Aprendizaje No Supervisado

Inteligencia Artificial e Ingeniería del Conocimiento

Constantino Antonio García Martínez

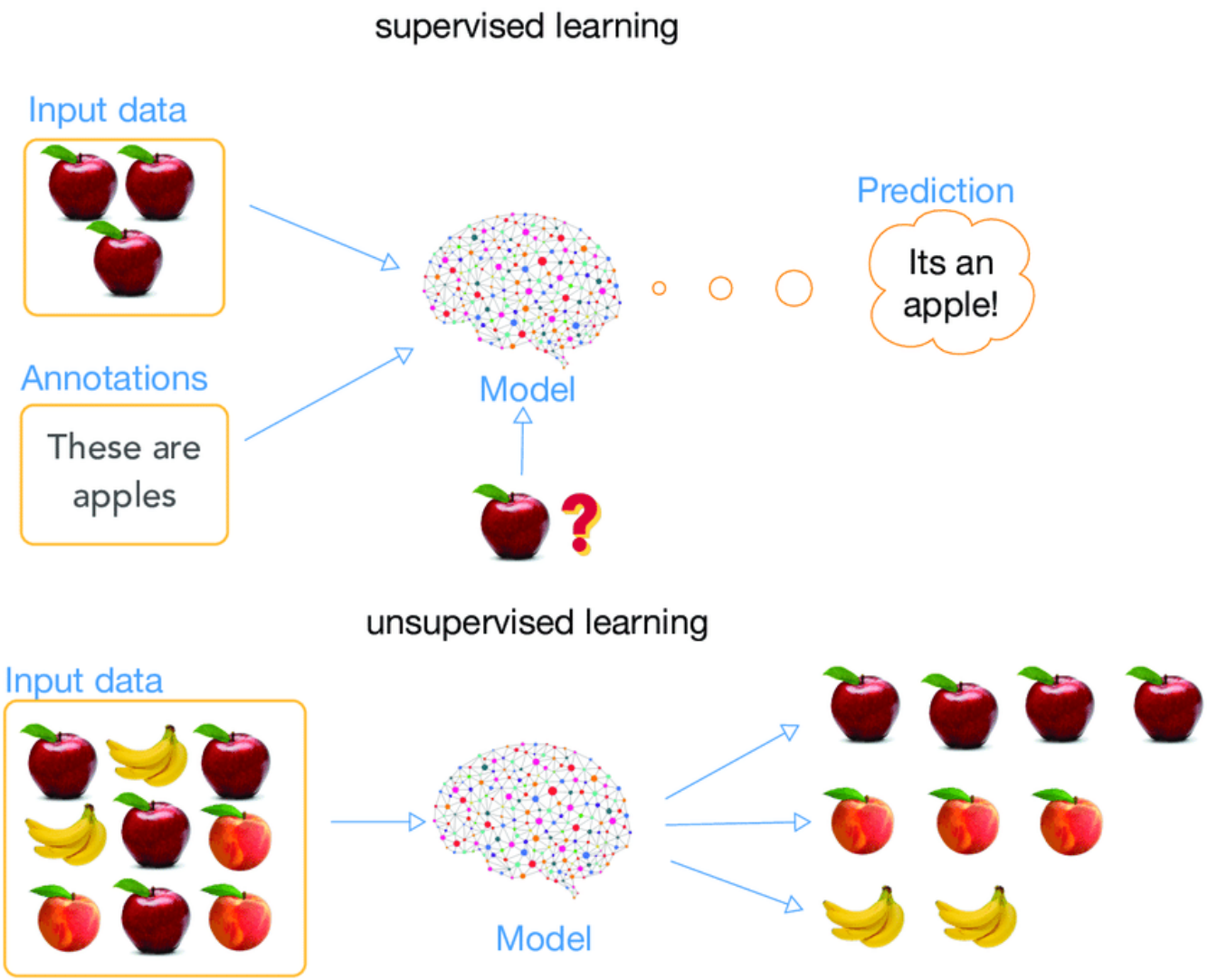
Universidad San Pablo Ceu

Bibliografía

- Hastie, T., Tibshirani, R., & Friedman, J. (2009). The elements of statistical learning.

Introducción

¿Qué es el Aprendizaje No Supervisado?



¿Qué es el Aprendizaje No Supervisado?

Definición
Aprendizaje a partir de datos **sin etiquetas**. El objetivo es descubrir estructura oculta en los datos.

Aprendizaje Supervisado:

- Datos: $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots$
- Objetivo: $f(x) \approx y$
- Ejemplos: clasificación, regresión

Aprendizaje No Supervisado:

- Datos: $x_1, x_2, \ldots$
- Objetivo: encontrar patrones
- Ejemplos: clustering, reducción de dimensionalidad

Tipos Principales de Problemas

1. **Clustering (Agrupamiento)**
   - Aplicación: Segmentación de clientes, análisis de redes sociales
   - Pregunta: ¿Qué grupos naturales existen en los datos?

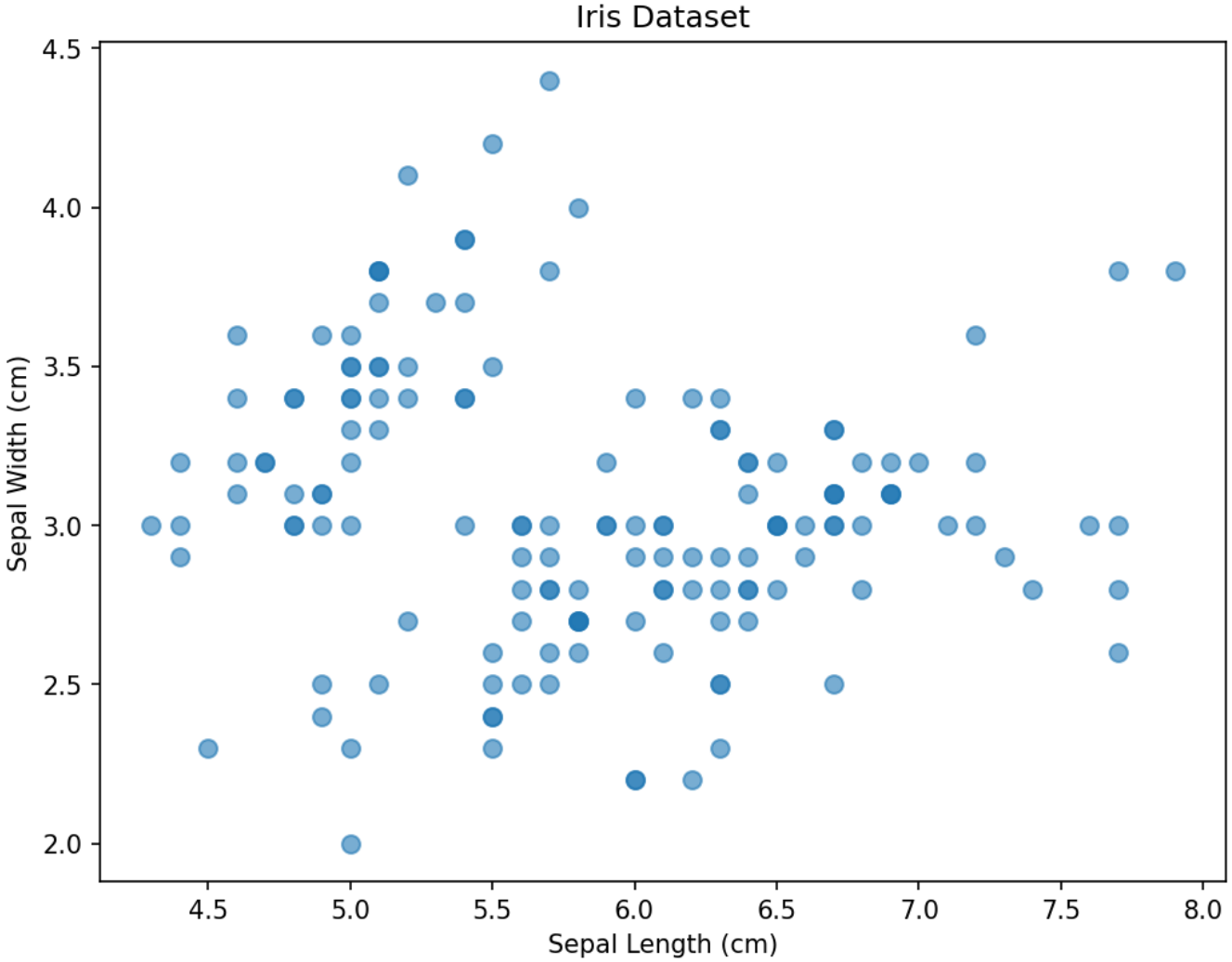
2. **Reducción de Dimensionalidad / Visualización**
   - Aplicación: Compresión de datos, visualización de datos de alta dimensión
   - Pregunta: ¿Cuáles son las direcciones de mayor variación?

3. **Aprendizaje de Representaciones**
   - Aplicación: Detección de anomalías, pre-entrenamiento para tareas supervisadas
   - Pregunta: ¿Qué características latentes explican los datos?

