巨匠線上真人

Python 資料科學應用開發

第十堂：特徵選擇與萃取

（ Feature selection and extraction ）

同學，歡迎你參加本課程

- 請關閉你的FB 、Line等溝通工具，以免影響你上課。
- 考量頻寬、雜音，請預設關閉攝影機、麥克風，若有需要再打開。
- 隨時準備好，老師會呼叫你的名字進行互動，鼓勵用麥克風提問。
- 如果有緊急事情，你必需離開線上教室，請用聊天室私訊給老師，以免老師癡癡呼喚你的名字。
- 軟體安裝請在上課前安裝完成，未完成的同學，請盡快進行安裝。

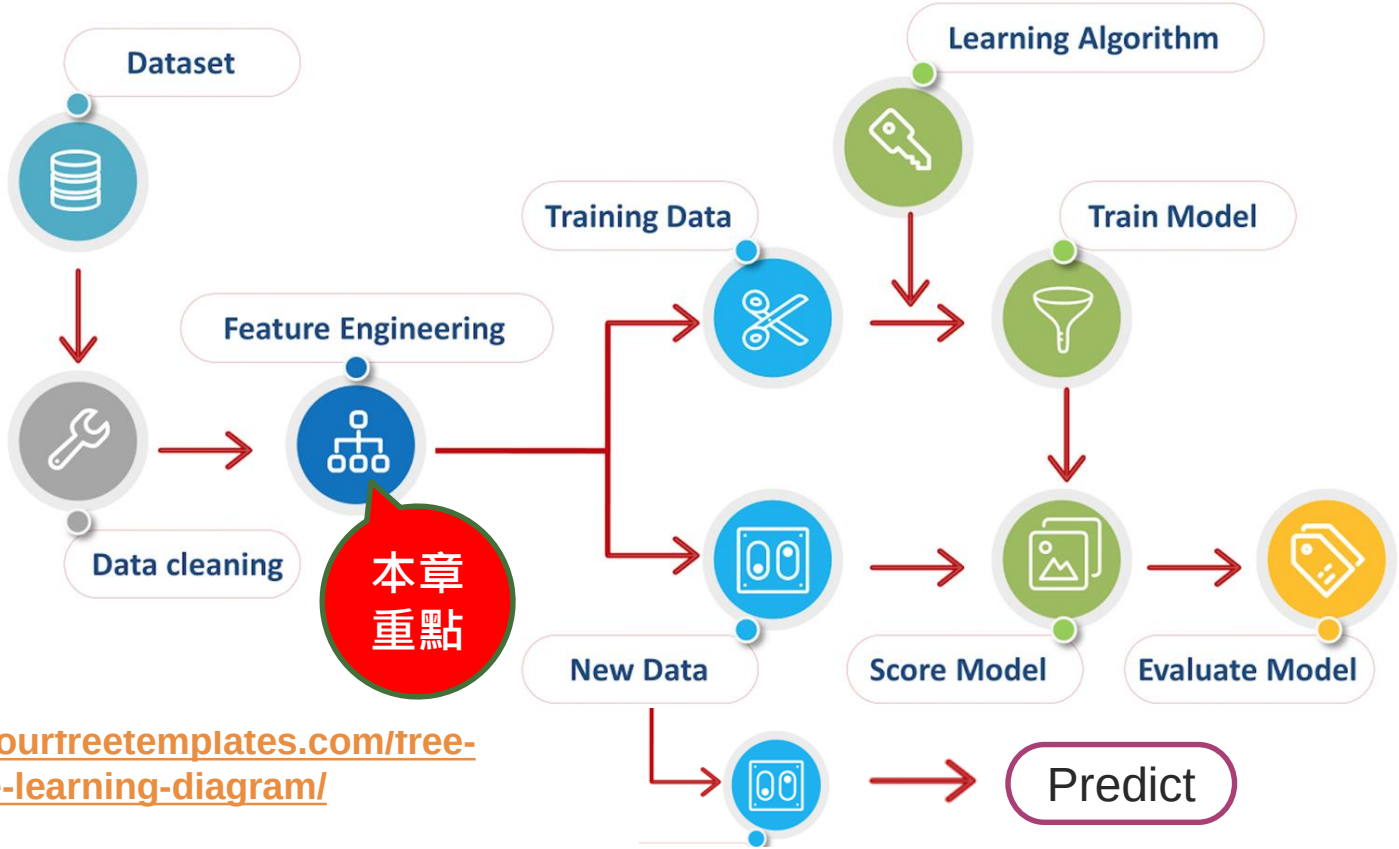
課程檔案下載


巨匠電腦線上真人
開課查詢
免費體驗專區
課程總覽
專業師資
學員專區
講師專區
最新消息
您好!
登出
點數卡產品兌換
APCS檢測專區
公告專區
我的課表
IT真人課程劃位
電腦分校課程劃位
外語真人課程劃
美語分校課程劃
取消劃位
課程檔案下載
上課權益查詢
教學平台測試
學習諮詢
常見問題
個資維護
忘記密碼
登出
課程檔案下載
程式語言好難學?
那是因為
你還沒學過Python!
線上老師LIVE直播教學．搶先看
巨匠電腦真人課程

ZOOM 學員操作說明


www.pcschool.com.tw
您正在觀看蘇世宗的螢幕
查看選項
原始大小
請求遠端控制
共同註記
退出全螢幕
5 查看選項/共同註記/筆（連連看）
