t-SNE & UMAP

Oscar Painen Briones

Stochastic Neighbor Embedding (SNE)

Objetivo: Proyectar los datos a 2D o 3D para visualización.

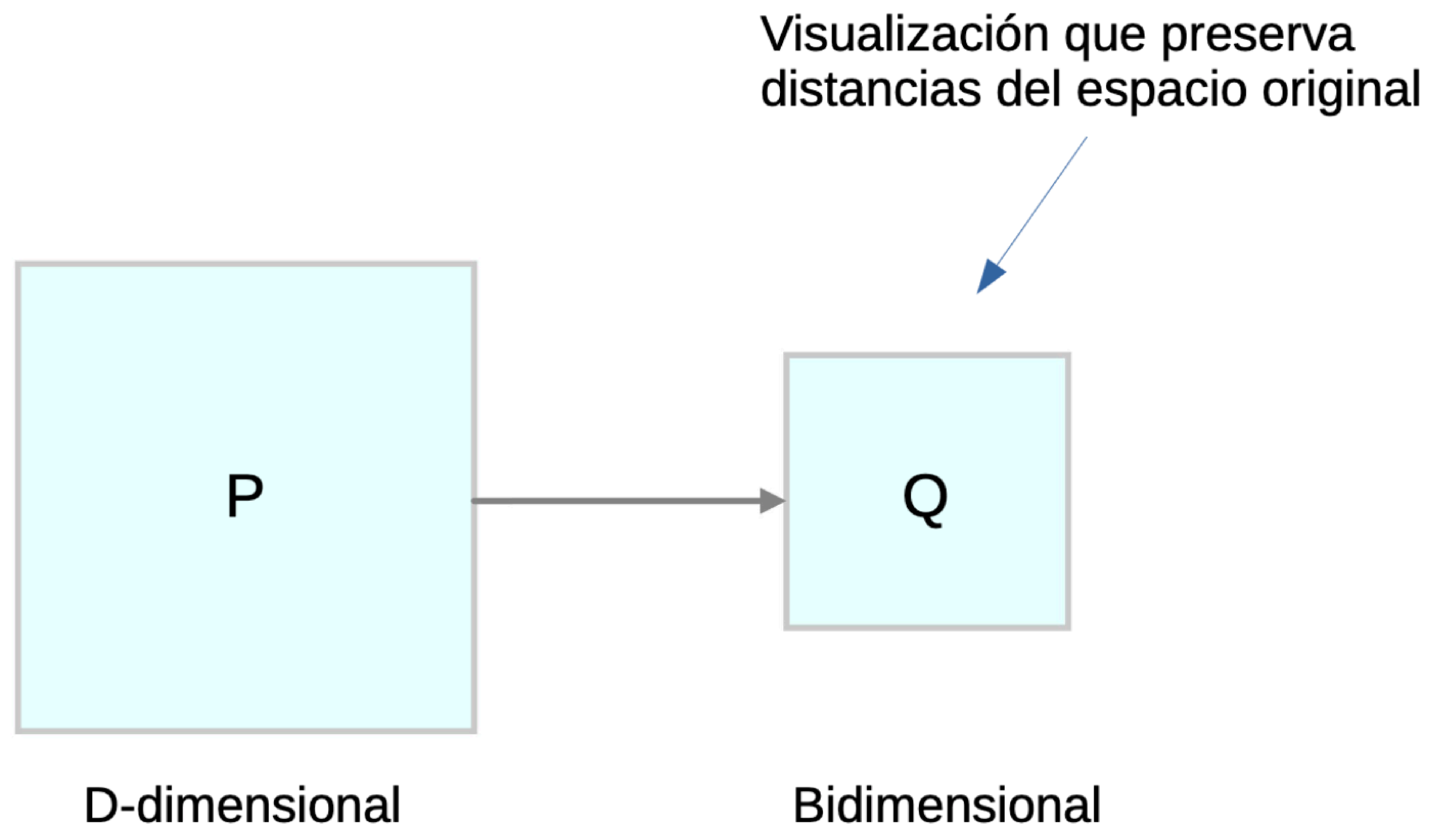
Idea: Convertir distancias (Euclideanas) a probabilidades condicionales.

$$p_{j|i} = \frac{\exp\left(-\|x_i - x_j\|^2 / 2\sigma_i^2\right)}{\sum_{k \neq i} \exp\left(-\|x_i - x_k\|^2 / 2\sigma_i^2\right)}$$

Vecindario (parametrizable)

Definimos la proyección tal que: $$q_{j|i} = \frac{\exp\left(-\|y_i - y_j\|^2\right)}{\sum_{k \neq i} \exp\left(-\|y_i - y_k\|^2\right)}$$

