특성 공학: 개요, 특성 선택 (Feature Selection) 방법론

Key words

#특성선택 #특성추출
#Filter 방식 #Wrapper 방식

특성 공학

특성공간 차원축소의 필요성

- 모델의 해석력 향상.
- 모델 훈련시간의 단축.
- 차원의 저주 방지.
- 과적합(overfitting)에 의한 일반화 오차를 줄여 성능 향상.

특성공학의 방법론은 크게 특성 선택(feature selection) 방법과 특성 추출(feature extraction) 방법으로 구분할 수 있음.

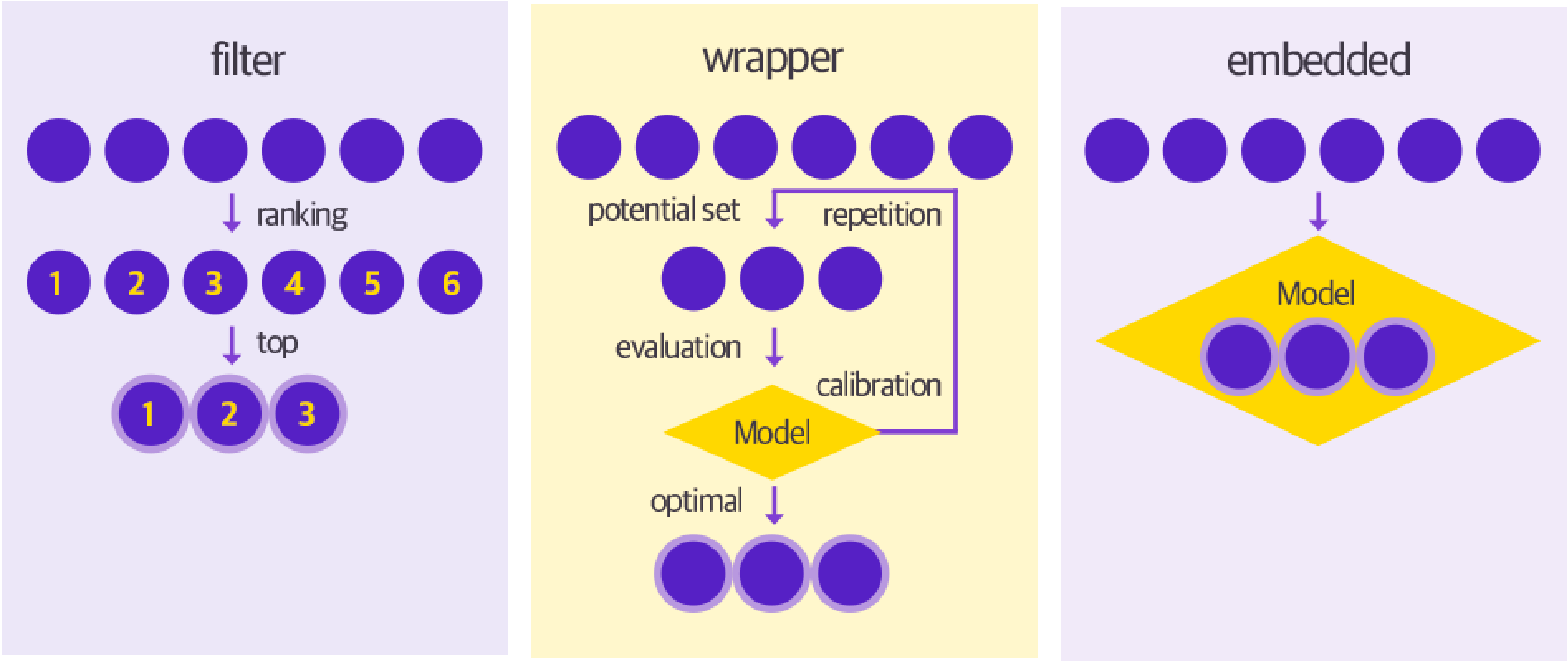
특성 선택(Feature Selection) 방법론

특성 선택(feature selection)

- 주어진 특성 변수들 가운데 가장 좋은 특성변수의 조합만 선택함.
- 불필요한 특성 변수를 제거함.
- Filtering, Wrapper, Embedded 방식으로 분류할 수 있음.

특성 선택(Feature Selection) 방법론

특성 선택(feature selection)



특성 선택(Feature Selection) 방법론

Filter 방식 : 각 특성변수를 독립적인 평가함수로 평가함.

