Riduzione Dimensionalità

Definizioni

Obiettivo dei metodi per la riduzione di dimensionalità (*dimensionality reduction*) è quello di eseguire un mapping dallo spazio iniziale $\Re^d$ a uno spazio di dimensione inferiore $\Re^k,\ k < d$.

Può essere vista come una forma di compressione (con perdita di informazione). Obiettivo è scartare le informazioni non rilevanti o meno rilevanti per il problema di interesse:

- allevia i problemi collegati alla curse of dimensionality: operare in spazi ad elevata dimensionalità, a causa del fatto che i pattern sono molto sparsi, richiede ingenti moli di dati per l'addestramento.
- operare in spazi a dimensionalità inferiore rende più semplice addestrare algoritmi di machine learning. Scartando dati ridondanti (informazioni correlate) e rumorosi talvolta si migliorano anche le prestazioni.

Attenzione: riduzione di dimensionalità non significa mantenere alcune «dimensioni» e cancellarne altre, ma «combinare» le dimensioni in modo opportuno.

Le principali tecniche

Le più note tecniche di riduzione di dimensionalità (che vedremo) sono:

- Principal Component Analysis (PCA): trasformazione non-supervisionata nota anche come Karhunen Loeve (KL) transform. Esegue un mapping lineare con l'obiettivo di preservare al massimo l'informazione dei pattern.
- Linear Discriminant Analysis (LDA): il mapping è ancora lineare, ma in questo caso è supervisionato. Mentre PCA privilegia le dimensioni che rappresentano al meglio i pattern, LDA privilegia le dimensioni che discriminano al meglio i pattern del TS.
- t-distributed Stochastic Neighbor Embedding (t-SNE): trasformazione non lineare e non supervisionata, specificatamente ideata per ridurre dimensionalità a 2 o 3 dimensioni onde poter visualizzare dati multidimensionali.

Altre tecniche di interesse:

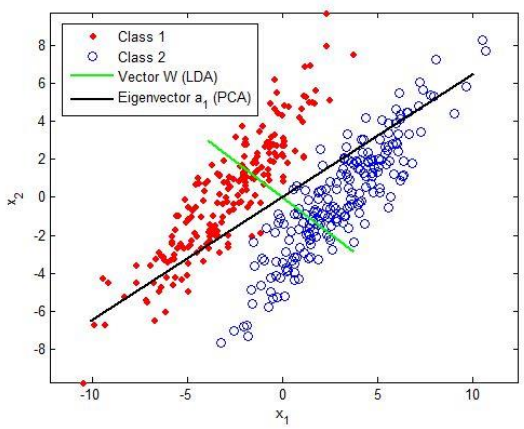
- Independent Component Analysis (ICA): trasformazione lineare orientata a proiettare i pattern su una base di componenti (statisticamente indipendenti).
- Kernel PCA: simile a PCA ma più potente perché il mapping è non-lineare. Utilizza un «trucco» simile a quello che permette di passare da SVM lineare a SVM non lineare.
- Local Linear Embedding (LLE): trasformazione non-lineare che invece di calcolare un mapping «globale», considera relazioni tra gruppi di pattern vicini.

Esempio PCA vs LDA

In figura due esempi di riduzione di dimensionalità da $d = 2$ a $k = 1$ dimensione:

- Il segmento nero che identifica la soluzione PCA è l'iperpiano sul quale proiettando i pattern (indipendentemente dalla loro classe) conserviamo al massimo l'informazione.
- Il segmento verde che identifica la soluzione LDA è l'iperpiano sul quale proiettando i pattern siamo in grado di distinguere al meglio le due classi (pattern rossi contro blu).

Entrambi sono mapping lineari $\Re^2 \rightarrow \Re^1$ ma la soluzione (retta) è profondamente diversa.



