Estadística Multivariante - PEC 2

Alejandro Keymer

Ejercicio 1 (70 pt.)
(a)

Después de reducir la base de datos original a las p=13 especies destacadas, nos planteamos elegir una distancia adecuada para el análisis de conglomerados. Con este tipo de datos se suele utilizar la disimilaridad de Bray-Curtis con la siguiente fórmula según la Wikipedia:

$$d_{BC}^{(1)}(i,j) = 1 - \frac{2C_{ij}}{S_i + S_j}$$

donde C_{ij} es la suma del menor valor para cada una de las especies en común de las dos muestras. S_i y S_j son el total de especímenes en cada una de las muestras. También se puede calcular con la fórmula que utiliza la función vegdist() del paquete vegan

$$d_{BC}^{(2)}(i,j) = \frac{\sum_{k=1}^{p} |x_{ik} - x_{jk}|}{\sum_{k=1}^{p} (x_{ik} + x_{jk})}$$

Calcular la disimilaridad de Bray-Curtis entre las dos primeras muestras de la base de datos con ambas fórmulas (sin utilizar la función vegdist()). En la primera fórmula nos puede ayudar la función pmin() de R. Calcular a continuación la matriz de disimilaridades completa con la función vegdist() y comprobamos que el valor hallado para las dos primeras muestras coincide:

En primer lugar se calculan los datos y se crean nombres de fila con las coordenadas de cada muestra:

Con la base hacemos el cálculo manual con las fórmulas descritas utilizando las dos primeras muestras:

```
# formula 1
(d_bc_1 <- 1 - (2 * sum(pmin(df[1,], df[2,]))) / (sum(df[1,]) + sum(df[2,])))
## [1] 0.3181818
# formula 2
(d_bc_2 <- sum(abs(df[1,] - df[2,])) / sum(df[1,] + df[2,]))</pre>
```

[1] 0.3181818

A continucación se realiza el cálculo de la matriz de disimilaridad utilizando la función vegdist que, por defecto, utiliza la distancia de Bray-Curtis. Finalmente revisamos que la primera distancia, entre las dos primeras muestras, coincide con las calculadas manualmente.

```
df_dist <- vegdist(df)
df_dist[1]</pre>
```

[1] 0.3181818

Se puede ver que las tres soluciones dan el mismo valor para la distancia entre las primeras dos muestras.

(b)

Sin embargo, la disimilaridad de Bray-Curtis no verifica la desigualdad triangular de forma que no es una distancia. Comprobar este hecho, tal vez con algún contra ejemplo entre dos muestras o con alguna función de R que podamos hallar. Para corregir este problema podemos transformar la disimilaridad de Bray-Curtis calculando la raíz cuadrada de sus valores. Comprobar que dicha raíz cuadrada verifica la desigualdad triangular.

Para verificar la desigualdad triangular se puede utilizar la función tri.ineq de la librería fossil. Con esta función podemos corroborar que la distancia de Bray-Curtis calculada no verifica la desigualdad triangular, pero la raiz cuadrada de las distancias, si lo hacen. Al exmainar la función en sí, es posible modificar el procedimiento por el que se verifica la desigualdad triangular, y encontar un conta ejemplo especifico. La fórmula busca si hay casos en que se cumpla que el "cateto" mas grande, sea mayor a la suma de los otros dos "catetos", lo que implica que no es un triángulo.

```
tri.ineq(df_dist)
```

```
## [1] FALSE
```

```
## [1] "2-7"
rownames(mat)[i]
## [1] "1-2"
rownames(mat)[k]
```

Para la distancia al cuadrado si se cumple

[1] "5-2"

```
# cuadrado de las distancias
sq_dist <- sqrt(df_dist)
tri.ineq(sq_dist)
## [1] TRUE</pre>
```

(c)

Muchos procedimientos de Análisis multivariante requieren que la distancia utilizada sea euclídea. Comprobar que la raíz cuadrada de la disimilaridad de Bray-Curtis es una distancia euclídea.

Es posible crear una función con las fórmulas del apartado 8.2 del libro de C.M. Cuadras.

```
is_euclidean <- function(diss){
    mat <- as.matrix(diss)
    n <- dim(mat)[1]
    A <- mat * -(1/2)
    H <- diag(n) - (1/n) * (rep(1,n) %*% t(rep(1,n)))
    B <- H %*% A %*% H

# prueba
    eig <- eigen(B)
    all(eig$values >= 0)
}

# probamos con la raiz cuadrada de la distancia
is_euclidean(sq_dist)

## [1] TRUE
```

(d)

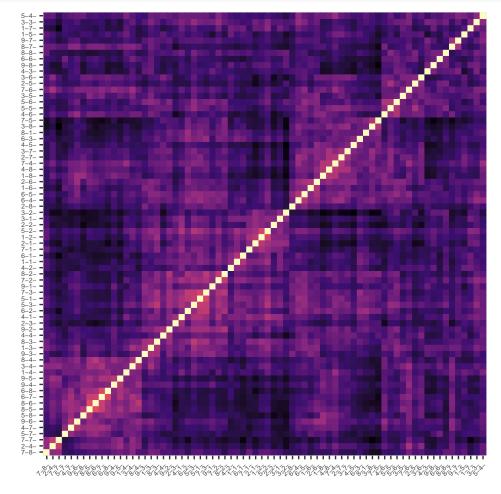
Evaluar la tendencia al agrupamiento con el estadístico de Hopkins que podéis calcular con la función get_clust_tendency() del paquete factoextra. La función fviz_dist() del mismo paquete permite realizar una imagen de la disimilaridad propuesta en el apartado anterior (ordered dissimilarity image, ODI) para evaluar gráficamente la tendencia al agrupamiento. También la misma función get_clust_tendency() lo hace con una imagen menos vistosa. ¿Cuantos conglomerados se intuyen? Para saber más sobre el análisis de la tendencia al agrupamiento, la fórmula del estadístico de Hopkins y un ejemplo se puede consultar la página https://www.datanovia.com/en/lessons/assessing-clustering-tendency/

Se realiza el cálculo del estadistico de Hopkins. En este caso resulta en aprox 0.32, lo que se acera medianamente a 0. Los datos tienen una tendencia a agruparse moderada. Al mirar la gráfica de las distancias (la raiz de la disimilaridad) se corrpobora lo anterior. Si bien los datos no son homogeneos, la forma en como se pueden agrupar no se ve tan claramente. Se podría intuir con el gráfico que hay 1 sector donde se aglomeran bien y luego unos 4 o quizas 5 sectores donde la los datos se aglomeran de manera menos estructurada, dependiendo del tamaño que se consiedere válido para una agrupación.

```
set.seed(41)
get_clust_tendency(df, nrow(df)-1, graph = F)$hopkins_stat
```

[1] 0.320416

```
fviz_dist(sq_dist, lab_size = 5) +
    # hay un 'bug' al compilar el pdf, que se ven los bordes de cada 'tile'
    # para arreglarlo hay que mapear 'color' a la variable de valor.
    aes(color = value) +
    scale_fill_viridis_c(direction = -1, option = "A") +
    scale_color_viridis_c(direction = -1, option = "A") +
    guides(fill = F, color = F)
```



(e)

Realizar un análisis de conglomerados jerárquico con el método de *Ward* de la distancia propuesta en el apartado (c). Dibujar el dendograma resultante.

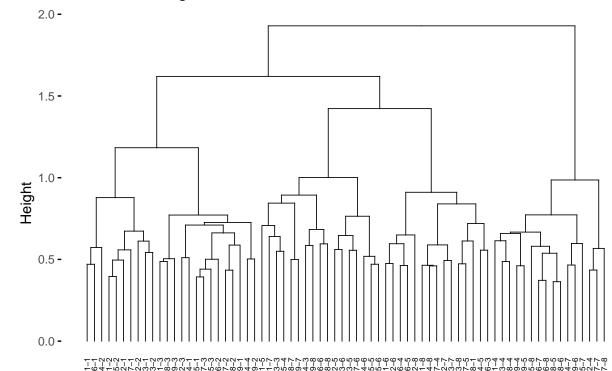
Nota: Justamente el método de *Ward* exige que la distancia sea euclídea, pero no necesariamentela distancia euclídea.

Dibujar también un *heatmap* de este análisis con la función heatmap(). Para ello, hay que elegir bien los parámetros distfun= y hclustfun= y una escala de colores. ¿Para qué sirve el heatmap?

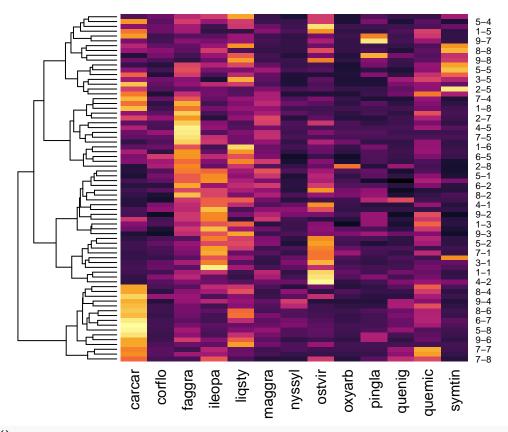
Nota: No nos interesa reordenar las variables o columnas y tampoco un dendograma sobre ellas.

El dendograma permite detallar mejor el agrupameint aglomerativo que se intuía en el apartado anterior.

```
clust_1 <- agnes(sq_dist, diss = T, method = "ward")
fviz_dend(clust_1, cex = .4, lwd = .3)</pre>
```



La ventaja del "heatmap" es que incluye la infromacion de las columnas. En este caso es posible ver la de manera gráfica la distibución de las especies en las diferentes muestra. Si ademas utilizamos un dendograma y ordenamos las muestras según el dendograma, obtenemos infroacion visual de como se diribuyen las especies en las ramas del dendograma, y como se podrian constrouir los diferens clusters.



hcl.pals()

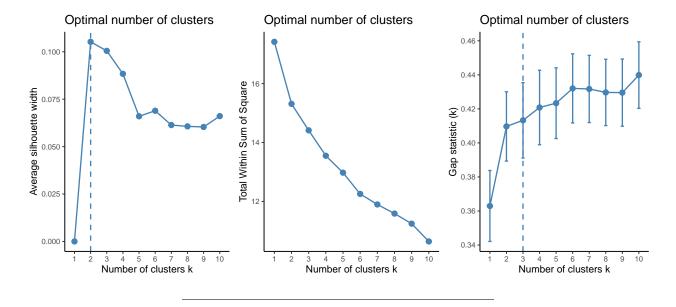
##	[1]	"Pastel 1"	"Dark 2"	"Dark 3"	"Set 2"
##	[5]	"Set 3"	"Warm"	"Cold"	"Harmonic"
##	[9]	"Dynamic"	"Grays"	"Light Grays"	"Blues 2"
##	[13]	"Blues 3"	"Purples 2"	"Purples 3"	"Reds 2"
##	[17]	"Reds 3"	"Greens 2"	"Greens 3"	"Oslo"
##	[21]	"Purple-Blue"	"Red-Purple"	"Red-Blue"	"Purple-Orange"
##	[25]	"Purple-Yellow"	"Blue-Yellow"	"Green-Yellow"	"Red-Yellow"
##	[29]	"Heat"	"Heat 2"	"Terrain"	"Terrain 2"
##	[33]	"Viridis"	"Plasma"	"Inferno"	"Dark Mint"
##	[37]	"Mint"	"BluGrn"	"Teal"	"TealGrn"
##	[41]	"Emrld"	"BluYl"	"ag_GrnYl"	"Peach"
##	[45]	"PinkYl"	"Burg"	"BurgYl"	"RedOr"
##	[49]	"OrYel"	"Purp"	"PurpOr"	"Sunset"
##	[53]	"Magenta"	"SunsetDark"	"ag_Sunset"	"BrwnYl"
##	[57]	"YlOrRd"	"YlOrBr"	"OrRd"	"Oranges"
##	[61]	"YlGn"	"YlGnBu"	"Reds"	"RdPu"
##	[65]	"PuRd"	"Purples"	"PuBuGn"	"PuBu"
##	[69]	"Greens"	"BuGn"	"GnBu"	"BuPu"
##	[73]	"Blues"	"Lajolla"	"Turku"	"Blue-Red"
##	[77]	"Blue-Red 2"	"Blue-Red 3"	"Red-Green"	"Purple-Green"
##	[81]	"Purple-Brown"	"Green-Brown"	"Blue-Yellow 2"	"Blue-Yellow 3"
##	[85]	"Green-Orange"	"Cyan-Magenta"	"Tropic"	"Broc"
##	[89]	"Cork"	"Vik"	"Berlin"	"Lisbon"
##	[CO]	"Tofino"	"ArmyRose"	"Earth"	"Fall"
	[93]	1011110	112 111) 110 20		
##		"Geyser"	"TealRose"	"Temps"	"PuOr"

```
## [105] "BrBG" "RdYlBu" "RdYlGn" "Spectral"
## [109] "Zissou 1" "Cividis"
```

(f)

El siguiente paso es estudiar por algún criterio el número óptimo de conglomerados para el análisis jerárquico. Con la distancia del apartado (c) en particular, lo más sencillo es utilizar el criterio de las siluetas. Sin embargo, el criterio de las siluetas y otros métodos como el de la suma de cuadrados dentro de los grupos o WSS o también el estadístico GAP se pueden aplicar con la función fviz_nbclust() del paquete factoextra. Habrá que especificar que se trata del método de clasificación jerárquico (que por defecto utiliza el método de Ward) y también la distancia raíz cuadrada de la disimilaridad de Bray-Curtis.

