#### Анализ главных компонент

Математические методы в зоологии с использованием R

Марина Варфоломеева

- 1 Снижение размерности многомерных данных
- Анализ главных компонент в R

## Знакомимся с ординацией на примере метода главных компонент

#### Вы сможете

- Проводить анализ главных компонент
- Снижать размерность данных, отбирая меньшее число главных компонент
- Оценивать долю объясненной изменчивости
- Интерпретировать компоненты по значениям факторных нагрузок
- Строить ординацию объектов в пространстве главных компонент
- Извлекать значения факторов объектов для дальнейшего использования с другими видами анализов

Снижение	размерности	многомерных данных	

Снижение размерности многомерных данных

## Анализ главных компонент — способ снижения размерности

#### Многомерные исходные данные

В этом примере для простоты - двумерные

```
# x1 x2

# 1 0.5 2.4

# 2 1.0 0.7

# 3 1.1 2.9

# 4 1.5 2.2

# 5 1.9 3.0

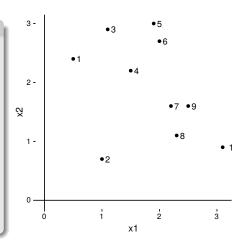
# 6 2.0 2.7

# 7 2.2 1.6

# 8 2.3 1.1

# 9 2.5 1.6

# 10 3.1 0.9
```

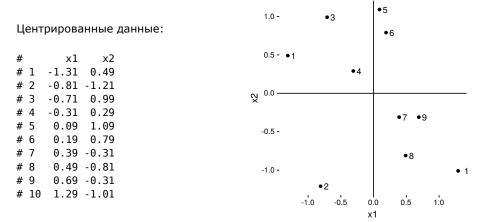


## Центрирование

#### Центрирование

Из каждого значения переменной нужно вычесть среднее значение этой переменной

Если центрировать данные, то центр координат переместится в точку  $(ar{x}_1, ar{x}_2)$ 



## Матрица ковариаций между признаками

#### Исходные данные:

x1

x2

```
# 1 -1.31 0.49
# 2 -0.81 -1.21
# 3 -0.71 0.99
# 4 -0.31 0.29
# 5 0.09 1.09
# 6 0.19 0.79
# 7 0.39 -0.31
# 8 0.49 -0.81
# 9 0.69 -0.31
```

### Матрица ковариаций:

```
# x1 x2
# x1 0.6165556 -0.2490000
# x2 -0.2490000 0.7165556
```

#### Матрица ковариаций

- описывает совместное варьирование нескольких переменных
- по диагонали дисперсии признаков
- выше и ниже диагонали ковариации признаков друг с другом

## Матрицу ковариаций можно представить в виде собственных векторов и собственных чисел

#### Матрица ковариаций:

```
# x1 x2
# x1 0.6165556 -0.2490000
# x2 -0.2490000 0.7165556
```

#### Собственные числа

- используются для оценки вклада главных компонент в общую изменчивость
- дисперсия вдоль собственных векторов пропорциональна их собственным числам

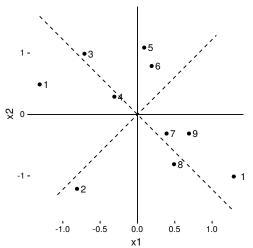
#### Собственные векторы

- задают направление осей главных компонент
- перпендикулярны друг другу
- вдоль первого максимальная дисперсия данных, вдоль следующего — максимальная дисперсия из оставшейся

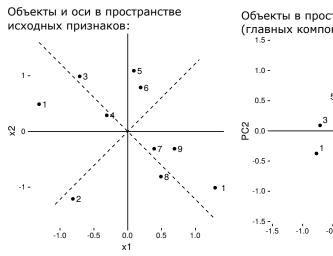
```
# [1] 0.9205260 0.4125851
```

```
# [,1] [,2]
# [1,] -0.6336903 -0.7735869
# [2.] 0.7735869 -0.6336903
```

С помощью собственных векторов и собственных чисел можно найти в пространстве признаков новые оси, вдоль которых будет максимальный разброс точек.



