

2010年6月29日(火)

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

- クラスタ分析

1. クラスタ分析概要
2. 類似度の測定
3. クラスタ化の方法の決定(類似度更新法)

- クラスタ分析[階層的方法]の実施

4. Excelで計算したクラスタ分析, Rによるクラスタ分析
5. クラスタ分析実施上の注意点

- クラスタ分析[非階層的方法]

6. 非階層的クラスタ分析[K-means法]
7. Rによるクラスタ分析[K-means法]

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, その**属性**によって**類似度(similarity)**をはかり, 均質な**集団(cluster)**に分類する方法の総称

どれとどれが似てる？
(同じクラスター？)

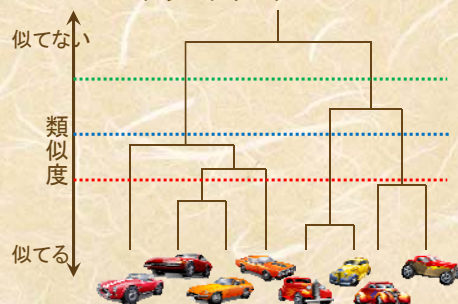


1. クラスタ分析概要

● クラスタ分析の種類

● 階層的な方法

- 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



● 非階層的な方法

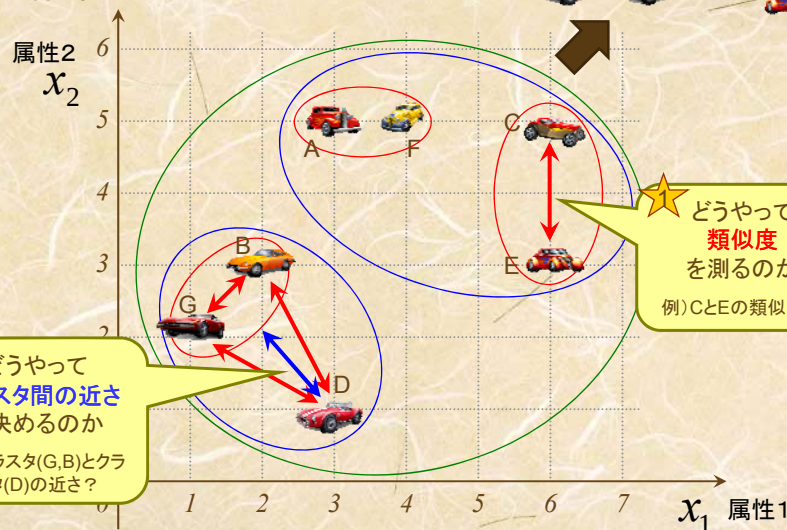
- 予めクラスタ数を決め (or決まっています), **クラスタリング**を行う



例: 3つのクラスターに分類

1. クラスタ分析概要

- 例: 階層的方法 (対象の属性が2つの場合)



2. 類似度の測定

類似度は尺度により距離や相関で測る
(距離: 近いほうが類似)
(相関: 高いほうが類似)

- 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 λ

データと尺度

データの種類	尺度の種類	特徴	例
量的データ (数値データ)	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
質的データ (カテゴリデータ)	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

厳密

曖昧

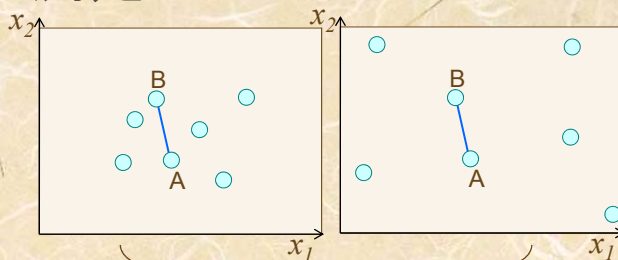
● 個体間類似度

-
- $l_2(C,D)^2 = 25 = (3-7)^2 + (1-4)^2$
- Points: A(3,7), B(2,3), C(7,4), D(3,1), E(7,1), F(4,7), G(1,2)
- Distances from D(3,1) to C(7,4):
- Horizontal distance: 4 (green)
 - Vertical distance: 7 (blue)
 - Euclidean distance: 8.6 (red)

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)
- マハラノビス汎距離



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! (ユークリッド距離などでは同じ)

