Disciplina:

MODELAGEM E PREPARAÇÃO
DE DADOS PARA APRENDIZADO
DE MÁQUINA

Professor: Rafael Barroso





PARTE 1 SELEÇÃO DE VARIÁVEIS



MALDIÇÃO DA DIMENSIONALIDADE

- Com o aumento de variáveis, mais esparso tende a ser a base de dados e, por conseguinte, o hiperespaço de modelagem;
- Muitos modelos tendem a falhar por haver uma razão de variáveis e observações muito grande;

- A adição de variável aumenta a complexidade do problema de forma exponencial;
- Exemplo do tabuleiro de xadrex:
 - Original: 2 dimensões → 64 posições possíveis (8 x 8)
 - Adicionando 1 dimensão: 3 dimensões (+50%) → 512 posições possíveis (+800%)



MALDIÇÃO DA DIMENSIONALIDADE

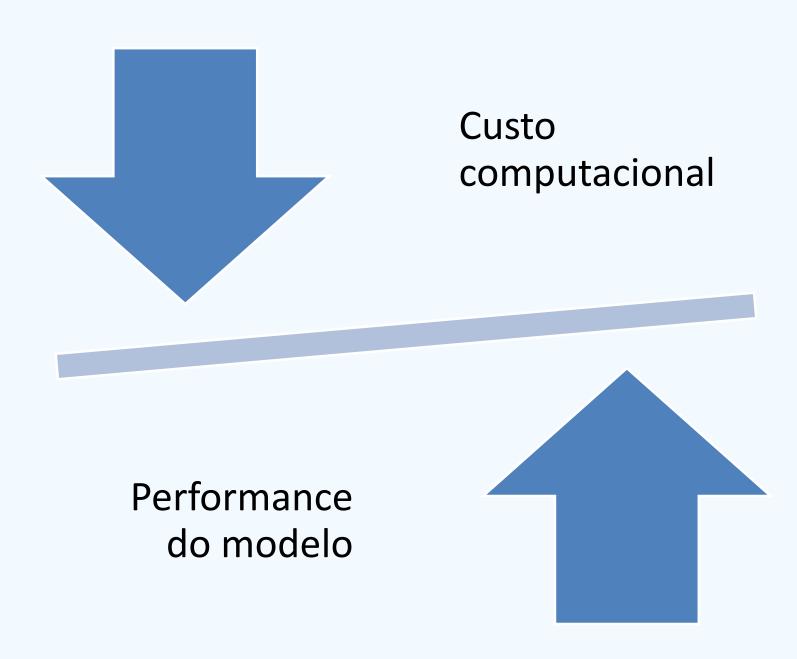
- Estatisticamente, a adição de variáveis (dimensões) afasta as observações;
- Num limite, tudo passa a estar tão distante que passa a ser considerado ruído;
- Logo, estruturas e padrões passam a não possíveis

de serem identificados;

Num contexto de big data, encontrar e selecionar as variáveis ideais passa a ser essencial para possibilitar o sucesso de um projeto.



OBJETIVO





TIPOS

Não Supervisionado

- Busca eliminar redundâncias
- Não utiliza a variável resposta
- Faz uso de análises de correlação, missings e variância, por exemplo

Supervisionado

- Busca eliminar irrelevâncias
- Utiliza a variável resposta
- Se divide em 3 métodos:
 - Filtros,
 - Wrappers e
 - Intrínsecos



NÃO SUPERVISIONADO: CORRELAÇÕES

Pearson's

- Mede a relação linear entre variáveis;
- Sempre é um valor entre -1 e +1;
- Quanto mais distante de 0, maior a correlação;
- Idealmente, as 2 variáveis:
 - São contínuas,
 - Têm distribuição normal,
 - Têm relação linear,
 - Devem ter os outliers tratados

Spearman's e Kendall's

- Medem a relação monotônica entre variáveis;
- Em outras palavras, avaliam a tendência de duas variáveis "moverem na mesma direção", mas não necessariamente de forma constante;
- Também retornam valores entre -1 e +1;
- São não-paramétricas, ou seja, não exigem comportamento normal das variáveis;
- Não demandam que os dados sejam contínuos (podem ser ordinais);
- Spearman's é matematicamente mais simples.



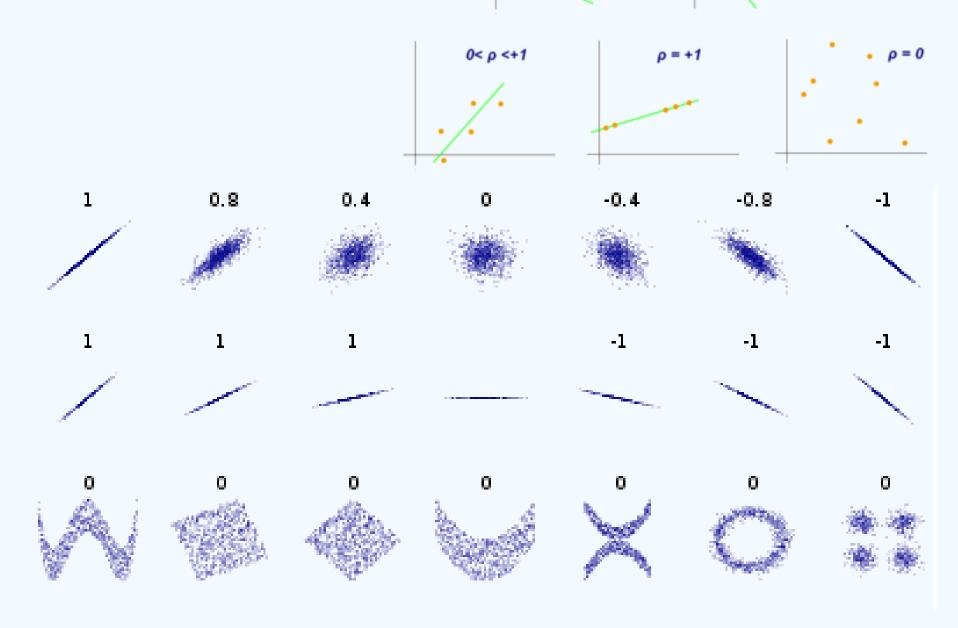
 $-1 < \rho < 0$

SELEÇÃO DE VARIÁVEIS

NÃO SUPERVISIONADO: CORRELAÇÕES



- Mede a relação linear entre variáveis;
- Sempre é um valor entre -1 e +1;
- Quanto mais distante de 0, maior a correlação;
- Idealmente, as 2 variáveis:
 - São contínuas,
 - Têm distribuição normal,
 - Têm relação linear,
 - Devem ter os outliers tratados

