

クラスタ分析

基本的な考え方と階層的方法

村田 昇

2020.12.01

今週の内容

- 第1日: クラスタ分析の考え方と階層的方法
- 第2日: 非階層的方法と分析の評価

クラスタ分析の考え方

クラスタ分析

- cluster analysis
 - 個体の間に隠れている**集まり＝クラスタ**を個体間の“距離”にもとづいて発見する方法
- 個体間の類似度・距離 (非類似度) を定義:
 - 同じクラスタに属する個体どうしは似通った性質
 - 異なるクラスタに属する個体どうしは異なる性質
- さらなるデータ解析やデータの可視化に利用
- 教師なし学習の代表的な手法の一つ

クラスタ分析の考え方

- 階層的方法:
 - データ点およびクラスタの間に **距離** を定義
 - 距離に基づいてグループ化:
 - * 近いものから順にクラスタを **凝集**
 - * 近いものが同じクラスタに残るように **分割**
- 非階層的方法:
 - クラスタの数を事前に指定
 - クラスタの **集まりの良さ** を評価する損失関数を定義
 - 損失関数を最小化するようにクラスタを形成

事例

- 総務省統計局より取得した都道府県別の社会生活統計指標の一部
 - 総務省 <https://www.e-stat.go.jp/SG1/estat/List.do?bid=000001083999&cycode=0>
 - データ https://noboru-murata.github.io/multivariate-analysis/data/japan_social.csv
 - * Pref: 都道府県名

- * Forest: 森林面積割合 (%) 2014 年
- * Agri: 就業者 1 人当たり農業産出額 (販売農家) (万円) 2014 年
- * Ratio: 全国総人口に占める人口割合 (%) 2015 年
- * Land: 土地生産性 (耕地面積 1 ヘクタール当たり) (万円) 2014 年
- * Goods: 商業年間商品販売額 [卸売業 + 小売業] (事業所当たり) (百万円) 2013 年

• データの内容

Forest	Agri	Ratio	Land	Goods	
Hokkaido	67.9	1150.6	4.23	96.8	283.3
Aomori	63.8	444.7	1.03	186.0	183.0
Iwate	74.9	334.3	1.01	155.2	179.4
Miyagi	55.9	299.9	1.84	125.3	365.9
Akita	70.5	268.7	0.81	98.5	153.3
Yamagata	68.7	396.3	0.88	174.1	157.5
Fukushima	67.9	236.4	1.51	127.1	184.5
Ibaraki	31.0	479.0	2.30	249.1	204.9
Tochigi	53.2	402.6	1.55	199.6	204.3
Gumma	63.8	530.6	1.55	321.6	270.0
Saitama	31.9	324.7	5.72	247.0	244.7
Chiba	30.4	565.5	4.90	326.1	219.7
Tokyo	34.8	268.5	10.63	404.7	1062.6
Kanagawa	38.8	322.8	7.18	396.4	246.1
Niigata	63.5	308.6	1.81	141.9	205.5
Toyama	56.6	276.1	0.84	98.5	192.4
Ishikawa	66.0	271.3	0.91	112.0	222.9
Fukui	73.9	216.1	0.62	98.5	167.3
Yamanashi	77.8	287.4	0.66	325.3	156.2
Nagano	75.5	280.0	1.65	211.3	194.4
Gifu	79.0	283.7	1.60	192.1	167.9
Shizuoka	63.1	375.8	2.91	314.5	211.4
Aichi	42.2	472.3	5.89	388.9	446.9
Mie	64.3	310.6	1.43	174.3	170.1
Shiga	50.5	222.8	1.11	104.9	170.7
Kyoto	74.2	267.8	2.05	212.5	196.7
Osaka	30.1	216.3	6.96	238.8	451.2
Hyogo	66.7	261.2	4.35	197.7	212.5
Nara	76.8	207.0	1.07	182.7	147.0
Wakayama	76.4	251.1	0.76	278.4	136.4
Tottori	73.3	249.9	0.45	187.6	162.2
Shimane	77.5	214.1	0.55	140.8	141.1
Okayama	68.0	254.8	1.51	184.9	207.8
Hiroshima	71.8	286.2	2.24	192.2	304.6
Yamaguchi	71.6	216.9	1.11	125.8	158.9
Tokushima	75.2	315.4	0.59	313.5	134.5
Kagawa	46.4	249.5	0.77	242.9	232.9
Ehime	70.3	288.5	1.09	231.6	179.4
Kochi	83.3	354.2	0.57	339.9	137.9
Fukuoka	44.5	381.0	4.01	255.6	295.7
Saga	45.2	468.7	0.66	230.3	137.9
Nagasaki	58.4	428.9	1.08	296.0	154.0
Kumamoto	60.4	456.6	1.41	285.5	172.5
Oita	70.7	360.1	0.92	222.8	148.3
Miyazaki	75.8	739.1	0.87	487.7	170.6
Kagoshima	63.4	736.5	1.30	351.2	169.4
Okinawa	46.1	452.4	1.13	232.8	145.4

