12강 군집분석 I

통계·데이터과학과 장영재 교수

한국방송통신대학교

목차

1.군집분석이란?

01 군집분석이란?

- 군집분석(cluster analysis)이란 관측값 또는 개체를 의미 있는 몇 개의 부분집단으로 나누는 과정을 의미
  - 군집분석은 대표적인 자율학습 방법으로 유사성에 관한 측도를 기준으로 개별 개체들끼리 스스로 묶이도록 군집을 형성
    - 군집의 특징을 사후적으로 분석할 수 있는데, 이 경우 지도학습에 해당하는 의사결정나무모형이나 로지스틱회귀모형 등을 이용
  - 군집이란 군집분석 과정에서 나뉜 부분집단
    - 유용한 군집이란 같은 집단 내의 관측값들은 서로 유사하고 서로 다른 군집에 속한 관측값들 간에는 유사성이 적은 것을 의미
      ex) 타겟 마케팅, 고객 세분화 등
    - 군집화에 유용한 변수가 많이 존재할수록 유용한 군집 생성이 용이
- 군집분석은 자료의 사전정보 없이 자료를 파악하는 방법으로 분석자의 주관에 결과가 달라질 수 있음

01 군집분석이란?

	군집분석	• 의사결정나무 • 로지스틱 회귀
목표 변수	없음	있음
분석 목적	군집형성	분류
학습의 종류	자율학습	감독학습

<그림1> 군집분석과 분류모형의 비교

2.비유사성 측도

02 비유사성 척도

- 군집분석에서의 개체의 개수가 n이고 변수의 개수가 p개일 때의 자료구조는 <그림2>와 같음. 즉, 행렬 X의 행은 개체, 열은 변수를 의미하며 x_{ij}는 i번째 개체에서 j번째 연속형 변수의 관측값을 나타냄

$$X=\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1j} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2j} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_{i1} & x_{i2} & \cdots & x_{ij} & \cdots & x_{ip} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nj} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_i \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \quad x_i = (x_{i1}, x_{ij}, \cdots, x_{1j}, \cdots, x_{1p})$$

<그림2> 군집분석의 자료구조

02 비유사성 측도

- 두 개체가 연속형 변수로 표현될 수 있다면 이들의 비유사성(dissimilarity)은 개체 간 거리로 간주할 수 있음
  - 비유사성(거리)의 측정 방법
    - j 번째 개체와 k번째 개체를 나타내는 두 연속형 변수를 $x_i = (x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{ip})$ 와 $x_k = (x_{k1}, x_{k2}, \cdots, x_{kp})$라고 할 때, 비유사성은 각각 다음과 같이 정의

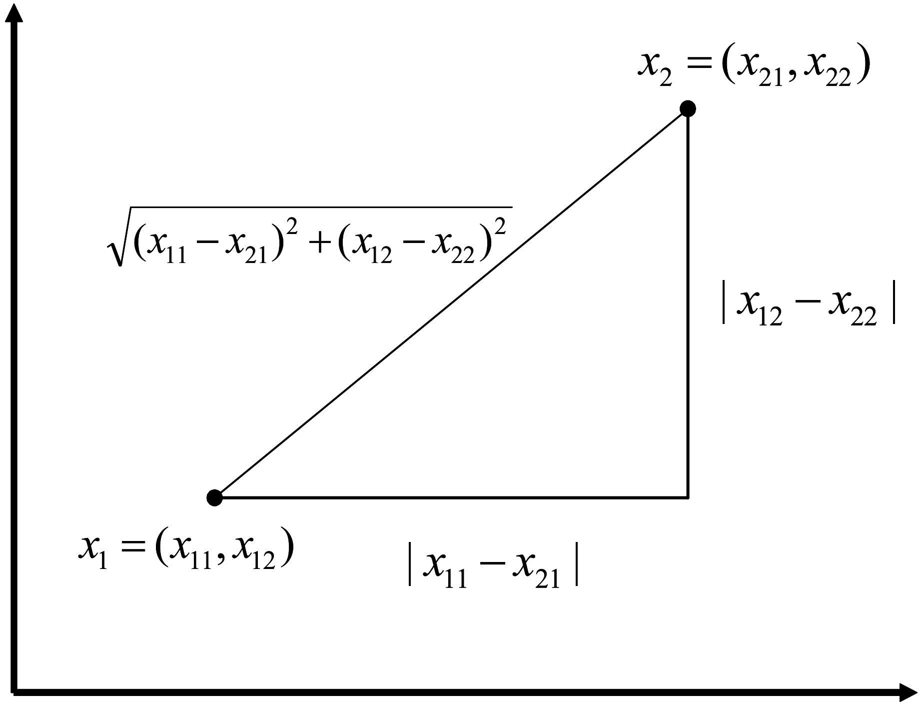
유클리디안(Euclidian) 거리 : $d(x_i, x_k) = \sqrt{\sum_{j=1}^{p} (x_{ij} - x_{kj})^2}$

