2017/6/30 Fri.

問題解決技法入門

3. Data Analysis

3. Cluster Analysis using R

堀田 敬介

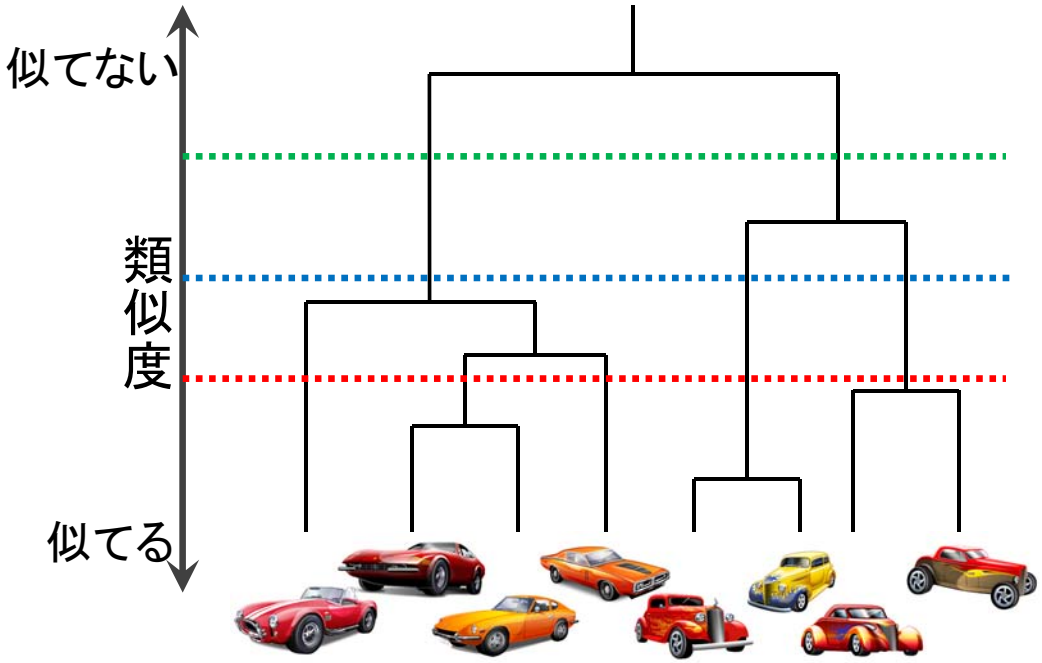
クラスター分析とは

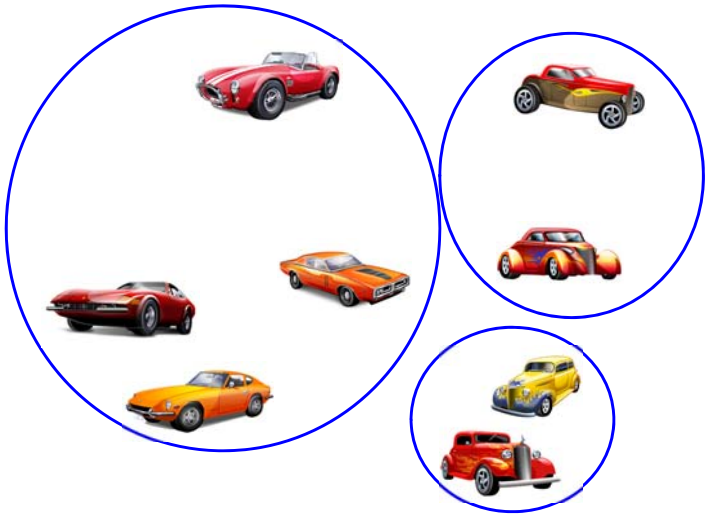
- クラスタ分析とは？
  - 複数の対象（もの，変数など）を，その**属性**によって**類似度（similarity）**をはかり，均質な集団（cluster）に分類する方法の総称

