

Agrupamiento

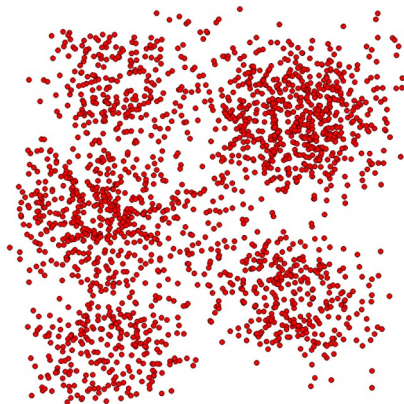
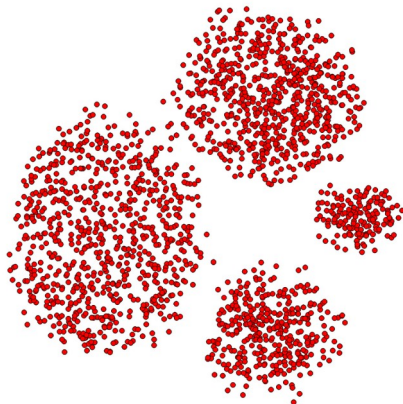
Definición

Dado un conjunto de datos, el agrupamiento trata de identificar subgrupos homogéneos de ejemplos que manifiestan diferencias relevantes con los otros subgrupos que se formen.

Agrupamiento

Definición

Dado un conjunto de datos, el agrupamiento trata de identificar subgrupos homogéneos de ejemplos que manifiestan diferencias relevantes con los otros subgrupos que se formen.

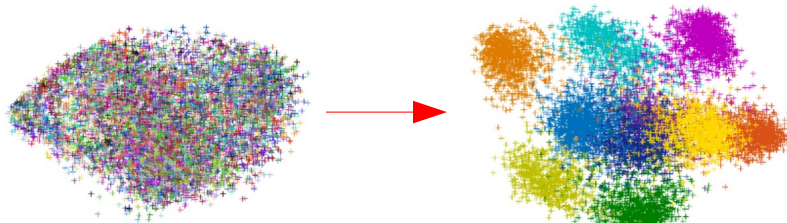


Agrupamiento profundo

Definición

Dado un conjunto de datos, el agrupamiento trata de identificar subgrupos homogéneos de ejemplos que manifiestan diferencias relevantes con los otros subgrupos que se formen.

Para ello, primero realiza una transformación de los datos a un espacio de representación diferente, casi siempre de **menor dimensionalidad**.

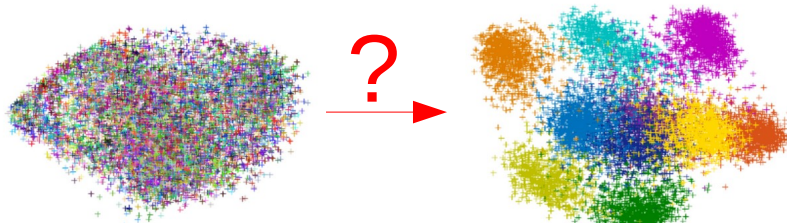


Agrupamiento profundo

Definición

Dado un conjunto de datos, el agrupamiento trata de identificar subgrupos homogéneos de ejemplos que manifiestan diferencias relevantes con los otros subgrupos que se formen.

Para ello, primero realiza una transformación de los datos a un espacio de representación diferente, casi siempre de **menor dimensionalidad**.



Agrupamiento profundo

Definición

Dado un conjunto de datos, el agrupamiento trata de identificar subgrupos homogéneos de ejemplos que manifiestan diferencias relevantes con los otros subgrupos que se formen.

Para ello, primero realiza una transformación de los datos a un espacio de representación diferente, casi siempre de **menor dimensionalidad**.

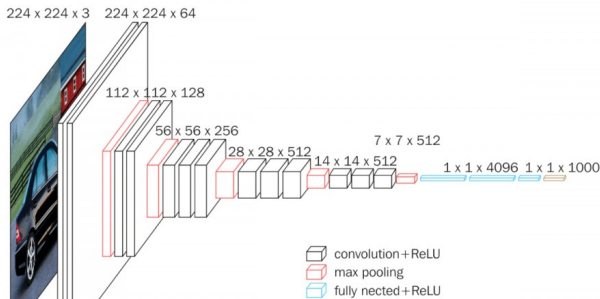
El primer paso es:
reducir la dimensionalidad de los datos

Agrupamiento profundo

¿Cómo encontramos las transformaciones adecuadas?

Definición

Las redes neuronales **profundas** permiten transformar los datos de un espacio de representación a otro de menor dimensionalidad y mayor densidad de información, el cual utilizan para llevar a cabo la tarea que se les exige.