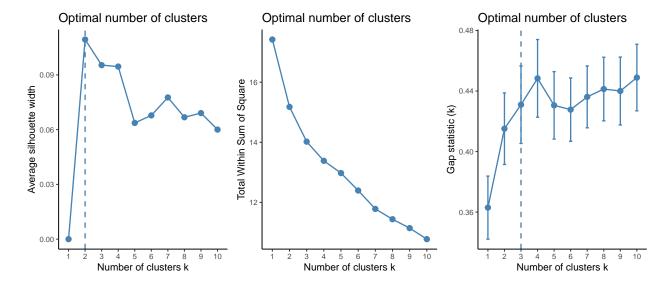
```
grid.arrange(
   fviz_nbclust(df, diss = sq_dist, FUNcluster = hcut, method = "silhouette") +
        theme_classic(base_size = 8),
   fviz_nbclust(df, diss = sq_dist, FUNcluster = hcut, method = "wss") +
        theme_classic(base_size = 8),
   fviz_nbclust(df, diss = sq_dist, FUNcluster = hcut, method = "gap_stat", verbose = F) +
        theme_classic(base_size = 8),
   nrow = 1)
```



(g)

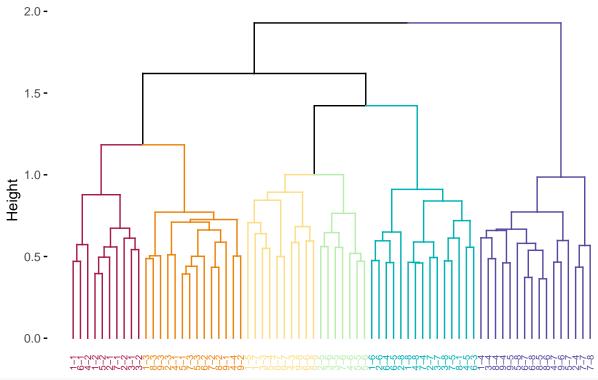
Estudiar con la misma distancia el número óptimo de conglomerados con el método PAM.

```
grid.arrange(
   fviz_nbclust(df, diss = sq_dist, FUNcluster = pam, method = "silhouette") +
        theme_classic(base_size = 8),
   fviz_nbclust(df, diss = sq_dist, FUNcluster = pam, method = "wss") +
        theme_classic(base_size = 8),
   fviz_nbclust(df, diss = sq_dist, FUNcluster = pam, method = "gap_stat", verbose = F) +
        theme_classic(base_size = 8),
   nrow = 1)
```

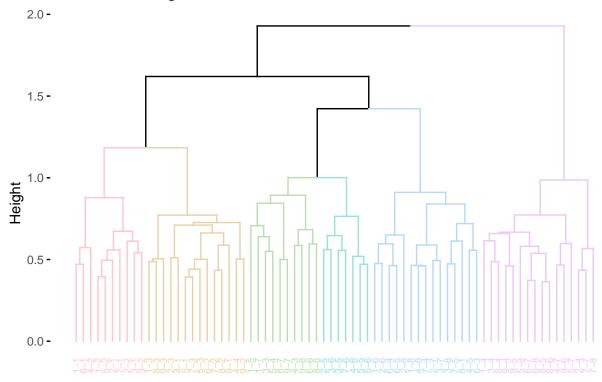


(h)

De los apartados anteriores se deduce que no hay un número claro de conglomerados. Un ecólogo experto propone que sean 6, ya que su experiencia así lo ha visto en otros bosques similares. Dibujar el dendograma del apartado (e) con esta partición. Con el objetivo de caracterizar los conglomerados, calcular una tabla con las medianas de las frecuencias de cada especie en cada uno de los seis conglomerados del dendograma anterior. Descartar de esta tabla las especies con una mediana inferior o igual a 4 en todos los conglomerados. Representar la tabla anterior con un análisis de correspondencias y un gráfico asimétrico.

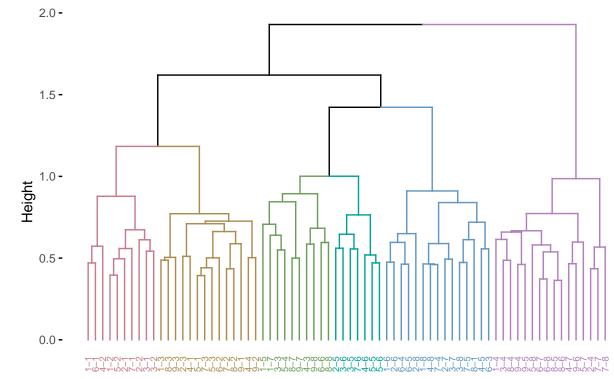


[[1]]

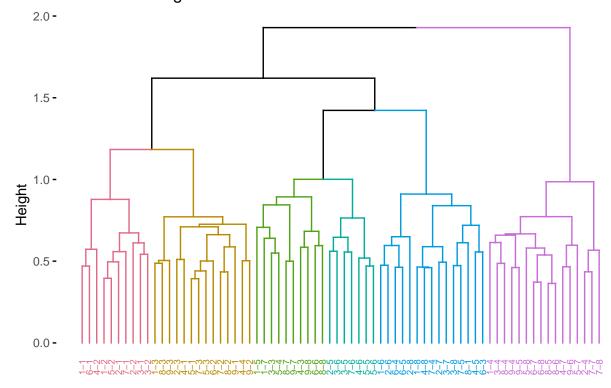


[[2]]

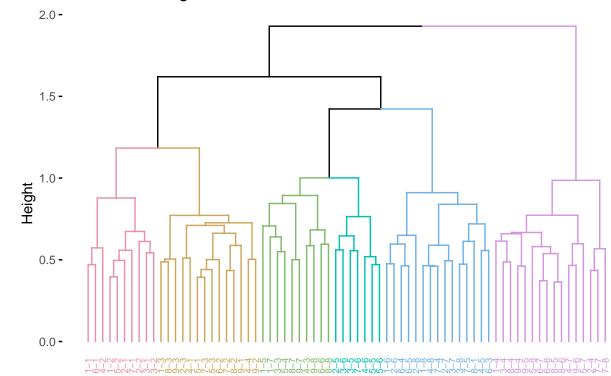
Cluster Dendrogram

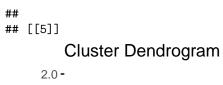


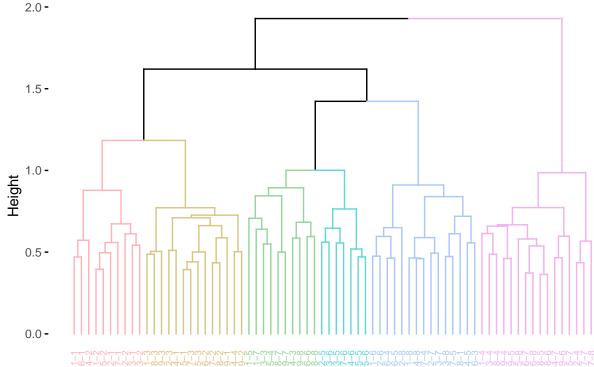




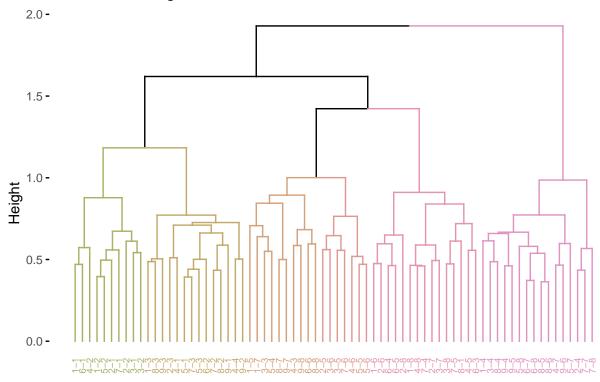
[[4]]





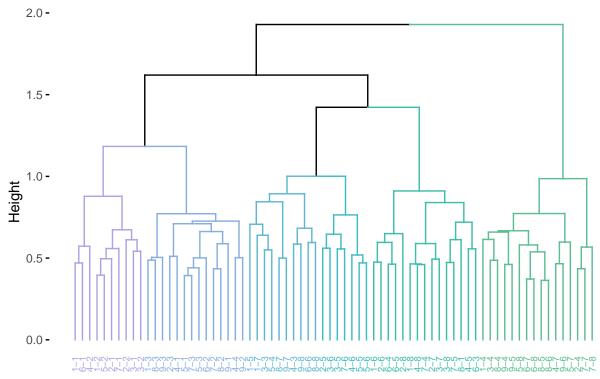


[[6]]

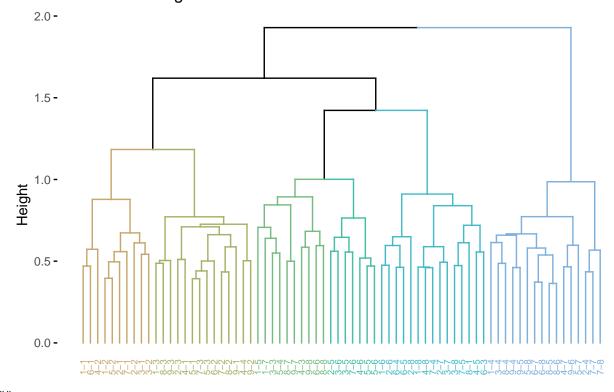


[[7]]

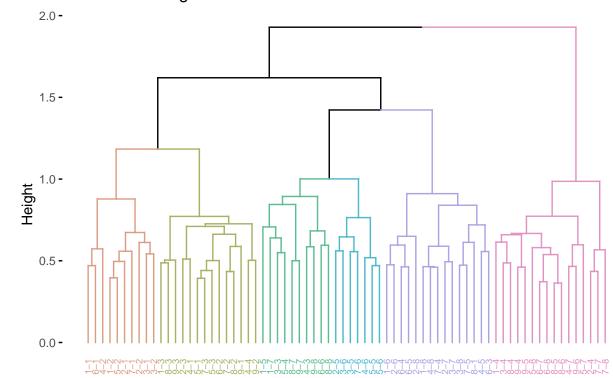
Cluster Dendrogram





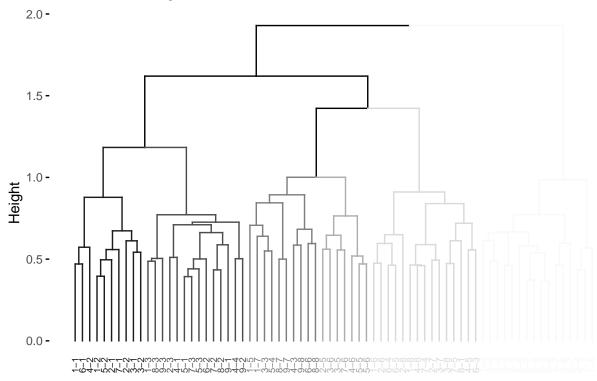


[[9]]

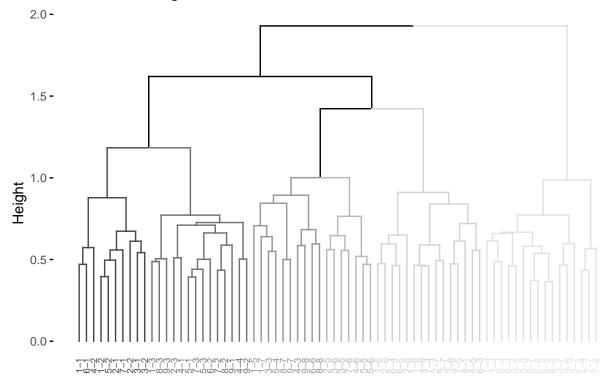


[[10]]

Cluster Dendrogram

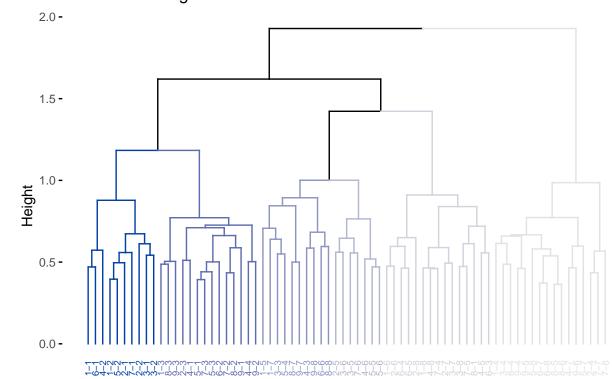


[[11]]



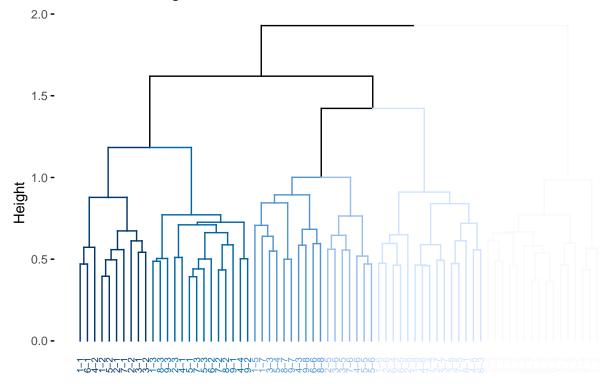
[[12]]

Cluster Dendrogram

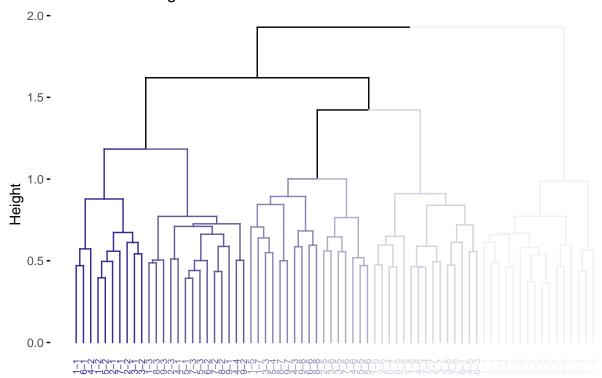


[[13]]

