

Analyse des UMAP Verfahrens

Christopher Reiners

Geboren am 9. April 1998 in Detmold

6. August 2019

5

Bachelorarbeit Mathematik

Betreuer: Prof. Dr. Jochen Garcke

Zweitgutachter: Dr. Bastian Bohn

MATHEMATISCHES INSTITUT FÜR NUMERISCHE SIMULATION

MATHEMATISCH-NATURWISSENSCHAFTLICHE FAKULTÄT DER
RHEINISCHEN FRIEDRICH-WILHELMS-UNIVERSITÄT BONN

Inhaltsverzeichnis

10	1 Einleitung	1
	1.1 Datenanalyse	1
	1.2 Dimensionsreduktion / Problemstellung	2
	1.3 Ziele der Arbeit	2
	1.4 Eigene Beiträge	2
15	1.5 Aufbau der Arbeit	2
	1.6 Vergleich mit Original Paper	3
	1.7 Danksagung	3
	2 Grundlagen	5
	2.1 Topologische Räume	5
20	2.2 Kategorientheorie	7
	2.3 Simpliziale Mengen	10
	3 UMAP	11
	3.1 Topologische Repräsentation	11
	3.2 Ergänzungen	12
25	4 Implementierung	13
	4.1 Numerische Formulierung der Optimierung	13
	4.2 Pseudo-Code	15
	4.3 Spektrale Einbettung	15
	4.4 Profiling	16
30	4.5 Gradientenverfahren	16
	4.6 Nächste-Nachbarn-Klassifikation	17
	4.7 Hyperparameter	18
	5 Experimente	19
	5.1 Alternative Verfahren	19
35	5.1.1 t-SNE	19
	5.1.2 TriMap	20
	5.2 Bewertung der Ergebnisse	20
	5.3 Cartoon Set	21
	5.4 MNIST	22
40	5.5 Laufzeitanalyse	22
	5.6 Stabilität unter sub-sampling	23
	5.7 Zusammenfassung der Ergebnisse	23
	6 Zusammenfassung und Ausblick	25
	Literatur	27

45 Kapitel 1

Einleitung

Wer eine Tageszeitung aufschlägt oder sie beim Frühstück auf seinem Tablett liest, wird nicht vermeiden können, mindestens einen Artikel über die „Algorithmen der Zukunft“, „Daten hungrigen Konzerne“, ... zu lesen. Fakt ist heutzutage werden mehr
 50 Daten generiert und gespeichert als je zuvor in der Geschichte der Menschheit und wir benötigen aussagekräftige, schnelle und zuverlässige Verfahren um die gesammelten Daten auszuwerten, zu strukturieren und einen Mehrwert für die Gesellschaft zu generieren.

Wir werden uns in dieser Arbeit mit einer Klasse an Verfahren befassen, welche
 55 hochdimensionale Daten visualisiert. Insbesondere werden wir das UMAP (Uniform Manifold Approximation and Projection) Verfahren

1.1 Datenanalyse

Eine neuere Form der Datenanalyse - die topologische Datenanalyse (*kurz: TDA*) - nutzt mathematische Instrumente des Teilgebiets der Topologie (*griechisch: Lehre vom*
 60 *Ort/Platz*) um Daten zu beschreiben und zu strukturieren.

Wir beschreiben die Situation einen Datensatz X zu analysieren wie folgt. Wir betrachten einen D -dimensionalen Raum und ein Objekt K . In unserem Fall werden wir uns größtenteils mit dem euklidischen Raum \mathbb{R}^D versehen mit der euklidischen Norm $\|\cdot\|$ beschäftigen.

K kann beispielsweise eine geschlossene Menge sein. Die genaue Struktur von K
 65 bleibt uns allerdings unbekannt. Später werden wir argumentieren, dass K gewisse Regularitätseigenschaften erfüllt und in vielen Fällen lokal einem niedrigdimensionalen Raum \mathbb{R}^d , ($d \ll D$) gleicht.

Statt K ist uns eine endliche Menge an N Punkten $X = \{x_i\}_{i=1}^N$, ($x_i \in \mathbb{R}^D$), gege-
 70 ben. X wird als *Punktwolke* bezeichnet und beschreibt in einem Experiment gemessene Daten, beispielsweise Sensormessdaten, biologische Informationen oder Bilddatensätze.

In Kapitel 5 werden wir uns mit einem Bilddatensatz mit 100 000 Farbbildern mit einer Auflösung von 300×300 Pixeln beschäftigen. Wir können diesen Datensatz
 75 als $N = 100\,000$ -elementige Punktwolke im $\mathbb{R}^{300 \times 300 \times 4}$ auffassen, wobei wir die vier Farbkanaäle der Bilder berücksichtigen.

Wir gehen dabei davon aus, dass K und X in einem gewissen Sinne „ähnlich“ sind. Nun ist es Ziel der TDA mittels Methoden der Topologie Aussagen über die Struktur von X zu treffen, welche, aufgrund der Ähnlichkeit, auch für K gelten sollen.
 80 Die K zugrundeliegende Struktur kann uns dann dabei helfen Aussagen über weitere gemessene Daten zu treffen, da diese auch in der uns unbekannten Menge K liegen sollten. Zusätzlich hilft

1.2 Dimensionsreduktion / Problemstellung

Sei $X = \{x_i\}_{i=1}^N$, ($x_i \in \mathbb{R}^D$) wir bezeichnen D als die Dimension unserer Daten, beziehungsweise als die Anzahl der gemessenen Eigenschaften. N ist die Anzahl der verfügbaren Datenpunkte. In der Praxis können D und N sehr groß sein. So gilt für den Bilddatensatz welchen wir in Kapitel 5 betrachten werden, $N = 100\,000$, $D = 360\,000$.

Eine Herangehensweise die d -dimensionale Repräsentation zu finden ist es eine $N \times N$ Matrix M aufzustellen, die ersten d Eigenvektoren von M , wobei die Eigenvektoren absteigend nach der Größe der zugehörigen Eigenvektoren geordnet sind, geben

Hier sollen die zwei Arten an DR Algorithmen vorgestellt werden (Matrix-Faktorisierung und Graph Layout). Zusätzlich sollen PCA, Isomap, Laplacian Eigenmaps und t-SNE vorgestellt werden.

Die meisten Verfahren zur Dimensionsreduktion beruhen auf der Annahme, dass reale hochdimensionale Daten sich in der Umgebung einer niedrigdimensionalen Mannigfaltigkeit konzentrieren. In der Literatur ist diese Annahme als Mannigfaltigkeit-Hypothese (*engl.: manifold hypothesis*) bekannt [22, 27]. Ansätze um einen gegebenen Datensatz auf diese Annahme zu testen finden sich in [6].

1.3 Ziele der Arbeit

1.4 Eigene Beiträge

Wir möchten nun die Ziele dieser Arbeit formulieren.

- Einführung in die grundlegenden Werkzeuge der topologischen Datenanalyse
- Mögliche Schritte wie die Lücke zwischen Theorie und Praxis des UMAP Verfahrens geschlossen werden kann
- UMAP anhand sinnvoller Datensätze mit anderen Dimensionsreduktionsverfahren vergleichen
-

Insbesondere werden wir die in Kapitel 2 von [18] beschriebene Theorie ausführlicher beschreiben und in einen allgemeineren Kontext setzen.

1.5 Aufbau der Arbeit

In Kapitel 2 werden wir die theoretische Grundlage des UMAP Verfahrens erklären. Dies wird einige Definitionen und Grundlagen aus der Kategorientheorie und der (Algebraischen-)Topologie erfordern. Wir haben mich bemüht diese möglichst vollständig darzustellen. Für zusätzliche Informationen empfiehlt sich [3, 2, 21].

Kapitel 3 wird die Theorie des UMAP Verfahrens darstellen. Dabei werden wir auf die in 2 gelegten Grundlagen zurückgreifen. Zusätzlich soll argumentiert werden, dass eine praktische Implementierung wie sie in der Theorie beschrieben ist zu rechenaufwendig ist und somit wenig praktischen nutzen hat. Deshalb

120 1.6 Vergleich mit Original Paper

1.7 Danksagung

Ich bin den Personen sehr dankbar und verbunden welche mich auch dem Weg zu dieser Arbeit begleitet haben.

125 Zuerst möchte ich Annalena Lange, Lennard Schiefelbein und Nico Gerber für die vielen anregenden Gespräche danken und Hendrik Baers und Tobias Bork, welche die letzten drei Jahre zu einer spannenden und herausfordernden Studienzeit gemacht haben.

130 Besonderer Dank gilt Prof. Dr. Jochen Garcke für das sehr interessante Thema und die wegweisende Betreuung. Gerne möchte ich auch Leland McInnes für das persönliche Gespräch in Ottawa, Kanada danken. So konnte ich die Motivation, welche er für das UMAP Verfahren hatte, aus erster Hand erfahren.

Zum Schluss meiner Familie und Freunden für Ihre bedingungslose Unterstützung.

Kapitel 2

Grundlagen

135 Um die Geometrie „mathematischer Räume“ zu beschreiben, ist es aus topologischer Sicht ausreichend, die „Löcher“ der Räume zu charakterisieren. Um diese Aussage zu formalisieren, und damit die Grundlage für das UMAP-Verfahren zu legen, werden wir einige Begriffe aus der (algebraischen) Topologie benötigen.

Die grundlegenden Definitionen *topologischer und metrischer Räume* werden uns 140 helfen (*riemannsche*) *Mannigfaltigkeiten* einzuführen. Der Begriff der Mannigfaltigkeit formalisiert den niedrigdimensionalen Raum auf welchem unsere Daten liegen.

