11기 정규과정 4주차 ToBig's 10기 이민주

### PCA & t-SNE

# 

```
Unit 01 | Intro: Dimensionality Reduction
Unit 02 | Eigen Decomposition
Unit 03 | PCA: Principal Component Analysis
Unit 04 | t-SNE: t - Stochastic Neighbor Embedding
Unit 05 | Assignment
```

### Dimensionality Reduction 수 가원 축소

■ Curse of Dimensionality 차원의 저주

: 변수가 늘어나고 차원\*이 커지면서 발생하는 문제

### ■ Curse of Dimensionality 차원의 저주

: 변수가 늘어나고 차원이 커지면서 발생하는 문제

- 필요한 데이터의 수 기하급수적으로 증가

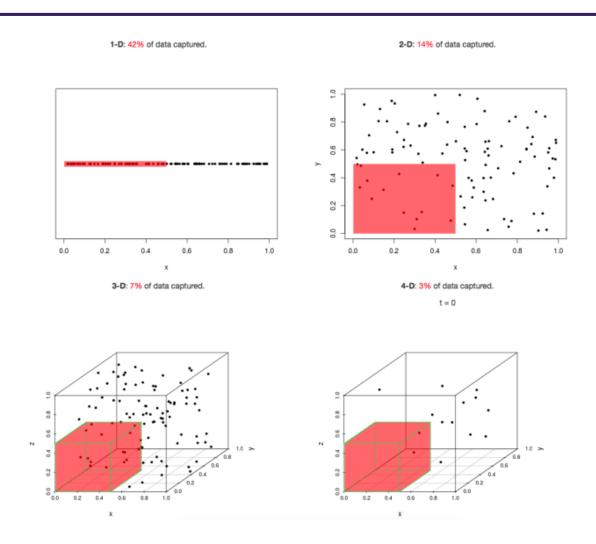
1차원 1 2 3

2712		
1	2	3
4	5	6
7	8	9

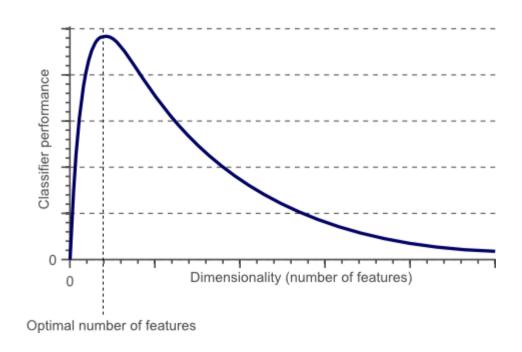
2차워

3차원			
19	20	21	
22	23	24	
25	26	27	

- Curse of Dimensionality 차원의 저주
  - : 변수가 늘어나고 차원이 커지면서 발생하는 문제
  - 필요한 데이터의 수 기하급수적으로 증가
  - 데이터의 크기가 정해진 경우, 차원공간의 희소성이 증가 & 데이터의 밀도 감소



- Curse of Dimensionality 차원의 저주
  - : 변수가 늘어나고 차원이 커지면서 발생하는 문제
  - 필요한 데이터의 수 기하급수적으로 증가
  - 데이터의 크기가 정해진 경우, 차원공간의 희소성이 증가 & 데이터의 밀도 감소
  - 오버피팅 확률 증가 & 성능 감소
  - 연산량 급증



- Dimensionality Reduction 차원축소
  - : 데이터의 특징을 잘 나타내는 변수만 사용해 차원 수를 줄이는 방법
    - → 차원의 저주를 해결 & 시각화 용이 & 데이터 특성 파악 용이 & 컴퓨팅파워 절약

Feature Selection 변수 선택
 변수들 중 <mark>중요한 변수만 선택</mark>하고
 나머지 변수는 버림



2. Feature Extraction 변수 추출
 : 모든 변수를 조합해서 데이터를
 잘 표현할 수 있는 <mark>새로운 변수 추출</mark>

A, B, C, D, E → 가, 나

모든 정보 사용 가: f(A,B,C,D,E) 나: g(A,B,C,D,E)

- Dimensionality Reduction 차원축소
  - : 데이터의 특징을 잘 나타내는 변수만 사용해 차원 수를 줄이는 방법
    - → 차원의 저주를 해결 & 시각화 용이 & 데이터 특성 파악 용이 & 컴퓨팅파워 절약

Feature Selection 변수 선택
 변수들 중 중요한 변수만 선택하고
 나머지 변수는 버림

A, B, C, D, E  $\rightarrow$  A, D

2. Feature Extraction 변수 추출
 : 모든 변수를 조합해서 데이터를
 잘 표현할 수 있는 사로운 변수 추출
 A, B, C, D, E → 가, 나

■ Eigenvector 고유벡터 & Eigenvalue 고유값

정방대칭행렬 A에 대해,

- Eigenvector 고유벡터 : K AK=λK

: 선형변환 A를 했을 때, 방향이 변하지 않는 벡터

- Eigenvalue 고유값 : λ det(A-λI)=0

: 벡터의 크기가 변하는 정도

A:n \* n행렬

K: k1,k2,···,kn n개의 n\*1 행렬(벡터)

