindo para os demais autovalores, chega-se a:

$$\alpha = \begin{bmatrix} 5,6657\alpha_{13} & 15,4202\alpha_{23} & -0,0858\alpha_{33} \\ -11,8400\alpha_{13} & 7,4633\alpha_{23} & 0,0434\alpha_{33} \\ \alpha_{13} & \alpha_{23} & \alpha_{33} \end{bmatrix}$$

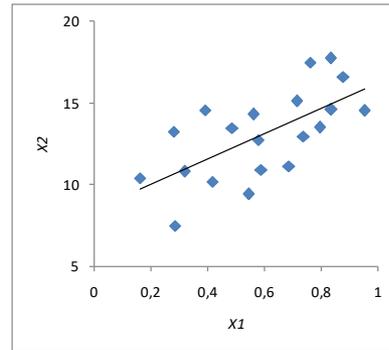
Como os autovetores são ortogonais então $\alpha' \alpha = \mathbf{I}$

Assim $\alpha_{13} = 0,0760$ $\alpha_{23} = 0,0583$ $\alpha_{33} = 0,9954$

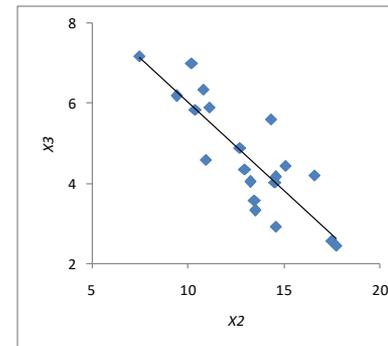
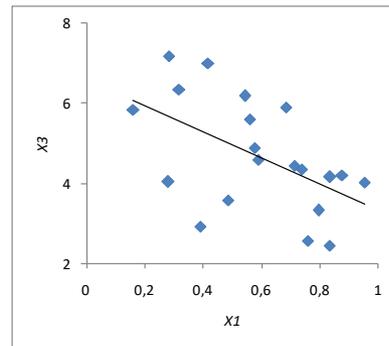
$$\alpha = \begin{bmatrix} 0,43039784 & 0,89858539 & -0,08545169 \\ -0,89943698 & 0,43491207 & 0,04318105 \\ 0,07596583 & 0,05827338 & 0,99540615 \end{bmatrix}$$

Análise de Componentes Principais

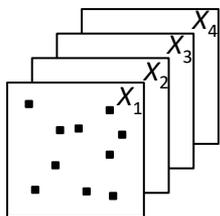
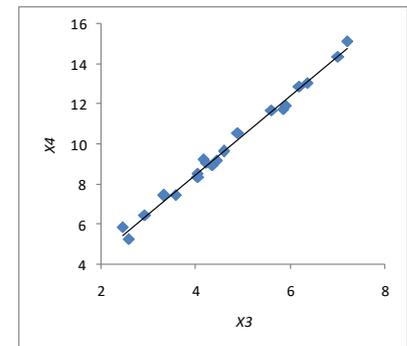
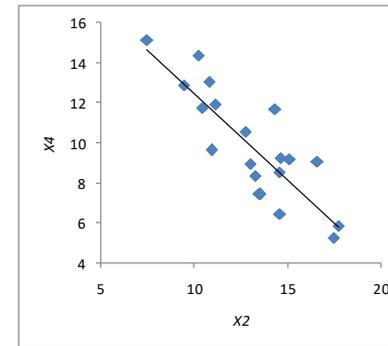
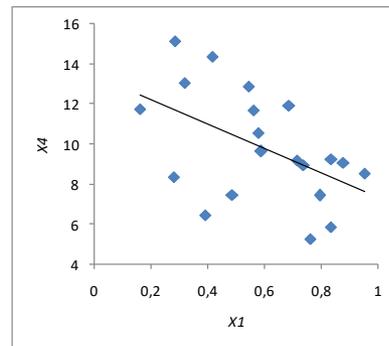
X_1	X_2	X_3	X_4
0,1596	10,4043	5,8457	11,7544
0,4160	10,1971	6,9976	14,3787
0,6841	11,1176	5,8942	11,9172
0,5421	9,4291	6,1867	12,8827
0,7133	15,0980	4,4443	9,1690
0,7587	17,4789	2,5728	5,2574
0,2824	7,4640	7,1848	15,1390
0,8336	14,5949	4,1581	9,2457
0,5752	12,7215	4,8841	10,5356
0,8308	17,7273	2,4392	5,8491
0,9510	14,5368	4,0345	8,5466
0,2796	13,2739	4,0397	8,3507
0,7357	12,9786	4,3470	8,9358
0,8759	16,5915	4,2100	9,0698
0,3904	14,5826	2,9220	6,4501
0,5584	14,3165	5,5950	11,6657
0,4849	13,4711	3,5743	7,4431
0,3169	10,8015	6,3426	13,0677
0,5869	10,9385	4,5867	9,6230
0,7940	13,5060	3,3238	7,4271



Matriz de Variância-Covariância			
0,0516	0,4024	-0,1683	-0,3171
0,4024	7,3698	-3,2402	-6,3600
-0,1683	-3,2402	1,9737	3,8806
-0,3171	-6,3600	3,8806	7,6995

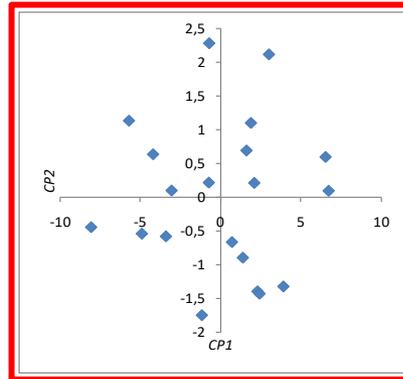


Autovalores			
15,7615	1,2900	0,0310	0,0121
Autovetores			
0,0340	0,0583	0,9481	0,3108
0,6485	0,7582	-0,0670	-0,0087
-0,3437	0,2787	-0,2837	0,8507
-0,6784	0,5865	0,1272	-0,4238

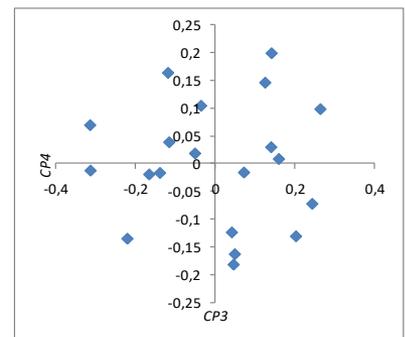
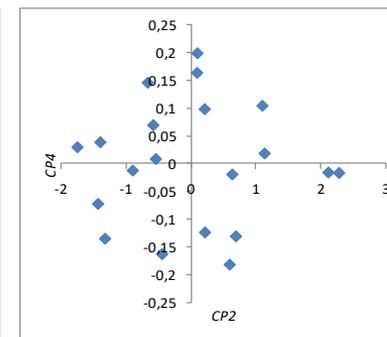
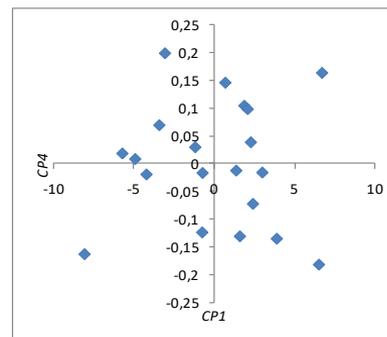
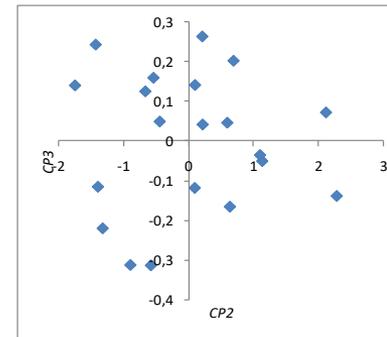
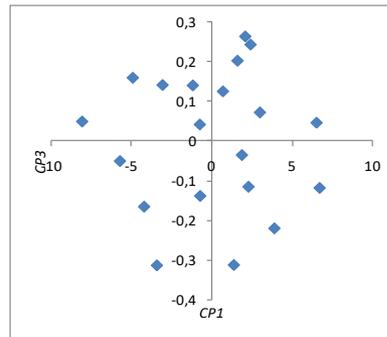


