

Chapter 07. 비지도 학습 - 진우

비지도학습(Unsupervised Learning)

레이블이 달린 데이터를 이용해 모델을 학습하는 과정없이 데이터로부 터 의미를 이끌어내는 통계적 기법

- ※ 비지도 학습의 활용사례
- 1. 클러스터링 (Clustering): 데이터의 의미있는 그룹들을 찾을 때



예시) 웹사이트에서 사용자의 클릭 데이터와 인구통계정보를 이용해 서로 다른 성격의 사용자를 그룹화

- → 이를 통해 웹사이트를 사용자 그룹의 기호에 맞게 개선할 수 있음
- ▼ 콜드스타트 (cold-start) 문제에서 유용

새로운 마케팅 홍보를 론칭하거나 잠재적인 새로운 형태의 사기나 스팸을 걸러내는 유형의 문제에서는 모델을 훈련시킬 수 있는 **응답 데이터를 초기에 갖고 있지 않다**. 시간이 지나고 데이터가 쌓이면 시스템에 대해 좀 더 알 게 되고 있는 전형적인 예측 모델을학습할 수 있다. 이럴때 클러스터링은 패턴이 비슷한 데이터들을 분류하여 학습과정을 더 빨리 시작할 수 있도록 도와준다.

2. 차원축소 (Reducing the dimension) : 데이터의 변수들을 관리할 수 있을 만한 수준으로 줄임



예시) 제조 공정 모니터링 하기 위해 수천 개의 센서를 사용한다고 가정

공정 실패 예측하는 모델을 만들고자 할 때, 전체 데이터의 차원을 훨씬 작은 차원의 의미 있는

피처로 데이터로 줄일 수 있다면 수천 개의 센서에서 나오는 데이터를 전부 포함하는 것 보다 강력

하면서도 쉬운 모델을 만들 수 있음

3. 데이터와 다른 변수 들 사이에 서로 어떤 관계가 있는지에 대한 통찰을 얻는 것이 목적



예시) 변수와 레코드 수가 아주 큰 상황(EDA 연장)

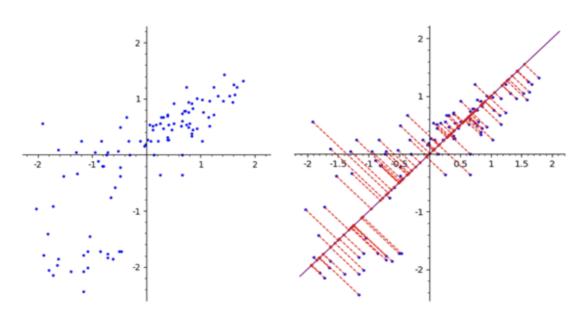
→ 변수들을 정밀하게 조사하고 밝혀내는데 유용한 방법 제시

▼ 7.1 주성분 분석 (PCA)

PCA (Principal Components Analysis)

다수의 수치형 예측 변수들을 더 적은 수의 변수들의 집합으로 나타 내는 것

전체 변수들의 특징을 대부분 설명할 수 있는 적은 수의 변수들의 집합을 <mark>주성분</mark>이라고 함



PCA를 통해 고차원의 데이터를 저차원으로 축소



<u>주성분 분석</u> (참고자료)

주성분 분석(PCA)은 가장 널리 사용되는 차원 축소 기법 중 하나로, 원 데이터의 분포를 최대한 보존하면서 **고차원 공간의 데이터들을 저차원 공간으로** 변환한다.

PCA는 기존의 변수를 조합하여 서로 연관성이 없는 새로운 변수, 즉 주성분 (principal component, PC)들을 만들어 낸다. 첫 번째 주성분 PC1이 원 데 이터의 분포를 가장 많이 보존하고, 두 번째 주성분 PC2가 그 다음으로 원 데이터의 분포를 많이 보존하는 식이다. 앞서 언급한 11차원의 데이터의 경우 기존의 변수들을 조합하여 같은 개수(11개)의 주성분을 만들 수 있는데, 만일 PC1, PC2, PC3가 원 데이터의 분포(성질)의 약 90%를 보존한다면, 10% 정도의 정보는 잃어버리더라도, 합리적인 분석에 큰 무리가 없으므로, PC1, PC2, PC3만 택하여 3차원 데이터로 차원을 줄일 수 있다.

