Ординация и классификация с использованием мер сходства-различия

Математические методы в зоологии - на R, осень 2015

Марина Варфоломеева

Меры сходства и различия, ординация, классификация

- Коэффициенты сходства и различия
- Неметрическое многомерное шкалирование
- Иерархическая кластеризация

Вы сможете

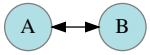
- Выбирать подходящий для данных коэффициент сходства/различия
- Представлять многомерные данные в меньшем числе измерений при помощи неметрического многомерного шкалирования
- Строить дендрограммы при помощи подходящего метода аггрегации

Коэффициенты сходства и различия

Коэффициенты сходства и различия

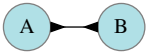
Расстояния

$d \geq 0$



Сходства

$0 \leq S \leq 1$ или $-1 \leq S \leq 1$



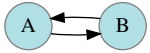
- Используются в качестве исходных данных для многих видов многомерных анализов, в т.ч. для неметрического многомерного шкалирования и некоторых видов кластерного анализа
- Из сходств можно получить расстояния и наоборот
- Свои коэффициенты для количественных и качественных признаков

Свойства коэффициентов сходства-различия

Метрики и полуметрики

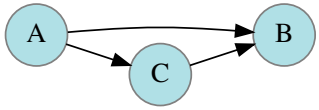
Адекватность: $d_{A,A} = 0$

Симметричность: $d_{A,B} = d_{B,A}$



Только метрики

Триангулярность:
$d_{A,B} \leq d_{A,C} + d_{C,B}$



Неметрики

Все остальное

Свойства коэффициентов сходства-различия

Нестандартные

$$-\inf \leq d \leq \inf$$

Стандартные

$$d_{min} \leq d \leq d_{max}$$

- частный случай стандартных коэффициентов - коррелятивные коэффициенты сходства

$$-1 \leq S \leq 1$$

Примеры коэффициентов

Метрики:

- без стандартизации:
  - Евклидово расстояние
  - Манхеттен (расстояние городских кварталов)
- со стандартизацией:
  - Канберра
  - хи-квадрат
  - Евклидово расстояние, рассчитанное по стандартизованным данным

Полуметрики:

- расстояние Махаланобиса

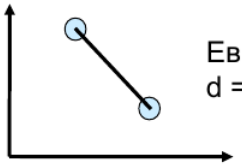
Неметрики:

- со стандартизацией:
  - корреляционные:
    - корреляция Пирсона
  - некорреляционные:
    - коэффициент Брея-Куртиса

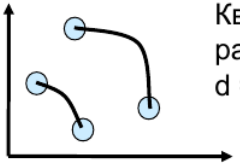
Если количественные признаки измерены в одинаковых шкалах

Метрики без стандартизации

- Евклидово расстояние

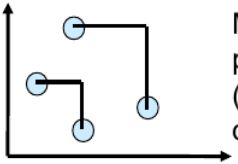


Евклидово расстояние
$d = [\sum(x_{ik}-x_{jk})^2]^{-2}$



Квадрат Евклидова расстояния
$d = (1/k) \cdot \sum(x_{ik}-x_{jk})^2$

- Манхэттеновское расстояние



Манхэттеновское расстояние (городские кварталы)
$d = 1/k \sum|x_{ik}-x_{jk}|$

Неевклидовы метрики

- Квадрат Евклидова расстояния

Если количественные признаки измерены в разных шкалах

Можно стандартизовать исходные данные

- Евклидово (или другое) расстояние, рассчитанное по стандартизованным данным

Можно использовать коэффициенты со стандартизацией

- Канберра (метрика) $d = \sum \frac{|x_{ik} - x_{jk}|}{|x_{ik}| + |x_{jk}|}$
- хи-квадрат (метрика) $\chi^2 = \sqrt{\sum \frac{1}{c_k}(x_{ik} - x_{jk})^2}$
- Коэффициент Махаланобиса (неметрика, not a distance) $d = \frac{\sum x_{ik} - x_{jk}}{\sigma^2}$
- Корреляция Браве-Пирсона (коррелятивный) $S = \frac{\sum (x_{ik} - \bar{x}_i)(x_{ik} - \bar{x}_j)}{n\sigma_i^2\sigma_j^2}$
- Коэффициент Брея-Куртиса (не метрика) $BC_{ij} = \frac{2C_{ij}}{S_i + S_j}$,

  где C_{ij} - сумма минимальных значений из тех, которые не равны нулю для обоих объектов, S_i и S_j - общее число ненулевых значений признаков для обоих объектов.

