Análisis Multivariado

ID 033521 - Clase 4901

Lina Maria Acosta Avena

Ciencia de Datos Departamento de Matemáticas Pontificia Universidad Javeriana

Semana 3: 29/07/24 - 03/08/24



1/54



Lina Maria Acosta Avena Análisis Multivariado Semestre 2430

Recuerde que, para evaluar la normalidad,

- √ en el caso univariado tenemos
 - **Gráficos**: Histograma, Boxplots y Q-Q plot (*n* grandes).
 - Pruebas de Hipótesis: Shapiro-Wilk, Kolmogorov-Smirnoff, Anderson-Darling, entre otras.
- √ en el caso bivariado podemos (informalmente)
 - construir el diagrama de dispersión entre las dos variables y observar si se forma una elipse (sospecha de normalidad bivariada).
 - construir el Q-Q plot con los valores de las distancias de Mahalanobis con las respectivas ordenadas de los cuantiles de la distribución chi-cuadrado.

2/54

Observaciones:

- En el Q-Q plot se grafican los cuantiles muestrales contra los cuantiles (teóricos) que se esperaría observar si las observaciones realmente provienen de una distribución particular.
- Si en el Q-Q plot se forma una recta, hay sospecha de la distribución en cuestion, en caso contrario, hay indicios de desvíos de la distribución en cuestion.
- En este gráfico también se pueden detectar outliers.



Semestre 2430

Tenga presente que normalidad univariada o bivariada \underline{NO} implican que el vector aleatorio $\mathbf{X}_{p\times 1}$ siga una normal mutivariada. Sin embargo, Si las observaciones fueran generadas por un distribución **normal multivariada**, \underline{TODAS} las distribuciones **bivariadas** deberían ser **normales** y los **contornos** de densidad constante deberían ser **elipses**.



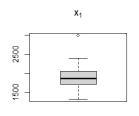
Example

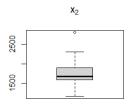
Los datos del archivo Rigidez.xlsx corresponden a 4 medidas de rigidez de n=30 tablas. La primera medición (x_1) implica enviar una onda de choque hacia abajo por la tabla, la segunda medición (x_2) se determina mientras se hace vibrar a la tabla y las dos últimas mediciones (x_3,x_4) se obtienen a partir de pruebas estáticas.

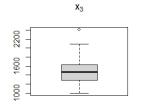
Obs: Example 4.14 de Johnson and Wichern (2014), Applied Multivariate Statistical Analysis, 6th Edition, pp. 186

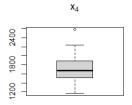


```
# --- Example 4.14 from Johnson and Wichern --- #
require(tidyverse)
Rigidez <- read excel("D:/Desktop/Rigidez.xlsx")</pre>
Datos<-Rigidez %>% as.data.frame()
# --- Boxplot
par(mfrow=c(2,2))
boxplot(Datos$x1, main=expression(x[1]),xlab="",ylab="")
boxplot(Datos$x2, main=expression(x[2]),xlab="",ylab="")
boxplot(Datos$x3, main=expression(x[3]),xlab="",ylab="")
boxplot(Datos$x4, main=expression(x[4]),xlab="",ylab="")
```







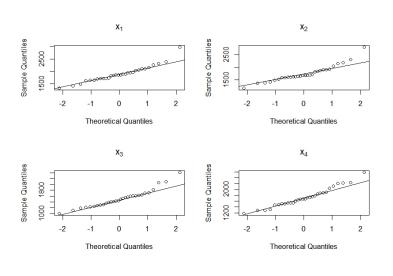






```
# --- QQplot
par(mfrow=c(2,2))
qqnorm(Datos$x1, main=expression(x[1]))
qqline(Datos$x1)
qqnorm(Datos$x2, main=expression(x[2]))
qqline(Datos$x2)
qqnorm(Datos$x3, main=expression(x[3]))
qqline(Datos$x3)
qqnorm(Datos$x4, main=expression(x[4]))
qqline(Datos$x4)
```