- 각 특성변수 X_i 와 목표변수(Y)와의 연관성을 측정한 뒤, 목표변수를 잘 설명할 수 있는 특성 변수만을 선택하는 방식.
- X_i와 Y의 1:1 관계로만 연관성을 판단.
- 연관성 파악을 위해 t-test, chi-square test, information gain 등의 지표가 활용됨.

특성 선택(Feature Selection) 방법론

Wrapper 방식 : 학습 알고리즘을 이용.

- 다양한 특성변수의 조합에 대해 목표변수를 예측하기 위한 알고리즘을 훈련하고, cross-validation 등의 방법으로 훈련된 모델의 예측력을 평가함. 그 결과를 비교하여 최적화된 특성변수의 조합을 찾는 방법.
- 특성변수의 조합이 바뀔 때 마다 모델을 학습함.
- 특성변수에 중복된 정보가 많은 경우 이를 효과적으로 제거함.
- 대표적인 방법으로는 순차탐색법인 forward selection, backward selection, stepwise selection 등이 있음.

특성 선택(Feature Selection) 방법론

Filter 와 Wrapper의 장단점 비교

	장점	단점
Filter	- 계산비용이 적고 속도가 빠름.	- 특성 변수간의 상호작용을 고려하지 않음.
Wrapper	- 특성변수 간의 상호작용을 고려함. - 주어진 학습 알고리즘에 대해 항상 최적의 특성변수 조합을 찾음.	- 모델을 학습해야 하므로, 계산비용이 크고 속도가 느림. - 과적합(overfitting)의 가능성 있음.

특성 선택(Feature Selection) 방법론

Embedded 방식 : 학습 알고리즘 자체에 feature selection을 포함하는 경우

- Wrapper 방식은 모든 특성변수 조합에 대한 학습을 마친 결과를 비교하는데 비해, Embedded 방식은 학습 과정에서 최적화된 변수를 선택한다는 점에서 차이가 있음.
- 대표적인 방법으로는 특성변수에 규제를 가하는 방식인 Ridge, Lasso, Elastic net 등이 있음.

특성 공학: 특성 추출 (Feature Extraction) 방법론

Key words

#차원축소법 #주성분분석(PCA)
#특이값분해(SVD)

특성 추출법 개요

특성 공학

- 특성공간 방법론
  - 특성 선택(feature selection) : 가지고 있는 특성 중 더 유용한 특성을 선택.
  - 특성 추출(feature extraction) : 가지고 있는 특성을 결합하여 더 유용한 특성을 생성.