どれとどれが似てる？
（同じクラスター？）

クラスター分析とは

- 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て（or 決まっていて）クラスタリングを行う

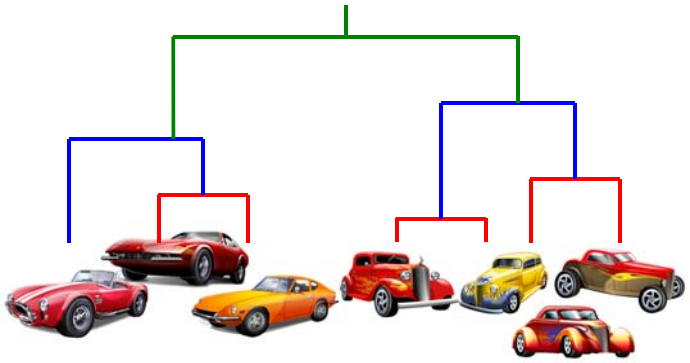


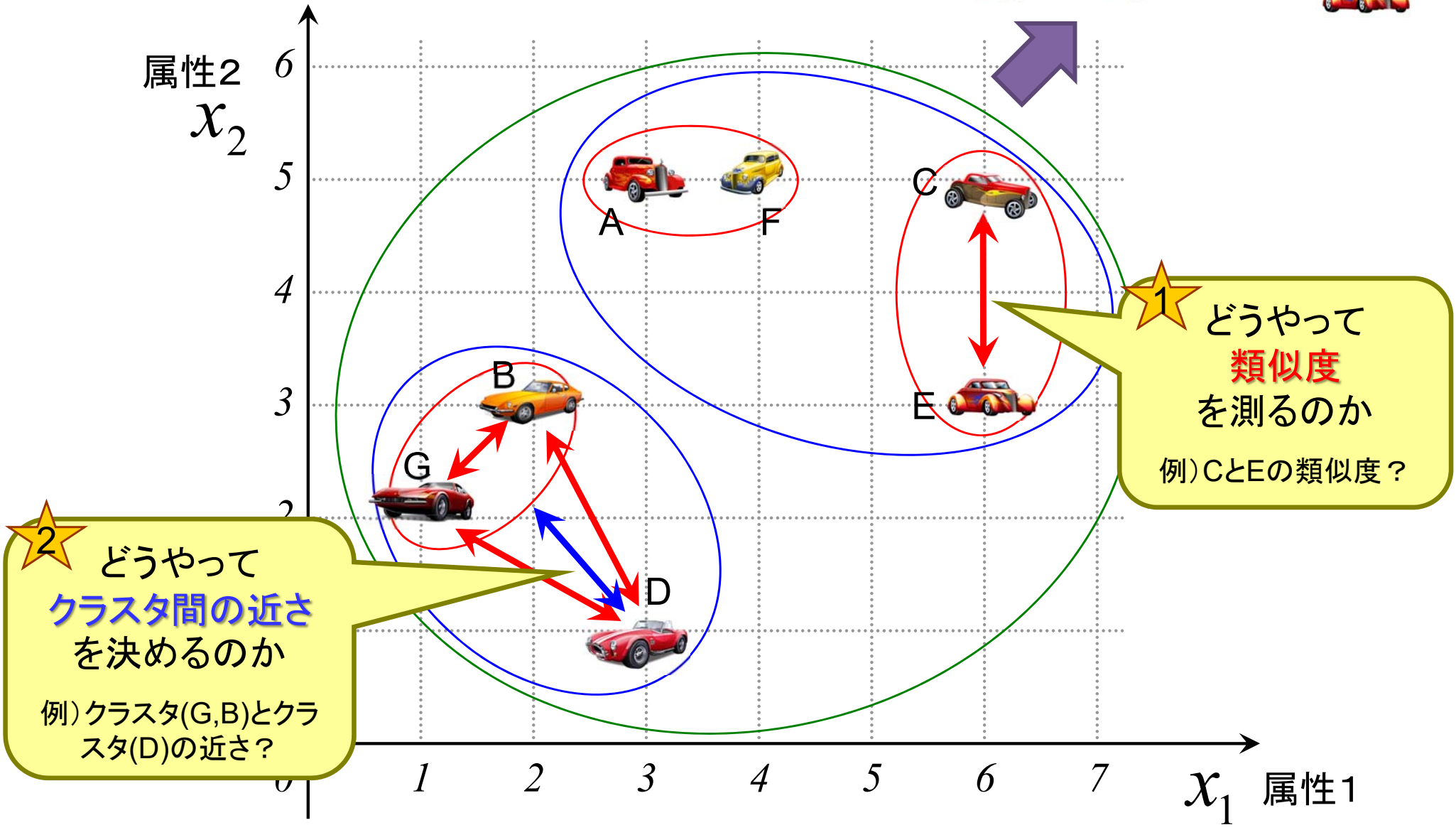


例：3つのクラスタに分類

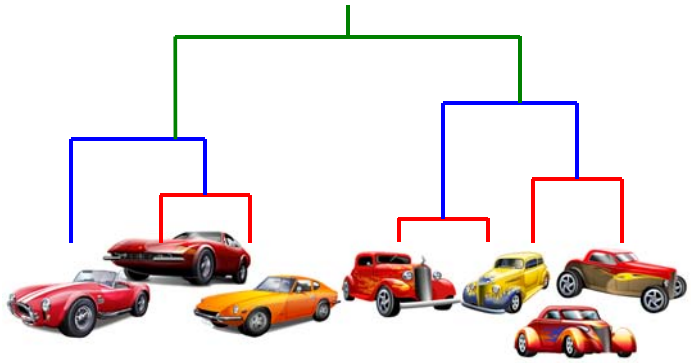
1. クラスタ分析概要

- 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）

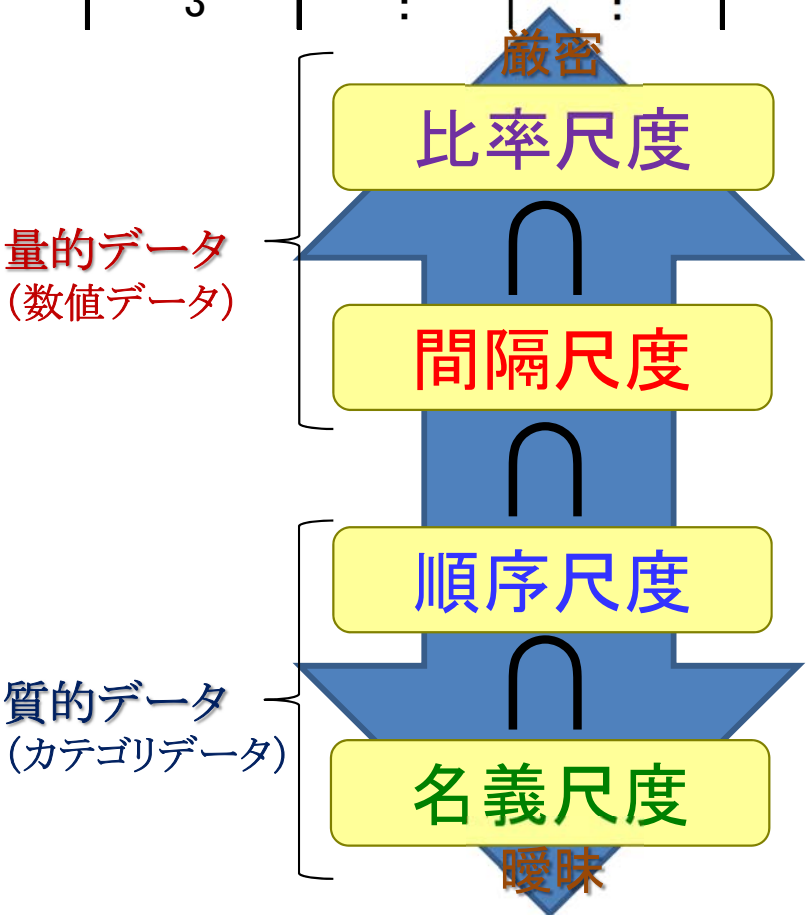
- 距離【間隔尺度】
  - ユークリッド距離
  - ユークリッド平方距離
  - 重み付きユークリッド距離
  - マンハッタン距離
  - ミンコフスキー距離
  - マハラノビス汎距離
- 相関【間隔尺度】
  - Pearsonの積率相関係数
  - ベクトル内積
- 相関【順序尺度】
  - Spearmanの順位相関係数
  - Kendallの順位相関係数
- 距離【名義尺度 [0, 1] 】
  - 類似比
  - 一致係数
  - Russel-Rao係数
  - Rogers-Tanimoto係数
  - Hamann係数
  - ファイ係数
- 変量間類似度【名義尺度】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

学籍番号	氏名	性別	生年月日	身長	体重	問題発見技法成績	…
名義尺度	名義尺度	名義尺度	名義尺度 順序尺度 間隔尺度 比率尺度	名義尺度 順序尺度 間隔尺度 比率尺度	名義尺度 順序尺度 間隔尺度 比率尺度	名義尺度 順序尺度	
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	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	



量的データ
(数値データ)

質的データ
(カテゴリデータ)

