



Minería de datos y Modelización predictiva l

CAPÍTULO I. Técnicas de Reducción de la dimensión

CAPÍTULO II. Análisis Clúster



CAPÍTULO I. Técnicas de Reducción de la Dimensión

I.1.- Introducción

- I.1.1.- Técnicas para el Análisis de Datos Multivariantes
 - I.1.2.-Variables aleatorias multivariantes. Conceptos básicos

I.2.-Análisis de Componentes Principales

- I.2.1.- Objetivos y metodología del A.C. P.
- I.2.2.- Obtención y determinación del número de C. P.
- I.2.3.- Análisis y representación de las variables en el nuevo espacio formado por las C. P.
- I.2.4.- Análisis y representación de los individuos en el nuevo espacio formado por las C. P.
- I.2.5.- Caso práctico analizado con R

I.1.- Introducción

El Análisis Multivariante es «la rama de la estadística que estudia las relaciones entre conjuntos de variables dependientes y los individuos para los cuales se han medido dichas variables» (Kendall).

Sus métodos analizan conjuntamente *p* variables, medidas sobre un conjunto de *n* individuos.

CLASIFICACIÓN:

- ❖Simplificación estructural: Análisis de Componentes Principales, Factorial y de correspondencias.
- Clasificación o agrupación: Análisis Cluster y técnicas de segmentación.
- *Análisis de interdependencia: Análisis de correspondencias múltiple, Correlaciones Canónicas.
- *Análisis de dependencia: Métodos de regresión múltiple, Análisis Discriminante y regresión logística.



I.1.2.-Variables aleatorias multivariantes.

$$X = (X_1, \dots, X_p)$$

Vector de medias

$$\vec{\mu} = E(X)$$
 donde $\mu_i = E(X_i)$

Matriz de Varianzas-Covarianzas

$$\Sigma = egin{pmatrix} \sigma_{1,1} & \sigma_{1,2} & \dots & \sigma_{1,p} \\ \sigma_{2,1} & \sigma_{2,2} & \dots & \sigma_{2,p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sigma_{p,1} & \sigma_{p,2} & \dots & \sigma_{p,p} \end{pmatrix}$$

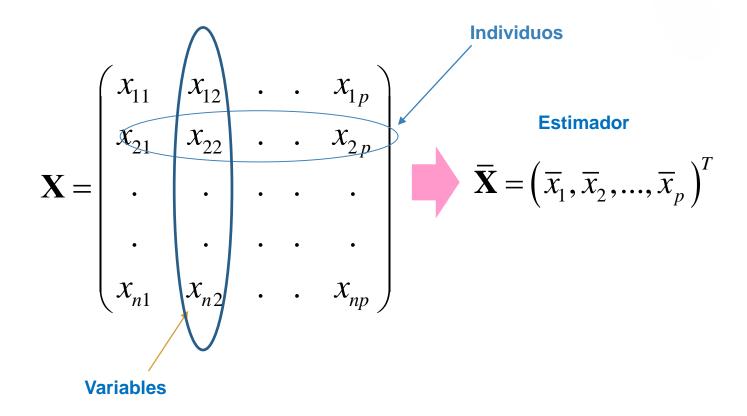
 $\sigma_{i,i}$ es la varianza de X_i

$$V(X_i) = \sigma_{ii} = E[(X_i - \mu_i)^2]$$

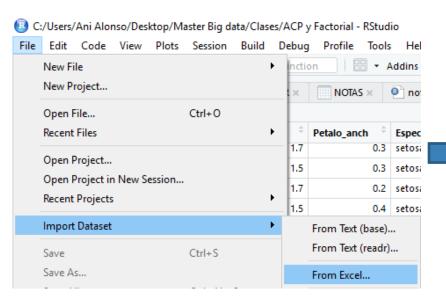
$$\sigma_{i,j}$$
 es la covarianza (X_i, X_j) $COV(X_i, X_j) = \sigma_{ij} = E[(X_i - \mu_i)(X_j - \mu_j)]$



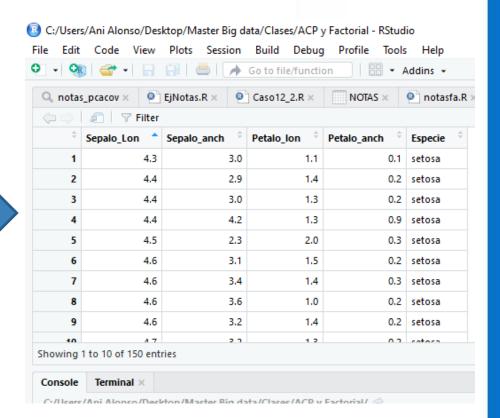
Observaciones



Importamos los datos desde Excel



datos <- DATOS_IRIS head(datos)





