차원 축소

고차원 데이터

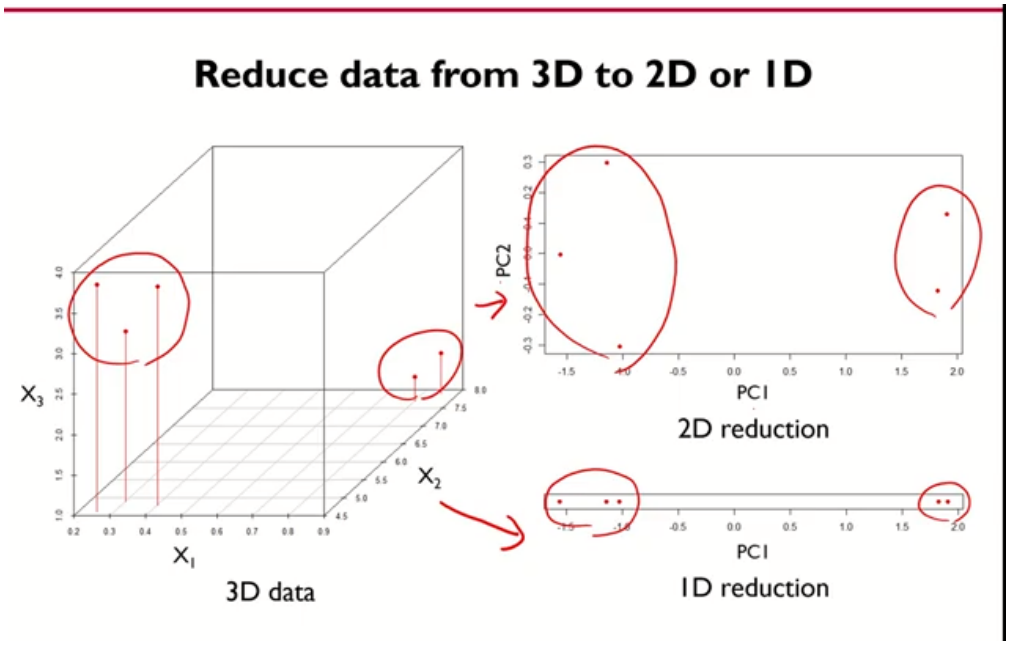
- 변수의 수가 많음 -> 불필요한 변수 존재
- 시각적으로 표현하기 어려움
- 계산 복잡도 증가 -> 모델링 비효율적
- 중요한 변수만을 선택 -> 효율적

변수선택/추출을 통한 차원 축소

- 변수 선택 : 분석 목적에 부합하는 소수의 예측변수만을 선택
  - 장점 : 선택한 변수 해석 용이
  - 단점 : 변수간 상관관계 고려 어려움
  - 지도학습 : 정보이득, stepwise, LASSO, Genetic algorithm...
  - 비지도학습 : PCA loading
- 변수 추출 : 예측변수의 변환을 통해 새로운 변수 추출
  - 장점 : 변수간 상관관계 고려, 일반적으로 변수의 개수를 많이 줄일 수 있음
  - 단점 : 추출된 변수의 해석이 어려움
  - 지도학습 : PLS
  - 비지도학습 : PCA, Wavelets transforms, Autoencoder

Principal Components Analysis(주성분분석)

- 개요
  - 고차원 데이터를 효과적으로 분석하기 위해 기존 변수의 선형조합을 이용하여 변수를 추출하는 대표적 분석 기법
  - 차원축소 -> 시각화, 군집화, 압축, 해석
  - n개의 관측치와 p개의 변수로 구성된 데이터 -> 상관관계가 없는 k개의 변수로 구성된 데이터(n개의 관측치)로 요약
  - 원래 데이터의 분산을 최대한 보존하는 새로운 축을 찾음 -> 그 축에 데이터를 사영
  - 일반적으로 PCA는 전체 분석 과정 중 초기에 사용(어떤 데이터인지 궁금할 때/모델링 할 때)



$$Z_1 = \alpha_1^T X = \alpha_{11}X_1 + \alpha_{12}X_2 + \cdots + \alpha_{1p}X_p$$
$$Z_2 = \alpha_2^T X = \alpha_{21}X_1 + \alpha_{22}X_2 + \cdots + \alpha_{2p}X_p$$
$$\vdots \qquad\qquad \vdots$$
$$Z_p = \alpha_p^T X = \alpha_{p1}X_1 + \alpha_{p2}X_2 + \cdots + \alpha_{pp}X_p$$

