Aprendizaje automatizado

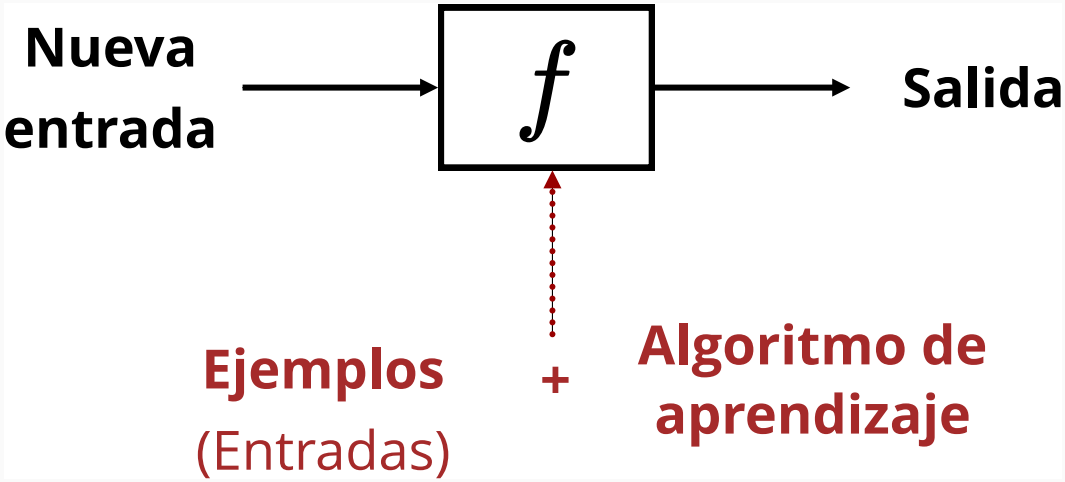
Aprendizaje sin supervisión y modelos de variables latentes

Gibran Fuentes Pineda

Abril 2020

Aprendizaje sin supervisión

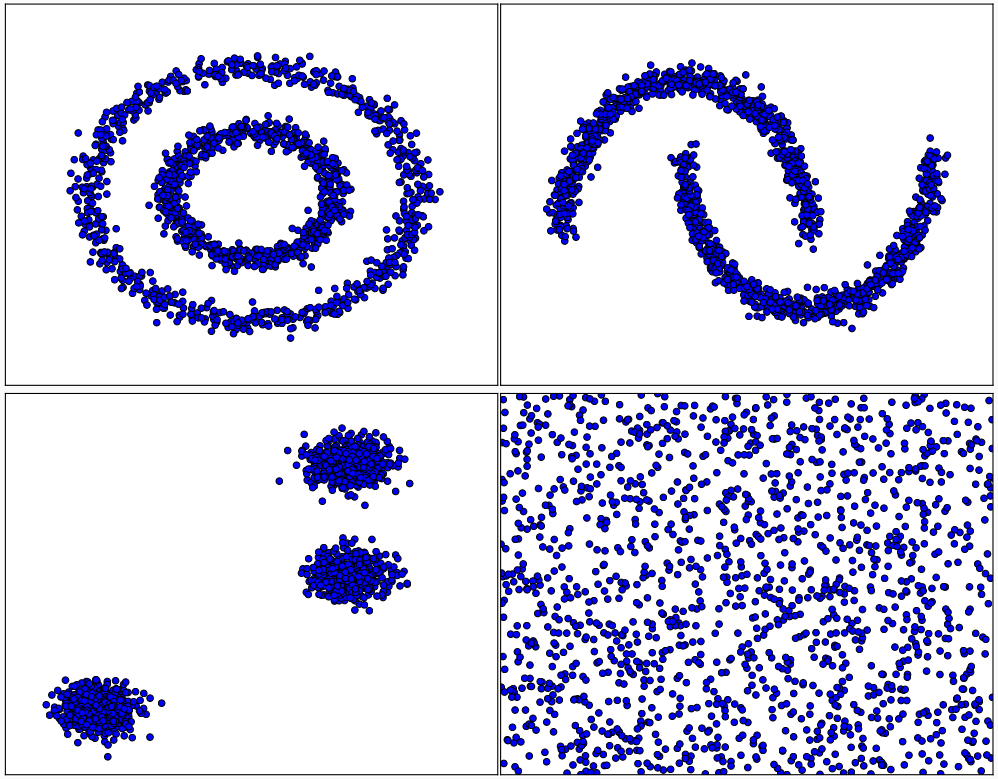
- Ejemplos sólo contienen entradas sin salidas deseadas
- Algunas tareas: el agrupamiento y el descubrimiento de patrones



- Busca encontrar la estructura escondida de los datos sin necesitar etiquetas

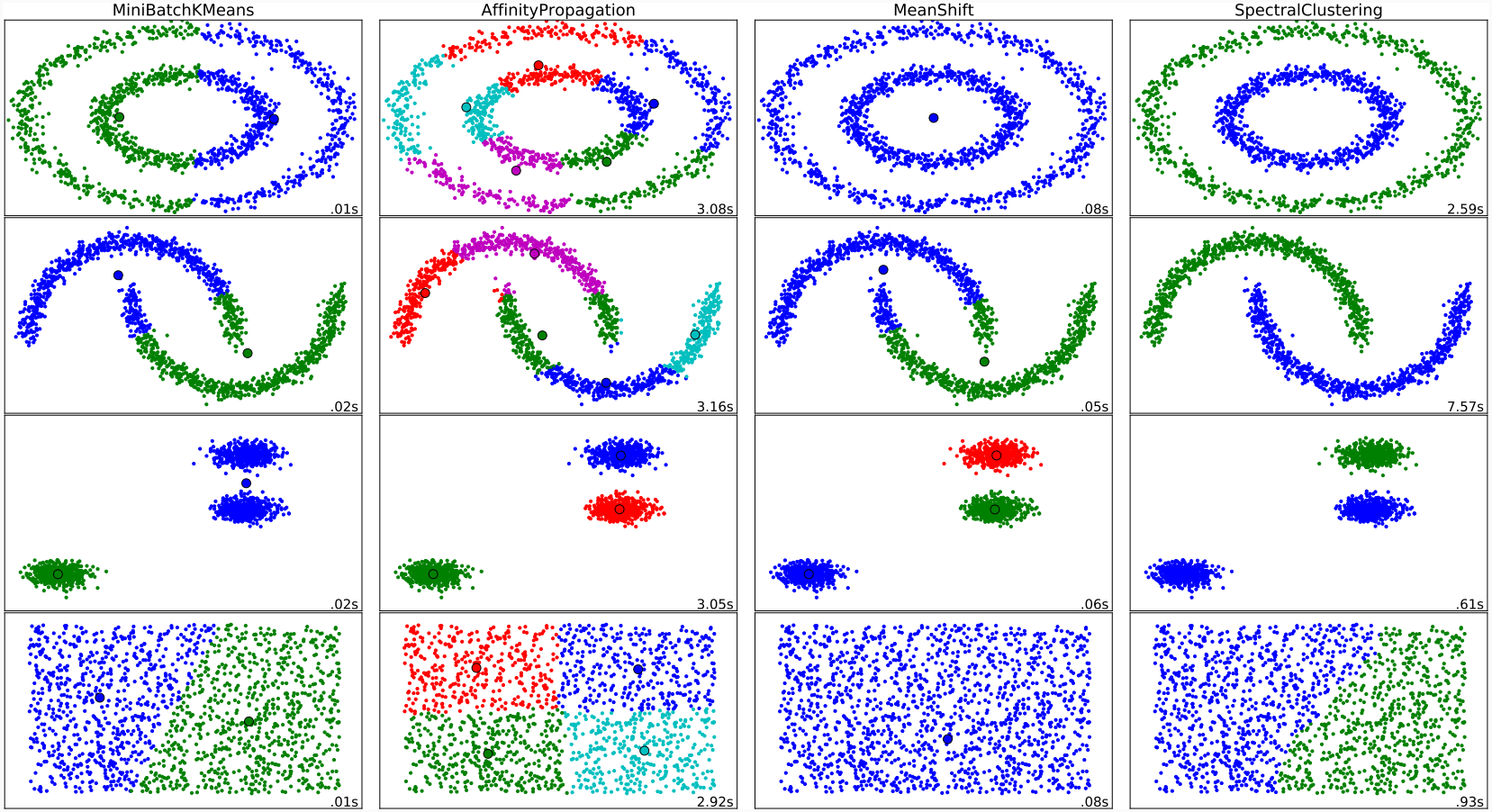
Agrupamiento

- Objetivo: agrupar ejemplos en base a su proximidad
- Criterios: por conectividad y por compacidad



Ejemplo de `http://scikit-learn.org`

Diferentes algoritmos de agrupamiento



Ejemplo de `http://scikit-learn.org`

Agrupamiento por K-medias

- Divide ejemplos en K grupos, asignando cada ejemplo al grupo con el centroide más cercano

- Busca los K centroides que minimicen

$$E[\boldsymbol{\mu}_1, \ldots, \boldsymbol{\mu}_K] = \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{K} r_{ik} \|\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k\|^2$$

  donde $r_{ik} = 1$ si $\boldsymbol{\mu}_k$ es el centroide más cercano a $\mathbf{x}_i$ y $r_{ik} = 0$ en caso contrario

