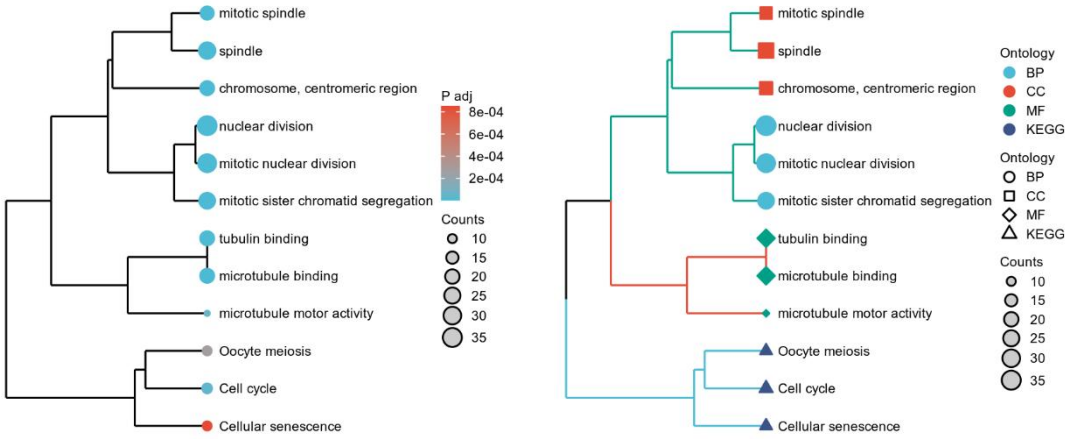
功能聚类 - GOKEGG 聚类树



网址：https://www.xiantao.love

更新时间：2023.10.08

目录

基本概念

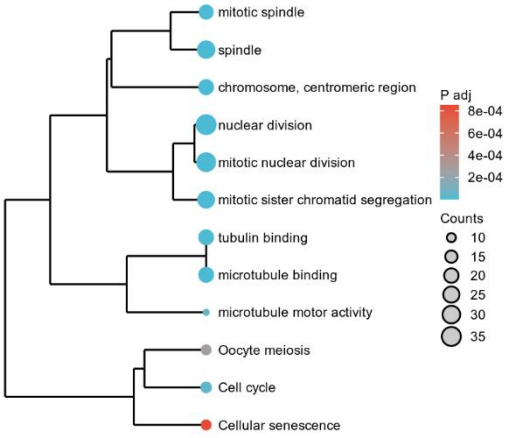
- 富集分析：简单而言，就是取一部分有功能注释的分子与所有有功能注释的分子去比较（超几何分布检验），确定这一部分分子中都涉及了哪些功能作用。注意：单独几个分子做富集分析意义并不大。
- GO（Gene Ontology，基因本体）数据库：把基因的功能分成了三类：生物过程（biological process, BP）、细胞组分（cellular component, CC）、分子功能（molecular function, MF）。利用 GO 数据库，可以得到目标基因在 CC, MF 和 BP 三个层面上有什么关联。
- KEGG（Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes）数据库：一种通路数据库，收集了很多通路相关的数据库。通路数据库还包括 wikipathway，reactome 等。
- 超几何分布检验：超几何分布（hypergeometric）是统计学上一种离散概率分布。它描述了在 N 个物件中指定 M 个种类的物件，不放回的抽取 n 个，成功抽中指定类型物件的个数（k）的事件。
- Jaccard 相似性指数：Jaccard similarity index，定义为 A 与 B 交集的大小与 A 与 B 并集的大小的比值。本模块即使用 JC 方法，计算 term 与 term 之间交集基因的占比，从而获得一个类目与另一个类目之间的成对相似性。

应用场景

本模块为 GO|KEGG 富集分析后结果的可视化展示。对于所选择的类目（ID），计算类目之间的成对相似性，利用相似性矩阵作为距离矩阵，进行聚类分析，并以聚类树形式进行展示。

注意：模块需要先进行 GO|KEGG 富集分析 并 保存结果后，此处的云端数据才会有结果记录，然后才能进行可视化的操作。主要基本参数中有 ID 列表 输入框，可以将对应云端数据记录的富集分析表格中的感兴趣的 ID 列复制到此处，进行可视化。

