Clase 20 Introducción análisis multivariante

Diplomado en Análisis de Datos con R e Investigación reproducible para Biociencias.

Dr. José Gallardo Matus

Pontificia Universidad Católica de Valparaíso

14 November 2022

PLAN DE LA CLASE

1.- Introducción

- ¿Qué son los análisis multivariantes?.
- Estudio de caso: Análisis de microbiota intestinal.
- Matrices de distancia.
- Análisis de cluster: jerárquico y no jerárquico.

2). Práctica con R y Rstudio cloud.

- Matriz de distancia: cálculo con R.
- Análisis de cluster.

INTRODUCCIÓN ANÁLISIS MULTIVARIANTE

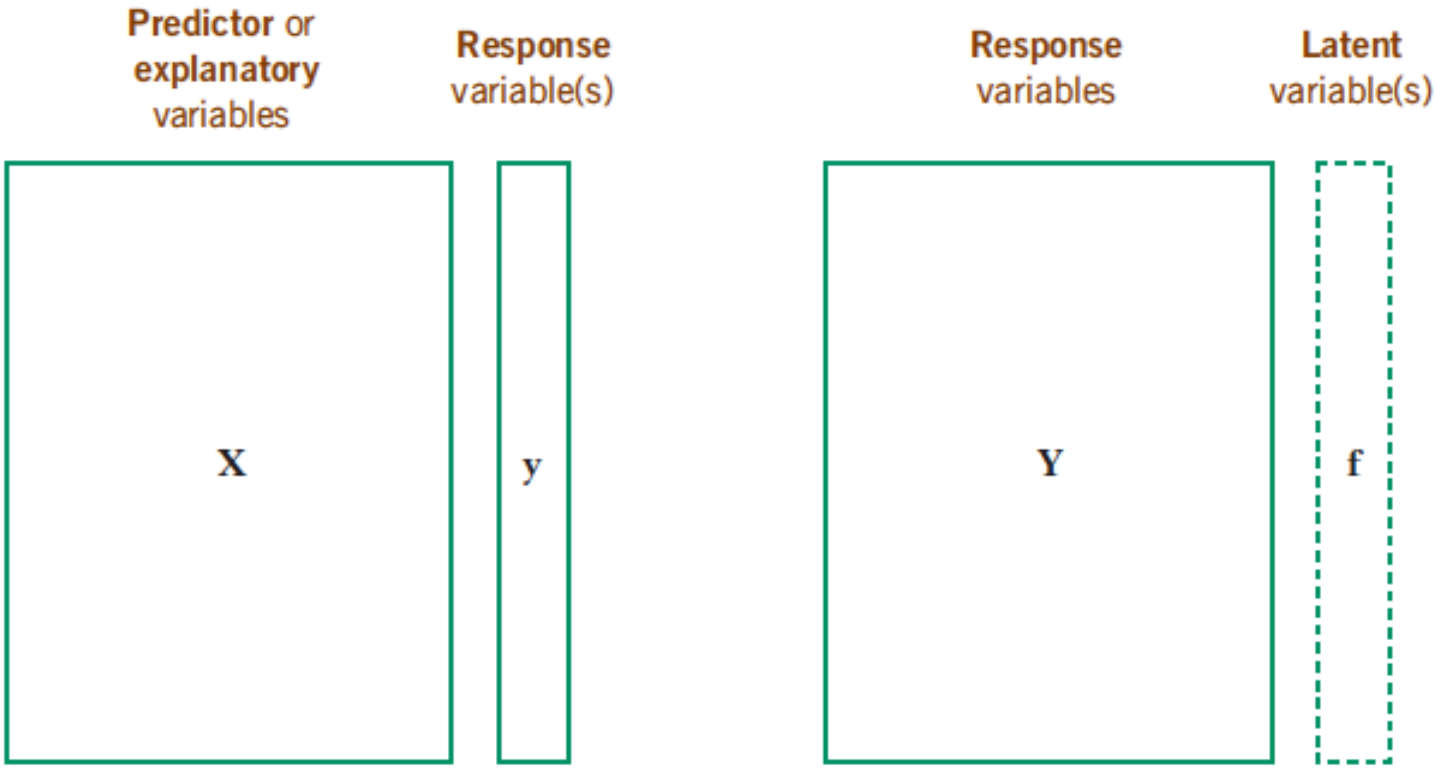
¿Qué son los análisis multivariantes?

Conjunto diverso de métodos estadísticos que observan y estudian el comportamiento simultáneo de múltiples variables.

