Analisis de componentes principales

Luis Fernando Delgado Muñoz - Ing. Agroindustrial, M.Sc

Ifdelgadom@unal.edu.co

Universidad Nacional de Colombia Facultad de Ingeniería y Administración Departamento de Ingenieria



Análisis de componentes principales

El análisis de componentes principales es una técnica de la reducción de la dimensión que describe la información de un conjunto de variables observadas mediante un conjunto de variables mas pequeño (componentes principales), que son combinaciones lineales de las variables de partida.

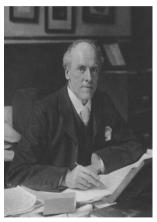
El objetivo principal del ACP, es comparar individuos según valores de las variables continuas que se parecen.

Por ejemplo dos individuos se parecen porque obtienen más o menos los mismos indicadores en diferentes aspectos.

Objetivos

- Generar nuevas variables que pueden expresar la información contenida en el conjunto original de datos.
- Reducir la dimensionalidad del problema que se está estudiando, como paso previo para futuros análisis.
- Eliminar cuando sea posible, algunas de las variables originales si ellas aportan poca información.

Orígenes del Análisis en Componentes Principales



En 1901 Karl Pearson publicó un trabajo sobre el ajuste de un sistema de puntos en un multiespacio a una línea o un plano. Este enfoque fue retomado en 1933 por Hotelling, quien fue el primero en formular el análisis por componentes tal como se ha difundido hasta nuestros días.

El trabajo original de Pearson (1901) se centraba en aquellos componentes, o combinaciones lineales de variables originales, para los cuales la varianza no explicada fuera mínima. Estas combinaciones generaban un plano, función de las variables, en el cual el ajuste del sistema de puntos es "el mejor", por ser mínima la suma de las distancias de cada punto al plano de ajuste.

Fundamentos del método

El ACP recurre a dos representaciones geométricas: una para comparar a los individuos y otra para estudiar las relaciones entre las variables.

La representación de los datos depende de las unidades y escalas usadas, por lo tanto es necesario que las variables estén expresadas en la misma unidad de medida.

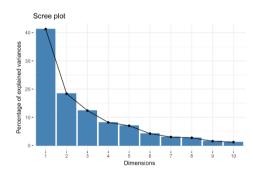
Para ello es conveniente estandarizar los caracteres a media 0 y varianza 1

Estas representaciones requieren de transformaciones de la tabla de datos. La transformación más utilizada es la de la estandarización de los datos, es decir restar la media y dividir por la desviación estándar.

Cada observación tendrá un nuevo valor definido en función de unidades de desvío estándar.

Fundamentos del método

Los están componentes no correlacionados entre sí independientemente, interpretan cada uno capturando parte de la variabilidad total de la matriz básica de datos (MBD). Εl primer componente (PC1) contiene la mayor variabilidad, seguido por el segundo (PC2) y el tercero (PC3), cada uno con mayor variabilidad capturada por los anteriores. Este proceso continúa hasta distribuir toda variabilidad la entre los componentes, cada uno con información de todas las variables en diferentes proporciones.



Terminología estándar del análisis de componentes principales

Componente principal: variable hipotética que se construye a partir de las variables originales, no se encuentra correlacionada con otros componentes principales.

Eigenvalor: varianza explicada por un componente principal.

Eigenvector: vector que define la dirección de un componente principal.

Loading: se define como loading = eigenvector*sqrt(eigenvalor)

Círculo de correlación: gráfico en el cual se representan las variables junto con una circunferencia de radio igual a 1 y que permite visualizar la calidad de la representación de las variables.

Terminología estándar del análisis de componentes principales

Biplot: gráfico en el cual se representan dos conjuntos de objetos de diferentes formas (individuos y variables). Esta superposición es ficticia, dado que las nubes de las UE y las variables no se encuentran en el mismo espacio.

La calidad de la representación indica qué tan bien está proyectada una unidad experimental (UE) o variable en el espacio de ordenación. Se mide con el coseno cuadrado del ángulo entre una UE o variable y un componente principal (PC), equivalente al coeficiente de correlación al cuadrado (loading²), y varía entre 0 y 1. La suma de los valores de calidad a lo largo de todos los PCs es igual a 1 para cada UE o variable.

Contribución: importancia relativa de una UE o variable en la construcción de un determinado PC. La suma de todas las contribuciones de las UE o variables para un mismo PC es igual a 100.