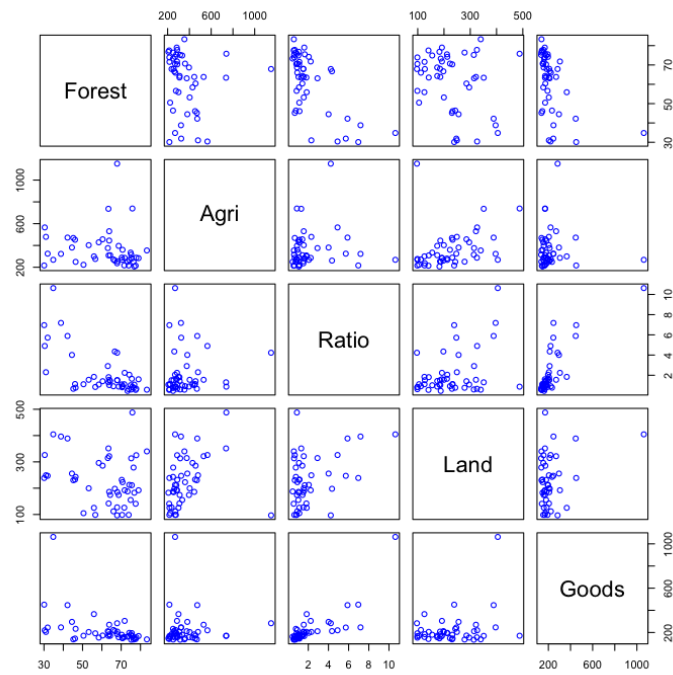


図 1: データの散布図

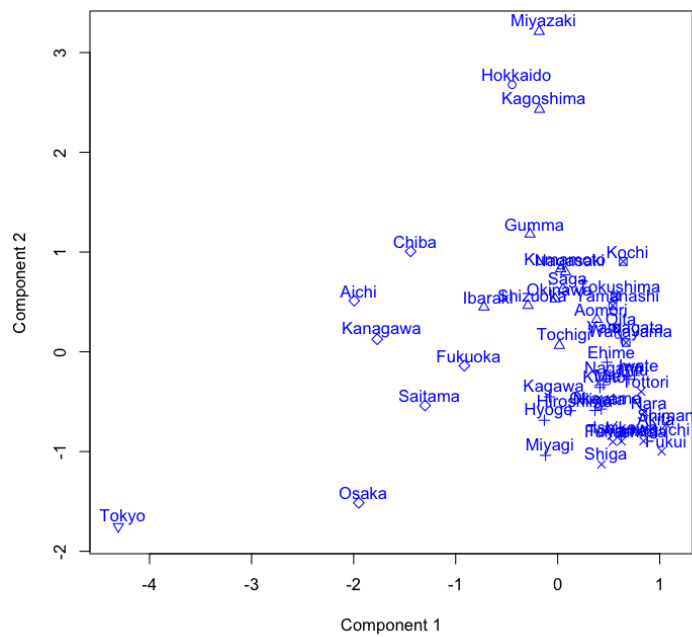


図 2: 主成分得点の散布図

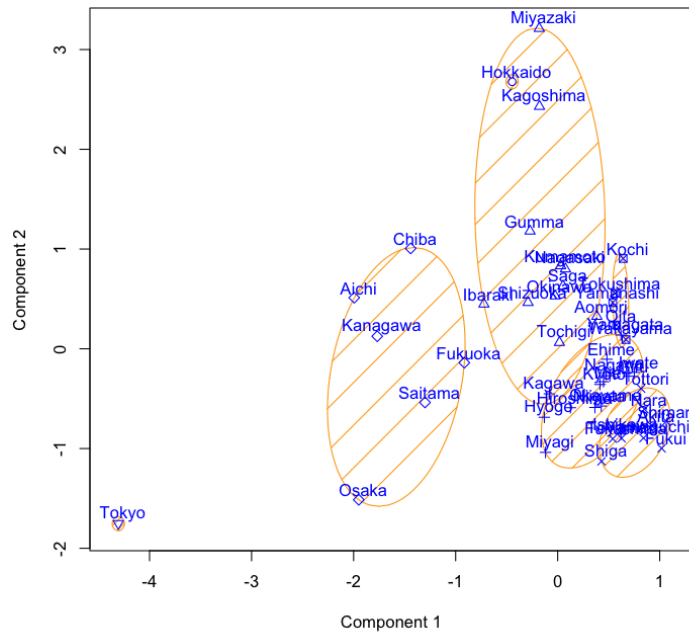


図 3: 散布図上のクラスタ構造 (クラスタ分析の概念図)

階層的クラスタリング

凝集的方法の手続き

1. データ・クラスタ間の距離を定義する
 - データ点とデータ点の距離
 - クラスタとクラスタの距離
2. データ点およびクラスタ間の距離を求める
3. 最も近い2つを統合し新たなクラスタを形成する
 - データ点とデータ点
 - データ点とクラスタ
 - クラスタとクラスタ
4. クラスタ数が1つになるまで2-3の手続きを繰り返す