Algoritmo de K-medias

1. Elige *K* ejemplos aleatoriamente como centroides iniciales

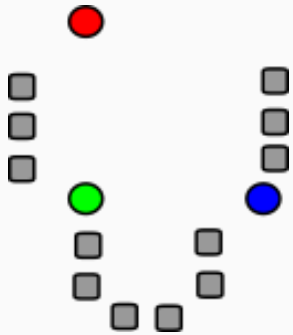


Imagen tomada de Wikipedia (K-means clustering)

Algortimo de K-medias

1. Elige *K* ejemplos aleatoriamente como centroides iniciales
2. Asigna cada ejemplo al centroide más próximo

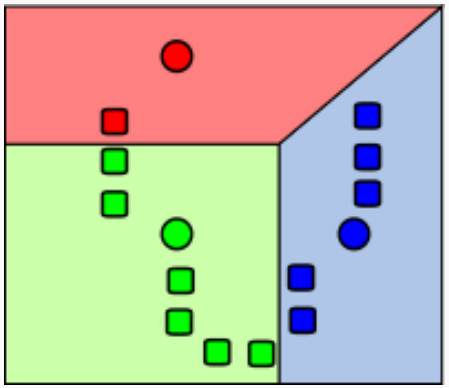


Imagen tomada de Wikipedia (K-means clustering)

Algoritmo de K-medias

1. Elige K ejemplos aleatoriamente como centroides iniciales
2. Asigna cada ejemplo al centroide más próximo
3. Re-calcula los centroides a partir de las asignaciones

$$\boldsymbol{\mu}_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i=1}^{n} r_{ik} \mathbf{x}_i, n_k = \sum_{i=1}^{n} r_{ik}, k = 1, \ldots, K$$

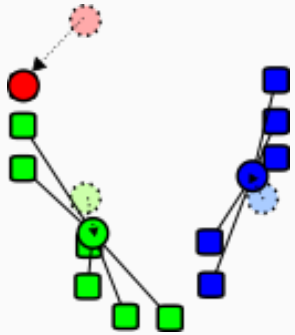


Imagen tomada de Wikipedia (K-means clustering)

Algoritmo de K-Means

1. Elige *K* ejemplos aleatoriamente como centroides iniciales
2. Asigna cada ejemplo al centroide más próximo
3. Re-calcula los centroides a partir de las asignaciones
4. Repite hasta cumplir criterio de convergencia (por ej. que *E* no disminuya)

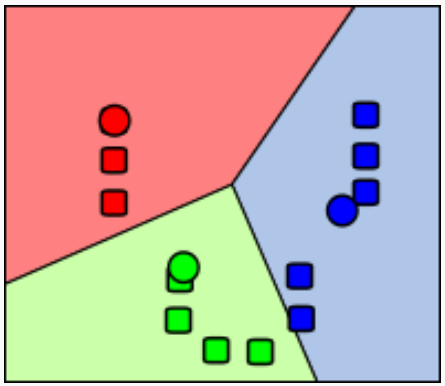


Imagen tomada de Wikipedia (K-means clustering)

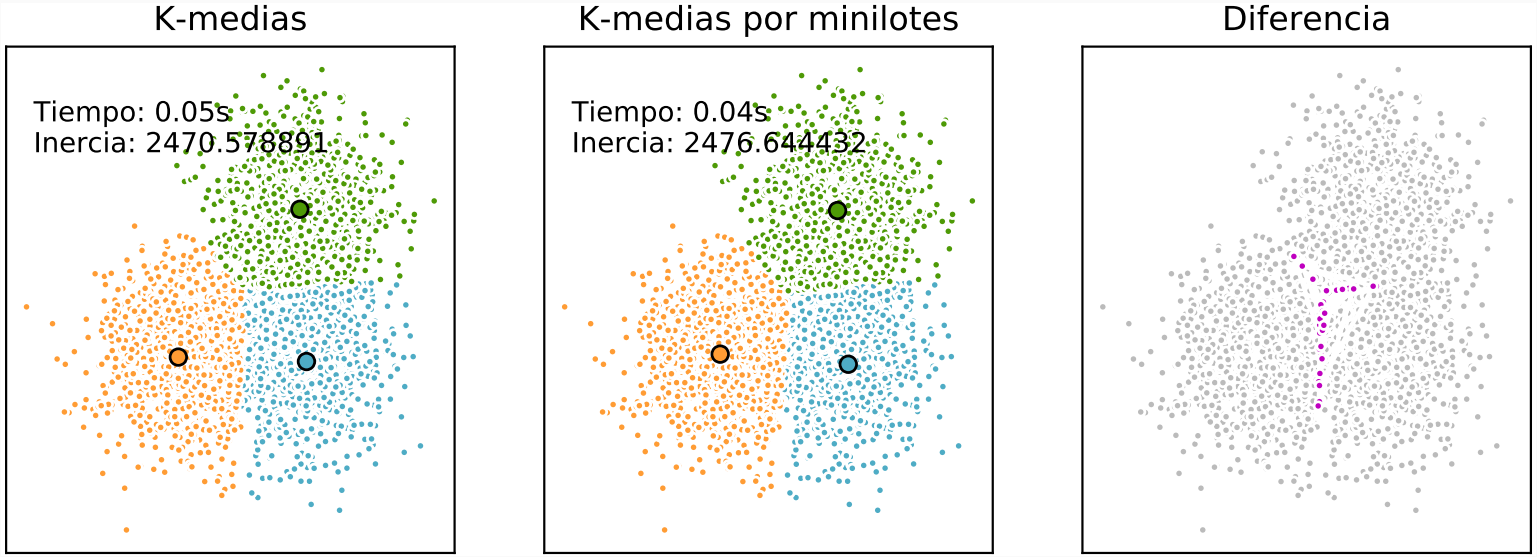
Agrupamiento de imágenes de dígitos con K-medias

- El algoritmo de K-medias genera una partición del espacio representado por el diagrama de Voronoi en el que cada punto está asociado al centroide más próximo.

Ejemplo de `http://scikit-learn.org`

K-medias por minilotes[1]

- Actualiza centroides y asignaciones usando un ejemplo o un subconjunto pequeño de ejemplos a la vez



Ejemplo de `http://scikit-learn.org`

[1] D. Sculley. *Web-Scale K-Means Clustering*, 2010.

Agrupamiento jerárquico

- Construye de forma gradual una jerarquía de grupos siguiendo un criterio dado
  - **Aglomerativo**: empieza considerando cada dato como un grupo y va mezclando grupos
  - **Divisivo**: empieza considerando todos los datos como un solo grupo y lo va dividiendo
- Dados dos grupos $\{\mathcal{G}_i, \mathcal{G}_j\}$, algunos criterios son
  - Mínimo o simple: $\textbf{mín}\,\{dist(\mathbf{x}, \mathbf{y}) : \mathbf{x} \in \mathcal{G}_i, \mathbf{y} \in \mathcal{G}_j\}$
  - Completo o máximo: $\textbf{máx}\,\{dist(\mathbf{x}, \mathbf{y}) : \mathbf{x} \in \mathcal{G}_i, \mathbf{y} \in \mathcal{G}_j\}$
  - Promedio

$$\frac{1}{\mid \mathcal{G}_i \mid\mid \mathcal{G}_j \mid} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{G}_i} \sum_{\mathbf{y} \in \mathcal{G}_j} dist(\mathbf{x}, \mathbf{y})$$

  - Mínima varianza: elige el par de grupos en el que la varianza intergrupal se incremente menos

