Talleres de Análisis Multivariados en R

Maestría en Ecología y Biodiversidad

Javier Rodríguez-Barrios

Invalid Date

Tabla de contenidos

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

```
# 2) Asignaciín de valores a objetos o a variables
sitios <- 2         # Número de sitios = 2
sitios = 2          # Otra forma
n.sitios <- "dos"   # Número de sitios como un caracter
dos.sitios <- TRUE  # Objeto lógico
```

Algebra

```r
# Vectores
sitios <- c(2, 3, 2, 3)   # Vector sitios
sitios                    # Imprimir el vector

sitios <- c("dos", "tres", "dos", "dos")    # Vector como caracter
sitios

abundancia <- c(TRUE, FALSE, TRUE, TRUE)    # vector con elementos lógicos
abundancia
```

```r
# Vectores (continuación)
sitios <- c(2, 3, 2, 3)   # Vector sitios
names(sitios) <- c("dos", "tres", "dos", "dos")   # Nombres de los elementos

sitios <- c(dos= 2, tres= 3, dos= 2, dos= 2)      # Otra forma
sitios
```

```r
# 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
```

```r
# Matrices
Matriz <- matrix(c(1:15),5,3, byrow= FALSE)   # 5,3: Número de filas y columnas
Matriz
```

```r
# Matrices (continuación)
t(Matriz)         # Transpuesta de la 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(
  "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

datos      # 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

```
# Base de datos (datos)
datos = data.frame (meses = c("enero", "junio", "octubre"),
                    periodos = c("sequía", "lluvias1", "lluvias2"),
                    taxón1 = c(2, 1, 3),
                    taxón2 = c(20, 25, 30),
                    taxón3 = c(4, 4, 4))

datos  # Ejecutar la asignación (datos)
```

Exportación

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

write.csv2(datos, "datos1.csv")   # paquete "utils"

write_csv2(datos, "datos1.csv")   # paquete "readxl"
```

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

Importación

```r
# 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"
```

Importación desde internet

```r
# 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")
```

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"
```

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

```
# Base de datos para 4 estudiantes (con 4 replicas)
# a los que se les midieron dos variables en cuatro ocasiones.
datos <- data.frame(n= 1:16,
                    Estudiante= c("a","a","a","a","b","b","b","b",
                                  "c","c","c","c", "d","d","d","d"),
                    Sexo= c("f","f","f","f","f","f","f","f",
```

```
                          "m","m","m","m","m","m","m","m"),
                Variable1= c(1.2,3.4,4.5,5.6,1.2,3.4,4.5,5.6,
                             0.8,2.4,1.8,1.5,1.6,2.1,1.2,0.8),
                Variable2= c(2.4,6.8,9.0,11.2,2.4,6.8,9.0,11.2,
                             1.6,4.8,3.6,3.0,3.2,4.2,2.4,1.6))
datos
```

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

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

- 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

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)'
```

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

1.2 Determinantes

```r
# 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}

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

1.3 Matriz inversa

```r
# 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)

```
A <- data.frame(Var1= c(1.2,3.4,4.5,5.6,1.2,3.4,4.5,5.6,
                        0.8,2.4,1.8,1.5,1.6,2.1,1.2,0.8),
                Var2= c(2.4,6.8,9.0,11.2,2.4,6.8,9.0,11.2,
                        1.6,4.8,3.6,3.0,3.2,4.2,2.4,1.6),
                Var3= c(4.4,10.8,19.0,21.2,12.4,16.8,19.0,21.2,
                        11.6,14.8,13.6,13.0,13.2,14.2,12.4,11.6))
A

v.m <- colMeans(A)    # Vector de medias
v.m

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

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)
```

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)
```

```r
round(m.r, 2)

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

6. figura (paquete - stats)

```r
x11()
plot(m.r[,1:2],
     xlab="PC1", ylab="PC2")

text(m.r,               # Rótulos de los datos (filas)
     labels = row.names(A),
     pos=3, cex=0.7)
```

7. figura

```r
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)
```

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

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

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
```

```r
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

```r
#------------
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

```r
# 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)
```

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

```r
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)
```

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)
```

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)
```

6. figura (paquete - stats)

```
x11()
plot(m.r[,1:2],
     xlab="PC1", ylab="PC2")

text(m.r,               # Rótulos de los datos (caimanes)
     labels = row.names(datos),
     pos=3, cex=0.7)

abline(v=0, lty=2,col= "blue")
abline(h=0, lty=2,col= "blue")
```

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)
```

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
```

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
library(reshape)      # Figuras de cajas con múltiples variables
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
```

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

1. Figuras de elipses

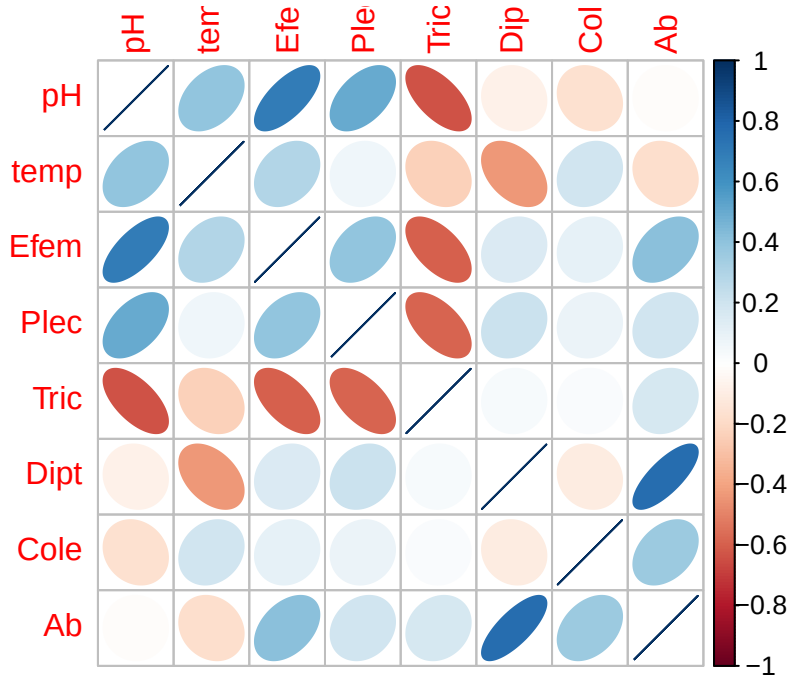
El Paquete **corrplot** es el que permite realizar las opciones gráficas de elipses a color, ingresar a este enlace:

corrplot

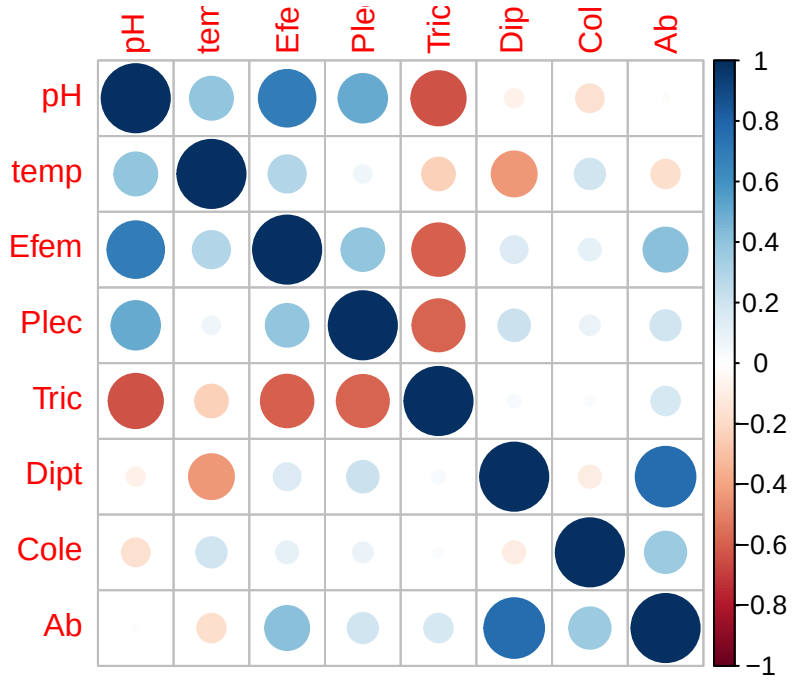
Otro enlace a **corrplot**:

corrplot

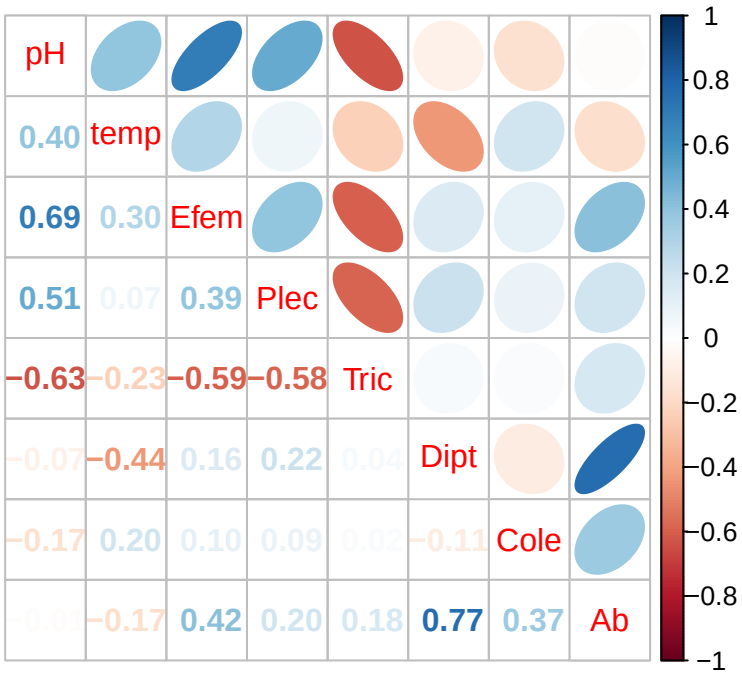
```
#---
# 1. Elipses
library(corrplot)

# 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
```



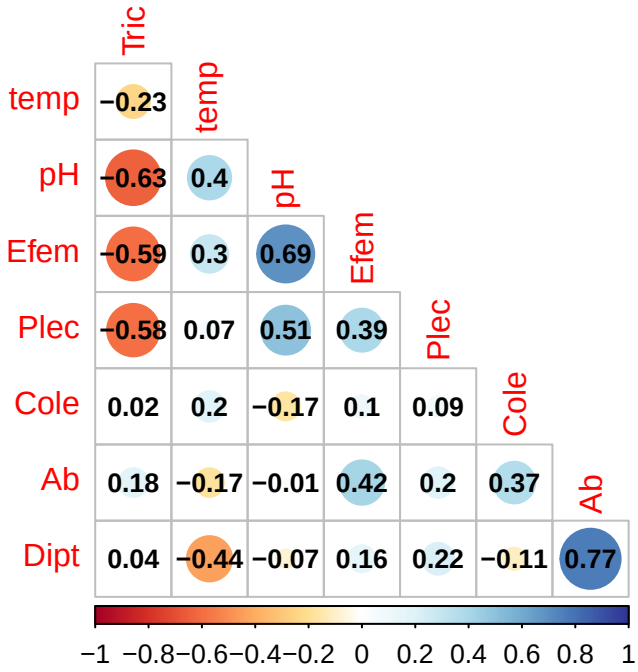

```
# Elipses con colores
X11()
corrplot(M, method = "circle")    # Figura de correlaciones con circulos
```




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




```
# Figura de elipses con coeficientes de correlación
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
```



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

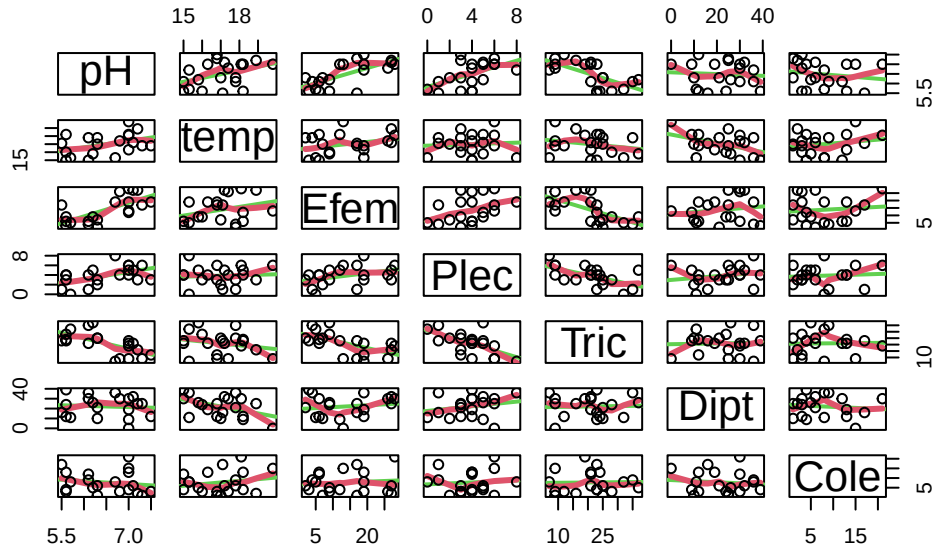
El Paquete **pairs** es el que permite realizar las opciones gráficas de dispersión por parejas de variables, ingresar a este enlace:

pairs

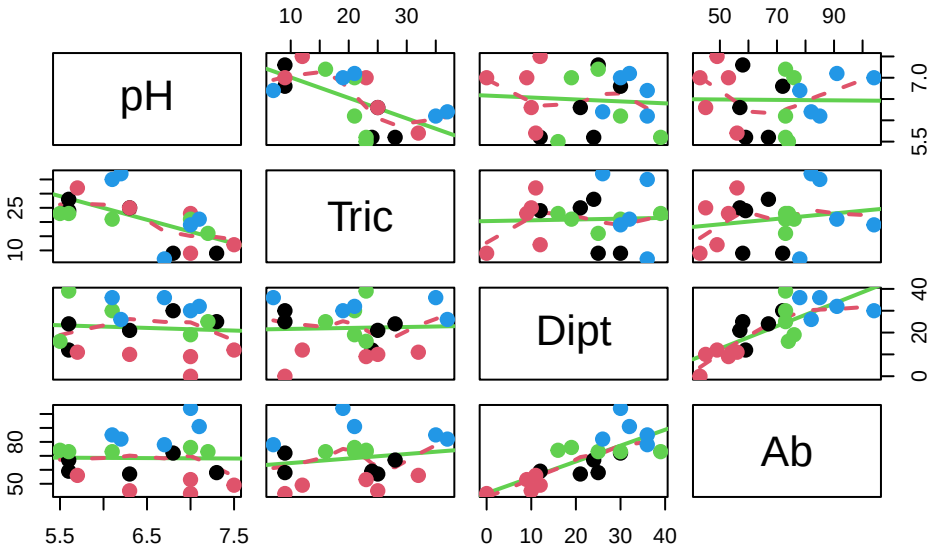
Otro enlace a **pairs**:

pairs

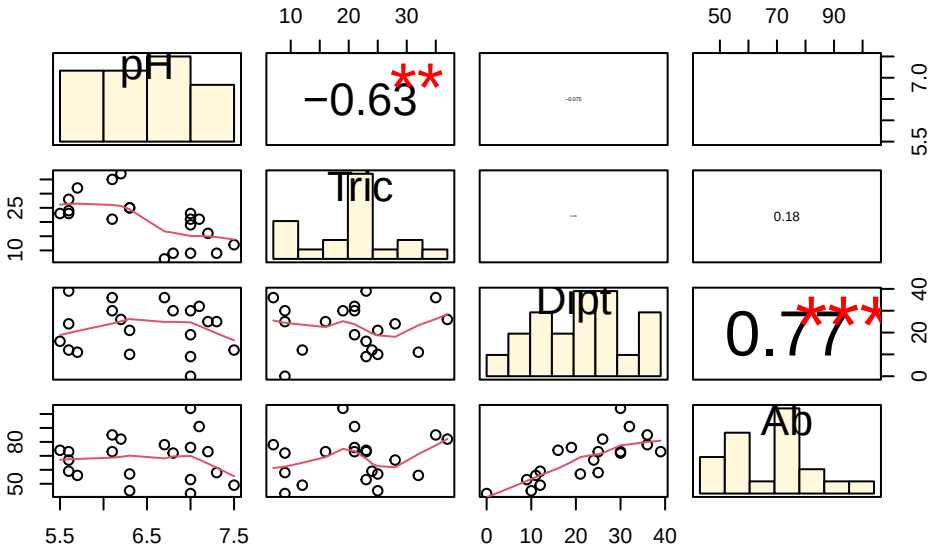
```
# Figuras de pares
x11()
pairs ((datos[,c(3:9)]),panel=function(x,y)
{abline(lsfit(x,y)$coef,lwd=2,col=3)    # lwd = Ancho de la línea
  lines(lowess(x,y),lty=1,lwd=3,col=2)    # col= Color de la línea
  points(x,y,cex=1)})
```



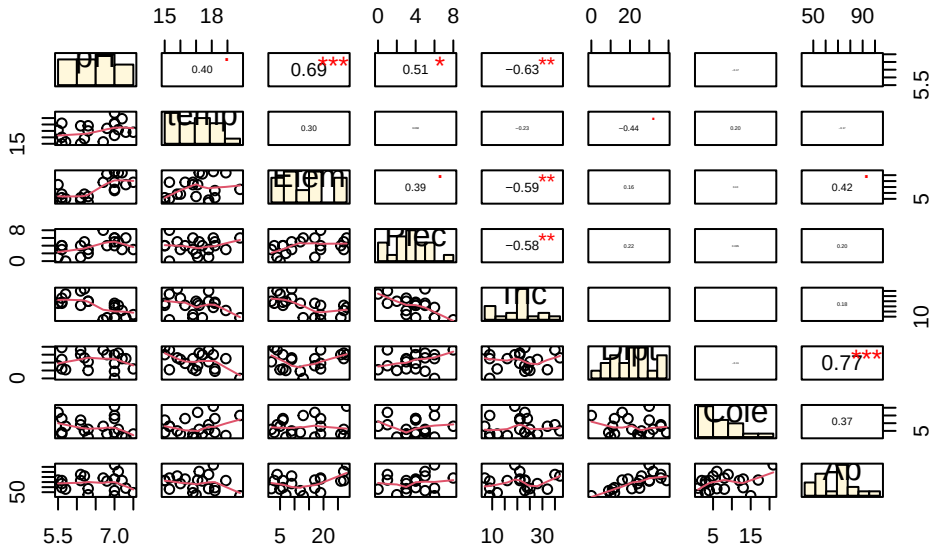

```
# Incluir el factor (cuenca)
# **requiere a cuenca como factor
datos$cuenca =as.factor(datos$cuenca)
pairs ((datos[,c(3,7,8,10)]),panel=function(x,y)
{abline(lsfit(x,y)$coef,lwd=2,col=3)
  lines(lowess(x,y),lty=2,lwd=2,col=2)
  points(x,y,col=datos$cuenca, cex=1.4,pch=19)})
```




```
# Correlaciones de Pearson
library(SciViews)
x11()
pairs(datos[,c(3,7,8,10)], diag.panel = panel.hist,
      upper.panel = panel.cor, lower.panel = panel.smooth)
```

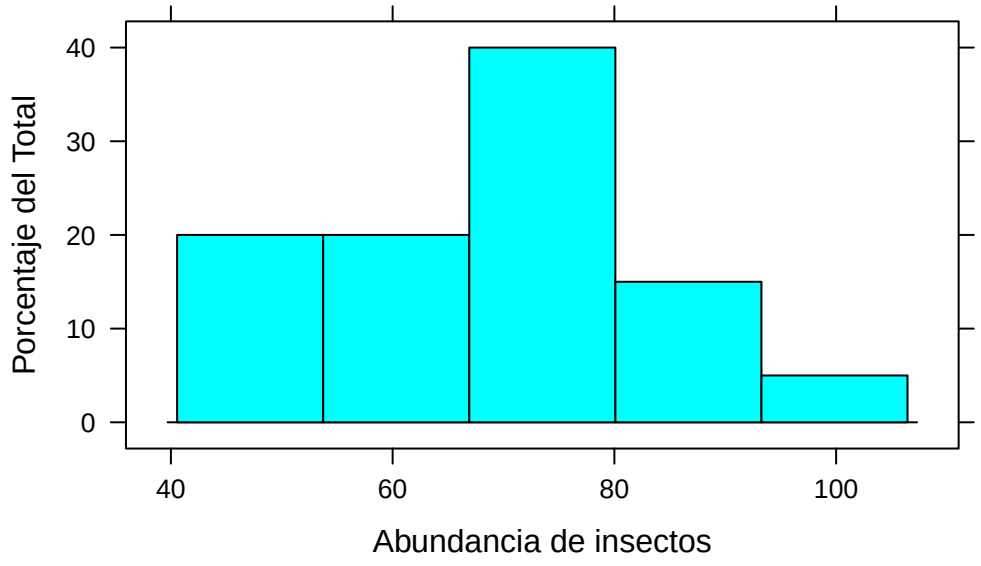



```
# Incluir histogramas
pairs(datos[, 3:10], diag.panel = panel.hist,
      upper.panel = panel.cor, lower.panel = panel.smooth)
```

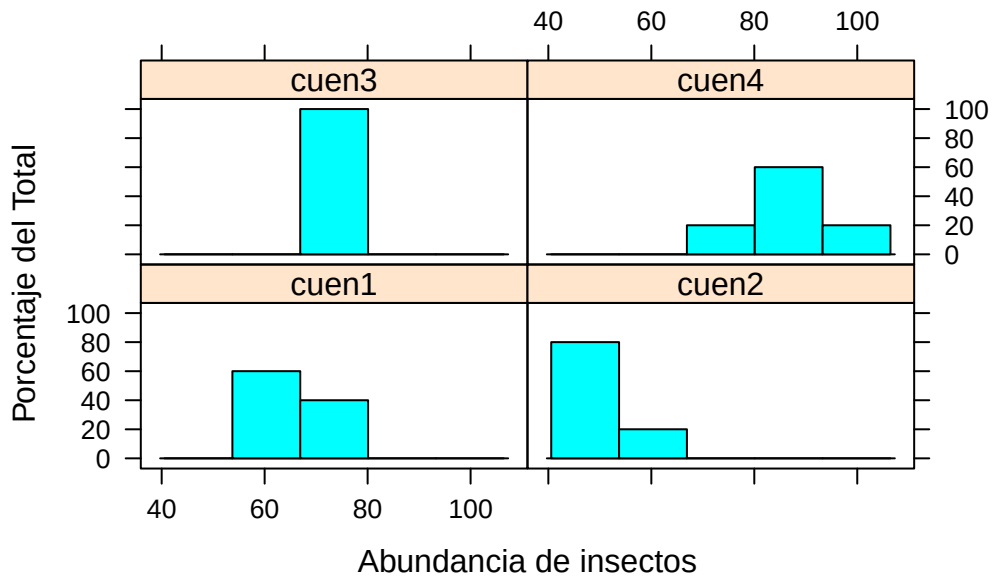


3. Histogramas

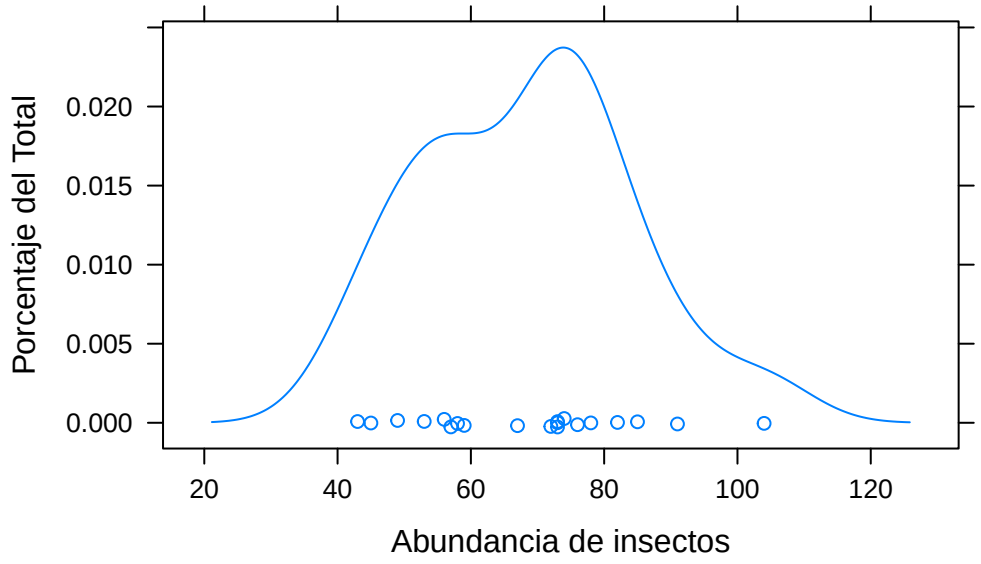
```
# Frecuencias de abundancias
histogram (~Ab,data=datos, ylab="Porcentaje del Total",
           xlab="Abundancia de insectos")
```



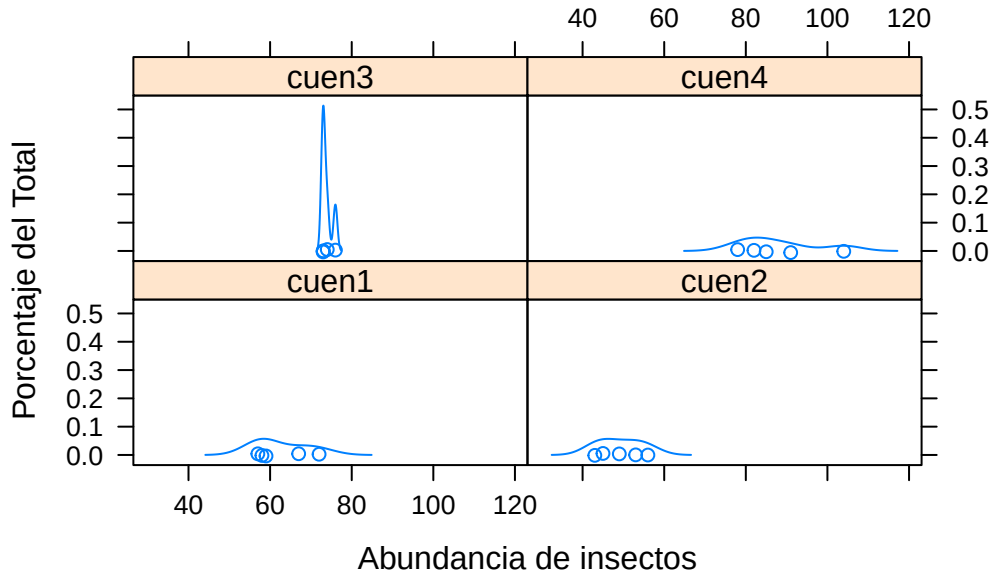

```
# Frecuencias de abundancias por cuencas
histogram (~Ab|cuenca,data=datos, ylab="Porcentaje del Total",
           xlab="Abundancia de insectos")
```



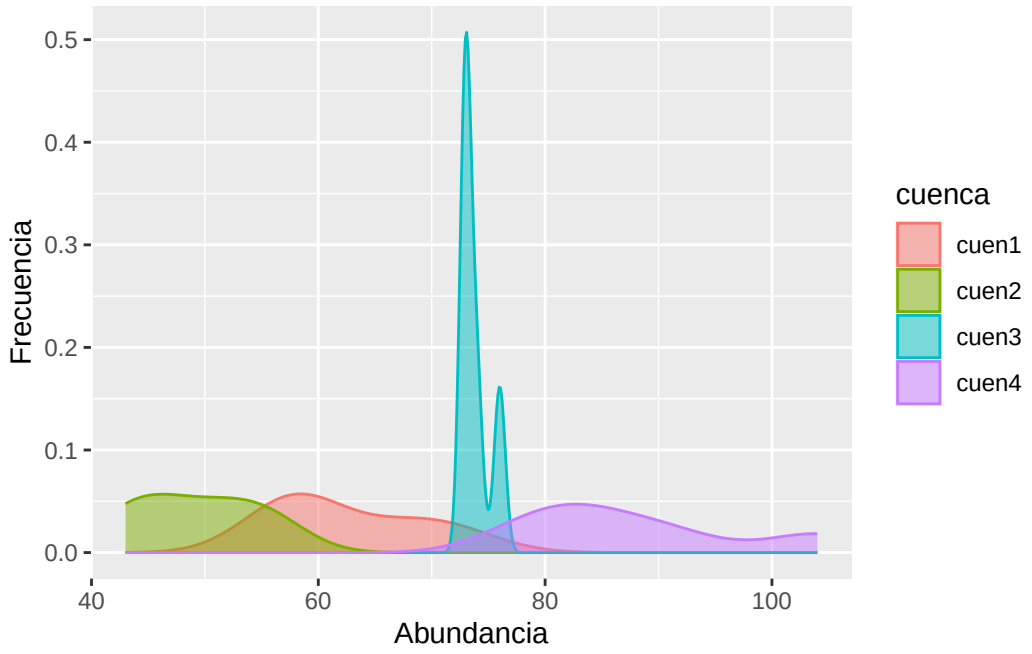

```
# Frecuencias por densidad
densityplot(~Ab,data=datos, ylab="Porcentaje del Total",
            xlab="Abundancia de insectos")
```



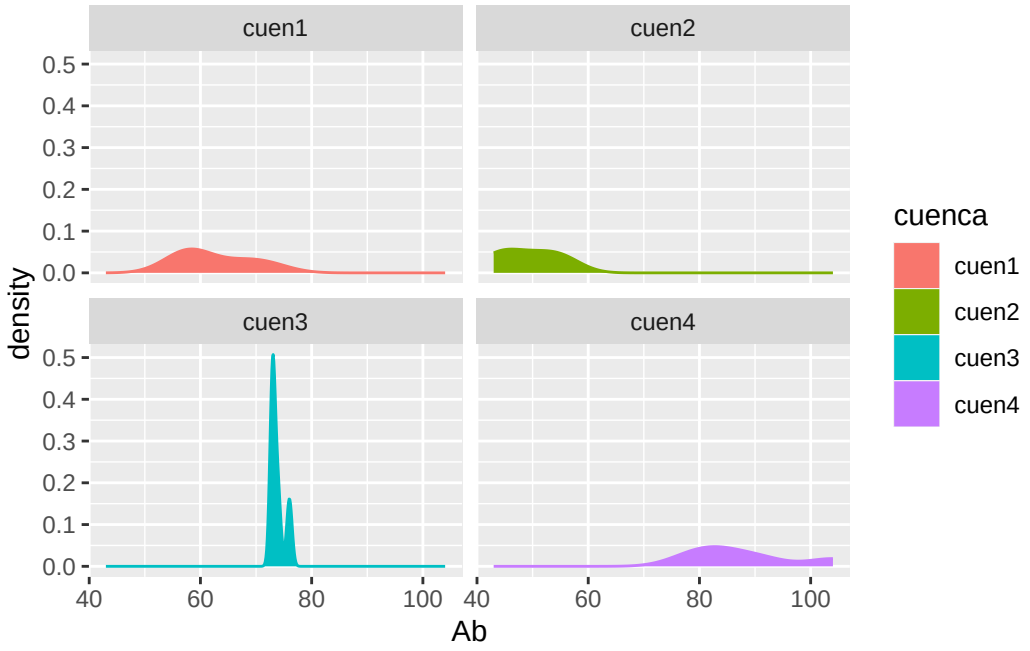

```
densityplot(~Ab|cuenca,data=datos, ylab="Porcentaje del Total",
            xlab="Abundancia de insectos")
```



```r
# 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")
```




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

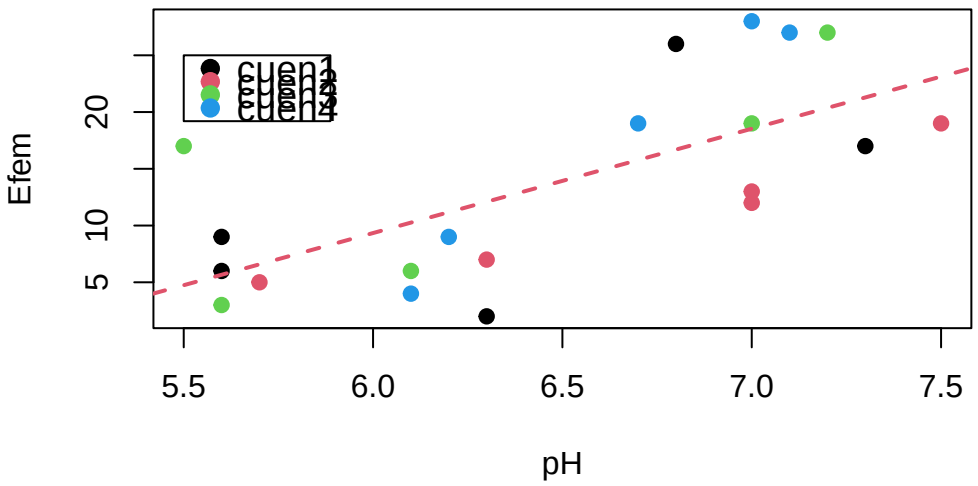


4. Dispersión X-Y

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

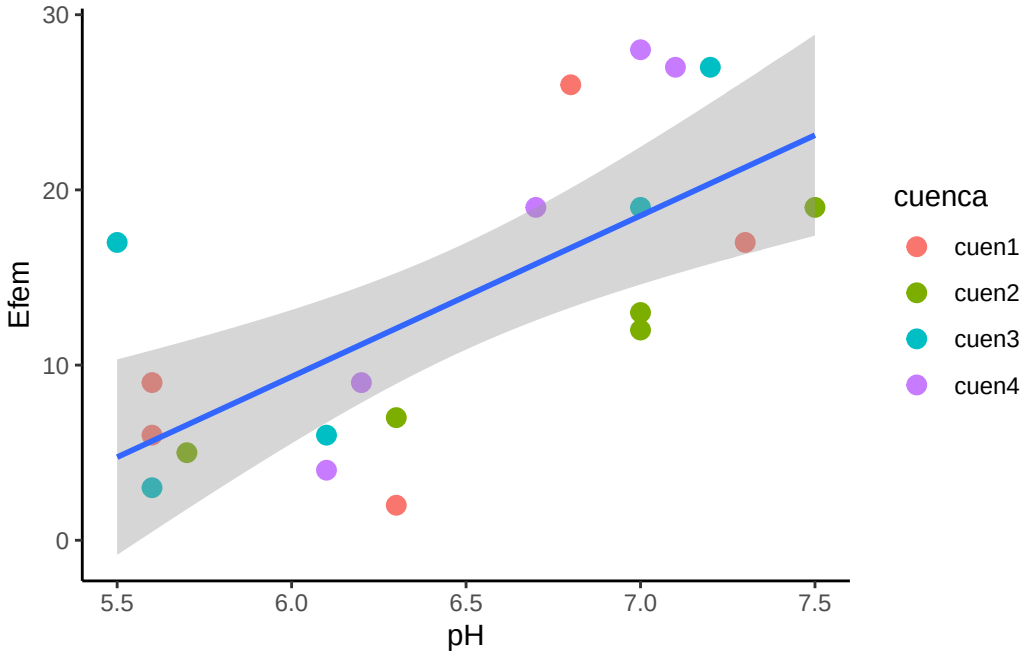
El Paquete **ggplot2** es el que permite realizar las opciones gráficas de dispersión bivariados, ingresar a este enlace:

RPubs.

