

평균내부거리를 이용한 데이터 분류에 관한 연구

유 현 재* · 김 문 수 · 조 석 제

A Study on the Data Classification Using
Average Intracluster Distance

Hyun-Jai You* · Mun-su Kim · Seok-Je Cho

abstract

This paper presents an approach which classifies more accurately clusters for the data sets being different size cluster. We have more degree of membership to the large cluster and less degree of membership to the small cluster by the size of cluster. In the proposed algorithm, the internal data in the average intracluster distance was given the degree of membership more than 1. So we assume the data is proper. FCM is given the degree of membership depends on the distance between data and the center of cluster. But in the proposed algorithm, the center searching was improved about different size cluster by giving the degree of membership using the distance from each data to intracluster.

1. 서 론

클러스터링이란 주어진 데이터 집합의 패턴들을 비슷한 성질을 가지는 그룹으로 나누는 방법이다[1] [2]. 지금까지 이를 위한 많은 알고리즘들이 연구되어 왔으며, 패턴인식, 영상처리[3][4] 등의 여러 공학 분야에 널리 적용되고 있다.

데이터를 분류하는 기존의 클러스터링 방법으로는 하드 클러스터링, FCM(Fuzzy

* 한국해양대학교 공과대학 제어계측공학과

C-Means)[5], PCM (Possibilistic C-Means)[6] 등의 방법이 있다. 하드 클러스터링 기법은 주어진 데이터 상호간의 관계가 명확하다는 가정 하에 각 패턴을 분할하는 방식이다. 따라서 이 방법은 다루고자 하는 데이터의 경계가 명확하지 않을 경우 실제 데이터 상호간의 군집성을 묘사하기에 부적절할 뿐만 아니라, 주어진 데이터 분포의 성질을 손실하는 결과를 초래 할 수도 있다.

이를 개선하기 위해, Bezdek은 FCM 알고리즘을 제안하였다[2][5]. FCM 알고리즘은 각 패턴이 특정 클러스터의 중심에 속하는 소속정도를 줌으로써 보다 정확한 정보를 획득하도록 하였다. 하지만 FCM 알고리즘은 데이터로부터 각 클러스터들에 대한 소속정도의 합이 1이 되는 확률적 제약조건(probabilistic constraint)을 이용하므로 소속 함수 값이 belonging이나 compatibility의 정도의 직관적인 개념과 항상 일치하지는 않는다. 따라서, 최근에 믿음 이론(belief theory)과 가능성 이론(possibility theory)등이 이와 같은 문제점을 개선하기 위해 연구되어져 왔다.

Raghav[6]는 PCM(Possibilistic C-Means) 알고리즘을 제안하였다. 이 방법은 소속정도의 값이 다른 클러스터와 관계가 없고, 각 패턴과 해당 클러스터 중심간의 거리에만 의존하기 때문에 위의 문제점을 개선할 수 있었다. 그러나 PCM 알고리즘은 각 영역에 해당하는 클러스터들의 크기와 초기 중심 값을 사전에 알아야함으로 스케일 공간 필터링 Scale Space Filtering[8]과 같은 전처리 과정이 필요하다[7][8].

FCM 방법은 각 패턴이 클러스터의 중심에 속하는 소속정도를 부여함으로 패턴으로부터 각 클러스터 중심까지의 거리가 같으면 같은 소속정도를 가진다. 그러므로 중심 탐색에 있어 클러스터의 크기가 다른 경우 문제점이 발생한다. 이러한 문제점을 해결하기 위해 평균내부거리를 이용한 클러스터링 방법을 제안한다.

제안된 알고리즘은 각 패턴들로부터 내부클러스터까지의 거리에 의해 소속정도를 부여하고 중심을 탐색한다. 내부클러스터는 평균내부거리 안에 속하는 패턴들의 집합을 말하며 클러스터의 크기와 밀도에 비례하게 된다. 그 결과 소속정도를 클러스터의 크기에 상관없이 균일하게 부여하므로 중심 탐색 능력을 향상시킬 수 있었다. 또한 제안된 알고리즘의 분류 성능을 평가하기 위하여 CE(Classification Entropy)와 Xie-Beni의 타당성 측정함수를 사용하였다[9][10].

