Redução de Dimensionalidade

Fabrício J. Barth

Pós Graduação em Big Data - BandTec

Junho de 2015

Sumário

- Justificativa
- Ideia principal
- Algoritmo PCA
- Escolhendo o número de componentes principais
- Alguns exemplos
- Considerações finais

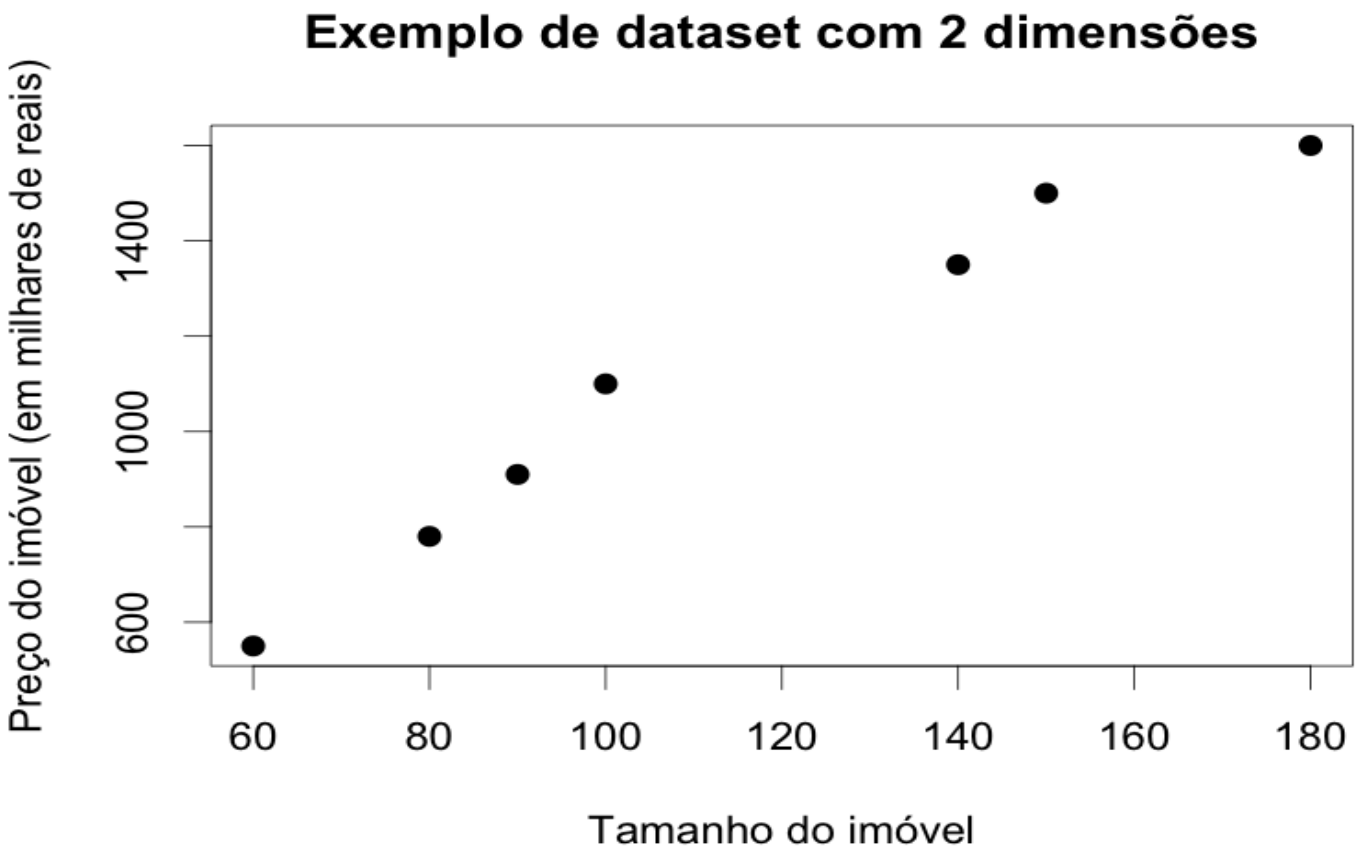
Justificativa

- Em muitas situações temos que trabalhar com datasets com muitas dimensões.

- **Tais datasets são difíceis de serem visualizados**. Conseguimos visualizar bem apenas datasets com duas ou três dimensões. Eventualmente, conseguimos fazer uso do $scatterplot$ para visualizar mais dimensões. No entanto, quanto maior o número de visualizações, mais difícil é esta visualização.
- **Podem não ser adequados** para a criação de alguns modelos preditivos.
- **Ocupam muito espaço**. Ou seja, poderiam ser compactados.

