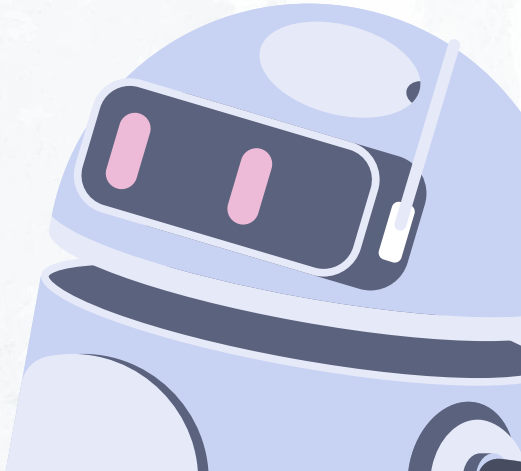
Analítica de Datos (Aprendizaje de máquina)

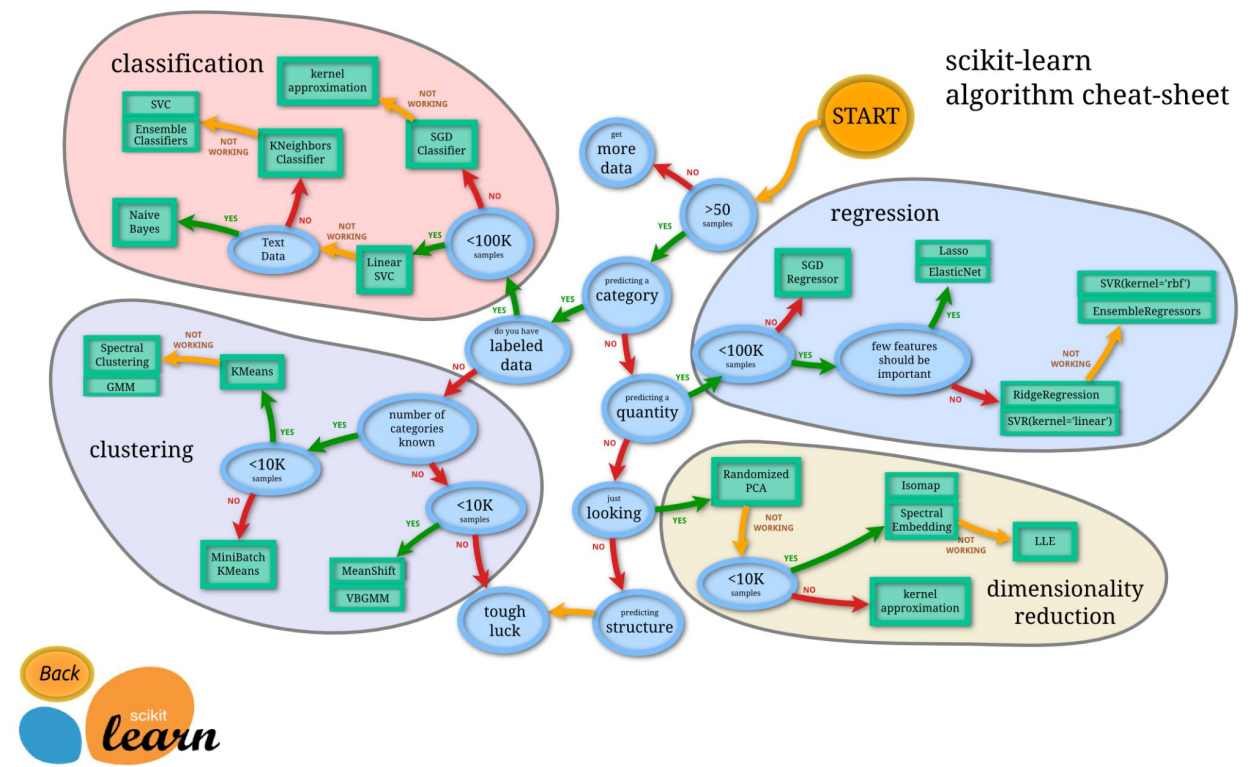


UNAL

Departamento de Eléctrica, Electrónica y Computación
Facultad de Ingeniería y Arquitectura
Sede Manizales

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

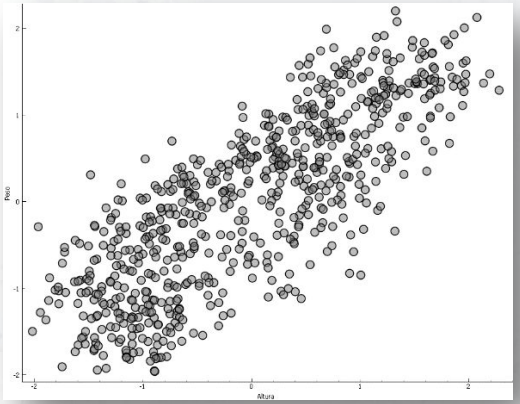
Machine learning - Guideline



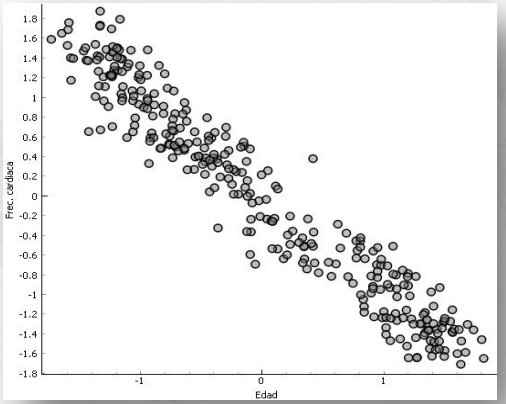
Buscando relaciones

Correlación

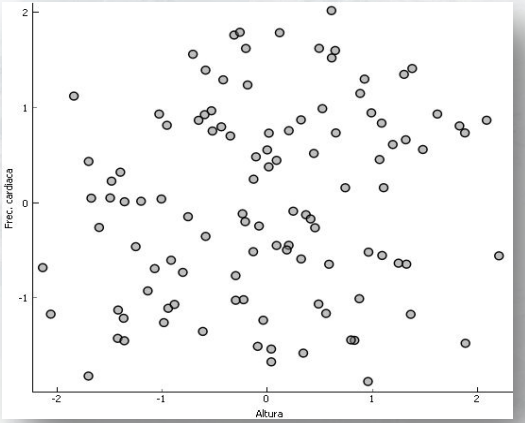
Cualquier **relación lineal** existente entre dos variables de un conjunto de datos se conoce como **correlación.**



Correlación positiva



Correlación negativa



Sin Correlación

Buscando relaciones

Correlación - Definición

La medida más familiar de dependencia entre dos cantidades es el **"Coeficiente de Correlación de Pearson".**

Dependiendo del signo de nuestro coeficiente de correlación de Pearson, podemos terminar con una correlación negativa o positiva si existe algún tipo de relación entre las variables de nuestro conjunto de datos.

$$\rho_{X,Y} = \operatorname{corr}(X,Y) = \frac{\operatorname{cov}(X,Y)}{\sigma_X \sigma_Y} = \frac{\operatorname{E}[(X-\mu_X)(Y-\mu_Y)]}{\sigma_X \sigma_Y}, \quad \text{if } \sigma_X \sigma_Y > 0.$$

$$\rho_{X,Y} = \frac{\operatorname{E}(XY) - \operatorname{E}(X)\operatorname{E}(Y)}{\sqrt{\operatorname{E}(X^2) - \operatorname{E}(X)^2} \cdot \sqrt{\operatorname{E}(Y^2) - \operatorname{E}(Y)^2}}$$