2. 클러스터링 알고리즘

데이터 집합을 분류하기 위해 폭넓게 이용되는 방법으로 FCM과 PCM 알고리즘이 있다. 이 방법들은 각 데이터로부터 중심값과의 거리를 고려한 유사도 측정에 기초한 목적함수를 가진다. 그리고 목적함수가 최소화되도록 하는 조건을 만족하는 퍼지분할

과 가능성분포를 구하여 데이터 집합을 분류한다.

2.1 FCM(Fuzzy C-Means) 알고리즘

FCM 알고리즘은 식(1)과 같이 각 데이터와 각 클러스터 중심과의 거리를 고려한 목적함수를 최소화 할 수 있도록 데이터 집합을 분류한다.

$$J_m(U, V) = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^c (u_{ij})^m \|x_j - v_i\|^2 \quad (1)$$

$$\text{where } \sum_{i=1}^c u_{ij} = 1 \text{ for all}$$

여기서 n 은 데이터의 개수, c 는 클러스터의 개수이고 $m \in [1, \infty]$ 은 퍼지 정도를 나타내는 가중치 지수이다. $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 인 데이터 벡터 집합과 $V = \{v_1, v_2, \dots, v_c\}$ 인 클러스터 중심들 사이의 소속정도를 $c \times n$ 인 행렬 U 로 나타낼 수가 있다.

$$u_{ij} = \left\{ \sum_{k=1}^c \left(\frac{d_{ij}}{d_{kj}} \right)^{\frac{2}{(m-1)}} \right\}^{-1} \text{ where } d_{ij} = \|v_i - x_j\|, \quad i=1, 2, \dots, c, j=1, 2, \dots, n \quad (2)$$

$$v_i = \frac{\sum_{j=0}^n (u_{ij})^m x_j}{\sum_{j=0}^n (u_{ij})^m} \quad (3)$$

여기서 m 이 1보다 큰 경우에 모든 i, j 에 대해서 $v_i \neq x_j$ 를 만족한다고 가정하면 위의 식을 만족할 때만 (U, V) 가 J_m 의 최소화를 가능하게 한다. FCM 알고리즘은 식(2)와 식(3)의 과정을 반복하므로 J_m 은 어떤 정해진 값에 수렴하게 된다. 그러나, FCM은 데이터로부터 중심까지의 거리에 의해 소속정도를 부여하므로 클러스터의 크기가 다른 경우 퍼지분할과 중심탐색에 있어 오류를 발생하게 된다.

2.2 PCM(Possibilistic C-Means) 알고리즘

PCM 알고리즘은 식(4)와 같이 데이터로부터 중심사이의 거리와 해당 클러스터에 속하지 않을 가능성을 최소화 할 수 있도록 데이터 분류를 한다.

$$J_m(U, V) = \sum_{i=1}^c \sum_{j=1}^n (u_{ij})^m \|x_j - v_i\|^2 + \sum_{i=1}^c \eta_i \sum_{j=1}^n (1 - u_{ij})^m \quad (4)$$

여기서 η_i 는 클러스터의 전체 모양과 크기에 관계되는 정보이며, 해당 클러스터에 속

하지 않을 소속정도의 가중치가 된다. 목적함수 J_m 의 전역 최소치를 만족하는 U 는 식(4)를 u_{ij} 에 대해 미분하고 미분치를 0으로 놓을 때 다음 식을 얻을 수 있다.

$$u_{ij} = \{1 + \left(\frac{d_{ij}^2}{\eta_i}\right)^{\frac{1}{(m-1)}}\}^{-1} \quad (5)$$

PCM 알고리즘은 식(3), 식(5)을 반복 수행하여 목적함수의 최소치를 만족하는 가능성 분포를 구할 수가 있다.

가능성 분포를 나타내는 PCM 알고리즘의 성능은 기존의 방법보다 우수하다. 그러나 각 해당 클러스터의 크기 η_i 를 알아야하기 때문에 FCM이나 스케일 필터링과 같은 전처리 과정이 필요하고 초기중심값이 명확하지 않으면 발산하는 문제점이 있다.

