2006年7月4日

問題発見技法

6. クラスタ分析

情報学部　堀田敬介

クラスタ分析

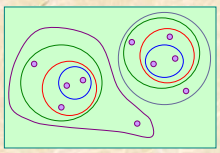
- Contents
  1. クラスタ分析概要
  2. 類似度の測定
  3. クラスタ間の近さの決定
  4. クラスタ分析の実施〔SPSS，手計算〕
  5. クラスター分析実施上の注意点
  6. 演習：やってみよう！

1. クラスタ分析概要

- クラスタ分析とは？
  - 複数の対象（もの，変数など）を，
    類似度（similarity）を定義し，
    均質な集団（cluster）に分類する
    方法の総称

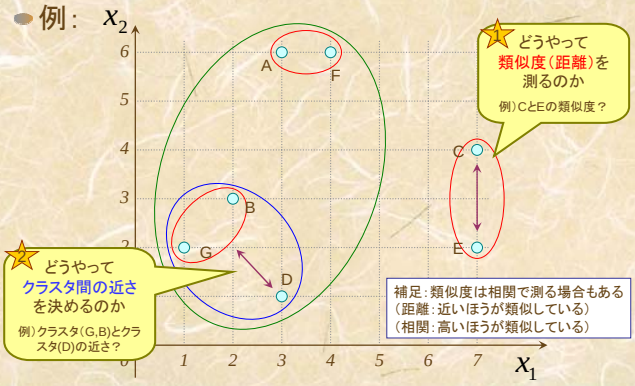
1. クラスタ分析概要

- クラスタ分析の種類
  - 階層的方法
    - 樹形図（デンドログラム）を作成
    - 目的により高さを決めてクラスタリング
  - 非階層的方法
    - 予めクラスタ数を決め（or決まっていて），クラスタリングを行う



1. クラスタ分析概要

- 例：



2. 類似度の測定

- 距離，間隔尺度
  - ユークリッド距離
  - ユークリッド平方距離
  - 重み付きユークリッド距離
  - マンハッタン距離
  - ミンコフスキー距離
  - マハラノビス汎距離
- 相関，間隔尺度
  - Pearsonの積率相関係数
  - ベクトル内積
- 相関，順序尺度
  - Spearmanの順位相関係数
  - Kendallの順位相関係数
- 距離，名義尺度 [0, 1]
  - 類似比
  - 一致係数
  - Russel-Rao係数
  - Rogers-Tanimoto係数
  - Hamann係数
  - ファイ係数
- 変量間類似度，名義尺度
  - 平均平方根一致係数
  - グッドマン・クラスカルの λ

2. 類似度の測定

- 尺度について

比率尺度 — 比に意味がある（絶対原点が存在）
例）身長　180cmのAさんは息子(100cm)の1.8倍背が高い

∩

間隔尺度 — 差に意味がある
例) 温度　気温20℃より30℃の方が10℃高い

∩

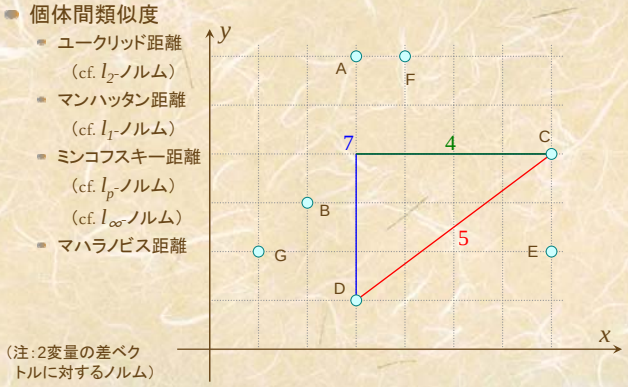
順序尺度 — 順序関係がある
例) 成績評価　（A > B > C > D）

∩

名義尺度 — 単なる分類
例)名前，性別

2. 類似度の測定

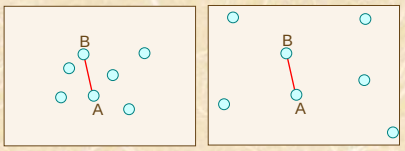
- 個体間類似度
  - ユークリッド距離
    （cf. l_2-ノルム）
  - マンハッタン距離
    （cf. l_1-ノルム）
  - ミンコフスキー距離
    （cf. l_p-ノルム）
    （cf. l_∞-ノルム）
  - マハラノビス距離