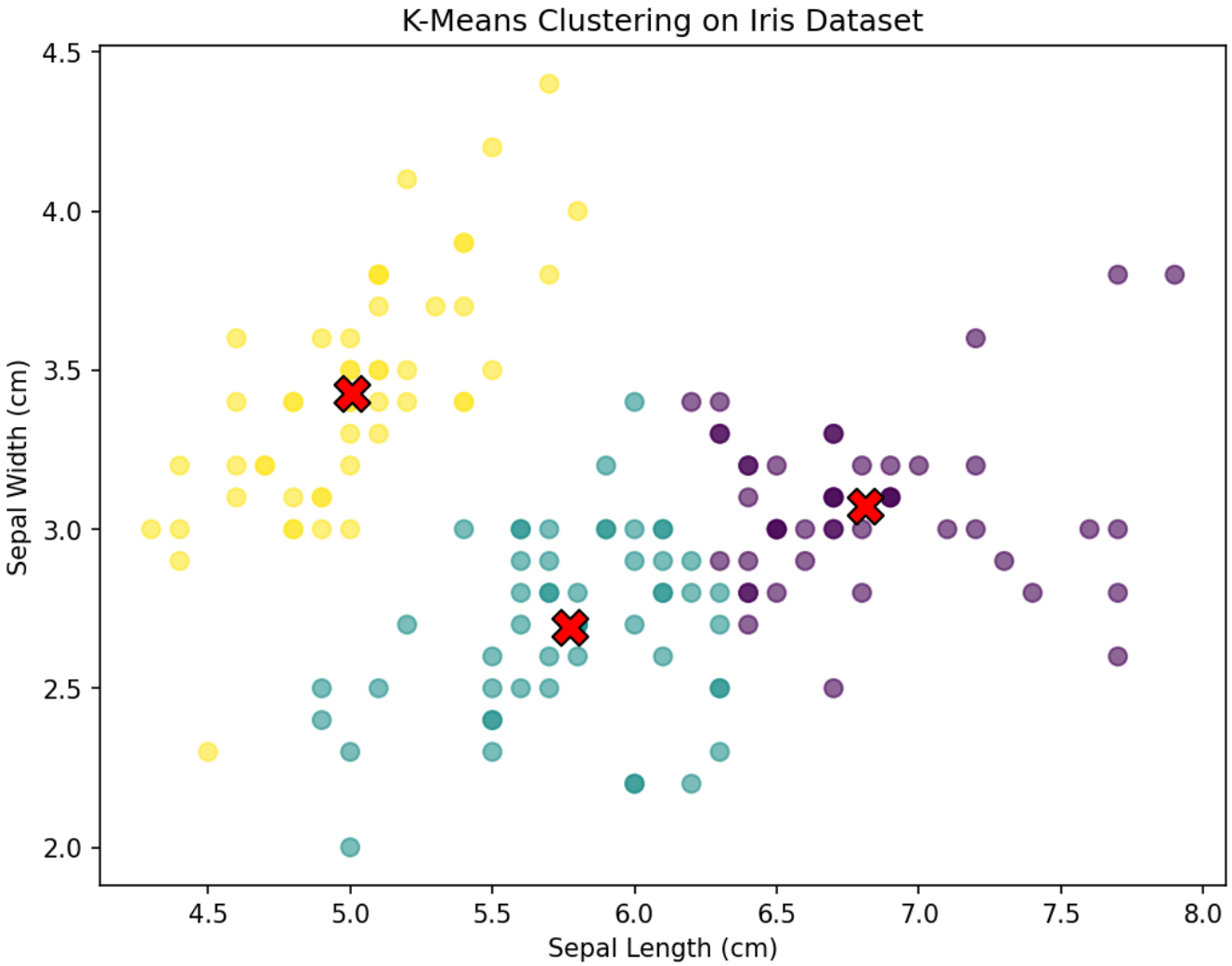
4. **Modelado Generativo**
   - Aplicación: Generación de imágenes, síntesis de datos, data augmentation
   - Pregunta: ¿Cuál es la distribución de probabilidad que generó estos datos?

Clustering

K-Means: Ejemplo Visual



K-Means: Ejemplo Visual



K-Means: Implementación con scikit-learn

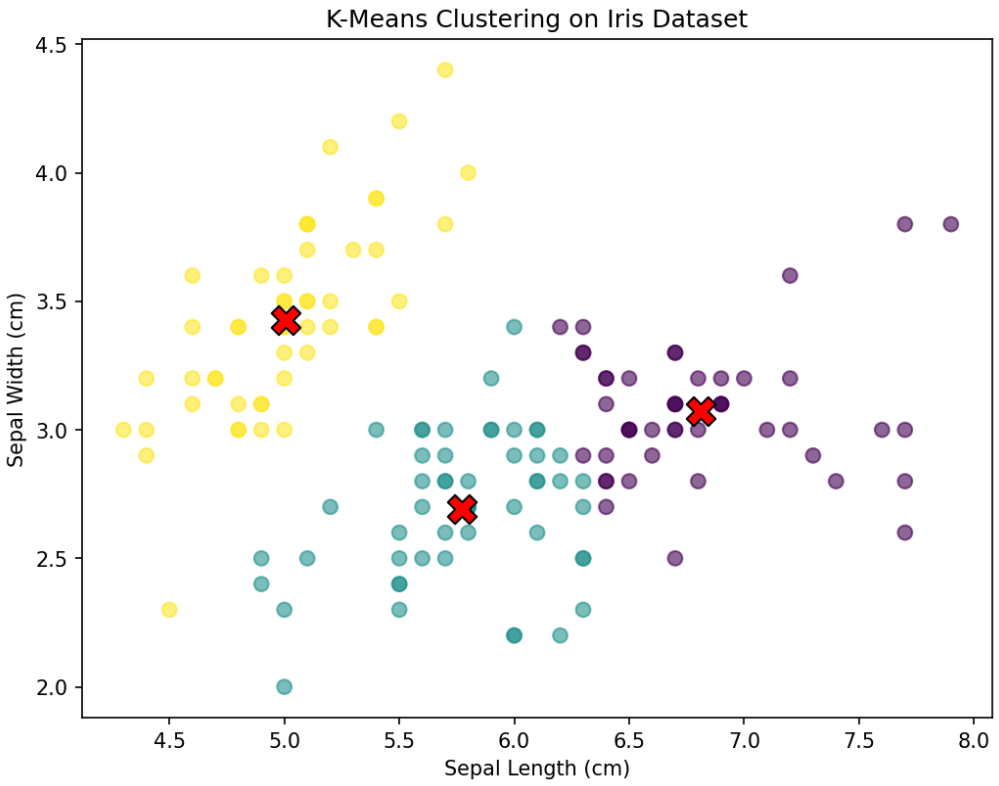
Example: Notebook, ejemplo sobre KMeans

```
from sklearn.datasets import load_iris
from sklearn.cluster import KMeans
import matplotlib.pyplot as plt

iris = load_iris()
X = iris.data[:, :2]


kmeans = KMeans(n_clusters=3, random_state=42)
```

