2015年6月8日（月）

問題解決技法入門

クラスタ分析

堀田敬介

クラスタ分析

- Contents

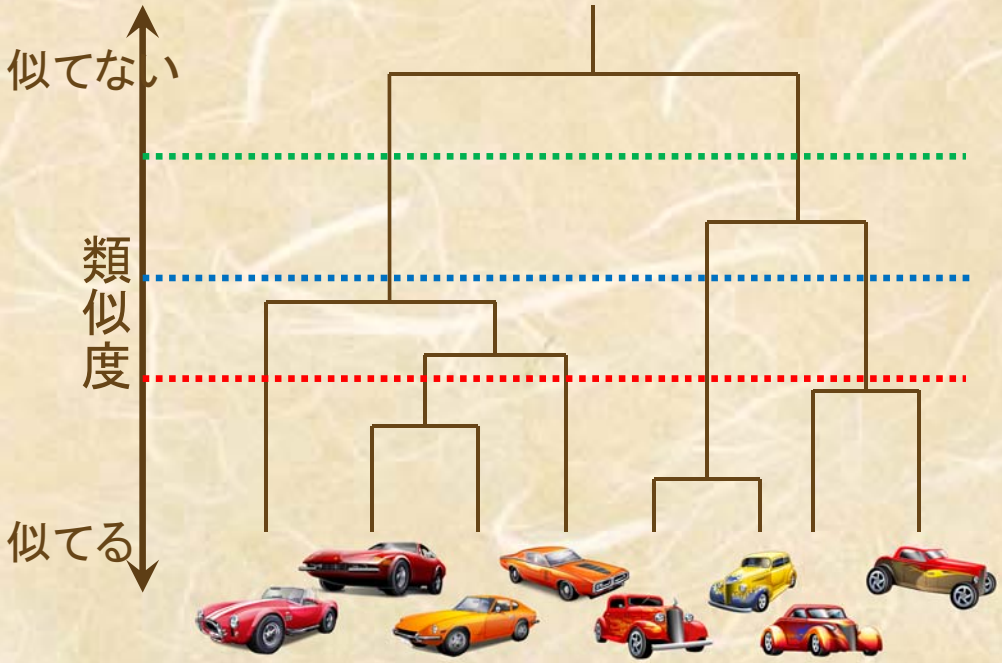
1. クラスタ分析概要

どれとどれが似てる？
（同じクラスター？）

- 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

1. クラスタ分析概要

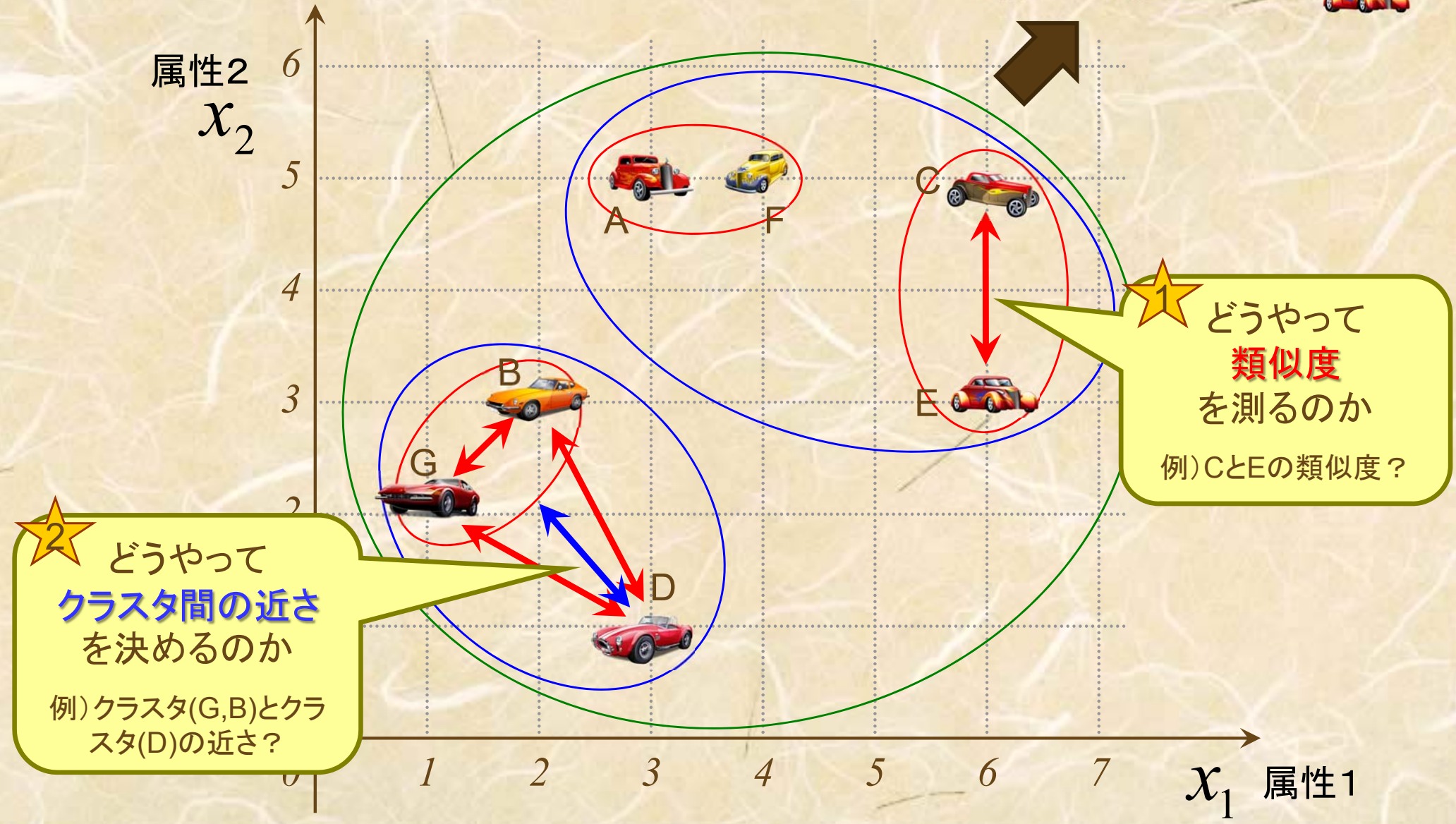
- クラスタ分析の種類
  - 階層的方法
    - 樹形図（デンドログラム）を作成
    - 目的により高さを決めてクラスタリング
  - 非階層的方法
    - 予めクラスタ数を決め（or決まっていて），クラスタリングを行う



例：3つのクラスタに分類

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）



1. クラスタ分析概要

- どうやって類似度を測るか？

									
			3	1	2	3	4	6	6
	x_1	x_2	1	2	3	5	5	5	3
	3	1							
	1	2							
	2	3							
	3	5							
	4	5							
	6	5							
	6	3							

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・クラスカルのλ

クラスタ分析ノート.pdf

2. 類似度の測定

データと尺度

				比率尺度	比率尺度		
			間隔尺度	間隔尺度	間隔尺度		
			順序尺度	順序尺度	順序尺度	順序尺度	
名義尺度	名義尺度	名義尺度	名義尺度	名義尺度	名義尺度	名義尺度	
学籍番号	氏名	性別	生年月日	身長	体重	問題発見技法成績	…
1	文教太郎	男	1987.5.6	175cm	69kg	B	…
2	湘南花子	女	1988.1.4	163cm	48kg	AA	…
3	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	

厳密

量的データ
（数値データ）

比率尺度

比に意味がある（絶対原点が存在する）
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（順序に意味がある）
例）成績評価　（A > B > C > D）

名義尺度

単なる分類，区別ができる
例）名前，性別

曖昧

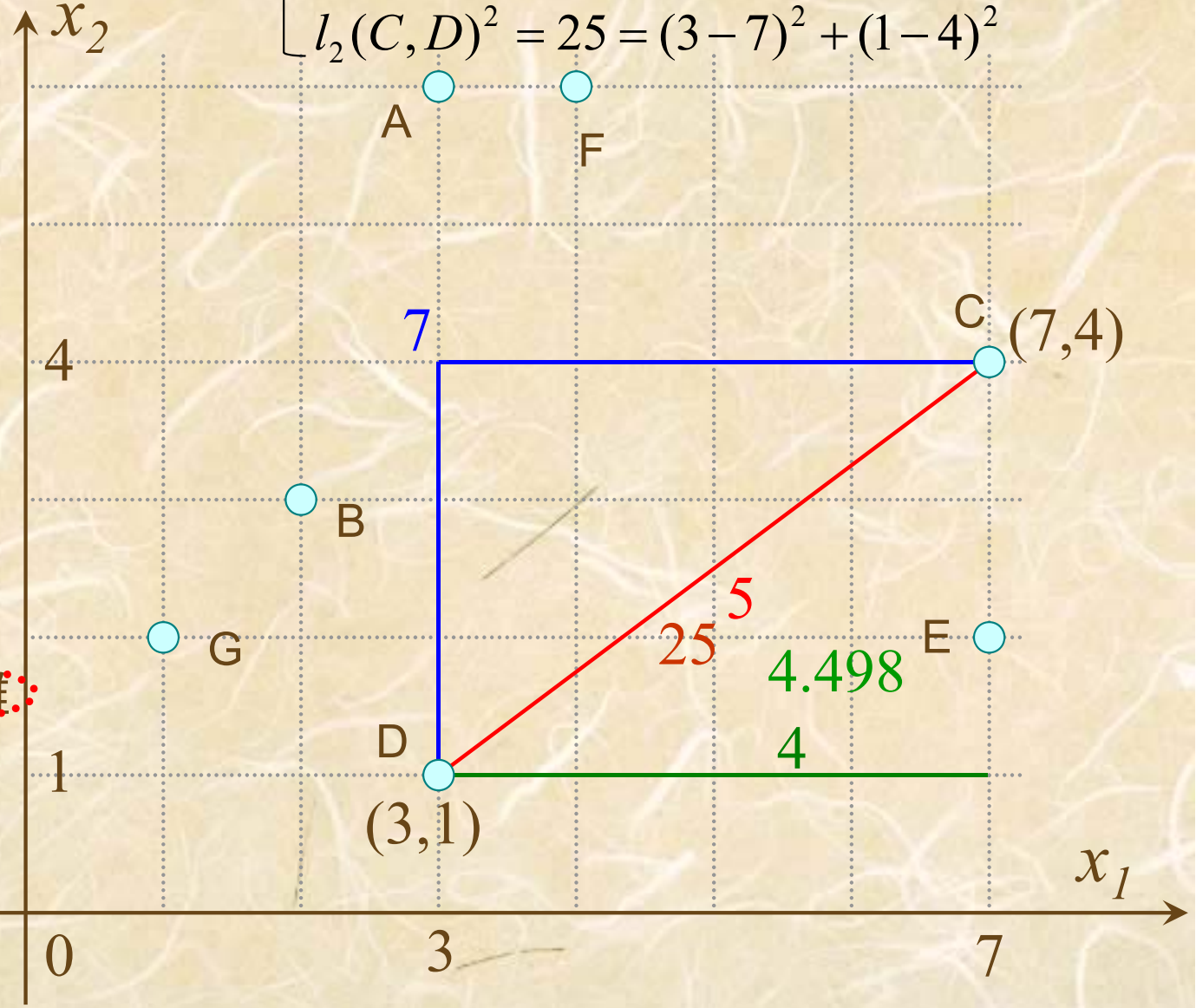
2. 類似度の測定

$$
\begin{cases}
l_2(C,D) = 5 = \sqrt{(3-7)^2 + (1-4)^2} \\
l_1(C,D) = 7 = |3-7| + |1-4| \\
l_3(C,D) = 4.498 = \sqrt[3]{|3-7|^3 + |1-4|^3} \\
l_\infty(C,D) = 4 = \max\{|3-7|, |1-4|\} \\
l_2(C,D)^2 = 25 = (3-7)^2 + (1-4)^2
\end{cases}
$$

- 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
  - ユークリッド平方距離

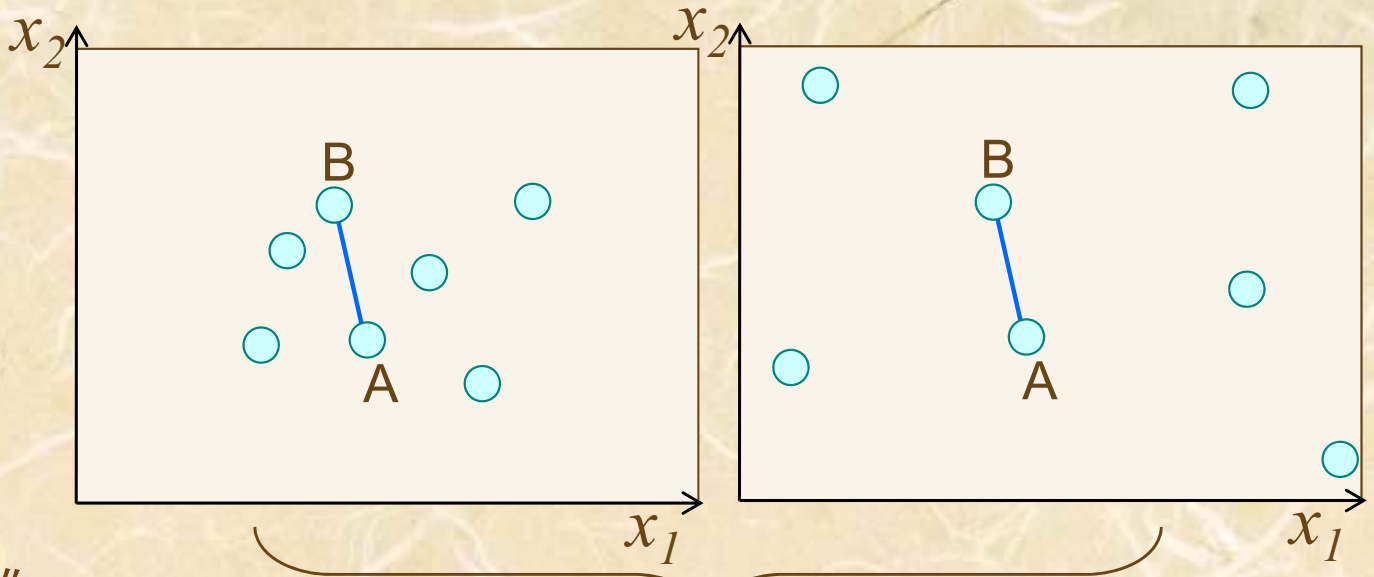
クラスター分析で
よく使われる

（注：各ノルムとは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）

2変量版 $\boldsymbol{x}=(x_1, x_2)$

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

u_1, u_2 は x_1, x_2 の標準化変量で，

$$u_1 = \frac{x_1 - \mu_1}{\sigma_2}, u_2 = \frac{x_2 - \mu_2}{\sigma_2}$$

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

多変量版 $\boldsymbol{x}=(x_1, \ldots, x_m)$

$$D \equiv (x_p - x_q)^T \Sigma^{-1} (x_p - x_q)$$

Σ は $\boldsymbol{x}_p, \boldsymbol{x}_q$ の分散共分散行列

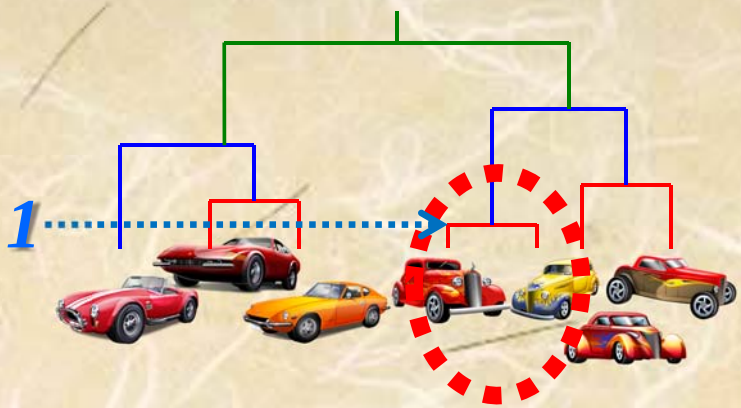
2. 類似度の測定

- どうやって類似度を測るか？
  - 例：ユークリッド平方距離

									
			3	1	2	3	4	6	6
	x_1	x_2	1	2	3	5	5	5	3
	3	1		5	5	16	17	25	13
	1	2			2	13	18	34	26
	2	3				5	8	20	16
	3	5					1	9	13
	4	5						4	8
	6	5							4
	6	3							

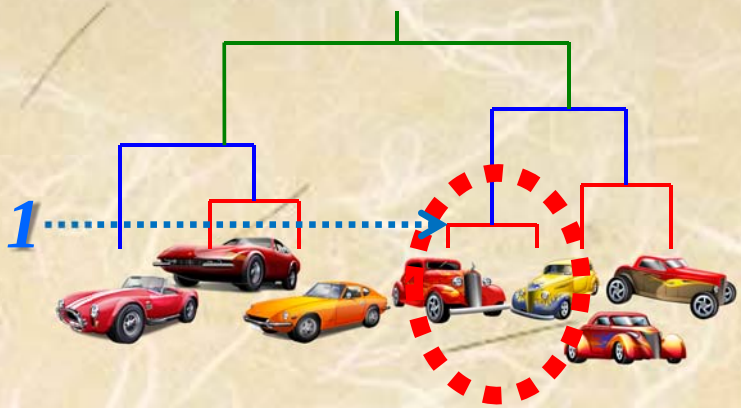
2. 類似度の測定

- どうやって類似度を更新するか？



			3	1	2	3	4	6	6
	x_1	x_2	1	2	3	5	5	5	3
	3	1		5	5	16	17	25	13
	1	2			2	13	18	34	26
	2	3				5	8	20	16
	3	5					1	9	13
	4	5						4	8
	6	5							4
	6	3							