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

差に意味がある
例）温度　気温20℃より30℃の方が10℃高い

順序関係がある(順序に意味がある)
例）成績評価　（A > B > C > D）

単なる分類，区別ができる
例）名前，性別

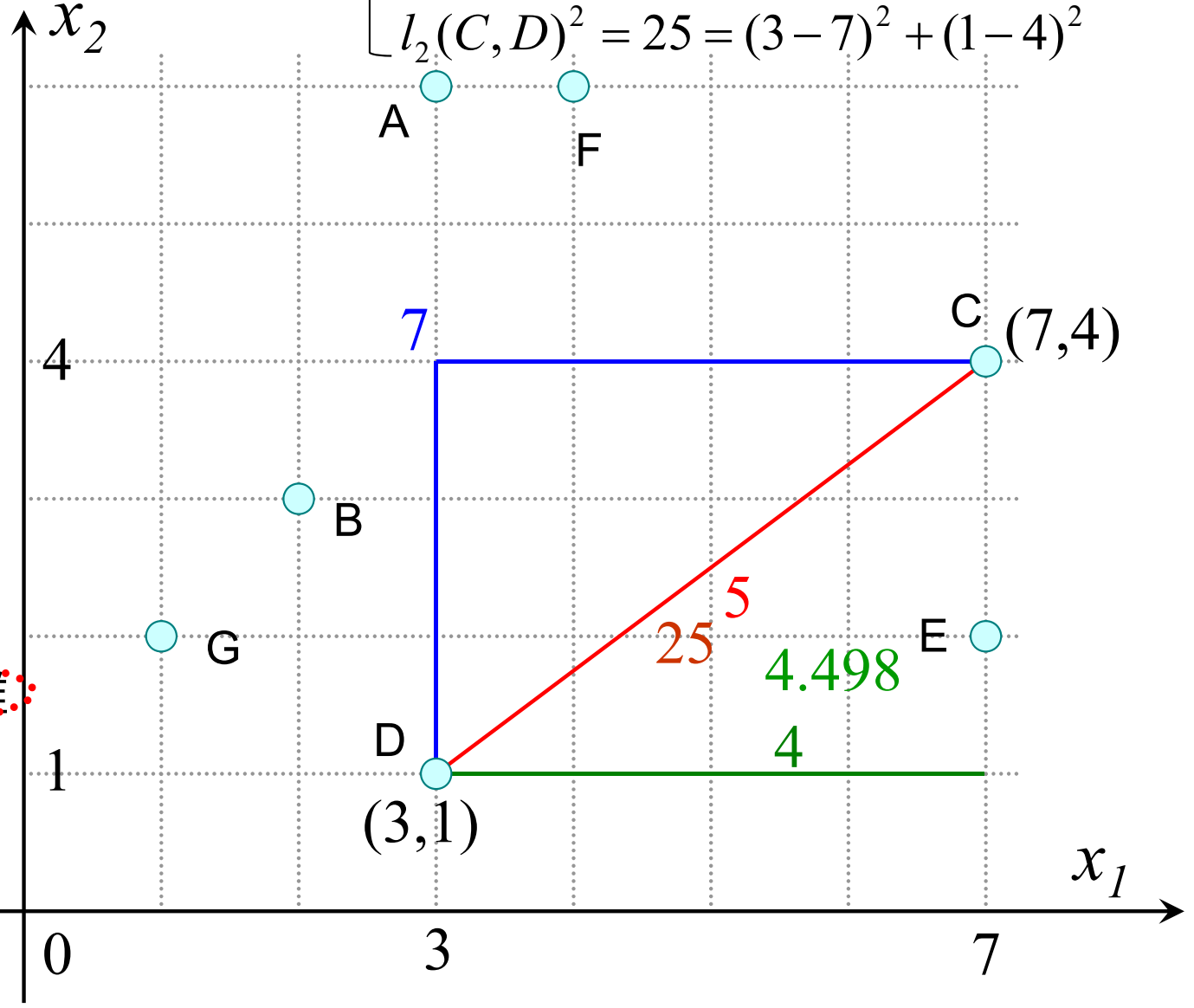
2. 類似度の測定

- 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

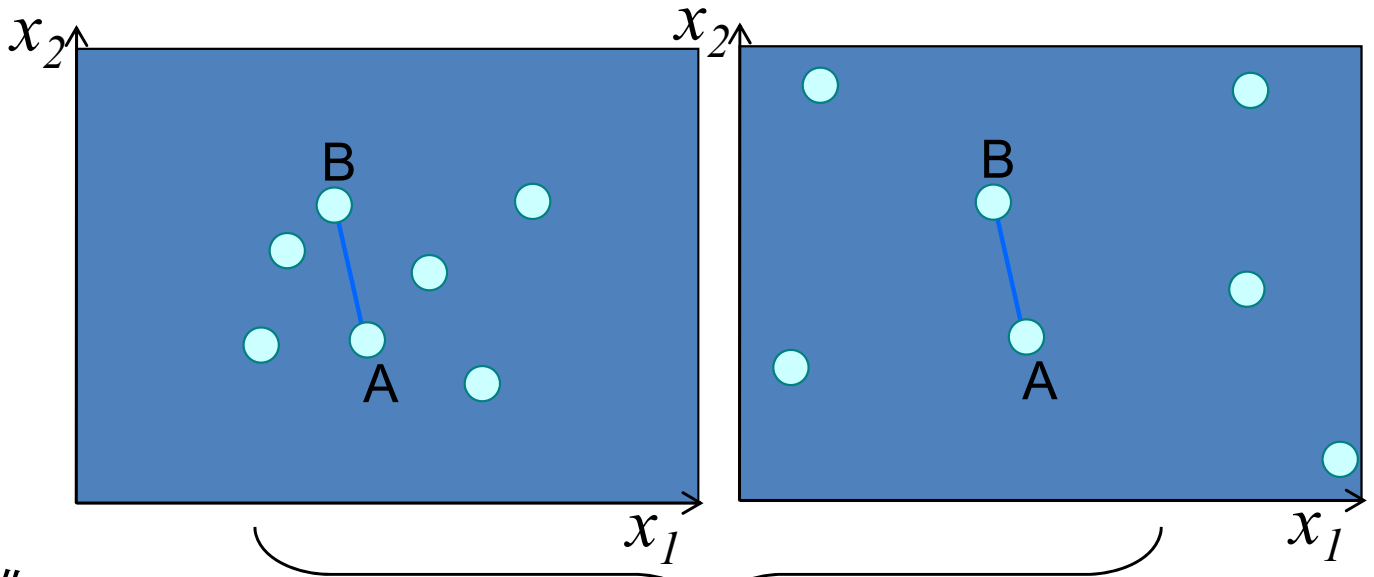
（注：各ノルムとは2変量の差ベクトルに対するノルム）

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



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，

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

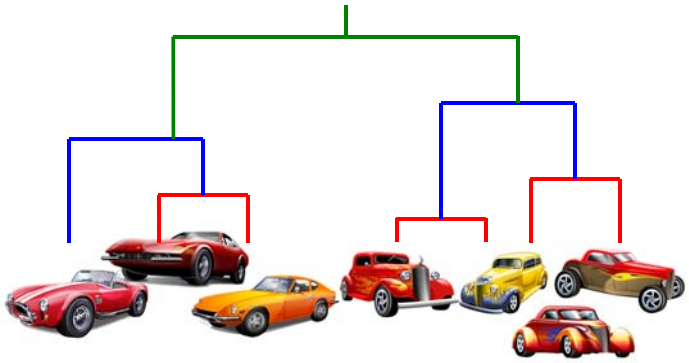
- μ_1, μ_2 はそれぞれ x_1, x_2 の平均
- σ_1, σ_2 はそれぞれ x_1, x_2 の標準偏差
- ρ は x_1, x_2 の相関係数

