8-manifolds_spectral-emb

March 11, 2021

#

Ciencia de Datos

Víctor Muñiz Sánchez

Maestría en Cómputo Estadístico

Enero a junio 2021

1 Spectral embeddings

1.1 Ejemplo 1

[1]:
```
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
import importlib

sns.set()
%matplotlib inline
%load_ext autoreload
%autoreload 2

import os
os.chdir('/home/victor/cursos/ciencia_de_datos_2021/programs/')
from spectral_clustering import *
```

[2]:
```
def plot_graph(X,knn_graph):
    # crea los indices
    a, b = np.where(knn_graph>0)
    indices_temp = np.array([a,b]).T
    ix = indices_temp
    for i in range(indices_temp.shape[0]):
        test_elem = indices_temp[i,]
        temp = np.sum(np.isin(indices_temp,test_elem),axis=1)
        ix[temp==2,] = test_elem

    indices = np.unique(ix,axis=0)
```

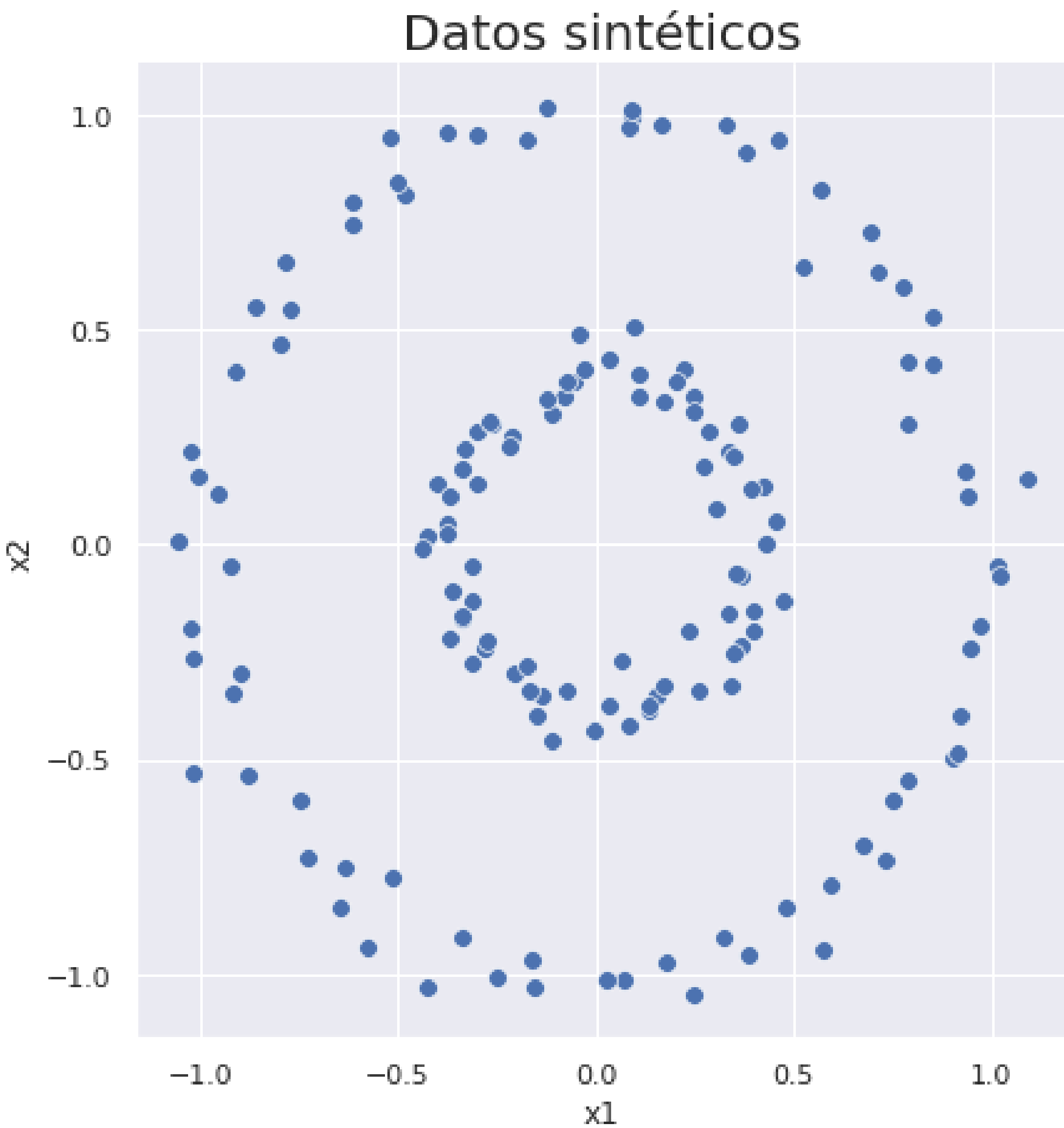
```
    data_toy = pd.DataFrame(X)
    data_toy.columns = ['x1','x2']
    data_toy = pd.DataFrame(data_toy).assign(cl = y)
    fig, ax = plt.subplots(figsize=(8,8))
    sns.scatterplot(x='x1', y='x2', data = data_toy, s=150)
    #for i in range(X.shape[0]):
    #    plt.text(X[i,0], X[i,1]+.1, i)

    for i in range(indices.shape[0]):
        coords = np.array([X[indices[i,0],:], X[indices[i,1],:]])
        #sns.lineplot(coords.T[0,], coords.T[1,], color='black',ax=ax)
        plt.plot(coords.T[0,], coords.T[1,], color='black')
```

[3]:

```
ndata = 150
X, y, custom_palette, kclust = get_dataset('dona', ndata)

data_toy = pd.DataFrame(X)
data_toy.columns = ['x1','x2']
data_toy = pd.DataFrame(data_toy).assign(cl = y)
sns.relplot(x='x1', y='x2', data = data_toy, palette=custom_palette, s=60,␣
 ↪height=6)
plt.title('Datos sintéticos', fontsize=20)
```

