Preprocessing & Feature extraction

Hyunjoong Kim

soy.lovit@gmail.com

github.com/lovit

- 데이터를 테이블 형식으로 표현하는 경우가 많습니다.
  - 하나의 데이터 (row, data, point, instance, record, …) 는 이를 설명하는 변수 (column, feature, column, variables) 로 구성되어 있습니다.

	datetime	temperature	humidity	wind speed	demand
row 1	2016. 06. 25	33	45	3.5	254
row 2	2016. 05. 21	23	21	4.3	761
row 3	2016. 05. 23	27	57	2.1	340
row 4	…	…	…	…	…

- 데이터의 종류는 다양합니다.
  - 테이블 외에도 “이미지”, “텍스트”, “음성”, “영상”, “그래프” 등이 있습니다.
  - 앞서 살펴본 선형회귀나 로지스틱 분류모델을 이용하기 위해서는 데이터를 벡터로 표현해야 합니다.

- 때로는 변수를 "정보력이 더 좋은 벡터"로 가공해야 합니다.
  - 명목형 변수는 dummy variables 로 치환이 가능합니다.
  - 범위가 다른 연속형 변수들은 스케일링 (scaling) 이 필요할 때도 있습니다.
  - 연속형 변수를 명목형 변수로 묶을 수도 있습니다 (binning)

categorical variable

different scaled numerical variable

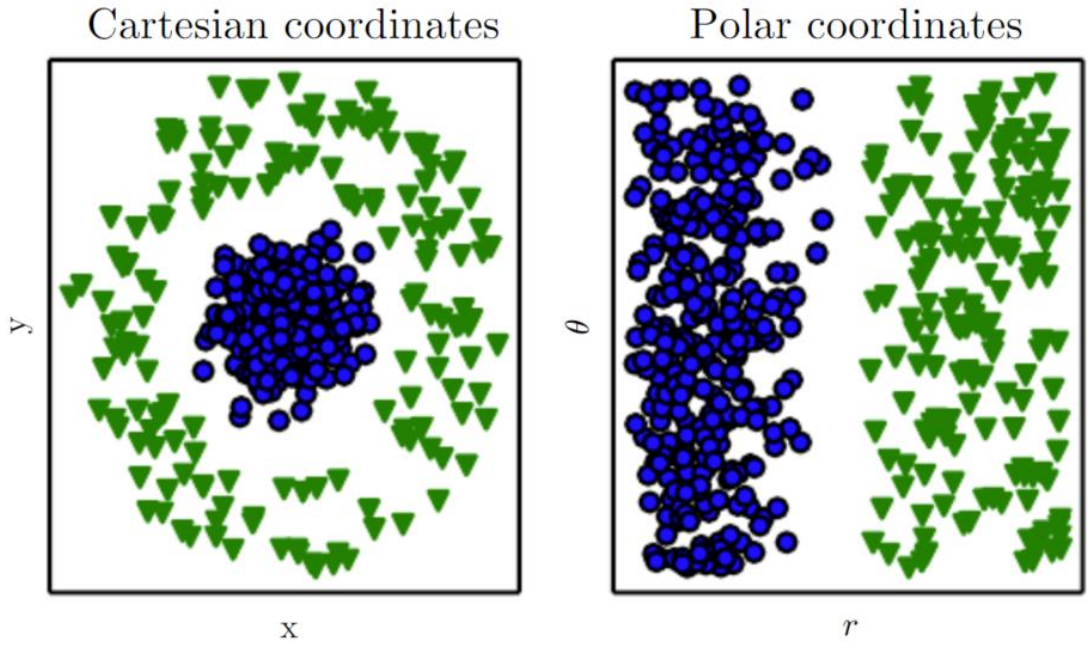
PassengerId	Survived	Pclass	Sex	Age	Fare
1	0	3	male	22.0	7.2500
2	1	1	female	38.0	71.2833
3	1	3	female	26.0	7.9250
4	1	1	female	35.0	53.1000
5	0	3	male	35.0	8.0500
6	0	3	male	NaN	8.4583
7	0	1	male	54.0	51.8625
8	0	3	male	2.0	21.0750
9	1	3	female	27.0	11.1333
10	1	2	female	14.0	30.0708

Feature engineering

- 벡터 공간을 이용하는 머신러닝 알고리즘이 잘 작동하기 위해서는 과업에 적합한 형태로 정보를 가공할 필요가 있습니다.
  - Feature engineering 은 정보력이 좋은 변수들을 가공하여 과업의 성능을 향상하기 위한 일련의 과정입니다.
  - feature generation / vectorizing : 새로운 변수를 생성하거나 데이터를 벡터로 표현
  - feature selection : 변수 중 필요한 것을 선택
  - feature extraction/transformation : 주어진 변수를 이용하여 새로운 변수를 생성

Feature engineering

- 벡터 공간을 이용하는 머신러닝 알고리즘이 잘 작동하기 위해서는 과업에 적합한 형태로 정보를 가공할 필요가 있습니다.

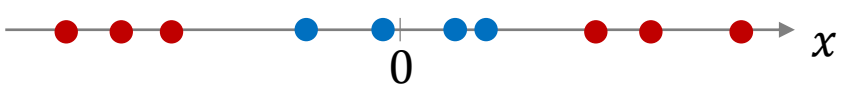


직교좌표계에서 선형 모델로 두 클래스를 구분할 수 없지만,
동일한 데이터를 극좌표계로 표현하면 구분이 가능하기도 합니다.

Feature engineering

- 벡터 공간을 이용하는 머신러닝 알고리즘이 잘 작동하기 위해서는 과업에 적합한 형태로 정보를 가공할 필요가 있습니다.

Linear inseparable with x



Linear separable with (x, x^2)

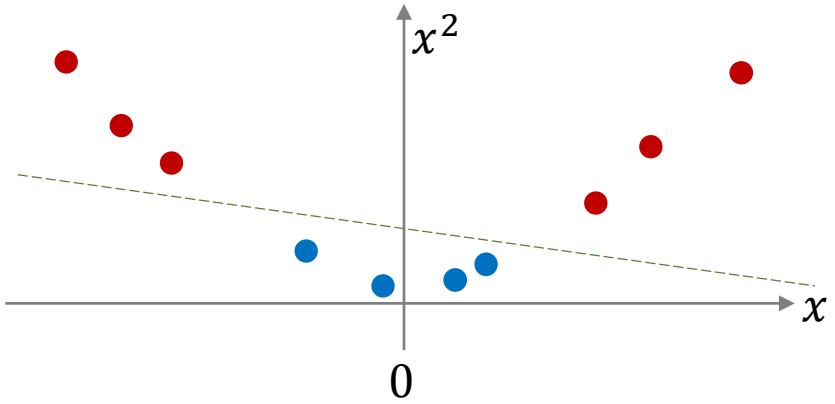
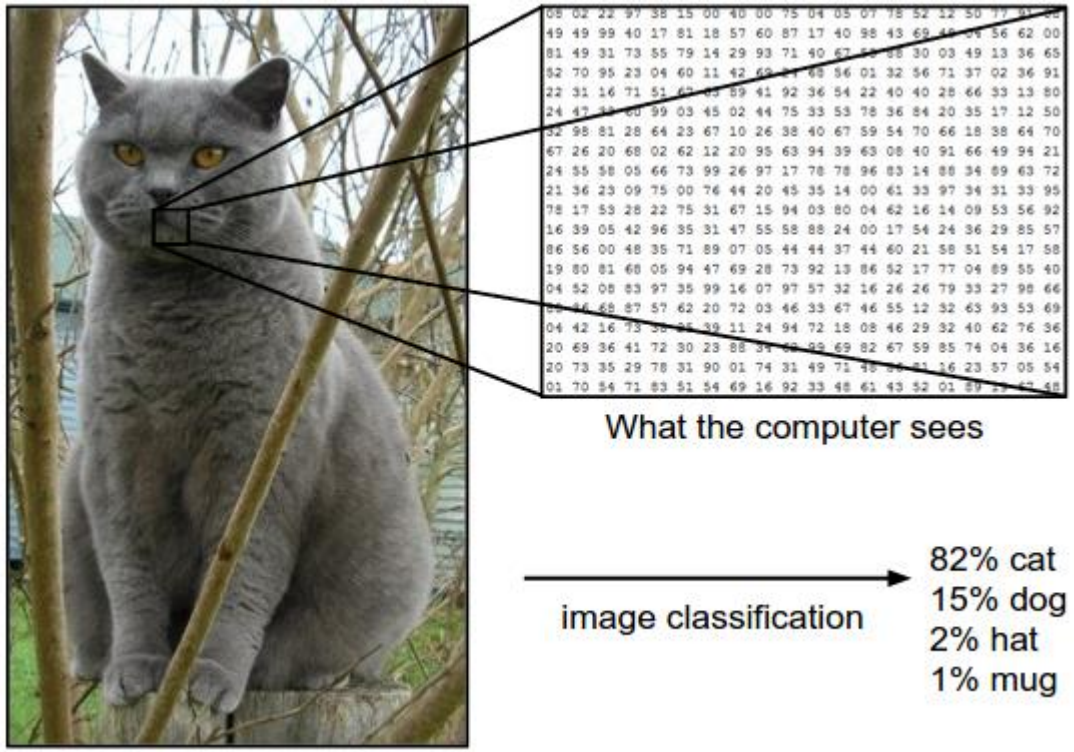


Image as vector

- 이미지는 그 자체로 벡터로 인식될 수 있습니다.



http://cs231n.github.io/classification/

Image as vector

- 이미지 파일을 읽으면 주로 RGB 색체계를 이용한 3차원 tensor 가 됩니다.
  - 3차원 tensor 는 행렬이 3개 겹쳐져 있는 형식입니다.

```
from matplotlib.pyplot import imshow
from matplotlib.pyplot import figure
from skimage.io import imread

image = imread('lalaland.jpg')
print(type(image))
print(image.shape)
```

```
<class 'numpy.ndarray'>
(1377, 2000, 3)
```

Image as vector

- 각 행렬을 flatten 한다음 이어붙이면 벡터로 표현됩니다.

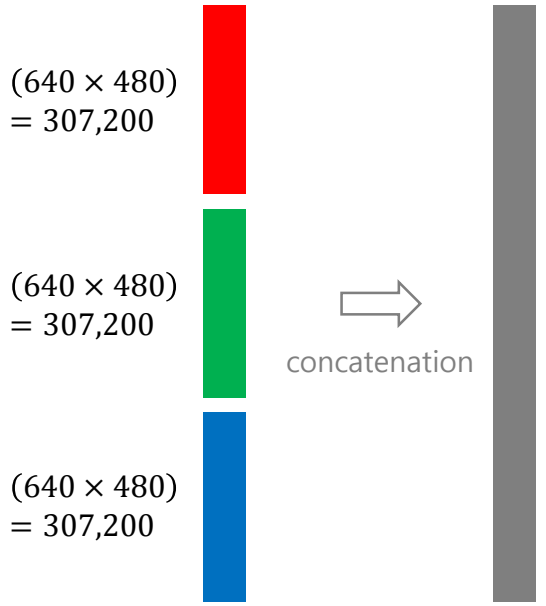
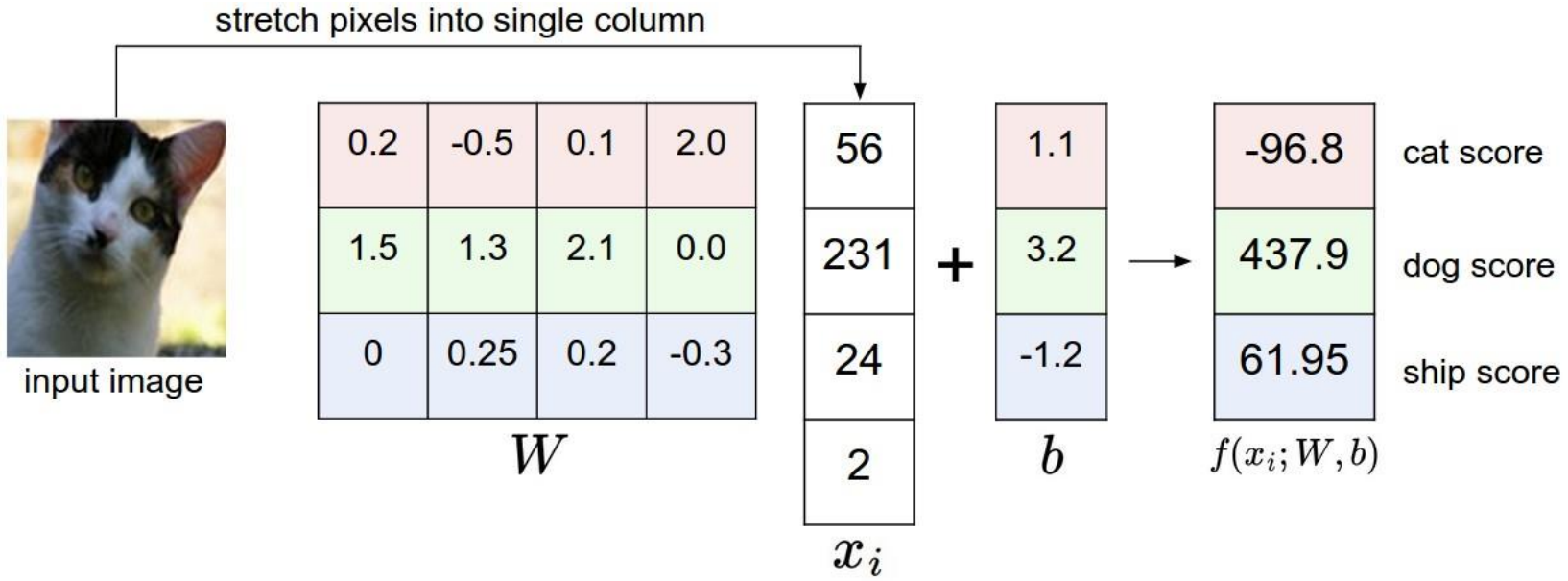


Image as vector

- 이후 모델에 벡터가 입력되어 과업을 수행할 수 있습니다.

$$y = f(x \mid W, b) = W \cdot x + b$$



http://cs231n.github.io/linear-classify/

Text as vector

- 문서/문장은 등장한 단어의 빈도를 이용하여 벡터로 표현할 수 있습니다.

	기계	학습	은	텍스트	마이닝	는
Doc 1	3	2	5	0	0	0
Doc 2	0	0	0	3	5	5
…	…	…	…	…	…	…

Doc 1 = [(0, 3), (1, 2), (2, 5)]
Doc 2 = [(3, 3), (4, 5), (5, 5)]

	0	1	2	3	4	5
Doc 1	3	2	5	0	0	0
Doc 2	0	0	0	3	5	5
…	…	…	…	…	…	…

Text as vector

article

박태환이 금지 약물 양성반응 통보를 받은 이후에 '도핑 파문'이 일어난 T 병원 김모 원장과 나눈 대화 내용을 녹음해 검찰에 제출한 것으로 알려졌다. 일부 매체는 이에 대해 "박태환이 김 원장에게 '아무 문제가 없는 주사약이라고 해놓고 이게 무슨 일이냐'라고 강하게 따진 것으로 전해졌 …

토크나이징/ 품사판별 후

[박태환/N] [이/J] [금지/N] [약물/N] [양성반응/N] [통보/N] [를/J] …

Feature extraction

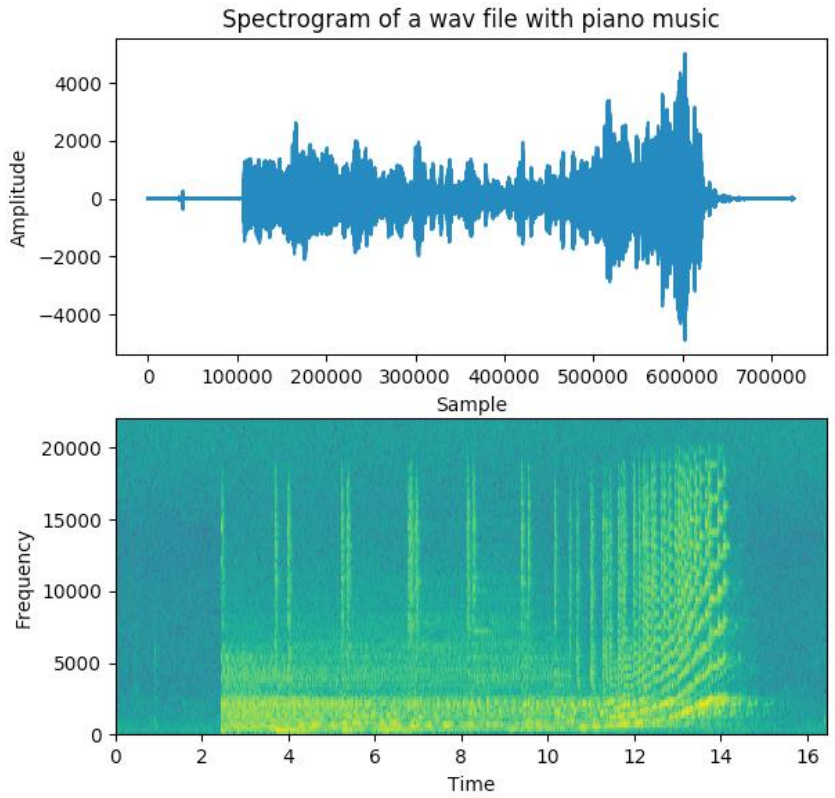
Term	박태환/N	~~이/J~~	금지/N	약물/N	양성반응/N	통보/N	~~를/J~~	…
frequency	28	35	12	15	13	5	32	…

Vector representation

Term	1		55	21	3	27		…
frequency	28		12	15	13	5		…

Sound as vector

- 음성은 한 시점 t 에서의 주파수 별 에너지량을 이용하여 시계열 형식의 벡터로 표현할 수 있습니다.

