

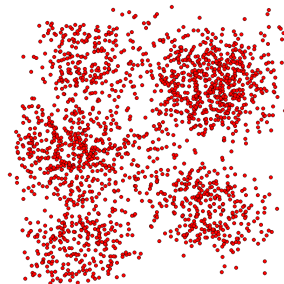
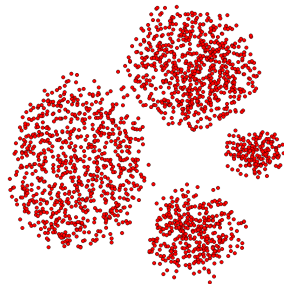
Aprendizaje no supervisado

Agrupamiento espectral

Javier Sevilla

Tipos de algoritmos de agrupamiento

- ▶ Basados en particiones
- ▶ Jerárquicos
- ▶ **Espectrales**
- ▶ Basados en densidad
- ▶ Probabilísticos



Puntos básicos

1. Obtener un grafo y su matriz de adyacencias
2. Obtener una representación alternativa de los datos
3. Aplicar un algoritmo de agrupamiento estándar (K -means)

Puntos básicos

1. **Obtener un grafo y su matriz de adyacencias**
2. Obtener una representación alternativa de los datos
3. Aplicar un algoritmo de agrupamiento estándar (K -means)

Agupamiento espectral

Consideraciones previas

Matriz de similitud

- ▶ El algoritmo no funciona con la matriz original
- ▶ Se usa la **matriz de similitud**

Se transforma la matriz de ejemplos D ($n \times v$) en...
matriz de distancias, M ($n \times n$), tal que:

$$M_{ij} = d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

y ésta, a su vez, en una matriz de similitudes, S ($n \times n$):

$$S_{ij} = \exp(-M_{ij}^2 / 2 \cdot \sigma^2)$$

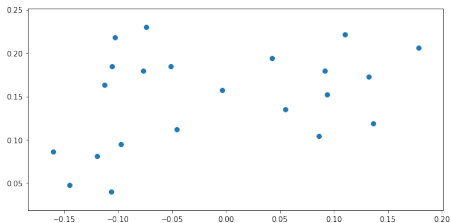
Agrupamiento espectral

Obtener un grafo y su matriz de adyacencias

Procedimientos de generación de un grafo

- ▶ Cada ejemplo de D es un nodo del grafo
- ▶ Todos los nodos están conectados con todos
- ▶ El peso de la arista entre dos nodos es su similitud, $W_{ij} = S_{ij}$

Grafo completo



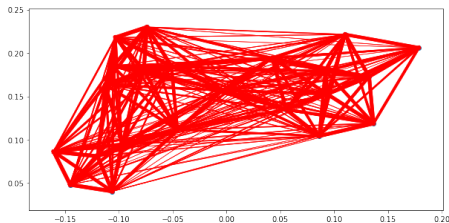
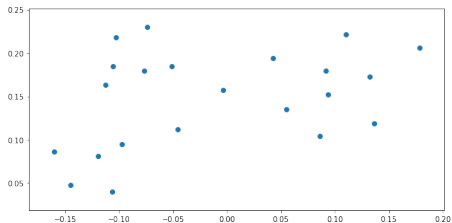
Agrupamiento espectral

Obtener un grafo y su matriz de adyacencias

Procedimientos de generación de un grafo

- ▶ Cada ejemplo de D es un nodo del grafo
- ▶ Todos los nodos están conectados con todos
- ▶ El peso de la arista entre dos nodos es su similitud, $W_{ij} = S_{ij}$

Grafo completo



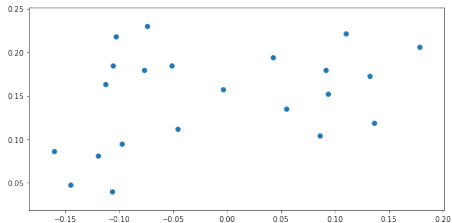
Agrupamiento espectral

Obtener un grafo y su matriz de adyacencias

Procedimientos de generación de un grafo

- ▶ Cada ejemplo de D es un nodo del grafo
- ▶ Existe una arista entre dos nodos si hay un mínimo de similitud entre ambos, $S_{ij} > \epsilon$
- ▶ El peso de la arista entre dos nodos es su similitud, $W_{ij} = S_{ij}$