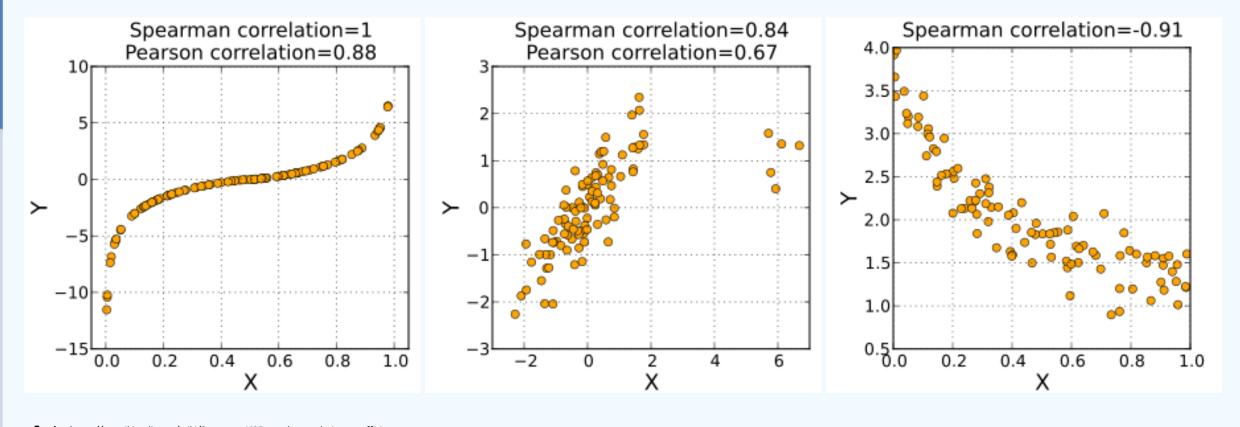




NÃO SUPERVISIONADO: CORRELAÇÕES

Spearman's e Kendall's

- Medem a relação monotônica entre variáveis;
- Em outras palavras, avaliam a tendência de duas variáveis "moverem na mesma direção", mas não necessariamente de forma constante;
- Também retornam valores entre -1 e +1;
- São não-paramétricas, ou seja, não exigem comportamento normal das variáveis;
- Não demandam que os dados sejam contínuos (podem ser ordinais);
- Spearman's é matematicamente mais simples.

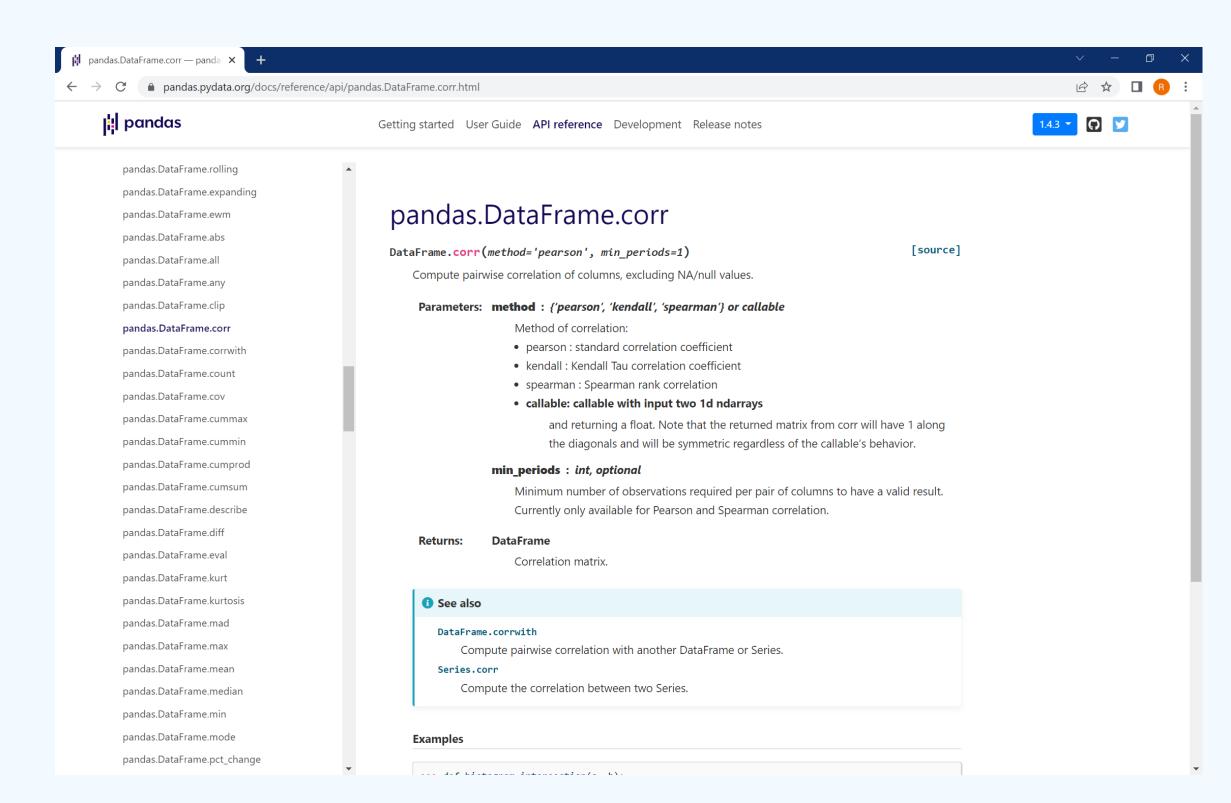


 $\textbf{Fonte:} \ \text{https://en.wikipedia.org/wiki/Spearman\%27s_rank_correlation_coefficient} \\$

PUC Minas

SELEÇÃO DE VARIÁVEIS

NÃO SUPERVISIONADO: CORRELAÇÕES





NÃO SUPERVISIONADO: VARIÂNCIA

- Busca remover todas as variáveis cuja variância não atinge um valor mínimo;
- Se baseia no conceito de que algoritmos de machine learning necessitam de certa variância nos dados para efetivamente aprenderem (casos

de baixa variância costumam gerar o que chamamos de *underfit*)