La linealidad del Q-Q plot se puede medir calculando el coeficiente de correlación para los puntos del gráfico:

$$r_{Q} = \frac{\sum\limits_{j=1}^{n} \left(x_{(j)} - \overline{x}\right) \left(q_{(j)} - \overline{q}\right)}{\sqrt{\sum\limits_{j=1}^{n} \left(x_{(j)} - \overline{x}\right)^{2}} \sqrt{\sum\limits_{j=1}^{n} \left(q_{(j)} - \overline{q}\right)^{2}}}$$

donde

- $x_{(j)}$ es la j-ésima observación ordenada
- $q_{(j)}$ es el cuantil de la normal para la posición (j-0.5)/n
- \overline{x} es la media de $x_{(j)}$
- ullet q es la media de $q_{(j)}$





La hipótesis de normalidad

 H_0 : Los datos <u>provienen</u> de una poblacion <u>Normal</u>

 H_1 : Los datos NO provienen de una Poblacion Normal

es **rechazada** a un nivel de significancia α , cuando

$$r_Q < r_Q(\alpha, n)$$

donde $r_Q(\alpha, n)$ son los valores de la Tabla 4.2 de Johnson and Wichern (2013), Applied Multivariate Statistical Analysis, pp. 181:





Semestre 2430

Sample size n	Significance levels α			
	.01	.05	.10	
5	.8299	.8788	.9032	
10	.8801	.9198	.9351	
15	.9126	.9389	.9503	
20	.9269	.9508	.9604	
25	.9410	.9591	.9665	
30	.9479	.9652	.9715	
35	.9538	.9682	.9740	
40	.9599	.9726	.9771	
45	.9632	.9749	.9792	
50	.9671	.9768	.9809	
55	.9695	.9787	.9822	
60	.9720	.9801	.9836	
75	.9771	.9838	.9866	
100	.9822	.9873	.9895	
150	.9879	.9913	.9928	
200	.9905	.9931	.9942	
300	.9935	.9953	.9960	





Para los datos del ejemplo tenemos

	X_1	X_2	<i>X</i> ₃	X_4
r_Q	0.9599	0.9504	0.9635	0.9803

Observe que para los niveles de significancia del 5 % y del 10 %, sólo X_4 provendría de una población normal; mientras que al 1 %, las 4 variables serían normales.



```
#--- linealidad del QQplot - r Q
x j<-sort(Datos$x1)</pre>
x barra<-mean(x j)</pre>
q<-c()
for(j in 1:30){
                 q[j] < -qnorm((j-0.5)/30)
q barra<-mean(q)</pre>
num rQ<-sum((x j-x barra)%*%(q-q barra))
den rQ<-(sqrt(sum((x j-x barra)^2)))*</pre>
         (sqrt(sum((q-q barra)^2)))
r Q<-num rQ/den rQ
```



Semestre 2430

Por otro lado, podemos probar (**formalmente**) las hipótesis de **normalidad univariada** (para cada X_i) usando la prueba de **Shapiro-Wilk**:

```
shapiro.test(Datos$x1); shapiro.test(Datos$x2)
shapiro.test(Datos$x3); shapiro.test(Datos$x4)
```

De ahí se tiene que

$$p - \text{valor}_{x_1} = 0.05118$$
 $p - \text{valor}_{x_2} = 0.01746$
 $p - \text{valor}_{x_3} = 0.05805$ $p - \text{valor}_{x_4} = 0.33370$

Observe que para un nivel de significancia del 5% las distribuciones marginales de X_1 , X_3 y X_4 son normales. X_2 es normal a un nivel de significancia del 1%.



16 / 54



Si las observaciones fueran generadas por un distribución **normal multivariada**:

- ✓ Cada una de las distribuciones bivariadas serían normales y los contornos de densidad constante deberían ser elipses.
- √ El scatterplot de cada par de variables debería mostrar un patrón aproximadamente elíptico.
- √ el conjunto de puntos bivariados x tal que

$$(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^{\top} \mathbf{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \leq \chi_2^2(\alpha)$$

tendrá una **probabilidad** α .