$X_1, X_2, \ldots, X_p$: 원래 변수 (original variable)

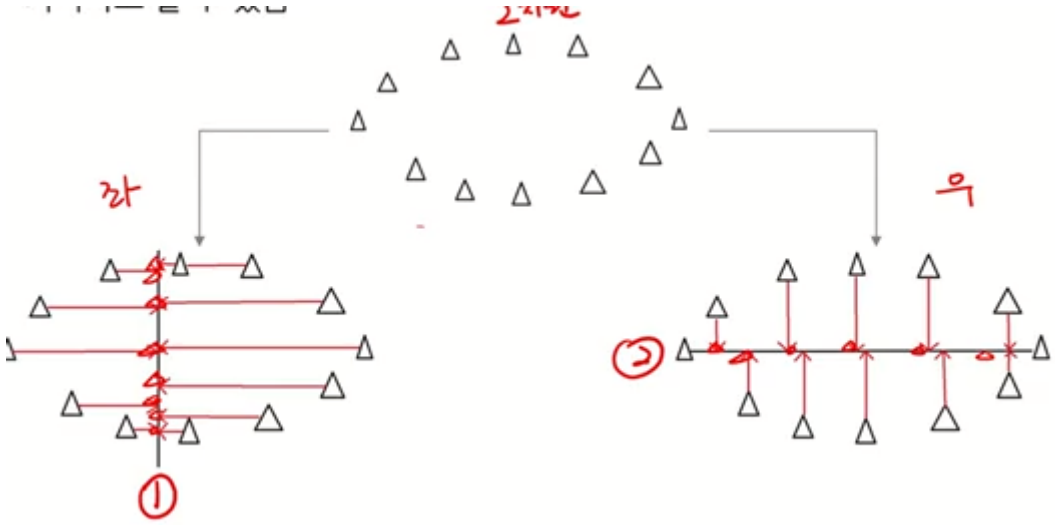
$\alpha_i = [\alpha_{i1}, \alpha_{i2}, \ldots, \alpha_{ip}]$: i 번째 기저(basis) 또는 계수 (Loading)

$Z_1, Z_2, \ldots, Z_p$: 각 기저로 사영된 변환 후 변수 (주성분, Score)

PCA 변수 추출을 이용하여 생긴 변수 -> Z1, Z2, Z3 ...
Z는 원래 변수의 모든 선형결합으로 생긴 변수 -> 각 변수마다 선형 결합의 방법(계수)가 다름
a -> 각 선형 결합에서의 계수

- 효율적인 계산을 위해 고유값과 고유벡터를 사용해서 계산하겠다!

- 아래 2차원 데이터를 두 개의 축에 사영시켰을 때, 우측 기저가 좌측 기저에 비해 손실되는 정보의 양(분산이 줄어드는 정도)가 적으므로 더 선호되는 기저



PCA 수리적 배경

- mean vector : 각 feature마다의 평균을 담고있는 벡터
- covariance matrix
  - 대각 원소 : 각 feature의 분산
    - 데이터의 분산 : 대각원소들의 합
  - 나머지 원소 : 각 feature의 공분산 -
- correlation matrix
  - 대각 원소 : 자기 자신과의 상관계수(항상 1)
  - 나머지 원소 : 각 feature의 상관계수
- **사영** : 한 벡터 b를 다른 벡터 a에 사영시킨다는 것은 b벡터로부터 a 벡터에 수직인 점까지의 길이를 가지며, 벡터 a와 같은 방향을 갖는 벡터를 찾는다는 것을 의미
  - 벡터 b를 a에 사영시켰을 때의 크기를 찾고, 벡터 a의 방향(크기를 제거한)을 곱해주면 사영 벡터

