Tema 2

Pré-processamento

Redução de Dimensionalidade

PCA (Principal Components Analysis)

Professora:
Ariane Machado Lima

Aula Passada

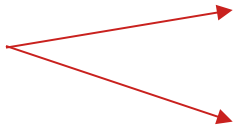
Ciclo de aprendizado supervisionado

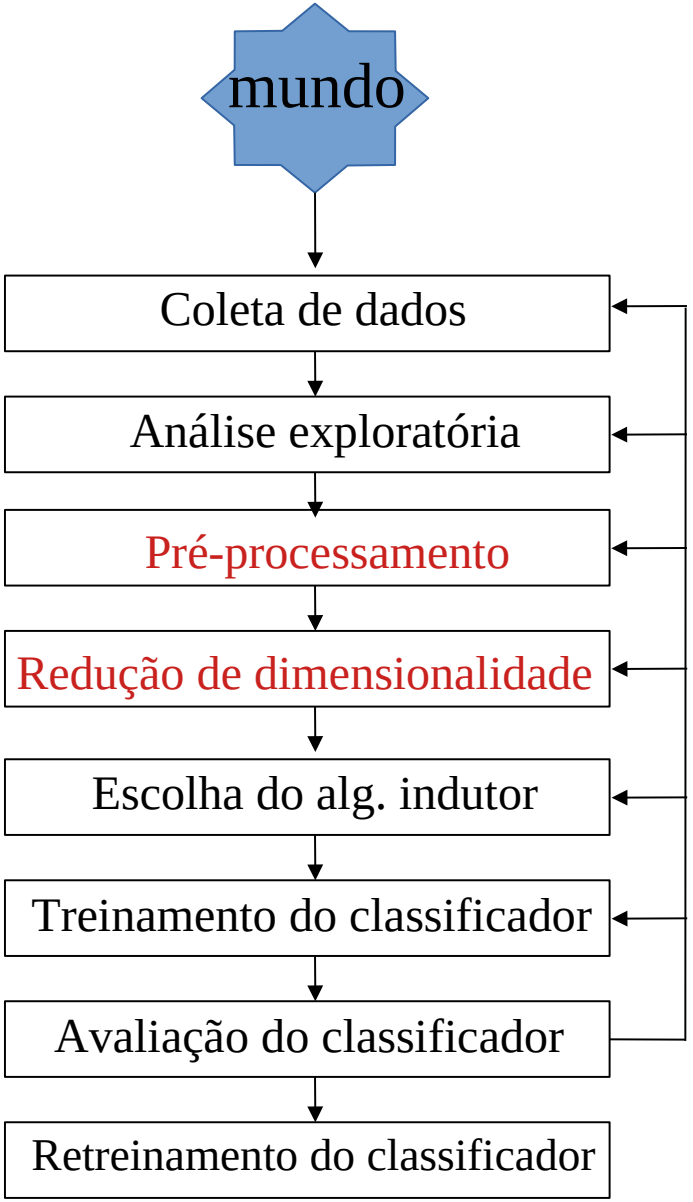
Na verdade verão que esses dois caminham bem juntos

Aula de hoje

Ciclo de aprendizado supervisionado

Na verdade verão que esses dois caminham bem juntos

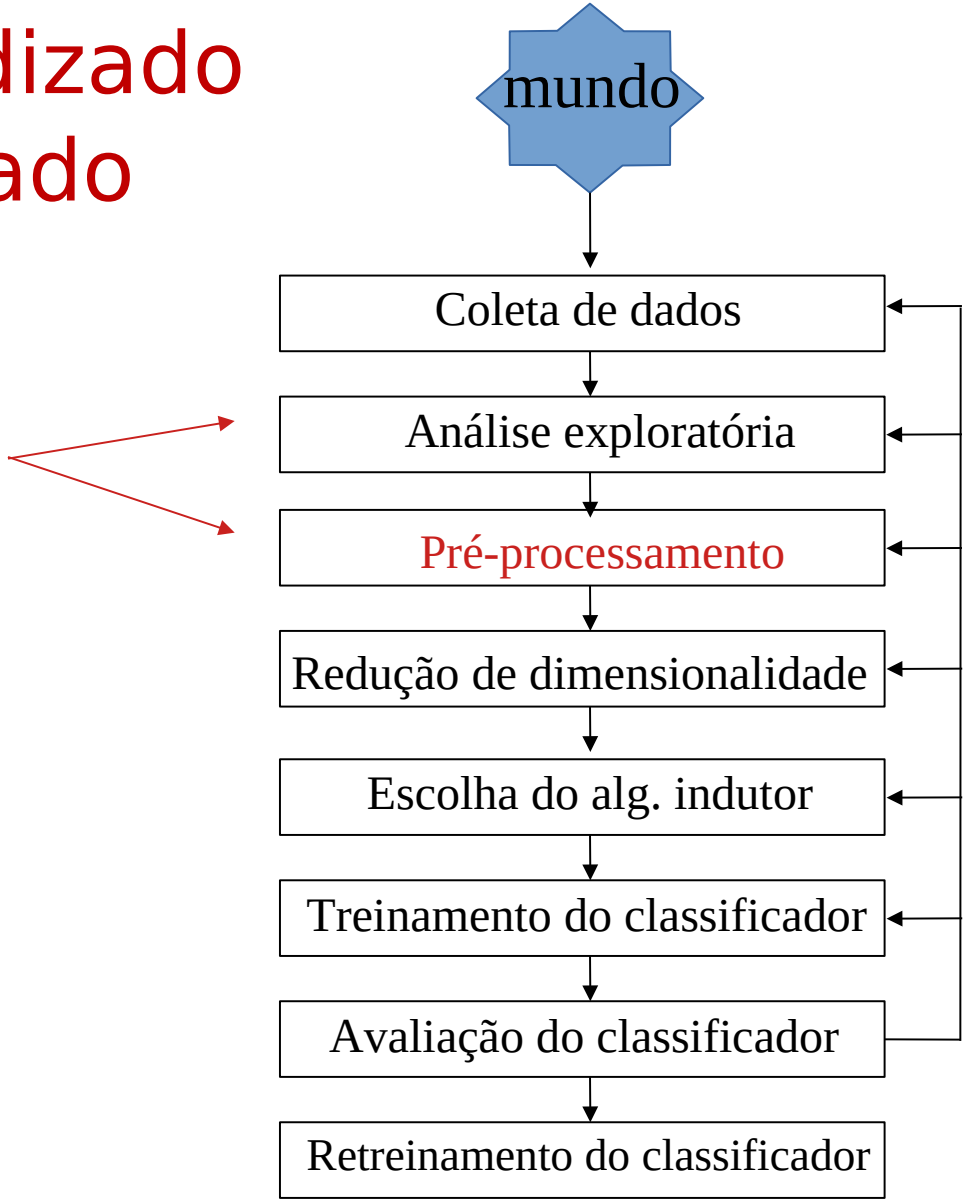




Pré-processamento

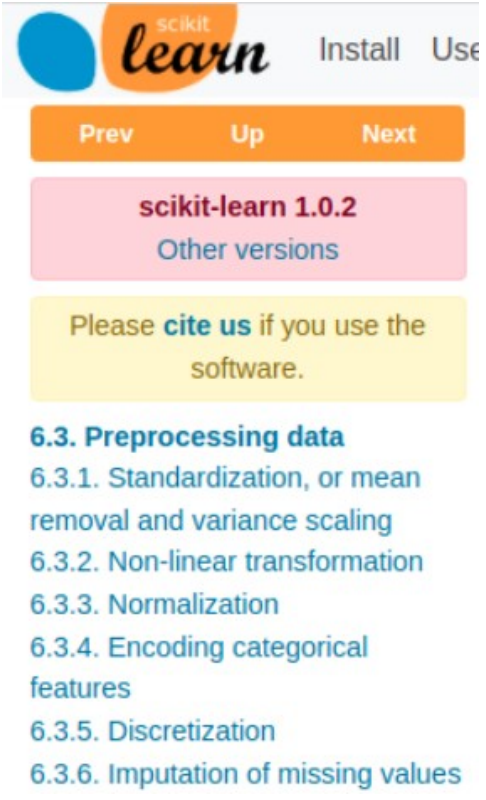
Ciclo de aprendizado supervisionado

Na verdade verão que esses dois caminham bem juntos



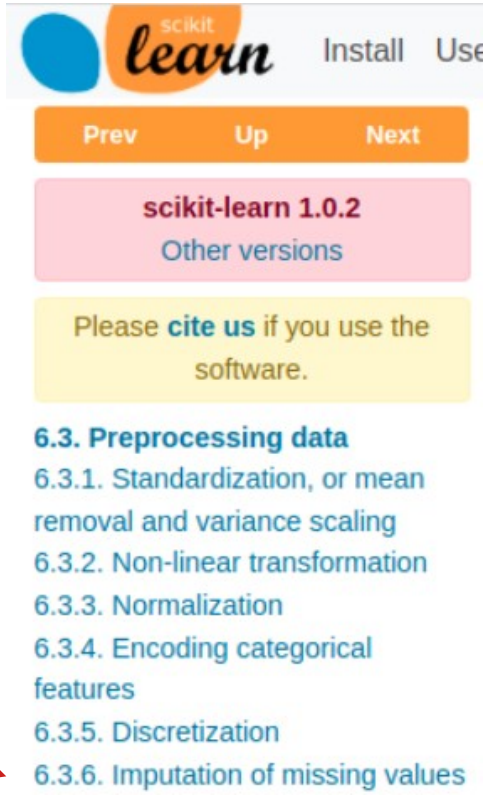
Algumas possíveis tarefas da etapa de pré-processamento

- Eliminação (ou não) de instâncias com *missing values*
- Eliminação de ruídos e inconsistências (ex: duas instâncias idênticas de classes distintas, valores inválidos, etc)
- Eliminação (ou não) de *outliers*
- Engenharia de características
- Normalização
- Discretização
- Codificação de variáveis categóricas
- Balanceamento de classes



Algumas possíveis tarefas da etapa de pré-processamento

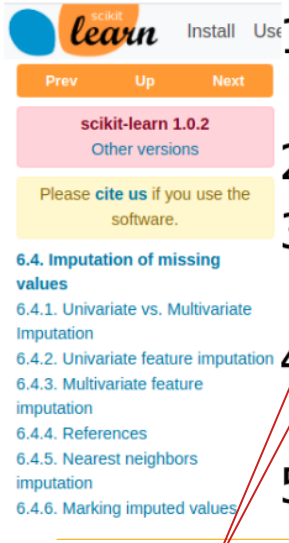
- Eliminação (ou não) de instâncias com *missing values*
- Eliminação de ruídos e inconsistências (ex: duas instâncias idênticas de classes distintas, valores inválidos, etc)
- Eliminação (ou não) de *outliers*
- Engenharia de características
- Normalização
- Discretização
- Codificação de variáveis categóricas
- Balanceamento de classes



Valores ausentes:

Tratamento de missing values

- Missing values: pode-se não conhecer alguns atributos de algumas instâncias
- Alternativas (descarte ou imputação de valor):



1) Usar um valor “desconhecido” (ou um código numérico próprio)
2) Substituir pelo valor médio no dataset
3) Substituir pelo valor médio dos objetos da mesma classe no dataset
4) Substituir pelo valor dado por uma regressão sobre os dados de sua classe (ou outra técnica – ex: missForest, KNN)
5) Descartar instâncias com *missing values*

Imputação univariada

Imputação multivariada

Valores ausentes:

Tratamento de missing values

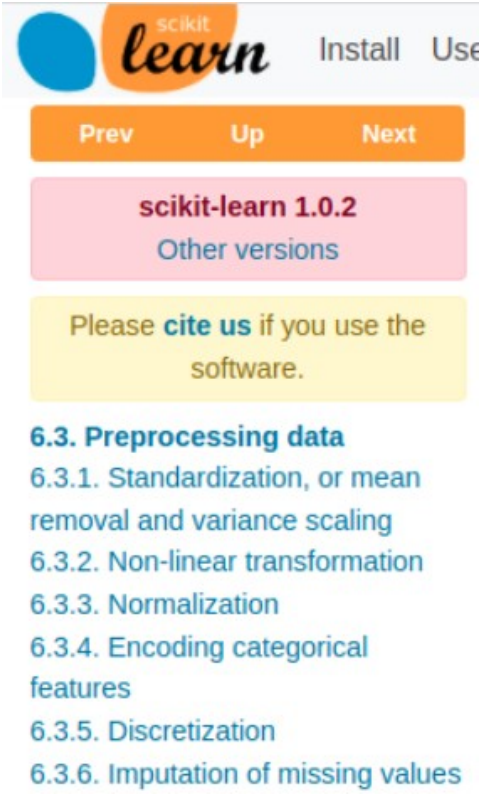
- Missing values: pod
  algumas instâncias
- Alternativas (descart

1) Usar um valor
   próprio)
2) Substituir pelo
3) Substituir pelo
   dataset
4) Substituir pelo
   de sua classe
5) Descartar instâncias com *missing values*

Com exceção da opção 5, todas as outras inserem algum viés no dataset (mas não descartam dados, e às vezes eles já são escassos…)

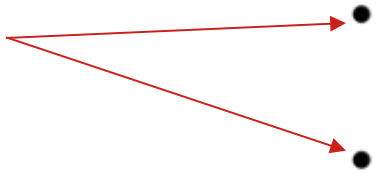
Algumas possíveis tarefas da etapa de pré-processamento

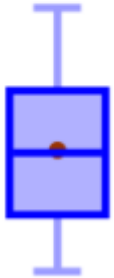
- Eliminação (ou não) de instâncias com *missing values*
- Eliminação de ruídos e inconsistências (ex: duas instâncias idênticas de classes distintas, valores inválidos, etc)
- Eliminação (ou não) de *outliers*
- Engenharia de características
- Normalização
- Discretização
- Codificação de variáveis categóricas
- Balanceamento de classes



Algumas possíveis tarefas da etapa de pré-processamento

- Eliminação (ou não) de instâncias com *missing values*
- Eliminação de ruídos e inconsistências (ex: duas instâncias idênticas de classes distintas, valores inválidos, etc)
- Eliminação (ou não) de *outliers*
- Engenharia de características
- Normalização
- Discretização
- Codificação de variáveis categóricas
- Balanceamento de classes





Algumas possíveis tarefas da etapa de pré-processamento

- Eliminação (ou não) de instâncias com *missing values*
- Eliminação de ruídos e inconsistências (ex: duas instâncias idênticas de classes distintas, valores inválidos, etc)
- Eliminação (ou não) de *outliers*
- Engenharia de características
- Normalização
- Discretização
- Codificação de variáveis categóricas
- Balanceamento de classes

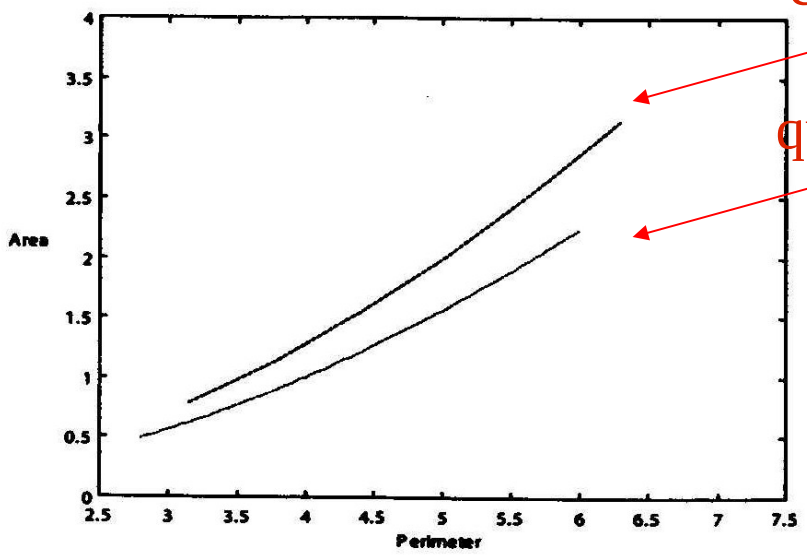
Engenharia de características

Exemplo: discriminar dois tipos de queijo: quadrados e circulares (vários tamanhos)

- Área e perímetro

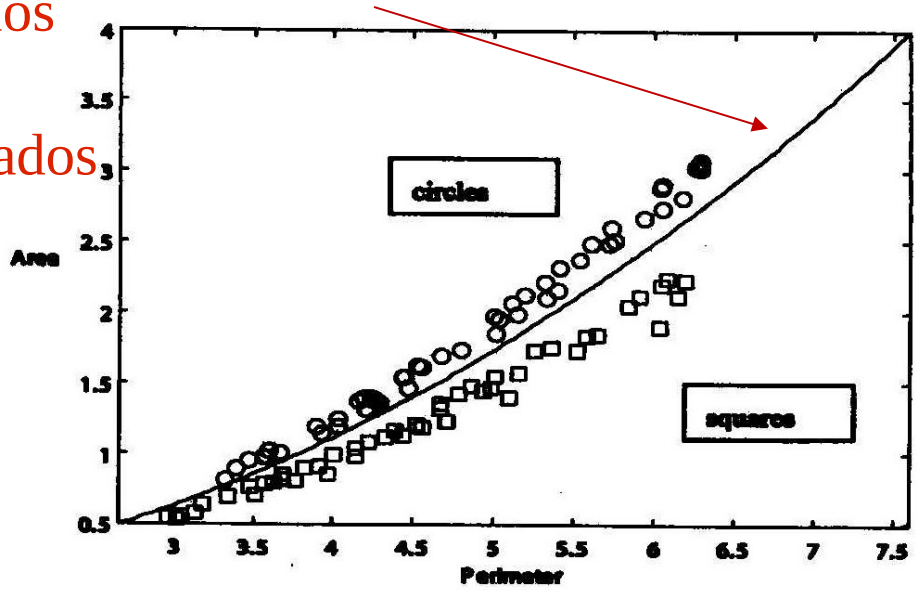
círculos

quadrados



Como deveria ser...

