

# Fenetický přístup

shluková analýza

ordinační metody

diskriminační analýza

# Stupnice

- **Nominální stupnice (*nominal scale*)**  
z matematických operátorů zde platí jen rovnost (=) nebo nerovnost ( $\neq$ )
- **Pořadová stupnice (*ordinal scale*)**  
kromě rovnosti a nerovnosti zde platí také operátory  $<$  a  $>$
- **Intervalová stupnice (*interval scale*)**  
kromě vlastností předcházejících dvou stupnic je zde možné také sčítání a odečítání (znaky mohou nabývat také hodnoty 0)
- **Poměrová stupnice (*ratio scale*)**  
dovoluje vyjádřit poměr mezi objekty (lze použít též operátor dělení)

# Klasifikace znaků

(1) kvalitativní (*qualitative*):

binární (*binary*, dvoustavové, dvouhodnotové,  
alternativní)

vícestavové (*multistate*, vícehodnotové)

(2) semikvantitativní (*semiquantitative*)

(3) kvantitativní (*quantitative*)

nespojité, diskrétní (*discontinuous, discrete,*  
*meristic*)

spojité, kontinuální (*continuous*)

Převedení čtyřstavového kvalitativního znaku do soustavy binárních znaků

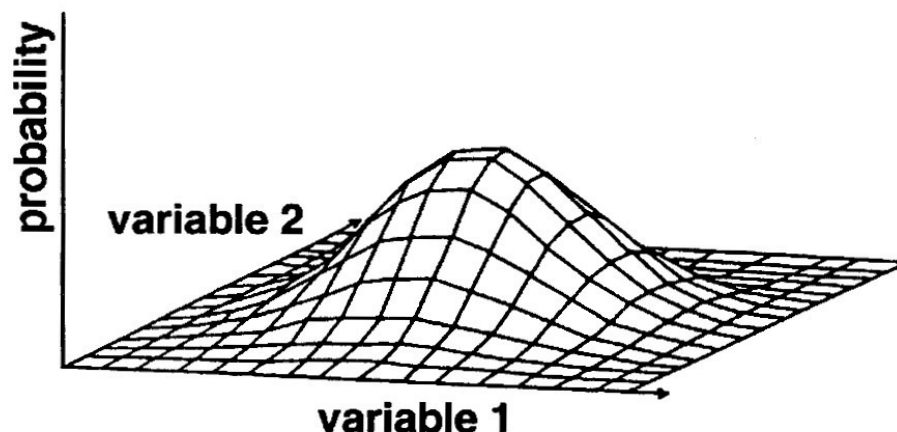
stavy kvalitativního znaku	umělé binární proměnné			
a	<b>1</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>0</b>
b	<b>0</b>	<b>1</b>	<b>0</b>	<b>0</b>
c	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>1</b>	<b>0</b>
d	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>1</b>

# Transformace dat

Některé mnohorozměrné metody nevyžadují **normální rozdělení dat**, případně jsou dostatečně robustní ve vztahu k odchýlkám od normálního rozdělení dat (např. shlukové analýzy, PCA ...)

Jiné metody mnohorozměrné normální rozdělení dat vyžadují (např. diskriminační analýza).

**Transformací** lze někdy rozdělení dat přiblížit k normálnímu rozdělení.



*Diagram hustoty pravděpodobnosti pro dvourozměrné normální rozdělení*

# Transformace dat

K **transformaci** se používají **konstanty** a **funkce nezávislé** na analyzovaných datech

**Lineární transformace** (např. násobení znaků konstantou) pokud se aplikují u všech znaků – výsledky analýzy se tím nemění; pokud se použijí jenom u jednoho nebo několika znaků, dochází tu k jejich vážení

**Nelineární transformace** mění strukturu dat

# Transformace dat

**Logaritmická transformace (*logarithmic transformation*):**  
**Naměřené hodnoty se nahrazují jejich logaritmem**

$$x'_{ij} = \log_c x_{ij}$$



**Protože logaritmus nuly není definován, připočítává se v takových případech ke každé naměřené hodnotě daného znaku konstanta 1 anebo 0,5.**

