APRENDIZADO DE MÁQUINA

REDUÇÃO DE DIMENSIONALIDADE

PROF. RONALDO CRISTIANO PRATI

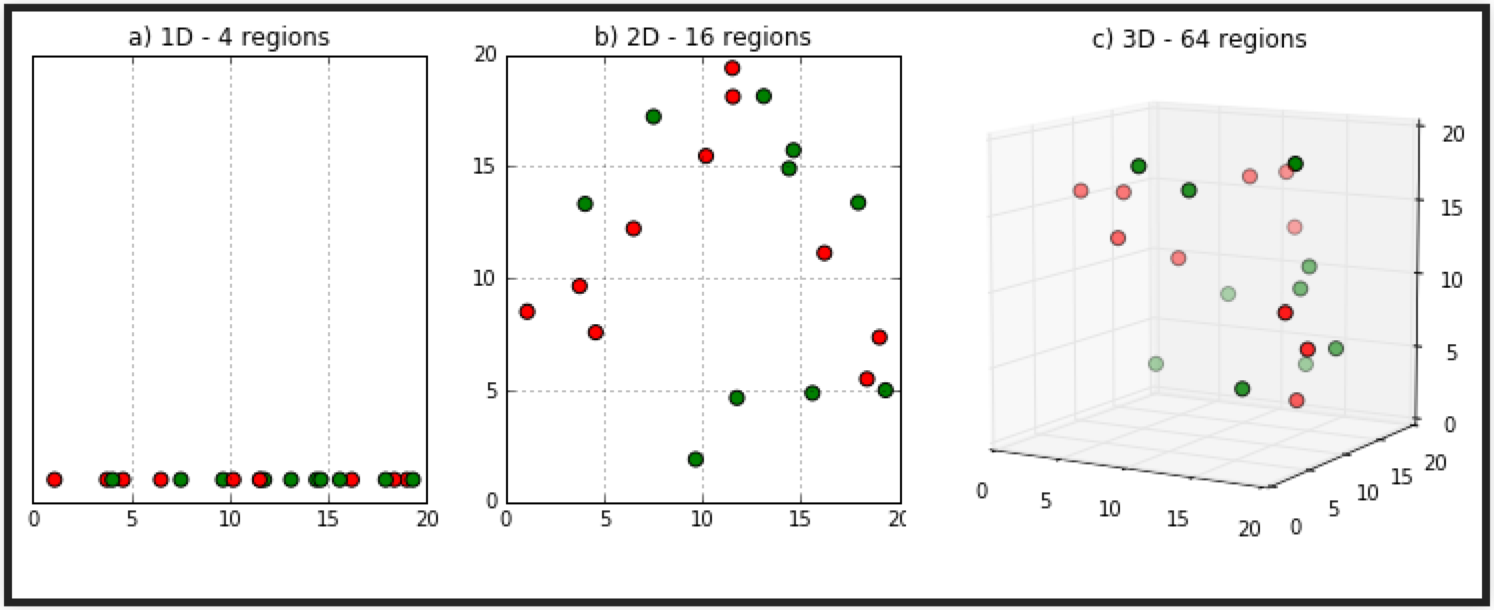
ronaldo.prati@ufabc.edu.br

Bloco A, sala 513-2

MALDIÇÃO DA DIMENSIONALIDADE

- A princípio, aumentar o número de atributos tem o potencial de melhorar o desempenho
- Na prática, em muitos casos, mais atributos podem levar a uma degração no desempenho
- Número de exemplos de treinamento necessário cresce exponencialmente com o número de dimensões