Grafo umbral



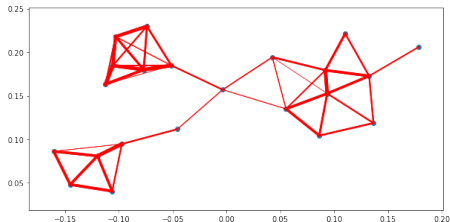
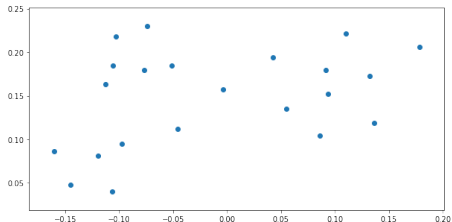
Agrupamiento espectral

Obtener un grafo y su matriz de adyacencias

Procedimientos de generación de un grafo

- ▶ Cada ejemplo de D es un nodo del grafo
- ▶ Existe una arista entre dos nodos si hay un mínimo de similitud entre ambos, $S_{ij} > \epsilon$
- ▶ El peso de la arista entre dos nodos es su similitud, $W_{ij} = S_{ij}$

Grafo umbral



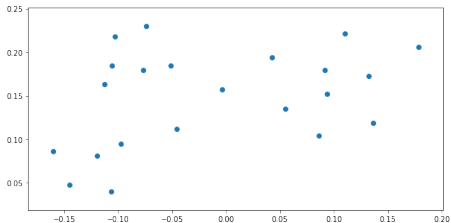
Agrupamiento espectral

Obtener un grafo y su matriz de adyacencias

Procedimientos de generación de un grafo

- ▶ Cada ejemplo de D es un nodo del grafo
- ▶ Un nodo i tiene una arista con otro nodo j si j es uno de los K 'vecinos' más similar de i (o viceversa)
- ▶ El peso de la arista entre dos nodos es su similitud, $W_{ij} = S_{ij}$

Grafo KNN



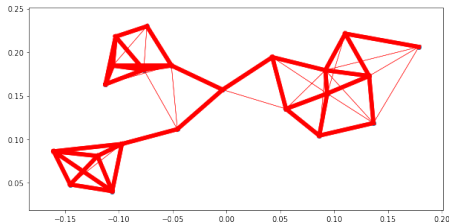
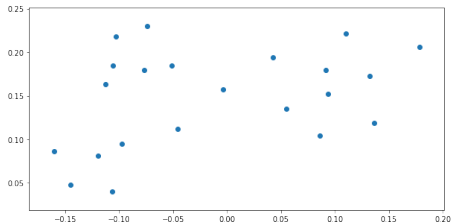
Agrupamiento espectral

Obtener un grafo y su matriz de adyacencias

Procedimientos de generación de un grafo

- ▶ Cada ejemplo de D es un nodo del grafo
- ▶ Un nodo i tiene una arista con otro nodo j si j es uno de los K 'vecinos' más similar de i (o viceversa)
- ▶ El peso de la arista entre dos nodos es su similitud, $W_{ij} = S_{ij}$

Grafo KNN



Puntos básicos

1. Obtener un grafo y su matriz de adyacencias
2. Obtener una representación alternativa de los datos
3. Aplicar un algoritmo de agrupamiento estándar (K -means)

Puntos básicos

1. Obtener un grafo y su matriz de adyacencias
2. **Obtener una representación alternativa de los datos**
3. Aplicar un algoritmo de agrupamiento estándar (K -means)

Agrupamiento espectral

Obtener una representación alternativa de los datos

Procedimientos de la matriz Laplaciana

$$L = D - W$$

- ▶ W : matriz representativa del grafo (paso anterior)
- ▶ D : matriz diagonal con $D_{ii} = \sum_j W_{ij}$

Matriz Laplaciana básica

$$\begin{bmatrix} L_1 & & & \\ & L_2 & & \\ & & 0 & \\ & & & \ddots \\ & & 0 & & L_3 \end{bmatrix}$$