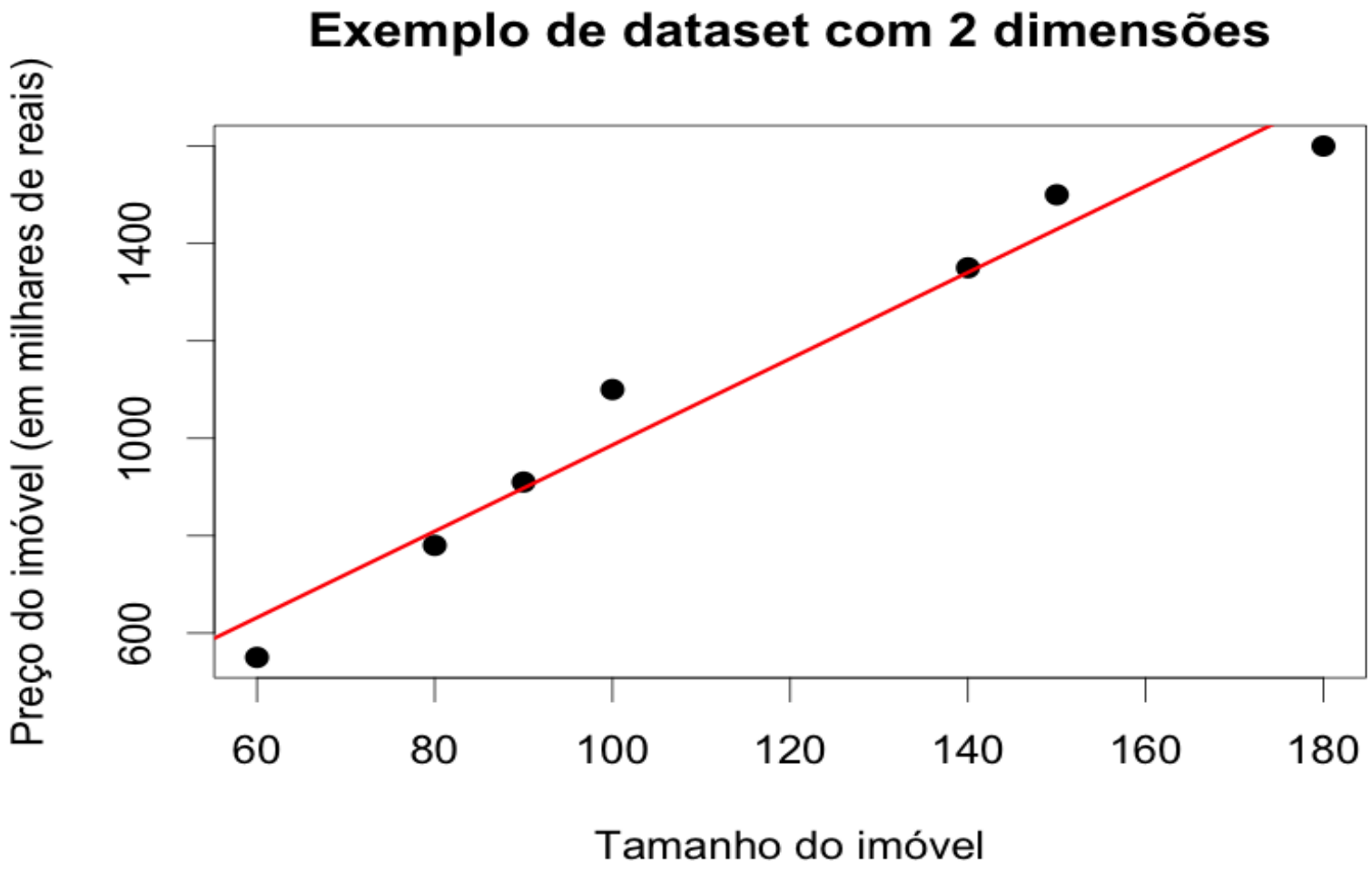
Ideia principal

Exemplo

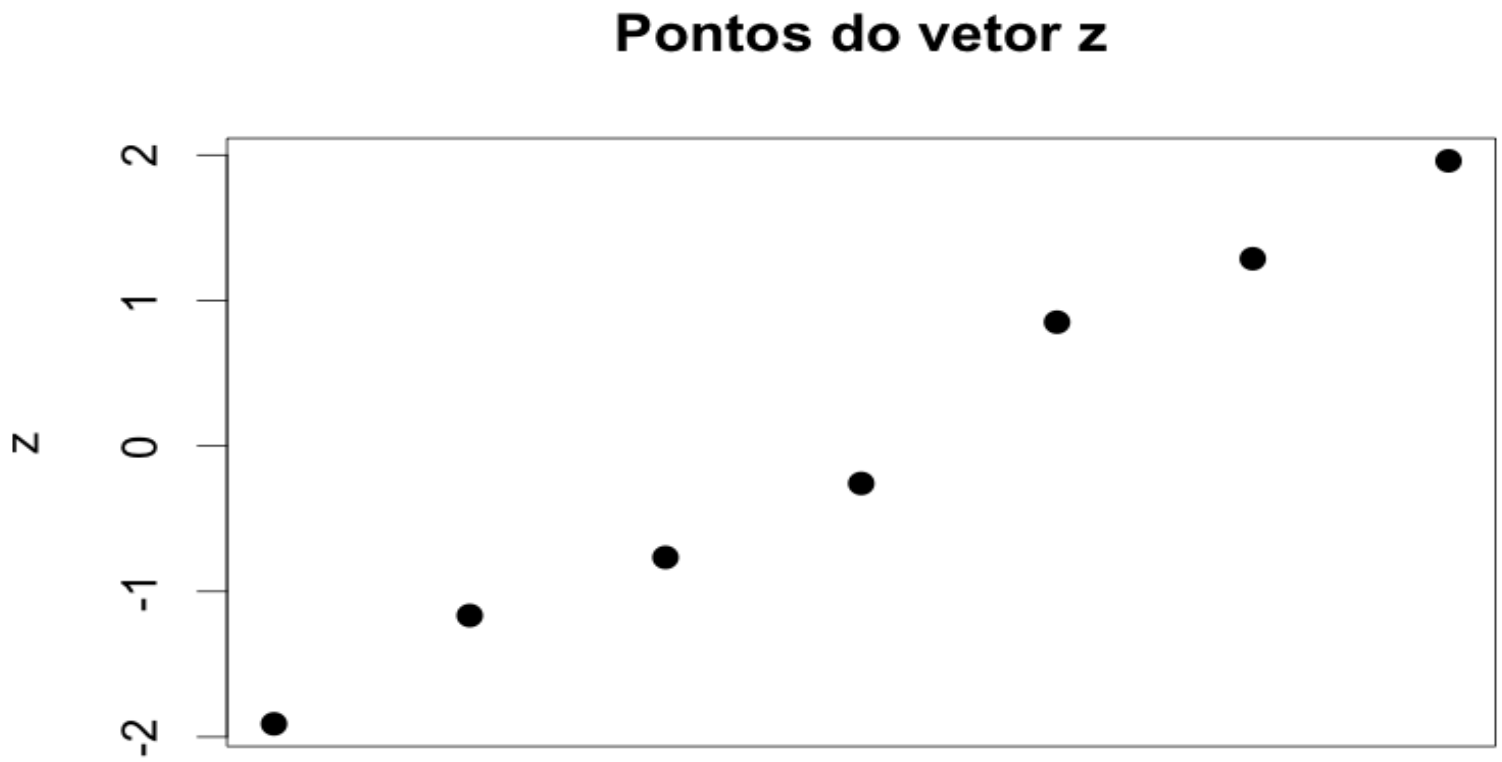

Exemplo de dataset com 2 dimensões
Preço do imóvel (em milhares de reais)
600
1000
1400
60
80
100
120
140
160
180
Tamanho do imóvel

	tamanho	preco
1	60.00	550.00
2	80.00	780.00
3	90.00	910.00
4	100.00	1100.00
5	140.00	1350.00
6	150.00	1500.00

$X \in \Re^2$



É necessário projetar os pontos $X \in \Re^2$ para $z \in \Re^1$ de tal forma que a distância entre os pontos em X para z seja a mínima possível.