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

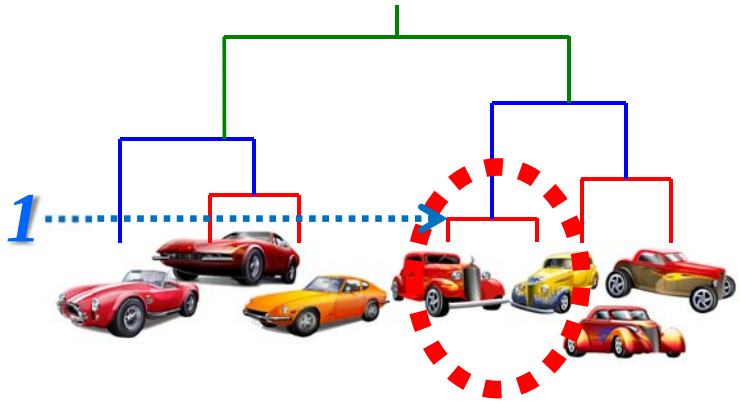


- どうやって類似度を測るか？
  - 例：ユークリッド平方距離

									
			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							

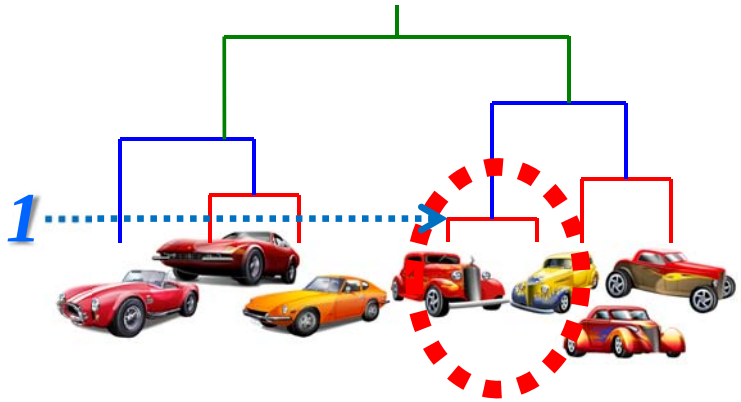
2. 類似度の測定

- 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

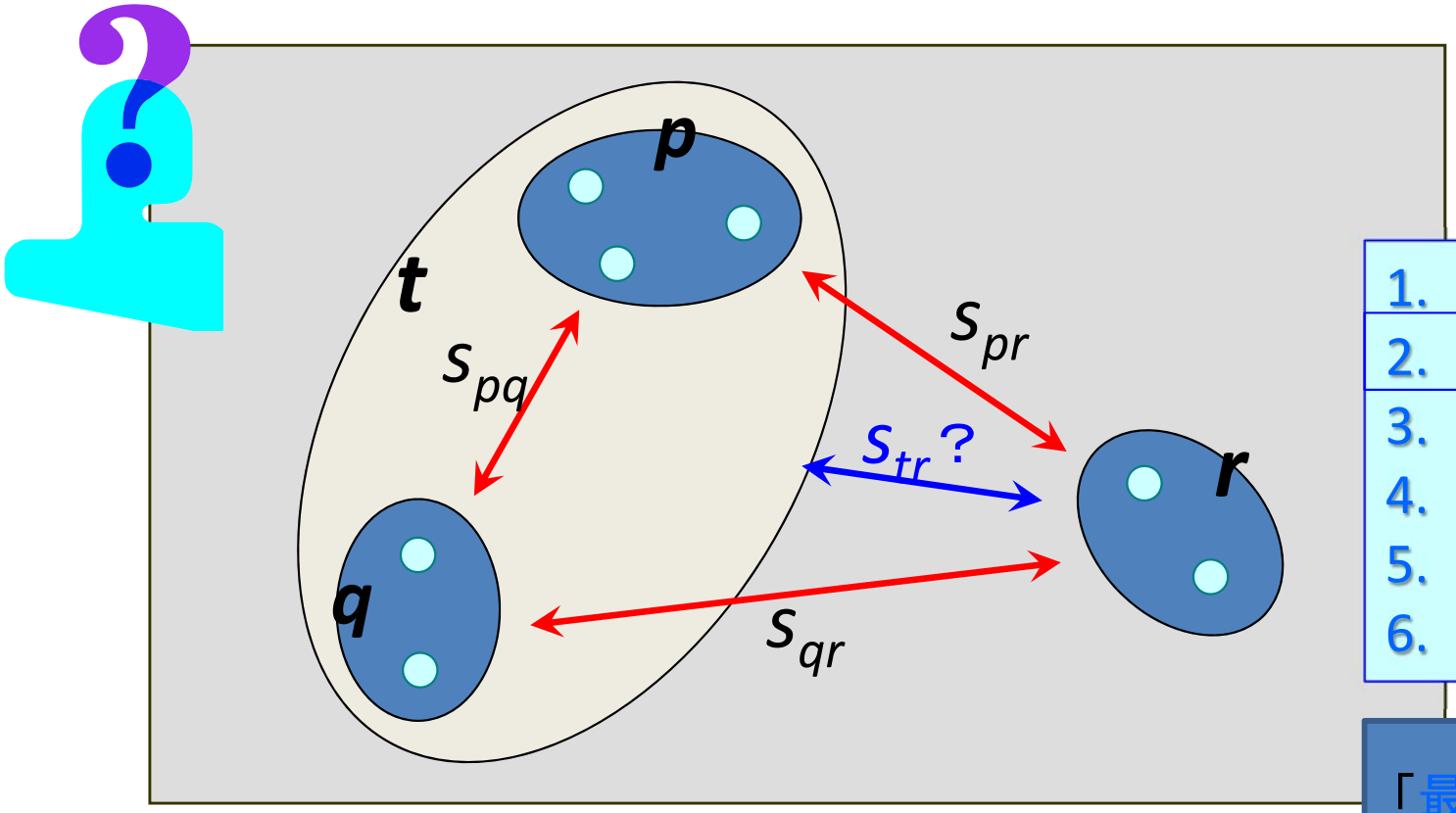


- どうやって類似度を更新するか？

			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？



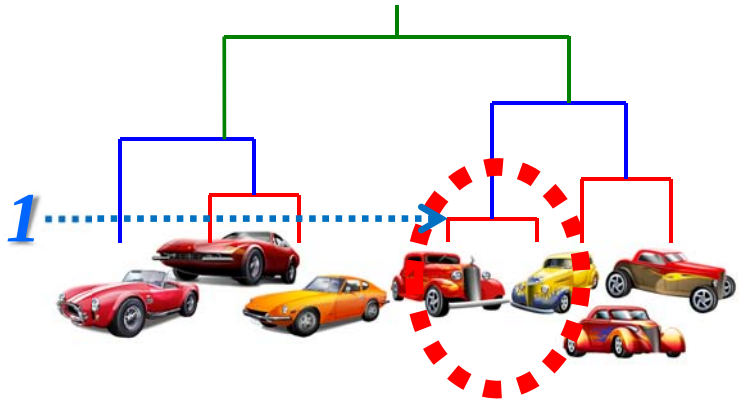
（s_{pr} : クラスタp, rの類似度）

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

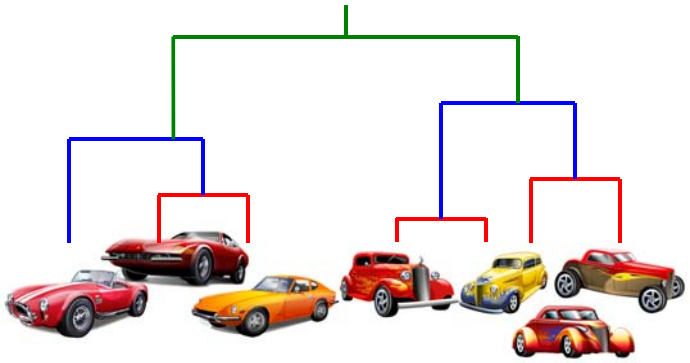
- どうやって類似度を更新するか？



			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？

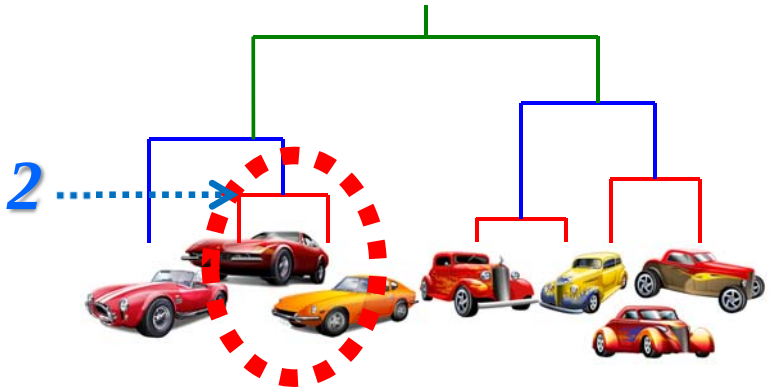


								
			3	1	2	3:4	$\frac{1+1}{1+1+1}16+\frac{1+1}{1+1+1}17-\frac{1}{1+1+1}1$	
	x_1	x_2	1	2	3	5:5	$\frac{1+1}{1+1+1}13+\frac{1+1}{1+1+1}18-\frac{1}{1+1+1}1$	
	3	1		5	5	21.7	25	13
	1	2			2	20.3	34	26
	2	3				8.3	20	16
	3:4	5:5	$\frac{1+1}{1+1+1}5+\frac{1+1}{1+1+1}8-\frac{1}{1+1+1}$			1	8.3	13.7
	6	5						4
	6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