2. 類似度の測定

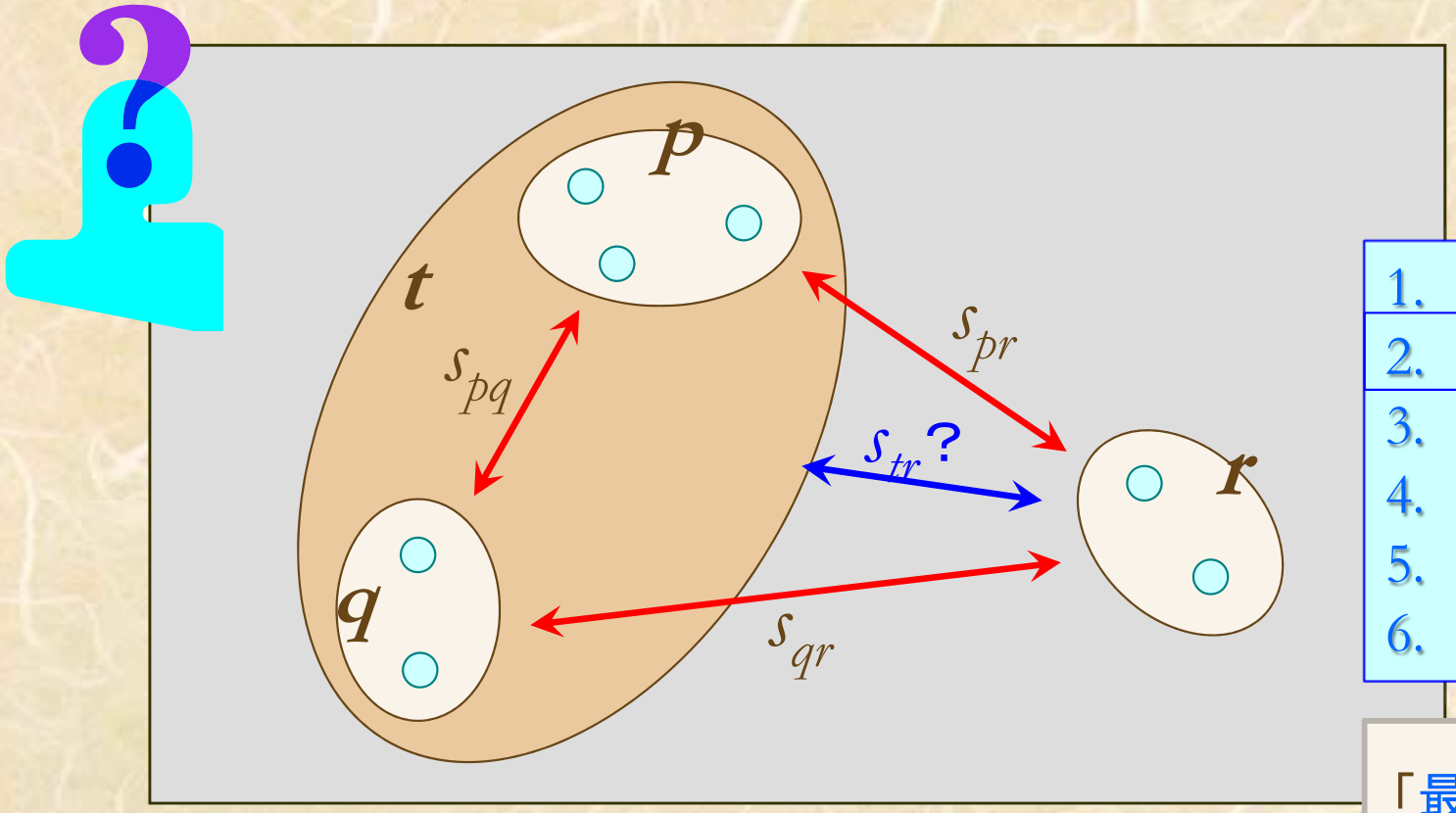


- どうやって類似度を更新するか？

			3	1	2	3,4	6	6
	x_1	x_2	1	2	3	5,5	5	3
	3	1		5	5	16,17	25	13
	1	2			2	13,18	34	26
	2	3				5,8	20	16
	3,4	5,5				1	9,4	13,8
	6	5						4
	6	3						

3. クラスタ化の方法

- 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？



（s_{pr}：クラスタp, rの類似度）

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

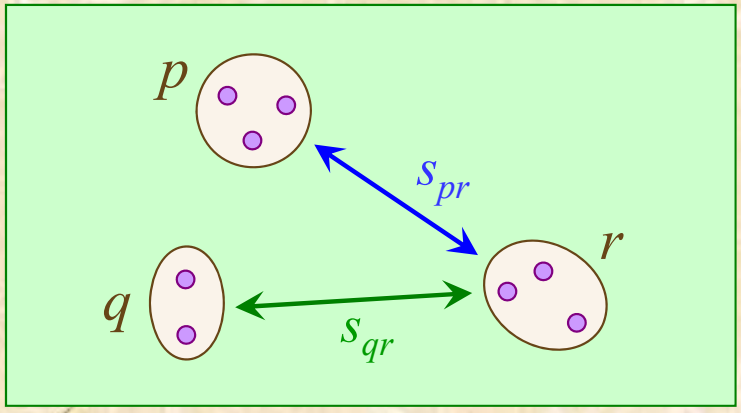
「最短」か「最長」か何らかの「平均」

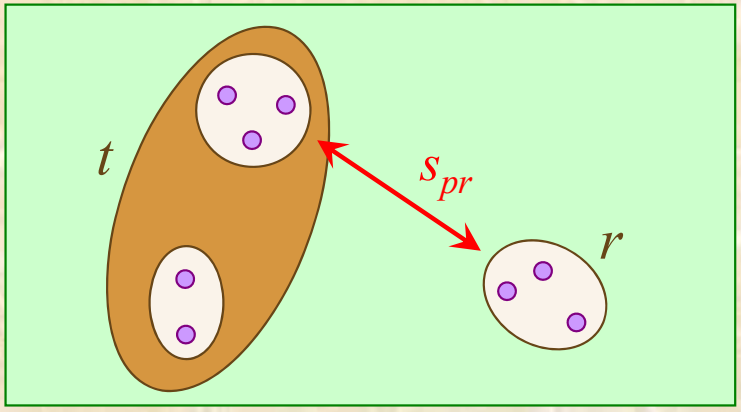
3. クラスタ化の方法

1. 最短距離法 (nearest neighbor method)

〔単連結法 (single linkage method)〕

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





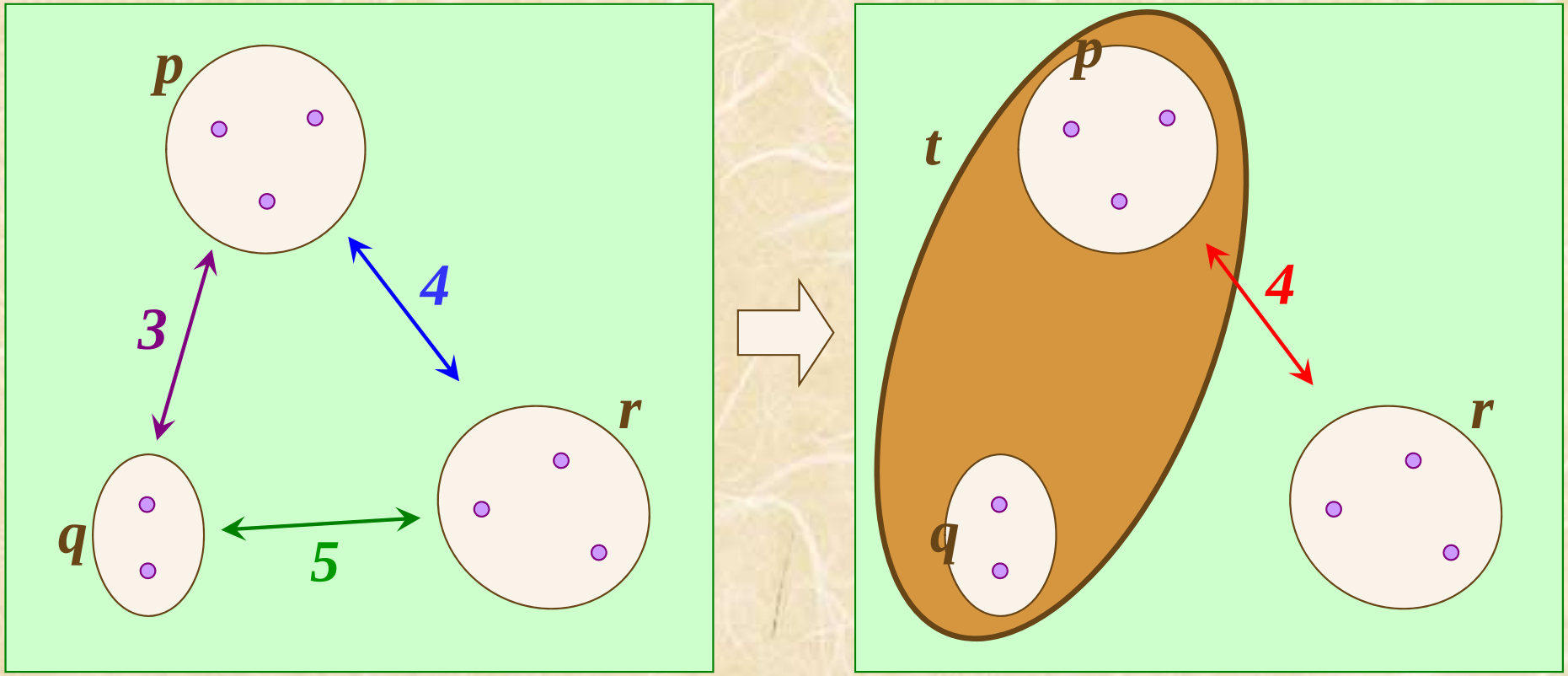
あるクラスタにおいて，クラスタ内の各対象が，そのクラスタ外の任意の対象よりも，そのクラスタ内の少なくとも1つの対象とより近接している．

※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

1. 最短距離法

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

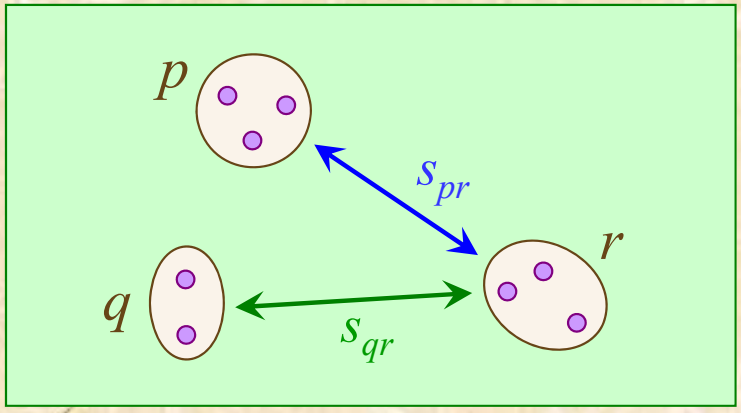


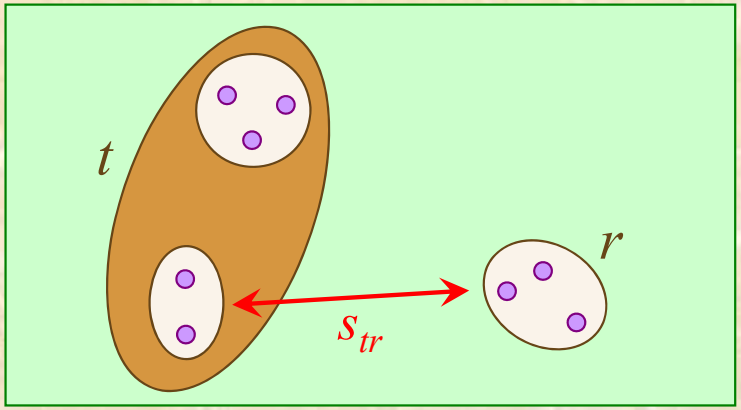
3. クラスタ化の方法

2. 最長距離法 (furthest neighbor method)

〔完全連結法 (complete linkage method)〕

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





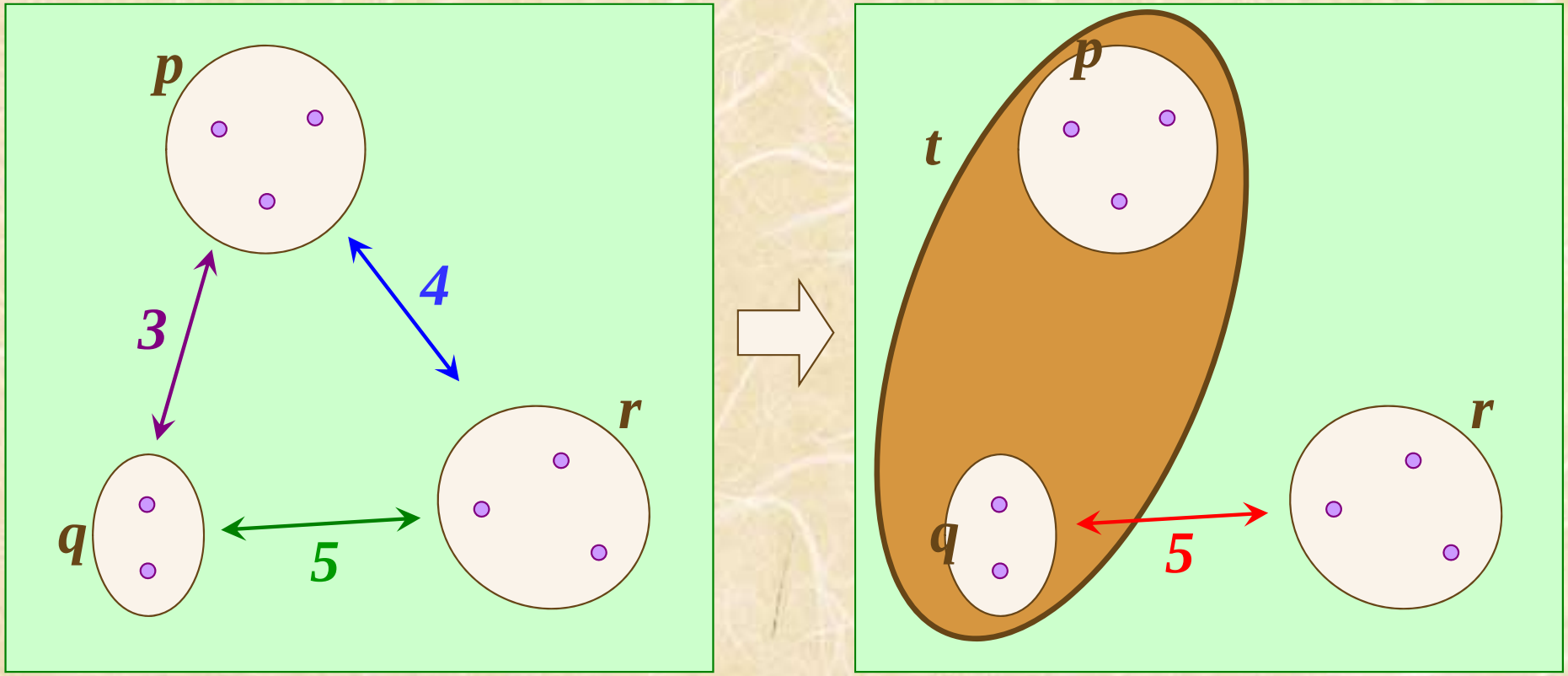
あるクラスタにおいて，クラスタ内の全ての対象が，そのクラスタ外の任意の対象との距離よりも常に近接している．

※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

2. 最長距離法

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

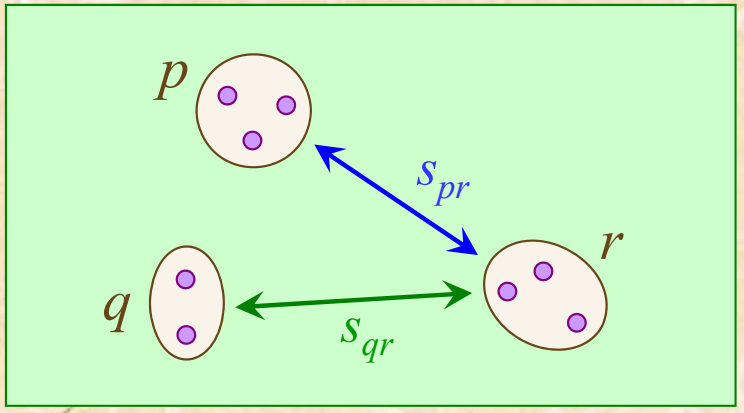


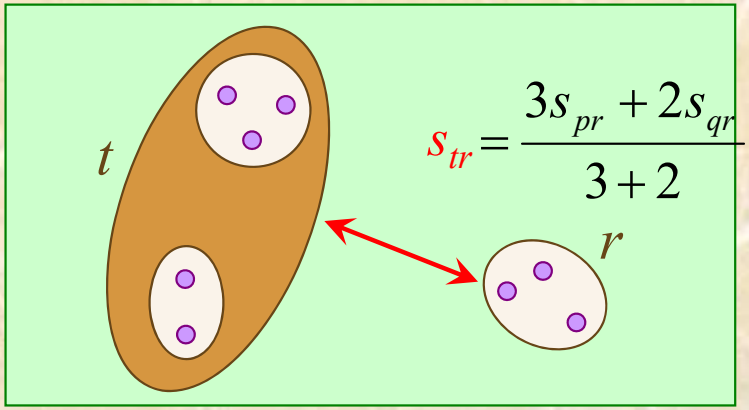
3. クラスタ化の方法

3. 群平均法 (group average method)

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

$\begin{cases} n_p : \text{クラスタ } p \text{ に含まれる対象数} \\ n_q : \text{クラスタ } q \text{ に含まれる対象数} \end{cases}$



