Dimensionality Reduction

Ali Akbar Septiandri

Universitas Al-Azhar Indonesia

aliakbars@live.com

March 19, 2020

Selayang Pandang

Bahan Bacaan

1. VanderPlas, J. (2016). Python Data Science Handbook. (In Depth: Principal Component Analysis) `https://jakevdp.github.io/PythonDataScienceHandbook/05.09-principal-component-analysis.html`
2. Witten, I. H., Frank, E., Hall, M. A., & Pal, C. J. (2016). Data Mining: Practical machine learning tools and techniques. Morgan Kaufmann. (Section 8.3)
3. Leskovec, J., Rajaraman, A., & Ullman, J. D. (2014). *Mining of massive datasets*. Cambridge University Press. (Section 11.1-11.2)

Ulasan

Minggu lalu...

- Naïve Bayes
- Conditional independence
- Penggunaan distribusi Gaussian dan Bernoulli untuk NB
- Diagonal dan full covariance matrix saat klasifikasi

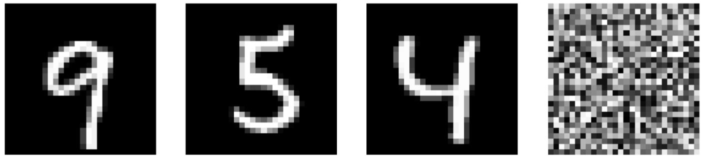
Bagaimana representasi Naïve Bayes untuk multivariate Gaussian?

Curse of Dimensionality

Curse of Dimensionality

- Dataset yang kita punya biasanya memiliki dimensi yang tinggi, e.g. gambar, suara, teks
- Dimensi yang "penting" mungkin jauh lebih kecil
- Ada atribut yang variansnya kecil

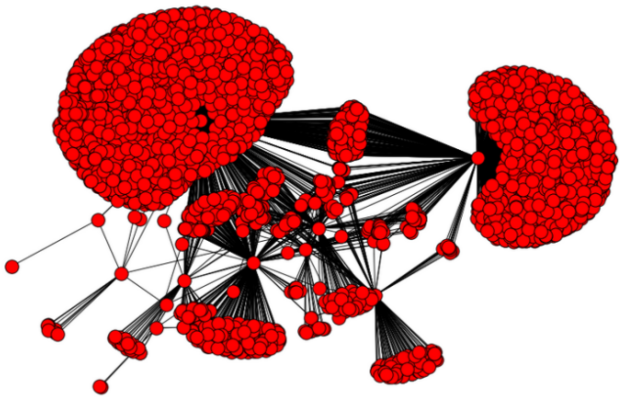
Contoh Kasus: MNIST



Gambar: Hanya sebagian dari semua pixel yang berubah nilainya pada data MNIST dari $\mathbb{R}^{784}$

Contoh kasus apa lagi yang dapat kalian bayangkan?

Contoh Kasus: Social Network



Gambar: Tidak semua orang terhubung dalam jejaring sosial

Bagaimana cara menanganinya?

Penanganan

- Gunakan pengetahuan terhadap domain tersebut, e.g. MFCC pada data suara
- Berasumsi terhadap dimensinya, e.g. independensi pada Naïve Bayes
- Mereduksi dimensinya, buat dimensi baru!

Reduksi Dimensi

- Tujuannya adalah merepresentasikan data dengan variabel yang lebih sedikit
- Memilih fitur, misalnya dengan *information gain*
- Ekstraksi fitur, misalnya IMT dari berat dan tinggi badan, atau dengan **kombinasi linear**

Untuk apa?

