Data Exploration

Felipe José Bravo Márquez

October 1, 2020

Exploratory Data Analysis

- Exploratory Data Analysis or (EDA) encompasses a set of techniques to quickly understand the nature of a data collection or **dataset**.
- It was proposed by the statistician John Tukey.
- It is based mainly on two criteria: **summary statistics** and **data visualization**.
- In this class you will see both types of techniques, in addition to their application in R for some toy datasets.

El dataset Iris

- Trabajaremos con un dataset muy conocido en análisis de datos llamado **Iris**.
- El dataset se compone de 150 observaciones de flores de la planta iris.
- Existen tres tipos de clases de flores iris: **virginica**, **setosa** y **versicolor**.
- Hay 50 observaciones de cada una.
- Las variables o atributos que se miden de cada flor son:
  1. El tipo de flor como variable categórica.
  2. El largo y el ancho del pétalo en cm como variables numéricas.
  3. El largo y el ancho del sépalo en cm como variables numéricas.

El dataset Iris



Figure: Virginica - Setosa - Versicolor

- El dataset se encuentra disponible en R:

```
>data(iris) # cara cargar el dataset al workspace
> names(iris)
[1] "Sepal.Length" "Sepal.Width"  "Petal.Length"
    "Petal.Width"  "Species"
```

- Para poder acceder a las variables directamente usamos el comando `attach(iris)`.

Estadísticas de Resumen

- Las estadísticas de resumen son valores que explican propiedades de los datos.
- Algunas de estas propiedades incluyen: frecuencias, medidas de tendencia central y dispersión.
- Ejemplos:
  - Tendencia central: media, mediana, moda.
  - Dispersión: miden la variabilidad de los datos, como la desviación estándar, el rango, etc..
- La mayor parte de las estadísticas de resumen se pueden calcular haciendo una sola pasada por los datos.

Frecuencia y Moda

- La frecuencia de un valor de atributo es el porcentaje de veces que éste es observado.
- En R podemos contar las frecuencias de aparición de cada valor distinto de un vector usando el comando `table`:

```
> table(iris$Species)
    setosa versicolor  virginica
        50         50         50
> vec<-c(1,1,1,0,0,3,3,3,3,2)
> table(vec)
vec
0 1 2 3
2 3 1 4
```

- Ejercicio: Calcular las frecuencias porcentuales del vector anterior.

```
> table(vec)/length(vec)   # Frecuencia porcentual
vec
  0   1   2   3
0.2 0.3 0.1 0.4
```

Frecuencia y Moda (2)

- La moda de un atributo es el valor más frecuente observado.
- No existe la función moda directamente en R, pero es fácil de calcular usando `table` y `max`:

```
my_mode<-function(var){
  frec.var<-table(var)
  valor<-which(frec.var==max(frec.var))  # Elementos con el valor
  names(valor)
}
> my_mode(vec)
[1] "3"
> my_mode(iris$Sepal.Length)
[1] "5"
```

- Generalmente usamos la frecuencia y la moda para estudiar variables categóricas.

Medidas de Tendencia Central

- Estas medidas tratan de resumir los valores observados en único valor asociado al valor localizado en el centro.
- La media es la medida más común de tendencia central para una variable numérica.
- Si tenemos m observaciones se calcula como la media aritmética o promedio.

$$\text{mean}(x) = \overline{x} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x_i$$

- El mayor problema de la media es que es una medida muy sensible a **outliers** o valores atípicos.
- Ejemplo: Tomamos un vector aleatorio de media 20 y luego le agregamos un elemento aleatorio que proviene de una distribución de media mucho mayor. Vemos que la media es fuertemente afectada por el ruido:

```
> vec<-rnorm(10,20,10)
> mean(vec)
[1] 16.80036
> vec.ruid<-c(vec,rnorm(1,300,100))
> mean(vec.ruid)
[1] 35.36422
```

Medidas de Tendencia Central (2)

- Podemos robustecer la media eliminando una fracción de los valores extremos usando la **media truncada** o **trimmed mean**.
- En R podemos darle un segundo parámetro a la función `mean` llamado `trim` que define la fracción de elementos extremos a descartar.
- Ejemplo: Descartamos el 10% de los valores extremos en el ejemplo anterior:

```
> mean(vec,trim=0.1)
[1] 17.78799
> mean(vec.ruid,trim=0.1)
[1] 19.51609  # Mucho más robusto
```

Medidas de Tendencia Central (3)

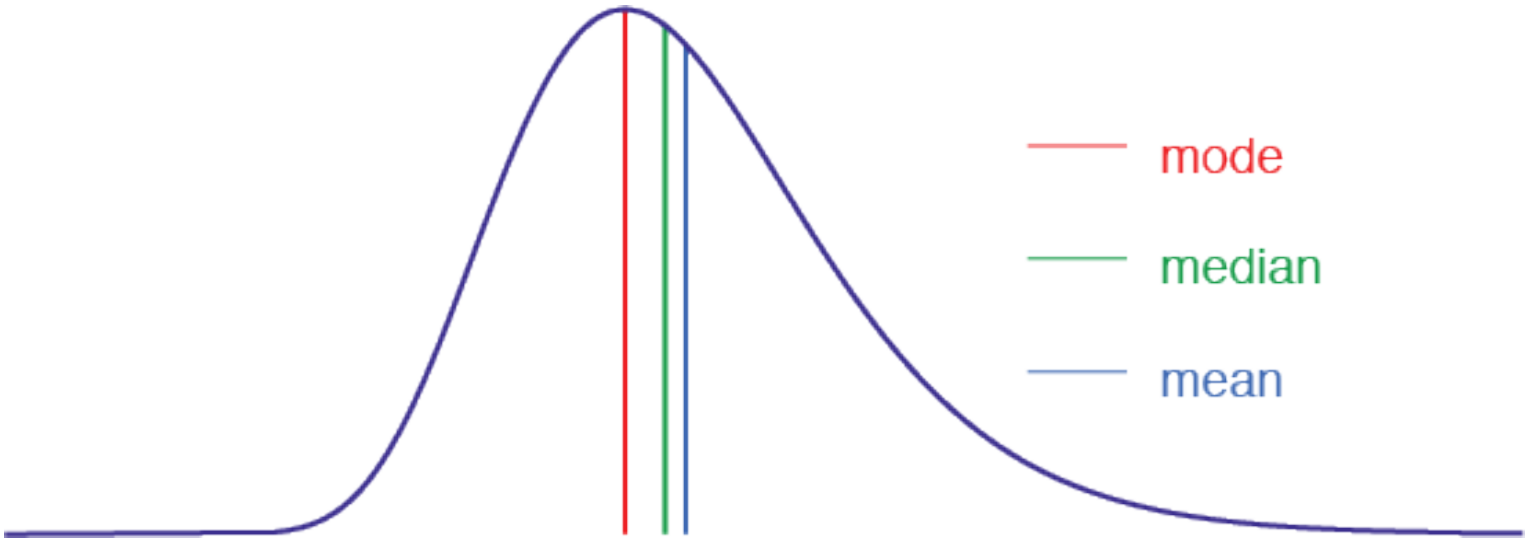
- La mediana representa de posición central de la variable que separa la mitad inferior y la mitad superior de las observaciones.
- Intuitivamente, consiste el valor donde para una mitad de las observaciones todos los valores son mayores que ésta, y para la otra mitad todos son menores.

$$\text{median}(x) = \begin{cases} x_{r+1} & \text{Si } m \text{ es impar con } m = 2r+1 \\ \frac{1}{2}(x_r + x_{r+1}) & \text{Si } m \text{ es par con } m = 2r \end{cases}$$

- Para el ejemplo anterior, vemos que la mediana es más robusta al ruido que la media:

```
> median(vec)
[1] 17.64805
> median(vec.ruid)
[1] 17.64839
```

Comparación entre la moda, la mediana y la media



Percentiles o Cuantiles

- El k-ésimo percentil de una variable numérica es un valor tal que el $k\%$ de las observaciones se encuentran debajo del percentil y el $(100 - k)\%$ se encuentran sobre este valor.
- En estadística se usan generalmente los **cuantiles** que son equivalentes a los percentiles expresados en fracciones en vez de porcentajes.
- En R se calculan con el comando `quantile`:

```
# Todos los percentiles
quantile(Sepal.Length,seq(0,1,0.01))
```

- Además es muy común hablar de los **cuartiles** que son tres percentiles específicos:
  - El primer cuartil Q_1 (lower quartile) es el percentil con $k = 25$.
  - El segundo cuartil Q_2 es con $k = 50$ que equivale a la mediana.
  - El tercer cuartil Q_3 (upper quartile) es con $k = 75$.

```
# El mínimo, los tres cuartiles y el máximo
> quantile(Sepal.Length,seq(0,1,0.25))
  0%  25%  50%  75% 100%
 4.3  5.1  5.8  6.4  7.9
```

Resumiendo un Data Frame

- En R podemos resumir varias estadísticas de resumen de una variable o de un data.frame usando el comando `summary`.
- Para las variables numéricas nos entrega el mínimo, los cuartiles, la media y el máximo.
- Para las variables categóricas nos entrega la tabla de frecuencias.

```
> summary(iris)
 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
```

Ejercicio

- Usando el comando `tapply` analice la media, la mediana y los cuartiles para las tres especies de **Iris** para las cuatro variables.
- ¿Nota alguna diferencia en las distintas especies?

```
tapply(iris$Petal.Length,iris$Species,summary)
tapply(iris$Petal.Width,iris$Species,summary)
tapply(iris$Sepal.Length,iris$Species,summary)
tapply(iris$Sepal.Width,iris$Species,summary)
```