Agrupamiento espectral

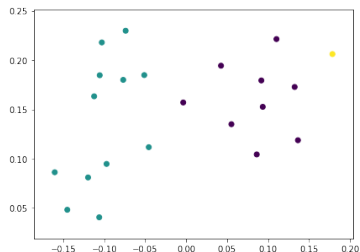
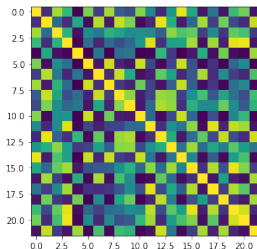
Obtener una representación alternativa de los datos

Procedimientos de la matriz Laplaciana

$$L = D - W$$

- ▶ W : matriz representativa del grafo (paso anterior)
- ▶ D : matriz diagonal con $D_{ii} = \sum_j W_{ij}$

Matriz Laplaciana básica



Agrupamiento espectral

Obtener una representación alternativa de los datos

Procedimientos de la matriz Laplaciana

$$L = I - D^{-1}W$$

- ▶ W : matriz representativa del grafo (paso anterior)
- ▶ D : matriz diagonal con $D_{ii} = \sum_j W_{ij}$
- ▶ I : matriz identidad

Matriz Laplaciana normalizada (RW)

$$\begin{bmatrix} L_1 & & & \\ & L_2 & & \\ & & 0 & \\ & & & \ddots \\ & 0 & & & L_3 \end{bmatrix}$$

Agrupamiento espectral

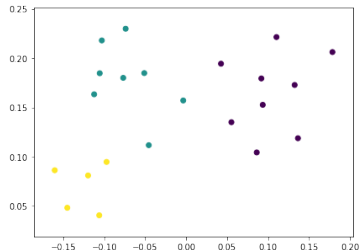
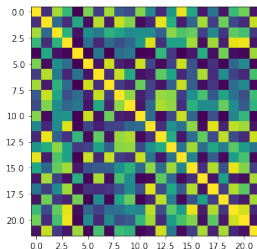
Obtener una representación alternativa de los datos

Procedimientos de la matriz Laplaciana

$$L = I - D^{-1}W$$

- ▶ W : matriz representativa del grafo (paso anterior)
- ▶ D : matriz diagonal con $D_{ii} = \sum_j W_{ij}$
- ▶ I : matriz identidad

Matriz Laplaciana normalizada (RW)



Aggrupamiento espectral

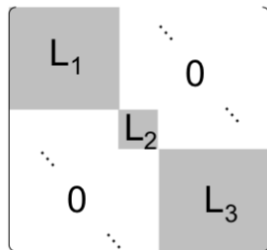
Obtener una representación alternativa de los datos

Procedimientos de la matriz Laplaciana

$$L = I - D^{-1/2} W D^{-1/2}$$

- ▶ W : matriz representativa del grafo (paso anterior)
- ▶ D : matriz diagonal con $D_{ii} = \sum_j W_{ij}$
- ▶ I : matriz identidad

Matriz Laplaciana normalizada simétrica



The diagram shows a large square matrix enclosed in large square brackets. The matrix is block-diagonal, with three main square blocks highlighted in gray and labeled L_1 , L_2 , and L_3 from top-left to bottom-right. L_1 is in the top-left corner, L_2 is in the middle, and L_3 is in the bottom-right corner. The off-diagonal blocks are represented by the number 0. Ellipses (\dots) are used to indicate that the matrix can have more than three blocks and to show the continuation of the diagonal and off-diagonal elements.

