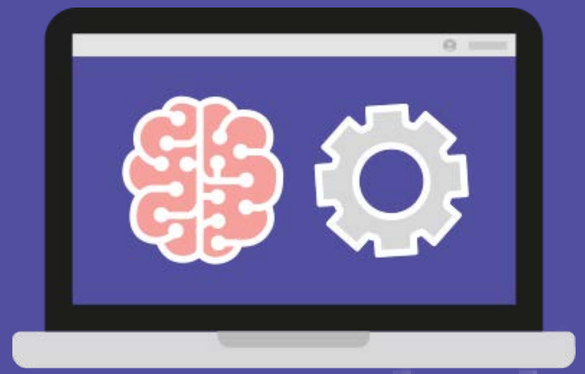
/* elice */

양재 AI School 인공지능 캠프

Lecture 8

Confusion Matrix, ROC Curve, F1 Score



김도경 선생님

수업 목표

1 클러스터링(Clustering)

1. 클러스터링(Clustering) 개요
2. 클러스터링의 타당성 평가

2 여러 클러스터링 알고리즘

1. K-means
2. KNN
3. 가우시안 혼합모델(GMM)과 EM 알고리즘
4. 계층적(Hierarchical) 클러스터링(HC)

1. Clustering(클러스터링)

1-1. 클러스터링(Clustering) 개요

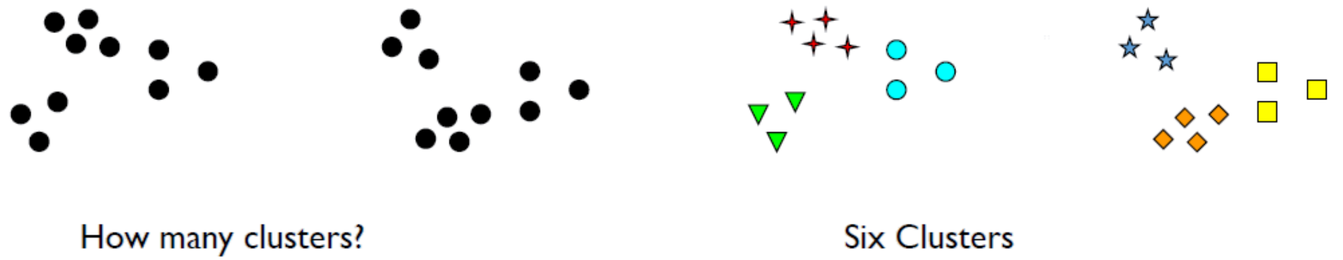
- **클러스터링 vs 분류**
- 클러스터링: 정답이 없는 비지도학습(unsupervised)
  각 개체의 그룹 정보 없이 비슷한 개체끼리 묶어보는 것
- 분류: 정답이 있는 지도학습(supervised)

- **클러스터링의 목표**
  (1) 군집 간 분산(inter-cluster variance) 최대화
  (2) 군집 내 분산(inner-cluster variance) 최소화

1-2. 클러스터링의 타당성 평가

- **군집 타당성 평가**

  비지도학습의 경우 정답이 없기 때문에 일반적인 머신러닝 알고리즘처럼 단순정확도(Accuracy) 등 지표로 평가할 수 없음
- 그림과 같이 최적의 군집 개수를 정답 없이 알아내기 쉽지 않음

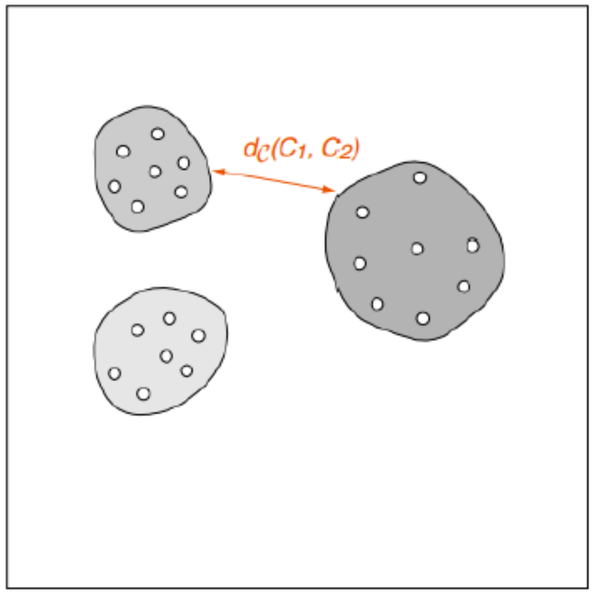


1-2. 클러스터링의 타당성 평가

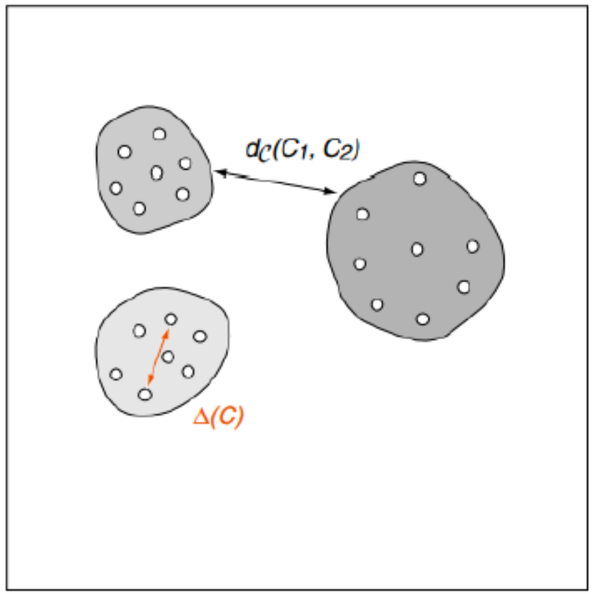
- 군집 타당성 지표

  (1) 군집 간 거리 (2) 군집의 지름 (3) 군집의 분산

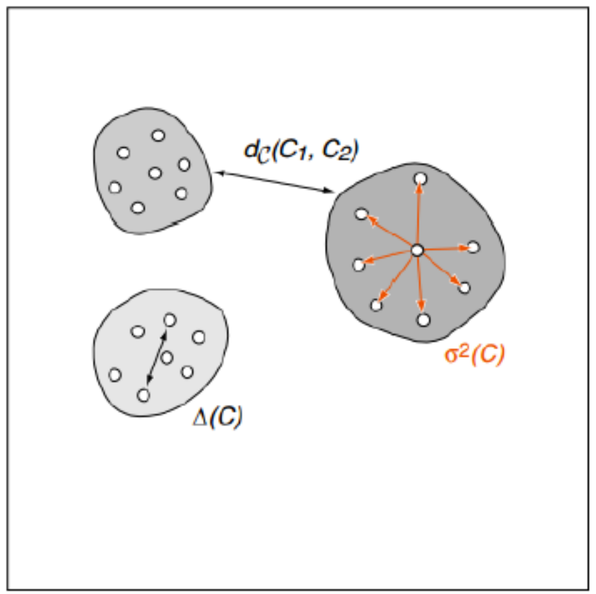
Distance between two clusters



Diameter of a cluster



Scatter within a cluster (SSE)

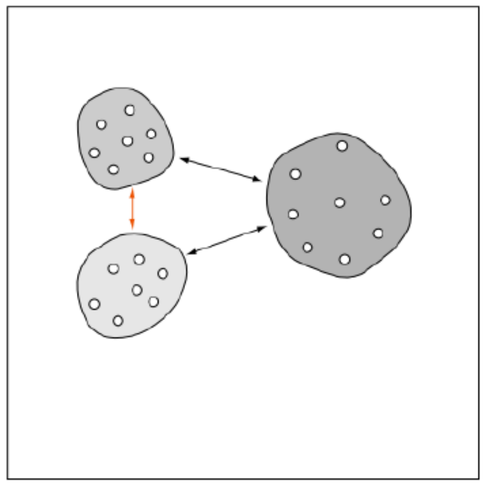


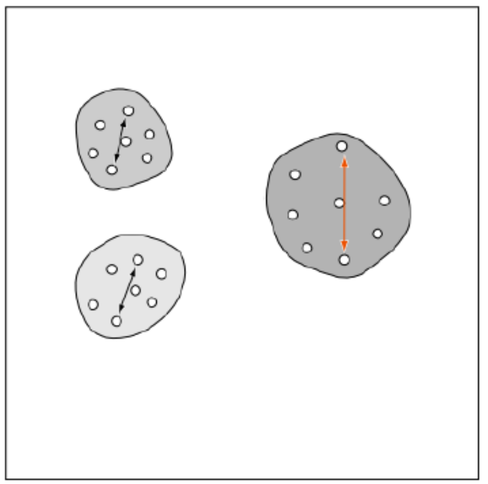
1-2. 클러스터링의 타당성 평가

- Dunn Index

  군집 간 거리의 최소값(하단 좌측)을 분자, 군집 내 요소 간 거리의 최대값(하단 우측)을 분모로 하는 지표

$$I(C) = \frac{\min_{i \neq j} \{d_c(C_i, C_j)\}}{\max_{1 \leq l \leq k} \{\triangle(C_l)\}}$$





2. 여러 클러스터링 알고리즘

2-1. K-means

- K-means는 **EM 알고리즘**을 기반으로 함

  1. EM알고리즘은 **Expectation** 스텝과 **Maximization** 스텝으로 나뉨
  2. 이를 수렴할 때까지 반복
  3. 동시에 해를 찾기 어려운 문제를 풀 때 많이 사용되는 방법론

- E 스텝: 각 군집 중심의 위치를 구함
- M 스텝: 각 점이 어떤 클러스터에 속해야 하는지 멤버십 갱신

2-1. K-means

- **입력**

  1. K (클러스터의 수)

  2. 트레이닝 셋 $x^{(1)}, x^{(2)}, \cdots, x^{(m)} \in \mathbb{R}^n$

- **알고리즘**

  K개의 무게중심 $\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_K \in \mathbb{R}^n$을 랜덤하게 초기화

  Repeat

  i는 1부터 m까지

  $c^{(i)} :=$ $x^{(i)}$에서 가장 가까운 클러스터 인덱스

  k는 1부터 K까지

  $\mu_K :=$ 클러스터 k에 속해있는 점들의 평균

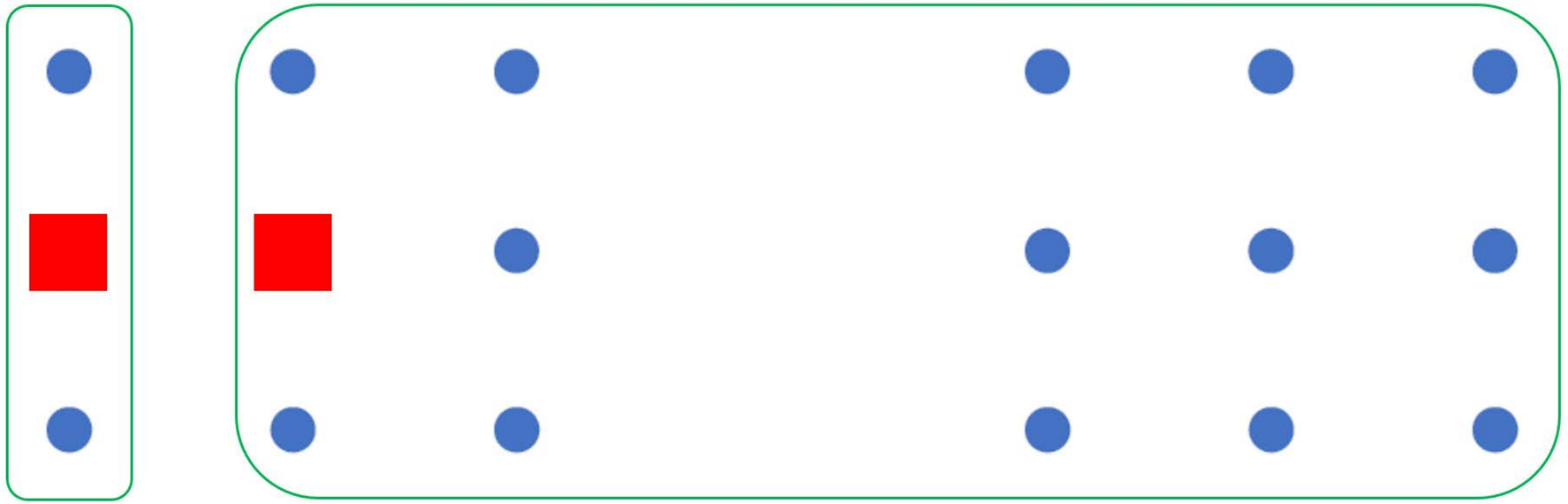
2-1. K-means

- 클러스터의 수 K를 2로 정함
- 군집의 무게중심(빨간색 점)을 랜덤 초기화
  (이 경우에는 점들 중에서)