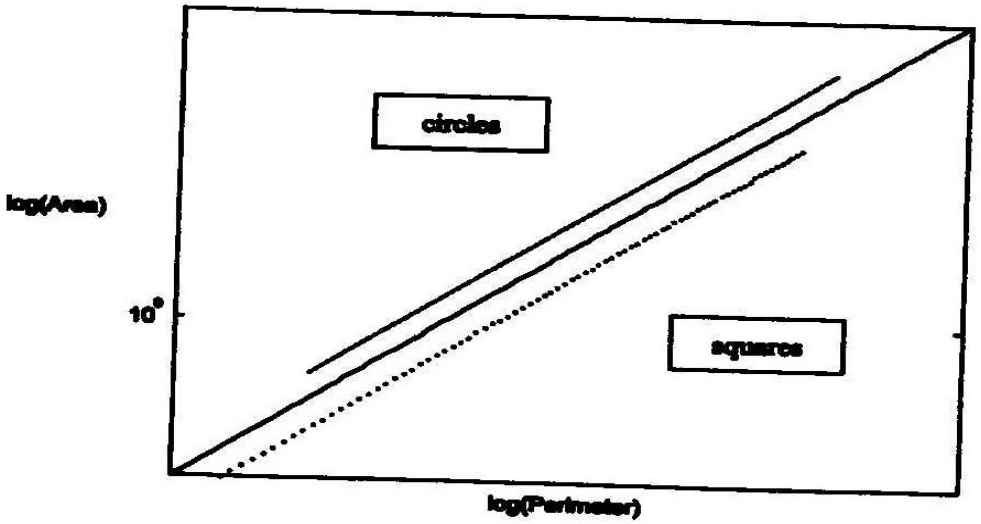
Fronteira de Decisão



Mundo real

Engenharia de características

Transformação de variáveis pode simplificar o classificador



Neste exemplo, transformação logarítmica: uma reta como separador ao invés de uma parábola

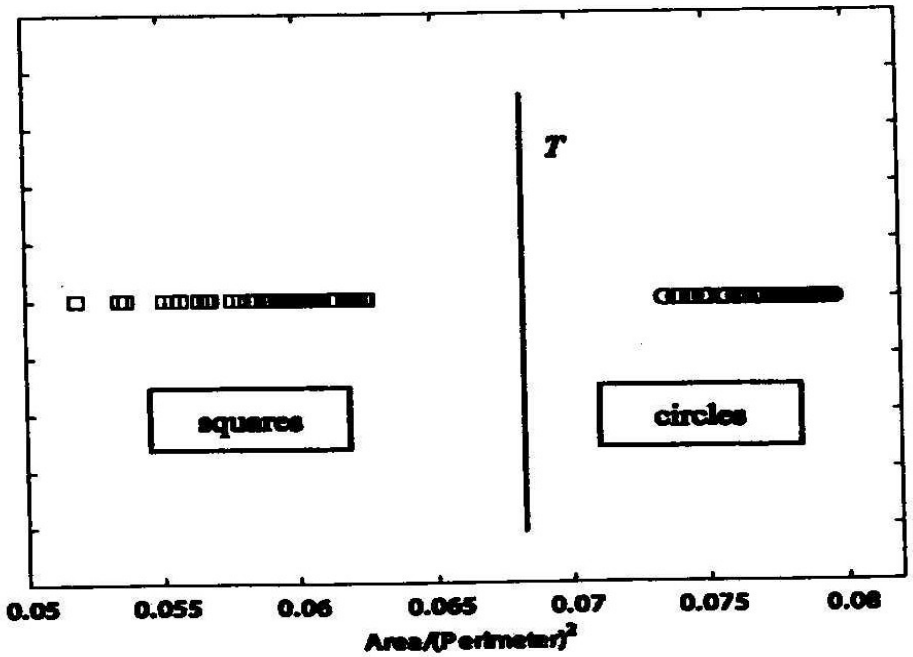
Engenharia de características

- Usar um número menor de características, combinando algumas, pode fornecer resultados similares ou melhores
- *Thinness ratio*: T = Área / Perímetro^2 (vantagem de ser adimensional)
- Mundo perfeito:
  - R(círculo): $\pi r^2/(2\pi r)^2 = 1/(4\pi)$
  - R(quadrado): $l^2/(4l)^2 = 1/16$

Engenharia de características

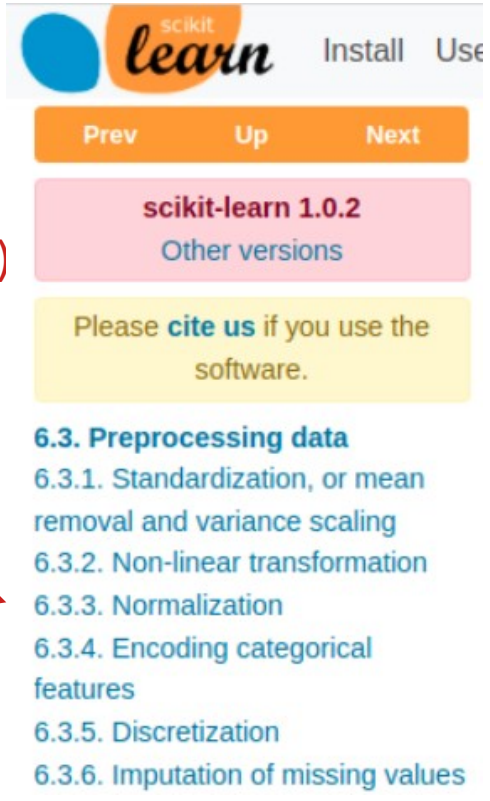
- *Thinness ratio*: Área / Perímetro^2 (adimensional)

Mundo real: threshold: algo entre 1/(4π) e 1/16



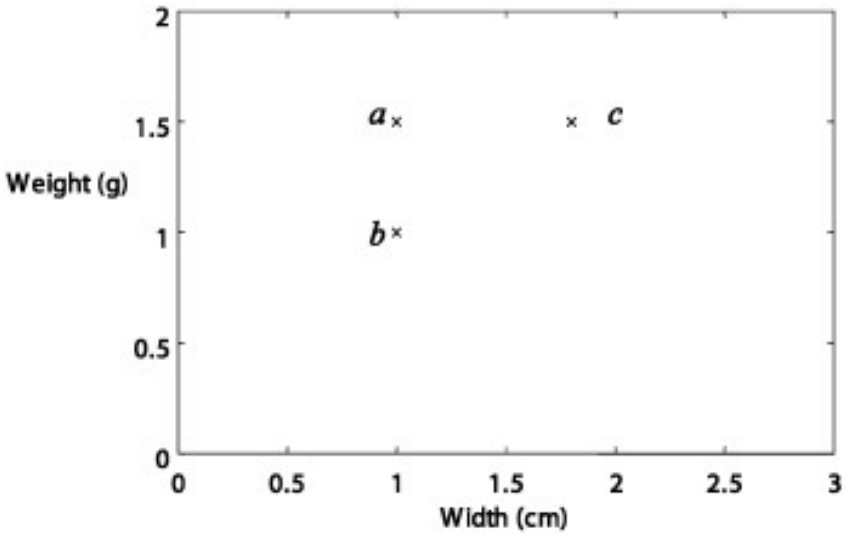
Algumas possíveis tarefas da etapa de pré-processamento

- Eliminação (ou não) de instâncias com *missing values*
- Eliminação de ruídos e inconsistências (ex: duas instâncias idênticas de classes distintas, valores inválidos, etc)
- Eliminação (ou não) de *outliers*
- Engenharia de características
- Normalização
  - (para variáveis numéricas! Não categóricas...)
- Discretização
- Codificação de variáveis categóricas
- Balanceamento de classes



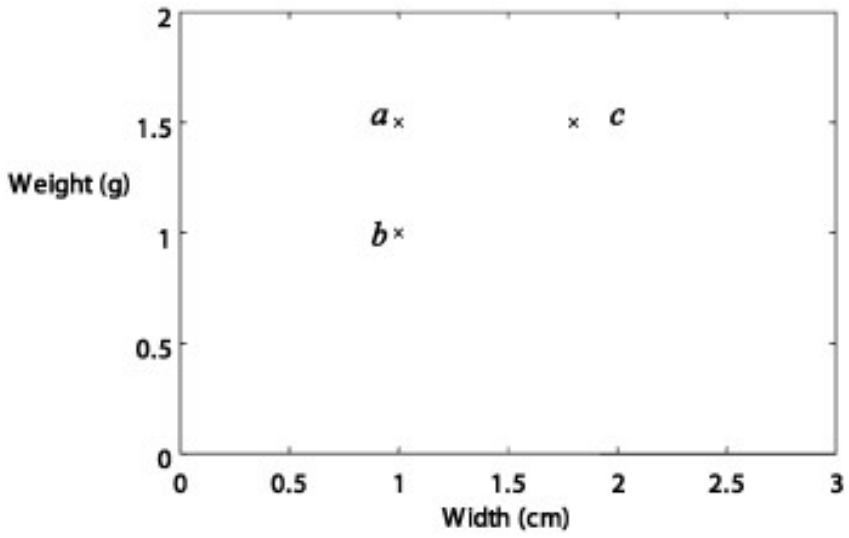
Normalização de características

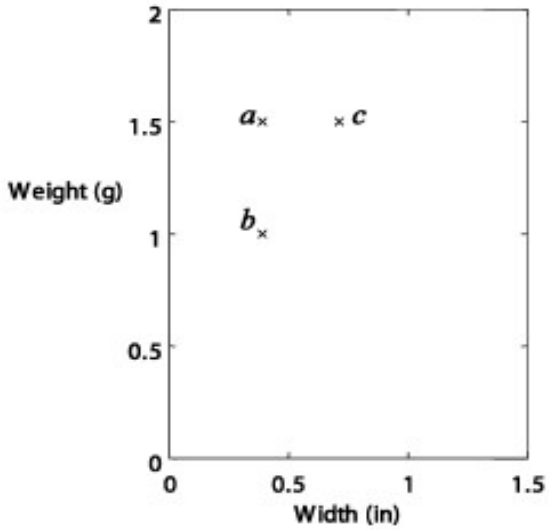
- A maioria das características são dimensionais (possuem unidade métrica)
- 3 objetos (por exemplo, folhas)



Normalização de características

- Unidades de medidas afetam as distâncias entre os objetos no espaço de características





Normalização de características

- Ter em mente:

1) Melhor utilizar características adimensionais

1) Várias características deveriam estar mais ou menos no mesmo intervalo de valores

(se não, a que tem intervalo maior *parece* ser mais importante – varia mais)

Normalização de características

- Algumas estratégias (o mais apropriado depende da característica, do problema e do método a ser usado depois):
  - Utilizar **razões entre características** (ex: IMC)
  - **Dividir por uma referência** (ex: renda/teto salarial)
  - **Proporção** em relação à soma de todos os valores relacionados **intra-instância** (ex: nr de palavras positivas/total de palavras, etc...)
  - **Min-max**: (X - Xmin) / (Xmax-Xmin) (valores normalizados estarão entre 0 e 1) – importante ter eliminado os outliers
  - **Transformação normal** - z-score (novas medidas com média = 0 e desvio padrão = 1

Normalização de características

- Algumas estratégias (o mais apropriado depende da característica, do problema e do método a ser usado depois):
  - Utilizar **razões entre características** (ex: IMC)
  - **Dividir por uma referência** (ex: renda/teto salarial)
  - **Proporção** em relação à soma de todos os valores relacionados **intra-instância** (ex: nr de palavras positivas/total de palavras, etc...)
  - **Min-max**: (X - Xmin) / (Xmax-Xmin) (valores normalizados estarão entre 0 e 1) – importante ter eliminado os outliers
  - **Transformação normal** - z-score (novas medidas com média = 0 e desvio padrão = 1)

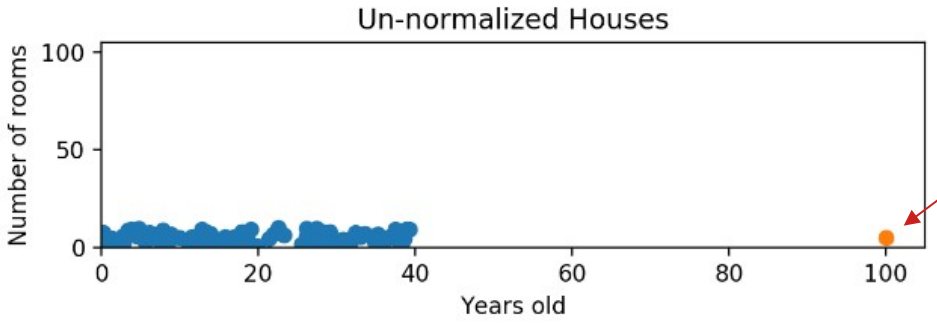
Normalização de características

- Transformação **normal**
  - $x_i' = (x_i - \overline{x}) / S$ (z-score)
  - Sendo $\overline{x}$ a média amostral e S o desvio padrão da amostra
  - Assume-se uma distribuição normal sobre x
  - E se não for?
  - Checar antes (teste de normalidade)

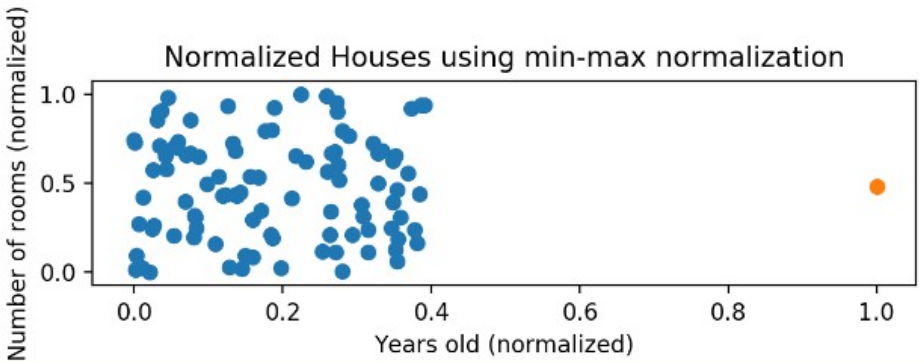
Tests for Normality

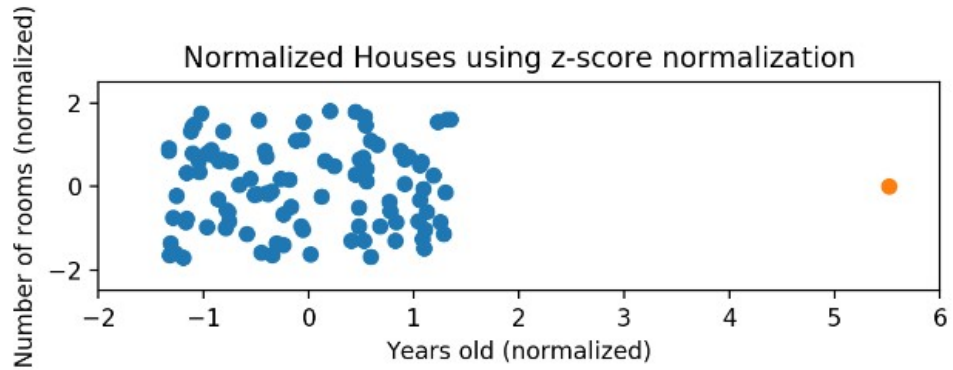
ad.test	Anderson-Darling test for normality
cvm.test	Cramer-von Mises test for normality
lillie.test	Lilliefors (Kolmogorov-Smirnov) test for normality
pearson.test	Pearson chi-square test for normality
sf.test	Shapiro-Francia test for normality

Normalização - exemplo



outlier

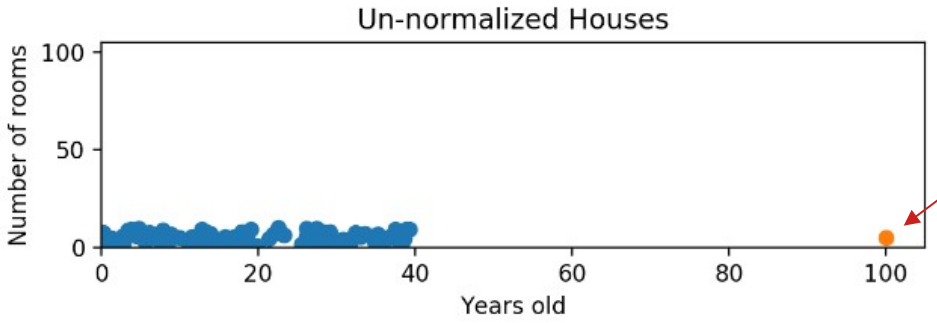




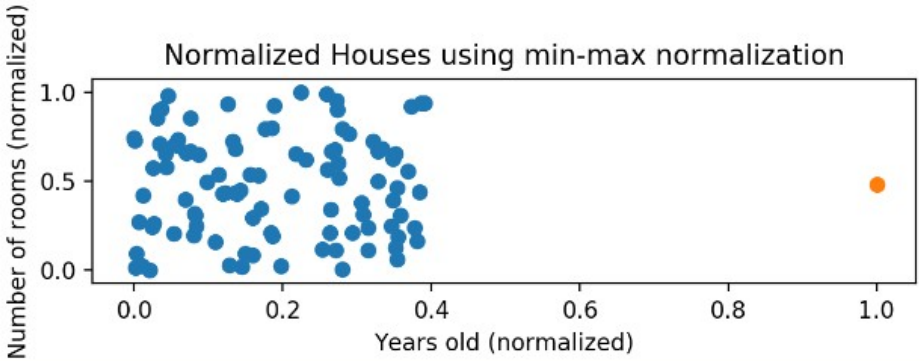
https://www.codecademy.com/article/normalization

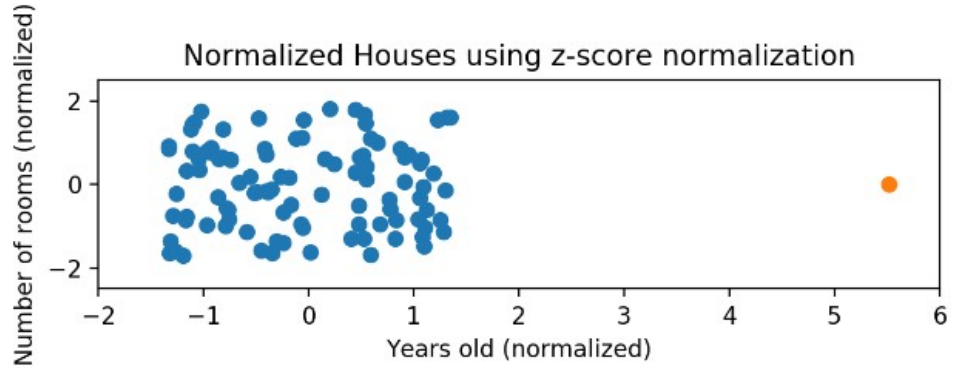
Normalização - exemplo

2 variáveis
2 diferentes intervalos de valores (variações)



outlier

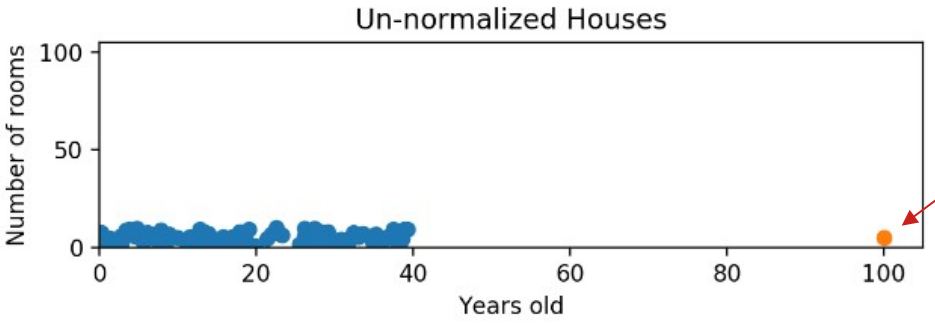




https://www.codecademy.com/article/normalization

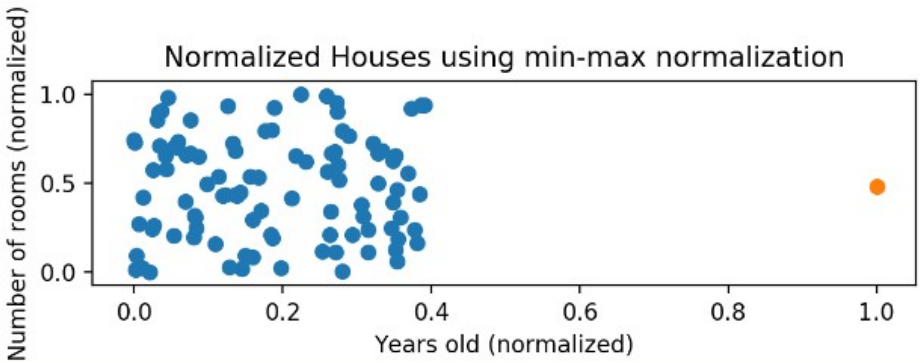
Normalização - exemplo

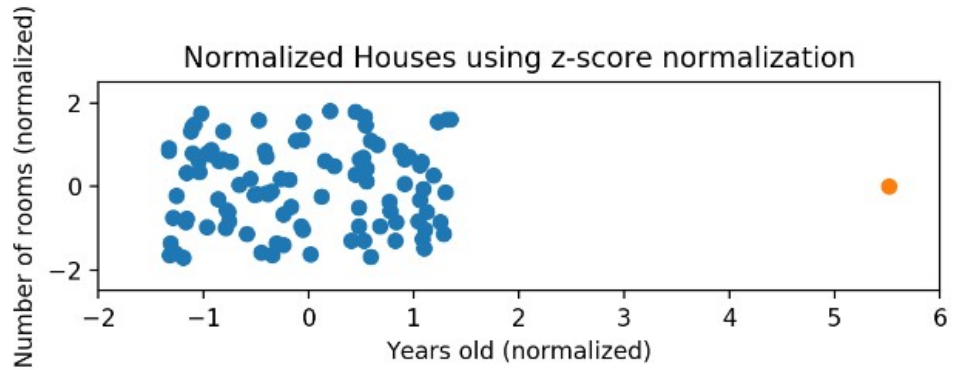
2 variáveis
2 diferentes intervalos de valores (variações)



outlier

Eixo y: distribuição entre 0 e 1
Eixo x: melhorou, mas por conta do outlier a maior parte dos dados ficam entre 0 e 0.4

