Talleres de Análisis Multivariados en R

Maestría en Ecología y Biodiversidad

Javier Rodríguez-Barrios

Invalid Date

Tabla de contenidos

2	Resumen	4
3	Introducción	5
Ta	aller 1. Introducción a R y a Tidyverse	6
	R como calculadora	6
	Asignaciones	6
	Algebra	7
	Bases de datos (data.frames - cbind)	8
	Enlaces de operaiciones en R	8
lm	nportar y exportar bases de datos (read y write)	9
	Complementos requeridos	9
	Base de datos del ejercicio	9
	Exportación	9
	Importación	10
	Importación desde internet	10
	Enlaces de importación y Exportación de datos	10
In	troductorio a Tidyverse	11
	Importar la base de datos (datos)	11
	Manipulación de los datos {.unnumbered} enlace	11
	Nueva base de datos con factor	11
	Filtrando elementos del dataframe (filter)	12
	Filtrando en orden descendente o ascendente (arrange)	12
	Combinación de filtrado y orden (filter + arrange)	13
	Generación de variables derivadas (arrange)	13
	Combinación de filtrado, nuevas variables y orden (filter + mutate + arrange)	13
	Enlaces de operaiciones en Tidyverse	14
Ta	aller práctico para la casa	15
Τa	aller 2.1 Operaciones matriciales	16
	1.1 producto matricial	16
	Respuestas {.unnumbered}	
	1.2 Determinantes	

Respuestas {.unnumbered}	
1.3 Matriz inversa	. 17
Respuestas	. 18
1.4 Matriz de varianza - covarianza	. 18
Respuestas	. 18
1.5 Covarianza generalizada (S)	. 18
Respuestas	. 19
Aplicación de matrices en un Análisis de Componentes Principales - PCA	20
1. Matriz centrada (m.c) y matriz rotada (m.r)	
2. Cargar las librerías requeridas	
3. Vector de medias (v.m) y matriz centrada (m.c)	
4. Vectores própios (v.p)	
5. Matriz Rotada (m.r)	
6. figura (paquete - stats)	
7. figura	
Audition de Commentes mineiroles - DCA en librario lles mult	22
Análisis de Componentes principales - PCA en librería "vegan"	23
1. Realización del PCA	
2. Figura del PCA	. 23
Operaciones matriciales - base <i>Caimanes</i>	24
Procedimiento del PCA	. 24
1. Cargar las librerías requeridas	
2. Cargar o importar la base de datos	. 25
3. Hallar el vector de medias (v.m) y la matriz centrada (m.c)	. 25
4. Vectores própios (v.p)	. 26
5. Matriz Rotada (m.r)	. 26
6. figura (paquete - stats)	. 26
7. figura	. 27
Análisis de Componentes principales - PCA en librería "vegan"	
1. Realización del PCA	. 27
2. Figura del PCA	. 27
Taller 3. Exploración Univariada y Multivariada	28
Procedimiento de la exploración	. 28
Cargar las librerías requeridas	
Cargar o importar la base de datos	
1. Figuras de elipses	
3. Figuras de Dispersión por pares de variables (pairs)	
3. Histogramas	
4. Dispersión X-Y	
4 1 Dispersión X-Y con gaplot2	44

5. Cajas y Bigotes	47
6. Coplot	51
7. Figuras con estadísticos (promedios, errores,)	54
7.1 Base de datos con múltiples factores	57
8. parentesis Figuras de dispersión animadas	59
Taller de entrenamiento	60
Taller 4.1 Análisis de Componentes Principales - PCA	62
Lirerías requeridas	62
Cargar la base de datos	63
Exploración Gráfica	63
1) PCA con el paquete stats (pca1)	66
2) PCA con el paquete FactoMiner	69
3) PCA con el paquete vegan	72
Taller en casa	74
4) Análisis avanzado de PCA	75
5) PCA por tipos con la función "dudi.pca" del paquete ade4	77
Taller 4.2 Análisis de Componentes Principales - PCA	81
Lirerías requeridas	81
Cargar la base de datos	
Exploración Gráfica	
1) Ajuste de las bases de datos fisique quimica (amb) y biológica (tax.hel)	
2) PCA con paquete factoextra	85
2.1) Contribución eje 1	85
2.2) Elipses por cada periodo climático	86
2.3) Escala de contribuciones de las observaciones y las variables	
3) PCA con vegan	
3.1) Insumos del análisis	
3.2) Autovalores	
3.3) Figura del PCA	
3.4) PCA con vegan - biplot + orditorp	
3.5) PCA con vegan + orditorp + envfit (ajuste ambiental)	
4) PCA con paquete ggplot2	
4.1 Coordenadas de los sitios y el factor "coord.sit"	
4.2 Coordenadas de los taxones "coord.tax"	
4.3 Coordenadas de las ambientales "coord.amb"	
4.4 Figura con de elipses por concavidades - geom_mark_hull	
4.5 Figura con vectores de especies y ambientales	
Taller de entrenamiento	
Taller 5.1 Análisis de Escalamiento Multidimensional no Métrico - NMDS	98
Referencias bibliográficas de apoyo	98

Cargar las librerías requeridas	99 99 100 100 101 102 103
1) Ordenación de las localidades y las especies de malezas. 2) Figuras del nmds con el paquete "vegan" 2.1 nMDS con solapamiento de taxones 2.2 Ordenación con el comando "orditorp" 3) NMDS con paquete ggplot2 3.1 Coordenadas de los sitios y el factor "coord.sit" 3.2 Coordenadas de los taxones "coord.tax" 3.3 Figura con de elipses	99 100 100 101 102 103
2) Figuras del nmds con el paquete "vegan"	100 100 101 102 103
2.1 nMDS con solapamiento de taxones 2.2 Ordenación con el comando "orditorp" 3) NMDS con paquete ggplot2 3.1 Coordenadas de los sitios y el factor "coord.sit" 3.2 Coordenadas de los taxones "coord.tax" 3.3 Figura con de elipses	100 101 102 103
2.2 Ordenación con el comando "orditorp"	101 102 103
2.2 Ordenación con el comando "orditorp"	101 102 103
3) NMDS con paquete ggplot2	102 103
3.1 Coordenadas de los sitios y el factor "coord.sit"	103
3.2 Coordenadas de los taxones "coord.tax"	
3.3 Figura con de elipses	
•	104
Faller 6.1 Análisis de Correspondencias Múltiples - MCA	106
Procedimiento de la exploración	106
Librerías requeridas	
Cargar o importar la base de datos	
1) Ajuste de la base de datos de bagres	107
2) Primera ordenación de las variables cualitativas activas (mca1)	
2.1) Ajuste de la ordenación definida por los autovalores	
2.2) Figuras generales del mca1	
2.3) Figuras del mca con ponderaciones	
3) Segunda ordenación de las variables cualitativas activas (mca2)	
Taller de entrenamiento	
Faller 7.1 Análisis de Redundancia - RDA	122
Procedimiento resumido de la ordenación con el RDA	
Cargar las librerías requeridas	
Funciones adicionales (Bordcard et al. 2018)	
Cargar o importar la base de datos	
Ajuste de las bases de datos biológica (tax.hel) y Ambiental (amb)	
Doce pasos para el análisis de redundancia - RDA	
Paso 1. Ordenación de los taxones y las variables ambientales	
Paso 2. Coeficientes de las variables regresoras (ambientales), en el modelo lineal	
Paso 3. R2 sin ajuste vs. R2 ajustado (Ezequiel 1930)	
Paso 4. Figura de Triplot	
Paso 5. Prueba global del RDA	
Paso 6. Factor de inflación de la varianza (VIF) del RDA	
Paso 7. Criterios de selección de variables ambientales (X)	133
Paso 8. R2 ajustado	136
Paso 9. RDA Parsimonioso (rda.par)	
Paso 10. Coeficientes del modelo lineal parsimonioso	
Paso 11. Dos Triplots del RDA parsimonioso (Scaling 1 y Scaling 2)	190

Paso 12. RDA con paquete ggplot2		 	 		138
Taller de entrenamiento					
Taller 8.1 Análisis de Clúster - CLA					140
Referencias bibliográficas de apoyo					
Cargar las librerías requeridas					
Cargar o importar la base de datos					
Exploración de los datos					
Cuatro pasos para el análisis de clúster					
PASO 1. Distancia entre observaciones					
PASO 2. Elección del método de agrupación de mayor a	-				
PASO 3. Número de grupos formados					
Paso 4. Variables de mayor contrinución a la clasificación	n	 	 	•	170
Taller 9.1 Análisis Discriminante Lineal - LDA					174
Referencias bibliográficas de apoyo		 	 		175
Cargar las librerías requeridas		 	 		175
Cargar o importar la base de datos					
Exploración de los datos					
Mapa de Calor					
Tres pasos para la realización del discriminante lineal - LDA					
Paso 1. Pruebas de supuestos					
Paso 2. Análisis Discriminante Lineal de Fisher - LDA					
Paso 3. Visualización grafica del LDA					
Tallar 10 1 Análisis de Verienze Multiveriede - MANOVA					194
Taller 10.1 Análisis de Varianza Multivariado - MANOVA					
Referencias bibliográficas de apoyo					
Cargar las librerías requeridas					
Cargar o importar la base de datos					
Exploración de los datos					
Cuatro pasos para la realización del MANOVA					
Paso 1. Pruebas de supuestos					
Paso 2. Análisis de Varinaza Multivariado - MANOVA		 	 		
Paso 3. Supuestos del MANOVA		 	 		203
3.1. Supuesto de normalidad de los residuales del MANO					
3.2. Supuesto de independencia					205
Paso 4. Prueba a postriori del MANOVA		 	 	•	205
Taller 11.1 Análisis de Varianza Multivariado No Paramétricos	i				208
Referencias bibliográficas de apoyo		 	 		209
Cargar las librerías requeridas					
Cargar o importar la base de datos					$\frac{1}{209}$

Figura de <i>cajas</i> por cada variable morfométrica	210
Figura del lda para comparar a las especies de peces $\dots \dots \dots \dots \dots$	21
Permanova 1. Análisis de similitudes multivariadas - ANOSIM	213
Paso 1. Distancia entre las observaciones	213
Paso 2. Prueba de hipótesis multivariada con el ANOSIM	21
Permanova 2. Permutación multirespuesta - MRPP	21!
Paso 1. Distancia entre las observaciones	21!
Paso 2. Prueba de hipótesis multivariada con el MRPP	216
Permanova 3. PERMANOVA de un factor (Especies de peces)	216
Paso 1. Distancia entre las observaciones	21'
Paso 2. Prueba de hipótesis multivariada con el PERMANOVA	21'
Paso 3. Efecto de las variables morfométricas en la diferenciación de los grupos	218

1

Talleres de Estadística Multivariada Javier Rodríguez Barrios Maestría en Ecología y Biodiversidad "Actualizado: 2023-03-26"

2 Resumen

El siguiente manual es un compendio de temas vistos en el componente práctico del módulo de estadística multivariada de la Maestría en Ecología y Biodiversidad. Se fundamenta en cuatro grandes módulos:

- Introducción al RStudio y al algebra lineal aplicada a multivariados.
- Exloración y visualización gráfica de datos univariados y multivariados.
- Técnicas de ordenación multivariada (PCA, NMDS, MCA y RDA).
- Técnicas de clasificación multivariada (CLA, LDA)
- Pruebas de hipótesis (MANOVAS y PERMANOVAS).

Para un mejor entendimiento de este manual, se sugiere complementar la información con las referencias bibliográficas sugeridas en cada capitulo, especialmente el libro **Análisis de datos ecológicos y ambientales - aplicaciones en el programa R" de Rodríguez-Barrios (2023) enlace

3 Introducción

Pendiente de documentar.

Taller 1. Introducción a R y a Tidyverse

R como calculadora

```
# Operaciones aritméticas básicas
5 + 7 # Suma
5 - 3 # Resta
5 * 7 # Multiplicación
5/3 # División
2^3
     # Exponentes
# Logarítmos y exponenciales
x = 5/3
log2(x) # Logarítmo en base 2 de x
log10(x) # Logarítmo en base 10 de x
exp(x)
         # Exponencial de x
# Funciones trigonométricas :
cos(x) # Coseno de x
sin(x) # Seno de x
tan(x) # Tangente de x
```

Asignaciones

Algebra

```
# Vectores
sitios \leftarrow c(2, 3, 2, 3) # Vector sitios
                             # Imprimir el vector
sitios
sitios <- c("dos", "tres", "dos", "dos")  # Vector como caracter
sitios
abundancia <- c(TRUE, FALSE, TRUE, TRUE) # vector con elementos lógicos
abundancia
# Vectores (continuación)
sitios \leftarrow c(2, 3, 2, 3) # Vector sitios
names(sitios) <- c("dos", "tres", "dos", "dos") # Nombres de los elementos</pre>
sitios <- c(dos= 2, tres= 3, dos= 2, dos= 2) # Otra forma
sitios
# Vectores (continuación)
sitios [1:3] # Tres primeros elementos del vector sitios
sitios[c(1,4)]  # Primer y cuarto elemento del vector
sitios [-1]  # Eliminar el primer elemento del vector
# Matrices
Matriz \leftarrow matrix(c(1:15),5,3, byrow= FALSE) # 5,3: Número de filas y columnas
Matriz
# Matrices (continuación)
             # Transpuesta de la Matriz
t(Matriz)
Matriz[2,]
                  # Ver la segunda fila (coma a la derecha del dato)
Matriz[,2] # Ver la segunda columna (coma a la izquierda del dato)
Matriz[2:4,] # Filas 2 a la 4
Matriz[c(2,4),] # Filas 2 y 4
Matriz[ ... ]  # Valores de la fila 3 y de las columnas 1:3
Matriz[ ... ]  # Excluye a la 3a fila
```

Bases de datos (data.frames - cbind)

```
# Base de datos (datos)
datos <- data.frame(</pre>
 "n" = 1:4,
                                            # filas
 "indiv." = c("a", "b", "c", "d"),
                                            # Individuos
  "sexo" = c("f", "f", "m", "m"),
                                            # Sexo
  "variable" = c(1.2, 3.4, 4.5, 5.6))
                                            # Valor de la variable
          # Ver asinación del data.frame
# Base de datos (continuación)
head(datos) # Muestra las primeras filas
names(datos) # Nombres de las columnas
str(datos)  # Estructura de la base de datos
t(datos) # Transpuesta de la base de datos
```

Enlaces de operaiciones en R

Diapositivas Intro a R

Diapositivas Operaciones en R

Trucos en R

RPubs-Intro

RPubs-Intermed

Importar y exportar bases de datos (read y write)

Complementos requeridos

```
# Librerías requeridas
library(tidyverse)
library(xtable)  # Importar y exportar
library(openxlsx)  # exportar "*.xlsx"
library(readxl)  # Importar y exportar
library(xlsx)  # Importar y exportar "*.xlsx"
```

Base de datos del ejercicio

Exportación

```
# Exportar bases de datos como "datos1"
write.csv2(datos, "datos1.csv") # paquete "utils"
write_csv2(datos, "datos1.csv") # paquete "readx1"
```

```
write.xlsx(datos, "datos1.xlsx") # paquete "openxlsx" y "xlsx"
```

Importación

```
# Importar bases de datos como "datos1"

datos1 <- read.csv2("datos1.csv", row.names = 1)  # paquete "utils"
datos1 <- read.csv2(file.choose(), row.names = 1)  # paquete "utils"

datos1 <- read_csv2("datos1.csv")  # paquete "readxl"
datos1 <- read_csv2(file.choose())  # paquete "readxl"

datos1 <- read_excel("datos1.xlsx")  # paquete "readxl"
datos1 <- read_excel(file.choose())  # paquete "readxl"

datos1 <- read.xlsx("datos1.xlsx")  # paquete "openxlsx"
datos1 <- read.xlsx(file.choose())  # paquete "openxlsx"</pre>
```

Importación desde internet

```
# Importar archivo *.csv desde la web
datos2 <- read.csv2("https://javier-2712.github.io/Multivariados/Insectos.csv")
datos2 <- read_csv2("https://javier-2712.github.io/Multivariados/Insectos.csv")</pre>
```

Enlaces de importación y Exportación de datos

Importación de datos1 Importación de datos2 Diapositivas Resúmenes con psych /page()

Introductorio a Tidyverse

Importar la base de datos (datos)

```
datos1 <- read_excel(file.choose()) # paquete "readxl"</pre>
```

Manipulación de los datos {.unnumbered} enlace

- comando gather para visualizar bases de datos alargadas
- comando spread para visualizar bases de datos a lo ancho
- comando %>% tuberías o pippelines.

```
# Base de datos alargada (datos.l)
datos.l <- datos %>%
  gather(key= Columnas, value= Valores)
datos.l

# Excluir la columna periodo en formato alargado (-periodos)
datos.l <- datos %>%
  gather(key= columnas, value= valores, -periodos)
datos.l
```

Nueva base de datos con factor

Filtrando elementos del dataframe (filter)

```
# Fitrado por sexos "f" y "m"
datos.f <- datos %>% filter(Sexo == "f")
datos.f # Base de datos para mujeres

datos.h <- datos %>% filter(Sexo == "m")
datos.h # Base de datos para hombres

# Fitrado por sexos y estudiantes "f" y "m"
datos.a <- datos %>% filter(Sexo == "f", Estudiante == "a")
datos.a # Datos de la estudiante a

datos.a <- datos.f %>% filter(Estudiante == "a")
datos.a # Datos de la estudiante a
```

Filtrando en orden descendente o ascendente (arrange)

```
# Filtrando en orden descendente y ascendente
datos.des <- datos %>% arrange(desc(Variable1))
datos.des # Variable asignada

datos.asc <- datos %>% arrange(Variable1)
datos.asc # Variable asignada
```

Combinación de filtrado y orden (filter + arrange)

```
# Filtrar mujeres en orden descendente.
datos.des.f <- datos %>%
  filter(Sexo == "f") %>%
  arrange(desc(Variable1))
datos.des.f # Asignación
```

Generación de variables derivadas (arrange)

```
# Insertar nuevas variables (mutate)
datos.3 <- datos %>%
  mutate(Variable3 = Variable1 * Variable2)
datos.3 # Asignación
```

Combinación de filtrado, nuevas variables y orden (filter + mutate + arrange)

```
# Combinación de funciones (filter, mutate, arrange)
datos.4 <- datos %>%
  filter (Sexo == "f") %>%
  mutate (Variable3 = Variable2 * 12) %>%
  arrange (desc(Variable3))
datos.4  # Asignación

# Combinación de funciones (filter, mutate, arrange)
datos.4 <- datos %>%
  filter (Sexo == "f", Estudiante == "b") %>%
  mutate (Variable3 = Variable2 * 12) %>%
  arrange (desc(Variable3))
datos.4
```

Enlaces de operaiciones en Tidyverse

Videos de Tidyverse

Introducción al Tidyverse

Introducción al Tidyverse

Introducción al Tidyverse

El Tidyverso y tidyr

Curso de Tidyverse

10 funciones de Tidyverse

Manipulación de datos

Estandarización de variables

Transformaciones de variables

/page()

Taller práctico para la casa

•	Filter
•	Arrange
•	Mutate
3.	Realizar los ejemplos del siguiente enlace , utilizando las siguientes opciones de tidyverse:
•	Pipeline
•	summarize
•	group_by
•	mutate
•	filter
•	select
•	joins
2.	Realizar los ejemplos del siguiente enlace , utilizando las siguientes opciones de tidyverse:
•	summarize
•	group_by
•	mutate
•	filter
•	select
3.	Realizar los ejemplos del siguiente enlace , utilizando las siguientes opciones de tidyverse:
•	Ejemplo de los censos
•	spread

1. Realizar los ejemplos del siguiente **enlace**, utilizando las siguientes opciones de tidyverse:

Taller 2.1 Operaciones matriciales

Objetivo de la actividad:

Poner en práctica operaciones matriciales, para resolver un ejercicio de ordenación multivariada, denominado "Análisis de Componentes Principales - PCA", cuyo objetivo es relacionar a las observaciones de las matrices o de las bases de datos (filas de la matriz), de acuerdo a las variables definidas (columnas de la matriz). Finalmente se realizará la misma técnica con la librería vegan de R.

1.1 producto matricial

```
# A (2,1,1,3)
# B (1,4,2,5,0,3)
# Calcular: (1) B'.A' (2) (A.B)' (3) Demostrar que B'.A' = (A'.B')

# R./
A = matrix(c(2,1,1,3),2,2,byrow=TRUE)  # Matriz A
B = matrix(c(1,4,2,5,0,3),2,3,byrow=TRUE)  # Matriz B
A
B
```

Respuestas {.unnumbered}

```
# (1) B'.A'
t(B)%*%t(A)  # %*% representa el producto matricial,
# "t" corresponde a la transpuesta de una matriz

# (2) (A.B)'
t(A%*%B)

# (3) B'.A' = (A.B)'
```

```
(t(B)%*%t(A)) == t(A%*%B) # Demostración
```

1.2 Determinantes

```
# A (2,3,3,2)
# B (1,4,2,5,0,3)
# Cacular: Determinante de A y de B

#R./
A = matrix (c(2,3,3,2),2,2,byrow=TRUE)
B = matrix (c(1,4,2,5,0,3),3,3,byrow=TRUE)
A
B
```

Respuestas {.unnumbered}

```
# Determinantes
det(A)
det(B)
```

1.3 Matriz inversa

```
# A (5,2,2,2)
# Calcular inversa de A
# R./
A = matrix(c(5,2,2,2), 2,2, byrow= T)
A
```

Respuestas

```
# Matriz inversa (solve)
solve(A)
```

1.4 Matriz de varianza - covarianza

```
# A (2,2,4,3,6,9), 3 x 2
# B (2:10), 5 x 2

# R./
A = matrix(c(2,2,4,3,6,9),3,2, byrow= T)
B = matrix(c(2:10), 5,2, byrow=T)

A
B
```

Respuestas

```
# Covarianzas de cada matriz (c/grupo)
cov.A = cov(A)
cov.B = cov(B)

cov.A
cov.B
```

1.5 Covarianza generalizada (S)

```
cov.g = (3*(cov.A) + 5*(cov.B))/8 # cov.g corresponde a la covarianza generalizada cov.g
```

Respuestas

```
# Covarianza generalizada invertida (S-1)
cov.g.i = solve(cov.g)  # cov.g.i representa a la covarianza gralizada invertida
cov.g.i
round(cov.g.i,2)  # round corresponde al redondeo de decimales
```

Aplicación de matrices en un Análisis de Componentes Principales - PCA

1. Matriz centrada (m.c) y matriz rotada (m.r)

Pasos:

- Cargar librerías requeridas
- Crear una matriz (o un dataframe)
- Hallar el vector de medias (v.m)
- Hallar la matriz centrada (m.c)
- Hallar la matriz de covarianzas de m.c (s.c)
- Hallar la matriz de autovectores o vectores propios (v.p)
- Hallar la matriz rotada de A (m.r)
- Graficar (stats y ggplot2)
- Comparar con el PCA realizado en el paquete vegan

2. Cargar las librerías requeridas

```
# Librerías requeridas
library(tidyverse)
library(xtable)  # Importar y exportar
library(openxlsx)  # exportar "*.xlsx"
library(readxl)  # Importar y exportar

library(ggplot2)  # gráfica en ggplot2
library(ggrepel)  # insertar rótulos a los puntos
library(vegan)  # para realizar el pca con vegan
```

3. Vector de medias (v.m) y matriz centrada (m.c)

4. Vectores própios (v.p)

```
m.c <- t(t(A) - v.m) # Matriz centrada
round(m.c , 2)

s.c <- var(m.c) # Covarianza de la matriz centrada
round(s.c , 2)

vv.p <- eigen(s.c) # Vectores y valores propios de m.centrada
round(vv.p, 2)

v.p <- vv.p$vectors # Matriz de vectores propios
round(v.p, 2)</pre>
```

5. Matriz Rotada (m.r)

```
m.c <- as.matrix(m.c)  # Matriz centrada (m.c)
round(m.c, 2)

m.r <- m.c %*% v.p  # Matriz rotada (m.r)</pre>
```

```
round(m.r, 2)
A <- data.frame (n= 1:16, A) # matriz A como dataframe
round(A, 2)</pre>
```

6. figura (paquete - stats)

7. figura

```
m.r <- data.frame(m.r) # matriz rotada como data.frame
x11()
ggplot(m.r, aes(x= X1 ,y= X2)) +
   geom_point() +
   geom_text_repel (aes (label = A$n)) +
   geom_hline(yintercept=0,linetype=2,size=1) +
   geom_vline(xintercept=0,linetype=2,size=1)</pre>
```

Análisis de Componentes principales - PCA en librería "vegan"

 ${\bf Objetivo:}$ Comparar los resultados del PCA anterior con los generados por un paquete o librería de R

1. Realización del PCA

```
library(vegan)  # Librería requerida
A
head(A[,2:4])  # Variables y observaciones (columnas y filas)
pca <- rda(A[,2:4])  # Realización del pca</pre>
```

2. Figura del PCA

```
x11()
biplot(pca) # Figura del pca
```

Operaciones matriciales - base Caimanes

Objetivo de la actividad:

Poner en práctica operaciones matriciales, para resolver un ejercicio de ordenación multivariada, denominado "Análisis de Componentes Principales – PCA", cuyo objetivo es relacionar a las observaciones de las matrices o de las bases de datos (filas de la matriz), de acuerdo a las variables definidas (columnas de la matriz). Finalmente se realizará la misma técnica con la librería vegan de R. La base de datos a utilizar se presenta en dos formatos: caimanes.csv y caimanes.xlsx. Esta base cuenta con 3 variables morfométricas (columnas) y 17 individuos evaluados (filas).

Procedimiento del PCA

- Cargar librerías requeridas
- Cargar la base datos (usar diferentes opciones para practicar)
- Hallar el vector de medias (v.m) y la matriz centrada (m.c)
- Hallar la matriz de covarianzas de m.c (s.c)
- Hallar la matriz de autovectores o vectores propios (v.p)
- Hallar la matriz rotada de A (m.r)
- Graficar (stats y ggplot2)
- Comparar con el PCA realizado en el paquete vegan

1. Cargar las librerías requeridas

```
# Librerías requeridas
library(tidyverse)
library(xtable)  # Importar y exportar
library(openxlsx)  # exportar "*.xlsx"
library(readxl)  # Importar y exportar
```

```
library(ggplot2)  # gráfica en ggplot2
library(ggrepel)  # insertar rótulos a los puntos
library(vegan)  # para realizar el pca con vegan
```

2. Cargar o importar la base de datos

```
#------
datos <- read_excel("caimanes.xlsx")  # paquete "readxl"
head(datos)

datos <- read_csv2("caimanes.csv")  # paquete "readxl"
head(datos)

datos <- read.csv2("caimanes.csv")  # paquete "utils"
head(datos)

• Ajustar la base de datos

# Resumir los rótulos de las columnas
colnames(datos) <- c("ID", "Sexo","LT","CD","CS")  # Rótulos de la base de datos
head(datos)  # Base de datos abreviada
str(datos)</pre>
```

3. Hallar el vector de medias (v.m) y la matriz centrada (m.c)

```
v.m <- colMeans(datos[,3:5]) # Vector de medias
v.m

m.c <- t(t(datos[,3:5]) - v.m) # Centralización de datos = Matriz centrada
round(m.c , 2)</pre>
```

4. Vectores própios (v.p)

```
s.c <- var(m.c)  # Covarianza de la matriz centrada
round(s.c , 2)

vv.p <- eigen(s.c)  # Vectores y valores propios de m.centrada
round(vv.p, 2)

v.p <- vv.p$vectors  # Matriz de vectores propios
round(v.p , 2)</pre>
```

5. Matriz Rotada (m.r)

```
m.c <- as.matrix(m.c) # Matriz centrada (m.c)
round(m.c, 2)

m.r <- m.c %*% v.p # Matriz rotada (m.r)
round(m.r, 2)

A <- data.frame (n= 1:16, A) # matriz A como dataframe
round(A, 2)</pre>
```

6. figura (paquete - stats)

7. figura

```
x11()
m.r <- data.frame(m.r)  # matriz rotada como data.frame

ggplot(m.r, aes(x= X1 ,y= X2)) +
   geom_point() +
   geom_text_repel (aes (label = datos$ID)) +
   geom_hline(yintercept=0,linetype=2,size=1) +
   geom_vline(xintercept=0,linetype=2,size=1)</pre>
```

Análisis de Componentes principales - PCA en librería "vegan"

Objetivo: Comparar los resultados del PCA anterior con los generados por un paquete o librería de R

1. Realización del PCA

```
# Comparar con el Análisis de Componentes Principales - pca
head(datos[,3:5])  # Variables y observaciones (caimanes)
pca <- rda(datos[,3:5])  # Realización del pca</pre>
```

2. Figura del PCA

```
x11()
biplot(pca)
```

Taller 3. Exploración Univariada y Multivariada

Objetivo de la actividad:

Poner en práctica el manejo de bases de datos y la visualización de datos uni, bi, tri y multivariados, para responder principalmente a dos tipos de objetivos:

- 1. **Relaciones** entre variables biológicas y de estas con las ambientales (ej. figuras de elipses, pares, dispersión y coplot).
- 2. **Diferencias** para el caso en el que contemos con variables agrupadoras (factores o v. cualitativas), orientado a evaluar las diferencias entre variables biológicas en gradientes espaciales o temporales (ej. entre grupos de sitios).

La base de datos a utilizar se presenta en dos formatos: **Insectos.csv** e **Insectos.xlsx**. Esta base cuenta con 2 variables ambientales y 6 biológicas, así como con un factor o variable agrupadora (cuencas), todo esto distribuido en las columnas. Además cuenta con y 20 localidades o quebradas (filas).

Procedimiento de la exploración

- Cargar librerías requeridas
- Cargar la base Insectos (usar diferentes opciones para practicar)
- Explorar al **objetivo 1** (figuras de elipses, pares, dispersión y coplot).
- Explorar al **objetivo 2** (figuras de elipses, pares, dispersión y coplot).
- Realizar las opciones gráficas relacionadas a los objetivos.
- Realizar transformaciones de los datos, para mejorar la visualización de patrones.
- Practicar con leyendas y resultados de la visualización realizada.