**Vzorec má potom tvar  $x'_{ij} = \log_c (x_{ij}+1)$**

# Transformace dat

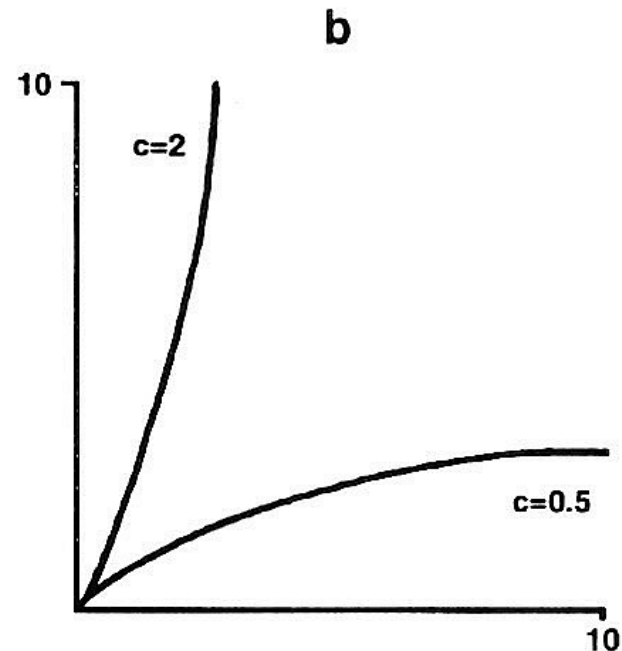
Odmocninová transformace (*square root transformation*)

