Métodos locales II

Alan Reyes-Figueroa

Introducción a la Ciencia de Datos (Aula 16) 01.marzo.2021

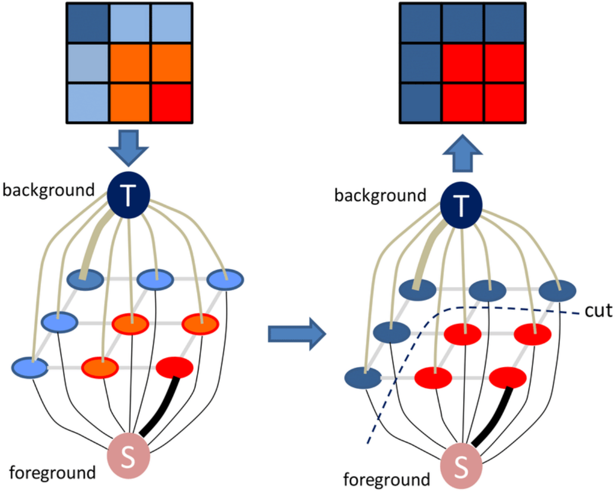
Spectral Embedding

Ref: Laplacian Eigenmaps for Dimensionality Reduction and Data Representation. M. Belkin, P. Niyogi, Neural Computation, June 2003; 15(6) 1373-1396.

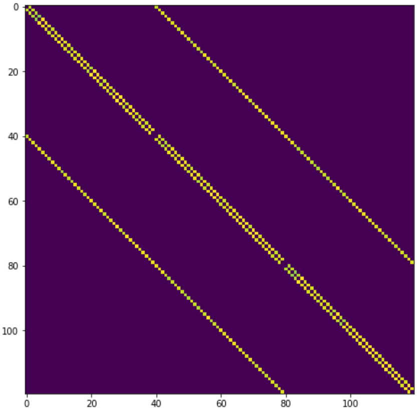
Idea: Se construye una matriz de adyacencia o de afinidad (similaridad) W entre una estructura de grafo entre los datos. Los elementos w_{ij} de W pesan o miden el grado de afinidad.

- Se construye la matriz laplaciana $L = D - W$ y la laplaciana normalizada $\mathcal{L} = D^{-1/2}(D - W)D^{-1/2}$.
- Se calculan la descomposición en autovalores de $\mathcal{L}$. Los autovectores describen las direcciones de proyección.

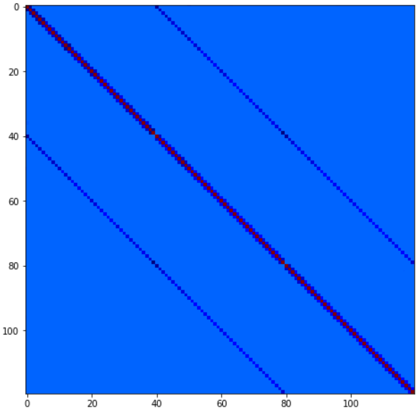
Spectral Embedding



Spectral Embedding



Matriz de afinidad W



Laplaciano normalizado $\mathcal{L}$

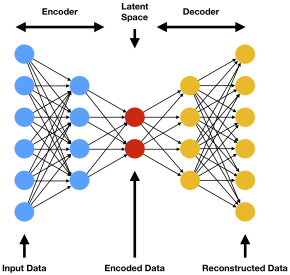
Autoencoders

Definir mapas lineales $\mathcal{E} : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^p$ y $\mathcal{D} : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}^d$, con $p < d$.

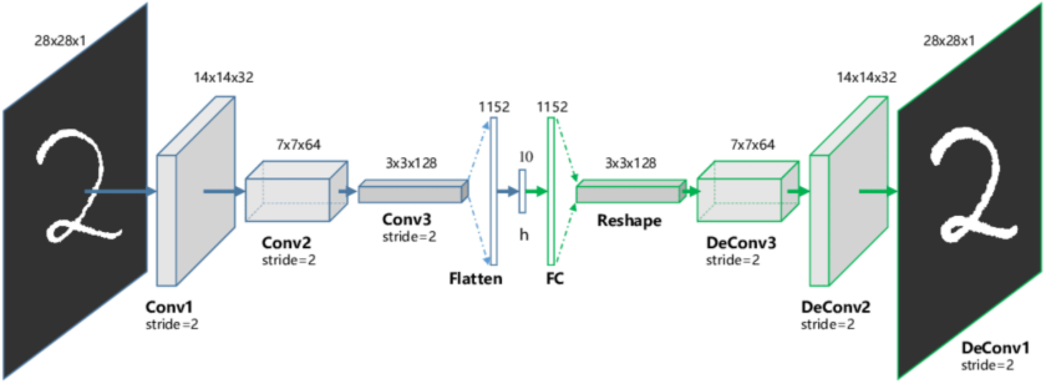
$\mathcal{E}$ se llama el *encoder*, y $\mathcal{D}$ el *decoder*. El objetivo es resolver

$$\min_{\mathcal{E},\mathcal{D}} \sum_i ||\mathbf{x}_i - (\mathcal{D} \circ \mathcal{E})(\mathbf{x}_i)||^2.$$

Se usa $\mathbf{x}_i^* = \mathcal{E}(\mathbf{x}_i)$ como representación de $\mathbf{x}_i$. La elección popular para $\mathcal{E}$ y $\mathcal{D}$: redes neuronales.