Table 1: Biodiversidad especies fondo marino y parámetros ambientales.

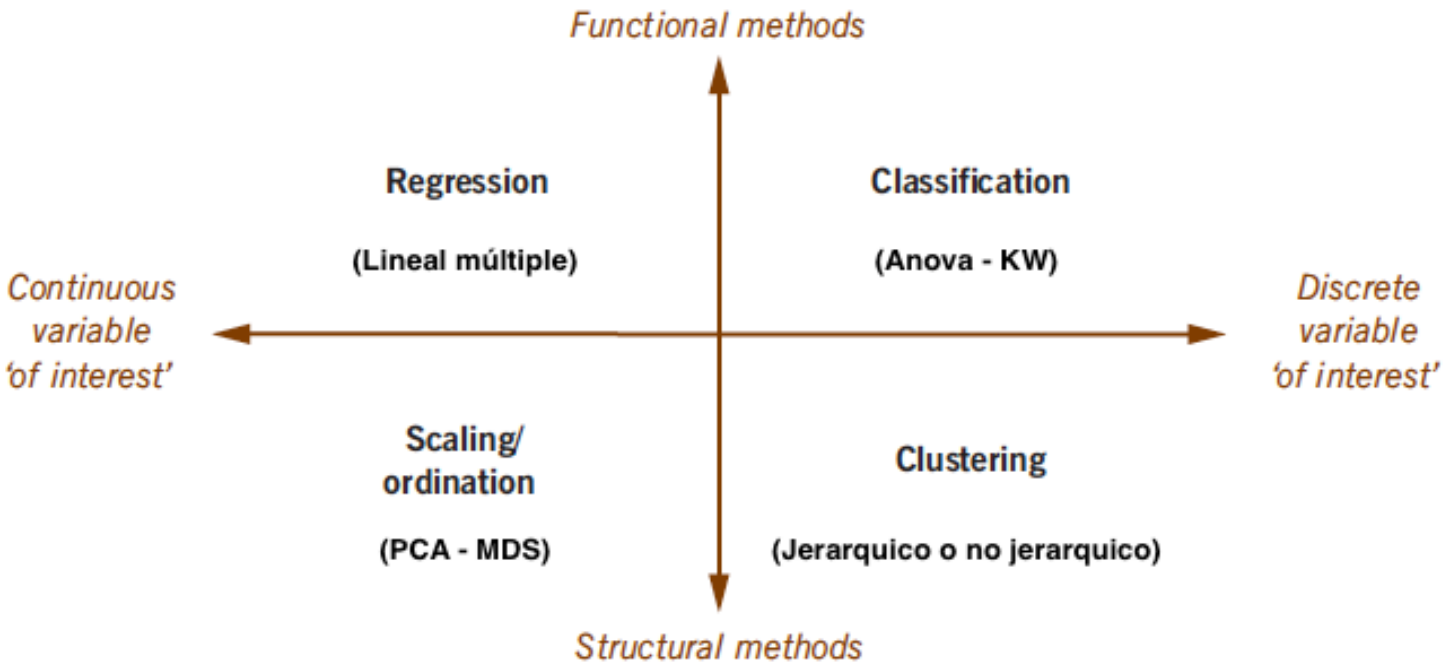
a	b	c	d	e	Depth	Pollution	Temperature
0	2	9	14	2	72	4.8	3.5
26	4	13	11	0	75	2.8	2.5
0	10	9	8	0	59	5.4	2.7
0	0	15	3	0	64	8.2	2.9
13	5	3	10	7	61	3.9	3.1
31	21	13	16	5	94	2.6	3.5

TIPOS DE MÉTODOS MULTIVARIANTES



Fuente: Multivariate Statistic, 2014

MÉTODOS MULTIVARIANTES SEGÚN TIPO DE VARIABLE



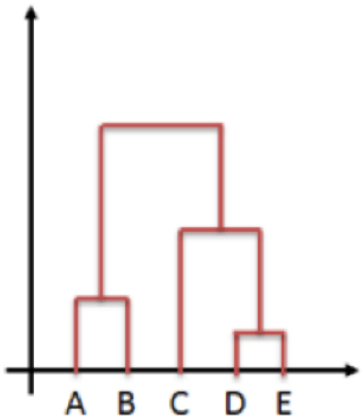
Fuente: Multivariate Statistic, 2014

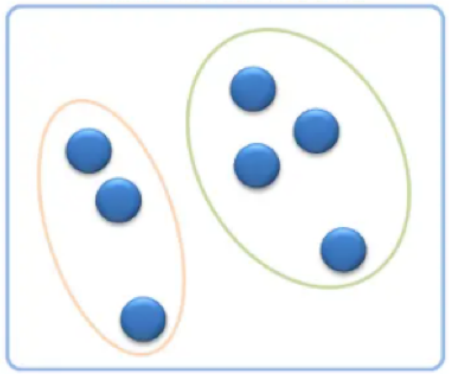
ANÁLISIS DE CLUSTER

¿Qué son?: Herramientas de exploración que permiten agrupar y visualizar datos multivariados con base a su similitud (matriz de distancia).