マハラノビス汎距離 (2変量 x_1, x_2 版)

$$D = \sqrt{\frac{u_1^2 + u_2^2 - 2\rho u_1 u_2}{1 - \rho^2}}$$

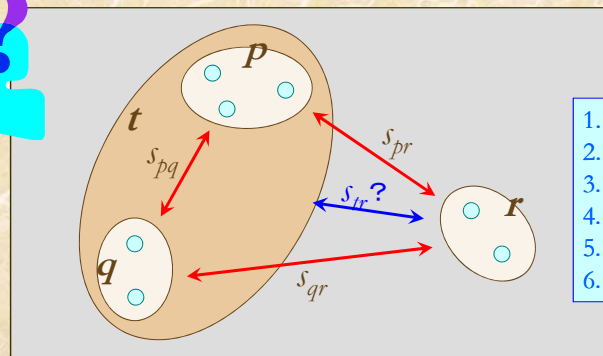
ただし, u_1, u_2 は x_1, x_2 の標準化変量で, $u_1 = \frac{x_1 - \mu_1}{\sigma_1}, u_2 = \frac{x_2 - \mu_2}{\sigma_2}$

また, μ_1, μ_2 はそれぞれ, 変量 x_1, x_2 の平均,
 σ_1, σ_2 は x_1, x_2 の標準偏差, ρ は x_1, x_2 の相関係数

3. クラスタ化の方法の決定

● 新たなクラスタ生成時の**類似度の更新方法**

- 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 との類似度をどう更新する?



1. 最短距離法
2. 最長距離法
3. 群平均法
4. 重心法
5. 中央値法
6. ウォード法

(s_{pr} : クラスタ p, r の類似度)

3. クラスタ化の方法の決定

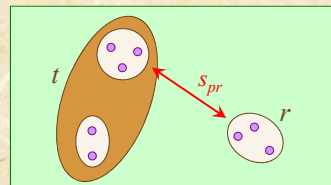
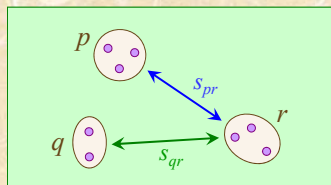
1. 最短距離法 (nearest neighbor method)

[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。

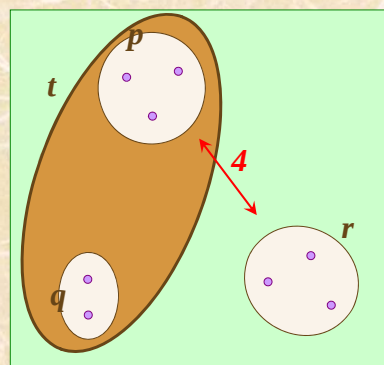
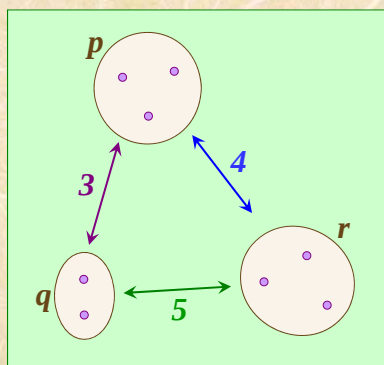
※類似度は、対象間の類似度の大小関係だけで決まる。よって、類似度(距離)は順序尺度ならばよい。



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

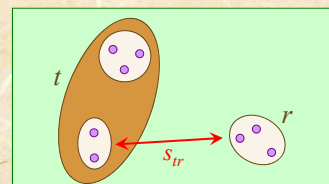
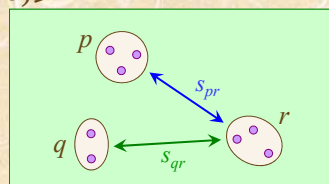
2. 最長距離法 (furthest neighbor method)

[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。

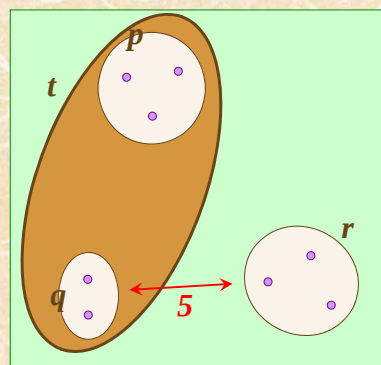
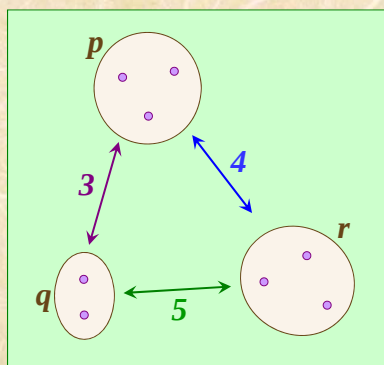
※類似度は、対象間の類似度の大小関係だけで決まる。
よって、類似度(距離)は**順序尺度**ならばよい。



