In [1]:

```
import numpy as np
from sklearn.datasets import make_blobs
from sklearn.manifold import TSNE
from sklearn.decomposition import PCA

import seaborn as sns
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline

sns.set()
```

t-SNE

Страница на сайте автора (http://lvdmaaten.github.io/tsne/)

Реализация в R (https://cran.r-project.org/web/packages/tsne/tsne.pdf)

Реализация в sklearn: `sklearn.manifold.TSNE` (http://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.manifold.TSNE.html) `(n_components=2, perplexity=30, ...)`

- `n_components` --- число компонент;
- `perplexity` --- перплексия (сглаженный показатель эффективного числа соседей);

Методы:

- `fit_transforn(X)` --- обучиться на данных `X` и вернуть сжатое представление `X`.

Примеры использования метода t-SNE

Генерация выборки размера 500 из пяти "облаков" (гауссовских выборок) в 10-мерном пространстве.

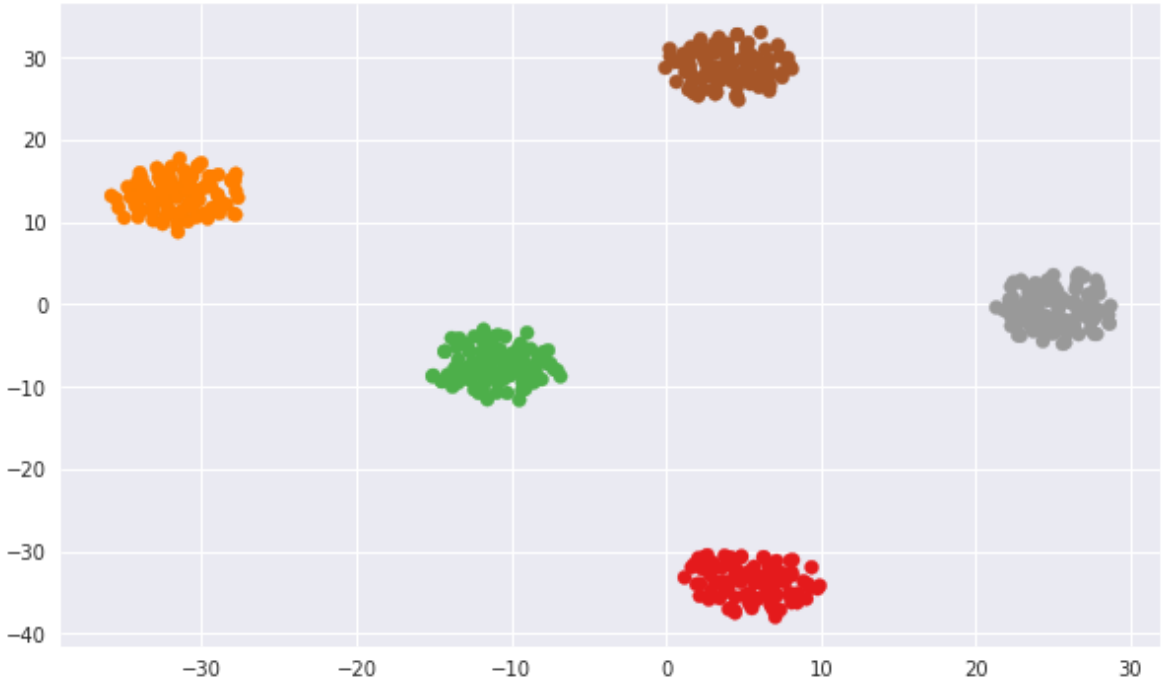
In [2]:

```
X, y = make_blobs(n_samples=500, n_features=10, centers=5)
```

Простое применение t-SNE для сжатия в пространство размерности 2.

In [3]:

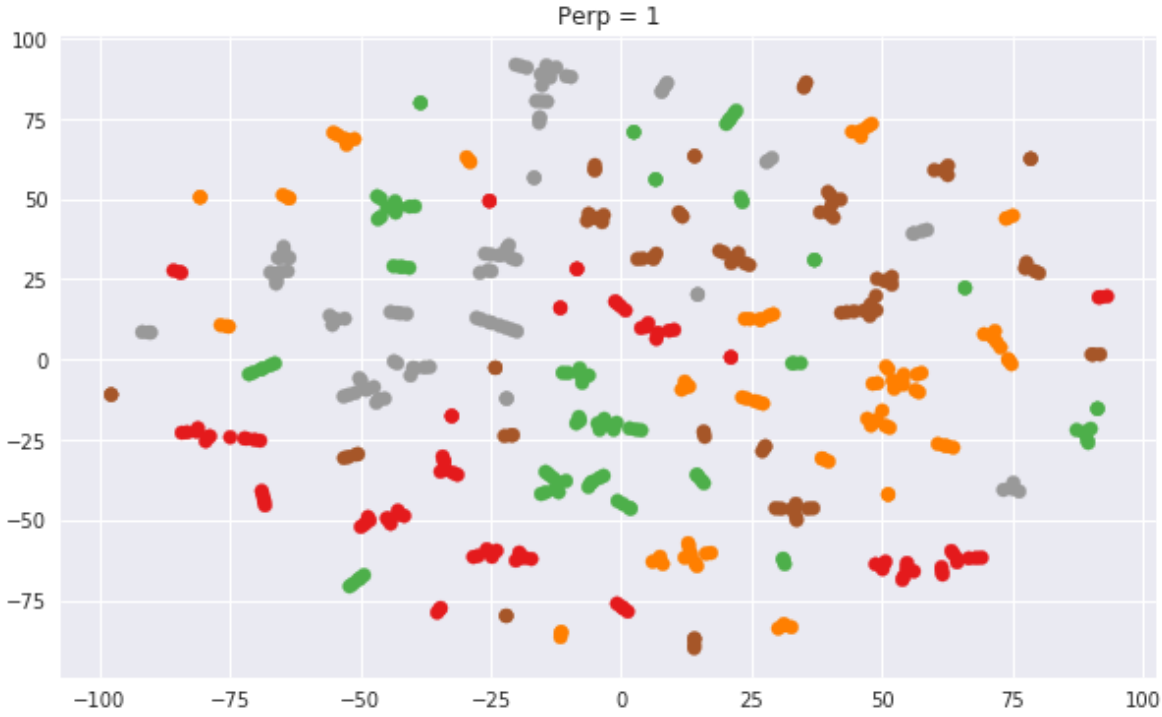
```
tsne = TSNE(n_components=2)
X_hat = tsne.fit_transform(X)

plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.scatter(X_hat[:, 0], X_hat[:, 1], c=y, cmap='Set1')
plt.show()
```

