Selección y Reducción de atributos

Felipe Bravo

Basado ligeramente en slides previas de Benjamín Bustos

CIENCIAS DE LA COMPUTACIÓN
UNIVERSIDAD DE CHILE

Selección y Reducción de Atributos

Muchas veces tenemos atributos irrelevantes o redundantes en nuestros datos.

Vamos a ver dos enfoques para atacar este problema.

1. **Selección de atributos:** es un enfoque supervisado donde escogemos el subconjunto de atributos más útil para nuestro problema de clasificación.

2. **Reducción de atributos:** enfoque no-supervisado donde encontramos una proyección de menor dimensionalidad que concentra la información contenida en los datos.

Selección de Atributos

- Es un proceso supervisado que busca encontrar el mejor subconjunto de atributos para una tarea de clasificación/regresión.

- La presencia de atributos irrelevantes o redundantes puede afectar el desempeño de un modelo.

Selección de Atributos

Por ejemplo, agregar un atributo aleatorio (por ende irrelevante) afecta a los árboles de decisión.

- Esto es sorprendente puesto que los árboles están pensados para solo seleccionar atributos relevantes.

- Pero en la práctica es común que el árbol escoja al atributo irrelevante en algún momento del branching y "aprenda" el ruido.

- Piensen que cuando bajamos la profundidad del árbol el splitting se hace sobre menos datos.

- Entonces el atributo irrelevante podría separar las clases por chance en estos datasets pequeños.

- A esto se le llama **fragmentación**.

Selección de Atributos

- KNN es muy sensible a atributos irrelevantes
  - Todos los atributos se ponderan igual en el cálculo de distancias.
  - La clasificación solo se hace sobre pocos datos (los vecinos más cercanos). ¡Un atributo irrelevante afecta mis distancias!
  - En KNN el número de datos de entrenamiento requeridos para realizar buenas clasificaciones aumenta exponencialmente con el número de atributos irrelevantes.

Selección de Atributos

- Naïve Bayes si es robusto a atributos irrelevantes.
  - El valor de P(A|C) es parecido para todas las clases cuando A es irrelevante => el atributo irrelevante es implícitamente ignorado.

- Pero, naïve Bayes es sensible a atributos redundantes (pares de atributos fuertemente correlacionados entre sí).
  - Al asumir independencia condicional entre atributos se amplifica el efecto de los atributos redundantes sobre la clase.

  - Si A1 y A2 son redundantes, nuestras probabilidades posteriores tendrán el efecto amplificado P(A1|C)*P(A2|C)

  - Por otro lado, un árbol tendería a escoger solo uno y descartar el otro.

Enfoques

- Debido al efecto negativo de los atributos irrelevantes para varios métodos de aprendizaje, es común realizar una selección de atributos.

- Una selección manual es muy costosa.

- La selección automática se divide en dos enfoques:

  a. **Scheme-independent o método de filtro**: evalúa el subconjunto de atributos en base a características generales de los datos.

  b. **Scheme-dependent o método de wrapper**: evalúa el subconjunto de atributos usando un clasificador (la calidad de los atributos se define por la capacidad predictiva del modelo).

Selección de atributos Scheme-independent

- Los atributos se seleccionan usando alguna métrica calculada a partir de los datos.
  - Ejemplo: Entropía, Mutual Information, Information Gain.

- También se pueden usar algoritmos de aprendizaje **rápidos** que entregan información sobre la utilidad de los atributos:
  - Los atributos escogidos en los nodos de más arriba en un árbol de decisión.
  - Los coeficientes de un modelo lineal con alto valor absoluto.
  - Esto es distinto al enfoque **wrapper** pues no consideramos la capacidad predictiva del modelo.

Scheme-independent attribute selection

Correlation-based Feature Selection (CFS):

- Encontrar atributos que correlacionan con la clase, pero que a la vez tienen poca correlación entre sí:
  - Se mide la correlación entre atributos categóricos usando symmetric uncertainty:

$$U(A,B) = 2\frac{H(A)+H(B)-H(A,B)}{H(A)+H(B)} \in [0,1]$$

  - H(A), H(B) son la entropía del atributo correspondiente.
  - H(A,B) es la entropía conjunta de A,B.

$$\mathrm{H}(X,Y) = -\sum_{x\in\mathcal{X}}\sum_{y\in\mathcal{Y}} P(x,y)\log_2[P(x,y)]$$