3. 평균내부거리를 이용한 퍼지 클러스터링

기존의 FCM 알고리즘은 속성 데이터로부터 클러스터 중심 사이의 거리를 가능한 작게 하는 방향으로 소속정도를 부여하므로 클러스터의 크기가 다른 경우 퍼지분할과 중심탐색에 있어 문제점을 발생시킨다. 이러한 문제점을 개선하기 위해 평균내부거리 를 이용한 퍼지 클러스터링 방법을 제안하였다. 이 방법은 먼저 평균내부거리 안쪽에 속하는 데이터들의 집합을 내부 클러스터라 정의한다. 그리고 각 데이터로부터 내부클러스터까지의 거리에 의존하여 소속정도를 구함으로 클러스터의 크기에 상관없이 균일한 소속정도를 부여할 수가 있었다. 그림 1는 이것을 잘 보여주고 있다.

C_1 과 C_2 는 각 클러스터의 중심, a 와 b 는 각 클러스터의 평균내부거리, 그리고 d_1 과 d_2 는 데이터로부터 클러스터 중심까지의 거리를 나타낸다. 그리고 X_1 , X_2 는 동일한 소속정도를 가지는 위치를 보여주고 있다. 그림 1에서 PCM 알고리즘의 X_2 는 C_1 에 가깝게 위치하고 있지만 동일한 가능성정도를 부여한다. 이것은 가능성정도를 내부클러스터의 크기에 비례하여 부여하기 때문이다. 그러나 PCM 알고리즘은 평균내부거리보다 멀리 있는 데이터에 대해서는 아주 작은 가능성정도를 부여하기 때문에 중심탐색에 별 영향을 미치지 않는다. FCM 알고리즘에서 X_1 은 큰 클러스터에 가깝게 위치하고 있지만 동일한 소속정도를 부여한다. 이것은 FCM 알고리즘이 특징 벡터로부터 중심 까지의 거리에 의해 소속정도를 부여하기 때문이다. 이러한 문제점은 경계영역에 있는 데이터에 대해 오분류를 하게 할 뿐 아니라, 상대적으로 작은 클러스터를 찾지 못하게 된다. 하지만 제안된 알고리즘에서는 평균내부 클러스터의 크기를 고려함으로 클러스터의 크기가 다르더라도 균일한 소속정도를 부여할 수 있었다.

제안된 알고리즘의 목적함수는 평균내부거리를 고려한 각 특징벡터로부터 클러스터

중심까지의 거리를 제곱한 함수로 내부클러스터로부터 데이터에 이르는 분산정도를 최소화하도록 하는 조건을 만족하는 소속정도를 부여하게 된다. 제안된 목적함수와 평균내부거리는 다음과 같다.

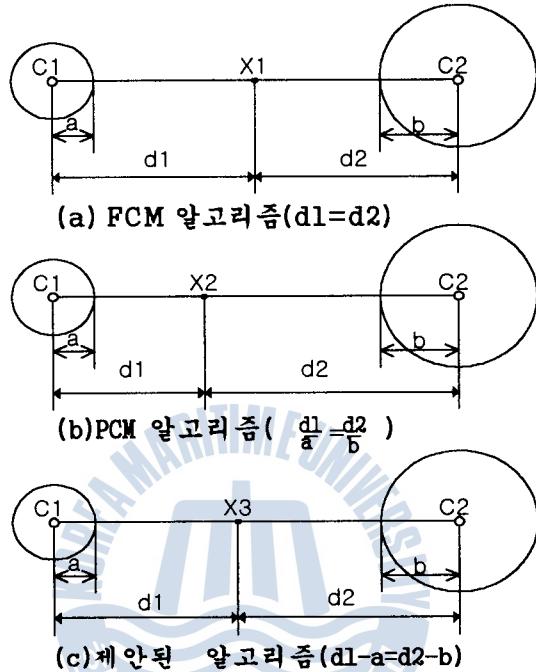


그림 1 두 개의 클러스터를 가지는 데이터 집합소속정도가 같은 경우의 FCM, PCM, 제안된 알고리즘의 비교((a), (b), (c))

3.1 목적함수

제안된 알고리즘의 목적함수는 각 데이터로부터 각 내부클러스터까지의 거리를 최소로 하는 응집성을 고려하여 데이터 집합을 분할하도록 설계된다. 정의된 목적함수는 식 (6)과 같다. 여기서 η_i 는 적당한 양의 정수로 내부클러스터의 크기를 나타내는 것이다. 이에 대한 내용은 다음 절에서 언급하도록 하겠다.