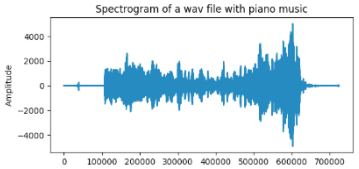


https://pythontic.com/visualization/signals/spectrogram

Feature engineering

- 이미지/텍스트/음성 등 복잡한 데이터는 특징을 더 잘 표현하는 벡터로 변환하기 위하여 인코딩 과정을 거치는 경우가 많습니다.
  - 데이터마다 적합한 인코딩 과정은 대체로 다릅니다.

박태환이 금지 약물 양성반응 통보를 받은 이후에 '도핑 파문'이 일어난 T 병원 김모 원장과 나눈 대화 내용을 녹음해 검찰에 제출한 것으로 알려졌다. 일부 매체는 이에 대해 "박태환이 김 원장에게 '아무 문제가 없는 주사약이라고 해놓고 이게 무슨 일이냐'라고 강하게 따진 것으로 전해졌 …

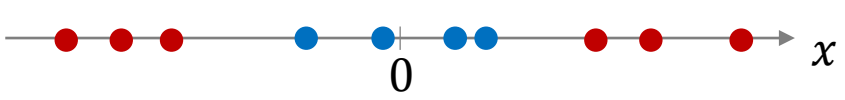


vector → (encoding) → refined vector → classification / regression / clustering / …

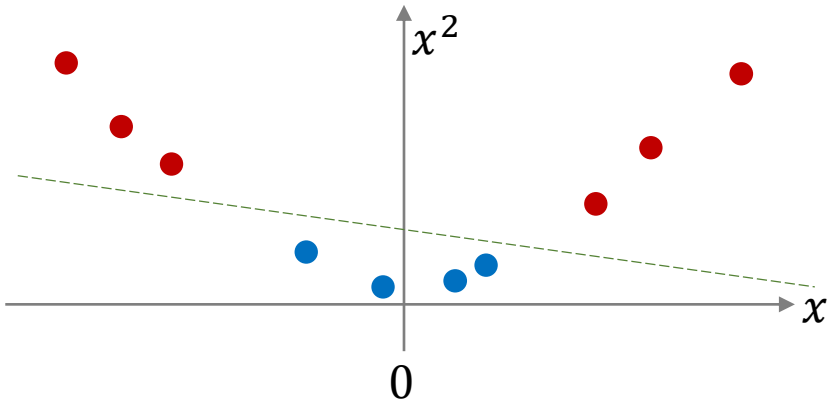
Feature engineering

- 이미지/텍스트/음성 등 복잡한 데이터는 특징을 더 잘 표현하는 벡터로 변환하기 위하여 인코딩 과정을 거치는 경우가 많습니다.
  - 공통된 목적은 각 과업을 더 쉬운 문제로 만들기 위함입니다.

Linear inseparable with x



Linear separable with (x, x^2)



Feature scaling

- 변수 X^j 의 크기/분포를 조절하는 과정입니다.
  - centering : $X^j \leftarrow X^j - mean(X^j)$
  - Standardization : $X^j \leftarrow \frac{X^j - mean(X^j)}{\sigma_{X^j}}$
  - min-max scaling : 특정 범위내에 값이 존재하도록 특정합니다.
    - $X^j \leftarrow \alpha_j \times (X^j - \beta_j)$
    - [0, 1] scaling : $X^j \leftarrow \frac{X^j - \min(X^j)}{\max(X^j) - \min(X^j)}$
    - [-1, 1] scaling : $X^j \leftarrow 2 \times \left(\frac{X^j - \min(X^j)}{\max(X^j) - \min(X^j)} - 0.5 \right)$

Feature scaling

- 변수 X^j 의 크기/분포를 조절하는 과정입니다.
  - 변수 별 scale 이 다를 경우, 점들 간 거리를 정의할 때 특정 변수의 영향력이 큽니다.
    - 첫번째 변수의 범위는 [150, 200], 두번째 변수의 범위는 [20.5, 22.5] 라면 두번째 변수가 변화량이 큰 경우이지만, 거리 척도가 이를 반영하지 못합니다.

      $d = |(170, 22) - (160 - 21)|_2$
    - 변수 별 정규화를 통하여 두번째 변수의 영향력이 크도록 벡터를 수정합니다.

      $d = |(0.5, 0.75) - (0.45 - 0.25)|_2$

Feature scaling

- 변수 X^j 의 크기/분포를 조절하는 과정입니다.
  - 변수 별 scale 이 다를 경우, 내적을 취할 때 특정 변수의 영향력이 큽니다.
  - $cos(u, v) = \frac{u \cdot v}{|u|_2 \cdot |v|_2} = \left(\frac{u}{|u|_2}\right) \cdot \left(\frac{v}{|v|_2}\right)$
  - $cos\big((3, 0, 4), (4, 3, 0)\big) = \frac{12}{5 \times 5} = 0.48$
  - $cos\big((300, 0, 4), (400, 3, 0)\big) \cong 1$

Feature scaling

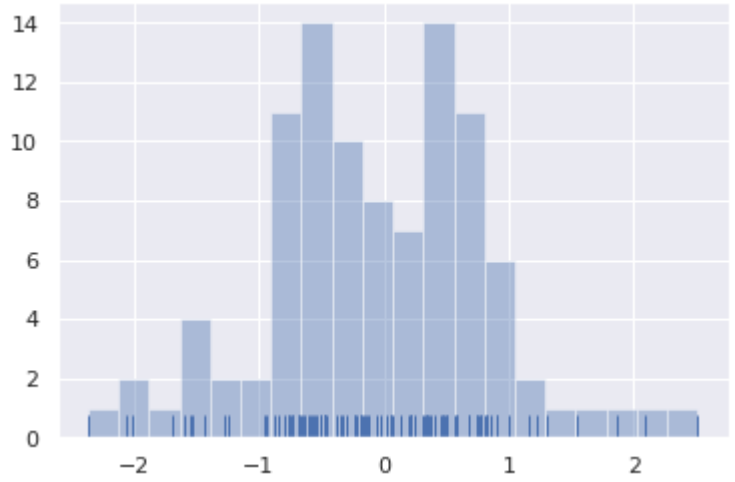
- 변수 X^j 의 크기/분포를 조절하는 과정입니다.
  - L2 regularization 은 변수의 스캐일에 영향을 받습니다. 또한 경사하강법을 이용할 때 변수의 스캐일에 따라 gradient 의 값이 달라집니다.
  - 뉴럴 네트워크 모델들은 변수 별 스캐일이 다르면 학습이 잘 이뤄지지 않기도 합니다.

$$\text{NLL} \quad : \quad \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{K} I(y_i = j) \left(-x_i^T \beta_j + \log \sum_{j`}^{K} \exp\left( x_i^T \beta_{j`} \right) \right)$$

$$\frac{\partial l(x_i, y_i)}{\partial \beta_{jq}} = x_{iq} \frac{\exp\left(x_i^T \beta_j\right)}{\sum_{j`}^{K} \exp\left(x_i^T \beta_{j`}\right)} - x_{iq} = \boldsymbol{x_{iq}}(\pi_i - 1)$$

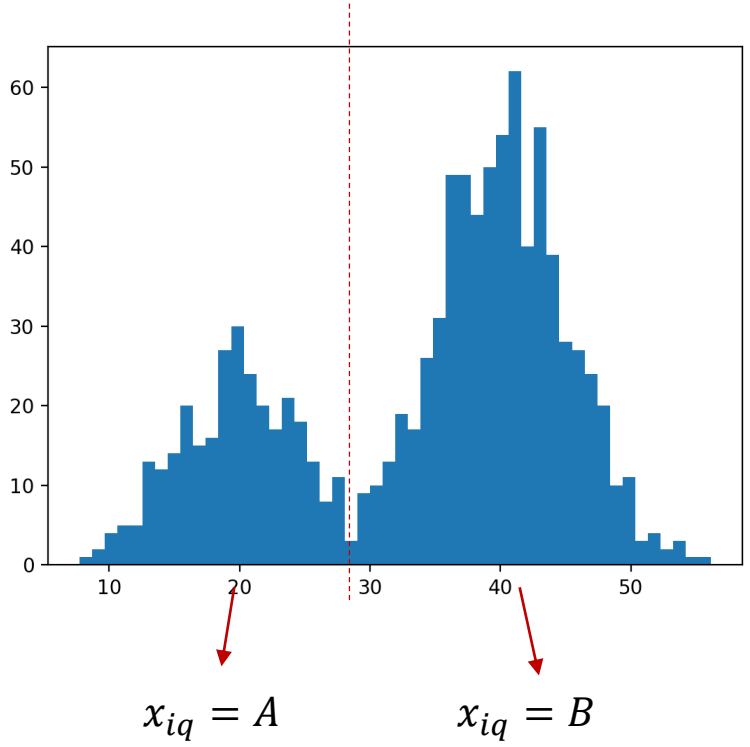
Binning

- 연속형 변수라 하더라도 유형별로 구분할 때가 있습니다. 이때는 범위를 지정하여 연속형 변수를 이산형으로 변형합니다.
  - (예시) if age < 15 children, else adult
  - (예시) histogram



Binning

- Multimodal distribution 의 경우에도 standardization 보다 변수의 특징을 잘 표현할 수 있습니다.



Feature extraction

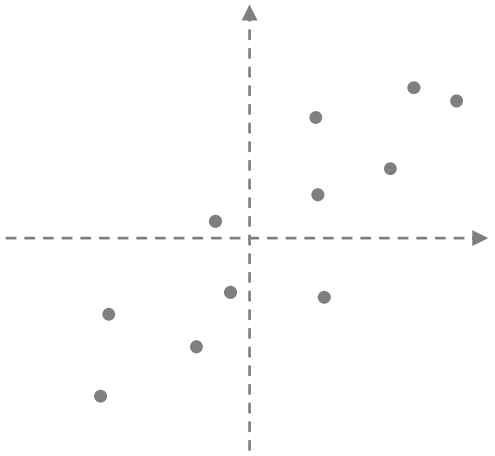
- 변수 추출 (extraction) 은 중복된 변수를 제거하는데 이용될 수 있습니다.
  - PCA 는 경향이 비슷한 여러 features 를 하나의 새로운 feature 로 묶을 수 있습니다.
  - Features 의 개수가 줄어들기 때문에 모델의 regularization cost 가 감소합니다.

Feature extraction

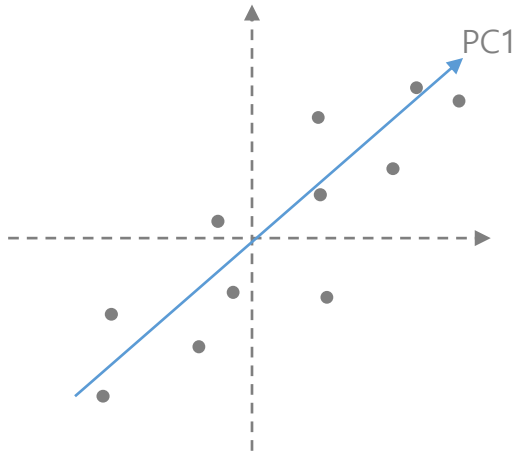
- 변수 추출은 고차원의 데이터를 2, 3차원으로 압축하여 고차원을 시각적으로 확인하는데 이용될 수 있습니다.
  - t-SNE, UMAP 은 새로운 features 를 만드는 용도가 아닙니다.
  - Input space 에서 가까이 위치한 점들을 2 차원 (임베딩) 공간에서도 가깝게 위치시켜 고차원 공간의 모습을 짐작할 수 있도록 도와줍니다.

Principal Component Analysis (PCA)

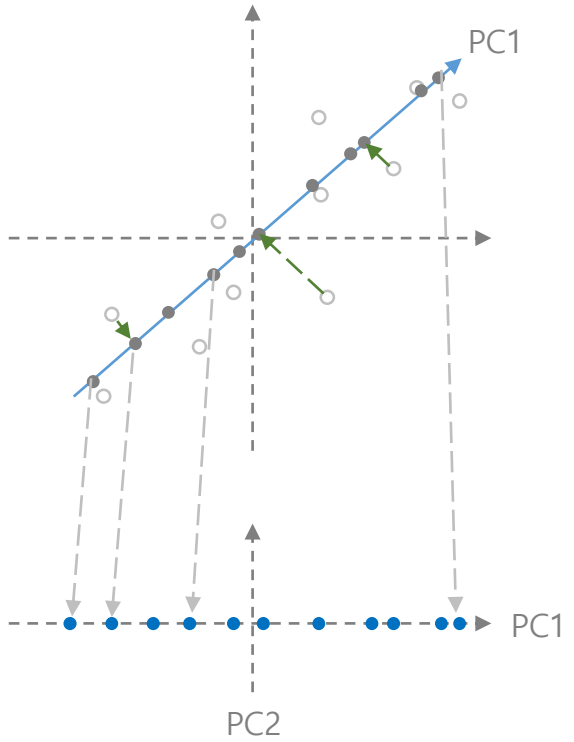
- p 차원 X 의 방향적 분포를 잘 설명하는 새로운 $(q \leq p)$ 차원 직교 좌표를 학습합니다.
- 데이터는 평균이 원점이라 가정합니다



input data



find the most principal component (PC1)



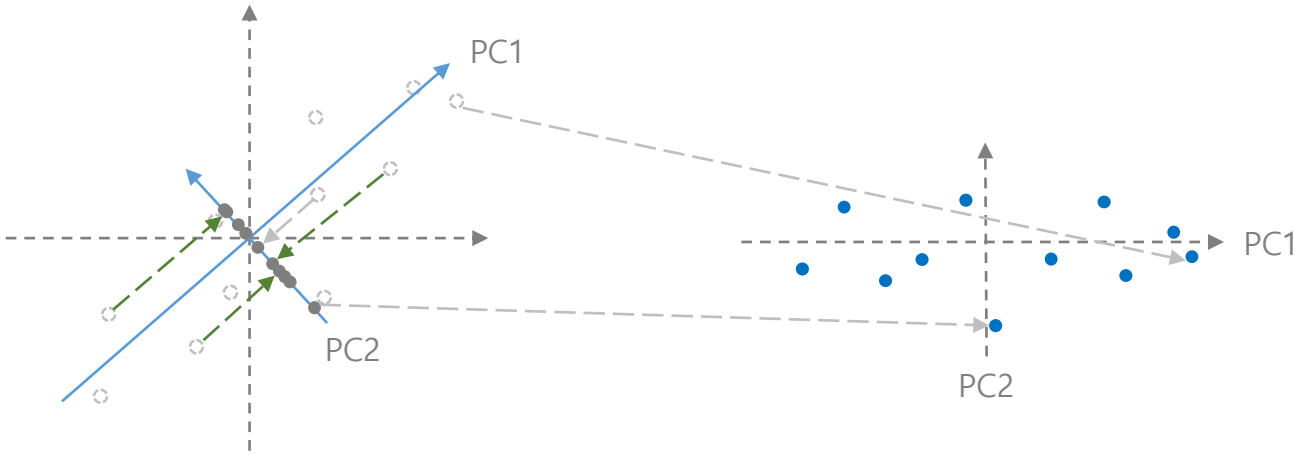
$$w_1 = argmax_{||w||=1} \left\{ \frac{w^T X^T X w}{w^T w} \right\}$$

$wX^T Xw$ (Covariance) 이 가장 큰 방향 벡터 w 를 찾습니다

Principal Component Analysis (PCA)

- PC1 을 제외한 값에서 Covariance 가 가장 큰 방향 벡터 w_{i+1} 를 찾습니다.

$$\widehat{X_k} = X - \sum_{s=1}^{k-1} X w_s w_s^T$$



new coordinate system

$$w_k = argmax_{||w||=1} \left\{ \frac{w^T \widehat{X_k}^T \widehat{X_k} w}{w^T w} \right\}$$

$\widehat{X_k}^T \widehat{X_k}$ (Covariance) 이 가장 큰 방향 벡터 w 를 찾습니다

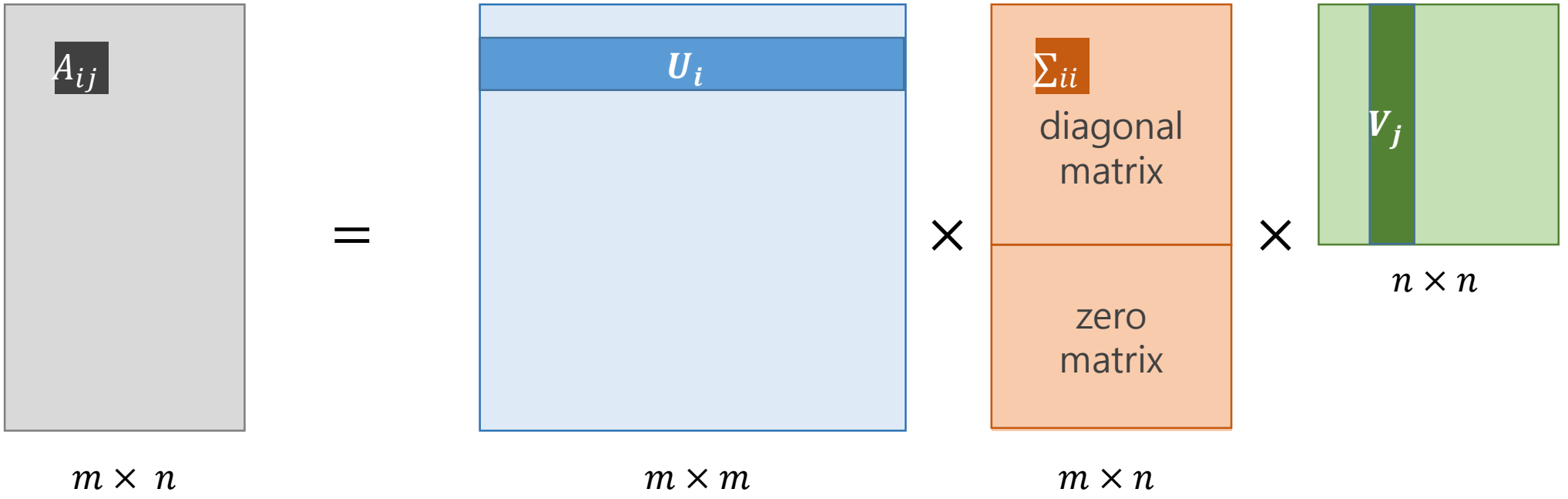
Principal Component Analysis (PCA)

- PCA 에서 variance 가 큰 방향벡터를 탐색하는 방법으로 Singular Vector Decomposition (SVD) 가 이용됩니다.
  - PCA 는 데이터 평균이 원점이라 가정하기 때문에, 주어진 학습데이터에서 평균값을 뺀 뒤, SVD 를 적용합니다.