Jerárquico: Los grupos se fusionan sucesivamente siguiendo una jerarquía de similitud (mayor a menor).

No jerárquico: Se forman grupos homogéneos sin establecer jerarquía entre ellos.

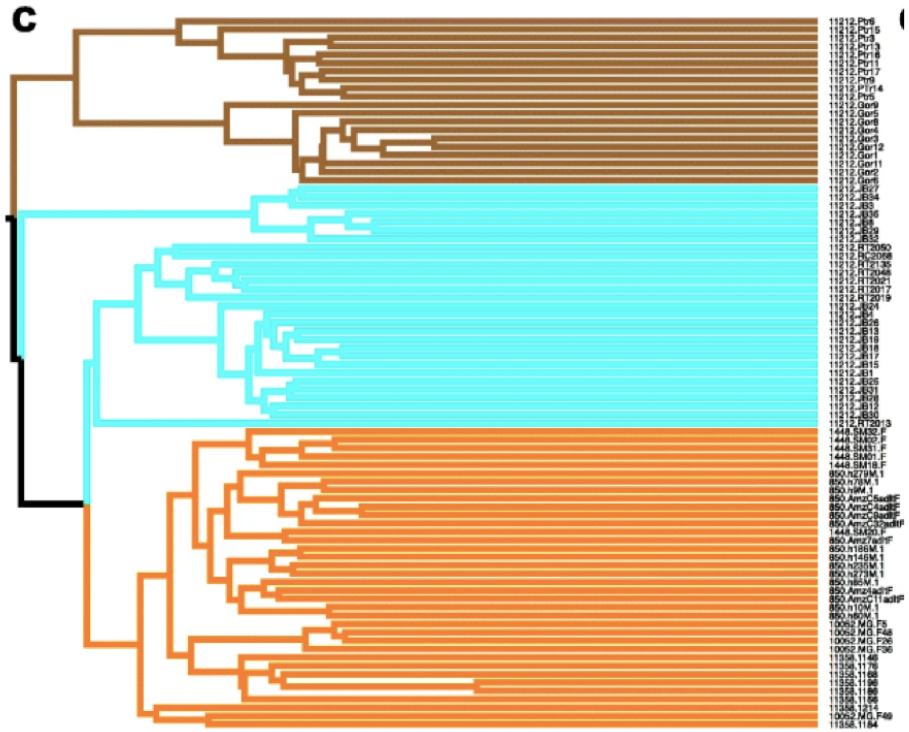




Fuente: Multivariate Statistic, 2014

ESTUDIO CASO 1: ANÁLISIS DE MICROBIOTA INTESTINAL.

- La diversidad observada de microbiota intestinal es mas similar entre humano y Macaco, que entre humano y gorila.