K-Means: Algoritmo Básico

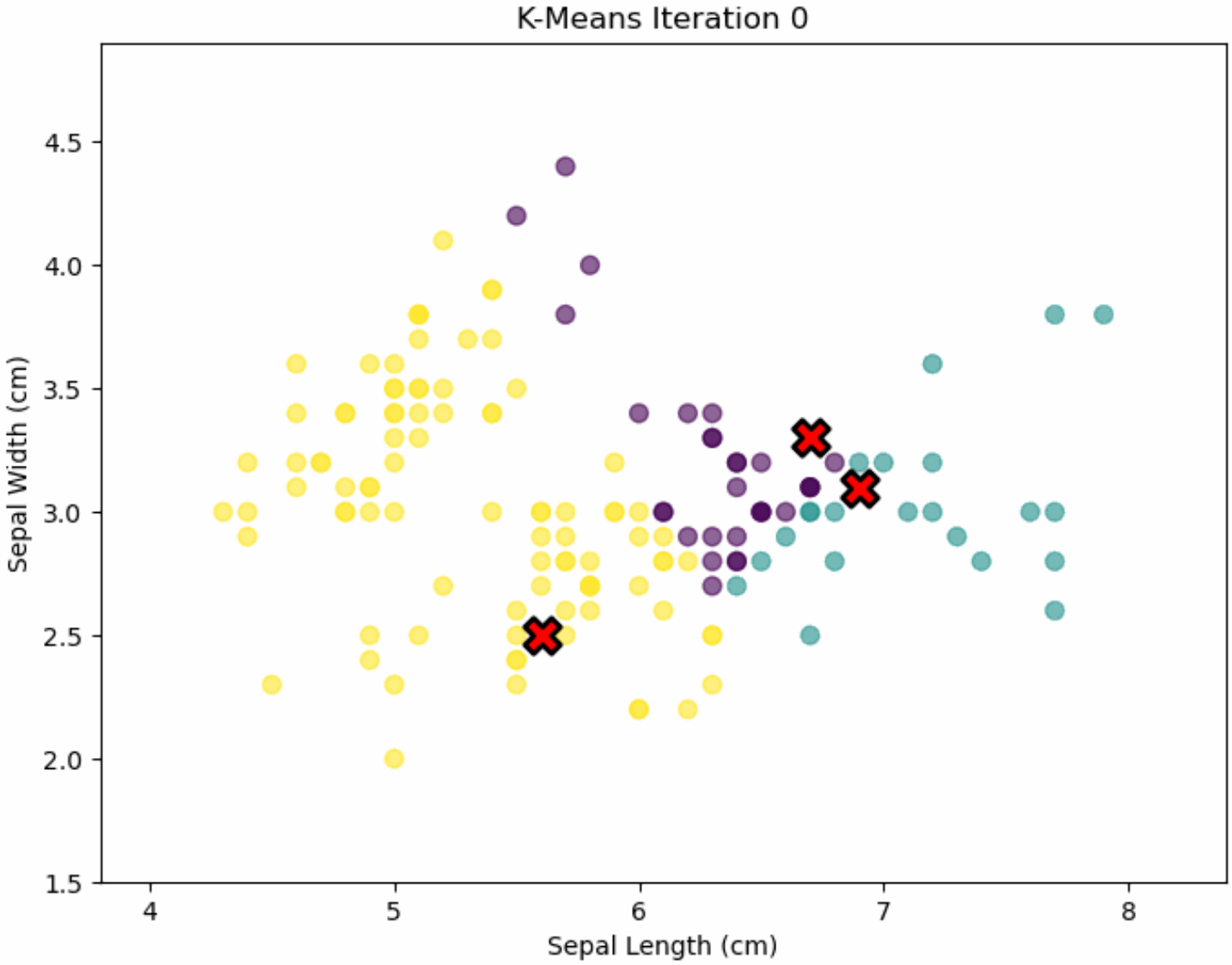


Función Objetivo: Minimizar distancia intra-cluster

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^{k} \sum_{x \in C_i} ||x - \mu_i||^2$$

donde μ_i es el centroide del cluster C_i.

K-Means: Algoritmo Básico



K-Means: Algoritmo Básico

Algoritmo
Input: Dataset X, número de clusters k

Output: Clusters $C_1, \ldots, C_k$

1. Inicializar k centroides $\mu_1, \ldots, \mu_k$ aleatoriamente
2. **Repetir** hasta convergencia:
   - **Asignación:** Para cada x_i, asignar al cluster más cercano:
   $$c_i = \arg\min_j ||x_i - \mu_j||^2$$
   - **Actualización:** Recalcular centroides:
   $$\mu_j = \frac{1}{|C_j|} \sum_{x \in C_j} x$$
3. **Devolver** clusters $C_1, \ldots, C_k$

Exercise: my_kmeans.py
Estudia el código de K-means in my_kmeans.py

K-Means: Limitaciones y Soluciones

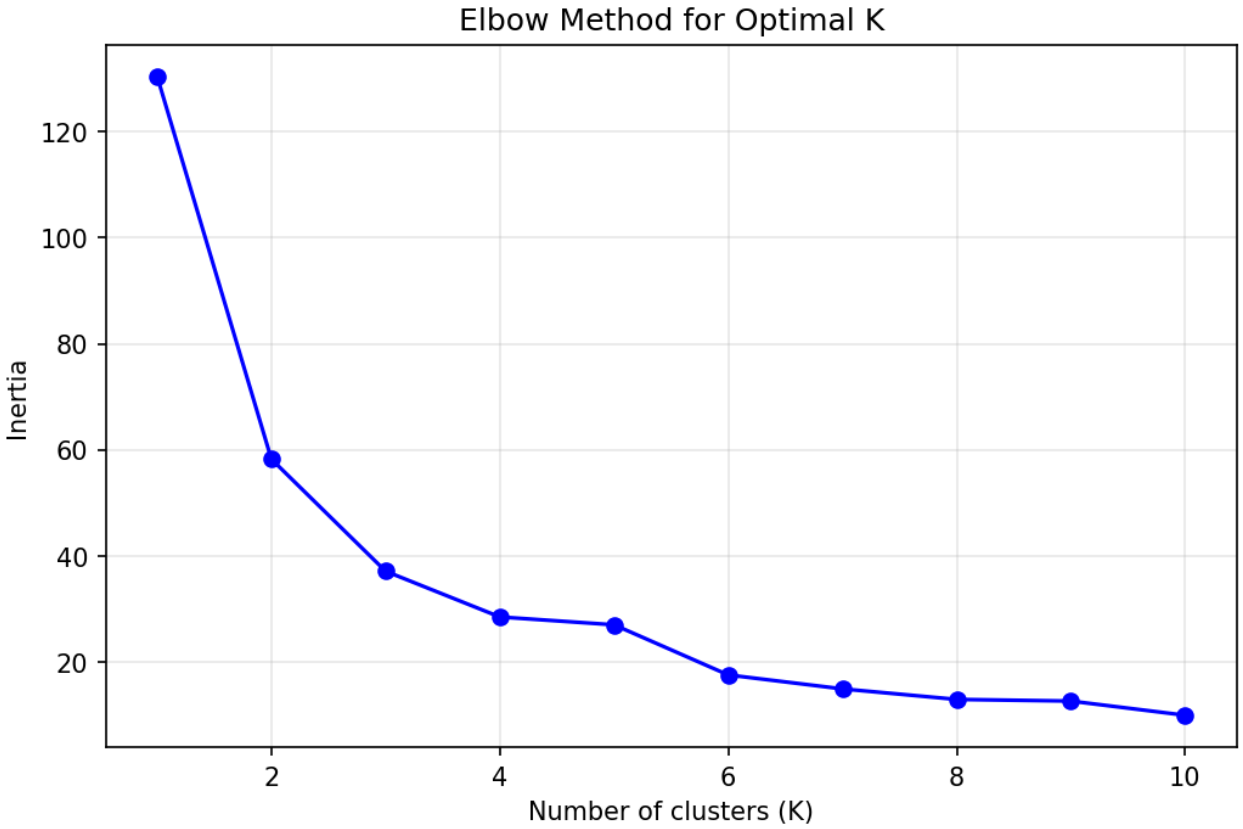
Limitaciones

1. **K fijo:** Número de clusters debe especificarse a priori. Alternativa: "Elbow method"
2. **Clusters esféricos:** Asume clusters de forma convexa y similar tamaño
3. **Sensible a inicialización:** Puede converger a mínimos locales

Soluciones a la Inicialización:

- Algoritmo de inicialización inteligente: K-Means++
  - Selecciona centroides iniciales alejados entre sí
  - Implementado por defecto en `sklearn.cluster.KMeans`
- ejecutar múltiples veces con diferentes inicializaciones y elegir la mejor según $\mathcal{L}$. Ver `n_init` en `sklearn`.

Selección de K: Método del Codo (Elbow Method)



- Probar varios valores de K
- Graficar inercia (suma de distancias al cuadrado) vs K
- Buscar el “codo"donde la mejora se ralentiza

Example: Notebook, ejemplo sobre “elbow-method”

Otros Algoritmos de Clustering

Gaussian Mixture Models (GMM)

- Modelo probabilístico: cada cluster es una Gaussiana
- Soft clustering: probabilidades de pertenencia
- Uso: Cuando clusters tienen formas elípticas