Singular Value Decomposition

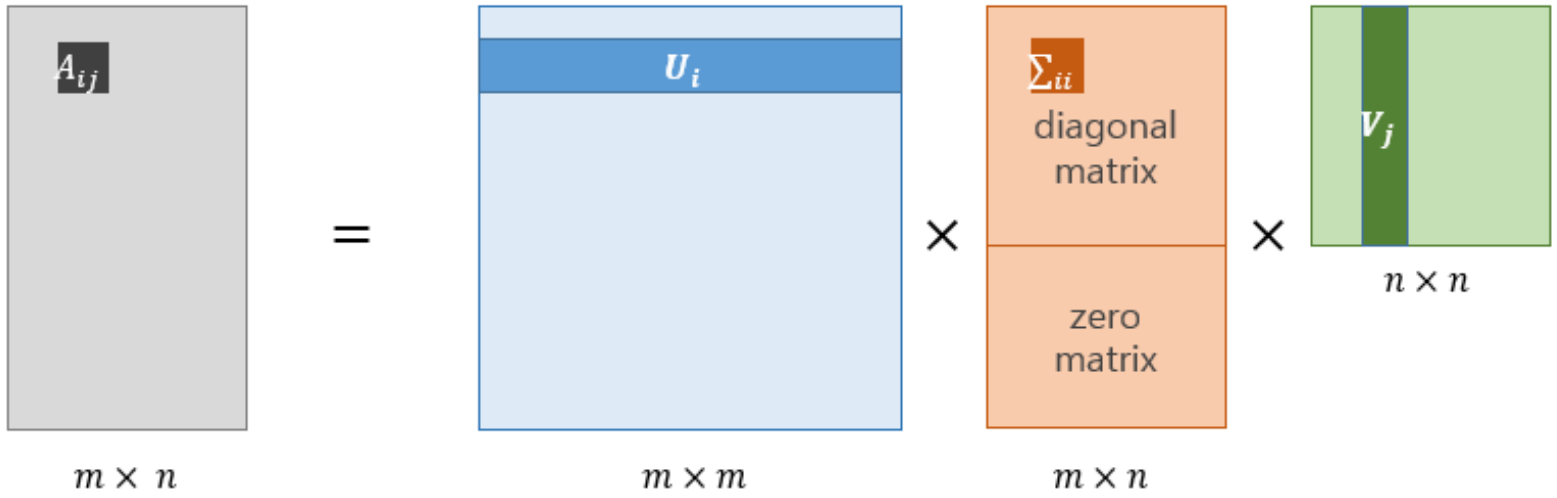
- SVD 는 행렬 A 를 다음처럼 세 개의 행렬로 분해합니다.

$$A = U\sum V^T$$



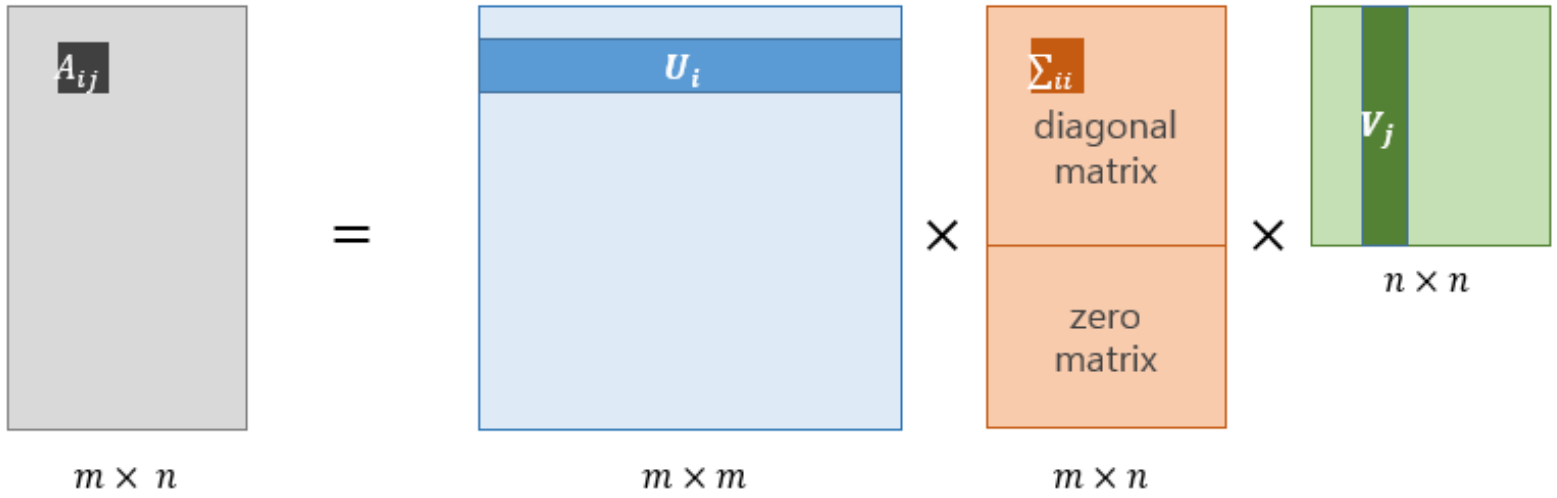
Singular Value Decomposition

- U, V 는 각각 orthonormal matrix 입니다.
  - 각 행과 열의 벡터의 크기는 1 이며 (normal)
  - $U_i \times U_j^T = 0, U_i \cdot U_i^T = 1$ 입니다.
  - V 도 동일합니다.



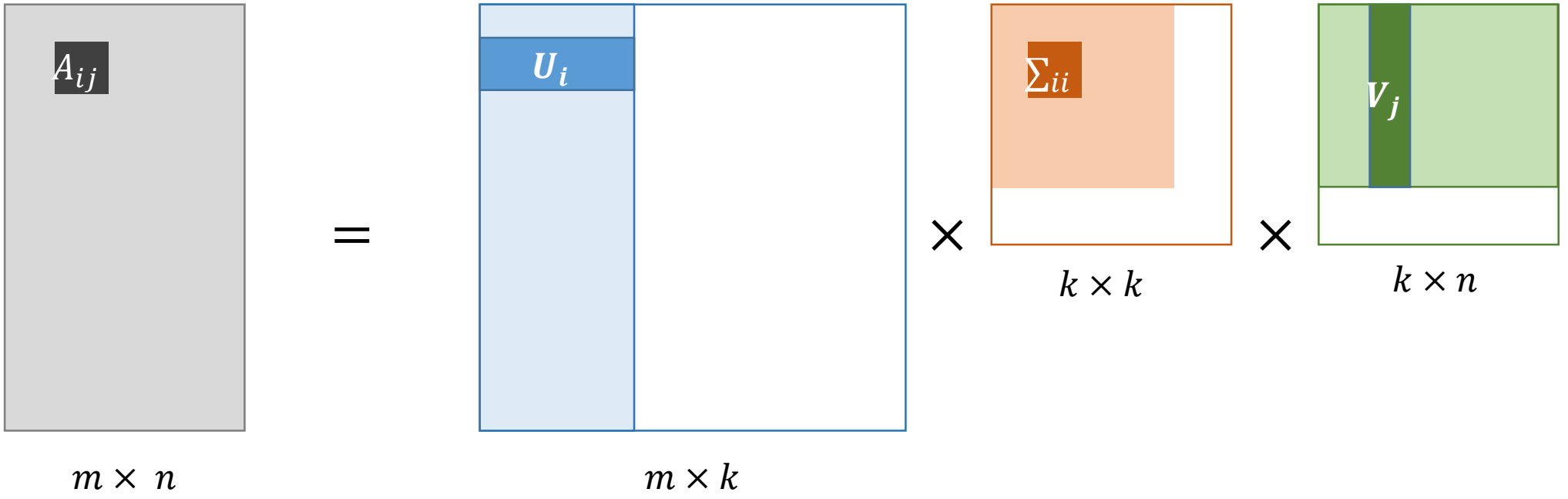
Singular Value Decomposition

- $\sum$ 는 PCA 에서의 각 component 별 중요도 (variance proportion) 입니다.
  - $\min(m, n)$ 개의 components 에 대한 중요도로 해석할 수 있습니다.



Singular Value Decomposition

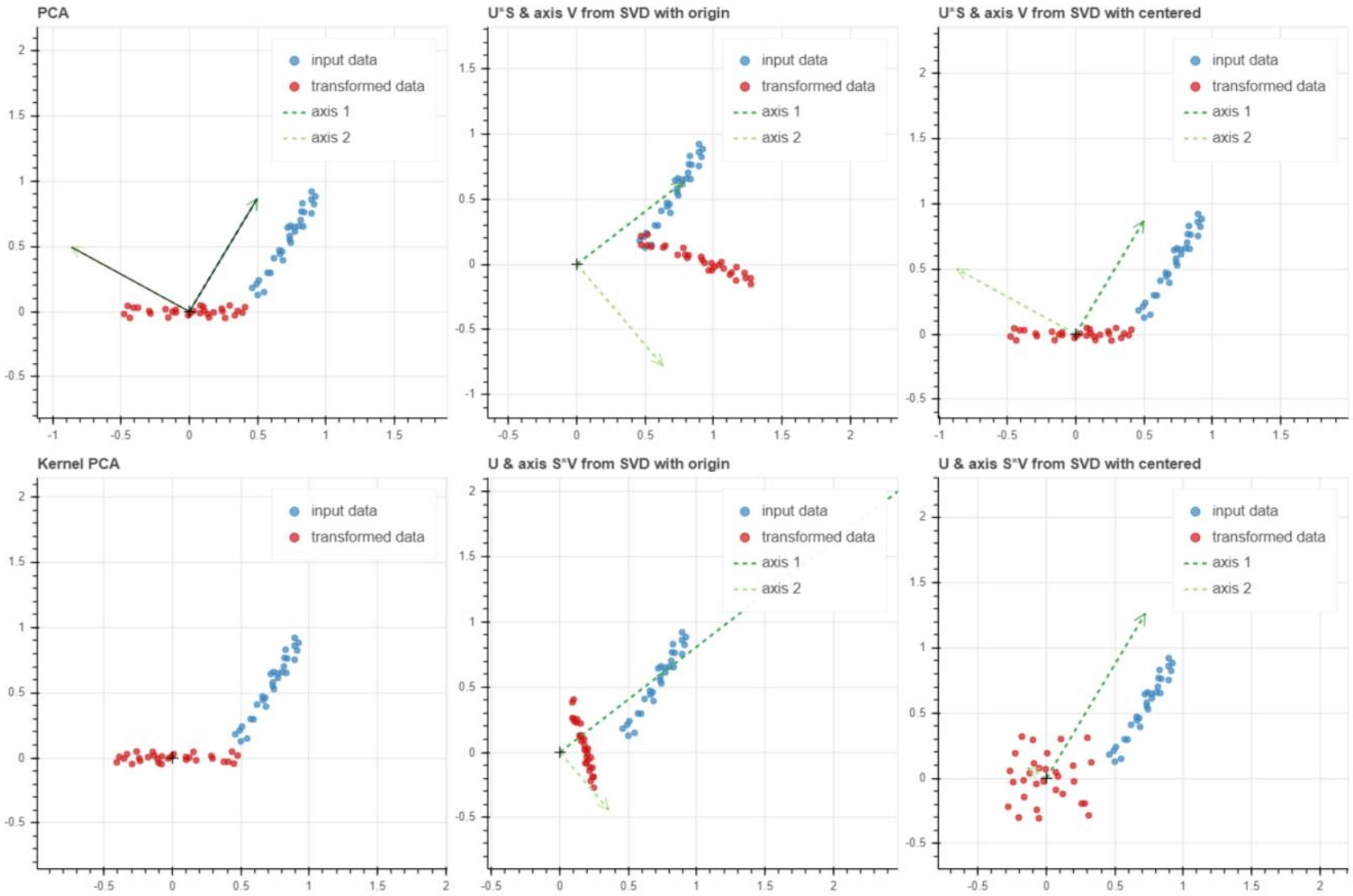
- truncated SVD 는 $\sum$ 에서 중요한 k 개의 components 만 이용합니다.
  - U, V 를 k 차원으로 축소한 것으로 해석할 수 있습니다.



Singular Value Decomposition

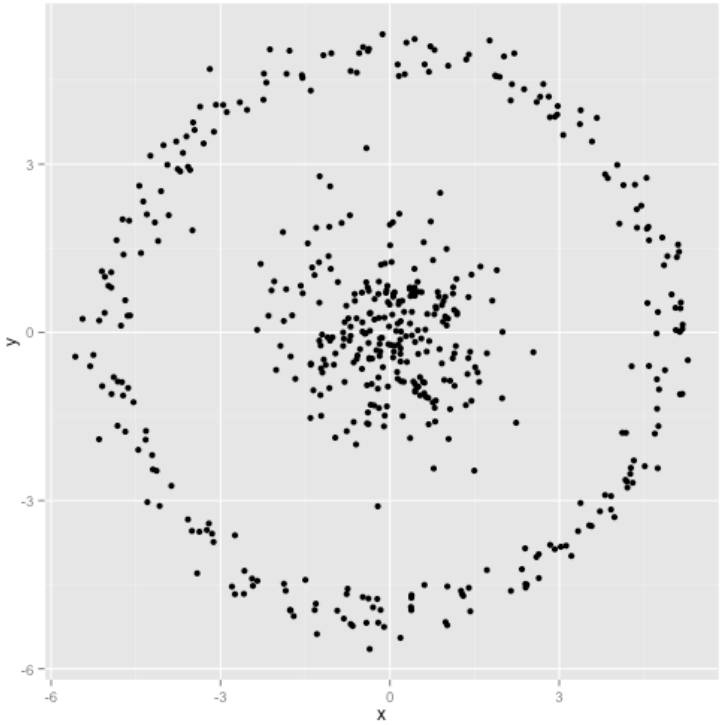
- Top principal components 에서 중요한 정보들은 추출이 되었기 때문에 정보의 손실이 적습니다.
- 비슷한 points 에서 함께 등장한 features 의 정보가 각 components 에 저장됩니다.

SVD vs PCA


PCA
input data
transformed data
axis 1
axis 2
U*S & axis V from SVD with origin
input data
transformed data
axis 1
axis 2
U*S & axis V from SVD with centered
input data
transformed data
axis 1
axis 2
Kernel PCA
input data
transformed data
U & axis S*V from SVD with origin
input data
transformed data
axis 1
axis 2
U & axis S*V from SVD with centered
input data
transformed data
axis 1
axis 2

Principal Component Analysis (PCA)

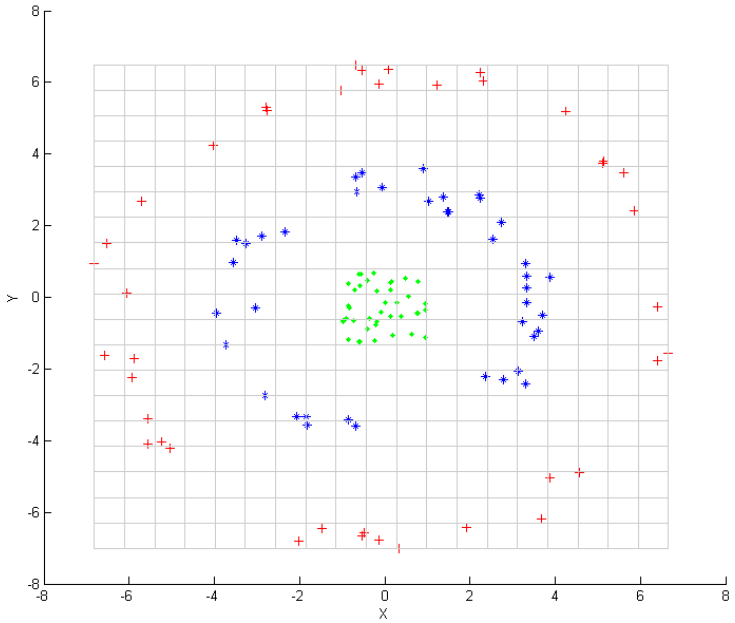
- PCA 는 데이터의 방향적인 경향이 있을 때 잘 작동합니다.
- 데이터의 경향이 방향적이지 않는 경우는 주요 축을 찾을 수 없습니다.