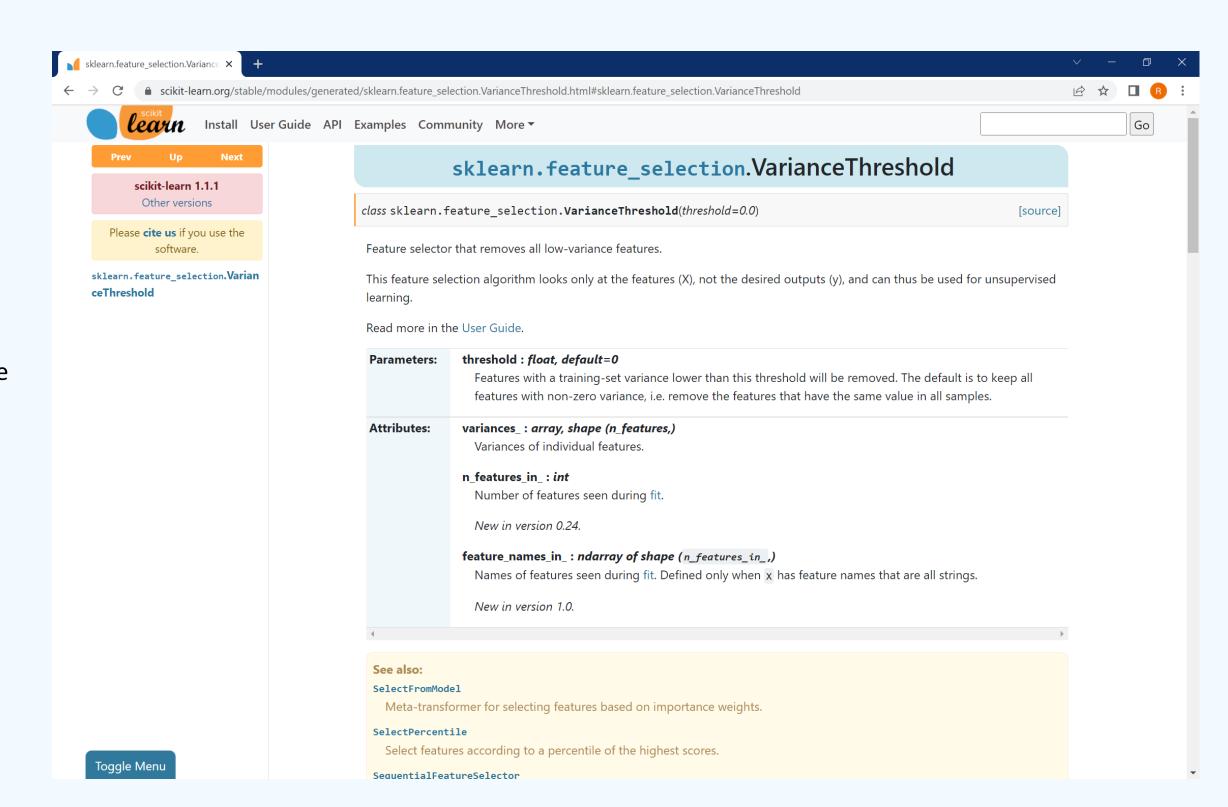


NÃO SUPERVISIONADO: VARIÂNCIA

 Para variáveis booleanas (variáveis aleatórias de Bernoulli), quando queremos uma variância de 0,8, devemos calcular o threshold da seguinte maneira:

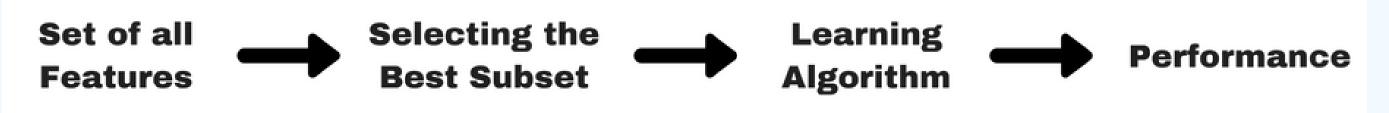
$$Var[X] = p(1-p)$$

 $Var[X] = 0.8(1-0.8)$
 $Var[X] = 0.8(0.2) = 0.16$





SUPERVISIONADO: FILTROS



Fonte: https://www.analyticsvidhya.com/blog/2016/12/introduction-to-feature-selection-methods-with-an-example-or-how-to-select-the-right-variables/

- As variáveis são selecionadas a partir do resultado de testes estatísticos que as relacionam com a variável resposta;
- Pearson's, Spearman's e Kendall's podem ser utilizadas, sendo que sempre uma das variáveis de entrada será a variável resposta;

- Outras possibilidades existem, entre elas:
 - ANOVA,
 - Chi Quadrado,
 - Permutation Importance e
 - Mutual Information

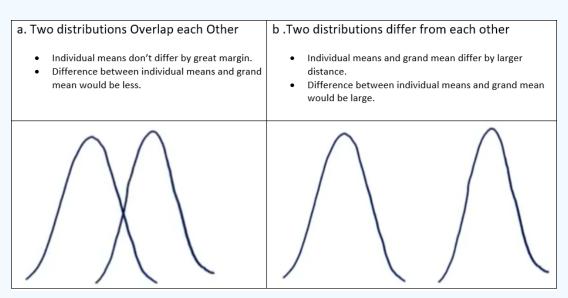


SUPERVISIONADO: FILTROS

- É uma análise de variância entre a variável resposta e a variável explicativa;
- Caso a variância entre o par observado for igual/muito próxima, conclui-se que a variável explicativa não tem impacto na resposta;

ANOVA

 Responde à pergunta: "a variável X impacta a variável Y?", se H0 for rejeitado, a resposta é sim.



H0: Means of all groups are equal.

H1: At least one mean of the groups are different.



ANOVA





SUPERVISIONADO: FILTROS

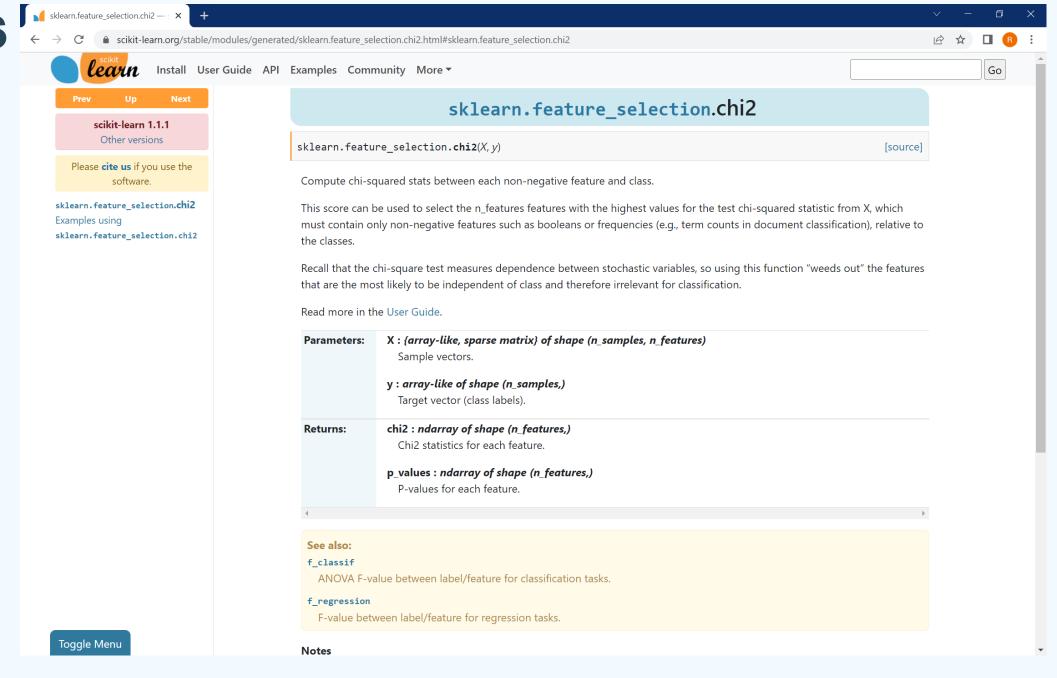
- Baseia-se na análise de independência entre dois eventos;
- Buscamos selecionar as variáveis mais dependentes em relação à resposta;
- Logo, buscamos as variáveis que tem maior valor