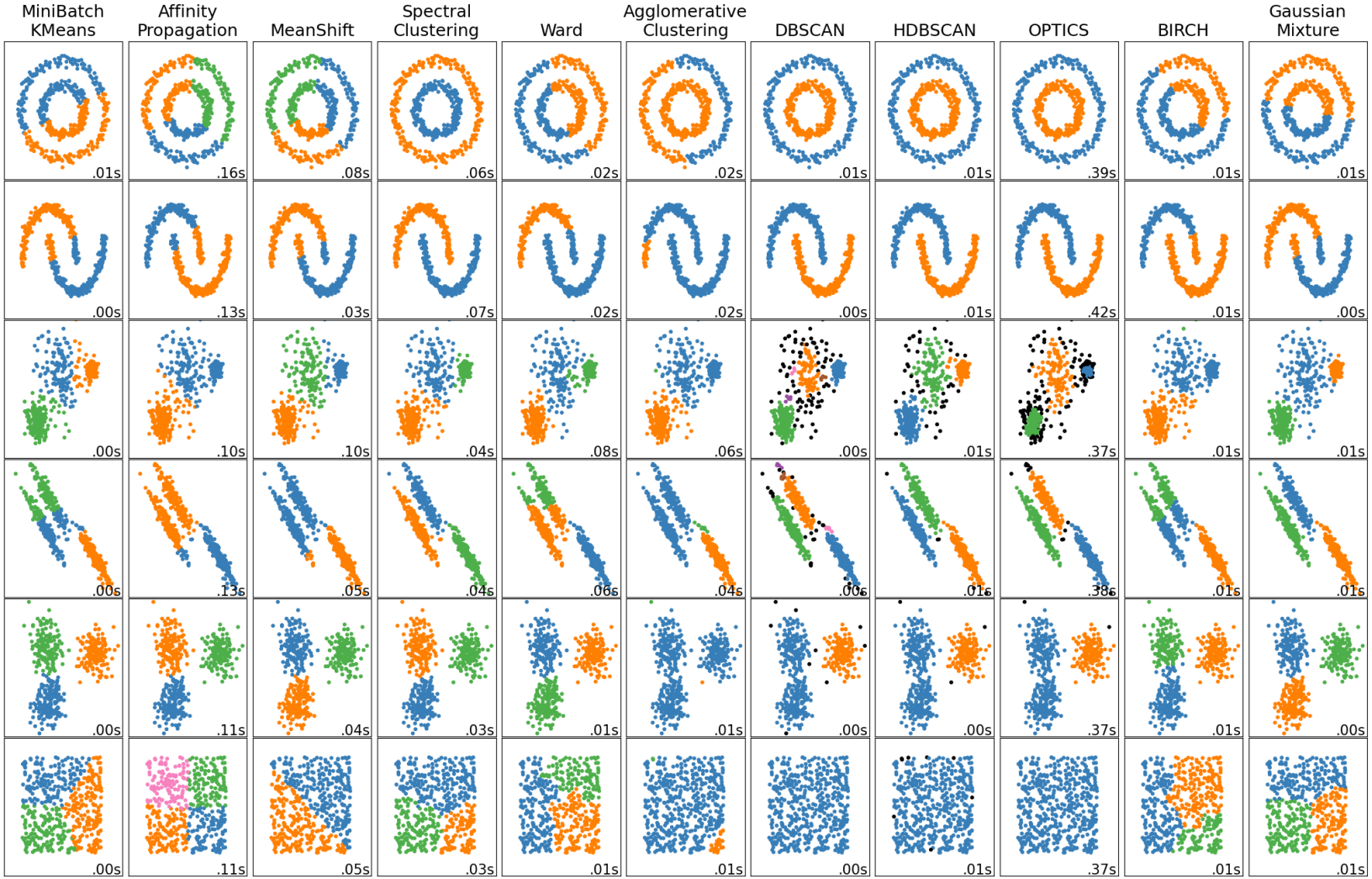
DBSCAN (Density-Based Spatial Clustering)

- Basado en densidad, no requiere especificar K
- Detecta outliers automáticamente
- Uso: Detección de anomalías, clusters de forma arbitraria

Clustering Jerárquico

- Crea jerarquía de clusters (dendrograma)
- Agglomerative (bottom-up) o Divisive (top-down)
- Uso: Análisis exploratorio, taxonomías

Otros Algoritmos de Clustering



1

[1] Fuente: https://scikit-learn.org/stable/modules/clustering.html

Problema Motivador: Análisis de Trending Topics

Example: Notebook, descubrimiento de Trending Topics

Contexto: Tienes 1490 noticias recolectadas durante una semana (sin hashtags ni etiquetas).

Objetivo: Descubrir automáticamente los principales temas de conversación (Trending Topics).

Reducción de la Dimensionalidad / Visualización

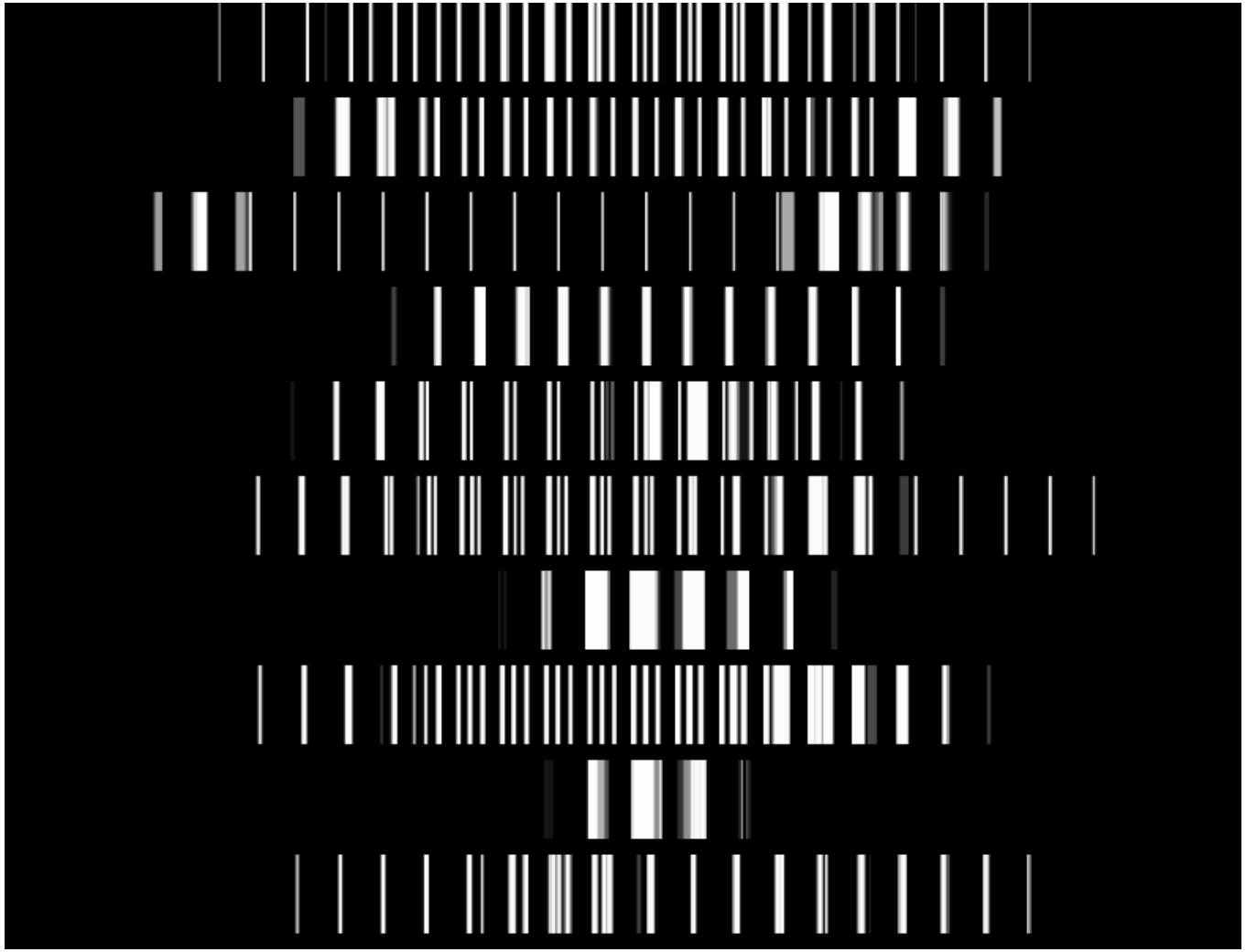
PCA: Ejemplo Motivador - Compresión de Imágenes

Problema
Imagen 256×256 en escala de grises = 65,536 números (píxeles)

¿Podemos representarla con **menos números** sin perder información esencial?

