

# ESTUDIO COMPARATIVO DE PROCEDIMIENTOS DE ESCALAMIENTO MULTIDIMENSIONAL A TRAVES DE EXPERIMENTOS DE SIMULACION

Elina Miret Barroso<sup>1</sup>, Gladys Linares Fleites<sup>2</sup> y María V. Mederos Bru<sup>3</sup>  
Facultad de Matemática y Computación, Universidad de La Habana, Cuba

## RESUMEN

El Escalamiento Multidimensional es una colección de técnicas que construyen configuraciones de puntos a partir de la información inicial entre objetos, medida a través de coeficientes de disimilaridades. Para encontrar estos puntos existen, entre otras, dos estrategias fundamentales: el escalamiento métrico y el escalamiento no métrico. En el trabajo se hace un estudio de simulación para comparar una nueva técnica métrica, ACE, con la no métrica de Kruskal, usando dos métodos de minimización del stress, el de máximo descenso y el quasi Newton de Broyden. Con este propósito se generan cien configuraciones aleatorias de puntos en  $R^2$  usando distribución  $U[0,1]$ . Las distancias euclidianas asociadas a estas configuraciones son llamadas distancias perfectas. Si las cien configuraciones son modificadas por cierto error aleatorio, las nuevas distancias asociadas a cada configuración son llamadas distancias perturbadas. Utilizando estas configuraciones se realiza un estudio comparativo entre las cuatro combinaciones de técnica y método de minimización mencionadas, teniendo en cuenta dos criterios de comparación: el stress y la función de pérdida.

## ABSTRACT

Multidimensional Scaling (MDS) is a collection of techniques that construct geometric configurations of points from the initial information among objects measured through dissimilarity coefficients. To find these points there are two strategies: the metric and the non metric MDS. In this work, a simulation study is done to compare the ACE's new metric technique and Kruskal's non metric with two minimization methods: steepest descent and Broyden's quasi Newton method. For this purpose, one hundred random configurations of points are generated in  $R^2$  using distribution  $U[0,1]$ . The Euclidean distances associated to these configurations are called perfect distances. If the configurations are modified by certain random error, the new distances associated to each configuration are called perturbed distances. Using these configurations a comparative study is done among the four possible combinations of technique and minimization method with two comparison criteria: the stress and the loss function.

MSC: 62P10

## 1. INTRODUCCION

El problema del Escalamiento Multidimensional (EMD) consiste, esencialmente, en representar disimilaridades entre objetos o individuos como distancias entre puntos en un espacio de dimensión reducida.

El punto de partida es un conjunto  $\Omega$  de  $n$  objetos y una matriz  $\Delta = (\delta_{ij})_{n \times n}$  de disimilaridades entre los objetos. El resultado final es una configuración de puntos que se identifican con los  $n$  objetos en un espacio euclidiano de baja dimensión, de forma que las distancias  $d_{ij}$  entre los puntos representan lo "mejor posible" las disimilaridades  $\delta_{ij}$  iniciales.

Bajo el nombre de EMD se agrupan diversos procedimientos surgidos, según el tipo de transformación que pudiera emplearse sobre las disimilaridades percibidas o según el método de optimización utilizado, al querer alcanzar distancias  $d_{ij}$  que se parezcan lo más posible a las disimilaridades  $\delta_{ij}$  iniciales. Trosset (1993) enfatiza estos aspectos.

El objetivo de este trabajo consiste en comparar cuatro procedimientos de MDS mediante experimentos con datos simulados. Estos procedimientos surgen de las transformaciones de Kruskal y ACE y de la aplicación de los métodos de gradiente conocidos como máximo descenso y quasi Newton de Broyden. La transformación ACE consiste en estimar funciones de transformación óptima a partir de los datos y su aplicación al problema de EMD es novedosa, ya que no se ha utilizado antes en este tipo de técnicas multivariadas. Como es lógico, la elección de la de Kruskal, como punto de referencia para una comparación,

E-mail: <sup>1</sup>elina@matcom.uh.cu

<sup>2</sup>glinares@matcom.uh.cu

<sup>3</sup>mvmederos@matcom.uh.cu

es casi obligada, dado las bondades de esta última que la hace uno de los procedimientos de EMD de más amplio uso en las aplicaciones.

La comparación de diferentes enfoques del EMD mediante simulación ha sido empleada recientemente por Schneider (1992) y Groenen (1997), y las ideas de estos autores nos han servido de referencia para nuestro estudio.