Semestre 2430

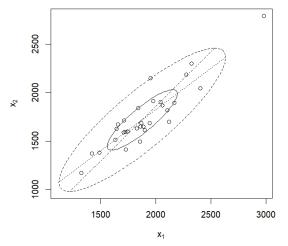
Por ejemplo, si $\underline{\alpha=0.5}$, se esperaría que alrededor del 50 % de las observaciones caigan dentro de la elipse

$$(\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}})^{\top} \, \mathsf{S}^{-1} (\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}}) \leq \chi_2^2(0.5)$$

En caso contrario, la normalidad es considerada sospechosa. En otras palabras, si los datos proceden de una distribución normal, el 50 % de las distancias calculadas deberian ser $\leq 1.39 = \chi_2^2$.

qchisq(0.5,2)
[1] 1.386294











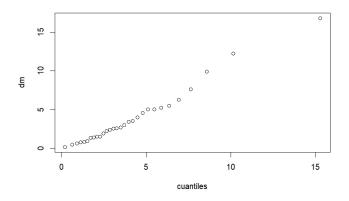
Más **formalmente**, para evaluar la **normalidad conjunta** (*p* variables)

√ se pueden calcular las distancias cuadráticas generalizadas

$$d_j^2 = (\mathbf{x}_j - \overline{\mathbf{x}})^{\top} S^{-1}(\mathbf{x}_j - \overline{\mathbf{x}})$$
 $j = 1, \dots, n$

las cuales deben seguir una distribución χ_p^2 . Bajo normalidad, el gráfico debería mostrar un patrón lineal a través del origen y pendiente 1. Patrones por fuera de la linealidad sugieren falta de normalidad.







```
# --- QQplot normal multivariada
X<-as.matrix(Datos)
Xbarra<-colMeans(X)
S<-cov(X)
dm<-mahalanobis(X,Xbarra,S)
cuantiles<-qchisq(ppoints(length(X)),df=4)
qqplot(cuantiles,dm)</pre>
```



√ se puede probar las hipótesis

 H_0 : Los datos provienen de una poblacion Normal Multivariada

 H_1 : Los datos $\underline{\mathsf{NO}}$ provienen de una poblacion $\underline{\mathsf{Normal}}$ Multivariada

o matemáticamente

 $\mathsf{H}_0\,:\,\mathsf{X}_{
ho imes1}\sim\mathsf{N}_{
ho}(oldsymbol{\mu},oldsymbol{\Sigma})$

 $\mathsf{H}_1: \mathbf{X}_{p imes 1} \mathscr{S} \mathsf{N}_p(\mu, \mathbf{\Sigma})$





√ se puede probar las hipótesis

 H_0 : Los datos provienen de una poblacion $\underline{\operatorname{Normal\ Multivariada}}$

 H_1 : Los datos $\underline{\mathsf{NO}}$ provienen de una poblacion $\underline{\mathsf{Normal}}$ Multivariada

o matemáticamente

 $\mathsf{H}_0\,:\, \mathbf{X}_{
ho imes 1} \sim \mathsf{N}_{
ho}(oldsymbol{\mu}, oldsymbol{\Sigma})$

 $\mathsf{H}_1: \mathbf{X}_{p imes 1} \mathscr{S} \mathsf{N}_p(\mu, \mathbf{\Sigma})$

Existen varias estadísticas de pruebas y varios paquetes para probar estas hipótesis, dentro de los cuales tenemos:



```
# ---- Prueba de Shapiro ---- #
require(mvShapiroTest)
mvShapiro.Test(X)
# ---- Otras Pruebas ---- #
require(MVN)
mvn(X. mvnTest="mardia")
                           # test de Mardia
mvn(X. mvnTest="hz")
                           # test de Henze-Zirkler
mvn(X, mvnTest="royston")
                           # test de Royston
mvn(X, mvnTest="dh")
                           # test de Doornik-Hansen
```

Más detalles en Selcuk et al (2014), MVN An R Package for Assessing Multivariate Normality, The R Journal, vol. 6(2)



25 / 54

En el QQplot anterior, los dos **puntos más distantes** corresponden a las **distancias** más **grandes** (observaciones 9 y 16).

```
> dm
 Г17
      0.5986403
                  5.4765410
                              7.6242571
                                          5.2337826
                                                      1.3985786
 [6]
      2.2198583
                  5.0205375
                              1.4854047
                                         12.2667558
                                                      0.7650085
Γ117
      1.9291087
                  0.4650468
                              2.6967437
                                          0.1285018
                                                      0.9452695
[16]
     16.8468161
                  3.5024405
                              3.9904867
                                          1.3608102
                                                      1.4745213
[21]
      9.9436642
                  5.0536019
                              0.7971562
                                          2.5484135
                                                      4.5785994
Γ261
      3.4046873
                  2.3799906
                              2.9944696
                                          6.2880650
                                                      2.5822428
```

Las observaciones correspondientes a estas distancias son llamadas **atípicas** y aunque parecieran no pertenecer al patrón de variabilidad que siguen las otras observaciones, **hacen parte del grupo** y pueden conducir a una **mejor comprensión del fenómeno estudiado**.