$$\left(\vec{b}-p\vec{a}\right)^T\vec{a}=0 \Rightarrow \vec{b}^T\vec{a}-p\vec{a}^T\vec{a}=0 \Rightarrow p=\frac{\vec{b}^T\vec{a}}{\vec{a}^T\vec{a}}$$

$$\vec{x}=p\vec{a}=\frac{\vec{b}^T\vec{a}}{\vec{a}^T\vec{a}}\vec{a}$$

If $\vec{a}$ is unit vector

$$p=\vec{b}^T\vec{a} \Rightarrow \vec{x}=p\vec{a}=(\vec{b}^T\vec{a})\vec{a}$$

- **고유값 및 고유벡터** : 어떤 행렬 A에 대해 상수와 벡터가 다음 식을 만족할 때, 상수와 x를 각각 행렬 A의 고유값 및 고유벡터라고 함

$$\mathbf{Ax}=\lambda\mathbf{x} \quad \rightarrow \quad (\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I})\mathbf{x}=0$$

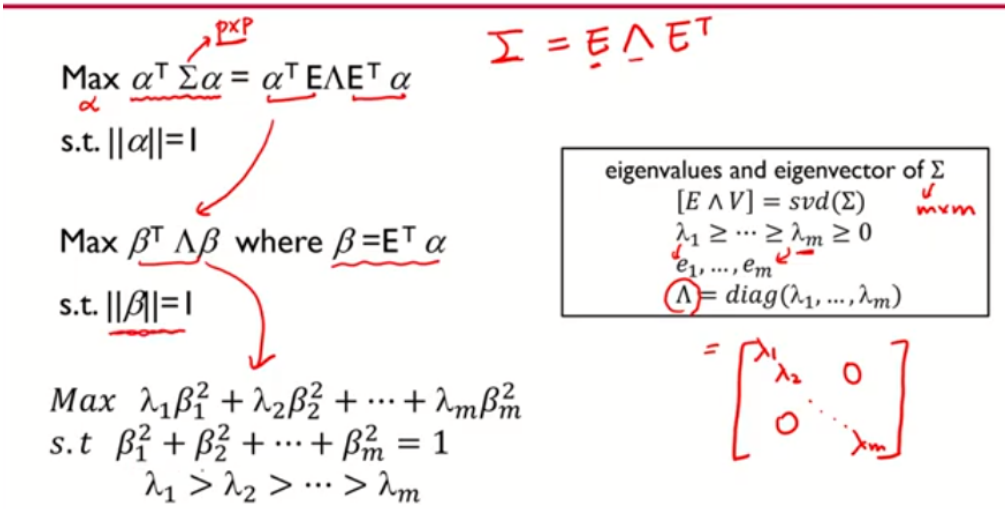
- 벡터에 행렬을 곱하여 벡터를 선형변환
- 고유벡터는 이 변환에 의해 방향이 변하지 않는 벡터
- 해당 식을 만족하는 0이 아닌 x벡터를 찾으려면, (A-aI)가 역행렬이 존재하지 않아야 함. del()의 값이 0이 되어야 함.
- 만약 A의 고유값이 존재한다면 해당 방정식의 차수가 p차수이기 때문에 p개의 고유값이 존재

PCA 알고리즘

- X의 선형결합으로 Z를 생성할건데, 이 때 Z의 분산을 최대화하는 알파를 찾겠다.
- Z는 X의 선형결합으로 이루어진다.
- Var(aTX) 에서의 aT가 Var()밖으로 나오면서 제곱의 형태로 나오게 됨 -> aTVar(X)a = at시그마a
- 제약조건 : a의 놈은 1이다.

$$\max_{\alpha} \mathrm{Var}(\mathbf{Z}) = \mathrm{Var}(\alpha^T \mathbf{X}) = \alpha^T \mathrm{Var}(\mathbf{X}) \alpha = \alpha^T \Sigma \alpha$$
$$\text{s.t. } ||\alpha|| = \alpha^T \alpha = 1$$

