

# Анализ избыточности (Redundancy analysis, RDA)

Анализ и визуализация многомерных данных с использованием R

Марина Варфоломеева, Вадим Хайтов

### Анализ избыточности (Redundancy analysis, RDA)

- Связь нескольких наборов переменных
- Анализ избыточности, теория и практика
- Проверка значимости ординации
- Выбор оптимальной модели
- Частный анализ избыточности и компоненты объясненной инерции
- Компоненты объясненной изменчивости

#### Вы сможете

- Проводить анализ избыточности
- Оценивать долю объясненной инерции
- Интерпретировать компоненты по нагрузкам переменных
- Строить ординацию объектов в пространстве компонент
- Проверять значимость модели ординации при помощи пермутационного теста
- · Разделять объясненную инерцию на компоненты, связанные с разными наборами переменных, при помощи частного анализа избыточности

## Связь нескольких наборов переменных

### Пример: генетика бабочек Euphydryas editha

Частоты разных аллелей фосфоглюкоизомеразы и данные о факторах среды для 16 колоний бабочек *Euphydryas editha* в Калифорнии и Орегоне

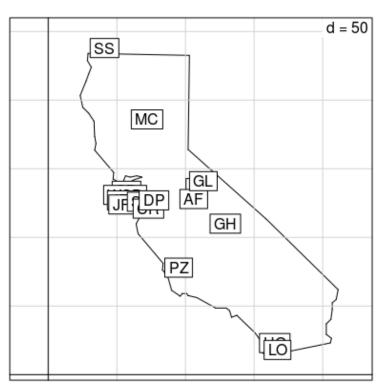


Euphydryas editha

Winged Wonder by Roger Lynn on Flickr

## Как вы думаете, что будет определять генетическую структуру в колониях бабочек?

```
library(ade4)
data(butterfly)
# расположение сайтов
s.label(butterfly$xy, contour = butterfly$contour, inc = FALSE)
```



#### Структура данных

\$xy - координаты колоний
\$envir - 4 фактора среды для колоний
\$genet - частоты 6 аллелей в колониях
\$contour - карта Калифорнии

```
str(butterfly, max.level = 2, give.attr = FALSE, vec.len = 2)
## List of 5
             :'data.frame': 16 obs. of 2 variables:
    $ XV
     ..$ x: num [1:16] 41 57 56 57 58
     ..$ y: num [1:16] 238 134 131 127 124
    $ envir :'data.frame': 16 obs. of 4 variables:
     ...$ Altitude
                      : num [1:16] 500 800 570 550 550 ...
     ..$ Precipitation: num [1:16] 43 20 28 28 28 ...
                    : num [1:16] 98 92 98 98 98 ...
     ..$ Temp Max
                      : num [1:16] 17 32 26 26 26 ...
     ..$ Temp Min
    $ genet : 'data.frame': 16 obs. of 6 variables:
     ..$ 0.4 : num [1:16] 0 0 0 0 0
     ..$ 0.6 : num [1:16] 3 16 6
     ..$ 0.8 : num [1:16]
                          22 20 28 19 8
           : num [1:16] 57 38 46 47 50 ...
                          17 13 17
     ..$ 1.16: num [1:16]
     ..$ 1.3 : num [1:16] 1 13 3 3 6
    $ contour:'data.frame': 59 obs. of 4 variables:
     ..$ x1: num [1:59] 29 103 ...
     ..$ y1: num [1:59] 234 233 ...
     ..$ x2: num [1:59] 103 102
     ..$ y2: num [1:59] 233 164 ...
    $ Spatial:
```

## Создадим переменные с более короткими названиями для удобства

```
# частоты аллелей
gen <- butterfly$genet</pre>
head(gen, 3)
        0.4 0.6 0.8 1 1.16 1.3
                         17 1
13 13
17 3
       0 3 22 57
## SS
## SB 0 16 20 38
## WSB 0 6 28 46
# переменные среды и географические координаты env_geo <- cbind(butterfly$envir, butterfly$xy)
head(env geo, 3)
##
        Altitude Precipitation Temp_Max Temp_Min x
## SS
                                                   17 41 238
             500
                                         98
                               43
## SB
             800
                               20
                                         92
                                                   32 57 134
                                                   26 56 131
## WSB
             570
                               28
                                         98
```

# Анализ избыточности, теория и практика

### Анализ избыточности (RDA, Redundancy analysis)

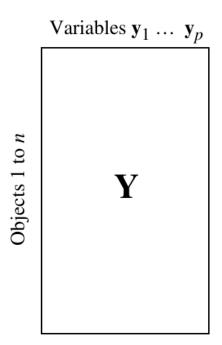
- · Метод прямой ординации (ограниченной ординации = constrained ordination)
- Основан на анализе главных компонент
- Нужно две матрицы данных: матрица зависимых переменных и матрица предикторов
- · Нужно найти такие компоненты матрицы зависимых переменных, которые являются линейными комбинациями предикторов и отражают максимум изменчивости.