맨해튼(Manhattan) 거리 : $d(x_i, x_k) = \sum_{j=1}^{p} |x_{ij} - x_{kj}|$

민코브스키(Minkowski) 거리 : $d(x_i, x_k) = (\sum_{j=1}^{p} |x_{ij} - x_{kj}|^m)^{1/m}$

02 비유사성 척도

- <그림 3>은 좌표평면에서 두 점간의 유클리디안 거리와 맨해튼 거리를 비교한 그림



<그림3> 두 점 간의 유클리디안 거리와 맨해튼 거리 비교

02 비유사성 측도

- 이밖에도 다차원 공간에서의 거리 측정방법인 마할라노비스(Mahalanobis) 거리와 코사인 거리 등이 있음
  - 마할라노비스 거리는 두 지점의 단순한 거리뿐만이 아니라, 변수의 특성을 나타내는 분산과 공분산이 함께 고려되며 코사인 거리는 다차원의 양수 공간에서의 거리 측정에 많이 사용됨

마할라노비스(Mahalanobis) 거리 : $d(x_i, x_k) = (x_i - x_k)^T \Sigma^{-1} (x_i - x_k)$

코사인(cosine) 거리 : $1 - \dfrac{\sum_{j=1}^{p} (x_{ij} \times x_{kj})}{\sqrt{\sum_{j=1}^{p} x_{ij}^2} \times \sqrt{\sum_{j=1}^{p} x_{kj}^2}}$

3. 계층적 군집분석

03 계층적 군집분석

- 계층적 군집분석에는 가까운 관측 값들 끼리 묶는 응집분석(agglomerative analysis)과 먼 관측 값들을 나누어가는 분할분석(divisive analysis)이 있음

  - 계층적 군집화는 비계층적 군집화에 비하여 군집의 수에 대한 사전 지식이 필요하지 않다는 장점

    - 한 계층에서 어떤 군집에 할당되면 그 계층 아래에서는 다른 위 계층에서 나뉜 다른 군집으로 할당될 수 없다는 특징이 있음

03 계층적 군집분석

1 응집분석

응집분석의 알고리즘

①각 개체를 하나의 군집으로 하여 전체 n개의 군집을 형성

②각 군집 간의 거리를 기준으로 가장 가까운 두 개의 군집을 병합하여 n-1개의 군집을 형성

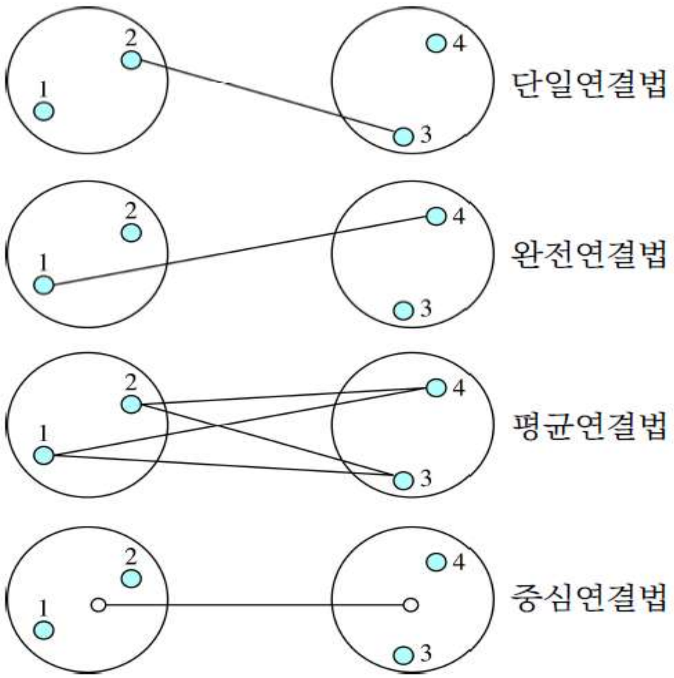
③n-1개의 군집 중 가장 가까운 두 군집을 병합하여 군집을 n-2개로 축소