Scheme-independent attribute selection

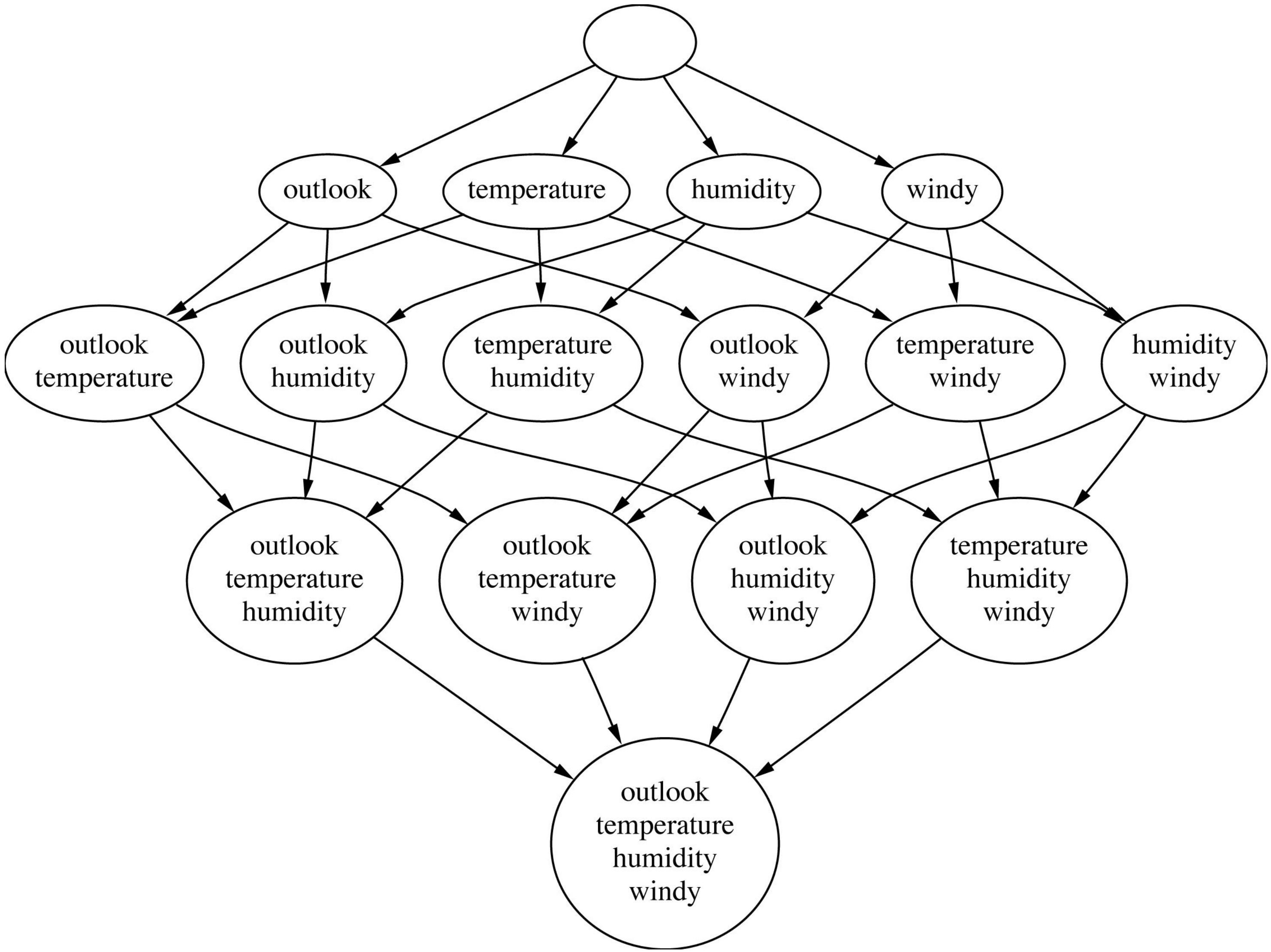
- CFS mide la calidad de un conjunto de atributos como:

$$\sum_j U(A_j, C) \Big/ \sqrt{\sum_i \sum_j U(A_i, A_j)}$$

- Favorece atributos con alta asociación con la clase pero penaliza pares de atributos con alta asociación entre sí.

- Favorece conjuntos más pequeños en caso de empates.

Subconjuntos de atributos para el weather dataset



Buscando en el espacio de atributos

- Necesito recorrer mi espacio de subconjuntos de atributos y evaluar cada candidato según mi "criterio". El criterio puede venir de un método de filtro o de un método de wrapper.

- El número de subconjuntos posibles de atributos es exponencial sobre el número total de atributos.

- Algunas estrategias greedy (no aseguran encontrar el óptimo):
  - forward selection (top-down): parto con cero atributos y voy agregando atributos uno por uno escogiendo el que maximiza el criterio. Paro cuando no veo mejora al agregar atributos nuevos.
  - backward elimination (bottom-up): parto con todos los atributos y voy sacando atributos a medida que mejore mi criterio.

Buscando en el espacio de atributos

- Estrategias más sofisticadas:
  - **Bidirectional search**: combina forward con backward elimination.
  - **Best-first search**: en vez de parar al no encontrar mejora (usando forward o backward search), mantiene una lista de los subconjuntos de atributos evaluados ordenados según el criterio.
    - Hay que asignarle alguna condición de parada para que no recorra todo el espacio de búsqueda.
  - **Beam search:** aproximación truncada de best-first search. El ancho “width” del beam o “viga” define el número de candidatos a tener guardados en la lista.
  - **Genetic algorithms**: inspirados en el principio de selección natural. La selección de atributos “evoluciona” al combinar subconjuntos de atributos “buenos” según el criterio.

Selección Scheme-specific ó Wrapper (Envoltura)

- Enfoque Wrapper: la selección se hace usando un clasificador sobre el subconjunto de atributos y evaluando su performance (accuracy, F1, AUC).

- El proceso de selección es caro computacionalmente.

- Si cada evaluación se hace con 10-fold cross-validation, debemos ejecutar el algoritmo de aprendizaje 10 veces.

Selección Scheme-specific ó Wrapper (Envoltura)

- Con m atributos, una estrategia “greedy” (forward o backward) multiplica el tiempo de evaluación por un factor proporcional a m^2 en el peor caso.

- Esto es mucho más caro para estrategias de búsqueda más sofisticadas, donde puede llegar a ser orden 2^m para una búsqueda exhaustiva que evalúa los 2^m subconjuntos posibles.

- ¡El enfoque wrapper se porta bien con Naive Bayes!