Die geometrische Struktur dieser Räume werden wir mit Hilfe der *Homologie* einführen und sehen wie diese visuelle Eigenschaften beschreibt. Um diese strukturelle Darstellung auf eine endliche Punktwolke anwenden zu können, werden wir den Begriff 145 der *persistenten Homologie* einführen müssen.

Die Begriffe und benötigten Aussagen werden vollständig und anschaulich eingeführt. An einigen Stellen werden wir den Leser auf geeignete ergänzende Literatur verweisen.

2.1 Topologische Räume

150 Der Grundlegende Begriff der Topologie ist der des topologischen Raumes.

Definition 2.1 (Topologischer Raum). Eine Topologie ist ein Mengensystem T ...

Man kann den Begriff erweitern indem man einen Abstandsbegriff auf der Menge X definiert. Dies führt uns zum metrischen Raum.

Definition 2.2 (Metrischer Raum). Eine Metrik ist eine Abbildung,...

155 In der Einleitung bereits erwähnt, werden wir annehmen, dass unsere Daten $X = \{x_i\}_{i=1}^N$, ($x_i \in \mathbb{R}^D$) mit D gemessenen Eigenschaften mittels d , ($d \ll D$) Eigenschaften dargestellt werden können. Dies werden wir formalisieren indem wir Mannigfaltigkeiten einführen. Anschaulich ist eine d -dimensionale Mannigfaltigkeit ein topologischer Raum welcher lokal dem euklidischen Raum \mathbb{R}^d gleicht.

160 **Definition 2.3** (Mannigfaltigkeit). Sei \mathcal{M} ein topologischer Raum,...

Bemerkung. Eine *differenzierbare* Mannigfaltigkeit ist eine...

Beispiel 2.1. S^n ist eine n -dimensionale Mannigfaltigkeit im \mathbb{R}^{n+1} .

Unter der Annahme, dass wir nur d Eigenschaften benötigen um unsere Daten X darzustellen, können wir sagen, dass X eine d -dimensionale Mannigfaltigkeit im \mathbb{R}^D 165 ist. Wir können eine Mannigfaltigkeit \mathcal{M} mit einem Abstandsbegriff erweitern. Diese zusätzliche Regularitätseigenschaft ermöglicht es uns von Distanzen, Winkeln und Kurven auf \mathcal{M} zu sprechen. Diesen Abstandsbegriff nennen wir *riemannsche Metrik* und er ist wie folgt definiert:

Definition 2.4 (Riemannsche Mannigfaltigkeit). Sei g, \dots Ein Tupel (\mathcal{M}, g) , wobei
 170 \mathcal{M} eine Mannigfaltigkeit und g eine riemannsche Metrik ist heißt *riemannsche Mannigfaltigkeit*.

Bemerkung. Eine riemannsche Mannigfaltigkeit ist stets metrisierbar im Sinne, das ...

Bemerkung. Es ist sinnvoll in unserem Fall X als riemannsche Mannigfaltigkeit zu betrachten, da wir erwarten, wenn x_i Nahe bei x_j und x_k liegt, dass x_j auch Nahe
 175 bei x_j liegt. Wenn X einen Bilddatensatz beschreibt, nehmen wir an, dass eine kleine Veränderung im Bild den Inhalt nicht wesentlich ändert.

Die Riemannmetrik beschreibt eine Distanz auf der Mannigfaltigkeit. Die Länge eines kürzesten Weges auf \mathcal{M} zwischen zwei Punkten $p, q \in \mathcal{M}$ wird als Geodäte bezeichnet und ist definiert als

180 **Definition 2.5** (Geodäte). Seien $p, q \in \mathcal{M} \dots$

Der Begriff der riemannschen Mannigfaltigkeit ermöglicht es uns unsere zentrale Annahme, das $X \subseteq \mathbb{R}^D$ einer niedrigdimensionalen Struktur entnommen ist, zu formalisieren. Wir möchten nun diese niedrigdimensionale Struktur genauer beschreiben.

Eine bekannte Aussage, welche der Topologie entstammt, ist, dass eine Kaffeetas-
 185 se das Gleiche topologische Objekt wie ein Donut ist. Dies ist dadurch begründet, dass man eine Kaffeetasse durch strecken und stauchen (ohne reißen) in einen Donut transformieren kann. Diese „Gleichheit“ lässt sich wie folgt mathematisch darstellen:

Definition 2.6 (Stetige Abbildung). Sei ...

Definition 2.7 (Homöomorphismus). Sei ...

190 Nun werden wir den Begriff der Homologie einführen. Dafür werden wir den Begriff der simplizialen Komplexe benötigen um zuerst die simpliziale Homologie einzuführen.

Definition 2.8 (Simplizialer Komplex). Sei ...

Definition 2.9 (Abstrakter simplizialer Komplex). Sei ...

Definition 2.10 (Homologie). Sei ...

195 **Definition 2.11** (Homologiegruppe). Sei ...

Beispiel 2.2. Die Homologiegruppen eines Balls, Donuts, Graphen, ...

Definition 2.12 (Filtration). Sei $T \subseteq \mathbb{R}$, eine *Filtration* \mathcal{X} über T ist eine Familie von topologischen Räumen $\{X_i\}_{i \in T}$, so dass $X_i \subseteq X_j$ für $i \leq j \in T$.

Bemerkung. Eine Filtration \mathcal{X} wird meist nicht als Familie verschiedener topologischer Räume X_i angesehen, sondern als ein einziger Raum, welcher sich im Laufe
 200 der Zeit „transformiert“. Siehe dazu [24]. Dies stimmt mit unserem Bild überein, den ϵ -Parameter eines Čech-Komplexes immer größer werden zu lassen. Wir werden *persistente Homologie* nutzen um die homologischen Eigenschaften zu beschreiben, welche für alle $i \in T$ erhalten (bzw. persistent) bleiben.

205 **Beispiel 2.3.** Insbesondere ist somit der Čech-Komplex eine Filtration, da ...

Beispiel 2.4. Eine weitere Filtration ist der Vietoris-Rips-Komplex

Bemerkung. Der VR-Komplex ist ein Beispiel eines Clique-Komplexes und wird als solcher eindeutig durch sein 1-Skelet identifiziert. Sei V ein VR-Komplex und V^1 das zugehörige 1-Skelet. Dann erhält man V aus V^1 , indem man alle Cliquen im V^1
 210 zugrundeliegenden Graphen bestimmt. Eine k -Clique ist ein vollständiger Subgraph mit k Knoten.

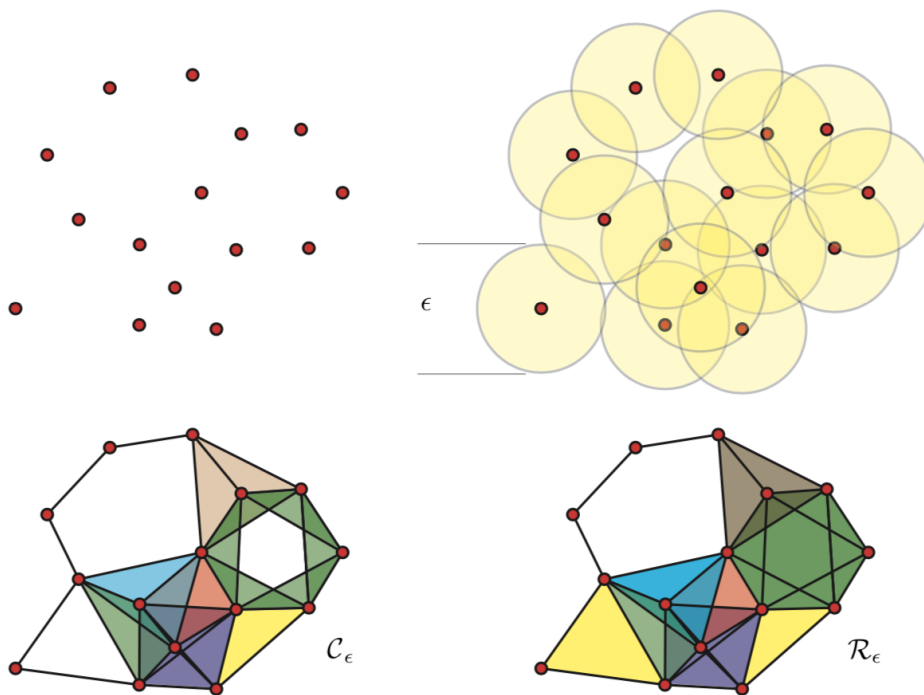


ABBILDUNG 2.1: Eine Punktwolke [oben links] kann zu einem Čech-Komplex [unten links] oder einem VR-Komplex [unten rechts] basierend auf dem Parameter ϵ konstruiert werden. Die Homotopietypen der $\epsilon/2$ Überdeckung vom Čech-Komplex $(S^1 \vee S^1 \vee S^1)$, während das VR-Komplex die Homotopietypen $(S^1 \vee S^2)$ besitzt. (Quelle: [8])

Es gibt weitere Formen von Komplexen, die bekanntesten sind die CW-Komplexe und Zellkomplexe. Ziel ist es stets mit Hilfe einfacher Konstrukte die Topologie eines Raums zu beschreiben.

215 Die vom Čech-Komplex und vom Vietoris-Rips-Komplex beschriebene Homologie kann sich unterscheiden.

Nerv Theorem. Sei ...