事例

- 社会生活統計指標の一部 (関東) での例

データ間の距離

データ間の距離

- データ: 変数の値を成分としてもつベクトル

$$\mathbf{x}_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip})^T, \mathbf{x}_j = (x_{j1}, \dots, x_{jp})^T \in \mathbb{R}^p$$

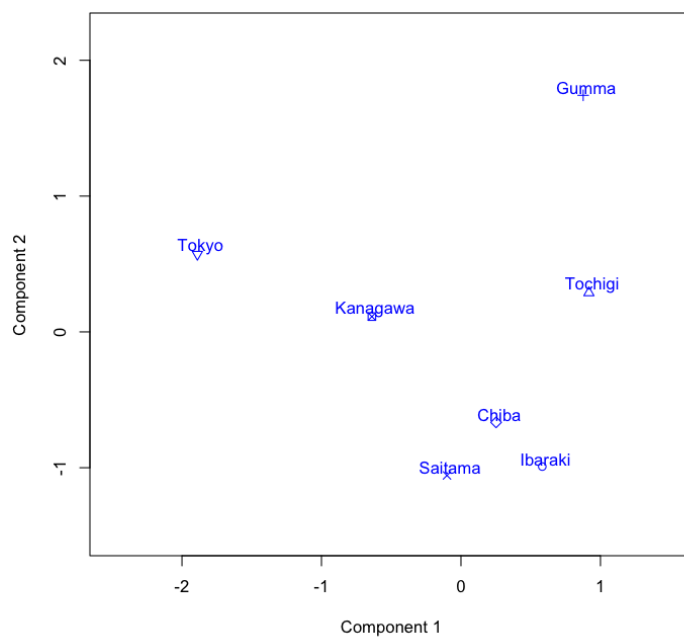


図 4: 凝集的方法

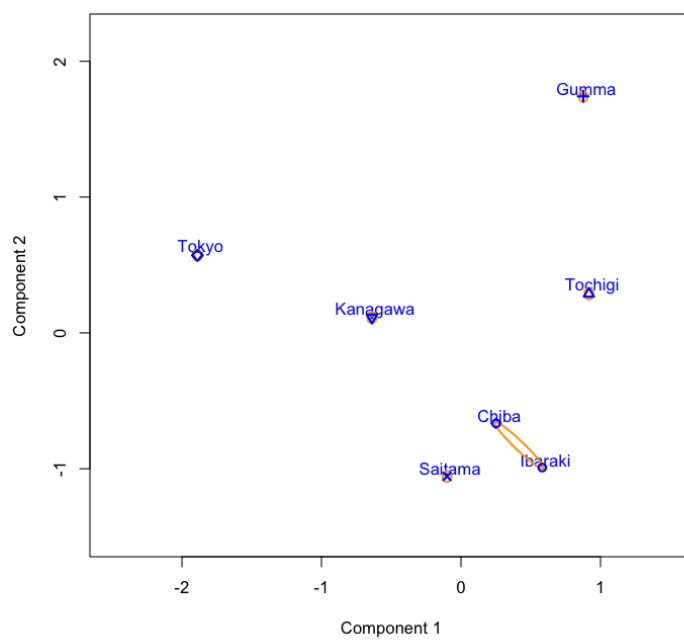


図 5: クラスタリングの手続き (その 1)

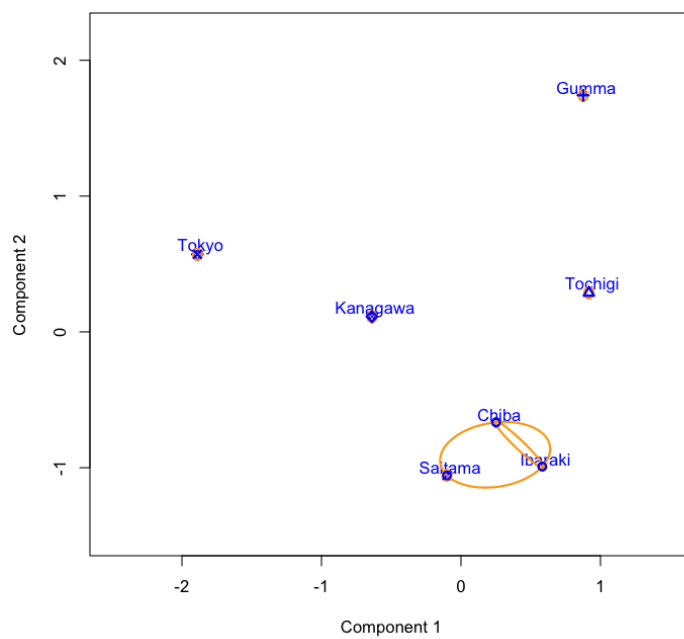


図 6: クラスターリングの手続き (その 2)