Reducción de la dimensión

- Proceso de reducir el número de características en un dataset de atributos numéricos de manera no-supervisada.
- Ventajas
  - Elimina ruido y/o características redundantes.
  - Mejora la eficiencia del análisis de los datos.
  - Puede mejorar el rendimiento de un clasificador.
  - Útil para proyectar datos a dos dimensiones y poder visualizar tanto los datos como el resultado del método de clustering.
- Métodos a estudiar:
  - Análisis de Componentes Principales (PCA)
  - Multidimensional Scaling (MDS)

Conceptos matemáticos

- Media de una población

$$\overline{x} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x_i$$

- Varianza

$$s^2 = \frac{1}{m-1}\sum_{i=1}^{m}(x_i - \overline{x})^2$$

Conceptos matemáticos

- Covariance

$$cov(x,y) = \frac{1}{m-1}\sum_{i=1}^{m}(x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})$$

- Covarianza es conmutativa
- Signo de la covarianza:
  - +: ambas dimensiones se incrementan juntas
  - - : si una se incrementa, la otra se decrementa

Conceptos matemáticos

- Matriz de covarianza
  - Para vectores *n*-dimensionales

$$C^{n\times n} = (c_{ij} | c_{ij} = cov(Dim_i, Dim_j))$$

  - Ejemplo con vectores 3-dimensionales

$$C = \begin{pmatrix} cov(x,x) & cov(x,y) & cov(x,z) \\ cov(y,x) & cov(y,y) & cov(y,z) \\ cov(z,x) & cov(z,y) & cov(z,z) \end{pmatrix}$$

Para una matriz X de m vectores donde todos los vectores tienen media cero, se tiene que $X^T X = m\Sigma$ donde $\sum$ es la matriz de covarianza.

Conceptos matemáticos

- Vectores y valores propios
  - Se calculan para matrices cuadradas
  - Sea **A** una matriz de *n* x *n, esta* tiene *n* vectores propios **v** (si es que existen) que satisfacen

$$Av = \lambda v$$

    - Donde λ es un escalar llamado valor propio.
  - Propiedad: vectores propios son ortogonales entre sí.

Conceptos matemáticos

- Vector propio normalizado (unitario): su largo es 1
- Cálculo de valores propios
  - Resolver sistema de ecuaciones lineales

$$det(A - \lambda I) = 0$$

- Cálculo de los vectores propios

$$(A - \lambda I) \cdot v = 0$$

PCA

- PCA: *Principal Component Analysis*
  - Sirve para encontrar patrones en los datos
  - Sirve para reducir su dimensión sin perder “mucha” información
    - Retiene características de los datos que contribuyen más a su varianza

- También conocida como la transformación Karhunen-Loève (KLT).

Motivación

- Supongamos que tenemos un dataset de n atributos y m ejemplos de automóviles:

$$\{x^{(i)}; i = 1, \ldots, m\}$$

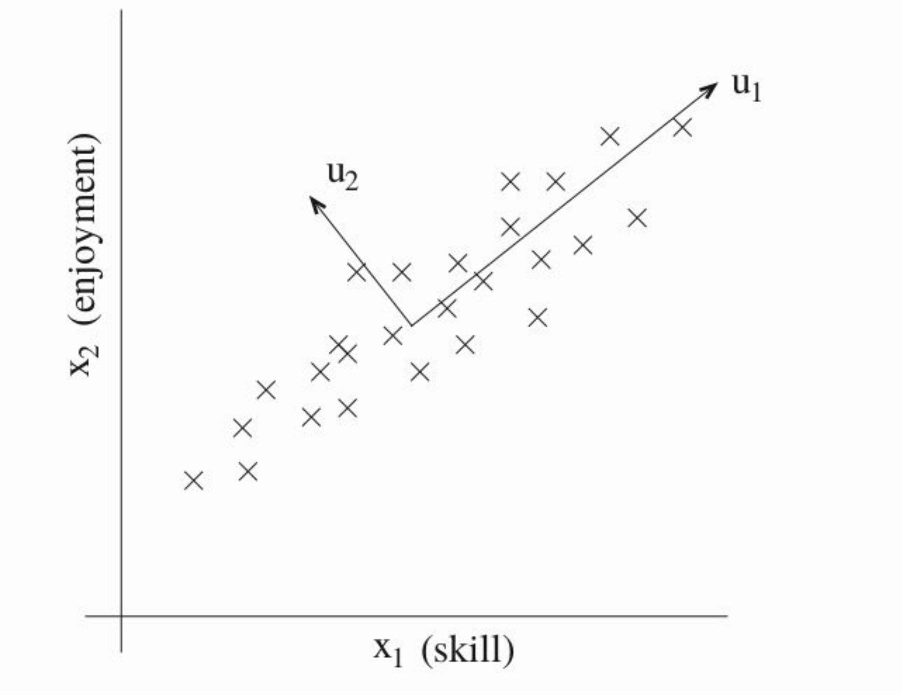
- Atributos: máxima velocidad, radio de giro, etc..

- Supongamos que hay dos atributos que son la velocidad máxima medida en Km/h y otra en millas por hora, que son casi linealmente dependientes salvo por pequeños redondeos numéricos.

- ¿Cómo podemos detectar y ojalá eliminar esta redundancia?

Motivación

- Otro ejemplos: Tenemos una encuesta hecha a pilotos de helicóptero.
- X_1 corresponde a qué tan habilidoso es el piloto y X_2 corresponde a cuánto disfruta la actividad.
- Cómo ser un buen piloto requiere mucha dedicación es común que los buenos pilotos disfruten mucho de la actividad.