Medidas de Dispersión

- Estas medidas nos dicen que tan distintas o similares tienden a ser las observaciones respecto a un valor particular. Generalmente este valor se refiere a alguna medida de tendencia central.
- El rango es la diferencia entre el valor máximo y el mínimo:

```
> max(Sepal.Length)-min(Sepal.Length)
[1] 3.6
```

- La desviación estándar es la raíz cuadrada de la varianza que mide las diferencias cuadráticas promedio de las observaciones con la media.

$$\text{var}(x) = \frac{1}{m-1}\sum_{i=1}^{m}(x_i - \overline{x})^2$$

$$\text{sd}(x) = \sqrt{\text{var}(x)}$$

```
> var(Sepal.Length)
[1] 0.6856935
> sd(Sepal.Length)
[1] 0.8280661
```

Medidas de Dispersión (2)

- Al igual que la media, la desviación estándar es sensible a outliers.
- Las medidas más robustas se basan generalmente en la mediana.
- Sea $m(x)$ una medida de tendencia central de x (usualmente la mediana), se define la **desviación absoluta promedio** o **average absolute deviation** (AAD) como:

$$\text{AAD}(x) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}|x_i - m(x)|$$

- Programe la función `add` en R, como una función que recibe un vector `x` y una función de media central `fun`. El valor absoluto se calcula con el comando `abs`:

```
aad<-function(x,fun=median){
  mean(abs(x-fun(x)))
}
> aad(Sepal.Length)
[1] 0.6846667
> aad(Sepal.Length,mean)
[1] 0.6875556
```

Medidas de Dispersión (3)

- Sea b una constante de escala se define la **desviación media absoluta** o **median absolute deviation** como:

$$\text{MAD}(x) = b \times \text{median}(|x_i - \text{m}(x)|)$$

- En R se calcula con el comando `mad` con los parámetros `center` como una función que mide la tendencia central de la variable y `constant` como la constante b. Por defecto se usa la mediana y el valor 1.482.

```
 > mad(Sepal.Length)
[1] 0.7
```

- Finalmente, se define el rango inter-cuartil (IQR) como la diferencia entre el tercer y el primer cuartil ($Q_3 - Q_1$).

```
IQR(Sepal.Length)
[1] 1.3
```

Estadísticas de Resumen Multivariadas

- Para comparar como varía una variable respecto a otra, usamos medidas multivariadas.
- La covarianza $cov(x, y)$ mide el grado de variación lineal conjunta de un par de variables x, y :

$$cov(x, y) = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^{n} (x - \overline{x})(y - \overline{y})$$

- Donde $cov(x, x) = var(x)$
- En R se calcula con el comando `cov`:

```
> cov(Sepal.Length,Sepal.Width)
[1] -0.042434
```

- Si le damos una matriz o un data.frame de variables numéricas, calcula una matriz de covarianzas:

```
> cov(iris[,1:4])
              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
```

Estadísticas de Resumen Multivariadas (2)

- Si dos variables son independientes entre sí, su covarianza es cero.
- Para tener una medida de relación que no dependa de la escala de cada variable, usamos la **correlación lineal**.
- Se define a la correlación lineal o coefiente de correlación de **Pearson** $r(x, y)$ como:

$$r(x, y) = \frac{cov(x, y)}{sd(x)sd(y)}$$

- La correlación lineal varía entre -1 a 1. Un valor cercano a 1 indica que mientras una variable crece la otra también lo hace en una proporción lineal. Un valor cercano a -1 indica una relación inversa (una crece la otra decrece). Si la correlación es cercana a cero tenemos independencia lineal. Ojo que eso no implica que no pueda haber una relación no-lineal entre las variables.
- En R se calcula con el comando `cor`.

```
> cor(iris[,1:4])
             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
```

Tablas de Contingencia

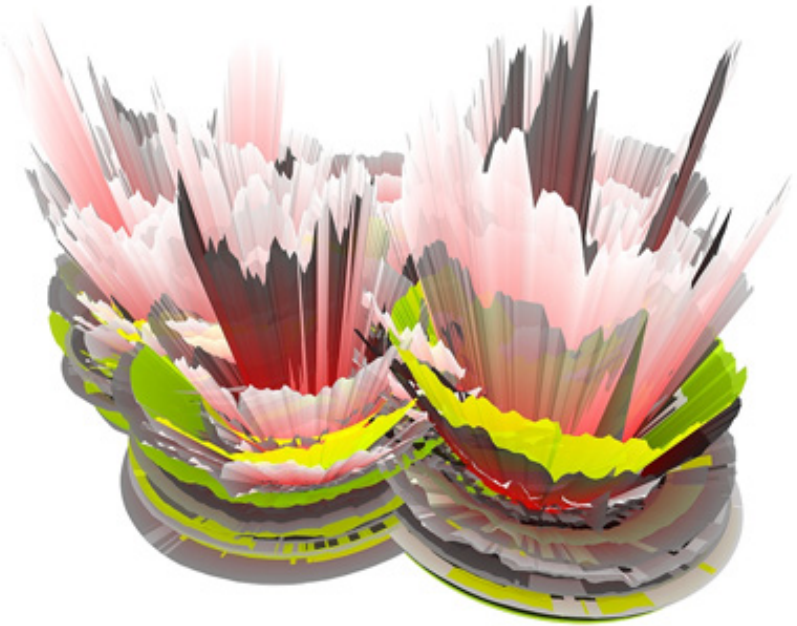
- Para analizar la relación entre variables de naturaleza categórica usamos **tablas de contingencia**.
- La tabla se llena con las frecuencias marginales de todos los pares de valores entre dos variables categóricas.
- En R se crean usando el comando `table` que usábamos para frecuencias, pero entregándole dos vectores:

```
sexo<-c("Hombre","Hombre","Mujer","Hombre","Mujer","Mujer")
estudios<-c("universitario","secundario","secundario",
            "postgrado","secundario","universitario")
```

```
> table(sexo,estudios)
        estudios
sexo     postgrado secundario universitario
  Hombre         1          1             1
  Mujer          0          2             1
```

Visualización de Datos

- La visualización de datos es la transformación de un dataset a un formato visual que permita a las personas identificar las características y las relaciones entre los elementos del dataset.
- La visualización permite que las personas reconozcan patrones o tendencias en base a su criterio o expertiz en el dominio particular.



Representación

- Se entiende por representación como el mapeo que se hace a partir de los datos hacia un formato visual.
- Se traducen los datos, sus atributos y relaciones a elementos gráficos como puntos, líneas, formas y colores.
- Los objetos son usualmente representados como puntos.
- Los valores de atributos se representan como la posición de los puntos o las características de los puntos, ej: color, tamaño y forma.
- Cuando se usa la posición para representar los valores es simple detectar si es que se forman grupos de obejtos o la presencia de objetos atípicos.

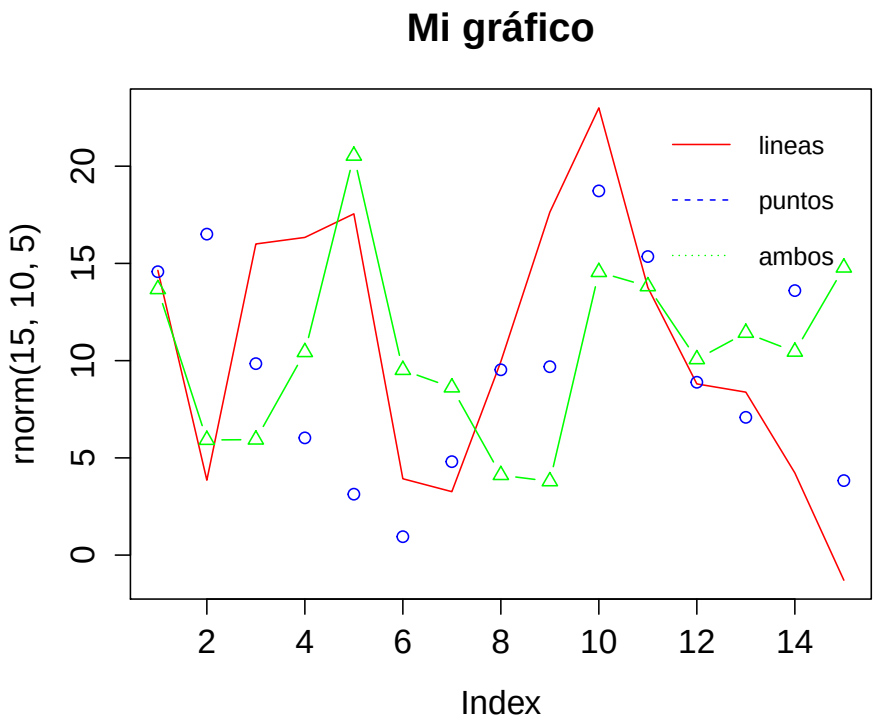
Graficando en R

- En R la función de visualización más frecuente en `plot`.
- Es una función genérica cuyo resultado depende de la naturaleza de las variables usadas.
- A todos los gráficos les podemos agregar parámetros adicionales como: `main` para el título, `xlab` e `ylab` para el nombre del eje x y del el eje y.
- Otras propiedades son `col` para definir el color, `type` para definir el tipo de gráfico: (p) para puntos o (l) para líneas.
- Además podemos agregarle nuevas capas a un gráfico con el comando `lines`.
- Para grabar una imagen en un archivo podemos usar el botón **export** de Rstudio.
- Para hacerlo de la línea de comandos en R:

```
png("imagen.png")
plot(1:10)
dev.off()
```