2-1. K-means

- E스텝

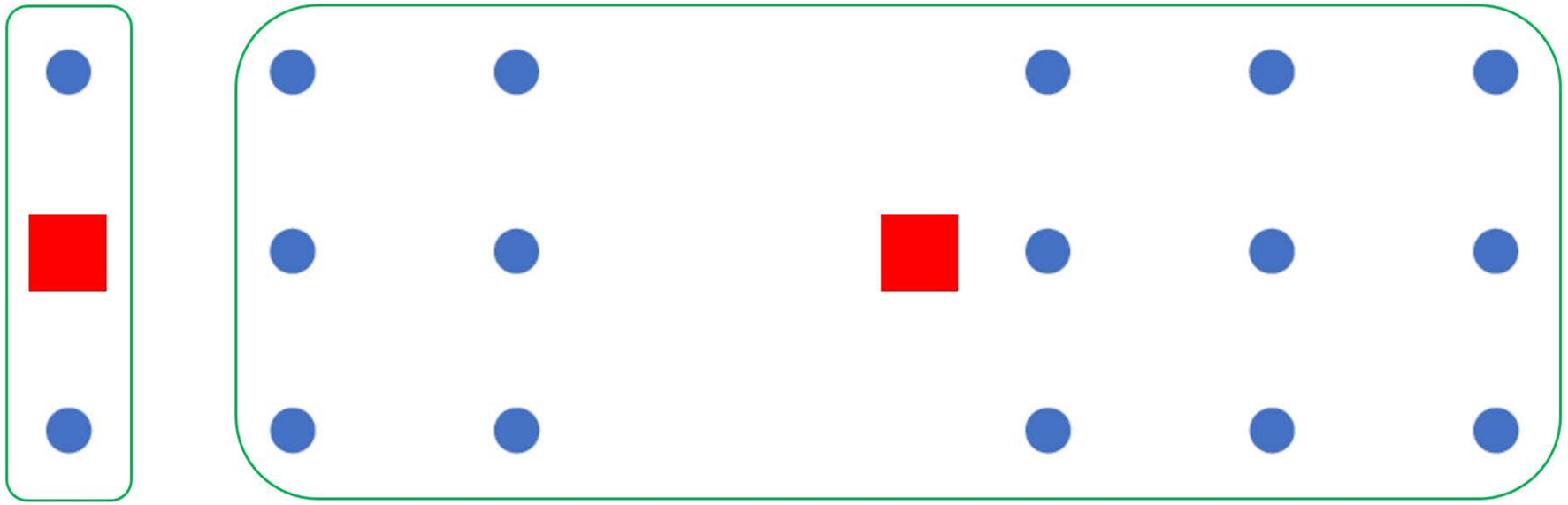
  모든 점들(파란색 점)을 가장 가까운 무게중심을 기준으로 클러스터링



2-1. K-means

- M스텝

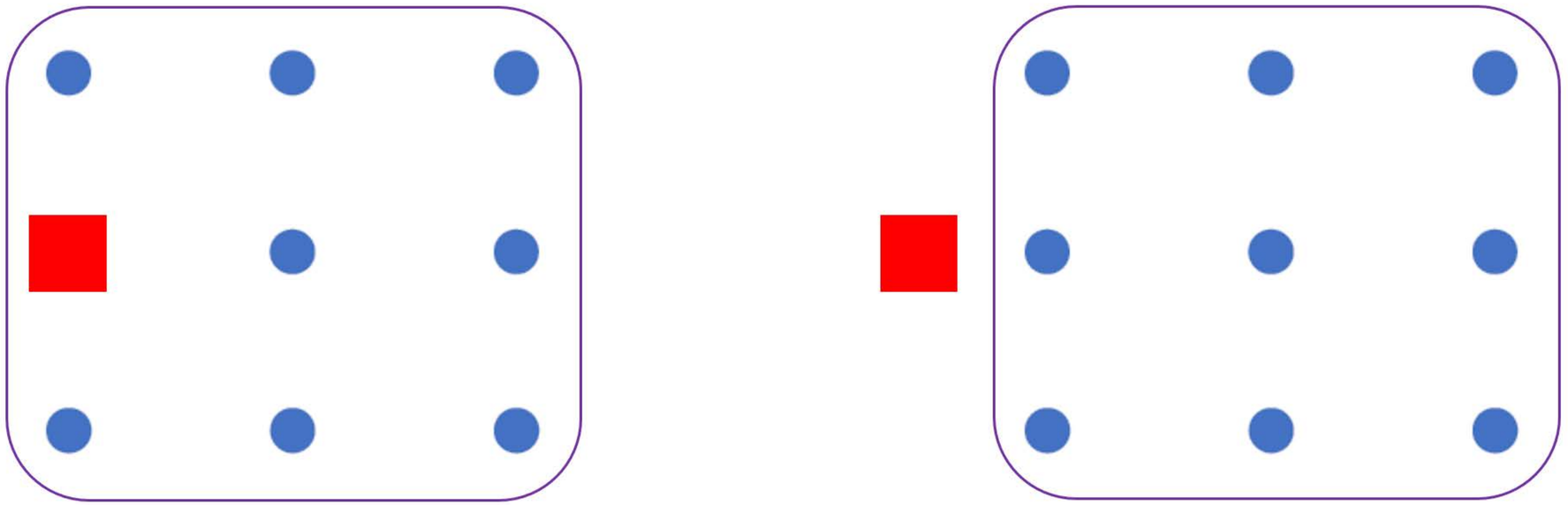
  클러스터의 무게중심을 업데이트



2-1. K-means

- E스텝

  모든 점들(파란색 점)을 가장 가까운 무게중심을 기준으로 클러스터링

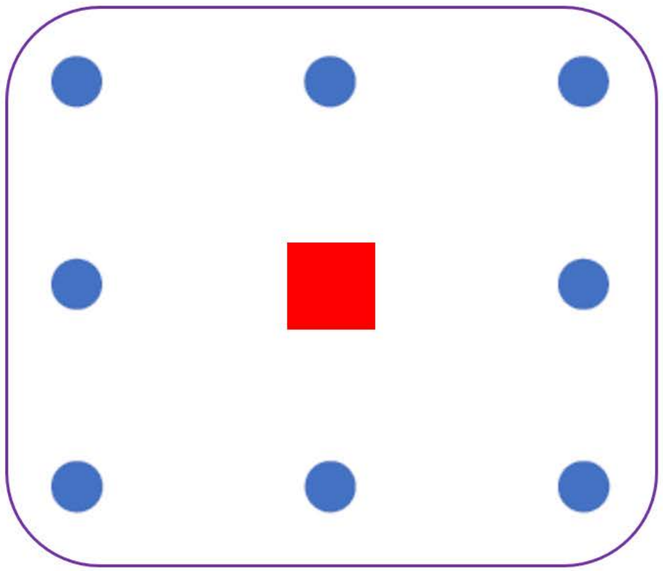


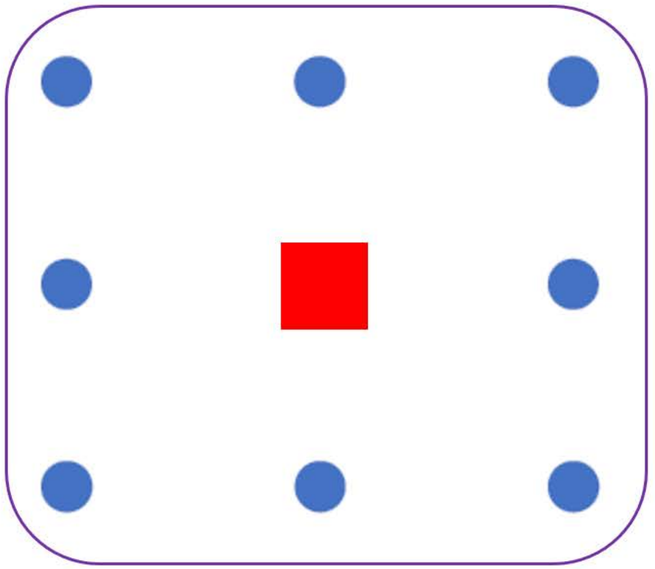
2-1. K-means

- M스텝

  클러스터의 무게중심을 업데이트
- E, M스텝을 반복 적용해도 결과가 바뀌지 않거나(=해가 수렴),

  사용자가 정한 반복수를 채우게 되면 학습이 끝남





2-1. K-means

- 손실함수

  K-means 알고리즘은 결국 아래의 손실함수를

$$J(c^{(1)},\ldots,c^{(m)},\mu_1,\ldots,\mu_K)=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}||x^{(i)}-\mu_{c^{(i)}}||^2$$

