Análisis Descriptivo de Datos Multivariados

José Antonio Perusquía Cortés

Análisis Multivariado Semestre 2025-II

¿Qué es el análisis multivariado?

&

¿Qué tipo de datos nos interesan?

Introducción

- El estudio de "muchas" variables correlacionadas

- Se considera que se tiene un vector aleatorio $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_p)$ y se registran n realizaciones

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix}$$

- Otras notaciones

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1^T \\ \mathbf{x}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n^T \end{pmatrix} \qquad \mathbf{X} = (\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots, \mathbf{x}^{(p)})$$

Introducción

- (Algunos) problemas de interés
  - Graficar/describir la estructura de los datos
  - Selección de variables
  - Aprendizaje supervisado, semi-supervisado y no supervisado
  - Analizar correlación entre variables

- Retos
  - Muchas observaciones y muchas variables $(n \gg 1, p \gg 1)$
  - Más variables que observaciones $(p > n)$

Ánalisis descriptivo multivariado

Análisis descriptivo

- Medidas numéricas
  - Media muestral
  - Varianza/covarianza muestral
  - Curtosis y coeficiente de asimetría
- Gráficas
  - Diagramas de dispersión/correlación
  - Gráfica de estrellas
  - Caras de Chernoff
  - Curvas de Andrews

Estadísticas descriptivas

Media muestral

- Para la matriz $\mathbf{X}$ podemos obtener la media muestral para cada variable $\mathbf{x}^{(j)}$

$$\bar{x}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_{ij}$$

- Así el vector de medias muestrales queda definido como

$$\bar{\mathbf{x}} = (\bar{x}_1, \ldots, \bar{x}_p)$$

- Formalmente, se define al vector de medias como

$$\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}^{(i)}$$

Media muestral

Proposición

Sea $\mathbf{X}$ una matriz de datos entonces la media muestral se puede calcular como

$$\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n}\mathbf{X}^T\mathbf{1}_n,$$

donde $\mathbf{1}_n \equiv (1,1,\ldots,1)^T$.

Observaciones

- $\mathbf{1}_n^T\mathbf{1}_n = n$
- $\mathbf{1}_n\mathbf{1}_p^T = \mathbf{J}_{n\times p}$

Media muestral

En **R** existen muchas formas de obtener el vector de medias como:

- summary( )

- apply( )

- colMeans( )

- by( ) : para la media muestral por grupos

Varianza y covarianza muestral

- Varianza muestral de cada variable $\mathbf{x}^{(j)}$

$$s_j^2 = s_{jj} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_{ij} - \bar{x}_j)^2$$

- Covarianza muestral entre $\mathbf{x}^{(j)}$ y $\mathbf{x}^{(k)}$

$$s_{jk} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_{ij} - \bar{x}_j)(x_{ik} - \bar{x}_k)$$

- Y así, la matriz de covarianzas muestral

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{pp} \end{pmatrix}$$

Varianza y covarianza muestral

- Formalmente, se define a la matriz $\mathbf{S}$ como

$$\mathbf{S} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})^T$$

- Considerando $\mathbf{w}_i = \mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}$

$$\mathbf{S} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\mathbf{w}_i\mathbf{w}_i^T$$

-Podemos pensar a $\mathbf{w}_i$ como observaciones de una “nueva” matriz de datos $\mathbf{W}$

Varianza y covarianza muestral

Observación

$$
\begin{aligned}
\mathbf{W} &= \mathbf{X} - \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{x}}^T \\ \bar{\mathbf{x}}^T \\ \vdots \\ \bar{\mathbf{x}}^T \end{pmatrix} \\
&= \mathbf{X} - \mathbf{1}_n \bar{\mathbf{x}}^T \\
&= \mathbf{X} - \mathbf{1}_n \left[\frac{1}{n} \mathbf{X}^T \mathbf{1}_n \right]^T \\
&= \mathbf{X} - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^T \mathbf{X} \\
&= \left(\mathbf{I}_{n \times n} - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^T \right) \mathbf{X} \\
&= \mathbf{H}_n \mathbf{X}
\end{aligned}
$$

Varianza y covarianza muestral

Definición

A la matriz $\mathbf{H}_n$ se le conoce como matriz de centrado

Proposición (tarea)

i. $\mathbf{H}_n$ es simétrica

ii. $\mathbf{H}_n$ es idempotente

iii. $\mathbf{W} = \mathbf{H}_n\mathbf{X}$ tiene como media muestral al vector de ceros

iv. $\mathbf{S} = \dfrac{1}{n-1}\mathbf{X}^T\mathbf{H}_n\mathbf{X}$

Varianza y covarianza muestral

Proposición (tarea)

Sea $\mathbf{B}$ una matriz cuadrada tal que $\mathbf{B} = \mathbf{A}^T\mathbf{A}$, donde $\mathbf{A}_{n \times p}$ entonces

i. $\mathbf{B}$ es simétrica

ii. $\mathbf{B}$ es semidefinida positiva, i.e., $\forall \alpha \in \mathbb{R}^p$ se cumple $\alpha^T \mathbf{B} \alpha \geq 0$

Proposición (tarea)

La matriz de covarianza muestral $\mathbf{S}$ es semidefina positiva

Varianza y covarianza muestral

En **R** existen varias formas de encontrar la matriz de covarianzas muestral

- var ()

- cov()

- sweep( ) : para construir la matriz **W**

- by( ) : para la matriz de covarianza muestral por grupos

Correlación muestral

- La correlación entre $\mathbf{x}^{(j)}$ y $\mathbf{x}^{(k)}$

$$r_{jk} = \frac{s_{jk}}{s_j s_k}, \quad s_j = \sqrt{s_{jj}}$$

- La matriz de correlación dada por

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 1 & r_{12} & \cdots & r_{1p} \\ r_{21} & 1 & \cdots & r_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ r_{p1} & r_{p2} & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

Correlación muestral

- Otra representación útil está dada por $\mathbf{R} = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{S}\mathbf{D}^{-1}$, donde

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} s_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & s_p \end{pmatrix}$$

Proposición (tarea)

Sea $\mathbf{R}$ la matriz de correlación muestral entonces

i. $\mathbf{R}$ es simétrica.

ii. $\mathbf{R}$ es semidefinida positiva.

Correlación muestral

En **R** se puede calcular como

- cor ()

- by( ) - para la correlación muestral por grupos

Propiedades de los estimadores

Proposición

Suponer que se tienen n observaciones independientes de un vector aleatorio $\mathbf{x}$ tal que $\mathbb{E}(\mathbf{x}) = \mu$ y $\text{Var}(\mathbf{x}) = \Sigma$ entonces

i. $\mathbb{E}(\bar{\mathbf{x}}) = \mu$

ii. $\text{Var}(\bar{\mathbf{x}}) = \dfrac{1}{n}\Sigma$

iii. $\bar{\mathbf{x}}$ es consistente, esto es, $\mathbb{P}(\,||\,\bar{\mathbf{x}} - \mu\,||\, < \epsilon) \to 1$ para todo $\epsilon > 0$

iv. $\mathbb{E}(\mathbf{S}) = \Sigma$

Gráficas

Gráficas de dispersión y correlación

Diagrama de dispersión

- Graficar todas las variables contra todas las variables

- Útil para:
  - Observar la relación por pares entre las variables
  - Identificar el tipo de correlación por pares entre ellas

- Desventajas:
  - Solo se puede analizar a las variables por pares
  - Muy difícil de graficar/analizar si se tienen muchas variables