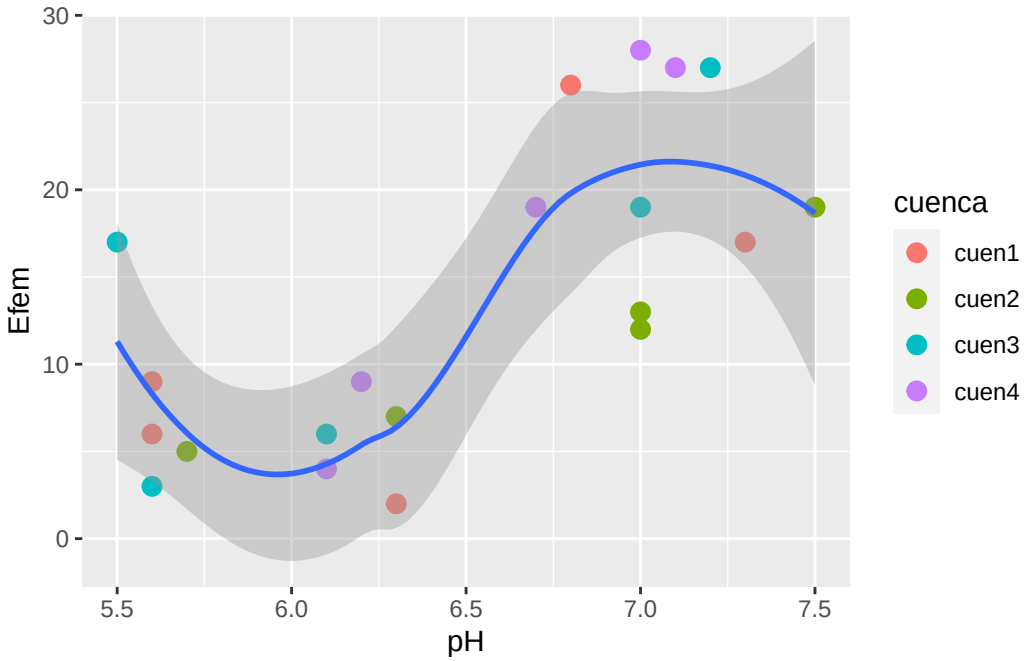
Otro enlace a **ggplot2**:

ggplot2

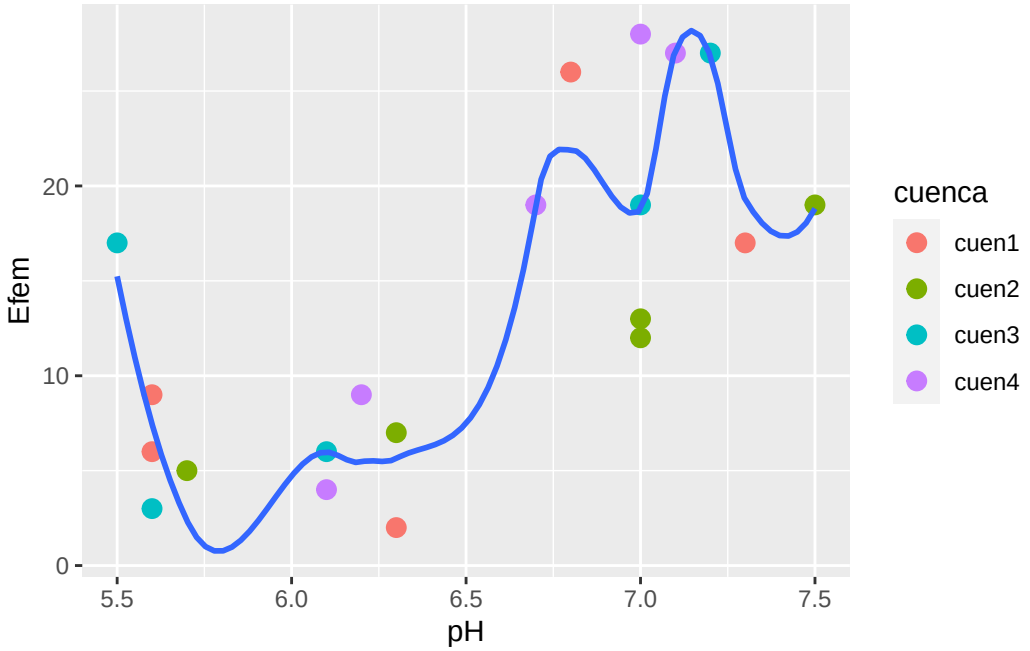
```
# Regresiones lineales (Esquema ggplot2)
ggplot(datos,aes(x = pH,y = Efem)) +
  geom_point(aes(color = cuenca), size = 3) +
  geom_smooth(method= "lm") +
  theme_classic()
```




```
# 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:

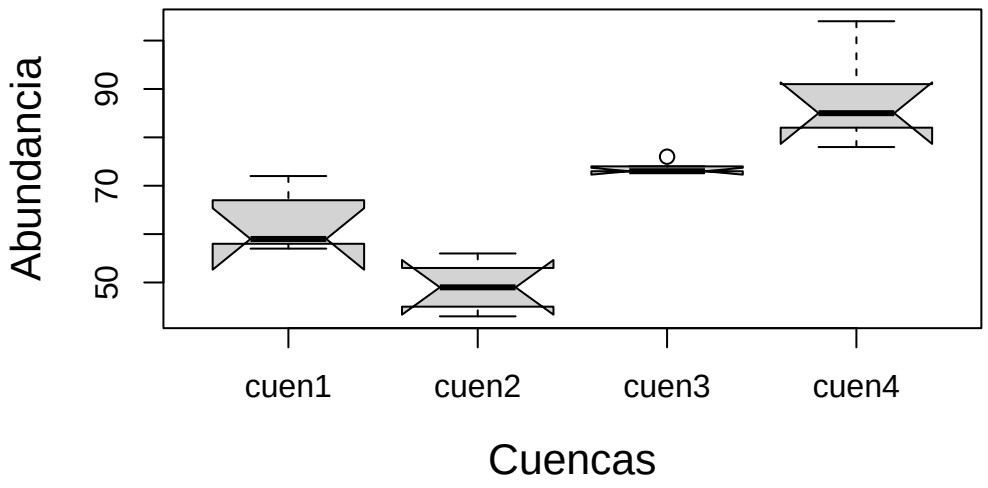
How to make a boxplot in R

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

Enlace1

Enlace2

```
# Figuras de Cajas y bigotes
datos$cuenca<-factor(datos$cuenca,
                     levels=c("cuen1","cuen2","cuen3","cuen4"))

# Cajas y Bigotes con muescas
boxplot(Ab~cuenca,data=datos,notch=TRUE,
        xlab="Cuencas",ylab="Abundancia",
        col="lightgray", cex.lab=1.3)     # Probar con otros colores
```

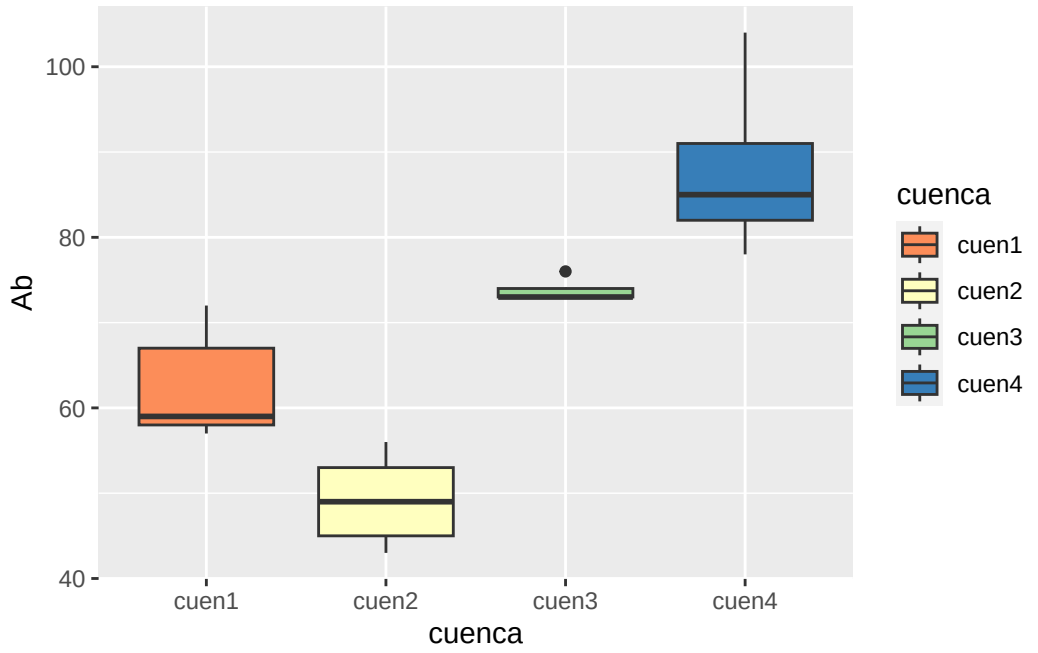


Enlaces de **paletas de colores** para la edición de las figuras:

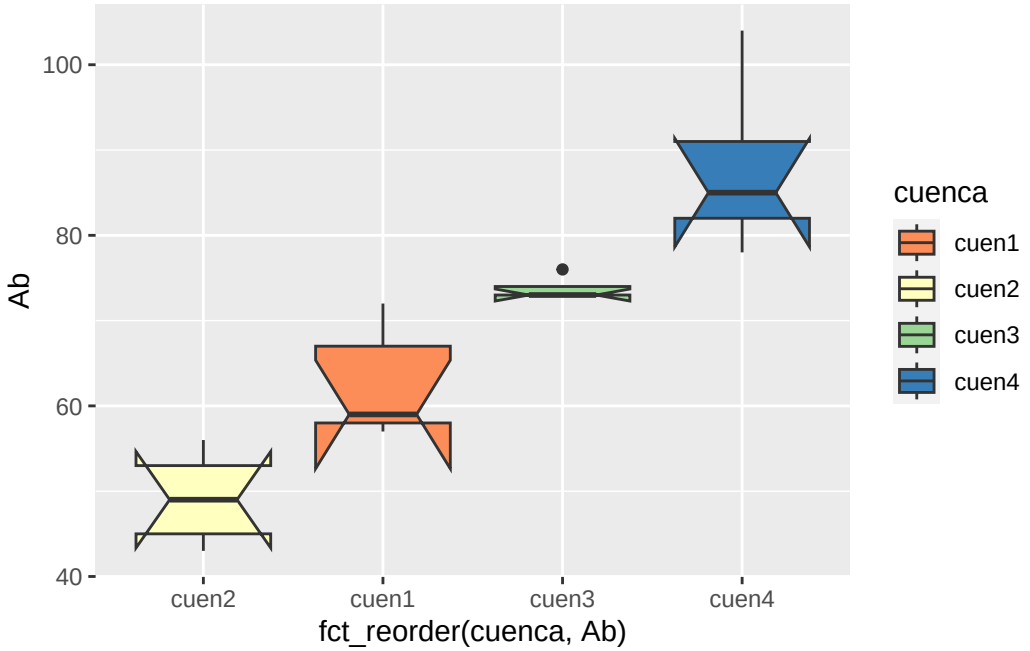
colorbrewer

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'))
```

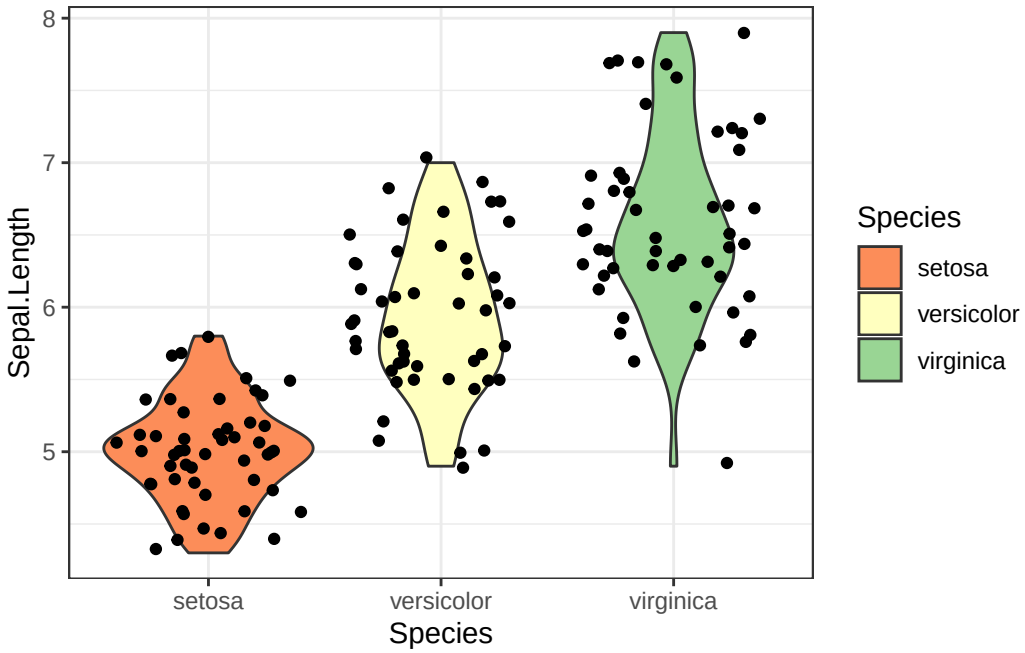



```
# Organización por nivel de magnitud
ggplot(datos, aes(x = fct_reorder(cuenca, Ab),y=Ab)) +
  geom_boxplot(notch = T, aes(fill = cuenca)) +
  scale_fill_manual(values = c('#fc8d59','#ffffbf','#99d594','#377eb8'))
```



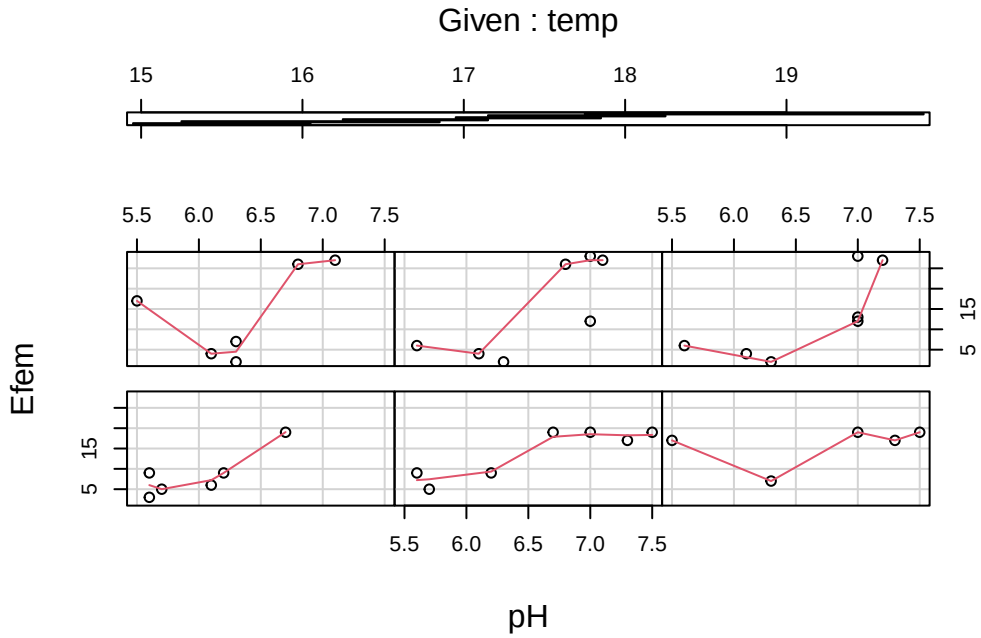
Paréntesis Base de datos de lirios (iris) para figura de violín

```
# 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 líneas 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])
```

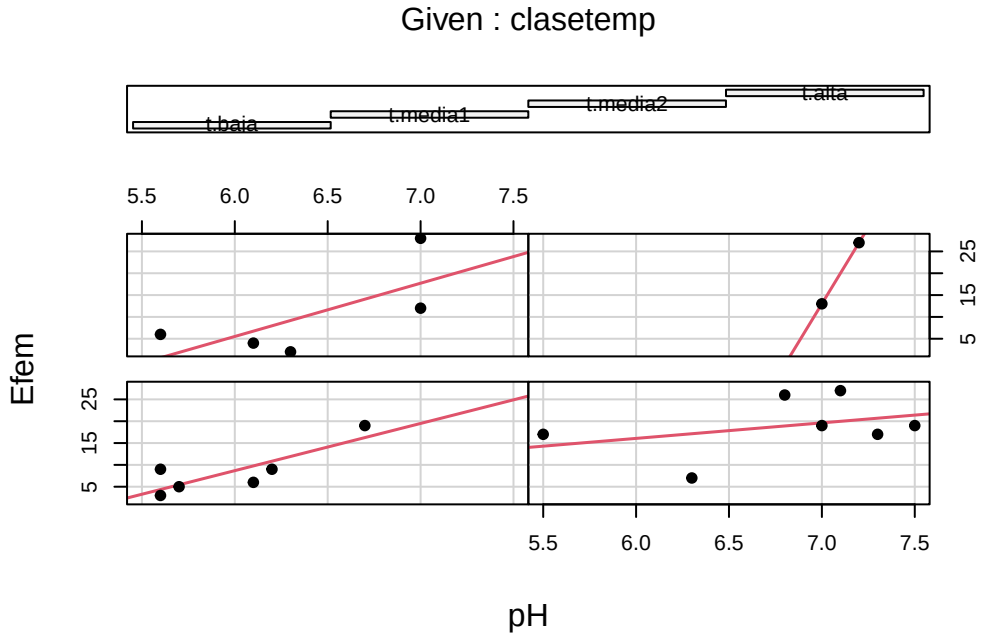
```
  cuenca        pH              temp            Efem             Plec
cuen1:5   Min.   :5.50   Min.   :15.00   Min.   : 2.00   Min.   :0.00
cuen2:5   1st Qu.:6.00   1st Qu.:15.95   1st Qu.: 6.00   1st Qu.:3.00
cuen3:5   Median :6.50   Median :17.05   Median :12.50   Median :4.00
cuen4:5   Mean   :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   Mean   :22.15
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,
                 labels = c("t.baja", "t.media1","t.media2", "t.alta"))
```

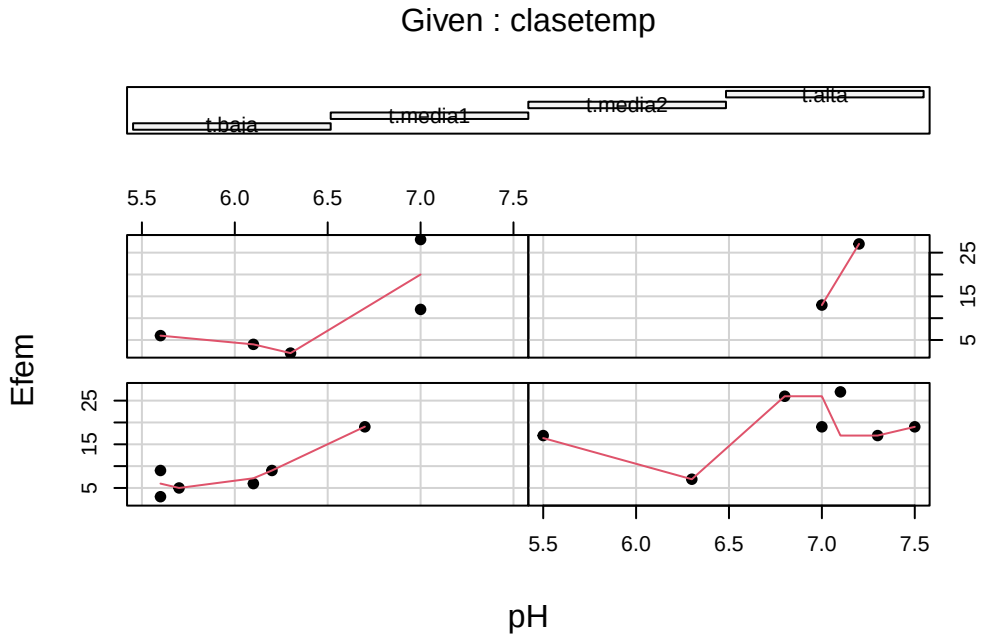
```
clasepH <- cut(datos$pH,seq(5,8,1),include.lowest=T,
               labels = c("pH.bajo", "pH.medio","pH.alto"))
```

```
# Función para el coplot
panel.lm = function(x, y, ...) {
  tmp<-lm(y~x,na.action=na.omit)
  abline(tmp, lwd = 1.5, col= 2)
  points(x,y, ...)}
```

```
# Relación trivariada - Lineal
coplot(Efem~pH | clasetemp, pch=19,
       panel = panel.lm, data=datos)
```




```
coplot(Efem~pH | clasetemp, pch=19,
       panel = panel.smooth, data=datos)
```



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

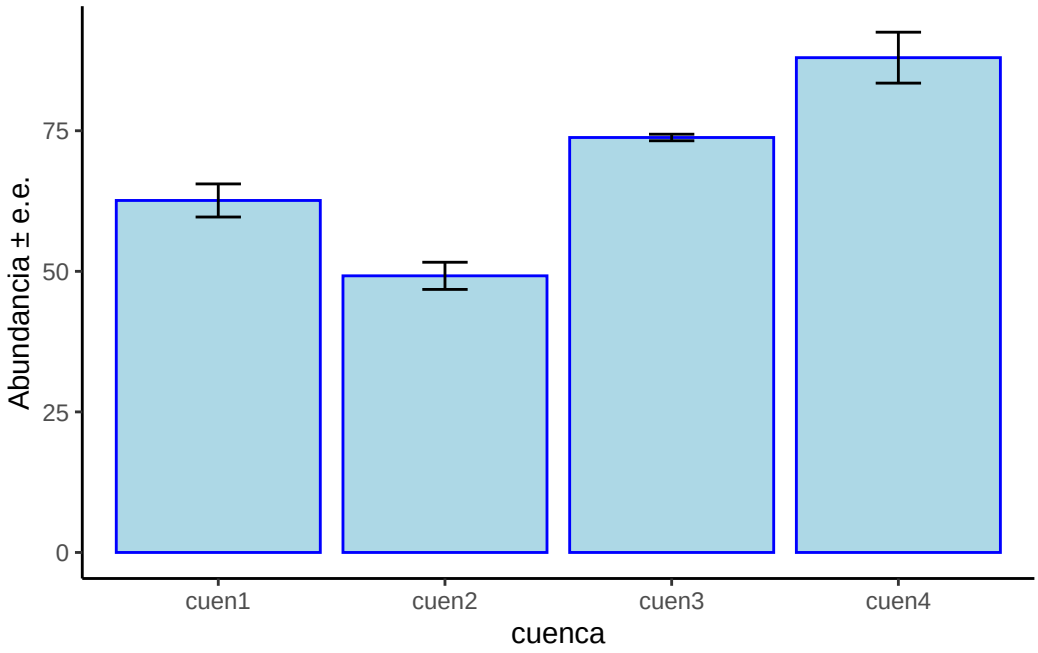
Stunning Bar Charts

```
# Resumen estadístico "datos_resum"
datos_resum <- datos %>%         # Base de datos resumida
  group_by(cuenca) %>%           # Factor o variable agrupadora
  summarise(datos.m = mean(Ab),    # Media de cada grupo del factor
            datos.de  = sd(Ab),    # Desviacioes estándar de cada grupo
            datos.var = var(Ab),   # Varianzas de cada grupo
            n.Ab = n(),            # Tamaño de cada grupo
            datos.ee = sd(Ab)/sqrt(n()))   # Error estándar de cada grupo
datos_resum
```

```
# 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
3 cuen3     73.8     1.30       1.7     5    0.583
4 cuen4     88      10.1      102.      5    4.53
```

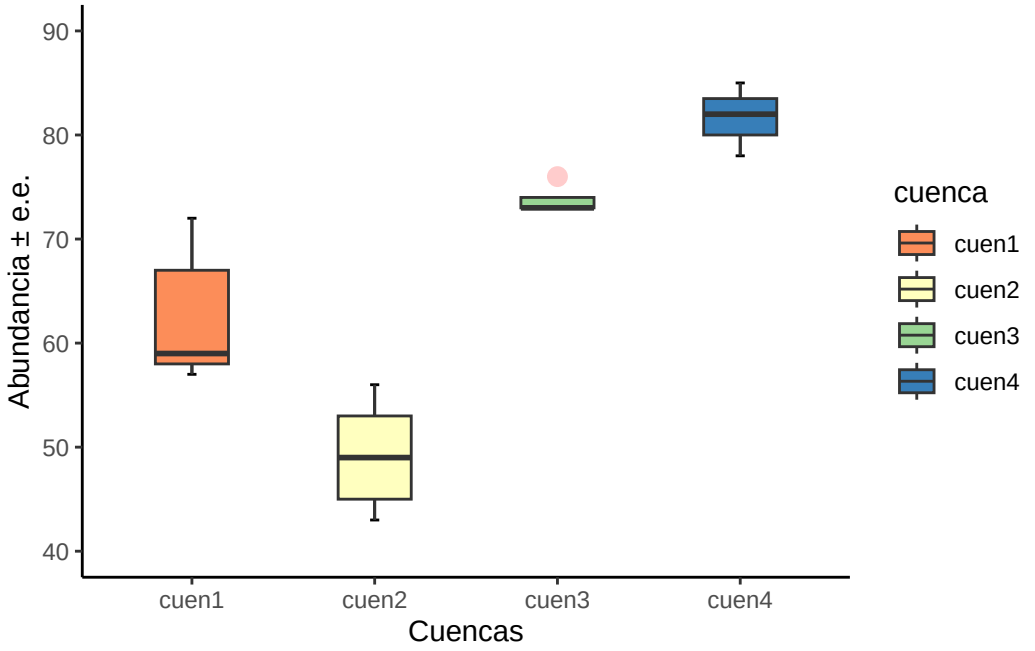
```
# Figura de promedios y errores estándar
DatosPlot<-
  ggplot(datos_resum, aes(cuenca, datos.m, dev.off())) +
  geom_bar(stat="identity", col="blue", fill="lightblue") +
  geom_errorbar(aes(ymin=datos.m-datos.ee,
                    ymax=datos.m+datos.ee),width=0.2)
```

```
# Imprimir la figura de promedios con errores estándar
print (DatosPlot +
       labs(y="Abundancia ± e.e.",
            x = "cuenca") +
        scale_fill_manual(values= c("#A1D5D5")) +
        theme_classic())
```



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

```
# Opción de cajas y bigotes con errores estándar
ggplot(datos, aes(x=cuenca, y= Ab, fill= cuenca)) +
  stat_boxplot(geom = "errorbar",width = 0.05) +
  geom_boxplot(width = 0.4,
        notchwidth = 0.9, outlier.colour="red",
        outlier.fill="red",
        outlier.size=3, outlier.alpha = 0.2) +
  theme_classic() +
  scale_fill_manual(values=c('#fc8d59','#ffffbf','#99d594','#377eb8')) +
  labs(x = "Cuencas", y = "Abundancia ± e.e.")+
  scale_y_continuous(limits = c(40,90))
```



7.1 Base de datos con múltiples factores

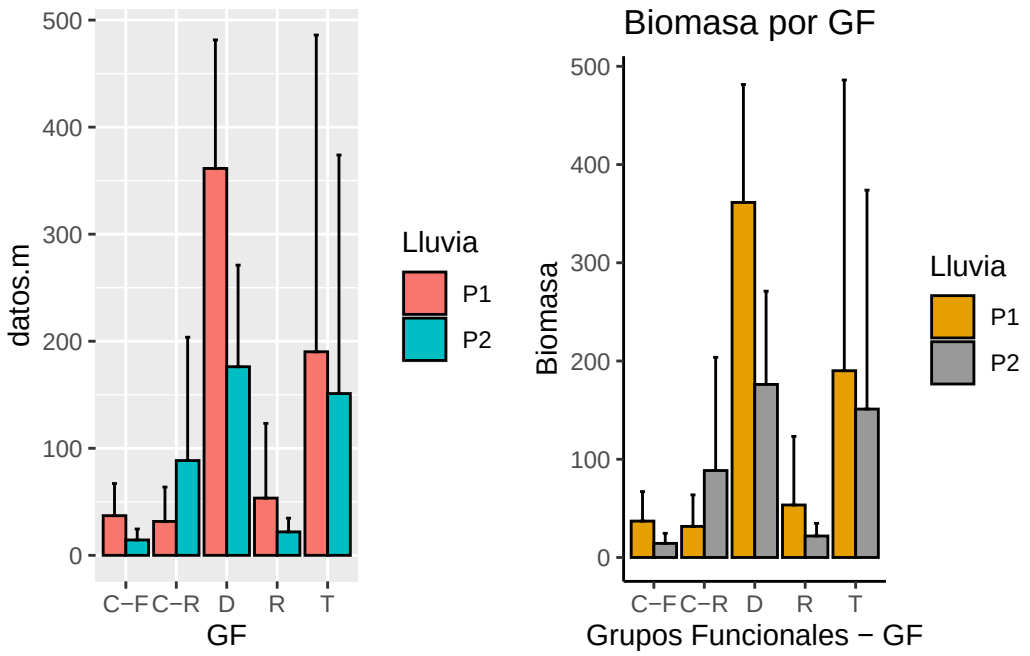
```
# Base de datos multifactorial (insectos1)
datos1<-read_csv2("Insectos2.csv")    # Formato *xlsx
head(datos1)  # Encabezado
```

```
# A tibble: 6 x 6
     No Muestreo GF    Lluvia    Ab  Biom
  <dbl> <chr>    <chr> <chr>  <dbl> <dbl>
1     1 M1       C-F   P1        98 56.0
2     2 M2       C-F   P1       198 52.7
3     3 M3       C-F   P2        45 11.4
4     4 M4       C-F   P2        51 25.3
5     5 M5       C-F   P2         3  0.36
6     6 M6       C-F   P2        69 23.6
```

```
# Resumen estadístico "datos_resum"
datos_resum <- datos1 %>%        # Base de datos resumida
  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
```

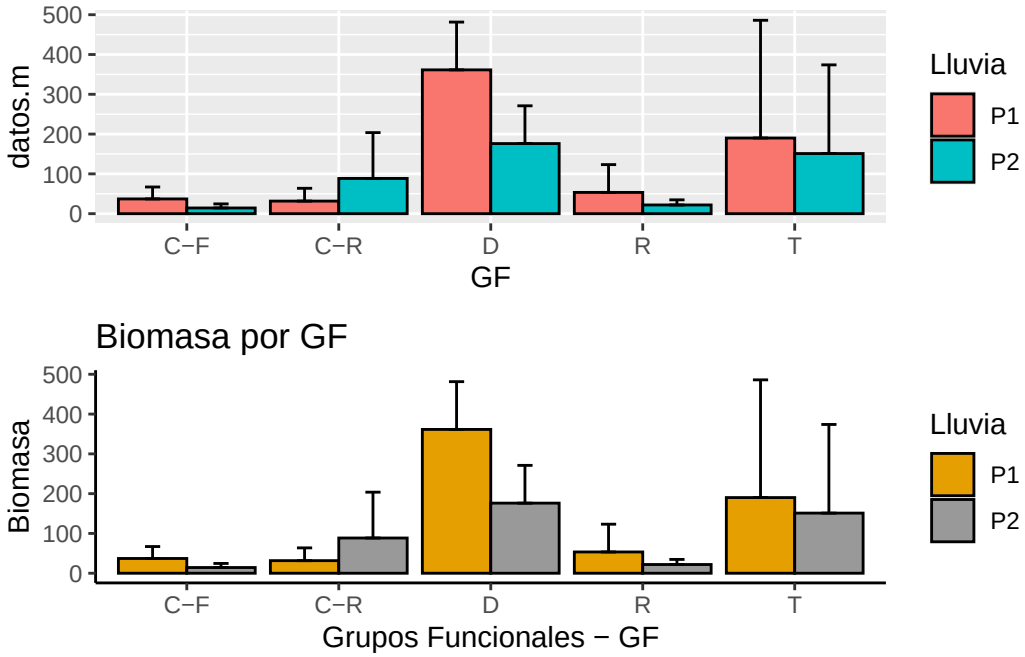
```
# A tibble: 10 x 7
# Groups:   Lluvia [2]
   Lluvia GF    datos.m datos.de datos.var n.Biom datos.ee
   <chr>  <chr>   <dbl>    <dbl>     <dbl>  <int>    <dbl>
 1 P1     C-F      37.0     30.0      902.      3    17.3
 2 P1     C-R      31.7     32.1     1029.      3    18.5
 3 P1     D       361.     120.     14411.      3    69.3
 4 P1     R        53.5     69.8     4873.      3    40.3
 5 P1     T       190.     296.     87533.      3   171.
 6 P2     C-F      14.4     10.2      105.      5     4.58
 7 P2     C-R      88.5    115.     13273.      5    51.5
 8 P2     D       176.      94.9     9010.      5    42.4
 9 P2     R        21.9     12.9      165.      5     5.75
10 P2     T       151.     223.     49655.      5    99.7
```

```
# Figura 1 (f1)
f1 = ggplot(datos_resum, aes(x=GF, y=datos.m, fill=Lluvia)) +
     geom_bar(stat="identity", color="black",
              position=position_dodge()) +
     geom_errorbar(aes(ymin=datos.m, ymax=datos.m+datos.de), width=.2,
              position=position_dodge(.9))

# f2: Otro formato de figura bifactorial - theme_classic
f2 = f1+labs(title="Biomasa por GF",
             x="Grupos Funcionales - GF",
             y = "Biomasa")+
     theme_classic() +
     scale_fill_manual(values=c('#E69F00','#999999'))

# Impresión de un panel con las dos figuras (p1 y p2)
grid.arrange (f1, f2, ncol=2)
```




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

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



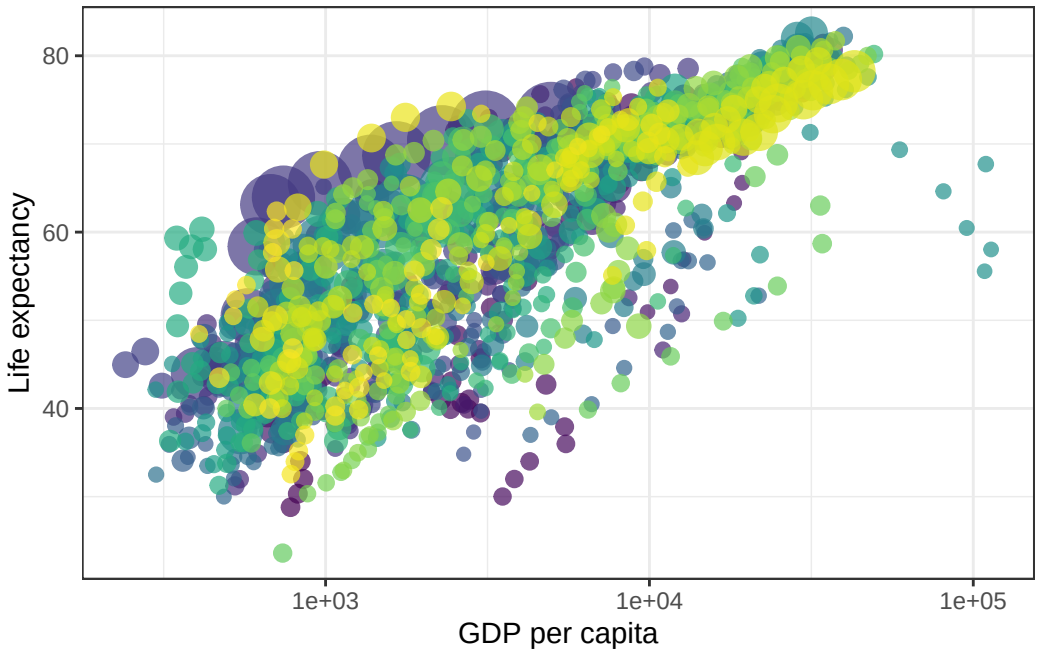
8. parentesis Figuras de dispersión animadas