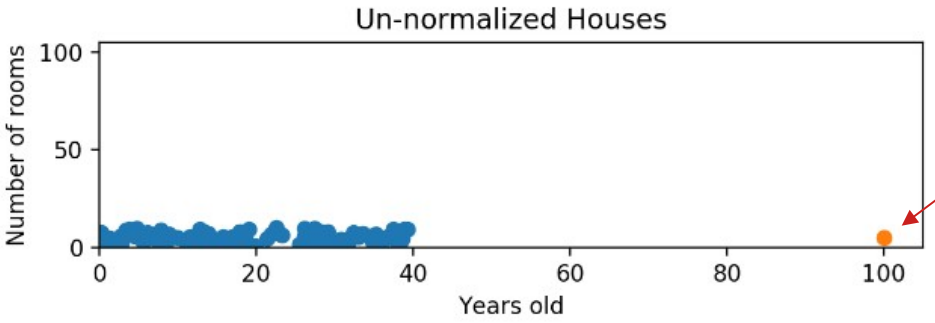




https://www.codecademy.com/article/normalization

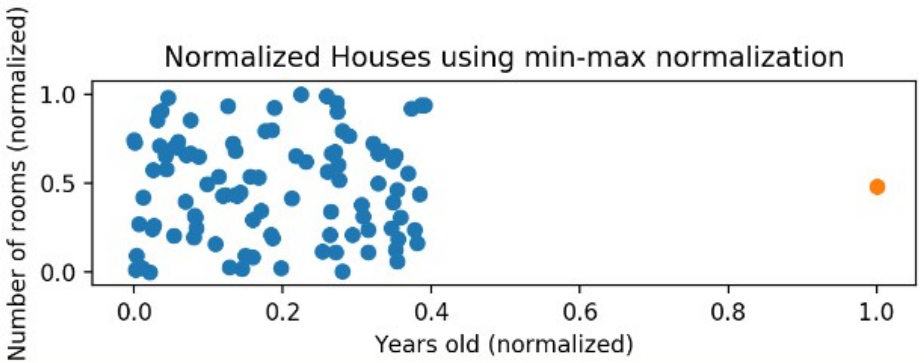
Normalização - exemplo

2 variáveis
2 diferentes intervalos de valores (variações)

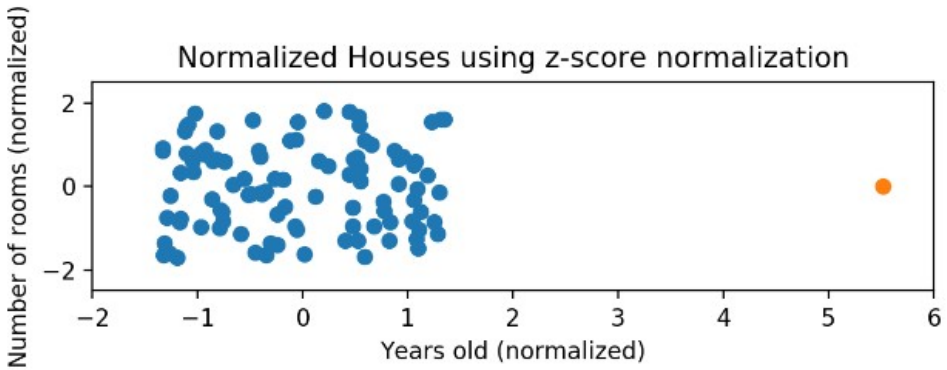


outlier

Eixo y: distribuição entre 0 e 1
Eixo x: melhorou, mas por conta do outlier a maior parte dos dados ficam entre 0 e 0.4



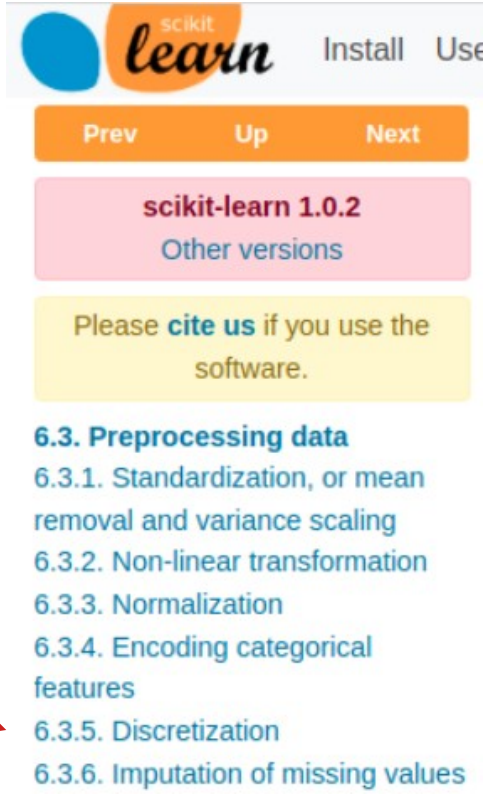
Eixos x e y: distribuição ao redor do 0:
- o quão bem distribuído depende de ser normal ou não
- intervalo depende de cada variável



https://www.codecademy.com/article/normalization

Algumas possíveis tarefas da etapa de pré-processamento

- Eliminação (ou não) de instâncias com *missing values*
- Eliminação de ruídos e inconsistências (ex: duas instâncias idênticas de classes distintas, valores inválidos, etc)
- Eliminação (ou não) de *outliers*
- Engenharia de características
- Normalização
- Discretização
- Codificação de variáveis categóricas
- Balanceamento de classes



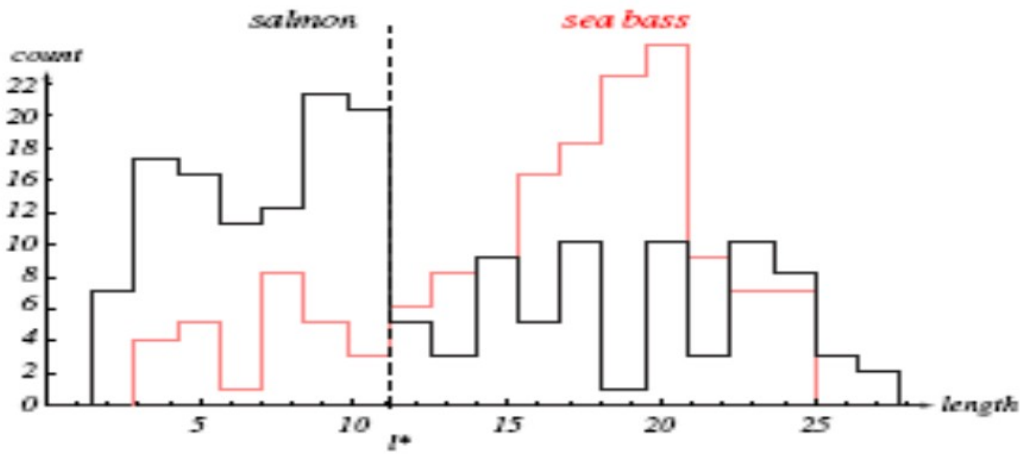
Discretização

- Quando variáveis contínuas (ou em alguns casos inteiras) precisam se tornar discretas (inteiras ou categóricas)

Discretização

Contínua → inteira:

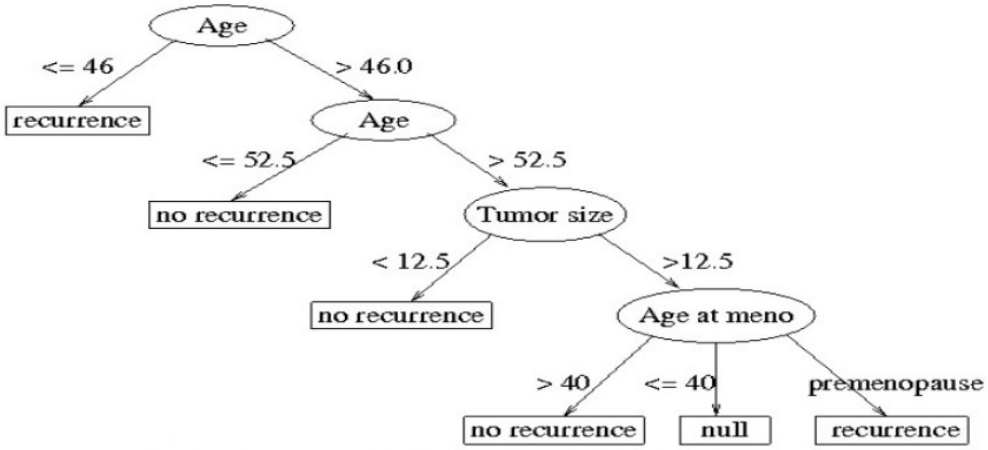
- Ex de utilização: construção de histograma
- Ex de abordagem: aplicar round/floor/ceil (arredonda para o mais próximo/baixo/cima)



Discretização

intervalares/racionais → categóricas ordinais:

- Ex de utilização: para uso de técnicas categóricas (ex: árvores de decisão – mas muitos algoritmos já fazem esta etapa)



Exemplo: Predição de recorrência de câncer de mama

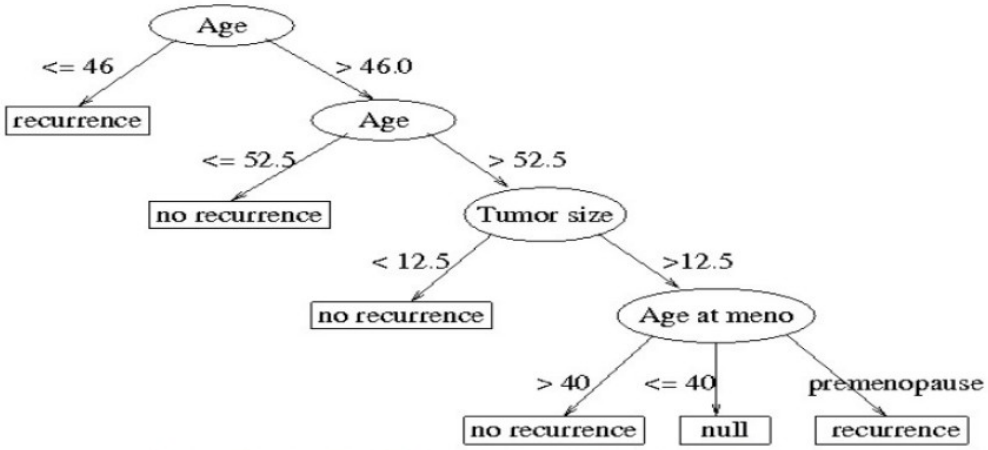
Ex:

- algoritmo KbinsDiscretizer (bins de tamanhos iguais)
- algoritmo Omega (supervisionado) – tenta não misturar muito instâncias de classes distintas no mesmo bin (bins de tamanhos potencialmente diferentes → ?

Discretização

intervalares/racionais → categóricas ordinais:

- Ex de utilização: para uso de técnicas categóricas (ex: árvores de decisão – mas muitos algoritmos já fazem esta etapa)



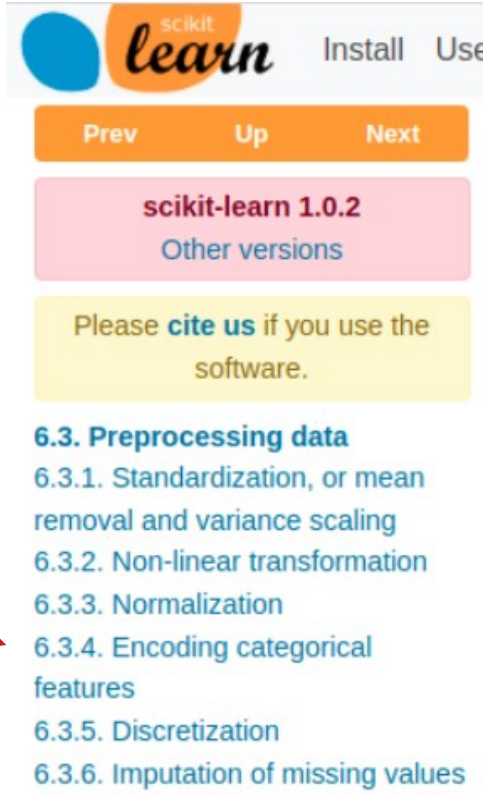
Exemplo: Predição de recorrência de câncer de mama

Ex:

- algoritmo KbinsDiscretizer (bins de tamanhos iguais)
- algoritmo Omega (supervisionado) – tenta não misturar muito instâncias de classes distintas no mesmo bin (bins de tamanhos potencialmente diferentes → não intervalar)

Algumas possíveis tarefas da etapa de pré-processamento

- Eliminação (ou não) de instâncias com *missing values*
- Eliminação de ruídos e inconsistências (ex: duas instâncias idênticas de classes distintas, valores inválidos, etc)
- Eliminação (ou não) de *outliers*
- Engenharia de características
- Normalização
- Discretização
- Codificação de variáveis categóricas
- Balanceamento de classes



Codificação de variáveis categóricas

que vou aplicar depois

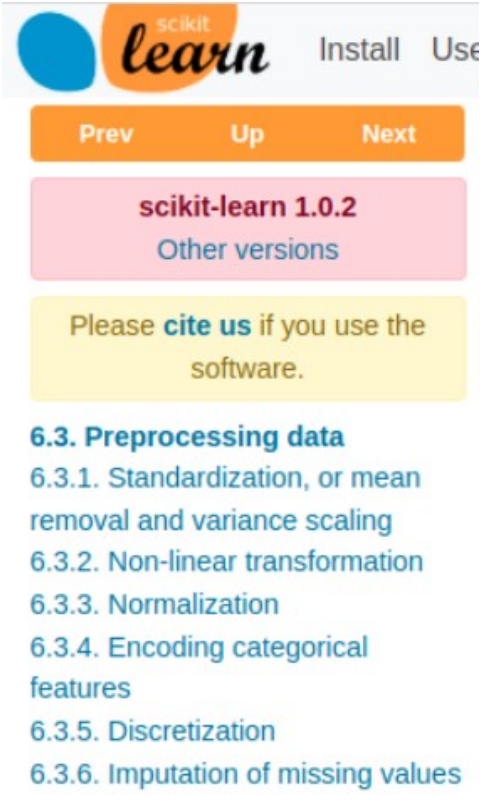
- Primeira coisa a se pensar: esse método é mesmo apropriado para esse dataset?
- Principais tipos de codificação:
  - Ordinal (valores 1, 2, ...) → só faz sentido para variáveis categóricas ordinais
  - One-hot ou dummy: útil para variáveis categóricas nominais
    - "cada categoria vira uma variável binária"
    - Na verdade, uma variável categórica com n valores **deve ser** transformada em n-1 variáveis binárias
    - Ex: variável cor da pele = {branca, preta, amarela} de ser trocada por duas: branca = {0,1} e preta = {0,1}

      Se as duas forem 0, então é amarela

Outras em https://scikit-learn.org/stable/modules/preprocessing.html#encoding-categorical-features

Algumas possíveis tarefas da etapa de pré-processamento

- Eliminação (ou não) de instâncias com *missing values*
- Eliminação de ruídos e inconsistências (ex: duas instâncias idênticas de classes distintas, valores inválidos, etc)
- Eliminação (ou não) de *outliers*
- Engenharia de características
- Normalização
- Discretização
- Codificação de variáveis categóricas
- Balanceamento de classes



Desbalanceamento de classes

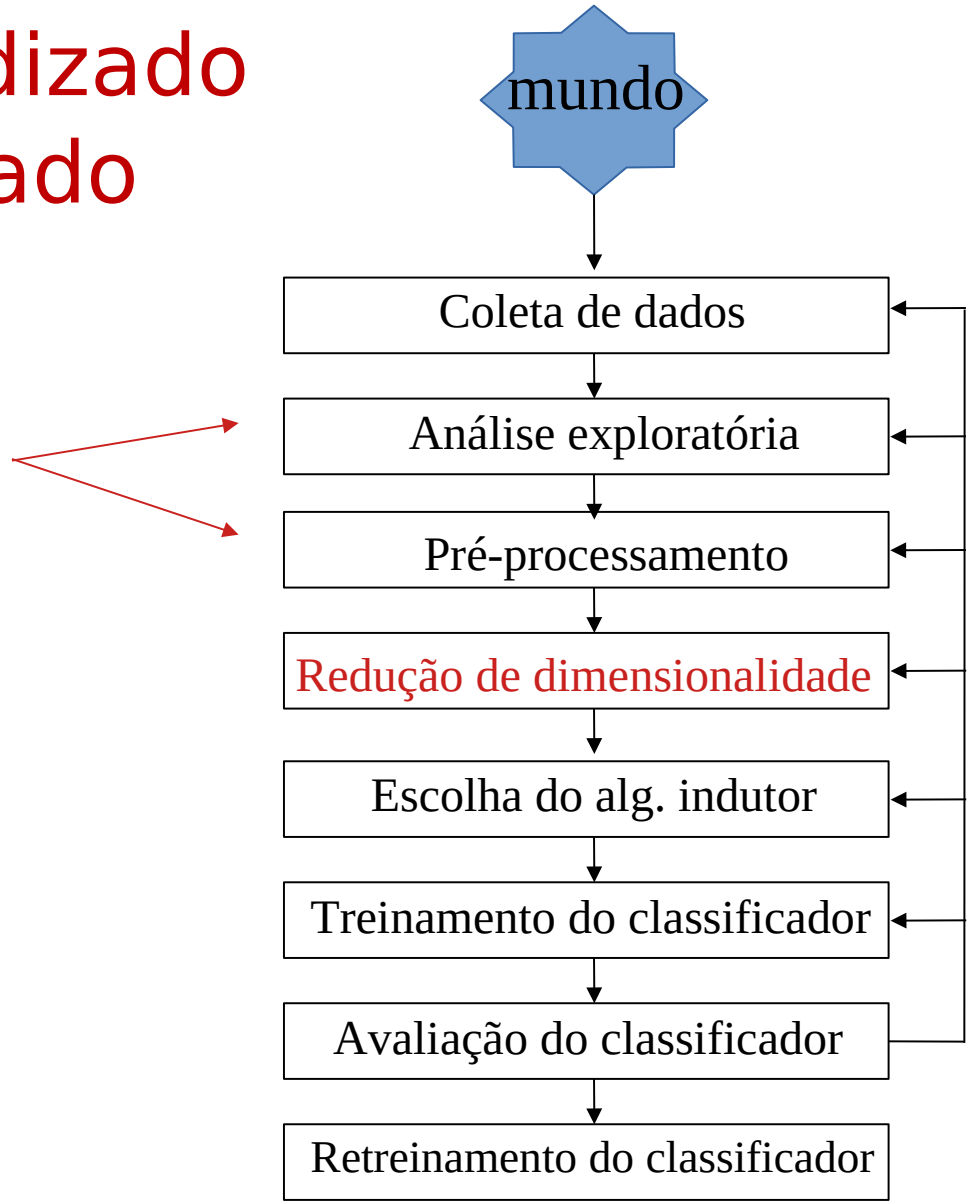
- **Undersampling** (diminui a classe majoritária)
- **Oversampling** (aumenta a classe minoritária)
  - SMOTE
  - SMOTE Tomek (misto das duas)

Algumas possíveis tarefas da etapa de pré-processamento

- Eliminação (ou não) de instâncias com *missing values*
- Eliminação de ruídos e inconsistências (ex: duas instâncias idênticas de classes distintas, valores inválidos, etc)
- Eliminação (ou não) de *outliers*
- Engenharia de características
- Normalização
- Discretização
- Codificação de variáveis categóricas
- Balanceamento de classes
- Remoção de variáveis altamente redundantes:
  - Filtro de correlação (remover 1 quando 2 possuem correlação de Pearson acima de 98-99%)

Ciclo de aprendizado supervisionado

Na verdade verão que esses dois caminham bem juntos



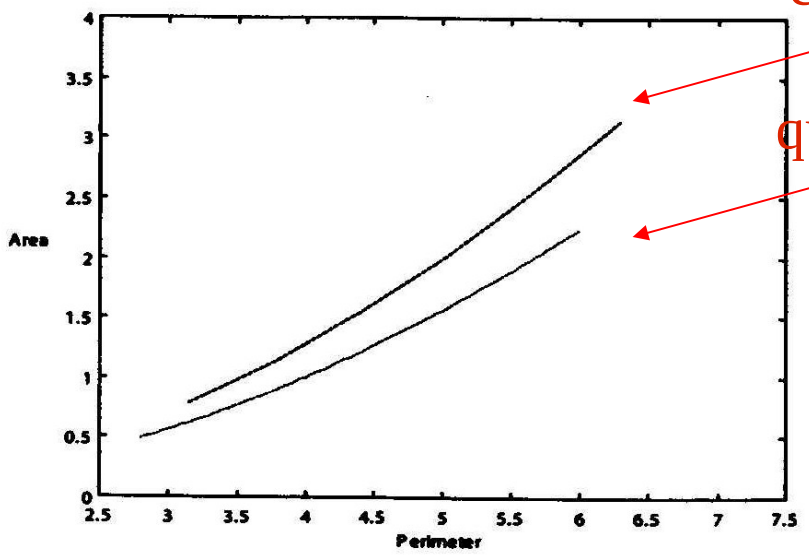
Antes, voltando ao exemplo dos queijos...

