Clase 9: Aprendizaje No Supervisado Reducción de Dimensionalidad y Otros Métodos

Matías Leoni

Aprendizaje Automático I Maestría en IA - Universidad de San Andrés

19 de Agosto de 2025

• Parte 1: Fundamentos y PCA (45 min)

- Parte 1: Fundamentos y PCA (45 min)
 - Motivación: El desafío de la alta dimensionalidad.

- Parte 1: Fundamentos y PCA (45 min)
 - Motivación: El desafío de la alta dimensionalidad.
 - La "Maldición de la Dimensionalidad".

- Parte 1: Fundamentos y PCA (45 min)
 - Motivación: El desafío de la alta dimensionalidad.
 - La "Maldición de la Dimensionalidad".
 - Análisis de Componentes Principales (PCA): Teoría.

- Parte 1: Fundamentos y PCA (45 min)
 - Motivación: El desafío de la alta dimensionalidad.
 - La "Maldición de la Dimensionalidad".
 - Análisis de Componentes Principales (PCA): Teoría.
 - Interpretación geométrica y matemática de PCA.

- Parte 1: Fundamentos y PCA (45 min)
 - Motivación: El desafío de la alta dimensionalidad.
 - La "Maldición de la Dimensionalidad".
 - Análisis de Componentes Principales (PCA): Teoría.
 - Interpretación geométrica y matemática de PCA.
- Pausa (15 min)

- Parte 1: Fundamentos y PCA (45 min)
 - Motivación: El desafío de la alta dimensionalidad.
 - La "Maldición de la Dimensionalidad".
 - Análisis de Componentes Principales (PCA): Teoría.
 - Interpretación geométrica y matemática de PCA.
- Pausa (15 min)
- Parte 2: Aplicación de PCA y Métodos No Lineales (45 min)

- Parte 1: Fundamentos y PCA (45 min)
 - Motivación: El desafío de la alta dimensionalidad.
 - La "Maldición de la Dimensionalidad".
 - Análisis de Componentes Principales (PCA): Teoría.
 - Interpretación geométrica y matemática de PCA.
- Pausa (15 min)
- Parte 2: Aplicación de PCA y Métodos No Lineales (45 min)
 - Varianza explicada y selección de componentes (Scree Plot).

- Parte 1: Fundamentos y PCA (45 min)
 - Motivación: El desafío de la alta dimensionalidad.
 - La "Maldición de la Dimensionalidad".
 - Análisis de Componentes Principales (PCA): Teoría.
 - Interpretación geométrica y matemática de PCA.
- Pausa (15 min)
- Parte 2: Aplicación de PCA y Métodos No Lineales (45 min)
 - Varianza explicada y selección de componentes (Scree Plot).
 - Consideraciones prácticas de PCA: El escalado de datos.

- Parte 1: Fundamentos y PCA (45 min)
 - Motivación: El desafío de la alta dimensionalidad.
 - La "Maldición de la Dimensionalidad".
 - Análisis de Componentes Principales (PCA): Teoría.
 - Interpretación geométrica y matemática de PCA.
- Pausa (15 min)
- Parte 2: Aplicación de PCA y Métodos No Lineales (45 min)
 - Varianza explicada y selección de componentes (Scree Plot).
 - Consideraciones prácticas de PCA: El escalado de datos.
 - t-SNE para visualización de datos.

- Parte 1: Fundamentos y PCA (45 min)
 - Motivación: El desafío de la alta dimensionalidad.
 - La "Maldición de la Dimensionalidad".
 - Análisis de Componentes Principales (PCA): Teoría.
 - Interpretación geométrica y matemática de PCA.
- Pausa (15 min)
- Parte 2: Aplicación de PCA y Métodos No Lineales (45 min)
 - Varianza explicada y selección de componentes (Scree Plot).
 - Consideraciones prácticas de PCA: El escalado de datos.
 - t-SNE para visualización de datos.
 - UMAP: una alternativa moderna a t-SNE.

- Parte 1: Fundamentos y PCA (45 min)
 - Motivación: El desafío de la alta dimensionalidad.
 - La "Maldición de la Dimensionalidad".
 - Análisis de Componentes Principales (PCA): Teoría.
 - Interpretación geométrica y matemática de PCA.
- Pausa (15 min)
- Parte 2: Aplicación de PCA y Métodos No Lineales (45 min)
 - Varianza explicada y selección de componentes (Scree Plot).
 - Consideraciones prácticas de PCA: El escalado de datos.
 - t-SNE para visualización de datos.
 - UMAP: una alternativa moderna a t-SNE.
- Bonus Track: Un Vistazo a Otros Métodos No Supervisados

• Muchos datasets modernos tienen un gran número de características (p), a veces incluso más que observaciones $(p \gg n)$.

- Muchos datasets modernos tienen un gran número de características (p), a veces incluso más que observaciones $(p \gg n)$.
- Ejemplos: datos genómicos (miles de genes), procesamiento de imágenes (cada píxel es una característica), datos de texto (vocabulario extenso).

- Muchos datasets modernos tienen un gran número de características (p), a veces incluso más que observaciones $(p \gg n)$.
- Ejemplos: datos genómicos (miles de genes), procesamiento de imágenes (cada píxel es una característica), datos de texto (vocabulario extenso).
- Problemas de la alta dimensionalidad:

- Muchos datasets modernos tienen un gran número de características (p), a veces incluso más que observaciones $(p \gg n)$.
- Ejemplos: datos genómicos (miles de genes), procesamiento de imágenes (cada píxel es una característica), datos de texto (vocabulario extenso).
- Problemas de la alta dimensionalidad:
 - Costo Computacional: Más dimensiones implican mayor tiempo de procesamiento y más memoria.

- Muchos datasets modernos tienen un gran número de características (p), a veces incluso más que observaciones $(p \gg n)$.
- Ejemplos: datos genómicos (miles de genes), procesamiento de imágenes (cada píxel es una característica), datos de texto (vocabulario extenso).
- Problemas de la alta dimensionalidad:
 - Costo Computacional: Más dimensiones implican mayor tiempo de procesamiento y más memoria.
 - Sobreajuste (Overfitting): Con muchas características, es más fácil que un modelo se ajuste al ruido en lugar de a la señal subyacente.

