Análisis Multivariado

ID 033521 - Clase 4901

Lina Maria Acosta Avena

Ciencia de Datos Departamento de Matemáticas Pontificia Universidad Javeriana

Semana 15: 28/10/24 - 02/11/24



1/55



Lina Maria Acosta Avena Análisis Multivariado Semestre 2430

- En **estudios de marketing**, una de las estrategias para aplicar una determinada campaña, suele ser inicialmente la identificación de **grupos similares de clientes** para después establecer/trazar un plan específico de dicha campaña en cada grupo.
- En estudios de mercado, cuando se va lanzar un nuevo producto, se identifican los productos relacionados que ya están en el mercado y con base en eso determinar el desempeño que tendrá éste.
- En Ecología, se clasifica a un grupo de plantas o animales de acuerdo con un conjunto de características que tienen en común.



- En Psicología, se colectan información sobre algunas características de las personas y con base en ellas se agrupan algunas personas que de alguna forma tienen personalidades similares.
- En Ciencias Sociales, las personas con condiciones socioeconómicas homogeneas se agrupadas/consideradas dentro de un mismo estrato.



Observe que en todos los casos las unidades muestrales o poblacionales son congregados/reunidos/clasificados en grupos.



Observe que en todos los casos las unidades muestrales o poblacionales son congregados/reunidos/clasificados en grupos. El Análisis de Conglomerado (cluster o de clasificación) tiene como propósito definir la estructura de los datos colocando las unidades más parecidas en grupos.



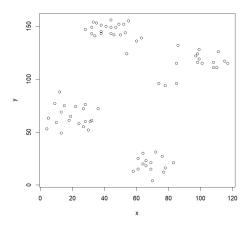
Observe que en todos los casos las unidades muestrales o poblacionales son congregados/reunidos/clasificados en grupos. El Análisis de Conglomerado (cluster o de clasificación) tiene como propósito definir la estructura de los datos colocando las unidades más parecidas en grupos. El análisis de agrupamiento es bastante popular en Data Mining (mineración de datos).



Los datos ruspini 1 del paquete cluster contiene 75 observaciones sobre 2 variables que dan las coordenadas x e y de los puntos, respectivamente.

```
# ---- Datos Ruspini ---- #
require(cluster)
data("ruspini")
head(ruspini)
plot(ruspini)
```

5 / 55





6/55

Se pueden observar que los puntos se aglomeran en 4 grupos

Objetivos del Análisis de Conglomerados

El Análisis de Conglomerados/Cluster/Clasificación tiene como objetivo principal:

Dividir las unidades muestrales/poblacionales en grupos de tal forma que aquellas que pertenecen a un grupo específico sean similares (homogéneos) entre si de acuerdo con las características (variables) que fueron medidas en ellas, y aquellas unidades de grupos diferentes sean disimilares (heterogéneos) con relación a esas mismas características.



Objetivos del Análisis de Conglomerados

De acuerdo con los objetivos plantedos se deben considerar los siguientes aspectos:

1. ¿Cómo se mide la similitud?

Se debe establecer algún mecanismo/instrumento que permita comparar las unidades/observaciones en términos de las variables medidas sobre ellos. Éste instrumento debe registrar la proximidad entre pares de unidades/observaciones de tal forma que las distancias indiquen la similitud.



Objetivos del Análisis de Conglomerados

- ¿Cómo se forman los conglomerados o cluster?
 Se debe establecer el pocedimiento mediante el cual se agrupan las observaciones que son más similares dentro de un determinado conglomerado/cluster.
- 3. ¿Cuántos grupos se deben formar? El criterio debe tener en cuenta la homogeneidad media alcanzada dentro de los conglomerados.







Lina Maria Acosta Avena Análisis Multivariado Semestre 2430 10 / 55

Suponga que un conjunto de datos contiene n unidades muestrales u **observaciones** y p variables y que el objetivo es **agrupar** esas observaciones en g **grupos**.

Observaciones	X_1	X_2	• • •	Xi	• • •	X_p
1	X_{11}	X_{21}		X_{i1}		X_{p1}
2	X_{12}	X_{22}		X_{i2}		X_{p2}
	:	:		:		:
j	X_{1j}	X_{2j}		X_{ij}	• • •	X_{pj}
	:	:		:		:
n	X_{1n}	X_{2n}	• • •	X _{in}	• • •	X_{pn}



Cada j = 1, 2, ..., n es una **observación multivariada**

$$\mathbf{X}_j = \begin{bmatrix} X_{1j} & X_{2j} & \dots & X_{pj} \end{bmatrix}^{\top}$$

donde X_{ij} es el valor observado de la variable i ($i=1,2,\ldots,p$) en la unidad/observación j.