obecně  $x'_{ij} = x^c_{ij}$

$c > 1$  zdůrazňují se vysoké číselné hodnoty – používá se zřídka

$c < 1$  vysoké číselné hodnoty se podhodnocují

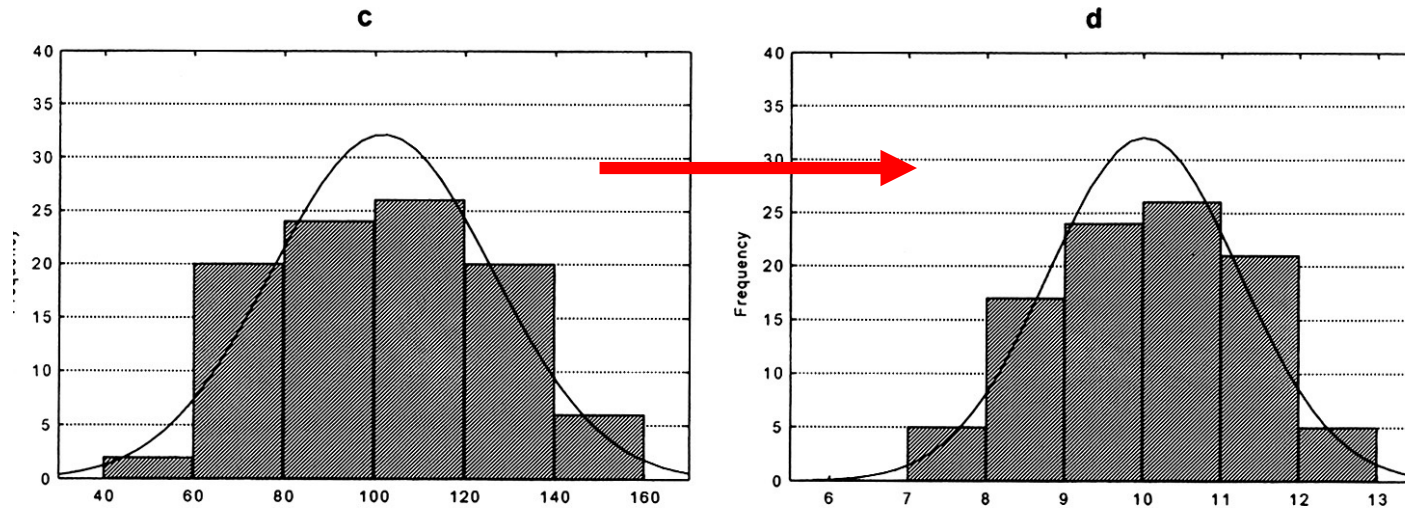
$c = 0.5$  - odmocninová transformace





# Transformace dat

## Odmocninová transformace (*square root transformation*)



Znaky nesmí dosahovat nulových hodnot, proto se někdy používá ve tvaru

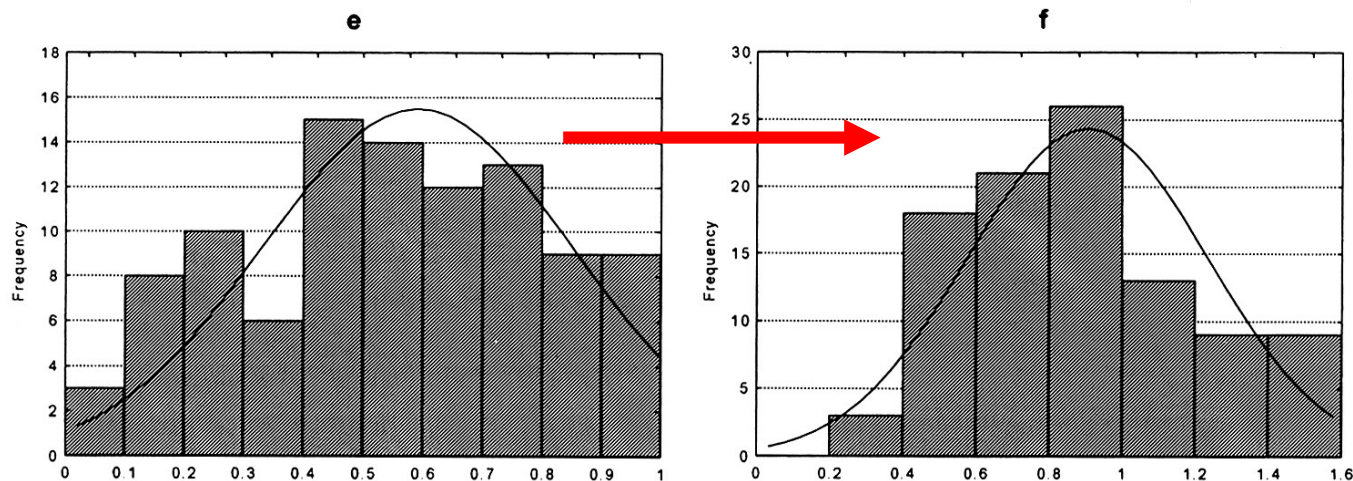
$$x'_{ij} = \sqrt{x_{ij} + 0.5}$$

# Transformace dat

## *Arkussinová transformace (Arc sin transformation)*

$$x'_{ij} = \arcsin x_{ij}$$

Používá se i v kombinaci s odmocninovou transformací;  
arkussinová transformace předpokládá, že data jsou  
měřená v intervalu  $\langle 0, 1 \rangle$   
pokud tomu tak není, je možné naměřené hodnoty  
vydělit konstantami 10, 100, 1000, atd.



# Standardizace dat

Ke **standardizaci** se používají statistiky odvozené z analyzovaného souboru dat (rozpětí, směrodatná odchylka, průměr, maximum atd.)

Znaky se tímto postupem převádějí na stejné měřítko (jinými slovy přestává záležet na skutečném rozměru příslušného znaku)

**Centrování** (*centring*, standardizace na průměr rovný nule)

$$x'_{ij} = x_{ij} - \bar{x}_i$$

Centrování nemění jednotky, ve kterých jsou znaky měřené, mění se jen poloha nulového bodu v soustavě souřadnic.