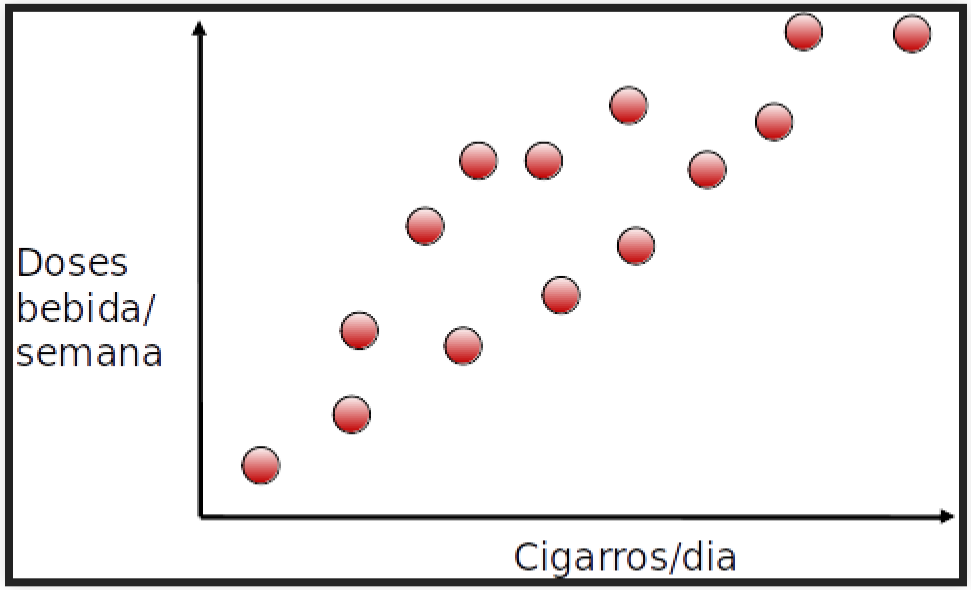
MALDIÇÃO DA DIMENSIONALIDADE



REDUÇÃO DA DIMENSIONALIDADE

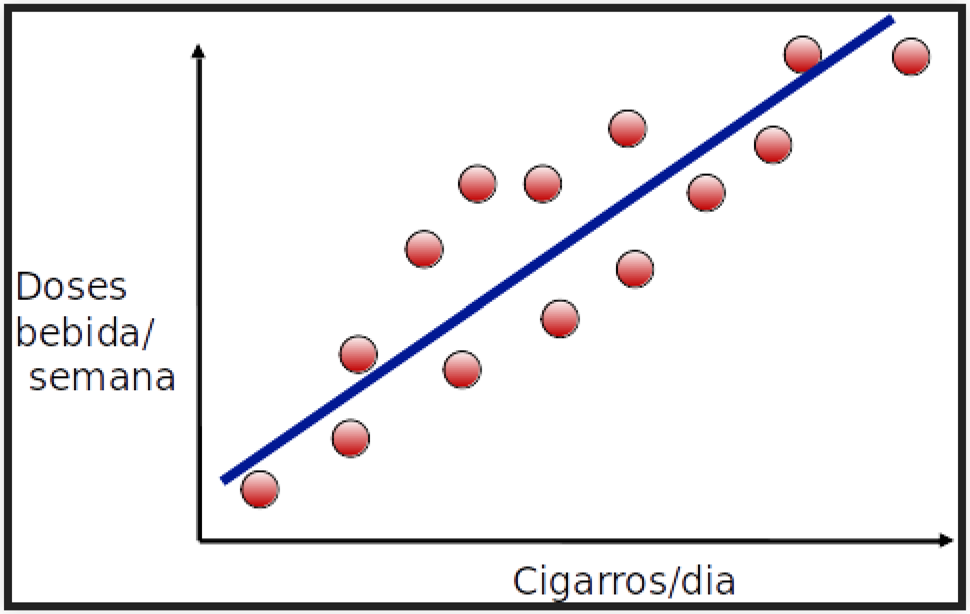
- Em muitos casos, podemos reduzir a dimensionalidade dos dados
  - **Selecionar** um subconjunto de atributos mais relevantes
  - **Combinar** atributos usando transformações (lineares ou não lineares)

TRANSFORMAÇÃO DE ATRIBUTOS



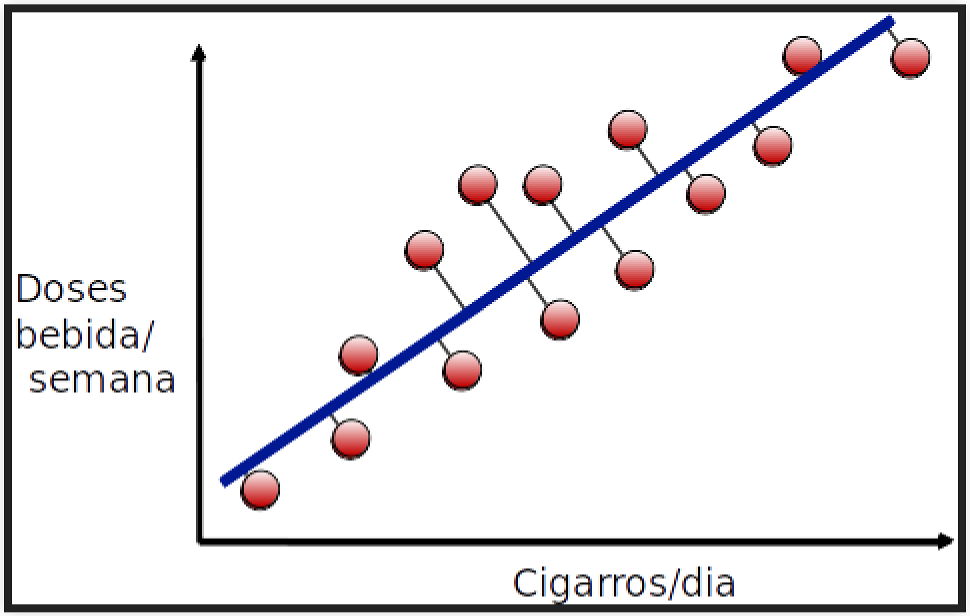
- Ambos atributos crescem juntos (estão correlacionados)
- Podemos combiná-los em um único atributo?

TRANSFORMAÇÃO DE ATRIBUTOS



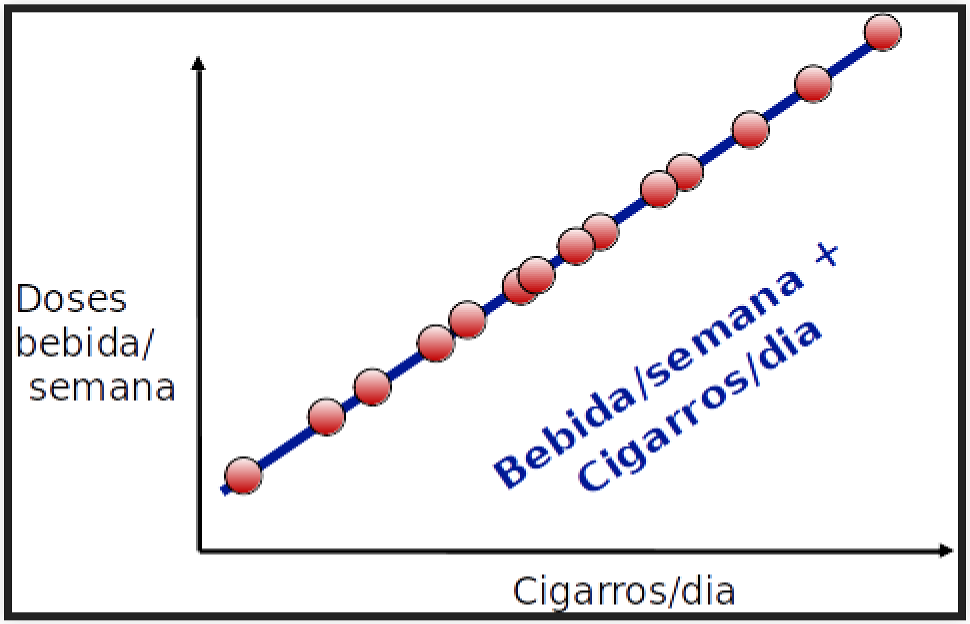
- Podemos encontrar a linha que minimiza a distância dos pontos à linha

TRANSFORMAÇÃO DE ATRIBUTOS



- E projetar os pontos nessa linha

TRANSFORMAÇÃO DE ATRIBUTOS



- Essa projeção é representada por um único atributo que faz uma combinação linear eentre bebida/semana e cigarros/dia

TRANSFORMAÇÃO DE ATRIBUTOS

- Esse é o princípio por trás da Análise de Componentes principais
- Dado um conjunto de dados com n dimensões, encontrar uma projeção linear em p dimensões, de maneira que $p < n$.
- Essa projeção deve minimizar a perda de informação.