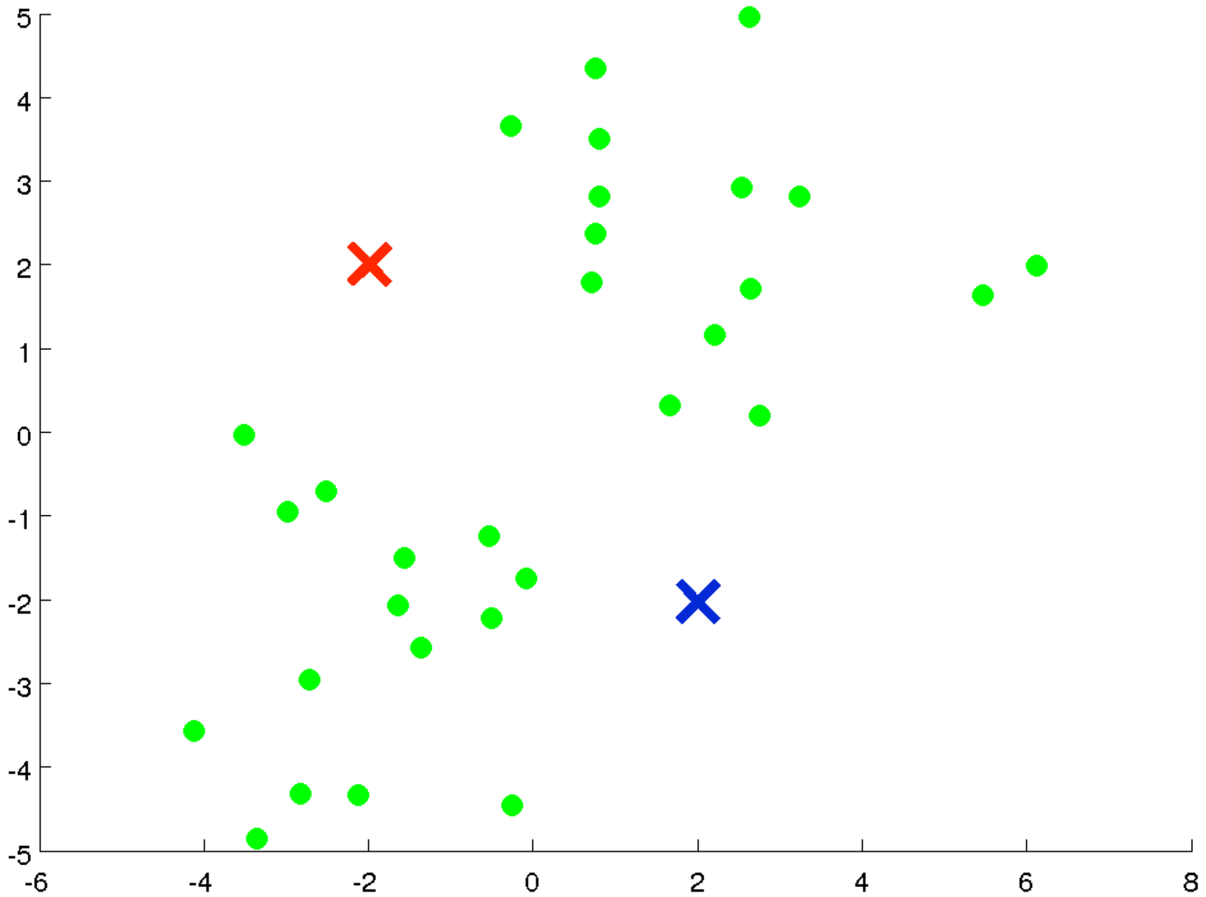
  E스텝에서는

  $c^{(1)}$, $c^{(2)}$, …, $c^{(i)}$에 대해서 최소화하고,

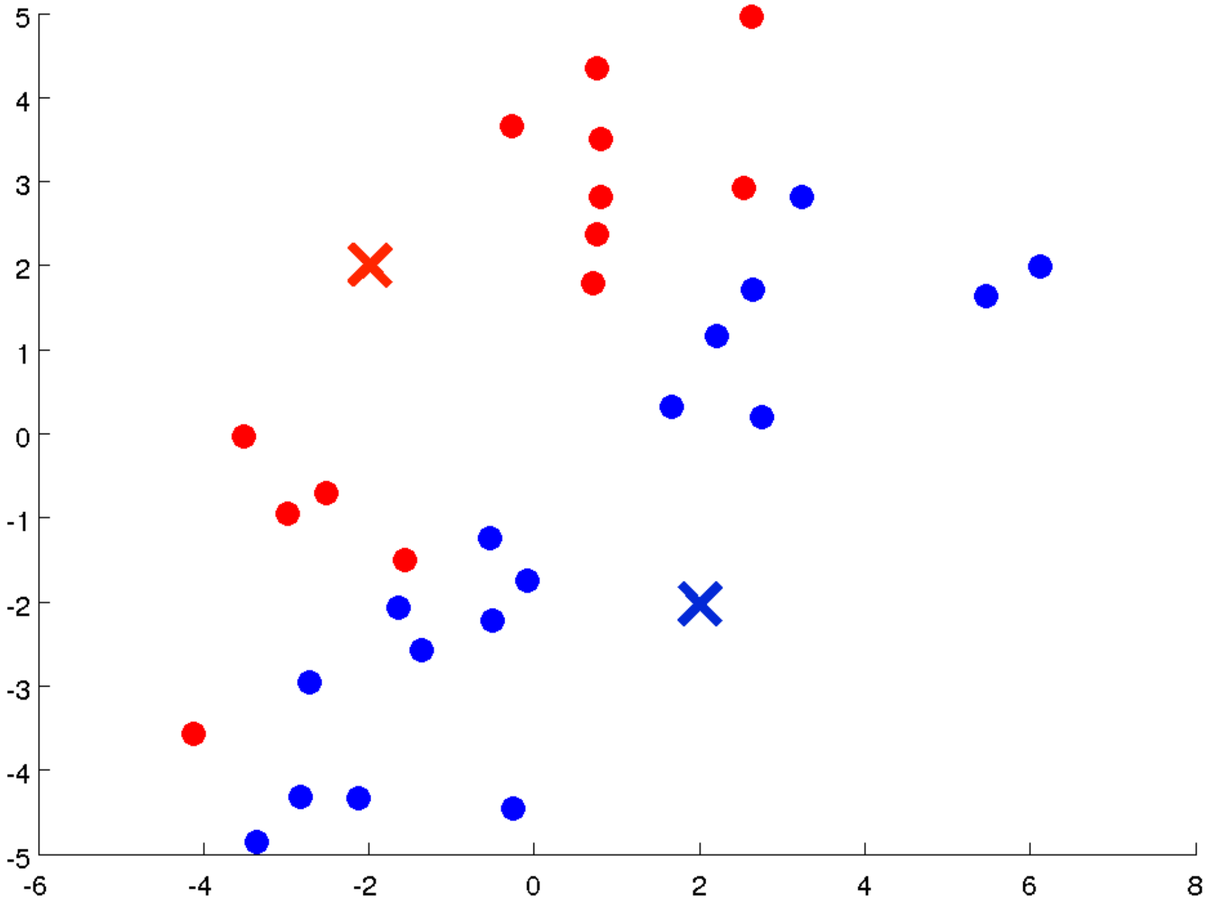
  M스텝에서는

  $\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_K$에 대해서 최소화하는 것

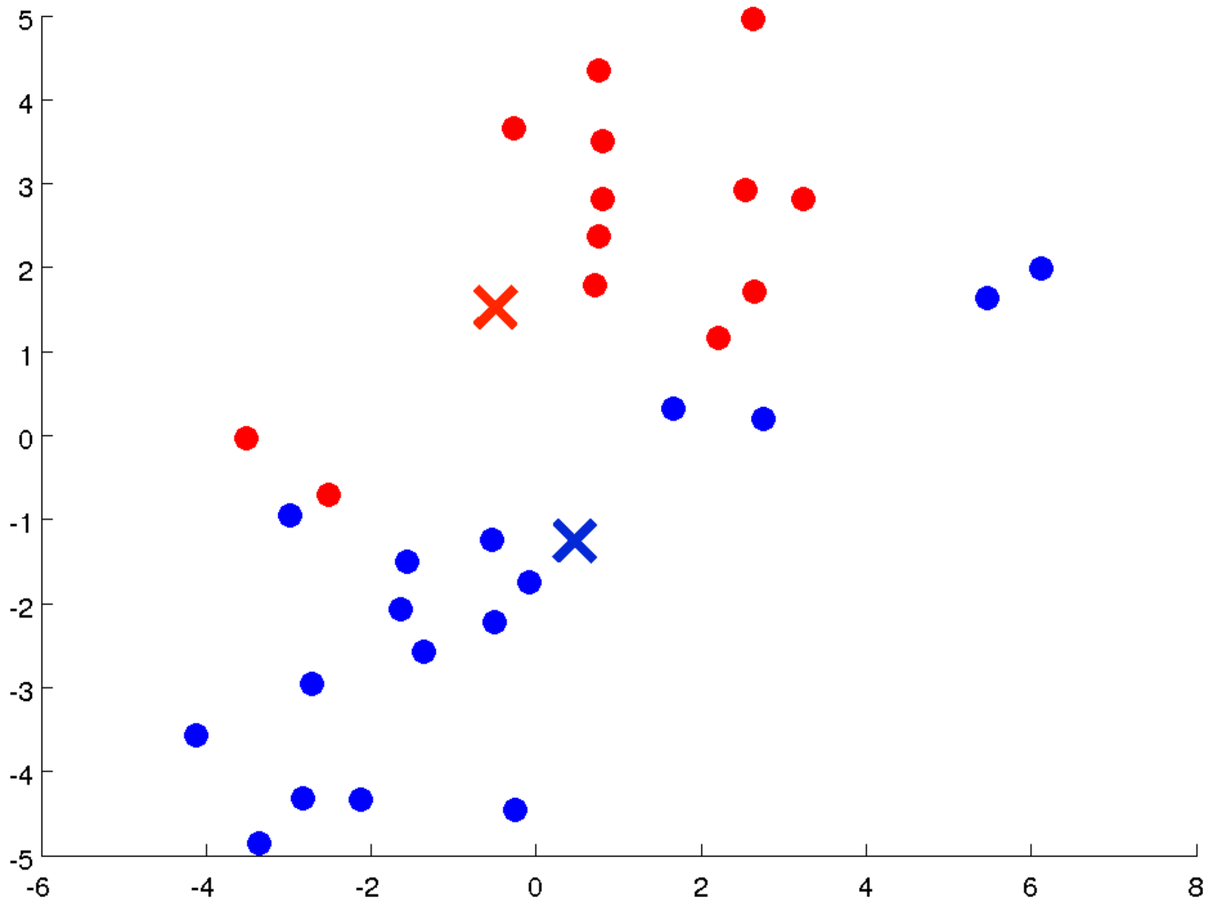
2-1. K-means



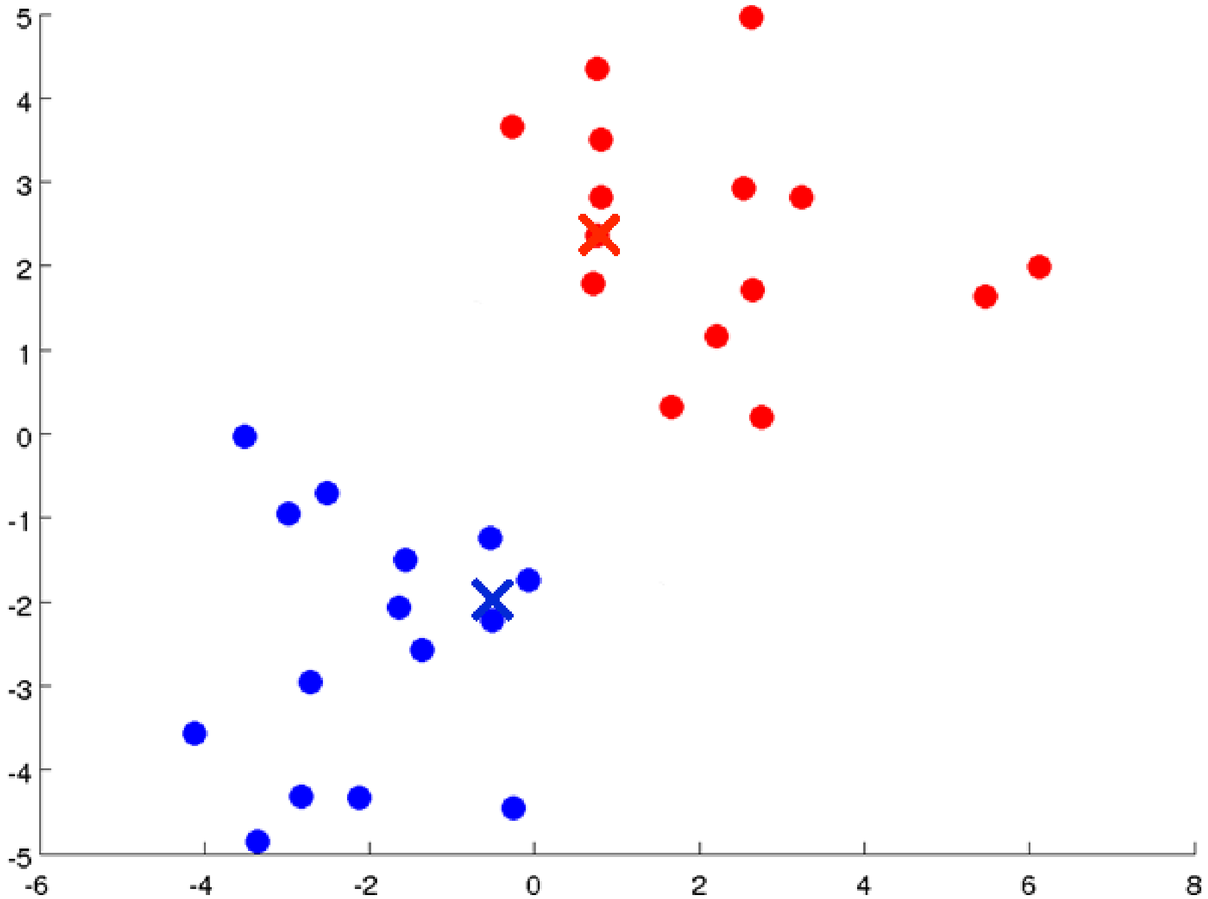
2-1. K-means



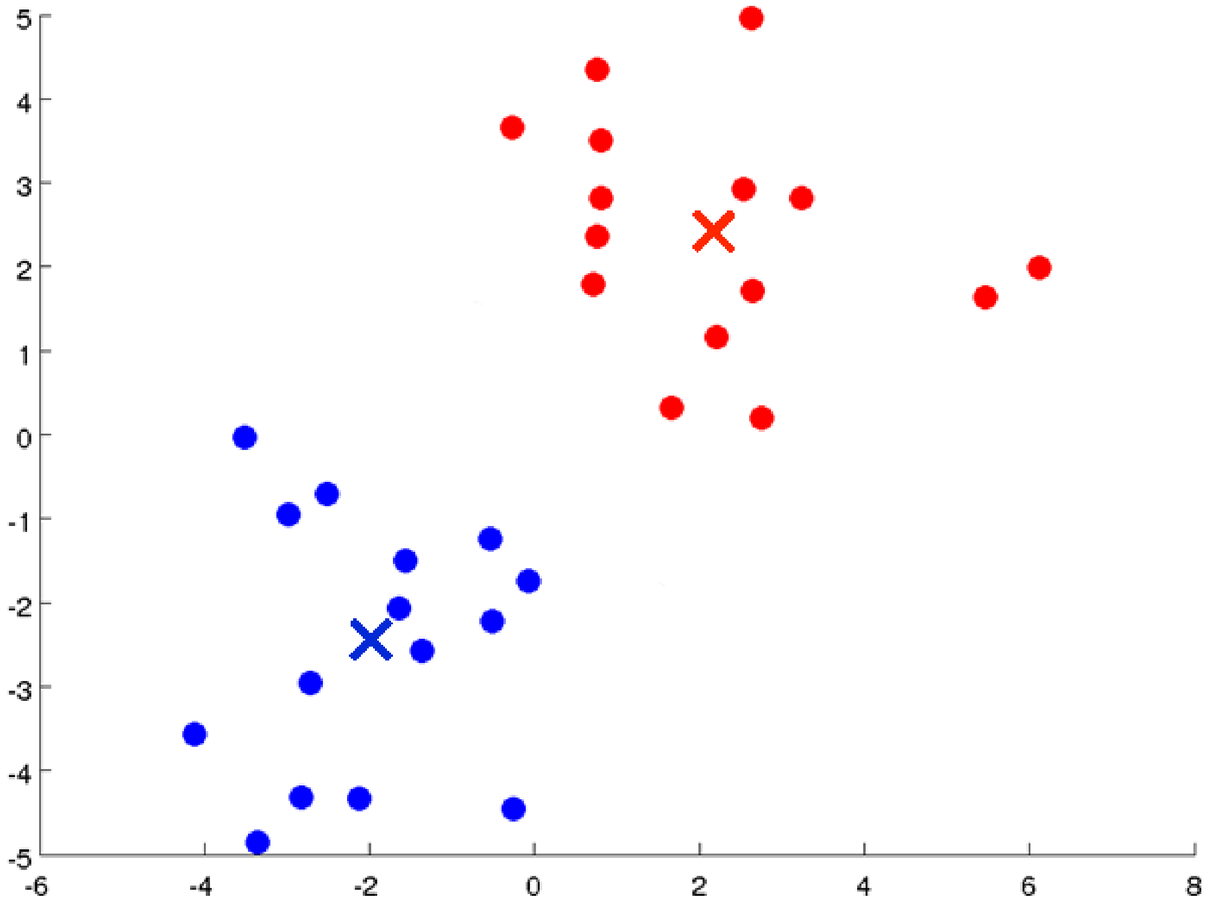
2-1. K-means



2-1. K-means



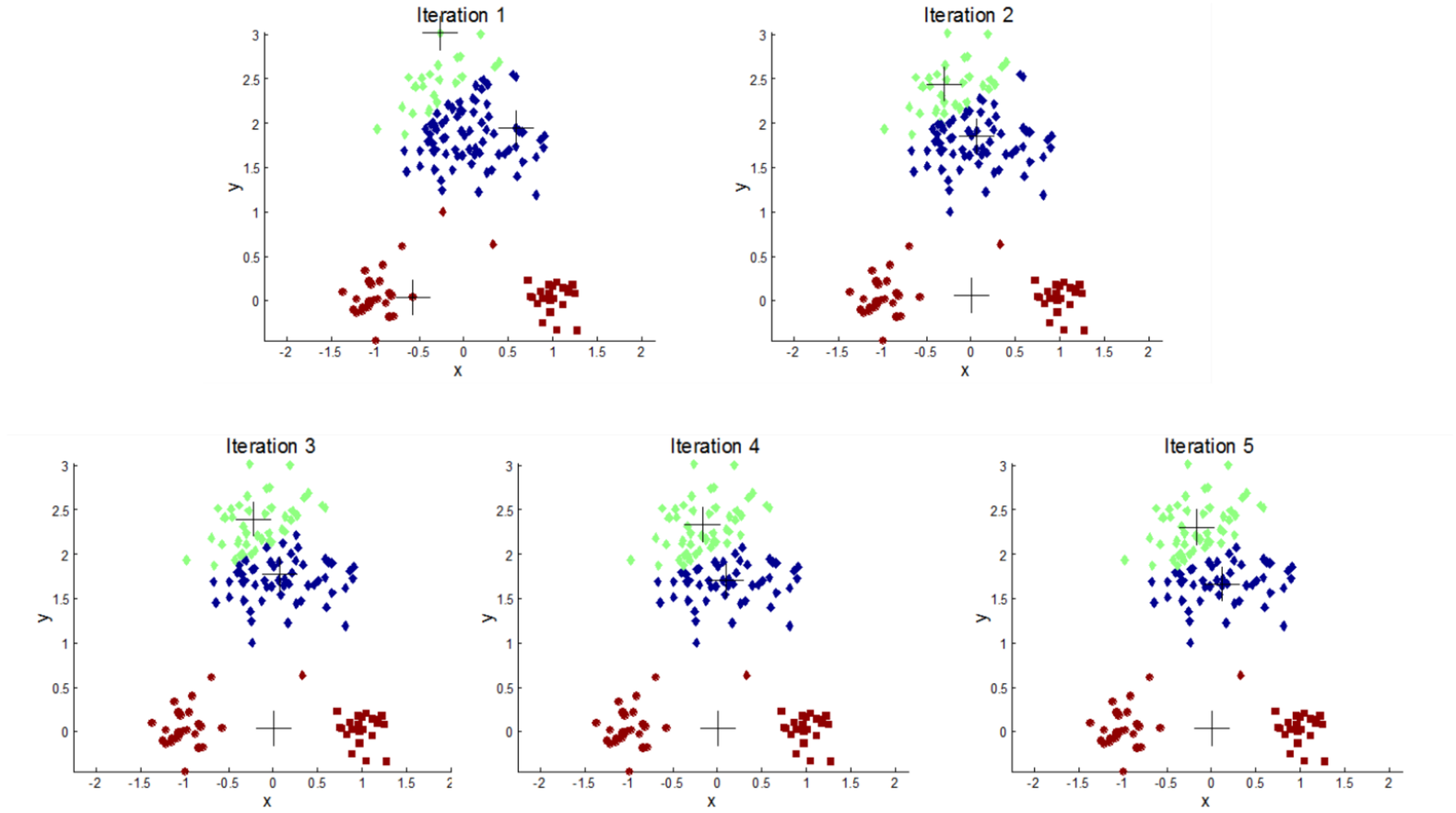
2-1. K-means



2-1. K-means

- **Local Minima**