Cada j = 1, 2, ..., n es una **observación multivariada**

$$\mathbf{X}_j = [X_{1j} \quad X_{2j} \quad \dots \quad X_{pj}]^{\top}$$

donde X_{ij} es el valor observado de la variable i (i = 1, 2, ..., p) en la unidad/observación j. Para **agrupar esas observaciones** es necesario que se defina apriori la **medidad de similaridad o disimilaridad** que será utilizada.



Existen varias **medidas diferentes** que proporcionan un determinado tipo de **agrupamiento**:

- 1. Medidas de Distancia:
 - Principalmente para variables cuantitativas.
 - Cuanto menor sea la distancia, más parecidas son las unidades.
- 2. Coeficientes de **Concordancia/Asociación**: Principalmente para **variables cualitativas**
- Coeficientes de Correlación:
 Se usa sólo para variables en la escala de intervalo.
- Medidas Probabilísticas de Similitud:
 Se usa sólo para variables dicótomas.



Medidas de Distancia:

Sean \mathbf{X}_k e \mathbf{X}_l los vectores de las mediciones de las **unidades** k e l, respectivamente. A seguir se presentan las técnicas distancias entre \mathbf{X}_k e \mathbf{X}_l .

Distancia Euclidiana:

$$d_{kl} = \sqrt{(\mathbf{X}_k - \mathbf{X}_l)^{\top}(\mathbf{X}_k - \mathbf{X}_l)} = \sqrt{\sum_{i=1}^{p} (X_{ik} - X_{lk})^2}$$





Distancia Generalizada o Ponderada:

$$d_{kl} = \sqrt{(\mathbf{X}_k - \mathbf{X}_l)^{\top} \mathbf{A} (\mathbf{X}_k - \mathbf{X}_l)}$$

donde A es una matriz de ponderación:

- (i) Si $\mathbf{A} = \mathbf{I}$ se tiene la distancia **Euclidiana**.
- (ii) Si $\mathbf{A} = \mathbf{\Sigma}^{-1}$ se tiene la distancia de Mahalanobis.
- (iii) $\mathbf{A} = \operatorname{diag}(1/p)$ se tiene la distancia **Euclidiana Media**.



15 / 55



Lina Maria Acosta Avena Análisis Multivariado

variado Semestre 2430

• Distancia de Manhattan o city block:

$$d_{kl} = \sum_{i=1}^{p} |\mathbf{X}_{ik} - \mathbf{X}_{il}|$$

Distancia de Minkowski:

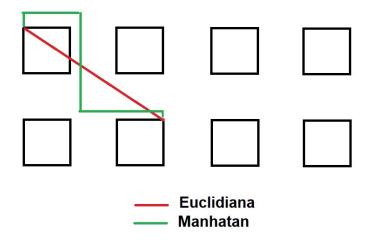
$$d_{kl} = \left(\sum_{i=1}^{p} |\mathbf{X}_{ik} - \mathbf{X}_{il}|^{r}\right)^{1/r} \quad r = 1, 2, \dots$$

Note que si

- r = 1, se tiene la distancia de **Manhatan**.
- r = 2, se tiene la distancia **Euclidiana**.









Una vez se defina la distancia, se **organizan las distancias en una** matriz:

$$\begin{bmatrix} 0 & d_{12} & d_{13} & \cdots & d_{1n} \\ & 0 & d_{23} & \cdots & d_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & d_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

Observe que ésta es una matriz simétrica.