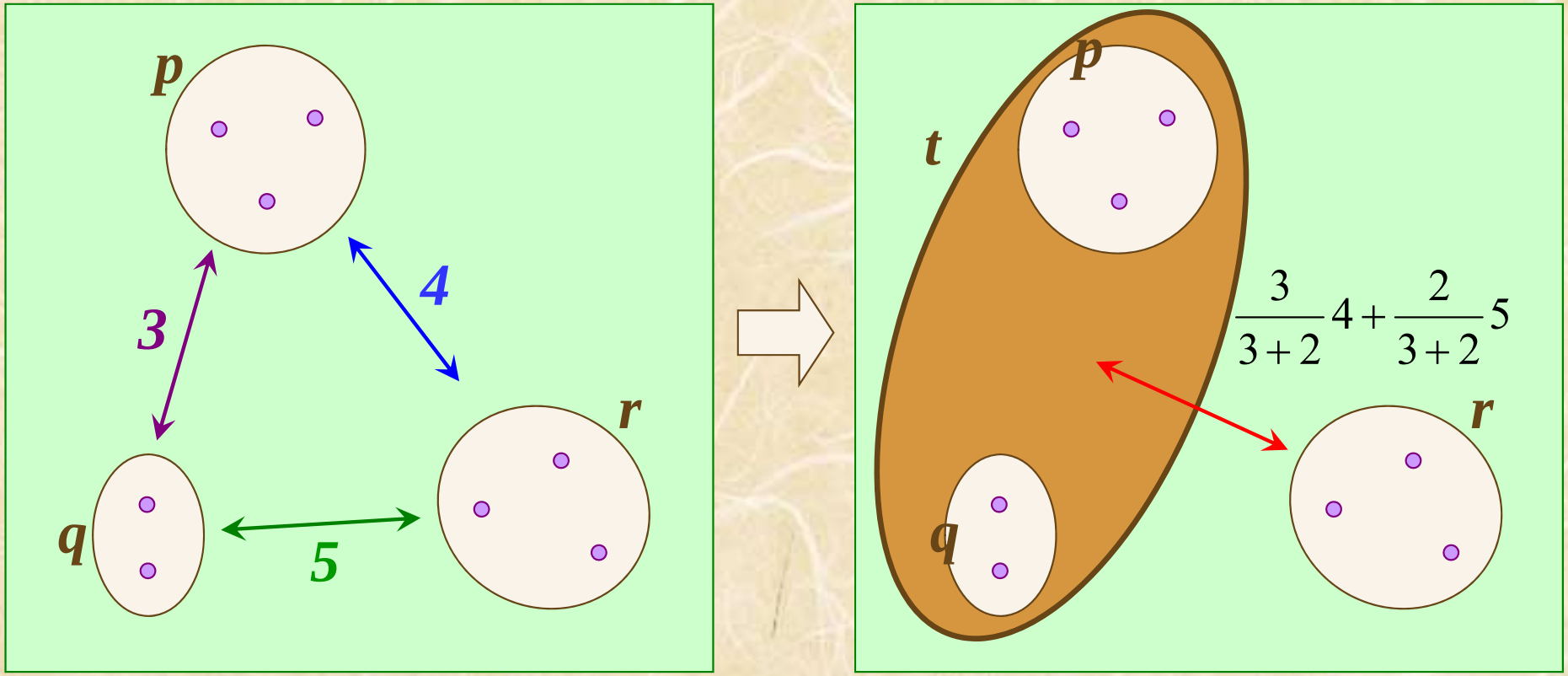


※類似度は，間隔尺度ならばOK

3. クラスタ化の方法

3. 群平均法

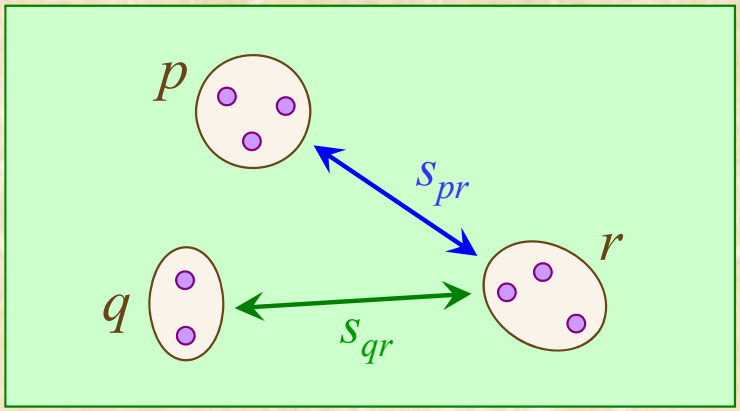
$$s_{tr} = \frac{n_p}{n_p + n_q} s_{pr} + \frac{n_q}{n_p + n_q} s_{qr}$$



3. クラスタ化の方法

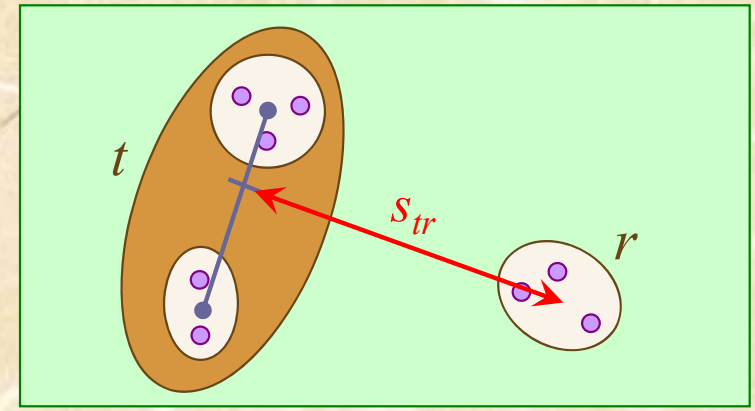
4. 重心法 (centroid method)

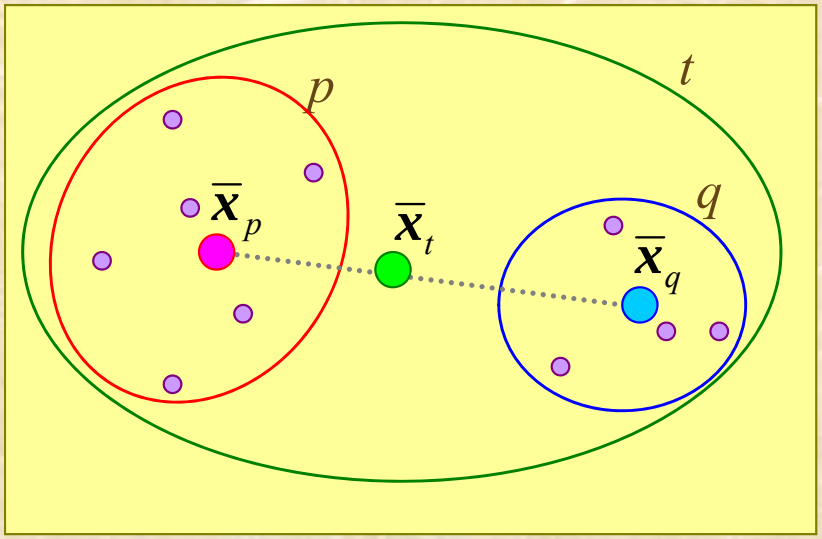
$$s_{tr} = \frac{n_p}{n_p + n_q} s_{pr} + \frac{n_q}{n_p + n_q} s_{qr} - \frac{n_p n_q}{(n_p + n_q)^2} s_{pq}$$



$\begin{cases} n_p : \text{クラスタ } p \text{ に含まれる対象数} \\ n_q : \text{クラスタ } q \text{ に含まれる対象数} \end{cases}$

※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」





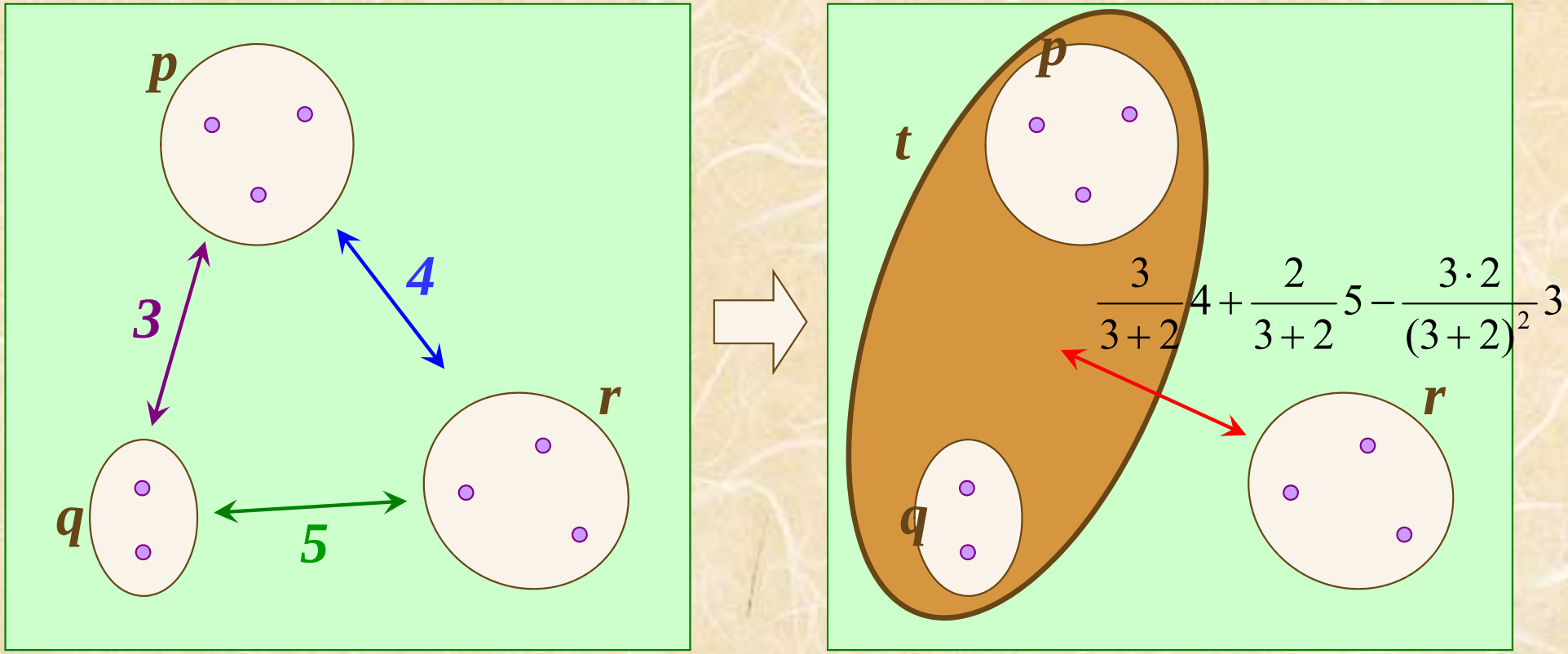
$$\bar{x}_t = \frac{n_p \bar{x}_p + n_q \bar{x}_q}{n_p + n_q}$$

※ xはベクトル

3. クラスタ化の方法

4. 重心法

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

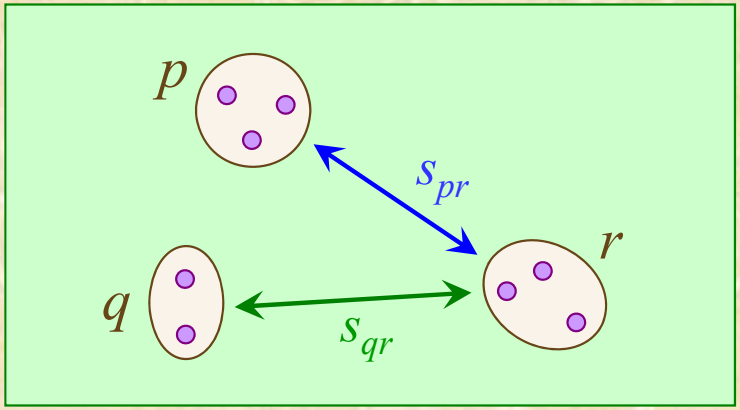


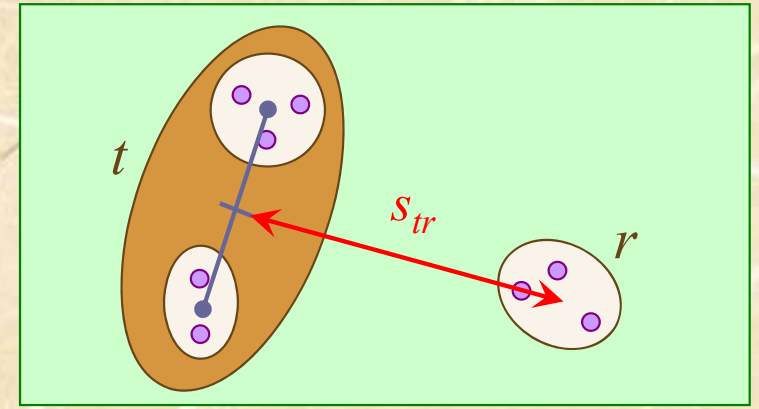
3. クラスタ化の方法

5. 中央値法 (median method)

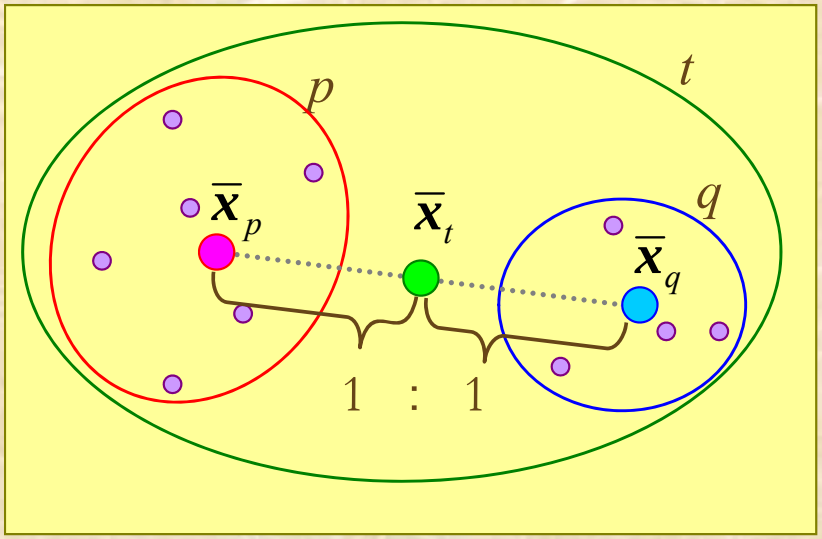
$$s_{tr} = \frac{1}{2} s_{pr} + \frac{1}{2} s_{qr} - \frac{1}{4} s_{pq}$$

（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」



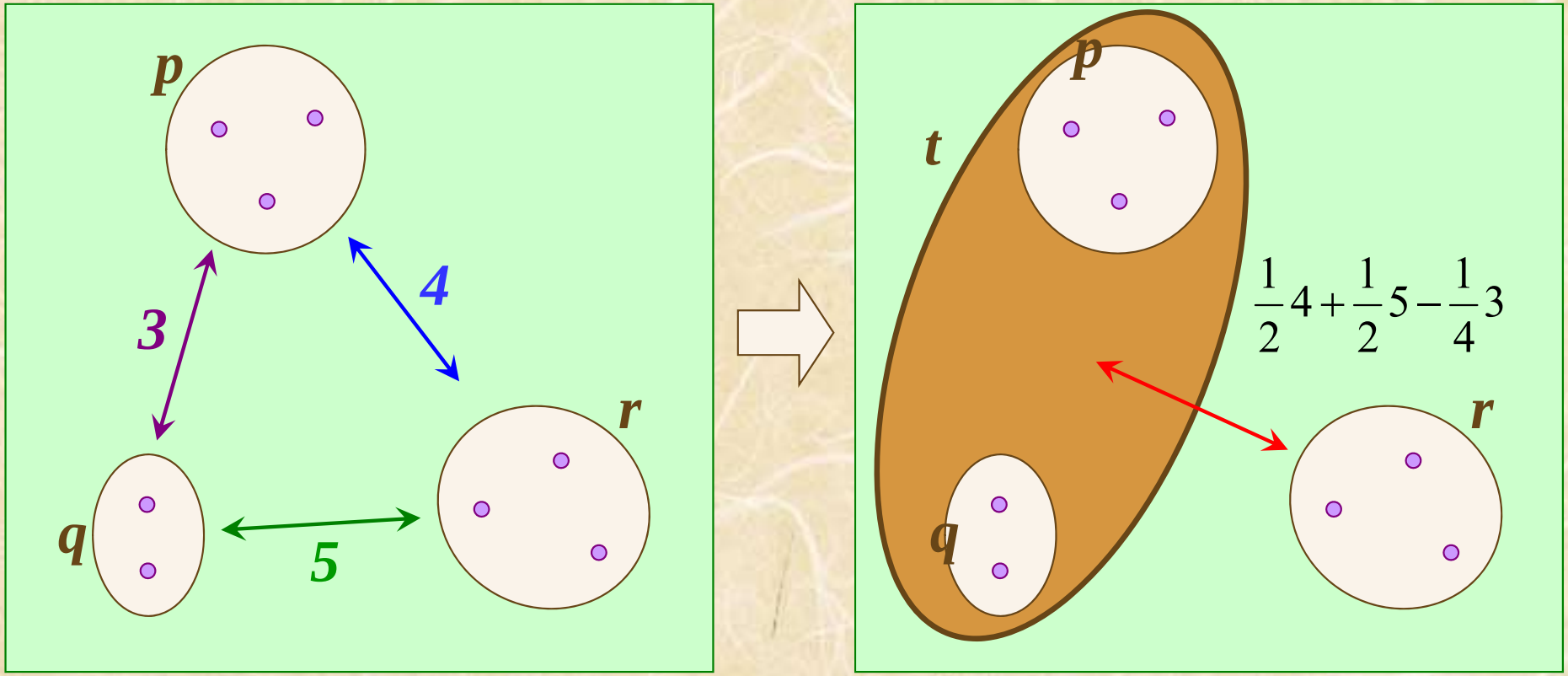
$$\bar{x}_t = \frac{\bar{x}_p + \bar{x}_q}{2}$$

