특성 추출을 사용한 차원 축소

차원 축소는 featur로 구성된 다차원 데이터 세트의 차원을 축소해 새로운 차원의 데이터 세트를 생성하는 것입니다.
차원이 증가할수록(feature가 많아질수록) 예측 신뢰도가 떨어지고, 과적합(overfitting)이 발생하고, 개별 featur간의 상관관계가 높을 가능성이 있습니다.
PCA(중성분 분석)는 고차원의 데이터를 저차원의 데이터로 축소시키는 차원 축소 방법중 하나입니다

1. 차원 축소는 시각화를 가능하게 하며 시각화를 통해 데이터 패턴을 쉽게 인지할 수 있습니다.
2. 쓸모 없는 feature를 제거함으로써 노이즈를 제거할 수 있습니다.
3. 쓸모 없는 feature를 제거함으로써 메모리를 절약할 수 있습니다.
4. 쓸모 없는 feature를 제거함으로써 모델 성능 향상에 기여를 합니다.

특성 추출을 사용한 차원 축소

➢ 특성 추출을 사용한 차원 축소

- 차원 축소를 위한 특성 추출의 목적은 특성에 내재된 정보는 많이 유지하면서 특성 집합 $P_{original}$ 을 새로운 집합 P_{new} 으로 변환하는 것입니다.
- 고품질 예측을 만들기 위한 데이터의 능력을 조금만 희생하고 특성의 수를 줄입니다.
- 특성 추출 기법의 단점은 새로운 특성을 사람이 이해하지 못한다는 것입니다.
- 모델을 훈련하기 위해 필요한 특성을 담고 있지만 사람의 눈에는 무작위한 숫자의 모음으로 보일 것입니다.

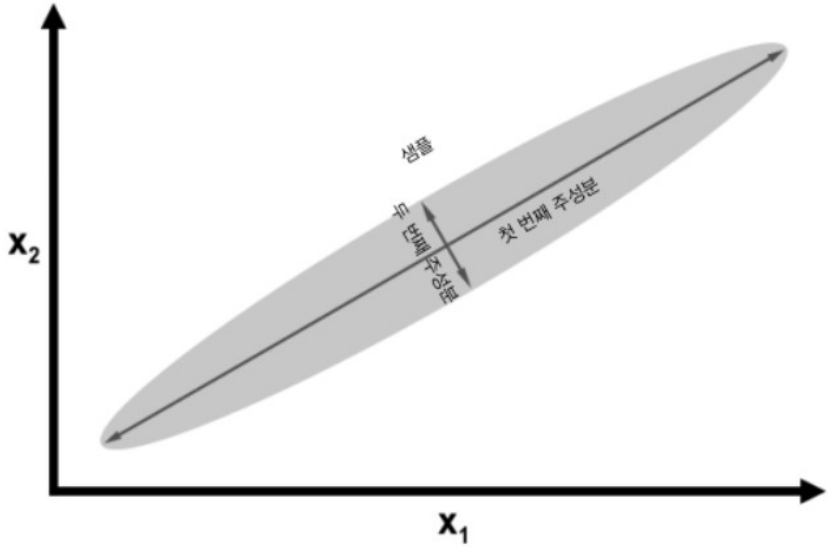
특성 추출을 사용한 차원 축소

➢ 주성분을 사용해 특성 줄이기

PCA는 데이터의 분산을 유지하면서 특성의 수를 줄이는 선형 차원 축소 기법입니다

- PCA는 타킷 벡터의 정보를 사용하지 않고 특성 행렬만 이용하는 비지도 학습 기법입니다

- 데이터는 두개의 특성 x1과 x2를 가집니다
- 그래프의 샘플들은 길이가 길고 높이는 낮은 타원 모양으로 퍼져 있는 '길이' 방향의 분산이 '높이'방향보다 훨씬 큽니다.
- 길이와 높이 대신 가장 분산이 많은 방향을 첫번째 주성분으로 부르고 두번째로 가장 많은 방향을 두번째 주성분이라고 부릅니다.
- 특성을 줄이는 한 가지 방법은 2D 공간의 모든 샘플을 1차원 주성분에 투영하는 것입니다.