Ejemplo

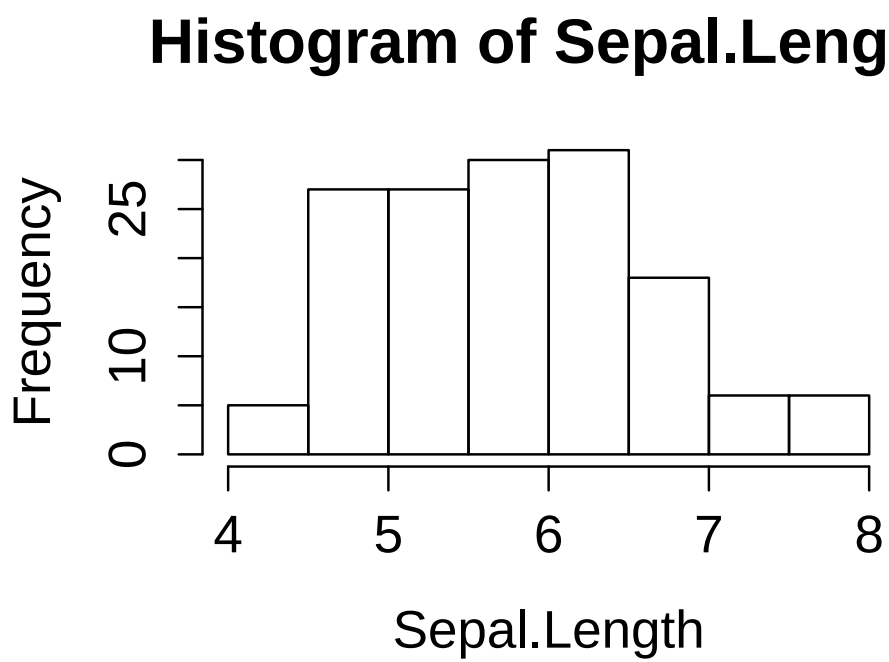
```
plot(rnorm(15,10,5),col="red",type="l")
lines(rnorm(15,10,5),col="blue",type="p",pch=1)
lines(rnorm(15,10,5),col="green",type="b",pch=2)
title(main="Mi gráfico")
legend('topright', c("lineas","puntos","ambos") ,
       lty=1:3, col=c("red", "blue","green"), bty='n', cex=.75)
```



Histogramas

- Muestran la distribución de los valores de una variable.
- Los valores de los elementos se dividen en contenedores (bins) y se crean gráficos de barra por cada contenedor.
- La altura de cada barra indica el número de elementos o frecuencia del contenedor.
- En R se crean con el comando `hist`.

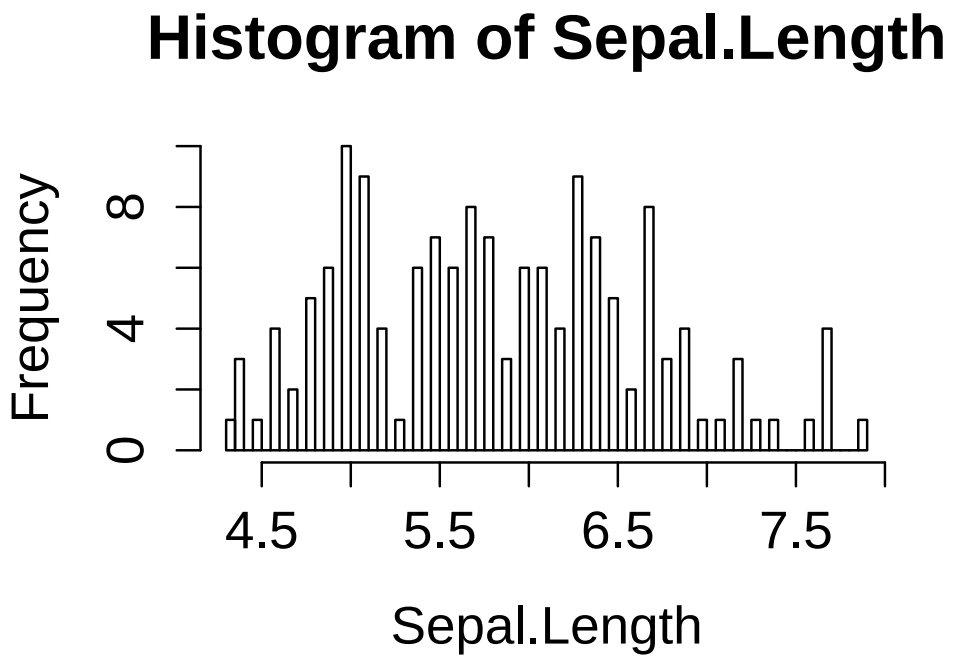
```
> hist(Sepal.Length)
```



Histogramas (2)

- La forma del histograma depende de el número de contenedores.
- En R se puede definir esa cantidad con el parámetro `nclass`.

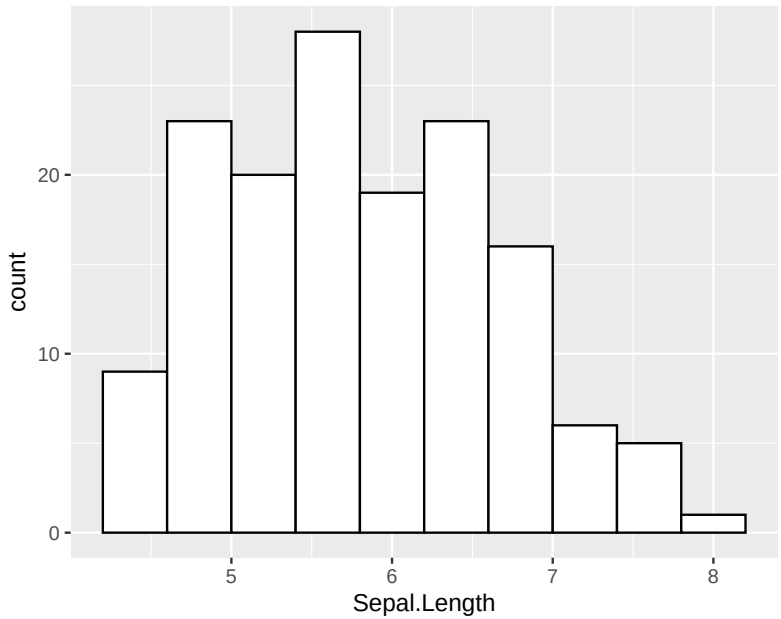
```
> hist(Sepal.Length,nclass=100)
```



Histogramas (3)

- Una librería muy popular para hacer visualizaciones en R es *ggplot2*.
- Se basa en la idea de descomponer el gráfico en componentes semánticos como escalas y capas.

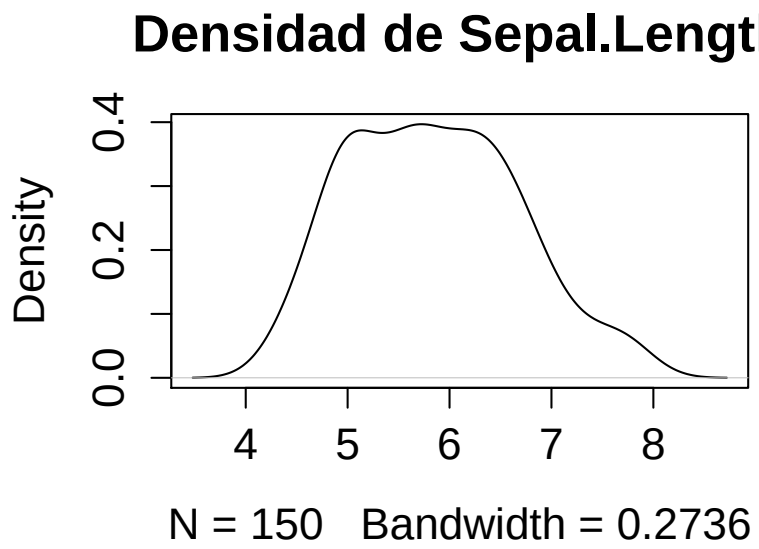
```
>install.packages("ggplot2")
>library(ggplot2)
>ggplot(iris, aes(x=Sepal.Length))
+ geom_histogram(bins = 10, color="black", fill="white")
```



Densidad

- Otra forma de visualizar como se distribuyen los datos es estimando una densidad.
- Se calculan usando técnicas estadísticas no paramétricas llamadas estimación de densidad de **kernel**.
- La densidad es una versión suavizada del histograma y nos permite determinar más claramente si los datos observados se comportan como una densidad conocida ej: normal.
- En R se crean con el comando `density`, para luego visualizarlas con el comando `plot`.