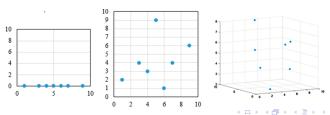
- Muchos datasets modernos tienen un gran número de características (p), a veces incluso más que observaciones $(p \gg n)$.
- Ejemplos: datos genómicos (miles de genes), procesamiento de imágenes (cada píxel es una característica), datos de texto (vocabulario extenso).
- Problemas de la alta dimensionalidad:
 - Costo Computacional: Más dimensiones implican mayor tiempo de procesamiento y más memoria.
 - Sobreajuste (Overfitting): Con muchas características, es más fácil que un modelo se ajuste al ruido en lugar de a la señal subyacente.
 - **Redundancia y Ruido:** Muchas características pueden ser irrelevantes o estar altamente correlacionadas, añadiendo ruido.

• A medida que el número de dimensiones (p) aumenta, el volumen del espacio de características crece exponencialmente.

- A medida que el número de dimensiones (p) aumenta, el volumen del espacio de características crece exponencialmente.
- Los datos se vuelven escasos (sparse). La distancia entre cualquier par de puntos tiende a ser similar, dificultando la tarea de algoritmos basados en distancia (como k-NN o clustering).

- A medida que el número de dimensiones (p) aumenta, el volumen del espacio de características crece exponencialmente.
- Los datos se vuelven escasos (sparse). La distancia entre cualquier par de puntos tiende a ser similar, dificultando la tarea de algoritmos basados en distancia (como k-NN o clustering).
- Para mantener la misma densidad de datos, la cantidad de observaciones (n) necesarias crece de forma exponencial con p.

- A medida que el número de dimensiones (p) aumenta, el volumen del espacio de características crece exponencialmente.
- Los datos se vuelven escasos (sparse). La distancia entre cualquier par de puntos tiende a ser similar, dificultando la tarea de algoritmos basados en distancia (como k-NN o clustering).
- Para mantener la misma densidad de datos, la cantidad de observaciones (n) necesarias crece de forma exponencial con p.
- La reducción de dimensionalidad busca proyectar los datos en un subespacio de menor dimensión, preservando la mayor cantidad de "información" posible.



• **Objetivo:** Encontrar una representación de baja dimensión de los datos que capture la mayor cantidad de varianza posible.

- **Objetivo:** Encontrar una representación de baja dimensión de los datos que capture la mayor cantidad de varianza posible.
- Es una técnica lineal y no supervisada.

- **Objetivo:** Encontrar una representación de baja dimensión de los datos que capture la mayor cantidad de varianza posible.
- Es una técnica lineal y no supervisada.
- PCA encuentra un nuevo conjunto de ejes (coordenadas) ortogonales, llamados Componentes Principales (CP).

- **Objetivo:** Encontrar una representación de baja dimensión de los datos que capture la mayor cantidad de varianza posible.
- Es una técnica lineal y no supervisada.
- PCA encuentra un nuevo conjunto de ejes (coordenadas) ortogonales, llamados Componentes Principales (CP).
- El primer componente principal (CP1) es la dirección en el espacio de características a lo largo de la cual los datos varían más.

- **Objetivo:** Encontrar una representación de baja dimensión de los datos que capture la mayor cantidad de varianza posible.
- Es una técnica lineal y no supervisada.
- PCA encuentra un nuevo conjunto de ejes (coordenadas) ortogonales, llamados Componentes Principales (CP).
- El primer componente principal (CP1) es la dirección en el espacio de características a lo largo de la cual los datos varían más.
- El segundo componente principal (CP2) es la dirección, ortogonal a la primera, que captura la mayor varianza restante. Y así sucesivamente.

• Cada componente principal, Z_m , es una combinación lineal de las características originales X_1, X_2, \ldots, X_p .

- Cada componente principal, Z_m , es una combinación lineal de las características originales X_1, X_2, \ldots, X_p .
- Primer Componente Principal (Z_1) :

$$Z_1 = \phi_{11}X_1 + \phi_{21}X_2 + \dots + \phi_{p1}X_p$$

- Cada componente principal, Z_m , es una combinación lineal de las características originales X_1, X_2, \ldots, X_p .
- Primer Componente Principal (Z_1) :

$$Z_1 = \phi_{11}X_1 + \phi_{21}X_2 + \dots + \phi_{p1}X_p$$

• Los valores ϕ_{j1} son los **loadings** (cargas) del primer componente. Forman el vector de loadings ϕ_1 .

- Cada componente principal, Z_m , es una combinación lineal de las características originales X_1, X_2, \ldots, X_p .
- Primer Componente Principal (Z_1) :

$$Z_1 = \phi_{11}X_1 + \phi_{21}X_2 + \dots + \phi_{p1}X_p$$

- Los valores ϕ_{j1} son los **loadings** (cargas) del primer componente. Forman el vector de loadings ϕ_1 .
- Los loadings se calculan para maximizar la varianza de Z_1 , sujeto a la restricción de que son normalizados:

$$\sum_{j=1}^p \phi_{j1}^2 = 1$$



¿Qué son los Componentes Principales? (Matemáticamente)

- Cada componente principal, Z_m , es una combinación lineal de las características originales X_1, X_2, \ldots, X_p .
- Primer Componente Principal (Z_1) :

$$Z_1 = \phi_{11}X_1 + \phi_{21}X_2 + \dots + \phi_{p1}X_p$$

- Los valores ϕ_{j1} son los **loadings** (cargas) del primer componente. Forman el vector de loadings ϕ_1 .
- Los loadings se calculan para maximizar la varianza de Z_1 , sujeto a la restricción de que son normalizados:

$$\sum_{j=1}^{p} \phi_{j1}^2 = 1$$

 Los valores de Z₁ para cada observación son los scores o puntuaciones.

• PCA puede ser interpretado de dos maneras equivalentes:

- PCA puede ser interpretado de dos maneras equivalentes:
- 1. Dirección de Máxima Varianza:

- PCA puede ser interpretado de dos maneras equivalentes:
- 1. Dirección de Máxima Varianza:
 - El primer componente principal ϕ_1 define la línea que mejor captura la variabilidad de los datos.