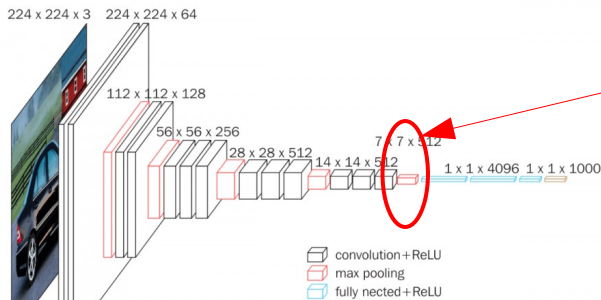


Agrupamiento profundo

¿Cómo encontramos las transformaciones adecuadas?

Definición

Las redes neuronales **profundas** permiten transformar los datos de un espacio de representación a otro de menor dimensionalidad y mayor densidad de información, el cual utilizan para llevar a cabo la tarea que se les exige.



En este punto la red ha comprimido la información de la entrada con la menor pérdida de información posible

Agrupamiento profundo

Tipos de algoritmos de agrupamiento profundo

- Basados en auto-encoders
- Basados en modelos generativos
- Basados en optimización directa de cluster

Agrupamiento profundo: AEs

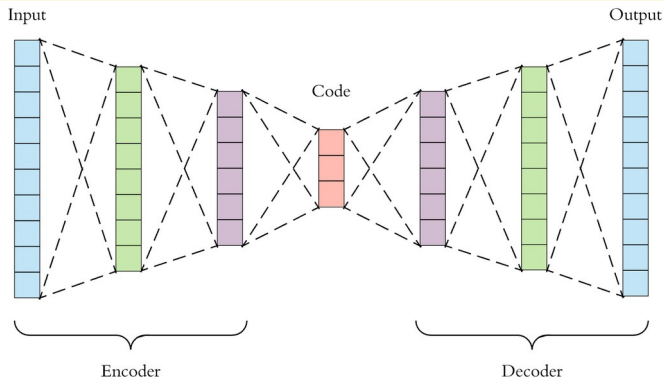
Tipos de algoritmos de agrupamiento profundo

- **Basados en auto-encoders**
- Basados en modelos generativos
- Basados en optimización directa de cluster

Agrupamiento profundo: AEs

Definición

El propósito de los **auto-encoders** es reconstruir los datos que tienen a la entrada con el menor error posible tras haberlos **comprimido** a un espacio de menor dimensionalidad (espacio latente o *bottleneck*).

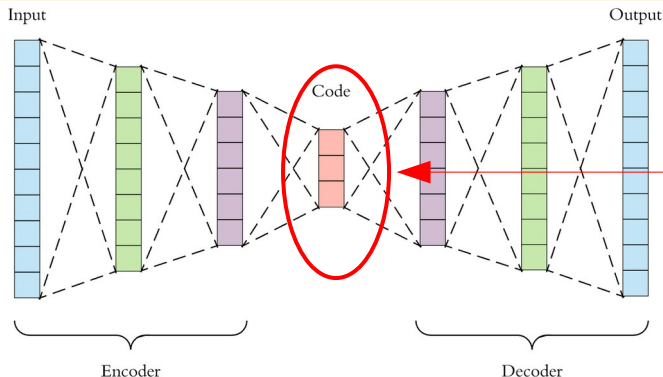


Arquitectura típica de un auto-encoder

Agrupamiento profundo: AEs

Definición

El propósito de los **auto-encoders** es reconstruir los datos que tienen a la entrada con el menor error posible tras haberlos **comprimido** a un espacio de menor dimensionalidad (espacio latente o *bottleneck*).

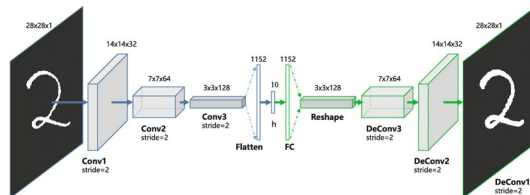
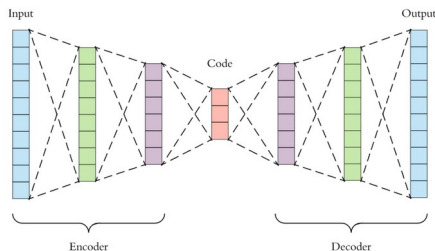


En este punto la red ha comprimido la información de la entrada con la menor pérdida de información posible

Arquitectura típica de un auto-encoder

Agrupamiento profundo: AEs

¿Cómo funcionan los auto-encoders?



- El **encoder** tiene como entrada los datos originales (x) y devuelve el **código** (z)

$$z = \sigma(\mathbf{W}\mathbf{x} + \mathbf{b})$$

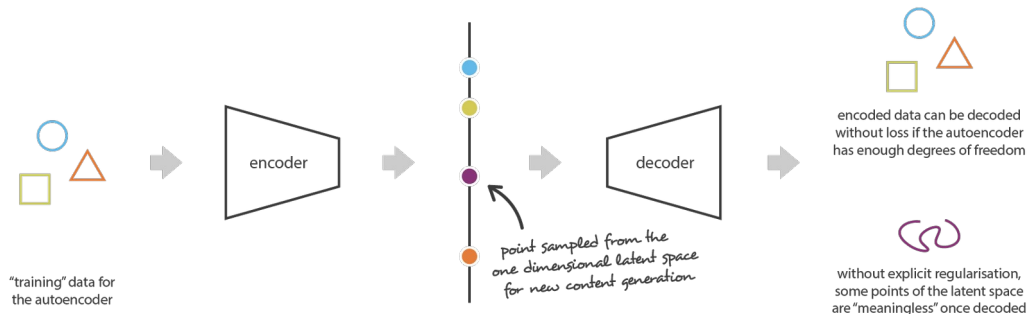
- El **decoder** toma como entrada el **código** y trata de reconstruir los datos originales (x')