- E : 고유벡터를 열벡터로 하는 행렬
- 공분산행렬 : m개의 feature을 가지는 행렬
  - 대칭행렬이기 때문에 항상 고유값 분해가 가능하고
  - 고유값 분해를 했을 때, E가 직교행렬이 나옴
- ^ : 각 고유값을 대각원소로 하는 행렬



- a의 제약조건이 놈이 1인 이유 : 최대화하는 a의 조합을 찾아야 하는데, 그 때마다 a의 총합이 바뀌면 안되기 때문에
- b의 제약조건이 놈이 1인 이유도 마찬가지
- b1이 1일 때 해당 식이 최대화
- 첫번째 최적 a는 가장 큰 고유값에 대응되는 고유벡터
  - 대칭행렬이기 때문에 다른 고유벡터들과 해당 고유벡터를 곱했을 때 값 = 0
  - 고유벡터의 놈을 1로 맞추기 때문에 해당 고유벡터를 내적했을 때 값 = 1
- 두번째 최적 a는 두번째로 큰 고유값에 대응되는 고유벡터
- 세번째 최적 a는 세번째로 큰 고유값에 대응되는 고유벡터

PCA - 예제

$$\lambda_1 = 0.0786, e_1^T = [0.2590 \quad 0.5502 \quad 0.7938]$$
$$\lambda_2 = 0.1618, e_2^T = [0.7798 \quad -0.6041 \quad 0.1643]$$
$$\lambda_3 = 2.7596, e_3^T = [0.5699 \quad 0.5765 \quad -0.5855]$$

$, \mathbf{X} =$

X_1	X_2	X_3
-1.1930	-1.0300	1.5012
-0.0370	-0.7647	0.3540
-0.5919	-0.3257	-0.0910
0.3792	1.0739	-0.7140
1.4427	1.0464	-1.0502

(normalize X to $E(X_i)=0$, $Var(X_i)=1$)

$$\lambda_3 > \lambda_2 > \lambda_1$$

$$Z_1 = e_1^T X = 0.5699 \cdot X_1 + 0.5765 \cdot X_2 - 0.5855 \cdot X_3 = 0.5699 \cdot \begin{bmatrix} -1.1930 \\ -0.0370 \\ -0.5919 \\ 0.3792 \\ 1.4427 \end{bmatrix} + 0.5765 \cdot \begin{bmatrix} -1.0300 \\ -0.7647 \\ -0.3257 \\ 1.0739 \\ 1.0464 \end{bmatrix} - 0.5855 \cdot \begin{bmatrix} 1.5012 \\ 0.3540 \\ -0.0910 \\ -0.7140 \\ -1.0502 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2.1527 \\ -0.6692 \\ -0.4718 \\ 1.2533 \\ 2.0404 \end{bmatrix}$$

$$Z_2 = e_2^T X = \begin{bmatrix} -0.0615 \\ 0.4912 \\ -0.2798 \\ -0.4703 \\ 0.3204 \end{bmatrix} \qquad Z_3 = e_3^T X = \begin{bmatrix} 0.3160 \\ -0.1493 \\ -0.4047 \\ 0.1223 \\ 0.1157 \end{bmatrix}$$