Cargar las librerías requeridas

```
# Librerías requeridas
library(tidyverse)
library(xtable) # Importar y exportar
library(openxlsx) # exportar "*.xlsx"
library(readxl) # Importar y exportar
library(stats)
                        # Para las figuras de pares
library(lattice)  # No se requiere instalar
library(ggplot2)  # gráfica en ggplot2
library(ggrepel)  # insertar rótulos a los puntos
require(SciViews) # Fig. dispersión con coef. de pearson
library(plotrix)
                       # Figuras de cajas con múltiples variables
                      # Figuras de cajas con múltiples variables
library(reshape)
library(corrplot)
                       # Figuras de elipses
library(gridExtra)
                         # Para figuras estadísticas (varios factores)
library(grid)
                         # Para figuras estadísticas (varios factores)
```

Nota: ggcorrplot2 requiere instalarse de la siguiente manera, debido a que está en proceso de ajuste para las nuevas plataformas de R. ver_enlace_procedimiento

```
# Instalar "ggcorrplot2", solo por una vez
install.packages("remotes")
remotes::install_github("caijun/ggcorrplot2")
```

• Nota: gganimate requiere instalarse de la siguiente manera: ver_enlace_procedimiento

```
install.packages('gganimate')
devtools::install_github('thomasp85/gganimate')
```

Cargar o importar la base de datos

```
#-----
datos <- read.csv2("Insectos.csv")  # paquete "utils"
head(datos)

quebrada cuenca pH temp Efem Plec Tric Dipt Cole Ab
1  1 cuen1 6.8 17.4 26 4 9 30 3 72</pre>
```

```
2
       4 cuen1 7.3 16.8
                         17
                              6
                                9
                                      25
                                           1 58
3
       11 cuen1 5.6 16.0
                              3
                                 28
                                      24
                                           3 67
       13 cuen1 6.3 17.8
                         2
                              3
                                 25
                                      21
                                           6 57
                                      12
5
       19 cuen1 5.6 18.2
                         6
                              4
                                 24
                                          13 59
       3 cuen2 6.3 17.0
                         7
                              2
6
                                 25
                                      10
                                           1 45
```

1. Figuras de elipses

El Paquete **corrplot** es el que permite realizar las opciones gráficas de elipses a color, ingresar a este enlace:

corrplot

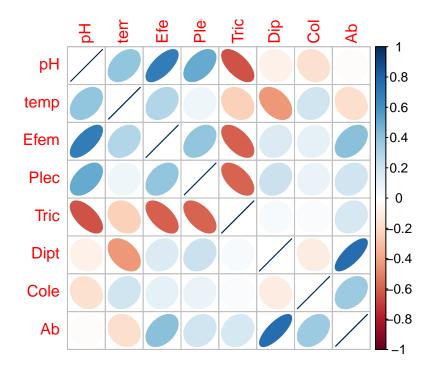
Otro enlace a **corrplot**:

corrplot

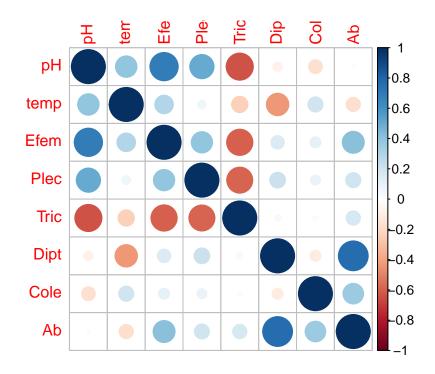
```
#---
# 1. Elipses
library(corrplot)

# Elipses con colores
M <- cor(datos[,3:10])  # Matriz de Correlación (M)

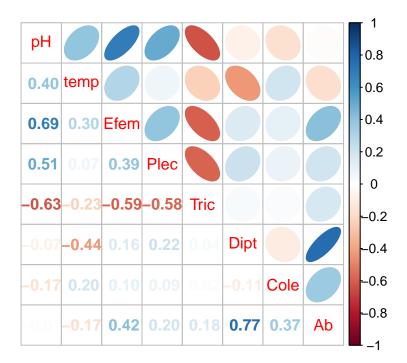
# Elipses con colores
x11()  # Panel gráfico adicional
corrplot(M, method = "ellipse")  # Figura de correlaciones con elipses</pre>
```

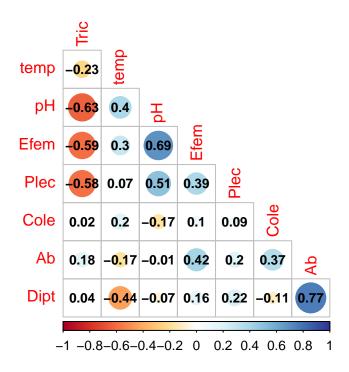


```
# Elipses con colores
X11()
corrplot(M, method = "circle")  # Figura de correlaciones con circulos
```



Elipses con colores
X11()
corrplot.mixed(M, upper="ellipse")





3. Figuras de Dispersión por pares de variables (pairs)

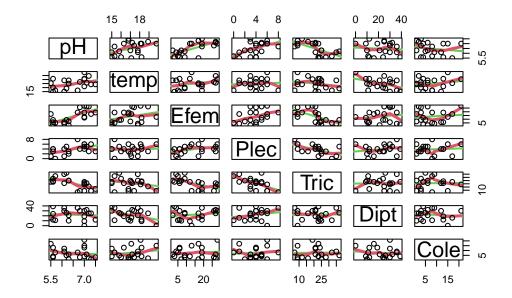
El Paquete **pairs** es el que permite realizar las opciones gráficas de dispersión por parejas de variables, ingresar a este enlace:

pairs

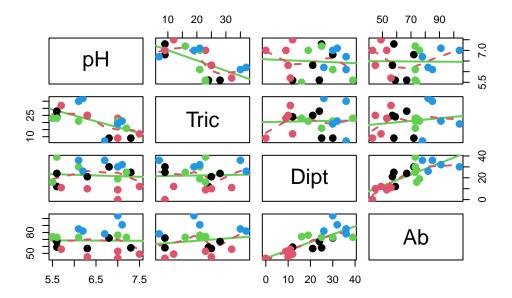
Otro enlace a pairs:

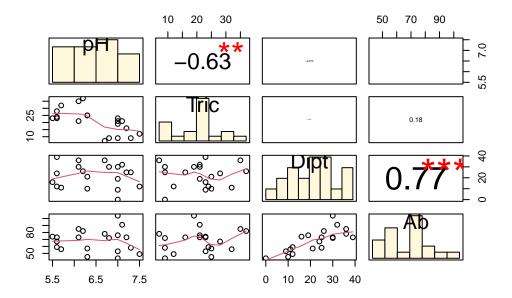
pairs

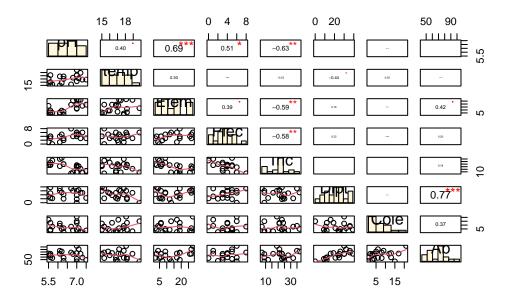
```
# Figuras de pares
x11()
pairs ((datos[,c(3:9)]),panel=function(x,y)
{abline(lsfit(x,y)$coef,lwd=2,col=3)  # lwd = Ancho de la línea
    lines(lowess(x,y),lty=1,lwd=3,col=2)  # col= Color de la línea
    points(x,y,cex=1)})
```



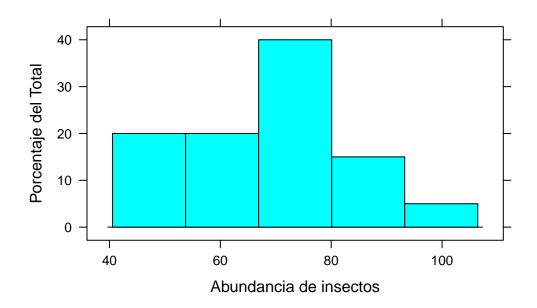
```
# Incluir el factor (cuenca)
# **requiere a cuenca como factor
datos$cuenca =as.factor(datos$cuenca)
pairs ((datos[,c(3,7,8,10)]),panel=function(x,y)
{abline(lsfit(x,y)$coef,lwd=2,col=3)
   lines(lowess(x,y),lty=2,lwd=2,col=2)
   points(x,y,col=datos$cuenca, cex=1.4,pch=19)})
```

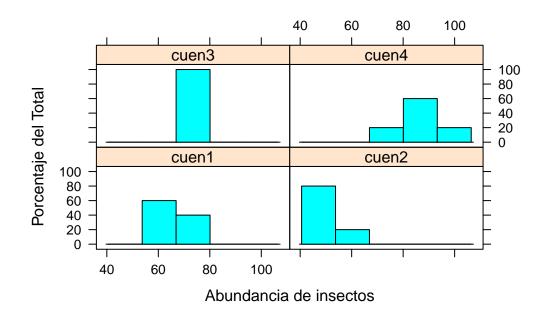


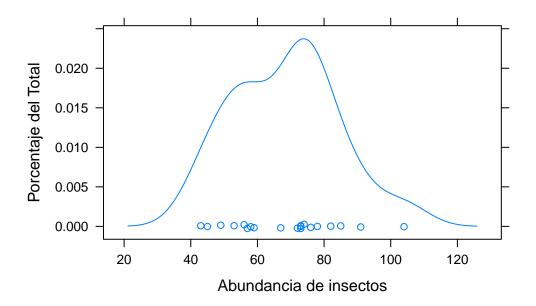


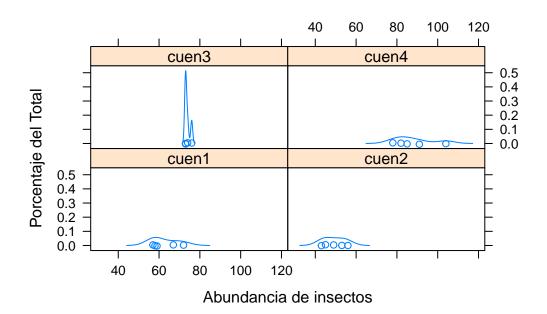


3. Histogramas

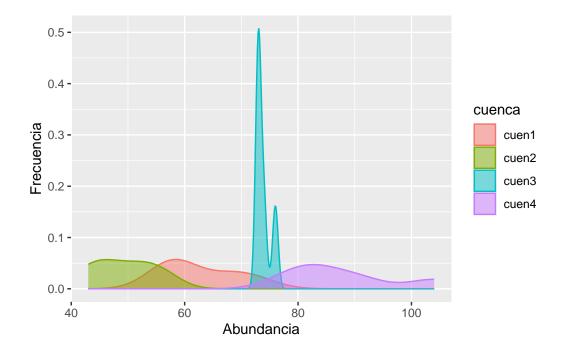




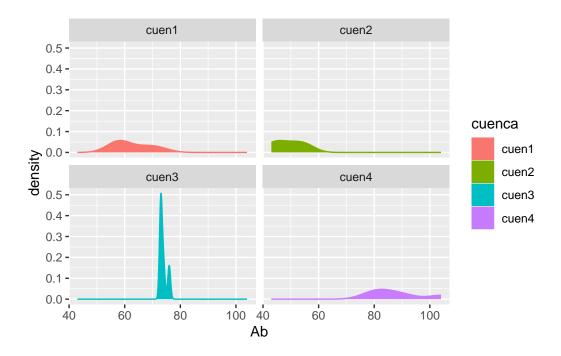




```
# Frecuencias de abundancias por densidad
ggplot(data = datos, aes(x = Ab, color = cuenca)) +
  geom_density(aes(fill = cuenca), alpha = 0.5) +
  labs( y="Frecuencia", x="Abundancia")
```



```
# Otra opción
ggplot(data = datos, aes(x = Ab, color = cuenca)) +
  geom_density(aes(fill = cuenca)) +
  facet_wrap(~ cuenca)
```

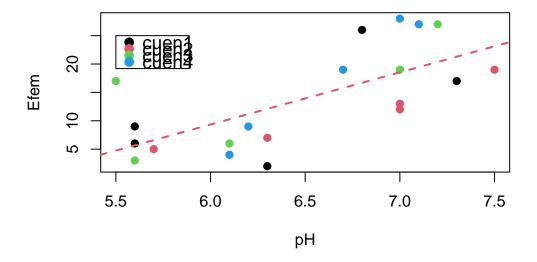


4. Dispersión X-Y

El Paquete lattice es uno de los que permite realizar las opciones gráficas de dispersión, ingresar a este enlace:

lattice

```
# Regresión lineal (esquema básico)
library(lattice)
datos$cuenca <- as.factor (datos$cuenca) # cuenca como factor
x11()
plot(Efem~pH,
                                      # Relación pH vs. Efem
     col=as.integer(cuenca),
                                      # Colores por tipo de cuencas
     data=datos, pch=19)
                                      # Base de datos
legend(5.5,25,
                                      # Coordenadas de la leyenda
       legend=levels(datos$cuenca),
                                      # Grupos de la leyenda
       pch=19,col=1:4,cex=1.2)
lines(abline(lm(datos$Efem~datos$pH), # regresión lineal
             lwd=2,col=2, lty=2))
```



4.1 Dispersión X-Y con ggplot2

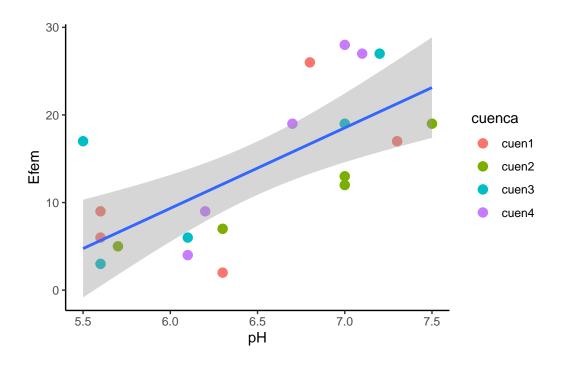
El Paquete **ggplot2** es el que permite realizar las opciones gráficas de dispersión bivariados, ingresar a este enlace:

RPubs.

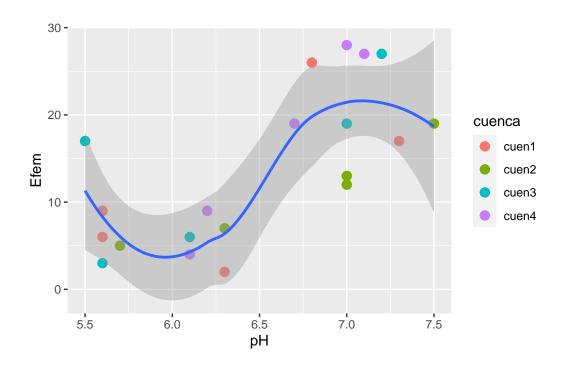
Otro enlace a **ggplot2**:

ggplot2

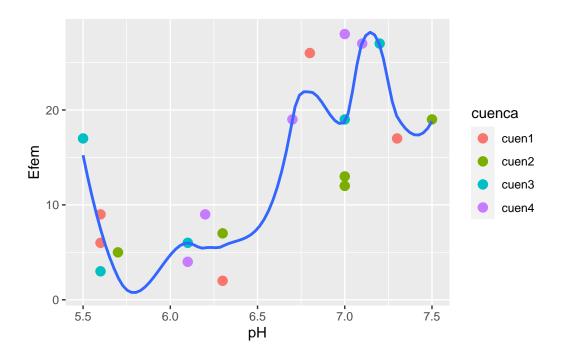
```
# Regresiones lineales (Esquema ggplot2)
ggplot(datos,aes(x = pH,y = Efem)) +
  geom_point(aes(color = cuenca), size = 3) +
  geom_smooth(method= "lm") +
  theme_classic()
```



```
# Regresiones suavizadas - Loess o Lowess (Esquema ggplot2)
ggplot(datos,aes(x = pH, y = Efem)) +
  geom_point(aes(color = cuenca), size = 3) +
  geom_smooth()
```



```
# Regresiones suavizadas (Loess)
ggplot(datos,aes(x = pH, y = Efem)) +
  geom_point(aes(color = cuenca), size = 3) +
  geom_smooth(se = FALSE, span = 0.4)
```



5. Cajas y Bigotes

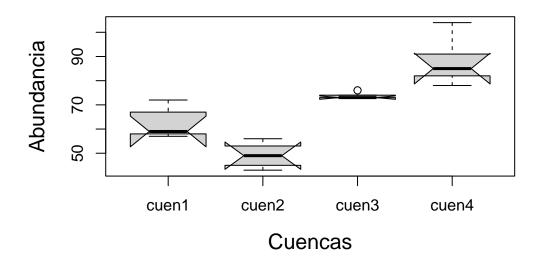
El Paquete lattice es uno de los que permite realizar las opciones gráficas de cajas, ingresar a este enlace:

How to make a boxplot in R

El Paquete ggplot2 presenta opciones más estéticas y robustas para estas y muchas más figuras, ingresar a este enlace:

Enlace1

Enlace2

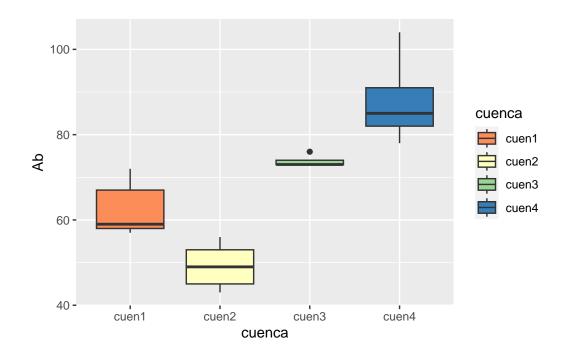


Enlaces de paletas de colores para la edición de las figuras:

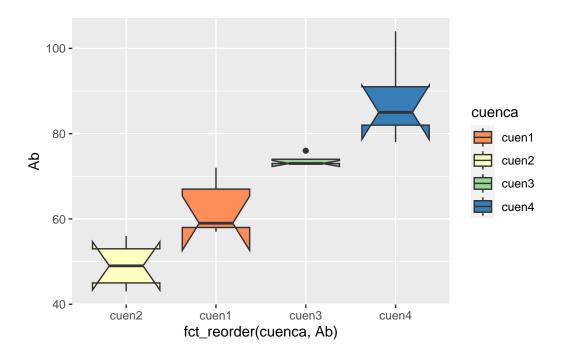
colorbrewer

coolors

```
# Buscar en google: colorbrewer2
ggplot(datos, aes(x=cuenca, y=Ab)) +
  geom_boxplot(aes(fill = cuenca)) +
  scale_fill_manual(values = c('#fc8d59','#ffffbf','#99d594','#377eb8'))
```

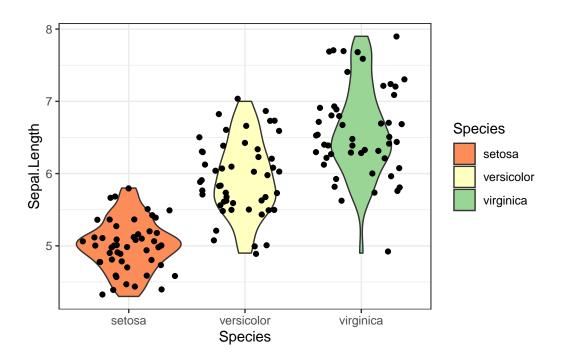


```
# Organización por nivel de magnitud
ggplot(datos, aes(x = fct_reorder(cuenca, Ab),y=Ab)) +
  geom_boxplot(notch = T, aes(fill = cuenca)) +
  scale_fill_manual(values = c('#fc8d59','#ffffbf','#99d594','#377eb8'))
```



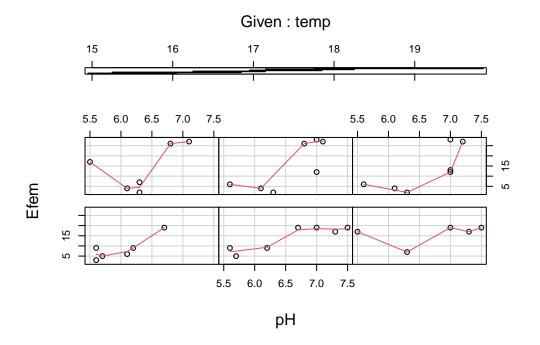
Paréntesis Base de datos de lirios (iris) para figura de violín

```
# violin: como histograma acostado
ggplot(iris, aes(x = Species, y = Sepal.Length)) +
    geom_violin(aes(fill = Species)) +
    geom_jitter() +
    scale_fill_manual(values = c('#fc8d59','#ffffbf','#99d594')) +
    theme_bw()
```



6. Coplot

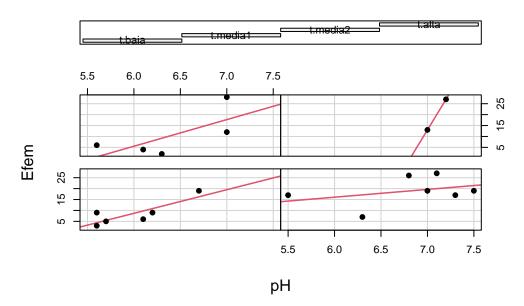
```
# Coplot con lineas de ajuste suavizado (loess)
with(datos, {
   coplot(Efem~pH|temp,
        panel = panel.smooth)})
```



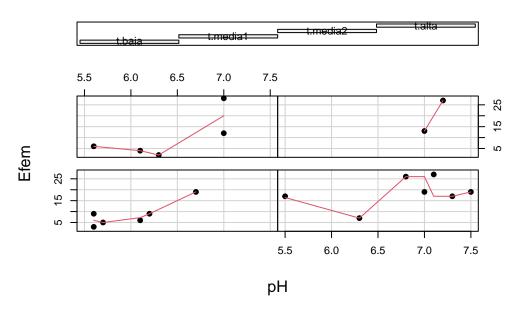
Categorización de dos variables contínuas (pH y Temp)
summary(datos[,2:8])

```
cuenca
                рΗ
                               temp
                                                Efem
                                                                 Plec
                                                                   :0.00
cuen1:5
          Min.
                 :5.50
                                 :15.00
                                           Min.
                                                  : 2.00
                                                           Min.
                          Min.
cuen2:5
          1st Qu.:6.00
                          1st Qu.:15.95
                                           1st Qu.: 6.00
                                                            1st Qu.:3.00
          Median:6.50
                                           Median :12.50
                                                           Median:4.00
cuen3:5
                          Median :17.05
cuen4:5
          Mean
                 :6.48
                          Mean
                                 :16.99
                                           Mean
                                                  :13.75
                                                            Mean
                                                                   :3.85
          3rd Qu.:7.00
                          3rd Qu.:17.88
                                           3rd Qu.:19.00
                                                            3rd Qu.:5.00
          Max.
                 :7.50
                          Max.
                                 :19.80
                                           Max.
                                                  :28.00
                                                            Max.
                                                                   :8.00
     Tric
                      Dipt
Min.
       : 7.00
                Min.
                        : 0.00
1st Qu.:15.00
                1st Qu.:12.00
Median :22.00
                Median :24.50
Mean
       :20.95
                        :22.15
                Mean
3rd Qu.:25.00
                 3rd Qu.:30.00
Max.
       :37.00
                Max.
                        :39.00
 clasetemp <- cut(datos$temp,seq(15,20,1.2),include.lowest=T,</pre>
                   labels = c("t.baja", "t.media1", "t.media2", "t.alta"))
```

Given: clasetemp



Given: clasetemp



7. Figuras con estadísticos (promedios, errores, ...)

El Paquete ggplot2 es uno de los que permite realizar las opciones gráficas de barras con estadísticos, ingresar a este enlace:

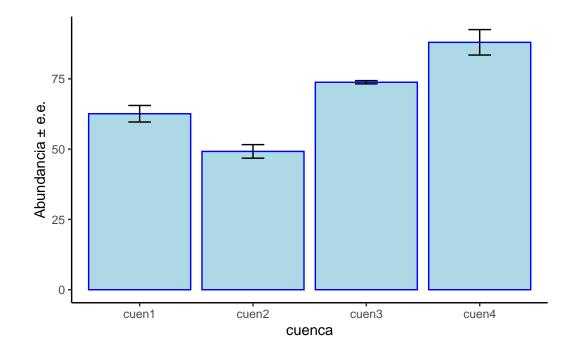
Exploratory Data Analysis with ggplot

Existen otros enlaces en los que se puede encontrar información complementaria para figuras de barras, como los siguientes

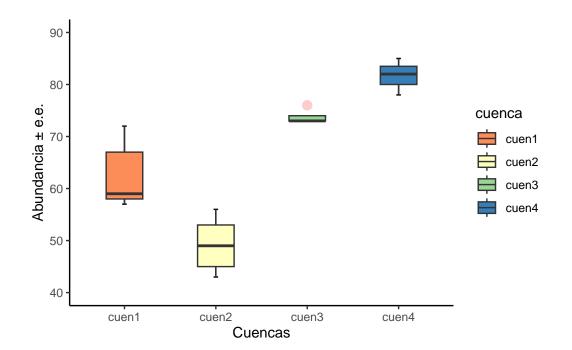
ggplot2 barplots

Stunning Bar Charts

```
# A tibble: 4 x 6
  cuenca datos.m datos.de datos.var n.Ab datos.ee
  <fct>
           <dbl>
                     <dbl>
                               <dbl> <int>
                                               <dbl>
1 cuen1
            62.6
                      6.58
                                43.3
                                         5
                                               2.94
2 cuen2
            49.2
                      5.40
                                29.2
                                         5
                                               2.42
                                 1.7
3 cuen3
            73.8
                      1.30
                                         5
                                               0.583
4 cuen4
                                               4.53
            88
                     10.1
                               102.
                                         5
```

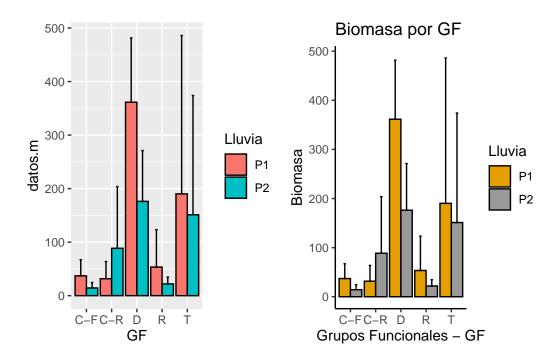


Nota: Para las figuras de **Cajas y Bigotes**, el comando stat_boxplot(geom = "errorbar",...) permite realizar gráficas sin necesidad de extraer algunos estadísticos previamente.



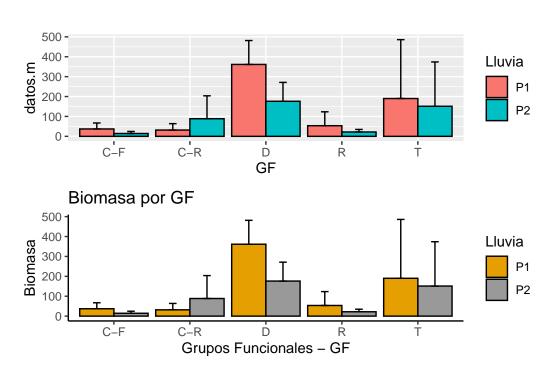
7.1 Base de datos con múltiples factores

```
# Base de datos multifactorial (insectos1)
  datos1<-read_csv2("Insectos2.csv") # Formato *xlsx</pre>
  head(datos1) # Encabezado
# A tibble: 6 x 6
    No Muestreo GF
                                Ab Biom
                      Lluvia
 <dbl> <chr>
                <chr> <chr> <dbl> <dbl>
     1 M1
                C-F
                      Ρ1
                                98 56.0
1
2
     2 M2
                C-F
                      P1
                               198 52.7
3
     3 M3
                C-F
                      P2
                                45 11.4
                                51 25.3
4
     4 M4
                C-F
                      P2
5
     5 M5
                C-F
                      P2
                                3 0.36
     6 M6
6
                C-F
                      P2
                                69 23.6
  # Resumen estadístico "datos_resum"
                                 # Base de datos resumida
  datos_resum <- datos1 %>%
    group_by(Lluvia,GF) %>%
                                   # Factor o variable agrupadora
    summarise(datos.m = mean(Biom),
                                   # Media de cada grupo del factor
             datos.de = sd(Biom),
                                   # Desviacioes estándar de cada grupo
              datos.var = var(Biom), # Varianzas de cada grupo
              n.Biom = n(),
                                     # Tamaño de cada grupo
              datos.ee = sd(Biom)/sqrt(n())) # Error estándar de cada grupo
  datos_resum
# A tibble: 10 x 7
# Groups:
           Lluvia [2]
  Lluvia GF
               datos.m datos.de datos.var n.Biom datos.ee
  <chr> <chr>
                 <dbl>
                          <dbl>
                                    <dbl> <int>
                                                    <dbl>
         C-F
1 P1
                  37.0
                                     902.
                                                    17.3
                           30.0
                                               3
2 P1
         C-R
                  31.7
                           32.1
                                    1029.
                                               3
                                                  18.5
3 P1
                                   14411.
                                               3
         D
                 361.
                          120.
                                                    69.3
4 P1
         R.
                 53.5
                          69.8
                                    4873.
                                               3
                                                   40.3
5 P1
         Т
                 190.
                          296.
                                   87533.
                                               3
                                                   171.
6 P2
                 14.4
                                               5
         C-F
                          10.2
                                     105.
                                                   4.58
7 P2
         C-R
                  88.5
                          115.
                                   13273.
                                               5
                                                   51.5
                                                    42.4
8 P2
                 176.
                          94.9
                                    9010.
                                               5
         D
9 P2
         R
                 21.9
                          12.9
                                     165.
                                               5
                                                   5.75
10 P2
         Τ
                 151.
                          223.
                                   49655.
                                               5
                                                    99.7
```



```
# Inserción de las figuras en columna (figuras p1 y p2)
f3 <- ggplotGrob(f1)
f4 <- ggplotGrob(f2)
g <- rbind(f3, f4, size="first")</pre>
```

```
g$widths <- unit.pmax(f3$widths, f4$widths)
grid.newpage()
grid.draw(g)</pre>
```



8. parentesis Figuras de dispersión animadas

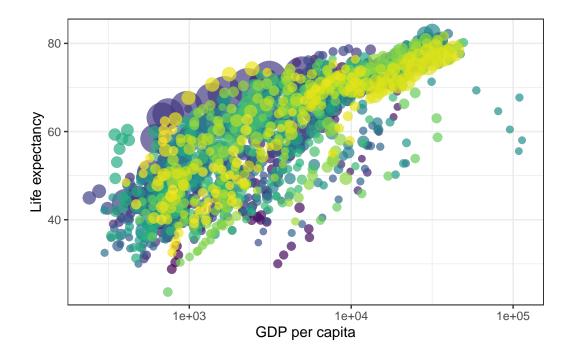
Enlace

```
library(ggplot2)
library(gganimate)
theme_set(theme_bw())  # Tema o fondo de la figura por default

# Demo
library(gapminder)

p <- ggplot(
    gapminder,
    aes(x = gdpPercap, y=lifeExp, size = pop, colour = country)
    ) +</pre>
```

```
geom_point(show.legend = FALSE, alpha = 0.7) +
scale_color_viridis_d() +
scale_size(range = c(2, 12)) +
scale_x_log10() +
labs(x = "GDP per capita", y = "Life expectancy")
p
```



```
p + transition_time(year) +
   labs(title = "Year: {frame_time}")
```

Taller de entrenamiento

Objetivo: Poner en práctica los conceptos vistos en el módulo de exploratorios multivariados, realizando las siguientes opciones gráficas en las bases de datos asignadas para los estdios de caso:

- 1. Figuras de elipses
- 2. Figuras de Dispersión por pares de variables (pairs)
- 3. Histogramas

- 4. Dispersión X-Y
- 5. Cajas y Bigotes
- 6. Coplot
- 7. Figuras con estadísticos (promedios, errores, ...)

Taller 4.1 Análisis de Componentes Principales - PCA

El siguiente ejemplo relaciona a 7 lugares en playas de de Santa Marta (observaciones) y en cada una de ellas se midieron 7 variables ambientales (descriptores). En este análisis de comonentes principales - PCA, se intenta saber cuál es la relación entre variables ambientales y cómo estas estructuran o caracterizan a las localidades estudiadas. La base de datos a trabajar es FQmarino.csv.

Ejercicio tomado de: Rodríguez-Barrios (2023) Enlace del libro

Enlace de los archivos del libro

- Sigatoka en cultivos de banano Aguirre et al. (2015). Análisis de componentes principales con el paquete "dudipca" y algunas técnicas multivariadas complementarias.
- Métodos de componentes principales en R STHDA
- Artículos Métodos de componentes principales STHDA
- PCA en factoextra datanovia
- Guía práctica sonre el PCA datanovia
- PCA para variables categóricas R-bloggers
- Capítulo PCA Libro Numerical Ecology with R Borcard et al. 2018

Lirerías requeridas

```
# LIBRERÍAS REQUERIDAS
library(factoextra) # Para el PCA
library(rlang) #
library(FactoMineR) # Para el PCA
library(vegan) # Para el PCA
library(ade4) # Para el PCA
library(corrplot) # Figuras de elipses
library(ggplot2) # Figuras de dispersión
```

Cargar la base de datos

```
# Lectura de la base de datos "FQmarino"
  datos <-read.csv2("FQmarino.csv",row.names=1) # file.choose()</pre>
  View(datos)
  str(datos)
               7 obs. of 8 variables:
'data.frame':
$ Sitio : chr
                   "S1" "S1" "S1" "S1" ...
Hq $
            : num 8.42 8.49 8.51 8.56 8.61 ...
$ Cond
            : num
                   38 38.1 37.8 37.3 37.3 ...
$ Turbidez : num 1.364 0.545 1.273 1.273 0.636 ...
$ Temp
            : num 29.5 29.5 29.6 29.3 29.3 ...
$ Salinidad : num 2.42 2.43 2.42 2.38 2.38 ...
$ CapaFotica: num 19.7 22.1 22.1 10.8 9 ...
$ Oxigeno
           : num 0.097 0.147 0.331 0.17 0.098 0.098 0.098
```

Exploración Gráfica

```
# Elipses con colores
  M <- cor(datos[,2:8])</pre>
                                 # Matriz de Correlación (M)
  round(head(M),2)
             pH Cond Turbidez Temp Salinidad CapaFotica Oxigeno
           1.00 -0.27
                         -0.04 - 0.68
                                          0.37
                                                    -0.77
                                                            -0.38
рΗ
                          0.21 0.68
                                         -0.19
Cond
          -0.27 1.00
                                                     0.61
                                                             0.12
Turbidez
          -0.04 0.21
                          1.00 0.03
                                         -0.16
                                                     0.01
                                                             0.26
Temp
          -0.68 0.68
                          0.03 1.00
                                         -0.03
                                                     0.97
                                                             0.59
Salinidad 0.37 -0.19
                         -0.16 -0.03
                                          1.00
                                                     0.02
                                                          -0.15
CapaFotica -0.77 0.61
                          0.01 0.97
                                                             0.56
                                          0.02
                                                     1.00
```

La Figura 3.13 muestra la relación entre las variables, a partir de figuras de elipses.

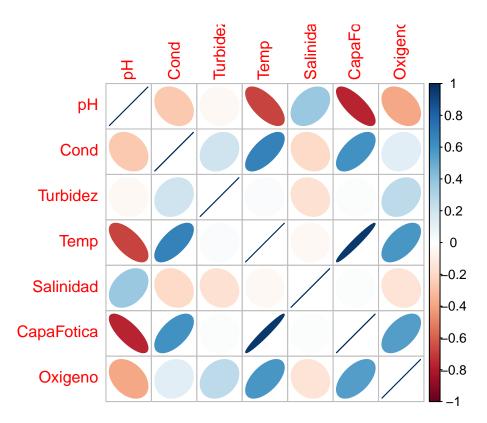


Figura 3.1: Relación de variables ambientales en las siete bahías estudiadas.

La Figura 3.14 muestra la relación entre las variables, a partir de figuras de elipses y coeficientes de correlación de Pearson.

```
X11()
corrplot.mixed(M, upper="ellipse") # Figura con coeficientes de correlación
```

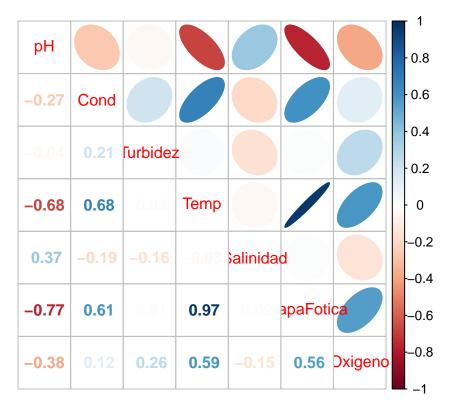


Figura 3.2: Relación de variables ambientales en las siete bahías estudiadas.

La Figura 3.15 otra forma de mostrar la relación entre las variables, a partir de figuras de elipses y coeficientes de correlación de Pearson.

```
x11()
corrplot(M, method = "circle",  # Correlaciones con circulos
    type = "lower", insig="blank",  # Forma del panel
    order = "AOE", diag = FALSE,  # Ordenar por nivel de correlación
    addCoef.col ="black",  # Color de los coeficientes
    number.cex = 0.8,  # Tamaño del texto
    col = COL2("RdYlBu", 200))  # Transparencia de los circulos
```

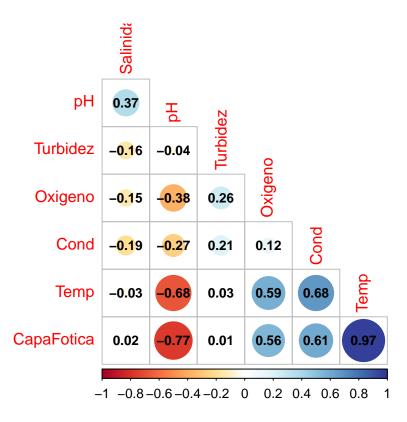


Figura 3.3: Relación de variables ambientales en las siete bahías estudiadas.

1) PCA con el paquete stats (pca1)

```
pca1 <- princomp(datos[,2:8],cor=TRUE)</pre>
```

1.1) Valores propios - autovalores para medir el ajuste del PCA

```
summary(pca1)
```

Importance of components:

```
Comp.1 Comp.2 Comp.3 Comp.4 Comp.5 Standard deviation 1.8454563 1.1063340 0.9919952 0.9474050 0.68078731 Proportion of Variance 0.4865298 0.1748536 0.1405792 0.1282252 0.06621019 Cumulative Proportion 0.4865298 0.6613834 0.8019626 0.9301878 0.99639798 Comp.6 Comp.7 Standard deviation 0.158789715 0 Proportion of Variance 0.003602025 0
```

1.2) Insumos del pca (names)

```
names(pca1)
```

```
[1] "sdev" "loadings" "center" "scale" "n.obs" "scores" "call"
```

1.3) Valores propios - autovectores y escores

```
round(pca1$loadings,2) # Autoectores (loadings)
```

Loadings:

```
Comp.1 Comp.2 Comp.3 Comp.4 Comp.5 Comp.6 Comp.7
Щq
           0.43
                         0.42
                                0.18
                                       0.61
                                              0.20
                                                     0.45
Cond
           -0.36
                         0.16
                                0.74
                                       0.27 -0.35 -0.32
                                              0.11
Turbidez
                 -0.65
                         0.62
                                      -0.41
          -0.52
                  0.21
                                              0.81 -0.10
Temp
Salinidad
           0.13
                  0.67
                         0.60 -0.11 -0.29 -0.13 -0.26
CapaFotica -0.52
                  0.25
                                      -0.13
                                             -0.29
                                                     0.75
Oxigeno
          -0.35 -0.15
                         0.24 - 0.63
                                       0.53 -0.25 -0.22
```

```
Comp.1 Comp.2 Comp.3 Comp.4 Comp.5 Comp.6 Comp.7 SS loadings 1.003 1.006 1.010 0.992 1.003 0.994 1.002 Proportion Var 0.143 0.144 0.144 0.142 0.143 0.142 0.143 Cumulative Var 0.143 0.287 0.431 0.573 0.716 0.858 1.001
```

```
round(pca1$scores,2) # Coordenadas de las localidades (Scores)
```

```
Comp.1 Comp.2 Comp.3 Comp.4 Comp.5 Comp.6 Comp.7
       -1.55
              -0.34
                      0.14
                                  -1.34
                                           0.11
                                                     0
BTag
                             0.85
               1.54 -0.97
                                                     0
PBet
       -1.80
                             0.67
                                    0.36
                                         -0.19
Mono
       -2.77
             -0.36
                      0.84 - 1.20
                                    0.63
                                           0.11
                                                     0
Gran
        0.93 -1.34 -0.27
                            -0.96 -0.41 -0.27
                                                     0
        1.67
               0.05 - 1.70
                            -0.52
                                    0.16
                                           0.22
PGran
                                                     0
        1.19 -1.20
Rod
                      0.58
                             1.53
                                    0.82
                                           0.01
                                                     0
        2.33
               1.64
                      1.38 -0.36 -0.22
                                           0.01
                                                     0
Aero
```

1.4) Contribución de los ejes del pca

La Figura 3.16 muestra la manera de graficar a la varinza que captura cada componente principal.