[3]:

```
Text(0.5, 1.0, 'Datos sintéticos')
```



1.1.1 Parámetros para clústering espectral

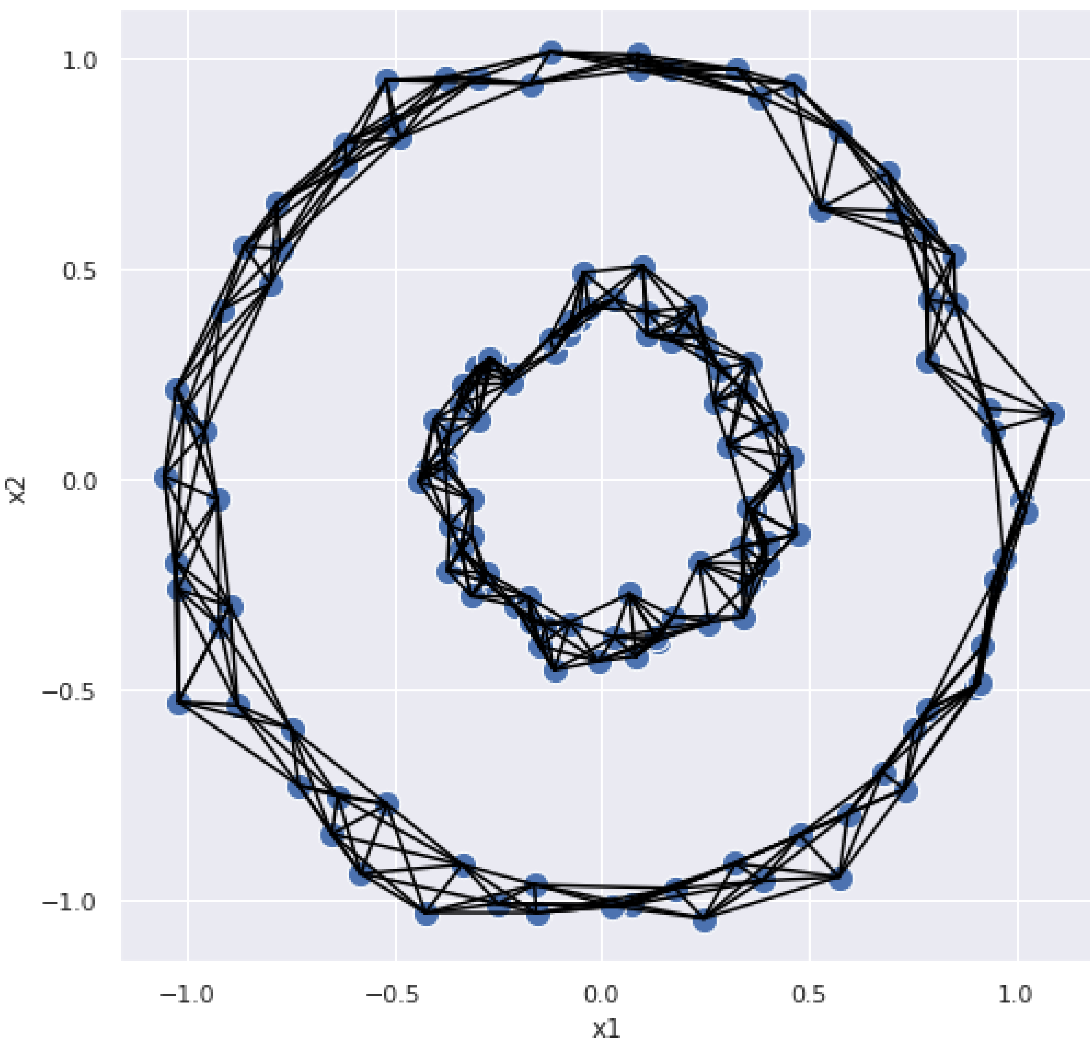
[4]:
```
knn = 8 # k-vecinos cercanos para la construcción del grafo
sigma = 1.5 # sigma del Kernel Gaussiano
lflag = 'rw' # Tipo de Laplaciano
```

1.1.2 Realiza el embedding de los datos según el Laplaciano inducido por el grafo construido

[5]:
```
indices, knn_graph = graph(X,knn,mutual=False)
W = adjacency_matrix(X, knn_graph, sigma, True)
L, D = laplacian(W, flag=lflag)
vals, vecs, vecs_k = eigen_Lap(L,kclust,lflag)
```

1.1.3 El grafo creado

[6]:
```
plot_graph(X,knn_graph)
```

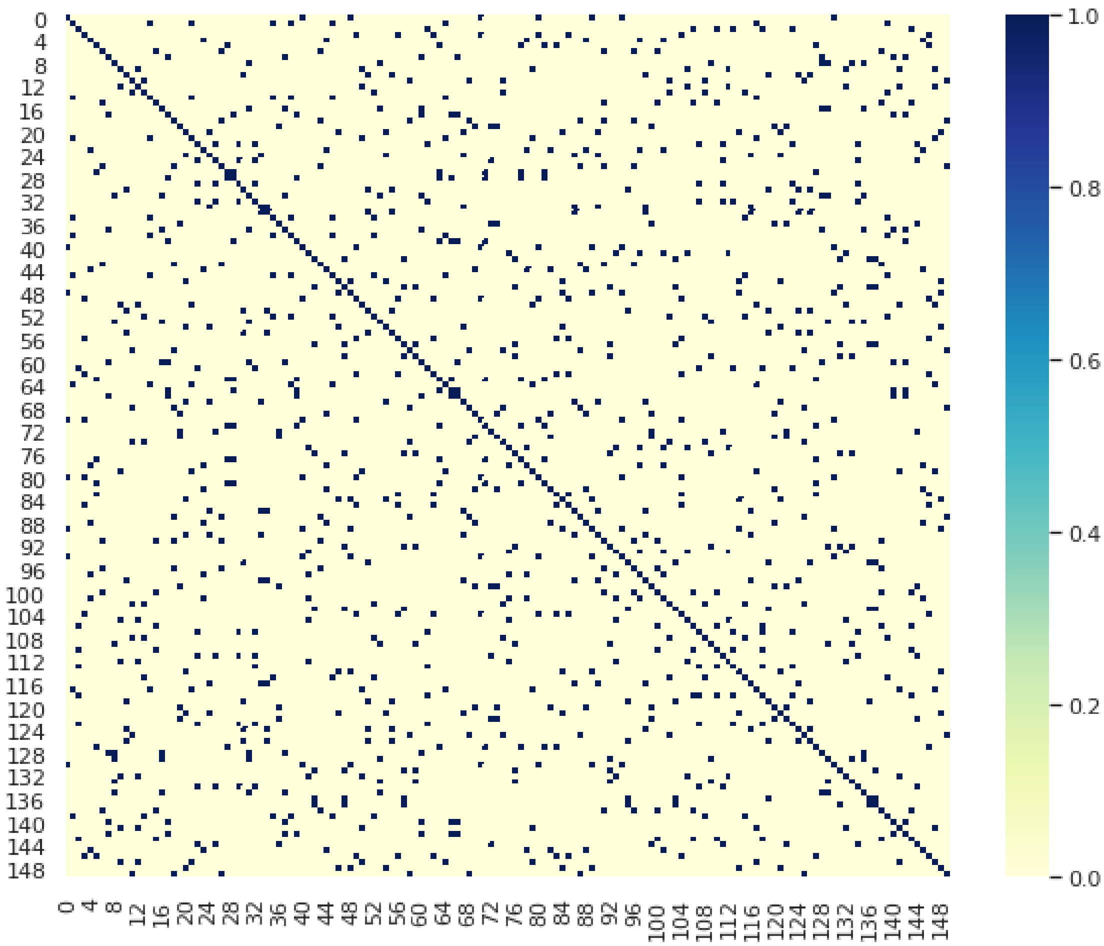


Detalle con el grafo. Cuando usamos $k-$nn induce un grafo dirigido, por lo tanto, no es simétrico. Dos formas de solucionarlo es: - ignorar las direcciones y considerar conexiones simétricas - conexiones mútuas