④군집의 수를 줄여나가며 전체가 하나의 군집을 이룰 때까지 이 과정을 반복

03 계층적 군집분석

1 응집분석

- 자료에서 i번째 개체와 k번째 개체의 거리를 d(i, k)라 하고, 군집 P와 군집 Q의 거리를 d(P, Q)라 할 때 개체 간의 거리 d(i, k)는 앞서 살펴 본 여러 가지 방법 중 하나를 선택



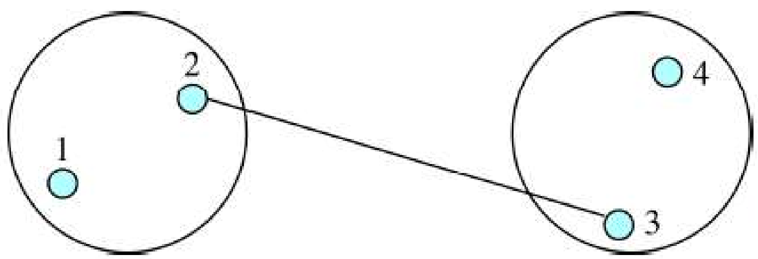
<그림4> 거리 계산 방법에 따른 주요 응집분석의 종류

03 계층적 군집분석

- 두 군집 간의 거리 d(P, Q)를 계산하는 방법에 따라 응집분석의 형태가 달라지는데 응집분석의 방법으로는 다음과 같은 방법이 있음

① 단일연결법(Single Linkage Method)

- 단일연결법은 최단연결법이라고도 하며 두 군집 P와 Q간의 거리는 P에 속한 개체와 Q에 속한 개체 하나씩을 뽑았을 때 나타날 수 있는 거리의 최솟값으로 측정



$$d(P, Q) = \min_{i \in P,\ k \in Q} d(i, k)$$

<그림5> 단일연결법에서의 두 군집 간 거리

03 계층적 군집분석

<예제 7-2>

개체	X1(변수1)	X2(변수2)
1	1	1
2	1	2
3	3	4
4	5	5
5	7	5.5

$$\begin{array}{c c} & \begin{array}{ccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{array} \\ \begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{array} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 5 & 8 & 10.5 \\ 1 & 0 & 4 & 7 & 9.5 \\ 5 & 4 & 0 & 3 & 5.5 \\ 8 & 7 & 3 & 0 & 2.5 \\ 10.5 & 9.5 & 5.5 & 2.5 & 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

$$\begin{array}{c c} & \begin{array}{cccc} \{1,2\} & 3 & 4 & 5 \end{array} \\ \begin{array}{c} \{1,2\} \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{array} & \begin{pmatrix} 0 & 4 & 7 & 9.5 \\ 4 & 0 & 3 & 5.5 \\ 7 & 3 & 0 & 2.5 \\ 9.5 & 5.5 & 2.5 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c c} & \begin{array}{ccc} \{1,2\} & 3 & \{4,5\} \end{array} \\ \begin{array}{c} \{1,2\} \\ 3 \\ \{4,5\} \end{array} & \begin{pmatrix} 0 & 4 & 7 \\ 4 & 0 & 3 \\ 7 & 3 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c c} & \begin{array}{cc} \{1,2\} & \{3,4,5\} \end{array} \\ \begin{array}{c} \{1,2\} \\ \{3,4,5\} \end{array} & \begin{pmatrix} 0 & 4 \\ 4 & 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