Análise de Componentes Principais

CP_1	CP_2	CP_3	CP_4
-3,4404	-0,5891	-0,3154	0,0689
-5,7422	1,1290	-0,0515	0,0181
-3,0872	0,0914	0,1410	0,1980
-4,9424	-0,5494	0,1594	0,0082
1,8577	1,0951	-0,0362	0,1037
6,7000	0,0872	-0,1194	0,1628
-8,0993	-0,4530	0,0486	-0,1626
1,5819	0,6859	0,2024	-0,1305
-0,7664	0,2092	0,0411	-0,1235
6,5079	0,5895	0,0455	-0,1814
2,0649	0,2042	0,2638	0,0977
1,3543	-0,9060	-0,3144	-0,0126
0,6757	-0,6745	0,1249	0,1452
2,9795	2,1135	0,0716	-0,0161
3,8802	-1,3335	-0,2217	-0,1349
-0,7436	2,2786	-0,1397	-0,0168
2,2647	-1,4066	-0,1165	0,0383
-4,2393	0,6300	-0,1669	-0,0195
-1,2009	-1,7602	0,1400	0,0294
2,3949	-1,4413	0,2433	-0,0723



Matriz de Variância-Covariância			
15,7615	0	0	0
0	1,2900	0	0
0	0	0,0310	0
0	0	0	0,0121



A primeira componente guarda 92,2% da variação total

As 2 primeiras CP, acumulam 99,7% da variação total

Análise de Componentes Principais no R

```
x1<-c(0.1596,0.416,0.6841,0.5421,0.7133,0.7587,0.2824,0.8336,0.5752,0.8308,0.951,0.2796,0.7357,0.8759,0.3904,
0.5584,0.4849,0.3169,0.5869,0.794)
x2<-c(10.4043,10.1971,11.1176,9.4291,15.098,17.4789,7.464,14.5949,12.7215,17.7273,14.5368,13.2739,12.9786,
16.5915,14.5826,14.3165,13.4711,10.8015,10.9385,13.506)
x3<-c(5.8457,6.9976,5.8942,6.1867,4.4443,2.5728,7.1848,4.1581,4.8841,2.4392,4.0345,4.0397,4.347,4.21,2.922,
5.595,3.5743,6.3426,4.5867,3.3238)
x4<-c(11.7544,14.3787,11.9172,12.8827,9.169,5.2574,15.139,9.2457,10.5356,5.8491,8.5466,8.3507,8.9358,9.0698,
6.4501,11.6657,7.4431,13.0677,9.623,7.4271)
x<-cbind(x1,x2,x3,x4)
```

```
round(cov(x),4)
```

	x1	x2	x3	x4
x1	0.0516	0.4024	-0.1683	-0.3171
x2	0.4024	7.3698	-3.2402	-6.3599
x3	-0.1683	-3.2402	1.9737	3.8805
x4	-0.3171	-6.3599	3.8805	7.6995

```
sum(diag(cov(x)))
```

- [1] 17.09458

```
pccov<-prcomp(x)
```

```
pccov
```

- Standard deviations:

- [1] 3.9700671 1.1358016 0.1759476 0.1101858

- Rotation:

	PC1	PC2	PC3	PC4
x1	0.03398365	-0.05831431	0.94807140	-0.310813742
x2	0.64847514	-0.75822916	-0.06702796	0.008705756
x3	-0.34373410	-0.27866559	-0.28371255	-0.850705320
x4	-0.67835977	-0.58654366	0.12718124	0.423815393

```
sum(pccov$sdev^2)
```

- [1] 17.09458

Análise de Componentes Principais no R

```
summary(pccov)
```

- Importance of components:

	PC1	PC2	PC3	PC4
• Standard deviation	3.970	1.13580	0.17595	0.11019
• Proportion of Variance	0.922	0.07547	0.00181	0.00071
• Cumulative Proportion	0.922	0.99748	0.99929	1.00000

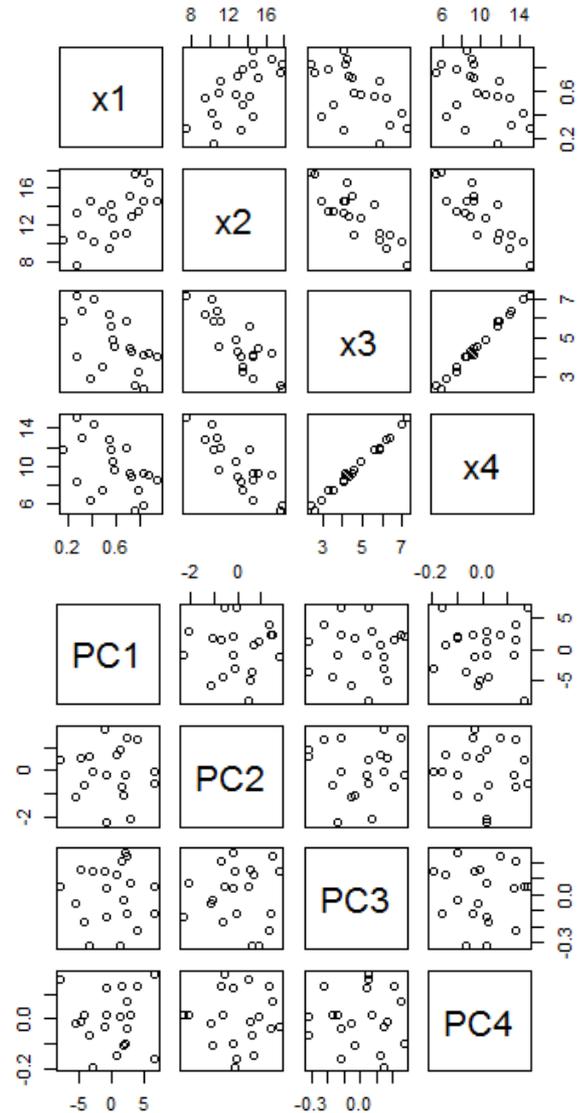
```
pc<-pccov$x #Calculando as componentes principais
```

```
round(cov(pc),3)
```

	PC1	PC2	PC3	PC4
• PC1	15.761	0.000	0.000	0.000
• PC2	0.000	1.290	0.000	0.000
• PC3	0.000	0.000	0.031	0.000
• PC4	0.000	0.000	0.000	0.012

```
pairs(x)
```

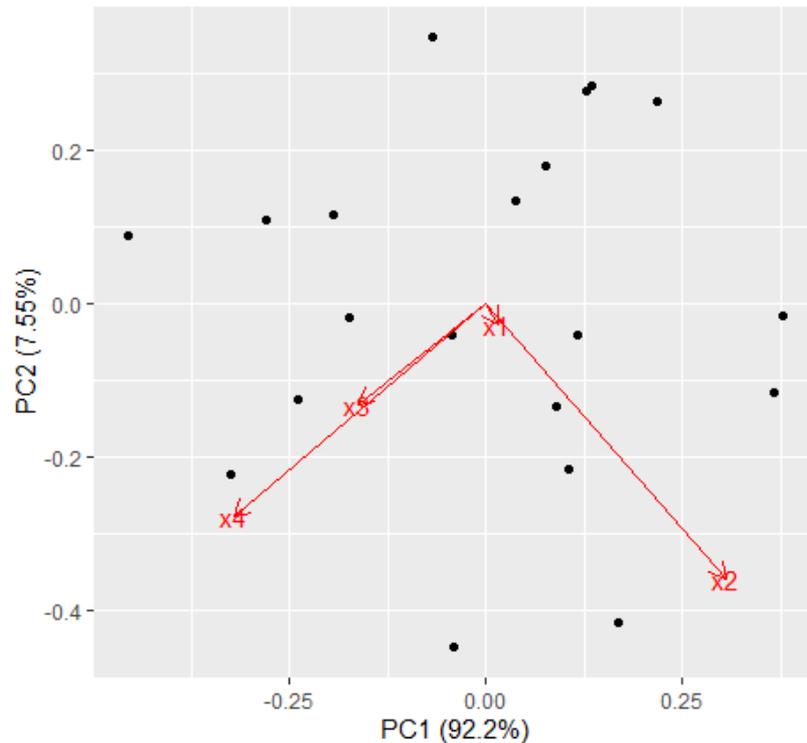
```
pairs(pc)
```



Análise de Componentes Principais no R

```
library(ggfortify)
ggplot2::autoplot(pccov,loadings=TRUE,loadings.label=TRUE)
round(pccov$rotation,4)
```

- PC1 PC2 PC3 PC4
- x1 0.0340 -0.0583 0.9481 -0.3108
- x2 0.6485 -0.7582 -0.0670 0.0087
- x3 -0.3437 -0.2787 -0.2837 -0.8507
- x4 -0.6784 -0.5865 0.1272 0.4238



As setas representam como cada variável original contribui para cada PC.