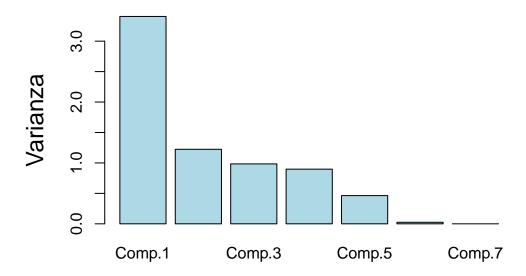


Figura 3.4: Varianza capturada o representada por cada componente principal.

1.5) Opciones de biplot, por combinaciones de ejes.

La Figura 3.17 muestra la ordenación de las locaidades y las variables ambientales en las 7 bahías evaluadas (gráfico de biplot).

```
biplot(pca1,choices = 1:2, cex=0.9)
abline(v=0,lty=2, col=4)
abline(h=0,lty=2, col=4)
```

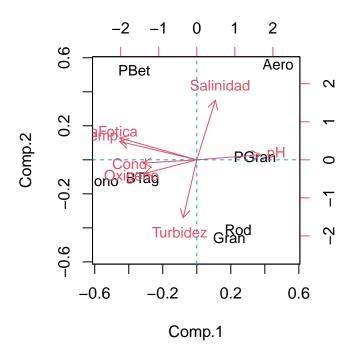


Figura 3.5: Figura del "Biplot" del análisis de componentes principales.

```
# Otras opciones de pca por combinaciones de ejes
biplot(pca1,choices = 2:3, cex=0.9)
biplot(pca1,choices = c(1,3), cex=0.9)
```

2) PCA con el paquete FactoMiner

2.1) Inserción de las variables al PCA

```
# Insertar las variables al PCA
names(datos)

[1] "Sitio"    "pH"    "Cond"    "Turbidez"    "Temp"
[6] "Salinidad"    "CapaFotica"    "Oxigeno"
```

2.1) PCA con escalamiento de las variables (similar a la matriz de correlación)

```
# Realización del pca con la librería FactoMiner
pca2<-PCA(datos.PCA , scale.unit=TRUE, ncp=5, graph = FALSE)</pre>
```

2.2) Figura del PCA

La Figura 3.18 muestra la ordenación de las locaidades en las 7 bahías evaluadas (gráfico de biplot).

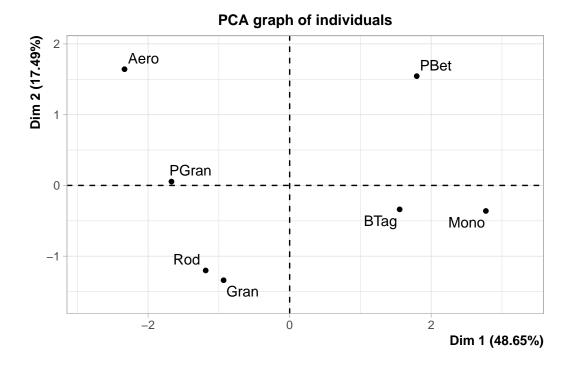


Figura 3.6: Figura del "Plot" del análisis de componentes principales.

2.3) Circulo de contribuciones de las variables

La Figura 3.19 muestra el circulo de contribuciones para identificar a las variables con mayor aporte por cada componente principal del análisis.

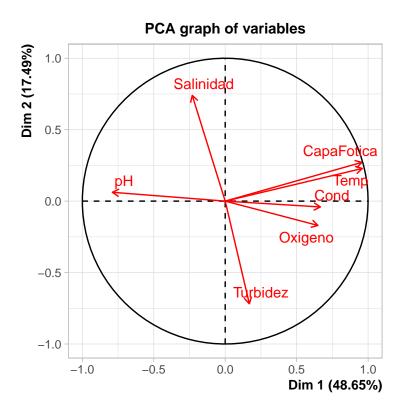


Figura 3.7: Figura del circuo de contribuciones del PCA.

2.4) Selección de variables a partir del PCA

```
# Variables con mayor aporte al PC1
dimdesc=dimdesc(pca2, axes=1:2)
round(dimdesc$Dim.1$quanti,4)

correlation p.value
Temp     0.9594   0.0006
```

```
CapaFotica 0.9564 0.0007 pH -0.7899 0.0346
```

3) PCA con el paquete vegan

```
# Realización del pca
pca3 <- rda(datos[,c(2:8)], scale = TRUE)</pre>
```

3.1) Insumos del análisis

```
# Insumos del pca summary(pca3)
```

Call:

rda(X = datos[, c(2:8)], scale = TRUE)

Partitioning of correlations:

Inertia Proportion

Total 7 1 Unconstrained 7 1

Eigenvalues, and their contribution to the correlations

Importance of components:

PC1 PC2 PC3 PC4 PC5 PC6
Eigenvalue 3.4057 1.2240 0.9841 0.8976 0.46347 0.025214
Proportion Explained 0.4865 0.1749 0.1406 0.1282 0.06621 0.003602
Cumulative Proportion 0.4865 0.6614 0.8020 0.9302 0.99640 1.000000

Scaling 2 for species and site scores

- * Species are scaled proportional to eigenvalues
- * Sites are unscaled: weighted dispersion equal on all dimensions
- * General scaling constant of scores: 2.54573

Species scores

PC1 PC2 PC3 PC4 PC5 PC6 pH 0.7600 -0.05946 -0.39634 0.16779 0.39815 -0.03017

```
      Cond
      -0.6409
      0.03919
      -0.15521
      0.67510
      0.17577
      0.05298

      Turbidez
      -0.1626
      0.69132
      -0.59117
      0.02172
      -0.26687
      -0.01640

      Temp
      -0.9231
      -0.21981
      -0.06696
      0.04433
      0.05922
      -0.12436

      Salinidad
      0.2220
      -0.71203
      -0.56910
      -0.09845
      -0.18854
      0.02044

      CapaFotica
      -0.9203
      -0.26095
      -0.03157
      -0.01094
      -0.08801
      0.04456

      Oxigeno
      -0.6245
      0.16367
      -0.22590
      -0.57864
      0.34878
      0.03860
```

Site scores (weighted sums of species scores)

```
PC1
                PC2
                       PC3
                             PC4
                                    PC5
                                            PC6
     BTag
PBet
     -0.9363 -1.34295 0.9378 0.6784 0.5141 1.12733
    -1.4457 0.31382 -0.8173 -1.2159 0.8964 -0.64531
Mono
Gran
     0.4866 1.16512 0.2621 -0.9789 -0.5863 1.60931
PGran 0.8705 -0.04719 1.6534 -0.5317 0.2280 -1.31394
Rod
     0.6186 1.04517 -0.5617 1.5570 1.1561 -0.05927
     1.2166 -1.42828 -1.3407 -0.3694 -0.3161 -0.03060
Aero
```

3.2) Autovalores

```
# Ajuste del pca
round((ev <- pca3$CA$eig),2)

PC1 PC2 PC3 PC4 PC5 PC6
3.41 1.22 0.98 0.90 0.46 0.03</pre>
```

3.3) Figura del PCA

La Figura 3.20 muestra dos opciones de visualizar los resultados del pca "scaling 1" y "scaling 2".

```
# Panel con dos figuras del pca
x11(12,6)
par(mfrow=c(1,2))
biplot(pca3, scaling=1, main="PCA - scaling 1")
biplot(pca3, main="PCA - scaling 2")
```

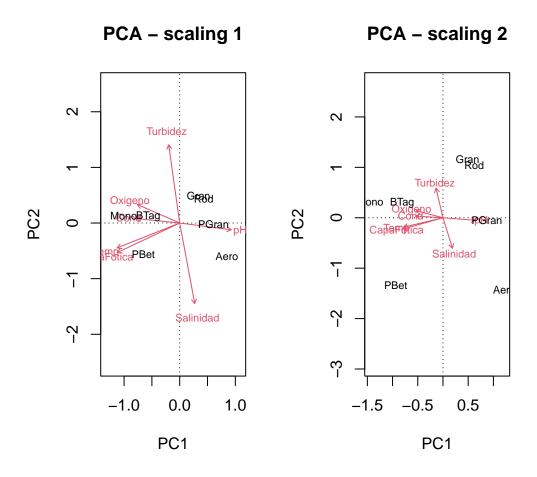


Figura 3.8: dos copciones de figuras del PCA - "scaling 1" y "scaling 2".

Taller en casa

Realizar el cálculo del los siguientes insumos de la página 126 a 127, del libro Análisis de datos ecológicos y ambientales: Aplicaciones con el programa R el cual se encuentra en la biblioteca.

- Ajuste de los componentes principales.
- Figura de atovalores
 - a. Figura del modelo de Kaiser
 - b. Figura del modelo de Vara Quebrada

4) Análisis avanzado de PCA

4.1) Combinación de clasificación y ordenación

Tomado de 5.3.2.6 Combining Clustering and Ordination Results del libro de Borcard et al. (2018), el cual se encuentra en la base de la Biblioteca de Unimagdalena.

4.1) Generación de grupos con la distancia euclídea y el agrupamiento de Ward

```
str(datos)
               # Identificación de las variables cuantitativas
'data.frame':
               7 obs. of 8 variables:
                   "S1" "S1" "S1" "S1" ...
$ Sitio
            : chr
$ pH
            : num 8.42 8.49 8.51 8.56 8.61 ...
$ Cond
            : num 38 38.1 37.8 37.3 37.3 ...
$ Turbidez : num
                   1.364 0.545 1.273 1.273 0.636 ...
            : num 29.5 29.5 29.6 29.3 29.3 ...
$ Temp
$ Salinidad : num 2.42 2.43 2.42 2.38 2.38 ...
$ CapaFotica: num 19.7 22.1 22.1 10.8 9 ...
$ Oxigeno
             : num 0.097 0.147 0.331 0.17 0.098 0.098 0.098
  # Generación de grupos
  datos.w <- hclust(dist(scale(datos[,c(2:8)])), "ward.D")</pre>
```

4.2) Cortar la clasificación en 2 grupos

```
gr <- cutree(datos.w, k = 2)
grl <- levels(factor(gr))</pre>
```

4.3) Base de datos con el factor agrupador

```
datos.gr=data.frame(gr,datos)  # Dataframe con la variable agrupadora (gr)
datos.gr$gr=as.factor(datos.gr$gr)  # crear los grupos como factor
```

4.4) Extraer los escores de los sitios con el pca del paquete "vegan"

```
sit.sc1 <- scores(pca3, display = "wa", scaling = 1)</pre>
```

4.5) PCA con simbolos y colores por cada grupo

La Figura 3.21 muestra los dos grupos de bahías generados en el pca.

```
x11()
pc4 <- plot(pca3, display = "wa", scaling = 1, type = "n",</pre>
          main = "PCA correlation + clusters")
abline(v = 0, lty = "dotted")
abline(h = 0, lty = "dotted")
for (i in 1:length(grl)) {
  points(sit.sc1[gr == i, ],
         pch = (14 + i),
         cex = 2,
         col = i + 1)
}
# Agregar los rótulos de los sitios
text(sit.sc1, row.names(datos), cex = 0.7, pos = 3)
# Adicionar el dendograma al pca generado (uniones entre puntos)
ordicluster(pc4, datos.w, col = "dark grey")
# Adicionar la leyenda de la figura (**Nota**: hacer clic en la figura)
legend(locator(1),
       paste("Grupo", c(1:length(grl))),
       pch = 14 + c(1:length(grl)),
       col = 1 + c(1:length(grl)),
       pt.cex = 2)
```

PCA correlation + clusters

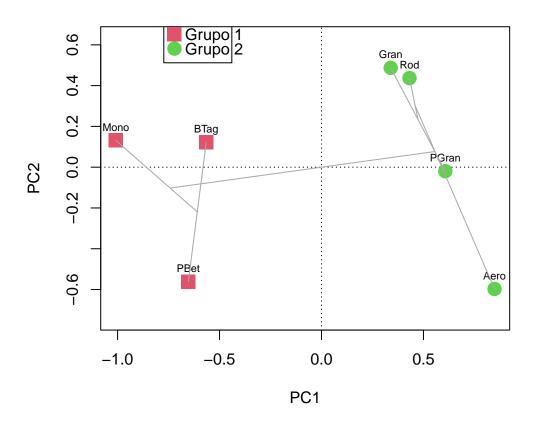


Figura 3.9: dos grupos de bahías generados en el PCA.

5) PCA por tipos con la función "dudi.pca" del paquete ade4

```
pca5 <- dudi.pca(datos[,c(2:8)],scannf=F,nf=2,scale=T)</pre>
```

5.1) Figuras del pca por tipo de grupo

La Figura 3.22 muestra el agrupamiento por elipses en el pca.

```
s.class(pca5$li,datos.gr$gr, cpoi = 2)
```

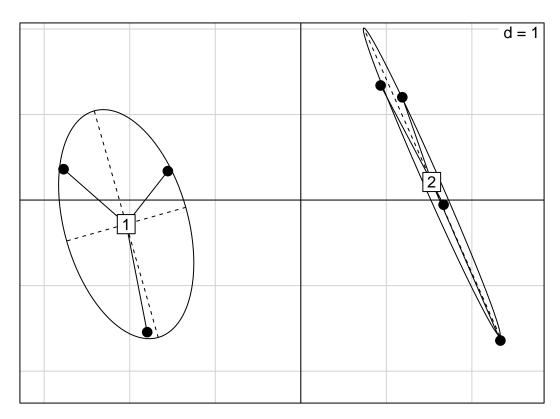


Figura 3.10: agrupamiento por elipses en el PCA.

La Figura 3.11 muestra el agrupamiento por líneas en el pca.

```
s.class(pca5$li,datos.gr$gr, cell = 0, cstar = 0.5)
```

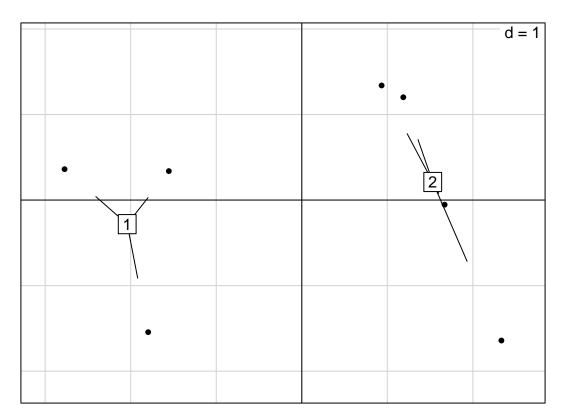


Figura 3.11: agrupamiento por líneas en el PCA.

La Figura 3.12 muestra el agrupamiento por triangulos en el pca.

```
coul <- c("red", "blue")
s.chull(pca5$li,datos.gr$gr, cpoi = 1, col = coul)</pre>
```

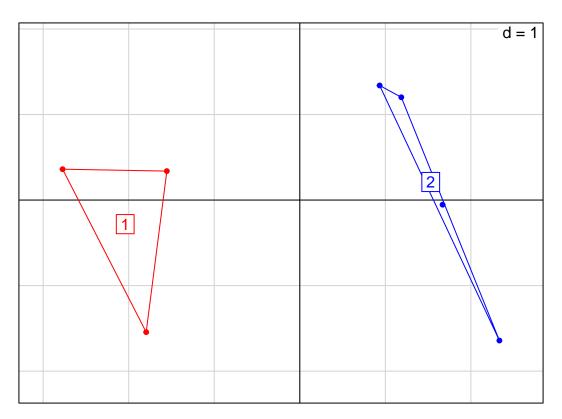


Figura 3.12: agrupamiento por triangulos en el PCA.

Taller 4.2 Análisis de Componentes Principales - PCA

El siguiente ejemplo tiene en cuenta a la propuesta de Legendre & Gallagher (2001), en el cual se realiza una linealización de datos de abundancias de taxones, mediante la transformación de Hellinger, para poderlas ordenar en un PCA. Adicionalmente se incorporan las variables ambientales, con el objeto de analizar como estas caracterizan a las biológicas en gradientes espaciales y/o temporales. La base de datos que se utilizará es Tayrona.csv y el archivo de R es Tayrona.pca.r. Estos datos corresponden a un estudio realizado en el 2015, en el Parque Nacional Natural Tayrona (PNNT), valorando la fauna de invertebrados acuáticos y variables fisicoquímicas asociadas en diferentes quebradas de ese lugar. Estos datos hacen parte del trabajo realizado por Bruges Emilio (2022).

Ejercicio tomado de: Rodríguez-Barrios (2023) Enlace del libro

Enlace de los archivos del libro

Fuentes bibliográficas sobre el análisis de componentes principales:

- Métodos de componentes principales en R STHDA
- Artículos Métodos de componentes principales STHDA
- PCA en factoextra datanovia
- Guía práctica sonre el PCA datanovia
- PCA para variables categóricas R-bloggers
- Capítulo PCA Libro Numerical Ecology with R Borcard et al. 2018

Lirerías requeridas

```
# Librerías requeridas
library(ggplot2)
library(reshape2)
library(ggrepel)
library(vegan)
```

```
library(factoextra)
library(ggsci)
library(ggforce)
library(concaveman)
library(corrplot)
```

Cargar la base de datos

```
# Lectura de la base de datos "FQmarino"
datos <-read.csv2("Tayrona.csv",row.names=1) # file.choose()
View(datos)
# str(datos)</pre>
```

Exploración Gráfica

```
# Matriz de correlaciones (M)
amb = datos[,c(2:12)]
biol = datos[,c(13:63)]
M <- cor(amb, biol)</pre>
```

La Figura 3.13 muestra la relación entre las variables, a partir de figuras de elipses.

```
x11(8, 6)
corrplot(M, method = "ellipse", type = "upper")
```

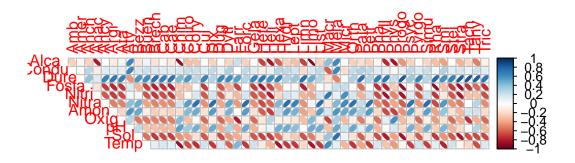


Figura 3.13: Relación de variables ambientales en las siete bahías estudiadas.

1) Ajuste de las bases de datos fisiqcoquimica (amb) y biológica (tax.hel)

```
datos$Epoca = as.factor (datos$Epoca)
                                           # Convertir Epoca a factor
  # Variables ambientales
  amb= log10(datos[,c(2:12)]+1)
  round(head(amb),1)
     Alca Condu Dure Fosfa Nitri Nitra Amon Oxíg pH Sol Temp
M.s
      2.2
            2.8
                 1.7
                       0.0
                             0.0
                                   0.2
                                           0 0.6 1.0 2.3
ST.s
      2.1
            2.8
                 1.7
                       0.1
                             0.1
                                   0.2
                                              0.8 1.0 2.4 1.4
Bo.s
      2.2
                       0.1
                                   0.5
                                              0.8 1.0 2.6 1.4
            3.0
                1.7
                             0.1
M.l
      2.2
            2.9
                 1.7
                       0.1
                             0.1
                                   0.5
                                              0.7 1.0 2.5 1.4
ST.1
                       0.2
                                              0.7 0.9 2.5
      2.2
            2.5
                 1.6
                             0.1
                                   0.3
                                                           1.4
Bo.l
      2.2
            2.4 1.7
                       0.1
                             0.1
                                   0.3
                                           0 0.6 1.0 2.6 1.4
```

```
# Siete primeros Taxones transformados con Hellinger
  tax.hel= decostand(datos[,c(13:63)], "hellinger")
  round(head(tax.hel[,1:7]),2)
      Amb Amer Anch Anac Ancy Argi Ata
M.s 0.11 0.13 0.04 0.00 0.03 0.07 0.30
ST.s 0.07 0.07 0.00 0.08 0.00 0.04 0.14
Bo.s 0.04 0.06 0.00 0.00 0.00 0.00 0.06
M.1 0.09 0.17 0.10 0.00 0.00 0.00 0.00
ST.1 0.00 0.20 0.00 0.14 0.00 0.00 0.31
Bo.1 0.00 0.32 0.00 0.00 0.00 0.00 0.10
  # Matriz de correlaciones con variables transformadas (M1)
  M1 <- cor(amb, tax.hel)
```

La Figura 3.14 muestra la relación entre las variables, con las transformaciones realizadas.

```
# Figuras de elipses con variables transformadas
x11(8, 6)
corrplot(M1, method = "ellipse", type = "upper")
```

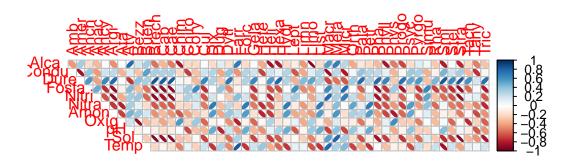


Figura 3.14: Relación de variables ambientales en las siete bahías estudiadas.

2) PCA con paquete factoextra

```
pca1 <- prcomp(amb,scale.=T)
summary(pca1)</pre>
```

Importance of components:

```
PC1 PC2 PC3 PC4 PC5 PC6 Standard deviation 2.1415 1.8802 1.3296 0.90111 0.54661 1.977e-15 Proportion of Variance 0.4169 0.3214 0.1607 0.07382 0.02716 0.000e+00 Cumulative Proportion 0.4169 0.7383 0.8990 0.97284 1.00000 1.000e+00
```

2.1) Contribución eje 1

La Figura 3.15 muestra las contribuciones de cada variable ambiental al pca.

```
x11(5,5)
fviz_contrib(pca1,choice="var",axes=1)
```

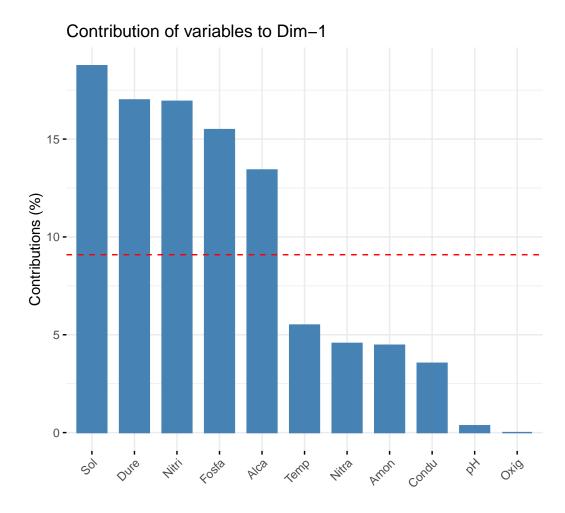


Figura 3.15: Contribuciones de las variables ambientales.

2.2) Elipses por cada periodo climático

La Figura 3.16 muestra la ordenación de las localidades por cada periodo climático.



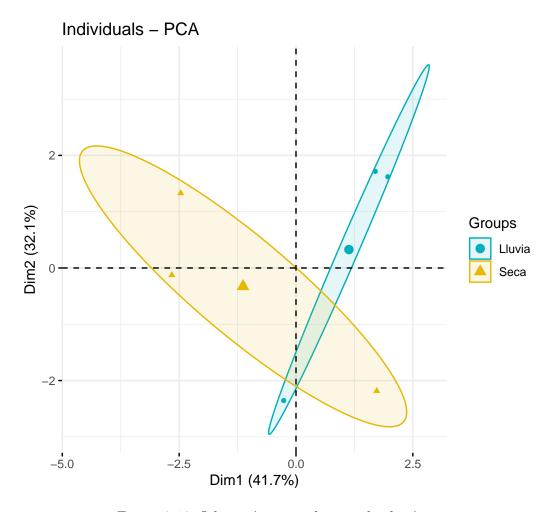


Figura 3.16: Odenación por cada periodo climático.

2.3) Escala de contribuciones de las observaciones y las variables

La Figura 3.17 muestra las contribuciones de cada variable ambiental al pca.

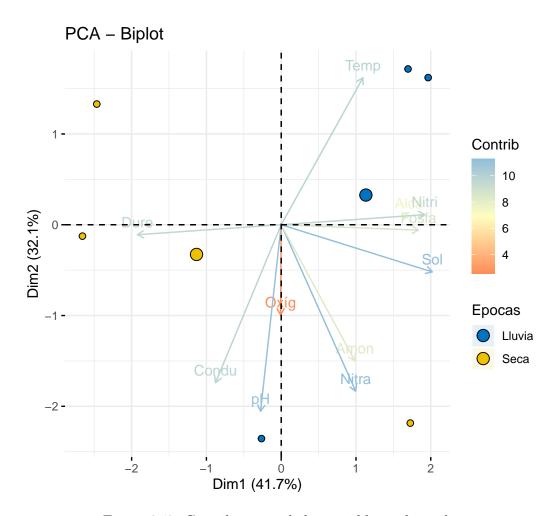


Figura 3.17: Contribuciones de las variables ambientales.

3) PCA con vegan

```
pca2 <- rda(tax.hel)</pre>
```

3.1) Insumos del análisis

*Nota: No se ejecutará el siguiente comendo para poder resumir los insumos obtenidos del análisis.

```
# Insumos del pca
summary(pca2)
```

3.2) Autovalores

```
# Ajuste del pca
round((ev <- pca2$CA$eig),2)

PC1 PC2 PC3 PC4 PC5
0.22 0.12 0.09 0.06 0.03</pre>
```

3.3) Figura del PCA

La Figura 3.18 muestra dos opciones de visualizar los resultados del pca "scaling 1" y "scaling 2".

```
# Panel con dos figuras del pca
x11(12,6)
par(mfrow=c(1,2))
biplot(pca2, scaling=1, main="PCA - scaling 1")
biplot(pca2, main="PCA - scaling 2")
```

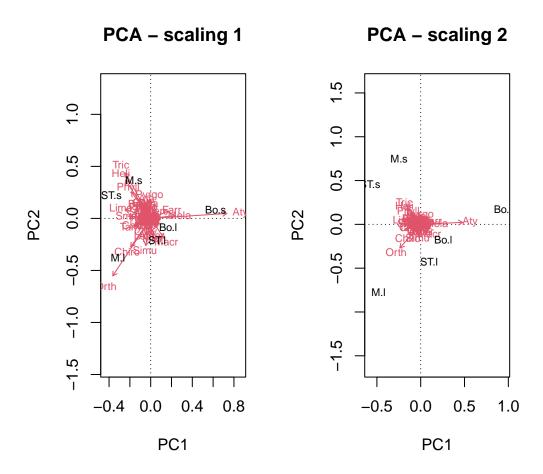


Figura 3.18: dos copciones de figuras del PCA - "scaling 1" y "scaling 2".

3.4) PCA con vegan - biplot + orditorp

La Figura 3.19 muestra la ordenación de las localidades y los taxones con "scaling 2".

PCA - Scaling 2

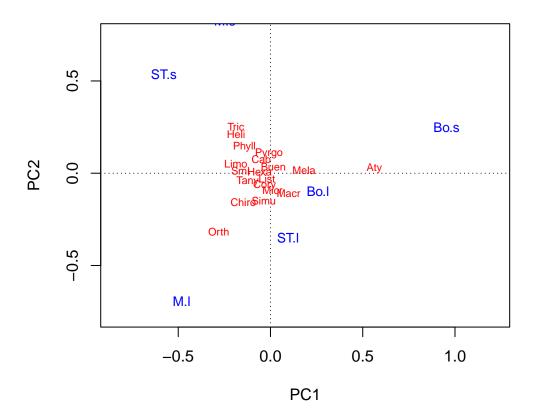


Figura 3.19: Ordenación de las localidades y los taxones, con scaling 2.

3.5) PCA con vegan + orditorp + envfit (ajuste ambiental)

La Figura 3.20 muestra la ordenación de las localidades, los taxones y las variables ambientales con "scaling 2".

```
cex = 0.6, col = "lightblue", lwd=1.5) # Opcional - puntos de muestreo
amb1 = envfit(pca2,amb) # Insertar variables ambientales en el pca
plot(amb1,col=3,cex=0.7)
```

PCA - Scaling 2

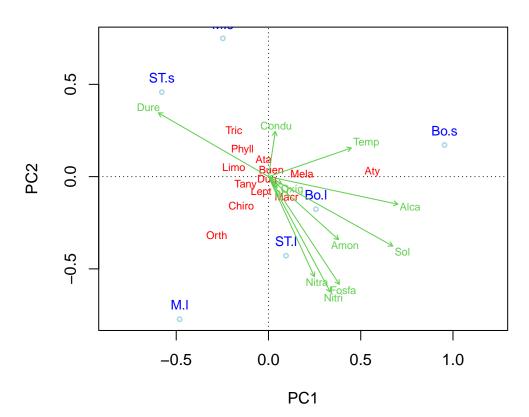


Figura 3.20: Ordenación de las localidades, los taxones y las variables ambientales

#---

4) PCA con paquete ggplot2

Realización p<a de los paquetes factoextra y ggbiplot Para gererar las coordenadas de los sitios y taxones

```
# Nuevamente el pca
pca3 <- prcomp(tax.hel)</pre>
```

4.1 Coordenadas de los sitios y el factor "coord.sit"

```
coord.sit <- as.data.frame(pca3$x[,1:2])</pre>
                                                 # Coordenadas de los sitios
  coord.sit$sitio <- rownames(coord.sit)</pre>
                                                # Crear una columna con nombres de los sitios
  coord.sit$grp <- datos$Epoca</pre>
                                                # Adicionar columna de grupos por Epoca
  head(coord.sit)
                                                # vista resumida de las coordenadas de sitios
             PC1
                         PC2 sitio
                                      grp
M.s -0.20509987 0.4633949
                               M.s
                                     Seca
ST.s -0.47947160 0.2828349 ST.s
                                     Seca
```

Seca

4.2 Coordenadas de los taxones "coord.tax"

Bo.s 0.79183051 0.1058759 Bo.s

M.1 -0.39969319 -0.4779970 M.1 Lluvia ST.1 0.07910077 -0.2650291 ST.1 Lluvia Bo.1 0.21333338 -0.1090797 Bo.1 Lluvia

```
coord.tax <- as.data.frame(pca3$rotation[,1:2])  # Dos primeros ejes
coord.tax$especies <- rownames(coord.tax)  # Insertar columna con nombres de las es
head(coord.tax)</pre>
```

```
PC1 PC2 especies
Amb -0.050809593 0.05712214 Amb
Amer 0.005666684 -0.12845725 Amer
Anch -0.042528327 -0.04368374 Anch
Anac -0.024746853 -0.02282280 Anac
Ancy -0.006287099 0.02558412 Ancy
Argi -0.029886629 0.06956166 Argi
```

4.3 Coordenadas de las ambientales "coord.amb"

4.4 Figura con de elipses por concavidades - geom_mark_hull

La Figura 3.21 muestra la ordenación de las localidades, los taxones y los periodos climáticos.

```
x11(6,6)
ggplot() +
  # Sitios
  geom_text_repel(data = coord.sit,aes(PC1,PC2,label=row.names(coord.sit)),
                  size=4)+ # Muestra el cuadro de la figura
  geom_point(data = coord.sit,aes(PC1,PC2,colour=grp),size=4)+
  scale shape manual(values = c(21:25))+
  # Taxones *valores de cero para caracteres de las flechas (arrow)
  geom_segment(data = coord.tax,aes(x = 0, y = 0, xend = PC1, yend = PC2),
               arrow = arrow(angle=0,length = unit(0,"cm"),
                             type = "closed"),linetype=0, size=0,colour = "red")+
  geom_text_repel(data = coord.tax,aes(PC1,PC2,label=especies),colour = "red")+
  # Factor
  geom_mark_hull(data=coord.sit, aes(x=PC1,y=PC2,fill=grp,group=grp,
                                     colour=grp),alpha=0.30) +
  geom_hline(yintercept=0,linetype=3,size=1) +
  geom_vline(xintercept=0,linetype=3,size=1)+
  guides(shape=guide_legend(title=NULL,color="black"),
         fill=guide_legend(title=NULL))+
  theme_bw()+theme(panel.grid=element_blank())
```

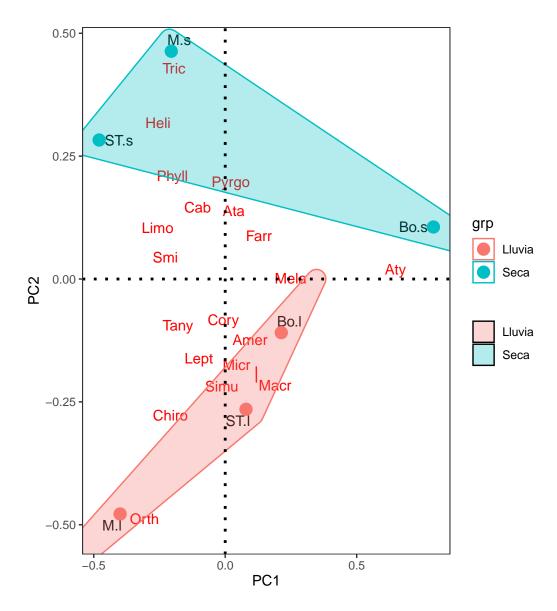


Figura 3.21: Ordenación de las localidades, los taxones y los periodos climáticos.