03 계층적 군집분석

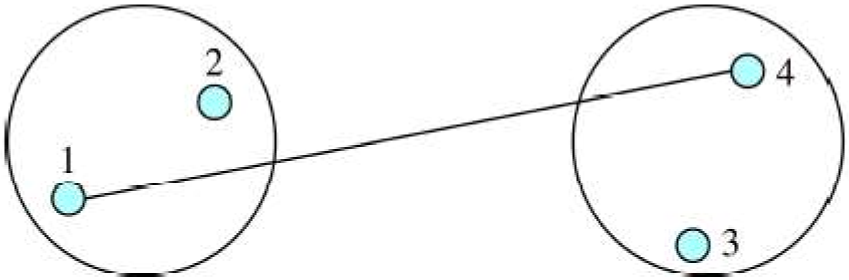
<군집 수의 결정>

군집의 변화	군집 수의 변화	군집형성 시 군집 간 거리	단계별 거리 차
{1}, {2}, {3}, {4}, {5} → {1, 2}, {3}, {4}, {5}	5 → 4	1 {1}과 {2}	1-0=1
{1, 2}, {3}, {4}, {5} → {1, 2}, {3}, {4, 5}	4 → 3	2.5 {4}와 {5}	2.5-1=1.5
{1, 2}, {3}, {4, 5} → {1, 2}, {3, 4, 5}	3 → 2	3 {3}과 {4,5}	3-2.5=0.5
{1, 2}, {3, 4, 5} → {1, 2, 3, 4, 5}	2 → 1	4 {1, 2}와 {3, 4, 5}	4-3=1

03 계층적 군집분석

② 완전 연결법(Complete Linkage Method)

- 완전연결법은 최장 연결법이라고도 하며 두 군집 P와 Q간의 거리는 P에 속한 개체와 Q에 속한 개체 하나를 뽑았을 때 나타날 수 있는 거리의 최대값으로 정의



$$d(R, Q) = \max_{i \in R,\, k \in Q} d(i, k)$$

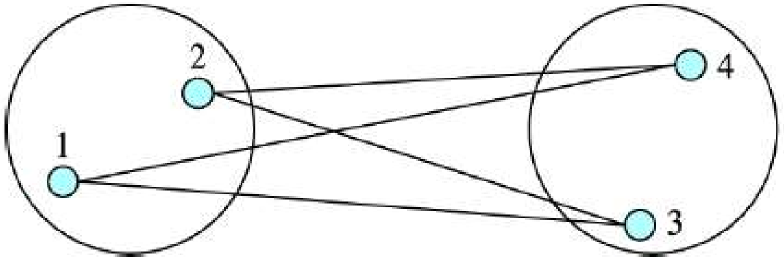
<그림6> 완전연결법에서의 두 군집 간 거리

- 완전연결법은 단일연결법에 비해 이상치나 잡음의 존재에 영향을 덜 받는다고 알려져 있고 전형적으로 관측값이 서로 매우 유사하여 밀집되어 있는 군집을 구별하는데 이용

03 계층적 군집분석

③ 평균연결법(Average Linkage Method).

- 평균연결법에서는 두 군집 P와Q간의 거리가 P에 속한 개체와 Q에 속한 개체 간의 모든 거리의 평균



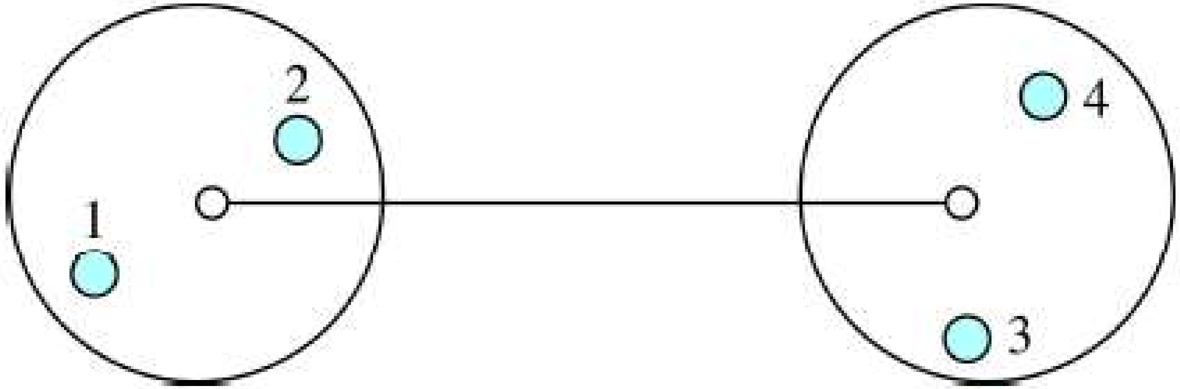
$$d(P, Q) = \frac{\sum_{i \in P,\, k \in Q} d(i, k)}{(\text{군집 } P\text{에서의 개체수}) \times (\text{군집 } Q\text{에서의 개체수})}$$

