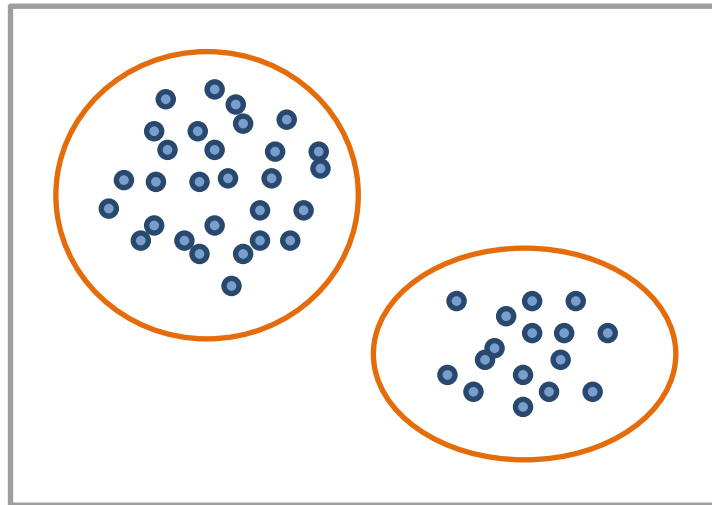


# NUMERICKÁ KLASIFIKACE

# SHLUKOVÁNÍ

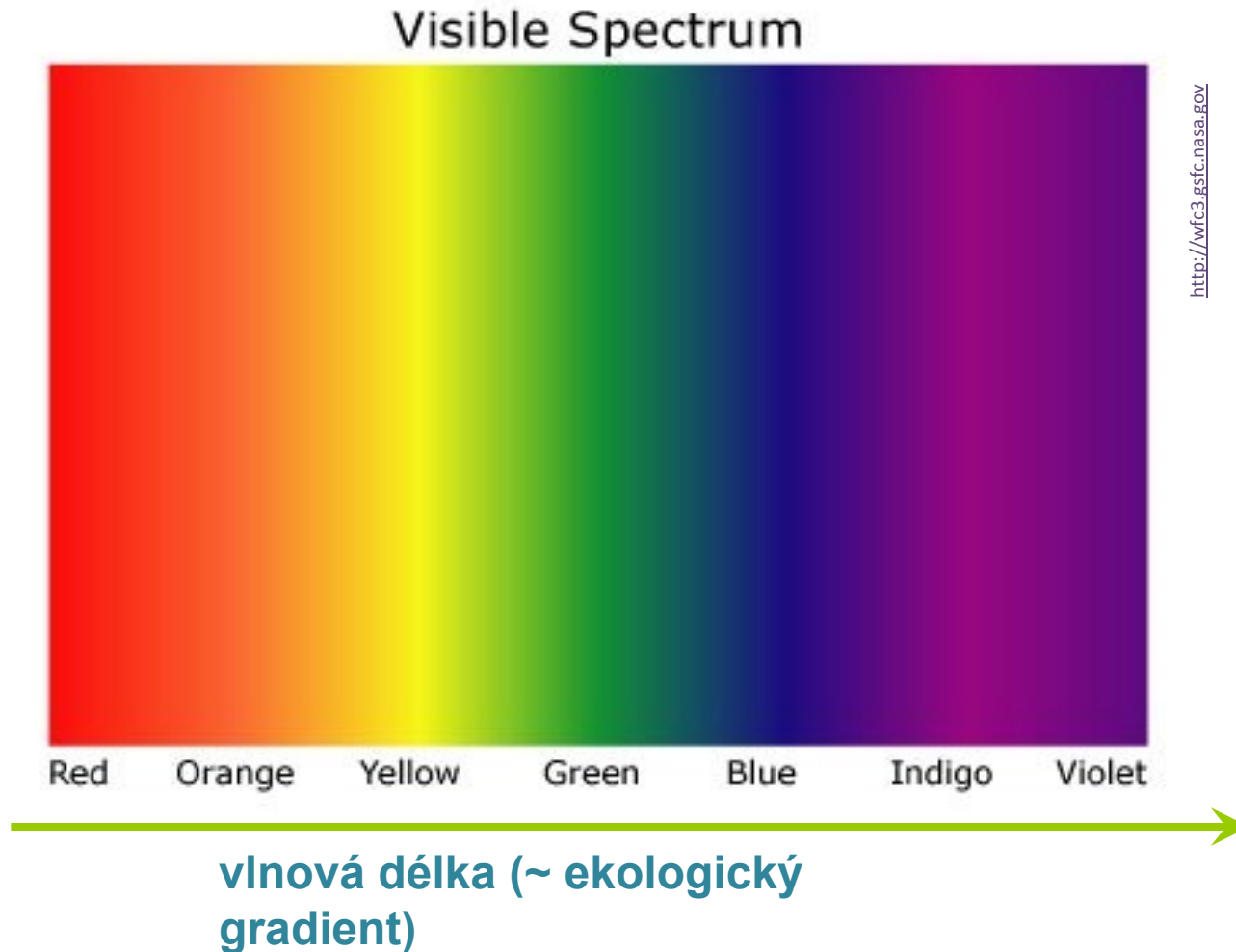
- rozpoznání objektů, které jsou si dostatečně podobné, aby mohly být dány do stejné skupiny
- zjištění odlišností mezi skupinami



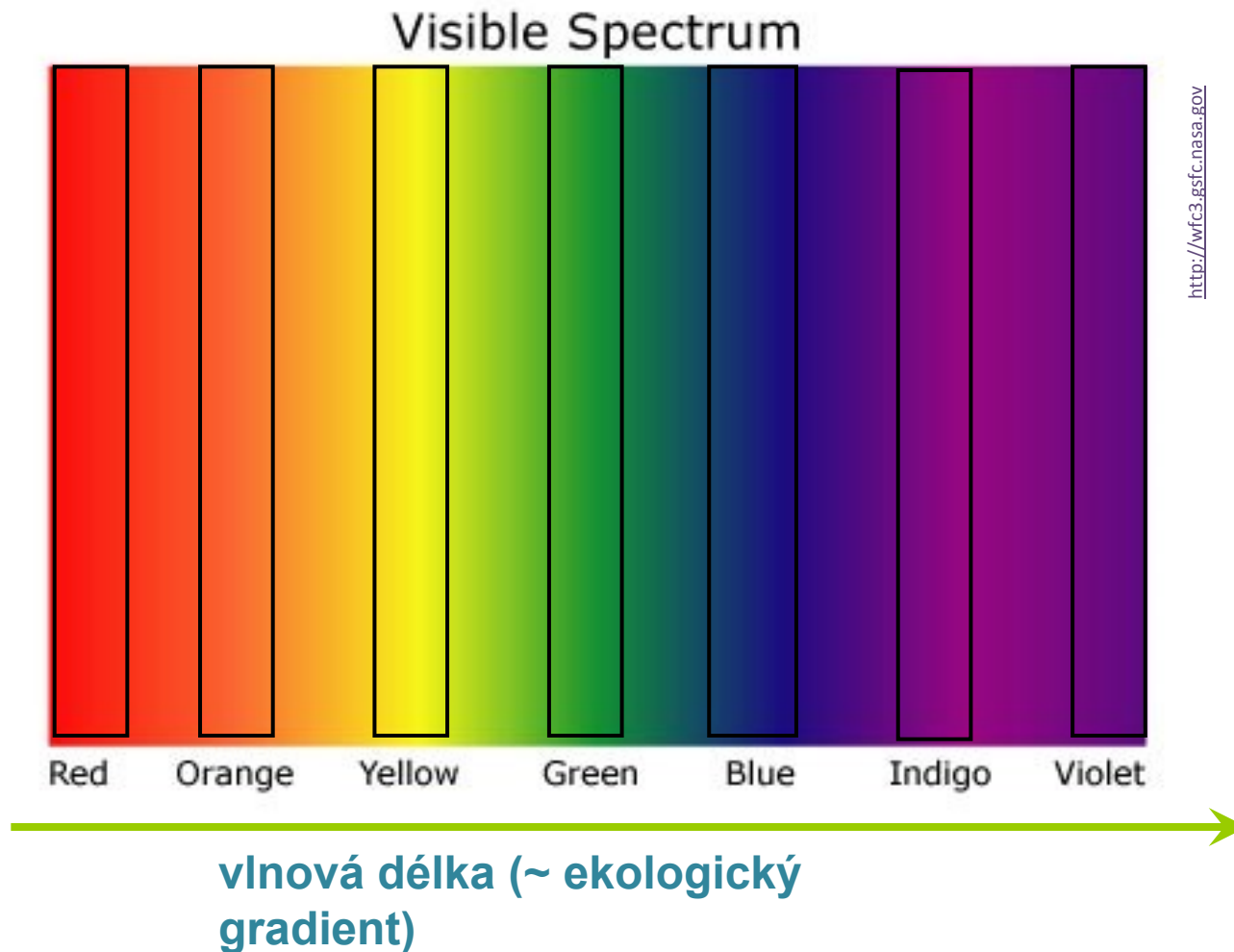
# DISKONTINUUM VS. KONTINUUM

- Evoluční teorie predikuje diskontinuum – druhy
  - taxonomové hledají diskontinuity dané odlišnostmi mezi druhy
- Svět ekologie nejčastěji kontinuální
  - metody schopné rozpoznat shluky podobných objektů, zatímco ignorují několik hraničních
- Nelze očekávat diskontinuity ve společenstvech, aniž by prostředí bylo diskontinuální (nebo nevzorkujeme opačné konce gradientů) Whittaker 1962