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)
  ) +
```

```
  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()
View(datos)
str(datos)
```

```
'data.frame':   7 obs. of  8 variables:
 $ Sitio     : chr  "S1" "S1" "S1" "S1" ...
 $ 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 ...
 $ 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])            # Matriz de Correlación (M)
round(head(M),2)
```

```
              pH  Cond Turbidez  Temp Salinidad CapaFotica Oxigeno
pH          1.00 -0.27    -0.04 -0.68      0.37      -0.77   -0.38
Cond       -0.27  1.00     0.21  0.68     -0.19       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      0.02       1.00    0.56
```

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

```
x11()                            # Panel gráfico adicional
corrplot(M, method = "ellipse")  # Figura de correlaciones con elipses
```

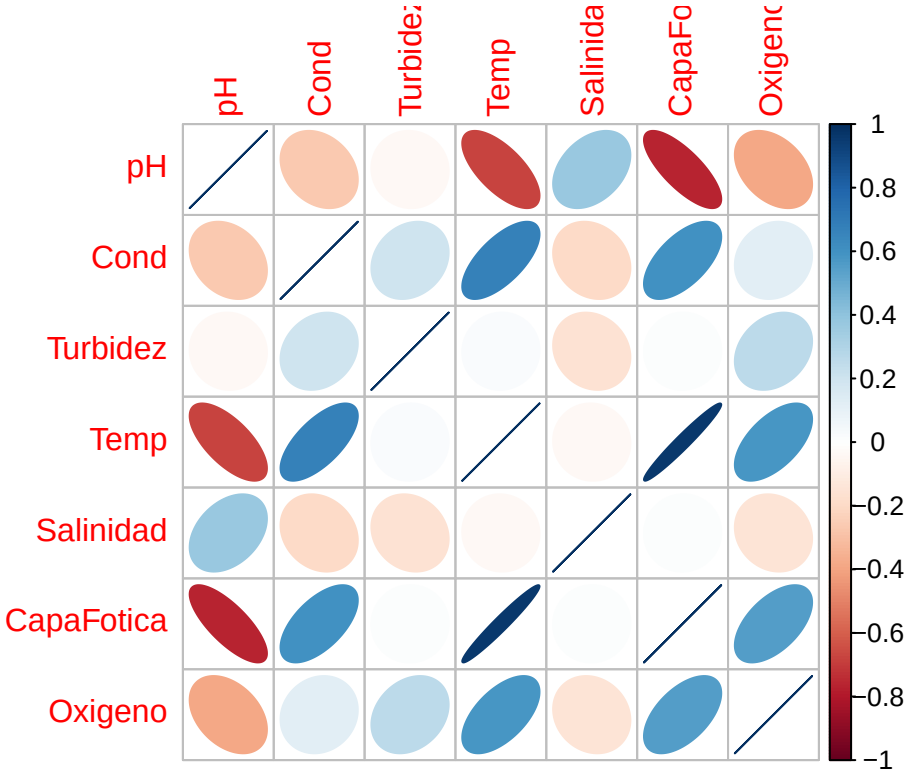


Figura 3.1: Relación de variables ambientales en las siete bahías estudiadas.

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
```

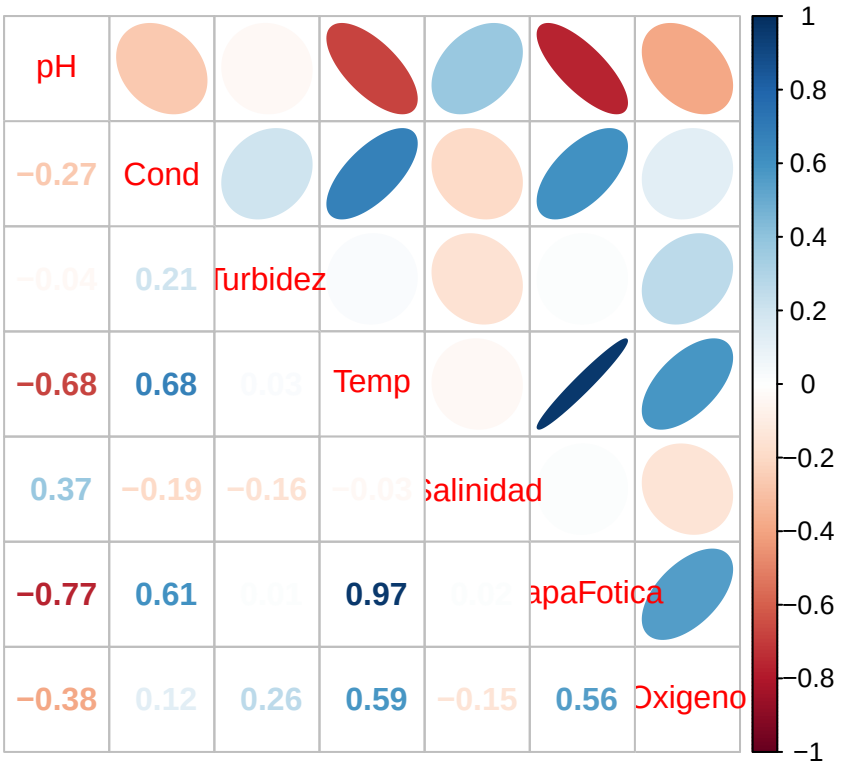


Figura 3.2: Relación de variables ambientales en las siete bahías estudiadas.

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
```

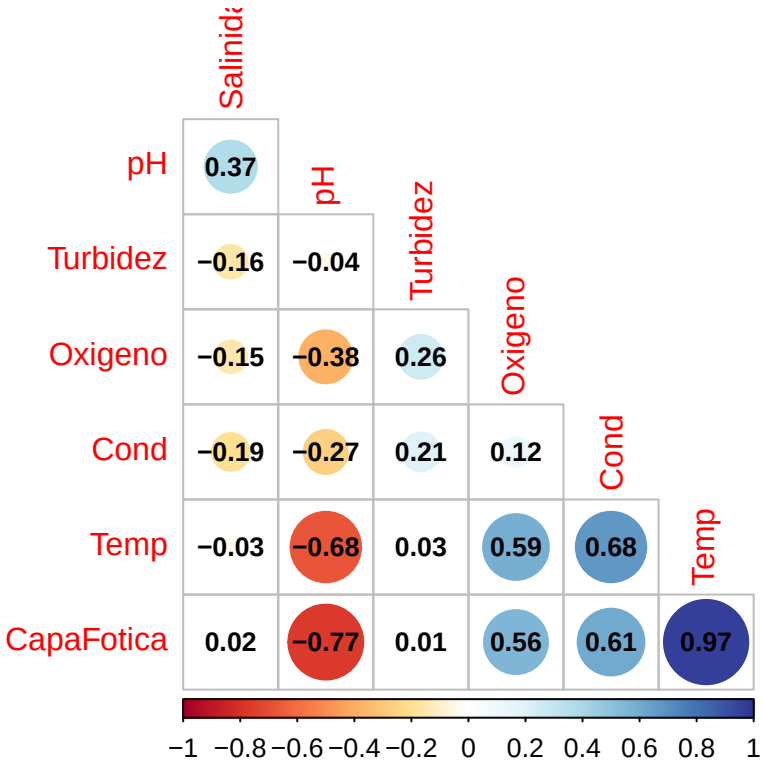


Figura 3.3: Relación de variables ambientales en las siete bahías estudiadas.

1) PCA con el paquete stats (pca1)

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

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
```

```
Cumulative Proportion  1.000000000      1
```

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
pH          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
Turbidez          -0.65   0.62         -0.41   0.11
Temp       -0.52   0.21                        0.81  -0.10
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
BTag   -1.55  -0.34   0.14   0.85  -1.34   0.11      0
PBet   -1.80   1.54  -0.97   0.67   0.36  -0.19      0
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
PGran   1.67   0.05  -1.70  -0.52   0.16   0.22      0
Rod     1.19  -1.20   0.58   1.53   0.82   0.01      0
Aero    2.33   1.64   1.38  -0.36  -0.22   0.01      0
```

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.

```
x11()
screeplot(pca1,ylab="Varianza",main="",
          cex.lab=1.5, col="lightblue")
```

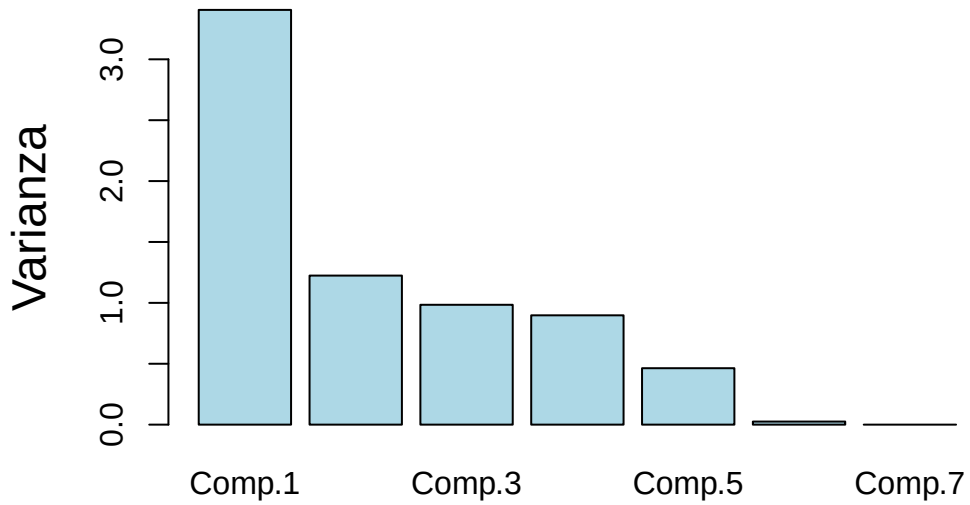


Figura 3.4: Varianza capturada o representada por cada componente principal.

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)
```

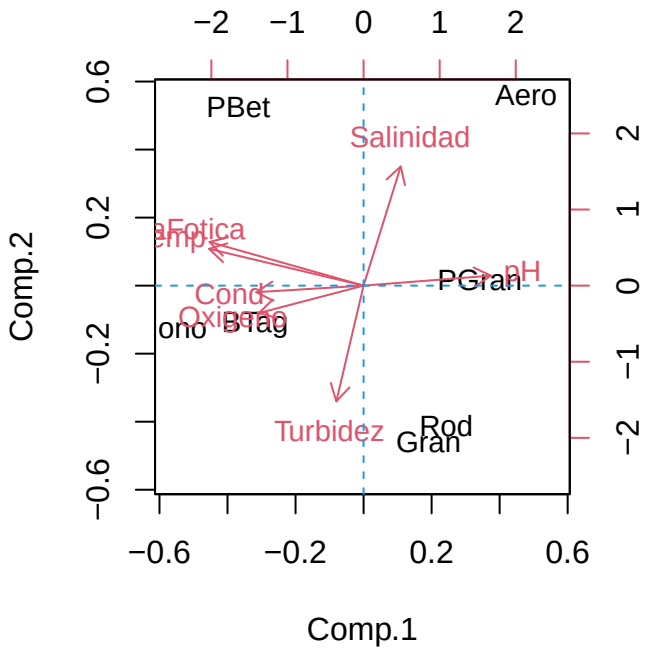


Figura 3.5: Figura del "Biplot" del análisis de componentes principales.

```
# 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"
```

```
datos.PCA<-datos[, c("pH", "Cond", "Turbidez", "Temp", "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)
```

2.2) Figura del PCA

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

```
# Figura del pca realizado (grafica de observaciones)
plot.PCA(pca2, axes=c(1, 2), choix="ind", habillage="none", col.ind="black",
         col.ind.sup="blue", col.quali="magenta",
         label=c("ind", "ind.sup", "quali"))
```

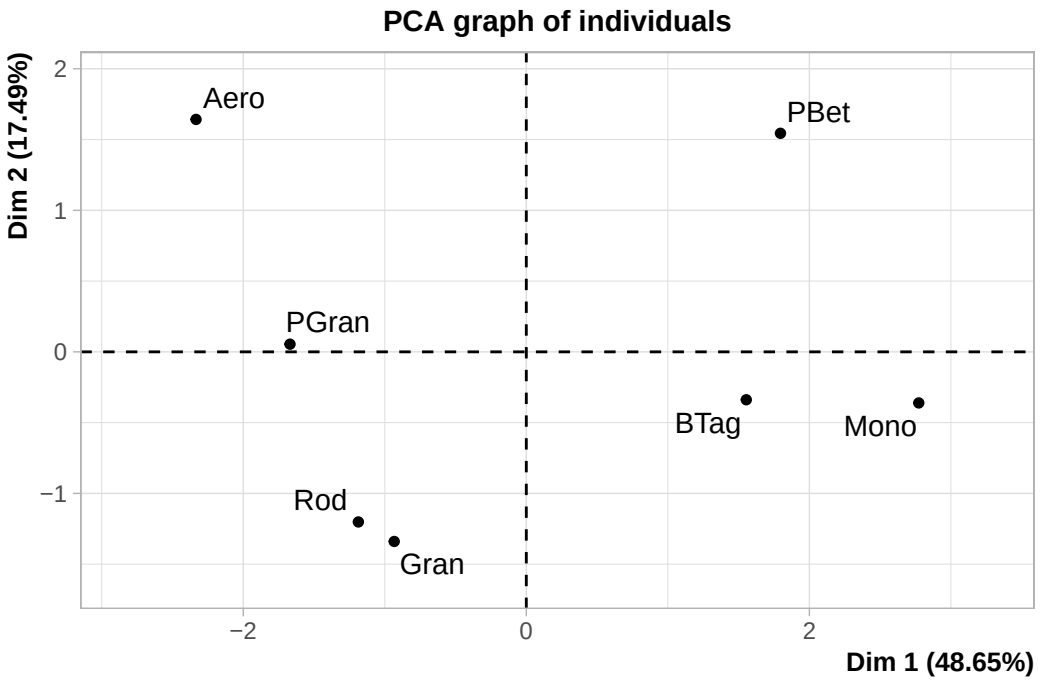


Figura 3.6: Figura del "Plot" del análisis de componentes principales.

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.

```
# Circulo de contribuciones
plot.PCA(pca2, axes=c(1, 2), choix="var", col.var="#ff0000", new.plot=T,
         col.quanti.sup="blue", label=c("var", "quanti.sup"), lim.cos2.var=0)
```

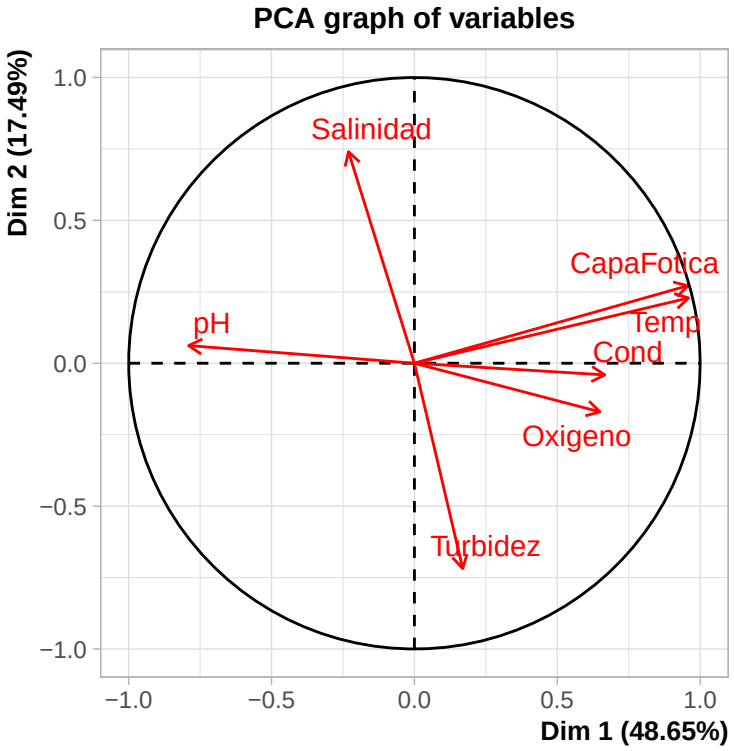


Figura 3.7: Figura del circuo de contribuciones del PCA.

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

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

3.1) Insumos del análisis

```r
# 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  -0.8103  0.29431 -0.1336  0.8605 -1.8923 -0.68752
PBet  -0.9363 -1.34295  0.9378  0.6784  0.5141  1.12733
Mono  -1.4457  0.31382 -0.8173 -1.2159  0.8964 -0.64531
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
Aero   1.2166 -1.42828 -1.3407 -0.3694 -0.3161 -0.03060
```

3.2) Autovalores

```r
# 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
```

3.3) Figura del PCA

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

```r
# 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")
```

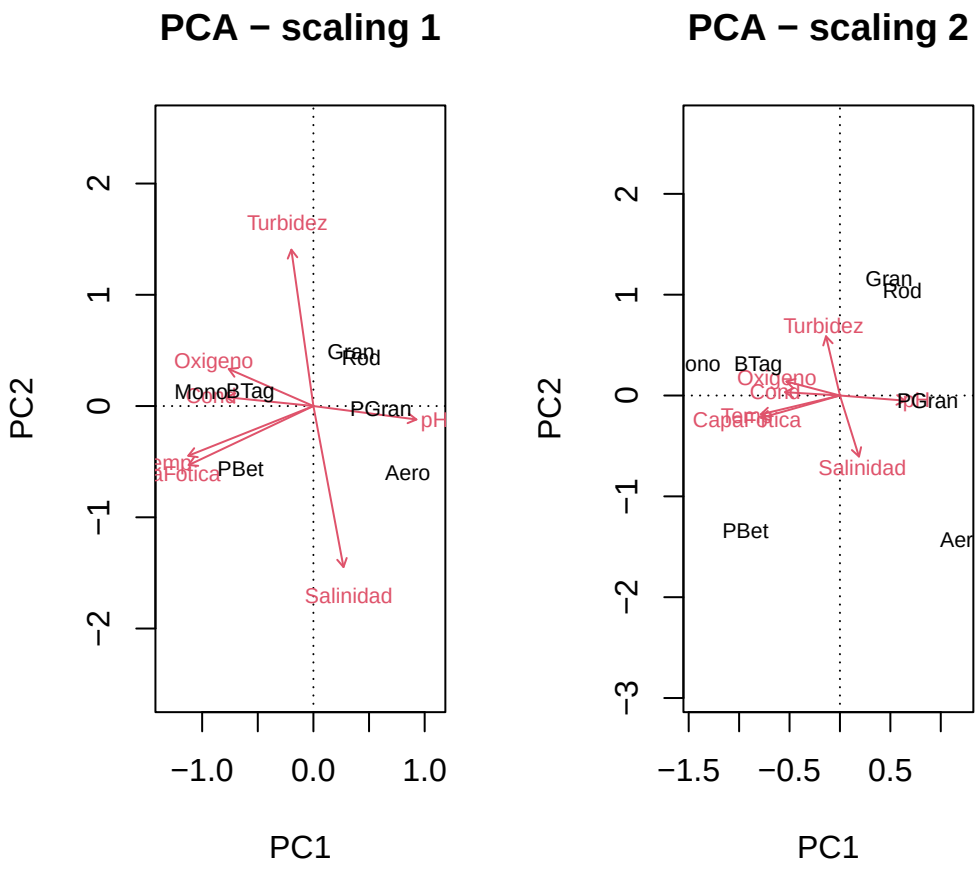


Figura 3.8: dos copciones de figuras del PCA - “scaling 1” y “scaling 2”.

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:
 $ Sitio     : chr  "S1" "S1" "S1" "S1" ...
 $ 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 ...
 $ 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
```

```
  # Generación de grupos
  datos.w <- hclust(dist(scale(datos[,c(2:8)])), "ward.D")
```

4.2) Cortar la clasificación en 2 grupos

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

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)
```

4.5) PCA con simbolos y colores por cada grupo

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

```r
x11()
pc4 <- plot(pca3,  display = "wa",  scaling = 1,  type = "n",
          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)
```

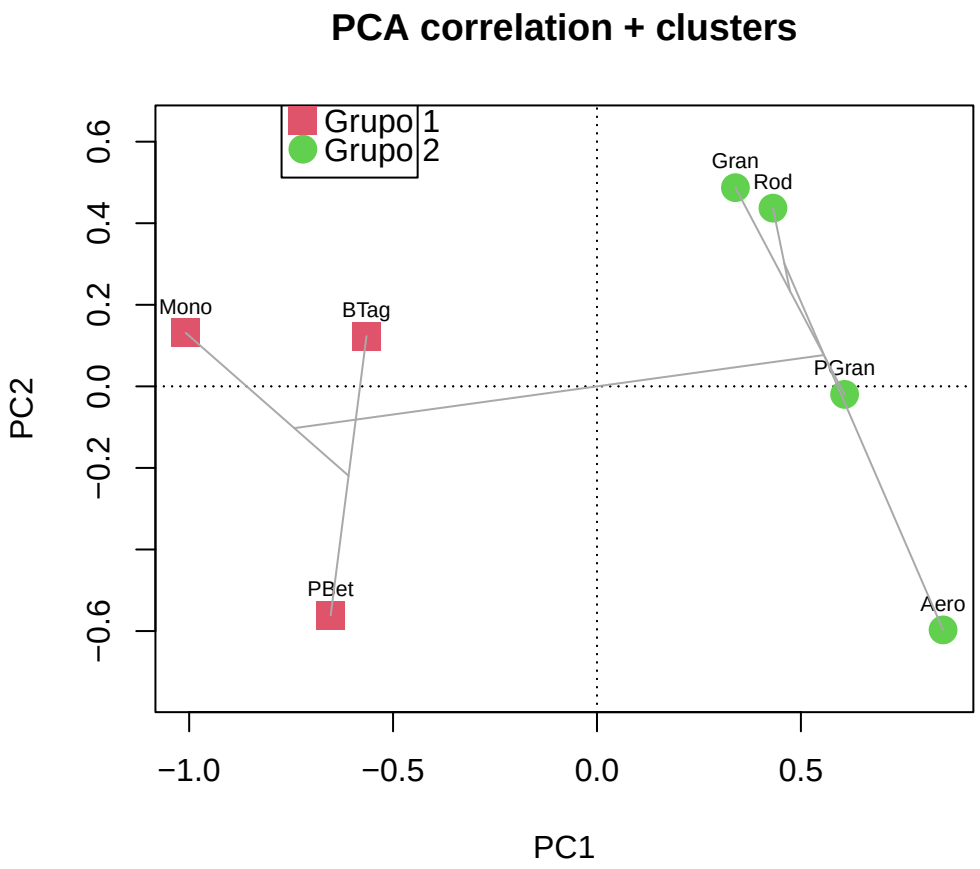


Figura 3.9: dos grupos de bahías generados en el PCA.

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)
```

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)
```

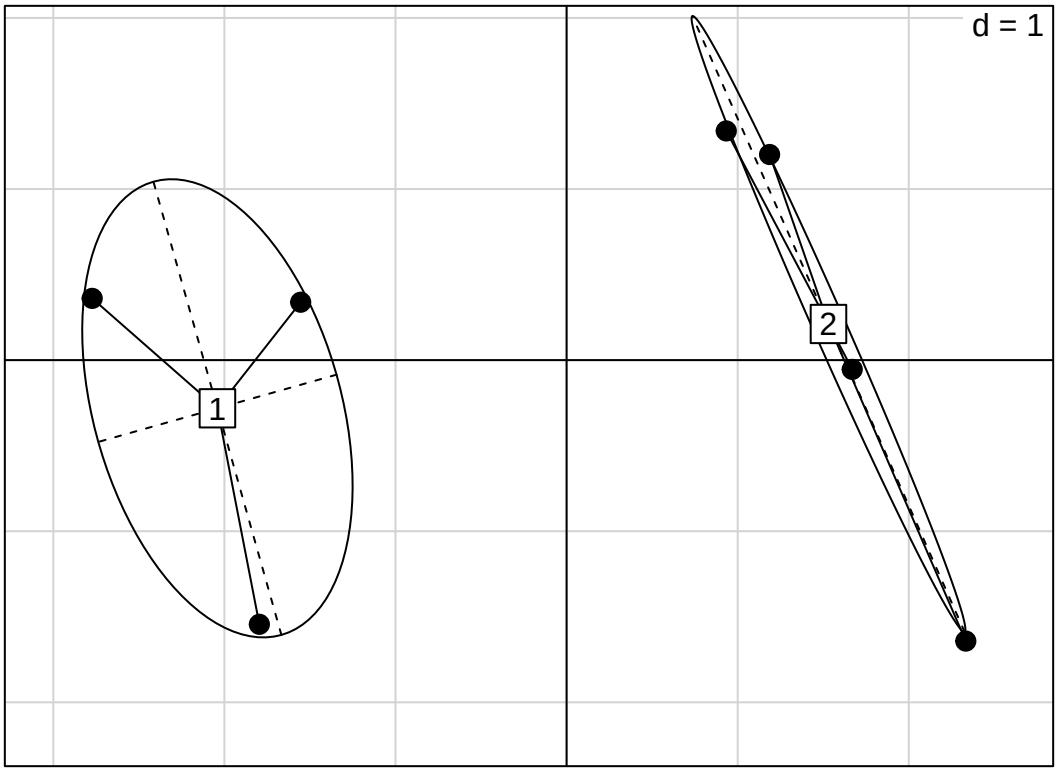


Figura 3.10: agrupamiento por elipses en el PCA.

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

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

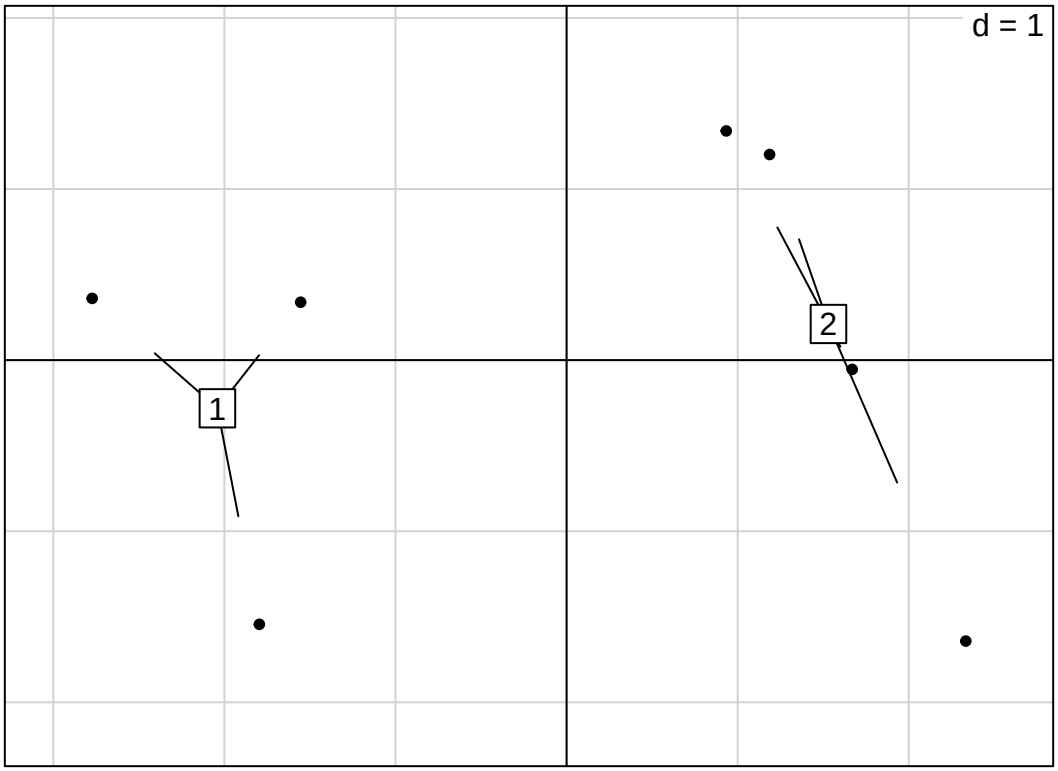


Figura 3.11: agrupamiento por líneas en el PCA.

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)
```

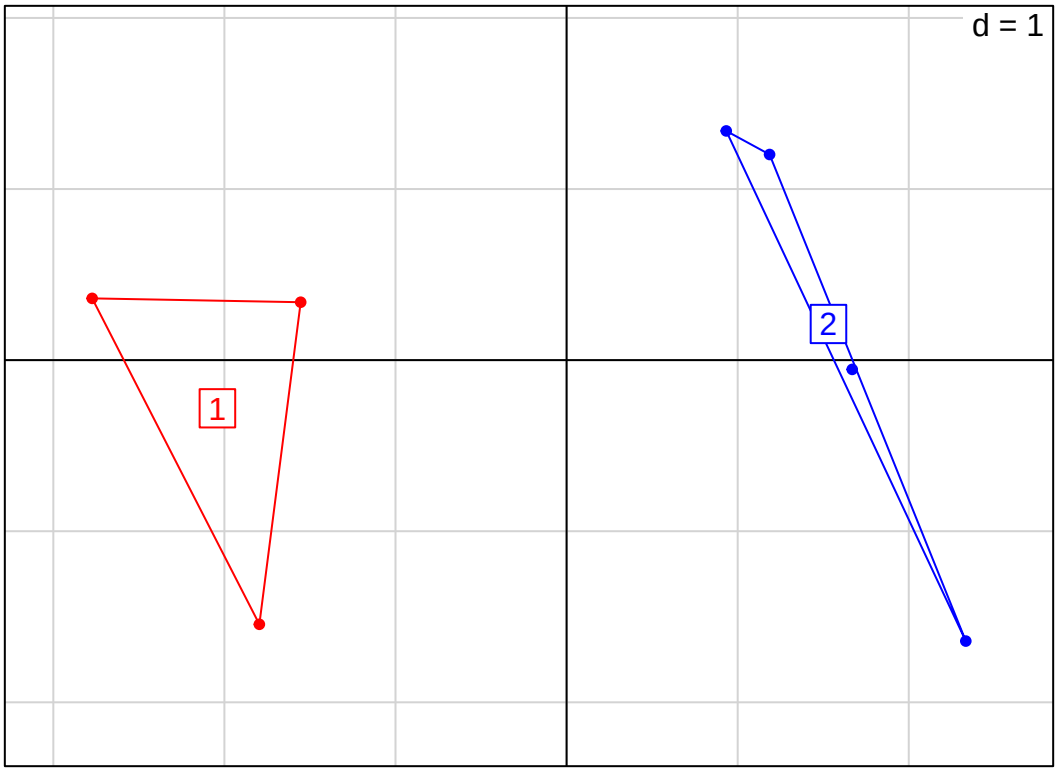


Figura 3.12: agrupamiento por triangulos en el PCA.

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)
```

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

Cargar la base de datos

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

Exploración Gráfica

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

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

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

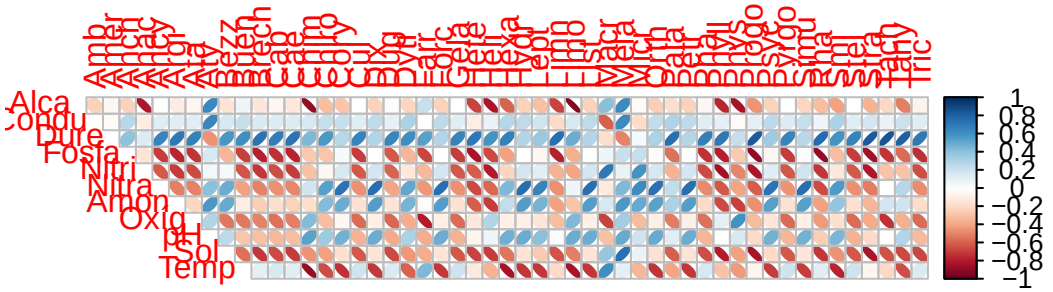


Figura 3.13: Relación de variables ambientales en las siete bahías estudiadas.

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  1.4
ST.s  2.1   2.8  1.7   0.1   0.1   0.2    0  0.8 1.0 2.4  1.4
Bo.s  2.2   3.0  1.7   0.1   0.1   0.5    0  0.8 1.0 2.6  1.4
M.l   2.2   2.9  1.7   0.1   0.1   0.5    0  0.7 1.0 2.5  1.4
ST.l  2.2   2.5  1.6   0.2   0.1   0.3    0  0.7 0.9 2.5  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
```

```r
# 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.l  0.09 0.17 0.10 0.00 0.00 0.00 0.00
ST.l 0.00 0.20 0.00 0.14 0.00 0.00 0.31
Bo.l 0.00 0.32 0.00 0.00 0.00 0.00 0.10
```

```r
# 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.

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

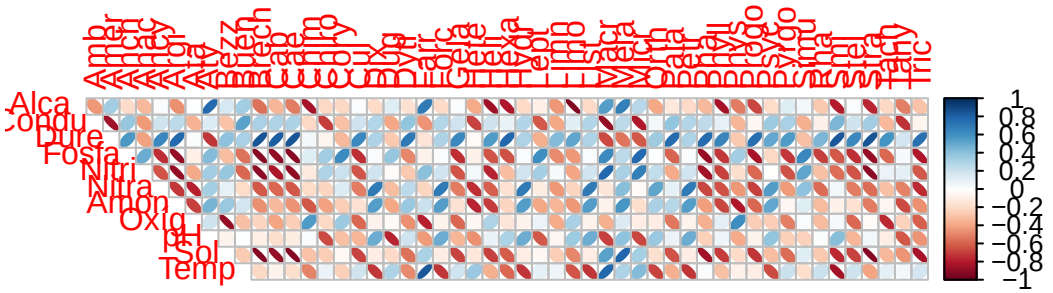


Figura 3.14: Relación de variables ambientales en las siete bahías estudiadas.

