19기 정규세션
ToBig's 18기 강의자
강효은

Clustering

군집화

コナ nts

Unit 01 | Clustering

Unit 02 | Hierarchical Clustering

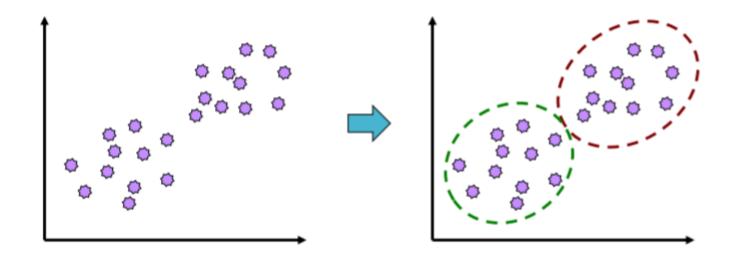
Unit 03 | Partitioning Clustering

Unit 04 | 모델평가

Unit 05 | Clustering 실습

Clustering(군집화)

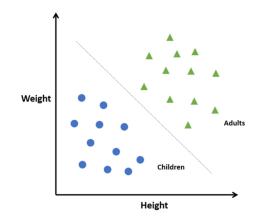
- 비지도 학습의 경우 일반적으로 데이터를 적절하게 scaling 해야함!
- Categorical의 경우 One-Hot Encoding 실행
- 유사한 속성을 갖는 데이터를 묶어 몇 개의 군집(그룹)으로 나누는 것



Classification VS Clustering

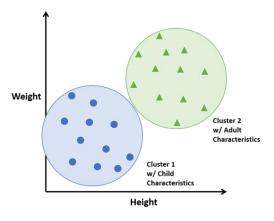
Classification (Supervised)

- 사전 정의된 범주가 있는 (labeled) 데이터로부터 비슷한 집단으로 묶는 방법
- 지도학습의 한 종류



Clustering (Unsupervised)

- 사전 정의된 범주가 없는 (unlabeled) 데이터로부터 최적의 그룹을 찾아나가는 문제
- 비지도학습의 한 종류



Clustering의 적용

- 데이터들로부터 유의미한 그룹들을 찾음
- 주로 데이터의 경향성을 파악

1. 고객 세분화

Group A

High value, high income, no dependents, homeowners

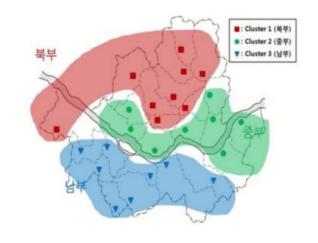




2. 유사 문서 군집화



3. 서울시 오존농도 패턴 군집화



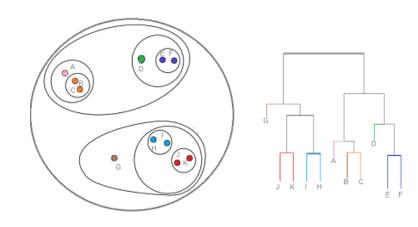
Clustering 종류



어떤 <mark>클러스터링</mark> 알고리즘을 사용할 것인가?

- 1 Hierarchical Clustering
 - 계층적 군집화
 - 개체들을 가까운 집단부터 차근차근 묶어나가는 방식
 - 군집화 결과 뿐만 아니라 유사한 개체들이 결합되는 dendrogram 생성

2 Partitioning Clustering

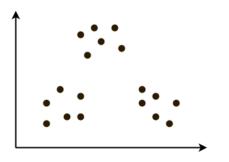


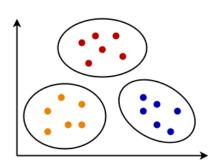
Clustering 종류



어떤 클러스터링 알고리즘을 사용할 것인가?