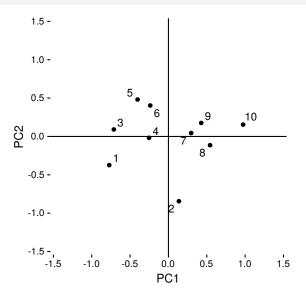
## Можно найти новые координаты точек в получившемся новом пространстве



Объекты в пространстве новых осей (главных компонент): 10 0.5 0.0

PC<sub>1</sub>

## На графике ординации изображено новое пространство



### Анализ главных компонент в R

## Пример: Морфометрия поссумов



Possum by Hasitha Tudugalle on Flickr https://www.flickr.com/photos/hasitha\_tudugalle/6037880962

Данные Lindenmayer et al. (1995)

### Знакомимся с данными

```
library(DAAG)
data(possum)
colnames(possum)
```

```
# [1] "case" "site" "Pop" "sex" "age" "hdlngth" # [7] "skullw" "totlngth" "taill" "footlgth" "earconch" "eye" # [13] "chest" "belly"
```

```
sum(is.na(possum))
```

# [1] 3

```
possum[!complete.cases(possum), ]
```

```
.
```

```
case site Pop sex age hdlngth skullw totlngth taill footlgth
     41
          2 Vic f
                       88.4
                            57.0
                                     83 36.5
BB36
                 5
                                                NA
BB41 44 2 Vic m NA
                       85.1 51.5
                                    76 35.5 70.3
BB45
     46
          2 Vic
                  NA 91.4 54.4
                                     84 35.0
                                              72.8
```

# earconch eye chest belly # BB36 40.3 15.9 27.0 30.5

# BB41 52.6 14.4 23.0 27.0 Марина Варфоломеева Анализ главных компонент

```
# поссумы из разных сайтов
table(possum$site)

#
# 1 2 3 4 5 6 7
```

```
# поссумы из 2 популяций table(possum$Pop)
```

# 33 13 7 7 13 13 18

```
#
# Vic other
# 46 58
```

# половой состав выборок из разных сайтов with(possum, table(sex, site, Pop))

```
, , Pop = Vic
    site
 sex 1 2 3 4 5 6 7
   f 19 5 0 0 0 0 0
   m 14 8 0 0 0 0
#
 , Pop = other
    site
 sex 1 2 3 4 5 6 7
   f 0 0 3 2 6 4 4
```

4 5 7

9 14

```
# В исходных данных сайты закодированы цифрами unique(possum$site)
```

```
# [1] 1 2 3 4 5 6 7
```

```
# Добавим названия сайтов

possum$site <- factor(possum$site,

levels = 1:7,

labels = c("Cambarville","Bellbird",

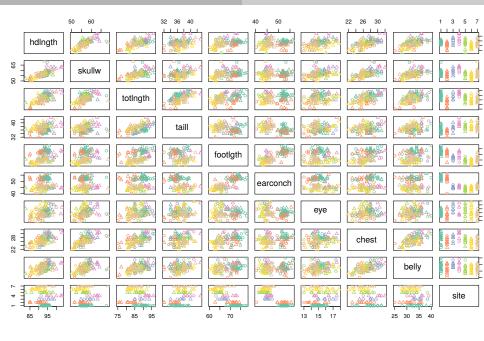
"Whian Whian", "Byrangery",

"Conondale ","Allyn River",

"Bulburin"))
```

## Как связаны признаки между собой?

Можно построить серию графиков с признаками во всех возможных комбинациях.



### Анализ главных компонент

```
library(vegan)
# возьмем только строки, где нет пропущенных значений
possum <- possum[complete.cases(possum), ]
# ординация, используем переменные с hdlngth по belly
ord <- rda(possum[, 6:14], scale = TRUE)</pre>
```

```
summary(ord)
```

## Все результаты можно посмотреть при помощи функции summary()

```
# Call:
\# rda(X = possum[, 6:14], scale = TRUE)
# Partitioning of correlations:
                Inertia Proportion
# Total
# Unconstrained
# Eigenvalues, and their contribution to the correlations
 Importance of components:
#
                           PC1
                                  PC2
                                         PC3
                                                  PC4
                                                          PC5
                                                                  PC6
# Eigenvalue
                        3.9314 1.9486 0.9084 0.75157 0.57685 0.30986
# Proportion Explained 0.4368 0.2165 0.1009 0.08351 0.06409 0.03443
# Cumulative Proportion 0.4368 0.6533 0.7543 0.83777 0.90186 0.93629
                            PC7
                                    PC8
                                             PC9
                       0.26713 0.16252 0.14373
# Eigenvalue
# Proportion Explained 0.02968 0.01806 0.01597
# Cumulative Proportion 0.96597 0.98403 1.00000
# Scaling 2 for species and site scores
```