Estimadores de la matriz de Varianzas-Covarianzas y de la matriz de correlaciones

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \dots & S_{1p} \\ S_{21} & S_{22} & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{p1} & S_{p2} & \dots & S_{pp} \end{pmatrix} \qquad S_{ii} = \frac{\sum_{k=1}^{n} (x_{ki} - \overline{x}_{i})^{2}}{n-1} \\ S_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^{n} (x_{ki} - \overline{x}_{i})^{2}}{n-1}$$

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 1 & r_{12} & \dots & r_{1p} \\ r_{21} & 1 & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{p1} & r_{p2} & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{S} = (\mathbf{X} - \mathbf{1}\overline{\mathbf{X}})'(\mathbf{X} - \mathbf{1}\overline{\mathbf{X}})$$

$$r_{ij} = \frac{S_{ij}}{\sqrt{S_{ii}}\sqrt{S_{jj}}}$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{S}\mathbf{D}^{-1/2}$$

$$\mathbf{D} = Diag(\mathbf{S})$$

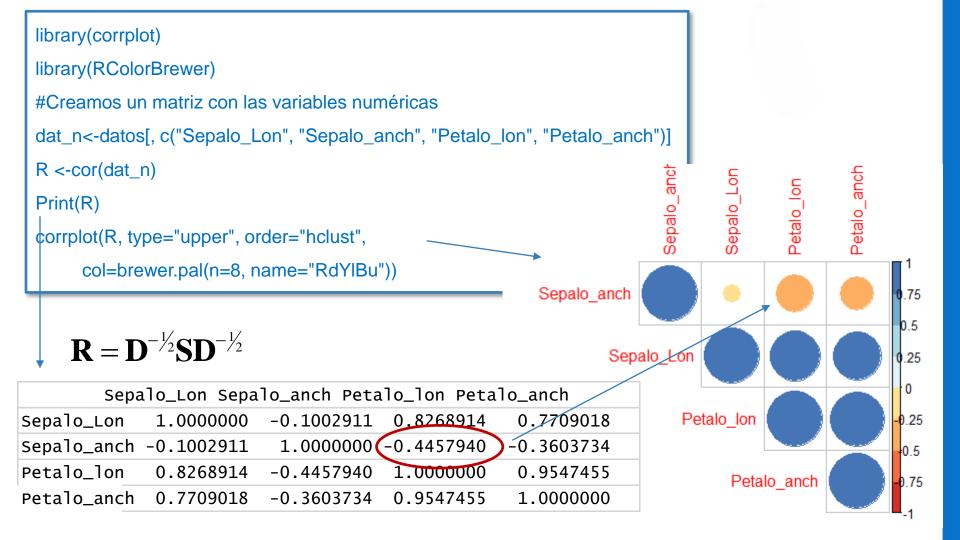
$$\mathbf{S} = (\mathbf{X} - \mathbf{1}\overline{\mathbf{X}})'(\mathbf{X} - \mathbf{1}\overline{\mathbf{X}})/(n-1)$$

$$r_{ij} = \frac{S_{ij}}{\sqrt{S_{ii}} \sqrt{S_{jj}}}$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{S} \mathbf{D}^{-1/2}$$

$$\mathbf{D} = Diag(\mathbf{S})$$





Instalamos y cargamos las librerías que vamos a necesitar

install. Packages("lattice")

install.packages("pastecs")

install.packages("corrplot")

install.packages("ggplot2")

install.packages("factoextra")

install.packages("FactoMineR")



library(FactoMineR)



FactoMineR & factoextra

Analyzing & Visualizing Multivariate Data

FactoMineR 1. Analyze 2. Visualize 3. Interpret

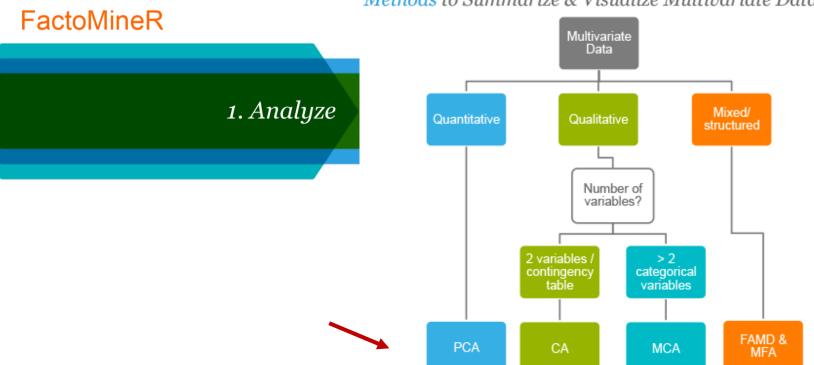
- Performs PCA, (M)CA, FAMD, MFA, HCPC & more
- Provides the coordinates, the quality of representation and the contribution of individuals & variables
- Predicts the results for supplementary individuals & variables

