10장 비지도학습

주성분분석

임요한

서울대학교

Aug, 2018

“비지도학습" 수업에서 다룰 내용

- 군집분석
  - 자율학습과 지도학습의 소개
  - K평균 군집분석
  - 계층군집화
- 주성분 분석
  - 주성분분석
  - 주성분회귀분석
- 인자분석

군집분석(clustering)

- 자율학습과 지도학습의 소개
- Kmeans 군집분석
- Kmeans++ 알고리즘
- 계층군집화

군집분석

- 자료를 동질적인 군집 혹은 부분으로 나누는 분석.
- 각 군집을 쉽게 설명하므로 전체를 설명하고자 한다.
- 군집분석의 예
  - 유방암 환자들의 자료를 이용해 알려지지 않은 암의 subtype을 찾으려고 한다.
  - 사람들의 자료를 이용하여 시장을 분할하고, 특정 광고에 잘 반응할 subgroup을 찾으려 한다.

자율학습(unsupervised Learning)

- 반응변수 Y는 없고 변수들 $X_1, \ldots, X_p$만 있는 경우이다.
- 예측에는 관심이 없고, 변수들 사이의 특별한 관계가 있는가? 관측치들에 그룹이 있는가 등의 질문에 관심이 있다.
- 보통 탐색적 자료분석의 일부분이다.
- 자료분석의 결론이 성능이 좋은지 안좋은지 판단하기가 어렵고, 주관적인 측면이 강하다.

지도학습(supervised learning)

- 자료가 반응변수 Y와 설명변수 $X_1, \ldots, X_p$로 구성되어 있다.
- 설명변수 $X_1, \ldots, X_p$가 주어져 있을 때, 반응변수 Y의 예측에 목적이 있다.

K 평균(K means) 군집분석

군집 $C_1, \ldots, C_K$를 군집들이라 한다. 이는 다음의 조건을 만족한다.

$$\bigcup_{k=1}^{K} C_k = \{1, 2, \ldots, n\} \qquad C_i \bigcap C_j = \emptyset, \ i \neq j.$$

목표

$$\sum_{k=1}^{K} W(C_k)$$

를 최소화하는 $C_1, \ldots, C_K$를 찾고자 한다.

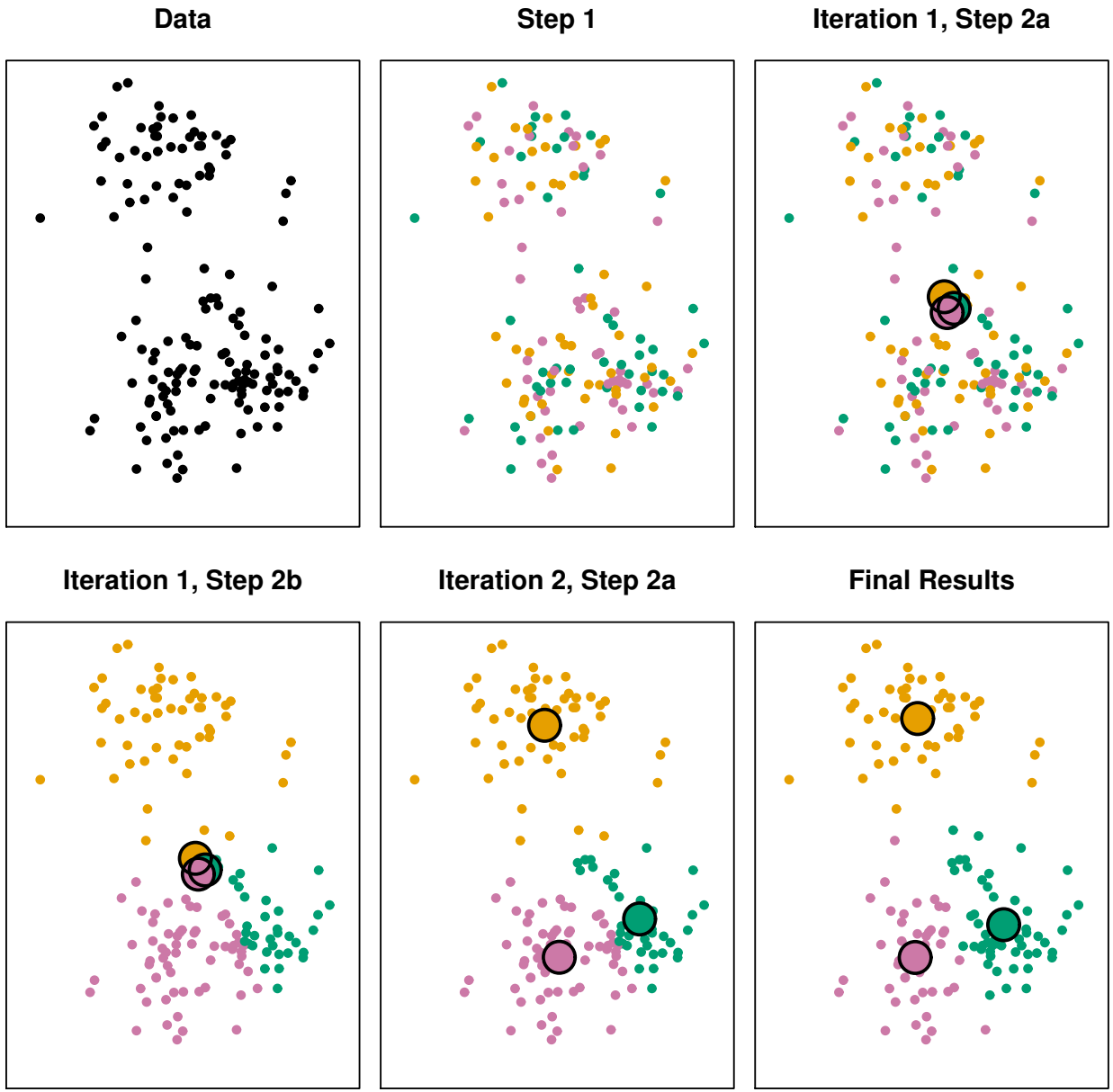
여기서 $W(C_k)$는 군집 C_k의 변동을 측정하는 측도이다. 즉, C_k의 동질성이 커지면 작아지는 값으로 대표적인 예로는