특성 추출법 개요

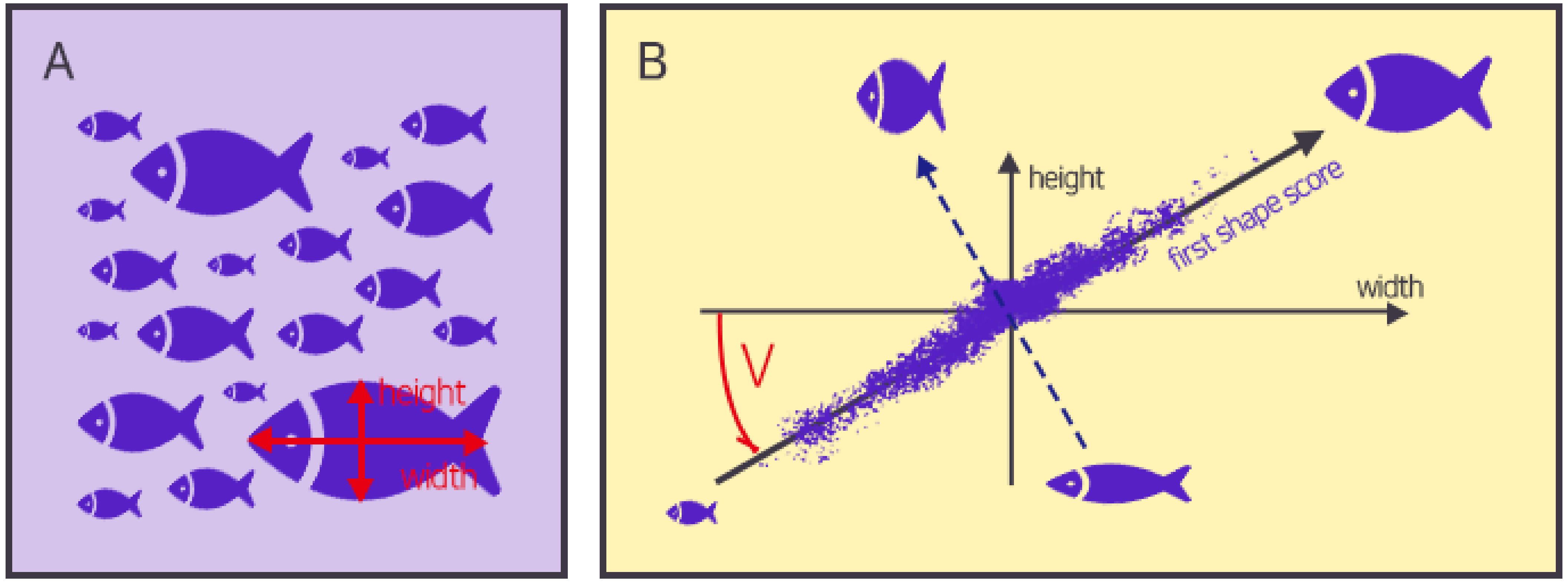
특성 공학

- 주요 특성 추출법
  - PCA(Principal component analysis)
  - SVD(Singular Value Decomposition)
  - LDA(Linear discriminant analysis)
  - NMF(Non-negative matrix factorization)

주성분분석(PCA)

주성분 분석이란

- 서로 연관되어 있는 변수들 ($x_1, ..., x_k$)이 관찰되었을 때, 이 변수들이 전체적으로 가지고 있는 정보들을 최대한 확보하는 적은 수의 새로운 변수(주성분, PC)를 생성하는 방법.



주성분분석(PCA)

주성분 분석의 목적

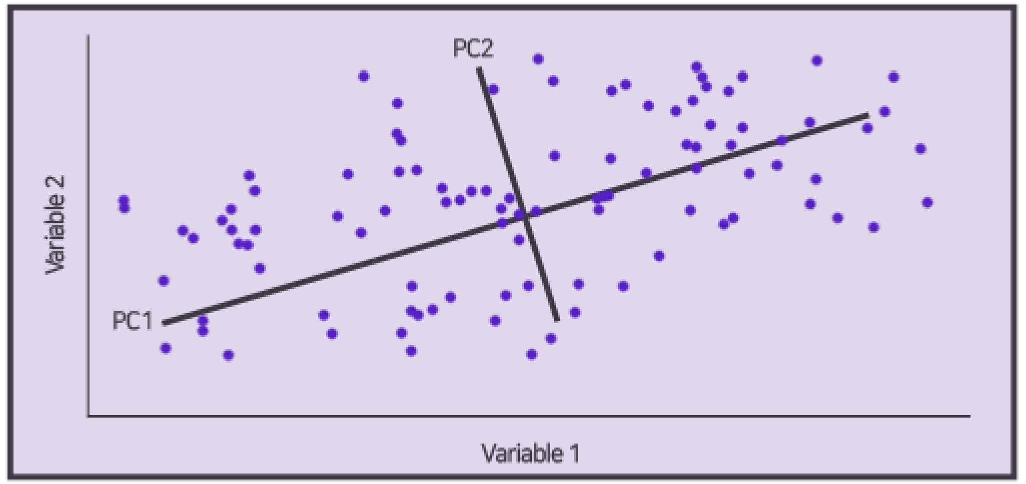
- 자료에서 변동이 큰 축을 탐색함.
- 변수들에 담긴 정보의 손실을 최소화하면서 차원을 축소함.
- 서로 상관이 없거나 독립적인 새로운 변수인 주성분을 통해 데이터의 해석을 용이하게 함.

주성분분석(PCA)

주성분 분석 아이디어

- k개의 특성변수 $x_1, ..., x_k$의 주성분이 $y_1, ..., y_k$라면 이들은 $x_1, ..., x_k$의 선형결합식으로 아래와 같이 표현됨.

$$
\begin{aligned}
y_1 &= l_{11}x_1 + l_{21}x_2 + \cdots + l_{k1}x_k \\
y_2 &= l_{12}x_1 + l_{22}x_2 + \cdots + l_{k2}x_k \\
&\cdots \\
y_k &= l_{1k}x_1 + l_{2k}x_2 + \cdots + l_{kk}x_k
\end{aligned}
$$



주성분분석(PCA)

주성분 분석 아이디어

1) $V[y_1]$를 최대로 하는 길이가 1인 벡터 $l_1 = (l_{11}, l_{21}, \ldots, l_{k1})$
   로 첫번째 주성분 y_1을 결정.
2) $Cov[y_2, y_1] = 0$을 만족하며 $V[y_2]$를 최대로 하는 길이가
   1인 벡터 $l_2 = (l_{12}, l_{22}, \ldots, l_{k2})$로 두번째 주성분 y_2을 결정.
3) $Cov\left[y_j, y_m\right] = 0\ (m < j)$을 만족하며 $V[y_j]$를 최대로 하는 길이가
   1인 벡터 $l_j = (l_{1j}, l_{2j}, \ldots, l_{kj})$로 j번째 주성분 y_j을 결정.
   ($j = 3, \ldots, k$에 대하여 이 과정을 반복)