Если признаки - подсчеты численности

Можно стандартизовать исходные данные

Простая стандартизация не подходит (счет, не может быть среднее 0)
Можно использовать трансформации: - корень, корень 4-й степени - логарифмирование со сдвигом (log10(1+n))

Можно использовать коэффициенты со стандартизацией

- Канберра (метрика) $d = \sum \frac{|x_{ik} - x_{jk}|}{|x_{ik}| + |x_{jk}|}$
- хи-квадрат (метрика) $\chi^2 = \sqrt{\sum \frac{1}{c_k}(x_{ik} - x_{jk})^2}$

Если признаки - доли или проценты

- хи-квадрат (метрика) $\chi^2 = \sqrt{\sum \frac{1}{c_k}(x_{ik} - x_{jk})^2}$
- коэффициент Брея-Куртиса (не метрика) $BC_{ij} = \frac{2C_{ij}}{S_i + S_j}$
- Евклидово расстояние $d = \sqrt{\sum (x_{ik} + x_{jk})^2}$

Если используются бинарные данные (присутствие-отсутствие признака)

I\J	+	-
+	a	b
-	c	d

I, J – множества

$n_J = a + c \quad n_I = a + b$

$n = a + b + c + d$

	I	J	
1	+	+	a – сходство по наличию
2	+	-	b – различие
3	-	+	c – различие
4	-	-	d – сходство по отсутствию

Примеры коэффициентов для качественных данных

Jaccard и Russel Rao

I\J	+	-
+	a	b
-	c	d

Jaccard S = a/(a+b+c)	Russel, Rao S = a/n
С учетом сходства по отсутствию	Без учета сходства по отсутствию

a=2, b=1, c=0, d=2

a=0, b=1, c=2, d=2

Если данные смешанные (качественные и количественные)

Коэффициенты для смешанных данных

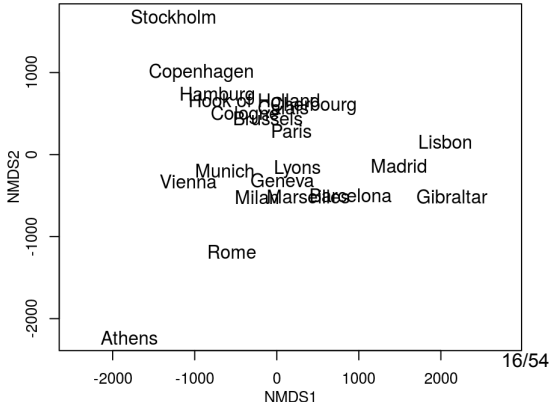
- расстояние Говера

Неметрическое многомерное шкалирование

Неметрическое многомерное шкалирование визуализирует отношения между объектами на основе расстояний между ними

```
##           Athens Barcelona Brussels Calais
## Barcelona   3313
## Brussels    2963      1318
## Calais      3175      1326      204
## Cherbourg   3339      1294      583    460
```

мы бы смогли восстановить по ним карту



Если бы мы знали расстояния по автодорогам

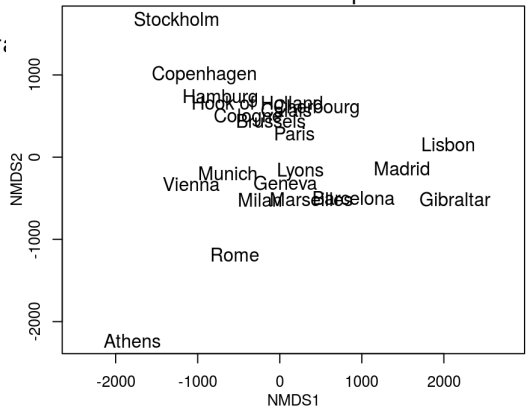
Неметрическое многомерное шкалирование

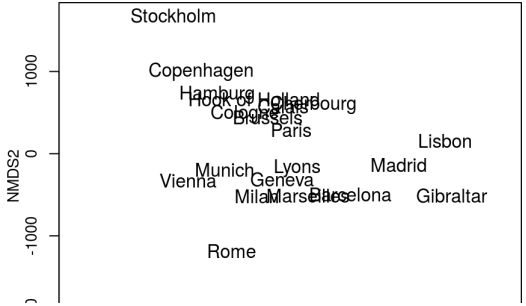
Неметрическое многомерное шкалирование (nonmetric multidimensional scaling, nMDS) - метод визуализации отношений между объектами в пространстве с небольшим числом измерений.

Исходные данные - матрица расстояний между объекта

nMDS подбирает расстояния между объектами на графике так, чтобы сохранились соотношение исходных расстояний между ними. Т.е. если исходно A и B были ближе, чем B и C, то и в результате они должны быть ближе, чем B и C.

Ординацию nMDS можно поворачивать, отражать, сдвигать - результат от этого не изменится.





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
## BB36   41    2 Vic   f   5    88.4   57.0       83  36.5       NA
## BB41   44    2 Vic   m  NA    85.1   51.5       76  35.5     70.3
## BB45   46    2 Vic   m  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
## BB45     51.2 14.4  24.5  35.0
```

```r
# Добавим названия сайтов
possum$site <- factor(possum$site, levels = 1:7, labels = c("Cambarville",
    "Bellbird", "Whian Whian", "Byrangery", "Conondale ", "Allyn River",
    "Bulburin"))
```

Отберем переменные, с которыми будем работать

```r
colnames(possum)
```

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

```r
possumc <- possum[complete.cases(possum), c(3:4, 5:14)]
```

Неметрическое многомерное шкалирование

Построим ординацию поссумов на основе их сходства по морфометрии и возрасту.

Функция metaMDS трансформирует и стандартизует данные, а затем итеративно подбирает координаты поссумов в новом пространстве (двумерном по умолчанию).

