차원 축소와 척도 학습

10.4 커널 선형 차원 축소
10.5 매니폴드 학습
- Isomap
- LLE

10.6 척도 학습

10.4.0. 후반부의 내용

Data set 특성의 증가 → 각 특성에 대해 차원 증가

↓

차원의 증가 → 부피가 기하급수적으로 증가, 데이터의 밀도 희소

↓

점 간의 거리가 증가 → 과적합 발생험!

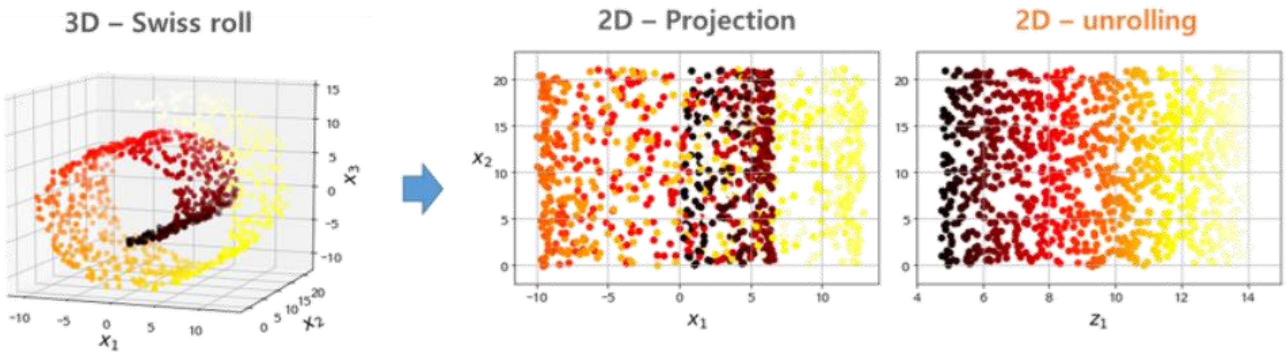
↓

차원 축소 필요

10.4.0. 후반부의 내용

차원 축소의 두 가지 접근법

- 투영projection : 실제 데이터 셋은 서로 연관된 특성을 가진다. 즉, 특성(차원)이 고르게 분포되어 있지 않다. 데이터 셋은 고차원 공간에서 저차원 부분공간 위에 위치하게 되며, 이를 하나의 특성(차원)으로 표현할 수 있다는 말이 된다. 이를 통해 고차원의 데이터를 저차원으로 투영해 저차원의 데이터 셋으로 만들 수 있다.
- 매니폴드 학습manifold learning: 매니폴드(다양체) 국소적으로 유클리드 공간과 닮은 위상공간이다. 데이터 셋이 위상수학적 구조를 가질 수 있다는 가정에 의해, 고차원인 실제 데이터셋이 더 낮은 저차원 매니폴드에 가깝게 놓여있다고 가정해 차원을 축소시키는 방식이다. 대부분의 차원 축소 알고리즘이 매니폴드를 모델링하는 방식으로 동작된다.



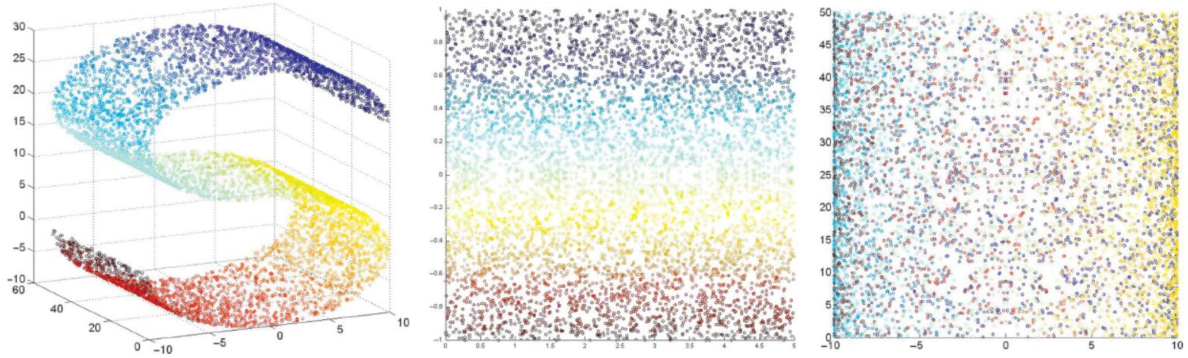
10.4.1 커널 선형 차원 축소

- 선형 차원 축소: 고차원 공간에서 저차원 공간으로 매핑하는 함수가 선형이라고 가정.