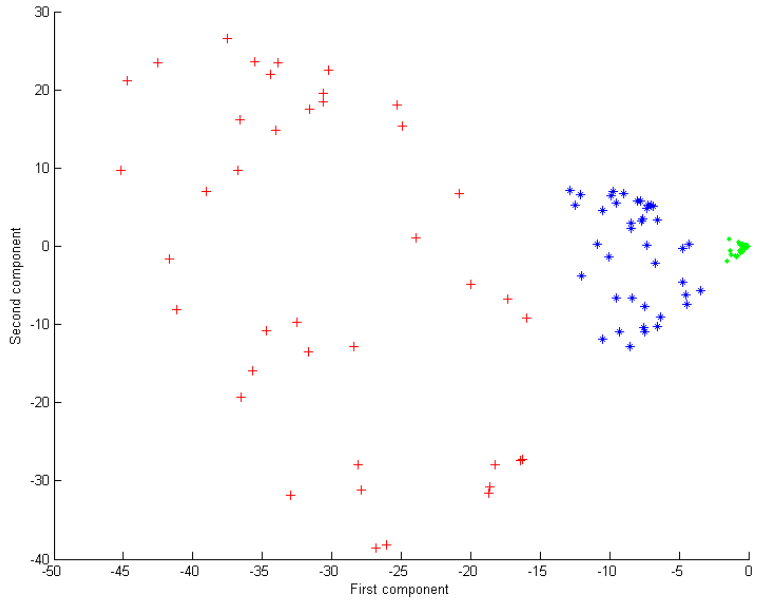
http://varianceexplained.org/

Kernel Principal Component Analysis (KPCA)

- Kernel PCA 는 분포의 경향을 보존하는 새로운 직교 좌표를 학습합니다.
  - 데이터의 개수가 n 일 때, n 보다 작은 q 차원의 공간을 학습합니다.
  - $w_1 = argmax_{||w||=1} \left\{ \frac{w^T \boldsymbol{K(X,X)} w}{w^T w} \right\}$



$$k(x,y) = (x^T y + 1)^2$$

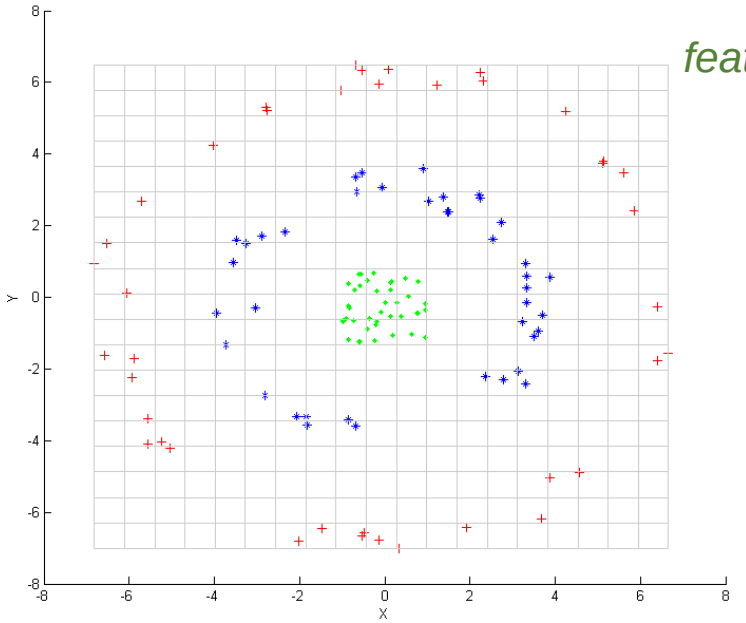


https://en.wikipedia.org/wiki/Kernel_principal_component_analysis

Kernel Principal Component Analysis (KPCA)

- Kernel 은 데이터 간의 유사성 (proximity) 으로 해석할 수 있습니다.

For many algorithms that solve these tasks, the data in raw representation have to be explicitly transformed into feature vector representations via a user-specified feature map:

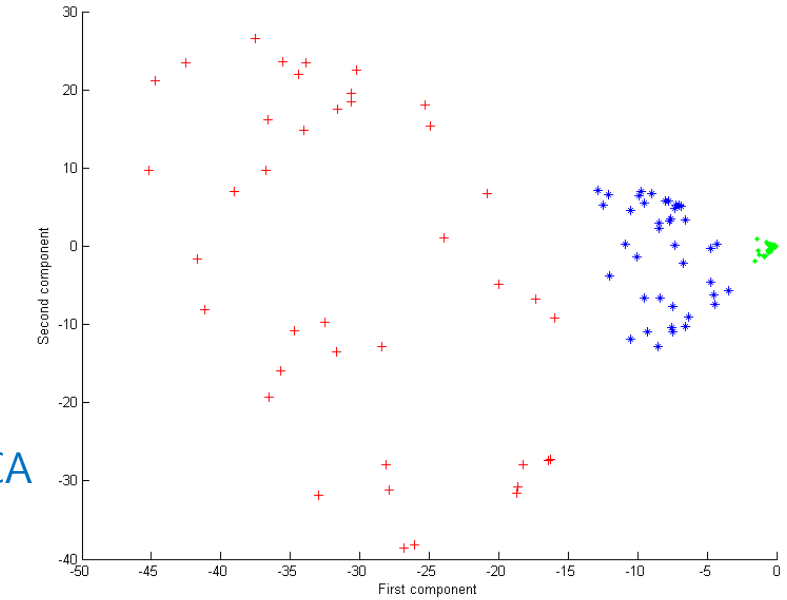


user-specified feature map:

feature vector

$$k(x, y) = (x^T y + 1)^2$$

$X^T X$ 대신 $k(x, y)$ 를 PCA



https://en.wikipedia.org/wiki/Kernel_principal_component_analysis

Kernel Principal Component Analysis (KPCA)

- Kernel 은 데이터 간의 유사성 (proximity) 으로 해석할 수 있습니다.
  - n 개의 데이터를 유사도 벡터로 representation 을 변환한 뒤, PCA 를 적용한 것과 같습니다.
  - $n \times n$ 크기의 kernel matrix 는 점들 간의 유사도 행렬과 같습니다.
  - "유사한 점들이 비슷한 점들"은 kernel PCA 변환 뒤에도 유사한 벡터를 지닙니다.

Kernel Principal Component Analysis (KPCA)

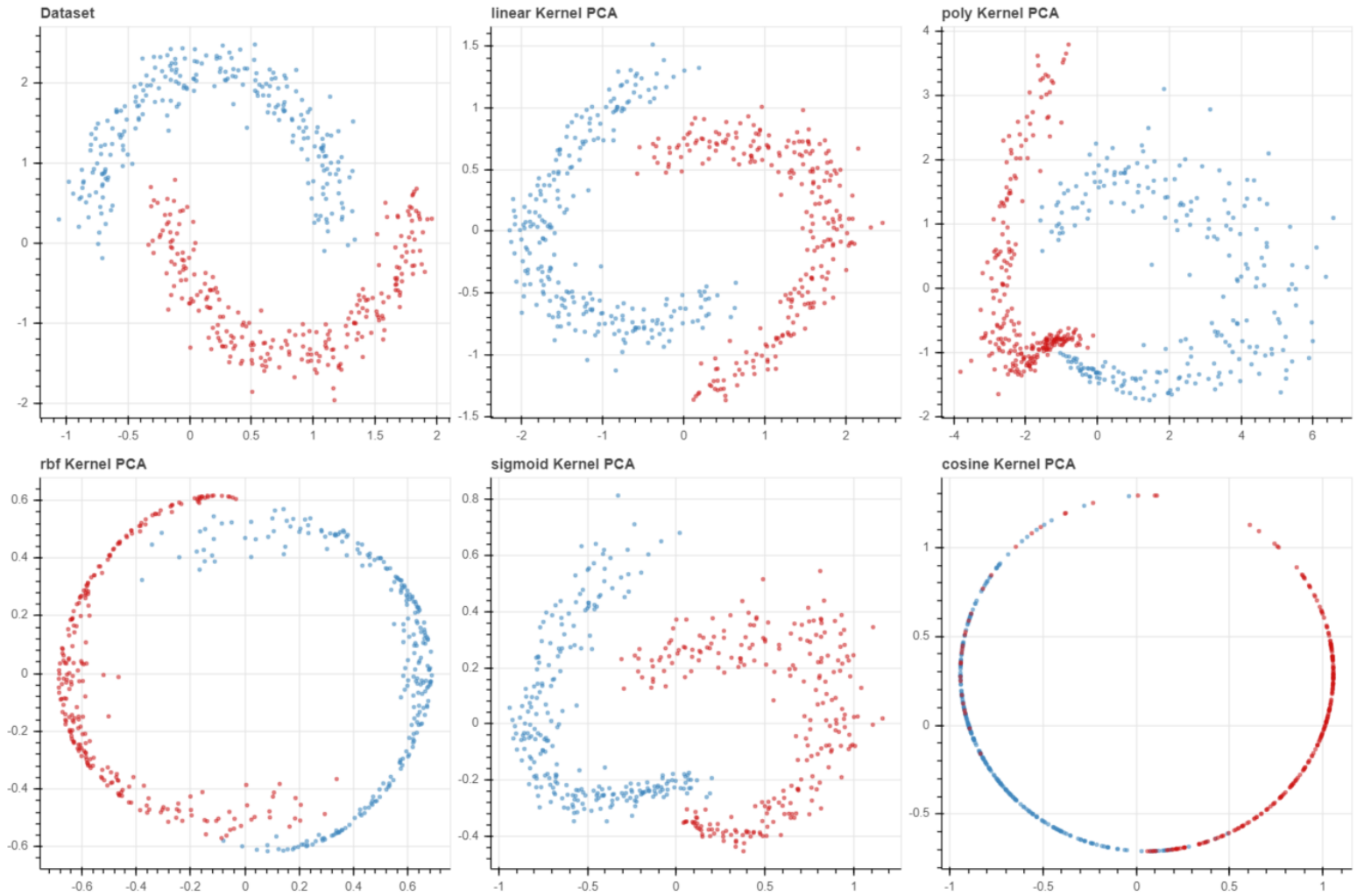
- 일반적으로 이용되는 kernels 은 아래와 같습니다.

kernel name	$K(x, y)$
Linear	$x^T y + c$
Polynomial	$(x^T y + a)^d$
RBF kernel	$\exp(-\beta \lvert x - y \rvert_2^2)$
Sigmoid	$\tanh(x^T y + c)$
Cosine	$\cos(\mathrm{x}, \mathrm{y})$
etc ...	

https://data-flair.training/blogs/svm-kernel-functions/
http://crsouza.com/2010/03/17/kernel-functions-for-machine-learning-applications/

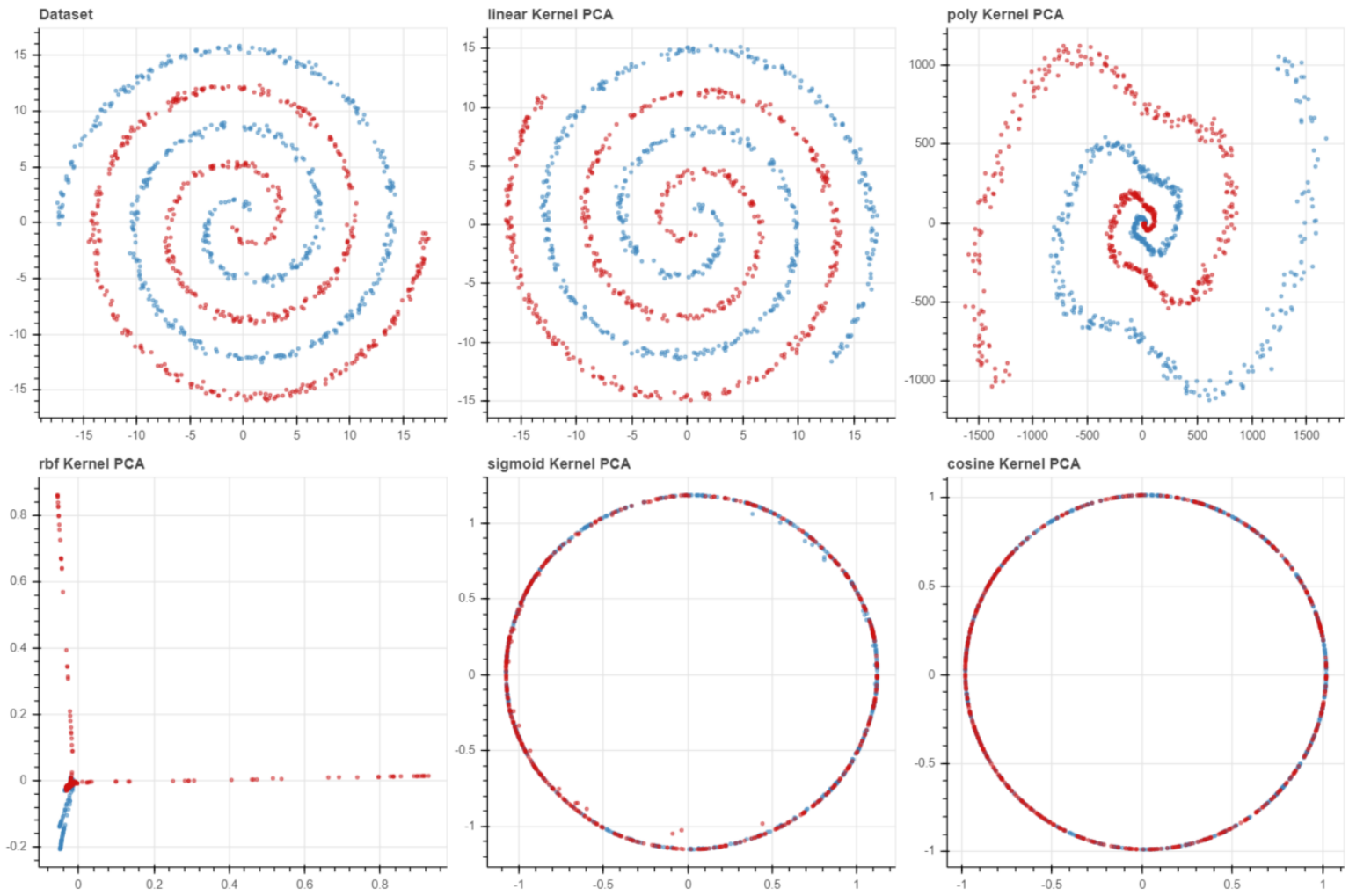
Kernel Principal Component Analysis (KPCA)

- Kernel 의 종류에 따라 같은 데이터도 서로 다른 features 로 변환됩니다.



Kernel Principal Component Analysis (KPCA)

- Kernel 의 종류에 따라 같은 데이터도 서로 다른 features 로 변환됩니다.



t-Stochastic Neighbor Embedding (t-SNE)

- t-SNE 는 SNE 알고리즘의 문제를 개선한 방법이며, 이후 LargeVis, UMAP 으로 발전합니다.
  - SNE → t-SNE → LargeVis → UMAP 의 목적은 모두 input space 에서 가까운 두 점 x_i, x_j 가 embedding space 에서 가깝고, input space 에서 먼 두 점은 embedding space 에서도 멀리 떨어지도록 좌표값 y_i, y_j 를 학습하는 것입니다.

Stochastic Neighbor Embedding (SNE)

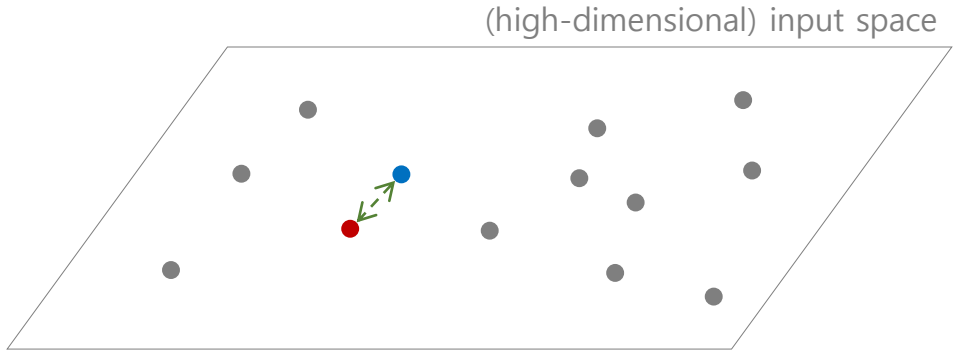
$$v_{j|i} = \exp\left(-\beta_i \left|x_i - x_j\right|_2^2\right)$$

$$p_{j|i} = \frac{v_{j|i}}{\sum_{k \neq i} v_{k|i}}, \; p_{ij} = \frac{p_{j|i} + p_{i|j}}{2n}$$

$$w_{ij} = \exp\left(-\left|y_i - y_j\right|_2^2\right)$$

$$q_{ij} = \frac{w_{ij}}{\sum_{p,q \neq p} w_{pq}}$$

$$C_{SNE} = \sum_{i,j \neq i} p_{ij} \log \frac{p_{ij}}{q_{ij}}$$



p_{ij}, q_{ij}는 확률입니다. $\sum p_{ij} = 1, \sum q_{ij} = 1$ 입니다.

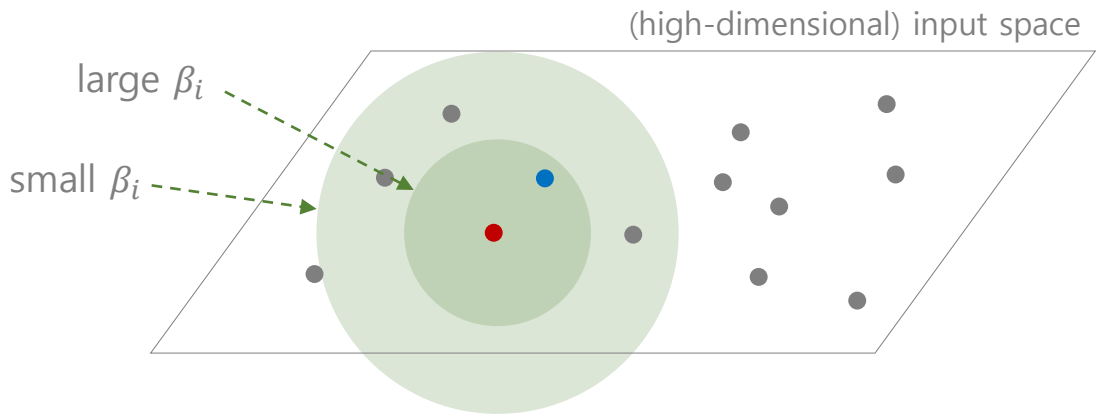
i 에서 j 로 이동할 확률이기 때문에 stochastic model 이라 부릅니다.

