Machine Learning

12장 군집 (Clustering)

고려대학교 통계학과
박유성

Contents

01 Introduction

- 군집 (Clustering)
  - 목적: 특성변수의 유사성을 토대로 관측치를 2개 이상의 그룹으로 구별
  - 목표변수의 관측값 y_i (class)가 주어지지 않음. ➔ "비지도 학습 (Unsupervised learning)"

- 비유사성 (dissimilarity) 측도
  - 관측치 i와 i' 의 유사성은 특성변수의 관측값 $\boldsymbol{x}_i$와 $\boldsymbol{x}_{i'}$의 비유사성 측도에 의해 측정

특성변수	비유사성 측도	
연속형	제곱 유클리디안 거리 (squared Euclidean distance)	$d(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_{i'}) = \sum_{j=1}^{m} (\boldsymbol{x}_{ij} - \boldsymbol{x}_{i'j})^2 = (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_{i'})^T (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_{i'})$
	1차 유클리디안 거리 (L1 Euclidean distance)	$d(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_{i'}) = \sum_{j=1}^{m} \lvert \boldsymbol{x}_{ij} - \boldsymbol{x}_{i'j} \rvert$
	마할라노비스 거리 (Mahalanobis distance)	$d(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_{i'}) = (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_{i'})^T \Sigma^{-1} (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_{i'})$ (Σ: 특성변수들의 분산-공분산 행렬)
순서형 (ordinal)	특성변수를 $\frac{k-1/2}{M}$ $(k = 1, \cdots, M.\ M$: 순서의 크기)로 변환 후 연속형 비유사성 측도 적용	
범주형 (categorical)	두 관측치가 같은 범주에 속하면 0, 아니면 1로 값 부여	

02 K-means Clustering

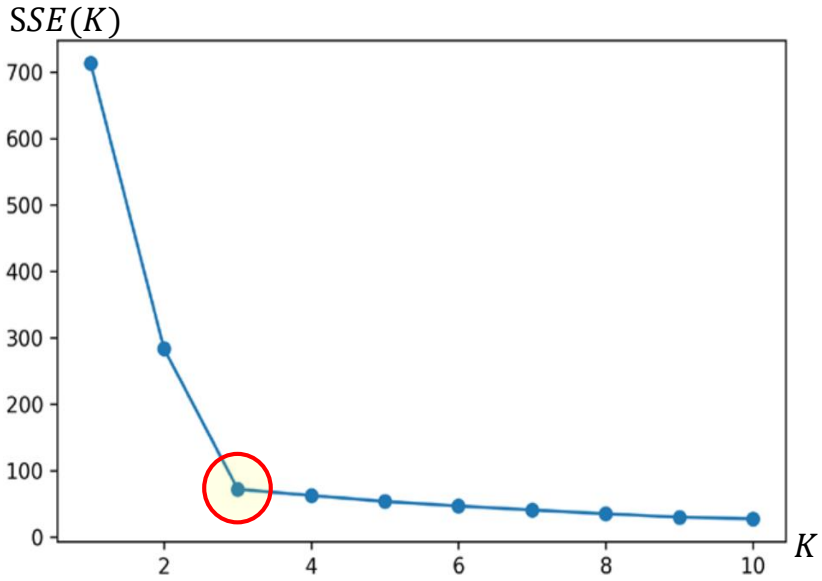
- 개요
  - 가장 널리 사용되는 군집방법
  - 군집의 개수 K는 미리 정해주어야 하는 숫자임 ➔ K-means 군집의 최대 약점

- Algorithm
  - [Step 1] 각 특성변수의 자료타입에 따라 자료를 변환한 후 특성변수를 표준화
  - [Step 2] 학습데이터에서 임의의 K개 표본을 뽑아 K개 군집의 중심값 $\boldsymbol{\mu}_l$ (l=1, ⋯, K)로 놓음
  - [Step 3] 각 관측치를 제곱 유클리디안거리 기준으로 가장 가까운 $\boldsymbol{\mu}_l$ 군집에 편입
  - [Step 4] 각 군집의 평균을 새로 구해 이를 새로운 중심값 $\boldsymbol{\mu}_l$ (l=1, ⋯, K)로 놓고 [Step 3] 실행
  - [Step 5] 각 군집의 member가 변하지 않을 때 까지 (or 미리 정해진 최대 반복횟수에 도달할 때 까지) [Step 4] 반복