1.1.4 Matriz de Adyacencias o Afinidad

[7]:
```
plt.figure(figsize=(10,8))
sns.heatmap(knn_graph, cmap="YlGnBu")
```

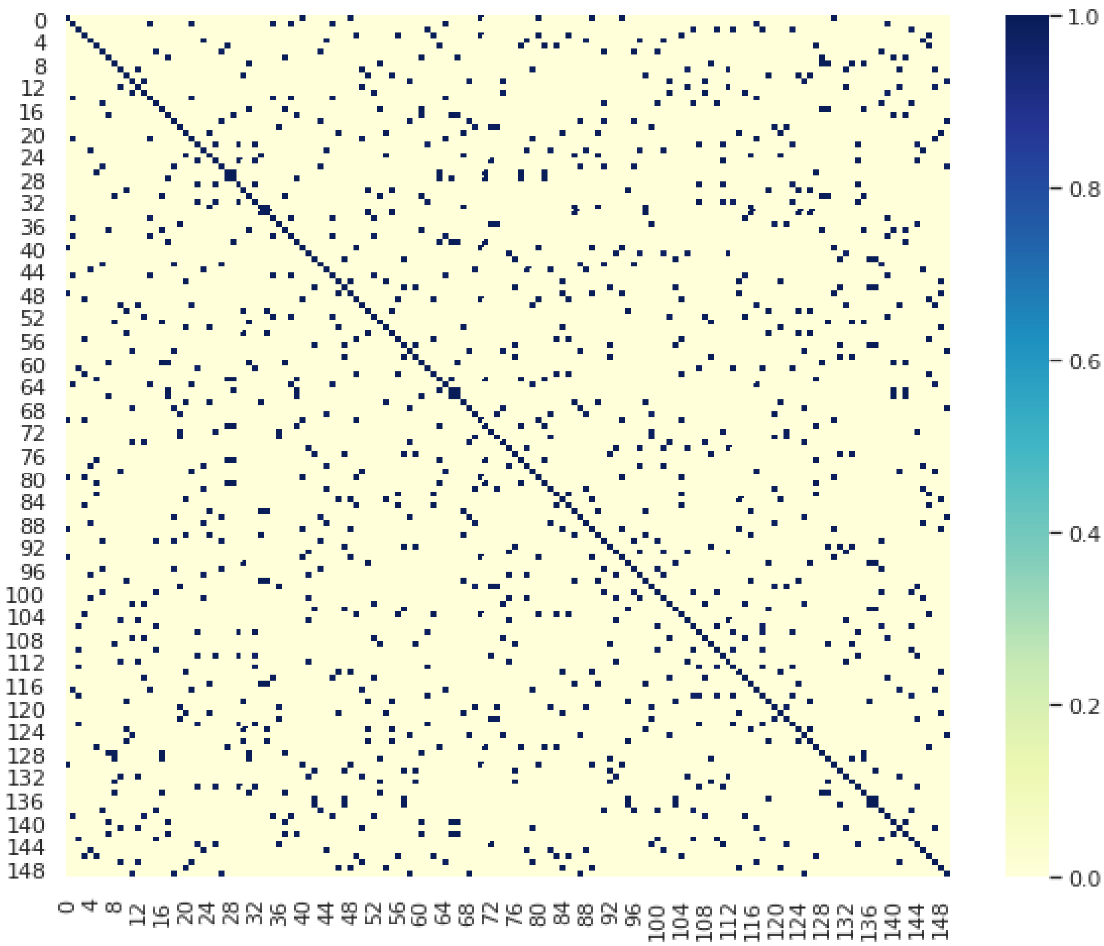
[7]: <AxesSubplot:>



Matriz de adyacencias (afinidad) sin pesos. Solo muestra los componentes están conectados

[8]:
```
plt.figure(figsize=(10,8))
sns.heatmap(W, cmap="YlGnBu")
```

[8]: <AxesSubplot:>



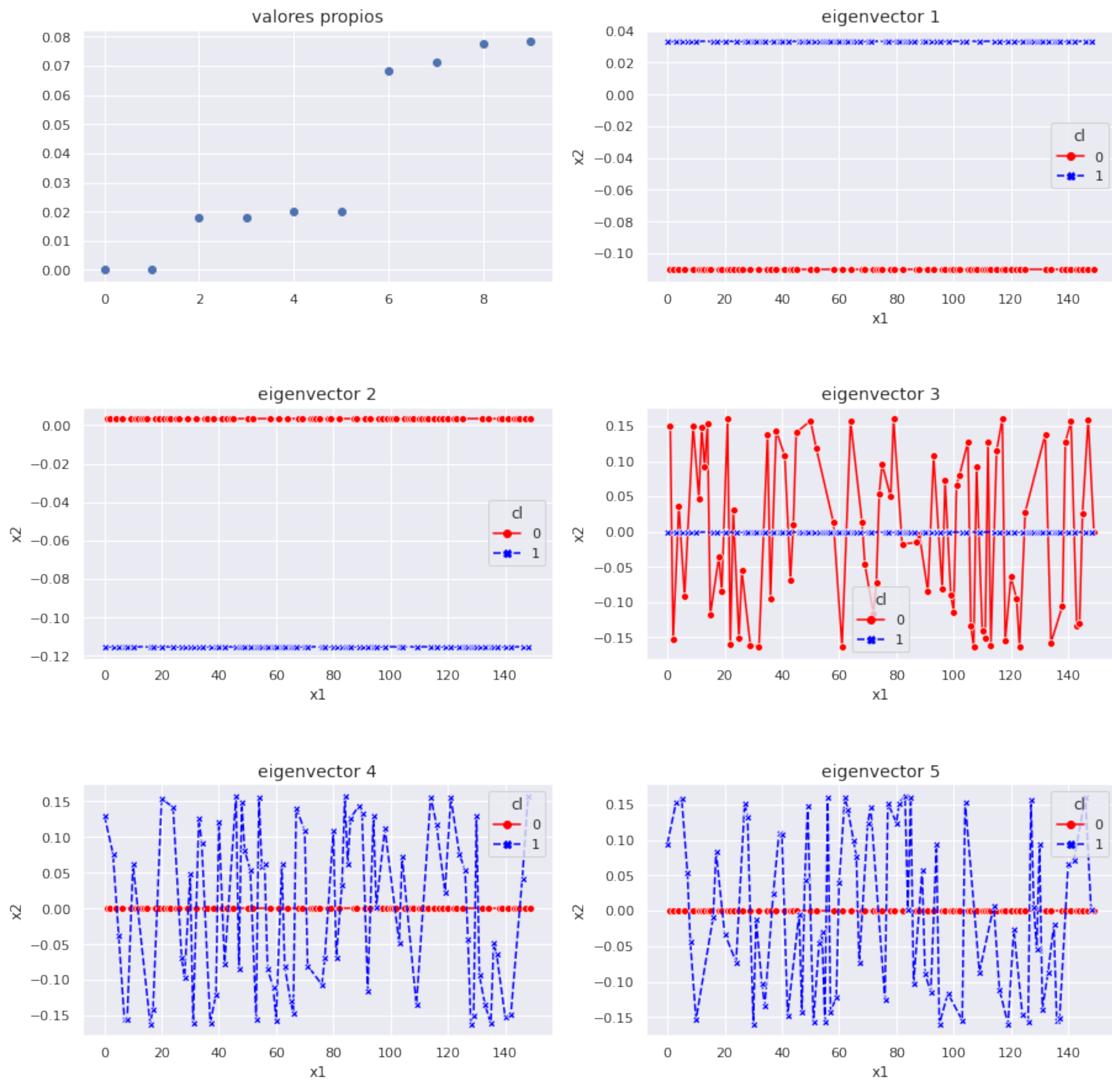
Matriz de adyacencias (afinidad) pesada usando distancia Gaussiana, es decir, con pesos $w_{i,j} = e^{\frac{-\|\mathrm{x}_i - \mathrm{x}_j\|^2}{2\sigma^2}}$ si x_i y x_j se conectan.