$$W(C_k) = \frac{1}{|C_k|} \sum_{i,j \in C_k} ||x_i - x_j||^2$$

를 생각한다.

알고리듬

- 관측치들을 $C_1, \ldots, C_K$에 랜덤하게 할당한다.
- 군집이 바뀌지 않을 때까지 다음을 반복한다.
  - 각 군집마다 군집의 중앙(centroid)을 계산한다.
  - 모든 관측치를 가장 가까운 중심의 군집에 할당한다.


Data
Step 1
Iteration 1, Step 2a
Iteration 1, Step 2b
Iteration 2, Step 2a
Final Results

알고리듬의 수렴

위의 알고리듬은 반복이 진행될 때마다 $\sum_{k=1}^{K} W(C_k)$를 감소시킨다. 따라서, 이 알고리듬은 지역최적값(local optimum)으로 수렴한다. 지역 최적값으로 수렴하기 때문에 초기 조건을 달리하여 여러 번 돌리고 그 중 최소의 변동을 갖는 군집을 최종 결론으로 한다.

`https://en.wikipedia.org/wiki/K-means_clustering`

K-means ++

- 데이터 집합으로부터 임의의 데이터를 하나 선택하여 첫 번째 중심으로 설정한다.
- K개의 중심이 선택될 때 까지 다음의 단계를 반복한다.
  - 데이터 집합의 각 데이터에 대해서, 해당 데이터와 선택된 중심점들 중 가장 가까운 중심과의 거리 $D(x)$를 계산한다.
  - 확률이 $D(x)^2$에 비례하는 편중 확률 분포를 사용하여 임의의 데이터를 선택한 후, k-번째 중심으로 설정한다.
- 선택된 K개의 중심들을 초기 값으로 하여 K-평균 클러스터링을 수행한다.