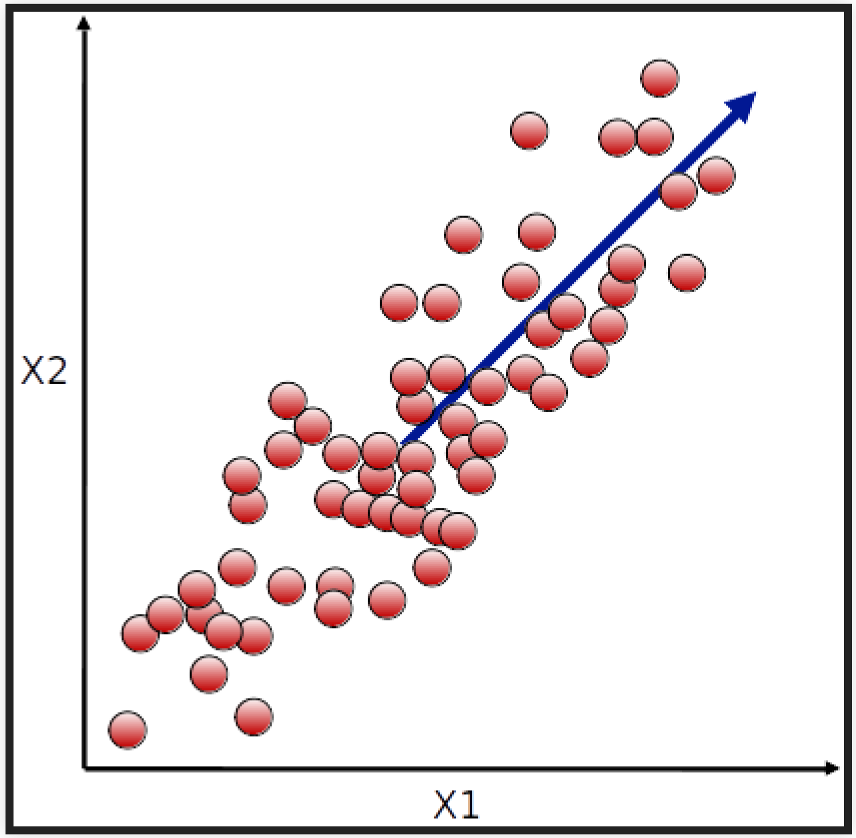
PCA

- Dado um conjunto de dados n-dimensional, encontrar uma matriz U de dimensões $n \times k$ tal que:
  - $z = U^\intercal x$, em que z tem uma dimensão $k < n$.
  - Minimizar o erro de projeção
  - As novas variáveis de z são linearmente não correlacionadas.

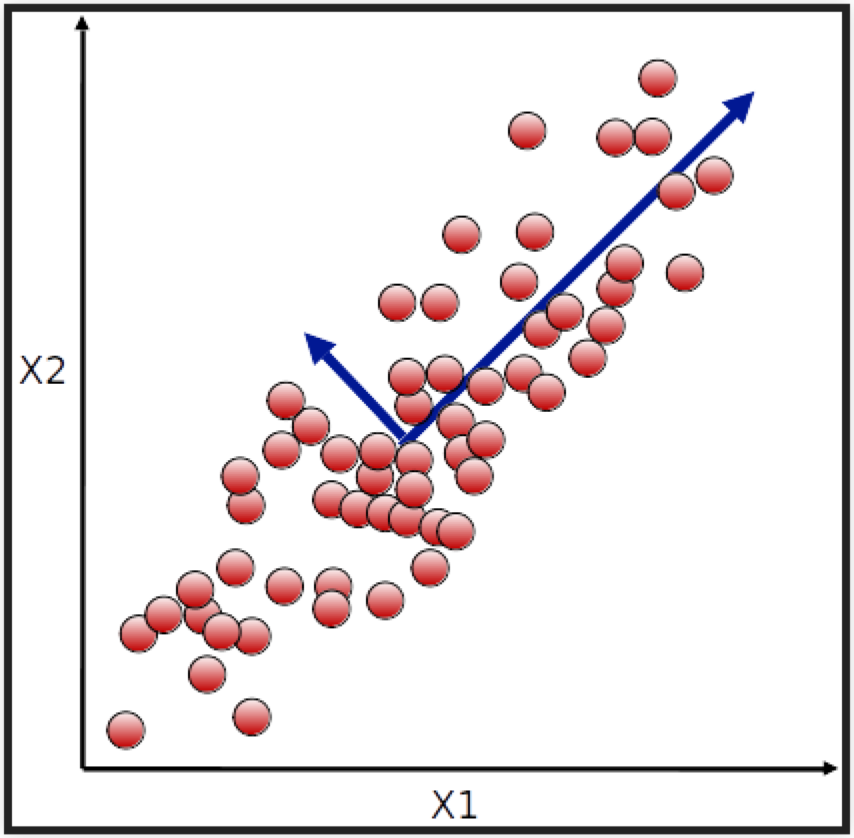
PCA

- Como encontrar a matriz U?
  - O vetor u^1 (primeira coluna de U) indica a direção de maior variância de X
  - O segundo vetor u^2 indica a próxima direção de maior variância, desconsiderando a primeira
  - E assim por diante

PCA



PCA

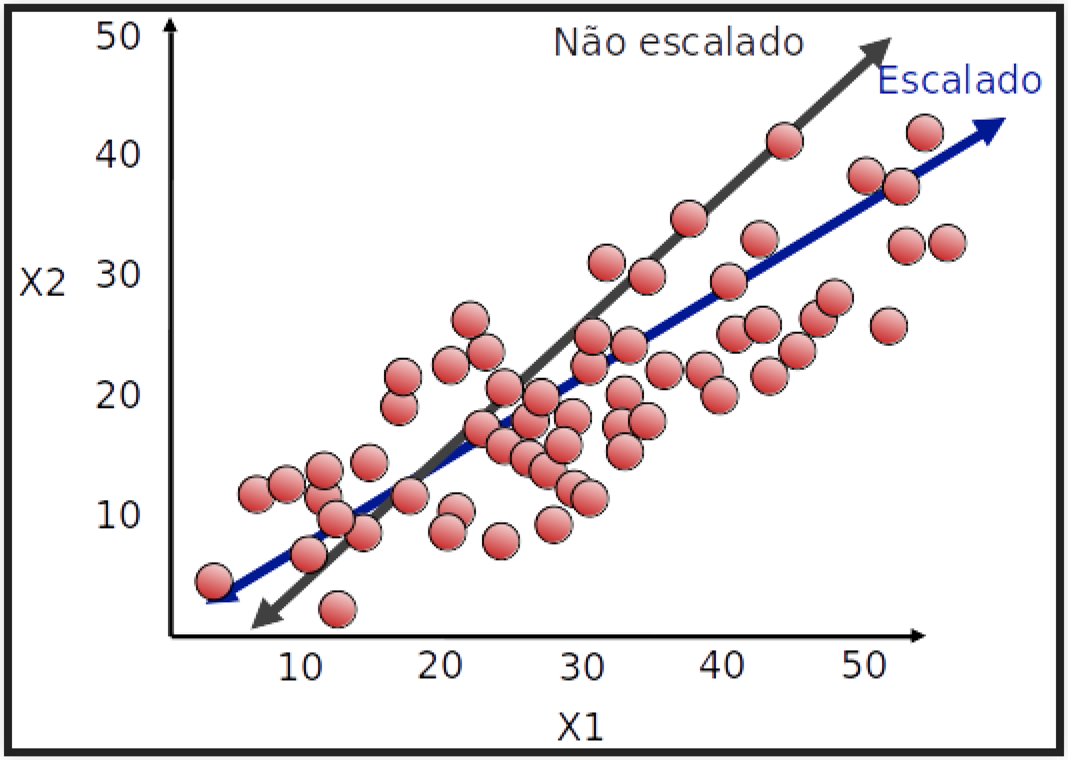


PCA

- Como encontrar a matriz U?
  - Centrar os dados (para cada atributo, subtrair a média)
  - Eventualmente colocar na mesma escala (dividir pela variância)
- Os vetores u^i são os auto-vetores da matriz de correlação de x