2) PCA con paquete factoextra

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

```
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)
```

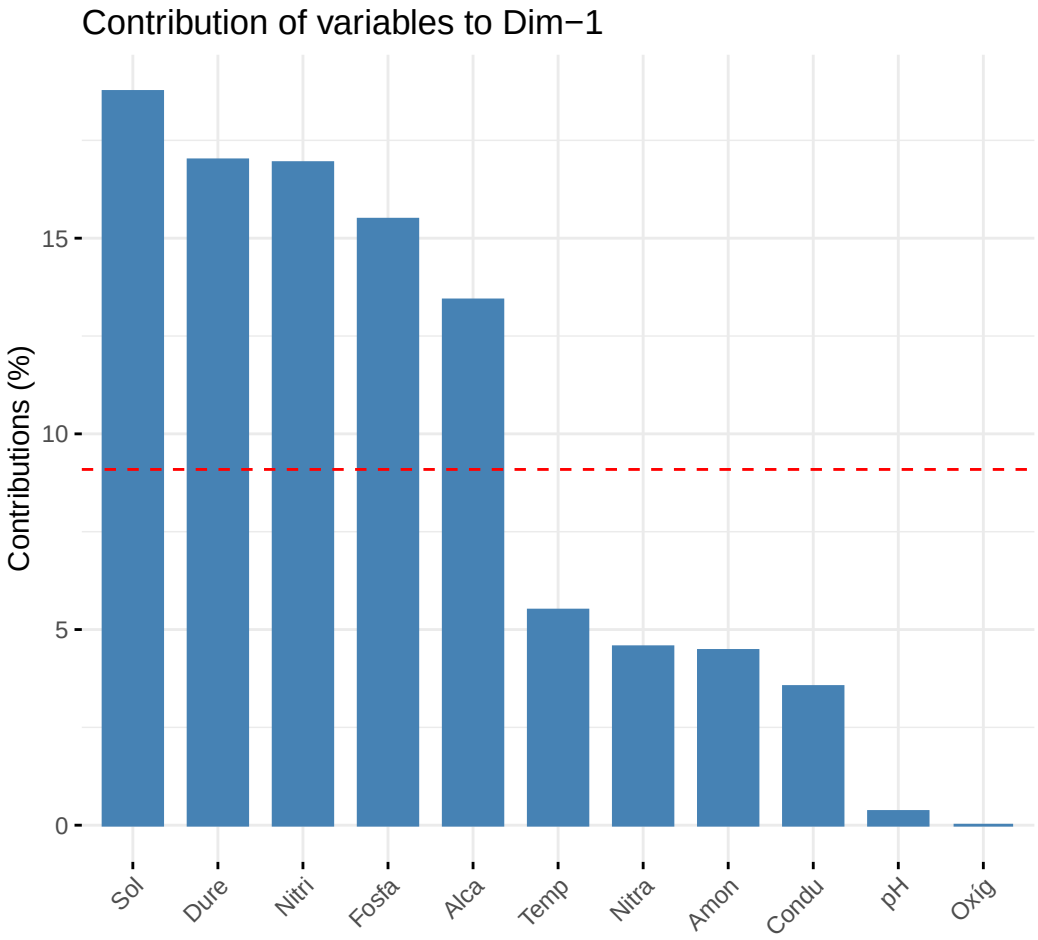


Figura 3.15: Contribuciones de las variables ambientales.

2.2) Elipses por cada periodo climático

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

```
fviz_pca_ind(pca1, geom.ind = "point",
        col.ind = datos$Epoca,   # Colores por grupo - periodo
        palette = c("#00AFBB", "#E7B800", "#FC4E07"),
        addEllipses = TRUE, ellipse.type = "confidence",
```

```
        legend.title = "Groups")
```

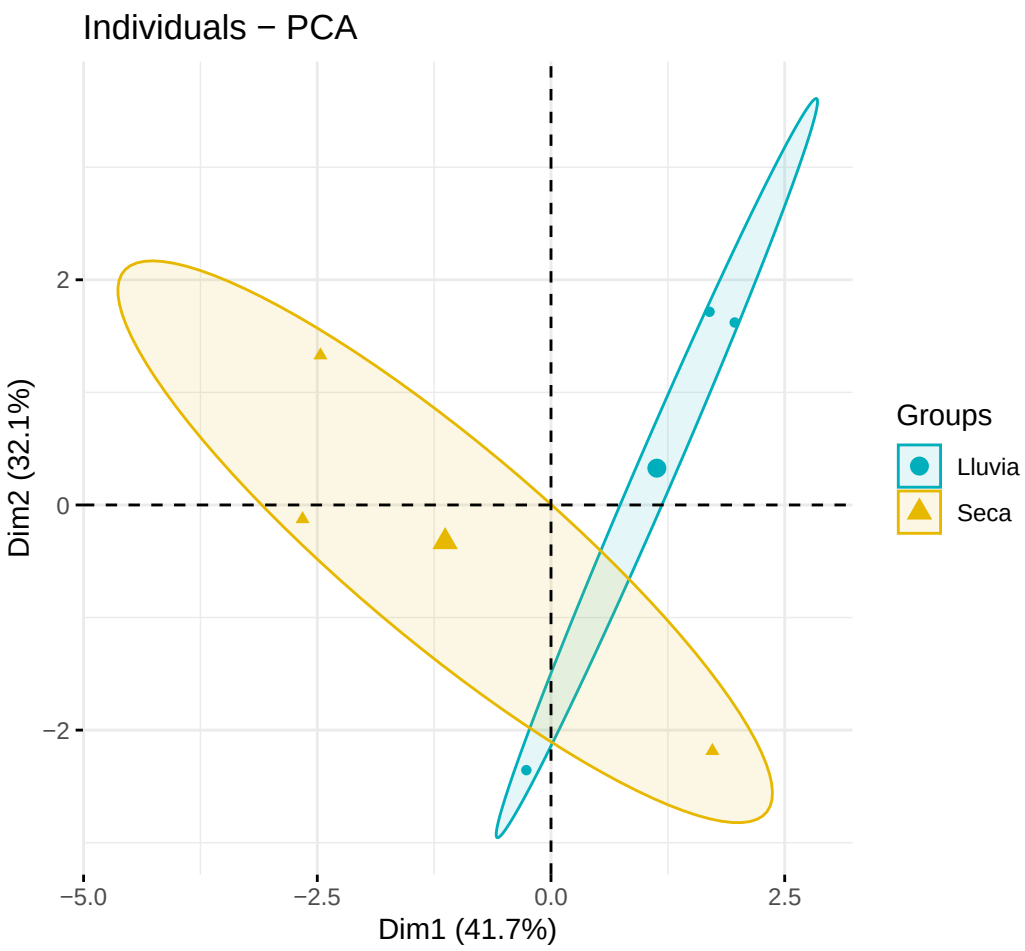


Figura 3.16: Odenación por cada periodo climático.

2.3) Escala de contribuciones de las observaciones y las variables

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

```
fviz_pca_biplot(pca1,
# Observaciones (Sitios)
        geom.ind = "point",
            fill.ind = datos$Epoca, col.ind = "black",
            pointshape = 21, pointsize = 2,
```

```
            palette = "jco",
            addEllipses = TRUE,
# Variables ambientales
          col.var = "contrib",
            gradient.cols = "RdYlBu",
            legend.title = list(fill = "Epocas", color = "Contrib",
                                alpha = "Contrib"))
```

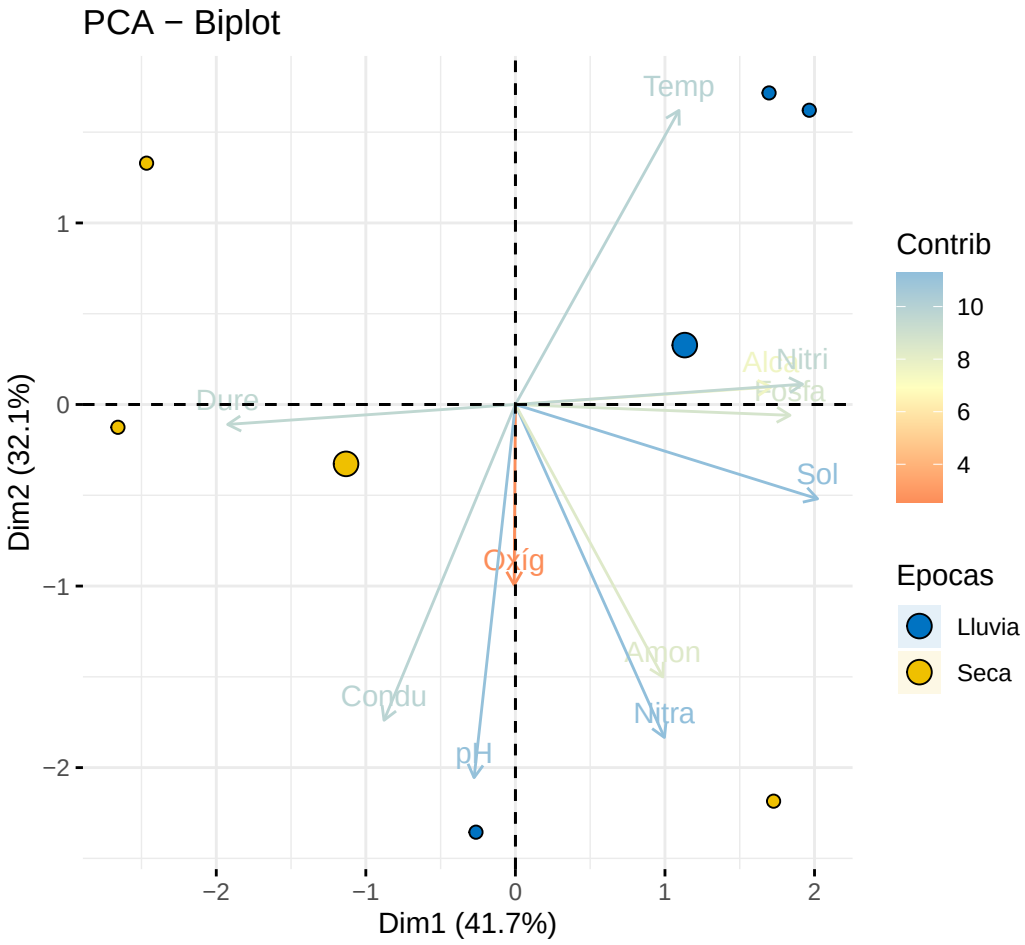


Figura 3.17: Contribuciones de las variables ambientales.

3) PCA con vegan

```
pca2 <- rda(tax.hel)
```

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
```

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")
```

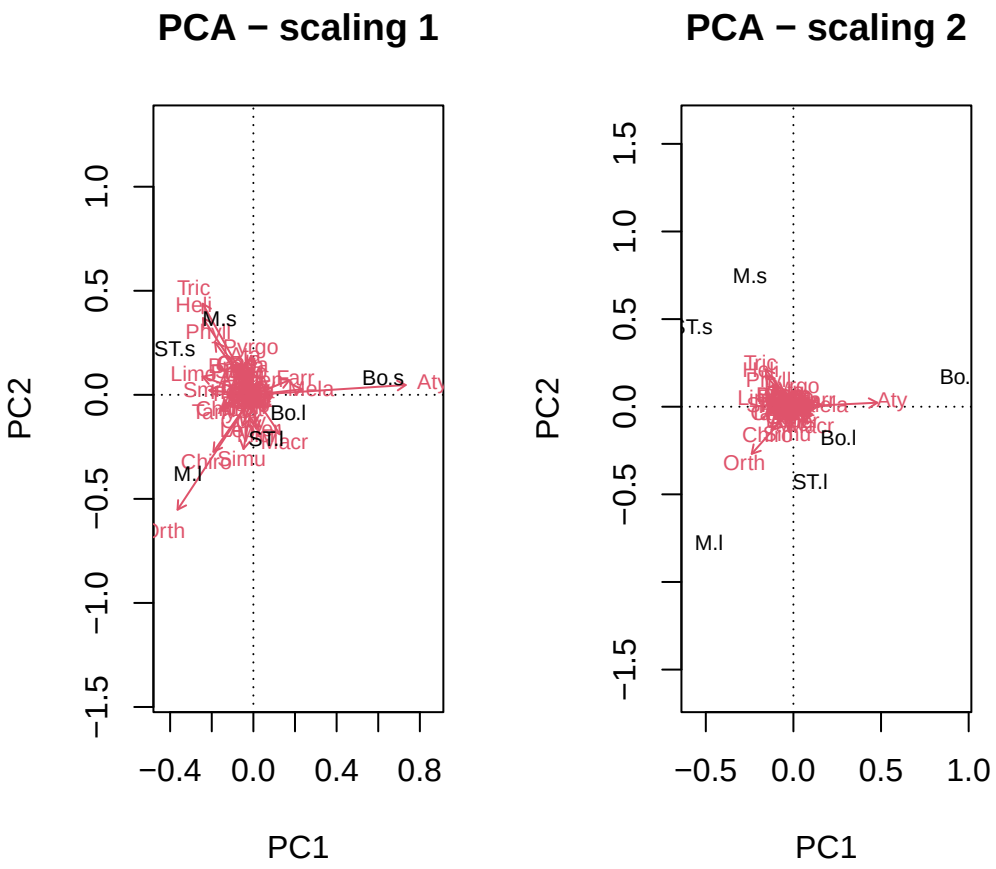


Figura 3.18: dos copciones de figuras del PCA - “scaling 1” y “scaling 2”.

3.4) PCA con vegan - biplot + orditorp

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

```
x11(8,8)
biplot(pca2, choices = c(1, 2),type = "n",scaling =2,
       main="PCA - Scaling 2",cex=2)   # Panel gráfico
text(pca2, display="sites", cex=0.8,
     col="blue", lwd=1.5, pos=3)       # Figura de sitios y Épocas
ordi=orditorp(pca2, display = "species",
              shrink = FALSE, col = "red", type="n") # Taxones Filtrados
```

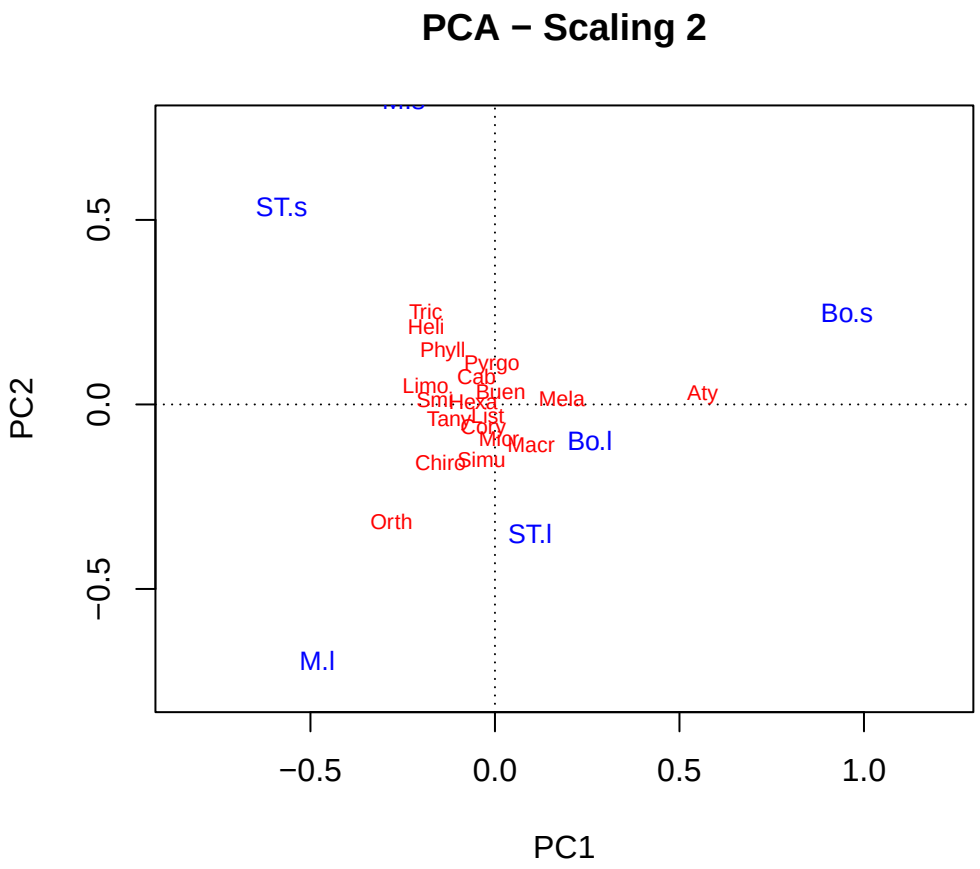


Figura 3.19: Ordenación de las localidades y los taxones, con scaling 2.

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`".

```
biplot(pca2, choices = c(1, 2),type = "n",scaling =2,
       main="PCA - Scaling 2",cex=2)   # Panel gráfico
text(pca2, display="sites", cex=0.8,
     col="blue", lwd=1.5, pos=3)       # Figura de sitios y Épocas
ordi=orditorp(pca2, display = "species",
     shrink = FALSE, col = "red", type="n") # Taxones Filtrados
points(pca2, display = "sites",
```

```
      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)
```

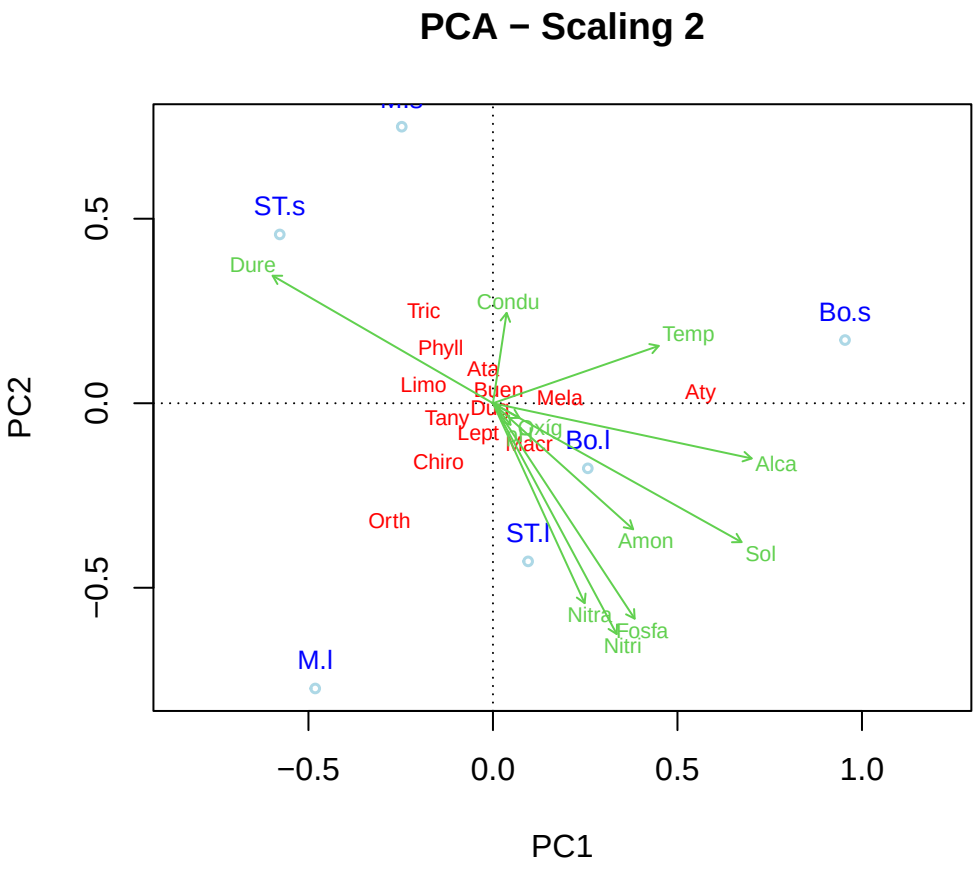


Figura 3.20: Ordenación de las localidades, los taxones y las variables ambientales

#—-

4) PCA con paquete ggplot2

Realización pca de los paquetes factoextra y ggbiplot Para gererar las coordenadas de los sitios y taxones

```r
# Nuevamente el pca
pca3 <- prcomp(tax.hel)
```

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

```r
coord.sit <- as.data.frame(pca3$x[,1:2])     # Coordenadas de los sitios
coord.sit$sitio <- rownames(coord.sit)       # Crear una columna con nombres de los sitios
coord.sit$grp <-  datos$Epoca                # 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
Bo.s  0.79183051  0.1058759  Bo.s   Seca
M.l  -0.39969319 -0.4779970   M.l Lluvia
ST.l  0.07910077 -0.2650291  ST.l Lluvia
Bo.l  0.21333338 -0.1090797  Bo.l Lluvia
```

4.2 Coordenadas de los taxones "coord.tax"

```r
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)
```

```
              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"

```
amb1 = envfit(pca3,amb)
coord.amb = as.data.frame(scores(amb1, "vectors"))
coord.amb$amb <- rownames(coord.amb)         # Insertar columna con nombres de las ambient
head(coord.amb)
```

```
              PC1        PC2   amb
Alca   0.84803475 -0.2427936  Alca
Condu  0.03410165  0.3025273 Condu
Dure  -0.67034682  0.5206620  Dure
Fosfa  0.37835304 -0.7719269 Fosfa
Nitri  0.32400015 -0.8109169 Nitri
Nitra  0.23720481 -0.6939225 Nitra
```

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())
```

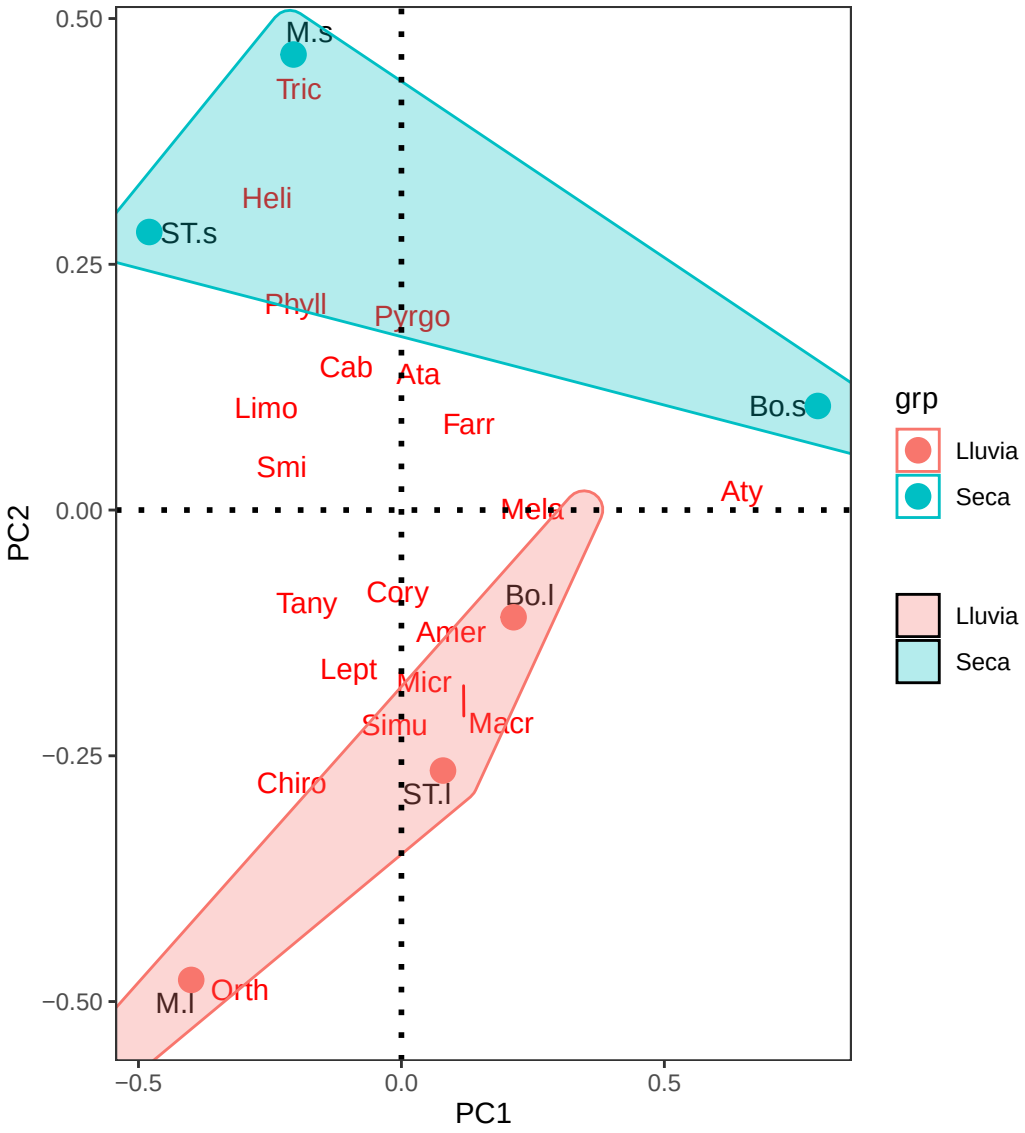


Figura 3.21: Ordenación de las localidades, los taxones y los periodos climáticos.

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())
```

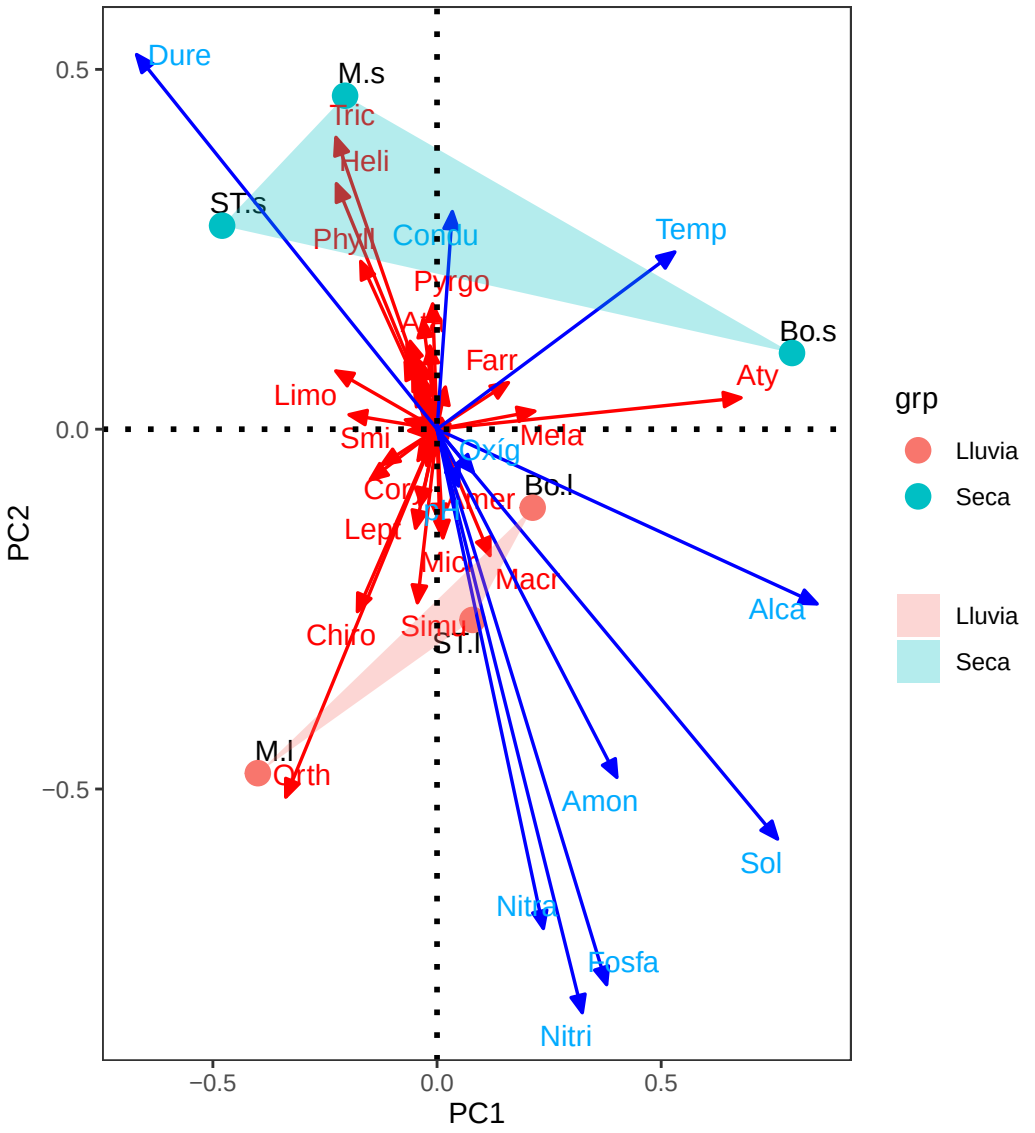


Figura 3.22: las localidades, los taxones, las variables ambientales y los periodos climáticos.

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

```
# Librerías 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)
```

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
```

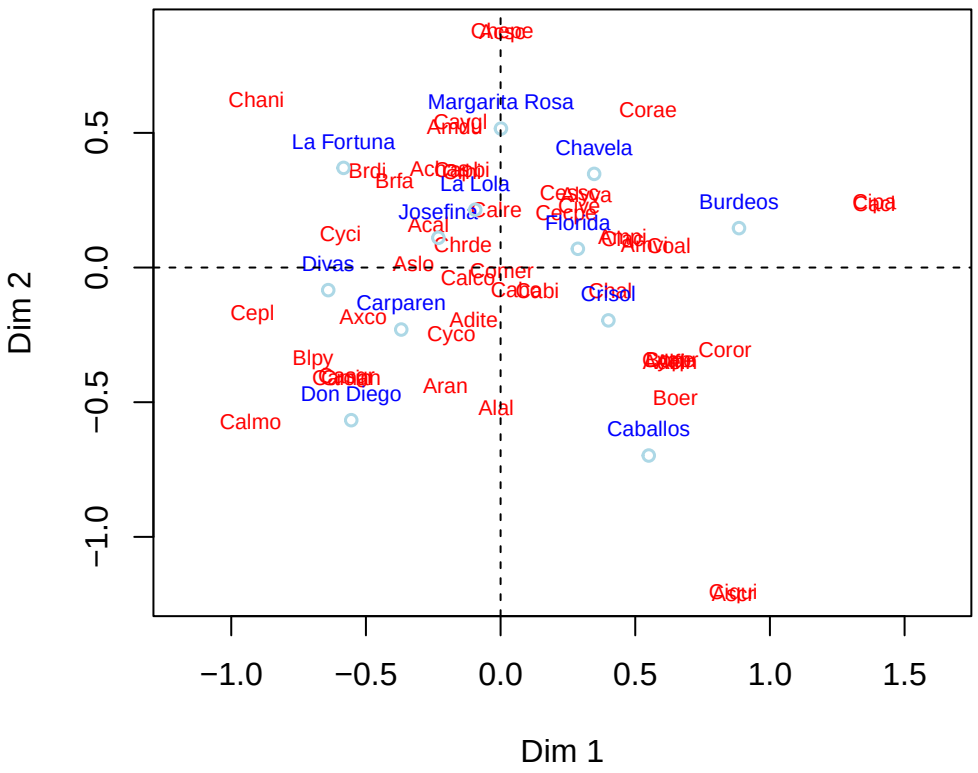
```
Call:
metaMDS(comm = datos[, 3:52], distance = "jaccard", trace = FALSE)

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.

```r
x11()
fig=plot(datos.nmds, type = "t",display = c("n", "species"),
         ylab="Dim 2", xlab="Dim 1", cex=0.7,shrink = FALSE)
# Texto
text(datos.nmds, display="sites", labels = as.character(datos$Finca),
     cex=0.7, col="blue", lwd=1.5, pos=3)
# Puntos *opcionales
points(datos.nmds, display = "sites",cex = 0.8,
       col = "lightblue", lwd=1.5)
# plano cartesiano
abline(h=0,lty=2)
abline(v=0,lty=2)
```

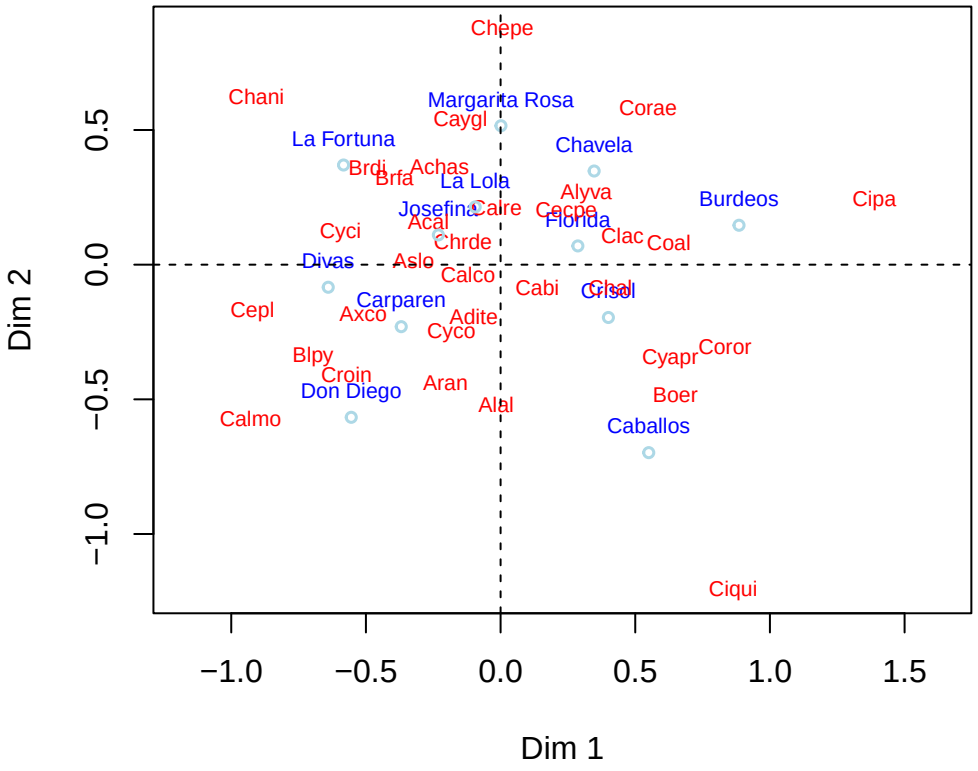


2.2 Ordenación con el comando "orditorp"

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.