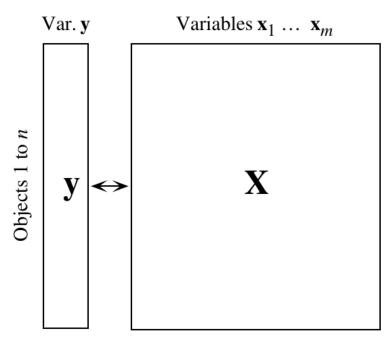
#### Условия применимости RDA

- Линейная зависимость переменных-откликов от предикторов
- Независимость наблюдений (сайтов)
- Сайтов должно быть значительно больше, чем предикторов (как в регрессии, см. проклятие размерности)

### Непрямая ординация и множественная регрессия

- (a) Simple ordination of matrix **Y**: principal comp. analysis (PCA) correspondence analysis (CA)
- (b) Ordination of y (single axis) under constraint of X: multiple regression





Model: 
$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + \dots + b_m x_m$$

Рис. из Legendre, Legendre, 1998

### Прямая (ограниченная) ординация

(c) Ordination of **Y** under constraint of **X**: redundancy analysis (RDA) canonical correspondence analysis (CCA)

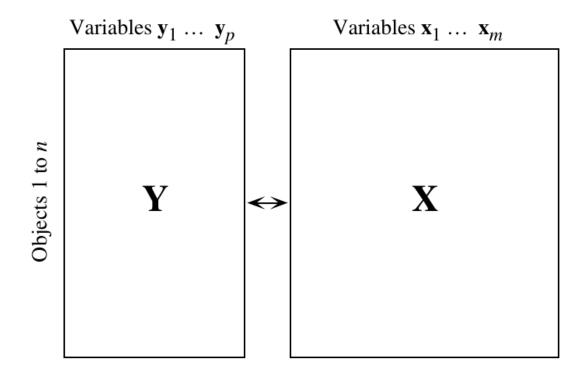


Рис. из Legendre, Legendre, 1998

## Если множественную линейную регрессию можно обобщить для нескольких зависимых переменных — получится RDA

$$\hat{y}_i = b_0 + b_1 x_{1i} + b_2 x_{2i} + \dots + b_k + \epsilon_i$$

Уравнение множественной линейной регрессии можно переписать в виде матриц.

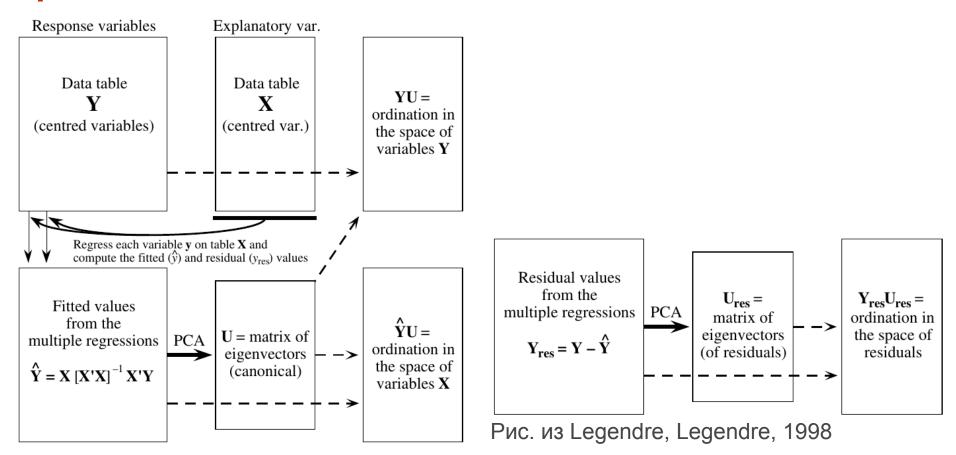
$$\begin{bmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \\ \vdots \\ \hat{y}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,k} \\ 1 & x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n,1} & x_{n,2} & \cdots & x_{n,k} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{bmatrix}$$

Сокращенная форма записи:  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \epsilon$ , причем  $\mathbf{b} = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}^T\mathbf{y})$ .