AJUSTE DE ESCALA

- Variância é sensível a escala



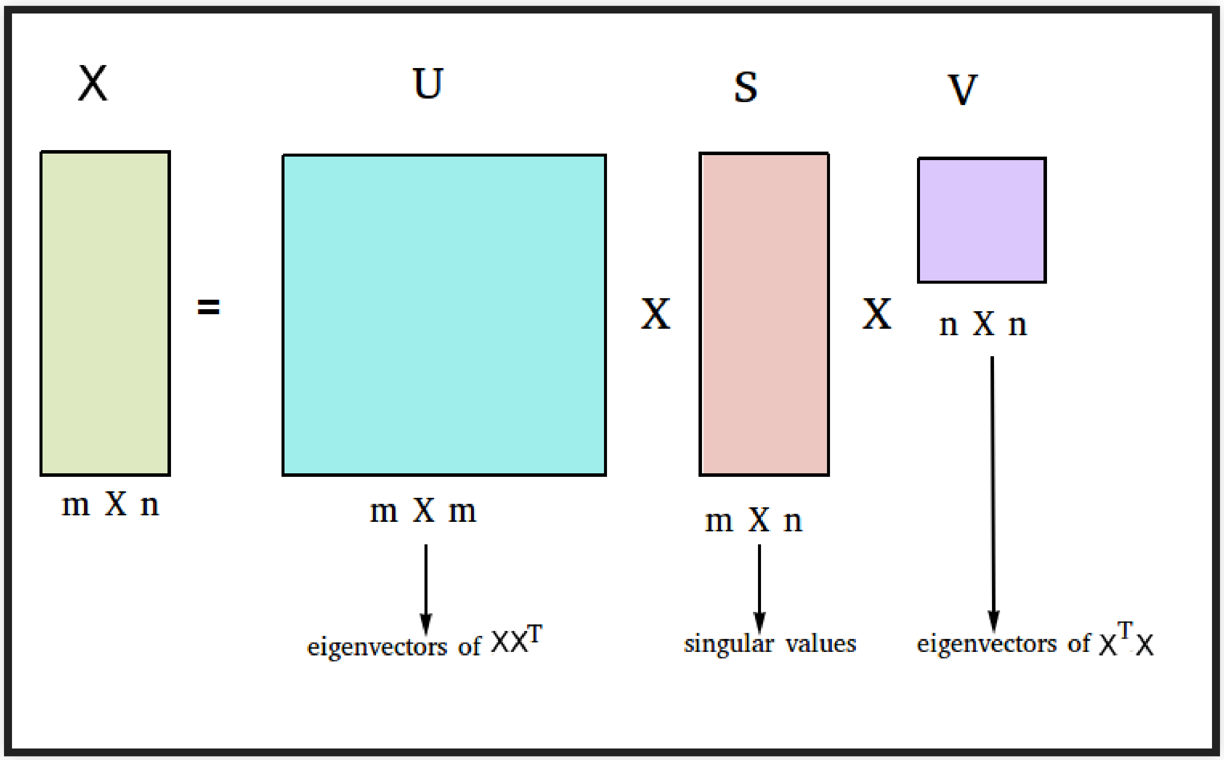
MATRIZ DE CORRELAÇÃO

- Correlação de cada atributo com os demais

$$XX^\intercal = \begin{bmatrix} \sigma(x_1, x_1), \sigma(x_1, x_2), \ldots, \sigma(x_1, x_n) \\ \sigma(x_2, x_1), \sigma(x_2, x_2), \ldots, \sigma(x_2, x_n) \\ \vdots \\ \sigma(x_n, x_1), \sigma(x_n, x_2), \ldots, \sigma(x_n, x_n) \end{bmatrix}$$