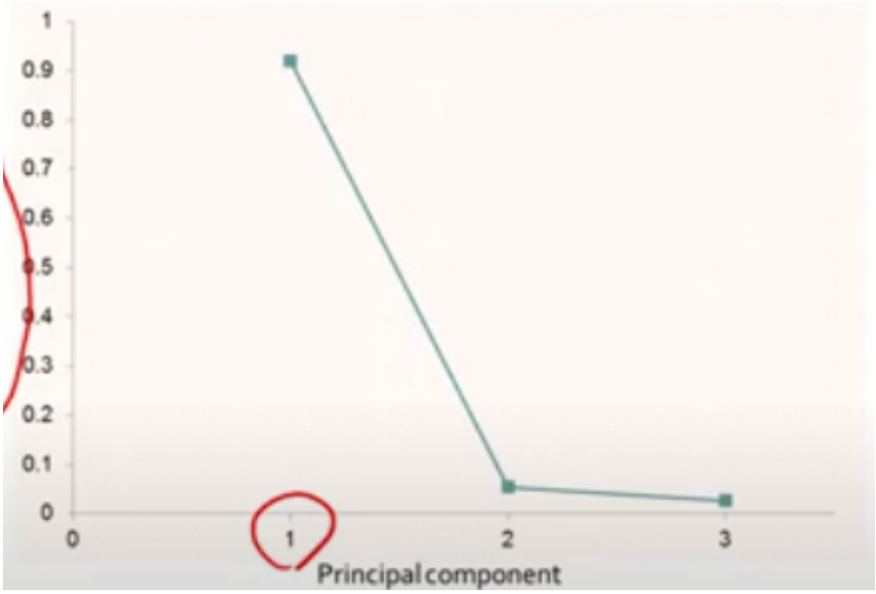
$$\therefore Z = \begin{bmatrix} -2.1527 & -0.0615 & 0.3160 \\ -0.6692 & 0.4912 & -0.1493 \\ -0.4718 & -0.2798 & -0.4047 \\ 1.2533 & -0.4703 & 0.1223 \\ 2.0404 & 0.3204 & 0.1157 \end{bmatrix}$$

- 첫번째 z는 가장 큰 고유값으로, 두번째 z는 두번째로 큰 고유값의 계수를 이용하여 선형결합을 통해 만듦
  - z간의 직교, 선형독립(각각이 하나의 축이 됨)을 만들기 위해서 각각의 고유벡터를 계수로 하는 것
  - Z의 covariance matrix의 비대각원소의 값은 0
  - 주성분(Z)들은 서로 독립(직교하기 때문에)
  - 각각 직교, 독립이어야 데이터를 가장 잘 분포시키고, 폭넓게 가장 잘 설명할 수 있음
- 이론적으로 원래 feature 개수인 p개 까지의 새로운 변수를 얻을 수 있음

주성분 선택하기

- **X의 covariance matrix의 고유값 = 각 주성분의 분산**
- 모든 고유값의 합에서 해당 주성분을 만들 때 사용한 고유값이 차지하는 비율이 큰 주성분들을 선택하면 됨.
  - 해당 비율이 전체 데이터에서 해당 주성분이 설명할 수 있는 정도(해당 주성분이 담고 있는 정보의 양)
    - 전체 feature을 사용했을 때의 총분산 -> 모든 feature을 사용하였을 때의 해당 data의 정보의 양
    - 해당 주성분의 분산 -> 해당 주성분을 사용하였을 때의 해당 data의 정보의 양
  - ex) 해당 주성분의 분산이 차지하는 비율이 90.5%라면 해당 주성분의 분산이 데이터를 설명할 수 있는 저온 90.5%