1.1.5 Análisis espectral. Observa el tipo de Laplaciano que usamos (L, $L_{\mathbf{sym}}$ ó $L_{\mathbf{rw}}$)

[9]:
```
nv = 10
fig = plt.figure(figsize=(15,15))
plt.subplots_adjust(hspace = .5)
fig.add_subplot(321)
plt.title('valores propios', fontsize=14)
plt.scatter(range(nv),vals[:nv])
fig.add_subplot(322)
plt.title('eigenvector 1', fontsize=14)
data_vecs = pd.DataFrame(dict(x1=range(vecs.shape[0]),x2=vecs[:,0],cl=y))
sns.lineplot(x='x1', y='x2', data = data_vecs, hue='cl', palette =␣
 ↪custom_palette, legend = 'brief',
```

```
                style = 'cl', markers = True)
fig.add_subplot(323)
data_vecs = pd.DataFrame(dict(x1=range(vecs.shape[0]),x2=vecs[:,1],cl=y))
plt.title('eigenvector 2', fontsize=14)
sns.lineplot(x='x1', y='x2', data = data_vecs, hue='cl', palette =␣
 ↪custom_palette,legend = 'brief',
                style = 'cl', markers = True)
fig.add_subplot(324)
data_vecs = pd.DataFrame(dict(x1=range(vecs.shape[0]),x2=vecs[:,2],cl=y))
plt.title('eigenvector 3', fontsize=14)
sns.lineplot(x='x1', y='x2', data = data_vecs, hue='cl', palette =␣
 ↪custom_palette,legend = 'brief',
                style = 'cl', markers = True)
fig.add_subplot(325)
data_vecs = pd.DataFrame(dict(x1=range(vecs.shape[0]),x2=vecs[:,3],cl=y))
plt.title('eigenvector 4', fontsize=14)
sns.lineplot(x='x1', y='x2', data = data_vecs, hue='cl', palette =␣
 ↪custom_palette,legend = 'brief',
                style = 'cl', markers = True)
fig.add_subplot(326)
data_vecs = pd.DataFrame(dict(x1=range(vecs.shape[0]),x2=vecs[:,4],cl=y))
plt.title('eigenvector 5', fontsize=14)
sns.lineplot(x='x1', y='x2', data = data_vecs, hue='cl', palette =␣
 ↪custom_palette,legend = 'brief',
                style = 'cl', markers = True)
```

[9]:
```
<AxesSubplot:title={'center':'eigenvector 5'}, xlabel='x1', ylabel='x2'>
```



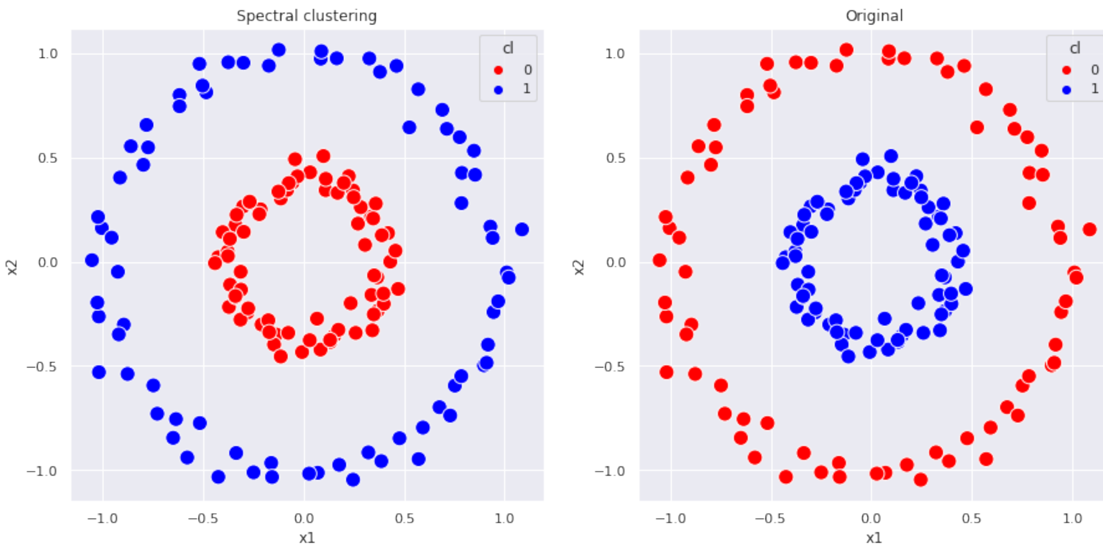
1.1.6 Finalmente, realizamos $k-$means con el embedding obtenido

[10]:

```
# kmeans
kmeans = cluster.KMeans(n_clusters=kclust, init='random',random_state=0)
y_km = kmeans.fit_predict(vecs_k)
data_km = pd.DataFrame(dict(x1=X[:,0],x2=X[:,1],cl = y_km))

fig = plt.figure(figsize=(15,7))
fig.add_subplot(121)
plt.title('Spectral clustering')
sns.scatterplot(x='x1', y='x2', data = data_km, hue='cl', s=150,
            palette = custom_palette,legend = 'brief')
fig.add_subplot(122)
plt.title('Original')
```

```
sns.scatterplot(x='x1', y='x2', hue = 'cl', data = data_toy,␣
 ↪palette=custom_palette, s=150)
```

