

MÉTODOS LOCALES I (*MANIFOLD LEARNING*)

ALAN REYES-FIGUEROA
APRENDIZAJE ESTADÍSTICO

(AULA 11) 19.FEBRERO.2025

Métodos locales

Recordemos la idea subyacente en el escalamiento multidimensional: mapear los datos $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ a un espacio de menor dimensión $\mathbf{x}_i^* \in \mathbb{R}^p$, con $p < d$

$$\min_{\mathbf{x}_i^*, \mathbf{x}_j^*} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)^2 - d(\mathbf{x}_i^*, \mathbf{x}_j^*)^2)^2. \quad (1)$$

Los métodos locales tienen el mismo propósito, queremos reducir la dimensión de los datos $\mathbf{x}_i$. De igual forma, mapeamos los datos vía una función (no lineal) $f: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^p$, $f(\mathbf{x}_i) = \mathbf{x}_i^*$, de modo que f preserve la estructura de los datos originales $\mathbf{x}_i$.

Obs! La diferencia con los métodos globales (PCA, MDS) es que no utilizan todos los datos, y usualmente no son lineales.

A la aplicación de estos métodos también se le conoce como **manifold learning**, o aprendizaje de la variedad (asociada a la estructura de los datos).

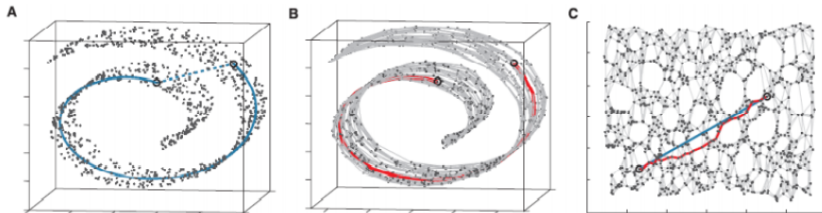
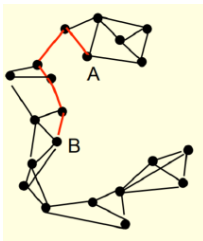
Ref: J. B. Tenenbaum *et al.* A Global Geometric Framework for Nonlinear Dimensionality Reduction, Science 290, (2000), 2319-2323.

<http://www-clmc.usc.edu/publications/T/tenenbaum-Science2000.pdf>

Idea: Hacer MDS (escalamiento multidimensional) con distancias entre puntos calculadas a partir de un grafo que refleja la estructura local de los datos.

- Construye un grafo ponderado G basado en estructura local: cada dato $\mathbf{x}_i$ es un vértice; conecta un dato con sus k -vecinos más cercanos (simetrizar); pesos son distancias.
- Calcula para cada par de datos $d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ la distancia del camino más corto entre $\mathbf{x}_i$ y $\mathbf{x}_j$ sobre el grafo G (algoritmo de Dijkstra).
- Aplicar escalamiento multidimensional a partir de $\{d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)\}$

Isomap



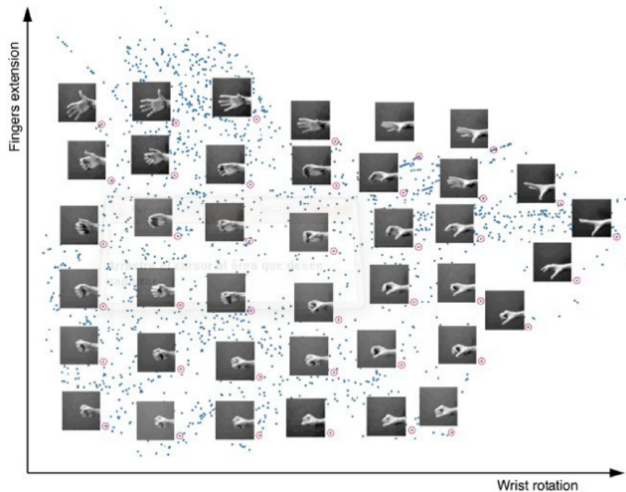
(Tenenbaum et al.)

Isomap



(Tenenbaum et al.)

Isomap

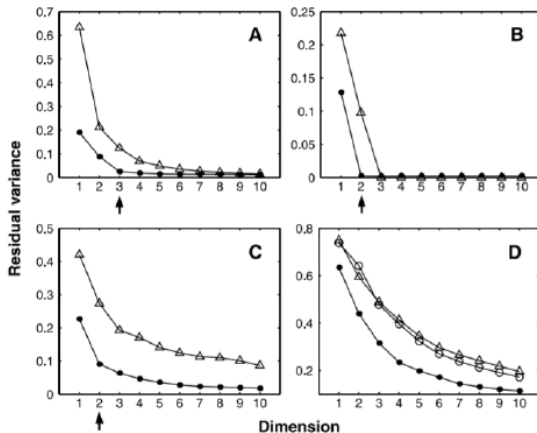


(Tenenbaum et al.)