특성 추출을 사용한 차원 축소

➢ 주성분을 사용해 특성 줄이기

- n_components의 입력 매개변수값이 1보다 크면 n_components 개수만큼의 특성이 반환
- n_componentsfmf 0과 1 사이로 지정하면 pca는 해당 비율의 분산을 유지할 수 있는 최소한의 특성 개수를 반환
- 원본 특성의 95%와 99% 의 분산을 유지하는 0.95와 0.99가 사용됨
- whiten=True로 지정하면 각 주성분의 값을 평균이 0이고 분산이 1이 되도록 변환
- solver="randomized"는 아주 짧은 시간 안에 첫 번째 주성분을 찾아주는 확률적 알고리즘을 사용
- 화이트닝whitening은 주성분에 투영된 특성의 스케일을 맞추는 역할을 합니다.
- PCA는 평균을 0으로 맞추기 때문에 화이트닝 옵션 대신 나중에 투영된 특성을 표준화해도 됩니다

```
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.decomposition import PCA
from sklearn import datasets

digits = datasets.load_digits()                  # 8X8 크기의 손글씨 숫자 데이터 로드
features = StandardScaler().fit_transform(digits.data)  # 특성 행렬을 표준화 처리
# 99%의 분산을 유지하도록 PCA 클래스 객체 생성
pca = PCA(n_components=0.99, whiten=True)
features_pca = pca.fit_transform(features)  # PCA를 수행

print("원본 특성 개수:", features.shape[1])   # 결과를 확인
print("줄어든 특성 개수:", features_pca.shape[1])
```

특성 추출을 사용한 차원 축소

➢ 주성분을 사용해 특성 줄이기

- PCA 클래스의 whiten 매개변수의 기본값은 False로 화이트닝을 적용하지 않으면 평균은 0이지만 스케일은 맞춰지지 않습니다.
- PCA로 찾은 주성분은 components_속성에 저장
- 각 주성분은 원본 특성 공간에서 어떤 방향을 나타내므로 이 벡터 크기는 64입니다.

```
# 주성분에 투영된 처음 두 개의 특성을 사용해 산점도 출력
import matplotlib.pyplot as plt

plt.scatter(features_pca[:, 0], features_pca[:, 1])
plt.show()                                  #화이트닝되었기 때문에 두 특성의 스케일이 비슷합니다.
```

```
pca_nowhiten = PCA(n_components=0.99)
features_nowhiten = pca_nowhiten.fit_transform(features)
plt.scatter(features_nowhiten[:, 0], features_nowhiten[:, 1])
plt.show()

pca_nowhiten.components_.shape
```

특성 추출을 사용한 차원 축소

➢ 주성분을 사용해 특성 줄이기

```
# 특성 행렬을 주성분에 투영하려면  components_ 배열을 전치하여 행렬곱을 수행합니다.
#넘파이 allclose()를 사용하여 features_nowhiten 배열과 동일한지 확인
import numpy as np
np.allclose(features_nowhiten, np.dot(features, pca_nowhiten.components_.T))
```

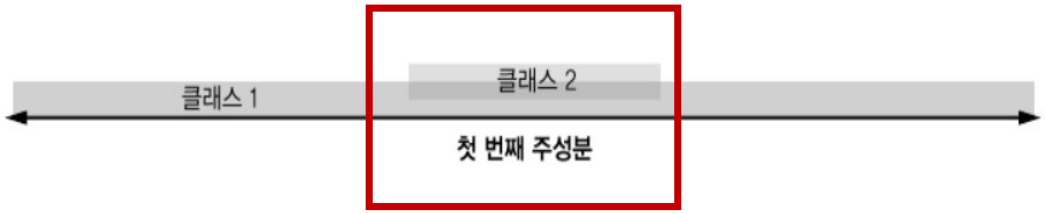
- 적절한 분산 비율을 선택하기 위해 전체 주성분의 explained 분산에서 유지되는 분산의 양이 크게 늘어나지 않는 지점을 찾을 수 있습니다.
- n_components 매개변수를 지정하지 않으면 특성 개수만큼 주성분이 만들어집니다.
- explained 분산은 explained_variance_ratio_속성에 저장되어 있습니다.