<그림7> 평균연결법에서의 두 군집 간 거리

03 계층적 군집분석

④ 중심연결법(Centroid Linkage Method)

- 중심연결법에서는 두 군집 P와Q간의 거리가 P에 속한 개체와 Q에 속한 개체 의 중심점 간의 거리

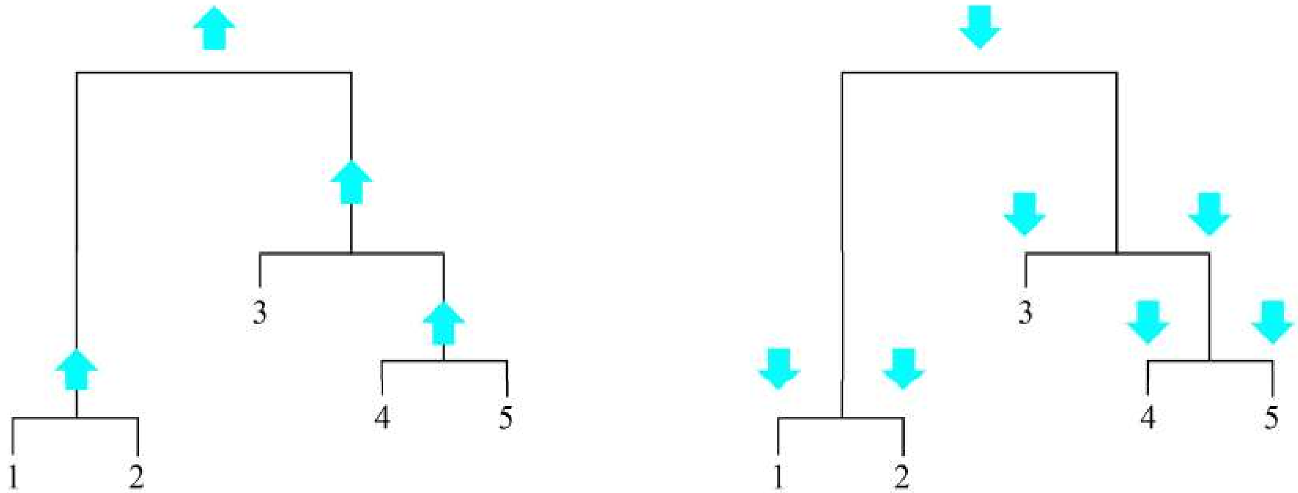


<그림8> 중심연결법에서의 두 군집 간 거리

03 계층적 군집분석

2 분할분석(Divisive Analysis)

- 개체의 수가 많을 경우 계산시간이 오래 걸린다는 응집분석의 단점을 보완하기 위하여 Macnaughton-smith(1964)가 분할분석을 제안
  - 대표적인 분할분석으로는 다음에 요약된 Kaufman과 Rousseeuw(1990)의 DIANA(Divisive Analysis)알고리즘을 꼽을 수 있음



<그림9> 응집분석과 분할분석의 군집형성 방향 비교

03 계층적 군집분석

2 분할분석(Divisive Analysis)

① 군집 Q에 속한 각 개체에서 다른 개체까지의 평균거리를 계산하여 평균거리가 가장 긴 개체를 선택. 이 개체를 군집에서 제거하여 군집 A(new)를 만들고 제거된 개체를 갖는 군집B(new)라 정의