Cluster Dendrogram

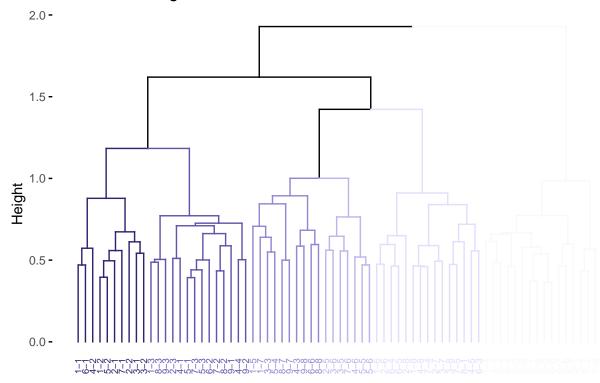


[[14]]

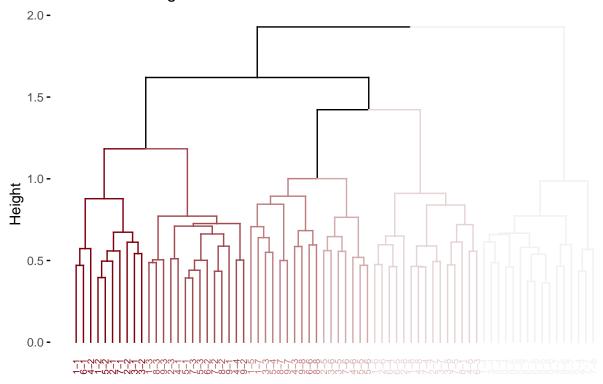


[[15]]

Cluster Dendrogram

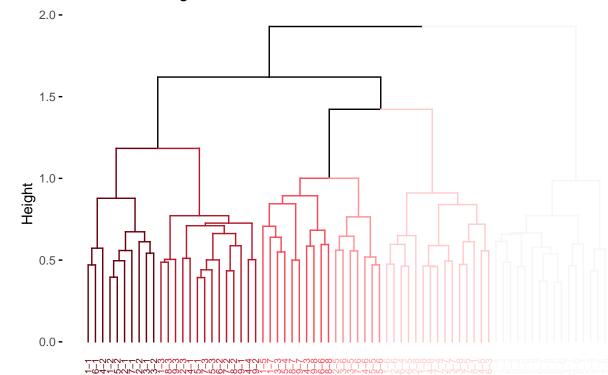


[[16]]



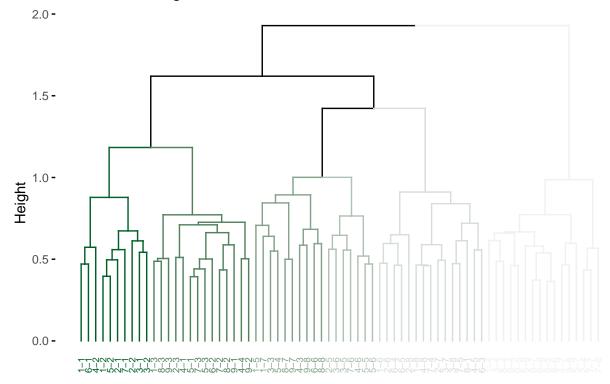
[[17]]

Cluster Dendrogram

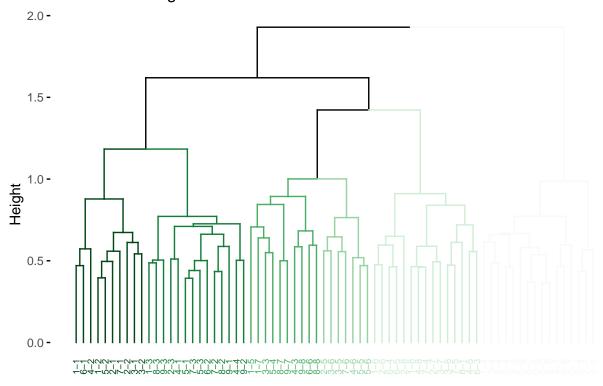


[[18]]

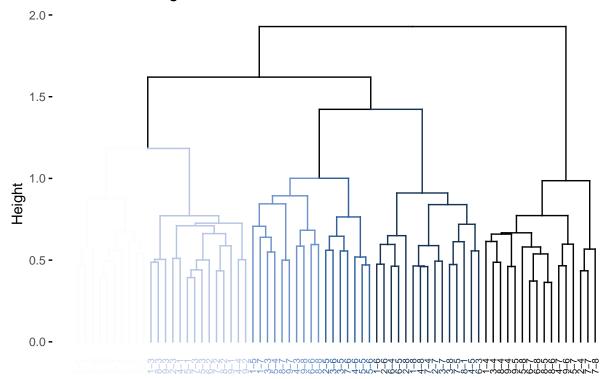
Cluster Dendrogram



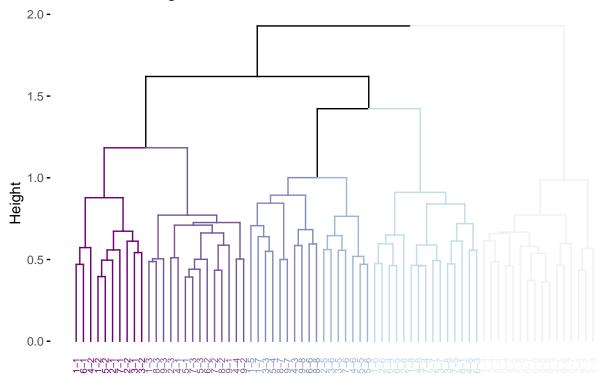
[[19]]





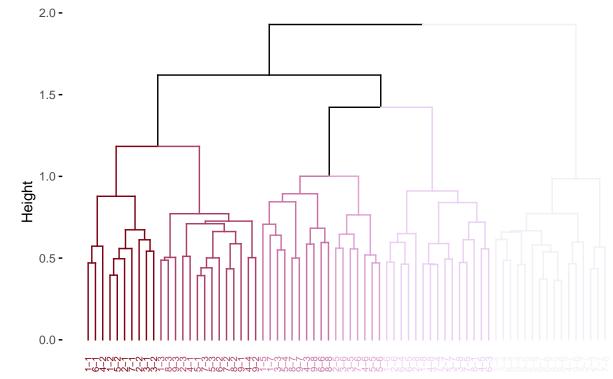


[[21]]



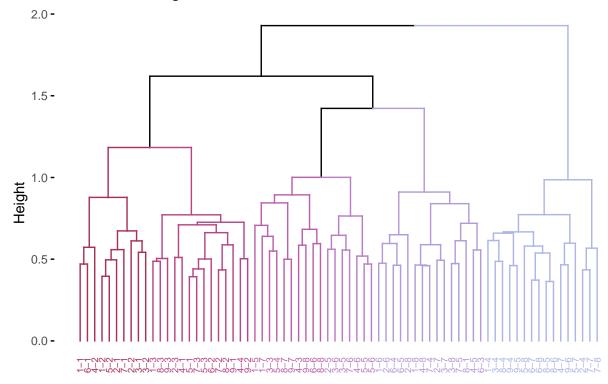
[[22]]

Cluster Dendrogram

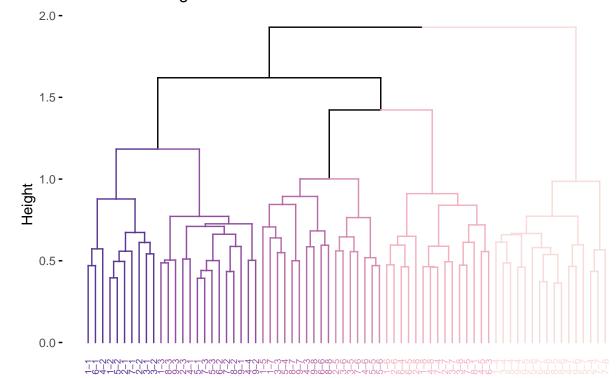


[[23]]

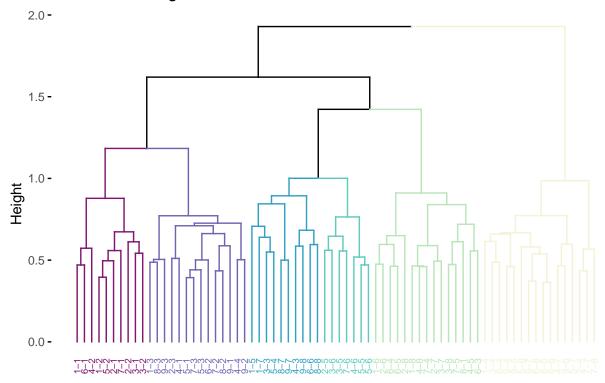
Cluster Dendrogram



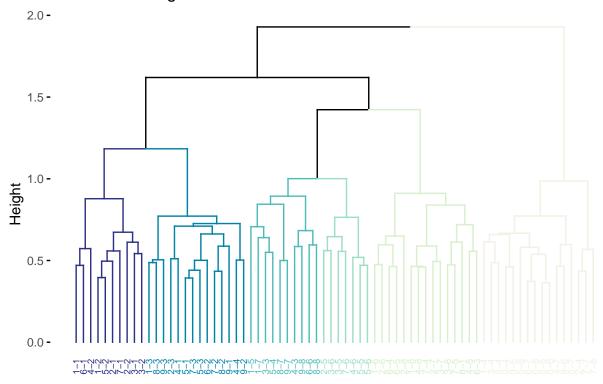
[[24]]





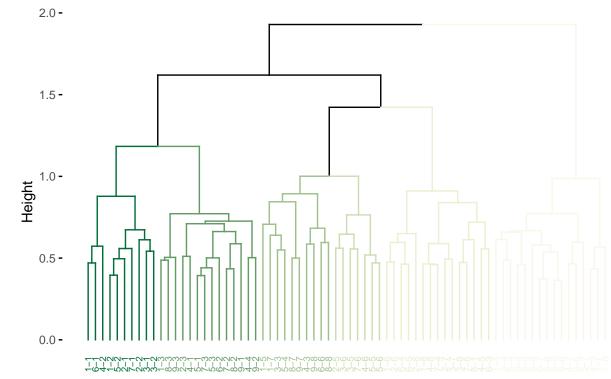


[[26]]



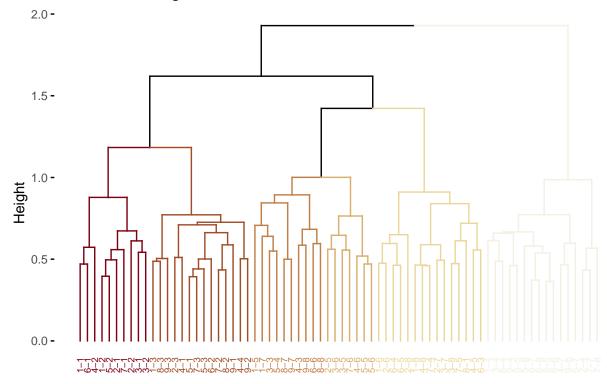
[[27]]

Cluster Dendrogram

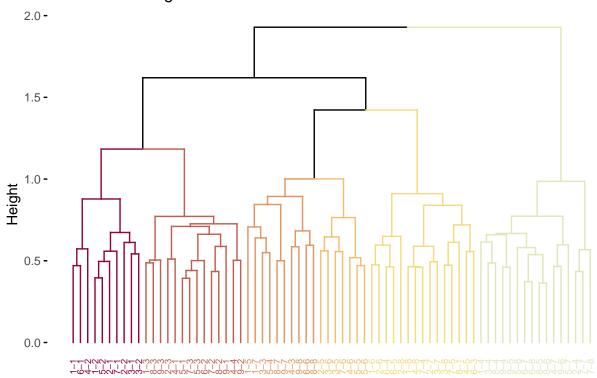


[[28]]

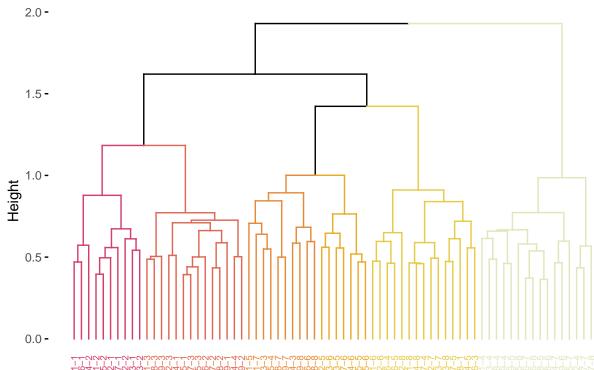
Cluster Dendrogram



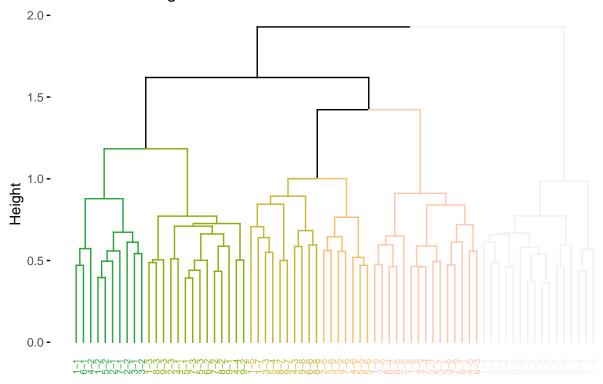
[[29]]