※ 예제

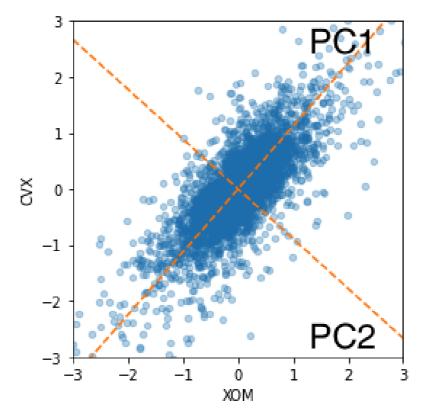
	XOM	CVX
1993-01-29	-0.016991	0.072921
1993-02-01	0.016991	0.102089
1993-02-02	0.084954	0.029168
1993-02-03	0.067964	0.058337
1993-02-04	0.034378	0.044272

엑슨모빌(XOM), 셰브런(CVS)의 주가 데이터

주성분 분석
pcs = PCA(n_components=2)
pcs.fit(oil_px)
loadings = pd.DataFrame(pcs.components_, columns=oil_px.columns)
print(loadings)

종목	XOM	CVM
PC1	-0.665	-0.747
PC2	0.747	-0.665

▼ 주성분 분석 시각화 코드

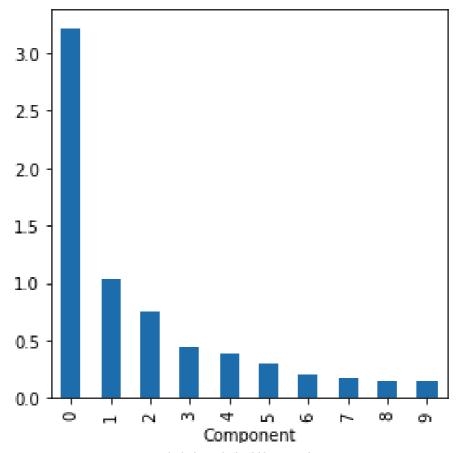


주성분 분석 시각화 (엑슨모빌과 셰브런의 주가 수익에 대한 주성분)

- PC1(타원의 장축) : 두 회사 사이의 상관관계를 반영하는 XOM과 CVM의 평균을 의미
- PC2(타원의 단축): XOM과 CVM의 주가가 달라지는 지점을 반영

※ **스크리그래프 (Scree Graph)** : **주성분의** 이해를 돕기 위해 사용되는 것, **상대적인 중요도**를 표시해 줌

(그림이 절벽이 있는 산비탈 모양과 흡사하다고 해서 붙여짐)