3. クラスタ化の方法の決定

2. 最長距離法

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



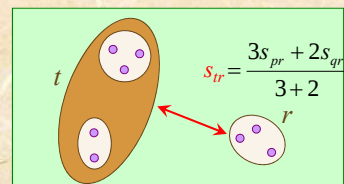
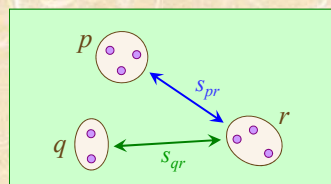
3. クラスタ化の方法の決定

3. 群平均法 (group average method)

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

n_p : クラスタ p に含まれる対象数
 n_q : クラスタ q に含まれる対象数

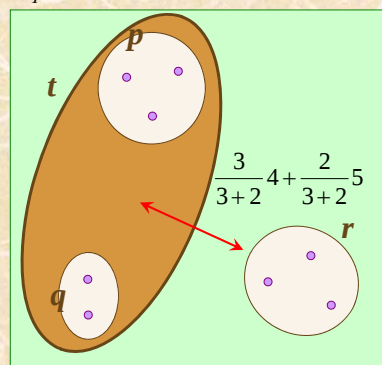
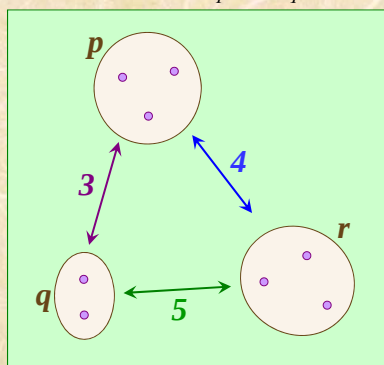
※類似度は, 間隔尺度ならばOK



3. クラスタ化の方法の決定

3. 群平均法

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



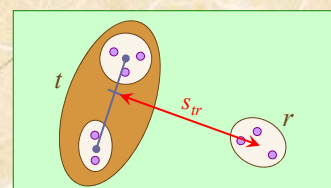
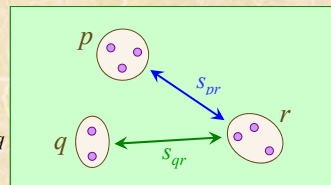
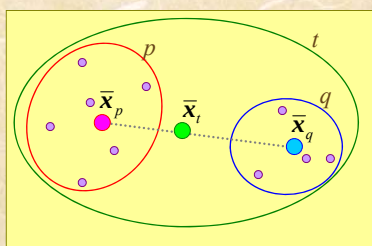
3. クラスタ化の方法の決定

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
 n_q : クラスタ q に含まれる対象数

※導出過程より, 類似度 S_{tr} はユークリッド平方距離の時のみ妥当. → cf. ファイル「クラスタ分析ノート.pdf」

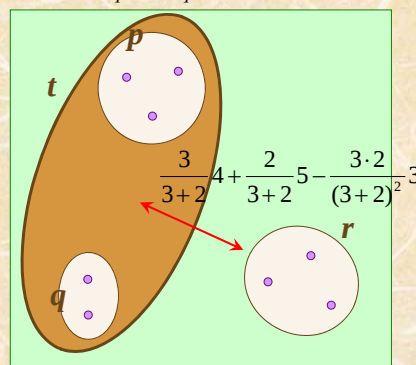
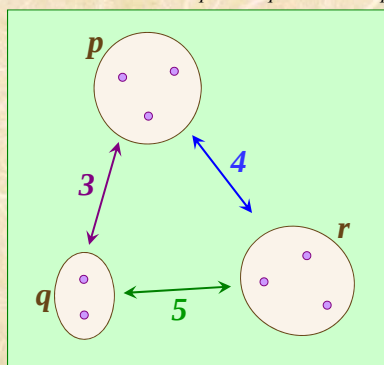


$$\bar{x}_t = \frac{n_p \bar{x}_p + n_q \bar{x}_q}{n_p + n_q} \quad \text{※ } \mathbf{x} \text{ はベクトル}$$

3. クラスタ化の方法の決定

4. 重心法

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



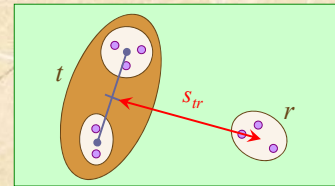
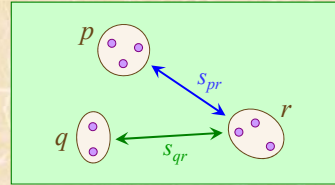
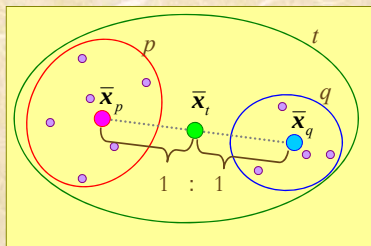
3. クラスタ化の方法の決定

