ME731 - Métodos em Análise Multivariada
– Análise de Correlação Canônica I –

Prof. Carlos Trucíos
ctrucios@unicamp.br
ctruciosm.github.io

Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica,
Universidade Estadual de Campinas

Aula 19

UNICAMP

Agenda I

Motivação

Motivação

1. Suponha que estamos interessados em estudar a relação entre os resultados de um teste de capacidade intelectual (o resultado do teste são vários scores para diferentes *atributos*) e as medidas físicas de um grupo de indivíduos.
2. Uma empresa de venda de autos está interessada em estudar a relação entre *Preço* e *Valor* do auto com as variáveis *Economia*, *Serviço*, *Desing*, *Carro esportivo*, *Segurança* e *Facilidade para dirigir*, respectivamente.

Motivação

1. Suponha que estamos interessados em estudar a relação entre os resultados de um teste de capacidade intelectual (o resultado do teste são vários scores para diferentes *atributos*) e as medidas físicas de um grupo de indivíduos.
2. Uma empresa de venda de autos está interessada em estudar a relação entre *Preço* e *Valor* do auto com as variáveis *Economia*, *Serviço*, *Desing*, *Carro esportivo*, *Segurança* e *Facilidade para dirigir*, respectivamente.

Como faria as análises?

Introdução

Introdução

- Em análise de regressão multipla temos um conjunto de covariáveis $\mathbf{x}$ e uma única variável resposta y. A solução implica em encontrar $\mathbf{a}$ tal que $\mathbf{a}'\mathbf{x}$ tenha a maior correlação possível com y.

Introdução

- Em análise de regressão multipla temos um conjunto de covariáveis $\mathbf{x}$ e uma única variável resposta y. A solução implica em encontrar $\mathbf{a}$ tal que $\mathbf{a}'\mathbf{x}$ tenha a maior correlação possível com y.
- Suponha agora que y não é mais de dimensão $p = 1$, mas de dimensão $p > 1$.

Introdução

- Em análise de regressão multipla temos um conjunto de covariáveis $\mathbf{x}$ e uma única variável resposta y. A solução implica em encontrar $\mathbf{a}$ tal que $\mathbf{a}'\mathbf{x}$ tenha a maior correlação possível com y.
- Suponha agora que y não é mais de dimensão $p = 1$, mas de dimensão $p > 1$.
- Análise de correlação canônica implica encontrar vetores $\mathbf{a}$ e $\mathbf{b}$ tal que $\eta = \mathbf{a}'\mathbf{x}$ e $\phi = \mathbf{b}'\mathbf{y}$ tenham a maior correlação possível.

Análise de Correlação Canônica

Análise de Correlação Canônica

Proposto por Hotelling (1935, 1936), tem como objetivo o estudo das relações lineares existentes entre dois conjuntos de variáveis ($\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$).

Análise de Correlação Canônica

Proposto por Hotelling (1935, 1936), tem como objetivo o estudo das relações lineares existentes entre dois conjuntos de variáveis (**x** e **y**).

- As combinações lineares ($\eta = \mathbf{a}'\mathbf{x}$ e $\phi = \mathbf{b}'\mathbf{y}$) são chamadas variáveis canônicas.
- A correlação entre $\eta = \mathbf{a}'\mathbf{x}$ e $\phi = \mathbf{b}'\mathbf{y}$ é chamada de correlação canônica e mede o grau de associação entre os dois conjuntos de variáveis.

Análise de Correlação Canônica

Sejam $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^q$ e $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^p$ dois vetores aleatorios tais que:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix} \sim \left(\begin{pmatrix} \mu \\ \nu \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Sigma_{XX} & \Sigma_{XY} \\ \Sigma_{YX} & \Sigma_{YY} \end{pmatrix} \right)$$

Análise de Correlação Canônica

Sejam $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^q$ e $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^p$ dois vetores aleatorios tais que:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix} \sim \left(\begin{pmatrix} \mu \\ \nu \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Sigma_{XX} & \Sigma_{XY} \\ \Sigma_{YX} & \Sigma_{YY} \end{pmatrix} \right)$$

Sejam os vetores **a** e **b** tais que $\eta = \mathbf{a}'\mathbf{X}$ e $\phi = \mathbf{b}'\mathbf{Y}$.