Dendogramas

- Diagrama jerárquico que muestra los agrupamientos en distintos niveles

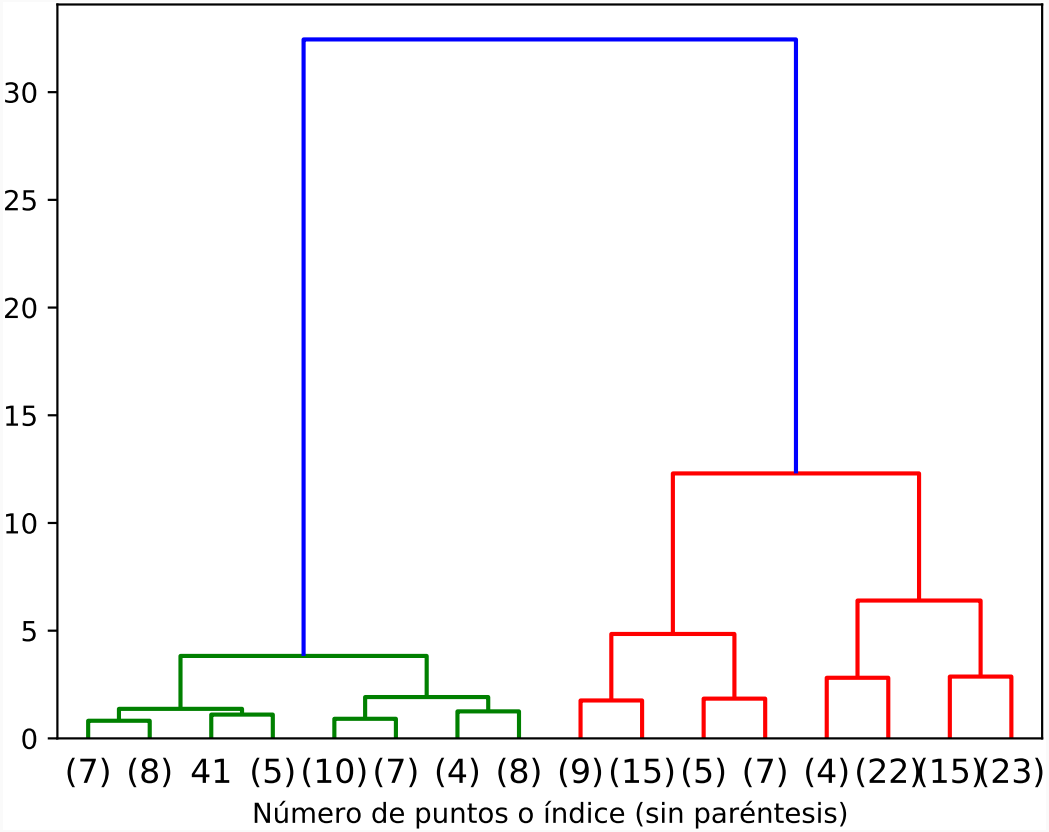


Imagen generada por ejemplo de scikit-learn

Agrupamiento espectral

- Se calcula la matriz laplaciana $\mathbf{L}$ a partir de la matriz de adyacencia o afinidad $\mathbf{A}$ de la siguiente manera
  - **Sin normalizar**

$$\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{A}$$

  - **Normalizada simétrica**

$$\mathbf{L}_{\text{sim}} = \mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{L}\mathbf{D}^{-1/2} = \mathbf{I} - \mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{A}\mathbf{D}^{-1/2}$$

  - **Caminata aleatoria**

$$\mathbf{L}_{\text{ca}} = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{L} = \mathbf{I} - \mathbf{D}^{-1}\mathbf{A}$$

- Se realiza el agrupamiento usando K-medias sobre los puntos representados por los K eigenvectores con mayores eigenvalores de la matriz laplaciana $\mathbf{L}$

Modelando con variables latentes

- En muchos fenómenos las observaciones (variables observadas) dependen de variables no directamente visibles (variables latentes)

- Un modelo con variables no visibles se conoce como **modelo de variable latente** (MVL)

- Ventajas
  1. Son modelos más compactos en general
  2. Es posible aprender ciertas estructuras en los datos sin supervisión

Dependencia local en MVLs

- Suposición: relación entre variables observadas se da únicamente a través de variables latentes

- Ejemplo (de Lazarsfeld and Henry): 1000 personas fueron encuestadas sobre si leen la revista A y B.

	Leyó A	No leyó A	Total
Leyó B	260	140	400
No leyó B	240	360	600
Total	500	500	1000

Dependencia local en MVLs

- Suposición: relación entre variables observadas se da únicamente a través de variables latentes

- Ejemplo (de Lazarsfeld and Henry): 1000 personas fueron encuestadas sobre si leen la revista A y B.

High education	Read A	Did not read A	Total
Read B	240	60	300
Did not read B	160	40	200
Total	400	100	500
Low education	**Read A**	**Did not read A**	**Total**
Read B	20	80	100
Did not read B	80	320	400
Total	100	400	500

Tipos de MVLs

- Los modelos de variables latentes se pueden clasificar por la naturaleza de sus variables latentes y observadas

	V. observadas	
V. latentes	**Continua**	**Categórica**
Continua	Análisis de factores	Teoría de la respuesta al reactivo
Discreta	Modelo de mezclas	Análisis de clases latentes

Modelos de mezclas

- Variable latente discreta $z \in \{1, \ldots, K\}$

$$z \sim Cat(\boldsymbol{\pi})$$

- K distribuciones base $P(\mathbf{x}|z = k) = f_k(\mathbf{x})$

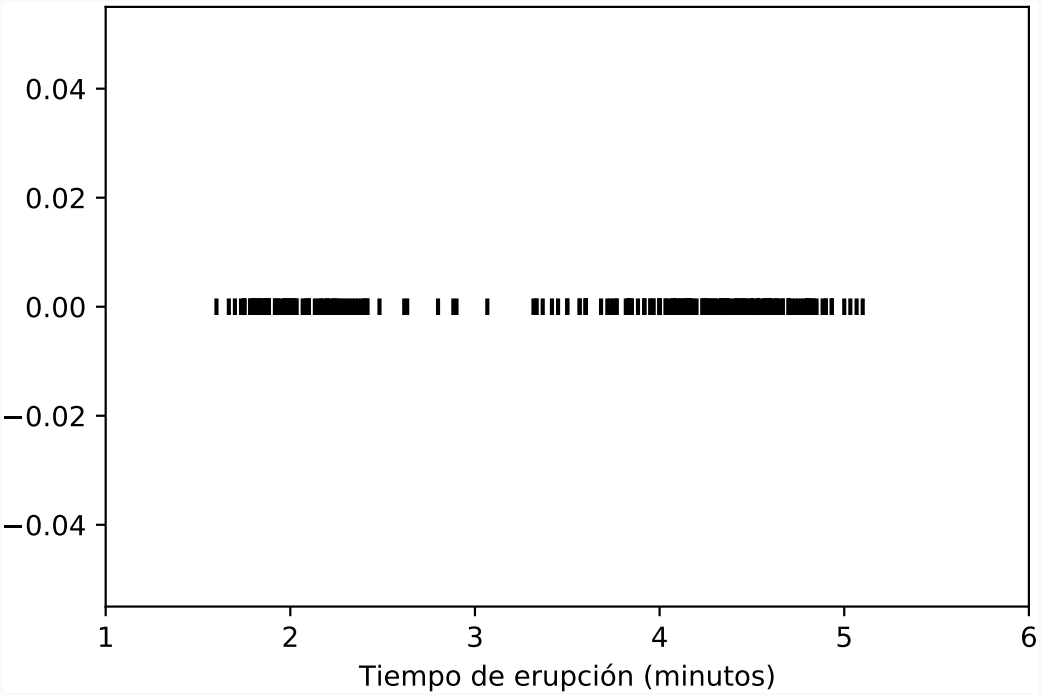
$$\mathbf{x}|z \sim f_k(\mathbf{x})$$

- Distribución de $\mathbf{x}$ se puede expresar como

$$P(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{K} \pi_k f_k(\mathbf{x})$$

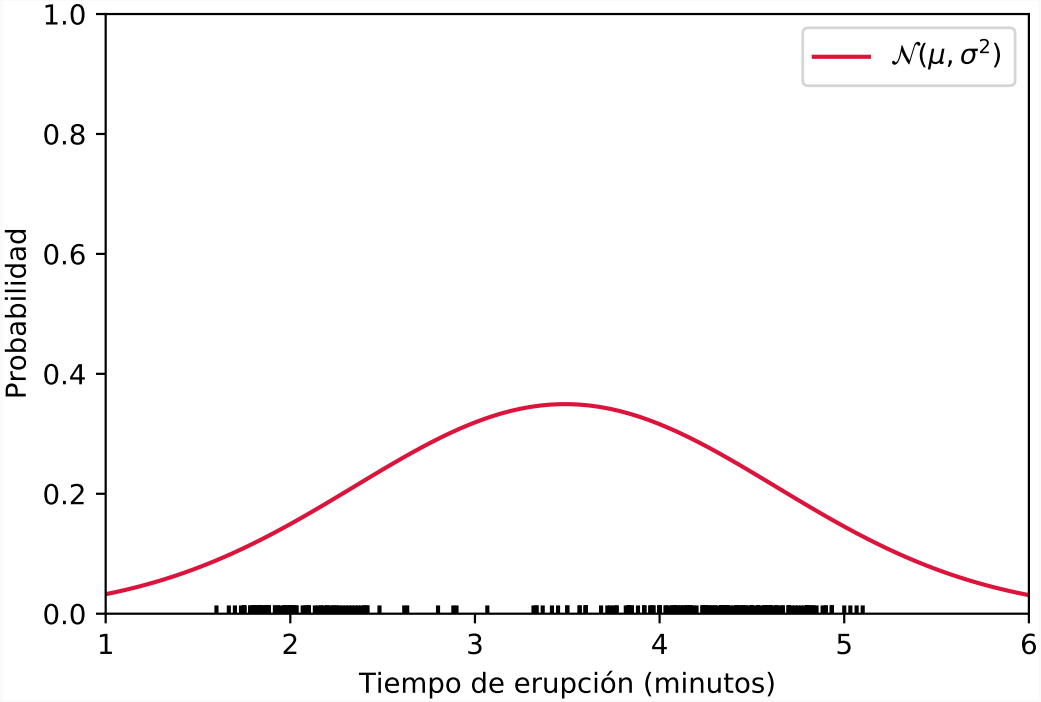
Modelos de mezclas: representando distribuciones complejas

- ¿Qué distribución podríamos presuponer para los siguientes datos?