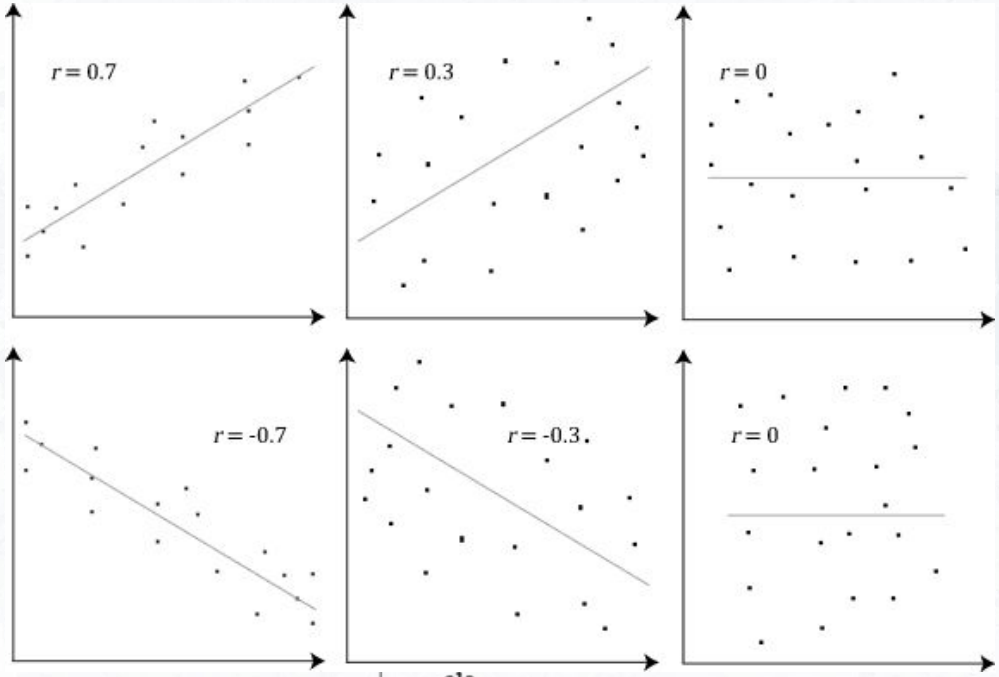
Buscando relaciones

Correlación y dependencia

- El **valor absoluto** del coeficiente de correlación de Pearson no es mayor que 1.
- El valor de un coeficiente de correlación oscila entre −1 y +1
- El coeficiente de correlación es **+1** en el caso de una relación lineal (correlación) directa (creciente) perfecta.
- El coeficiente de correlación es **−1** en el caso de una relación lineal (anti-correlación) inversa (decreciente) perfecta.
- Algún valor en el intervalo abierto **(-1,1)** indicando el grado de dependencia lineal entre las variables
- A medida que se acerca **a cero**, hay menos relación (más cercana a no correlacionada).

Buscando relaciones

Correlación y dependencia

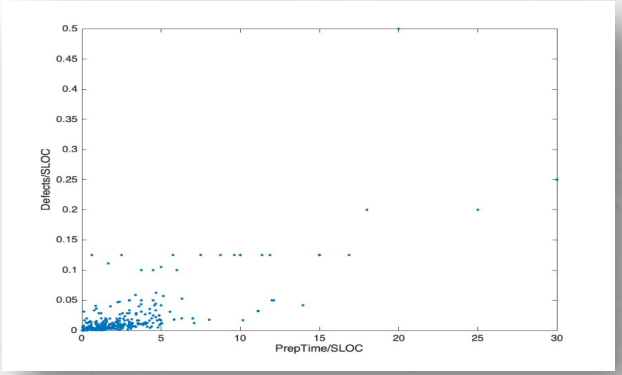


Diagramas de dispersión de ejemplo de varios conjuntos de datos con **varios coeficientes de correlación**.

Buscando relaciones

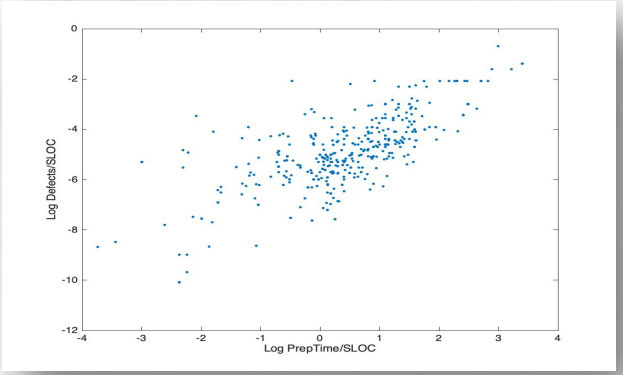
Correlación y dependencia

- En muchas ocasiones la correlación **NO** es evidente. Es posible que tengamos que transformar los datos para encontrarla.



No hay correlación evidente

Calculando el logaritmo a cada una de las variables



Aparece una correlación positiva

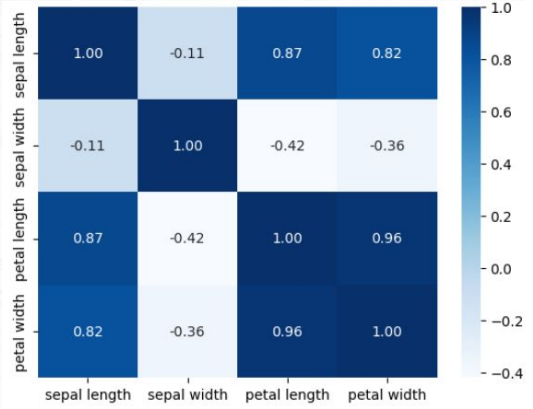
Buscando relaciones

Correlación - Mapa de correlación

	longitude	latitude	housing_median_age	total_rooms	total_bedrooms	population	households	median_income	median_house_value
longitude	1.000000	-0.924478	-0.105823	0.048909	0.076686	0.108071	0.063146	-0.019615	-0.047466
latitude	-0.924478	1.000000	0.005737	-0.039245	-0.072550	-0.115290	-0.077765	-0.075146	-0.142673
housing_median_age	-0.105823	0.005737	1.000000	-0.364535	-0.325101	-0.298737	-0.306473	-0.111315	0.114146
total_rooms	0.048909	-0.039245	-0.364535	1.000000	0.929391	0.855103	0.918396	0.200133	0.135140
total_bedrooms	0.076686	-0.072550	-0.325101	0.929391	1.000000	0.876324	0.980167	-0.009643	0.047781
population	0.108071	-0.115290	-0.298737	0.855103	0.876324	1.000000	0.904639	0.002421	-0.026882
households	0.063146	-0.077765	-0.306473	0.918396	0.980167	0.904639	1.000000	0.010869	0.064590
median_income	-0.019615	-0.075146	-0.111315	0.200133	-0.009643	0.002421	0.010869	1.000000	0.687151
median_house_value	-0.047466	-0.142673	0.114146	0.135140	0.047781	-0.026882	0.064590	0.687151	1.000000

Base de datos Housing California

Base de datos Iris



UNAL

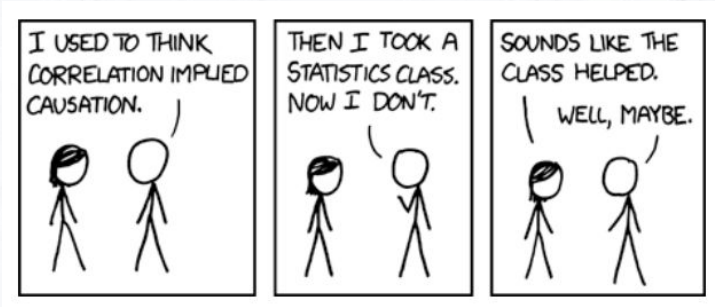
Departamento de Eléctrica, Electrónica y Computación
Facultad de Ingeniería y Arquitectura
Sede Manizales

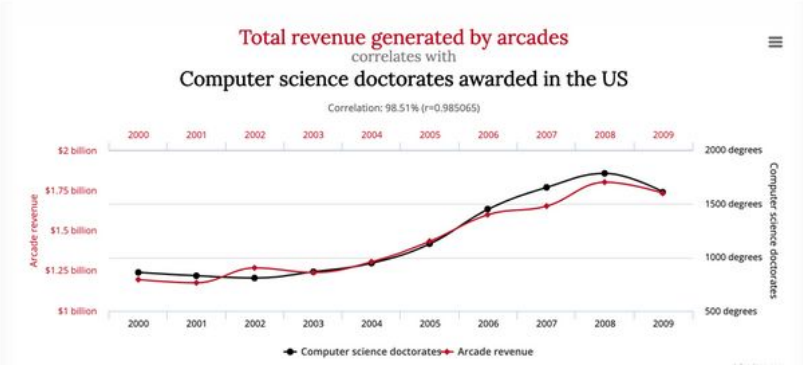
UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Buscando relaciones

Correlación - Causalidad

Es un error común **confundir** correlación con causalidad. Dos fenómenos pueden estar correlacionados y que aún así no tengan realmente una relación.





