

S8

Estructura, Análisis y Estadística Simpliciales

Simplicial Structure, Analysis and Statistics

hrs.: 6

email: josepantoni.martin@udg.edu

Organizadores / Organizers:

- Josep Antoni Martín Fernández (Universitat de Girona)

Conferencias / Talks:

Fri 4, 15:30 - 16:30, M1 – Vera Pawlowsky-Glahn (Universitat de Girona):

Geometría del simplex.

Fri 4, 16:30 - 17:30, M1 – Carles Barceló-Vidal (Universitat de Girona):

Calculus on the Simplex.

Fri 4, 18:00 - 19:00, M1 – Juan José Egozcue (Univ. Politècnica de Catalunya):

Espacios de Hilbert de funciones de densidad.

Fri 4, 19:00 - 19:30, M1 – José Antonio Martín-Fernández (Universitat de Girona):

Medidas de diferencia en el simplex.

Fri 4, 19:30 - 20:30, M1 – Karel Hron (Palacky University, Olomouc (Czech Republic)):

Mathematical elements in robust statistics for CODA.

Sat 5, 11:00 - 11:30, M1 – Glòria Mateu-Figueras (Universitat de Girona):

Modelos de probabilidad sobre el simplex.

Sat 5, 11:30 - 12:00, M1 – Raimón Tolosana (Univ. Politècnica de Catalunya):

Momentos en el simplex.

Sat 5, 12:00 - 12:30, M1 – Javier Palarea-Albaladejo (Biomathematics and Statistics Scotland (BioSS), Edinburgh, UK):

Practical issues in statistical modelling of CODA: dealing with zero values.

Medidas de diferencia en el símplex^{**}

J. A. Martín-Fernández¹, J. Palarea-Albaladejo²

El hecho de utilizar una medida de diferencia no adecuada a la naturaleza del espacio muestral no es impedimento para que en determinadas ocasiones puedan obtenerse resultados razonables. Por otra parte, el uso de una disimilitud adecuada a la naturaleza de los datos no garantiza de por sí un análisis libre de errores. Sin embargo, elegir una medida de diferencia compatible con el carácter del espacio muestral sobre el que se definen los datos supone dar coherencia al análisis. Por ejemplo, cuando el espacio muestral es la hiperesfera, la elección natural es una distancia basada en el ángulo formado por los vectores de observaciones.

En [1] se puso por primera vez de manifiesto que los datos composicionales necesitan de una distancia, diferente de la euclídea, que sea coherente con su naturaleza especial. En desarrollos posteriores, *e.g.* [3], se estableció con detalle que una distancia adecuada para el símplex debe cumplir requerimientos de dos tipos: por un lado, los relacionados con la naturaleza del espacio muestral; y por otro lado, los relacionados con la estructura de espacio euclídeo. En consecuencia, el carácter especial del símplex exige que las medidas de diferencia sean: invariantes por permutaciones de las componentes, invariantes por cambio de escala, y que cumplan la dominación respecto las subcomposiciones. Para obtener una medida respetuosa con la estructura euclídea del espacio se debe satisfacer la invariancia por perturbaciones y la coherencia con el producto por escalar. Mediante sencillos contraejemplos es fácil comprobar que las distancias más usuales no cumplen todos estos requisitos. Una distancia que sin embargo sí satisface todos los requerimientos, es la denominada *distancia de Aitchison* [2].

En [3] se propuso por primera vez una medida composicional inspirada en la medida de entropía de Shannon. En particular, dadas dos composiciones $\mathbf{x}, \mathbf{x}^* \in \mathcal{S}^D$, se define la medida *KL-composicional* como

$$d_{\mathcal{KL}}^2(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*) = \frac{D}{2} \left(\mathcal{I}(\mathbf{e}, \mathbf{x} \circ \mathbf{x}^{*-1}) + \mathcal{I}(\mathbf{e}, \mathbf{x}^* \circ \mathbf{x}^{-1}) \right),$$

donde $\mathcal{I}(\cdot, \cdot)$ representa la medida de Kullback-Leibler entre dos vectores composicionales. La medida $d_{\mathcal{KL}}$, coherente con los requisitos composicionales, se ha aplicado recientemente en el estudio aplicado [5] donde ha proporcionado resultados razonables al medir la diferencia entre matrices diagonales que caracterizan la forma de los haces de fibras en el cerebro humano.

En la abundante literatura se puede comprobar que en algunas condiciones las distancias más usuales proporcionan resultados similares a la distancia de Aitchison. Este hecho se pone especialmente de manifiesto en aquellos estudios experimentales donde los vectores composicionales corresponden a observaciones cercanas al centro

^{**}**Agradecimientos:** Esta investigación ha recibido apoyo financiero del Ministerio de Educación y Ciencia español (proyectos Ref.: MTM2009-13272 y Ref.: *Ingenio Mathematica (i-MATH)* No.CSD2006-00032 (*Consolider Ingenio 2010*)), y de la *Agència de Gestió d' Ajuts Universitaris i de Recerca* de la *Generalitat de Catalunya* (proyecto Ref: 2009SGR424).

del espacio muestral. Esta particularidad se analizó desde un punto de vista teórico, utilizando desarrollos de Taylor de primer orden, en [3] y sus estudios complementarios [4].

Keywords: datos composicionales, distancia, log-cociente

Mathematics Subject Classification 2000: 62H99

Referencias

- [1] J. AITCHISON. On criteria for measurements of compositional difference. *Mathematical Geology* **24**(4), 365–379, (1992).
- [2] J. AITCHISON, C. BARCELÓ-VIDAL, J. A. MARTÍN-FERNÁNDEZ, AND V. PAWLOWSKY-GLAHN. Logratio analysis and compositional distance. *Mathematical Geology* **32**(3), 271–275, (2000).
- [3] J. A. MARTÍN-FERNÁNDEZ. *Medidas de diferencia y clasificación no paramétrica de datos composicionales*. UPC, Barcelona (E), 233p, (2001).
- [4] J. A. MARTÍN-FERNÁNDEZ AND M. BREN. Some Practical Aspects on Multidimensional Scaling of Compositional Data. In *Proceedings of the Annual Conference of the International Association for Mathematical Geology*, Cancún (México), 16p, (2001).
- [5] F. PRADOS, I. BOADA, A. PRATS, J. A. MARTÍN-FERNÁNDEZ, M. FEIXAS, G. BLASCO, J. PUIG, S. PEDRAZA. Analysis of New Diffusion Tensor Imaging Anisotropy Measures in the 3P-plot. *Journal of Magnetic Resonance Imaging* **31**(6), 1435–1444, (2010).

¹Dept. Informàtica i Matemàtica Aplicada
Universitat de Girona
Campus Montilivi, Edifici P-IV. E-17071, Girona, Spain
josepantoni.martin@udg.edu

²Biomathematics and Statistics Scotland
JCMB, The King's Buildings, Edinburgh, EH9 3JZ, UK
javier@bioass.ac.uk