Во множественной линейной регрессии  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} (\mathbf{X}^T \mathbf{y})$ 

В RDA зависимая переменная — матрица, т.е.  $\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}^T\mathbf{Y})$  ,

### Принцип RDA



### RDA B R

### RDA в vegan

- Зависимые переменные (отклики) генетические данные
- Независимые переменные (предикторы) переменные среды

```
library(vegan)
bf rda <- rda(gen ~ Altitude + Precipitation + Temp_Max + Temp_Min, data = env_geo)</pre>
summary(bf rda)
##
## Call:
## rda(formula = gen ~ Altitude + Precipitation + Temp Max + Temp Min,
                                                                              data = env geo)
## Partitioning of variance:
##
                 Inertia Proportion
## Total
                     730
                              1.000
                      380
## Constrained
                              0.521
                     350
                              0.479
## Unconstrained
##
## Eigenvalues, and their contribution to the variance
## Importance of components:
                                    RDA2
                                                             PC1
##
                           RDA1
                                            RDA3
                                                    RDA4
                                                                      PC2
## Eigenvalue
                         357.20 19.6391 2.30457 0.75999 211.979 101.540
## Proportion Explained
                           0.49 0.0269 0.00316 0.00104
                                                           0.291
                                                                   0.139
## Cumulative Proportion
                                                           0.811
                           0.49 0.5165 0.51966 0.52070
                                                                    0.950
##
                                     PC4
                              PC3
                                             PC5
                         27.1344 7.9192 1.12065
## Eigenvalue
## Proportion Explained 0.0372 0.0109 0.00154
## Cumulative Proportion 0.9876 0.9985 1.00000
## Accumulated constrained eigenvalues
                                                                                         15/53
## Importance of components:
##
                           RDA1
                                    RDA2
                                            RDA3
                                                 RDA4
```

#### Структура общей изменчивости

О структуре изменчивости можно судить по суммам собственных чисел ординационных осей (ограниченных и неограниченных)

## Partitioning of variance:

```
## Total 730 1.000
## Constrained 380 0.521
## Unconstrained 350 0.479
```

- · Total всех осей общая изменчивость исходной матрицы откликов (генетич. структуры в разных сайтах)
- · Constrained осей, кот. являются комбинациями факторов среды изменчивость объясненная средой
- · Unconstrained необъясненная изменчивость

#### Важность различных компонент

Можно более подробно оценить, как распределяется изменчивость между осями

## Eigenvalues, and their contribution to the variance

```
## Importance of components:
                                                   RDA4
                                                            PC1
                                                                    PC2
                           RDA1
                                   RDA2
                                           RDA3
                         357.20 19.6391 2.30457 0.75999 211.979 101.540
## Eigenvalue
                          0.49 0.0269 0.00316 0.00104
## Proportion Explained
                                                         0.291
                                                                 0.139
## Cumulative Proportion
                          0.49 0.5165 0.51966 0.52070
                                                          0.811
                                                                  0.950
                             PC3
                                   PC4
                                            PC5
## Eigenvalue
                        27.1344 7.9192 1.12065
## Proportion Explained 0.0372 0.0109 0.00154
## Cumulative Proportion 0.9876 0.9985 1.00000
```

· Много изменчивости объяснено, но много осталось необъясненной. Первые две ограниченных оси объясняют 51% изменчивости, но первые две неограниченных объясняют еще 43%

### Распределение изменчивости, потенциально объяснимой факторами

## Accumulated constrained eigenvalues

```
## Importance of components:
## RDA1 RDA2 RDA3 RDA4
## Eigenvalue 357.20 19.6391 2.30457 0.760
## Proportion Explained 0.94 0.0517 0.00607 0.002
## Cumulative Proportion 0.94 0.9919 0.99800 1.000
```

· Первая ограниченная ось объясняет большую часть потенциально объяснимой изменчивости. Остальные оси почти ничего не объясняют.