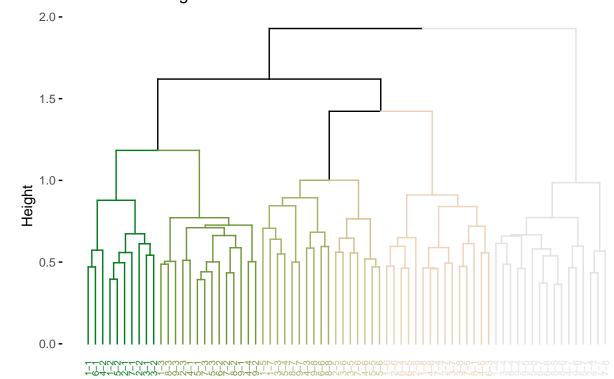


[[31]]

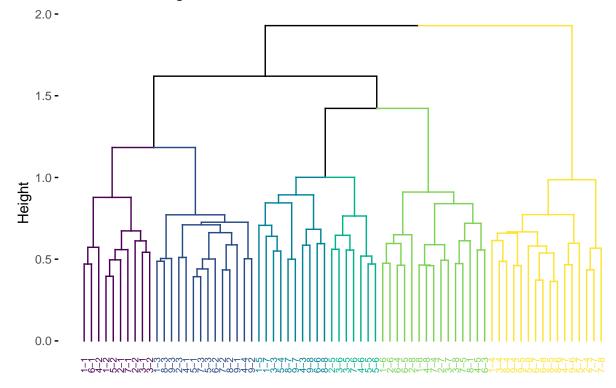


[[32]]

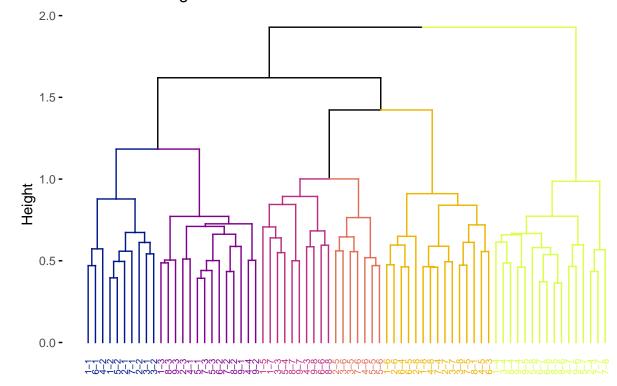
Cluster Dendrogram





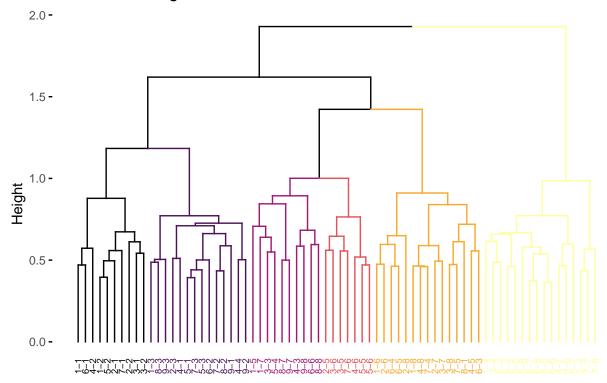


[[34]]

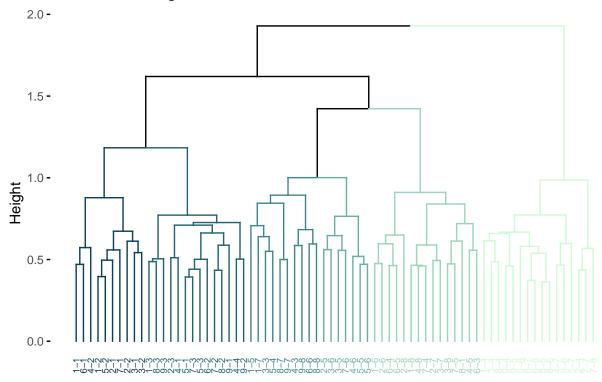


[[35]]

Cluster Dendrogram

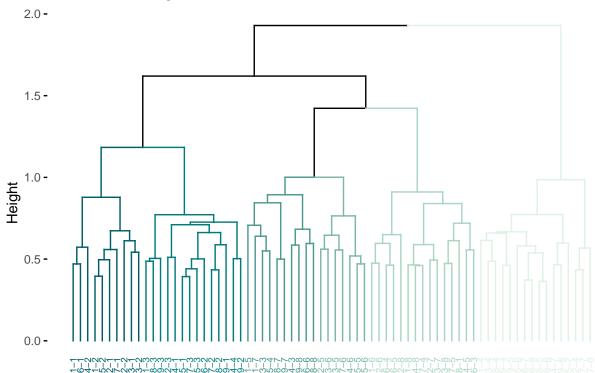


[[36]]



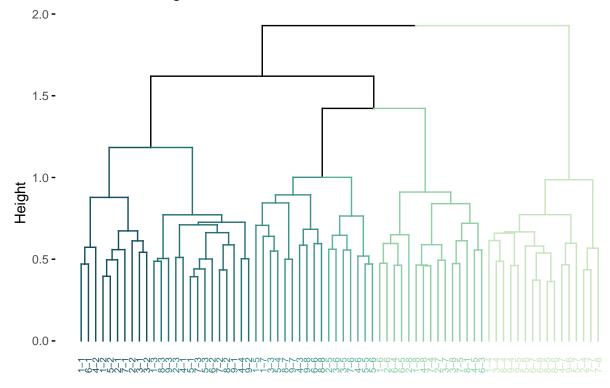
[[37]]

Cluster Dendrogram

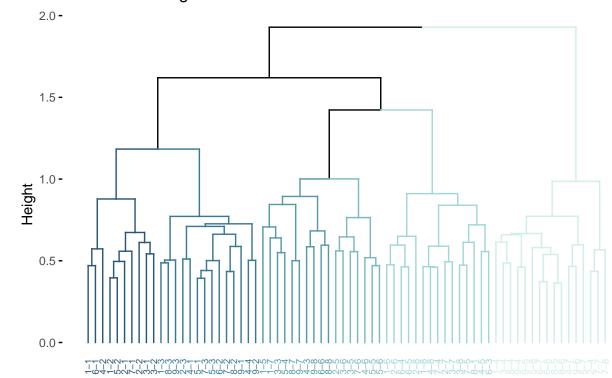


[[38]]

Cluster Dendrogram

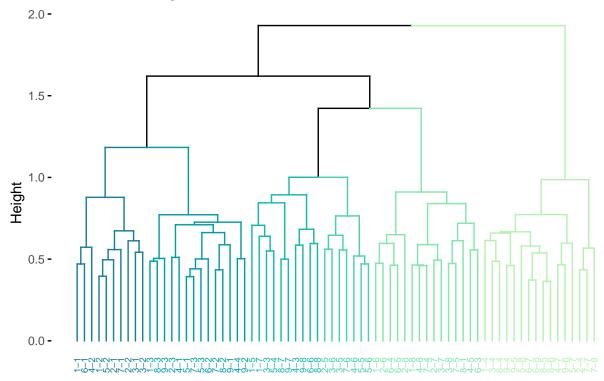


[[39]]

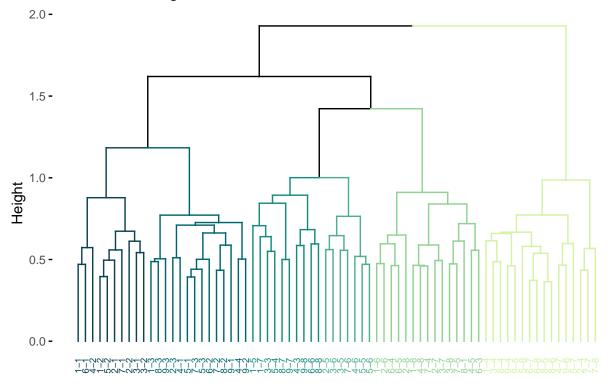


[[40]]

Cluster Dendrogram

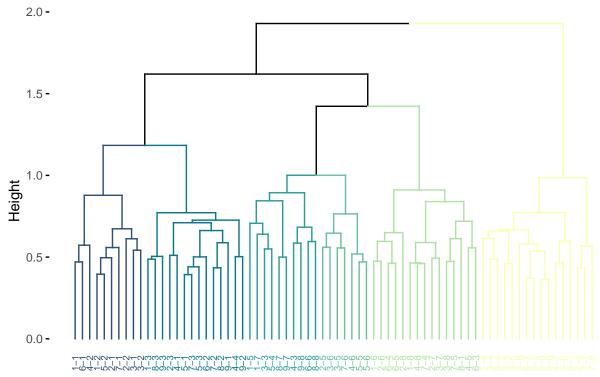


[[41]]

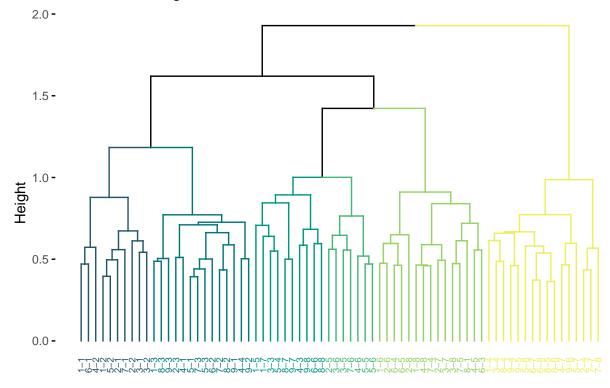


[[42]]

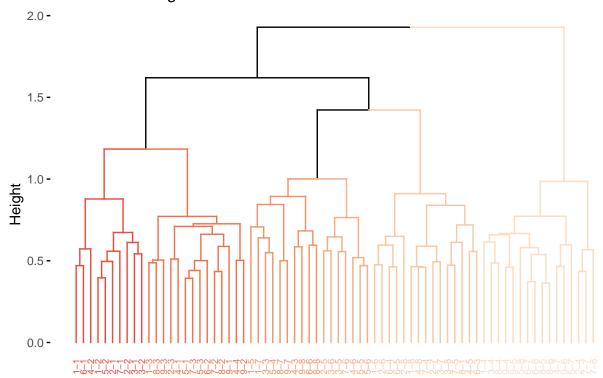
Cluster Dendrogram





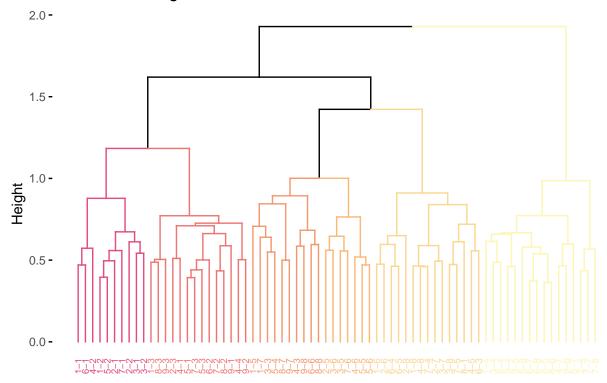


[[44]]

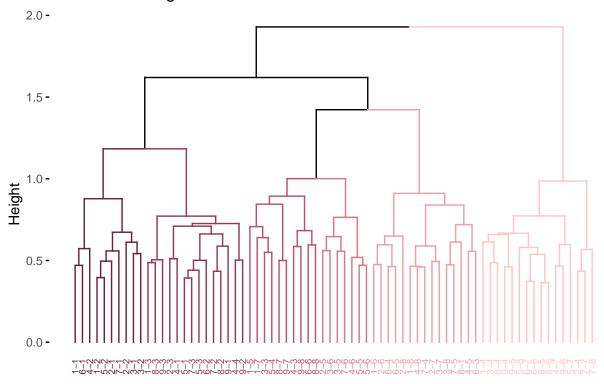


[[45]]

Cluster Dendrogram

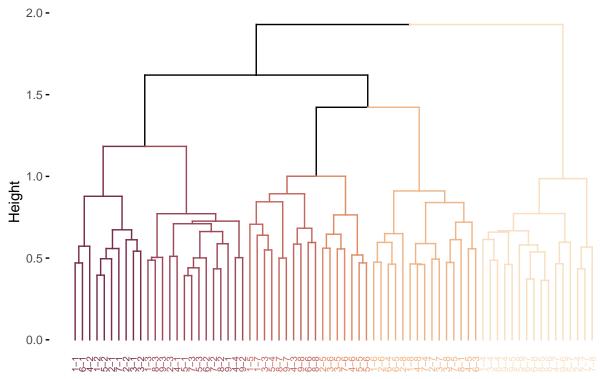


[[46]]

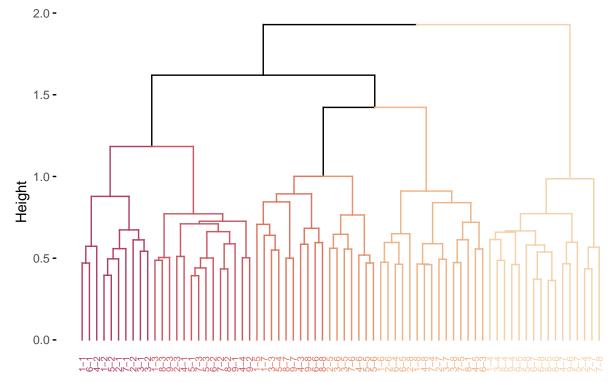


[[47]]