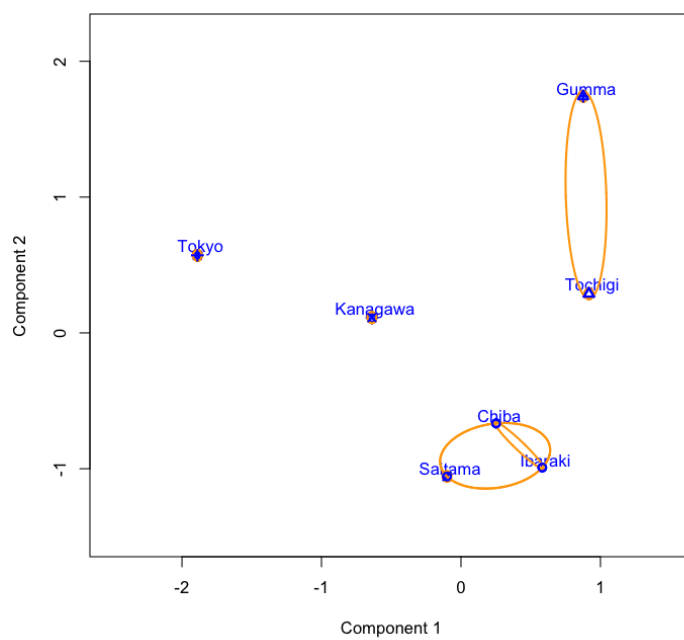


図 7: クラスターリングの手続き (その 3)

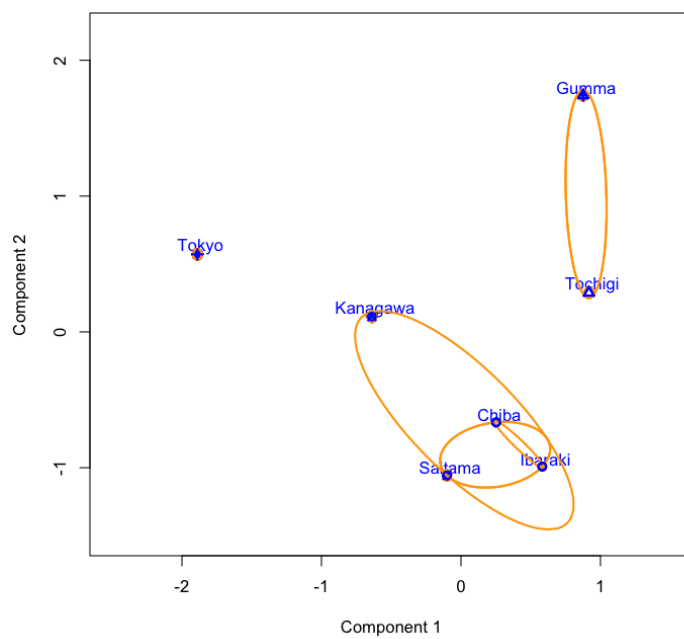


図 8: クラスターリングの手続き (その 4)

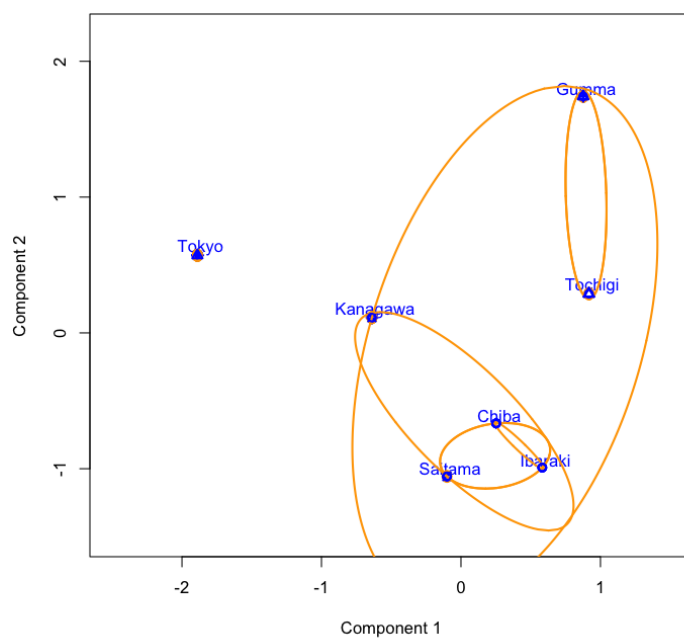


図 9: クラスターリングの手続き (その 5)

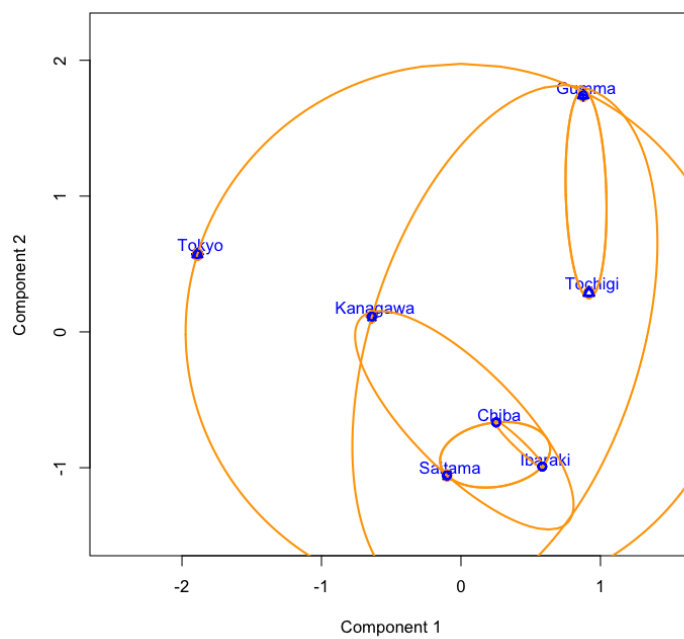


図 10: クラスタリングの手続き (その 6)