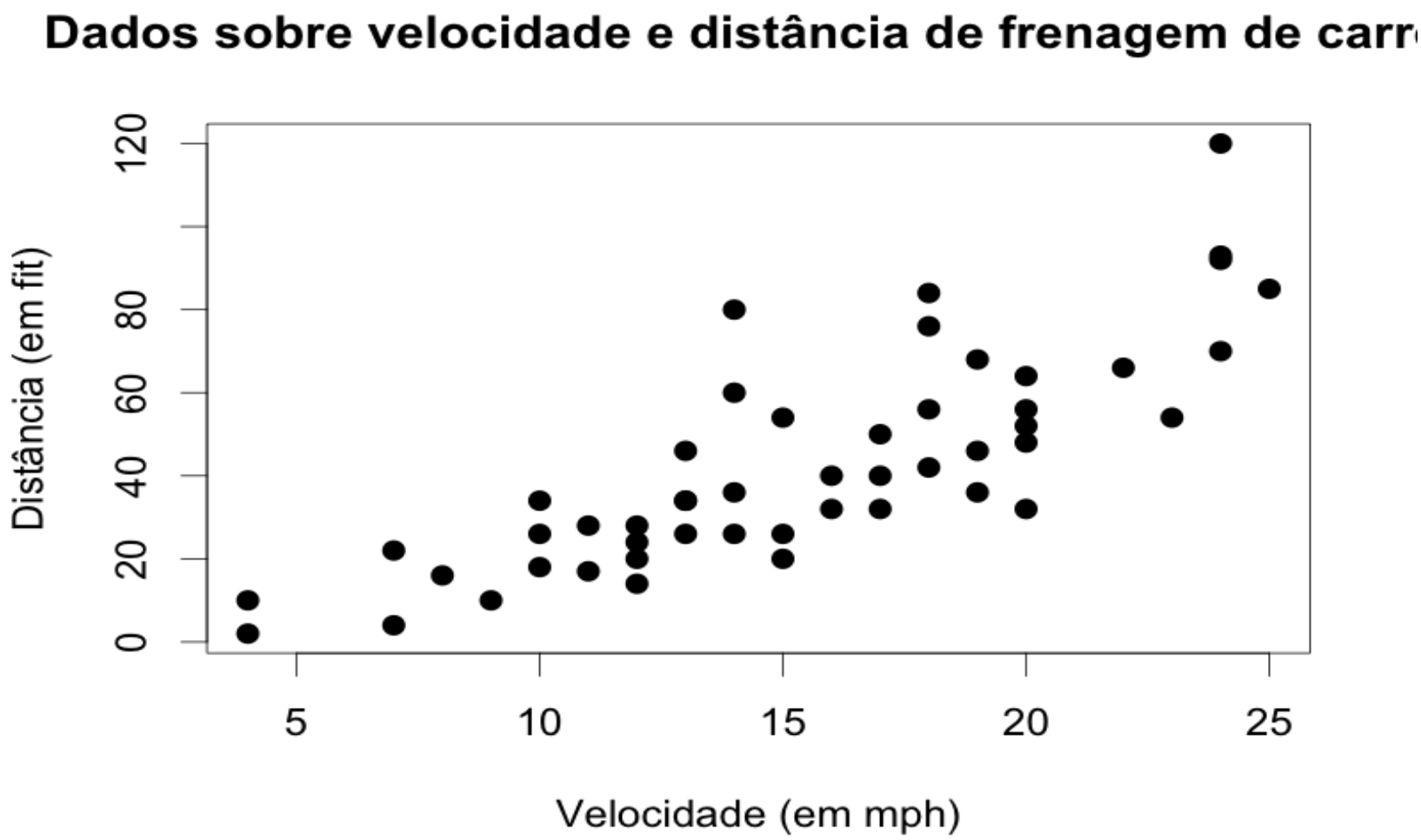
$z = \{-1.9102, -1.1654, -0.7658, -0.2574, 0.8514, 1.2872, 1.9602\}$

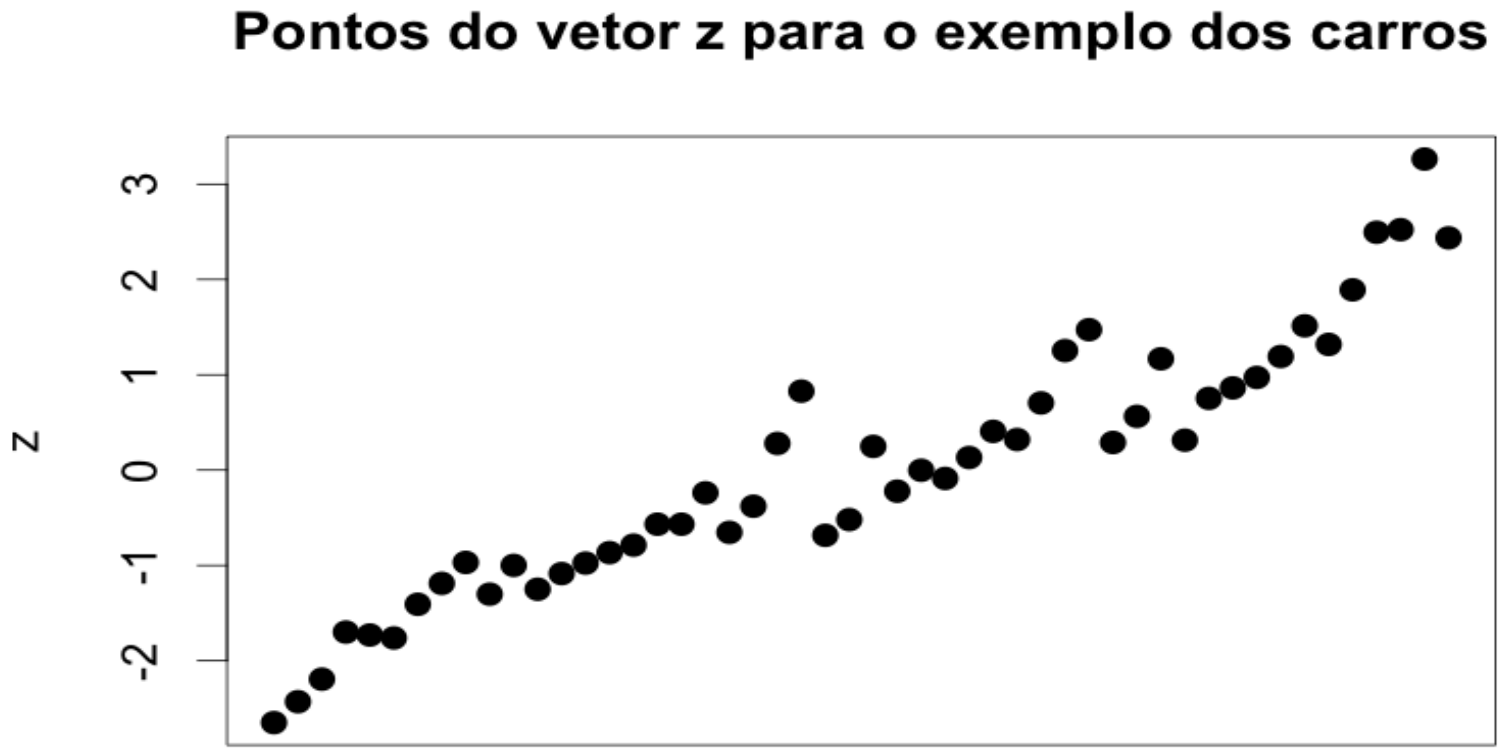
```
casas <- data.frame(tamanho=c(60,80,90,100,140,150,180),
                    preco=c(550,780,910,1100,1350,1500,1600))
pca <- prcomp(casas, scale. = TRUE)
summary(pca)
z <- pca$x[,1]
```