4.5 Figura con vectores de especies y ambientales

La Figura 3.22 muestra la ordenación de las localidades, los taxones, las variables ambientales y los periodos climáticos.

```
library(ggrepel)
x11(6,6)
ggplot() +
# Sitios
  geom_text_repel(data = coord.sit,aes(PC1,PC2,label=row.names(coord.sit)),
                  size=4)+ # Muestra el cuadro de la figura
  geom_point(data = coord.sit,aes(PC1,PC2,colour=grp),size=4)+
  scale_shape_manual(values = c(21:25))+
# especies
  geom_segment(data = coord.tax,aes(x = 0, y = 0, xend = PC1, yend = PC2),
               arrow = arrow(angle=22.5,length = unit(0.25, "cm"),
                             type = "closed"), linetype=1, size=0.6, colour = "red")+
  geom_text_repel(data = coord.tax,aes(PC1,PC2,label=especies),colour = "red")+
# Ambiental
  geom_segment(data = coord.amb,aes(x = 0, y = 0, xend = PC1, yend = PC2),
               arrow = arrow(angle=22.5,length = unit(0.25, "cm"),
                             type = "closed"), linetype=1, size=0.6, colour = "blue")+
  geom_text_repel(data = coord.amb,aes(PC1,PC2,label=row.names(coord.amb)),colour = "#00ab
# Factor
  geom_polygon(data=coord.sit,aes(x=PC1,y=PC2,fill=grp,group=grp),alpha=0.30) +
  geom_hline(yintercept=0,linetype=3,size=1) +
  geom_vline(xintercept=0,linetype=3,size=1)+
  guides(shape=guide_legend(title=NULL,color="black"),
         fill=guide_legend(title=NULL))+
  theme_bw()+theme(panel.grid=element_blank())
```

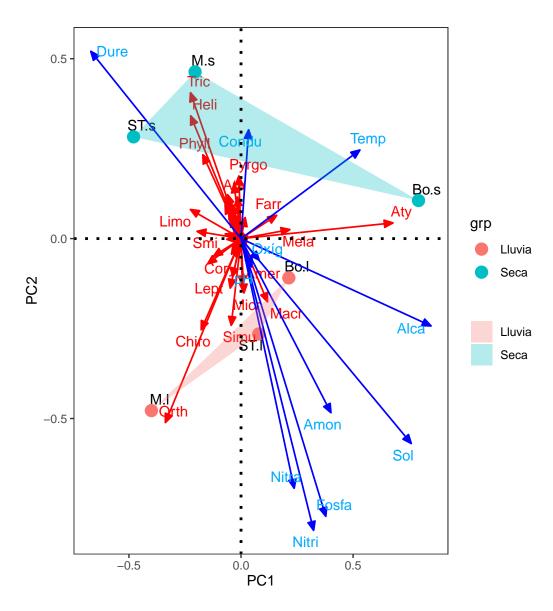


Figura 3.22: las localidades, los taxones, las variables ambientales y los periodos climáticos.

Taller de entrenamiento

Objetivo: Poner en práctica los conceptos vistos en este taller, realizando las siguientes opciones realizando un PCA que integgre a las variables biológicas (taxones) y a las ambientalñes de la base seleccionada. Enviar los resultados al *Teams* del profesor.

Taller 5.1 Análisis de Escalamiento Multidimensional no Métrico - NMDS

Objetivo de la actividad:

La siguiente base de datos, corresponde a una muestra de 50 especies de malezas asociadas a cultivos de banano en cuatro localidades del Departamento del Magdalena (Regiones Alta, Norte, Media y Baja), basado en la composición y abundancia de estas especies vegetales. Estos datos fueron tomados del estudio realizado por Quintero-Pertuz et al., 2020) y solo representan a una parte de los taxones registrados (en total fueron 202 especies). Se utilizará el siguiente archivo como base de datos: maezas.csv

Ejercicio tomado de: Rodríguez-Barrios (2023) Enlace del libro

Enlace de los archivos del libro

Referencias bibliográficas de apoyo.

Perifiton de un río de Montaña - Osorio et al. 2014 Valoración del proceso sucesional de microalgas perifíticas el tramo medio del río Gaira - Santa Marta.

Invertebrados de un río de Montaña - Rodríguez-Barrios et al. 2011 Estudio de diferentes atributos comunitarios en invertebados acuáticos del río Gaira - Santa Marta.

Descomposición de Hojarásca en Ríos - Eyes et al. 2011 Trabajo realizado en el bosque de ribera del río Gaira - Santa Marta.

Nutrientes de la hojarásca - Fuentes y Rodríguez. 2011 Otro trabajo realizado en el bosque de ribera del río Gaira - Santa Marta.

Análisis de Volnerabilidad a Inundaciones - Noriega et al. 2011 Valoración de riesgo a inundaciones en la parte baja del río Gaira - Santa Marta.

Procedimiento de la exploración

- Cargar librerías requeridas
- Cargar la base malezas.csv
- Correr el NMDS con una distancia binaria (Jaccard)
- Realizar las opciones gráficas con las librerías "vegan" y "ggplot2".

Cargar las librerías requeridas

```
# Librerias requeridas
library (ade4)
require(vegan)
library(analogue)
library(magrittr)
library(dplyr)
library(ggpubr)
library(vegan)
library(ggplot2)
library(ggrepel)
```

Cargar o importar la base de datos

```
# Base de datos
datos<-read.csv2("malezas.csv",row.names=1)</pre>
```

1) Ordenación de las localidades y las especies de malezas.

Se prsenta un estrés de 0.13 (13%) con la distancia binaria de Jaccard.

```
# 1. 1) Ordenación con el nmds
datos.nmds <- metaMDS(datos[,3:52],trace = FALSE,distance = "jaccard")
datos.nmds</pre>
```

```
Call:
metaMDS(comm = datos[, 3:52], distance = "jaccard", trace = FALSE)

global Multidimensional Scaling using monoMDS

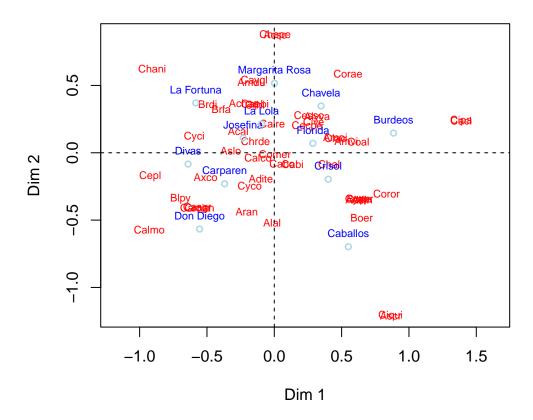
Data: datos[, 3:52]
Distance: jaccard

Dimensions: 2
Stress: 0.1362424
Stress type 1, weak ties
Best solution was repeated 2 times in 20 tries
The best solution was from try 18 (random start)
Scaling: centring, PC rotation, halfchange scaling
Species: expanded scores based on 'datos[, 3:52]'
```

2) Figuras del nmds con el paquete "vegan"

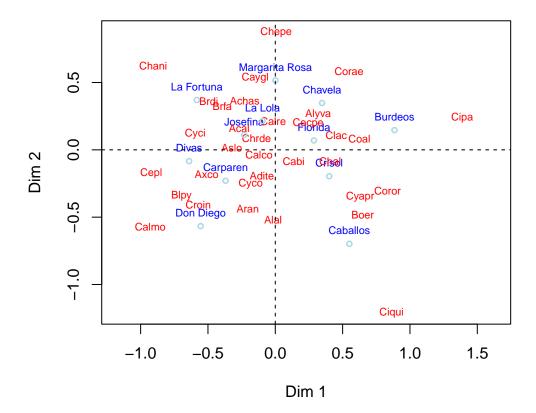
2.1 nMDS con solapamiento de taxones

La figura muestra la ordenación de las especies de malezas con las localidades evaluadas. Muchas de las especies quedan solapadas enn la figura, en la siguiente figura se aplicará un comando para eliminar el solapamiento.



2.2 Ordenación con el comando "orditorp"

La figura elimina el solapamiento de las especies con el comando orditorp. Las especies de malezas son graficadas en rojo y las fincas en color azul.



3) NMDS con paquete ggplot2

A continuación se utilizarán las coordenadas de las regiones, las fincas y las especies de malazas, para graficarlas con el paquete ggplot2, debido a que muestra unas imágenes más didácticas y compactas. El siguiente comando - names(datos.nmds), permite visualizar los insumos del escalamiento multidimensional realizado.

```
# Correr nuevamente el nMDS
names(datos.nmds)
```

```
[1] "nobj"
                                 "ndim"
                   "nfix"
                                               "ndis"
                                                             "ngrp"
 [6] "diss"
                                 "jidx"
                                                             "istart"
                   "iidx"
                                               "xinit"
[11] "isform"
                                 "iregn"
                   "ities"
                                               "iscal"
                                                             "maxits"
[16] "sratmx"
                   "strmin"
                                 "sfgrmn"
                                               "dist"
                                                             "dhat"
[21] "points"
                   "stress"
                                 "grstress"
                                               "iters"
                                                             "icause"
[26] "call"
                   "model"
                                                             "data"
                                 "distmethod" "distcall"
[31] "distance"
                   "converged"
                                 "tries"
                                               "bestry"
                                                             "engine"
[36] "species"
```

3.1 Coordenadas de los sitios y el factor "coord.sit"

Con el siguiente comando - datos.nmds\$points, se extraen las coordenadas de los sitios y con el comando datos\$Región se obtienen la columna del factor región.

```
# 1) Coordenadas de los sitios y el factor (coord.sit)

coord.sit <- as.data.frame(datos.nmds$points)  # Coordenadas de los sitios

coord.sit$sitio <- rownames(coord.sit)  # Crear una columna con nombres de los sit

coord.sit$grp <- datos$Región  # Adicionar columna de grupos por región

head(coord.sit)  # vista resumida de las coordenadas de sti
```

```
MDS1 MDS2 sitio grp
ACa -0.368863805 -0.2302093 ACa Alta
ACr 0.400347080 -0.1960954 ACr Alta
ALa -0.583049688 0.3700380 ALa Alta
BBu 0.885283038 0.1463778 BBu Baja
BLa -0.094236884 0.2144674 BLa Baja
BMa 0.001416507 0.5159295 BMa Baja
```

3.2 Coordenadas de los taxones "coord.tax"

Con el comando datos.nmds\$species, se extraen las coordenadas de las especies.

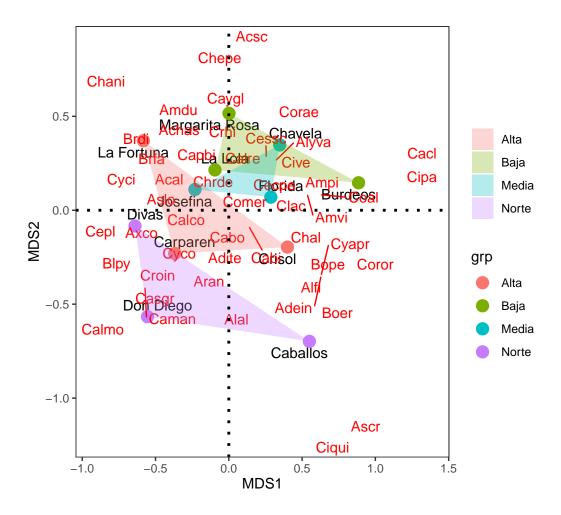
```
# 2) Coordenadasde las especies (coord.tax)
coord.tax <- as.data.frame(datos.nmds$species) # Dos primeros ejes
coord.tax$especies <- rownames(coord.tax) # Insertar columna con nombres de las espe
head(coord.tax)</pre>
```

```
MDS1 MDS2 especies
Acal -0.267752570 0.1591883 Acal
Achas -0.226786330 0.3661173 Achas
Acsc 0.006707608 0.8749336 Acsc
Adein 0.629903044 -0.3486057 Adein
Adite -0.099401864 -0.1925400 Adite
Alal -0.016477728 -0.5190524 Alal
```

3.3 Figura con de elipses

La siguiente figura presenta los comandos que se organizan por sitios, especies y el factor Región.

```
x11()
ggplot() +
# Sitios
  geom_text_repel(data = coord.sit,aes(MDS1,MDS2,label = as.character(datos$Finca)),
                  size=4)+ # Muestra el cuadro de la figura
  geom_point(data = coord.sit,aes(MDS1,MDS2,colour=grp),size=4)+
  scale_shape_manual(values = c(21:25))+
# Especies
  geom_segment(data = coord.tax,aes(x = 0, y = 0, xend = MDS1, yend = MDS2),
               arrow = arrow(angle=0,length = unit(0, "cm"),
                             type = "closed"),linetype=0, size=0,colour = "red")+
  geom_text_repel(data = coord.tax,aes(MDS1,MDS2,label=especies),colour = "red")+
#Factor
  geom_polygon(data=coord.sit,aes(x=MDS1,y=MDS2,fill=grp,group=grp),alpha=0.30) +
  geom_hline(yintercept=0,linetype=3,size=1) +
  geom_vline(xintercept=0,linetype=3,size=1)+
  guides(shape=guide_legend(title=NULL,color="black"),
         fill=guide_legend(title=NULL))+
  theme bw()+theme(panel.grid=element blank())
```



Taller de entrenamiento

Objetivo: Poner en práctica los conceptos vistos en este taller, realizando las siguientes opciones realizando un NMDS con las variables biológicas del estudio de caso (taxones). Enviar los resultados al *Teams* del profesor.

Taller 6.1 Análisis de Correspondencias Múltiples - MCA

Objetivo de la actividad:

El siguiente ejercicio analizará los datos de un proyecto de **SEPEC** (2021), basado en 100 registros tomados aleatoriamente de encuestas realizadas a pescadores y comercializadores de diferentes especies de bagres en Colombia.

El **objetivo** de este ejercicio consiste en valorar la relación entre las variables categóricas producto de las encuestas y la información relacionada a la comercialización de los bagres censados. Se utilizará el siguiente archivo como base de datos: **bagres.xlsx**

Ejercicio tomado de: Rodríguez-Barrios (2023) Enlace del libro

Enlace de los archivos del libro

Procedimiento de la exploración

Análisis de Correspondencia múltiple (MCA). A partir de la muestra de 100 registros de bagres y de variables cualitativas o categóricas obtenidas mediante las encuestas realizadas, se identifican los siguientes elementos de los datos seleccionados:

- Individuos activos: Filas de la base de datos (100 registros de bagres).
- Variables activas: Variables categóricas que se utilizarán en el primer mca, que corresponden a las categóricas que han sido encuestadas.
- Variables cuantitativas suplementarias (quanti.sup): Son las variables cuantitativas que presenta la base de datos de bagres (venta en kg y precio de venta de los bagres).
- Variables cualitativas suplementarias (quali.sup): corresponden a las que se requieran analizar por separado, en este caso serán los nombres vernaculares de los bagres. Las variables cuantitativas y cualitativas suplementarias serán evaluadas al final del ejercicio con un mca adicional.

Más detalles de este procedimiento se pueden revisaar en el siguiente enlace: MCA - Multiple Correspondence Analysis in R

Librerías requeridas

```
# Librerías requeridas
library(tidyverse)
library(xtable)  # Importar y exportar
library(openxlsx)  # exportar "*.xlsx"
library(readxl)  # Importar y exportar

library(FactoMineR)  # Para realizar el MCA
library(factoextra)  # Para realizar el MCA
library(dplyr)  # Para pasar variables a factor
```

Cargar o importar la base de datos

```
# Base de datos
bagres <- read_excel("bagres.xlsx")  # paquete "readxl"
head(bagres)
str(bagres)
View(bagres)</pre>
```

1) Ajuste de la base de datos de bagres.

Para la realización del primer mca, que solo incluirá a las variables activas (excluye a las suplementarias), se escogerán solo las variables categóricas requeridas para este análisis (columnas 1, 9 a la 22).

```
# Base de variables activas
bagres <- read_excel("bagres.xlsx")  # paquete "readxl"
datos.activos = bagres[,c(1,9:22)]  # selección de columnas 1, 9 a 22
View(datos.activos)</pre>
```

Al analizar la estructura de la base datos activos, a excepción de las columnas 4 y 5 (variables cuantitativas o cuantitativas suplementarias) Venta.kg y Precio.venta, el resto son de tipología caracter (chr) y se deben pasar a factores, para que el MCA pueda ejecutarse de forma apropiada. Es importante aclarar que las columnas 1 a la 4 no corresponden a variables activas, pero serán tabuladas en el siguiente data.frame.

```
# Cambiar todas las variables cualitativas a factor
  datos.activos <- datos.activos %>%
                   mutate_all(factor)  # Pasar a factores excepto variables 5 y 6
  print(head(datos.activos))
# A tibble: 6 x 15
        Import~1 Origen Destino Tipo.~2 Prove~3 Sit.c~4 Frec.~5 Trans~6 Conserv
 <fct> <fct>
                 <fct> <fct>
                                 <fct>
                                        <fct>
                                                <fct>
                                                        <fct>
                                                                <fct>
1 1.Psdo Importa~ Orige~ Destin~ Tipo.p~ Provee~ Sitio.~ Frec.c~ Transf~ Conser~
2 2.Psdo Importa~ Orige~ Destin~ Tipo.p~ Provee~ Sitio.~ Frec.c~ Transf~ Conser~
3 3.Psdm Importa~ Orige~ Destin~ Tipo.p~ Provee~ Sitio.~ Frec.c~ Transf~ Conser~
4 4.Psdp Importa~ Orige~ Destin~ Tipo.p~ Provee~ Sitio.~ Frec.c~ Transf~ Conser~
5 5.Psdp Importa~ Orige~ Destin~ Tipo.p~ Provee~ Sitio.~ Frec.c~ Transf~ Conser~
6 6.Psdm Importa~ Orige~ Destin~ Tipo.p~ Provee~ Sitio.~ Frec.c~ Transf~ Conser~
# ... with 5 more variables: Empaque <fct>, Transporte <fct>,
   Cliente.prim. <fct>, Cliente.sec. <fct>, Cliente.ter. <fct>, and
   abbreviated variable names 1: Importado, 2: Tipo.prod, 3: Proveedor,
   4: Sit.comp, 5: Frec.compra, 6: Transform
  View(datos.activos)
```

2) Primera ordenación de las variables cualitativas activas (mca1)

Las variables consideradas para esta ordenación, son las cualitativas (tipo factor) que pueden ejercer un efecto en la comercialización de los bagres.

2) Ordenación de las variables acualitativas activas

```
# Las columnas 5 a 18 son las requeridas por el mca
  str(datos.activos)
tibble [100 x 15] (S3: tbl_df/tbl/data.frame)
                : Factor w/ 100 levels "1.Psdo","10.Psdo",..: 1 13 24 35 46 57 68 79 90 2 ...
$ Importado
                : Factor w/ 2 levels "Importado.F",..: 1 1 1 1 2 1 1 1 1 1 ...
                : Factor w/ 2 levels "Origen.i", "Origen.n": 2 2 2 2 1 2 2 2 2 ...
$ Origen
$ Destino
                : Factor w/ 2 levels "Destino.c", "Destino.i": 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 ...
               : Factor w/ 1 level "Tipo.prod.p": 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 ...
$ Tipo.prod
                : Factor w/ 3 levels "Proveedor.i",..: 1 1 1 1 3 1 1 1 1 1 ...
$ Proveedor
                : Factor w/ 6 levels "Sit.comp.c", "Sit.comp.o", ...: 3 3 3 3 6 3 3 3 4 4 ...
$ Sit.comp
```

Call:

MCA(X = datos.activos[, c(2:15)], graph = FALSE)

Eigenvalues

	Dim.1	Dim.2	Dim.3	Dim.4	Dim.5	Dim.6	Dim.7
Variance	0.391	0.197	0.172	0.161	0.139	0.111	0.105
% of var.	18.874	9.525	8.307	7.768	6.700	5.348	5.073
Cumulative % of var.	18.874	28.399	36.706	44.474	51.174	56.522	61.596
	Dim.8	Dim.9	Dim.10	Dim.11	Dim.12	Dim.13	Dim.14
Variance	0.102	0.091	0.087	0.077	0.068	0.062	0.052
% of var.	4.928	4.404	4.197	3.712	3.291	3.000	2.504
Cumulative % of var.	66.523	70.928	75.125	78.837	82.128	85.128	87.632
	Dim.15	Dim.16	Dim.17	Dim.18	Dim.19	Dim.20	Dim.21
Variance	0.046	0.040	0.037	0.029	0.025	0.020	0.018
% of var.	2.243	1.937	1.774	1.381	1.223	0.958	0.850
Cumulative % of var.	89.875	91.812	93.585	94.966	96.189	97.147	97.997
	Dim.22	Dim.23	Dim.24	Dim.25	Dim.26	Dim.27	Dim.28
Variance	0.015	0.009	0.008	0.005	0.003	0.001	0.000
% of var.	0.728	0.453	0.395	0.251	0.148	0.027	0.000
Cumulative % of var.	98.726	99.179	99.574	99.825	99.973	100.000	100.000
	Dim.29						
Variance	0.000						
% of var.	0.000						
Cumulative $\%$ of var.	100.000						

Individuals (the 10 first)

```
ctr
                Dim.1
                         ctr
                                cos2
                                        Dim.2
                                                       cos2
                                                               Dim.3
                                                                         ctr
1
             | -0.171
                       0.075
                              0.086 | -0.077
                                               0.030
                                                      0.017 |
                                                                      0.003
                                                               0.022
2
             I -0.066
                       0.011
                              0.004 | -0.427
                                               0.925
                                                      0.180 |
                                                               0.265
                                                                      0.407
3
             | -0.024
                       0.002
                              0.000 | 0.116
                                               0.068
                                                      0.009 |
                                                               0.325
                                                                      0.614
4
             1 - 0.342
                       0.299
                              0.220 | -0.037
                                               0.007
                                                      0.003 | -0.305
                                                                      0.542
5
                1.905
                       9.283
                              0.692 | -0.242
                                               0.297
                                                      0.011 | -0.472
                                                                       1.293
6
             -0.342
                       0.299
                              0.220 | -0.037
                                               0.007
                                                      0.003 | -0.305
                                                                      0.542
7
             1 - 0.207
                       0.109
                                               0.124
                              0.065 | -0.157
                                                      0.037 |
                                                               0.200
                                                                      0.233
8
             | -0.300
                       0.230
                              0.090 | -0.046 0.011
                                                      0.002 |
                                                               0.053
                                                                      0.016
             -0.310
                       0.245
                              0.111 |
                                        0.071
                                               0.025
                                                      0.006 | -0.250
                                                                      0.363
9
10
             -0.310
                       0.245
                              0.111 |
                                        0.071 0.025
                                                      0.006 | -0.250
                                                                      0.363
               cos2
1
              0.001 |
2
              0.069 |
3
              0.073 |
4
              0.175
5
              0.042 |
6
              0.175
7
              0.061 |
8
              0.003 I
9
              0.072 |
10
              0.072 |
Categories (the 10 first)
                Dim.1
                         ctr
                                cos2 v.test
                                               Dim.2
                                                        ctr
                                                              cos2 v.test
             | -0.241 0.984
                              0.770 -8.730 | -0.013
                                                      0.005
                                                             0.002 -0.457 |
Importado.F
Importado.v
                3.198 13.079
                              0.770 8.730 |
                                               0.167
                                                      0.071
                                                             0.002 0.457 |
                3.198 13.079
                              0.770 8.730 |
                                                      0.071
Origen.i
                                               0.167
                                                             0.002 0.457 |
             | -0.241 0.984
                              0.770 -8.730 | -0.013
                                                      0.005
                                                             0.002 - 0.457
Origen.n
Destino.c
                0.126
                       0.012
                              0.001 0.255 |
                                               2.133
                                                      6.589
                                                             0.190 4.332 |
Destino.i
             1 -0.005
                       0.000
                              0.001 -0.255 | -0.089
                                                      0.275
                                                             0.190 -4.332 |
                0.000
Tipo.prod.p
                       0.000
                                NaN
                                        NaN |
                                               0.000
                                                      0.000
                                                               NaN
                                                                      NaN |
                       1.018
                              0.506 -7.080 | -0.112
                                                             0.102 -3.170 |
Proveedor.i
             | -0.250
                                                      0.404
Proveedor.o
             -0.571
                       0.179
                              0.010 -0.999 |
                                               1.092
                                                      1.295
                                                             0.037
                                                                    1.911 |
Proveedor.pa |
                2.997 13.129
                              0.781 8.794 |
                                               0.837
                                                      2.027
                                                             0.061 2.455 |
              Dim.3
                       ctr
                              cos2 v.test
Importado.F
              0.083
                     0.264
                            0.091 2.997 |
Importado.v
             -1.098
                     3.503
                            0.091 -2.997 |
Origen.i
             -1.098 3.503
                            0.091 -2.997 |
                     0.264
                            0.091
Origen.n
              0.083
                                  2.997
Destino.c
              1.601
                     4.255
                            0.107
                                   3.251 |
Destino.i
             -0.067
                     0.177
                            0.107 -3.251 |
Tipo.prod.p
              0.000
                     0.000
                              Inf
                                     -Inf |
```

Importado Origen Destino | 0.001 0.190 0.107 | | 0.000 0.000 0.000 | Tipo.prod Proveedor | 0.784 0.103 0.002 | Sit.comp | 0.798 0.317 0.338 | Frec.compra | 0.350 0.235 0.107 | Transform | 0.303 0.249 0.181 | Conserv | 0.047 0.024 0.102 | Empaque | 0.494 0.321 0.398 |

El anterior insumo es importante, porque define el orcentaje de varianza que capturan los 29 ejes canónicos - Eigenvalues y selecciona a las 10 variables de mayor relevancia para el análisis de ordenación - mca Categories (the 10 first) en los tres primeros ejes canónicos - Categorical variables (eta2).

2.1) Ajuste de la ordenación definida por los autovalores

A continuación se calcula el componente tabular, para identificar la varianza que captira cada eje canónico o Dim.i, en donde i es cada uno de los ejes de la ordenación.

```
# # Matriz de autovalores de los seis primeros ejes canónicos
head(mca1$eig)
```

		eigenvalue	percentage	of variance	cumulative	percentage	of	variance
\dim	1	0.3909689		18.874360				18.87436
\dim	2	0.1972939		9.524535				28.39889
dim	3	0.1720808		8.307348				36.70624
dim	4	0.1609039		7.767773				44.47401
dim	5	0.1387903		6.700220				51.17423
dim	6	0.1107851		5.348244				56.52248

En la Figura 3.62, se grafican los resultados de la tabla anterior.

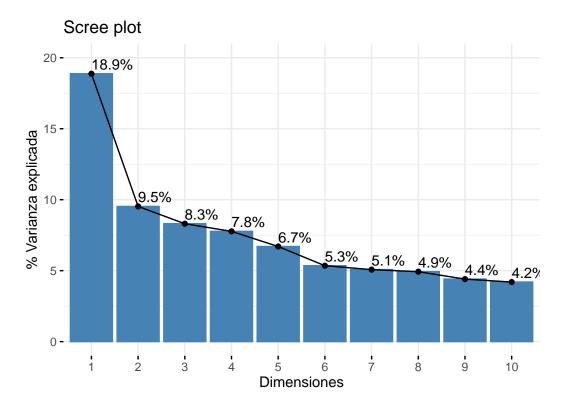


Figura 3.23: Varianza capturada por cada eje canónico

2.2) Figuras generales del mca1

La Figura 3.63 muestra la relación de las 14 variables categoricas del análisis, el nivel de relación o cercanía es definido por la distancia chi cuadrado. fviz_mca_var representa a la grafica de variables, mca.cor muestra solo a las variables que más contribuyen a la ordenación, repel = TRUE permite visualizar los elementos sin solapamientos. ior.

```
# Figura de relación de las variables categóricas
x11()
fviz_mca_var(mca1, choice = "mca.cor", repel = TRUE,
```

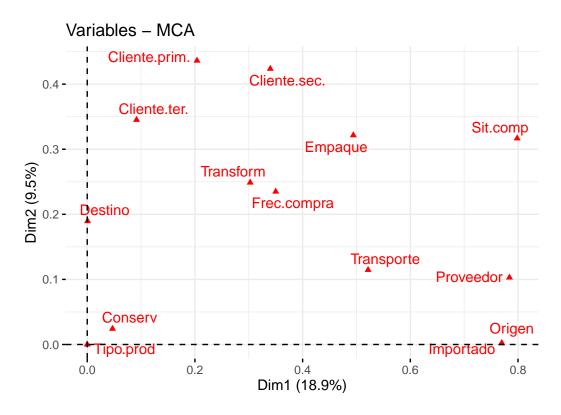


Figura 3.24: Ordenación de las variables que más contribuyen al análisis

La Figura 3.60 muestra el biplot integrado por los 100 registros de peces y las variables categóricas que los caracterizan. fviz_mca_biplot permite visualizar a las observaciones o filas de la base de datos (números en azul) y a las variables con mayor contribución al análisis (en rojo).

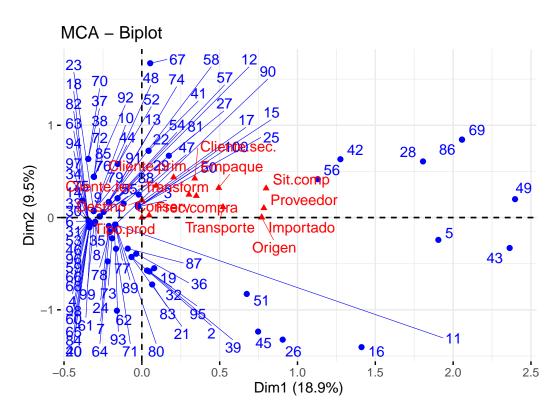


Figura 3.25: Ordenación de las variables que más contribuyen al análisis y de las observaciones (registros de peces)

La Figura 3.53 define a 100 registros de peces con todas las variables activas y sus categorías (no incluye al comando "mca.cor").

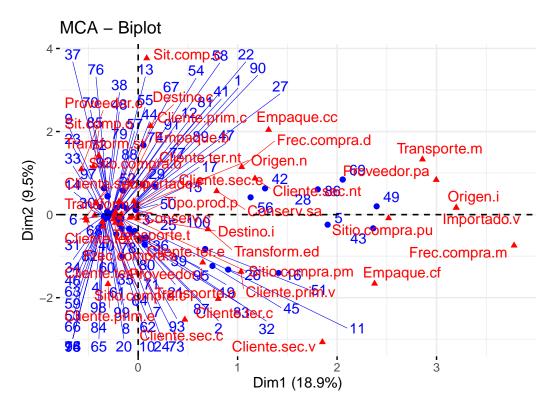


Figura 3.26: Ordenación de todas las variables activas y de las observaciones (registros de peces)

2.3) Figuras del mca con ponderaciones

A continuación se visualiza la ordenación de las observaciones (100 registros de peces) y su nivel de importancia (observaciones en rojo son las más importantes). fviz_mca_ind, permite visualizar a los individuos u observaciones (Figura 3.54).

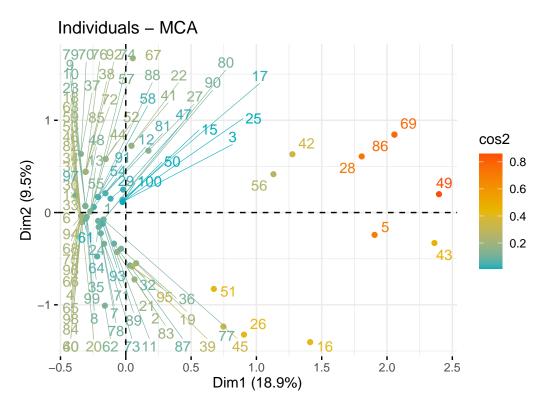


Figura 3.27: Ordenación de las observaciones (registros de peces) y su nivel de contribución al análisis.

En la Figura 3.55 se muestra la ordenación de las variables activas y su nivel de contribución (variables en rojo son las más importantes).

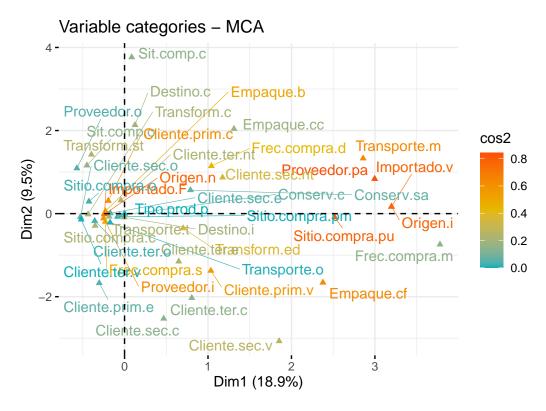


Figura 3.28: Ordenación de las variables activas y su nivel de contribución al análisis.

3) Segunda ordenación de las variables cualitativas activas (mca2).

A continuación se realiza un mca con dos elementos adicionales a a las variables activas ordenadas anteriormente:

- Variables cuantitativas suplementarias (quanti.sup), correspondientes a la venta en kilogramos y el precio de venta de los bagres.
- Variables cualitativas suplementarias (quali.sup), representadas por los nombres o tipos de bagres (columna: Nombre.vernacular)

Esto con el objetivo de visualizar aspectos asociados a la comercialización de los bagres (variables cuantitativas y tipos de bagres), en respuesta a las variables categóricas producto de las encuestas (variables activas).

Paso 1. Incluir los nombres de los bagres a la base "datos.activos" (datos.activos.2)

```
# Pasar nombres de los bagres a factor
  bagres <- read_excel("bagres.xlsx")</pre>
                                        # paquete "readxl"
  bagres$Nombre.vernacular = as.factor(bagres$Nombre.vernacular)
  # Crear data frame con los nombres de los bagres y variables cuantitativas.
  datos.activos.1 <- data.frame(bagres = bagres[,6],</pre>
                                 venta.kg = bagres[,7],
                                 Precio.venta = bagres[,8],
                                 datos.activos[,2:15])
  str(datos.activos.1)
'data.frame':
                100 obs. of 17 variables:
$ Nombre.vernacular: Factor w/ 4 levels "B.Ray.o.Tigr",..: 4 4 3 2 2 2 2 4 4 4 ...
                    : num 150 1000 150 50 2200 20 30 20 50 35 ...
$ Venta.kg
                    : num 18000 14000 16000 19000 13000 24000 24000 22000 22000 18000 ...
$ Precio.venta
                    : Factor w/ 2 levels "Importado.F",..: 1 1 1 1 2 1 1 1 1 1 ...
 $ Importado
 $ Origen
                    : Factor w/ 2 levels "Origen.i", "Origen.n": 2 2 2 2 1 2 2 2 2 ...
 $ Destino
                    : Factor w/ 2 levels "Destino.c", "Destino.i": 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 ...
 $ Tipo.prod
                    : Factor w/ 1 level "Tipo.prod.p": 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 ...
                    : Factor w/ 3 levels "Proveedor.i",..: 1 1 1 1 3 1 1 1 1 1 ...
 $ Proveedor
                    : Factor w/ 6 levels "Sit.comp.c", "Sit.comp.o", ..: 3 3 3 3 6 3 3 3 4 4 .
 $ Sit.comp
$ Frec.compra
                    : Factor w/ 3 levels "Frec.compra.d",..: 3 3 1 3 3 3 3 3 3 ...
                    : Factor w/ 3 levels "Transform.c",..: 2 2 2 1 2 1 2 1 1 1 ...
 $ Transform
 $ Conserv
                    : Factor w/ 2 levels "Conserv.c", "Conserv.sa": 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 ...
 $ Empaque
                    : Factor w/ 3 levels "Empaque.b", "Empaque.cc", ..: 1 1 1 1 3 1 1 1 1 1 ...
                    : Factor w/ 3 levels "Transporte.m",..: 3 3 2 3 3 3 3 2 3 3 ...
 $ Transporte
                    : Factor w/ 3 levels "Cliente.prim.c",..: 1 3 1 1 3 1 1 1 1 1 ...
$ Cliente.prim.
                    : Factor w/ 5 levels "Cliente.sec.c",..: 2 2 2 4 3 4 2 2 2 2 ...
$ Cliente.sec.
$ Cliente.ter.
                    : Factor w/ 5 levels "Cliente.ter.c",..: 3 4 3 3 3 3 4 3 3 3 ...
Paso 2. Nuevo mca, que incluye a las variables suplementarias (quali.sup y quanti.sup)
  # mca con nombres de los bagres (quali.sup) y variables cuantitativas (cuanti sub)
  mca2 <- MCA (datos.activos.1,</pre>
                quali.sup = 1,
                                           # Registros de peces (X)
```

2 y 3 son Variables cuantitativas

Paso 3. Gráfica de las variables cuantitativas suplementarias (quanti.sup) (Figura 3.56).

quanti.sup = 2:3,

graph=FALSE)

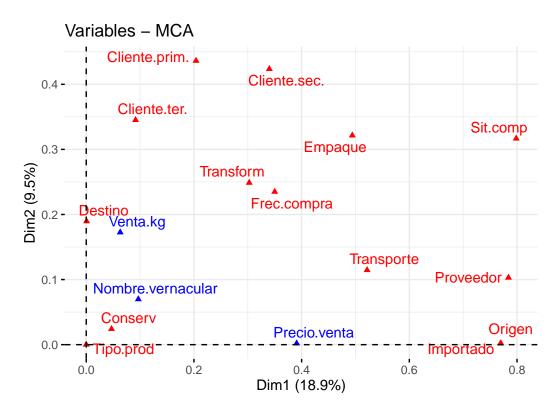


Figura 3.29: Ordenación de las variables activas y su nivel de contribución al análisis.