Stochastic Neighbor Embedding (SNE)

Finding β_i for each point i to meet certain perplexity with $v_{j|i}$

$$v_{j|i} = \exp\left(-\beta_i \left| x_i - x_j \right|_2^2\right)$$

$$\text{Perplexity} = 2^{H(p)}, 2^{entropy}$$



- β_i 에 의하여 $v_{j|i}$ 분포가 변화합니다. β_i 가 크면 가까운 점들만 큰 $v_{j|i}$ 가 만들어집니다.

- Entropy 는 확률 분포의 불확실성을 정의하는 방법입니다.
  - $entropy(p) = -\sum_p p \log p$
  - $P(x) = \{a: 0.3, b: 0.4, c: 0.3\}$ 에서 하나를 선택할 때, 결과를 예상하기 어렵습니다.

$$entropy\left(P(x)\right) = -(0.3 \times \log 0.3 + 0.4 \times \log 0.4 + 0.3 \times \log 0.3)$$

- Entropy 는 확률 분포의 불확실성을 정의하는 방법입니다.
  - $entropy(p) = -\sum_p p \log p$
  - $P(x) = \{a: 0.99, b: 0.005, c: 0.005\}$ 에서 하나를 선택하면 거의 a 일 것입니다.

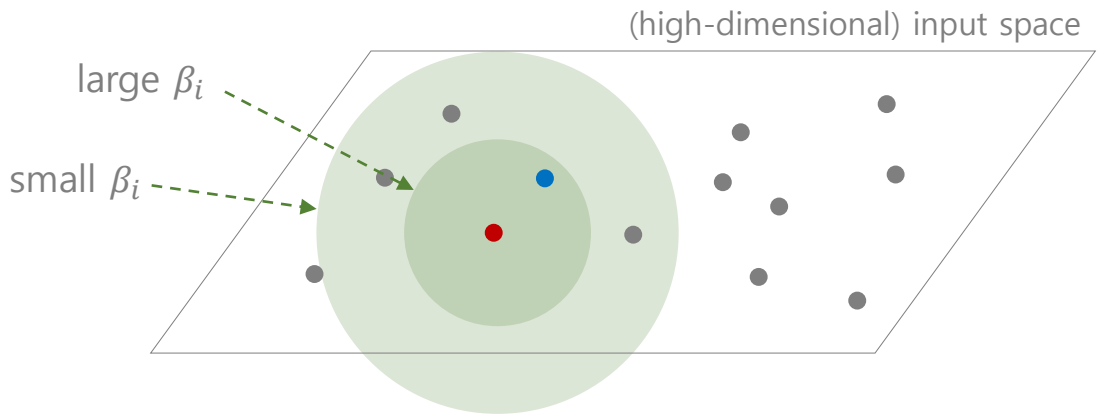
    $entropy\left(P(x)\right) = -(0.99 \times \log 0.99 + 0.005 \times \log 0.005 + 0.005 \times \log 0.005) = 0.063$

Stochastic Neighbor Embedding (SNE)

Finding β_i for each point i to meet certain perplexity with $v_{j|i}$

$$v_{j|i} = \exp\left(-\beta_i \left| x_i - x_j \right|_2^2\right)$$

$$\text{Perplexity} = 2^{H(p)}, 2^{entropy}$$



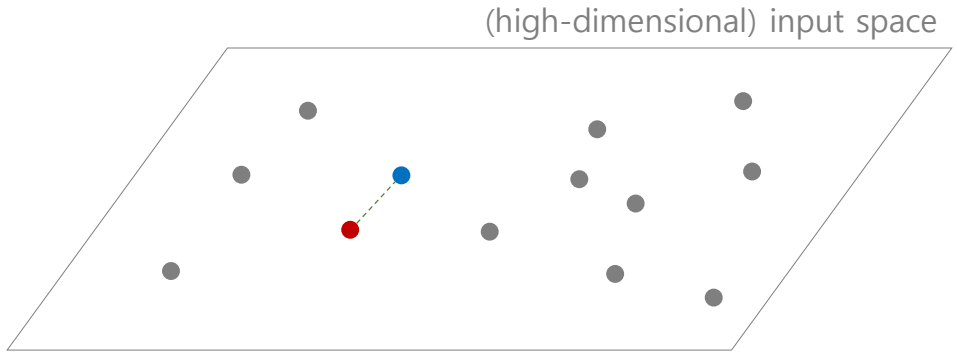
- 사용자에 의하여 특정 perplexity 가 주어지면 이를 맞추기 위해 β_i 를 조절합니다.

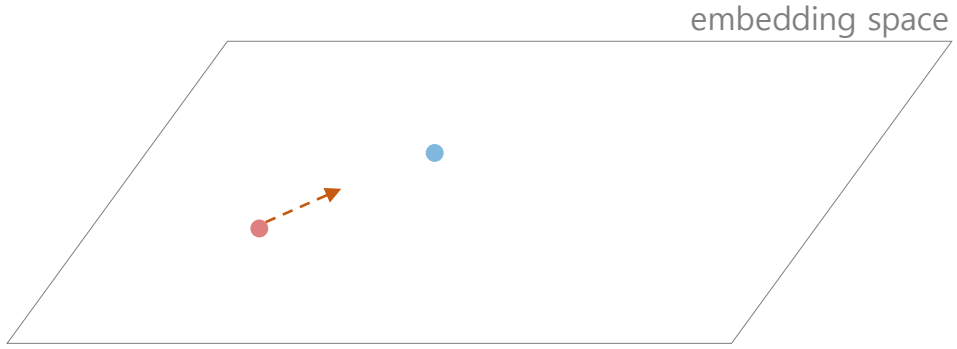
  Perplexity 가 작을수록 주위의 (local) 점들만 집중하여 $v_{j|i}$ 가 큰 값이 만들어집니다.

Stochastic Neighbor Embedding (SNE)

$$C_{SNE} = \sum_{i,j \neq i} p_{ij} \log \frac{p_{ij}}{q_{ij}}$$

$$\frac{dC_{SNE}}{dy_i} = 4 \sum_{j \neq i} (p_{ij} - q_{ij})(y_i - y_j)$$





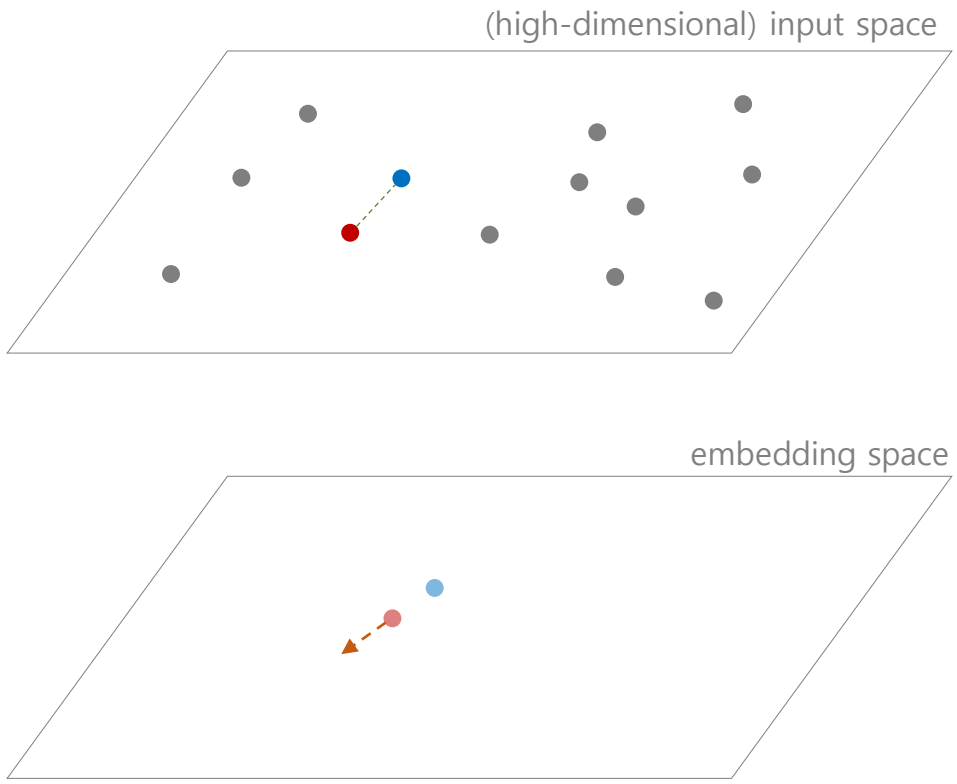
Input space 에서 x_i, x_j 가 가깝다면 (p_{ij} 가 크다면)

embedding space 에서 y_i, y_j 도 가깝도록 y_i 를 이동합니다.

Stochastic Neighbor Embedding (SNE)

$$C_{SNE} = \sum_{i,j \neq i} p_{ij} \log \frac{p_{ij}}{q_{ij}}$$

$$\frac{dC_{SNE}}{dy_i} = 4 \sum_{j \neq i} (p_{ij} - q_{ij})(y_i - y_j)$$



embedding space 에서 y_i, y_j 가 지나치게 가깝다면 두 점을 조금 떨어트립니다.

Stochastic Neighbor Embedding (SNE)

$$C_{SNE} = \sum_{i,j \neq i} p_{ij} \log \frac{p_{ij}}{q_{ij}}$$

$$\frac{dC_{SNE}}{dy_i} = 4 \sum_{j \neq i} (p_{ij} - q_{ij}) (y_i - y_j)$$

Gradient descent 를 이용하여 p_{ij} 와 유사한 q_{ij} 를 만들도록 y_i, y_j 를 조금씩 움직입니다.

Stochastic Neighbor Embedding (SNE)

- 모든 (i, j) 가 동일한 중요도로 학습됩니다.
  - $p_{ij} = 0.01, q_{ij} = 0.009$ 과 $p_{ij} = 0.002, q_{ij} = 0.001$ 모두 $p_{ij} - q_{ij} = 0.001$ 이기 때문에 동일한 중요도로 학습됩니다.
  - 하지만 우리는 원 공간에서 가까운 (p_{ij} 이 큰) 점들이 더 잘 학습되길 원합니다.

$$C_{SNE} = \sum_{i,j \neq i} p_{ij} \log \frac{p_{ij}}{q_{ij}}$$

$$\frac{dC_{SNE}}{dy_i} = 4 \sum_{j \neq i} (p_{ij} - q_{ij})(y_i - y_j)$$

t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding (t-SNE)

$$v_{j|i} = \exp\left(-\beta_i \left|x_i - x_j\right|_2^2\right)$$

$$p_{j|i} = \frac{v_{j|i}}{\sum_{k \neq i} v_{k|i}}, p_{ij} = \frac{p_{j|i} + p_{i|j}}{2n}$$

$$w_{ij} = \frac{1}{1 + \left|y_i - y_j\right|_2^2}$$

$$q_{ij} = \frac{w_{ij}}{\sum_{p,q \neq p} w_{pq}}$$

$$C_{tSNE} = \sum_{i,j \neq i} p_{ij} \log \frac{p_{ij}}{q_{ij}}$$

Embedding space 에서의 점들 간 유사도를 재정의합니다.

학습이 더욱 안정적으로 이뤄집니다.

t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding (t-SNE)

$$C_{tSNE} = \sum_{i,j \neq i} p_{ij} \log \frac{p_{ij}}{q_{ij}}$$

$$\frac{dC_{tSNE}}{dy_i} = 4 \sum_{j \neq i} (p_{ij} - q_{ij}) (y_i - y_j) \times \frac{1}{1 + |y_i - y_j|_2^2}$$

q_{ij} 가 크거나 p_{ij} 가 큰 점에 집중적으로 학습합니다.

t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding (t-SNE)

- $v_{j|i} = \exp\left(-\beta_i |x_i - x_j|_2^2\right)$ 는 안정적인 임베딩 결과를 도출합니다.
  - 데이터 분포와 거리 척도에 관계없이 대체로 비슷한 $p_{j|i}$ 를 생성합니다.
  - 데이터에 관계없이 비슷한 input p_{ij} 가 만들어지기 때문에 비슷한 (안정적인) 임베딩 결과가 학습됩니다.
- 하지만 β_i 가 지나치게 크면 점들 간 유사도의 변별력이 사라집니다.
  - 임베딩이 제대로 학습되지 않습니다.

t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding (t-SNE)

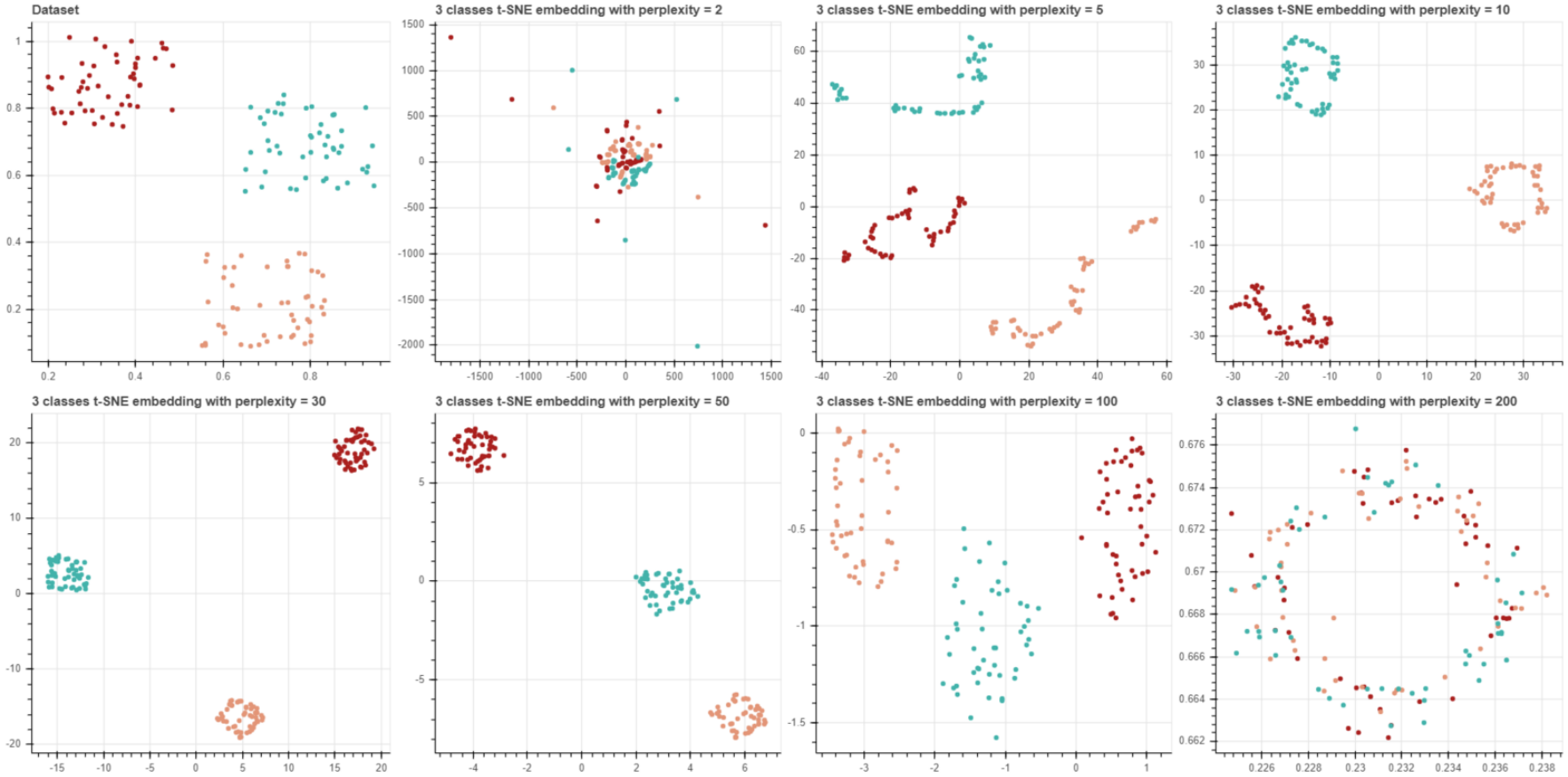
- $P_{j|i} \gg 0$ 인 점들의 개수는 perplexity 에 의하여 조절됩니다.
  - Perplexity 가 클수록 더 많은 점들을 고려합니다.
  - 그 값이 지나치게 크면 모든 점들 간의 $P_{j|i}$ 가 비슷한 값이 되어 점들 간 유사도가 uniform 하게 변환됩니다. 반대로 지나치게 작은 값은 한 두 개의 이웃만 고려합니다.
  - 적은 수의 데이터를 학습할 때에는 perplexity 를 신경써야 합니다.

sklearn.manifold.TSNE

class sklearn.manifold. TSNE (*n_components=2, perplexity=30.0, early_exaggeration=4.0, learning_rate=1000.0, n_iter=1000, n_iter_without_progress=30, min_grad_norm=1e-07, metric='euclidean', init='random', verbose=0, random_state=None, method='barnes_hut', angle=0.5*) ¶ [source]

t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding (t-SNE)

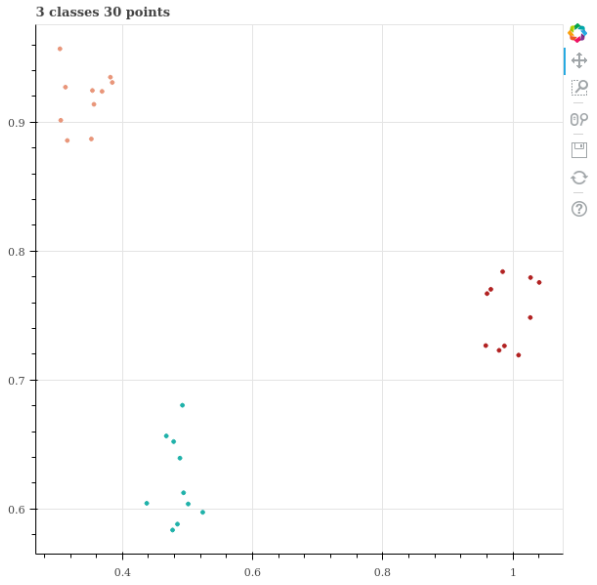
- 데이터의 개수에 따라 perplexity 를 조절해야 합니다.



