Tema 6: Distancias estadísticas y MDS

(Análisis de Coordenadas Principales)

Aurea Grané
Departamento de Estadística
Universidad Carlos III de Madrid

Distancias estadísticas

El concepto de distancia entre objetos o individuos permite interpretar geométricamente muchas técnicas clásicas del análisis multivariante, equivalentes a representar estos objetos como puntos de un espacio métrico adecuado.

Esta interpretación es posible no solamnente cuando se dispone de variables cuantitativas, sino también, y sobretodo, cuando las variables observadas son de tipo más general, o incluso cuando no se dispone de variables propiamente dichas, siempre que tenga sentido obtener una medida de proximidad entre los objetos o individuos.

I. Distancias para variables cuantitativas

Sean $\mathbf{x}_i' = (x_{i1}, \ldots, x_{ip})$ $\mathbf{x}_j' = (x_{j1}, \ldots, x_{jp})$ las observaciones de dos objetos o individuos i, j, resultado de medir p variables $X_1, \ldots, X_p$ sobre ellos.

La distancia euclídea

$$\delta_E^2(i,j) = \sum_{k=1}^{p} (x_{ik} - x_{jk})^2 = (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)' (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j),$$

no es recomendable cuando las X_j son las variables originales porque:

- no es invariante frente a cambios de escala de las variables,
- presupone que las variables son incorrelacionadas y de varianza unidad.

La distancia de Minkowski

$$\delta_{m_q}(i,j) = \left(\sum_{k=1}^{p} |x_{ik} - x_{jk}|^q \right)^{1/q}, \quad q > 0.$$

Presenta los mismos inconvenientes que δ_E ($\delta_E = \delta_{m_2}$) y, además, es difícilmente euclidianizable (veremos este concepto más adelante). Casos particulares de la distancia de Minkowski son:

Distancia ciudad o de Manhattan ($q = 1$)

$$\delta_{m_1}(i,j) = \sum_{k=1}^{p} |x_{ik} - x_{jk}|$$

Distancia dominante ($q \to \infty$)

$$\delta_{m_\infty}(i,j) = \max\{|x_{i1} - x_{j1}|, \ldots, |x_{ip} - x_{jp}|\}$$

Distancias **invariantes frente a cambios de escala**:

Distancia de Canberra (modificación de la distancia ciudad):

$$\delta_C(i,j) = \sum_{k=1}^{p} \frac{|x_{ik} - x_{jk}|}{|x_{ik}| + |x_{jk}|}$$

Distancia de Karl Pearson (modificación de la distancia euclídea):

$$\delta_K^2(i,j) = \sum_{k=1}^{p} \frac{(x_{ik} - x_{jk})^2}{s_k^2} = (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)' \, \mathbf{S}_0^{-1} \, (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j),$$

donde $\mathbf{S}_0 = \mathsf{diag}(s_1^2, \ldots, s_p^2)$ es la matriz diagonal que contiene las varianzas de $X_1, \ldots, X_p$.

Esta expresión equivale a reescalar cada variable en unidades de desviación típica. El peso que se atribuye a la diferencia entre individuos es mayor cuanto menor es la dispersión en esa variable. Pero sigue suponiendo que las variables están incorrelacionadas.

Distancia de Mahalanobis:

$$\delta_M^2(i,j) = (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)' \, \mathbf{S}^{-1} \, (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j),$$

donde $\mathbf{S}$ es la matriz de covarianzas de la matriz de datos $\mathbf{X}$.

Es adecuada como medida de discrepancia entre datos, porque

- es invariante frente a transformaciones lineales no singulares de las variables,
- $\delta_E = \delta_M$ cuando $\mathbf{S} = \mathbf{I}$, y $\delta_K = \delta_M$ cuando $\mathbf{S} = \mathsf{diag}(s_1^2, \ldots, s_p^2)$,
- tiene en cuenta las correlaciones entre las variables. Por ejemplo, no aumenta por el simple hecho de aumentar el número de variables observadas, sino que solamente aumentará cuando las nuevas variables no sean redundantes con respecto de la información aportada por las anteriores.

II. Distancias para variables binarias

Sean $X_1, \ldots, X_p$ p variables binarias con posibles valores $\{0, 1\}$.