Principal Component Analysis (PCA)

Dato un training set $TS = \{\mathbf{x}_i \in \Re^d, i = 1 \dots n\}$, siano:

$$\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1\dots n} \mathbf{x}_i$$

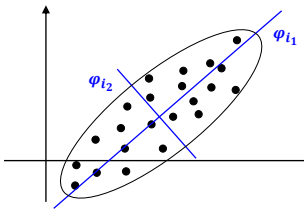
$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1\dots n} (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})^t$$

il vettore medio $\in \Re^d$ e la matrice di covarianza $\in \Re^{d\times d}$ (*definizioni simili a quelle usate per il classificatore di Bayes parametrico con multinormali. La divisione per $n-1$ invece di n dovuta a correzione di Bessel per caso unbiased*).

allora per un dato k $(k < d, k < n, k > 0)$, lo spazio k dimensionale $(S_{\bar{\mathbf{x}},\Phi_k})$ è univocamente definito dal vettore medio e dalla matrice di proiezione $\Phi_k \in \Re^{d\times k}$ le cui colonne sono costituite dagli autovettori di $\boldsymbol{\Sigma}$ corrispondenti ai k più grandi autovalori:

$$\Phi_k = [\boldsymbol{\varphi}_{i_1}, \boldsymbol{\varphi}_{i_2} \dots \boldsymbol{\varphi}_{i_k}] \text{ con } \lambda_{i_1} \geq \lambda_{i_2} \geq \cdots \lambda_{i_k} \geq \cdots \lambda_{i_d}$$

$\boldsymbol{\varphi}_{i_r}$ autovettore di $\boldsymbol{\Sigma}$ corrispondente all'autovalore λ_{i_r} , $r = 1 \dots d$



$\boldsymbol{\varphi}_{i_1}$ indica la direzione di maggior varianza nel training set *TS*

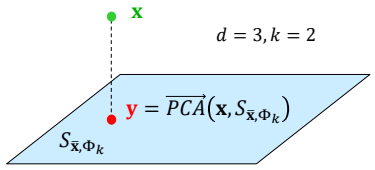
I primi k autovettori sono detti componenti principali

PCA: proiezione e retroproiezione

- Proiezione (→): una volta determinato lo spazio PCA, la proiezione di un pattern su tale spazio è semplicemente la proiezione geometrica di un vettore sull'iperpiano che definisce lo spazio. In realtà la vera proiezione geometrica è un vettore che ha la stessa dimensionalità del vettore originale mentre in questo contesto indichiamo con proiezione il vettore (ridotto) nello spazio PCA. Matematicamente questa operazione è eseguita come prodotto della matrice di proiezione trasposta per il pattern al quale è preventivamente sottratta la media.

$$\overrightarrow{PCA}: \Re^d \rightarrow \Re^k$$

$$\overrightarrow{PCA}(\mathbf{x}, S_{\bar{\mathbf{x}},\Phi_k}) = \Phi_k{}^t(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})$$

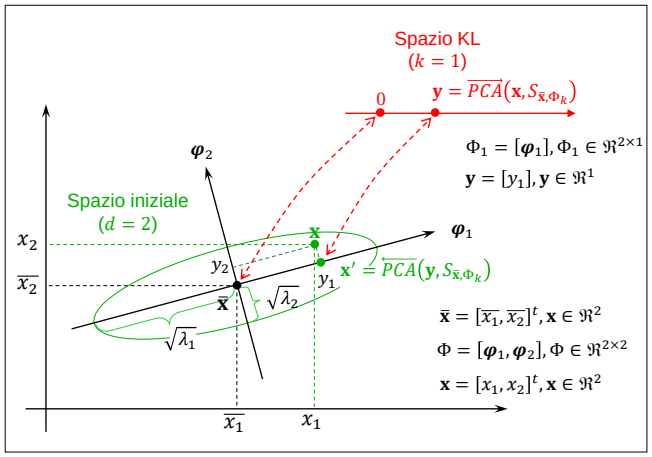


- *Retro-proiezione* (←): Dato un vettore nello spazio PCA, la sua retro-proiezione verso lo spazio originale si ottiene moltiplicando il vettore per la matrice di proiezione e sommando il vettore medio. Questa trasformazione non sposta spazialmente il vettore, che giace ancora sullo spazio PCA, ma opera un cambiamento di coordinate che ne permette la codifica in termini delle d componenti dello spazio originale.

$$\overleftarrow{PCA}: \Re^k \rightarrow \Re^d$$

$$\overleftarrow{PCA}(\mathbf{y}, S_{\bar{\mathbf{x}},\Phi_k}) = \Phi_k\mathbf{y} + \bar{\mathbf{x}}$$

PCA: esempio riduzione 2→1



- L'ellisse rappresenta la distribuzione dei pattern nel training set.
- $\boldsymbol{\varphi}_1$ e $\boldsymbol{\varphi}_2$ sono gli autovettori della matrice di covarianza.
- Gli autovalori λ_1 e λ_2 sono le varianze della distribuzione lungo gli assi $\boldsymbol{\varphi}_1$ e $\boldsymbol{\varphi}_2$.
- y_1 e y_2 sono le proiezioni di $\mathbf{x}$ sugli assi $\boldsymbol{\varphi}_1$ e $\boldsymbol{\varphi}_2$.
- Se λ_2 è piccolo, $\mathbf{x}$ può essere approssimato con $\mathbf{x}'$ (retroproiezione di $\mathbf{y}$) senza perdite significative di informazione.
- Si può dimostrare che tra tutte le riduzioni di dimensionalità lineari PCA è quella che preserva al massimo l'informazione dei vettori originali.