Quanto maior o comprimento, maior sua contribuição (autovetor). A direção indica se a contribuição é positiva ou negativa.

Observe que as variáveis X2 e X4 têm grandes contribuições na PC1 e PC2. Já a variável X1 contribui muito pouco para ambas PCs.

A variável X3 tem uma contribuição relativa igual a metade daquela observada pela variável X4 e ambas contribuem negativamente nas PC1 e PC2.

Observações

- A transformação prioriza as variáveis com maior variância

Atenção: isso pode ocorrer quando as variáveis possuem diferentes grandezas

Para neutralizar o efeito das variâncias de cada variável de modo que todas tenham o mesmo peso, os autovalores e autovetores devem ser calculados a partir da **matriz de correlação** (que equivale realizar a transformação sobre as variáveis padronizadas)

$$r_{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} X_1 & X_2 & \cdots & X_m \\ 1 & r_{X_1, X_2} & \cdots & r_{X_1, X_m} \\ r_{X_1, X_2} & 1 & \cdots & r_{X_2, X_m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{X_1, X_m} & r_{X_2, X_m} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} X_1 \\ X_2 \\ \\ X_m \end{matrix}$$

$$r_{X_1, X_2} = \frac{\text{Cov}(X_1, X_2)}{\sqrt{\text{Var}(X_1)\text{Var}(X_2)}}$$

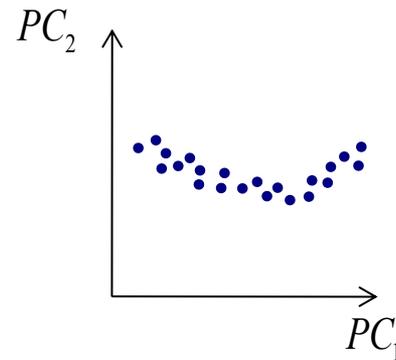
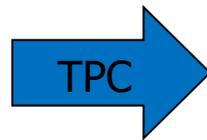
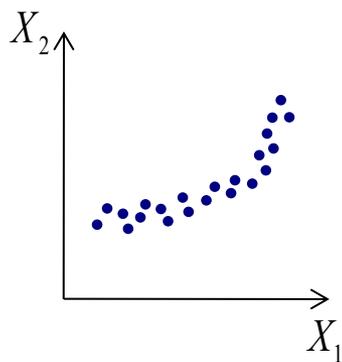
$$r_{X_k, X_l} = r_{X_l, X_k}$$

$$r_{X_k, X_k} = 1$$

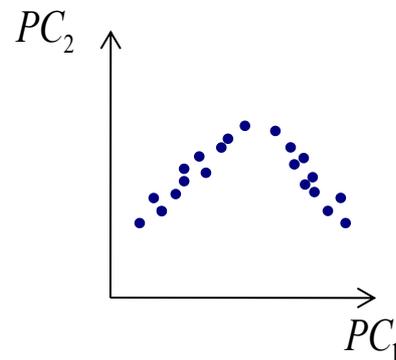
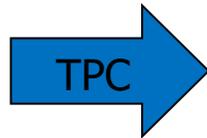
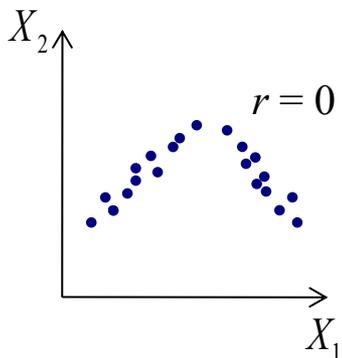
OBS: em R, para computar a transformação por componentes principais utilizando a matriz de correlação, pode-se usar a função `pccor<-prcomp(x, scale=TRUE)`

Observações

- Por usar covariância (ou correlação), esta transformação pressupõe **relações lineares** entre variáveis



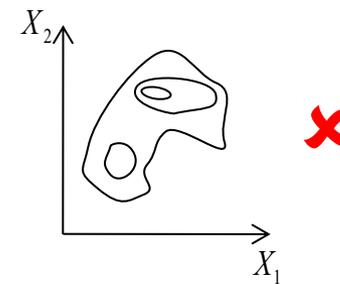
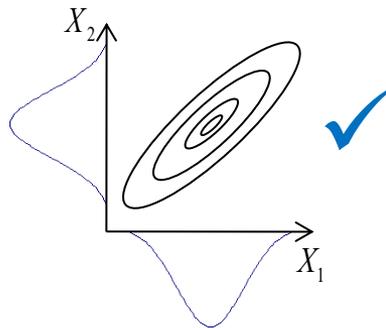
A relação entre as variáveis ainda parece existir



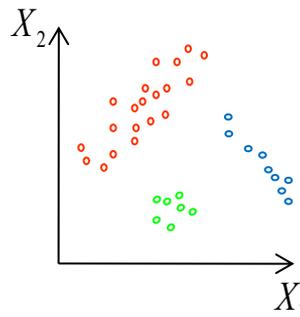
Nesse caso, a correlação (relação linear) é zero

Observações

- Por usar a matriz de covariância ou correlação, os resultados desta transformação são mais adequados quando os dados podem ser representados por uma distribuição multigaussiana (gaussiana multidimensional)



- A transformação pode não ser eficiente se diversas sub-populações com diferentes relações forem analisadas simultaneamente



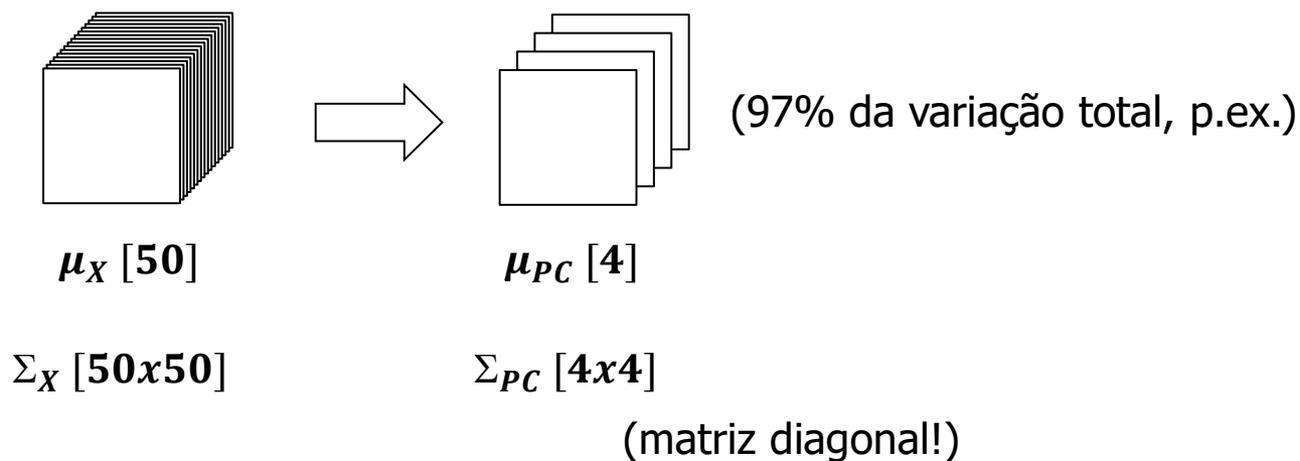
- A interpretação dos valores de uma determinada componente principal pode ser bastante difícil, necessitando a avaliação do autovetor correspondente