Análise de Correlação Canônica

Sejam $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^q$ e $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^p$ dois vetores aleatorios tais que:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix} \sim \left(\begin{pmatrix} \mu \\ \nu \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Sigma_{XX} & \Sigma_{XY} \\ \Sigma_{YX} & \Sigma_{YY} \end{pmatrix} \right)$$

Sejam os vetores $\mathbf{a}$ e $\mathbf{b}$ tais que $\eta = \mathbf{a}'\mathbf{X}$ e $\phi = \mathbf{b}'\mathbf{Y}$.

$$\rho = \mathbb{C}or(\eta, \phi) = \frac{Cov(\mathbf{a}'\mathbf{X}, \mathbf{b}'\mathbf{Y})}{\sqrt{\mathbb{V}(\mathbf{a}'\mathbf{X})}\sqrt{\mathbb{V}(\mathbf{b}'\mathbf{Y})}} = \frac{\mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b}}{\sqrt{\mathbf{a}'\Sigma_{XX}\mathbf{a} \times \mathbf{b}'\Sigma_{YY}\mathbf{b}}}$$

Análise de Correlação Canônica

Dado que $\mathbb{C}or(\eta, \phi) = \mathbb{C}or(c\eta, d\phi)$, para $c, d \in \mathbb{R}$ (a correlação não depende da escala), maximizar $\mathbb{C}or(\eta, \phi)$ é equivalente a maximizar

$$\mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b},$$

sujeito às restrições

- $\mathbf{a}'\Sigma_{XX}\mathbf{a} = 1$
- $\mathbf{b}'\Sigma_{YY}\mathbf{b} = 1$

Análise de Correlação Canônica

Dado que $\mathbb{C}or(\eta, \phi) = \mathbb{C}or(c\eta, d\phi)$, para $c, d \in \mathbb{R}$ (a correlação não depende da escala), maximizar $\mathbb{C}or(\eta, \phi)$ é equivalente a maximizar

$$\mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b},$$

sujeito às restrições

- $\mathbf{a}'\Sigma_{XX}\mathbf{a} = 1$
- $\mathbf{b}'\Sigma_{YY}\mathbf{b} = 1$

Então, interessados no seguinte problema de optimização

$$\text{Max:} \quad \mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b} - \frac{\lambda}{2}(\mathbf{a}'\Sigma_{XX}\mathbf{a} - 1) - \frac{\gamma}{2}(\mathbf{b}'\Sigma_{YY}\mathbf{b} - 1) \tag{1}$$

Análise de Correlação Canônica

$$\text{Max:} \quad \mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b} - \frac{\lambda}{2}(\mathbf{a}'\Sigma_{XX}\mathbf{a} - 1) - \frac{\gamma}{2}(\mathbf{b}'\Sigma_{YY}\mathbf{b} - 1)$$

Derivando w.r.t **a** e **b** temos que:

$$\frac{\partial M}{\partial \mathbf{a}} = \Sigma_{XY}\mathbf{b} - \lambda\Sigma_{XX}\mathbf{a}, \quad \frac{\partial M}{\partial \mathbf{b}} = \underbrace{\Sigma'_{XY}}_{\Sigma_{YX}}\mathbf{a} - \gamma\Sigma_{YY}\mathbf{b}$$

Análise de Correlação Canônica

$$\text{Max:} \quad \mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b} - \frac{\lambda}{2}(\mathbf{a}'\Sigma_{XX}\mathbf{a} - 1) - \frac{\gamma}{2}(\mathbf{b}'\Sigma_{YY}\mathbf{b} - 1)$$

Derivando w.r.t **a** e **b** temos que:

$$\frac{\partial M}{\partial \mathbf{a}} = \Sigma_{XY}\mathbf{b} - \lambda\Sigma_{XX}\mathbf{a}, \quad \frac{\partial M}{\partial \mathbf{b}} = \underbrace{\Sigma'_{XY}}_{\Sigma_{YX}}\mathbf{a} - \gamma\Sigma_{YY}\mathbf{b}$$

Igualando a zero:

$$\Sigma_{XY}\mathbf{b} = \lambda\Sigma_{XX}\mathbf{a} \quad e \quad \Sigma_{YX}\mathbf{a} = \gamma\Sigma_{YY}\mathbf{b} \tag{2}$$

Análise de Correlação Canônica

$$\text{Max:} \quad \mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b} - \frac{\lambda}{2}(\mathbf{a}'\Sigma_{XX}\mathbf{a} - 1) - \frac{\gamma}{2}(\mathbf{b}'\Sigma_{YY}\mathbf{b} - 1)$$

Derivando w.r.t **a** e **b** temos que:

$$\frac{\partial M}{\partial \mathbf{a}} = \Sigma_{XY}\mathbf{b} - \lambda\Sigma_{XX}\mathbf{a}, \quad \frac{\partial M}{\partial \mathbf{b}} = \underbrace{\Sigma'_{XY}}_{\Sigma_{YX}}\mathbf{a} - \gamma\Sigma_{YY}\mathbf{b}$$