滑鼠
文字
筆
箭頭
擦除
格式
撤銷
重做
清除
與會者 (15)
查找參會者
張齡月 (我)
婷婷
解除靜音
舉手
2 共享螢幕（指導演練；點評作品）
老師須先停止共享螢幕
才能請學生共享螢幕
1 聊天
解除靜音
啟動視訊
邀請
與會者
共享螢幕
聊天
錄影
4 解除靜音
3 與會者/舉手

機器學習流程



https://yourfreetemplates.com/free-machine-learning-diagram/

偏差與差異

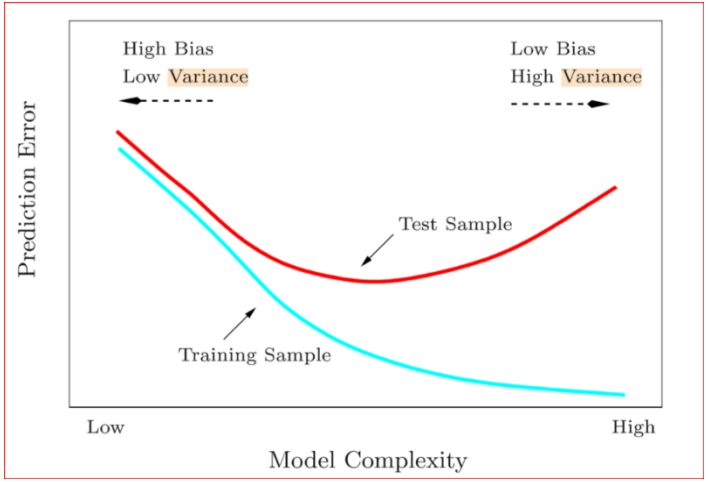
- 模型擬合
  - Overfitting：過度擬合，找出來的模型受到訓練資料的影響太大，使得對預測的效果不佳。
  - Underfitting：低度擬合，模型對於資料的描述能力太差，無法正確解釋資料。
- 可透過偏差和差異調整降低誤差
  - 偏差或差異會導致模型過度擬合或低度擬合。

偏差與差異

- 偏差 Bias
  - 偏差是指實際值與預測值差異。
  - 當模型具有高偏差時，代表模型過於簡單並且不能捕獲數據的複雜性，不適合用於這個數據上。
- 差異 Variance
  - 當模型在訓練有素的資料集上表現良好，但在未經過訓練的資料集上表現不佳時，就會出現差異。
  - 差異告訴我們實際值與預測值分散程度。
  - 高差異導致過度擬合，遇到尚未學習的不同數據時無法做出正確的預測。