→ 단위 길이(길이 = 1) & 서로 직교

λ: λ1, λ2,···, λn n개의 스칼라값

### ■ Eigenvector 고유벡터 & Eigenvalue 고유값

$$det |A - \lambda I| = det |2-\lambda| = (2-\lambda)^2 - 1$$

$$|2-\lambda| = (2-\lambda)^2 - 1$$

$$|2-\lambda| = (2-\lambda)^2 - 1$$

$$|2-\lambda| = (2-\lambda)^2 - 1$$

$$= \lambda^2 - 4\lambda + 3$$
$$= (\lambda - 1)(\lambda - 3)$$

$$A\binom{kl}{k2} = \lambda\binom{kl}{k2}$$

$$\binom{2}{1} \binom{1}{2} \binom{K1}{k1} = \binom{2k_1 + k_2}{k_1 + 2k_2} = \binom{k_1}{k_2}$$

$$\binom{k_1}{k_1} = \binom{1}{-1} \times 1/\sqrt{2}$$

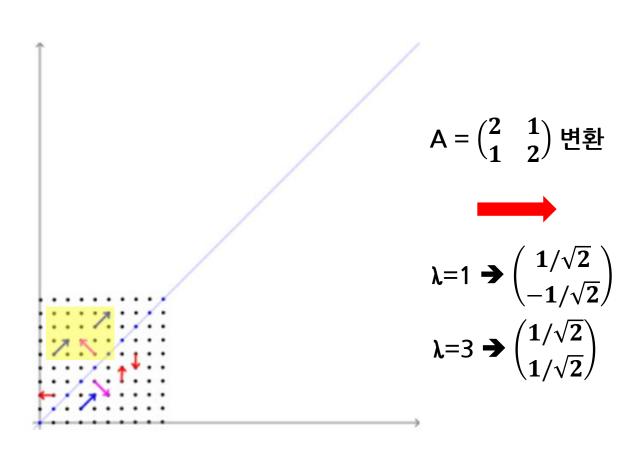
### $AK=\lambda K$ $det(A-\lambda I)=0$

$$A\binom{kl}{k2} = \lambda \binom{kl}{k2}$$

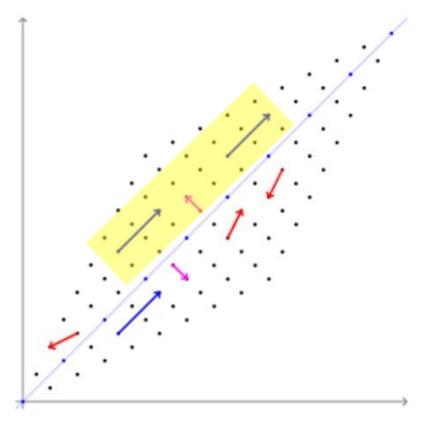
$$\binom{2}{1} \binom{k}{k} = \binom{2k+k}{k+2k} = \binom{3k}{3k}$$

$$\binom{kl}{kl} = \binom{1}{1} \times 1/\sqrt{2}$$

■ Eigenvector 고유벡터 & Eigenvalue 고유값



- Eigenvector 선형변환 A를 했을 때, 방향이 변하지 않는 벡터
- Eigenvalue 벡터의 크기가 변하는 정도



### ■ Spectral Decomposition 스펙트럼 분해

### n차 대칭행렬 A

$$A = \lambda 1 * k 1 * k 1' + \lambda 2 * k 2 * k 2' + \dots + \lambda n * k n * k n'$$

$$= \Sigma \lambda i * k i * k i'$$

$$= \begin{bmatrix} k 1 & k 2 & \dots & k n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda 1 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda 2 & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \lambda n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k 1' \\ k 2' \\ \vdots \\ k n' \end{bmatrix}$$

P: 고유벡터의 열로 구성된 행렬

**= P\P** (단, PP' = P'P = I)

Λ: 고유값을 대각원소로 하는 대각행렬

n차 양정치행렬\* A의 성질

\*\*tr(A) = tr(P
$$\Lambda$$
P') = tr(P'P $\Lambda$ )  
= tr( $\Lambda$ ) =  $\Sigma \lambda i$ 

\*양의 정부호 행렬 == 양정치행렬

\*\*tr:trace, 행렬의 대각합

\*\*\*공분산행렬은 언제나 양정치행렬

### ■ Spectral Decomposition 스펙트럼 분해

### n차 대칭행렬 A

$$A = \lambda 1*k1*k1' + \lambda 2*k2*k2' + \dots + \lambda n*kn*kn'$$

$$= \Sigma \lambda i * ki * ki'$$

$$= \begin{bmatrix} k1 & k2 & \cdots & kn \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda1 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda2 & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k1' \\ k2' \\ \vdots \\ kn' \end{bmatrix}$$

P: 고유벡터의 열로 구성된 행렬

Λ: 고유값을 대각원소로 하는 대각행렬

### n차 양정치행렬\* A의 성질

\*\*tr(A) = tr(P
$$\Lambda$$
P') = tr(P'P $\Lambda$ )