Igualando a zero:

$$\Sigma_{XY}\mathbf{b} = \lambda\Sigma_{XX}\mathbf{a} \quad e \quad \Sigma_{YX}\mathbf{a} = \gamma\Sigma_{YY}\mathbf{b} \tag{2}$$

Se premultiplicarmos a primeira equação por $\mathbf{a}'$ e a segunda por $\mathbf{b}'$, temos:

Análise de Correlação Canônica

$$\mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b} = \lambda \underbrace{\mathbf{a}'\Sigma_{XX}\mathbf{a}}_{1} = \lambda \quad e \quad \mathbf{b}'\Sigma_{YX}\mathbf{a} = \gamma \underbrace{\mathbf{b}'\Sigma_{YY}\mathbf{b}}_{1} = \gamma$$

Análise de Correlação Canônica

$$\mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b} = \lambda \underbrace{\mathbf{a}'\Sigma_{XX}\mathbf{a}}_{1} = \lambda \quad e \quad \mathbf{b}'\Sigma_{YX}\mathbf{a} = \gamma \underbrace{\mathbf{b}'\Sigma_{YY}\mathbf{b}}_{1} = \gamma$$

Note que $\lambda = \mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b} = (\mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b})' = \mathbf{b}'\Sigma'_{XY}\mathbf{a} = \mathbf{b}'\Sigma_{YX}\mathbf{a} = \gamma$.

Análise de Correlação Canônica

$$\mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b} = \lambda \underbrace{\mathbf{a}'\Sigma_{XX}\mathbf{a}}_{1} = \lambda \quad e \quad \mathbf{b}'\Sigma_{YX}\mathbf{a} = \gamma \underbrace{\mathbf{b}'\Sigma_{YY}\mathbf{b}}_{1} = \gamma$$

Note que $\lambda = \mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b} = (\mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b})' = \mathbf{b}'\Sigma_{XY}'\mathbf{a} = \mathbf{b}'\Sigma_{YX}\mathbf{a} = \gamma$.

Então, de (2), temos que

$$\Sigma_{XY}\mathbf{b} = \lambda\Sigma_{XX}\mathbf{a} \quad e \quad \Sigma_{YX}\mathbf{a} = \lambda\Sigma_{YY}\mathbf{b} \tag{3}$$

Análise de Correlação Canônica

$$\mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b} = \lambda \underbrace{\mathbf{a}'\Sigma_{XX}\mathbf{a}}_{1} = \lambda \quad e \quad \mathbf{b}'\Sigma_{YX}\mathbf{a} = \gamma \underbrace{\mathbf{b}'\Sigma_{YY}\mathbf{b}}_{1} = \gamma$$

Note que $\lambda = \mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b} = (\mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b})' = \mathbf{b}'\Sigma_{XY}'\mathbf{a} = \mathbf{b}'\Sigma_{YX}\mathbf{a} = \gamma$.

Então, de (2), temos que

$$\Sigma_{XY}\mathbf{b} = \lambda\Sigma_{XX}\mathbf{a} \quad e \quad \Sigma_{YX}\mathbf{a} = \lambda\Sigma_{YY}\mathbf{b} \tag{3}$$

Colocando **b** em evidência na segunda equação e substituindo na primeira:

$$\mathbf{b} = \lambda^{-1}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\mathbf{a} \quad e \quad \Sigma_{XY}\lambda^{-1}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\mathbf{a} = \lambda\Sigma_{XX}\mathbf{a}.$$

Análise de Correlação Canônica

$$\mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b} = \lambda \underbrace{\mathbf{a}'\Sigma_{XX}\mathbf{a}}_{1} = \lambda \quad e \quad \mathbf{b}'\Sigma_{YX}\mathbf{a} = \gamma \underbrace{\mathbf{b}'\Sigma_{YY}\mathbf{b}}_{1} = \gamma$$

Note que $\lambda = \mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b} = (\mathbf{a}'\Sigma_{XY}\mathbf{b})' = \mathbf{b}'\Sigma_{XY}'\mathbf{a} = \mathbf{b}'\Sigma_{YX}\mathbf{a} = \gamma$.

Então, de (2), temos que

$$\Sigma_{XY}\mathbf{b} = \lambda\Sigma_{XX}\mathbf{a} \quad e \quad \Sigma_{YX}\mathbf{a} = \lambda\Sigma_{YY}\mathbf{b} \tag{3}$$

Colocando **b** em evidência na segunda equação e substituindo na primeira:

$$\mathbf{b} = \lambda^{-1}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\mathbf{a} \quad e \quad \Sigma_{XY}\lambda^{-1}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\mathbf{a} = \lambda\Sigma_{XX}\mathbf{a}.$$

Então

$$\mathbf{b} = \lambda^{-1}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\mathbf{a} \quad e \quad \Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\mathbf{a} = \lambda^2\mathbf{a}.$$

Análise de Correlação Canônica

a é o autovetor associado ao autovalor λ^2 da matriz $\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}$!