PCA: scelta di k

- Talvolta la scelta di k è obbligata: ad esempio per la visualizzazione 2D o 3D dei dati.
- Quando invece l'obiettivo è quello di scartare informazione inutile e dati correlati mantenendo gran parte del contenuto informativo si può scegliere k nel modo seguente:
  - Fissata una percentuale t del contenuto informativo che si vuole preservare (es. $t = 95\%$) si sceglie il minimo valore di k per cui la somma dei più grandi k autovalori, rispetto alla somma di tutti gli autovalori, è maggiore o uguale a t.
  - Considerando gli autovalori ordinati in ordine decrescente:

$$k = \underset{z}{arg\,min}\left\{\frac{\sum_{i=1\dots z}\lambda_i}{\sum_{i=1\dots d}\lambda_i} \geq t\right\}$$

Infatti, ricordando che gli autovalori denotano la varianza lungo i diversi assi, il rapporto nella formula indica la varianza «conservata» rispetto alla varianza totale.

PCA: codifica di un'immagine

i primi 8 autovettori o componenti principali
(denominati eigenfaces nell'applicazione al riconoscimento volto)

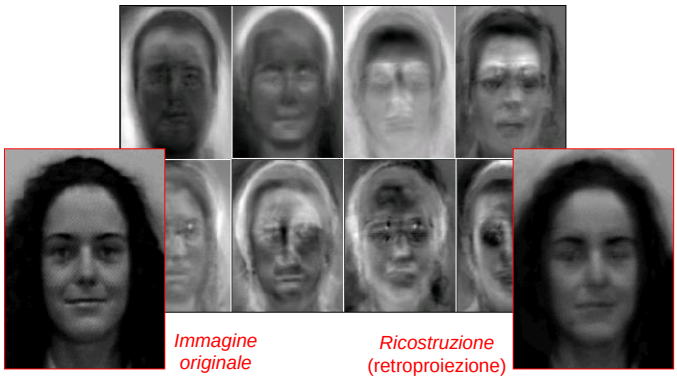


Immagine originale

Ricostruzione (retroproiezione)

$\mathbf{x} \in \Re^{16500}$

$\mathbf{x}' \in \Re^{16500}$

$\mathbf{y} = \overrightarrow{PCA}(\mathbf{x}, S_{\bar{\mathbf{x}},\Phi_{15}})$

$\mathbf{x}' = \overrightarrow{PCA}(\mathbf{y}, S_{\bar{\mathbf{x}},\Phi_{15}})$

$\mathbf{y} \in \Re^{15}$

-2532	2193	-2179	2099	491
427	-324	961	35	-40
-149	-624	317	-158	-142

proiezione

retro-proiezione

Calcolo PCA in pratica

Per d elevato (tipico nel caso di immagini, audio, ecc.) la matrice di covarianza può essere molto grande.

- per $d = 16500, \boldsymbol{\Sigma} \in \Re^{16500\times16500}$, oltre 272 milioni di valori !
- se $n \ll d$, è conveniente calcolare la matrice di proiezione (primi k autovettori) attraverso decomposizione SVD della matrice rettangolare dei pattern centralizzati $\mathbf{X} \in \Re^{d\times n}$ senza passare per la matrice di covarianza (vedi [1]).

$$\mathbf{X} = \left[\mathbf{x}_1 - \bar{\mathbf{x}} \quad \mathbf{x}_2 - \bar{\mathbf{x}} \quad \cdots \quad \mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}}\right]$$

Attenzione

formato trasposto rispetto a $\mathbf{X}$ *usata in regressione. Ogni pattern una colonna.*

decomposizione SVD per $d > n$: $\mathbf{X} = \mathbf{U\Gamma V}^t$, con $\mathbf{U} \in \Re^{d\times n}$ ortonormale, con $\mathbf{V} \in \Re^{n\times n}$ ortonormale, $\boldsymbol{\Gamma} \in \Re^{n\times n}$ diagonale.