（注：2変量の差ベクトルに対するノルム）

2. 類似度の測定

- 個体間類似度
  - ユークリッド距離
    （cf. l_2-ノルム）
  - マンハッタン距離
    （cf. l_1-ノルム）
  - ミンコフスキー距離
    （cf. l_p-ノルム）
    （cf. l_∞-ノルム）
  - マハラノビス距離

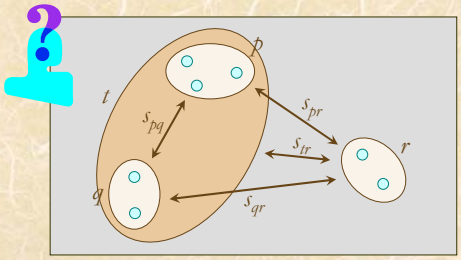


左側の対象内での，A-B間距離と
右側の対象内でのA-B間距離が
異なる！

（注：2変量の差ベクトルに対するノルム）

3. クラスタ化の方法の決定

- 新たなクラスタ生成時の近さの決定
  - クラスタp，クラスタq が一つのクラスタtになる場合，他のクラスタrとの類似度（距離）はどうなる？



(s_{pr}：クラスタp, rの類似度[距離])

3. クラスタ化の方法の決定

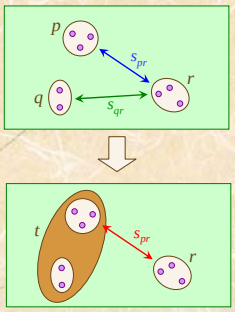
- クラスタ間の近さ決定方法
  （事前にクラスタ数を決める必要はない方法群）

1. 最短距離法 (nearest neighbor method)
2. 最長距離法 (furthest neighbor method)
3. 群平均法 (group average method)
4. 重心法 (centroid method)
5. 中央値法 (median method)
6. ウォード法 (Ward method)

3. クラスタ化の方法の決定

1. 最短距離法 (nearest neighbor method)
   〔単連結法 (single linkage method)〕

$$s_{tr} = \min\{s_{pr}, s_{qr}\}$$



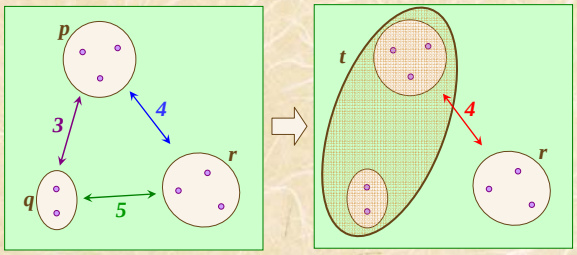
あるクラスタにおいて，クラスタ内の各対象が，そのクラスタ外の任意の対象よりも，そのクラスタ内の少なくとも1つの対象とより近接している．

※類似度は，対象間の類似度の大小関係だけで決まる．
よって，類似度（距離）は順序尺度ならばよい．

3. クラスタ化の方法の決定

1. 最短距離法

$$s_{tr} = \min\{s_{pr}, s_{qr}\}$$



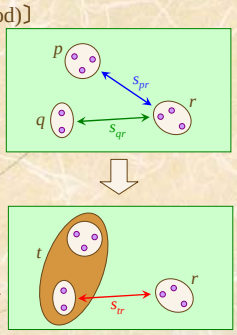
3. クラスタ化の方法の決定

2. 最長距離法 (furthest neighbor method)
〔完全連結法 (complete linkage method)〕

$$s_{tr} = \max\{s_{pr}, s_{qr}\}$$

あるクラスタにおいて，クラスタ内の全ての対象が，そのクラスタ外の任意の対象との距離よりも常に近接している．

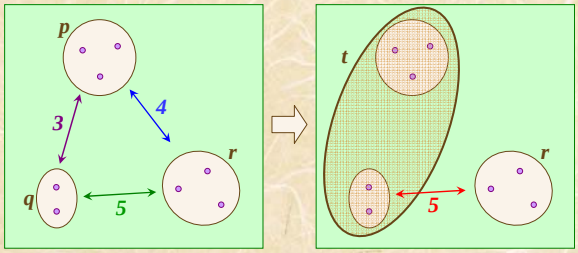
※類似度は，対象間の類似度の大小関係だけで決まる．
よって，類似度（距離）は順序尺度ならばよい．