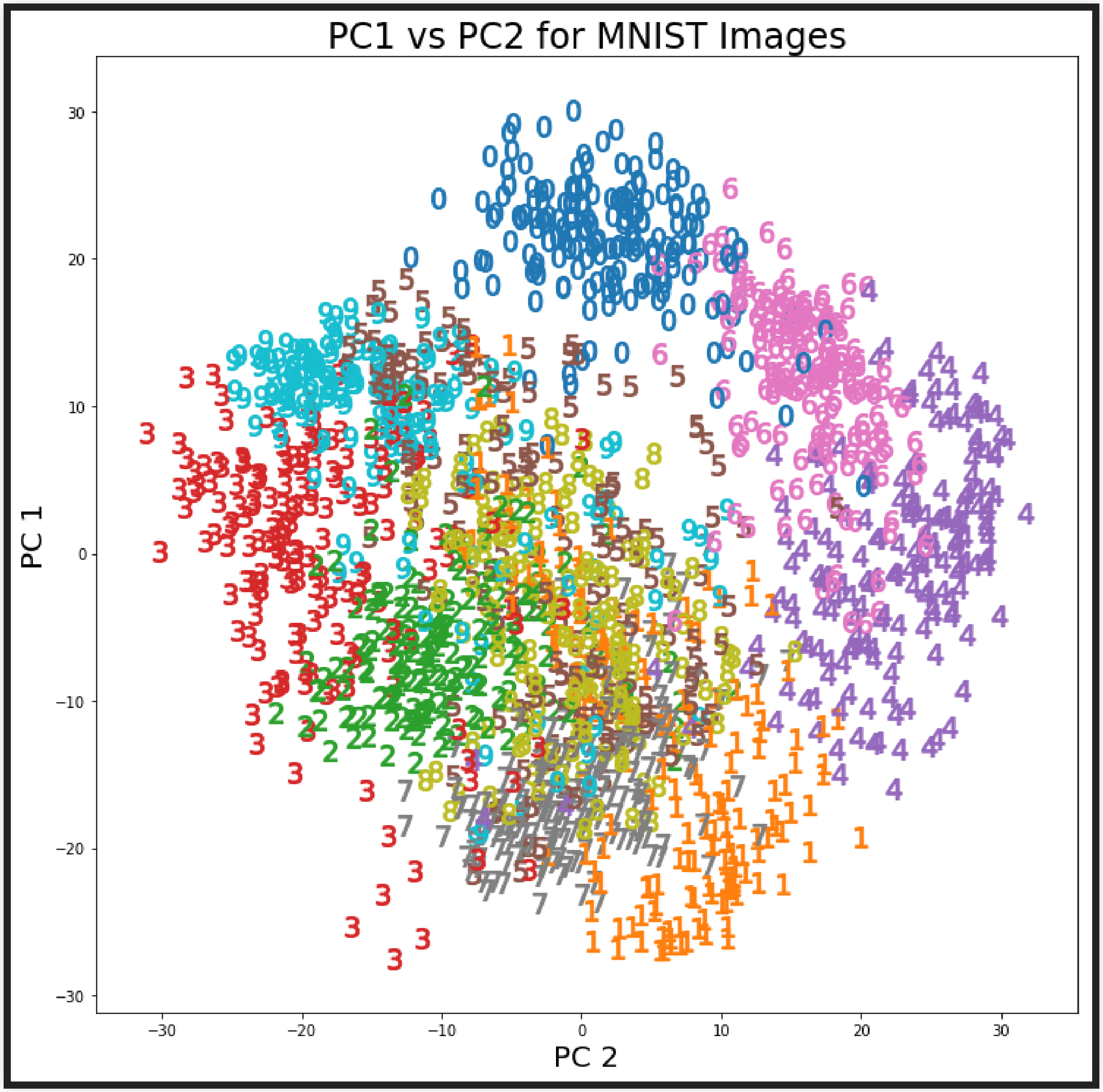
SVD

- Uma maneira de computar os auto-vetores de M é usar decomposição em valores singulares (SVD)



SVD E PCA

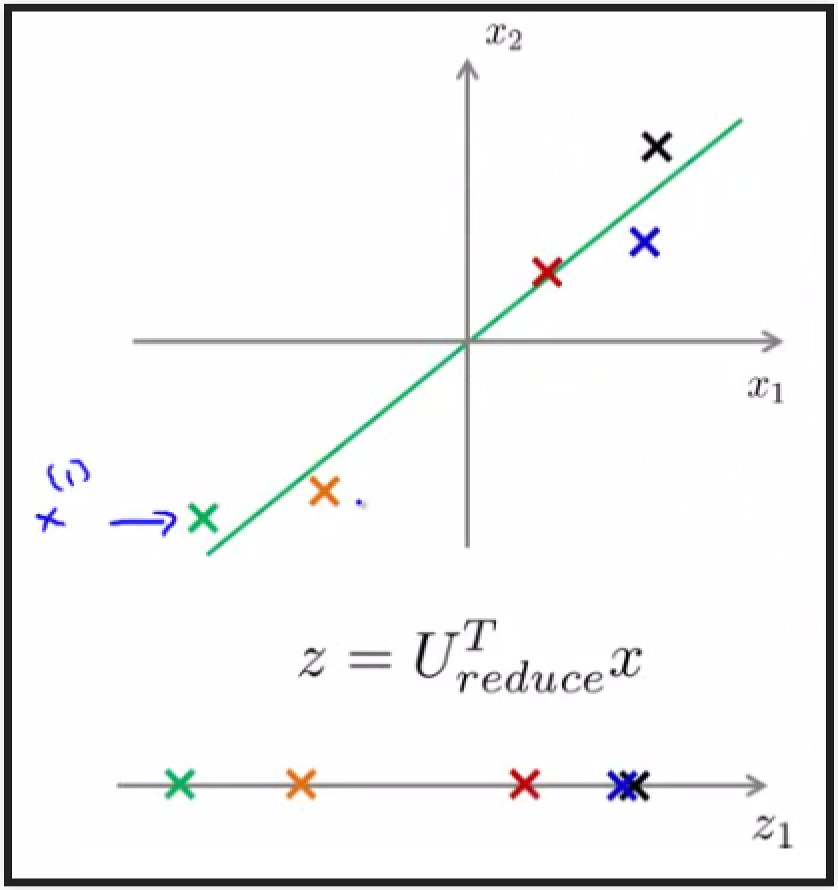
- Para fazer a redução de dimensionalidade, podemos usar a matriz $U_{reduzida}$, com as k primeiras colunas de U
- Quando fazemos $(U_{reduzida})^\intercal x$, temos uma projeção de x em k dimensões:
  - $z = (U_{reduzida})^\intercal x$ tem dimensão $k \times n$, e X tem dimensão $n \times 1$, e obtemos a projeção de x com dimensão $k \times 1$

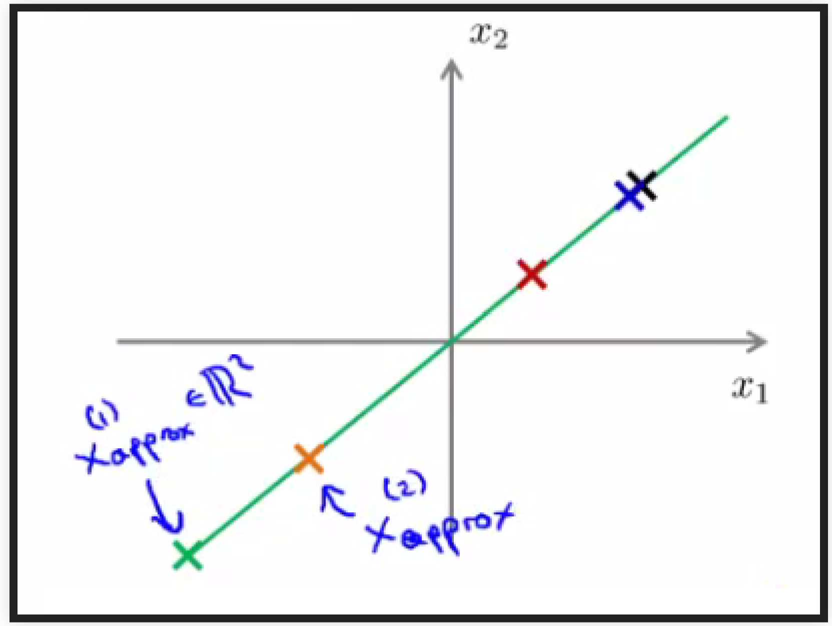

PC1 vs PC2 for MNIST Images
PC 1
PC 2
30
20
10
0
−10
−20
−30
−30
−20
−10
0
10
20
30