### Собственные векторы, нагрузки переменных = "species scores"

```
scores(bf rda, display = "species", choices = 1:5)
##
         RDA1
                 RDA2
                          RDA3
                                  RDA4
                                         PC1
## 0.4
       0.637 -0.6604 0.19728 -0.2423
                                       0.968
        0.894 -0.7525 -0.00662 0.1207
## 0.6
                                       2.244
       2.618 -0.0949 0.14157 0.1699
## 0.8
                                      2.768
        -6.350 0.1208 0.05462 0.0470 -3.337
## 1.16 1.554 1.3370 0.11772 -0.0419 -2.355
       0.647  0.0501  -0.50457  -0.0534  -0.289
## attr(,"const")
## [1] 10.2
```

#### Корреляции между откликами и предикторами

· Сильная корреляция между генетической структурой и средой только для первой ограниченной оси. Для других - умеренные или слабые.

```
spenvcor(bf_rda)
## RDA1 RDA2 RDA3 RDA4
## 0.836 0.353 0.332 0.183
```

#### Визуализация ординации

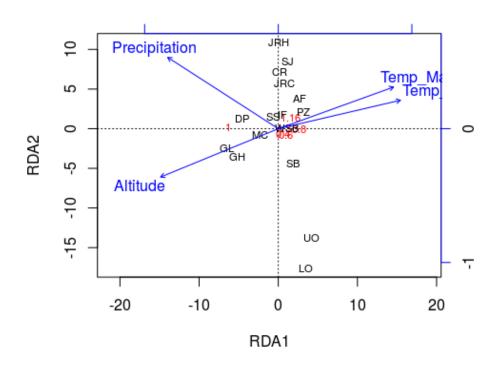
- Какие предикторы важнее всего?
- Какими факторами определяется значение зависимых переменных?

Триплоты:- переменные-отклики ("species"),- объекты ("sites")- переменные-предикторы (непрерывные в виде векторов, дискретные в виде центроидов)

Биплоты:- отклики + предикторы- объекты + предикторы

## Триплот корреляций (scaling = 2): Какие переменные среды важнее всего?

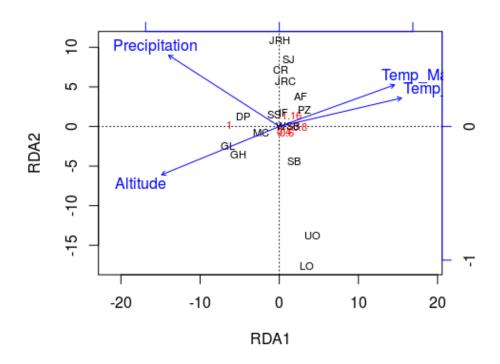
plot(bf\_rda, scaling = 2)



- Векторы независимые переменные, факторы среды
- Надписи объекты (сайты, особи, популяции и пр.)

### Пример интерпретации триплота корреляций

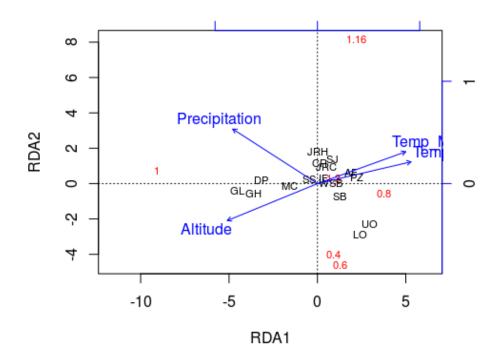
plot(bf\_rda, scaling = 2)



- Вдоль первой оси изменяется температура, высота и осадки
- Вдоль второй оси немного меняется уровень осадков

### Триплот расстояний (scaling = 1)

 $plot(bf_rda, scaling = 1)$ 

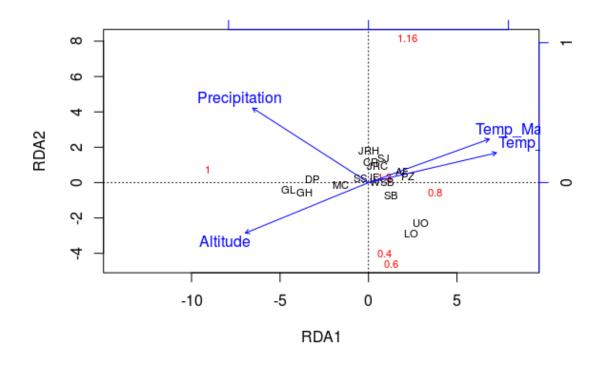


# s.label(butterfly\$xy, contour = butterfly\$contour, inc = FALSE) # карта

- Надписи объекты (сайты, особи, популяции и пр.)
- Красные надписи зависимые

### Пример интерпреатции триплота расстояний

plot(bf\_rda, scaling = 1)