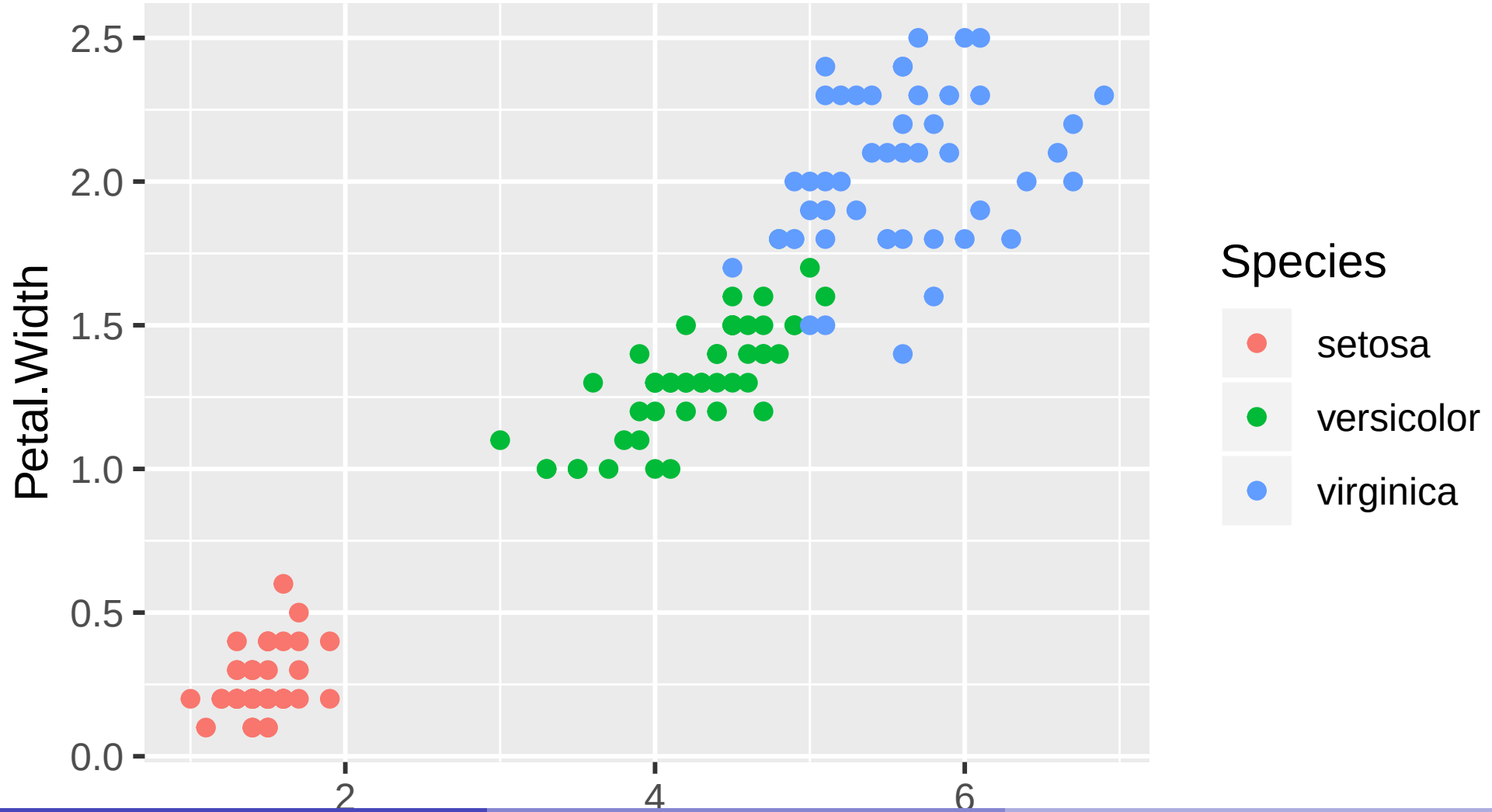
K-means: R code-1

```
library(datasets)
head(iris)
```

```
##   Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width Species
## 1          5.1         3.5          1.4         0.2  setosa
## 2          4.9         3.0          1.4         0.2  setosa
## 3          4.7         3.2          1.3         0.2  setosa
## 4          4.6         3.1          1.5         0.2  setosa
## 5          5.0         3.6          1.4         0.2  setosa
## 6          5.4         3.9          1.7         0.4  setosa
```

K-means: R code-2

```
library(ggplot2)
ggplot(iris, aes(Petal.Length, Petal.Width, color = Species)) + geom_point()
```



K-means: R code-3

```r
set.seed(20)
irisCluster <- kmeans(iris[, 3:4], 3, nstart = 20)
irisCluster
```

```
## K-means clustering with 3 clusters of sizes 50, 52, 48
##
## Cluster means:
##   Petal.Length Petal.Width
## 1     1.462000    0.246000
## 2     4.269231    1.342308
## 3     5.595833    2.037500
##
## Clustering vector:
##   [1] 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
##  [36] 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
##  [71] 2 2 2 2 2 2 2 3 2 2 2 2 2 3 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
## [106] 3 2 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 2 3 3 3 3 3 3 2 3 3 3 3 3 3 3
## [141] 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3
##
```

Within cluster sum of squares by cluster: [1] 2.02200 13.05769 16.29167
(between_SS / total_SS = 94.3 %)

Available components:

[1] “cluster” “centers” “totss” “withinss”
[5] “tot.withinss” “betweenss” “size” “iter”
[9] “ifault”