Wie wir sehen ist die Konstruktion stark abhängig vom ϵ -Parameter. Um dem entgegenzuwirken führt man die Idee der *persistenten Homologie* ein. Dabei betrachtet
220 man wie sich die Homologie eines Raumes für eine monoton wachsende Folge $(\epsilon_i)_{i \in \mathbb{N}}$ verhält.

2.2 Kategorientheorie

Die für die mathematischen Grundlagen des UMAP Verfahren benötigten Definitionen werde ich mithilfe der Kategorientheorie einführen. Diese sehr abstrakte Form
225 mathematische Objekte und Zusammenhänge zu formalisieren wurde erstmals in den 1940ern von Samuel Eilenberg und Saunders Mac Lane eingeführt. Die Definitionen sind dem Buch von Brandenburg [3] entnommen.

Definition 2.13 (Kategorie). Eine Kategorie \mathcal{C} besteht aus folgenden Daten:

1. Eine Klasse $Ob(\mathcal{C})$, deren Elemente wir *Objekte* nennen

- 230 2. zu je zwei Objekten $A, B \in \text{Ob}(\mathcal{C})$ einer Menge $\text{Hom}_{\mathcal{C}}(A, B)$, deren Elemente wir mit $f : A \rightarrow B$ notieren und *Morphismen* von A nach B nennen,
3. zu je drei Objekten $A, B, C \in \text{Ob}(\mathcal{C})$ einer Abbildung

$$\text{Hom}_{\mathcal{C}}(A, B) \times \text{Hom}_{\mathcal{C}}(B, C) \rightarrow \text{Hom}_{\mathcal{C}}(A, C)$$

die wir mit $(f, g) \mapsto g \circ f$ notieren und *Komposition von Morphismen* nennen,

4. zu jedem Objekt $A \in \text{Ob}(\mathcal{C})$ einen ausgezeichneten Morphismus

$$\text{id}_A \in \text{Hom}_{\mathcal{C}}(A, A),$$

welchen wir die *Identität* von A nennen.

Diese Daten müssen den folgenden Regeln genügen:

1. Die Komposition von Morphismen ist *assoziativ*: Für drei Morphismen der Form $f : A \rightarrow B$, $g : B \rightarrow C$, $h : C \rightarrow D$ in \mathcal{C} gilt

$$h \circ (g \circ f) = (h \circ g) \circ f$$

- 235 als Morphismen $A \rightarrow D$.

2. Die Identität sind *beidseitig neutral* bezüglich der Komposition: Für jeden Morphismus $f : A \rightarrow B$ in \mathcal{C} gilt

$$f \circ \text{id}_A = f = \text{id}_B \circ f$$

Bemerkung. Anstelle von $A \in \text{Ob}(\mathcal{C})$ schreibt man meistens $A \in \mathcal{C}$. Falls die Kategorie \mathcal{C} aus dem Kontext bekannt ist, werden wir $\text{Hom}_{\mathcal{C}}(A, B)$ mit $\text{Hom}(A, B)$ abkürzen.

Bemerkung. Eine Klasse ist eine Menge, welche zu groß ist um eine Menge zu sein. Für eine Definition einer Klasse verweisen wir auf [12]. In unseren Beispielen genügt
240 die Vorstellung einer Menge. Meist ist $\text{Ob}(\mathcal{C})$ sogar eine Menge. Dann spricht man formal von einer strikten kleinen Kategorie.

Insbesondere kann man für eine Kategorie \mathcal{C} und Objekte $A, B, C \in \mathcal{C}$ den *Hom-Funktor* definieren, indem man

$$\text{Hom}(-, B) : \mathcal{C} \rightarrow \mathbf{Set} \tag{2.1}$$

betrachtet. Der Hom-Funktor bildet ein Objekt $A \in \mathcal{C}$ auf die Menge der Morphismen
245 $\text{Hom}(A, B)$ ab, und einen Morphismus $h : A \rightarrow C$ auf die Funktion

$$\text{Hom}(h, B) : \text{Hom}(C, B) \rightarrow \text{Hom}(A, B), \text{ wobei } g \mapsto g \circ h \text{ für } g \in \text{Hom}(C, B) \tag{2.2}$$

Beispiel 2.5. *Passende Beispiele von Kategorien, welche später wieder genutzt werden.* **Top, Set**

Ein weiterer für die folgenden Definitionen wichtiger Begriff ist der der dualen Kategorie.

Definition 2.14 (Duale Kategorie). Es sei \mathcal{C} eine Kategorie. Dann können wir eine neue Kategorie \mathcal{C}^{op} konstruieren: Sie besitzt dieselben Objekte wie \mathcal{C} , allerdings werden die Morphismen „umgedreht“. Für $A, B \in \mathcal{C}$ sei

$$\text{Hom}_{\mathcal{C}^{op}}(A, B) := \text{Hom}_{\mathcal{C}}(B, A).$$

Die Identitäten verändern sich nicht. Die Komposition

$$\circ^{op} : \text{Hom}_{\mathcal{C}^{op}}(A, B) \times \text{Hom}_{\mathcal{C}^{op}}(B, C) \rightarrow \text{Hom}_{\mathcal{C}^{op}}(A, C)$$

ist durch

$$\text{Hom}_{\mathcal{C}}(B, A) \times \text{Hom}_{\mathcal{C}}(C, B) \cong \text{Hom}_{\mathcal{C}}(C, B) \times \text{Hom}_{\mathcal{C}}(C, B) \times \text{Hom}_{\mathcal{C}}(B, A) \xrightarrow{\circ} \text{Hom}_{\mathcal{C}}(C, A)$$

250 definiert, d.h. $f \circ^{op} g := g \circ f$. Auf diese Weise ist \mathcal{C}^{op} tatsächlich eine Kategorie und heißt die zu \mathcal{C} *duale Kategorie*.

Bemerkung. Eine Eigenschaft der dualen Kategorie ist, dass Aussagen, welche für alle Kategorien bewiesen wurden, auch für alle dualen Kategorien gelten.

Wir möchten nun den Begriff des Funktors zwischen zwei Kategorien einführen.
255 Ein Funktor ordnet Objekte einer Kategorie \mathcal{C} Objekten einer Kategorie \mathcal{D} zu, und entsprechend für Morphismen. Insbesondere bleibt die Eigenschaft der Isomorphie zwischen zwei Objekten erhalten.

Definition 2.15 (Funktor). Es seien \mathcal{C} und \mathcal{D} zwei Kategorien. Ein *Funktor*

$$F : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{D}$$

von \mathcal{C} nach \mathcal{D} besteht aus folgenden Daten:

1. für jedes Objekt $A \in \mathcal{C}$ ein Objekt $F(A) \in \mathcal{D}$,
2. für jeden Morphismus $f : A \rightarrow B$ in \mathcal{C} einen Morphismus

$$F(f) : F(A) \rightarrow F(B)$$

260 in \mathcal{D} .

Dabei soll gelten:

1. Für jedes Objekt $A \in \mathcal{C}$ ist $F(id_A) = id_{F(A)}$.
2. Für je zwei Morphismen $f : A \rightarrow B$, $g : B \rightarrow C$ in \mathcal{C} gilt in \mathcal{D} :

$$F(g \circ_{\mathcal{C}} f) = F(g) \circ_{\mathcal{D}} F(f)$$

Bemerkung. Bezüglich der Kategorie \mathcal{C} ist ein Funktor $F : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{D}$ kovariant, während $F : \mathcal{C}^{op} \rightarrow \mathcal{D}$ kontravariant (bzgl. \mathcal{C}) ist.

265 Eine häufig verwendete Form eines kontravarianten Funktors ist die Prägarbe (engl.: *presheaf*). Wir werden diesen Funktor später verwenden um *simpliciale Mengen* einzuführen.

Definition 2.16 (Prägarbe). Eine Prägarbe auf einer kleinen Kategorie \mathcal{C} ist ein Funktor

$$F : \mathcal{C}^{op} \rightarrow \mathbf{Set}$$

von der dualen Kategorie \mathcal{C}^{op} von \mathcal{C} in die Kategorie **Set** von Mengen.

Definition 2.17 (Prägarbenkategorie). Sei $\widehat{\mathcal{C}}$ die Prägarbenkategorie einer Kategorie \mathcal{C} : Objekte sind die Funktoren $F : \mathcal{C}^{op} \rightarrow \mathbf{Set}$, und Morphismen sind natürliche Transformationen der Funktoren.
270

Bemerkung. Allgemeiner kann man auch die Kategorie $[\mathcal{C}, \mathcal{D}]$ einführen, deren Objekte Funktoren $F : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{D}$ sind und deren Morphismen ebenfalls natürliche Transformationen der Funktoren sind.

275 2.3 Simpliciale Mengen

Simpliciale Mengen, . . .

Definition 2.18 (Simplexkategorie). Die Objekte der *Simplexkategorie* Δ sind die Mengen $[n] := \{0, 1, \dots, n\}$ für $n \in \mathbb{N}$, und Morphismen sind monoton wachsende Abbildungen.

Wir können die n -elementigen Mengen in Δ als geometrische n -Simplizes auffassen. Dazu betrachten wir den Funktor $|\cdot| : \Delta \rightarrow \mathbf{Top}$, gegeben durch

$$|\cdot| : [n] \mapsto |\Delta^n| := \left\{ (t_0, \dots, t_n) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid \sum_{i=0}^n t_i = 1, t_i \geq 0 \right\}$$

280 **Definition 2.19.** Eine *simpliciale Menge* ist ein Funktor $X : \Delta^{op} \rightarrow \mathbf{Set}$. Üblicherweise wird $X([n])$ als X_n geschrieben, und wir bezeichnen die Elemente $x \in X_n$ als n -Simplizes. Der n -dimensionale *Standardsimplex* ist

$$\Delta^n := \mathrm{Hom}(-, [n]).$$

Der Standardsimplex ist somit ein Hom-Funktor (siehe 2.1).