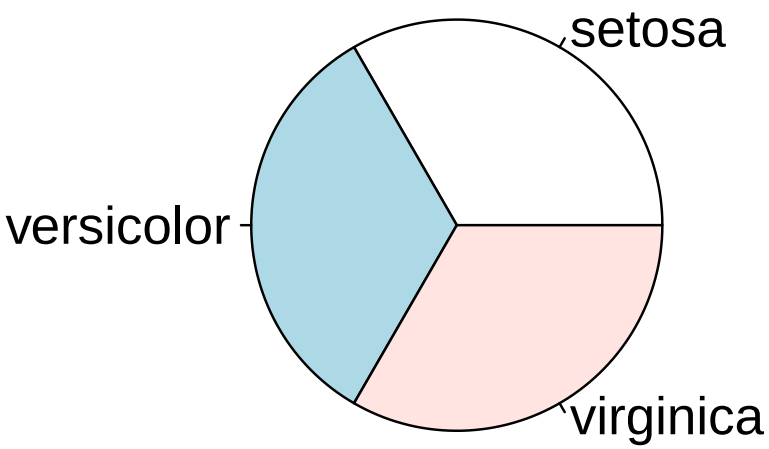
```
plot(density(iris$Sepal.Length),main="Densidad de Sepal.Length")
```



Gráficos de Torta o Pie Charts

- Los gráficos de torta, gráficos circulares o pie charts representan la frecuencia de los elementos en un círculo.
- Cada elemento tiene una participación proporcional a su frecuencia relativa.
- Se usan generalmente para variables categóricas:

```
pie(table(iris$Species))
```



Boxplots

- Los Boxplots o diagramas de caja se construyen a partir de los percentiles.
- Se construye una rectángulo usando entre el primer y el tercer cuartil (Q_1 y Q_3).
- La altura del rectángulo es el rango intercuartil RIC ($Q_3 - Q_1$).
- La mediana es una línea que divide el rectángulo.
- Cada extremo del rectángulo se extiende con una recta o brazos de largo $Q1 - 1.5 * \text{RIC}$ para la recta inferior y $Q_3 + 1.5 * \text{RIC}$ para la recta superior.
- Los valores más extremos que el largo de los brazos son considerados atípicos.
- El boxplot nos entrega información sobre la simetría de la distribución de los datos.
- Si la mediana no está en el centro del rectángulo, la distribución no es simétrica.
- Son útiles para ver la presencia de valores atípicos u outliers.

Boxplots (2)

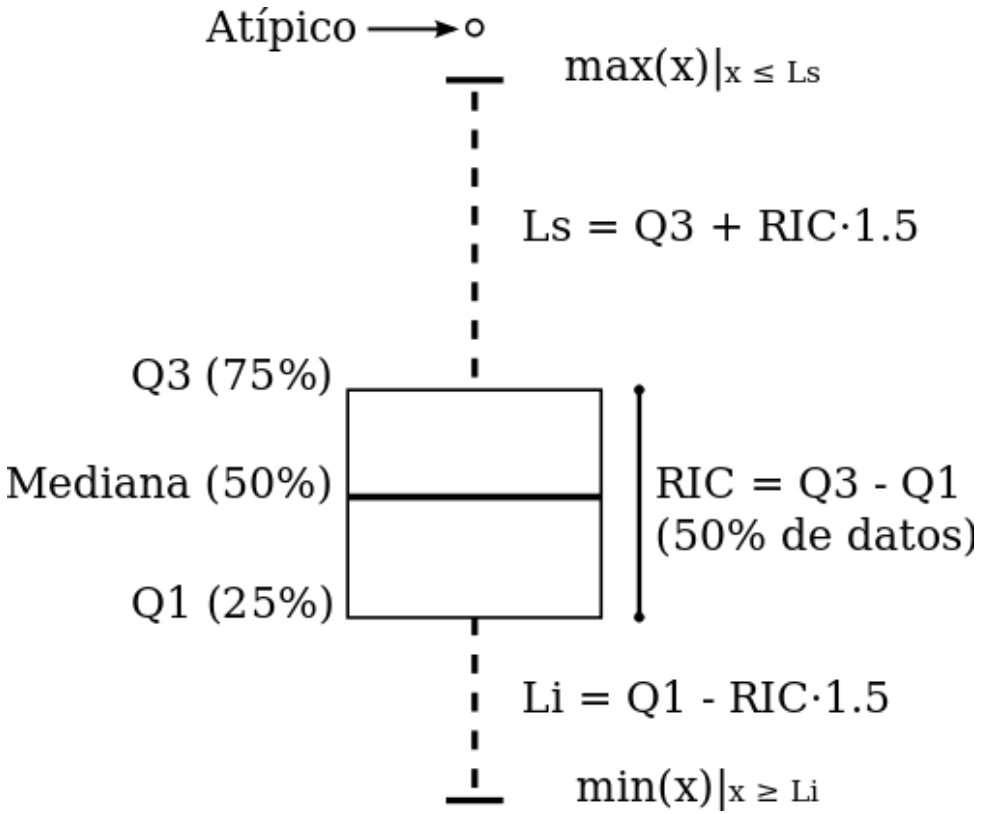
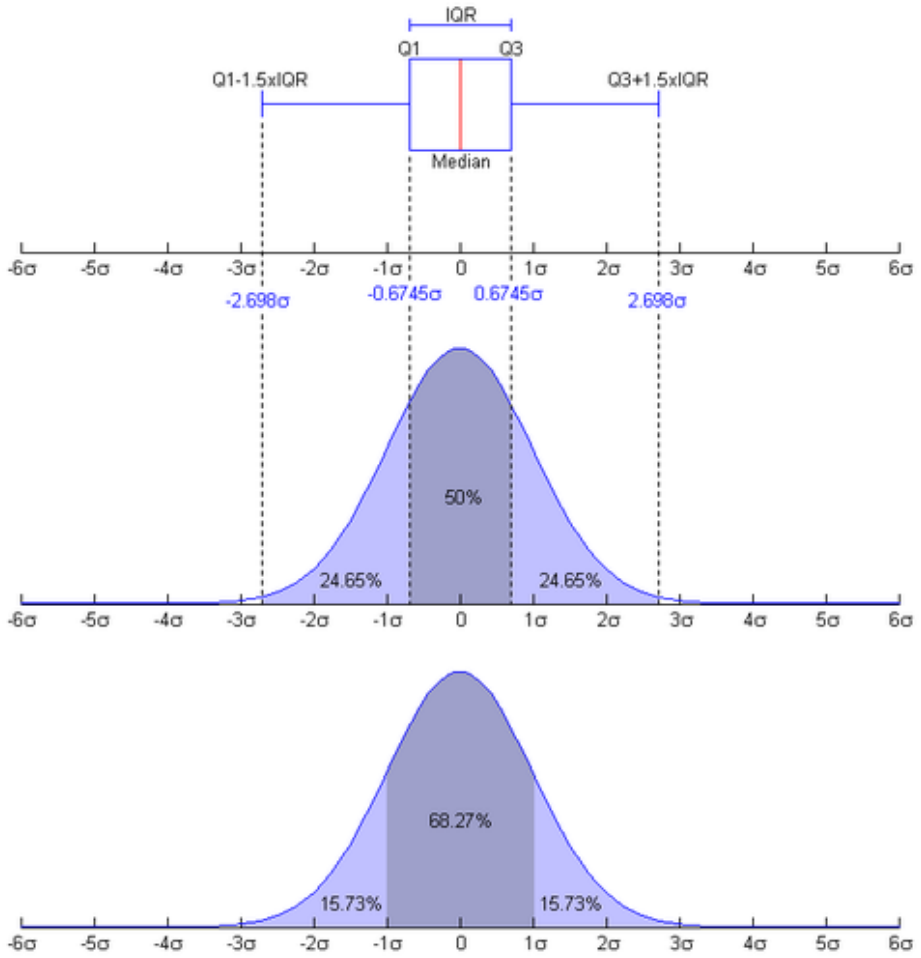


Figure: Fuente:
`http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Boxplot.svg`

Boxplots (3)

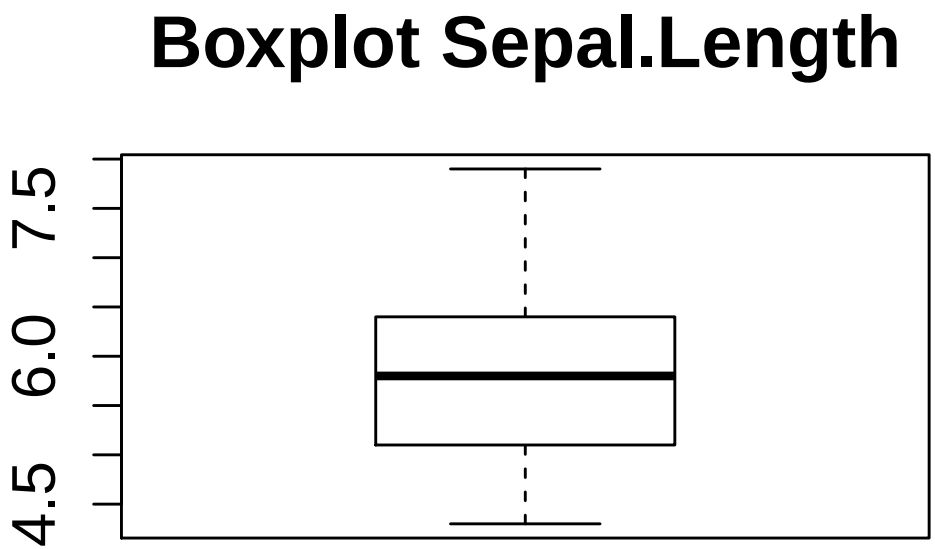
- El largo de los brazos así como el criterio para identificar valores atípicos se basa en el comportamiento de una normal.