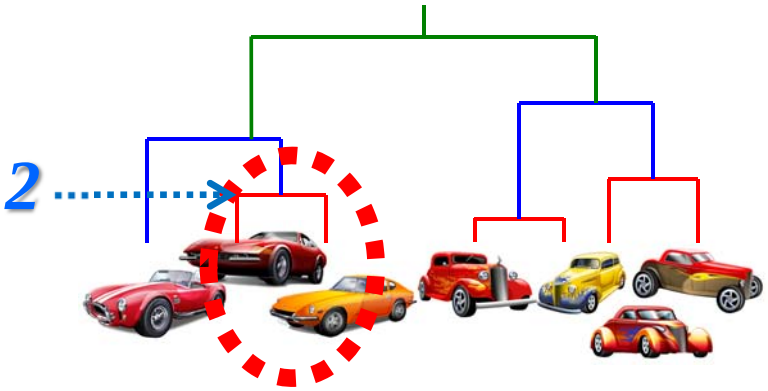
- どうやって類似度を**更新**するか？



	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

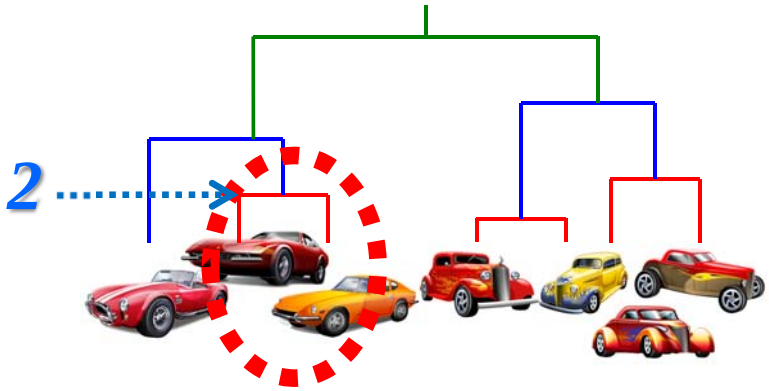
- どうやって類似度を**更新**するか？



	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？

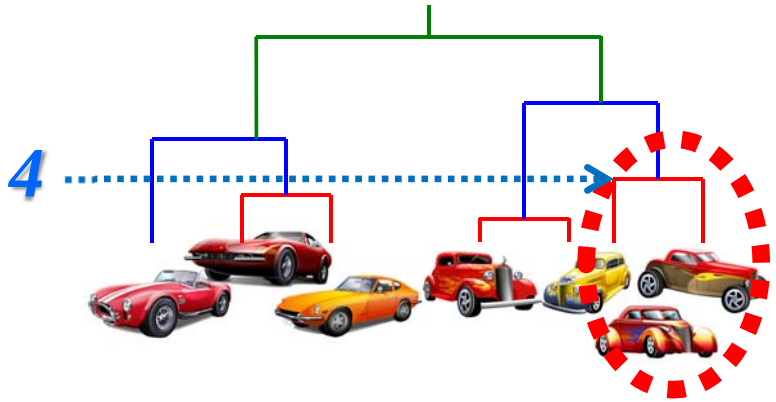


	x_1	x_2					
						$\frac{1+2}{1+1+2}20.3+\frac{1+2}{1+1+2}8.3-\frac{2}{1+1+2}2$	
				6	21.7	25	13
				2	20.5	35.3	27.3
						8.3	13.7
			$\frac{1+1}{1+1+1}34+\frac{1+1}{1+1+1}20-\frac{1}{1+1+1}2$				4