Existen muchísimos coeficientes de similaridad s_{ij} entre dos individuos i, j, calculados a partir de las frecuencias:

$a =$"número de variables con respuesta 1 en ambos individuos",
$b =$"número de variables con respuesta 0 en el individuo i y con respuesta 1 en el individuo j",
$c =$"número de variables con respuesta 1 en el individuo i y con respuesta 0 en el individuo j",
$d =$"número de variables con respuesta 0 en ambos individuos".

Observad que $a + b + c + d = p$.

Algunos coeficientes de similaridad son:

$$\textit{Sokal y Michener:} \quad s_{ij} = \frac{a+d}{p}, \qquad \textit{Jaccard:} \quad s_{ij} = \frac{a}{a+b+c}.$$

Aplicando uno de estos coeficientes a un conjunto de n objetos se obtiene una matriz de similaridades $\mathcal{S} = (s_{ij})_{n \times n}$.

Ejemplo 1: Se han medido 6 variables sobre 3 individuos:

ind.	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6
1	1	1	0	0	1	1
2	1	1	1	0	0	1
3	1	0	0	1	0	1

	a (1,1)			b (0,1)			c (1,0)			d (0,0)		
ind.	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
1	4	3	2	0	1	1	0	1	2	2	1	1
2	3	4	2	1	0	1	1	0	2	1	2	1
3	2	2	3	2	2	0	1	1	0	1	1	3

	a (1,1)			b (0,1)			c (1,0)			d (0,0)		
ind.	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
1	4	3	2	0	1	1	0	1	2	2	1	1
2	3	4	2	1	0	1	1	0	2	1	2	1
3	2	2	3	2	2	0	1	1	0	1	1	3

La matrices de similaridades de Sokal y Michener y de Jaccard son:

$$\mathcal{S}_{Sokal} = \begin{pmatrix} 1 & 0.6667 & 0.5 \\ 0.6667 & 1 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{S}_{Jaccard} = \begin{pmatrix} 1 & 0.6 & 0.4 \\ 0.6 & 1 & 0.4 \\ 0.4 & 0.4 & 1 \end{pmatrix}$$

III. Distancias para variables categóricas

Se mide una variable categórica nominal con k estados excluyentes sobre una muestra de $n = n_1 + \ldots + n_g$ individuos provenientes de g poblaciones diferentes. Se desea obtener una medida de disimilaridad entre estas poblaciones.

En estas condiciones, el vector de frecuencias de cada población $\mathbf{n}_\alpha = (n_{\alpha 1}, \ldots, n_{\alpha k})$, para $\alpha = 1, \ldots, g$, tiene una distribución conjunta multinomial con parámetros $(n_\alpha, \mathbf{p}_\alpha)$, donde $n_\alpha = n_{\alpha 1} + \ldots + n_{\alpha k}$ y $\mathbf{p}_\alpha = (p_{\alpha 1}, \ldots, p_{\alpha k})$ es el vector de probabilidades de los k estados en la población α (con $p_{\alpha 1} + \ldots + p_{\alpha k} = 1$).

Ejemplo 2. Problema 5.3

La siguiente tabla contiene las proporciones génicas observadas entre 10 poblaciones.

	Población	grupo A	grupo AB	grupo B	grupo O
1.	francesa	0.21	0.06	0.06	0.67
2.	checa	0.25	0.04	0.14	0.57
3.	germánica	0.22	0.06	0.08	0.64
4.	vasca	0.19	0.04	0.02	0.75
5.	china	0.18	0.00	0.15	0.67
6.	ainu	0.23	0.00	0.28	0.49
7.	esquimal	0.30	0.00	0.06	0.64
8.	afroamericana	0.10	0.06	0.13	0.71
9.	española	0.27	0.04	0.06	0.63
10.	egipcia	0.21	0.05	0.20	0.54

Observad que las filas suman 1.