Exemplo: discriminar dois tipos de queijo: quadrados e circulares (vários tamanhos)

- Área e perímetro

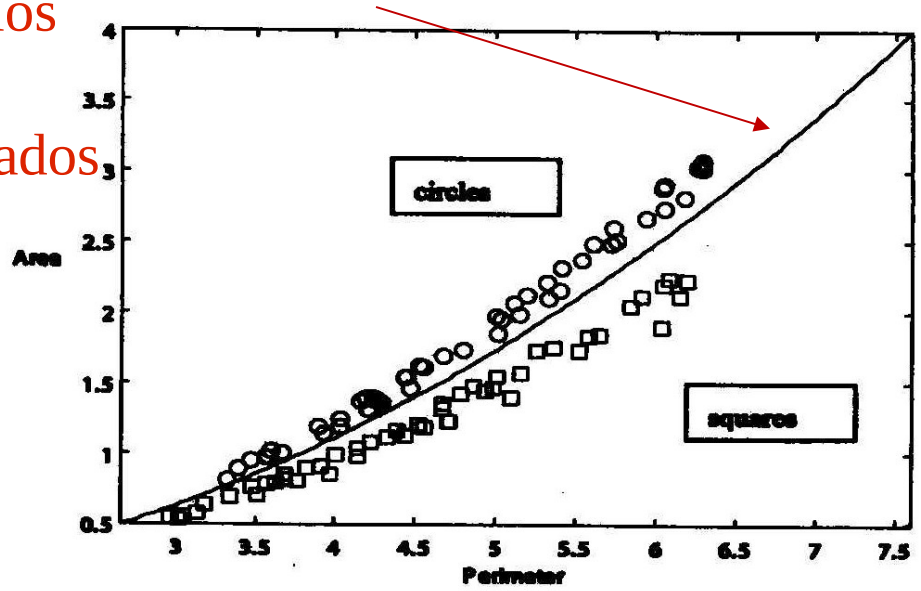
círculos

quadrados



Como deveria ser...

Fronteira de Decisão

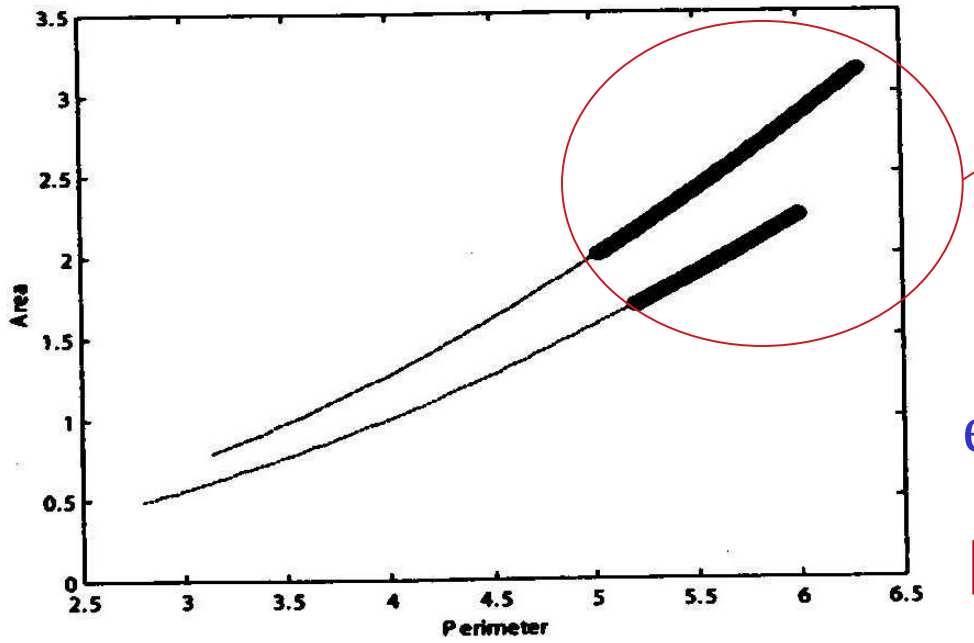


Mundo real

Antes, voltando ao exemplo dos queijos...

- Complicando um pouco:
- Em épocas especiais há a produção de queijos especiais, circulares E quadrado
  - Circular: $0.8 < r \leq 1$
  - Quadrado: $1.3 < l \leq 1.5$

Antes, voltando ao exemplo dos queijos...



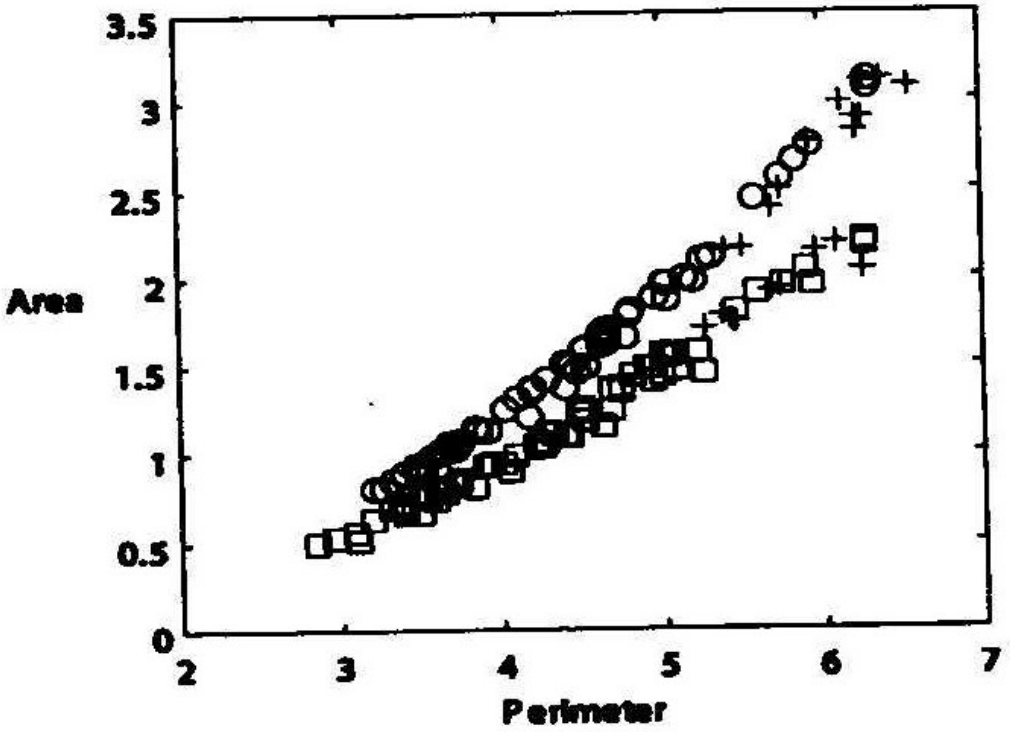
Queijos especiais

Mundo “ideal”,
e mesmo assim problemático:

Regiões sobrepostas

Regiões descontínuas

Antes, voltando ao exemplo dos queijos...

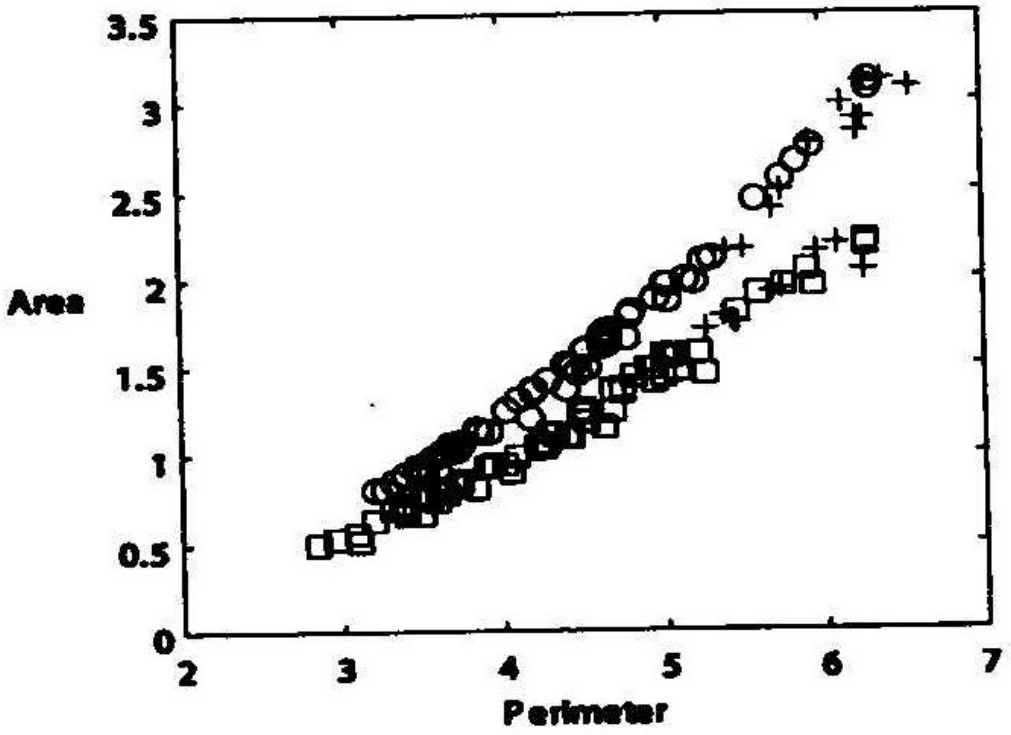


Mundo real

Regiões sobrepostas

Regiões descontínuas

Antes, voltando ao exemplo dos queijos...



Mundo real

Regiões sobrepostas

Regiões descontínuas

Como resolver?

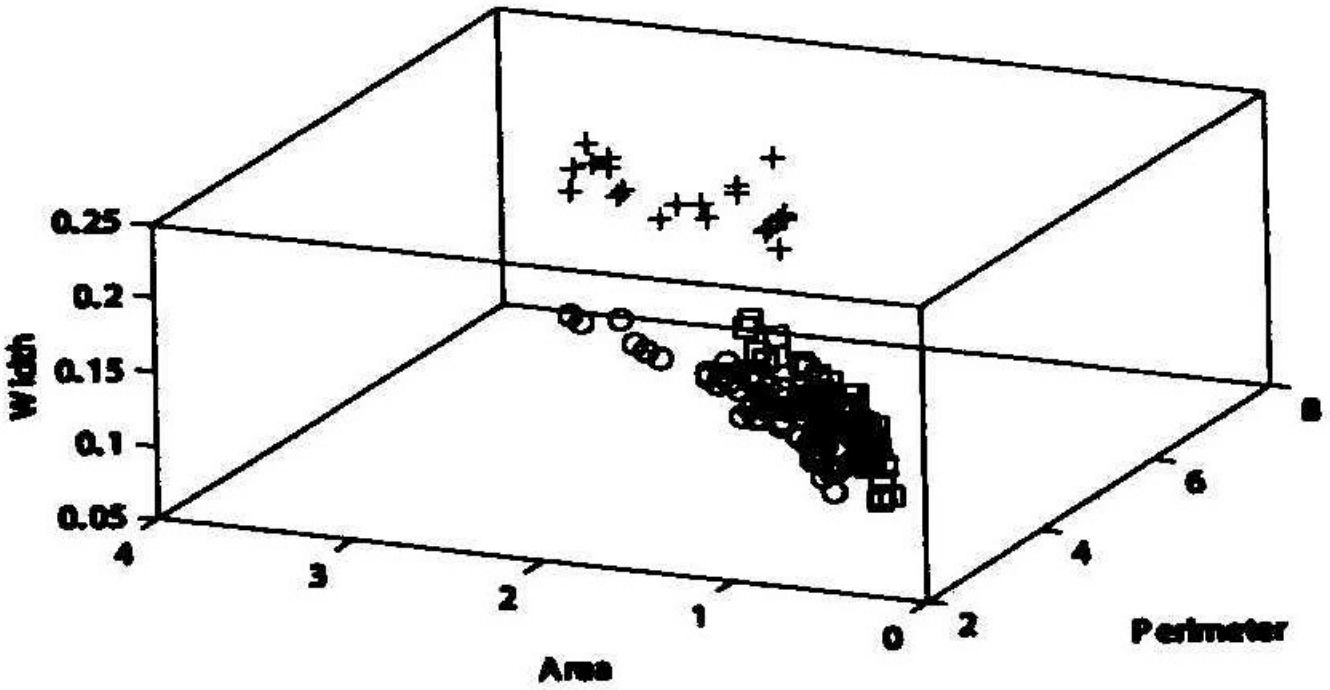
Antes, voltando ao exemplo dos queijos...

- Há mais características que podem ser consideradas?

Antes, voltando ao exemplo dos queijos...

- Se as larguras forem diferentes...

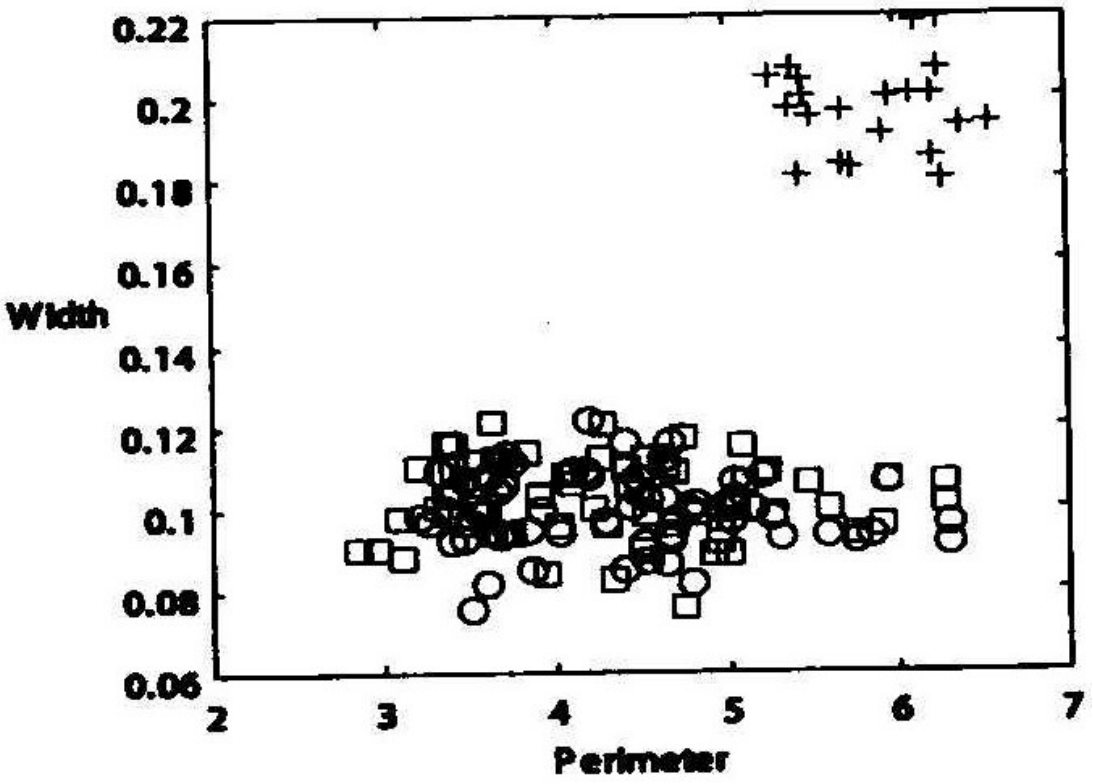
3 D



Antes, voltando ao exemplo dos queijos...

Se as larguras forem diferentes...

Projeção 2 D



Antes, voltando ao exemplo dos queijos...

E se as larguras não fossem diferentes?

Antes, voltando ao exemplo dos queijos...

- E se as larguras não fossem diferentes?
- É preciso descobrir características que separem as classes...
  - Talvez a data de fabricação?
- Classificar ~ descobrir (ou conhecer mais a respeito) o processo de geração dos objetos
- Modelo de cada classe
- Classificar não é fácil...

Dimensionalidade

Quantas características utilizar?

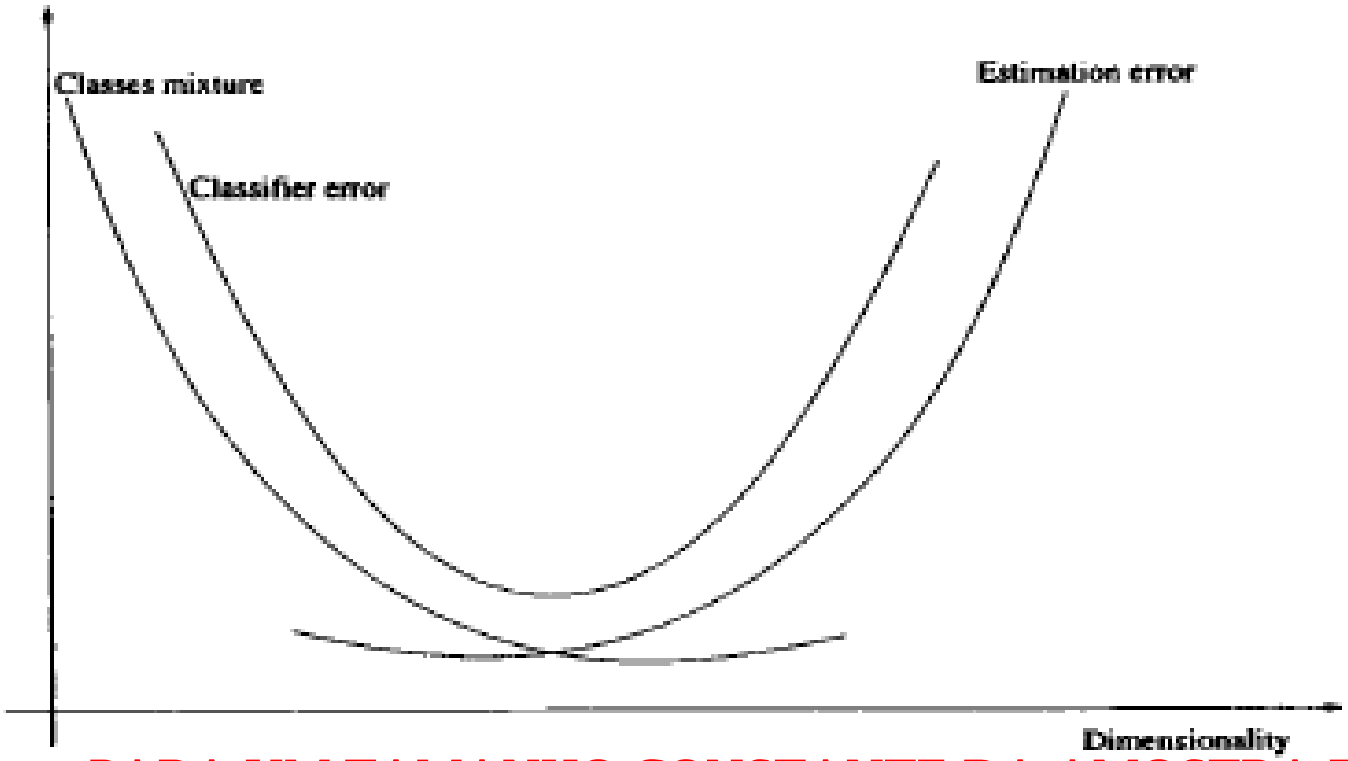
Quanto mais melhor?

Dimensionalidade

MALDIÇÃO

Dimensionalidade

MALDIÇÃO DA DIMENSIONALIDADE



PARA UM TAMANHO CONSTANTE DA AMOSTRA DE TREINAMENTO!