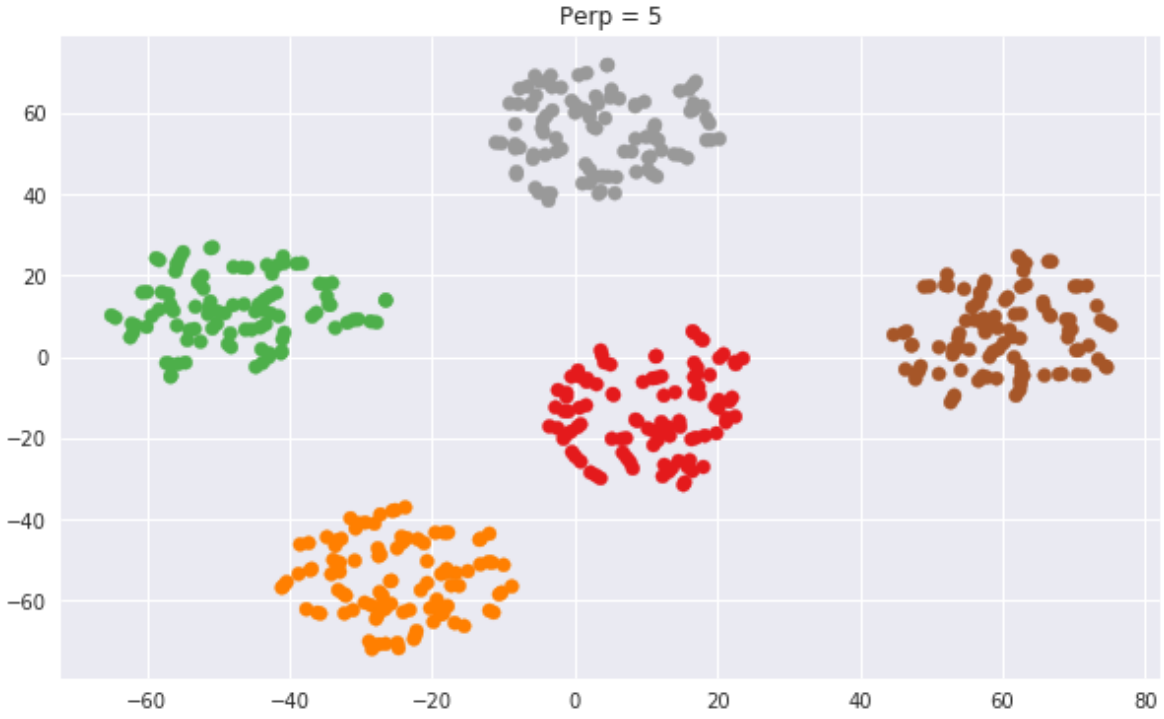


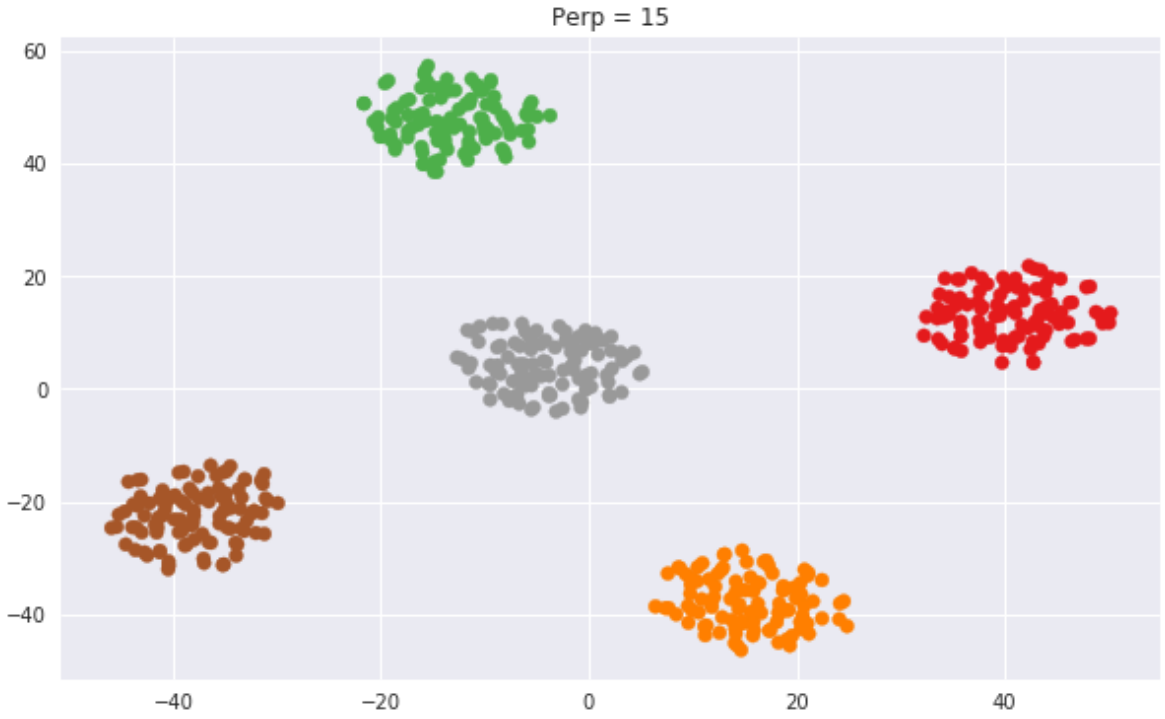
Посмотрим, как меняется расположение точек в двумерном пространстве в зависимости от значения перплексии (сглаженный показатель эффективного числа соседей).

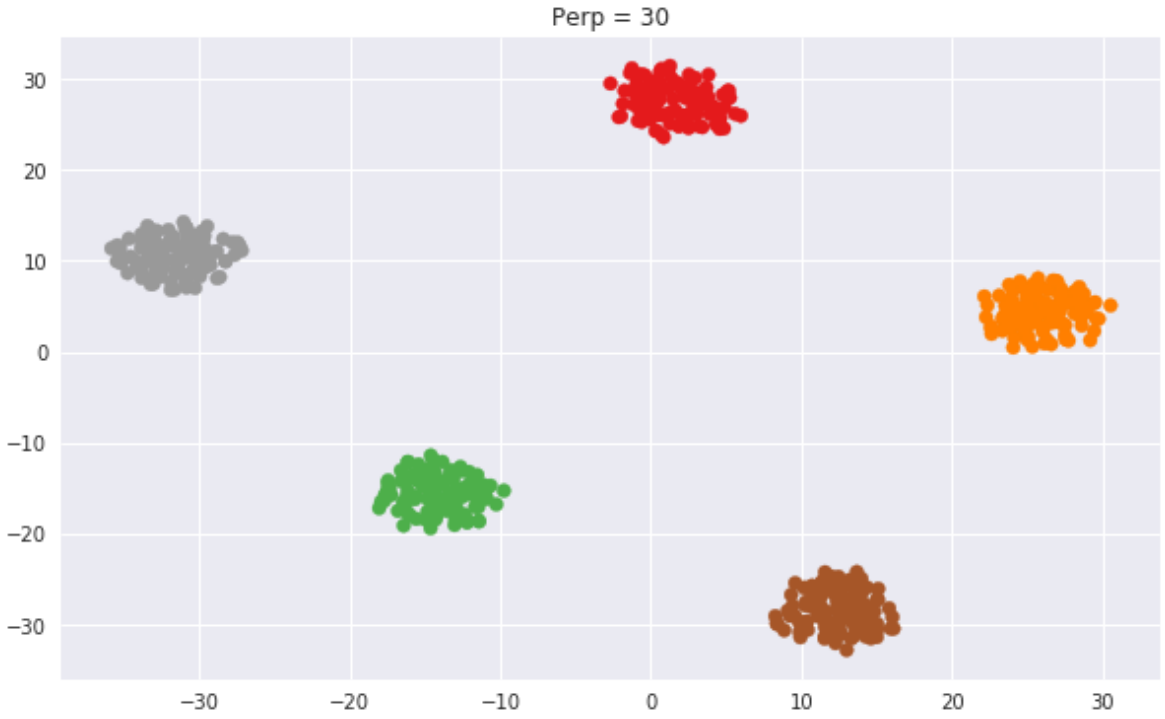
In [4]:

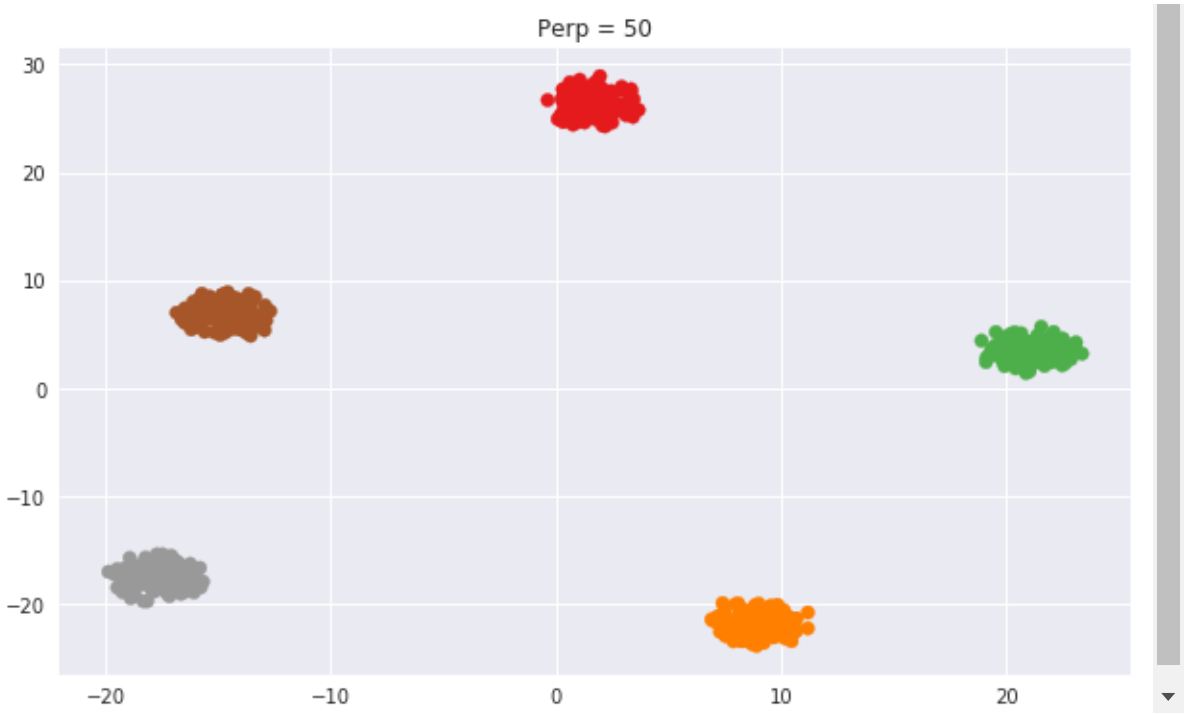
```
for perplexity in [1, 5, 15, 30, 50, 75, 100]:

    tsne = TSNE(n_components=2, perplexity=perplexity)
    X_hat = tsne.fit_transform(X)

    plt.figure(figsize=(10, 6))
    plt.scatter(X_hat[:, 0], X_hat[:, 1], c=y, cmap='Set1')
    plt.title('Perp = {}'.format(perplexity))
    plt.show()
```