Dos medidas de disimilaridad para este tipo de variables son:

la distancia de Bhattacharyya, conocida en genética como distancia de Cavalli-Sforza:

$$d_{ij}^2 = \arccos\left(\sum_{l=1}^{k} \sqrt{p_{il}\, p_{jl}}\right)$$

y la distancia de Balakrishnan-Sanghvi:

$$d_{ij}^2 = 2\sum_{l=1}^{k} \frac{(p_{il} - p_{jl})^2}{p_{il} + p_{jl}}$$

Para los datos del ejemplo 2, la matriz de cuadrados de distancias de Bhattacharyya es:

0	0.1567	0.0435	0.1246	0.2863	0.3966	0.2622	0.1850	0.0800	0.2204
0.1567	0	0.1156	0.2665	0.2240	0.2605	0.2476	0.2093	0.1364	0.0897
0.0435	0.1156	0	0.1660	0.2715	0.3636	0.2608	0.1769	0.0778	0.1787
0.1246	0.2665	0.1660	0.0000	0.3221	0.4732	0.2607	0.2555	0.1517	0.3359
0.2863	0.2240	0.2715	0.3221	0	0.1933	0.1896	0.2710	0.2653	0.2491
0.3966	0.2605	0.3636	0.4732	0.1933	0	0.3101	0.3701	0.3642	0.2422
0.2622	0.2476	0.2608	0.2607	0.1896	0.3101	0	0.3608	0.2024	0.3226
0.1850	0.2093	0.1769	0.2555	0.2710	0.3701	0.3608	0.0000	0.2438	0.1997
0.0800	0.1364	0.0778	0.1517	0.2653	0.3642	0.2024	0.2438	0	0.2211
0.2204	0.0897	0.1787	0.3359	0.2491	0.2422	0.3226	0.1997	0.2211	0

Los individuos más cercanos (según la distancia de Battacharyya medida sobre sus proporciones génicas) son las poblaciones *francesa* y *germánica* con $\delta^2_{1,3} = 0.0435$, mientras que los más alejados son las poblaciones *vasca* y *ainu* con $\delta^2_{4,6} = 0.4732$.

IV. Distancias para variables mixtas

Se dispone de un conjunto de datos mixto, es decir, un conjunto de individuos sobre los que se han observado tanto variables cuantitativas como cualitativas (o categóricas).

Se define la distancia de Gower como $d^2_{ij} = 1 - s_{ij}$, donde

$$s_{ij} = \frac{\sum_{h=1}^{p_1} (1 - |x_{ih} - x_{jh}|/G_h) + a + \alpha}{p_1 + (p_2 - d) + p_3} \qquad (1)$$

es el coeficiente de similaridad de Gower,
p_1 es el número de variables cuantitativas continuas,
p_2 es el número de variables binarias,
p_3 es el número de variables cualitativas(no binarias),
a es el número de coincidencias $(1,1)$ en las variables binarias,
d es el número de coincidencias $(0,0)$ en las variables binarias,
α es el número de coincidencias en las variables cualitativas (no binarias) y
G_h es el rango (o recorrido) de la h-ésima variable cuantitativa.

Ejemplo 3. Problema 5.5: Siete variables observadas sobre 50 jugadores de la liga española de fútbol 2006/07.

	Jugador	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	X_7
1.	Ronaldinho	15	26	1.78	71	1	2	2
2.	Etoo	21	25	1.8	75	0	3	2
3.	Xavi	6	26	1.7	68	0	5	4
4.	Messi	7	19	1.69	67	0	1	3
5.	Puyol	1	28	1.78	78	0	5	3
6.	Raúl	7	29	1.8	73.5	1	5	3
7.	Ronaldo	18	30	1.83	82	0	2	1
8.	Beckham	4	31	1.8	67	0	9	3
	...				...			
50.	Doblas	0	25	1.84	78	0	5	3

X_1 =número de goles marcados, X_2 =edad (años), X_3 =altura (m),
X_4 =peso (kg), X_5 =pierna buena del jugador (1 =derecha, 0 =izquierda),
X_6 =nacionalidad (1 =Argentina, 2 =Brasil, 3 =Camerun, 4 =Italia,
5 =España, 6 =Francia, 7 =Uruguay, 8 =Portugal, 9 =Inglaterra),
X_7 =tipo de estudios (1 =sin estudios, 2 =básicos, 3 =medios,
4 =superiores).

Propiedades generales de las Distancias

$\delta : \mathcal{E} \times \mathcal{E} \to \mathbb{R}_+$ es una *disimilaridad* o *casi-métrica* si

- $\forall i, j, \quad \delta_{ij} = \delta_{ji}$,
- $\forall i, \quad \delta_{ii} = 0$.