- PCA puede ser interpretado de dos maneras equivalentes:
- 1. Dirección de Máxima Varianza:
 - El primer componente principal ϕ_1 define la línea que mejor captura la variabilidad de los datos.
 - Proyectar los datos sobre esta línea nos da los scores z_{i1} .

- PCA puede ser interpretado de dos maneras equivalentes:
- 1. Dirección de Máxima Varianza:
 - El primer componente principal ϕ_1 define la línea que mejor captura la variabilidad de los datos.
 - Proyectar los datos sobre esta línea nos da los scores z_{i1} .
- 2. Subespacio de Mínima Distancia:

- PCA puede ser interpretado de dos maneras equivalentes:
- 1. Dirección de Máxima Varianza:
 - El primer componente principal ϕ_1 define la línea que mejor captura la variabilidad de los datos.
 - Proyectar los datos sobre esta línea nos da los scores z_{i1} .
- 2. Subespacio de Mínima Distancia:
 - El plano (o hiperplano) definido por los primeros M componentes principales es el que está más cerca de las observaciones.

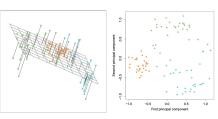
• PCA puede ser interpretado de dos maneras equivalentes:

• 1. Dirección de Máxima Varianza:

- El primer componente principal ϕ_1 define la línea que mejor captura la variabilidad de los datos.
- Proyectar los datos sobre esta línea nos da los scores z_{i1} .

• 2. Subespacio de Mínima Distancia:

- El plano (o hiperplano) definido por los primeros M componentes principales es el que está más cerca de las observaciones.
- Minimiza el error de reconstrucción (la suma de distancias euclidianas al cuadrado desde los puntos al plano).



• El proceso para calcular los componentes principales es:

- El proceso para calcular los componentes principales es:
- Paso 1: Estandarizar los datos.

- El proceso para calcular los componentes principales es:
- Paso 1: Estandarizar los datos.
 - Es crucial que cada característica tenga media cero y desviación estándar uno.

- El proceso para calcular los componentes principales es:
- Paso 1: Estandarizar los datos.
 - Es crucial que cada característica tenga media cero y desviación estándar uno.
- Paso 2: Calcular la matriz de covarianza.

- El proceso para calcular los componentes principales es:
- Paso 1: Estandarizar los datos.
 - Es crucial que cada característica tenga media cero y desviación estándar uno.
- Paso 2: Calcular la matriz de covarianza.
 - Esta matriz $p \times p$ describe las relaciones lineales entre las características.

- El proceso para calcular los componentes principales es:
- Paso 1: Estandarizar los datos.
 - Es crucial que cada característica tenga media cero y desviación estándar uno.
- Paso 2: Calcular la matriz de covarianza.
 - Esta matriz $p \times p$ describe las relaciones lineales entre las características.
- Paso 3: Realizar la descomposición espectral (Eigen-decomposition).

- El proceso para calcular los componentes principales es:
- Paso 1: Estandarizar los datos.
 - Es crucial que cada característica tenga media cero y desviación estándar uno.
- Paso 2: Calcular la matriz de covarianza.
 - Esta matriz p × p describe las relaciones lineales entre las características.
- Paso 3: Realizar la descomposición espectral (Eigen-decomposition).
 - Los vectores propios (eigenvectors) de la matriz de covarianza son los vectores de loadings (ϕ_m) , es decir, las direcciones de los componentes principales.

- El proceso para calcular los componentes principales es:
- Paso 1: Estandarizar los datos.
 - Es crucial que cada característica tenga media cero y desviación estándar uno.
- Paso 2: Calcular la matriz de covarianza.
 - Esta matriz p x p describe las relaciones lineales entre las características.
- Paso 3: Realizar la descomposición espectral (Eigen-decomposition).
 - Los vectores propios (eigenvectors) de la matriz de covarianza son los vectores de loadings (ϕ_m) , es decir, las direcciones de los componentes principales.
 - Los valores propios (eigenvalues) indican la cantidad de varianza capturada por cada componente principal.

• Objetivo: Maximizar la varianza de los datos proyectados.

- Objetivo: Maximizar la varianza de los datos proyectados.
- Para el primer componente principal, la varianza de los scores $(z_{i1} = \phi_1^T \mathbf{x}_i)$ es:

$$\mathsf{Var}(Z_1) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\phi_1^T \mathbf{x}_i)^2 = \phi_1^T \left(\frac{1}{n} \mathbf{X}^T \mathbf{X} \right) \phi_1$$

- Objetivo: Maximizar la varianza de los datos proyectados.
- Para el primer componente principal, la varianza de los scores $(z_{i1} = \phi_1^T \mathbf{x}_i)$ es:

$$\mathsf{Var}(Z_1) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\phi_1^T \mathbf{x}_i)^2 = \phi_1^T \left(\frac{1}{n} \mathbf{X}^T \mathbf{X} \right) \phi_1$$

• Notamos que $S = \frac{1}{n}X^TX$ es la matriz de covarianza muestral (para datos centrados).

- Objetivo: Maximizar la varianza de los datos proyectados.
- Para el primer componente principal, la varianza de los scores $(z_{i1} = \phi_1^T \mathbf{x}_i)$ es:

$$\mathsf{Var}(Z_1) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\phi_1^\mathsf{T} \mathbf{x}_i)^2 = \phi_1^\mathsf{T} \left(\frac{1}{n} \mathbf{X}^\mathsf{T} \mathbf{X} \right) \phi_1$$

- Notamos que $S = \frac{1}{n}X^TX$ es la matriz de covarianza muestral (para datos centrados).
- El problema de optimización para el primer componente es:

$$\max_{\phi_1} \max \left\{ \phi_1^T \mathbf{S} \phi_1 \right\}$$

- Objetivo: Maximizar la varianza de los datos proyectados.
- Para el primer componente principal, la varianza de los scores $(z_{i1} = \phi_1^T \mathbf{x}_i)$ es:

$$\mathsf{Var}(Z_1) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\phi_1^\mathsf{T} \mathbf{x}_i)^2 = \phi_1^\mathsf{T} \left(\frac{1}{n} \mathbf{X}^\mathsf{T} \mathbf{X} \right) \phi_1$$

- Notamos que $S = \frac{1}{n}X^TX$ es la matriz de covarianza muestral (para datos centrados).
- El problema de optimización para el primer componente es:

$$\underset{\phi_1}{\mathsf{maximizar}} \quad \left\{ \phi_1^\mathsf{T} \mathbf{S} \phi_1 \right\}$$

• Sujeto a la restricción de normalización para evitar soluciones infinitas:

$$\phi_1^T \phi_1 = \sum_{j=1}^p \phi_{j1}^2 = 1$$



• El problema de optimización restringida se resuelve usando **multiplicadores de Lagrange**.