Isomap

Fig. 2. The residual variance of PCA (open triangles), MDS (open triangles in (A) through (C); open circles in (D)), and Isomap (filled circles) on four data sets (42). (A) Face images varying in pose and illumination (Fig. 1A). (B) Swiss roll data (Fig. 3). (C) Hand images varying in finger extension and wrist rotation (20). (D) Handwritten "2"s (Fig. 1B). In all cases, residual variance decreases as the dimensionality d is increased. The intrinsic dimensionality of the data can be estimated by looking for the "elbow"

at which this curve ceases to decrease significantly with added dimensions. Arrows mark the true or approximate dimensionality, when known. Note the tendency of PCA and MDS to overestimate the dimensionality, in contrast to Isomap.



t-SNE

Refs: SNE: Roweis, Sam; Hinton, G. (2002). Stochastic neighbor embedding. Neural Information Processing Systems.

T-SNE: van der Maaten, L.J.P.; Hinton, G.E. (2008). Visualizing Data Using t-SNE. Journal of Machine Learning Research.

Idea: convierte similitudes entre datos en probabilidades de un experimento aleatorio. Trata de conservar estas distribuciones en el nuevo espacio.

- Para un dato $\mathbf{x}_i$ define P_i : $p_{j|i}$ = probabilidad de elegir $\mathbf{x}_j$ como vecino: entre más similar, mayor probabilidad.
- Buscamos datos $\{\mathbf{x}_i^*\}$ con Q_i : $q_{j|i}$ = probabilidad de elegir $\mathbf{x}_j^*$ como vecino de $\mathbf{x}_i^*$, tal que las distribuciones $p_{j|i}$ y $q_{j|i}$ se parecen.

¿Cómo medir distancias entre distribuciones? Divergencia Kullback-Leibler:

$$D_{KL}(P||Q) = \sum_i P_i \log \frac{P_i}{Q_i}.$$

SNE: *stochastic neighbourhood embedding*.

Definimos:

$$P_i : \quad p_{j|i} = \frac{1}{c_i} \exp(-\|x_j - x_i\|^2 / \sigma_i), \quad c_i = \sum_{k \neq i} \exp(-\|x_k - x_i\|^2 / \sigma_i);$$

$$Q_i : \quad q_{j|i} = \frac{1}{c_i^*} \exp(-\|x_j^* - x_i^*\|^2), \quad c_i^* = \sum_{k \neq i} \exp(-\|x_k^* - x_i^*\|^2).$$

Función de costo: $J = \sum_i d(P_i, Q_i)$.

La derivada de la función de costo en $\frac{\partial J}{\partial x_i}$ es

$$\frac{\partial J}{\partial x_i} = 2 \sum_j (x_j^* - x_i^*)^2 (p_{j|i} - q_{j|i} + p_{i|j} - q_{i|j}).$$

Está relacionada con atracción / repulsión.

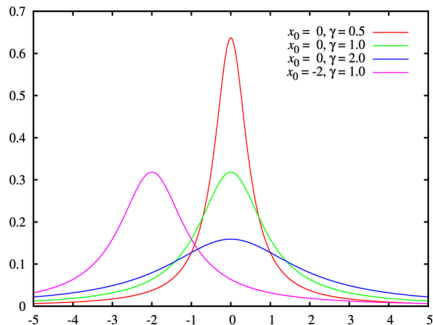
Parámetro *perplexity* (para calcular las σ_i): número de vecinos efectivos de un dato (se basa en la entropía de la distribución de las distancias).

t-SNE

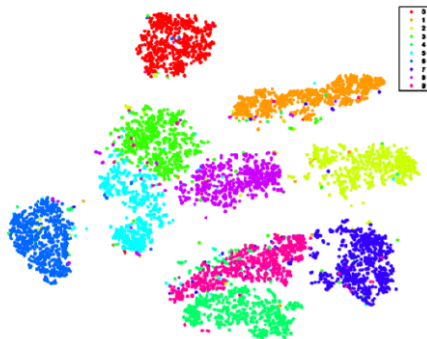
t-SNE: *t-distributed stochastic neighbourhood embedding*.

En el espacio de $\{\mathbf{x}_i^*\}$, cambiamos la gaussiana por una distribución t_1 (distribución Cauchy): $f(t) = \frac{1}{\pi(1+t^2)}$, tiene colas más pesadas.