- Produces ggplot2-based elegant data visualization and facilitates the interpretation
- Creates human readable outputs
- Simplifies cluster analysis and visualization



Principal Component Methods

Methods to Summarize & Visualize Multivariate Data



- PCA: Principal Component Analysis
- (M) CA: (Multiple) Correspondence Analysis
- FAMD: Factor Analysis of Mixed Data
- MFA: Multiple Factor Analysis

factoextra

2. Visualize 3. Interpret

Functions	Description
fviz_eig (or fviz_eigenvalue)	Visualize eigenvalues.
fviz_pca	Graph of PCA results.
fviz_ca	Graph of CA results.
fviz_mca	Graph of MCA results.
fviz_mfa	Graph of MFA results.
fviz_famd	Graph of FAMD results.
fviz_hmfa	Graph of HMFA results.
fviz_ellipses	Plot ellipses around groups.
fviz_cos2	Visualize element cos2.1
fviz_contrib	Visualize element contributions. ²

Functions	Description
get_eigenvalue	Access to the dimension eigenvalues.
get_pca	Access to PCA outputs.
get_ca	Access to CA outputs.
get_mca	Access to MCA outputs.
get_mfa	Access to MFA outputs.
get_famd	Access to MFA outputs.
get_hmfa	Access to HMFA outputs.
facto_summarize	Summarize the analysis.

I.2.- Análisis de Componentes Principales

Si tomamos demasiadas variables es difícil visualizar relaciones entre ellas.

Otro problema que se presenta es la fuerte correlación.

Se hace necesario, pues, reducir el número de variables sin perder información.

Es importante resaltar el hecho de que el concepto de mayor información se relaciona con el de mayor variabilidad o varianza.





Se buscan m<p variables que sean combinaciones lineales de las originales y que estén incorreladas, recogiendo la mayor parte de la información o variabilidad de los datos.

Ejemplo.

Alumno	Mats	Francés	Inglés	Física
1	1	4	5	3
2	5	5	4	4
3	6	10	9	6
4	3	6	6	4
5	2	4	6	1
6	6	8	7	8
7	6	6	6	7
8	3	5	8	4
9	8	5	5	8
10	2	5	8	4
11	9	7	7	9

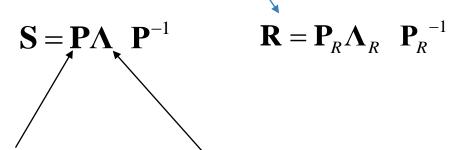
¿Existen relaciones entre las calificaciones de algunas asignaturas (variables) que nos permita agruparlas?

¿Podemos calcular uno o dos índices que resuman el comportamiento de los individuos (alumnos) teniendo en cuenta sus calificaciones?

I.2.2.- Obtención y determinación del número de C. P.

¿CÓMO SE OBTIENEN LAS COMPONENTES PRINCIPALES?.

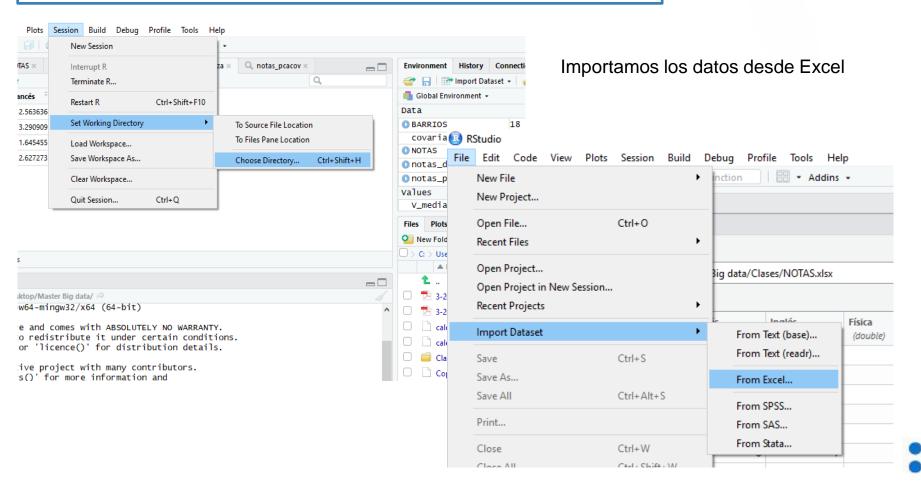
Partiendo bien de la matriz de Correlaciones ó de la matriz de Varianzas-Covarianzas estimadas, se hallará su descomposición, en función de sus valores propios y la matriz formada por sus autovectores correspondientes.