1 Hierarchical Clustering





2 Partitioning Clustering

- 전체 데이터의 영역을 특정 기준에 의해 동시에 구분
- 각 개체들은 사전에 정의된 개수의 군집 중 하나에 속하게 됨

1 T nts

Unit 01 | Clustering

Unit 02 | Hierarchical Clustering

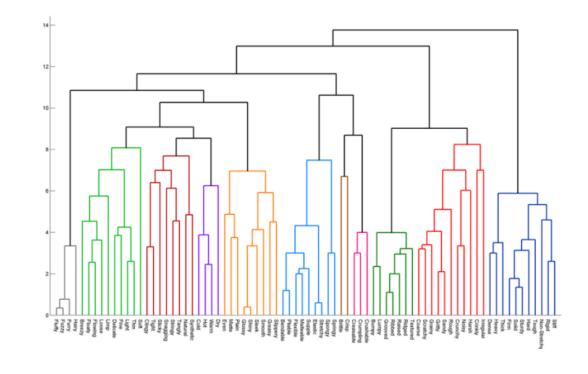
Unit 03 | Partitioning Clustering

Unit 04 | 모델평가

Unit 05 | Clustering 실습

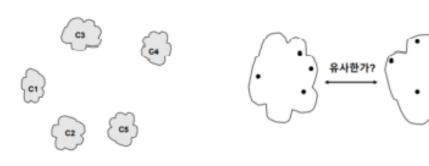
Hierarchical Clustering (계층적 군집화)

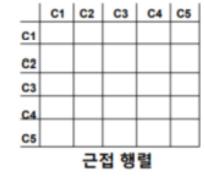
- 개체들을 가까운 집단부터 <mark>차근차근</mark> 묶어가는 방식
 - 계층적 트리모형을 이용하여 개별 개체들을
 순차적/계층적으로 유사한 개체/군집과 통합한다.
- 클러스터 수를 미리 정해주지 않아도 되는 장점
- <mark>덴드로그램</mark>을 통해 시각화가 가능!
 - 덴드로그램 : 개체들이 결합되는 순서를 나타내는 트리 형태의 구조



Proximity Matrix (근접 행렬)

: A square matrix in which the entry in cell (j,k) is some measure of the similarity (or distance) between the items to which row j and column k correspond





클러스터들이 있을 때,

두 클러스터가 유사한지 알아보기 위해 클러스터 간의 거리를 나타낸 행렬

Hierarchical Clustering 수행 예시

1 모든 개체들 사이의 거리에 대한 유사도 행렬 계산

	Α	В	С	D
Α		20	7	2
В			10	25
С				3
D				

Α

D

В

C

Hierarchical Clustering 수행 예시

- 1 모든 개체들 사이의 거리에 대한 유사도 행렬 계산
- 2 거리가 인접한 관측치끼리 군집 형성

	Α	В	С	D
Α		20	7	2
В			10	25
С				3
D				



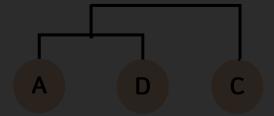
В

C

Hierarchical Clustering 수행 예시

- 1 모든 개체들 사이의 거리에 대한 유사도 행렬 계산
- 2 거리가 인접한 관측치끼리 군집 형성
- 3 유사도 행렬 업데이트

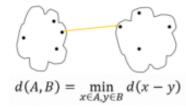
	A,D	В	С	
A,D		20	3	
В			10	
С				



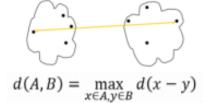
A-D <mark>군집</mark>과 나머지 <mark>개체</mark> 사이의 거리는 어떻게 결정하지 ?!

군집 간 거리 측정 두 군집 사이의 유사성 / 거리 측정

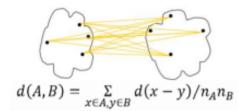
1. MIN (Single link)



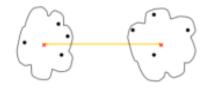
2. MAX (Complete link)



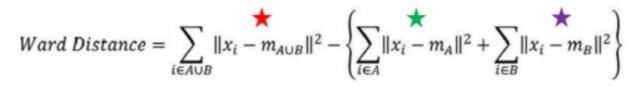
3. Group Average



4. Centroid



군집 간 거리 측정 Ward's



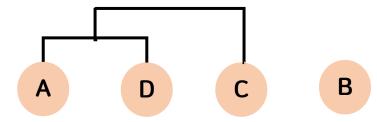
 m_A is the center of cluster A.