⇒ se castiga menos distancias grandes.

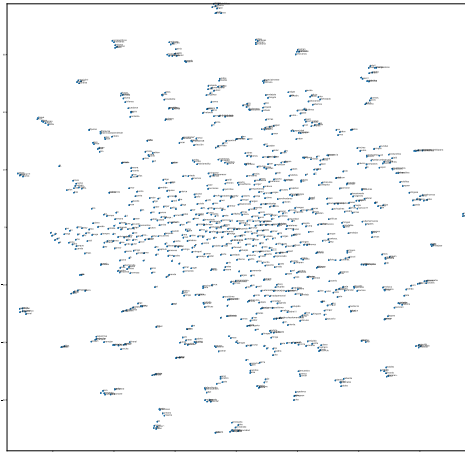


MNIST Data:



Hinton

Explorar <https://projector.tensorflow.org/>.

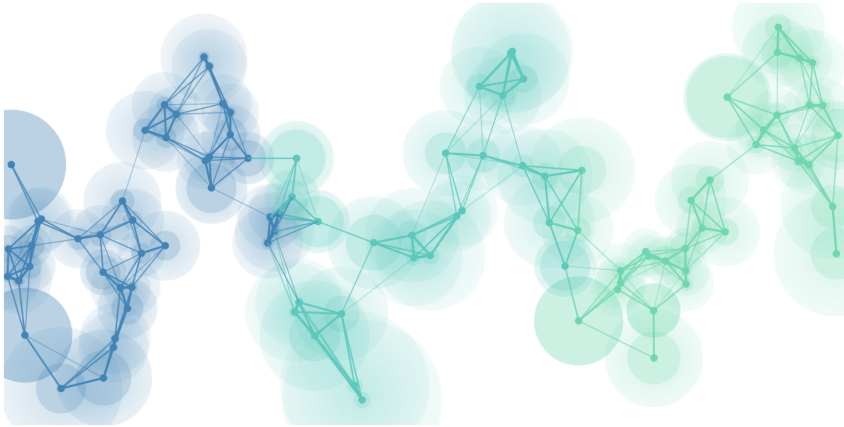


t-SNE aplicado a palabras en tweets.

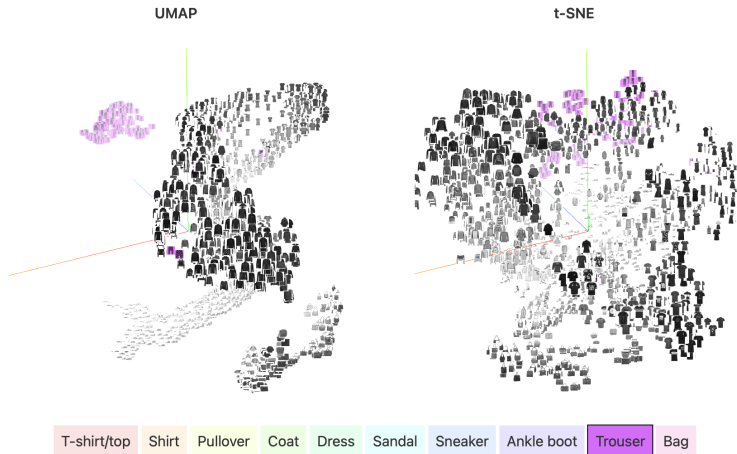
Refs: UMAP: L. McInnes, J. Healy, J. Melville. (2018). Uniform Manifold Approximation and Projection for Dimension Reduction.

Idea: Se puede entender como una versión mejorada del t-SNE. Construye primero un grafo multidimensional a partir de la estructura de los datos, luego reduce este grafo a uno de mejor dimensión.

- En lugar de usar un parámetro de perplexity, UMAP utiliza dos parámetros: `n_neighbors` y `min_dist`.
- Para construir el grafo inicial de alta dimensión, UMAP se basa en la construcción de lo que se conoce como complejo de Čech, que es una forma de representar una topología de forma combinatoria (usando simplejos). Al pensar en los datos como un conjunto de simplejos, podemos capturar una representación de la topología y, al combinar esos simples de una manera específica para formar un complejo de Čech, obtenemos algunas garantías teóricas sobre qué tan bien representa la topología.



Construcción de un complejo simplicial a partir del conjunto de datos.



Comparación entre los algoritmos t-SNE y UMAP.

Ver

- <https://arxiv.org/abs/1802.03426>.
- <https://pair-code.github.io/understanding-umap/>.
- <https://pair-code.github.io/understanding-umap/supplement.html>.