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, 重心の代わりに中央値を取る
重心法で $n_p:=1, n_q:=1$ に相当)

※導出過程より, 類似度 s_{tr} はユークリッド平方距離の時のみ妥当. → cf.ファイル「クラスタ分析ノート.pdf」



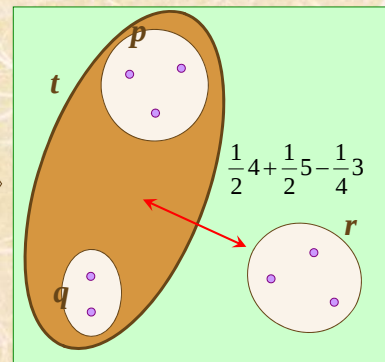
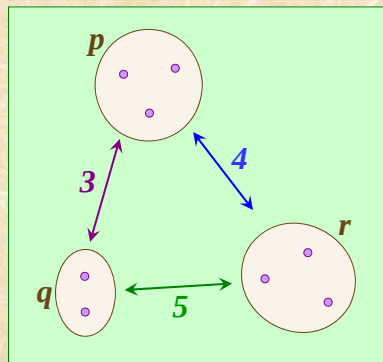
$$\bar{x}_t = \frac{\bar{x}_p + \bar{x}_q}{2}$$

※ xはベクトル

3. クラスタ化の方法の決定

5. 中央値法

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

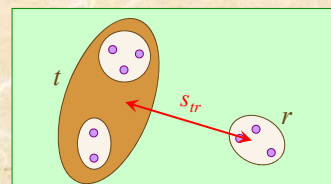
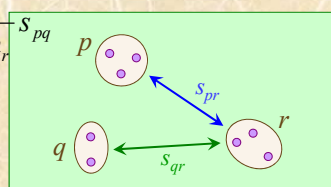


3. クラスタ化の方法の決定

6. ウォード法 (Ward method)

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

n_p : クラスタ p に含まれる対象数
 n_q : クラスタ q に含まれる対象数
 n_r : クラスタ r に含まれる対象数

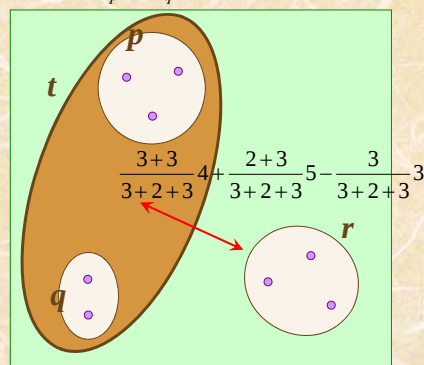
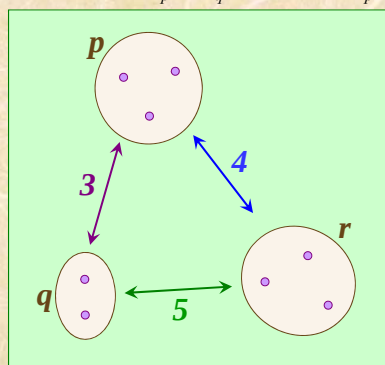


※導出過程より, 類似度 S_{tr} は
 ユークリッド平方距離の時のみ妥当.
 → cf.ファイル「クラスタ分析ノート.pdf」

3. クラスタ化の方法の決定

6. ウォード法

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



4. クラスタ分析の実施

● Excelを用いて計算するクラスタ分析: 例

- 対象: 5人の学生
- 対象の属性: 7つ

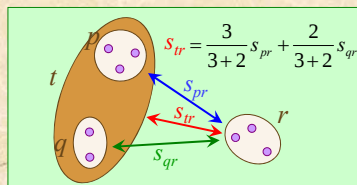
	属性1	属性2	属性3	属性4	属性5	属性6	属性7
太郎	13	12	7	1	13	13	12
次郎	6	5	8	4	9	5	15
三郎	13	14	5	15	2	19	17
四郎	13	5	8	7	9	3	13
五郎	1	18	6	1	3	1	20

