Encajes de Vecinos Estocásticos con distribución t

Guillermo Ruiz

El método de PCA es muy usado debido a su popularidad y simpleza. Sin embargo, su principal desventaja es que se limita a una transformación lineal. Muchas veces, los datos con los que trabajamos son muy complejos y requieren transformaciones más complicadas para una visualización más útil.

El algoritmo de t-SNE obtiene la distribución de los vecinos de los puntos originales y busca replicar esa distribución en un espacio de menor dimensión. La idea es que los puntos cercanos aparezcan cercanos en el espacio reducido (no le importan los puntos lejanos).

El algoritmo funciona de la siguiente manera. Para cada punto x_i, se centra una distribución gaussiana en ese punto. Luego, para cada x_j, se obtiene su densidad normalizada dada por dicha distribución. Esto es, la probabilidad condicional de elegir al punto x_j dado el punto central x_i es:

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

La normalización garantiza que $\sum_j p_{j|i} = 1$. La probabilidad condicional $p_{j|i}$ es la probabilidad de que el punto x_i eliga al punto x_j como su vecino tomando en cuenta la distribución gaussiana centrada en x_i. Se define la distribución

$$p_{ij} = \frac{p_{j|i} + p_{i|j}}{2N}$$

donde N es la cantidad de puntos. Intuitivamente, p_{ij} es la probabilidad de que los puntos x_i, x_j sean vecinos. La desviación estandar σ_i depende de un valor llamado **perplejidad** que se indica con el número de vecinos que se toman alrededor de cada punto. Este valor lo define el usuario.

Se busca elegir vectores reducidos de dimensión y_i que tengan la misma distribución de p_{ij}. Se define

$$q_{ij} = \frac{(1 + ||y_i - y_j||^2)^{-1}}{\sum_k \sum_{l \neq k} (1 + ||y_k - y_l||^2)^{-1}}$$

aquí se usa una distribución t-student en lugar de agussianas. Para medir la similitud entre p_{ij} y q_{ij} se usa **Kullback-Leibler** (KL) que se define como

$$KL(P||Q) = \sum_{i \neq j} p_{ij} \log \frac{p_{ij}}{q_{ij}}$$

La minimización se hace usando la técnica del descenso de gradiente para obtener los puntos y_i.

El algoritmo es cuadrático en tiempo y espacio así que se recomienda no usarlo en muchos datos.

Veamos un ejemplo de uso del t-SNE con el conjunto de datos de MNIST.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.manifold import TSNE
import time
```

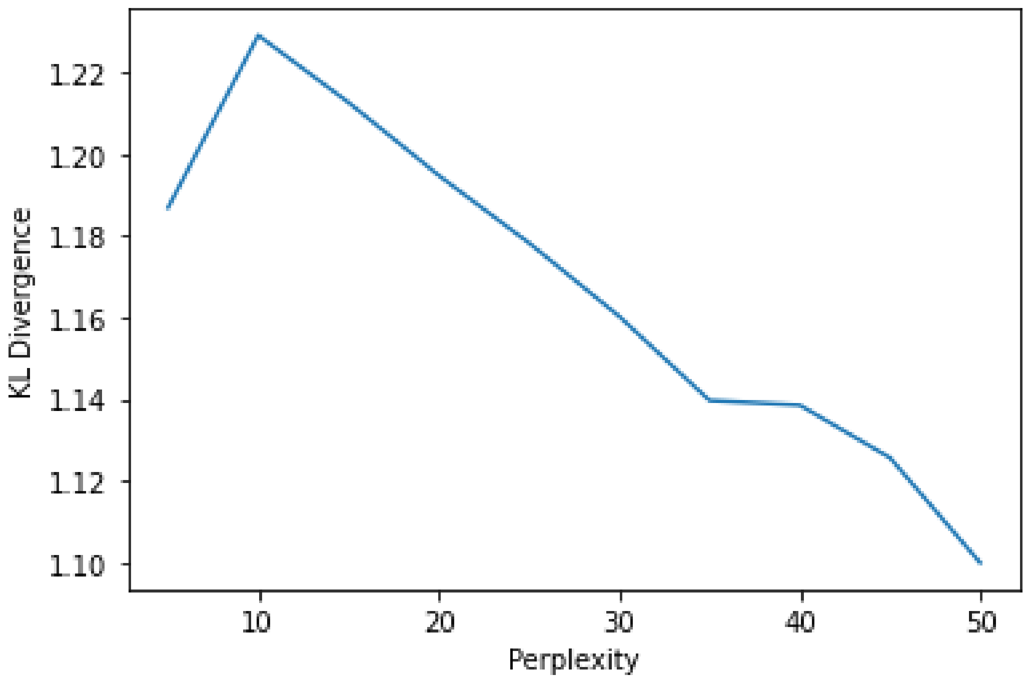
```
from sklearn.datasets import fetch_openml

mnist = fetch_openml('mnist_784', as_frame=False)