RECONSTRUÇÃO

- Podemos "reconstruir" os dados para a dimensão original
  - Sair do espaço de dimensão k e voltar para a dimensão n
- Para isso, fazemos $x_{aproximado} = (U_{reduzida})z$
- Obviamente há uma perda de informação com relação à x

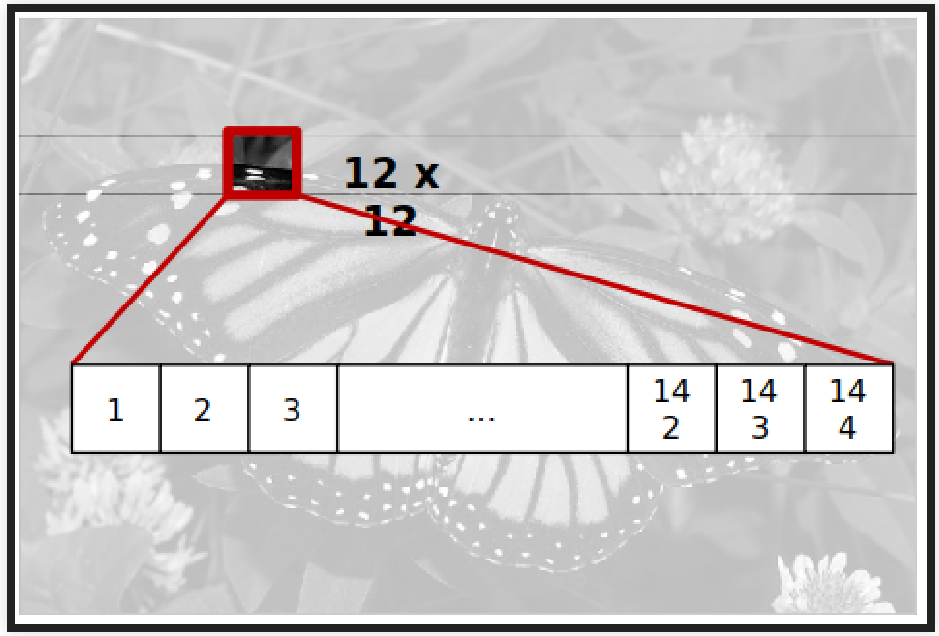
RECONSTRUÇÃO





APLICAÇÃO

- Compressão de imagem



APLICAÇÃO

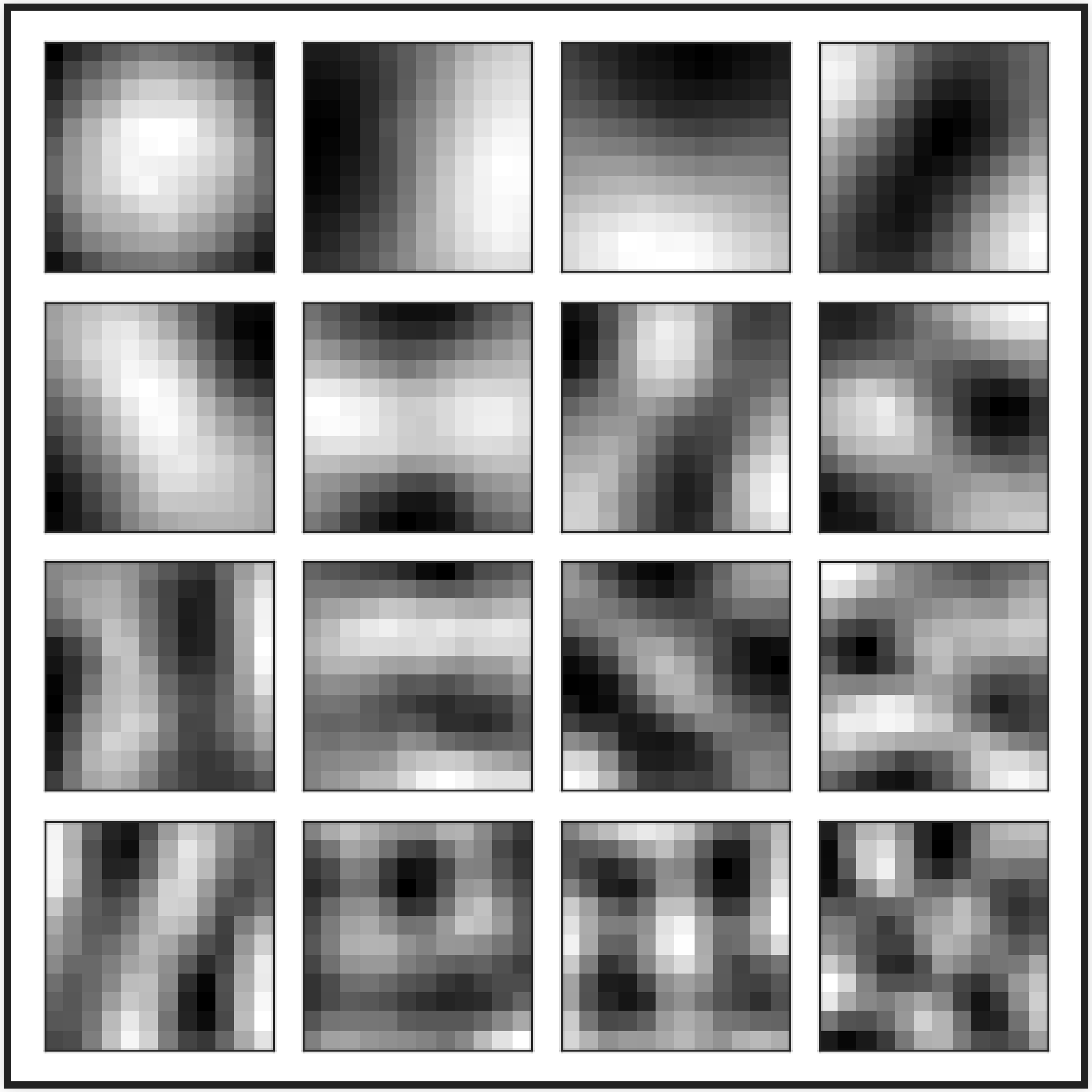
- Redução para 60 dimensões

APLICAÇÃO

- Redução para 16 dimensões

APLICAÇÃO

- 16 autovetores mais relevantes

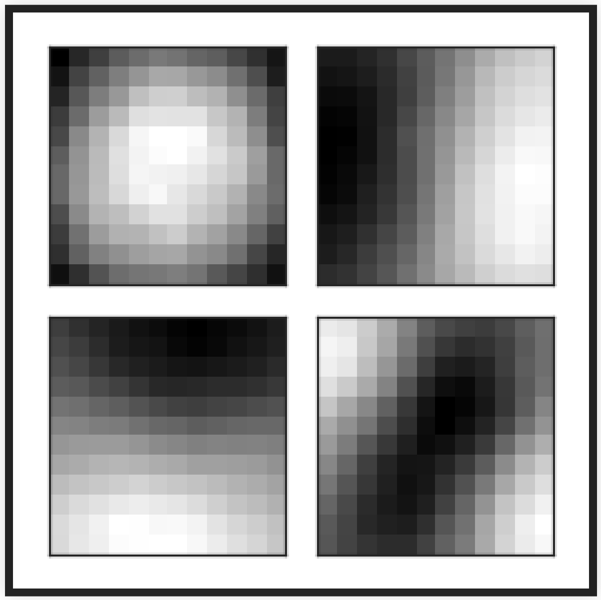


APLICAÇÃO

- Redução para 4 dimensões

APLICAÇÃO

- 4 autovetores mais relevantes



VALOR DE K

- Uma estratégia para escolher o número de componentes principais é atribuir um valor mínimo ϵ para erro de projeção:

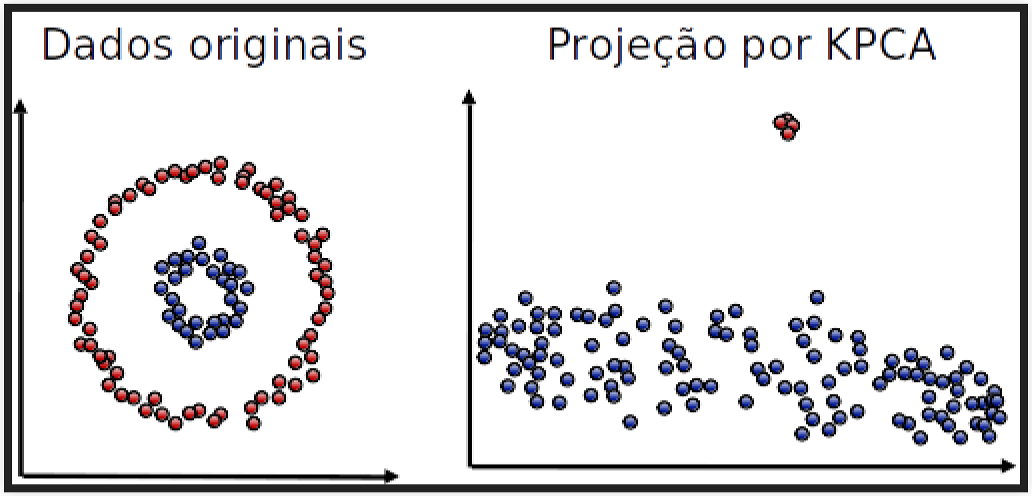
$$\frac{\sum_i^m \|x - x_{aproximado}\|^2}{\sum_i^m \|x\|^2} \leq \epsilon$$

- Começamos com $k = 1$, e vamos aumentando o número de dimensões até o erro de projeção seja menor que ϵ

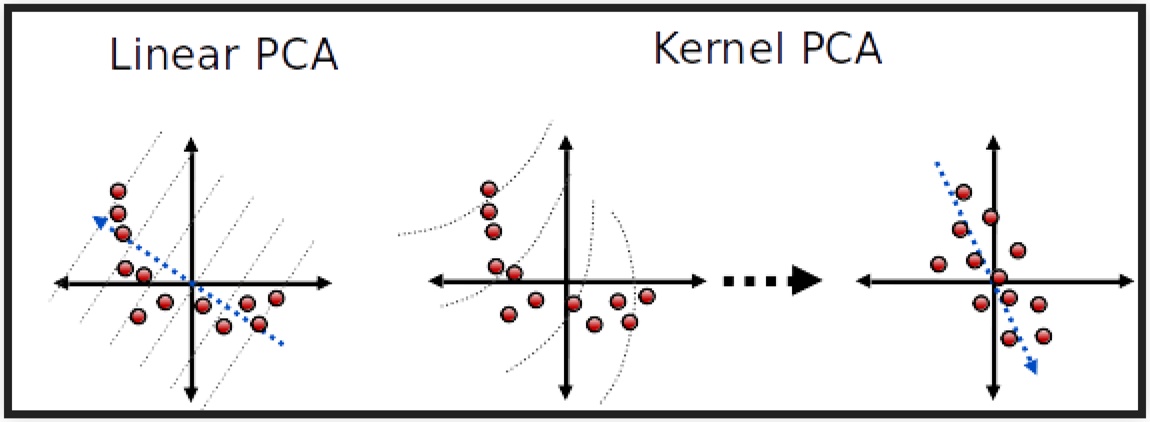
KERNEL PCA

- As tranformações feitas pelo PCA são lineares
- Caso os atributos tenham correlação não linear, a projeção pode falhar
- Podemos usar a ideia de *kernel* (similar como fizemos com SVMs) para fazer projeções não lineares

KERNEL PCA



KERNEL PCA



SELEÇÃO DE ATRIBUTOS

- Ao contrário da combinação de atributos, que combina todos atributos em um subconjunto menor, na seleção descartamos atributos para reduzir a dimensionalidade.