3. クラスタ化の方法の決定

2. 最長距離法

$$s_{tr} = \max\{s_{pr}, s_{qr}\}$$



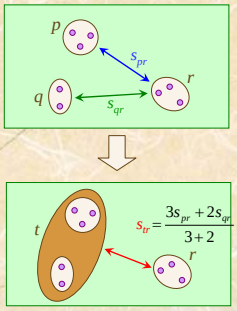
3. クラスタ化の方法の決定

3. 群平均法 (group average method)

$$s_{tr} = \frac{n_p s_{pr} + n_q s_{qr}}{n_p + n_q}$$

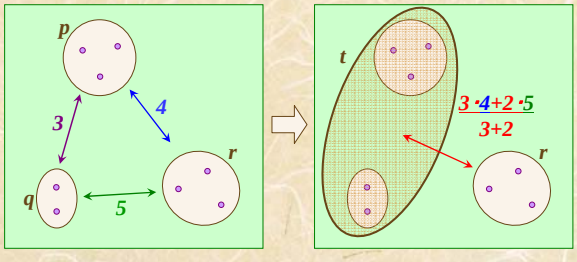
（n_p：クラスタ p に含まれる対象数）

※類似度は，対象間の類似度の大小関係だけで決まる．
よって，類似度（距離）は順序尺度ならばよい．



3. クラスタ化の方法の決定

3. 群平均法 $s_{tr} = \frac{n_p s_{pr} + n_q s_{qr}}{n_p + n_q}$



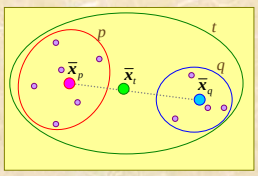
3. クラスタ化の方法の

4. 重心法 (centroid method)

$$s_{tr} = \frac{n_p}{n_p + n_q} s_{pr} + \frac{n_q}{n_p + n_q} s_{qr} - \frac{n_p n_q}{(n_p + n_q)^2} s_{pq}$$

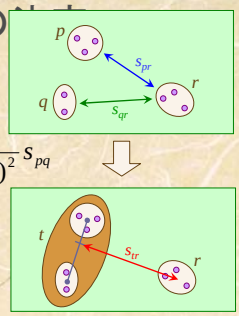
（n_p：クラスタ p に含まれる対象数）

※導出過程（tex-file参照）より，類似度s_{tr}は
ユークリッド距離の平方の時のみ妥当．



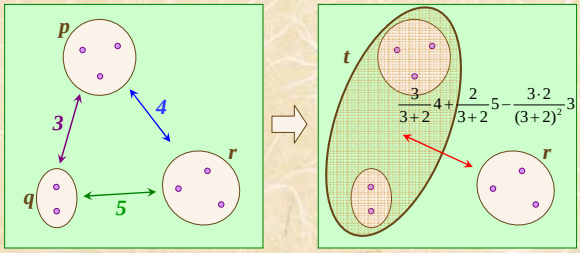
$$\bar{x}_t = \frac{n_p \bar{x}_p + n_q \bar{x}_q}{n_p + n_q}$$

※ xはベクトル



3. クラスタ化の方法の決定

4. 重心法 $s_{tr} = \frac{n_p}{n_p + n_q} s_{pr} + \frac{n_q}{n_p + n_q} s_{qr} - \frac{n_p n_q}{(n_p + n_q)^2} s_{pq}$



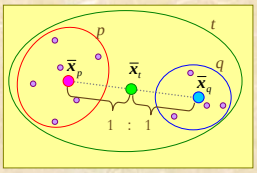
3. クラスタ化の方法の

5. 中央値法 (median method)