Una *semi-métrica* es una disimilaridad tal que

- $\forall i, j, k, \quad \delta_{ij} \leq \delta_{ik} + \delta_{kj}$.

Una *métrica* es una semi-métrica que cumple

- $\forall i, j, \quad \delta_{ij} = 0 \Leftrightarrow i = j$.

La palabra *distancia* puede hacer referencia tanto a una métrica como a una semi-métrica.

Propiedades generales de las Similaridades

$s : \mathcal{E} \times \mathcal{E} \to \mathbb{R}$ es una *similaridad* si

- $\forall i, j, \quad 0 \leq s_{ij} \leq s_{ii} = 1,$
- $\forall i, j, \quad s_{ij} = s_{ji}.$

La transformación $\delta_{ij}^2 = s_{ii} + s_{jj} - 2\, s_{ij}$ permite obtener una distancia δ de forma natural a partir de una similaridad s. En notación matricial,

$$\mathbf{D}^{(2)} = 2\,(\mathbf{1}\,\mathbf{1}' - \mathcal{S}),$$

donde $\mathcal{S}$ es la matriz de similaridades y $\mathbf{D}^{(2)}$ denota la matriz de cuadrados de distancias.

Escalado Multidimensional

Objetivo: Obtener una representación euclídea, exacta o aproximada, de los elementos de un conjunto $\mathcal{E}$ de n objetos o individuos, a partir de una matriz de distancias $\mathbf{D}$ sobre $\mathcal{E}$.

Atención: No disponemos de una matriz de datos, sino de una matriz de distancias entre individuos. Y buscamos representar estos individuos en un plano.

Representación euclídea exacta en dimensión $p \geq 0$ de $(\mathcal{E}, \mathbf{D})$ es un conjunto de n puntos $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$ del espacio euclídeo $\mathbb{R}^p$, que verifica que las distancias euclídeas entre los $\mathbf{x}_i$ son iguales a los elementos correspondientes de la matriz $\mathbf{D}$, es decir:

$$\delta_{i,j}^2 = \sum_{k=1}^{p} (x_{ik} - x_{jk})^2 = (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)'(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j), \quad 1 \leq i, j \leq n.$$

donde $\delta_{i,j}$ son los elementos de la matriz $\mathbf{D}$.

¿Cuando una distancia es euclídea?

$\mathbf{D} = (\delta_{ij})_{1 \leq i,j \leq n}$ una matriz de distancias,
$\mathbf{1}$ el vector columna de unos de dimensión n,
$\mathbf{I}$ la matriz identidad de dimensión n,
$\mathbf{H} = \mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{1}\,\mathbf{1}'$ la matriz de centrado.

Teorema 1. *La matriz de distancias* $\mathbf{D}$ *tiene una representación euclídea de dimensión* $p \leq n-1$ *si, y sólo si, la matriz*

$$\mathbf{B} = -\frac{1}{2}\,\mathbf{H}\,\mathbf{D}^{(2)}\,\mathbf{H}$$

es semidefinida positiva con $p = \mathsf{rang}(\mathbf{B})$*, donde* $\mathbf{D}^{(2)}$ *denota la matriz de cuadrados de distancias.*

Obtención de las coordenadas principales

Si $\mathbf{B}$ es semidefinida positiva, entonces utilizando su descomposición espectral, podemos escribir:

$$\mathbf{B} = \mathbf{U}\,\Lambda\,\mathbf{U}' = \mathbf{X}\,\mathbf{X}',$$

siendo $\mathbf{X} = \mathbf{U}\,\Lambda^{1/2}$ las *coordenadas principales*, donde Λ es la matriz diagonal que contiene los autovalores de $\mathbf{B}$

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_p > \lambda_{p+1} = \ldots = \lambda_n = 0,$$

y $\mathbf{U}$ es una matriz $n \times p$ ortogonal cuyas columnas son los autovectores de $\mathbf{B}$.

Las n filas de la matriz $\mathbf{X}$ son las *coordenadas* de los individuos cuya matriz de distancias era $\mathbf{D}$. Las dos primeras columas de $\mathbf{X}$ dan lugar a una representación de los n individuos sobre un plano.