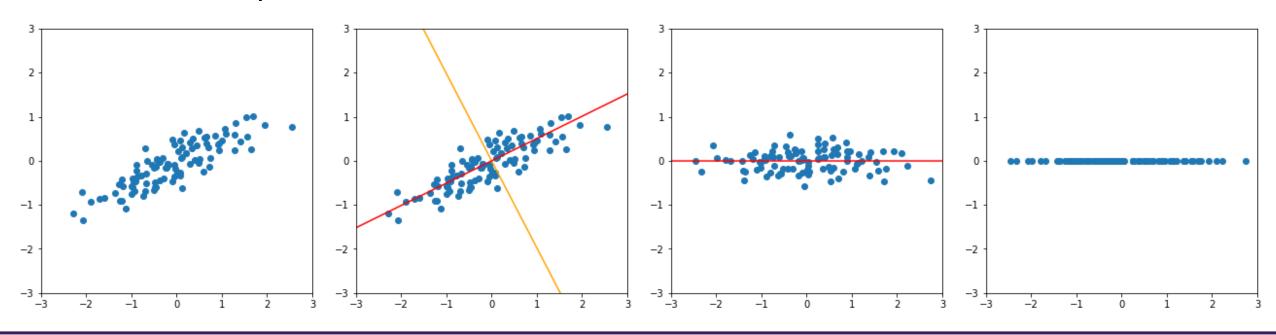
$$= \operatorname{tr}(\Lambda) = \Sigma \lambda i$$

\*양의 정부호 행렬 == 양정치행렬

\*\*tr:trace, 행렬의 대각합

\*\*\*공분산행렬은 언제나 양정치행렬

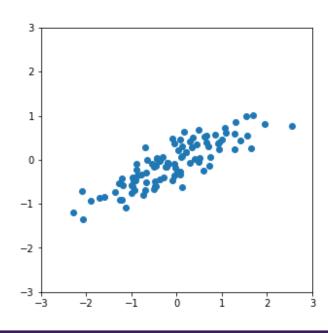
- Principal Component Analysis 주성분분석
  - : 변수들의 전체 분산을 최대한 설명하는 소수의 주성분을 통해 분석하는 방법
    - → 데이터의 구조 최대한 유지
    - → 서로 상관관계가 있는 변수들 사이의 복잡한 구조를 좀 더 간편하게 변환
    - → 기하학적 측면, 좌표축을 회전시켜 얻어진 새로운 좌표축을 선택



■ Principal Component Analysis 주성분분석

### 공분산행렬

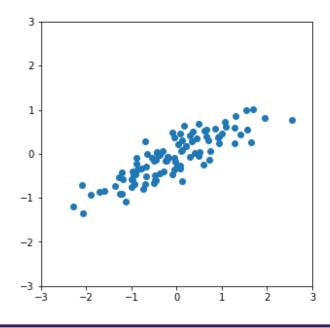
$$\Sigma = \begin{pmatrix} 0.879 & 0.415 \\ 0.415 & 0.268 \end{pmatrix}$$



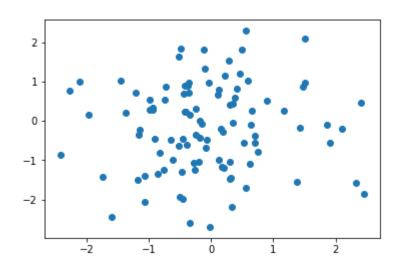
■ Principal Component Analysis 주성분분석

### <mark>공분산행렬</mark>

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 0.879 & 0.415 \\ 0.415 & 0.268 \end{pmatrix}$$



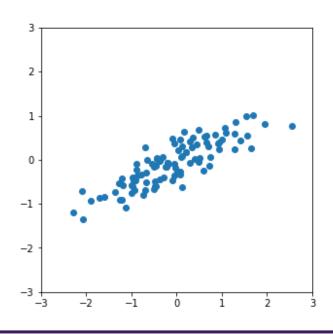




### ■ Principal Component Analysis 주성분분석

### 공분산행렬

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 0.879 & 0.415 \\ 0.415 & 0.268 \end{pmatrix}$$



### 공분산행렬 스펙트럼 분해

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 0.879 & 0.415 \\ 0.415 & 0.268 \end{pmatrix}$$

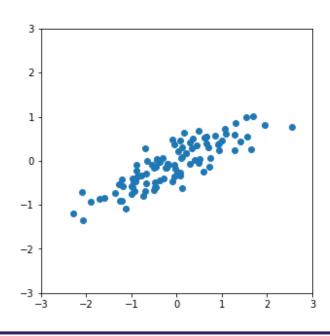
 $= P\Lambda P'$ 

$$=\begin{pmatrix} 0.8923 & -0.4514 \\ 0.4513 & 0.8923 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1.089 & 0 \\ 0 & 0.0058 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.8923 & 0.4513 \\ -0.4514 & 0.8923 \end{pmatrix}$$

### ■ Principal Component Analysis 주성분분석

### 공분산행렬

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 0.879 & 0.415 \\ 0.415 & 0.268 \end{pmatrix}$$



### 공분산행렬 스펙트럼 분해

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 0.879 & 0.415 \\ 0.415 & 0.268 \end{pmatrix}$$

$$= P\Lambda P'$$

$$= \begin{pmatrix} 0.8923 \\ 0.4513 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -0.4514 \\ 0.8923 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1.089 \\ 0 & 0.0058 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.8923 & 0.4513 \\ -0.4514 & 0.8923 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1.089 & 0.4513 \\ 0.8923 & 0.4513 \\ 0.8923 & 0.4514 \end{pmatrix}$$

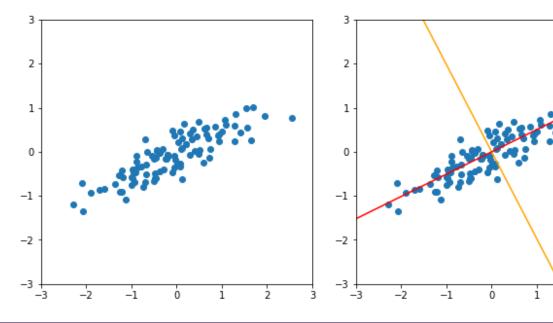
### ■ Principal Component Analysis 주성분분석