Diagrama de dispersión

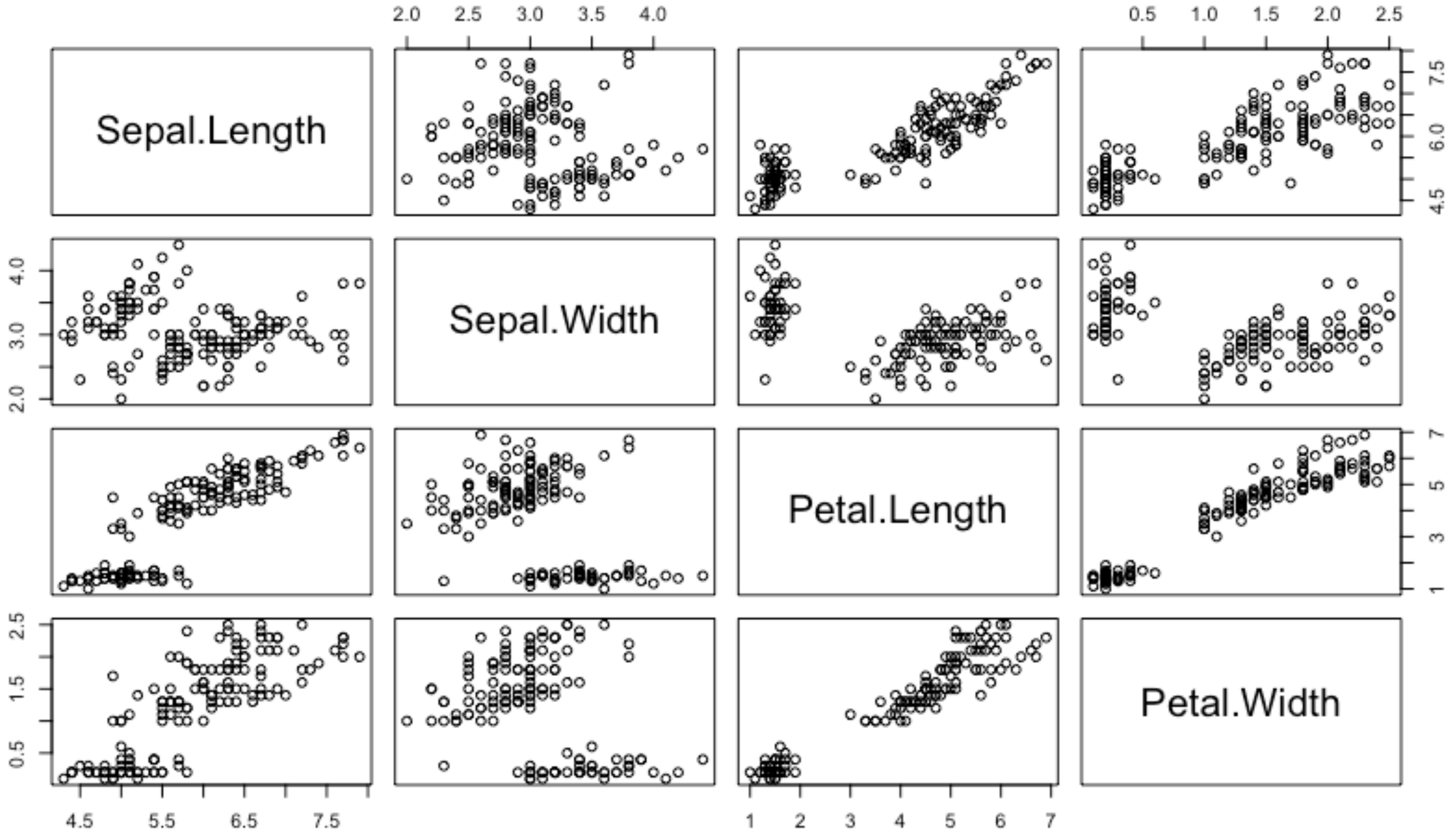


Diagrama de correlación

- Graficar la correlación por pares de las variables

- Útil para:

    - Identificar el tipo y el grado de correlación por pares entre ellas

- Desventajas:

    - Solo se puede analizar a las variables por pares

    - Muy difícil de graficar/analizar si se tienen muchas variables

- En R:

    - Librería: corrplot

Diagrama de correlación

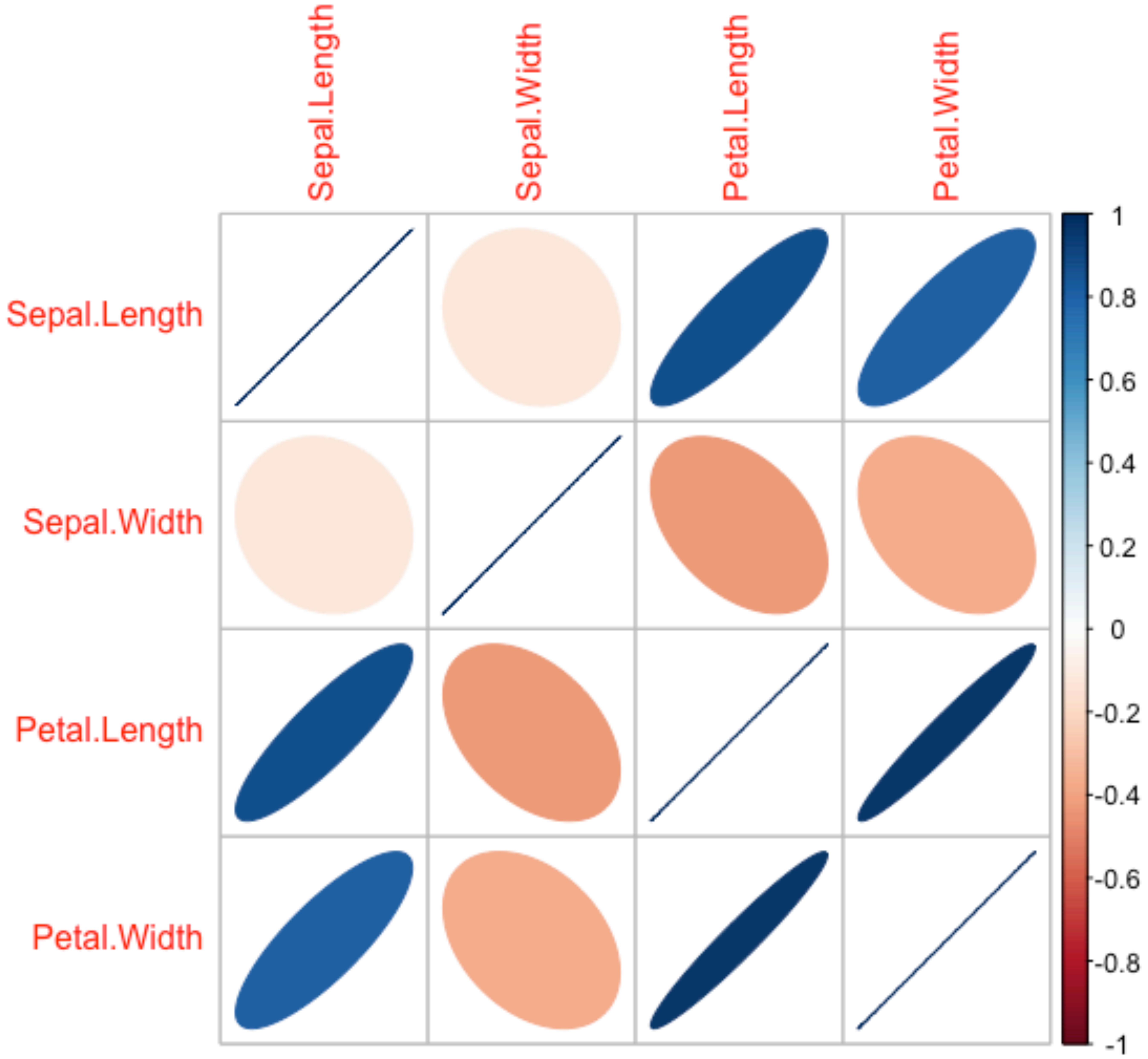


Diagrama de dispersión con datos agrupados

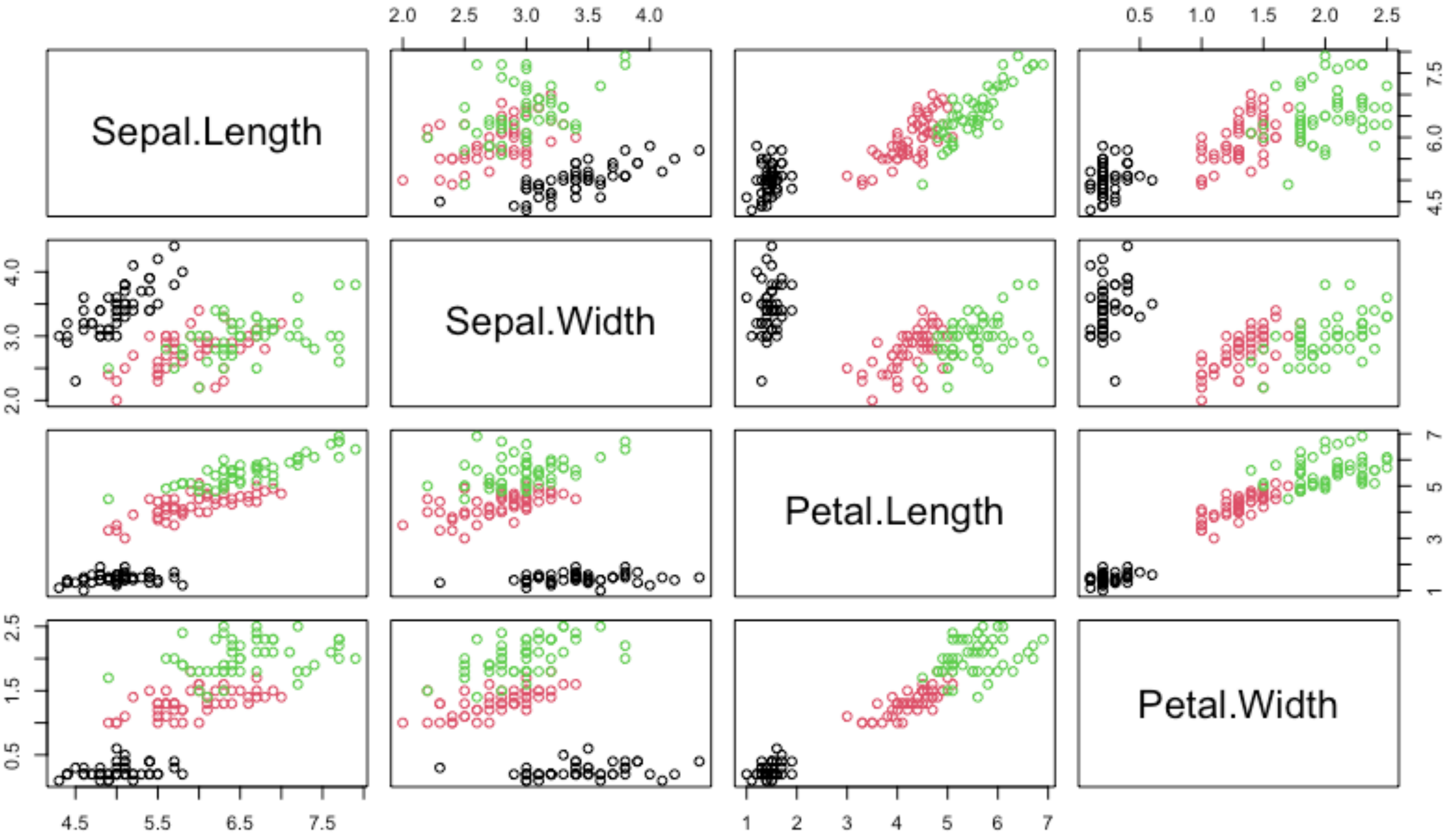
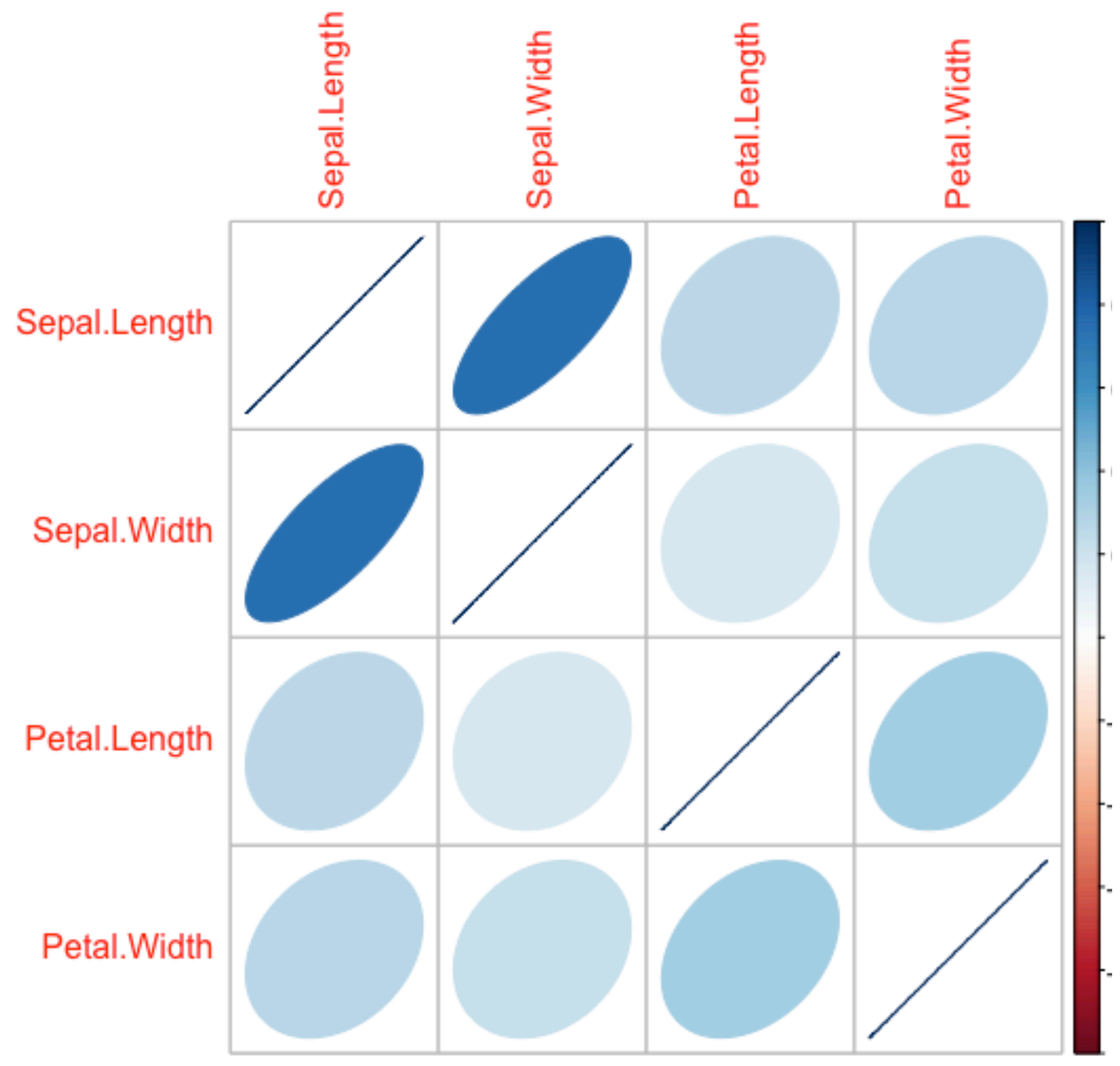
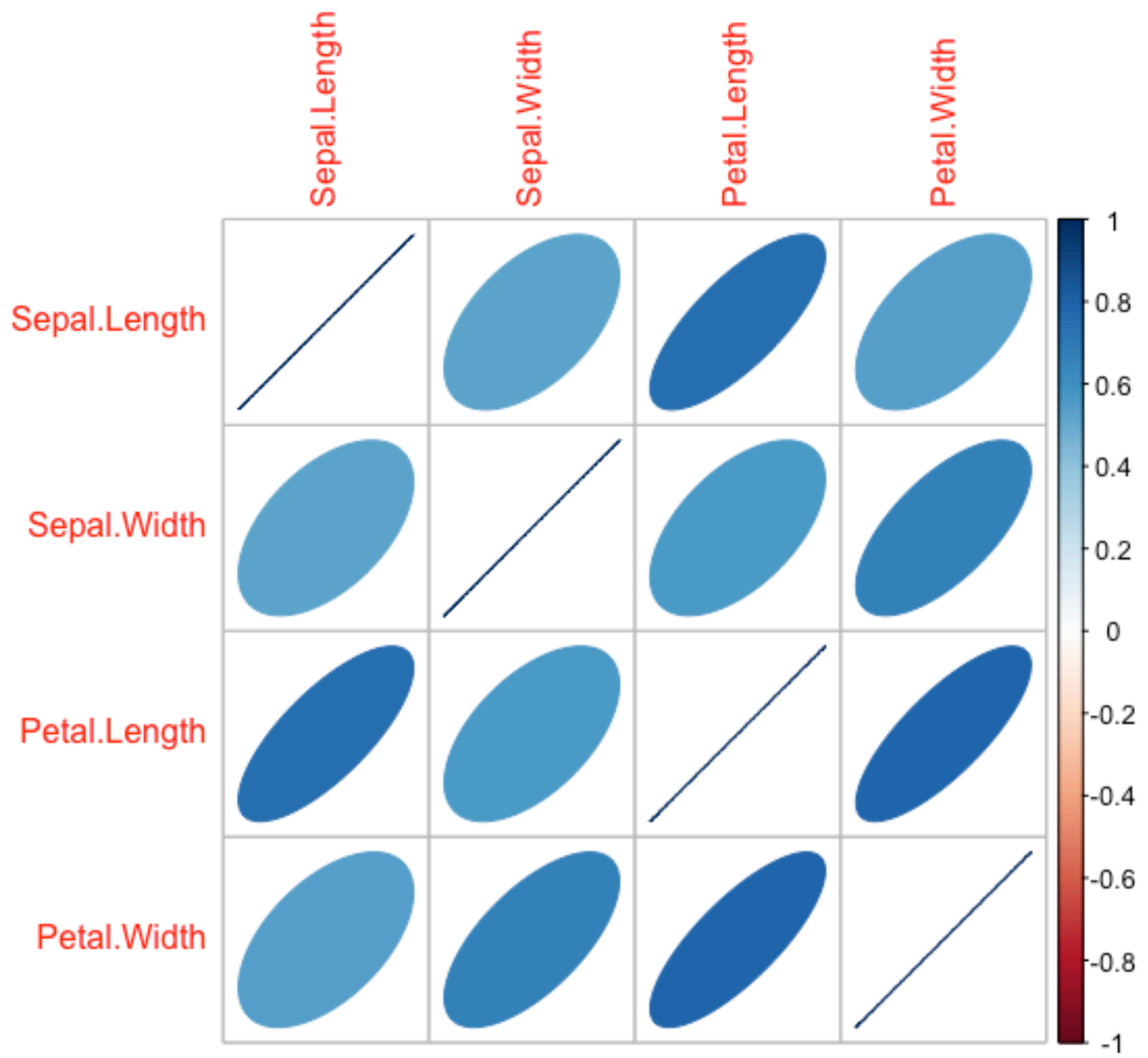