```
x11()
fig=plot(datos.nmds, type = "n",display = c("n", "species"),
         ylab="Dim 2", xlab="Dim 1", ex=0.7,shrink = FALSE)
#
text(datos.nmds, display="sites", labels = as.character(datos$Finca),
     cex=0.7, col="blue", lwd=1.5, pos=3)
#
ordi=orditorp(datos.nmds, display = "species",
```

```
              shrink = FALSE, col = "red", type="n")
#
points(datos.nmds, display = "sites",cex = 0.7,
       col = "lightblue", lwd=1.5)
abline(h=0,lty=2)
abline(v=0,lty=2)
```



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"       "nfix"       "ndim"       "ndis"       "ngrp"
 [6] "diss"       "iidx"       "jidx"       "xinit"      "istart"
[11] "isform"     "ities"      "iregn"      "iscal"      "maxits"
[16] "sratmx"     "strmin"     "sfgrmn"     "dist"       "dhat"
[21] "points"     "stress"     "grstress"   "iters"      "icause"
[26] "call"       "model"      "distmethod" "distcall"   "data"
[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.

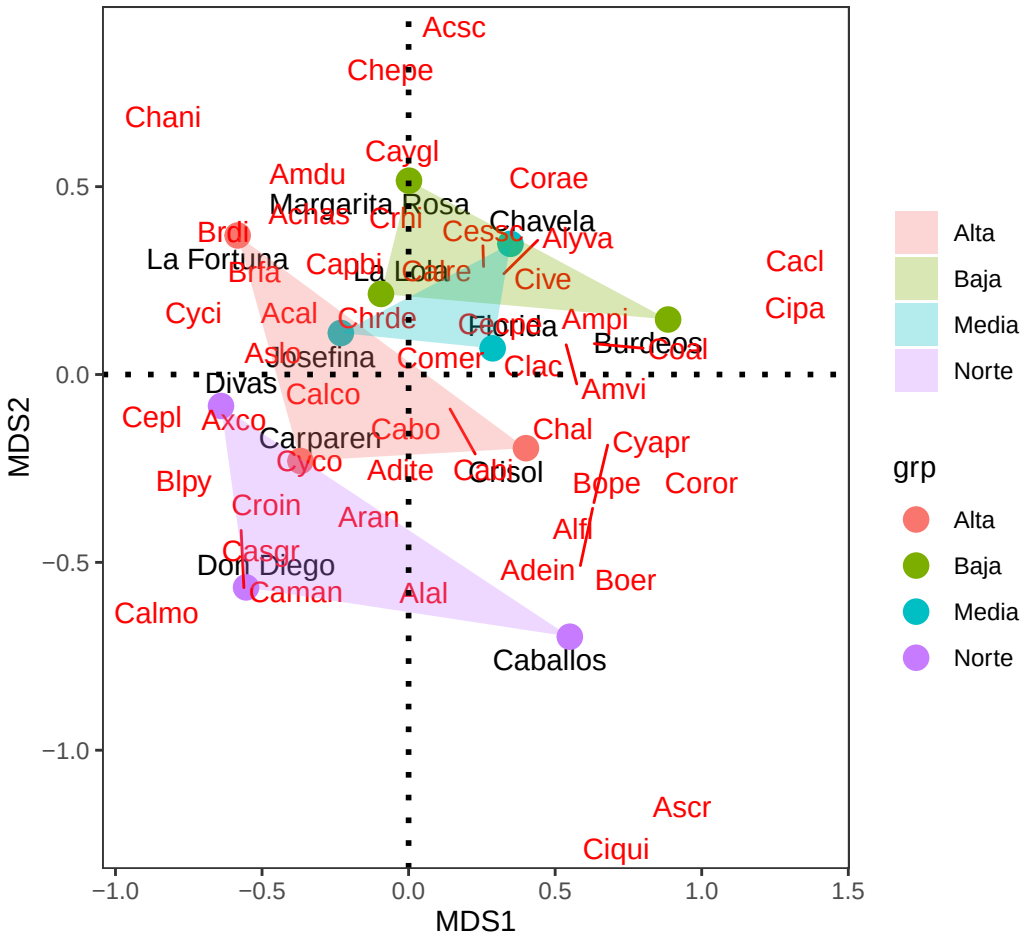
```
# 2) Coordenadasde las especies (coord.tax)
coord.tax <- as.data.frame(datos.nmds$species)  # Dos primeros ejes
coord.tax$especies <- rownames(coord.tax)       # Insertar columna con nombres de las espe
head(coord.tax)
```

```
              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)
```

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)
```

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.

```r
# 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
  ...1   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>   <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
```

```r
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.

```r
# 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)
 $ ...1         : 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 ...
 $ Origen       : Factor w/ 2 levels "Origen.i","Origen.n": 2 2 2 2 1 2 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 ...
 $ Proveedor    : Factor w/ 3 levels "Proveedor.i",..: 1 1 1 1 3 1 1 1 1 1 ...
 $ Sit.comp     : Factor w/ 6 levels "Sit.comp.c","Sit.comp.o",..: 3 3 3 3 6 3 3 3 4 4 ...
```

```
 $ Frec.compra  : Factor w/ 3 levels "Frec.compra.d",..: 3 3 1 3 3 3 3 3 3 3 ...
 $ Transform    : Factor w/ 3 levels "Transform.c",..: 2 2 2 1 2 1 2 1 1 1 ...
 $ Conserv      : Factor w/ 2 levels "Conserv.c","Conserv.sa": 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 ...
 $ Transporte   : Factor w/ 3 levels "Transporte.m",..: 3 3 2 3 3 3 3 2 3 3 ...
 $ Cliente.prim.: Factor w/ 3 levels "Cliente.prim.c",..: 1 3 1 1 3 1 1 1 1 1 ...
 $ Cliente.sec. : Factor w/ 5 levels "Cliente.sec.c",..: 2 2 2 4 3 4 2 2 2 2 ...
 $ Cliente.ter. : Factor w/ 5 levels "Cliente.ter.c",..: 3 4 3 3 3 3 4 3 3 3 ...
```

```r
View(datos.activos[,c(2:15)])
mca1 <- MCA(datos.activos[,c(2:15)], graph = FALSE)
summary(mca1)
```

```
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)
```

```
               Dim.1    ctr   cos2    Dim.2    ctr   cos2    Dim.3    ctr
1            | -0.171  0.075  0.086 | -0.077  0.030  0.017 |  0.022  0.003
2            | -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            | -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            | -0.207  0.109  0.065 | -0.157  0.124  0.037 |  0.200  0.233
8            | -0.300  0.230  0.090 | -0.046  0.011  0.002 |  0.053  0.016
9            | -0.310  0.245  0.111 |  0.071  0.025  0.006 | -0.250  0.363
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 |
9            0.072 |
10           0.072 |

Categories (the 10 first)
               Dim.1    ctr   cos2 v.test    Dim.2    ctr   cos2 v.test
Importado.F  | -0.241  0.984  0.770 -8.730 | -0.013  0.005  0.002 -0.457 |
Importado.v  |  3.198 13.079  0.770  8.730 |  0.167  0.071  0.002  0.457 |
Origen.i     |  3.198 13.079  0.770  8.730 |  0.167  0.071  0.002  0.457 |
Origen.n     | -0.241  0.984  0.770 -8.730 | -0.013  0.005  0.002 -0.457 |
Destino.c    |  0.126  0.012  0.001  0.255 |  2.133  6.589  0.190  4.332 |
Destino.i    | -0.005  0.000  0.001 -0.255 | -0.089  0.275  0.190 -4.332 |
Tipo.prod.p  |  0.000  0.000    NaN    NaN |  0.000  0.000    NaN    NaN |
Proveedor.i  | -0.250  1.018  0.506 -7.080 | -0.112  0.404  0.102 -3.170 |
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 |
Origen.n      0.083  0.264  0.091  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 |
```

```
Proveedor.i   0.015  0.008  0.002  0.412 |
Proveedor.o  -0.005  0.000  0.000 -0.009 |
Proveedor.pa -0.160  0.085  0.002 -0.470 |

Categorical variables (eta2)
               Dim.1 Dim.2 Dim.3
Importado    | 0.770 0.002 0.091 |
Origen       | 0.770 0.002 0.091 |
Destino      | 0.001 0.190 0.107 |
Tipo.prod    | 0.000 0.000 0.000 |
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 4.2, se grafican los resultados de la tabla anterior.

```
# Figura de autovalores (para la escogencia de variables)
x11()
fviz_screeplot(mca1, addlabels = TRUE, ylim = c(0, 20),
               ylab = "% Varianza explicada", xlab = "Dimensiones",
               col="steelblue")
```

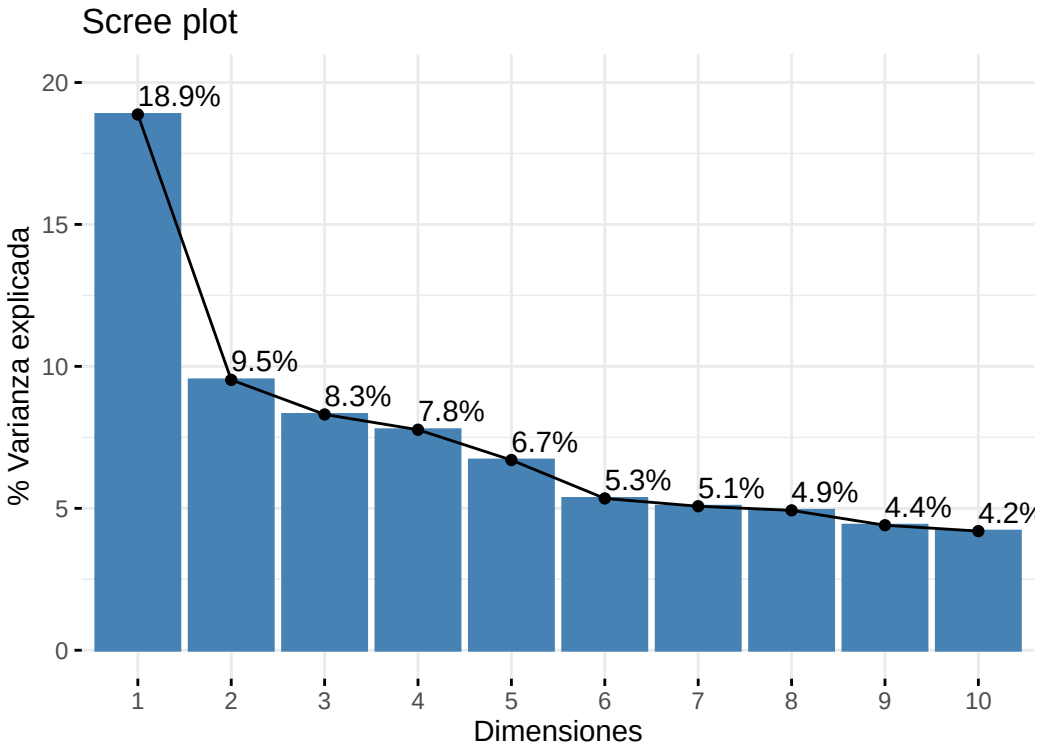


Figura 3.23: Varianza capturada por cada eje canónico

2.2) Figuras generales del mca1

La Figura 4.3 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,
```

```
        ggtheme = theme_minimal())
```

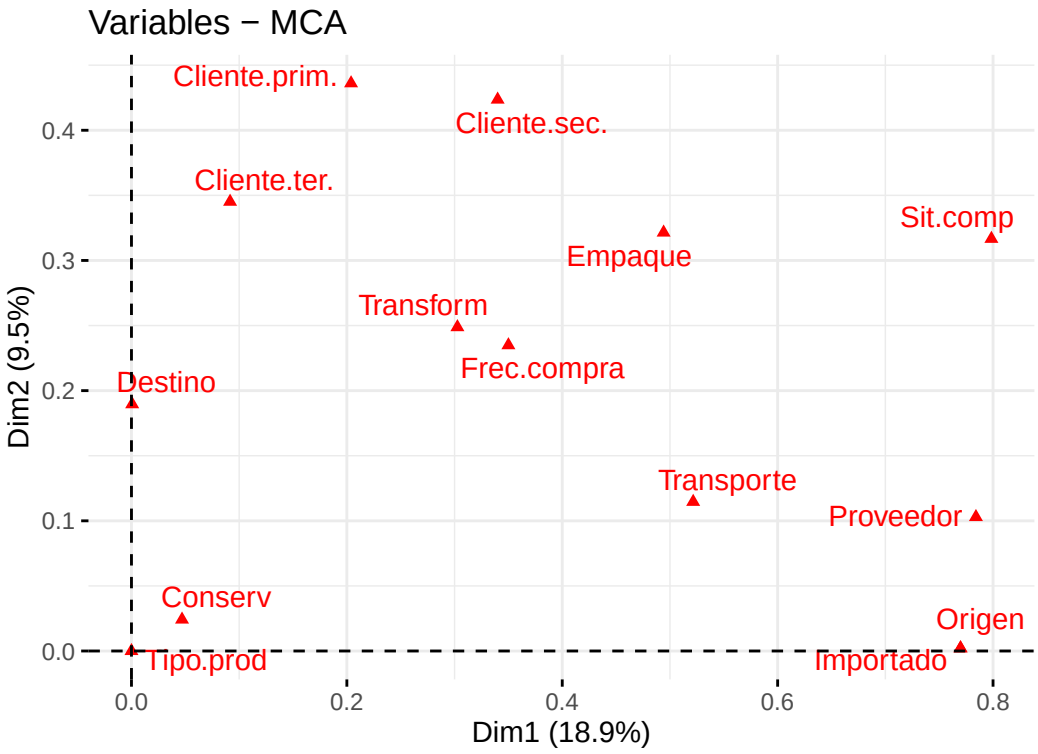


Figura 3.24: Ordenación de las variables que más contribuyen al análisis

La Figura 4.4 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 del Biplot de ordenación registros de peces y de variables
x11()
fviz_mca_biplot(mca1, choice = "mca.cor",repel = TRUE,
                ggtheme = theme_minimal())
```

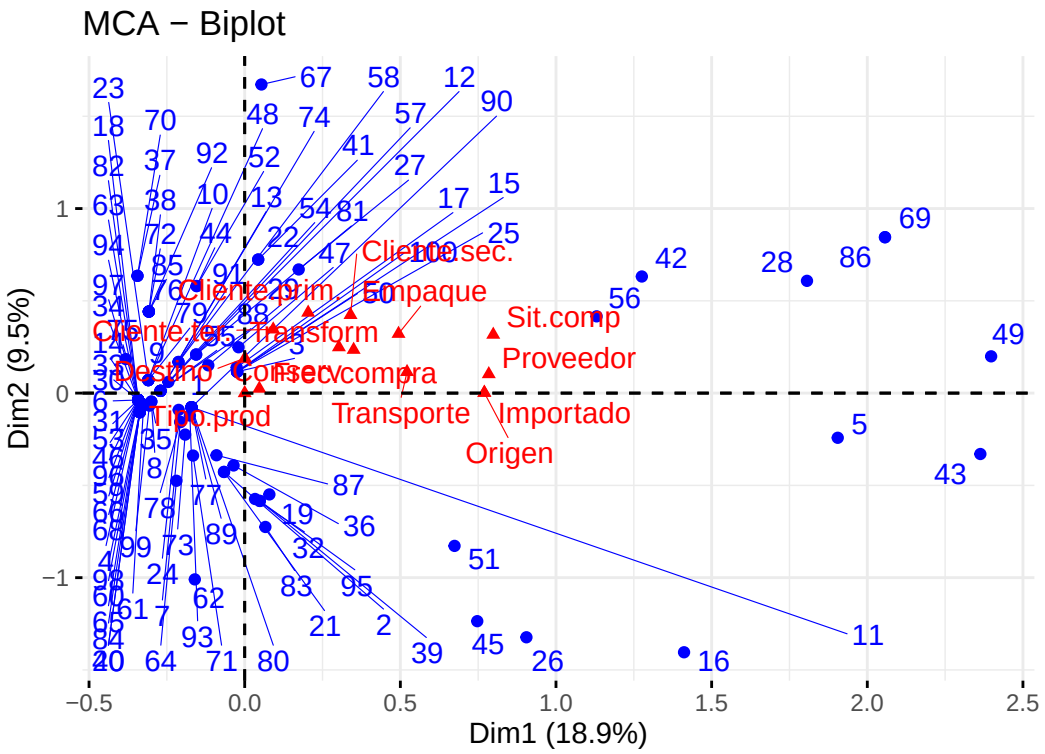


Figura 3.25: Ordenación de las variables que más contribuyen al análisis y de las observaciones (registros de peces)

La Figura 3.53 define a l00 registros de peces con todas las variables activas y sus categorías (no incluye al comando "mca.cor").

```
# Figura del Biplot de ordenación para registros de peces y categoricas de las variables
x11()
fviz_mca_biplot(mca1, repel = TRUE,
                ggtheme = theme_minimal())
```

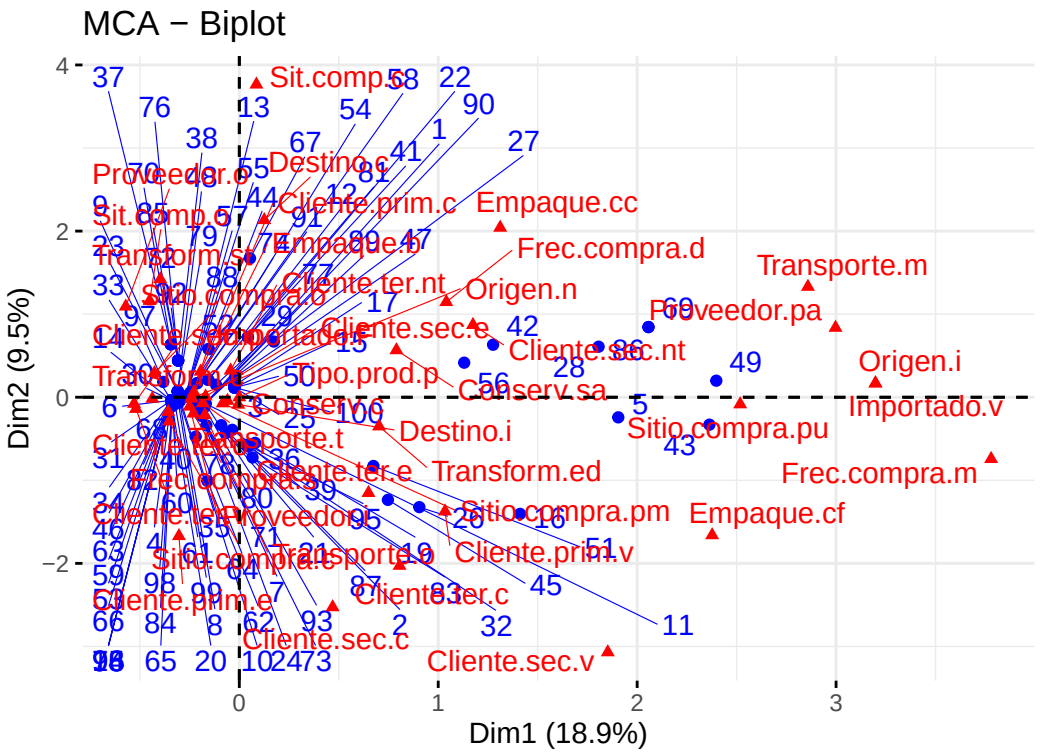


Figura 3.26: Ordenación de todas las variables activas y de las observaciones (registros de peces)

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).

```
# Contribuciones de las observaciones (filas de la la base de bagres)
x11()
fviz_mca_ind(mca1, col.ind = "cos2",
             gradient.cols = c("#00AFBB", "#E7B800", "#FC4E07"),
             repel = TRUE,
             ggtheme = theme_minimal())
```

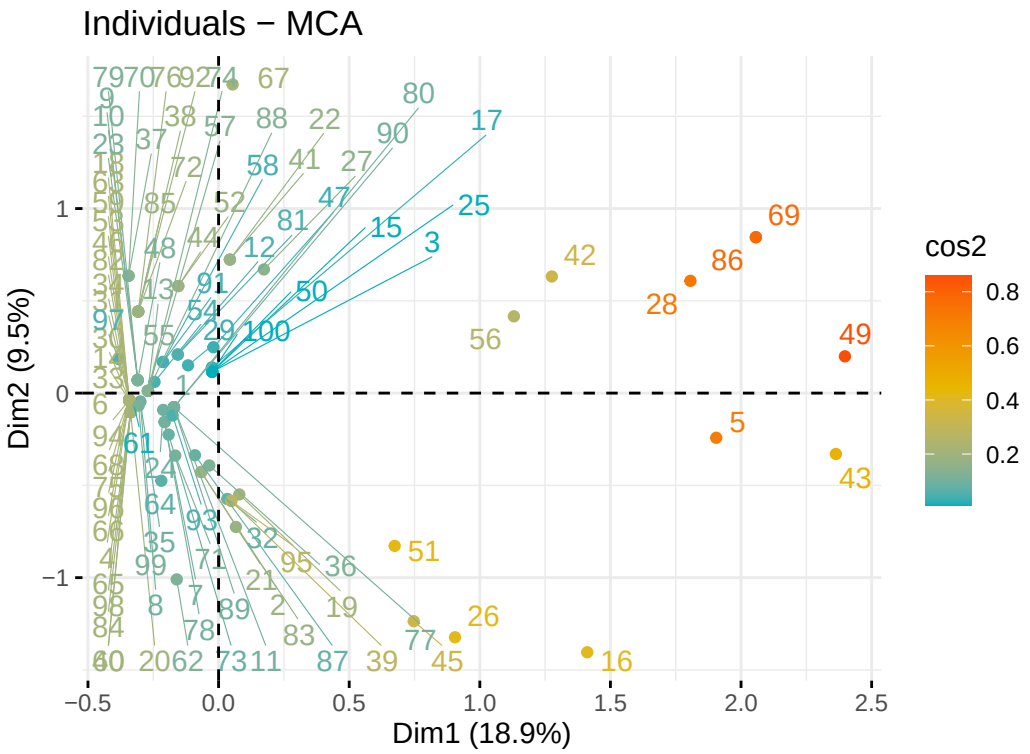


Figura 3.27: Ordenación de las observaciones (registros de peces) y su nivel de contribución al análisis.

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).

```
# Contribuciones de las variables categóricas (columnas de variables activas)
x11()
fviz_mca_var(mca1, col.var = "cos2",
             gradient.cols = c("#00AFBB", "#E7B800", "#FC4E07"),
             repel = TRUE, ggtheme = theme_minimal())
```

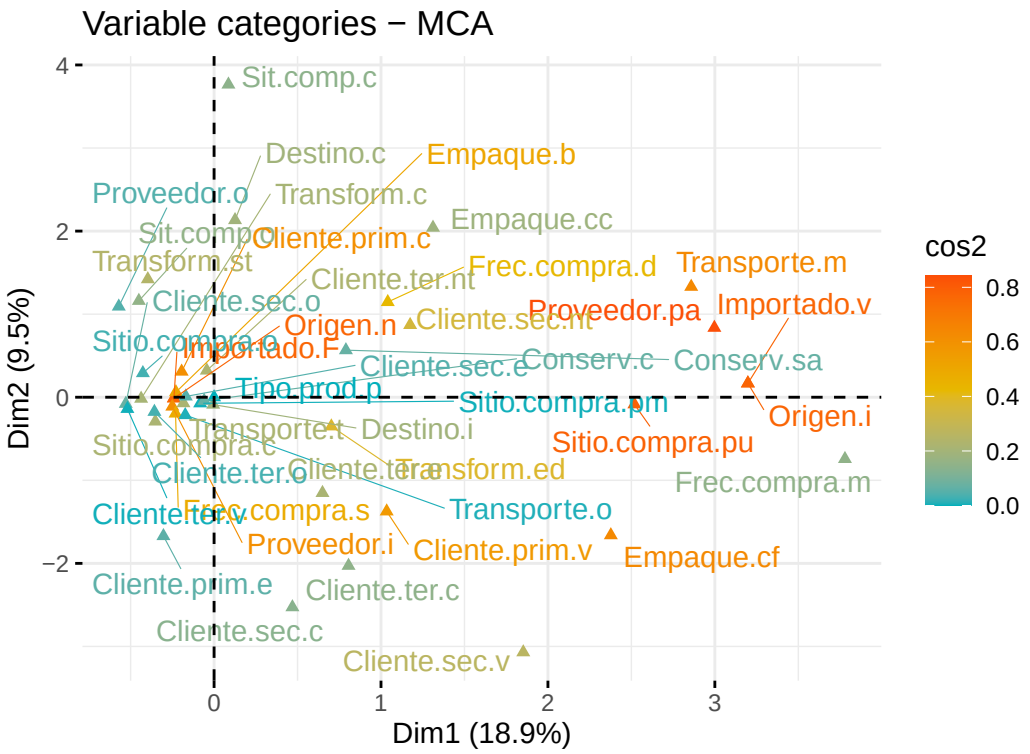


Figura 3.28: Ordenación de las variables activas y su nivel de contribución al análisis.

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)

```r
# Pasar nombres de los bagres a factor
bagres <- read_excel("bagres.xlsx")    # 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],
                              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 ...
 $ Venta.kg         : num  150 1000 150 50 2200 20 30 20 50 35 ...
 $ Precio.venta     : num  18000 14000 16000 19000 13000 24000 24000 22000 22000 18000 ...
 $ Importado        : Factor w/ 2 levels "Importado.F",..: 1 1 1 1 2 1 1 1 1 1 ...
 $ Origen           : Factor w/ 2 levels "Origen.i","Origen.n": 2 2 2 2 1 2 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 ...
 $ Proveedor        : Factor w/ 3 levels "Proveedor.i",..: 1 1 1 1 3 1 1 1 1 1 ...
 $ Sit.comp         : Factor w/ 6 levels "Sit.comp.c","Sit.comp.o",..: 3 3 3 3 6 3 3 3 4 4 .
 $ Frec.compra      : Factor w/ 3 levels "Frec.compra.d",..: 3 3 1 3 3 3 3 3 3 3 ...
 $ Transform        : Factor w/ 3 levels "Transform.c",..: 2 2 2 1 2 1 2 1 1 1 ...
 $ Conserv          : Factor w/ 2 levels "Conserv.c","Conserv.sa": 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 ..
 $ Transporte       : Factor w/ 3 levels "Transporte.m",..: 3 3 2 3 3 3 3 2 3 3 ...
 $ Cliente.prim.    : Factor w/ 3 levels "Cliente.prim.c",..: 1 3 1 1 3 1 1 1 1 1 ...
 $ Cliente.sec.     : Factor w/ 5 levels "Cliente.sec.c",..: 2 2 2 4 3 4 2 2 2 2 ...
 $ 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)

```r
# mca con nombres de los bagres (quali.sup) y variables cuantitativas (cuanti sub)
mca2  <- MCA (datos.activos.1,
              quali.sup = 1,            # Registros de peces (X)
              quanti.sup = 2:3,         # 2 y 3 son Variables cuantitativas
              graph=FALSE)
```

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

```
# Figura de las variables suplementarias (azul) y las activas (rojo)
x11()
fviz_mca_var(mca2,
             choice = "mca.cor",    # Principales variables cualitativas
             repel = TRUE)          # Quita el solapamiento de las variables.
```

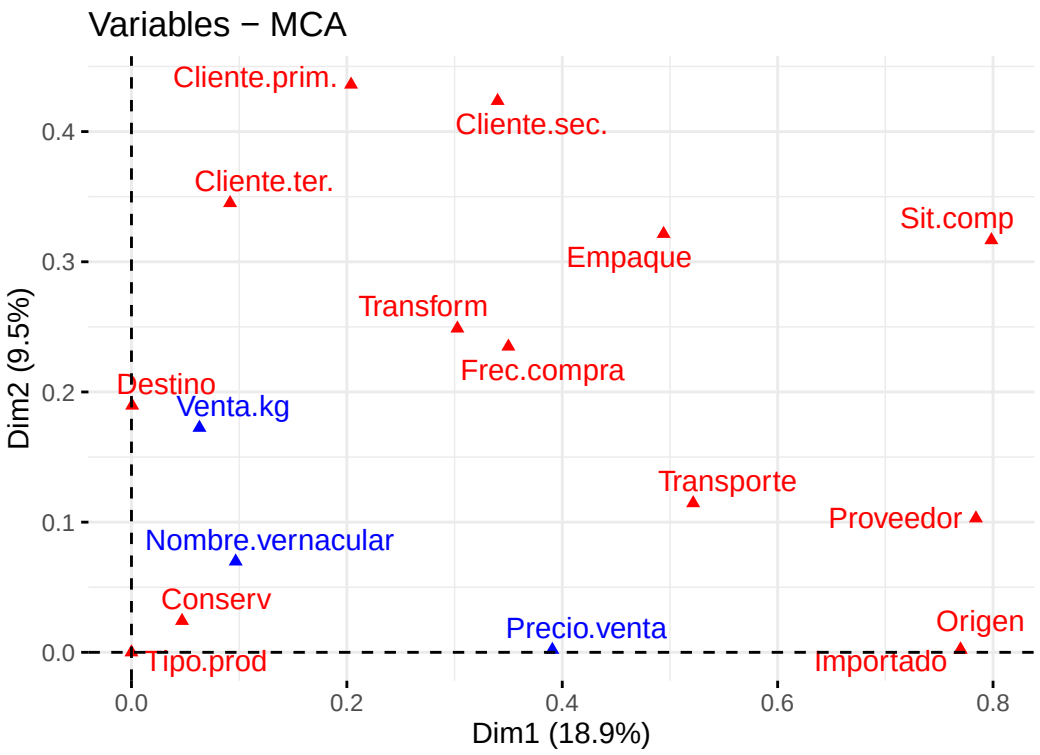


Figura 3.29: Ordenación de las variables activas y su nivel de contribución al análisis.

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

```
# Figura de las variables suplementarias (verde), las activas (rojo) y los individuos (azu
x11()
fviz_mca_biplot(mca2, repel = TRUE,
                geom.ind = c("n", "n"),    # No mostrar a los individuos
                ggtheme = theme_bw())      # Puede usar temas de "ggplot2"
```

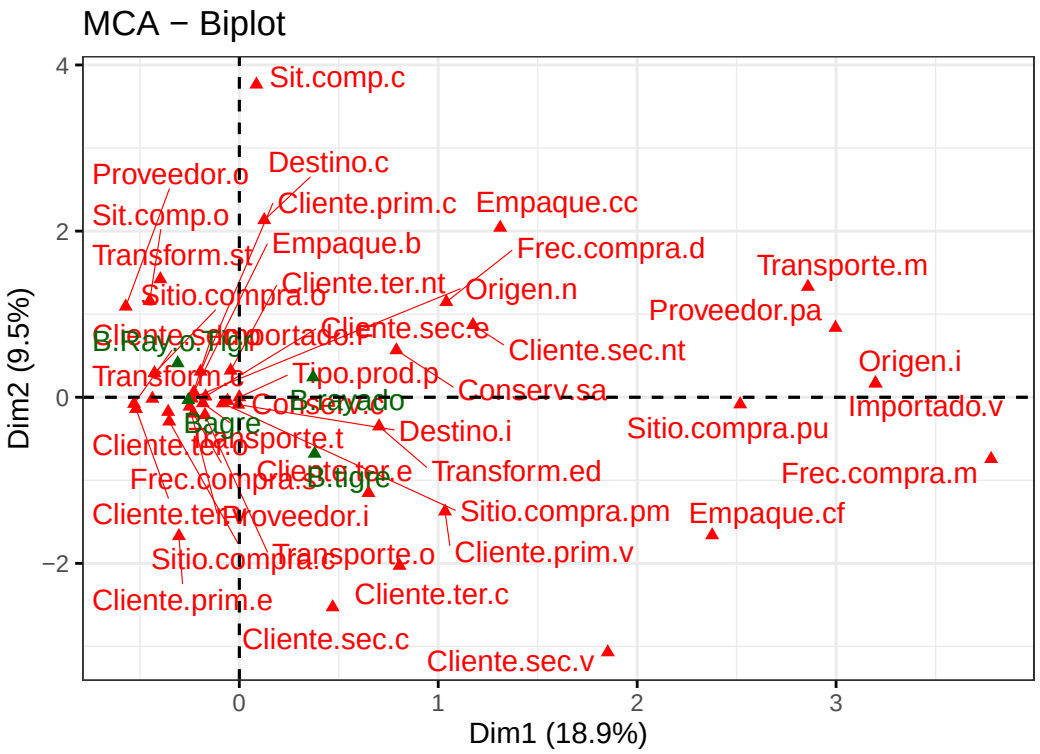


Figura 3.30: Ordenación de todas las variables activas que más contribuyen al análisis (rojo) y su relación co las variables cualitativas suplementarias (verde).

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.

```
# Elipses por cada tipo de bagre
x11()
fviz_ellipses(mca2, "Nombre.vernacular",
              geom = "text", repel = TRUE)
```

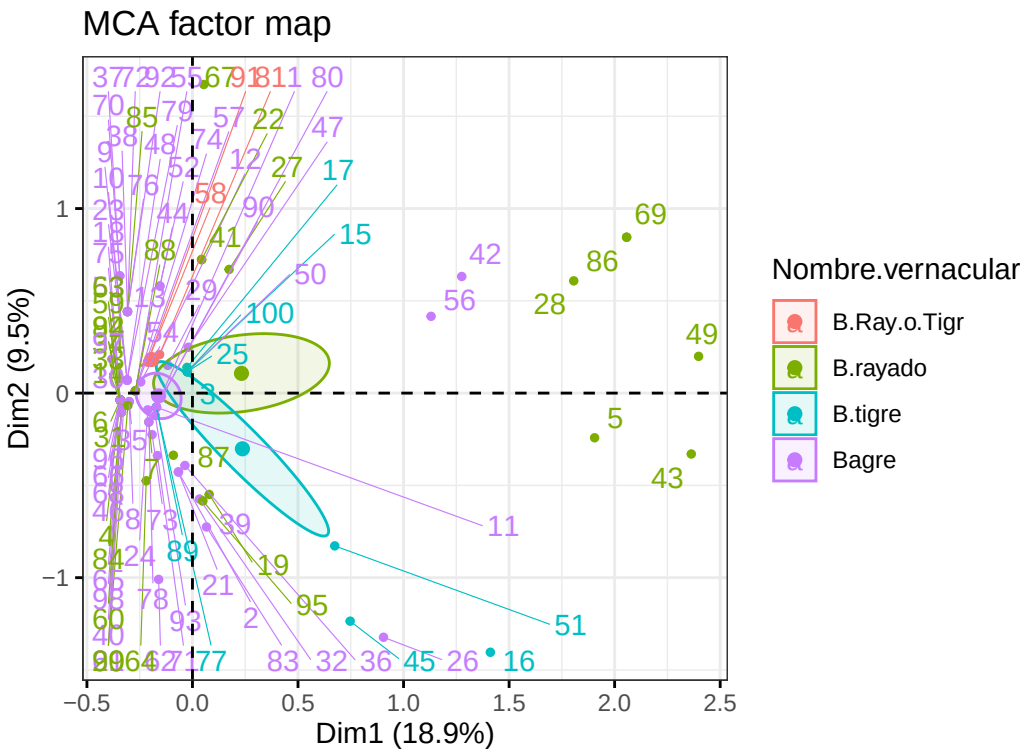


Figura 3.31: Relación entre las especies de bagres y con sus observaciones (registros de peces).

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)
```

```
     Amonio Nitrito Nitrato Oxigeno    pH Conductividad Caudal Vel_Corriente
T1.1   1.30    1.84    1.90    8.68  9.10            77   1.51          1.73
T1.2   1.30    1.78    1.83    7.54  8.45            77   2.59          1.37
T1.3   2.11    2.18    4.43    6.62  8.81            77   2.48          2.15
T1.4   2.02    1.88    3.67    7.08 10.21            77   2.24          2.33
T1.5   1.19    1.15    1.52    6.10 10.24            77   2.32          2.32
T1.6   1.21    1.47    1.90    6.60 10.63            78   2.25          2.29
     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
T1.6 201 18.8
```

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)
```

```
     Fragillaria Lyngbya Chamaepinnularia Achnantes Amphora Caloneis Closterium
T1.1        0.00    0.62             0.10      0.00    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      0.00    0.00     0.00       0.18
T1.4        0.31    0.21             0.23      0.05    0.07     0.14       0.11
T1.5        0.28    0.14             0.22      0.08    0.10     0.12       0.09
T1.6        0.25    0.18             0.19      0.09    0.11     0.19       0.06
     Cocconeis Cymbella Eolimna Epithemia 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
     Gomphonema Melosira Navicula Nitzchia Planothidium Surilella Pinnularia
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     0.25         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.