- 距離: ユークリッド平方距離

$$l_2(\text{Taro}, \text{Jiro})^2 = (13-6)^2 + (12-5)^2 + \dots + (12-15)^2$$

- クラスタ間の類似度更新方法: 群平均法

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



4. クラスタ分析の実施

● Excelで計算によるクラスタ分析: 例

	属性1	属性2	属性3	属性4	属性5	属性6	属性7
太郎	13	12	7	1	13	13	12
次郎	6	5	8	4	9	5	15
三郎	13	14	5	15	2	19	17
四郎	13	5	8	7	9	3	13
五郎	1	18	6	1	3	1	20



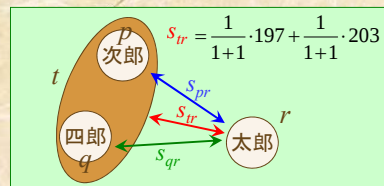
類似度の測定: ユークリッド平方距離による

太郎	次郎	三郎	四郎
次郎	197		
三郎	386	509	
四郎	203	66	475
五郎	489	234	691



類似度の更新: 群平均法による

太郎	次&四	三郎
次&四	200	
三郎	386	492
五郎	489	363



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

4. クラスタ分析の実施

- Excelで計算によるクラスタ分析: 例

	太郎	次&四	三郎
次&四	200		
三郎	386	492	
五郎	489	363	691

↓ 類似度の更新: 群平均法による

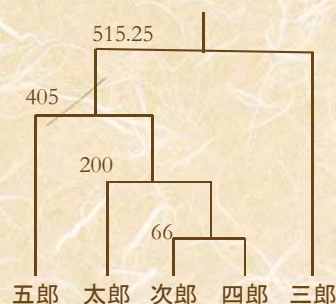
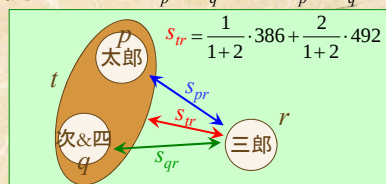
	太&(次&四)	三郎
三郎	456.67	
五郎	405	691

	太&(次&四)	三郎
三郎	456.67	
五郎	405	691

↓ 類似度の更新: 群平均法による

	五&(太&(次&四))
三郎	515.25

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

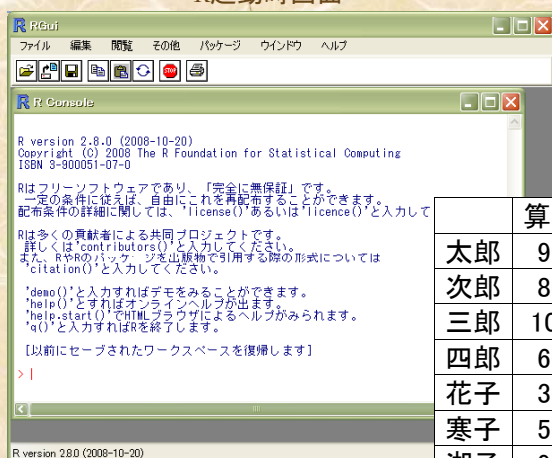


樹形図(デンドログラム)

4. クラスタ分析の実施

- Rによるクラスタ分析: 1. 起動画面とデータファイル

R起動画面



データをcsvファイルで
用意
(Excelやeditorで作成)

ファイル「data-seiseki.csv」

	算数	理科	国語	英語	社会
太郎	90	100	70	90	30
次郎	80	60	70	70	20
三郎	100	40	30	70	80
四郎	60	30	40	80	80
花子	30	60	80	90	90
寒子	50	60	40	30	60
湘子	90	100	90	80	70

4. クラスタ分析の実施

● Rによるクラスタ分析:2. クラスタ分析の実施例

```

> seiseki <- read.csv("C:/data-seiseki.csv", header=T, row.names=1)
> seiseki
  算数 理科 国語 英語 社会
太郎  90 100  70  90  30
次郎  80  60  70  70  20
三郎 100  40  30  70  80
四郎  60  30  40  80  80
花子  30  60  80  90  90
寒子  50  60  40  30  60
湘子  90 100  90  80  70

> seiseki.d <- dist(seiseki, "manhattan")
> seiseki.d
  太郎 次郎 三郎 四郎 花子 寒子
次郎  80
三郎 180 140
四郎 190 150  70
花子 170 150 170 120
寒子 200 140 140 110 150
湘子  70 130 150 160 140 190

> (seiseki.hc <- hclust(seiseki.d, "ward"))

Call:
hclust(d = seiseki.d, method = "ward")

Cluster method : ward
Distance       : manhattan
Number of objects: 7

> plot(seiseki.hc, hang=-1)

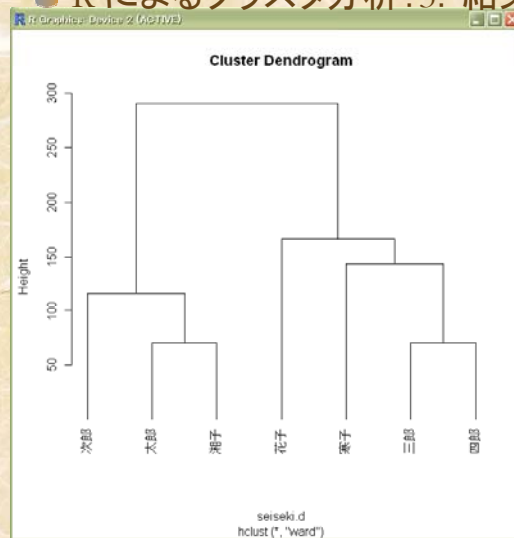
```