主要结果



通过聚类树展示 GOKEGG 富集分析结果。

- 聚类树图中，纵向坐标为类目名称，横向坐标表示类目之间的相对距离。
- 聚类树状图中，横线表示从最右端（每个类目）开始将距离最近的两个分类聚为一类，然后将其看作一个整体计算与其它分类之间的距离，继续聚类，直至所有的分类都被聚为一类。分类（节点）之间的连线（竖线）表示其对应的分类都被聚为一类，有多少条连线就表示经过多少次聚类。
- 图中最右端节点的颜色为所选择的 颜色映射(点) 内容。（如上图，对应校正后 p 值 ）
- 图中最右端节点的大小为所选择的 大小映射(点) 内容。（如上图，对应包含 ID 的数量 ）
- 图中最右端节点的形状为所选择的 形状映射(点) 内容。（默认 无）

默认展示各类别的 top 几个结果（默认 满足校正后 p 值<0.05），分面是对应的数据库或者分类。可以挑选在满足阈值下的 top 的类目，或者一些感兴趣的类目。

云端数据

云端数据

	记录名称	来源模块	时间	补充说明
☑	GOKEGG	GOKEGG富集分析 @1.0	2023-02-06 16:14:19	数据记录可以在历史记录中找到

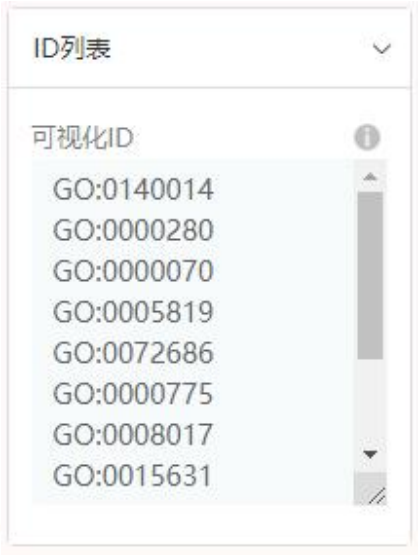
这里的云端数据与历史记录汇总 GOKEGG 富集分析模块的数据记录是保持一致的，可以在历史记录中找到相应的数据记录。

根据需要可视化的项目 选择好对应的云端数据记录。默认使用最近生成的分析记录。

参数说明

（说明：标注了颜色的为常用参数。）

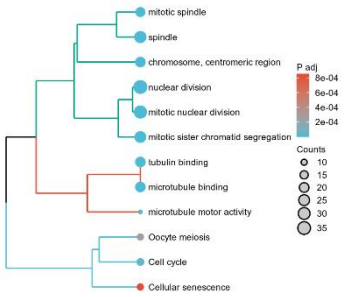
ID 列表



- 可视化 ID：输入想要可视化的功能或者通路的条目 ID，默认为对应云端数据结果中每个类目的前几个条目，可以根据需要进行输入修改。注意：输入的 ID 来自所选云端数据记录的结果，需要先在历史记录中找到对应的记录，下载 excel 结果，复制想要展示的 ID 到这个输入框中，一行代表一个。最多支持 1 张图同时绘制 50 个类目，至少绘制 2 个类目。

聚类

- 方法：可以选择聚类的方法，默认使用 离差平方和法(ward.D) 对条目(ID)间的成对相似性矩阵进行聚类，可选择 类平均法(average)、最短距离法(single)、最长距离法(complete)、中间距离法(median)、相似法(mcquitty)、重心法(centroid)、离差平方和法(ward.D)、离差平方和法 2(ward.D2)。
- 切分：可以选择是否对数据进行聚类分群的操作，默认为不进行切分，还可以选择切分以及切分成几类，并提供聚类分群的相关补充结果，如下：



聚类分群

提供切分后的分群的情况

聚类群	包含个数
1	3
2	3
3	6

聚类分群.xlsx

样式

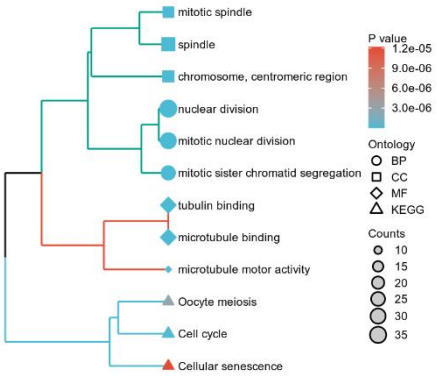
- ID 展示：ID 名称过长时，可以根据需要选择换行模式。可选择 ID 号、全名(自动换行)、全名(一行 20 长度)、全名(一行 30 长度)、全名(一行 40 长度)、全名(一行 50 长度)、全名(一行 60 长度)、全名(一行 70 长度)、全名(一行 80 长度)、全名(不换行)。
- 颜色映射：主要影响点的颜色范围，注意映射内容的数值类型，数值型数据为渐变色，分类型数据为单个颜色。可选择 p 值(pvalue)、校正后 p 值(padj)、q 值(qvalue)(错误率)、类别(Ontology)、无。
- 大小映射：主要影响点的大小，可选择 包含 ID 的数量、无。
- 形状映射：主要影响点的形状，可选择 类别(Ontology)、无。