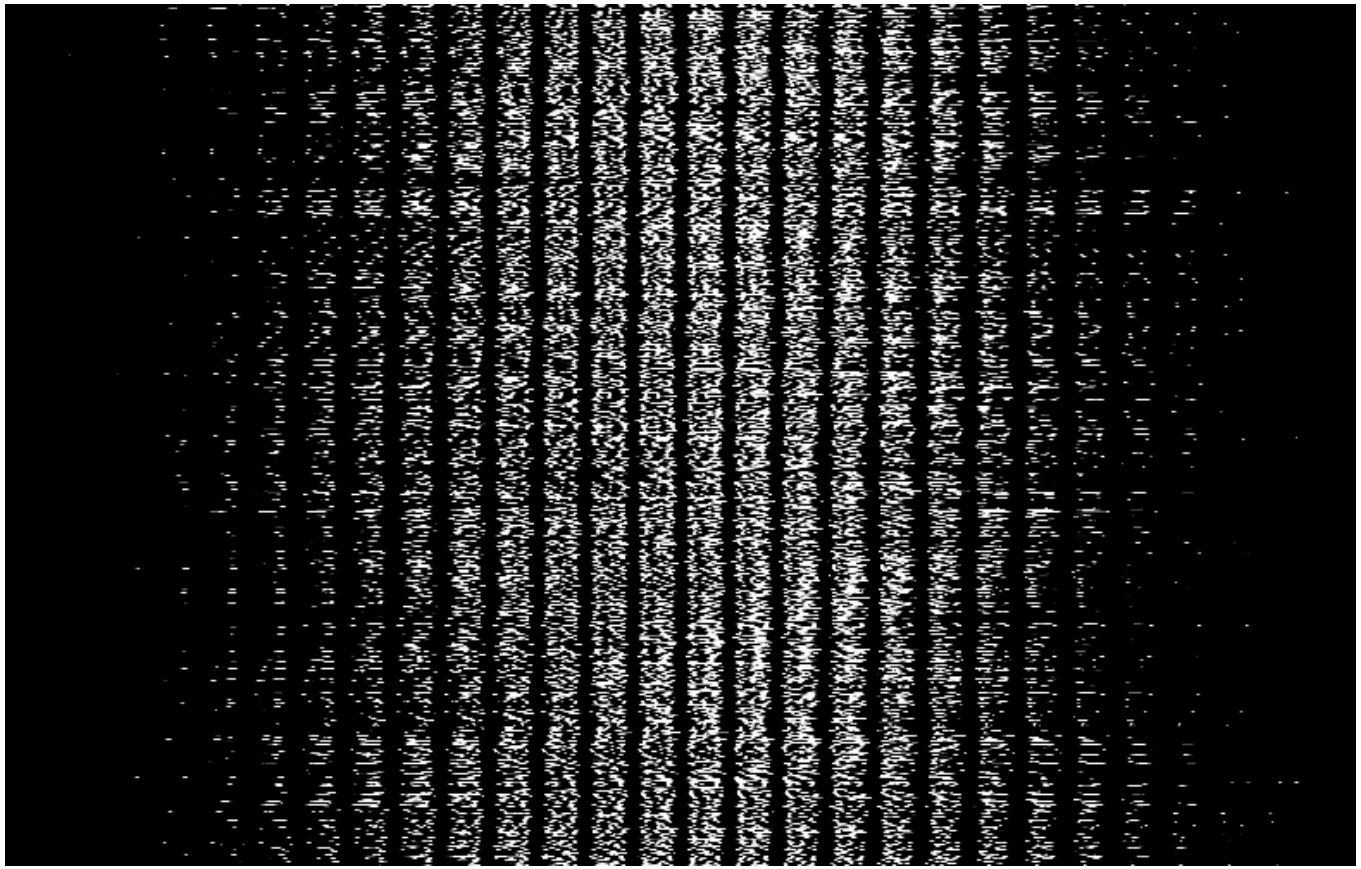
PCA: Ejemplo Motivador - Compresión de Imágenes

Intuición: ¿Qué dimensiones son más relevantes?



PCA: Ejemplo Motivador - Compresión de Imágenes

Intuición: ¿Qué dimensiones son más relevantes?



PCA: Ejemplo Motivador - Compresión de Imágenes

Problema
Imagen 256×256 en escala de grises = 65,536 números (píxeles)

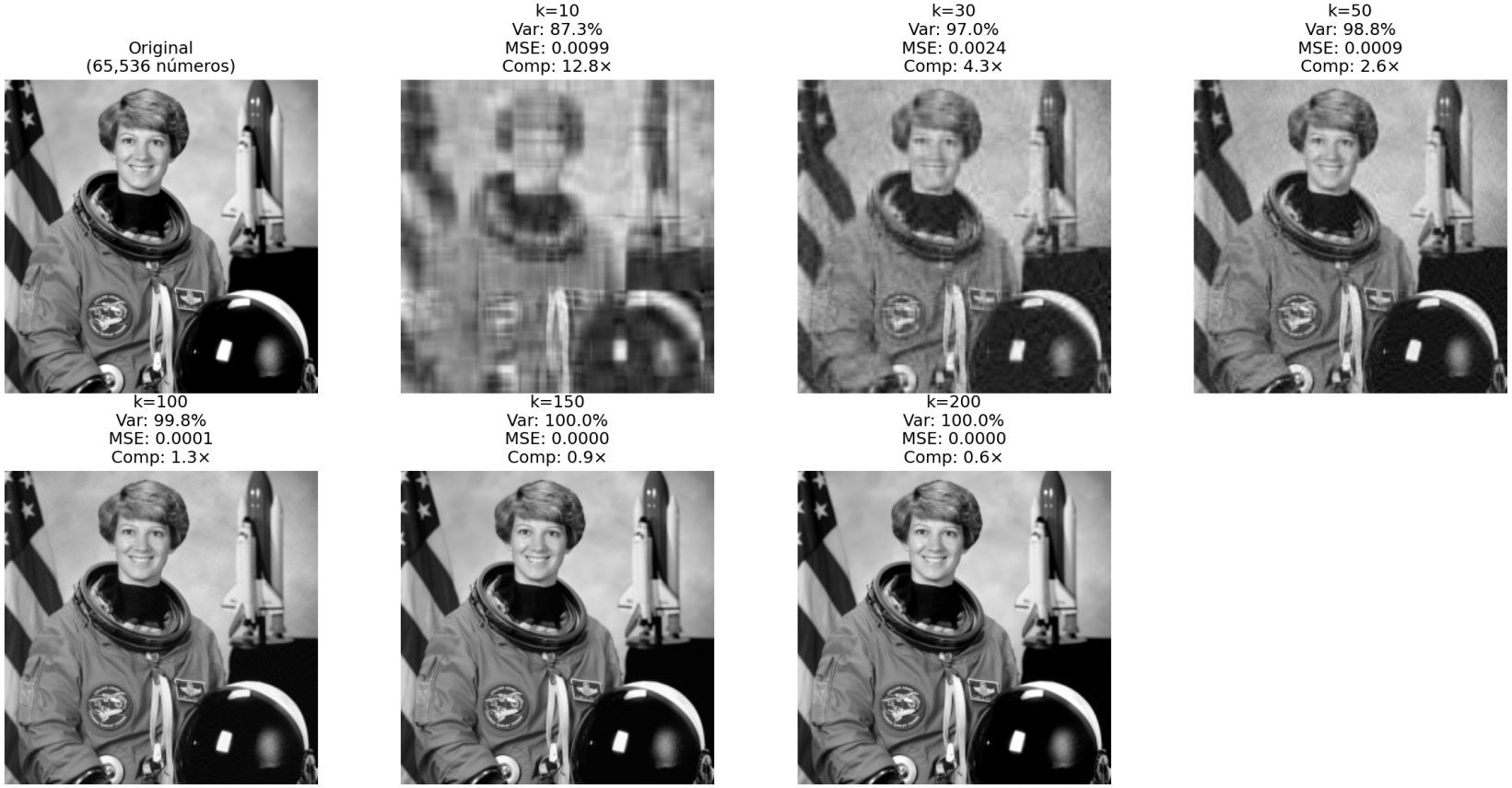
¿Podemos representarla con **menos números** sin perder información esencial?

Solución: PCA

- Encontrar direcciones de máxima varianza
- Mantener solo las k direcciones más importantes
- Reconstruir imagen desde estas k componentes

PCA: Ejemplo Motivador - Compresión de Imágenes

Example: Notebook, PCA para Compresión



PCA: Aplicaciones Más Allá de la Compresión

1. Reducción de Dimensionalidad para Machine Learning
Problema: Curse of Dimensionality $\rightarrow$ Sol: PCA como Feature Extraction

- Reducir de 1000 features $\rightarrow$ 50 componentes principales
- Entrenamiento más rápido, menos overfitting
- Usado antes de: clasificación, clustering, regresión

2. Análisis Exploratorio en Análisis Multivariante

- **Análisis financiero**: Identificar factores de riesgo
- **Recomendación**: Latent factors en collaborative filtering

3. Visualización de Datos de Alta Dimensión
Problema: No podemos visualizar datos en 100 dimensiones $\rightarrow$ **Sol**: PCA proyecta a 2D/3D manteniendo máxima varianza

- Exploración inicial de datasets complejos
- Identificar clusters o patrones visuales
- Detectar outliers

Otras Técnicas de Visualización: t-SNE y UMAP

t-SNE (t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding)
Idea: Preservar **estructura local** (vecindarios) en la proyección 2D/3D

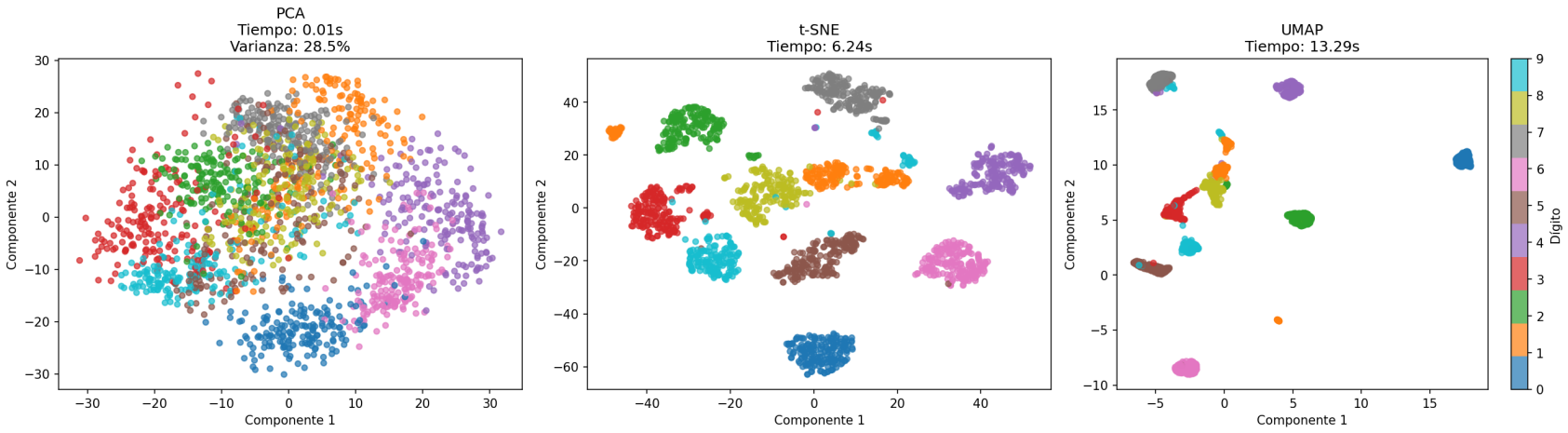
Características:

- No lineal: puede capturar relaciones complejas
- Computacionalmente costoso ($O(n^2)$)
- Distancias globales no son confiables

UMAP (Uniform Manifold Approximation and Projection)
Alternativa moderna a t-SNE:

- No lineal
- Más rápido ($O(n)$ con aproximaciones)
- Preserva más estructura global que t-SNE
- Se está convirtiendo en el estándar para visualización

Comparando PCA, t-SNE y UMAP



DL No Supervisado: Aprendizaje de Representaciones y Modelado Generativo

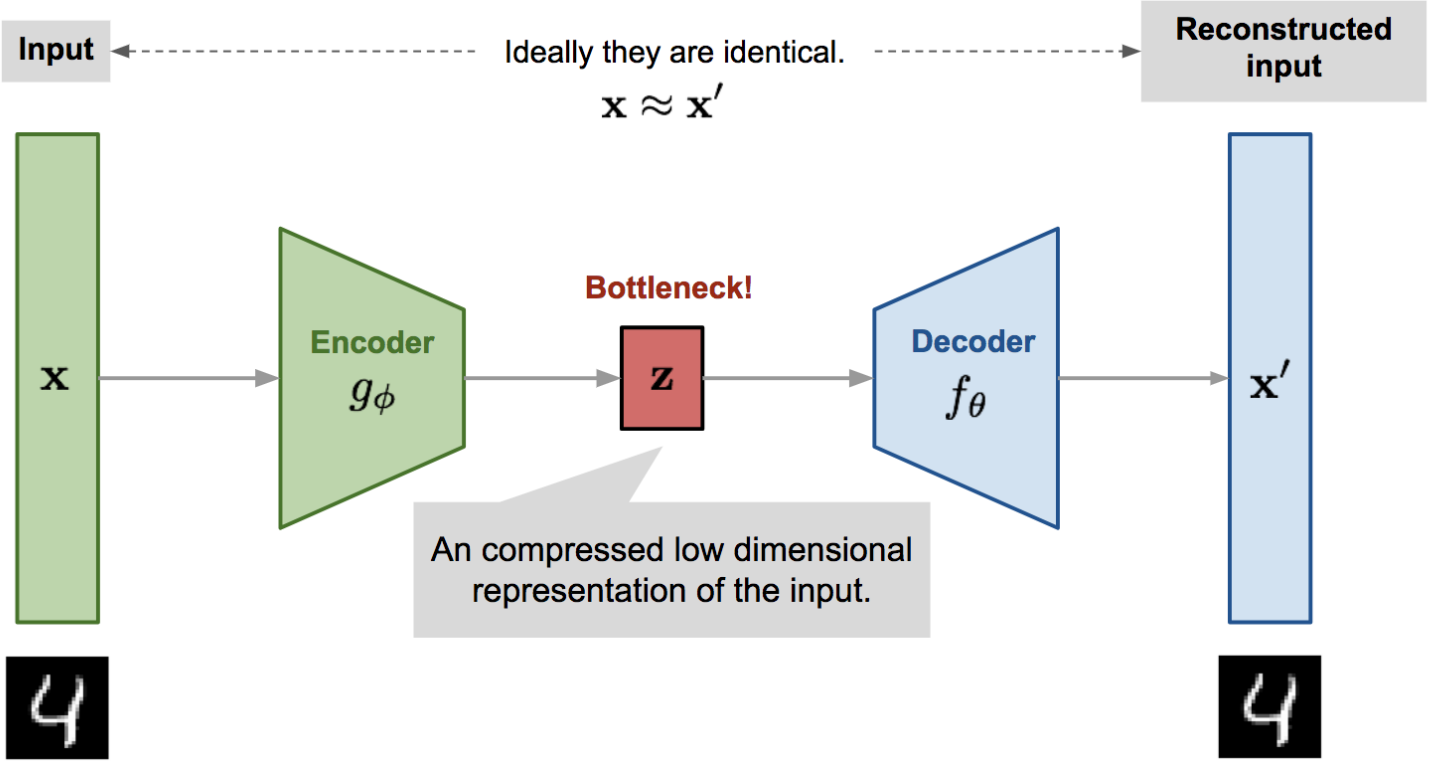
Aprendizaje No Supervisado en Deep Learning: Enfoques Clave

Objetivo: Aprender a partir de datos no etiquetados x para alcanzar uno o ambos objetivos:

- **Aprendizaje de Representaciones**
  - Descubrir características significativas (ej.: atributos de imágenes).
  - Mejorar tareas posteriores como la clasificación.
- **Modelado Generativo**
  - Aprender la distribución de los datos $p(\mathrm{x})$.
  - Generar nuevas muestras realistas.

Solapamiento: Muchos algoritmos (ej.: VAEs, GANs) combinan ambos objetivos.

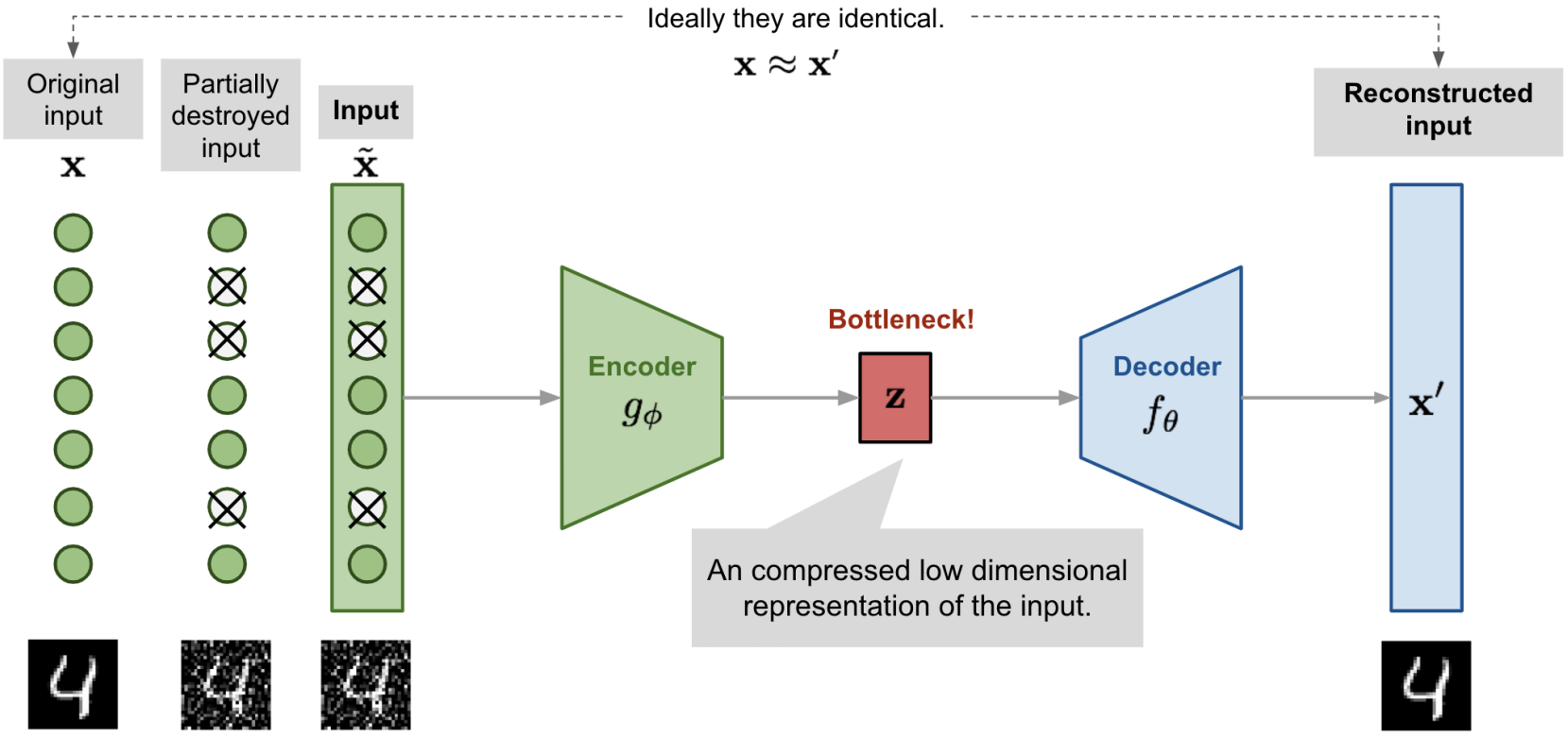
Autoencoders



[2]