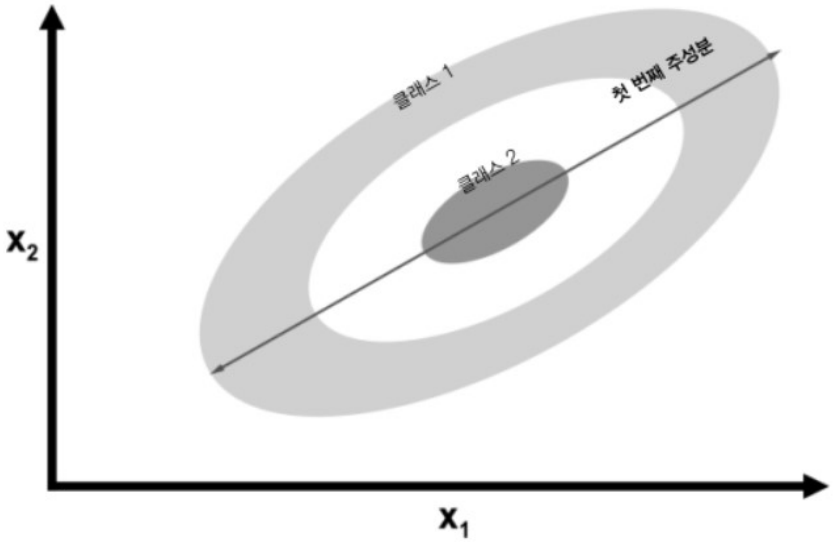
```
pca = PCA(whiten=True).fit(features)
plt.plot( np.cumsum(pca.explained_variance_ratio_) )
plt.show()
#넘파이 cumsum()를 사용하여 분산을 누적하여 그래프 출력
#대략 30개의 주성분으로도 80% 이상의 분산을 유지
# 표준화하지 않은 원본 데이터를 사용합니다.
pca.fit(digits.data)
plt.plot(np.cumsum(pca.explained_variance_ratio_))
plt.show()
```

특성 추출을 사용한 차원 축소

➢ 선형적으로 구분되지 않는 데이터의 차원 축소

- 커널 트릭을 사용하는 주성분 분석의 확장을 사용하여 비선형 차원 축소를 수행
- 표준 PCA는 샘플이 다른 클래스 사이에 직선이나 초평면을 그릴 수 있다면 선형적으로 투영하여 특성을 축소합니다.
- 데이터가 구부러진 결정 경계를 사용해서만 클래스를 나눌 수 있다면 선형 변환이 맞지 않기 때문에 사이킷런의 make_circles()를 사용해 두개의 클래스를 가진 타깃 벡터와 두 개의 특성을 가진 모의 데이터셋을 만듭니다.
- make_circles()는 하나의 클래스가 다른 클래스 안에 둘러싸여 있는 선형적으로 구분되지 않는 데이터를 만듭니다.
- 선형 PCA를 사용하여 데이터의 차원을 축소시킨다면 두 클래스가 첫 번째 주성분에 선형적으로 투영되기 때문에 서로 섞이게 됩니다.





특성 추출을 사용한 차원 축소

➢ 선형적으로 구분되지 않는 데이터의 차원 축소

- 커널 함수는 선형적으로 구분되지 않는 데이터를 선형적으로 구분되는 고차원으로 투영시켜줍니다. (커널 트릭)
- 사이킷런의 KernelPCA의 kernel 매개변수의 값 - rbf(가우시안 방사 기저 함수 커널), ploy(다항식 커널), sigmoid(시그모이드 커널), 선형 투영(linear)로 지정
- 여러 가지 커널과 매개변수 조합으로 머신러닝 모델을 여러 번 훈련시켜서 가장 높은 예측 성능을 만드는 값의 조합을 찾아야 합니다.
- 커널 트릭은 실제 고차원으로 데이터를 변환하지 않으면서 고차원 데이터를 다루는 듯한 효과를 냅니다.

```
from sklearn.decomposition import KernelPCA
from sklearn.datasets import make_circles

# 선형적으로 구분되지 않는 데이터를 만듭니다.
features, _ = make_circles(n_samples=1000, random_state=1, noise=0.1, factor=0.1)

# 방사 기저 함수(radius basis function, RBF)를 사용하여 커널 PCA를 적용합니다.
kpca = KernelPCA(kernel="rbf", gamma=15, n_components=1)
features_kpca = kpca.fit_transform(features)

print("원본 특성 개수:", features.shape[1])
print("줄어든 특성 개수:", features_kpca.shape[1])
```