Matriz de contiene los autovectores

Matriz diagonal formada por los autovalores

Importamos el fichero Excel con las calificaciones de los 11 alumnos



¿Cómo realizar un análisis de Componentes Principales con R?

Primero creamos una matriz con los datos de las variables numéricas:

datos<- as.data.frame(NOTAS)
rownames(datos)<-datos[,1]
notas_dat<-datos[,-1]</pre>

Guardamos la primera columna que suele ser categórica en el vector rownames para luego utilizarlas como etiquetas

Alumno	Mats	Francés	Inglés	Física
1	1	4	5	3
2	5	5	4	4
3	6	10	9	6
4	3	6	6	4
5	2	4	6	1
6	6	8	7	8
7	6	6	6	7
8	3	5	8	4
9	8	5	5	8
10	2	5	8	4
11	9	7	7	9

#======================================
Descriptivos de las variables
#======================================
#Descriptivos
library(pastecs)
stat.desc(notas_dat,basic=FALSE)

		Mats	Francés	Inglés	Física
_	median	5.0000000	5.0000000	6.0000000	4.0000000
7	mean	4.6363636	5.9090909	6.4545455	5.2727273
	SE.mean	0.7893925	0.5469676	0.4545455	0.7518572
	CI.mean.0.95	1.7588761	1.2187198	1.0127904	1.6752422
	var	6.8545455	3.2909091	2.2727273	6.2181818
	std.dev	2.6181187	1.8140863	1.5075567	2.4936282
	coef.var	0.5646923	0.3069992	0.2335651	0.4729295

#Matriz correlaciones

Library(corrplot)

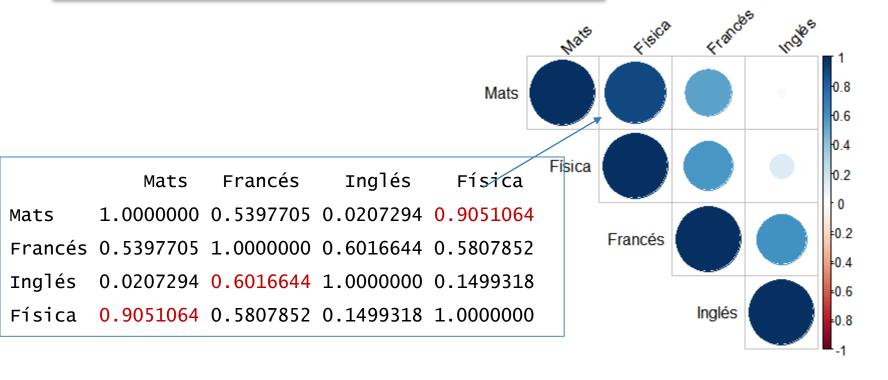
R<-cor(notas_dat, method="pearson")

print(R, digits = 2)

	Mats	Francés	Inglés	Física
Mats	1.000	0.54	0.021	0.91
Francés			0.602	
Inglés			1.000	0.15
Física (0.905	0.58	0.150	1.00

Cuando tenemos muchas variables es muy útil poder analizar las correlaciones mediante una salida gráfica. La siguiente sintaxis representa las correlaciones según su valor en el gráfico anterior.

corrplot(R, type="upper", order="hclust",tl.col="black", tl.srt=45)





La sintaxis básica del procedimiento de R para realizar un análisis de componentes principales

fit<-PCA(notas_dat, scale.unit=TRUE, ncp=4,graph=TRUE)</pre>

$$X_{ij}^* = \frac{X_{ij} - X_j}{\sqrt{S_{jj}}}$$

- Fichero de datos: Las variables deben ser todas númericas
- •scale.unit: valor lógico. *TRUE*, indica que los datos serán estandarizados, pasan a tener media 0 y desviación típica 1. Es decir la matriz a diagonalizar es la matriz de correlaciones entre las variables. Es conveniente utilizarlo siempre.
- •ncp: Número de componentes a retener en el resultado final.
- •graph: valor lógico. TRUE indica que se mostrarán los gráficos.

El resultado del análisis de componentes principales se guardará en el fichero de datos fit



head(fit)

Esta función nos muestra todo el contenido del objeto fit que contiene listas y matrices

Resultados del PCA guardados en fit:

- 1 "\$eig" Autovalores
- 2 "\$var" Resultados para las variables, que son los siguientes:
 - 3 "\$var\$coord": Coordenadas de las variables en las Componentes" -
 - 4 "\$var\$cor": Correlaciones entre las variables y las Componentes
 - 5 "\$var\$cos2" "cosenos al cuadrado de las variables"
 - 6 "\$var\$contrib" "contributions of the variables"
- 7 "\$ind" Resultados para los individuos, que son los siguientes:
 - 8 "\$ind\$coord" "coord. for the individuals"
 - 9 "\$ind\$cos2" "cos2 for the individuals"
 - 10 "\$ind\$contrib" "contributions of the individuals"
- 11 "\$call" "summary statistics" : Medidas estadísticas
 - 12 "\$call\$centre" "mean of the variables"
 - 13 "\$call\$ecart.type" "standard error of the variables"

Functions	Description
get_eigenvalue	Access to the dimension eigenvalues.
get_pca	Access to PCA outputs.