Euclideanización de una distancia

Según el Teorema 1, si $\mathbf{B}$ no es semidefinida positiva no existe una configuración euclídea para la matriz de distancias $\mathbf{D}$, es decir, no existe ninguna matriz $\mathbf{X}$ cuyas filas sean las coordenadas de los individuos.

Teorema 2. *Si* $\mathbf{B}$ *tiene valores propios negativos, la transformación*

$$\tilde{\delta}_{ij}^2 = \begin{cases} \delta_{ij}^2 + c, & i \neq j, \\ 0, & i = j, \end{cases} \tag{2}$$

donde $c \geq 2|\lambda|$, λ *es el valor propio negativo de módulo máximo, da lugar a una nueva matriz de distancias* $\tilde{\mathbf{D}}$ *que admite una representación euclídea.*

Algoritmo de obtención

El Teorema 1 proporciona un algoritmo para la obtención de las coordenadas principales a partir de una matriz $\mathbf{D}$ euclídea sobre los n individuos de un conjunto $\mathcal{E}$:

a) Calcular la matriz de cuadrados de distancias $\mathbf{D}^{(2)}$.

b) Construir la matriz $\mathbf{B} = -\frac{1}{2}\,\mathbf{H}\,\mathbf{D}^{(2)}\,\mathbf{H}$.

c) Diagonalizar $\mathbf{B} = \mathbf{U}\,\Lambda\,\mathbf{U}'$.

d) Las filas de $\mathbf{X} = \mathbf{U}\,\Lambda^{1/2}$ son las coordenadas principales (euclídeas) de los elementos del conjunto $\mathcal{E}$.

Propiedades

1. Las filas de $\mathbf{X}$ verifican que $\delta_{ij}^2 = (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)'(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$.

2. La columnas de $\mathbf{X}$, $X_1, \ldots, X_p$, tienen media cero.
   Puesto que $\mathbf{X} = \mathbf{U}\,\mathbf{\Lambda}^{1/2}$, donde $\mathbf{U}$ son los autovectores de $\mathbf{B}$, entonces
   $$\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n}\mathbf{1}'\,\mathbf{X} = \frac{1}{n}\mathbf{1}'\,\mathbf{U}\,\mathbf{\Lambda}^{1/2} = \mathbf{0},$$
   al ser $\mathbf{1}$ un autovector de $\mathbf{B}$ de autovalor 0.

3. Las variables X_j, $j = 1, \ldots, p$, son incorrelacionadas y sus varianzas son proporcionales a los autovalores de $\mathbf{B}$.
   $$\mathsf{Var}(\mathbf{X}) = \frac{1}{n}\mathbf{X}'\,\mathbf{X} = \frac{1}{n}\mathbf{\Lambda}^{1/2}\,\mathbf{U}'\,\mathbf{U}\,\mathbf{\Lambda}^{1/2} = \frac{1}{n}\mathbf{\Lambda}$$

4. Sea $\mathbf{X}$ una configuración exacta centrada de $\mathbf{D}$, $n \times p$, donde $p = \mathsf{rang}(\mathbf{B})$. Las columnas de $\mathbf{X}$ pueden interpretarse como componentes principales.
   La matriz de covarianzas de $\mathbf{X}$ es $\mathbf{S} = \mathbf{X}'\mathbf{X}/n$. Puesto que $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ y $\mathbf{B} = \mathbf{X}\mathbf{X}'$ tienen los mismos autovalores no nulos,
   $$\mathbf{X}'\mathbf{X} = \mathbf{T}\Lambda\mathbf{T}',$$
   donde $\mathbf{T}$ es la matriz ortogonal de autovectores de $\mathbf{S}$. La matriz de componentes principales de $\mathbf{X}$ es
   $$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\mathbf{T}.$$
   $\mathbf{Y}$ coincide con la solución de coordenadas principales de $\mathbf{D}$, excepto un posible factor ± 1 que afecta a las columnas, puesto que
   $$\mathbf{Y}\mathbf{Y}' = \mathbf{X}\mathbf{T}\mathbf{T}'\mathbf{X}' = \mathbf{X}\mathbf{X}' = \mathbf{B}.$$