계층적 군집화

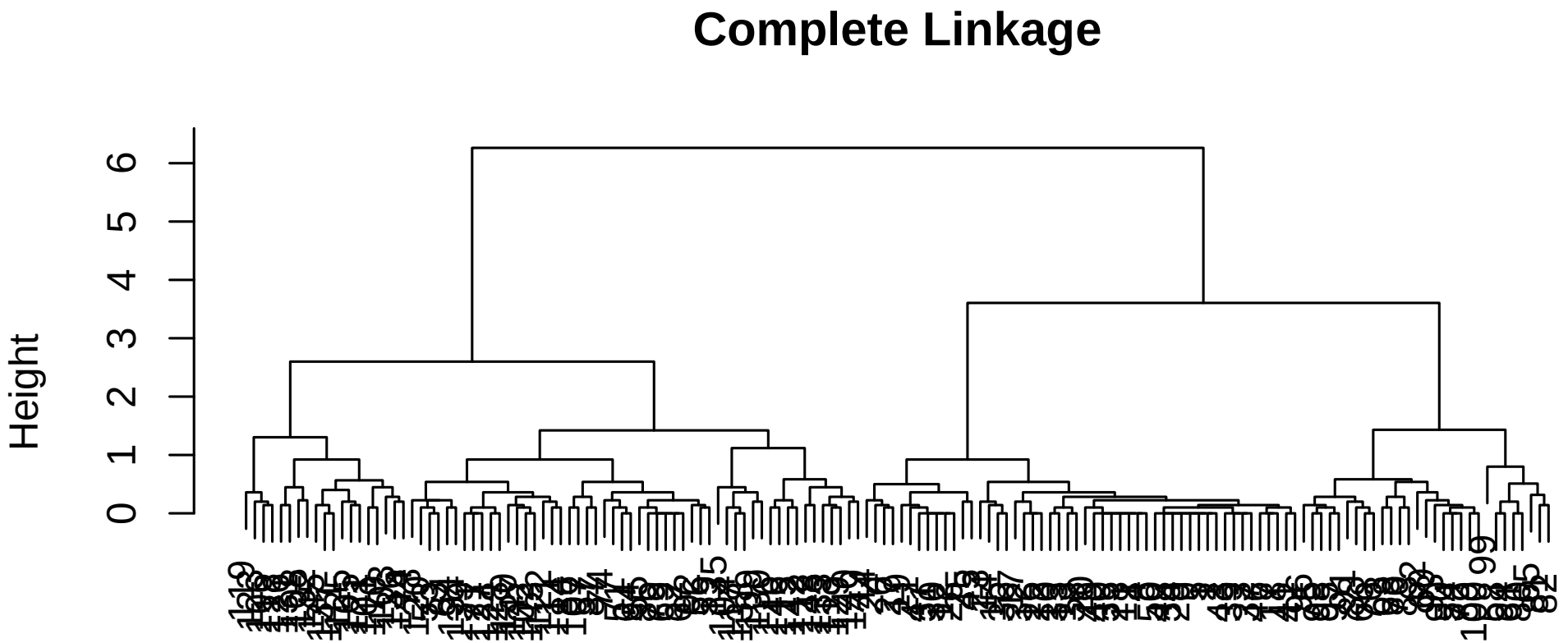
방법론 설명은 노트를 따라간다.

계층적군집화 Rcode-1

```
x=iris[,3:4]
hc.complete=hclust(dist(x), method="complete")
hc.average=hclust(dist(x), method="average")
hc.single=hclust(dist(x), method="single")
```

계층적군집화 Rcode-2

```
plot(hc.complete,main="Complete Linkage", xlab="", sub="", cex=.9)
```



계층적군집화 Rcode-3

```
cutree(hc.complete, 2)
```

```
##   [1] 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
##  [36] 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 2 2 1 2 2 2 1 2 1 1 1 1 2 1
##  [71] 2 1 2 2 1 1 2 2 2 1 1 1 1 2 2 2 2 1 1 1 1 2 1 1 1 1 1 1 1 1
## [106] 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
## [141] 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
```

```
cutree(hc.complete, 3)
```

```
##   [1] 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
##  [36] 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 2 2 3 2 2 2 3 2 3 3 3 3 2 3
##  [71] 2 3 2 2 3 3 2 2 2 3 3 3 3 2 2 2 2 3 3 3 3 2 3 3 3 3 3 3 3 3
## [106] 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
## [141] 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
```

계층적군집화 Rcode-4

```
out.c=cutree(hc.complete, 3)
table(iris$Species,out.c)
```

```
##                out.c
##                  1  2  3
##    setosa       50  0  0
##    versicolor    0 21 29
##    virginica     0 50  0
```

주성분분석

방법론 설명은 노트를 따라간다.

알즈하이머자료

- diagnosis: “Impaird”, “Control”
- predictors: 130 variables
- 333 obs : 250 train samples, 83 test samples

```r
load("AlzheimerDisease.RData")
head(predictors,n=1)
```

```
##   ACE_CD143_Angiotensin_Converti ACTH_Adrenocorticotropic_Hormon
## 1                         2.0031                       -1.386294
##   Adiponectin Alpha_1_Antichymotrypsin Alpha_1_Antitrypsin
## 1   -5.360193                1.740466          -12.63136
##   Alpha_1_Microglobulin Alpha_2_Macroglobulin Angiopoietin_2_ANG_
## 1             -2.577022             -72.65029             1.06471
##   Angiotensinogen Apolipoprotein_A_IV Apolipoprotein_A1 Apolipopr
## 1        2.510547           -1.427116         -7.402052        -0
##   Apolipoprotein_B Apolipoprotein_CI Apolipoprotein_CIII Apolipop
## 1        -4.624044         -1.272966           -2.312635
##   Apolipoprotein_E Apolipoprotein_H B_Lymphocyte_Chemoattractant_
## 1         3.754521       -0.1573491                      2.2969
##       BMP_6 Beta_2_Microglobulin Betacellulin C_Reactive_Protein
## 1 -2.200744            0.6931472          34          -4.074542
##         CD40       CD5L Calbindin Calcitonin      CgA Clusterin_A
## 1 -0.7964147 0.09531018  33.21363   1.386294 397.6536        3.55
##   Complement_3 Complement_Factor_H Connective_Tissue_Growth_Facto
## 1    -10.36305            3.573725                      0.530628
```