Kapitel 3

UMAP

285

In diesem Kapitel werden wir die aus 2 erlangten Grundlagen verwenden um eine geeignete topologische Repräsentation unserer Daten $X = \{x_i\}_{i=1}^N$, ($x_i \in \mathbb{R}^D$) zu erlangen. Eine ähnliche Repräsentation werden wir von einem d -dimensionalen Raum ($d \ll D$) betrachten, um dann mit einem geeigneten Begriff des Abstandes der beiden Repräsentationen die niedrigdimensionale Repräsentation der hochdimensionalen anzupassen. Dies wird uns zum UMAP Verfahren führen.

290

3.1 Topologische Repräsentation

Blabla bla

Fluch der Dimensionen

Ein kritischer Punkt beim analysieren hochdimensionaler Daten ist der sogenannte Fluch der Dimensionen. Was das bedeutet und wie das UMAP Verfahren macht um diesen zu vermeiden werde ich im Folgenden kurz erklären. Unter dem Fluch der Dimensionen versteht man.

Abbildung 3.1 kann man zwei interessante Aussagen über den Fluch der Dimensionen entnehmen.

300

1. Die paarweisen euklidischen Distanzen steigen mit zunehmender Größe der Dimensionen.
2. Die paarweisen Distanzen sind ungefähr normalverteilt, wobei die Varianz der Normalverteilung für höhere Dimensionen abnimmt. Dadurch sind die Distanzen eines Punktes zu seinen ersten, zweiten, ... k-ten Nachbarn im hochdimensionalen Raum annähernd gleich.

305

Um dieses Phänomen zu vermeiden nutzt das UMAP Verfahren eine Normalisierung der Distanzen mit dem ersten Nachbarn. So werden die relativen Distanzen zwischen den k-nächsten-Nachbarn größer, siehe

Um die niedrigdimensionale Repräsentation der hochdimensionalen anzupassen wird für das UMAP Verfahren die Kreuzentropie zwischen zwei unsicheren (simplicialen) Mengen vorgeschlagen.

310

$$C((A, \mu), (A, \nu)) := \sum_{a \in A} \left(\mu(a) \log \left(\frac{\mu(a)}{\nu(a)} \right) + (1 - \mu(a)) \log \left(\frac{1 - \mu(a)}{1 - \nu(a)} \right) \right) \quad (3.1)$$

In Abschnitt 4.1 werden wir die Kreuzentropie genauer betrachten.

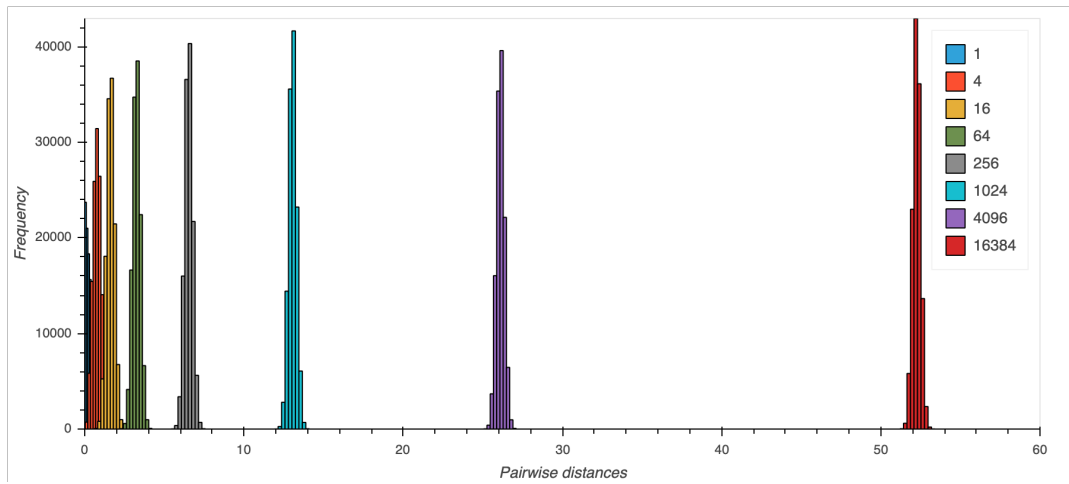


ABBILDUNG 3.1: Paarweise Distanzen von $N = 500$ zufällig gleichverteilten Punkten im R^D .

3.2 Ergänzungen

Kapitel 4

Implementierung

In diesem Kapitel möchten wir die Implementierung des UMAP Verfahren beschreiben. Die vollständige Berechnung aller Simplizes hat eine exponentielle Laufzeit, da hierfür alle 2^N Teilmengen unseres N -elementigen Datensatzes betrachtet werden müssten. In aktuellen Implementierungen werden hingegen nur alle zweielementigen Teilmengen betrachtet. Wie wir in Kapitel 5 sehen werden, liefert uns diese Approximation des Čech-Komplexes sehr gute visuelle Ergebnisse. In Kapitel 6 werden wir Ansätze erwähnen um Simplizes höherer Ordnungen effizient zu finden.

Zunächst werden wir die Notation aus Kapitel 3 anpassen, da wir nur das 1-Skelett der topologischen Repräsentationen betrachten. Danach werden wir die Zielfunktion explizit angeben und den Gradienten herleiten. In Abschnitt 4.2 werden wir den UMAP Algorithmus im Pseudo-Code angeben. Die darauf folgenden Abschnitte identifizieren rechenintensive Schritte der von uns verwendeten Implementierung [19] und beschreiben Alternativen. Abschnitt 4.7 gibt eine Beschreibung der Hyperparameter an.

4.1 Numerische Formulierung der Optimierung

Um eine Unterscheidung zwischen der theoretischen Sichtweise auf das UMAP Verfahren, welche alle k -Simplizes ($1 \leq k \leq N$) berücksichtigt, und der praktischen Implementierung zu verdeutlichen, werden wir die verwendete Notation anpassen.

Die unsicheren Mengen $(A, \mu), (A, \nu)$ aus Gleichung (3.1) lassen sich als gewichtete Graphen, in Form einer Adjazenzmatrix darstellen. Das 1-Skelett der hochdimensionalen Repräsentation notieren wir als Adjazenzmatrix V mit $v_{ij} = \mu(a)$, für ein 1-Simplex a , mit Facetten i und j .

Die Wahl des Zugehörigkeitsgrades für 1-Simplizes der niedrigdimensionalen Repräsentation der Daten ist wie folgt gegeben:

$$w_{ij} = (1 + a(\|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|_2^2)^b)^{-1}, \quad (4.1)$$

wobei $\mathbf{y}_i, 1 \leq i \leq N$ die Vektoren der Einbettung sind. Die Wahl der Werte a, b werden wir in Abschnitt 4.7 beschreiben.

Somit erhalten wir folgende Kreuzentropie zwischen den Graphen der hoch- und niedrigdimensionalen Darstellung der Daten:

$$C(V, W) = \sum_{i,j=1}^N v_{ij} \log \left(\frac{v_{ij}}{w_{ij}} \right) + (1 - v_{ij}) \log \left(\frac{1 - v_{ij}}{1 - w_{ij}} \right) \quad (4.2)$$

$$= \sum_{i,j=1}^N (v_{ij} \log(v_{ij}) + (1 - v_{ij}) \log(1 - v_{ij})) \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} & - \sum_{i,j=1}^N (v_{ij} \log(w_{ij})) - \sum_{i,j=1}^N ((1 - v_{ij}) \log(1 - w_{ij})) \\ & = C_v - \sum_{i,j=1}^N (v_{ij} \log(w_{ij}) + (1 - v_{ij}) \log(1 - w_{ij})) \end{aligned} \quad (4.4)$$

345 Der Term C_v bleibt während der Minimierung der Funktion bezüglich der \mathbf{y}_i konstant.

Aufgrund der Wahl einer differenzierbaren Funktion für den Zugehörigkeitsgrad der 1-Simplizes, bzw. der Gewichte des niedrigdimensionalen Graphen, lässt sich nun der Gradient der Zielfunktion (4.4) herleiten.

350 Mittels der Kettenregel ergibt sich mit $d_{ij} := \|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|_2$:

$$\frac{\partial C}{\partial \mathbf{y}_i} = \sum_{k,l=1}^N \frac{\partial C}{\partial w_{kl}} \sum_{m,n=1}^N \frac{\partial w_{kl}}{\partial d_{mn}^2} \sum_{p,q=1}^N \frac{\partial d_{mn}^2}{\partial d_{pq}} \frac{\partial d_{pq}}{\partial \mathbf{y}_i} \quad (4.5)$$

$$= \sum_{k,l=1}^N \frac{\partial C}{\partial w_{kl}} \sum_{m,n=1}^N \frac{\partial w_{kl}}{\partial d_{mn}^2} \frac{\partial d_{mn}^2}{\partial d_{mn}} \frac{\partial d_{mn}}{\partial \mathbf{y}_i} \quad (4.6)$$

$$= 2 \sum_{k,l=1}^N \frac{\partial C}{\partial w_{kl}} \sum_{m=1}^N \frac{\partial w_{kl}}{\partial d_{mi}^2} \frac{\partial d_{mi}^2}{\partial d_{mi}} \frac{\partial d_{mi}}{\partial \mathbf{y}_i} \quad (4.7)$$

$$= 2 \sum_{m=1}^N \left(\sum_{k,l=1}^N \frac{\partial C}{\partial w_{kl}} \frac{\partial w_{kl}}{\partial d_{mi}^2} \right) \frac{\partial d_{mi}^2}{\partial d_{mi}} \frac{\partial d_{mi}}{\partial \mathbf{y}_i} \quad (4.8)$$

$$= 4 \sum_{m=1}^N \left(\sum_{k,l=1}^N \frac{\partial C}{\partial w_{kl}} \frac{\partial w_{kl}}{\partial d_{mi}^2} \right) (\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_m) \quad (4.9)$$

Bei der Umformung von (4.8) nach (4.9) haben wir verwendet, dass d_{mi} die euklidische Norm ist. Für Einbettungen in andere metrische Räume müsste der Gradient an dieser Stelle entsprechend angepasst werden. Da wir das UMAP Verfahren im wesentlichen zur Visualisierung im \mathbb{R}^2 benutzen ist die Wahl der euklidischen Norm 355 gerechtfertigt. Die übrigen Umformungen ergeben sich aus umordnen und wegfallen der Terme.