```
library(vegan)
ord_euclid <- metaMDS(possumc[, 3:10], distance = "euclid")
```

```
## Square root transformation
## Wisconsin double standardization
## Run 0 stress 0.0382
## Run 1 stress 0.0403
## Run 2 stress 0.0403
## Run 3 stress 0.0441
## Run 4 stress 0.0382
## ... procrustes: rmse 0.000539  max resid 0.00428
## *** Solution reached
```

Качество подгонки модели

stress - оценивает, насколько были искажены исходные расстояния между объектами при снижении размерности

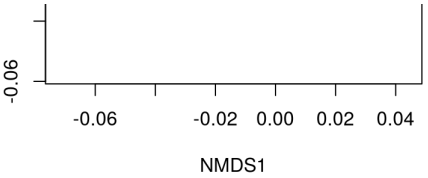
```
ord_euclid$stress
```

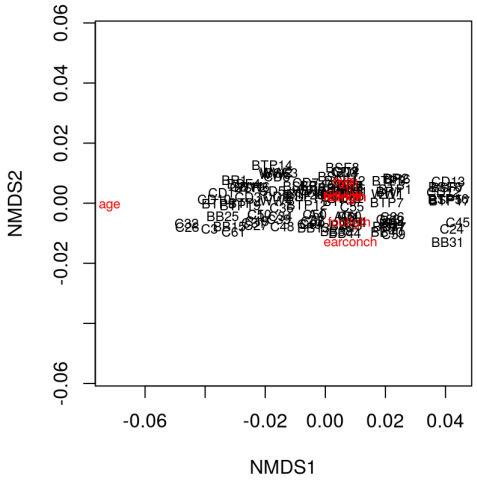
```
## [1] 0.0382
```

- Эмпирическое правило предложено Краскалом
- S > 20% плохо
- S = 10% нормально
- S < 5% хорошо
- S = 0 прекрасно

Ординация

```
ordiplot(ord_euclid, type = "t")
```






```
head(ord_euclid$points, 10)
```

```
##        MDS1     MDS2
## C3  -0.0386 -0.00863
## C5  -0.0233 -0.00379
## C10 -0.0219 -0.00382
## C15 -0.0228 -0.00594
## C23  0.0220 -0.00572
## C24  0.0421 -0.00860
## C26  0.0222 -0.00464
## C27 -0.0233 -0.00734
## C28 -0.0460 -0.00786
## C31 -0.0240 -0.00662
```

Задание:

При помощи `ggplot2` постройте график неметрического многомерного шкалирования.

Для графика используйте координаты точек `ord_euclid$points` и исходные данные.

Раскрасьте график по значениям переменных `Pop` и `age`

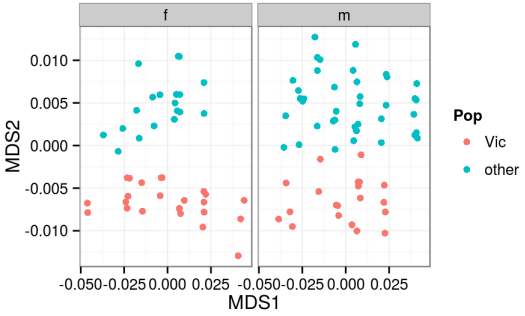
Изобразите поссумов разного пола на разных панелях

Решение:

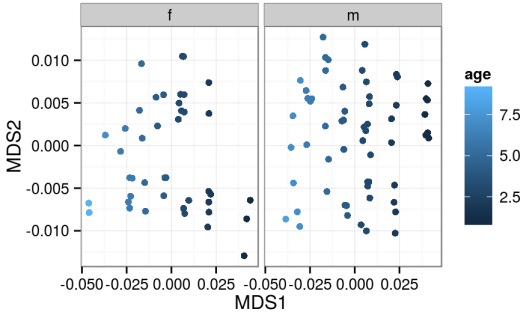
```
library(ggplot2)
theme_set(theme_bw(base_size = 12) + theme(legend.key = element_blank()))
ord_euclid_points <- data.frame(ord_euclid$points, possumc)
gg <- ggplot(ord_euclid_points, aes(x = MDS1, y = MDS2)) + geom_point() +
    facet_wrap(~sex) + theme(legend.key = element_blank())
```

Примеры графиков nMDS ординации

```
gg + aes(colour = Pop)
```




```
gg + aes(colour = age)
```



Задание:

Постройте nMDS ординацию при помощи евклидова расстояния, **без стандартизации**

Воспользуйтесь справкой к функции `metaMDS()`, чтобы узнать, какие аргументы потребуется изменить.

Решение:

Стресс сильно вырос, эта ординация хуже. Почему так произошло?