주성분분석 Rcode-1

```
train.x=predictors[1:250,1:129]
test.x=predictors[251:333,1:129]
train.y=as.numeric(diagnosis[1:250])
test.y=as.numeric(diagnosis[251:333])
```

주성분분석 Rcode-2

```r
pr.out=prcomp(train.x,scale=TRUE)
str(pr.out)
```

```
## List of 5
##  $ sdev    : num [1:129] 5.98 3.83 2.33 2 1.98 ...
##  $ rotation: num [1:129, 1:129] -0.1059 -0.0281 -0.1154 -0.0749 -
##   ..- attr(*, "dimnames")=List of 2
##   .. ..$ : chr [1:129] "ACE_CD143_Angiotensin_Converti" "ACTH_Adr
##   .. ..$ : chr [1:129] "PC1" "PC2" "PC3" "PC4" ...
##  $ center  : Named num [1:129] 1.31 -1.556 0.285 -5.249 1.348 ...
##   ..- attr(*, "names")= chr [1:129] "ACE_CD143_Angiotensin_Conver
##  $ scale   : Named num [1:129] 0.552 0.267 0.452 0.67 0.365 ...
##   ..- attr(*, "names")= chr [1:129] "ACE_CD143_Angiotensin_Conver
##  $ x       : num [1:250, 1:129] -11.486 -3.087 0.565 -0.589 -11.5
##   ..- attr(*, "dimnames")=List of 2
##   .. ..$ : chr [1:250] "1" "2" "3" "4" ...
##   .. ..$ : chr [1:129] "PC1" "PC2" "PC3" "PC4" ...
##  - attr(*, "class")= chr "prcomp"
```

주성분분석 Rcode-3

```
pr.out$rotation
```

```
##                                          PC1           PC2
## ACE_CD143_Angiotensin_Converti   -0.105936157 -0.1292568290 -0.05
## ACTH_Adrenocorticotropic_Hormon  -0.028129754 -0.0663231776  0.01
## AXL                              -0.115412879 -0.1318680364 -0.05
## Adiponectin                      -0.074905479  0.1259499772  0.04
## Alpha_1_Antichymotrypsin         -0.129034627  0.1020186687  0.01
## Alpha_1_Antitrypsin              -0.083273696  0.1196552718  0.06
## Alpha_1_Microglobulin            -0.123397498  0.1258695666  0.02
## Alpha_2_Macroglobulin            -0.115058728 -0.0061491878  0.10
## Angiopoietin_2_ANG_2             -0.115878753 -0.1065056764  0.02
## Angiotensinogen                  -0.021077009 -0.0859870509  0.00
## Apolipoprotein_A_IV              -0.092736118  0.1290239700 -0.05
## Apolipoprotein_A1                -0.101134352  0.1423530979 -0.09
## Apolipoprotein_A2                -0.099531360  0.1722375502 -0.06
## Apolipoprotein_B                 -0.077015389  0.1272307761  0.07
## Apolipoprotein_CI                -0.089880486  0.1514731907 -0.08
```