② 군집 A(new)와 B(new)를 군집 A(old)와 B(old)로 정함

③ 군집 A(old)에서 다른 개체와의 평균거리가 가장 긴 개체를 찾아 이 개체를 i라 정의

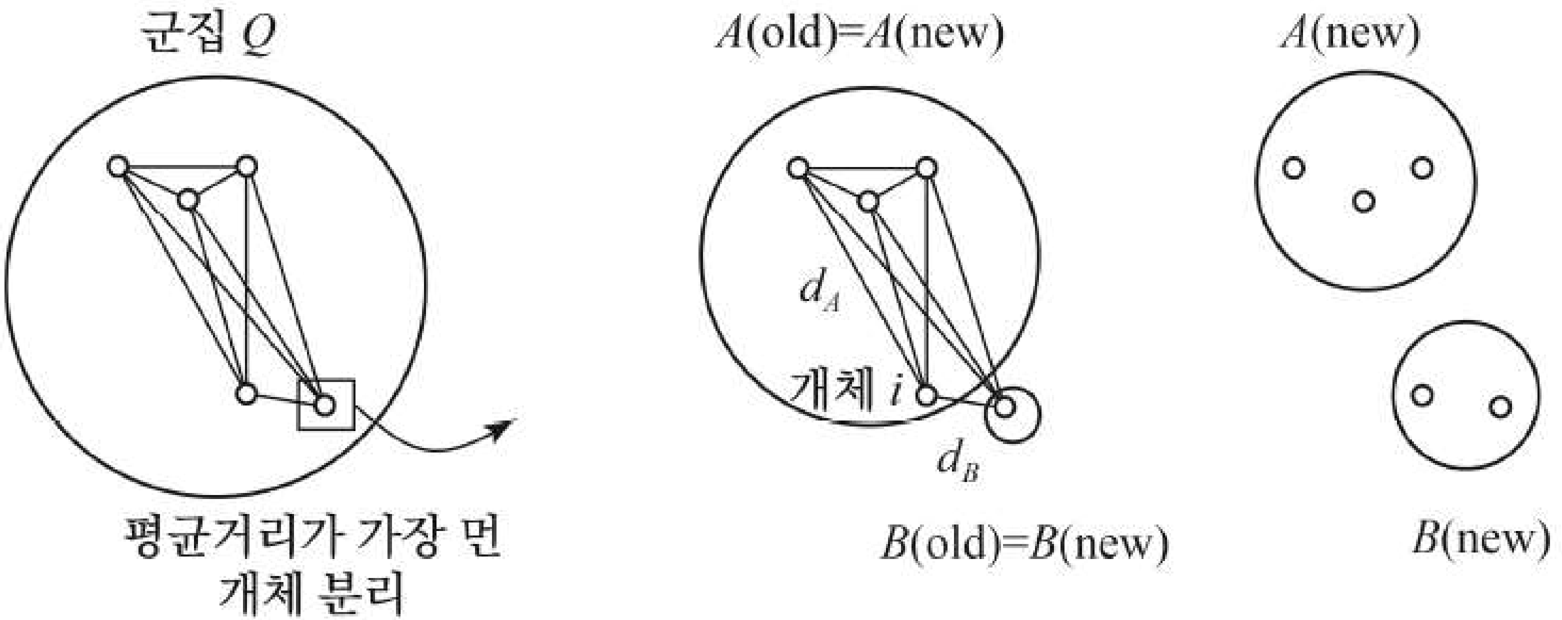
④ ③에서 찾은 개체 i와 군집 B(old)에 속한 개체들 간에 평균거리를 계산

⑤ 개체 i와 군집 A(old)에서, 다른 개체의 평균거리 d_A에서 개체 i와 군집 B(old)의 개체의 평균거리 d_B 를 뺀 값이 0보다 크면 개체 A(old)에서 i를 제거한 군집 A(new)를 생성. 그리고 B(old)에서 i를 추가한 군집 B(new)를 생성. 이후 ②-④번 과정을 계속 반복.

- 만약 거리의 차 $d_A - d_B$ 가 0 이하면 군집형성을 중지하고 A(old)와 B(old)를 최종 군집으로 선택.