- El problema de optimización restringida se resuelve usando multiplicadores de Lagrange.
- Construimos la función Lagrangiana \mathcal{L} :

$$\mathcal{L}(\phi_1, \lambda) = \phi_1^\mathsf{T} \mathbf{S} \phi_1 - \lambda (\phi_1^\mathsf{T} \phi_1 - 1)$$

- El problema de optimización restringida se resuelve usando multiplicadores de Lagrange.
- Construimos la función Lagrangiana L:

$$\mathcal{L}(\phi_1, \lambda) = \phi_1^T \mathbf{S} \phi_1 - \lambda (\phi_1^T \phi_1 - 1)$$

• Derivando con respecto a ϕ_1 e igualando a cero para encontrar el máximo:

$$\nabla_{\phi_1} \mathcal{L} = 2\mathbf{S}\phi_1 - 2\lambda\phi_1 = 0 \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{S}\phi_1 = \lambda\phi_1$$

- El problema de optimización restringida se resuelve usando multiplicadores de Lagrange.
- Construimos la función Lagrangiana \mathcal{L} :

$$\mathcal{L}(\phi_1, \lambda) = \phi_1^T \mathbf{S} \phi_1 - \lambda (\phi_1^T \phi_1 - 1)$$

• Derivando con respecto a ϕ_1 e igualando a cero para encontrar el máximo:

$$\nabla_{\phi_1} \mathcal{L} = 2\mathbf{S}\phi_1 - 2\lambda\phi_1 = 0 \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{S}\phi_1 = \lambda\phi_1$$

• ¡Este es el resultado fundamental! La ecuación anterior es la definición de un problema de valores y vectores propios.

- El problema de optimización restringida se resuelve usando multiplicadores de Lagrange.
- ullet Construimos la función Lagrangiana \mathcal{L} :

$$\mathcal{L}(\phi_1, \lambda) = \phi_1^T \mathbf{S} \phi_1 - \lambda (\phi_1^T \phi_1 - 1)$$

• Derivando con respecto a ϕ_1 e igualando a cero para encontrar el máximo:

$$\nabla_{\phi_1} \mathcal{L} = 2\mathbf{S}\phi_1 - 2\lambda\phi_1 = 0 \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{S}\phi_1 = \lambda\phi_1$$

- ¡Este es el resultado fundamental! La ecuación anterior es la definición de un problema de valores y vectores propios.
- El vector de loadings ϕ_1 debe ser un **vector propio** (eigenvector) de la matriz de covarianza **S**.

- El problema de optimización restringida se resuelve usando multiplicadores de Lagrange.
- Construimos la función Lagrangiana \mathcal{L} :

$$\mathcal{L}(\phi_1, \lambda) = \phi_1^T \mathbf{S} \phi_1 - \lambda (\phi_1^T \phi_1 - 1)$$

• Derivando con respecto a ϕ_1 e igualando a cero para encontrar el máximo:

$$\nabla_{\phi_1} \mathcal{L} = 2\mathbf{S}\phi_1 - 2\lambda\phi_1 = 0 \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{S}\phi_1 = \lambda\phi_1$$

- ¡Este es el resultado fundamental! La ecuación anterior es la definición de un problema de valores y vectores propios.
- El vector de loadings ϕ_1 debe ser un **vector propio** (eigenvector) de la matriz de covarianza **S**.
- Para maximizar la varianza $(\phi_1^T \mathbf{S} \phi_1 = \lambda)$, debemos elegir el eigenvector correspondiente al **valor propio (eigenvalue) más**

Pausa de 15 minutos

• ¿Cuánta información perdemos al proyectar los datos a un subespacio de menor dimensión?

- ¿Cuánta información perdemos al proyectar los datos a un subespacio de menor dimensión?
- La Proporción de Varianza Explicada (PVE) por el m-ésimo componente principal es la fracción de la varianza total que captura ese componente.

$$\mathsf{PVE}_m = \frac{\lambda_m}{\sum_{j=1}^p \lambda_j} = \frac{\mathsf{Varianza\ del\ CP\ m}}{\mathsf{Varianza\ Total}}$$

- ¿Cuánta información perdemos al proyectar los datos a un subespacio de menor dimensión?
- La Proporción de Varianza Explicada (PVE) por el m-ésimo componente principal es la fracción de la varianza total que captura ese componente.

$$\mathsf{PVE}_m = \frac{\lambda_m}{\sum_{j=1}^p \lambda_j} = \frac{\mathsf{Varianza\ del\ CP\ m}}{\mathsf{Varianza\ Total}}$$

 La PVE acumulada nos ayuda a decidir cuántos componentes conservar. Por ejemplo, podríamos querer retener suficientes componentes para explicar el 80-95% de la varianza total.

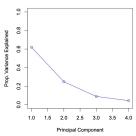
Selección de Componentes: El Scree Plot

 Un Scree Plot es un gráfico que muestra la varianza explicada por cada componente principal, ordenados de mayor a menor.

- Un Scree Plot es un gráfico que muestra la varianza explicada por cada componente principal, ordenados de mayor a menor.
- Es la herramienta visual principal para decidir cuántos componentes retener.

- Un Scree Plot es un gráfico que muestra la varianza explicada por cada componente principal, ordenados de mayor a menor.
- Es la herramienta visual principal para decidir cuántos componentes retener.
- Buscamos un "codo" (elbow) en el gráfico: el punto donde la PVE marginal de componentes adicionales disminuye drásticamente.

- Un Scree Plot es un gráfico que muestra la varianza explicada por cada componente principal, ordenados de mayor a menor.
- Es la herramienta visual principal para decidir cuántos componentes retener.
- Buscamos un "codo" (elbow) en el gráfico: el punto donde la PVE marginal de componentes adicionales disminuye drásticamente.
- Los componentes a la izquierda del codo son los que retienen la mayor parte de la "señal", mientras que los de la derecha podrían ser principalmente "ruido".