$$J_m(U, V) = \sum_{i=1}^c \sum_{j=1}^n (u_{ij})^m \|x_j - v_i\|^2 - \sum_{i=1}^c \sum_{j=1}^n \eta_i (u_{ij})^m \quad (6)$$

$$\text{where } \sum_{i=1}^c u_{ij} = 1 \text{ for all}$$

위의 식에서 첫 번째 항은 측정 데이터로부터 클러스터 중심사이의 거리를 가능한 작게 유지하도록 하고, 두 번째 항은 각 내부 클러스터의 크기만큼 보정해 주도록 한다. 그러므로 목적함수를 최소화 하는 조건을 만족하는 소속정도 u_{ij} 를 클러스터의 크기에 따라 균일하게 부여할수 있도록 하였다. $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 는 특징 벡터의 집합, $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ 는 클러스터의 중심 벡터의 집합, $U = [u_{ij}]$ 는 특징 벡터와 클러스터 중심 사이의 유사성을 나타내는 $c \times n$ 행렬의 소속정도를 나타낸다. 그리고 m 은 페지 가중치 정도를 나타내며, m 이 무한대로 갈수록 소속정도는 최대로 페지화된 값을 가지게 된다. m 이 1보다 큰 경우, 모든 i, j 에 대해서 $v_i \neq x_j$ 를 만족한다고 가정하고, J_m 을 최소화 하는 조건은 다음과 같다.

$$u_{ij} = \left\{ \sum_{k=1}^c \left(\frac{d_{ij} - \eta_i}{d_{kj} - \eta_k} \right)^{\frac{2}{(m-1)}} \right\}^{-1} \quad (7)$$

$$\text{where } d_{ij} = \|v_i - x_j\|, \quad i=1, 2, \dots, c, \quad j=1, 2, \dots, n$$

제안된 알고리즘은 식 (3)와 식 (7)의 과정을 반복하므로 J_m 은 어떤 정해진 값에 수렴하게 된다.

3.2 평균내부거리

평균내부거리(average intraccluster distance) η_i 는 해당 클러스터의 크기와 밀도에 관한 정보로 클러스터의 크기에 따라 다른 값을 가지게 된다. Krishnapuram은 η_i 를 식 (8)과 식 (9)를 이용하여 추정하였다. 그리고 η_i 는 페지 분할을 먼저 실행하고 페지 분할로부터 얻은 정보를 가지고 구할 수가 있다.

$$\eta_i = K \frac{\sum_{j=1}^n (u_{ij})^m d_{ij}^2}{\sum_{j=1}^n (u_{ij})^m} \quad (8)$$

여기서 K 는 보통 1보다 작은 값을 선택하게 된다.

$$\eta_i = \frac{\sum_{x_j \in (\Pi_i)_\alpha} d_{ij}^2}{|(\Pi_i)_\alpha|} \quad (9)$$

여기서 Π_i 는 특징 벡터가 i 번째 클러스터에 속할 소속정도의 집합을 나타내고

$(\Pi_i)_a$ 는 적절한 수준의 $a - cut$ 이다. 즉 a 를 높게 설정함으로 i 번째 클러스터에 속할 가능성이 높은 특징 벡터들의 평균거리가 될 것이다. 그리고 d_{ij} 는 i 번째 클러스터의 중심으로부터 j 번째 특징벡터 사이의 거리이다.

3.3 제안된 알고리즘의 수행 절차

제안된 알고리즘의 수행 절차는 다음과 같다.

단계 1 : 초기 클러스터의 개수와 퍼지가중치 정도를 결정한다. ($2 \leq c < n$, $1 < m < \infty$)

단계 2 : 다음 조건을 만족하는 퍼지 c 분할 $U^{(0)}$ 을 초기화한다.

$$\sum_{i=1}^c u_{ij} = 1, \quad 0 < \sum_{j=1}^n u_{ij} < n; \quad 1 \leq i \leq c, 1 \leq j \leq n$$

단계 3 : 각 클러스터에 대한 중심값 $v_i^{(l)}$ 을 구한다. ($l = 0, 1, 2, \dots$)

$$v_i = \frac{\sum_{j=0}^n u_{ij}^{(l)m} x_k}{\sum_{j=0}^n u_{ij}^{(l)m}}$$

단계 4 : 평균내부거리 η_i 를 구한다.

$$\eta_i = K \frac{\sum_{j=1}^n (u_{ij})^m d_{ij}^2}{\sum_{j=1}^n (u_{ij})^m}$$

단계 5 : 퍼지 c 분할 $U^{(l+1)}$ 을 계산한다.