En el epígrafe 2 se resumen los aspectos fundamentales de los procedimientos de Kruskal y ACE enmarcándolos en las ideas de Rao(1995) y extendidas por Miret (1996) al definir la función de pérdida en que incurren estos procedimientos en la configuración final de puntos. En el epígrafe 3 se explican brevemente las acciones que en materia computacional fue necesario desarrollar previamente para poder llevar a cabo esta comparación, y en el epígrafe 4 se describen los experimentos realizados y se dan los resultados obtenidos. Finalmente, se hace una discusión y se presentan conclusiones.

## PROCEDIMIENTOS DE EMD

Los procedimientos del EMD generalmente parten de la matriz  $\Delta = (\delta_{ij})_{n \times n}$  donde las  $\delta_{ij}$  no son distancias, sólo disimilaridades. Estos procedimientos se clasifican en métricos y no métricos.

Los procedimientos no métricos construyen ciertos valores  $\hat{d}_{ij}$  asociados a las disimilaridades iniciales preservando su orden. El objetivo de cualquier procedimiento no métrico es encontrar un conjunto de puntos en un espacio de dimensión mínima tal que los datos de disimilaridades sean una *función monótona* de las distancias en este espacio, esto es, que cuando la disimilaridad entre los objetos  $i$  y  $j$  es menor que la disimilaridad entre  $k$  y  $l$ , entonces la distancia entre  $i$  y  $j$  debiera ser al menos tan pequeña como la que exista entre  $k$  y  $l$ . Entre los mismos se encuentra el procedimiento de Kruskal, que constituye la base de casi todo el trabajo posterior en esta área a partir de su formulación en 1964.

En la mayoría de los procedimientos de EMD es necesario realizar un proceso de optimización con respecto a alguna medida de ajuste. La medida propuesta por Kruskal se llama *índice de esfuerzo* (del inglés, stress) y está dada por:

$$\text{STRESS} = f(d_{ij}, \hat{d}_{ij}) = \frac{\sqrt{\sum_{i < j} (d_{ij} - \hat{d}_{ij})^2}}{\sum_{i < j} d_{ij}^2}.$$

Los procedimientos métricos construyen ciertas funciones de las disimilaridades  $f(\delta_{ij})$  a partir de transformaciones aritméticas de las mismas. El procedimiento ACE, que presentamos a continuación, puede considerarse un procedimiento métrico.

La metodología ACE (Alternating Conditional Expectations) ofrece un fértil y excitante campo para la exploración de datos, Breiman y Friedman (1985). Se han señalado posibles extensiones de ACE a diversos problemas de estadística multivariada, Fowlkes y Kettenring (1985), pero hasta el momento no se ha considerado su aplicación en el EMD.

ACE tiene la capacidad de descubrir transformaciones muy generales y su posibilidad en el problema de EMD es necesario investigarla. Esta metodología consiste en lo siguiente:

Para un conjunto de datos  $\{(y_k, x_{k1}, \dots, x_{kp}), 1 \leq k \leq N\}$ , el objetivo es estimar funciones de transformación óptima  $\theta(Y), \phi_1(X_1), \dots, \phi_p(X_p)$  a partir de los datos. Las *transformaciones óptimas* definidas como las funciones  $\theta^*, \phi_1^*, \dots, \phi_p^*$  minimizan la función

$$e^2(\theta_1, \phi_1, \dots, \phi_p) = \frac{E \left\{ \left[ \theta(Y) - \sum_{i=1}^p \phi_i(X_i) \right]^2 \right\}}{E \theta^2(Y)}$$

El algoritmo de optimización es un procedimiento iterativo que trata con *esperanzas condicionales alternantes*, de donde surgen las siglas ACE de su nombre en idioma inglés. Su aplicación a EMD es completamente natural al establecer una regresión de las disimilaridades sobre las distancias.

Profundizaciones sobre estas y otras transformaciones pueden obtenerse en Cox y Cox (1994).

### 2.1. Función de pérdida en los procedimientos de EMD

Los procedimientos de EMD forman parte del conjunto de técnicas de Análisis de Datos que permiten la representación gráfica de datos multivariados. En los mismos es necesario precisar la pérdida en que se incurre al hacer dicha representación gráfica en un espacio de dimensión reducida.

Si tomamos en cuenta la teoría de coordenadas canónicas, propuesta por Rao (1995) y extendida por Miret (1996), podremos utilizar como criterio de comparación para estos procedimientos, además del usual criterio de esfuerzo (stress), la función de pérdida.

En los procedimientos de EMD considerados la función de pérdida se toma como

$$\|X X^t - X_f X_f^t\|$$

Para calcularla se restan las trazas de las matrices diagonales  $S_1$  y  $S_2$  de las descomposiciones singulares de  $X X^t$  y  $X_f X_f^t$ , respectivamente. Esta pérdida se puede expresar en forma absoluta o relativa con respecto a la traza de la descomposición singular  $S$  de la matriz  $C = X X^t$ . Aquí utilizamos la expresión relativa en por ciento.

