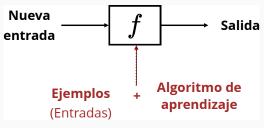
Aprendizaje automatizado

APRENDIZAJE SIN SUPERVISIÓN Y MODELOS DE VARIABLES LATENTES

Gibran Fuentes Pineda Mayo 2021

Aprendizaje sin supervisión

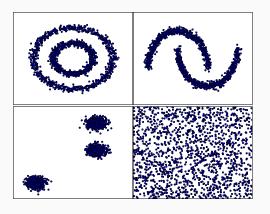
- · Ejemplos sólo contienen entradas sin salidas deseadas
- Algunas tareas: el agrupamiento y el descubrimiento de patrones



 Busca encontrar la estructura escondida de los datos sin necesitar etiquetas

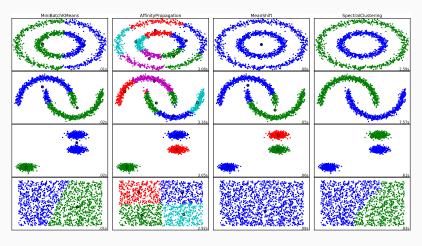
Agrupamiento

- · 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

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

donde $r_{ik} = 1$ si μ_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

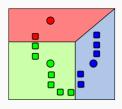


Imagen tomada de Wikipedia (K-means clustering)

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

$$\mu_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i=1}^n r_{ik} \mathbf{x}_i, n_k = \sum_{i=1}^n r_{ik}, k = 1, \dots, K$$



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)

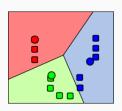
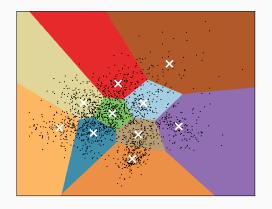


Imagen tomada de Wikipedia (K-means clustering)

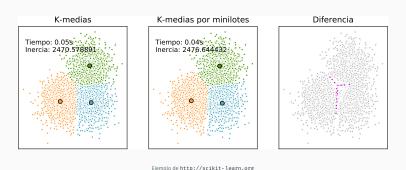
Agrupamiento de imágenes de dígitos con K-medias

• 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.



K-medias por minilotes¹

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



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

Agrupamiento jerárquico

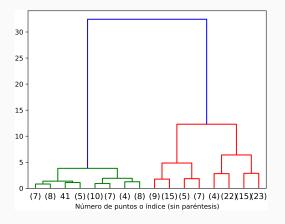
- Construye de forma gradual una jerarquía de grupos siguiendo un criterio dado
 - Aglomerativo: empieza considerando cada dato como un grupo y va mezclando grupos
 - Divisivo: empieza considerando todos los datos como un solo grupo y lo va dividiendo
- Dados dos grupos $\{\mathcal{G}_a,\mathcal{G}_b\}$,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

$$\frac{1}{\mid \mathcal{G}_{a} \mid \mid \mathcal{G}_{b} \mid} \sum_{\mathbf{x}^{(i)} \in \mathcal{G}_{a}} \sum_{\mathbf{x}^{(j)} \in \mathcal{G}_{b}} dist(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)})$$

 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



Agrupamiento espectral

- Se calcula la matriz laplaciana L a partir de la matriz de adyacencia o afinidad A de la siguiente manera
 - · Sin normalizar

$$L = D - A$$

· Normalizada simétrica

$$L_{sim} = D^{-1/2}LD^{-1/2} = I - D^{-1/2}AD^{-1/2}$$

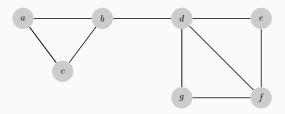
· Caminata aleatoria

$$L_{ca} = D^{-1}L = I - D^{-1}A$$

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

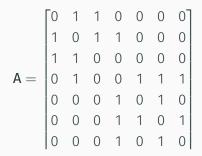
Corte de grafos

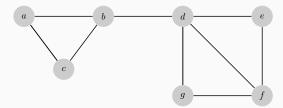
- · Consideremos una red como grafo no dirigido $\mathcal{G}(V,E)$
- · Objetivo: dividir los vertices en grupos disjuntos tal que
 - Se maximice el número de conexiones entre vértices del mismo grupo
 - Se minimice el número de conexiones entre vértices de grupos distintos



Representación de grafos: matriz de adyacencia

· Matriz de adyacencia A

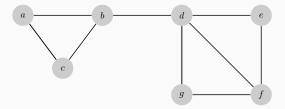




Representación de grafos: matriz de grado

· Matriz de grado G

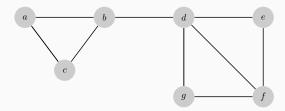
$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$



Representación de grafos: matriz laplaciana

• Laplaciana L = G - A

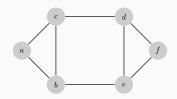
$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 4 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$



Partición espectral

- 1. Construir la matriz laplaciana L.
- 2. Calcular los eigenvalores y eigenvectores de la matriz laplaciana
- 3. Mapear los vértices a los elementos del eigenvector **e** asociado al segundo eigenvalor
- 4. Ordenar los elementos del vector e
- 5. Agrupar vértices dividiendo el vector ordenado en dos
 - · Por ejemplo usando el 0 o la mediana.