  - Atributos redundantes: se temos 2 atributos correlacionadas, podemos escolher apenas 1
  - Atributos irrelevantes: atributo pode não estar relacionado com a tarefa

SELEÇÃO DE ATRIBUTOS

- Muitos algoritmos de AM são projetados de modo a selecionar os atributos mais apropriados para a tomada de decisão
- Algoritmos de indução de árvores de decisão (falaremos um pouco mais a frente desses algoritmos) são projetados para:
  - Escolher o atributo mais promissor para particionar o conjunto de dados
  - Não selecionar atributos irrelevantes

SELEÇÃO DE ATRIBUTOS

- Devido à maldição da dimensionalidade, no entanto, a adição de atributos irrelevantes à base de dados, geralmente, "confunde" o algoritmo de aprendizado
- Simulações mostram uma degração média de 5 a 10% quando atributos irrelevantes são adicionados

SELEÇÃO DE ATRIBUTOS

- Seleção de atributos antes do aprendizado
  - Pode melhorar o desempenho preditivo
  - Acelera o processo de aprendizado
- Produz uma representação mais compacta do conceito a ser aprendido
  - O foco será nos atributos que realmente são importantes para a definição do conceito

SELEÇÃO DE ATRIBUTOS

- O processo de seleção de atributos, às vezes, pode ser muito mais custoso que o processo de aprendizado
- Ou seja, quando somarmos os custos das duas etapas, pode não haver vantagem

MÉTODOS DE SELEÇÃO DE ATRIBUTOS

- Manual
- Ideal se for baseado em um entendimento profundo sobre ambos:
  - O problema de aprendizado
  - O significado de cada atributo
- Entretanto, tende a ser bastante custoso.