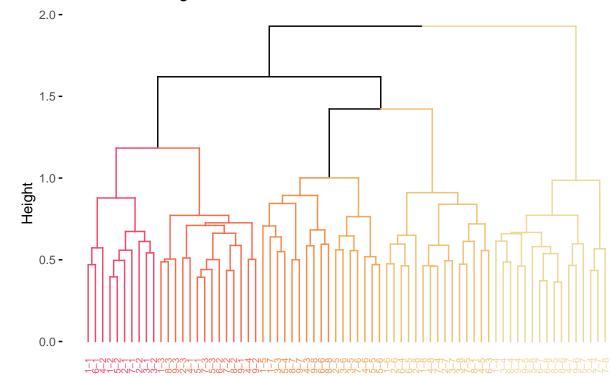
Cluster Dendrogram





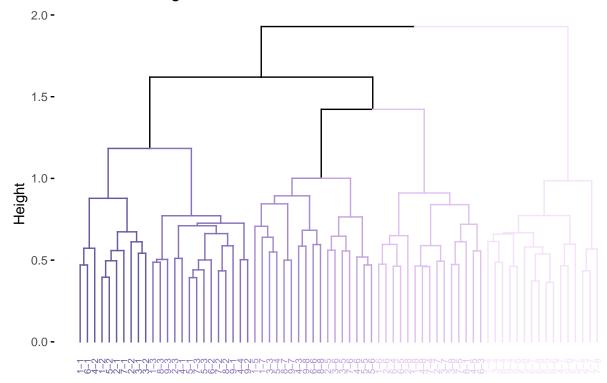


[[49]]

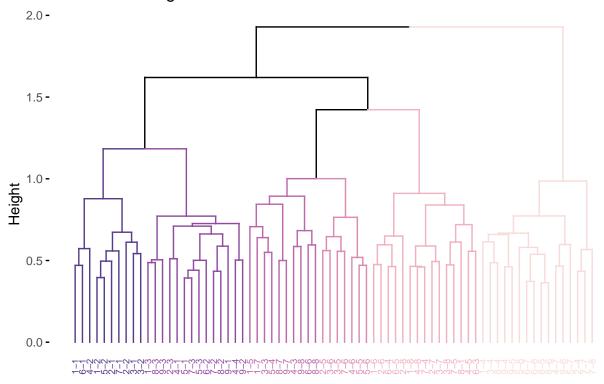


[[50]]

Cluster Dendrogram

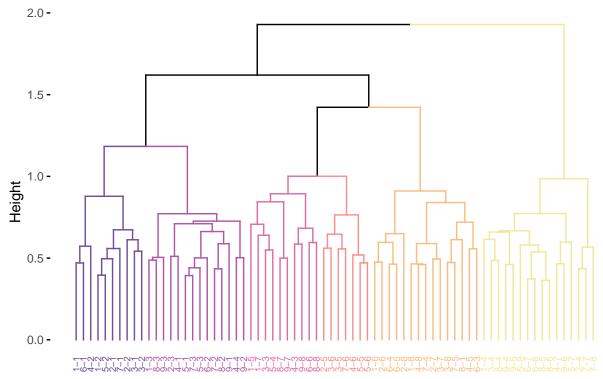


[[51]]



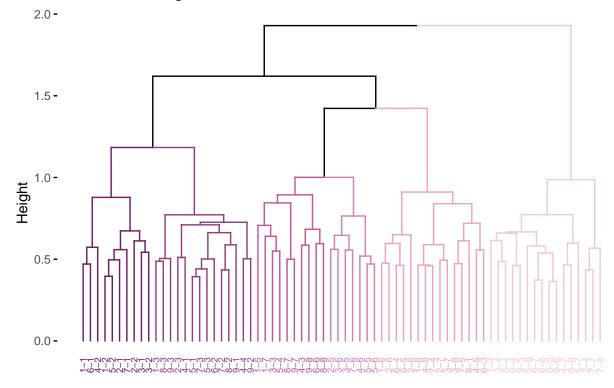
[[52]]

Cluster Dendrogram

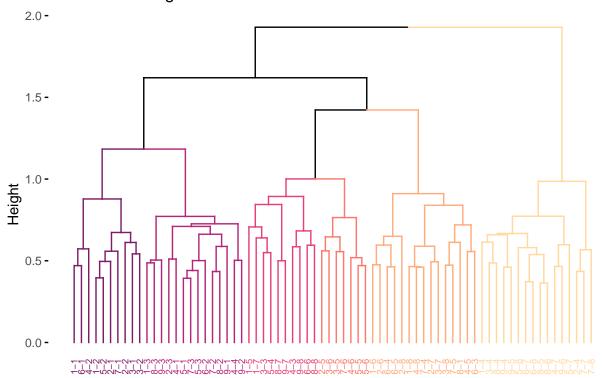


[[53]]

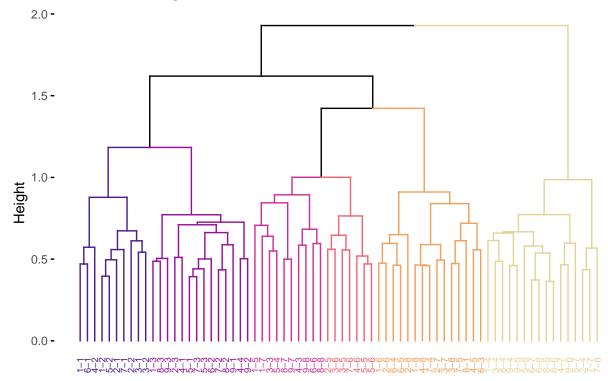
Cluster Dendrogram



[[54]]

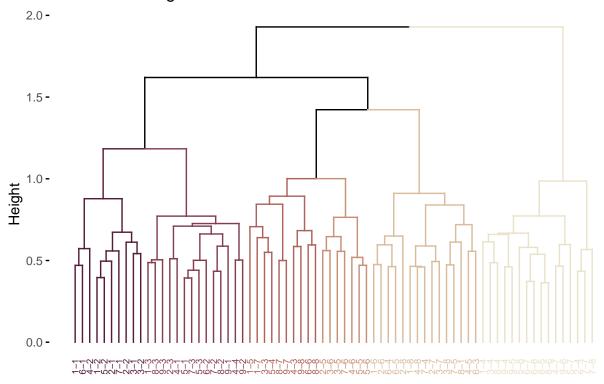






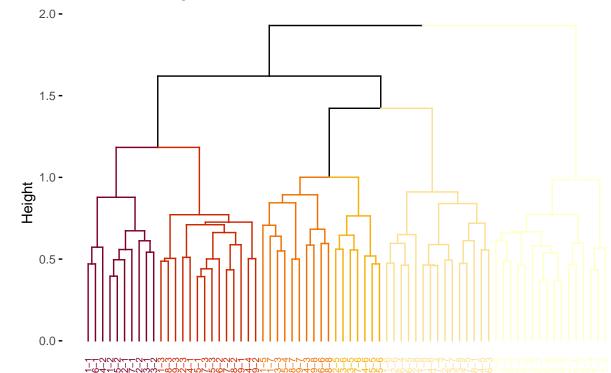
##

[[56]]



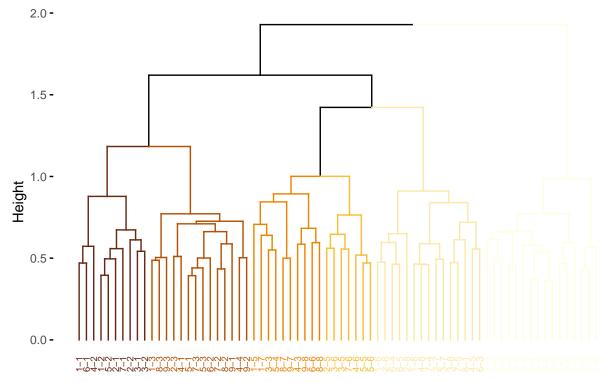
[[57]]

Cluster Dendrogram

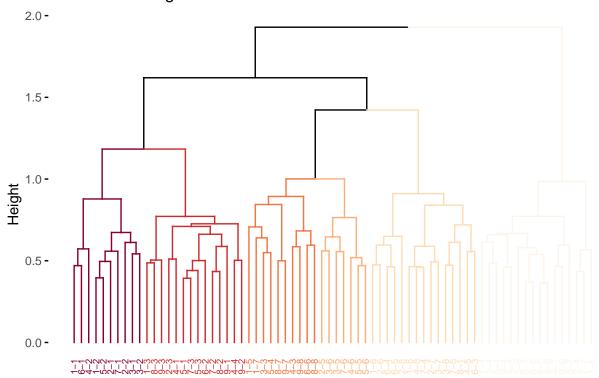


[[58]]

Cluster Dendrogram

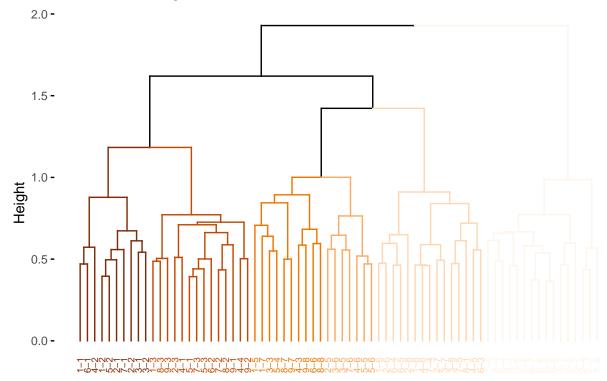


[[59]]

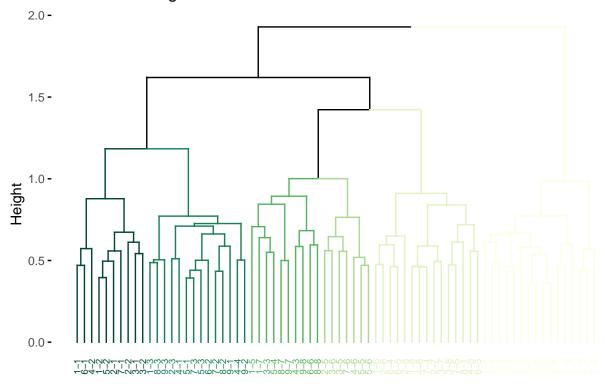


[[60]]

Cluster Dendrogram

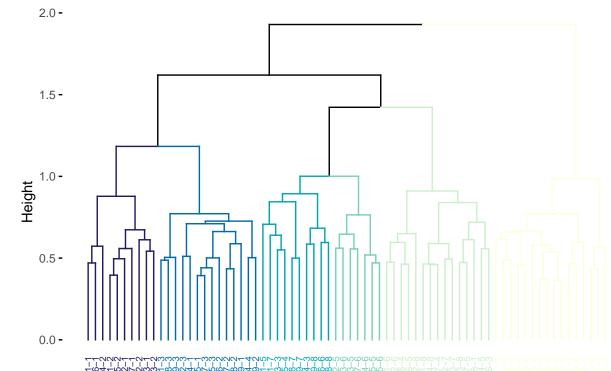


[[61]]



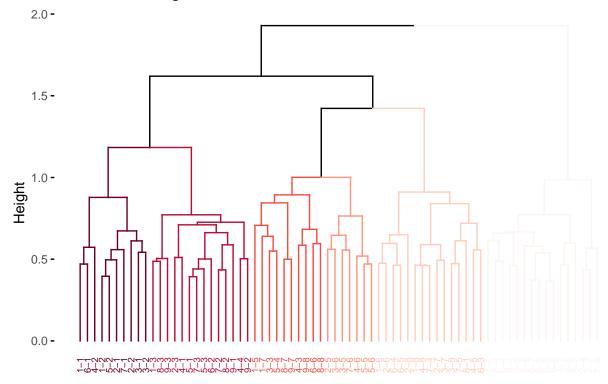
[[62]]

Cluster Dendrogram

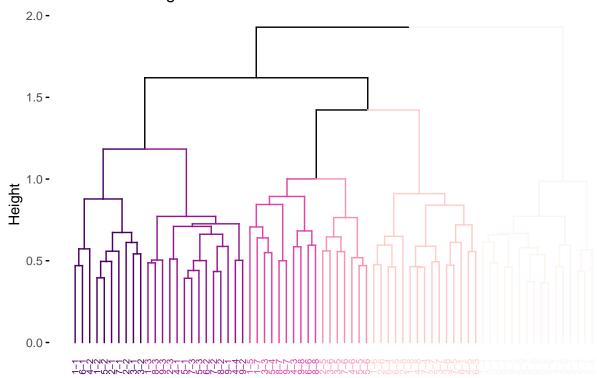


[[63]]

Cluster Dendrogram

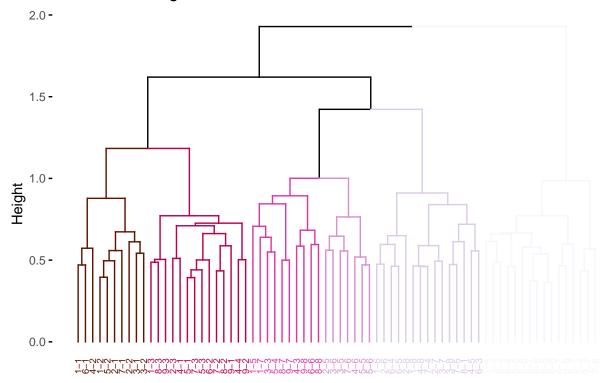


[[64]]