Redução de Dimensionalidade

- Fusão de características

- Seleção de características

Redução de Dimensionalidade

- Fusão de características
  - PCA
  - ICA
  - Outras: análise de Fourier, wavelets e LDA (linear discriminant analysis)
- Seleção de características

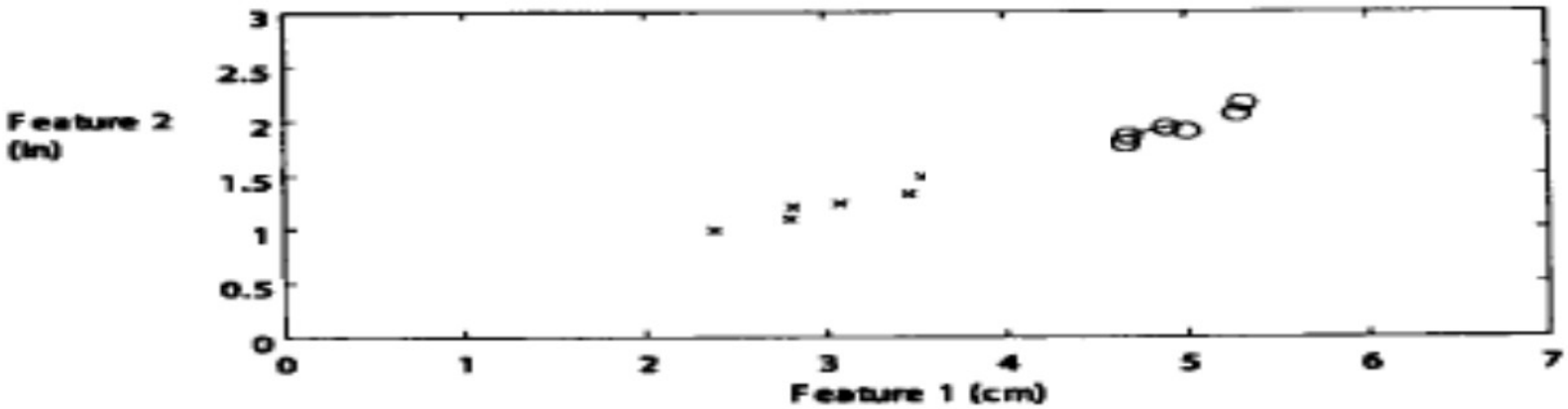
Análise de Componentes Principais

PCA – *Principal Components Analysis*

Redução de dimensionalidade (fusão de características)

Exemplo

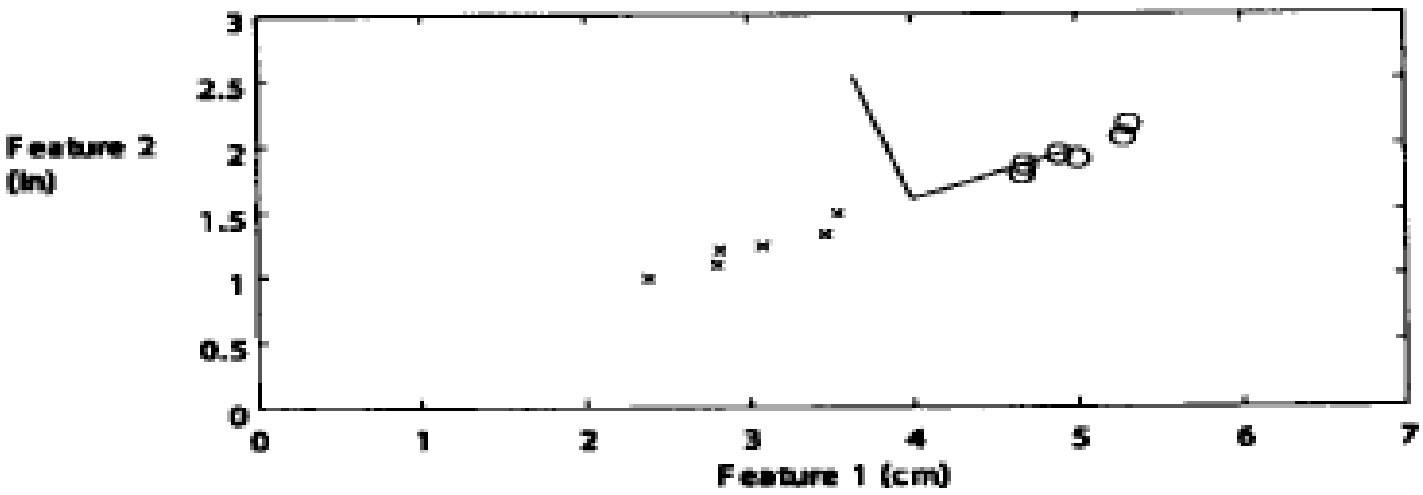
- Duas classes de objetos
- Cada objeto é representado por 2 características
- O que se nota neste gráfico?



[COSTA& CESAR, 2009]

Exemplo

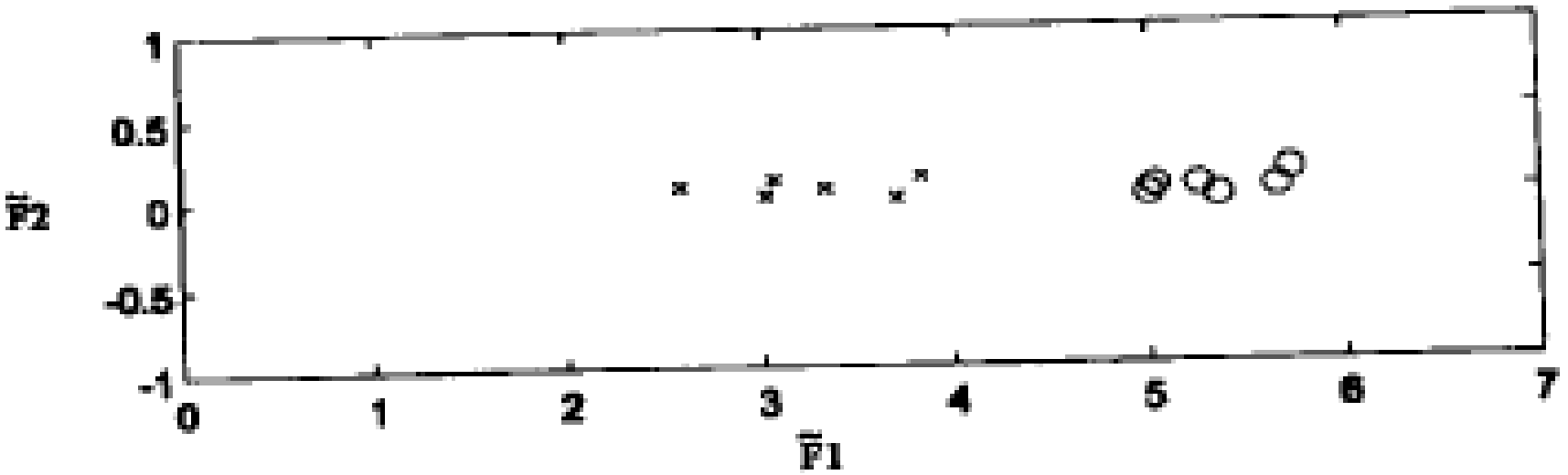
- Existe uma correlação linear entre a variáveis!
- Isso poderia nos ajudar a reduzir a dimensionalidade?



[COSTA& CESAR, 2009]

Exemplo

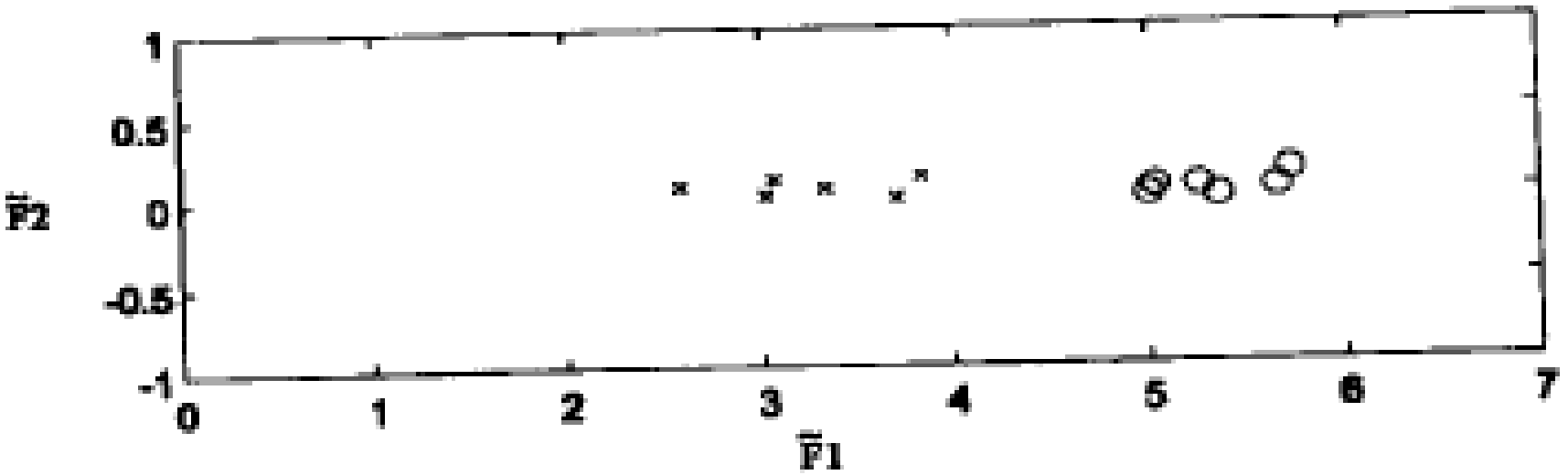
Transformação para 2 novas características:
Nova F1 é a que apresenta maior dispersão (variância) dos dados
Nova F2 é a que apresenta a segunda maior dispersão (variância) dos dados



[COSTA& CESAR, 2009]

Exemplo

Transformação para apenas 1 nova característica (qual delas?)

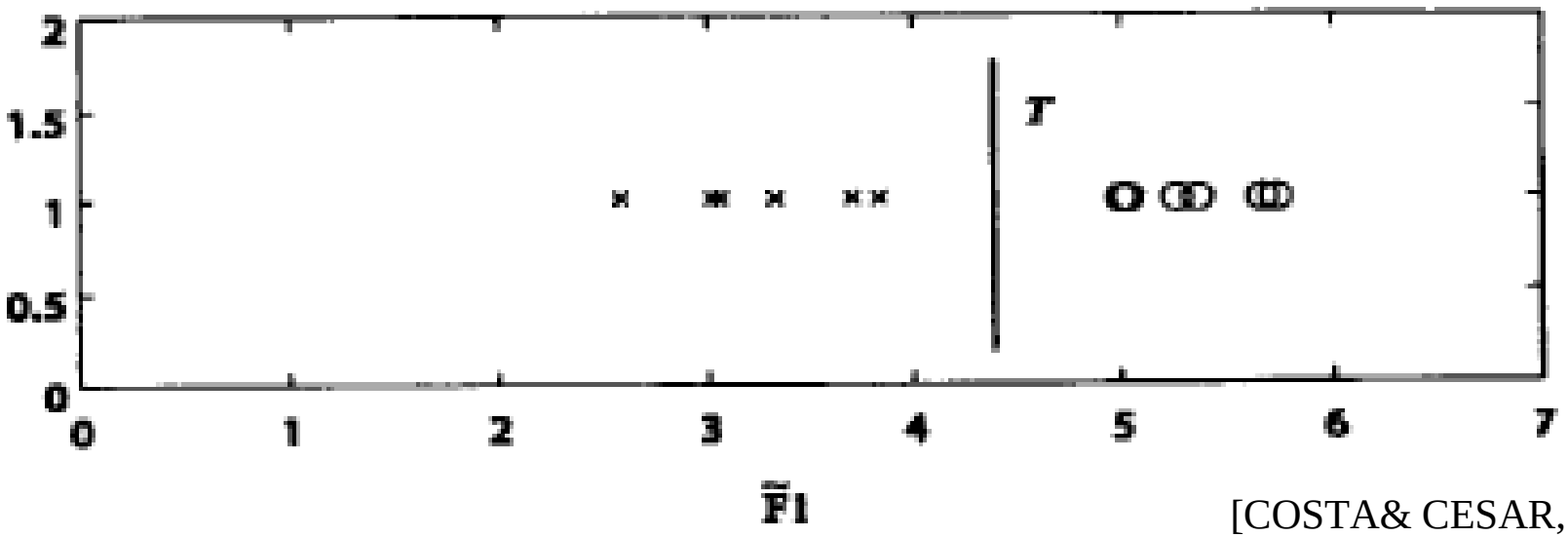


[COSTA& CESAR, 2009]

Exemplo

Nova F1 !!!

Objetos mais dispersos → maior chance de separação



[COSTA& CESAR, 2009]

Perfeitamente separáveis por um limiar!

Análise de Componentes Principais

- PCA – *Principal Components Analysis*
- Assume que os dados originais estão representados por variáveis correlacionadas
- Objetivo: transformar essas variáveis em novas variáveis (mudança de base do espaço vetorial) que
  - não sejam correlacionadas
  - que as primeiras (poucas) novas variáveis retenham a maior parte da variação apresentada pelas variáveis originais (para que essa variação permita a separação das classes)

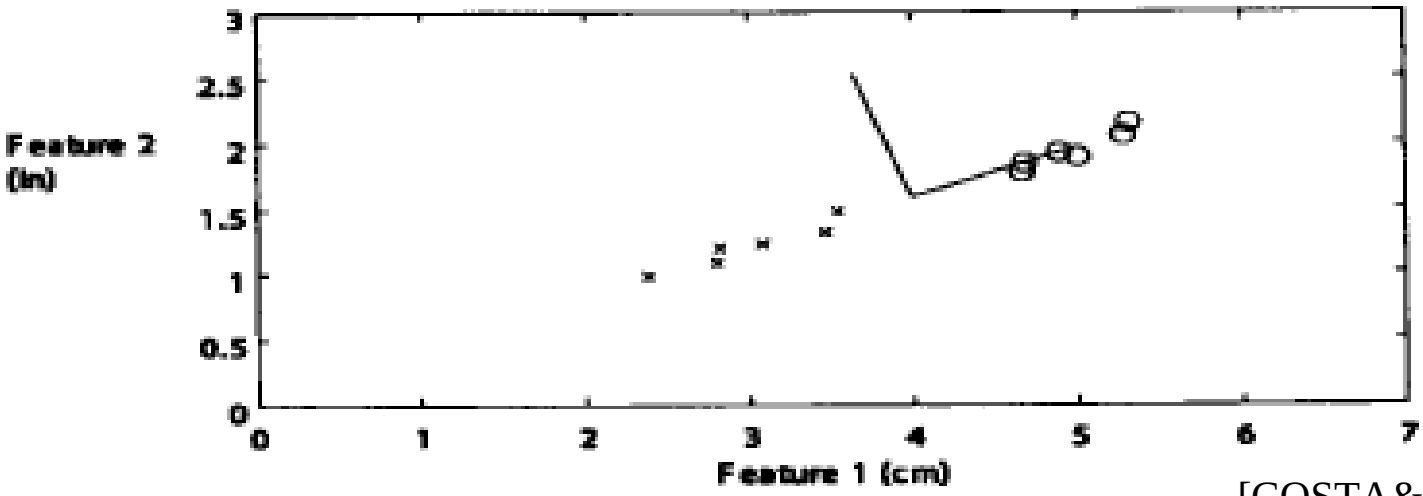
  Variáveis novas = componentes principais

Outro exemplo visual

http://setosa.io/ev/principal-component-analysis/

Como fazer essa transformação?

- Aplicação da transformação de Karhunen-Loève (ou *Spectral Decomposition*)
- No novo espaço, escolher as características que “governam o sinal”



[COSTA& CESAR, 2009]

Como fazer essa transformação?

- Aplicação da transformação de Karhunen-Loève (ou *Spectral Decomposition*)
- No novo espaço, escolher as características que “governam o sinal”
- Para isso, precisamos de conceitos de Álgebra Linear, Probabilidade e Estatística...
- ... vamos ver que não cursamos essas disciplinas à toa.

Álgebra linear

Álgebra Linear

- Escalares e vetores (vetores escritos em negrito ou com uma flecha em cima)
- Representação gráfica de vetores
- Espaço vetorial

- Transformação: Sejam dois espaços vetoriais R e S.
  - T: R $\rightarrow$ S
  - Exemplo: T: $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ | T(**p**) = -**p**
    - **Ex: p =** $(1, -2)^T$ **, -p** = $(-1, 2)^T$

Transformação Linear

- Transformação linear: T onde

$$T(\alpha\mathbf{p} + \beta\mathbf{q}) = \alpha T(\mathbf{p}) + \beta T(\mathbf{q})$$

  α,β escalares

- Pode ser expressa por uma matriz:

$$T(\mathbf{p}) = \mathbf{Ap}$$

Transformação Linear

- Exemplo:

  $T: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2 \mid T(\mathbf{p}) = -\mathbf{p}$

- A = ?

Transformação Linear

- Exemplo:

  $T: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2 \mid T(\mathbf{p}) = -\mathbf{p}$

- $A = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$

$T(\mathbf{p}) = -\mathbf{p} = A\mathbf{p}$

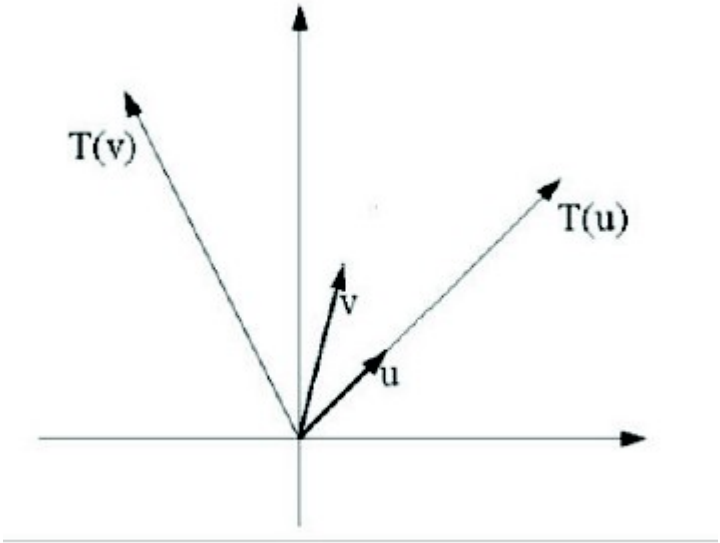
Paralelização de transformações lineares

- Transformação de vários vetores em paralelo

- Seja A uma transformação linear
  - **B** uma matriz onde a coluna i é o vetor $\mathbf{p_i}$
  - $\mathbf{C} = \mathbf{AB}$
  - sendo **C** uma matriz onde a coluna i é o vetor $\mathbf{q_i} = \mathbf{Ap_i}$

Autovalores e autovetores

- Dada uma matriz A_{nxn} que define uma transformação linear (não muda dimensionalidade)
- Existem vetores cuja orientação não é afetada por essa transformação (autovetores)



Ex: **u** é um autovetor de T, mas **v** não...