### 공분산행렬

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 0.879 & 0.415 \\ 0.415 & 0.268 \end{pmatrix}$$

$$\lambda 1 = 1.089 \& k1 = \begin{pmatrix} 0.8923 \\ 0.4513 \end{pmatrix}$$

$$\lambda 2 = 0.058 \& k2 = \begin{pmatrix} -0.4514 \\ 0.8923 \end{pmatrix}$$



### ■ Principal Component Analysis 주성분분석

### 공분산행렬

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 0.879 & 0.415 \\ 0.415 & 0.268 \end{pmatrix}$$



$$\lambda 2 = 0.058 \& k2 = \begin{pmatrix} -0.4514 \\ 0.8923 \end{pmatrix}$$



고유값 : 전체분산에 대한

주성분 PCi의 설명비율

total variance = 
$$tr(\Sigma)$$
 =  $tr(\Lambda)$  =  $\lambda 1$  + ... +  $\lambda n$   
var(PCi) =  $\lambda i$ 

- → 고유값이 큰 것부터 사용
- → 처음 k개 주성분의 설명비율 = (λ1+···+ λk) / total variance

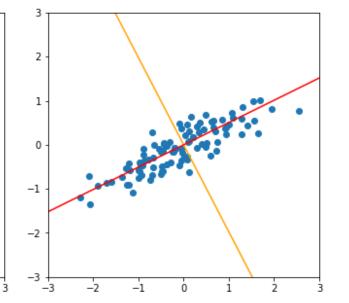
### ■ Principal Component Analysis 주성분분석

공분산행렬

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 0.879 & 0.415 \\ 0.415 & 0.268 \end{pmatrix}$$



$$\lambda 2 = 0.058 \& k2 = \begin{pmatrix} -0.4514 \\ 0.8923 \end{pmatrix}$$



고유벡터 : 데이터가 분산된 방향

고유값 : 전체분산에 대한

주성분 PCi의 설명비율

total variance = 
$$tr(\Sigma)$$
 =  $tr(\Lambda)$  =  $\lambda 1$  + ... +  $\lambda n$   
var(PCi) =  $\lambda i$ 

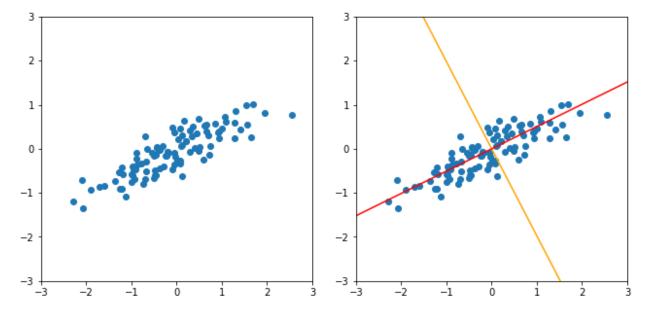
$$0.879(\sigma 1^2) + 0.268(\sigma 2^2)$$
$$= 1.089(\lambda 1) + 0.058(\lambda 2) = 1.147$$

### ■ Principal Component Analysis 주성분분석

 $\lambda 2 = 0.058 \& k2 = \begin{pmatrix} -0.4514 \\ 0.8923 \end{pmatrix}$ 

### 공분산행렬

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 0.879 & 0.415 \\ 0.415 & 0.268 \end{pmatrix}$$



### $\lambda 1 = 1.089 \& k1 = {0.8923 \choose 0.4513}$ 단! 공분산의 문제점 존재

- 측정단위에 영향을 받음
- <mark>정규화 사용</mark>

$$\rho = \begin{pmatrix} 1.0 & 0.858 \\ 0.858 & 1.0 \end{pmatrix}$$

$$\lambda 1 = 1.858 \Rightarrow \begin{pmatrix} 0.707 \\ 0.707 \end{pmatrix}$$

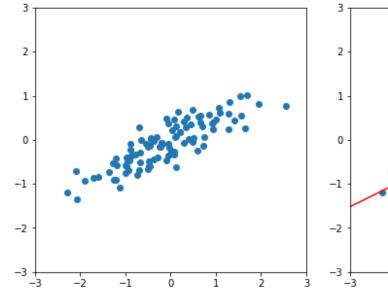
$$\lambda 2 = 0.142 \Rightarrow \begin{pmatrix} -0.707 \\ 0.707 \end{pmatrix}$$

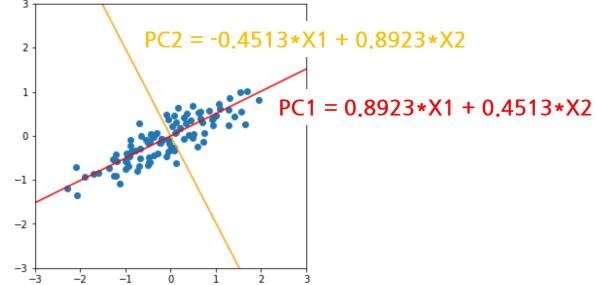
### ■ Principal Component Analysis 주성분분석