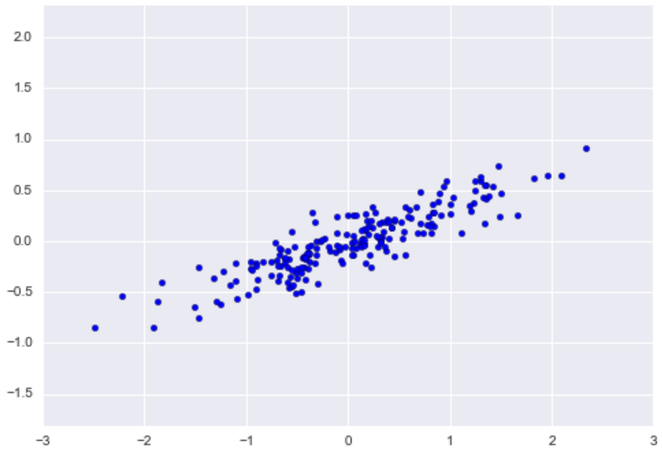
1. Visualisasi data
2. Membuang fitur berupa *noise*
3. Mempercepat komputasi

Principal Component Analysis

Principal Components

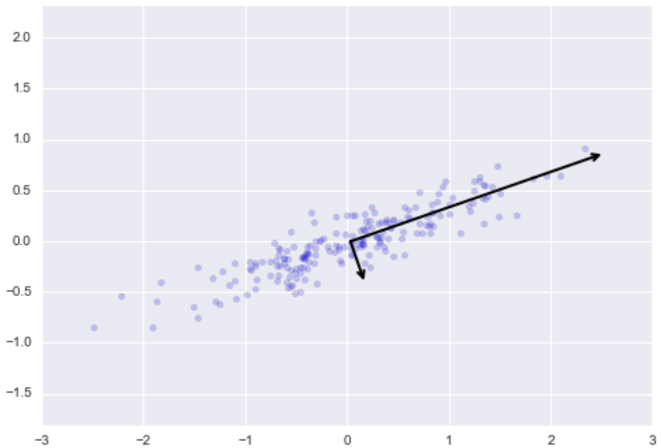
- Pencarian *principal components* dilakukan dengan mencari arah keragaman data terbesar secara berurut
- Setiap *principal components* tersebut bersifat tegak lurus satu dengan yang lain
- Terus dilakukan hingga D dimensi original

Pencarian PC



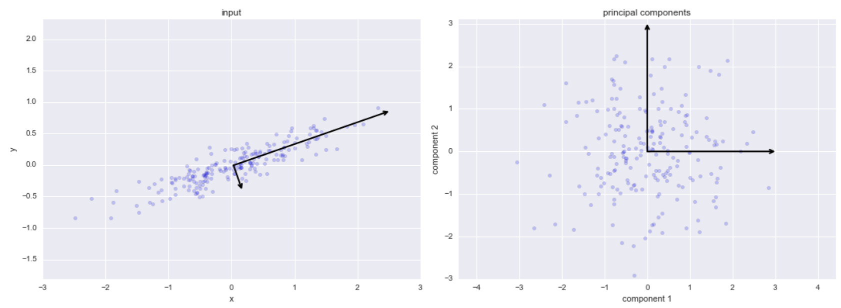
Gambar: Data dalam dua dimensi [VanderPlas, 2016]

Pencarian PC



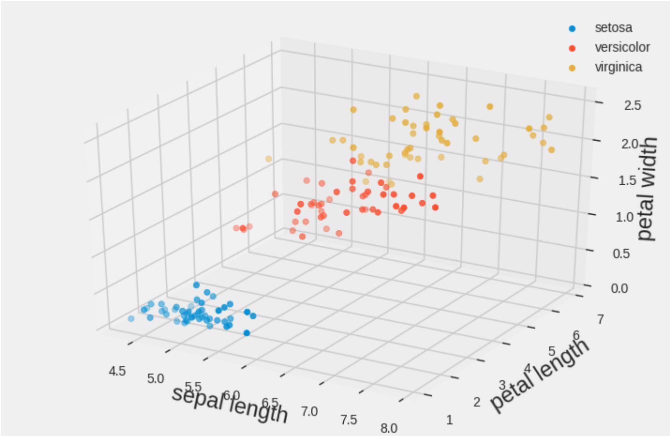
Gambar: Principal components dari data [VanderPlas, 2016]