# \* Species are scaled proportional to eigenvalues

## Части результатов в summary()

- Importance of components собственные числа (eigenvalues) и доля объясненной изменчивости
- Species scores факторные нагрузки исходных переменных на каждую из компонент
- Site scores факторные координаты объектов

#### Mасштабирование — scaling

- scaling = "species", correlation = TRUE отношения между переменными (нагрузки переменных пересчитаны с учетом соб. чисел, интерпретируются как корреляции)
- scaling = "sites" отношения между объектами (факт. координаты пересчитаны с учетом соб. чисел)

## **Что нужно знать, чтобы интерпретировать результаты?**

Мы хотим снизить размерность данных и вместо n-дцати исходных признаков получить несколько главных компонент (лучше 2 или 3 для удобства интерпретации).

Эти главные компоненты будут описывать данные почти так же хорошо, как исходные признаки, но при этом будут независимы друг от друга.

Эти компоненты мы сможем трактовать как сложные признаки и описывать отношения между объектами в терминах этих признаков.

- Околько компонент нужно оставить?
- Околько общей изменчивости объясняют оставленные компоненты?
- Что означают получившиеся компоненты?
- Как располагаются объекты в пространстве главных компонент?

### 1А. Сколько компонент нужно оставить?

Вариант А. Оставляем компоненты с соб. числами > 1 (правило Кайзера)

```
eigenvals(ord)
```

```
PC1
            PC2
                     PC3
                             PC4
                                     PC5
                                              PC6
                                                      PC7
3.931419 1.948555 0.908362 0.751571 0.576850 0.309860 0.267133
    PC8
             PC9
0.162520 0.143728
```

```
eigenvals(ord) > mean(eigenvals(ord))
```

```
PC1
    PC2
          PC3
               PC4 PC5
                         PC6
                              PC7
                                   PC8
                                        PC9
```

TRUE TRUE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE

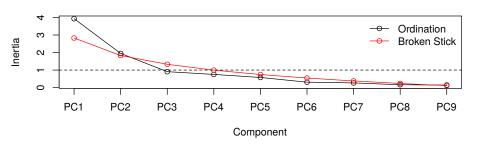
### 1Б. Сколько компонент нужно оставить?

Вариант Б. Оставляем компоненты, кот объясняют больше изменчивости, чем возможно случайно (по модели сломанной палки).

Строим график собственных чисел

```
screeplot(ord, bstick = TRUE, type = "lines")
abline(h = 1, lty = 2)
```

#### ord



#### 2. Сколько изменчивости объясняют компоненты?

Допустим, мы решили оставить первые две компоненты.

Изменчивость, объясненная каждой из компонент, в процентах

```
eigenvals(ord)/sum(eigenvals(ord))*100
```

```
# PC1 PC2 PC3 PC4 PC5 PC6 PC7
# 43.68244 21.65061 10.09291 8.35079 6.40945 3.44289 2.96814
# PC8 PC9
# 1.80578 1.59698
```

Первые две компоненты объясняют 65 % общей изменчивости

## 3. Что означают получившиеся компоненты?

Факторные нагрузки описывают связь переменных с компонентами

- Вклад переменных в изменчивость вдоль компоненты тем сильнее, чем больше модуль их факторной нагрузки.
- Знак факторной нагрузки означает направление изменения исходной переменной вдоль главной компоненты.

```
# hdlngth -0.4713851 -0.04837773 0.078655520 # skullw -0.4194429 -0.08480655 0.131206176 # totlngth -0.4542416 -0.05969730 -0.177801904 # taill -0.2098116 -0.36809068 -0.279173018 # footlgth -0.3333944 0.38003868 -0.041289909 # earconch -0.1504873 0.48821273 -0.011420156 # eye -0.2017138 -0.21130983 0.370315121 # chest -0.4446740 0.06787162 -0.005893116 # belly -0.393862 -0.06276943 -0.023506174 # attr(,"const") # [1] 5.477226
```

DCO

## 3. Что означают получившиеся компоненты?

	PCI	PC2	PC3
hdlngth skullw totlngth taill	-0.4194429 -0.4542416	-0.04837773 -0.08480655 -0.05969730 <b>-0.36809068</b>	0.078655520 0.131206176 -0.177801904 -0.279173018
	-0.3333944	0.38003868	-0.041289909
earconch	-0.1504873	0.48821273	-0.011420156
eye		-0.21130983	0.370315121
chest	-0.4446740		-0.005893116
belly	-0.3983862	-0.06276943	-0.023506174

DC1

Марина Варфоломеева

Первая главная компонента — это физические размеры поссумов (высокие нагрузки у переменных длина головы, общая длина, измерения черепа, груди и живота). У нагрузок отрицательный знак, значит у крупных поссумов будут маленькие значения координат по первой компоненте.