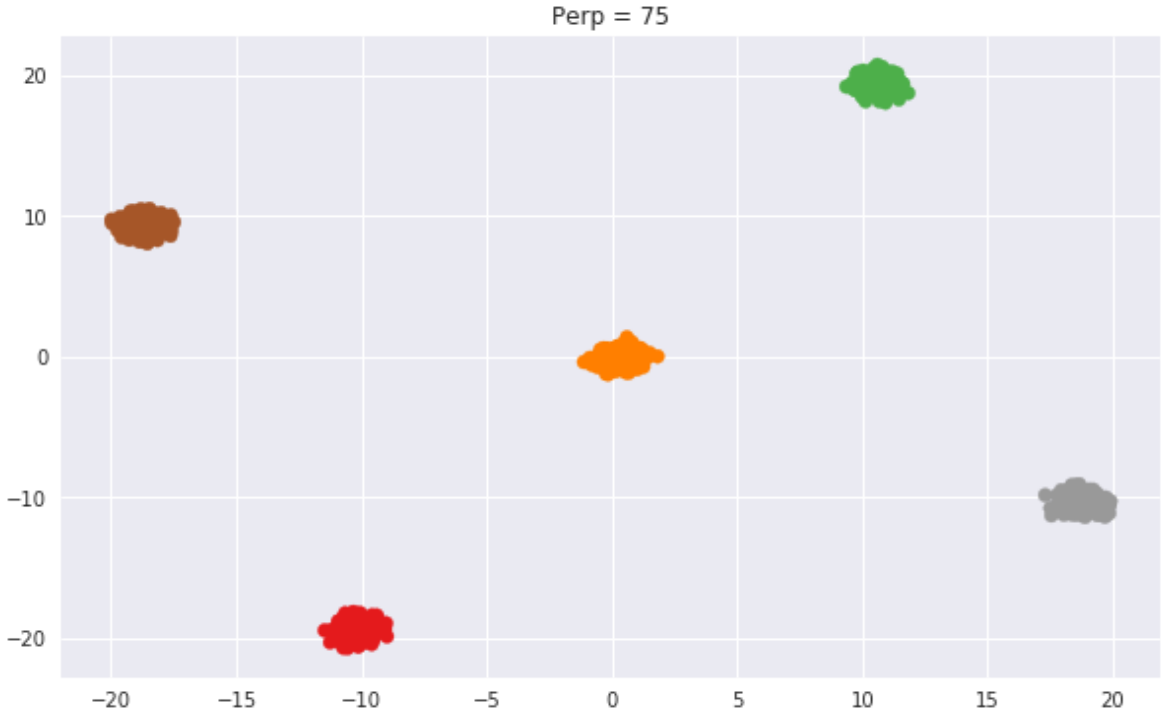


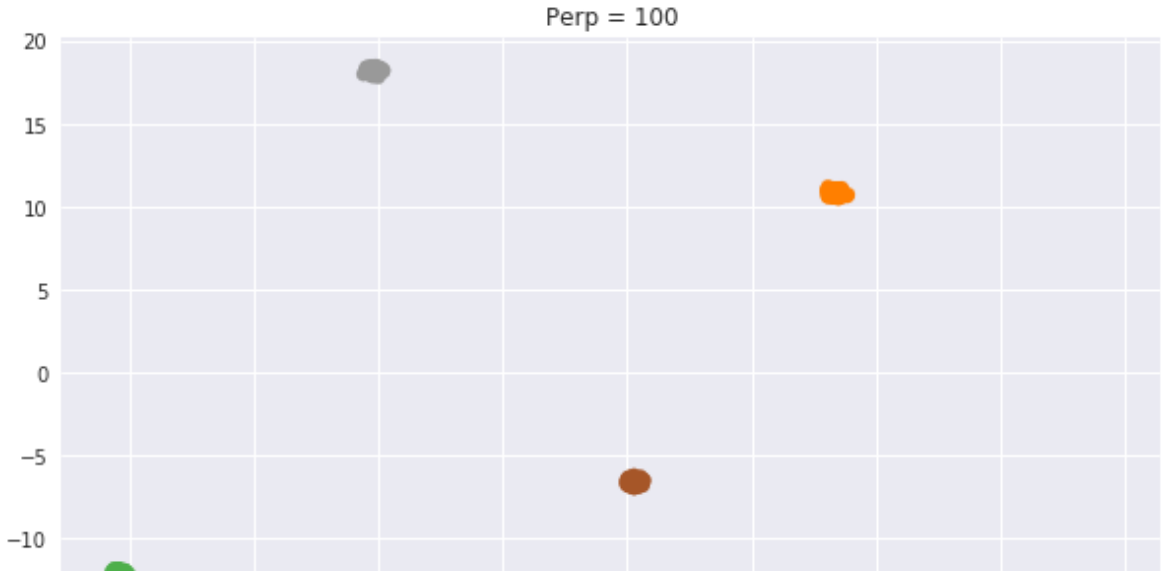



Perp = 15
60
40
20
0
−20
−40
−40
−20
0
20
40


Perp = 30
30
20
10
0
−10
−20
−30
−30
−20
−10
0
10
20
30


Perp = 50
30
20
10
0
−10
−20
−20
−10
0
10
20


Perp = 75
20
10
0
−10
−20
−20
−15
−10
−5
0
5
10
15
20



Как видим, чем меньше перплексия, тем более картинка получается размытой. Это происходит из-за того, что с уменьшением перплексии уменьшаются величины σ_i, отвечающие за дисперсию. При малом значении перплексии на расположение точки в маломерном пространстве влияют только самые ближайшие соседи.

Если же увеличить дисперсию "облаков", то картинка станет хуже при том же значении перплексии (30).

In [5]:

```
X, y = make_blobs(n_samples=500, n_features=10, centers=5, cluster_std=5)

tsne = TSNE(n_components=2)
X_hat = tsne.fit_transform(X)

plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.scatter(X_hat[:, 0], X_hat[:, 1], c=y, cmap='Set1')
plt.show()
```

MNIST

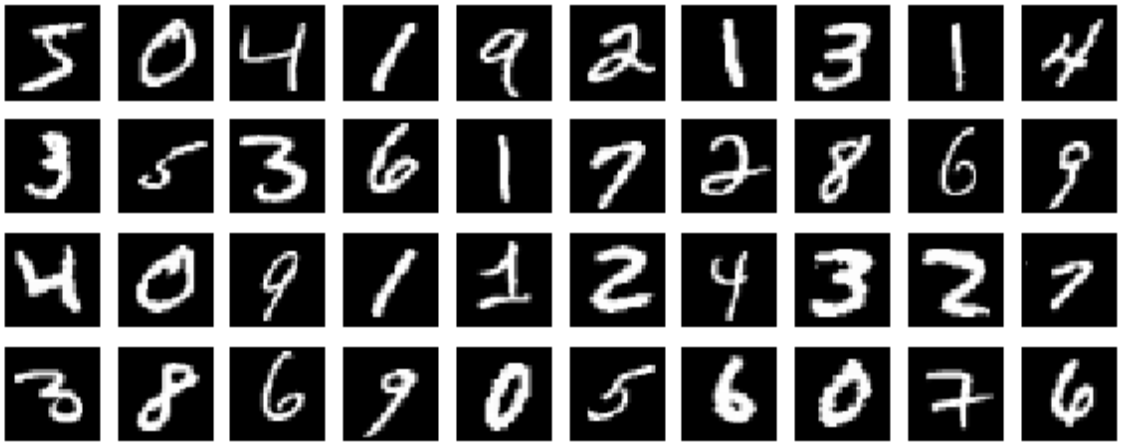
Загрузим часть обычного MNIST'a

In [ ]:

```
X = np.loadtxt('train.txt')
labels = np.loadtxt('train_labels.txt')
```

In [7]:

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



Применим к нему сначала PCA для сжатия в пространство размерности 30, а затем t-SNE для сжатия в двумерное пространство.