CHI QUADRADO

para o teste.



CHI QUADRADO





SUPERVISIONADO: FILTROS

- Baseia-se em quebrar a relação entre uma variável explicativa e a variável resposta a partir de um modelo;
- O impacto gerado expressa o quanto a relação é importante para as predições;

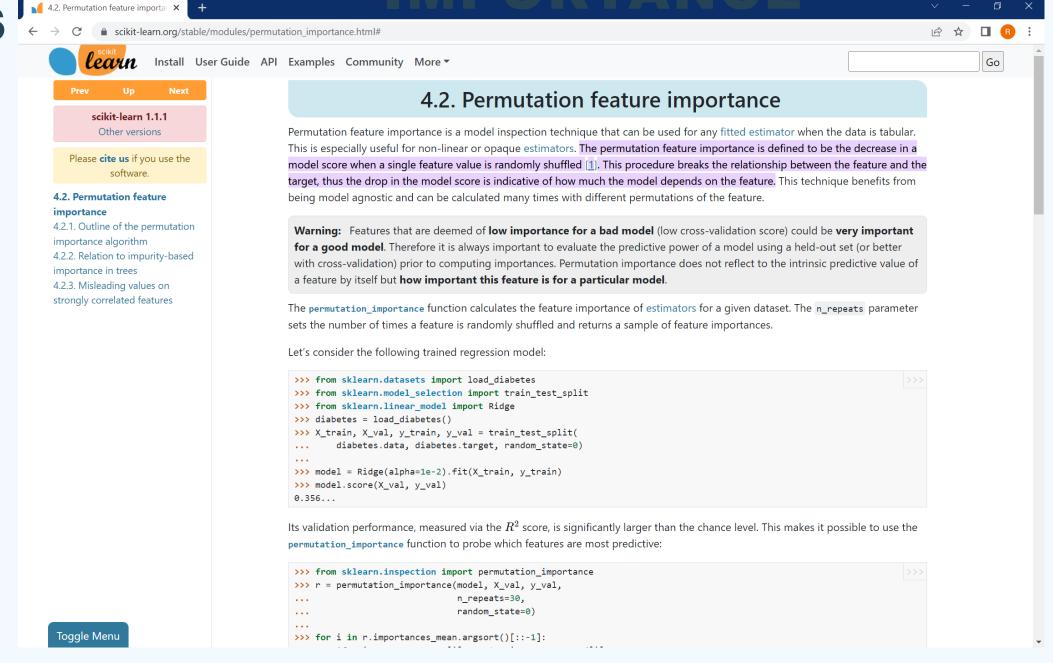
PERMUTATION IMPORTANCE

 A variável sendo analisada é aleatoriamente embaralhada para que a relação se "quebre" e a queda no escore do modelo é o impacto



SUPERVISIONADO: FILTROS

PERMUTATION IMPORTANCE



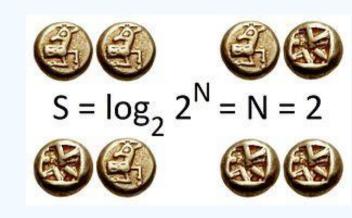


SUPERVISIONADO: FILTROS

- Baseia-se na dependência mutua entre duas variáveis;
- Quantifica a "informação" de uma das variáveis que é obtida ao observar-se uma segunda;
- Associa-se com o conceito de entropia, que, nesse

MUTUAL INFORMATION

sentido, compreende a quantidade de informação sobre a variável resposta que está presente em uma dada variável explicativa



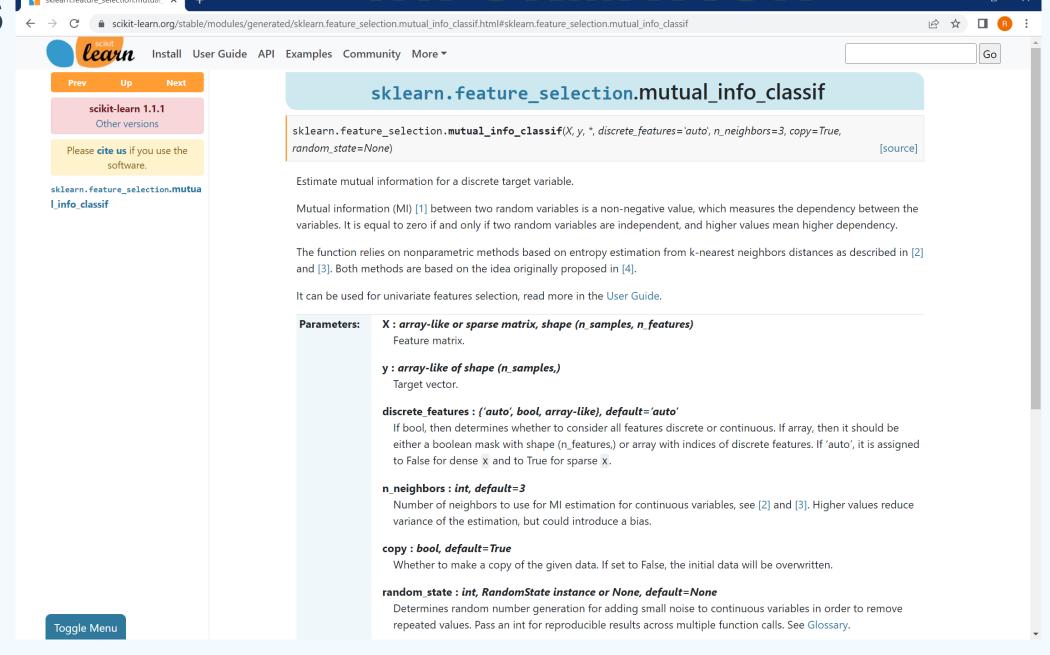
Two bits of entropy: In the case of two fair coin tosses, the information entropy in bits is the base-2 logarithm of the number of possible outcomes; with two coins there are four possible outcomes, and two bits of entropy. Generally, information entropy is the average amount of information conveyed by an event, when considering all possible outcomes.