### 3. PROGRAMAS DE COMPUTO PREVIAMENTE ELABORADOS

En Linares, Mederos y Miret (2000) se ofrece una estrategia computacional para la resolución de problemas de EMD con las siguientes características:

Con la matriz de disimilaridades inicial se obtiene la matriz de productos escalares, a la que se le aplica el teorema de descomposición singular, Miret y Linares (1995), obteniéndose finalmente una matriz de configuración.

A partir de la configuración inicial se calcula la matriz de distancias derivadas utilizando la métrica de Minkowski.

De acuerdo con la transformación escogida (Kruskal, o ACE) se calcula la matriz de disparidades. Aquí estamos utilizando el término “disparidad”, acuñado por Kruskal en su método de EMD no métrico, para cualquier tipo de transformación monótona de los datos.

Utilizando un índice de bondad de ajuste (al que llamaremos genéricamente “stress”, en lo adelante) se obtiene el valor inicial  $S_0$  del “stress”. Si  $S_0$  no es satisfactorio de acuerdo con una cierta precisión prefijada, se procede a su minimización mediante un proceso iterativo que puede utilizar el método de máximo descenso o el método *quasi Newton* de Broyden, Mederos, Linares y Miret, 2000).

Además de la precisión prefijada ( $S_f < 0.025$ ) se utilizan los criterios de parada por más de 10 pasos de iteración y diferencia menor que 0.0001 entre dos valores consecutivos del stress.

Después de obtenida la configuración final de puntos se calcula la pérdida de información en que se incurre.

El programa fue elaborado en MATLAB (1994).

#### 3.1. Características del programa de simulación

Para realizar el estudio comparativo entre los procedimientos de Kruskal y ACE se elaboró, además del anterior, un programa MATLAB con las características siguientes.

A partir del dato  $s$  correspondiente a una semilla, se genera una matriz de configuración  $X$  de números aleatorios con distribución uniforme; se genera después otra matriz aleatoria con distribución normal ( $E$ ), y se obtienen entonces dos matrices de configuración  $X_1$  y  $X_2$  con varianza 0.3 y 0.15 respectivamente:

$$X_1 = X + .3 E,$$

$$X_2 = X + .15 E.$$

Para cada una de estas tres matrices de configuración  $X$ ,  $X_1$  y  $X_2$  se obtienen dos de distancias derivadas, una, con norma “city-block” ( $q = 1$ ), y otra, con norma euclidiana ( $q = 2$ ). En total 6 matrices, con las cuales se llevan a cabo los experimentos de simulación para los procedimientos de Kruskal y ACE con los métodos de minimización quasi Newton de Broyden (B) y máximo descenso (MD).

4. RESULTADOS DE LOS EXPERIMENTOS NUMERICOS

Para comparar los cuatro procedimientos de EMD mencionados antes (Kruskal - Broyden (KB), Kruskal - Máximo Descenso (KMD), ACE - Broyden (ACEB) y ACE - Máximo Descenso (ACEMD)) se generaron conjuntos de datos haciendo variar los siguientes factores: (a) el parámetro de Minkowski y (b) la varianza del error aleatorio. Se fijaron  $p = 2$  (parámetro de dimensionalidad) y  $n = 10$  (número de puntos) y se utilizaron dos criterios de comparación: el stress, utilizado tradicionalmente, y la pérdida de información incurrida en la configuración final de puntos, surgido de aplicar el enfoque unificador de Rao (1995).

Se llevaron a cabo dos experimentos de simulación, uno, con distancias perfectas y, otro, con distancias perturbadas.

4.1. Datos con distancias perfectas

El primer experimento consistió en recobrar datos de distancias perfectas haciendo variar el parámetro de Minkowski ( $q = 1, 2$ ). Para cada uno de los valores de  $q$  se determinaron 10 puntos y las distancias entre ellos sirvieron como matriz de disimilaridad. Entonces se calcularon los valores de stress y de las pérdidas en los 4 procedimientos de EMD para 100 semillas. La distribución de estos valores se presenta en la Tabla 1 y El gráfico 1, para el stress, y en la Tabla 2 y el Gráfico 2, para la pérdida.

Como puede apreciarse en la Tabla No. 1, los valores medios de stress más altos se deben a los procedimientos ACE con  $q = 2$ . Con  $q = 1$ , los stress en ambos procedimientos ACE son ligeramente más altos que todos los de Kruskal. En general el máximo descenso siempre obtiene valores de stress medios más bajos que el *quasi* Newton de Broyden. Los valores mínimos en los procedimientos de Kruskal son siempre más cercanos al óptimo global.