Partición espectral: otro ejemplo con 2 grupos



$$L = \begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & -0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 3 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & 3 \end{bmatrix}$$

λ	0	1	2	3	4	5
Х	1	1	-5	-1	-1	-1
	1	2	4	-2	1	0
	1	1	1	3	-1	1
	1	-1	-5	-1	1	1
	1	-2	4	-2	-1	0
	1	-1	1	3	1	-1

Partición espectral: ejemplo con 2 grupos

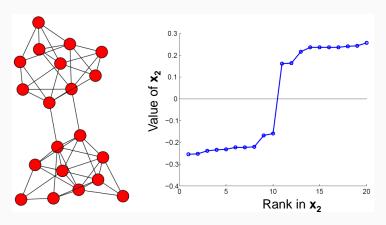


Figura tomada de diapositivas por J. Leskovec, A. Rajaraman, J. Ullman: Mining of Massive Datasets, http://www.mmds.org

Partición espectral: ejemplo con 4 grupos (1)

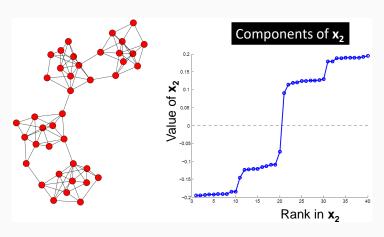
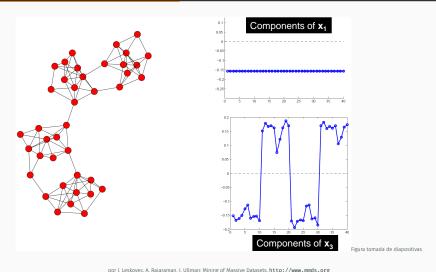


Figura tomada de diapositivas por J. Leskovec, A. Rajaraman, J. Ullman: Mining of Massive Datasets, http://www.mmds.org

Partición espectral: ejemplo con 4 grupos (2)



por J. Leskovec, A. Rajaraman, J. Ullman: Mining of Massive Datasets, http://www.mmds.org

Partición de grafos en K grupos

- Partición recursiva
 - Divide el grafo en dos grupos, posteriormente se aplica el algoritmo en cada grupo generando a su vez dos subgrupos cada uno y así sucesivamente.
- Múltiples eigenvectores
 - Se representa cada vértice usando los elementos de múltiples eigenvectores (asociados a los eigenvalores $\lambda_2, \lambda_3, \ldots, \lambda_K$).
 - Se agrupan las representaciones usando algún algoritmo de agrupamiento (por ej. K-medias).

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
 - 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

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	
Continua		respuesta al reactivo	
Discreta	Modelo de mezclas	Análisis de clases	
Discreta		latentes	

Modelos de mezclas

· Variable latente discreta $z \in \{1, \dots, K\}$

$$z \sim Cat(\pi)$$

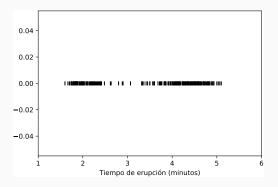
• *K* distribuciones base $P(\mathbf{x}|z=k)=f_k(\mathbf{x})$

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

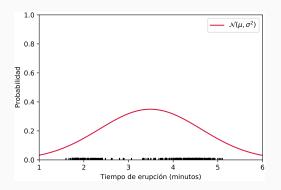
· Distribución de **x** se puede expresar como

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

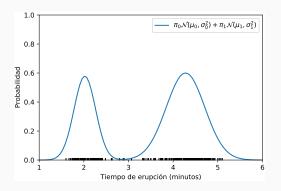
 ¿Qué distribución podríamos presuponer para los siguientes datos?



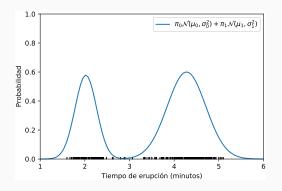
 ¿Qué distribución podríamos presuponer para los siguientes datos?



 ¿Qué distribución podríamos presuponer para los siguientes datos?



 ¿Qué distribución podríamos presuponer para los siguientes datos?



· ¿Cómo estimamos los parámetros?

Mezclas gaussianas

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

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

· 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 {D, Z}
- Busca encontrar los valores de los parámetros $m{ heta}$ que maximicen la verosimilitud logarítmica de $\{\mathcal{D},\mathbf{Z}\}$

$$oldsymbol{ heta} = rg \max_{oldsymbol{ heta}} \log \left\{ \sum_{oldsymbol{Z}} P(\mathcal{D}, oldsymbol{Z} | oldsymbol{ heta})
ight\}$$

Esperanza: paso E

 Como los valores de las variables latentes Z no se conocen, se calcula la distribución a posteriori P(Z|D, θ^{viejo}) con los parámetros actuales θ^{viejo}

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

Maximización: paso M

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

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

EM general

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

$$oldsymbol{ heta}^{ ext{nuevo}} = rg\max_{oldsymbol{ heta}} \mathcal{Q}(oldsymbol{ heta}, oldsymbol{ heta}^{ ext{viejo}})$$