(4.9) lässt sich weiter umformen, dazu nutzen wir:

$$\frac{\partial C}{\partial w_{ij}} = -\frac{v_{ij}}{w_{ij}} + \frac{1 - v_{ij}}{1 - w_{ij}} = \frac{w_{ij} - v_{ij}}{w_{ij}(1 - w_{ij})} \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial w_{ij}}{\partial d_{ij}^2} = -\frac{b}{d_{ij}^2} w_{ij}^2 = -\frac{b}{d_{ij}^2} w_{ij}(1 - w_{ij}) \quad (4.11)$$

Der UMAP Gradient ist also gegeben durch:

$$\frac{\partial C}{\partial \mathbf{y}_i} = 4 \sum_{j=1}^N (w_{ij} - v_{ij}) \frac{b}{d_{ij}^2} (\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j) \quad (4.12)$$

4.2 Pseudo-Code

360 Nun können wir das UMAP Verfahren für die 1-Skelette der topologischen Repräsentation angeben.

Algorithm 1 UMAP Algorithmus

```

1: function UMAP( $X, N, D, d, min\_dist, n\_epochs$ )
2:   for  $x \in X$  do
3:      $knn(x) \leftarrow k$ -nächste-Nachbarn( $x$ )
4:      $graph(x) \leftarrow \perp_{y \in knn(x)}(\{x, y\}, exp(-d_{x,y})) \perp \perp_{y \in X \setminus \{x\}}(\{x, y\}, 0)$ 
5:    $V \leftarrow$  gewichtete Adjazenzmatrix( $\bigcup_{x \in X} graph(x)$ )
6:    $D \leftarrow$  Grad-Matrix des Graphen  $V$ 
7:    $L \leftarrow D^{1/2}(D - V)D^{1/2} \rightarrow$  Symmetrische normalisierte Laplace-Matrix
8:    $evect \leftarrow$  sortierte Eigenvektoren von  $L$ 
9:    $Y \leftarrow evect[1, \dots, d+1]$ 
10:   $Y \leftarrow$  OPTIMIEREEINBETTUNG( $Y, min\_dist, n\_epochs$ )  $\rightarrow$  siehe Algorithmus 2
11:  return  $Y$ 

```

In Abschnitt 4.6 werden zwei effiziente Verfahren für die k-nächste-Nachbarn Suche (Zeile 3) angegeben.

Der in Zeile 4 verwendete \perp Operator verdeutlicht, dass wir die Kantengewichte mittels wahrscheinlichkeitstheoretischer t-Conorm vereinigen. In den von uns verwendeten Implementierung des UMAP Verfahrens [19, 23] wird ein zusätzlicher Hyperparameter verwendet, welcher eine Verallgemeinerung der Vereinigung darstellt (siehe: `set_op_mix_ratio` in Abschnitt 4.7). Zusätzlich ist zu beachten, dass die Vereinigung in Zeile 4 ungerichtete Kanten betrachtet. Der so erhaltene ungerichtete Graph besitzt aufgrund der Symmetrie der t-Conorm wohldefinierte Kantengewichte.

Die Grad-Matrix D (Zeile 6) ist eine Diagonalmatrix, wobei $d_{ii} := \sum_{1 \leq k \leq N} v_{ik}$, ($1 \leq i \leq N$). Für den Spezialfall, der ungewichteten Adjazenzmatrix, beschreibt d_{ii} also den Grad des Knoten i .

Die Initialisierung der niedrigdimensionalen Repräsentation Y in Zeile 9 ist die spektrale Einbettung des Graphen. Eine genauere Beschreibung warum die so gewählte Initialisierung sinnvoll ist findet sich in Abschnitt 4.3. Dabei ist zu beachten, dass eine Lösung des Eigenwertproblems nur von der Größe der Einbettungsdimension abhängig ist. Da wird stets $d \ll D$ betrachten ist eine effiziente Implementierung mittels sukzessiver Eigenwertsuche möglich.

4.3 Spektrale Einbettung

Der Laplace Operator ist eine diskrete Approximation des Laplace-Beltrami Operators. Spektrale Einbettung ...

D	Laufzeit NN-Descent	Laufzeit der Optimierung
100	9%	75,3%
500	12%	73,8%
1000	14%	72,9%
5000	30,4%	58%
10000	44%	45,1%
50000	78,8%	14,8%

TABELLE 4.1: D beschreibt die Größe der Umgebungsdimension. Abhängig von D haben wir die Laufzeit des UMAP Verfahrens profiliert. Die zweite und dritte Spalte beziehen sich auf die relativen Laufzeiten des kNN Verfahrens und der Optimierung der Einbettung.

4.4 Profiling

In Kapitel 5 werden wir genauer auf die tatsächliche Laufzeit des UMAP Algorithmus eingehen. An dieser Stelle möchten wir die rechenintensiven Subroutinen des Verfahrens ausmachen. Dafür haben wir den Python cProfiler verwendet, dieser misst die Laufzeit der aufgerufenen Funktionen. Um für verschiedene Umgebungsdimensionen vergleichbare Ergebnisse zu erhalten, haben wir $N = 10\,000$ Datenpunkte in 10 unterschiedlichen $D = [100, 500, 1000, 5000, 10000, 50000]$ -dimensionalen Gauß-verteilten Datenwolken gewählt. Diese Daten wurden dann in den zweidimensionalen Raum eingebettet.

Dabei ist uns aufgefallen, dass besonders der k-nächste-Nachbarn-Algorithmus und die Optimierung mittels stochastischem Gradienten Verfahren einen großen Teil der Laufzeit des Verfahrens beanspruchen. In Tabelle 4.1 sind die Ergebnisse der Profilerung zusammengefasst. Insbesondere scheint die k-nächste-Nachbarn Suche die Laufzeit des UMAP Verfahren für hochdimensionale Daten stark zu beeinflussen. Wir werden beide rechenintensiven Subroutinen im folgenden betrachten und geeignete Verbesserungen diskutieren.

4.5 Gradientenverfahren

Um die Zielfunktion (4.4) zu optimieren bietet sich die Wahl eines Gradientenverfahrens an, da eine differenzierbare Approximation des Zugehörigkeitsgrades (siehe Gleichung 4.1) gegeben ist.

In den vergangenen Jahren gab es viele Weiterentwicklungen, insbesondere bezüglich der Konvergenzgeschwindigkeit, von Gradientenverfahren. Diese werden unter anderem für das trainieren neuronaler Netzwerke bei der Backpropagation genutzt. In [15] werden verschiedene Implementierungen verglichen.

Um den Rechenaufwand im Gradientenverfahren zu verringern, wird der Gradient in zwei Summanden aufgeteilt. Dabei wird folgende Beobachtung genutzt: Für Kanten $\{i, j\}$ mit einem hohen Zugehörigkeitsgrad ($v_{ij} \approx 1$) ist der Term $(1 - v_{ij}) \log(1 - w_{ij})$ aus Gleichung (4.4) nahe Null, deshalb ist es sinnvoll nur den Gradienten des Terms $v_{ij} \log(w_{ij})$ zu betrachten. Für Kanten mit $v_{ij} \approx 0$ sollte hingegen der Gradient des Terms $(1 - v_{ij}) \log(1 - w_{ij})$ betrachtet werden. Für das UMAP Verfahren wird deswegen folgende Implementierung vorgeschlagen:

Die in Zeile 5 beschriebene Ziehung der Stichprobe dient dazu in Zeile 6 keine zusätzliche Multiplikation mit v_{ij} zu machen. Diese Idee entstammt [29]. Dadurch wird der Gradient nicht durch den Wert von v_{ij} beeinflusst.

Algorithm 2 Optimierte die Einbettung mittels modifiziertem SGD

```

1: function OPTIMIEREEINBETTUNG( $Y, V, W, n\_epochs$ )
2:    $\alpha \leftarrow 1.0$ 
3:   for  $e \leftarrow 1, \dots, n\_epochs$  do
4:     for all  $v_{ij}$  do
5:       if  $\text{Random}() \leq v_{ij}$  then
6:          $\mathbf{y}_i \leftarrow \mathbf{y}_i + \alpha \cdot \nabla(\log(w_{ij}))$ 
7:         for  $l \leftarrow 1, \dots, n\_neg\_samples$  do
8:            $m \leftarrow \text{Unif}((0, N))$ 
9:            $\mathbf{y}_i \leftarrow \mathbf{y}_i + \alpha \gamma \cdot \nabla(\log(1 - w_{im}))$ 
10:    $\alpha \leftarrow 1.0 - e/n\_epochs$ 
11: return  $Y$ 

```

Das in jedem Durchlauf des modifizierten SGD mehrere *negative samples* betrachtet werden geht auch [20] zurück. Im wesentlichen verhindert dies, dass sich die Vektoren der niedrigdimensionalen Darstellung häufen. Die dabei $(0, N)$ -gleichverteilt gezogene Stichprobe ist eine Modifizierung von [30].