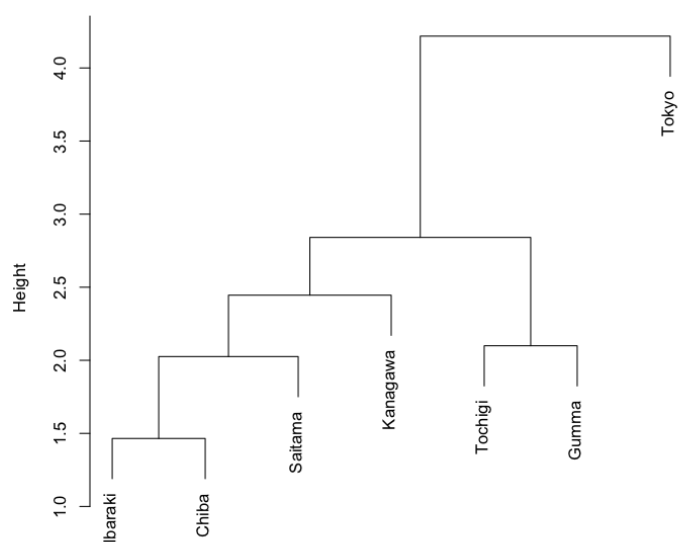


図 11: デンドログラムによるクラスタ構造の表示

- 距離: $d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$
- 代表的なデータ間の距離:
 - ユークリッド距離 (Euclidean distance)
 - マンハッタン距離 (Manhattan distance)
 - ミンコフスキー距離 (Minkowski distance)

ユークリッド距離

- 最も一般的な距離
- 各成分の差の 2 乗和の平方根 (2 ノルム)

$$d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \sqrt{(x_{i1} - x_{j1})^2 + \cdots + (x_{ip} - x_{jp})^2}$$

マンハッタン距離

- 後述するミンコフスキー距離の $q = 1$ の場合
- 格子状に引かれた路に沿って移動するときの距離

$$d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = |x_{i1} - x_{j1}| + \cdots + |x_{ip} - x_{jp}|$$

ミンコフスキー距離

- ユークリッド距離を q 乗に一般化した距離
- 各成分の差の q 乗和の q 乗根 (q ノルム)

$$d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \left\{ |x_{i1} - x_{j1}|^q + \cdots + |x_{ip} - x_{jp}|^q \right\}^{1/q}$$

その他の距離

- 類似度や乖離度などデータ間に自然に定義されるものを用いることは可能
 - 語句の共起 (同一文書に現れる頻度・確率)
 - 会社間の取引量 (売上高などで正規化が必要)
- 擬似的な距離でもアルゴリズムは動く

演習

問題

- 以下の問に答えなさい.
 - 距離の定義を述べなさい
 - ミンコフスキー距離において $q \rightarrow \infty$ とするとどのような距離となるか答えなさい

$$d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \left\{ |x_{i1} - x_{j1}|^q + \cdots + |x_{ip} - x_{jp}|^q \right\}^{1/q}$$

解答例

- 2変数の実数値関数で以下の3つの条件を満たす
 - 非退化性

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

- 対称性

$$d(x, y) = d(y, x)$$

- 劣加法性 (三角不等式の成立)

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

- 非負性 $d(x, y) \geq 0$ は3つの条件から自然に導かれる

$$d(x, y) + d(y, x) \geq d(x, x) \quad (\text{劣加法性})$$

$$d(x, y) + d(x, y) \geq d(x, x) \quad (\text{対称性})$$

$$2d(x, y) \geq 0 \quad (\text{非退化性})$$

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

- 最大の要素に着目して計算すればよい

$$\begin{aligned} \lim_{q \rightarrow \infty} d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) &= \lim_{q \rightarrow \infty} \{ |x_{i1} - x_{j1}|^q + \cdots + |x_{ip} - x_{jp}|^q \}^{1/q} \\ &= \lim_{q \rightarrow \infty} \max_r |x_{ir} - x_{jr}| \left\{ \left(\frac{|x_{i1} - x_{j1}|}{\max_r |x_{ir} - x_{jr}|} \right)^q \right. \\ &\quad \left. + \cdots + \left(\frac{|x_{ip} - x_{jp}|}{\max_r |x_{ir} - x_{jr}|} \right)^q \right\}^{1/q} \\ &= \max_r |x_{ir} - x_{jr}| \lim_{q \rightarrow \infty} (1 \text{ 以上の有限値})^{1/q} \\ &= \max_r |x_{ir} - x_{jr}| \end{aligned}$$