Tenemos causalidad cuando un fenómeno lo causa otro

A veces es difícil determinar si hay causalidad y en qué sentido sucede

UNAL

Departamento de Eléctrica, Electrónica y Computación
Facultad de Ingeniería y Arquitectura
Sede Manizales

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

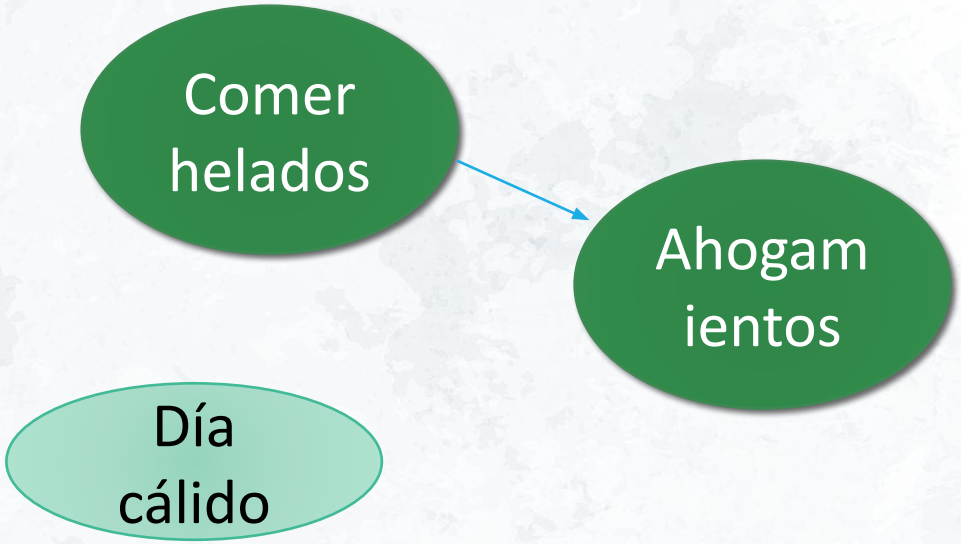
Buscando relaciones

Correlación - Causalidad

Correlación no implica Causalidad

Si cuando la gente consume más helados también se ahoga más gente... **¿será que comer helados nos ahoga?**

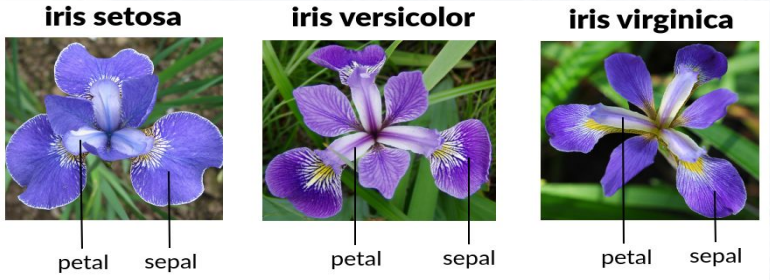
¿O tal vez es que ahogarse le provoca a uno ganas de comer helado?

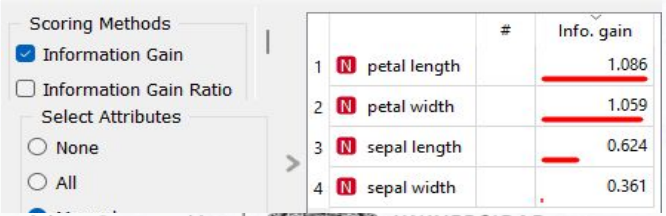


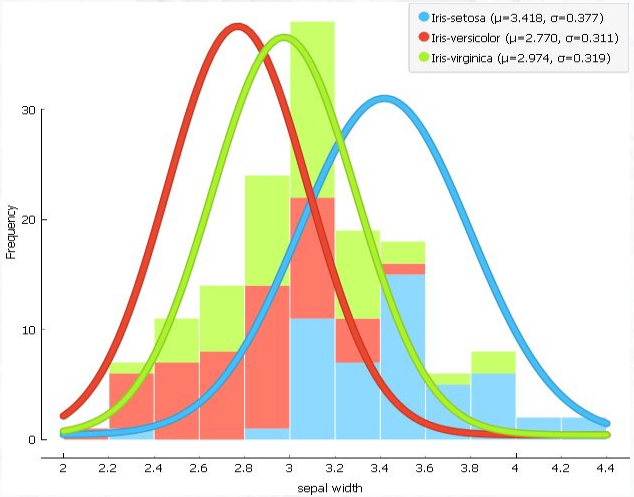
Selección y extracción de características

En casos de la vida real, **no todas las características disponibles** tienen información relevante para la tarea de análisis que se esté llevando a cabo.

Un **ejemplo** de esto se puede ver en la base de datos de Iris. En la cual para diferenciar entre los tipos de esta flor no todas las características son necesarias.







Selección y extracción de características

Selección:

Existen varias metodologías para la selección de características. Estas metodologías o métodos calculan una medida que indica la importancia de las características según algún criterio fijo. Por medio de esta medida se realiza un **ranking** de importancia.

Estas metodologías se separan en:

- **Supervisadas:** se requiere de la variable objetivo o target para definir qué características son las importantes.

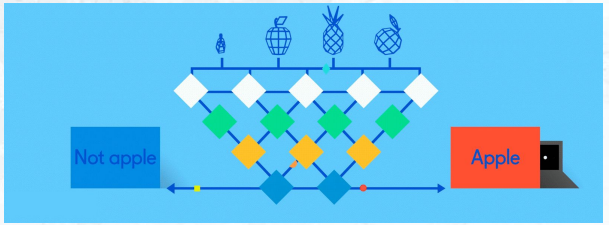
- **No-supervisadas:** no se requiere de la variable objetivo para definir niveles de importancia de las características bajo estudio.

Selección y extracción de características

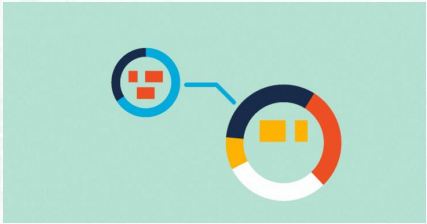
Selección - SUPERVISADAS:

Dentro de las técnicas supervisadas para la selección de las características más relevantes se encuentran metodologías que:

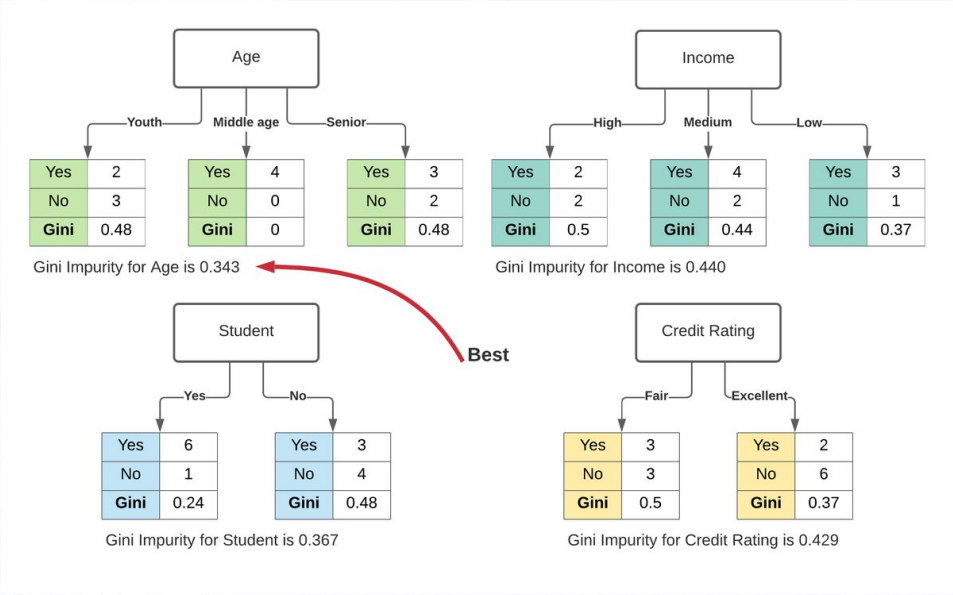
- Hacen uso de métricas para realizar el ranking. Entre estas medidas, las más usadas son:
  - Gini
  - Entropía/Ganancia de Información
  - ANOVA
  - Chi-Cuadrado



- Metodologías que hacen uso de un método de clasificación (target categórico) o de regresión (target numérico)
  - RelieF
  - RFE (Recursive Feature Elimination)



Selección y extracción de características



Selección - SUPERVISADAS:

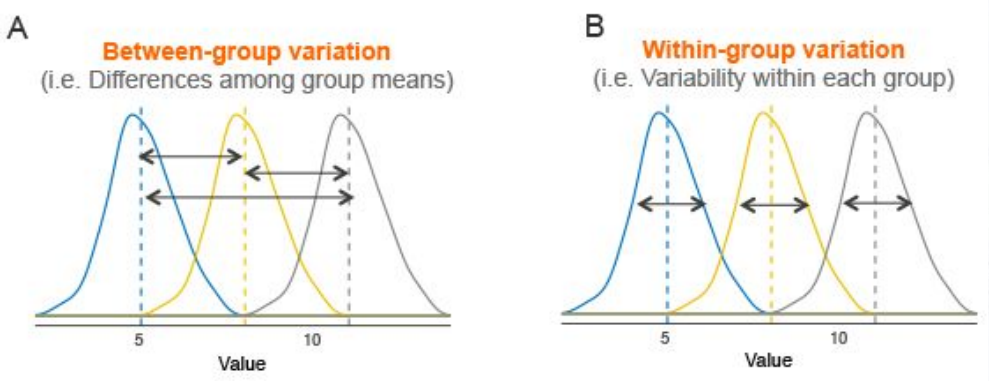
- **GINI:** Este es un coeficiente obtenido de dos variables/atributos para medir el nivel de desigualdad entre dos variables, muy usado en economía.

$$Gini(D) = 1 - \sum_{i=1}^{k} p_i^2$$

Selección y extracción de características

Selección - SUPERVISADAS:

- **ANOVA:** Es de los test estadísticos más conocidos, el cual tiene como hipótesis nula que las medias de dos variables son iguales. Adicional, esta técnica hace uso de la Distribución F, y se hace uso de su score para ranquear los atributos por nivel de importancia.



La idea detrás de la prueba **ANOVA** es muy simple: si la variación promedio entre grupos es lo suficientemente grande en comparación con la variación promedio dentro de los grupos, entonces se podría concluir que al menos la media de un grupo no es igual a las demás.

Selección y extracción de características

The Formula for Chi Square Is

$$\chi_c^2 = \sum \frac{(O_i - E_i)^2}{E_i}$$

where:

c = degrees of freedom

O = observed value(s)

E = expected value(s)

Selección - SUPERVISADAS:

- **CHI-cuadrado:** También es un popular test estadístico para saber si dos variables (categóricas) son independientes o no. Esta hace uso de la distribución de Chi-cuadrado para determinar lo anterior.

Cuando dos características **son independientes**, el recuento observado se acerca al recuento esperado, por lo que tendremos un valor de Chi-cuadrado más pequeño. Un valor tan alto de Chi-cuadrado indica que la hipótesis de independencia es incorrecta.

En palabras simples, cuanto mayor sea el valor de Chi-cuadrado, la característica dependerá más de la respuesta y se puede seleccionar para el entrenamiento del modelo.

Selección y extracción de características

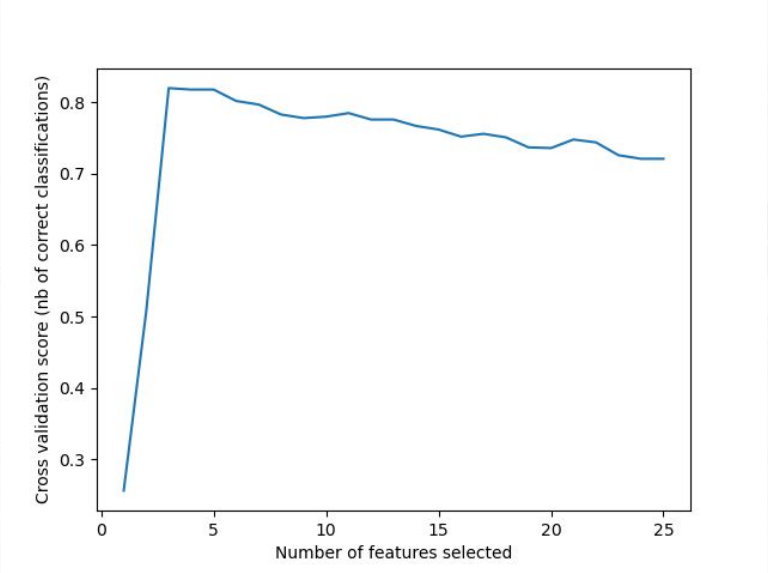
Selección - SUPERVISADAS:

- **Relief:** Dado un ejemplo, Relief busca a sus *dos vecinos más cercanos*, uno de la misma clase y otro de una clase diferente, y actualiza los pesos de los atributos involucrados dependiendo de si sus valores son iguales o no a estos ejemplos.

- La idea es favorecer atributos que tengan valores diferentes en ejemplos parecidos de diferente clase y valores iguales en ejemplos parecidos de la misma clase.

for $i = 1$ to n **do**
  Selecciona aleatoriamente un ejemplo E de una clase
  Encuentra el ejemplo de la misma clase más cercano P
  y el ejemplo de otra clase más cercano N
  for $A := 1$ to *Num. de atributos* **do**
    $W[A] := W[A] - \text{diff}(A, E, P)/n + \text{diff}(A, E, N)/n$
  end for
end for

Selección y extracción de características



Selección - SUPERVISADAS:

- **Eliminación recursiva de características:** Esta metodología hace uso de un clasificador (target categórico) o de un regresor (target numérico).
  - Se aplica el método en cuestión sobre la base de datos y se calcula **su rendimiento** (acierto, error cuadrático medio, etc.)
  - Se realiza el procedimiento anterior eliminando, de forma aleatoria, atributos.
  - Los atributos son rankeados según la pérdida de rendimiento con respecto al caso donde se usan todos ellos.

Selección y extracción de características

Selección - NO SUPERVISADAS:

- ¿Cuáles son los métodos más comunes de selección de características no supervisadas y en qué situaciones son especialmente efectivos?

- ¿Cuáles son las métricas típicas utilizadas para evaluar la calidad de las características seleccionadas por algoritmos no supervisados, como la **reducción de dimensionalidad** o la mejora en la representación de datos?

Extracción de características

Reducción de dimensión

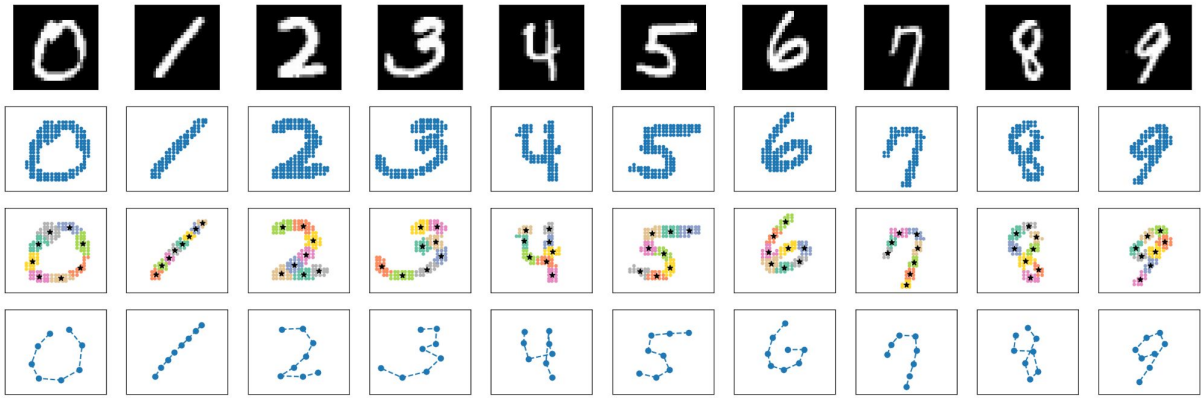
El enfoque de la extracción de características como su nombre lo indica es la extracción de **“nuevos”** atributos a partir de los ya existentes.

Lo anterior se hace con dos objetivos principales en mente:

- Reducir el número de atributos. Con esto se reduce el efecto de la maldición de la dimensionalidad.
- Tener una “mejor” representación de la base.