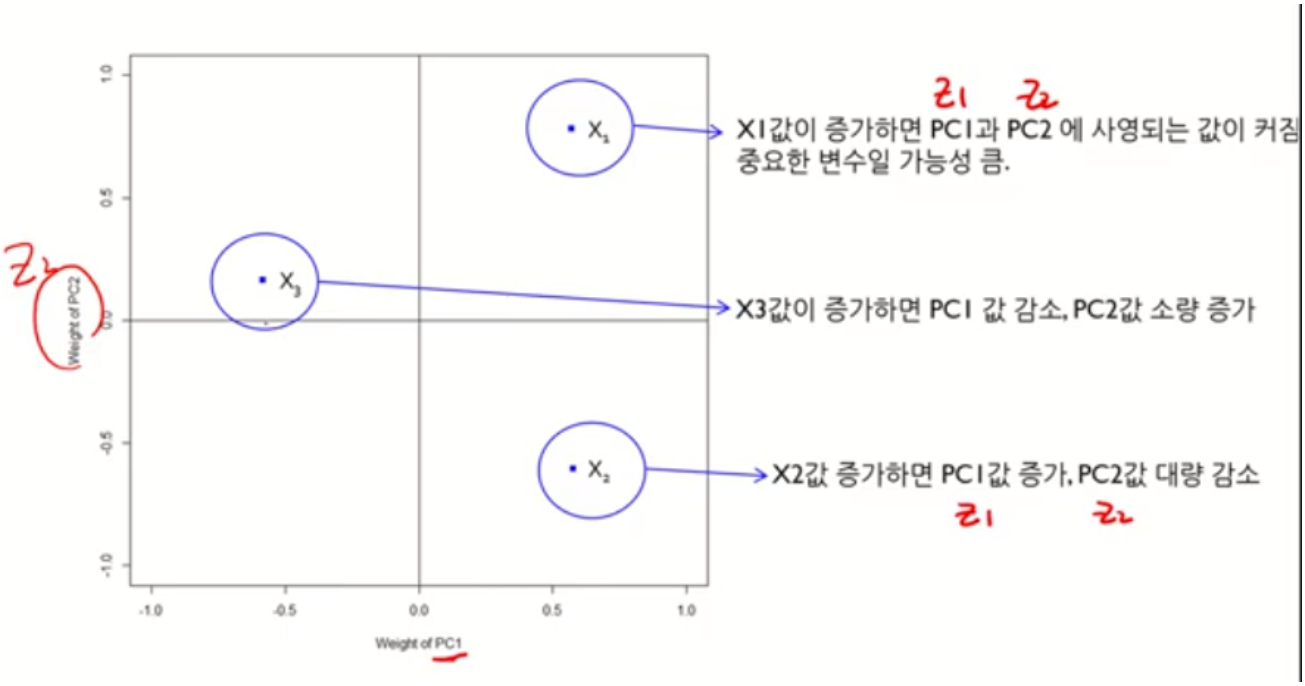
1. 선택방식1 : 고유값 감소율이 유의미하게 낮아지는 Elbow point까지 해당하는 주성분 수를 선택



-> 여기서는 1~2개
2. 선택방식2 : 일정 수준 이상의 분산비를 보존하는 최소의 주성분을 선택(보통 70% 이상)
3. 선택방식3 : 시각화가 목적이라면 3차원까지 선택해주는 것도 가능

PCA Loading Plot

- 각 주성분은 원래 feature의 선형결합으로 이루어짐.
- 각 주성분을 만들 때에 사용된 각 feature의 계수를 살펴봄으로써 각 feature의 주성분에 끼친 영향도를 알아봄



PCA 알고리즘 - 요약

단계

1. 데이터 정규화(mean centering)
   - 스케일에 의한 분산의 차이를 없애주기 위해서
2. 기존 변수의 covariance(correlation) matrix 계산
   - 정규화를 하면 covariance와 correlation matrix가 동일
   - 정규화를 안했으면 스케일에 의한 분산의 차이를 없애주기 위해서 correlation matrix를 사용해주어야 함
3. covariance(correlation) matrix로부터 고유값 및 이에 해당되는 고유벡터를 계산
4. 고유값 및 해당되는 고유벡터를 순서대로 나열
5. 정렬된 고유값을 토대로 기존 변수를 변환

특징

- 공분산 행렬의 고유벡터를 사용하므로 단일 가우시안 분포로 추정할 수 있는 데이터에 대해 서로 독립적인 축을 찾는데 사용할 수 있음

한계점

- 데이터의 분포가 가우시안이 아니거나 다중 가우시안에 대해서는 적용하기 어려움
  - 상관관계는 선형 관계만을 포착할 수 있기 때문

    - 대안 : 커널 PCA, LLE
- 분류/예측 문제에 대해서 데이터의 범주 정보를 고려하지 않기 때문에(비지도 학습) 범주간 구분이 잘 되도록 변환을 해주는 것이 아님
    - 주성분분석은 단순히 변환된 축이 최대 분산방향과 정렬되도록 좌표회전을 수행함(각 축이 직교하기 때문에 회전에 해당)
    - 대안 : Partial Least Square

In [1]:

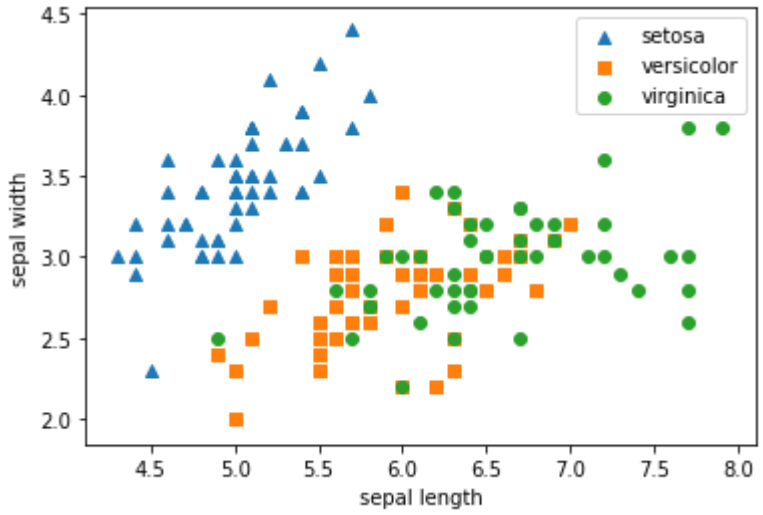
```
from sklearn.datasets import load_iris
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline

# 사이킷런 내장 데이터 셋 API 호출
iris = load_iris()

# 넘파이 데이터 셋을 판다스 데이터프레임으로 변환
columns = ["sl","sw","pl","pw"]
irisDF = pd.DataFrame(iris.data, columns = columns)
irisDF["target"]=iris.target
irisDF.head()
```

Out[1]:

	sl	sw	pl	pw	target
0	5.1	3.5	1.4	0.2	0
1	4.9	3.0	1.4	0.2	0
2	4.7	3.2	1.3	0.2	0
3	4.6	3.1	1.5	0.2	0
4	5.0	3.6	1.4	0.2	0

In [4]:

```
# setosa는 세모, versicolor는 네모, virginica는 동그라미로 표현
markers = ["^","s","o"]

for i, marker in enumerate(markers):
    x_axis_data = irisDF[iris["target"]==i]["sl"]
    y_axis_data = irisDF[iris["target"]==i]["sw"]
    plt.scatter(x_axis_data, y_axis_data, marker=marker, label=iris.target_names[i])

plt.legend()
plt.xlabel("sepal length")
plt.ylabel("sepal width")
plt.show()
```



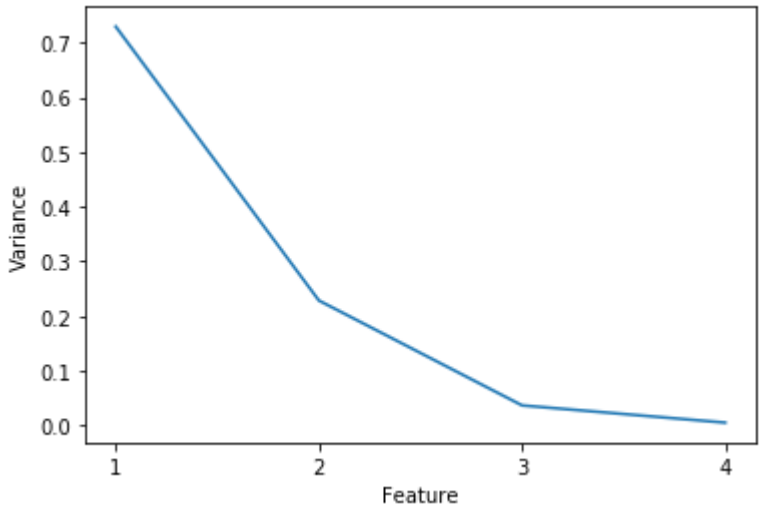
In [8]:

```
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.decomposition import PCA
import seaborn as sns

iris = load_iris()
iris_scaled = StandardScaler().fit_transform(iris.data)

pca = PCA()
pca = pca.fit(iris_scaled)
print(pca.explained_variance_ratio_)
# 더했을 때 70~90% 정도 되는 것 까지 사용해주면 됨!

irisDF = pd.DataFrame({"Variance":pca.explained_variance_ratio_,"Feature":["1","2","3","4"]})
sns.lineplot("Feature", "Variance", data=irisDF)

# 변동성 곡선이 꺾이는 지점 바로 앞의 주성분 개수 선택
```

```
[0.72962445 0.22850762 0.03668922 0.00517871]
```