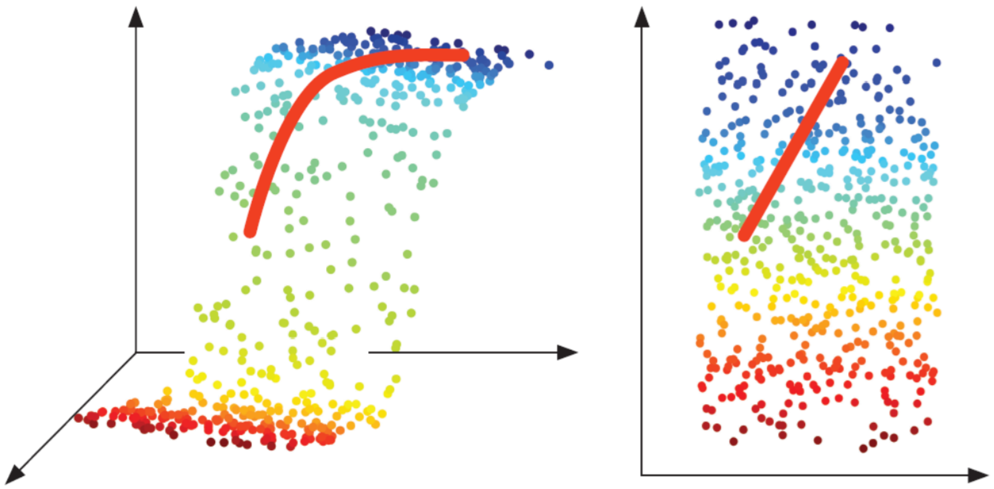
선형 차원 축소의 한계 → 많은 현실 문제는 비선형으로 매핑해야 할 경우가 많음.

- 비선형 차원 축소: 커널 트릭을 통해 선형 차원 축소법에 대해 커널화를 진행. – svm 학습법에서 자세하게 다뤄짐.

  ex) KPCA(커널 주성분 분석) - PCA에 적용 & 비선형 투영으로 차원을 축소



(a) 3차원 공간 (b) 고유 저차원 공간 (c) PCA 차원 축소 결과



(a) 3차원 공간에서 관측한 샘플 포인트 (b) 2차원 공간의 곡면

10.4.2 매니폴드 학습

매니폴드 학습: 위상학 개념을 빌린 차원 축소 방법. (매니폴드 - 국소적으로 유클리드 공간과 동형인 공간.)

장점: 차원의 수가 2차원이나 3차원으로 줄어들 때, 데이터에 대한 시각화 가능.

데이터 전처리 때 유용. → SVM, Decision Tree 등 다양한 학습법을 적용하기 전,

데이터를 정제함으로써 학습법의 성능을 올릴 수 있음.

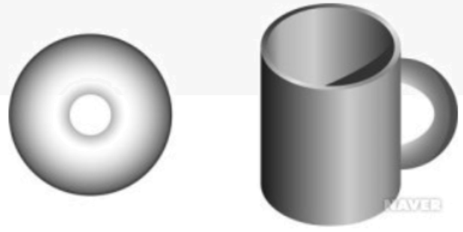
- Isomap – 근접 샘플 사이의 거리를 보존. (고전 알고리즘)
- 국소적 선형 임베딩(Locally Linear Embedding, LEE) – 영역 내 샘플의 선형 관계를 유지 (LLE를 기반으로 한 다양한 알고리즘이 존재)

10.4.2 위상학, 동형

- 매니폴드 학습: 위상학 개념을 빌린 차원 축소 방법. (매니폴드 - 국소적으로 유클리드 공간과 동형인 공간.)

위상학: 연결성이나 연속성 등, 작은 변환에 의존하지 않는 기하학적 성질들을 다루는 수학의 한 분야

예시는 손잡이가 있는 컵과 도넛, 그리고 안이 꽉 찬 찰흙공과 접시의 같음과 다름을 구분하는 것이다. 어떤 물체를 변형하는데 구부리거나, 늘이거나, 줄일 수 있지만 구멍을 뚫을 수는 없다고 할 때, 찰흙공은 적절한 변형을 통해 접시와 같은 형태로 만들 수 있다. 마찬가지로 컵은 도넛 모양의 찰흙 모형을 가지고 적절한 변형을 통해 손잡이가 있는 컵과 같은 형태로 만들 수 있다.
하지만 찰흙공은 뚫지 않고서는 도넛과 같은 모양이 될 수 없다. 위상수학에서는 손잡이가 있는 컵과 도넛을 같은 형태로, 찰흙공과 접시를 같은 형태로 생각한다. 마찬가지로 도넛과 접시는 다른 형태이다. 이 때, 같은 형태라고 할 수 있는 사물들 사이에 변하지 않는 어떤 공통된 성질을 연구하는 학문으로 위상수학을 소개할 수 있다.
위상수학에서는 위상적 불변성을 공유하는 동형들을 구부리고, 늘이고, 줄이는 것과 같은 변형을 통해 같은 형태로 만들 수 있을 때 같은 도형들로 생각한다. 그리고 위상 수학에서 같은 도형들의 관계는 '동형'이라 일컫는다.
[출처: 네이버 지식백과, 위상수학(Topology)]