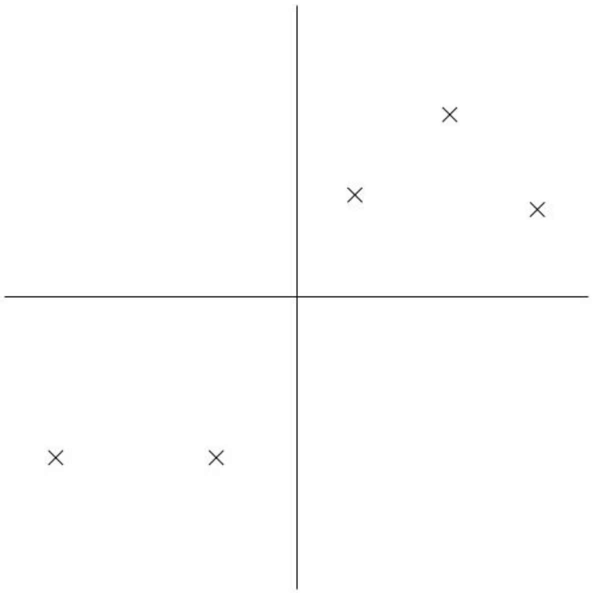
Motivación

- X_1 y X_2 están fuertemente correlacionados.
- De hecho uno podría plantear que los datos están sobre un eje diagonal (la dirección del vector u_1) que capturan el "karma" intrínseco del piloto
- Luego u_2 proyecta el ruido.
- ¿Cómo podemos calcular la dirección de u_1 automáticamente?
- Antes de explicar PCA tenemos que normalizar los datos para que tengan media nula y varianza unitaria:

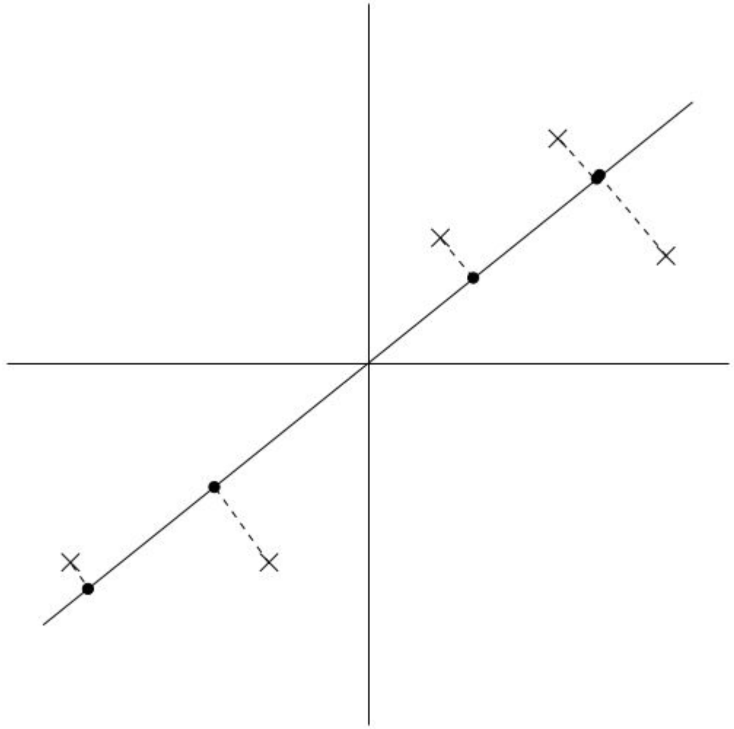
1. Let $\mu = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x^{(i)}$.
2. Replace each $x^{(i)}$ with $x^{(i)} - \mu$.
3. Let $\sigma_j^2 = \frac{1}{m}\sum_i (x_j^{(i)})^2$
4. Replace each $x_j^{(i)}$ with $x_j^{(i)}/\sigma_j$.

PCA

- Nuestro objetivo es encontrar un vector unitario *u* (||u|| =1), tal que cuando proyectemos los datos al eje definido por ***u*** la varianza se maximize.
- Ejemplo: Sea el siguiente dataset

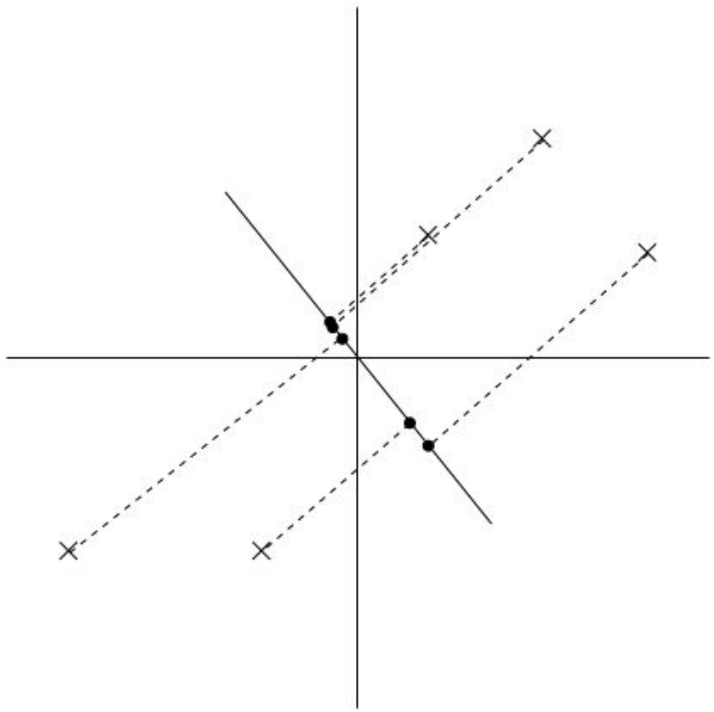


PCA



- Los círculos reflejan la proyección de los datos originales sobre la línea.
- Los datos proyectados tienen alta varianza y están lejos de cero.