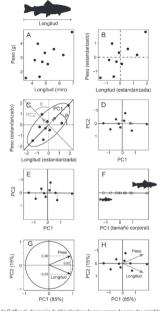


Fig. 5.1 PCA. (A) Grificto de dispersión de 10 individuos de una especie de pez y dos variables (longitud y peso); (B) estandarización de las variables en medio 3 variantas 1; (C) elipse que especiable las UE y componentes principales (PC) 1 y 2, estos ejes correspondes a la rotación de la cordenada y la abscisa un cierto ingulo 8, los vectores (flechas grusse) espresentanto no ejemevectores multiplicados por la ratiz cuadrada de una ejementares (locality); (B) as UE se proyectan sobre el PCI (ligues as perpendiculares); (D) las utevas cordenadas de la UE oprovectadas sobre el PCI (ligues as perpendiculares); (D) las utevas cordenadas de las UE proyectadas dos les UE espreyectados sobre el PCI (ligues as perpendiculares); (D) las utevas cordenadas de las UE proyectadas sobre el PCI (ligues as perpendiculares); (D) las utevas cordenadas de las UE proyectadas sobre el PCI (ligues as perpendiculares); (D) las utevas cordenadas de las UE proyectadas sobre las UE proyectadas sobre el PCI (ligues as perpendiculares); (D) piún de UE v. variables (vectores) y usa coordenadas (nodantez) que definar la caldado de la representación; (D) piún de UE v. variables (vectores) y

ANÁLISIS MULTIVARIADO DEL GÉNERO BULNESIA

Variable	Estados	Codificación
	Arbustos	0
1. Hábito	Arbustos y árboles	1
	Árboles	2
2. Longitud del internodio (cm)	-	-
3. Diámetro del internodio (cm)	-	-
4. Longitud de la hoja (cm)	-	-
5. Ancho de la hoja (cm)		
6. Longitud del pecíolo (cm)	-	-
7. Número de folíolos		
	Folíolos no sésiles	0
8. Presencia de peciólulos	Folíolos sésiles o no sésiles	1
	Foliolos sésiles	2
	Foliolos alternos	0
9. Disposición de los folíolos en el raquis	Foliolos subopuestos	1
	Foliolos opuestos	2
	Ausente	0
10. Pubescencia de la hoja	Ausente y presente	1
	Presente	2
11. Longitud del folíolo (mm)	-	-
12. Ancho del folíolo (mm)		
 Número de nervaduras primarias del foliolo 	-	-

	+	
 Número de nervaduras primarias del folíolo 	-	-
	Paralelos	0
 Posición de los folíolos terminales 	Paralelos y divergentes	1
termines.	Divergentes	2
15 Presencia de mucrón en folíolos	Folíolos no mucronados	0
15. Presencia de mucron en foliolos	Folíolos mucronados	1
46.00	Flores solitarias	1
Tipo de inflorescencia	Inflorescencia en dicasio	2
17. Longitud del pedúnculo (mm)	-	
18. Longitud del sépalo (mm)		
19. Ancho del sépalo (mm)	-	-
20. Color de los pétalos	Blanco	1
20. Color de los petalos	Amarillo	2
21. Longitud del pétalo (mm)	-	-
22. Ancho del pétalo (mm)		
23. Número de nervaduras del pétalo	-	-
	Heterogéneos	0
24. Tipo de estambres	Heterogéneos y homogéneos	1
	Homogéneos	2
	No modificados	0
25. Modificación de los estambres	Modificados y no modificados	1
	Modificados	2

Crisci et al. 1979

	Ausente	0	
26. Presencia de gran escama junto al estam- bre	Ausente y presente	1	36. 2
0.00	Presente	2	
	Sin pelos	0	
27. Presencia de pelos en la base del filamento estaminal	Con o sin pelos	1	-
estallinai	Con pelos	2	3
28. Presencia de una escama suplementaria	Ausente	0	
junto al estambre	Presente	1	4
	No agrupados	0	
29. Agrupación de los estambres	Agrupados o no agrupados	1	41.
	Agrupados	2	
30. Longitud del filamento (mm)		-	
31. Longitud de la antera (mm)		-	43.
32. Longitud de la escama (mm)		-	
	Sin ápice laciniado	0	
33. Presencia de ápice laciniado en la escama estaminal	Con o sin ápice laciniado	1	
	Con ápice laciniado	2	
	En número de 3	0	
34. Número de carpelos	En número de 3 y 5	1	
	En número de 5	2	
	Estilo no curvado	0	
35. Curvatura del estilo	Estilo curvado o no curvado	1	

Estilo curvado

36. Número de óvulos por carpelo	-	-
37. Pubescencia del fruto	Glabro	0
37. Pubescencia dei fruto	Pubescente	1
38. Longitud del fruto (mm)		-
39. Ancho del fruto (mm)	-	-
40 P	Reducido	1
40. Desarrollo del carpóforo	Bien desarrollado	2
41. Longitud del carpóforo (mm)	-	-
42. Forma de la semilla	Semicircular o semielíptica	1
42. Forma de la semilia	Oblongo-reniforme	2
43. Longitud de la semilla (mm)	-	-