Coinciden

1 "\$eig" Autovalores de la matriz R

Proporción de variabilidad total explicada por la componente 1

\$`eig`

eigenvalue percentage of variance cumulative percentage of variance

comp 1 2.48576274

62.144068

62.14407

comp 2 1.19280496

29.820124

91.96419

comp 3 0.23856665

5.964166

97.92836

comp 4 0.08286565

2.071641

100.00000

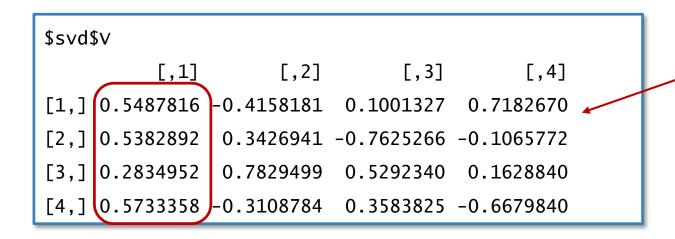
 $\mathbf{R} = \mathbf{P}_{R} \mathbf{\Lambda}_{R} \mathbf{P}_{R}^{-1}$

Proporción de variabilidad total explicada por las componentes 1 y 2.



¿Cómo se construyen las Componentes Principales?

Los autovectores asociados a dichos autovalores nos dan los coeficientes de la combinación lineal con la que se construyen las componentes.



$$\mathbf{R} = \mathbf{P}_R \mathbf{\Lambda}_R \quad \mathbf{P}_R^{-1}$$

Las Componentes Principales, tienen, por lo tanto, vector de dirección, e₁, e₂, e₃ y e₄.

Por ejemplo, la componente 1 será combinación lineal de las variables estandarizadas:

$$CP_1 = 0.548X_1^* + 0.538X_2^* + 0.283X_3^* + 0.573X_4^*$$



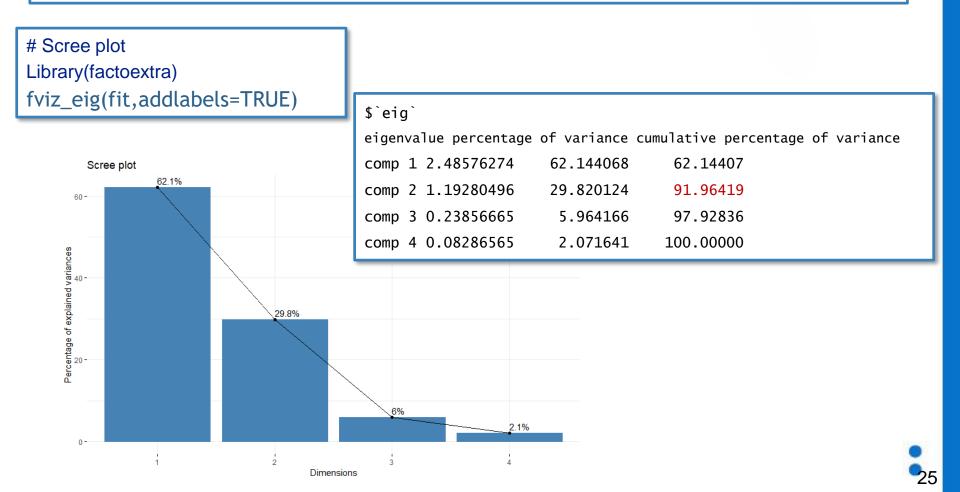
¿Cuántas Componentes principales son suficientes?

Lo ideal es explicar aproximadamente el 90% de la variabilidad total. Al menos que la proporción de variabilidad explicada sea > 0.7

```
$`eig`
eigenvalue percentage of variance cumulative percentage of variance
comp 1 2.48576274 62.144068 62.14407
comp 2 1.19280496 29.820124 91.96419
comp 3 0.23856665 5.964166 97.92836
comp 4 0.08286565 2.071641 100.00000
```



Representación gráfica de la proporción de varianza explicada por cada Componente Principal



Las **covarianzas entre cada componente principal y las variables** vienen dadas por el producto de las coordenadas del vector propio que define el componente por su valor propio:

$$Cov(Y_i, X_j) = \lambda_i e_{ij}$$

La correlación entre una componente principal y una variable X es proporcional al coeficiente de esa variable en la definición del componente.