Tabla 1. Distribución de los valores del STRESS con distancias perfectas para 100 semillas en configuraciones de  $n = 10$  puntos en  $p = 2$  dimensiones.

	Media	Mínimo	Desviación Estándar
<b>q = 1</b>			
ST-KB-1	.151379	.082421	.034084
ST-KMD-1	.131365	.063943	.034716
ST-ACEB-1	.204889	.151085	.031202
ST-ACEMD-1	.169668	.111173	.027932
<b>q = 2</b>			
ST-KB-2	.152893	.044668	.040403
ST-KMD-2	.130638	.027060	.039737
ST-ACEB-2	.343127	.163746	.078755
ST-ACEMD-2	.276651	.120145	.065603

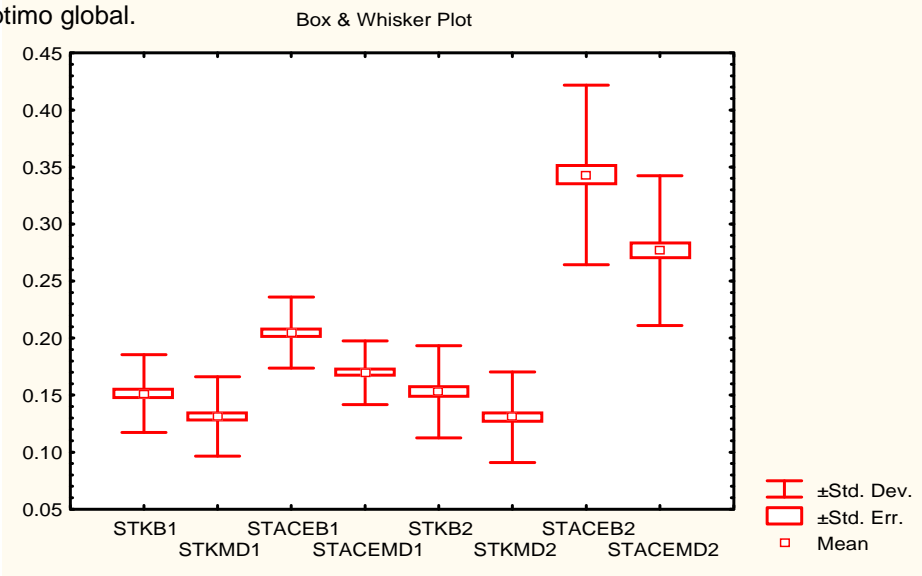
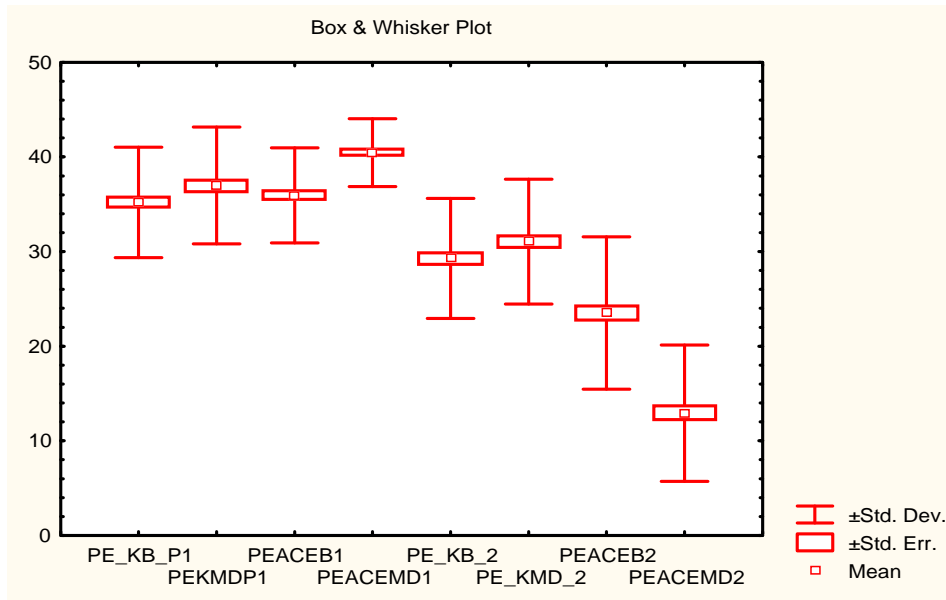


Gráfico 1. Distribución de los valores de STRESS para 100 semillas en datos con distancias perfectas en dos dimensiones.

**Tabla 2.** Distribución de los valores de PERDIDA con distancias perfectas para 100 semillas de configuraciones de  $n = 10$  puntos en  $p = 2$  dimensiones.

