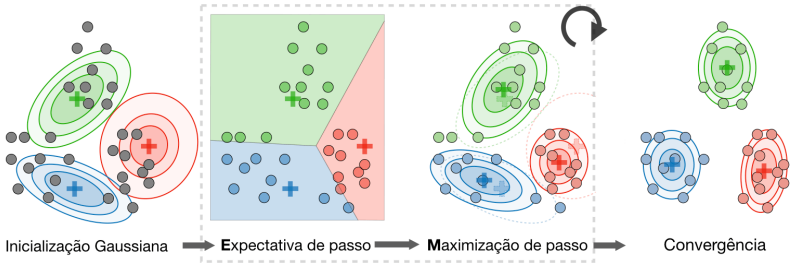
Dicas VIP: Aprendizado não supervisionado

Afshine Amidi e Shervine Amidi

13 de Outubro de 2018



Introdução ao aprendizado não supervisionado

❒ **Motivação** – O objetivo do aprendizado não supervisionado (*unsupervised learning*) é encontrar padrões em dados sem rótulo $\{x^{(1)},...,x^{(m)}\}$.

❒ **Desigualdade de Jensen** – Seja f um função convexa e X uma variável aleatória. Temos a seguinte desigualdade:

$$\boxed{E[f(X)] \geqslant f(E[X])}$$

Maximização de expectativa

❒ **Variáveis latentes** – Variáveis latentes são variáveis escondidas/não observadas que dificultam problemas de estimativa, e são geralmente indicadas por z. Aqui estão as mais comuns configurações onde há variáveis latentes:

Configuração	Variável latente z	$x\|z$	Comentários
Mistura de k gaussianos	Multinomial(ϕ)	$\mathcal{N}(\mu_j,\Sigma_j)$	$\mu_j \in \mathbb{R}^n, \phi \in \mathbb{R}^k$
Análise de fator	$\mathcal{N}(0,I)$	$\mathcal{N}(\mu+\Lambda z,\psi)$	$\mu_j \in \mathbb{R}^n$

❒ **Algoritmo** – O algoritmo de maximização de expectativa (*EM - Expectation-Maximization*) fornece um método eficiente para estimar o parâmetro θ através da probabilidade máxima estimada ao construir repetidamente uma fronteira inferior na probabilidade (E-step) e otimizar essa fronteira inferior (M-step) como a seguir:

- E-step: Avalia a probabilidade posterior $Q_i(z^{(i)})$ na qual cada ponto de dado $x^{(i)}$ veio de um grupo particular $z^{(i)}$ como a seguir:

$$\boxed{Q_i(z^{(i)}) = P(z^{(i)}|x^{(i)};\theta)}$$

- M-step: Usa as probabilidades posteriores $Q_i(z^{(i)})$ como grupo específico de pesos nos pontos de dado $x^{(i)}$ para separadamente estimar cada modelo do grupo como a seguir:

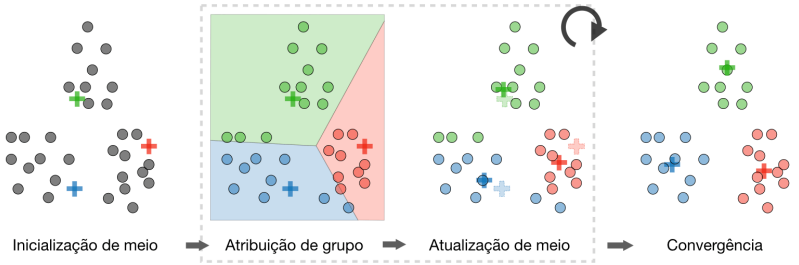
$$\boxed{\theta_i = \underset{\theta}{\text{argmax}} \sum_i \int_{z^{(i)}} Q_i(z^{(i)}) \log\left(\frac{P(x^{(i)},z^{(i)};\theta)}{Q_i(z^{(i)})}\right) dz^{(i)}}$$

Agrupamento k-means

Nós indicamos $c^{(i)}$ o grupo de pontos de dados i e μ_j o centro do grupo j.

❒ **Algoritmo** – Após aleatoriamente inicializar os centróides do grupo $\mu_1,\mu_2,...,\mu_k \in \mathbb{R}^n$, o algoritmo k-means repete os seguintes passos até a convergência:

$$\boxed{c^{(i)} = \underset{j}{\arg\min}||x^{(i)}-\mu_j||^2} \quad \text{e} \quad \boxed{\mu_j = \frac{\sum_{i=1}^m 1_{\{c^{(i)}=j\}} x^{(i)}}{\sum_{i=1}^m 1_{\{c^{(i)}=j\}}}}$$



❒ **Função de distorção** – A fim de ver se o algoritmo converge, nós olhamos para a função de distorção (*distortion function*) definida como se segue:

$$\boxed{J(c,\mu) = \sum_{i=1}^m ||x^{(i)} - \mu_{c^{(i)}}||^2}$$

Agrupamento hierárquico

❒ **Algoritmo** – É um algoritmo de agrupamento com uma abordagem hierárquica aglometariva que constrói grupos aninhados de uma maneira sucessiva.

❒ **Tipos** – Existem diferentes tipos de algoritmos de agrupamento hierárquico que objetivam a otimizar funções objetivas diferentes, os quais estão resumidos na tabela abaixo:

Ligação de vigia	Ligação média	Ligação completa
Minimizar distância dentro do grupo	Minimizar a distância média entre pares de grupos	Minimizar a distância máxima entre pares de grupos

Métricas de atribuição de agrupamento

Em uma configuração de aprendizado não supervisionado, é geralmente difícil acessar o desempenho de um modelo desde que não temos rótulos de verdade como era o caso na configuração de aprendizado supervisionado.