$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{n}\mathbf{XX}^t = \frac{1}{n}\mathbf{U\Gamma V}^t\mathbf{V\Gamma U}^t = \frac{1}{n}\mathbf{U\Gamma}^2\mathbf{U}^t$$

decomposizione spettrale della matrice quadrata $\boldsymbol{\Sigma}$

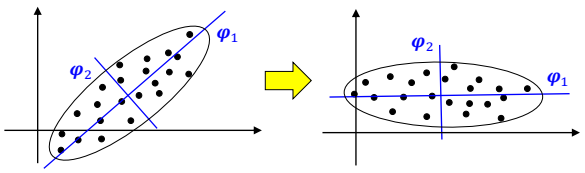
Autovettori e autovalori di $\boldsymbol{\Sigma}$ possono dunque essere ottenuti dalle colonne di $\mathbf{U}$ (*vettori singolari sinistri di* $\mathbf{X}$) e corrispondenti elementi diagonali di $\boldsymbol{\Gamma}$ al quadrato (*valori singolari al quadrato di* $\mathbf{X}$).

[1] R. Madsen, L. Hansen, O. Winther, "Singular Value Decomposition and Principal Component Analysis", http://www2.imm.dtu.dk/pubdb/views/edoc_download.php/4000/pdf/imm4000.pdf

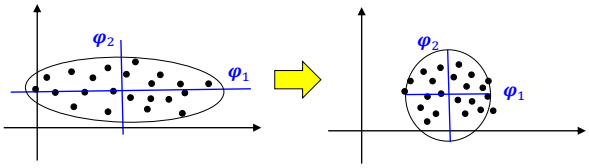
PCA Whitening

È una tecnica di pre-normalizzazione dei dati, che:

- Rimuove le correlazioni tra le dimensioni, ruotando la nuvola di punti per allineare gli assi di variazione principale dei dati (autovettori) agli assi cartesiani.



- Sfericizza l'ellissoide, uniformando le varianze (denotate dagli autovalori) a 1 lungo tutti gli assi

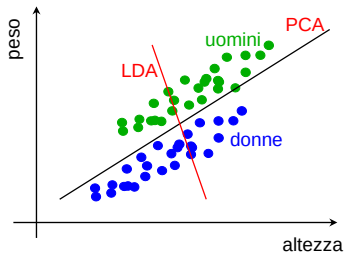


Dopo aver proiettato i pattern sullo spazio PCA (definito dai primi k autovettori) è sufficiente dividere ogni dimensione per la radice quadrata dell'autovalore corrispondente (deviazione standard).

La matrice di covarianza dei dati normalizzati è l'identità.

Linear Discriminant Analysis (LDA)

- Riduzione di dimensionalità lineare e supervisionata il cui obiettivo è massimizzare la separazione tra le classi (*che nel TS sono etichettate*). L'esempio seguente mostra che al fine della discriminazione la soluzione ottimale può essere anche molto diversa dalla soluzione PCA.



- Per formulare il criterio di ottimizzazione di massima separazione tra le classi sono definite le seguenti matrici di scattering (in italiano "sparpagliamento"):
  - *within-class* $\mathbf{S}_w$: indica come i vettori sono scattered rispetto al centro delle classi (ciascuno rispetto alla propria classe).
  - *between-class* $\mathbf{S}_b$: indica come i centri delle classi sono scattered rispetto al centro generale della distribuzione (ovvero quanto le classi sono scattered).

Una matrice di scatter si calcola come una matrice di covarianza senza normalizzare per il numero di pattern

Calcolo LDA

Dato un training set TS contenente n pattern $(\mathbf{x}_1, y_1) \dots (\mathbf{x}_n, y_n)$, dove $\mathbf{x}_i \in \Re^d$ sono i pattern multidimensionali e $y_i \in [1 \dots s]$ le etichette delle s classi. Siano n_i e $\bar{\mathbf{x}}_i$ il numero di pattern e il vettore medio della classe i-esima. Allora le matrici di scattering sono definite come:

- *within-class*:

$$\mathbf{S}_w = \sum_{i=1\dots s} \mathbf{S}_i, \qquad \mathbf{S}_i = \sum_{\mathbf{x}_j \mid y_j = i} (\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}_i)(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}_i)^t$$

