In [1]:

```
import pandas as pd
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.datasets import make_blobs
import scipy.stats as sps
import scipy.sparse as sparse
from sklearn.model_selection import train_test_split
from time import time_ns
import sympy

from umap.umap_ import UMAP
from umap import umap_
from MulticoreTSNE import MulticoreTSNE
from sklearn.manifold import TSNE

from warnings import filterwarnings
filterwarnings('ignore')

import seaborn as sns
sns.set(font_scale=1.5)
```

started 08:39:28 2020-03-10, finished in 3.50s

Внимание!!!
Не спользуйте UMAP версии 0.4.0rc1. Лучше используйте 0.3.10.

UMAP

Главная страница проекта (https://umap-learn.readthedocs.io/en/latest/).
Статья от авторов (https://arxiv.org/abs/1802.03426).
Визуализация (https://pair-code.github.io/understanding-umap/).

```
UMAP(n_neighbors=15, n_components=2, metric='euclidean', n_epochs=None,
learning_rate=1.0, init='spectral', min_dist=0.1, spread=1.0,
set_op_mix_ratio=1.0, local_connectivity=1.0, repulsion_strength=1.0,
negative_sample_rate=5, transform_queue_size=4.0, a=None, b=None,
random_state=None, metric_kwds=None, angular_rp_forest=False,
target_n_neighbors=-1, target_metric='categorical', target_metric_kwds=None,
target_weight=0.5, transform_seed=42, verbose=False)
```

Гиперпараметры

- `n_neighbors` — количество соседей, используемое при подсчете локальной метрики. Определяет глобальность многообразий, определяемых методом. При очень маленьких значениях параметра, UMAP концентрируется только на локальных структурах. И, наоборот, при слишком больших значениях, метод изучает глобальную структуру, и практически игнорирует локальные отличия.
- `min_dist` — минимальное расстояние между точками в новом представлении. Чем меньше значение этого параметра, тем больше новое представление будет похоже на комочки точек. При больших значениях распределение точкек в пространстве будут больше походить на равномерное распределение.
- `n_components` — размерность нового представления.
- `metric` — метрика входных данных. Поддерживаются следующие метрики: метрики на подобие метрики Минковского — `euclidean`, `manhattan`, `chebyshev`, `minkowski`; нормированные

пространственные метрики — `mahalanobis`, `wminkowski`, `seuclidean`; другие пространственные метрики — `canberra`, `braycurtis`, `haversine`; угловые и корреляционные метрики — `cosine`, `correlation`; а также метрики для бинарных данных — `hamming`, `jaccard`, `dice`, `russellrao`, `kulsinski`, `rogerstanimoto`, `sokalmichener`, `sokalsneath`, `yule`.
...

Методы

- `fit(X, y=None)` — обучиться на данных `X`, можно указать `y` для использования метода снижения размерности с учителем.
- `fit_transform(X, y=None)` — обучиться на данных `X` и вернуть сжатое представление `X`, можно указать `y` для использования метода снижения размерности с учителем.
- `transform(X_new)` — вернуть сжатое представление `X_new` для обученной ранее модели.
- `inverse_transform(Y)` — восстановить сжатые данные `Y` в исходное пространство. *Пока не поддерживается.*

`MulticoreTSNE` — ускоренная версия TSNE

Главная страница проекта (https://github.com/DmitryUlyanov/Multicore-TSNE).

```
MulticoreTSNE(n_components=2, perplexity=30.0, early_exaggeration=12,
learning_rate=200, n_iter=1000, n_iter_early_exag=250, 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, n_jobs=1, cheat_metric=True,)
```

Гиперпараметры

- `n_components` — размерность сжатого пространства
- `perplexity` — связано с количеством соседей для оценки многообразия.

Методы

- `fit(X)` — обучиться на данных `X`.
- `fit_transform(X, y=None)` — обучиться на данных `X` и вернуть сжатое представление `X`.

Сравенение `UMAP` и `MulticoreTSNE`

Датасет — точки, координаты которых в первых двух измерениях представляют собой три нормально распределенных кластера, в остальных 8 измерениях координаты не образуют кластеров и распределены нормально.

In [2]:

```
# Генерация данных
n_samples = 500
X = np.zeros((n_samples, 10))

X[:, :2], y = make_blobs(
    n_samples=n_samples, n_features=2,
    # параметры 3 кластеров
    centers=[[0, 0], [2, -0.5], [1.5, 3]],
    cluster_std=[0.5, 0.5, 0.5],
)

X[:, 2:] = sps.norm(0, 0.2).rvs((n_samples, 8))
```