❒ **Coeficiente de silhueta** – Ao indicar a e b a distância média entre uma amostra e todos os outros pontos na mesma classe, e entre uma amostra e todos os outros pontos no grupo mais próximo, o coeficiente de silhueta s para uma única amostra é definida como se segue:

$$\boxed{s = \frac{b-a}{\max(a,b)}}$$

❒ **Índice Calinski-Harabaz** – Indicando por k o número de grupos, B_k e W_k as matrizes de disperção entre e dentro do agrupamento respectivamente definidos como:

$$B_k = \sum_{j=1}^{k} n_{c^{(i)}}(\mu_{c^{(i)}} - \mu)(\mu_{c^{(i)}} - \mu)^T, \qquad W_k = \sum_{i=1}^{m}(x^{(i)} - \mu_{c^{(i)}})(x^{(i)} - \mu_{c^{(i)}})^T$$

o índice Calinski-Harabaz $s(k)$ indica quão bem um modelo de agrupamento define o seu grupo, tal que maior a pontuação, mais denso e bem separado os grupos estão. Ele é definido como a seguir:

$$\boxed{s(k) = \frac{\mathrm{Tr}(B_k)}{\mathrm{Tr}(W_k)} \times \frac{N-k}{k-1}}$$

Análise de componente principal

É uma técnica de redução de dimensão que encontra direções de maximização de variância em que projetam os dados.

❒ **Autovalor, autovetor** – Dada uma matriz $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, λ é dito ser um autovalor de A se existe um vetor $z \in \mathbb{R}^n \backslash \{0\}$, chamado autovetor, tal que temos:

$$\boxed{Az = \lambda z}$$

❒ **Teorema espectral** – Seja $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Se A é simétrica, então A é diagonizável por uma matriz ortogonal $U \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Denotando $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1,...,\lambda_n)$, temos:

$$\boxed{\exists \Lambda \text{ diagonal}, \quad A = U\Lambda U^T}$$

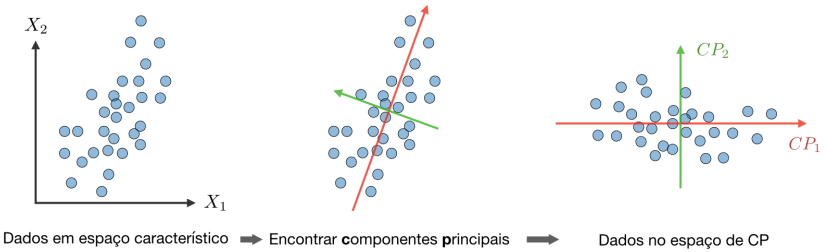
Observação: o autovetor associado com o maior autovalor é chamado de autorvetor principal da matriz A.

❒ **Algoritmo** – O processo de Análise de Componente Principal (*PCA - Principal Component Analysis*) é uma técnica de redução de dimensção que projeta os dados em dimensções k ao maximizar a variância dos dados como se segue:

- Etapa 1: Normalizar os dados para ter uma média de 0 e um desvio padrão de 1.

$$\boxed{x_j^{(i)} \leftarrow \frac{x_j^{(i)} - \mu_j}{\sigma_j}} \quad \text{où} \quad \boxed{\mu_j = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x_j^{(i)}} \quad \text{e} \quad \boxed{\sigma_j^2 = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x_j^{(i)} - \mu_j)^2}$$

- Etapa 2: Computar $\Sigma = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x^{(i)}x^{(i)^T} \in \mathbb{R}^{n\times n}$, a qual é simétrica com autovalores reais.
- Etapa 3: Computar $u_1,...,u_k \in \mathbb{R}^n$ os k principais autovetores ortogonais de Σ, i.e. os autovetores ortogonais dos k maiores autovalores.
- Etapa 4: Projetar os dados em $\mathrm{span}_{\mathbb{R}}(u_1,...,u_k)$.
Esse processo maximiza a variância entre todos espaços dimensionais k.



Análise de componente independete

É uma técnica que pretende encontrar as fontes de geração subjacente.

❒ **Suposições** – Nós assumimos que nosso dado x foi gerado por um vetor fonte dimensional n $s = (s_1,...,s_n)$, onde si são variáveis aleatórias independentes, através de uma matriz A misturada e não singular como se segue:

$$\boxed{x = As}$$

O objetivo é encontrar a matriz $W = A^{-1}$ não misturada.

❒ **Algoritmo Bell e Sejnowski ICA** – Esse algoritmo encontra a matriz W não misturada pelas seguintes etapas abaixo:

- Escreva a probabilidade de $x = As = W^{-1}s$ como:

$$p(x) = \prod_{i=1}^{n} p_s(w_i^T x) \cdot |W|$$

- Escreva o logaritmo da probabilidade dado o nosso dado treinado $\{x^{(i)}, i \in [\![1,m]\!]\}$ e indicando g a função sigmoide como:

$$l(W) = \sum_{i=1}^{m}\left(\sum_{j=1}^{n} \log\left(g'(w_j^T x^{(i)})\right) + \log|W|\right)$$

Portanto, a regra de aprendizagem do gradiente ascendente estocástico é tal que para cada exemplo de treinamento $x^{(i)}$, nós atualizamos W como a seguir:

$$\boxed{W \longleftarrow W + \alpha \left(\begin{pmatrix} 1 - 2g(w_1^T x^{(i)}) \\ 1 - 2g(w_2^T x^{(i)}) \\ \vdots \\ 1 - 2g(w_n^T x^{(i)}) \end{pmatrix} x^{(i)^T} + (W^T)^{-1} \right)}$$