Agrupamiento espectral

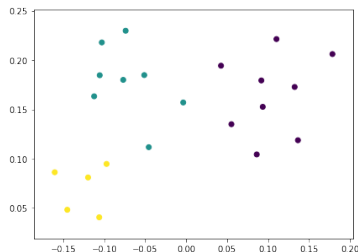
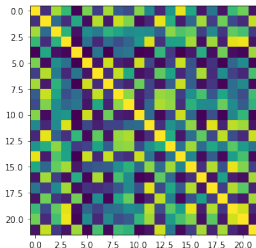
Obtener una representación alternativa de los datos

Procedimientos de la matriz Laplaciana

$$L = I - D^{-1/2}WD^{-1/2}$$

- ▶ W : matriz representativa del grafo (paso anterior)
- ▶ D : matriz diagonal con $D_{ii} = \sum_j W_{ij}$
- ▶ I : matriz identidad

Matriz Laplaciana normalizada simétrica



Agrupamiento espectral

Obtener una representación alternativa de los datos

Obtener datos transformados

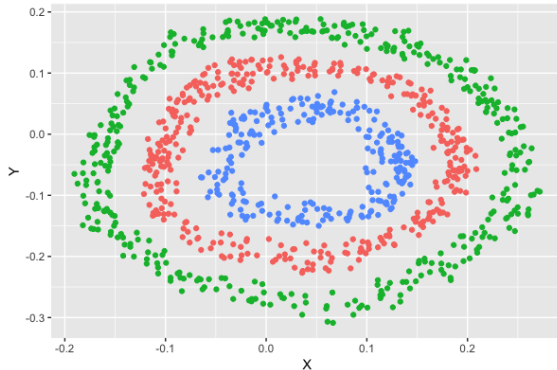
1. Descomponer la matriz L en vectores propios
2. Ordenar los vectores propios según el valor propio correspondiente (ascendente)
3. Seleccionar los primeros K vectores propios

Cada vector propio es una “variable” en el dataset transformado, que tiene n filas (tantas como ejemplos) y K variables (vectores propios):

$$D(n \times v) \rightarrow M(n \times K)$$

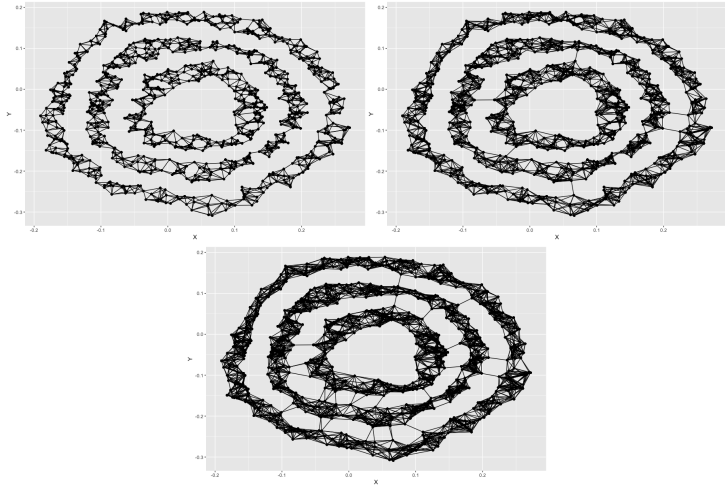
Agrupamiento espectral

Efecto de la K en KNN (generación del grafo)



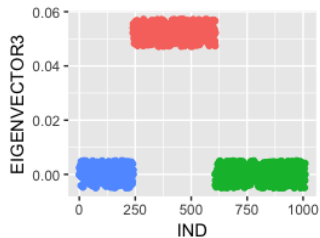
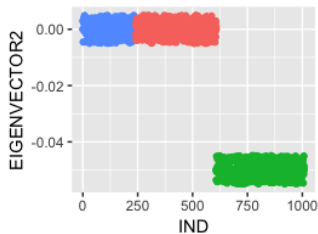
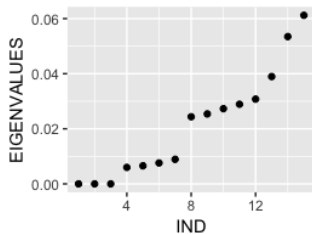
Agrupamiento espectral

Efecto de la K en KNN (generación del grafo)