Der Gradient in Zeile 6 ist gegeben durch:

$$\nabla(\log(w_{ij})) = \frac{-2ab\|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|_2^{2(b-1)}}{(1 + a(\|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|_2^2)^b)^{-1}}(\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j) \quad (4.13)$$

und der Gradient in Zeile 9 durch:

$$\nabla(1 - \log(w_{ij})) = \frac{2b}{(\epsilon + \|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|_2^2)(1 + a\|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|_2^{2b})}(\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j), \quad (4.14)$$

wobei der ϵ -Parameter eine Division mit Null vermeidet.

4.6 Nächste-Nachbarn-Klassifikation

Zum effizienten finden der 1-Simplizes der topologischen Repräsentation unserer Daten, benötigen wir einen k-nächste-Nachbarn-Algorithmus (kurz: *kNN-Algorithmus*).

Das Ergebnis eines kNN-Algorithmus wird meist in einem ungerichteten Graph – dem kNN-Graph – dargestellt, wobei die Knoten den Datenpunkten entsprechen und die Kanten den Nachbarschaftsbeziehungen, somit besitzt jeder Knoten Grad k .

Bei einer naiven Implementierung beträgt die Laufzeit $\mathcal{O}(N^2D)$ (wobei N die Anzahl der Datenpunkte und D die Dimension der Datenpunkte ist). Mit einer effizienten Implementierung ist in der Praxis eine annähernd in N lineare Laufzeit möglich. Die Herangehensweisen lassen sich nach [30] in drei Kategorien einteilen. (1) Baum basierte Verfahren auf Partitionen des Raumes, (2) Hashfunktionen auf lokalen Teilgebieten des Raumes (3) Nachbarschafts-Erkundungen.

Wir möchten nun zwei Verfahren vorstellen.

NN-Descent

Der NN-Descent Algorithmus [5] beruht auf dem Prinzip der Nachbarschafts-Erkundungen.

Dabei wird ein initialer kNN-Graph iterativ verbessert, unter der Annahme, dass die Nachbarschaftsbeziehung transitiv ist, für zwei vorhandene Nachbarschaftspaare $(x, y), (y, z)$ also mit hoher Wahrscheinlichkeit auch ein Nachbarschaftspaar (x, z) im

kNN-Graph existiert. Der initiale Graph im NN-Descent Verfahren wird dabei zufällig gewählt. Dies kann dazu führen, dass nur lokal optimale k-NN-Graphen gefunden werden. Dies könnte laut [7] dadurch verbessert werden, indem für die Initialisierung

445 „random projection trees“, wie in [30], verwendet werden.

Ein Vorteil des NN-Descent Verfahren ist, dass kein globaler Index der verwaltet werden muss. Somit ist eine Anwendung auf großen Datensätzen möglich welche nicht komplett in den Arbeitsspeicher (RAM) des verwendeten Rechners geladen werden können.

450 Nachteil des NN-Descent Algorithmus ist die Speicherplatzkomplexität, diese ist durch $\mathcal{O}(N^2)$ beschränkt. Im wesentlichen ist dies dadurch begründet, dass paarweise die Ähnlichkeit, welche im Falle von UMAP durch die Metrik des Umgebungsraums gegeben ist, gespeichert wird. Aufgrund dessen, dass nur lokale Optima garantiert sind, ist das Ergebnis des NN-Descent Verfahren approximativ. In [18] wird jedoch argu-

455 mentiert, dass dies wegen des Informationsverlust bei Dimensionsreduktionen kaum Auswirkungen auf die resultierende Einbettung hat.

FAISS

Das FAISS Bibliothek [11] nutzt die Architektur einer GPU aus. Dabei baut FAISS eine effiziente Datenstruktur, welche für die Vektoren die nächsten Nachbarn speichert.

460 Somit ist eine sehr schnelle Implementierung für das aufstellen des k-NN-Graphen möglich.

Der RAM der meisten GPUs ist stark begrenzt. Um dennoch mit großen Datensätzen zu arbeiten werden komprimierte Darstellungen der Vektoren genutzt. Für FAISS werden „product quantization codes“ genutzt.

465 Vorteile der FAISS Datenstruktur sind die effiziente Implementierung auf GPUs und das sowohl exakte Ergebnisse sowie Approximationen für die nächsten Nachbarn angegeben werden können. Die Rückgabe approximativer Ergebnisse erhält Laufzeit sowie Speicherplatz Vorteile.

Nachteil des FAISS Verfahren ist, dass zurzeit nur die euklidische Distanz unter-

470 stützt wird.

4.7 Hyperparameter

- `n_neighbors`: beschreibender Text
- `metric` Text
- `n_epochs` Text
- 475 • `set_op_mix_ratio`
- `local_connectivity`
- `repulsion_strength`
- `a`, `b`: Erwähne wie `a` und `b` standardmäßig gewählt werden, zeige Plot von `a`, `b`
Erwähne `min_dist` und `spread`
- 480 • `negative_sample_weight`

Kapitel 5

Experimente

Nach ausführlicher Darstellung der Theorie des UMAP Verfahrens, möchten wir nun UMAP auf drei Datensätzen mit alternativen Verfahren empirisch testen. Wir werden
 485 eine möglichst vollständige Darstellung der Ergebnisse in dieser Arbeit präsentieren. Allerdings ist es zu empfehlen die Ergebnisse in einem interaktiven Jupyter notebook zu betrachten. Dieses befindet sich auf der beigelegten CD oder auf GitHub ¹.

5.1 Alternative Verfahren

Wir haben uns dazu entschieden UMAP mit folgenden Verfahren zu vergleichen:

490 Da die Implementierungen des Laplacian Eigenmaps Verfahrens und Isomap Verfahrens schlecht für große Datensätze skalieren, haben wir uns bewusst dazu entschieden, diese nicht mit in die Analyse aufzunehmen.

5.1.1 t-SNE

Das t-SNE Verfahren [17] ist zur Zeit eines der bekanntesten und meistgenutzten nicht-linearen Dimensionsreduktionsverfahren. Dabei wird UMAP fast ausschließlich zur
 495 Visualisierung genutzt, da die Laufzeit für höhere Einbettungsdimensionen schlecht ist.

t-SNE konstruiert zuerst eine Wahrscheinlichkeitsverteilung P auf Paaren (i, j) der hochdimensionalen Datenpunkten. Diese ist so gewählt, dass Paare ähnlicher Objekte
 500 eine höhere Wahrscheinlichkeit zugeordnet bekommen, wohingegen sehr unterschiedliche Datenpunkte eine Wahrscheinlichkeit nahe 0 haben. Die Ähnlichkeit der Punkte wird dabei meist mittels der euklidischen Distanz gemessen, kann aber ähnlich wie im UMAP Algorithmus durch andere Metriken ersetzt werden. Um P zu konstruieren wird eine Gaußverteilung genutzt, wobei die Varianz abhängig vom **perplexity**
 505 Parameter ist. Die so erhaltenen Wahrscheinlichkeiten $p_{i|j}$ sind im Allgemeinen nicht symmetrisch. Die Symmetrie wird durch mitteln der Daten erhalten.

Ähnlich wird eine Wahrscheinlichkeitsverteilung Q im niedrigdimensionalen Raum mithilfe der studentschen t-Verteilung konstruiert. Ursprünglich wurde Q ebenfalls durch eine Gausverteilung konstruiert, das so erhaltene Verfahren (SNE [10]) ist
 510 allerdings aufgrund einer schwierig zu optimierenden Zielfunktion und dem „crowding problem“ wenig praktikabel.

Um die d -dimensionale Repräsentation der Daten zu optimieren wir die Kullback-Leiber Divergenz von zwischen P und Q bezüglich der y_i minimiert.

Seit der Veröffentlichung des Verfahrens wurden zahlreiche Verbesserungen, insbesondere für die Laufzeit, vorgeschlagen [28, 14]. Dabei ist besonders Barnes-Hut-SNE
 515 [16] zu erwähnen, allerdings sollte hier beachtet werden, dass aufgrund der Konstruktion einer speziellen Datenstruktur die Laufzeit für $d > 3$ sehr schlecht ist.

¹<https://github.com/reinerschristopher/bachelorthesis>

Die von t-SNE produzierte Repräsentation der Daten ist vom **perplexity** Parameter abhängig. Dabei kann man festhalten, je größer die **perplexity** ist, desto größer ist die Varianz der Gauß-Verteilung. Somit werden für große **perplexity** Werte globalere Strukturen erfasst, da der Gauß-Kern sehr breit ist. Wenn der **perplexity** Parameter in der Größenordnung der Anzahl an Datenpunkten N liegt, gleicht t-SNE dem MDS-Verfahren.

Der zweite wichtige Hyperparameter, welchen wir beschreiben möchten, ist die **exaggeration**. meistens wird hier zwischen **early-** und **late-exaggeration** unterschieden. Im wesentlichen verbessert der Parameter die Optimierung des Gradienten und sorgt dafür, dass Punkte desselben Clusters möglichst schnell in der niedrig-dimensionalen Repräsentation gruppiert werden [13]. Der **late-exaggeration** wie in [14] beschrieben kontrahiert gefundene Cluster, so lassen sich in einer 2- oder 3-dimensionalen Darstellung leichter Cluster bestimmen - entweder visuell oder mittels Clustering-Verfahren.