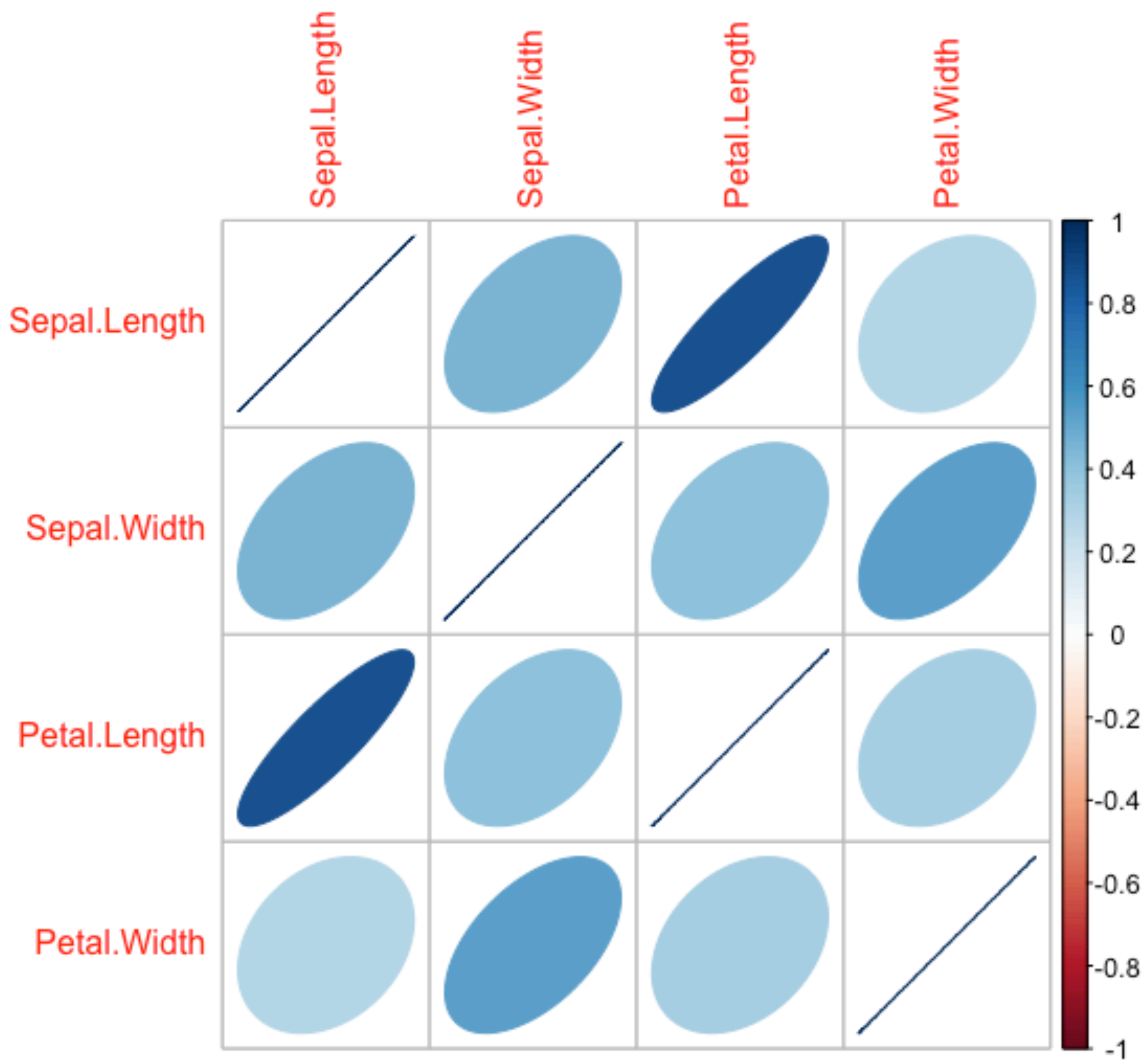
Diagrama de correlación con datos agrupados



Setosa



Versicolor



Virginica

Diagrama de dispersión II

- Librería GGally (ggplot2)