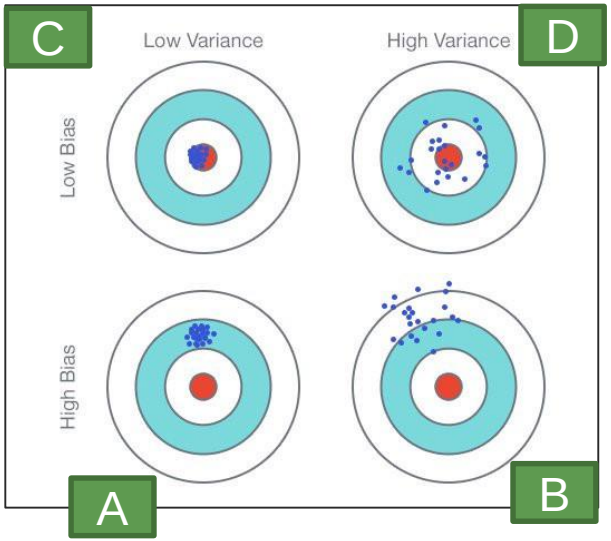
偏差與差異

- 高偏差的模型看起來非常簡單。具有高差異的模型試圖適合大多數數據，使得模型複雜且難以建模。



偏差與差異

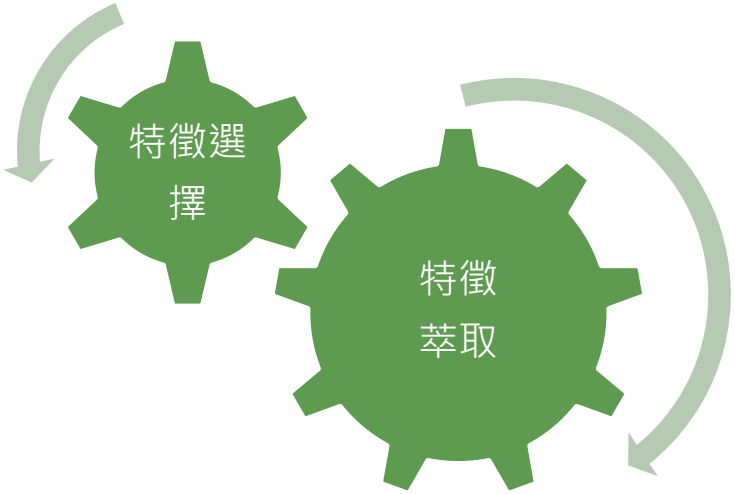
- A- 高偏差低差異：模型一致但平均不準確。
- B- 高偏差高差異：模型不準確，平均不一致。
- C- 低偏差低差異：模型在平均值上是準確且一致的。我們在模型中努力實現這一目標。
- D- 低偏差高差異：模型有些準確，但平均值不一致。數據的微小變化可能導致較大的錯誤。
- Lab (275x)：
  - Module5-275 / Bias-Variance-Trade-Off.ipynb



降維（Dimensionality Reduction）

- 目的：reduce the complexity of the model and avoid overfitting
- 分兩類：
  - 特徵選擇（Feature Selection）：只選擇部分特徵，作為訓練模型的輸入
  - 特徵萃取（Feature Extraction）：從既有特徵導出新的特徵空間

降維之後的特徵處理



特徵選擇

- 兩種分析方式
  - 透過 SBS，進行各種組合計算，循序的移除特徵，將最佳分數存入 list，最後只包含想要的特徵。
  - 透過隨機森林分類方式，顯示出特徵的重要性。

循序向後選擇
（Sequential Backward Selection；SBS）

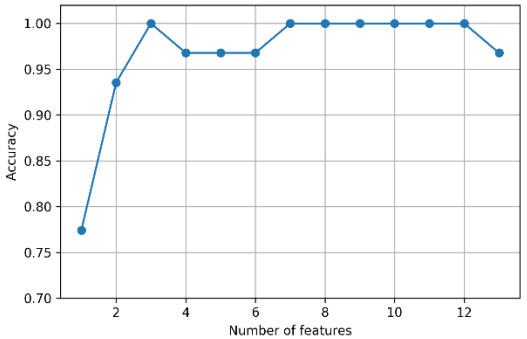
- SBS循序的移除特徵，直到特徵空間只包含所想要的特徵個數。
- 目標：最小化『準則函數』（Criterion Function）
- 按以下步驟進行

1. 以 $k=d$ 初始化演算法，其中 d 是全部「特徵空間」 $\mathbf{X}_d$ 維數。
2. 確認會令「準則」最大的「特徵」 $x^- = \arg\max J(X_k - x) \quad x \in X_k$
3. 從「特徵空間」中移除「特徵」： $X_{k-1} := X_k - x^-; k := k-1$
4. 如果 k 等於所需「特徵」的個數，則停止，不然回到步驟 2 繼續。

實作

- 程式碼：ch04.ipynb
  - 第45～49格，Sequential feature selection algorithms
  - from itertools import combinations

    會取各種組合計算分數，將最佳分數放入比較的List中
- 當特徵 = 3時，與特徵 = 12時準確率一樣好
- 第47格顯示哪三個特徵



優點

- 降低資料集的大小，可節省資料收集的成本，並降低資料調查的難度
- 避免過多特徵值造成的『維數災難』（The curse of dimensionality），見下頁說明