손잡이가 있는 컵과 도넛

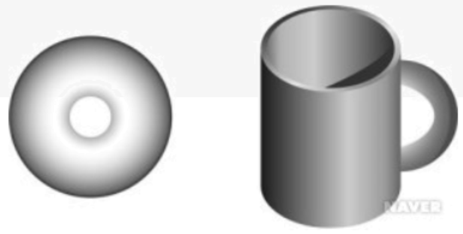
10.4.2 위상학, 동형

국소적으로 유클리드 공간의 성질이 있고,
유클리드 거리를 통해 거리를 계산 가능

- 매니폴드 학습: 위상학 개념을 빌린 차원 축소 방법. (매니폴드 - 국소적으로 유클리드 공간과 동형인 공간.)

위상학: 연결성이나 연속성 등, 작은 변환에 의존하지 않는 기하학적 성질들을 다루는 수학의 한 분야

예시는 손잡이가 있는 컵과 도넛, 그리고 안이 꽉 찬 찰흙공과 접시의 같음과 다름을 구분하는 것이다. 어떤 물체를 변형하는데 구부리거나, 늘이거나, 줄일 수 있지만 구멍을 뚫을 수는 없다고 할 때, 찰흙공은 적절한 변형을 통해 접시와 같은 형태로 만들 수 있다. 마찬가지로 컵은 도넛 모양의 찰흙 모형을 가지고 적절한 변형을 통해 손잡이가 있는 컵과 같은 형태로 만들 수 있다.
하지만 찰흙공은 뚫지 않고서는 도넛과 같은 모양이 될 수 없다. 위상수학에서는 손잡이가 있는 컵과 도넛을 같은 형태로, 찰흙공과 접시를 같은 형태로 생각한다. 마찬가지로 도넛과 접시는 다른 형태이다. 이 때, 같은 형태라고 할 수 있는 사물들 사이에 변하지 않는 어떤 공통된 성질을 연구하는 학문으로 위상수학을 소개할 수 있다.
위상수학에서는 위상적 불변성을 공유하는 동형들을 구부리고, 늘이고, 줄이는 것과 같은 변형을 통해 같은 형태로 만들 수 있을 때 같은 도형들로 생각한다. 그리고 위상 수학에서 같은 도형들의 관계는 '동형'이라 일컫는다.
[출처: 네이버 지식백과, 위상수학(Topology)]



손잡이가 있는 컵과 도넛

10.4.2 매니폴드 학습

매니폴드 학습: 위상학 개념을 빌린 차원 축소 방법. (매니폴드 - 국소적으로 유클리드 공간과 동형인 공간.)

장점: 차원의 수가 2차원이나 3차원으로 줄어들 때, 데이터에 대한 시각화 가능.

데이터 전처리 때 유용. → SVM, Decision Tree 등 다양한 학습법을 적용하기 전,

데이터를 정제함으로써 학습법의 성능을 올릴 수 있음.

- Isomap – 근접 샘플 사이의 거리를 보존. (고전 알고리즘)
- 국소적 선형 임베딩(Locally Linear Embedding, LEE) – 영역 내 샘플의 선형 관계를 유지

10.5.1 Isomap

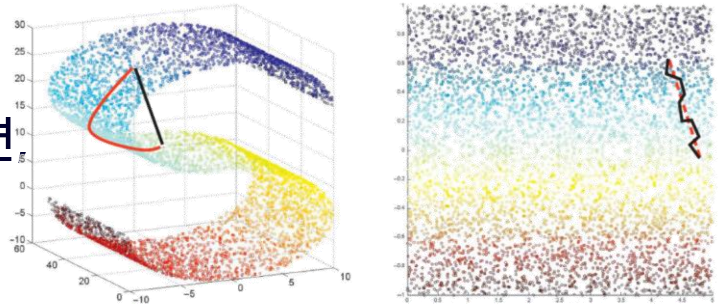
아이디어

→ 저차원 매니폴드를 고차원 공간으로 임베딩한 후 직접 고차원 공간 내에서 직선 거리를 계산하는 것이 적절하지 않다. 매니폴드가 국소적으로 유클리드 공간과 동형인 성질이 있다는 것을 이용해서 각 점에 대해 유클리드 거리에 기반해 최근접 이웃 점들을 찾아 최근접 이웃 그래프를 구축한다. 최근접 이웃 거리에 가까우면 저차원 매니폴드 상의 측지선 거리의 근삿값을 얻을 수 있다.