$$x' = \sigma'(\mathbf{W}'\mathbf{z} + \mathbf{b}')$$

- La función de pérdidas se encarga de que x y x' sean lo más parecidas posible calculando el **error de reconstrucción**

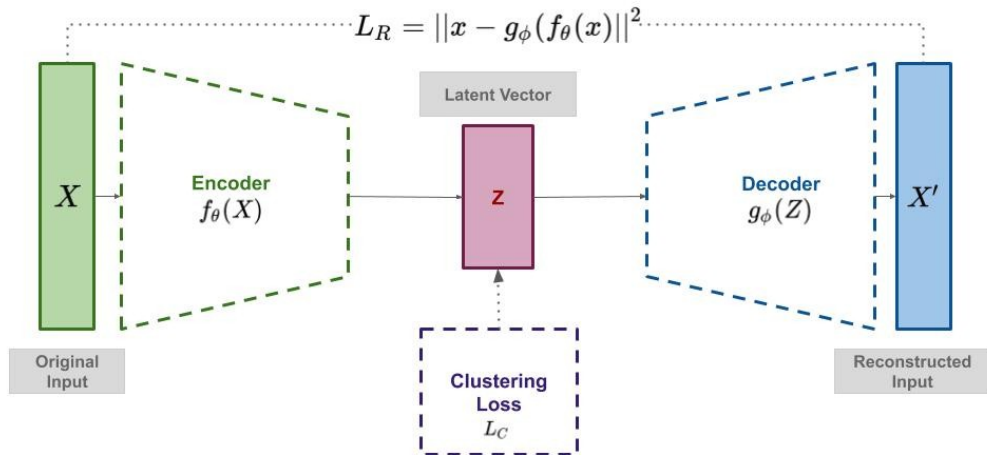
Agrupamiento profundo: AEs

¿Cómo funcionan los auto-encoders?



- El **auto-encoder** se preocupa únicamente de que la reconstrucción sea lo más parecida a la entrada, no de crear un espacio latente *organizado*.
- La muestra de entrada se codifica como un **punto** del espacio latente.

Agrupamiento profundo: AEs



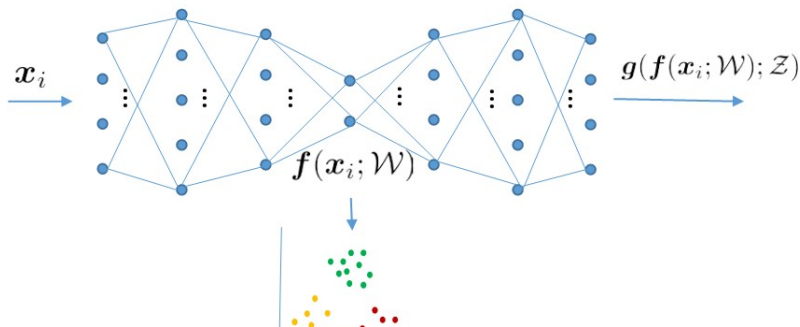
- Para que el espacio latente sea adecuado para realizar un clustering de buena calidad, es necesario añadir una **condición extra** al entrenamiento.
- La mayoría de métodos introducen un **término de pérdidas** que optimice el **clustering** obtenido.

Agrupamiento profundo: AEs

Método: Deep Clustering Network (DCN)

Utiliza un auto-encoder para aprender representaciones de los datos que puedan ser útiles a un K-means.

Primero, pre-entrena el AE, después, optimiza las **pérdidas de reconstrucción** y las **pérdidas del K-means** iterativamente.