Semestre 2430





¿Cómo detectar observaciones atípicas?

- ✓ En el caso univariado se pueden construir Boxplot para cada variable.
- ✓ En el caso bivariado el diagrama de dispersión para cada par de variables.
- √ En el caso multivariado:
 - se hacen las estandarizaciones¹ para cada variable

$$z_{jk} = \frac{x_{jk} - \overline{x}_k}{\sqrt{s_{kk}}}$$

y se **examinan conjuntamente todos** los *nk* valores para detectar aquellos inusuales (muy grandes o muy pequeños).

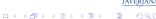
Observación: si n = 100 y p = 5, tendremos np = 500. Para una **normal estándar**

$$P[|Z| > 3] = 0.0026$$

luego **se esperaria** que 1 o 2 sean menores que -3 y mayores que 3, puesto que

$$500 \times 0.0026 = 1.3$$





se calculan las distancias generalizadas

$$d_j^2 = (\mathbf{x}_j - \overline{\mathbf{x}})^{\top} S^{-1}(\mathbf{x}_j - \overline{\mathbf{x}})$$
 $j = 1, \dots, n$

y se **examinan** aquellas que sean **inusualmente más grandes**. Observación: Si n = 100 y p = 5, se debería esperar que 5 observaciones excedan el percentil 0.05-superior de la distribución chicuadrado.

Note que $d_{16}^2=16.85>14.86=\chi_4^2(0.005)^2$ por lo que se considera una observación atípica multivariada.

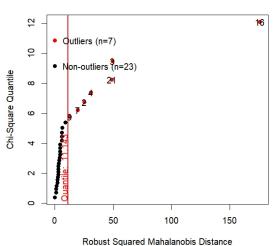
Podemos detectar los outliers multivariados gráficamente:

El gráfico

- considera una **Distancia** de **Mahalanobis Robusta**, esto es, considera <u>vector de medias</u> y <u>matriz de covarianas robustas</u>.
- crea un punto de corte a partir del cual identifica los outlier

Lina Maria Acosta Avena

Chi-Square Q-Q Plot





32 / 54



Semestre 2430

Transformaciones

¿Como proceder si no se cumple el supuesto de normalidad?

✓ Si se ignora y se **continúa** como si se cumpliera, las **conclusiones** pueden ser incorrectas.



Transformaciones

¿Como proceder si no se cumple el supuesto de normalidad?

- ✓ Si se ignora y se **continúa** como si se cumpliera, las **conclusiones** pueden ser incorrectas.
- √ Hacer transformaciones sobre los datos originales para tratar de aproximarlos a la normalidad. Éstas transformaciones pueden ser sugeridas por los mismos datos o por consideraciones teóricas.



Semestre 2430

Transformaciones





Dentro de las consideraciones teóricas están

Escala original	Escala transformada		
x es de conteo	\sqrt{x}		
\hat{p} es una proporción	$\operatorname{logit}(\hat{p}) = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\hat{p}}{1-\hat{p}} \right)$		
r correlaciones	$z(r)^3 = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+r}{1-r} \right)$		



³Transformación de Fisher

Existe una familia de transformaciones potenciales, conocida como transformación de Box-Cox:

$$x^{\lambda} = \begin{cases} \frac{x^{\lambda} - 1}{\lambda} &, \lambda \neq 0\\ \ln(\lambda) &, \lambda = 0 \end{cases}$$

la cual es **continua** en λ para x > 0.