Boxplots (4)

- En R los boxplots se grafican con el comando `boxplot`:

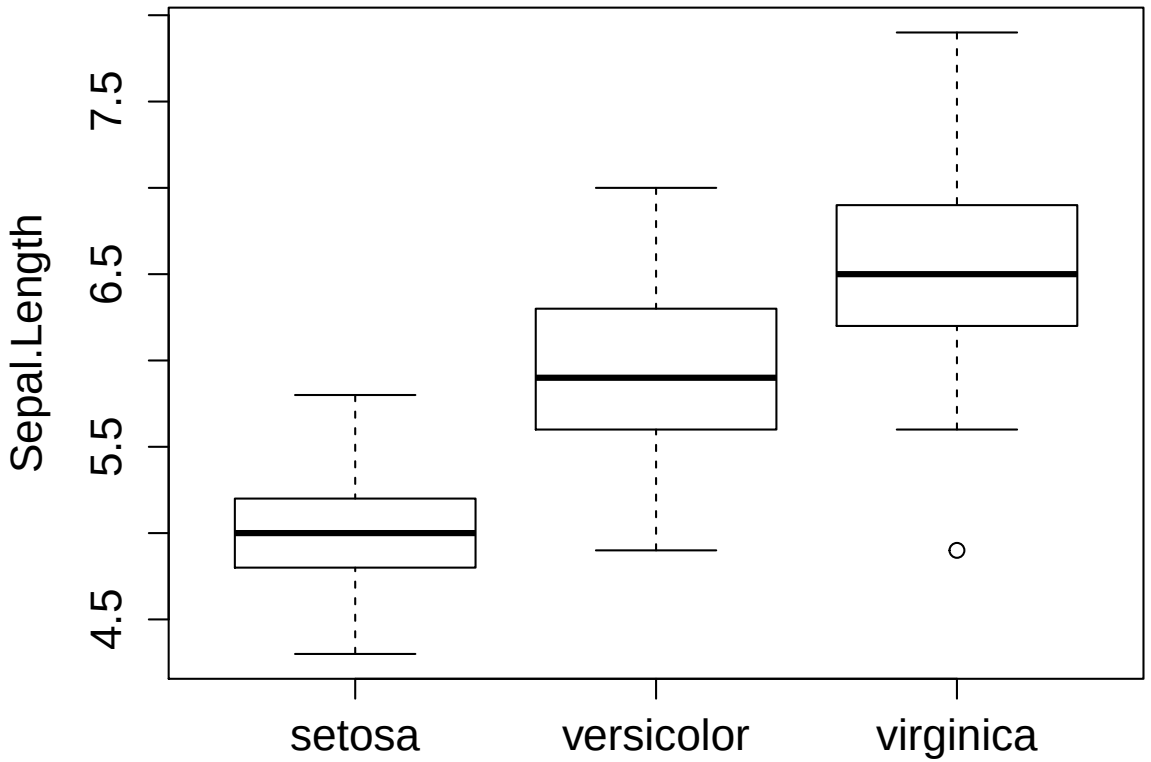
```
> boxplot(Sepal.Length,main="Boxplot Sepal.Length")
```



Boxplots (4)

- Si tenemos una variable factor podemos crear un boxplot para cada categoría de la siguiente manera:

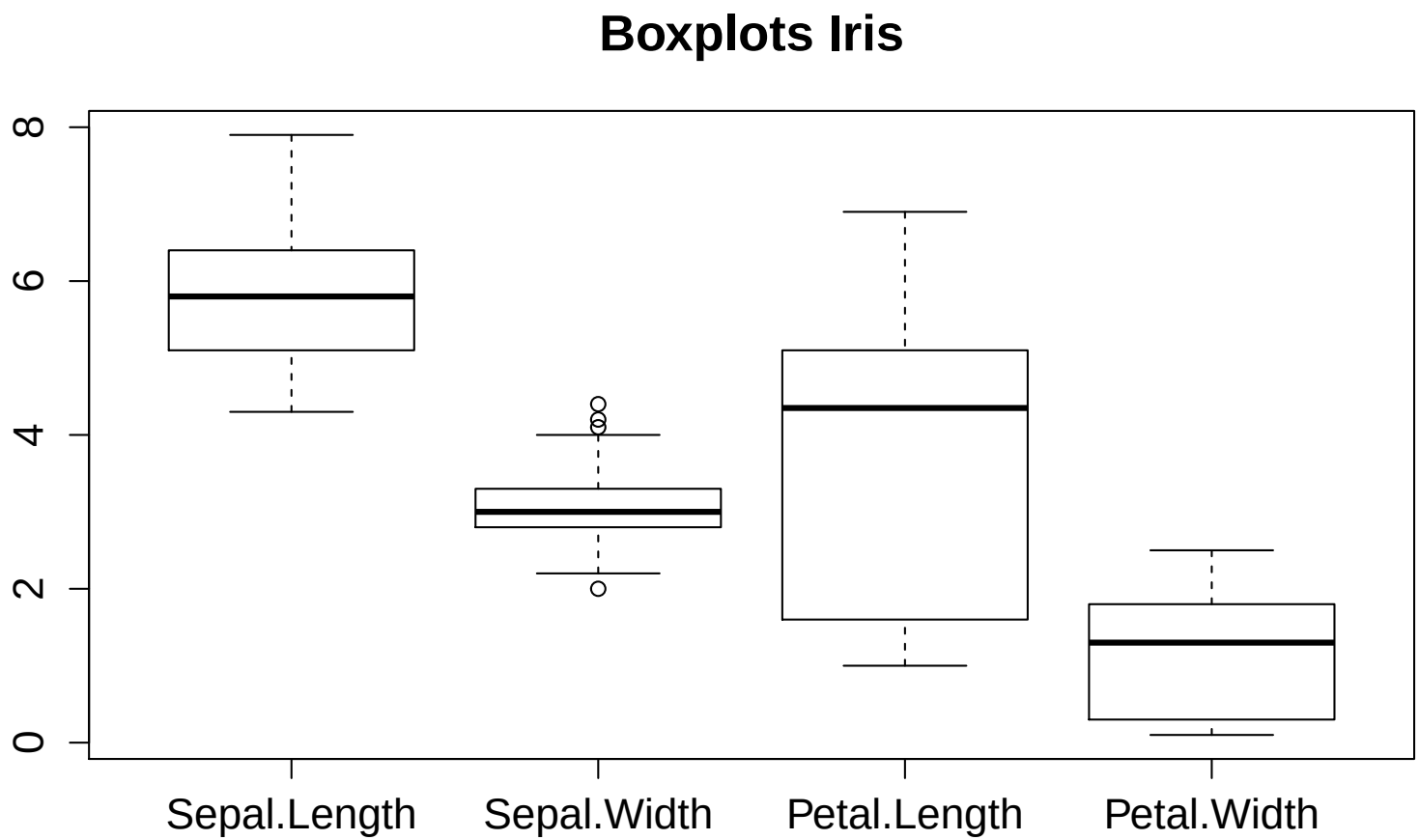
```
> boxplot(Sepal.Length~Species,ylab="Sepal.Length")
```



Boxplots (5)

- También podemos podemos comparar varios boxplots en un mismo gráfico:

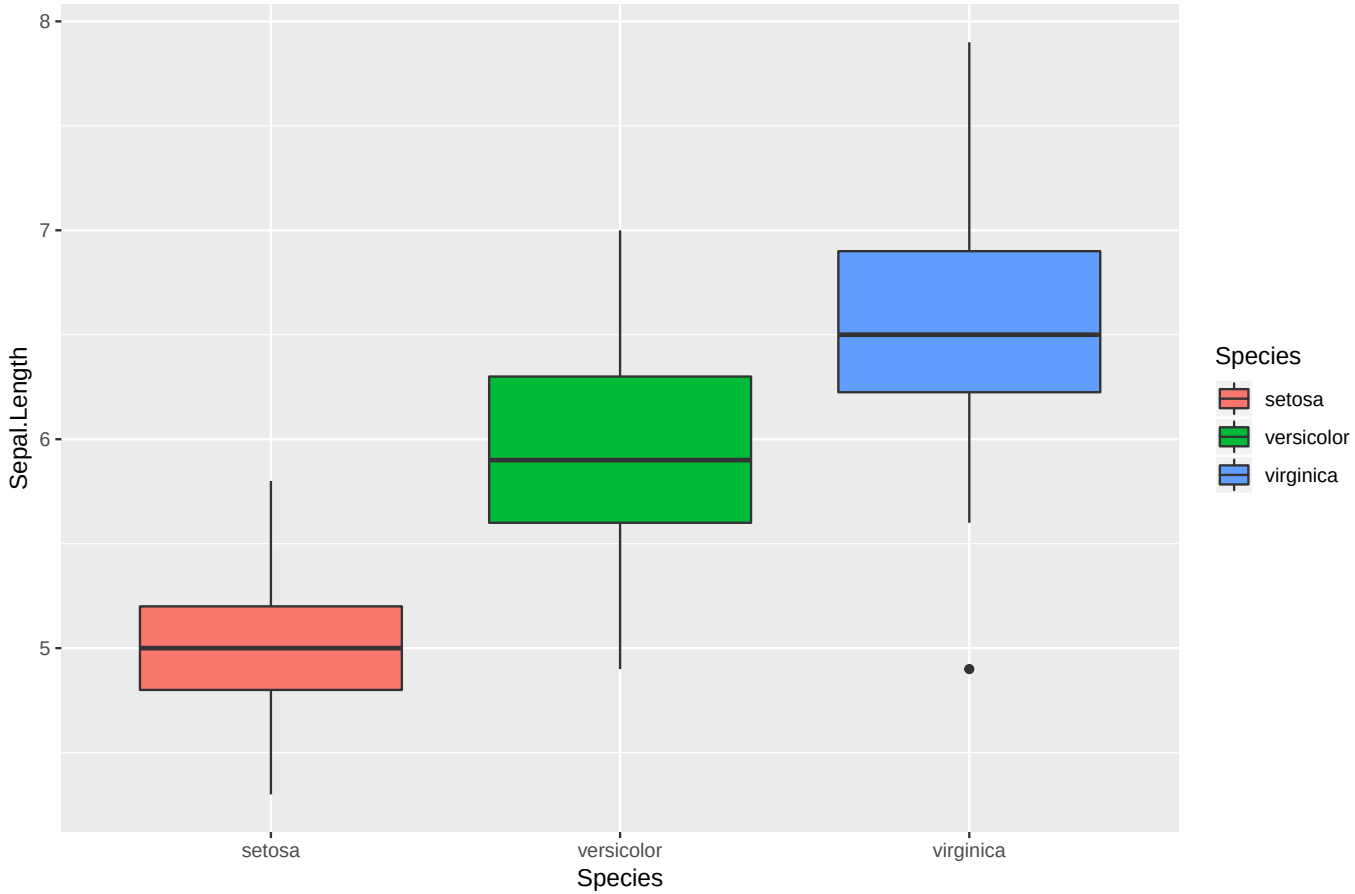
```
> boxplot(x=iris[,1:4],main="Boxplots Iris")
```