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.

```
# 1. Realización del RDA
tax.rda<-rda(tax.hel ~.,amb)
tax.rda # Resultados resumidos
```

```
Call: rda(formula = tax.hel ~ Amonio + Nitrito + Nitrato + Oxigeno + pH
+ Conductividad + Caudal + Vel_Corriente + Luz + Temp, data = amb)

              Inertia Proportion Rank
Total         0.14283    1.00000
Constrained   0.07804    0.54640   10
Unconstrained 0.06479    0.45360   13
Inertia is variance

Eigenvalues for constrained axes:
```

```
    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:
     PC1      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.

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

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

Partitioning of variance:
              Inertia Proportion
Total         0.14283     1.0000
Constrained   0.07804     0.5464
Unconstrained 0.06479     0.4536

Eigenvalues, and their contribution to the variance
```

```
Importance of components:
                         RDA1   RDA2     RDA3     RDA4     RDA5     RDA6
Eigenvalue            0.02886 0.0194 0.009741 0.006291 0.004905 0.003407
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    PC2
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
Eigenvalue            0.009607 0.004206 0.002286 0.00204 0.001779 0.001226
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      PC13
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:
                         RDA1   RDA2     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
Eigenvalue            0.002132 0.001938 0.0009267 0.0004403
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
T1.1 -0.608094  0.069700 -0.2659805  0.04600 -0.09435 -0.06431
T1.2 -0.672062 -0.282194 -0.1487709 -0.10561  0.35054 -0.16350
T1.3 -0.356768 -0.237330  0.2273373 -0.54749 -0.12603  0.04596
T1.4  0.009029  0.394109  0.1840858 -0.36486 -0.01351 -0.26989
T1.5 -0.018557  0.506317 -0.0001257 -0.12165 -0.12484  0.38849
T1.6 -0.084608  0.400060  0.0271550 -0.29946 -0.05580  0.08539
T1.7 -0.058104  0.306643 -0.2006076  0.20594  0.15177  0.29384
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
pH             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")
```

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
pH              0.07  0.07  0.04
Conductividad -0.02  0.01 -0.01
Caudal          0.10 -0.28  0.00
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
```

Paso 4. Figura de Triplot

A continuación, se realizará la gráfica del RDA (figura Triplot) (Figura 4.2), que relaciona a los tres elementos: taxones, variables ambientales y sitios de muestreo mediante dos tipos de escalamiento (Scalings 1 y 2).

```
dev.new(title = "RDA scaling 1 y 2",
        width = 16,height = 8,noRStudioGD = TRUE)
par(mfrow = c(1, 2))
# Scaling 1
plot(tax.rda,scaling=1, display = c("sp", "lc", "cn"), main="RDA - scaling 1")
# Scaling 2
plot(tax.rda, display = c("sp", "lc", "cn"), main="RDA - scaling 2")

par(mfrow = c(1, 1))
```

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
```

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

```
Permutation test for rda under reduced model
Permutation: free
Number of permutations: 1000

Model: rda(formula = tax.hel ~ Amonio + Nitrito + Nitrato + Oxigeno + pH + Conductividad + Ca
          Df Variance      F  Pr(>F)
Model     10 0.078044 1.5659 0.04595 *
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.

```r
# 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 + Ca
          Df Variance      F Pr(>F)
RDA1       1 0.028864 5.7914 0.1389
RDA2       1 0.019400 3.8926 0.3766
RDA3       1 0.009741 1.9544 0.9361
RDA4       1 0.006291 1.2622 0.9970
RDA5       1 0.004905 0.9842 0.9960
RDA6       1 0.003407 0.6835 1.0000
RDA7       1 0.002132 0.4278 1.0000
RDA8       1 0.001938 0.3888 0.9990
RDA9       1 0.000927 0.1859 1.0000
RDA10      1 0.000440 0.0884 0.9990
Residual  13 0.064790
```

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

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

```
      Amonio       Nitrito       Nitrato       Oxigeno            pH
        1.40          2.02          1.61          1.22          1.47
Conductividad        Caudal Vel_Corriente           Luz          Temp
        9.28          7.46          4.85          2.04          2.31
```

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.sel`permitirá 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))
```

```
Start: tax.hel ~ Amonio + Nitrito + Nitrato + Oxigeno + pH + Conductividad +      Caudal + Ve

                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
- pH             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_Corriente

                Df     AIC      F Pr(>F)
- Nitrito        1 -46.555 0.7127  0.626
- Caudal         1 -46.216 0.9222  0.424
- pH             1 -45.915 1.1104  0.398
- Amonio         1 -46.112 0.9867  0.392
- Luz            1 -45.947 1.0903  0.336
- Oxigeno        1 -45.753 1.2124  0.264
- Temp           1 -45.284 1.5132  0.176
- 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 + T

                Df     AIC      F Pr(>F)
- Caudal         1 -47.100 0.9375  0.436
- Amonio         1 -46.967 1.0261  0.370
- Luz            1 -46.842 1.1100  0.334
- pH             1 -46.802 1.1365  0.258
- Oxigeno        1 -46.620 1.2591  0.210
- Vel_Corriente  1 -44.635 2.6618  0.052 .
- Temp           1 -45.383 2.1193  0.046 *
- 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
- pH             1 -47.448 1.1398  0.320
- Oxigeno        1 -47.387 1.1836  0.298
- 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
- pH             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)
- pH             1 -48.466 1.3708  0.172
- Vel_Corriente  1 -46.305 3.2899  0.012 *
- Temp           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)
- Temp           1 -47.549 2.5845  0.018 *
- 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))
```

```
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:
    PC1     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)
```

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")
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")
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`”).

```
# Insumos del RDA parsimonioso o que resume a las tres variables
(rda.pars <- rda(tax.hel ~ Temp + Vel_Corriente + Conductividad, data = amb))   # RDA resu
```

```
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:
    PC1     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)
```

```r
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"

```r
# 1) Coordenadas de los sitios y el factor (coord.sit)
coord.sit <- as.data.frame(scores(rda.pars,
                                  choices = 1:2, display = "sites"))     # Coordenadas de
coord.sit$sitio <- rownames(coord.sit)      # Crear una columna con nombres de los sitios
coord.sit$grp <-  datos$Tributario              # Adicionar columna de grupos por Tributa
head(coord.sit)                             # vista resumida de las coordenadas de sitios
```

```
           RDA1        RDA2 sitio grp
T1.1 -1.11971663 -0.30601405  T1.1  T1
T1.2 -0.85825274 -0.42028232  T1.2  T1
T1.3 -0.18370421 -0.36439466  T1.3  T1
T1.4 -0.12410643  0.08403049  T1.4  T1
T1.5 -0.02273675  0.46138698  T1.5  T1
T1.6 -0.10175889  0.47796564  T1.6  T1
```

12.2 Coordenadas de los taxones "coord.tax"

```
# 2) Coordenadasde las especies (coord.tax)
coord.tax <- as.data.frame(scores(rda.pars,
                                  choices = 1:2, display = "sp"))    # Dos primeros ejes
coord.tax$especies <- rownames(coord.tax)       # Insertar columna con nombres de las espe
head(coord.tax)
```

```
                      RDA1         RDA2         especies
Fragillaria       0.18835404 -0.111108636      Fragillaria
Lyngbya          -0.41883579  0.006822599          Lyngbya
Chamaepinnularia  0.09146325  0.064258294 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)
```

```
                    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

```
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))+
```

```
# Taxones
geom_segment(data = coord.tax,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 = "red")+
geom_text_repel(data = coord.tax,aes(RDA1,RDA2,label=especies),colour = "red")+
# Factor
geom_polygon(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())
```

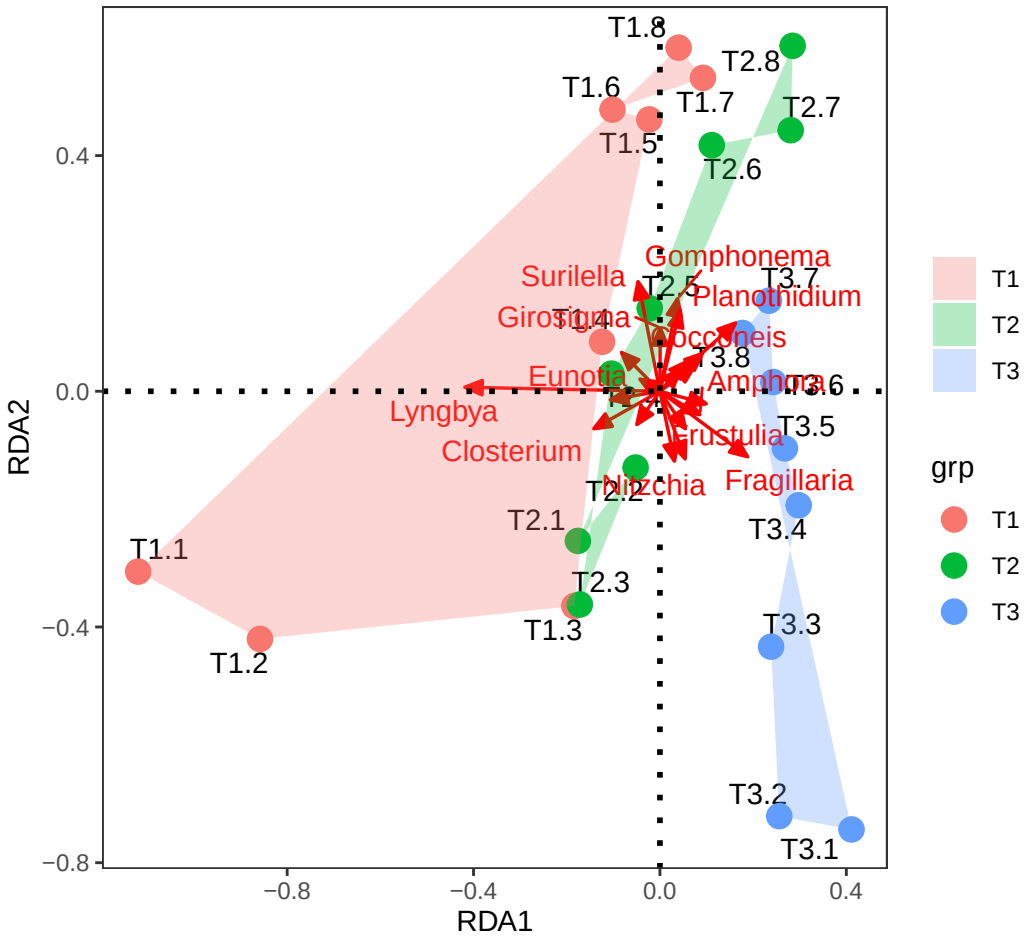


Figura 3.32: Figuras del RDA con las variables biológicas y los sitios

12.5 Figura con vectores de especies (sin flechas)

```
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))+
  # Taxones  *valores de cero para caracteres de las flechas (arrow)
  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")+
# Factor
geom_polygon(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())
```

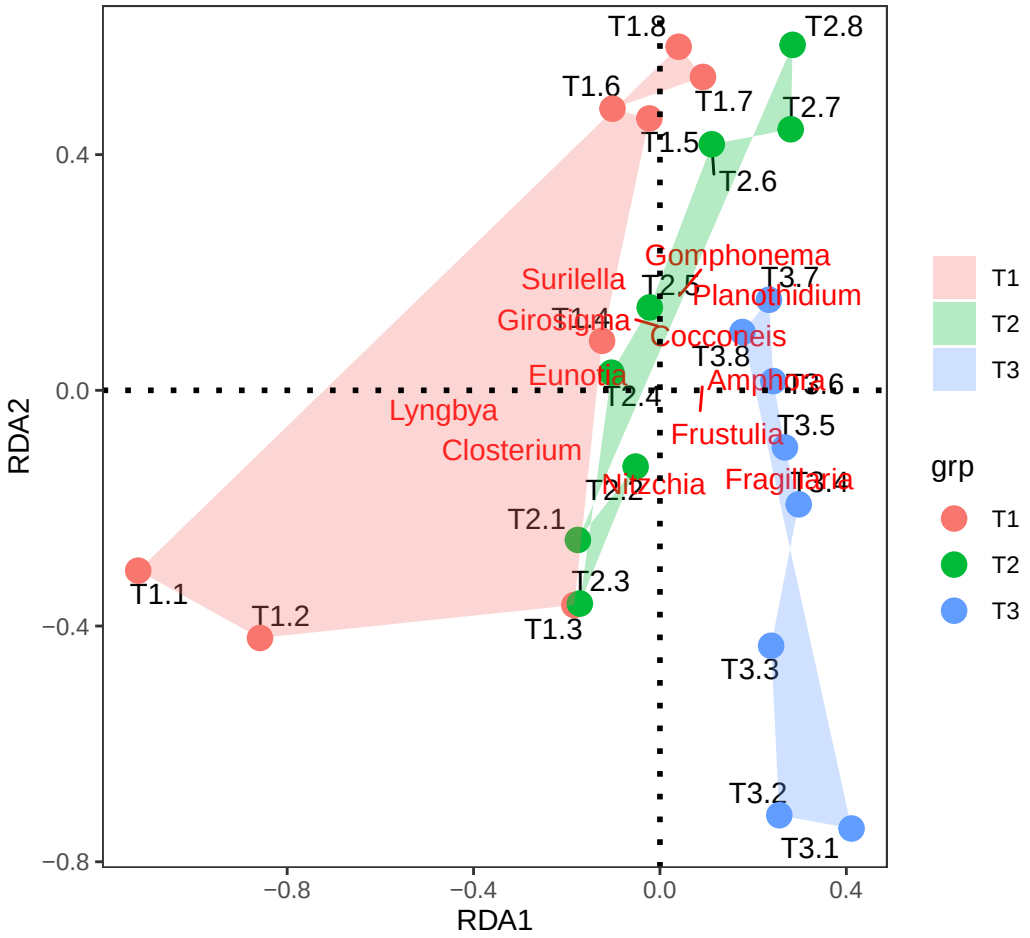


Figura 3.33: Figuras del RDA con las variables biológicas y los sitios

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())
```

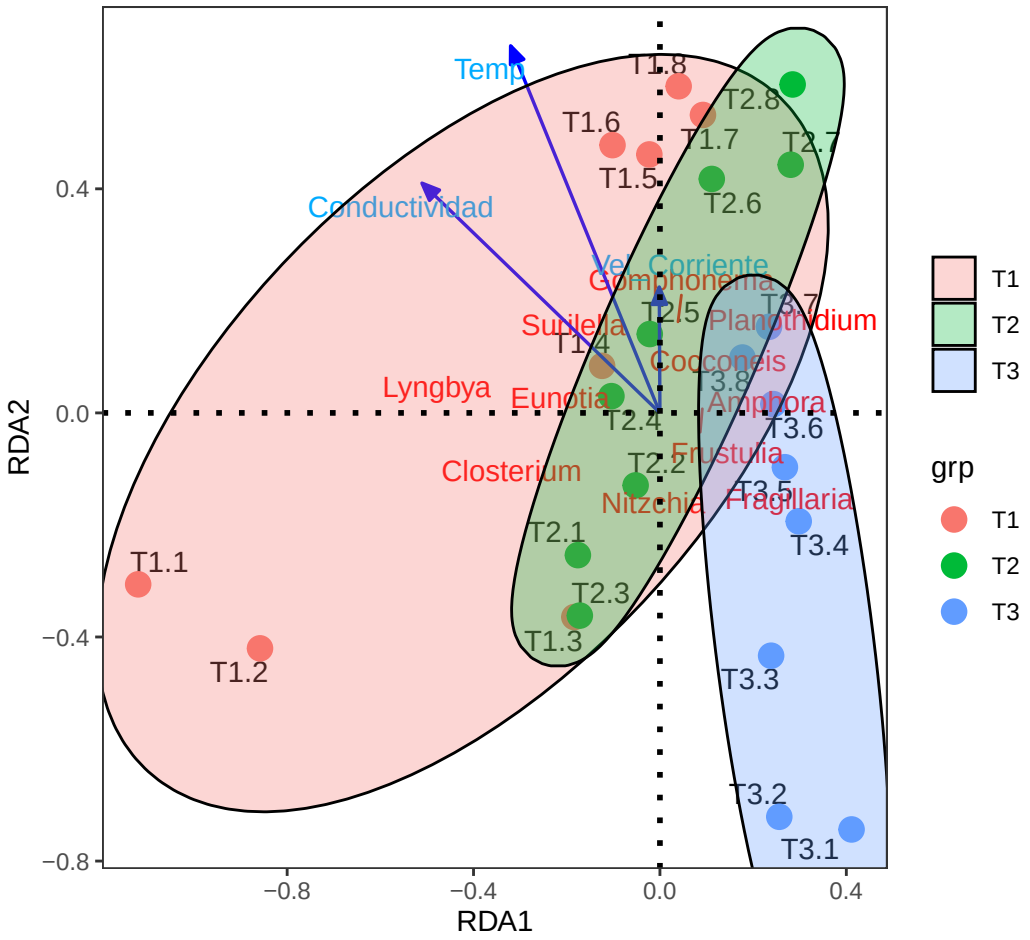


Figura 3.34: Figuras del RDA con las variables biológicas, las ambientales y los sitios

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)
```

La Figura 4.2 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
```

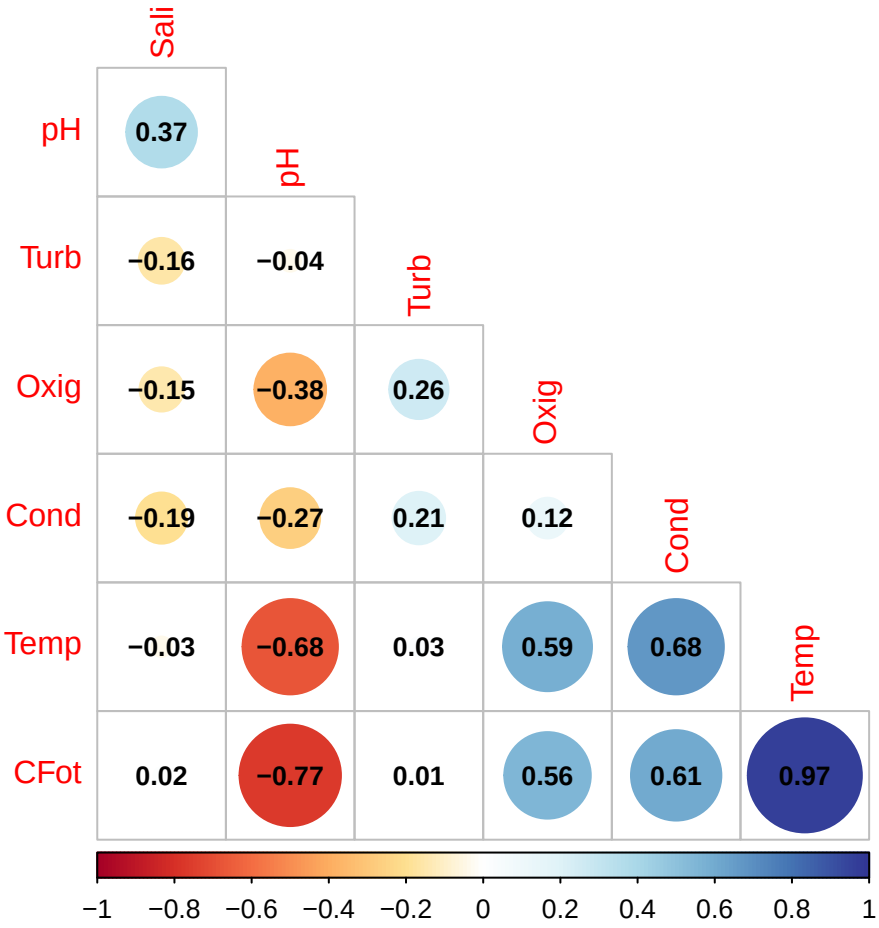


Figura 3.35: Correlaciones y coeficientes de correlación.

La Figura 4.3 es otra posigilidad para visualizar la relación entre las parejas de variables, pero además incluye páneles que visualizan la dispersión de los datos.

```
library(GGally)
x11()
ggpairs(data=datos[,c(2:8)],
        diag = list(continuous = "densityDiag"),
        upper = list(combo = "box"),
        lower = list(combo = "dot", aes(fill = Sitio))) +
  scale_fill_brewer(palette = "Set1") +
  theme(axis.text.x = element_text(angle = 90, vjust = 0.5))
```

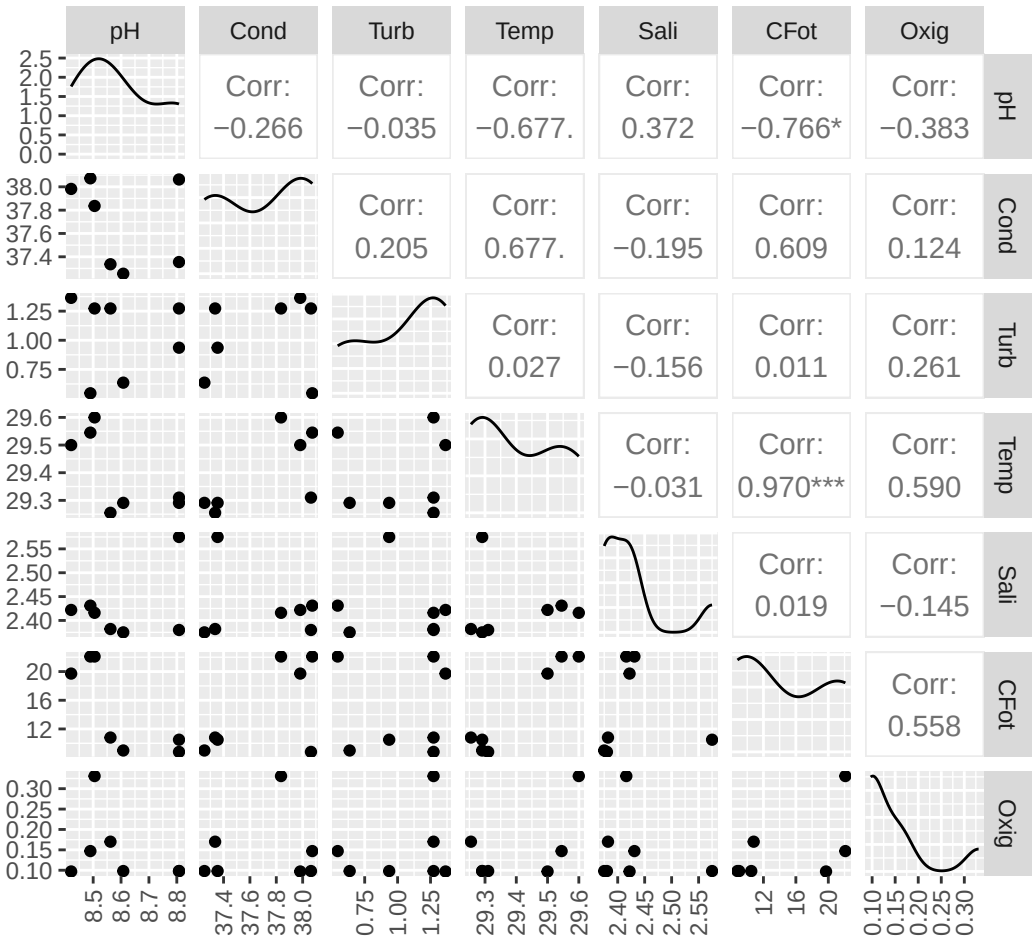


Figura 3.36: Correlaciones, dispersión y coeficientes de correlación.

La Figura 4.4 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.

```
library(GGally)
x11()
ggpairs(datos[,c(2:8)], aes(color=datos$Sitio),
        diag = list(continuous = "densityDiag"),
        upper = list(combo = "box"),
        lower = list(combo = "dot")) +
  theme(axis.text.x = element_text(angle = 90, vjust = 0.5))
```

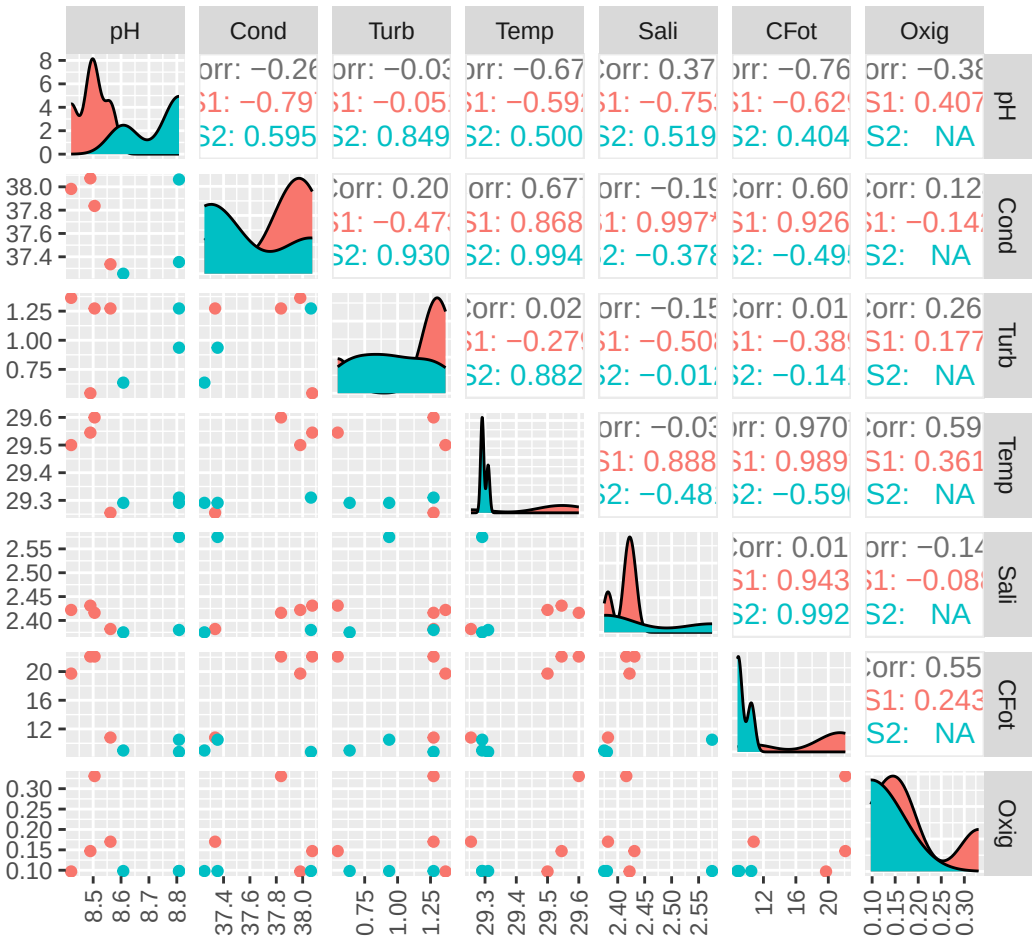


Figura 3.37: Correlaciones, dispersión y coeficientes de correlación, por cada grupo en comparación.

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

```
# Relación trivariada - Lineal
panel.lm = function(x, y, ...) {
  tmp<-lm(y~x,na.action=na.omit)
  abline(tmp, lwd = 1.5, col= 2)
  points(x,y, ...)}

coplot(Temp ~ CFot | Sitio, pch=19,
       panel = panel.smooth, data=datos)
```

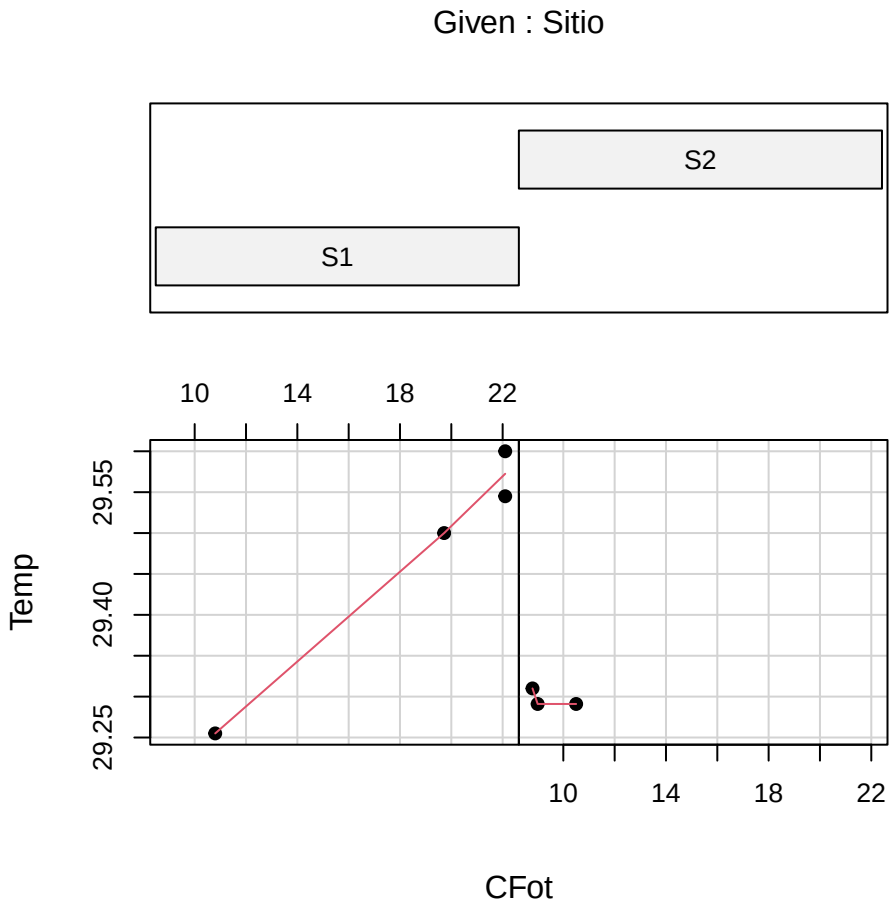


Figura 3.38: Relación bivariada en cada grupo asignado (Sitios).

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())
```

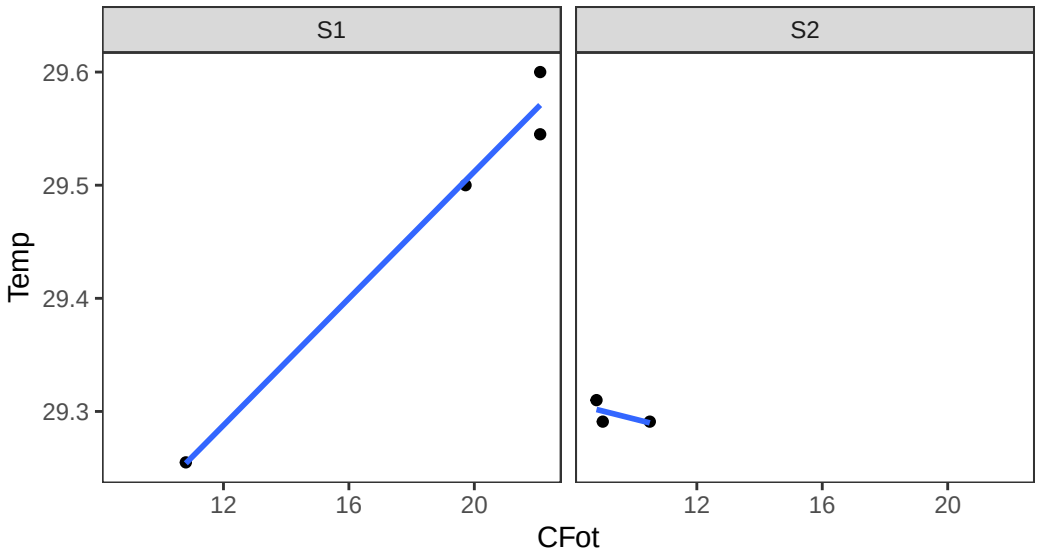


Figura 3.39: Relación bivariada en cada grupo asignado (Sitios).

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.

```
# Selección de una relación bivariada
names(datos)
```

```
[1] "Sitio" "pH"    "Cond"  "Turb"  "Temp"  "Sali"  "CFot"  "Oxig"
```

```
x11()
ggplot(datos, aes(x=CFot, y= Temp)) +
  geom_point(aes(color = Sitio), size=3) +
  geom_smooth(method= "lm") +
  theme_bw() +
  theme(panel.grid=element_blank())
```

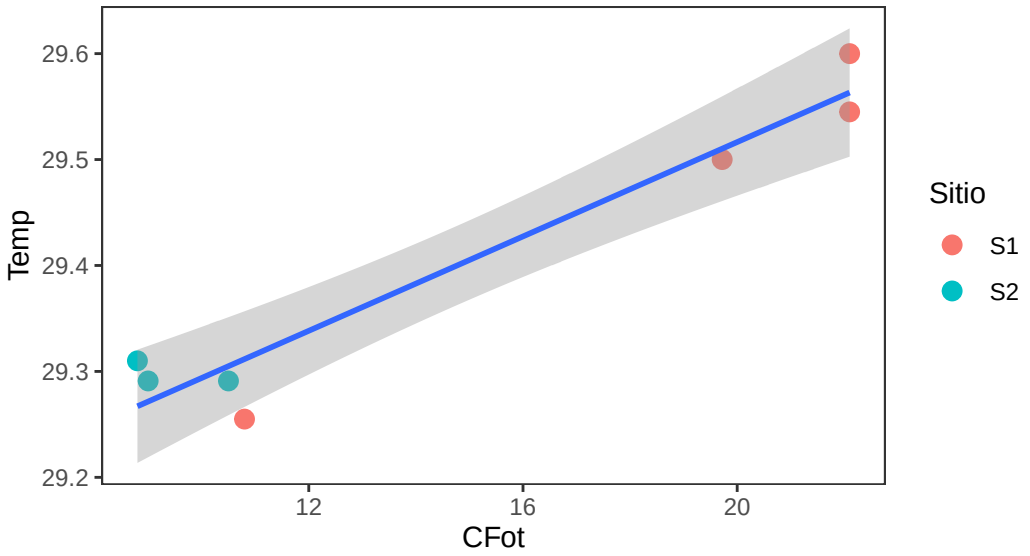


Figura 3.40: Relación bivariada en cada grupo asignado (Sitios).