X = mnist.data
y = mnist.target.astype(np.uint8)

X.shape, y.shape
```

```
C:\Users\msubr\Anaconda3\lib\site-packages\sklearn\datasets\_openml.py:1022: FutureWarning: T
  warn(
```

```
((70000, 784), (70000,))
```

Tenemos 70k ejemplos de 784 dimensiones cada uno. El método requiere el parámetro de las dimensiones de salida, vamos a usar `n_components=2`. Otro parámetro es la perplejidad. Vamos a iterar variando desde 5 hasta 50 la perplejidad en una muestra de 2k puntos. Vamos a graficar la métrica KL para elegir la perplejidad que tenga la KL más chica.

```
kl = []
for i in range(5, 55, 5):
    tsne = TSNE(n_components=2, perplexity=i)
    X_tsne = tsne.fit_transform(X[0:2000])
    kl.append(tsne.kl_divergence_)
plt.plot(range(5, 55, 5), kl)
plt.xlabel("Perplexity")
plt.ylabel("KL Divergence")
plt.show()
```



Elejimos la perplejidad de 50 para nuestro conjunto de datos. Note que usamos 10k elementos porque no queremos que tarde mucho la ejecución.

```
st = time.time()
tsne = TSNE(n_components=2, perplexity=50)
X_tsne = tsne.fit_transform(X[0:10000])
print("Tiempo total:", time.time() - st)
```

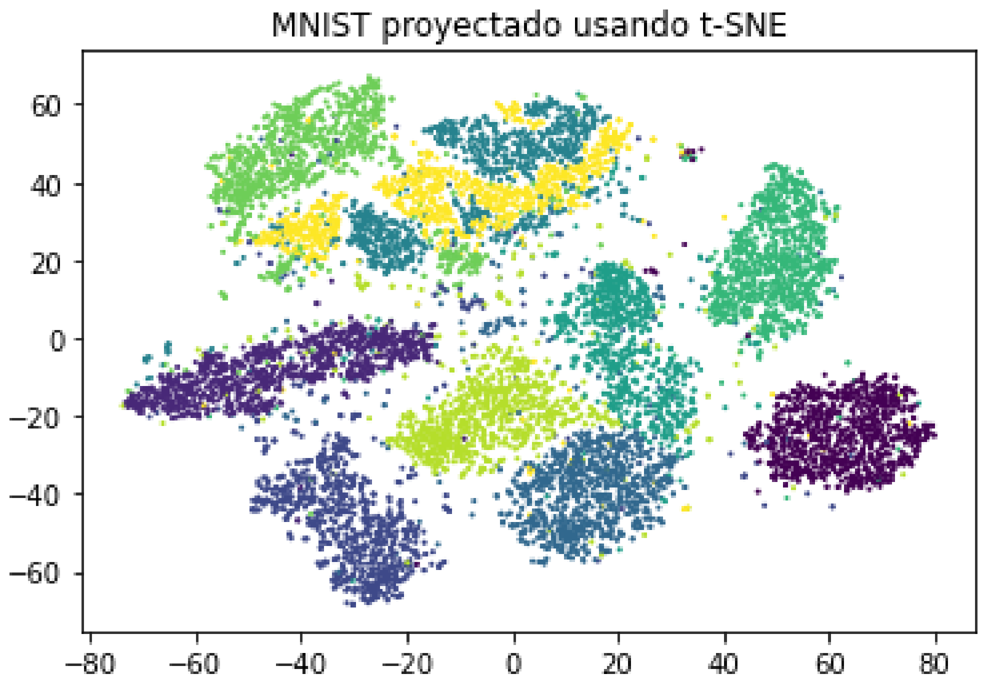
```
Tiempo total: 42.138206481933594
```

```
print("Tiene una KL de:", tsne.kl_divergence_)
```

```
Tiene una KL de: 1.6694427728652954
```

Graficamos los puntos proyectados en dos dimensiones.