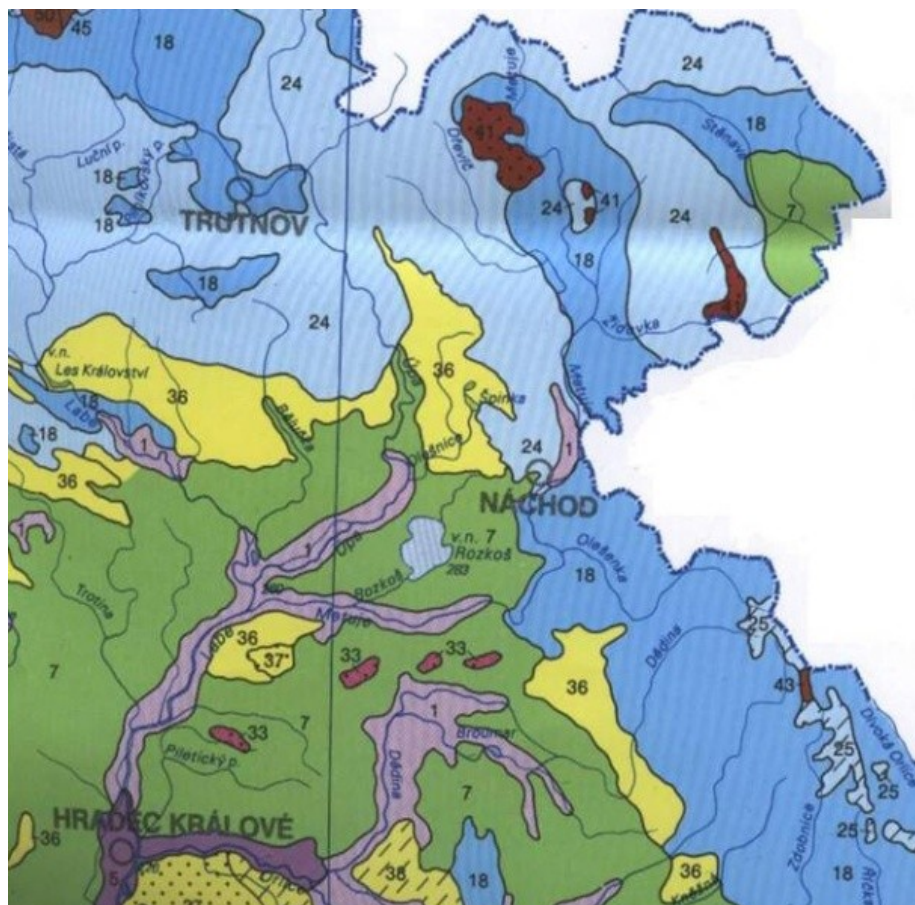
# PROČ MÁ SMYSL VĚCI KLASIFIKOVAT?



# PROČ MÁ SMYSL VĚCI KLASIFIKOVAT?



# PROČ MÁ SMYSL KLASIFIKOVAT?



- 1-střemchová jasenina /Pruno-Fraxinetum/ místy v komplexu s mokřadními olšinami /Alnion glutinosae/
- 7-černýšová dubohabřina /Melampyro nemorosi-Carpinetum/
- 18-bučina s kyčelnicí devítilistou /Dentario enneaphylli-Fagetum/
- 24-biková bučina /Luzulo-Fagetum/
- 33-mochnová doubrava /Potentillo albae-Quercetum/
- 36-biková a/nebo jedlová doubrava /Luzulo albidae-Quercetum petraeae, Abieti-Quercetum/
- 37-bezkolencová doubrava /Molinio arundinaceae-Quercetum/
- 41-(sub)montánní a smrčina na balvanitých rozpadech /Betulo carpaticae-Pinetum, Anastrepto piceteum/

# KLASIFIKACE

- smyslem je najít diskontinuity (v jinak často kontinuální realitě), které můžeme pojmenovat – například proto, abychom si usnadnili komunikaci
- cílem je seskupit podobné objekty (vzorky, druhy) do skupin, které jsou vnitřně homogenní, dobře popsitelné a zároveň dobře odlišitelné od ostatních skupin
  - pokud analyzují vzorky – daná skupina obsahuje vzorky s podobným druhovým složením (např. podobná stanoviště)
  - pokud analyzují druhy – daná skupina obsahuje druhy s podobným ekologickým chováním

# TYPOLOGIE

## „SYSTEM TYPŮ“

- výsledek shlukování objektů na kontinuálním gradientu
- výsledkem typy, pomocí nichž lze popsat kontinuum
- tyto typy samozřejmě nejsou ani „přirozené“, ani jediné „správné“



# KLASIFIKACE

## OBECNÉ ROZDĚLENÍ

### ○ subjektivní vs ~~objektivní~~

- v době rozkvětu metod numerické klasifikace se věřilo, že numerické metody přinášejí klasifikaci založenou na objektivních kritériích, tedy tu která „skutečně existuje“ (narozdíl od té subjektivní, která je „výmyslem badatele“)
- všechny klasifikace jsou ale z principu subjektivní

### ○ neformalizovaná vs formalizovaná

- formalizovaná klasifikace je taková, která je provedena na základě jasných kritérií a díky tomu je možné ji znovu reprodukovat
- opakem je klasifikace založená na neformálních kritériích (například pocitu), kterou pak není snadné zopakovat

# OTÁZKY, KTERÉ BYCH SI MĚL POLOŽIT PŘED TÍM, NEŽ ZAČNU NĚCO KLASIFIKOVAT

## ○ **Pro jaký účel klasifikaci dělám?**

- chci klasifikovat můj datový soubor (*srovnat knihy v mojí domácí knihovničce*)
- chci vytvořit obecný klasifikační systém, který bude použitelný i na další soubory (*vytvořit knihovnický systém kategorizace knih, používaný i v jiných knihovnách*)

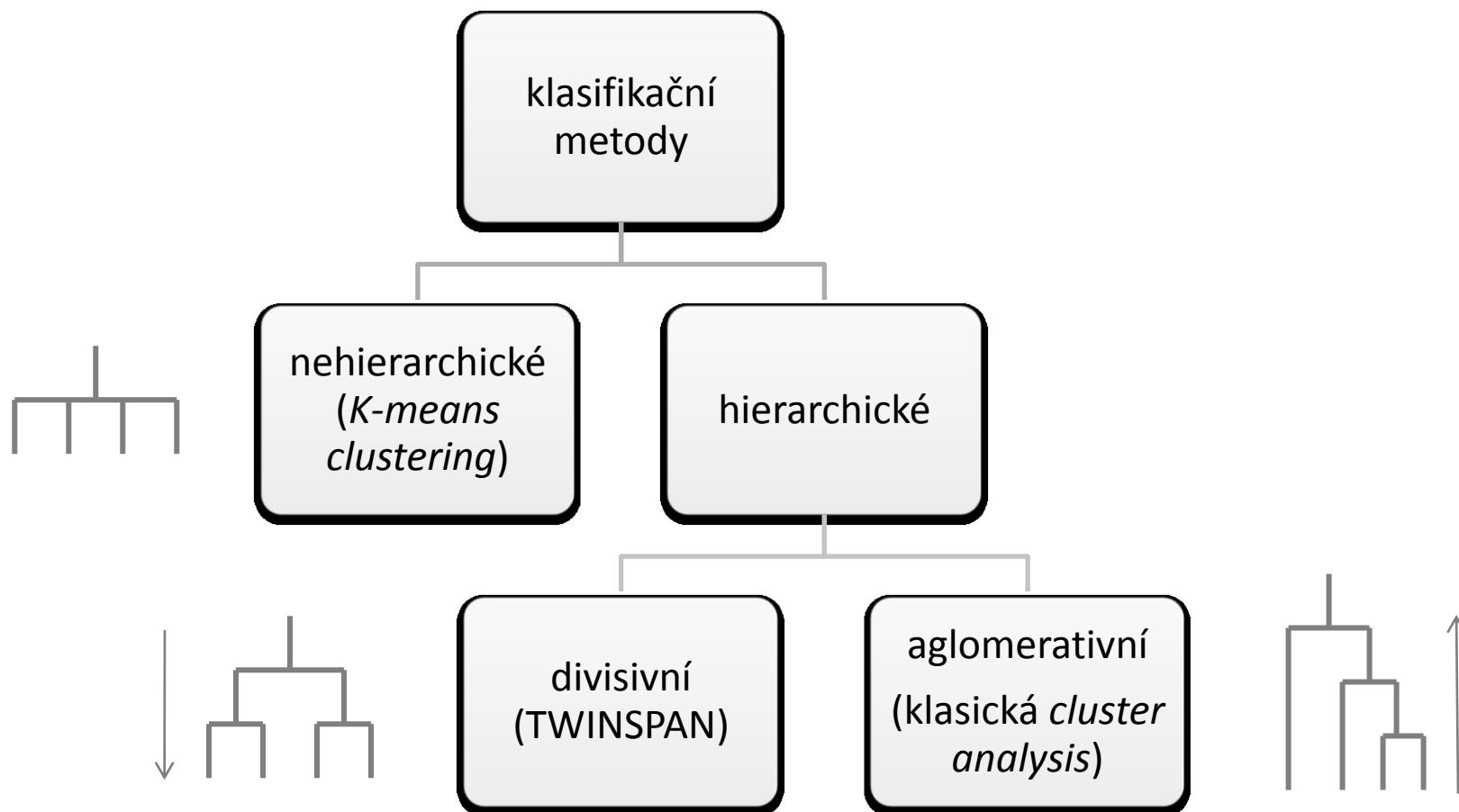
## ○ **Podle jakých kritérií budu objekty klasifikovat?**