S&P 500 상위권 주가에 대한 PCA의 Scree plot

• 상위 주성분들의 가중치를 표시해 보는 것도 주성분을 이해하는데 도움이 됨

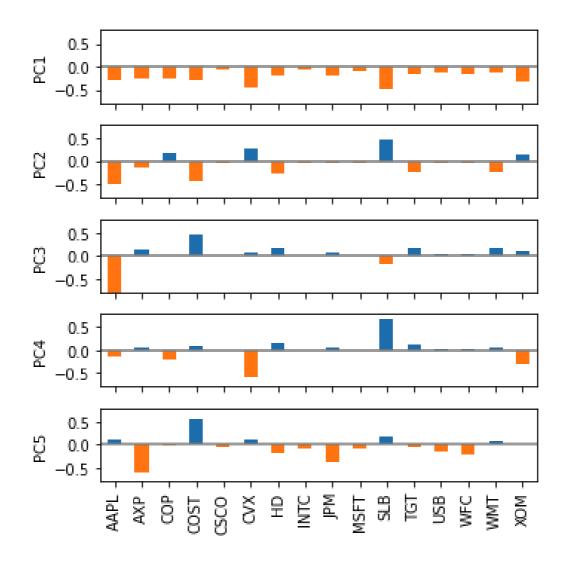
```
AXP
                      COP
                              COST
                                      CSCO
                                               CVX
0 -0.300825 -0.246332 -0.261529 -0.273634 -0.064059 -0.444490 -0.207983
2 -0.786730 0.135458 -0.002367 0.465862 -0.007524 0.082374 0.166320
3 -0.120586 0.061814 -0.206026 0.092596 0.003904 -0.577665 0.162814
 0.111576 -0.596666 -0.005813 0.555529 -0.039860 0.109016 -0.185488
     INTC
              JPM
                     MSFT
                               SLB
                                       TGT
                                               USB
                                                       WFC
0 -0.076956 -0.196397 -0.105012 -0.481786 -0.148833 -0.116421 -0.145684
1 -0.033898 -0.040723 -0.053954  0.472494 -0.228123 -0.054796 -0.047427
3 -0.001605 0.057687 -0.012558 0.680914 0.109895 0.016752 0.018614
4 -0.072047 -0.385160 -0.077135 0.181332 -0.055557 -0.155440 -0.216425
      WMT
              XOM
0 -0.122304 -0.317952
1 -0.222889 0.154192
 0.175806 0.090167
 0.058439 -0.295204
4 0.091541 0.013277
```

```
maxPC = 1.01 * np.max(np.max(np.abs(loadings.loc[0:5, :])))

f, axes = plt.subplots(5, 1, figsize=(5, 5), sharex=True)

for i, ax in enumerate(axes):
    pc_loadings = loadings.loc[i, :]
    colors = ['C0' if l > 0 else 'C1' for l in pc_loadings]
    ax.axhline(color='#888888')
    pc_loadings.plot.bar(ax=ax, color=colors)
    ax.set_ylabel(f'PC{i+1}')
    ax.set_ylim(-maxPC, maxPC)

plt.tight_layout()
plt.show()
```



• PC1: 모든 변수로 부터 비슷한 정도의 영향을 공유한다는 것을 알 수 있음

• PC2: 에너지 관련 주식과 다른주식의 가격 변동을 잡아냄

• PC3: 애플(AAPL), 코스트코(COST)의 움직임이 서로 반대라는 사실을 알려줌

• PC4 : 슬륨베르거(SLB)와 나머지 에너지 회사들의 움직임이 반대라는 것을 보여줌

• PC5 : 금융회사들이 주를 이루고 있다는 것을 보여줌



💮 성분을 몇 개까지 골라야 할까?

1. 가장 일반적 방법 : 대부분의 변동성을 설명할 수 있는 성분들을 고르기 위 한 특별한 규칙을 사용

ex) 스크리 플롯 활용, 상위 N개 주성분 분석 제한, 누 적 분산 임계치 이상 성분 등

2. 직관적인 해석이 가능한 성분들 알아보기 위해 가중치 참고 교차타당성검사를 통해 중요한 주성분들의 개수를 결정하기 위한 공식적 인 방법

▼ 7.2 K-평균 클러스터링

K-Means Clustering

클러스터링(군집화)은 데이터의 유의미한 그룹들을 구분하는 것으 로 각 그룹에 비슷한 데이터들이 속함

k-means는 최초로 개발된 클러스터링 기법으로 알고리즘이 상대 적으로 간단하고 데이터 크기가 커져도 손쉽게 사용할 수 있다는 점 에서 널리 사용 중

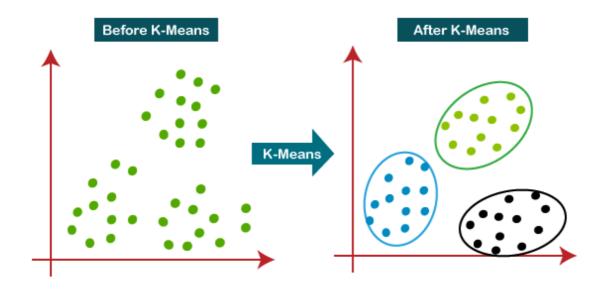
- k-means는 데이터 k개를 클러스터로 나눔
- 이때 할당된 클러스터 평균과 포함된 데이터들의 거리 제곱합이 최소가 되도록 함



정규화

데이터 값에서 평균을 빼고 그 편차를 표준편차로 나눠주는 방법이 가장 일 바적

이렇지 않으면 스케일이 가장 큰 변수가 클러스터링 독점하게 됨!