Paso 4. Grafica de las variables cualitativas suplementarias (quali.sup) (Figura 3.42)

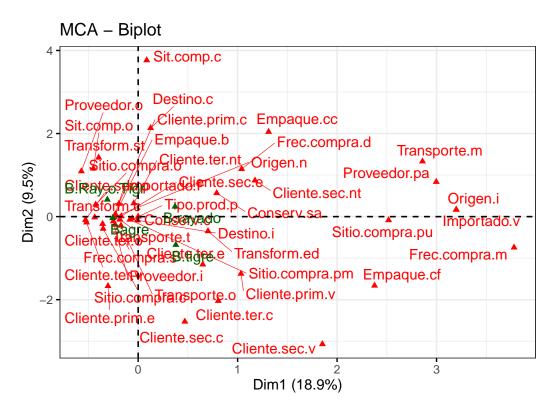


Figura 3.30: Ordenación de todas las variables activas que más contribuyen al análisis (rojo) y su relación co las variables cualitativas suplementarias (verde).

La Figura 3.43 muestra las elipses que representan a los intervalos de confianza de cada grupo de bagres, para medir el tipo de relación o de colapamiento entre estos, basado en las variables activas que los caracterizan.

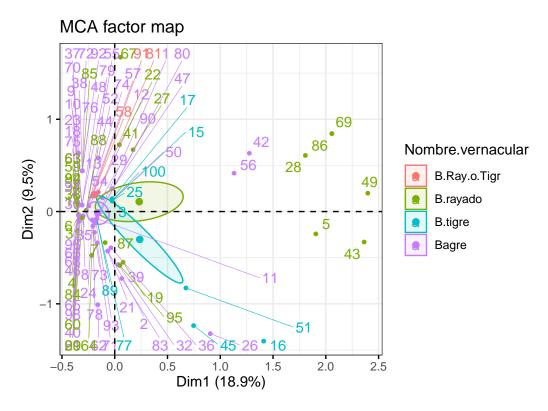


Figura 3.31: Relación entre las especies de bagres y con sus observaciones (registros de peces).

Taller de entrenamiento

Objetivo: Poner en práctica los conceptos vistos en este taller, realizando las siguientes opciones realizando un MCA con las variables biológicas (taxones). Enviar los resultados al *Teams* del profesor.

Taller 7.1 Análisis de Redundancia - RDA

Objetivo de la actividad:

La siguiente base de datos es tomada del trabajo de (Osorio, 2021), relacionado a un estudio sobre la composición de microalgas de la ciénaga Sevillano en el complejo lagunar de la Ciénaga Grande de Santa Marta (Colombia). La información contiene a 21 géneros de microalgas (matriz Y) y 10 variables ambientales (matriz X) medidas en 24 observaciones (localidades y campañas de muestreo). El propósito del ejercicio consiste en determinar la relación entre la composición de las microalgas y las variables fisicoquímicas de su ambiente, aplicando un análisis de redundancia (RDA) y un Análisis de Correspondencia Canónica (ACC), para finalmente comparar la aplicación de cada técnica. Se utilizará el siguiente archivo: Microalgas.csv

Ejercicio tomado de: Rodríguez-Barrios (2023) Enlace del libro

Enlace de los archivos del libro Revisar el capitulo de Análisis de Redundancia - RDA Numerical Ecology With R - Borcard et al. 2018 Capítulo de Análisis de Redundancia - RDA

Procedimiento resumido de la ordenación con el RDA

- Cargar librerías y funciones requeridas
- Cargar la base Microalgas.csv
- Realizar los ajustes a las variables y factores
- Correr el RDA con todas las variables
- Correr el RDA con las variables ambientales seleccionadas
- Figuras de BIPLOT y TRIPLOT con librerías "vegan" y "ggplot2".

Cargar las librerías requeridas

```
# Librerías requeridas
library(ade4)
library(adegraphics)
library(adespatial)
library(cocorresp)
library(vegan)
library(MASS)
library(ellipse)
library(FactoMineR)
library(rrcov)
library(ggplot2)
library(reshape2)
library(ggrepel)
library(ggforce)
```

Funciones adicionales (Bordcard et al. 2018)

```
# Funciones a cargar
source("hcoplot.R")
source("triplot.rda.R")
source("plot.lda.R")
source("polyvars.R")
source("screestick.R")
```

Cargar o importar la base de datos

Esta base de datos cuenta con una variable agrupadora o factor (Tributario), 10 variables ambientales y 21 taxones de microalgas.

```
# Base de datos
datos = read.csv2("Microalgas.csv",row.names=1)
```

Ajuste de las bases de datos biológica (tax.hel) y Ambiental (amb)

A continuación se realizará un ajuste de la base de datos, primero convirtiendo a la columna Tributario como un factor, luego transformando a las variables ambientales amb con logaritmo en base 10 y finalmente ajustando a los taxones tax.hel con la transformación de Hellinger. Las abreviaturas en las filas T1.1, ..., T1.6, ... Representan el número del tributario (T1) y el numero de la visita realizada al lugar de muestreo (1).

```
# Ajuste de factores
  datos$Tributario = as.factor (datos$Tributario)
  # str(datos)
                   # Nueva estructura de la base de datos
  # Variables ambientales
  amb=(datos[,c(2:11)]+1)
  round(head(amb),2)
                                         pH Conductividad Caudal Vel_Corriente
     Amonio Nitrito Nitrato Oxigeno
T1.1
       1.30
                1.84
                        1.90
                                8.68
                                      9.10
                                                        77
                                                             1.51
                                                                            1.73
       1.30
                                                        77
                                                             2.59
T1.2
                1.78
                        1.83
                                7.54
                                      8.45
                                                                            1.37
                                6.62 8.81
                                                        77
                                                             2.48
T1.3
       2.11
               2.18
                        4.43
                                                                            2.15
T1.4
                                7.08 10.21
                                                        77
                                                             2.24
       2.02
               1.88
                        3.67
                                                                            2.33
T1.5
       1.19
               1.15
                        1.52
                                6.10 10.24
                                                        77
                                                             2.32
                                                                            2.32
T1.6
                        1.90
                                6.60 10.63
                                                        78
                                                             2.25
                                                                            2.29
       1.21
                1.47
     Luz Temp
T1.1 801 18.6
T1.2 401 19.3
T1.3 301 18.1
T1.4 101 19.6
T1.5 801 18.9
```

Los datos de abundancia de los taxones están en cifras decimales, debido a la transformación logarítmica que se les aplicó.

```
# Variables biológicas linealizadas - Taxones con Hellinger
tax.hel=decostand(datos[,c(12:32)], "hellinger")
round(head(tax.hel),2)
```

T1.6 201 18.8

```
Fragillaria Lyngbya Chamaepinnularia Achnantes Amphora Caloneis Closterium
            0.00
                     0.62
                                                  0.00
T1.1
                                       0.10
                                                          0.15
                                                                    0.00
                                                                               0.23
T1.2
            0.10
                     0.49
                                       0.07
                                                  0.00
                                                          0.12
                                                                   0.00
                                                                               0.22
```

T1.3	0.34	0.16	;	0.20	0.0	0.00	0.00	0.18
T1.4	0.31	0.21		0.23	0.0	5 0.07	0.14	0.11
T1.5	0.28	0.14	:	0.22	0.0	8 0.10	0.12	0.09
T1.6	0.25	0.18	}	0.19	0.0	9 0.11	0.19	0.06
	Cocconeis C	Cymbella	Eolimna E	pithemia 1	Eunotia	Frustulia	Girosigma	
T1.1	0.22	0	0.27	0.00	0.00	0.00	0.00	
T1.2	0.30	0	0.33	0.00	0.17	0.17	0.00	
T1.3	0.33	0	0.32	0.00	0.09	0.11	0.00	
T1.4	0.29	0	0.26	0.05	0.00	0.00	0.15	
T1.5	0.44	0	0.29	0.07	0.10	0.00	0.16	
T1.6	0.44	0	0.28	0.08	0.09	0.00	0.13	
	${\tt Gomphonema}$	Melosira	Navicula	Nitzchia	Planoth	idium Suri	ilella Pinı	nularia
T1.1	0.00	0.51	0.00	0.24		0.15	0.10	0.25
T1.2	0.00	0.49	0.20	0.29		0.17	0.00	0.19
T1.3	0.09	0.50	0.11	0.37		0.32	0.00	0.22
T1.4	0.18	0.49	0.20	0.33		0.33	0.12	0.20
T1.5	0.20	0.43	0.20			0.35	0.19	0.12
T1.6	0.19	0.49	0.20	0.21		0.31	0.19	0.09

Doce pasos para el análisis de redundancia - RDA.

Paso 1. Ordenación de los taxones y las variables ambientales.

0.54640

0.45360

En el siguiente analisis se relaciona a la matriz de datos biológicos (abundancia de taxones) con la matriz de datos ambientales. A continuación se determinan los insumos generales del análisis.

10

13

Unconstrained 0.06479 Inertia is variance

Constrained

Eigenvalues for constrained axes:

0.07804

RDA1 RDA2 RDA3 RDA4 RDA5 RDA6 RDA7 RDA8 0.028864 0.019400 0.009741 0.006291 0.004905 0.003407 0.002132 0.001938 RDA9 RDA10 0.000927 0.000440

Eigenvalues for unconstrained axes:

PC2 PC3 PC4 PC5 PC6 PC7 PC8 0.026487 0.015199 0.009607 0.004206 0.002286 0.002040 0.001779 0.001226 PC9 PC10 PC11 PC12 PC13 0.000826 0.000485 0.000303 0.000258 0.000088

Matriz 1. Partición de la varianza. La inercia restringida es la que define el ajuste (restringida) en la relación entre las dos matrices de variables. Para este caso es de 0.54 (54%). Más adelante se aplicará el R2 de Ezequiel (1930), para encontrar el ajuste sin restricción (ajuste final del RDA). A continuación se muestra el comando para presentar los resultados detallados del RDA.

Matriz 2. Importancia de los componentes. Muestra que se requiere de 10 ejes canónidos (RDA) para explicar el 54% de la varianza explicada por la inercia restringida. La inercia restante se explica por los ejes de los 12 componentes principales PC.

Matriz 3. Species scores, muestra las coordenadas de las especies en los ejes canónicos, de los cuales se graficarán los dos primeros.

Matriz 4. Site scores, Muestra las coordenadas de los sitios

Matriz 5. Site constraints, muestra a las coordenadas de los sitos en el espacio de los taxones.

Matriz 6. Biplot scores, muestra las coordenadas de las variables ambientales.

```
summary(tax.rda) # Resultados completos
```

Call:

Total

rda(formula = tax.hel ~ Amonio + Nitrito + Nitrato + Oxigeno + pH + Conductividad + Cau

Partitioning of variance:

Inertia Proportion 0.14283 1.0000 0.07804 Constrained 0.5464 Unconstrained 0.06479 0.4536

Eigenvalues, and their contribution to the variance

Importance of components:

RDA1 RDA2 RDA3 RDA4 RDA5 RDA6 0.02886 0.0194 0.009741 0.006291 0.004905 0.003407 Eigenvalue Proportion Explained 0.20208 0.1358 0.068195 0.044042 0.034342 0.023850 Cumulative Proportion 0.20208 0.3379 0.406096 0.450138 0.484481 0.508331 RDA7 RDA8 RDA9 RDA10 PC1 Eigenvalue 0.002132 0.001938 0.0009267 0.0004403 0.02649 0.0152 Proportion Explained 0.014928 0.013566 0.0064878 0.0030829 0.18544 0.1064 Cumulative Proportion 0.523259 0.536825 0.5433124 0.5463953 0.73183 0.8382 PC3 PC4 PC5 PC6 PC7 PC8 0.009607 0.004206 0.002286 0.00204 0.001779 0.001226 Eigenvalue Proportion Explained 0.067262 0.029449 0.016001 0.01428 0.012454 0.008585 Cumulative Proportion 0.905501 0.934951 0.950952 0.96524 0.977690 0.986274 PC9 PC10 PC11 PC12 Eigenvalue 0.0008263 0.0004854 0.0003026 0.0002579 8.835e-05 Proportion Explained 0.0057854 0.0033982 0.0021184 0.0018053 6.186e-04 Cumulative Proportion 0.9920595 0.9954577 0.9975762 0.9993814 1.000e+00

Accumulated constrained eigenvalues Importance of components:

RDA2 RDA1 RDA3 RDA4 RDA5 RDA6 Eigenvalue 0.02886 0.0194 0.009741 0.006291 0.004905 0.003407 Proportion Explained 0.36984 0.2486 0.124809 0.080605 0.062853 0.043650 Cumulative Proportion 0.36984 0.6184 0.743228 0.823833 0.886685 0.930335 RDA7 RDA8 RDA9 RDA10 0.002132 0.001938 0.0009267 0.0004403 Eigenvalue Proportion Explained 0.027321 0.024828 0.0118739 0.0056423 Cumulative Proportion 0.957656 0.982484 0.9943577 1.0000000

Scaling 2 for species and site scores

- * Species are scaled proportional to eigenvalues
- * Sites are unscaled: weighted dispersion equal on all dimensions
- * General scaling constant of scores: 1.346293

Species scores

	RDA1	RDA2	RDA3	RDA4	RDA5	RDA6
Fragillaria	0.13772	-0.142031	0.176943	0.0562043	-0.063697	0.0736817
Lyngbya	-0.45345	0.075392	0.055651	0.0747107	-0.007676	-0.0088353
Chamaepinnularia	0.11821	0.067633	0.002487	-0.0394544	-0.046828	-0.0453373
Achnantes	0.12193	-0.007016	-0.005199	-0.0579162	0.007942	0.0004642

Amphora	0.07641	-0.055694	-0.073152	0.0983283	0.009532	-0.0447069
Caloneis	0.10235	0.100918	0.010924	-0.0128037	-0.110912	-0.0484938
Closterium	-0.13921	-0.049866	-0.040879	-0.1396354	0.023961	-0.0356380
Cocconeis	0.08230	0.111537	-0.116166	-0.0253457	0.078588	0.0767795
Cymbella	0.05167	-0.055582	0.016607	-0.0439576	-0.006371	0.0316069
Eolimna	-0.04478	0.040748	0.035461	0.0316799	-0.075134	-0.0244236
Epithemia	0.07696	0.053827	0.045227	0.0438611	0.041962	-0.0432302
Eunotia	-0.05858	0.073250	-0.007121	-0.0114420	-0.009144	-0.0119924
Frustulia	0.02272	-0.199618	-0.124568	0.0131044	0.025406	-0.0360106
Girosigma	0.02634	0.128337	-0.026327	-0.0387420	-0.032438	0.0447555
Gomphonema	0.07341	0.161492	0.025849	0.0627397	0.022804	0.0060812
Melosira	-0.05697	0.080419	0.113156	-0.1522371	-0.010332	-0.0211294
Navicula	0.06661	0.024720	0.170748	0.0007566	0.147542	-0.0024464
Nitzchia	-0.01762	-0.146199	-0.006291	-0.0369694	-0.062184	0.0808324
Planothidium	0.19033	0.088406	0.005299	0.0107074	-0.019909	-0.0672288
Surilella	-0.01394	0.225111	-0.076448	0.0277918	-0.025008	0.0725367
Pinnularia	-0.07301	-0.071644	-0.012235	0.0131215	-0.014800	-0.0209236

Site scores (weighted sums of species scores)

	RDA1	RDA2	RDA3	RDA4	RDA5	RDA6
T1.1	-1.07703	0.01888	-0.336999	-0.09191	-0.07613	-0.45253
T1.2	-0.84054	-0.20049	-0.141839	-0.17384	0.41711	-0.36452
T1.3	-0.21890	-0.28606	0.057019	-0.41733	-0.19777	0.18328
T1.4	-0.10950	0.13679	0.237775	-0.15358	-0.27403	0.24129
T1.5	0.03167	0.36875	-0.068462	-0.02417	0.03290	0.45435
T1.6	-0.02467	0.44011	-0.025990	-0.07247	0.04603	0.29248
T1.7	0.16166	0.39197	-0.238118	-0.11707	0.09933	-0.03318
T1.8	0.10948	0.45084	-0.180997	-0.02135	0.13711	0.57389
T2.1	-0.26911	-0.30806	-0.767805	0.87397	-0.04427	0.98553
T2.2	-0.09952	-0.13226	0.772156	0.70675	0.69534	0.25746
T2.3	-0.22223	-0.20709	0.295607	0.34609	-0.52442	0.03893
T2.4	-0.10695	0.08534	0.088760	0.27482	-0.62125	-0.25749
T2.5	-0.01470	0.16145	0.362241	0.26382	-0.47381	-0.22220
T2.6	0.16730	0.34242	0.051480	0.06839	-0.07649	-0.30779
T2.7	0.32172	0.27478	-0.097778	0.15784	0.11343	-0.39605
T2.8	0.34014	0.40401	-0.109732	0.25509	0.06223	-0.44183
T3.1	0.20708	-0.87754	-0.685639	0.93999	-0.34090	0.42622
T3.2	0.15556	-0.56176	0.588049	-0.31921	-0.28143	0.64658
T3.3	0.19044	-0.31732	0.423720	-0.29719	-0.08333	0.35854
T3.4	0.26461	-0.20676	-0.026922	-0.24747	-0.14614	-0.28402
T3.5	0.26567	-0.07627	-0.007015	-0.51250	-0.24973	-0.40467

```
T3.6 0.26294 -0.02789 -0.060279 -0.54987 0.29896 -0.27382
T3.7 0.27363 0.07944 -0.083931 -0.34491 0.49386 -0.54819
T3.8 0.23124 0.04670 -0.045299 -0.54391 0.99339 -0.47227
```

Site constraints (linear combinations of constraining variables)

```
RDA1
               RDA2
                       RDA3
                              RDA4
                                     RDA5
                                            RDA6
T1.2 -0.672062 -0.282194 -0.1487709 -0.10561 0.35054 -0.16350
T1.4 0.009029 0.394109 0.1840858 -0.36486 -0.01351 -0.26989
T1.8 -0.160580 0.192429 -0.4894293 0.01713 0.14478 0.50417
T2.1 0.059599 -0.099508 -0.1636965 0.23651 -0.09396 0.42975
T2.2 -0.152474 -0.181670 0.7823215 0.65227 0.57180 0.22938
T2.3 -0.135133 0.072656 0.1381488 0.31328 -0.15771 -0.26812
T2.4 0.080845 0.150351 0.1744033 0.11732 -0.18811 -0.19088
T2.5 -0.031560 -0.016833 0.3379676 0.09039 -0.71895 -0.07707
T2.6 0.223424 0.286614 0.0244991 0.13025 0.03622 -0.30461
T2.7 0.162822 0.261848 -0.0774071 0.33031 -0.01031 -0.18129
T2.8 0.214704 0.144374 -0.1007849 0.12653 0.16237 -0.32115
T3.1 0.276688 -0.515338 -0.5875697 0.21567 0.03745 -0.21428
T3.2 -0.078309 -0.261042 0.0094046 0.01194 -0.09537 0.23117
T3.3 0.445486 -0.242713 0.3772510 -0.37955 0.05636 0.29527
T3.4 -0.128534 -0.394367 0.1125166 -0.31742 0.01463 -0.11643
T3.5 0.206039 -0.409549 -0.1202982 0.19481 -0.60608 0.19190
T3.6 0.512665 -0.044235 -0.0726911 -0.31755 0.36432 0.26933
T3.7 0.092435 -0.008915 -0.0763885 -0.02302 0.01115 -0.43913
T3.8 0.201048 -0.091407 -0.0913406 -0.21175 0.38361 -0.35399
```

Biplot scores for constraining variables

	RDA1	RDA2	RDA3	RDA4	RDA5	RDA6
Amonio	-0.05176	-0.12017	0.67080	0.2933	0.41466	0.27637
Nitrito	-0.58706	-0.22830	0.29302	-0.3920	-0.10474	-0.33554
Nitrato	0.11287	-0.04070	0.34885	-0.4042	-0.26078	-0.02453
Oxigeno	0.10513	-0.04085	-0.64672	0.1262	0.55134	-0.18159
pН	0.22497	0.26189	-0.03689	-0.5123	-0.15576	-0.46422
Conductividad	-0.61873	0.43117	-0.22737	-0.3900	0.06681	0.25390

```
Caudal -0.32017 0.13247 -0.28194 -0.5026 0.08692 0.36194 

Vel_Corriente 0.03368 0.27010 -0.30589 -0.4551 -0.06465 0.51914 

Luz 0.30256 -0.52037 -0.35636 0.2878 -0.31339 -0.01181 

Temp -0.32332 0.77248 -0.07647 0.2202 0.25887 -0.12217
```

A continuación se muestra una manera de extraer algunos insumos por separado del anterior comando summary(tax.rda). Las coordenadas de los taxonesy de los sitios serán tenidas en cuenta más adelante, para las figuras de ggplot2.

```
# Matriz 3. Escores o coordenadas de los taxones
species.scores <- scores(tax.rda, display = "species")

# Escores o coordenadas de los sitios
site.scores <- scores(tax.rda, display = "sites")

# Escores de las variables restringidas
biplot.scores <- scores(tax.rda, display = "bp")</pre>
```

Paso 2. Coeficientes de las variables regresoras (ambientales), en el modelo lineal.

Solo se mostrarán los tres primeros ejes canónicos [,1:3], para facilidad de su interpretación.

```
round(coef(tax.rda),2)[,1:3]
```

	RDA1	RDA2	RDA3
Amonio	0.01	-0.01	0.10
Nitrito	-0.18	-0.32	0.18
Nitrato	0.04	0.03	0.01
Oxigeno	0.03	-0.04	-0.11
рН	0.07	0.07	0.04
${\tt Conductividad}$	-0.02	0.01	-0.01
Caudal	0.10	-0.28	0.00
${\tt Vel_Corriente}$	0.37	0.21	0.02
Luz	0.00	0.00	0.00
Temp	0.06	0.14	0.01

Se puede pensar en un modelo lineal, que tiene en cuenta a los coeficientes descritos en el primer eje canónico:

Distribución de los taxones de microalgas (Matriz Y) = 0.01(Amonio) - 0.18(Nitrito) + ... + 0.06(Temp)

Paso 3. R2 sin ajuste vs. R2 ajustado (Ezequiel 1930)

La nueva inercia no sesgada (sin restricción) calculada con la formula de Ezequiel es de 0.19 o del 19%.

```
# R^2 sin ajuste (inercia restringida)
(R2 <- RsquareAdj(tax.rda)$r.squared)

[1] 0.5463953

# R^2 ajustado
(R2adj <- RsquareAdj(tax.rda)$adj.r.squared)

[1] 0.1974686</pre>
```

Paso 4. Figura de Triplot

A continuación, se realizará la gráfica del RDA (figura Triplot) (Figura 3.62), que relaciona a los tres elementos: taxones, variables ambientales y sitios de muestreo mediante dos tipos de escalamiento (Scalings 1 y 2).

Paso 5. Prueba global del RDA

Esta prueba obtiene un valor p = 0.04296 *, por lo cual se valida que el modelo de regresión múltiple de este RDA presenta un ajuste apropiado (a pesar de la poca inercia encontrada).

```
# Prueba global del RDA (dos opciones)
# Ho= no hay relación entre las variables X y las Y
```

```
Permutation test for rda under reduced model
Permutation: free
Number of permutations: 1000
Model: rda(formula = tax.hel ~ Amonio + Nitrito + Nitrato + Oxigeno + pH + Conductividad + Conductividad + Conductividad + Conductividad + Conductividad + Conductividad
          Df Variance
                               F Pr(>F)
          10 0.078044 1.5659 0.04595 *
Model
Residual 13 0.064790
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
A continuación se muestra que ninguno de los ejes canónicos prsenta significancia para la
ordenación de las variables y de las observaciones de este análisis (valor p > 0.05), sin embargo
se continuará con el procedimiento.
   # Prueba de los ejes canónicos
   anova(tax.rda, by = "axis", permutations = how(nperm = 1000))
Permutation test for rda under reduced model
Forward tests for axes
Permutation: free
Number of permutations: 1000
Model: rda(formula = tax.hel ~ Amonio + Nitrito + Nitrato + Oxigeno + pH + Conductividad + Conductividad + Conductividad + Conductividad + Conductividad + Conductividad
          Df Variance
                               F Pr(>F)
RDA1
           1 0.028864 5.7914 0.1389
RDA2
           1 0.019400 3.8926 0.3766
            1 0.009741 1.9544 0.9361
RDA3
           1 0.006291 1.2622 0.9970
RDA4
           1 0.004905 0.9842 0.9960
RDA5
RDA6
           1 0.003407 0.6835 1.0000
```

anova(tax.rda, permutations = how(nperm = 1000))

RDA7

RDA8

RDA9

RDA10

Residual 13 0.064790

1 0.002132 0.4278 1.0000

1 0.001938 0.3888 0.9990

1 0.000927 0.1859 1.0000 1 0.000440 0.0884 0.9990

Paso 6. Factor de inflación de la varianza (VIF) del RDA

```
# Factor de inflación
round(vif.cca(tax.rda), 2)
```

xigeno	Oxigeno	Nitrato	Nitrito	Amonio
1.22 1	1.22	1.61	2.02	1.40
Luz T	Luz	Vel_Corriente	Caudal	Conductividad
2.04 2	2.04	4.85	7.46	9.28

Los resultados están por debajo de un VIF de 10, por lo que todas las variables son importantes para el análisis.

Paso 7. Criterios de selección de variables ambientales (X)

7.1 Forward selection usando forward.sel()

El comando forward.selpermitirá definir a las variables ambientales con importancia para ser relacionadas con los taxones en el RDA. Para este caso define a la *Conductividad* y a la *Velocidad del la Corriente*.

```
# Factor de inflación
forward.sel(tax.hel, amb, adjR2thresh = R2adj)

Testing variable 1
Testing variable 2
Testing variable 3
Procedure stopped (adjR2thresh criteria) adjR2cum = 0.200960 with 3 variables (> 0.197469)
```

```
      variables order
      R2
      R2Cum
      AdjR2Cum
      F pvalue

      1 Conductividad
      6 0.11614724 0.1161472 0.07597211 2.891024 0.013

      2 Vel_Corriente
      8 0.09924816 0.2153954 0.14067115 2.656384 0.024
```

7.2 Eliminación anticipada (Backward) usando "ordistep()" de vegan

El anterior resultado es validado por esta función ordistep, la cual luego de varias corridas, define a las mismas variables ambientales Conductividad y a la Velocidad del la Corriente, pero incluye a la Temperatura como las significativas para el análisis RDA. Para continuar el ejercicio, a continuación se realizará un nuevo RDA (RDA parsimonioso) con estas tres variables.

```
# 7.2 Eliminación anticipada (Backward) usando "ordistep()" de vegan
  step.backward <- ordistep(tax.rda,permutations = how(nperm = 499))</pre>
Start: tax.hel ~ Amonio + Nitrito + Nitrato + Oxigeno + pH + Conductividad +
                                                                                  Caudal + V
               Df
                      AIC
                                F Pr(>F)
- Nitrato
                1 -45.747 0.5267
                                  0.832
- Nitrito
                1 -45.375 0.7380 0.632
- Luz
                1 -45.164 0.8591 0.486
- Caudal
                1 -45.084 0.9053 0.466
- Amonio
                1 -44.961 0.9770 0.404
- pН
                1 -44.738 1.1072 0.322
- Oxigeno
                1 -44.667 1.1492 0.304
- Vel_Corriente 1 -44.412 1.3001 0.262
- Temp
                 1 -44.020 1.5356 0.166
- Conductividad 1 -43.286 1.9875 0.086 .
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Step: tax.hel ~ Amonio + Nitrito + Oxigeno + pH + Conductividad + Caudal +
                                                                                Vel_Corrient
                Df
                               F Pr(>F)
                      AIC
                 1 -46.555 0.7127
- Nitrito
                                   0.626
- Caudal
                1 -46.216 0.9222 0.424
                1 -45.915 1.1104 0.398
Hq -
- Amonio
                1 -46.112 0.9867 0.392
- Luz
                1 -45.947 1.0903 0.336
                1 -45.753 1.2124 0.264
- Oxigeno
                1 -45.284 1.5132 0.176
- Temp
- Vel_Corriente 1 -44.698 1.8963 0.104
- Conductividad 1 -43.786 2.5121 0.042 *
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

```
Step: tax.hel ~ Amonio + Oxigeno + pH + Conductividad + Caudal + Vel_Corriente +
                                                                                     Luz + '
               Df
                               F Pr(>F)
                      AIC
- Caudal
                1 -47.100 0.9375 0.436
- Amonio
                1 -46.967 1.0261 0.370
- Luz
                1 -46.842 1.1100 0.334
- pН
                1 -46.802 1.1365 0.258
                1 -46.620 1.2591 0.210
- Oxigeno
- Vel_Corriente 1 -44.635 2.6618 0.052 .
                 1 -45.383 2.1193 0.046 *
- Temp
- Conductividad 1 -43.968 3.1590 0.018 *
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Step: tax.hel ~ Amonio + Oxigeno + pH + Conductividad + Vel_Corriente +
                                                                            Luz + Temp
               Df
                      AIC
                               F Pr(>F)
- Amonio
                1 -47.616 1.0204 0.370
- Luz
                1 -47.525 1.0854 0.360
                1 -47.448 1.1398 0.320
Hq -
                1 -47.387 1.1836 0.298
- Oxigeno
- Temp
                1 -45.715 2.4235 0.020 *
- Vel_Corriente 1 -44.448 3.4221 0.004 **
- Conductividad 1 -42.714 4.8773 0.002 **
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Step: tax.hel ~ Oxigeno + pH + Conductividad + Vel_Corriente + Luz +
                                                                         Temp
               Df
                      AIC
                               F Pr(>F)
- Luz
                1 -48.000 1.1841 0.324
Hq -
                1 -47.803 1.3343 0.200
- Oxigeno
                1 -47.714 1.4020 0.192
- Temp
                1 -46.427 2.4162 0.040 *
- Vel_Corriente 1 -45.170 3.4595 0.006 **
- Conductividad 1 -43.486 4.9469 0.002 **
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Step: tax.hel ~ Oxigeno + pH + Conductividad + Vel_Corriente + Temp
               Df
                      AIC
                               F Pr(>F)
```

```
- Oxigeno
                1 -48.138 1.4525 0.204
- pH
                1 -48.202 1.4002 0.196
- Temp
                1 -46.244 3.0499 0.010 **
- Vel_Corriente 1 -45.949 3.3094 0.008 **
- Conductividad 1 -44.266 4.8576 0.002 **
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Step: tax.hel ~ pH + Conductividad + Vel_Corriente + Temp
               Df
                      AIC
                               F Pr(>F)
Hq -
                1 -48.466 1.3708 0.172
- Vel_Corriente 1 -46.305 3.2899 0.012 *
                1 -46.614 3.0048 0.008 **
- Conductividad 1 -44.637 4.8945 0.004 **
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Step: tax.hel ~ Conductividad + Vel_Corriente + Temp
               Df
                      AIC
                               F Pr(>F)
                1 -47.549 2.5845 0.018 *
- Temp
- Vel_Corriente 1 -46.730 3.3681 0.006 **
- Conductividad 1 -45.444 4.6545 0.002 **
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Paso 8. R2 ajustado

Al validar el ajuste del RDA con las dos variables seleccionadas, se obtiene un valor de 0.3 o 30% de ajuste.

```
# Se define un R^2: 0.3 (30% de relación)
RsquareAdj(step.backward)

$r.squared
[1] 0.3051824

$adj.r.squared
[1] 0.2009598
```

Paso 9. RDA Parsimonioso (rda.par)

RDA Parsimonioso significa que se realizará un nuevo RDA con las dos variables ambientales seleccionadas.

```
# RDA resumido
  (rda.pars <- rda(tax.hel ~ Temp + Vel_Corriente + Conductividad, data = amb))</pre>
Call: rda(formula = tax.hel ~ Temp + Vel_Corriente + Conductividad,
data = amb)
              Inertia Proportion Rank
Total
              0.14283
                          1.00000
Constrained
              0.04359
                          0.30518
                                     3
Unconstrained 0.09924
                          0.69482
                                    20
Inertia is variance
Eigenvalues for constrained axes:
    RDA1
             RDA2
                      RDA3
0.025917 0.013517 0.004157
Eigenvalues for unconstrained axes:
                    PC3
                             PC4
                                             PC6
                                                      PC7
                                                              PC8
    PC1
            PC2
                                     PC5
0.03482 0.01676 0.01396 0.00973 0.00677 0.00518 0.00252 0.00220
(Showing 8 of 20 unconstrained eigenvalues)
```

Paso 10. Coeficientes del modelo lineal parsimonioso

```
# RDA resumido round(coef(rda.pars),2)

RDA1 RDA2 RDA3
Temp 0.04 0.23 0.08
Vel_Corriente 0.47 0.36 -0.36
Conductividad -0.02 -0.01 0.00
```

Paso 11. Dos Triplots del RDA parsimonioso (Scaling 1 y Scaling 2)

```
dev.new(title = "RDA Parsimonioso scaling 1 y 2",
        width = 16, height = 8, noRStudioGD = TRUE)
par(mfrow = c(1, 2))
# Scaling 1
plot(rda.pars,scaling = 1,display = c("sp", "lc", "cn"),
     main = "Triplot RDA taxa.hel ~ amb - scaling 1")
spe.sc1 <- scores(rda.pars, choices = 1:2, scaling = 1, display = "sp")</pre>
arrows(0, 0, spe.sc1[, 1] * 0.92, spe.sc1[, 2] * 0.92,
       length = 0, lty = 1, col = "red")
# Scaling 2
plot(rda.pars,scaling = 2,display = c("sp", "lc", "cn"),
     main = "Triplot RDA taxa.hel ~ amb - scaling 2")
spe.sc1 <- scores(rda.pars, choices = 1:2, scaling = 2, display = "sp")</pre>
arrows(0, 0, spe.sc1[, 1] * 0.92, spe.sc1[, 2] * 0.92,
       length = 0, lty = 1, col = "red")
par(mfrow = c(1, 1))
```

#---

Paso 12. RDA con paquete ggplot2

Se realizará la figura del RDA con el paquete ggplot2, dada su mejor presentación, comparado a las figuras anteriores, realizadas con el paquete vegan. Los siguientes comandos sirven para identificar las coorddenadas de los sitios ("sites"), los taxones ("sp") y las variables ambientales ("vectors").