주성분분석 Rcode-4

```
dim(pr.out$x)
```

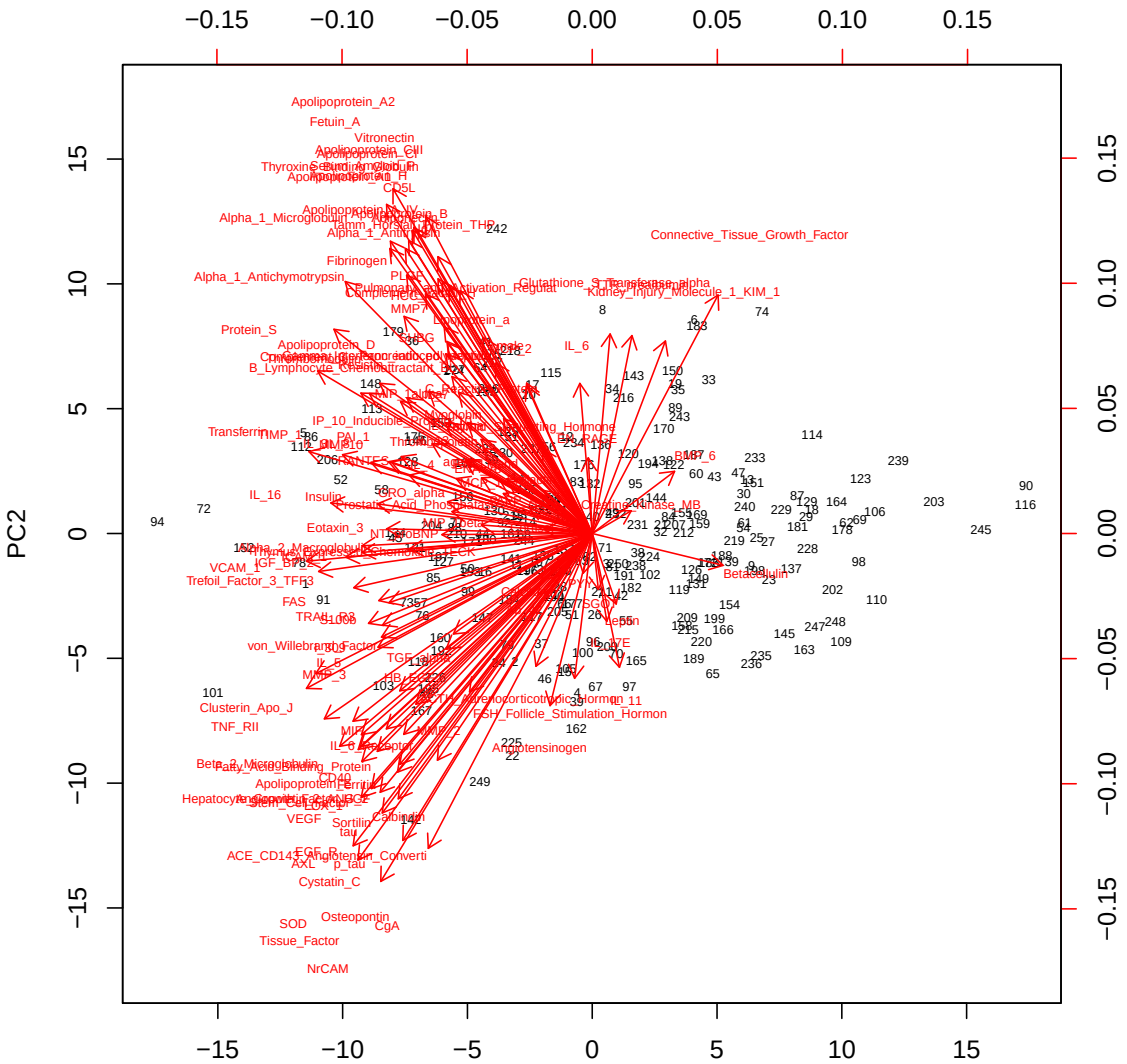
```
## [1] 250 129
```

```
str(pr.out$x)
```

```
##  num [1:250, 1:129] -11.486 -3.087 0.565 -0.589 -11.561 ...
##  - attr(*, "dimnames")=List of 2
##   ..$ : chr [1:250] "1" "2" "3" "4" ...
##   ..$ : chr [1:129] "PC1" "PC2" "PC3" "PC4" ...
```

주성분분석 Rcode-5

```
biplot(pr.out,scale=0,cex=0.5)
```



주성분분석 Rcode-6

```
pr.out$sdev[1:10]
```

```
##   [1] 5.977187 3.828614 2.334865 2.004566 1.979021 1.887169 1.8587
##   [8] 1.630767 1.575265 1.453642
```

```
pr.var=pr.out$sdev^2
pr.var[1:10]
```