DC2

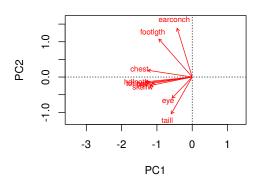
- Вторая главная компонента длина ушей, ног и хвоста. Высокие значения по этой компоненте у поссумов с большими ушами, длинными ногами и коротким хвостом.
- Третья главная компонента размеры глаз. Высокие значения по этой компоненте булут у поссумов с большими глазами Анализ главных компонент

## Можно нарисовать факторные нагрузки на графике

- Чем ближе стрелки исходных признаков к оси компоненты, тем выше их нагрузка.
- Стрелки направлены в сторону увеличения значения исходного признака

```
biplot(ord, scaling = "species", correlation = TRUE,
    main = "PCA - species scaling", display = "species")
```

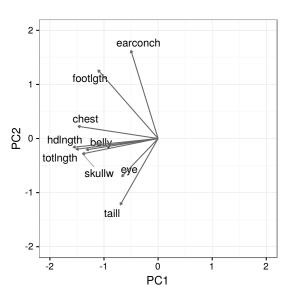
#### PCA - species scaling



## График факторных нагрузок в ggplot2

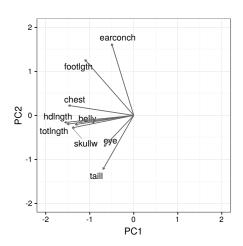
```
library(ggplot2)
theme set(theme bw())
library(ggrepel) # для подписей
library(grid) # для стрелочек
ar <- arrow(length = unit(0.1, "cm"))</pre>
df load <- data.frame(scores(ord, display = "species",</pre>
         choices = c(1, 2), scaling = 2))
ggloadings <- ggplot(df load) +
  geom text repel(aes(x = PC1, y = PC2,
    label = rownames(df load)), segment.alpha = 0.5) +
  geom segment(aes(x = 0, y = 0, xend = PC1, yend = PC2),
    colour = "grey40", arrow = ar) +
  coord equal(xlim = c(-2, 2), ylim = c(-2, 2))
ggloadings
```

## График факторных нагрузок в ggplot2



## Интерпретируем компоненты по графику факторных нагрузок

- Первая главная компонента это физические размеры поссумов (высокие нагрузки у переменных длина головы, общая длина, измерения черепа, груди и живота). У нагрузок отрицательный знак, значит у крупных поссумов будут маленькие значения координат по первой компоненте.
- Вторая главная компонента длина ушей, ног и хвоста.
   Высокие значения по этой компоненте у поссумов с большими ушами, длинными ногами и коротким хвостом.



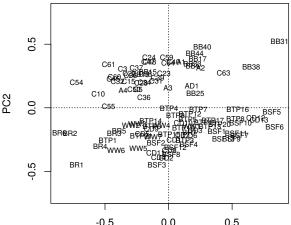
# 4. Значения факторов (= факторные координаты) — координаты объектов в пространстве главных компонент

```
# Координаты можно добыть так (но сейчас нам нужен только график) scores(ord, display = "sites", choices = c(1, 2, 3), scaling = "sites")
```

```
PC1
                             PC2
                                           PC3
# C3
        -0.360819375
                    0.304131424
                                  0.0688821891
# C5
        -0.240088432
                     0.143367378
                                  0.0693525874
# C10
       -0.551140377 0.107837459 -0.1423865805
# C15
        -0.312799927
                     0.207126158 -0.1273986533
# C23
        -0.034485559 0.267285182 0.0488052857
# C24
       -0.151004588 0.394274329 -0.1264112959
# C26
       -0.298396559 0.251333661 -0.0692674630
# C27
        -0.306099050 0.266871815 -0.1203631232
# C28
                     0.193184218 -0.0296039420
        -0.214566258
# C31
                     0.209273041 -0.1387304801
       -0.095501125
# C32
       -0.399460404 0.205195000 -0.1800913882
# C34
       -0.187568929
                     0.198586258
                                  0.0183336106
# C36
        -0.191356099
                     0.080859321
                                  0.1644518057
# C37
       -0.250735386 0.312058901
                                  0.0033603952
# C39
       -0.084377646
                     0.232837138
                                  0.2515360165
# C40
       0.039106450
                    0.358378412
                                  0.0251344458
# C45
        -0.431885643
                     0.225796864
                                  0.1077821334
```