A B A B Ward's distance = 10 - (3+2) = 5

데이터들을 하나의 군집으로 묶음으로써 생기는 정보의 손실을 측정

Hierarchical Clustering 수행 예시

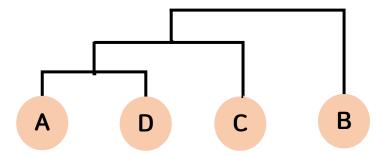
- 1 모든 개체들 사이의 거리에 대한 유사도 행렬 계산
- 2 거리가 인접한 관측치끼리 군집 형성
- 3 유사도 행렬 업데이트



	A,D	В	С	
A,D		20	3	
В			10	
С				

Hierarchical Clustering 수행 예시

- 1 모든 개체들 사이의 거리에 대한 유사도 행렬 계산
- 2 거리가 인접한 관측치끼리 군집 형성
- 3 유사도 행렬 업데이트
- 4 위 과정 반복



	A,D,C	В	
A,D,C		10	
В			

Hierarchical Clustering 정리

- 1) 단일 데이터 간 거리를 정의 Euclidean dist. / Manhattan dist. / ···
- 2) 군집 군집 or 군집 개체 간 거리 정의 MIN, MAX, Ward's method
- 3) 반복

コナ nts

Unit 01 | Clustering

Unit 02 | Hierarchical Clustering

Unit 03 | Partitioning Clustering

Unit 04 | 모델평가

Unit 05 | Clustering 실습

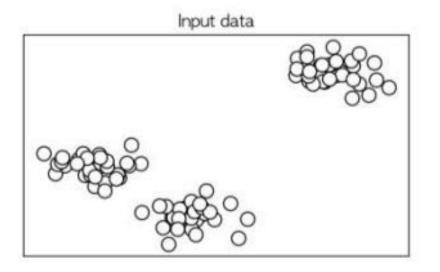
K-Means Clustering (K-평균 군집화)

- 대표적인 분리형 군집화 알고리즘
- 각 군집은 <mark>하나의 중심</mark>을 가진다.
- <mark>사전에 군집의 수 K</mark>가 정해져야 알고리즘을 실행
- 각 개체는 가장 <mark>가까운 중심</mark>에 할당되며,
 같은 중심에 할당된 개체들이 모여 하나의 군집을 형성

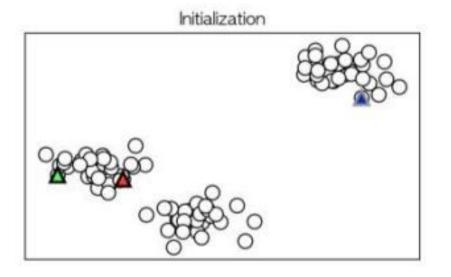
$$X = C_1 \cup C_2 \cdots \cup C_k$$
, $C_i \cap C_j = \emptyset$, $i \neq j$ argmin $\sum_{i=1}^K \sum_{x_i \in C_i} \|x_j - c_i\|^2$

각 클러스터(집합)별 중심점~클러스터 내 점들간 거리의 제곱합을 최소로 하는 집합 C를 찾는 것!

K-Means Clustering 수행 예시

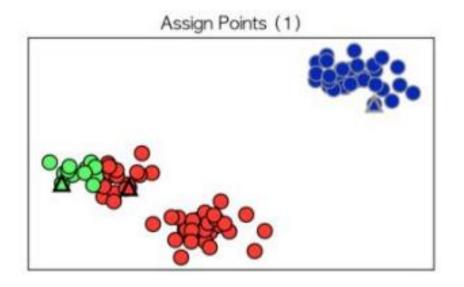


K-Means Clustering 수행 예시



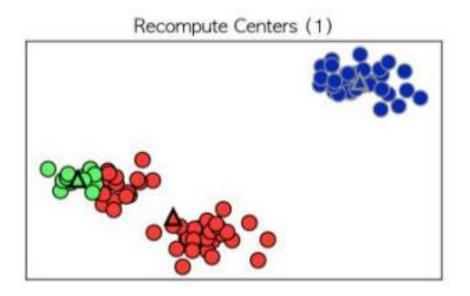
1 초기 중심(centroid)로 할 K개의 데이터를 임의로 선택

K-Means Clustering 수행 예시



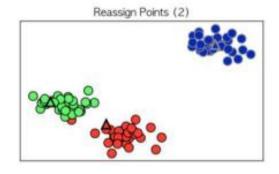
2 각 데이터를 <mark>가장 가까운</mark> 군집 중심(centroid)에 할당