※ xはベクトル

3. クラスタ化の方法

5. 中央値法

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

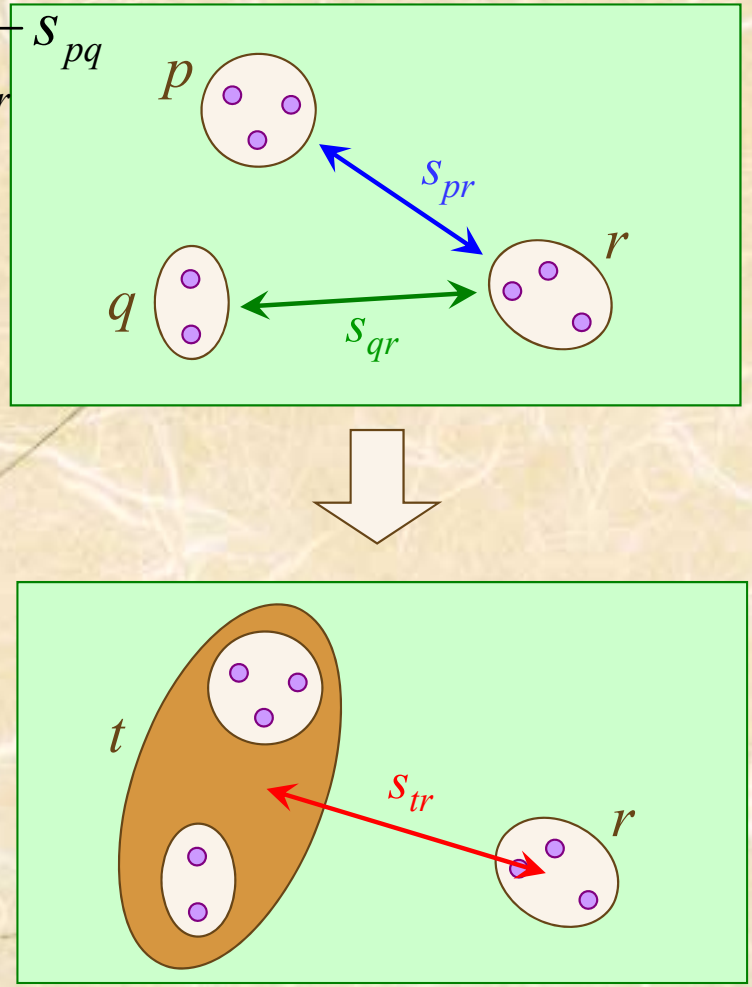


3. クラスタ化の方法

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

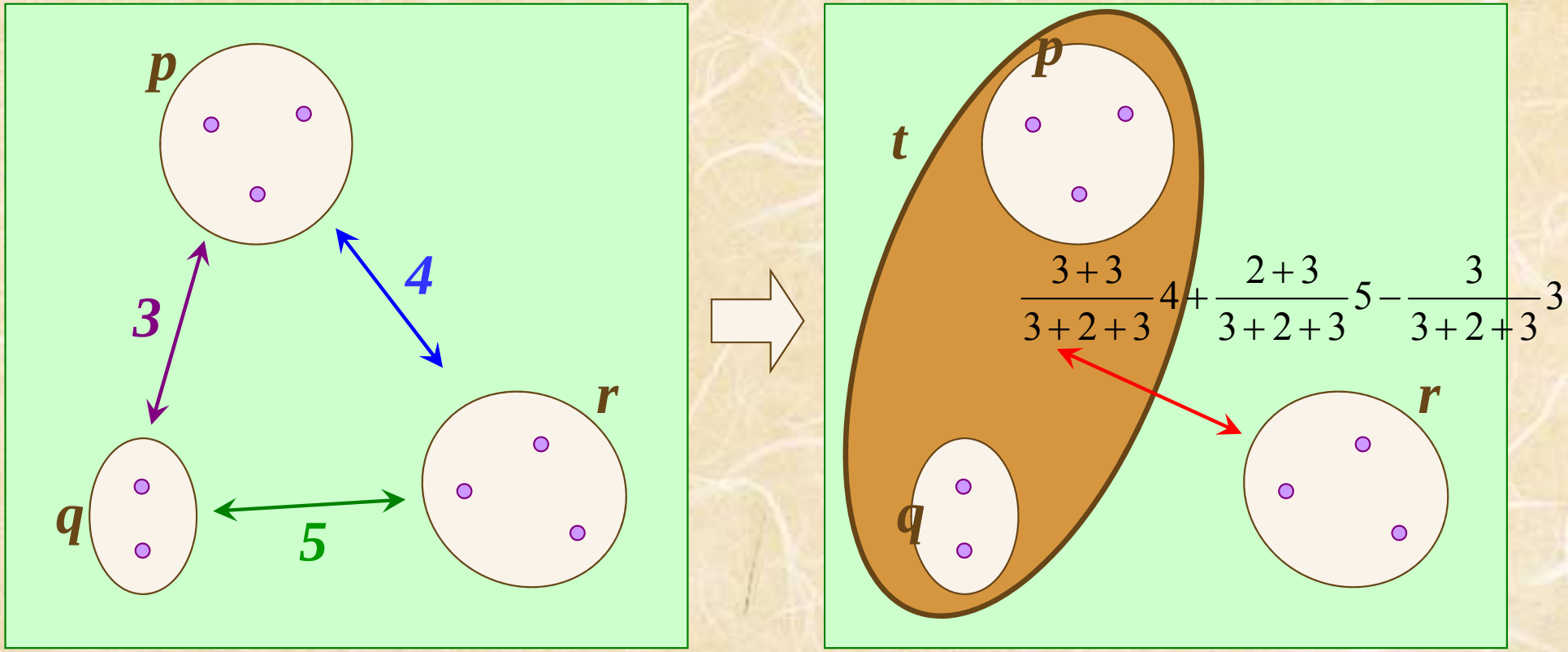


※導出過程より，類似度S_{tr}は
ユークリッド平方距離の時のみ妥当.
→ cf.ファイル「クラスタ分析ノート.pdf」

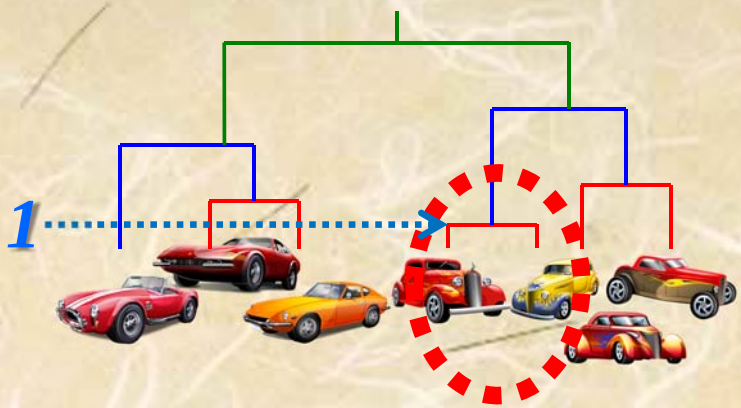
3. クラスタ化の方法

6. ウォード法

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



3. クラスタ化の方法



- どうやって類似度を更新するか？

			3	1	2	3:4	6	6
	x_1	x_2	1	2	3	5:5	5	3
	3	1		5	5	16:17	25	13
	1	2			2	13:18	34	26
	2	3				5:8	20	16
	3:4	5:5				1	9:4	13:8
	6	5						4
	6	3						

3. クラスタ化の方法

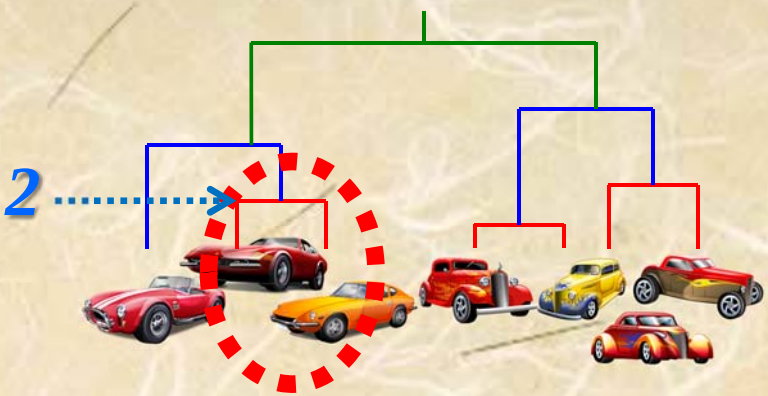
- どうやって類似度を更新するか？

				3	1	2	3:4	$\frac{1+1}{1+1+1}16+\frac{1+1}{1+1+1}17-\frac{1}{1+1+1}1$
	x_1	x_2		1	2	3	5:5	$\frac{1+1}{1+1+1}13+\frac{1+1}{1+1+1}18-\frac{1}{1+1+1}1$
	3	1			5	5	21.7	25	13
	1	2				2	20.3	34	26
	2	3					8.3	20	16
	3:4	5:5	$\frac{1+1}{1+1+1}5+\frac{1+1}{1+1+1}8-\frac{1}{1+1+1}1$				1	8.3	13.7
	6	5							4
	6	3	$\frac{1+1}{1+1+1}9+\frac{1+1}{1+1+1}4-\frac{1}{1+1+1}1$						

$$\frac{1+1}{1+1+1}13+\frac{1+1}{1+1+1}8-\frac{1}{1+1+1}1$$

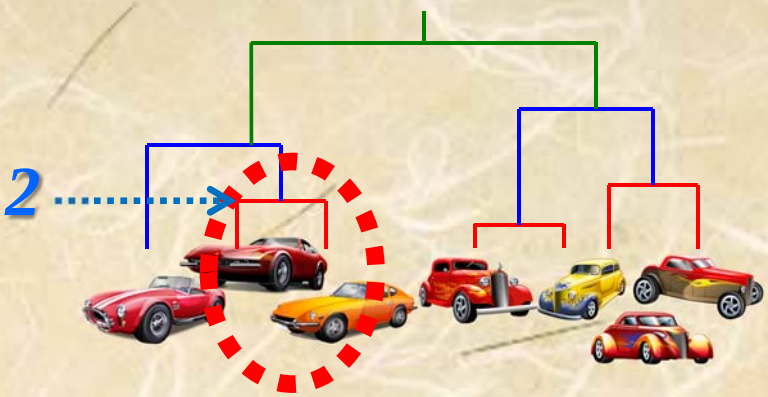
3. クラスタ化の方法

- どうやって類似度を**更新**するか？



	x_1	x_2						
				5	5	21.7	25	13
					2	20.3	34	26
						8.3	20	16
							8.3	13.7
								4

3. クラスタ化の方法

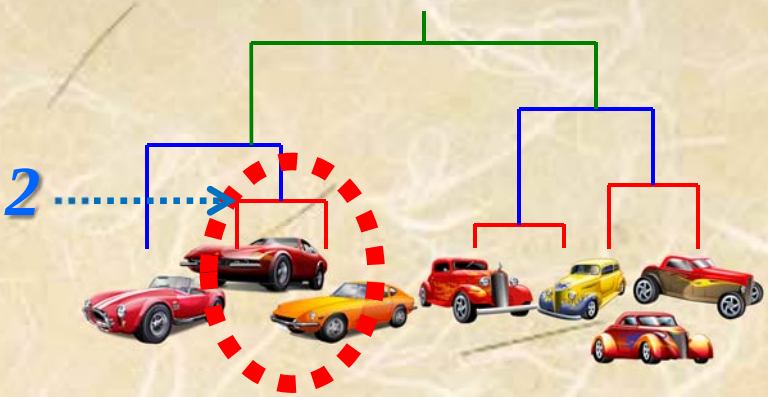


- どうやって類似度を**更新**するか？

	x_1	x_2					
				5:5	21.7	25	13
				2	20.3:8.3	34:20	26:16
						8.3	13.7
							4

3. クラスタ化の方法

- どうやって類似度を**更新**するか？

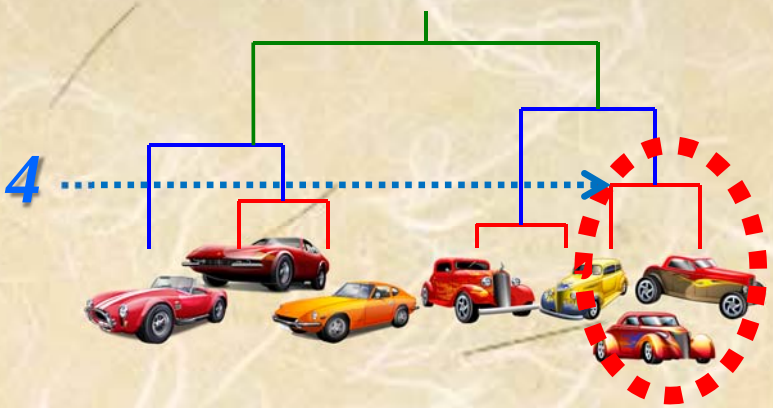


	x_1	x_2					
				6	21.7	25	13
				2	20.5	35.3	27.3
						8.3	13.7
			$\frac{1+1}{1+1+1}34+\frac{1+1}{1+1+1}20-\frac{1}{1+1+1}2$				4