維數災難（The curse of dimensionality）

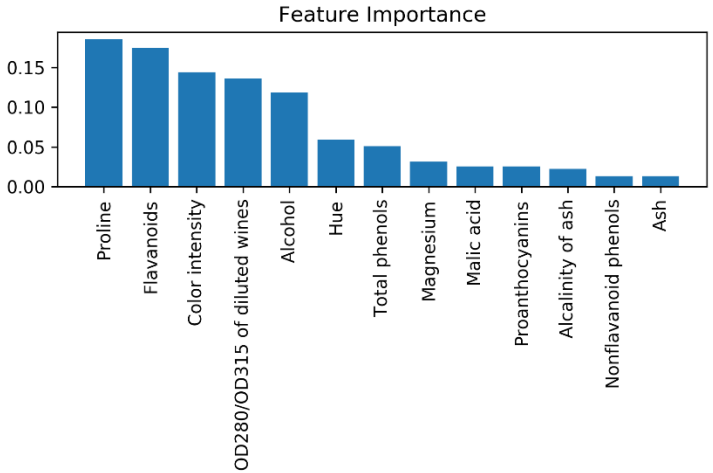
維數災難

必須要注意的是，由於「維數災難」（curse of dimensionality），「KNN」很容易產生「過度適合」現象。「維數災難」描述這樣一個現象：對一個固定大小的「訓練數據集」，當維度越多的時候，特徵空間變得越來越稀疏。直觀地說，我們可以這樣想，在一個高維度的空間中，即使是最近的鄰近樣本，也是太遙遠到不能提供一個合理的估計。

我們在介 紹「邏輯斯迴歸」的小節 中，討論過關 於「正規化」（regularization）的觀念，以它來避免「過度適合」。然而，面對「正規化」不適用的模型（如：「決策樹」與「KNN」），我們可以使用「特徵選擇」或是「降維技術」，來幫助我們避免「維數災難」。這將在下一章中詳細的討論。

以隨機森林評估特徵的重要性

- 第50格，Assessing feature importance with Random Forests
- 利用 RandomForestClassifier 的 feature_importances_ 屬性可顯示特徵的重要性



降維（Dimensionality Reduction）

- 特徵選擇（Feature Selection）
  - 只選擇部分特徵，作為訓練模型的輸入
- 特徵萃取（Feature Extraction）
  - 從既有特徵導出新的特徵空間

特徵萃取

主成分分析 PCA

- Principal Component Analysis
- 非監督式學習
- 可線性分離

線性判別分析 LDA

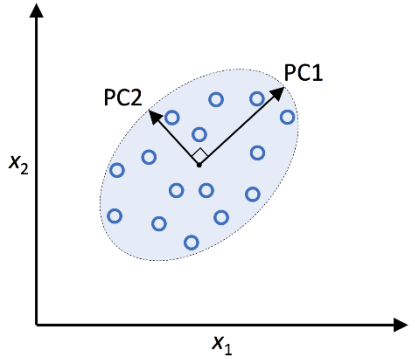
- Linear Discriminant Analysis
- 監督式學習
- 可線性分離

核主成分分析 Kernel PDA

- 非線性分離

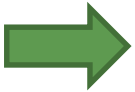
主成分分析
（Principal Component Analysis；PCA）

- 將數據轉換，投影到較低維的特徵空間，是一種以保留最多資訊為前提的數據壓縮方法。
- 新的特徵空間的『正交軸』（Orthogonal axes）即為『主成分』（Principal Component；PC），如右圖。
  - x1、x2 ：原來的特徵座標軸
  - PC1、PC2 ：主成分



特徵萃取方法

- 從 d 維轉換為 k 維，d>k



$$\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \ldots, x_d], \quad \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$$