[10]: <AxesSubplot:title={'center':'Original'}, xlabel='x1', ylabel='x2'>

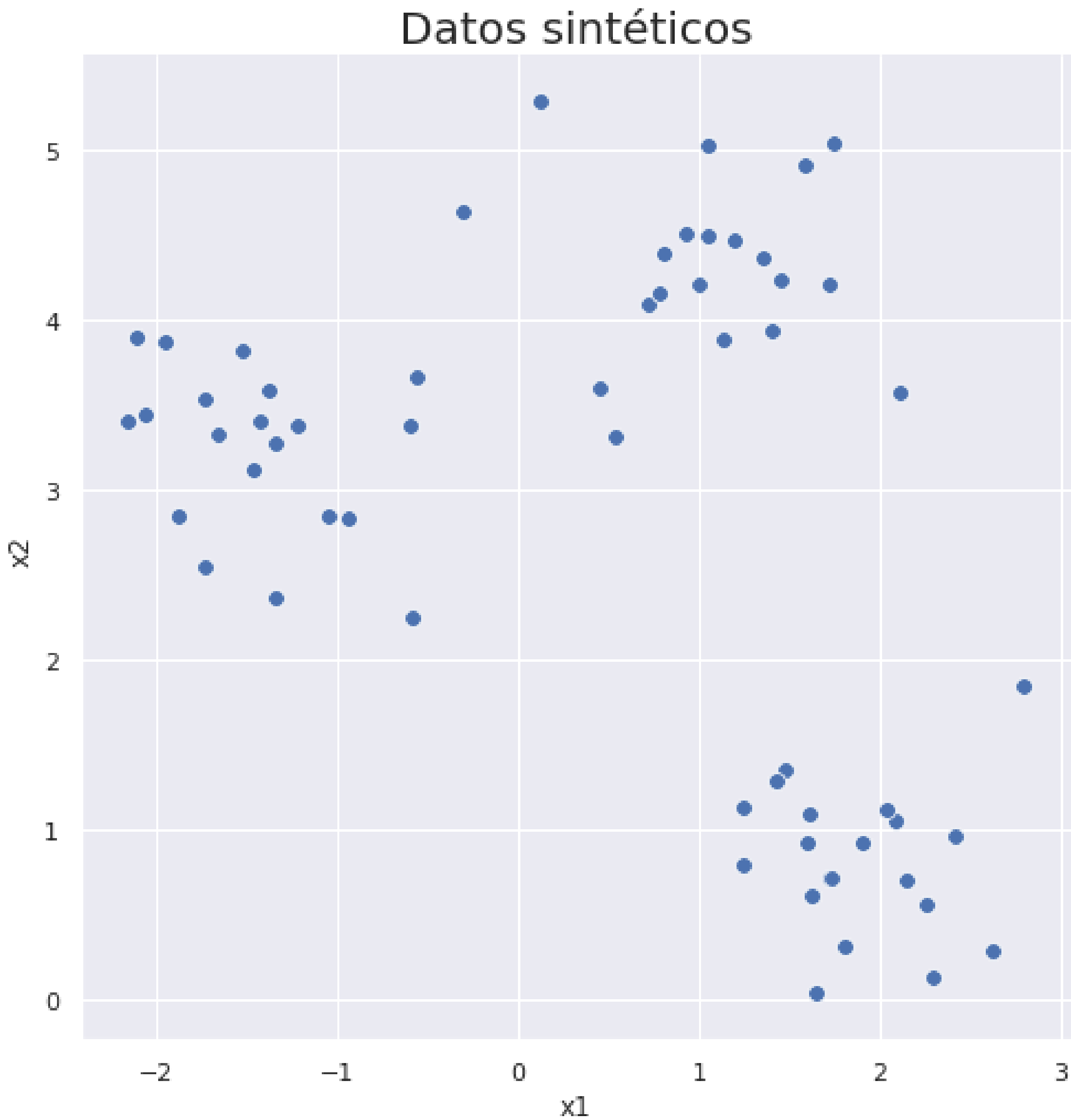


- MENCIONAR LOS DETALLES DE LAS GRAFICAS DE ADYACENCIA, SOBRE TODO LAS FULL CONNECTED CON KERNEL GAUSSIANO Y COMO SE RELACIONAN EN SKLEARN CON LAS K-NEIGHBOR
- MOSTRAR EJEMPLO ESPIRALES
- MOSTRAR IMPLEMENTACION SKLEARN Y COMPARARLO CON LA IMPLEMENTACION SEGUN LA MATRIZ DE AFINIDAD (KNN O KERNEL)
- MOSTRAR EL CONCEPTO DE EMBEDDING CON EL PAIRSPLOT DE EIGENVECTORES
- MOSTRAR SPECTRAL EMBEDDING DE SKLEARN
- MOSTRAR EJEMPLO IMAGENES

1.2 Ejemplo 2

[50]:
```
ndata = 60
X, y, custom_palette, kclust = get_dataset('blobs', ndata)

data_toy = pd.DataFrame(X)
data_toy.columns = ['x1','x2']
data_toy = pd.DataFrame(data_toy).assign(cl = y)
sns.relplot(x='x1', y='x2', data = data_toy, palette=custom_palette, height=7,␣
 ↪s=60)
plt.title('Datos sintéticos', fontsize=20)
```

[50]: Text(0.5, 1, 'Datos sintéticos')



1.2.1 Parámetros para clústering espectral

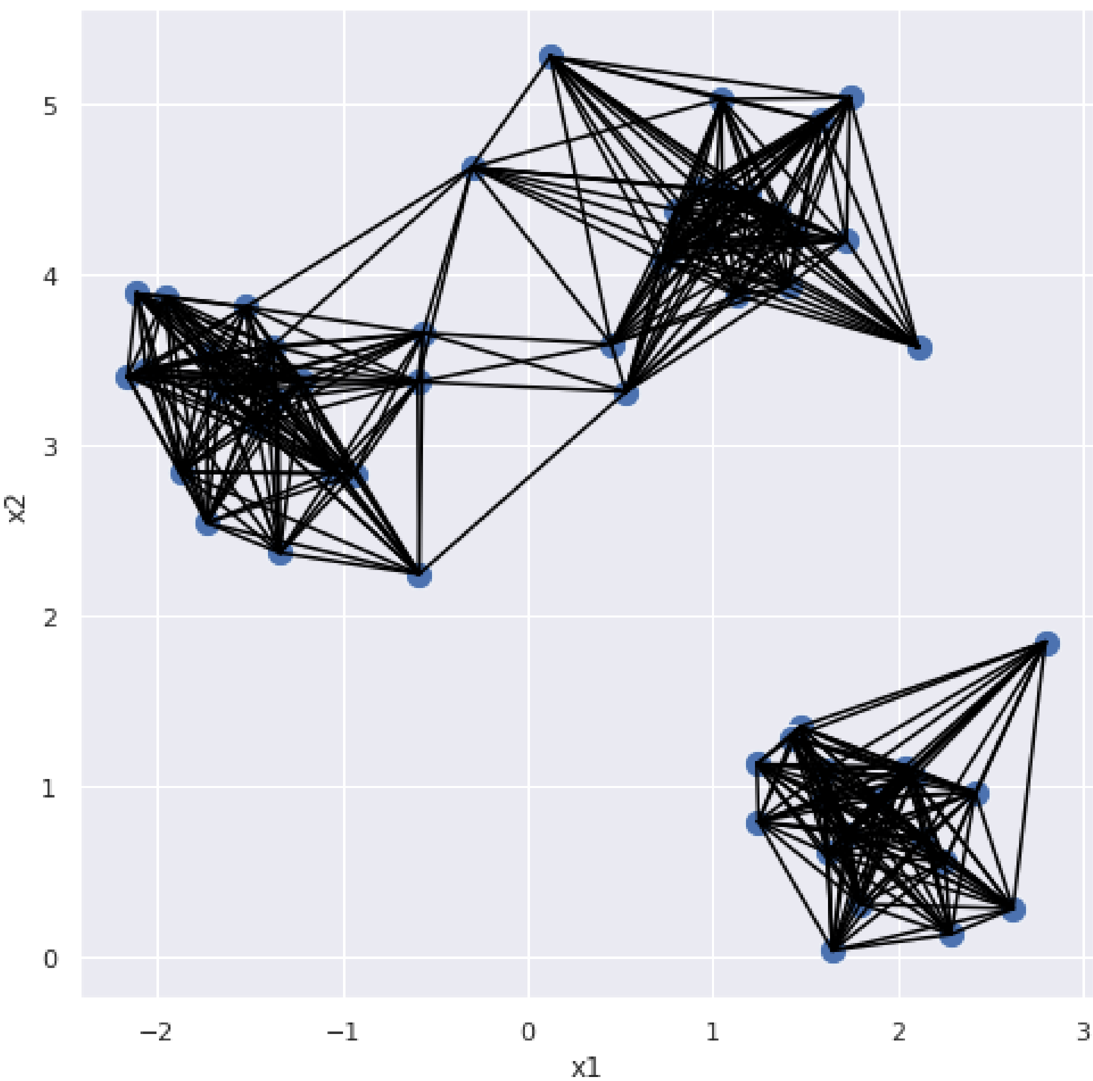
[23]:
```
knn = 15 # k-vecinos cercanos para la construcción del grafo
sigma = 1.5 # sigma del Kernel Gaussiano
lflag = 'rw' # Tipo de Laplaciano
```