※ 예제

```
# 엑슨모빌, 셰브런 일변 주가 수익률을 변수고 놓고 4개 클러스터 분류
# 주식 수익률은 이미 표준화된 방식으로 보고되므로 정규화 필요 없음

df = sp500_px.loc[sp500_px.index >= '2011-01-01', ['XOM', 'CVX']]

kmeans = KMeans(n_clusters=4).fit(df)

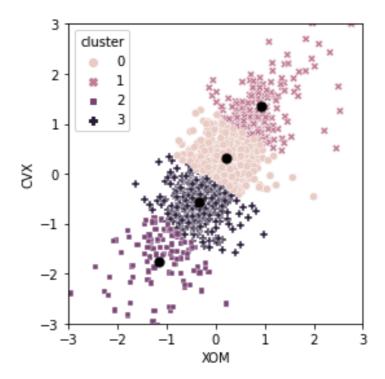
df['cluster'] = kmeans.labels_
print(df.head())

# 클러스터 중심

centers = pd.DataFrame(kmeans.cluster_centers_, columns=['XOM', 'CVX'])
print(centers)
# 클러스터 0,1은 상승장, 2,3은 하락장 의미
```

	XOM	CVX	cluster
2011-01-03	0.736805	0.240681	0
2011-01-04	0.168668	-0.584516	3
2011-01-05	0.026631	0.446985	0
2011-01-06	0.248558	-0.919751	3
2011-01-07	0.337329	0.180511	0

	MOX	CVX
0	0.231540	0.316965
1	0.927032	1.346412
2	-1.143980	-1.750297
3	-0.328742	-0.573470

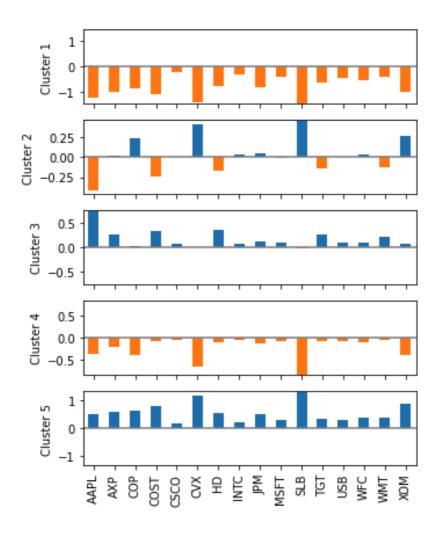


```
# 클러스터 해석
# PCA와 유사
centers = pd.DataFrame(kmeans.cluster_centers_, columns=syms)

f, axes = plt.subplots(5, 1, figsize=(5, 6), sharex=True)

for i, ax in enumerate(axes):
    center = centers.loc[i, :]
    maxPC = 1.01 * np.max(np.max(np.abs(center)))
    colors = ['C0' if l > 0 else 'C1' for l in center]
    ax.axhline(color='#888888')
    center.plot.bar(ax=ax, color=colors)
    ax.set_ylabel(f'Cluster {i + 1}')
    ax.set_ylim(-maxPC, maxPC)

plt.tight_layout()
plt.show()
```



- Cluster 1, 5: 주식시장이 내리고 오른날
- Cluster 2: 에너지 주식은 오르고 소비재 주식은 내린날
- Cluster 3, 4: 에너지 주식이 내린날과 소비재 주식이 오른날

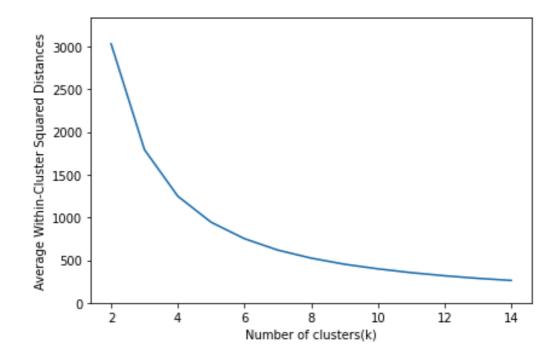
※ 클러스터 개수 선정 (elbow method)