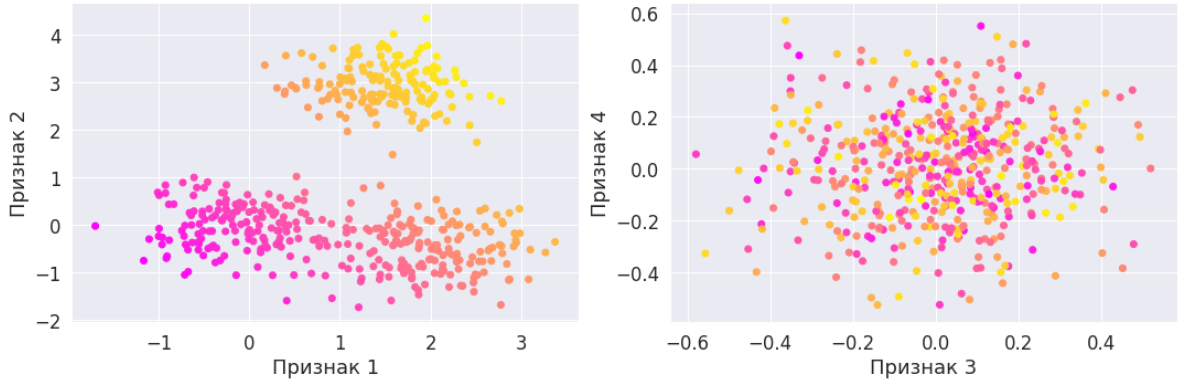
started 08:39:32 2020-03-10, finished in 7ms

Посмотрим на данные. На данном этапе цвет точек не имеет значение. Он пригодится в дальнейшем для сравнения этих графиков с графиком точек в сжатом пространстве.

In [3]:

```
colors = 3*X.T[0] + 2*X.T[1]

plt.figure(figsize=(15, 5))
plt.subplot(121)
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=colors, cmap='spring')
plt.xlabel('Признак 1')
plt.ylabel('Признак 2')
plt.subplot(122)
plt.scatter(X[:, 2], X[:, 3], c=colors, cmap='spring')
plt.xlabel('Признак 3')
plt.ylabel('Признак 4')
plt.tight_layout()
```

started 08:39:32 2020-03-10, finished in 735ms



Сравнение времени работы MulticoreTSNE, UMAP и реализации t-SNE из sklearn.

In [4]:

```
%timeit MulticoreTSNE(n_components=2).fit_transform(X)
```

started 08:39:32 2020-03-10, finished in 15.7s

```
1.95 s ± 62.2 ms per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 1 loop each)
```

In [5]:

```
%timeit UMAP(n_components=2).fit_transform(X)
```

started 08:39:48 2020-03-10, finished in 8.52s

```
708 ms ± 4.47 ms per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 1 loop each)
```

In [6]:

```
%timeit TSNE(n_components=2).fit_transform(X)
```

started 08:39:57 2020-03-10, finished in 18.4s

```
2.27 s ± 54.7 ms per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 1 loop each)
```

Применяем методы для визуализации

In [7]:

```
X_tsne = MulticoreTSNE(n_components=2).fit_transform(X)
X_umap = UMAP(n_components=2).fit_transform(X)
```

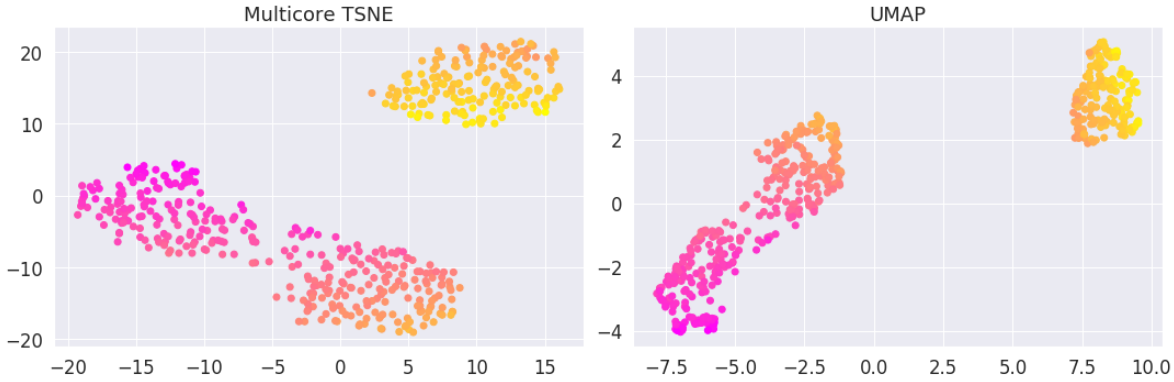
started 08:40:15 2020-03-10, finished in 2.81s

Визуализация результатов

In [8]:

```
plt.figure(figsize=(15, 5))
plt.subplot(121)
plt.scatter(X_tsne[:, 0], X_tsne[:, 1], c=colors, cmap='spring')
plt.title('Multicore TSNE')
plt.subplot(122)
plt.scatter(X_umap[:, 0], X_umap[:, 1], c=colors, cmap='spring')
plt.title('UMAP')
plt.tight_layout()
```

started 08:40:18 2020-03-10, finished in 834ms



UMAP train & test

UMAP в отличие от TSNE позволяет обучаться на части данных, и получать новое представление для другой части данных, не используемых при обучении.