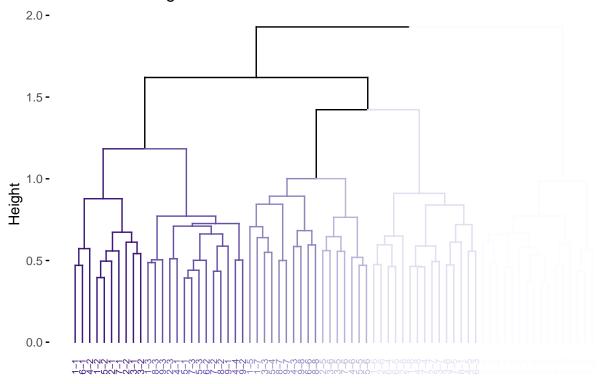


[[65]]

Cluster Dendrogram

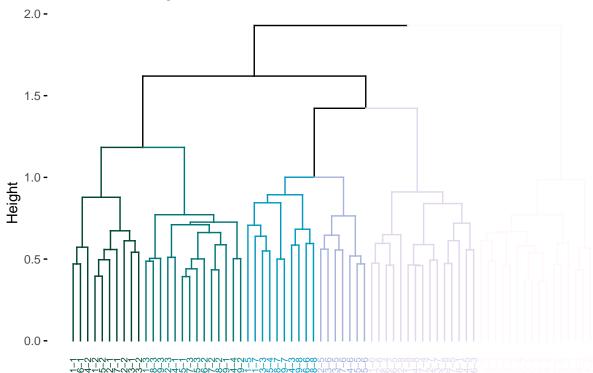


[[66]]



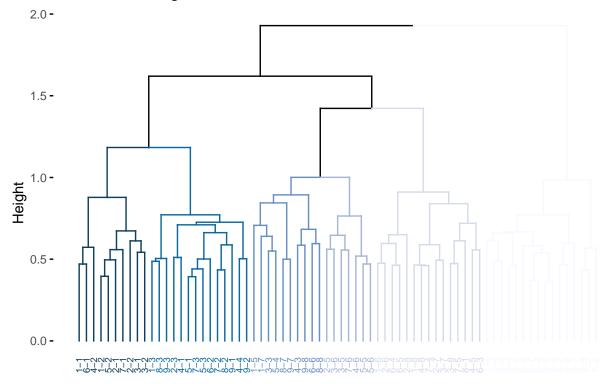
[[67]]

Cluster Dendrogram

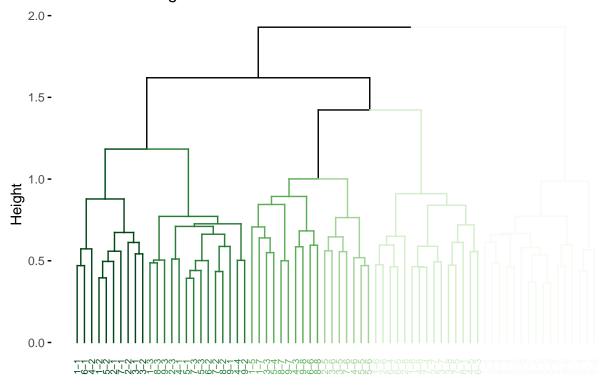


[[68]]

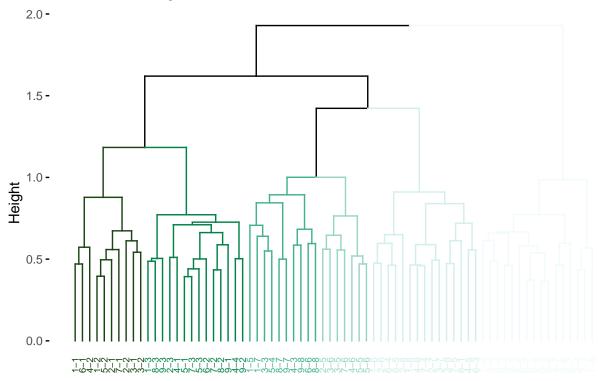
Cluster Dendrogram



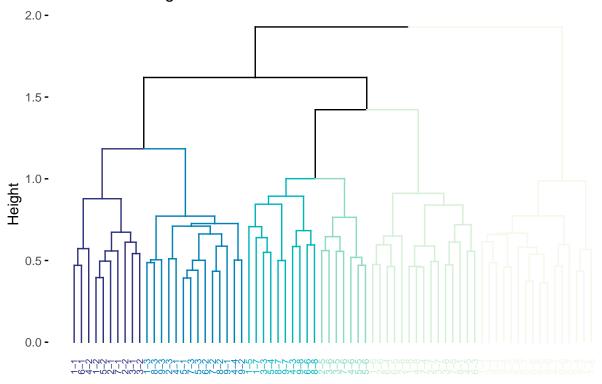
[[69]]





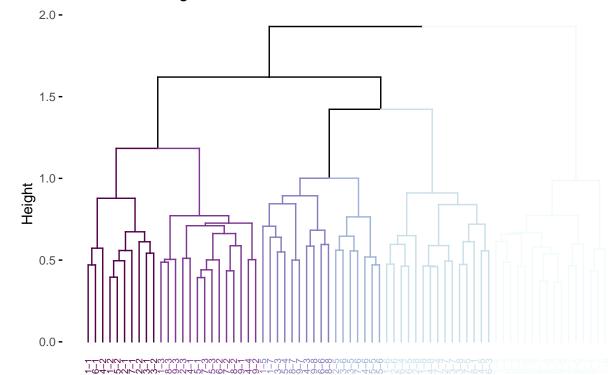


[[71]]

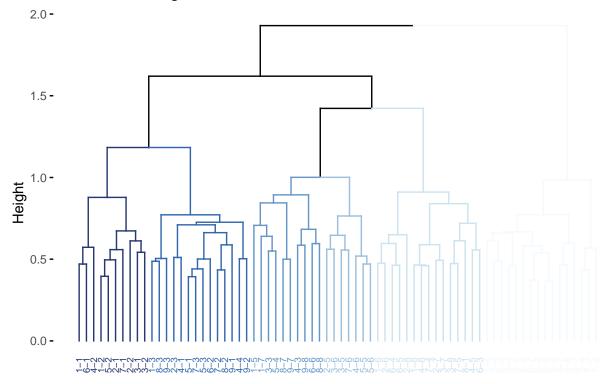


[[72]]

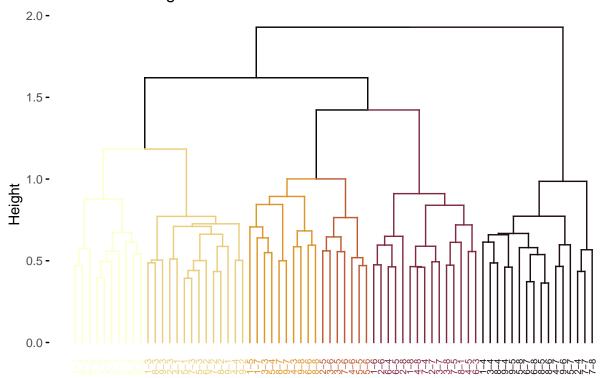
Cluster Dendrogram



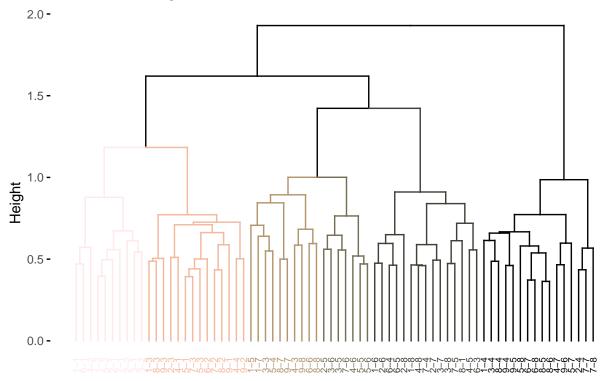




[[74]]

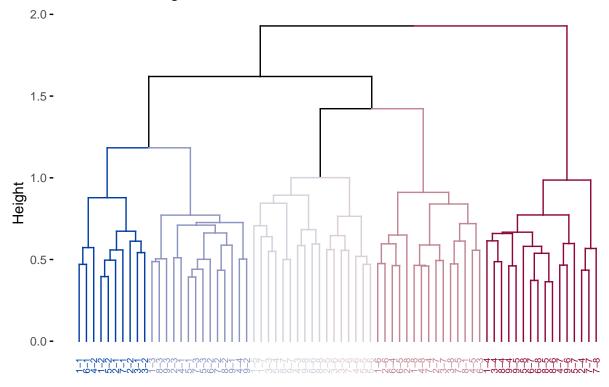






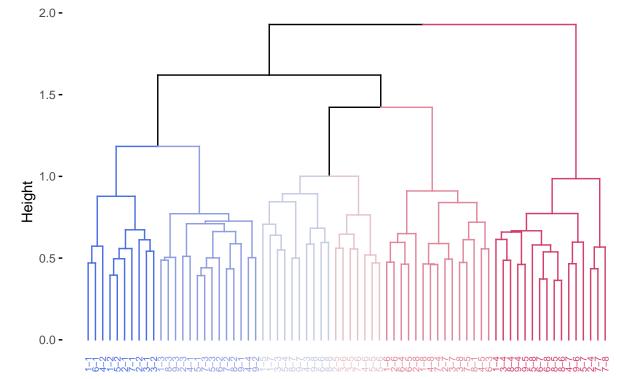
##

[[76]]

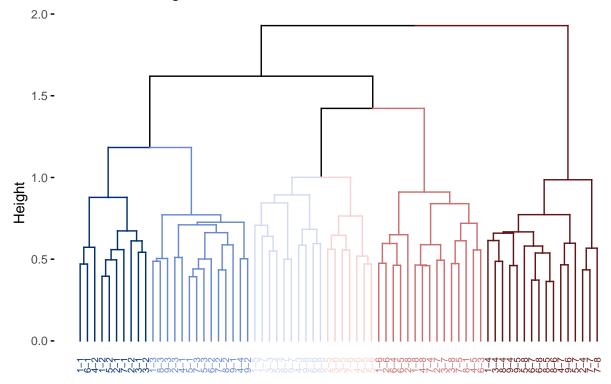


[[77]]

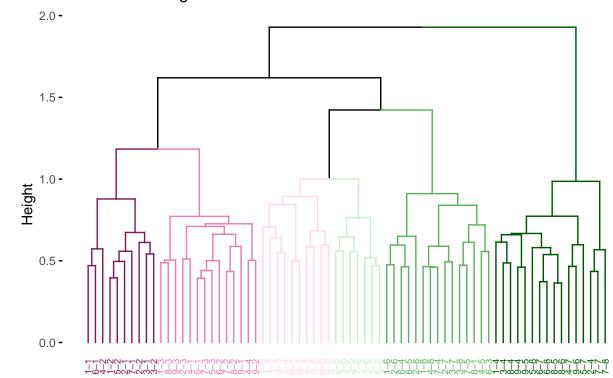
Cluster Dendrogram





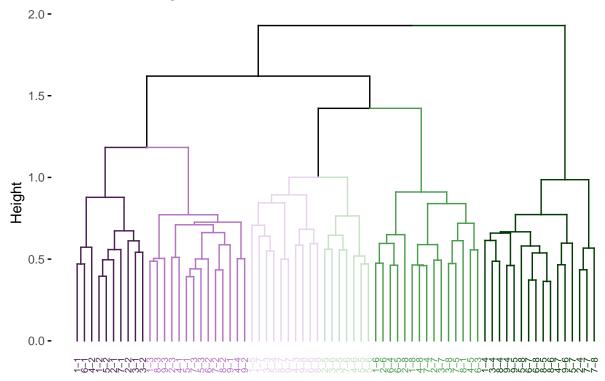


[[79]]

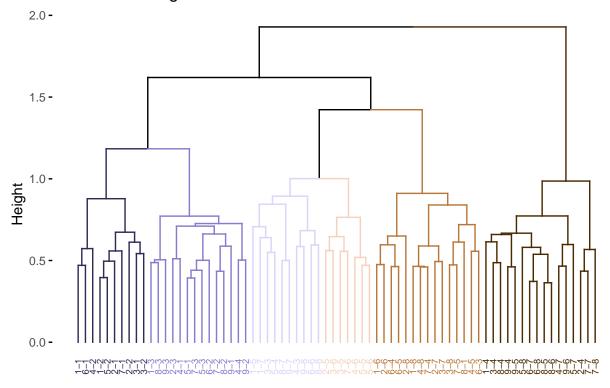


[[80]]

Cluster Dendrogram

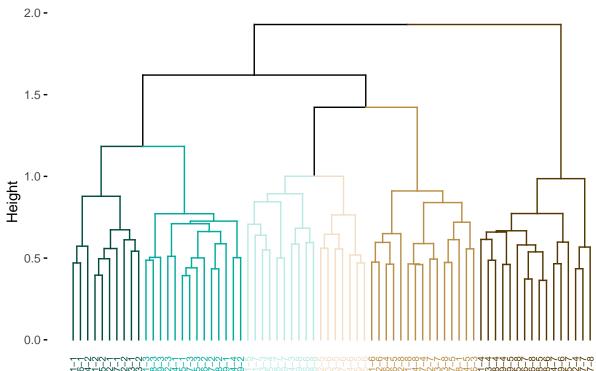


[[81]]

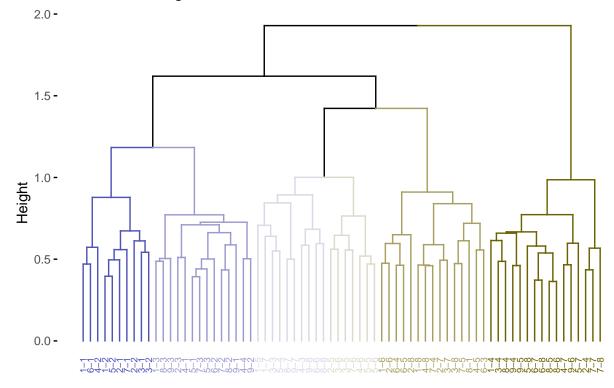


[[82]]