	Media	Mínimo	Máximo	Desviación Estándar
<b>q = 1</b>				
PE_KB_1	35.18900	20.94062	46.16028	5.842188
PE-KMD-1	36.98794	21.45175	51.62577	6.178607
PE-ACEB-1	35.94095	24.16628	48.27130	5.028020
PE-ACEMD-1	40.44096	30.09493	49.20116	3.588869
<b>q = 2</b>				
PE_KB_2	29.26540	14.02451	41.70221	6.333912
PE_KMD_2	31.04584	14.63634	43.72861	6.587583
PE-ACEB-2	23.50778	-8.26000	40.38376	8.053915
PE-ACEMD-2	12.91640	-1.18550	28.18940	7.204453



**Gráfico 2.** Distribución de los valores de PERDIDA para 100 semillas en datos con distancias perfectas en dos dimensiones.

Los valores de pérdidas promedio disminuyen ostensiblemente para  $q=2$ , en especial el procedimiento ACEMD es bastante bajo, disminuyendo a más de la mitad de la pérdida de KMD. Puede observarse que en los mínimos promedio aparecen dos valores negativos para la pérdida, lo que significa que en estos procedimientos, algunos casos han alcanzado una explicación completa del fenómeno.

#### 4.2. Datos con distancias perturbadas

En las aplicaciones reales, es poco probable tratar con distancias perfectas entre datos. Por esta razón hemos llevado a cabo un experimento de simulación con distancias que se perturbaban con un error aleatorio. Además de los cuatro procedimientos de EMD que deseamos comparar hemos variado los siguientes factores: (a) el parámetro de Minkowski ( $q = 1, 2$ ) y (b) el error aleatorio ( $e = 30\%$  y  $15\%$ ). Este diseño produce 4 matrices de disimilitud diferentes para las que se utilizaron 100 semillas en cada uno de los 4 procedimientos conduciendo a un total de 1600 corridas. Para obtener una matriz de distancia con error comenzamos generando una configuración de puntos  $X$  con distribución uniforme. Con las 100 matrices  $X = (x_{is})_{10 \times 2}$  se construyeron matrices:

$$X^{(e)} = (x_{is}^{(e)})_{10 \times 2} \text{ donde } x_{is}^{(e)} = x_{is} + N_p(0, e) \text{ siendo } e = 0,15 \text{ y } e = 0,30.$$

Las matrices de distancia asociadas a las  $X^{(e)}$  fueron:

$$\Delta^{(q)} = (\delta_{ij})_{10} = \left( |x_{i1}^{(e)} - x_{j1}^{(e)}|^q + |x_{i2}^{(e)} - x_{j2}^{(e)}|^q \right)^{1/q}, q = 1, 2.$$

A partir de estas últimas se calcularon los valores de stress y de las pérdidas para los 4 procedimientos de EMD. La distribución de estos valores se presenta en las Tablas 3 y 4.

**Tabla 3.** Promedios, valores mínimos y desviaciones estándares del STRESS de 100 semillas para distancias perturbadas con errores (30 % y 15 %) en 10 puntos de dimensión 2 variando el parámetro de Minkowski ( $q = 1, 2$ )

	Media	Mínimo	Máximo	Desviación Estándar
<b>e = .3, q = 1</b>				
ST-KB-31	.142384	.076434	.232331	.030328
ST-KMD-31	.119955	.057566	.207661	.027353
ST-ACEB-31	.199434	.144362	.285414	.027313
ST-ACEMD-31	.161437	.109117	.245389	.025178
<b>e = .15, q = 1</b>				
ST-KB-151	.147120	.022700	.232607	.036390
ST-KMD-151	.126975	.055558	.220387	.034624
ST-ACEB-151	.201715	.144967	.279935	.028492
ST-ACEMD-151	.164802	.112442	.255748	.028441
<b>e = .3, q = 2</b>				
ST-KB-32	.142440	.049801	.247152	.039130
ST-KMD-32	.120573	.037733	.226298	.040185
ST-ACEB-32	.301456	.152099	.481445	.063567
ST-ACEMD-32	.237849	.103432	.389168	.057244
<b>e = .15, q = 2</b>				
ST-KB-152	.145581	.048500	.247821	.042392
ST-KMD-152	.124306	.046900	.222365	.042063
ST-ACEB-152	.324478	.150500	.568774	.074586
ST-ACEMD-152	.253542	.096700	.449623	.063023

La Tabla 3 muestra como los valores medios de stress son siempre más bajos con el método de minimización de máximo descenso comparado con el de quasi Newton de Broyden. Los procedimientos ACE alcanzan siempre stress más altos que los de Kruskal en  $q = 2$  para los dos tipos de errores. Los valores mínimos promedio de Kruskal son más bajos que los del ACE, pero cabe destacar el ACEMD con  $e = .15$  y  $q = 2$  que alcanza un stress mínimo promedio de .09. y los restantes ACEMD tienen valores medios y mínimos bastante bajos.