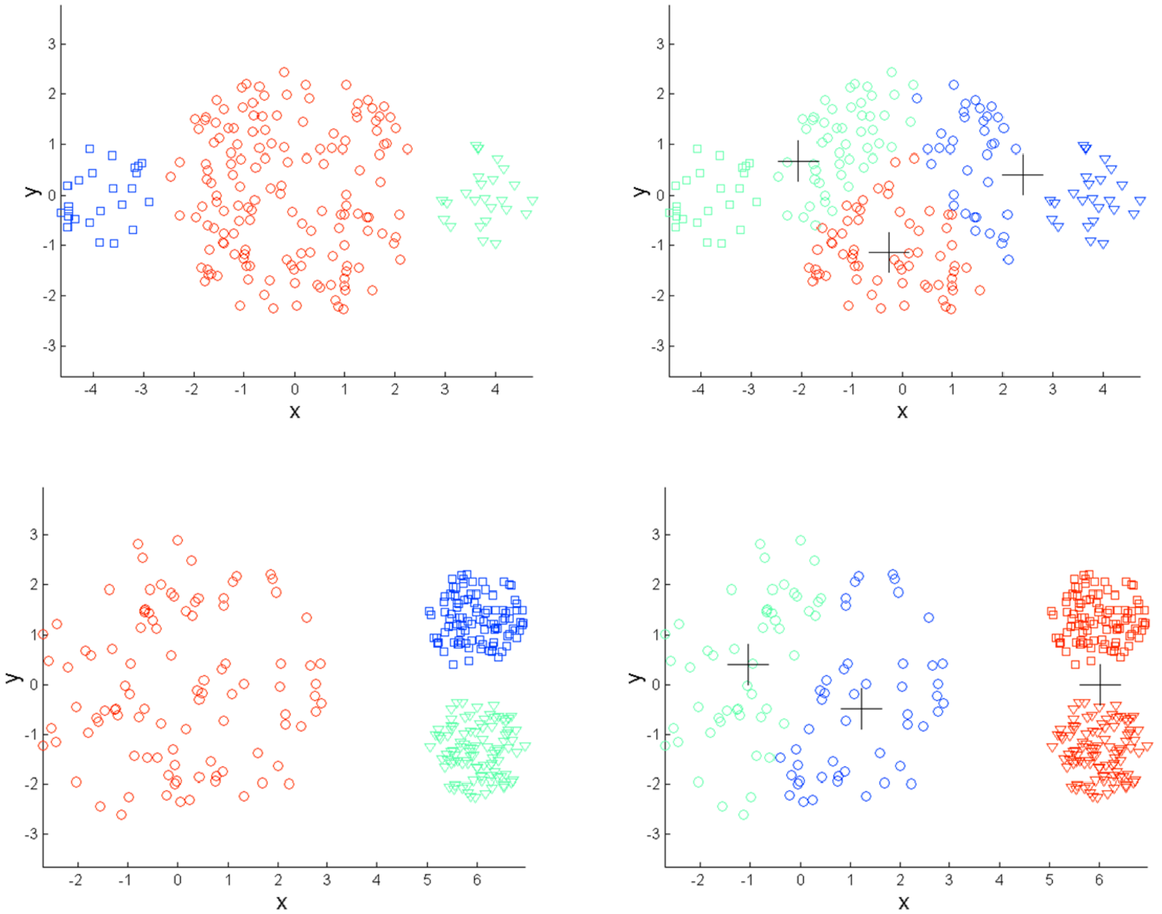
  초기값 위치에 따라 원하는 결과가 나오지 않을 수 있음



2-1. K-means

- **Local Minima**

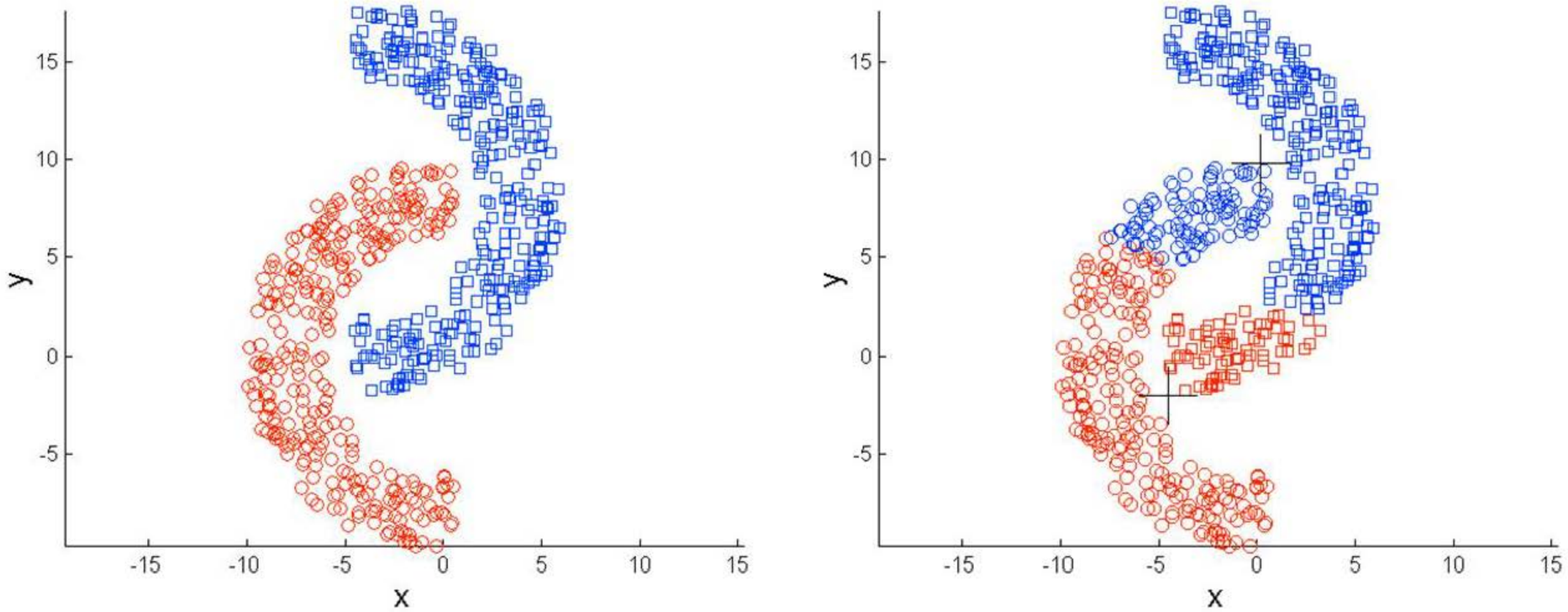
  클러스터의 크기나 밀도가 다를 경우 원치않는 결과가 나올수 있음



2-1. K-means

- **Local Minima**

  데이터의 분포가 특이한 경우에도 작 작동하지 않을수 있음



2-1. K-means

- 시간 복잡도(Time Complexity)

  Big O notation

  $$f(n) = O\big(g(n)\big)$$

  이라는 것은 충분히 큰 모든 자연수 n에 대해

  $|f(n)| \leq C|g(n)|$가 성립한다는 뜻

- 시간복잡도가 O(n)으로 가벼운 편
- 실제 문제에 적용할 때는 여러번 클러스터링을 수행해 가장 빈번히 등장하는 군집에 할당하는 majority voting 방법을 쓰는 경우가 많음