Wir werden reale Datensätze analysieren und das Verhalten der Hyperparameter beschreiben, um ein zusätzliches Verständnis für die von t-SNE genutzten Hyperparameter zu bekommen. empfiehlt sich [31] - zeigt interaktiv auf künstlich erzeugten Datensätzen die Auswirkung der Parameter.

Für unsere Experimente haben wir die scikit Implementierung des t-SNE Verfahrens genutzt [25]. Zusätzlich haben wir die openTSNE [26] Implementierung genutzt. Diese beschleunigt die Laufzeit des t-SNE Algorithmus durch eine zusätzliche Fourier-Transformation [14]. Die openTSNE Implementierung besitzt im Vergleich zur scikit Implementierung die Möglichkeit den **late-exaggeration** Parameter zu spezifizieren.

5.1.2 TriMap

Das TriMap Verfahren [1] soll eine globalere Repräsentation der Daten finden als beispielsweise t-SNE, das nicht nur paarweise die Ähnlichkeit zweier Objekte i, j betrachtet wird, sondern stets Triple i, j, k . Die so erhaltene globale Struktur der Daten soll die Cluster-Abstände der Daten repräsentieren.

Wir haben diesem Algorithmus gewählt, da die Triplets Ähnlichkeiten mit 2-Simplizes des UMAP Verfahrens haben. Die Triplets sind vergleichbar mit den 2-Simplizes des UMAP Verfahrens. Insbesondere können die Ansätze eine lineare Teilmenge ($O(N)$) an Triplets zu finden weitere Entwicklungen des UMAP Verfahrens motivieren.

5.2 Bewertung der Ergebnisse

Um die d -dimensionalen Repräsentationen der Daten zu bewerten, gibt es verschiedene Ansätze. Diese sollen nun vorgestellt und verglichen werden.

Ein DR-Verfahren, welches die statistischen Eigenschaften der zugrundeliegenden Daten erfasst, sollte invariant bezüglich Rauschen der Daten sein. Hingegen sollte eine schlechte Einbettung wenig stabil sein, wenn zusätzliches Rauschen in den Daten auftritt.

Eine weitere Methodik, um die Qualität der Einbettung zu erfassen, erhält man dadurch, dass

In [9] werden zwei Methoden zur Auswahl eines geeigneten DR-Verfahrens verglichen.

Um die lokale Qualität der Algorithmen zu analysieren, haben wir uns die *Cluster* in der 2-dimensionalen Repräsentation angeschaut, wobei wir als Cluster eine Teilmenge der Daten bezeichnen, welche deutlich von den anderen Datenpunkten getrennt ist.



ABBILDUNG 5.1: Sechs zufällig gewählte Gesichter des Cartoon Set.

Insbesondere bei der Analyse des Cartoon Set 5.3 konnten wir gut lokale Strukturen erkennen, da jeder Datenpunkt mehrere Eigenschaften gegeben hat – im Vergleich zum MNIST und FMNIST Datensatz, wo uns nur ein *Label* pro Datenpunkt gegeben ist.

Die globale Struktur der Repräsentation qualitativ zu bewerten ist subjektiv. Dabei ist insbesondere die Frage – „Wie *stark* unterscheiden sich die Cluster?“ – zu beantworten. Beispielsweise sollten die Cluster welche die Ziffern 1 und 7 darstellen näher zueinander liegen als die Cluster der Ziffern 1 und 6.

Für die qualitative Analyse wird die Fähigkeit des Gehirns genutzt Strukturen zu erkennen. Nachteile der qualitativen Analyse sind, (1) die Subjektivität und somit Abhängigkeit vom Betrachter, (2) dass sie nur im d -dimensionalen ($d \leq 3$) möglich ist.

In den folgenden Experimenten haben wir uns auf eine qualitative Analyse der Daten beschränkt. Einerseits ist dies unserer Erfahrung nach (und Einträgen in Internetforen, ...) die meistgenutzte Art die Repräsentation in der Praxis zu bewerten. Zusätzlich bietet die Wahl der Datensätze eine gute Gelegenheit die Repräsentationen visuell zu bewerten.

5.3 Cartoon Set

In diesem Abschnitt werden wir den *Cartoon Set* Datensatz analysieren [4]. Dabei werden wir:

- sehen, dass UMAP eine vergleichbare Laufzeit mit der von FIT-SNE hat
- das Verhalten der niedrigdimensionalen Darstellung unter verschiedenen Hyperparametern betrachten
- eine exemplarische Beschreibung der Hyperparameter geben
- UMAP mit anderen Dimensionsreduktionsverfahren vergleichen
- sehen, dass UMAP zugrundeliegende Mannigfaltigkeiten erkennt und darstellt

Beschreibung des Datensatzes

Der Cartoon Datensatz enthält 100 000 unterschiedliche Bilder von gezeichneten Gesichtern (siehe Abbildung 5.1).

Die Bilder wurden aus 16 Komponenten zusammengesetzt (u.a. Gesichtsform, Gesichtsfarbe, Frisur, Haarfarbe), dabei variiert die Anzahl der Möglichkeiten pro Komponente zwischen zwei (Augenlid, Wimpern, ...) und 111 (Anzahl mögliche Frisuren). Die Farben der Komponenten wurden aus einem diskreten RGB Raum gewählt. Insgesamt ergibt sich eine mögliche Anzahl von 10^{13} Gesichtern.

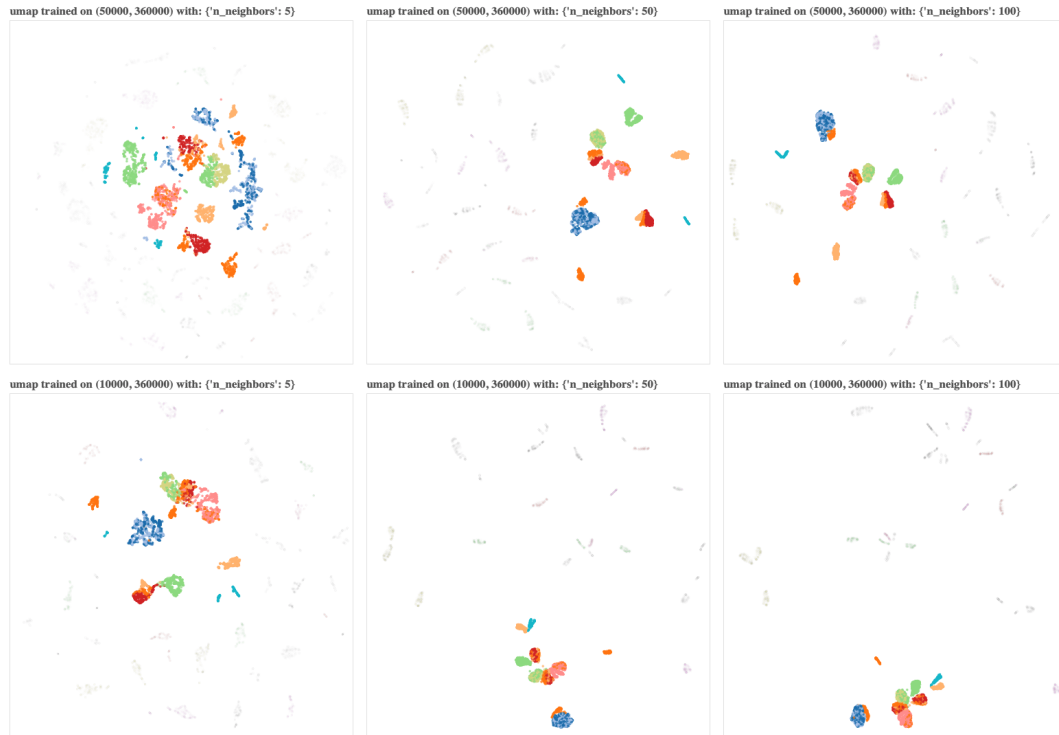


ABBILDUNG 5.2: TODO: Beschreibung des Bildes

Für die Analyse haben wir verschiedene Eigenschaften zusammengefasst um einen
 600 besseren Überblick zu haben. Beispielsweise haben wir die 111 Frisuren, nach quali-
 tativer Analyse, zu 19 Frisurformen zusammengefasst.

Wir haben uns für diesen Datensatz entschieden um UMAP auf Daten mit einer
 komplexeren Struktur zu testen als dies in [18] gemacht wird. Dabei ist auch zu beach-
 605 ten, dass es aufgrund der 16 Komponenten aus welchen die Gesichter bestehen kein
 richtige oder falsche Einbettung der Daten gibt.

Wir haben die Bewertung der Einbettung unter der Annahme gemacht, dass *ähn-
 liche* Gesichter *ähnliche* Hautfarben, Frisuren, Haarfarben, Brillen und Bärte haben.
 Diese fünf Eigenschaften möchten wir besonders hervorheben, da sie die dominantes-
 ten Merkmale des Gesichts beschreiben.

Die ursprüngliche Größe eines Bildes betrug 500×500 Pixel mit vier Farbkanälen
 610 (CYMK-Darstellung der Farben). Aufgrund des großen Randes haben wir uns dazu
 entschieden die Größe der Bilder auf 300×300 ohne nennenswerten Informationsverlust
 zu verringern. Weiterhin haben wir uns für die Bewertung der Einbettung auf 10 000
 Bilder beschränkt. Somit beträgt die Dimension des Cartoon Set $D = 360\,000$ und die
 615 Anzahl an Beispielen $N = 100\,000$.