- kritérium, podle kterého budu posuzovat, jestli si jsou objekty více či méně podobné (*knihy budu třídit podle obsahové podobnosti nebo např. podle velikosti*)
- odpovídá výběru indexu podobnosti mezi vzorky

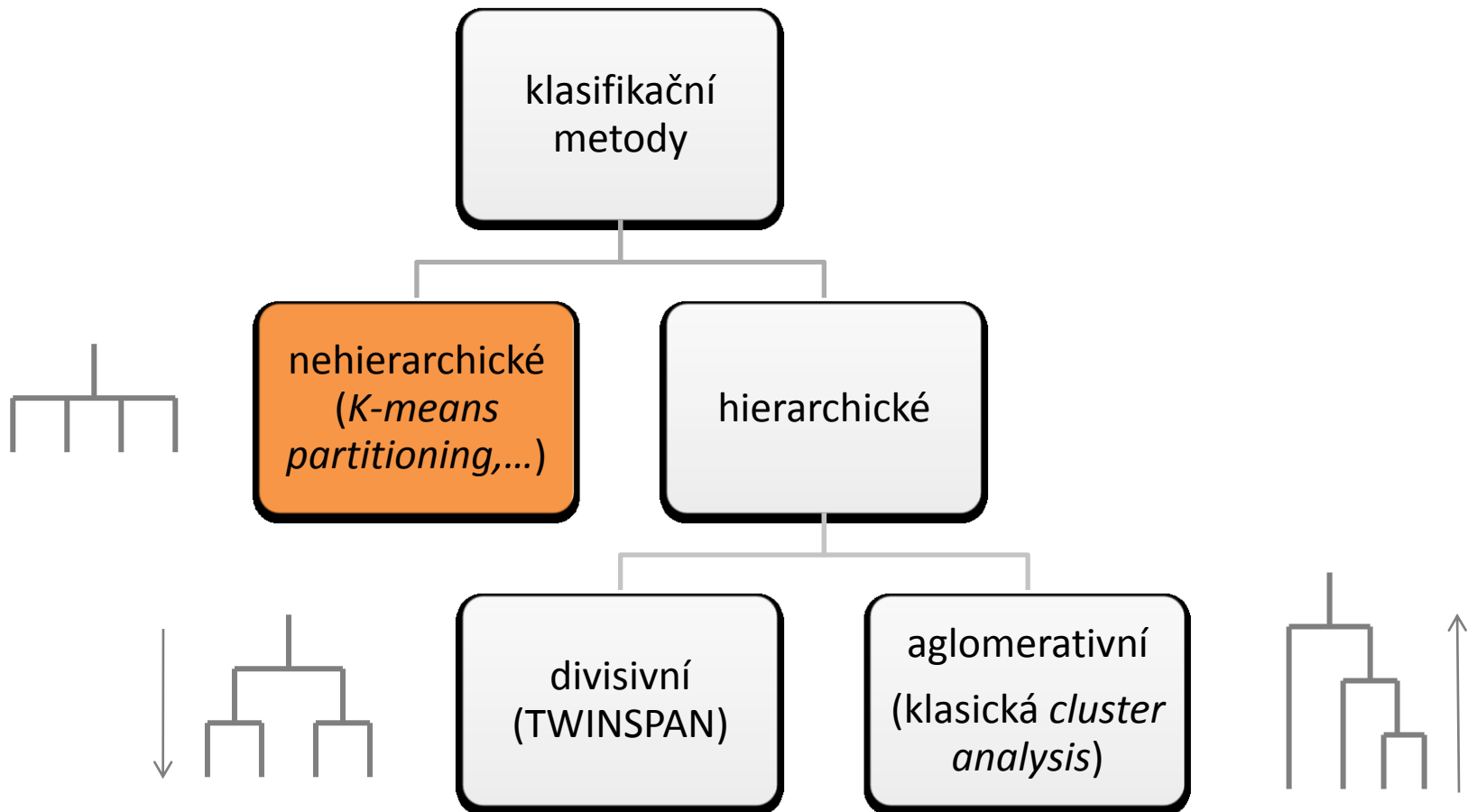
## ○ **Jak stanovím hranice mezi jednotlivými skupinami?**

- pravidla, podle kterých budu přiřazovat objekty do skupin
- odpovídá výběru klasifikačního algoritmu

# KLASIFIKACE



# KLASIFIKACE



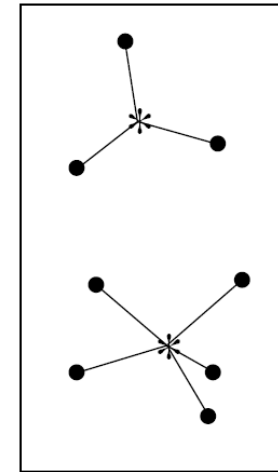
# KLASIFIKACE

## NEHIERARCHICKÁ

### *K-means partitioning*

#### (shlukování metodou K-průměrů)

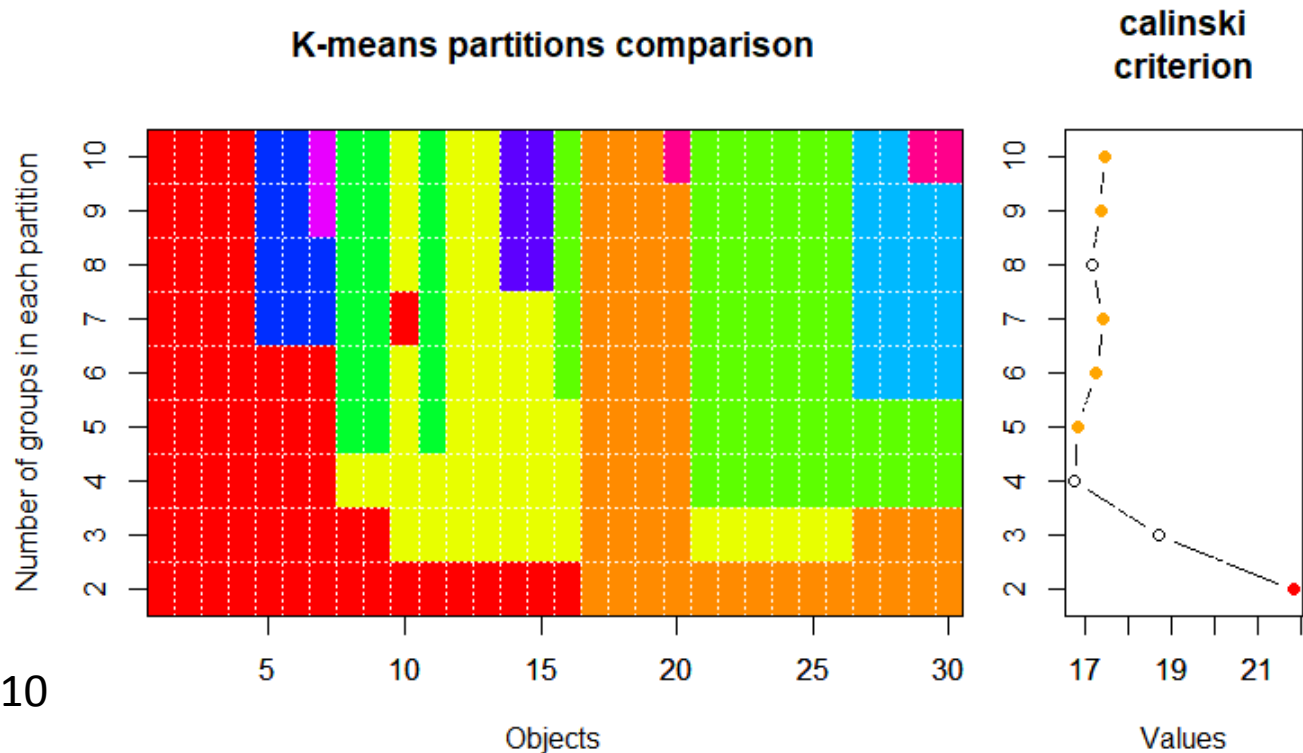
- nehierarchická metoda – všechny shluky jsou si rovny
- minimalizuje sumy čtverců vzdáleností vzorků od centroidů shluku
- na začátku uživatel zvolí počet shluků ( $k$ )
- iterativní metoda, začne od náhodného přiřazení vzorků do shluků, postupně přehazuje vzorky mezi shluky a hledá optimální řešení
- výsledek do určité míry záleží na počátečním rozmístění shluků do vzorků a je proto dobré proces mnohokrát zopakovat (najít stabilní řešení), protože metoda má tendenci nacházet lokální minima