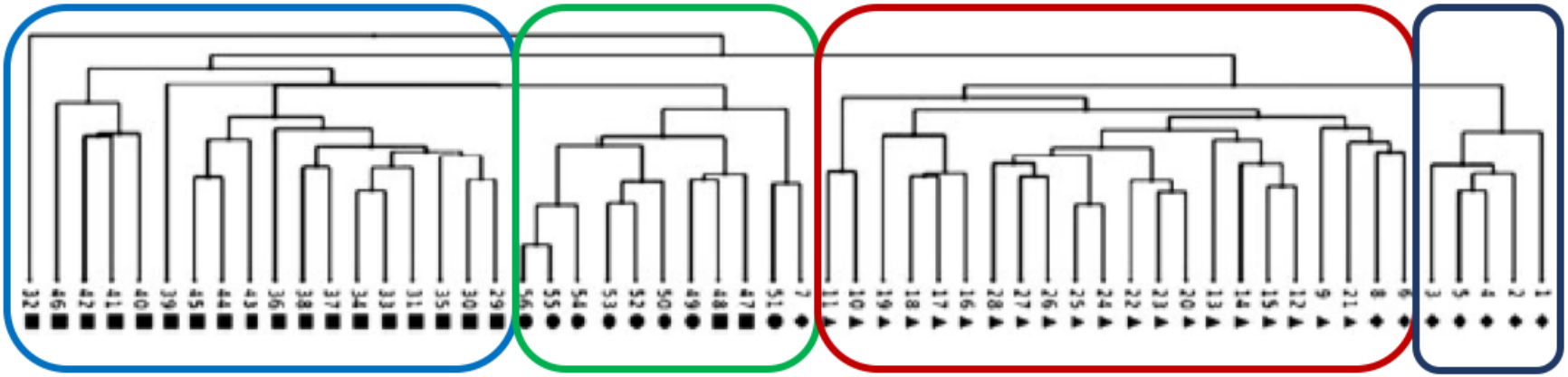


Fuente: Amato. et al. 2019

ESTUDIO CASO 2: DIVERSIDAD DE MAQUI EN CHILE.

- La diversidad genética de Maqui es mas similar dentro de un area geográfica que entre áreas geográficas.

Figure 2. A UPGMA dendrogram illustrating genetic relationships of the 56 maqui genotypes from four different geographical areas based on the genetic distance coefficient. Numbers indicate the corresponding individuals. 1–8, Puchuncavi (♦); 9–28, Paredones (▲); 29–48, Talca (■); 49–56, Pucon (●).



Fuente: Fredes. et al. 2014

VENTAJAS Y DESVENTAJAS

Tipo	Ventajas
Jerárquico	No requiere especificar grupos al inicio
No jerárquico	Útil cuando existen muchos elementos

Tipo	desventajas
Jerárquico	Difícil decidir que grupos son relevantes y cuales no.
Jerárquico	Difícil de interpretar cuando existen muchos elementos.
No jerárquico	El número de cluster que se define al inicio, podría no ser el adecuado.

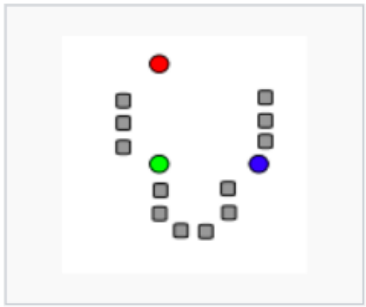
ANALISIS NO JERÁRQUICO: MÉTODO K-MEANS

Métodos K-MEANS

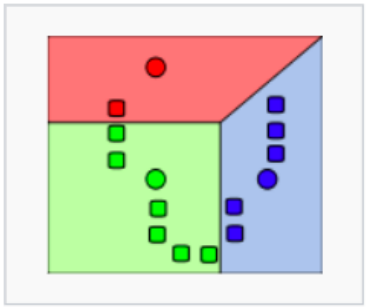
¿Qué hace el algoritmo k-means?

1. Se crea un conjunto inicial de k centroides (lo define el investigador).
2. Asigna cada elemento al grupo con la media más cercana.
3. Calcula un nuevo centroide para cada grupo.
4. Finaliza cuando las asignaciones no cambian.

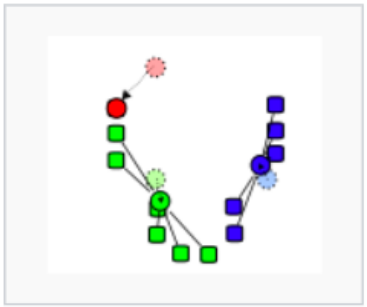
MÉTODO K-MEANS



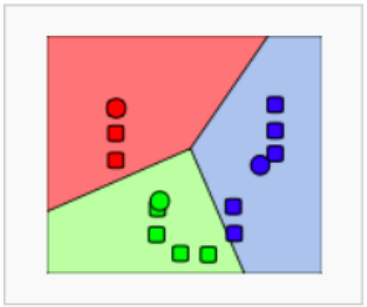
1) *k* centroides iniciales (en este caso *k*=3) son generados aleatoriamente dentro de un conjunto de datos (mostrados en color).



2) *k* grupos son generados asociándole el punto con la media más cercana. La partición aquí representa el diagrama de Voronoi generado por los centroides.



3) EL centroide de cada uno de los *k* grupos se recalcula.



4) Pasos 2 y 3 se repiten hasta que se logre la convergencia.

Fuente: https://es.wikipedia.org/wiki/K-medias

ANALISIS JERÁRQUICO: MÉTODO ESTANDAR

¿Qué hace el algoritmo estándar?