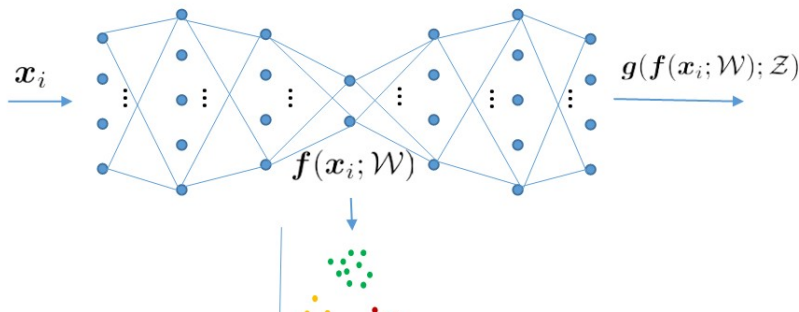


Agrupamiento profundo: AEs

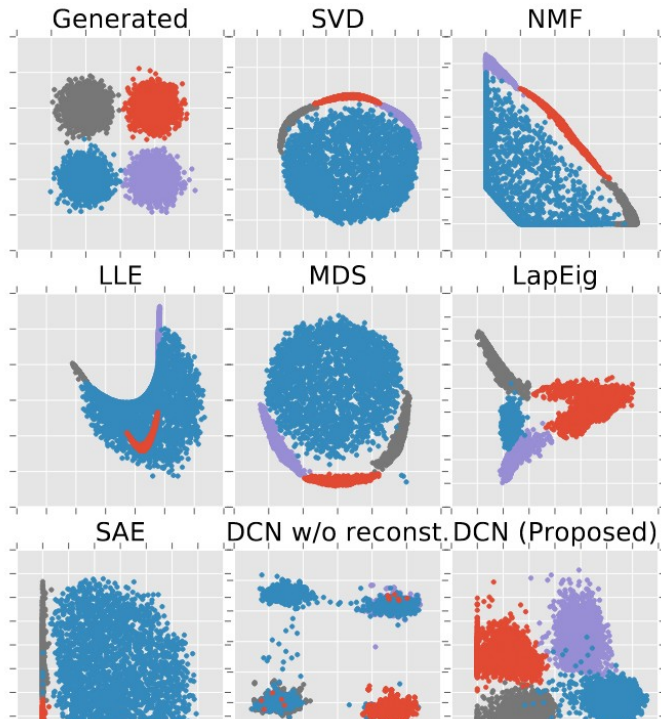
La optimización **minimiza**:

- El error de **reconstrucción**
- Las pérdidas introducidas por la función de pérdidas correspondiente al **K-means**

$$\min \sum_{i=1}^N \left(\ell(g(f(x_i)), x_i) + \frac{\lambda}{2} \|f(x_i) - M s_i\|_2^2 \right)$$



Agrupamiento profundo: AEs



Agrupamiento profundo: AEs

¡Implementación disponible!

<https://github.com/xuyxu/Deep-Clustering-Network>

Agrupamiento profundo

Tipos de algoritmos de agrupamiento profundo

- Basados en auto-encoders
- **Basados en modelos generativos**
- Basados en optimización directa de cluster

Agrupamiento profundo: modelos generativos

Definición

El propósito de los **modelos generativos** es aprender la distribución de los datos originales para ser capaces de reproducirlos con la mayor fidelidad posible.

Dos métodos:

- Variational auto-encoder (VAE)
- Generative Adversarial Network (GAN)

Agrupamiento profundo: modelos generativos

Definición

El propósito de los **modelos generativos** es aprender la distribución de los datos originales para ser capaces de reproducirlos con la mayor fidelidad posible.

Dos métodos:

- **Variational auto-encoder (VAE)**
- Generative Adversarial Network (GAN)

Agrupamiento profundo: VAEs

Definición

El propósito de los **auto-encoders variacionales** es reconstruir los datos que tienen a la entrada con el menor error posible tras haberlos **comprimido** a un espacio de menor dimensionalidad (espacio latente o *bottleneck*).

A diferencia del AE tradicional, el VAE codifica las muestras originales como una **distribución de probabilidad**, en vez de como un único punto del espacio latente.

Agrupamiento profundo: VAEs

Definición

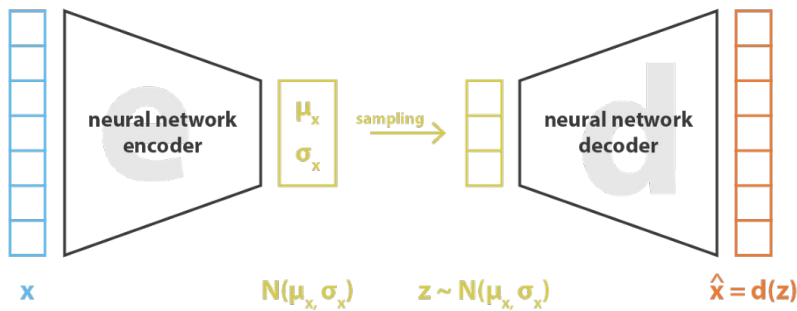
A diferencia del AE tradicional, el **VAE** codifica las muestras originales como una **distribución de probabilidad**, en vez de como un único punto del espacio latente.



Agrupamiento profundo: VAEs

Definición

A diferencia del AE tradicional, el **VAE** codifica las muestras originales como una **distribución de probabilidad**, en vez de como un único punto del espacio latente.