Análise de Correlação Canônica

a é o autovetor associado ao autovalor λ^2 da matriz $\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}$!

De forma semelhante, obtemos que **b** é o autovetor associado ao autovalor λ^2 da matriz $\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}$ (**Provar!**)

Análise de Correlação Canônica

a é o autovetor associado ao autovalor λ^2 da matriz $\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}$!

De forma semelhante, obtemos que **b** é o autovetor associado ao autovalor λ^2 da matriz $\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}$ (**Provar!**)

Por outro lado, se quisermos minimizar (3) para obter a máxima correlação negativa teriamos chegado o mesmo sistema.

Análise de Correlação Canônica

a é o autovetor associado ao autovalor λ^2 da matriz $\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}$!

De forma semelhante, obtemos que **b** é o autovetor associado ao autovalor λ^2 da matriz $\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}$ (**Provar!**)

Por outro lado, se quisermos minimizar (3) para obter a máxima correlação negativa teriamos chegado o mesmo sistema.

Como o que nos interessa é a magnitude e não o sinal da correlação, queremos **a** e **b** tal que a correlação entre as variáveis canônicas seja máxima (em valor absoluto) ou, equivalentemente, tal que a correlação ao quadrado entre as variáveis canônicas seja máxima.

Análise de Correlação Canônica

Voilá

Note que $\rho^2 = \lambda^2 = \eta^2$, ou seja, para maximizar a correlação ao quadrdo entre as variáveis canônicas, os vetores **a** e **b** devem ser os autovetores associados ao maior autovalor de $\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}$ e $\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}$, respectivamente.

Análise de Correlação Canônica

Algoritmo

1. Identificar as matrices Σ_{XX}, Σ_{YY} e Σ_{XY}.
2. Calcular $\mathbf{A} = \Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}$ e $\mathbf{B} = \Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}$
3. Fazer a decomposição espectral $\mathbf{Aa} = \lambda^2\mathbf{a}$ e $\mathbf{Bb} = \lambda^2\mathbf{b}$

Análise de Correlação Canônica

Algoritmo

1. Identificar as matrices Σ_{XX}, Σ_{YY} e Σ_{XY}.
2. Calcular $\mathbf{A} = \Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}$ e $\mathbf{B} = \Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}$
3. Fazer a decomposição espectral $\mathbf{Aa} = \lambda^2\mathbf{a}$ e $\mathbf{Bb} = \lambda^2\mathbf{b}$

Note que de (3) temos que:

$$\mathbf{a} = \Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}\mathbf{b}\lambda^{-1} \quad e \quad \mathbf{b} = \Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{XY}'\mathbf{a}\lambda^{-1}$$

Obtendo **a** (**b**) teremos **b** (**a**). Só precisamos obter os autovetores de uma das matrizes (**A** ou **B**).

Análise de Correlação Canônica

Observação:

- É possivel que, uma vez encontrados **a** e **b**, não exista mais relação entre ambos os conjuntos de dados. Neste caso dizemos que toda a relação entre ambos os conjuntos se resume em uma dimensão.

Análise de Correlação Canônica

Observação:

- É possivel que, uma vez encontrados **a** e **b**, não exista mais relação entre ambos os conjuntos de dados. Neste caso dizemos que toda a relação entre ambos os conjuntos se resume em uma dimensão.
- Para verificar isto, podemos calcular as $2r$ combinações lineares ($r = min\{p, q\}$), extraindo os r autovetores associados aos r maiores autovalores de **A** e **B**.

Propriedades

Propriedades

1. Os autovalores de $\mathbf{A}$ e $\mathbf{B}$ são reais e não negativos.
2. $\mathbf{a}_i'\mathbf{X}$ e $\mathbf{a}_j'\mathbf{X}$ são não correlacionadas.
3. $\mathbf{b}_i'\mathbf{Y}$ e $\mathbf{b}_j'\mathbf{Y}$ são não correlacionadas.
4. $\mathbf{a}_i'\mathbf{X}$ e $\mathbf{b}_j'\mathbf{Y}$ são não correlacionadas.
5. Se $\mathbf{a}_i'\mathbf{X}$ é uma variável canônica, também é $-\mathbf{a}_i'\mathbf{X}$
6. As correlações canônias λ_i^2 são o quadrado do coeficiente de correlação entre $\mathbf{a}_i'\mathbf{X}$ e $\mathbf{b}_i'\mathbf{Y}$

Propriedades: P1

Lema

As matrizes $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}$ e $\mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{Q}\mathbf{R}^{-1/2}$ tem os mesmos autovalores.