线(聚类树)

- 颜色：聚类树连线的颜色选项，当选择对结果进行聚类分群(切分)操作时，可以修改各个分群的颜色，有多少个功能类别会提取多少个颜色，最多支持修改 5 个颜色。受配色方案全局性修改。
- 线条类型：聚类树连线的类型，可以选择 实线、虚线。
- 线条粗细：聚类树连线的粗细，默认 0.75
- 不透明度：聚类树连线的不透明度，1 表示完全不透明，0 表示完全透明。

点

- 填充色：点的填充色颜色选项，取决于 颜色映射(点) 参数所选择的内容，展示数值型内容时，修改第一和第二色卡作为数值从小到大的渐变色；展示分类型内容（如 类别）时，有多少个功能类别会提取多少个颜色，最多支持修改 4 个颜色。受配色方案全局性修改。
- 描边色：点的描边色颜色选项，取决于 颜色映射(点) 参数所选择的内容，展示数值型内容时，修改第一和第二色卡作为数值从小到大的渐变色；展示分类型内容（如 类别）时，有多少个功能类别会提取多少个颜色，最多支持修改 4 个颜色。受配色方案全局性修改。
- 样式：点的样式类型，取决于 形状映射(点) 参数所选择的内容，可选择 圆形、正方形、菱形、三角形、倒三角，多选后不同的分组中点的类型也会有不同。



- 大小比例：点的相对大小，取决于 大小映射(点) 参数所选择的内容。
- 不透明度：点的透明度。0 为完全透明，1 为完全不透明。

标题

- 大标题：大标题文本
- x 轴标题：x 轴标题文本
- y 轴标题：y 轴标题文本
- 补充：在要换行的中间插入\n。如果需要上标，可以用两个英文输入法下的大括号括住，比如 {{2}}；如果需要下标，可以用两个英文输入法下的中括号括住，比如 [[2]]。

图注

- 是否展示：是否展示图注
- 图注位置：可选择 默认、右、上、下。

风格

- 外框：是否添加外框
- 网格：是否添加网格
- 文字大小：针对图中所有文字整体的大小控制

图片

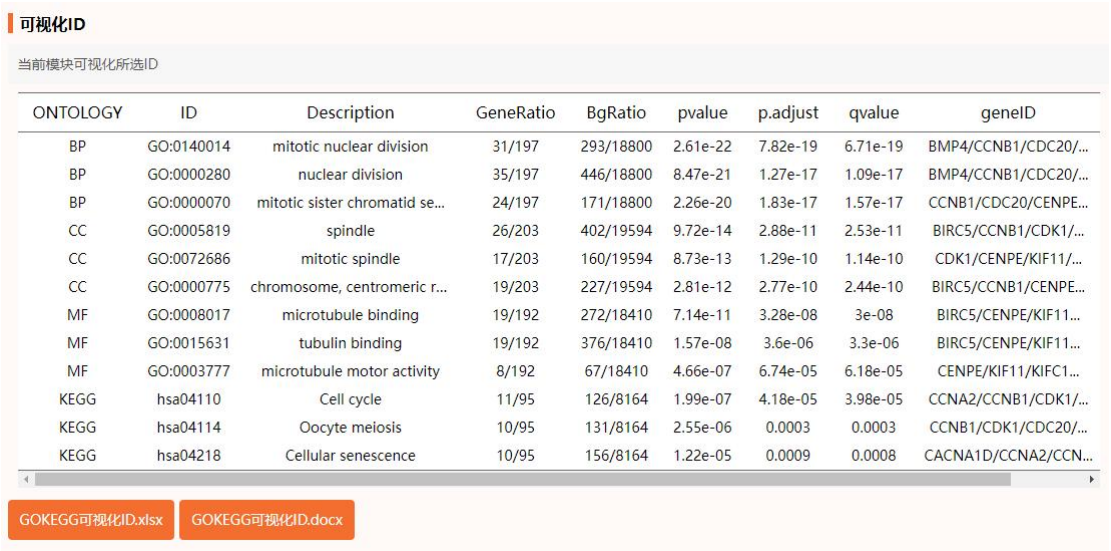
- 宽度：图片横向长度，单位为 cm
- 高度：图片纵向长度，单位为 cm
- 字体：可以选择图片中文字的字体