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
```

```
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

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

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

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

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

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

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

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

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()

f1 <- fviz_dend(Cl.single, k = 2,        # k grupos (opcionales)
          cex = 0.7,               # tamaño del texto de las ramas
          ylab = "Distancia Euclídea",  # Rotulo de la distancia
          main = "Vecino más Cercano - Single")  # Rotulo de título

f2 <- fviz_dend(Cl.complete, k = 2,        # 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 <- fviz_dend(Cl.upgma, k = 2,           # k grupos (opcionales)
          cex = 0.7,                  # tamaño del texto de las ramas
          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 Euclídea",
          main = "Unión Promedio Ponderado - upgmc")


grid.arrange(f1,f2,f3,f4, ncol = 2)
```

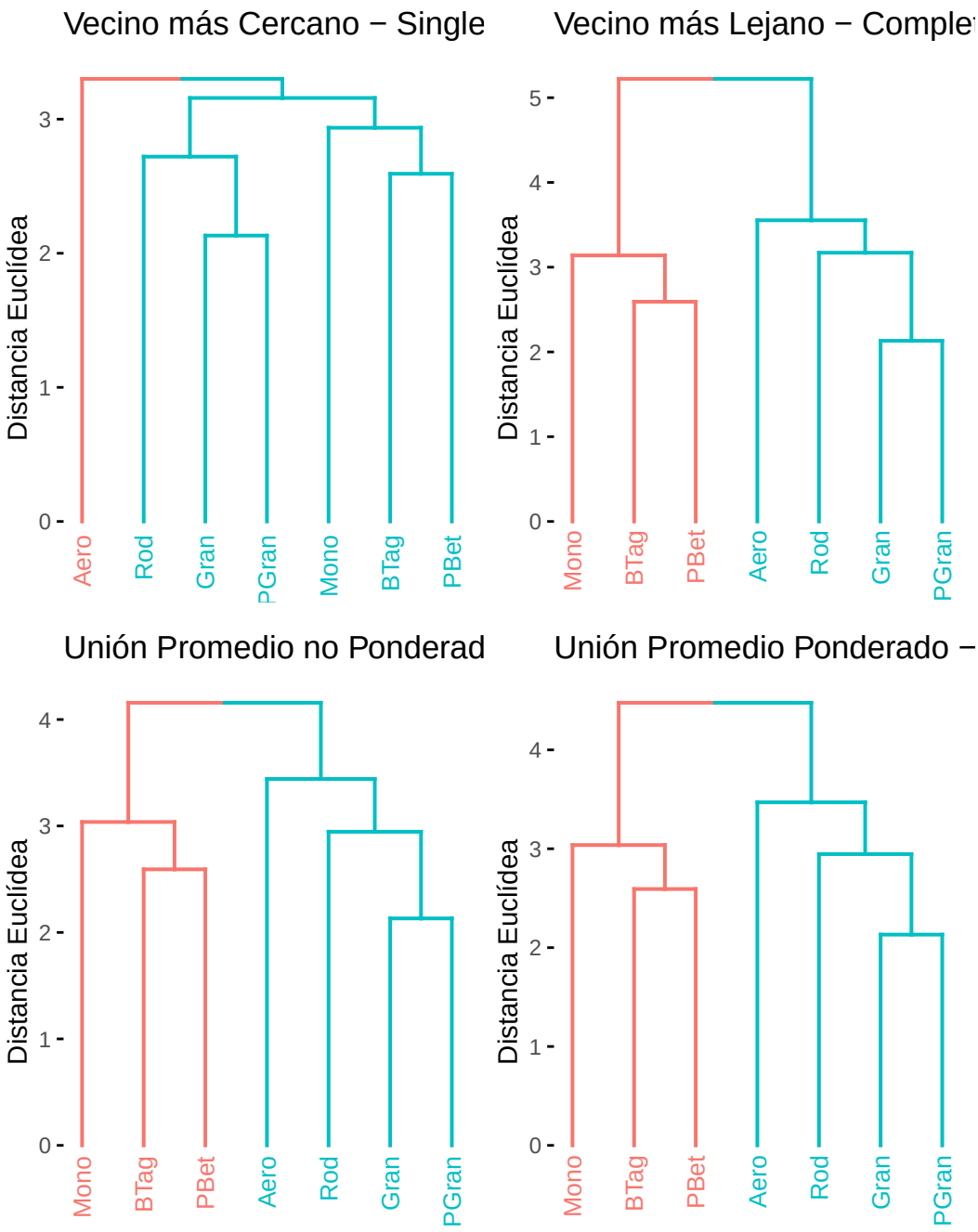


Figura 3.41: Cuatro dendogramas jerárquicos con la distancia euclídea.

```r
x11()

f5 <- fviz_dend(Cl.wpgma, k = 2,
          cex = 0.7,
          ylab = "Distancia Euclídea",
          main = "Unión Centroide no Ponderado - wpgma")

f6 <- fviz_dend(Cl.wpgmc, k = 2,
          cex = 0.7,
          ylab = "Distancia Euclídea",
          main = "Unión Centroide Ponderado - wpgmc")

f7 <- fviz_dend(Cl.ward, k = 2,
          cex = 0.7,
          ylab = "Distancia Euclídea",
          main = "Método de Ward")

grid.arrange(f5,f6,f7, ncol = 2)
```

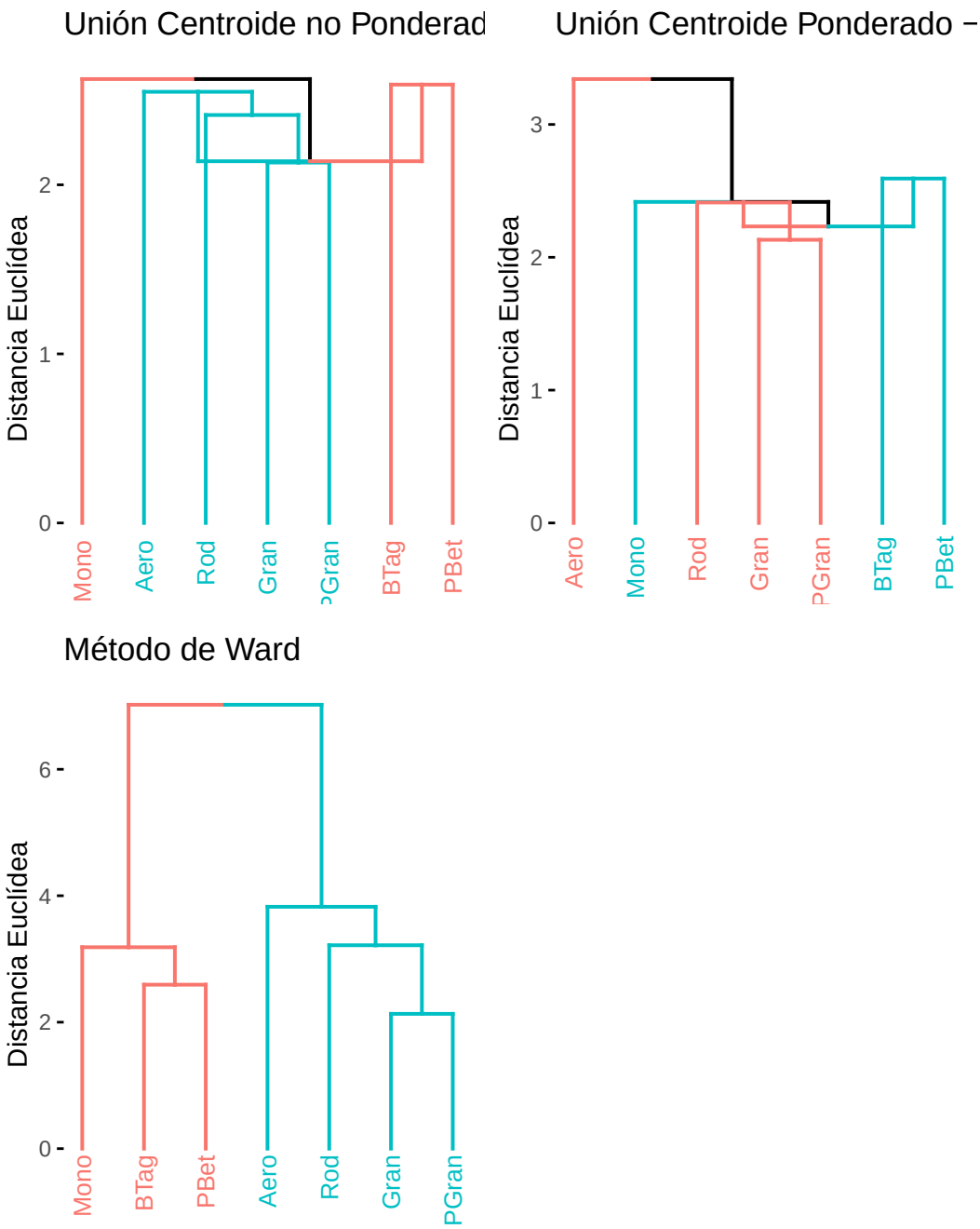


Figura 3.42: Tres dendogramas jerárquicos restantes, con la distancia euclídea.

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)
simple = cor(d.euclid,cofenet1)
simple
```

```
[1] 0.7358594
```

```
# (2) Correlación cofenética  para "complete"
cofenet2<-cophenetic(Cl.complete)
compl = cor(d.euclid,cofenet2)
compl
```

```
[1] 0.8113013
```

```
# (3) Correlación cofenética  para "average"
cofenet3<-cophenetic(Cl.upgma)
upgma = cor(d.euclid,cofenet3)
upgma
```

```
[1] 0.8233726
```

```
# (4) CCorrelación cofenética  para "mcquitty"
cofenet4<-cophenetic(Cl.upgmc)
upgmc = cor(d.euclid,cofenet4)
upgmc
```

```
[1] 0.8209463
```

```
# (5) Correlación cofenética  para "centroid"
cofenet5<-cophenetic(Cl.wpgma)
```

```
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
```

```
[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.

```
# data frame con cofenéticos
cofeneticos = data.frame(simple,compl,upgma,upgmc,
                         wpgma,wpgmc,ward)

# cofenéticos por cada métodos (Met)
cofenet=data.frame(Met = 1:7,Cofen=t(round(cofeneticos,3)))

# tabla con orden descendente de cofenéticos
cof_ordenado = cofenet[order(cofenet$Cofen, decreasing = TRUE), ]
cof_ordenado
```

```
       Met Cofen
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)
d.cofenet1 <- as.vector(cofenet1)
d.cofenet2 <- as.vector(cofenet2)
d.cofenet3 <- as.vector(cofenet3)
d.cofenet4 <- as.vector(cofenet4)


# 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
1 2.592758   2.592758   2.592758   2.592758   2.592758
2 2.935826   2.935826   3.138967   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",
       y="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)
```

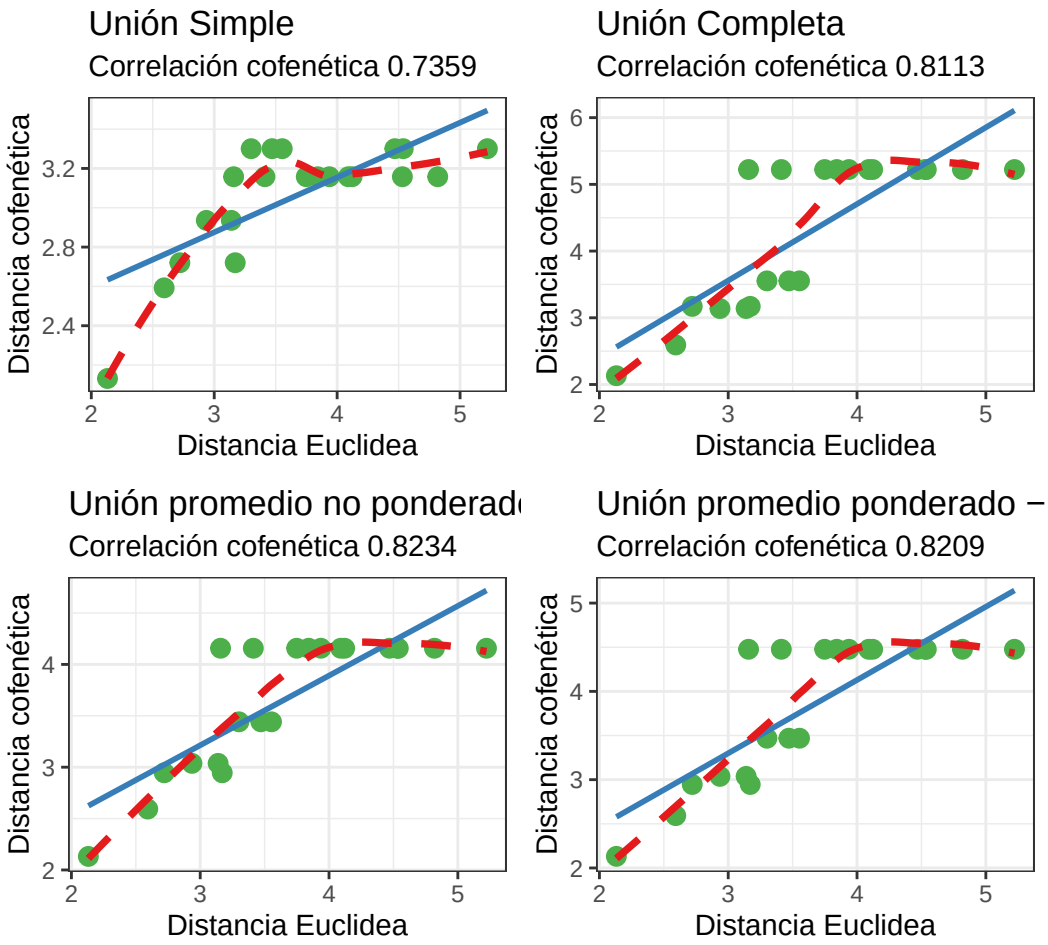


Figura 3.43: Cuatro regresiones entre la distancia euclídea empleada y las distancias cofenéticas de cada método de agrupamiento definido.

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 <- 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()
```

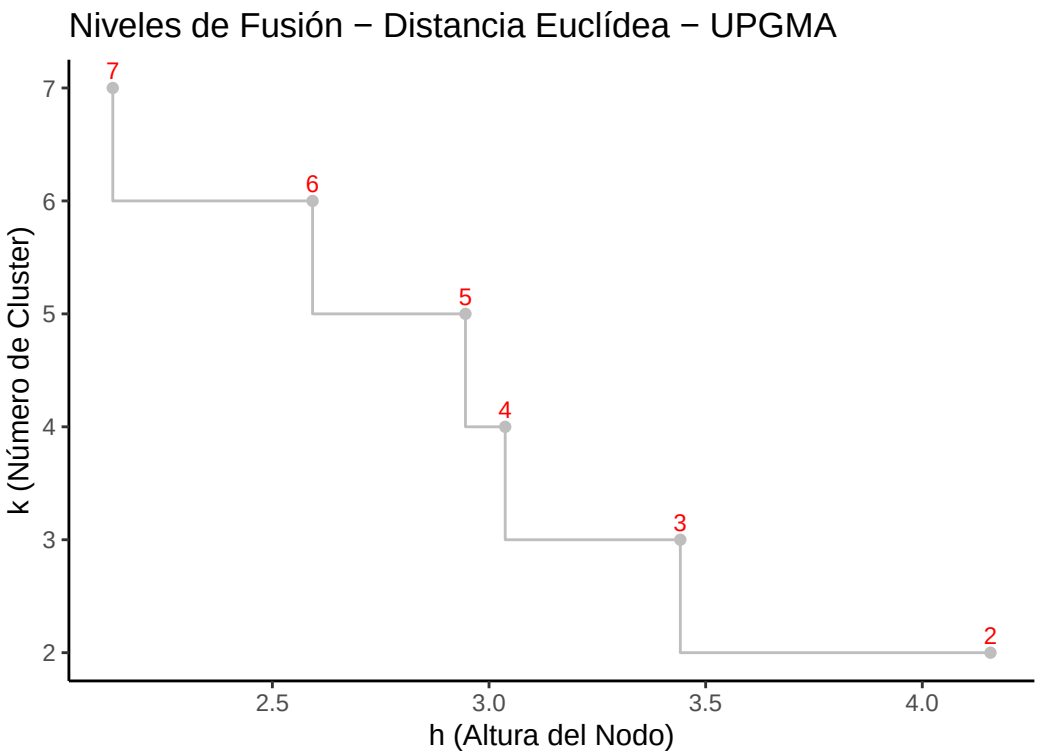


Figura 3.44: Cuatro regresiones entre la distancia euclídea empleada y las distancias cofenéticas de cada método de agrupamiento definido.

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}
```

```
# 3. Mejor o mayor amplitud de silueta (2 particiones)
k.mejor <- which.max(amb.vacio)
k.mejor
```

```
# Grafica de silueta
x11()
plot(1:nrow(amb),amb.vacio,type="h",
     main="Silueta-Número Óptimo de Clusters", xlab="(Número de grupos)",
     ylab="Amplitud promedio de  silueta")

axis(1,k.mejor,paste("optimum",k.mejor,sep="\n"),col="red",
     font=2,col.axis="red")

points(k.mejor,max(amb.vacio),pch=16,col="red",cex=1.5)

cat("","Silueta-Número óptimo de Clusters k=",k.mejor,
    "\n","Con una aplitud promedio de silueta",max(amb.vacio),"\n")
```

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.

```
# Dendograma final
x11()
fviz_dend(Cl.upgma, k = 2,        # k grupos
          cex = 0.9,              # tamaño del texto de las observaciones
          ylab = "Distancia Euclídea",  # Rotulo de la distancia
          main = "Unión Promedio no Ponderada (UPGMA)", # Rotulo de título
          lower_rect = 0,           # Inicio de los rectángulos en cero
          k_colors = c("#00AFBB","#FC4E07"),
          color_labels_by_k = TRUE,    # Colores para cada grupo
          rect = TRUE)                 # Rectángulos de cada grupo
```

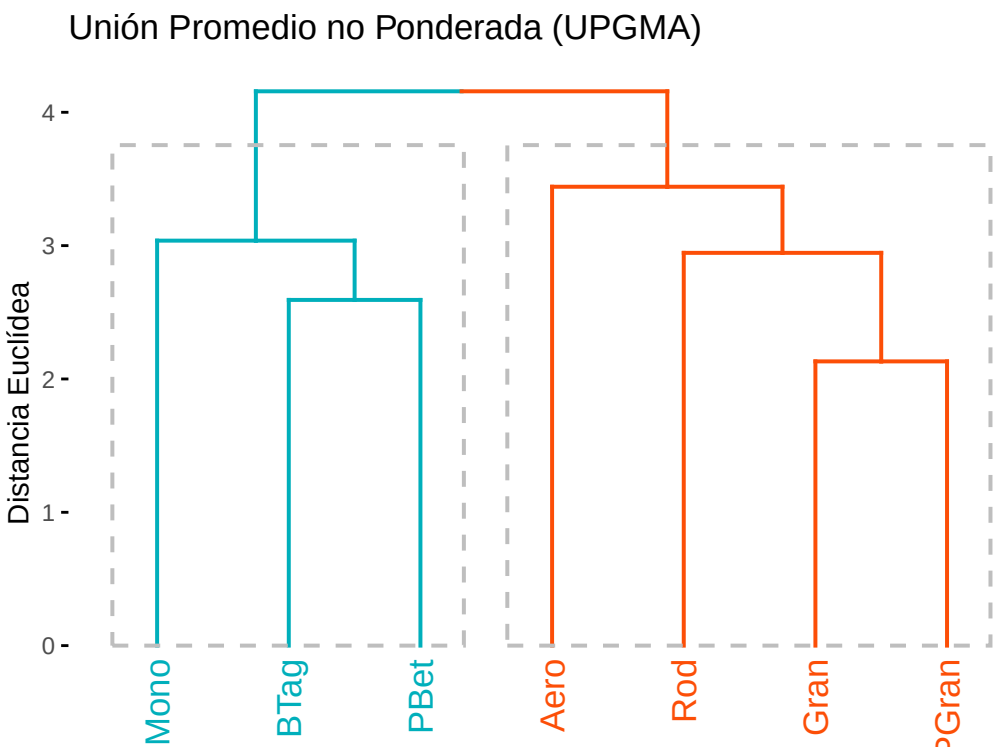


Figura 3.45: Dendograma jerárquico final con los dos grupos asignados.

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")
```

- 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
```

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`.

```
x11()
fviz_cluster(list(data = amb, cluster = grp),
             palette = c("#2E9FDF", "#FC4E07"),  # Colores para cada grupo
             ellipse.type = "confidence",        # Elipses
             repel = TRUE,                  # Elimina solapamiento de observaciones
             show.clust.cent = FALSE,       # Muestra a los clúster centrados
             ggtheme = theme_bw())      # Tipo de fondo tomado de ggplot2
```

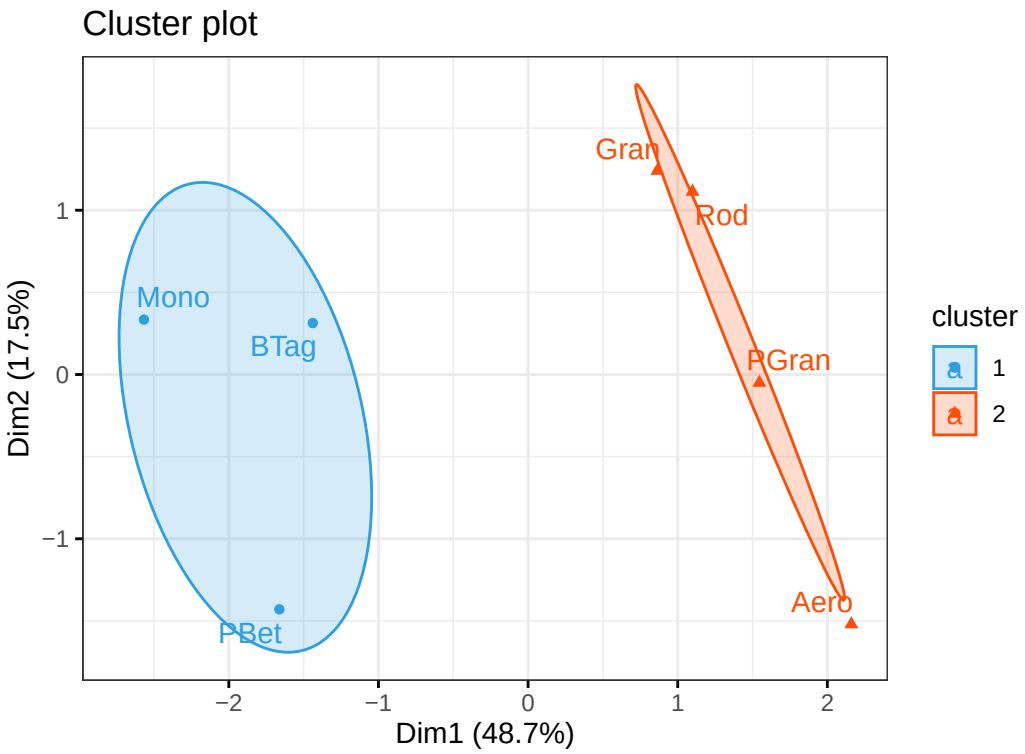


Figura 3.46: Dendograma no jerárquico final con los dos grupos asignados.

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 seleecionar 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()
```

```r
hv <- heatmap(amb1, margins=c(7,6),
              distfun = dist,
              xlab ="Variables fisico-químicas",
              ylab= "Bahías",
              main = "Clasificación de Bahías",
              scale = "row")   # Estandariza variables diferentes.
```

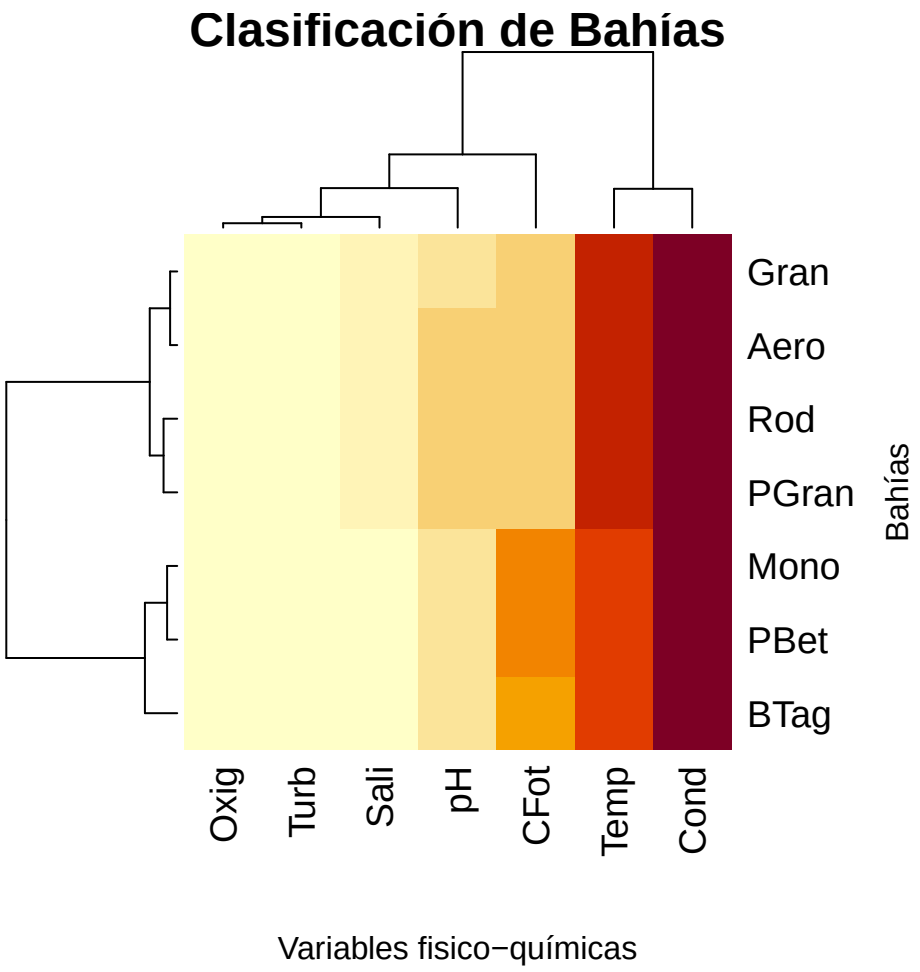


Figura 3.47: Mapa de calor que define en color rojo a las variables de mayor aporte a la clasificación realizada.

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

```r
# Opción 2. Mapa de calor con paquete "stats"
hclust.fq <- function(amb1) hclust(amb1, method="average")   # Inserción de agrupación UPG

x11()
heatmap.2(amb1,               # Base de datos en formato matricial
          margins=c(7,7),     # Margenes de la figura
          scale = "row",      # Estandariza variables diferentes.
          col = bluered(100),                 # Colores del mapa de calor
          xlab ="Variables fisico-químicas",
          ylab= "Bahías",
          main = "Clasificación de Bahías",
          trace = "none",
          density.info = "none",
          distfun = dist,          # Se puede usar vegdist de "vegan"
          hclustfun=hclust.fq)     # Agrupamiento UPGMA
```

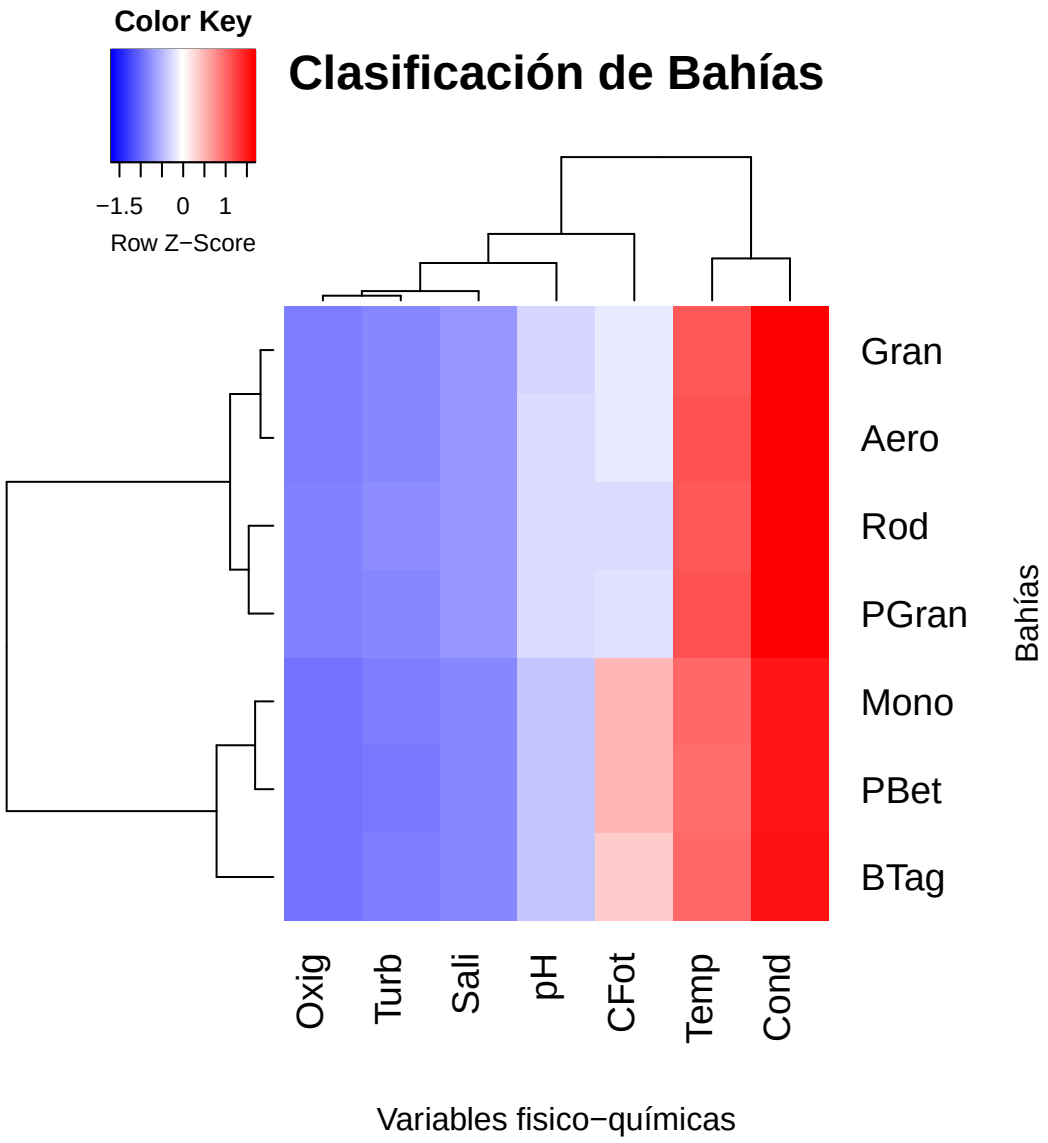


Figura 3.48: Mapa de calor que define en color rojo a las variables de mayor aporte a la clasificación realizada.

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.

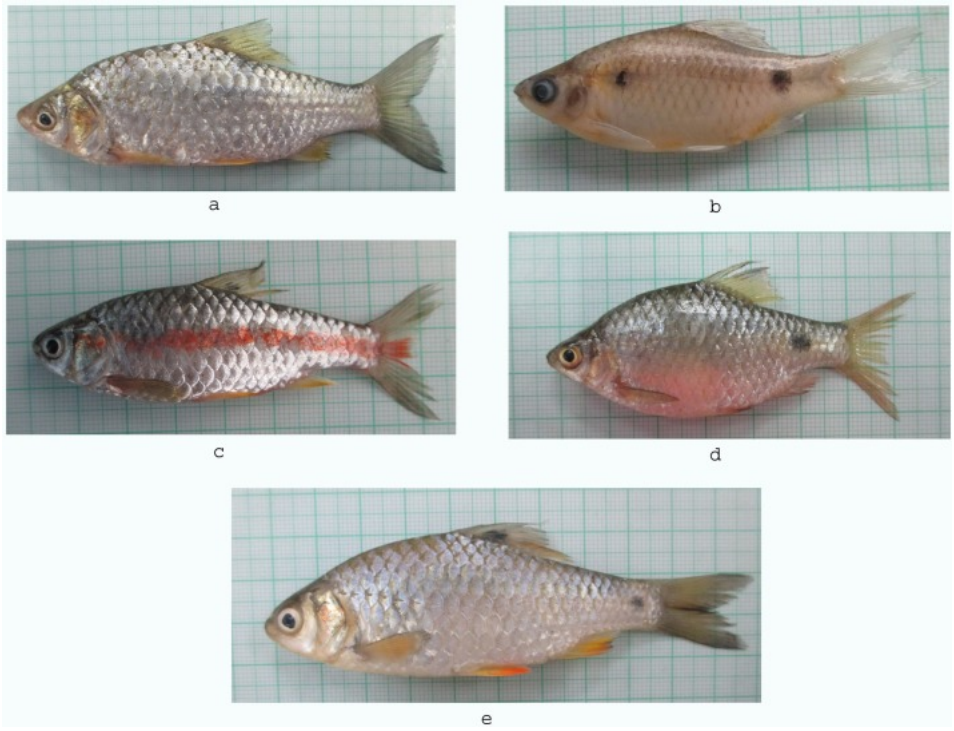


Figura 3.49: Imágen tomada de *Gupta et al. (2018)* (a) *S . Sarana* (b) *P . ticto* (c) *P . sóforo* , (d) *P . conconio* y (e) *P . chola*

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`.

```r
# Base de datos
peces<-read.csv2("peces.csv",row.names=1)
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"
```

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.

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

La Figura 4.2 permite visualizar las relaciones lineales entre todas las parejas de variables, incluyendo a los coeficientes de correlación de Pearson.

```r
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 = 0.6,                  # Tamaño del texto
         col = COL2("RdYlBu", 200))         # Transparencia de los circulos
```

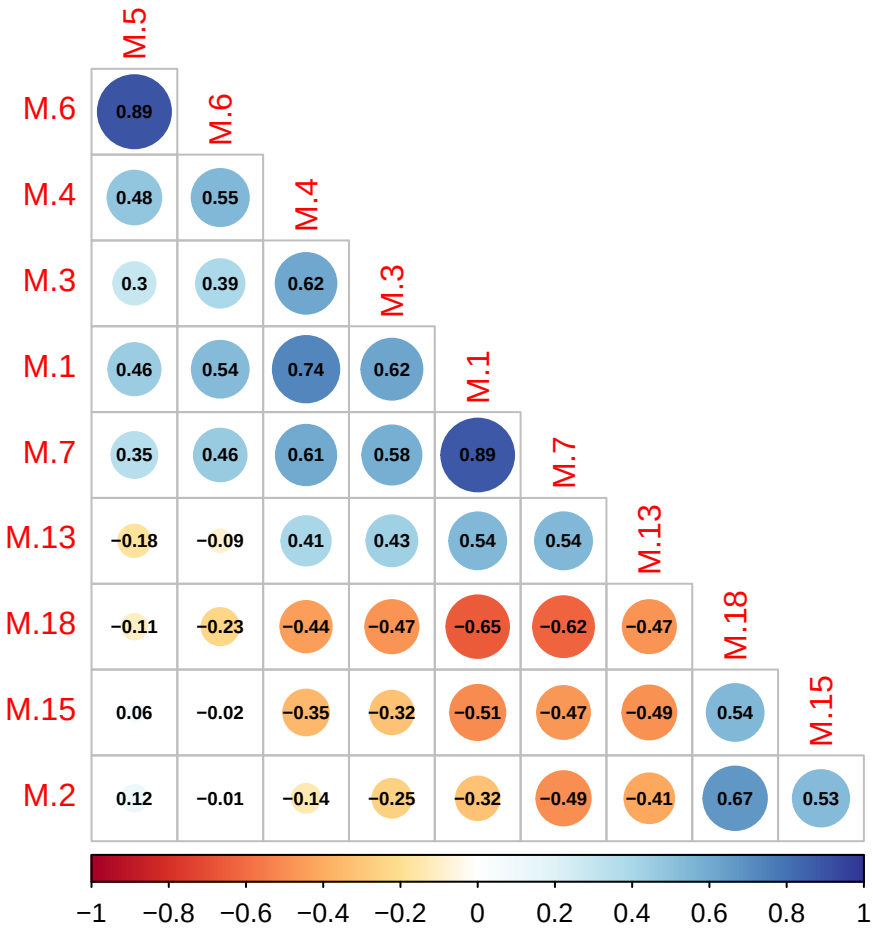


Figura 3.50: Correlaciones y coeficientes de correlación.