Total 0.14283 1.00000

Constrained 0.04359 0.30518 3

Unconstrained 0.09924 0.69482 20

Inertia is variance

```
Eigenvalues for constrained axes:
    RDA1
             RDA2
                      RDA3
0.025917 0.013517 0.004157
Eigenvalues for unconstrained axes:
            PC2
                     PC3
                             PC4
                                     PC5
                                              PC6
                                                      PC7
                                                              PC8
0.03482 0.01676 0.01396 0.00973 0.00677 0.00518 0.00252 0.00220
(Showing 8 of 20 unconstrained eigenvalues)
  names(summary(rda.pars))
                              # Insumos del RDA parsimonioso
 [1] "species"
                    "sites"
                                  "constraints" "biplot"
                                                                "call"
 [6] "tot.chi"
                    "constr.chi"
                                  "unconst.chi" "cont"
                                                                "concont"
[11] "scaling"
                    "digits"
                                  "inertia"
                                                 "method"
12.1 Coordenadas de los sitios y el factor "coord.sit"
  # 1) Coordenadas de los sitios y el factor (coord.sit)
  coord.sit <- as.data.frame(scores(rda.pars,</pre>
```

choices = 1:2, display = "sites"))

Coordenadas de

Crear una columna con nombres de los sitios

vista resumida de las coordenadas de sitios

Adicionar columna de grupos por Tributa

coord.sit\$sitio <- rownames(coord.sit)</pre>

coord.sit\$grp <- datos\$Tributario</pre>

head(coord.sit)

12.2 Coordenadas de los taxones "coord.tax"

	RDA1	RDA2	especies
Fragillaria	0.18835404	-0.111108636	Fragillaria
Lyngbya	-0.41883579	0.006822599	Lyngbya
${\tt Chamaepinnularia}$	0.09146325	0.064258294	${\tt Chamaepinnularia}$
Achnantes	0.09957281	-0.021272988	Achnantes
Amphora	0.08594521	-0.039656846	Amphora
Caloneis	0.07482072	0.043049919	Caloneis

12.3 Coordenadas de las ambientales "coord.amb"

```
# 3) Coordenadasde las especies (coord.tax)
amb1 <- envfit(tax.rda, amb) # Se pueden seleccionar variables con, p.max = 0.05
coord.amb = as.data.frame(scores(amb1, "vectors"))
coord.amb$amb <- rownames(coord.amb) # Insertar columna con nombres de las ambient
coord.amb = coord.amb[c(6,8,10),] # La 3 variables seleccionadas
head(coord.amb)</pre>
```

```
RDA1 RDA2 amb
Conductividad -0.51073374 0.4101799 Conductividad
Vel_Corriente -0.00143185 0.2248100 Vel_Corriente
Temp -0.32050590 0.6553301 Temp
```

12.4 Figura del RDA con vectores de especies

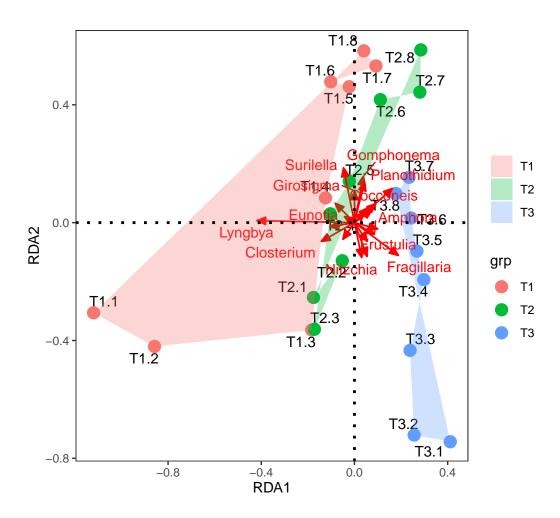


Figura 3.32: Figuras del RDA con las variables biológicas y los sitios

12.5 Figura con vectores de especies (sin flechas)

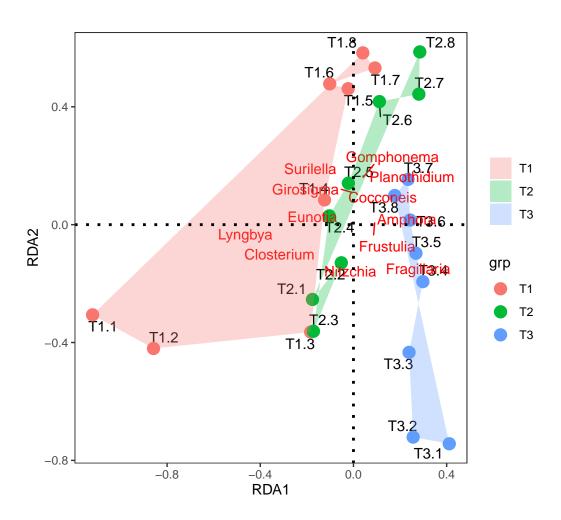


Figura 3.33: Figuras del RDA con las variables biológicas y los sitios

12.6 Figura con vectores de especies y ambientales

```
x11()
ggplot() +
  # Sitios
  geom_text_repel(data = coord.sit,aes(RDA1,RDA2,label=row.names(coord.sit)),
                  size=4)+ # Muestra el cuadro de la figura
  geom_point(data = coord.sit,aes(RDA1,RDA2,colour=grp),size=4)+
  scale_shape_manual(values = c(21:25))+
  # especies
  geom_segment(data = coord.tax, aes(x = 0, y = 0, xend = RDA1, yend = RDA2),
               arrow = arrow(angle=0,length = unit(0,"cm"),
                             type = "closed"),linetype=0, size=0,colour = "red")+
  geom_text_repel(data = coord.tax,aes(RDA1,RDA2,label=especies),colour = "red")+
  # Ambiental
  geom\_segment(data = coord.amb,aes(x = 0, y = 0, xend = RDA1, yend = RDA2),
               arrow = arrow(angle=22.5,length = unit(0.25, "cm"),
                             type = "closed"),linetype=1, size=0.6,colour = "blue")+
  geom_text_repel(data = coord.amb,aes(RDA1,RDA2,label=row.names(coord.amb)),colour = "#00
  # Factor
  geom_mark_ellipse(data=coord.sit, aes(x=RDA1,y=RDA2,fill=grp,group=grp),alpha=0.30) +
  geom_hline(yintercept=0,linetype=3,size=1) +
  geom_vline(xintercept=0,linetype=3,size=1)+
  guides(shape=guide_legend(title=NULL,color="black"),
         fill=guide_legend(title=NULL))+
  theme_bw()+theme(panel.grid=element_blank())
```

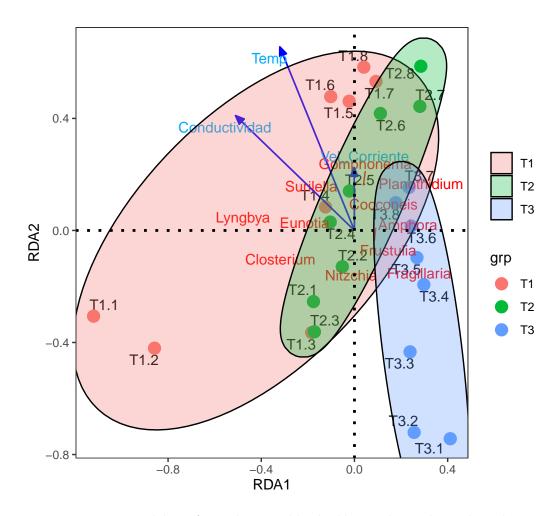


Figura 3.34: Figuras del RDA con las variables biológicas, las ambientales y los sitios

Taller de entrenamiento

Objetivo: Poner en práctica los conceptos vistos en este taller, realizando las siguientes opciones realizando un RDA con las variables biológicas (taxones) y variables ambientales. Enviar los resultados al *Teams* del profesor. ### P

Taller 8.1 Análisis de Clúster - CLA

Objetivo de la actividad:

Este ejercicio se realizará con la base de datos **FQmarino.csv**, que ya fue utilizada en el *Taller* 4.1 de *Componentes Pincipales*. Esta base contiene datos de siete variables fisicoquímicas, tomadas en siete bahías de Santa Marta.

El objetivo de este ejercicio consiste en la realización de un análisis de clúster, basado en cuatro pasos generales (distancia, método de agrupación, número de clúster y selección de variables clasificadoras), para realizar una clasificación de las bahías, basado en las variables que las caracterizan.

Referencias bibliográficas de apoyo.

• Clúster Jerárquicos

Libro: Análisis de datos ecológicos y ambientales - Rodríguez-Barrios Javier 2023 Se detallan todos los procedimientos descritos en el presente ejercicio.

Microalgas de la CGSM - Vidal et al. (2018). Implementación de un cluster no jerárquico para valorar paleoambientes con microalgas de la Ciénaga Grande de Santa Marta.

Cluster Brinda información complementaria para los diferentes pasos que requiere un análisis de clúster.

Clustering y heatmaps Similar al anterior enlace, brinda información detallada sobre el análisis de clúster.

Análisis de conglomerados Otro enlace con información general sobre los clúster.

Clustering y heatmaps: aprendizaje no supervisado Aplicación de clúster en diferentes disciplinas.

Hierarchical Cluster Analysis Enlace en el que se encuentra información sobre cluster jerárquicos y técnicas detalladas para seleccionar el número de k - clúster o grupos formados.

Determining The Optimal Number Of Clusters Información relevante para el paso 3 de este ejercicio, relacionado a la definición de los k-clúster o el número de grupos formados.

• Clúster no Jerárquicos

K-means Cluster Analysis Brinda información sobre la construcción de clúster no jerárquicos.

• Otros

Introduction to dendextend El paquete dendextend brinda opciones para comparar y visualizar dendogramas. Esto complementa al paso 3 del presente ejercicio, relacionado a la definición de los k-clúster formados.

Hierarchical Clustering on Principal Components Articulación de los clúster en los análisis de componentes principales.

Cargar las librerías requeridas

```
# Librerías requeridas
library(ellipse)
require(gclus)
require(SciViews)
require(ade4)
require(vegan)
library(corrplot)
library(ggplot2)
library(pheatmap)
library("gplots")
library(gridExtra)
library(factoextra)
```

Cargar o importar la base de datos

```
# Base de datos
datos = read.csv2("FQmarino.csv",row.names=1)

colnames(datos) = c("Sitio","pH","Cond","Turb","Temp","Sali","CFot","Oxig")
```

Exploración de los datos

Para este ejemplo se urtilizarán figuras que relacionan a dos o más variables. En casos en los que se tengan diferentes grupos definidos, se pueden incluir figuras de cajas que permitan visualizar diferencias entre dichos grupos definidos por algún factor.

```
# Elipses con colores
M <- cor(datos[,2:8])  # Matriz de Correlación (M)</pre>
```

La Figura 3.62 permite visualizar las relaciones lineales entre todas las parejas de variables, incluyendo a los coeficientes de correlación de Pearson.

```
x11()
corrplot(M, method = "circle",  # Correlaciones con circulos
    type = "lower", insig="blank",  # Forma del panel
    order = "AOE", diag = FALSE,  # Ordenar por nivel de correlación
    addCoef.col ="black",  # Color de los coeficientes
    number.cex = 0.8,  # Tamaño del texto
    col = COL2("RdYlBu", 200))  # Transparencia de los circulos
```

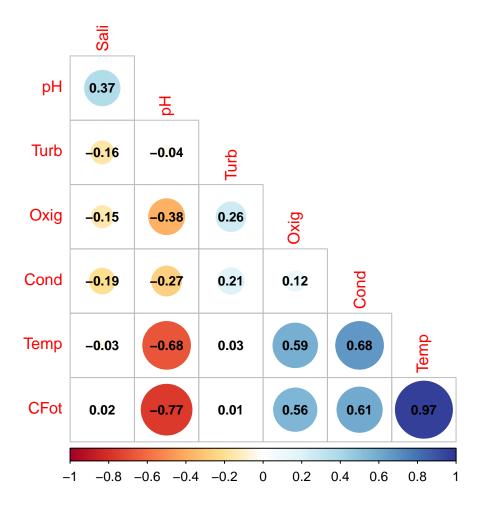


Figura 3.35: Correlaciones y coeficientes de correlación.

La Figura 3.63 es otra posigilidad para visualizar la relación entre las parejas de variables, pero además incluye páneles que visualizan la dispersión de los datos.

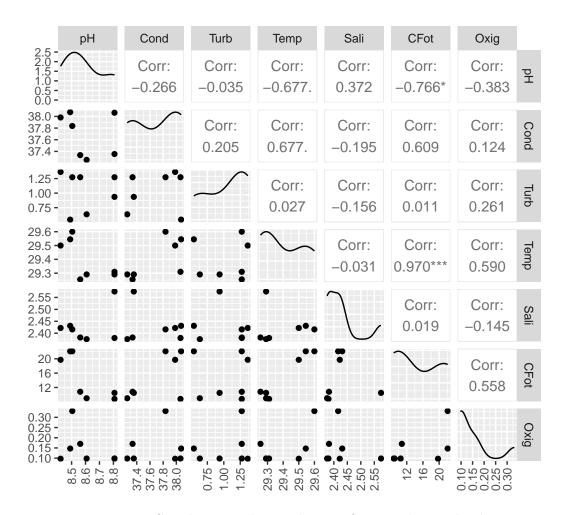


Figura 3.36: Correlaciones, dispersión y coeficientes de correlación.

La Figura 3.60 a diferencia de la anterior, clasifica a los grupos por colores y además incluye a sus coeficientes de correlación y el patrón de distribución de cada variable mediante histogramas de densidad.

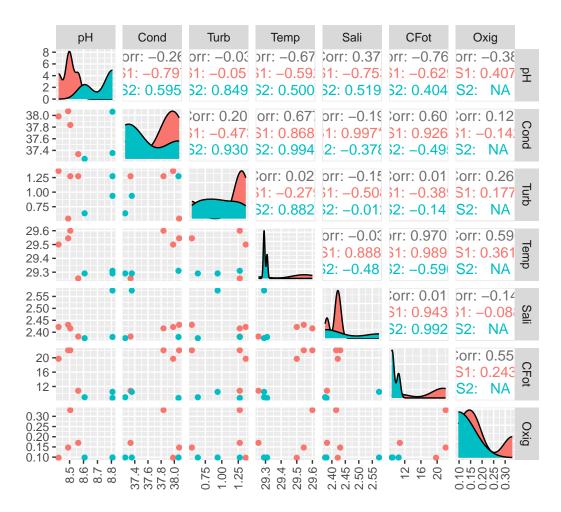


Figura 3.37: Correlaciones, dispersión y coeficientes de correlación, por cada grupo en comparación.

La Figura 3.53 permite visualizar a una de las relaciones relevantes, diferenciando por tipos de sitios (S1 y S2).

Given: Sitio

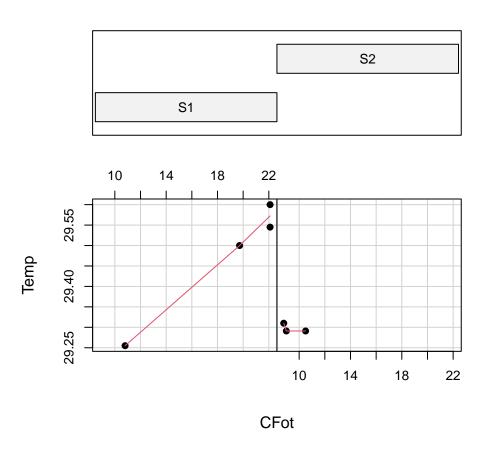


Figura 3.38: Relación bivariada en cada grupo asignado (Sitios).

La Figura 3.54 es otra forma de visualizar la relación anterior, pero con el paquete "ggplot2"

```
ggplot(datos, aes(x = CFot, y = Temp)) +
  geom_point() +
  geom_smooth(method = "lm", se = FALSE) +
  facet_wrap(~Sitio) +
  theme_bw() +
  theme(panel.grid=element_blank())
```

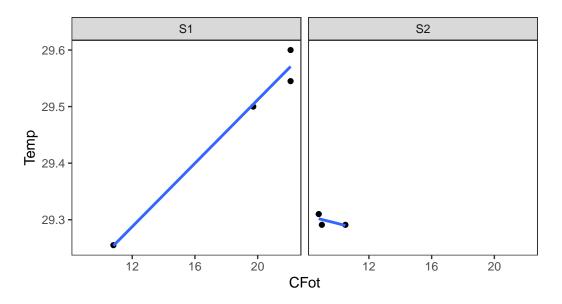


Figura 3.39: Relación bivariada en cada grupo asignado (Sitios).

Finalmente, la Figura 3.55 permite visualizar una relación más detallada entre dos variables seleccionadas y cuyos puntos caracterizan a cada uno de los sitios evaluados.

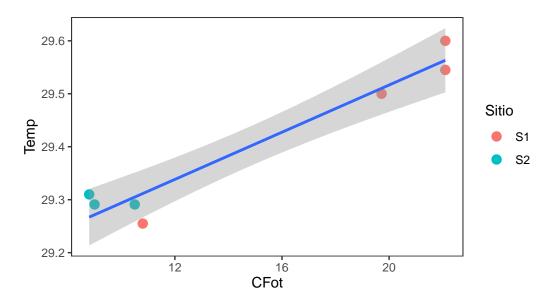


Figura 3.40: Relación bivariada en cada grupo asignado (Sitios).

Cuatro pasos para el análisis de clúster

A continuación se presenta el paso a paso requerido para un análisis de cluster - cla. Cabe mencionar que es un proceso algo dispendioso en tiempo, pero que brinda la posibilidad de contar con los códigos elaborados para ajustarlos de forma eficiente a otras bases de datos que requieran a este tipo de procedimientos.

PASO 1. Distancia entre observaciones

Son muchas las distancias que pueden emplearse, pero cada una se ajusta al tipo de datos que se requieran trabajar. Para este caso se usará la distancia euclídea, debido a que se ajusta de manera apropiada a datos ambientales, incorporando además al comando scale, debido a que permite estandarizar a este tipo de variables que presentan escalas disímiles.

```
# Matriz de distancia
d.euclid <- dist(scale(datos[,c(2:8)]))
round(d.euclid,2)

BTag PBet Mono Gran PGran Rod
PBet 2.59
Mono 2.94 3.14</pre>
```

```
Gran 3.16 4.09 3.84

PGran 3.94 3.75 4.82 2.13

Rod 3.41 4.12 4.53 2.72 3.17

Aero 4.47 4.54 5.22 3.47 3.30 3.55
```

PASO 2. Elección del método de agrupación de mayor ajuste

Son siete las opciones de dendogramas, de las cuales solo una será la que mejor se ajusta a los datos trabajados. Para ello, primero se realizarán los dendogramas y posteriormente se escogerá l de mejor ajuste con la correlación cofenética.

2.1 Siete métodos de agrupamiento

```
# Método 1. Vecino más cercano "Cl.single", función "hclust" y método "single"
Cl.single <- hclust(d.euclid,method="single")

# Método 2. Vecino más lejano "Cl.complete", función "complete"
Cl.complete<-hclust(d.euclid,method="complete")

# Método 3. UPGMA función "average" Unión Promedio no Ponderado
Cl.upgma<-hclust(d.euclid,method="average")

# Método 4. UPGMC función "mcquitty" Unión Promedio Ponderado
Cl.upgmc<-hclust(d.euclid,method="mcquitty")

# Método 5. WPGMA función "centroid"
Cl.wpgma<-hclust(d.euclid,method="centroid")

# Método 6. WPGMC función "median"
Cl.wpgmc<-hclust(d.euclid,method="median")

# Método 7. WARD, función "ward"
Cl.ward<-hclust(d.euclid,method="ward.D")</pre>
```

2.2 Figuras de los dendogramas con los siete métodos de agrupamiento

A continuación se realizará un panel que contenga hasta 4 figuras de dendogramas (Figura 3.56 y Figura 3.42), lo cual permite resumir al número de gráficas generadas, el comando que se empleará para incluir a varias figuras en un mismo panel grafico es grid.arrange() del paquete gridextra.

```
x11()
# tamaño del texto de las ramas
         cex = 0.7,
         ylab = "Distancia Euclídea", # Rotulo de la distancia
         main = "Vecino más Cercano - Single") # Rotulo de título
f2 <- fviz_dend(Cl.complete, k = 2,</pre>
                                        # k grupos (opcionales)
         cex = 0.7,
                                # tamaño del texto de las ramas
         ylab = "Distancia Euclídea", # Rotulo de la distancia
         main = "Vecino más Lejano - Complete") # Rotulo de título
f3 \leftarrow fviz_dend(Cl.upgma, k = 2,
                                        # k grupos (opcionales)
                                  # tamaño del texto de las ramas
         cex = 0.7,
         ylab = "Distancia Euclídea", # Rotulo de la distancia
         main = "Unión Promedio no Ponderado - upgmc") # Rotulo de título
f4 <- fviz_dend(Cl.upgmc, k = 2,
         cex = 0.7,
         ylab = "Distancia Euclidea",
         main = "Unión Promedio Ponderado - upgmc")
grid.arrange(f1,f2,f3,f4, ncol = 2)
```

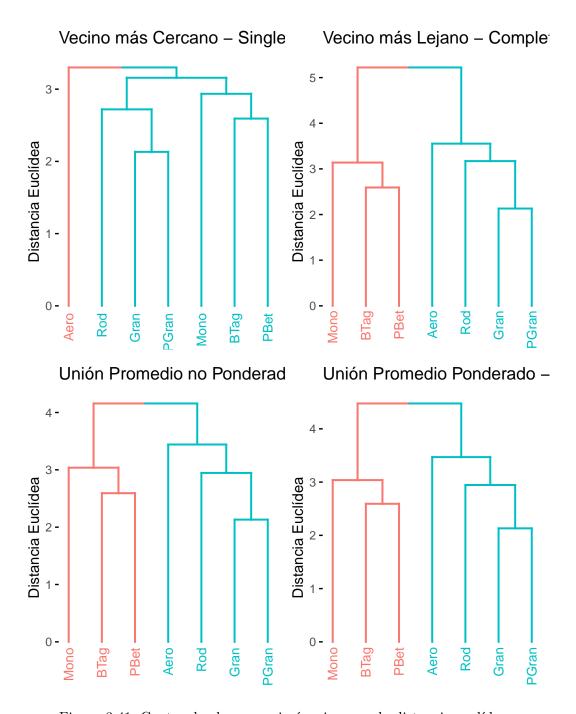


Figura 3.41: Cuatro dendogramas jerárquicos con la distancia euclídea.

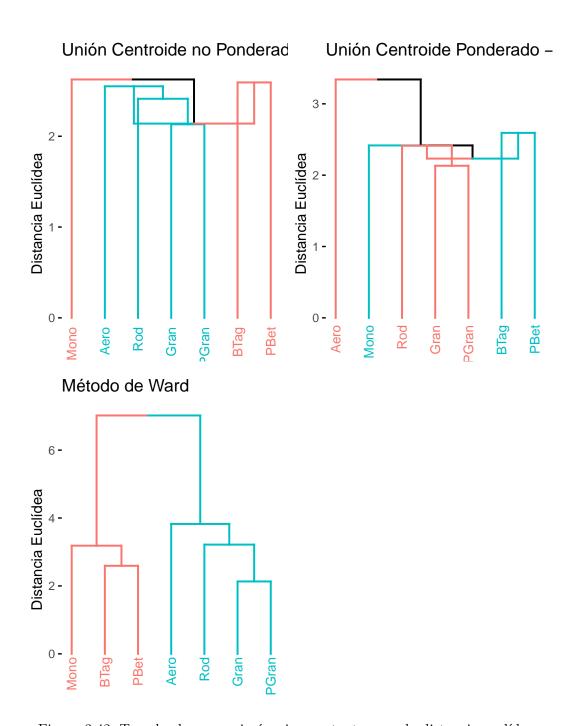


Figura 3.42: Tres dendogramas jerárquicos restantes, con la distancia euclídea.

2.3 Selección del mejor método de agrupamiento - Correlación Cofenética

• 2.3.1 Cálculo de las correlaciones cofenéticas

El método que presente la mayor correlación cofenética será el seleccionado. Para este caso se escogerá el dendograma con el método upgma, el cuál presenta un cofenético de 0.8234.

```
# (1) Correlación cofenpetica para "single"
  cofenet1 <- cophenetic(Cl.single)</pre>
  simple = cor(d.euclid,cofenet1)
  simple
[1] 0.7358594
  # (2) Correlación cofenética para "complete"
  cofenet2<-cophenetic(C1.complete)</pre>
  compl = cor(d.euclid,cofenet2)
  compl
[1] 0.8113013
  # (3) Correlación cofenética para "average"
  cofenet3<-cophenetic(Cl.upgma)</pre>
  upgma = cor(d.euclid,cofenet3)
  upgma
[1] 0.8233726
  # (4) CCorrelación cofenética para "mcquitty"
  cofenet4<-cophenetic(Cl.upgmc)</pre>
  upgmc = cor(d.euclid,cofenet4)
  upgmc
[1] 0.8209463
  # (5) Correlación cofenética para "centroid"
  cofenet5<-cophenetic(Cl.wpgma)</pre>
```

```
wpgma = cor(d.euclid,cofenet5)
wpgma

[1] 0.02444114

# (6) Correlación cofenética para "median"
cofenet6<-cophenetic(Cl.wpgmc)
wpgmc = cor(d.euclid,cofenet6)
wpgmc

[1] 0.3397504

# (7) Correlación cofenética para "ward"
cofenet7<-cophenetic(Cl.ward)
ward = cor(d.euclid,cofenet7)
ward</pre>
```

[1] 0.79712

• 2.3.2 Tabulación de las correlaciones cofenéticas

Los siguientes comandos permitirán organizar a los siete métodos de agrupamiento, de acuerdo a su nivel de correlación cofenética.

upgma 3 0.823 upgmc 4 0.821 compl 2 0.811

```
ward 7 0.797
simple 1 0.736
wpgmc 6 0.340
wpgma 5 0.024
```

Con este comando se puede exportar la tabla de cofenéticos como un archivo plano de csv.

```
# guardar tabla como csv
# write.csv2(cof_ordenado, "cofenet.csv")
```

• 2.3.3 Figuras de algunas correlaciones cofenéticas vs. matriz de distancia

A continuación se presenta una muestra de la relación entre las matrices de distancia cofenética y de distancia euclínea, que permitió seleccionar al mejor método de agrupamiento (Figura 3.43).

```
# convertir matricesde distancia a vectores
  d.euclid <- as.vector(d.euclid)</pre>
  d.cofenet1 <- as.vector(cofenet1)</pre>
  d.cofenet2 <- as.vector(cofenet2)</pre>
  d.cofenet3 <- as.vector(cofenet3)</pre>
  d.cofenet4 <- as.vector(cofenet4)</pre>
  # crear un data frame con los vectores y agregar una columna de etiquetas
  simple1 <- data.frame(d.euclid, d.cofenet1, d.cofenet2, d.cofenet3, d.cofenet4)
  head(simple1)
 d.euclid d.cofenet1 d.cofenet2 d.cofenet3 d.cofenet4
3.037397 3.037397
3 3.157893 3.157893 5.222324 4.157454 4.476721
4 3.936806  3.157893  5.222324  4.157454  4.476721
5 3.412345 3.157893 5.222324
                               4.157454 4.476721
6 4.469605
           3.300609 5.222324 4.157454 4.476721
  # Figuras correlaciones cofenéticas
  x11()
  # (1) distancia cofenética para "unión simple"
  f1<-ggplot(simple1, aes(d.euclid,d.cofenet1))+
   geom_point(size=3, color="#4daf4a") +
```

```
geom_smooth(method="lm",se=FALSE,color="#377eb8") +
  geom smooth(method="loess",se=FALSE,color ="#e41a1c",lty=2,size=1.3) +
 labs(title= "Unión Simple",
       subtitle= paste("Correlación cofenética",
                 round(cor(d.euclid,cofenet1),4)),
       x="Distancia Euclidea",
       y="Distancia cofenética") +
 theme bw()
# (2) distancia cofenética para "unión completa"
f2<-ggplot(simple1, aes(d.euclid,d.cofenet2))+
 geom point(size=3, color="#4daf4a") +
 geom_smooth(method="lm",se=FALSE,color="#377eb8") +
 geom_smooth(method="loess",se=FALSE,color = "#e41a1c",lty=2,size=1.3) +
 labs(title= "Unión Completa",
       subtitle= paste("Correlación cofenética",
                 round(cor(d.euclid,cofenet2),4)),
       x="Distancia Euclidea",
       y="Distancia cofenética") +
 theme_bw()
# (3) distancia cofenética para "unión upgma"
f3<-ggplot(simple1, aes(d.euclid,d.cofenet3))+
 geom_point(size=3, color="#4daf4a") +
 geom_smooth(method="lm",se=FALSE,color="#377eb8") +
 geom_smooth(method="loess",se=FALSE,color ="#e41a1c",lty=2,size=1.3) +
 labs(title= "Unión promedio no ponderado - upgma",
       subtitle= paste("Correlación cofenética",
                 round(cor(d.euclid,cofenet3),4)),
       x="Distancia Euclidea",
       v="Distancia cofenética") +
 theme_bw()
# (4) distancia cofenética para "unión upgmc"
f4<-ggplot(simple1, aes(d.euclid,d.cofenet4))+
 geom point(size=3, color="#4daf4a") +
 geom_smooth(method="lm",se=FALSE,color="#377eb8") +
 geom_smooth(method="loess",se=FALSE,color ="#e41a1c",lty=2,size=1.3) +
 labs(title= "Unión promedio ponderado - upgmc",
       subtitle= paste("Correlación cofenética",
```

```
round(cor(d.euclid,cofenet4),4)),
x="Distancia Euclidea",
y="Distancia cofenética") +
theme_bw()
grid.arrange(f1,f2,f3,f4, ncol = 2)
```

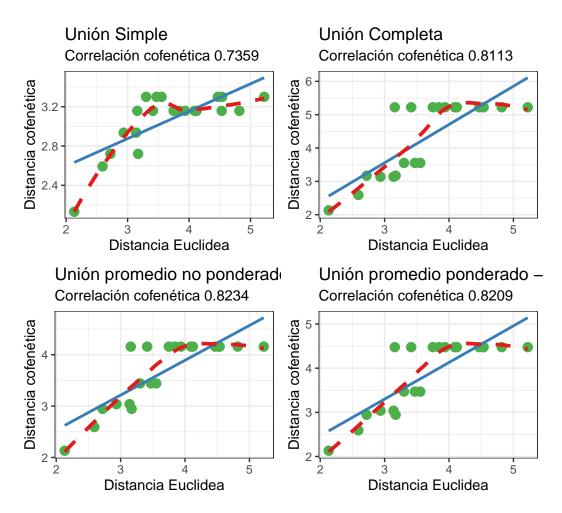


Figura 3.43: Cuatro regresiones entre la distancia euclídea empleada y las distancias cofenéticas de cada método de agrupamiento definido.

PASO 3. Número de grupos formados

La definición de los grupos formados, representan un insumo importante de información, debido a que permiten generar los k cluster en los que se agrupan las observaciones, basado en las

variables que las caracterizan. Este insumo es relevante además, como paso previo a otras técnicas que requieren los grupos definidos a priori, como los análisis discriminantes lineales (lda) o los análisis de varianza multivariados (manovas), de igual forma, a partir de los grupos se pueden responder hipótesis enfocadas en las variaciones que pueden presentar las variables a lo largo de gradientes discretos o en cluster.

Opción 1. Niveles de Fusión.

La figura de niveles de fusión es una de las más utilizadas para la generación de grupos o de cluster, debido a la sencillez del componente gráfico, en el cual se definen los cluster o grupos (eje Y), dependiendo del escalón de mayor amplitud o distancia horizontal (eje X). En la Figura 3.44 se observa que la mayor amplitud se presenta en 2 k cluster, por lo cual, el dendograma seleccionado en el paso anterior se puede clasificar en dos grupos de observaciones.

```
# Base de variables a relacionar (amb)
amb \leftarrow datos[,c(2:8)]
# Crear un data.frame con los datos de altura, k y número de cluster
f1 <- data.frame(h = Cl.upgma$height, k = nrow(amb):2, cluster = nrow(amb):2)
# Crear el gráfico de dispersión y agregar etiquetas de texto
ggplot(f1, aes(x = h, y = k, label = cluster)) +
  geom_point(color = "grey") +
  geom_text(color = "red", size = 3, vjust = -0.5) +
  geom_step(color = "grey", direction = "vh") +
# Personalizar el gráfico con títulos, etiquetas de ejes y paleta de colores
  ggtitle("Niveles de Fusión - Distancia Euclídea - UPGMA") +
  ylab("k (Número de Cluster)") +
  xlab("h (Altura del Nodo)") +
  scale_color_manual(values = c("grey", "red")) +
  theme(axis.title = element text(size = 16)) +
  theme classic()
```

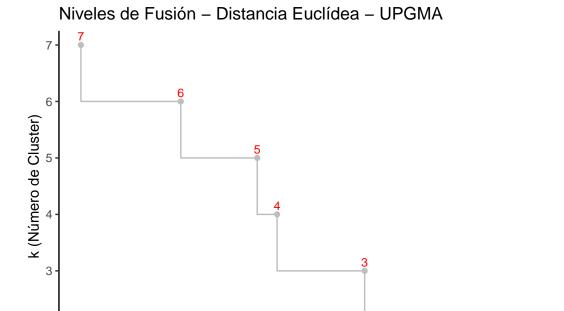


Figura 3.44: Cuatro regresiones entre la distancia euclídea empleada y las distancias cofenéticas de cada método de agrupamiento definido.

h (Altura del Nodo)

3.5

4.0

3.0

Opción 2. Número optimo de clusters de acuerdo al Ancho de silueta. Índice de calidad de Rousseeuw

La amplitud de silueta es de las opciones más usadas para definir al número de k cluster o grupos del dendograma realizado. En este ejercicio también se define a dos grupos. En caso que los resultados de esta técnica sean diferentes a la anterior, se suele decidir por esta, debido a su mayor grado de precisión.

```
# 1. Crear un vector vacío (amb.vacio) con asw valores
amb.vacio <- numeric(nrow(amb))

# 2. Silueta "sil"
for(k in 2: (nrow(amb)-1)){
    sil <- silhouette(cutree(Cl.upgma,k=k),d.euclid)
    amb.vacio[k]<-summary(sil)$avg.width}</pre>
```

2.5

2

3.1 Figura del dendograma jerárquico final

La Figura 3.45 muestra la manera en la que se organizan las observaciones en los dos grupos formados (ramas rojas y azules) devido a la naturaleza de las variables fisicoquímicas que las caracterizar.