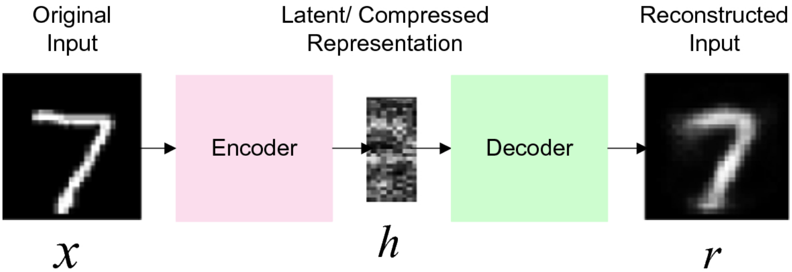


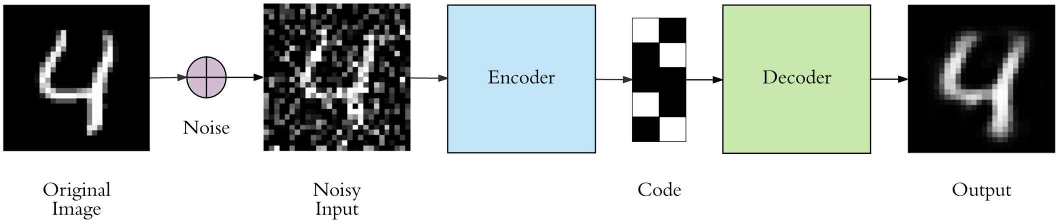
Autoencoders



Red neuronal covolucional profunda (CNN).

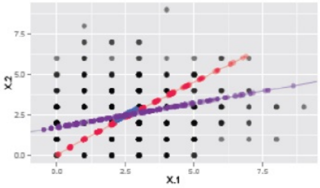
Autoencoders





Probabilistic PCA:
Hacer PCA en el espacio de parámetros de la distribución. Considermaso $\mathbb{X} = [\theta_{ij}]$ ó $\mathbb{X} = [g(\theta_{ij})]$ asociados a una muestra $[X_{ij}$ de v.a. independientes con distribuciones cualquiera.
Hacer $[\theta_{ij}] = USV^T$.

Ejemplo Poisson PCA:



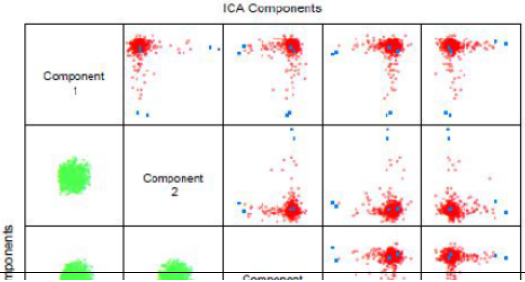
(e) $n = 500, \lambda \in (2.16, 2.90)$

Otros métodos

Projection Pursuit:

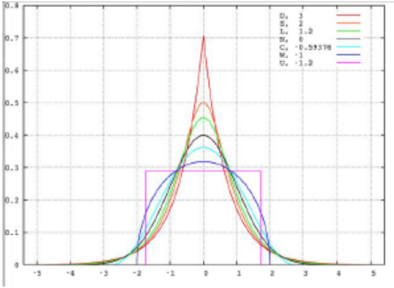
Similar a PCA. En lugar de buscar la dirección ℓ de máxima varianza, usamos otra medida de proyección óptima.

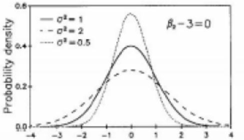
Buscar direcciones que maximicen la no gaussianidad (caracterizamos la gaussiana en términos de la entropía). Por ejemplo, buscamos ℓ tal que la negentropía de $\ell^T \mathbf{x}$ sea máxima. (Similar a ICA)



Camino alternativo: usar Kurtosis (peakedness)

$$Kurt_N(X) = \frac{E(X - EX)^4}{Var(X)^2} \qquad Kurt(X) = E(X - EX)^4 - 3Var(X)^2$$

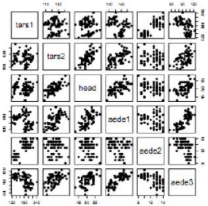


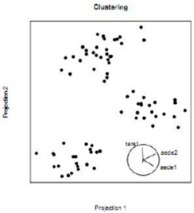


Otros métodos

Métodos aleatorios y *grand tour*:

Hacer una caminata aleatoria (película) con proyecciones que cambian suavemente.





Recursos en Python

- `sklearn.decomposition`: Contiene los métodos de PCA, KernelPCA, NMF, FastICA, y contiene otros similares como LDA, FactorAnalysis, DictionaryLearning.
- `sklearn.manifold`: Contiene métodos de *manifold learning*: Isomap, t-SNE, Local Lineal Embedding (y variantes de LLE: modified LLE, Hessian LLE, LTSA LLE), MultiDimensionalScaling (MDS), SpectralEmbedding.
- `tensorflow` y `pytorch`: Librerías para redes neuronales, en particular auto-encoders.
- Software *ggobi*: Tiene importantes herramientas para visualización. Contiene el método de *grand tour*.
- `SimpSOM`, `MiniSom`, `SOMPy`, `kohonen`: Librerías con implementaciones de SOM. (pip install ...)