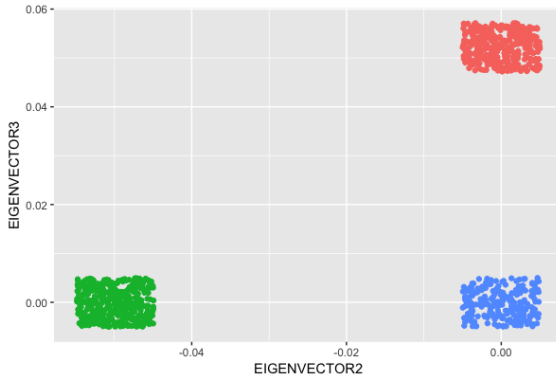
Agrupamiento espectral

Efecto de la K en KNN (generación del grafo)



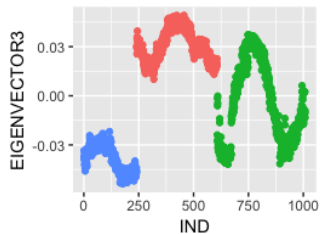
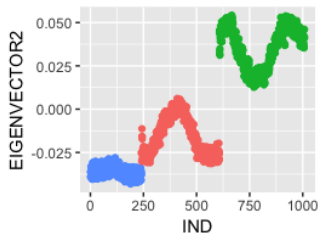
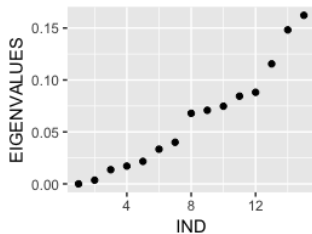
Agrupamiento espectral

Efecto de la K en KNN (generación del grafo)



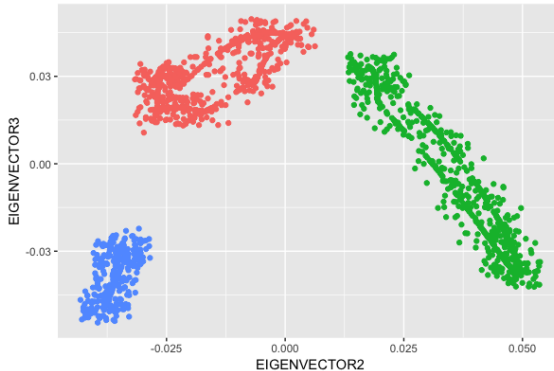
Agrupamiento espectral

Efecto de la K en KNN (generación del grafo)



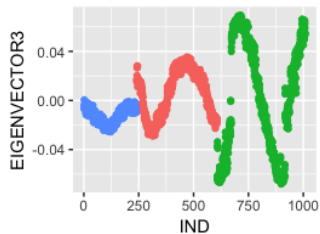
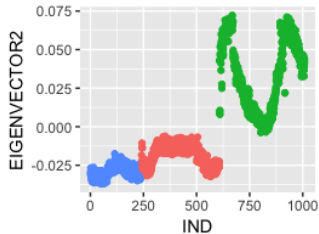
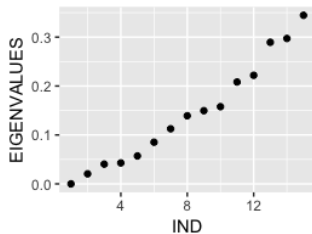
Agrupamiento espectral

Efecto de la K en KNN (generación del grafo)



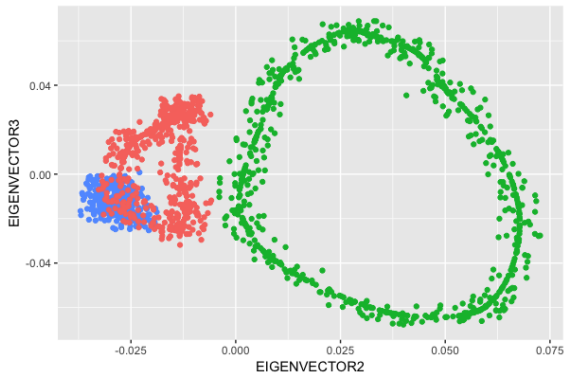
Agrupamiento espectral

Efecto de la K en KNN (generación del grafo)