특성 추출을 사용한 차원 축소

- 선형적으로 구분되지 않는 데이터의 차원 축소
  - 실제 고차원 공간으로 변환하는 것은 아니기 때문에 PCA처럼 주성분을 얻을 수는 없습니다.
  - kernel 매개변수의 기본값은 linear입니다.
  - gamma 매개변수는 rbf, poly, sigmoid 커널에서 사용하는 계수이고 기본값은 특성 개수의 역수입니다.
  - degree 매개변수는 poly 커널에 사용하는 거듭제곱 수이고 기본값은 3입니다.
  - coef0 매개변수는 poly와 sigmoid 커널에 사용되는 상수항으로 기본값은 1입니다.

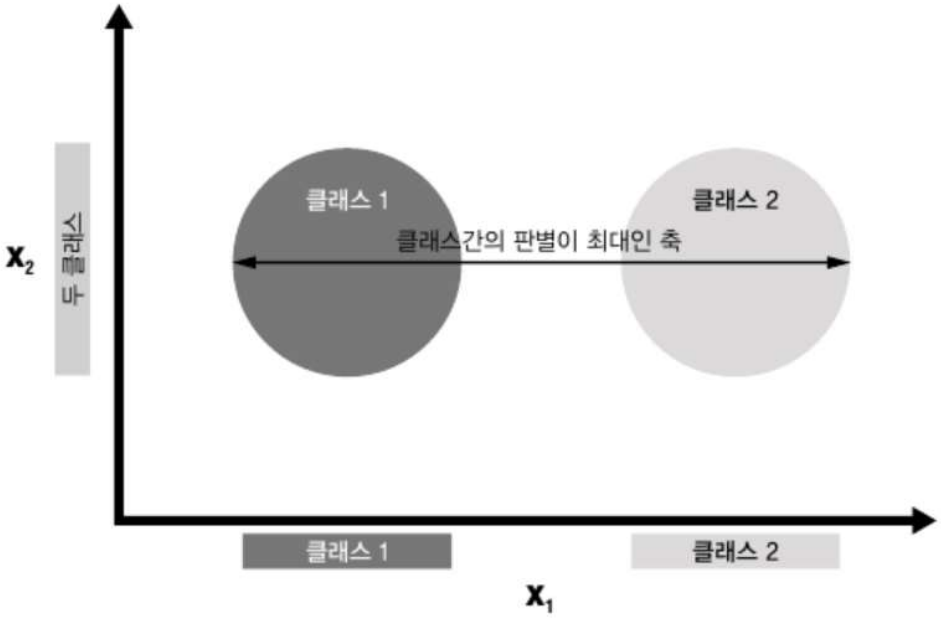
특성 추출을 사용한 차원 축소

- 클래스 분리를 최대화함으로써 특성 축소
  - 선형 판별 분석(LDA)를 사용하여 클래스를 최대한 분리하는 성분 축으로 특성을 투영합니다.
  - LDA는 분류 알고리즘이지만 차원 축소에도 자주 사용되는 기법
  - LDA는 특성 공간을 저차원 공간으로 투영합니다
  - explained_variance_ratio_ 속성에서 각 성분이 설명하는 분산의 양을 확인할 수 있습니다.

```
from sklearn import datasets
from sklearn.discriminant_analysis import LinearDiscriminantAnalysis

iris = datasets.load_iris() # 붓꽃 데이터셋을 로드
features = iris.data
target = iris.target

# LDA 객체를 만들고 실행하여 특성을 변환합니다.
lda = LinearDiscriminantAnalysis(n_components=1)
features_lda = lda.fit(features, target).transform(features)

print("원본 특성 개수:", features.shape[1])            # 특성 개수 출력
print("줄어든 특성 개수:", features_lda.shape[1])

lda.explained_variance_ratio_
```

특성 추출을 사용한 차원 축소

- 클래스 분리를 최대화함으로써 특성 축소
  - PCA가 데이터에서 분산이 최대인 성분 축에만 관심이 있는 반면 LDA는 클래스 간의 차이를 최대화하는 추가적인 목적을 가집니다.
  - LDA는 사이킷런의 LinearDiscriminantAnalysis 클래스로 구현
  - n_components를 None으로 지정하여 LinearDiscriminantAnalysis를 실행
  - 모든 성분 특성에 의해 설명된 분산의 비율을 반환합니다.
  - LDA는 PCA와 달리 타깃 벡터를 사용합니다.