PCA



- Si proyectos en otra dirección, los datos proyectados tienen mucho menos varianza y están más cerca del origen.

PCA

- Nuestro objetivo es encontrar automáticamente la dirección **u** que proyecta los datos a una máxima varianza.
- Sea **u** un vector unitario y otro vector **v**.
- Por el álgebra lineal sabemos que $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = ||\mathbf{u}||\ ||\mathbf{v}||\ cos(\theta)$
- Esto se puede reordenar como:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = (||\mathbf{v}||\ cos(\theta))\ ||\mathbf{u}|| = \mathbf{v}_u\ ||\mathbf{u}||$$

- Donde $\mathbf{v}_u = ||\mathbf{v}||\ cos(\theta)$, representa el largo de v en la dirección de u.

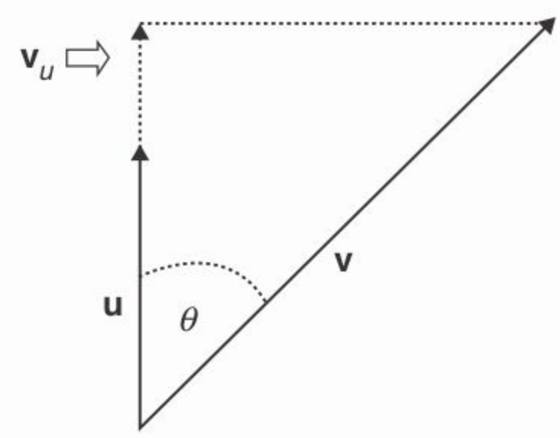


Figure A.2. Orthogonal projection of vector $\mathbf{v}$ in the direction of vector $\mathbf{u}$.

PCA

- Como **u** es vector unitario => ||**u**|| = 1

- Entonces si **u** es un vector unitario, el producto punto $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$ es la proyección del vector **v** en **u**.

- A esto se le llama la proyección ortogonal de **v** en **u**.

PCA

- Entonces, sea **u** un vector unitario y **x** un ejemplo de nuestro dataset
- Por lo visto anteriormente sabemos que la proyección de **x** sobre **u** se puede calcular como $\mathbf{x}^T\mathbf{u}$.
- Entonces para maximizar la **varianza de la proyección** tenemos que encontrar un vector unitario **u** que maximice la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x_{(i)}^T \cdot u)^2 = \frac{1}{m}(Xu)^T(Xu)$$

$$= \frac{1}{m}u^T X^T X u = u^T \frac{X^T X}{m} u$$

$$= u^T \Sigma u$$

Donde $\sum$

es la matriz de covarianza asumiendo que los datos tiene media nula.

PCA

- Maximizar la ecuación anterior sujeto a que $||u||_2=1$ nos da el vector propio principal de la matriz de covarianza **Σ** .
- La restricción $||u||_2=1$ equivale a decir que $u^Tu =1$
- Entonces queremos resolver el siguiente problema:

$$\max_u u^T \Sigma u$$

$$\text{sujeto a } u^T u = 1$$

Esto usando multiplicadores de Langrange equivale a:

$$\mathcal{L}(u, \lambda) = u^T \Sigma u - \lambda(u^T u - 1)$$

OJO: Σ es la matriz de covarianza (no es una sumatoria)

PCA

Maximizamos **u**, derivando e igualando a cero:

$$\nabla_u \mathcal{L} = \Sigma u - \lambda u$$

Y eso nos da:

$$\Sigma u = \lambda u$$

- Esta es exactamente la ecuación para encontrar el vector propio de Σ.
- El vector propio principal (de máxima varianza) se asocia al mayor valor propio λ.
- Si queremos reducir mis datos a k dimensiones, escojo los vectores propios $u_1, u_2, \ldots, u_k$ de mi matriz de covarianza asociados a los k valores propios más grandes.
- Los vectores propios son ortogonales entre sí.

PCA

- Algoritmo (entrada: vectores en R^d):
  1. Centrar los datos y normalizar los datos: restar la media en cada dimensión y normalizar por la desviación estándar.

  2. Calcular la matriz de covarianza

$$\hat{C} = \begin{pmatrix} cov(\hat{x},\hat{x}) & cov(\hat{x},\hat{y}) & cov(\hat{x},\hat{z}) \\ cov(\hat{y},\hat{x}) & cov(\hat{y},\hat{y}) & cov(\hat{y},\hat{z}) \\ cov(\hat{z},\hat{x}) & cov(\hat{z},\hat{y}) & cov(\hat{z},\hat{z}) \end{pmatrix}$$

PCA

- Algoritmo:
  3. Calcular valores y vectores propios (normalizados) de la matriz de covarianza
  4. Elegir componentes principales
     - Ordenar valores propios en orden descendente
       - Primer componente principal: vector propio asociado al valor propio mayor
       - Segundo componente principal: vector propio asociado al segundo valor propio mayor
       - Etc.