Boxplots (6)

- Ahora usando *ggplot2*:

```
> ggplot(iris, aes(x = Species, y = Sepal.Length,
  fill = Species)) +  geom_boxplot()
```



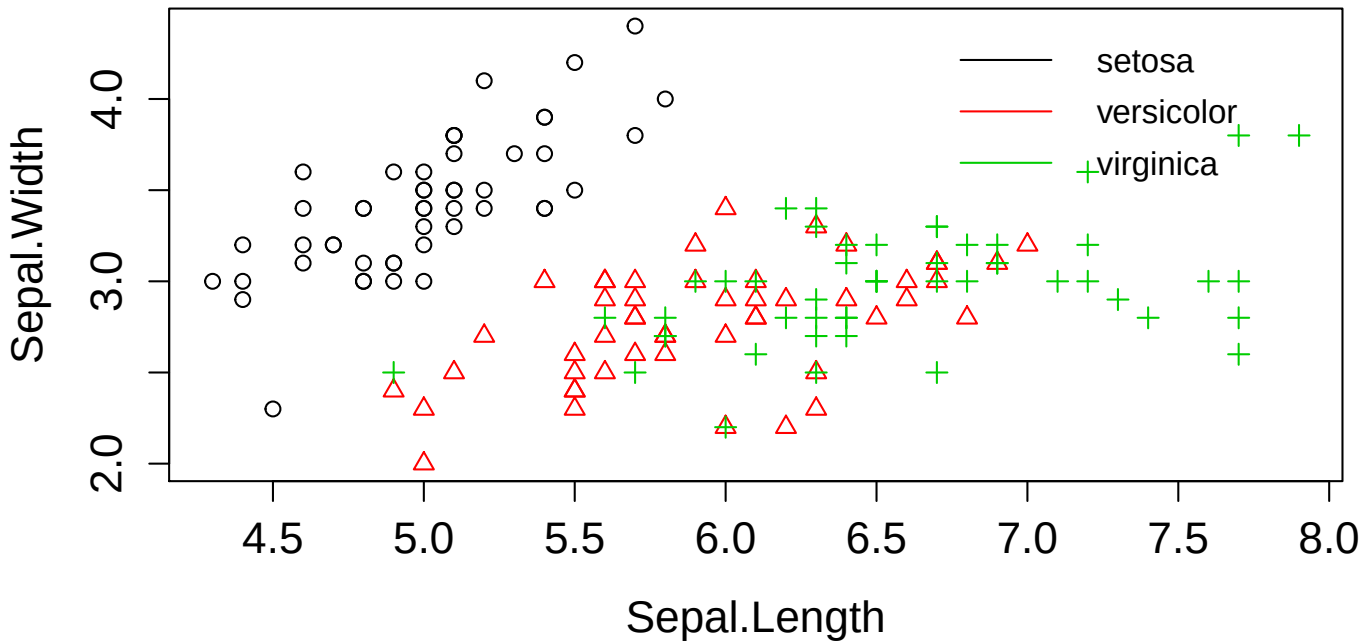
Diagramas de Dispersión

- Los diagramas de dispersión o scatter plots usan coordenadas cartesianas para mostrar los valores de dos variables númericas del mismo largo.
- Los valores de los atributos determinan la posición de los elementos.
- Otros atributos pueden usarse para definir el tamaño, la forma o el color de los objetos.
- En R podemos graficar un scatterplot de dos variables numéricas usando el comando `plot(x,y)`, que sería y vs x.
- También se pueden definir fórmulas $f(x) = y$ usando la notación `y~x`.
- De esta manera el comando `plot(y~x)` es equivalente a `plot(x,y)`.
- Si tenemos un data.frame o matriz numérica podemos ver los scatterplots de todos los pares usando el comando `pairs(x)`.

Diagramas de Dispersión (2)

- Ejemplos:

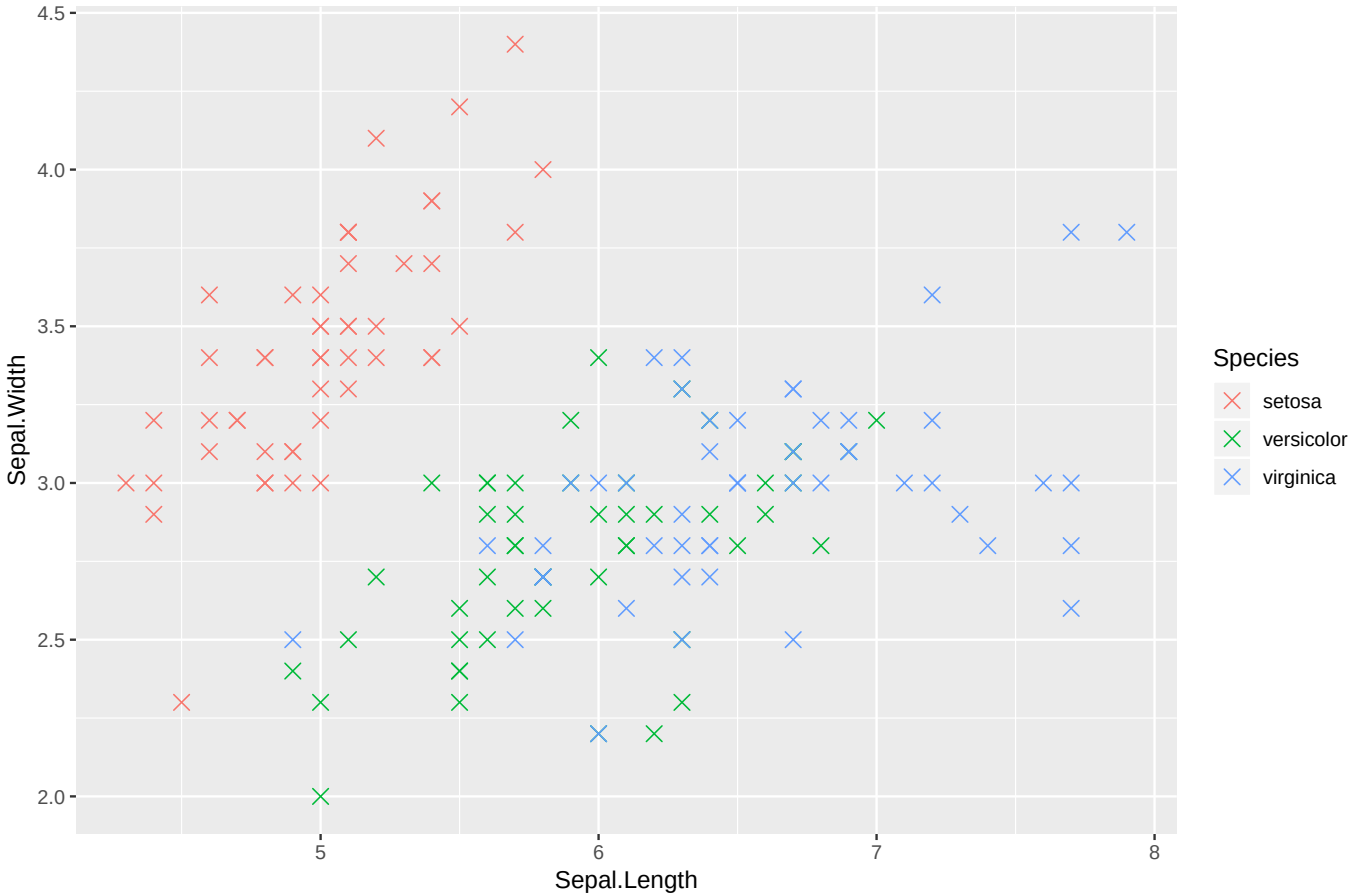
```
# El ancho del sépalo vs el largo del sépalo
plot(Sepal.Width~Sepal.Length, col=Species)
# Equivalente
plot(Sepal.Length, Sepal.Width,col=Species,
     pch=as.numeric(Species))
# Le agregamos una leyenda
legend('topright', levels(Species) ,
       lty=1, col=1:3, bty='n', cex=.75)
```



Diagramas de Dispersión (3)

- Lo mismo usando *ggplot2*:

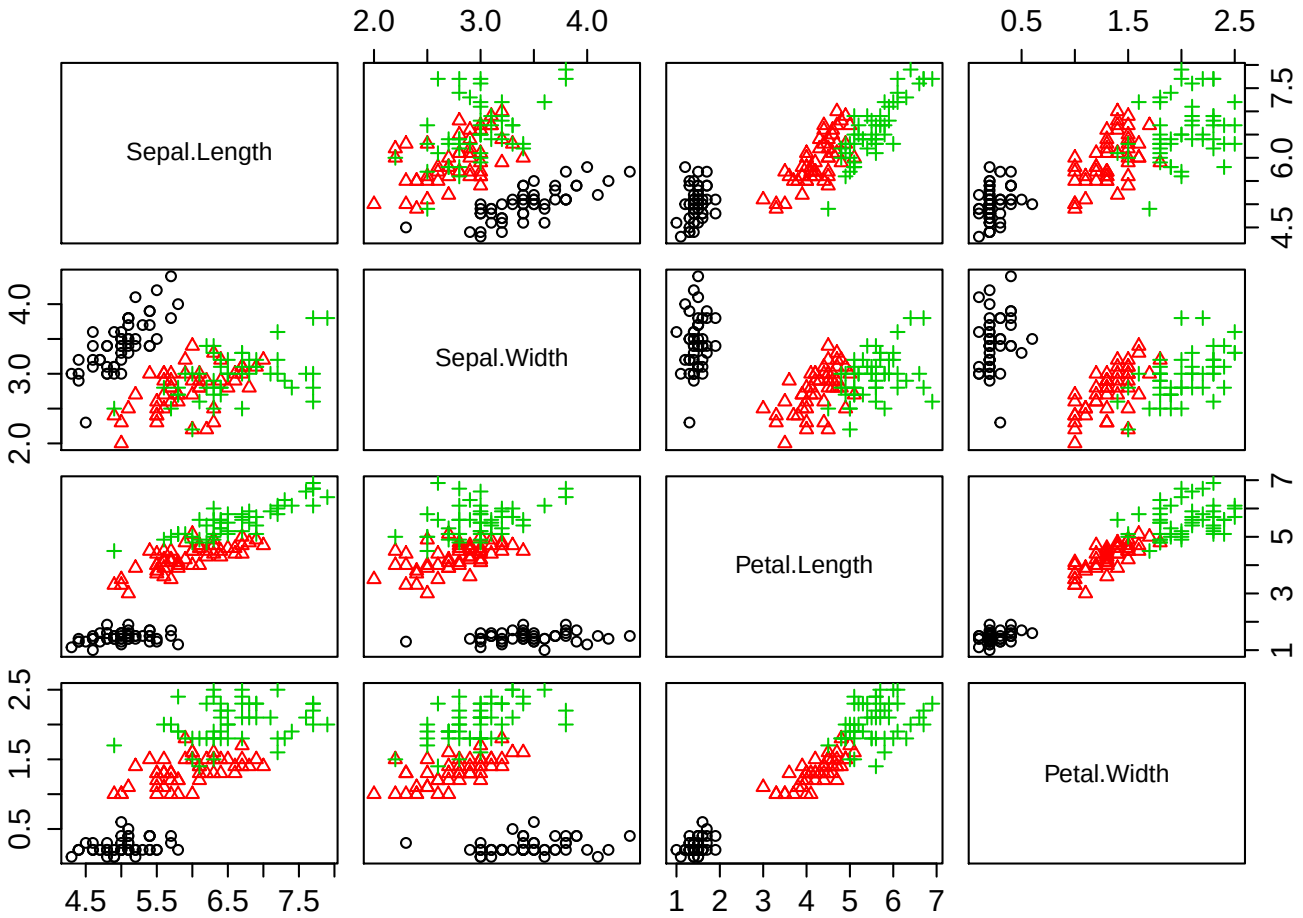
```
ggplot(iris, aes(x=Sepal.Length,
y=Sepal.Width, color=Species)) +
geom_point(size=3,shape=4)
```



Diagramas de Dispersión (4)

- Todos los pares de las 4 variables del dataset iris usando un color y un carácter distinto para cada especie:

```
pairs(iris[,1:4],pch=as.numeric(iris$Species),col=iris$Species)
```



Diagramas de Dispersión (5)

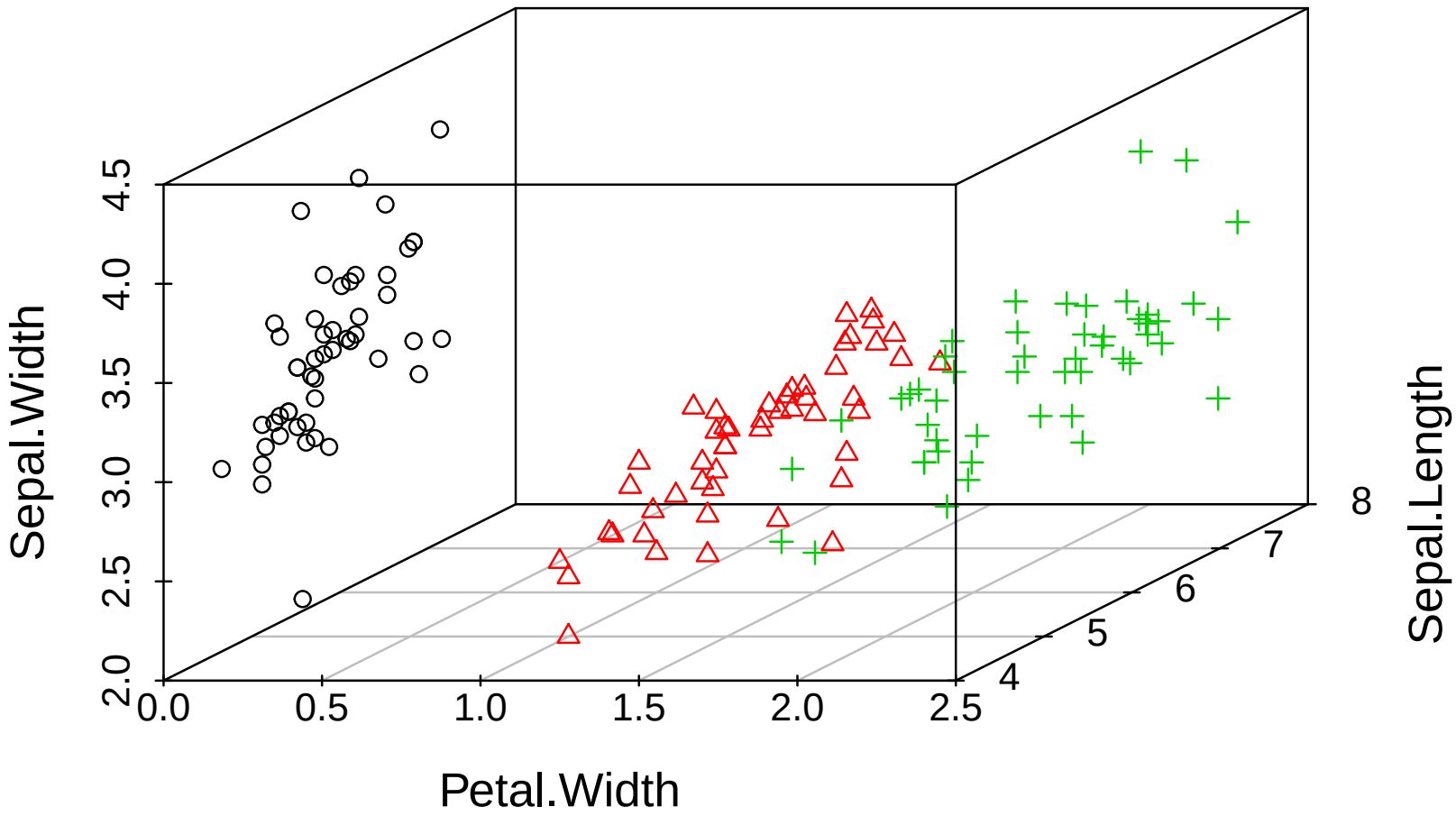
- También se pueden crear scatterplots en tres dimensiones.
- Se debe instalar la librería `scatterplot3d` usando el siguiente comando:

```
install.packages("scatterplot3d",dependencies=T)
```

- Luego cargan la librería escribiendo `library(scatterplot3d)`.
- Un scatterplot 3d para el ancho del pétalo, el largo del sépalo y el ancho del sépalo:

```
scatterplot3d(iris$Petal.Width, iris$Sepal.Length,
              iris$Sepal.Width, color=as.numeric(iris$Species),
              pch=as.numeric(iris$Species))
```

Diagramas de Dispersión (6)