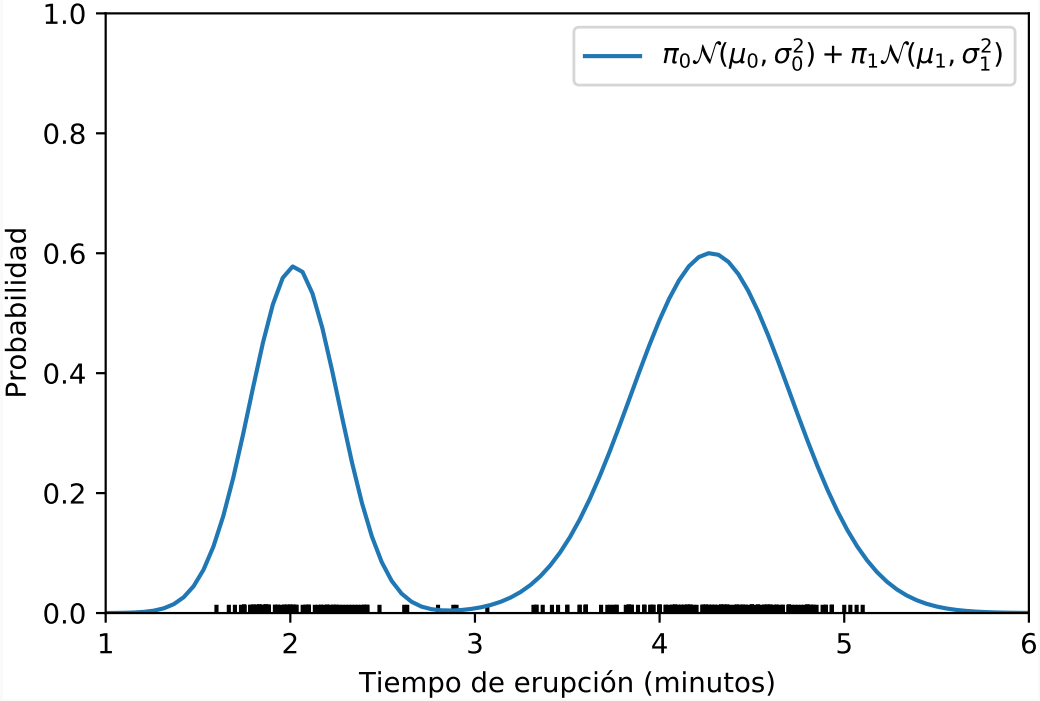
Modelos de mezclas: representando distribuciones complejas

- ¿Qué distribución podríamos presuponer para los siguientes datos?



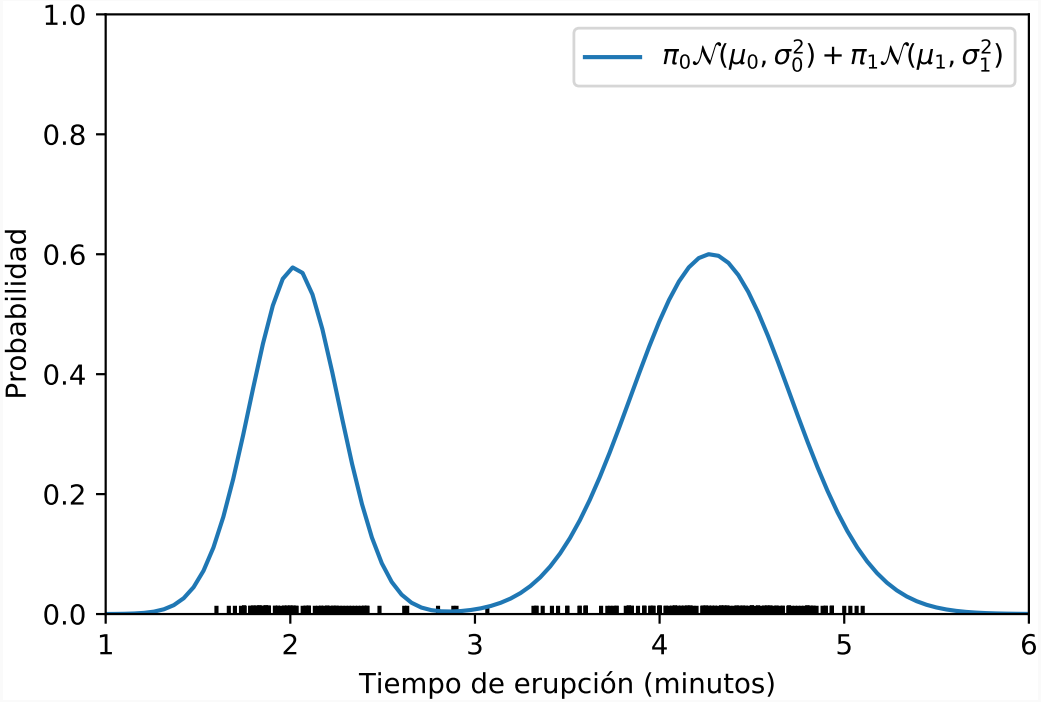
Modelos de mezclas: representando distribuciones complejas

- ¿Qué distribución podríamos presuponer para los siguientes datos?



Modelos de mezclas: representando distribuciones complejas

- ¿Qué distribución podríamos presuponer para los siguientes datos?



- ¿Cómo estimamos los parámetros?

Mezclas gaussianas

- K distribuciones base $f_k(\mathbf{x})$ gaussianas

$$\mathbf{x}|z \sim \mathcal{N}(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k) \Rightarrow P(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)$$

- La verosimilitud logarítmica está dada por

$$\log\{P(\mathcal{D}|\boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})\} = \sum_{i=1}^{N} \log\left\{\sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}^{(i)}|\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)\right\}$$

- No hay solución cerrada analítica, necesitamos usar algoritmos de optimización iterativa.

Esperanza-Maximización

- Algoritmo para estimar parámetros por máxima verosimilitud o máximo a posteriori en problemas con datos faltantes y modelos de variables latentes

- Procedimiento general
  1. **Paso E**: inferir valores faltantes o de variales latentes
  2. **Paso M**: optimizar parámetros usando datos inferidos

EM para estimación por máxima verosimilitud

- Considera que el conjunto de ejemplos está dado por los valores tanto de las variables observadas como las variables latentes $\{\mathcal{D}, \mathsf{Z}\}$

- Busca encontrar los valores de los parámetros $\boldsymbol{\theta}$ que maximicen la verosimilitud logarítmica de $\{\mathcal{D}, \mathsf{Z}\}$

$$\boldsymbol{\theta} = \arg\max_{\boldsymbol{\theta}} \log \left\{ \sum_{\mathsf{Z}} P(\mathcal{D}, \mathsf{Z}|\boldsymbol{\theta}) \right\}$$

Esperanza: paso E

- Como los valores de las variables latentes Z no se conocen, se calcula la distribución a posteriori $P(\mathsf{Z}|\mathcal{D}, \boldsymbol{\theta}^{viejo})$ con los parámetros actuales $\boldsymbol{\theta}^{viejo}$

$$P(\mathsf{Z}|\mathcal{D}, \boldsymbol{\theta}^{viejo}) = \frac{P(\mathcal{D}|\mathsf{Z}, \boldsymbol{\theta}^{viejo})P(\mathsf{Z}|\boldsymbol{\theta}^{viejo})}{P(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}^{viejo})}$$

Maximización: paso M

- Se asignan parámetros que maximizan la esperanza de la verosimilitud logarítmica usando $P(\mathsf{Z}|\mathcal{D}, \boldsymbol{\theta}^{viejo})$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\theta}^{nuevo} &= \arg\max_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{viejo}) \\
&= \arg\max_{\boldsymbol{\theta}} \mathbb{E}_{\mathsf{Z}|\mathcal{D},\boldsymbol{\theta}^{viejo}} \left[\log \left\{ \sum_{\mathsf{Z}} P(\mathcal{D}, \mathsf{Z}|\boldsymbol{\theta}) \right\} \right] \\
&= \sum_{\mathsf{Z}} P(\mathsf{Z}|\mathcal{D}, \boldsymbol{\theta}^{viejo}) \log \{P(\mathcal{D}, \mathsf{Z}|\boldsymbol{\theta})\}
\end{aligned}$$

EM general

1. Initializa parámetros $\boldsymbol{\theta}$
2. **Paso E:** Evaluar $P(\mathsf{Z}|\mathcal{D}, \boldsymbol{\theta}^{viejo})$
3. **Paso M:** Re-estimar parámetros

$$\boldsymbol{\theta}^{nuevo} = \arg\max_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{Q}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}^{viejo})$$

4. Repetir 2 y 3 hasta que se cumpla el criterio de convergencia

Distribución a posteriori para modelo de mezclas gaussianas

- Probabilidad a posteriori $P(z = k|\mathbf{x}^{(i)})(responsabilidad)$ está dada por

$$P(z^{(i)} = k|\mathbf{x}^{(i)}) = \gamma(z_{ik}) = \frac{\pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}^{(i)}|\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)}{\sum_{j=1}^{K} \pi_j \mathcal{N}(\mathbf{x}^{(i)}|\boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)}$$