1.2.2 Realiza el embedding de los datos según el Laplaciano inducido por el grafo construido

[24]:
```
indices, knn_graph = graph(X,knn,mutual=False)
W = adjacency_matrix(X, knn_graph, sigma, True)
L, D = laplacian(W, flag=lflag)
vals, vecs, vecs_k = eigen_Lap(L,kclust,lflag)
```

1.2.3 El grafo creado

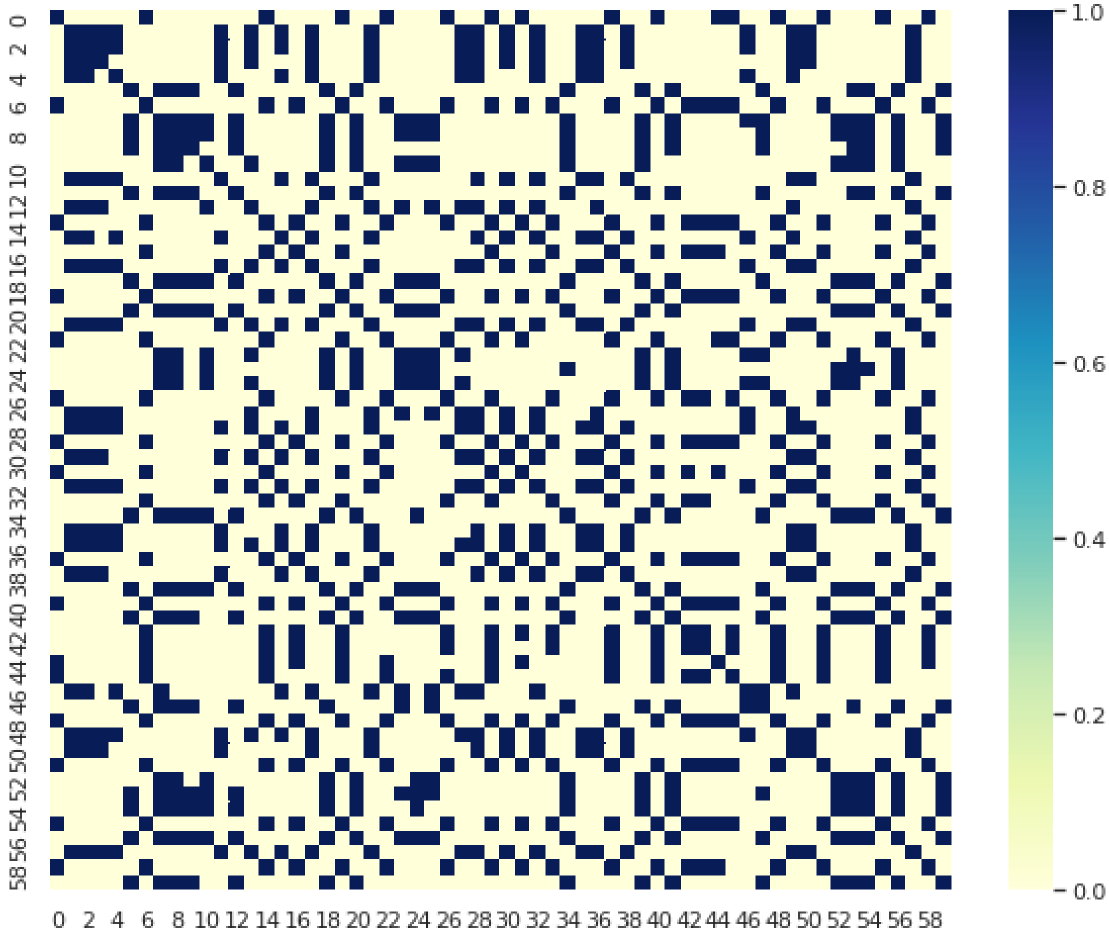
[25]:
```
plot_graph(X,knn_graph)
```



1.2.4 Matriz de Adyacencias o Afinidad

[26]:
```
plt.figure(figsize=(10,8))
sns.heatmap(knn_graph, cmap="YlGnBu")
```

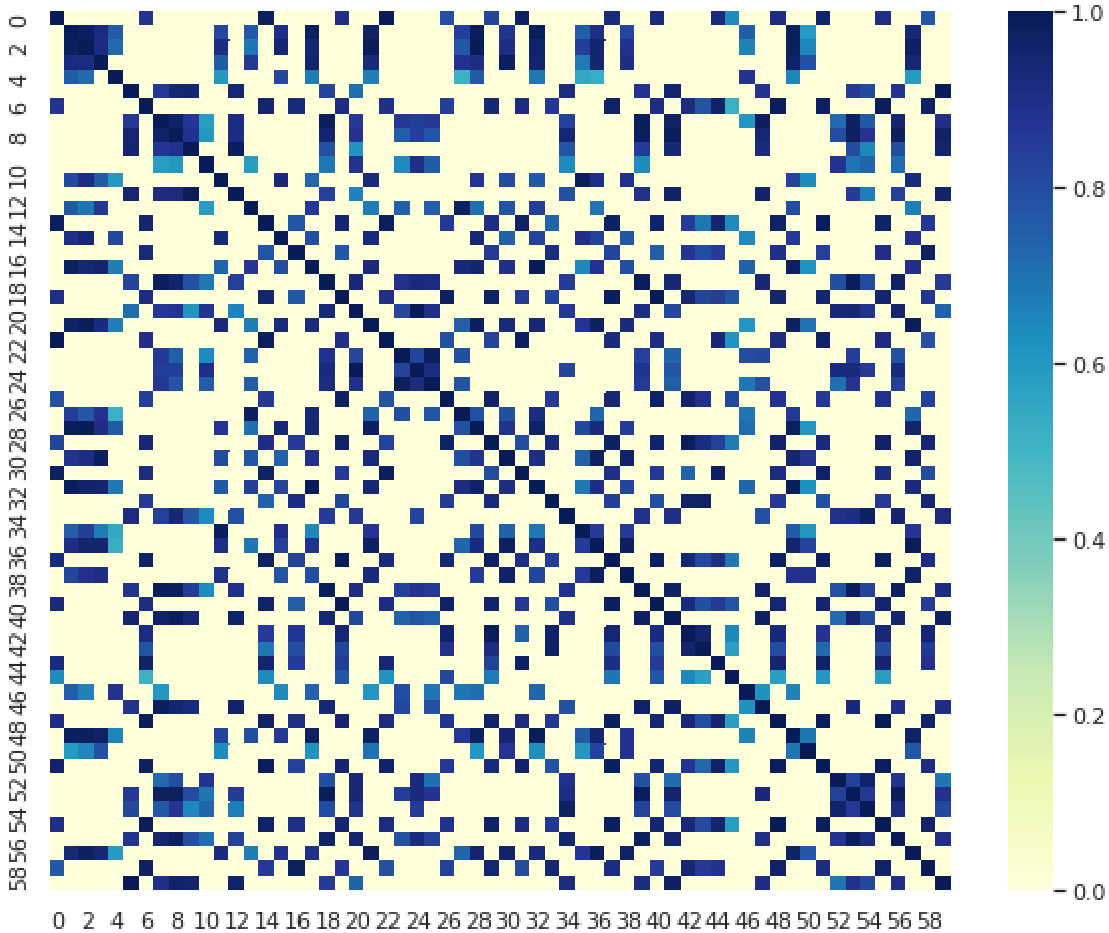
[26]: `<matplotlib.axes._subplots.AxesSubplot at 0x7fac452373c8>`