**Standardizace rozpětím** (*standardization by range, ranging*)

$$x'_{ij} = \frac{x_{ij} - \min_j \{x_{ij}\}}{\max_j \{x_{ij}\} - \min_j \{x_{ij}\}}$$

Doporučuje se použít v případech, kdy jsou sice znaky měřeny ve stejném měřítku, ale mezi jejich hodnotami jsou velmi velké rozdíly, hodnoty znaků se převedou do intervalu [0,1]

# Standardizace dat

**Standardizace směrodatnou odchylkou** (*standardization by standard deviation*)

$$x'_{ij} = \frac{x_{ij} - \bar{x}_i}{s_i}$$

kde  $s_i$  je směrodatná odchylka znaku  $i$

doporučuje se použít v případech, kdy jsou znaky měřené v odlišných škálách a jednotkách

# Koeficienty vyjadřující vztahy mezi objekty nebo znaky (*resemblance coefficients*)

- (1) koeficienty vzdálenosti pro kvantitativní a binární znaky (*metric distances*)
- (2) koeficienty podobnosti pro binární znaky (*binary similarity coefficients*)
- (3) koeficienty pro smíšená data (*coefficients for mixed data*)
- (4) korelační koeficienty (*correlation coefficients*)

## Metriky (vzdálenosti)

Pokud koeficienty vzdálenosti splňují následující požadavky, považují se za **metriky** (metric):

(1) symetrie – pro vzdálenost dvou objektů  $(x, y)$  platí:

$$d(x,y) = d(y,x) \geq 0$$

(2) trojúhelníková (triangulární) nerovnost – pro vzdálenost třech objektů  $(x, y, z)$  platí:

$$d(x,y) \leq d(x,z) + d(y,z)$$

tj. vzdálenost dvou objektů je menší, nanejvýš rovna součtu jejich vzdáleností od objektu třetího;

(3) vzdálenost totožných objektů (a vzdálenost objektu od sebe samého) je 0:

$$d(x,y) = 0 \text{ v případě, že } x = y$$

(4) vzdálenost objektů, které nejsou totožné, je větší než 0 (je kladná):

$$d(x,y) > 0 \text{ v případě, že } x \neq y.$$

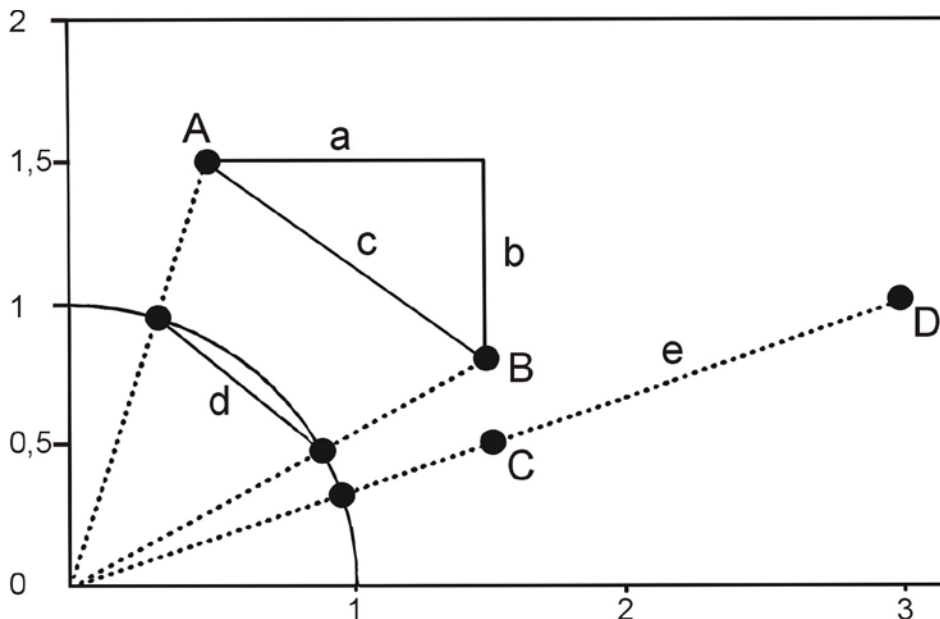
Pokud koeficienty vzdálenosti nespĺňují kritérium trojúhelníkové nerovnosti, považují se za pseudometriky (*pseudometric*, *semimetric*).