언제 클러스터 세트가 데이터 분산의 '대부분'을 설명하는지 알려주 는 방법

```
inertia = []
for n_clusters in range(2, 15):
    kmeans = KMeans(n_clusters=n_clusters, random_state=0).fit(top_sp)
    inertia.append(kmeans.inertia_ / n_clusters)
inertias = pd.DataFrame({'n_clusters': range(2, 15), 'inertia': inertia})
ax = inertias.plot(x='n_clusters', y='inertia')
```

```
plt.xlabel('Number of clusters(k)')
plt.ylabel('Average Within-Cluster Squared Distances')
plt.ylim((0, 1.1 * inertias.inertia.max()))
ax.legend().set_visible(False)

plt.tight_layout()
plt.show()
```





주요 개념

- 사용자가 원하는 클러스터 k개를 선택
- k-means 알고리즘은 클러스터가 더는 변하지 않을 때까지 반복해서 클러 스터 평균이 가장 가까운 클러스터에 할당
- 실무적인 상황을 고려해 k개를 선택하는 것이 가장 일반적, 통계적으로 최적의 수를 구하는 방법은 없다.

▼ 7.3 계층적 클러스터링

계층적 클러스터링 (Hierarchical Clustering) : k-means와는 아 주 다른 결과 서로 다른 수의 클러스터를 지정하는 효과를 시각화

특이점이나 비정상적인 그룹이나 레코드를 발견하는 데 더 민감함 직관적인 시각화가 가증하여 클러스터를 해석하기 수월

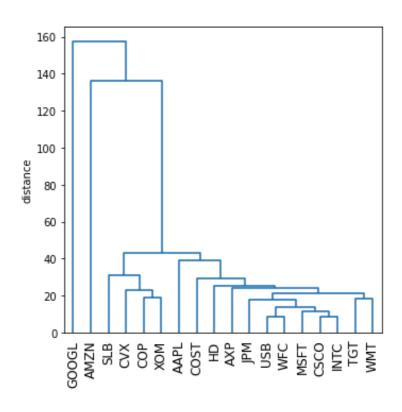
- 덴드로그램(dendrogram): 레코드들이 속한 계층적 클러스터를 시각적으로 표현
- 거리(distance) : 한 레코드가 다른 레코드들과 얼마나 가까운지 보여주는 측정 지표
- 비유사도(dissimilarity) : 한 클러스터가 다른 클러스터들과 얼마나 가까운지 보여 주는 측정 지표

※ 예제

▼ 덴드로그램

```
fig, ax = plt.subplots(figsize=(5, 5))
dendrogram(Z, labels=list(df.index), color_threshold=0)
plt.xticks(rotation=90)
ax.set_ylabel('distance')

plt.tight_layout()
plt.show()
```



- 구글, 아마존에 대한 수익률은 다르고 다른 주식에 대한 수익률과 상당히 다름
- 다른주식들은 자연스럽게 그룹 형성
- 애플(AAPL)은 독자적, 석유 관련주(SLB, CVX, XOM, COP)그룹, 나머지는 서로 비슷함

```
# fcluster 사용
memb = fcluster(Z, 4, criterion='maxclust')
memb = pd.Series(memb, index=df.index)
for key, item in memb.groupby(memb):
    print(f"{key} : {', '.join(item.index)}")
```

1 : COP, CVX, SLB, XOM

2 : AAPL, AXP, COST, CSCO, HD, INTC, JPM, MSFT, TGT, USB, WFC, WMT

3 : AMZN

4 : GOOGL

▼ 비유사도 측정

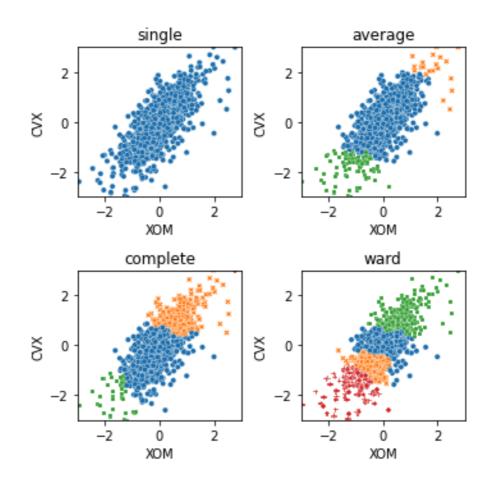
- 완전연결 : 비슷한 맴버가 있는 클러스터를 만드는 경향
- 단일연결: 두 클러스터의 레코드간 최소 거리를 사용하는 방식
 - 탐욕적 방법으로 결과로 나온 클러스터는 서로 크게 다른 요소들을 포함하는 일도 발생