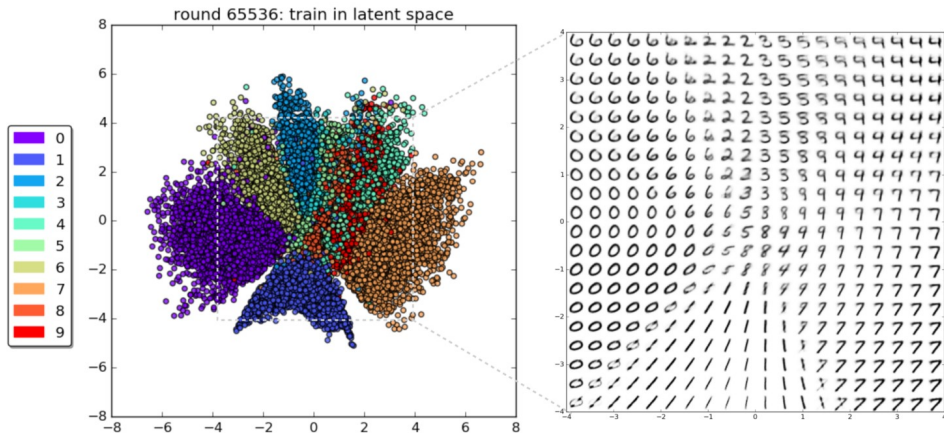


$$\text{loss} = ||x - \hat{x}||^2 + \text{KL}[N(\mu_x, \sigma_x), N(0, I)] = ||x - d(z)||^2 + \text{KL}[N(\mu_x, \sigma_x), N(0, I)]$$

Agrupamiento profundo: VAEs

Objetivo

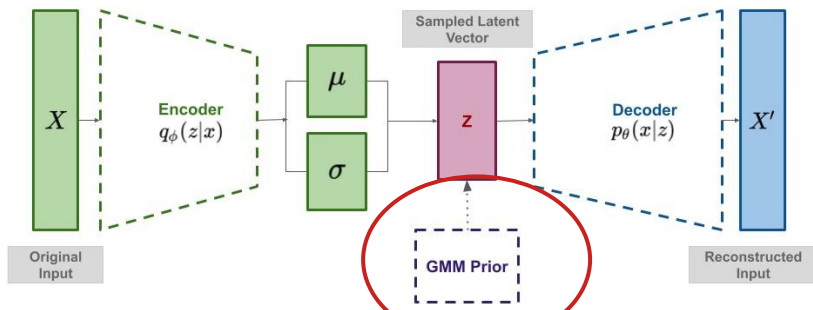
El objetivo del *Auto-Encoder Variacional* (VAE) es obtener un espacio latente “**ordenado**” del cual podemos muestrear y obtener nuevos datos similares (pero no iguales) a los originales.



Agrupamiento profundo: VAEs

Método: Variational Deep Embedding (VaDE)

Se impone una distribución de probabilidad **a priori** (*prior*) consistente en una **mixtura de Gaussianas** (GMM) y se optimizan los parámetros del modelo de forma que las **probabilidades** de que los datos puedan haber sido generados por dicha mixtura sea **máxima**.

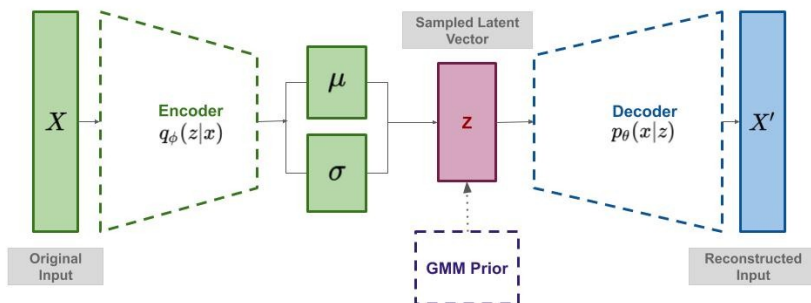


Agrupamiento profundo: VAEs

La optimización minimiza:

- El error de **reconstrucción**
- La **divergencia KL** entre la mixtura de Gaussianas y la distribución aprendida por el VAE

$$\mathcal{L}_{\text{ELBO}}(\mathbf{x}) = E_{q(\mathbf{z}, c|\mathbf{x})}[\log p(\mathbf{x}|\mathbf{z})] - D_{KL}(q(\mathbf{z}, c|\mathbf{x})||p(\mathbf{z}, c))$$