Aplicações

- **Diminuição da dimensionalidade do problema**

Ao invés de se trabalhar com 50 dimensões, escolhem-se as primeiras componentes que guardam a maior parte da informação total

Isso melhora o desempenho de classificadores que se baseiam em inversões de matrizes como os classificadores MaxVer



Aplicações

- **Diminuição da dimensionalidade do problema**

Ao invés de se trabalhar com 50 dimensões, escolhem-se as primeiras componentes que guardam a maior parte da informação total

Isso melhora o desempenho de classificadores que se baseiam em inversões de matrizes

- **Visualização de Dados**

A informação contida numa imagem hiperespectral pode ser visualizada usando-se as 3 primeiras componentes numa composição colorida RGB (OBS: as cores podem ser de difícil interpretação)

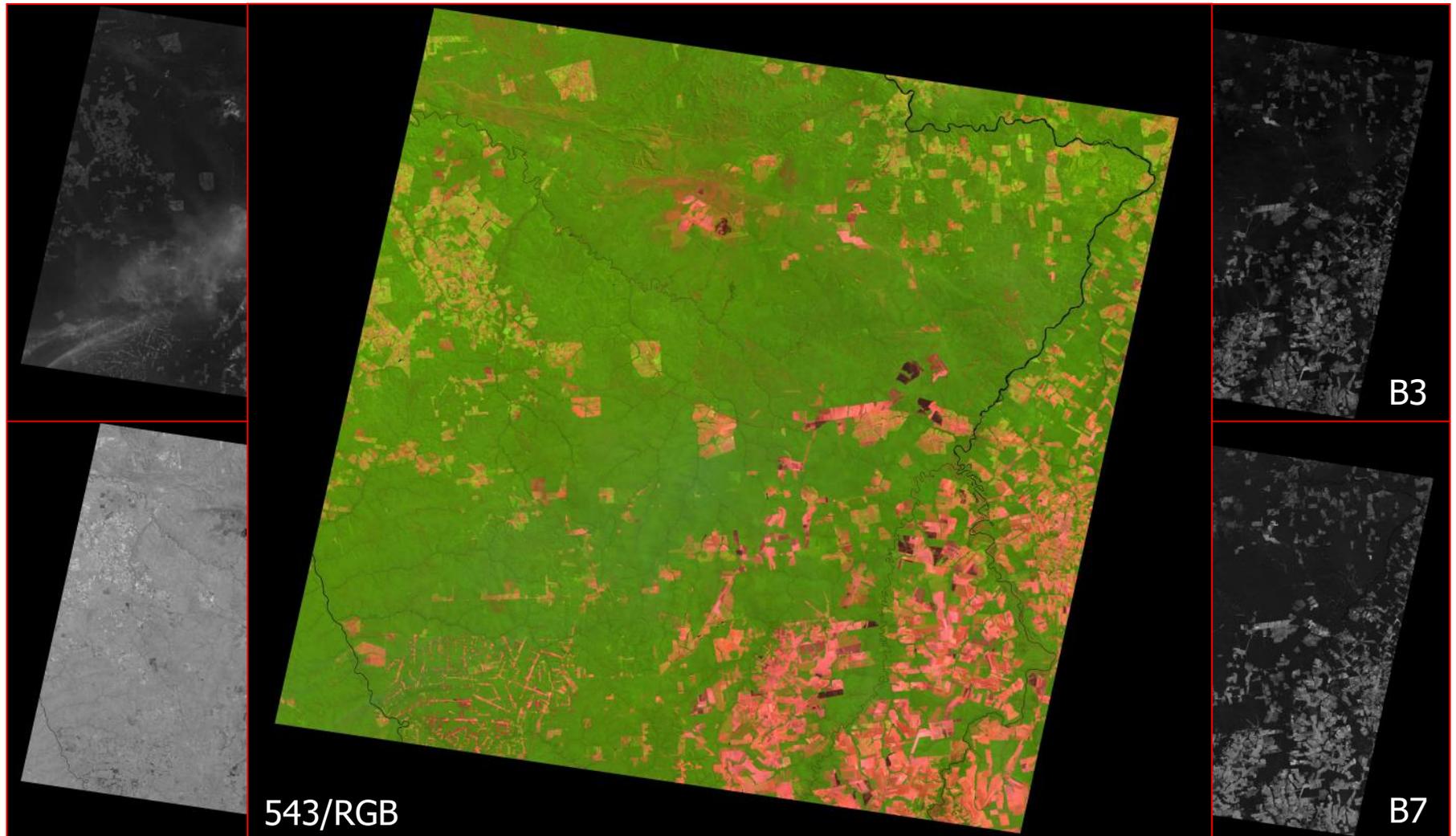
Visualização de Dados

TM/LANDSAT (Bandas 1 a 5 e 7) 227/68 ano 1999



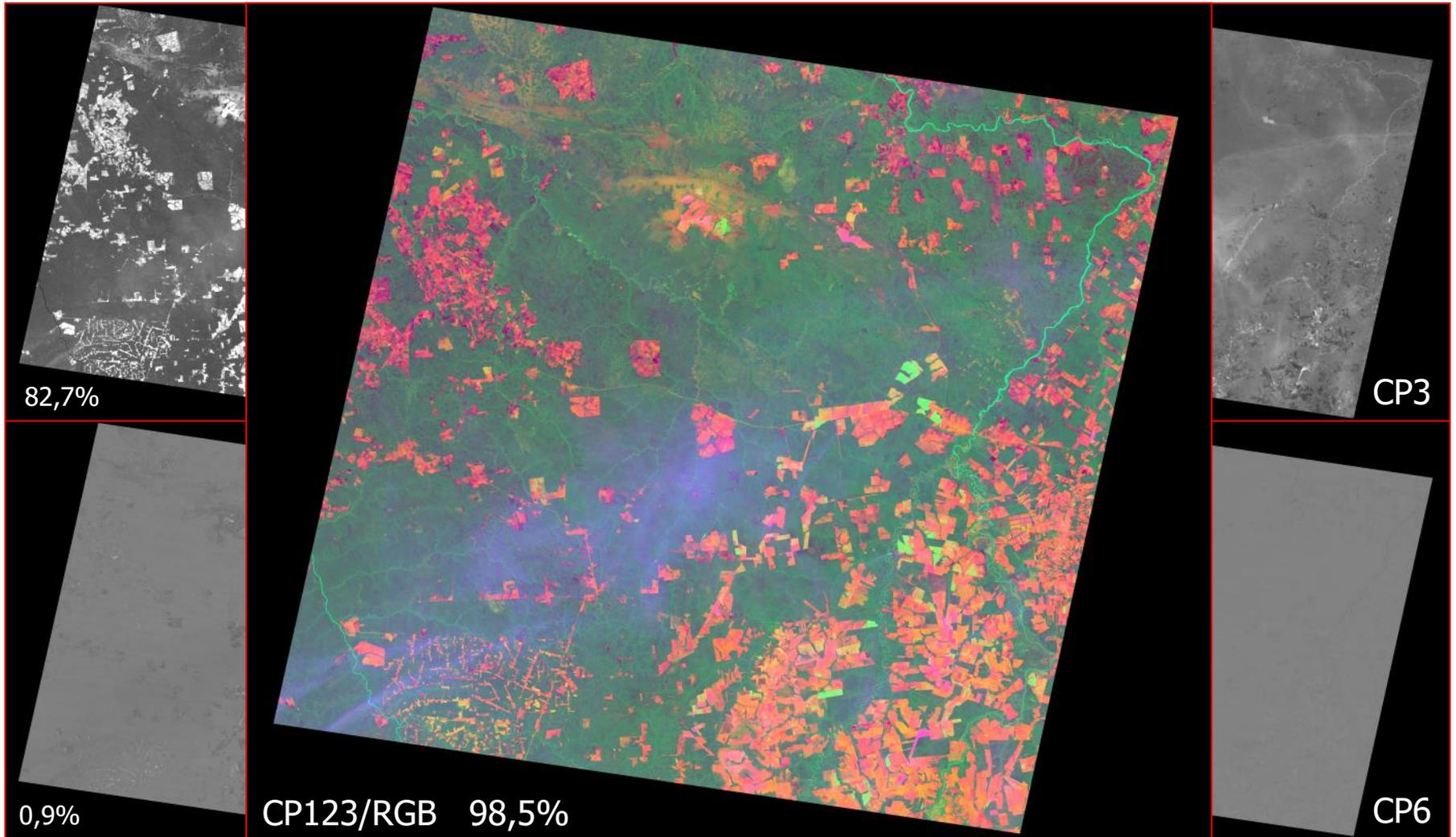
Visualização de Dados

TM/LANDSAT (Bandas 1 a 5 e 7) 227/68 ano 1999 (ganho 2,45 e offset variável)