# Metriky (vzdálenosti)

**Euklidovská vzdálenost** (Euclidean distance):

$$EU=c \quad EU_{jk} = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_{ij} - x_{ik})^2}$$

kde  $x_{ij}$  je hodnota znaku  $i$  pro objekt  $j$ ,  $x_{ik}$  je hodnota znaku  $i$  pro objekt  $k$ ,  $n$  je celkový počet znaků



## Euklidovská vzdálenost je závislá na škále znaků

	Váha v librách	Výška v stopách	Výška v palcích
A	60	3,0	36,0
B	65	3,5	42,0
C	63	4,0	48,0

$$= (60 - 65)^2 + (3,0 - 3,5)^2 = 25.25 \quad [(60 - 65)^2 + (36,0 - 42,0)^2 = 61]$$

$$= (60 - 63)^2 + (3,0 - 4,0)^2 = 10.00 \quad [(60 - 63)^2 + (36,0 - 48,0)^2 = 153]$$

$$= (65 - 63)^2 + (3,5 - 4,0)^2 = 4.25 \quad [(65 - 63)^2 + (42,0 - 48,0)^2 = 40]$$



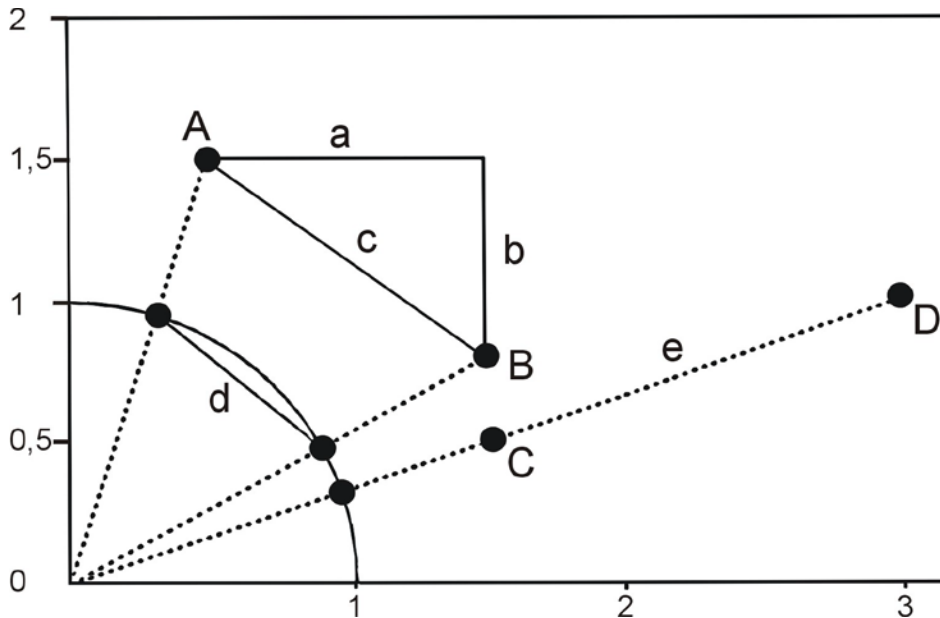
# Metriky (vzdálenosti)

Manhattanská (city block) metrika:

$$CB = a + b$$

$$CB_{jk} = \sum_{i=1}^n |x_{ij} - x_{ik}|$$

Připomíná severoamerická města s kolmými ulicemi, kde se musí chodit kolem bloků



Minkowského metrika:

$$MNK_{jk} = \sqrt[r]{\sum_{i=1}^n (x_{ij} - x_{ik})^r}$$

kde  $r \geq 1$ ;