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

3. クラスタ化の方法

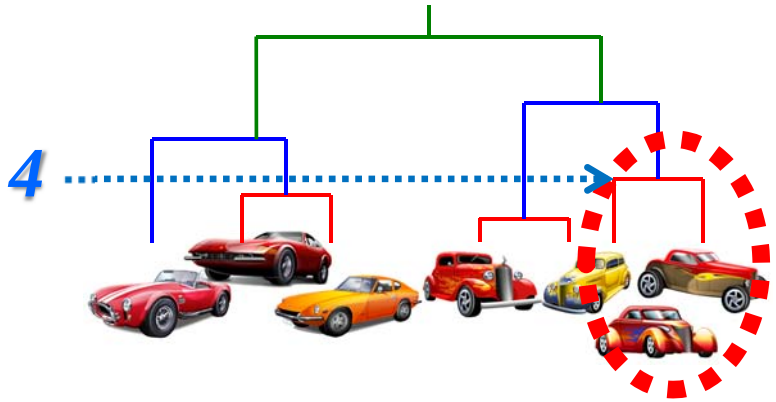
- どうやって類似度を**更新**するか？



	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

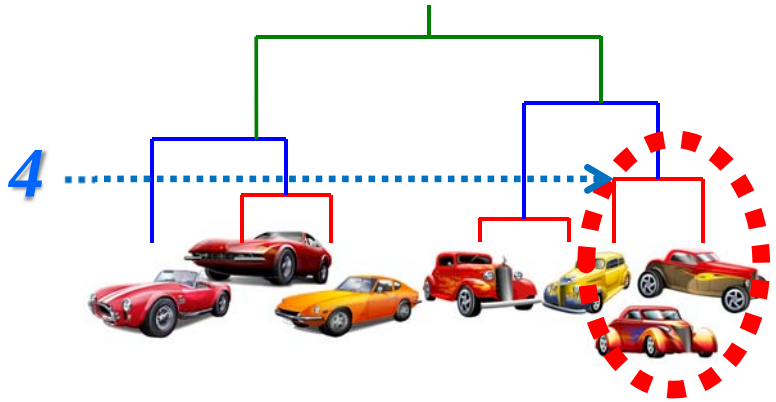
- どうやって類似度を**更新**するか？



	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？

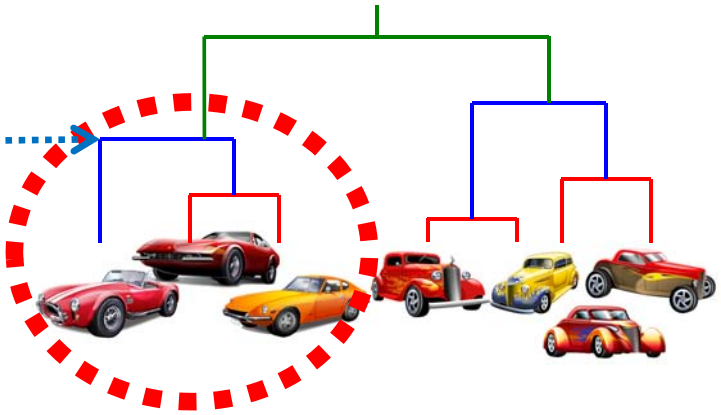


	x_1	x_2				
				6	21.7	24
					20.5	45
						14.5
						4

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

3. クラスタ化の方法

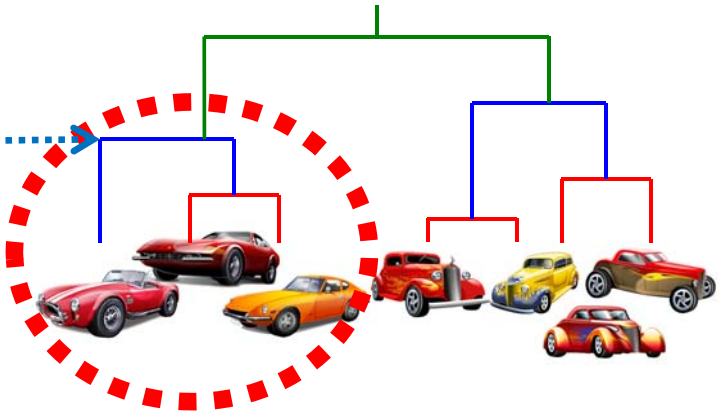
- どうやって類似度を**更新**するか？



						
	x_1	x_2				
				6	21.7	24
					20.5	45
						14.5
						

3. クラスタ化の方法

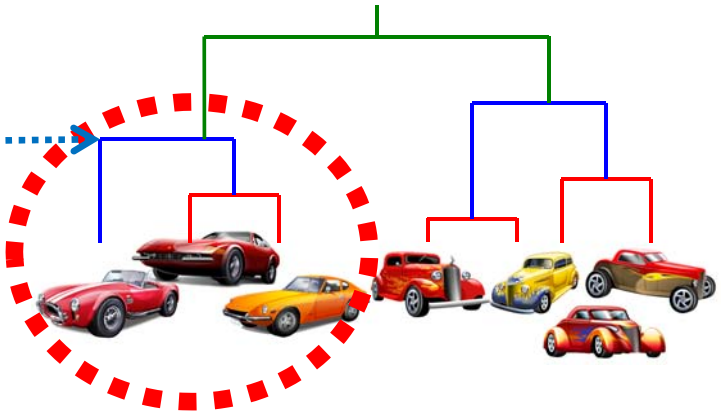
- どうやって類似度を**更新**するか？



					
	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？



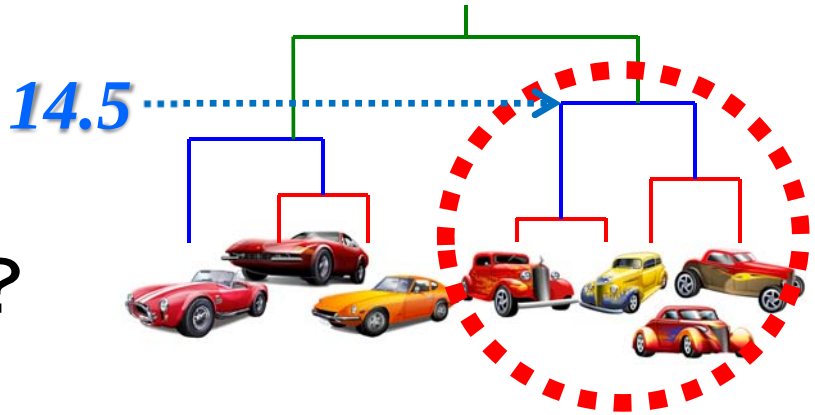
	x_1	x_2			
			6	27	48
					14.5

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

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

3. クラスタ化の方法

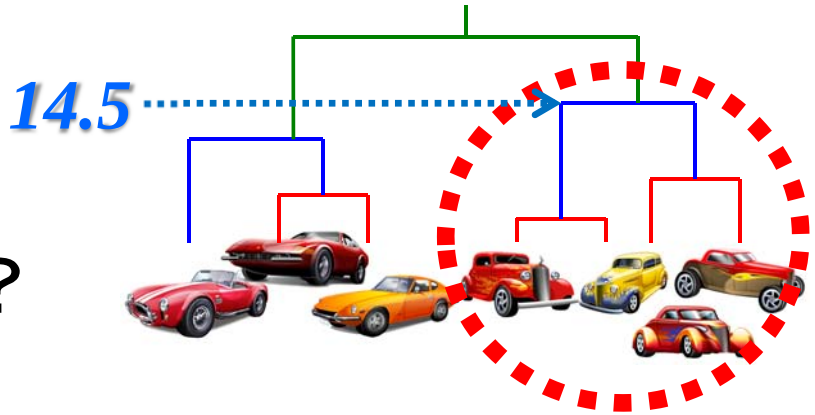
- どうやって類似度を**更新**するか？



					
	x_1	x_2			
				27	48
					14.5
					

3. クラスタ化の方法

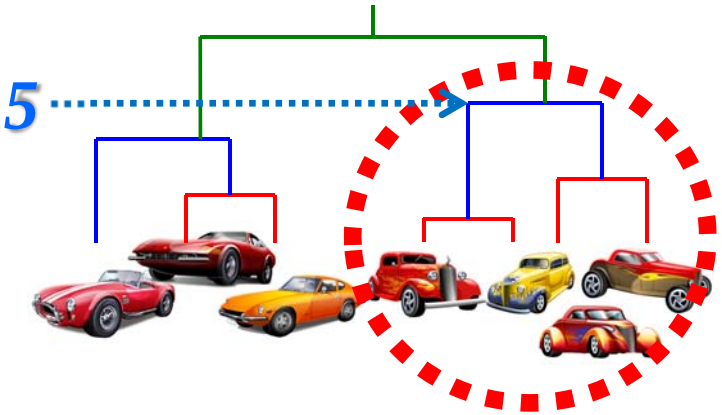
- どうやって類似度を**更新**するか？



				
	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？

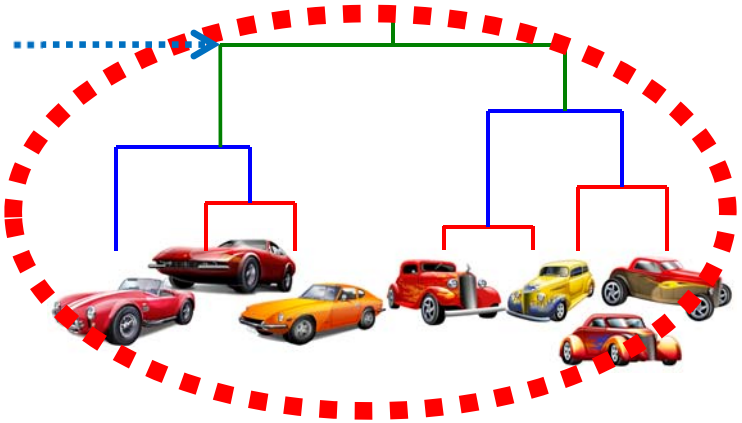


				
	x_1	x_2		
				47.4
				14.5

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

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. Rでクラスター分析

- Rを起動，csv ファイルをデータとして読込み
  - 「マイドキュメント（Y:）」の「R」フォルダに保存

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

- csvファイルを読み込み，変数seiseki に代入

```
> seiseki <- read.csv("Y:/R/data-seiseki.csv", header=T, row.names=1)
```

※読み込むファイル名　※1行目にheaderあり　※各行1列目は名前

4. Rでクラスター分析

- 関数 dist() で距離を計算し，seiseki.dに代入

```
> seiseki.d <- dist(seiseki, “manhattan”)
```

※マンハッタン距離（”manhattan”）を用いて距離を計算している
他の距離を使いたいときは”manhattan”を以下に変更

“euclidean” =ユークリッド距離
“minkowski”, p=3 = p=3のミンコフスキー距離
“maximum” =l_∞ノルム（える むげんだい のるむ）

- 階層クラスター分析をし，結果をseiseki.hcに代入

```
> seiseki.hc <- hclust(seiseki.d, “ward.D2”)
```