Сделаем разбиение данных на train и test и обучим UMAP на обучающей выборке

In [9]:

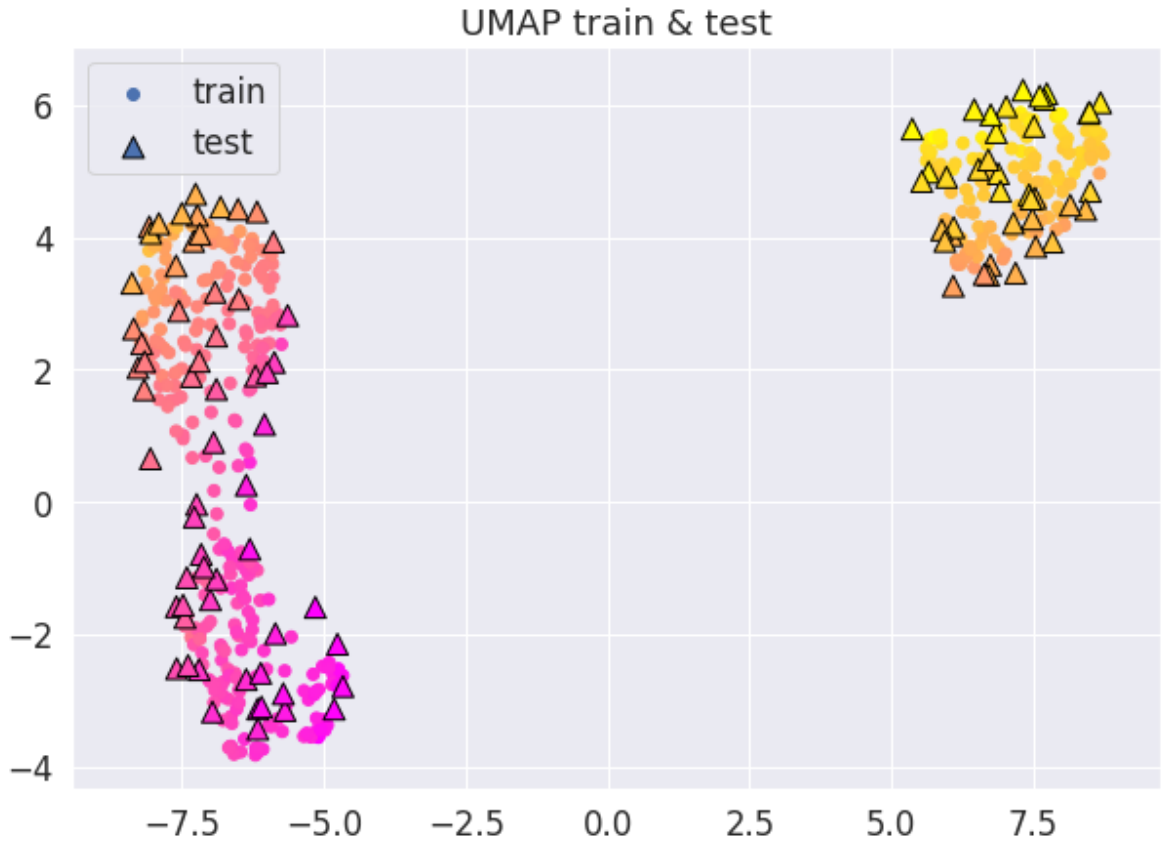
```
X_train, X_test, colors_train, colors_test = train_test_split(
    X, colors, test_size=0.2)

model = UMAP(n_components=2).fit(X_train)
X_umap_train = model.transform(X_train)
X_umap_test = model.transform(X_test)
```

started 08:40:19 2020-03-10, finished in 5.25s

In [10]:

```
plt.figure(figsize=(10, 7))
plt.scatter(X_umap_train[:, 0], X_umap_train[:, 1],
            c=colors_train, label='train', cmap='spring')
plt.scatter(X_umap_test[:, 0], X_umap_test[:, 1], s=120,
            c=colors_test, label='test', marker='^',
            edgecolors='black', cmap='spring')
plt.legend()
plt.title('UMAP train & test');
```

started 08:40:24 2020-03-10, finished in 404ms



Сравнение времени работы

Сгенерируем больший размер данных

In [11]:

```
n_samples = 10000
X = np.zeros((n_samples, 10))

X[:, :2], y = make_blobs(n_samples=n_samples, n_features=2)
X[:, 2:] = sps.norm(0, 0.2).rvs((n_samples, 8))
```

started 08:40:24 2020-03-10, finished in 10ms

In [12]:

```
%timeit UMAP(n_components=2).fit_transform(X)
```

started 08:40:24 2020-03-10, finished in 2m 22s

```
17.4 s ± 723 ms per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 1 loop each)
```

In [13]:

```
%timeit MulticoreTSNE(n_components=2).fit_transform(X)
```

started 08:42:46 2020-03-10, finished in 9m 5s

```
1min 6s ± 3.96 s per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 1 loop each)
```

Реализация t-SNE из sklearn

In [14]:

```
%timeit TSNE(n_components=2).fit_transform(X)
```

started 08:51:51 2020-03-10, finished in 10m 18s

```
1min 17s ± 4.74 s per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 1 loop each)
```

UMAP на высокоразмерных данных

UMAP в отличие от TSNE эффективно справляется с данными с большой размерностью.

Датасет — MNIST, черно-белые изображения цифр. Размерность объекта: 28*28 = 784 .