In [8]:

```
%%time
pca = PCA(n_components=30)
Y = pca.fit_transform(X)
```

```
CPU times: user 11.8 s, sys: 3.2 s, total: 15 s
Wall time: 5.11 s
```

Доля дисперсии данных, которую они могут объяснить

In [9]:

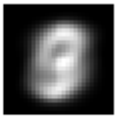
```
pca.explained_variance_ratio_.sum()
```

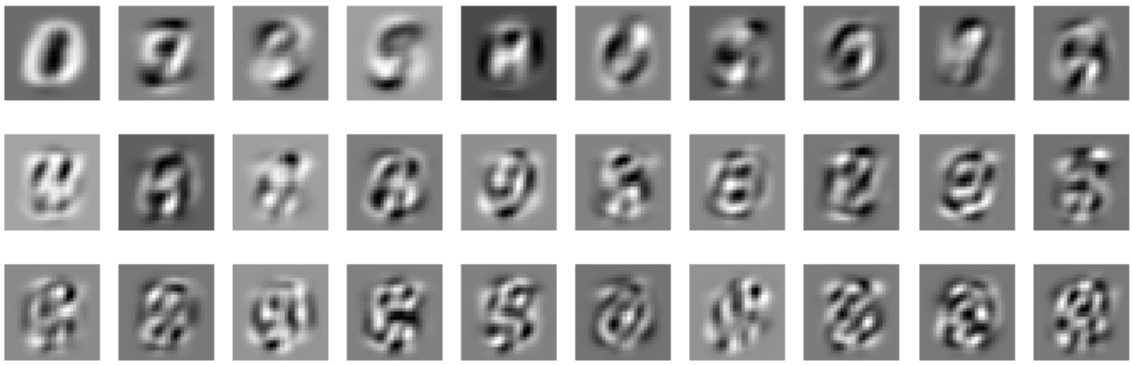
Out[9]:

```
0.730539514069253
```

In [10]:

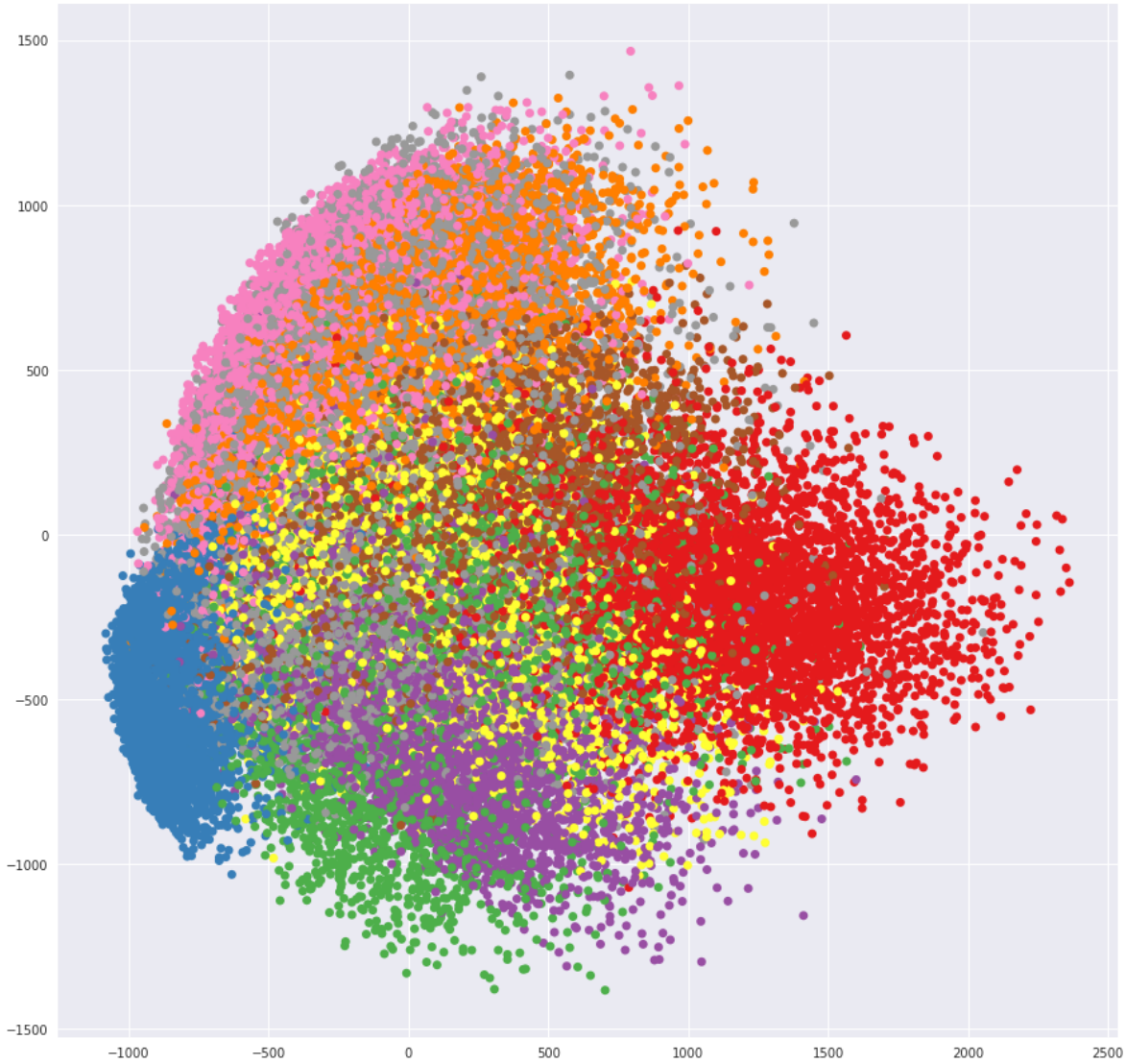
```
plt.figure(figsize=(1, 1))
plt.imshow(pca.mean_.reshape((28, 28)), cmap='gray')
plt.axis('off')
plt.show()

plt.figure(figsize=(12, 4))
for i in range(30):
    plt.subplot(3, 10, i + 1)
    plt.imshow(pca.components_[i].reshape((28, 28)), cmap='gray')
    plt.axis('off')
```