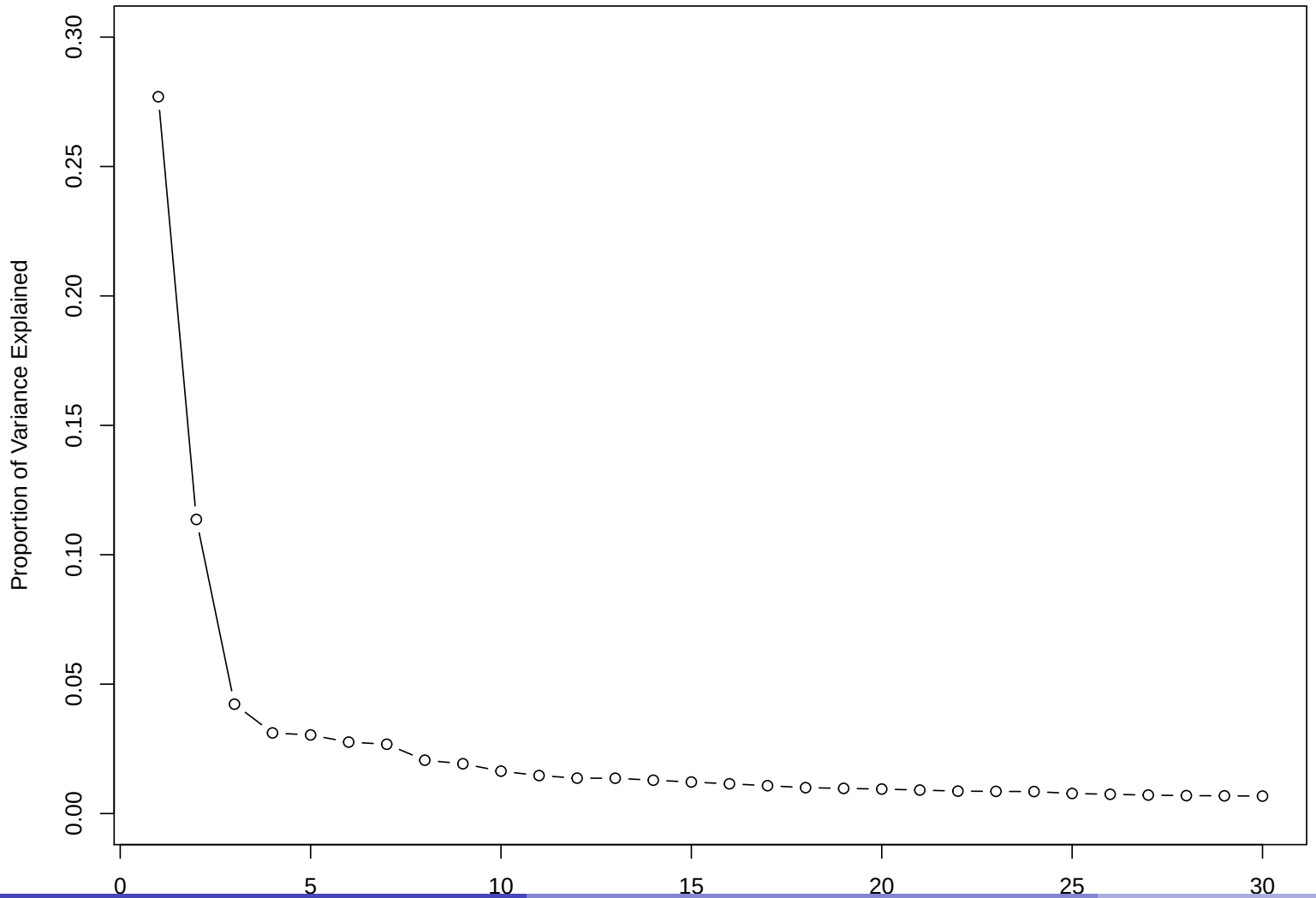
```
##   [1] 35.726760 14.658288  5.451597  4.018287  3.916525  3.561407
##   [8]  2.659402  2.481461  2.113075
```

```
pve=pr.var/sum(pr.var)
pve[1:10]
```

```
##   [1] 0.27695163 0.11363014 0.04226044 0.03114951 0.03036066 0.027
##   [7] 0.02678388 0.02061552 0.01923613 0.01638043
```

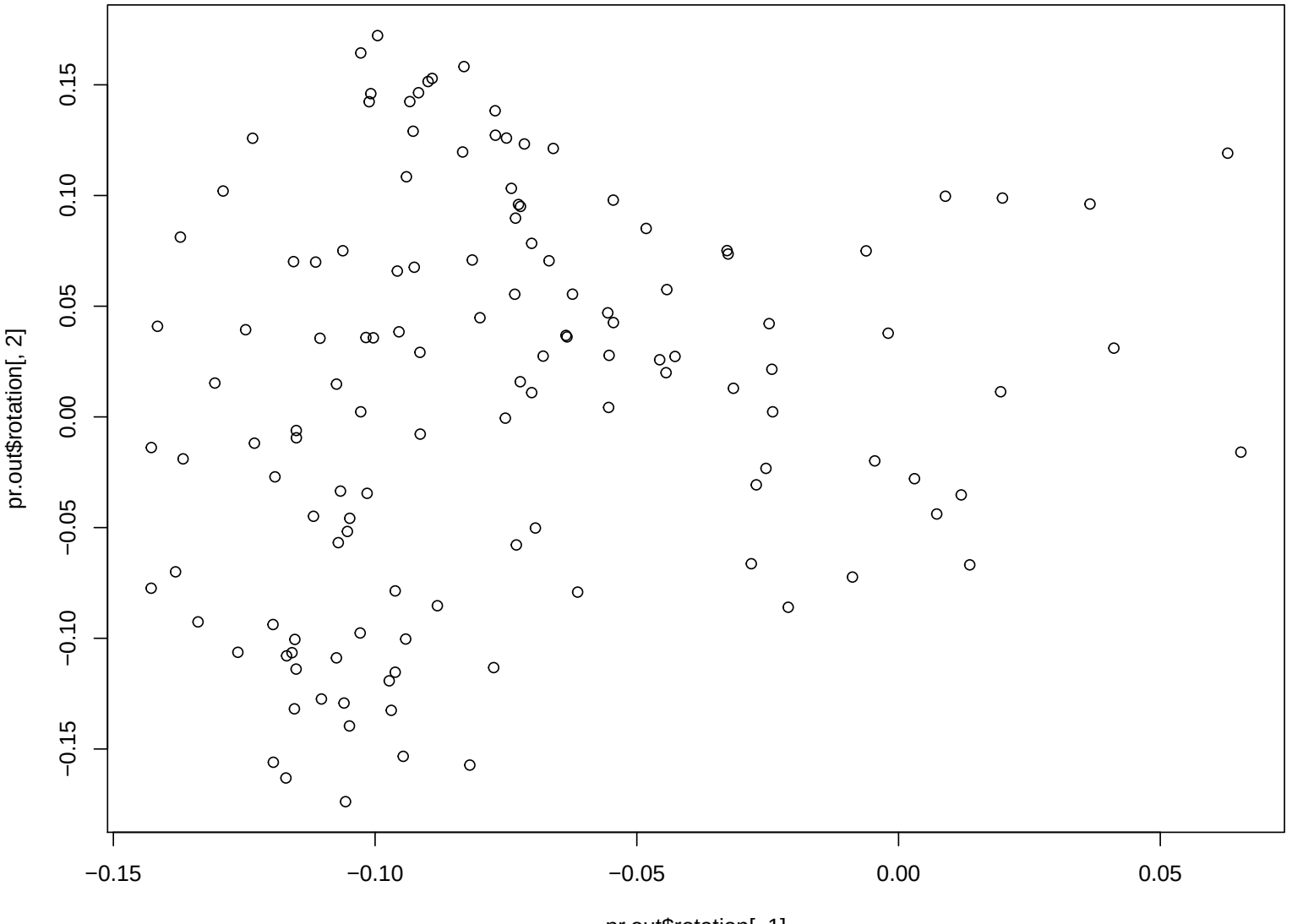
주성분분석 Rcode-7

```
plot(pve[1:30], xlab="Principal Component",
ylab="Proportion of Variance Explained", ylim=c(0,0.3),type='b')
```