La Figura 4.3 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)})
```

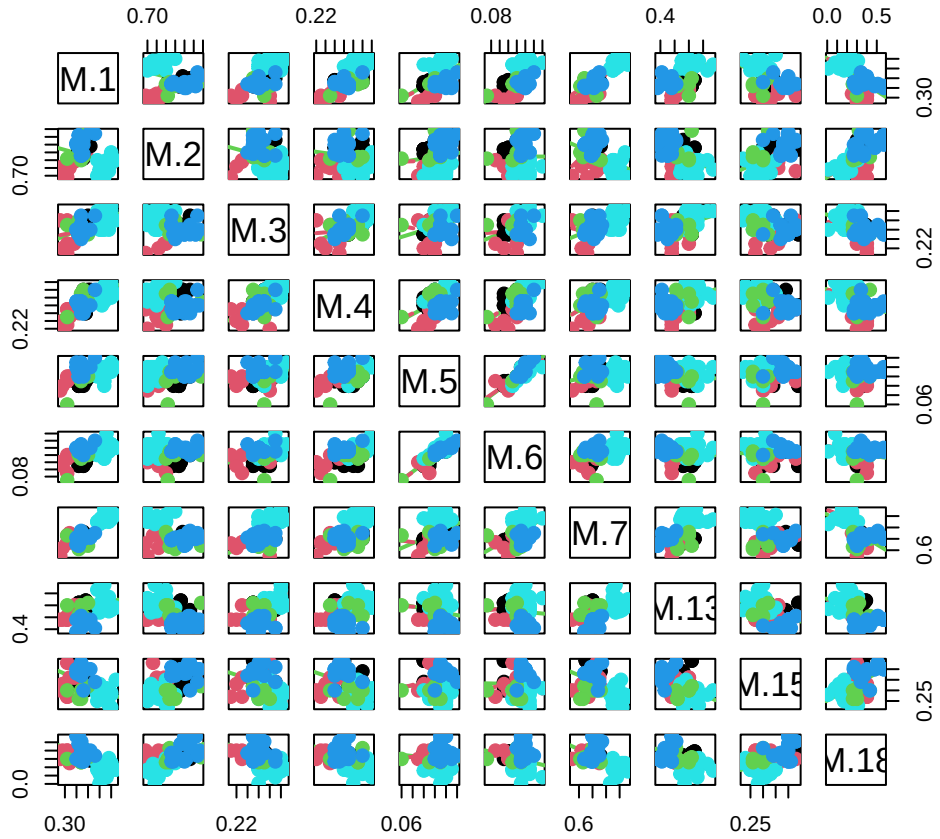


Figura 3.51: Relación entre parejas de variables, por cada grupo en comparación (colores).

La Figura 4.4 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()
```

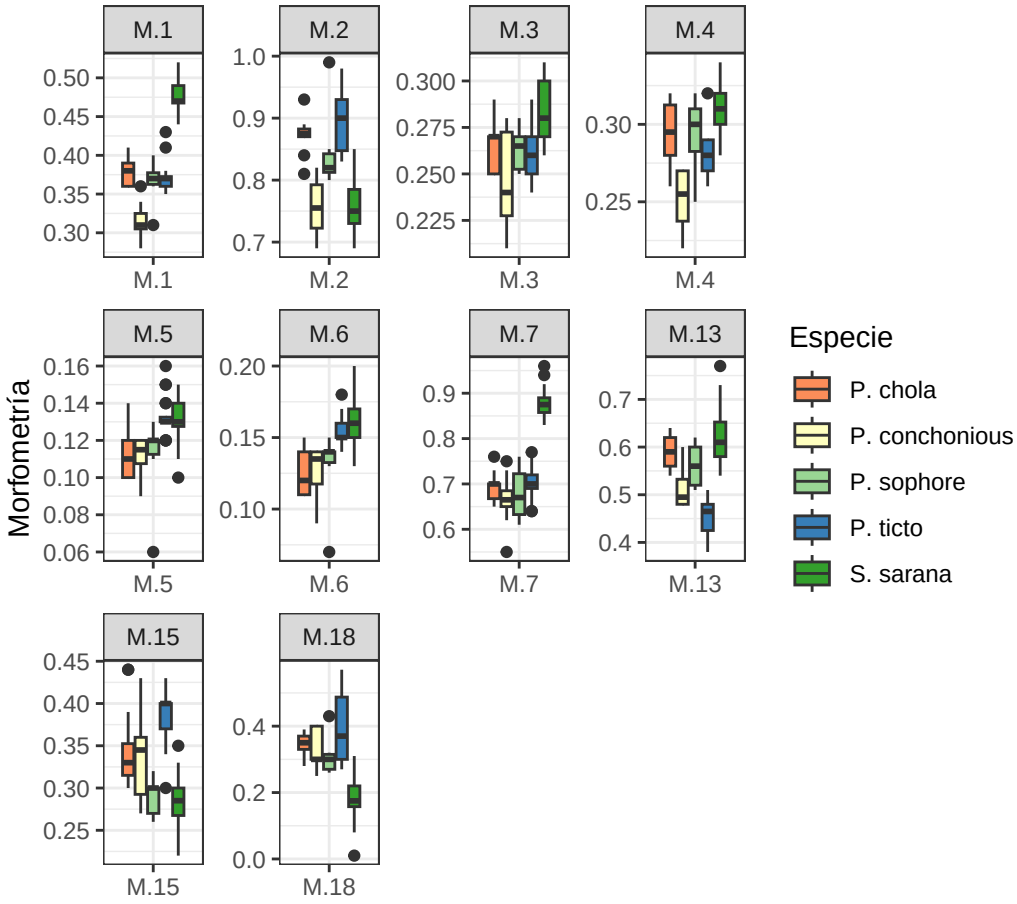


Figura 3.52: Variación en la morfometría de los peces, de acuerdo a cada una de las variables seleccionadas.

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
```

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

```
# Seleccionar columnas de 2 a 10 del data frame peces1 y convertirlas en matriz
promedios2 <- promedios %>%
              subset(select = c(2:11)) %>%
              as.matrix()
round(promedios2,2)
```

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

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 pe
rownames(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 del primer mapa de calor
x11()
hv <- heatmap(promedios2,
              margins=c(5,12),
              distfun = dist,
              xlab ="Variables morfométricas",
```

```
        ylab= "Especie de Peces",
        main = "Clasificación de Peces")
```

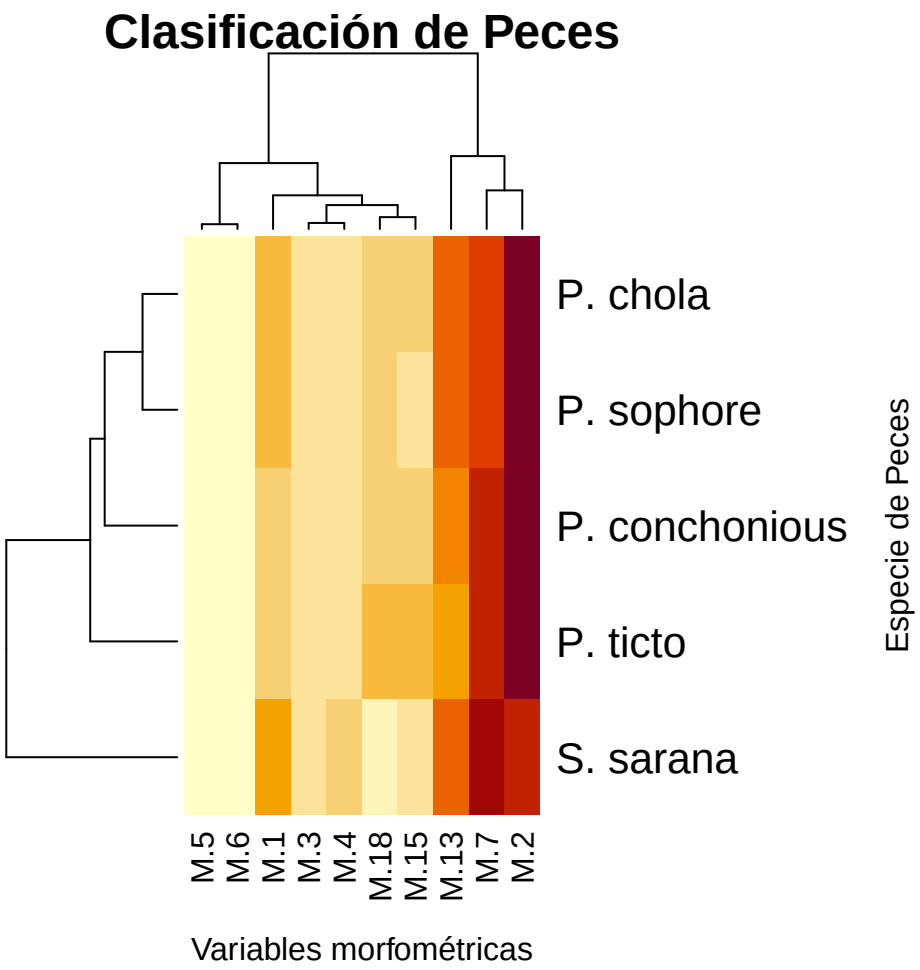


Figura 3.53: Mapa de calor que relaciona a las variables morfométricas y a las especies de peces.

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.

```
# Opción 2. Mapa de calor con paquete "stats"
hclust.fq <- function(promedios2)
             hclust(promedios2, method="average")   # Inserción de UPGMA
```

```
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
```

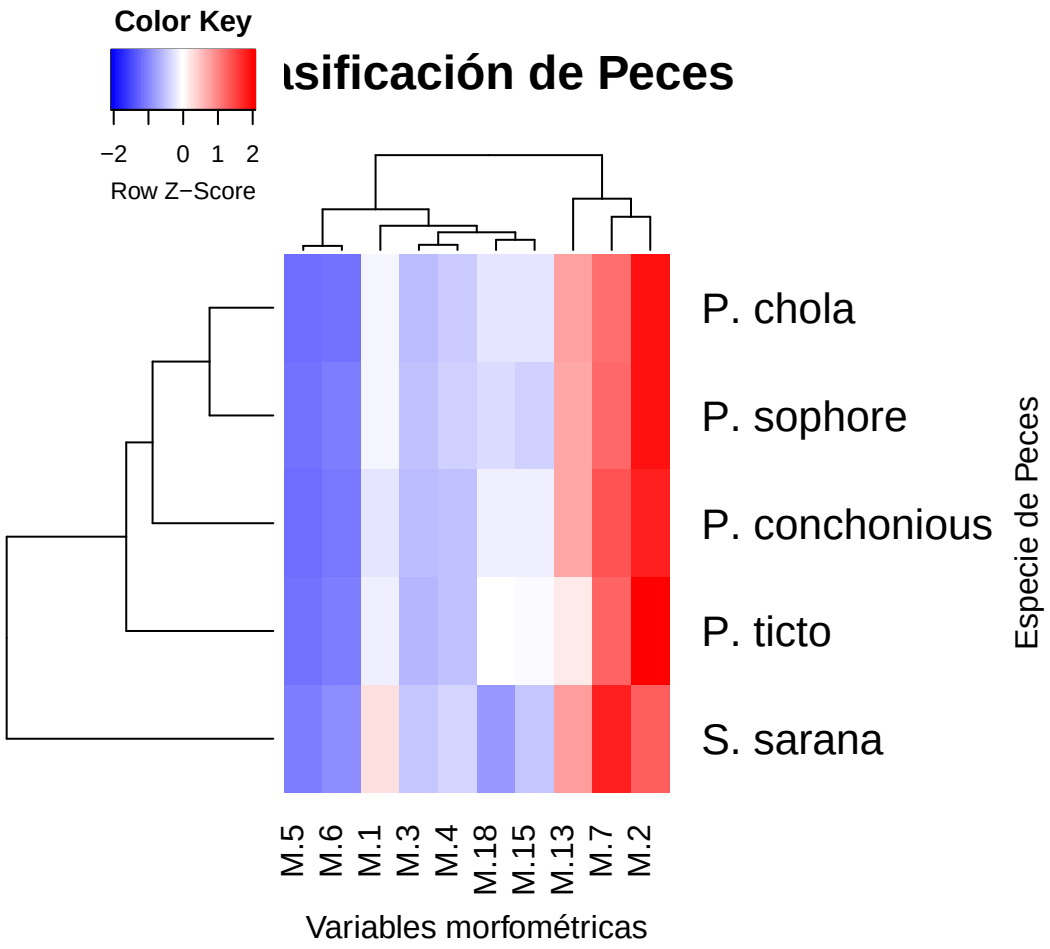


Figura 3.54: Mapa de calor que relaciona a las variables morfométricas y a las especies de peces.

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 estadìstico 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 `#`.

```r
# 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))
```

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.

```r
# Resumen de el diagnóstico de normalidad
(normalidad = data.frame(Norm.P.concho = norm2$p.value,
                         Norm.ticto    = norm4$p.value,
                         Norm.sarana   = norm5$p.value))
```

```
  Norm.P.concho   Norm.ticto  Norm.sarana
1   0.001050723 2.629679e-08 5.169222e-07
```

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.

```r
# 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
```

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).

```r
# 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).

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

```
Permutation test for homogeneity of multivariate dispersions
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  0.016 *
Residuals 65 0.098082 0.0015090
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Paso 2. Análisis Discriminante Lineal de Fisher - 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)

```r
# 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)
round(dis$prior,2)
```

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

"*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.

Prbabilidad 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)
```

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

```
M.3   -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
M.7    6.98  -9.75  -4.18  -5.66
M.13  10.55  12.26  -5.03   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)
```

```
   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))
```

```
               group
Especie         P. chola P. conchonious P. sophore P. ticto S. sarana
  P. chola             12              0          0       0         0
  P. conchonious        0              8          0       0         0
  P. sophore            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.

```
# M?todo 2: con clasifiación basada en jacknife (validación cruzada dejando uno afuera)
dis.jac <- lda(Especie ~ M.1+M.2+M.3+M.4+M.5+M.6+M.7+M.13+M.15+M.18,
               data=peces, CV=TRUE)
```

```
# Número y proporciones de clasificación correcta
clases.jac <- dis.jac$class
tabla.jac <- table(Especie, clases.jac)
tabla.jac
```

```
               clases.jac
Especie         P. chola P. conchonious P. sophore 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)
```

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.

```
# Figura del LDA
attach(peces)
x11()
scatterplot(LD2~LD1 | Especie, data=peces.coord,reg.line=FALSE,
            smooth=F, spread=F,span= 1,grid=F,
            legend=list(coords="bottom"),
            ellipse=T,font.lab=2, pch=c(15,16,17,18,19),
            col=c('#fc8d59','#e41a1c','#984ea3','#377eb8','#33a02c'),
            main="Análisis discriminante",
            font.main=2,cex.main=2,cex.lab=1.5,
            xlab="Eje1", ylab="Eje2")
```

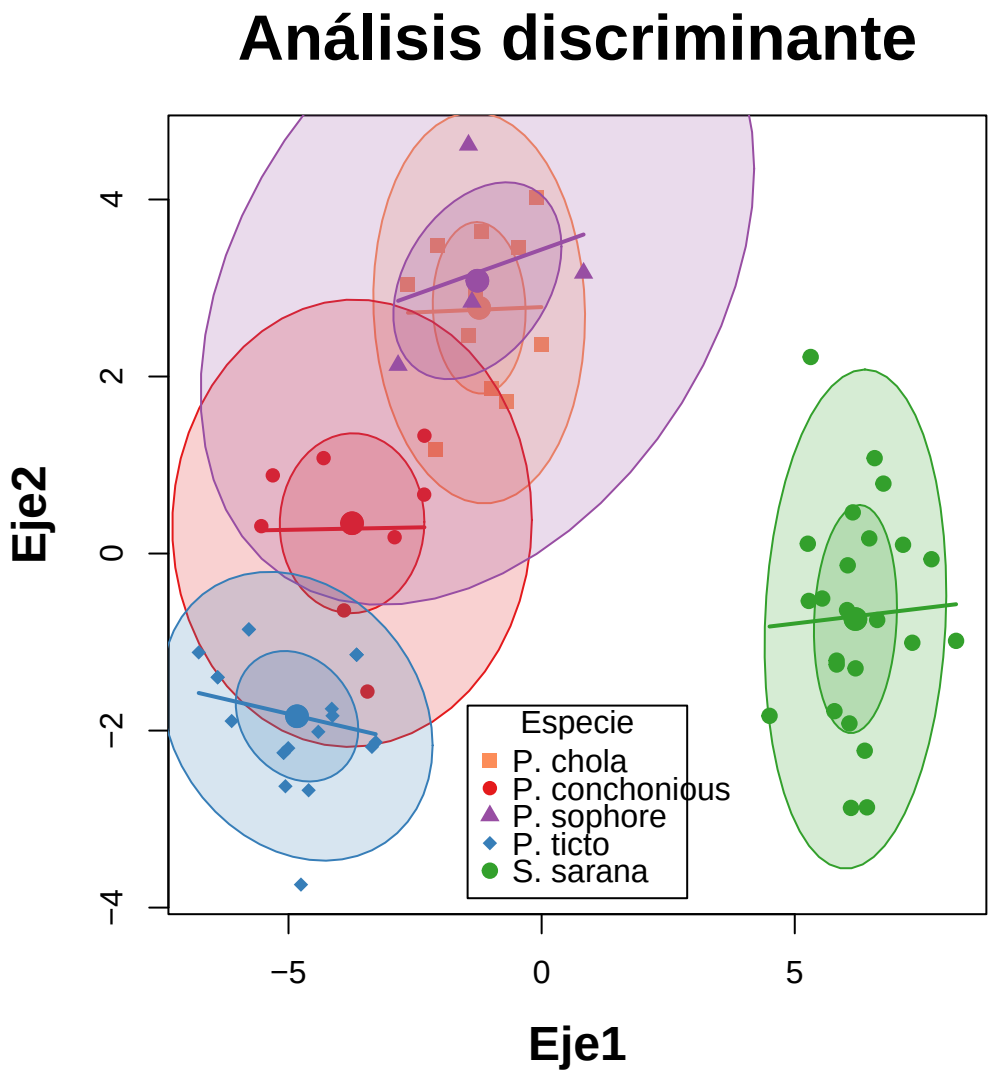


Figura 3.55: Mapa de calor que relaciona a las variables morfométricas y a las especies de peces.

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)
```

```
 [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"
```

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)
```

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)
```

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"))
```

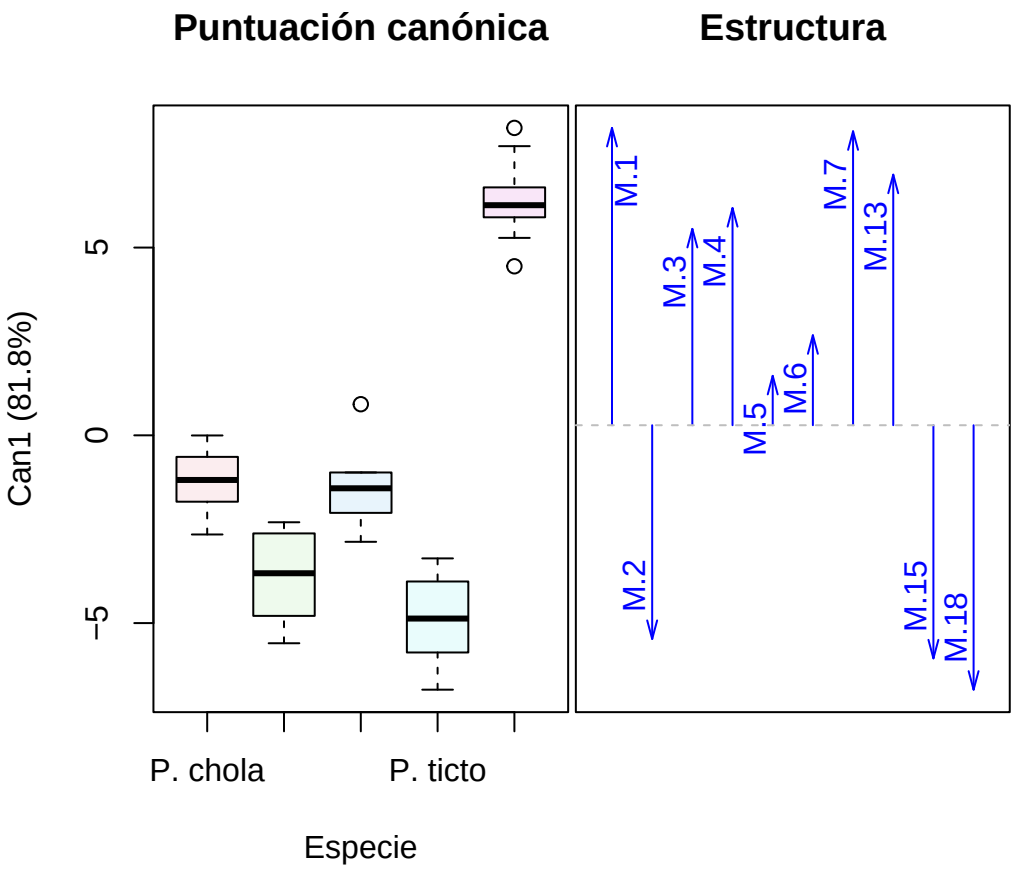


Figura 3.56: Mapa de calor que relaciona a las variables morfométricas y a las especies de peces.

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.

4 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.

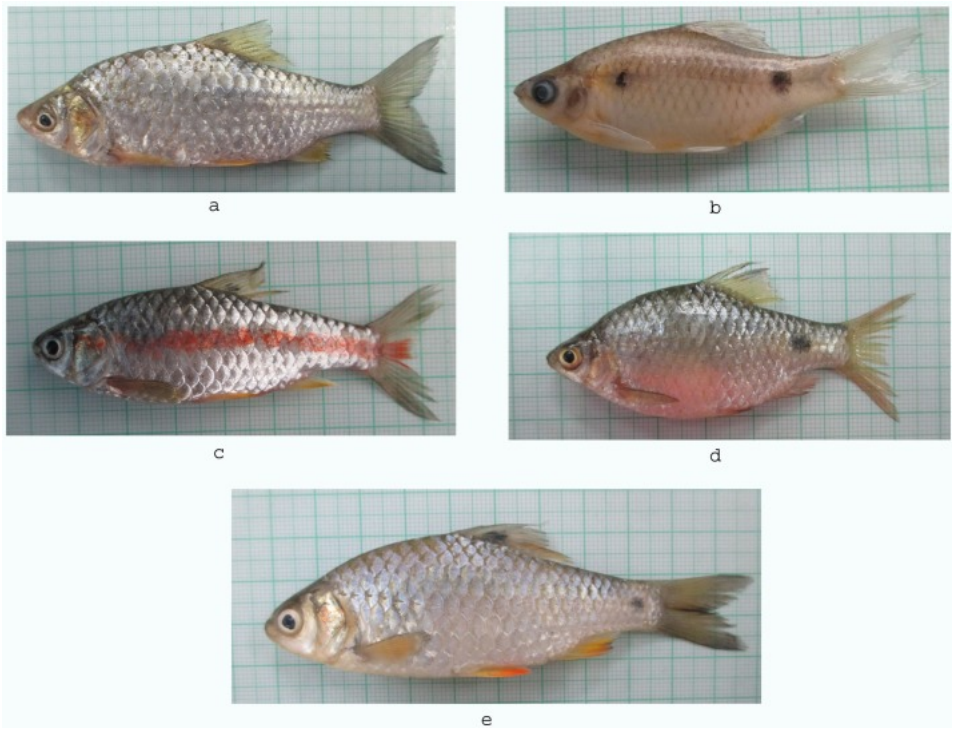


Figura 4.1: Imágen tomada de *Gupta et al. (2018)* (a) *S . Sarana* (b) *P . ticto* (c) *P . sóforo* , (d) *P . conconio* y (e) *P . chola*

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**.

4.0.1 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.

4.0.2 Cargar las librerías requeridas

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

library(vegan)          # 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)
```

4.0.3 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)
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"
```

4.0.4 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)
```

La Figura 4.2 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()
```

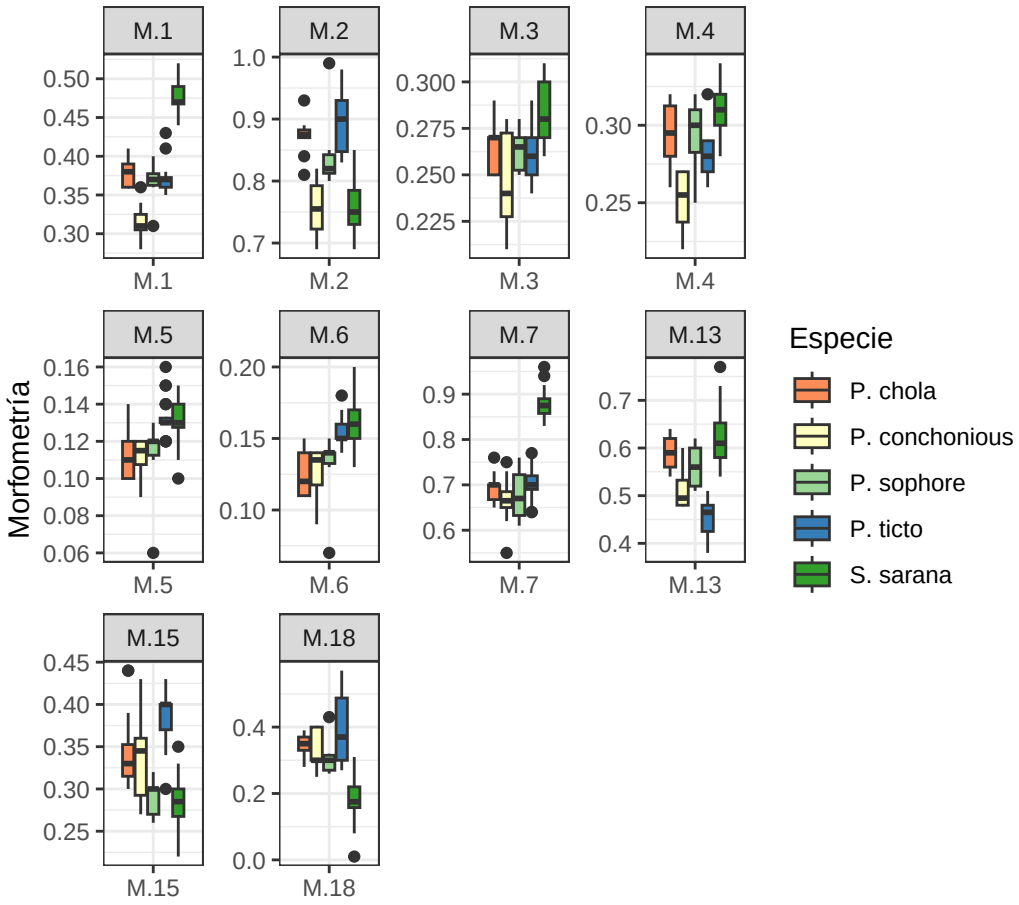


Figura 4.2: Variación en la morfometría de los peces, de acuerdo a cada una de las variables seleccionadas.

4.0.5 Cuatro pasos para la realización del MANOVA

4.0.5.1 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 ls dos primeros supuestos, por lo cual serán los diseños multivariados más apropiados para esta base de datos.

4.0.5.1.1 1.1 Supuesto de normalidad

El supuesto de normalidad multivariada será evaluado con el paquete `mvnormtest`, el cual utiliza el estadìstico 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 **#**.

```
# Prueba de normalidad para cada especie
library(mvnormtest)

# 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))
```

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.

```
# Resumen de el diagnóstico de normalidad
(normalidad = data.frame(Norm.P.concho = norm2$p.value,
                         Norm.ticto    = norm4$p.value,
                         Norm.sarana   = norm5$p.value))
```

```
  Norm.P.concho   Norm.ticto  Norm.sarana
1   0.001050723 2.629679e-08 5.169222e-07
```

4.0.5.1.2 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
```

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 $p < 0.05$).

```r
# 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).

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

```
Permutation test for homogeneity of multivariate dispersions
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  0.022 *
Residuals 65 0.098082 0.0015090
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

4.0.5.2 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.

```r
# 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)
```

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"
```

```
            Df   Sum Sq  Mean Sq F value    Pr(>F)
Especie      4 0.221052 0.055263  127.36 < 2.2e-16 ***
Residuals   65 0.028205 0.000434
---
Signif. codes:  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 ***
Residuals   65 0.13250 0.002038
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

```
# respuesta de la variable M.3
summary.aov(peces.manova)$" Response M.3"
```

```
            Df   Sum Sq    Mean Sq F value   Pr(>F)
Especie      4 0.010738 0.00268443  10.486 1.29e-06 ***
Residuals   65 0.016641 0.00025601
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 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 4.4).

```r
# 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)
Especie    4  2.513   9.9711     40    236 < 2.2e-16 ***
Residuals 65
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

```r
summary(peces.manova,test="Wilks")
```

```
          Df     Wilks approx F num Df den Df    Pr(>F)
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
```

```r
summary(peces.manova,test="Hotelling")
```

```
          Df Hotelling-Lawley approx F num Df den Df    Pr(>F)
Especie    4           29.052   39.584     40    218 < 2.2e-16 ***
Residuals 65
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

```r
summary(peces.manova,test="Roy")
```

```
          Df    Roy approx F num Df den Df    Pr(>F)
Especie    4 23.757   140.17     10     59 < 2.2e-16 ***
Residuals 65
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

4.0.5.3 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.

4.0.5.4 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
```

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 4.3 qqplot).

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

En la Figura 4.3 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
```

```r
center <- colMeans(x)
n <- nrow(x); p <- ncol(x); cov <- cov(x);
d <- mahalanobis(x,center,cov)

x11()
qqplot(qchisq(ppoints(n),df=p),d,
       main="Normalidad multivariada",
       ylab="Cuantil Chi-Cuadrado", xlab= "Distancia Mahalanobish")
abline(a=0,b=1,col=2)
```

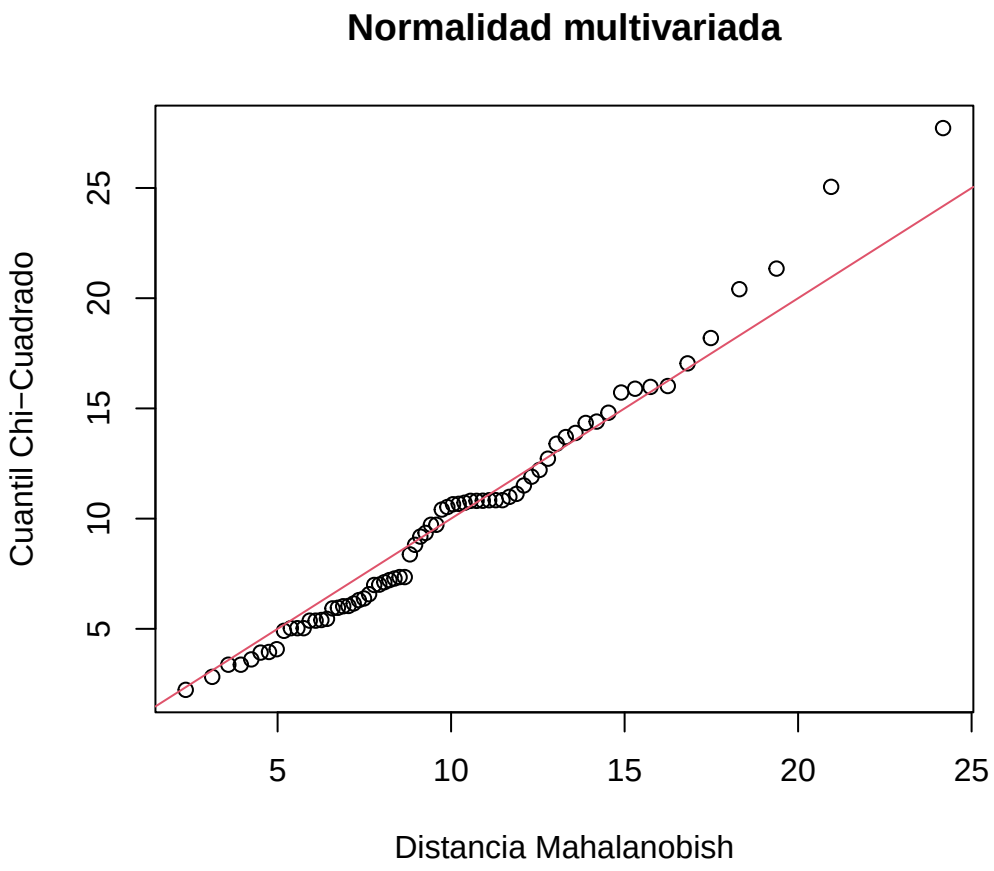


Figura 4.3: Figura qqplot entre los residuales observados (Distancia Mahalanobish) y los cuantiles chi cuadrado (estimados).

4.0.5.5 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    0.21
 Alternative hypothesis: rho != 0
```

4.0.5.6 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)
```

```
 [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)
```

La Figura 4.4 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.

```
# Figura del LDA
attach(peces)
x11()
scatterplot(LD2~LD1 | Especie, data=peces.coord,reg.line=FALSE,
            smooth=F, spread=F,span= 1,grid=F,
            legend=list(coords="bottom"),
            ellipse=T,font.lab=2, pch=c(15,16,17,18,19),
            col=c('#fc8d59','#e41a1c','#984ea3','#377eb8','#33a02c'),
            main="Análisis discriminante",
            font.main=2,cex.main=2,cex.lab=1.5,
            xlab="Eje1", ylab="Eje2")
```

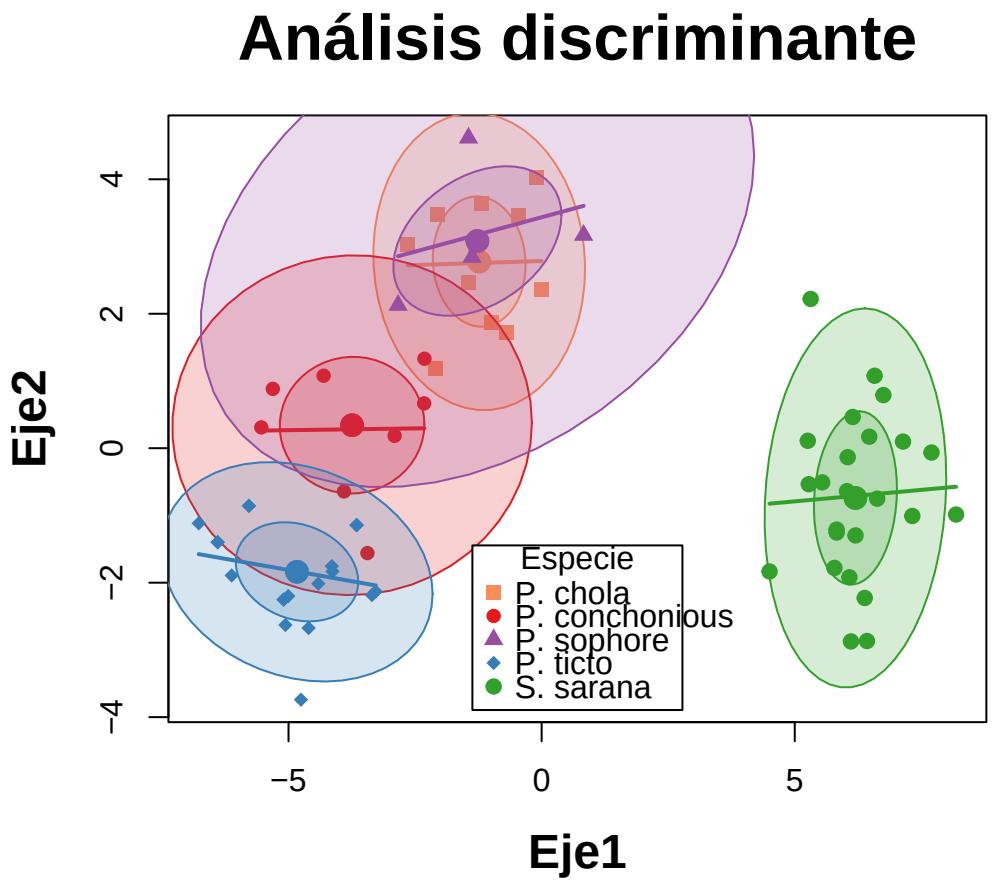


Figura 4.4: Mapa de calor que relaciona a las variables morfométricas y a las especies de peces.

Referencias

Pendiente de documentar.