$\frac{1+2}{1+1+2}20.3+\frac{1+2}{1+1+2}8.3-\frac{2}{1+1+2}2$

$\frac{1+1}{1+1+1}26+\frac{1+1}{1+1+1}16-\frac{1}{1+1+1}2$

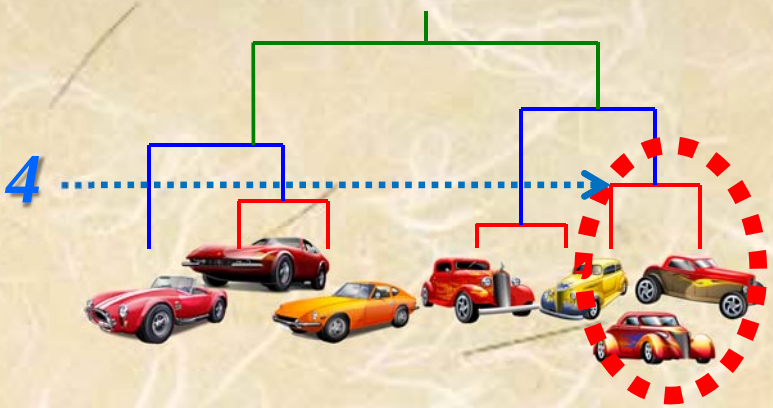
3. クラスタ化の方法



- どうやって類似度を**更新**するか？

	x_1	x_2					
				6	21.7	25	13
					20.5	35.3	27.3
						8.3	13.7
							4

3. クラスタ化の方法

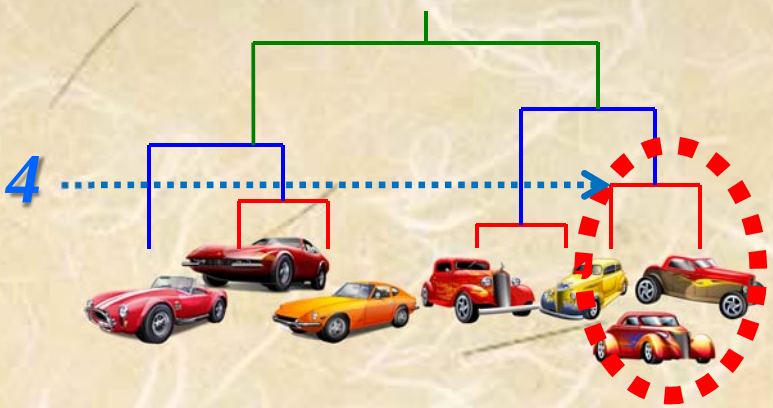


- どうやって類似度を**更新**するか？

	x_1	x_2				
				6	21.7	25:13
					20.5	35.3:27.3
						8.3:13.7
						4

3. クラスタ化の方法

- どうやって類似度を**更新**するか？

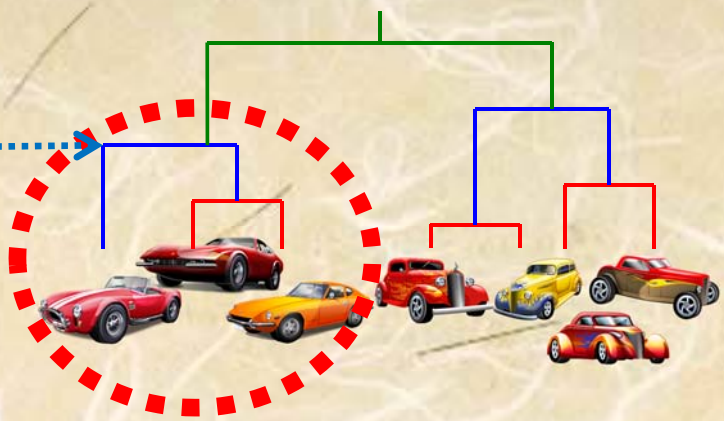


	x_1	x_2				
				6	21.7	24
					20.5	45
						14.5
						4

$$\frac{1+2}{1+1+2}8.3+\frac{1+2}{1+1+2}13.7-\frac{2}{1+1+2}4$$

3. クラスタ化の方法

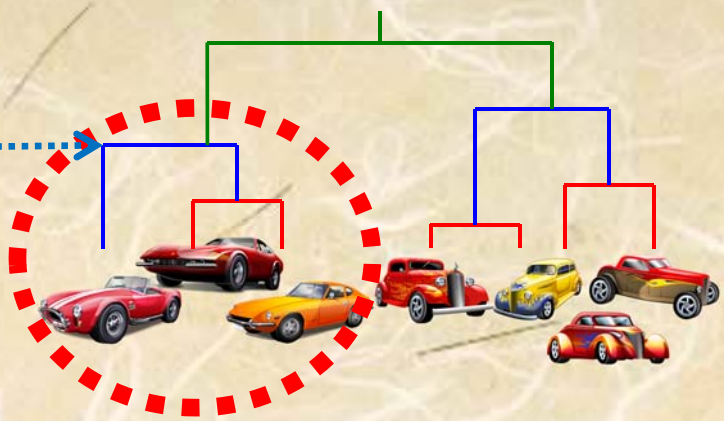
- どうやって類似度を**更新**するか？



						
	x_1	x_2				
				6	21.7	24
					20.5	45
						14.5
						

3. クラスタ化の方法

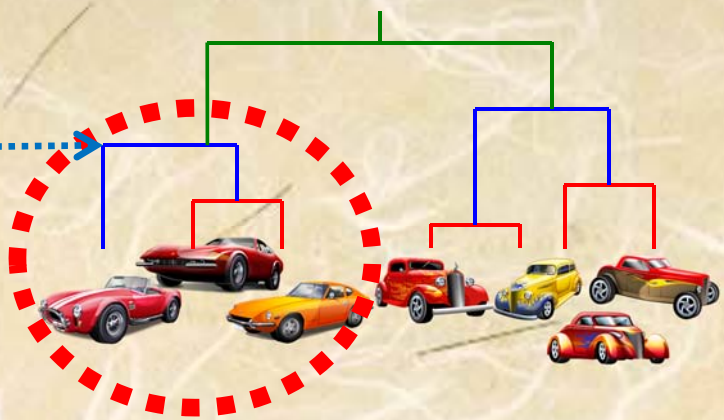
- どうやって類似度を**更新**するか？



	x_1	x_2			
			6	21.7 20.5	24 45
					14.5

3. クラスタ化の方法

- どうやって類似度を**更新**するか？

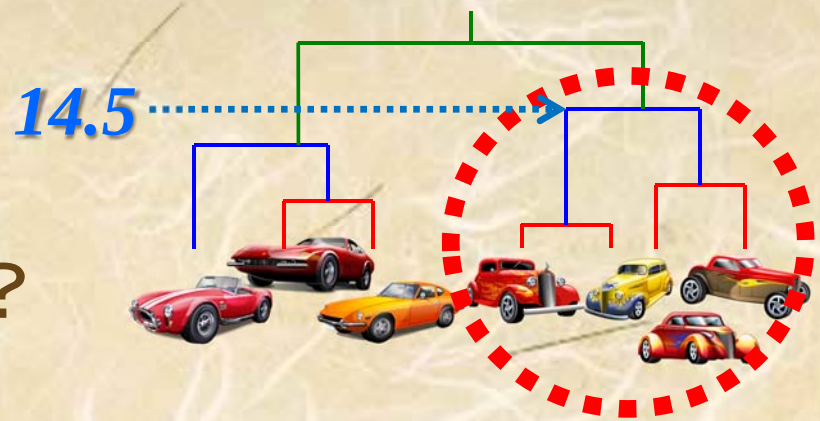


	x_1	x_2			
			6	27	48
					14.5

$$\frac{1+2}{1+2+2}21.7+\frac{2+2}{1+2+2}20.5-\frac{2}{1+2+2}6$$

$$\frac{1+2}{1+2+2}24+\frac{2+2}{1+2+2}45-\frac{2}{1+2+2}6$$

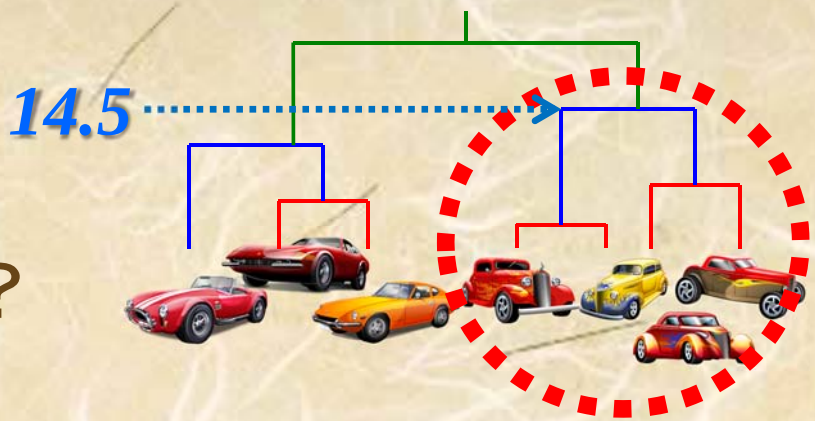
3. クラスタ化の方法



- どうやって類似度を**更新**するか？

	x_1	x_2			
				27	48
					14.5

3. クラスタ化の方法

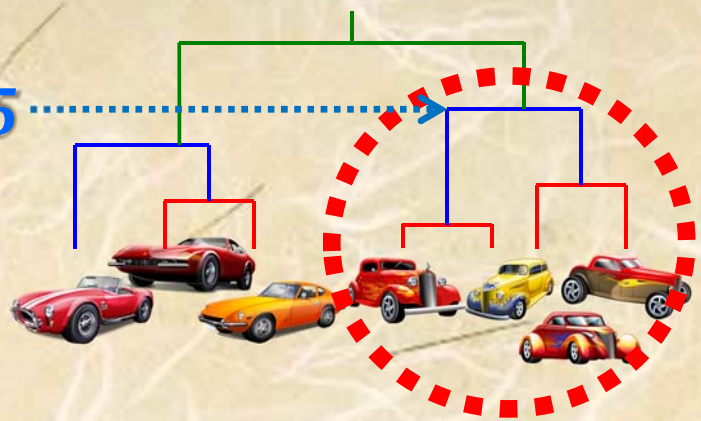


- どうやって類似度を**更新**するか？

				
	x_1	x_2		
				27 48
				14.5

3. クラスタ化の方法

- どうやって類似度を**更新**するか？

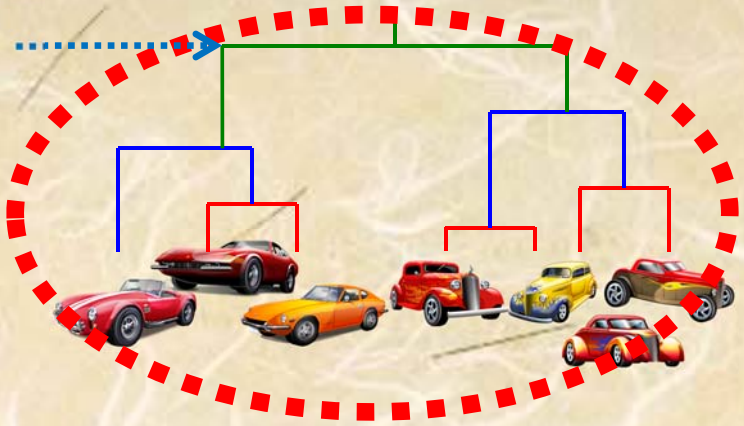


	x_1	x_2		
				47.4
				14.5

$$\frac{2+3}{2+2+3}27+\frac{2+3}{2+2+3}48-\frac{3}{2+2+3}14.5$$

3. クラスタ化の方法

- どうやって類似度を**更新**するか？



	x_1	x_2		
				47.4
				

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2
  - 対象：5人の学生
  - 対象の属性：7つ

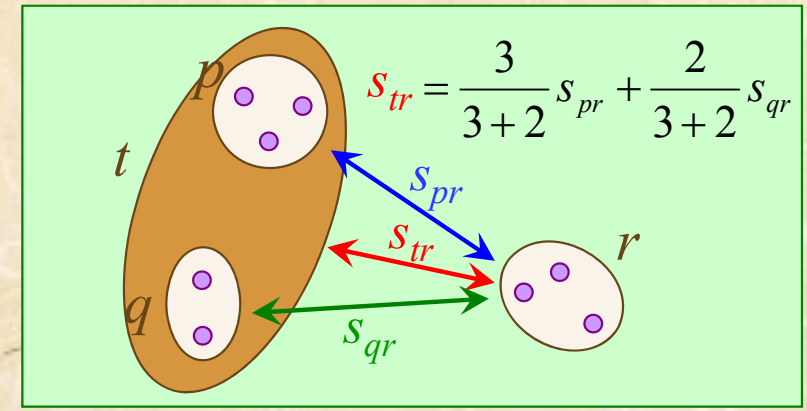
	属性1	属性2	属性3	属性4	属性5	属性6	属性7
太郎	13	12	7	1	13	13	12
次郎	6	5	8	4	9	5	15
三郎	13	14	5	15	2	19	17
四郎	13	5	8	7	9	3	13
五郎	1	18	6	1	3	1	20

  - 距離：ユークリッド平方距離

$$l_2(Taro, Jiro)^2 = (13-6)^2 + (12-5)^2 + \cdots + (12-15)^2$$

  - 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2

	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

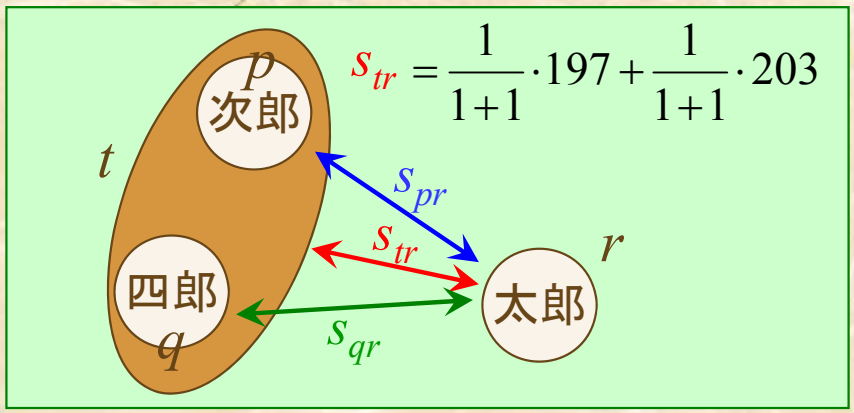
↓ 類似度の測定：ユークリッド平方距離による

$$l_2(Taro, Jiro)^2 = 197 = (13-6)^2 + \cdots + (12-15)^2$$

	太郎	次郎	三郎	四郎
次郎	197			
三郎	386	509		
四郎	203	66	475	
五郎	489	284	691	442

↓ 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	691



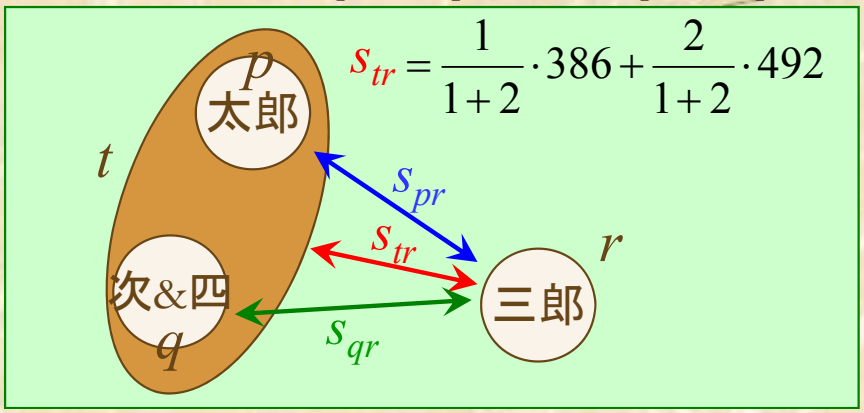
$$s_{tr} = \frac{n_p}{n_p + n_q} s_{pr} + \frac{n_q}{n_p + n_q} s_{qr}$$