Pencarian PC



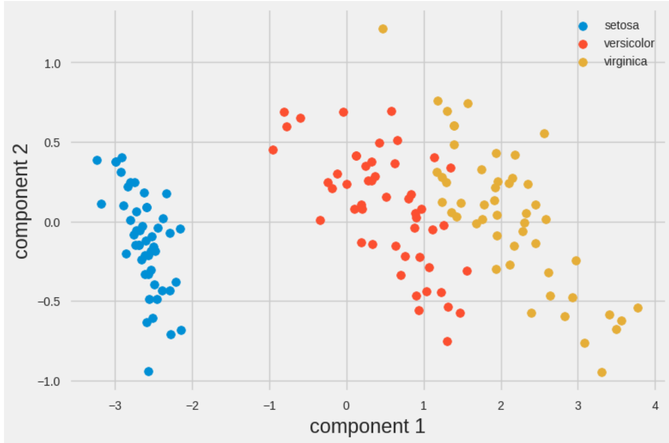
Gambar: Proyeksi data menggunakan principal components [VanderPlas, 2016]

Contoh: PCA pada Iris Dataset



Gambar: Dataset Iris dalam tiga dimensi

Contoh: PCA pada Iris Dataset



Gambar: Dataset Iris setelah diproyeksi dengan PCA

Mencari Principal Components

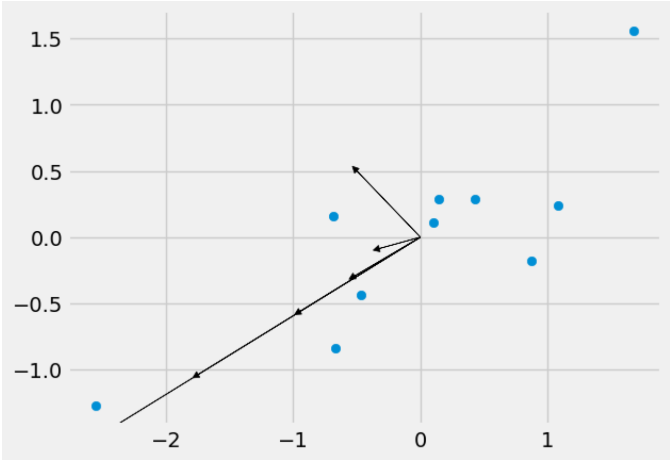
1. Pusatkan data ke titik nol: $x_{i,a} \leftarrow x_{i,a} - \mu$
2. Hitung matriks kovarian Σ
3. Cari vektor eigen $\mathbf{e}$ untuk matriks tersebut!

Principal Components

Sebagai ilustrasi, menggunakan matriks kovarian tersebut:

1. Pilih satu vektor secara acak
2. Kalikan dengan matriks kovarian – apa yang terjadi?

Contoh: Principal Components



Arah dari vektornya tidak berubah lagi!

Principal Components

- Kita ingin vektor **e** yang arahnya tidak berubah lagi, $\Sigma \mathbf{e} = \lambda \mathbf{e}$
- **e** ... vektor eigen dari Σ, λ ... nilai eigen untuk vektor tersebut
- **Principal components** = vektor eigen dengan nilai eigen terbesar

Aljabar Matriks

Beberapa pemahaman yang dibutuhkan untuk materi ini:

- perkalian
- transpose
- determinan
- solusi persamaan linear

Definisi

Nilai dan Vektor Eigen

M adalah matriks bujur sangkar. λ adalah konstanta dan $\mathbf{e}$ adalah vektor kolom tak-nol dengan jumlah baris seperti M. Maka, λ adalah *nilai eigen* (*eigenvalue*) dari M dan $\mathbf{e}$ adalah *vektor eigen* (*eigenvector*) dari M jika $M\mathbf{e} = \lambda\mathbf{e}$.