- 평균연결 : 모든 거리 쌍의 평균을 사용하는 방법으로 단일연결과 완전연결을 절충한 방법
- 워드기법(최소분산) : 클러스터 내의 제곱합을 최소화 하므로 k-means와 유사

```
df = sp500_px.loc[sp500_px.index >= '2011-01-01', ['XOM', 'CVX']]
fig, axes = plt.subplots(nrows=2, ncols=2, figsize=(5, 5))
for i, method in enumerate(['single', 'average', 'complete', 'ward']):
    ax = axes[i // 2, i % 2]
    Z = linkage(df, method=method)
    colors = [f'C{c+1}' for c in fcluster(Z, 4, criterion='maxclust')]
    ax = sns.scatterplot(x='XOM', y='CVX', hue=colors, style=colors, size=0.5, ax=ax, data=df, legend=False)

ax.set_xlim(-3, 3)
    ax.set_ylim(-3, 3)
    ax.set_title(method)

plt.tight_layout()
plt.show()
```



▼ 7.4 모델 기반 클러스터링

k-means, 계층적 클러스터링은 **휴리스틱**한 방법 모델 기반 클러스터링은 **통계 이론에 기초하고 클러스터의 성질과 수를 결정하는데 엄격한 방법은 제공**

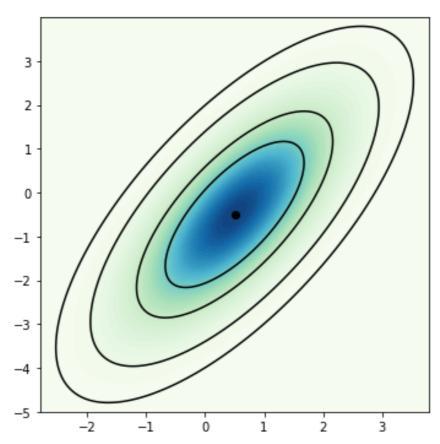


휴리스틱(heuristics) 또는 **발견법**(發見法)이란 불충분한 시간이나 정보로 인하여 합리적인 판단을 할 수 없거나, 체계적이면서 합리적인 판단이 굳이 필요하지 않은 상황에서 사람들이 빠르게 사용할 수 있게 보다 용이하게 구 성된 간편추론의 방법이다.

- 대부분 모델 기반 클러스터링 방법은 모두 다변량 정규분포를 따름
- 다변량 정규 분포는 p개의 변수 집합 $X_1, X_2, ... X_p$ 에 대해 정규분포를 일반화 한 것
- 모델 기반 클러스터링의 핵심 아이디어는 각 레코드가 k개의 다변량정규분포 중 하나로부터 발생했다고 가정하는 것, 각 분포는 서로다른 평균과 공분산행렬을 갖는다. (정규혼합)

※ 예제

```
# 다변량 정규 분포 예시
mean = [0.5, -0.5]
cov = [[1, 1], [1, 2]]
probability = [.5, .75, .95, .99]
def probLevel(p):
   D = 1
    return (1 - p) / (2 * math.pi * D)
levels = [probLevel(p) for p in probability]
fig, ax = plt.subplots(figsize=(5, 5))
x, y = np.mgrid[-2.8:3.8:.01, -5:4:.01]
pos = np.empty(x.shape + (2,))
pos[:, :, 0] = x; pos[:, :, 1] = y
rv = multivariate_normal(mean, cov)
CS = ax.contourf(x, y, rv.pdf(pos), cmap=cm.GnBu, levels=50)
ax.contour(CS, levels=levels, colors=['black'])
ax.plot(*mean, color='black', marker='o')
plt.tight_layout()
plt.show()
```