4. クラスタ分析の実施

- Excelで計算によるクラスタ分析：例2

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

	太郎	次&四	三郎
次&四	200		
三郎	386	492	
五郎	439	363	691



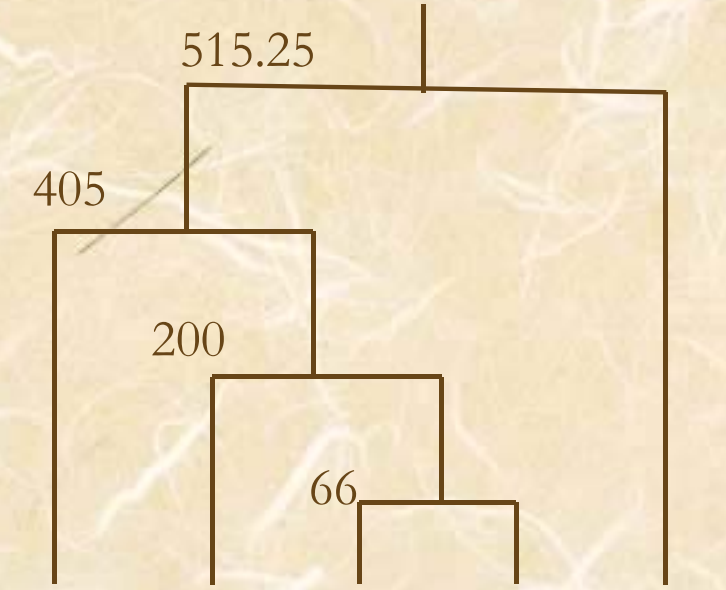
類似度の更新：群平均法による

	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

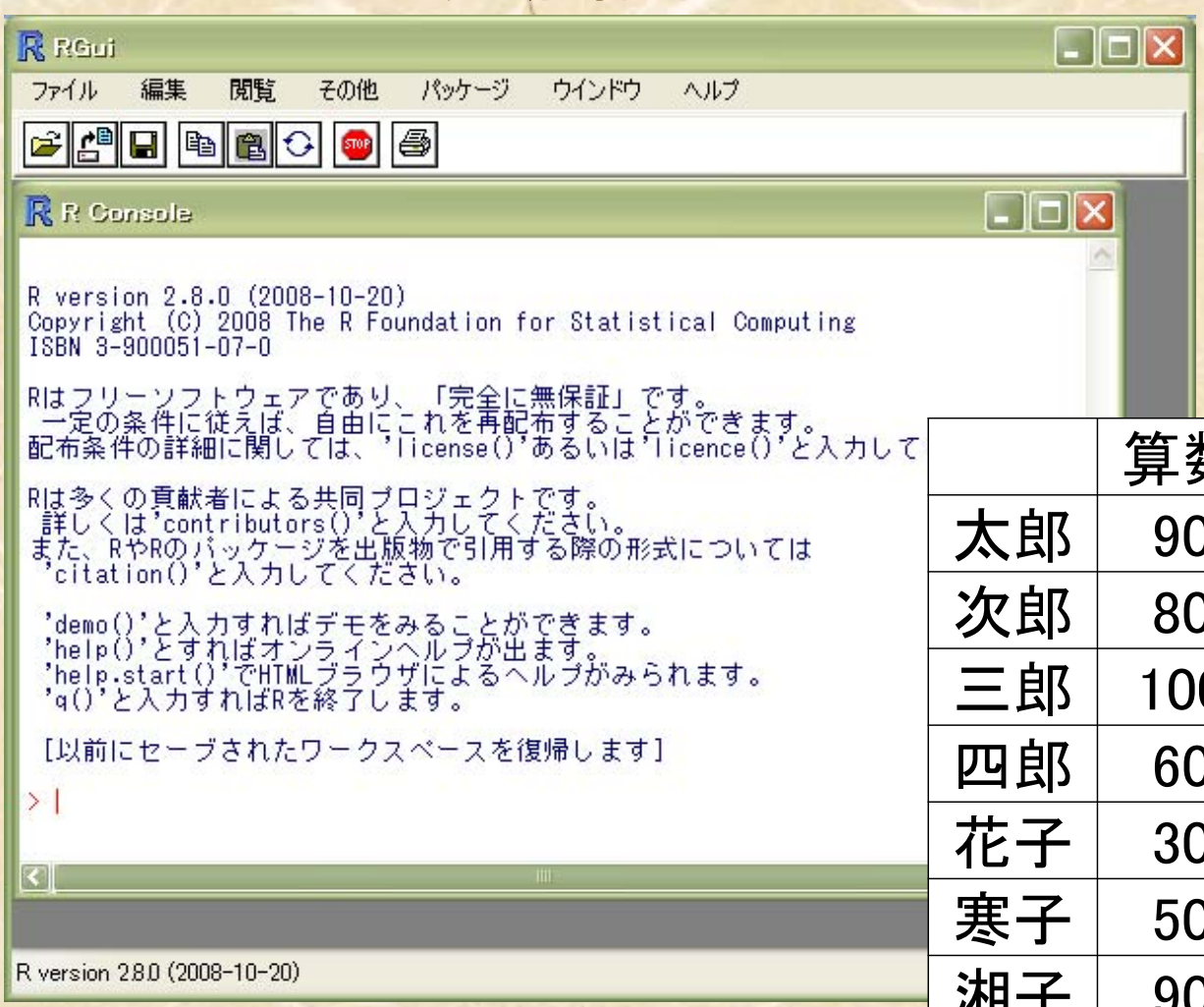


樹形図（デンドログラム）

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起動時画面



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

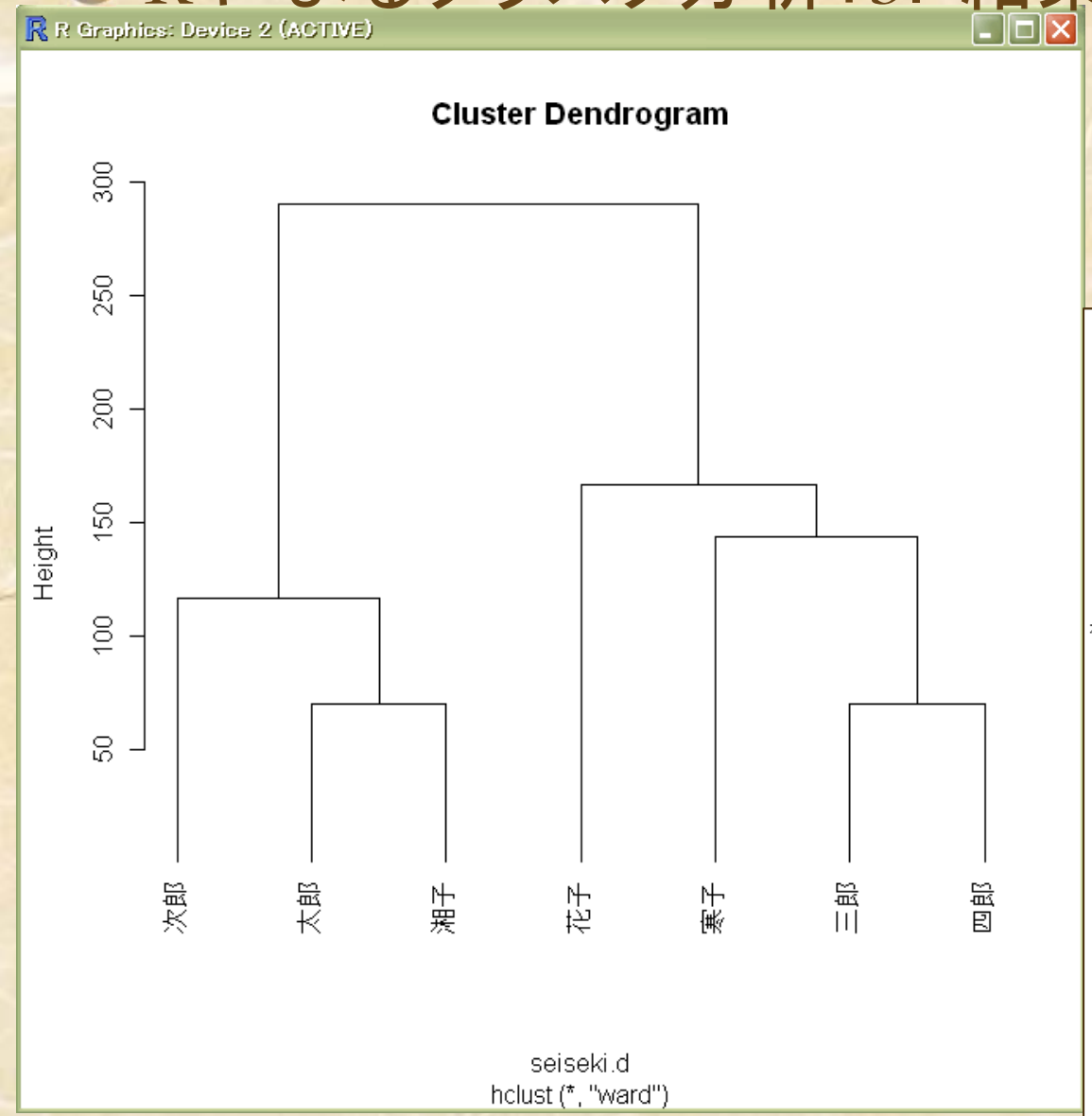
クラスタ化：ward法
類似度：manhattan距離　を確認！
対象の数：7

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

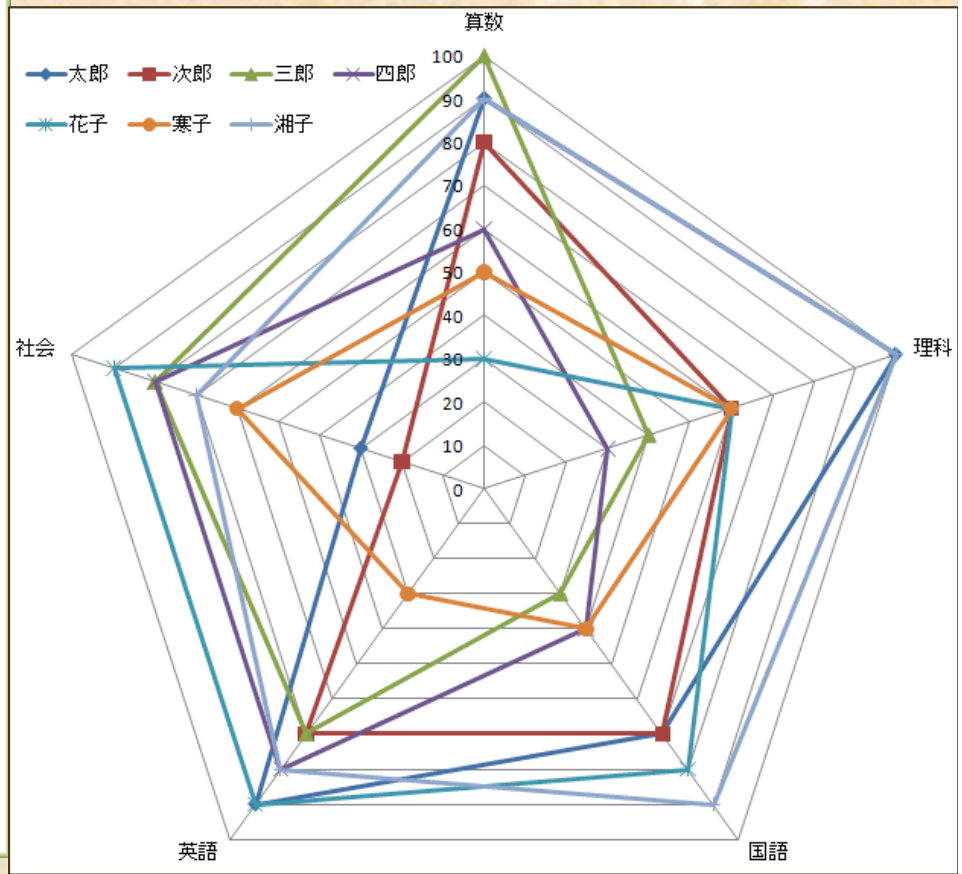
4. クラスタ分析の実施

- 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”)

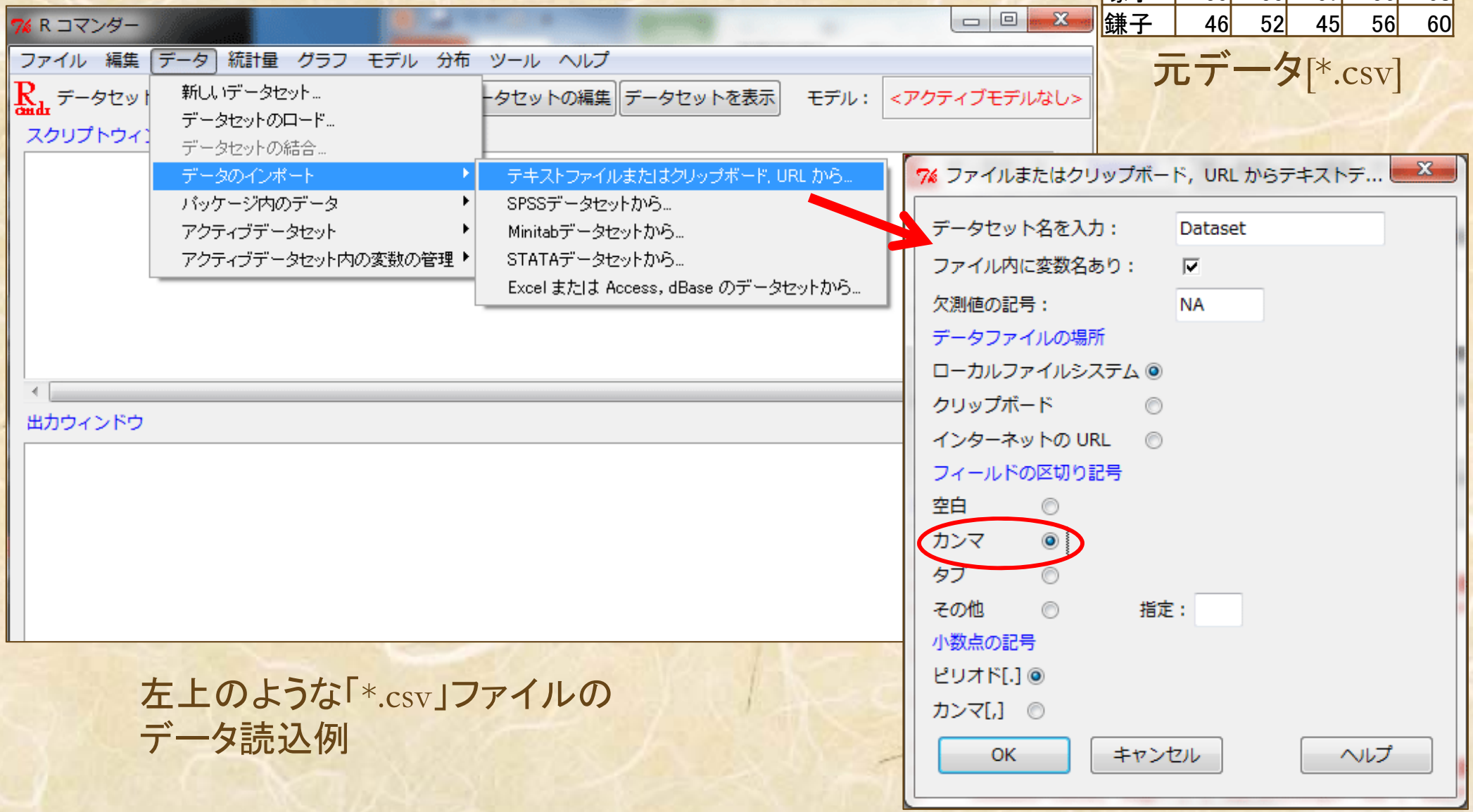
注）この2つの手法では「ユークリッド平方距離」を用いる（data.dがユークリッド距離の計算結果でその2乗を使用）

4. クラスタ分析の実施

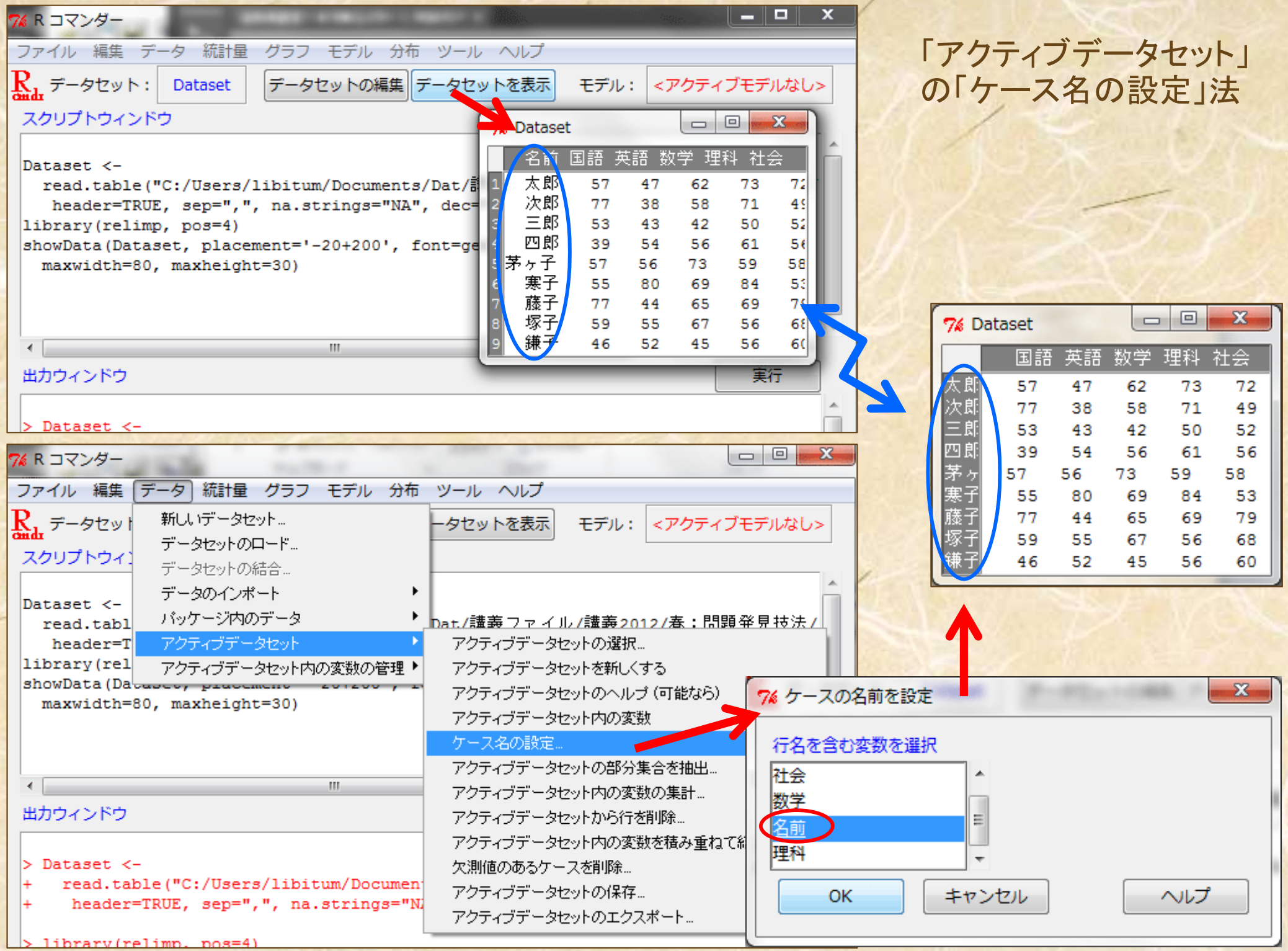
- R commanderによるクラスタ分析

名前	国語	英語	数学	理科	社会
太郎	57	47	62	73	72
次郎	77	38	58	71	49
三郎	53	43	42	50	52
四郎	39	54	56	61	56
茅ヶ子	57	56	73	59	58
寒子	55	80	69	84	53
藤子	77	44	65	69	79
塚子	59	55	67	56	68
鎌子	46	52	45	56	60

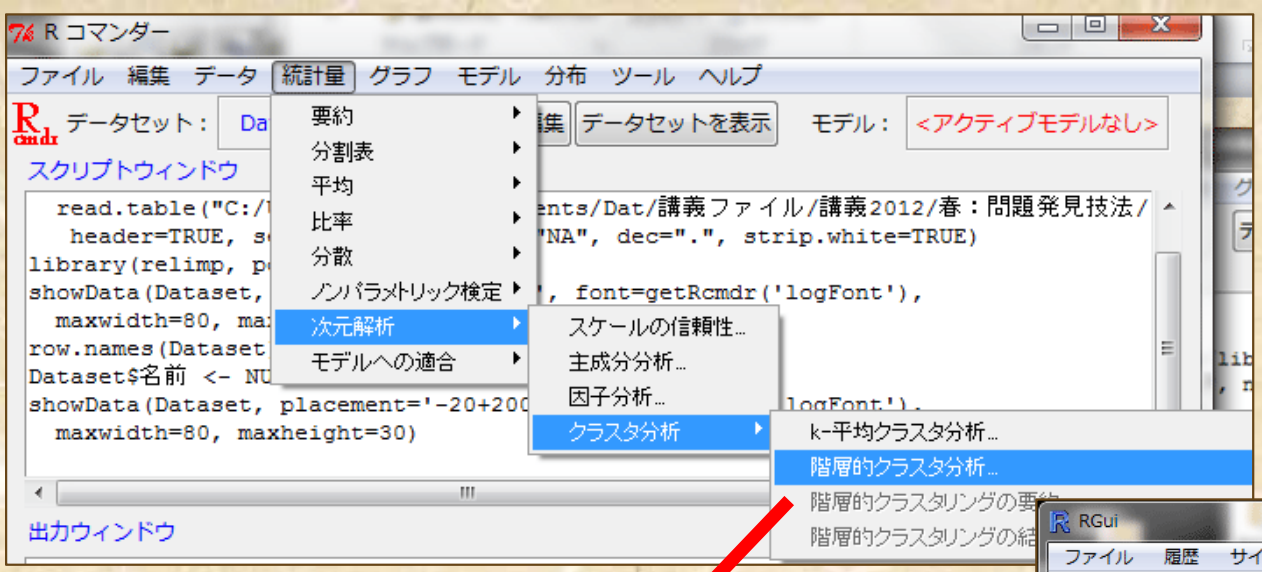
元データ[*.csv]