$s_{tr} = \frac{1}{2} s_{pr} + \frac{1}{2} s_{qr} - \frac{1}{4} s_{pq}$

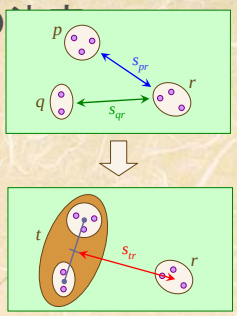
（重心法の簡易版，重心ではなく中央値を取る．
よって，重心法でn_p:=1, n_q:=1 に相当する）

※導出過程（重心法参照）より，類似度s_{tr}は
ユークリッド距離の平方の時のみ妥当．



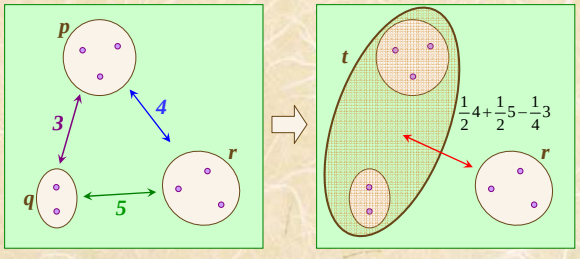
$\bar{x}_t = \frac{\bar{x}_p + \bar{x}_q}{2}$

※ xはベクトル



3. クラスタ化の方法の決定

5. 中央値法 $s_{tr} = \frac{1}{2} s_{pr} + \frac{1}{2} s_{qr} - \frac{1}{4} s_{pq}$

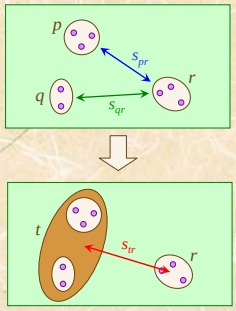


3. クラスタ化の方法の決定

6. ウォード法 (Ward method)

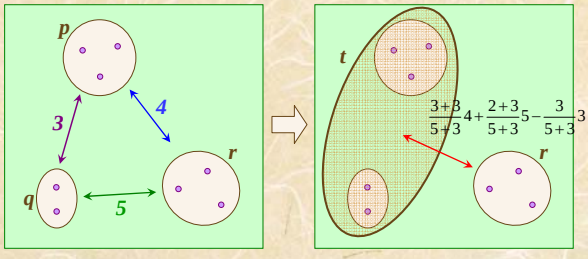
$s_{tr} = \frac{n_p + n_r}{n_t + n_r} s_{pr} + \frac{n_q + n_r}{n_t + n_r} s_{qr} - \frac{n_r}{n_t + n_r} s_{pq}$