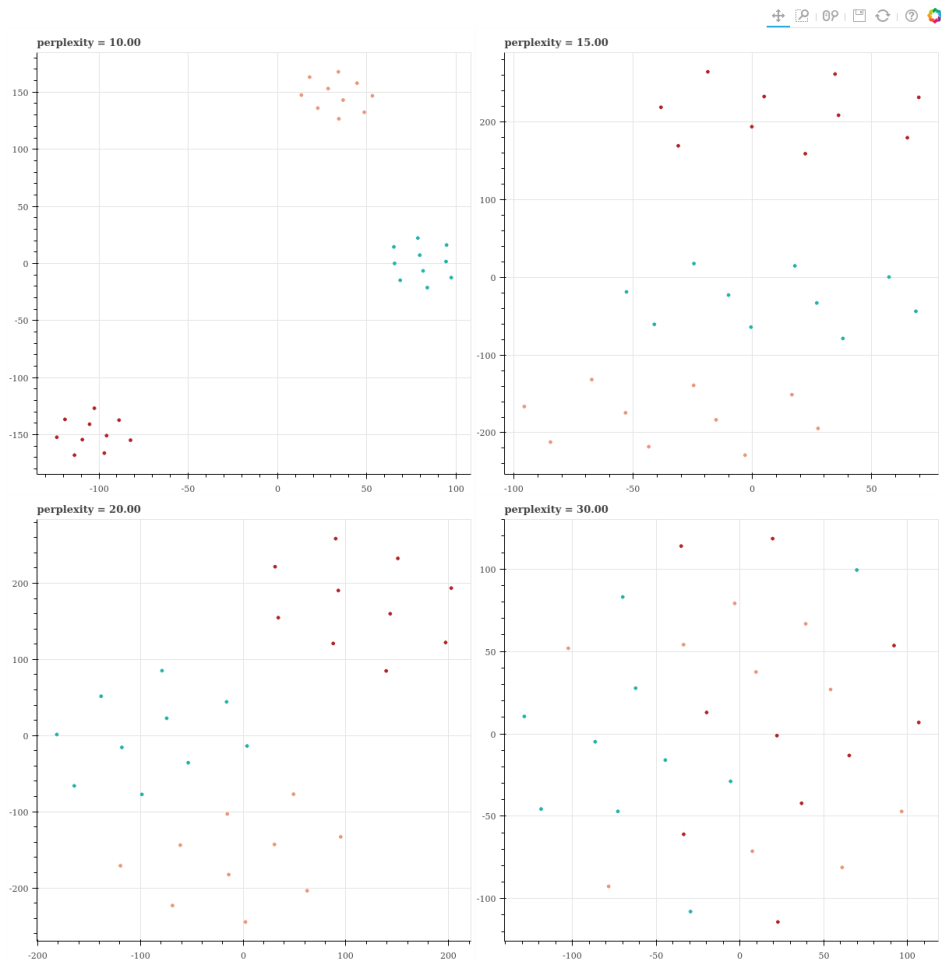
150 points 의 perplexity 에 따른 t-SNE 변화

t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding (t-SNE)

- 데이터의 개수에 따라 perplexity 를 조절해야 합니다.



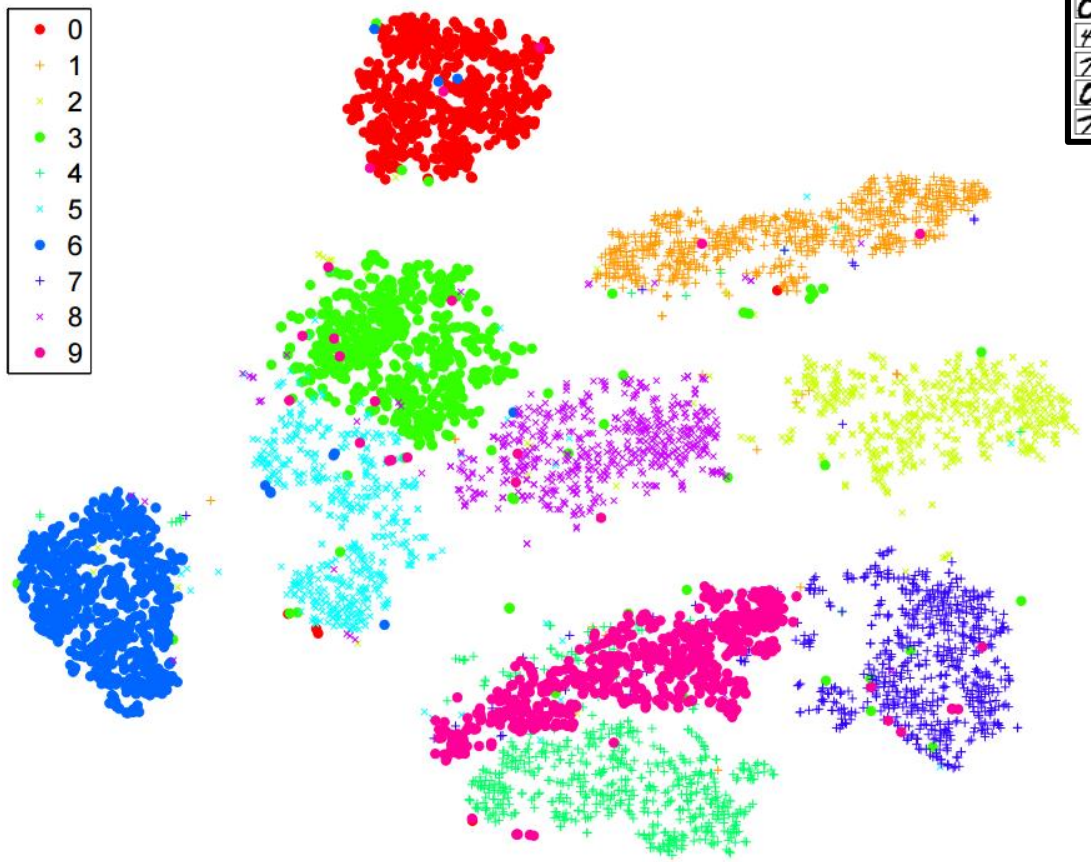
raw data, 30 points

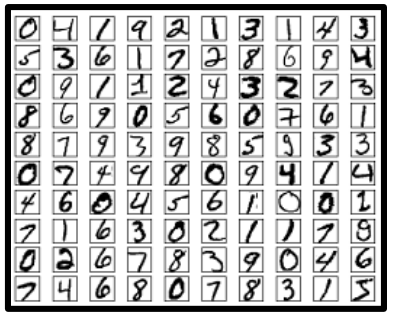


embedding results

t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding (t-SNE)

- 손글씨 숫자 데이터 (MNIST)의 시각화 예시





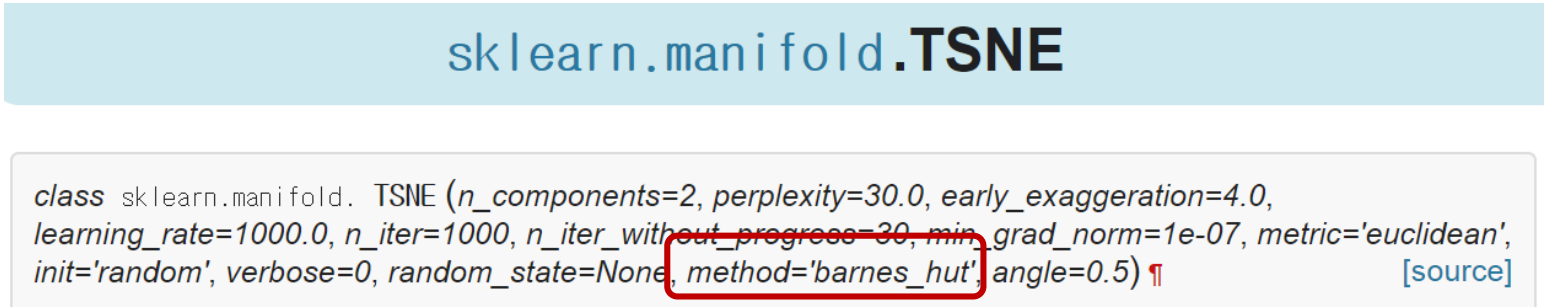
* Van der Maaten, L., & Hinton, G. (2008). Visualizing data using t-SNE. *Journal of Machine Learning Research*, *9*(2579-2605), 85.

t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding (t-SNE), 한계점

- $w_{ij} = \frac{1}{1+\left|y_i - y_j\right|_2^2}$ $q_{ij} = \frac{w_{ij}}{\sum_{p,q \neq p} w_{pq}}$ 이므로 gradient descent 의 매 iteration step 마다 정규화를 포함한 q_{ij} 를 재계산 해야 합니다. 이 계산비용은 $O(n^2)$ 으로 큰 데이터에 t-SNE 를 적용하지 못하게 만듭니다.

Barnes hut t-SNE

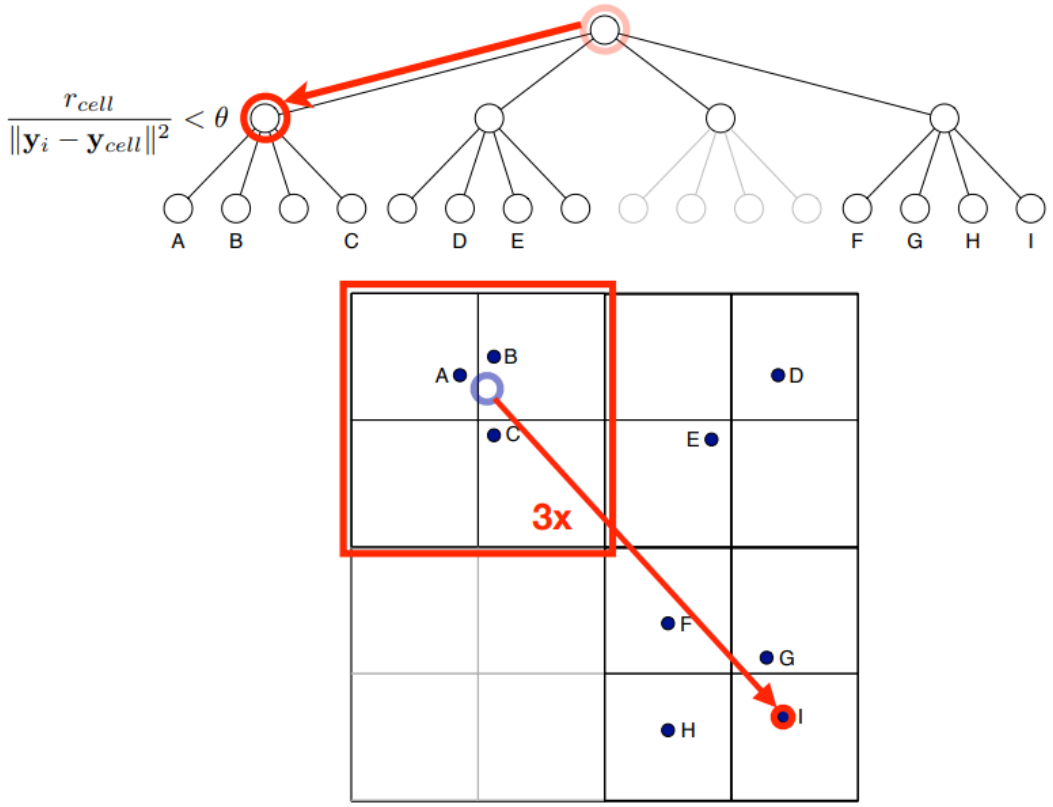
- t-SNE (Maaten & Hinton, 2008) 는 계산 복잡도가 높아서 큰 데이터의 시각화에 사용되지 못했습니다. 이후 개선된 Barnes hut t-SNE (Maaten, 2014)이 제안되었으며, 대부분의 패키지는 이 알고리즘을 쓰고 있습니다.



Maaten, L. V. D., & Hinton, G. (2008). Visualizing data using t-SNE. *Journal of machine learning research*, *9*(Nov), 2579-2605.
Van Der Maaten, L. (2014). Accelerating t-SNE using tree-based algorithms. *The Journal of Machine Learning Research*, *15*(1), 3221-3245.

Barnes hut t-SNE

- 비슷한 위치에 존재하는 점들을 한번에 비슷한 방향으로 학습시킴으로써 계산비용을 줄였습니다.



Van Der Maaten, L. (2014). Accelerating t-SNE using tree-based algorithms. *The Journal of Machine Learning Research*, *15*(1), 3221-3245.

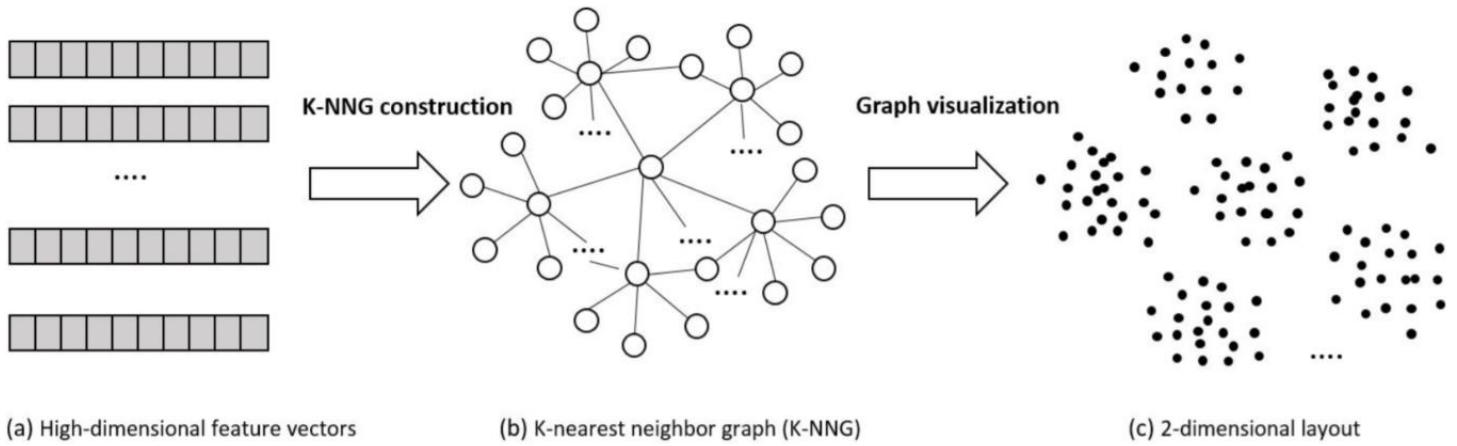
LargeVis

- LargeVis 는 Barnes hut t-SNE 와 다른 방법으로 계산비용을 줄입니다.
  - 이미 멀리 떨어진 점 (y_i, y_j) 는 열심히 학습할 필요가 없습니다.
  - 샘플링을 통하여 일부만 선택한 뒤, p_{ij} 가 작지만 q_{ij} 가 큰 점들을 많이 학습합니다.

$$\frac{dC_{tSNE}}{dy_i} = 4\sum_{j\neq i}(p_{ij} - q_{ij})(y_i - y_j) \times \frac{1}{1+|y_i - y_j|_2^2}$$

LargeVis

- 세 단계로 임베딩 공간을 학습합니다.
  - k-NNG 를 계산하는 비용은 최대 $O(n^2)$ 입니다.
  - 이를 해결하기 위하여 approximated neighbor search 방법을 이용합니다.



Tang, J., Liu, J., Zhang, M., & Mei, Q. (2016, April). Visualizing large-scale and high-dimensional data. In *Proceedings of the 25th international conference on world wide web* (pp. 287-297).

LargeVis

$$v_{j|i} = \exp\left(-\beta_i \left|x_i - x_j\right|_2^2\right), p_{j|i} = \frac{v_{j|i}}{\sum_{k \neq i} v_{k|i}}, p_{ij} = \frac{p_{j|i} + p_{i|j}}{2n}$$

$$d_{ij} = \left|y_i - y_j\right|_2 , w_{ij} = \frac{1}{1 + d_{ij}^2}$$

$$C_{LV} = \sum_{(i,j) \in E} p_{ij} \log w_{ij} + \gamma \sum_{(i,j) \in \bar{E}} \log\left(1 - w_{ij}\right)$$

C_{LV}^{+} C_{LV}^{-}

p_{ij} 는 t-SNE 와 동일하지만 q_{ij} 를 계산하지 않습니다.
w_{ij} 를 직접 계산에 이용합니다.