단, $\eta_i \neq d_{ij}$ 일 때,

단계 6 : 만약 $\| U^{(l+1)} - U^{(l)} \| \leq \epsilon$ 이면 알고리즘을 종료하고 그렇지 않으면 단계 3으로 이동하여 반복 수행한다.

4. 실험 및 고찰

실험에 사용된 데이터 집합은 경계영역의 분류가 애매한 3가지 유형의 데이터 집합을 사용한다. 각 데이터 집합들은 2차원으로 구성되어 있고 크기가 서로 다른 두 개의

클러스터로 이루어져 있다. 클러스터링 된 데이터 집합의 타당성을 보이기 위해 CE 측정함수와 Xie-Beni의 타당성 측정함수를 사용한다. CE 측정함수는 각 패턴들이 클러스터의 중심에 밀집해 있는 정도를 가지고 판단한다. 다음은 Bezdek에 의해 정의된 타당성 측정함수이다[5].

$$CE = -\frac{1}{n} \left\{ \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^c [u_{ij} \log_a(u_{ij})] \right\} \quad (10)$$

여기서 $a \in (1, \infty)$ 이고, 데이터가 잘 분류될수록 CE는 작은 값을 가진다. Xie-Beni의 타당성 측정함수는 다음과 같다[9].

$$S = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^c u_{ij}^2 \|x_i - v_j\|^2}{n(\min_{i \neq j} [\|v_i - v_j\|])} \quad (11)$$

여기서 분자는 응집성을 나타내고 분모는 분리성을 나타낸다. 그러므로 S값이 작을수록 데이터가 잘 분류되었다고 할 수 있다.

1) 실험 데이터 집합 A

데이터 집합 A는 응집성만을 고려하여 설계된 FCM의 경우 Cluster 1은 Cluster 2의 영향을 많이 받아 중심 값이 오른쪽으로 이동해 있음을 알 수 있다. 그러나 제안된 알고리즘은 클러스터의 크기에 따라 소속 정도를 보정해 줄 수 있도록 설계되었기 때문에 상대적으로 작은 클러스터에 대해서도 중심 값을 잘 찾아가고 있음을 보여준다. PCM은 초기 값으로 각 클러스터의 타당한 중심 값과 크기를 설정해 주어야 하기 때문에 전처리 과정이 필요했고 본 논문에서는 FCM에서 구한 중심 값과 Krishnapuram이 제안한 식(5)를 사용하여 평균 내부 거리를 구하였다. 표 1은 데이터 집합 A를 제안된 방법과 각 클러스터링 기법과의 성능을 비교하고 있다. FCM은 11번 째 열의 7개의 패턴이 Cluster1으로 오분류함을 알 수 있었다.

2) 실험 데이터 B

그림 3에서 데이터 집합 B는 경계영역에 속한 X1(10, 6)과 같은 애매한 패턴의 분류를 보여주고 있다. 표 2에서 알 수 있듯이 FCM은 상대적으로 작은 Cluster 1에 많은

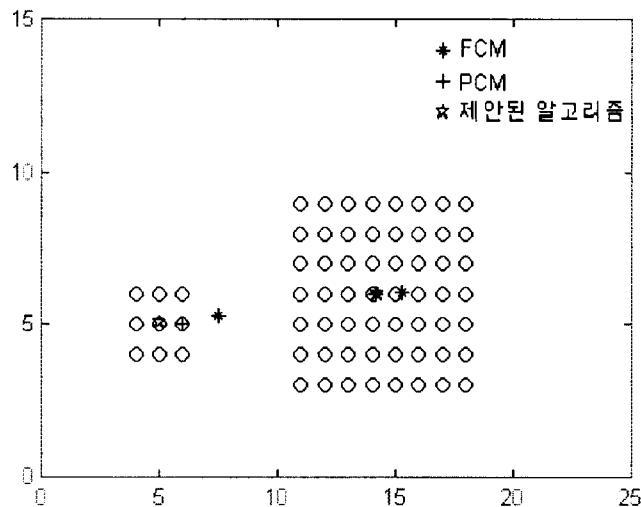


그림 2 데이터 집합 A

표 1. 각 클러스터링 기법의 성능 비교(집합A)