※導出過程（tex-file参照）より，類似度s_{tr}は
ユークリッド距離の平方の時のみ妥当．



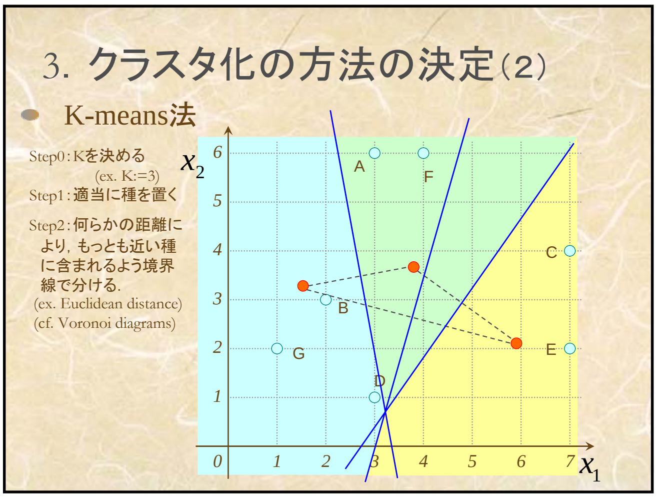
3. クラスタ化の方法の決定

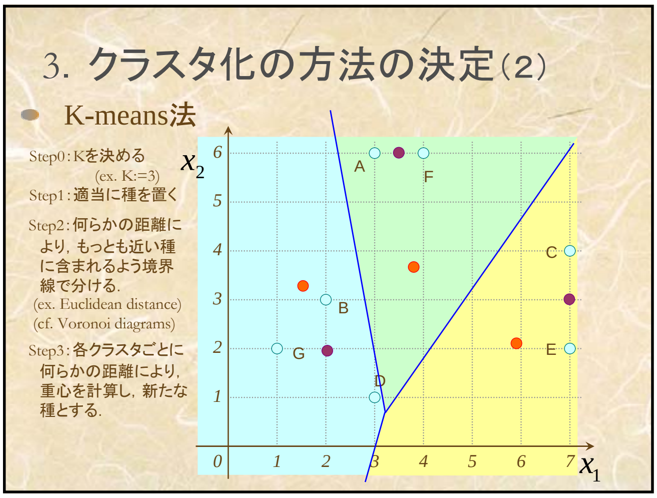
6. ウォード法 $s_{tr} = \frac{n_p + n_r}{n_t + n_r} s_{pr} + \frac{n_q + n_r}{n_t + n_r} s_{qr} - \frac{n_r}{n_t + n_r} s_{pq}$

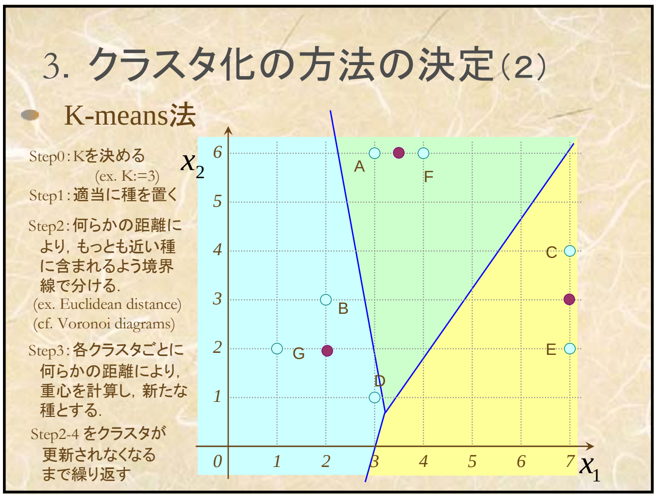


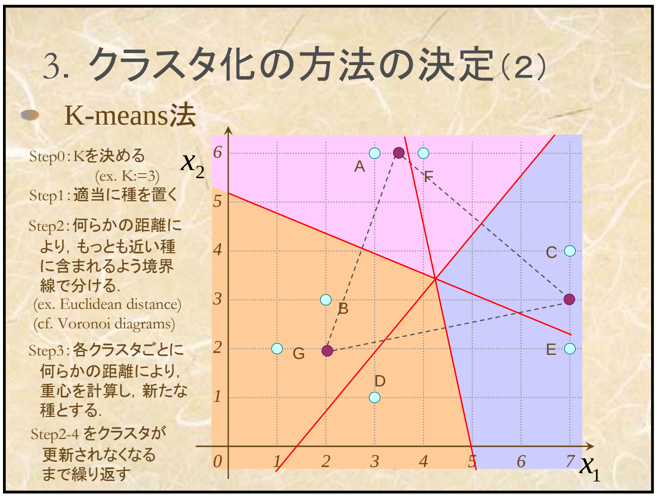
3. クラスタ化の方法の決定（2）

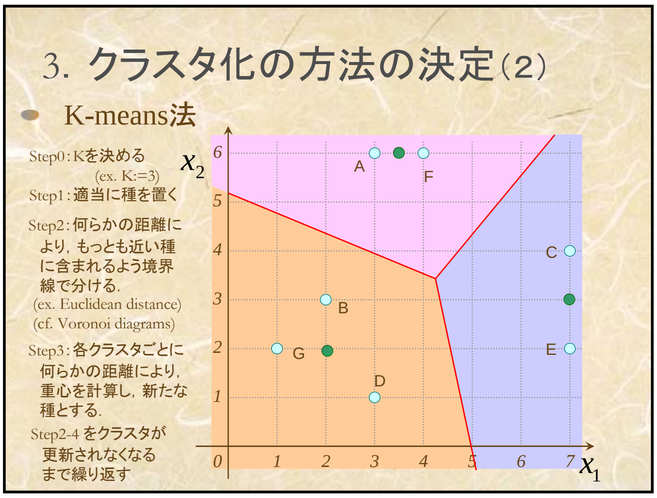
- クラスタ間の近さ決定方法（非階層的方法）
  - K-means法
    - 事前にクラスタ数をKとしてクラスタリングを行う．