- · Генетическая структура в LO и UO похожа, но не похожа на остальные места
- · GL и GH более высокогорные сайты, чем LO и UO

### Проверка значимости ординации

#### Общий тест на значимость ординации

• тестируем гипотезу о том, что отношения между генотипом и средой значимы.

 $H_0$ : значения предикторов в пробах не зависят от переменных среды (генетическая структура не зависит от среды)

- основан на пермутациях: проверяем, насколько наблюдаемая связь сильнее, чем если случайно переставить данные
- статистика сумма всех соб. чисел ограниченных осей

### Общий тест: Влияют ли факторы на зависимые переменные?

Есть ли связь генетики со средой?

• связь генетической структуры и среды значима

### Тест факторов, type I эффекты: Какие факторы влияют на зависимые переменные?

- · Генетическая структура популяций бабочек достоверно зависит от высоты, если в модель включены др. факторы.
- Но это Туре I эффекты они зависят от порядка включения факторов в модель. Т.е. после включения высоты в модель другие факторы уже не влияют.

## Тест факторов, type III эффекты: Какие факторы влияют на зависимые переменные?

```
anova(bf rda, by = "mar")
## Permutation test for rda under reduced model
## Marginal effects of terms
## Permutation: free
## Number of permutations: 999
## Model: rda(formula = gen ~ Altitude + Precipitation + Temp Max + Temp Min, data =
env_geo)
                 Df Variance
                              F Pr(>F)
## Altitude
                       3 0.08
                                  0.95
                    34 1.08
25 0.79
8 0.26
350
                                  0.32
## Precipitation 1
## Temp_Max 1
## Temp_Min 1
                                  0.46
                                    0.78
## Residual
```

• Если протестировать каждый из факторов отдельно, при у словии, что все остальные включены в модель, то получится, что ни один из них не влияет.

### Тест значимости осей, ограниченных факторами:

- $H_0$ : значения переменных-откликов для объектов не зависят от переменных-предикторов
- пермутационный: выбирает оси, которые объясняют больше изменчивости, чем из др. матриц, полученных путем перестановок

## Тест значимости осей, ограниченных факторами: Вдоль какой из осей значимо меняется генетическая структура?

```
anova(bf rda, by = "axis")
## Permutation test for rda under reduced model
## Marginal tests for axes
## Permutation: free
## Number of permutations: 999
## Model: rda(formula = gen ~ Altitude + Precipitation + Temp Max + Temp Min, data =
env geo)
           Df Variance
                         F Pr(>F)
                  357 11.24 0.001 ***
## RDA1
## RDA2
                  20 0.62 0.540
## RDA3
                  2 0.07 0.962
                   1 0.02 0.999
## RDA4
## Residual 11
                  350
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

• Генетическая структура значимо меняется вдоль первой главной оси

### Выбор оптимальной модели

#### Выбор оптимальной модели

У нас проблема. Если мы тестируем любой из факторов, после включения остальных в модель - он не влияет. Это значит, что модель не оптимальна.

Как подобрать оптимальную модель?

 Можно использовать пошаговый выбор модели: добавляем в модель лучшие переменные и снова исключаем те, что потеряли значимость. (Вспомните, как это было для регрессионных моделей.)

Какой можно использовать тест для сравнения моделей?

- Модели с разным числом предикторов можно сравнить при помощи пермутационного теста (АІС для ограниченных ординаций не существует!)
- · Осторожно! В vegan факторы включенные в модель обозначаются "-", а факторы, исключенные из модели "+"

#### Пошаговый выбор оптимальной модели

Для пошагового выбора нам понадобятся полная и нулевая модели