In [15]:

```
X_mnist = np.loadtxt('../5/train.txt')
labels_mnist = np.loadtxt('../5/train_labels.txt')
```

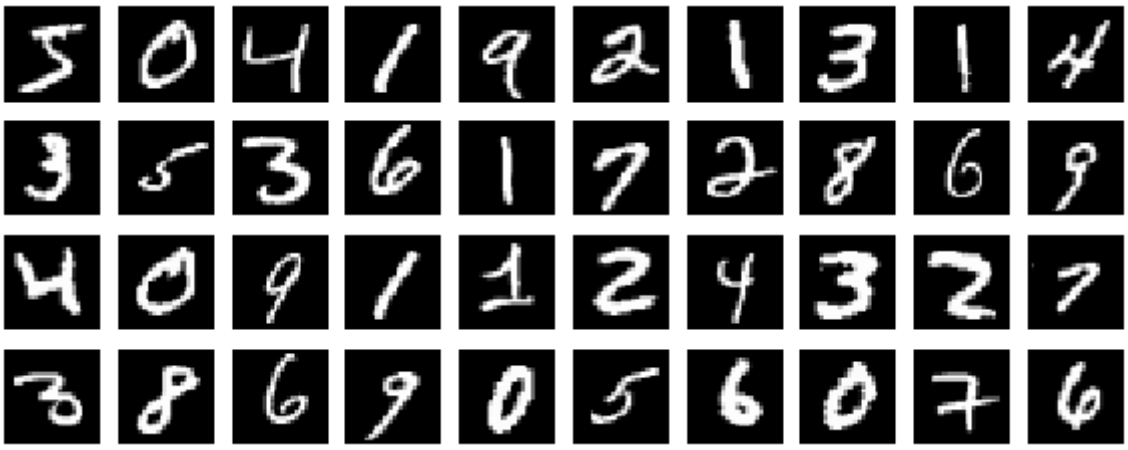
started 09:02:08 2020-03-10, finished in 15.8s

Визуализация изображений цифр

In [16]:

```
plt.figure(figsize=(10, 4))
for i in range(40):
    plt.subplot(4, 10, i + 1)
    plt.imshow(X_mnist[i].reshape((28, 28)), cmap='gray')
    plt.axis('off')
```

started 09:02:24 2020-03-10, finished in 4.34s



Разбиение на train и test

In [17]:

```
X_mnist_train, X_mnist_test, labels_mnist_train, labels_mnist_test \
    = train_test_split(X_mnist, labels_mnist, test_size=50)
```

started 09:02:28 2020-03-10, finished in 197ms

Обучаем UMAP на высокоразмерных данных **без** предварительного использования PCA и применяем к тестовой выборке

In [18]:

```
%%time

umap = UMAP(n_components=2)
umap.fit(X_mnist_train)
X_mnist_umap_train = umap.transform(X_mnist_train)
X_mnist_umap_test = umap.transform(X_mnist_test)
```

started 09:02:29 2020-03-10, finished in 1m 7.75s

```
CPU times: user 1min 14s, sys: 1.94 s, total: 1min 16s
Wall time: 1min 7s
```

Визуализация результатов

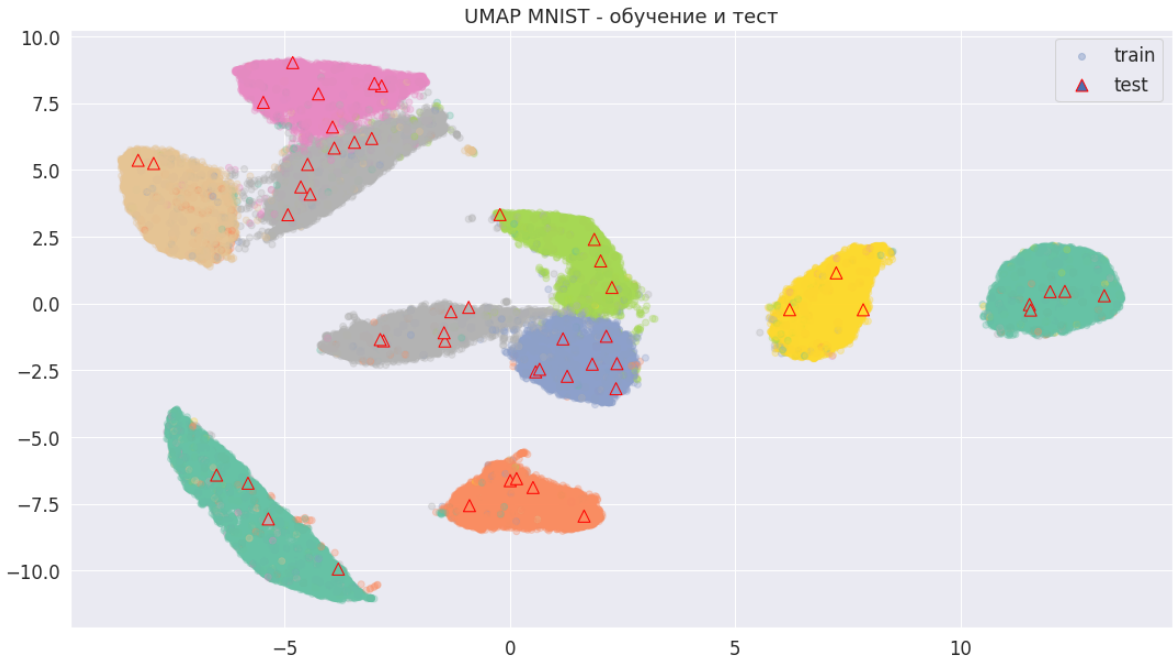
In [19]:

```
plt.figure(figsize=(18, 10))
plt.scatter(
    X_mnist_umap_train[:, 0], X_mnist_umap_train[:, 1],
    c=labels_mnist_train, label='train', cmap='Set2', alpha=0.3
)
plt.scatter(
    X_mnist_umap_test[:, 0], X_mnist_umap_test[:, 1], s=120,
    c=labels_mnist_test, label='test', marker='^',
    edgecolors='red', cmap='Set2'
)
plt.legend()
plt.title('UMAP MNIST - обучение и тест')
```