### 공분산행렬

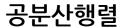
$$\Sigma = \begin{pmatrix} 0.879 & 0.415 \\ 0.415 & 0.268 \end{pmatrix}$$

$$\lambda 1 = 1.089 \& k1 = \begin{pmatrix} 0.8923 \\ 0.4513 \end{pmatrix}$$
 고유벡터 식교 
$$\lambda 2 = 0.058 \& k2 = \begin{pmatrix} -0.4514 \\ 0.8923 \end{pmatrix}$$





### ■ Principal Component Analysis 주성분분석



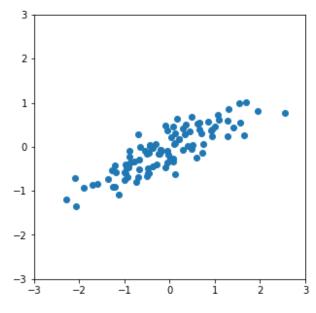
$$\Sigma = \begin{pmatrix} 0.879 & 0.415 \\ 0.415 & 0.268 \end{pmatrix}$$

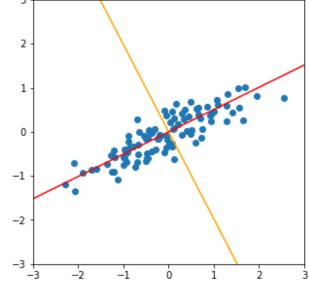
$$\lambda 1 = 1.089 \& k1 = \begin{pmatrix} 0.8923 \\ 0.4513 \end{pmatrix}$$

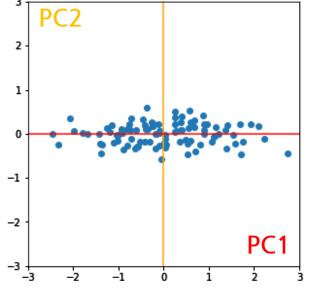
$$\lambda 2 = 0.058 \& k2 = \begin{pmatrix} -0.4514 \\ 0.8923 \end{pmatrix}$$