$pattern\ della\ classe\ i - esima$

- *between-class*:

$$\mathbf{S}_b = \sum_{i=1\dots s} n_i \cdot (\bar{\mathbf{x}}_i - \bar{\mathbf{x}}_0)(\bar{\mathbf{x}}_i - \bar{\mathbf{x}}_0)^t, \qquad \bar{\mathbf{x}}_0 = \frac{1}{n} \sum_{i=1\dots s} n_i \cdot \bar{\mathbf{x}}_i$$

$media\ globale$

Tra i diversi criteri di ottimizzazione possibili quello più frequentemente utilizzato è la massimizzazione della quantità:

$$J_1 = tr\left(\mathbf{S}_w^{-1} \mathbf{S}_b\right) = \sum_{i=1\dots d} \lambda_i$$

dove tr è la traccia (somma degli autovalori) della matrice. Il criterio è intuitivo in quanto cerca di massimizzare lo scattering tra le classi ($\mathbf{S}_b$) minimizzando al contempo (matrice inversa $\mathbf{S}_w^{-1}$) quello all'interno di ogni classe.

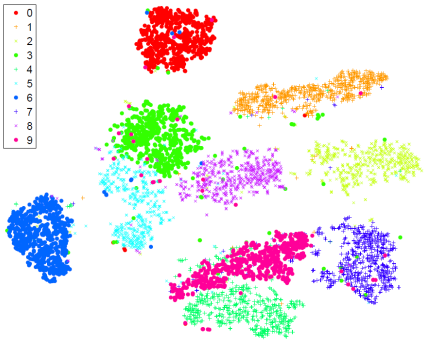
Si dimostra che per la massimizzazione di J_1 lo spazio LDA è definito (*analogia con PCA*) dagli autovettori relativi ai primi k ($k < n, k < s, k < d$) autovalori della matrice $\mathbf{S}_w^{-1} \mathbf{S}_b$.

↓

valore massimo di $k = s - 1$

t-distributed Stochastic Neighbor Embedding (t-SNE)

- È una tecnica non lineare (non supervisionata) per la riduzione di dimensionalità introdotta nel 2008 da Van der Maaten e Hinton [1].
- Rappresenta lo stato dell'arte per la visualizzazione 2D o 3D di dati multidimensionali. Implementazione disponibile in molti linguaggi in [2].
- Anche PCA (con $k = 2$ o $k = 3$) può essere utilizzata a tale scopo, ma dati con distribuzioni spiccatamente non multinormali non possono essere efficacemente «ridotti» attraverso un mapping lineare.
- Esempio: visualizzazione 2D di MNIST (digit scritti a mano).



[1] L.J.P. van der Maaten and G.E. Hinton. Visualizing High-Dimensional Data Using t-SNE. *Journal of Machine Learning Research*, 2008.

[2] https://lvdmaaten.github.io/tsne/

t-SNE in sklearn

- Esempio: visualizzazione 2D di un dataset contente immagini (non controllate) di 1000 Cani + 1000 Gatti, utilizzando come feature di input le HOG (Histogram of Oriented Gradients) invece dei pixel.

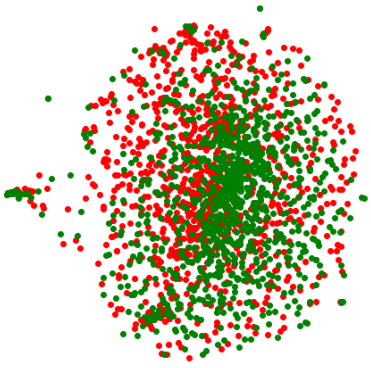
```
from sklearn.manifold import TSNE

tsne = TSNE(n_components=2, perplexity=30.0,  n_iter=1500,
            init = 'random', random_state = 1, verbose = 2)

X_embedded_hog = tsne.fit_transform(hog_features_x)

plt.scatter(X_embedded_hog[0:1000, 0], X_embedded_hog[0:1000, 1], c="r")
plt.scatter(X_embedded_hog[1000:2000, 0], X_embedded_hog[1000:2000, 1], c="g")
plt.show()

print(X_embedded_hog.shape)
```



I due cluster sono molto sovrapposti. I classificatori tradizionali (es. SVM) raggiungono il 70% circa, sfruttando la maggiore densità dei patter verdi (gatti) in una certa regione.

- Vedi https://distill.pub/2016/misread-tsne/ per consigli su come tarare i parametri (es. perplexity) di tsne.