$(i,j) \in E$: nodes in neighbor graph

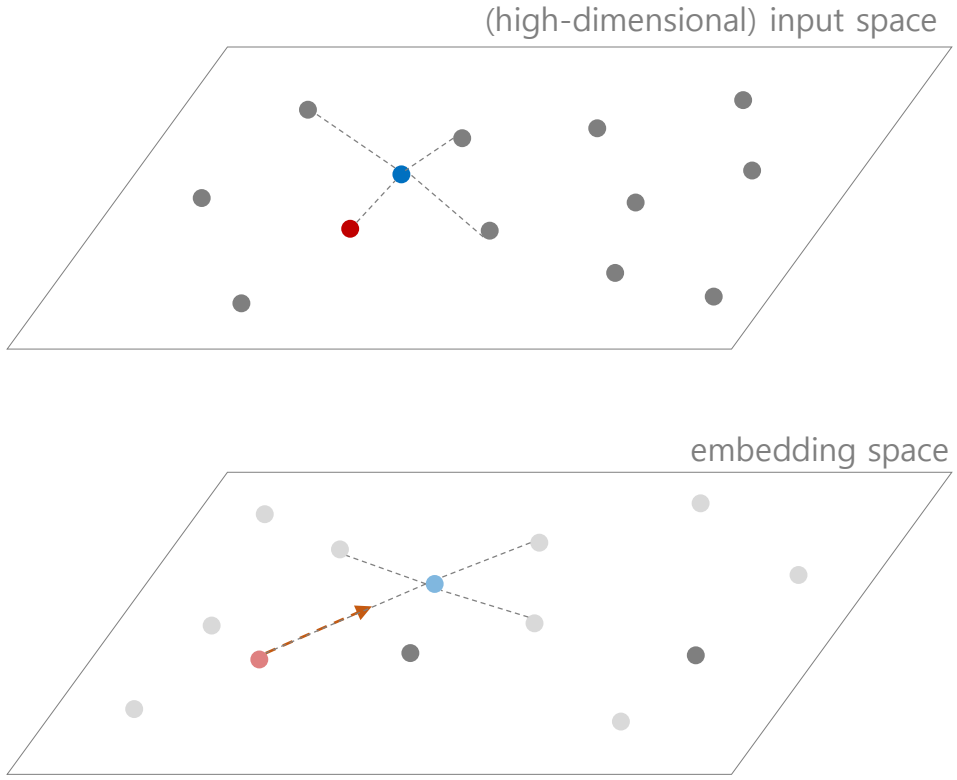
LargeVis

$$C_{LV} = \sum_{(i,j)\in E} p_{ij} \log w_{ij} + \gamma \sum_{(i,j)\in \bar{E}} \log(1 - w_{ij})$$

$$\frac{dC_{LV}^{+}}{dy_i} = \frac{-2}{1+d_{ij}^2} p_{ij}(y_i - y_j)$$

$$\frac{dC_{LV}^{-}}{dy_i} = \frac{2\gamma}{(0.1 + d_{ij}^2)(1+d_{ij}^2)}(y_i - y_j)$$

Input space 에서 이웃한 점들은 embedding space 에서 가까워지도록 학습합니다.

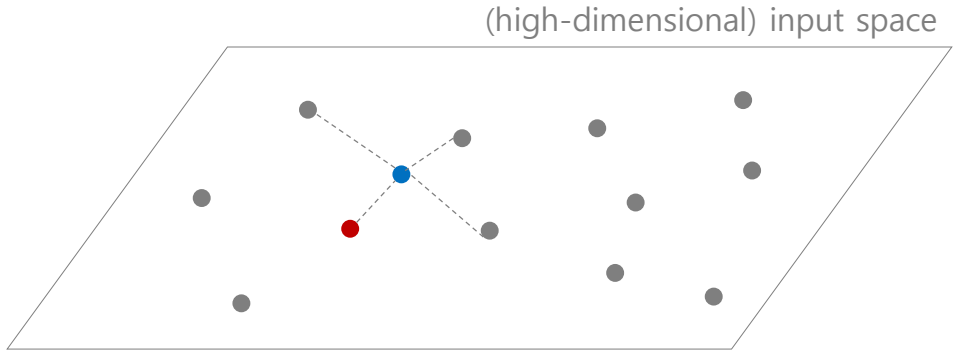


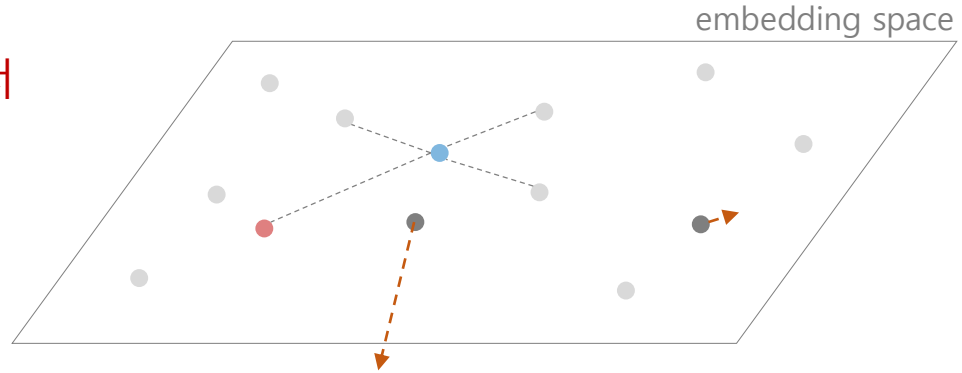
LargeVis

$$C_{LV} = \sum_{(i,j)\in E} p_{ij} \log w_{ij} + \gamma \sum_{(i,j)\in \bar{E}} \log(1 - w_{ij})$$

$$\frac{dC_{LV}^{+}}{dy_i} = \frac{-2}{1+d_{ij}^2} p_{ij}(y_i - y_j)$$

$$\frac{dC_{LV}^{-}}{dy_i} = \frac{2\gamma}{(0.1 + d_{ij}^2)(1+d_{ij}^2)}(y_i - y_j)$$





Input space 에서 이웃하지 않은 점들은 embedding space 에서 멀어지도록 학습합니다.

이미 충분히 멀다면 (d_{ij}^2 가 크다면) 크게 신경쓰지 않습니다.

LargeVis

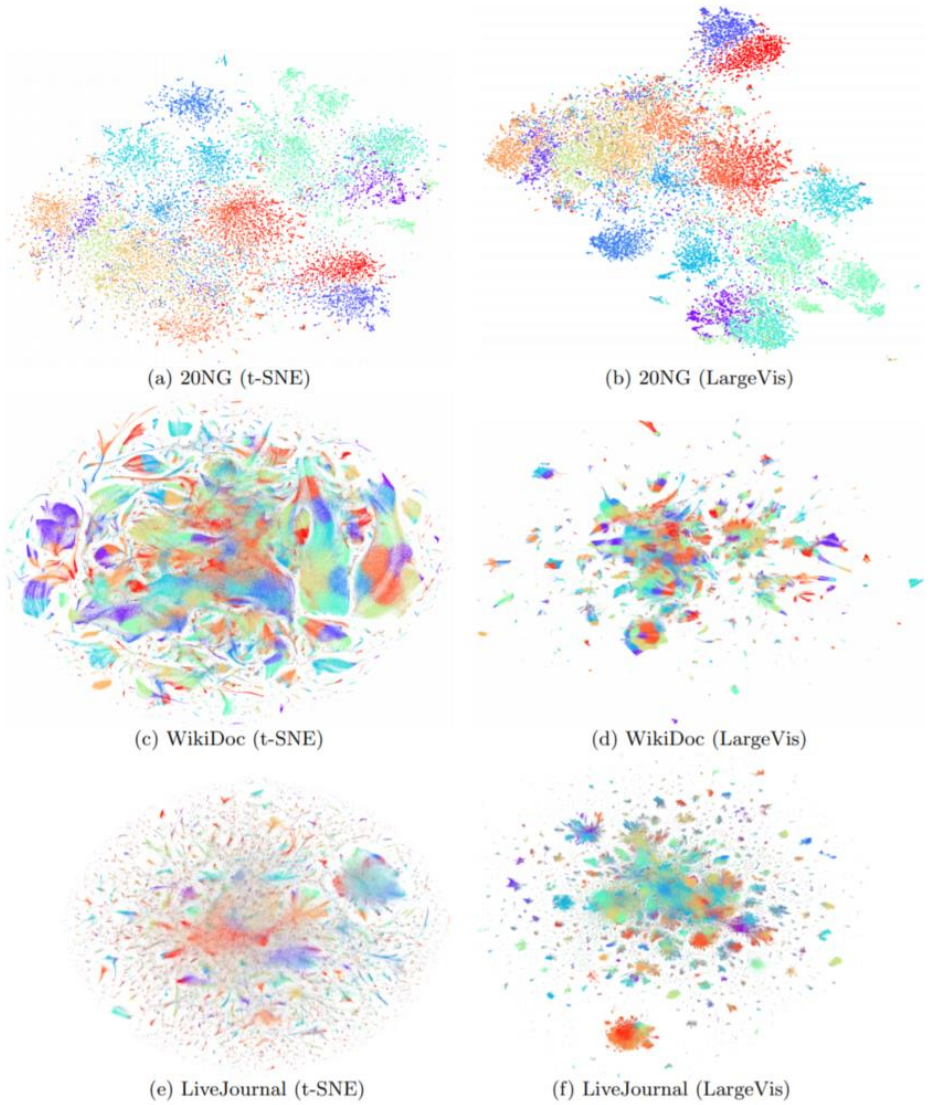
$$\frac{dC_{LV}^{+}}{dy_i} = \frac{-2}{1+d_{ij}^2} p_{ij}(y_i - y_j)$$

$$\frac{dC_{LV}^{-}}{dy_i} = \frac{2\gamma}{(0.1 + d_{ij}^2)(1+d_{ij}^2)}(y_i - y_j)$$, min dist = 0.1, 분모가 0 이 되는 것을 방지합니다.

- $(i,j) \in E$ 는 모든 마디에 대하여, $(i,j) \in \bar{E}$ 는 일부를 샘플링하여 선택적 학습을 합니다.
- 샘플링은 $d_i = \sum_j v_{j|i}$ 에 비례하게 이뤄집니다.

LargeVis

- 사실 임베딩 학습 결과는 비슷합니다.
  무엇이 더 좋은 임베딩인 걸까요?



Tang, J., Liu, J., Zhang, M., & Mei, Q. (2016, April). Visualizing large-scale and high-dimensional data. In *Proceedings of the 25th international conference on world wide web* (pp. 287-297).

UMAP

- UMAP 도 input data X 를 이용하여 k-nearest neighbor graph, G_x 를 생성한 뒤 이를 임베딩 학습에 이용합니다.
- $v_{j|i}$, v_{ij} 를 정의하는 방법이 조금 다릅니다.

UMAP

$$v_{j|i} = \exp\left(-\beta_i \left| r_{ij} - \rho_i \right|_2^2\right)$$

$$v_{ij} = \left(v_{j|i} + v_{i|j}\right) - v_{j|i} \cdot v_{i|j}$$

ρ_i : distance between i and the most closest point

β_i such that $\sum_j v_{j|i} = \log k$, k is the number of neighbors in graph

- ρ_i 최인접이웃과의 거리를 뺌으로써 input space 의 x_i 주변의 거리 분포를 반영합니다.
- G_x 에 포함되지 않으면 $v_{j|i} = 0$ 입니다 (disconnected).

UMAP

$$v_{j|i} = \exp\left(-\beta_i \left| r_{ij} - \rho_i \right|_2^2\right)$$

$$v_{ij} = \left(v_{j|i} + v_{i|j}\right) - v_{j|i} \cdot v_{i|j}$$

$$w_{ij} = \frac{1}{1+ad_{ij}^{2b}}$$

$$C_{UMAP} = \sum_{ij} v_{ij} \log\left(\frac{v_{ij}}{w_{ij}}\right) + \left(1 - v_{ij}\right) \log\left(\frac{1-v_{ij}}{1-w_{ij}}\right)$$

G_x 에 포함된 점들은 임베딩 공간에서 서로 가깝도록 당겨오고,

G_x 에 포함되지 않은 점들은 어느 정도 멀어질때까지 밀어냅니다.

UMAP

$$C_{UMAP} = \sum_{ij} v_{ij} \log\left(\frac{v_{ij}}{w_{ij}}\right) + (1 - v_{ij}) \log\left(\frac{1-v_{ij}}{1-w_{ij}}\right)$$

$$\frac{dC^{+}_{UMAP}}{dy_i} = \frac{-2}{1+d_{ij}^2} v_{ij}(y_i - y_j)$$

$$\frac{dC^{-}_{UMAP}}{dy_i} = \frac{b}{(0.001 + d_{ij}^2)(1+d_{ij}^2)}(1 - v_{ij})(y_i - y_j)$$

$\frac{dC^{-}_{UMAP}}{dy_i}$ 에 이용할 y_i, y_j 는 분포를 이용하지 않고 임의로 선택합니다.

UMAP

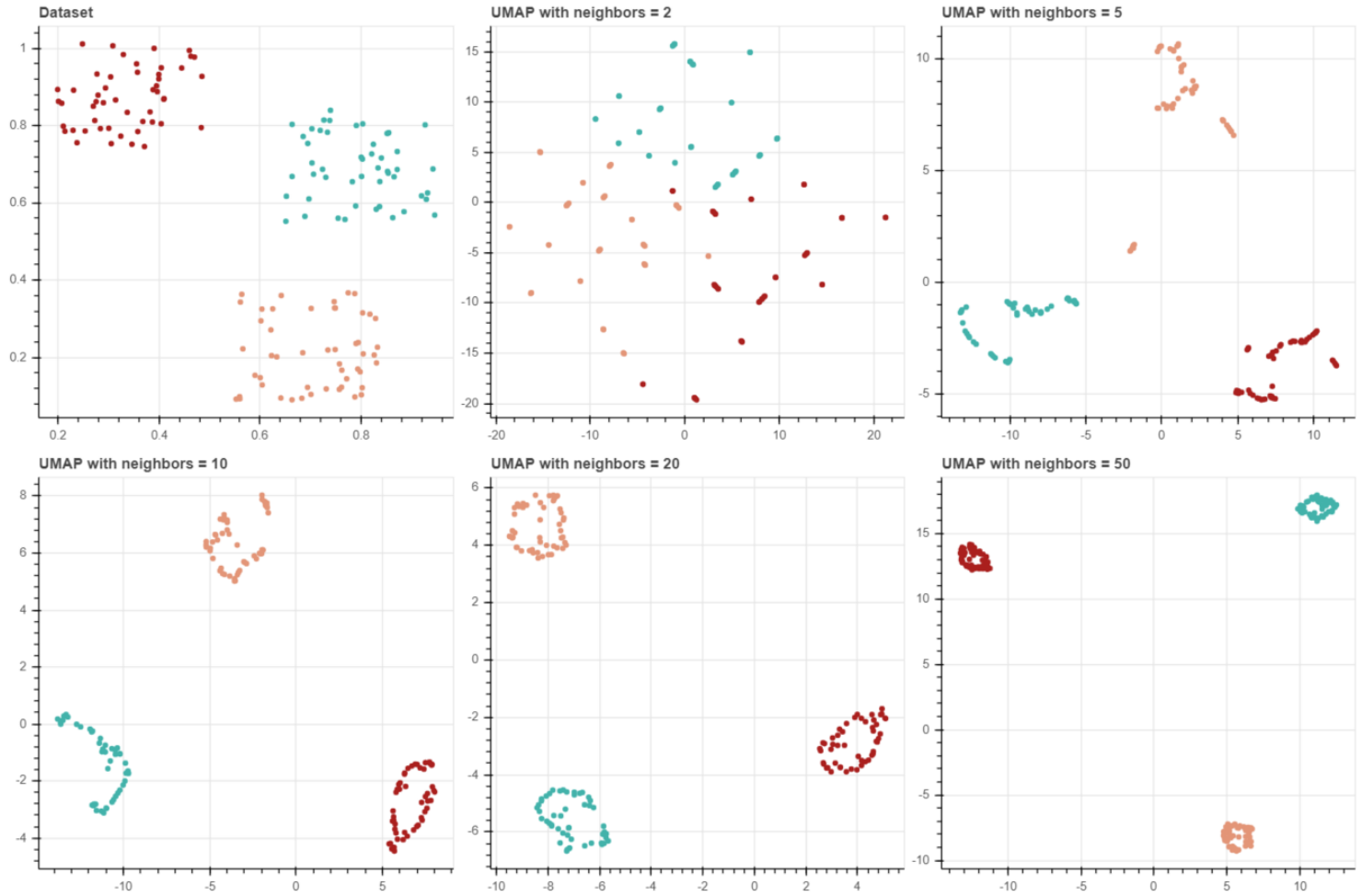
- UMAP 은 항상 빠르고, LargeVis 는 데이터가 클 때만 t-SNE 보다 몇 배 빠릅니다. LargeVis 는 확률에 기반한 샘플링의 비용이 크기 때문에 데이터가 매우 커야 t-SNE 보다 빨라집니다.

	UMAP	FIt-SNE	t-SNE	LargeVis	Eigenmaps	Isomap
Pen Digits (1797x64)	9s	48s	17s	20s	**2s**	**2s**
COIL20 (1440x16384)	**12s**	75s	22s	82s	47s	58s
COIL100 (7200x49152)	**85s**	2681s	810s	3197s	3268s	3210s
scRNA (21086x1000)	**28s**	131s	258s	377s	470s	923s
Shuttle (58000x9)	**94s**	108s	714s	615s	133s	–
MNIST (70000x784)	**87s**	292s	1450s	1298s	40709s	–
F-MNIST (70000x784)	**65s**	278s	934s	1173s	6356s	–
Flow (100000x17)	**102s**	164s	1135s	1127s	30654s	–
Google News (200000x300)	**361s**	652s	16906s	5392s	–	–

McInnes, L., Healy, J., & Melville, J. (2018). Umap: Uniform manifold approximation and projection for dimension reduction. *arXiv preprint arXiv:1802.03426*.