Legendre & Legendre 1998

# IDENTIFIKACE “SPRÁVNÉHO K”

- Spuštění kmeans přes
- Calinski – Harabasz criterion ( $\sim$  F-ratio:  $MS_{\text{mezi shluky}}/MS_{\text{uvnitř shluků}}$ )
  - Nejvyšší hodnota  $\sim$  optimum
  - Hodnota K, při které C-H crit. Vzroste, může být taky zajímavá

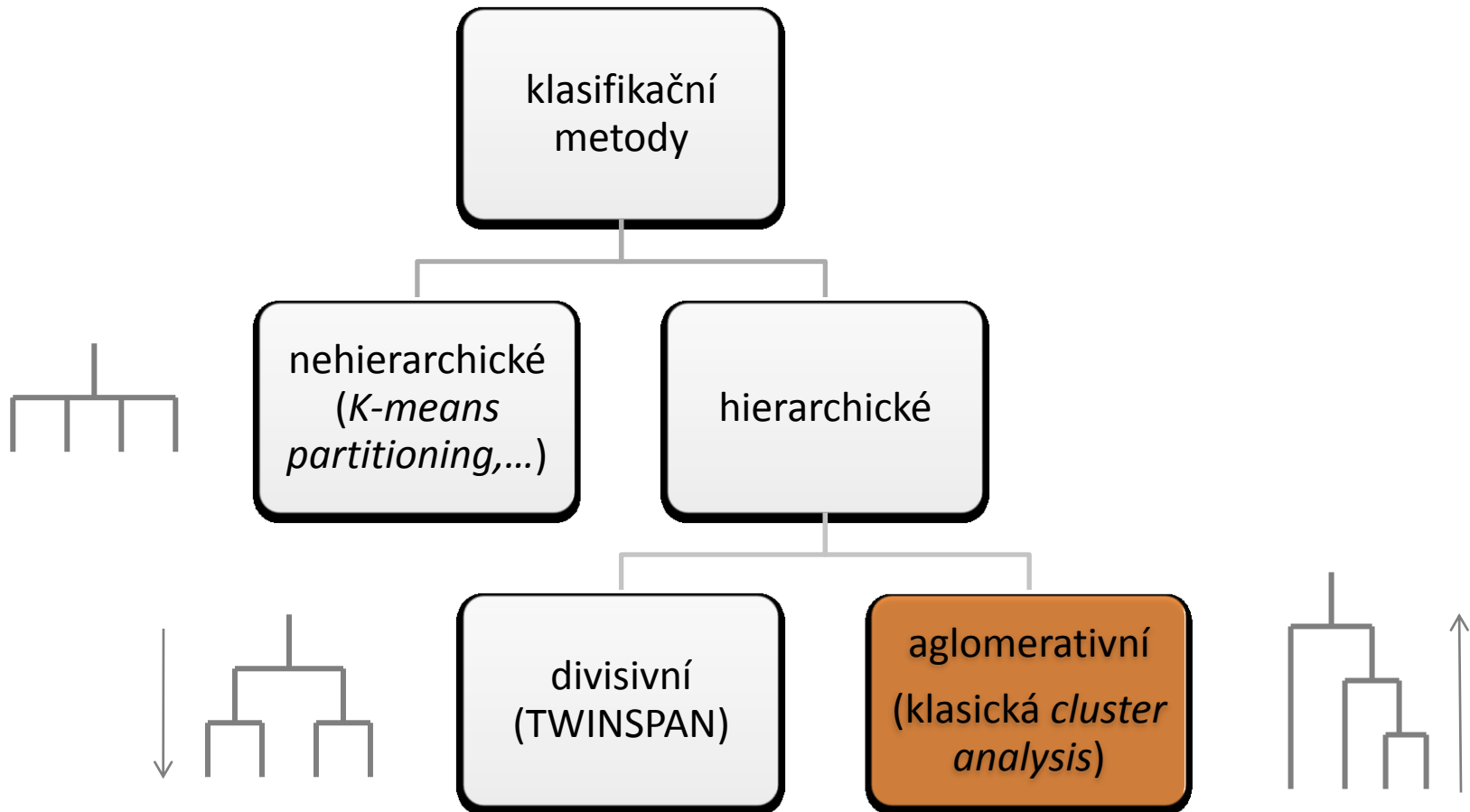


K-means pro k = 2-10

## DALŠÍ METODY PARTITIONING

- K-means
  - Limitované použití na metrické distance
  - Jinak nutné přepočítat nepodobnosti na vzdálenosti pomocí PCoA
- Partitioning around the medoids
  - Centrum není průměr, ale nějaký konkrétní bod (medoid)
  - Použitelné na jakoukoliv nepodobnost
  - Má být robustnější než k-means