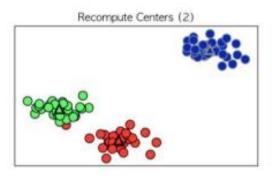
K-Means Clustering 수행 예시

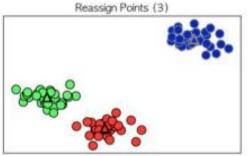


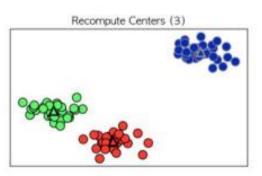
3 각 군집 내의 데이터들의 <mark>평균</mark>을 계산하여 군집 중심 update

K-Means Clustering 수행 예시









4 군집 중심의 변화가 없을 때까지 2,3 의 과정 반복

K-Means Clustering 수행 절차

- 1 초기 중심 K개를 임의로 생성
- 개별 관측치로부터 각 중심까지의 거리를 계산 후 가장 가까운 중심이 이루는 군집에 관측치 할당
- 3 각 군집이 중심을 다시 계산
- 4 중심이 변하지 않을 때까지 2,3의 과정을 반복

K-Means Clustering 수행 절차

- 1. K(군집의 수)는 몇 개로 지정하지 ?
- 초기 중심 K개를 임의로 생성 →
 - 2. 초기 중심(centroid)으로 할 데이터를 선택하는 기준은 ?
- 2 개별 관측치로부터 각 중심까지의 거리를 계산 후 가장 가까운 중심이 이루는 군집에 관측치 할당
- 3 각 군집이 중심을 다시 계산
- 4 중심이 변하지 않을 때까지 2,3의 과정을 반복

1 초기 중심 K개를 임의로 생성 → K(군집의 수)는 몇 개로 지정 ?!

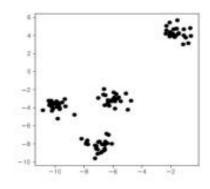
1. Elbow Method

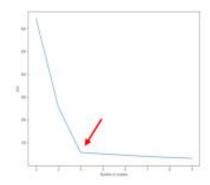
- 군집 내 편차제곱합(WSS)이 최소가 되도록 군집의 중심을 결정해 나가는 방법
- WSS의 총합이 급격하게 감소하기 시작하는 K를 선택
- 그래프가 꺾이는 모양이 팔꿈치 같아 Elbow Method라고 불림

$$WSS = \sum_{x=C} (x - \mu_C)^2$$

x : 데이터

 μ_C : 군집의 중심. K-Means의 경우 군집 안 데이터들의 '평균'이 됨.





1 초기 중심 K개를 임의로 생성 → K(군집의 수)는 몇 개로 지정 ?!

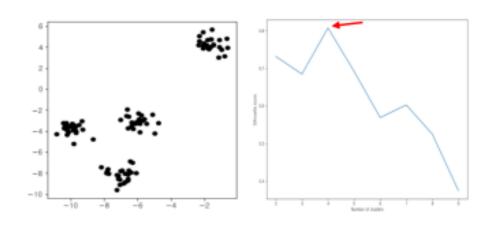
2. Silhouette Coefficient

- 실루엣 계수는 군집 안의 데이터가 자신이 속한 군집 안의 다른 데이터와 얼마나 유사하며, 다른 군집에 속한 데이터와 얼마나 차이가 나는지 측정
- (-1,1)의 값을 가지며 <mark>1에 가까울수록</mark> 적절한 군집화가 되었다고 판단

a: 데이터 x와 동일한 군집 내의 나머지 데이터들과의 평균 거리 - 군집 내 응집도 (cohesion)

b: 데이터 x와 가장 가까운 군집 내의 모든 데이터들 간의 평균 거리 - 군집 간 분리도 (separation)