started 09:03:36 2020-03-10, finished in 3.93s

Out[19]:

```
Text(0.5, 1.0, 'UMAP MNIST - обучение и тест')
```



UMAP на категориальных признаках

Загрузим данные

https://github.com/datasets/openml-datasets/blob/master/data/kr-vs-kp/kr-vs-kp.csv (https://github.com/datasets/openml-datasets/blob/master/data/kr-vs-kp/kr-vs-kp.csv)

Данные состоят некоторого количества бинарных переменных, которые задают комбинацию в игре, а так же результата игры с такой позицией.

In [20]:

```
kr_vs_kp = pd.read_csv('kr-vs-kp.csv')
kr_vs_kp.head()
```

started 09:03:40 2020-03-10, finished in 87ms

Out[20]:

	bkblk	bknwy	bkon8	bkona	bkspr	bkxbq	bkxcr	bkxwp	blxwp	bxqsq	...	spcop	stlmt
0	'f'	'f'	'f'	'f'	'f'	'f'	'f'	'f'	'f'	'f'	...	'f'	'f
1	'f'	'f'	'f'	'f'	't'	'f'	'f'	'f'	'f'	'f'	...	'f'	'f
2	'f'	'f'	'f'	'f'	't'	'f'	't'	'f'	'f'	'f'	...	'f'	'f
3	'f'	'f'	'f'	'f'	'f'	'f'	'f'	'f'	't'	'f'	...	'f'	'f
4	'f'	'f'	'f'	'f'	'f'	'f'	'f'	'f'	'f'	'f'	...	'f'	'f

5 rows × 37 columns

Размер данных

In [21]:

```
kr_vs_kp.shape
```

started 09:03:40 2020-03-10, finished in 7ms

Out[21]:

```
(3196, 37)
```

Все признаки бинарны, переведем их в целочисленный тип данных

In [22]:

```
X = (kr_vs_kp.iloc[:, :-2] == "'t'").astype(int)
```

started 09:03:40 2020-03-10, finished in 27ms

Обучаем UMAP, используя меру Жаккара (https://ru.wikipedia.org/wiki/Коэффициент_Жаккара). С помощью параметра `min_dist` увеличиваем также минимальное расстояние между точками в новом пространстве равным 1 (вместо 0.1 по умлчанию). Это позволяет располагать точки более разреженно.

In [23]:

```
X_umap = UMAP(n_components=2, metric='jaccard', min_dist=1).fit_transform(X)
```

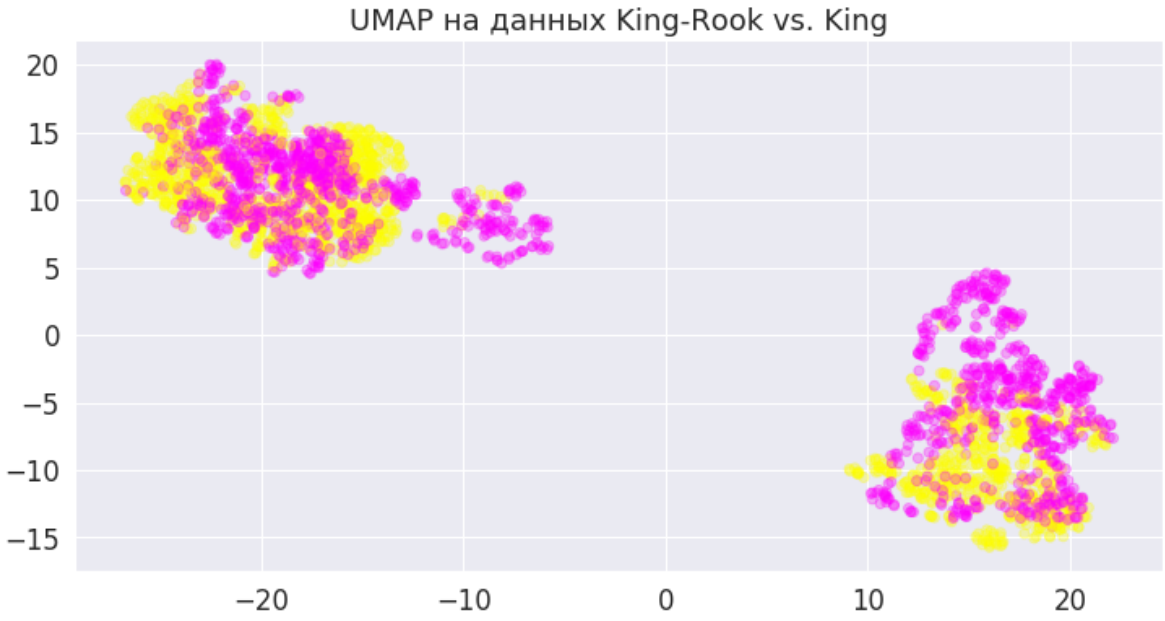
started 09:03:41 2020-03-10, finished in 8.69s

Визуализация результата. Цвет точки означает тип комбинации (выигрышная или проигрышная).