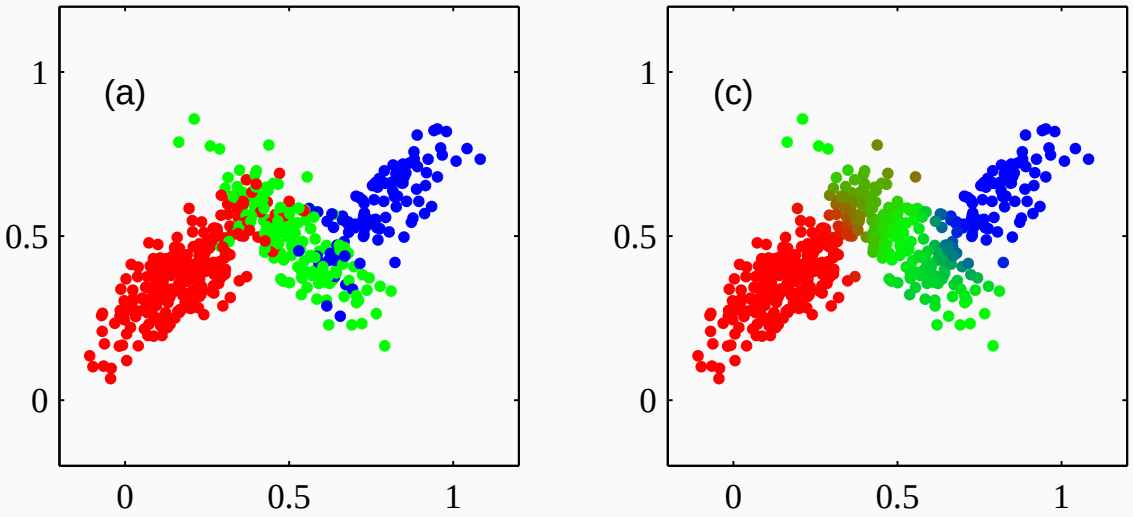


Imagen tomada de Bishop, PRML 2007

EM para modelos de mezclas gaussianas

1. Inicializa $\boldsymbol{\mu}_k$, $\boldsymbol{\Sigma}_k$ y $\boldsymbol{\pi}_k$
2. **Paso E**: Evalúa responsabilidades con parámetros actuales

$$\gamma(z_{ik}) = \frac{\pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}^{(i)} | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)}{\sum_{j=1}^{K} \pi_j \mathcal{N}(\mathbf{x}^{(i)} | \boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)}$$

3. **Paso M**: Recalcula parámetros $\boldsymbol{\mu}_k$, $\boldsymbol{\Sigma}_k$ y $\boldsymbol{\pi}_k$ a partir de $\gamma(z_{nk})$

$$n_k = \sum_{i=1}^{n} \gamma(z_{ik})$$

$$\boldsymbol{\mu}_k^{nuevo} = \frac{1}{n_k} \sum_{i=1}^{n} \gamma(z_{ik}) \cdot \mathbf{x}^{(i)}$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_k^{nuevo} = \frac{1}{n_k} \sum_{i=1}^{n} \gamma(z_{ik}) \cdot (\mathbf{x}^{(i)} - \boldsymbol{\mu}_k^{nuevo})(\mathbf{x}^{(i)} - \boldsymbol{\mu}_k^{nuevo})^T$$

$$\boldsymbol{\pi}_k^{nuevo} = \frac{n_k}{n}$$

4. Evalúa verosimilitud logarítmica

$$\log \left\{ P(\mathcal{D} | \boldsymbol{\mu}^{nuevo}, \boldsymbol{\Sigma}^{nuevo}, \boldsymbol{\pi}^{nuevo}) \right\}$$

Modelo de mezclas gaussianas y EM en acción

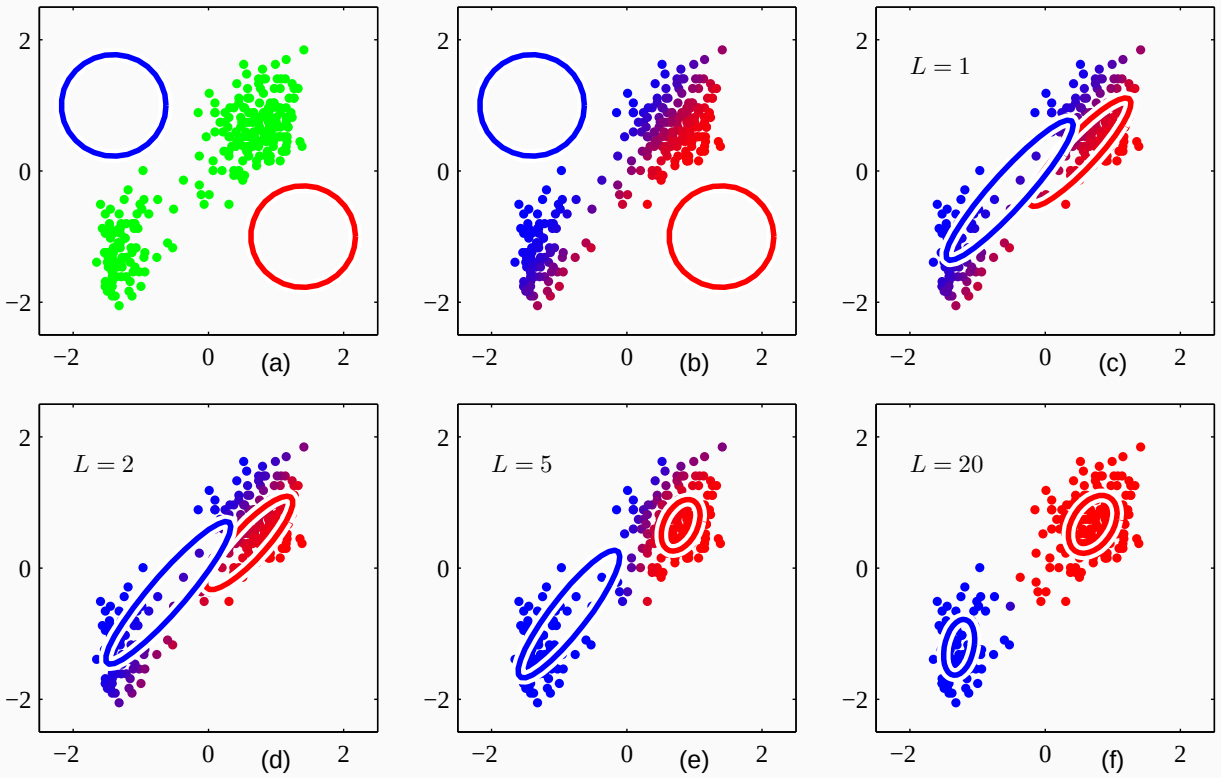


Imagen tomada de Bishop, PRML 2007

Modelo de mezclas de Bernoulli (análisis de clases latentes)

- Ejemplos con d variables binarias $\mathbf{x}^{(i)} = \{x_1, \ldots, x_d\}$

$$P(\mathbf{x}^{(i)}|\boldsymbol{\mu}) = \prod_{j=1}^{d} \mu_j^{x_j^{(i)}} \left(1 - \mu_j^{x_j^{(i)}}\right)^{\left(1-x_j^{(i)}\right)}$$

- Mezcla de K de estas distribuciones

$$P(\mathbf{x}^{(i)}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\pi}) = \sum_{k=1}^{K} \pi_k \cdot \left[\prod_{j=1}^{d} \mu_{kj}^{x_j^{(i)}} \left(1 - \mu_{kj}^{x_j^{(i)}}\right)^{\left(1-x_j^{(i)}\right)}\right]$$

donde $\boldsymbol{\mu} = \{\boldsymbol{\mu}_1, \ldots, \boldsymbol{\mu}_K\}$ y $\boldsymbol{\pi} = \{\pi_1, \ldots, \pi_K\}$

EM para modelo de mezclas de Bernoulli

1. Inicializa $\boldsymbol{\mu}_k$ y $\boldsymbol{\pi}_k$
2. **Paso E**: Evalúa responsabilidades con parámetros actuales

$$\gamma(z_{ik}) = \frac{\pi_k \cdot \left[\prod_{j=1}^{d} \mu_{kj}^{x_j^{(i)}} \left(1 - \mu_{kj}^{x_j^{(i)}}\right)^{\left(1-x_j^{(i)}\right)} \right]}{\sum_{l=1}^{K} \pi_l \cdot \left[\prod_{j=1}^{d} \mu_{lj}^{x_j^{(i)}} \left(1 - \mu_{lj}^{x_j^{(i)}}\right)^{\left(1-x_j^{(i)}\right)} \right]}$$

3. **Paso M**: Re-estima parámetros $\boldsymbol{\mu}_k$ y $\boldsymbol{\pi}_k$ a partir de $\gamma(z_{nk})$

$$\boldsymbol{\mu}_k = \sum_{i=1}^{n} \gamma(z_{ik}) \mathbf{x}^{(i)}$$

$$\pi_k = \frac{n_k}{n}$$

$$n_k = \sum_{i=1}^{n} \gamma(z_{ik})$$

4. Evalúa verosimilitud logarítmica $\log P(\mathcal{D}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\pi})$

Desventajas de EMV en MMG

- Singularidades: cuando una media es igual a un ejemplo $\mathbf{x}^{(i)} = \boldsymbol{\mu}_k$, la verosimilitud logarítmica se vuelve infinito ya que $\sigma_k \to 0$.