$$s = \frac{b - a}{max(a, b)}$$



1 초기 중심 K개를 임의로 생성 → <mark>초기 중심으로 할 데이터를 선택하는 기준</mark>

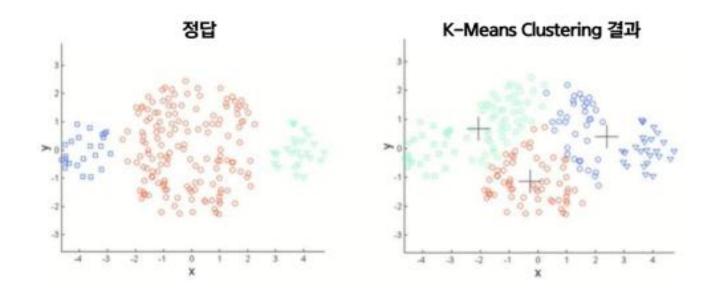
많은 경우 초기 중심 설정이 최종 결과에 큰 영향을 미치지는 않음! → 가장 기본적인 방법 : 랜덤초기화

랜덤 초기 중심 설정의 위험을 피하고자 다양한 연구 존재

- 반복적으로 수행하여 가장 여러 번 나타나는 군집 사용
- 전체 데이터 중 일부만 샘플링하여 계층적 군집화를 수행한 뒤 초기 군집 중심 설정
- 데이터 분포의 정보를 사용하여 초기 중심 설정

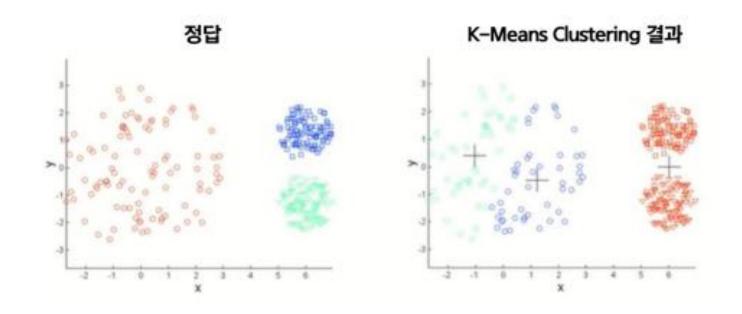
K-Means Clustering 문제점

1 서로 다른 크기의 군집을 잘 찾아내지 못한다



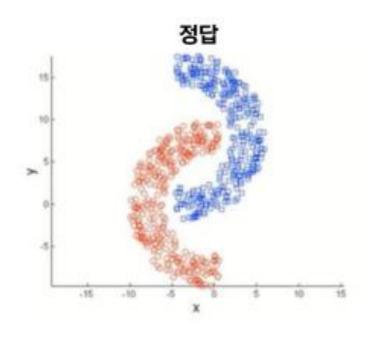
K-Means Clustering 문제점

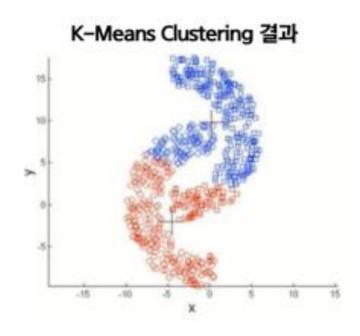
2 서로 다른 밀도의 군집을 잘 찾아내지 못한다



K-Means Clustering 문제점

3 지역적 패턴이 존재하는 군집을 판별하기 어렵다.





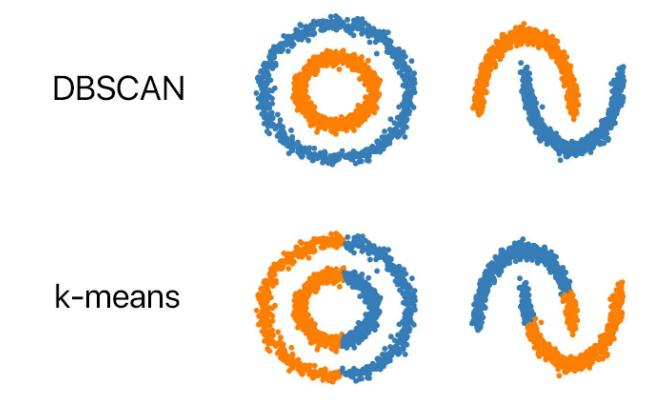
DBSCAN Density-Based Spatial Clustering of Application with Noise

공간상에 높은 밀도를 가지고 모여있는 관측치들을 하나의 그룹으로 간주하고, 낮은 밀도를 가지고 홀로 있는 관측치는 이상치 또는 잡음으로 분류하는 <mark>밀도 기반</mark> 군집화 알고리즘