PCA

- Algoritmo:

4. Transformada lineal:

$$W = (eig_1; eig_2; \ldots; eig_d)$$

5. Transformación de los datos:

$$y = W^T \cdot \hat{x}$$

PCA

- Reconstrucción de los datos

$$x = \left(\left(W^T\right)^{-1} \cdot y\right) + \bar{x} == \left(\left(W^T\right)^T \cdot y\right) + \bar{x} = (W \cdot y) + \bar{x}$$

En matrices ortogonales (como W) la inversa es equivalente a la transpuesta.

Ejemplo

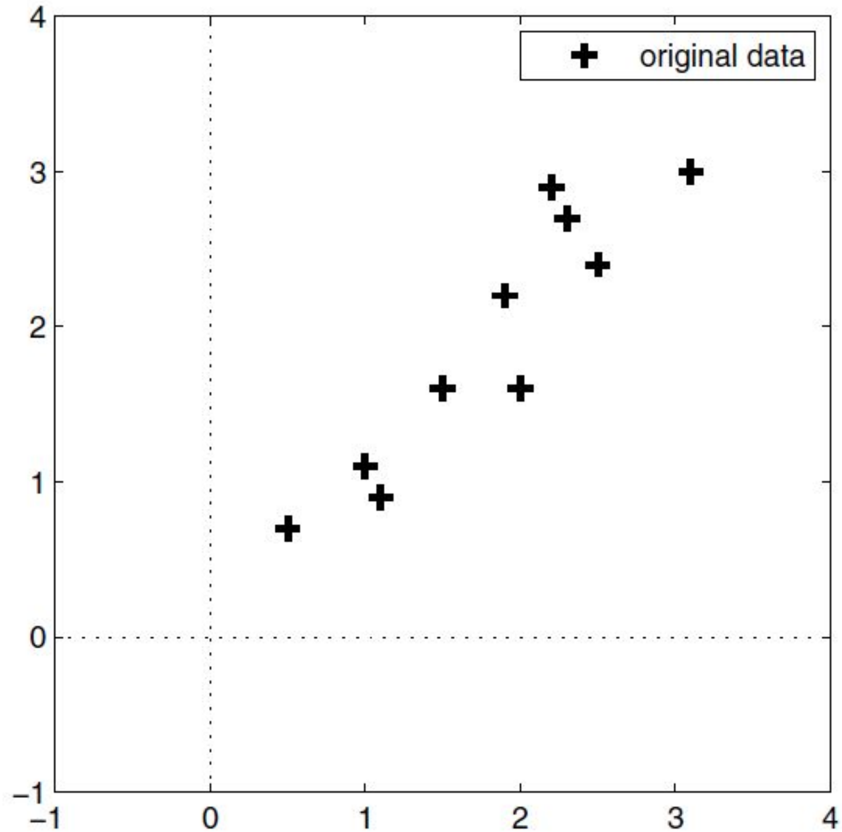


Fig. 3.10. Original PCA data plot.

Ejemplo

- Calculo de matriz de covarianza

$$\hat{\Sigma} = \begin{pmatrix} 0.61656 & 0.61544 \\ 0.61544 & 0.71656 \end{pmatrix}$$

  - Notar correlación positiva entre ambas dimensiones

Ejemplo

- Valores propios:

$$\lambda_1 = 0.049083 \text{ and } \lambda_2 = 1.284$$

- Vectores propios (columnas):

$$\begin{pmatrix} -0.73518 & -0.67787 \\ 0.67787 & -0.73518 \end{pmatrix}$$

Ejemplo

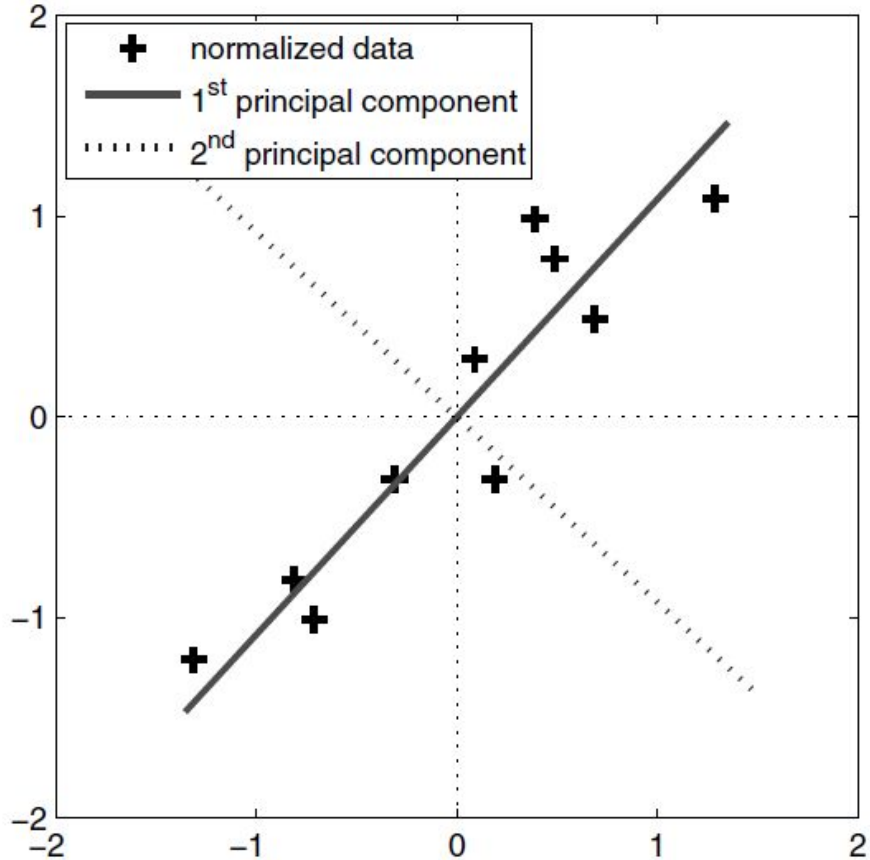


Fig. 3.11. Normalized PCA data and the principal components.