[2] Tomado de https://lilianweng.github.io/posts/2018-08-12-vae/

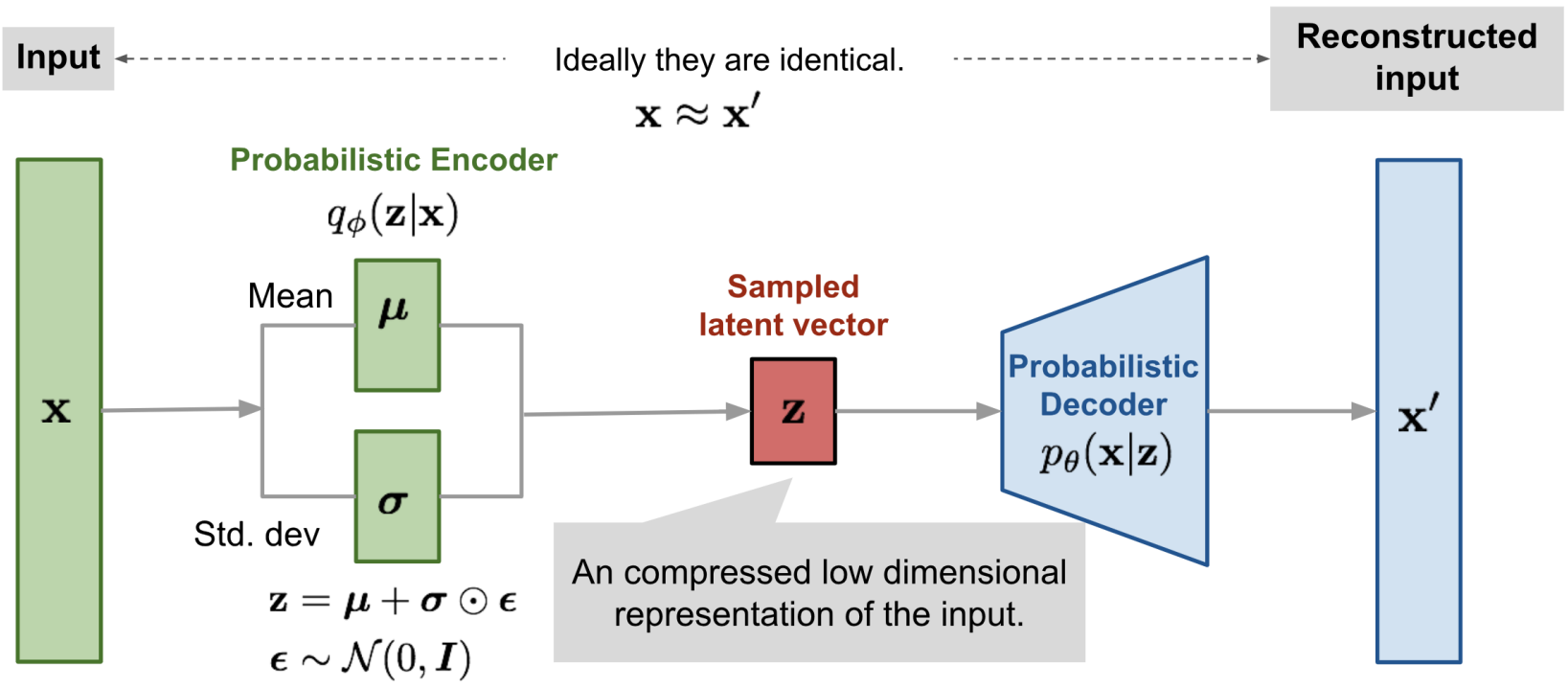
Denoising-Autoencoders



[3]

[3] Tomado de https://lilianweng.github.io/posts/2018-08-12-vae/

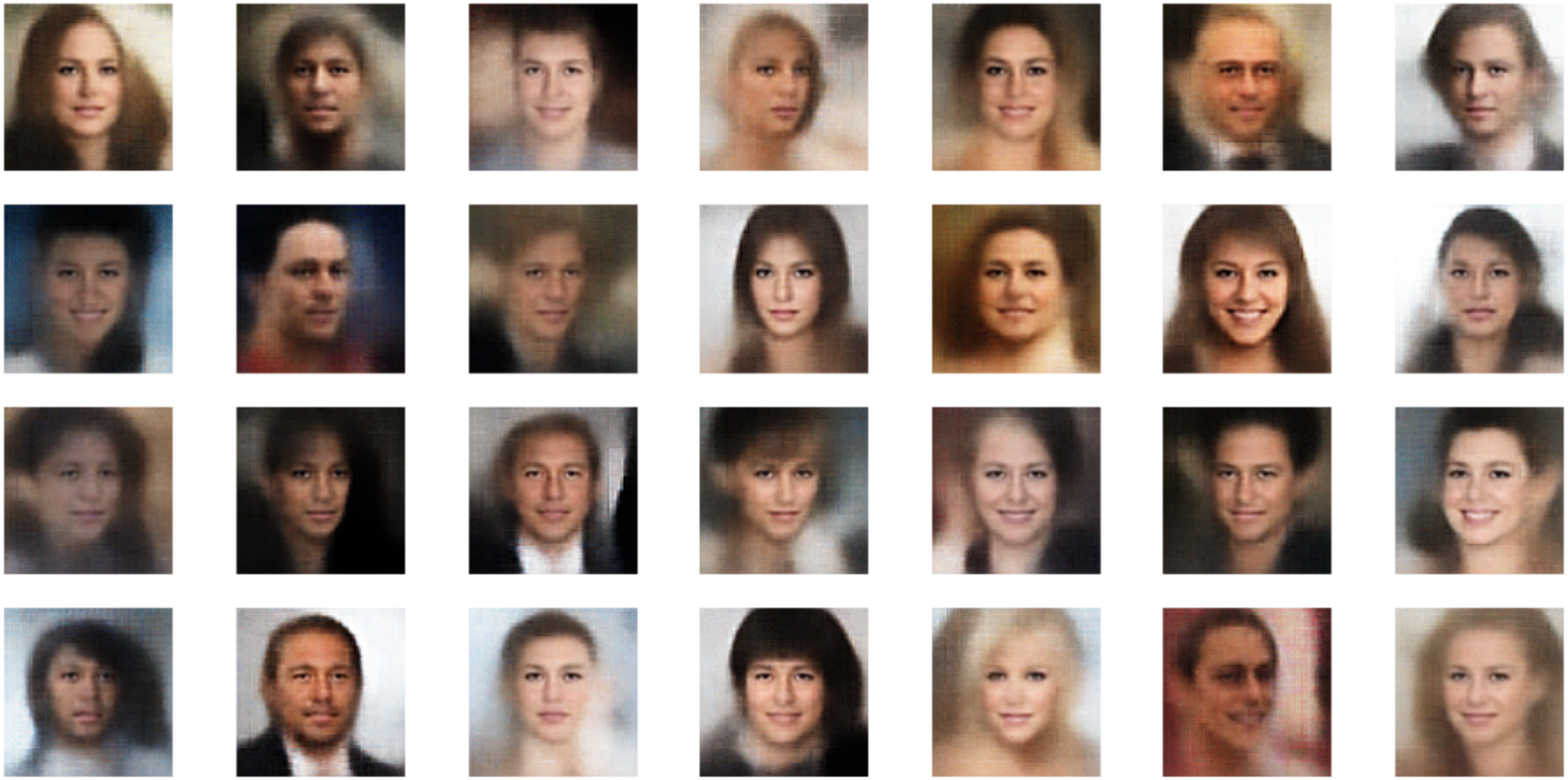
Variational Autoencoders: A Generative Model