[특징]

- 클러스터의 개수를 미리 지정할 필요 X
- 병합 군집이나 k-평균보다는 다소 느리지만 비교적 큰 데이터셋에도 적용 가능
- 복잡한 형상도 찾을 수 있으며, 어떤 클래스에도 속하지 않는 데이터를 구분 가능
- 클러스터링을 수행하는 동시에 <mark>노이즈 데이터도 분류</mark>할 수 있기 때문에, 이상치에 의해 클러스터링 성능이 하락하는 현상 완화 가능

DBSCAN Density-Based Spatial Clustering of Application with Noise



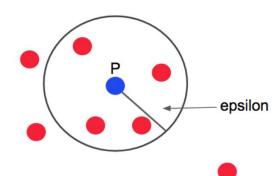
DBSCAN Density-Based Spatial Clustering of Application with Noise

[매개변수]

eps(epsilon) 한 데이터가 주변으로부터 얼마만큼 떨어진 거리를 같은 군집이라고 할 것인가? (주변 거리)

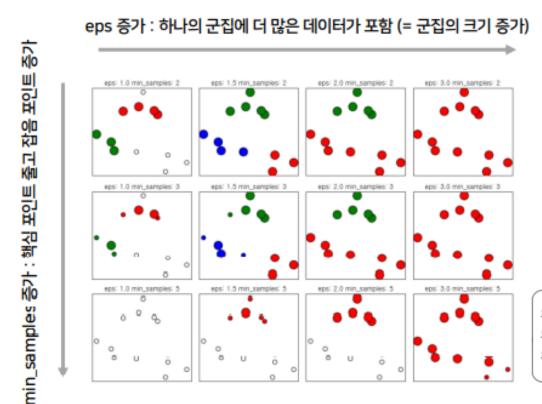
min_samples 적어도 한 군집에 몇 개의 데이터가 있어야 군집이라고 할 것인가? (최소 데이터 수)

→ 거리 eps 내에 데이터가 min_samples개 이상 있으면 <mark>하나의 cluster</mark>라고 인식



Unit 03 | Partitioning Clustering

DBSCAN Density-Based Spatial Clustering of Application with Noise



eps) too small → 많은 관측치가 잡음 자료로 분류 too big → 군집의 개수가 너무 작아짐

min_samples) 2차원 데이터의 경우 통상적으로 4를 사용

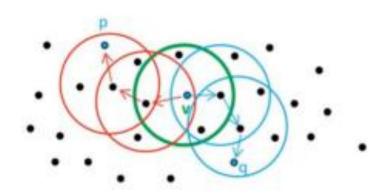
흰색이 아닌 큰 원: 핵심 포인트 흰색이 아닌 작은 원: 경계 포인트 흰색 원: 잡음 포인트

Unit 03 | Partitioning Clustering

DBSCAN Density-Based Spatial Clustering of Application with Noise

작동 절차

- 1 랜덤으로 데이터 포인트로 선택
- 2 그 포인트에서 eps 거리 안의 모든 포인트를 찾음
 - 2-1. N(eps 거리안에 있는 데이터) < min_samples → 어떤 클래스에도 속하지 않는 잡음 포인트로 레이블
 - 2-2. N(eps 거리안에 있는 데이터) > min_samples → 핵심 포인트로 레이블하고 새로운 클러스터 레이블 할당
- 3 2-2의 핵심포인트의 eps 거리 안의 모든 이웃을 살핌
 - 3-1. 만약 어떤 클러스터에도 아직 할당되지 않았다면 바로 전에 만든 클러스터 레이블 할당
 - 3-2. 만약 핵심 샘플이면 그 포인트의 이웃을 차례로 방문
- 4 Eps 거리 안에 더 이상 핵심포인트가 없을 때까지 진행



Unit 03 | Partitioning Clustering

DBSCAN Density-Based Spatial Clustering of Application with Noise

한계

- 1 사전에 데이터에 대한 충분한 이해도가 없다면 eps와 min_samples를 정하기 어려움
- 2 연산량이 많아 K-Means에 비해 속도가 느림
- 3 차원의 저주 문제
 - 차원의 수가 낮은 데이터는 문제가 되지 않지만, 고차원 데이터일수록 학습 데이터 양이 급증해 많은 연산 필요
 - 유클리드 거리 사용하는 모든 모델의 공통적인 단점