$$Corr(Y_i, X_j) = \frac{Cov(Y_i, X_j)}{\sqrt{V(Y_i)V(X_j)}} = \frac{\lambda_i e_{ij}}{\sqrt{\lambda_i s_j^2}} = e_{ij} \frac{\sqrt{\lambda_i}}{s_j}$$

\$var\$cor

Por ejemplo la correlación entre la variable X_1 y la componente 1 es:

$$Corr(Y_1, X_1) = 0.548 \frac{\sqrt{2.486}}{\sqrt{6.854}} = 0.865$$

s: Mats 0.8652256 -0.4541383

Inglés 0.4469671 0.8551036

Francés 0.8486830 0.3742755

Dim.1

Dim.2

Física 0.9039386 -0.3395278

#-----

Representación gráfica variables

fviz_pca_var(fit, col.var="cos2", gradient.cols = c("#00AFBB", "#E7B800", "#FC4E07"),

repel = TRUE # Avoid text overlapping (slow if many points))

 $Corr(Y_i, X_j^*) = e_{ij} \sqrt{\lambda_i}$ pim.1 Dim.2

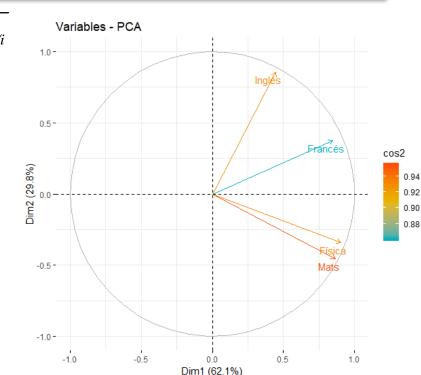
Mats 0.8652256 -0.4541383

Francés 0.8486830 0.3742755

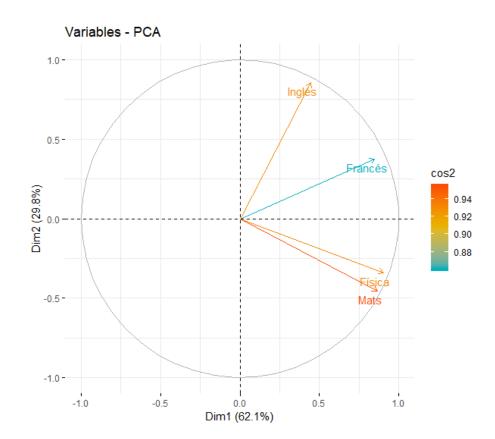
Inglés 0.4469671 0.8551036

Física 0.9039386 -0.3395278

Las coordenadas de cada variable son el coeficiente de correlación entre la variable y las nuevas componentes

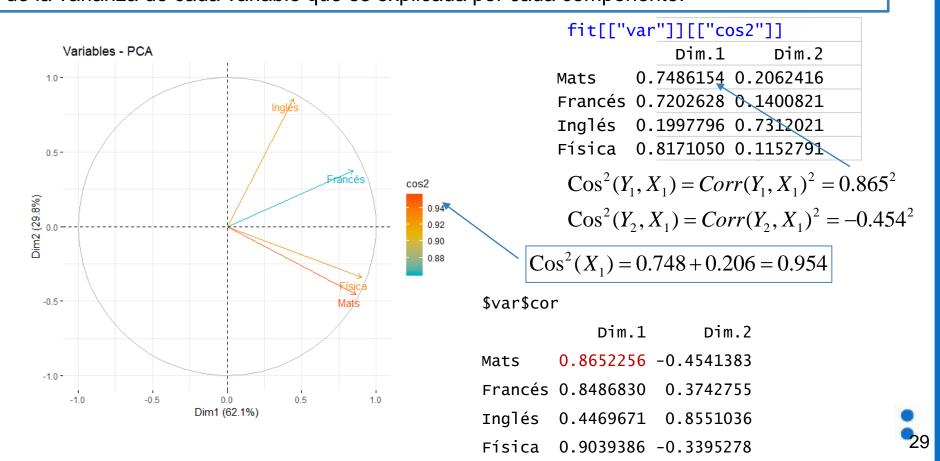


La primera componente recoge sobre todo los valores de Física y Matemáticas, por lo que podríamos identificar dicha componente como la que representa las calificaciones de las asignaturas de ciencias.

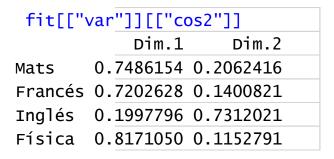


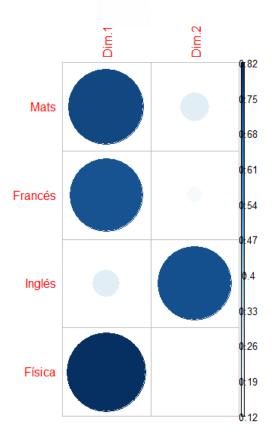
La segunda componente recoge sobre todo los valores de Francés e Inglés, por lo que podríamos identificar dicha componente como la que recoge las calificaciones en idiomas.