# KLASIFIKACE





# KLASIFIKACE

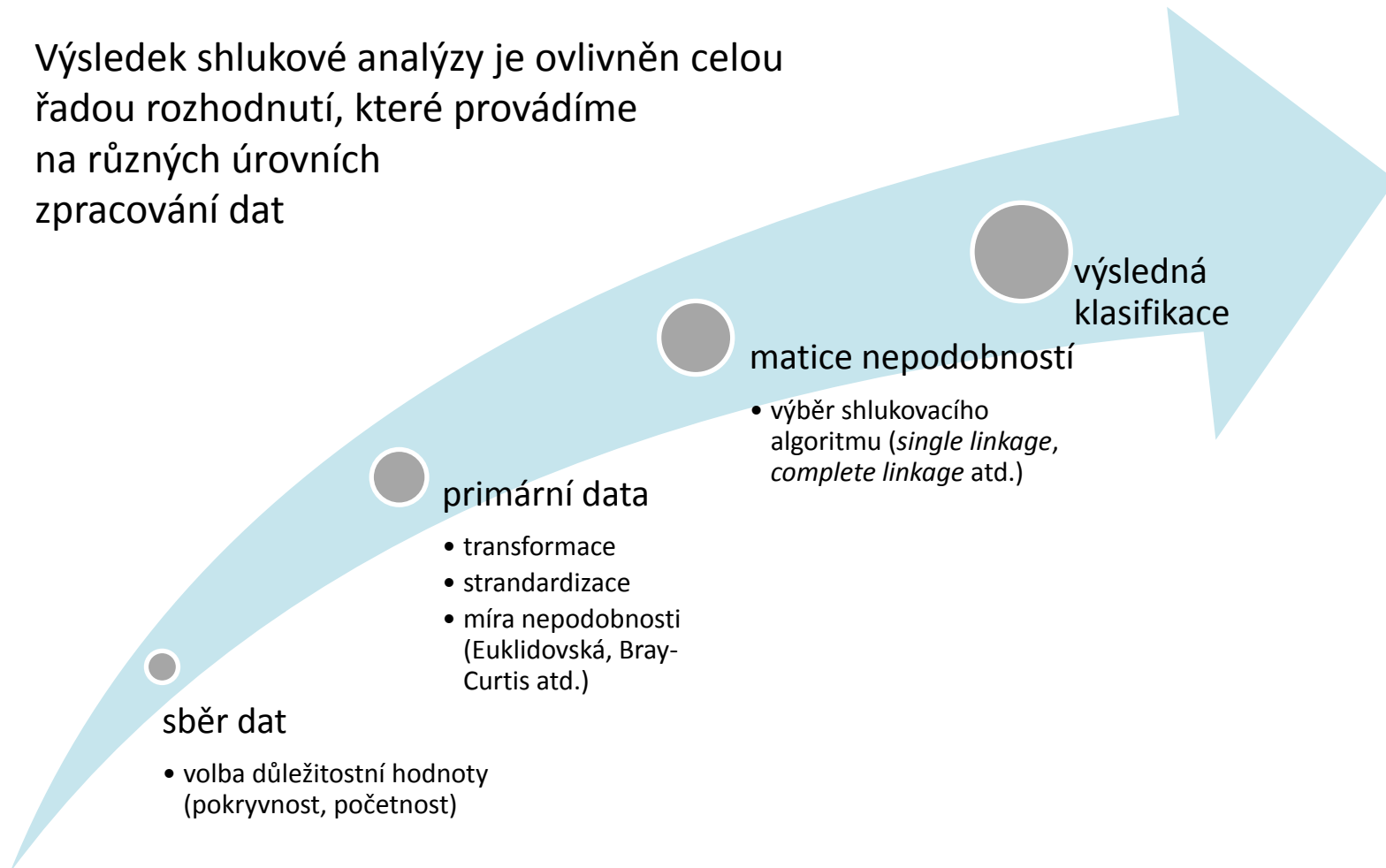
## HIERARCHICKÁ A AGLOMERATIVNÍ

### Shluková analýza (*cluster analysis*)

- hierarchická metoda
  - shluky jsou hierarchicky uspořádány
- aglomerativní metoda
  - shluky jsou tvořeny 'odspodu', tzn. postupným shlukováním jednotlivých vzorků do větších skupin
- základní volby:
  - míra nepodobnosti mezi vzorky (*distance measure*)
  - shlukovací (klastrovací) algoritmus (*clustering algorithm*)

# SHLUKOVÁ ANALÝZA (*CLUSTER ANALYSIS*)

Výsledek shlukové analýzy je ovlivněn celou řadou rozhodnutí, které provádíme na různých úrovních zpracování dat



# SHLUKOVÁ ANALÝZA (*CLUSTER ANALYSIS*)

## SHLUKOVACÍ ALGORITMY

### Metoda jednospojčná (*single linkage*)

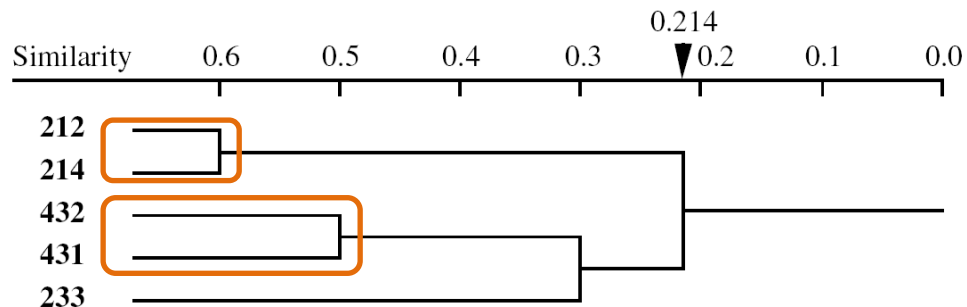
Ponds	Ponds				
	212	214	233	431	432
212	—				
214	0.600	—			
233	0.000	0.071	—		
431	0.000	0.063	0.300	—	
432	0.000	0.214	0.200	0.500	—

matice podobností

páry vzorků seřazené podle podobnosti

$S_{20}$	Pairs formed
0.600	212-214
0.500	431-432
0.300	233-431
0.214	214-432
0.200	233-432
0.071	214-233
0.063	214-431
0.000	212-233
0.000	212-431
0.000	212-432

Legendre & Legendre 1998



výsledný dendrogram

# SHLUKOVÁ ANALÝZA (*CLUSTER ANALYSIS*)

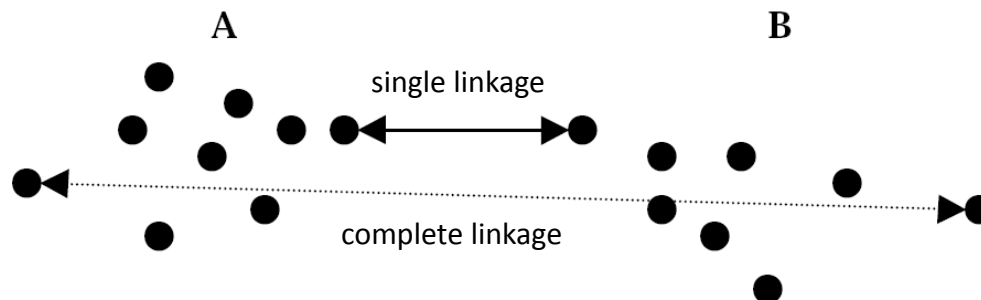
## SHLUKOVACÍ ALGORITMY

### Metoda jednospojná (*single linkage, nearest neighbour*)

- vzorky se pojí ke shluku, ve kterém je jim nejpodobnější vzorek
- *přidám se ke skupině, ve které je ten, kdo je mí nejvíc sympatický*

### Metoda všespojná (*complete linkage, farthest neighbour*)

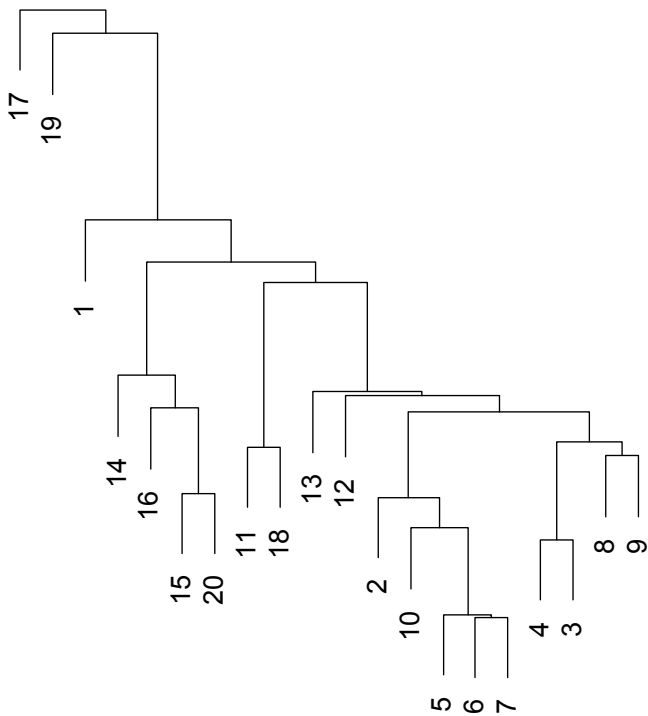
- vzorky se připojí ke shluku až v okamžiku, kdy shluk obsahuje všechny podobné vzorky
- *zjistím nejnesympatičtější jedince ve všech skupinách a přidám se ke skupině ve které je ten nejmíň nesympatický*



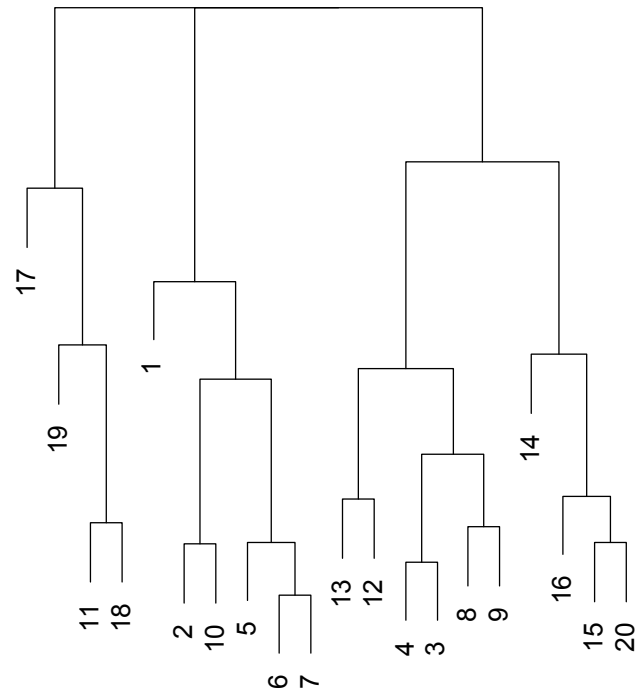


# METODA JEDNOSPOJNÁ VS VŠESPOJNÁ

Bray-Curtis distance / Single linkage



Bray-Curtis distance / Complete linkage



metoda jednospojná se výrazně řetězí



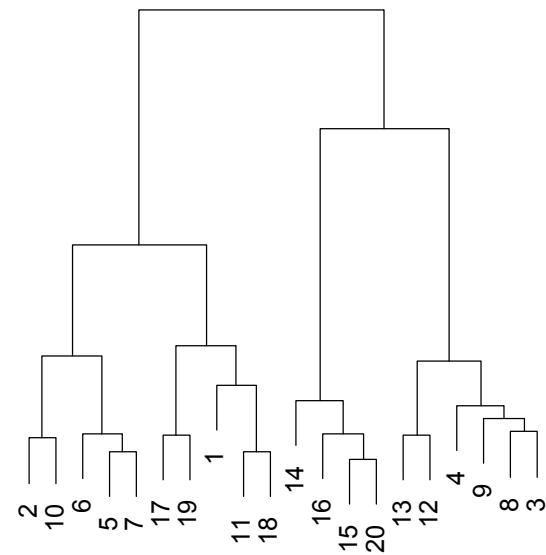
# SHLUKOVÁ ANALÝZA (*CLUSTER ANALYSIS*)