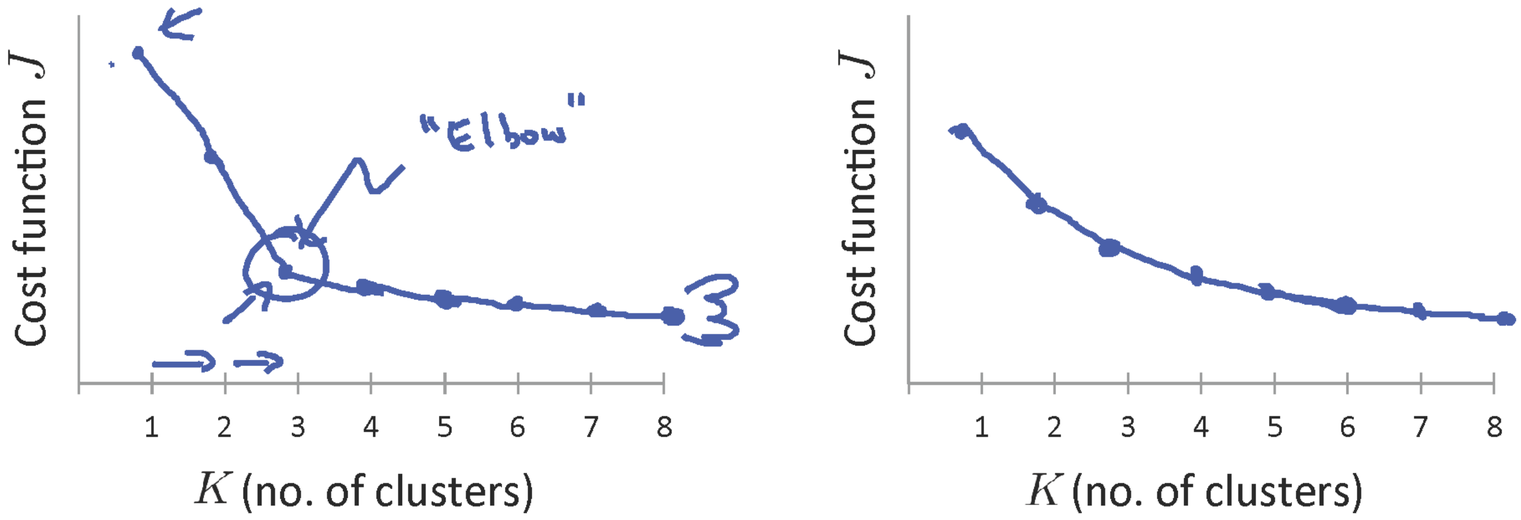
2-1. K-means

- 하이퍼 파라미터 K 정하기

  Elbow Method

  다양한 K의 값을 시도해 보고

  그림과 같이 꺾이는 점이 있는 경우 최적이라고 판단

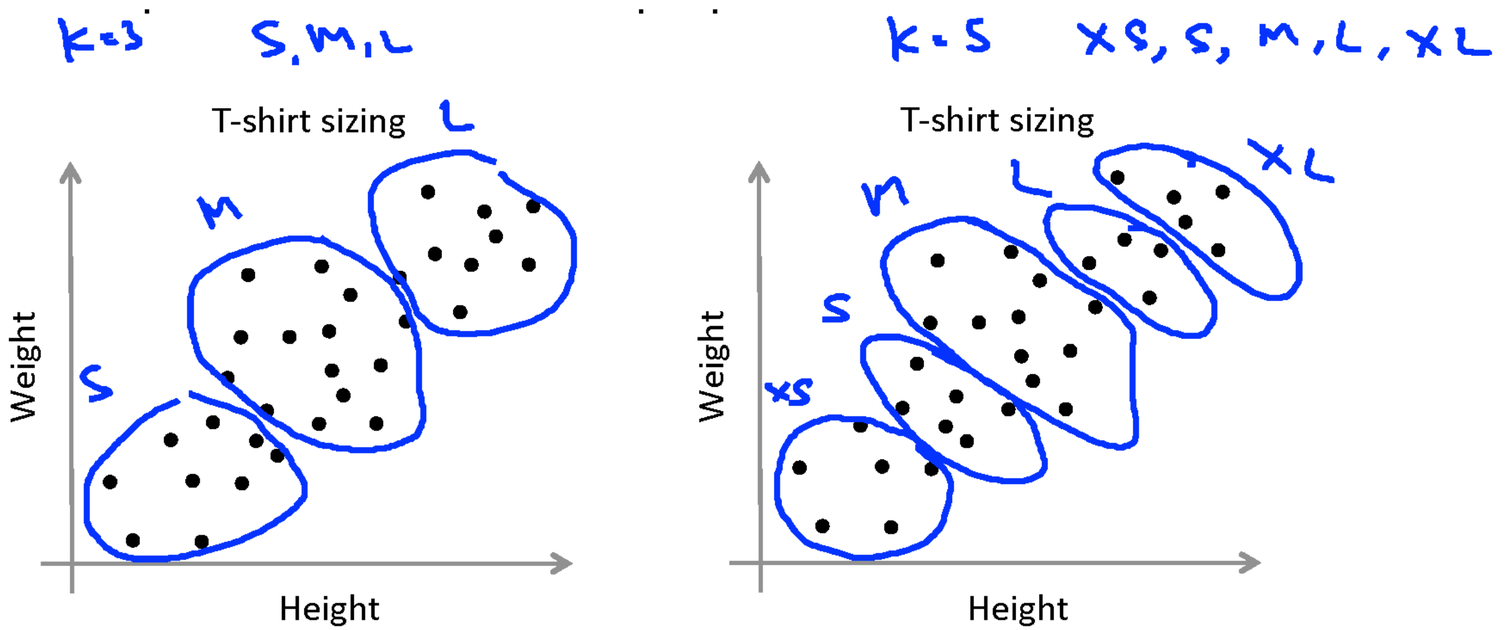


2-1. K-means

- 하이퍼 파라미터 K 정하기

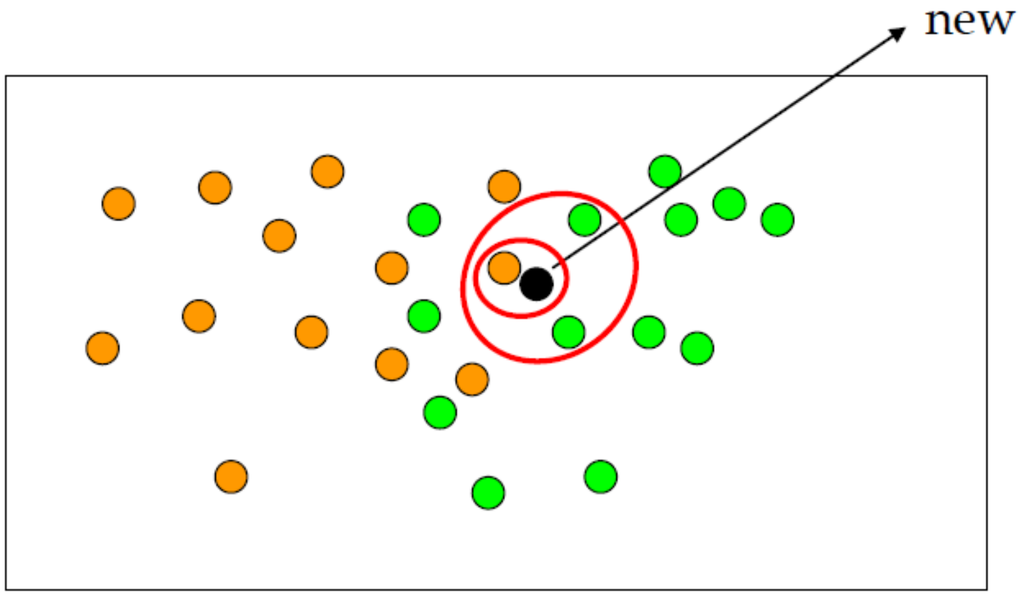
  티셔츠 사이즈 분류와 같이 필요와 목적에 맞게 정할수도 있음

E.g.



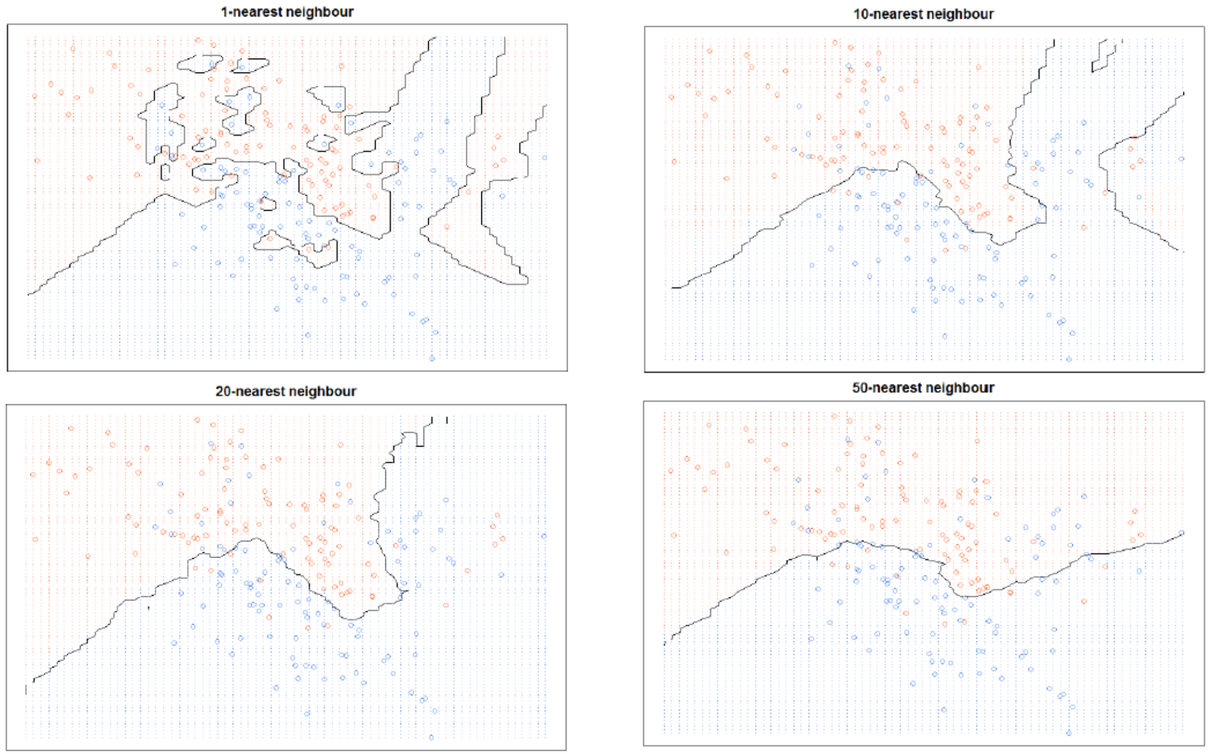
2-2. KNN

- 새로운 데이터가 주어졌을 때 기존 데이터 가운데 가장 가까운 k개 이웃의 정보로 새로운 데이터를 예측하는 방법론 (Supervised)
- 레이지(lazy) 모델 – 딱히 학습이라고 할 만한 것이 없음
- 그림에서 검은색 점의 범주 정보는 주변 이웃들을 가지고 추론
- k가 1이면 오렌지색, k가 3라면 녹색으로 분류



2-2. KNN

- 하이퍼 파라미터는 탐색할 이웃 수(k), 거리 측정방법의 두가지
- k가 작을 경우 오버피팅,
  반대로 매우 클 경우 언더피팅이 일어나는 경향이 있음