csvファイルを読み込み、変数seisekiに格納
 変数seisekiの中身確認
 対象間の類似度をmanhattan距離で測定し、変数seiseki.dに格納
 変数seiseki.dの中身確認
 ward法でクラスタ分析を実施し、変数seiseki.hcに格納
 クラスタ化: ward法
 類似度: manhattan距離を確認!
 対象の数: 7
 結果を樹形図で表示

注) ward法を用いる場合、距離はユークリッド平方距離を使うのが妥当

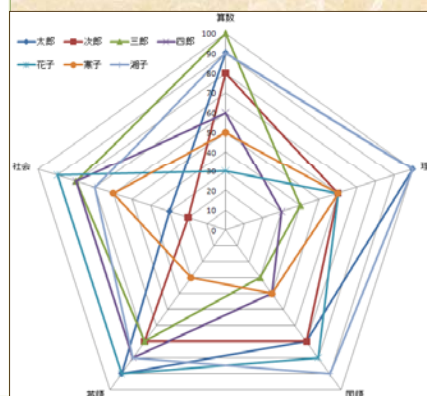
4. クラスタ分析の実施

● Rによるクラスタ分析:3. 結果



cf. 元データ

	算数	理科	国語	英語	社会
太郎	90	100	70	90	30
次郎	80	60	70	70	20
三郎	100	40	30	70	80
四郎	60	30	40	80	80
花子	30	60	80	90	90
寒子	50	60	40	30	60
湘子	90	100	90	80	70



4. クラスタ分析の実施

● R によるクラスタ分析: 4.手法選択について

● 距離の測定: 関数 `dist()` 【書式: `dist( data, "method" )`】

- `method`の部分に距離の測定方法を指定
 - euclidean ... ユークリッド距離 (l_2 ノルム) ex) `dist( data )` ← 指定無しだとこれ
 - manhattan ... マンハッタン距離 (l_1 ノルム) ex) `dist( data, "manhattan" )`
 - minkowski ... ミンコフスキー距離 (l_p ノルム) ex) `dist( data, "minkowski", p=4 )`
 - maximum ... l_∞ ノルム ex) `dist( data, "maximum" )`

注) ユークリッド平方距離は、ユークリッド距離の計算後、2乗する

● クラスタ化の方法: 関数 `hclust()` 【書式: `hclust( data.d, "method" )`】

- `method`の部分にクラスタ化の方法を指定
 - single ... 最短距離法 ex) `hclust( data.d, "single" )`
 - complete ... 最長距離法 ex) `hclust( data.d, "complete" )`
 - average ... 群平均法 ex) `hclust( data.d, "average" )`
 - centroid ... 重心法 ex) `hclust( data.d^2, "centroid" )`
 - median ... 中央値法 ex) `hclust( data.d, "median" )`
 - ward ... ウォード法 ex) `hclust( data.d^2, "ward" )`
- 注) この2つの手法では「ユークリッド平方距離」を用いる
(`data.d`がユークリッド距離の計算結果でその2乗を使用)