Mencari Principal Components

1. Cari nilai eigen dengan menyelesaikan persamaan $\det(\Sigma - \lambda I) = 0$
2. Cari vektor eigen ke-i dengan menyelesaikan persamaan $\Sigma\mathbf{e}_i = \lambda_i\mathbf{e}_i$
3. Principal components secara berurut adalah vektor eigen dengan nilai eigen terbesar

Contoh

Diberikan matriks kovarian $\Sigma = \begin{bmatrix} 2.0 & 0.8 \\ 0.8 & 0.6 \end{bmatrix}$, nilai eigen dapat dicari dengan

$$\det \begin{bmatrix} 2.0 - \lambda & 0.8 \\ 0.8 & 0.6 - \lambda \end{bmatrix} = (2 - \lambda)(0.6 - \lambda) - (0.8)(0.8) = 0$$
$$\lambda^2 - 2.6\lambda + 0.56 = 0$$

Nilai eigen yang didapatkan

$$\{\lambda_1, \lambda_2\} = \frac{1}{2}(2.6 \pm \sqrt{2.6^2 - 4 \times 0.56}) = \{2.36, 0.23\}$$

Contoh (lanjutan)

Vektor eigen untuk masing-masing nilai eigen dapat dicari dengan

$$\begin{bmatrix} 2.0 & 0.8 \\ 0.8 & 0.6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{1,1} \\ e_{1,2} \end{bmatrix} = 2.36 \begin{bmatrix} e_{1,1} \\ e_{1,2} \end{bmatrix} \Leftrightarrow \begin{aligned} 2.0e_{1,1} + 0.8e_{1,2} &= 2.36e_{1,1} \\ 0.8e_{1,1} + 0.6e_{1,2} &= 2.36e_{1,2} \end{aligned}$$
$$\Leftrightarrow e_{1,1} = 2.2e_{1,2}$$
$$\Leftrightarrow e_1 \sim \begin{bmatrix} 2.2 \\ 1 \end{bmatrix}$$
$$\Leftrightarrow e_1 = \begin{bmatrix} 0.91 \\ 0.41 \end{bmatrix} \text{(vektor unit)}$$

Dengan cara yang sama

$$\begin{bmatrix} 2.0 & 0.8 \\ 0.8 & 0.6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{2,1} \\ e_{2,2} \end{bmatrix} = 0.23 \begin{bmatrix} e_{2,1} \\ e_{2,2} \end{bmatrix} \Leftrightarrow e_2 = \begin{bmatrix} -0.41 \\ 0.91 \end{bmatrix}$$

Proyeksi ke Dimensi Baru

- $\mathbf{e}_1 ... \mathbf{e}_m$ adalah vektor dimensi baru
- Untuk setiap titik data $\mathbf{x}_i$:
  1. Pusatkan terhadap rata-rata, i.e. $\mathbf{x}_i - \mu$
  2. Proyeksikan ke dimensi baru, i.e. $(\mathbf{x}_i - \mu)^T \mathbf{e}_j$ untuk $j = 1...m$

$$\begin{bmatrix} x'_{i,1} \\ x'_{i,2} \\ \vdots \\ x'_{i,m} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\mathbf{x}_i - \mu)^T \mathbf{e}_1 \\ (\mathbf{x}_i - \mu)^T \mathbf{e}_2 \\ \vdots \\ (\mathbf{x}_i - \mu)^T \mathbf{e}_m \end{bmatrix}$$

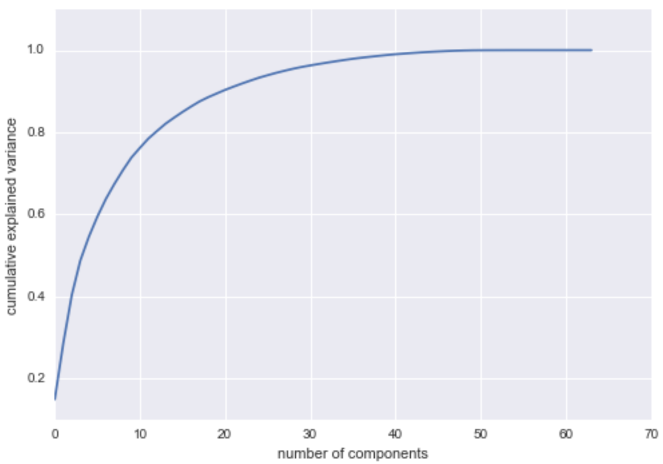
Berapa Dimensi?