**Tabla 4.** Promedios, valores mínimos y desviaciones estándares de las PERDIDAS de 100 semillas para distancias perturbadas con errores (30 % y 15 %) en 10 puntos de dimensión 2, variando el parámetro de Minkowski ( $q = 1, 2$ ).

	Media	Mínimo	Máximo	Desviación Estándar
<b>e = .3, q = 1</b>				
PE-KB-31	33.67843	17.48735	47.46792	5.383019
PE-KMD-31	35.57558	20.77132	51.76822	5.792957
PE-ACEB-31	34.58630	25.52858	47.94817	4.466346
PE-ACEMD-31	39.10597	30.14192	48.32904	3.743062
<b>e = .15, q = 1</b>				
PE-KB-151	33.79978	13.79296	53.07712	6.173948
PE-KMD-151	35.63302	12.92527	51.91274	6.872171
PE-ACEB-151	34.44934	22.38968	47.76771	5.033704
PE-ACEMD-151	38.94981	23.32720	48.27538	4.398008
<b>e = .3, q = 2</b>				
PE-KB-32	27.42653	13.79684	41.88776	5.871676
PE-KMD-32	29.88445	15.64598	41.22610	5.324391
PE-ACEB-32	22.01331	-26610	38.68550	7.015907
PE-ACEMD-32	9.73540	-5.52620	24.93048	7.128112
<b>e = .15, q = 2</b>				
PE-KB-152	28.33324	14.30300	43.25094	6.173145
PE-KMD-152	30.11371	10.79590	46.52493	6.390401
PE-ACEB-152	23.28604	2.69550	42.99491	7.798453
PE-ACEMD-152	10.91789	-5.67000	30.13627	7.188824

En la Tabla 4 se destacan los valores de pérdida media muy bajos en ACEMD para  $q = 2$  en los errores .15 y .3 considerados. Para  $q = 1$  las pérdidas medias son similares para Kruskal y para ACE. De nuevo aparecen en los valores mínimos medios pérdidas negativas en el procedimiento ACEMD con ambos tipos de errores, luego se dieron casos donde se alcanzó una explicación total del fenómeno bajo este procedimiento.

A continuación se muestran los análisis de varianzas realizados con ambos criterios de comparación.

La Tabla 5 muestra los análisis de varianza en cada uno de los criterios de comparación considerados. En ambos se observa diferencia significativa entre los métodos de EMD. Al observar el comportamiento de los valores medios de stress (Gráfico 3) pudiera pensarse que los procedimientos de Kruskal son más adecuados al alcanzar valores de stress más bajos, sin embargo, las medias de los valores de pérdida (gráfico 4) tienen un comportamiento diferente y apuntan hacia mayores explicaciones del fenómeno bajo estudio en los procedimientos ACE, especialmente en el ACEMD.

**Tabla 5.** Análisis de Varianza del experimento con distancias **perturbadas**.

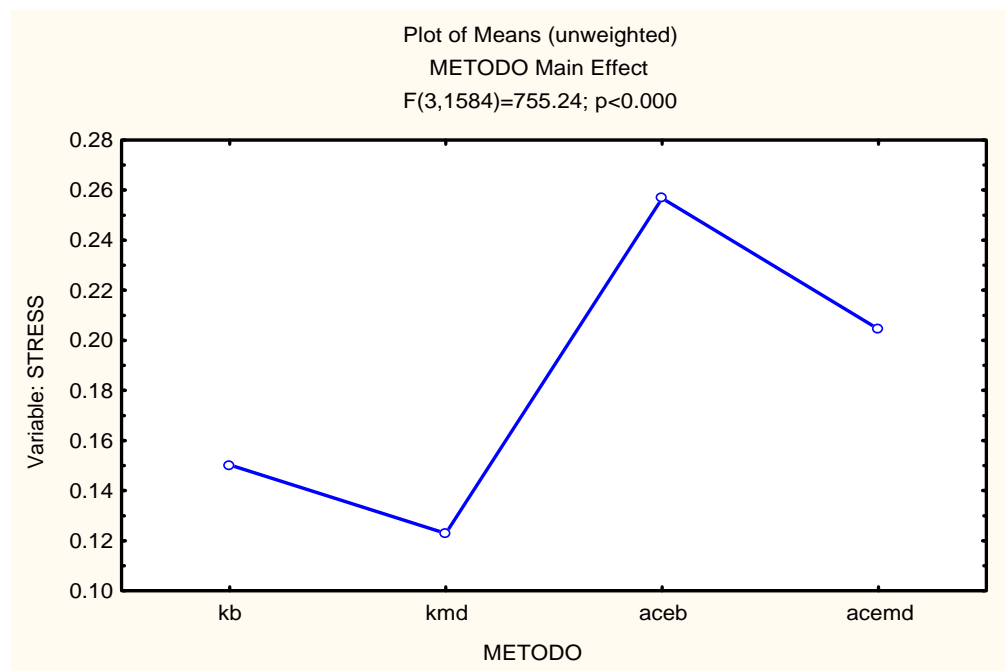
(A) STRESS. (1-ERROR, 2-METODO, 3-q)