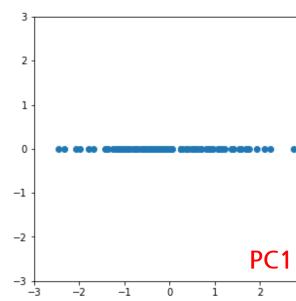
회전

### 주성분1만 사용

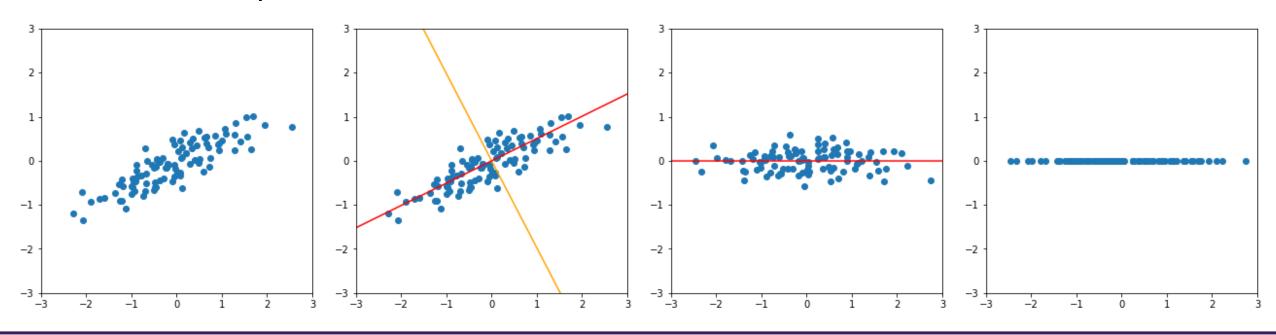




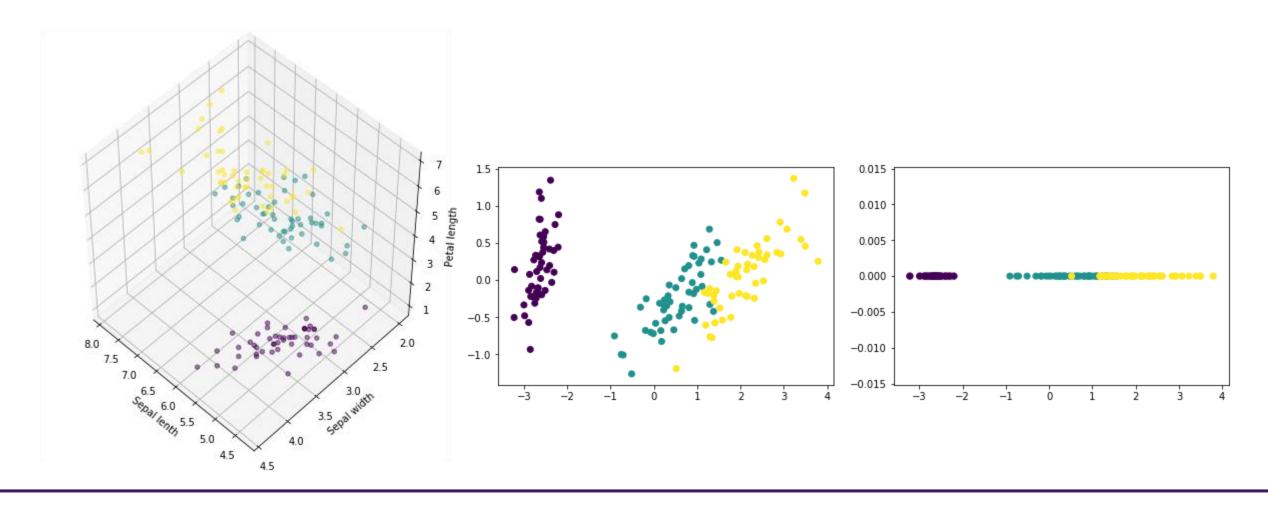




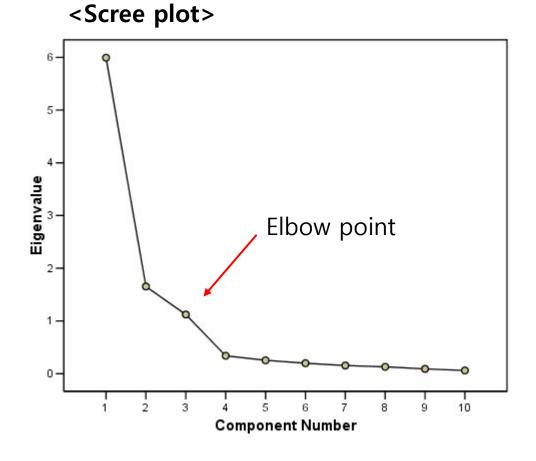
- Principal Component Analysis 주성분분석
  - : 변수들의 전체 분산을 최대한 설명하는 소수의 주성분을 통해 분석하는 방법
    - → 데이터의 구조 최대한 유지
    - → 서로 상관관계가 있는 변수들 사이의 복잡한 구조를 좀 더 간편하게 변환
    - → 기하학적 측면, 좌표축을 회전시켜 얻어진 새로운 좌표축을 선택



### ■ Principal Component Analysis 주성분분석



### ■ 주성분의 개수 k 결정



- 1. Elbow point
- : 곡선의 기울기가 급격히 감소하는 지점
- 2. Kaiser's Rule
- : 고유값이 1 이상
- 3. 누적설명률이 70%~80% 이상인 지점

### ■ PCA Regression 주성분 회귀분석

$$PC1 = a11*x1 + a12*x2 + ... + a1n*xn$$
  
 $PC2 = a21*x1 + a22*x2 + ... + a2n*xn$ 

$$y^* = b0 + b1PC1 + b2PC2$$
  
=  $b0 + b1(a11*x1 + a12*x2 + ... + a1n*xn) + b2(a21*x1 + a22*x2 + ... + a2n*xn)$   
=  $b0 + (b1*a11+b2*a21)x1 + (b1*a12+b2*a22)x2 + (b1*a1n+b2*a2n)xn$ 

- → X에 대한 선형 결합
- → 범주형자료는 사용 X
- → <mark>다른 알고리즘에 PC이용</mark>

### ※주의사항

Train dataset을 정규화 했으면, Test dataset을 정규화 할 때는 Train의 mean & std 사용

■ PCA Regression 주성분 회귀분석

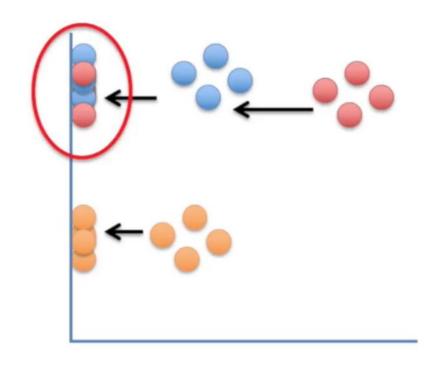
```
PC1 = a11*x1 + a12*x2 + ... + a1n*xn

PC2 = a21*x1 + a22*x2 + ... + a2n*xn

y^* = b0 + b1PC1 + b2PC2
= b0 + b1(a11*x1 + a12*x2 + ... + a12*x2 + ... + a2n*xn) + b2(a11*x1 + a22*x2 + ... + a2n*xn)
= b0 + (b1*a11+b2*a21)x1 + (b1*a12+b2*a22)x2 + (b1*a1n+b2*a2n)xn
```

- → X에 대한 선형 결합
- → 범주형자료는 사용 X
- → 다른 알고리즘에 PC이용

### ■ PCA의 문제점



선형으로 데이터를 투영

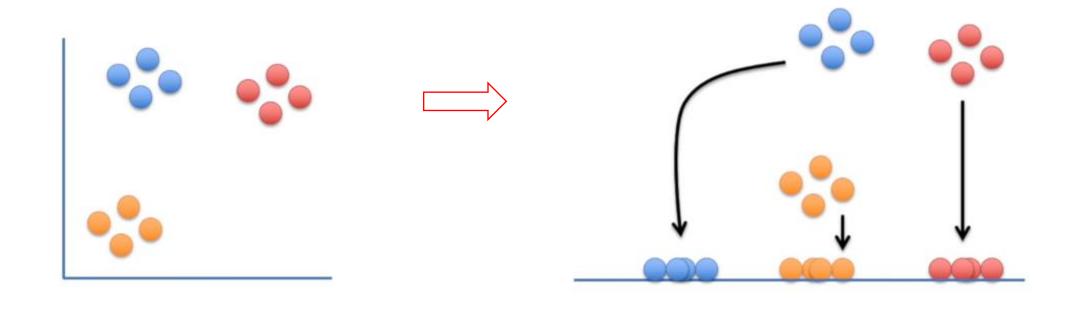
- → 군집화 되어있는 데이터들이 뭉게짐
- → 데이터 사이의 구별이 어려움
- → 군집의 변별력이 사라짐

t - Stochastic Neighbor Embedding

: 고차원에서 데이터 x와 이웃 간의 거리를 최대한 보존하는 저차원의 y를 학습시켜, 직관적으로 데이터 구조를 확인할 수 있도록 시각화 하는 기법