Example

Suponga que para n=4 **personas** se tiene información sobre su edad $(X_1, \text{en a} \tilde{\text{nos}})$, su estatura $(X_2, \text{en metros})$ y su peso $(X_3, \text{en kilogramos})$:

Persona	X_1	X_2	<i>X</i> ₃
A	23	1.69	61
В	40	1.70	72
С	26	1.65	68
D	38	1.68	70





Tenemos

$$\overline{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} 31.75 \\ 1.68 \\ 67.75 \end{bmatrix} \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} 72.25 & 0.08 & 35.58 \\ 0.08 & 0.00 & 0.00 \\ 35.58 & 0.00 & 22.92 \end{bmatrix} \quad \mathbf{R} = \begin{bmatrix} 1.00 & 0.45 & 0.87 \\ 0.45 & 1.00 & 0.03 \\ 0.87 & 0.03 & 1.00 \end{bmatrix}$$

Las distancias Euclidianas:

$$d_{AB} = \sqrt{(23 - 40)^2 + (1.69 - 1.70)^2 + (61 - 72)^2} \approx 20.25$$

$$d_{AC} = \sqrt{(23 - 26)^2 + (1.69 - 1.65)^2 + (61 - 68)^2} \approx 7.62$$

$$d_{AD} = \sqrt{(23 - 38)^2 + (1.69 - 1.68)^2 + (61 - 70)^2} \approx 17.49$$



20 / 55

$$d_{BC} = \sqrt{(40 - 26)^2 + (1.70 - 1.65)^2 + (72 - 68)^2} \approx 14.56$$

$$d_{BD} = \sqrt{(40 - 38)^2 + (1.70 - 1.68)^2 + (72 - 70)^2} \approx 2.83$$

$$d_{CD} = \sqrt{(26 - 38)^2 + (1.65 - 1.68)^2 + (68 - 70)^2} \approx 12.17$$

Por lo tanto, la matriz de distancias Euclidiana:





Observe que:

- La **menor distancia** (personas más cercanas) son B y D ($d_{BD} = 2.83$).
- La **segunda menor distancia** se observa entre las personas A y C ($d_{AC} = 7.62$).
- Las personas **más distantes** son A y B ($d_{AB} = 20.25$).





Observe que:

- La **menor distancia** (personas más cercanas) son B y D ($d_{BD} = 2.83$).
- La **segunda menor distancia** se observa entre las personas A y C ($d_{AC} = 7.62$).
- Las personas **más distantes** son A y B ($d_{AB} = 20.25$).

Recuerde que las variables X_1, X_2, X_3 están **medidas en diferentes escalas**. Así que se deben **estandarizar**, por lo cuál calculamos la distancia de **Mahalanobis**:

Observe que:

• con la distancia de **Mahalanobis**, la **mayor distancia** es entre las personas B y D ($d_{BD} = 15.62$), mientras que con la distancia **Euclidiana**, estas dos personas presentaban las **menores distancias**.

Observe que:

- con la distancia de **Mahalanobis**, la **menor distancia** se observa entre las personas A y C ($d_{AC} = 6.36$)
- con la distancia de Mahalanobis, la segunda menor distancia (7.21) se observa entre las personas A y B, las cuales eran las más altas en la distancia Euclidiana.



```
X<-Datos[.-1]
Xbarra<-colMeans(X)
S \leftarrow round(cov(X), 2)
R < -round(cor(X), 2)
require(abdiv)
dAB \leftarrow round(euclidean(X[1,],X[2,]),2)
dAC<-round(euclidean(X[1.].X[3.]).2)
dAD \leftarrow round(euclidean(X[1,],X[4,]),2)
dBC \leftarrow round(euclidean(X[2,],X[3,]),2)
dBD \leftarrow round(euclidean(X[2,],X[4,]),2)
dCD<-round(euclidean(X[3,],X[4,]),2)
```





Coeficientes de Concordancia/Asociación:

Cuando las variables son nominales, usamos medidas de similaridad. En general, las unidades/observaciones son comparadas de acuerdo con la presencia o ausencia de ciertas características, éstas pueden ser representadas por una variable binária (dummy): 0 (de ausencia) y 1 (presencia). Las variables dummy son resumidas en una tabla de doble entrada, una para cada par de observaciones/unidades. Las observaciones "parecidas" deben tener en común más variables que concuerdan que no concuerdan.



Example

Supponga que se tienen n=2 unidades/observaciones, para los cuales se tiene la siguiente información:

Obs	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	<i>X</i> ₇	X_8	X_9	X_{10}
1	0	1	1	1	1	0	1	0	0	0
2	0	0	1	1	1	0	1	1	0	0

Al comparar estas dos observaciones se tiene:

- ullet ambas tengan presente el carácter comparado: (1,1)
- ullet ambas tengan ausente el carácter comparado: (0,0)



27 / 55

6 . 0420

- La primera tenga presente el carácter comparado y la segunda no lo tenga: (1,0).
- la prirmera no tenga presente el carácter comparado y la segunda lo tenga: (0,1).