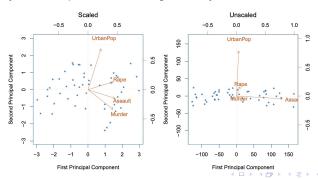


• PCA es muy sensible a la escala de las variables.

- PCA es muy sensible a la escala de las variables.
- Si las variables no se escalan, aquellas con mayor varianza dominarán el primer componente principal, independientemente de su importancia real.

- PCA es muy sensible a la escala de las variables.
- Si las variables no se escalan, aquellas con mayor varianza dominarán el primer componente principal, independientemente de su importancia real.
- Ejemplo: Si una variable está en kilogramos y otra en metros, la elección de unidades (gramos vs. kilómetros) cambiaría drásticamente el resultado de PCA.

- PCA es muy sensible a la escala de las variables.
- Si las variables no se escalan, aquellas con mayor varianza dominarán el primer componente principal, independientemente de su importancia real.
- Ejemplo: Si una variable está en kilogramos y otra en metros, la elección de unidades (gramos vs. kilómetros) cambiaría drásticamente el resultado de PCA.
- Regla general: Siempre estandarizar las variables (media 0, desviación estándar 1) antes de aplicar PCA, a menos que todas las variables estén en las mismas unidades y se desee que la varianza original influya.

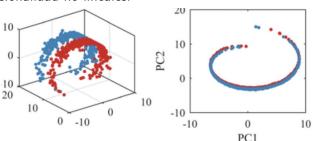


 PCA es una técnica lineal, por lo que asume que la estructura subyacente de los datos puede ser bien representada por un subespacio lineal.

- PCA es una técnica lineal, por lo que asume que la estructura subyacente de los datos puede ser bien representada por un subespacio lineal.
- ¿Qué pasa si los datos se encuentran en una variedad (manifold) no lineal y curva?

- PCA es una técnica lineal, por lo que asume que la estructura subyacente de los datos puede ser bien representada por un subespacio lineal.
- ¿Qué pasa si los datos se encuentran en una variedad (manifold) no lineal y curva?
- PCA "aplastará" la estructura, perdiendo información importante sobre la proximidad de los puntos.

- PCA es una técnica lineal, por lo que asume que la estructura subyacente de los datos puede ser bien representada por un subespacio lineal.
- ¿Qué pasa si los datos se encuentran en una variedad (manifold) no lineal y curva?
- PCA "aplastará" la estructura, perdiendo información importante sobre la proximidad de los puntos.
- Para estos casos, necesitamos técnicas de reducción de dimensionalidad no lineales.



• t-SNE (t-distributed Stochastic Neighbor Embedding) es una técnica no lineal, principalmente para visualización en 2D o 3D.

- t-SNE (t-distributed Stochastic Neighbor Embedding) es una técnica no lineal, principalmente para visualización en 2D o 3D.
- Intuición: Intenta preservar las "vecindades" de los puntos. Si dos puntos son cercanos en el espacio de alta dimensión, t-SNE intentará que sigan siendo cercanos en el espacio de baja dimensión.

- t-SNE (t-distributed Stochastic Neighbor Embedding) es una técnica no lineal, principalmente para visualización en 2D o 3D.
- Intuición: Intenta preservar las "vecindades" de los puntos. Si dos puntos son cercanos en el espacio de alta dimensión, t-SNE intentará que sigan siendo cercanos en el espacio de baja dimensión.
- Funciona bien para revelar la estructura de clusters locales en los datos.

- t-SNE (t-distributed Stochastic Neighbor Embedding) es una técnica no lineal, principalmente para visualización en 2D o 3D.
- Intuición: Intenta preservar las "vecindades" de los puntos. Si dos puntos son cercanos en el espacio de alta dimensión, t-SNE intentará que sigan siendo cercanos en el espacio de baja dimensión.
- Funciona bien para revelar la estructura de clusters locales en los datos.
- Consideraciones:

- t-SNE (t-distributed Stochastic Neighbor Embedding) es una técnica no lineal, principalmente para visualización en 2D o 3D.
- Intuición: Intenta preservar las "vecindades" de los puntos. Si dos puntos son cercanos en el espacio de alta dimensión, t-SNE intentará que sigan siendo cercanos en el espacio de baja dimensión.
- Funciona bien para revelar la estructura de clusters locales en los datos.
- Consideraciones:
 - Es computacionalmente intensivo.

- t-SNE (t-distributed Stochastic Neighbor Embedding) es una técnica no lineal, principalmente para visualización en 2D o 3D.
- Intuición: Intenta preservar las "vecindades" de los puntos. Si dos puntos son cercanos en el espacio de alta dimensión, t-SNE intentará que sigan siendo cercanos en el espacio de baja dimensión.
- Funciona bien para revelar la estructura de clusters locales en los datos.
- Consideraciones:
 - Es computacionalmente intensivo.
 - Los tamaños de los clusters y las distancias entre ellos en el gráfico final no siempre tienen un significado global directo. ¡La interpretación requiere cautela!

 1. Similitud en alta dimensión (p_{ij}): Se modela la probabilidad de que x_j sea vecino de x_i con una distribución Gaussiana. Tras simetrizar:

$$p_{ij} = \frac{\exp(-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 / 2\sigma^2)}{\sum_{k \neq I} \exp(-\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_I\|^2 / 2\sigma^2)}$$

 1. Similitud en alta dimensión (p_{ij}): Se modela la probabilidad de que x_j sea vecino de x_i con una distribución Gaussiana. Tras simetrizar:

$$p_{ij} = \frac{\exp(-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 / 2\sigma^2)}{\sum_{k \neq I} \exp(-\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_I\|^2 / 2\sigma^2)}$$

• 2. Similitud en baja dimensión (q_{ij}) : En el espacio 2D/3D, se usa una distribución t-Student (cola pesada) para permitir que puntos que eran moderadamente distantes se alejen más, ayudando a separar clusters.

$$q_{ij} = rac{(1 + \|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|^2)^{-1}}{\sum_{k
eq l} (1 + \|\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_l\|^2)^{-1}}$$