5. Si $\mathbf{D}$ tiene una representación euclídea exacta $\mathbf{X}$ de dimensión $p = \mathsf{rang}(\mathbf{B}) \leq n-1$, entonces para cada $r < p$ puede obtenerse una representación euclídea aproximada $\mathbf{X}(r)$ de dimensión r, tomando las r primeras columnas de $\mathbf{X}$

$$\mathbf{X}(r) = (\mathbf{X}_1, \ldots, \mathbf{X}_r).$$

La variabilidad total de $\mathbf{X}(r)$ es $(\lambda_1 + \ldots + \lambda_r)/n$, y el porcentaje de variabilidad explicado por $\mathbf{X}(r)$ respecto de $\mathbf{X}$ es

$$P_r = \frac{\lambda_1 + \ldots + \lambda_r}{\lambda_1 + \ldots + \lambda_p} \times 100.$$

Ejemplo 3: Problemas 5.4 y 5.11

Sobre el conjunto de individuos $\mathcal{E} = \{$león, girafa, vaca, oveja, gato, hombre$\}$ se han medido las siguientes variables binarias:

$X_1 =$¿tiene cola?, $X_2 =$¿es salvaje?, $X_3 =$¿tiene el cuello largo?, $X_4 =$¿es animal de granja?, $X_5 =$¿es carnívoro?, $X_6 =$¿camina sobre cuatro patas?

La matriz de datos es

$$\mathbf{X} = \begin{array}{c} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{l} \text{león} \\ \text{girafa} \\ \text{vaca} \\ \text{oveja} \\ \text{gato} \\ \text{hombre} \end{array}$$

Coeficiente de similaridad de Sokal y Michener

$$\mathcal{S} = (\mathbf{a} + \mathbf{d})/p,$$

donde $\mathbf{a} = \mathbf{X}\mathbf{X}'$, $\mathbf{d} = (\mathbf{1}_n\mathbf{1}_p' - \mathbf{X})(\mathbf{1}_n\mathbf{1}_p' - \mathbf{X})'$, $p = 6$ es el número de variables observadas y $n = 6$ es el número de individuos.

La matriz de similaridades es

$$\mathcal{S} = \begin{pmatrix} 1.00 & 0.67 & 0.50 & 0.50 & 0.83 & 0.50 \\ 0.67 & 1.00 & 0.50 & 0.50 & 0.50 & 0.17 \\ 0.50 & 0.50 & 1.00 & 1.00 & 0.67 & 0.33 \\ 0.50 & 0.50 & 1.00 & 1.00 & 0.67 & 0.33 \\ 0.83 & 0.50 & 0.67 & 0.67 & 1.00 & 0.67 \\ 0.50 & 0.17 & 0.33 & 0.33 & 0.67 & 1.00 \end{pmatrix}$$

Utilizando la transformación

$$\delta_{ij}^2 = s_{ii} + s_{jj} - 2\, s_{ij},$$

que, en notación matricial es

$$\mathbf{D}^{(2)} = 2\,(\mathbf{1}_n\mathbf{1}_n' - \mathcal{S}),$$

se obtiene la matriz de distancias (al cuadrado)

$$\mathbf{D}^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 0.67 & 1.00 & 1.00 & 0.33 & 1.00 \\ 0.67 & 0 & 1.00 & 1.00 & 1.00 & 1.67 \\ 1.00 & 1.00 & 0 & 0 & 0.67 & 1.33 \\ 1.00 & 1.00 & 0 & 0 & 0.67 & 1.33 \\ 0.33 & 1.00 & 0.67 & 0.67 & 0 & 0.67 \\ 1.00 & 1.67 & 1.33 & 1.33 & 0.67 & 0 \end{pmatrix}$$

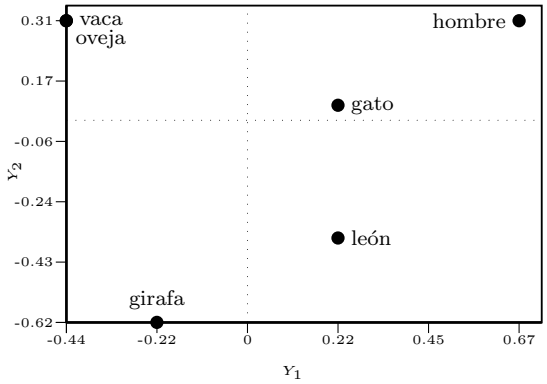
Los autovalores de $\mathbf{B} = -\mathbf{H}\mathbf{D}^{(2)}\mathbf{H}/2$ son:

$$1 \quad 0.7958 \quad 0.3333 \quad 0.0931 \quad 0.0000 \quad 0.0000$$

Existe una configuración euclídea de $\mathbf{D}$ de dimensión 4. Las coordenadas principales son la filas de la matriz

$$\begin{pmatrix} 0.22361 & -0.35823 & 0.86603 & 1.9993 \\ -0.22361 & -0.61643 & -0.86603 & -0.77460 \\ -0.44721 & 0.30822 & 0 & 0.38730 \\ -0.44721 & 0.30822 & 0 & 0.38730 \\ 0.22361 & 0.050016 & 0.86603 & -0.23866 \\ 0.67082 & 0.30822 & -0.86603 & 0.38730 \end{pmatrix}$$

Representación de los individuos en dimensión 2



Porcentaje de variabilidad explicada:

$$P_2 = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_i} \times 100 = \frac{1.7958}{2.2222} \times 100 = 80.811\%.$$

Ejemplo 4: Problema 5.9

Con los datos del Ejemplo 2:

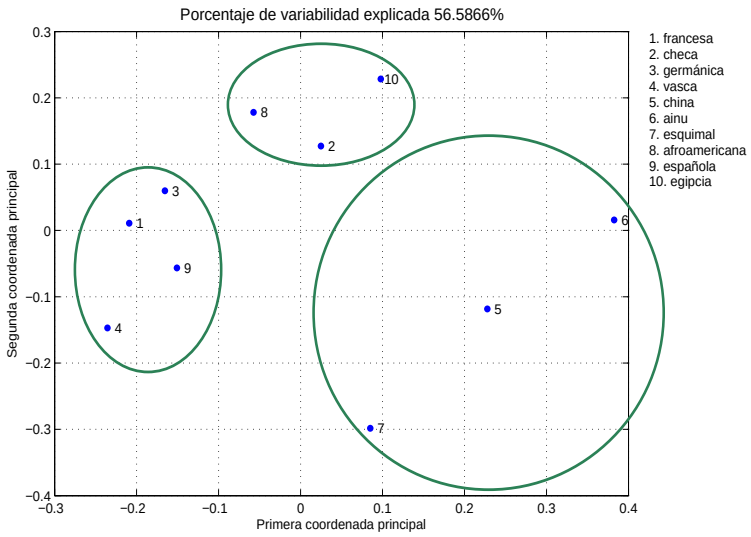
	Población	grupo A	grupo AB	grupo B	grupo O
1.	francesa	0.21	0.06	0.06	0.67
2.	checa	0.25	0.04	0.14	0.57
3.	germánica	0.22	0.06	0.08	0.64
4.	vasca	0.19	0.04	0.02	0.75
5.	china	0.18	0.00	0.15	0.67
6.	ainu	0.23	0.00	0.28	0.49
7.	esquimal	0.30	0.00	0.06	0.64
8.	afroamericana	0.10	0.06	0.13	0.71
9.	española	0.27	0.04	0.06	0.63
10.	egipcia	0.21	0.05	0.20	0.54

obtener una representación en coordenadas principales utilizando la matriz de distancias de Bhattacharyya. Determina cuál es el porcentaje de variabilidad explicado por las dos primeras coordenadas principales.

La matriz de cuadrados de distancias de Bhattacharyya es:

```
     0  0.1567  0.0435  0.1246  0.2863  0.3966  0.2622  0.1850  0.0800  0.2204
0.1567       0  0.1156  0.2665  0.2240  0.2605  0.2476  0.2093  0.1364  0.0897
0.0435  0.1156       0  0.1660  0.2715  0.3636  0.2608  0.1769  0.0778  0.1787
0.1246  0.2665  0.1660  0.0000  0.3221  0.4732  0.2607  0.2555  0.1517  0.3359
0.2863  0.2240  0.2715  0.3221       0  0.1933  0.1896  0.2710  0.2653  0.2491
0.3966  0.2605  0.3636  0.4732  0.1933       0  0.3101  0.3701  0.3642  0.2422
0.2622  0.2476  0.2608  0.2607  0.1896  0.3101       0  0.3608  0.2024  0.3226
0.1850  0.2093  0.1769  0.2555  0.2710  0.3701  0.3608  0.0000  0.2438  0.1997
0.0800  0.1364  0.0778  0.1517  0.2653  0.3642  0.2024  0.2438       0  0.2211
0.2204  0.0897  0.1787  0.3359  0.2491  0.2422  0.3226  0.1997  0.2211       0
```

La función Matlab `[X,vaps,percent,acum] = coorp(D2)` realiza la representación en coordenadas principales de un conjunto de elementos cuya matriz de cuadrados distancias es `D2`.