Out[8]:

```
<matplotlib.axes._subplots.AxesSubplot at 0x153e0653088>
```



In [17]:

```
pca = PCA(n_components=2) # PCA로 변환할 차원의 수

# fit()과 transform()을 호출하여 pca변환 데이터 반환
pca.fit(iris_scaled)
iris_pca = pca.transform(iris_scaled)
print(iris_pca.shape)
```

```
(150, 2)
```

In [18]:

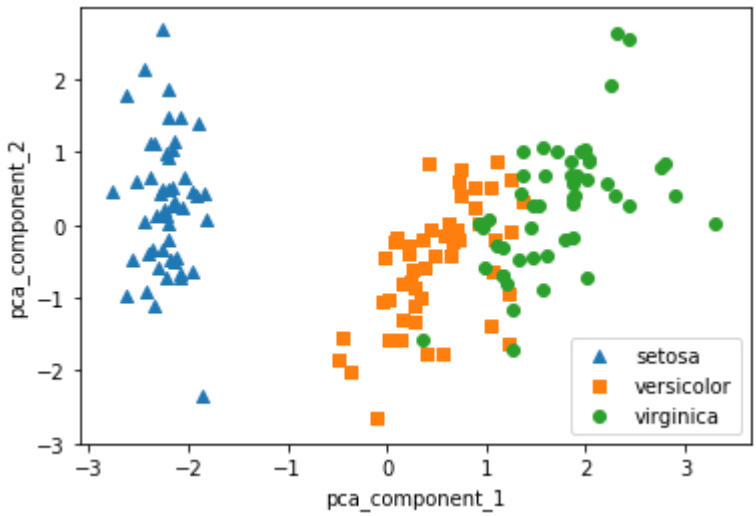
```
# PCA 변환된 데이터의 컬럼명을 각각 pca_component_1, pca_component_2로 명명
pca_columns = ["pca_component_1","pca_component_2"]
irisDF_pca = pd.DataFrame(iris_pca, columns = pca_columns)
irisDF_pca["target"]=iris.target
irisDF_pca.head(3)
```

Out[18]:

	pca_component_1	pca_component_2	target
0	-2.264703	0.480027	0
1	-2.080961	-0.674134	0
2	-2.364229	-0.341908	0

In [20]:

```
# setosa는 세모, versicolor는 네모, virginica는 동그라미로 표현
markers = ["^","s","o"]

for i, marker in enumerate(markers):
    x_axis_data = irisDF_pca[iris["target"]==i]["pca_component_1"]
    y_axis_data = irisDF_pca[iris["target"]==i]["pca_component_2"]
    plt.scatter(x_axis_data, y_axis_data, marker=marker, label=iris.target_names[i])

plt.legend()
plt.xlabel("pca_component_1")
plt.ylabel("pca_component_2")
plt.show()
```



In [22]:

```
print(pca.explained_variance_ratio_)
```

```
[0.72962445 0.22850762]
```

In [23]:

```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
from sklearn.model_selection import cross_val_score
import numpy as np
rcf = RandomForestClassifier(random_state = 156)
scores = cross_val_score(rcf, iris.data, iris.target, scoring="accuracy", cv=3)
print("원본 데이터 교차 검증 개별 정확도", scores)
print("원본 데이터 평균 정확도 :", np.mean(scores))
```

```
원본 데이터 교차 검증 개별 정확도 [0.98 0.94 0.96]
원본 데이터 평균 정확도 : 0.96
```

In [24]:

```
pca_X = irisDF_pca[["pca_component_1", "pca_component_2"]]
scores_pca = cross_val_score(rcf, pca_X, iris.target, scoring="accuracy", cv=3)
print("PCA 변환 데이터 교차 검증 개별 정확도", scores_pca)
print("PCA 변환 데이터 평균 정확도", np.mean(scores_pca))
```

```
PCA 변환 데이터 교차 검증 개별 정확도 [0.88 0.88 0.88]
PCA 변환 데이터 평균 정확도 0.88
```