结果说明

主要结果

主要结果格式为图片格式，提供 PDF、TIFF 和 PPTX 格式下载，结果报告可以下载包括 pdf 以及说明文本的内容。

补充结果



可视化ID

当前模块可视化所选ID

ONTOLOGY	ID	Description	GeneRatio	BgRatio	pvalue	p.adjust	qvalue	geneID
BP	GO:0140014	mitotic nuclear division	31/197	293/18800	2.61e-22	7.82e-19	6.71e-19	BMP4/CCNB1/CDC20/...
BP	GO:0000280	nuclear division	35/197	446/18800	8.47e-21	1.27e-17	1.09e-17	BMP4/CCNB1/CDC20/...
BP	GO:0000070	mitotic sister chromatid se...	24/197	171/18800	2.26e-20	1.83e-17	1.57e-17	CCNB1/CDC20/CENPE...
CC	GO:0005819	spindle	26/203	402/19594	9.72e-14	2.88e-11	2.53e-11	BIRC5/CCNB1/CDK1/...
CC	GO:0072686	mitotic spindle	17/203	160/19594	8.73e-13	1.29e-10	1.14e-10	CDK1/CENPE/KIF11/...
CC	GO:0000775	chromosome, centromeric r...	19/203	227/19594	2.81e-12	2.77e-10	2.44e-10	BIRC5/CCNB1/CENPE...
MF	GO:0008017	microtubule binding	19/192	272/18410	7.14e-11	3.28e-08	3e-08	BIRC5/CENPE/KIF11...
MF	GO:0015631	tubulin binding	19/192	376/18410	1.57e-08	3.6e-06	3.3e-06	BIRC5/CENPE/KIF11...
MF	GO:0003777	microtubule motor activity	8/192	67/18410	4.66e-07	6.74e-05	6.18e-05	CENPE/KIF11/KIFC1...
KEGG	hsa04110	Cell cycle	11/95	126/8164	1.99e-07	4.18e-05	3.98e-05	CCNA2/CCNB1/CDK1/...
KEGG	hsa04114	Oocyte meiosis	10/95	131/8164	2.55e-06	0.0003	0.0003	CCNB1/CDK1/CDC20/...
KEGG	hsa04218	Cellular senescence	10/95	156/8164	1.22e-05	0.0009	0.0008	CACNA1D/CCNA2/CCN...

GOKEGG可视化ID.xlsx　GOKEGG可视化ID.docx

此表格提供当前可视化的 GOKEGG 富集分析结果，提供 Excel、Docx 格式下载。

方法学

所有分析和可视化均在 R 4.2.1 中进行

涉及的 R 包：ggplot2 包（用于可视化）

处理过程：

1) 通过 Jaccard 的相似性指数(JC)计算富集项（term）的成对相似性；
2) 使用 hclust 对其结果进行聚类分析；
3) 使用 ggplot2 包对聚类结果进行可视化。

如何引用

生信工具分析和可视化用的是 R 语言，可以直接写自己用 R 来进行分析和可视化即可，可以无需引用仙桃，如果想要引用仙桃，可以在致谢部分（Acknowledge）致谢仙桃学术（www.xiantao.love）。