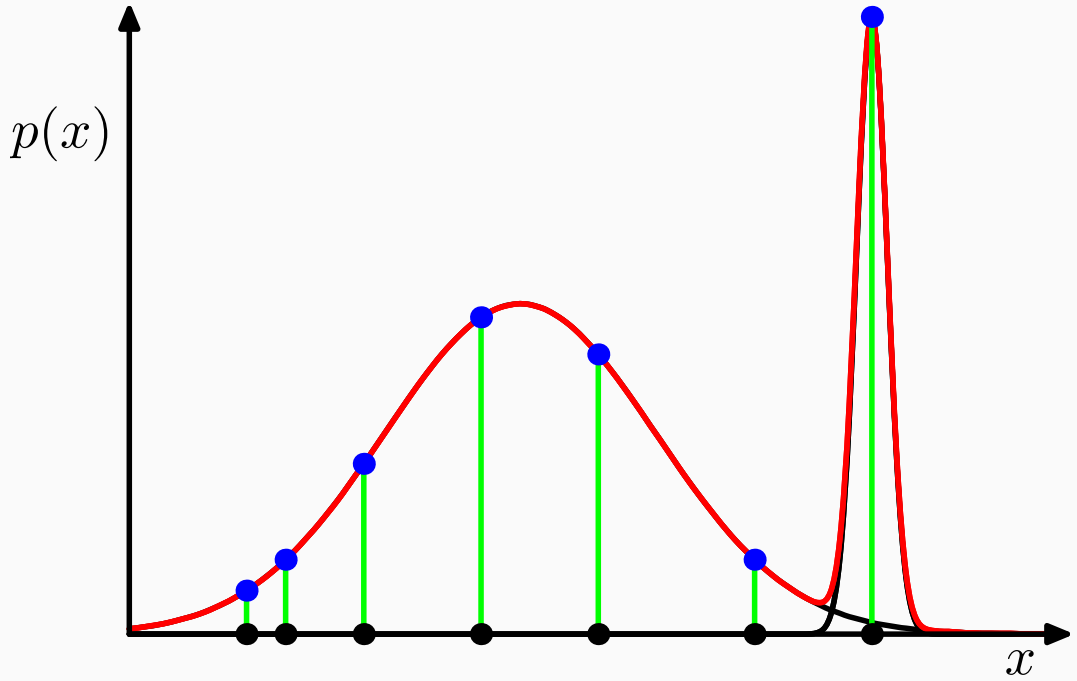


Figura tomada de Bishop, PRML 2007

Desventajas de EMV en MMG

- Singularidades: cuando una de las medias μ_k es exactamente igual a un dato.

- No identificabilidad: existen $K!$ soluciones equivalentes

La hipótesis de la variedad

- Ejemplos pueden vivir en una variedad de muchas menores dimensiones que el espacio original

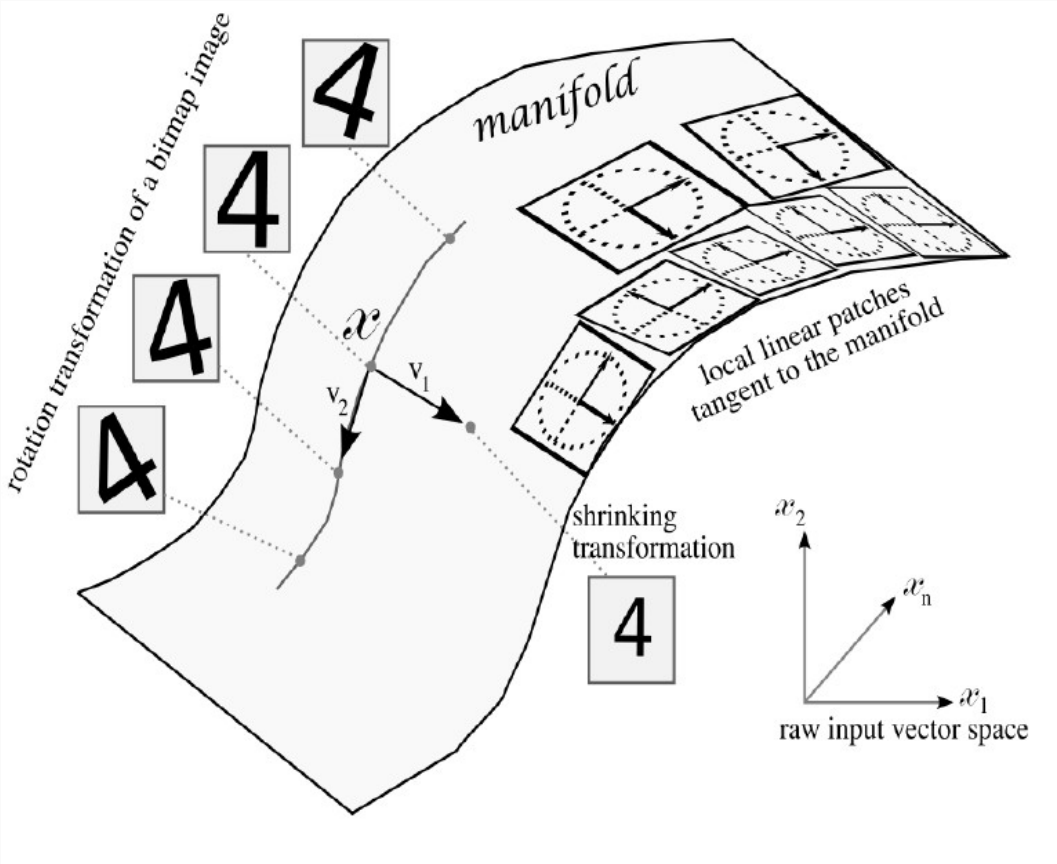


Imagen tomada de Bengio, MLSS 2015

Análisis de componentes principales (PCA)

- Busca subespacio de m dimensiones que maximiza varianza (o minimiza error) de los ejemplos
  - Definido por eigenvectores $\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_m$ con eigenvalores más grandes $\lambda_1, \ldots, \lambda_m$ de la matriz de covarianza

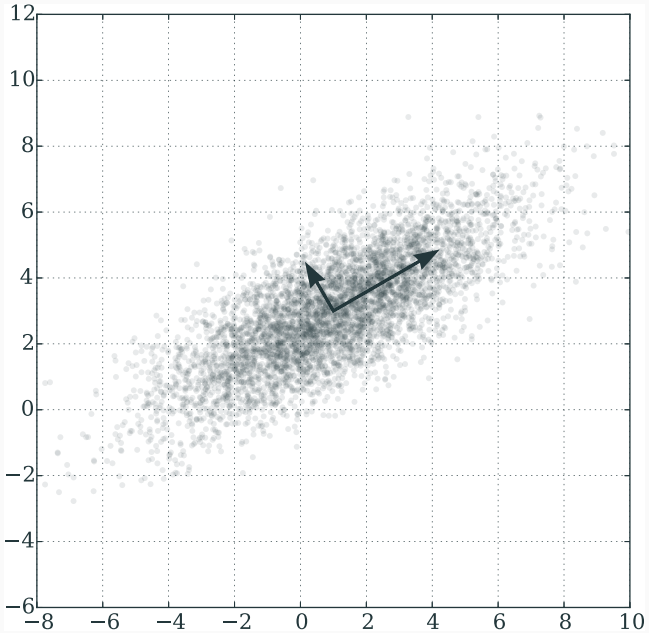
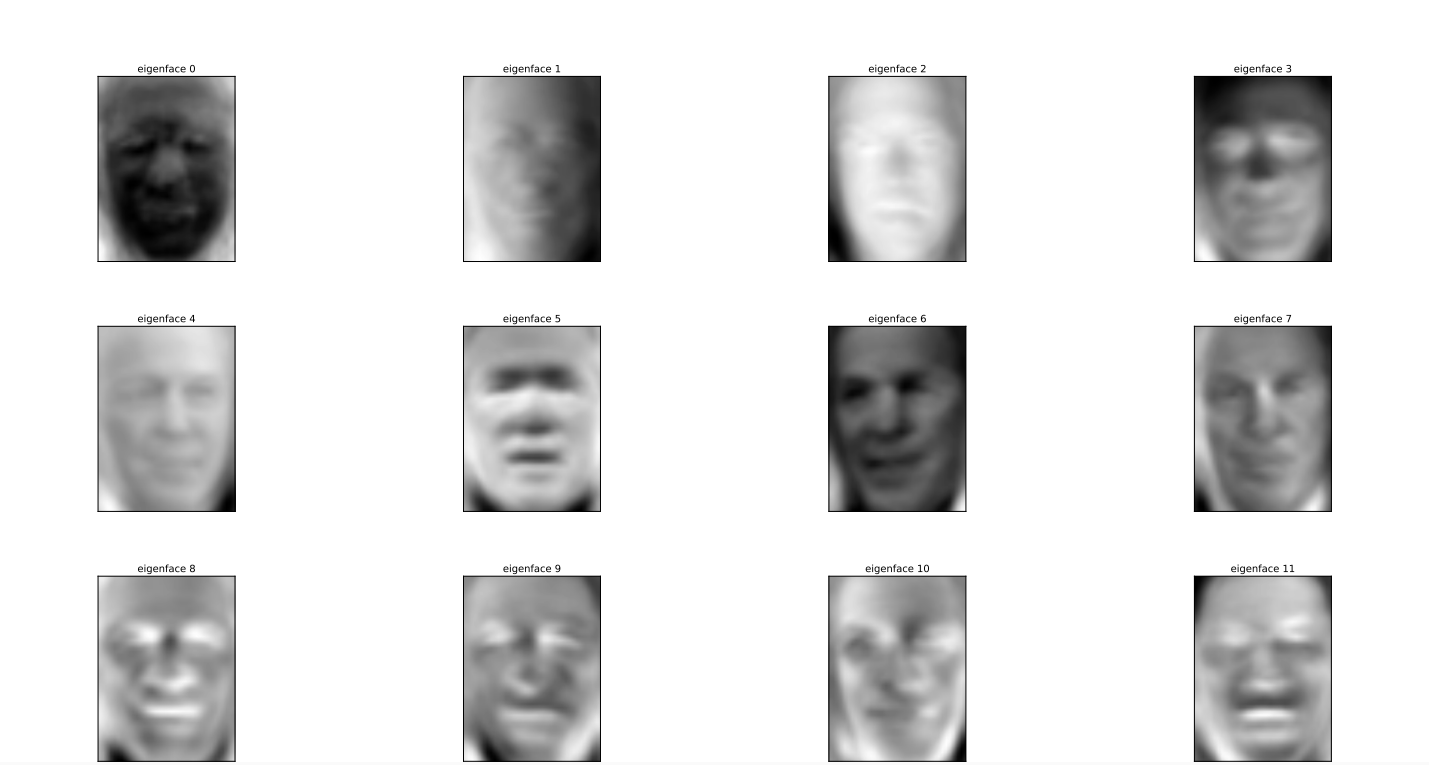