03 계층적 군집분석

2 분할분석(Divisive Analysis)



<그림10> DIANA 알고리즘의 기본구조

03 계층적 군집분석

<예제 7-5>

개체	X1(변수1)	X2(변수2)
1	1	1
2	1	2
3	3	4
4	5	5
5	7	5.5

$$\begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 1 & 5 & 8 & 10.5 \\ 1 & 0 & 4 & 7 & 9.5 \\ 5 & 4 & 0 & 3 & 5.5 \\ 8 & 7 & 3 & 0 & 2.5 \\ 10.5 & 9.5 & 5.5 & 2.5 & 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

개체	다른 개체와의 평균거리
1	(1+5+8+10.5)/4=6.125
2	(1+4+7+9.5)/4=5.375
3	(5+4+3+5.5)/4=4.375
4	(8+7+3+2.5)/4=5.125
5	(10.5+9.5+5.5+2.5)/4=7

가장 먼 개체 : 5번
A(new)={1, 2, 3, 4}
B(new)={5}

▷ A(old)=A(new),
B(old)=B(new)로 함

03 계층적 군집분석

개체	{1,2,3,4}에서 다른 개체와의 거리	{5}와의 거리	거리의 차이
1	(1+5+8)/3=4.67	10.5	−5.83
2	(1+4+7)/3=4	9.5	−5.5
3	(5+4+3)/3=4	5.5	−1.5
4	(8+7+3)/3=6	2.5	3.5

개체	{1,2,3}에서 다른 개체와의 거리	{4,5}와의 거리	거리의 차이
1	(1+5)/2=3	(8+10.5)/2=9.25	−6.25
2	(1+4)/4=2.5	(7+9.5)/2=8.25	−5.75
3	(5+4)/4=4.5	(3+5.5)/2=4.25	0.25

03 계층적 군집분석

개체	{1,2}에서 다른 개체와의 거리	{3,4,5}와의 거리	거리의 차이
1	1	(5+8+10.5)/3=7.83	−6.83
2	1	(4+7+9.5)/3=5.83	−5.83

개체	다른 개체와의 평균거리
3	(3+5.5)/2=4.25
4	(3+2.5)/2=2.75
5	(5.5+2.5)/2=4

개체	{4,5}에서 다른 개체와의 거리	{3}과의 거리	거리의 차이
4	2.5	3	−0.5
5	2.5	5.5	−3

4. 비계층적 군집분석

04 비계층적 군집분석

- 계층적 군집분석은 관찰치의 수가 적은 경우에 적당하지만 대용량의 데이터를 가지고 군집분석을 실시할 때에는 비계층적 군집분석 방법인 K-평균 군집분석을 사용
  - K-평균 군집분석은 매퀸(1967)이 제안한 것으로 계층적 군집분석과 달리 군집수를 미리 정하고 분석을 실행

① 군집의 수 K를 설정

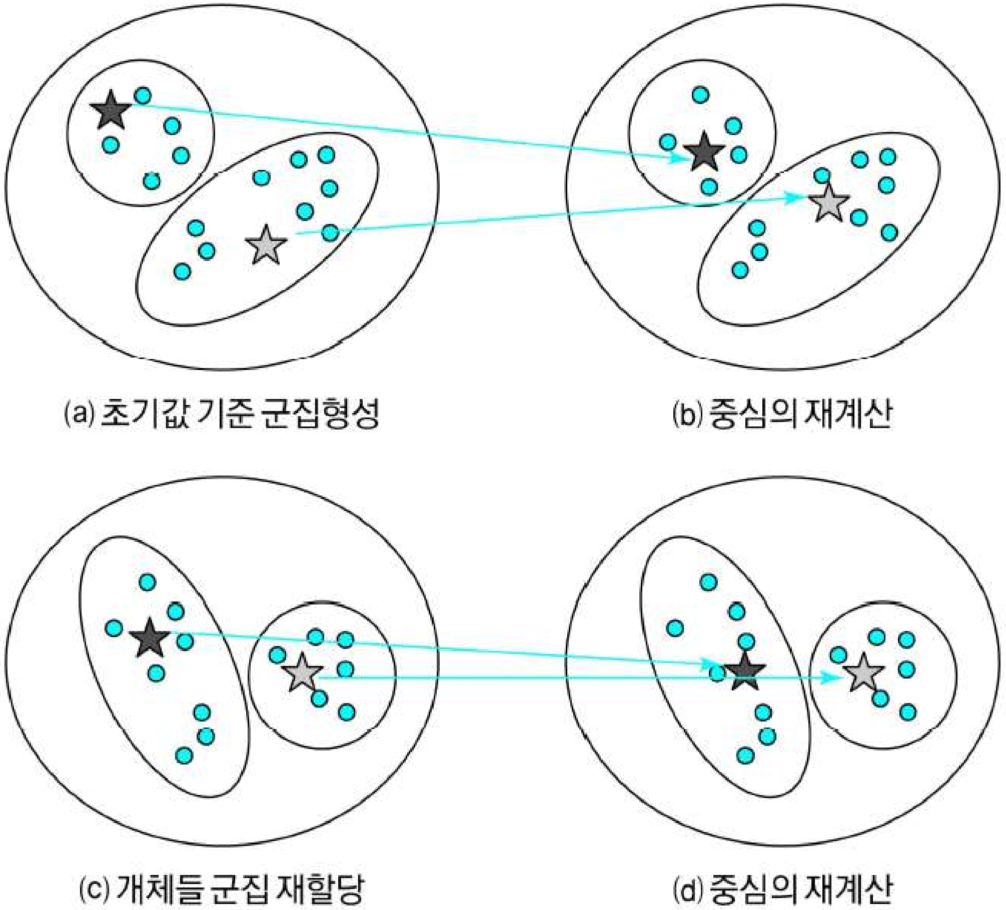
② 임의의 K개 관찰값을 K개 각 군집에 임의로 지정. 이를 K개 각 군집의 중심으로 이용