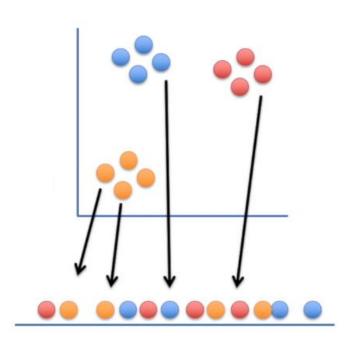
t - Stochastic Neighbor Embedding

: 고차원에서 데이터 x와 이웃 간의 거리를 최대한 보존하는 저차원의 y를 학습시켜, 직관적으로 <mark>데이터 구조를 확인</mark>할 수 있도록 시각화 하는 기법



### t - Stochastic Neighbor Embedding

: 고차원에서 데이터 x와 이웃 간의 거리를 최대한 보존하는 저차원의 y를 학습시켜, 직관적으로 데이터 구조를 확인할 수 있도록 시각화 하는 기법

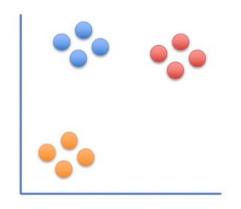


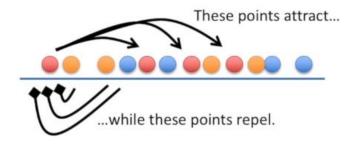
<t-SNE 과정>

1. 랜덤하게 배열

### t - Stochastic Neighbor Embedding

: 고차원에서 데이터 x와 이웃 간의 거리를 최대한 보존하는 저차원의 y를 학습시켜, 직관적으로 데이터 구조를 확인할 수 있도록 시각화 하는 기법



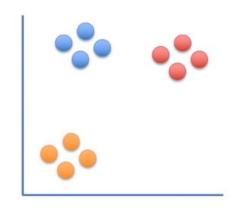


<t-SNE 과정>

- 1. 랜덤하게 배열
- 2. 동일 군집의 값은 가까이로, 다른 군집의 값은 멀리

### t - Stochastic Neighbor Embedding

: 고차원에서 데이터 x와 이웃 간의 거리를 최대한 보존하는 저차원의 y를 학습시켜, 직관적으로 데이터 구조를 확인할 수 있도록 시각화 하는 기법

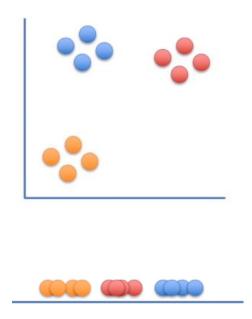




- 1. 랜덤하게 배열
- 2. 동일 군집의 값은 가까이로, 다른 군집의 값은 멀리
- 3. 균형이 되는 지점으로 이동

### t - Stochastic Neighbor Embedding

: 고차원에서 데이터 x와 이웃 간의 거리를 최대한 보존하는 저차원의 y를 학습시켜, 직관적으로 데이터 구조를 확인할 수 있도록 시각화 하는 기법



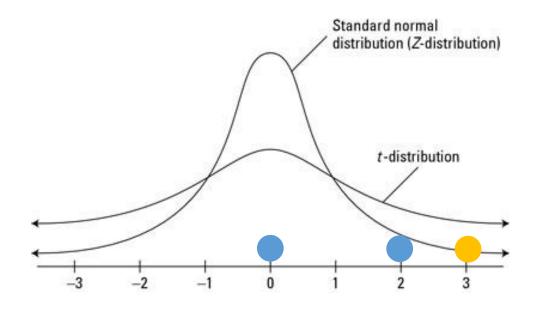
〈t-SNE 과정〉

- 1. 랜덤하게 배열
- 2. 동일 군집의 값은 가까이로, 다른 군집의 값은 멀리
- 3. 균형이 되는 지점으로 이동
- 4. 2&3 반복 후 군집끼리 가까이 이동

### t - Stochastic Neighbor Embedding

: 고차원에서 데이터 x와 이웃 간의 거리를 최대한 보존하는 저차원의 y를 학습시켜, 직관적으로 데이터 구조를 확인할 수 있도록 시각화 하는 기법