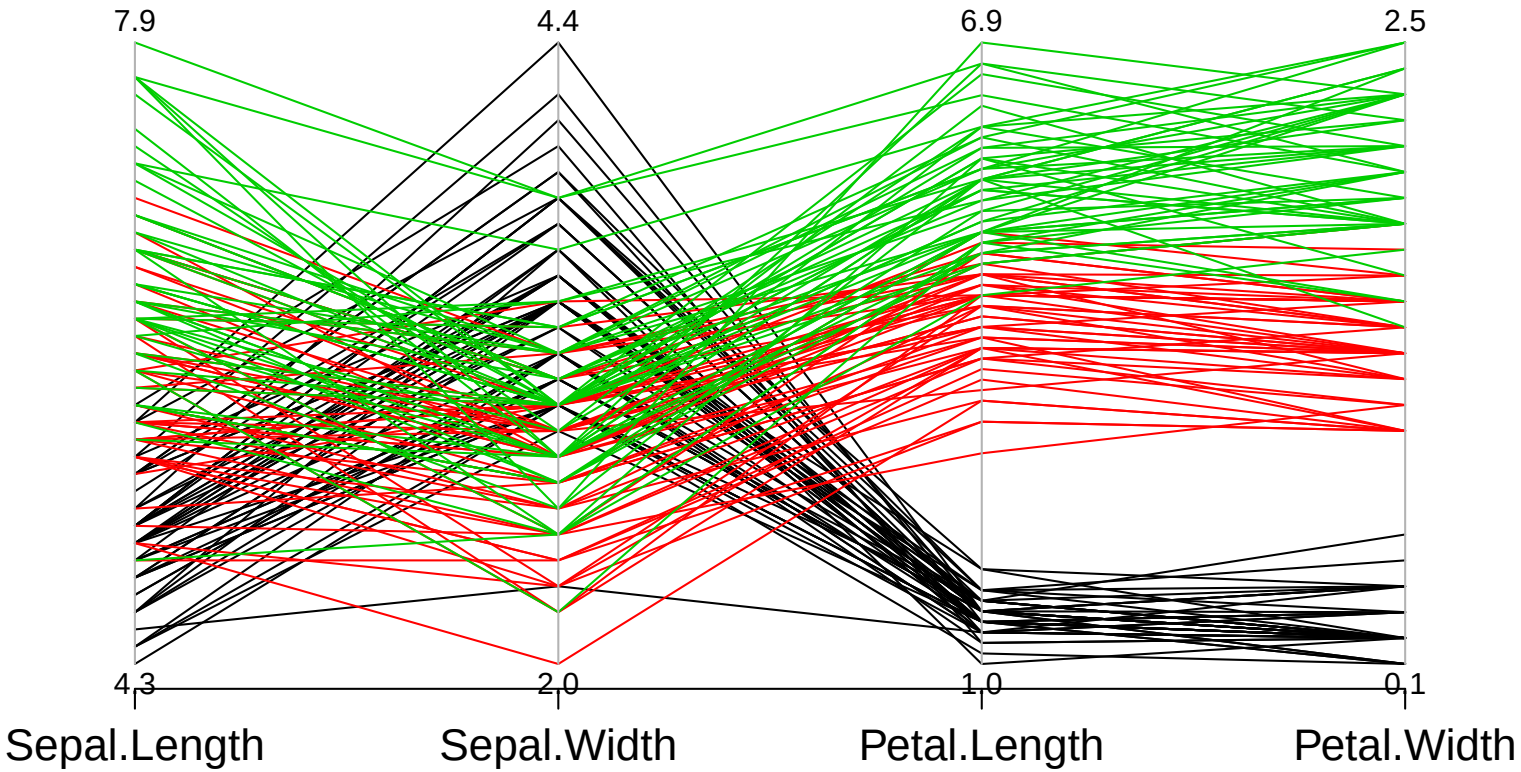
Gráficos de Coordenadas Paralelas

- Los gráficos de coordenadas paralelas son otra forma de visualizar datos multi-dimensionales.
- En vez de usar ejes perpendiculares (x-y-z) usamos varios ejes paralelos entre sí.
- Cada atributo es representado por uno de los ejes paralelo con sus respectivos valores.
- Los valores de los distintos atributos son escalados para que cada eje tenga la misma altura.
- Cada observación representa una línea que une los distintos ejes de acuerdo a sus valores.
- De esta manera, objetos similares entre sí tienden a agruparse en líneas con trayectoria similar.
- En muchas ocasiones es necesario realizar un re-ordenamiento de los ejes para poder visualizar un patrón.

Gráficos de Coordenadas Paralelas (2)

- En R podemos crear gráficos de coordenadas paralelas con el comando `parcoord` de la librería `MASS`.
- Ejemplo:

```
library(MASS)
parcoord(iris[1:4], col=iris$Species,var.label=T)
```



Otras técnicas de Visualización

Gráficos de Estrellas

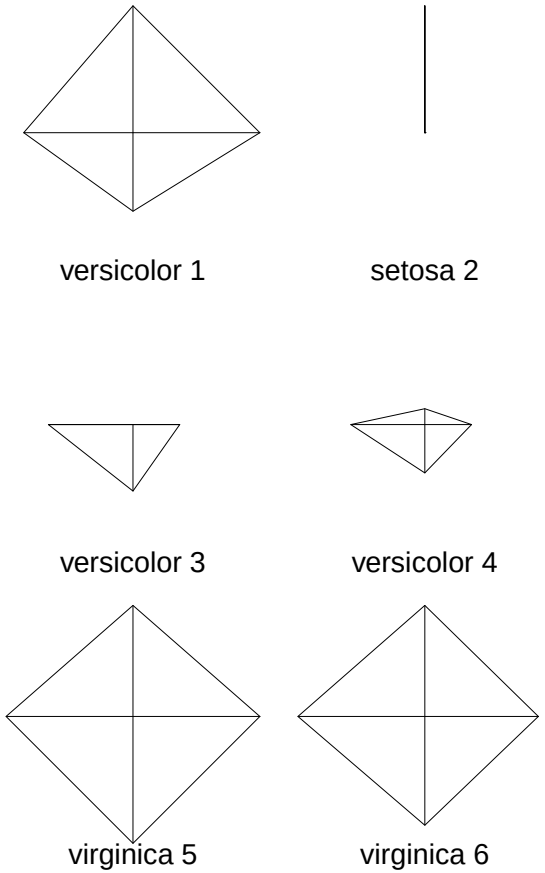
- También conocidos como **gráficos radiales**.
- Cada estrella representa una observación, formando un polígono a partir de cada variables con dirección a las agujas del reloj hasta formar un polígono.
- El tamaño de cada línea respecto al centro de la estrella corresponde al valor re-escalado de la variable.
- Sirve para comparar objetos o detectar valores atípicos.

Caras de Chernoff

- Enfoque creado por Herman Chernoff basado en la capacidad humana para distinguir rostros.
- Cada atributo corresponde a alguna característica de la cara (boca, ojos, nariz, etc..)
- El valor de los atributos determina la apariencia de la característica facial.
- Cada observación es una cara.

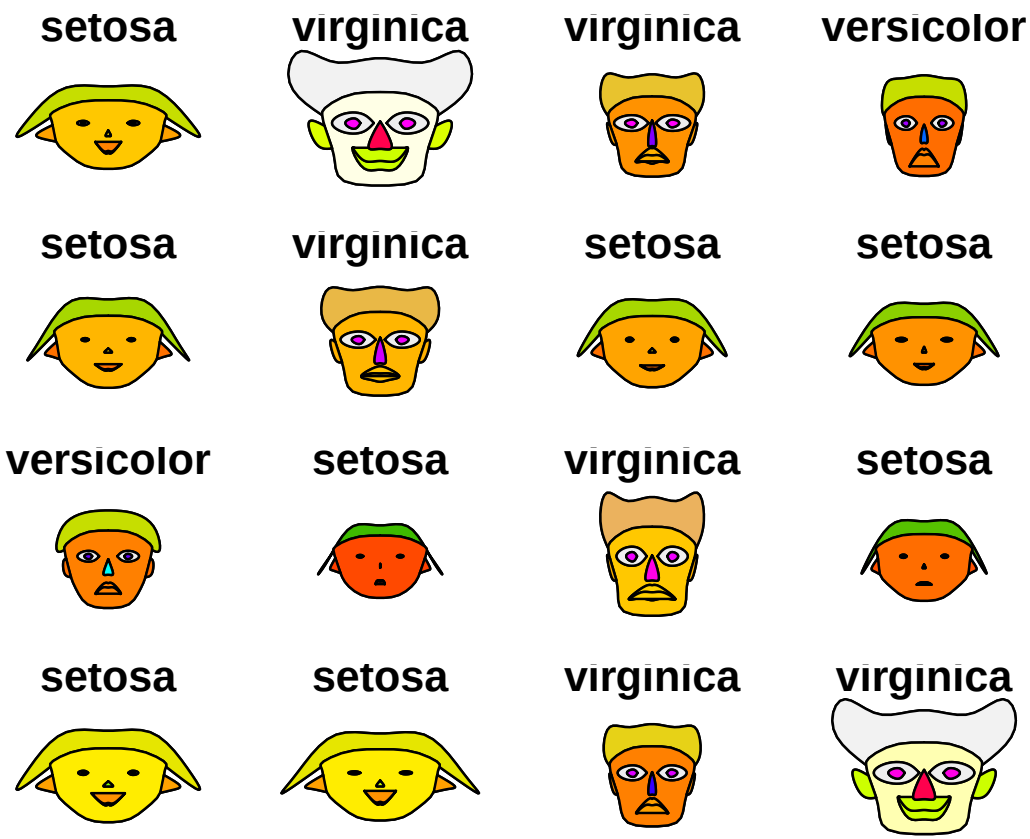
Ejemplo Star Plot

```
iris_sample1<-iris[sample(1:dim(iris)[1],size=6,replace=F),]
rownames(iris_sample1)<-paste(as.character(iris_sample1$Species),1:6)
stars(iris_sample1[1:4])
```



Ejemplo Chernoff Face

```
library("aplpack")
iris_sample<-iris[sample(1:dim(iris)[1],size=16,replace=F),]
faces(iris_sample[1:4],face.type=1,labels=iris_sample$Species)
```



Bilbiografía I


Venables, William N., David M. Smith, and R Development Core Team. *An introduction to R.*, 2002.


Tan, P. N., Steinbach, M., & Kumar, V. *Introduction to Data Mining*, 2005.


`http://cran.r-project.org/doc/contrib/grafi3.pdf`