MÉTODOS DE SELEÇÃO DE ATRIBUTOS

- Automático
- **Filtros:** método usado antes do processo de aprendizado para selecionar o subconjunto de atributos
- **Wrappers:** o processo de escolha do subconjunto de atributos está “empacotado” com o algoritmo de aprendizado sendo utilizado

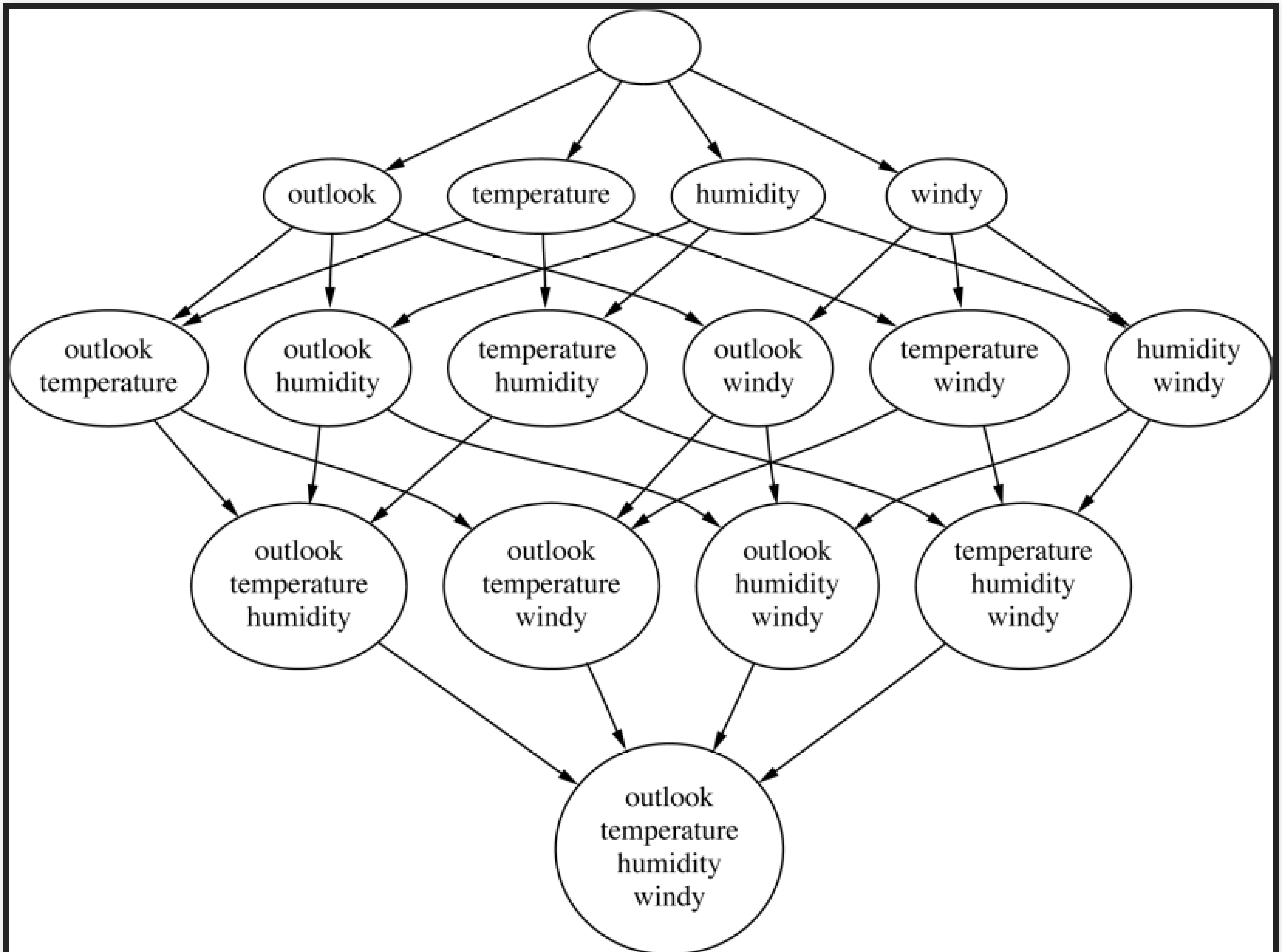
FILTROS

- O método de **filtro** geralmente é unidimensional (avalia cada atributo individualmente).
- Não consegue identificar atributos redundantes.
- Baseado em alguma medição sobre o atributo (correlação com o atributo meta, por exemplo).
- Os atributos cuja medida é maior que um limite (definido pelo usuário) são selecionados.

SELEÇÃO MULTIVARIADA

- Implica em uma busca no “espaço” de atributos.
- O número de possíveis combinaçõe de atributos é $O(2^m)$, em que m é o número total de atributos.
- Portanto, na maioria dos casos práticos, uma busca exaustiva não é viável.
- Solução: busca heurística

ESPAÇO DE BUSCA



BUSCA HEURÍSTICA NO ESPAÇO DE ATRIBUTOS

- Busca para Frente (Seleção *Forward*)
  - A busca é iniciada sem atributos e os mesmos são adicionados um a um
  - Cada atributo é adicionado isoladamente e o conjunto resultante é avaliado segundo um critério
  - O atributo que produz o melhor critério é incorporado

BUSCA HEURÍSTICA NO ESPAÇO DE ATRIBUTOS

- Busca para trás (Eliminaçao *Backward*)
  - Similar a Seleção *Forward*
  - Começa com todo o conjunto de atributos, eliminando um atributo a cada passo

BUSCA HEURÍSTICA NO ESPAÇO DE ATRIBUTOS

- Podemos usar a acurácia de um modelo como critério de avaliação (wrapper)
- Tanto na Seleção *Forward* quanto na Eliminação *Backward* , pode-se adicionar um peso por subconjuntos pequenos
- Por exemplo, pode-se requerer não apenas que a medida de avaliação crescer a cada passo, mas que ela cresça mais que uma determinada constante

BUSCA HEURÍSTICA NO ESPAÇO DE ATRIBUTOS

- Outros métodos de busca:
  - Busca bidirecional
  - Best-first search
  - Beam search
  - Algoritmos genéticos