チェビシェフ距離 (最大距離, チェス盤距離) という

- $q \rightarrow -\infty$ の場合は以下となることを確認せよ

$$\lim_{q \rightarrow -\infty} d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \min_r |x_{ir} - x_{jr}|$$

クラスタ間の距離

クラスタ間の距離

- クラスタ: いくつかのデータ点からなる集合

$$C_a = \{\mathbf{x}_i | i \in \Lambda_a\}, \quad C_b = \{\mathbf{x}_j | j \in \Lambda_b\}$$

- 2つのクラスタ間の距離: $D(C_a, C_b)$
 - データ点の距離から陽に定義する方法

- クラスタの統合にもとづき再帰的に定義する方法
- 代表的なクラスタ間の距離
 - 最短距離法 (単連結法; single linkage method)
 - 最長距離法 (完全連結法; complete linkage method)
 - 群平均法 (average linkage method)

最短距離法

- 最も近い対象間の距離を用いる方法:

$$D(C_a, C_b) = \min_{\mathbf{x}_i \in C_a, \mathbf{x}_j \in C_b} d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

- 統合前後のクラスタ間の関係:

$$D(C_a + C_b, C_c) = \min\{D(C_a, C_c), D(C_b, C_c)\}$$

最長距離法

- 最も遠い対象間の距離を用いる方法:

$$D(C_a, C_b) = \max_{\mathbf{x}_i \in C_a, \mathbf{x}_j \in C_b} d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

- 統合前後のクラスタ間の関係:

$$D(C_a + C_b, C_c) = \max\{D(C_a, C_c), D(C_b, C_c)\}$$

群平均法

- 全ての対象間の平均距離を用いる方法:

$$D(C_a, C_b) = \frac{1}{|C_a||C_b|} \sum_{\mathbf{x}_i \in C_a, \mathbf{x}_j \in C_b} d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

ただし $|C_a|, |C_b|$ はクラスタ内の要素の数を表す

- 統合前後のクラスタ間の関係:

$$D(C_a + C_b, C_c) = \frac{|C_a|D(C_a, C_c) + |C_b|D(C_b, C_c)}{|C_a| + |C_b|}$$

距離計算に関する注意

- データの性質に応じて距離は適宜使い分ける
 - データ間の距離の選択
 - クラスタ間の距離の選択
- 変数の正規化は必要に応じて行う
 - 物理的な意味合いを積極的に利用する場合はそのまま
 - 単位の取り方などによる分析の不確定性を避ける場合は平均 0, 分散 1 に正規化
- データの性質を鑑みて適切に前処理

演習

問題

- 以下の問に答えなさい
 - 群平均法におけるクラスタの距離の定義

$$D(C_a, C_b) = \frac{1}{|C_a||C_b|} \sum_{\mathbf{x}_i \in C_a, \mathbf{x}_j \in C_b} d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

から統合前後のクラスタの距離の関係

$$D(C_a + C_b, C_c) = \frac{|C_a|D(C_a, C_c) + |C_b|D(C_b, C_c)}{|C_a| + |C_b|}$$

を導け

解答例

- 定義に従って計算する

$$\begin{aligned} D(C_a + C_b, C_c) &= \frac{1}{|C_a + C_b||C_c|} \sum_{\mathbf{x}_i \in C_a + C_b, \mathbf{x}_j \in C_c} d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \\ &= \frac{1}{|C_a + C_b||C_c|} \sum_{\mathbf{x}_i \in C_a, \mathbf{x}_j \in C_c} d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \\ &\quad + \frac{1}{|C_a + C_b||C_c|} \sum_{\mathbf{x}_i \in C_b, \mathbf{x}_j \in C_c} d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \end{aligned}$$

- (続き)

$$\begin{aligned} &= \frac{|C_a||C_c|}{|C_a + C_b||C_c|} \frac{1}{|C_a||C_c|} \sum_{\mathbf{x}_i \in C_a, \mathbf{x}_j \in C_c} d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \\ &\quad + \frac{|C_b||C_c|}{|C_a + C_b||C_c|} \frac{1}{|C_b||C_c|} \sum_{\mathbf{x}_i \in C_b, \mathbf{x}_j \in C_c} d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \\ &= \frac{|C_a||C_c|}{|C_a + C_b||C_c|} D(C_a, C_c) + \frac{|C_b||C_c|}{|C_a + C_b||C_c|} D(C_b, C_c) \\ &= \frac{|C_a|D(C_a, C_c) + |C_b|D(C_b, C_c)}{|C_a| + |C_b|} \end{aligned}$$

解析事例

都道府県別の社会生活統計指標

- 各データを正規化
 - Forest: 森林面積割合 (%) 2014 年
 - Agri: 就業者 1 人当たり農業産出額 (販売農家) (万円) 2014 年
 - Ratio: 全国総人口に占める人口割合 (%) 2015 年

- Land: 土地生産性（耕地面積1ヘクタール当たり）(万円) 2014年
- Goods: 商業年間商品販売額〔卸売業＋小売業〕（事業所当たり）(百万円) 2013年
- ユークリッド距離 + 群平均法