Estas metodologías pueden ser:

- No supervisadas
- Supervisadas



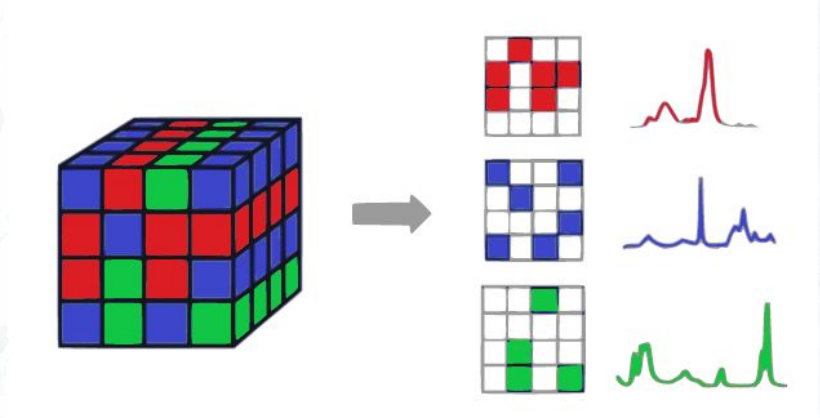
Extracción de características

Reducción de dimensión

Muchos problemas de Machine Learning implican millones de características para cada instancia de entrenamiento.

- Extremadamente lento
- Es mucho más difícil encontrar una buena solución.

Este problema a menudo se conoce como **curse of dimensionality**.



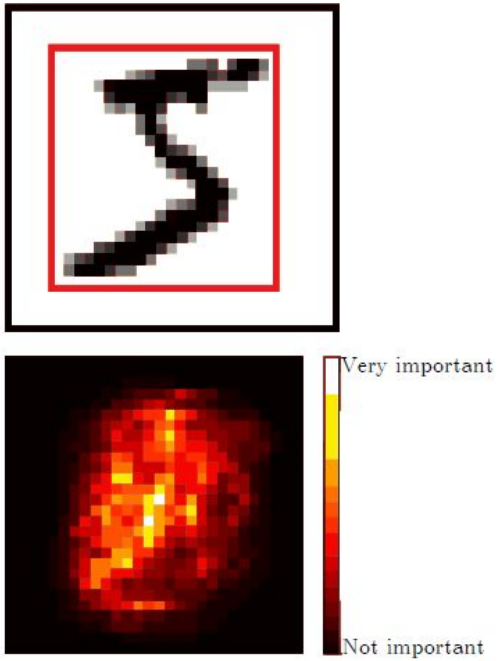
En el mundo real, es posible **reducir considerablemente el número de características**, convirtiendo un “intractable problem” en un “tractable problem”.

Extracción de características

Reducción de dimensión - Ejemplo

Consideremos las imágenes de la base de datos **MNIST**:

- Los pixeles en los bordes de la imagen casi siempre son blancos, por lo que puede eliminar estos píxeles sin perder mucha información.
- La imágen de relevancia, confirma que estos píxeles no son importantes para la tarea de clasificación.

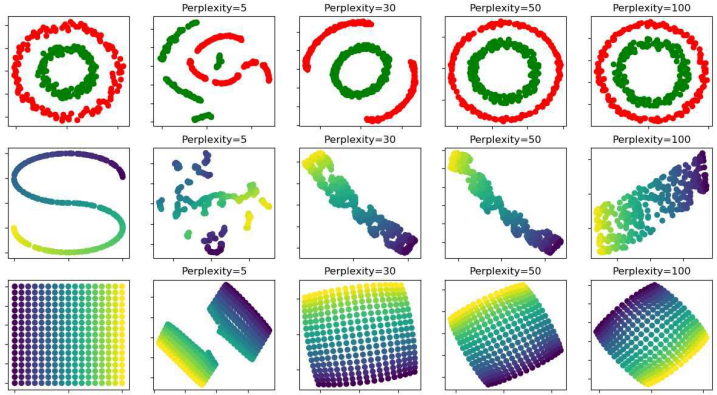


En el proceso de reducción de la dimensionalidad se pierde algo de información.

Extracción de características

Reducción de dimensión - Tips

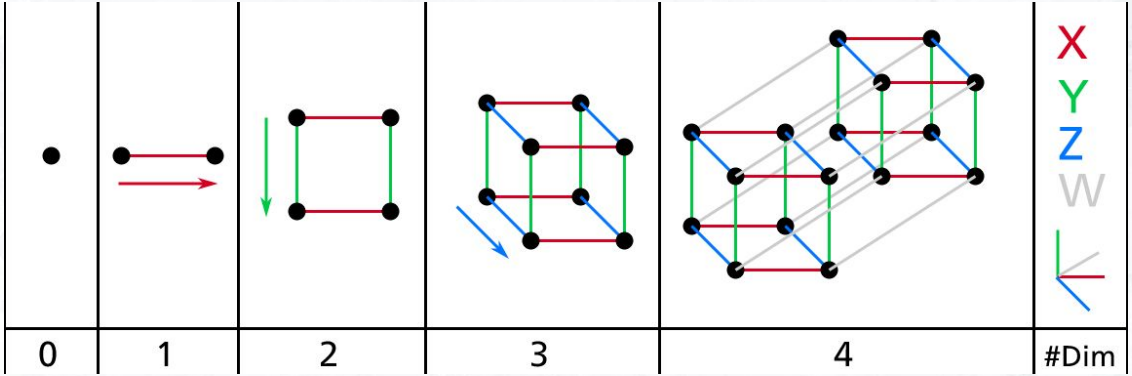
- En algunos casos, reducir la dimensionalidad de los datos de entrenamiento puede filtrar algunos ruidos y detalles innecesarios y, por lo tanto, **generar un mayor rendimiento**.
- Además de acelerar el entrenamiento, la reducción de dimensionalidad también es extremadamente útil para la visualización de datos.



Extracción de características

Reducción de dimensión - Curse of Dimensionality

Estamos tan acostumbrados a vivir en **tres dimensiones** que nuestra intuición nos falla cuando tratamos de imaginar un espacio de alta dimensión.

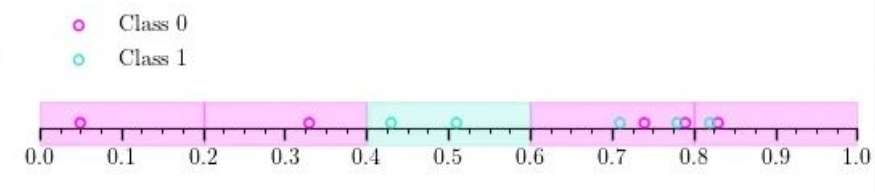


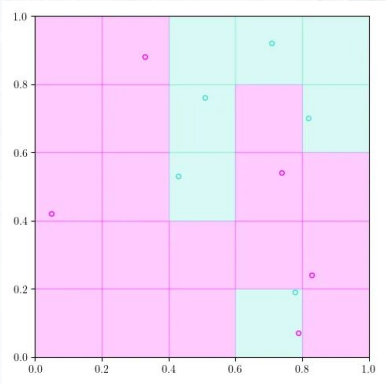
Resulta que muchas cosas se comportan de manera muy diferente en espacios de alta dimensión

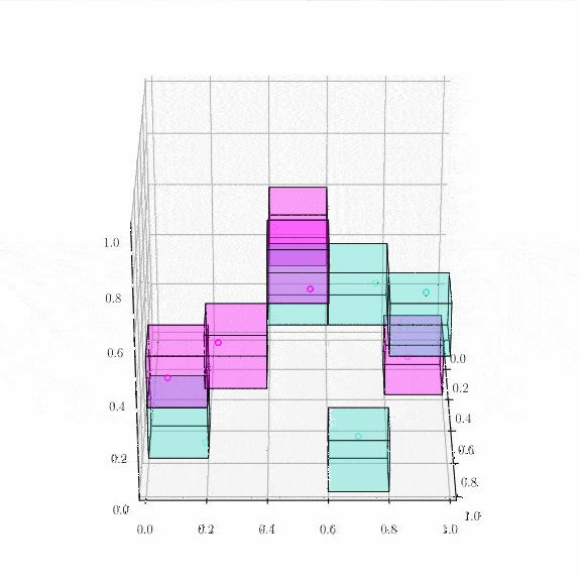
Extracción de características

Reducción de dimensión - Curse of Dimensionality

Consiste en que a mayor sea la dimensionalidad de los datos, mayor será la cantidad de muestras para tener una buena representación para la tarea a realizar.







Extracción de características

Reducción de dimensión - Curse of Dimensionality

Solución: Aumentar el tamaño del conjunto de entrenamiento para alcanzar una densidad suficiente de instancias de entrenamiento.