Propriedades: P1

Lema

As matrizes $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}$ e $\mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{Q}\mathbf{R}^{-1/2}$ tem os mesmos autovalores.

Demostração:

- $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}\mathbf{a} = \lambda\mathbf{a}$
- $\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}\mathbf{a} = \lambda\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{a}$
- $\mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{Q}\mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{a} = \lambda\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{a}$
- $\mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{Q}\mathbf{R}^{-1/2}\underbrace{\mathbf{a}^*}_{\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{a}} = \lambda\underbrace{\mathbf{a}^*}_{\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{a}}$

Propriedades: P1

Lema

As matrizes $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}$ e $\mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{Q}\mathbf{R}^{-1/2}$ tem os mesmos autovalores.

Demostração:

- $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}\mathbf{a} = \lambda\mathbf{a}$
- $\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}\mathbf{a} = \lambda\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{a}$
- $\mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{Q}\mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{a} = \lambda\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{a}$
- $\mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{Q}\mathbf{R}^{-1/2}\underbrace{\mathbf{a}^*}_{\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{a}} = \lambda\underbrace{\mathbf{a}^*}_{\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{a}}$

$\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}$ e $\mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{Q}\mathbf{R}^{-1/2}$ tem os mesmos autovalores. Note que se $\mathbf{a}$ é o autovetor de $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}$, então $\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{a}$ é o autovetor de $\mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{Q}\mathbf{R}^{-1/2}$.

Propriedades: P1

- Se fizermos $\mathbf{R} = \Sigma_{XX}$ e $\mathbf{Q} = \Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}$, temos que $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q} = \underbrace{\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}}_{\mathbf{A}}$ e $\mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{Q}\mathbf{R}^{-1/2} =$
$\Sigma_{XX}^{-1/2}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1/2} = \underbrace{\Sigma_{XX}^{-1/2}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1/2}}_{\mathbf{H}}\underbrace{\Sigma_{YY}^{-1/2}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1/2}}_{\mathbf{H}'}$ tem os mesmo autovalores.

Propriedades: P1

- Se fizermos $\mathbf{R} = \Sigma_{XX}$ e $\mathbf{Q} = \Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}$, temos que $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q} = \underbrace{\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}}_{\mathbf{A}}$ e $\mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{Q}\mathbf{R}^{-1/2} =$ $\Sigma_{XX}^{-1/2}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1/2} = \underbrace{\Sigma_{XX}^{-1/2}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1/2}}_{\mathbf{H}}\underbrace{\Sigma_{YY}^{-1/2}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1/2}}_{\mathbf{H}'}$ tem os mesmo autovalores.
- Se fizermos $\mathbf{R} = \Sigma_{YY}$ e $\mathbf{Q} = \Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}$, temos que $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q} = \underbrace{\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}}_{\mathbf{B}}$ e $\mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{Q}\mathbf{R}^{-1/2} =$ $\Sigma_{YY}^{1/2}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{1/2} = \underbrace{\Sigma_{YY}^{1/2}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1/2}}_{\mathbf{H}'}\underbrace{\Sigma_{XX}^{-1/2}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{1/2}}_{\mathbf{H}}$ tem os mesmos autovalores

Propriedades: P1

- $\mathbf{A}$ tem os mesmo autovalores do que $\mathbf{HH}'$ e $\mathbf{B}$ tem os mesmos autovalores do que $\mathbf{H}'\mathbf{H}$.

Propriedades: P1

- $\mathbf{A}$ tem os mesmo autovalores do que $\mathbf{HH'}$ e $\mathbf{B}$ tem os mesmos autovalores do que $\mathbf{H'H}$.
- Como $\mathbf{HH'}$ e $\mathbf{H'H}$ são simétricas e semidefinidas positivas, os autovalores são reais e não negativos (**Propriedade**)

Propriedades: P2

- Sejam $\mathbf{a}_1$ e $\mathbf{a}_2$ autovetores de $\mathbf{A}$ (associados a diferentes autovalores, digamos λ_1 e λ_2).