3. クラスタ化の方法の決定(2)
K-means法
Step0:Kを決める
(ex. K:=3)
Step1:適当に種を置く
Step2:何らかの距離に
より，もっとも近い種
に含まれるよう境界
線で分ける.
(ex. Euclidean distance)
(cf. Voronoi diagrams)
x_2
x_1
A
B
C
D
E
F
G


3. クラスタ化の方法の決定(2)
K-means法
Step0:Kを決める
(ex. K:=3)
Step1:適当に種を置く
Step2:何らかの距離に
より，もっとも近い種
に含まれるよう境界
線で分ける.
(ex. Euclidean distance)
(cf. Voronoi diagrams)
Step3:各クラスタごとに
何らかの距離により，
重心を計算し，新たな
種とする.
x_2
x_1
A
B
C
D
E
F
G


3. クラスタ化の方法の決定(2)
K-means法
Step0:Kを決める
(ex. K:=3)
Step1:適当に種を置く
Step2:何らかの距離に
より，もっとも近い種
に含まれるよう境界
線で分ける.
(ex. Euclidean distance)
(cf. Voronoi diagrams)
Step3:各クラスタごとに
何らかの距離により，
重心を計算し，新たな
種とする.
Step2-4 をクラスタが
更新されなくなる
まで繰り返す
x_2
x_1
A
B
C
D
E
F
G

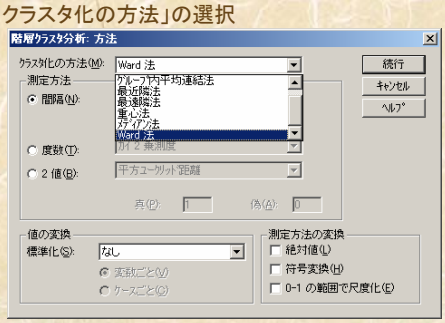

3. クラスタ化の方法の決定(2)
K-means法
Step0:Kを決める
(ex. K:=3)
Step1:適当に種を置く
Step2:何らかの距離に
より，もっとも近い種
に含まれるよう境界
線で分ける.
(ex. Euclidean distance)
(cf. Voronoi diagrams)
Step3:各クラスタごとに
何らかの距離により，
重心を計算し，新たな
種とする.
Step2-4 をクラスタが
更新されなくなる
まで繰り返す
x_2
x_1
A
B
C
D
E
F
G


3. クラスタ化の方法の決定(2)
K-means法
Step0:Kを決める
(ex. K:=3)
Step1:適当に種を置く
Step2:何らかの距離に
より，もっとも近い種
に含まれるよう境界
線で分ける.
(ex. Euclidean distance)
(cf. Voronoi diagrams)
Step3:各クラスタごとに
何らかの距離により，
重心を計算し，新たな
種とする.
Step2-4 をクラスタが
更新されなくなる
まで繰り返す
x_2
x_1
A
B
C
D
E
F
G


4. クラスタ分析の実施〔SPSS〕
統計パッケージ SPSS によるクラスタ分析
bcancer.sav - SPSS ﾃﾞｰﾀ ｴﾃﾞｨﾀ
分類(Y)
TwoStep クラスタ(T)...
大規模ファイルのクラスタ(K)...
階層クラスタ(H)...
判別分析(D)...

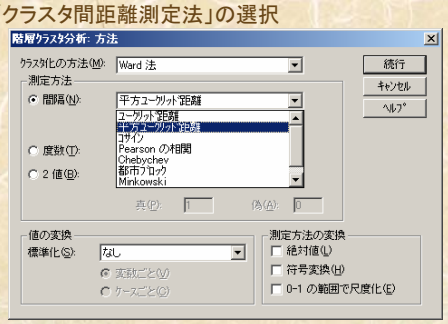
4. クラスタ分析の実施〔SPSS〕

- 統計パッケージ SPSS によるクラスタ分析
  - 「クラスタ化の方法」の選択



4. クラスタ分析の実施〔SPSS〕

- 統計パッケージ SPSS によるクラスタ分析
  - 「クラスタ間距離測定法」の選択



〔佐々木作成スライド(2003堀田研ゼミ)〕

4. クラスター分析の実施〔例題〕

ある部屋に次の8人(①～⑧)が図7－1の様に座った。
座り方は任意なので、似たもの同士、親しい同士ほど接近して座るものと思われる。座った位置のデータは表7－1である。
このデータをもとにして8人を分類しデンドログラムをつくる。