```
m1 <-rda(gen ~ Altitude + Precipitation + Temp Max + Temp Min, data = env geo)
m0 < - rda(gen \sim 1, data = env geo)
Запускаем пошаговый выбор
m <- ordistep(m0, scope = formula(m1))</pre>
##
## Start: gen ~ 1
                  Df AIC F Pr(>F)
                              0.005 **
## + Temp Min
              1 100 9.75
## + Temp Max
                 1 101 8.12
                              0.005 **
## + Precipitation 1 102 7.30
                              0.005 **
## + Altitude
             1 101 8.69
                              0.010 **
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
## Step: gen ~ Temp Min
             Df AIC F Pr(>F)
## - Temp Min 1 106 9.75 0.005 **
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
                  Df AIC
                           F Pr(>F)
## + Precipitation 1 100 1.41
                              0.21
## + Temp Max
                   1 101 1.08
                               0.33
## + AltiTude
                   1 102 0.23
                               0.89
```

### Оптимальная модель, отобранная при помощи пошагового алгоритма

m\$anova

```
## Df AIC F Pr(>F)
## + Temp_Min 1 100 9.75 0.005 **
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

• Оптимальная модель содержит только один предиктор - минимальную температуру

# Частный анализ избыточности и компоненты объясненной инерции

### Зачем нужен частный анализ избыточности?

Мы уже обнаружили тесную связь генотипов со средой, и даже знаем, с какими переменными.

Но генотипы в близких местах могут быть похожи по разным причинам.

И теперь у нас два вопроса:

#### Кто виноват?

- сходный климат в близких локациях
- поток генов между близкими колониями облегчен

### Что делать?

· Нужно удалить влияние географического положения, чтобы сделать корректный вывод о связи генотипов со средой.

### Частный анализ избыточности

- зависимость от одного набора переменных (предикторов), когда влияние другого (ковариат) исключено.

#### Техника:

- 1. Множественная регрессия зависимости предикторов от ковариат.
- 2. Остатки от этой регрессии это то, что от ковариат не зависит можно использовать в РСА в качестве предикторов (вместо исходных переменных среды).

### Делаем частный RDA: зависимость генетической структуры от среды с учетом географического положения

```
bf_prda_1 <- rda(gen ~ Temp_Min + Condition(x + y), data = env_geo)
anova(bf_prda_1) ## Пермутационный тест

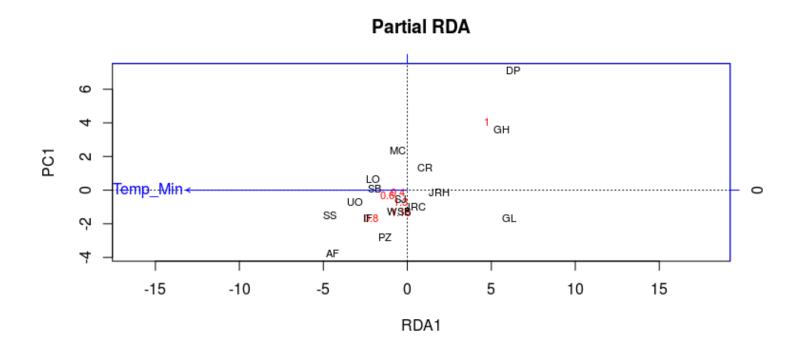
## Permutation test for rda under reduced model
## Permutation: free
## Number of permutations: 999

##
## Model: rda(formula = gen ~ Temp_Min + Condition(x + y), data = env_geo)
## Df Variance F Pr(>F)
## Model 1 202 9.01 0.001 ***
## Residual 12 268
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

· Климат объясняет генетическую изменчивость, даже после удаления влияния географических координат

### График ординации

plot(bf\_prda\_1, main = "Partial RDA")



- Смысл графика остался прежним, изменились нюансы
- Первая ось мин температура.

## Компоненты объясненной изменчивости

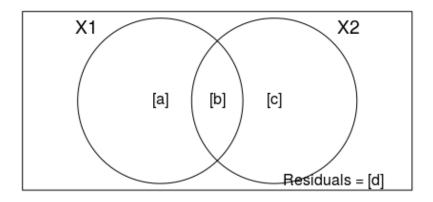
### Компоненты изменчивости

К этому моменту мы знаем, что климат объясняет генетическую изменчивость, даже после удаления влияния географических координат.

Но какая часть изменчивости генетической структуры обясняется в чистом виде географической близостью, а какая — общим действием климата и географии?

### Общую изменчивость делим на части:

showvarparts(2)



- 1. a + b + c вся потенциально объяснимая средой и географией изменчивость
- 2. а изменчивость, объясненная климатом
- 3. с изменчивость, объясненная географией
- 4. b изменчивость, совместно объясненная средой и географией

### Чтобы выделить компоненты изменчивости нам нужно несколько элементов

У нас уже есть **частный RDA № 1: зависимость генетики от среды с учетом географии** (для а)

Нам нужен **частный RDA №2: генетика от географии с учетом свойств среды** (для с)