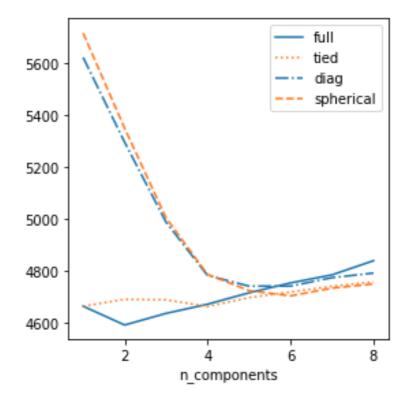


모델 기반 클러스터링의 목적은 <u>데이터를 가장 잘 설명하는 다변량 정규분포를 찾는 것</u>, 그림과 같은 등 고선을 보면 **정규분포 모양을 갖고 있는 것 처럼 보임**

※ 클러스터 개수 결정

k-means나 계층적 클러스터링과 달리 모델 기반 클러스터링은 클 러스터 수를 자동으로 선택

베이즈 정보기준(BIC) 값이 가장 큰 클러스터의 개수를 선택하도록 동작하기 때문!



- 최상의 다변량 정규분포를 결정하기 위해서는 공분산행렬을 모수화하는 여러가지 방법들이 있기 때문에 여러 모델을 사용한다.
- 위 그림에서 BIC에 따르면 full, spherical 두가지 모델이 4가지 구성요소를 사용할 때 가장 적합??
- 하지만 모델 기반 클러스터링 기술에는 몇가지 한계점이 있음
 - 데이터들이 모델을 따른다는 가정이 필요하며 결과는 이 가정에 따라 매우 다름
 - 필요한 계산량 역시 계층적 클러스터링보다 높으므로 대용량 데이터로 확장하기 어려움

。 알고리즘이 다른 방법들보다 더 복잡하고 이용하기 어려움

▼ 7.5 스케일링과 범주형 변수

비지도 학습 기술을 이용할 때는 일반적으로 데이터를 적절하게 스 케일 해야함



스케일링 : 데이터의 범위를 늘리거나 줄이는 방식으로 여러변수들이 같은 스케일에 나오게 하는 것

정규화 : 원래 변수 값에서 평균을 뺀 후에 표준편차로 나누는 방법(유의어 : 표준화)

고워 거리 : 수치형과 범주형 데이터가 섞여 있을 경우 모든 변수가 0~1 사이로 나오도록 하는 것

- 예를 들어 어떤 변수는 상대적으로 작은 값인 반면 다른 변수는 매우 큰 값을 갖게 된다면 PCA, k-means 혹은 기타 클러스터링 방법은 큰 값을 갖는 변수들에 좌우되고 작은 값을 갖는 변수는 무시됨
- 범주형 데이터는 일반적으로 원-핫인코딩을 사용하여 이진 변수 집합으로 변환하는 데 이러한 이진변수는 다른 데이터와 스케일이 다를 뿐만 아니라 PCA, k-means와 같은 기법을 사용할 때 이진 변수가 두 가지의 값만 가질 수 있다는 것 때문에 문제가 될 수 있음

※ 예제1(정규화)

```
loan amnt
                annual inc
                             revol bal open acc
                                                        dti
0 18275.132345 83354.634595 19635.189254 11.664373 16.774586
 21852.701005 165407.730318 38907.295645 12.597152 13.466876
 10591.893792 42453.058692 10268.048598 9.583820 17.713563
3 22570.192308 489783.403846 85161.346154 13.326923 6.907500
  revol_util size
0
  62.258588 7543
1
   63.634900 1194
   58.111226 13882
3 59.651923
                52
```

큰 값을 가지는 annual_inc, revol_bal이 클러스터링 결과를 좌우함 클러스터 3에는 비교적 높은 소득(annual_inc)와 높은 회전 신용잔고(revol_bal)을 가진 52명만 포함 됨

```
loan amnt
                annual inc
                               revol bal
                                          open acc
                                                         dti
 10499.824632 51070.958451 11629.172535 7.511129 15.965747
 10315.255666 53468.181307
                            6032.616033
                                          8.637385 11.255855
  25920.260952 116308.326663 32827.641428 12.389941 16.204021
 13420.700048 55844.852918 16370.832021 14.334512 24.189881
  revol util size
0
  77.806693 7405
 31.000342 5339
1
2
 66.172004 3701
3 59.227862 6226
```

annual_inc와 revol_bal에 큰 영향을 받지 않고 클러스터 4개에 적절히 분배되어 있는 결과를 확인할수 있음

※ 예제2(지배변수)

```
# 구글과 아마존 주가를 추가한 주가 (PCA에서 사용)
syms = ['GOOGL', 'AMZN', 'AAPL', 'MSFT', 'CSCO', 'INTC', 'CVX', 'XOM',
```