※ウォード法（”ward.D2”）を用いてクラスター分析を実施している
他の方法を使いたいときは、”ward.D2”を以下に変更

“single”=最短距離法, “complete”=最長距離法
“average”=群平均法, “centroid”=重心法, “median”=中央値法

4. Rでクラスター分析

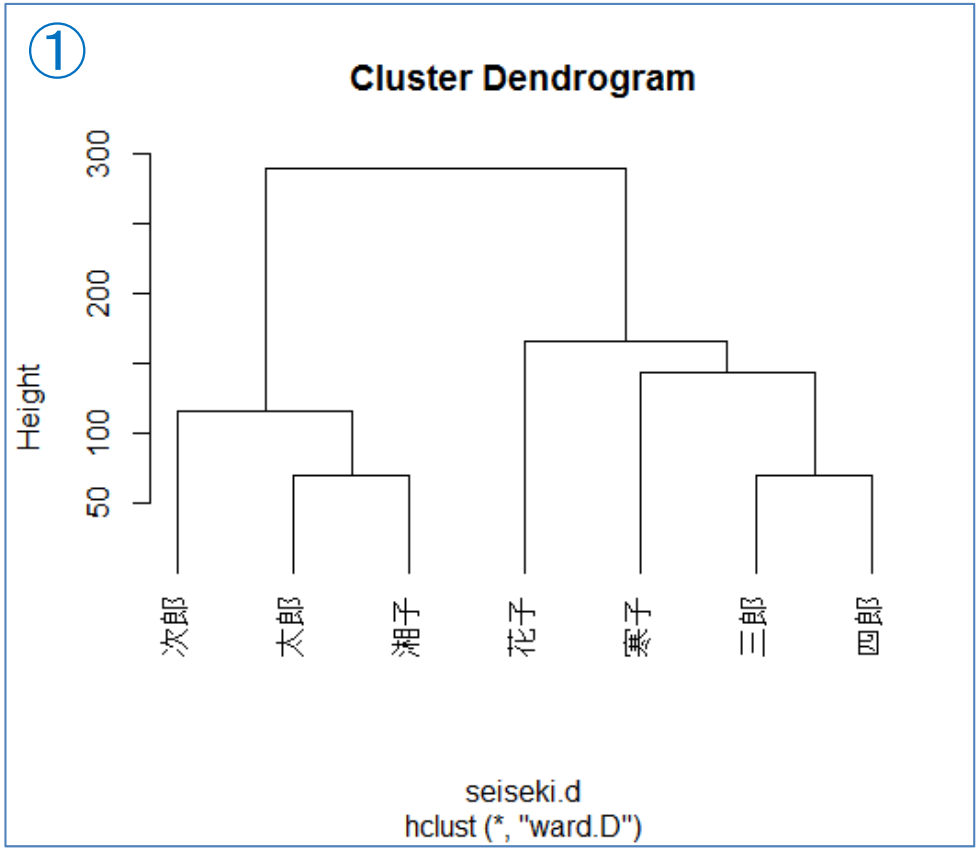
- 結果をデンドログラム（樹形図）で描画①

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

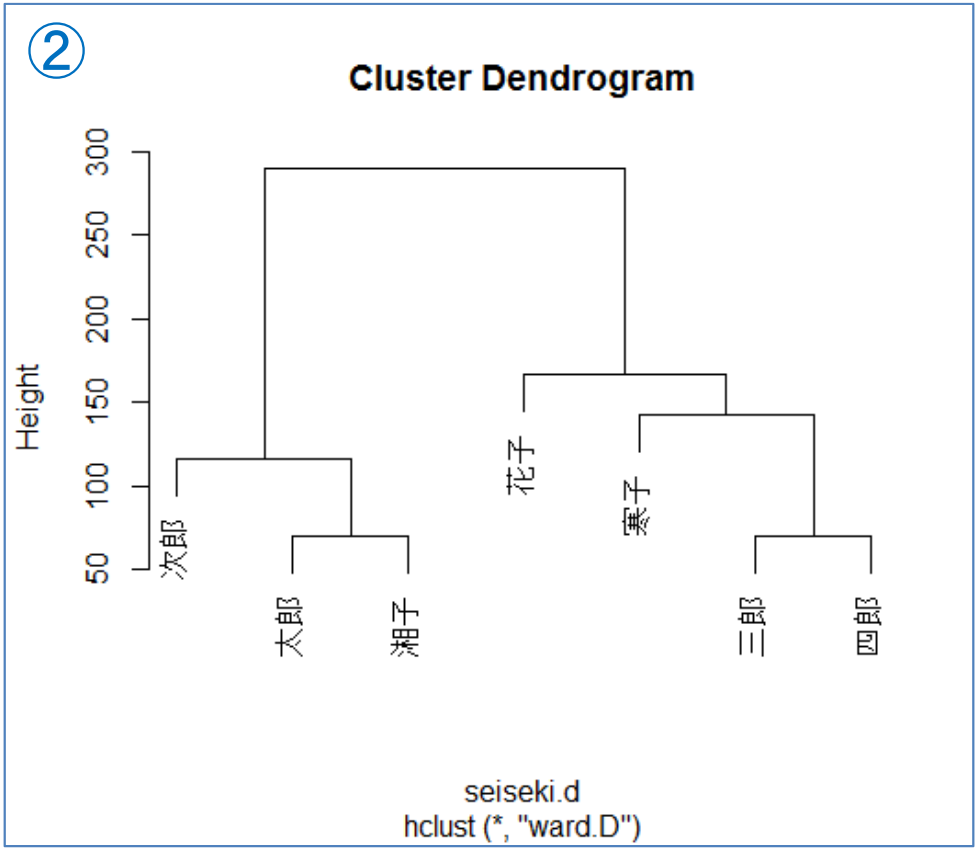
- 結果をデンドログラム（樹形図）で描画②

```
> plot(seiseki.hc)
```

①



②



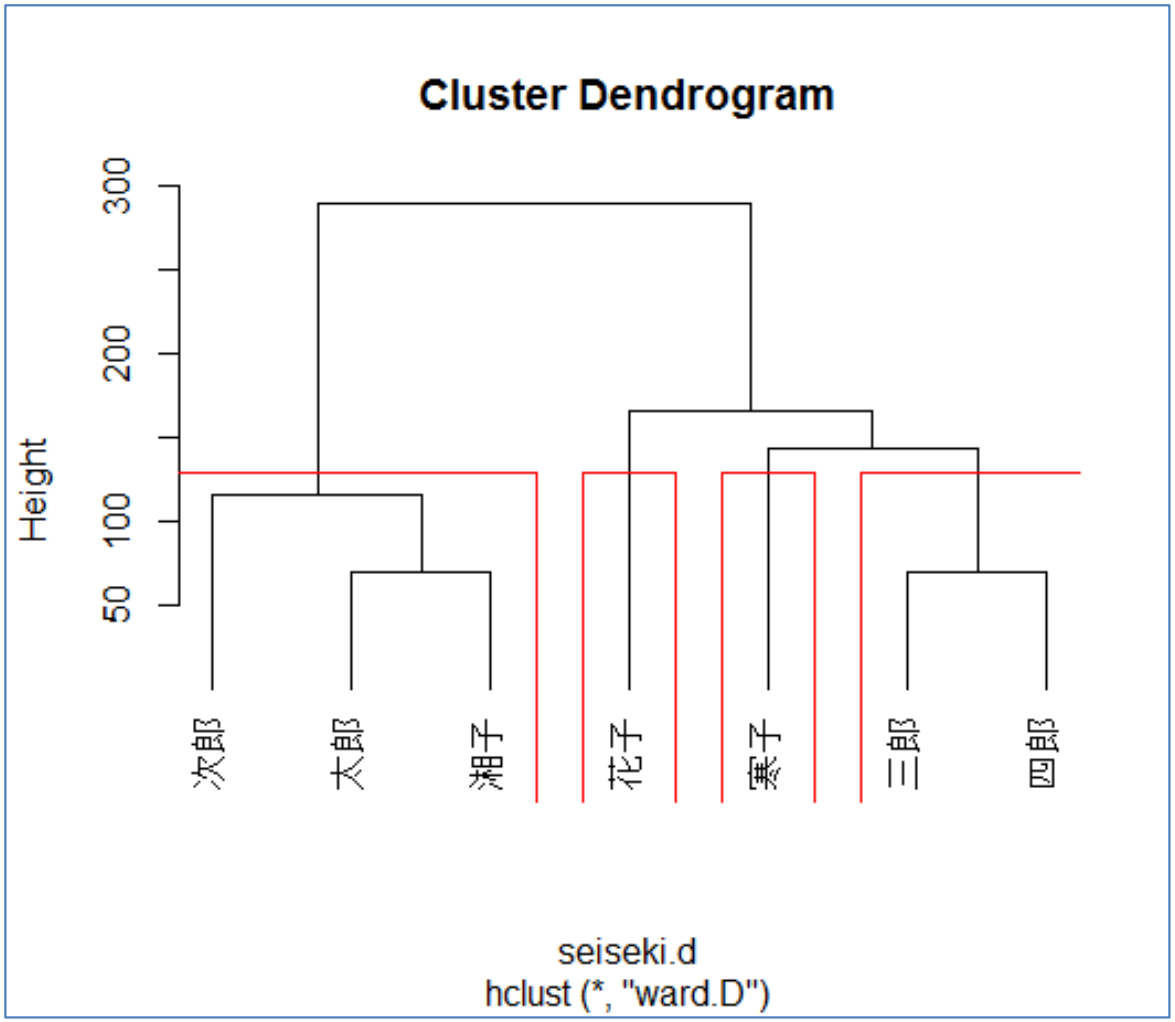
4. Rでクラスター分析

- デンドログラム（樹形図）を4つに分割

```
> plot(seiseki.hc, hang=-1)
> rect.hclust(seiseki.hc, k=4, border="red")
```

※分割数を4に指定

※分割線の色を赤に指定



4. Rでクラスター分析

【練習】距離とクラスター化の方法，分割数を以下の設定に従ってクラスター分析をし，樹形図を描き，比較せよ

	距離	クラスター化の方法	分割数
①	ユークリッド距離（euclidean）	最短距離法（single）	4
②	ユークリッド距離（euclidean）	最長距離法（complete）	4
③	ユークリッド距離（euclidean）	群平均法（average）	4
④	ユークリッド距離（euclidean）	重心法（centroid）	4
⑤	ユークリッド距離（euclidean）	中央値法（median）	4
⑥	ユークリッド距離（euclidean）	ウォード法（ward.D2）	4

	距離	クラスター化の方法	分割数
①	マンハッタン距離（manhattan）	最短距離法（single）	4
②	マンハッタン距離（manhattan）	最長距離法（complete）	4
③	マンハッタン距離（manhattan）	群平均法（average）	4
④	マンハッタン距離（manhattan）	重心法（centroid）	4
⑤	マンハッタン距離（manhattan）	中央値法（median）	4
⑥	マンハッタン距離（manhattan）	ウォード法（ward.D2）	4

※たくさん計算するので変数は整理して使う
例えば，距離は
seiseki.man <- dist(...)
seiseki.euc <- dist(...)
などとし，ユークリッド距離とマンハッタン距離を計算した結果を，わかり易い名前の別変数で区別し，クラスター化も[距離_方法]付加で区別等
seiseki.e_si <-hclust(...)
seiseki.e_cp <-hclust(...)
seiseki.e_av <-hclust(...)
seiseki.e_ce <-hclust(...)
seiseki.e_m <-hclust(...)
seiseki.m_si <-hclust(...)
seiseki.m_cp <-hclust(...)