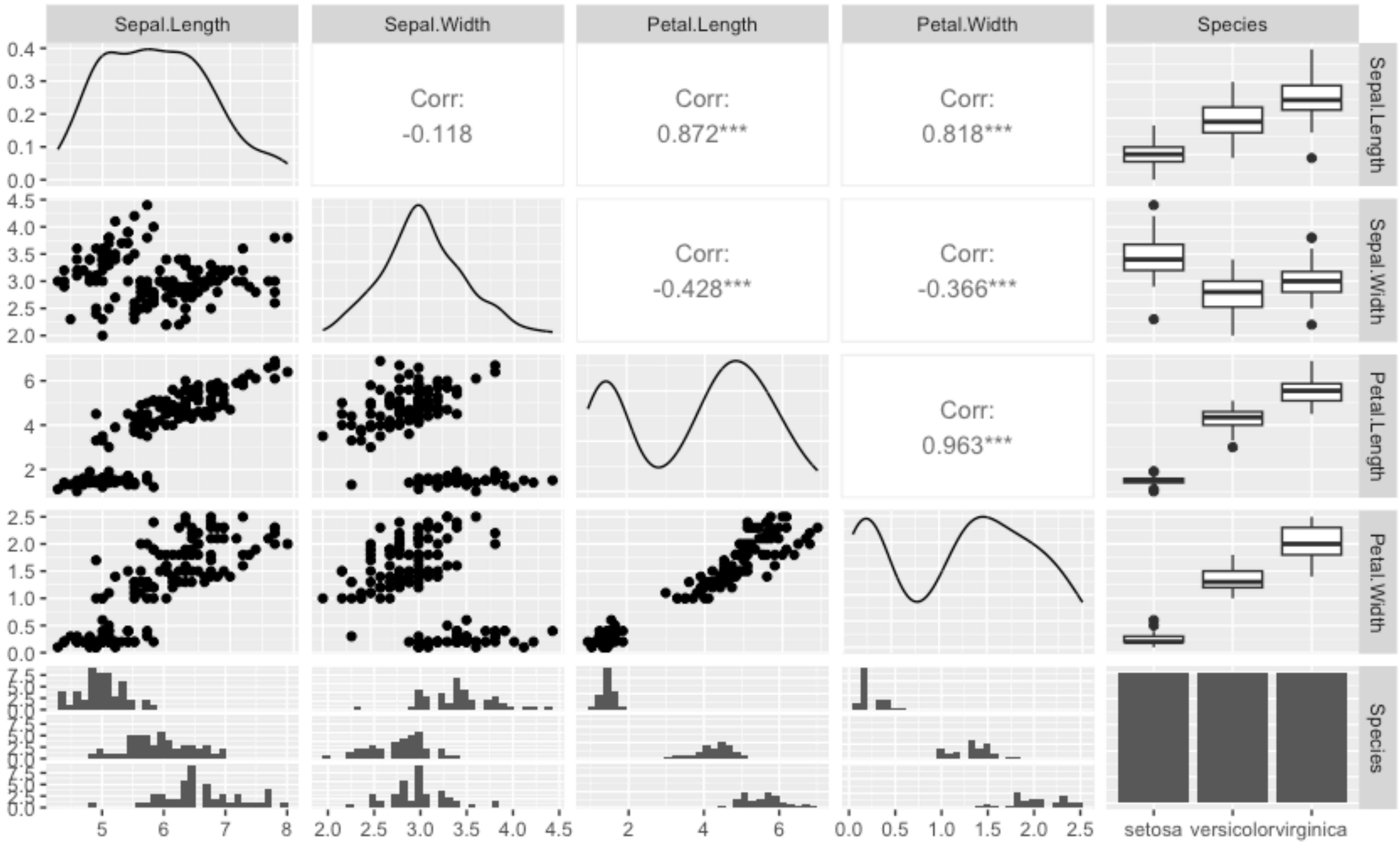
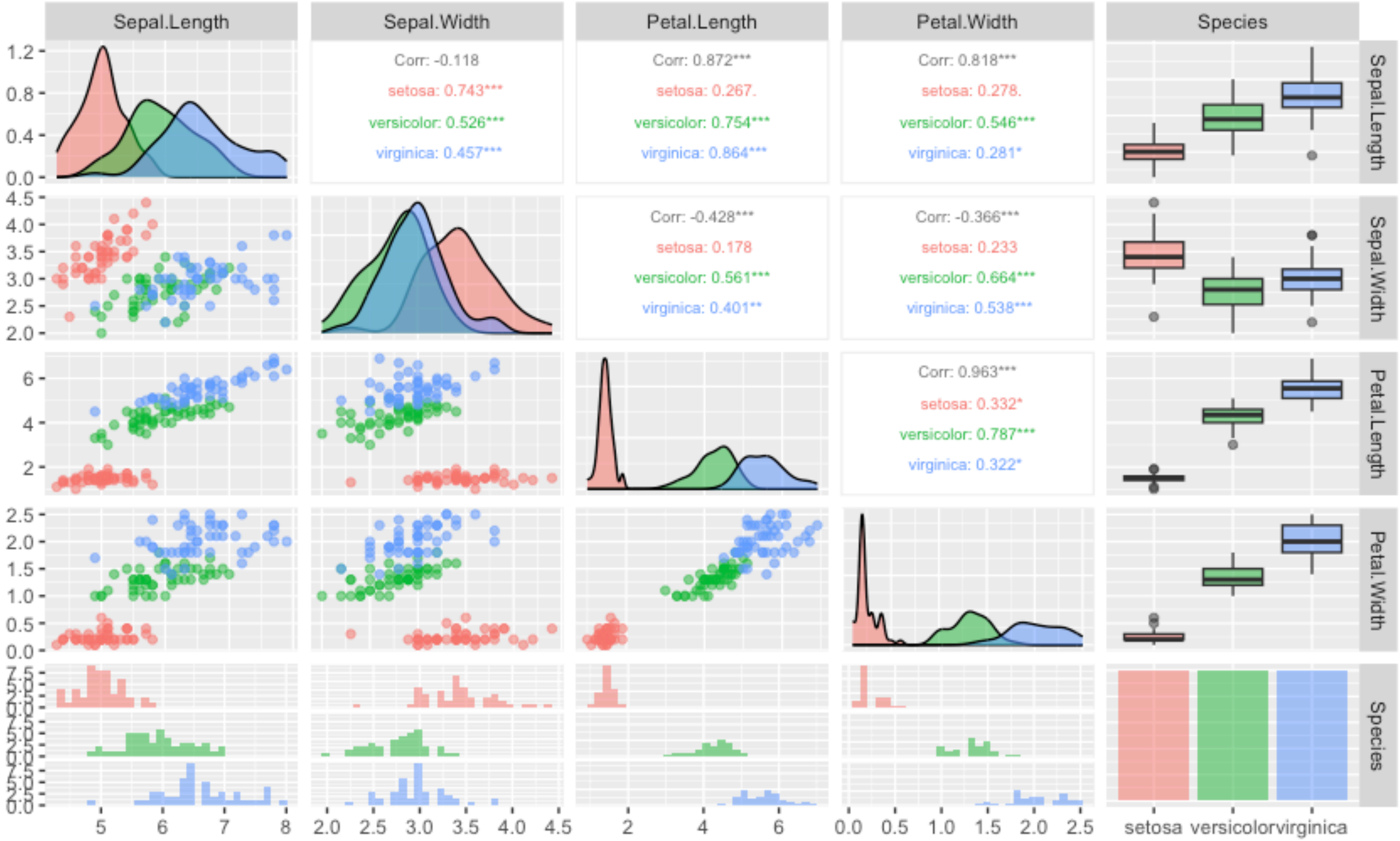