- → 데이터의 군집성 유지
- → 가까운 이웃(동일 군집 데이터)의 거리만을 유지



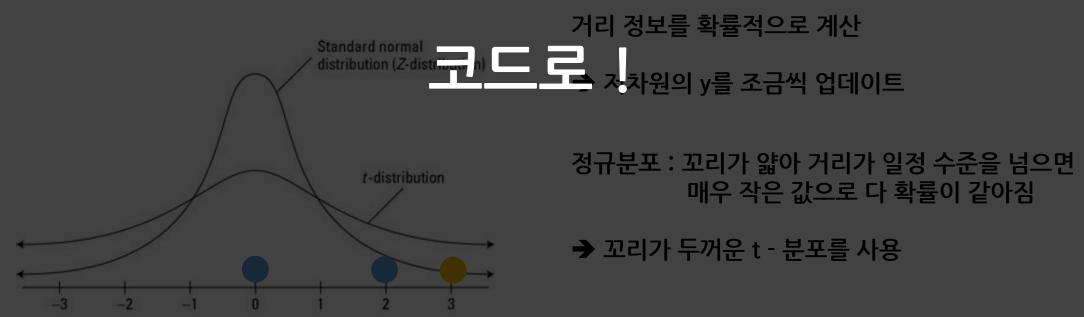
거리 정보를 확률적으로 계산

→ 저차원의 y를 조금씩 업데이트

정규분포 : 꼬리가 얇아 거리가 일정 수준을 넘으면 매우 작은 값으로 다 확률이 같아짐

→ 꼬리가 두꺼운 t - 분포를 사용

- t Stochastic Neighbor Embedding
  - : 고차원에서 데이터 x와 이웃 간의 거리를 최대한 보존하는 저차원의 y를 학습시켜, 직관적으로 데이터 구조를 확인할 수 있도록 시각화 하는 기법
    - → 데이터의 군집성 유지
    - → 가까운 이웃(동일 군집 데이터)의 거리만을 유지



- t Stochastic Neighbor Embedding
  - : 고차원에서 데이터 x와 이웃 간의 거리를 최대한 보존하는 저차원의 y를 학습시켜, 직관적으로 데이터 구조를 확인할 수 있도록 시각화 하는 기법
    - → 데이터의 군집성 유지
    - → 가까운 이웃(동일 군집 데이터)의 거리만을 유지

### ※ 문제점

계속 업데이트하는 방식으로 변형된 값이 매번 바뀜

→ t-SNE 결과를 새로운 feature로 사용 불가능

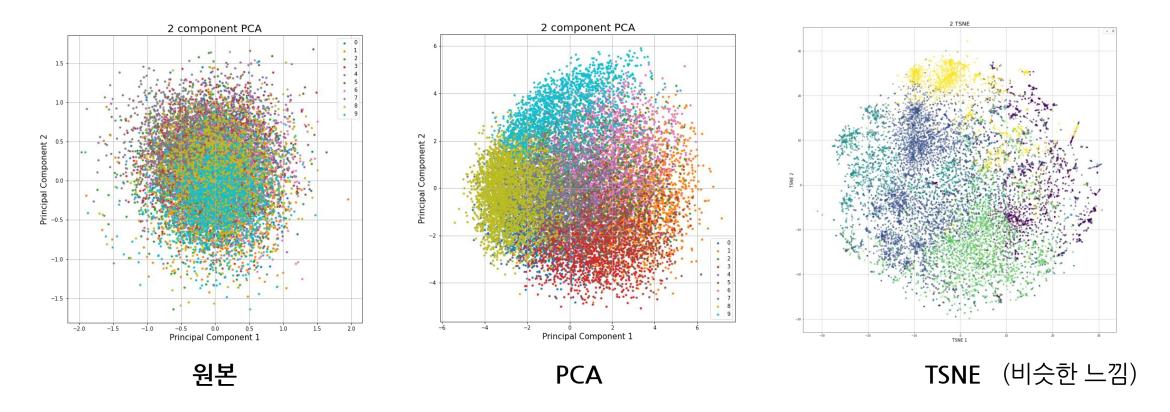
군집만 유지하고 값이 완전히 변화

### Unit 05 | Assignment

- Q1. PCA를 직접 구현한 myPCA
- Q2. 단어 임베딩 벡터 시각화
  - → kmeans로 n=10 군집화
  - → 차원축소 전 데이터로 시각화
  - → PCA & TSNE로 시각화
- Q3. 축소 전 데이터와 PCA축소 데이터 training 시간 비교
  - → train 데이터 로드 후 train과 test(20%) 로 split
  - → 원본 데이터로 knn과 svm 적용 + 타임스탬프
  - → 축소 데이터로 knn과 svm 적용 + 타임 스템프
  - → training 시간 비교 & test accuracy 비교

### Unit 05 | Assignment

### Q2 결과



### Unit 00 | 참고자료

# 공돌이의 수학정리노트 → 자세한 수학적 접근

PCA: <a href="https://wikidocs.net/7646">https://wikidocs.net/7646</a>
<a href="mailto:Eigen">Eigen: https://wikidocs.net/4050</a>

# ratsgo's blog → 상세한 예시와 R코드

PCA: <a href="https://ratsgo.github.io/machine%20learning/2017/04/24/PCA/">https://ratsgo.github.io/machine%20learning/2017/04/24/PCA/</a> t-SNE: <a href="https://ratsgo.github.io/machine%20learning/2017/04/28/tSNE/">https://ratsgo.github.io/machine%20learning/2017/04/28/tSNE/</a>

# 조대협의 블로그 → Python 코드

PCA: <a href="https://bcho.tistory.com/1209?category=555440">https://bcho.tistory.com/1209?category=555440</a>

t-SNE: <a href="https://bcho.tistory.com/1210">https://bcho.tistory.com/1210</a>

# 꼬깔콘의 분석일지 → 차원의 저주 https://kkokkilkon.tistory.com/127

# t-SNE 관련 youtube https://www.youtube.com/watch?v=NEaUSP4YerM # 책 : 응용다변량분석 (성웅현)

## Q & A

들어주셔서 감사합니다.