In [24]:

```
plt.figure(figsize=(12, 6))
plt.scatter(X_umap[:, 0], X_umap[:, 1], c=kr_vs_kp.iloc[:, -1]=="'won'",
            cmap='spring', alpha=0.3)
plt.title('UMAP на данных King-Rook vs. King');
```

started 09:03:49 2020-03-10, finished in 562ms



UMAP на данных с вещественными и категориальными признаками

С помощью подбора правильной метрики, можно работать с категориальными признаками.

Датасет — ранее используемый датасет с искуственными данными, но теперь последний признак будет бинарным. Можно рассматривать и большее количество признаков, но небинарные нужно предварительно бинаризировать.

In [26]:

```
# Генерация данных
n_samples = 1000
X = np.zeros((n_samples, 10))

X[:, :2], y = make_blobs(
    n_samples=n_samples, n_features=2,
    # параметры 3 кластеров
    centers=[[0, 0], [2, -0.5], [1.5, 3]],
    cluster_std=[0.5, 0.5, 0.5],
)

X[:, 2:-1] = sps.norm(0, 0.2).rvs((n_samples, 7))
```

started 09:04:09 2020-03-10, finished in 10ms

Создаем бинарный признак

In [27]:

```
from scipy.special import expit
X[:, -1] = sps.bernoulli(p=expit(-3*X[:, 0] + 2*X[:, 1])).rvs(size=n_samples)
```

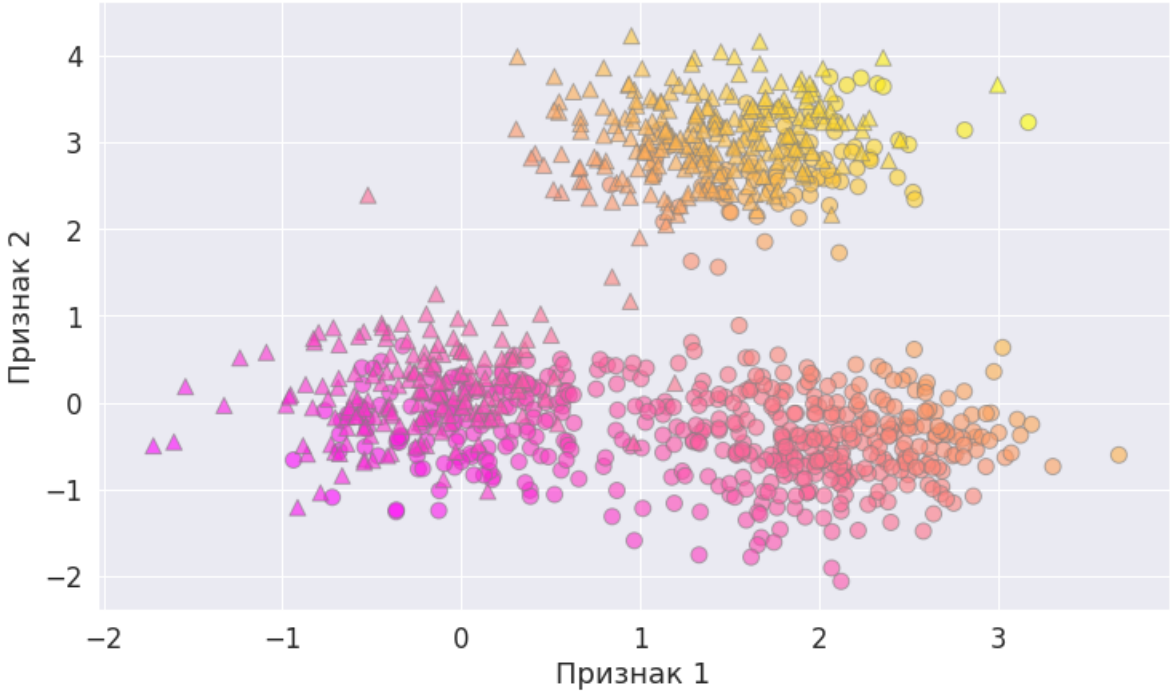
started 09:04:11 2020-03-10, finished in 10ms

Визуализируем первые два признака и бинарный (формой точки)

In [29]:

```
plt.figure(figsize=(12, 7))

colors = 3*X.T[0] + 2*X.T[1]
for k, marker in zip([0, 1], ['o', '^']):
    mask = X[:, -1] == k
    plt.scatter(X[mask, 0], X[mask, 1], c=colors[mask], cmap='spring',
                marker=marker, edgecolors='gray', s=100, alpha=0.6)

plt.xlabel('Признак 1'), plt.ylabel('Признак 2');
```

started 09:04:44 2020-03-10, finished in 502ms



О проблеме UMAP с категориальными признаками написано в этом посте

https://github.com/lmcinnes/umap/issues/58 (https://github.com/lmcinnes/umap/issues/58)