Visualização de Dados

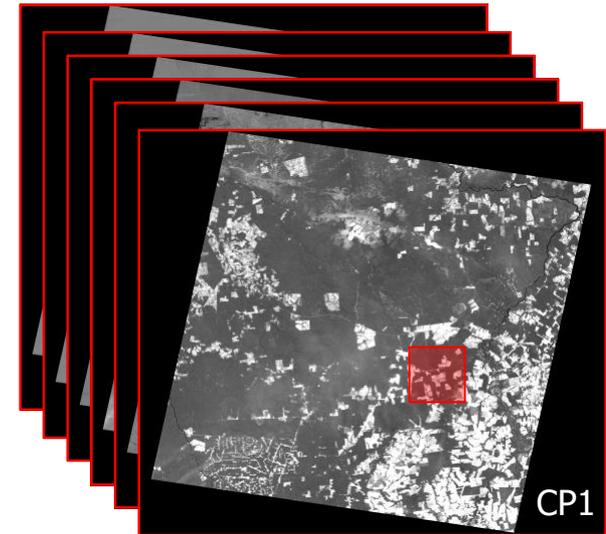
Componentes Principais



(mesmo ganho e offset da CP1)

Visualização de Dados

	Média	D.Padrão				
CP1	0	56,882				
CP2	0	18,600				
CP3	0	16,520				
CP4	0	5,934				
CP5	0	4,375				
CP6	0	2,172				
Covariância	CP1	CP2	CP3	CP4	CP5	CP6
CP1	3235,55	0	0	0	0	0
CP2	0	345,967	0	0	0	0
CP3	0	0	272,900	0	0	0
CP4	0	0	0	35,210	0	0
CP5	0	0	0	0	19,145	0
CP6	0	0	0	0	0	4,720



(ganho e offset arbitrários)

Aplicações

- **Diminuição da dimensionalidade do problema**

Ao invés de se trabalhar com 50 dimensões, escolhem-se as primeiras componentes que guardam a maior parte da informação total

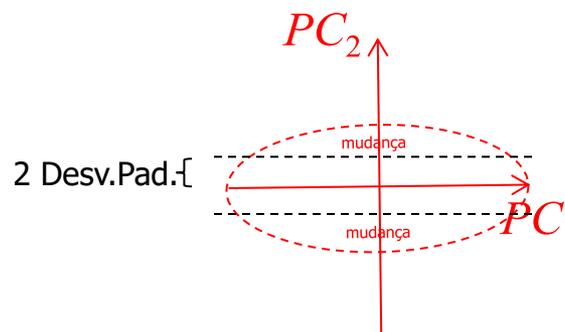
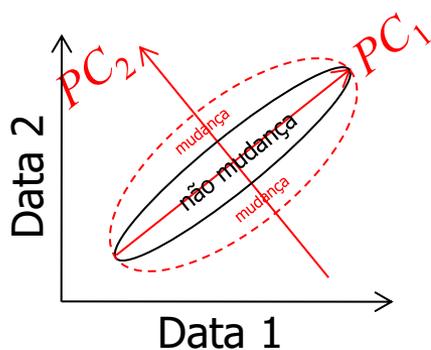
Isso melhora o desempenho de classificadores que se baseiam em inversões de matrizes

- **Visualização de Dados**

A informação contida numa imagem hiperespectral pode ser visualizada usando-se as 3 primeiras componentes numa composição colorida RGB (obs: as cores podem ser de difícil interpretação)

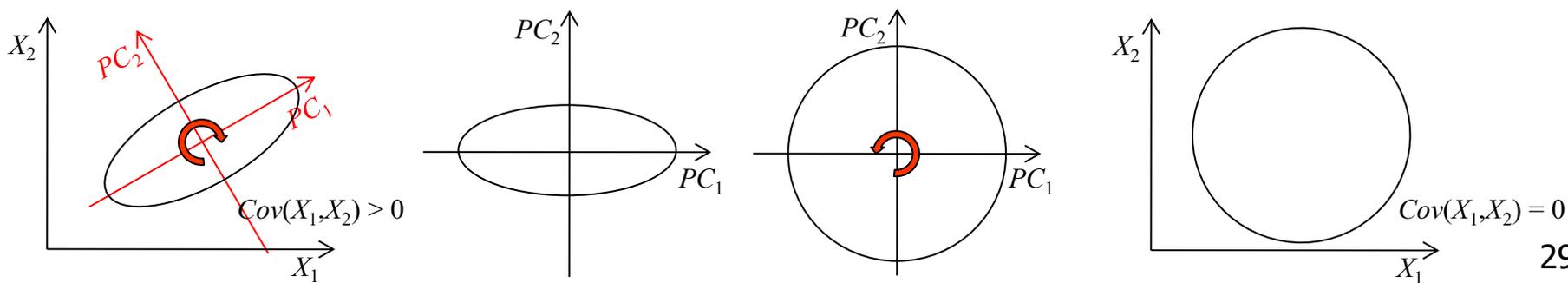
- **Detecção de Mudanças**

Numa comparação de 2 datas (mesma banda), os valores extremos da segunda componente evidenciam onde ocorreu mudança entre datas



Aplicações

- **Diminuição da dimensionalidade do problema**
Ao invés de se trabalhar com 50 dimensões, escolhem-se as primeiras componentes que guardam a maior parte da informação total
Isso melhora o desempenho de classificadores que se baseiam em inversões de matrizes
- **Visualização de Dados**
A informação contida numa imagem hiperespectral pode ser visualizada usando-se as 3 primeiras componentes numa composição colorida RGB (obs: as cores podem ser de difícil interpretação)
- **Detecção de Mudanças**
Numa comparação de 2 datas (mesma banda), os valores extremos da segunda componente evidenciam onde ocorreu mudança entre datas
- **Aumento de Contraste por Decorrelação**
Aplica-se a transformada por componentes principais, faz-se um aumento de contraste das componentes de modo que todas fiquem com a mesma variância e, por fim, faz-se a transformação inversa, restabelecendo-se as variáveis originais



Aplicações

- **Diminuição da dimensionalidade do problema**
Ao invés de se trabalhar com 50 dimensões, escolhem-se as primeiras componentes que guardam a maior parte da informação total
Isso melhora o desempenho de classificadores que se baseiam em inversões de matrizes
- **Visualização de Dados**
A informação contida numa imagem hiperespectral pode ser visualizada usando-se as 3 primeiras componentes numa composição colorida RGB (obs: as cores podem ser de difícil interpretação)
- **Detecção de Mudanças**
Numa comparação de 2 datas (mesma banda), os valores extremos da segunda componente evidenciam onde ocorreu mudança entre datas
- **Aumento de Contraste por Decorrelação**
Aplica-se a transformada por componentes principais, faz-se um aumento de contraste das componentes de modo que todas fiquem com a mesma variância e, por fim, faz-se a transformação inversa, restabelecendo-se as variáveis originais
- **Simulação de dados correlacionados**
Calculam-se os autovalores e autovetores da matriz de variância-covariância. Simulam-se dados não-correlacionados com variância igual aos autovalores e faz-se a transformação inversa

Exemplo: Simulação de dados correlacionados

Simulação de 3 variáveis correlacionadas sendo que

$$\begin{aligned} X_1 &\sim N(\mu_{X_1} = 10,3; \sigma_{X_1}^2 = 3,5) \\ X_2 &\sim N(\mu_{X_2} = 35,1; \sigma_{X_2}^2 = 7,8) \\ X_3 &\sim N(\mu_{X_3} = 107,8; \sigma_{X_3}^2 = 1,2) \end{aligned} \quad \begin{aligned} \boldsymbol{\mu} &= [10,3 \quad 35,1 \quad 107,8] \\ \boldsymbol{\Sigma}_X &= \begin{bmatrix} 3,5 & -2,2 & -0,5 \\ -2,2 & 7,8 & 0,9 \\ -0,5 & 0,9 & 1,2 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad \Leftrightarrow \mathbf{X} \sim N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}_X)$$

Deseja-se simular 500 valores destas 3 variáveis respeitando suas correlações.