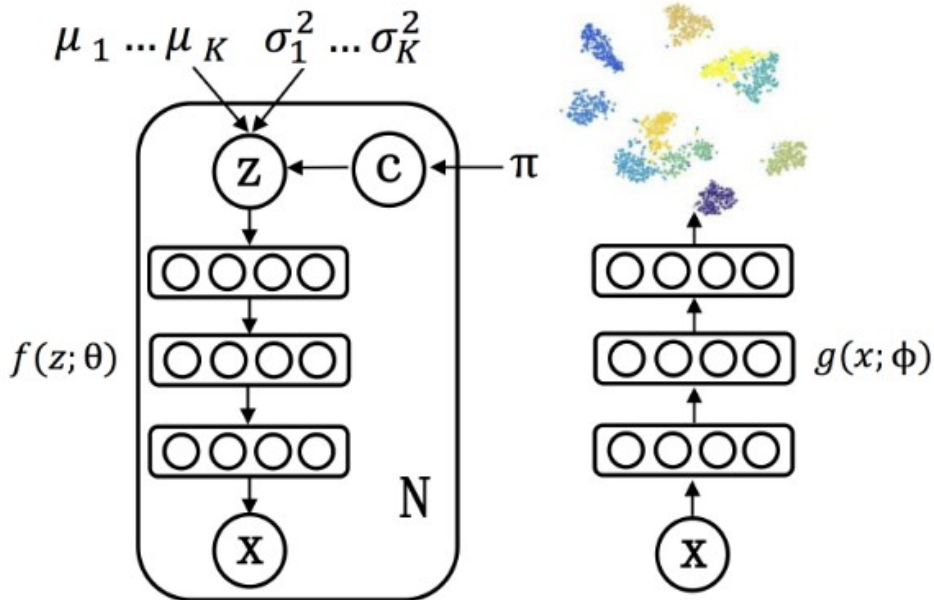
Agrupamiento profundo: VAEs

Método: Variational Deep Embedding (VaDE)

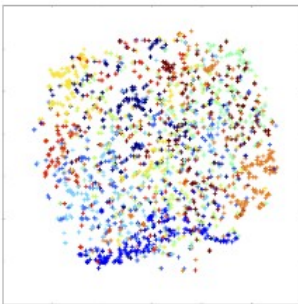
El modo de funcionamiento es el siguiente:

- 1) Se selecciona una componente de la mixtura de Gaussianas
- 2) Se muestrea dicha componente, obteniendo un código latente
- 3) Se introduce el código latente al decoder y se obtiene una posible reconstrucción de x
- 4) Se calculan las pérdidas y se actualizan los pesos

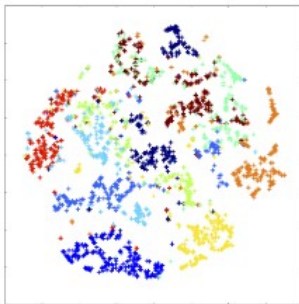
Agrupamiento profundo: VAEs



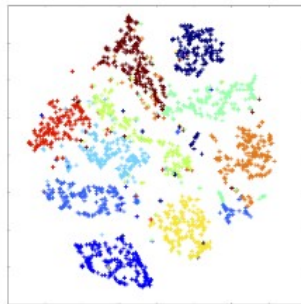
Agrupamiento profundo: VAEs



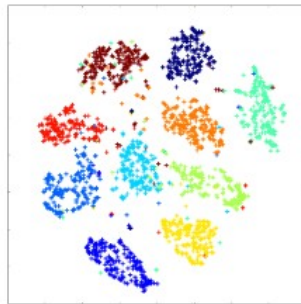
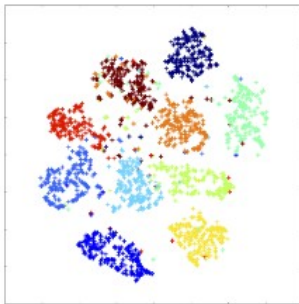
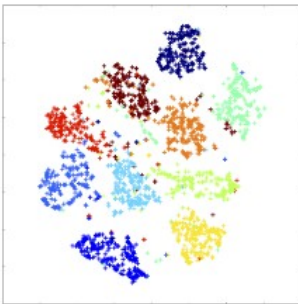
(a) Epoch 0 (11.35%)



(b) Epoch 1 (55.63%)



(c) Epoch 5 (72.40%)



Agrupamiento profundo: VAEs

¡Implementación disponible!

<https://github.com/slim1017/VaDE>

Agrupamiento profundo: modelos generativos

Definición

El propósito de los **modelos generativos** es aprender la distribución de los datos originales para ser capaces de reproducirlos con la mayor fidelidad posible.

Dos métodos:

- Variational auto-encoder (VAE)
- **Generative Adversarial Network (GAN)**

Agrupamiento profundo: GANs

Definición

El propósito de las **redes generativas adversarias** es generar nuevo contenido capaz de hacerse pasar por el original partiendo de **ruido** a la entrada (en su versión más básica).

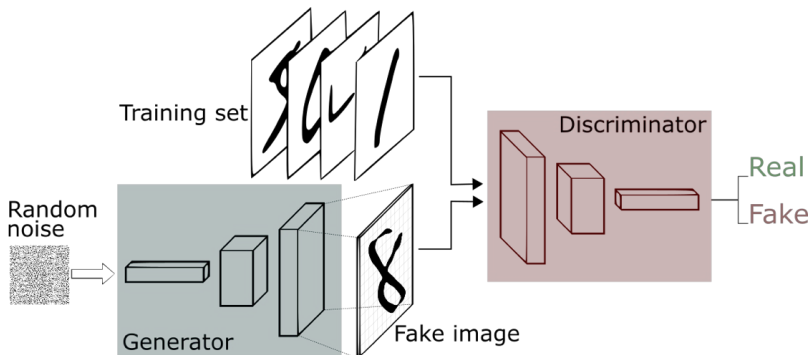
Durante el entrenamiento, el modelo aprende a generar contenido **realista** partiendo del ruido original, es decir, encuentra un “**mapeo**” adecuado entre vectores (o matrices) de elementos aleatorios a contenido realista.