```
ord_raw <- metaMDS(possumc[, 3:10], dis = "euclide", autotransform = FALSE)
```

```
## Run 0 stress 0.101
## Run 1 stress 0.101
## ... New best solution
## ... procrustes: rmse 0.000036  max resid 0.000253
## *** Solution reached
```

```
ord_raw$stress
```

```
## [1] 0.101
```

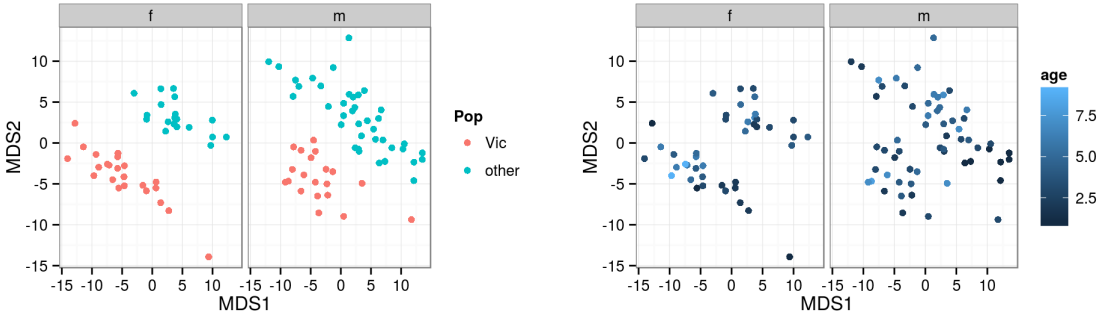
Для сравнения, стресс был

```
ord_euclid$stress
```

```
## [1] 0.0382
```

Графики ординации по матрице евклидовых расстояний без стандартизации

```
ord_raw_points <- data.frame(ord_raw$points, possumc)
library(gridExtra)
grid.arrange(gg %+% ord_raw_points + aes(colour = Pop), gg %+% ord_raw_points +
    aes(colour = age), ncol = 2)
```



Популяции можно различить, но возраста смешались

- Это произошло потому, что нет стандартизации, и теперь на расстояния между поссумами влияют в основном переменные, измеренные в больших единицах (общая длина, длина ног), а возраст не влияет

Как изменилась сама ординация?

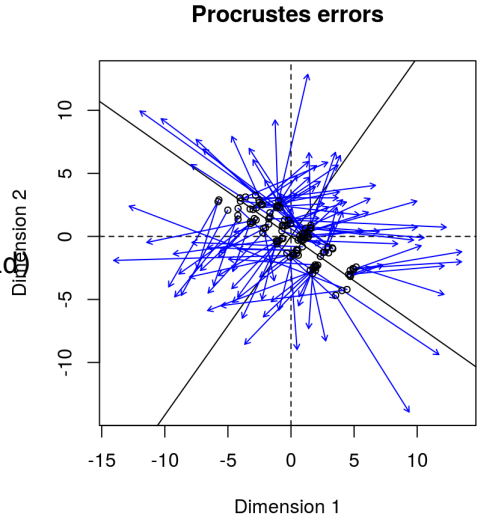
Прокрустово преобразование

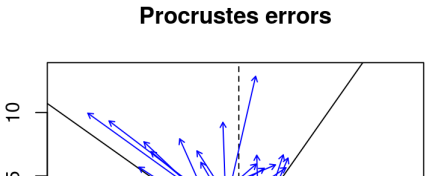
```
procrustes(что_стало, что_было)
```

```
proc <- procrustes(ord_raw, ord_euclid)
proc
```

```
##
## Call:
## procrustes(X = ord_raw, Y = ord_euclid)
##
## Procrustes sum of squares:
## 5.67e+03
```

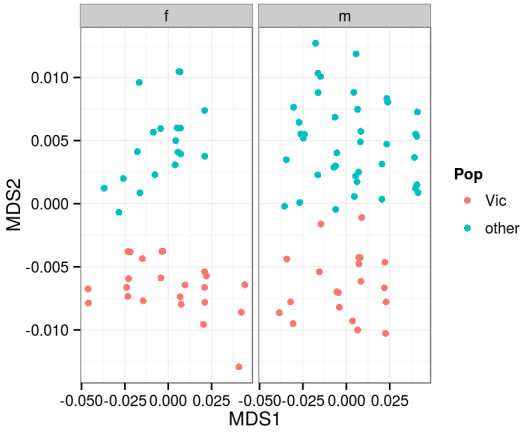
```
plot(proc)
```

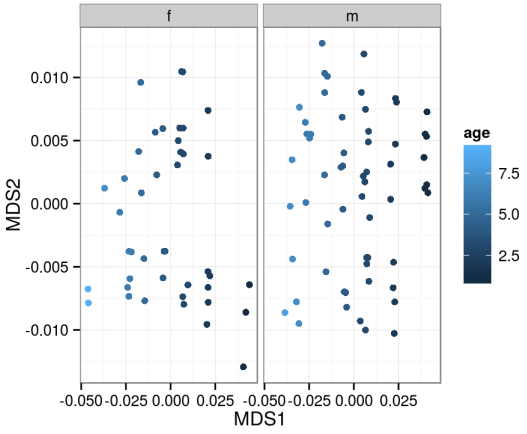




Похоже, что в этом случае лучшая ординация была получена при использовании евклидова расстояния со стандартизацией

