t-SNE とは

主成分分析のような低次元への写像をうまい具合にやってくれる
高次元データのビジュアライゼーションなどに使われる

t-SNE のメリット

- SNE の場合と比較して余分なパラメーターが存在しない
    - 手動で変更加える必要がない

- SNE と比較して近い要素を近くづけるだけでなく、確率分布的に遠いものは遠く配置してくれる
- ... 他いくつか

t-SNE 導出

高次元データの同時確率分布を以下で表せると仮定する（ガウシアンカーネル）

$$p_{ij} = \frac{\exp\left\{-\|\mathbf{x^{(i)}} - \mathbf{x^{(j)}}\| / 2\sigma^2\right\}}{\sum_{k\neq l}\exp\left\{-\|\mathbf{x^{(k)}} - \mathbf{x^{(l)}}\| / 2\sigma^2\right\}} \tag{1}$$

イメージとしては動径方向のデータ点同士の距離を確率分布として定義してあげた形になる。
また、あくまでデータ点同士の距離関係だけを問題にしているので、$p_{ii} = 0$ とする。

低次元データを $\mathbf{y_i}$ として、こちらのデータ点を 1 次元のスチューデントの t 分布で表すことにする。

$$q_{ij} = \frac{\left\{1 + \|\mathbf{y^{(i)}} - \mathbf{y^{(j)}}\|^2\right\}^{-1}}{\sum_{k\neq l}\left\{1 + \|\mathbf{y^{(i)}} - \mathbf{y^{(j)}}\|^2\right\}^{-1}} \tag{2}$$

このようにして q_{ij} と p_{ij} の近似度を KL 距離で測り、これを最小とするような y_i の座標を求めてあげればよい。

したがって目的関数は

$$C = \sum_{i,j} p_{ij} \ln \frac{p_{ij}}{q_{ij}} \tag{3}$$

ここで以下のように b_{ij} と a_{ij} を定義する

$$a_{ij} = \exp\left\{-\|\mathbf{x^{(i)}} - \mathbf{x^{(j)}}\| / 2\sigma^2\right\} \tag{4}$$

$$b_{ij} = \left\{1 + \|\mathbf{y^{(i)}} - \mathbf{y^{(j)}}\|^2\right\}^{-1} \tag{5}$$

(3) を $y_d^{(l)}$ について微分すると

$$\frac{\partial C}{\partial y_d^{(l)}} = \sum_{i,j} \left\{ -\frac{\partial}{\partial y_d^{(l)}} p_{ij} \ln q_{ij} \right\} \tag{6}$$

$$= \sum_{i,j} \left\{ -\frac{q_{ij}}{p_{ij}} \frac{\partial q_{ij}}{\partial y_d^{(l)}} \right\} \tag{7}$$

ここで

$$\frac{\partial q_{ij}}{\partial y_d^{(l)}} = \frac{\partial b_{ij}}{\partial y_d^{(l)}} \frac{1}{\sum_{n,m} b_{nm}} - \frac{b_{ij}}{(\sum_{n,m} b_{nm})^2} \left\{ \sum_{s,t} \frac{\partial b_{st}}{\partial y_d^{(l)}} \right\} \tag{8}$$

また $\frac{\partial b_{st}}{\partial y_d^{(l)}}$ の微分は以下のように与えられる。

$$d_{ij} = \|\mathbf{y^{(i)}} - \mathbf{y^{(j)}}\|^2$$

とおいて

$$\frac{\partial b_{st}}{\partial y_d^{(l)}} = \frac{\partial}{\partial d_{ij}} \left\{1 + (d_{ij})^2\right\}^{-1} \frac{\partial}{\partial y_d^{(l)}} \left\{\|\mathbf{y^{(i)}} - \mathbf{y^{(j)}}\|^2\right\} \tag{9}$$

$$= -(1 + (d_{ij})^2)^{-2} \sum_k \frac{\partial}{\partial y_d^{(l)}} \left\{y_k^{(i)} - y_k^{(j)}\right\}^2 \tag{10}$$

$$= -2b_{ij}^2 (y_d^{(i)} - y_d^{(j)})(\delta_{il} - \delta_{jl}) \tag{11}$$

$$= -2b_{ij}^2 G_{ijd}^{(l)} \qquad (G_{ijd}^{(l)} = (y_d^{(i)} - y_d^{(j)})(\delta_{il} - \delta_{jl})\text{とおいた}) \tag{12}$$

(12) を (8) に代入する

$$\frac{\partial q_{ij}}{\partial y_d^{(l)}} = -2b_{ij}^2 G_{ijd}^{(l)} \frac{1}{\sum_{n,m} b_{nm}} - \frac{b_{ij}}{(\sum_{n,m} b_{nm})^2} \left\{ \sum_{s,t} -2b_{ij}^2 G_{std}^{(l)} \right\} \tag{13}$$

$$= -2q_{ij} b_{ij} G_{ijd}^{(l)} + 2q_{ij} \sum_{s,t} q_{st} b_{st} G_{std}^{(l)} \tag{14}$$

最後に (14) を (7) に代入すると

$$\frac{\partial C}{\partial y_d^{(l)}} = \sum_{i,j} -\frac{q_{ij}}{p_{ij}} \left\{ -2q_{ij}b_{ij}G_{ijd}^{(l)} + 2q_{ij}\sum_{s,t} q_{st}b_{st}G_{std}^{(l)} \right\} \tag{15}$$

$$= \sum_{i,j} p_{ij}b_{ij}G_{ijd}^{(l)} - (\sum_{i,j} p_{ij}) \left\{ \sum_{s,t} q_{st}b_{st}G_{std}^{(l)} \right\} \tag{16}$$

$$= \sum_{i,j}(p_{ij} - q_{ij})b_{ij}G_{ijd}^{(l)} \tag{17}$$

$$= \sum_{i,j}(p_{ij} - q_{ij})b_{ij}(y_d^{(i)} - y_d^{(j)})(\delta_{il} - \delta_{jl}) \tag{18}$$

ここで一般的に $A_{ij} = -A_{ij}$ のときに

$$\begin{aligned}\sum_{i,j} A_{ij}(\delta_{il} - \delta jl) &= \sum_j(\sum_i A_{ij}\delta_{il}) - \sum_i(\sum_j A_{ij}\delta_{jl}) \\ &= \sum_j A_{lj} - \sum_i A_{il} \\ &= 2\sum_j A_{lj}\end{aligned}$$

が成り立つので

$$(18) = \sum_j 4(p_{lj} - q_{lj})(y_d^{(i)} - y_d^{(l)})b_{il} \tag{19}$$

これより微分は以下で与えられることがわかった

$$\boxed{\frac{\partial C}{\partial y_d^{(l)}} = \sum_j 4(p_{lj} - q_{lj})(y_d^{(i)} - y_d^{(l)})\left\{1 + \|\mathbf{y}^{(\mathbf{i})} - \mathbf{y}^{(\mathbf{l})}\|^2\right\}^{-1}} \tag{20}$$