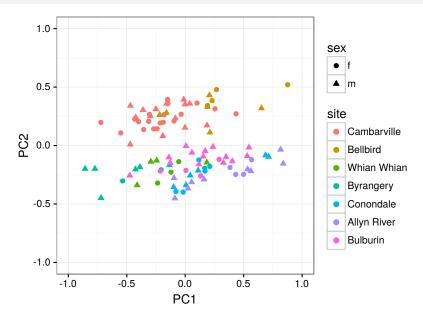
## График факторных координат (= график ординации)

### PCA - sites scaling



## График факторных координат в ggplot2

## График факторных координат в ggplot2

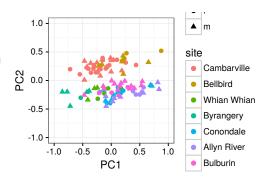


# **Интерпретируем сходство объектов по графику** ординации

Первые две компоненты объясняют 65% общей изменчивости

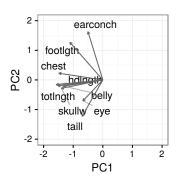
44% общей изменчивости объясняет первая главная компонента, связанная с размером особей. Более крупные поссумы встречаются в популяциях из Камбарвиля и Бирангери

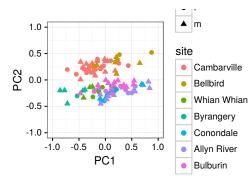
Вторая компонента — которую мы интерпретировали как пропорции ног, ушей и хвоста объясняет 21% общей изменчивости. Внутри отдельных популяций поссумы мало отличаются по этим параметрам (об этом говорит небольшой разброс точек вдоль второй компоненты). Зато поссумы из Камбарвиля и Беллберда не похожи на других: у них относительно более крупные уши, длинные ноги и короткие хвосты, чем у поссумов из других популяций.



# Несколько графиков рядом: grid.arrange()

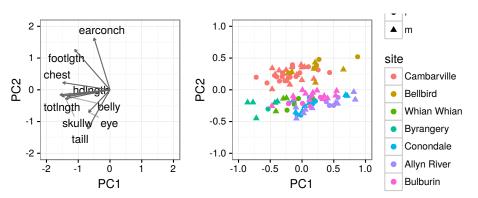
```
library(gridExtra)
grid.arrange(ggloadings, ggscores, nrow = 1)
```





# Несколько графиков рядом: gtable

```
library(gtable)
g1 <- ggplotGrob(ggloadings)
g2 <- ggplotGrob(ggscores)
g <- gtable:::cbind_gtable(g1, g2, size = "first")
grid.newpage()
grid.draw(g)</pre>
```



# Факторные координаты можно использовать для снижения размерности данных

Было 7 скоррелированных признаков, стало 2 **независимых** (они ведь перпендикулярны) главных компоненты

Значения факторных координат можно использовать в анализах, где нужна независимость переменных:

- Множественная регрессия
- Дискриминантный анализ (например, генетические данные)
- Дисперсионный анализ
- Корреляция с другими признаками, которые не были использованы в анализе главных компонент, и т.д., и т.п.

# Так можно экстрагировать компоненты с исходными данными

```
#
     case
               site Pop sex age hdlngth skullw totlngth taill
       1 Cambarville Vic
                                      60.4
                                             89.0 36.0
# C3
                        m
                           8
                                94.1
       2 Cambarville Vic f
                          6 92.5 57.6 91.5 36.5
# C5
# C10
       3 Cambarville Vic f
                             94.0 60.0 95.5 39.0
# C15
       4 Cambarville Vic f
                             93.2 57.1 92.0 38.0
# C23
       5 Cambarville Vic
                             91.5 56.3 85.5 36.0
# C24
       6 Cambarville Vic
                                93.1 54.8 90.5 35.5
     footlgth earconch eye chest belly
                                         PC1
                                                  PC2
        74.5 54.5 15.2 28.0 36 -0.36081938 0.3041314
# C3
# C5
        72.5 51.2 16.0
                         28.5
                                33 -0.24008843 0.1433674
# C10
     75.4 51.9 15.5 30.0
                                34 -0.55114038 0.1078375
     76.1 52.2 15.2
                         28.0
# C15
                                34 -0.31279993 0.2071262
# C23
     71.0 53.2 15.1 28.5
                                33 -0.03448556 0.2672852
# C24
      73.2 53.6 14.2
                         30.0
                                32 -0.15100459 0.3942743
#
            PC3
```