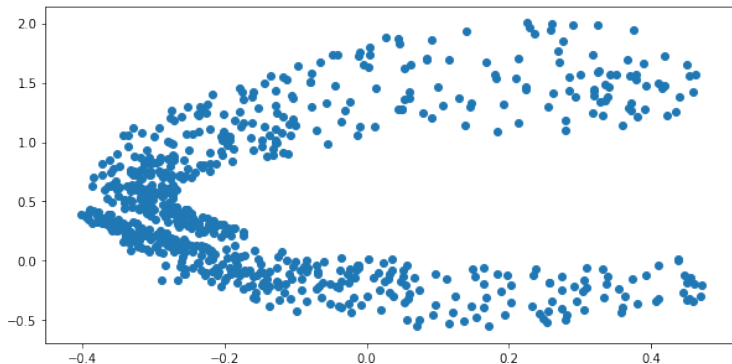
Agrupamiento espectral

Efecto de la K en KNN (generación del grafo)



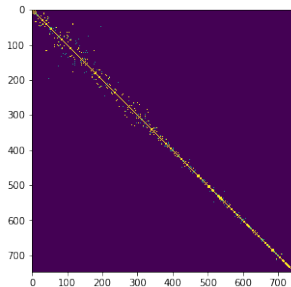
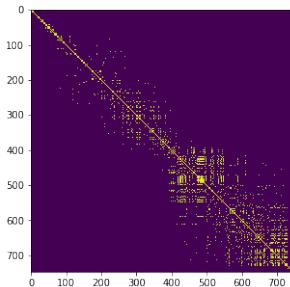
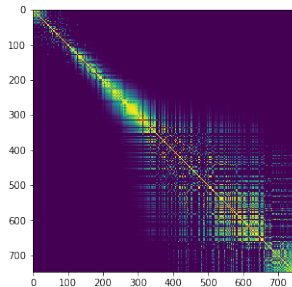
Agrupamiento espectral

Diferentes generaciones del grafo



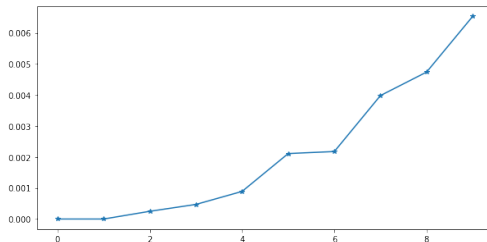
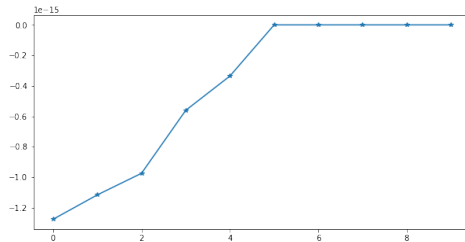
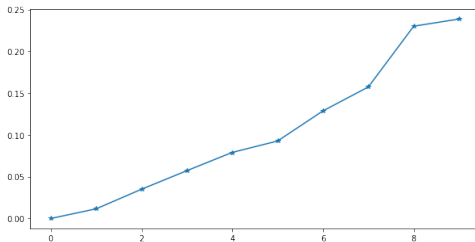
Agrupamiento espectral