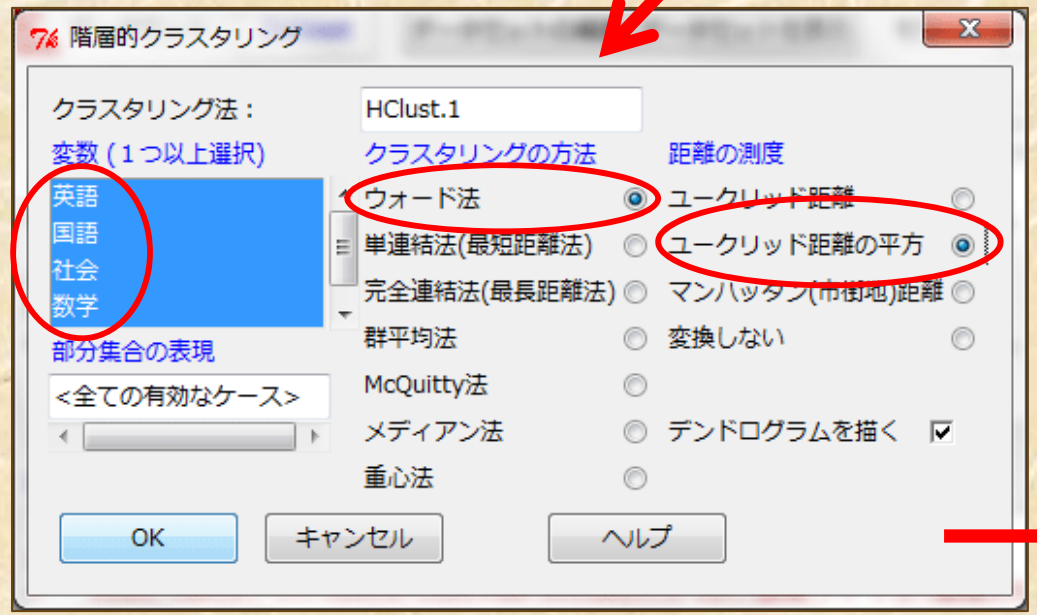


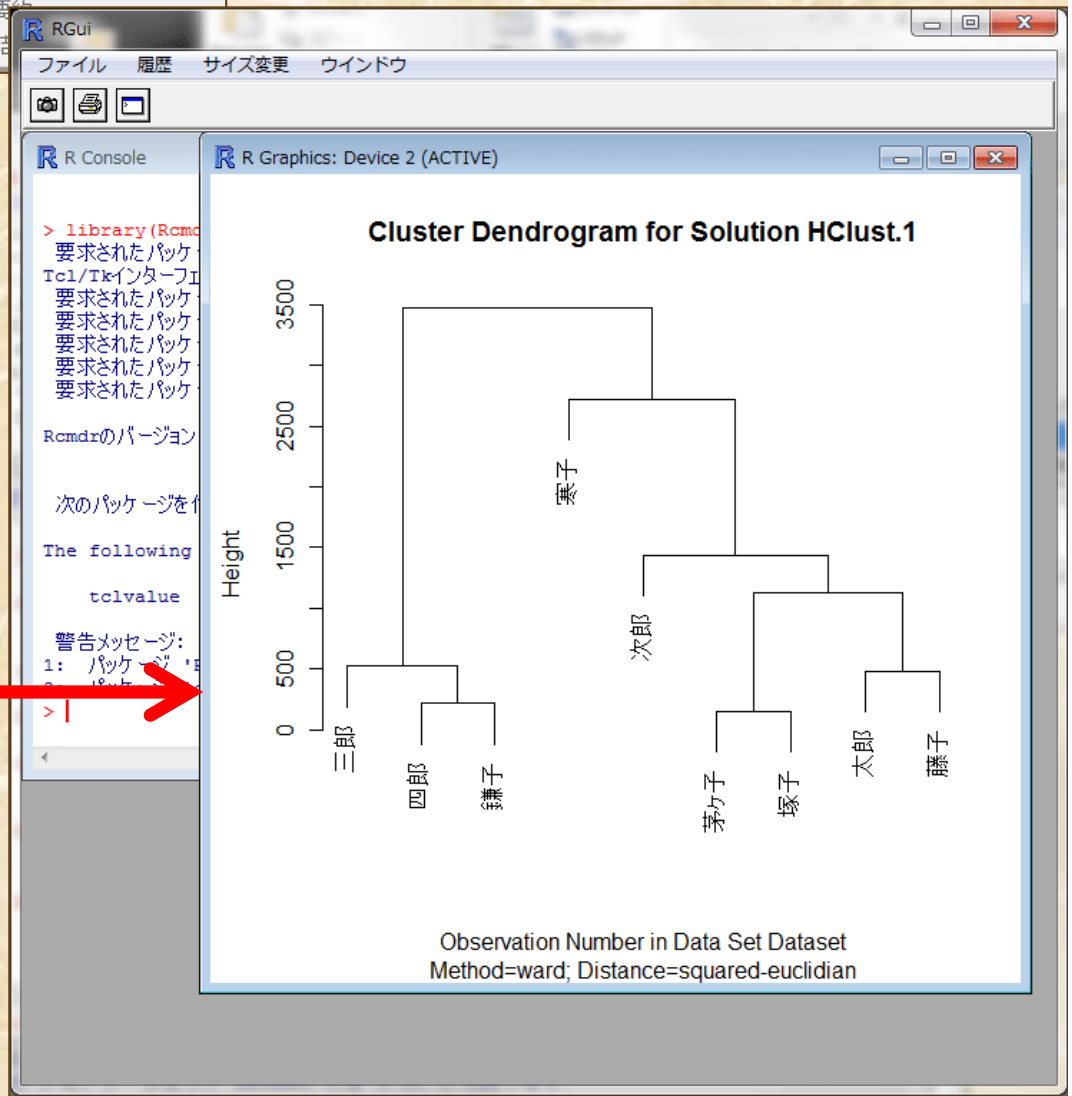
左上のような「*.csv」ファイルの
データ読込例


「アクティブデータセット」
の「ケース名の設定」法
R コマンダー
ファイル 編集 データ 統計量 グラフ モデル 分布 ツール ヘルプ
データセット： Dataset
データセットの編集
データセットを表示
モデル： <アクティブモデルなし>
スクリプトウィンドウ
Dataset <-
read.table("C:/Users/libitum/Documents/Dat/
header=TRUE, sep=",", na.strings="NA", dec=
library(relimp, pos=4)
showData(Dataset, placement='-20+200', font=ge
maxwidth=80, maxheight=30)
出力ウィンドウ
> Dataset <-
実行
Dataset
名前 国語 英語 数学 理科 社会
1 太郎 57 47 62 73 72
2 次郎 77 38 58 71 49
3 三郎 53 43 42 50 52
4 四郎 39 54 56 61 56
5 茅ヶ子 57 56 73 59 58
6 寒子 55 80 69 84 53
7 藤子 77 44 65 69 79
8 塚子 59 55 67 56 68
9 鎌子 46 52 45 56 60
Dataset
国語 英語 数学 理科 社会
太郎 57 47 62 73 72
次郎 77 38 58 71 49
三郎 53 43 42 50 52
四郎 39 54 56 61 56
茅ヶ 57 56 73 59 58
寒子 55 80 69 84 53
藤子 77 44 65 69 79
塚子 59 55 67 56 68
鎌子 46 52 45 56 60
R コマンダー
ファイル 編集 データ 統計量 グラフ モデル 分布 ツール ヘルプ
新しいデータセット...
データセットのロード...
データセットの結合...
データのインポート
パッケージ内のデータ
アクティブデータセット
アクティブデータセット内の変数の管理
アクティブデータセットの選択...
アクティブデータセットを新しくする
アクティブデータセットのヘルプ（可能なら）
アクティブデータセット内の変数
ケース名の設定...
アクティブデータセットの部分集合を抽出...
アクティブデータセット内の変数の集計...
アクティブデータセットから行を削除...
アクティブデータセット内の変数を積み重ねて
欠測値のあるケースを削除...
アクティブデータセットの保存...
アクティブデータセットのエクスポート...
ケースの名前を設定
行名を含む変数を選択
社会
数学
名前
理科
OK
キャンセル
ヘルプ

階層的クラスター分析の実施手順例







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

- クラスター分析の短所
  - どんな属性値を選んだらいいのか？
  - どの類似度（距離）測定法を選んだらいいのか？
  - どのクラスタ化更新法を選んだらいいのか？
  - データのスケーリング
  - 結果の解釈が困難な可能性がある

迷ったらとりあえず
「**ユークリッド平方距離**」
で

迷ったらとりあえず
「**ウォード法**」
で

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

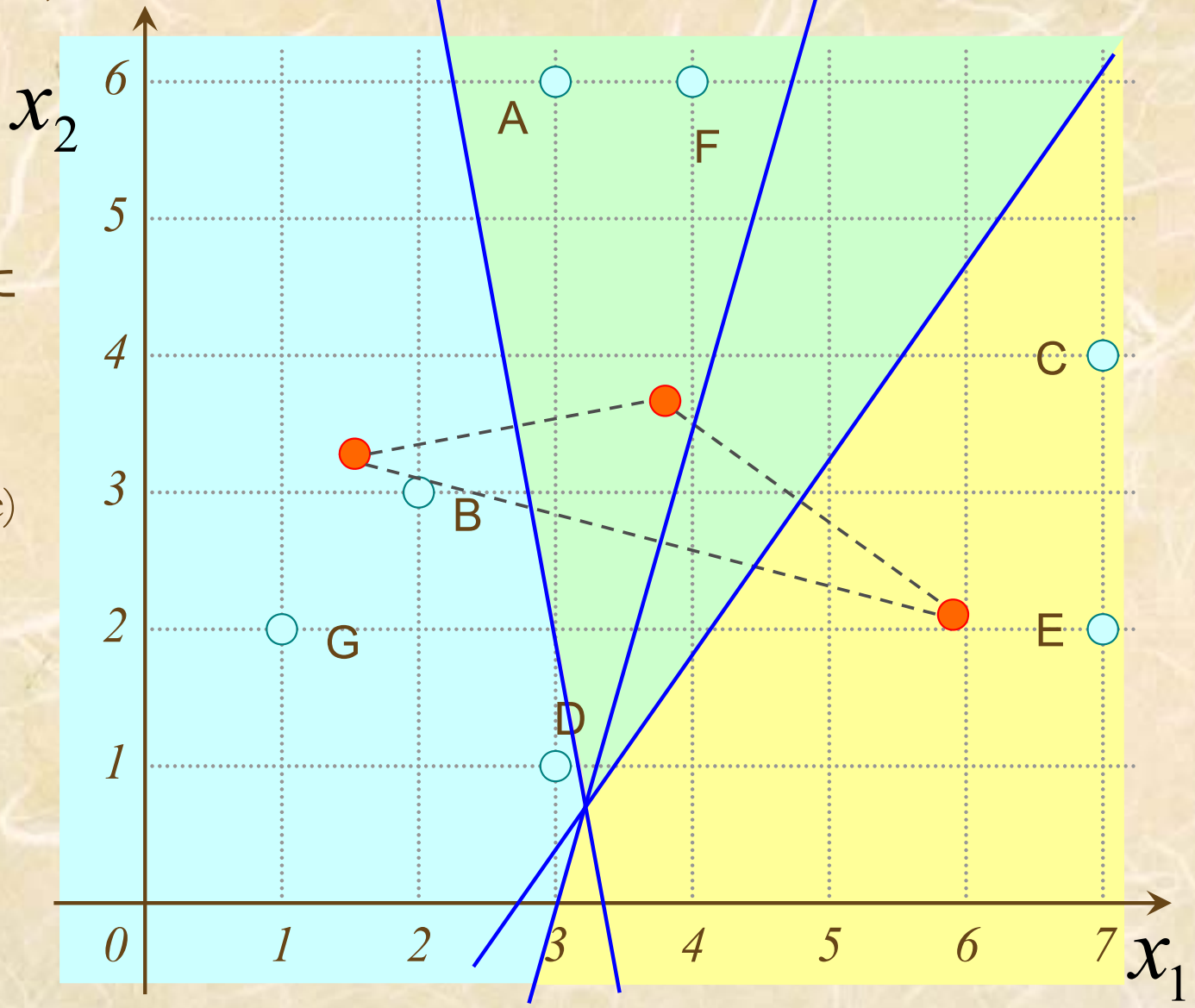
例：3つのクラスタ（K=3）に分類したい！としよう

6. 非階層的クラスタ分析

- K-means法

Step0：Kを決める
(ex. K:=3)
Step1：K個の種を置く

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)



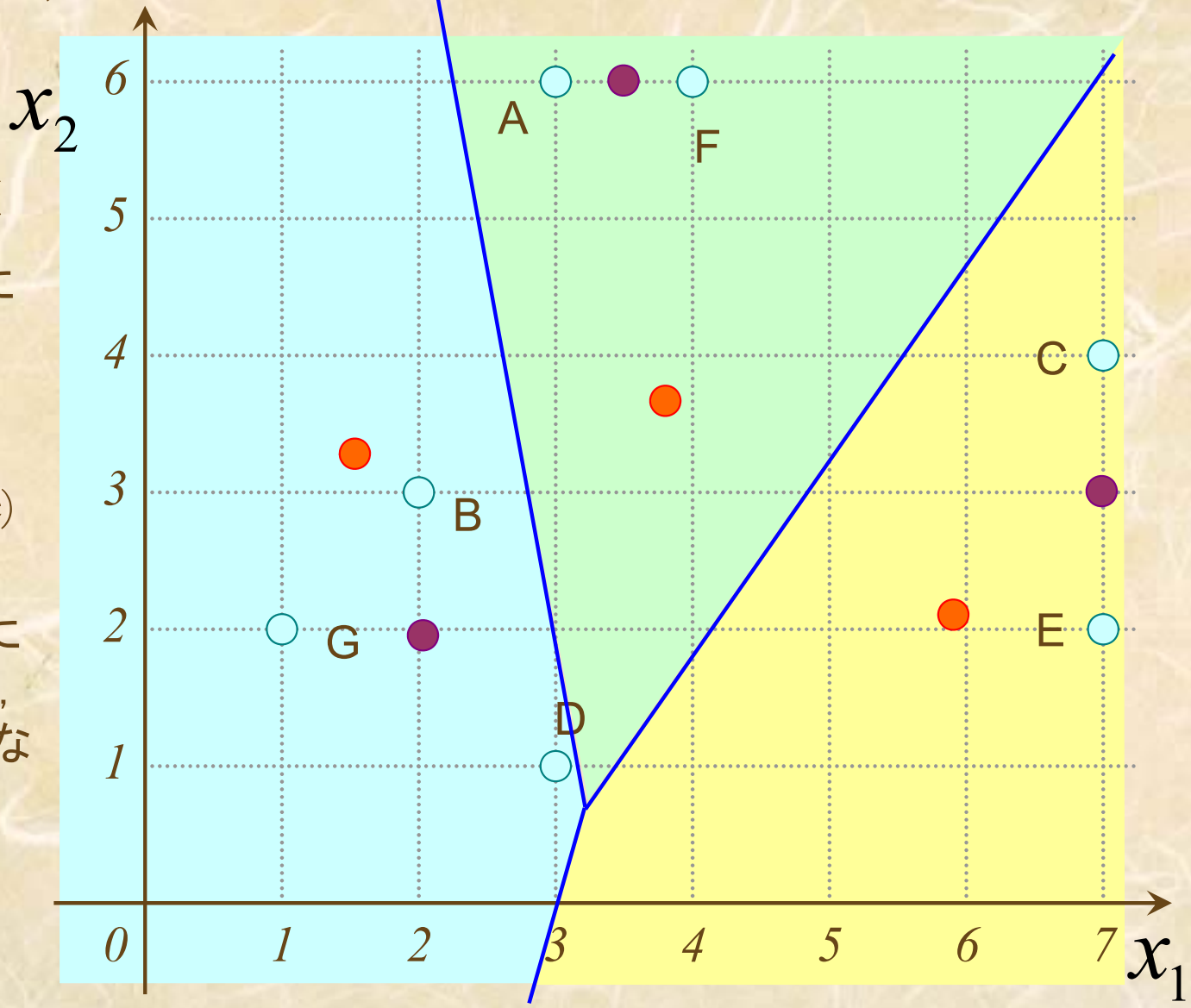
6. 非階層的クラスタ分析

- K-means法

Step0：Kを決める
(ex. K:=3)
Step1： K個の種を置く

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.