 1. Similitud en alta dimensión (p_{ij}): Se modela la probabilidad de que x_j sea vecino de x_i con una distribución Gaussiana. Tras simetrizar:

$$p_{ij} = \frac{\exp(-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 / 2\sigma^2)}{\sum_{k \neq I} \exp(-\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_I\|^2 / 2\sigma^2)}$$

• 2. Similitud en baja dimensión (q_{ij}): En el espacio 2D/3D, se usa una distribución t-Student (cola pesada) para permitir que puntos que eran moderadamente distantes se alejen más, ayudando a separar clusters.

$$q_{ij} = \frac{(1 + \|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|^2)^{-1}}{\sum_{k \neq l} (1 + \|\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_l\|^2)^{-1}}$$

• 3. Optimización: Se minimiza la divergencia de Kullback-Leibler (KL) entre las distribuciones de probabilidad P y Q, que mide la "diferencia" entre ellas.

$$C = \mathsf{KL}(P\|Q) = \sum_{i \in I} p_{ij} \log \frac{p_{ij}}{q_{ii}}$$

 UMAP (Uniform Manifold Approximation and Projection) es otra técnica no lineal de reducción de dimensionalidad.

- UMAP (Uniform Manifold Approximation and Projection) es otra técnica no lineal de reducción de dimensionalidad.
- Comparte objetivos similares con t-SNE, pero se basa en una teoría matemática diferente (topología de variedades).

- UMAP (Uniform Manifold Approximation and Projection) es otra técnica no lineal de reducción de dimensionalidad.
- Comparte objetivos similares con t-SNE, pero se basa en una teoría matemática diferente (topología de variedades).
- Ventajas sobre t-SNE:

- UMAP (Uniform Manifold Approximation and Projection) es otra técnica no lineal de reducción de dimensionalidad.
- Comparte objetivos similares con t-SNE, pero se basa en una teoría matemática diferente (topología de variedades).
- Ventajas sobre t-SNE:
 - Velocidad: Generalmente mucho más rápido, lo que permite su uso en datasets más grandes.

- UMAP (Uniform Manifold Approximation and Projection) es otra técnica no lineal de reducción de dimensionalidad.
- Comparte objetivos similares con t-SNE, pero se basa en una teoría matemática diferente (topología de variedades).
- Ventajas sobre t-SNE:
 - Velocidad: Generalmente mucho más rápido, lo que permite su uso en datasets más grandes.
 - Preservación de la estructura global: UMAP a menudo hace un mejor trabajo preservando la estructura a gran escala de los datos, no solo las vecindades locales.

- UMAP (Uniform Manifold Approximation and Projection) es otra técnica no lineal de reducción de dimensionalidad.
- Comparte objetivos similares con t-SNE, pero se basa en una teoría matemática diferente (topología de variedades).
- Ventajas sobre t-SNE:
 - Velocidad: Generalmente mucho más rápido, lo que permite su uso en datasets más grandes.
 - Preservación de la estructura global: UMAP a menudo hace un mejor trabajo preservando la estructura a gran escala de los datos, no solo las vecindades locales.
 - Es más versátil y puede usarse para más que solo visualización (ej. como paso de preprocesamiento).

- UMAP (Uniform Manifold Approximation and Projection) es otra técnica no lineal de reducción de dimensionalidad.
- Comparte objetivos similares con t-SNE, pero se basa en una teoría matemática diferente (topología de variedades).
- Ventajas sobre t-SNE:
 - Velocidad: Generalmente mucho más rápido, lo que permite su uso en datasets más grandes.
 - Preservación de la estructura global: UMAP a menudo hace un mejor trabajo preservando la estructura a gran escala de los datos, no solo las vecindades locales.
 - Es más versátil y puede usarse para más que solo visualización (ej. como paso de preprocesamiento).
- Se está convirtiendo en la herramienta de elección para muchas tareas de visualización.

UMAP: Formalización Matemática

UMAP: Formalización Matemática

 1. Grafo en alta dimensión (v_{ij}): UMAP construye un grafo de vecinos y define una similitud "difusa" que se desvanece con la distancia. Tras simetrizar:

$$v_{ij} = v_{j|i} + v_{i|j} - v_{j|i}v_{i|j}$$
 donde $v_{j|i} \approx \exp\left(\frac{-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|}{\sigma_i}\right)$

UMAP: Formalización Matemática

 1. Grafo en alta dimensión (v_{ij}): UMAP construye un grafo de vecinos y define una similitud "difusa" que se desvanece con la distancia. Tras simetrizar:

$$v_{ij} = v_{j|i} + v_{i|j} - v_{j|i}v_{i|j}$$
 donde $v_{j|i} \approx \exp\left(\frac{-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|}{\sigma_i}\right)$

 2. Grafo en baja dimensión (w_{ij}): Define una estructura similar en el espacio de baja dimensión, usando una familia de curvas parametrizada:

$$w_{ij} = \left(1 + a\|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|^{2b}\right)^{-1}$$

UMAP: Formalización Matemática

 1. Grafo en alta dimensión (v_{ij}): UMAP construye un grafo de vecinos y define una similitud "difusa" que se desvanece con la distancia. Tras simetrizar:

$$v_{ij} = v_{j|i} + v_{i|j} - v_{j|i}v_{i|j}$$
 donde $v_{j|i} \approx \exp\left(\frac{-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|}{\sigma_i}\right)$

• 2. Grafo en baja dimensión (w_{ij}): Define una estructura similar en el espacio de baja dimensión, usando una familia de curvas parametrizada:

$$w_{ij} = \left(1 + a\|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|^{2b}\right)^{-1}$$

• 3. Optimización: UMAP minimiza la Cross-Entropy (CE) binaria entre las dos representaciones. Esto es clave para su eficiencia y mejor preservación de la estructura global.

$$C(V,W) = \sum_{i \in I} \left[v_{ij} \log \left(\frac{v_{ij}}{w_{ii}} \right) + (1 - v_{ij}) \log \left(\frac{1 - v_{ij}}{1 - w_{ij}} \right) \right]$$

Matías Leoni (**Aprendizaje Automático I** M

• Para un mismo dataset de alta dimensionalidad (como MNIST, dígitos escritos a mano), cada técnica revela una estructura diferente.