Ejemplo

- Eligiendo componentes principales:

$$W = (w_1; w_2) = \begin{pmatrix} -0.67787 & -0.73518 \\ -0.73518 & 0.67787 \end{pmatrix}$$

- Transformar datos

$$y = W^T \cdot \hat{x}$$

Reducción de dimensión

- Se eligen sólo las *k* componentes principales más significativas para formar la matriz de transformación
    - Esto reduce la dimensión de los datos a k
- Para el ejemplo: reducir a una dimensión

$$W = (w_1) = \begin{pmatrix} -0.67787 \\ -0.73518 \end{pmatrix}$$

Reducción de dimensión

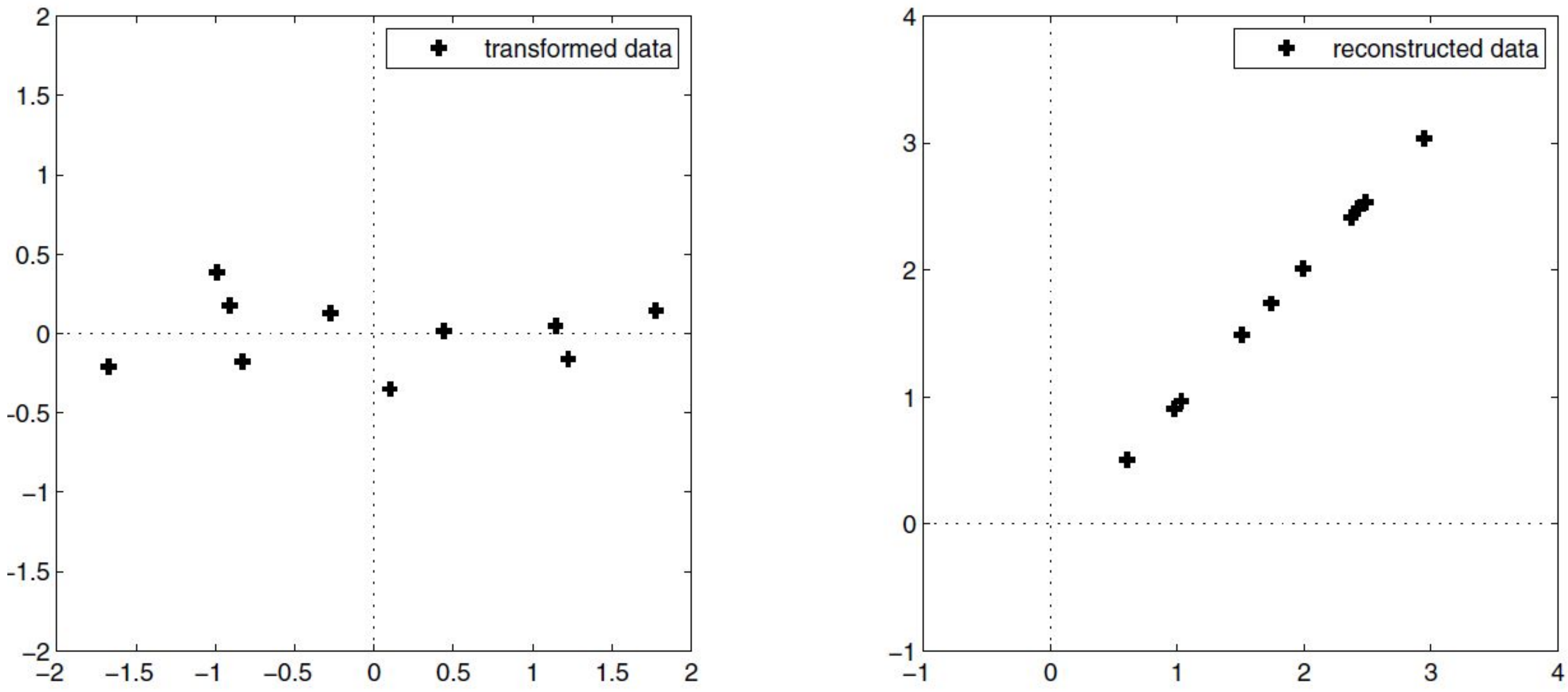


Fig. 3.12. *Left*: transformed PCA data plot; *right*: reconstructed data transformed using a single principal component.