Autovalores e autovetores

- Dada uma matriz A_{nxn} que define uma transformação linear
- Existem vetores cuja orientação não é afetada por essa transformação (autovetores)
- Podem ser descobertos pela equação:

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

sendo λ é um valor escalar complexo

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \quad \Rightarrow \quad A\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x} = \mathbf{0} \Rightarrow \quad (A - \lambda I)\mathbf{x} = \mathbf{0}$$

Autovalores e autovetores

- Dada uma matriz A_{nxn} que define uma transformação linear
- Existem vetores cuja orientação não é afetada por essa transformação (autovetores)
- Podem ser descobertos pela equação:

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

sendo λ é um valor escalar complexo

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \quad \Rightarrow \quad A\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x} = \mathbf{0} \Rightarrow \quad (A - \lambda I)\mathbf{x} = \mathbf{0}$$

- só possui solução não trivial ($\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$) se

$$\det(A - \lambda I) = 0$$

Autovalores e autovetores

- Dada uma matriz A_{nxn} que define uma transformação linear
- Existem vetores cuja orientação não é afetada por essa transformação (autovetores)
- Podem ser descobertos pela equação:

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

sendo λ é um valor escalar complexo

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \quad \Rightarrow \quad A\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x} = \mathbf{0} \Rightarrow \quad (A - \lambda I)\mathbf{x} = \mathbf{0}$$

- só possui solução não trivial ($\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$) se

$$\det(A - \lambda I) = 0$$ Equação característica

Soluções: autovalores

Autovalores e autovetores

Observação:
det(B) = 0 significa que B é responsável por B**x** = **0** (já que **x** ≠ **0**)

$B\mathbf{x} = \mathbf{0} \Rightarrow \begin{cases} b_{11}x_1 + b_{12}x_2 = 0 \Rightarrow x_1 = -b_{12}x_2/b_{11} \\ b_{21}x_1 + b_{22}x_2 = 0 \end{cases}$

$\Rightarrow -b_{21}b_{12}x_2/b_{11} + b_{22}x_2 = 0 \Rightarrow$

$-b_{21}b_{12}x_2 + b_{11}b_{22}x_2 = 0 \Rightarrow$

Já que $x2 \neq 0$, então $-b_{21}b_{12} + b_{11}b_{22} = 0$ (ie, det(B) = 0)

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \Rightarrow A\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x} = \mathbf{0} \Rightarrow (A - \lambda I)\mathbf{x} = \mathbf{0}$$

- só possui solução não trivial (**x** ≠ **0**) se

  $\det(A - \lambda I) = 0$ Equação característica

  Soluções: autovalores

Autovalores e autovetores

- Exemplo 1: Considere o operador linear definido no exemplo anterior: $T: R^2 \rightarrow R^2$. $T(x, y)=(4x + 5y, 2x + y)$. Encontre os autovalores de $A = \begin{bmatrix} 4 & 5 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$,

- Resolvemos a equação característica $\det(A - \lambda I) = 0$:

$$A - \lambda I = \begin{bmatrix} 4 & 5 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4-\lambda & 5 \\ 2 & 1-\lambda \end{bmatrix}$$

$\det(A - \lambda I) = 0 \leftrightarrow (4 - \lambda)(1 - \lambda) - 10 = 0 \leftrightarrow \lambda^2 - 5\lambda - 6 = 0$

- $\lambda_1 = -1$ e $\lambda_2 = 6$.

Para calcular os autovetores é só calcular agora o **x**:
$(A- \lambda I)\mathbf{x} = \mathbf{0}$

Probabilidade e Estatística

Covariância

- Covariância entre duas variáveis aleatórias

$$Cov(X,Y) = E\,[(X-E(X))(Y-E(Y))]$$

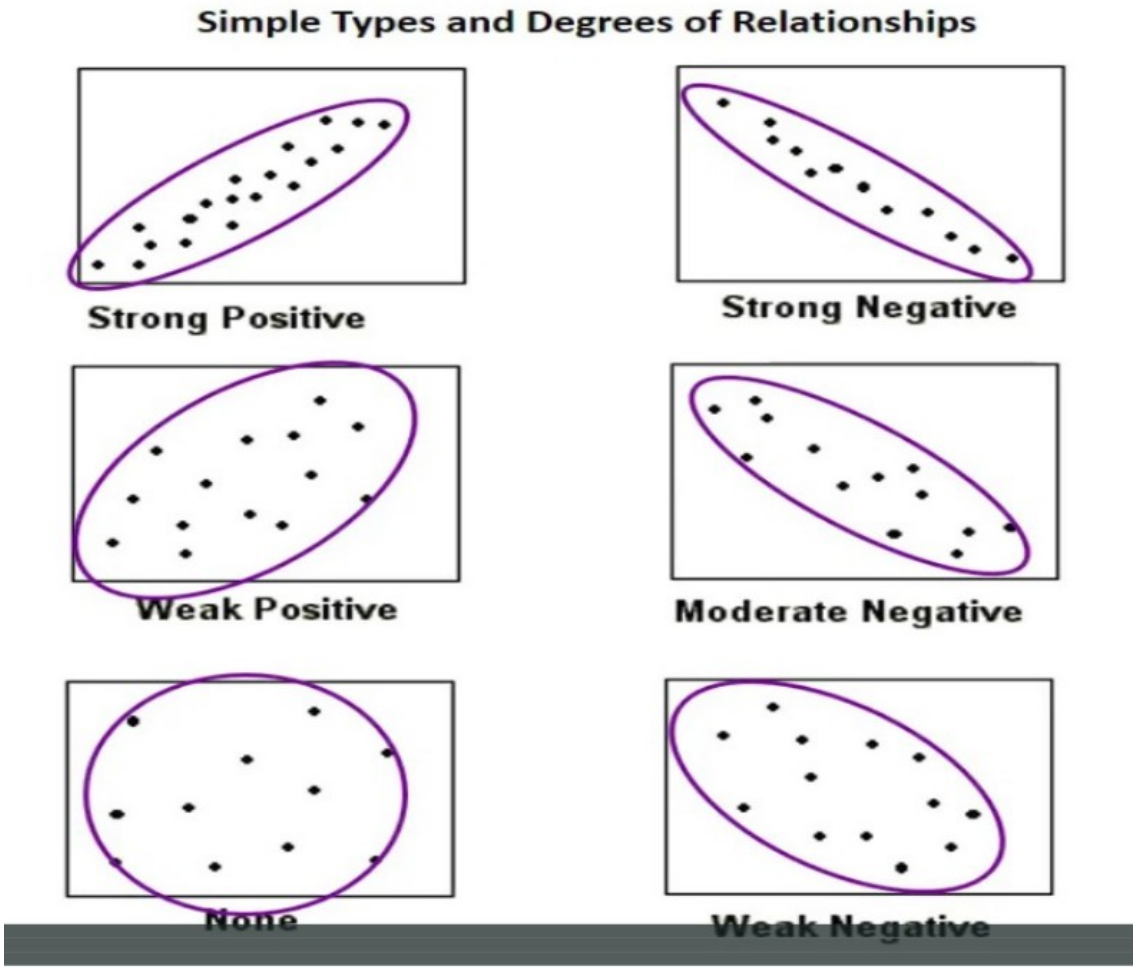
ou

$$Cov(X,Y) = E(XY) - E(X)E(Y)$$

Mostra o quanto X e Y mudam juntas

Pode ser positiva (maiores valores de X correspondem aos maiores de Y e vice-versa) ou negativa (o contrário)

Magnitude: interpretação não trivial



https://vimeo.com/185022311

Covariância

- Covariância entre duas variáveis aleatórias

$$Cov(X,Y) = E\,[(X-\mu_x)(Y-\mu_y)]$$

ou

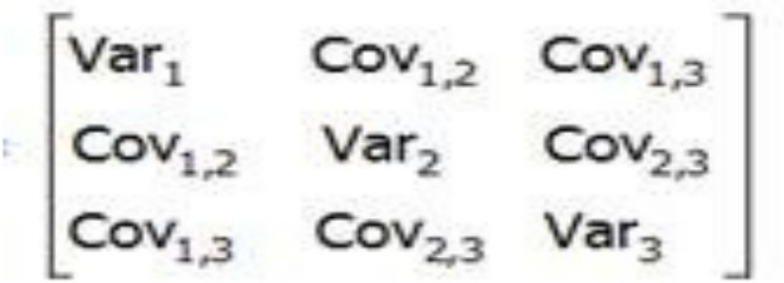
$$Cov(X,Y) = E(XY) - E(X)E(Y)$$

- Matriz de covariância de um vetor aleatório **x**:

$$K_x = [Cov\,(x_i, x_j)]$$

Lembrando que $Cov(x_i,x_i) = \sigma^2(x_i)$ (variância)

Covariância



- Matriz de covariância de um vetor aleatório **x**:

$$K_x = [Cov\ (x_i, x_j)]$$

Lembrando que $Cov(x_i,x_i) = \sigma^2(x_i)$ (variância)

Coeficiente de correlação linear

- Coeficiente de correlação (linear) entre duas variáveis aleatórias:

$$\rho_{X,Y} = Cov(X,Y) / \sigma_x \sigma_y$$

- $| \rho_{X,Y} | \leq 1$ (quanto mais próximo de 1 “mais forte” a correlação)

- $Cov(X,Y) = 0 \quad \Rightarrow \quad \rho_{X,Y} = 0 \Rightarrow$

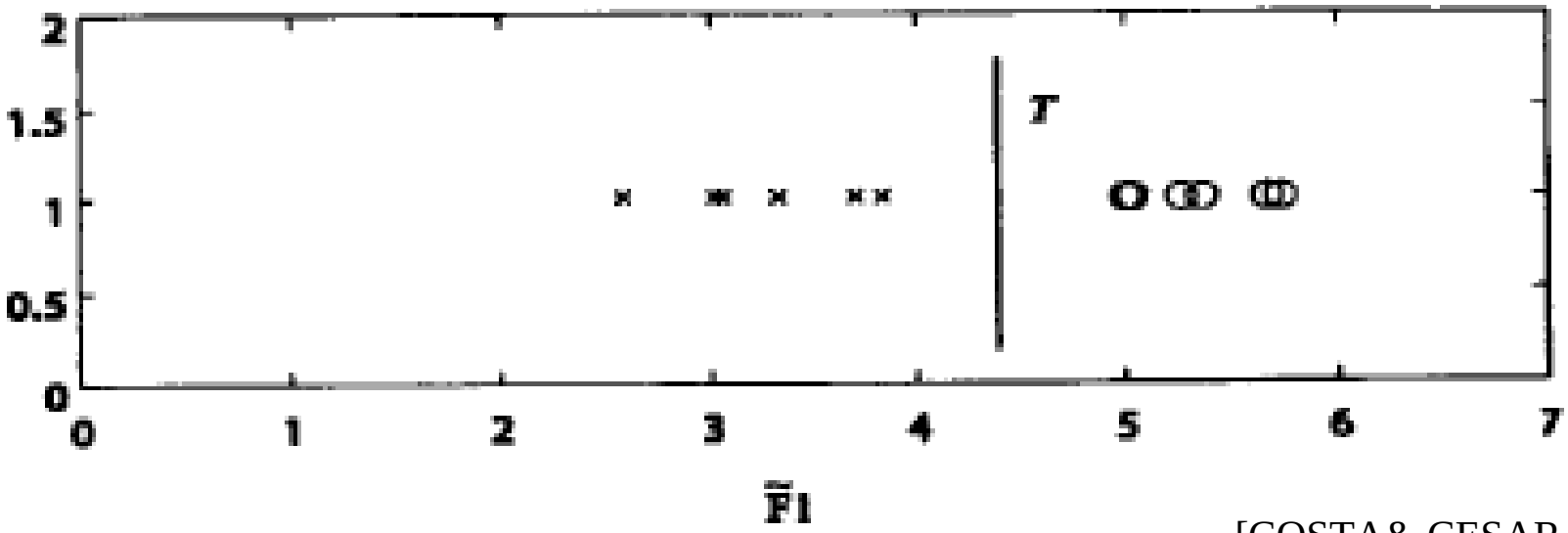
  Não há correlação linear entre X e Y

  Obs: isto NÃO quer dizer que sejam independentes

Juntando tudo

Exemplo

Transformação para apenas 1 nova característica
(qual delas? A com maior dispersão)



[COSTA& CESAR, 2009]

Perfeitamente separáveis por um limiar!

Análise de Componentes Principais

- PCA – *Principal Components Analysis*
- Assume que os dados originais estão representados por variáveis correlacionadas (não independentes)
- Objetivo: transformar essas variáveis em novas variáveis (mudança de base do espaço vetorial) que
  - **não** sejam **correlacionadas**
  - que as primeiras (poucas) novas variáveis retenham a maior parte da **variação** apresentada pelas variáveis originais (para que essa variação permita a separação das classes)

PCA

as várias instâncias de **x** representam o dataset original

- Dado um vetor aleatório **x**, de n variáveis
- PCA quer achar n componentes principais por ordem decrescente de variabilidade

PCA

as várias instâncias de **x** representam o dataset original

- Dado um vetor aleatório **x**, de n variáveis
- PCA quer achar n componentes principais por ordem decrescente de variabilidade
- Primeiro componente principal y_1 (que seja uma combinação linear de **x**) é tal que a var(y_1) seja máxima, isto é quero achar um vetor $\boldsymbol{\alpha^1}$ tal que $y_1 = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$ e var $(y_1 = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x})$ seja máxima

PCA

as várias instâncias de **x** representam o dataset original

- Dado um vetor aleatório **x**, de n variáveis
- PCA quer achar n componentes principais por ordem decrescente de variabilidade
- Primeiro componente principal y_1 (que seja uma combinação linear de **x**) é tal que a var(y_1) seja máxima, isto é quero achar um vetor $\boldsymbol{\alpha^1}$ tal que $y_1 = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$ e var ($y_1 = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$) seja máxima
- Segundo componente principal y_2 onde a var(y_2) seja máxima (descontando a de y_1)
- E assim por diante (até n)

PCA

as várias instâncias de **x** representam o dataset original

- Dado um vetor aleatório **x**, de n variáveis
- PCA quer achar n componentes principais por ordem decrescente de variabilidade
- Primeiro componente principal y_1 (que seja uma combinação linear de **x**) é tal que a var(y_1) seja máxima, isto é quero achar um vetor $\boldsymbol{\alpha^1}$ tal que $y_1 = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$ e var ($y_1 = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$) seja máxima
- Segundo componente principal y_2 onde a var(y_2) seja máxima (descontando a de y_1)
- E assim por diante (até n)
- Normalmente os m primeiros c.p., m « n, representam bem a variabilidade dos dados originais

PCA – Link interessante

http://setosa.io/ev/principal-component-analysis/

PCA

- Primeiro componente principal y_1 é tal que a var(y_1) seja máxima,
  isto é quero achar um vetor $\boldsymbol{\alpha^1}$ tal que $y_1 = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$ e var ($y_1 = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$) seja máxima

PCA – Exemplo em R^2 !!!

- Primeiro componente principal y_1 é tal que a var(y_1) seja máxima,

  isto é quero achar um vetor $\boldsymbol{\alpha^1}$ tal que $y_1 = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$ e

  var ($y_1 = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$) seja máxima

  - var (y_1) = var ($(\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$) = var ($\alpha^1_1 x_1 + \alpha^1_2 x_2$)

    $= (\alpha^1_1)^2$ var(x_1) + $(\alpha^1_2)^2$ var(x_2) + $2\alpha^1_1\alpha^1_2$Cov(x_1, x_2)

  - $= (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{K_x}\ \boldsymbol{\alpha^1}$

PCA – Exemplo em R^2 !!!

- Primeiro componente principal y_1 é tal que a var(y_1) seja máxima,

  isto é quero achar um vetor $\boldsymbol{\alpha^1}$ tal que $y_1 = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$ e

  var ($y_1 = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$) seja máxima

  - var (y_1) = var ($(\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$) = var ($\alpha^1_1 x_1 + \alpha^1_2 x_2$)

    $= (\alpha^1_1)^2$ var(x_1) + $(\alpha^1_2)^2$ var(x_2) + $2\alpha^1_1\alpha^1_2$Cov(x_1, x_2)

  - $= (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{K_x}\ \boldsymbol{\alpha^1}$
- Precisamos achar $\boldsymbol{\alpha^1}$ que ?

PCA – Exemplo em R^2 !!!

- Primeiro componente principal y_1 é tal que a var(y_1) seja máxima,
  isto é quero achar um vetor $\boldsymbol{\alpha^1}$ tal que $y_1 = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$ e
  var ($y_1 = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$) seja máxima
  - var (y_1) = var ($(\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$) = var ($\alpha^1_1 x_1 + \alpha^1_2 x_2$)
    $= (\alpha^1_1)^2$ var(x_1) + $(\alpha^1_2)^2$ var(x_2) + $2\alpha^1_1\alpha^1_2$Cov(x_1, x_2)
  - $= (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{K_x}\ \boldsymbol{\alpha^1}$
- Precisamos achar $\boldsymbol{\alpha^1}$ que maximize $(\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{K_x}\ \boldsymbol{\alpha^1}$

PCA – Exemplo em R^2 !!!

- Primeiro componente principal y_1 é tal que a var(y_1) seja máxima,
  isto é quero achar um vetor $\boldsymbol{\alpha^1}$ tal que $y_1 = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$ e
  var ($y_1 = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$) seja máxima
  - var (y_1) = var ($(\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{x}$) = var ($\alpha^1_1 x_1 + \alpha^1_2 x_2$)
    $= (\alpha^1_1)^2$ var(x_1) + $(\alpha^1_2)^2$ var(x_2) + $2\alpha^1_1\alpha^1_2$Cov(x_1, x_2)
  - $= (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{K_x}\ \boldsymbol{\alpha^1}$
- Precisamos achar $\boldsymbol{\alpha^1}$ que maximize $(\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{K_x}\ \boldsymbol{\alpha^1}$

Se adicionarmos uma restrição (por exemplo $(\boldsymbol{\alpha^1})^T \boldsymbol{\alpha^1} = 1$, $\Rightarrow (\boldsymbol{\alpha^1})^T \boldsymbol{\alpha^1} - 1 = 0$ (isto é, $\boldsymbol{\alpha^1}$ deve ser unitário), podemos usar a técnica de otimização de multiplicadores de Lagrange:

PCA

- Maximizar $f(\boldsymbol{\alpha^1}, \lambda) = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{K}_x \boldsymbol{\alpha^1} - \lambda((\boldsymbol{\alpha^1})^T \boldsymbol{\alpha^1} - 1)$

PCA

- Maximizar $f(\boldsymbol{\alpha^1}, \lambda) = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1} - \lambda((\boldsymbol{\alpha^1})^T \boldsymbol{\alpha^1} - 1)$
- Os pontos extremos de $f(\boldsymbol{\alpha^1}, \lambda)$ são tais que

  $(\partial f/\partial \boldsymbol{\alpha^1}, \partial f/\partial \lambda) = (0,0)$ (derivadas parciais)

  $\partial f/\partial \lambda$ recai na restrição $((\boldsymbol{\alpha^1})^T \boldsymbol{\alpha^1} - 1 = 0)$

  $$\partial f/\partial \boldsymbol{\alpha^1} = 2\mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1} - 2\lambda \boldsymbol{\alpha^1} = 0$$

  $$\mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1} - \lambda \boldsymbol{\alpha^1} = 0$$

  $$(\mathbf{K_x} - \lambda \mathbf{I_n})\, \boldsymbol{\alpha^1} = 0$$

PCA

- Maximizar $f(\boldsymbol{\alpha^1}, \lambda) = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1} - \lambda((\boldsymbol{\alpha^1})^T \boldsymbol{\alpha^1} - 1)$
- Os pontos extremos de $f(\boldsymbol{\alpha^1}, \lambda)$ são tais que

  $(\partial f/\partial \boldsymbol{\alpha^1}, \partial f/\partial \lambda) = (0,0)$

  $\partial f/\partial \lambda$ recai na restrição

  $\partial f/\partial \boldsymbol{\alpha^1} = 2\mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1} - 2\lambda \boldsymbol{\alpha^1} = 0$

  $\mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1} - \lambda \boldsymbol{\alpha^1} = 0$

  $(\mathbf{K_x} - \lambda \mathbf{I_n})\, \boldsymbol{\alpha^1} = 0$

Reconhecem algo?