		Variables								
		1	2	3		p				
	1	X ₁₁	X ₁₂	X ₁₃		X 1p				
	2	X ₂₁	X 22	X ₂₃		X _{2p}				
	3	X ₃₁	X ₃₂	X ₃₃		X _{3p}				
NE	:	:	:	:	*	:				
	n	<i>X</i> _{n1}	X _{n2}	X _{n3}		X _{np}				

Especie		C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7	C8	C9	C10	C11	C12	C13	C14	C18	c:	16 (017	C18	C19	C20	C21
B. arborea	z	2	35	2,1	85	57	7,7	13	2	0	2	30	8,6	6	0	1	1	2	17	7,1	3,4	2	22
B. carrapo	,	2	36	1,6	97	71	9	7	2	0	2	40	16	6	1	1	1	2	18	6,4	5,8	2	24
B. chilensi	z	0	24	2,6	14	8,9	1,8	8	2	1	0	5,2	2,4	NA	2	1	1	1	9	7,1	4,2	2	9,8
B. bonarien	sis	0	20	1,3	26	18	3,4	14	1	0	2	8,9	2	1	2	1	1	1	12	6,8	3,9	2	18
B. retama		1	40	2	13	11	3,1	5	1	1	2	6,6	2,6	2	1	2		1	10	7,4	4,4	2	7,7
B. foliosa		0	19	1,3	28	25	5,8	4	1	1	2	14	7,8	3	2	1	1	1	13	5,3	3	2	8,5
B. schickenda	ntzii	0	10	1,9	20	12	2,7	10	0	0	2	5,7	1,9	1	2	1	1	1	10	5,9	3,1	2	9,3
B. sarmient	oi	2	22	1,4	21	27	5,1	2	2	2	1	17	12	5	2	1		1 :	3,9	2,9	2,3	1	12
Especie	C22	C23	C24	C25	C20	C27	7 C2	8 C	29 (C30	C31	C32	C33	C34	C35	C36	C37	C38	C39	C40	C41	C42	C43
B. arborea	17	16	0	1	2	0	1		2	10	1,5	5,2	2	2	1	2	1	46	41	2	7,7	1	13
B. carrapo	19	12	0	2	2	0	1	:	!	9,9	1,4	53	2	2	2	2	1	56	52	2	5,3	1	12
B. chilensis	5,7	8	0	0	0	2	1	- 2	2	7	2	4,4	1	1	NA	7	1	13	12	2	0,6	2	2,7
B. bonariensis	10	10	0	1	1	0	1			11	1,6	4,4	0	2	2	1	1	36	33	2	4,8	1	11
B. retama	4,6	7	1	0	0	1	1			7,1	2,2	3,1	1	2	1	8	1	23	19	1	0,8	2	11
B. foliosa	2,7	6	2	0	0	0	1	() (6,2	1,6	3,9	1	2	1	4	2	16	13	1	0,7	2	4,9
	4.3	5	1	0	0	0	2	(7,4	1,7	4,4	2	2	1	4	2	12	13	1	0,4	2	5,3
B. schickendantzii	4,5																						

Tabla 6.1. Tabla resumen del PCA para la MBD de especies de *Bulnesia*. Se muestran los primeros siete componentes principales, sus eigenvalores (λ_i), el porcentaje de variación explicada por cada componente y el porcentaje acumulado.

Componente principal	Eigenvalor	Porcentaje de variación explicada	Porcentaje acumulado				
PC1	18,731	45,685	45,685				
PC2	8,620	21,024	66,719				
PC3	5,556	13,536	80,246				
PC4	3,353	8,189	88,414				
PC5	2,393	5,847	94,251				
PC6	1,455	3,535	97,786				
PC7	0,912	2,224	99,999				

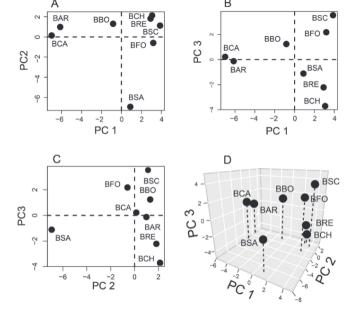


Fig. 6.2. Visualización del PCA aplicado a la MBD de especies de Bulnesia. Se grafican los espacios de ordenación bidimensionales del (A) PC1 vs. PC2; (B) PC1 vs. PC3; (C) PC2 vs. PC3; (D) espacio de ordenación tridimensional para el PC1, PC2 y PC3 BAR: B. arborea, BCA: B. carrapo, BCH: B. chilensis, BBO: B. bonariensis, BRE: B. retama, BFO: B. foliosa, BSC: B. schickendantzii, BSA: B. sarmientoi.