```
ord_euclid_points <- data.frame(ord_euclid$points, possumc)
grid.arrange(gg %+% ord_euclid_points + aes(colour = Pop), gg %+% ord_euclid_p
    aes(colour = age), ncol = 2)
```





Кластерный анализ

Пример: поссумы

Морфометрия самок поссумов

```
library(DAAG)
data(fossum)
# создадим 'говорящие' имена строк
rownames(fossum) <- paste(fossum$Pop, rownames(fossum), sep = "_")
fossumc <- fossum[complete.cases(fossum), 5:14]
```

Какие бывают методы построения деревьев?

Методы класстеризации на основании расстояний (о них сегодня)

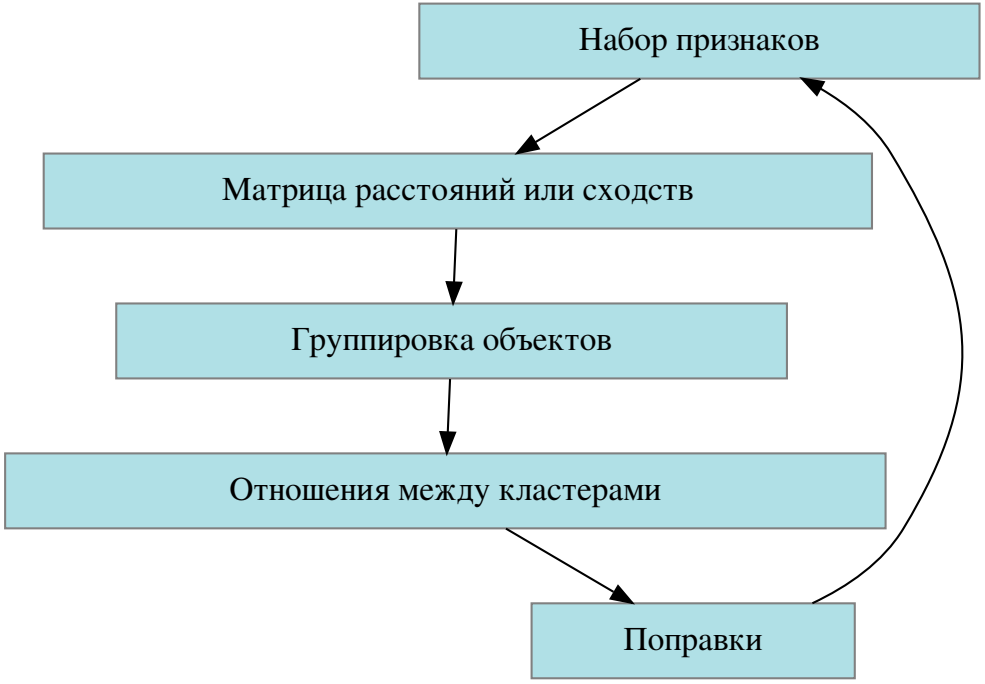
- Метод ближайшего соседа
- Метод отдаленного соседа
- Метод среднегруппового расстояния
- Метод Варда
- и т.д. и т.п.

Методы кластеризации на основании признаков

- Метод максимальной бережливости
- Метод максимального правдоподобия

Методы класстеризации на основании расстояний

Этапы кластеризации



От чего зависит результат кластеризации

Результат кластеризации зависит от

- коэффициента сходства-различия
- от алгоритма кластеризации

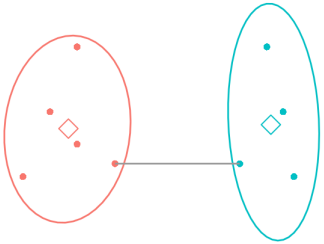
В начале лекции мы обнаружили, что евклидово расстояние, расчитанное по стандартизованным данным, хорошо разделяет поссумов.