A simulação conjunta, mesmo para uma distribuição gaussiana, não é muito simples.

Por outro lado, a simulação de variáveis independentes é bastante simples de ser implementada quando se conhece a distribuição destas variáveis.

Exemplo: Simulação de dados correlacionados

$$\Sigma_{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} 3,5 & -2,2 & -0,5 \\ -2,2 & 7,8 & 0,9 \\ -0,5 & 0,9 & 1,2 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{TCP}} \begin{matrix} \boldsymbol{\lambda} = [8,8629 & 2,5819 & 1,0552] \\ \boldsymbol{\alpha} = \begin{bmatrix} 0,3867 & 0,9146 & 0,1182 \\ -0,9126 & 0,3980 & -0,0934 \\ -0,1324 & -0,0717 & 0,9886 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

Por definição, todas as componentes principais tem média zero e a variância de cada componente é dada pelo autovalor correspondente.

Além disso, no caso de distribuições gaussianas, a forma da distribuição é preservada após a transformação, ou seja, as componentes também têm distribuição gaussiana:

$$PC_1 \sim N(\mu = 0; \sigma_{PC_1}^2 = \lambda_1 = 8,8629)$$

$$PC_2 \sim N(\mu = 0; \sigma_{PC_2}^2 = \lambda_2 = 2,5819)$$

$$PC_3 \sim N(\mu = 0; \sigma_{PC_3}^2 = \lambda_3 = 1,0552)$$

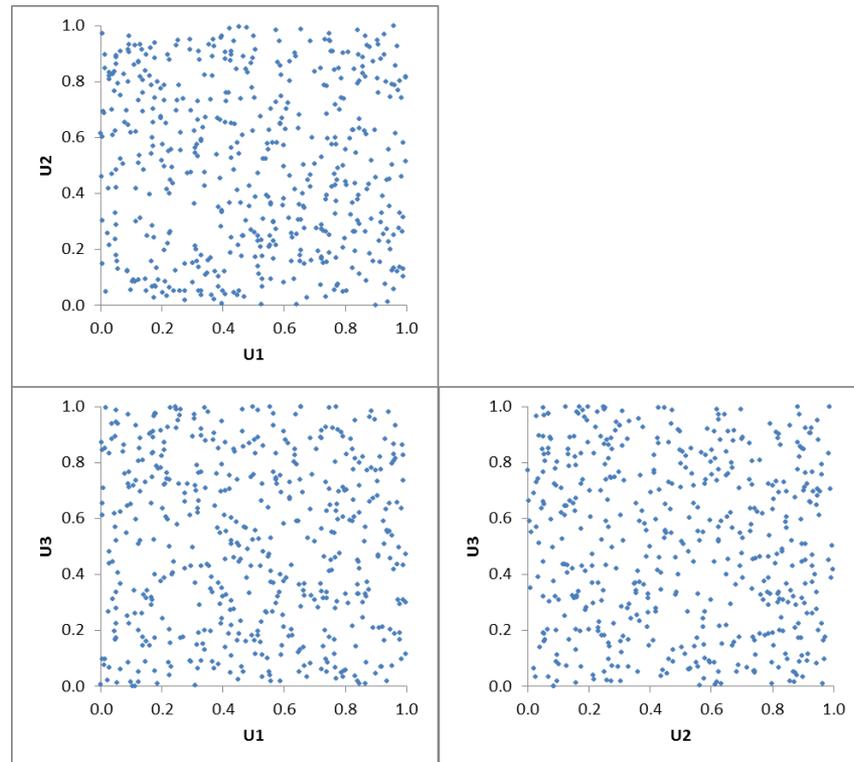
$$\mathbf{PC}' = \boldsymbol{\alpha}'(\mathbf{X} - \mathbf{1}_{(500 \times 1)} \boldsymbol{\mu})' \quad \mathbf{X}' = (\boldsymbol{\alpha}^{-1})' \mathbf{PC}' + (\mathbf{1}_{(500 \times 1)} \boldsymbol{\mu})' \quad \boldsymbol{\alpha}^{-1} = \boldsymbol{\alpha}' \quad \mathbf{X}' = \boldsymbol{\alpha} \mathbf{PC}' + (\mathbf{1}_{(500 \times 1)} \boldsymbol{\mu})'$$

Exemplo: Simulação de dados correlacionados

Neste exemplo, deseja-se gerar 500 valores para cada variável X

O processo inicia-se com a geração de números aleatórios de uma distribuição uniforme contínua entre 0 e 1:

U1	U2	U3
0.9789	0.1352	0.1669
0.7383	0.7855	0.3370
0.9224	0.3914	0.2114
0.5247	0.0030	0.6637
0.9010	0.0007	0.7718
.	.	.
.	.	.
.	.	.
0.7961	0.7392	0.0535
0.4524	0.9962	0.5041
0.5987	0.3815	0.5824
0.6906	0.6003	0.7568
0.2216	0.5514	0.0853

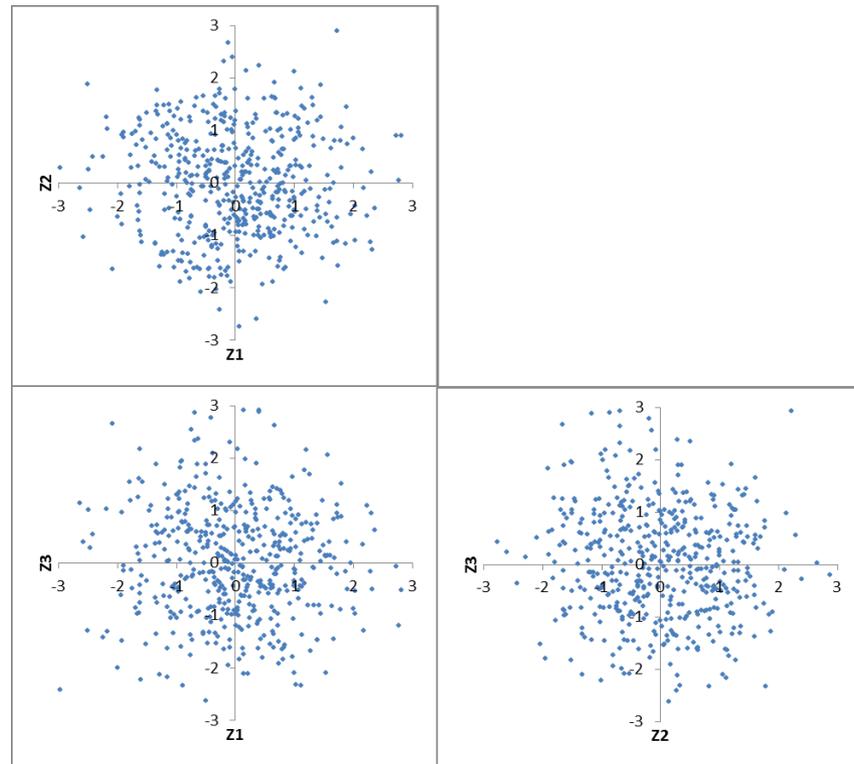


Exemplo: Simulação de dados correlacionados

A partir de U calcula-se Z através da relação: $P(Z < z_{ij}) = u_{ij}$

Exemplo: $P(Z < z_{1,1}) = 0,9789 \Rightarrow z_{1,1} = 2,0312$

Z1	Z2	Z3
2.0312	-1.1020	-0.9663
0.6381	0.7909	-0.4208
1.4215	-0.2756	-0.8016
0.0619	-2.7474	0.4226
1.2872	-3.1950	0.7448
.	.	.
.	.	.
.	.	.
0.8277	0.6408	-1.6114
-0.1195	2.6664	0.0103
0.2500	-0.3016	0.2081
0.4975	0.2542	0.6960
-0.7667	0.1293	-1.3702