SUPERVISIONADO: FILTROS

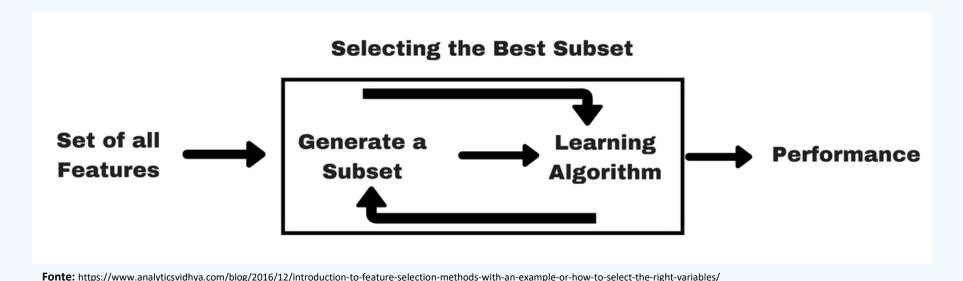
| sklearn.feature_selection.mutual_x
| c | scikit-learn.org/

MUTUAL INFORMATION





SUPERVISIONADO: WRAPPERS

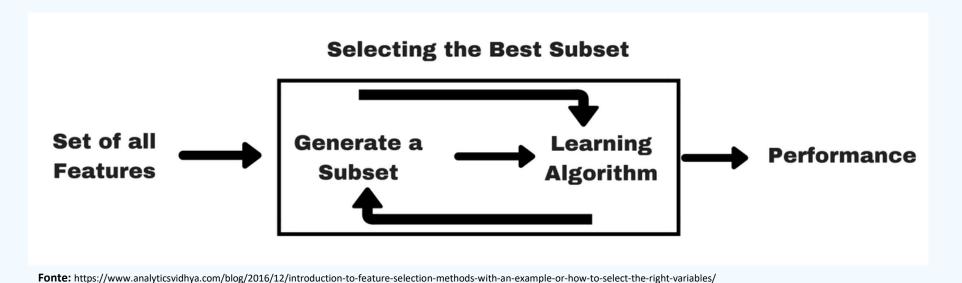


- Uma amostra das variáveis explicativas é selecionada e um modelo é treinado com elas;
- Baseado no resultado do modelo anterior,

- adiciona-se ou retira-se variáveis dessa amostra;
- Costumam ser computacionalmente mais robustos.



SUPERVISIONADO: WRAPPERS



- Como exemplos, temos:
 - Forward Selection,
 - Backward Elimination e

Recursive Feature Elimination



SUPERVISIONADO: WRAPPERS

- Baseia-se em adicionar variáveis até que a performance do modelo se estabilize;
- O modelo começa com uma única variável (a melhor) e vai adicionando novas em cada rodada;
- O processo se inicia por avaliar cada variável individualmente para ordenar entre a melhor e a

FORWARD SELECTION

pior individualmente;

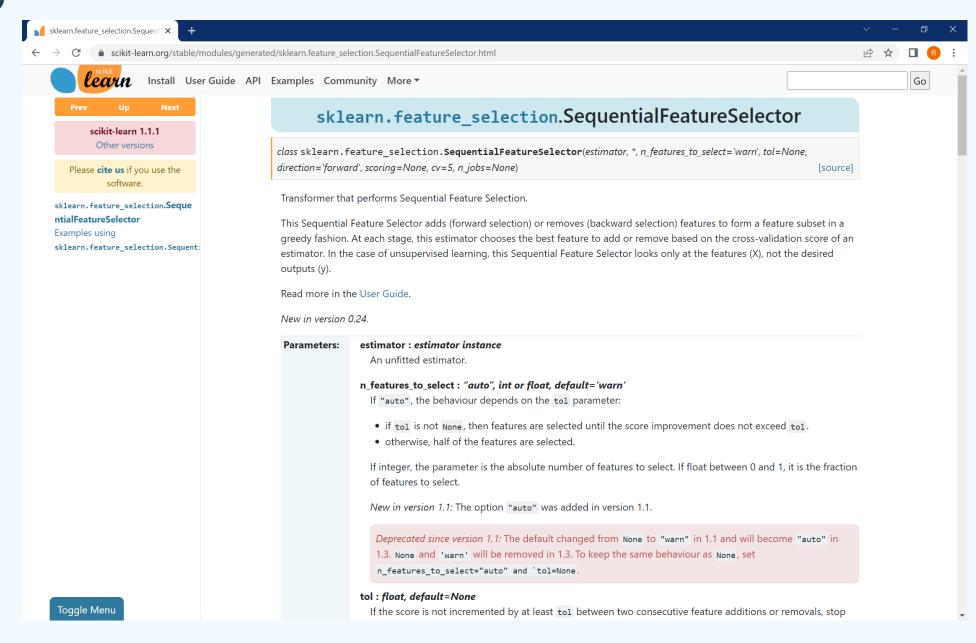
 A cada rodada o algoritmo avalia todas as combinações possíveis entre a variável selecionada e a próxima que culmine no melhor resultado para o modelo.

Fonte: https://en.wikipedia.org/wiki/Entropy_(information_theory)



SUPERVISIONADO: WRAPPERS

FORWARD SELECTION





SUPERVISIONADO: WRAPPERS

- Segue o mesmo racional do Forward Selection,
 mas de forma invertida;
- Portanto, começa com todas as variáveis e, a cada iteração, elimina a variável que que tem a menor importância no modelo;