```
d <- dist(x = scale(fossumc), method = "euclidean")
```

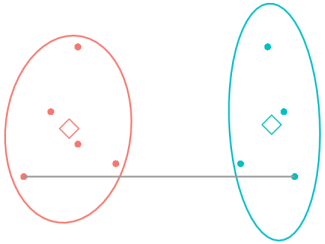
Давайте построим деревья при помощи нескольких алгоритмов кластеризации и сравним их.

Методы кластеризации

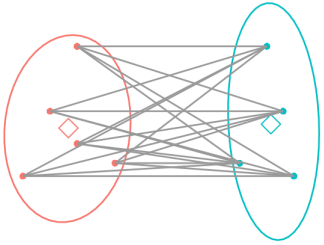
Метод ближайшего соседа



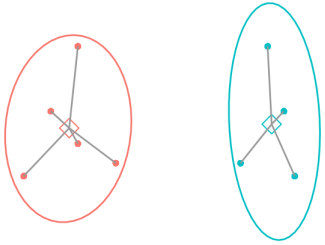
Метод отдаленного соседа



Метод среднегруппового расстояния

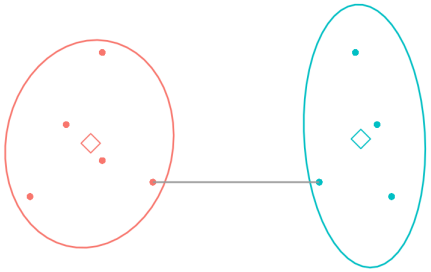


Метод Варда



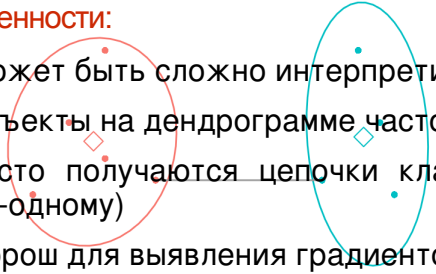
Метод ближайшего соседа

- = nearest neighbour = single linkage
- к кластеру присоединяется ближайший к нему кластер/объект
- кластеры объединяются в один на расстоянии, которое равно расстоянию между ближайшими объектами этих кластеров



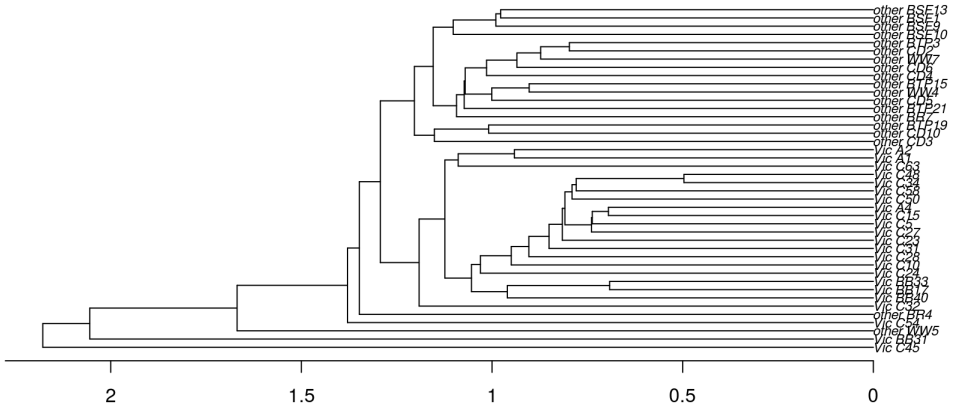
Особенности:

- Может быть сложно интерпретировать, если нужны группы
- объекты на дендрограмме часто не образуют четко разделенных групп
- часто получаются цепочки кластеров (объекты присоединяются как бы по-одному)
- Хорош для выявления градиентов



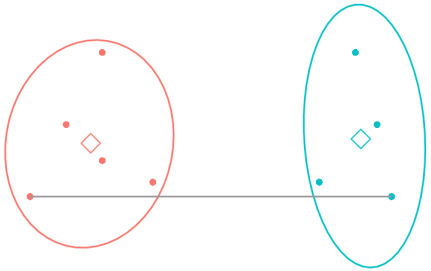
Метод ближайшего соседа в R

```
hc_single <- hclust(d, method = "single")
library(ape)
ph_single <- as.phylo(hc_single)
plot(ph_single, type = "phylogram", cex = 0.7)
axisPhylo()
```



Метод отдаленного соседа

- = furthest neighbour = complete linkage
- к кластеру присоединяется отдаленный кластер/объект
- кластеры объединяются в один на расстоянии, которое равно расстоянию между самыми отдаленными объектами этих кластеров (следствие - чем более крупная группа, тем сложнее к ней присоединиться)

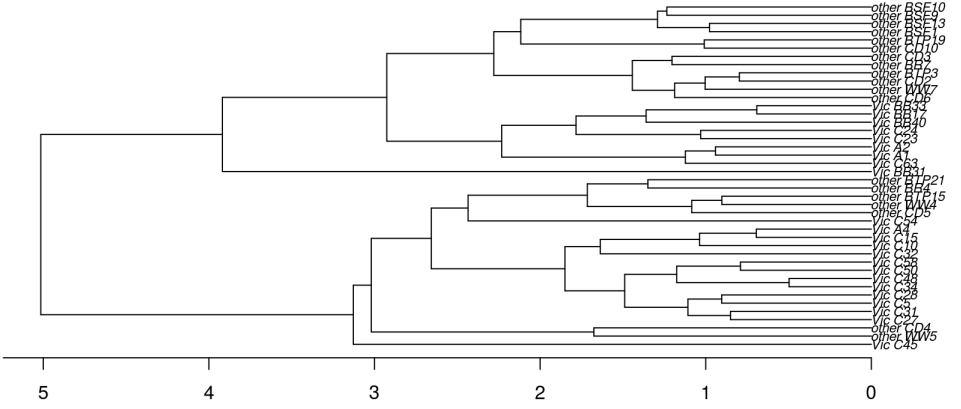


Особенности:

- На дендрограмме образуется много отдельных некрупных групп
- Хорош для поиска дискретных групп в данных

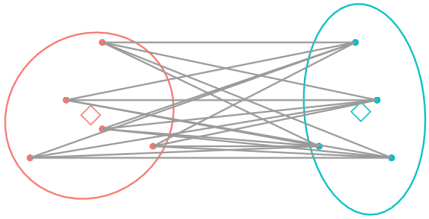
Метод отдаленного соседа в R