Notar que: $p_{i|i} = q_{i|i} = 0.$

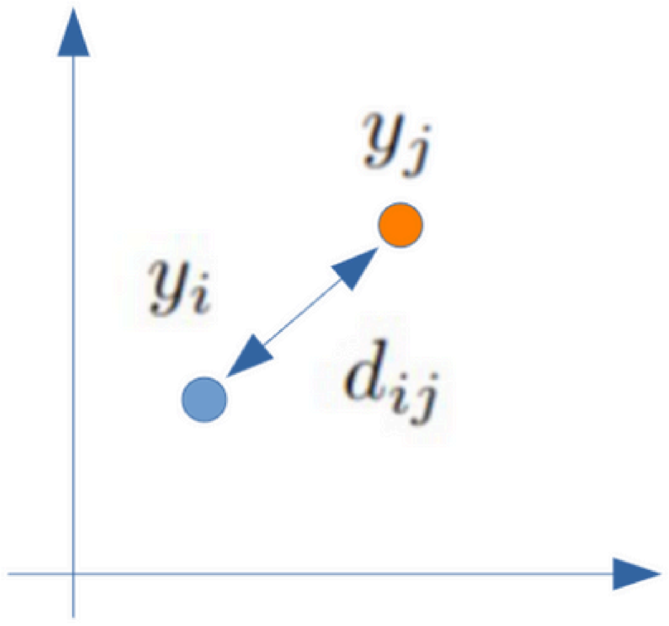

Visualización que preserva
distancias del espacio original
P
Q
D-dimensional
Bidimensional

Hacemos lo mismo en un espacio de menor dimensionalidad (proyección):

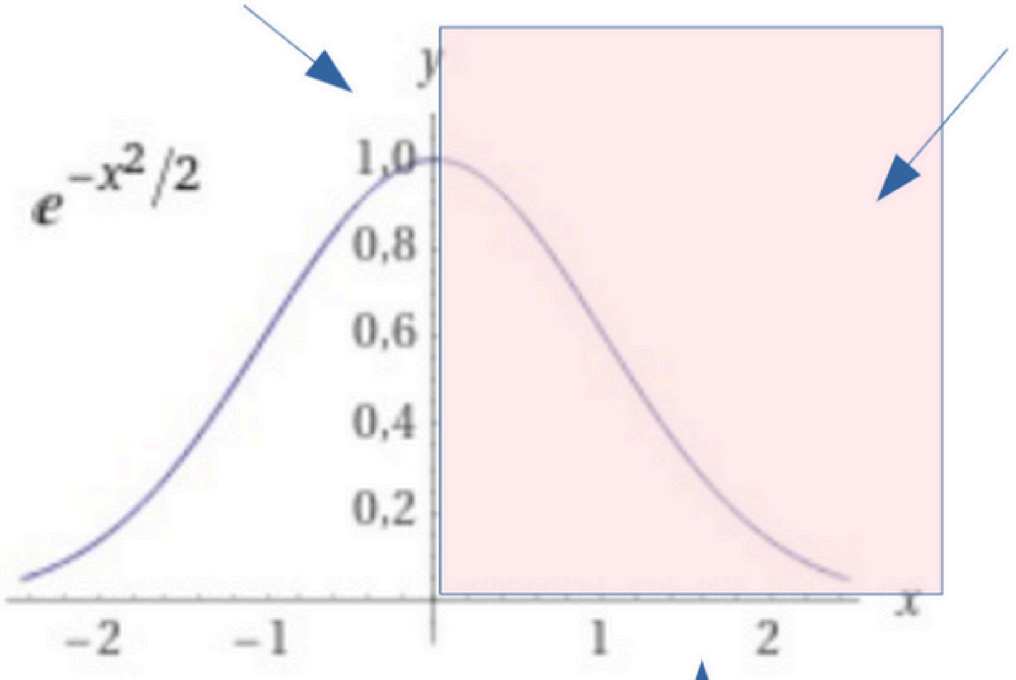
distancia

probabilidad

$$q_{j|i} = \frac{\exp\left(-\|y_i - y_j\|^2\right)}{\sum_{k \neq i} \exp\left(-\|y_i - y_k\|^2\right)}$$



probabilidad



distancia

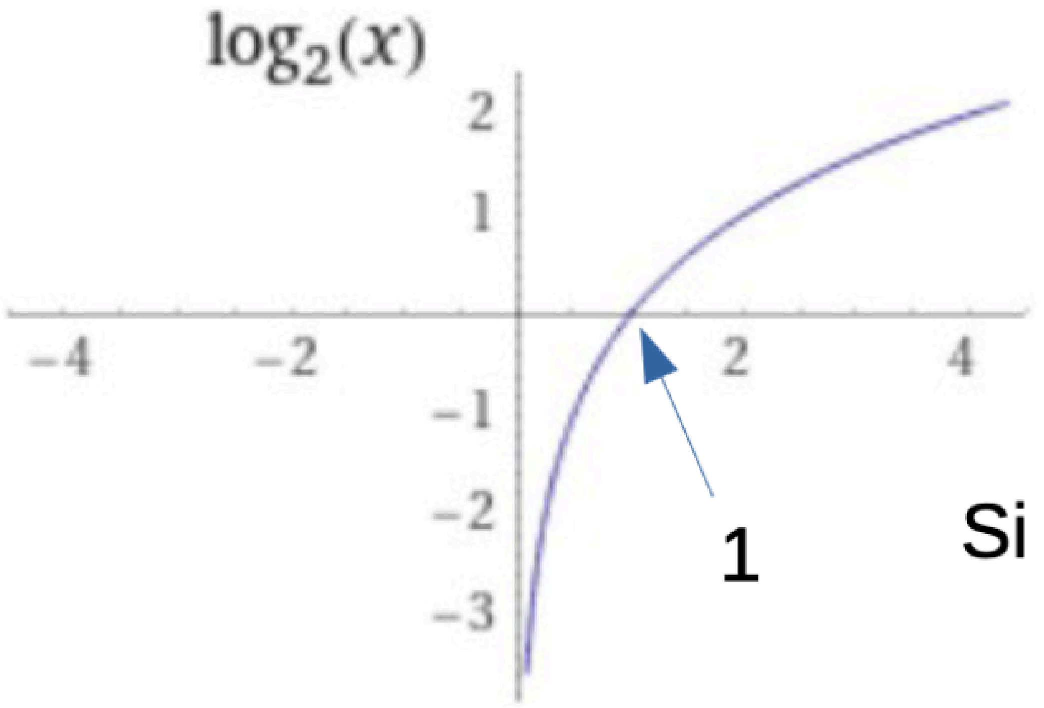
¿Cómo mido cuanto se parece el espacio original al proyectado?