	FCM	PCM	제안된 방법
클러스터1의 중심	7.51, 5.28	5.91, 5.03	5.02, 5.06
클러스터2의 중심	15.26, 6.06	14.13, 5.99	14.22, 6.04
Misclassification	7	0	0
CE	0.2530	unavailable	0.2069
S	0.1058	unavailable	0.0673

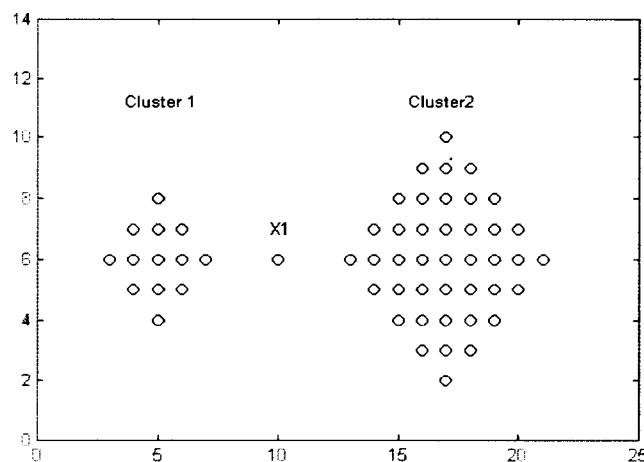


그림 3 데이터 집합 B

표 2. 패턴 X1의 소속 정도(집합 B)

소속정도	FCM	제안된
U11	0.6135	0.4485
U12	0.3865	0.5514

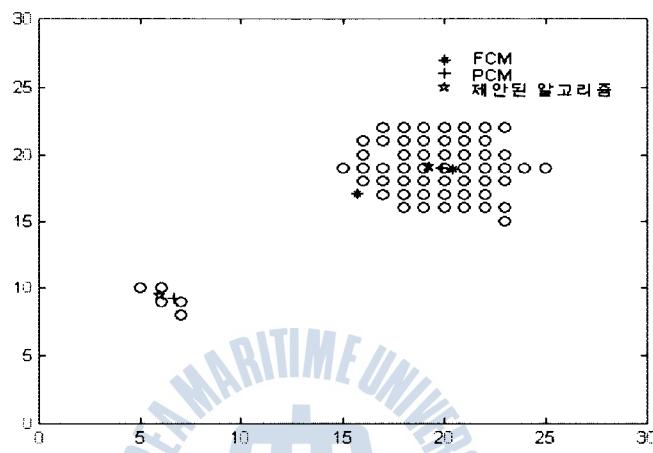


그림 4 데이터 집합 C

소속정도를 부여하고 제안된 알고리즘은 큰 Cluster2에 많은 소속정도를 부여하고 있다. 그러므로 FCM은 중심값이 큰 클러스터 쪽으로 이동하는 오류를 발생하게 된다. PCM은 내부 중심거리보다 멀리 떨어진 데이터에 대해서는 아주 낮은 소속정도를 주어 잡음으로 간주하여 비교할 필요가 없을 것이다.

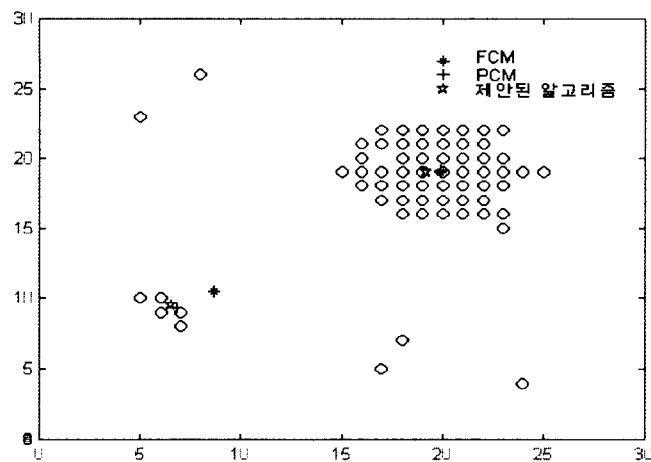


그림 5 데이터 집합 D

표 3 잡음 첨가 전후의 중심 값(집합 C, D)

	Cluster	FCM	PCM	제안된 방법
잡음 첨가 전	C1	(15.75, 17.07)	(6.65, 9.23)	(5.97, 9.44)
	C2	(20.46, 18.94)	(19.90, 19.02)	(19.29, 19.06)
잡음 첨가 후	C1	(8.65, 10.49)	(6.80, 9.32)	(6.54, 9.54)
	C2	(19.88, 18.96)	(19.86, 19.08)	(19.20, 19.01)
중심값의 이동거리	C1	9.6802	0.1749	0.5787
	C2	0.5803	0.7211	0.1029