La **solución Box-Cox** para escoger la **transformación** λ **adecuada** es aquella que maximiza el logaritmo de la función de verosimilitud de una normal después de haberla maximizado con respecto a los parámetros. Esto es:

$$I(\lambda) = -rac{n}{2} \ln \left[rac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} \left(x_j^{\lambda} - \overline{x^{\lambda}}
ight)^2 + (\lambda - 1) \sum_{j=1}^{n} \ln(x_j) \right]$$

donde

$$\overline{x^{\lambda}} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} x_j^{\lambda}$$

es la media de las observaciones transformadas.



```
En R, obetenemos el valor de \underline{\lambda} usando
```

```
# ---- Transformación BoxCox ---- #
require(car)
powerTransform(Datos$x2)
Estimated transformation parameter
   Datos$x2
-0.7756761
```

observe que para X_2 , $\lambda = -0.77$.

Ejercicio: Haga la transformación y repita la verificación de normalidad.



Es evidente que la **transformación de Box-Cox** antes presentada es para el caso **univariado**.



Es evidente que la **transformación de Box-Cox** antes presentada es para el caso **univariado**.

¿Cómo hacer la transformación en el caso multivariado?



Es evidente que la **transformación de Box-Cox** antes presentada es para el caso **univariado**.

¿Cómo hacer la transformación en el caso multivariado?

Para el caso multivariado, se **aplica el procedimiento anterior para cada una de las variables**. Asi que se tendrán

$$\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_p$$

transformaciones y por lo tanto la $\underline{j-\acute{e}sima}$ **observación transformada** es:

$$x_j^{\lambda} = egin{bmatrix} rac{x_{j1}^{\lambda_1}-1}{\lambda_1} \ rac{x_{j2}^{\lambda_2}-1}{\lambda_2} \ rac{x_{jp}^{\lambda_p}-1}{\lambda_p} \end{bmatrix}$$

Observación: Aunque normalidad univariada no implica normalidad multivariada, en aplicaciones prácticas esto puede ser suficiente.



40 / 54

Lina Maria Acosta Avena Análisis Multivariado Semestre 2430





Cuando las variables X_i e X_k son **normales univariadas** se puede probar la **significancia** de los **coeficientes de correlación** a través de una prueba de hipótesis:

 $H_0: \rho_{ik} = 0$

 $H_1:\,\rho_{ik}\neq 0$

Usando la **estadística de prueba**

$$t = r_{ik} \sqrt{\frac{n-2}{1-r_{ik}^2}} \stackrel{H_0 \, \mathrm{verd.}}{\sim} t_{(n-2)}$$
 ; $r_{ik} = \frac{s_{ik}}{s_{ii}s_{kk}}$





y el p-valor

$$p - \text{valor} = 2 P \left[t_{(n-2)} > |t| \right]$$

Observación: el procedimiento se debe hacer para todos los pares de variables.

Para los datos de Rigidez, se deben hacer 6 pruebas de hipótesis.





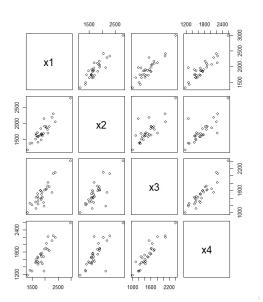
Antes de hacer las pruebas de hipótesis, vamos a dar una mirada a las **correlaciones muestrales** entre éstas variables:

$$\mathsf{R} = \begin{bmatrix} 1.00 & 0.91 & 0.89 & 0.90 \\ 0.91 & 1.00 & 0.79 & 0.79 \\ 0.89 & 0.79 & 1.00 & 0.92 \\ 0.90 & 0.79 & 0.92 & 1.00 \end{bmatrix}$$

Observe que **todas los pares** de variables tienen una **correlación** (muestral) **lineal positiva y fuerte**.



Semestre 2430







Verificamos si esas correlaciones son significativas o no.

Tenemos

	ρ_{12}	ρ_{13}	ρ_{14}	ρ_{23}	ρ_{24}	ρ_{34}
p-valor	1.807e-12	7.429e-11	1.688e-11	2.324e-07	2.337e-07	3.637e-13

Observe que en todos los casos

$$p - \text{valor} < 0.05 = \alpha$$
,

por lo tanto todas las correlaciones son significativas.



46 / 54

Lina Maria Acosta Avena Análisis Multivariado Semestre 2430

La aplicación de las **técnicas multivariadas** exigen que las **variables** estén **correlacionadas** entre sí de algún modo. Esto no significa que todas deban ser correlacionadas, sólo algunas. Pues, si ellas <u>NO</u> están <u>correlacionadas</u> son independientes y por lo tanto se puede hacer el análisis de forma separada.