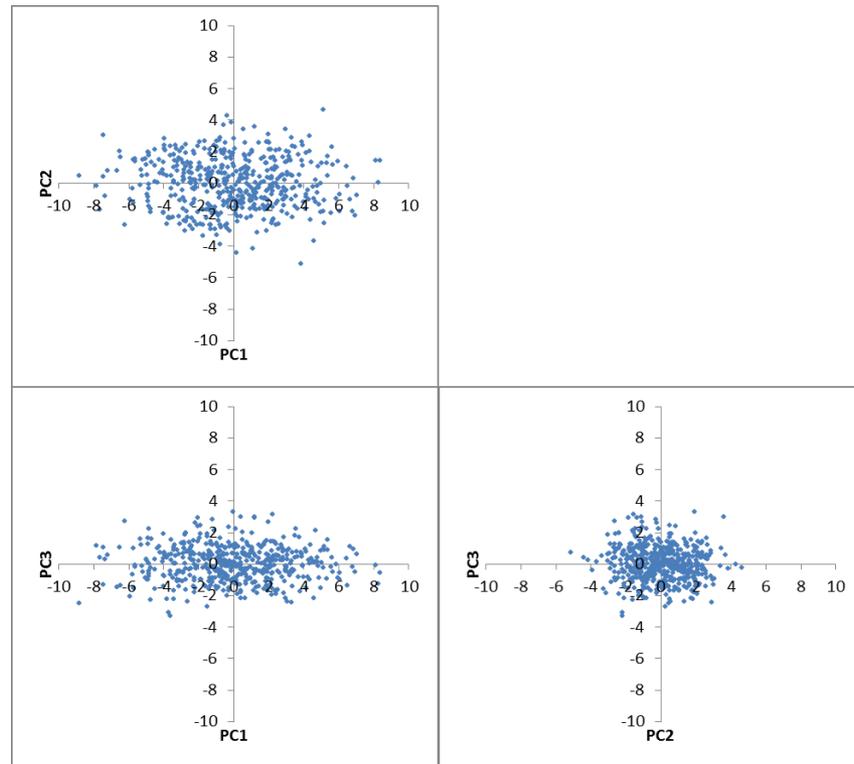
Exemplo: Simulação de dados correlacionados

A partir de Z calcula-se PC multiplicando cada z_{ij} pelo desvio padrão da componente principal i , ou seja, a raiz quadrada do autovalor i :

$$pc_{ij} = z_{ij} \times \sqrt{\lambda_i}$$

Exemplo: $pc_{1,1} = z_{1,1} \times \sqrt{\lambda_1} = 2,0312 \times \sqrt{8,8629} = 6,0470$

PC1	PC2	PC3
6.0470	-1.7708	-0.9926
1.8996	1.2708	-0.4322
4.2320	-0.4428	-0.8234
0.1842	-4.4145	0.4341
3.8320	-5.1337	0.7651
.	.	.
.	.	.
.	.	.
2.4641	1.0296	-1.6553
-0.3558	4.2844	0.0106
0.7443	-0.4846	0.2138
1.4812	0.4085	0.7149
-2.2824	0.2077	-1.4075



Exemplo: Simulação de dados correlacionados

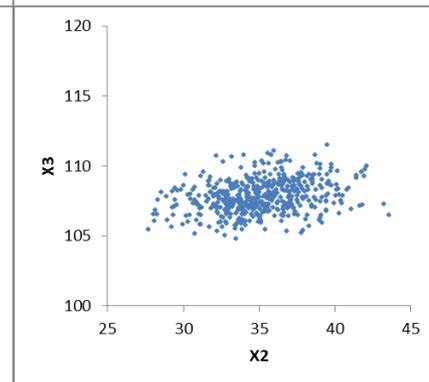
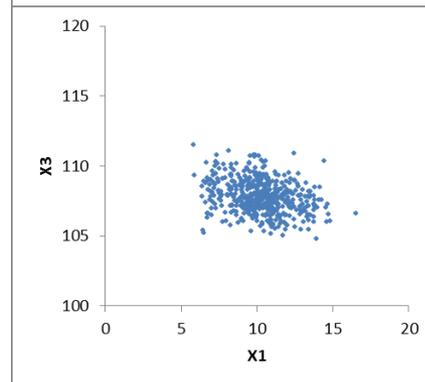
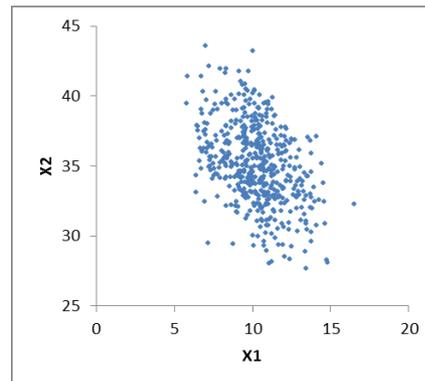
Finalmente, aplica-se a rotação inversa definida pela matriz de autovetores e soma-se a média correspondente a cada uma das variáveis X :

$$x_{ij} = \alpha_{1,1}pc_{1,j} + \alpha_{1,2}pc_{2,j} + \alpha_{1,3}pc_{3,j} + \mu_i \quad \text{onde } \alpha_{kw} \text{ é o } k\text{-ésimo elemento do autovetor } w$$

$$\text{Exemplo: } x_{1,1} = \alpha_{1,1}pc_{1,1} + \alpha_{1,2}pc_{2,1} + \alpha_{1,3}pc_{3,1} + \mu_1 =$$

$$= 0,3867 \times 6,0470 - 0,9146 \times 1,7708 - 0,1182 \times 0,9926 + 10,3 = 10,9015$$

X1	X2	X3
10.9015	28.9694	106.1450
12.1458	33.9125	107.0300
11.4342	31.1386	106.4574
6.3850	33.1343	108.5212
7.1769	29.4882	108.4171
.	.	.
.	.	.
.	.	.
11.9989	33.4157	105.7635
14.0822	37.1289	107.5504
10.1698	34.2079	107.9476
11.3309	33.8440	108.2814
9.4410	37.3971	106.6958



Exemplo: Simulação de dados correlacionados

É importante notar que, por se tratar de uma simulação, os valores de média, variância e covariância estimados a partir dos valores simulados não são exatamente os que se desejava (e variam a cada simulação!):

$$\boldsymbol{\mu} = [10,3 \quad 35,1 \quad 107,8]$$

$$\bar{\mathbf{X}} = [10,28 \quad 35,11 \quad 107,83]$$

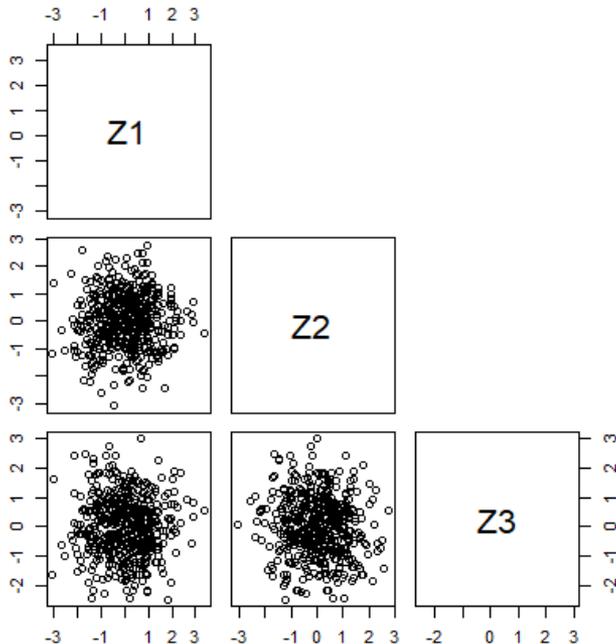
$$\boldsymbol{\Sigma}_x = \begin{bmatrix} 3,5 & -2,2 & -0,5 \\ -2,2 & 7,8 & 0,9 \\ -0,5 & 0,9 & 1,2 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_x = \begin{bmatrix} 3,37 & -2,16 & -0,59 \\ -2,16 & 8,19 & 0,93 \\ -0,59 & 0,93 & 1,40 \end{bmatrix}$$