주성분분석(PCA)

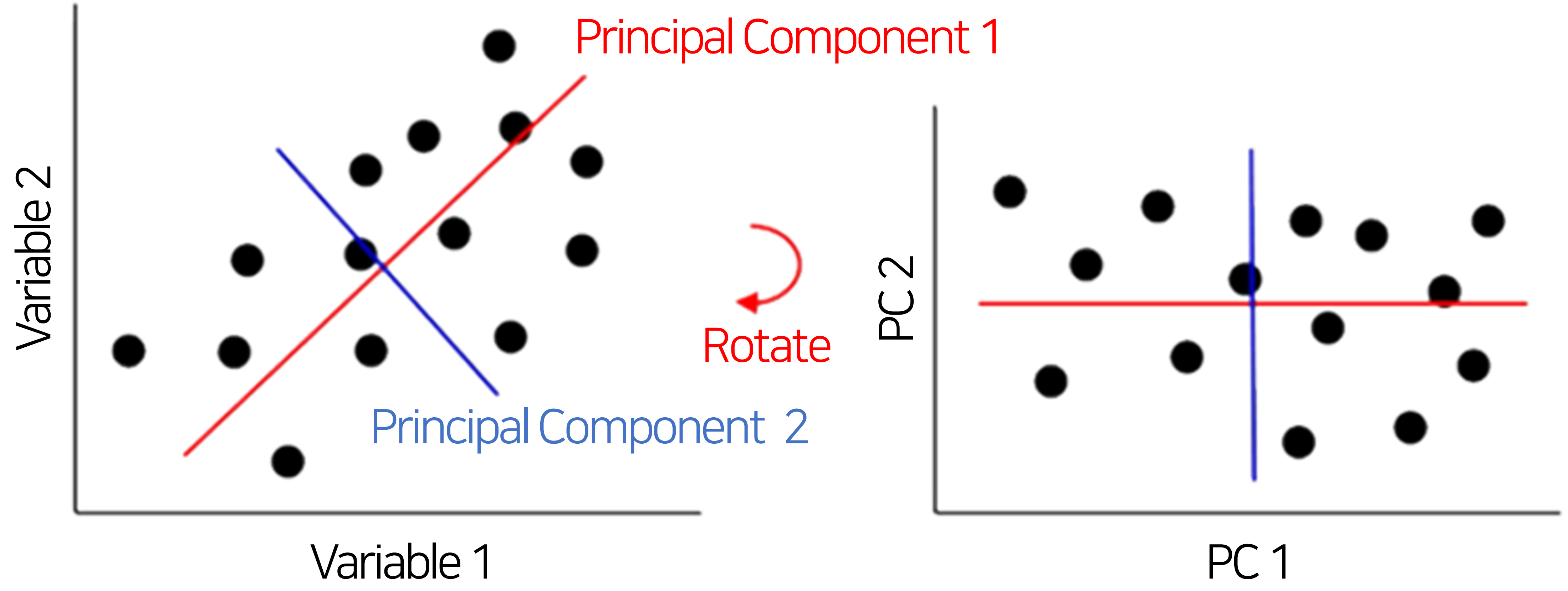
주성분 분석에 관한 기하학적 의미

- 주성분 축은 원래 변수들의 좌표축이 직교 회전 변환된 것으로 해석할 수 있음.
  - 첫번째 주성분 축은 데이터의 변동이 가장 커지는 축임.
  - 두번째 주성분 축은 첫번째 주성분 축과 직교하며 첫번째 주성분 축 다음으로 데이터의 변동이 큰 축을 나타냄.
  - 각 관찰치 별 주성분 점수는 대응하는 원 자료 값들의 주성분 좌표축에서의 좌표 값에 해당함.
  - 자료들의 공분산 행렬이 대각행렬이 되도록 회전한 것으로 해석할 수 있음.