- K 의 선택
  - Elbow method

K의 선택

- Elbow Method (팔꿈치 방법)
  - 목표: $SSE(K) = \sum_{l=1}^{K} S_l^2$를 최소화하는 K를 찾는다.
    - ▶ $S_l^2 = \sum_{i \in l} \sum_{j=1}^{d} (x_{ij} - \mu_{lj})^2$: class l에 포함된 관측치들의 $\boldsymbol{\mu}_l$로부터의 제곱 유클리디안거리의 합
  - But, $SSE(K)$는 K에 대해 단조감소 ➔ (대안) $SSE(K)$의 감소속도가 확연히 줄어드는 K를 찾는다.
  - 팔꿈치 그림: K를 가로축에, $SSE(K)$를 세로축에 놓고 그린 그림



- ▶ K가 커질수록 $SSE(K)$ 감소
- ▶ K=3에서 $SSE(K)$의 감소속도(기울기)가 현저하게 줄어듦
- ▶ K=3 선택
- ➔ "Elbow method"

  - 단점: 군집 결과가 [Step 2]에서 임의로 뽑은 초기 중심값의 질에 의존 ➔ (대안) "K-means++"

K-means++

- 목적: 임의추출한 K개의 초기 중심값에 군집 결과가 의존하는 문제 완화
  - By 초기 중심값을 지정하는 방법 수정

- Algorithm
  - **[Step 1]** n개 표본으로 구성된 학습데이터에서 임의표본 1개를 뽑아 이를 초기 중심값 $\boldsymbol{\mu}_1$으로 놓음.
  - **[Step 2]** 나머지 $(n-1)$개 자료에 대해 $\boldsymbol{\mu}_1$으로부터의 제곱 유클리디안거리를 구하고 이 거리에 비례하는 확률을 $(n-1)$개 자료 각각에 부여. 그리고 이 확률에 비례하여 1개의 임의표본을 뽑아 이를 두 번째 초기 중심값 $\boldsymbol{\mu}_2$로 놓음.
  - **[Step 3]** 나머지 $(n-2)$개 자료에 대해 $min\big(d(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\mu}_1), d(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\mu}_2)\big)$을 구하고 이 최소거리에 비례하는 확률을 $(n-2)$개 자료 각각에 부여. 그리고 이 확률에 비례하여 1개의 임의표본을 뽑아 이를 세 번째 초기 중심값 $\boldsymbol{\mu}_3$로 놓음.
  - **[Step 4]** [Step 1] – [Step 3]을 최종 $\boldsymbol{\mu}_K$를 구할 때 까지 반복. 즉, $(n-(k-1))$개 자료에 대해 $min\big(d(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\mu}_1), \cdots, d(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\mu}_{k-1})\big)$을 구하고 이 최소거리에 비례하는 확률을 $(n-(k-1))$개 자료 각각에 부여. 그리고 이 확률에 비례하여 1개의 임의표본을 뽑아 이를 k번째 초기 중심값 $\boldsymbol{\mu}_k$로 놓음.

03 Hierachical Clustering (계층적 군집)

- 종류
  - **결합적 (agglomerate) 군집**: n개의 자료가 있을 때 각 자료를 한 개의 군집으로 보고, 비유사성 측도 기준으로 군집간 결합(agglomerate)을 최종적으로 하나의 군집이 될 때 까지 반복
  - **분할적 (divisive) 군집**: 모든 자료를 하나의 동일한 군집으로 보고, 군집을 한 개씩 떼어냄.

- Notes
  - 두 방법은 본질적으로 동일
  - 군집의 개수 K를 미리 정할 필요 X ➔ 계층적 군집의 장점
  - 수업에서는 결합적 군집만 설명할 것임.

Agglomerate Clustering (결합적 군집)

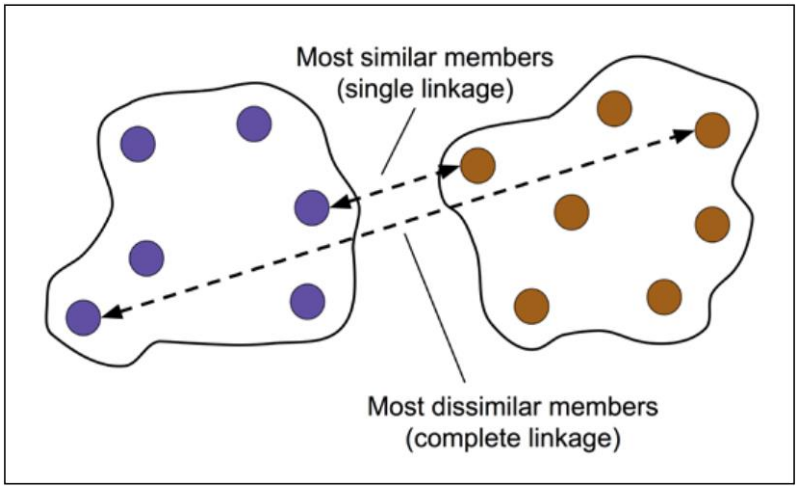
- 군집 간 거리 측도에 따른 결합적 군집의 분류

  - (기호) $\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_{n_A}$: 군집 A에 속한 관측치, $\boldsymbol{z}_1, \cdots, \boldsymbol{z}_{n_B}$: 군집 B에 속한 관측치