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

$$P(Z^{(i)} = k | \mathbf{X}^{(i)}) = \gamma(Z_{ik}) = \frac{\pi_k \mathcal{N}(\mathbf{X}^{(i)} | \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)}{\sum_{j=1}^K \pi_j \mathcal{N}(\mathbf{X}^{(i)} | \boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)}$$
1
(a)
0.5
0
0
1
(b)
0.5

Imagen tomada de Bishop, PRML 2007

0.5

0.5

EM para modelos de mezclas gaussianas

- 1. Inicializa μ_k , Σ_k y π_k
- 2. Paso E: Evalúa responsabilidades con parámetros actuales

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

3. **Paso M**: Recalcula parámetros μ_k , Σ_k y π_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

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

Modelo de mezclas gaussianas y EM en acción

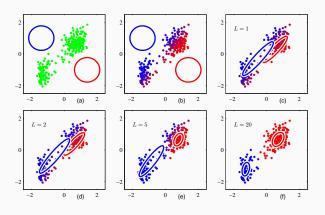


Imagen tomada de Bishop, PRML 2007

Modelo de mezclas de Bernoulli (análisis de clases latentes)

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

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

· Mezcla de K de estas distribuciones

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

donde
$$Q = \{q_1, ..., q_K\}$$
 y $\pi = \{\pi_1, ..., \pi_K\}$

EM para modelo de mezclas de Bernoulli

- 1. Inicializa q_k y π_k
- 2. Paso E: Evalúa responsabilidades con parámetros actuales

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

3. **Paso M**: Re-estima parámetros μ_k y π_k a partir de $\gamma(z_{nk})$

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

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

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

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

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 $\sigma_k \to 0$.

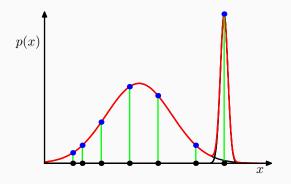


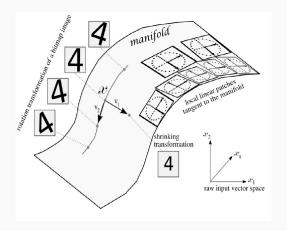
Figura tomada de Bishop, PRML 2007

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



Análisis de componentes principales (PCA)

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

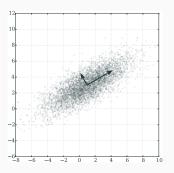
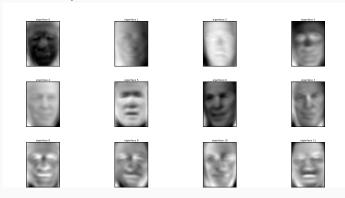


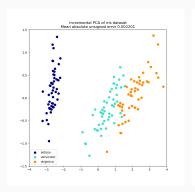
Figura tomada de Wikipedia (Principal Component Analysis)

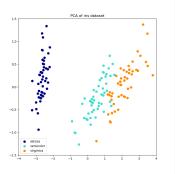
PCA aplicado a imágenes de rostros

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



PCA incremental





Ejemplo de http://scikit-learn.org

Análisis de factores: variables continuas (1)

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

$$\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\mathbf{z}|oldsymbol{\mu}_0, oldsymbol{\Sigma}_0)$$

• Variables observadas continuas $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ con²

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

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
$$\mathbf{C} = \mathbf{W}\mathbf{W}^{\mathsf{T}} + \mathbf{\Psi}$$

²Cuando $\Psi = \sigma^2$ I, $\mu_0 = 0$ y $\Sigma_0 = I$, se conoce como análisis de componentes principales probabilista (PPCA).

Proceso generativo de PPCA

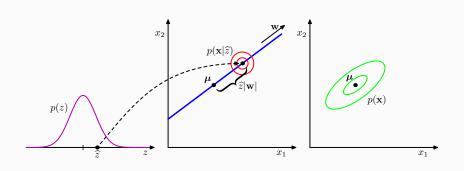


Imagen tomada de Bishop, PRML 2007

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: $\mathbf{W} = \tilde{\mathbf{X}}^{\top} \tilde{\mathbf{Z}}^{\top} (\tilde{\mathbf{Z}} \tilde{\mathbf{Z}}^{\top})^{-1}$

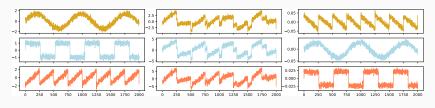
donde $\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{X}^{\top}$

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



PCA vs ICA

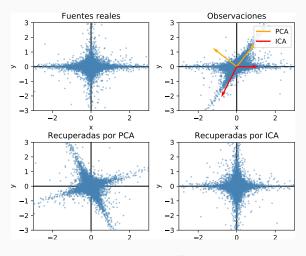


Imagen generado usando ejemplo de http://scikit-learn.org

Codificación dispersa

- · z tiene más dimensiones que x
- · Apriori de z viene de distribución que favorece dispersidad
- x se aproxima como combinación dispersa de columnas de W