In [11]:

```
plt.figure(figsize=(15, 15))
plt.scatter(Y[:, 0], Y[:, 1], c=labels, linewidths=0, cmap='Set1')
plt.show()
```



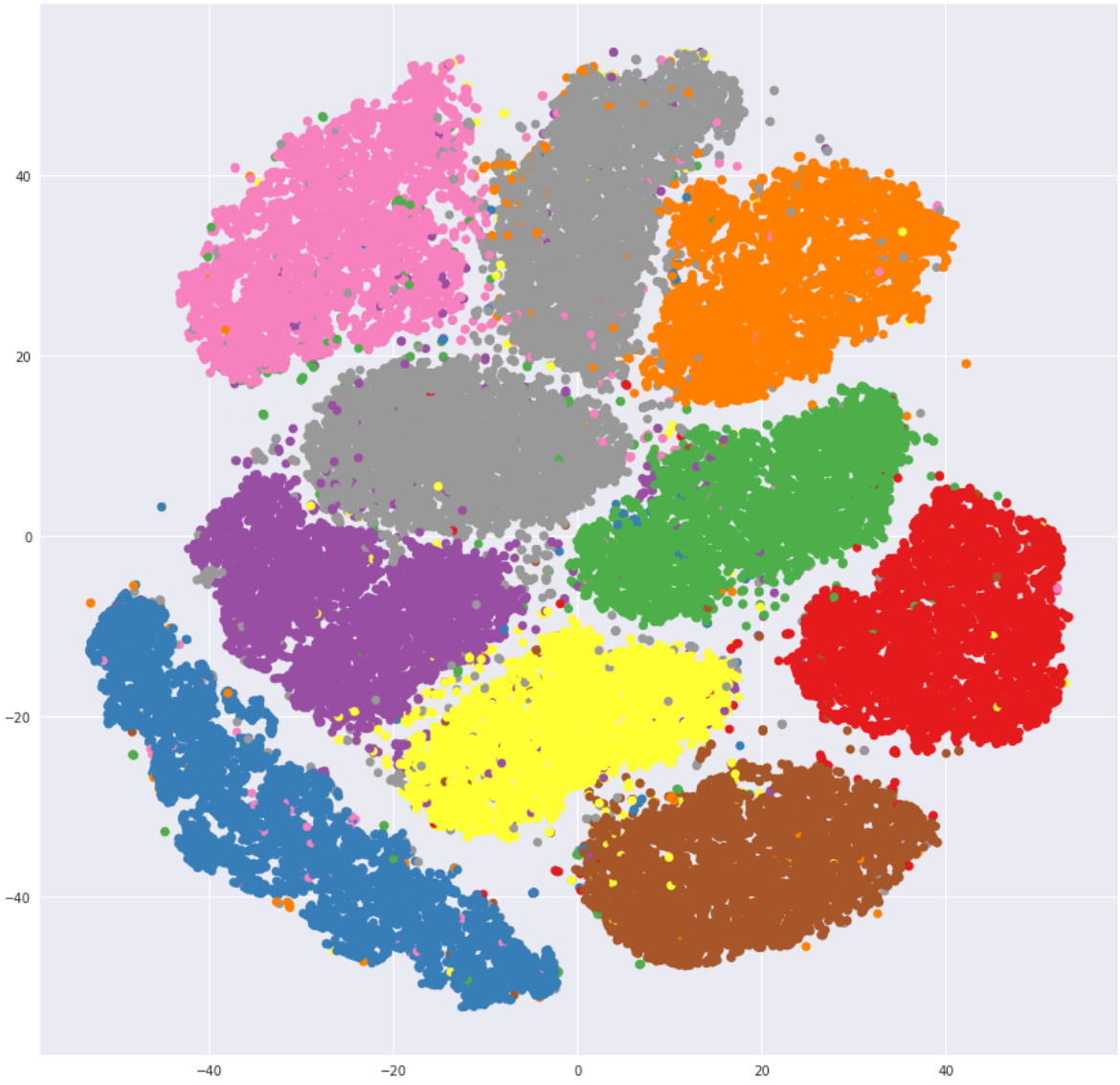
In [6]:

```
%%time
tsne = TSNE(n_components=2, perplexity=40)
Z = tsne.fit_transform(Y)
```

```
CPU times: user 27min 6s, sys: 1min 47s, total: 28min 54s
Wall time: 28min 58s
```