1. Agrupa dos elementos por su similitud (distancia).
2. Recalcula la matriz de distancia (muchas opciones).
3. Vuelve a punto 1.
4. Finaliza cuando todos los elementos han sido asignados a cluster.

¿Cómo recalculo la matriz?

1. Método de distancia máxima (vecino más lejano).
2. Método de distancia mínima (vecino más próximo).
3. Método UPGMA (unweighted Pair-group arithmetic averages).

MATRIZ DE DISTANCIA O SIMILARIDAD

¿Qué es y para que sirven?

- Las matrices de distancia o similaridad están en la base de todos los análisis multivariados de estructura.

Algunas consideraciones

- Las matrices de distancia se pueden elaborar tanto para variables cuantitativas continuas, como discretas.

- Debido a que las variables pueden tener diferente escala o magnitud es necesario muchas veces transformar o estandarizar las variables antes de calcular las matrices de distancia.
- Cuando una variable tiene muchos ceros también es conveniente transformarla.

TIPOS DE MATRICES DE DISTANCIA

- **Euclideana**: Para variables cuantitativas continuas.
  Con base en el teorema de pitágoras
  $c^2 = a^2 + b^2$
  $a = \sqrt{c^2 - b^2}$
  $b = \sqrt{c^2 - a^2}$
  $c = \sqrt{c^2 + b^2}$
- **No euclideana**: Para variables cuantitativas discretas.

a) Bray-Curtis (datos de conteo).
b) Jacard (binarias).

EJERCICIO ESTUDIO DIVERSIDAD AMBIENTAL

- ¿Cuán similares son las muestras entre si?
- ¿Qué muestras pertenecen a un mismo grupos (variable latente)?

Samples	Species									
	sp1	*sp2*	*sp3*	*sp4*	*sp5*	*sp6*	*sp7*	*sp8*	*sp9*	*sp10*
A	1	1	1	0	1	0	0	1	1	1
B	1	1	0	1	1	0	0	0	0	1
C	0	1	1	0	1	0	0	1	0	0
D	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0
E	1	1	1	0	1	0	1	1	1	0
F	0	1	0	1	1	0	0	0	0	1
G	0	1	1	0	1	1	0	1	1	0

Fuente: Multivariate Statistic, 2014

INDICE DE JACARD

Índice de Similitud de Jaccard se usa para expresar el grado en que dos muestras son semejantes por las especies presentes en ellas.

- Co-presencias (a)
- Co-ausencias (d)
- No coincidentes (b + c)

		Sample 2		
		1	0	
Sample 1	1	a	b	$a+b$
	0	c	d	$c+d$
		$a+c$	$b+d$	$a+b+c+d$

CALCULE INDICE DE JACARD

Jaccard index dissimilarity: $\frac{b+c}{a+b+c} = 1 - \frac{a}{a+b+c}$

Sitio	sp1	sp2	sp3	sp4	sp5	sp6	sp7	sp8	sp9	sp10
A	1	1	1	0	1	0	0	1	1	1
B	1	1	0	1	1	0	0	0	0	1

Sitio	sp1	sp2	sp3	sp4	sp5	sp6	sp7	sp8	sp9	sp10
A	1	1	1	0	1	0	0	1	1	1
F	0	1	0	1	1	0	0	0	0	1

Sitio	sp1	sp2	sp3	sp4	sp5	sp6	sp7	sp8	sp9	sp10
B	1	1	0	1	1	0	0	0	0	1
F	0	1	0	1	1	0	0	0	0	1

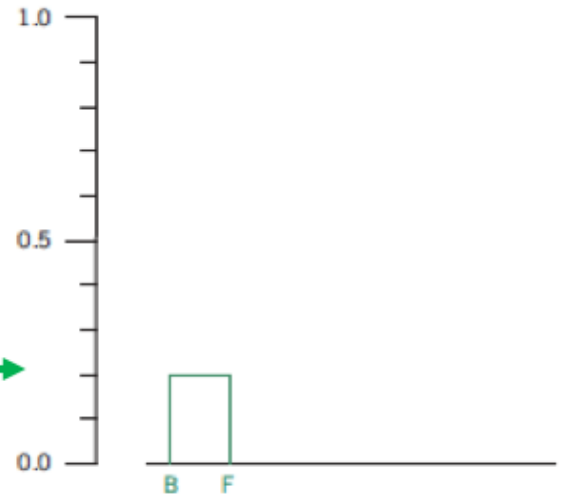
MATRIZ DE SIMILARIDAD DE JACARD

SAMPLES	A	B	C	D	E	F	G
A	0.000	0.500	0.429	1.000	0.250	0.625	0.375
B	0.500	0.000	0.714	0.833	0.667	0.200	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.429	0.667	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	1.000	0.800	0.857
E	0.250	0.667	0.429	1.000	0.000	0.778	0.375
F	0.625	0.200	0.667	0.800	0.778	0.000	0.750
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.375	0.750	0.000