③ 모든 관찰값을 군집중심으로 부터 유클리디안 거리가 최소인 군집에 할당

④ 각 군집에 속한 관찰값들을 이용하여 군집중심을 새로 계산

⑤ 변화(군집 간 관찰값 이동)가 없을 때까지 단계3 과 단계4 를 반복

04 비계층적 군집분석



<그림11> K-평균 군집분석에서의 중심 이동 예시(K=2)

04 비계층적 군집분석

- K-평균 군집분석에서는 군집의 수 결정과 초기값 설정이 중요
  - K-평균 군집분석 군집의 수 결정 방법

<방법1>
① 다양한 군집의 수에 대하여 K-평균 군집을 형성하고 최종 군집에 대하여 각 개체로부터 중심점까지의 평균거리를 산출

② 각 군집 수와 산출된 평균 거리를 대응하여 그림으로 표현.
이 평균 거리는 군집의 수가 작을수록 커지고 군집의 수가 많을수록 작아짐

③ 평균거리가 처음에는 급격하게 작아지다가 나중에는 평평해지는데 이 평균거리가 평평해지는 군집 수를 선택

<방법2>
주성분을 이용. 즉, 군집분석 수행 이전에 주성분분석을 먼저 수행하고
상위 2개의 주성분을 이용하여 군집의 개수를 확인

04 비계층적 군집분석

- K-평균 군집분석 초기값을 설정하는 여러 가지 방법

  <방법1>
  다양한 초기값을 가지고 주어진 군집 수 에 대하여 K-평균 군집분석을 수행하고 최종 군집에서 중심점까지의 평균거리를 구하여 이들 중 가장 작은 평균거리를 갖는 초기값에 대한 군집을 선택

  <방법2>
  계층적 군집분석을 시행하고 계층적 군집화 결과로부터 군집의 수와 형성된 군집으로부터 중심점을 구한 후, 이 결과를 가지고 K-평균 군집분석을 수행

5. 군집분석의 특징

05 군집분석의 특징

- 군집분석은 자료 사이의 거리를 이용하여 수행되기 때문에 자료의 단위가 결과에 큰 영향을 미치므로 자료를 표준화하는 방법을 사용
  - 각 변수의 중요도가 다를 경우 가중치를 이용하여 각 변수의 중요도를 조절. 가중치는 대부분의 경우 단위변환(표준화)를 수행한 후 부여

- 군집분석의 장단점
  - 장점은 군집분석이 탐색적인 기법으로 주어진 자료에 대한 사전정보 없이 의미 있는 자료구조를 찾아낼 수 있다는 것이고 다양한 형태의 데이터에 적용가능하며 분석방법의 적용이 쉽다는 점
  - 단점은 복잡한 자료에 대해서는 유의미한 군집을 찾기가 힘들다는 것인데, 군집이 이상치에 영향을 받기 때문. 변수의 개수가 많은 경우에도 좋은 군집을 찾기 힘든 경우가 많으며 가중치와 거리 정의가 어렵고 초기 군집수 k의 결정이 어려움 결과의 해석이 어렵다는 단점도 존재

다음시간 안내

13강.
군집분석 II