## SHLUKOVACÍ ALGORITMY

### Wardova metoda (*Ward's minimum variance method*)

- minimalizuje součet čtverců vzdáleností mezi vzorky a centroidy jejich shluků
- jsou spojovány ty shluky (vzorky) jejichž shluknutí povede k nejmenšímu nárůstu součtu čtverců vnitroshlukových vzdáleností
- výsledné shluky mají tendenci být hypersférické a zhruba stejné velikosti
- neměla by se kombinovat se Sørensenovým (Bray-Curtis) indexem nepodobnosti, možno pouze s metrickými distencemi

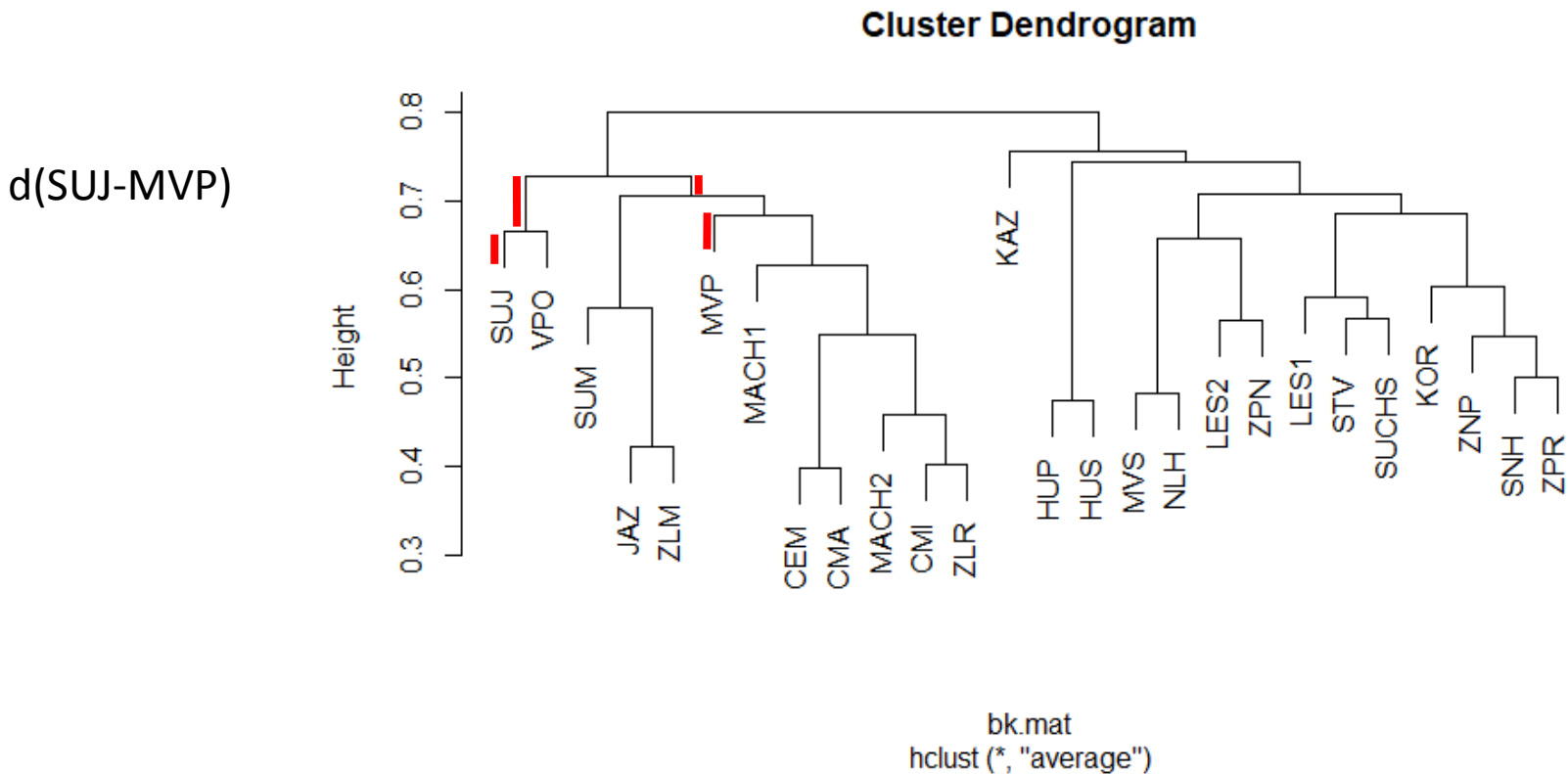
Euclidean distance / Ward's method



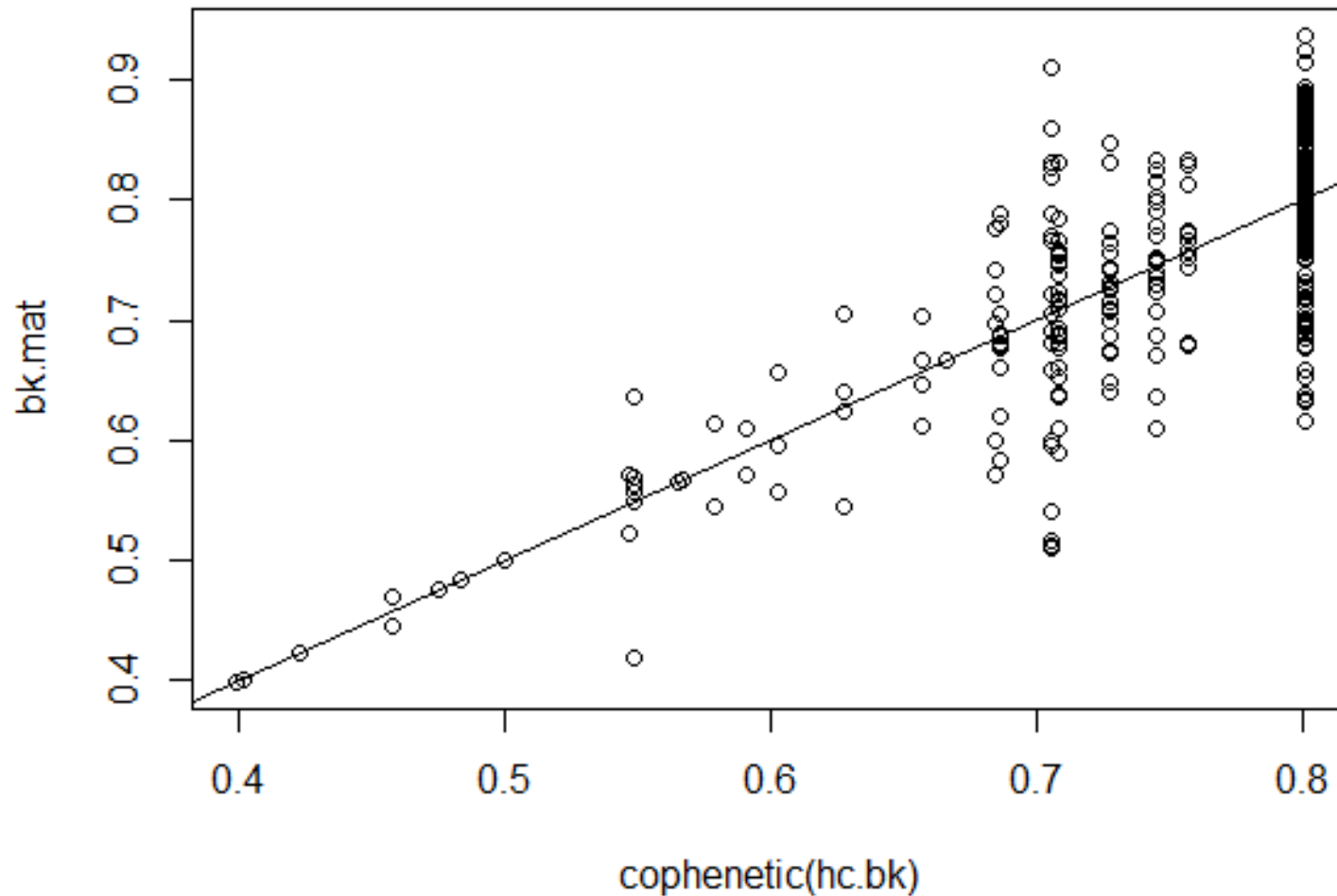


# KOFENETICKÁ VZDÁLENOST

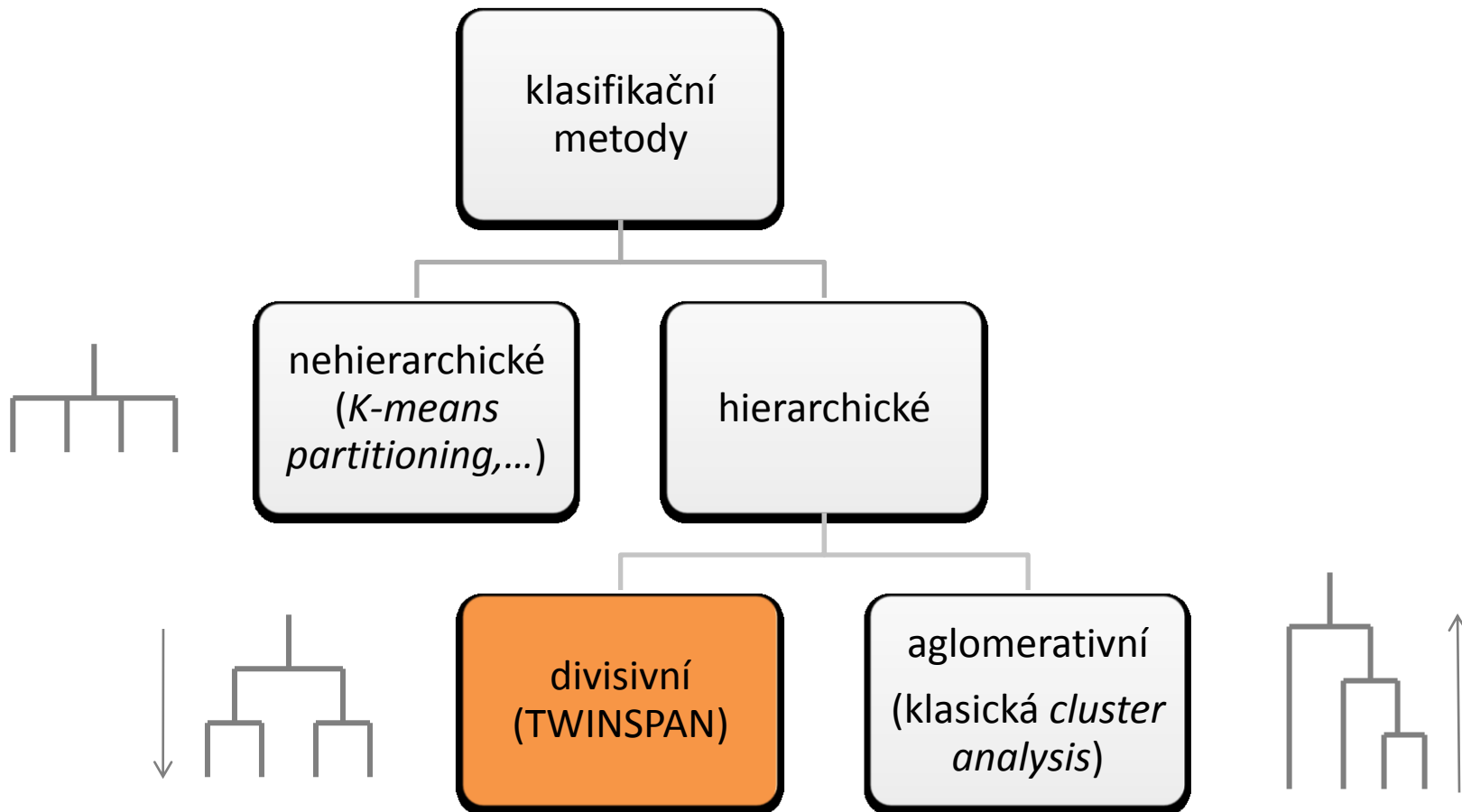
- Vzdálenost mezi dvěma vzorky definovaná jako nepodobnost v rámci skupiny v níž jsou dva vzorky spojené do jednoho klastru



# VZTAH MEZI ORIGINÁLNÍ NEPODOBNOSTÍ A KOFENETICKOU VZDÁLENOSTÍ



# KLASIFIKACE



# TWINSPAN

## TWO WAY INDICATOR SPECIES ANALYSIS

- **divisivní metoda**
  - začíná dělením celého souboru vzorků a postupuje směrem dolů
  - skupina se dále nedělí, pokud je příliš malá, nebo bylo dosaženo dělení do požadované úrovně
- **polytetická metoda**
  - každé dělení závisí na **několika (indikačních) druzích** (x monotetická metoda – dělení ovlivňuje jediný druh)
- **metoda velmi oblíbená mezi vegetačními ekology**
  - ale – algoritmus je poměrně složitý, né zcela popsáný a s řadou arbitrárních kroků. Proto má také řadu zarytých odpůrců: "TWINSPAN too unstable and tricky: Better avoided." (Jari Oksanen)