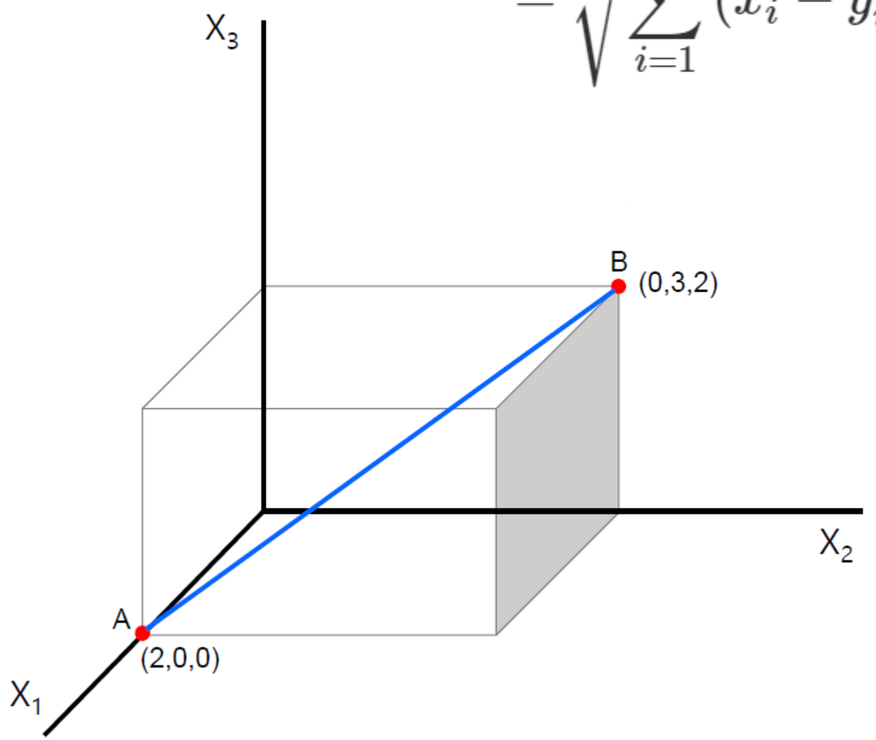
2-2. KNN

- 거리지표

  유클리드 거리

$$d_{(X,Y)} = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + \ldots + (x_n - y_n)^2}$$

$$= \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2}$$

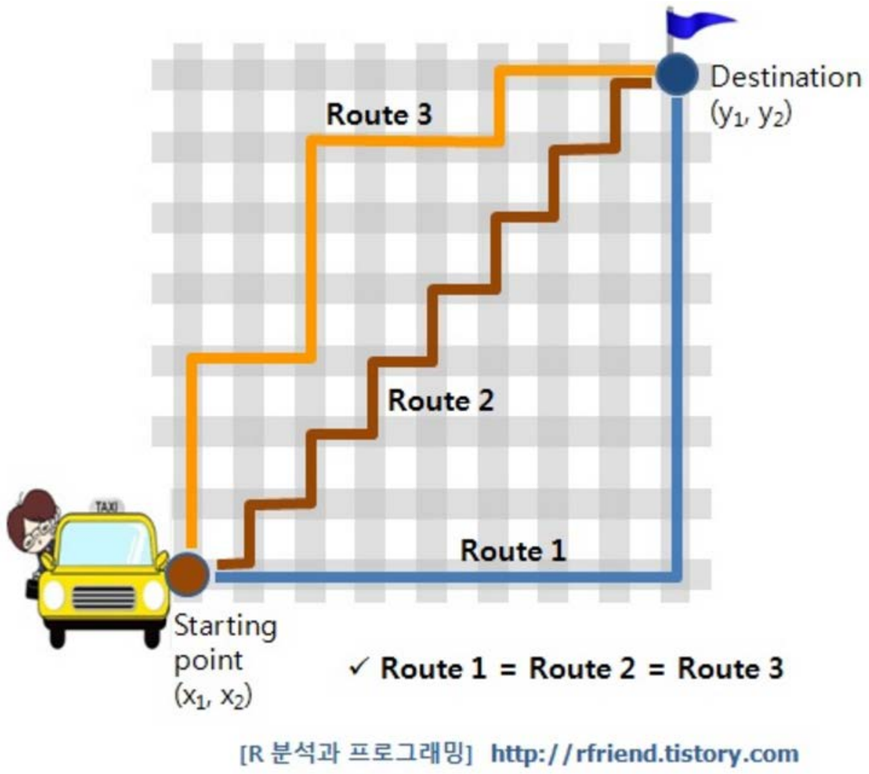


2-2. KNN

- 거리지표

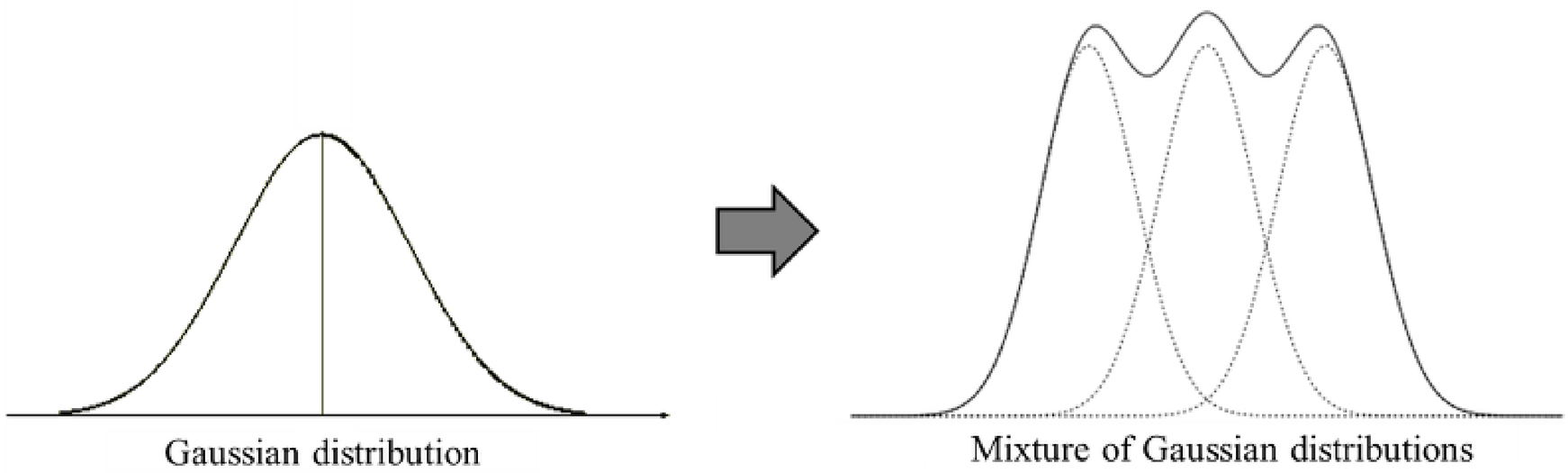
  맨해튼 거리

$$d_{Manhattan(X,Y)} = \sum_{i=1}^{n} |x_i - y_i|$$



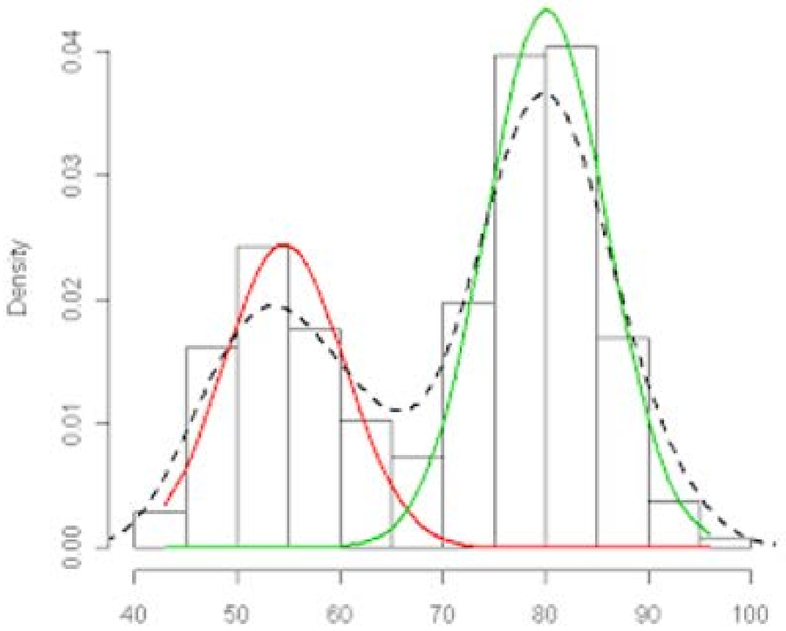
2-3. GMM과 EM 알고리즘

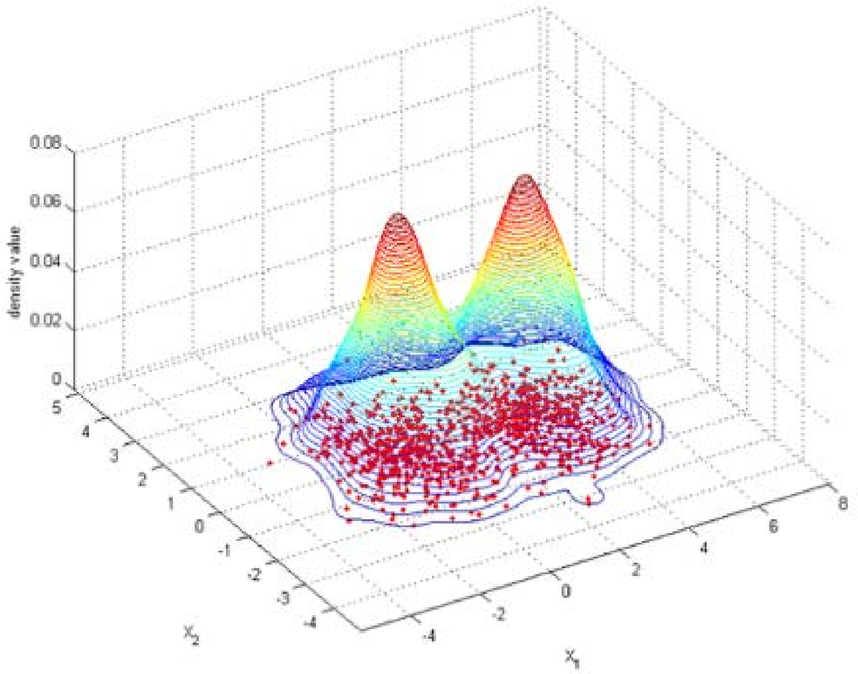
- GMM은 전체 데이터의 확률분포가 여러개의 정규분포의 조합으로 이루어져 있다고 가정하고 각 분포에 속할 확률이 높은 데이터끼리 클러스터링 하는 방법