$$\downarrow \boldsymbol{xW}, \quad \boldsymbol{W} \in \mathbb{R}^{d \times k}$$

$$\mathbf{z} = [z_1, z_2, \ldots, z_k], \quad \mathbf{z} \in \mathbb{R}^k$$

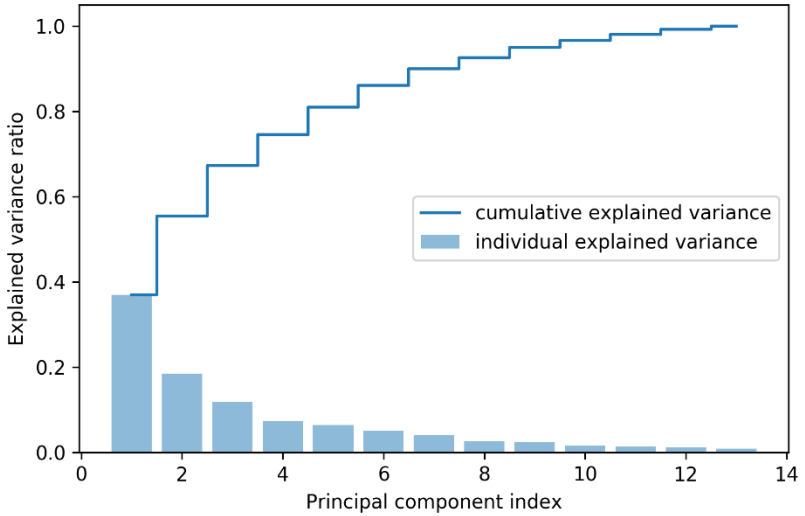
- 首先找變異數最大的特徵，為第一個主成分
- 其次，找次大的變異數最大的特徵，而且與第一個主成分最不相關（即正交）的特徵
- 依此類推，至全部特徵找到為止

主成分分析步驟

1. 標準化 d 維「數據集」。
2. 建立「共變異數矩陣」（covariance matrix）。
3. 分解「共變異數陣」為「特徵向量」（eigenvector）與「特徵值」（eigenvalues）
4. 依照「特徵向量」相應的「特徵值」以遞減的方式對進行排序。
5. 選取 k 個最大「特徵值」相對應的 k 個「特徵向量」，其中 k 是新「特徵空間」的維數（$k \leq d$）。
6. 用「最上面」的 k 個「特徵向量」，建立「投影矩陣」（project matrix）**W**。
7. 使用「投影矩陣」**W**，轉換輸入是 d 維「數據集」，輸出是新的 k 維「特徵子空間」。

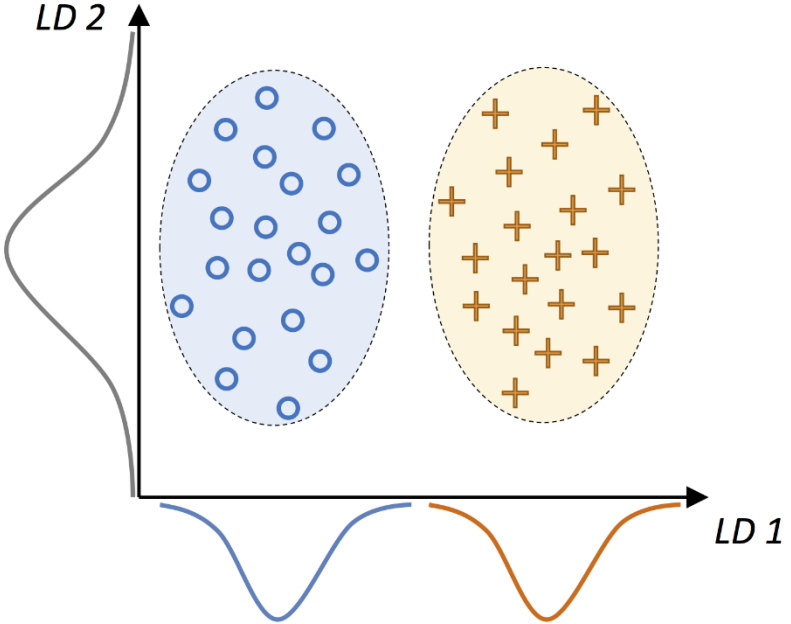
實作

- 程式碼：ch05.ipynb
  - 第4～13格：Wine資料集 PCA 範例
  - 第14～22格：scikit-learn 作法



線性判別分析
（Linear Discriminant Analysis；LDA）

- PCA 屬於『非監督演算法』，
  LDA 屬於『監督演算法』
- LDA 求取類別內(s_w)的『散佈矩陣』愈小愈好，類別間(s_b)的『散佈矩陣』愈大愈好。 類似 PCA，依s_w^{-1} s_b 降冪排序，選取 N 個新特徵