Figura tomada de Wikipedia (*Principal Component Analysis*)

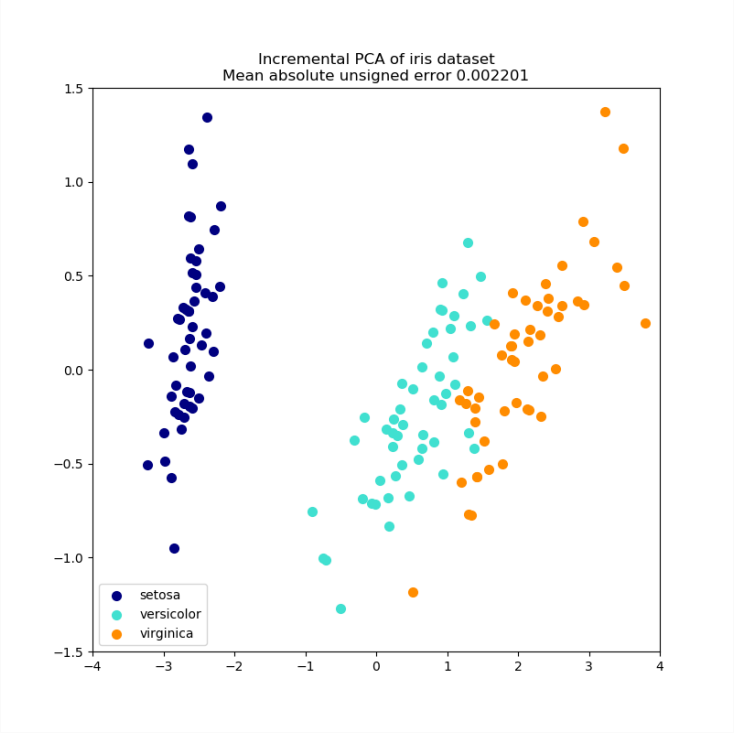
PCA aplicado a imágenes de rostros

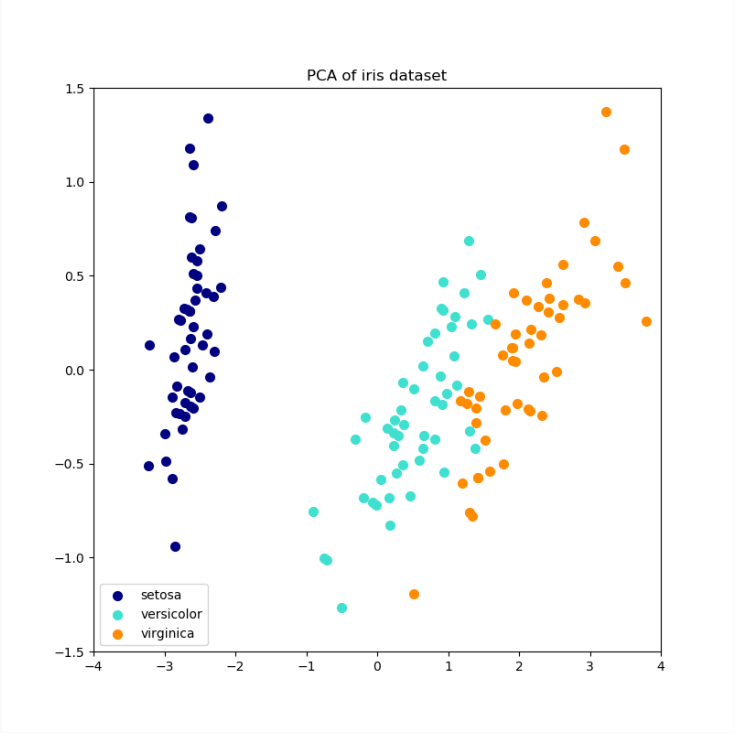
- Componentes principales se toman como base (**eigenfaces**)
- Nuevos rostros se proyectan en subespacio encontrado para ser comparados



Ejemplo de `http://scikit-learn.org`

PCA incremental





Ejemplo de `http://scikit-learn.org`

Análisis de factores: variables continuas (1)

- Variables latentes continuas $\mathsf{z} \in \mathbb{R}^K$, con a priori gaussiana

$$\mathsf{z} \sim \mathcal{N}(\mathsf{z}|\boldsymbol{\mu}_0, \boldsymbol{\Sigma}_0)$$

- Variables observadas continuas $\mathsf{x} \in \mathbb{R}^d$ con[2]

$$\mathsf{x}|\mathsf{z} \sim \mathcal{N}(\mathsf{W}\mathsf{z} + \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Psi})$$

- Distribución sobre x está dada por

$$P(\mathsf{x}) = \int P(\mathsf{x}|\mathsf{z})P(\mathsf{z})d\mathsf{z} = \mathcal{N}(\mathsf{x}|\boldsymbol{\mu}, \mathsf{C})$$

donde $\mathsf{C} = \mathsf{W}\mathsf{W}^\top + \sigma^2\mathsf{I}$

[2]Cuando $\boldsymbol{\Psi} = \sigma^2\mathsf{I}$, $\boldsymbol{\mu}_0 = \mathbf{0}$ y $\boldsymbol{\Sigma}_0 = \mathsf{I}$, se conoce como *análisis de componentes principales probabilista* (PPCA).