주성분분석(PCA)

주성분 분석에 관한 기하학적 의미

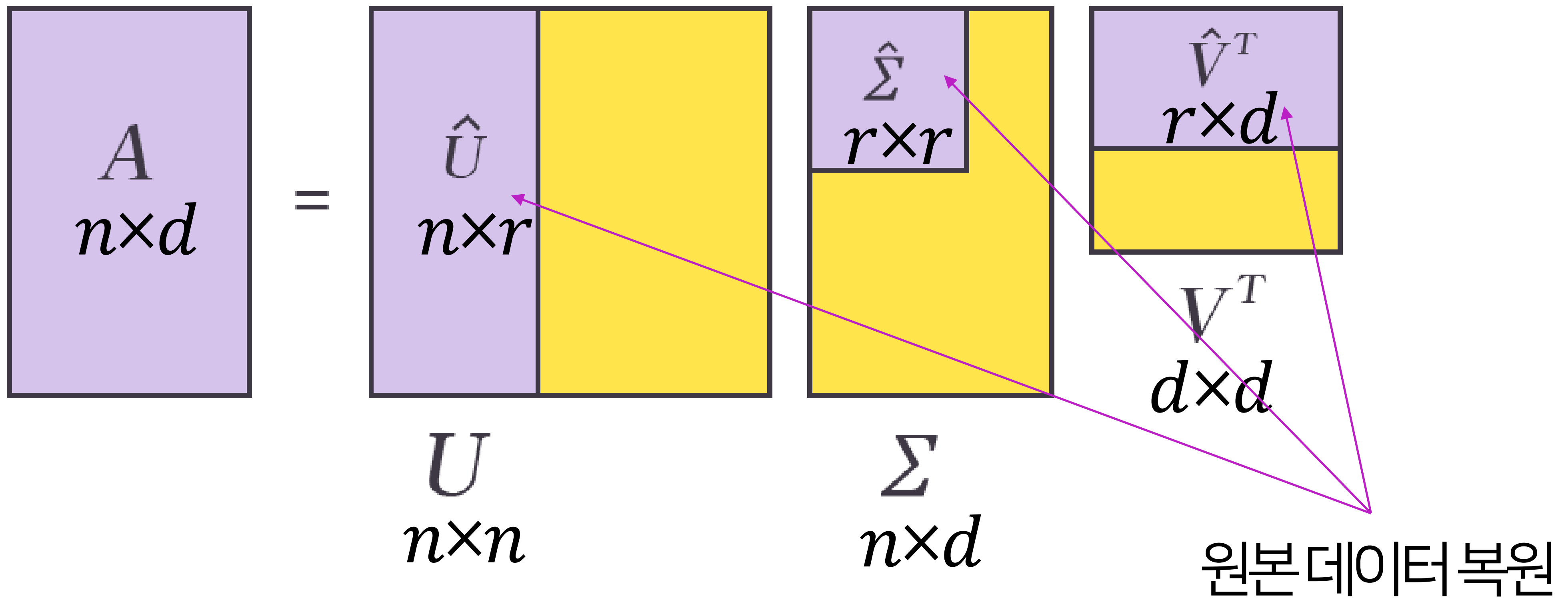
- 주성분 축은 원래 변수들의 좌표축이 직교 회전 변환된 것으로 해석할 수 있음.



특성값분해(SVD)

특성값 분해 이론

- 특이값 분해 : 임의의 $n×d$ 행렬 A는 $A = U\Sigma V^T$로 분해 가능함.
  - U와 V는 직교행렬 : $U^T U = I_{n×n}$, $VV^T = I_{d×d}$
  - U의 각 열을 A의 왼쪽 특성벡터, V의 각 열을 A의 오른쪽 특성벡터라고 함.
  - Σ는 $n×d$ 의 대각행렬 : 대각원소를 A의 특성값이라고 함.



특성값분해(SVD)

특이값 분해와 차원축소

- U의 각 열을 $u_i, i = 1, \dots, n$
- V^T의 각 행을 $v_i^T, i = 1, \dots, d$
- Σ의 0이 아닌 대각원소를 $\lambda_i, i = 1, \dots, r \ (\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_r)$ 이라고 할 때,

$$A = U\Sigma V^T = \sqrt{\lambda_1}u_1v_1^T + \sqrt{\lambda_2}u_2v_2^T + \cdots + \sqrt{\lambda_m}u_mv_m^T + \cdots + \sqrt{\lambda_r}u_rv_r^T$$

정보가 많은 순서대로 m개만 이용하여 근사하는 경우 **$\boldsymbol{m}$계수 근사**라고 함.

특성값분해(SVD)

주성분분석(PCA)와 특성값분해의 관계

- A의 오른쪽 특성벡터는 A의 공분산행렬의 고유벡터와 동일함.
- 자료 행렬에 대한 특성값 분해로 주성분을 도출가능.