Matriz de adyacencias (afinidad) sin pesos. Solo muestra los componentes están conectados

[27]:
```
plt.figure(figsize=(10,8))
sns.heatmap(W, cmap="YlGnBu")
```

[27]: `<matplotlib.axes._subplots.AxesSubplot at 0x7fac1ffb7fd0>`



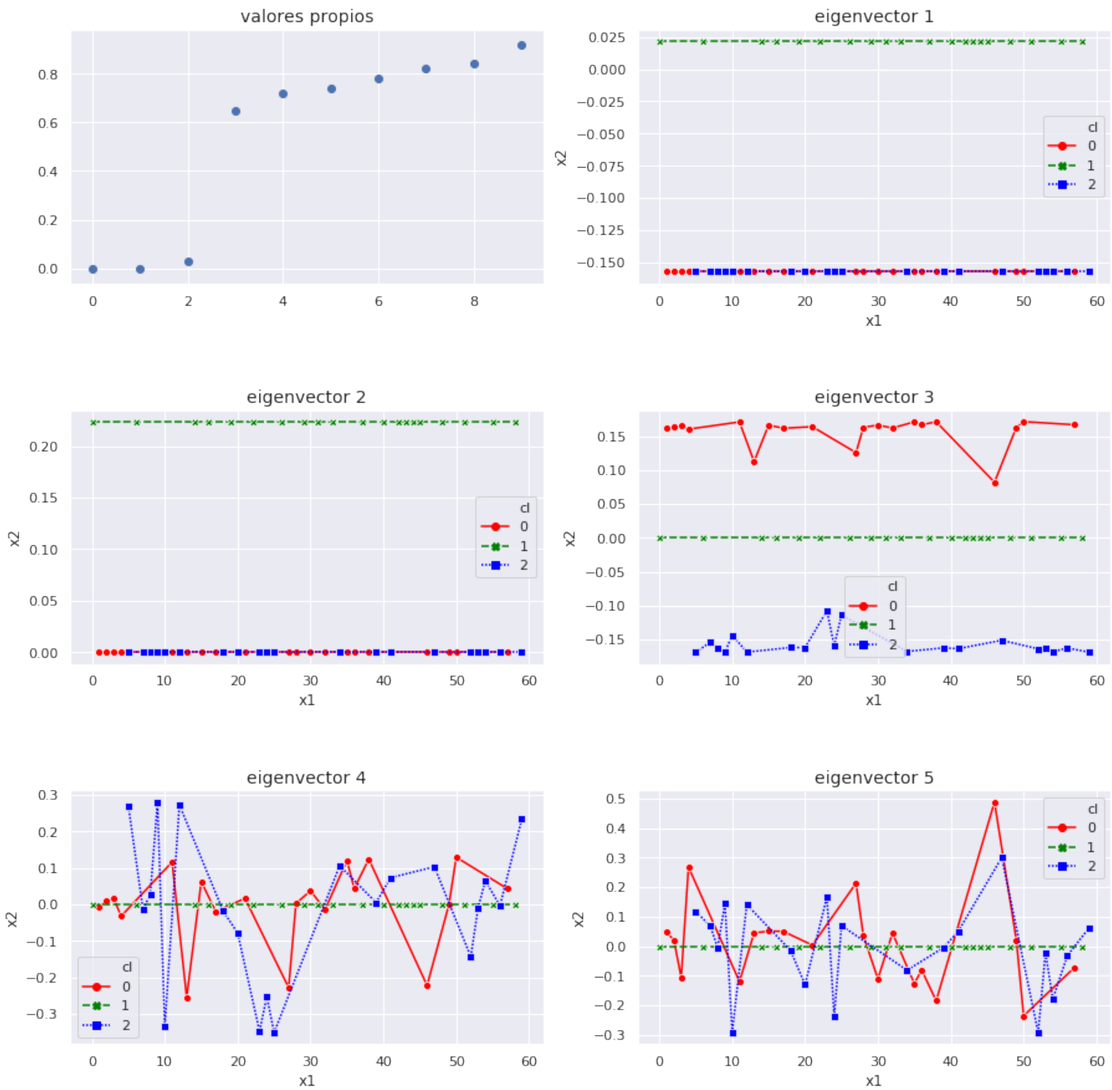
Matriz de adyacencias (afinidad) pesada usando distancia Gaussiana, es decir, con pesos $w_{i,j} = e^{\frac{-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{2\sigma^2}}$ si $\mathbf{x}_i$ y $\mathbf{x}_j$ se conectan.

1.2.5 Análisis espectral. Observa el tipo de Laplaciano que usamos (L, L_{sym} ó L_{rw})

[28]:
```
nv = 10
fig = plt.figure(figsize=(15,15))
plt.subplots_adjust(hspace = .5)
fig.add_subplot(321)
plt.title('valores propios', fontsize=14)
plt.scatter(range(nv),vals[:nv])
fig.add_subplot(322)
plt.title('eigenvector 1', fontsize=14)
data_vecs = pd.DataFrame(dict(x1=range(vecs.shape[0]),x2=vecs[:,0],cl=y))
sns.lineplot(x='x1', y='x2', data = data_vecs, hue='cl', palette =␣
↪custom_palette, legend = 'brief',
                style = 'cl', markers = True)
```

```
fig.add_subplot(323)
data_vecs = pd.DataFrame(dict(x1=range(vecs.shape[0]),x2=vecs[:,1],cl=y))
plt.title('eigenvector 2', fontsize=14)
sns.lineplot(x='x1', y='x2', data = data_vecs, hue='cl', palette =␣
 ↪custom_palette,legend = 'brief',
               style = 'cl', markers = True)
fig.add_subplot(324)
data_vecs = pd.DataFrame(dict(x1=range(vecs.shape[0]),x2=vecs[:,2],cl=y))
plt.title('eigenvector 3', fontsize=14)
sns.lineplot(x='x1', y='x2', data = data_vecs, hue='cl', palette =␣
 ↪custom_palette,legend = 'brief',
               style = 'cl', markers = True)
fig.add_subplot(325)
data_vecs = pd.DataFrame(dict(x1=range(vecs.shape[0]),x2=vecs[:,3],cl=y))
plt.title('eigenvector 4', fontsize=14)
sns.lineplot(x='x1', y='x2', data = data_vecs, hue='cl', palette =␣
 ↪custom_palette,legend = 'brief',
               style = 'cl', markers = True)
fig.add_subplot(326)
data_vecs = pd.DataFrame(dict(x1=range(vecs.shape[0]),x2=vecs[:,4],cl=y))
plt.title('eigenvector 5', fontsize=14)
sns.lineplot(x='x1', y='x2', data = data_vecs, hue='cl', palette =␣
 ↪custom_palette,legend = 'brief',
               style = 'cl', markers = True)
```

```
[28]: <matplotlib.axes._subplots.AxesSubplot at 0x7fac1fd10b00>
```