- Para un mismo dataset de alta dimensionalidad (como MNIST, dígitos escritos a mano), cada técnica revela una estructura diferente.
- **PCA:** Puede mostrar una separación general, pero los grupos a menudo se superponen.

- Para un mismo dataset de alta dimensionalidad (como MNIST, dígitos escritos a mano), cada técnica revela una estructura diferente.
- **PCA:** Puede mostrar una separación general, pero los grupos a menudo se superponen.
- t-SNE: Muestra clusters locales muy definidos y separados.

- Para un mismo dataset de alta dimensionalidad (como MNIST, dígitos escritos a mano), cada técnica revela una estructura diferente.
- PCA: Puede mostrar una separación general, pero los grupos a menudo se superponen.
- t-SNE: Muestra clusters locales muy definidos y separados.
- **UMAP:** También muestra clusters definidos, pero a menudo con una mejor representación de cómo se relacionan los clusters entre sí.

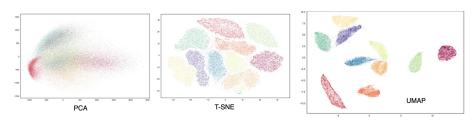


Figure: Visualización del dataset MNIST usando PCA, t-SNE y UMAP.

 Preprocesamiento para Supervisado: Reducir características con PCA antes de entrenar un clasificador o regresor puede mejorar el rendimiento y reducir el tiempo de entrenamiento.

- Preprocesamiento para Supervisado: Reducir características con PCA antes de entrenar un clasificador o regresor puede mejorar el rendimiento y reducir el tiempo de entrenamiento.
- Visualización de Datos:

- Preprocesamiento para Supervisado: Reducir características con PCA antes de entrenar un clasificador o regresor puede mejorar el rendimiento y reducir el tiempo de entrenamiento.
- Visualización de Datos:
 - Usar PCA para una primera exploración rápida y lineal.

- Preprocesamiento para Supervisado: Reducir características con PCA antes de entrenar un clasificador o regresor puede mejorar el rendimiento y reducir el tiempo de entrenamiento.
- Visualización de Datos:
 - Usar PCA para una primera exploración rápida y lineal.
 - Usar t-SNE o UMAP para descubrir e investigar estructuras de clusters complejas en 2D/3D (ej. datos genómicos, embeddings de texto).

- Preprocesamiento para Supervisado: Reducir características con PCA antes de entrenar un clasificador o regresor puede mejorar el rendimiento y reducir el tiempo de entrenamiento.
- Visualización de Datos:
 - Usar PCA para una primera exploración rápida y lineal.
 - Usar t-SNE o UMAP para descubrir e investigar estructuras de clusters complejas en 2D/3D (ej. datos genómicos, embeddings de texto).
- Compresión de Datos:

 Preprocesamiento para Supervisado: Reducir características con PCA antes de entrenar un clasificador o regresor puede mejorar el rendimiento y reducir el tiempo de entrenamiento.

Visualización de Datos:

- Usar PCA para una primera exploración rápida y lineal.
- Usar t-SNE o UMAP para descubrir e investigar estructuras de clusters complejas en 2D/3D (ej. datos genómicos, embeddings de texto).

Compresión de Datos:

• En procesamiento de imágenes, PCA (conocido como Eigenfaces) puede usarse para comprimir y reconocer rostros.

- Preprocesamiento para Supervisado: Reducir características con PCA antes de entrenar un clasificador o regresor puede mejorar el rendimiento y reducir el tiempo de entrenamiento.
- Visualización de Datos:
 - Usar PCA para una primera exploración rápida y lineal.
 - Usar t-SNE o UMAP para descubrir e investigar estructuras de clusters complejas en 2D/3D (ej. datos genómicos, embeddings de texto).
- Compresión de Datos:
 - En procesamiento de imágenes, PCA (conocido como Eigenfaces) puede usarse para comprimir y reconocer rostros.
- **Resumen:** Elegir la técnica adecuada (lineal vs. no lineal) depende del objetivo y la naturaleza de los datos.

Bonus Track: Un Vistazo a Otros Métodos No Supervisados

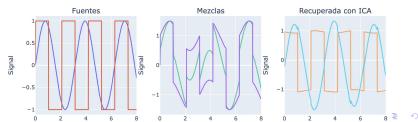
Las siguientes diapositivas presentan brevemente otros métodos importantes que no podremos cubrir en detalle.

El objetivo es que conozcan sus **nombres**, **aplicaciones clave** y una **imagen conceptual**.

• ¿Qué es? Una técnica para separar una señal multivariada en subcomponentes aditivos que son estadísticamente independientes.

- ¿Qué es? Una técnica para separar una señal multivariada en subcomponentes aditivos que son estadísticamente independientes.
- Diferencia con PCA: PCA maximiza la varianza y produce componentes no correlacionados. ICA maximiza la independencia estadística y puede encontrar componentes aunque no sean ortogonales.

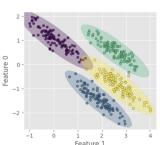
- ¿Qué es? Una técnica para separar una señal multivariada en subcomponentes aditivos que son estadísticamente independientes.
- Diferencia con PCA: PCA maximiza la varianza y produce componentes no correlacionados. ICA maximiza la independencia estadística y puede encontrar componentes aunque no sean ortogonales.
- Aplicación Clásica: El "problema de la fiesta" (cocktail party problem). ICA puede tomar grabaciones de varios micrófonos en una sala y separar las voces de las distintas personas en pistas de audio independientes.



• ¿Qué es? Un método de clustering probabilístico o "suave" (soft clustering). Modela los datos como generados por una mezcla de múltiples distribuciones Gaussianas.

- ¿Qué es? Un método de clustering probabilístico o "suave" (soft clustering). Modela los datos como generados por una mezcla de múltiples distribuciones Gaussianas.
- ¿Cómo funciona? Cada punto tiene una probabilidad de pertenecer a cada uno de los clusters (Gaussianas). Se ajusta con el algoritmo Expectation-Maximization (EM).

- ¿Qué es? Un método de clustering probabilístico o "suave" (soft clustering). Modela los datos como generados por una mezcla de múltiples distribuciones Gaussianas.
- ¿Cómo funciona? Cada punto tiene una probabilidad de pertenecer a cada uno de los clusters (Gaussianas). Se ajusta con el algoritmo Expectation-Maximization (EM).
- Ventaja sobre K-Means: Es más flexible. Mientras que K-Means asume clusters esféricos, GMM puede modelar clusters con formas elípticas y diferentes orientaciones.