	PC1	PC2
Standard deviation	1.4074	0.1387
Proportion of Variance	0.9904	0.0096
Cumulative Proportion	0.9904	1.0000

```
> z
[1] -1.9102 -1.1654 -0.7658 -0.2574  0.8514  1.2872  1.9602
```

Outro exemplo com duas dimensões


Dados sobre velocidade e distância de frenagem de carr
Distância (em fit)
0
20
40
60
80
120
5
10
15
20
25
Velocidade (em mph)


Pontos do vetor z para o exemplo dos carros
z
-2
-1
0
1
2
3

```
data(cars)
pca <- prcomp(cars, scale. = TRUE)
summary(pca)
```

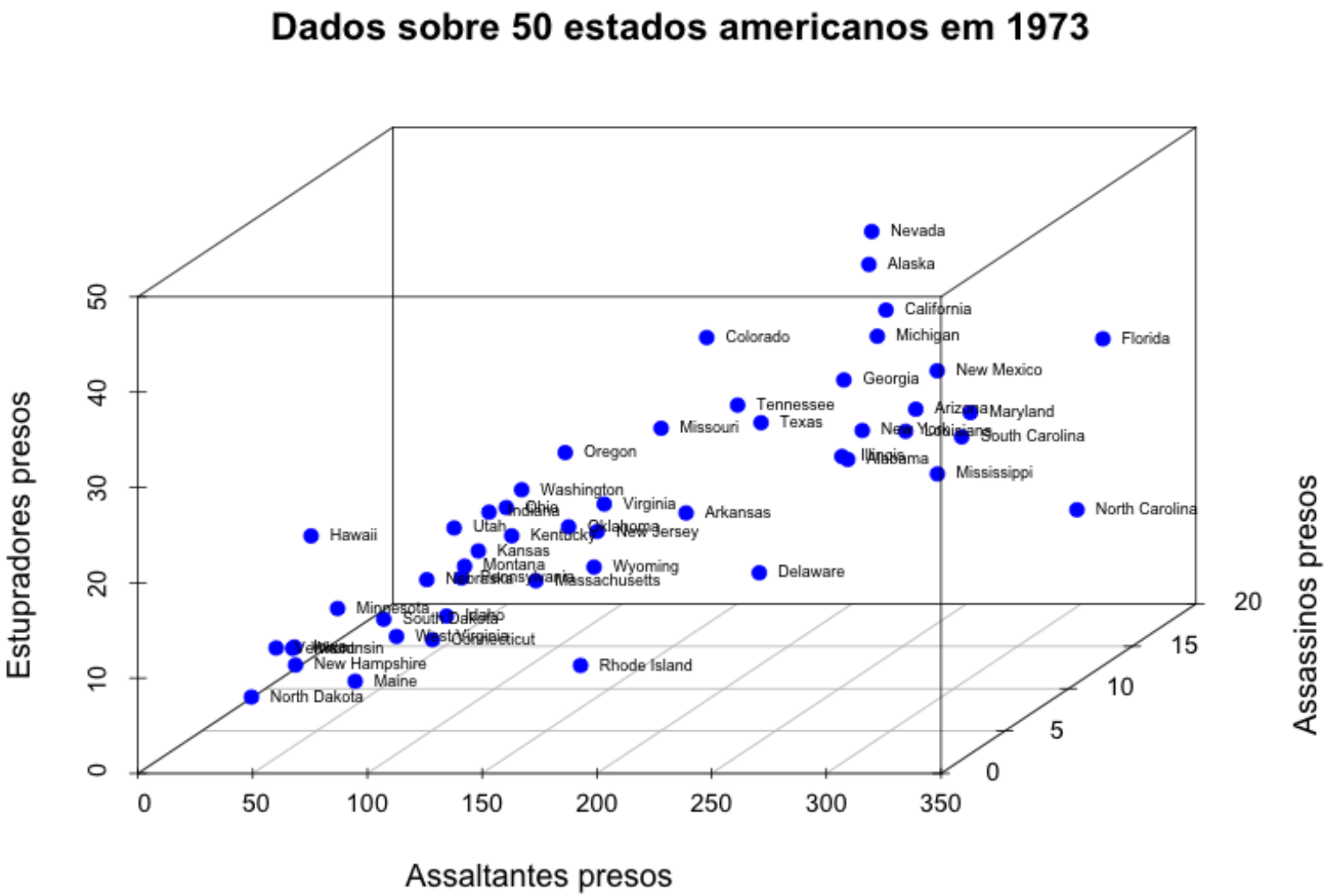
	PC1	PC2
Standard deviation	1.3442	0.4394
Proportion of Variance	0.9034	0.0965
Cumulative Proportion	0.9034	1.0000