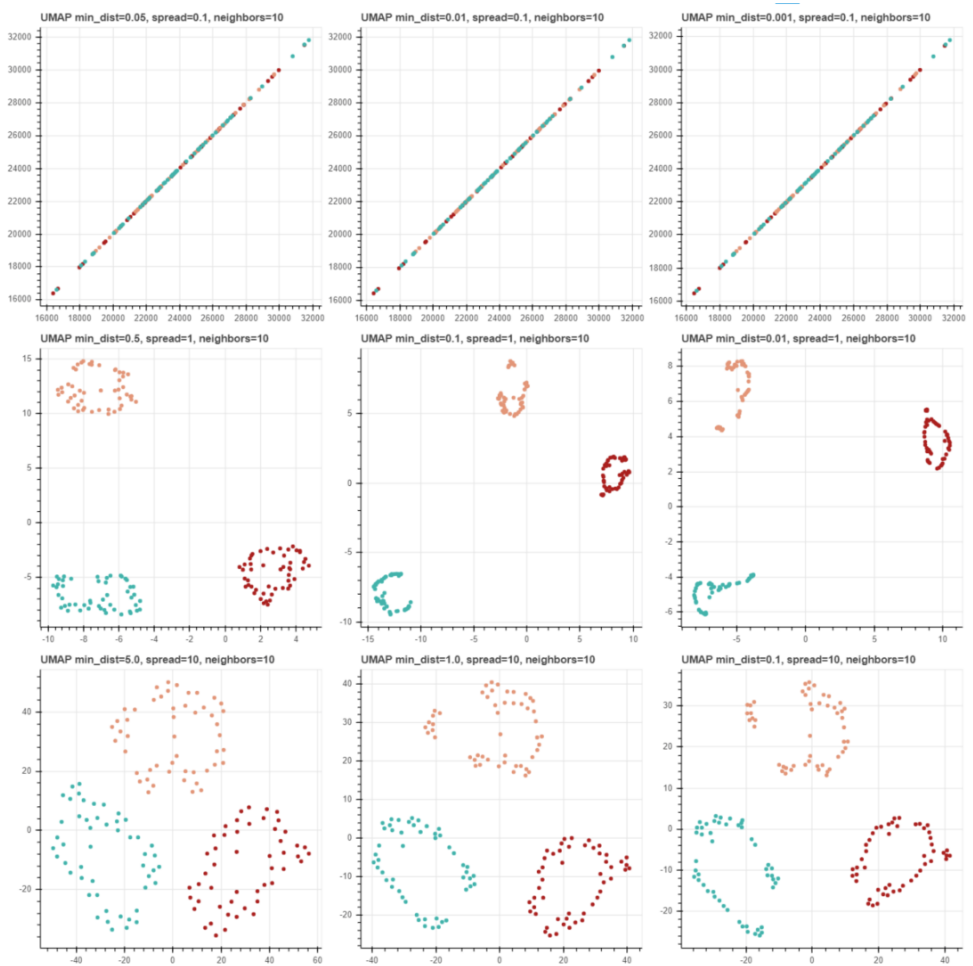
UMAP

- t-SNE 의 perplexity 의 역할을 UMAP 에서 n_neighbors 가 합니다.



UMAP

- `spread`, `min_dist` 에 의하여 경향이 달라질 수 있습니다.

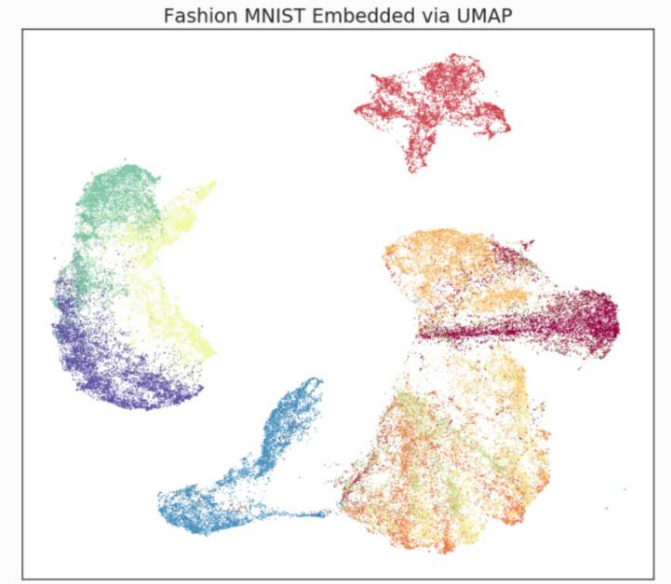


UMAP

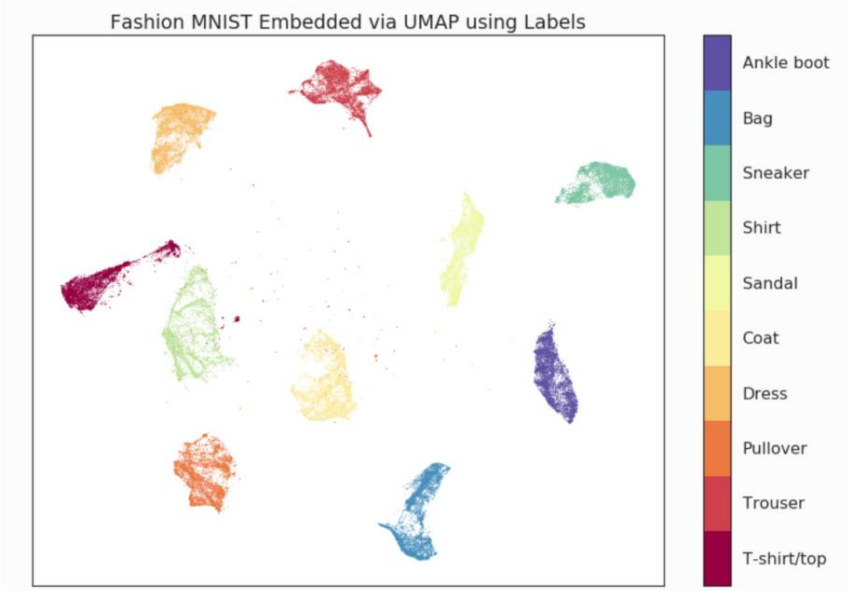
- UMAP 은 label 정보를 이용한 supervised embedding 을 지원합니다.
  - y 를 이용하여 G_y 를 만든 뒤, v_{ij} 를 만들 때 $\alpha G_x + (1-\alpha)G_y$ 를 이용합니다.
  - y 가 명목변수이면 {0, 1}, 연속형변수이면 L1, L2 거리를 G_y 의 weight 로 이용합니다.
  - `target_metric` 은 'categorical', 'l1', 'l2' 중 선택, `target_weight` 는 α 입니다.

UMAP

- 레이블을 이용하면 서로 다른 클래스의 객체들이 구분되어 임베딩 됩니다.



unsupervised embedding

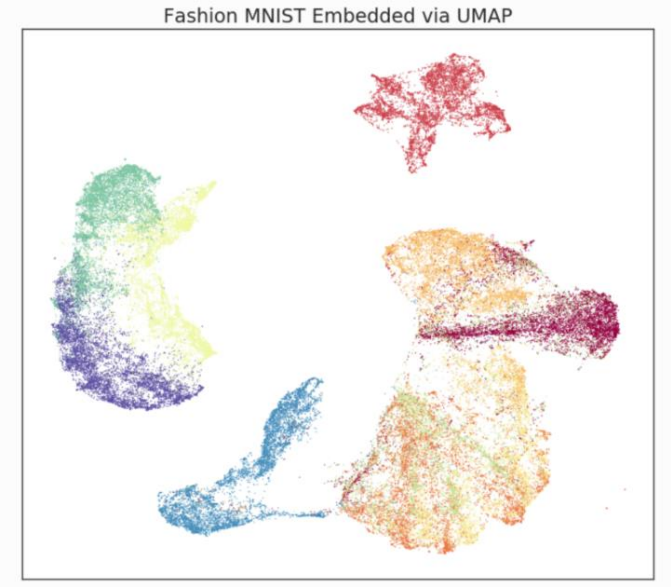


supervised embedding

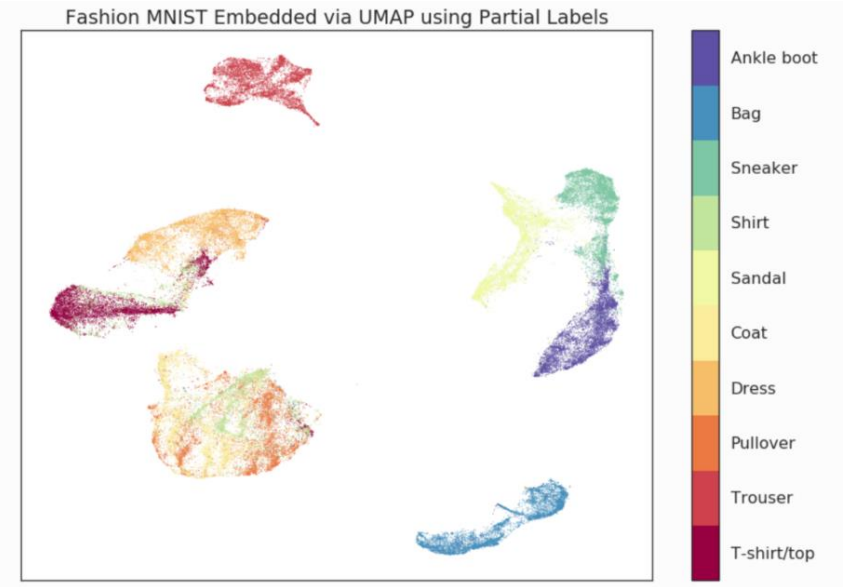
https://umap-learn.readthedocs.io/en/latest/supervised.html

UMAP

- Partial labeled (semi-supervised) embedding 도 가능합니다.
  - 클래스를 알지 못하는 데이터들은 label 을 -1 로 지정합니다.



unsupervised embedding



semi-supervised embedding

https://umap-learn.readthedocs.io/en/latest/supervised.html

UMAP

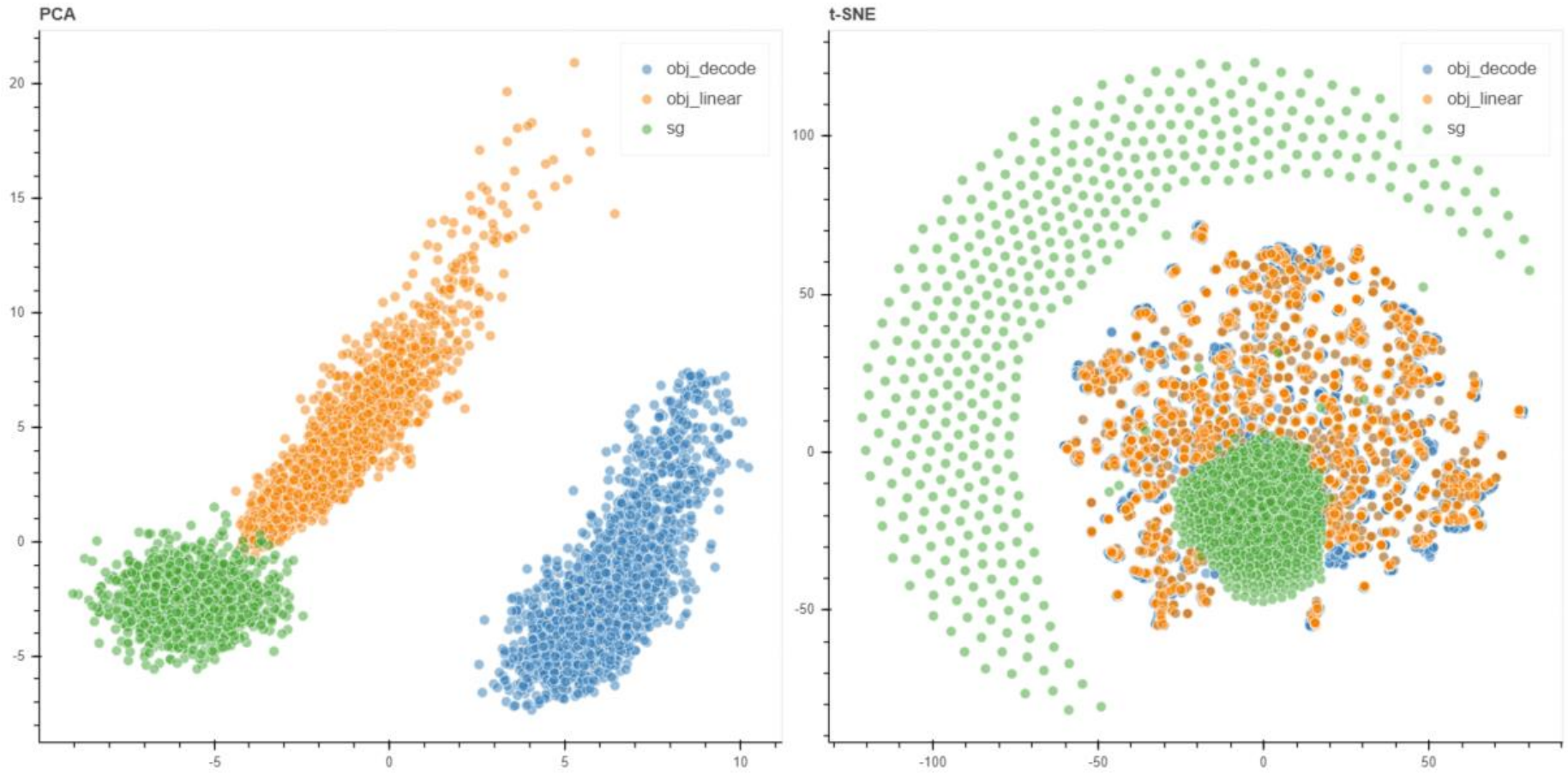
- UAMP 의 학습결과로 embedding mapper 를 얻기 때문에, 새로운 데이터에 대한 임베딩 벡터 추정이 가능합니다.

```
import umap

mapper = umap.UMAP(n_neighbors=10).fit(train_data, train_label)
test_embedding = mapper.transform(test_data)
```

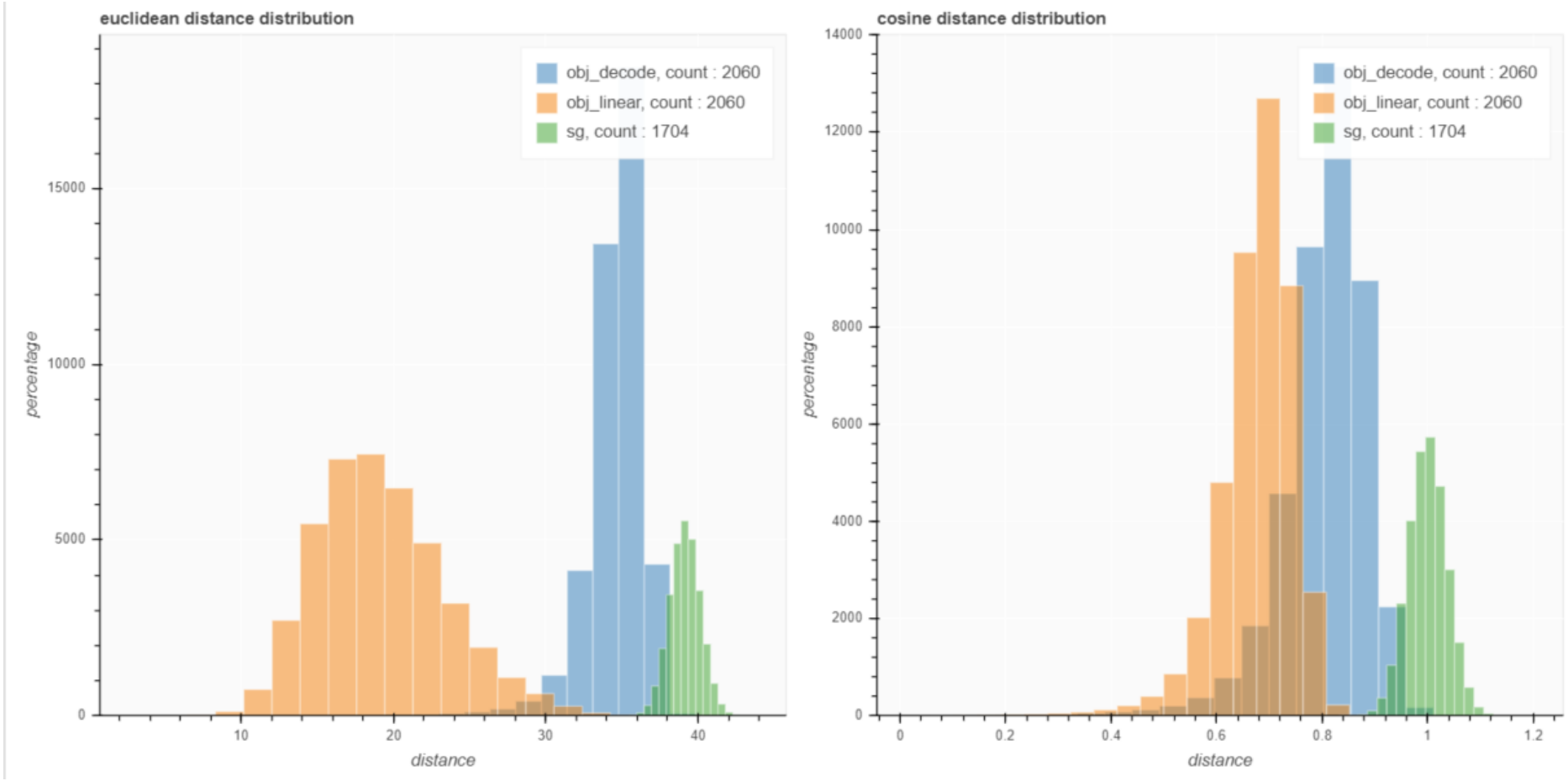
t-SNE vs PCA

- 동일한 데이터 (760 차원) 를 PCA 와 t-SNE 로 임베딩한 결과입니다. 서로 경향이 다릅니다.



t-SNE vs PCA

- 각 클래스별로 pairwise distance (Euclidean, cosine) 를 계산하여 분포를 살펴봅니다.



t-SNE vs PCA

- 녹색 클래스의 데이터가 전체 공간에 골고루 펼쳐져 있기 때문에 Cosine distance 가 1이 넘는 경우들이 많습니다. 하지만 그 개체수는 가장 적습니다.
- PCA 는 특정 방향에 데이터가 몰려있을 경우, 그 방향을 우선적으로 탐색합니다.
- PCA 임베딩 그림만으로는 녹색이 한 곳에 몰려있다고 곡해할 수 있습니다.