특성 추출을 사용한 차원 축소

➢ 클래스 분리를 최대화함으로써 특성 축소

```
lda = LinearDiscriminantAnalysis(n_components=None)  # LDA를 만들고 실행
features_lda = lda.fit(features, target)

# 설명된 분산의 비율이 담긴 배열을 저장합니다.
lda_var_ratios = lda.explained_variance_ratio_

def select_n_components(var_ratio, goal_var: float) -> int:
    total_variance = 0.0   # 설명된 분산의 초기값을 지정
    n_components = 0  # 특성 개수의 초깃값을 지정
    for explained_variance in var_ratio:   # 각 특성의 설명된 분산을 순회
        total_variance += explained_variance    # 설명된 분산 값을 누적
        n_components += 1  # 성분 개수를 카운트
        if total_variance >= goal_var:   # 설명된 분산이 목표치에 도달하면
            break  # 반복을 종료

     return n_components  # 성분 개수를 반환

select_n_components(lda_var_ratios, 0.95) # 함수를 실행
```

특성 추출을 사용한 차원 축소

- **행렬 분해를 사용하여 특성 축소**
  - 음수가 아닌 특성 행렬을 비음수 행렬 분해(non-negative matrix factorization NMF) 를 사용하여 특성 행렬의 차원을 축소합니다
  - NMF는 선형 차원 축소를 위한 비지도 학습 기법 으로 샘플과 특성 사이에 잠재되어 있는 관계를 표현하는 행렬로 특성 행렬을 분해합니다.
  - 행렬 곱셈에서 행렬은 결과 행렬보다 훨씬 적은 차원을 가지기 때문에 NMF가 차원을 축소할 수 있습니다.
  - 원하는 특성 개수 r이 주어지면

  - V는 n x d 크기의 특성 행렬입니다.(즉, n개의 샘플, d개의 특성)
  - W는 n x r 크기이고 H는 r x d크기 행렬입니다.
  - r 값을 조절하여 필요한 차원 축소의 양을 정할 수 있습니다.
  - 특성 행렬이 음수를 포함 할 수 없습니다.
  - H 행렬은 components_ 속성에 저장
  - W 행렬이 변환된 데이터 features_nmf 속성에 저장
  - 원본 데이터를 복원하려면 변환된 행렬 W와 성분 행렬 H을 곱합니다.
  - NMF 클래스의 solver 매개변수의 기본값은 cd로 좌표 하강법을 사용합니다.

특성 추출을 사용한 차원 축소

- **행렬 분해를 사용하여 특성 축소**

```
from sklearn.decomposition import NMF
from sklearn import datasets

digits = datasets.load_digits()  # 데이터 로드
features = digits.data  # 특성 행렬을 로드

nmf = NMF(n_components=10, random_state=1)  # NMF 생성
features_nmf = nmf.fit_transform(features)  #학습

print("원본 특성 개수:", features.shape[1])
print("줄어든 특성 개수:", features_nmf.shape[1])

nmf.components_.shape          #H 행렬
np.all(nmf.components_ >= 0)     # 모두 양수인지 확인
# 원본 데이터를 복원하려면 변환된 행렬 W 와 성분 행렬 H를 점곱합니다.
np.mean(features - np.dot(features_nmf, nmf.components_))
NMF 클래스의 solver 매개변수의 기본값은 cd로 좌표 하강법을 사용합니다
nmf_mu = NMF(n_components=10, solver='mu', random_state=1)
features_nmf_mu = nmf_mu.fit_transform(features)
np.mean(features - np.dot(features_nmf_mu, nmf_mu.components_))
```