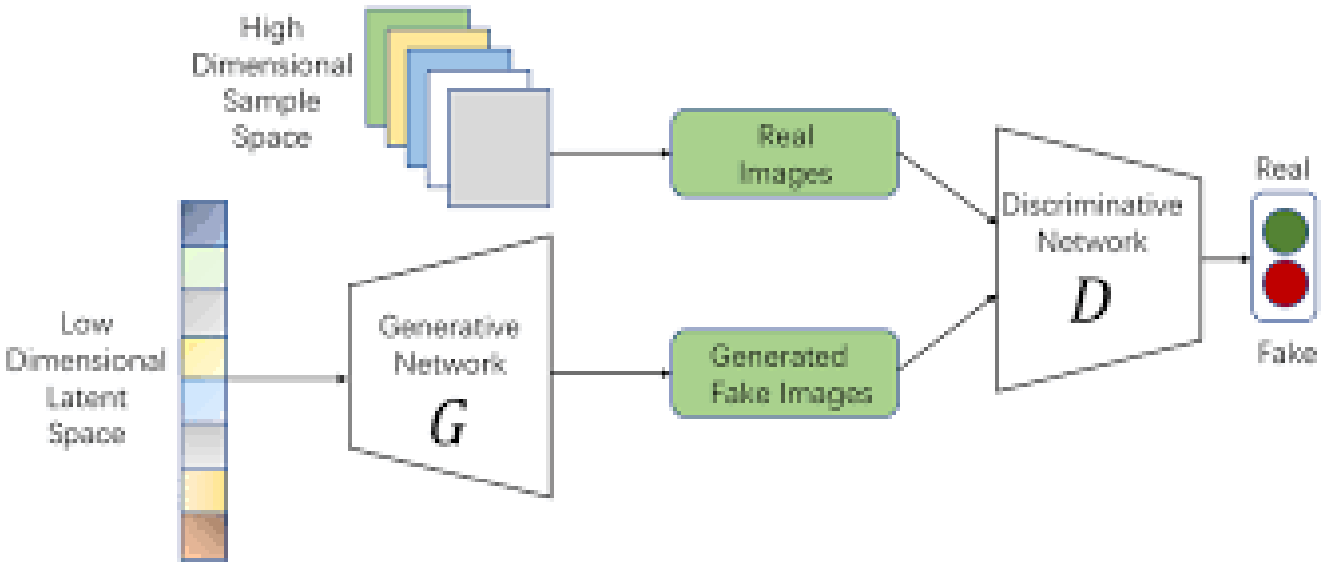
[4]

[4] Tomado de https://lilianweng.github.io/posts/2018-08-12-vae/

Variational Autoencoders: A Generative Model



Generative Adversarial Networks (GANs)



[5]

[5] fuente:https://www.linkedin.com/pulse/what-generative-adversarial-networks-gans-sushant-babbar-qpc9c

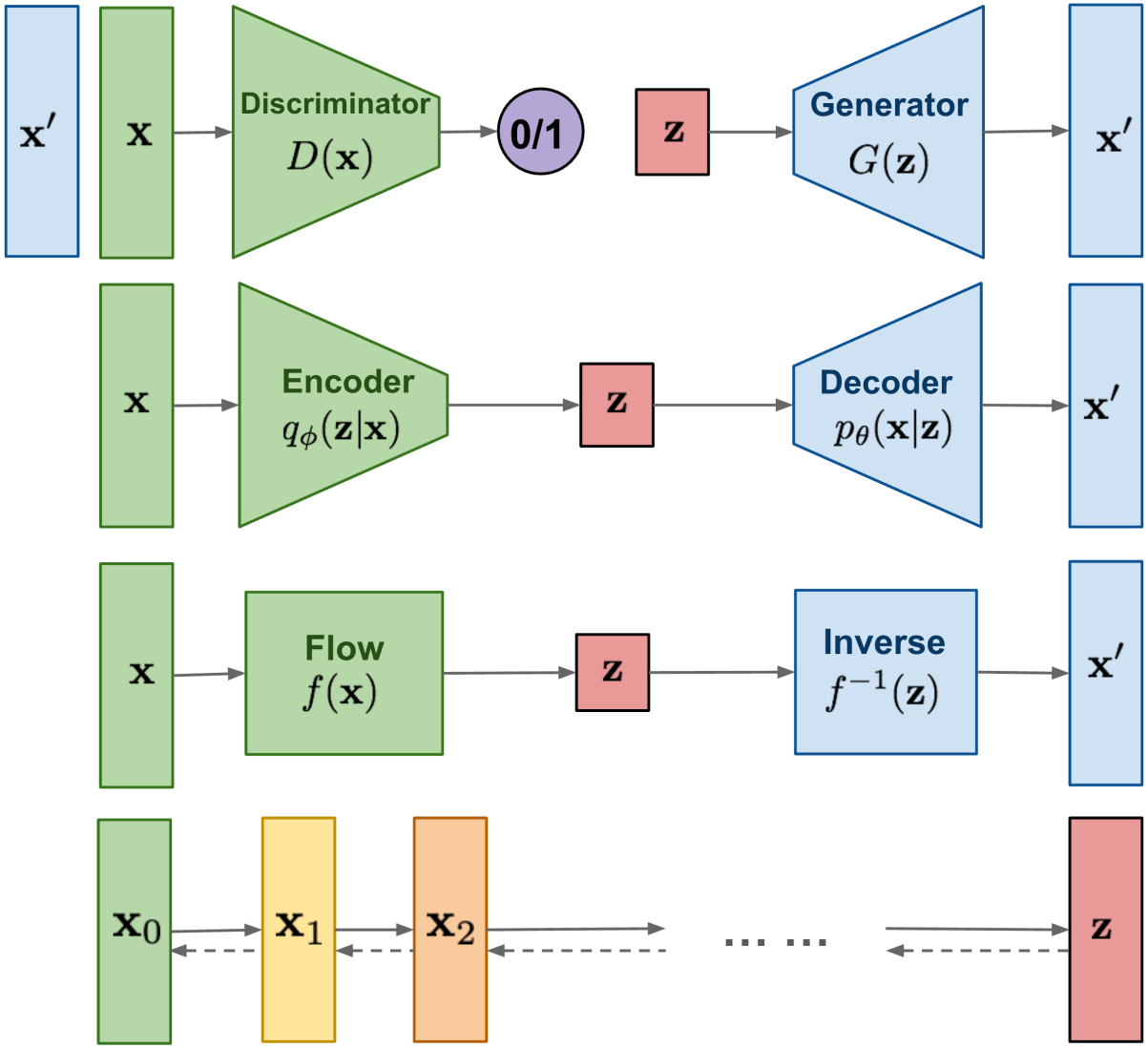
Difussion Models

GAN: Adversarial training

VAE: maximize variational lower bound

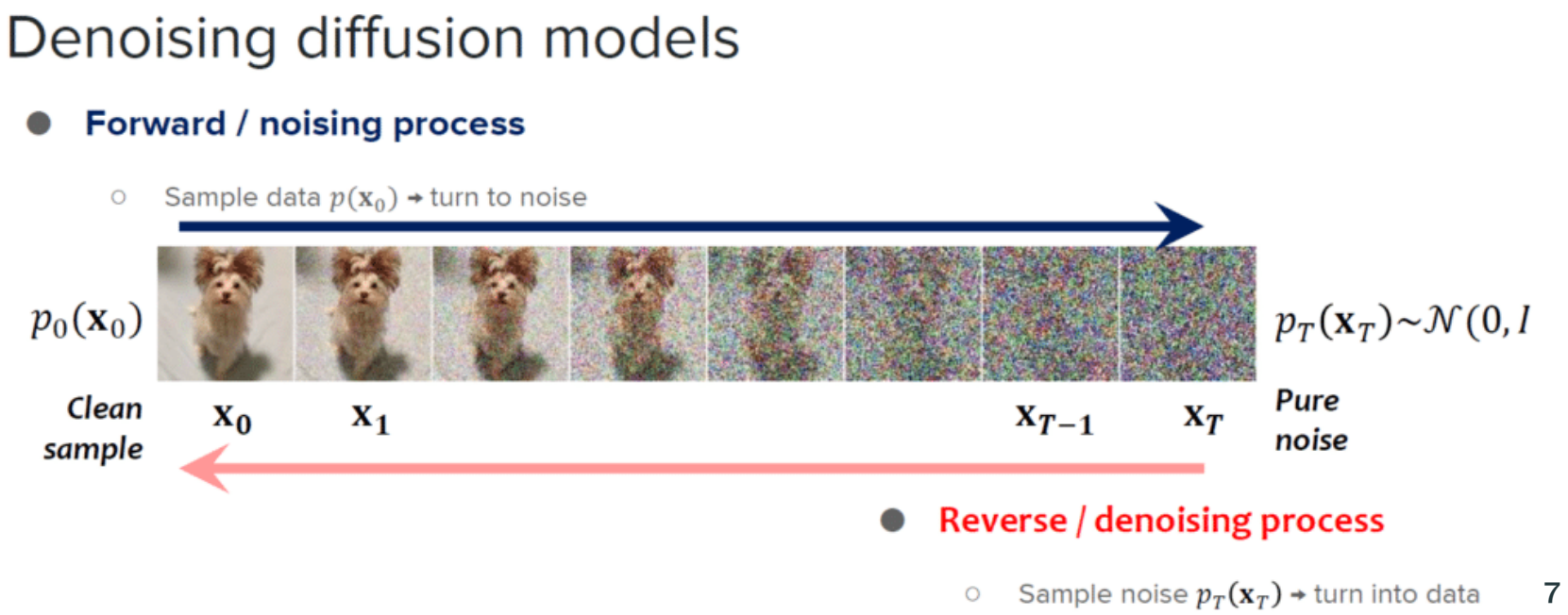
Flow-based models: Invertible transform of distributions

Diffusion models: Gradually add Gaussian noise and then reverse



[6]

[6] Fuente: https://lilianweng.github.io/posts/2021-07-11-diffusion-models/



[7] Fuente: https://arxiv.org/pdf/2011.13456

Difussion Models

[8]

[8] Fuente: https://arxiv.org/pdf/2011.13456