### Условия применимости анализа главных компонент

Похожи на условия применимости множественной линейной регрессии

- Линейные связи между переменными (т.к. матрица корреляций или ковариаций)
- Исключить наблюдения, в которых есть пропущенные значения
- Если много нулей трансформация данных (например, трансформация Хелингера)
- Если очень много нулей удалить такие переменные из анализа

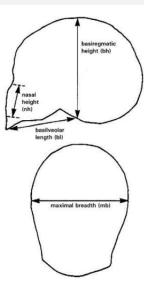
## Пример: Морфометрия египетских черепов

#### Измерения 150 черепов в мм:

- mb максимальная ширина
- bh высота от основания до макушки
- bl расстояние от основания черепа до края в. челюсти
- nh высота носа

#### Эпоха (epoch):

- 1 ранний прединастический период (ок. 4000 до н.э.)
- 2 поздний прединастический период (ок. 3300 до н.э.)
- 3 12 и 13 династии (ок. 1850 до н.э.)
- 4 Птолемейский период (ок. 200 до н.э.)
- 5 Римский период (ок. 150 н.э.)



Данные Thompson, Randall-Maciver (1905). Источник Manly (1994).

#### Знакомимся с данными

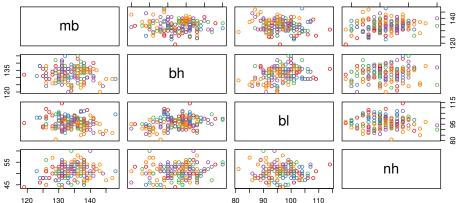
```
library (HSAUR)
data("skulls")
str(skulls, vec.len = 2)
  'data.frame': 150 obs. of 5 variables:
   $ epoch: Ord.factor w/ 5 levels "c4000BC"<"c3300BC"<...: 1 1 1 1 1 ...</pre>
   $ mb
          : num
                 131 125 131 119 136 ...
   $ bh : num
                 138 131 132 132 143 ....
   $ bl : num 89 92 99 96 100 ...
   $ nh : num 49 48 50 44 54 ...
sum(is.na(skulls))
# [1] 0
table(skulls$epoch)
```

```
#
  c4000BC c3300BC c1850BC c200BC
                                   cAD150
       30
               30
                               30
                       30
```

30

```
# μβετα
library(RColorBrewer)
cols <- brewer.pal(n = length(levels(skulls$epoch)), name = "Setl")
# Γραφικ
pairs(skulls[, -1], col = cols[skulls$epoch])

mb
```



#### Задание:

Сделайте анализ главных компонент. Как менялась форма черепов в древнем египте в разные эпохи?

#### Решение

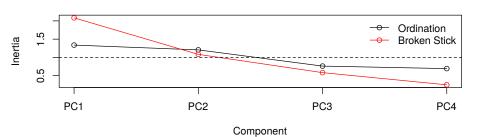
Делаем анализ главных компонент.

Не забудьте оставить в исходных данных только непрерывные переменные

### Сколько компонент нужно оставить?

```
screeplot(ord1, bstick = TRUE, type = "lines")
abline(h = 1, lty = 2)
```

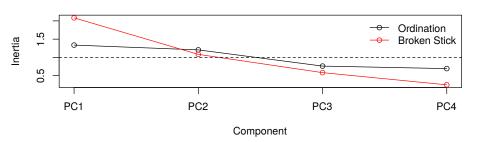
#### ord1



### Сколько компонент нужно оставить?

```
screeplot(ord1, bstick = TRUE, type = "lines")
abline(h = 1, lty = 2)
```

#### ord1



• Оставляем две компоненты (можно даже одну)

### Сколько изменчивости объясняют компоненты?

```
eig <- eigenvals(ord1)
explained <- sum(eig[1:2])/sum(eig) * 100
explained</pre>
```

```
# [1] 63.59221
```