pro  $r=1$  .... CB

Pro  $r=2$  ... EU

# Vzdálenosti

## Tětivová vzdálenost (*chord distance*)

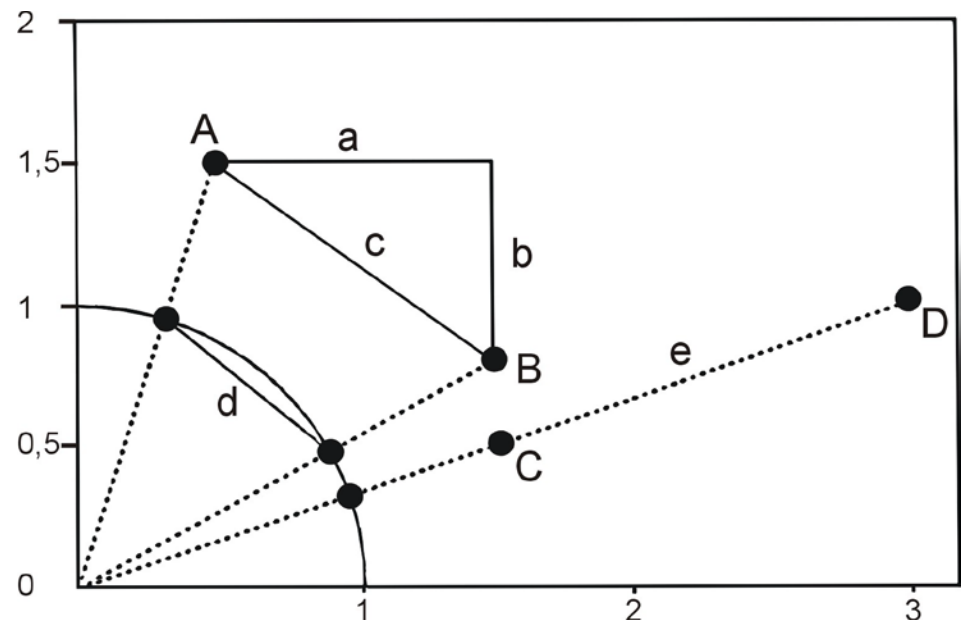
Pro dva znaky je tětivová vzdálenost přímoou vzdáleností mezi projekcí bodů na kružnici s jednotkovým poloměrem

$$CH=d$$

$$CH_{jk} = \left( 2 \left[ 1 - \frac{\sum_{i=1}^n x_{ij} x_{ik}}{\sqrt{\sum_{i=1}^n x_{ij}^2 \sum_{i=1}^n x_{ik}^2}} \right] \right)^{1/2}$$

Tětivová vzdálenost dosahuje stejných hodnot v případě, že dva nebo více objektů vykazují ve všech znacích proporčně těch samých hodnot, aniž by konkrétní hodnoty těchto znaků musely být u všech objektů stejné (vzdálenost bodů C a D).

Není pravou metrikou.



# Koeficienty podobnosti pro binární data

Jakákoliv funkce  $d$  je **nepodobností** pokud odpovídá alespoň prvním třem pravidlům o metrikách

(pokud  $j=k$ , pak  $d_{jk}=0$ ; pokud  $j \neq k$ , pak  $d_{jk} > 0$ ;  $d_{jk} = d_{kj}$ );

- většina funkcí nepodobnosti má dolní hranici = 0, horní hranici = 1:  $0 \leq d_{jk} \leq 1$
- většina funkcí nepodobnosti po transformaci  $(d_{jk})^{1/2}$  vyhovuje všem pravidlům o metrikách a pak představují **vzdálenosti**

obvykle uvažujeme o **podobnosti**:  $s_{jk} = 1 - d_{jk}$

pro identické objekty platí  $s_{jk} = 1$

# Koeficienty podobnosti pro binární data

Výběr koeficientu podobnosti

	objekt 2	
	1	0
objekt 1	$a$	$b$
	$c$	$d$

**a** – počet znaků, ve kterých mají oba objekty hodnotu + (resp. 1) (pozitivní shoda)

**b** – počet znaků, ve kterých má objekt  $i$  hodnotu – (resp. 0) a objekt  $j$  hodnotu + (resp. 1)

**c** – počet znaků, ve kterých má objekt  $i$  hodnotu + (resp. 1) a objekt  $j$  hodnotu – (resp. 0)

**d** – počet znaků, ve kterých mají oba objekty hodnotu – (resp. 0) (negativní shoda)

Volba mezi koeficienty závisí především na tom, jestli pro dané znaky má nebo nemá smysl **negativní shoda**, tj. zdali má nebo nemá smysl uvažovat, že nulová hodnota znaku má u porovnávaných objektů stejnou příčinu