Resumimos las frecuencias de estas características:

Obs 1	Obs 2				
ODS 1	1	0			
1	a = 4	b=1			
0	c = 1	d=4			





De ahí tenemos que el **índice/coeficiente** de **concordancias/similitud** entre las observaciones k = 1 y l = 2 es:

$$S_{k,l} = \frac{a+d}{a+b+c+d} = \frac{4+4}{4+1+1+4} = \frac{8}{10} = 0.80$$

Ésta medida es conocida como

Coeficiente de Similitud Simple (S)

Claramente $0 \le S_{k,l} \le 1$. Cuanto mayor sea el valor de $S_{k,l}$, mayor es la similaridad entre las observaciones k = 1 y l = 2.

Algunas veces, el 0 no es tan informativo como el 1, en otras palabras el par (0,0) puede no representar una concordancia (aveces los individuos tienen características diferentes). Por ejemplo, si

$$X = \begin{cases} 1 & \text{, tiene ojos azules} \\ 0 & \text{, no tiene ojos azules} \end{cases}$$

Así que

(1,1): ambos individuos tienen ojos azules

(0,0): puede ser (negro,café)



Omitiendo/excluyendo el par (0,0) tenemos el coeficiente de Jaccard:

$$J_{kl} = \frac{a}{a+b+c} = \frac{4}{4+1+1} = \frac{4}{6} \approx 0.67$$

Claramente $0 \le J_{k,l} \le 1$. Cuanto mayor sea J_{kl} , mayor es la similaridad de las observaciones k y l. Este coeficiente es quizás el más utilizado.





Existen otras medidas de similaridad:

√ Roger y Tanimoto: considere más importante las diferencias.

$$RT_{kl} = \frac{a+d}{a+2b+2c+d}$$

Asume valores entre 0 y 1.

✓ Sorense y Dice: considera de mayor importancia a las coincidencias en estado de presencia.

$$SD_{kl} = \frac{2a}{2a+b+c}$$

Asume valores entre 0 y 1.



Medidas de Similitud y Disimilitud

✓ Sokal y Sneath: Tiene más en cuenta las coincidencias, tanto por presencia como por ausencia de las características:

$$SS_{kl} = \frac{2(a+d)}{2(a+d)+c+d}$$

Asume valores entre 0 y 1.

√ Hamann: considera importante las diferencias entre coincidencias y no coincidencias.

$$H_{kl} = \frac{(a+d)-(c+b)}{a+b+c+d}$$

Asume valores entre -1 y 1.



Semestre 2430

Medidas de Similitud y Disimilitud

Cuando se tienen variables cualitativas y cuantitativas al mismo tiempo, se tienen las siguientes alternativas:

- 1. Transformar las variables cualitativas en cuantitativas por medio de atritutos numéricos a las categorías.
- 2. Transformar las variables cuantitativas en variables cualitativas a través de la categorizacion (usando algún criterio) de sus valores.
- 3. Construir medidas de similaridad mixtas y emplearlas para la comparación de las unidades/observaciones (combinación lineal de las variables cuantitativas (q) y cualitativas(p)):

$$c(A, B) = w_p \underbrace{c_p(A, B)}_{\text{Coef. Var. Cuant}} + w_q \underbrace{c_q(A, B)}_{\text{Coef. Var. Cual}}$$

donde

$$w_p = rac{p}{p+q} \qquad w_q = rac{q}{p+q}$$



Técnicas/Métodos de Agrupamiento

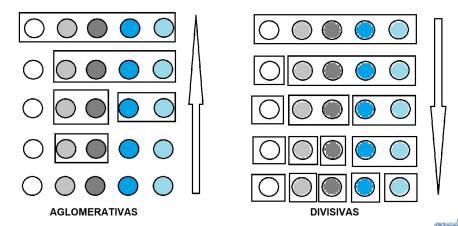


35 / 55



Las técnicas de para la construcción de conglomerados o cluster son clasificadas en:

- 1. **Jerarquicas:** usualmente usadas como exploratorias y su finalidad es identificar los posibles agrupamientos y el número probable de grupos (g). Existen técnicas jerarquicas agromerativas (cada unidad/observación forma un cluster y se empiezan aglomerar) y divisivas (el conjunto de datos es un cluster que se empieza a dividir).
- 2. **No-Jerarquicas:** el número de grupos (g) es predefinido por el investigador.