	gl	CM	gl	CM		
	Efecto	Efecto	Error	Error	F	p-level
1	1	.010833	1584	.001868	5.8001	.016139
2	3	1.410559	1584	.001868	755.2434	0.000000
3	1	1.039214	1584	.001868	556.4174	0.000000
12	3	.007231	1584	.001868	3.8717	.008984
13	1	.000146	1584	.001868	.0780	.780120
23	3	.305294	1584	.001868	163.4610	0.000000
123	3	.010084	1584	.001868	5.3991	.001071

(B) PERDIDA (1-ERROR, 2-METODO, 3-q)

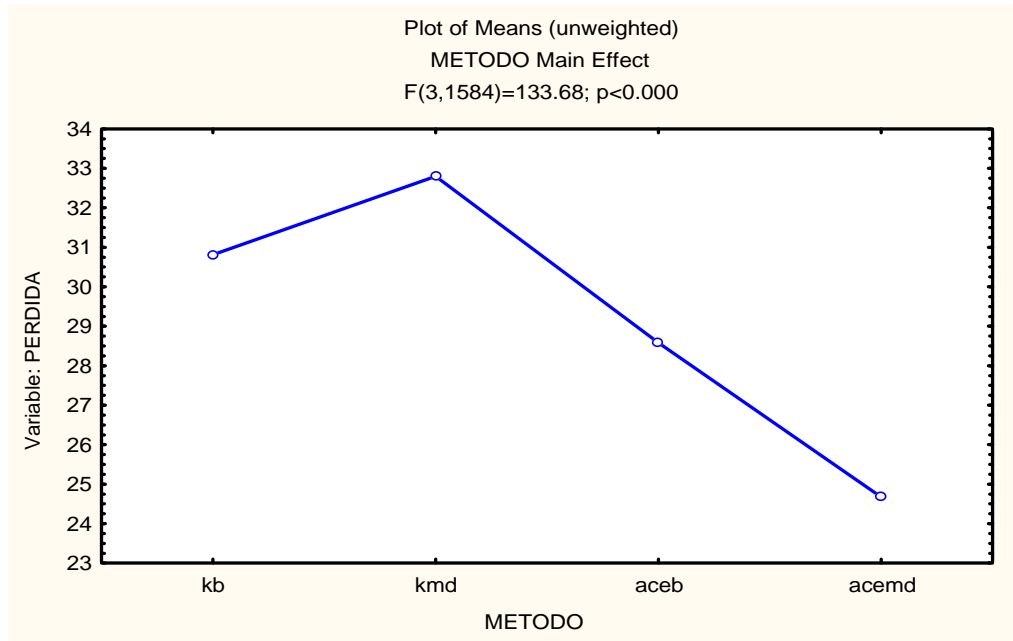
	gl	CM	gl	CM		
	Efecto	Efecto	Error	Error	F	P-level
1	1	75.55	1584	36.30111	2.081	.149312
2	3	4852.83	1584	36.30111	133.683	0.000000
3	1	67687.97	1584	36.30111	1864.625	0.000000
12	3	3.84	1584	36.30111	.106	.956787
13	1	85.82	1584	36.30111	2.364	.124357
23	3	11782.78	1584	36.30111	324.585	0.000000
123	3	8.27	1584	36.30111	.228	.877007

**Gráfico 3.** Medias de los valores de STRESS de los cuatro procedimientos de EMD.





**Gráfico 4.** Medias de los valores de PERDIDA de los cuatro procedimientos de EMD.



## 5. DISCUSION Y CONCLUSIONES

Hemos aplicado la transformación ACE al escalamiento multidimensional utilizando dos métodos de gradiente (el máximo descenso y el *quasi* Newton de Broyden) para la minimización del criterio de esfuerzo (stress) y lo hemos comparado con el procedimiento de Kruskal con estos dos mismos métodos. La comparación fue realizada utilizando dos criterios distintos, el propio stress, utilizado usualmente en la literatura y, la función de pérdida, concebida según ideas unificadoras para técnicas complejas de representación gráfica de datos multivariados.