### Сколько изменчивости объясняют компоненты?

```
eig <- eigenvals(ord1)
explained <- sum(eig[1:2])/sum(eig) * 100
explained</pre>
```

```
# [1] 63.59221
```

• Компоненты вместе объясняют 64 % общей изменчивости

### Что означают получившиеся компоненты?

- Вдоль 1й компоненты уменьшается расстояние от основания черепа до края в. челюсти (bl) и высота от основания до макушки (bh)
- Вдоль 2й компоненты уменьшается высота носа (nh) и максимальная ширина (mb)

```
# PC1 PC2

# mb 0.19050654 -0.252267512

# bh -0.28889919 -0.153390201

# bl -0.31476765 0.005671088

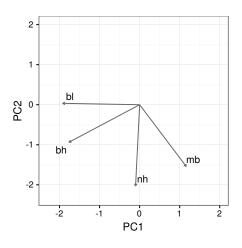
# nh -0.01663669 -0.332360682

# attr(,"const")

# [1] 4.940963
```

### Что означают получившиеся компоненты?

### Что означают получившиеся компоненты?

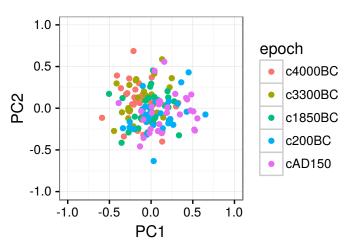


- Вдоль 1й компоненты уменьшается расстояние от основания черепа до края в. челюсти (bl) и высота от основания до макушки (bh)
- Вдоль 2й компоненты уменьшается высота носа (nh) и максимальная ширина (mb)

# Как располагаются объекты в пространстве главных компонент?

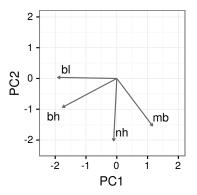
```
df_scores1 <- data.frame(skulls, scores(ord1, display = "sites", choices = c(
ggscores1 <- ggplot(df_scores1, aes(x = PC1, y = PC2)) + geom_point(aes(colou coord_equal(xlim = c(-1, 1), ylim = c(-1, 1))
agscores1</pre>
```

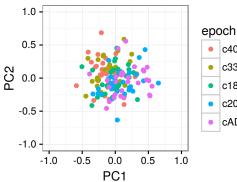
# **Как располагаются объекты в пространстве главных компонент?**



# Для облегчения интерпретации располагаем графики рядом

```
g1 <- ggplotGrob(ggloadings1)
g2 <- ggplotGrob(ggscores1)
g <- gtable:::cbind_gtable(g1, g2, "first")
grid.newpage()
grid.draw(g)</pre>
```





c4000BC

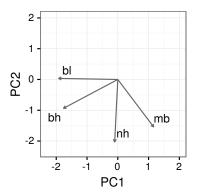
c3300BC

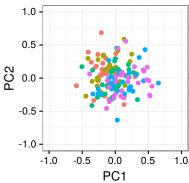
c1850BC c200BC

cAD150

# Для облегчения интерпретации располагаем графики рядом

```
g1 <- ggplotGrob(ggloadings1)
g2 <- ggplotGrob(ggscores1)
g <- gtable:::cbind_gtable(g1, g2, "first")
grid.newpage()
grid.draw(g)</pre>
```





# Take home messages

- Метод главных компонент:
  - исследование связей между переменными
  - построение ординации объектов
  - снижение размерности данных
- Собственные числа вклад компонент в общую изменчивость
- Факторные нагрузки связь исходных переменных с компонентами используются для интерпретации
- Значения факторов (факторные координаты) новые координаты объектов в пространстве уменьшенной размерности
- Значения факторов можно использовать как новые комплексные переменные в других видах анализов.

# Дополнительные ресурсы

- Borcard, D., Gillet, F., Legendre, P., 2011. Numerical ecology with R. Springer.
- Legendre, P., Legendre, L., 2012. Numerical ecology. Elsevier.
- Oksanen, J., 2011. Multivariate analysis of ecological communities in R: vegan tutorial. R package version 2–0.
- The Ordination Web Page URL http://ordination.okstate.edu/ (accessed 10.21.13).
- Quinn, G.G.P., Keough, M.J., 2002. Experimental design and data analysis for biologists. Cambridge University Press.
- Zuur, A.F., Ieno, E.N., Smith, G.M., 2007. Analysing ecological data. Springer.