UNIDAD TEMÁTICA 5: Aprendizaje No Supervisado, Clustering

Trabajo de Aplicación 3 - Análisis de Componentes Principales

EJERCICIO 1 - reducción de dimensionalidad

Comenzaremos con un dataset público sobre información nutricional.

Revisar la información disponible en http://lib.stat.cmu.edu/DASL/Stories/HealthyBreakfast.html y documentar el contexto del problema

El dataset está descrito en

http://lib.stat.cmu.edu/DASL/Datafiles/Cereals.html

y también disponible como planilla electrónica en la webasignatura "cereals.xls".

El dataset incluye información sobre los ratings e información nutricional de 77 cereales de desayuno. Hay un total de 16 variables, incluyendo 13 parámetros numéricos.

El objetivo es reducir este conjunto de 13 predictores a una lista mucho menor, utilizando PCA.

Paso 1. Preparación de los datos

- 1. Crea un nuevo proceso en blanco.
- 2. Importa el dataset al repositorio de datos de RapidMiner
- 3. Retira los parámetros no numéricos "Cereal name," "Manufacturer," y "Type (hot or cold)," ya que PCA sólo puede trabajar con atributos numéricos. Son las columnas A, B y C (en RapidMiner se pueden convertir estos atributos en rol ID para usarlos como referencia más tarde).

Paso 2. Operador PCA

Agrega un operador "PCA" y conéctalo con los datos (ya preparados). Analizar los parámetros que se pueden configurar en este operador.

En principio, para el parámetro "dimensionality reduction" selecciona "keep variance" y para "variance threshold" deja el valor por defecto 0.95. así el operador ha de seleccionar sólo los atributos que expliquen el 95% de la varianza total de los datos.

Conecta las salidas del operador PCA a los puertos de resultados.

Paso 3. Ejecución e Interpretación

- Al ejecutar el proceso RapidMiner crea varias pestañas en el panel de resultados. Al seleccionar la pestaña "PCA" veremos tres secciones relacionadas con PCA: "Eigenvalues" (valores propios), "Eigenvectors" (vectores propios) y "Cumulative Variance Plot" (gráfico de varianza acumulada).
- En la sección de "Eigenvalues" podemos obtener información sobre la contribución individual que cada componente principal aporta a la varianza de los datos.

- Si, como hemos configurado, nuestro umbral de varianza es 95%, entonces alcanza con tener en cuenta solamente los tres primeros componentes, ya que explican cerca del 97% de la varianza de los datos. PC1 contribuye mayoritariamente, con aprox. 55%.
- Luego podemos analizar en profundidad cómo cada uno de los componentes principales identificados se relaciona linealmente con los parámetros reales del dataset. Observa (y documenta) la composición de PC1, PC2 y PC3 (en la vista de "Eigenvectors").
- En este momento, deseamos tener en cuenta solamente los atributos reales que tienen peso significativo en la composición de los CPs.

¿Cómo seleccionar estos atributos?

- Podemos ordenar (en la vista de "Eigenvalues") por cada componente principal, y seleccionar entonces los dos o tres atributos reales que más le impactan.
- Para los PC1, PC2 y PC3, podemos seleccionar "calories", "sodium", "potassium", "vitamins", y
 "rating" para formar el dataset reducido (obtenidos seleccionando los 3 más importantes para
 cada PC). En este ejemplo entonces tenemos una reducción de 13 a 5 atributos, o sea, más del
 50%.
- Considera por un momento lo que esto significa, cuando el dataset es muy grande, en términos del rendimiento computacional de diferentes algoritmos de ML.
- PCA ES UNA HERRAMIENTA MUY EFECTIVA Y AMPLIAMENTE UTILIZADA para reducción de dimensionalidad, especialmente cuando los atributos son numéricos.

Riesgos a considerar cuando se utiliza PCA:

- 1. Los resultados de PCA deben ser evaluados en el contexto de los datos
 - Si los datos tienen mucho ruido, PCA puede erróneamente seleccionar los atributos más ruidosos como más significativos.
 - Interpreta los resultados anteriores (los PC en función de los atributos reales para cada producto)
- 2. Agregar datos no correlacionados no siempre ayuda. Tampoco ayuda agregar datos que pueden estar correlacionados pero son irrelevantes
- 3. PCA es muy sensible a los efectos de la escala en los datos!

Observa los datos del ejemplo.

• ¿qué características estadísticas tienen los atributos reales que fueron identificados como más significativos?

Estos factores dominan los resultados de PCA porque contribuyen más a la varianza total de los datos

- ¿Cuál sería el efecto de otro posible atributo, "volumen de ventas", cuyo rango estuviera en los millones (de \$ o cajas)? Claramente, enmascararía los efectos de cualquier otro atributo.
- Para minimizar los efectos de la escala, se recomienda NORMALIZAR LOS DATOS (rangos entre 0 y 1).
- Aplica esta normalización, ejecuta el proceso y analiza los nuevos resultados.