Diagrama de dispersión para datos agrupados II



Estrellas

Estrellas

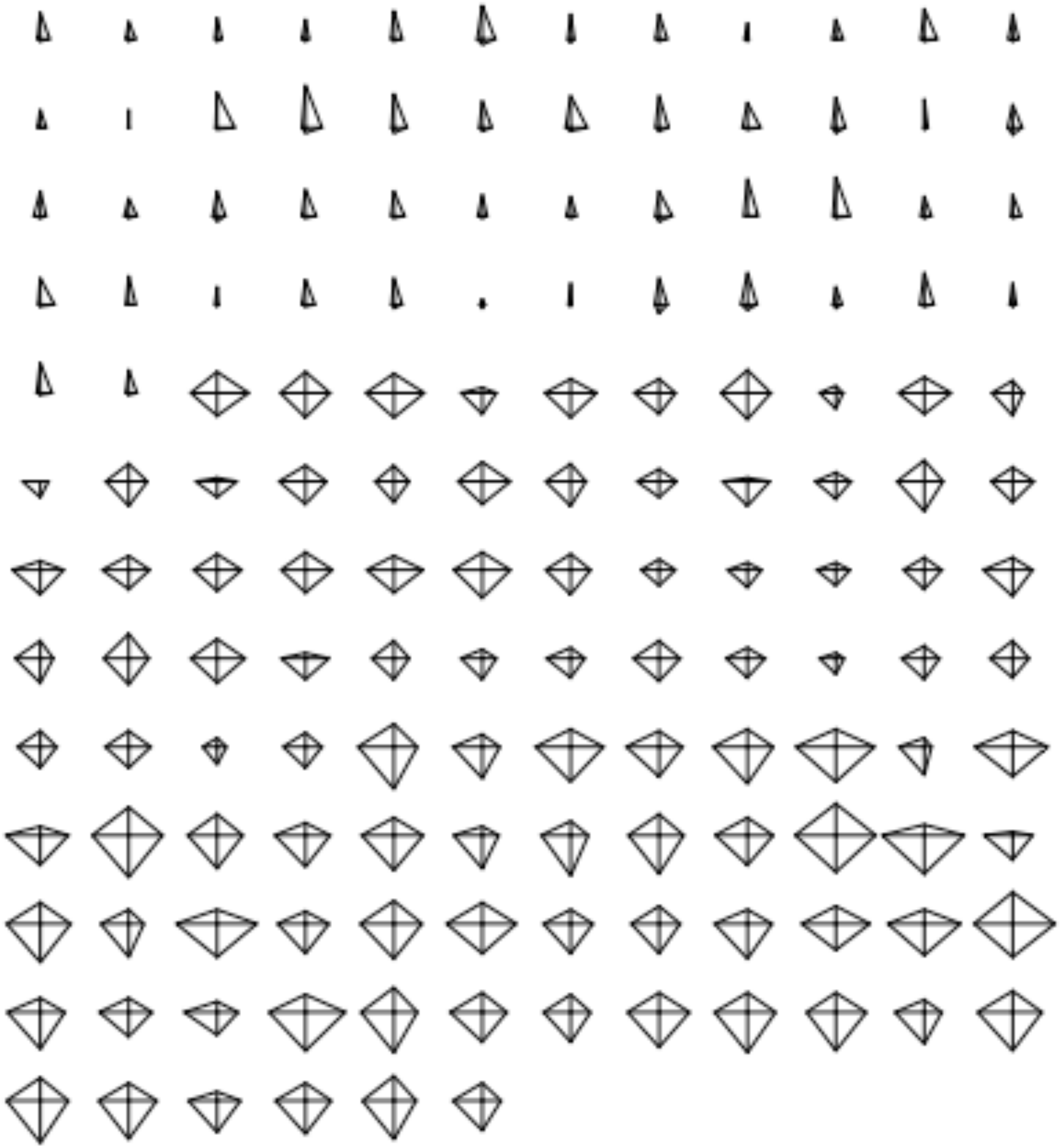
- Técnica para graficar datos multivariados en 2D (escalados a $[0,1]$)

- Se forma una "estrella" con p picos por cada una de las n observaciones

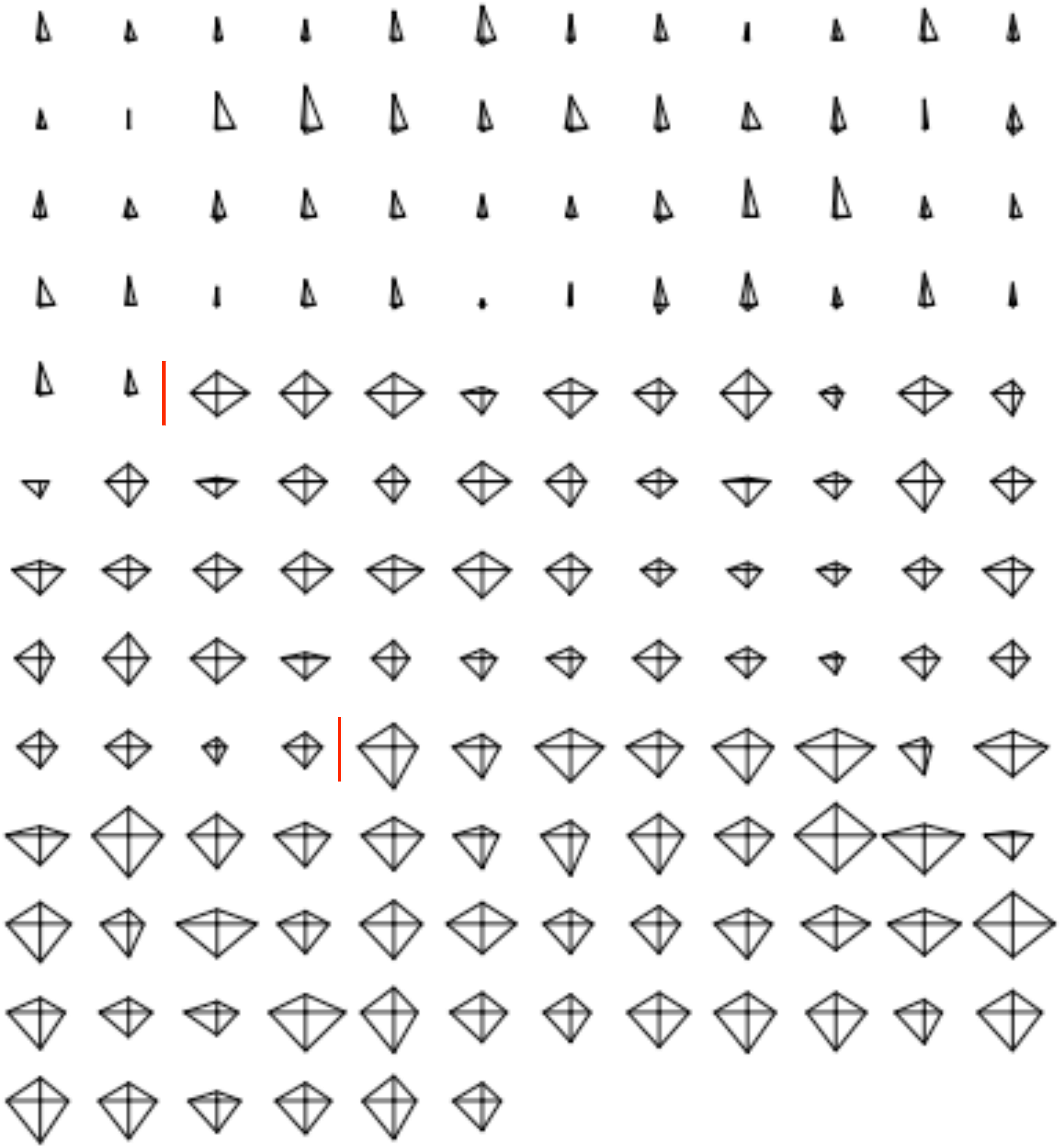
- Útil para:
  - Identificar clusters, outliers y variables "importantes"

- Desventajas:
  - Complicado de analizar si hay muchas observaciones y/o muchas variables

Estrellas



Estrellas



Caras de Chernoff

Caras de Chernoff

- Técnica similar a las estrellas para graficar datos multivariados (escalados a $[0,1]$)