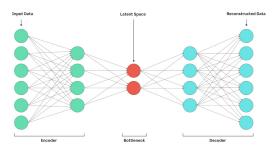


• ¿Qué es? Un tipo de red neuronal usada para aprender representaciones comprimidas de los datos de forma no supervisada.

- ¿Qué es? Un tipo de red neuronal usada para aprender representaciones comprimidas de los datos de forma no supervisada.
- Arquitectura: Un codificador (encoder) comprime el input a un "cuello de botella" (bottleneck) de baja dimensión. Un decodificador (decoder) intenta reconstruir el input original desde esa representación comprimida.

- ¿Qué es? Un tipo de red neuronal usada para aprender representaciones comprimidas de los datos de forma no supervisada.
- Arquitectura: Un codificador (encoder) comprime el input a un "cuello de botella" (bottleneck) de baja dimensión. Un decodificador (decoder) intenta reconstruir el input original desde esa representación comprimida.
- Poder: Aprende mapeos no lineales, lo que lo hace mucho más potente que PCA para datos complejos como imágenes o texto.

- ¿Qué es? Un tipo de red neuronal usada para aprender representaciones comprimidas de los datos de forma no supervisada.
- Arquitectura: Un codificador (encoder) comprime el input a un "cuello de botella" (bottleneck) de baja dimensión. Un decodificador (decoder) intenta reconstruir el input original desde esa representación comprimida.
- Poder: Aprende mapeos no lineales, lo que lo hace mucho más potente que PCA para datos complejos como imágenes o texto.
- Aplicaciones: Compresión y eliminación de ruido (denoising) de imágenes, detección de anomalías.

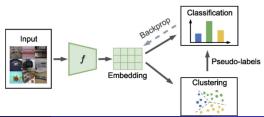


• ¿Qué es? Un enfoque híbrido que une Redes Neuronales Profundas (Deep Learning) con algoritmos de clustering.

- ¿Qué es? Un enfoque híbrido que une Redes Neuronales Profundas (Deep Learning) con algoritmos de clustering.
- Idea Central: Entrenar una red neuronal (ej. un autoencoder) para que, de forma simultánea, aprenda una representación de baja dimensión y optimice una función de pérdida de clustering.

- ¿Qué es? Un enfoque híbrido que une Redes Neuronales Profundas (Deep Learning) con algoritmos de clustering.
- Idea Central: Entrenar una red neuronal (ej. un autoencoder) para que, de forma simultánea, aprenda una representación de baja dimensión y optimice una función de pérdida de clustering.
- **Objetivo:** La red aprende características que son inherentemente "amigables para el clustering", es decir, que forman grupos compactos y bien separados en el espacio latente.

- ¿Qué es? Un enfoque híbrido que une Redes Neuronales Profundas (Deep Learning) con algoritmos de clustering.
- Idea Central: Entrenar una red neuronal (ej. un autoencoder) para que, de forma simultánea, aprenda una representación de baja dimensión y optimice una función de pérdida de clustering.
- **Objetivo:** La red aprende características que son inherentemente "amigables para el clustering", es decir, que forman grupos compactos y bien separados en el espacio latente.
- Aplicación: Muy útil para agrupar datos complejos y no estructurados (imágenes, documentos) donde las características relevantes no son obvias.



Análisis de Componentes Independientes (ICA)

- Análisis de Componentes Independientes (ICA)
 - Separación de señales de audio.

- Análisis de Componentes Independientes (ICA)
 - Separación de señales de audio.
 - Análisis de señales biomédicas (EEG, fMRI).

- Análisis de Componentes Independientes (ICA)
 - Separación de señales de audio.
 - Análisis de señales biomédicas (EEG, fMRI).
- Modelos de Mezcla Gaussiana (GMM)

- Análisis de Componentes Independientes (ICA)
 - Separación de señales de audio.
 - Análisis de señales biomédicas (EEG, fMRI).
- Modelos de Mezcla Gaussiana (GMM)
 - Segmentación de imágenes por color/textura.

- Análisis de Componentes Independientes (ICA)
 - Separación de señales de audio.
 - Análisis de señales biomédicas (EEG, fMRI).
- Modelos de Mezcla Gaussiana (GMM)
 - Segmentación de imágenes por color/textura.
 - Modelado de perfiles de riesgo o de clientes.

- Análisis de Componentes Independientes (ICA)
 - Separación de señales de audio.
 - Análisis de señales biomédicas (EEG, fMRI).
- Modelos de Mezcla Gaussiana (GMM)
 - Segmentación de imágenes por color/textura.
 - Modelado de perfiles de riesgo o de clientes.
- Autoencoders y Clustering Profundo

- Análisis de Componentes Independientes (ICA)
 - Separación de señales de audio.
 - Análisis de señales biomédicas (EEG, fMRI).
- Modelos de Mezcla Gaussiana (GMM)
 - Segmentación de imágenes por color/textura.
 - Modelado de perfiles de riesgo o de clientes.
- Autoencoders y Clustering Profundo
 - Detección de anomalías en ciberseguridad o finanzas.

- Análisis de Componentes Independientes (ICA)
 - Separación de señales de audio.
 - Análisis de señales biomédicas (EEG, fMRI).
- Modelos de Mezcla Gaussiana (GMM)
 - Segmentación de imágenes por color/textura.
 - Modelado de perfiles de riesgo o de clientes.
- Autoencoders y Clustering Profundo
 - Detección de anomalías en ciberseguridad o finanzas.
 - Búsqueda de imágenes por similitud visual.

- Análisis de Componentes Independientes (ICA)
 - Separación de señales de audio.
 - Análisis de señales biomédicas (EEG, fMRI).
- Modelos de Mezcla Gaussiana (GMM)
 - Segmentación de imágenes por color/textura.
 - Modelado de perfiles de riesgo o de clientes.
- Autoencoders y Clustering Profundo
 - Detección de anomalías en ciberseguridad o finanzas.
 - Búsqueda de imágenes por similitud visual.
 - Generación de datos sintéticos.