Se llevaron a cabo dos experimentos numéricos, uno, con distancias perfectas y otro, con distancias perturbadas por errores con distribución normal con varianzas pequeñas (15 %) y grandes (30 %) y en ambos se hizo variar la distancia de Minkowski, para observar resultados al tratar distancias con  $q = 1$  (city block) y  $q = 2$  (euclidianas). Se mantuvo fijo el número de puntos (10) y la dimensión (2).

Para los datos de distancias perfecta, los stress en ambos procedimientos ACE son ligeramente más altos que todos los de Kruskal cuando  $q = 1$ , y cuando  $q = 2$  los valores medios de stress más altos se deben también a los procedimientos ACE. Al analizar los valores de pérdidas promedio vemos que las pérdidas de ACE disminuyen ostensiblemente para  $q=2$  al compararlas con las de Kruskal; en especial, la pérdida del procedimiento ACEMD es bastante bajo, disminuyendo a más de la mitad de la pérdida de KMD. Esta aparente contradicción entre los resultados obtenidos en los dos criterios de comparación pudiera deberse al bajo número de iteraciones dado como criterio de parada de los algoritmos. Por otra parte, si utilizamos la clasificación del stress dada por el propio Kruskal (stress alrededor de 0.1: regular optimización, y alrededor de 0.2: pobre optimización) los resultados de stress entre los diferentes procedimientos, aunque diferentes cuantitativamente, se mantienen en un rango cualitativo similar.

Para los datos perturbados veamos los casos considerados:

Para la varianza del error pequeña (15 %), en  $q = 1$  los valores medios de stress disminuyen al utilizar el método de máximo descenso tanto en el procedimiento de Kruskal como en ACE. En cuanto a las pérdidas, cuando  $q = 1$ , las pérdidas de ACE son mayores que las de Kruskal. Cuando  $q = 2$  el comportamiento es similar en cuanto al stress, pero en las pérdidas, los valores son más bajos en los procedimientos ACE, destacándose el ACEMD con pérdidas muy bajas.

Para la varianza del error grande (30 %), el stress se comporta de manera muy similar al caso de varianza pequeña en ambos parámetros de Minkowski. También en las pérdidas hay un comportamiento bastante

similar ya que para  $q = 1$  las pérdidas de ACE son más altas que las de Kruskal, pero más bajas para  $q = 2$ , y en particular de nuevo para ACEMD.

Si no se tiene en consideración los tipos de errores y las distancias, los promedios de stress más altos se observan en los procedimientos ACE mientras que en los mismos las pérdidas promedio son más bajas.

## REFERENCIAS

BREIMAN, L. and J. H. FRIEDMAN (1985): "Estimating Optimal Transformations for Multiple Regression and Correlation". En: **Journal of the American Statistical Association** 80, 580-619.

COX, T. F. and M.A.A. COX (1994): **Multidimensional Scaling**. Chapman & Hall, London.

FOWLKES, E.B. and J.R. KETTENRING (1985): "The ACE Method of Optimal Transformations. (Comment)", En: **Journal of the American Statistical Association**, 80, 607-613.

GROENEN, P.J.F.; W.J. HEISER and J.J. Meulman (1997): Global optimization in least squares multidimensional scaling by Distance Smoothing, **Technical Report, Department of Data Theory**, Leiden University, The Netherlands.

LINARES, G.; M.V. MEDEROS y E. MIRET. (2000): "Una estrategia computacional para el Escalamiento Multidimensional Clásico", **Revista Investigación Operacional** (aceptado para publicar).

MATLAB (1994): **The Matrix Laboratory. The Math. Works**, Inc. Version 4.2c.

MEDEROS, M.V.; G. LINARES y E. MIRET (2000): Una comparación de dos métodos de gradiente en el Escalamiento Multidimensional, Ponencia presentada en el Congreso de la Sociedad de Matemática y Computación de Cuba, Manzanillo. Noviembre.

MIRET, E. y G. LINARES (1995): **El teorema de descomposición singular como herramienta unificadora de las técnicas de Análisis de Datos**, Serie Interna, Fac. de Mat. y Comp. Universidad de La Habana.

MIRET, E. (1996): Generalización de las coordenadas canónicas de Rao, Tesis de Maestría. Universidad de La Habana, Cuba.

SCHNEIDER, R.B. (1992): "A Uniform Approach to Multidimensional Scaling", **Journal of Classification**. 9, 257-273.

RAO, C.R. (1995): "A review of canonical coordinates and an alternative to correspondence analysis using Hellinger distance", **Qüestió**, Barcelona. 19, 23-63.

STATISTICA for Windows Release 5.1 (1998): StatSoft, Inc. EEUU.

TROSSET, M.W. (1993): "Numerical Algorithms for Multidimensional Scaling" En: **Information and Classification**, R. Klar & O. Opitz (Eds). Springer, Heidelberg, 81-92.