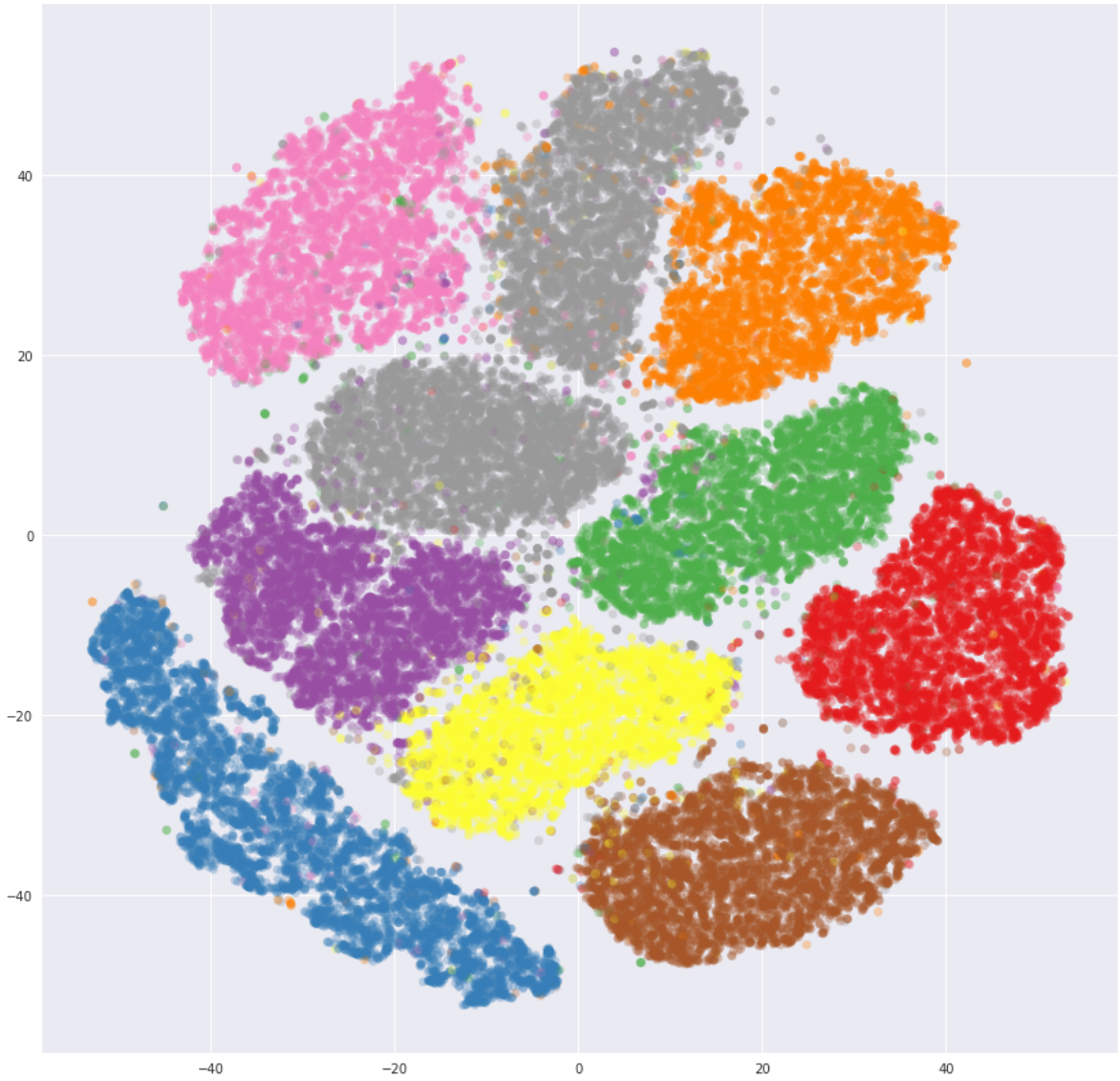
In [7]:

```
1 plt.figure(figsize=(15, 15))
2 plt.scatter(Z[:, 0], Z[:, 1], c=labels, linewidths=0, cmap='Set1')
3 plt.show()
```



In [10]:

```
plt.figure(figsize=(15, 15))
plt.scatter(Z[:, 0], Z[:, 1], c=labels, linewidths=0, cmap='Set1', alpha=0.3)
plt.show()
```



Оригинальная картинка http://lvdmaaten.github.io/tsne/examples/mnist_tsne.jpg (http://lvdmaaten.github.io/tsne/examples/mnist_tsne.jpg)

Прикладная статистика и анализ данных, 2019

Никита Волков

https://mipt-stats.gitlab.io/ (https://mipt-stats.gitlab.io/)