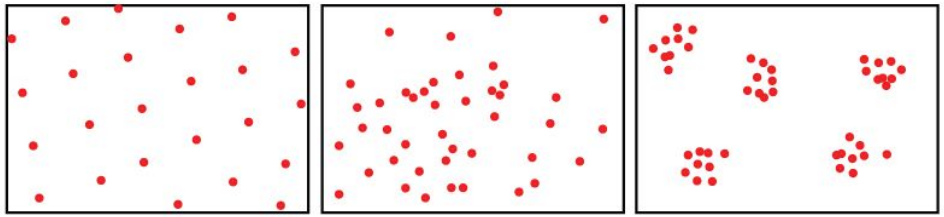
Sin embargo, **el número de instancias de entrenamiento requeridas** para alcanzar una densidad dada crece exponencialmente con el número de dimensiones.

- Con solo **100 características**, necesitaría más instancias que átomos en el universo.

Extracción de características

Reducción de dimensión - Enfoques: Proyección

- En los problemas del mundo real, las instancias de entrenamiento no se distribuyen de manera uniforme en todas las dimensiones.



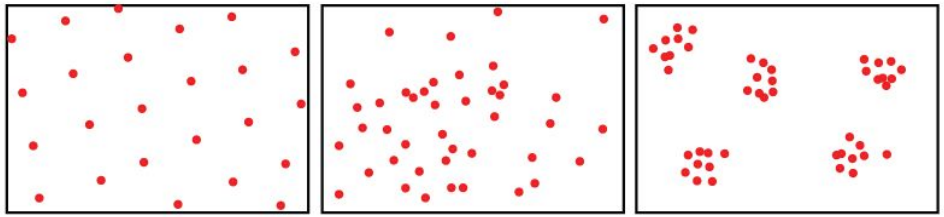
- Muchas características son casi constantes, mientras que otras están altamente correlacionadas.

Todas las instancias de entrenamiento realmente se encuentran dentro (o cerca) de un subespacio de dimensiones mucho más bajas.

Extracción de características

Reducción de dimensión - Enfoques: Proyección

- En los problemas del mundo real, las instancias de entrenamiento no se distribuyen de manera uniforme en todas las dimensiones.



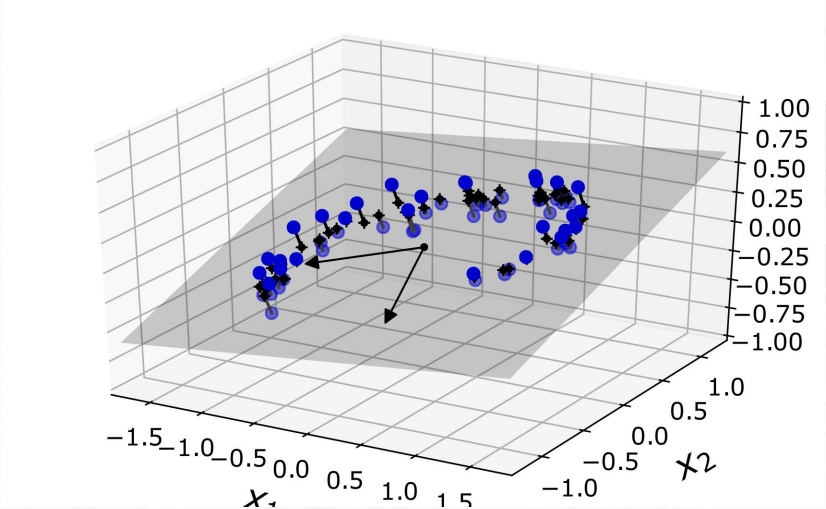
- Muchas características son casi constantes, mientras que otras están altamente correlacionadas.

Todas las instancias de entrenamiento realmente se encuentran dentro (o cerca) de un subespacio de dimensiones mucho más bajas.

Extracción de características

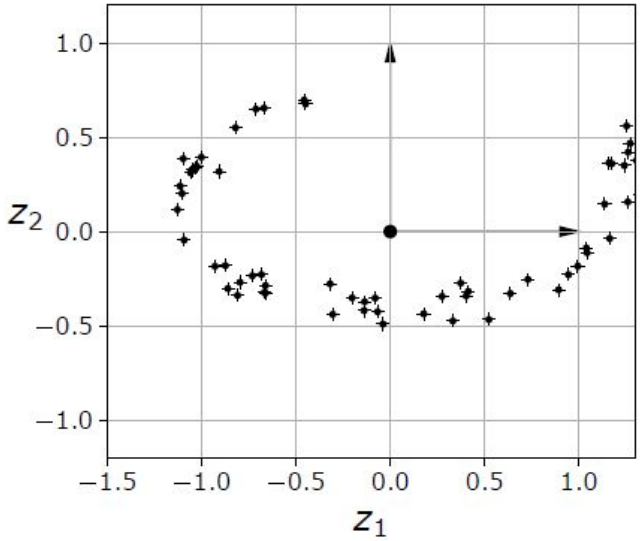
Reducción de dimensión - Enfoques: Proyección - Ejemplo I

En la Figura se puede ver un conjunto de datos en 3D representado por círculos.



Todas las instancias de entrenamiento se encuentran cerca de un plano: este es un subespacio de menor dimensión (2D) del de alta dimensión (3D).

Extracción de características



Reducción de dimensión - Enfoques: Proyección - Ejemplo I

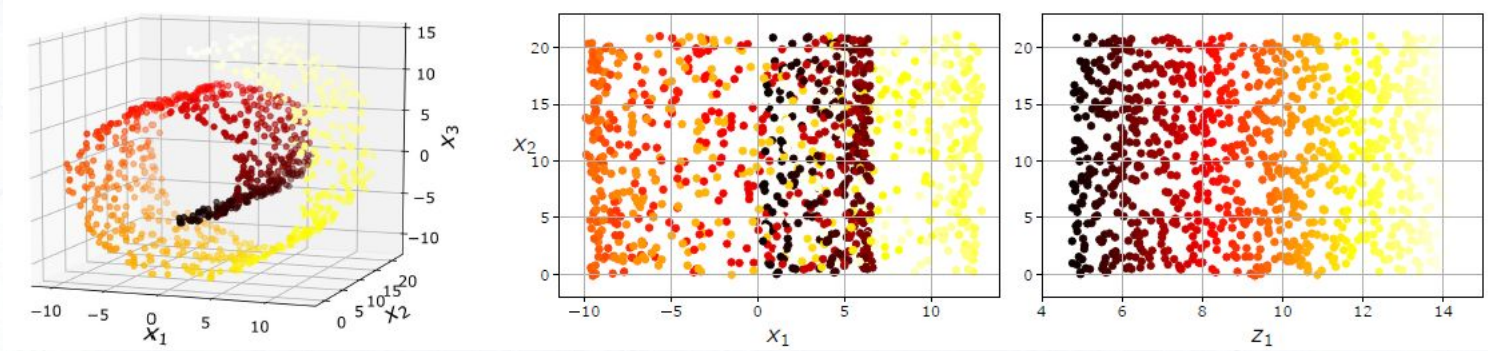
Si proyectamos cada instancia de entrenamiento perpendicularmente en este subespacio, obtenemos el nuevo conjunto de datos 2D:

- Tengamos en cuenta que los ejes corresponden a las nuevas características z1 y z2.
- Sin embargo, la proyección no siempre es el mejor enfoque para la reducción de la dimensionalidad.

Extracción de características

Reducción de dimensión - Enfoques: Proyección - Ejemplo II

En muchos casos, el subespacio puede girar y girar, como en el famoso conjunto de datos "Swiss roll":



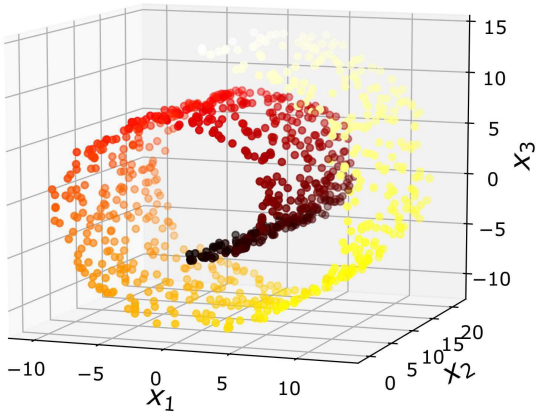
- Proyectar en un plano (por ejemplo, quitando x3) aplastará diferentes capas del rollo suizo (Centro).
- Lo que realmente deseamos es desenrollar el rollo suizo para obtener el conjunto de datos 2D (Derecha).