2-3. GMM과 EM 알고리즘

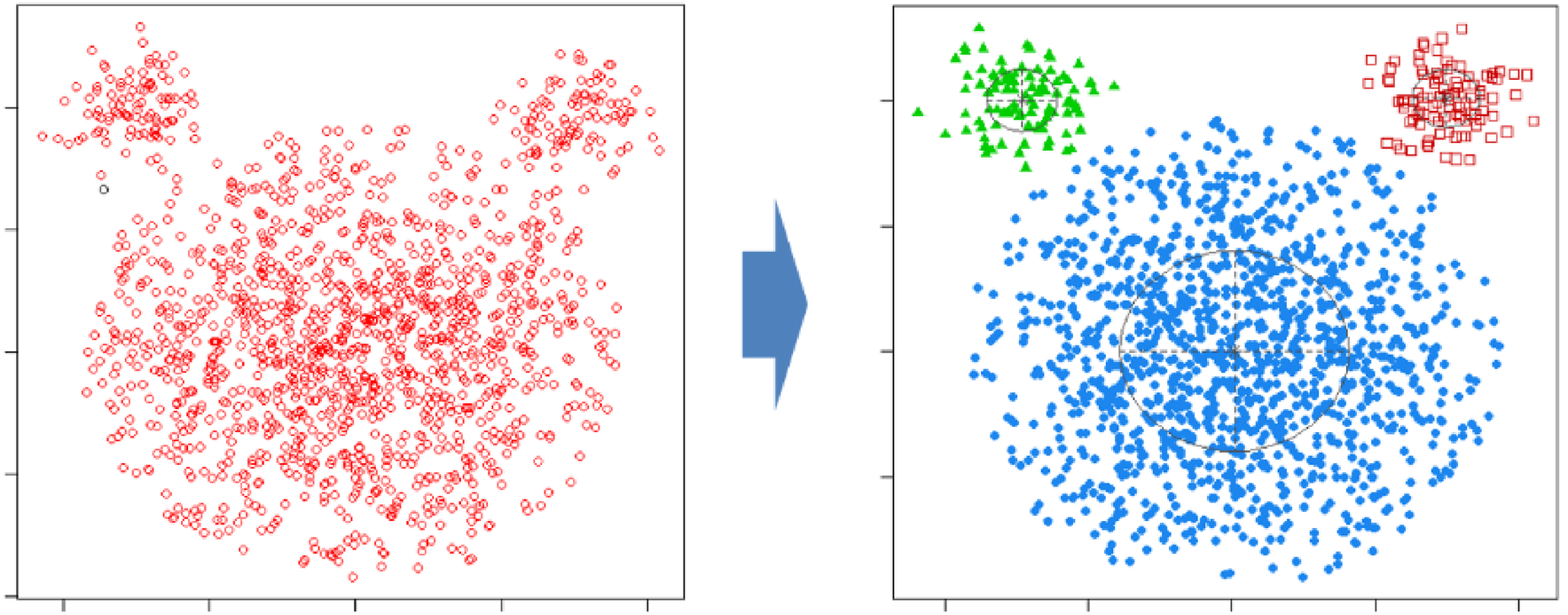
- 다변수 정규분포를 가정할수도 있음





2-3. GMM과 EM 알고리즘

- K-means 등의 클러스터링 알고리즘으로 잘 묶을수 없었던 아래 데이터에서도 잘 작동함



2-3. GMM과 EM 알고리즘

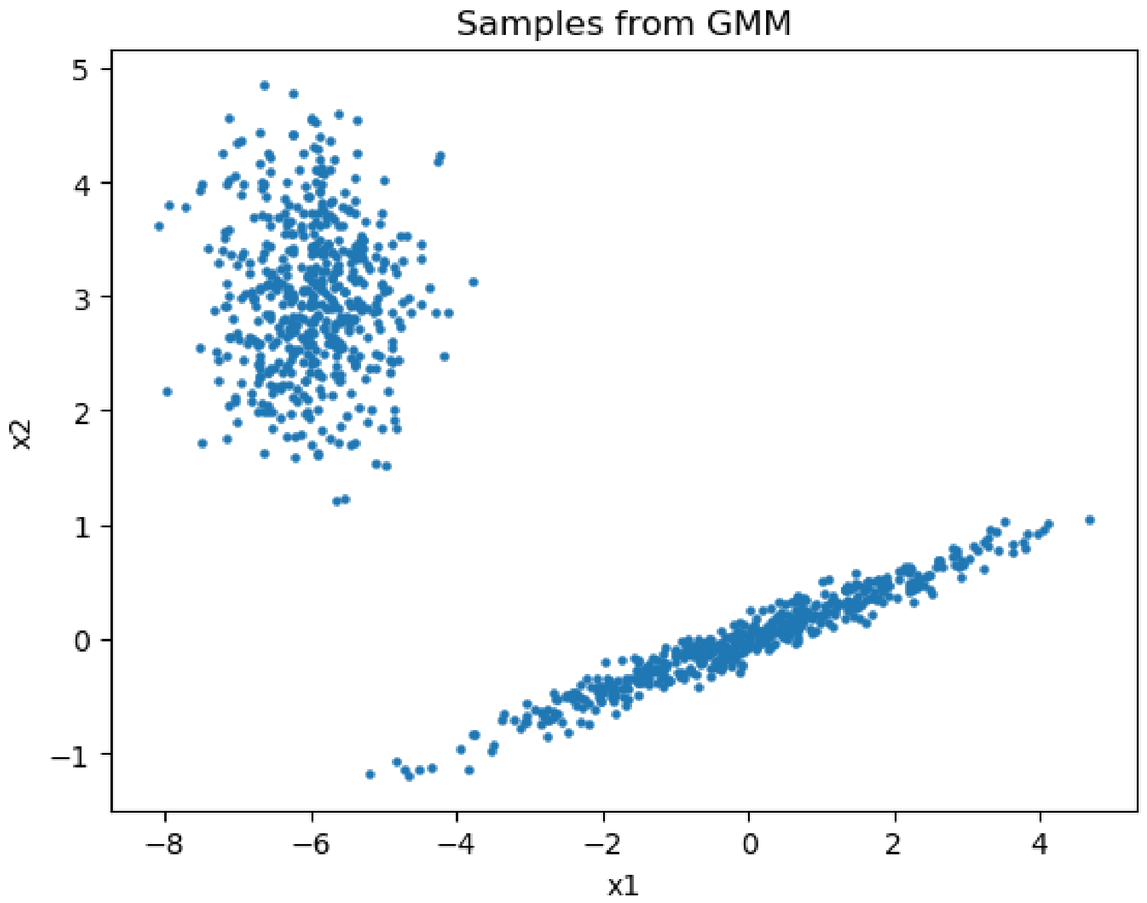
```
n_samples = 500


mu1 = np.array([0, 0])
mu2 = np.array([-6, 3])
sigma1 = np.array([[0., -0.1], [1.7, .4]])
sigma2 = np.eye(2)


np.random.seed(0)
X = np.r_[1.0 * np.dot(randn(n_samples, 2), sigma1) + mu1,
          0.7 * np.dot(randn(n_samples, 2), sigma2) + mu2]
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], s=5)
plt.title("Samples from GMM")
plt.show()
```

2-3. GMM과 EM 알고리즘

- 2개의 bivariate Gaussian을 가정한 GMM에서 뽑은 샘플들



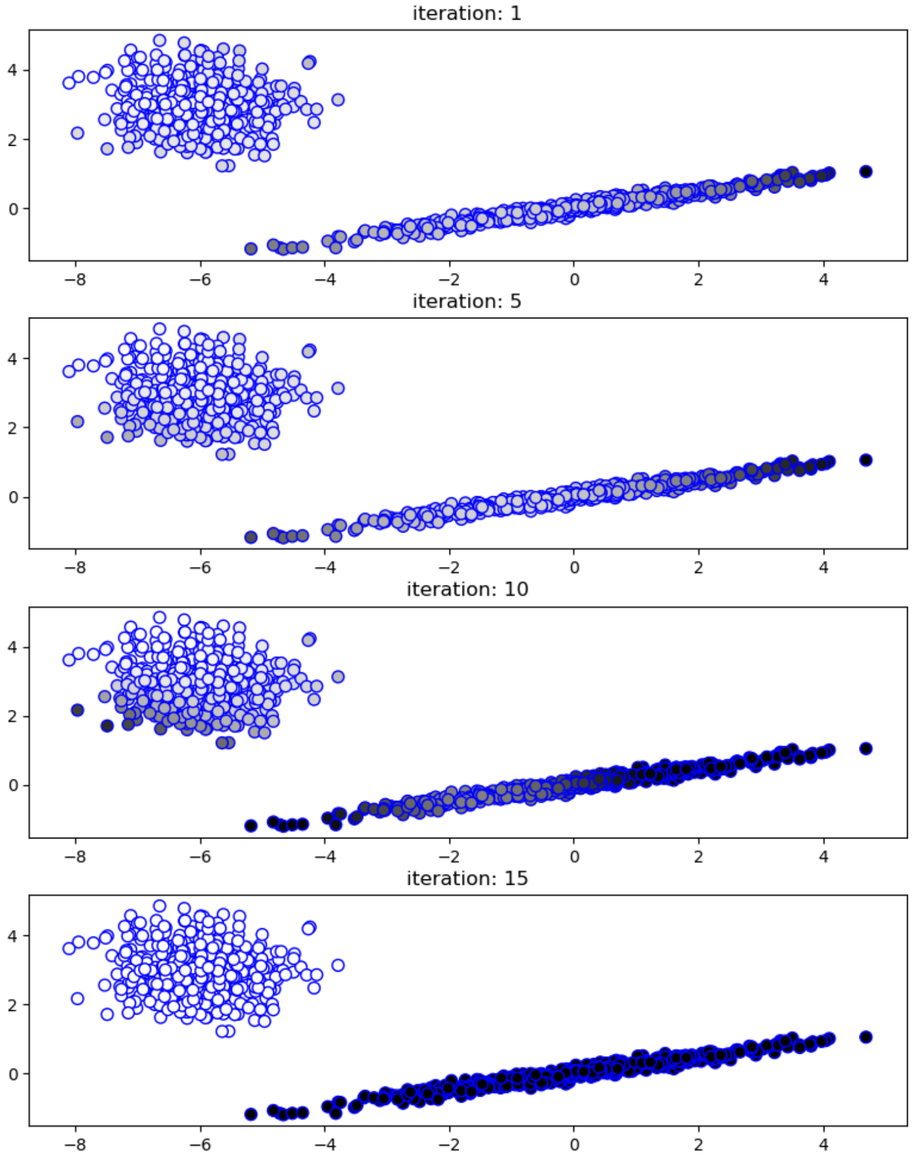
2-3. GMM과 EM 알고리즘

```
from sklearn.mixture import GaussianMixture


def plot_gaussianmixture(n):
    model = GaussianMixture(n_components=2, init_params='random',₩₩
                                    random_state=0, tol=1e-9, max_iter=n)
    with ignore_warnings(category=ConvergenceWarning):
        model.fit(X)
    pi = model.predict_proba(X)
    plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], s=50, linewidth=1, edgecolors="b", cmap=plt.cm.binary, c=pi[:, 0])
    plt.title("iteration: {}".format(n))
plt.figure(figsize=(8, 12))
plt.subplot(411)
plt.show()
```

2-3. GMM과 EM 알고리즘

- iteration이 증가함에 따라
  분류가 진행됨을 확인할 수 있음



2-3. GMM과 EM 알고리즘

- GMM의 parameter는 아래의 [알고리즘 1]과 같이 추정

Algorithm 1: EM algorithm for GMM

Input : a given data $X = \{x_1, x_2, ..., x_n\}$

Output : $\pi = \{\pi_1, \pi_2, ..., \pi_K\}$,
$\mu = \{\mu_1, \mu_2, ..., \mu_K\}$,
$\Sigma = \{\Sigma_1, \Sigma_2, ..., \Sigma_K\}$

Randomly initialize π, μ, Σ
for $t = 1 : T$ **do**
  // E-step
  for $n = 1 : N$ **do**
    for $k = 1 : K$ **do**
      $\gamma(z_{nk}) = \frac{\pi_k N(x_n|\mu_k, \Sigma_k)}{\sum_{j=1}^{K} \pi_j N(x_n|\mu_j, \Sigma_j)}$
    end
  end
  // M-step
  for $k = 1 : K$ **do**
    $\mu_k = \frac{\sum_{n=1}^{N} \gamma(z_{nk}) x_n}{\sum_{n=1}^{N} \gamma(z_{nk})}$
    $\Sigma_k = \frac{\sum_{n=1}^{N} \gamma(z_{nk})(x_n - \mu_k)(x_n - \mu_k)^T}{\sum_{n=1}^{N} \gamma(z_{nk})}$
    $\pi_k = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \gamma(z_{nk})$
  end
end

2-3. GMM과 EM 알고리즘

- 데이터에 대한 분류는 [알고리즘 2]와 같이 수행됨

Algorithm 2: GMM classification

Input : a given data $X = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$,
$\pi = \{\pi_1, \pi_2, \ldots, \pi_K\}$,
$\mu = \{\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_K\}$,
$\Sigma = \{\Sigma_1, \Sigma_2, \ldots, \Sigma_K\}$

Output : class labels $y = \{y_1, y_2, \ldots, y_N\}$ for X

1 **for** $n = 1 : N$ **do**

2 $\quad y_n = \arg\max_k \gamma(z_{nk})$

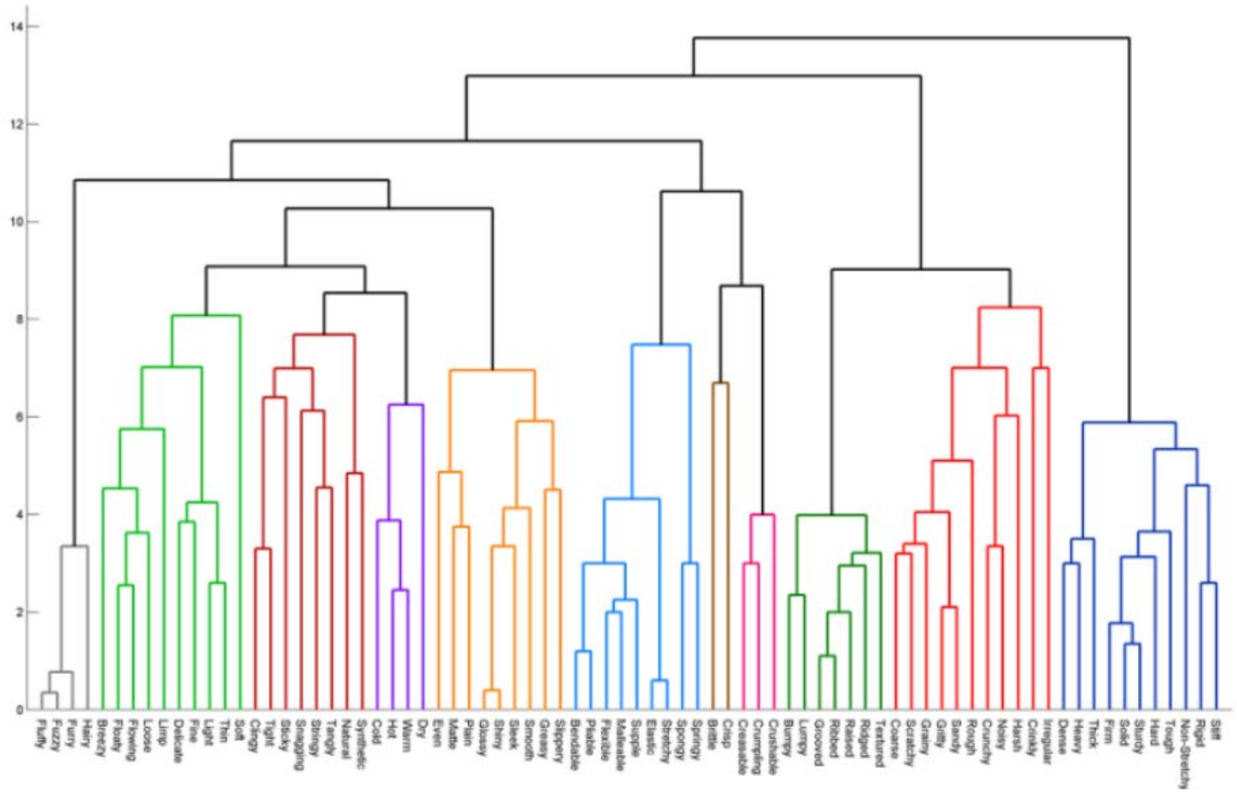
3 **end**

2-4. 계층적 클러스터링(HC)