Cuando

$$\mathbf{X}_{
ho imes1}\sim\mathsf{N}_{
ho}(oldsymbol{\mu},oldsymbol{\Sigma})$$

se pueden construir **pruebas de hipótesis** para evaluar la **matriz de correlación poblacional**

$$\mathbf{P}_{\rho \times \rho} = \begin{bmatrix} 1 & \rho_{12} & \cdots & \rho_{1\rho} \\ \rho_{21} & 1 & \cdots & \rho_{2\rho} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{\rho 1} & \rho_{\rho 2} & \cdots & 1 \end{bmatrix}_{\rho \times \rho}$$



esto es

$$\mathsf{H}_0: \, \mathbf{P}_{p \times p} = \mathsf{I}_{p \times p}$$
 $\mathsf{H}_1: \, \mathbf{P}_{p \times p} \neq \mathsf{I}_{p \times p}$

En este caso, en H_0 se está asumiendo que $\rho_{ik}=0 \ \forall i\neq k$, $i,k=1,2,\ldots,p$. Es decir, que las k variables no son correlacionadas.



esto es

$$\mathsf{H}_0: \, \mathsf{P}_{p \times p} = \mathsf{I}_{p \times p}$$
 $\mathsf{H}_1: \, \mathsf{P}_{p \times p} \neq \mathsf{I}_{p \times p}$

En este caso, en H_0 se está asumiendo que $\rho_{ik}=0 \ \forall i\neq k$, $i,k=1,2,\ldots,p$. Es decir, que las k variables no son correlacionadas.

Para probar estas hipótesis tenemos la **prueba de Bartlett**, también conocida como **prueba de Esfericidad**, cuya estadística de prueba está dada por:

$$T = -\left[n - 1 - \frac{2p + 5}{6}\right] \ln\left(|\mathsf{R}|\right) \stackrel{H_0 \, \mathrm{verd}}{\sim} \chi_{\frac{1}{2}p(p-1)}$$

Para los datos de rigidez:

$$H_0: \mathbf{P}_{4\times 4} = I_{4\times 4}$$

 $H_1: \mathbf{P}_{4\times 4} \neq I_{4\times 4}$

```
# ---- Prueba de Esfericidad ---- #
require(psych)
cortest.bartlett(cor(Datos), n=30)
```

```
$chisq
[1] 147.9593
```





\$p.value

[1] 2.089248e-29

\$df

[1] 6

Observe que

$$p - \text{valor} = 2.089248e - 29 < 0.05 = \alpha$$

entonces hay suficiente evidencia en la muestra para decir que

$$\textbf{P}_{4\times4}\neq\textbf{I}_{4\times4}$$



Semestre 2430

Ejercicio:

Los datos USairpollution del paquete HSAUR3 fueron colectados para un estudio sobre la contaminación del aire en ciudades de los Estados Unidos. Se obtuvieron las siguientes variables para 41 ciudades:

- **SO2:** contenido de SO2 del aire en microgramos por metro cúbico,
- temp: temperatura media anual en grados Fahrenheit,
- manu: número de empresas manufactureras que emplean a 20 o más trabajadores,
- popul: tamaño de la población (censo de 1970) en miles,



- wind: velocidad media anual del viento en millas por hora,
- precip: precipitación media anual en pulgadas;
- predays: número medio de días con precipitaciones al año

La pregunta de mayor interes era ¿cómo se relaciona el nivel de contaminación medido por la concentración de dióxido de azufre con las otras seis variables? la cual sugiere la aplicación de una regresión lineal múltiple, donde SO2 sería la variable de respuesta y las otras 6 variables serian las variables independientes o explicativas



Semestre 2430

recuerde que en en regresión lineal multiple, la variable **respuesta es aleatoria y las explicativas son son fijas**. Como en la práctica, rara vez las variables son fijas, los resultados de este modelo se interpretan como condicionales a los valores observados de las variables explicativas. Por lo tanto, trataremos todas las variables como aleatorias.

- a. verifique correlación univariada y multivariada, utilice gráficos y pruebas formales.
- verifique normalidad univariada y multivariada, usando gráficos y pruebas formales.



Semestre 2430