図7－1

表7－1

No	よこ座標	よこ座標
1	4	1
2	2	4
3	5	7
4	5	2
5	3	4
6	6	5
7	2	6
8	7	2

〔佐々木作成スライド(2003堀田研ゼミ)〕

8人相互間のユークリッド平方距離を表7－1から求める。

$$D_{ij} = \sum_{k=1}^{l} (x_{ki} - x_{kj})^2$$

図7－1

表7-2

	②	③	④	⑤	⑥	⑦	⑧
①	13	37	2	10	20	29	10
②		18	13	1	17	4	29
③			25	13	5	10	29
④				8	10	25	4
⑤					10	5	20
⑥						17	10
⑦							39

値が小さいほど類似性を表す

最短距離法で更新！！

〔佐々木作成スライド(2003堀田研ゼミ)〕

表7-3

	②2	③	④	⑥	⑦	⑧
①	10	37	2	20	29	10
②2		13	8	10	4	20
③			25	5	10	29
④				10	25	4
⑥					17	10
⑦						39

更新

表7-4

	②2	③	⑥	⑦	⑧
①2	8	25	10	25	4
②2		13	10	4	20
③			5	10	29
⑥				17	10
⑦					39

更新

表7-5

	②3	③	⑥
①3	8	25	10
②3		10	10
③			5

更新

表7-6

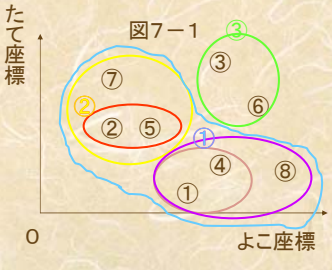
	②3	③2
①3	8	10
②3		10

更新

表7-7

	③2
①6	10

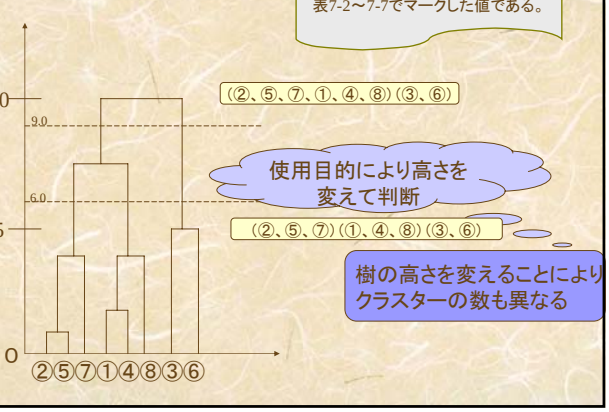
図7－1



〔佐々木作成スライド(2003堀田研ゼミ)〕

デンドログラム(樹形図)

各クラスターの非類似度は、表7-2～7-7でマークした値である。



5. クラスター分析実施上の注意点

- クラスター分析の長所
  - 探索的手法：データの構造を事前に知らなくてよい
  - あらゆる種類のデータに適用可能：数値・カテゴリー
  - 適用が簡単
- クラスター分析の短所
  - 類似度（距離）測定法の選択が困難の可能性
  - クラスタ化法の選択が困難の可能性
  - 非階層的手法の場合，事前に決定するクラスタ数の決定が困難の可能性
  - 結果の解釈が困難の可能性

6. やってみよう！

- 演習：類似度をユークリッド平方距離，クラスタ化を最短距離法でクラスタ分析しよう！

参考文献

- 田中豊ほか『多変量統計解析法』現代数学社
- 河口至商『多変量解析入門Ⅱ』森北出版
- 浅利英吉ほか『パソコンによるデータマイニング』日刊工業新聞社
- 東大教養学部統計学教室編『統計学入門』東京大学出版会
- M.J.A.ベリーほか『データマイニング手法』海文堂