주성분분석 Rcode-7

```
plot(pr.out$rotation[,1],pr.out$rotation[,2])
```



주성분회귀 Rcode-1

교재의 R code에서 다음의 부분이 중간에 추가되어야 한다.

```
library(ISLR)
Hitters=na.omit(Hitters)
x=model.matrix(Salary ~.,Hitters)[, -1]
y=Hitters$Salary
set.seed(1)
train=sample(1:nrow(x), nrow(x)/2)
test=(-train)
y.test=y[test]
```

주성분회귀 예제

- USArrests자료를 이용하고 가상 response에 대한 PCR을 생각하여 보자.
-

$$\begin{aligned} x5 &= x2 + \mathrm{rnorm}(50, 0, 1) \\ y &= 1 + 1 * x1 + 2 * x2 + 3 * x3 + 4 * x4 + 5 * x5 \end{aligned}$$

- 참값

$$[1, 1, 2, 3, 4, 5]$$

주성분회귀 Rcode-2

```
x0=USArrests
set.seed(1)
x5=USArrests[,2]+rnorm(50,0.01)
x=cbind(x0,x5)
x=scale(x)
y=1+1*x[1]+2*x[2]+3*x[3]+4*x[4]+5*x[5]+rnorm(50)
pr.out=prcomp(x,scale=T)
head(pr.out,n=1)
```

```
## $sdev
## [1] 1.835728367 1.007043291 0.618863150 0.482627383 0.006661972
```

주성분회귀 Rcode-3

```
pcscore=pr.out$x[,1:2] #2개의 principal component 사용
load=pr.out$rotation[,1:2]
plm=lm(unlist(y)~pcscore)
pbeta=plm$coef
betaest=rep(0,6)
betaest[1]=pbeta[1]
for(k in (2:6)){
betaest[k]=pbeta[2]*load[k-1,1]+pbeta[3]*load[k-1,2]
}
for(k in (2:6)){
betaest[k]=pbeta[2]*load[k-1,1]
}
betaest
```

```
## [1] 5.91125440 0.05836535 0.06580357 0.02569453 0.05522457 0.0657
```

주성분회귀 Rcode-4

```
library(pls)
```

```
##
## Attaching package: 'pls'

## The following object is masked from 'package:stats':
##
##     loadings
```

```
pcr.fit=pcr(unlist(y)~x,scale=T,ncomp=2)
pcr.fit$coef
```

```
## , , 1 comps
##
##             unlist(y)
## Murder    0.05836535
## Assault   0.06580357
## UrbanPop 0.02569453
## Rape      0.05522457
```

, , 1 comps

Murder 0.05836535 \ Assault 0.06580357 \ UrbanPop 0.02569453 \ Rape 0.05522457 \ x5 0.06576019 \

, , 2 comps

Murder -6.346392e-05\ Assault 4.315352e-02 \ UrbanPop 1.801896e-01\ Rape 9.888428e-02 \ x5 4.325277e-02\