Los cosenos al cuadrado son las correlaciones al cuadrado que expresan la proporción de la varianza de cada variable que es explicada por cada componente:



Gráficamente se muestra que la varianza de las variables Matemáticas, Física y Fránces es explicada por la Componente 1 mientras que la Componente 2 explica Inglés



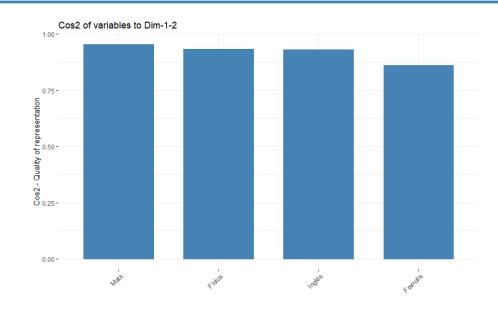




#Porcentaje de variabilidad explicada por las dos CP
fviz_cos2(fit, choice="var", axes=1:2)

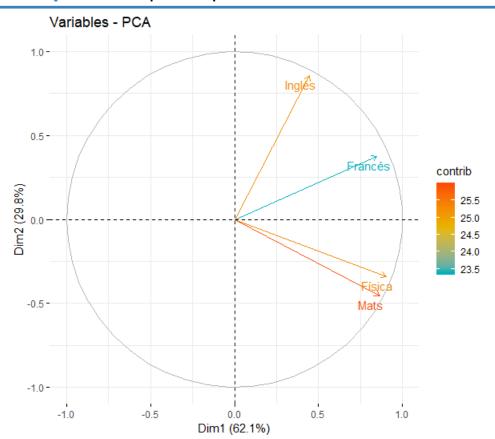
Mostramos el porcentaje de la varianza de las variables que es explicada por las dos Componentes en total

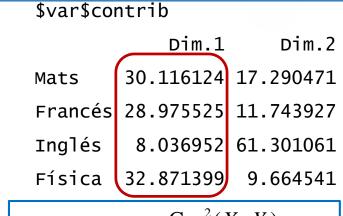
fit[["\	["var"]][["cos2"]]			
		Dim.1	Dim.2	
Mats	0.	7486154	0.2062416	
Francés	0.	7202628	0.1400821	
Inglés	0.	1997796	0.7312021	
Física	0.	8171050	0.1152791	

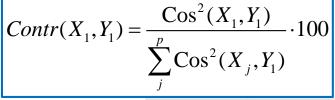


La contribución de una variable a una Componente es el porcentaje de varianza de la

Componente que es proviene de esa variable







fit[["var"]][["cos2"]]

Física

Dim.1 Dim.2

Mats 0.7486154 0.2062416

Francés 0.7202628 0.1400821

Inglés 0.1997796 0.7312021

0.8171050 0.1152791



corrplot(var\$contrib,is.corr=FALSE)

#Contribución de las variables a la Componente 1

fviz_contrib(fit,choice="var",axes=1,top=10)

fviz_contrib(fit,choice="var",axes=2,top=10)



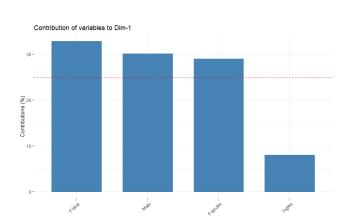
Dim.1 Dim.2

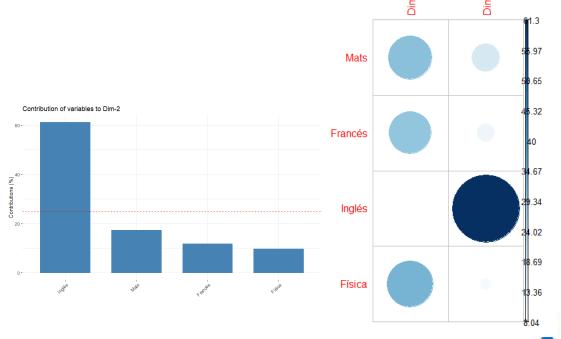
Mats 30.116124 17.290471

Francés 28.975525 11.743927

Inglés 8.036952 61.301061

Física 32.871399 9.664541





Cuando con dos Componentes no explicamos lo suficiente y necesitamos 3 o más, es necesario representar tanto las variables como los individuos en los planos formados por todas las componentes (1,3), (2,3), etc..

```
fviz_pca_ind(fit, axes = c(2, 3), col.ind = "cos2",

gradient.cols = c("#00AFBB", "#E7B800", "#FC4E07"),

repel = TRUE # Avoid text overlapping (slow if many points))
```