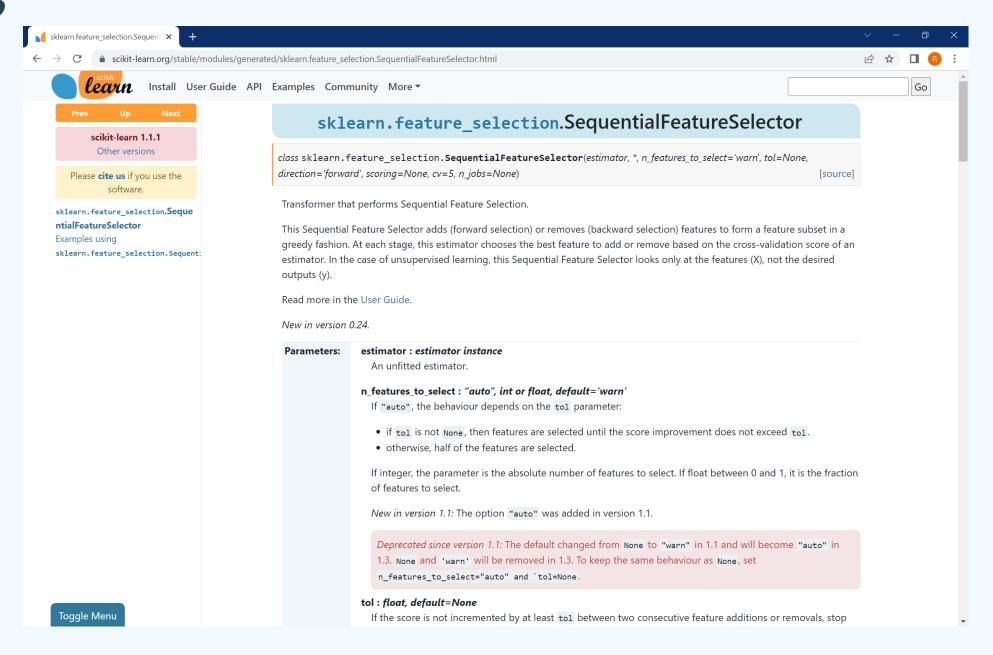
BACKWARD ELIMINATION

 Este processo acontece até que nenhuma melhora nas métricas seja observada.



SUPERVISIONADO: WRAPPERS

BACKWARD ELIMINATION





SUPERVISIONADO: WRAPPERS

- Cria modelos em cada iteração para identificar as piores variáveis, ou seja, as que podem/devem ser eliminadas;
- Em cada iteração, retira a variável que teve a pior performance;

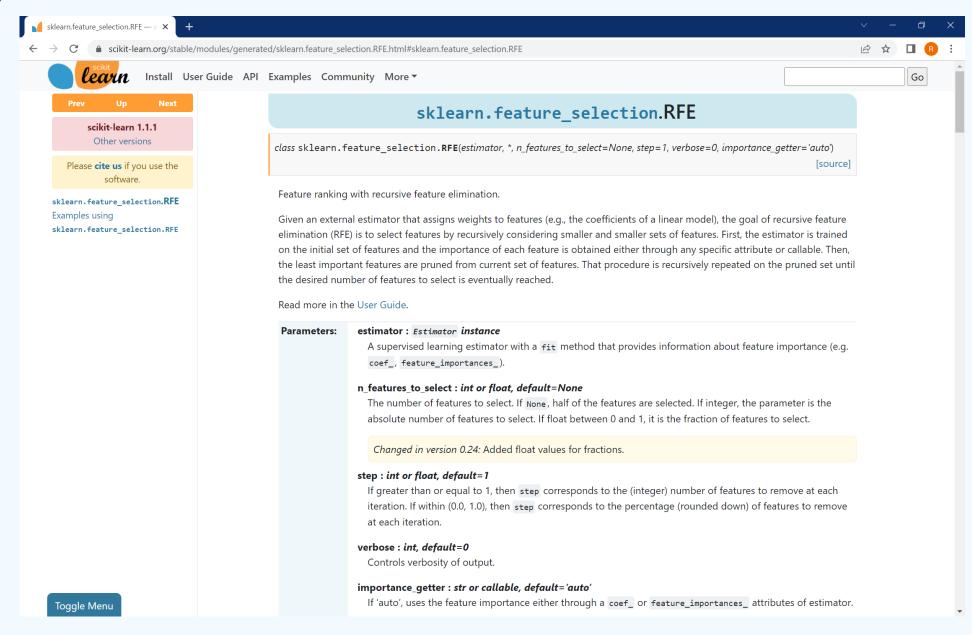
RFE

Em seguida, o próximo modelo é construído usando as variáveis do anterior que foram mantidas.



SUPERVISIONADO: WRAPPERS

RFE





SUPERVISIONADO: INTRÍNSECOS

- São métodos já presentes internamente em alguns algoritmos de aprendizado de máquina;
- Ou seja, no próprio funcionamento do algoritmo há uma seleção/definição de importância para as variáveis disponíveis;
- Avaliaremos dois casos:
 - LASSO

Random Forest Importance



LASSO

SUPERVISIONADO: INTRÍNSECOS

- Regressão LASSO é o mesmo que Regressão L1;
- Nesse tipo de regressão há a atribuição de uma penalidade no algoritmo;
- Essa penalidade é aplicada a cada parâmetro do modelo, o que diminuiu o grau de liberdade do

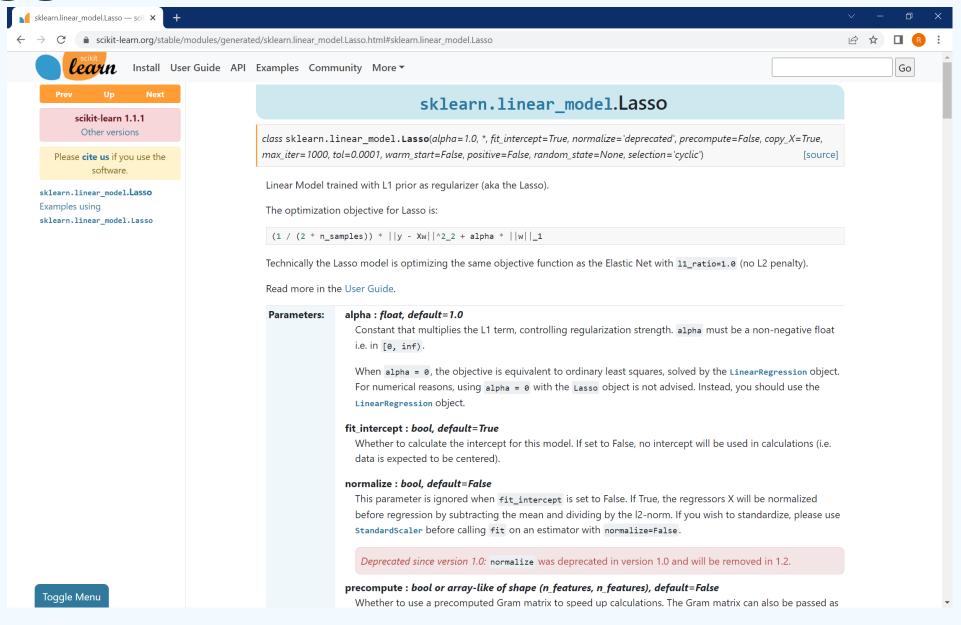
problema (evita overfit);

Caso nesse processo algum dos coeficientes da regressão se torne 0, isso significa que a variável associada a ele não tem importância para o problema.