В качестве решения проблемы предлагается следующий код

In [30]:

```
# Обучение на вещественных признаках
fit1 = UMAP().fit(X[:, [0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]])
# Обучение на бинарных признаках
# с использованием метрики jaccard
fit2 = UMAP(metric='jaccard').fit(X[:, [9]])

# Пересечение графов многообразий
intersection = umap_.general_simplicial_set_intersection(
    fit1.graph_, fit2.graph_, weight=0.5)
# Обновление весов в новом графе
intersection = umap_.reset_local_connectivity(intersection)

# Новое представление данных,
# в качестве графа используется новыый граф,
# все остальные параметры те же, что и для графа с вещ. признаками
embedding = umap_.simplicial_set_embedding(
    fit1._raw_data, intersection, fit1.n_components,
    fit1._initial_alpha, fit1._a, fit1._b,
    fit1.repulsion_strength, fit1.negative_sample_rate,
    200, 'random', np.random, fit1.metric,
    fit1._metric_kwds, False
)
```

started 09:04:48 2020-03-10, finished in 9.46s

In [31]:

```
plt.figure(figsize=(12, 7))

for k, marker in zip([0, 1], ['o', '^']):
    mask = X[:, -1] == k
    plt.scatter(embedding[mask, 0], embedding[mask, 1], c=colors[mask],
                cmap='spring', marker=marker, edgecolors='gray',
                s=100, alpha=0.6)
```

started 09:04:57 2020-03-10, finished in 458ms

UMAP на разреженных данных

Идея примера взята [отсюда (https://umap-learn.readthedocs.io/en/latest/sparse.html)](https://umap-learn.readthedocs.io/en/latest/sparse.html).
Датасет — натуральные числа, представленные в виде вектора из составляющих данное число простых числел.

Возьмем все простые числа от 2 до 110000 и присвоим каждому их них номер (индекс).

In [32]:

```
1  primes = list(sympy.primerange(2, 110000))
2  prime_to_column = {p:i for i, p in enumerate(primes)}
```

started 09:04:58 2020-03-10, finished in 213ms

Количество простых чисел в этом диапазоне

In [33]:

```
1  len(primes)
```

started 09:04:58 2020-03-10, finished in 3ms

Out[33]:

```
10453
```

Все числа от 0 до 100000 разложим на простые. Будем записывать только факт деления числа на простое без сохранения степени

In [34]:

```
1  %%time
2
3  # Представленеие данных в формате LIL - list to list
4  lil_matrix_rows = []
5  lil_matrix_data = []
6
7  for n in range(100000):
8      # простые множители, входящие в число n
9      prime_factors = sympy.primefactors(n)
10     lil_matrix_rows.append([prime_to_column[p] for p in prime_factors])
11     lil_matrix_data.append([1] * len(prime_factors))
```

started 09:04:58 2020-03-10, finished in 1.75s

```
CPU times: user 1.74 s, sys: 0 ns, total: 1.74 s
Wall time: 1.74 s
```

Индексы простых чисел, на которые делятся числа от 0 до 10

In [35]:

```
1  lil_matrix_rows[:11]
```

started 09:05:00 2020-03-10, finished in 7ms

Out[35]:

```
[[], [], [0], [1], [0], [2], [0, 1], [3], [0], [1], [0, 2]]
```

Степень простого числа не сохраняем:

In [36]:

```
1  lil_matrix_data[:11]
```

started 09:05:00 2020-03-10, finished in 10ms

Out[36]:

```
[[], [], [1], [1], [1], [1], [1, 1], [1], [1], [1], [1, 1]]
```

Составляем разреженную матрицу. Такая матрица хранится в виде списка `(i, j) -> value` .
Хранение данных в виде полной матрицы проблематично, а зачастую на практике невозможно вовсе.

In [37]:

```
1  factor_matrix = sparse.lil_matrix(
2      (len(lil_matrix_rows), len(primes)),
3      dtype=np.float32
4  )
5
6  factor_matrix.rows = np.array(lil_matrix_rows)
7  factor_matrix.data = np.array(lil_matrix_data)
```

started 09:05:00 2020-03-10, finished in 341ms

Обучаем UMAP, используя [косинусную метрику (https://en.wikipedia.org/wiki/Cosine_similarity)](https://en.wikipedia.org/wiki/Cosine_similarity).

In [38]:

```
1  %%time
2  mapper = UMAP(metric='cosine')
3  data_embedding = mapper.fit_transform(factor_matrix)
```