Extracción de características

Reducción de dimensión - Enfoques: Proyección - Manifold Learning

- El “Swiss roll” es un ejemplo de una variedad 2D.
- Un múltiple 2D es una forma 2D que se puede doblar y torcer en un espacio de dimensiones superiores.
- Una variedad d-dimensional es una parte de un espacio n-dimensional (donde d < n) que localmente se parece a un hiperplano d-dimensional.

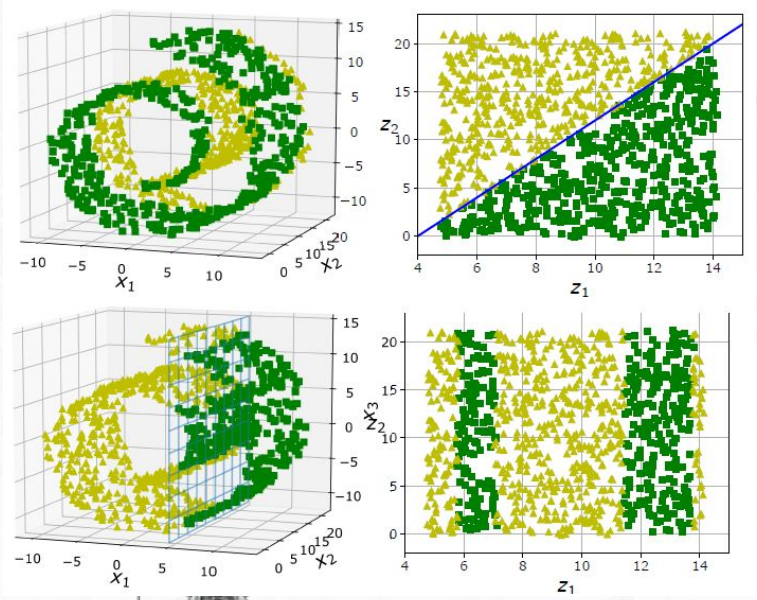
Manifold assumption: la mayoría de los conjuntos de datos de alta dimensión del mundo real se encuentran cerca de un manifold de mucha más baja dimensión.



Extracción de características

Reducción de dimensión - Enfoques: Proyección - Manifold Learning

El Implicit assumption: la tarea en cuestión (por ejemplo, clasificación o regresión) será más simple si se expresa en el espacio de dimensiones inferiores del manifold.



Extracción de características

Reducción de dimensión - Enfoques: Proyección - Manifold Learning

- En la **fila superior de la Figura**, el rollo suizo se divide en dos clases: en el espacio 3D (a la izquierda), el límite de decisión sería bastante complejo, pero en el espacio múltiple desenrollado 2D (en el derecha), el límite de decisión es una simple línea recta.

- De lo contrario, en la **fila inferior de la Figura**, el límite de decisión se encuentra en x1 = 5. Este límite de decisión parece muy simple en el espacio 3D original, pero se ve más complejo en el múltiple desenrollado.

Si se reduce la dimensionalidad antes de entrenar un modelo, acelerará el entrenamiento, **pero no siempre puede conducir a una solución mejor.**

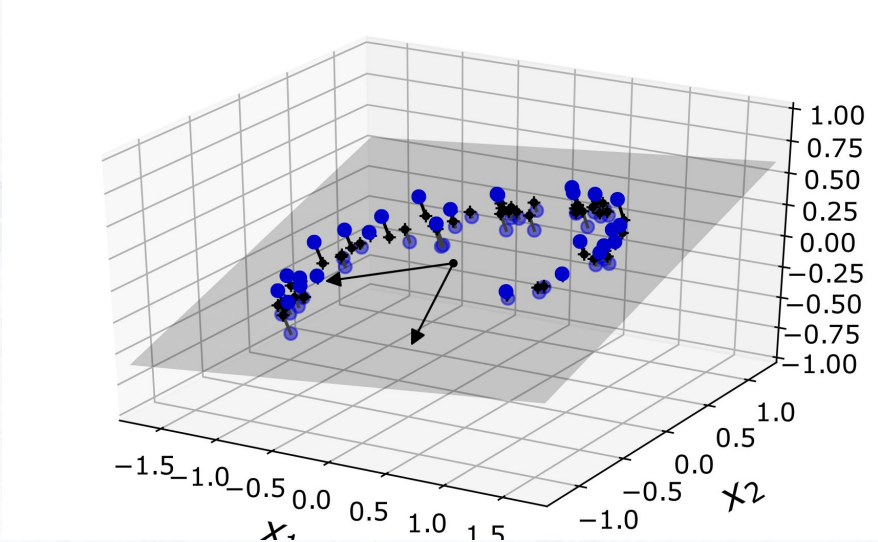
Extracción de características

Reducción de dimensión - Análisis de componentes principales (PCA)

PCA es el algoritmo de reducción de dimensionalidad más popular.

¿Cómo funciona?:

1. Identifica el hiperplano que se encuentra más cerca de los datos.
2. Luego proyecta los datos sobre él:

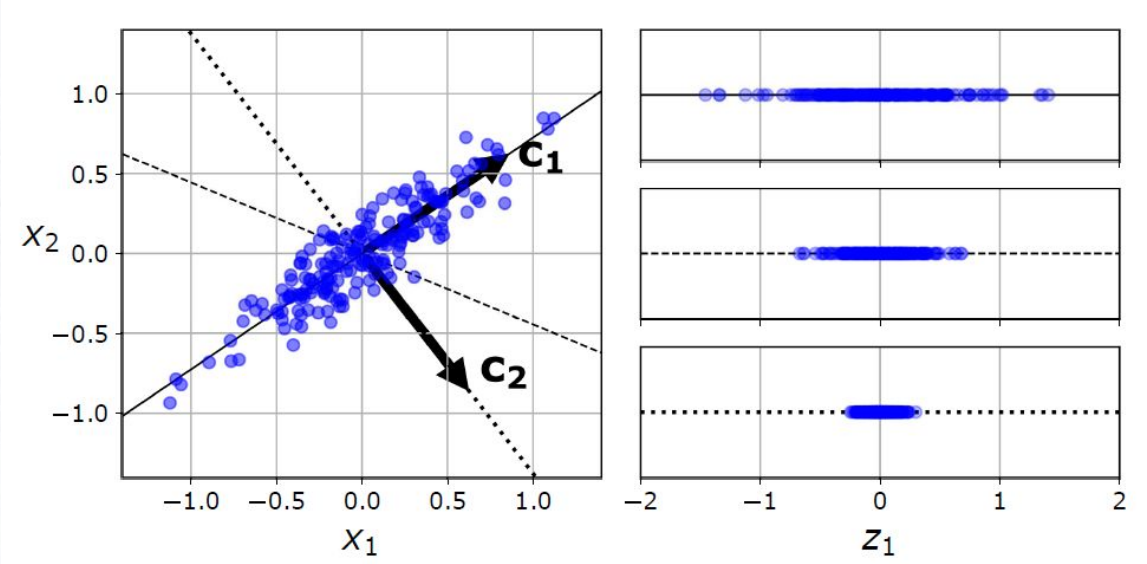


Extracción de características

Reducción de dimensión - PCA: Preservando la varianza

Antes de poder proyectar el conjunto de entrenamiento en un hiperplano de dimensiones inferiores, primero debemos elegir el hiperplano correcto.

- **Ejemplo:**



Extracción de características

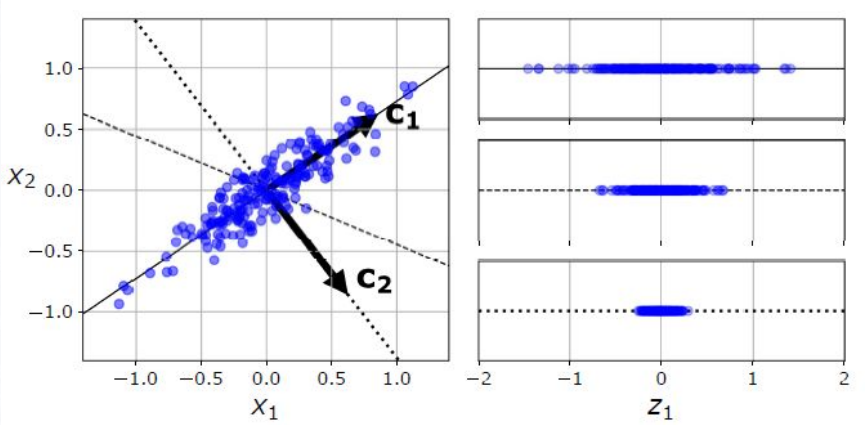
Reducción de dimensión - PCA: Preservando la varianza

- En la Figura de la izquierda tenemos un conjunto de datos 2D, junto con tres ejes diferentes.
- En la Figura de la derecha está el resultado de la proyección de los datos en cada uno de estos ejes.
- **Como podemos ver:**
  - La proyección en la línea continua conserva la varianza máxima.
  - La proyección en la línea punteada conserva muy poca varianza.
  - La proyecci´on en la línea discontinua conserva una cantidad intermedia de varianza.