Técnicas Jerarquicas Aglomerativas:

- EL proceso incia considerando que se tienen n conglomerados, es decir, cada unidad/observación es considerada un cluster de tamaño 1.
- En cada paso del algoritmo, las unidades van siendo agrupadas, hasta que todas las unidades son consideradas como un único grupo.
- En el primer paso se tiene la menor dispersión interna posible, mientras que en el último se tienen la mayor.
- En cada etapa, los grupos son comparados a través de alguna medida de similaridad previamente definida.

Básicamente el algoritmo es el siguiente:

- Cada observación constituye un cluster.
- En cada paso, los pares de conglomerados más similares son combinados y pasan a constituir un cluster. Se forma un nuevo conglomerado en cada paso, así que en cada paso del proceso el número de conglomerados va disminuyendo.

Note que en cada etapa del algoritmo, cada nuevo conglomerado formado es un agrupamiento de conglomerados formado en las etapas anteriores, ésta es la **jerarquía**. A partir de esta jerarquía, se puede construir un gráfico llamado **Dendrograma**, el cuál representa ese árbol de agrupamiento. Este gráfico permite definir el número de grupos (g).

Existen varios métodos de agrupamiento jerarquicos:

• Enlace Simple (Single Linkage) o vecino más cercano:

La <u>similaridad</u> entre <u>dos conglomerados</u> es definida por las dos unidades más parecidas entre sí.

Suponga que en un determinado paso del algoritmo de agrupamiento, se tienen g=2 grupos:

$$G_1: \mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2$$

$$\textit{G}_2: \boldsymbol{X}_3, \boldsymbol{X}_4, \boldsymbol{X}_5$$

La distancia entre los dos grupos es

$$d(G_1, G_2) = \min\{d(\mathbf{X}_I, \mathbf{X}_k)\}\ I \neq k, I = 1, 2, k = 3, 4, 5$$

donde X_l son las observaciones de G_1 y X_k son las observaciones de G_2 .

 Enlace Completa (Complete Linkage) o vecino más lejano:

La <u>similaridad entre dos conglomerados</u> es definida por las dos <u>unidades menos semejantes</u> entre sí.

Para nuestro ejemplo ilustrativo

$$d(G_1, G_2) = \max\{d(\mathbf{X}_l, \mathbf{X}_k)\}\ l \neq k, l = 1, 2 \ k = 3, 4, 5$$





• Distancias Medias (Average Linkage):

Trata las <u>distancias</u> entre dos <u>conglomerados</u> como la media de las distancias entre todos los pares de unidades que pueden ser formados con las unidades de los dos conglomerados que están siendo comparados:

$$d(G_1, G_2) = \sum_{I \in G_1} \sum_{k \in G_2} \frac{1}{n_1 n_2} d(\mathbf{X}_I, \mathbf{X}_k)$$

Para nuestro ejemplo ilustrativo

$$d(G_1, G_2) = \frac{1}{6} \left[d(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_3) + d(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_4) + d(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_5) + d(\mathbf{X}_2, \mathbf{X}_3) + d(\mathbf{X}_2, \mathbf{X}_4) + d(\mathbf{X}_2, \mathbf{X}_5) \right]$$



Positificial Universidad
JAVERIANA
Boyon

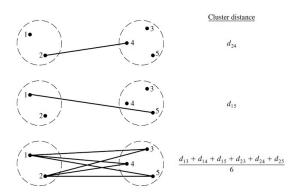


Figura: Figura 12.2 de Johnson and Wichern (2013). Applied Multivariate Statistical Analysis, pp. 681

JAVENIANA

43 / 55

Método de Ward:

Busca que la partición produzca grupos lo más homogeneos posibles de tal forma que las unidades dentro de cada grupo sean homogeneos. Es decir, en cada paso se agrupan conglomerados que minimicen la varianza de los grupos.

En general:

- ✓ El método de ligación simple es incapaz de delinear grupos pocos separados
- ✓ El método de ligación completa tiende a producir conglomerados de aproximadamente el mismo diámetro, además que en los primeros pasos, tiende aislar datos discrepantes de la muestra.