AGRUPAMIENTO JERARQUICO: PASO 1

Construcción del primer nodo: Mayor similitud entre B y F

SAMPLES	A	B	C	D	E	F
A	0.000	0.500	0.429	1.000	0.250	0.625
B	0.500	0.000	0.714	0.833	0.667	0.200
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.429	0.667
D	1.000	0.833	1.000	0.000	1.000	0.800
E	0.250	0.667	0.429	1.000	0.000	0.778
F	0.625	0.200	0.667	0.800	0.778	0.000
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.375	0.750



AGRUPAMIENTO JERARQUICO: PASO 2

SAMPLES	A	B	C	D	E	F	G
A	0.000	0.500	0.429	1.000	0.250	0.625	0.375
B	0.500	0.000	0.714	0.833	0.667	0.200	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.429	0.667	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	1.000	0.800	0.857
E	0.250	0.667	0.429	1.000	0.000	0.778	0.375
F	0.625	0.200	0.667	0.800	0.778	0.000	0.750
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.375	0.750	0.000

Construcción nueva matriz usando método de distancia máxima.

SAMPLES	A	(B,F)	C	D	E	G
A	0.000	0.625	0.429	1.000	0.250	0.375
(B,F)	0.625	0.000	0.714	0.833	0.778	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.429	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	1.000	0.857
E	0.250	0.778	0.429	1.000	0.000	0.375
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.375	0.000

(B-F)-A
(B-F)-C
(B-F)-D
(B-F)-E
(B-F)-G

AGRUPAMIENTO JERARQUICO: PASO 2.1

SAMPLES	A	B	C	D	E	F	G
A	0.000	0.500	0.429	1.000	0.250	0.625	0.375
B	0.500	0.000	0.714	0.833	0.667	0.200	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.429	0.667	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	1.000	0.800	0.857
E	0.250	0.667	0.429	1.000	0.000	0.778	0.375
F	0.625	0.200	0.667	0.800	0.778	0.000	0.750
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.375	0.750	0.000

SAMPLES	A	(B,F)	C	D	E	G
A	0.000	0.625	0.429	1.000	0.250	0.375
(B,F)	0.625	0.000	0.714	0.833	0.778	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.429	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	1.000	0.857
E	0.250	0.778	0.429	1.000	0.000	0.375
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.375	0.000

Construcción nueva matriz usando método de distancia máxima.

(B-F)-A
(B-F)-C
(B-F)-D
(B-F)-E
(B-F)-G

AGRUPAMIENTO JERARQUICO: PASO 2.2

SAMPLES	A	B	C	D	E	F	G
A	0.000	0.500	0.429	1.000	0.250	0.625	0.375
B	0.500	0.000	0.714	0.833	0.667	0.200	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.429	0.667	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	1.000	0.800	0.857
E	0.250	0.667	0.429	1.000	0.000	0.778	0.375
F	0.625	0.200	0.667	0.800	0.778	0.000	0.750
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.375	0.750	0.000

SAMPLES	A	(B,F)	C	D	E	G
A	0.000	0.625	0.429	1.000	0.250	0.375
(B,F)	0.625	0.000	0.714	0.833	0.778	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.429	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	1.000	0.857
E	0.250	0.778	0.429	1.000	0.000	0.375
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.375	0.000

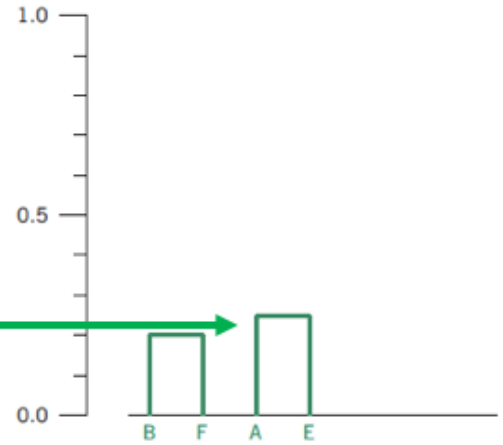
Construcción nueva matriz usando método de distancia máxima.