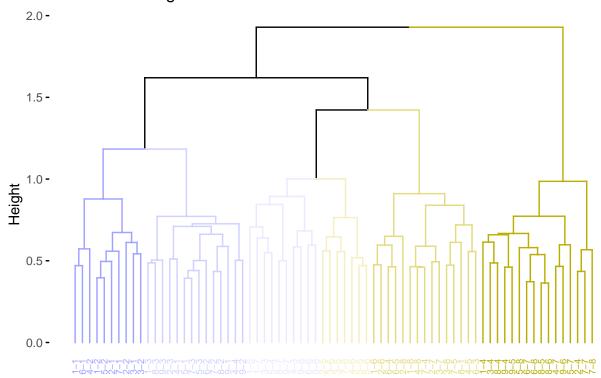
Cluster Dendrogram



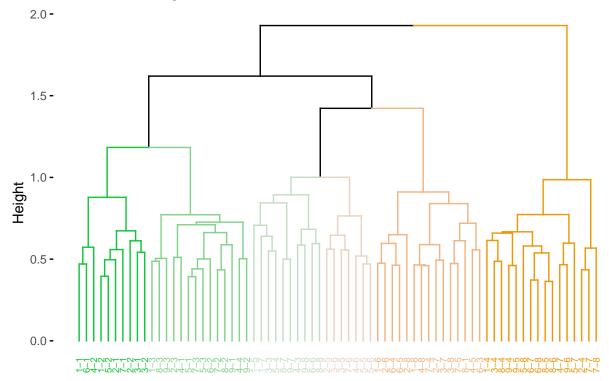




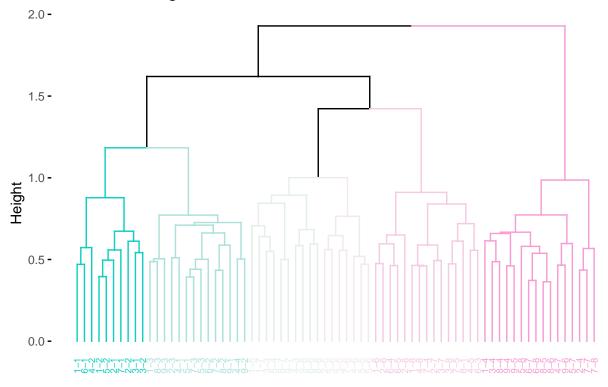
[[84]]





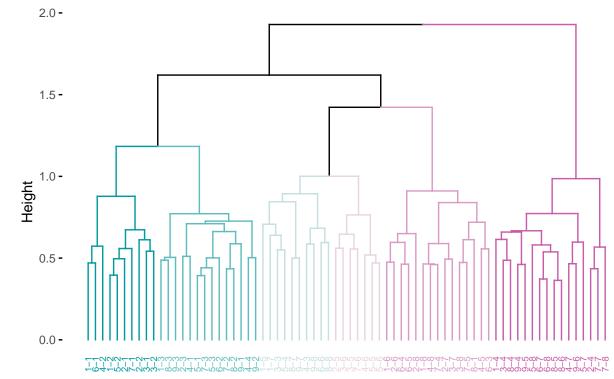


[[86]]



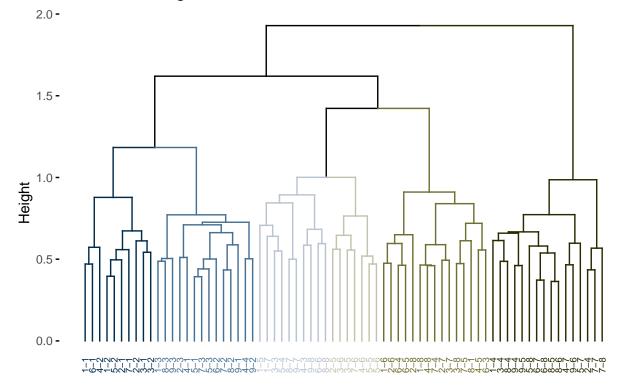
[[87]]

Cluster Dendrogram

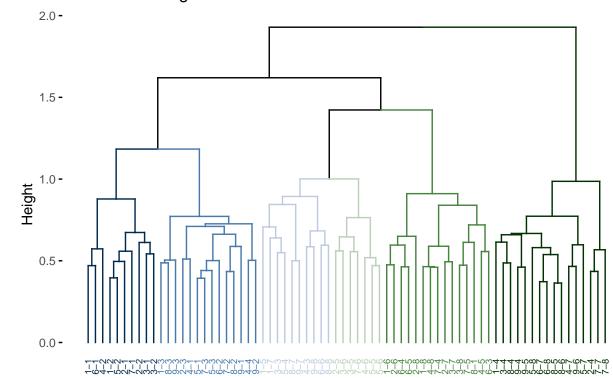


[[88]]

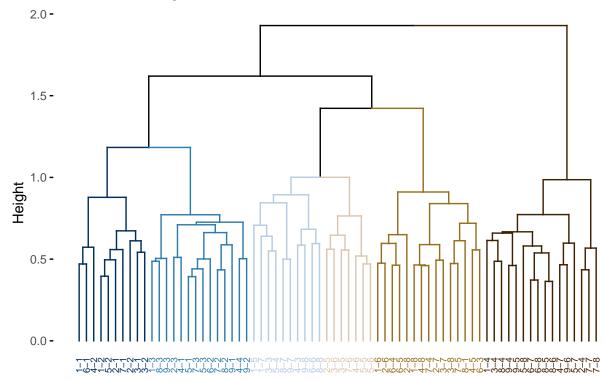
Cluster Dendrogram



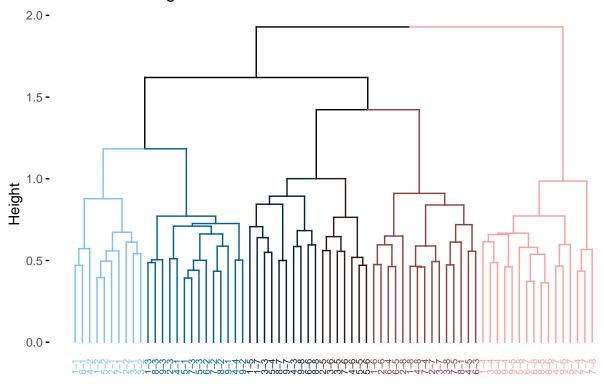
[[89]]





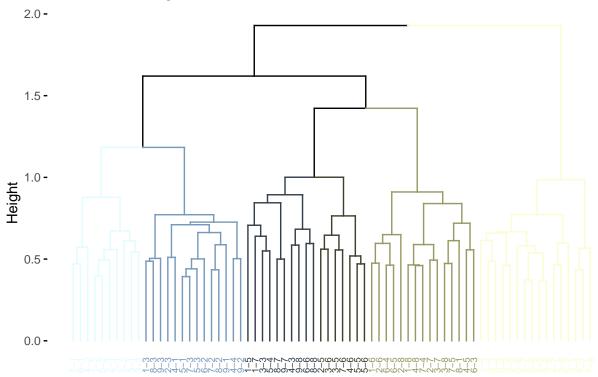


[[91]]



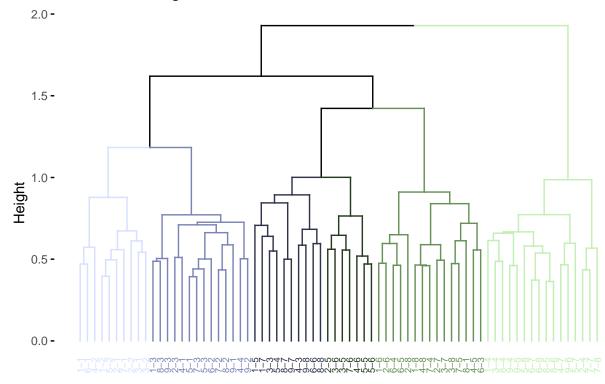
[[92]]

Cluster Dendrogram

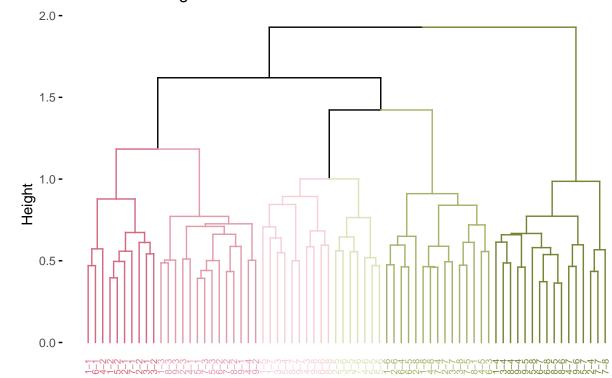


[[93]]

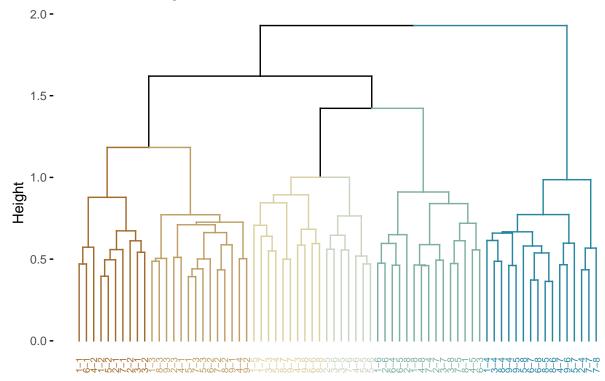
Cluster Dendrogram



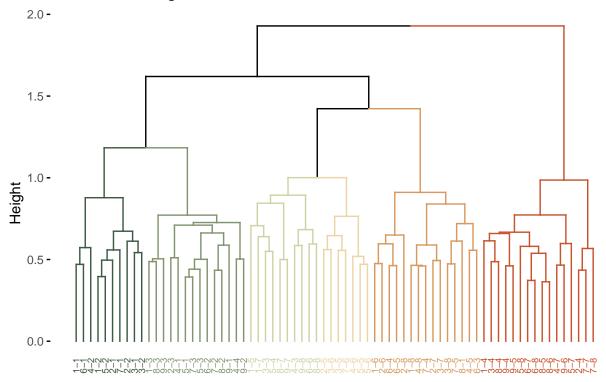
[[94]]





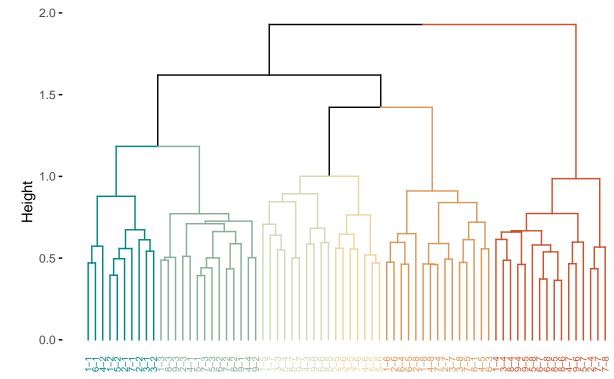


[[96]]

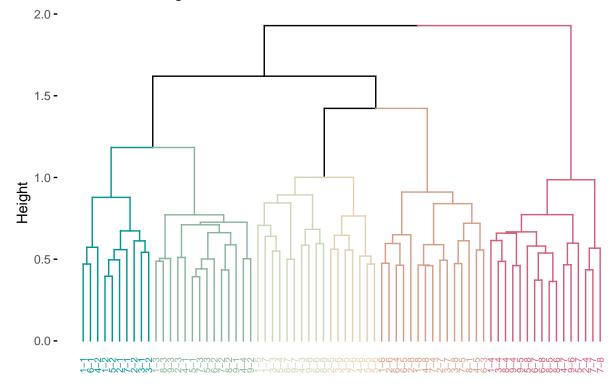


[[97]]

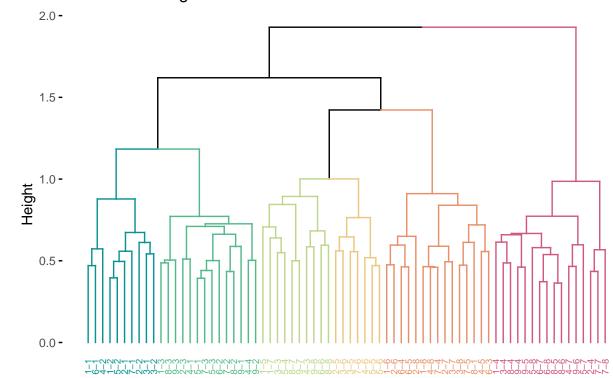
Cluster Dendrogram



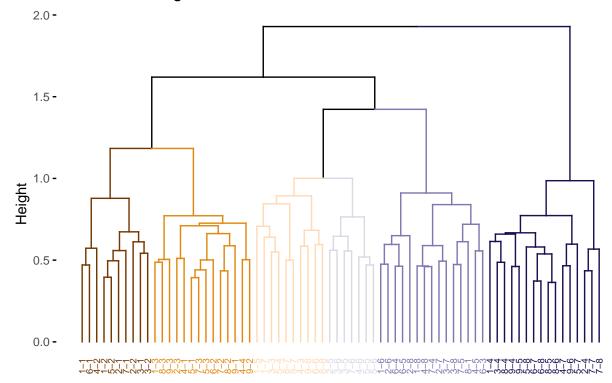




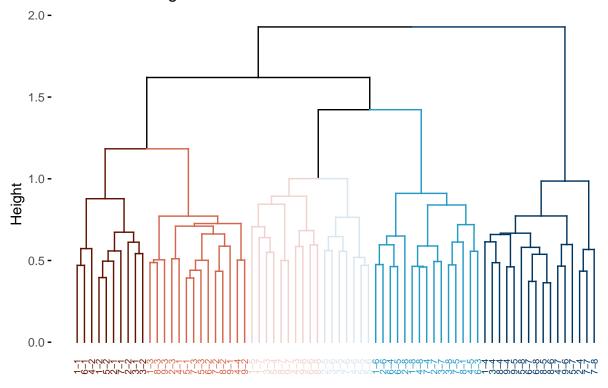
[[99]]