コナ nts

Unit 01 | Clustering

Unit 02 | Hierarchical Clustering

Unit 03 | Partitioning Clustering

Unit 04 | 모델평가

Unit 05 | Clustering 실습

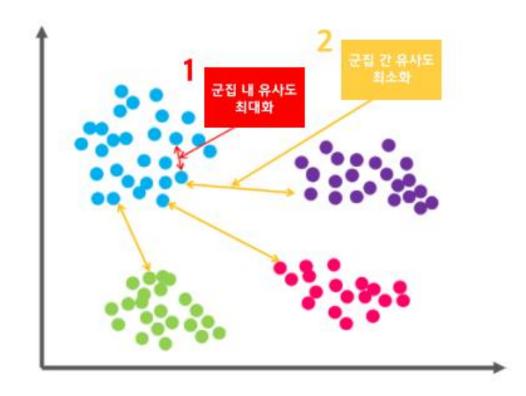
Good Clustering!

1. Maximizes the similarity within a group

: 군집 내 응집도 (cohesion) 최대화

2. Maximizes the difference between groups

: 분리도 (separation) 최대화

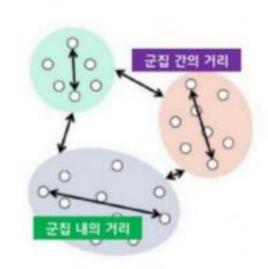


"분류 알고리즘 처럼 모든 상황에 적용가능한 평가 지표 부재 "

- 1 내부 평가 지표 :Dunn Index, Silhouette, Sum of Squared Error …
- 2 외부 평가 지표 : Rank Index, Jaccard Coefficient, ···

1. Dunn's Index

$$DI = \frac{\text{군집과 군집 사이의 거리 중 최솟값}}{\text{군집 내 객체 간 거리 중 최대값}}$$



군집과 군집 사이의 거리가 클수록, 군집 내 객체가 거리가 작을수록 좋은 모델 → DI가 큰 모델이 좋은 모델

2. Silhouette Coefficient

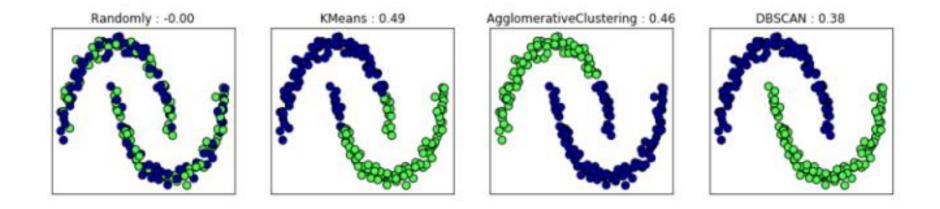
- 실루엣 계수는 군집 안의 데이터가 자신이 속한 군집 안의 다른 데이터와 얼마나 유사하며, 다른 군집에 속한 데이터와 얼마나 차이가 나는지 측정
- [-1,1]의 값을 가지며 <mark>1에 가까울수록</mark> 적절한 군집화가 되었다고 판단
- 일반적으로 S의 값이 0.5보다 크면 군집 결과가 타당하다고 볼 수 있음

$$S = \frac{b-a}{max(a,b)}$$

a: 데이터 x와 동일한 군집 내의 나머지 데이터들과의 평균 거리 - 군집 내 응집도 (cohesion)

b: 데이터 x와 가장 가까운 군집 내의 모든 데이터들 간의 평균 거리 - 군집 간 분리도 (separation)

2. Silhouette Coefficient



눈으로 보기엔 DBSCAN의 결과가 제일 좋지만, K-Means의 실루엣 계수가 가장 높음을 볼 수 있음
→모양이 복잡할 때는 평가가 잘 들어맞지 않음