```
ph_compl <- as.phylo(hclust(d, method = "complete"))
plot(ph_compl, type = "phylogram", cex = 0.7)
axisPhylo()
```



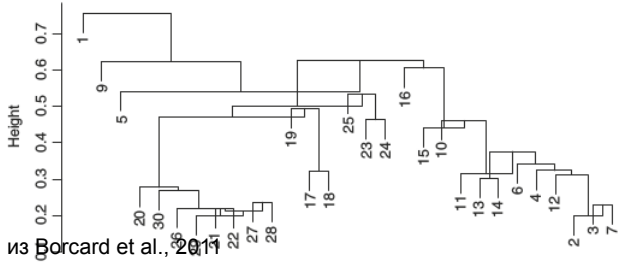
Метод невзвешенного попарного среднего

- = UPGMA = Unweighted Pair Group Method with Arithmetic mean
- кластеры объединяются в один на расстоянии, которое равно среднему значению всех возможных расстояний между объектами из разных кластеров.



Особенности:

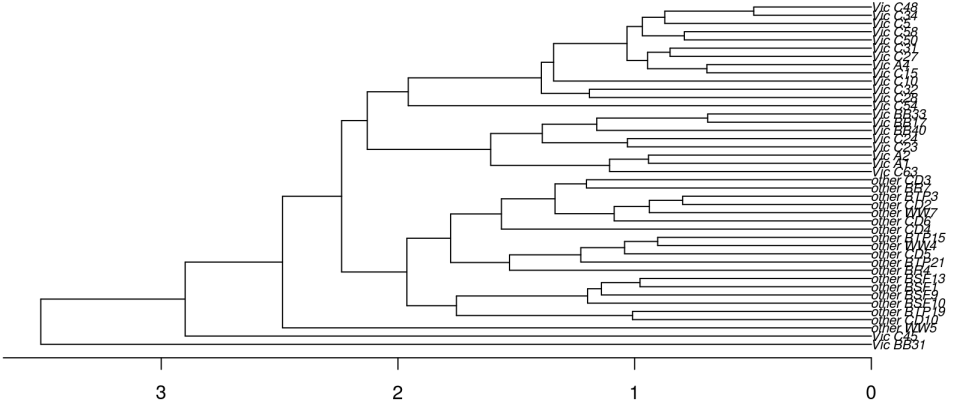
- UPGMA и WUPGMC иногда могут приводить к инверсиям на дендрограммах



из Borcard et al., 2011

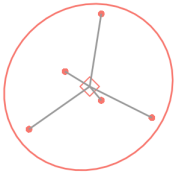
Метод невзвешенного попарного среднего в R

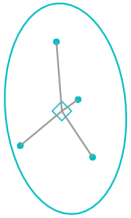
```
ph_avg <- as.phylo(hclust(d, method = "average"))
plot(ph_avg, type = "phylogram", cex = 0.7)
axisPhylo()
```



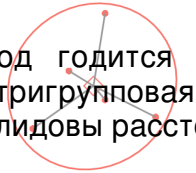
Метод Варда

- = Ward's Minimum Variance Clustering
- объекты объединяются в кластеры так, чтобы внутригрупповая дисперсия расстояний была минимальной





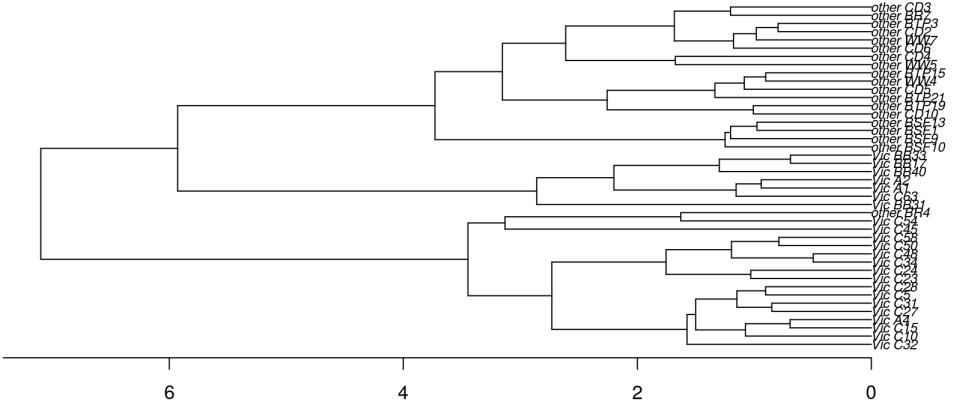
Осо



- метод годится и для неевклидовых расстояний несмотря на то, что внутригрупповая дисперсия расстояний рассчитывается так, как будто это евклидовы расстояния

Метод Варда в R

```
ph_w2 <- as.phylo(hclust(d, method = "ward.D2"))
plot(ph_w2, type = "phylogram", cex = 0.7)
axisPhylo()
```



Сравнение и интерпретация результатов кластеризации

Кофенетическая корреляция

Кофенетическое расстояние - расстояние между объектами на дендрограмме

Кофенетическую корреляцию можно рассчитать как пирсоновскую корреляцию (обычную) между матрицами исходных и кофенетических расстояний между всеми парами объектов

Метод, который дает наибольшую кофенетическую корреляцию дает кластеры лучше всего отражающие исходные данные

Кофенетическая корреляция в R

