Hierarchical Clustering

유승완

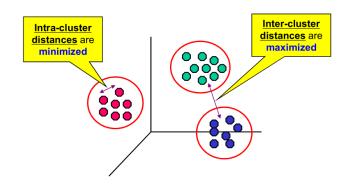


Clustering



Clustering (군집화)

- 비슷한 개체끼리 한 그룹으로, 다른 개체는 다른 그룹으로 묶는 것
- 대표적인 비지도학습(unsupervised learning)
- 군집 간 분산(inter-cluster variance) 최대화 군집 내 분산(inner-cluster variance) 최소화





Application

Understanding

- Browsing 시에 관련되어 있는 문서를 Grouping
- 비슷한 기능을 가지고 있는 유전자나 단백질들을 Grouping
- 비슷한 추세를 가진 주식들을 Grouping

Summarization

• 큰 사이즈의 데이터셋의 크기를 줄여줌



Hierarchical Clustering



Partitional Clustering vs Hierarchical Clustering

Partitional Clustering

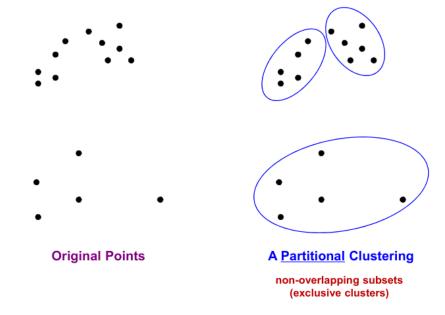
각 데이터가 겹치지 않는 exclusive한 clustering

Hierarchical Clustering

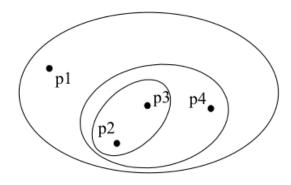
데이터들이 hierarchical 하게 묶이며 중첩되는 clustering



Partitional Clustering

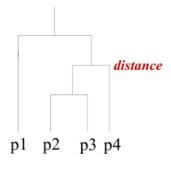


Hierarchical Clustering



Hierarchical Clustering

A set of nested clusters



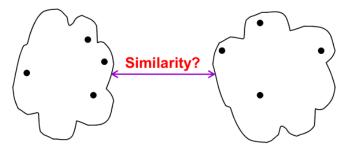
Dendrogram

Type of Hierarchical Clustering

- ◆ Agglomerative : bottom up
 - 1. 각각의 Point 를 cluster라고 생각하고 시작
 - 2. 모든 데이터가 모인 1개의 클러스터가 만들어질 때까지 merge
- ◆ Divisive : top down
 - 1. 모든 데이터를 포함한 1개의 Cluster로 시작
 - 2. 각각의 point가 cluster가 될 때까지 Cluster를 split
- ▶ Cluster들을 split 하거나 merge 하는 measure로 similarity나 distance matrix를 활용

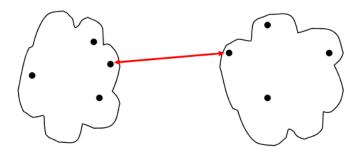
How to Define Inter-Cluster Similarity

- MIN
- MAX
- Group Average
- Ward's Method



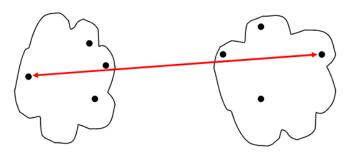
MIN (Single Link)

- 각각의 클러스터 내에 가장 가까운 점들의 거리를 기준
- Cluster가 원형이 아닌 다양한 형태로 생길 수 있음
- Noise와 Outlier에 Sensitive



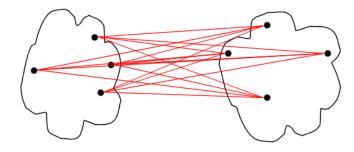
MAX (Complete Link)

- 각각의 클러스터 내에 가장 먼 점들의 거리를 기준
- 큰 Cluster들이 쪼개지는 경향이 있음
- 원형 모양의 Cluster로 biased 되는 경향이 있음
- Noise와 Outlier에 less susceptible



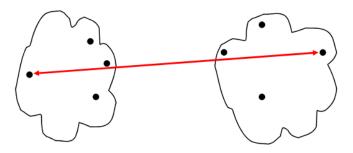
Group Average

- 두 클러스터 내에 점들의 거리 평균을 기준
- MIN 과 MAX Measure들의 사이 효과
- MIN Measure 보다는 noise와 outlier에 덜 민감함
- 원형 모양의 Cluster로 biased 되는 경향이 있음

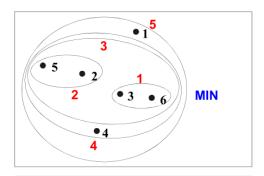


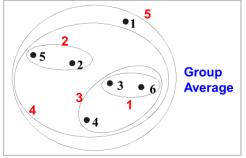
Ward's Method

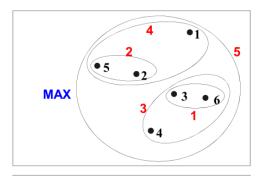
- 두 클러스터가 합쳐질 때 squared error의 증가량을 기준
- Noise와 Outlier에 Sensitive
- 원형 모양의 Cluster로 biased 되는 경향이 있음

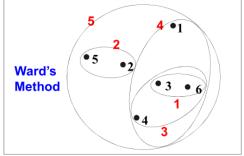


Comparsion









Example

| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
|---|------|------|------|------|------|
| 1 | 0.00 | 0.10 | 0.90 | 0.35 | 0.80 |
| 2 | 0.10 | 0.00 | 0.30 | 0.40 | 0.50 |
| 3 | 0.90 | 0.30 | 0.00 | 0.60 | 0.70 |
| 4 | 0.35 | 0.40 | 0.60 | 0.00 | 0.20 |
| 5 | 0.80 | 0.50 | 0.70 | 0.20 | 0.00 |

Problem and Limitations

- 한번 클러스터가 합쳐지면 Undo가 불가능함
- Local minmum에 빠지기 쉽다.
- Distance Measure 마다 단점이 있다.

MIN: outlier와 noise에 민감함

MAX / Average / Ward : 다양한 형태와 사이즈의 Cluster를 찾지 못함.

MAX : 큰 Cluster는 쪼개게 된다.

EOD



Reference

고려대학교 산업경영공학부 백준걸 교수님 - 데이터마이닝 수업자료 Chapter 7 Clustering