started 09:05:00 2020-03-10, finished in 5m 28s

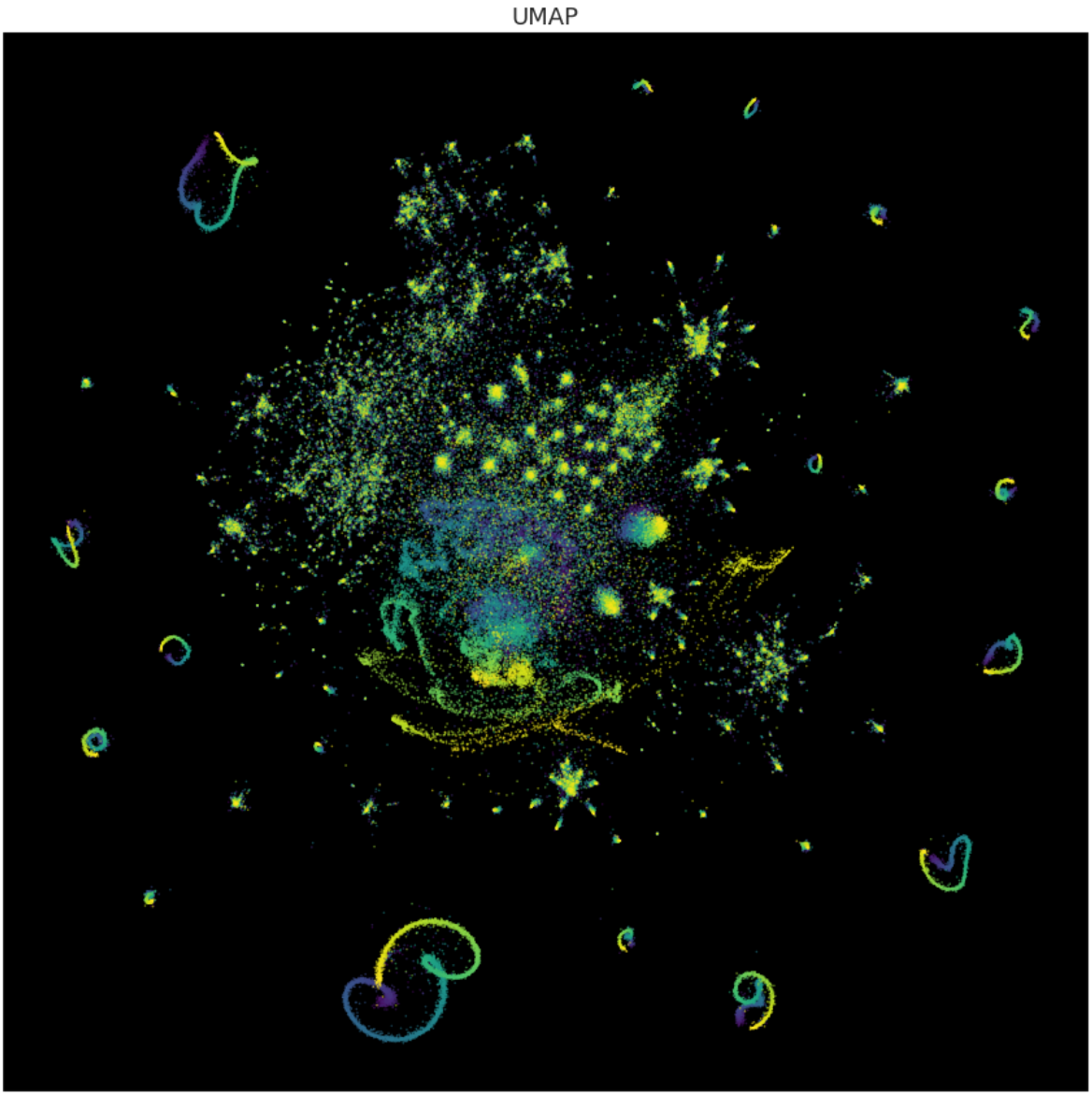
```
CPU times: user 6min 5s, sys: 8.81 s, total: 6min 14s
Wall time: 5min 28s
```

Визуализация

In [39]:

```
fig = plt.figure(figsize=(15, 15))
ax = fig.add_subplot(111)
plt.scatter(data_embedding[:, 0], data_embedding[:, 1], c=range(100000),
            cmap='viridis', s=0.5, alpha=0.5)
plt.title('UMAP')
ax.set(xticks=[], yticks=[], facecolor='black');
```

started 09:10:28 2020-03-10, finished in 3.99s



Разложим следующие чила на простые множители

In [40]:

```
%%time

lil_matrix_rows = []
lil_matrix_data = []

for n in range(100000, 110000):
    prime_factors = sympy.primefactors(n)
    lil_matrix_rows.append([prime_to_column[p] for p in prime_factors])
    lil_matrix_data.append([1] * len(prime_factors))
```

started 09:10:32 2020-03-10, finished in 214ms

```
CPU times: user 210 ms, sys: 0 ns, total: 210 ms
Wall time: 210 ms
```

Создадим из них разреженную матрицу

In [41]:

```
new_data = sparse.lil_matrix((len(lil_matrix_rows), len(primes)),
                             dtype=np.float32)
new_data.rows = np.array(lil_matrix_rows)
new_data.data = np.array(lil_matrix_data)
new_data
```

started 09:10:32 2020-03-10, finished in 21ms

Out[41]:

```
<10000x10453 sparse matrix of type '<class 'numpy.float32'>'
        with 27592 stored elements in LInked List format>
```

Переводим их в сжатое пространство и...

In [42]:

```
new_data_embedding = mapper.transform(new_data)
```

started 09:10:32 2020-03-10, finished in 29ms

```
---------------------------------------------------------------------------
-----
ValueError                                Traceback (most recent call
 last)
<ipython-input-42-e2f9dfbc9bfc> in <module>
----> 1 new_data_embedding = mapper.transform(new_data)

/usr/local/lib/python3.7/dist-packages/umap/umap_.py in transform(sel
f, X)
   1626
   1627         if self._sparse_data:
-> 1628             raise ValueError("Transform not available for spar
se input.")
   1629         elif self.metric == "precomputed":
   1630             raise ValueError(

ValueError: Transform not available for sparse input.
```

Хотя на сайте в нестабильной версии все есть. Ну не доработали еще разработчики UMAP. Бывает.

Подождем...