6. 非階層的クラスタ分析

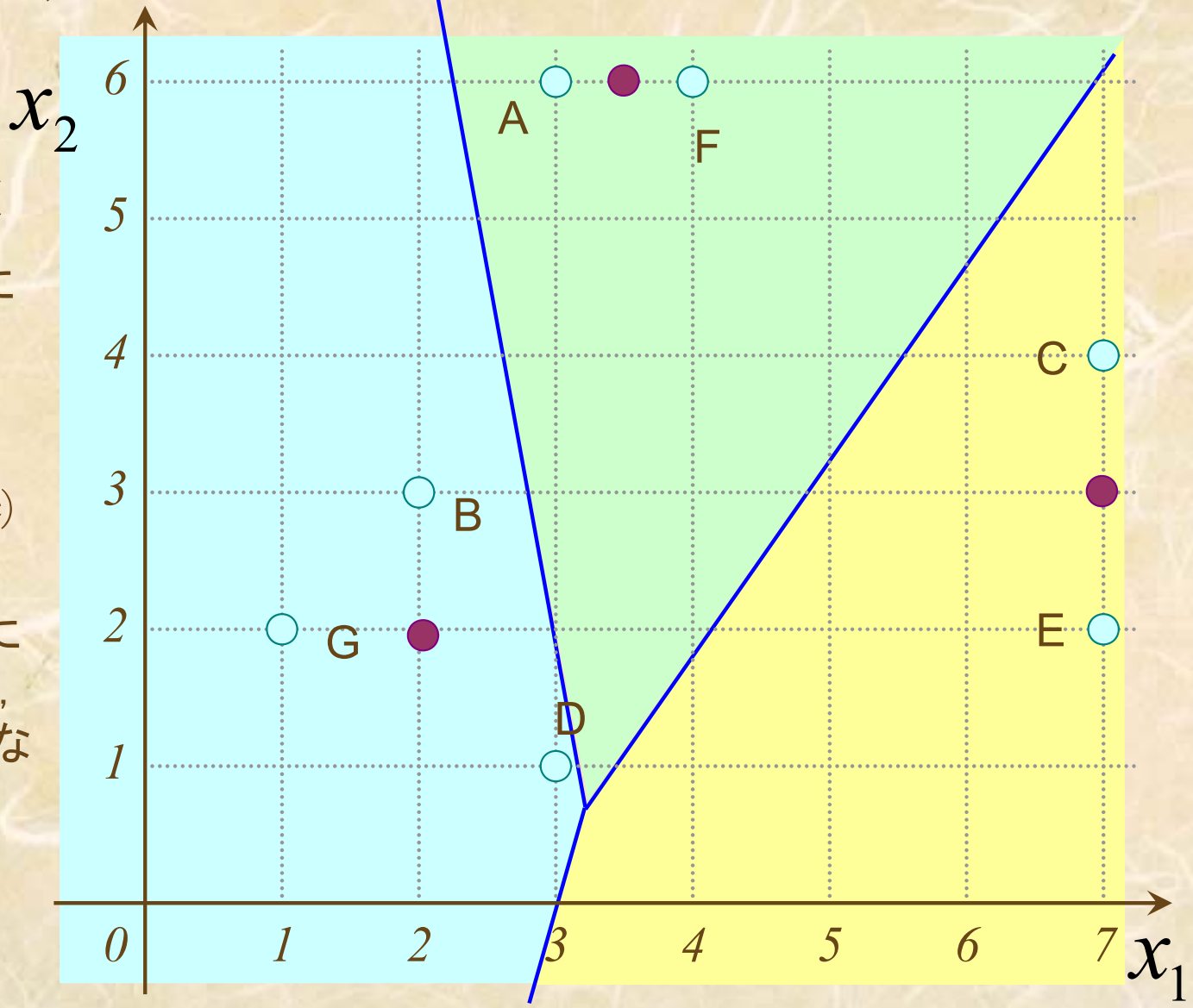
- K-means法

Step0：Kを決める
(ex. K:=3)
Step1： K個の種を置く

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



6. 非階層的クラスタ分析

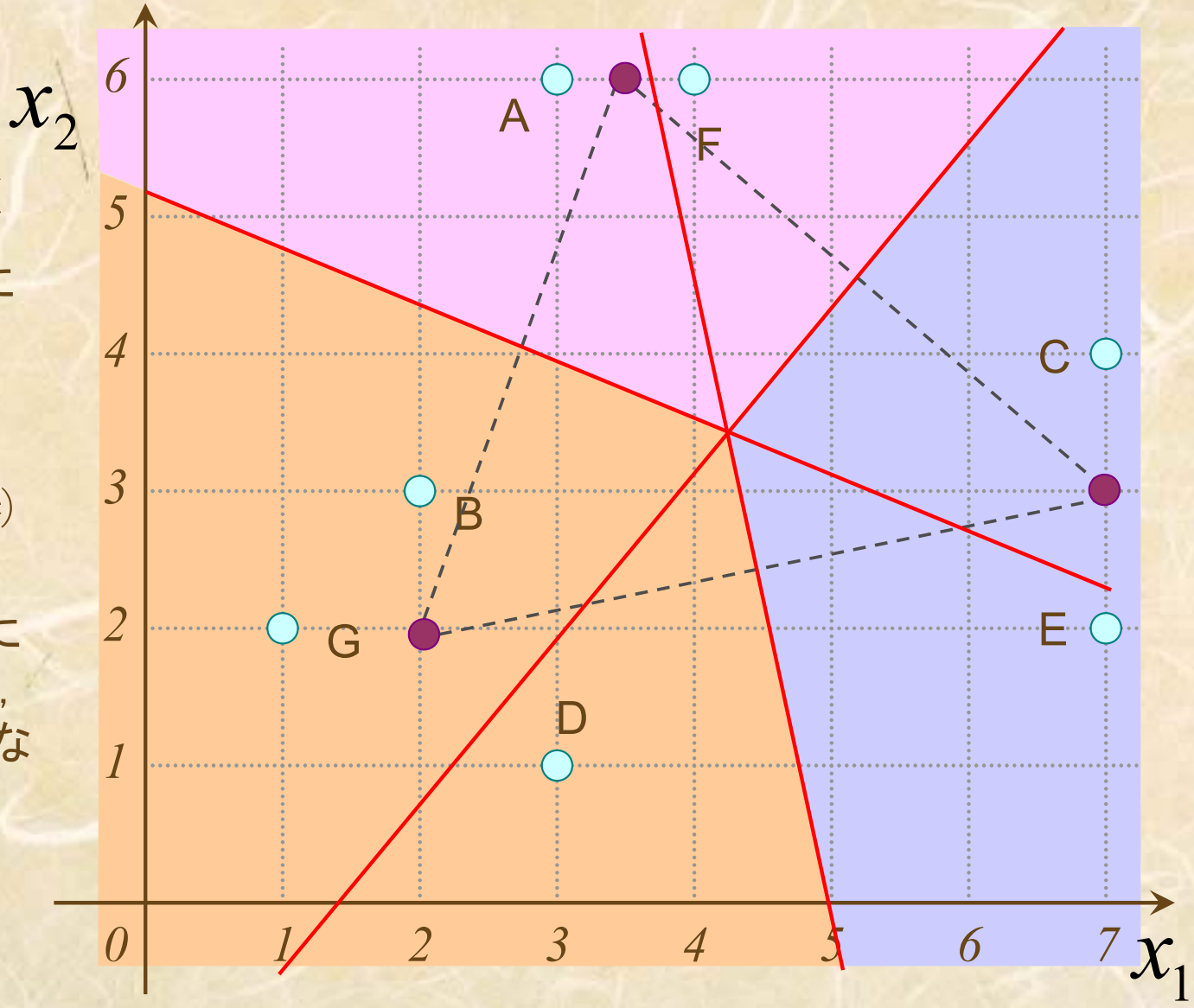
- K-means法

Step0：Kを決める
(ex. K:=3)
Step1： K個の種を置く

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



6. 非階層的クラスタ分析

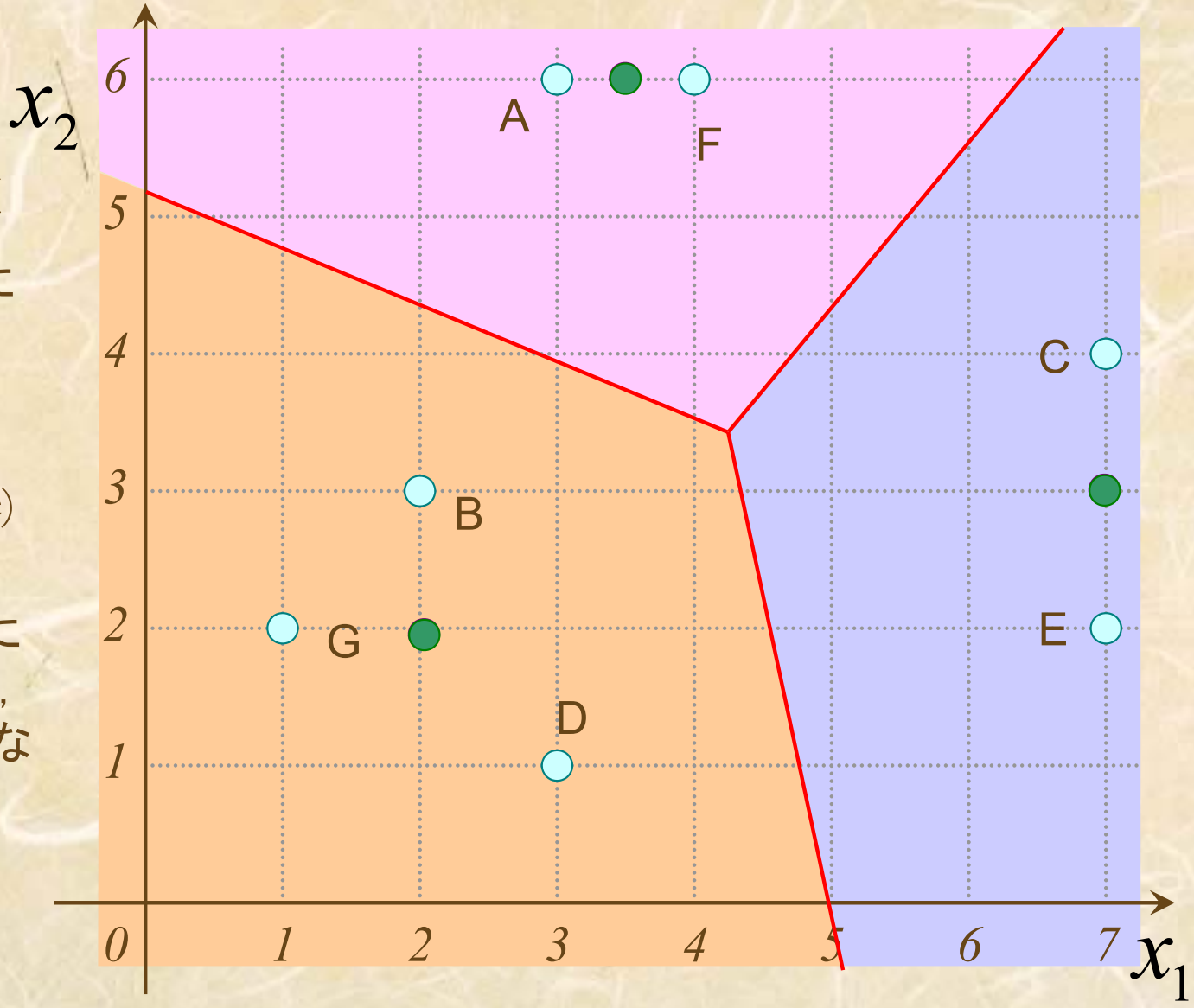
- K-means法

Step0：Kを決める
(ex. K:=3)
Step1： K個の種を置く

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



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"
> |
```

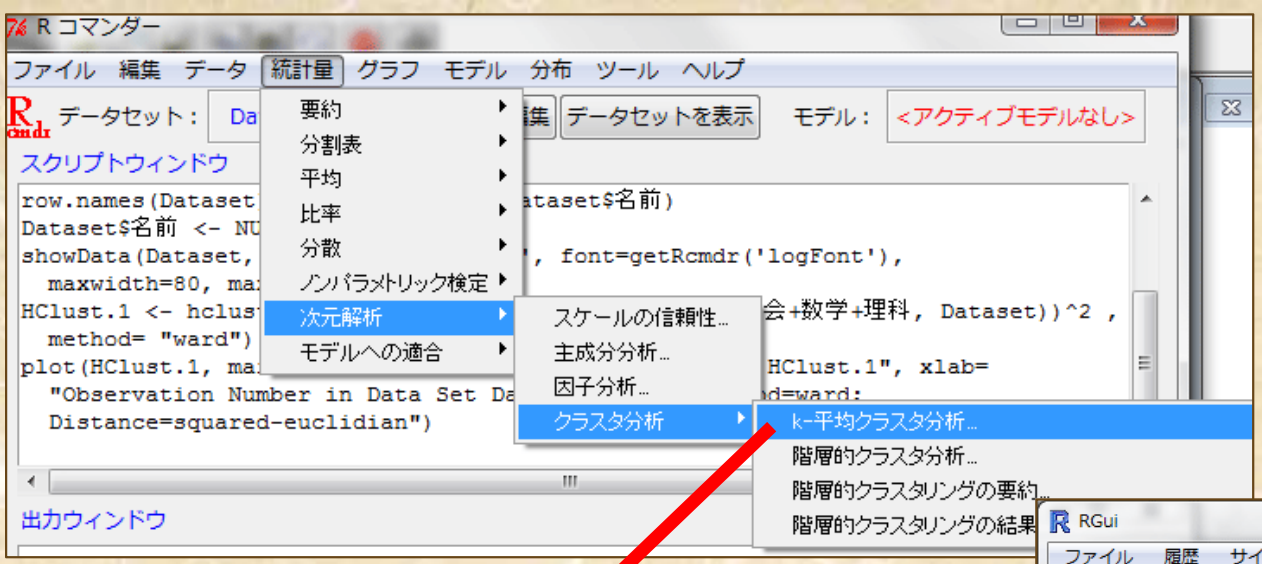
K-means法でクラスタ数を3として分析を実施し，
変数seiseki.kmに格納

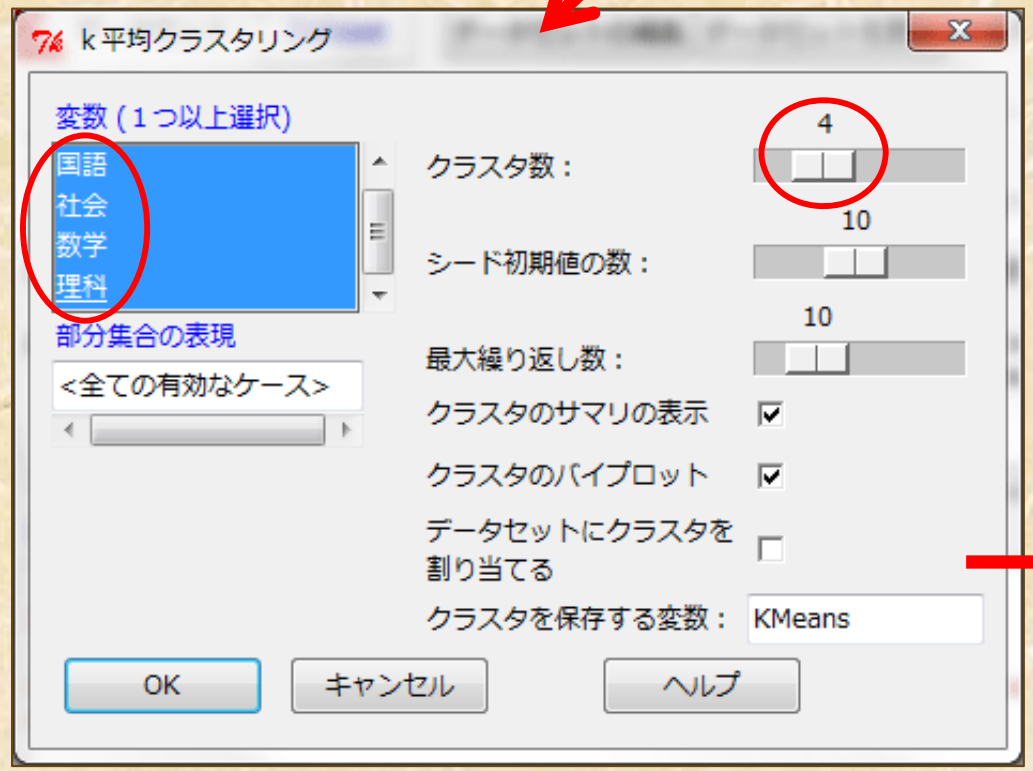
結果：
cluster1：花子
cluster2：三郎，四郎，寒子
cluster3：太郎，次郎，湘子

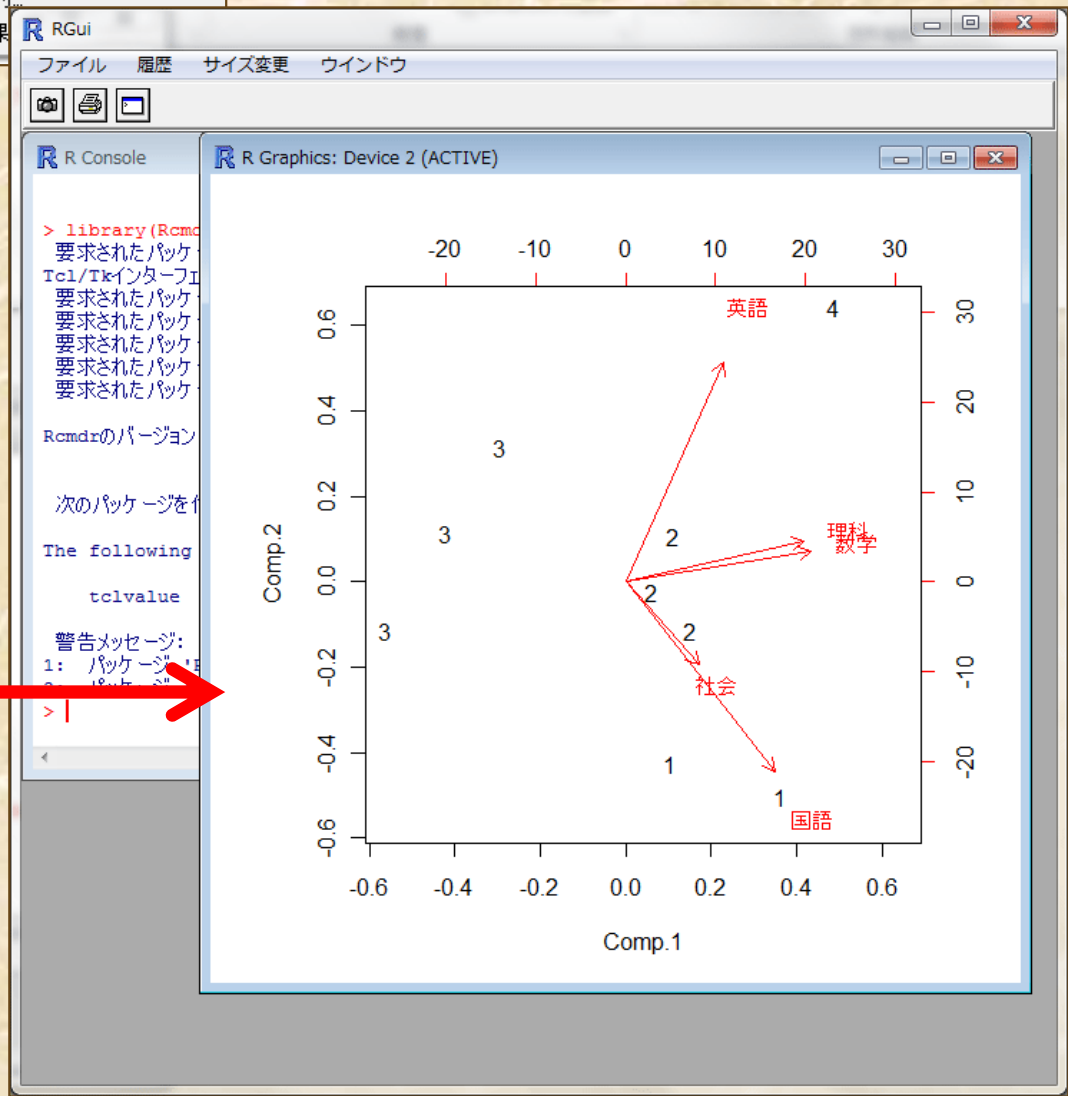
cf. 元データ

	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

R commander による
非階層的クラスター分析（K-means法）の実施手順例







演習

- 類似度を**マンハッタン距離**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)
- 青木繁伸『Rによる統計解析』オーム社(2009)
- 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)
- 金明哲『Rによるデータサイエンス』森北出版(2007)
- 新納浩幸『Rで学ぶクラスタ解析』オーム社(2007)