5. クラスタ分析実施上の注意点

● クラスタ分析の長所

- 探索的手法なので、データ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

● クラスタ分析の短所

- 類似度(距離)測定法の選択が困難な可能性がある
- クラスタ化更新法の選択が困難な可能性がある
- 結果の解釈が困難な可能性がある

6. 非階層的クラスタ分析

● 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

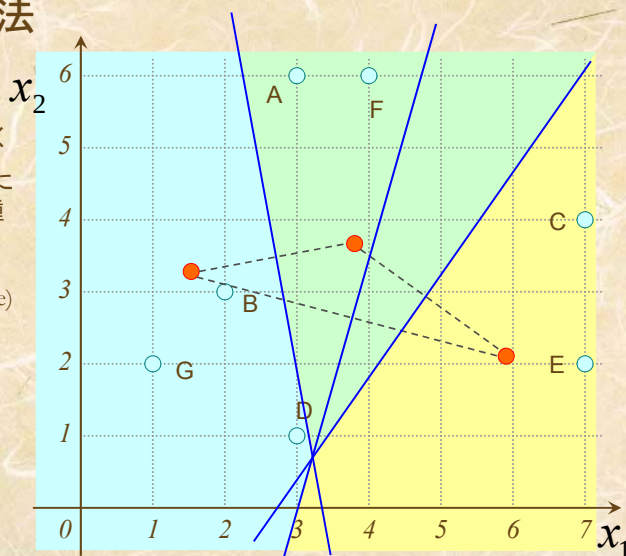


例: 3つのクラスタに分類

6. 非階層的クラスタ分析

● 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)



6. 非階層的クラスタ分析

K-means法

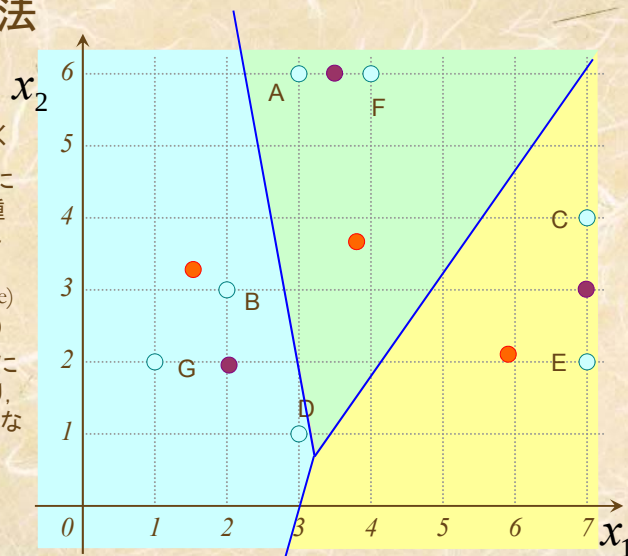
Step0: Kを決める
(ex. $K:=3$)

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)

(ex. Euclidean distance)
(cf. Voronoi diagrams)

Step3: 各クラス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。



6. 非階層的クラスタ分析

K-means法

Step0: Kを決める
(ex. $K:=3$)

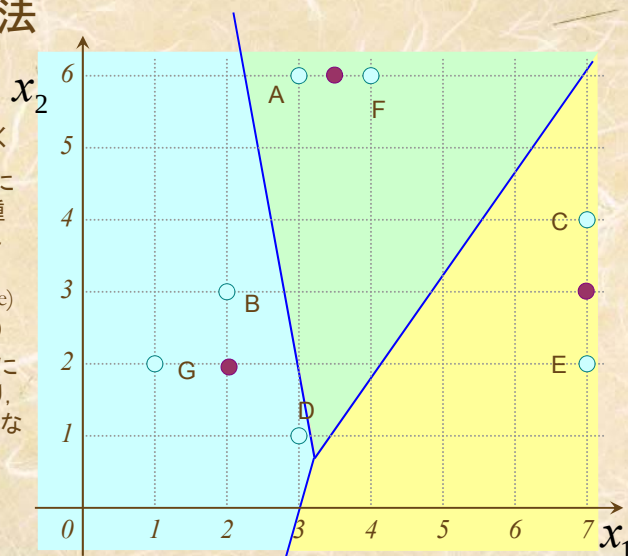
Step1: 適当に種を置く

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)

(ex. Euclidean distance)
(cf. Voronoi diagrams)

Step3: 各クラス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 をクラスが更新されなくなるまで繰り返す



6. 非階層的クラスタ分析

K-means法

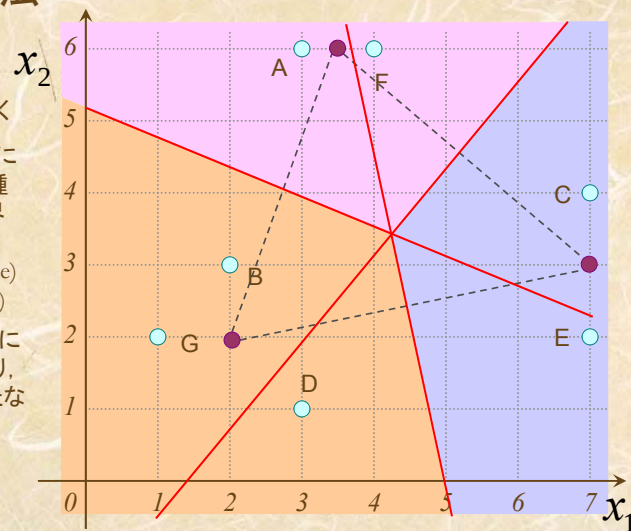
Step0: Kを決める
(ex. $K:=3$)