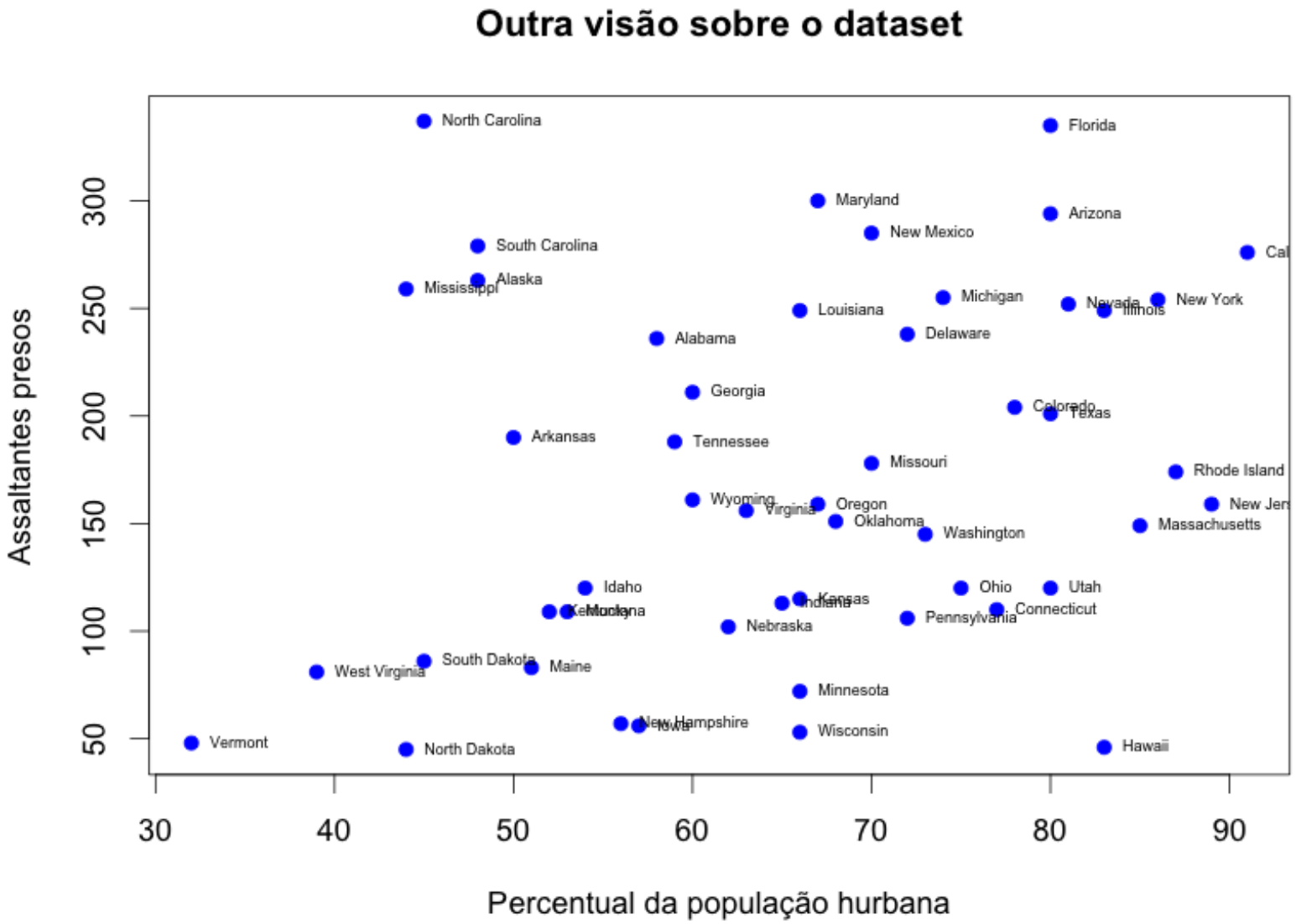
Um exemplo com 4 dimensões

	Murder	Assault	UrbanPop	Rape
Alabama	13.20	236	58	21.20
Alaska	10.00	263	48	44.50
Arizona	8.10	294	80	31.00
Arkansas	8.80	190	50	19.50
California	9.00	276	91	40.60
Colorado	7.90	204	78	38.70
...	...	...	...	...

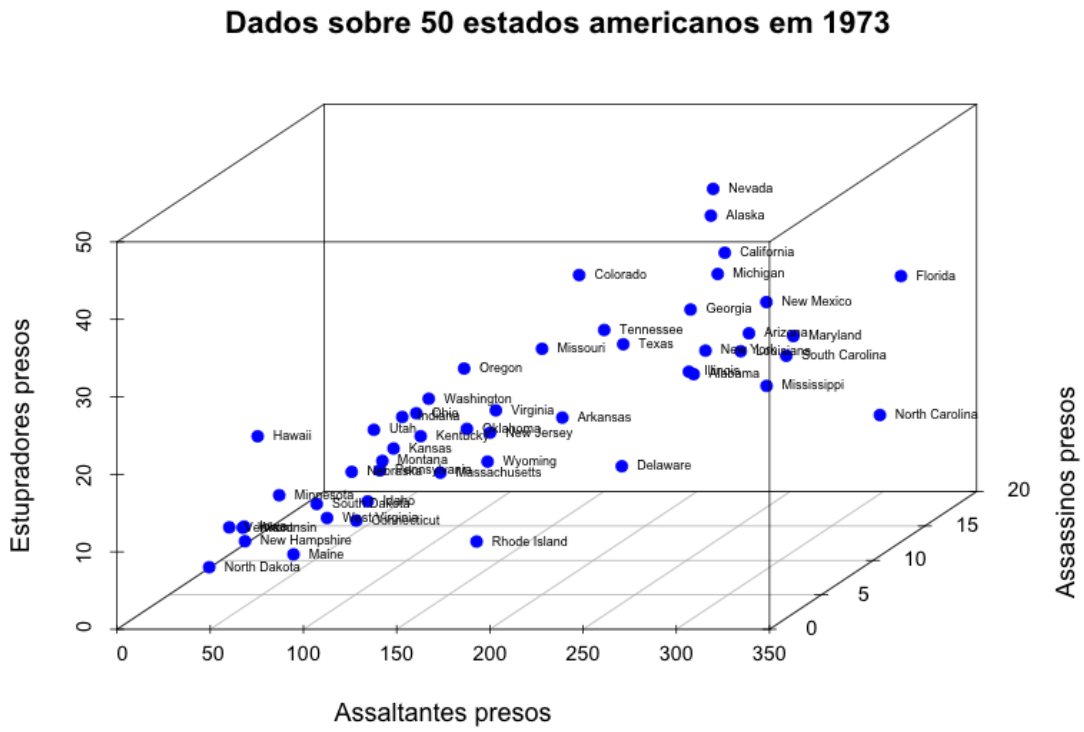
Dataset com informações sobre assassinos presos (murder), de assaltantes presos (assault), estupradores presos (rape) e o percentual da população que é urbana (UrbanPop) de 50 estados americanos[a].

[a] Os números em murder, assault e rape são os números de ocorrências para cada 100.000 habitantes.


Dados sobre 50 estados americanos em 1973
Estupradores presos
Assaltantes presos
Assassinos presos
0
10
20
30
40
50
0
50
100
150
200
250
300
350
0
5
10
15
20
Nevada
Alaska
California
Colorado
Michigan
Florida
New Mexico
Georgia
Tennessee
Arizona
Maryland
Missouri
Texas
South Carolina
Oregon
Illinois
Alabama
Mississippi
Washington
Virginia
Arkansas
North Carolina
Hawaii
Utah
Kentucky
New Jersey
Kansas
Montana
Wyoming
Delaware
Massachusetts
Minnesota
Idaho
Connecticut
New Hampshire
Rhode Island
Maine
North Dakota


Outra visão sobre o dataset
Assaltantes presos
Percentual da população hurbana
50
100
150
200
250
300
30
40
50
60
70
80
90
North Carolina
Florida
Maryland
Arizona
New Mexico
South Carolina
Alaska
Mississippi
Michigan
New York
Louisiana
Alabama
Delaware
Georgia
Colorado
Texas
Arkansas
Tennessee
Missouri
Rhode Island
Wyoming
Oregon
Virginia
Oklahoma
Washington
Massachusetts
Idaho
Ohio
Utah
Kansas
Connecticut
Nebraska
Pennsylvania
South Dakota
Maine
West Virginia
Minnesota
New Hampshire
Iowa
Wisconsin
Vermont
North Dakota
Hawaii

Como projetar os pontos $X \in \Re^3$ para $z \in \Re^2$?