Qualitative Analyse der Ergebnisse

5.4 MNIST

FMNIST

5.5 Laufzeitanalyse

620 Die praktischen Tests der Verfahren wurden auf Rechnern mit einer Linux-Architektur
 ausgeführt. Die CPU Tests haben wir auf Intel Xeon 6136 CPUs mit 48 Kernen und

384 GB RAM ausgeführt. Für die Verfahren welche mittels Berechnungen auf einer Graphikkarte verbessert wurden, haben wir Intel Xeon Gold 6136 CPUs mit 188 GB RAM und Nvidia V100 GPUs genutzt. Insgesamt haben wir über 100 Experimente
625 gemacht um genauere Aussagen über die Laufzeit der Verfahren zu treffen und diese in Abhängigkeit der wichtigen Parameter zu setzen.

5.6 Stabilität unter sub-sampling

5.7 Zusammenfassung der Ergebnisse

Kapitel 6

630 Zusammenfassung und Ausblick

Literatur

- [1] Ehsan Amid und Manfred K. Warmuth. „A more globally accurate dimensionality reduction method using triplets“. In: *CoRR* abs/1803.00854 (2018). arXiv: 1803.00854. URL: <http://arxiv.org/abs/1803.00854>.
- 635 [2] Michael Barr. „Fuzzy Set Theory and Topos Theory“. In: *Canadian Mathematical Bulletin* 29.04 (Dez. 1986), S. 501–508. ISSN: 1496-4287. DOI: 10.4153/cmb-1986-079-9. URL: <http://dx.doi.org/10.4153/CMB-1986-079-9>.
- [3] Martin Brandenburg. *Einführung in die Kategorientheorie*. Springer Berlin Heidelberg, 2016. ISBN: 9783662470688. DOI: 10.1007/978-3-662-47068-8. URL: <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-662-47068-8>.
- 640 [4] Forrester Cole, Shiraz Fuman und Aaron Sarna. *Cartoon Set*. URL: <https://google.github.io/cartoonset/download.html> (besucht am 19.07.2019).
- [5] Wei Dong, Charikar Moses und Kai Li. „Efficient K-nearest Neighbor Graph Construction for Generic Similarity Measures“. In: *Proceedings of the 20th International Conference on World Wide Web*. WWW '11. Hyderabad, India: ACM, 2011, S. 577–586. ISBN: 978-1-4503-0632-4.
- 645 [6] Charles Fefferman, Sanjoy Mitter und Hariharan Narayanan. „Testing the manifold hypothesis“. In: *Journal of the American Mathematical Society* 29.4 (Feb. 2016), S. 983–1049. ISSN: 1088-6834. DOI: 10.1090/jams/852. URL: <http://dx.doi.org/10.1090/jams/852>.
- 650 [7] Cong Fu und Deng Cai. „EFANNA : An Extremely Fast Approximate Nearest Neighbor Search Algorithm Based on kNN Graph“. In: *CoRR* abs/1609.07228 (2016). arXiv: 1609.07228. URL: <http://arxiv.org/abs/1609.07228>.
- [8] Robert Ghrist. „Barcodes: The persistent topology of data“. In: *Bulletin of the American Mathematical Society* 45.01 (Okt. 2007), S. 61–76. ISSN: 0273-0979. DOI: 10.1090/s0273-0979-07-01191-3. URL: <http://dx.doi.org/10.1090/S0273-0979-07-01191-3>.
- 655 [9] Stefan Harmeling. „Exploring model selection techniques for nonlinear dimensionality reduction“. (EDI-INF-RR-0960). Edinburgh, UK: School of Informatics, University of Edinburgh. 2007.
- 660 [10] Geoffrey E Hinton und Sam T. Roweis. „Stochastic Neighbor Embedding“. In: *Advances in Neural Information Processing Systems 15*. Hrsg. von S. Becker, S. Thrun und K. Obermayer. MIT Press, 2003, S. 857–864. URL: <http://papers.nips.cc/paper/2276-stochastic-neighbor-embedding.pdf>.
- 665 [11] Jeff Johnson, Matthijs Douze und Hervé Jégou. „Billion-scale similarity search with GPUs“. In: *arXiv preprint arXiv:1702.08734* (2017).
- [12] Paul Blain Levy. „Formulating Categorical Concepts using Classes“. In: (2018).
- [13] George C. Linderman und Stefan Steinerberger. „Clustering with t-SNE, Provably“. In: *SIAM Journal on Mathematics of Data Science* 1.2 (Jan. 2019), S. 313–332. ISSN: 2577-0187. DOI: 10.1137/18m1216134. URL: <http://dx.doi.org/10.1137/18m1216134>.
- 670

- [14] George C. Linderman u. a. „Fast interpolation-based t-SNE for improved visualization of single-cell RNA-seq data“. In: *Nature Methods* 16.3 (Feb. 2019), S. 243–245. ISSN: 1548-7105. DOI: [10.1038/s41592-018-0308-4](https://doi.org/10.1038/s41592-018-0308-4). URL: <http://dx.doi.org/10.1038/s41592-018-0308-4>.
675
- [15] Yujing Ma, Florian Rusu und Martin Torres. „Stochastic Gradient Descent on Modern Hardware: Multi-core CPU or GPU? Synchronous or Asynchronous?“ In: *IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS)*. Institute of Electrical und Electronics Engineers (IEEE), 2019, S. 1063–1072.
680
- [16] Laurens van der Maaten. „Accelerating t-SNE using Tree-Based Algorithms“. In: *Journal of Machine Learning Research* 15 (2014), S. 3221–3245. URL: <http://jmlr.org/papers/v15/vandermaten14a.html>.
- [17] Laurens van der Maaten und Geoffrey Hinton. „Visualizing Data using t-SNE“. In: *Journal of Machine Learning Research*. Hrsg. von Yoshua Bengio. Bd. 9. 2008, S. 2579–2605.
685
- [18] Leland McInnes, John Healy und James Melville. „UMAP: Uniform Manifold Approximation and Projection for Dimension Reduction“. In: ().
- [19] Leland McInnes u. a. *UMAP*. 2018. URL: <https://github.com/lmcinnes/umap> (besucht am 22.07.2018).
690
- [20] Tomas Mikolov u. a. „Distributed Representations of Words and Phrases and their Compositionality“. In: *CoRR* abs/1310.4546 (2013). arXiv: [1310.4546](https://arxiv.org/abs/1310.4546). URL: <http://arxiv.org/abs/1310.4546>.
- [21] James R Munkres. *Elements of algebraic topology*. Menlo Park u.a.: Addison-Wesley, 1984. ISBN: 0201045869, 9780201045864.
695
- [22] Hariharan Narayanan und Sanjoy Mitter. „Sample Complexity of Testing the Manifold Hypothesis“. In: *Advances in Neural Information Processing Systems 23*. Hrsg. von J. D. Lafferty u. a. Curran Associates, Inc., 2010, S. 1786–1794. URL: <http://papers.nips.cc/paper/3958-sample-complexity-of-testing-the-manifold-hypothesis.pdf>.
700
- [23] Corey J Nolet, Dante Dessavre und Thejaswi Rao. <https://github.com/rapidsai/cuml>. (Besucht am 19.07.2019).
- [24] Steve Oudot. „Persistence Theory - From Quiver Representations to Data Analysis“. In: *Mathematical surveys and monographs*. Bd. 207. Inria Saclay, Palaiseau, France. American Mathematical Society (AMS), 2015.
705
- [25] F. Pedregosa u. a. „Scikit-learn: Machine Learning in Python“. In: *Journal of Machine Learning Research* 12 (2011), S. 2825–2830.
- [26] Pavlin Policar. *openTSNE*. URL: <https://github.com/pavlin-policar/openTSNE> (besucht am 22.07.2019).
- [27] Salah Rifai u. a. „The Manifold Tangent Classifier“. In: *Advances in Neural Information Processing Systems 24*. Hrsg. von J. Shawe-Taylor u. a. Curran Associates, Inc., 2011, S. 2294–2302. URL: <http://papers.nips.cc/paper/4409-the-manifold-tangent-classifier.pdf>.
710
- [28] Erich Schubert und Michael Gertz. „Intrinsic t-Stochastic Neighbor Embedding for Visualization and Outlier Detection“. In: *Lecture Notes in Computer Science* (2017), S. 188–203. ISSN: 1611-3349. DOI: [10.1007/978-3-319-68474-1_13](https://doi.org/10.1007/978-3-319-68474-1_13). URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-68474-1_13.
715

- [29] Jian Tang u. a. „LINE“. In: *Proceedings of the 24th International Conference on World Wide Web - WWW '15* (2015). DOI: [10.1145/2736277.2741093](https://doi.org/10.1145/2736277.2741093). URL: <http://dx.doi.org/10.1145/2736277.2741093>.
720
- [30] Jian Tang u. a. „Visualizing Large-scale and High-dimensional Data“. In: *Proceedings of the 25th International Conference on World Wide Web. WWW '16*. Montrécal, Québec, Canada: International World Wide Web Conferences Steering Committee, 2016, S. 287–297. ISBN: 978-1-4503-4143-1. DOI: [10.1145/2872427.2883041](https://doi.org/10.1145/2872427.2883041). URL: <https://doi.org/10.1145/2872427.2883041>.
725
- [31] Martin Wattenberg, Fernanda Viégas und Ian Johnson. „How to Use t-SNE Effectively“. In: *Distill* (2016). DOI: [10.23915/distill.00002](https://doi.org/10.23915/distill.00002). URL: <http://distill.pub/2016/misread-tsne>.