Propriedades: P2

- Sejam $\mathbf{a}_1$ e $\mathbf{a}_2$ autovetores de $\mathbf{A}$ (associados a diferentes autovalores, digamos λ_1 e λ_2).
- Então os correspondes autovetores de $\mathbf{HH}'$ (associados aos mesmos λ_1 e λ_2) são, respectivamente $\Sigma_{XX}^{1/2}\mathbf{a}_1$ e $\Sigma_{XX}^{1/2}\mathbf{a}_2$ (**ver Lema**)

Propriedades: P2

- Sejam $\mathbf{a}_1$ e $\mathbf{a}_2$ autovetores de $\mathbf{A}$ (associados a diferentes autovalores, digamos λ_1 e λ_2).
- Então os correspondes autovetores de $\mathbf{HH}'$ (associados aos mesmos λ_1 e λ_2) são, respectivamente $\Sigma_{XX}^{1/2}\mathbf{a}_1$ e $\Sigma_{XX}^{1/2}\mathbf{a}_2$ (**ver Lema**)
- Como $\mathbf{HH}'$ é simétrica, então $\Sigma_{XX}^{1/2}\mathbf{a}_1$ e $\Sigma_{XX}^{1/2}\mathbf{a}_2$ são ortogonais, o que implica que $(\Sigma_{XX}^{1/2}\mathbf{a}_1)'\Sigma_{XX}^{1/2}\mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_1'\Sigma_{XX}\mathbf{a}_2 = 0$

Propriedades: P2

- Sejam $\mathbf{a}_1$ e $\mathbf{a}_2$ autovetores de $\mathbf{A}$ (associados a diferentes autovalores, digamos λ_1 e λ_2).
- Então os correspondes autovetores de $\mathbf{HH}'$ (associados aos mesmos λ_1 e λ_2) são, respectivamente $\Sigma_{XX}^{1/2}\mathbf{a}_1$ e $\Sigma_{XX}^{1/2}\mathbf{a}_2$ (**ver Lema**)
- Como $\mathbf{HH}'$ é simétrica, então $\Sigma_{XX}^{1/2}\mathbf{a}_1$ e $\Sigma_{XX}^{1/2}\mathbf{a}_2$ são ortogonais, o que implica que $(\Sigma_{XX}^{1/2}\mathbf{a}_1)'\Sigma_{XX}^{1/2}\mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_1'\Sigma_{XX}\mathbf{a}_2 = 0$
- Então, $Cov(\mathbf{a}_1'\mathbf{X}, \mathbf{a}_2'\mathbf{X}) = \mathbf{a}_1'\Sigma_{XX}\mathbf{a}_2 = 0$ (as variáveis canônicas são não correlacionadas).

Propriedades: P4

$$Cov(\mathbf{a}_1'\mathbf{X}, \mathbf{b}_2'\mathbf{Y}) = \mathbf{a}_1' \underbrace{\Sigma_{XY}\mathbf{b}_2}_{\lambda\Sigma_{XX}\mathbf{a}_2 \quad \text{(ver (2))}} = \lambda \underbrace{\mathbf{a}_1'\Sigma_{XX}\mathbf{a}_2}_{0} = 0$$

Implementação

Implementação

Algoritmo I

- Calcular as versões amostrais de **A** e **B** dadas por $\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{S}_{XX}^{-1}\mathbf{S}_{XY}\mathbf{S}_{YY}^{-1}\mathbf{S}_{YX}$ e $\hat{\mathbf{B}} = \mathbf{S}_{YY}^{-1}\mathbf{S}_{YX}\mathbf{S}_{XX}^{-1}\mathbf{S}_{XY}$
- Decompor a matriz de menor dimensão, digamos $\hat{\mathbf{A}}$.
- Seja **a** o vetor próprio associado a λ^2 ($\mathbf{S}_{XX}^{-1}\mathbf{S}_{XY}\mathbf{S}_{YY}^{-1}\mathbf{S}_{YX}\mathbf{a} = \lambda^2\mathbf{a}$). Então o vetor próprio associado a λ^2 mas obtido com a decomposição de $\hat{\mathbf{B}}$ será $\mathbf{S}_{YY}^{-1}\mathbf{S}_{YX}\mathbf{a}$ ($\mathbf{S}_{YY}^{-1}\mathbf{S}_{YX}\mathbf{S}_{XX}^{-1}\mathbf{S}_{XY}\mathbf{S}_{YY}^{-1}\mathbf{S}_{YX}\mathbf{a} = \lambda^2 \underbrace{\mathbf{S}_{YY}^{-1}\mathbf{S}_{YX}\mathbf{a}}_{\mathbf{b}}$)