Fazer o desenho da projeção.

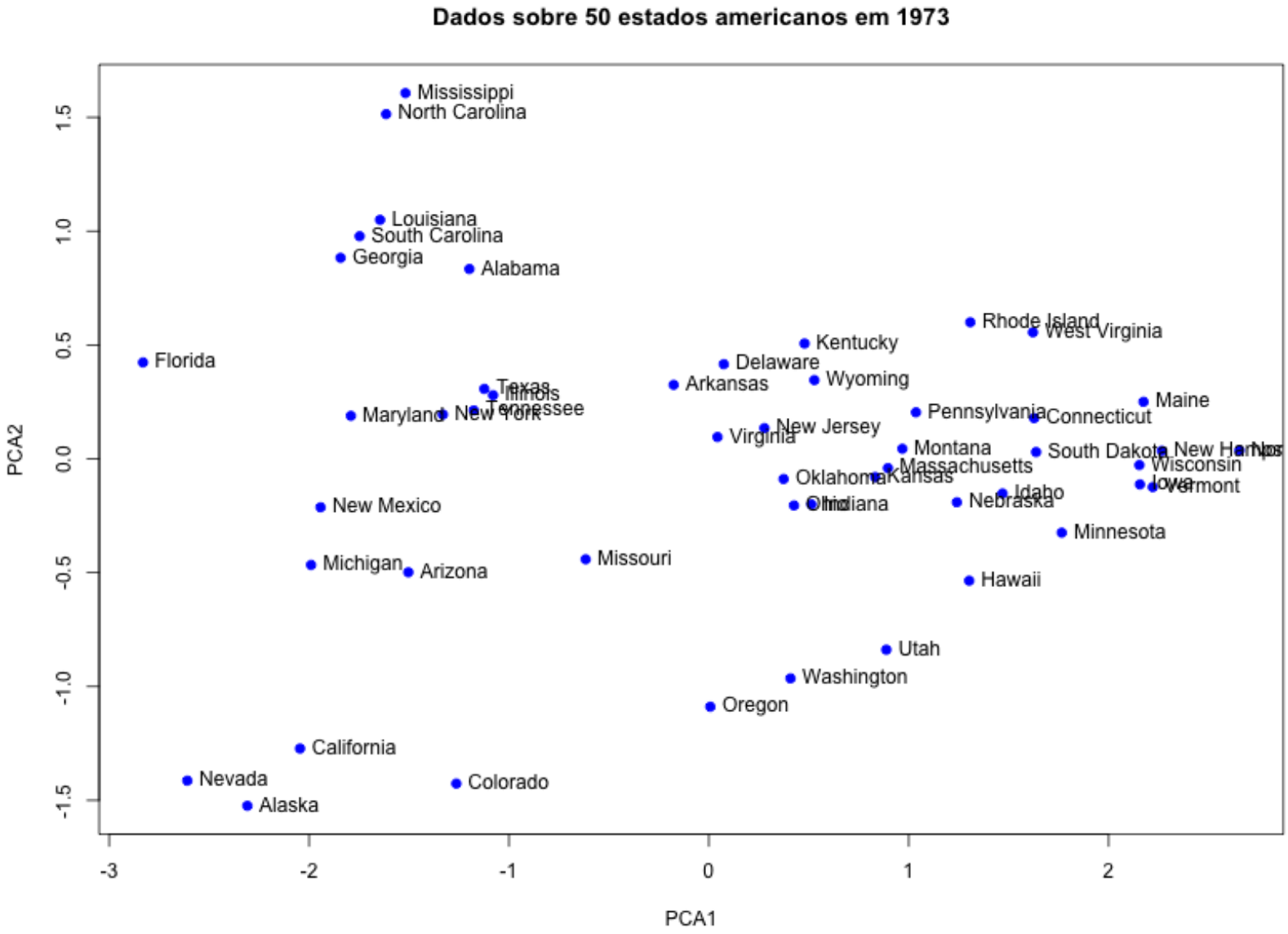
Fazendo a projeção para $\Re^2$

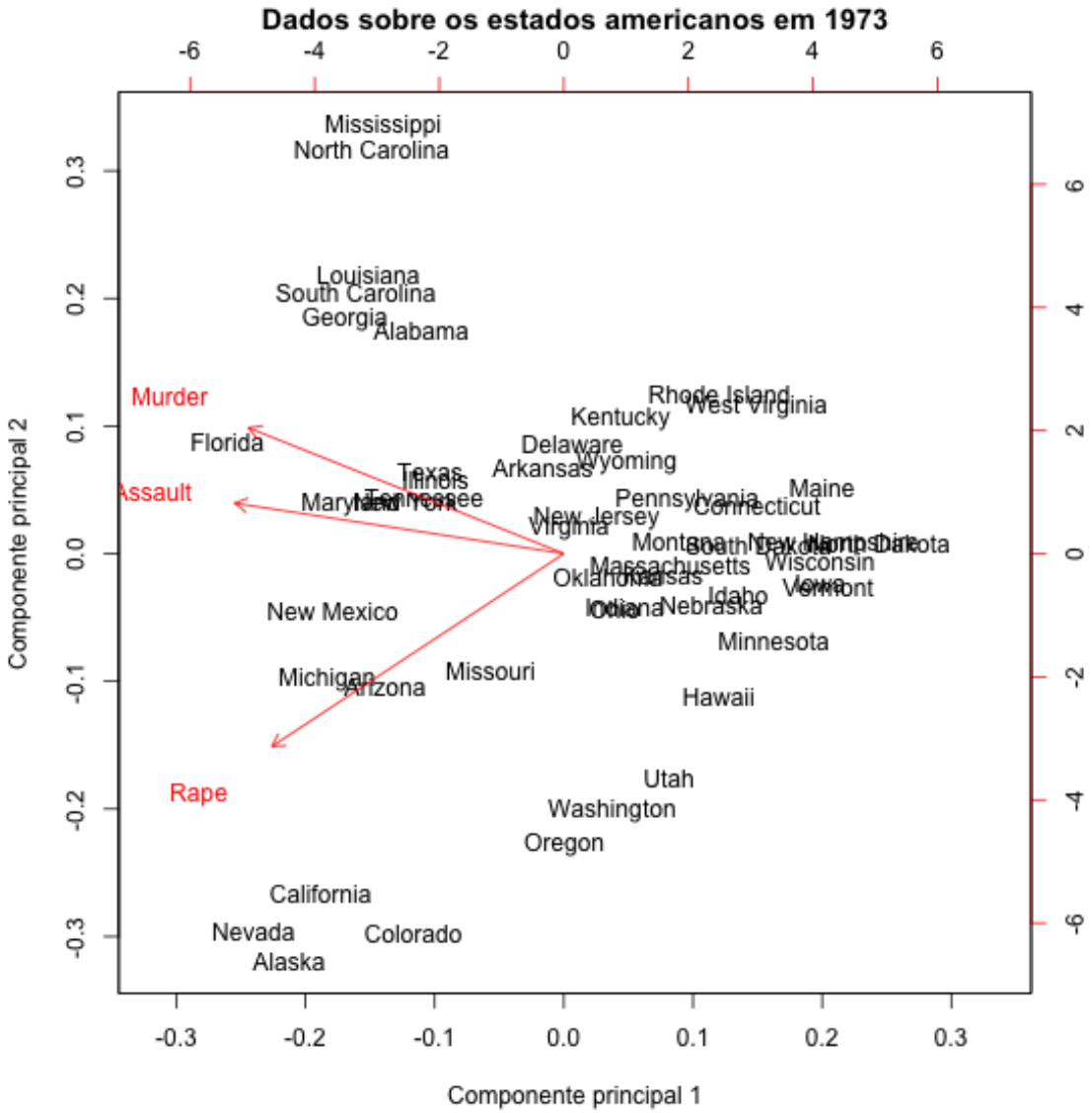
```
# Levando-se em consideracao apenas Murder, Assault e Rape
pca <- prcomp(USArrests[,c(1,2,4)], scale. = TRUE)
summary(pca)
```