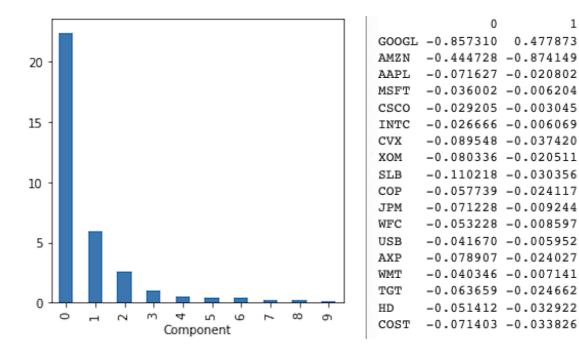
```
'SLB', 'COP', 'JPM', 'WFC', 'USB', 'AXP', 'WMT', 'TGT', 'HD', 'COST']
top_sp1 = sp500_px.loc[sp500_px.index >= '2005-01-01', syms]

sp_pca1 = PCA()
sp_pca1.fit(top_sp1)

explained_variance = pd.DataFrame(sp_pca1.explained_variance_)
ax = explained_variance.head(10).plot.bar(legend=False, figsize=(4, 4))
ax.set_xlabel('Component')

plt.tight_layout()
plt.show()

loadings = pd.DataFrame(sp_pca1.components_[0:2, :], columns=top_sp1.columns)
print(loadings.transpose())
```



- 스크리그래프는 첫번째 주성분에 대한 분산 표시, 하나 혹은 두개의 변수가 전체를 지배하는 것을 나타냄
- 오른쪽 수치에서는 GOOGL, AMZN에 의해 거의 완전 지배되고 있는 것을 확인할 수 있음
- 이러한 경우에는 변수 스케일링을 포함하거나, 지배 변수를 전체 분석에서 제외하고 별도 처리 할 수도 있음 → 어떤 방법이 항상 옳다고는 할수 없음
- ※ 예제3(고워거리, 파이썬에서는 고워 거리 계산 지원하지 않고 있음)
 - 범주형 데이터가 있는 경우에는 순서형, 이진형 변수를 사용하여 수치형 데이터로 변환

- 연속형, 이진형 변수가 섞여 있을 경우 비슷한 스케일이 되도록 변수 크기를 조정해 야함
 - → 고워 거리 사용!



고워거리

- 수치형 변수나 순서형 요소에서 두 레코드 간의 거리는 차이이의 절댓값 (맨해튼 거리)으로 계산
- 범주형 변수의 경우 두 레코드 사이의 범주가 서로 다르면 거리가 1이고 범주가 동일하면 거리는 0
- ※ 계산 방식
- 1. 각 레코드 변수 i와 j의 모든 쌍에 대해 거리 $d_{i,j}$ 를 계산한다
- 2. 각 $d_{i,j}$ 의 크기를 최솟값이 0이고 최댓값이 1이되도록 스케일을 조정한다
- 3. 거리 행렬을 구하기 위해 변수 간에 스케일된 거리를 모두 더한 후 평균 혹은 가중 평균을 계산

▼ 7.6 마치며

- 주성분 분석과 k-means 클러스터링은 수치형 데이터의 차원을 축소하기 위해 주로 사용되는 방법이므로 의미 있는 데이터 축소를 보장하기 위해서는 데이터 스케일을 적절히 조정해야함
- k-means는 매우 큰 데이터로 확장이 가능하고 이해하기 쉽다
- 계층적 클러스터링은 수치형과 범주형이 혼합된 데이터 유형에 적용이 가능하며 직 관적인 시각화 방법이 존재함(덴드로그램)
- 모델 기반 클러스터링은 통계 이론에 기초를 두고 있으며 엄밀한 접근방식을 제시