  -

결합적 군집	군집간 거리 측도
완전연계군집 (Complete-linkage clustering)	$max\{d(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{z}_j) \mid i = 1, \cdots, n_A, j = 1, \cdots, n_B\}$
단순연계군집 (Single-linkage clustering)	$min\{d(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{z}_j) \mid i = 1, \cdots, n_A, j = 1, \cdots, n_B\}$
평균연계군집 (Average-linkage clustering)	$\frac{1}{n_A n_B} \sum_{i=1}^{n_A} \sum_{j=1}^{n_B} d(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{z}_j)$

  -



▶ 완전연계: 가장 멀리 떨어진 멤버들 간의 거리

▶ 단순연계: 가장 가까운 멤버들 간의 거리

▶ 평균연계: 모든 멤버 조합의 거리들의 평균

Agglomerate Clustering (결합적 군집, 계속)

- Algorithm
  - [Step 1] 전체 n개 표본에서 거리가 가장 가까운 두 개 관측치를 한 개의 군집으로 합침.
  - [Step 2] $k = n - 1, \cdots, 2$에 대하여 적절한 연계군집을 통해 k개 군집간의 거리를 구하여, 가장 가까운 거리를 가진 두 개의 군집을 하나의 군집으로 합침.

04 DBSCAN (Density-based clustering of approximations with noises)

- 밀도기반 군집 (Density-based clustering)

  - 공간상에 높은 밀도 (high density)를 가지고 모여 있는 관측치들을 하나의 그룹으로 간주하고, 낮은 밀도를 가지고 홀로 있는 관측치는 이상치 또는 잡음 (noise)으로 분류

- 관측치의 유형 분류

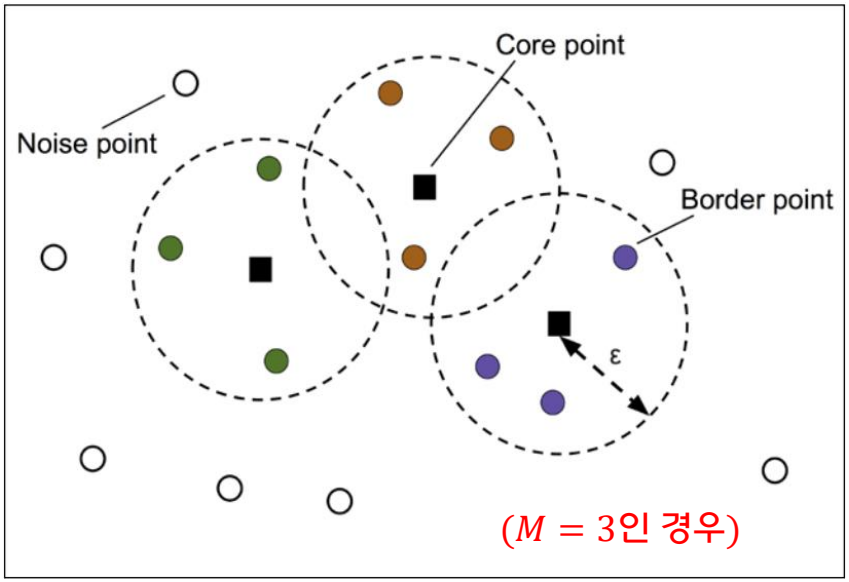
  - 관측치의 ε –neighborhood가 M개 이상의 다른 관측치를 포함하는지 여부를 고려하여 분류

    ➔ 즉, ε과 M은 초모수 (hyper parameter)가 됨.

① 핵심자료 (core point): ε –neighborhood에 M개 이상의 다른 관측치를 포함하는 관측치

② 주변자료 (border point): 핵심자료는 아니지만 ε –neighborhood에 핵심자료를 포함하는 관측치

③ 잡음자료 (noise point): 핵심자료도 주변자료도 아닌 관측치



수행 절차

- Algorithm
  - [Step 1] 각 핵심자료의 ε –neighborhood에 있는 관측치들로 하나의 군집을 형성
    - ▶ 핵심자료 간의 거리가 ε 이하인 경우, 대응하는 군집들은 하나의 군집으로 통합
  - [Step 2] 주변자료는 가장 가까운 거리에 있는 핵심자료가 포함된 군집으로 편입

- 초모수
  - ε: 너무 작으면 많은 관측치가 잡음자료로 분류되고, 너무 크면 군집의 개수가 적어짐.
  - M: 일반적으로 '특성변수의 개수 + 1'을 사용

Q & A