Tabla 6.2. Loadings de los tres primeros componentes principales (PCs) para cada una de las variables de la MBD de especies de Bulnesia. Las variables 13 y 35 fueron excluidas del análisis por presentar valores no disponibles.

de especies de Bulnesia. Las variables 13 y 35 fueron excluidas del análisis p	oor presentar v	alores no d	isponibles.
Variable	PC1	PC2	PC3
1. Hábito	0,717	-0,48	0,262
Longitud del internodio	0,551	0,195	0,562
Diámetro del internodio	0,007	0,462	0,759
4. Longitud de la hoja	0,947	0,059	-0,132
5. Ancho de la hoja	0,933	-0,128	-0,099
6. Longitud del pecíolo	0,840	-0,246	-0,193
7. Número de folíolos	0,371	0,611	-0,261
8. Presencia de peciólulos	0,578	-0,314	0,675
9. Disposición de los folíolos en el raquis	-0,487	-0,687	0,488
10. Pubescencia de la hoja	0,313	0,175	-0,696
11. Longitud del foliolo	0,917	-0,186	-0,062
12. Ancho del foliolo	0,674	-0,557	-0,007
14. Posición de los folíolos terminales	-0,713	-0,254	-0,181
15. Presencia de mucrón en folíolos	-0,273	0,251	0,381
16. Tipo de inflorescencia	0,936	0,119	-0,012
17. Longitud del pedúnculo	0,713	0,522	-0,287
18. Longitud del sépalo	0,182	0,955	0,192
19. Ancho del sépalo	0,468	0,547	0,269
20. Color de los pétalos	0,083	0,955	-0,191
21. Longitud del pétalo	0,977	0,071	-0,088
22. Ancho del pétalo	0,990	0,068	0,036
23. Número de nervaduras del pétalo	0,897	0,273	0,133
24. Tipo de estambres	-0,557	-0,665	-0,236
25. Modificación de los estambres	0,914	0,167	-0,124
26. Presencia de gran escama junto al estambre	0,975	0,19	-0,094
27. Presencia de pelos en la base del filamento estaminal	-0,403	0,398	0,786
28. Presencia de una escama suplementaria junto al estambre	-0,361	0,155	-0,607
29. Agrupación de los estambres	0,642	0,508	0,539
30. Longitud del filamento	0,676	0,638	-0,198
31. Longitud de la antera	-0,476	0,768	0,343
32. Longitud de la escama	0,679	0,516	-0,248
33. Presencia de ápice laciniado en la escama estaminal	0.334	-0.391	-0.104
34. Número de carpelos	0,216	0,768	-0,485
36. Número de óvulos por carpelo	-0.620	0.408	0.516
37. Pubescencia del fruto	-0,504	0,056	-0,749
38. Longitud del fruto	0,828	-0,497	0,094
39. Ancho del fruto	0,823	-0,51	0,072
40. Desarrollo del carpóforo	0,637	-0,222	0,41
41. Longitud del carpóforo	0.868	-0.324	0.016
42. Forma de la semilla	-0,807	0,409	0,024
43. Longitud de la semilla	0,677	-0,408	0,083
	3,511	.,	.,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,

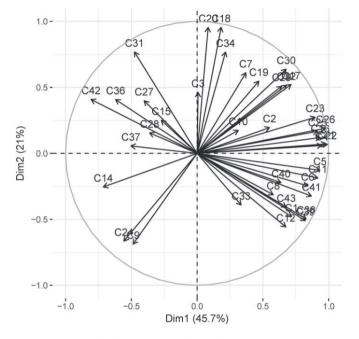


Fig. 6.3. Círculo de correlación unitario aplicado a la MBD de *Bulnesia* que muestra la calidad de la representación de las variables. Los códigos corresponden a los caracteres de la Tabla 2.8.

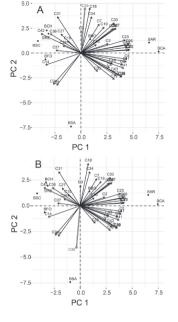


Fig. 6.4. (A) Biplot aplicado a la MBD de Bulmesto, observe que la ubicación de las UE en el espacio es una imagen especular de la expuesta en la Figura 6.2. (B) biplot resultado de la recodificación de la variable categòrica CO (color de los pelacios). Los códioso de las variables corresponden a los caracteres de la Babla 2.8, BAR. B araborae, BCA: B. carrapo, BCH: B. chiloratis, BBO: B. bonarientis, BRE: B. retama, BFO: B. foliosa, BSC: B. schichoradontis, BSA: S. szemiento.

Gracias