	PC1	PC2	PC3
Standard deviation	1.5358	0.6768	0.4282
Proportion of Variance	0.7862	0.1527	0.0611
Cumulative Proportion	0.7862	0.9389	1.0000

```
head(pca$x[,1:2])
```

	PC1	PC2
Alabama	-1.20	0.83
Alaska	-2.31	-1.52
Arizona	-1.50	-0.50
Arkansas	-0.18	0.32
California	-2.05	-1.27
Colorado	-1.26	-1.43

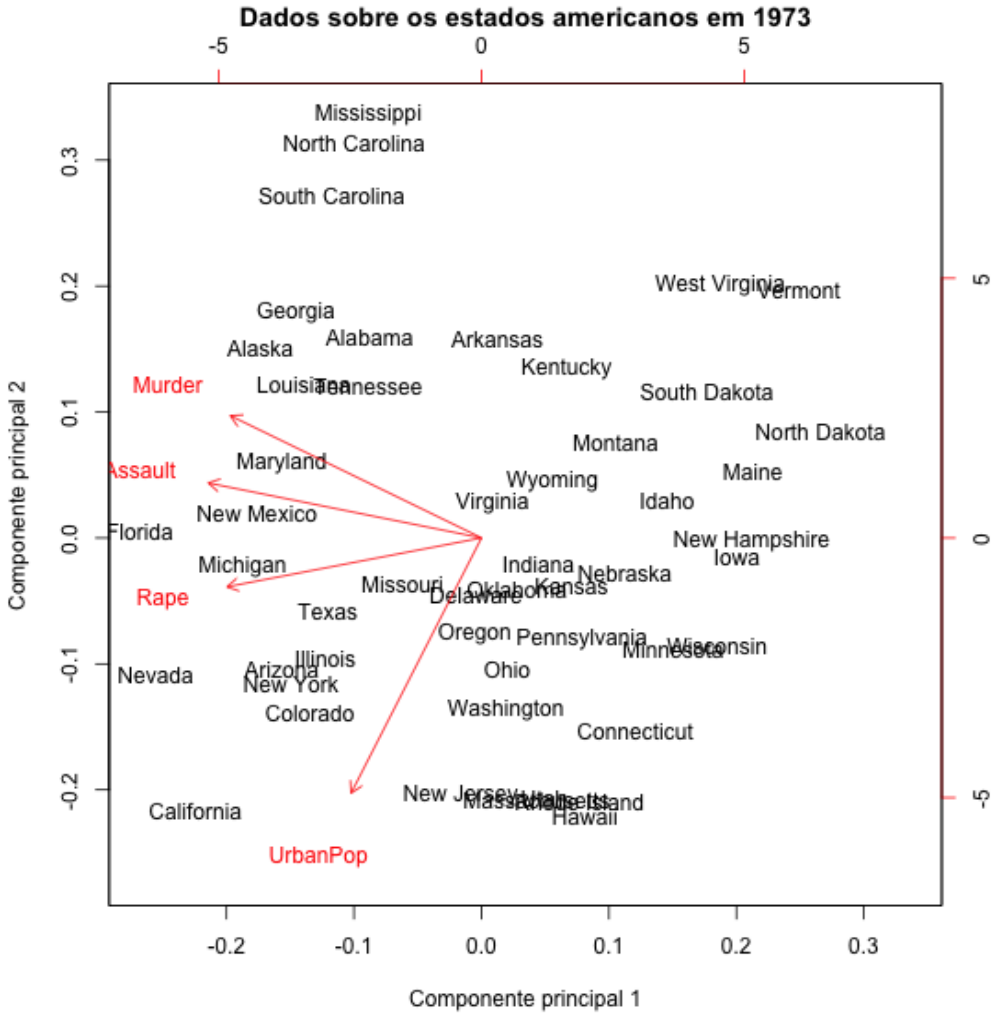

Dados sobre 50 estados americanos em 1973
Mississippi
North Carolina
Louisiana
South Carolina
Georgia
Alabama
Florida
Rhode Island
West Virginia
Kentucky
Delaware
Arkansas
Wyoming
Texas
Illinois
Tennessee
Maryland
New York
Pennsylvania
Connecticut
Maine
New Jersey
Virginia
Montana
South Dakota
Massachusetts
Wisconsin
Oklahoma
Kansas
Idaho
Vermont
Nebraska
New Mexico
Minnesota
Michigan
Arizona
Missouri
Hawaii
Utah
Washington
Oregon
California
Nevada
Colorado
Alaska
PCA1
PCA2
-3
-2
-1
0
1
2
1.5
1.0
0.5
0.0
-0.5
-1.0
-1.5


Dados sobre os estados americanos em 1973
Componente principal 1
Componente principal 2
Murder
Assault
Rape
Mississippi
North Carolina
Louisiana
South Carolina
Georgia
Alabama
Florida
Rhode Island
West Virginia
Kentucky
Delaware
Wyoming
Arkansas
Texas
Illinois
Maryland
Pennsylvania
Maine
Connecticut
New Jersey
Virginia
Wisconsin
Massachusetts
Idaho
Nebraska
Vermont
Minnesota
New Mexico
Michigan
Missouri
Arizona
Hawaii
Utah
Washington
Oregon
California
Nevada
Colorado
Alaska