SUPERVISIONADO: INTRÍNSECOS

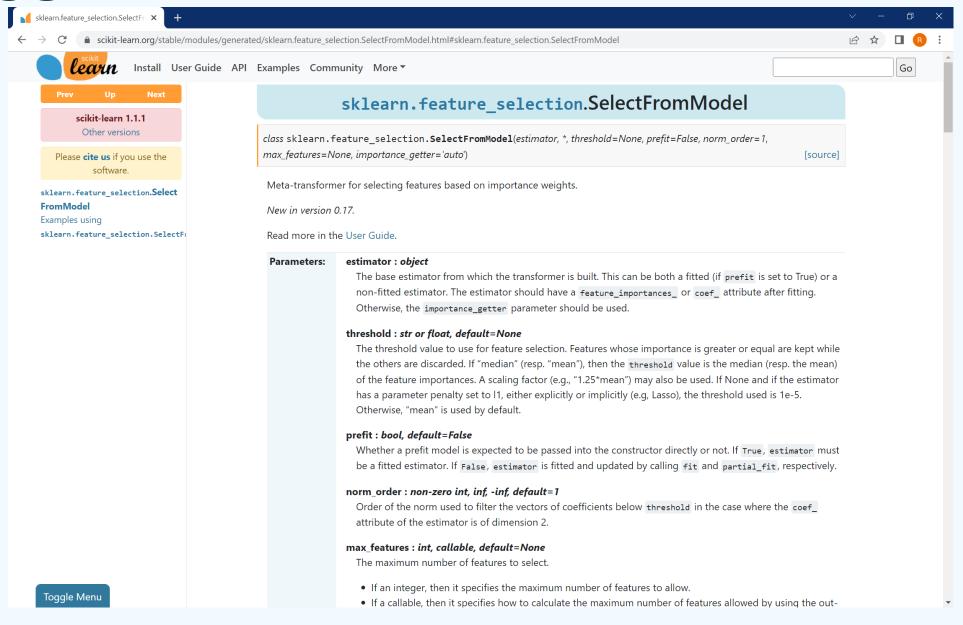
LASSO





SUPERVISIONADO: INTRÍNSECOS

LASSO





SUPERVISIONADO: INTRÍNSECOS

- É um método do tipo ensemble que constrói vários preditores do tipo árvore com baixa ou nenhuma correlação entre si;
- Por definição do algoritmo de árvore de decisão, a importância de cada variável é calculada para

RF IMPORTANCE

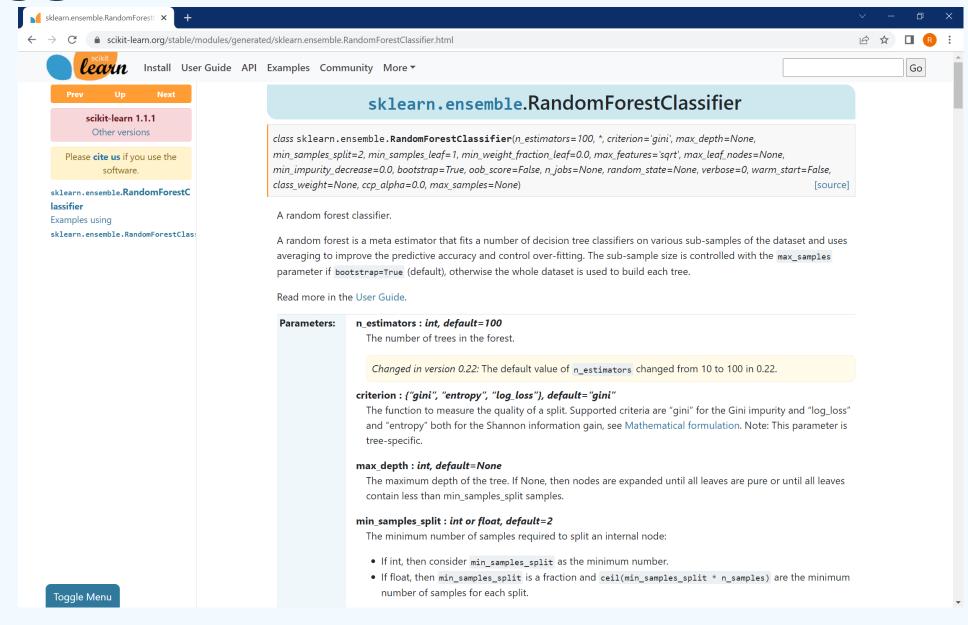
permitir o crescimento da árvore;

- A importância da va'riável é obtida pelo grau de pureza da amostra em cada galho/folha subsequente.
- A pureza é medida em GINI ou Entropia.