Ejemplo 5. Distâncias rodoviárias entre algumas cidades moçambicanas

	Beira	Chimoio	Inhambane	Lichinga	Maputo	Nampula	Pemba	Quelimane	Tete	Xai-xai
Beira	0	198	802	1273	1205	929	1357	485	591	999
Chimoio	198	0	732	1397	1135	1053	1481	609	393	929
Inhambane	802	732	0	2001	469	1657	2085	1213	1125	263
Lichinga	1273	1397	2001	0	2404	647	742	832	1790	2198
Maputo	1205	1135	469	2404	0	2060	2488	1616	1528	206
Nampula	929	1053	1657	647	2060	0	428	518	1446	1854
Pemba	1357	1481	2085	742	2488	428	0	946	1874	2282
Quelimane	485	609	1213	832	1616	518	946	0	1002	1410
Tete	591	393	1125	1790	1528	1446	1874	1002	0	1322
Xai-xai	999	929	263	2198	206	1854	2282	1410	1322	0

Construir un mapa según las distancias por carretera utilizando el análisis de coordenadas principales. ¿Coincide con el mapa geográfico?

Llamamos `D` a la matriz que contiene las distancias por carretera y construimos la matriz de cuadrados de distancias `D2=D.^2`

```
      0   39204  643204 1620529 1452025  863041 1841449  235225  349281  998001
  39204       0  535824 1951609 1288225 1108809 2193361  370881  154449  863041
 643204  535824       0 4004001  219961 2745649 4347225 1471369 1265625   69169
1620529 1951609 4004001       0 5779216  418609  550564  692224 3204100 4831204
1452025 1288225  219961 5779216       0 4243600 6190144 2611456 2334784   42436
 863041 1108809 2745649  418609 4243600       0  183184  268324 2090916 3437316
1841449 2193361 4347225  550564 6190144  183184       0  894916 3511876 5207524
 235225  370881 1471369  692224 2611456  268324  894916       0 1004004 1988100
 349281  154449 1265625 3204100 2334784 2090916 3511876 1004004       0 1747684
 998001  863041   69169 4831204   42436 3437316 5207524 1988100 1747684       0
```

La matriz de centrado es `H=eye(10)-ones(10)/10`. Construimos la matriz `B` y comprobamos si es semidefinida positiva:

```
B=-1/2*H*D2*H;
sort(eig(B))=
```

```
-233129.85 -2114.93 -1193.36 0 9107.12 13063.62 25745.90 305231.13 1101020.66 6968603.52
```

Directamente no pueden obtenerse las coordenadas principales de `D`.

Euclidianización de `D`:

```
lambda=min(eig(B));
D2_E=D2+2*abs(lambda)*ones(10)-2*abs(lambda)*eye(10);
```

y recalculamos la matriz `B`:

```
B=-1/2*H*D2_E*H;
sort(eig(B))=
```

```
6968603.52  1101020.66  305231.13  233129.85  25745.90  13063.62  9107.12  2114.93  1193.36  0
```

Por tanto, existe una configuración euclídea de `D_E` en dimensión 9.

Las coordenadas principales se obtienen:

```
[U,L]=eigsort(B);
X=U*(diag(L))^(1/2);
```

Las dos primeras columna de `X` son las coordenadas en el plano de las 10 ciudades:

Beira	69.2	144.6
Chimoio	180.5	241.4
Inhambane	817.6	-156.1
Lichinga	-1137.5	-160.5
Maputo	1219.7	-352.5
Nampula	-825.6	-110.3
Pemba	-1244.2	-212.0
Quelimane	-373.4	13.4
Tete	276.0	850.5
Xai-xai	1017.8	-258.5

con un porcentaje de variabilidad explicada del 93.19% (80.48% para X_1 y 12.72% para X_2).