- 계층적 트리 모형을 이용해 개별 개체들을 순차적, 계층적으로 유사한 개체 내지 그룹과 통합하여 군집화를 수행하는 알고리즘
- 클러스터의 수를 사전에 정하지 않아도 학습 수행가능

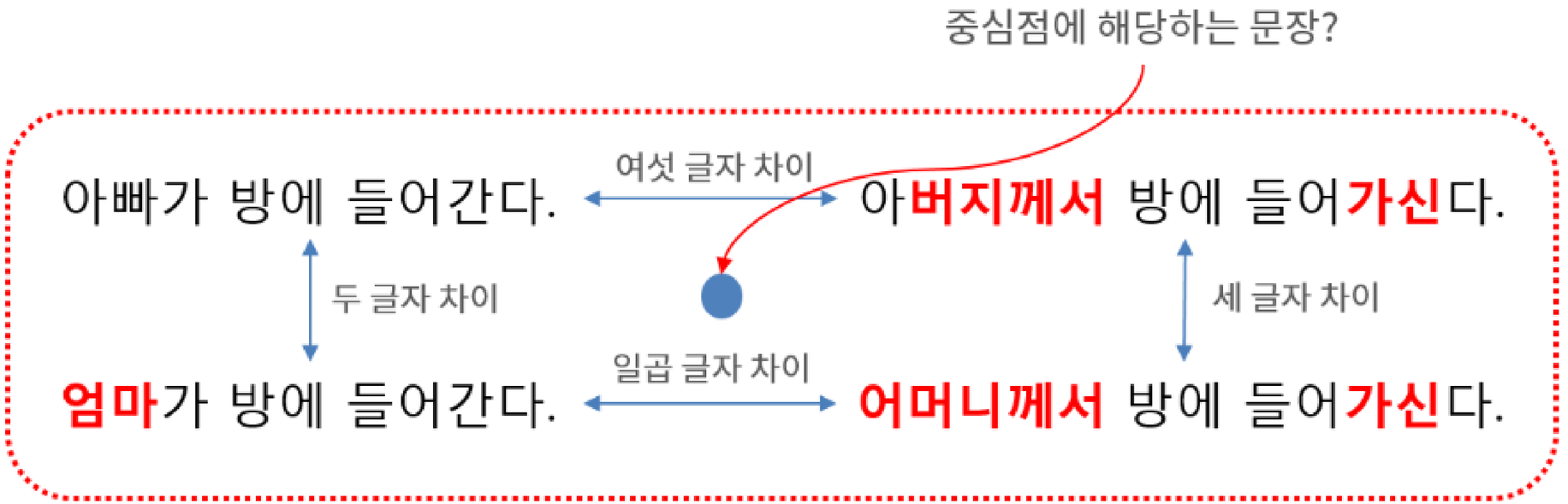
2-4. 계층적 클러스터링(HC)

- 개체들이 결합되는 순서를 나타내는 트리형태의 구조인 덴드로그램(Dendrogram)을 생성한 후 적절한 수준에서 트리를 자르면 클러스터링이 완료됨



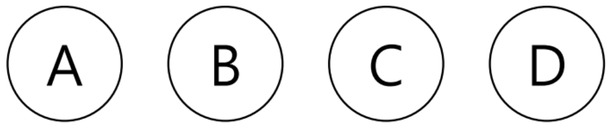
2-4. 계층적 클러스터링(HC)

- 데이터 각 쌍에 대해서는 유사도를 측정할 수 있지만 평균이나 분산 등을 구할 수 없는 경우에 사용할 수 있는 기법



2-4. 계층적 클러스터링(HC)

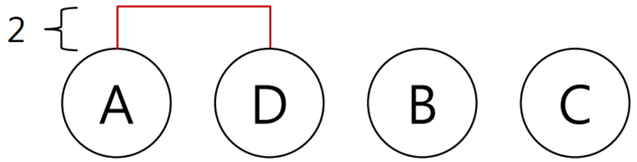
- HC를 수행하려면 모든 개체들 간 거리(distance)나 유사도(similarity)가 이미 계산되어 있어야 함
- 그림처럼 거리 행렬을 이미 구해놨다고 가정



	A	B	C	D
A		20	7	2
B			10	25
C				3
D				

2-4. 계층적 클러스터링(HC)

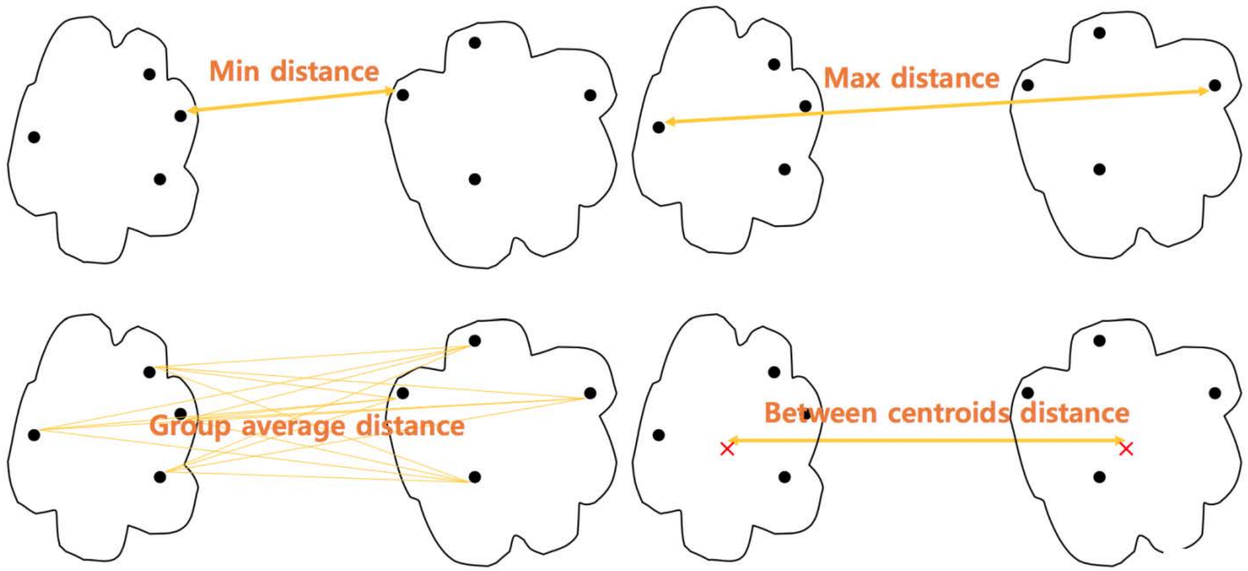
- 거리가 가장 짧은 것이 2이고 이에 해당하는 개체는 A와 D이므로 먼저 A와 D를 하나의 클러스터로 엮음
- 덴드로그램의 높이는 관측치간 거리(2)가 되도록 함



	A	B	C	D
A		20	7	2
B			10	25
C				3
D				

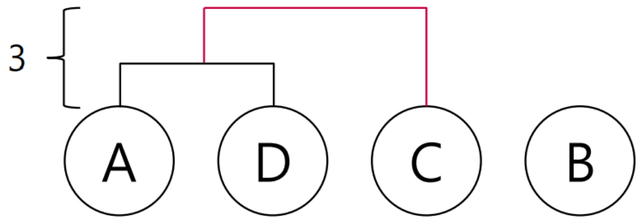
2-4. 계층적 클러스터링(HC)

- 여기서 A와 D를 한 군집으로 엮었으니 거리행렬을 바꿔주어야 함
  즉 개체-개체 거리를 군집-개체 거리로 계산해야 함
- 군집-개체, 혹은 군집-군집 간 거리는 어떻게 계산?
  아래 그림처럼 여러가지 선택지가 존재



2-4. 계층적 클러스터링(HC)

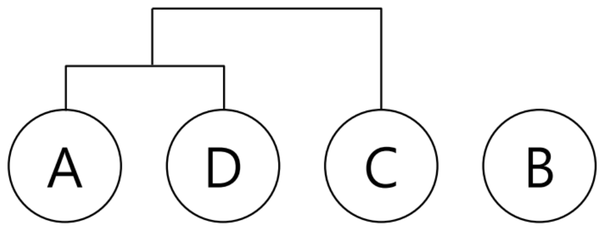
- 위 네 가지 방법 가운데 하나를 택했다고 가정
- 거리행렬을 업데이트했더니 AD와 C가 가장 인접



	AD	B	C	
AD		20	3	
B			10	
C				

2-4. 계층적 클러스터링(HC)

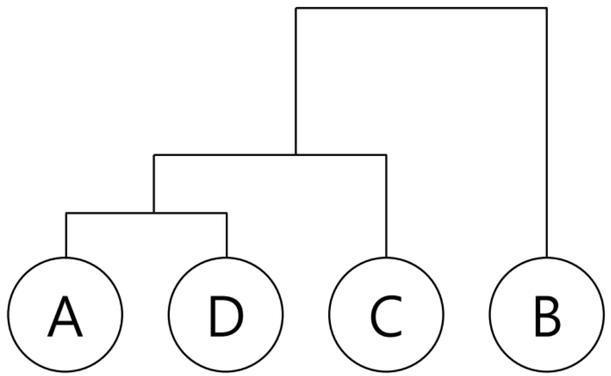
- 그 다음 과정을 수행



	ADC	B		
ADC		10		
B				

2-4. 계층적 클러스터링(HC)

- 분석 대상 관측치가 하나도 없으면 학습이 종료됨



	AD CB			
AD CB				

2-5. 알고리즘 비교

- K-means, GMM, 계층 클러스터링의 특성 및 장단점

	사용되는 유사도 측정 방식	하이퍼 파라미터	장점	단점 (한계점)
k 평균	좌표 기반 거리 구하기 (유클리드, 마할라노비스, 맨하탄)	• 군집 개수 • 종료 조건	• 알고리즘이 쉽고 직관적임 • 분산 시스템을 이용한 대용량 데이터 처리 가능 • 각 유형의 특징 파악 용이	• 아웃라이어에 민감 • 유형별 데이터의 분산이 비슷하고 구형으로 분포되어 있지 않으면 결과가 좋지 못함
GMM	좌표 기반 거리 구하기 (유클리드, 마할라노비스, 맨하탄)	• 군집 개수 • 종료 조건	• 확률 분포의 차이를 고려하여 군집을 묶는 방식이기 때문에 k 평균 알고리즘에 비해 좀 더 통계적으로 엄밀한 결과를 얻을 수 있음	• 계산량이 많기 때문에 대량의 데이터에 사용하기 어려움 • 유형들의 분포가 정규 분포와 차이가 크다면 결과가 좋지 못함
계층 클러스터링	모든 유사도 측정 방식 사용 가능	• 군집 개수 • 군집 간의 거리 측정 방법	• 개체간의 거리는 구할 수는 있지만 군집의 평균을 구할 수 없는 데이터에 대해서도 적용 가능	• 계산량이 많기 때문에 대량의 데이터에 사용하기 어려움

참고자료

1. 클러스터링
   1.https://ratsgo.github.io/machine%20learning/2017/04/16/clustering/
   2. https://brunch.co.kr/@gimmesilver/40
   3. Andrew Ng 강의 동영상
2. K-means
   https://ratsgo.github.io/machine%20learning/2017/04/19/KC/
3. KNN
   https://ratsgo.github.io/machine%20learning/2017/04/17/KNN/
4. GMM
   https://untitledtblog.tistory.com/133
   https://datascienceschool.net/view-notebook/c2934b8a2f9140e4b8364b266b1aa0d8/ - 코드
5. HC
   https://ratsgo.github.io/machine%20learning/2017/04/18/HC/

/* elice */

문의 및 연락처

academy.elice.io

contact@elice.io

facebook.com/elice.io

medium.com/elice