Se selecciona **el eje que preserva la cantidad máxima de variación**, el que minimiza la distancia cuadrática media entre el conjunto de datos original y su proyección sobre ese eje.

Extracción de características

Reducción de dimensión - PCA: componentes principales

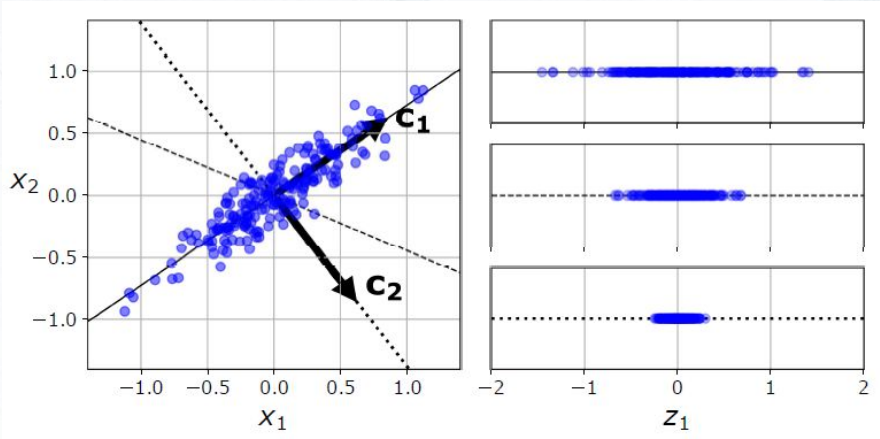


- PCA identifica el eje que representa la mayor cantidad de variación en el conjunto de entrenamiento (línea continua).
- También encuentra un segundo eje, ortogonal al primero, que representa la mayor cantidad de varianza restante (línea punteada).
- PCA encontraría tantos ejes como el número de dimensiones en el conjunto de datos.

Extracción de características

Reducción de dimensión - PCA: componentes principales

- El vector unitario que define el i -ésimo eje se llama i -ésimo componente principal (PC). En la Figura, la primera PC es c1 y la segunda PC es c2.
- Las dos primeras PC están representadas por las flechas ortogonales en el plano, y la tercera PC sería ortogonal al plano (apuntando hacia arriba o hacia abajo).



Extracción de características

Reducción de dimensión - PCA: componentes principales

- **Tip:** La dirección de los componentes principales no es estable. Sin embargo, generalmente seguirán en los mismos ejes.

Entonces, ¿cómo encontrar los componentes principales de un conjunto de entrenamiento?.

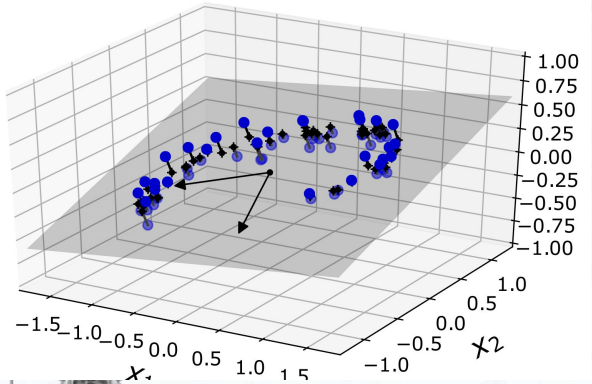
R/ Existe una técnica estándar de factorización de matriz llamada **Singular Value Decomposition (SVD)** que puede descomponer la matriz del conjunto de entrenamiento **X** en la multiplicación matricial de tres matrices $\mathbf{U\Sigma V}^T$, donde **V** contiene todos los componentes principales que estamos buscando:

$$\boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} | & | & & | \\ c_1 & c_2 & \cdots & c_n \\ | & | & & | \end{pmatrix}$$

Extracción de características

Reducción de dimensión - PCA: proyectando a *d*-dimensiones

- Se reduce la dimensionalidad a *d*-dimensiones proyectándose en el hiperplano definido por los primero *d* componentes principales. Garantizando que la proyección conservará la mayor variación posible.
- En la Figura, el conjunto de datos 3D se proyecta hacia abajo en el plano 2D definido por los dos primeros PCs, preservando una gran parte de la varianza del conjunto de datos.



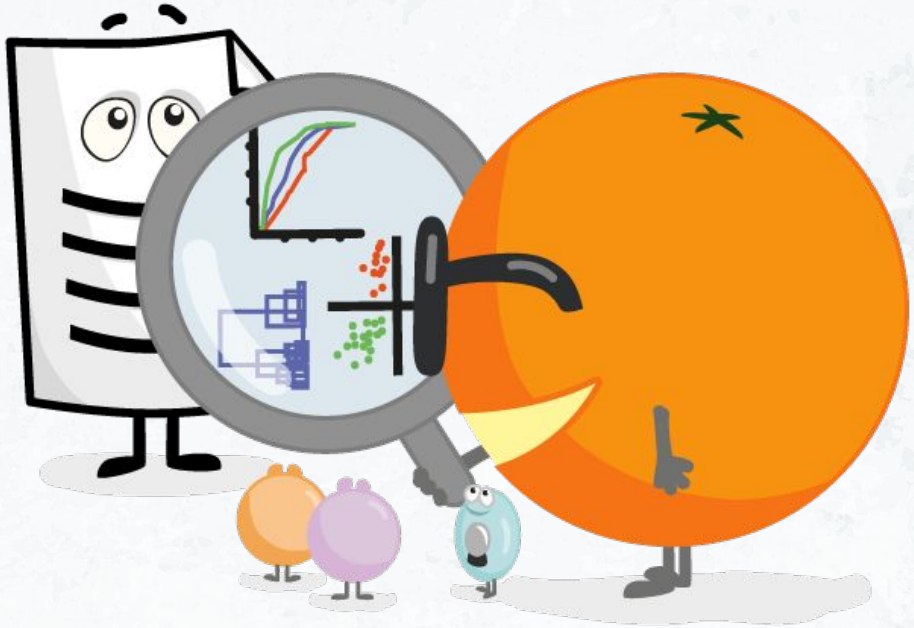
Extracción de características

Reducción de dimensión - PCA: proyectando a *d*-dimensiones

- Para proyectar el conjunto de entrenamiento en el hiperplano, se calcula la multiplicación matricial de la matriz ***X*** del conjunto de entrenamiento por la matriz ***W_d*** , que contiene los primeros ***d*** componentes principales, como se muestra en la siguiente ecuación:

$$\boldsymbol{X}_{d-proj} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{W}_d$$

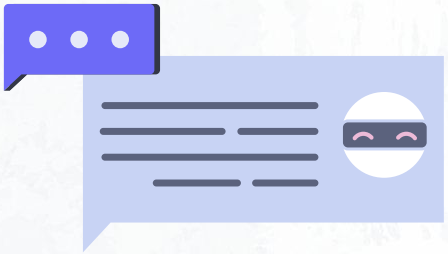
Ejercicios prácticos

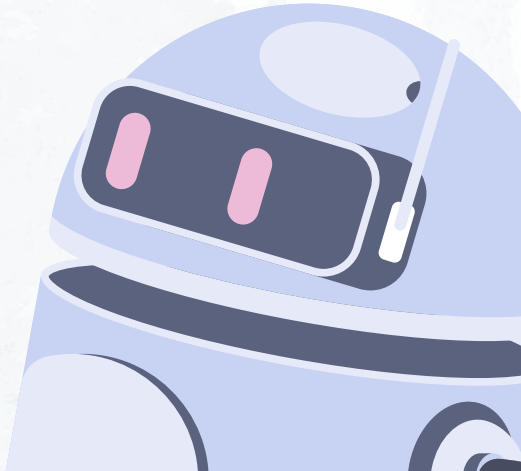


UNAL
Departamento de Eléctrica, Electrónica y Computación
Facultad de Ingeniería y Arquitectura
Sede Manizales
UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Gracias !

dfcollazosh@unal.edu.co





UNAL

Departamento de Eléctrica, Electrónica y Computación
Facultad de Ingeniería y Arquitectura
Sede Manizales

UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE COLOMBIA