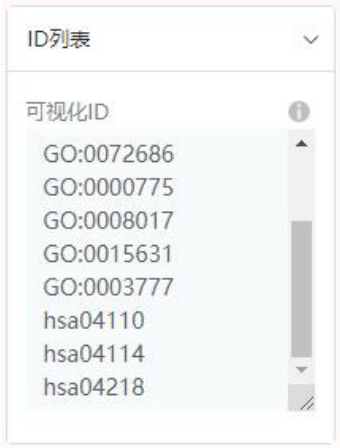
方法学部分可以参考对应说明文本中的内容以及一些文献中的描述。

常见问题

1. 可视化结果能否更换别的 ID？可视化结果的 ID 从哪里获得？为什么某个条目（BP、CC、MF、KEGG）只有 3 个？

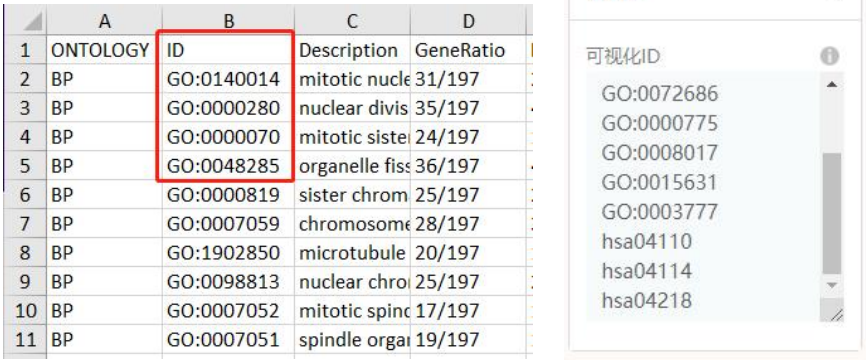
答：

在“ID 列表”选项卡中，有可视化 ID 的输入框：



选项框内**默认**选择对应云端记录结果中前几个条目，可以在此处选择想要可视化的 ID。

注意：输入的 ID 来自所选云端数据记录的结果，需要先在历史记录中找到对应的记录，下载 excel 结果，复制想要展示的 ID 到这个输入框中，一行代表一个。最多同时支持 50 个，至少展示 2 个。



	A	B	C	D
1	ONTOLOGY	ID	Description	GeneRatio
2	BP	GO:0140014	mitotic nucle	31/197
3	BP	GO:0000280	nuclear divis	35/197
4	BP	GO:0000070	mitotic siste	24/197
5	BP	GO:0048285	organelle fis	36/197
6	BP	GO:0000819	sister chrom	25/197
7	BP	GO:0007059	chromosome	28/197
8	BP	GO:1902850	microtubule	20/197
9	BP	GO:0098813	nuclear chro	25/197
10	BP	GO:0007052	mitotic spinc	17/197
11	BP	GO:0007051	spindle orga	19/197

2. 要选择哪些 ID 来进行可视化?

答:

可以对应云端记录表格中的各个分类的 TOP 几条目,也可以是自己感兴趣的想要展示的条目。

3. 为什么出来的图中少了 KEGG(或者 BP 或者 CC 或者 MF),明明已经选了 GO+KEGG? (为什么出来的图里面某个分类只有 1 个或者没有?)

答:

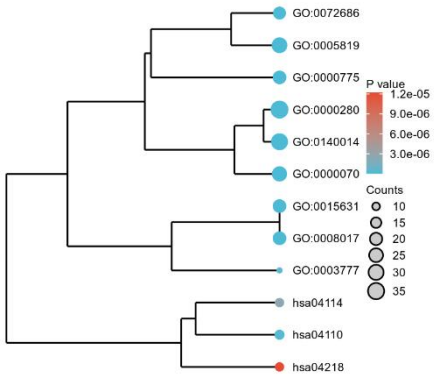
GOKEGG 可视化模块仅仅只是对已经完成 GOKEGG 富集分析的数据进行可视化,如果对应保存的数据中就不存在某些类(没有富集出来某些类),可视化是不可能会有这些类的。而在 GOKEGG 富集分析模块中,最终的结果表格只保留了满足较宽的阈值(p<0.1 以及 qvalue<0.2)的结果,而不满足这一较宽阈值下的条目都会被过滤,如果整个类(BP、CC、MF、KEGG)都不满足这个阈值,那么最终的表格中就会缺少这个类。

可以先检查 GOKEGG 富集分析的结果,在历史记录中找到保存的记录:

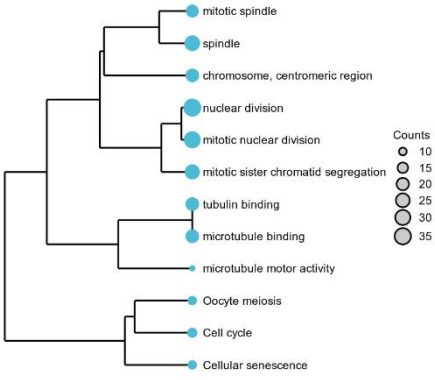
4. 如何修改展示的数据?

答:

可以通过样式中的 颜色映射(点) 参数，下拉框选择 GOKEGG 富集分析结果中不同的结果指标进行展示。



上图：颜色映射 - p 值(pvalue)

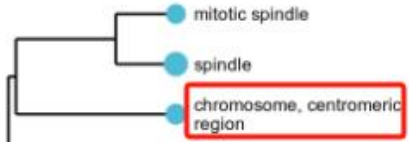


上图：颜色映射 - 无

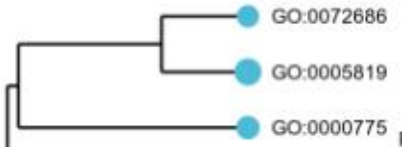
5. 名称太长了，如何修改?

答:

当类目名称太长时，可以在样式中的 ID 展示 参数中进行换行和修改。



上图：ID 展示 - 一行 20 长度



上图：ID 展示 - ID 号

6. 能否上传自己的富集数据进行可视化?

答:

由于涉及到类目相关的基因信息，暂时没有对应模块。