- vzorky jsou uspořádány podle první osy korespondenční analýzy (CA, DCA) a podle ní jsou rozděleny do dvou shluků (vzorky s pozitivním skóre a negativním skóre)
- metoda ošetří vzorky, které leží blízko středu osy, a které tak mají velkou pravděpodobnost, že budou špatně klasifikovány

# TWINSPAN

## TWO WAY INDICATOR SPECIES ANALYSIS

- *pseudospecies*
  - metoda primárně funguje pro **kvalitativní** data
  - kvantitativní informace se dodává rozdělením druhů na *pseudospecies* podle relativní abundance (*cut levels*), např. 1, 5, 10, 20 %.

	Species	Sample 1	Sample 2
Original table	<i>Cirsium oleraceum</i>	0	1
	<i>Glechoma hederacea</i>	6	0
	<i>Juncus tenuis</i>	15	25
Table with pseudo-species used in TWINSPAN	Cirsoler1	0	1
	Glechede1	1	0
	Glechede2	1	0
	Junctenu1	1	1
	Junctenu2	1	1
	Junctenu3	1	1
	Junctenu4	0	1

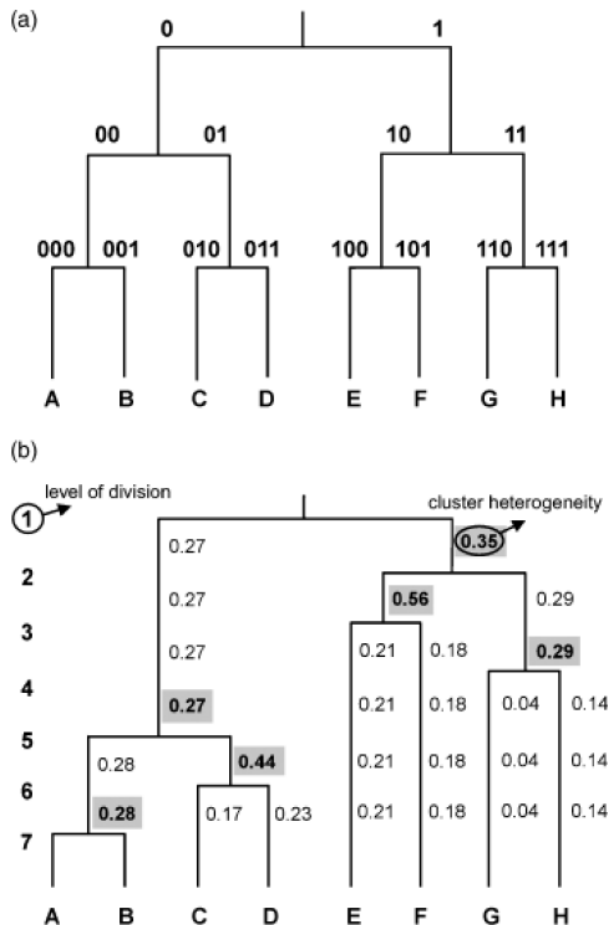
# TWINSPAN

## TWO WAY INDICATOR SPECIES ANALYSIS

- *pseudospecies*
  - metoda primárně funguje pro **kvalitativní** data
  - kvantitativní informace se dodává rozdělením druhů na *pseudospecies* podle relativní abundance (*cut levels*), např. 1, 5, 10, 20 %.
- výsledkem je (mimo jiné) tabulka podobná fytoecenologické
  - snímky z určitých klastrů a druhy s vysokou fidelitou k dané skupině jsou seskupeny dohromady
- metoda vhodná v případě, že jsou data strukturovaná podle jednoho výrazného gradientu
- vhodné na hledání (několika málo) ekologicky interpretovatelných skupin v datech