コナ nts

Unit 01 | Clustering

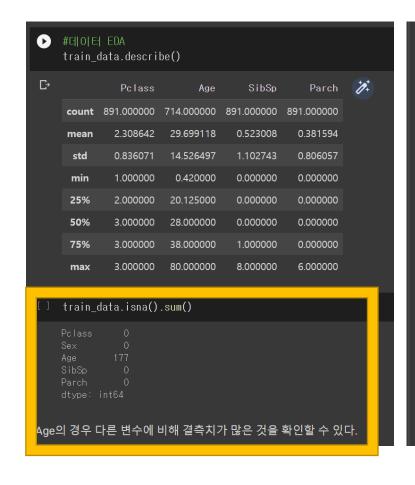
Unit 02 | Hierarchical Clustering

Unit 03 | Partitioning Clustering

Unit 04 | 모델평가

Unit 05 | Clustering 실습

Unit 05 | Clustering 실습 - titanic 생존자 예측



K-means를 활용 클러스터링 작업을 통해 같은 군집에 속하는 데이터들의 평균으로 결측치를 채워넣을 수 있음 k train data = train data.copy() k_test_data = test.copy() #결측치가 존재하는 Age column을 제외하고 클러스터링을 진행할 것 from sklearn.preprocessing import StandardScaler scaler = StandardScaler() scaler.fit(k_train_data.drop(["Age"], axis=1)) #Age를 제외한 변수들 스케일링 (정규화) train fill data = scaler.transform(k train data.drop(["Age"], axis=1)) test fill data = scaler.transform(k test data.drop(["Age"], axis=1))

Unit 05 | Clustering 실습 - titanic 생존자 예측

<u>| kmeans = KMeans(n clusters=n clusters)</u> Elbow method를 이용해 k값 결정 (SSE 찍어보기) kmeans.fit(train fill data) [] from sklearn.cluster import KMeans [] train_fill_data n cluster = [] sse = [] for n in range(3, 15, 2): kmeans = KMeans(n clusters=n) print(mean score) kmeans.fit(train_fill_data) n cluster += [n] sse += [kmeans.inertia_] clustered train = kmeans.predict(train fill data) plt.plot(n cluster, sse) clustered test = kmeans.predict(test fill data) [<matplotlib.lines.Line2D at 0x7ff5e5c2e550>] [] #각 군집 별 Age 평균값 찾기 [] print(len(clustered train)) cluster_fill_value = {} 1800 clustered train for i in range(n clusters): 1600 1400 1200 1000 cluster fill value 600 400 3: 25.48. [] #elbow point를 7으로 결정

n_clusters = 7

모든 데이터의 군집이 결정된 것을 확인 가능

- 클러스터링이 잘 되었는지 확인하기 위해 실루엣 계수 확인
- [] from sklearn.metrics import silhouette_score mean score = silhouette score(train fill data, clustered train)

실루엣 계수의 값이 0.5보다 크므로 타당하다고 판단 가능

```
class mean = k train data.loc[clustered train == i, "Age"].dropna().mean()
cluster fill value[i] = class mean
```

Unit 05 | Clustering 실습 - titanic 생존자 예측

```
[] #정확도 비교

mean_test_accuracy = accuracy_score(test_label, mean_test_pred)
cluster_test_accuracy = accuracy_score(test_label, cluster_test_pred)

print(f"Test Accuracy for mean data is {mean_test_accuracy:.4f}")
print(f"Test Accuracy for cluster data is {cluster_test_accuracy:.4f}")

Test Accuracy for mean data is 0.8086
Test Accuracy for cluster data is 0.8349

k-means를 통해 결측치를 채웠을 때의 결과가 더 높은 정확성을 가짐을 확인 가능하다.
```

Clustering 해보기

주어진 데이터로 주석과 함께 자유롭게 과제를 진행해주세요 ◎

- Preprocessing / EDA
- Clustering (수업시간에 배운 세 가지 방법 + α)
- Evaluation

데이터: https://www.kaggle.com/datasets/vjchoudhary7/customer-segmentation-tutorial-in-python

Reference

참고자료

- 투빅스 17기 이지수님 강의자료
- 투빅스 16기 박한나님 강의자료
- 투빅스 15기 김현지님 강의자료
- 고려대학교 김성범 교수님의 핵심 머신러닝 군집분석 강의 : https://www.youtube.com/watch?v=8zB-_LrAraw
- Clustering Evaluation and assessment (tistory.com)

Q&A

들어주셔서 감사합니다.