3) 실험 데이터 C, D

데이터 집합 C와 D는 제안된 알고리즘의 성능을 측정하기 위하여 잡음이 첨가되지 않은 경우와 첨가된 경우를 보여주고 있다. 그림 4에서는 크기가 다른 두 클러스터에 대해 FCM이 잘못된 중심 값을 찾고 있음을 보여준다. 그러나 제안된 알고리즘과 PCM은 클러스터의 크기에 상관없이 중심 값을 잘 찾아감을 알 수가 있다. 그림 5에서는 잡음이 첨가된 경우를 보여주며 FCM은 잡음의 영향으로 중심 값이 많이 이동하고 있음을 알 수가 있다. 표 3에서는 잡음이 첨가되기 전, 후의 중심 값을 보여주고 있다. 제안된 알고리즘은 상대적으로 크기가 다른 클러스터가 존재하거나 잡음이 첨가된 경우에도 개인한 특성을 가짐을 알 수 있다.

5. 결론 및 향후 과제

본 논문에서는 각 클러스터의 크기가 다른 데이터집합에 대해서 소속정도를 균일하게 부여하는 평균내부거리를 이용한 퍼지 클러스터링 알고리즘을 제안하였다. 기존의 퍼지 클러스터링 방법은 각각의 패턴으로부터 클러스터 중심까지의 거리에 의존하게 되므로 상대적으로 작은 클러스터에 대해서도 많은 소속정도를 부여하게 된다. 이러한 문제점을 해결하기 위하여 각 데이터로부터 내부클러스터까지의 거리로 소속정도를 부여하였다. 그 결과 상대적으로 작은 클러스터에 대해서도 데이터 분류와 중심 탐색을 잘 하고 있음을 알 수 있었다. 제안된 알고리즘은 패턴 인식이나 영상처리 등 여러 분야에 적용할 수 있을 것이다.

참 고 문 헌

- [1] H. Rhee and K. Oh, "A Design and Analysis of Objective Function-Based

- Unsupervised Neural Networks of Fuzzy Clustering," *Neural Processing Letters* Vol.4, pp. 83-95, 1996.
- [2] James C. Bezdek, "A convergence theorem for the fuzzy ISODATA clustering algorithms," *IEEE Trans. on Patt. Anal. and Mach. Intell.*, Vol. PAMI-2, No. 1, pp. 1-8, Jan. 1980.
- [3] D. N. Chun, "A Method of Clustering and Image Segmentation Based on Fuzzy Genetic Algorithm", Department of Computer Science. KAIST, pp. 26-34, 1996.
- [4] J. C. Bezdek and M. M. Rrivedi, "Low level segmentation of aerial images with fuzzy clustering, " *IEEE Trans. on Fuzzy Sys.*, Man, Cybert, Vol. SMC- 16, No. 4, pp. 589-598, 1986.
- [5] N. Pal and J. Bezdek, "On Cluster Validity for the Fuzzy C-Means Model," *IEEE Trans. on Fuzzy Sys.*, Vol. 3, No. 3, 1995.
- [6] R. Krishnapuram, H. Frigui and O. Nasraoui," Fuzzy and Possibilistic shell Clustering algorithms and their application to boundary detection and surface approximation," *IEEE Trans. on Fuzzy Sys*, Vol. 3, No. 1, pp. 29-60. 1995.
- [7] R. Krishnapuram and J. M. Keller, "A possibili- stic approach to clustering," *IEEE Trans. on Fuzzy Sys*, Vol. 1, No. 2, pp. 98-110, 1993.
- [8] A. P. Witkin, "Scalespace filtering," Proc. IJCAI-83, pp. 1019-1022, 1983.
- [9] X. Xie and G. Beni, "A Validity Measure for Fuzzy Clustering," *IEEE Trans. on Patt. Anal. and Mach. Intell.*, Vol. 13, No. 8, pp. 841-847, 1991.
- [10] C. H. Jeong, Y. H Im and D. H Park, "Fuzzy Clustering using Evolution Program," 정보과학회논문지(B) 제26권, 제1호, pp. 130-138, 1999.