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 をクラスが更新されなくなるまで繰り返す



6. 非階層的クラスタ分析

K-means法

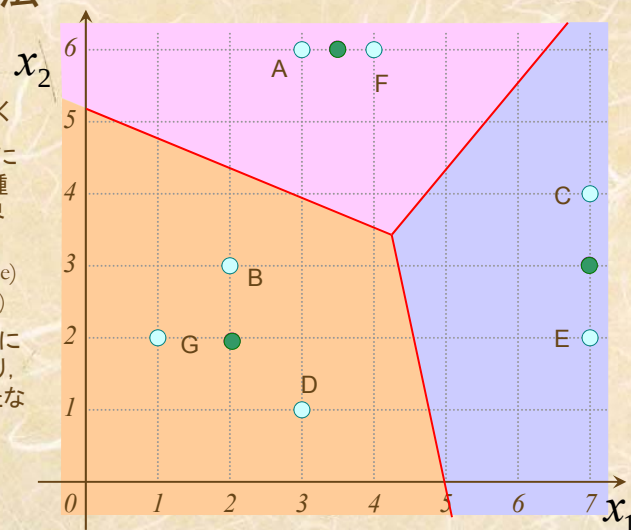
Step0: Kを決める
(ex. $K:=3$)

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 をクラスが更新されなくなるまで繰り返す



7. クラスタ分析の実施

● Rによるクラスタ分析: 4. K-means法による結果

```
> (seiseki.km <- kmeans(seiseki, 3))
K-means clustering with 3 clusters of sizes 1, 3, 3

Cluster means:
  算数  理科  国語  英語  社会
1 30.00000 60.00000 80.00000  90 90.00000
2 70.00000 43.33333 36.66667  60 73.33333
3 86.66667 86.66667 76.66667  80 40.00000

Clustering vector:
太郎 次郎 三郎 四郎 花子 寒子 湘子
  3    3    2    2    1    2    3

Within cluster sum of squares by cluster:
[1]  0 3600 3000

Available components:
[1] "cluster" "centers" "withinss" "size"
> |
```

K-means法でクラスタ数を3として分析を実施し、変数seiseki.kmに格納

cf. 元データ

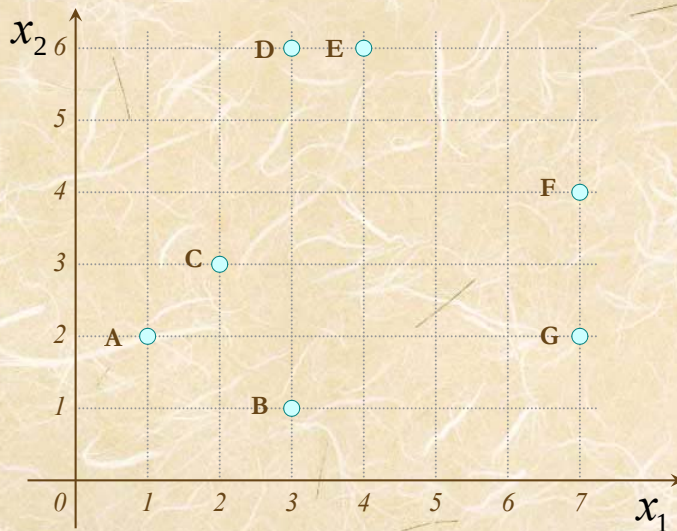
	算数	理科	国語	英語	社会
太郎	90	100	70	90	30
次郎	80	60	70	70	20
三郎	100	40	30	70	80
四郎	60	30	40	80	80
花子	30	60	80	90	90
寒子	50	60	40	30	60
湘子	90	100	90	80	70

結果:

cluster1: 花子
cluster2: 三郎, 四郎, 寒子
cluster3: 太郎, 次郎, 湘子

演習

- 類似度をユークリッド平方距離で測定し、クラスタ間の類似度更新に最短距離法を用いてクラスタ分析をしよう!



参考文献

- 田中豊・脇本和昌『多変量統計解析法』現代数学社(1983)
- 河口至商『多変量解析入門Ⅱ』森北出版(1978,2005)
- 金明哲『Rによるデータサイエンス』森北出版(2007)
- 荒木孝治『RとRコマンダーではじめる多変量解析』日科技連(2007)
- 新納浩幸『Rで学ぶクラスター解析』オーム社(2007)