Implementación en Numpy

```python
from numpy import array
from numpy import mean
from numpy import cov
from numpy.linalg import eig
# define a matrix
A = array([[1, 2], [3, 4], [5, 6]])
print(A)
# calculate the mean of each column
M = mean(A.T, axis=1)
print(M)
# center columns by subtracting column means
C = A - M
print(C)
# calculate covariance matrix of centered matrix
V = cov(C.T)
print(V)
# eigendecomposition of covariance matrix
values, vectors = eig(V)
print(vectors)
print(values)
# project data
P = vectors.T.dot(C.T)
print(P.T)
```

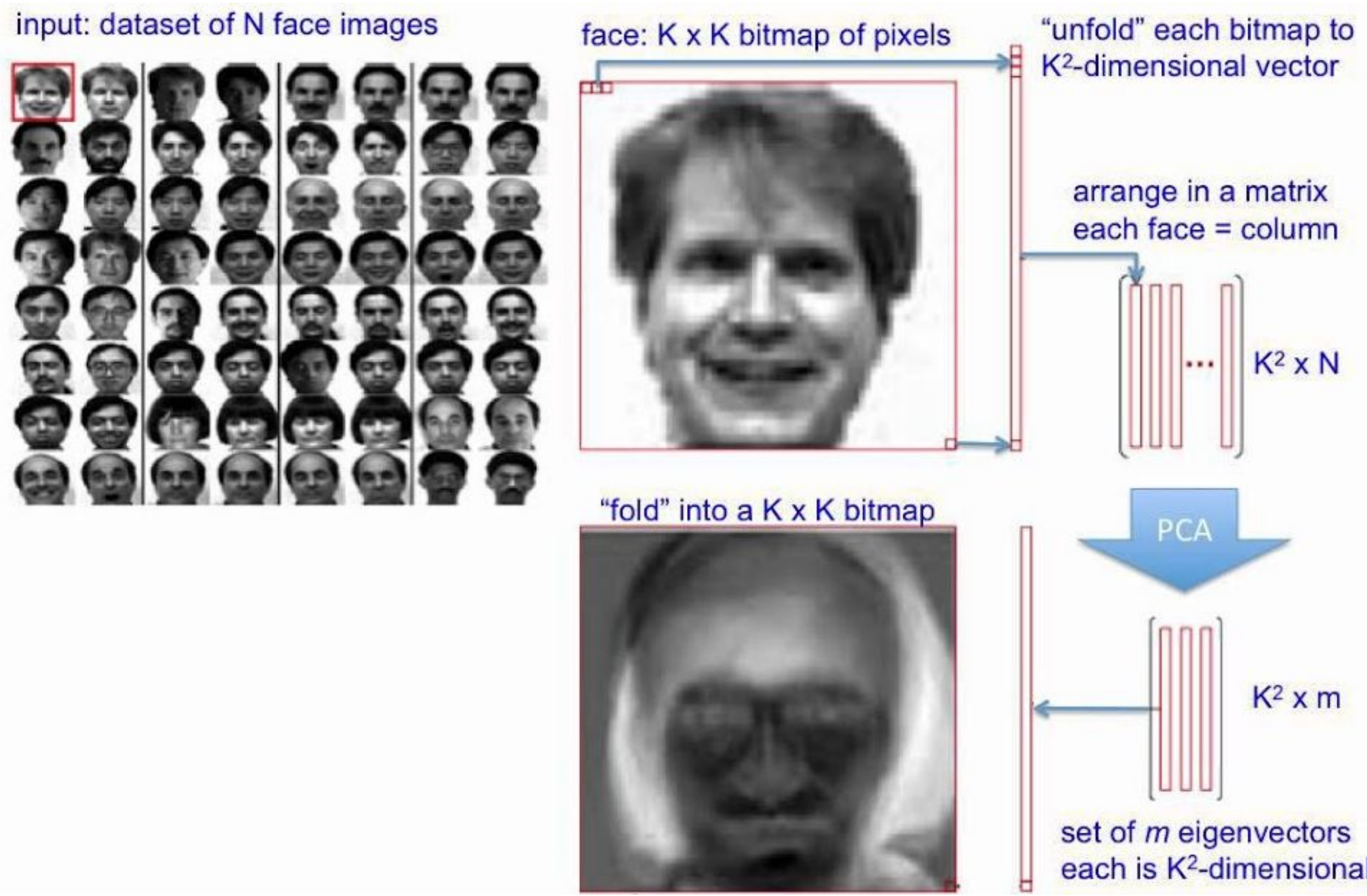
Fuente:
https://machinelearningmastery.com/calculate-principal-component-analysis-scratch-python/

Comentarios

- PCA sirve para visualizar datos multidimensionales al proyectar a dos dimensiones.
- PCA ayuda a métodos basados en distancias (KNN, K-means) que sufren con la maldición de la dimensionalidad
- Nuestros nuevos atributos pierden interpretabilidad.
- Complejidad: Para **n** atributos y **m** datos, calcular la matriz de covarianza cuesta $O(n^2m)$, la descomposición en vectores propios es $O(n^3)$.
- Complejidad es $O(n^2m+n^3)$.

- Los componentes principales también se pueden obtener aplicando descomposición por valores singulares SVD sobre la matriz de datos (en vez de usar la matriz de covarianza)
- SVD tiende a ser más estable.

PCA: Ejemplo EigenFaces



Otras técnicas

- Autoencoders
  - Red neuronal que reconstruye los datos. Se usa la capa intermedia como una representación.
- t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding (TSNE).
  - Modela cada objeto de alta dimensión por un punto de dos o tres dimensiones de tal manera que los objetos similares son modelados por puntos cercanos y los objetos diferentes son modelados por puntos distantes con alta probabilidad.
  - ¡Técnica muy buena para la visualización!
  - Explicado en este video: https://www.youtube.com/watch?v=NEaUSP4YerM
- ICA (Independent Component Analysis)
- UMAP: Uniform Manifold Approximation and Projection for Dimension Reduction.
  - Basado geometría de Riemann y topología algebraica: https://www.youtube.com/watch?v=nq6iPZVUxZU

dcc

CIENCIAS DE LA COMPUTACIÓN
UNIVERSIDAD DE CHILE

www.dcc.uchile.cl

/ DCCUCHILE