# Koeficienty podobnosti pro binární data

**Koeficienty hodnotící  $a$  a  $d$  symetricky:**

**Koeficient jednoduché shody (*simple matching*):**

koeficient je blízký ED:

$$ED^2 = n(1 - SM)$$

$$n = a + b + c + d$$

$$ED = \sqrt{b + c}$$

$$SM = \frac{a + d}{a + b + c + d}$$

	object 2		
object 1		1	0
	1	$a$	$b$
	0	$c$	$d$

**Koeficient Rogerse a Tanimota:**

neshody jsou vážené dva krát;

hodnoty vždy nižší než u SM, s výjimkou  $b+c=0$

$$RT = \frac{a + d}{a + 2b + 2c + d}$$

**Hamannův index:**

rozpětí  $[-1, 1]$

$$HAM = \frac{a + d - b - c}{a + d + b + c}$$

$$SM = \frac{HAM + 1}{2}$$

# Koeficienty podobnosti pro binární data

**Koeficienty hodnotící  $a$  a  $d$  asymetricky:**

$d$  se sice bere do úvahy,  $a$  a  $d$  se však neváží stejně

**Baroni-Urbani – Buser II:**

$$BB2 = \frac{\sqrt{ad} + a}{\sqrt{ad} + a + b + c}$$

modifikovaný  $SM$ ,  $d \rightarrow$  geometrický průměr  $a$  a  $d$   
rozpětí  $[0,1]$

**Baroni-Urbani – Buser I:**

$$BB1 = \frac{\sqrt{ad} + a - b - c}{\sqrt{ad} + a + b + c}$$

modifikovaný  $HAM$ ,  $d \rightarrow$  geometrický průměr  $a$  a  $d$   
rozpětí  $[0,1]$

**Russellův Raův koeficient:**

$$RR = \frac{a}{a + b + c + d}$$

zvýšení hodnoty  $d$  snižuje hodnotu nepodobnosti

	objekt 2		
objekt 1		1	0
	1	$a$	$b$
	0	$c$	$d$

# Koeficienty podobnosti pro binární data

**Koeficienty, které neberou do úvahy negativní shodu:**

**Jaccardův koeficient:**  $JAC = \frac{a}{a + b + c}$

rozpětí [0,1]

konverze  $d_{jk} = \sqrt{1 - s_{jk}}$

má za výsledek Euklidovskou vzdálenost

**Sorensenův koeficient:**  $SOR = \frac{2a}{2a + b + c}$

pozitivní shoda se váží dva krát

genetické vzdálenosti podle Nei & Li (1979), Link et al. (1995) využívané při NJ, PCoA odpovídají také tomuto typu koeficientů

**Nei & Li (1979):**

**Link et al. (1995):**

$$NL = 1 - \frac{2a}{2a + b + c}$$

$$L = \frac{b + c}{b + c + a}$$

	object 2		
object 1		1	0
	1	a	b
	0	c	d

## Koeficienty pro smíšená data

Do této kategorie patří Gowerův koeficient a vzdálenost pro smíšená data. Používají se v případech, kdy jsou v matici současně zastoupeny kvalitativní znaky a znaky kvantitativní nebo binární (případně všechny tři druhy znaků).