Exemplo: Simulação de dados correlacionados em R

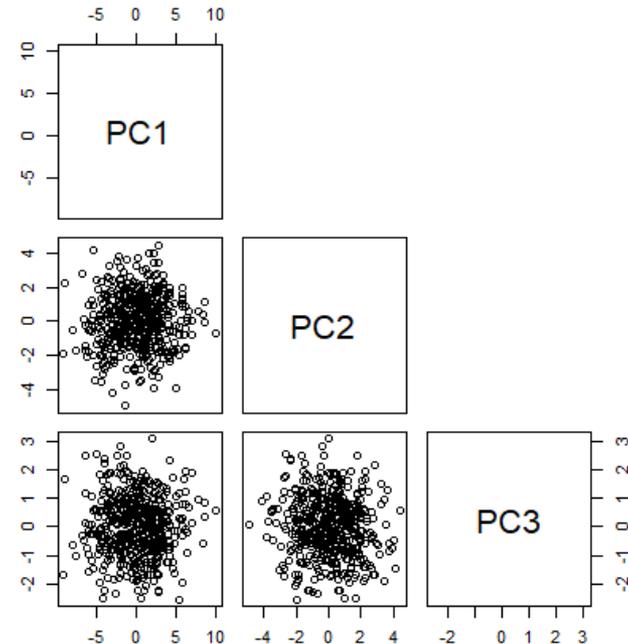
```
mX<-c(10.3,35.1,107.8)
covX<-cbind(c(3.5,-2.2,-0.5),c(-2.2,7.8,0.9),c(-0.5,0.9,1.2))
auto<-eigen(covX) #gera autovalores e autovetores a partir
da matriz de covariância
```

```
n<-500
Z<-matrix(rnorm(3*n),nrow=n,ncol=3) #as colunas
representam amostras de uma normal padrão
(independentes)
colnames(Z)<-c("Z1","Z2","Z3")
pairs(Z,upper.panel = NULL)
```



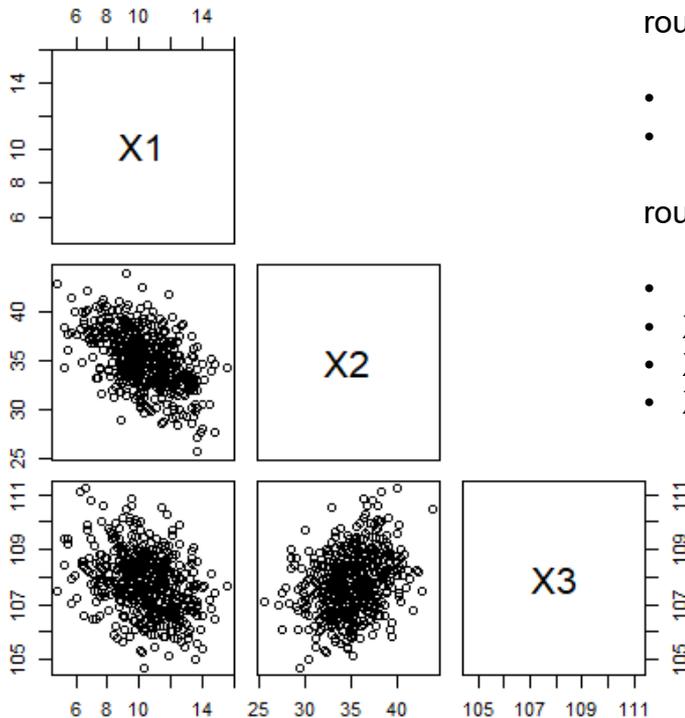
Só mudou a escala!

```
PC<-Z*(matrix(rep(1,n))%*%t(sqrt(auto$values)))
colnames(PC)<-c("PC1", "PC2", "PC3")
pairs(PC,upper.panel = NULL)
```



Exemplo: Simulação de dados correlacionados em R

```
X<-t(auto$vectors%*%t(PC)+t(matrix(rep(1,n))%*%mX)) #aplica a transformação inversa  
colnames(X)<-c("X1", "X2", "X3")  
pairs(X,upper.panel = NULL)
```



```
round(colMeans(X),2)
```

- X1 X2 X3
- 10.36 35.09 107.80 $\leftarrow \bar{X}$ $\mu = [10,3 \quad 35,1 \quad 107,8]$

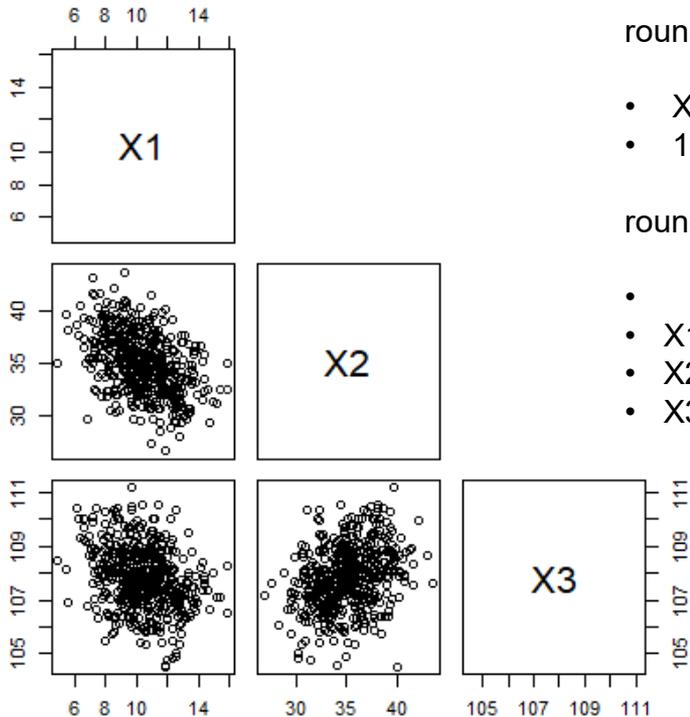
```
round(cov(X),2)
```

- X1 X2 X3
- X1 3.65 -2.71 -0.69
- X2 -2.71 8.22 0.97 $\leftarrow \hat{\Sigma}_X$ $\Sigma_X = \begin{bmatrix} 3,5 & -2,2 & -0,5 \\ -2,2 & 7,8 & 0,9 \\ -0,5 & 0,9 & 1,2 \end{bmatrix}$
- X3 -0.69 0.97 1.22

Exemplo: Simulação de dados correlacionados em R

No R, é possível também gerar dados de uma distribuição multigaussiana:

```
mX<-c(10.3,35.1,107.8)
covX<-cbind(c(3.5,-2.2,-0.5),c(-2.2,7.8,0.9),c(-0.5,0.9,1.2))
library(mvtnorm)
X<-rmvnorm(n = 500, mean = mX, sigma = covX)
colnames(X)<-c("X1", "X2", "X3")
pairs(X,upper.panel = NULL)
```



```
round(colMeans(X),2)
```

- X1 X2 X3
- 10.39 35.04 107.83 $\leftarrow \bar{X}$ $\mu = [10,3 \quad 35,1 \quad 107,8]$

```
round(cov(X),2)
```

- X1 X2 X3
- X1 3.48 -2.24 -0.61
- X2 -2.24 7.95 0.99 $\leftarrow \hat{\Sigma}_X$ $\Sigma_X = \begin{bmatrix} 3,5 & -2,2 & -0,5 \\ -2,2 & 7,8 & 0,9 \\ -0,5 & 0,9 & 1,2 \end{bmatrix}$
- X3 -0.61 0.99 1.28