- 측지선이란? 저차원 매니폴드상에서 두 점 간의 거리

  벌레 한마리가 한 점에서 다른 한 점까지 기어가는 것을 상상해 보면,

  곡면 위를 벗어날 수 없는 상황에서는 빨간색 선이 최단 거리가 됨.



(a) 측지선 거리와 고차원 직선 거리 (b) 측지선 거리와 근접 이웃 거리

그림 10.7 \ 저차원 임베딩 매니폴드상의 측지선 거리(빨간색)는 고차원 공간에서 직선 거리 계산을 사용할 수 없다. 하지만 최근접 이웃 거리를 이용해 근삿값을 계산할 수 있다

10.5.1 Isomap 알고리즘

1단계. 인접한 이웃 그래프 구축: 유클리드 거리로 계산.

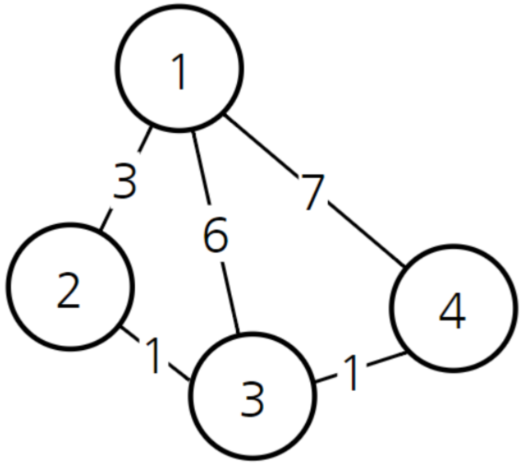
2단계. 두 점 간의 최단 경로 그래프 계산: 다익스트라 알고리즘, 플로이드 알고리즘 등 이용

3단계. MDS 방법론(10.2절)을 사용하여 d차원 임베딩 구축

최근접 이웃 연결 그래프에서 실제 거리(거리는 최소) 구하는 방법

다익스트라 알고리즘

→ 출발-도착 노드의 최단 경로를 찾는 알고리즘



- 각 점의 가장 가까운 이웃과 연결하는 식의 그래프.
- 두 노드 사이의 최단 경로를 구함.
- 간선의 가중치 = 두 연결된 점(노드) 사이의 유클리디안 거리

10.5.2 국소적 선형 임베딩 LLE

아이디어

→ 근접 샘플 사이의 거리를 보존하는 Isomap과 달리 영역 내 샘플이 선형 관계를 유지.

국소적 선형 임베딩(Local Linear Embedding, LLE): 고차원의 공간에서 인접해 있는 점(데이터)들 사이의 선형적 구조를 보존하면서 저차원으로 임베딩하는 방법론.

10.5.2 LLE 알고리즘: 선형대수의 방법으로 계산

1단계. 가장 가까운 이웃 검색

각 점에서 k개의 이웃을 구함.

2단계. 가중치 매트릭스 구성

현재의 데이터를 나머지 k개의 데이터의 가중치의 합을 뺄 때 최소가 되는 가중치 행렬을 구함.

$$E(W) = \sum_i \left| x_i - \sum_j W_{ij} x_j \right|^2$$

3단계. 부분 고유치 분해

앞서 구한 가중치를 최대한 보존하며 차원 축소.

이때 차원 축소된 후의 점을 Y로 표현→ 차원 축소된 Yj와의 값 차이를 최소화하는 Y를 구함.

$$\Phi(W) = \sum_i \left| y_i - \sum_j W_i k y_j \right|^2$$

10.6 척도학습

고차원 데이터를 차원 축소하는 목적 → 적합한 저차원 공간을 찾는 것.

이유: 차원 축소된 공간이 원시 공간에서 학습하는 것보다 성능이 좋음.

실제로 각 공간은 샘플속성 위에서 정의한 하나의 거리 척도에 대응함.

적합한 공간을 찾는 것 = 적합한 거리 척도를 찾는 것

척도학습의 동기: 차원 축소 때, 적합한 공간을 찾는 것