Autovalores e autovetores

- Dada uma matriz A_{nxn} que define uma transformação linear
- Existem vetores cuja orientação não é afetada por essa transformação (autovetores)
- Podem ser descobertos pela equação:

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

onde λ é um valor escalar complexo

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \Rightarrow A\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x} = \mathbf{0} \Rightarrow (A - \lambda I)\mathbf{x} = \mathbf{0}$$

- só possui solução não trivial ($\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$) se

$$\det(A - \lambda I) = 0$$ Equação característica

Soluções: autovalores

Slide anterior da revisão de álgebra linear

PCA

- Maximizar $f(\boldsymbol{\alpha^1}, \lambda) = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1} - \lambda((\boldsymbol{\alpha^1})^T \boldsymbol{\alpha^1} - 1)$
- Os pontos extremos de $f(\boldsymbol{\alpha^1}, \lambda)$ são tais que

  $(\partial f/\partial \boldsymbol{\alpha^1}, \partial f/\partial \lambda) = (0,0)$

  $\partial f/\partial \lambda$ recai na restrição

  $\partial f/\partial \boldsymbol{\alpha^1} = \mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1} - \lambda \boldsymbol{\alpha^1} = 0$

  $$(\mathbf{K_x} - \lambda \mathrm{I}_n)\, \boldsymbol{\alpha^1} = 0$$
- Logo, λ é um autovalor de $\mathbf{K_x}$ e $\boldsymbol{\alpha^1}$ é seu correspondente autovetor

PCA

- Maximizar $f(\boldsymbol{\alpha^1}, \lambda) = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1} - \lambda((\boldsymbol{\alpha^1})^T \boldsymbol{\alpha^1} - 1)$
- Os pontos extremos de $f(\boldsymbol{\alpha^1}, \lambda)$ são tais que

  $(\partial f/\partial \boldsymbol{\alpha^1}, \partial f/\partial \lambda) = (0,0)$

  $\partial f/\partial \lambda$ recai na restrição

  $\partial f/\partial \boldsymbol{\alpha^1} = \mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1} - \lambda \boldsymbol{\alpha^1} = 0$

  $$(\mathbf{K_x} - \lambda \mathrm{I}_n)\, \boldsymbol{\alpha^1} = 0$$
- Logo, λ é um autovalor de $\mathbf{K_x}$ e $\boldsymbol{\alpha^1}$ é seu correspondente autovetor
- Quero $\boldsymbol{\alpha^1}$ que maximize $(\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1}$

PCA

- Maximizar $f(\boldsymbol{\alpha^1}, \lambda) = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1} - \lambda((\boldsymbol{\alpha^1})^T \boldsymbol{\alpha^1} - 1)$
- Os pontos extremos de $f(\boldsymbol{\alpha^1}, \lambda)$ são tais que

  $(\partial f/\partial \boldsymbol{\alpha^1}, \partial f/\partial \lambda) = (0,0)$

  $\partial f/\partial \lambda$ recai na restrição

  $\partial f/\partial \boldsymbol{\alpha^1} = \mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1} - \lambda \boldsymbol{\alpha^1} = 0$

  $(\mathbf{K_x} - \lambda \mathbf{I_n})\, \boldsymbol{\alpha^1} = 0$
- Logo, λ é um autovalor de $\mathbf{K_x}$ e $\boldsymbol{\alpha^1}$ é seu correspondente autovetor
- Quero $\boldsymbol{\alpha^1}$ que maximize $(\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1}$ (no caso valerá $\mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1} = \lambda \boldsymbol{\alpha^1}$) então quero $\boldsymbol{\alpha^1}$ que maximize $(\boldsymbol{\alpha^1})^T \lambda \boldsymbol{\alpha^1} = \lambda (\boldsymbol{\alpha^1})^T \boldsymbol{\alpha^1} = \lambda$

  unitário

  Portanto basta o quê ?

PCA

- Maximizar $f(\boldsymbol{\alpha^1}, \lambda) = (\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1} - \lambda((\boldsymbol{\alpha^1})^T \boldsymbol{\alpha^1} - 1)$
- Os pontos extremos de $f(\boldsymbol{\alpha^1}, \lambda)$ são tais que

  $(\partial f/\partial \boldsymbol{\alpha^1}, \partial f/\partial \lambda) = (0,0)$

  $\partial f/\partial \lambda$ recai na restrição

  $\partial f/\partial \boldsymbol{\alpha^1} = \mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1} - \lambda \boldsymbol{\alpha^1} = 0$

  $$(\mathbf{K_x} - \lambda \mathrm{I}_n)\, \boldsymbol{\alpha^1} = 0$$
- Logo, λ é um autovalor de $\mathbf{K_x}$ e $\boldsymbol{\alpha^1}$ é seu correspondente autovetor
- Quero $\boldsymbol{\alpha^1}$ que maximize $(\boldsymbol{\alpha^1})^T \mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1}$ (no caso valerá $\mathbf{K_x}\, \boldsymbol{\alpha^1} = \lambda \boldsymbol{\alpha^1}$) então quero $\boldsymbol{\alpha^1}$ que maximize $(\boldsymbol{\alpha^1})^T \lambda \boldsymbol{\alpha^1} = \lambda (\boldsymbol{\alpha^1})^T \boldsymbol{\alpha^1} = \lambda$

  Portanto basta escolher o autovetor correspondente ao maior autovalor!

PCA

- i-ésimo componente principal: $y_i = (\boldsymbol{\alpha}^i)^T \mathbf{x}$ onde $\boldsymbol{\alpha}^i$ é o autovetor correspondente ao i-ésimo maior autovalor de $\mathbf{K}_x$

PCA

Seja **x** um vetor aleatório de dimensão n:

1. Calcule sua matriz de covariância K_x
2. Calcule os autovalores e autovetores de K_x
3. Monte a matriz Ω onde cada linha é um autovetor de K_x (em ordem decrescente de seus autovalores)

$$\mathbf{y} = \Omega\,\mathbf{x}$$

Transformação Karhunen-Loève

Seja **x** um vetor aleatório de dimensão n:

1. Calcule sua matriz de covariância K_x
2. Calcule os autovalores e autovetores de K_x
3. Monte a matriz Ω onde cada linha é um autovetor de K_x (em ordem decrescente de seus autovalores)

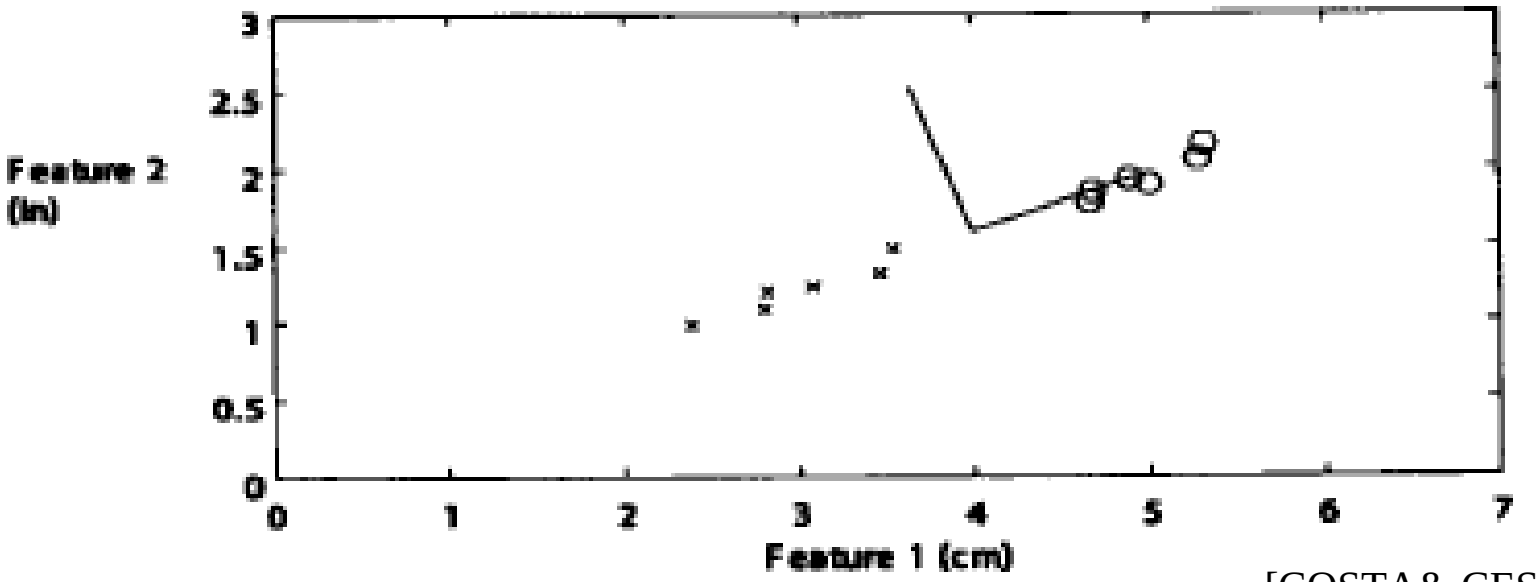
Transformação Karhunen-Loève:

$$\mathbf{y} = \Omega\,\mathbf{x}$$

Transformação Karhunen-Loève

- Propriedades:
  - Rotaciona os antigos eixos para novas orientações no espaço n-dimensional
  - Maximiza a variância (dispersão) ao longo de cada novo eixo
  - A matriz de covariância de **y** é $K_y = \boldsymbol{\lambda}\mathbf{I}$, onde $\boldsymbol{\lambda}$ é o vetor formados pelos autovalores de K_x e ordenados decrescentemente ($\lambda_i = var(y_i)$)
  - ⇒ novas variáveis escalares não são correlacionadas (linearmente)

Voltando ao nosso exemplo



[COSTA& CESAR, 2009]

$$K = \begin{bmatrix} 1.1547 & 0.4392 \\ 0.4392 & 0.1697 \end{bmatrix} \qquad \rho = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.992 \\ 0.992 & 1.0 \end{bmatrix}$$

Voltando ao nosso exemplo

- Aplicando a transformação Karhunen-Loève separadamente para cada exemplo $\mathbf{x}^i$ do dataset:

$$\mathbf{y}^i = \Omega\, \mathbf{x}^i$$

Voltando ao nosso exemplo

- Aplicando a transformação Karhunen-Loève separadamente para cada exemplo $\mathbf{x}^i$ do dataset:

$$\mathbf{y}^i = \Omega\, \mathbf{x}^i$$

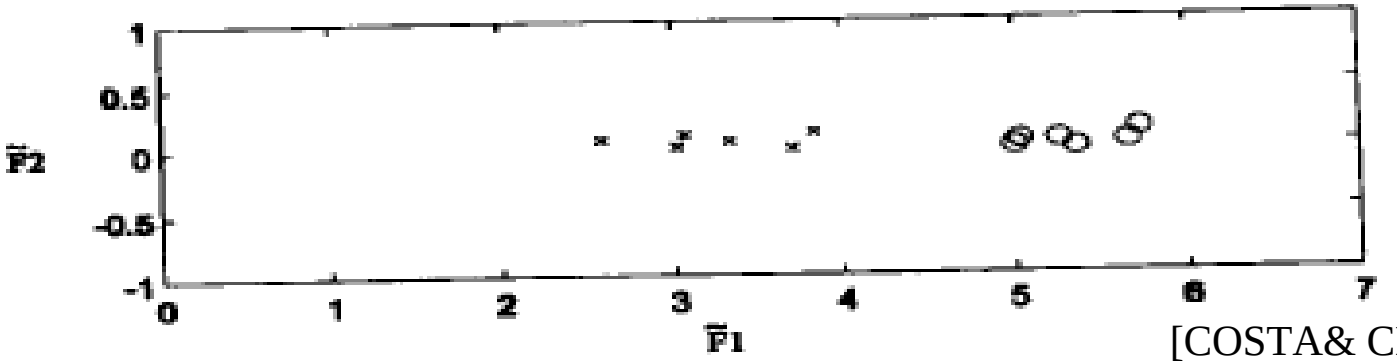
ou em paralelo (D seria o dataset inteiro, com os vetores de características $\mathbf{x}^i$ nas linhas, e D' o dataset todo transformado, também com os vetores de características $\mathbf{y}^i$ nas linhas):

$$D'^T = \Omega D^T$$

$$\mathbf{D' = D\, \Omega^T}$$

Voltando ao nosso exemplo

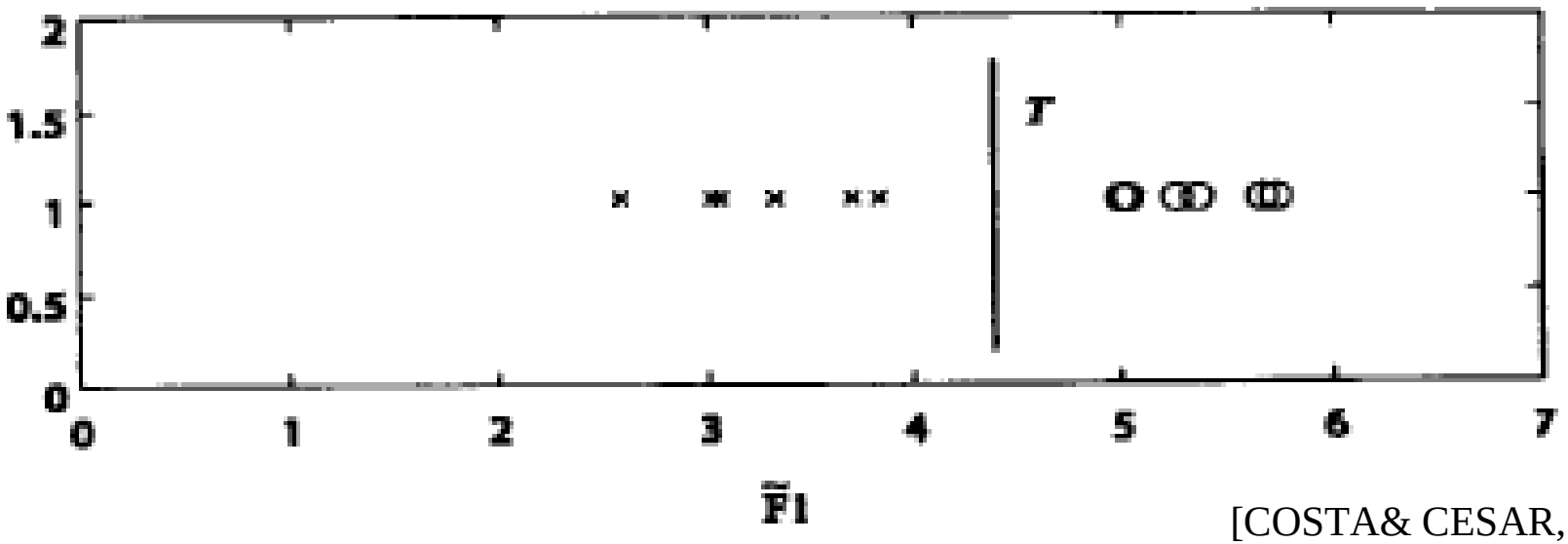
F'_1 varia mais que F'_2



[COSTA& CESAR, 2009]

Voltando ao nosso exemplo

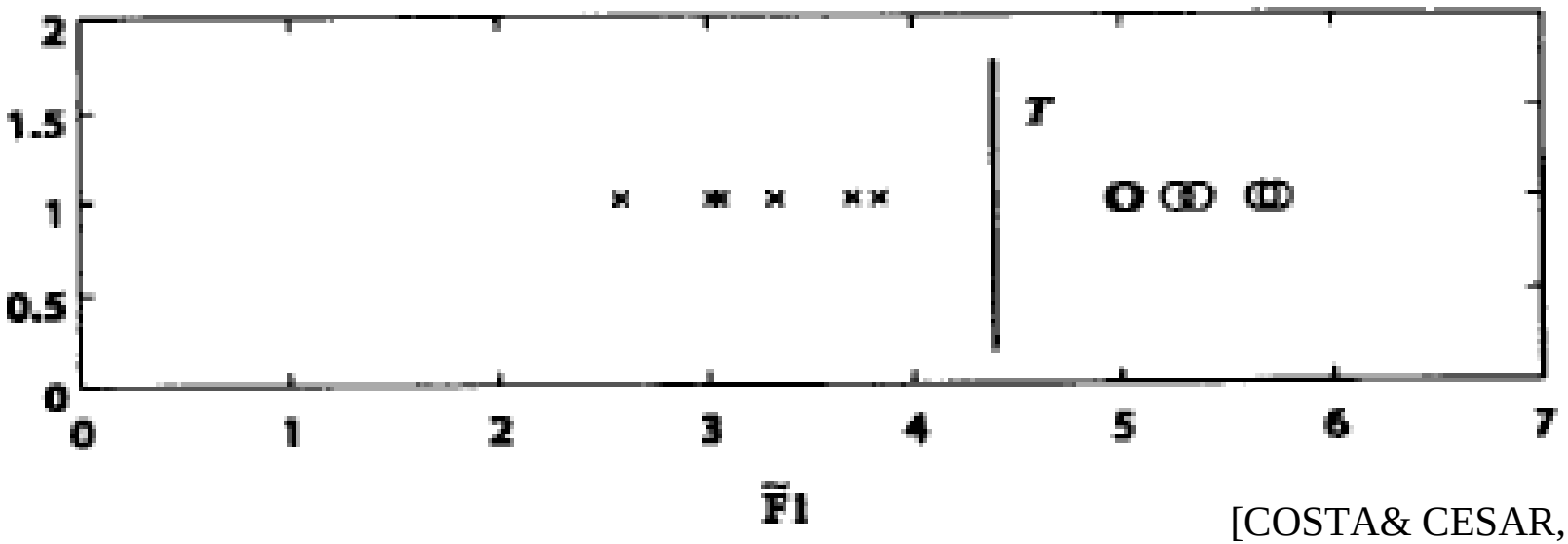
- Olhando só para F'_1



[COSTA& CESAR, 2009]

Voltando ao nosso exemplo

- Olhando só para F'_1



[COSTA& CESAR, 2009]

REDUÇÃO DE DIMENSIONALIDADE!!!

Análise de Componentes Principais

- Aplicação da transformação Karhunen-Loève
- Os maiores autovalores são os que “governam” o sinal
- Os demais são redundantes, ou contém ruídos ou bem pouco necessários (daria para descartá-los para evitar a maldição da dimensionalidade)
- Mas... quantos componentes principais utilizar?

Variação original e componentes individuais

Qual é a proporção da variação total (dos dados originais) que um componente consegue explicar? (Lembrando que $\lambda_i = var(y_i)$)

Variação original e componentes individuais

Qual é a proporção da variação total (dos dados originais) que um componente consegue explicar? (Lembrando que $\lambda_i = var(y_i)$)

variação total: $\sum_j \lambda_j$

proporção da variação "explicada" pelo i-ésimo componente: $p_i = \lambda_i / \sum_j \lambda_j$

Redução de dimensionalidade

Usar, ao invés das n variáveis originais, apenas os m primeiros componentes (m << n)

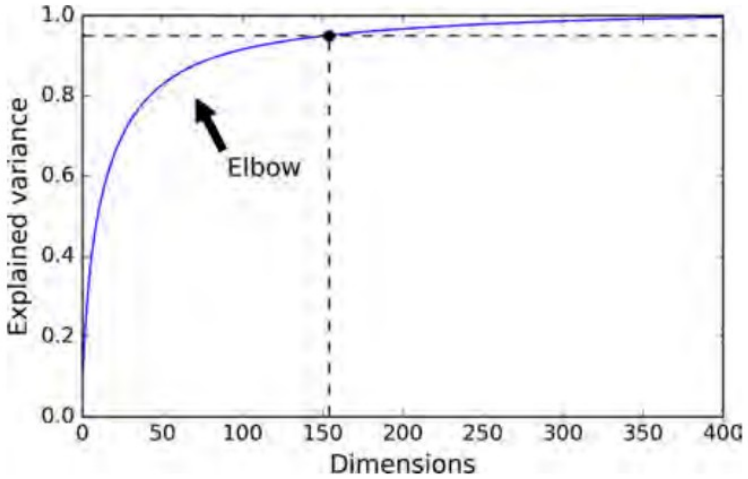
Qual valor de m? Aquele no qual a variação acumulada ($p_1+p_2+ ...+p_m$) é o suficiente para "explicar" a variação dos dados

Geralmente escolhido um limiar entre 70% a 90%

- m não pode ser muito próximo de n
- não faz sentido escolher 70% e obter m muito pequeno para valores "grandes" de n
- técnica do cotovelo

Eigenvalues of the Correlation Matrix

	Eigenvalue	Percentage of Variance	Cumulative
1	4.00644	44.52%	44.52%
2	1.635	18.17%	62.68%
3	1.12792	12.53%	75.22%
4	0.95466	10.61%	85.82%
5	0.46384	5.15%	90.98%
6	0.32513	3.61%	94.59%
7	0.27161	3.02%	97.61%
8	0.11629	1.29%	98.90%
9	0.09911	1.10%	100.00%



EACH

PCA – Comentários finais

- Objetivo: remover redundância (compressão), redução de dimensionalidade, normalização de variáveis
- Medida de redundância: correlação
- Se as características forem independentes,

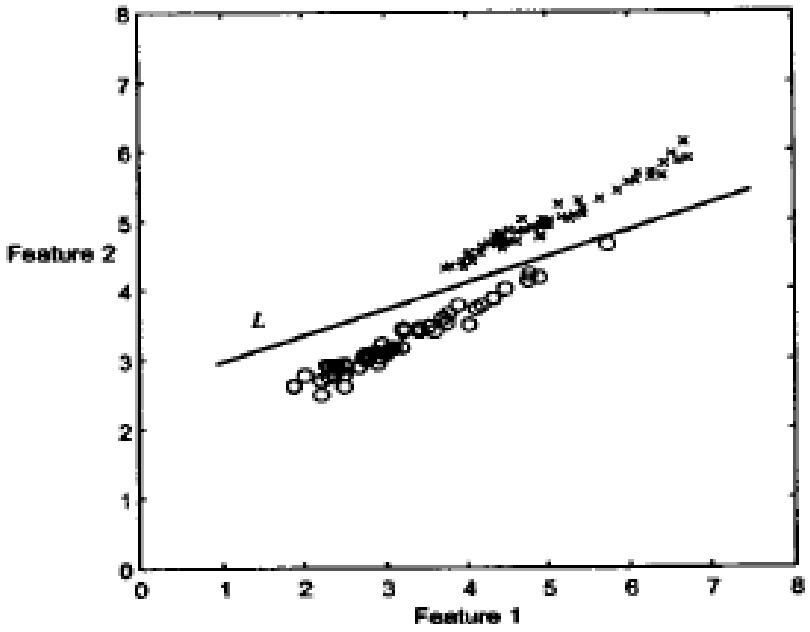
... ?