- ✓ El método de la media de las distancias, tienen a producir conglomerados de aproximadamente la misma varianza interna y produce mejores particiones que los métodos de ligación simple y completa.
- ✓ Los métodos de ligación simples, completa y de la media pueden ser utilizados para variables cualitativas y cuantitativas.
- ✓ El método de Ward es recomendado sólo para variables cuantitativas y tiende a producir grupos con aproximadamente el mismo número de unidades.



Semestre 2430





Lina Maria Acosta Avena Análisis Multivariado Semestre 2430 46 / 55

Criterios para determinar el **número de conglomerados/cluster**:

- El gráfico de Dendrogramas:
 - Este gráfico es el más utilizado para describir los resultados de un cluster jerarquico.
 - El eje vertical indica el nivel de similaridad (o disimilaridad) y en el eje horizontal se colocan las unidades/observaciones en un orden conveniente relativa a la historia de agrupamiento.
- Análisis del Comportamiento del Coeficiente de Fusión:
 Se grafica el número de conglomerados de un árbol jerárquico versus el nivel de la distancia (nivel de fusión) del agrupamiento de cada etapa del proceso, y se puede visualizar si hay puntos de salto relativamente grandes con relación a los demás valores de distancia.

Example

Considere que se tienen n=4 unidades/observaciones y que se tiene la matriz de distancias simples (vecino más cercano)





Observe que la menor distancia es

$$d(A, B) = 2$$

Así que el primer cluster es $\{C, E\}$ y

pues

$$\begin{split} \min\{d(A,CE)\} &= \min d(A,C), d(A,E) = \min\{3,11\} = 3 \\ \min\{d(B,CE)\} &= \min d(B,C), d(B,E) = \min\{7,10\} = 7 \\ \min\{d(D,CE)\} &= \min d(D,C), d(D,E) = \min\{9,8\} = 8 \end{split}$$

La menor distancia es

$$d(A, CE) = 3$$

Así que el segundo cluster es $\{CE, A\}$ y

$$\begin{array}{c|cccc}
CEA & B & D \\
CEA & 0 & & \\
B & 7 & 0 & \\
D & 6 & 5 &
\end{array}$$

pues

$$\min\{d(\textit{CEA}, \textit{B})\} = \min d(\textit{C}, \textit{B}), d(\textit{E}, \textit{B}), d(\textit{A}, \textit{B}) = \min\{7, 10, 9\} = 7 \\ \min\{d(\textit{CEA}, \textit{D})\} = \min d(\textit{C}, \textit{D}), d(\textit{E}, \textit{D}), d(\textit{A}, \textit{D}) = \min\{9, 8, 6\}$$

Note que la menor distancia es

$$d(B,D)=5$$

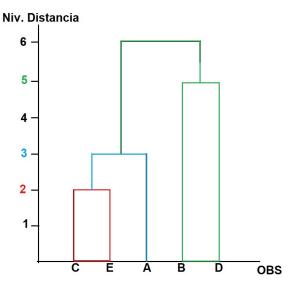
y por lo tanto el tercer y último cluster es $\{B, D\}$.

Resumiendo

Pasos	No. Grupos Formados	Obs. Fusionadas	Nivel de Distancia
1	4	{ <i>C</i> } y { <i>E</i> }	2
2	3	{ <i>CE</i> } y { <i>A</i> }	3
3	2	{ <i>CEA</i> } y { <i>BD</i> }	6

Por lo tanto, el **Dendrograma** es







```
x < -matrix(c(0.9.3.6.11.
            9. 0. 7. 5. 10.
            3, 7, 0, 9, 2,
            6. 5. 9. 0. 8.
             11.10.2. 8. 0).ncol=5)
dimnames(x)<-list(paste("Obs",1:5,sep=""),</pre>
                   paste("Obs",1:5,sep=""))
y<-as.dist(x)
# Enlace simple (vecino mas cercano):
cl<-hclust(y,</pre>
           method = "single",
           members = NULL)
plot(cl,hang = -1)
```



```
data("USArrests")
head(USArrests)
Datos <- scale (USArrests)
D<-dist(Datos)
cl<-hclust(D)
plot(cl)
g<-cutree(cl,4)
table(g)
Data cluster<-cbind(USArrests,g)
aggregate(USArrests, by=list(cluster=g), mean)
```





Semestre 2430