특성 추출을 사용한 차원 축소

- 희소 특성 행렬 차원 축소
  - 기본 SVD에서 d개의 특성이 주어지면 SVD는 d x d 크기의 분해 행렬을 만듭니다.
  - TSVD (truncated singular value decomposition) 는 사전에 매개변수에서 지정한 n으로 값n x n 크기의 행렬을 만듭니다.
  - TSVD는 PCA와 달리 희소 특성 행렬에 사용할 수 있습니다.
  - TSVD는 난수 생성기를 사용하기 때문에 출력 부호가 훈련하는 사이에 뒤집힐 수 있기 때문에 전처리 파이프라인마다 한 번만 fit() 호출하고 그 다음 여러 번 transform()를 사용합니다. 선형 판별 분석처럼 n_components를 사용하여 필요한 특성(성분)의 개수를 지정해야 합니다.
  - n_components를 하이퍼파라미터로 모델 선택 과정에서 최적화하는 것입니다.
  - TSVD가 성분마다 원본 특성 행렬의 설명된 분산 비율을 제공하기 때문에 필요한 분산의 양을 설명할 수 있는 성분 개수를 선택할 수 있습니다.

특성 추출을 사용한 차원 축소

➢ 희소 특성 행렬 차원 축소

```
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.decomposition import TruncatedSVD
from scipy.sparse import csr_matrix
from sklearn import datasets
import numpy as np

digits = datasets.load_digits()  # 데이터 로드
features = StandardScaler().fit_transform(digits.data)  # 특성 행렬을 표준화 처리

features_sparse = csr_matrix(features)  # 희소 행렬 생성
tsvd = TruncatedSVD(n_components=10)  # TSVD 객체 생성

# 희소 행렬에 TSVD를 적용합니다.
features_sparse_tsvd = tsvd.fit(features_sparse).transform(features_sparse)

print("원본 특성 개수:", features_sparse.shape[1])  # 결과 출력
print("줄어든 특성 개수:", features_sparse_tsvd.shape[1])

# 처음 세 개의 성분이 설명하는 분산의 비율 합
tsvd.explained_variance_ratio_[0:3].sum()
```

특성 추출을 사용한 차원 축소

- 희소 특성 행렬 차원 축소
  - 원본 특성 개수보다 하나 작게 n_components를 지정하고 TSVD를 실행하여 원하는 원본 데이터의 분산에서 설명된 양에 맞는 성분 개수를 계산하는 함수를 만들어 자동화 할 수 있습니다.
  - PCA는 최대 분산의 방향을 찾기 위해 원점에서 맞춘 특성 행렬의 고분산 행렬에서 고유 벡터를 찾습니다.
  - 특성 행렬을 원점에 맞추고 TSVD를 적용하면 PCA와 거의 같은 결과가 만들어집니다.
  - PCA 클래스의 svd_solver 매개변수가 기본값 auto이면 샘플의 개수가 500개 이하일 때 SVD 분해를 사용하는 full이 됩니다.
  - 500개보다 크면 랜덤 SVD를 사용하는 randomized입니다.

특성 추출을 사용한 차원 축소

➢ 희소 특성 행렬 차원 축소

```
# 특성 개수보다 하나 작은 TSVD를 만들고 실행합니다.
tsvd = TruncatedSVD(n_components=features_sparse.shape[1]-1)
features_tsvd = tsvd.fit(features)

# 설명된 분산을 리스트에 저장합니다.
tsvd_var_ratios = tsvd.explained_variance_ratio_

def select_n_components(var_ratio, goal_var):
    total_variance = 0.0  # 설명된 분산을 초기화
    n_components = 0  # 특성 개수를 초기화

    for explained_variance in var_ratio:   # 특성의 설명된 분산을 순환        .
        total_variance += explained_variance    # 설명된 분산을 누적
        n_components += 1     # 성분 개수를 카운트

        # 설명된 분산의 목표에 도달하면  반복을 마칩니다.
        if total_variance >= goal_var:
            break
    return n_components    # 성분 개수를 반환

select_n_components(tsvd_var_ratios, 0.95)    # 함수 실행
```

특성 추출을 사용한 차원 축소

- 희소 특성 행렬 차원 축소

```
features = digits.data - np.mean(digits.data, axis=0)

pca = PCA(n_components=40, random_state=1)
features_pca = pca.fit_transform(features)

svd = TruncatedSVD(n_components=40, random_state=1)
features_tsvd = tsvd.fit_transform(features)

np.max(np.abs(features_pca - features_tsvd))
```