Proceso generativo de PPCA

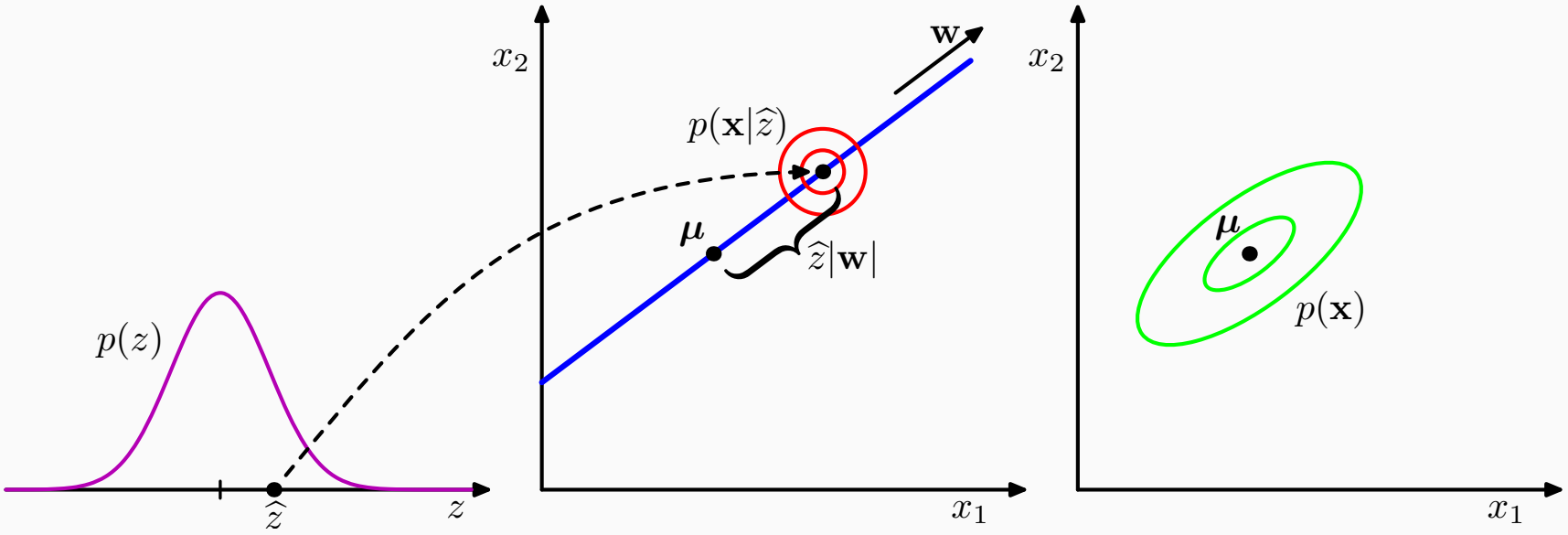


Imagen tomada de Bishop, PRML 2007

EM para PCA

- Presuponiendo $\sigma^2 = 0$, se pueden encontrar parámetros de PCA por máxima verosimilitud usando el algoritmo EM

  1. Paso E: $\tilde{\mathbf{Z}} = (\mathbf{W}^\top \mathbf{W})^{-1} \mathbf{W}^\top \tilde{\mathbf{X}}$
  2. Paso M: $\mathbf{W} = \tilde{\mathbf{X}}^\top \tilde{\mathbf{Z}}^\top (\tilde{\mathbf{Z}} \tilde{\mathbf{Z}}^\top)^{-1}$

  donde $\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{X}^\top$

Análisis de componentes independientes (ICA)

- ICA considera que variables latentes no siguen una distribución gaussiana pero son independientes

$$P(\mathbf{z}) = \prod_{j=1}^{d} P(z_j)$$

- Aplicación: separación de fuentes ciega

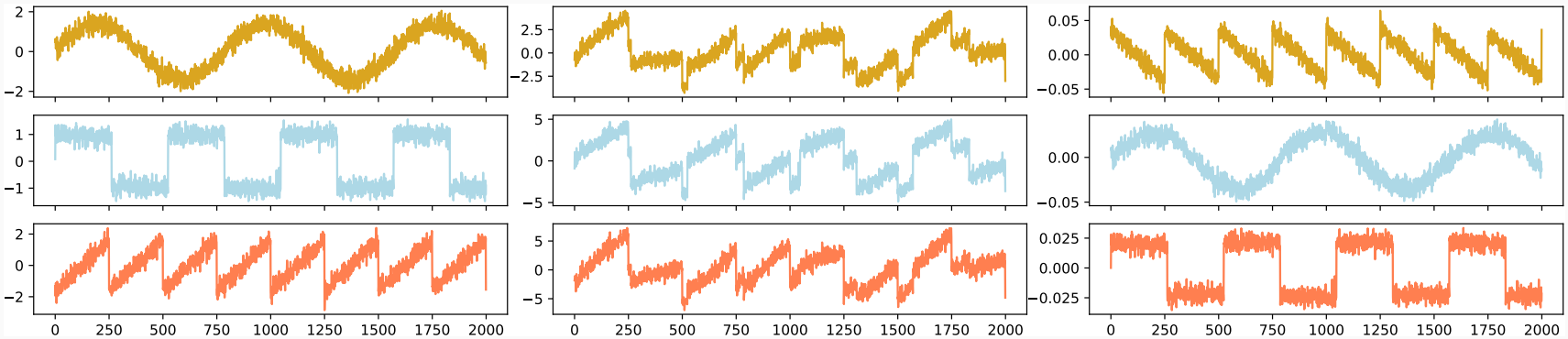


Imagen generado usando ejemplo de `http://scikit-learn.org`

PCA vs ICA

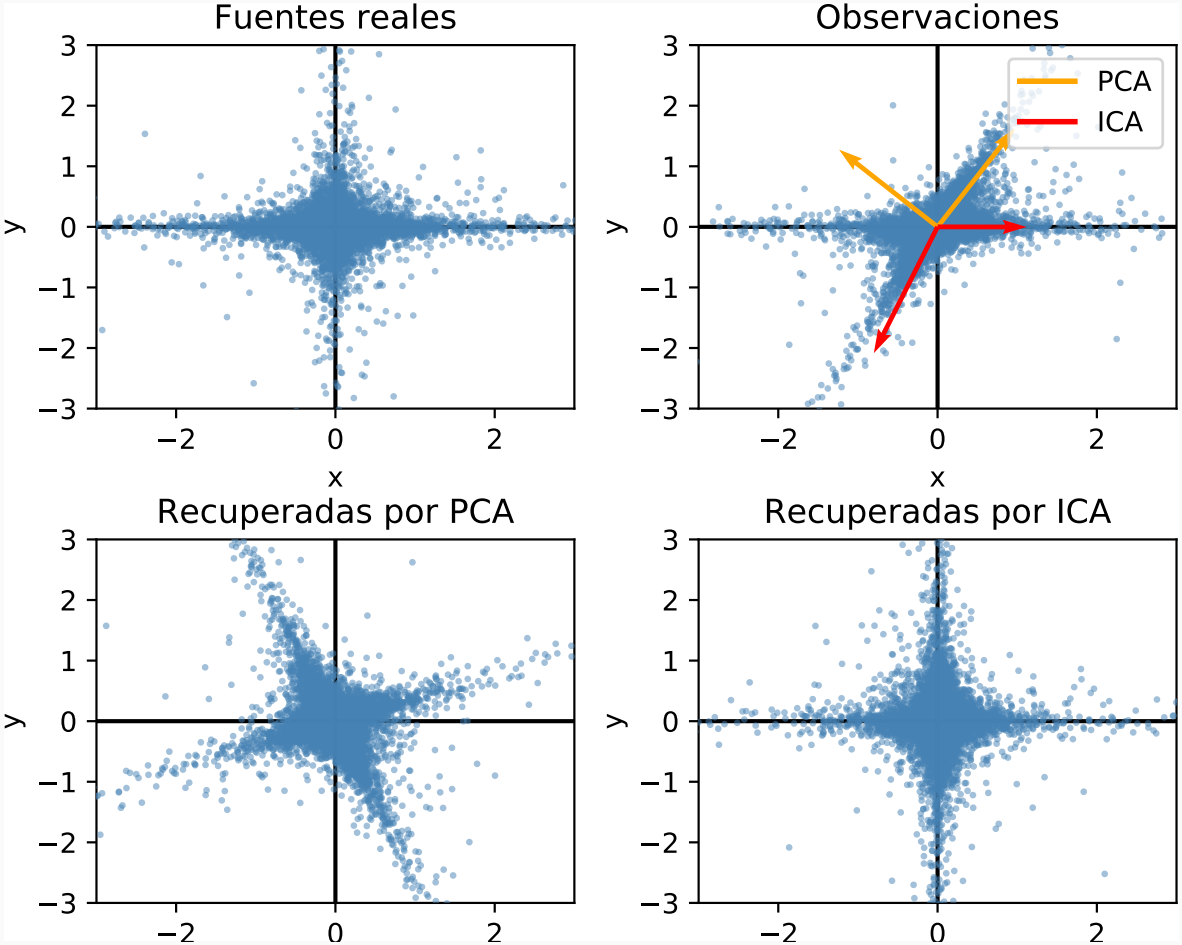


Imagen generado usando ejemplo de `http://scikit-learn.org`

Codificación dispersa

- $\mathbf{z}$ tiene más dimensiones que $\mathbf{x}$
- Apriori de $\mathbf{z}$ viene de distribución que favorece dispersidad
- $\mathbf{x}$ se aproxima como combinación dispersa de columnas de $\mathbf{W}$

$$\mathbf{x} = \mathbf{W}\mathbf{z} + \epsilon$$

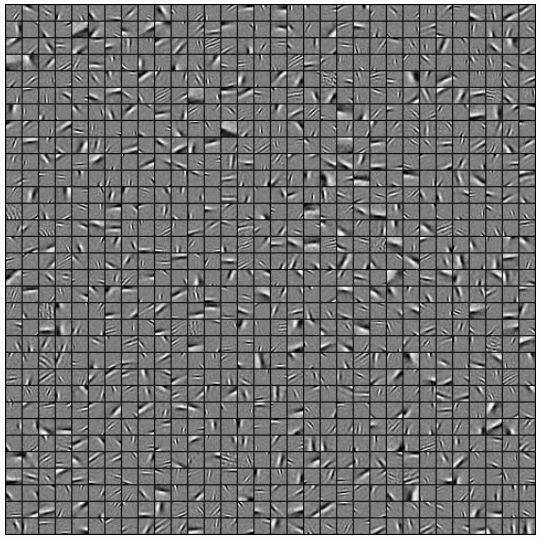


Imagen tomada de Lee et al. 2007