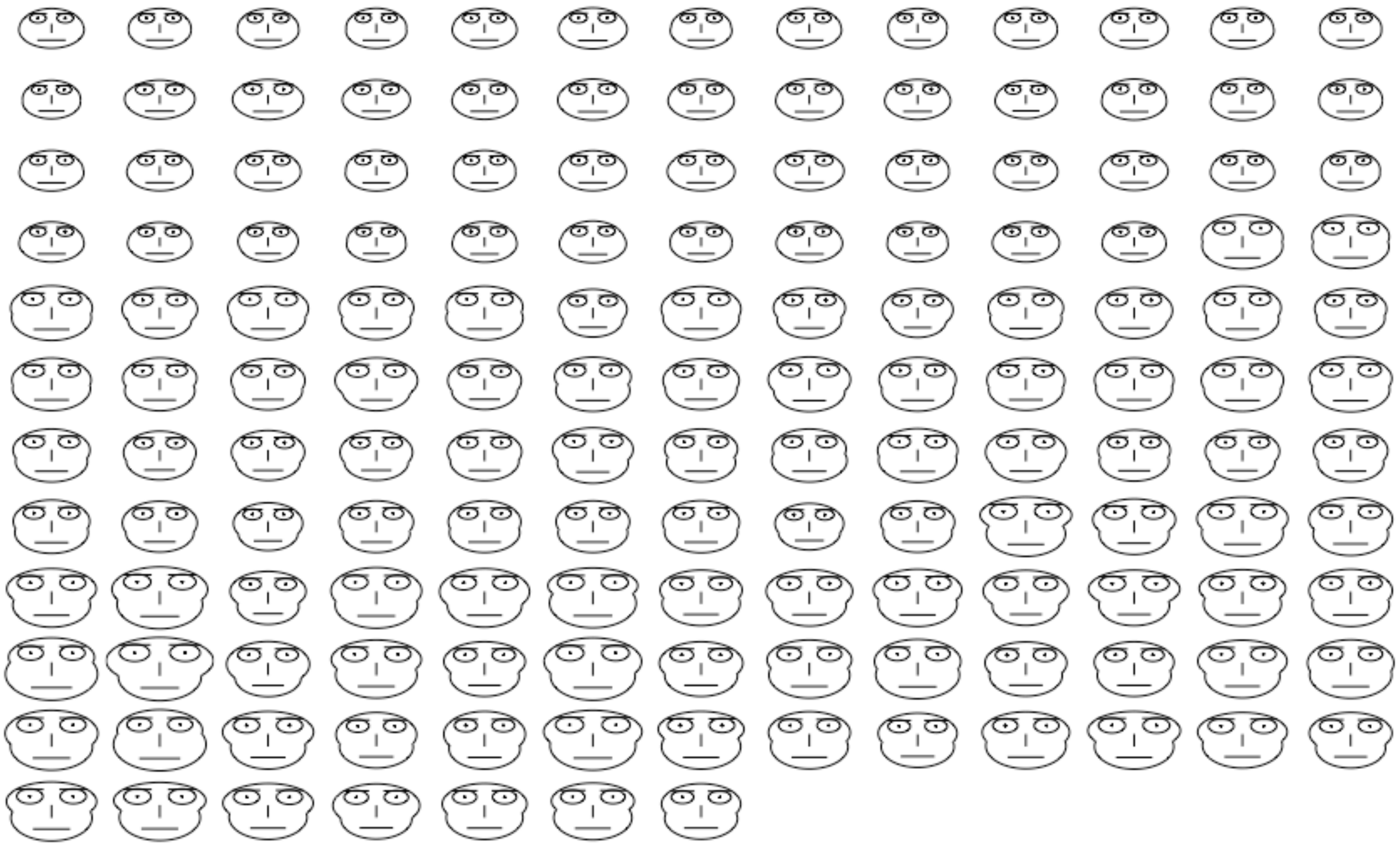
- Desarrollado por Chernoff, Herman (1973). **The use of Faces to Represent Points in K-Dimensional Space Graphically**

- Útil para:
  - Identificar rápidamente clusters, outliers y variables importantes

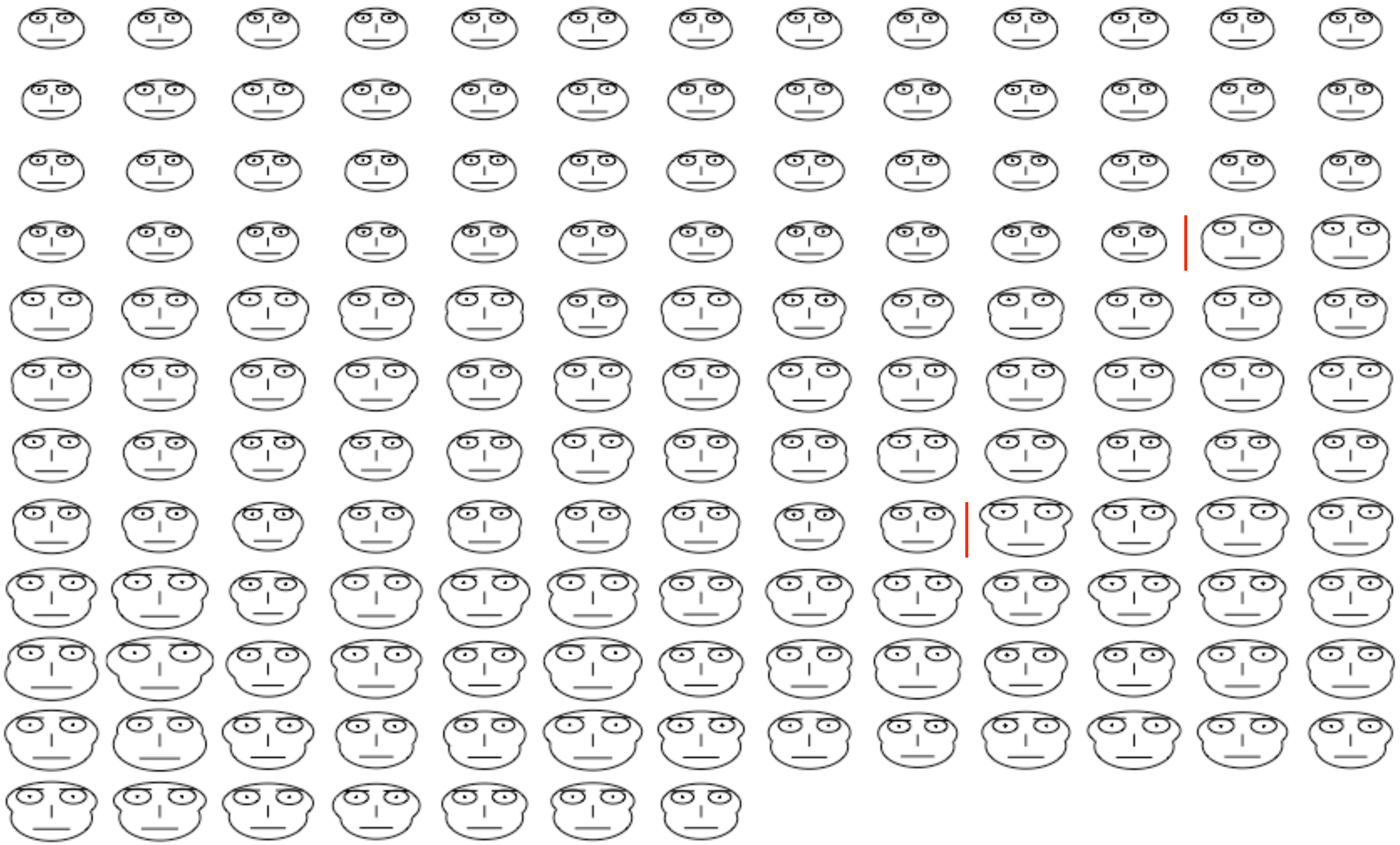
- Desventajas:
  - Limitado a $p \leq 18$
  - El orden de las variables importa

- En R: Librería TeachingDemos

Caras de Chernoff



Caras de Chernoff



Caras de Chernoff

- Si se cambia el orden de las variables las caras cambian

Curvas de Andrews

Curvas de Andrews

- Transformación para graficar datos multivariados en el plano cartesiano (o coordenadas polares)

- Desarrollado por Andrews, D.F. (1972). **Plots of High-Dimensional Data.**

- Cada punto $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_p)$ es mapeado a

$$f_{\mathbf{x}}(t) = \frac{x_1}{\sqrt{2}} + x_2 \sin(t) + x_3 \cos(t) + x_4 \sin(2t) + x_5 \cos(2t) + \cdots, \qquad -\pi < t < \pi$$

- (Algunas) Propiedades útiles:

Preserva medias, i.e., $$f_{\bar{x}}(t) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f_{x_i}(t)$$