4. Rでクラスター分析

Tips!　画面を分割して，複数の図を比較する

```
> par(mfrow=c(2,3))
```

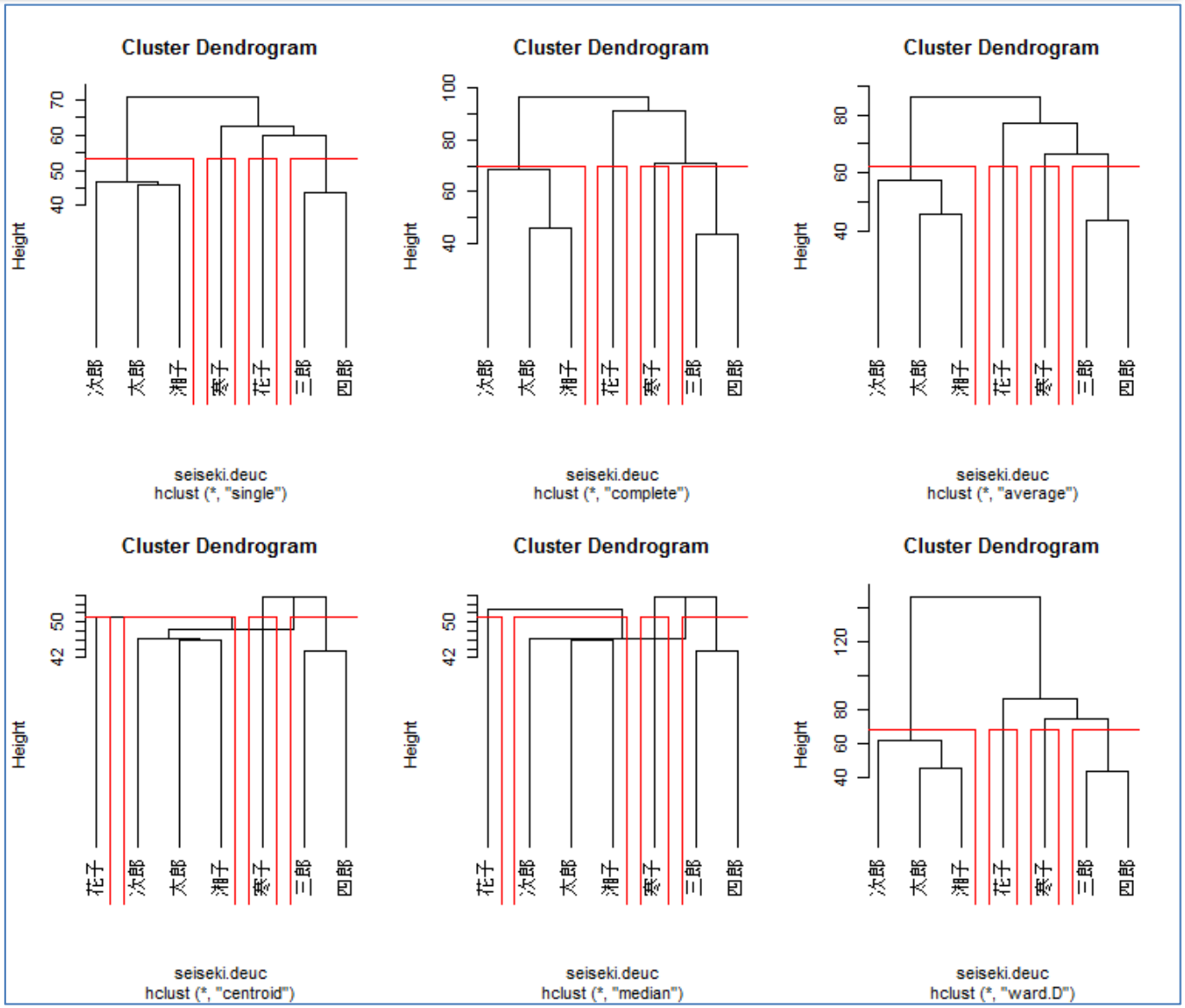
←　※1画面を2×3に分割

※c(x,y) の x, y に分割したい行数(x)と列数(y)を指定する

※この命令の後，plotなどで図を描画すると，左上から順に描画されていく

※6個描かれた後，7個目を描くと，画面がクリアされてまた左上から順に描画される

※別の分割に変えたい場合は，変えたい設定でもう一度実行すれば良い（何度でも変更可能）



4. Rでクラスター分析

Tips! 画面分割，複数図描画（前ページの場合の実行例）

```
> seiseki.euc <- dist(seiseki, "euclidean")

> seiseki.e_si <- hclust(seiseki.euc, "single")
> seiseki.e_cp <- hclust(seiseki.euc, "complete")
> seiseki.e_av <- hclust(seiseki.euc, "average")
> seiseki.e_ce <- hclust(seiseki.euc, "centroid")
> seiseki.e_m  <- hclust(seiseki.euc,"median")
> seiseki.e_wa <- hclust(seiseki.euc,"ward.D2")

> par(mfrow=c(2,3))

> plot(seiseki.e_si,hang=-1)
> rect.hclust(seiseki.e_si,k=4,border="red")
> plot(seiseki.e_cp,hang=-1)
> rect.hclust(seiseki.e_cp,k=4,border="red")
> plot(seiseki.e_av,hang=-1)
> rect.hclust(seiseki.e_av,k=4,border="red")
> plot(seiseki.e_ce,hang=-1)
> rect.hclust(seiseki.e_ce,k=4,border="red")
> plot(seiseki.e_m,hang=-1)
> rect.hclust(seiseki.e_m,k=4,border="red")
> plot(seiseki.e_wa,hang=-1)
> rect.hclust(seiseki.e_wa,k=4,border="red")
```

ユークリッド距離を計算

クラスター分析実施
上から順に，6つの方法でそれぞれ計算し結果を保存

6つの結果を描画したいので画面を2x3の6分割

6つの結果を順に描画
それぞれ2行で1つの画面を作っており，
plot(...) が樹形図描画
rect.hclust(...) が分割線描画をしている

4. Rでクラスター分析

Tips!　たくさんの命令を打つのは大変だし間違えちゃう！

一度にまとめて命令したい！

① まとめて実行したい命令（右）を1つのファイルに書く．制作には「TeraPad」や「メモ帳」「秀丸」などのテキストエディタを使う

② ファイルの種類を「全てのファイル」にし，「ファイル名.R」で保存．このとき，ファイル名は半角アルファベットが良い（例：ファイル名「euc_clust.R」とし「Y:/R/」フォルダに保存）

③ R（R Studio）で以下を実行

```
> source("Y:/R/euc_clust.R")
```

※ソースコード「euc_clust.R」内に間違いがなければ全て順に実行される．間違いがある場合は，その場所でエラーが出て止まる

【演習】manhattan 距離で同様のファイル「man_clust.R」をつくり実行しよう

```
seiseki.euc <- dist(seiseki, "euclidean")

seiseki.e_si <- hclust(seiseki.euc, "single")
seiseki.e_cp <- hclust(seiseki.euc, "complete")
seiseki.e_av <- hclust(seiseki.euc, "average")
seiseki.e_ce <- hclust(seiseki.euc, "centroid")
seiseki.e_m  <- hclust(seiseki.euc,"median")
seiseki.e_wa <- hclust(seiseki.euc,"ward.D2")

par(mfrow=c(2,3))

plot(seiseki.e_si,hang=-1)
rect.hclust(seiseki.e_si,k=4,border="red")
plot(seiseki.e_cp,hang=-1)
rect.hclust(seiseki.e_cp,k=4,border="red")
plot(seiseki.e_av,hang=-1)
rect.hclust(seiseki.e_av,k=4,border="red")
plot(seiseki.e_ce,hang=-1)
rect.hclust(seiseki.e_ce,k=4,border="red")
plot(seiseki.e_m,hang=-1)
rect.hclust(seiseki.e_m,k=4,border="red")
plot(seiseki.e_wa,hang=-1)
rect.hclust(seiseki.e_wa,k=4,border="red")
```

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

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）

もっと知りたい人へ

- 関連する経営学科の授業
  - 「**統計の見方**」（1/2セメ）
  - 「**統計の分析と利用**」（2セメ）
  - 「**統計データの扱い方**」（3/4セメ）
  - 「**多変量の統計データ解析**」（4セメ）