SUPERVISIONADO: INTRÍNSECOS

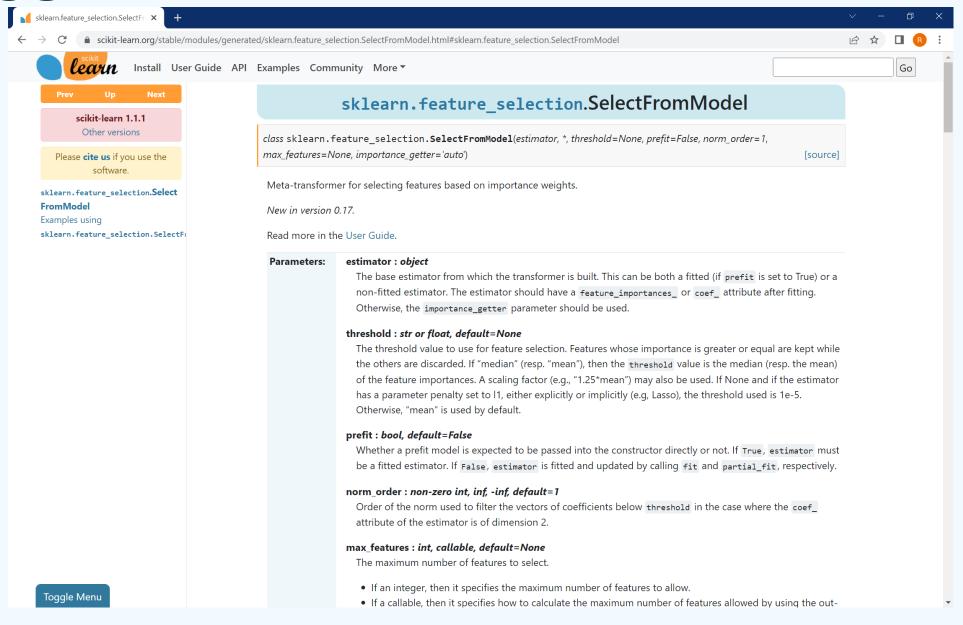
RF IMPORTANCE





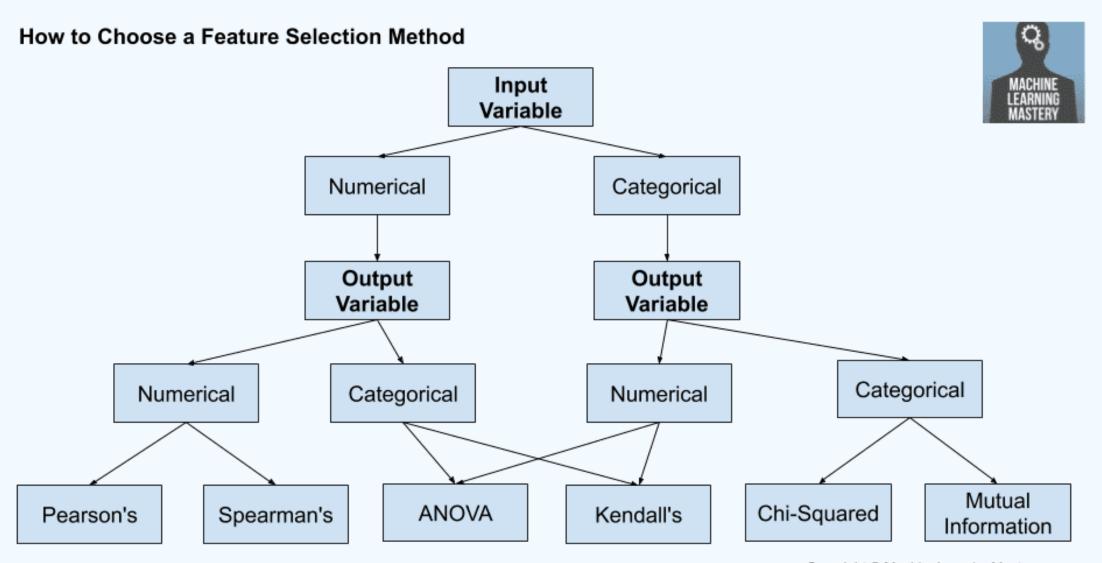
SUPERVISIONADO: INTRÍNSECOS

RF IMPORTANCE





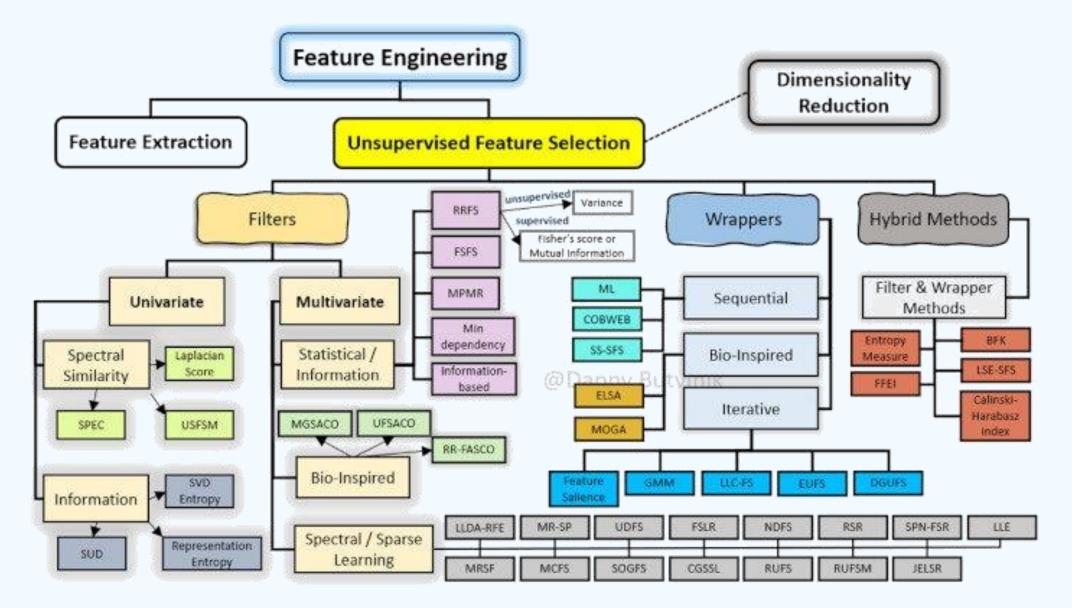
MÉTODOS



Copyright @ MachineLearningMastery.com

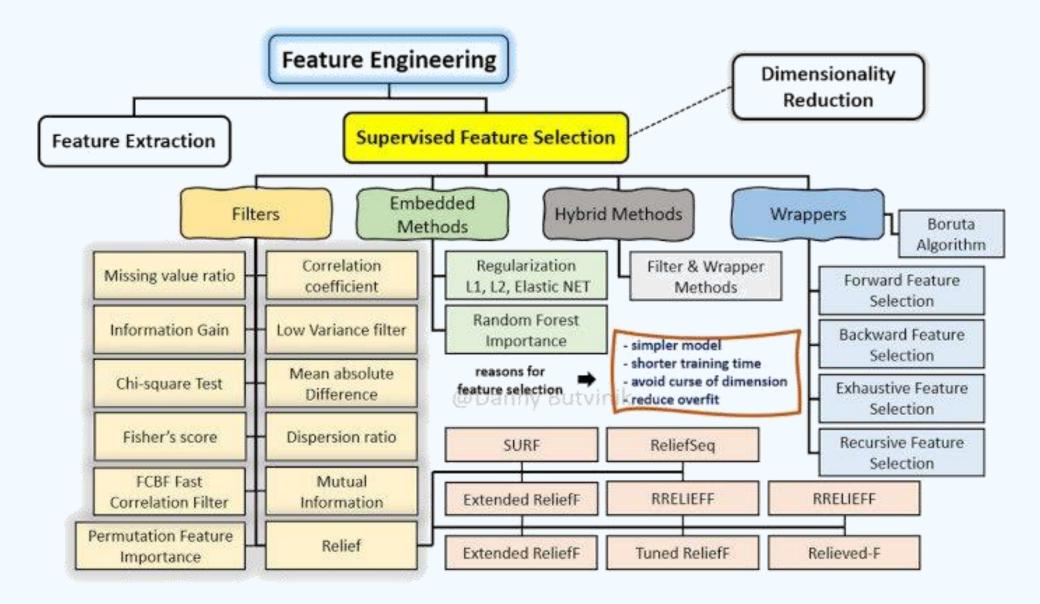


MÉTODOS





MÉTODOS





LEITURA RECOMENDADA