Voy a comparar las distribuciones de probabilidad P y Q.

<u>Divergencia de Kullback-Leibler</u>:

$$C = \sum_i KL(P_i||Q_i) = \sum_i \sum_j p_{j|i} \log \frac{p_{j|i}}{q_{j|i}}$$

La divergencia es menor en la medida que ambas distribuciones son más parecidas.



Si p~q → log p/q ~ 0

Model complexity

Principio (navaja de Ockham o principio de parsimonia)

“El modelo más simple es también el modelo más plausible”

Si los eventos no son equiprobables, debemos promediar:

$$H(P_i) = -\sum_j p_{j|i} \log_2 p_{j|i}.$$

Información codificada en el espacio original

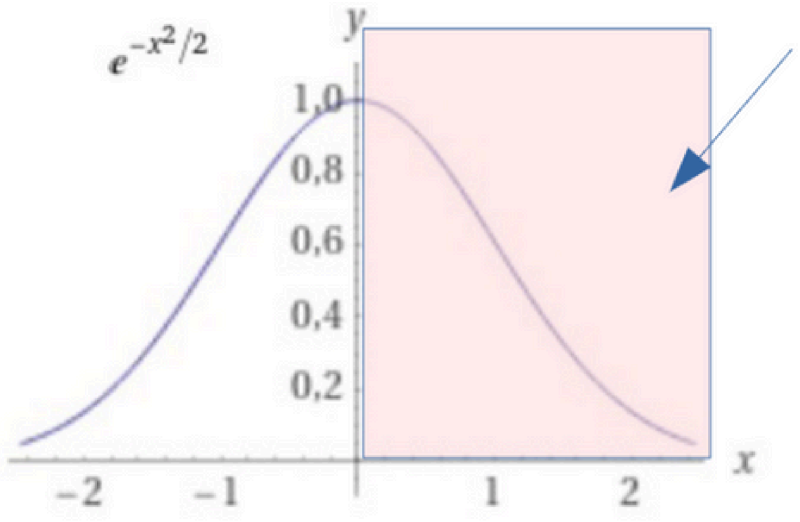
Volvamos a SNE:

Me da el # de estados promedio (vecinos de cada punto)

El usuario define: $Perp(P_i) = \boxed{2^{H(P_i)}}$

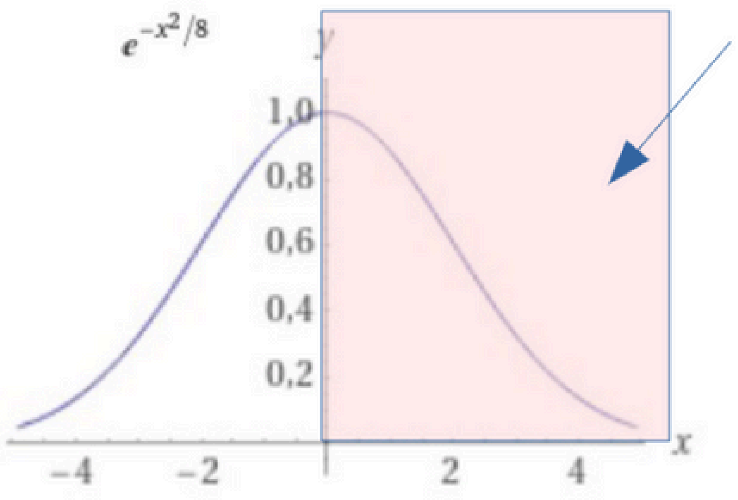
lo cual permite determinar σ_i (internamente).

Es decir, el usuario define la complejidad de la proyección, la cual es modelada en sigma!!!



Menos pares

$\sigma = 1$



Más pares

$\sigma = 2$

UMAP

Uniform Manifold Approximation and Projection (UMAP)

Idea básica: UMAP calcula un grafo que representa los datos, luego aprende un embedding a partir del grafo.