Diferentes generaciones del grafo



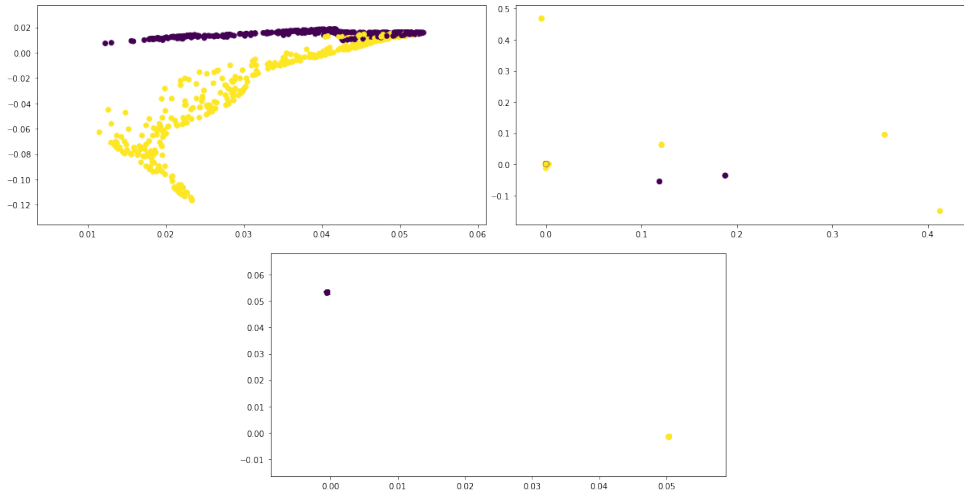
Agrupamiento espectral

Diferentes generaciones del grafo



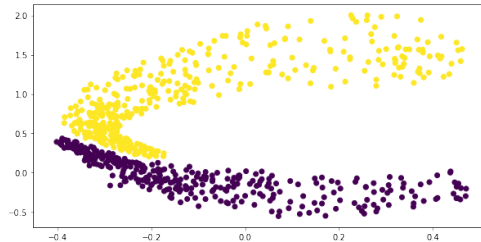
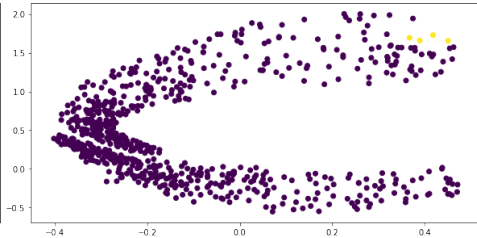
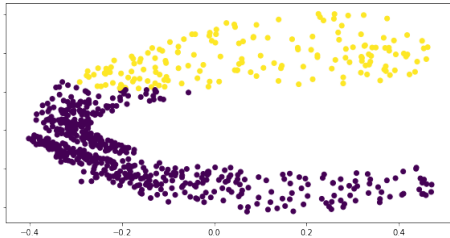
Agrupamiento espectral

Diferentes generaciones del grafo



Agrupamiento espectral

Diferentes generaciones del grafo



Puntos básicos

1. Obtener un grafo y su matriz de adyacencias
2. Obtener una representación alternativa de los datos
3. Aplicar un algoritmo de agrupamiento estándar (K -means)

Puntos básicos

1. Obtener un grafo y su matriz de adyacencias
2. Obtener una representación alternativa de los datos
3. **Aplicar un algoritmo de agrupamiento estándar (K -means)**

Ventajas

- ▶ Sólida base matemática
- ▶ Funciona con clústeres de diversa forma
- ▶ Diferentes criterios y maneras de crear el grafo de similitudes
- ▶ Puede funcionar con diferentes medidas de distancia
- ▶ Se pueden usar diferentes algoritmos sobre la matriz transformada

Obtener datos transformados

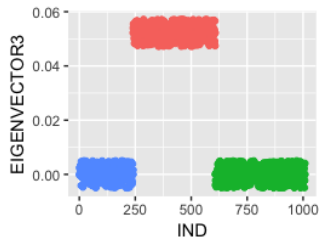
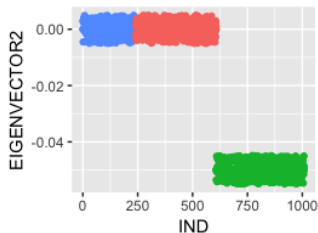
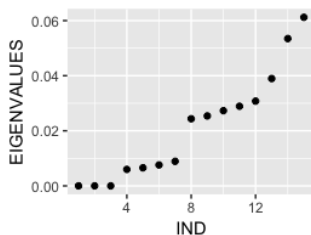
- ▶ Elegir el tipo de grafo (y K en KNN, o ϵ en umbral)
- ▶ Elegir el tipo de matriz Laplaciana
- ▶ Elegir el número de vectores propios

Agrupamiento espectral

Problemas

Obtener datos transformados

- ▶ Elegir el tipo de grafo (y K en KNN, o ϵ en umbral)
- ▶ Elegir el tipo de matriz Laplaciana
- ▶ Elegir el número de vectores propios
 - ▶ En la práctica, el número de clústeres
 - ▶ Salto máximo entre dos valores propios consecutivos



Gracias