步驟

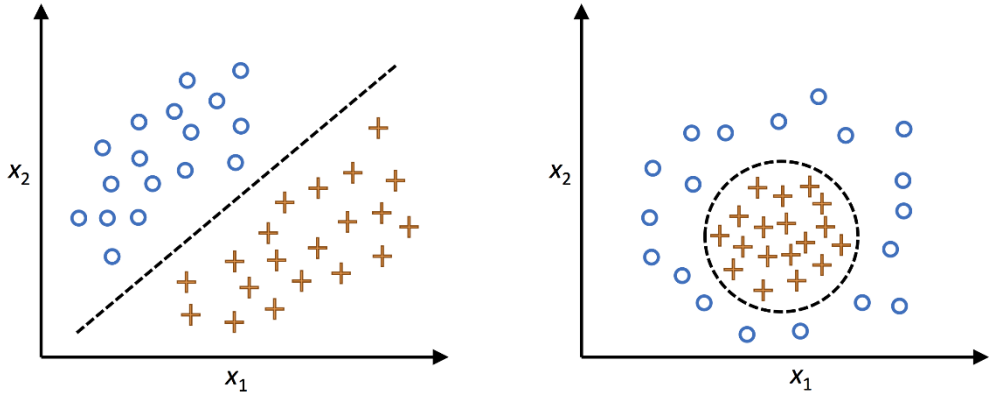
1. 「標準化」d 維「數據集」（d 為「特徵」的個數）。
2. 對於每個類別，計算 d 維的「平均值向量」（mean vector）。
3. 建立「類別間」（between-class）的「散佈矩陣」（scatter matrix）$\boldsymbol{S}_B$ 與「類別內」（within-class）的「散佈矩陣」$\boldsymbol{S}_w$。
4. 從矩陣 $\boldsymbol{S}_w^{-1}\boldsymbol{S}_B$ 中計算「特徵向量」和相對應的「特徵值」。
5. 依照「特徵向量」相應的「特徵值」以遞減的方式對進行排序。
6. 選擇最大的 k 個「特徵值」的相對應的 k 個「特徵向量」。並依此建立 $d \times k$ 維的「轉換矩陣」$\mathbf{W}$；「特徵向量」包含在「轉換矩陣」的「行」中。
7. 使用「轉換矩陣」$\mathbf{W}$，將樣本「投影」到新「特徵子空間」中。

實作

- 程式碼：ch05.ipynb
  - 第23～33格：LDA python 實作
  - 第34～36格：scikit-learn 作法

核主成分分析
（Kernel Principal Component Analysis；Kernel PCA）

- PCA 及 LDA 均假設輸入的數據是可以『線性分離』的，因此降維時，採取線性轉換，投影到新的特徵空間
- Kernel PCA 則支援將『非線性分離』的數據，降維成可『線性分離』的新特徵空間
- 左圖：線性分離
- 右圖：非線性分離



實作

- 程式碼：ch05.ipynb
  - 第38～39格： Kernel PCA python 實作
  - 第40～41格：scikit-learn 作法
- Lab (275x)
  - Module5-275 / DimensionalityReduction.ipynb

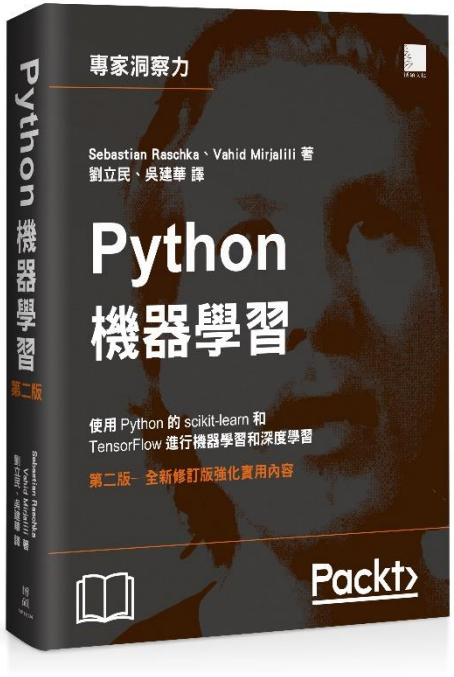
作品：鐵達尼資料集資料清理

- 資料集：鐵達尼（Titanic）
- import seaborn as sns
- titanic = sns.load_dataset("titanic")
- 參考

展示

『Titanic survival - python solution _ Kaggle』by zhenqi_liu

參考用書



- 書名：Python機器學習（第二版）

  http://www.drmaster.com.tw/bookinfo.asp?BookID=MP11804
- 作者：Sebastian Raschka, Vahid Mirjalili ISBN
- 譯者：劉立民、吳建華
- 出版社：博碩

問卷

http://www.pcschoolonline.com.tw

www.pcschoolonline.com.tw