Implementação

Algoritmo I

- Calcular as versões amostrais de $\mathbf{A}$ e $\mathbf{B}$ dadas por $\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{S}_{XX}^{-1}\mathbf{S}_{XY}\mathbf{S}_{YY}^{-1}\mathbf{S}_{YX}$ e $\hat{\mathbf{B}} = \mathbf{S}_{YY}^{-1}\mathbf{S}_{YX}\mathbf{S}_{XX}^{-1}\mathbf{S}_{XY}$
- Decompor a matriz de menor dimensão, digamos $\hat{\mathbf{A}}$.
- Seja $\mathbf{a}$ o vetor próprio associado a λ^2 ($\mathbf{S}_{XX}^{-1}\mathbf{S}_{XY}\mathbf{S}_{YY}^{-1}\mathbf{S}_{YX}\mathbf{a} = \lambda^2\mathbf{a}$). Então o vetor próprio associado a λ^2 mas obtido com a decomposição de $\hat{\mathbf{B}}$ será $\mathbf{S}_{YY}^{-1}\mathbf{S}_{YX}\mathbf{a}$ ($\mathbf{S}_{YY}^{-1}\mathbf{S}_{YX}\mathbf{S}_{XX}^{-1}\mathbf{S}_{XY}\mathbf{S}_{YY}^{-1}\mathbf{S}_{YX}\mathbf{a} = \lambda^2 \underbrace{\mathbf{S}_{YY}^{-1}\mathbf{S}_{YX}\mathbf{a}}_{\mathbf{b}}$)

Mas, *peraí*. . .

Implementação

Lembrete: Definição SVD

Qualquer matriz $\mathbf{M}_{m\times n}$ de posto r pode ser decomposta como:

$$\mathbf{M} = \mathbf{UDV}^t,$$

em que $\mathbf{U}_{m\times r}$, $\mathbf{V}_{n\times r}$ e $\mathbf{D}_{r\times r} = Diag\{\sqrt{\lambda_1}, \cdots, \sqrt{\lambda_r}\}$. $\lambda_1, \cdots, \lambda_r$ são os autovalores (em ordem decrescente) de $\mathbf{MM}'$.

- Os elementos D_{ii} são chamdos de valores singulares da matriz $\mathbf{M}$.
- As colunas de $\mathbf{U}$ são os r autovetores (normalizados) associados a $\mathbf{MM}'$.
- As colunas de $\mathbf{V}$ são os r autovetores (normalizados) associados a $\mathbf{M}'\mathbf{M}$.

Implementação

Seja $\mathbf{M} = \Sigma_{XX}^{-1/2}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1/2}$, então:

- $\mathbf{MM}' = \Sigma_{XX}^{-1/2}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1/2}$
- $\mathbf{M}'\mathbf{M} = \Sigma_{YY}^{-1/2}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1/2}$

Implementação

Seja $\mathbf{M} = \Sigma_{XX}^{-1/2}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1/2}$, então:

- $\mathbf{M}\mathbf{M}' = \Sigma_{XX}^{-1/2}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1/2}$
- $\mathbf{M}'\mathbf{M} = \Sigma_{YY}^{-1/2}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1/2}$

Pelo Lema 1, as matrizes $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}$ e $\mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{Q}\mathbf{R}^{-1/2}$ tem os mesmos autovalores, com respectivos autovalores δ e $\mathbf{R}^{1/2}\delta$.

Implementação

Seja $\mathbf{M} = \Sigma_{XX}^{-1/2}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1/2}$, então:

- $\mathbf{MM}' = \Sigma_{XX}^{-1/2}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1/2}$
- $\mathbf{M}'\mathbf{M} = \Sigma_{YY}^{-1/2}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1/2}$

Pelo Lema 1, as matrizes $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}$ e $\mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{Q}\mathbf{R}^{-1/2}$ tem os mesmos autovalores, com respectivos autovalores δ e $\mathbf{R}^{1/2}\delta$.

- Se fizermos $\mathbf{R} = \Sigma_{XX}$ e $\mathbf{Q} = \Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}$, os autovetores de $\mathbf{MM}'$ são da forma $\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{a}$ em que $\mathbf{a}$ são os autovetores de $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q} = \Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX} = \mathbf{A}$.

Implementação

Seja $\mathbf{M} = \Sigma_{XX}^{-1/2}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1/2}$, então:

- $\mathbf{MM}' = \Sigma_{XX}^{-1/2}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1/2}$
- $\mathbf{M}'\mathbf{M} = \Sigma_{YY}^{-1/2}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1/2}$

Pelo Lema 1, as matrizes $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}$ e $\mathbf{R}^{-1/2}\mathbf{Q}\mathbf{R}^{-1/2}$ tem os mesmos autovalores, com respectivos autovalores δ e $\mathbf{R}^{1/2}\delta$.

- Se fizermos $\mathbf{R} = \Sigma_{XX}$ e $\mathbf{Q} = \Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}$, os autovetores de $\mathbf{MM}'$ são da forma $\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{a}$ em que $\mathbf{a}$ são os autovetores de $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q} = \Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX} = \mathbf{A}$.