**Gowerův koeficient:**

$$GOW_{jk} = \frac{\sum_{k=1}^n w_{ijk} s_{ijk}}{\sum_{k=1}^n w_{ijk}}$$

$j, k$  – objekty charakterizované znakem  $k$ ,  
 $n$  – celkový počet znaků,  
 $s_{ijk}$  – skóre znaku  $i$

a) pro binární znaky:

$w_{ijk} = 1$  a  $s_{ijk} = 0$  pokud  $x_{ij} \neq x_{ik}$  (hodnoty znaku  $i$  pro objekty  $j$  a  $k$ )

$w_{ijk} = s_{ijk} = 1$  pokud  $x_{ij} = x_{ik} = 1$  nebo pokud  $x_{ij} = x_{ik} = 0$  a negativní shoda se bere do úvahy (odpovídá koeficientu jednoduché shody)

$w_{ijk} = s_{ijk} = 0$  pokud  $x_{ij} = x_{ik} = 0$  a negativní shoda se nebere do úvahy (odpovídá Jaccardovu koeficientu)



# Koeficienty pro smíšená data

**Gowerův koeficient:**

$$GOW_{jk} = \frac{\sum_{k=1}^n w_{ijk} s_{ijk}}{\sum_{k=1}^n w_{ijk}}$$

$j, k$  – objekty charakterizované znakem  $k$ ,  
 $n$  – celkový počet znaků,  
 $s_{ijk}$  – skóre znaku  $i$

b) pro nominální znaky:

$w_{ijk} = 1$  pokud  $x_{ij}$  a  $x_{ik}$  jsou známé; pak

$s_{ijk} = 0$  pokud  $x_{ij} \neq x_{ik}$ ;  $s_{ijk} = 1$  pokud  $x_{ij} = x_{ik}$  (počet stavů se nebere do úvahy)

# Koeficienty pro smíšená data

**Gowerův koeficient:**

$$GOW_{jk} = \frac{\sum_{k=1}^n w_{ijk} s_{ijk}}{\sum_{k=1}^n w_{ijk}}$$

$j, k$  – objekty charakterizované znakem  $k$ ,

$n$  – celkový počet znaků,

$s_{ijk}$  – skóre znaku  $i$

c) pro kvantitativní znaky:

$w_{ijk} = 1$  pokud  $x_{ij}$  a  $x_{ik}$  jsou oba známé, a  $s_{ijk} = 1 - \{|x_{ij} - x_{ik}| / (\text{rozpětí znaku } i)\}$   
(odpovídá Manhattanové metrice s daty standardizovanými na rozpětí)

# Koeficienty pro smíšená data

příklad:

Taxon / znak	Větvení lodyhy	barva korunních lístků	charakter listů	průměrná výška rostliny (cm)	Průměrná délka korunních lístků (mm)
1	1	bílá (1)	jednoduché (1)	30	2,6
2	1	červená (2)	lichozpeřené (2)	25	2,3
3	0	modrá (3)	lichozpeřené (2)	10	8,5
4	0	modrá (3)	dlanitodílné (3)	80	8,2

$$GOW(1,2) = \frac{[1 \times 1] + [1 \times 0] + [1 \times 0] + \left[ 1 \times \left( 1 - \frac{|30 - 25|}{80 - 10} \right) \right] + \left[ 1 \times \left( 1 - \frac{|2.6 - 2.3|}{8.5 - 2.3} \right) \right]}{1 + 1 + 1 + 1 + 1} = 0.576$$

# Korelační koeficienty

## Pearsonův korelační koeficient

$n$  počet objektů,  
 $i$  hodnota znaku 1 pro objekt  $i$

$$r_{12} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{i2} - \bar{x}_2)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_{i1} - \bar{x}_1)^2 \sum_{i=1}^n (x_{i2} - \bar{x}_2)^2}}$$

lineární korelace, předpokládá normální rozdělení dat

## Spearmanův korelační koeficient (rank koeficient, koeficient pořadí):

$$r_{12} = 1 - \frac{6 \sum_{i=1}^n d_i^2}{n^3 - n}$$

do úvahy se neberou konkrétní hodnoty znaků ale pořadí objektů,  
kde  $d_i$  je rozdíl v pořadí mezi objekty;

Pearsonův korelační koeficient a Spearmanův korelační koeficient:  
rozpětí  $[-1, +1]$ ,  $+1$  přímá závislost,  $-1$  nepřímá závislost,  $0$  absence vztahu