- Dari vektor eigen $\mathbf{e}_1 ... \mathbf{e}_d$, ingin dihasilkan $m \ll d$
- Pilih $\mathbf{e}_i$ yang “menjelaskan” varians sebanyak mungkin
  1. Urutkan vektor eigen berdasarkan $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq ... \geq \lambda_d$
  2. Pilih m vektor eigen pertama yang menjelaskan 90% atau 95% varians

$$\frac{\sum_{i=1}^{m} \lambda_i}{\sum_{i=1}^{d} \lambda_i} \leq 1$$

- Atau gunakan scree plot

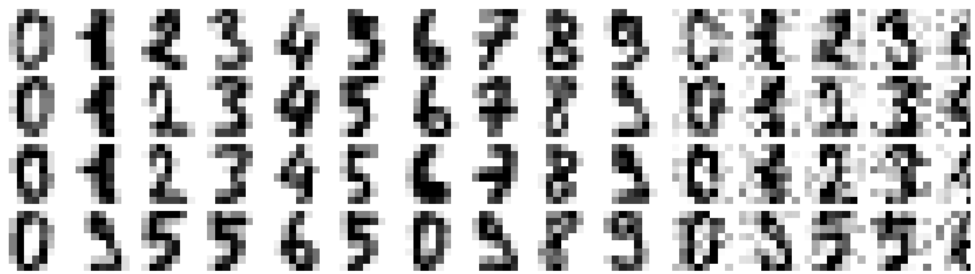
Kurva Varians



Gambar: Kurva varians dari data *hand-written digits* [VanderPlas, 2016]

Noise Filtering dengan PCA

Idenya adalah komponen dengan varians yang jauh lebih tinggi daripada *noise* tidak akan terkena dampak dari *noise*.



Gambar: Proses *noise filtering* dengan PCA [VanderPlas, 2016]

Contoh: Eigenfaces

Ide yang sama dapat digunakan untuk merepresentasikan wajah seseorang.

Gambar: Principal components dari wajah tokoh dunia [VanderPlas, 2016]

Masalah dalam PCA

- Dapat sangat dipengaruhi oleh pencilan (dalam perhitungan matriks kovarians),
  → bisa diatasi dengan normalisasi (membagi dengan simpangan baku)
- Asumsi linearitas dalam data,
  → bisa diatasi dengan transformasi

Variasi PCA

Karena beberapa batasan (termasuk yang tidak disebutkan sebelumnya), terdapat beberapa variasi untuk pengembangan PCA, antara lain:

- Linear Discriminant Analysis
- Probabilistic PCA
- Truncated Singular-Value Decomposition (SVD)
- CUR-decomposition (Leskovec, et al., 2014)

Dimensionality Reduction

Pros:

- Mewakili intuisi kita terhadap data
- Hasil estimasi probabilistik yang lebih baik
- Reduksi data → proses lebih cepat

Cons:

- Mahal secara komputasi
- Asumsi linearitas membuatnya sulit menangani kasus khusus, e.g. pencilan

Manifold Learning (non-examinable)

Bacaan lebih lanjut:

- **t-Stochastic Neighbor Embedding (t-SNE)** [van der Maaten & Hinton, 2008, Wattenberg et al., 2016]
- **Uniform Manifold Approximation and Projection (UMAP)** [McInnes &, 2018]

Ikhtisar

- Dimensionality Reduction
- Eigenvector & Eigenvalue
- Principal Component Analysis

Pertemuan Berikutnya

- Linear regression
- Logistic regression
- Metode optimasi

Referensi

Jake VanderPlas (2016)
In Depth: Principal Component Analysis
https://jakevdp.github.io/PythonDataScienceHandbook/05.09-principal-component-analysis.html

L.J.P. van der Maaten and G.E. Hinton. (2008)
Visualizing High-Dimensional Data Using t-SNE
Journal of Machine Learning Research 9(Nov):2579-2605

Wattenberg, et al. (2016)
"How to Use t-SNE Effectively"
Distill http://doi.org/10.23915/distill.00002

L. McInnes and J. Healy (2018)
UMAP: Uniform Manifold Approximation and Projection for Dimension Reduction
arXiv preprint arXiv:1802.03426

Terima kasih