PCA – Comentários finais

- Objetivo: remover redundância (compressão), redução de dimensionalidade, normalização de variáveis
- Medida de redundância: correlação
- Se as características forem independentes, não há vantagens
- Só faz sentido se algumas das variáveis observadas são correlacionadas
- Não é feita nenhuma suposição sobre a densidade de probabilidade dos vetores

PCA – Comentários finais - CUIDADOS

- Nem sempre essa abordagem é útil (mesmo quando as características originais são correlacionadas)
  - Pode causar sobreposição de classes



[COSTA& CESAR, 2009]

PCA – Comentários finais - CUIDADOS

- Em altas dimensões não podemos visualizar os dados para decidir se aplicamos PCA ou não
- Solução?

PCA – Comentários finais - CUIDADOS

- Em altas dimensões não podemos visualizar os dados para decidir se aplicamos PCA ou não
- Solução: comparar resultados de classificação com e sem PCA

PCA – Matriz de covariância ou matriz de correlação

- Pode ser baseado em matrizes de covariância ou de correlação. Qual é melhor? (Jolliffe, 2002)
- Há uma ampla discussão sobre isso
  - Não há uma melhor solução sempre, e as duas apresentam vantagens e desvantagens
  - Mas algumas coisas parecem ser consenso...

PCA – Matriz de covariância ou matriz de correlação - Exemplo

Table 3.1. Correlations and standard deviations for eight blood chemistry variables.

	Correlation matrix ($n = 72$)							
	RBLOOD	PLATE	WBLOOD	NEUT	LYMPH	BILIR	SODIUM	POTASS
RBLOOD	1.000							
PLATE	0.290	1.000						
WBLOOD	0.202	0.415	1.000					
NEUT	−0.055	0.285	0.419	1.000				
LYMPH	−0.105	−0.376	−0.521	−0.877	1.000			
BILIR	−0.252	−0.349	−0.441	−0.076	0.206	1.000		
SODIUM	−0.229	−0.164	−0.145	0.023	0.034	0.192	1.000	
POTASS	0.058	−0.129	−0.076	−0.131	0.151	0.077	0.423	1.000
Standard deviations	0.371	41.253	1.935	0.077	0.071	4.037	2.732	0.297

PCA – Matriz de covariância ou matriz de correlação - Exemplo

Table 3.1. Correlations and standard deviations for eight blood chemistry variables.

	Correlation matrix ($n = 72$)							
	RBLOOD	PLATE	WBLOOD	NEUT	LYMPH	BILIR	SODIUM	POTASS
RBLOOD	1.000							
PLATE	0.290	1.000						
WBLOOD	0.202	0.415	1.000					
NEUT	−0.055	0.285	0.419	1.000				
LYMPH	−0.105	−0.376	−0.521	−0.877	1.000			
BILIR	−0.252	−0.349	−0.441	−0.076	0.206	1.000		
SODIUM	−0.229	−0.164	−0.145	0.023	0.034	0.192	1.000	
POTASS	0.058	−0.129	−0.076	−0.131	0.151	0.077	0.423	1.000
Standard deviations	0.371	41.253	1.935	0.077	0.071	4.037	2.732	0.297

Correlações discretas a menos de um valor

PCA – Matriz de covariância ou matriz de correlação - Exemplo

Table 3.1. Correlations and standard deviations for eight blood chemistry variables.

	Correlation matrix ($n = 72$)							
	RBLOOD	PLATE	WBLOOD	NEUT	LYMPH	BILIR	SODIUM	POTASS
RBLOOD	1.000							
PLATE	0.290	1.000						
WBLOOD	0.202	0.415	1.000					
NEUT	−0.055	0.285	0.419	1.000				
LYMPH	−0.105	−0.376	−0.521	−0.877	1.000			
BILIR	−0.252	−0.349	−0.441	−0.076	0.206	1.000		
SODIUM	−0.229	−0.164	−0.145	0.023	0.034	0.192	1.000	
POTASS	0.058	−0.129	−0.076	−0.131	0.151	0.077	0.423	1.000
Standard deviations	0.371	41.253	1.935	0.077	0.071	4.037	2.732	0.297

Correlações discretas a menos de um valor

Alta variabilidade nos desvios padrões, o que dever ser devido às escalas muito diversas (dados não normalizados)

PCA – Matriz de covariância ou matriz de correlação - Exemplo

Table 3.1. Correlations and standard deviations for eight blood chemistry variables.

	Correlation matrix ($n = 72$)							
	RBLOOD	PLATE	WBLOOD	NEUT	LYMPH	BILIR	SODIUM	POTASS
RBLOOD	1.000							
PLATE	0.290	1.000						
WBLOOD	0.202	0.415	1.000					
NEUT	−0.055	0.285	0.419	1.000				
LYMPH	−0.105	−0.376	−0.521	−0.877	1.000			
BILIR	−0.252	−0.349	−0.441	−0.076	0.206	1.000		
SODIUM	−0.229	−0.164	−0.145	0.023	0.034	0.192	1.000	
POTASS	0.058	−0.129	−0.076	−0.131	0.151	0.077	0.423	1.000
Standard deviations	0.371	41.253	1.935	0.077	0.071	4.037	2.732	0.297

Correlações discretas a menos de um valor

Alta variabilidade nos desvios padrões, o que dever ser devido às escalas muito diversas (dados não normalizados)

PCA – Matriz de covariância ou matriz de correlação - Exemplo

Table 3.3. Principal components based on the covariance matrix for eight blood chemistry variables.

Component number	1	2	3	4
	Coefficients			
RBLOOD	0.0	0.0	0.0	0.0
PLATE	1.0	0.0	0.0	0.0
WBLOOD	0.0	−0.2	0.0	1.0
NEUT	0.0	0.0	0.0	0.0
LYMPH	0.0	0.0	0.0	0.0
BILIR	0.0	1.0	−0.2	0.2
SODIUM	0.0	0.2	1.0	0.0
POTASS	0.0	0.0	0.0	0.0
Percentage of total variation explained	98.6	0.9	0.4	0.2

PCA – Matriz de covariância ou matriz de correlação - Exemplo

Table 3.3. Principal components based on the covariance matrix for eight blood chemistry variables.

Component number	1	2	3	4
	Coefficients			
RBLOOD	0.0	0.0	0.0	0.0
PLATE	1.0	0.0	0.0	0.0
WBLOOD	0.0	−0.2	0.0	1.0
NEUT	0.0	0.0	0.0	0.0
LYMPH	0.0	0.0	0.0	0.0
BILIR	0.0	1.0	−0.2	0.2
SODIUM	0.0	0.2	1.0	0.0
POTASS	0.0	0.0	0.0	0.0
Percentage of total variation explained	98.6	0.9	0.4	0.2

PCA – Matriz de covariância ou matriz de correlação - Exemplo

Table 3.3. Principal components based on the covariance matrix for eight blood chemistry variables.

Component number	1	2	3	4
	Coefficients			
RBLOOD	0.0	0.0	0.0	0.0
PLATE	1.0	0.0	0.0	0.0
WBLOOD	0.0	−0.2	0.0	1.0
NEUT	0.0	0.0	0.0	0.0
LYMPH	0.0	0.0	0.0	0.0
BILIR	0.0	1.0	−0.2	0.2
SODIUM	0.0	0.2	1.0	0.0
POTASS	0.0	0.0	0.0	0.0
Percentage of total variation explained	98.6	0.9	0.4	0.2

Então para quê PCA?

PCA – Matriz de covariância ou matriz de correlação - Exemplo

Table 3.2. Principal components based on the correlation matrix for eight blood chemistry variables.

Component number	1	2	3	4
	Coefficients			
RBLOOD	0.2	−0.4	0.4	0.6
PLATE	0.4	−0.2	0.2	0.0
WBLOOD	0.4	0.0	0.2	−0.2
NEUT	0.4	0.4	−0.2	0.2
LYMPH	−0.4	−0.4	0.0	−0.2
BILIR	−0.4	0.4	−0.2	0.6
SODIUM	−0.2	0.6	0.4	−0.2
POTASS	−0.2	0.2	0.8	0.0
Percentage of total variation explained	34.9	19.1	15.6	9.7

PCA – Matriz de covariância ou matriz de correlação - Exemplo

Table 3.2. Principal components based on the correlation matrix for eight blood chemistry variables.

Component number	1	2	3	4
	Coefficients			
RBLOOD	0.2	−0.4	0.4	0.6
PLATE	0.4	−0.2	0.2	0.0
WBLOOD	0.4	0.0	0.2	−0.2
NEUT	0.4	0.4	−0.2	0.2
LYMPH	−0.4	−0.4	0.0	−0.2
BILIR	−0.4	0.4	−0.2	0.6
SODIUM	−0.2	0.6	0.4	−0.2
POTASS	−0.2	0.2	0.8	0.0
Percentage of total variation explained	34.9	19.1	15.6	9.7

Provavelmente detectou correlações mais sutis

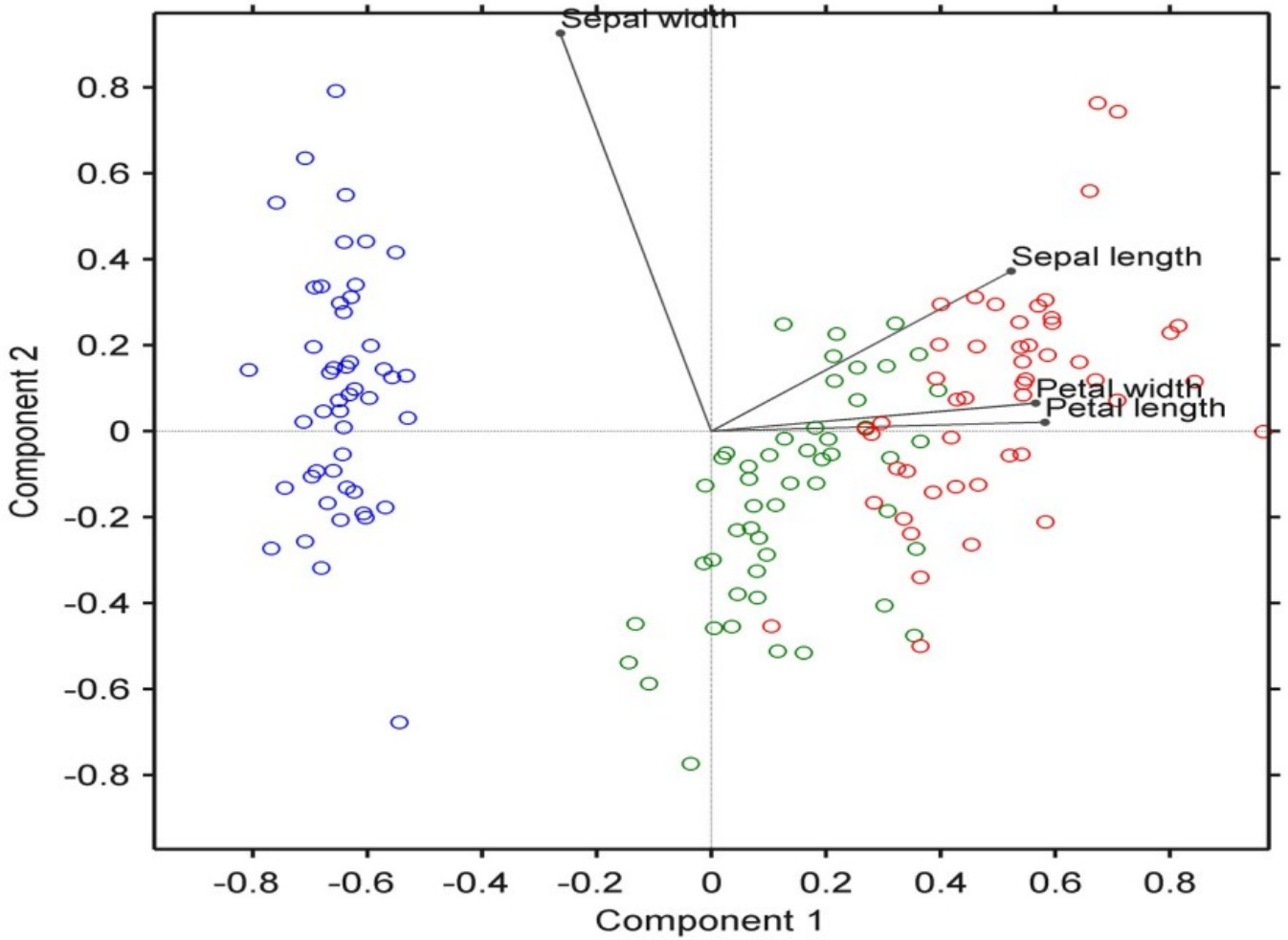
PCA – Matriz de covariância ou matriz de correlação

- Matriz de correlação normaliza os dados
  - Efeito semelhante seria normalizar os dados antes de usar a matriz de covariância
- Dados com fontes muito distintas de informação (e unidades métricas distintas, intervalos de valores discrepantes) “pedem” uma normalização (prévia, ou via uso de matriz de correlação), senão algumas poucas variáveis originais vão dominar
- Há quem defenda que essa normalização é muito “brutal”, e que se seus dados “comportados” (mesma escala, mesma origem de dados, variâncias similares, etc), pode haver perda de informação valiosa

PCA – Matriz de covariância ou matriz de correlação - CUIDADO

- PCA pode ser utilizado, por exemplo, com uma função descritiva ou para redução de dimensionalidade dentro de um contexto de aprendizado supervisionado ou não supervisionado
- Se supervisionado: após o treinamento do classificador, um NOVO dado precisa ser analisado => seu vetor de características precisa ser transformado para o novo espaço vetorial dos PCs.
- Se os dados de treinamento foram normalizados, o dado de teste precisa ser normalizado da mesma forma (por ex, usando a mesma média e desvio padrão (ou min/max), de cada característica original, utilizada na normalização dos dados de treinamento)

PCA – Visualização



https://iaisidro.wordpress.com/2015/10/09/biplotg/

PCA – Comentários finais

- PCA, como exposto aqui, faz sentido para variáveis categóricas?

Quadro 9.2 Níveis de mensuração e estatísticas possíveis

Escala	Exemplos	Operações empíricas básicas	Estatísticas possíveis
Nominal	Sexo, cor dos olhos, partido político	Determinação de igualdade	Número de casos % moda
Ordinal	Classificação em concursos, escalas tipo Likert	Anteriores, determinação >, <	Anteriores, mediana, percentis
Intervalar	Escore de QI, temperatura medida em graus Celsius	Anteriores, determinação dos intervalos das diferenças	Anteriores, média, desvio-padrão, correlação de postos (Spearman [estatística não paramétrica, dados não normais]), correlação produto-momento (Pearson)[estatística paramétrica, dados normalizados])
Racional	Tempo, temperatura medida em graus Kelvin, número de filhos	Anteriores, determinação da igualdade de razões	Todas, por exemplo, coeficiente de variação

[Appolinário, 2012]

PCA – Comentários finais

- PCA para variáveis categóricas: necessidade de adaptações (CATPCA)
- Mas se precisar usar mesmo o convencional (**como no nosso caso**), precisa codificar as variáveis categóricas (vimos hoje em pré-processamento)

PCA – Comentários finais

- O método apresentado é conhecido como *Spectral Decomposition* (analisa covariância entre as características)
- Método alternativo *Singular Value Decomposition* (analisa covariância entre os exemplos)
  - Método computacionalmente eficiente de cálculo do PCs
  - Mais apropriado quando há muito mais características do que exemplos na amostra

Pré-processamento e PCA (trabalho)

Trabalho:

- Objetivo: realizar o pré-processamento necessário e reduzir a dimensionalidade do dataset de vocês... (achar os componentes principais do dataset e decidir quantos componentes vai usar)

PDF de slides:

- Métodos: função utilizada e parâmetros (R, Matlab, python), se foi necessário algum pré-processamento dos dados, qual matriz utilizou (e se normalizou os dados ou não) e por quê...
  - Pode testar mais de uma alternativa para comparar os resultados
- Resultados:
  * mostrar os PCs (coeficientes) e as variâncias acumuladas
  * com base nos resultados, decidir quantos componentes vai usar, explicando o porquê dessa escolha
- Discussão: sua análise crítica dos resultados

PDF de documento: scripts utilizados (só para postar no Moodle)

PCA no R

Função **princomp** (Spectral Decomposition, como vimos em aula, com matriz de covariância ou correlação

Função **prcomp**: usa SVD (Single Value Decomposition)

Além de outras, sem indícios de grandes diferenças nos resultados:

Anderson, G. B. PRINCIPAL COMPONENT ANALYSIS IN R AN EXAMINATION OF THE DIFFERENT FUNCTIONS AND METHODS TO PERFORM PCA

PCA em Python

Links interessantes:

https://plot.ly/ipython-notebooks/principal-component-analysis/

PCA (trabalho)

Apoio:

- Manual do princomp no R
  http://stat.ethz.ch/R-manual/R-patched/library/stats/html/princomp.html

- Cap 6 do Jolliffe (ver referências)

- Diferentes formas de PCA (normalmente sem grandes diferenças nos resultados) :

  http://www.ime.usp.br/~pavan/pdf/MAE0330-PCA-R-2013

- Cap 13 do HSAUR

http://cran.r-project.org/web/packages/HSAUR/vignettes/Ch_principal_components_analysis.pdf

- Muita coisa na internet... (incluindo Python)

[sbc-l] E-book Gratuito da sobre Programação em Python com ChatGPT

Prezados(as),

Gostaria de convidá-los a conhecer o e-book: "Do Básico ao Complexo: Aprendendo a Programar em Python com o ChatGPT" que escrevi inicialmente para a disciplina de Programação de Computadores do curso de Licenciatura em Computação da UFT pela Universidade Aberta do Brasil e que agora compartilho com vocês. Este recurso educacional oferece uma abordagem completa, desde os princípios elementares até os elementos mais avançados da linguagem Python, enriquecidos pela aplicação do modelo de linguagem GPT-3.5 (ChatGPT) além de fornecer dicas de como solicitar o apoio do ChatGPT para esclarecer dúvidas e aprofundar o conhecimento nessa área.

Acesso ao E-book:

Para ter acesso ao e-book basta clicar no link abaixo:

https://repositorio.uft.edu.br/handle/11612/5585

Esta obra é um ótimo recurso tanto para aqueles que se aventuram na programação pela primeira vez, quanto para os professores que desejam ter um material complementar e atualizado para suas aulas. O e-book representa uma oportunidade singular de expandir aptidões e competências em programação Python explorando a ajuda do ChatGPT para isso.

Atenciosamente,

Prof. Dr. Eduardo Ribeiro

Referências

- DUDA, R.; HART, P.; STORK, D**. Pattern Classification**. John Willey, 2001 (Cap. 1)
- COSTA, L. F.; CESAR, R. M. Jr. **Shape Classification and Analysis: Theory and Practice**. 2. ed.CRC Press, 2009 (Cap. 8.1.6)
- EVERITT, B. ; HOTHORN, T. **A handbook of statistical analysis using R**. Ed. Chapman & Hall/CRC
- GÉRON, A. **Mãos à Obra: Aprendizado de Máquina com Scikit-Learn, Keras & TensorFlow**. 2ª ed. Alta Books, 2021. Cap 8.
- MAGALHÃES, M. N.; LIMA, A. C. P. de: **Noções de Probabilidade e Estatística**. Edusp, 2002
- JOLLIFFE, I. T. **Principal Component Analysis**. 2. ed. Springer, 2002 (Cap. 1)
  - Cap 6 discute quantos componentes escolher