```
plt.scatter(X_tsne[:, 0], X_tsne[:, 1], c=y[0:10000], s=1)
plt.title("MNIST proyectado usando t-SNE")
plt.show()
```



Actividad: Modifique el parámetro de perplejidad y compare los resultados.

Usando PCA + t-SNE

Debido a la complejidad de t-SNE, se puede combinar con otra técnica como PCA para disminuir el tamaño de los datos antes de aplicar t-SNE. Esto se muestra en el siguiente ejemplo. Note que el resultado final es muy parecido al usar los datos crudos.

```python
from sklearn.decomposition import PCA
pca = PCA(n_components=50)
X_pca = pca.fit_transform(X[0:10000])
X_pca.shape
```

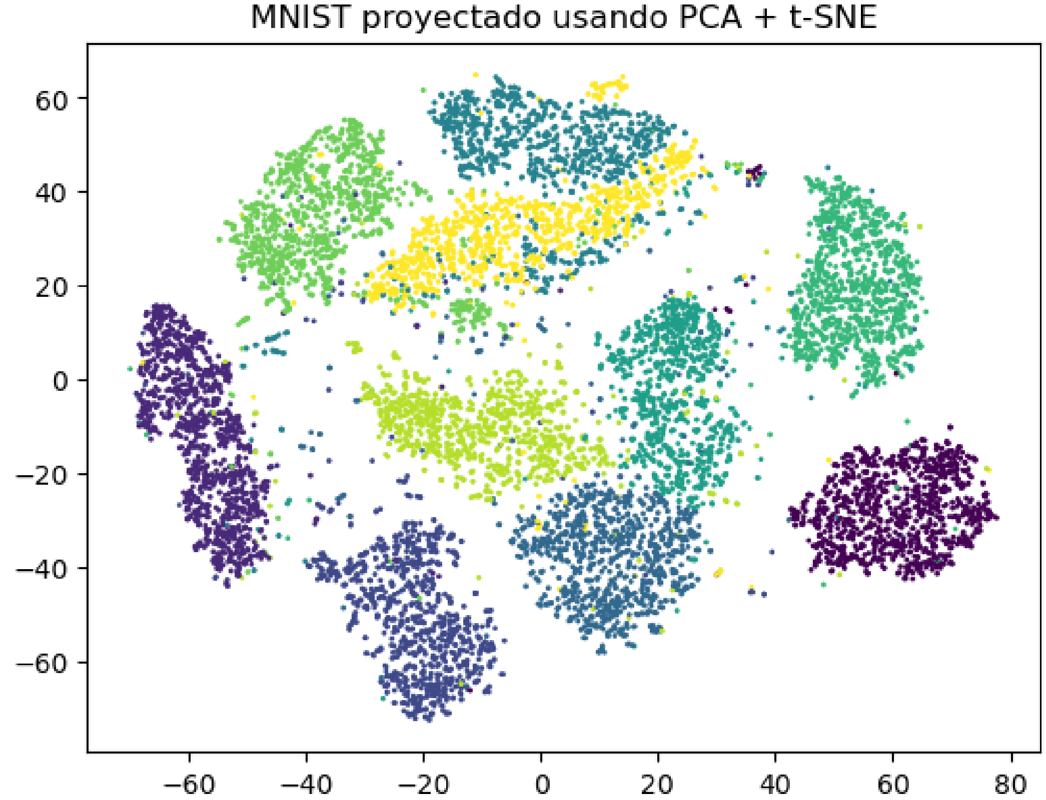
```
(10000, 50)
```

```python
st = time.time()
tsne = TSNE(n_components=2, perplexity=50)
X_tsne = tsne.fit_transform(X_pca)
print("Tiempo total:", time.time() - st)
print("Tiene una KL de:", tsne.kl_divergence_)
```

```
Tiempo total: 41.144171714782715
```

```
1.6148852109909058
```

```python
plt.scatter(X_tsne[:, 0], X_tsne[:, 1], c=y[0:10000], s=1)
plt.title("MNIST proyectado usando PCA + t-SNE")
plt.show()
```


MNIST proyectado usando PCA + t-SNE
60
40
20
0
−20
−40
−60
−60
−40
−20
0
20
40
60
80