```
c_single <- cophenetic(ph_single)
c_compl <- cophenetic(ph_compl)
c_avg <- cophenetic(ph_avg)
c_w2 <- cophenetic(ph_w2)
cor(d, as.dist(c_single))

## [1] 0.679

cor(d, as.dist(c_compl))

## [1] 0.524

cor(d, as.dist(c_avg))  # лучше всех отражает структуру данных

## [1] 0.742

cor(d, as.dist(c_w2))

## [1] 0.541
```

На каком уровне нужно делить дендрограмму на кластеры?

- Можно субъективно, на любом выбранном уровне. Главное, чтобы кластеры были осмысленными и интерпретируемыми.
- Можно выбрать, глядя на распределение расстояний ветвления
- Можно оценить вероятность разделения на кластеры при помощи бутстрепа

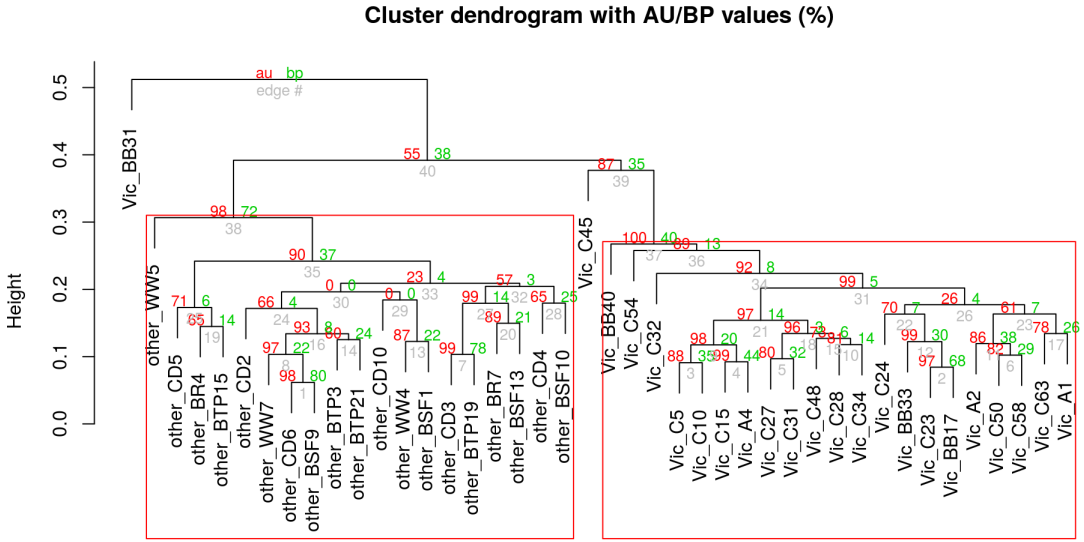
Бутстреп

```
library(pvclust)

# итераций должно быть 1000 и больше здесь мало для скорости
set.seed(42)
cl_boot <- pvclust(scale(t(fossumc)), method.hclust = "average", nboot = 50,
    method.dist = "euclidean")

## Bootstrap (r = 0.5)... Done.
## Bootstrap (r = 0.6)... Done.
## Bootstrap (r = 0.7)... Done.
## Bootstrap (r = 0.8)... Done.
## Bootstrap (r = 0.9)... Done.
## Bootstrap (r = 1.0)... Done.
## Bootstrap (r = 1.1)... Done.
## Bootstrap (r = 1.2)... Done.
## Bootstrap (r = 1.3)... Done.
## Bootstrap (r = 1.4)... Done.
```

```
plot(cl_boot)
pvrect(cl_boot)
```



Distance: euclidean

И небольшая демонстрация - дерево по генетическим данным

```
webpage <- "http://evolution.genetics.washington.edu/book/primates.dna"
primates.dna <- read.dna(webpage)
d_pri <- dist.dna(primates.dna)
hc_pri <- hclust(d_pri, method = "average")
ph_pri <- as.phylo(hc_pri)
plot(ph_pri)
axisPhylo()
```

Take home messages

- Неметрическое многомерное шкалирование - способ снижения размерности, сохраняющий ранги расстояний между объектами
- Направления на графике многомерного шкалирования можно интерпретировать произвольным образом в зависимости от изменения других переменных (не обязательно вдоль осей)
- Результат многомерного шкалирования зависит от выбора коэффициента различия

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.
- Quinn, G.G.P., Keough, M.J., 2002. Experimental design and data analysis for biologists. Cambridge University Press.

Borcard, D., Gillet, F., Legendre, P., 2011. Numerical ecology with R. Springer.

Как работает UPGMA можно посмотреть здесь: - http://www.southampton.ac.uk/~re1u06/teaching/upgma/

- pvclust: An R package for hierarchical clustering with p-values [WWW Document], n.d. URL http://www.sigmath.es.osaka-u.ac.jp/shimo-lab/prog/pvclust/ (accessed 11.7.14).

Для анализа молекулярных данных: - Paradis, E., 2011. Analysis of Phylogenetics and Evolution with R. Springer.