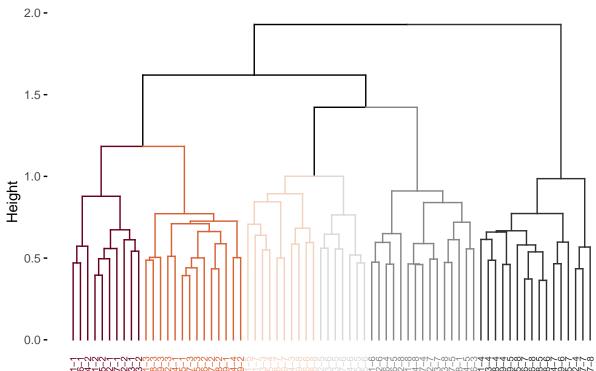


[[101]]



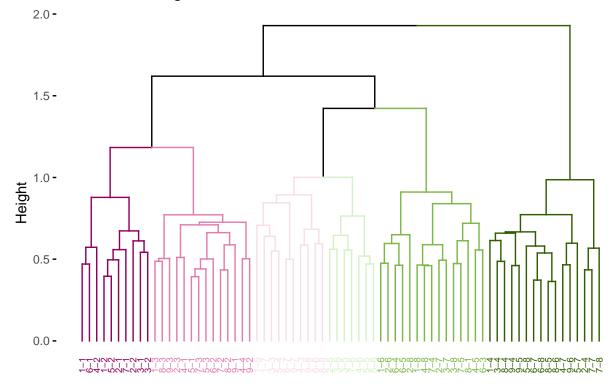
[[102]]

Cluster Dendrogram

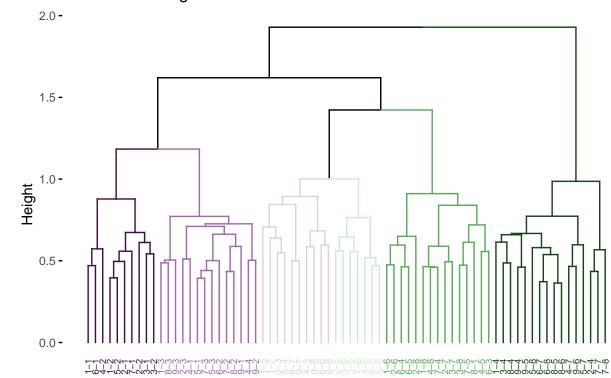


[[103]]

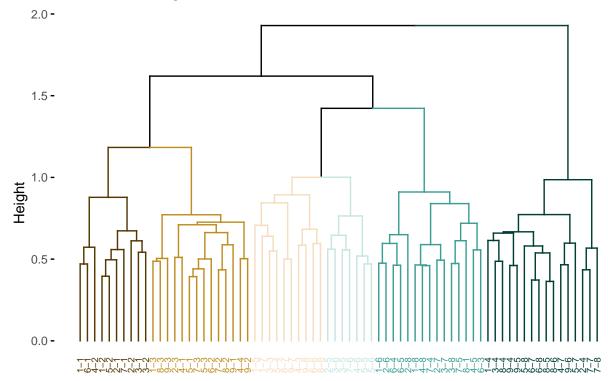
Cluster Dendrogram



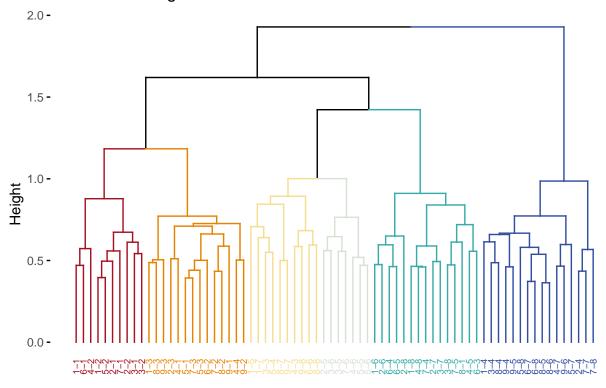
[[104]]





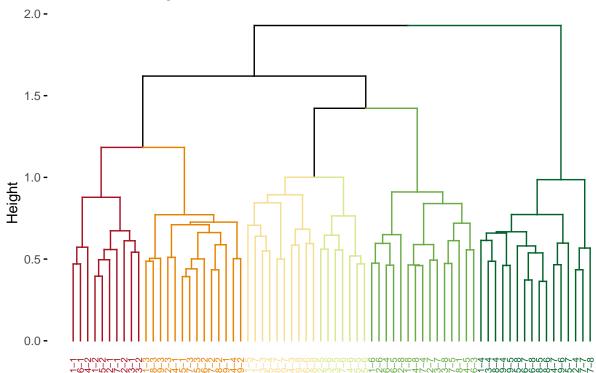


[[106]]



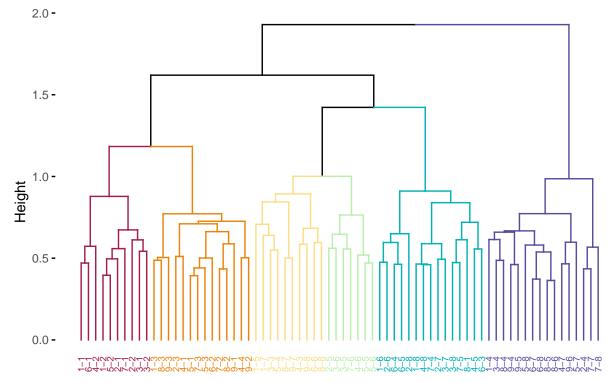
[[107]]

Cluster Dendrogram

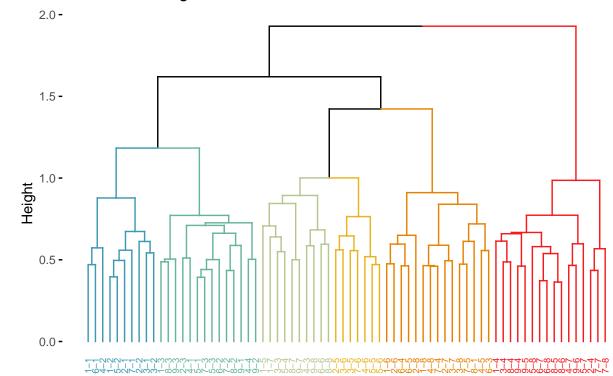


[[108]]

Cluster Dendrogram



[[109]]



[[110]] Cluster Dendrogram 2.0 -1.5 -Height 1.0 -0.5 -0.0 dt <mutate(cluster = factor(clust_6\$cluster)) %>% group_by(cluster) %>% summarise_all(median) %>% # traslocamos el tibble para mejor visualización gather(especie, value, -cluster) %>% spread(cluster, value) %>% mutate(chk = `1` <= 4 & `2` <= 4 & `3` <= 4 & `4` <= 4 & `5` <= 4 & `6` <= 4) %>% filter(!chk) %>% select(-chk) %>% column_to_rownames('especie') pander(dt)

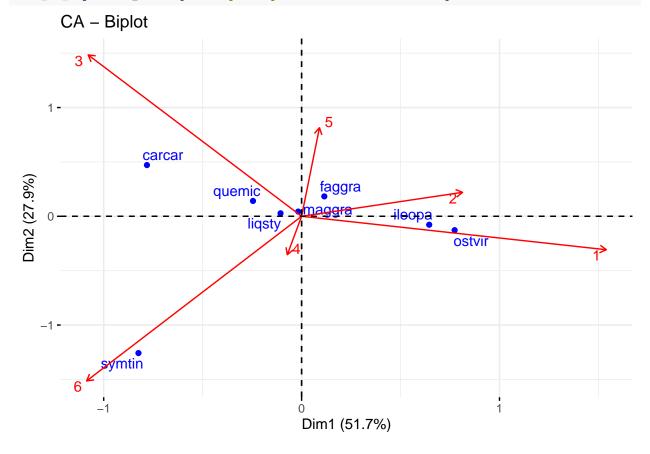
	1	2	3	4	5	6
carcar	0	1	21	5.5	4	9
faggra	5	9.5	4.5	4.5	14	6
ileopa	16.5	11	3	4	3	4
\mathbf{liqsty}	5.5	7	9	9	4	8
maggra	2.5	5	3	1	5	5
\mathbf{ostvir}	18.5	7	1.5	7	3	2
quemic	4	5	9.5	3	5	8
\mathbf{symtin}	0.5	0	0	4	0	16

```
ca_df <-
    FactoMineR::CA(dt, graph = F)

pander(ca_df$eig)</pre>
```

	eigenvalue	percentage of variance	cumulative percentage of variance
dim 1	0.2906	51.68	51.68
$\dim 2$	0.1571	27.94	79.62
$\dim 3$	0.09164	16.3	95.92
$\dim 4$	0.0157	2.792	98.71
$\dim 5$	0.007258	1.291	100





Ejercicio 2 (30 pt.)

Es posible utilizar la regresión logística para estudiar la discriminación entre dos grupos dado un conjunto de variables explicativas. Para más detalles podéis consultar el apartado 8.10 del libro de Manly.

(a)

Realizar un análisis discriminante con ayuda de la regresión logística con los datos de los 49 gorriones hembra después de una tormenta. Reproducir con todo detalle la tabla 8.6 de la

página 153 del libro de Manly.

```
load("gorriones.RData")
mod_lg <-
    glm(superviv ~ x1 + x2 + x3 + x4 + x5, gorriones, family = binomial(link = "logit"))
mod_NULL <-
    glm(superviv ~ 1, gorriones, family = binomial(link = "logit"))
# Para reporducir *con todo detalle* se puede utilizar la sintaxis de dplyr y crear la tabla
tbl <-
    tidy(mod lg) %>%
    mutate(
        chi_2 = (estimate / std.error) ^ 2,
        Variable = c(
            "Constant",
            "Total length",
            "Alar length",
            "Length beak and head",
            "Length humerus",
            "Length keel of sternum"
        ),
        chi_2 = round(chi_2, 2)
    mutate_at(vars(estimate:p.value), list( ~ round(., 3))) %>%
    select(
        Variable,
        ' estimate' = estimate,
        'Standard \\\\ error' = std.error,
        'Chi-squared' = chi_2,
        'p-Value' = p.value
    )
tbl[1,4:5] <- "--"
pander(tbl, justify = "lcccc")
```

Variable	estimate	Standard \ error	Chi-squared	p-Value
Constant	13.58	15.87	_	_
Total length	-0.163	0.14	1.36	0.244
Alar length	-0.028	0.106	0.07	0.794
Length beak and head	-0.084	0.629	0.02	0.894
Length humerus	1.062	1.023	1.08	0.299
Length keel of sternum	0.072	0.417	0.03	0.864

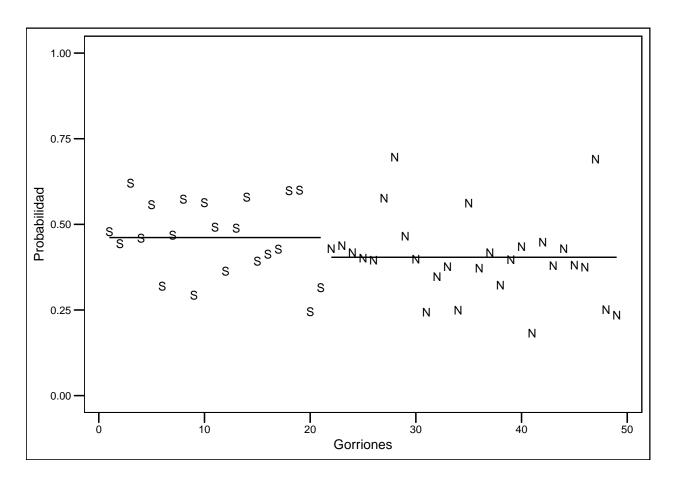
(b)

Contrastar con un test χ^2 la significación de la regresión y explicar su resultado.

```
anova(mod_NULL, mod_lg, test = "Chisq")
```

Realizar un gráfico como el de la figura 8.2 de la página 156 del libro de Manly pero con los datos de este ejercicio y valorar el resultado.

```
tibble(
   fitted = mod_lg$fitted.values,
   class = augment(mod_lg)$superviv
) %>%
   rowid_to_column() %>%
   group_by(class) %>%
   mutate(mean = mean(fitted)) %>%
   ggplot(aes(rowid, fitted, shape = class)) +
   geom_point(size = 3) +
   geom_line(aes(y=mean)) +
   scale_shape_manual(values = c("N","S")) +
   theme_base(base_size = 10) +
   labs(x="Gorriones", y="Probabilidad") +
   scale_y_continuous(limits = c(0,1)) +
   guides(shape = F)
```



(d)

Calcular la tabla de confusión de la clasificación obtenida con la regresión logística.

	N	S
N S	24 14	4 7

```
pander(cm$overall)
```

Table 5: Table continues below

Accuracy	Kappa	AccuracyLower	${\bf Accuracy Upper}$	AccuracyNull
0.6327	0.2025	0.4829	0.7658	0.7755

AccuracyPValue	McnemarPValue
0.9926	0.03389