```
bf_prda_2 < - rda(gen \sim x + y + Condition(Temp_Min), data = env_geo)
```

И полная модель RDA генетика от среды и географического положения (для a + b + c)

```
bf_rda_full <- rda(gen \sim x + y + Temp_Min, data = env_geo)
```

### Задание: Найдите компоненты инерции

- 1. изменчивость, потенциально объяснимую средой и географией
- 2. изменчивость, связанную только со средой, но не с географией
- 3. изменчивость, связанную только с географией, но не со средой
- 4. изменчивость, объясненную одновременно средой и географией

### Подсказка

Смотрите на результаты разных RDA

### Решение: 1) Сколько изменчивости потенциально объясняется средой и географией?

```
sum full <- summary(bf rda full)</pre>
> sum full
## Partitioning of variance:
                 Inertia Proportion
## Total
                     730
                              1.000
## Constrained
                     461
                              0.632
## Unconstrained
                     268
                             0.368
Изменчивость, объясненная вместе средой и географией, здесь достаточно велика —
461.24
```

```
(I total <- sum full$constr.chi)</pre>
## [1] 461
```

В отличие от нее, доля изменчивости, объясненной ограниченной матрицей, может быть оношению к общей изменчивости. Некоторые советуют малой ПО ДОВОЛЬНО объяснимой сосредоточиться потенциально изменчивости (OT на доле OT sum full\$constr.chi)

### Решение: 2) Изменчивость, объясненная климатом

```
sum prda 1 <- summary(bf prda 1)</pre>
> sum_prda_1
partit(sum prda 1)
## Partitioning of variance:
                 Inertia Proportion
##
                               1.000
## Total
                      730
                               0.356
                      260
## Conditioned
## Constrained
                     202
                           0.276
                      268
## Unconstrained
                               0.368
• Среда без географии объясняет 201.5
(I_env <- sum_prda_1$constr.chi)</pre>
## [1] 201
```

### Решение 3) Изменчивость, объясненная географией

```
sum prda 2 <- summary(bf prda 2)</pre>
> sum prda 2
partit(sum prda 2)
## Partitioning of variance:
##
                  Inertia Proportion
                               1.000
## Total
                      730
                      299
                               0.410
## Conditioned
                      162
## Constrained
                               0.222
## Unconstrained
                      268
                               0.368
География без среды объясняет 161.79
(I geo <- sum prda 2$constr.chi)</pre>
## [1] 162
```

### Решение: 4) Изменчивость, совместно объясненная средой и географией

```
(I_env_geo <- I_total - I_env - I_geo)
## [1] 98
```

### Компоненты изменчивости - сводим результаты вместе

```
      comp <- data.frame(Inertia = c(I_env, I_geo, I_env_geo, I_total))</td>

      rownames(comp) <- c('Только среда', 'Только география', 'Среда и география вместе', 'Общая объяснимая инерция')</td>

      comp$Proportion <- comp$Inertia/sum(comp$Inertia[1:3]) * 100</td>

      colnames(comp) <- c('Инерция', '%')</td>

      comp

      ## Только среда
      201 43.7

      ## Только география
      162 35.1

      ## Среда и география вместе
      98 21.2

      ## Общая объяснимая инерция
      461 100.0
```

Среда объясняет 50% общей изменчивости генетической структуры - очень много, но и география объясняет 30%. И только 21% объясняется совместным влиянием среды и географии

### Take home messages

- · Анализ избыточности помогает установить связь между несколькими наборами переменных. Один из наборов считается зависимым, другой считается объясняющим
- · Для анализа необходимо, чтобы зависимости переменных-откликов от предикторов были линейными
- В ходе анализа выделяют два типа осей ограниченные (объясненные) переменными-предикторами, и неограниченные (необъясненные) ими
- · Частный анализ избыточности позволяет описать зависимость двух наборов переменных с поправкой на влияние дополнительных переменных (ковариат)
- При помощи частного анализа избыточности можно выделить компоненты изменчивости связанные с несколькими (2-4) наборами переменных-предикторов

### 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.