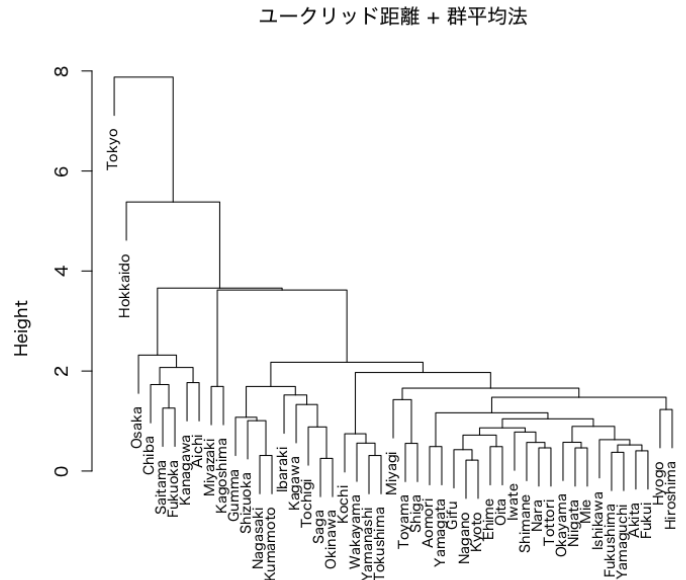


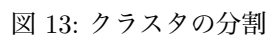
図 12: 社会生活統計指標のクラスタ分析 (デンドログラム)

- 5 クラスタに分割

```
<<cluster 1 >>
[1] "Hokkaido"
<<cluster 2 >>
[1] "Aomori"      "Iwate"      "Miyagi"     "Akita"      "Yamagata"   "Fukushima"
[7] "Ibaraki"     "Tochigi"    "Gumma"     "Niigata"    "Toyama"     "Ishikawa"
[13] "Fukui"       "Yamanashi" "Nagano"    "Gifu"       "Shizuoka"   "Mie"
[19] "Shiga"       "Kyoto"      "Hyogo"     "Nara"       "Wakayama"   "Tottori"
[25] "Shimane"     "Okayama"   "Hiroshima" "Yamaguchi"  "Tokushima"  "Kagawa"
[31] "Ehime"       "Kochi"      "Saga"      "Nagasaki"   "Kumamoto"   "Oita"
[37] "Okinawa"
<<cluster 3 >>
[1] "Saitama" "Chiba"      "Kanagawa" "Aichi"      "Osaka"      "Fukuoka"
<<cluster 4 >>
[1] "Tokyo"
<<cluster 5 >>
[1] "Miyazaki" "Kagoshima"
```

都道府県別好きなおむすびの具

- Web アンケート
 - 「ごはんを食べよう国民運動推進協議会」(平成 30 年解散)
(閉鎖) <http://www.gohan.gr.jp/result/09/anketo09.html>
 - データ <https://noboru-murata.github.io/multivariate-analysis/data/omusubi.csv>



ibaraki	15.42	26.49	7.98	2.54	18.33	11.79	11.79	5.62
tochigi	16.61	27.04	10.70	1.97	16.90	9.29	12.67	4.78
gunma	14.24	22.53	6.21	1.81	20.20	15.28	13.73	5.95
saitama	13.91	27.17	8.03	3.57	19.36	10.17	13.58	4.18
chiba	14.96	28.49	7.10	3.67	19.07	10.53	10.97	5.17
tokyo	14.07	28.03	8.28	3.28	17.80	11.74	11.20	5.56
kanagawa	15.05	28.06	9.61	3.47	16.10	10.67	11.49	5.51
niigata	21.06	23.03	3.37	1.12	19.66	15.16	7.02	9.55
toyama	19.41	21.84	14.56	4.85	13.59	7.76	11.16	6.79
ishikawa	23.05	20.00	19.66	4.06	13.89	7.11	10.16	2.03
fukui	20.58	20.58	18.62	4.90	15.68	6.86	9.80	2.94
yamanashi	14.11	20.58	9.41	2.35	20.58	12.35	18.23	2.35
nagano	18.64	21.30	9.68	2.66	20.33	13.80	10.16	3.38
gifu	16.52	20.55	11.44	4.44	15.88	8.68	15.46	6.99
shizuoka	15.96	27.71	11.86	4.98	14.30	9.20	10.75	5.21
aichi	15.38	27.62	10.87	3.10	14.77	8.23	13.64	6.35
mie	13.51	29.50	11.26	5.18	14.63	7.88	10.58	7.43
shiga	14.96	23.12	12.92	6.12	18.70	7.14	12.24	4.76
kyoto	18.99	26.62	12.66	5.68	15.09	8.44	8.92	3.57
osaka	17.19	25.33	13.71	6.87	14.54	8.22	10.49	3.61
hyogo	17.93	23.82	13.85	5.74	15.23	7.34	12.04	4.01
nara	16.45	24.83	11.61	8.38	14.83	9.35	10.64	3.87
wakayama	16.22	20.61	15.78	7.89	12.28	9.21	14.47	3.50
tottori	18.64	16.10	10.16	2.54	22.03	11.86	13.55	5.08
shimane	20.33	18.64	15.25	6.77	15.25	6.77	12.71	4.23
okayama	17.30	18.20	12.80	4.49	18.20	9.43	14.38	5.16
hiroshima	22.03	21.12	17.17	6.38	17.17	6.23	7.44	2.43
yamaguchi	22.22	17.20	16.84	2.86	20.07	5.37	9.67	5.73
tokushima	22.06	20.68	17.24	7.58	13.79	5.51	11.03	2.06
kagawa	17.75	22.42	12.61	4.67	13.08	8.41	14.95	6.07
ehime	21.72	25.29	11.60	5.95	15.17	5.95	12.50	1.78
kochi	11.72	33.79	17.93	3.44	9.65	10.34	9.65	3.44
fukuoka	15.62	22.59	11.73	4.94	22.77	5.11	11.65	5.56
saga	17.98	19.42	5.75	3.59	12.94	9.35	23.74	7.19
nagasaki	23.36	22.13	11.88	7.78	16.39	3.68	8.60	6.14
kumamoto	21.57	14.72	13.69	7.19	19.52	4.79	12.67	5.82
oita	14.00	27.53	11.11	4.83	20.77	3.38	9.66	8.69
miyazaki	20.88	22.15	10.75	3.79	18.35	11.39	7.59	5.06
kagoshima	17.59	24.53	9.25	4.16	19.44	6.01	14.81	4.16
okinawa	19.59	22.85	7.34	2.04	15.10	4.48	11.42	17.14