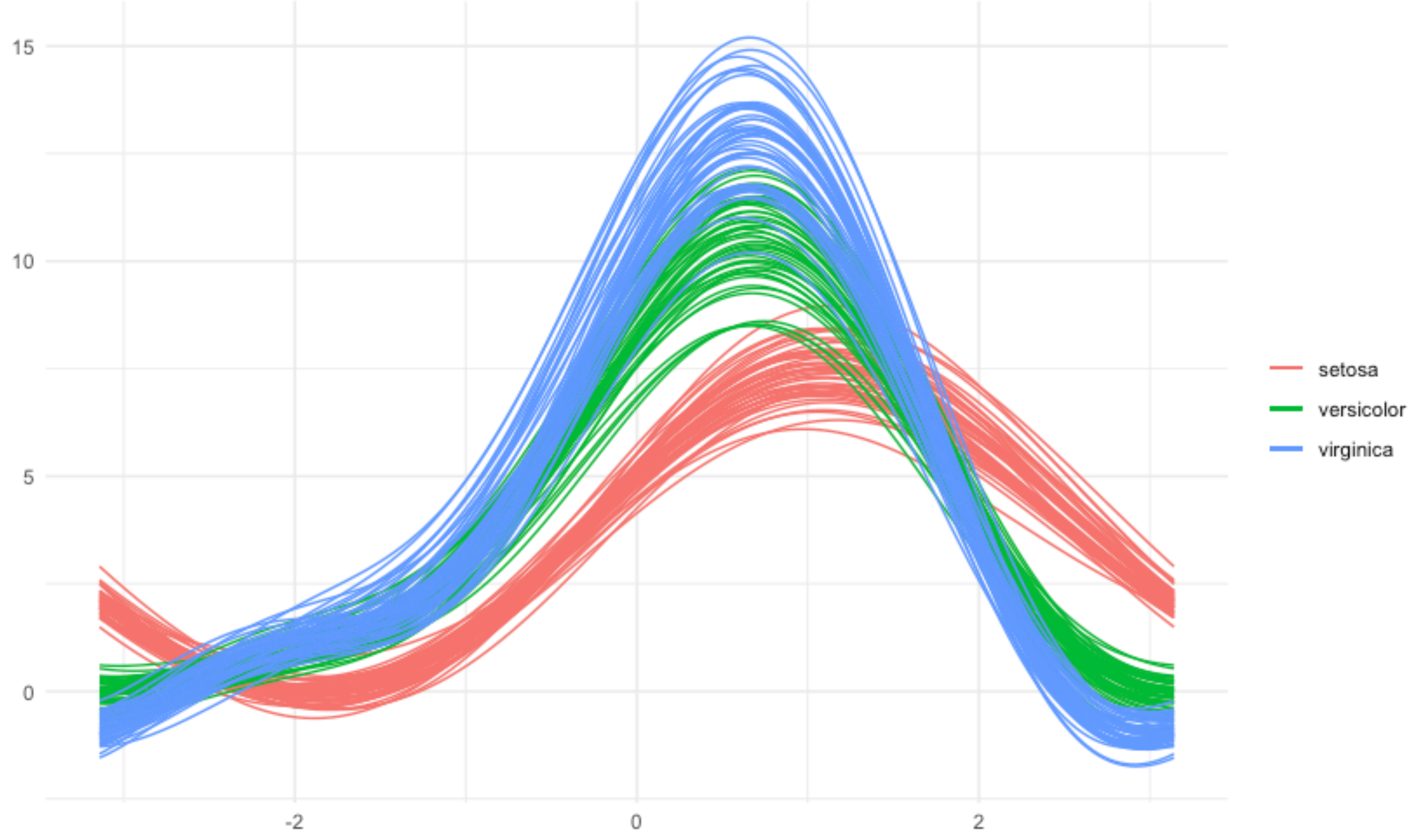
Preserva distancias, i.e., $$||f_{\mathbf{x}}(t) - f_{\mathbf{y}}(t)||_{L_2} = \int_{-\pi}^{\pi} [f_{\mathbf{x}}(t) - f_{\mathbf{y}}(t)]^2 dt = \pi ||\mathbf{x} - \mathbf{y}||^2$$

Curvas de Andrews

- Ventajas
  - No hay restricciones en el número de variables ni de observaciones.
  - Detección de outliers y clusters
  - No requiere datos escalados

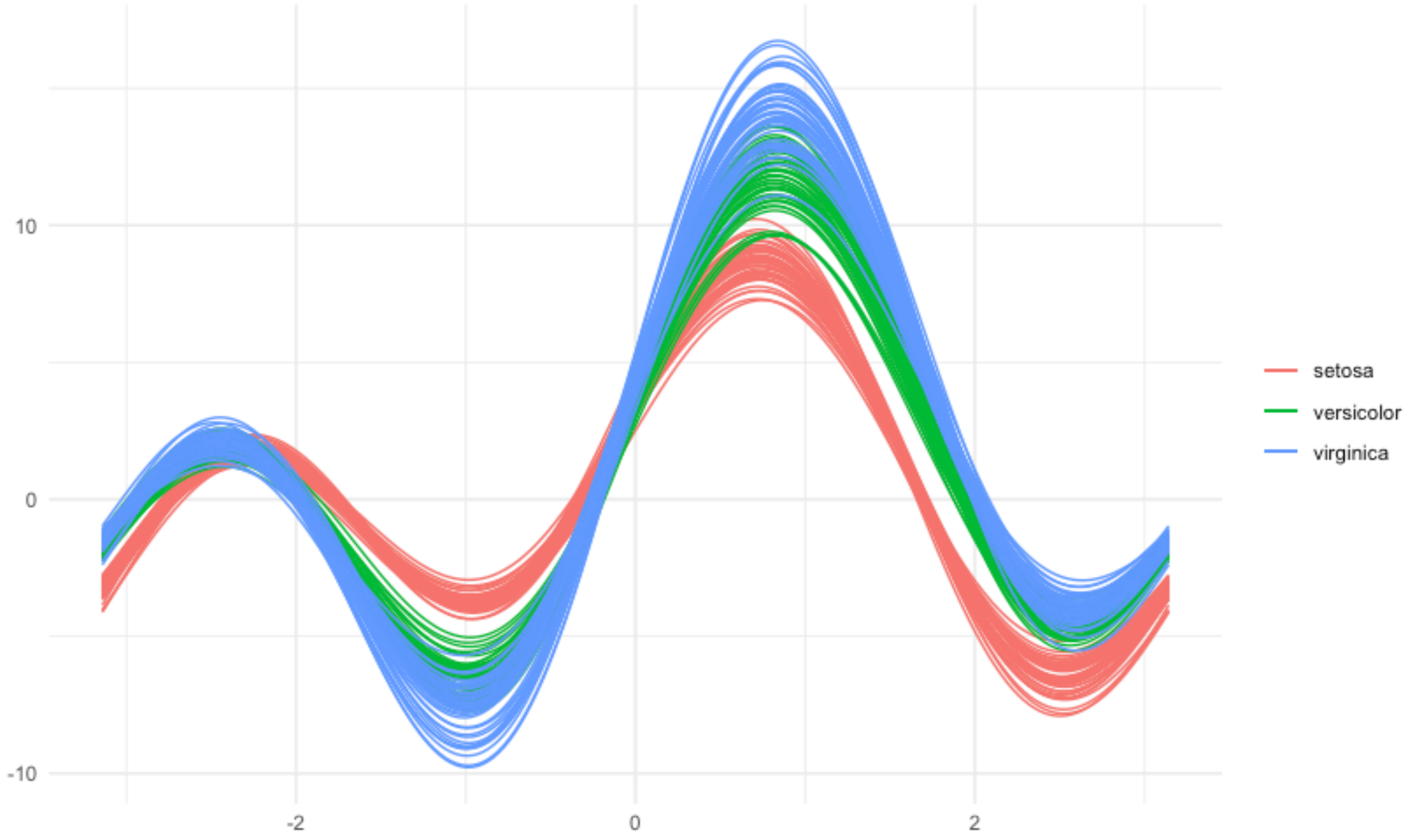
- Desventajas
  - El orden de las variables importa
  - Mayor peso a las primeras variables.

Curvas de Andrews



Curvas de Andrews

- Las curvas cambian si el orden de las variables cambia



Curvas de Andrews

- Otros posibles mapeos
  - Andrews, 1972

$$f_{\mathbf{x}}(t) = x_1 \sin(n_1 t) + x_2 \cos(n_1 t) + x_3 \sin(n_2 t) + x_4 \cos(n_2 t) + \cdots, \quad n_i \in \mathbb{N}, \quad -\pi \leq t \leq \pi$$

$$f_{\mathbf{x}}(t) = x_1 \sin(2t) + x_2 \cos(2t) + x_3 \sin(4t) + x_4 \cos(4t) + \cdots, \qquad 0 \leq t \leq \pi$$

  - Khattree, R. & Naik, D. (2002). **Andrews plots for multivariate data: some new suggestions and applications.** Para $-\pi \leq t \leq \pi$

$$f_{\mathbf{x}}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[x_1 + x_2(\sin(t) + \cos(t)) + x_3(\sin(t) - \cos(t)) + x_4(\sin(2t) + cos(2t)) + \ldots\right]$$

- En R: Librería pracma implementa la función definida por Khattree pero con $0 \leq t \leq 2\pi$

Curvas de Andrews (librería pracma)