Unión Promedio no Ponderada (UPGMA)

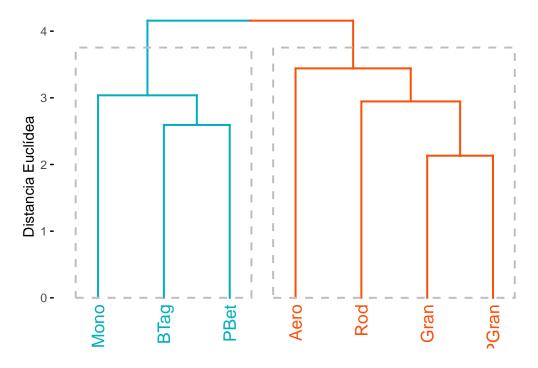


Figura 3.45: Dendograma jerárquico final con los dos grupos asignados.

Vale la pena mencionar que estos análisis son importantes cuando se cuenta con pocas observaciones (ramas del dendograma), en el caso contrario, es preferible utilizar dendogramas no jerarquicos como el k-meas, el cual fue descrito en uno de los complementos del PCA y se retoma a continuación.

3.2 Figura del dendograma no jerárquico final

• Agrupamiento elegido en el paso 2 (upgma)

```
# Matriz de distancia
d.euclid <- dist(scale(datos[,c(2:8)]))

# Método 3. UPGMA función "average" Unión Promedio no Ponderado
Cl.upgma<-hclust(d.euclid,method="average")</pre>
```

• Generación de la variable agrupadora (gr)

```
# Variable agrupadora con k=2 clúster
grp <- cutree(Cl.upgma, k = 2)  # Grupos generados "grp"
grl <- levels(factor(grp))  # Rotulos de los grupos formados</pre>
```

Este es un paso opcional en caso que se requiera insertar la nueva variable agrupadora a la base de datos en revisión.

```
# Incluir la variable agrupadora en la base de datos
datos.1=data.frame(grp,datos)  # Nuevo dataframe con la variable agrupadora (gr)
head (datos.1)
```

```
        grp
        Sitio
        pH
        Cond
        Turb
        Temp
        Sali
        CFot
        Oxig

        BTag
        1
        S1
        8.421
        37.982
        1.364
        29.500
        2.422
        19.72
        0.097

        PBet
        1
        S1
        8.490
        38.073
        0.545
        29.545
        2.431
        22.10
        0.147

        Mono
        1
        S1
        8.505
        37.836
        1.273
        29.600
        2.416
        22.10
        0.331

        Gran
        2
        S1
        8.562
        37.336
        1.273
        29.255
        2.382
        10.80
        0.170

        PGran
        2
        S2
        8.608
        37.255
        0.636
        29.291
        2.375
        9.00
        0.098

        Rod
        2
        S2
        8.808
        38.063
        1.273
        29.310
        2.380
        8.80
        0.098
```

• Generación del clúster No Jerárquico (K-Means)

La Figura 3.46 es la forma no jerárquica de presentar los resultados del cluster definido por el método de agrupamiento upgma.

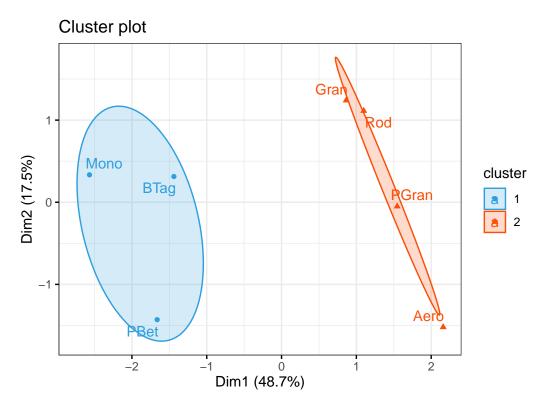


Figura 3.46: Dendograma no jerárquico final con los dos grupos asignados.

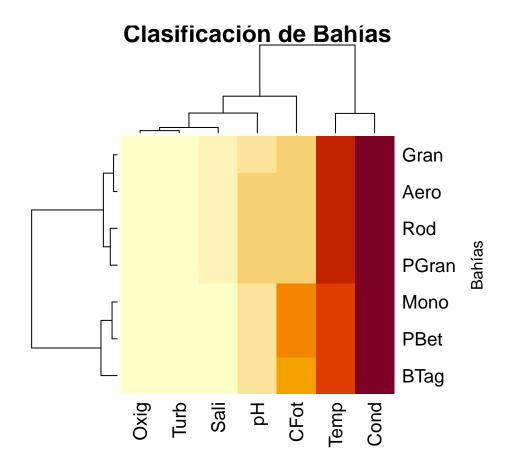
Una pregunta interesante que se podría resolver, sería valorar si las diferencias entre los dos grupos de observaciones formadas es estadísticamente significativa, para lo cual se debe aplicar un análisis de varianza multivariado (manova).

Paso 4. Variables de mayor contrinución a la clasificación

A continuación se realizan diferentes opciones de **mapas de calor** (Figura 3.47, Figura 3.48), para identifiar a las variables con mayor relevancia en la clasificación realizada anteriormente en el dendograma seleccionado. Este paso es relevante cuando se quiere ponderar o seleccionar a las variables que aportan al análisis, resumiento de esta forma, la dimensionalidad del problema (número de variables).

```
amb1 <- as.matrix(amb)

# Opción 1. Mapa de calor con paquete "stats"
x11()</pre>
```



Variables fisico-químicas

Figura 3.47: Mapa de calor que define en color rojo a las variables de mayor aporte a la clasificación realizada.

El siguiente mapa de calor (Figura 3.48) incorpora a la distancia euclídea utilizada y el método de agrupamiento seleccionado (upgma).

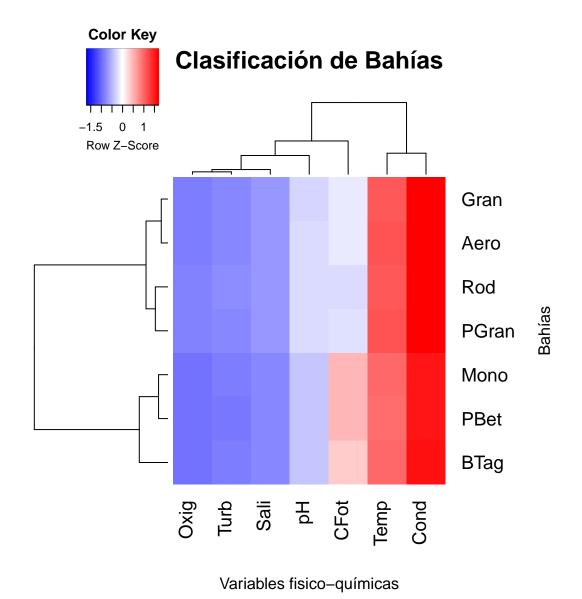


Figura 3.48: Mapa de calor que define en color rojo a las variables de mayor aporte a la clasificación realizada.

Nota: Es posible hacer mapas de calor cruzando a las variables con los grupos asignados. Este procedimiento se presentará en el ejercicio de análisis discriminante.

Taller 9.1 Análisis Discriminante Lineal - LDA

Objetivo de la actividad:

La base de datos que se utilizará es la de medidas morfométricas de peces de un estudio realizado con peces de la india por **Gupta et al. (2018)** Articulo fuente en los que se validó la taxonomía de peces de la subfamilia Barbinae, utilizando 19 variables morfométricas y 19 variables meristicas, correspondientes a 5 Especie de la familia en mención.

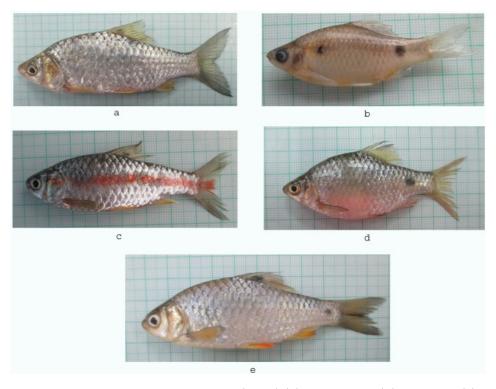


Figura 3.49: Imágen tomada de Gupta et al. (2018) (a) S . Sarana (b) P . ticto (c) P . sóforo , (d) P . conconio y (e) P . chola

El **objetivo** de este ejercicio consiste en identificar a las variables morfométricas que mejor discriminan a las Especie de peces y si dichas Especie se encuentran bien discriminadas en sus grupos taxonómicos asignados. De igual forma se construirá un modelo lineal en el que se puedan incluir nuevos individuos tomados de la misma muestra de peces y puedan ser discriminados de manera eficiente. La base de datos que se utilizará es **peces.csv**.

Referencias bibliográficas de apoyo.

Libro: Análisis de datos ecológicos y ambientales - Rodríguez-Barrios Javier 2023 Ver el capítulo de discriminante lineal (lda) en donde se detallan los procedimientos descritos en el presente ejercicio.

Sigatoka en cultivos de banano - Aguirre et al. (2015). Análisis de discriminante canónico y algunas técnicas multivariadas complementarias.

Linear Discriminant Analysis in R Se brinda información sobre las generalidades de los lda y su aplicación en R.

Computing and visualizing LDA in R En este documento se brinda información sobre el análisis y la visualización gráfica del lda.

Cargar las librerías requeridas

```
# Librerías requeridas
library(tidyverse)
library(lattice)
library(corrplot)
library(ggplot2)
library(ggrepel)
library(reshape2)
library(ggforce)

library(ade4)
require(vegan)
library(car)
library(MASS)
library(candisc)
library(mvnormtest)
```

Cargar o importar la base de datos

La presente base de datos se encuentra en formato plano de csv, presenta una columna Especie que agrupa a las 5 Especie de peces, otra columna Grupo, que asigna un número a cada especie y posteriormente a las 19 variables morfométricas y 10 variables meristicas, de las cuales se selecionarán las 19 morfométricas para este ejercicio M.1 a M.19.

```
# Base de datos
  peces<-read.csv2("peces.csv",row.names=1)</pre>
  names(peces)
 [1] "Especie" "Grupo"
                          "M.1"
                                     "M.2"
                                                "M.3"
                                                           "M.4"
                                                                     "M.5"
                "M.7"
                                     "M.9"
[8] "M.6"
                          "M.8"
                                                "M.10"
                                                           "M.11"
                                                                     "M.12"
[15] "M.13"
                "M.14"
                          "M.15"
                                     "M.16"
                                                "M.17"
                                                           "M.18"
                                                                     "M.19"
                "M.21"
[22] "M.20"
                          "M.22"
                                     "M.23"
                                                "M.24"
                                                           "M.25"
                                                                     "M.26"
[29] "M.27"
                "M.28"
                          "M.29"
```

Exploración de los datos

Para este ejemplo se urtilizarán figuras que relacionan parejas de variables y figuras de cajas que permitan visualizar diferencias entre las Especie de peces de acuerdo a su morfometría. *Para facilidad del ejercicio se seleccionarán algunas variables morfométricas - peces1, debido a que son las que presentan mejores patrones lineales.

```
# Elipses con colores con variables morfométricas
peces1 <- peces[,c(3:9,15,17,20)]
M <- cor(peces1) # Matriz de Correlación (M)</pre>
```

La Figura 3.62 permite visualizar las relaciones lineales entre todas las parejas de variables, incluyendo a los coeficientes de correlación de Pearson.

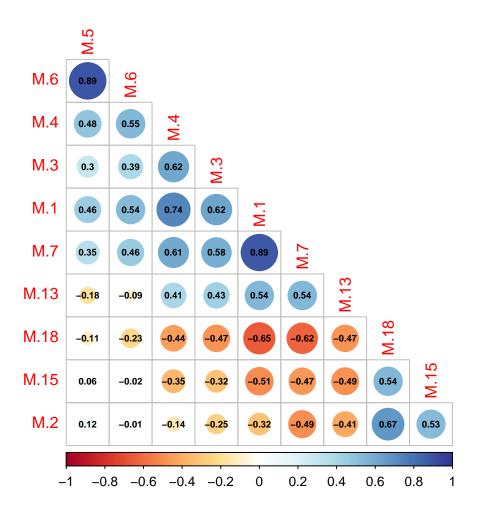


Figura 3.50: Correlaciones y coeficientes de correlación.

La Figura 3.63 a diferencia de la anterior, clasifica a los grupos por colores y además incluye a sus coeficientes de correlación y el patrón de distribución de cada variable mediante histogramas de densidad.

```
peces1 <- peces[,c(3:9,15,17,20)]
peces$Especie <- as.factor(peces$Especie)

x11()
pairs ((peces1),panel=function(x,y)
{abline(lsfit(x,y)$coef,lwd=2,col=3)
    lines(lowess(x,y),lty=2,lwd=2,col=2)
    points(x,y,col=peces$Especie, cex=1.4,pch=19,lwd=0.6)})</pre>
```

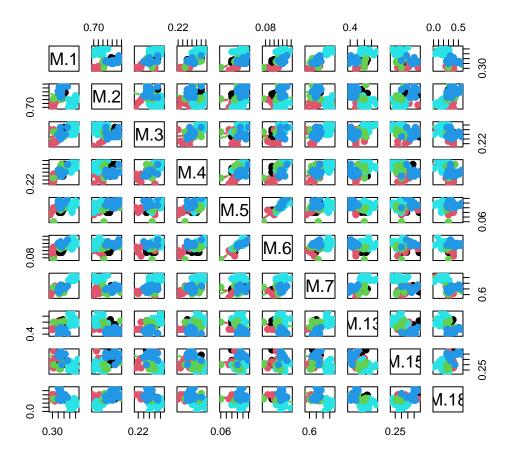


Figura 3.51: Relación entre parejas de variables, por cada grupo en comparación (colores).

La Figura 3.60 permite visualizar la resolución de cada variable para diferenciar o discriminar a las diferentes especies de peces. Esta figura sirve de insumo para descartar aquellas variables con poco potencial de discriminación de las especies.

```
# Figuras multivariadas de Cajas y bigotes
library(reshape)

x11()
ggplot(melt(peces[,c(1,3:9,15,17,20)]), aes(x=variable, y=value)) +
    geom_boxplot(aes(fill=Especie)) +
    scale_fill_manual(values = c('#fc8d59','#ffffbf','#99d594','#377eb8','#33a02c')) +
    labs(x="",y="Morfometría") +
```

facet_wrap(~ variable,scales="free") +
theme_bw()

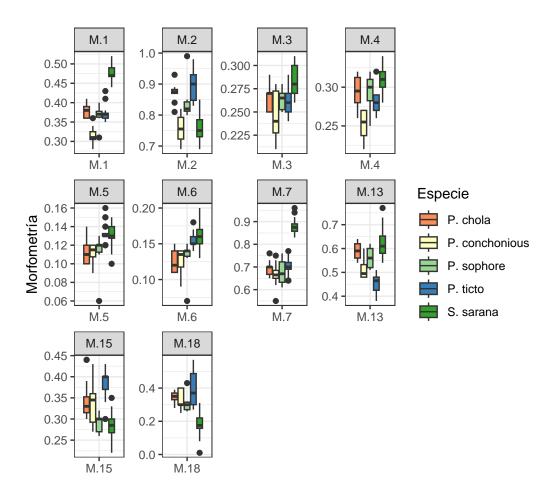


Figura 3.52: Variación en la morfometría de los peces, de acuerdo a cada una de las variables seleccionadas.

Mapa de Calor

El siguiente mapa de calor también permite visualizar a la resolución de las variables morfométricas para diferenciar a las especies de peces, las cuales representan a los grupos en comparación. Con los siguientes comandos se calculará una tabla que resume a los promedios de las 10 variables morfométricas para cada especie evaluada.

```
# Extracción de los promedios de las variables para cada especie
library(tidyverse)
promedios <- peces %>%
    subset(select = c("Especie","M.1","M.2","M.3","M.4","M.5","M.6","M.7","M.13","M.15","M.1
    na.omit() %>%
    group_by(Especie) %>%
    summarize(across(everything(), mean))

promedios <- data.frame(promedios) # Guardar promedios como dataframe
# promedios</pre>
```

A continuación se combierte el dataframe a formato matricial - promedios2, para poder ser graficado en el mapa de calor.

Ahora se incluyen los nombres de las especies a la matriz promedios2.

```
# Asignar los valores de la primera columna de peces1 como nombres de fila en la matriz perovnames(promedios2) <- promedios[,1]
```

La Figura 3.53 permite visualizar a las variables que mejor discriminan a las especies de peces (variables de tonalidad rojiza).



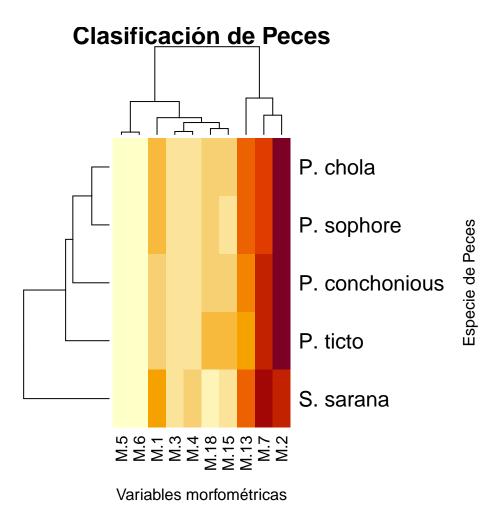


Figura 3.53: Mapa de calor que relaciona a las variables morfométricas y a las especies de peces.

La Figura 3.54 incorpora elementos adicionales como al método de agrupamiento upgma, asumiendo que puede ser el que mejor se ajusta a los datos de este ejercicio.

```
library("gplots")
x11()
heatmap.2(promedios2,  # Base de datos en formato matricial
    margins=c(5,12),  # Margenes de la figura
    scale = "row",  # Estandariza variables diferentes.
    col = bluered(100),  # Colores del mapa de calor
    xlab ="Variables morfométricas",
    ylab= "Especie de Peces",
    main = "Clasificación de Peces",
    trace = "none",
    density.info = "none",
    distfun = dist,  # Se puede usar vegdist de "vegan"
    hclustfun=hclust.fq)  # Agrupamiento UPGMA
```

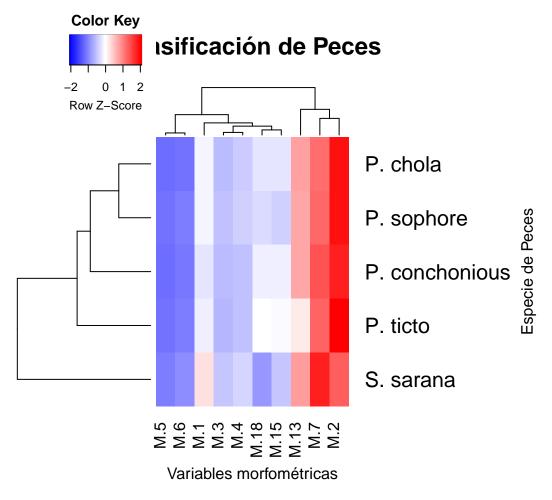


Figura 3.54: Mapa de calor que relaciona a las variables morfométricas y a las especies de peces.

Tres pasos para la realización del discriminante lineal - LDA

Paso 1. Pruebas de supuestos

Para que el análisis discriminante lineal sea considerado como un modelo lineal, debe cumplir con los supuestos de normalidad multivariada y de homogeneidad de covarianzas. Para el caso del presente ejercicio, dichos supuestos no alcanzan a cumplirse con los diagnosticos utilizados (valor p < 0.05), motivo por el cual, el lda de este ejercicio será tomado como una técnica de exploración moltivariada para saber que tan bien discriminados quedan los individuos de cada especie, basado en las 10 variables morfomètricas seleccionadas.

1.1 Supuesto de normalidad

El supuesto de normalidad multivariada será evaluado con el paquete mvnormtest, el cual utiliza el estadistico de Shapiro Wilks Multivariado. Para ello se realizarà esta prueba en cada uno de los grupos o especies en comparación.

```
# Diagnóstico de normalidad por cada tipo de Especie
library(mvnormtest)
```

Los siguientes generan los dataframes de cada especie con las 10 variables seleccionadas, convirtiendola ademàs en formato matricial.

```
# Dataframe por cada especie
# datos de P. chola.
P.chola <- peces %>%
             filter(Especie == "P. chola") %>%
             subset(select = c("M.1", "M.2", "M.3", "M.4", "M.5", "M.6", "M.7", "M.13", "M.15", "M.
# datos de P. conchonious.
P.concho <- peces %>%
             filter(Especie == "P. conchonious") %>%
             subset(select = c("M.1", "M.2", "M.3", "M.4", "M.5", "M.6", "M.7", "M.13", "M.15", "M.
# datos de P. sophore.
P.sophore <- peces %>%
             filter(Especie == "P. sophore") %>%
             subset(select = c("M.1","M.2","M.3","M.4","M.5","M.6","M.7","M.13","M.15","M.
# datos de P. ticto.
P.ticto <- peces %>%
             filter(Especie == "P. ticto") %>%
             subset(select = c("M.1", "M.2", "M.3", "M.4", "M.5", "M.6", "M.7", "M.13", "M.15", "M.
# datos de P. ticto.
S.sarana <- peces %>%
             filter(Especie == "S. sarana") %>%
             subset(select = c("M.1","M.2","M.3","M.4","M.5","M.6","M.7","M.13","M.15","M.
```

Vale la pena resaltar que los datos de las especies P. chola y P. sophore, son singulares, por lo cual no puede calcularse su supuesto de normalidad multivariada. Con el objeto de continuar en el ejercicio, las matrices que representan a las especies en menciòn, seràn desactivadas con #.

```
# Prueba de normalidad para cada especie

# norm1 <- mshapiro.test(t(P.chola))  # Matriz singular
norm2 <- mshapiro.test(t(P.concho))
# norm3 <- mshapiro.test(t(P.sophore))  # Matriz singular
norm4 <- mshapiro.test(t(P.ticto))
norm5 <- mshapiro.test(t(S.sarana))</pre>
```

A continuación se resume el resultado de los tres diagnósticos de normalidad multivariada realizados. Vale la pena mencionar que ninguna especie cumple con dicho supuesto estadóstico (valores p < 0.05), aunque existe la posibilidad de probar con alguna transformación.

1.2 Supuesto de homogeneidad de covarianzas

La prueba de homogeneidad de covarianza o **esfericidad**, corresponde al segundo supuesto del análisis discriminante lineal, se utilizará la función **betadisper**, la cual es complementada por dos análisis de varianza, los cuales definirán si el supuesto logra ser cumplido.

```
# Pruebas de Homogeneidad de covarianzas paquete "vegan"
peces.d <- dist(peces[,c(3:9,15,17,20)])  # Matriz de distancias
peces.homoge <- betadisper(peces.d, peces$Especie)  # Permutest</pre>
```

Con la siguiente anova se obtiene un valor p de 0.016^* , lo cual indica que no se cumple el supuesto de homogeneidad de covarianzas (valor p < 0.05).

```
Groups 4 0.019804 0.0049509 3.281 0.01638 *
Residuals 65 0.098082 0.0015090
---
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Con el permutest se obtiene un valor p de 0.015^* , lo cual indica que tampoco se cumple el supuesto de homogeneidad de covarianzas (valor p < 0.05).

Signif. codes: 0 '*** 0.001 '** 0.01 '* 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Paso 2. Análisis Discriminante Lineal de Fisher - LDA

Cálculo del LDA

A continuación, se realizará el lda, que permitirá generar definir al nivel de discriminación de cada grupo o especie de pez. Se presentan algunas opciones gráficas con el procedimiento general y con el análisis discriminate canónico (dca)

```
names(peces)
                         "M.1"
                                   "M.2"
                                              "M.3"
                                                        "M.4"
                                                                  "M.5"
 [1] "Especie" "Grupo"
 [8] "M.6"
               "M.7"
                                   "M.9"
                                                        "M.11"
                                                                  "M.12"
                         "M.8"
                                              "M.10"
[15] "M.13"
               "M.14"
                         "M.15"
                                   "M.16"
                                              "M.17"
                                                        "M.18"
                                                                  "M.19"
               "M.21"
                                   "M.23"
                                                        "M.25"
[22] "M.20"
                         "M.22"
                                              "M.24"
                                                                  "M.26"
[29] "M.27"
               "M.28"
                         "M.29"
```

```
P. chola P. conchonious P. sophore P. ticto S. sarana 0.17 0.11 0.09 0.29 0.34
```

Pr
babilidad de clasificar indv. de los cinco grupos: P. chola P. conchonious P. sophore P. ticto
 S. sarana 0.17 0.11 0.08 0.28 0.34

```
# Insumos del AD
# summary(dis)
```

A continuación se presentan los promedios de cada especie por cada variable morfométrica seleccionada para el análisis.

```
#Grupos de medias para las 4 variables
round(dis$means,2)
```

```
M.1 M.2 M.3 M.4 M.5 M.6 M.7 M.13 M.15 M.18
P. chola 0.38 0.87 0.27 0.30 0.11 0.12 0.69 0.59 0.35 0.35
P. conchonious 0.32 0.76 0.25 0.25 0.11 0.13 0.66 0.52 0.34 0.33
P. sophore 0.36 0.85 0.26 0.29 0.11 0.13 0.68 0.56 0.29 0.31
P. ticto 0.37 0.90 0.26 0.28 0.13 0.15 0.70 0.45 0.39 0.40
S. sarana 0.48 0.76 0.28 0.31 0.13 0.16 0.88 0.62 0.28 0.18
```

Los autovalores son los que permiten definir las coordenadas de las variables para cada función canónica (eje o dimensión del lda), para la grafica del discriminante, se utilizarán las funciones LD1 y LD2, como ejes x y y respectivamente (ver Figura 3.55).

```
# Autovalores estandarizados (pesos de las variables en cada eje)
round((Cs <- dis$scaling),2)</pre>
```

```
LD1 LD2 LD3 LD4
M.1 39.34 -16.59 26.35 21.80
M.2 -13.21 7.17 12.49 -11.29
```

[&]quot;Prior probabilities of groups" corresponde a la probabilidad de clasificación para cada grupo que dependerá del número de peces que lo conforman, aqueyas especies con mayor número de individuos censados, presentarán mayor probabilidad de discriminación.

```
М.З
      -6.94 - 6.34
                    13.47
                            -0.45
M.4
      18.73
             51.95
                     25.65
                            -9.48
M.5
     -17.12 -13.39 -35.00
                            44.46
M.6
     -13.94 -45.46
                    -9.77 -52.02
       6.98
M.7
             -9.75
                     -4.18
                            -5.66
M.13
      10.55
                     -5.03
             12.26
                             5.43
M.15
      -9.08
             -8.91
                      9.32
                            21.28
M.18
      -3.50
             -4.82
                      2.14
                             4.19
```

En el siguiente insumo se relacionan las coordenadas de las 6 primeras observaciones, las cuales también serán graficadas en la Figura 3.55.

```
# Coordenadas de las seis primeras observaciones en cada eje canónico
round(head(Fp <- predict(dis)$x),2)</pre>
```

```
LD1 LD2 LD3 LD4
1 -1.19 3.63 0.21 -0.41
2 -0.69 1.72 0.03 0.62
3 -2.64 3.04 1.36 3.00
4 -2.09 1.18 0.97 0.42
5 -1.45 2.47 1.56 -0.07
6 -1.31 2.95 2.77 -0.86
```

La siguiente tabla es conocida como **tabla de contingencia** la cual realiza una validación cruzada entre las especies (filas) y los grupos discriminados por el lda (columnas). De acuerdo a esta tabla solo *P. sophore* no discrimina a todos sus individuos en su grupo, debido a que hay dos peces que presentan una morfometría más similar a *P. chola*.

```
# Evaluación de desempeño del AD (método 1)
attach(peces)
group<-predict(dis,method="plug-in")$class
(tabla<-table(Especie,group))</pre>
```

group

Especie	P. chola	a P. conchonious	P. sophore	P. ticto	S. sarana
P. chola	12	2 0	0	0	0
P. conchonious	0) 8	0	0	0
P. sophore	2	2 0	4	0	0
P. ticto	0	0	0	20	0
S. sarana	0	0	0	0	24

La siguiente tabla realiza una validación en términos porcentuales, definiendo que en el caso de *P. sophore* el 64% de sus individuos discriminan correctamente en su especie. El resto de especies presentan una discriminación completa en su grupo.

```
# Porcentaje de clasificación correcta
round(diag(prop.table(tabla, 1)),2)*100
```

```
P. chola P. conchonious P. sophore P. ticto S. sarana 100 100 67 100 100
```

La siguiente validación realizada por el método de Jacknife, presenta menos resolución de discriminación que la anterior, por lo cual no será tenida en cuenta en este ejercicio.

clases.jac

Especie	Ρ.	chola P.	conchonious	Ρ.	sophore H	P. ticto	S. sarana
P. chola		10	0		2	0	0
P. conchonious		0	7		0	1	0
P. sophore		4	0		2	0	0
P. ticto		0	0		0	20	0
S. sarana		0	0		0	0	24

```
# Validación cruzada
round(diag(prop.table(tabla.jac, 1)),2)*100
```

```
P. chola P. conchonious P. sophore P. ticto S. sarana 83 88 33 100 100
```

Paso 3. Visualización grafica del LDA

3.1 Gráfico de elipses.

A continuación se realizará el componente grafico del lda, el cual inicia con una figura que definirá unas elipses, las cuales relacionan a los individuos de cada especie y cuyo solapamiento definirá el nivel de relación entre estas.

```
# Escores o coordenadas de las observaciones en cada eje can?nico
Fp <- predict(dis)$x

# Grupos asignados por el AD
group<-predict(dis,method="plug-in")$class

# Coordenadas y grupos asignados
peces.coord=data.frame(Especie=group,Fp)</pre>
```

La Figura 3.55 demuestra que si bien de presenta una buena discriminación de las especies de peces, 4 de las 5 evaluadas presentan cierta relación, definida por el solapamiento de sus elipses.

Análisis discriminante

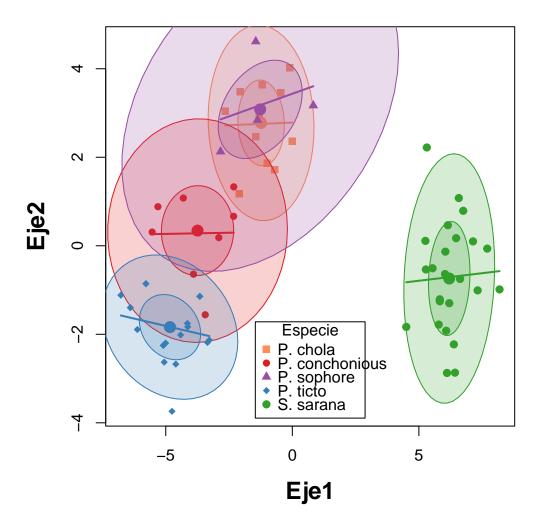


Figura 3.55: Mapa de calor que relaciona a las variables morfométricas y a las especies de peces.

3.2 Gráfico del discriminante canónico - cda

El siguiente análisis permite visualizar la influencia de cada variable morfométrica en la separación de los grupos de especies y selecciona a las variables que presentan más influencia en la discriminación de los peces.

```
attach(peces)
names(peces)
```

```
"M.2"
                                               "M.3"
                                                         "M.4"
                                                                    "M.5"
 [1] "Especie" "Grupo"
                          "M.1"
 [8] "M.6"
               "M.7"
                                    "M.9"
                                               "M.10"
                                                          "M.11"
                                                                    "M.12"
                          "M.8"
[15] "M.13"
               "M.14"
                                                         "M.18"
                                                                    "M.19"
                          "M.15"
                                    "M.16"
                                               "M.17"
[22] "M.20"
               "M.21"
                                    "M.23"
                                               "M.24"
                                                         "M.25"
                                                                    "M.26"
                          "M.22"
[29] "M.27"
               "M.28"
                          "M.29"
```

Lo primero que se realiza es el modelo lineal mod indicando las variables y los grupos a discriminar.

```
# Modelo Lineal multivariado con las variables morfom?tricas de peces
mod <- lm(cbind(M.1,M.2,M.3,M.4,M.5,M.6,M.7,M.13,M.15,M.18) ~ Especie,peces)
# Resumen del modelo multivariado
# summary(mod)</pre>
```

Posteriormente realiza el discriminante canónico can que permite realizar la discriminación de los grupos en los ejes canónicos.

```
# Análisis discriminante canónico - ADC
can <- candisc(mod, term="Especie",data=peces,ndim=1)</pre>
```

A continuación se presenta la Figura 3.56 que define a la discriminación de las especies con un solo eje canónico el cual explica el 81.8% de la variación de los datos. La orientación de los vectores (variables morfométricas), en relación a las cajas, indica su importancia para discriminar a cada especie o grupo en comparación.