- Se fizermos $\mathbf{R} = \Sigma_{YY}$ e $\mathbf{Q} = \Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY}$, os autovetores de $\mathbf{M}'\mathbf{M}$ são da forma $\mathbf{R}^{1/2}\mathbf{b}$ em que $\mathbf{b}$ são os autovetores de $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q} = \Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY} = \mathbf{B}$.

Implementação

Algoritmo II

- Defina $\mathbf{M} = \mathbf{S}_{XX}^{-1/2}\mathbf{S}_{YX}\mathbf{S}_{YY}^{-1/2}$
- Aplique a decomposição SVD ($\mathbf{M} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}'$)
- Faça $\mathbf{a}_i = \mathbf{S}_{XX}^{-1/2}\mathbf{u}_i$ e $\mathbf{b}_i = \mathbf{S}_{YY}^{-1/2}\mathbf{v}_i$

Implementação

```
library(expm)
cc_me731 = function(x, y) {
  S_xx <- cov(x)
  S_yy <- cov(y)
  S_xy <- cov(x, y)
  M <- sqrtm(solve(S_xx)) %*% S_xy %*% sqrtm(solve(S_yy))
  decomposicao_svd <- svd(M)
  a <- sqrtm(solve(S_xx)) %*% decomposicao_svd$u
  b <- sqrtm(solve(S_yy)) %*% decomposicao_svd$v
  lambda <- decomposicao_svd$d
  return(list(a, b, lambda))
}
```

Como exemplo, utilizaremos o *data set* disponível aqui

Implementação

```
library(dplyr)
dados <- read.table("https://raw.githubusercontent.com/ctruciosm/
colnames(dados) <- c("name", "economy",
                     "service", "value",
                     "price", "design",
                     "sporty", "safety",
                     "handling")
X <- dados %>% dplyr::select(price, value)
Y <- dados %>% dplyr::select(-price, -value, -name)
cor_canonica_na_mao <- cc_me731(X, Y)
cc_results <- cancor(X,Y)
```

Implementação

```
# Autovalores
cc_results$cor              # Pacote stats
```

```
## [1] 0.9791972 0.8851224
```

```
cor_canonica_na_mao[[3]] # Nossa implementacao
```

```
## [1] 0.9791972 0.8851224
```

Implementação

```
# Autovetores
round(cc_results$xcoef, 3)          # Pacote stats
```

```
##            [,1]   [,2]
## price  0.071 -0.342
## value -0.125 -0.360
```

```
round(cor_canonica_na_mao[[1]], 3) # Nossa implementacao
```

```
##          [,1]  [,2]
## [1,] -0.333 1.602
## [2,]  0.587 1.686
```

Implementação

```r
# Autovetores
round(cc_results$ycoef, 3)    # Pacote stats
```

```
##             [,1]   [,2]   [,3]   [,4]   [,5]   [,6]
## economy   0.092 -0.121 -0.255 -0.008 -0.037  0.340
## service  -0.041 -0.116  0.294  0.007 -0.730  0.329
## design   -0.001  0.003 -0.478 -0.516 -0.009 -0.051
## sporty   -0.098  0.020  0.014  0.439 -0.027 -0.256
## safety   -0.047  0.003  0.006 -0.006  0.549  0.208
## handling -0.080 -0.195 -0.007  0.004 -0.016 -0.811
```

Implementação

```
# Autovetores
round(cor_canonica_na_mao[[2]], 3) # Nossa implementacao
```

```
##         [,1]   [,2]
## [1,] -0.433  0.568
## [2,]  0.191  0.544
## [3,]  0.005 -0.012
## [4,]  0.458 -0.096
## [5,]  0.223 -0.014
## [6,]  0.376  0.915
```

Implementação

- Nossa implementação e do pacote `stats` são diferentes. E agora?

Implementação

- Nossa implementação e do pacote `stats` são diferentes. E agora?
- Na prática você pode enfrentar problemas como este, o que deveria fazer?

Implementação

- Nossa implementação e do pacote `stats` são diferentes. E agora?
- Na prática você pode enfrentar problemas como este, o que deveria fazer?
- Na próxima aula continuaremos utilizando ambas implementações para descobrir o que está acontecendo. Tente descobrir por si próprio o que está acontecendo!

Referências

Referências

- Härdle, W. K., & Simar, L. (2019). Applied Multivariate Statistical Analysis. Fifth Editon. Springer Nature. Capítulo 16.
- Mardia, K. V., Kent, J. T., & Bibby, J, M. (1979). Multivariate Analysis. Academic Press. Capítulo 10.
- Peña, D. (2002). Análisis de Datos Multivariantes. Mc Graw Hill. Capítulo 16.