次週の予定

- 第1日: クラスタ分析の考え方と階層的方法
- 第2日: 非階層的方法と分析の評価

おむすびの具 県別人気アンケート (2009)

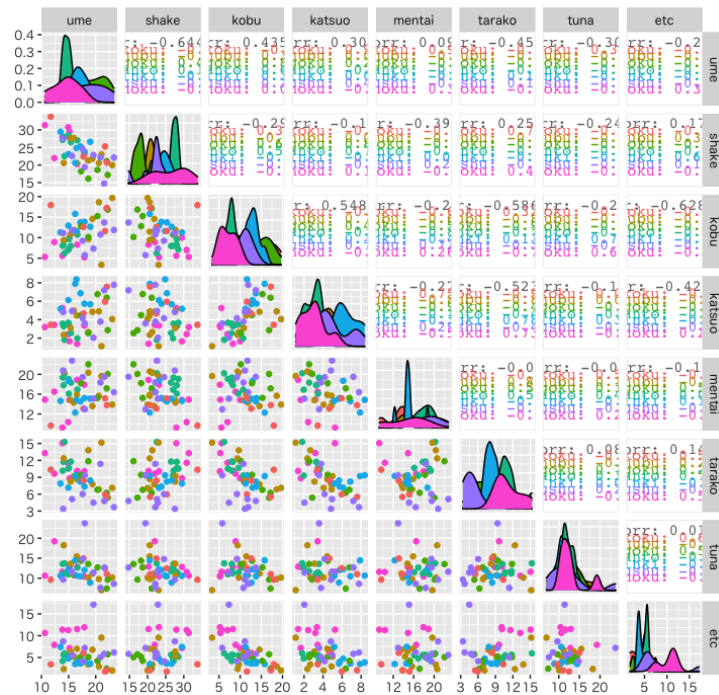


図 14: データの散布図

おむすびの具 県別人気アンケート (2009)

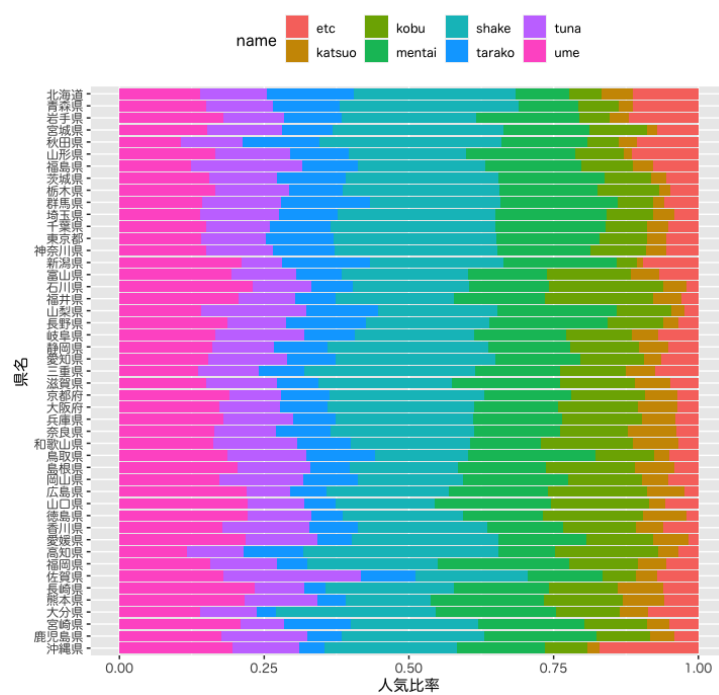


図 15: 県別の人気比率