-0.9939902 -1.4112633

1.8747871

-0.7280039 0.2094130

-2.2936920

0.3719952

0.1276254

-0.6447584 1.1006836

0.8273274 - 1.8893062

-0.8645983 1.2672589

2.3051863 -0.7009820

0.6549433 -0.6825749

2.2503261

1.7157345

6

9

Observemos, que la coordenada del primer alumno en la Primera Componente, viene dada por

Media de la CP1

 $\sum_{i=1}^{11} y_{i1} = 0$

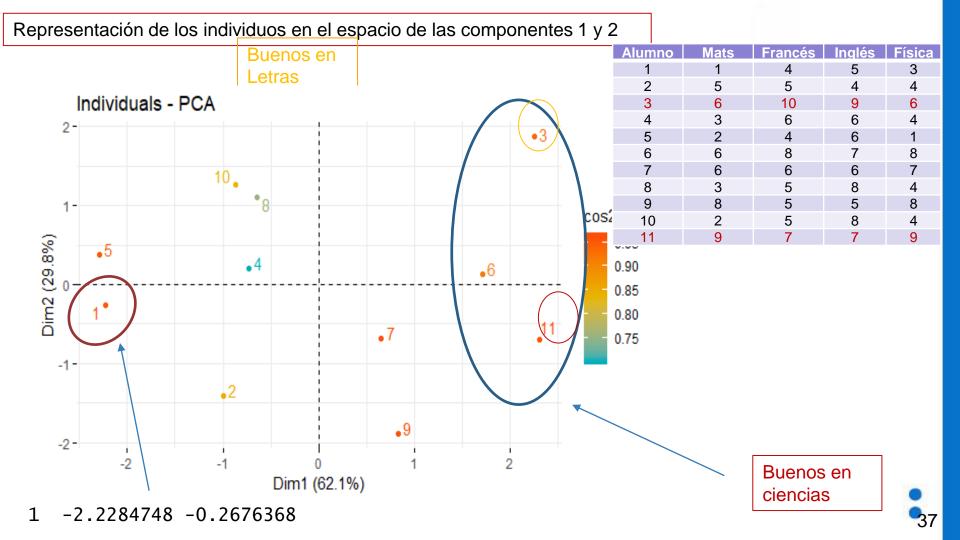
 $\Psi_{\alpha i} = \sum_{i}^{p} \frac{\left(x_{ij} - \overline{x}_{j}\right)}{S_{i}} e_{\alpha j}$

$$y_{11} = \frac{(1-4.63)}{2.61} \cdot 0.548 + \frac{(4-5.9)}{1.81} \cdot 0.538 + \frac{(5-6.45)}{1.51} \cdot 0.283 + \frac{(3-5.27)}{2.49} \cdot 0.573 = -2.228$$

En R además podemos representar los individuos en el plano de componentes, porque dichas representaciones pueden ofrecernos información adicional sobre el comportamiento de los individuos.

Alumno	Mats	Francés	Inglés	Física
1	1	4	5	3
2	5	5	4	4
3	6	10	9	6
4	3	6	6	4
5	2	4	6	1
6	6	8	7	8
7	6	6	6	7
8	3	5	8	4
9	8	5	5	8
10	2	5	8	4
11	9	7	7	9

\$ind\$`coord` Dim.1 Dim.2 -2.2284748 -0.2676368 -0.9939902 -1.4112633 2.2503261 1.8747871 -0.7280039 0.2094130 -2.2936920 0.3719952 6 1.7157345 0.1276254 0.6549433 -0.6825749 -0.6447584 1.1006836 9 0.8273274 - 1.8893062-0.8645983 1.2672589 2.3051863 -0.700982036



RESUMEN: SISTEMÁTICA DEL ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES.

- 1) Determinación, a la vista de los datos, de cual va a ser la matriz de partida: la matriz de Covarianzas o la de Correlaciones.
- 2) Determinación del número de Componentes.
- 3) Interpretación, si procede, de la **relación entre las Componentes y variables** originales a través de los coeficientes de correlación.
- 4) Representación de las variables en el espacio de las Componentes. Esto permitirá crear asociaciones entre variables.
- 5) Obtención de las coordenadas de los individuos en el espacio de las Componentes.
- 6) Representación los individuos en el espacio de las Componentes. Mediante dichas representaciones, se detectarán grupos de individuos, observaciones atípicas, etc.

Bibliografía

- Análisis de Datos Multivariantes. Peña D. 2002.
- Nuevos Métodos de Análisis Multivariante. Cuadras C.M. 2014
- Análisis Multivariante de Datos. Pérez, C. Ed. Garceta. 2013
- Practical Guide to Principal Component Methods in R. A. Kassambara. Ed STHDA.com. 2017
- http://www.sthda.com/english/