```
x11()
plot(can,titles.1d = c("Puntuación canónica", "Estructura"))
```

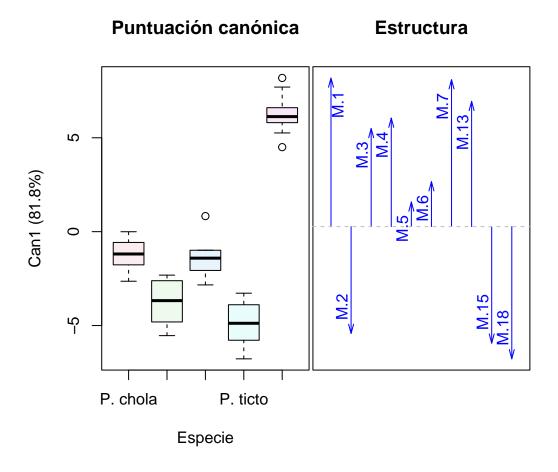


Figura 3.56: Mapa de calor que relaciona a las variables morfométricas y a las especies de peces.

En el siguiente enlace se puede obtener un caso aplicado con este tipo de análisis multivariados: Aguirre et al. (2015). Ver la figura 2 del manuscrito en mención.

Taller 10.1 Análisis de Varianza Multivariado - MANOVA

Objetivo de la actividad:

La base de datos que se utilizará es la de medidas morfométricas de peces de un estudio realizado con peces de la india por **Gupta et al. (2018)** Articulo fuente en los que se validó la taxonomía de peces de la subfamilia Barbinae, utilizando 19 variables morfométricas y 19 variables meristicas, correspondientes a 5 Especie de la familia en mención.

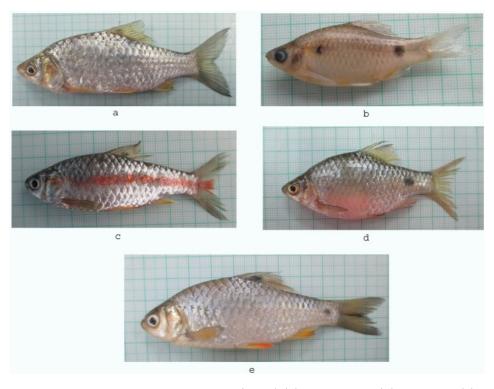


Figura 3.57: Imágen tomada de Gupta et al. (2018) (a) S . Sarana (b) P . ticto (c) P . sóforo , (d) P . conconio y (e) P . chola

El **objetivo** de este ejercicio consiste en comparar los promedios multivariados de las variables morfométricas que caracterizan a los peces de cada especie (grupos en comparación), para

conocer si los atributos morfométricos generan diferencias en cada grupo evaluado. La base de datos que se utilizará es **peces.csv**.

Referencias bibliográficas de apoyo.

Libro: Análisis de datos ecológicos y ambientales - Rodríguez-Barrios Javier 2023 Ver el capítulo de MANOVA, en donde se detallan los procedimientos descritos en el presente ejercicio.

MANOVA (Multivariate Analysis of Variance) Este documento presenta información relevante sobre la fundamentación de los MANOVAs y su análisis en R

How to perform the MANOVA test in R Este documento brinda información sobre los supuestos del MANOVA y la forma de realizar esta prueba multivariada en R.

Cargar las librerías requeridas

```
# Librerías requeridas
library(tidyverse)
library(ggplot2)
library(reshape2)
library(ggforce)

# Para el permutes en homogeneidad de covarianzas
library(mvnormtest) # Prueba de normalidad "mshapiro.test"
source("funciones.r") # Figuras de normalidad multivariada
library(ade4)
library(car) # Para ejecutar el diagnóstico de independencia
library(MASS)
```

Cargar o importar la base de datos

La presente base de datos se encuentra en formato plano de csv, presenta una columna Especie que agrupa a las 5 Especie de peces, otra columna Grupo, que asigna un número a cada especie y posteriormente a las 19 variables morfométricas y 10 variables meristicas, de las cuales se selecionarán las 19 morfométricas para este ejercicio M.1 a M.19.

```
# Base de datos
  peces<-read.csv2("peces.csv",row.names=1)</pre>
  names(peces)
[1] "Especie" "Grupo"
                          "M.1"
                                     "M.2"
                                                "M.3"
                                                           "M.4"
                                                                      "M.5"
                "M.7"
                                     "M.9"
                                                           "M.11"
[8] "M.6"
                          "M.8"
                                                "M.10"
                                                                      "M.12"
[15] "M.13"
                "M.14"
                                                           "M.18"
                          "M.15"
                                     "M.16"
                                                "M.17"
                                                                      "M.19"
                "M.21"
                                                           "M.25"
[22] "M.20"
                          "M.22"
                                     "M.23"
                                                "M.24"
                                                                      "M.26"
[29] "M.27"
                "M.28"
                          "M.29"
```

Exploración de los datos

Para este ejemplo se urtilizarán figuras que relacionan parejas de variables y figuras de cajas que permitan visualizar diferencias entre las Especie de peces de acuerdo a su morfometría. *Para facilidad del ejercicio se seleccionarán algunas variables morfométricas - peces1, debido a que son las que presentan mejores patrones lineales.

```
# Elipses con colores con variables morfométricas
peces1 <- peces[,c(3:9,15,17,20)]
M <- cor(peces1) # Matriz de Correlación (M)</pre>
```

La Figura 3.62 permite visualizar la resolución de cada variable para diferenciar o discriminar a las diferentes especies de peces. Esta figura sirve de insumo para descartar aquellas variables con poco potencial de discriminación de las especies.

```
# Figuras multivariadas de Cajas y bigotes
library(reshape)

x11()
ggplot(melt(peces[,c(1,3:9,15,17,20)]), aes(x=variable, y=value)) +
    geom_boxplot(aes(fill=Especie)) +
    scale_fill_manual(values = c('#fc8d59','#ffffbf','#99d594','#377eb8','#33a02c')) +
    labs(x="",y="Morfometría") +
    facet_wrap(~ variable,scales="free") +
    theme_bw()
```

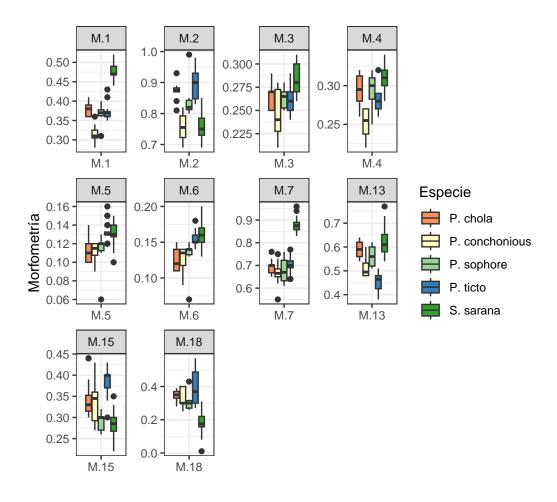


Figura 3.58: Variación en la morfometría de los peces, de acuerdo a cada una de las variables seleccionadas.

Cuatro pasos para la realización del MANOVA

Paso 1. Pruebas de supuestos

Para que el análisis de varianza multivariado - manova sea considerado como un modelo lineal, debe cumplir con los supuestos de normalidad multivariada, de homogeneidad de covarianzas y de independencia. Para el caso del presente ejercicio, los dos primeros supuestos no alcanzan a cumplirse con los diagnosticos utilizados (valor p < 0.05), motivo por el cual, el manova de este ejercicio será tomado como una técnica de exploración multivariada para evaluar las diferencias en las 5 especies, basado en las 10 variables morfomètricas seleccionadas. En el siguiente ejercicio se realizarán análisis de varianza no paramétricos pemanovas, que permiten

probar hipótesis sin el cumplimiento de la dos primeros supuestos, por lo cual serán los diseños multivariados más apropiados para esta base de datos.

1.1 Supuesto de normalidad

El supuesto de normalidad multivariada será evaluado con el paquete mvnormtest, el cual utiliza el estadistico de Shapiro Wilks Multivariado. Para ello se realizarà esta prueba en cada uno de los grupos o especies en comparación. NOTA: Este supuesto también será evaluado con los residuales del manova, posterior a su ejecución.

```
# Diagnóstico de normalidad por cada tipo de Especie library(mvnormtest)
```

Los siguientes generan los dataframes de cada especie con las 10 variables seleccionadas, convirtiendola ademàs en formato matricial.

```
# Dataframe por cada especie
# datos de P. chola.
P.chola <- peces %>%
             filter(Especie == "P. chola") %>%
             subset(select = c("M.1","M.2","M.3","M.4","M.5","M.6","M.7","M.13","M.15","M.
# datos de P. conchonious.
P.concho <- peces %>%
             filter(Especie == "P. conchonious") %>%
             subset(select = c("M.1", "M.2", "M.3", "M.4", "M.5", "M.6", "M.7", "M.13", "M.15", "M.
# datos de P. sophore.
P.sophore <- peces %>%
             filter(Especie == "P. sophore") %>%
             subset(select = c("M.1", "M.2", "M.3", "M.4", "M.5", "M.6", "M.7", "M.13", "M.15", "M.
# datos de P. ticto.
P.ticto <- peces %>%
             filter(Especie == "P. ticto") %>%
             subset(select = c("M.1", "M.2", "M.3", "M.4", "M.5", "M.6", "M.7", "M.13", "M.15", "M.
# datos de P. ticto.
S.sarana <- peces %>%
             filter(Especie == "S. sarana") %>%
```

```
subset(select = c("M.1", "M.2", "M.3", "M.4", "M.5", "M.6", "M.7", "M.13", "M.15", "M.
```

Vale la pena resaltar que los datos de las especies P. chola y P. sophore, son singulares, por lo cual no puede calcularse su supuesto de normalidad multivariada. Con el objeto de continuar en el ejercicio, las matrices que representan a las especies en menciòn, seràn desactivadas con #.

A continuación se resume el resultado de los tres diagnósticos de normalidad multivariada realizados. Vale la pena mencionar que ninguna especie cumple con dicho supuesto estadóstico (valores p < 0.05), aunque existe la posibilidad de probar con alguna transformación.

1.2 Supuesto de homogeneidad de covarianzas

La prueba de homogeneidad de covarianza o **esfericidad**, corresponde al segundo supuesto del análisis discriminante lineal, se utilizará la función **betadisper**, la cual es complementada por dos análisis de varianza, los cuales definirán si el supuesto logra ser cumplido.

```
# Pruebas de Homogeneidad de covarianzas paquete "vegan"
library(vegan)

peces.d <- dist(peces[,c(3:9,15,17,20)])  # Matriz de distancias
peces.homoge <- betadisper(peces.d, peces$Especie)  # Permutest</pre>
```

Con la siguiente anova se obtiene un valor p de 0.016^* , lo cual indica que no se cumple el supuesto de homogeneidad de covarianzas (valor p < 0.05).

```
# 1) Prueba con anova permutacional
anova(peces.homoge)
```

Analysis of Variance Table

```
Response: Distances

Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)

Groups 4 0.019804 0.0049509 3.281 0.01638 *

Residuals 65 0.098082 0.0015090

---

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Con el permutest se obtiene un valor p de 0.015^* , lo cual indica que tampoco se cumple el supuesto de homogeneidad de covarianzas (valor p < 0.05).

```
# 2) Prueba permutacional
permutest(peces.homoge) # Se cumple el supuesto de homogeneidad
```

```
Permutation: free
Number of permutations: 999

Response: Distances

Df Sum Sq Mean Sq F N.Perm Pr(>F)

Groups 4 0.019804 0.0049509 3.281 999 0.023 *

Residuals 65 0.098082 0.0015090

---

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Permutation test for homogeneity of multivariate dispersions

Paso 2. Análisis de Varinaza Multivariado - MANOVA

El manova, por ser un modelo lineal especial, requiere que se indiquen las variables continuas (variables Xi) y la variable cualitativa o categórica (variable Yi), que para este caso es la Especie.

```
# Manova (variables efecto: 10 morfológicas y la respuesta: Especie)
attach(peces)
peces.manova<-manova(cbind(M.1,M.2,M.3,M.4,M.5,M.6,M.7,M.13,M.15,M.18)~Especie)</pre>
```

A continuación se presentará la tabla del manova para las tres primeras variables morfométricas. Para visualizar todos los resultados de este insumo, es necesario colocar solo: summary.aov(peces.manova). Para este caso se observa que todas las variables efecto o morfológicas, tienen un efecto muy significativo (valor p «0.01) en la diferenciaciación de los 5 grupos o especies de peces.

```
# respuesta de la variable M.1
  summary.aov(peces.manova)$" Response M.1"
                Sum Sq Mean Sq F value
                                           Pr(>F)
            4 0.221052 0.055263 127.36 < 2.2e-16 ***
Especie
           65 0.028205 0.000434
Residuals
               0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
  # respuesta de la variable M.2
  summary.aov(peces.manova)$" Response M.2"
           Df Sum Sq Mean Sq F value
                                          Pr(>F)
Especie
            4 0.28343 0.070857
                                 34.76 1.654e-15 ***
           65 0.13250 0.002038
Residuals
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
  # respuesta de la variable M.3
  summary.aov(peces.manova)$" Response M.3"
                Sum Sq
                          Mean Sq F value
                                            Pr(>F)
            4 0.010738 0.00268443 10.486 1.29e-06 ***
Especie
Residuals
           65 0.016641 0.00025601
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

A continuación se presentan los cuatro tipos de MANOVAS, con la diferencia de que Hotelling puede utilizarse sin el cumplimiento del supuesto de normalidad multivariada (pero deben

cumplirse los otros supuestos como el de la homogeneidad y el de la independencia). Para este caso los 4 estadísticos muestran altas diferencias entre algunos de los grupos representados por las cinco especies, posiblemente por el efecto de P. sarana, que al ser de un género diferente, presenta marcadas diferencias morfológicas (ver Figura 3.60).

```
# Tipos de MANOVA para evaluar si hay diferencias en los promedios de cada Especie
  summary(peces.manova,test="Pillai")
          Df Pillai approx F num Df den Df
                                              Pr(>F)
           4 2.513
                      9.9711
                                       236 < 2.2e-16 ***
Especie
                                 40
Residuals 65
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
  summary(peces.manova,test="Wilks")
                 Wilks approx F num Df den Df
Especie
           4 0.0028912
                         19.667
                                    40 214.2 < 2.2e-16 ***
Residuals 65
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
  summary(peces.manova,test="Hotelling")
          Df Hotelling-Lawley approx F num Df den Df
                       29.052
                                                 218 < 2.2e-16 ***
                                39.584
                                           40
Especie
Residuals 65
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
  summary(peces.manova,test="Roy")
                Roy approx F num Df den Df
                                              Pr(>F)
           4 23.757
                      140.17
                                 10
                                        59 < 2.2e-16 ***
Especie
Residuals 65
```

Signif. codes: 0 '*** 0.001 '** 0.01 '* 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Paso 3. Supuestos del MANOVA

SOn tres los supuestos que a continuación se probarán: (1) Normalidad en los residuales, (2) homogeneidad de las covarianzas y (3) Independiencia en los datos. Vale la pena resaltar la importancia del cumplimiento de la independiencia, debido a que presenta un efecto sobre diseños que requieran ser aleatorios. La homogeneidad fue diagnosticada al inicio de este ejercicio no se cumple.

3.1. Supuesto de normalidad de los residuales del MANOVA

A continuación se probará el supuesto de (1) normalidad en los residuales del manova, de forma numérica y gráfica. El estadístico de Shapiro Wilks Multivariado es el que se utiliza, demostrando que los residuales están muy alejados del patrón normal (valor p « 0.01 o p = 3.043e-07).

```
# 1) Prueba de multinormalidad de los residuales del manova (mshapiro.test)
library(mvnormtest)
x <- as.matrix(t(residuals(peces.manova)))
mshapiro.test(x)

Shapiro-Wilk normality test

data: Z
W = 0.83893, p-value = 3.043e-07

# No se cumple este supuesto</pre>
```

A continuación se hará uso del código fuente "funciones.r" el cual presenta los comandos requeridos para la figura que diagnostica la normalidad multivariada (Figura 3.63 qqplot).

```
# Figura de multinormalidad
# Funciones para la figura
source("funciones.r")
```

En la Figura 3.63 se observa que algunos residuales (puntos circulares) se alejan considerablemente del patrón de normalidad, definido por la recta roja.

```
# Grafica QQ-PLot para visualizar la normalidad
x <- as.matrix(residuals(peces.manova))
# centroide</pre>
```

Normalidad multivariada



Figura 3.59: Figura qqplot entre los residuales observados (Distancia Mahalanobish) y los cuantiles chi cuadrado (estimados).

3.2. Supuesto de independencia

Se utilizará el estadístico Durbin Watson (DW) el cual demuestra que se cumple la independencia (valor p > 0.05).

```
# Prueba de Independencia - Estadistico Durbin Watson
attach(peces)
modelo<-lm(M.1+M.2+M.3+M.4+M.5+M.6+M.7+M.13+M.15+M.18~Especie)
durbinWatsonTest(modelo)

lag Autocorrelation D-W Statistic p-value
    1     0.08444408     1.80425     0.2
Alternative hypothesis: rho != 0</pre>
```

Paso 4. Prueba a postriori del MANOVA

A continuación, se realizará una figura del análisis discriminante - lda, que permitirá generar definir al nivel de discriminación de cada grupo o especie de pez. Se presentan algunas opciones gráficas con el procedimiento general y con el análisis discriminate canónico (dca)

```
# Cálculo del LDA
  names (peces)
                                               "M.3"
                                                          "M.4"
                                                                    "M.5"
 [1] "Especie" "Grupo"
                          "M.1"
                                    "M.2"
               "M.7"
[8] "M.6"
                          "M.8"
                                    "M.9"
                                               "M.10"
                                                          "M.11"
                                                                    "M.12"
               "M.14"
[15] "M.13"
                                                          "M.18"
                                                                    "M.19"
                          "M.15"
                                    "M.16"
                                               "M.17"
[22] "M.20"
               "M.21"
                                    "M.23"
                                               "M.24"
                                                         "M.25"
                          "M.22"
                                                                    "M.26"
[29] "M.27"
               "M.28"
                          "M.29"
  dis<-lda (Especie ~ M.1+M.2+M.3+M.4+M.5+M.6+M.7+M.13+M.15+M.18,
           data = peces)
```

A continuación se realizará el componente grafico del lda, el cual inicia con una figura que definirá unas elipses, las cuales relacionan a los individuos de cada especie y cuyo solapamiento definirá el nivel de relación entre estas.

```
# Escores o coordenadas de las observaciones en cada eje can?nico
Fp <- predict(dis)$x</pre>
```

```
# Grupos asignados por el AD
group<-predict(dis,method="plug-in")$class
# Coordenadas y grupos asignados
peces.coord=data.frame(Especie=group,Fp)</pre>
```

La Figura 3.60 demuestra que si bien de presenta una buena discriminación de las especies de peces, 4 de las 5 evaluadas presentan cierta relación, definida por el solapamiento de sus elipses.

Análisis discriminante

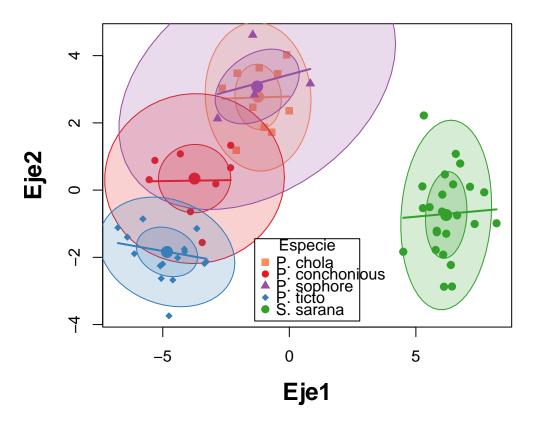


Figura 3.60: Mapa de calor que relaciona a las variables morfométricas y a las especies de peces.

Taller 11.1 Análisis de Varianza Multivariado No Paramétricos

Objetivo de la actividad:

La base de datos que se utilizará es la de medidas morfométricas de peces de un estudio realizado con peces de la india por **Gupta et al. (2018)** Articulo fuente en los que se validó la taxonomía de peces de la subfamilia Barbinae, utilizando 19 variables morfométricas y 19 variables meristicas, correspondientes a 5 Especie de la familia en mención.

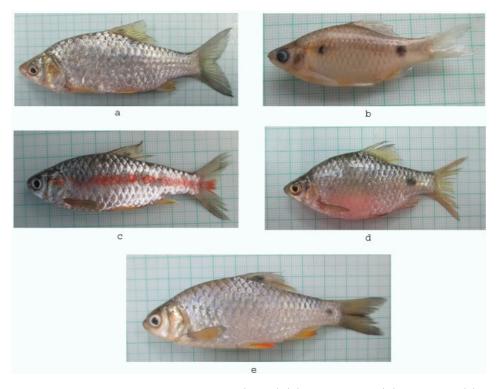


Figura 3.61: Imágen tomada de Gupta et al. (2018) (a) S . Sarana (b) P . ticto (c) P . sóforo , (d) P . conconio y (e) P . chola

El **objetivo** de este ejercicio consiste evaluar la variación morfométrica que se presenta en los peces de cada especie (grupos en comparación), para conocer si los atributos morfométricos

generan diferencias en cada grupo evaluado, basado en pruebas de varianza no paramétricos. La base de datos que se utilizará es **peces.csv**.

Referencias bibliográficas de apoyo.

Libro: Análisis de datos ecológicos y ambientales - Rodríguez-Barrios Javier 2023 Ver el capítulo de MANOVA, en donde se detallan los procedimientos descritos en el presente ejercicio.

Perifiton de un río de Montaña - Osorio et al. 2014 Valoración del proceso sucesional de microalgas perifíticas el tramo medio del río Gaira - Santa Marta.

Invertebrados de un río de Montaña - Rodríguez-Barrios et al. 2011 Estudio de diferentes atributos comunitarios en invertebados acuáticos del río Gaira - Santa Marta.

Descomposición de Hojarásca en Ríos - Eyes et al. 2011 Trabajo realizado en el bosque de ribera del río Gaira - Santa Marta.

Nutrientes de la hojarásca - Fuentes y Rodríguez. 2011 Otro trabajo realizado en el bosque de ribera del río Gaira - Santa Marta.

Cargar las librerías requeridas

```
# Librerías requeridas
library(tidyverse)

library(vegan)  # Para el permutes en homogeneidad de covarianzas
library(ade4)
library(car)  # Para ejecutar el diagnóstico de independencia
library(MASS)
```

Cargar o importar la base de datos

La presente base de datos se encuentra en formato plano de csv, presenta una columna Especie que agrupa a las 5 Especie de peces, otra columna Grupo, que asigna un número a cada especie y posteriormente a las 19 variables morfométricas y 10 variables meristicas, de las cuales se selecionarán las 10 morfométricas para este ejercicio M.1 a M.7, M.13 a M.15 y M.18.

```
# Base de datos
  peces<-read.csv2("peces.csv",row.names=1)</pre>
  names(peces)
 [1] "Especie" "Grupo"
                          "M.1"
                                     "M.2"
                                                "M.3"
                                                          "M.4"
                                                                     "M.5"
                "M.7"
                                     "M.9"
                                                "M.10"
                                                          "M.11"
 [8] "M.6"
                          "M.8"
                                                                     "M.12"
[15] "M.13"
               "M.14"
                                                "M.17"
                                                          "M.18"
                          "M.15"
                                     "M.16"
                                                                     "M.19"
               "M.21"
                                                          "M.25"
[22] "M.20"
                          "M.22"
                                     "M.23"
                                                "M.24"
                                                                     "M.26"
[29] "M.27"
               "M.28"
                          "M.29"
```

Exploración de los datos

Figura de cajas por cada variable morfométrica

La Figura 3.62 permite visualizar la resolución de cada variable para diferenciar o discriminar a las diferentes especies de peces. Esta figura sirve de insumo para descartar aquellas variables con poco potencial de discriminación de las especies.

```
# Figuras multivariadas de Cajas y bigotes
library(reshape)

x11()
ggplot(melt(peces[,c(1,3:9,15,17,20)]), aes(x=variable, y=value)) +
    geom_boxplot(aes(fill=Especie)) +
    scale_fill_manual(values = c('#fc8d59','#ffffbf','#99d594','#377eb8','#33a02c')) +
    labs(x="",y="Morfometría") +
    facet_wrap(~ variable,scales="free") +
    theme_bw()
```

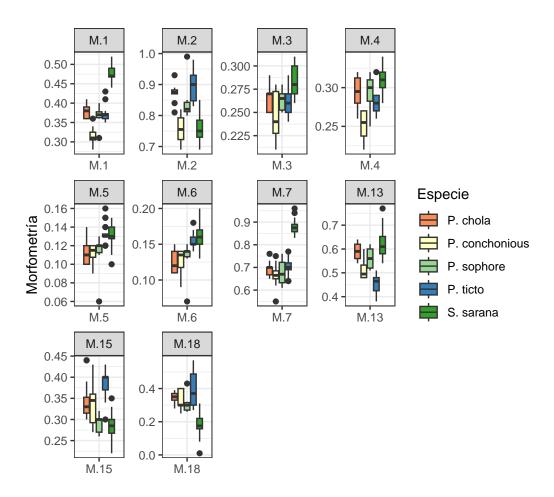


Figura 3.62: Variación en la morfometría de los peces, de acuerdo a cada una de las variables seleccionadas.

Figura del Ida para comparar a las especies de peces

A continuación, se realizará una figura del análisis discriminante - *lda*, que permitirá generar definir al nivel de discriminación de cada grupo o especie de pez. Se presentan algunas opciones gráficas con el procedimiento general y con el análisis discriminate canónico (dca)

```
# Cálculo del LDA
names(peces)

[1] "Especie" "Grupo" "M.1" "M.2" "M.3" "M.4" "M.5"
[8] "M.6" "M.7" "M.8" "M.9" "M.10" "M.11" "M.12"
```

```
[15] "M.13"
               "M.14"
                          "M.15"
                                    "M.16"
                                              "M.17"
                                                         "M.18"
                                                                   "M.19"
[22] "M.20"
               "M.21"
                         "M.22"
                                    "M.23"
                                              "M.24"
                                                         "M.25"
                                                                   "M.26"
[29] "M.27"
               "M.28"
                         "M.29"
  dis<-lda (Especie ~ M.1+M.2+M.3+M.4+M.5+M.6+M.7+M.13+M.15+M.18,
           data = peces)
```

A continuación se realizará el componente grafico del lda, el cual inicia con una figura que definirá unas elipses, las cuales relacionan a los individuos de cada especie y cuyo solapamiento definirá el nivel de relación entre estas.

```
# Escores o coordenadas de las observaciones en cada eje can?nico
Fp <- predict(dis)$x

# Grupos asignados por el AD
group<-predict(dis,method="plug-in")$class

# Coordenadas y grupos asignados
peces.coord=data.frame(Especie=group,Fp)</pre>
```

La Figura 3.63 demuestra que si bien de presenta una buena discriminación de las especies de peces, 4 de las 5 evaluadas presentan cierta relación, definida por el solapamiento de sus elipses.

Análisis discriminante

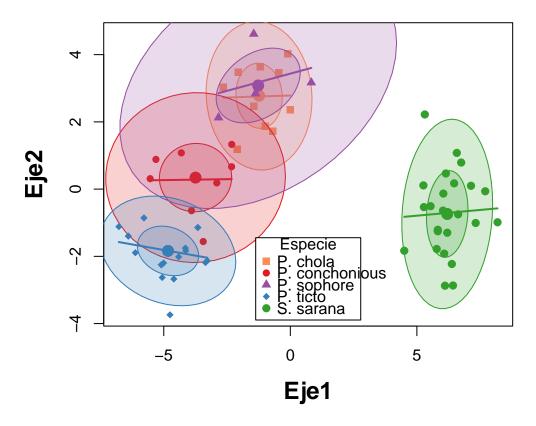


Figura 3.63: Mapa de calor que relaciona a las variables morfométricas y a las especies de peces.

Permanova 1. Análisis de similitudes multivariadas - ANOSIM

Paso 1. Distancia entre las observaciones

Se utilizará la distancia euclídea, debido a las relaciones lineales que existen entre las variables morfométricas.

```
# Distancia Euclídea con las 10 variables seleccionadas
peces.dist<-dist(peces[,c(3:9,15,17,20)],"euclid")
# round(peces.dist, 2)</pre>
```

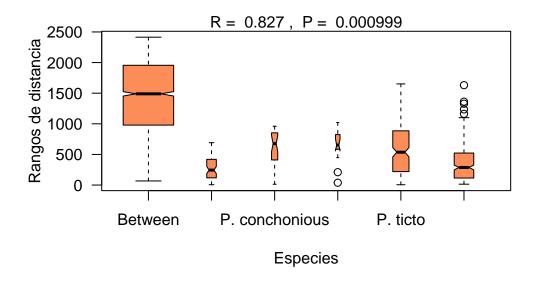
Paso 2. Prueba de hipótesis multivariada con el ANOSIM

- ANOSIM statistic = representa al estadístico de Clarc (R). Como R > 0 (= 0.82) indica que hay fuertes diferencias entre las especies de peces, basado en su morfometría.
- Significance: 0.0009, indica que las diferencias entre los grupos son altamente significativas (significancia de la permutación).
- Disimilarity ranks: Rangos de similitud entre y dentro de los grupos de Especies a diferentes percentiles (ver la siguiente figura que se muestra a continuación). De esta manera se reportan los resultados del estadístico MRPP: (R= 0.83, n= 70, p = 0.00099).

```
# ANOSIM
  peces.anosim <- anosim(peces.dist, peces$Especie, permutations=1000)</pre>
  summary(peces.anosim)
Call:
anosim(x = peces.dist, grouping = peces$Especie, permutations = 1000)
Dissimilarity: euclidean
ANOSIM statistic R: 0.8266
      Significance: 0.000999
Permutation: free
Number of permutations: 1000
Upper quantiles of permutations (null model):
   90%
          95% 97.5%
                        99%
0.0414 0.0566 0.0699 0.0855
Dissimilarity ranks between and within classes:
               0%
                             50%
                                     75%
                                           100%
                     25%
                                                   N
               67 979.50 1489.50 1955.25 2414.5 1840
Between
P. chola
                5 119.25 244.25 415.00 691.5
                                                  66
P. conchonious 13 410.50 675.75 847.50 960.0
                                                  28
P. sophore
               38 585.75 654.00 824.25 1022.0
                                                  15
P. ticto
                5 219.50 536.25 885.50 1651.5
                                                 190
S. sarana
               14 114.75 287.00 522.50 1631.0
```

La figura es una gráfica de cajas y bigotes con muescas que visualiza la comparación de medianas generadas por las 1000 permutaciones, para comparar a las cinco especies de peces,

entre y dentro de los grupos formados priori. De acuerdo con esta figura, todos los grupos son diferentes entre sí (sus cinturas o muescas no se solapan horizontalmente con la de la primera caja).



Permanova 2. Permutación multirespuesta - MRPP

Paso 1. Distancia entre las observaciones

Se utilizará la distancia euclídea calculada para el anterior ANOSIM.

```
# Distancia Euclídea con las 10 variables seleccionadas
peces.dist<-dist(peces[,c(3:9,15,17,20)],"euclid")
# round(peces.dist, 2)</pre>
```

Paso 2. Prueba de hipótesis multivariada con el MRPP

- Class means and counts: Corresponde al estadístico delta del MRPP (), evaluados para cada grupo o especie de pez, que muestra un nivel bajo de correlación intragrupo (Pearson tipo III de 0.16).
- Delta observado (0.16) < delta esperado por permutación (0.28), con lo que la diferenciación entre las cinco especies de peces es altamente significativo (p-valor: 0.0009). En este sentido se determina que las especies son diferentes en su morfología. De esta manera se reportan los resultados del estadístico MRPP: (MRPP= 0.16, n= 70, p = 0.00099).

```
# Prueba de hipótesis de diferencias en los grupos de Especies, mediante el MRPP
peces.mrpp <- mrpp(peces.dist, peces$Especie, permutations=1000)
peces.mrpp</pre>
```

```
Call:
mrpp(dat = peces.dist, grouping = peces$Especie, permutations = 1000)
Dissimilarity index: euclidean
```

Class means and counts:

Weights for groups: n

```
P. chola P. conchonious P. sophore P. ticto S. sarana delta 0.1224 0.1809 0.1898 0.176 0.142 n 12 8 6 20 24
```

Chance corrected within-group agreement A: 0.4339
Based on observed delta 0.1569 and expected delta 0.2772

Significance of delta: 0.000999

Permutation: free

Number of permutations: 1000

Permanova 3. PERMANOVA de un factor (Especies de peces)

Este es el análisis más similar al MANOVA o análisis de varianza multivariado, pero la construcción de la tabla del MANOVA la hace mediante permutaciones, comparando a la

matriz de distancias de los datos observados con otra matriz de distancia estimada por permutaciones.

Paso 1. Distancia entre las observaciones

Se utilizará la distancia euclídea calculada para el anterior ANOSIM y el MRPP, pero transformando las variables con logaritmo base 10, para mejorar su linealización de los datos.

```
# Distancia Euclídea con las 10 variables seleccionadas
peces.dist1 <-dist (log10(peces[,c(3:9,15,17,20)+1]),"euclid")
# round(peces.dist, 2)</pre>
```

Paso 2. Prueba de hipótesis multivariada con el PERMANOVA

Similar a las pruebas anteriores, este PERMANOVA permite probar que existen diferencias marcadas en la morfometría de los individuos que se agrupan en las cinco especies de peces (valor p < 0.05). De esta manera se reportan los resultados del estadístico MRPP: (Seudo F= 12.5, g.l= 4 v 65, p = 0.00099^{***}).

```
# PERMANOVA
  library(vegan)
  peces.dist1 <-dist (log10(peces[,c(3:9,15,17,20)+1]),"euclid")
  peces.permanova <- adonis2(peces.dist1 ~ peces$Especie, perm=1000)</pre>
  peces.permanova
Permutation test for adonis under reduced model
Terms added sequentially (first to last)
Permutation: free
Number of permutations: 1000
adonis2(formula = peces.dist1 ~ peces$Especie, permutations = 1000)
              Df SumOfSqs
                               R2
                                       F
                                           Pr(>F)
peces$Especie 4
                   1.3784 0.43566 12.545 0.000999 ***
Residual
              65
                   1.7855 0.56434
              69 3.1639 1.00000
Total
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Paso 3. Efecto de las variables morfométricas en la diferenciación de los grupos

Los resultados de este análisis, permiten definir, que con excepción de las variables M.13 y M.18, todas presentan un efecto significativo en la diferenciación de las especies de peces.

```
attach(peces)
  peces.permanova1<-adonis(peces.dist1 ~ M.1+M.2+M.3+M.4+M.5+M.6+M.7+M.13+M.15+M.18,
                           perm=1000)
  peces.permanova1$"aov.tab"
Permutation: free
Number of permutations: 1000
Terms added sequentially (first to last)
          Df SumsOfSqs MeanSqs F.Model
                                            R2
                                                 Pr(>F)
M.1
           1
                0.5285 0.52852 28.666 0.16705 0.000999 ***
M.2
                0.1529 0.15286 8.290 0.04831 0.000999 ***
           1
M.3
                0.0563 0.05634
                                 3.056 0.01781 0.020979 *
           1
M.4
           1
                0.2165 0.21651 11.743 0.06843 0.000999 ***
M.5
           1
               0.7716 0.77162 41.851 0.24388 0.000999 ***
M.6
           1
                0.0830 0.08303 4.503 0.02624 0.004995 **
M.7
           1
                0.0644 0.06441
                                 3.493 0.02036 0.021978 *
M.13
           1
                0.0478 0.04776
                                 2.590 0.01510 0.051948 .
M.15
           1
                0.1114 0.11142
                                 6.043 0.03521 0.000999 ***
M.18
           1
                0.0437 0.04366
                                 2.368 0.01380 0.067932 .
Residuals 59
                1.0878 0.01844
                                       0.34382
Total
          69
                3.1639
                                       1.00000
___
```

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Referencias

Pendiente de documentar.