(B-F)-A
(B-F)-C
(B-F)-D
(B-F)-E
(B-F)-G

AGRUPAMIENTO JERARQUICO: PASO 3

Construcción del segundo nodo:
Mayor similitud entre A y E

SAMPLES	A	(B,F)	C	D	E	G
A	0.000	0.625	0.429	1.000	0.250	0.375
(B,F)	0.625	0.000	0.714	0.833	0.778	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.429	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	1.000	0.857
E	0.250	0.778	0.429	1.000	0.000	0.375
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.375	0.000



AGRUPAMIENTO JERARQUICO: PASO 4

SAMPLES	A	(B,F)	C	D	E	G
A	0.000	0.625	0.429	1.000	0.250	0.375
(B,F)	0.625	0.000	0.714	0.833	0.778	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.429	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	1.000	0.857
E	0.250	0.778	0.429	1.000	0.000	0.375
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.375	0.000

SAMPLES	(A,E)	(B,F)	C	D	G
(A,E)	0.000	0.778	0.429	1.000	0.375
(B,F)	0.778	0.000	0.714	0.833	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	0.857
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.000

Construcción nueva matriz usando método de distancia máxima.

(A-E)-(B-F)

(A-E)-C

(A-E)-D

(A-E)-G

AGRUPAMIENTO JERARQUICO: PASO 4.1

SAMPLES	A	(B,F)	C	D	E	G
A	0.000	0.625	0.429	1.000	0.250	0.375
(B,F)	0.625	0.000	0.714	0.833	0.778	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.429	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	1.000	0.857
E	0.250	0.778	0.429	1.000	0.000	0.375
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.375	0.000

SAMPLES	(A,E)	(B,F)	C	D	G
(A,E)	0.000	0.778	0.429	1.000	0.375
(B,F)	0.778	0.000	0.714	0.833	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	0.857
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.000

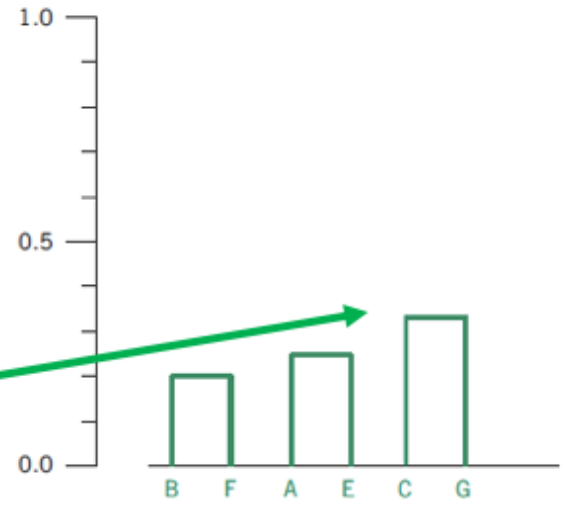
Construcción nueva matriz usando método de distancia máxima.

(A-E)-(B-F)
(A-E)-C
(A-E)-D
(A-E)-G

AGRUPAMIENTO JERARQUICO: PASO 5

Construcción del tercer nodo: Mayor similitud entre C y G

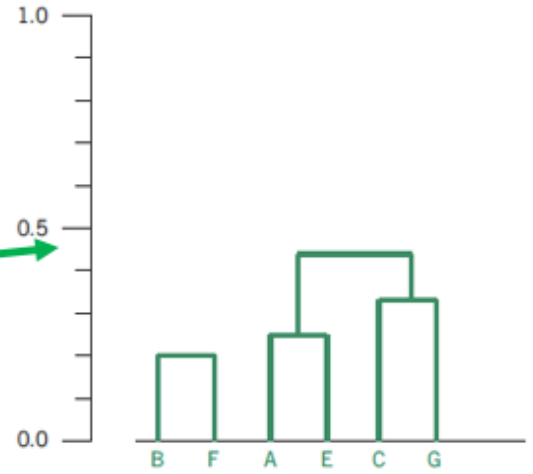
Samples	(A,E)	(B,F)	C	D	G
(A,E)	0.000	0.778	0.429	1.000	0.375
(B,F)	0.778	0.000	0.714	0.833	0.778
C	0.429	0.714	0.000	1.000	0.333
D	1.000	0.833	1.000	0.000	0.857
G	0.375	0.778	0.333	0.857	0.000



AGRUPAMIENTO JERARQUICO: PASO 6

Construcción del cuarto nodo: Mayor similitud entre A-E y C-G

Samples	(A,E)	(B,F)	(C,G)	D
(A,E)	0.000	0.778	0.429	1.000
(B,F)	0.778	0.000	0.778	0.833
(C,G)	0.429	0.778	0.000	1.000
D	1.000	0.833	1.000	0.000