Se usan sobretodo, pero no únicamente, en el ámbito de la **imagen**.

Agrupamiento profundo: GANs

Definición

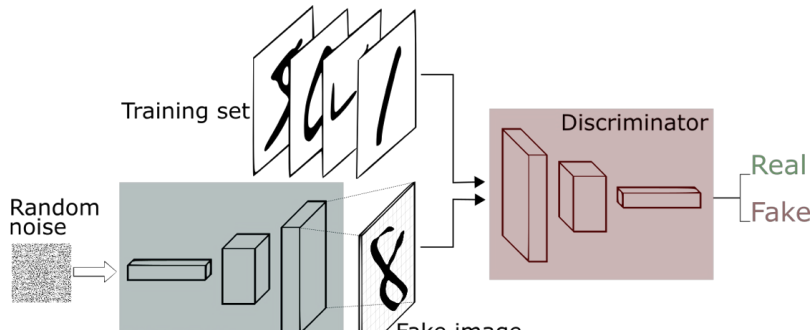
El propósito de las **redes generativas adversarias** es generar nuevo contenido capaz de hacerse pasar por el original partiendo de **ruido** a la entrada (en su versión más básica).



Agrupamiento profundo: GANs

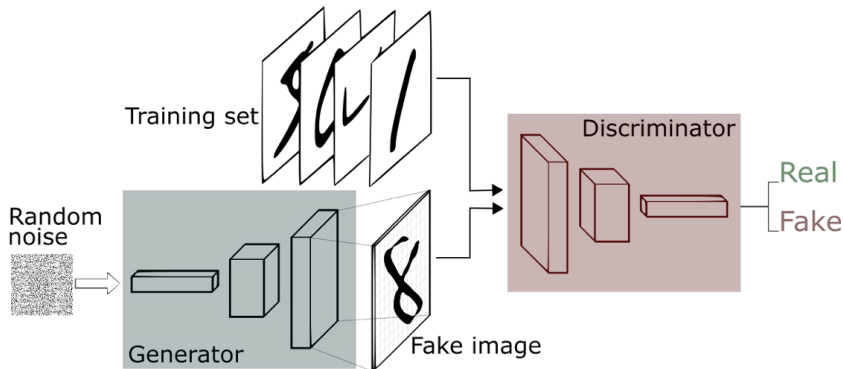
¿Cómo funcionan las GANs?

- El **generador** (“falsificador”) trata de generar contenido lo suficientemente realista como para **engañar** al discriminador (“policía”)
 - El discriminador trata de **distinguir** el contenido real del falso
- ¡Compiten entre ellos! → inestabilidad :(



Agrupamiento profundo: GANs

¿Cómo funcionan las GANs?



$$\mathcal{L}_{adv} = \min_G \max_D V(D, G) = \underbrace{\mathbb{E}_{x \sim p_{data}(x)} [\log D(x)]}_{\text{probabilidad de que } D(x) \text{ prediga que los datos reales son verdaderos}} + \underbrace{\mathbb{E}_{z \sim p_z(z)} [1 - \log D(G(z))]}_{\text{probabilidad de que } D(x) \text{ prediga que los datos generados, } x=G(z), \text{ no son verdaderos}}$$

Agrupamiento profundo: GANs

¿Cómo se entrenan las GANs?

El entrenamiento ocurre en **2 fases**:

- El discriminador recibe imágenes **reales y falsas**, con las **etiquetas correspondientes** (0 para las falsas y 1 para las reales), y debe aprender a predecir correctamente. Cuando se **equivoca**, sus **pesos** se **actualizan**.
- Con los pesos del **discriminador congelados**, el **generador** introduce **imágenes generadas** con **etiqueta “real”** (1) al **discriminador**. **Cuando** el discriminador predice que la imagen es falsa, al no coincidir la etiqueta con la predicción, se genera un **error** que permite **actualizar los pesos del generador** para que aprenda a sintetizar imágenes más realistas.

Agrupamiento profundo: GANs

Método: Information Maximizing GAN (InfoGAN)

El propósito principal de InfoGAN es el de “desenredar” las distintas componentes presentes en los datos (“*disentangled representations*”).

Para ello, InfoGAN descompone la entrada en dos partes:

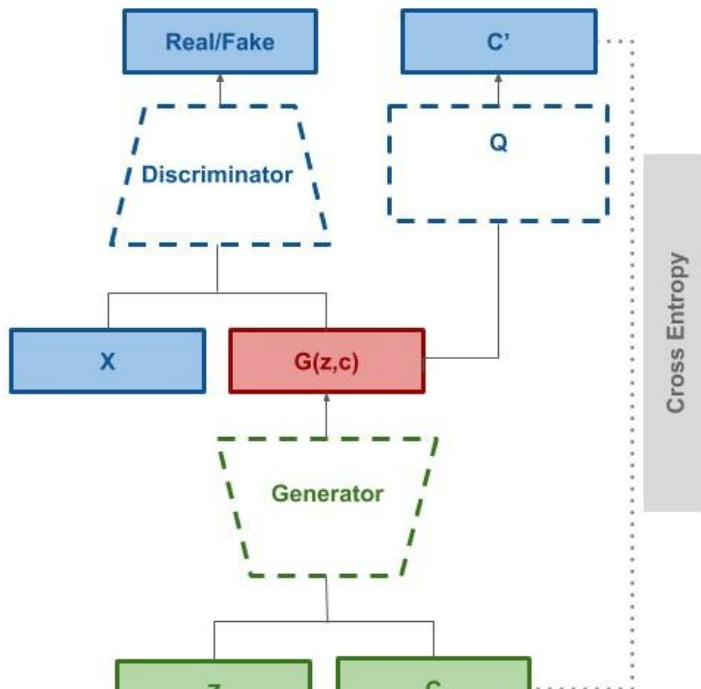
- Ruido incomprensible: z
- El código latente: c

El generador pasa a tener 2 entradas: $G(z, c)$.

Se combina el objetivo GAN con un término de regularización basado en la información mutua: $I(c; G(z, c))$.

El objetivo principal **no es el clustering**, pero se aprovecha para ello.

Agrupamiento profundo: GANs



Agrupamiento profundo: GANs



(a) Varying c_1 on InfoGAN (Digit type)



(b) Varying c_1 on regular GAN (No clear meaning)



(c) Varying c_2 from -2 to 2 on InfoGAN (Rotation)



(d) Varying c_3 from -2 to 2 on InfoGAN (Width)

Agrupamiento profundo: GANs

¡Implementación disponible!

<https://github.com/openai/InfoGAN>

Agrupamiento profundo

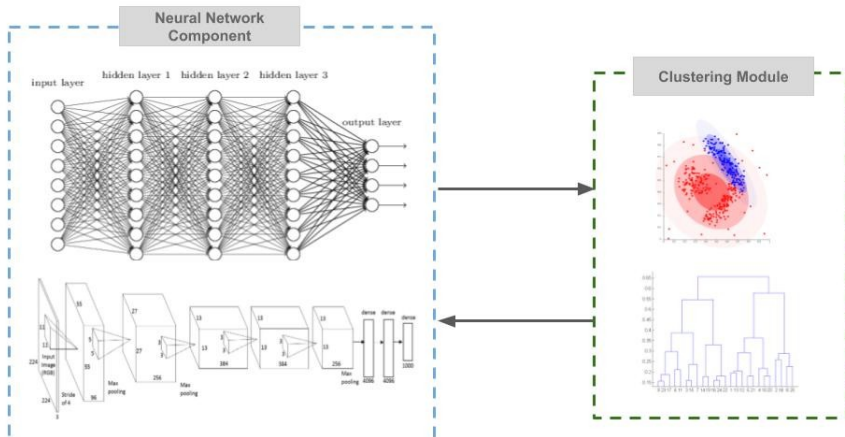
Tipos de algoritmos de agrupamiento profundo

- Basados en auto-encoders
- Basados en modelos generativos
- **Basados en optimización directa de cluster**

Agrupamiento profundo: optimización directa

Definición

En esta clase de métodos se prescinde de cualquier posible término de pérdidas de reconstrucción y se utiliza **únicamente** el término de **pérdidas de agrupamiento** para optimizar la red neuronal.



Agrupamiento profundo: optimización directa

Método: Joint Unsupervised Learning (JULE)

Este método emplea una **red neuronal convolucional** junto a una función de **pérdidas** de **agrupamiento aglomerativo**.

En cada **predicción** (*forward pass*) se realiza **clustering jerárquico** usando una medida de **afinidad** y las representaciones se **optimizan** en el *backward pass*.

Tiene el **inconveniente** de que requiere la construcción de una matriz de afinidad no dirigida que requiere de mucha **memoria** y capacidad de **cómputo**.

Agrupamiento profundo: GANs

¡Implementación disponible!

<https://github.com/FJR-Nancy/joint-cluster-cnn>

Agrupamiento profundo: GANs

Si queréis profundizar:

<https://deepnotes.io/deep-clustering>

Unsupervised Clustering for Deep Learning: A tutorial survey

Deep clustering: methods and implements

Agrupamiento profundo

Ventajas

- Las redes neuronales profundas permiten obtener **representaciones reducidas** de los datos que son más adecuadas para realizar **buenas agrupaciones**.
- El entrenamiento de estos modelos es **end-to-end**: combina *feature extraction, dimensionality reduction* y *clustering*.
- **Escalabilidad**: gracias a las redes neuronales profundas podemos procesar enormes datasets altamente dimensionales.

Agrupamiento profundo

Desventajas

- **Hiper-parámetros:** las redes neuronales y las pérdidas utilizadas en los algoritmos de agrupamiento profundo dependen de hiper-parámetros que no son sencillos de escoger.
- **Falta de interpretabilidad:** las redes neuronales profundas dificultan bastante la interpretabilidad de los modelos.
- **Falta de base teórica:** aunque en la práctica funcionen, los fundamentos teóricos no son sólidos.