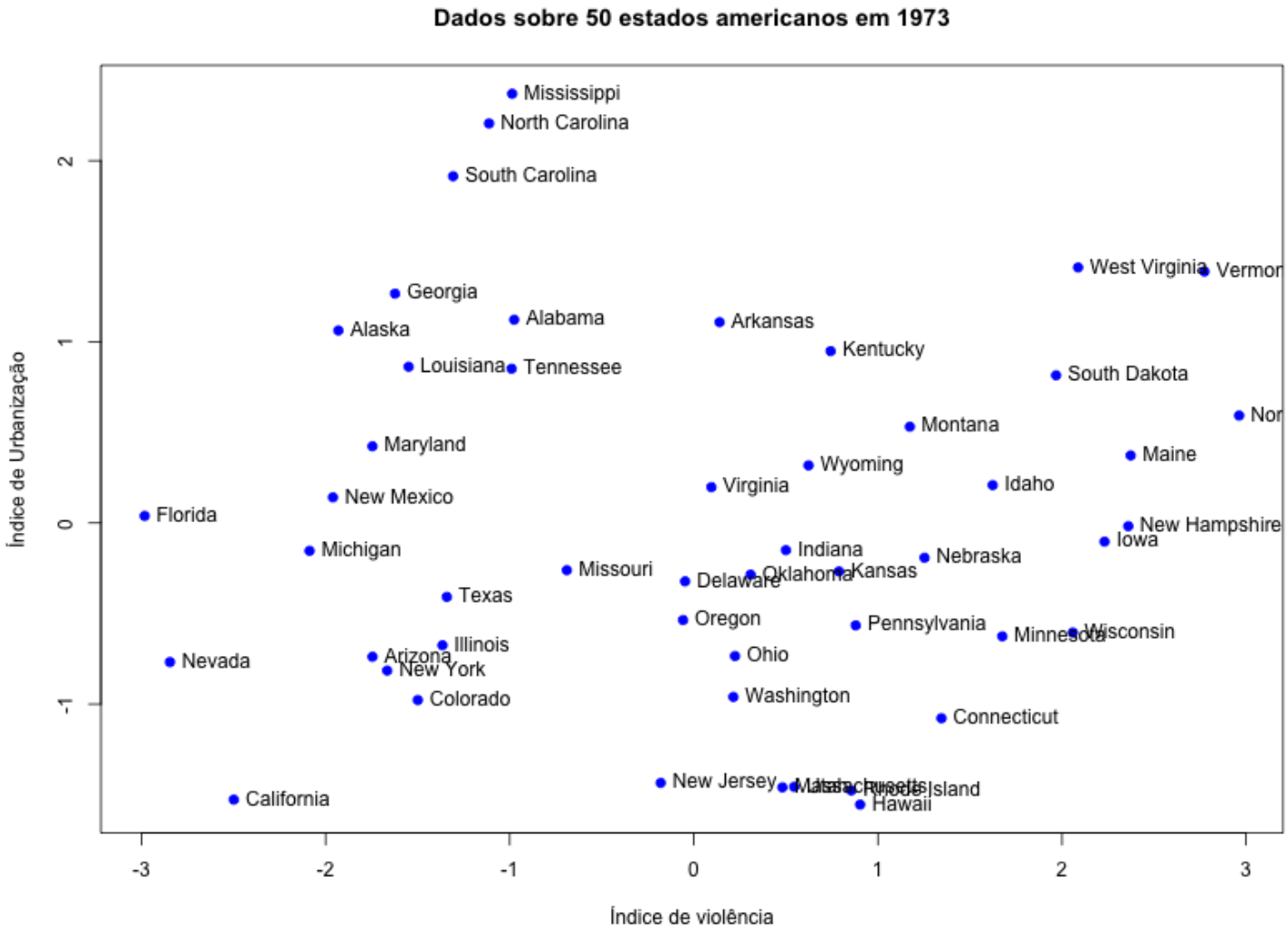
```
# Para todo o dataset
pca <- prcomp(USArrests, scale. = TRUE)
summary(pca)
pca$rotation
```

	PC1	PC2	PC3	PC4
Standard deviation	1.5749	0.9949	0.5971	0.4164
Proportion of Variance	0.6201	0.2474	0.0891	0.0434
Cumulative Proportion	0.6201	0.8675	0.9566	1.0000

	PC1	PC2	PC3	PC4
Murder	-0.54	0.42	-0.34	0.65
Assault	-0.58	0.19	-0.27	-0.74
UrbanPop	-0.28	-0.87	-0.38	0.13
Rape	-0.54	-0.17	0.82	0.09



Os atributos de murder, assault e rape estão correlacionadas, enquanto que a variável UrbanPop não está correlacionada com as outras.



No índice de urbanização, quanto mais em baixo do gráfico, mais urbano. Para o índice de violência, quanto mais a esquerda, mais violento

Principal Component Analysis (PCA)

Algoritmo PCA

- Reduz dados de n-dimensões para k-dimensões.
- Calcular a matriz de covariância:

$$Sigma = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{n} (X[i,])(X[i,])^T \quad (1)$$

- Calcular os autovetores[a] da matriz Sigma
  $U = SVD(Sigma)$, onde $U \in \Re^{n \times n}$.
- Calcular os PCAs, na forma de z:

$$U_{reduce} = U[, 1 : K] \quad (2)$$

$$z = (U_{reduce})^T \times X^T \quad (3)$$

[a] Singular Value Decomposition (SVD) - algebra linear

Algoritmo PCA: pré-processamento dos dados

- Os dados precisam estar normalizados! Mesma situação do $k - means$.
- No R, a maioria das implementações de PCA já fornecem esta opção como parâmetro.
- No $prcomp$, basta informar que o parâmetro $scale.$ é verdadeiro.

```
pca <- prcomp(dataset, scale. = TRUE)
```

Escolhendo o número de componentes principais

```
> summary(pca)
Importance of components:
                          PC1    PC2     PC3     PC4
Standard deviation     1.5749 0.9949 0.59713 0.41645
Proportion of Variance 0.6201 0.2474 0.08914 0.04336
Cumulative Proportion  0.6201 0.8675 0.95664 1.00000
```

Alguns exemplos

Exemplos de uso de PCA

Revisando a aplicabilidade

- Reduzir memória e disco necessário para armazenar os dados.
- Minimizar o tempo de processamento dos algoritmos de aprendizagem.
- Visualização de dados.

Material de consulta

- Capítulo 10 do livro Gareth James, Daniela Witten, Trevor Hastie, and Robert Tibshirani. An Introduction to Statistical Learning with Applications in R. Springer, 4th edition, 2014.