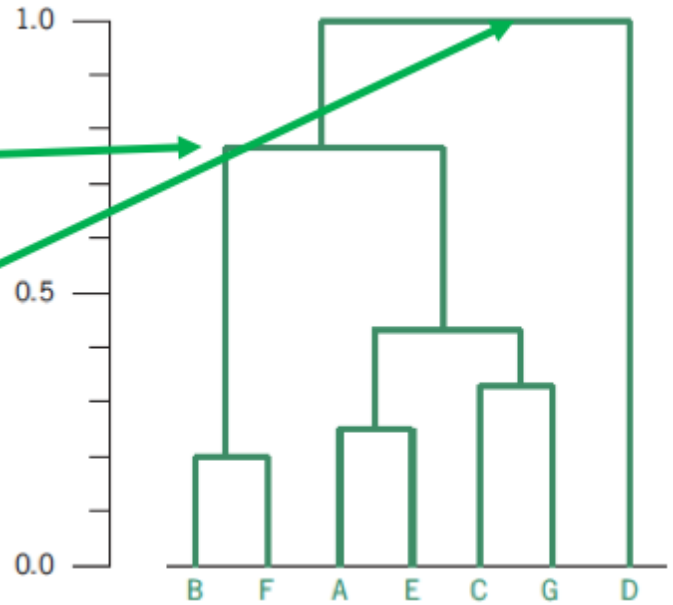


AGRUPAMIENTO JERARQUICO: PASO 7

Construcción del quinto y sexto nodo: Mayor similitud entre A-E-C-G con B-F y entre estos con D.

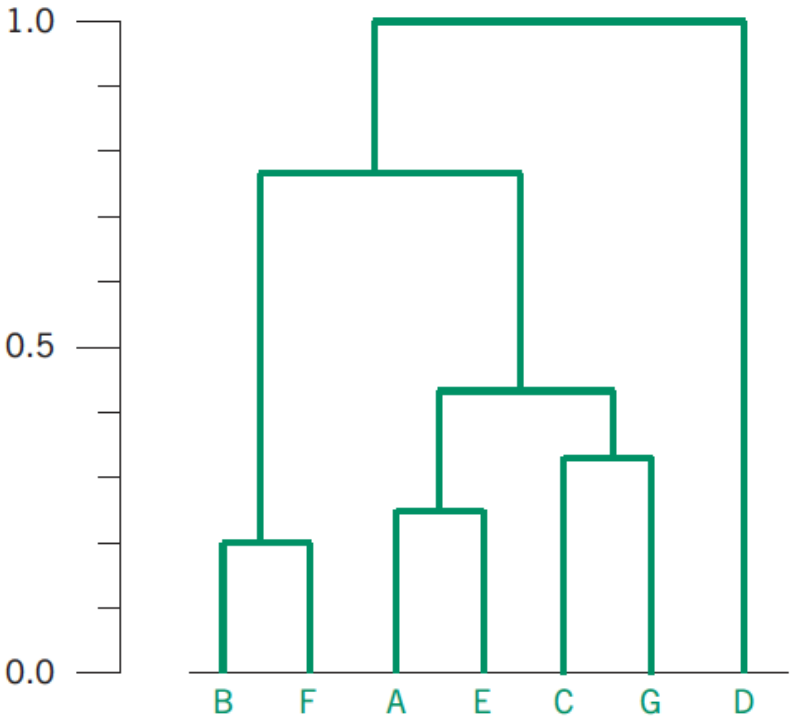
Samples	(A,E,C,G)	(B,F)	D
(A,E,C,G)	0.000	0.778	1.000
(B,F)	0.778	0.000	0.833
D	1.000	0.833	0.000

Samples	(A,E,C,G,B,F)	D
(A,E,C,G,B,F)	0.000	1.000
D	1.000	0.000



INTERPRETACIÓN CLUSTER JERÁRQUICO

- Establecemos nivel de agrupamiento = 0.5.
- Bajo 0.5 hay mas similaridad (Co-presencias).
- Se observan 3 grupos o cluster.



RESUMEN DE LA CLASE

- ¿Qué son los análisis multivariantes?.
- Análisis de cluster: jerárquico y no jerárquico.
- Estudio de caso 1: Análisis de microbiota intestinal.
- Estudio de caso 2: Biodiversidad de maqui.
- Matrices de distancia (Variables discretas): Jacard.
- Practica con R cluster jerarquico.