# MODIFIKOVANÝ TWINSPAN (ROLEČEK ET AL. 2009)

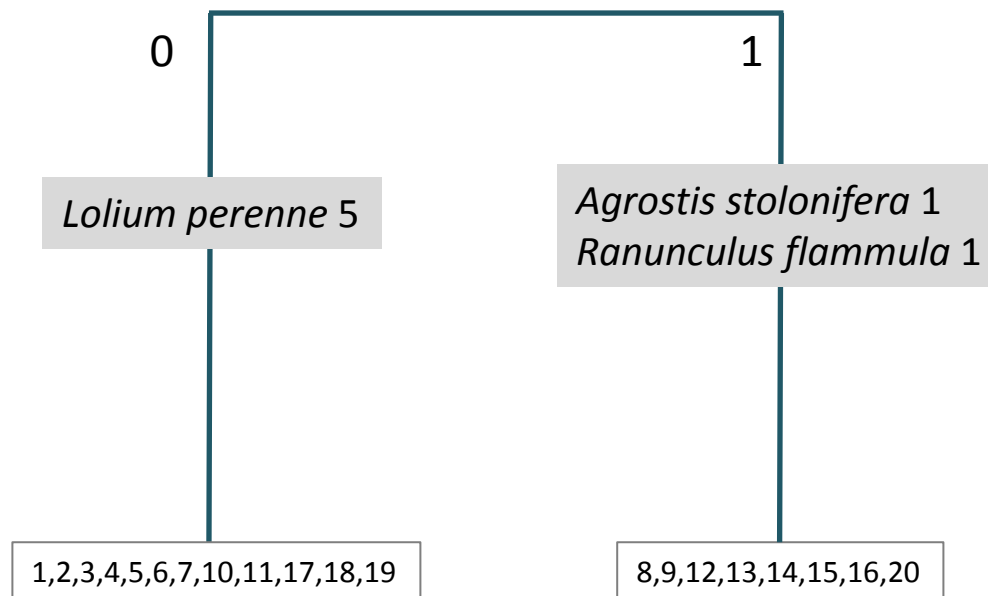


- na rozdíl od původního algoritmu (a) umožňuje modifikovaný TWINSpan (b) dopředu stanovit cílový počet skupin
- algoritmus se po každém dělení na dvě skupiny rozhoduje, kterou ze skupin bude dále dělit – vybere tu, která je více „heterogenní“ na základě její betadiverzity
- míru betadiverzity je nutné zvolit (např. Jaccardův index podobnosti)
- JUICE, R



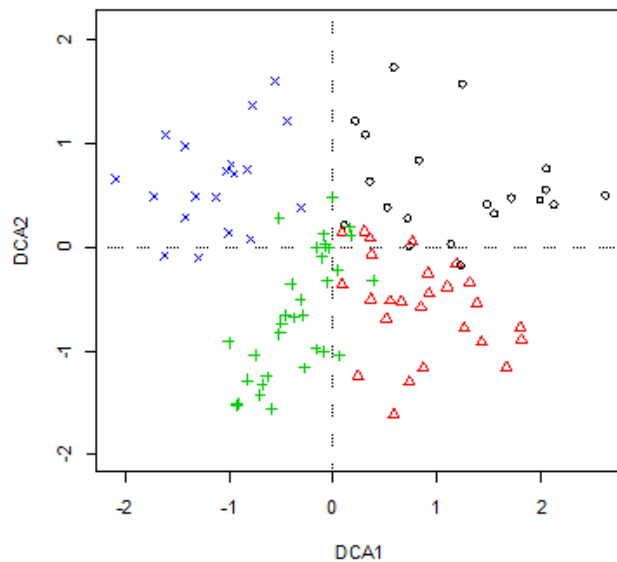
# TWINSPAN

- kde je to možné, dělení je doplněno indikátorovými druhy

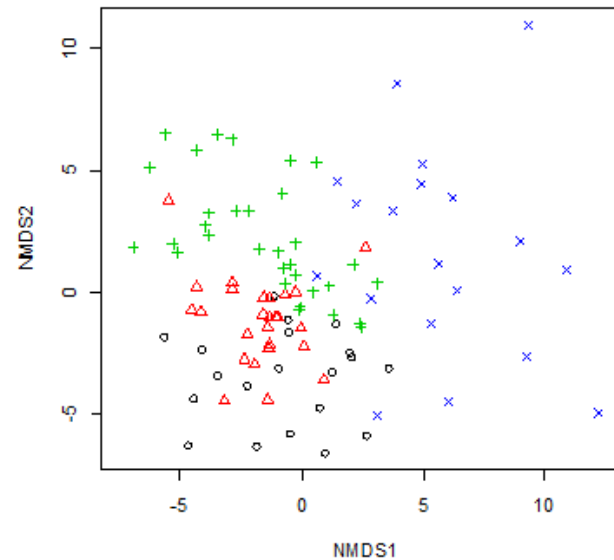


# PROMÍTNUTÍ VÝSLEDKŮ NUMERICKÉ KLASIFIKACE DO ORDINAČNÍHO DIAGRAMU

DCA + TWINSPAN



NMDS (Bray-Curtis) + TWINSPAN



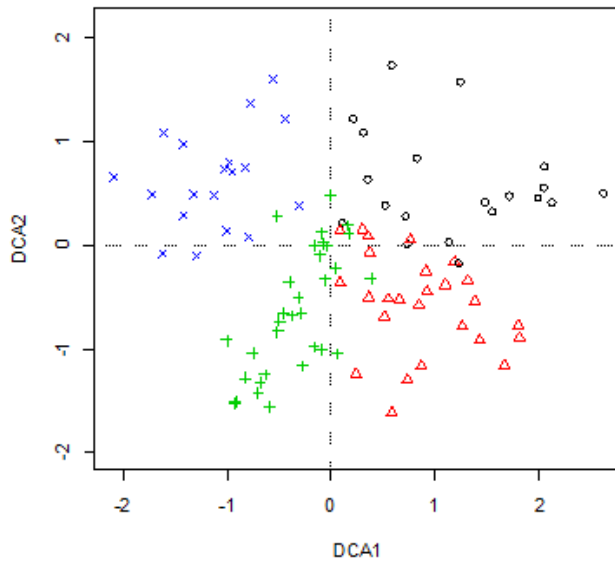
Je vhodné, aby míra nepodobnosti mezi vzorky byla v obou metodách (numerické klasifikaci i ordinační analýze) stejná (ze zvolených příkladů ten vlevo je vhodné řešení, vpravo nevhodné)

## INTERPRETACE VÝSLEDKŮ NUMERICKÉ KLASIFIKACE

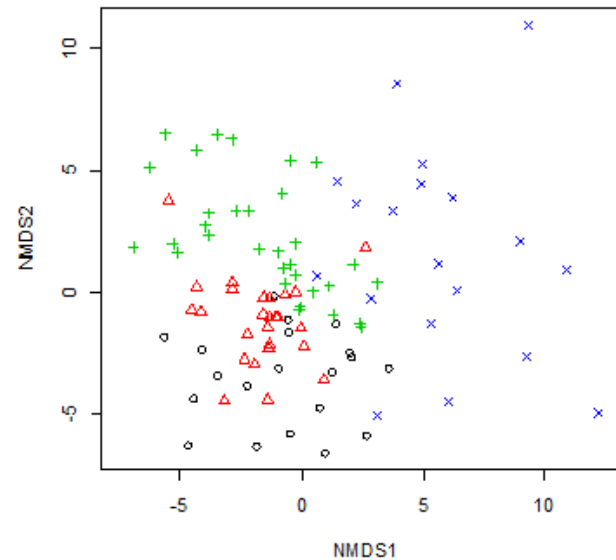
- promítnutí výsledků do ordinačního diagramu
- porovnání skupin na základě externích kritérií (např. měřených proměnných prostředí)
- porovnání skupin na základě druhového složení – stanovení charakteristických druhů

# PROMÍTNUTÍ VÝSLEDKŮ NUMERICKÉ KLASIFIKACE DO ORDINAČNÍHO DIAGRAMU

DCA + TWINSPAN



NMDS (Bray-Curtis) + TWINSPAN



Je vhodné, aby míra nepodobnosti mezi vzorky byla v obou metodách (numerické klasifikaci i ordinační analýze) stejná (ze zvolených příkladů ten vlevo je vhodné řešení, vpravo nevhodné)