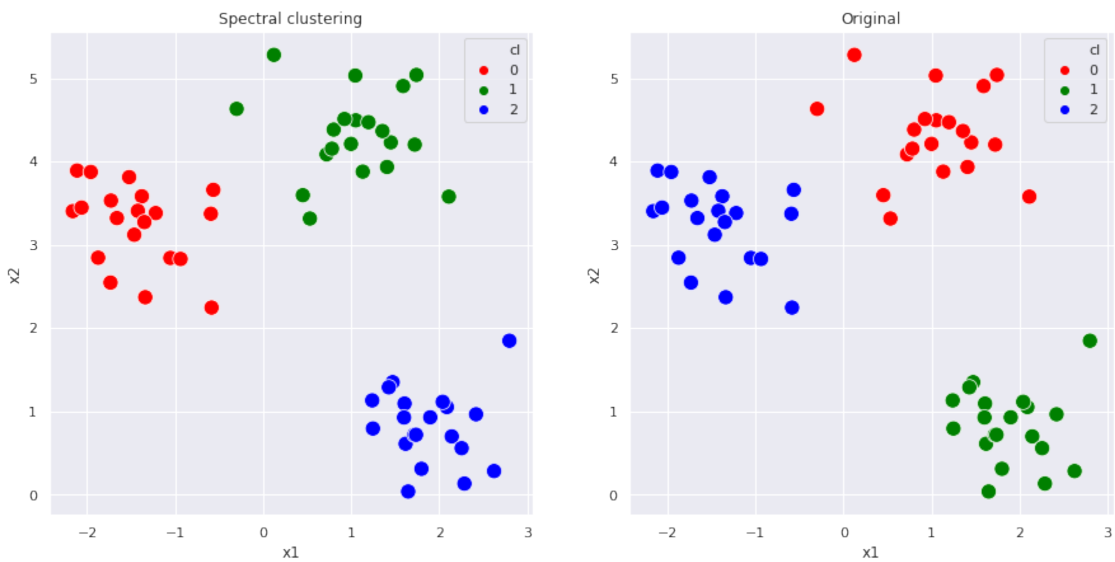


1.2.6 Finalmente, realizamos $k-$means con el embedding obtenido

[29]:
```
# kmeans
kmeans = cluster.KMeans(n_clusters=kclust, init='random',random_state=0)
y_km = kmeans.fit_predict(vecs_k)
data_km = pd.DataFrame(dict(x1=X[:,0],x2=X[:,1],cl = y_km))

fig = plt.figure(figsize=(15,7))
fig.add_subplot(121)
plt.title('Spectral clustering')
sns.scatterplot(x='x1', y='x2', data = data_km, hue='cl', s=150,
            palette = custom_palette,legend = 'brief')
fig.add_subplot(122)
```

```
plt.title('Original')
sns.scatterplot(x='x1', y='x2', hue = 'cl', data = data_toy,␣
 ↪palette=custom_palette, s=150)
```

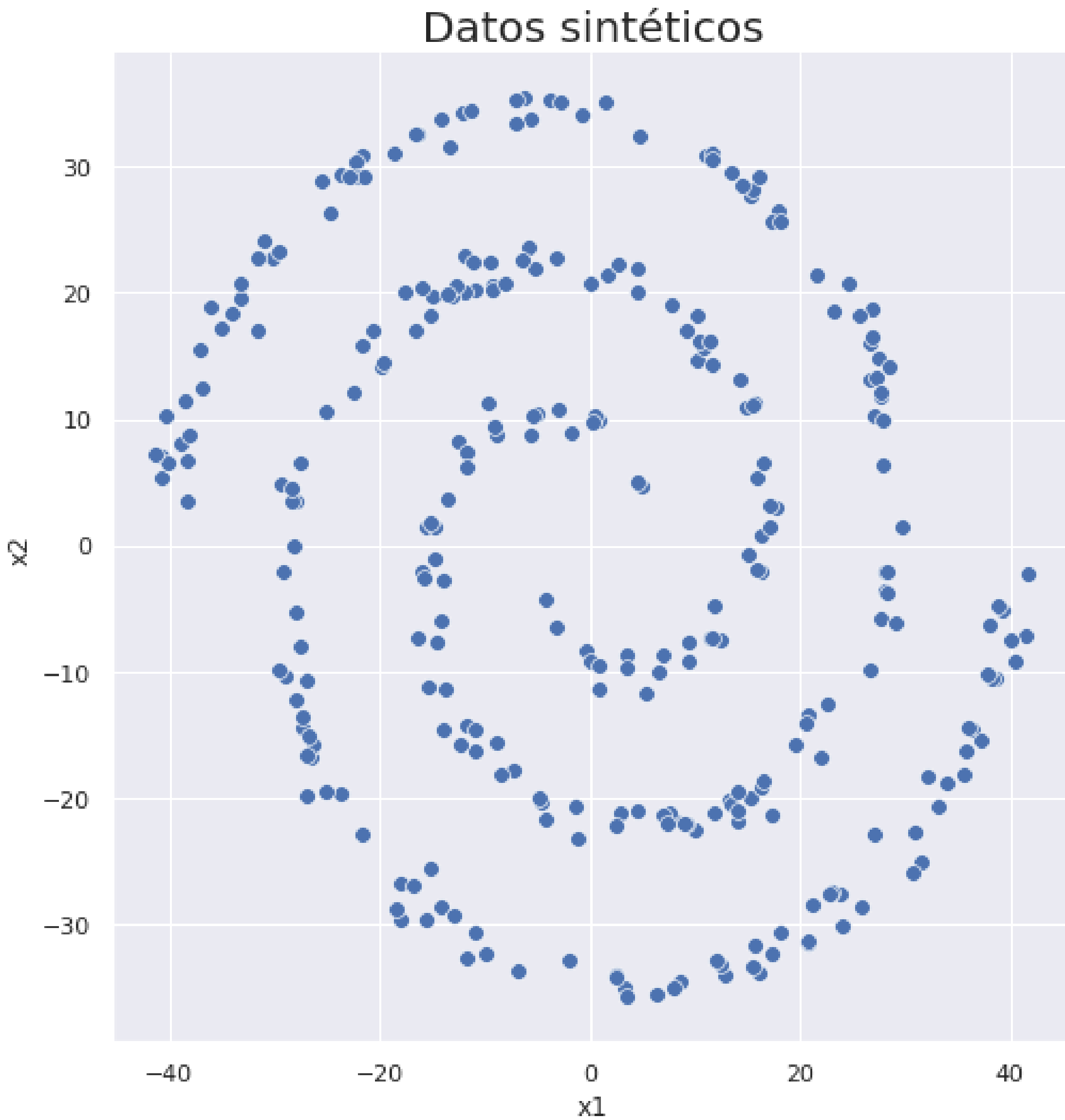
[29]: <matplotlib.axes._subplots.AxesSubplot at 0x7fac1fbf90f0>



1.3 Ejemplo 3

[11]:
```
ndata = 150
X, y, custom_palette, kclust = get_dataset('spirals', ndata)

data_toy = pd.DataFrame(X)
data_toy.columns = ['x1','x2']
data_toy = pd.DataFrame(data_toy).assign(cl = y)
sns.relplot(x='x1', y='x2', data = data_toy, palette=custom_palette, height=7,␣
 ↪s=60)
plt.title('Datos sintéticos', fontsize=20)
```

[11]: Text(0.5, 1.0, 'Datos sintéticos')



1.3.1 Parámetros para clústering espectral

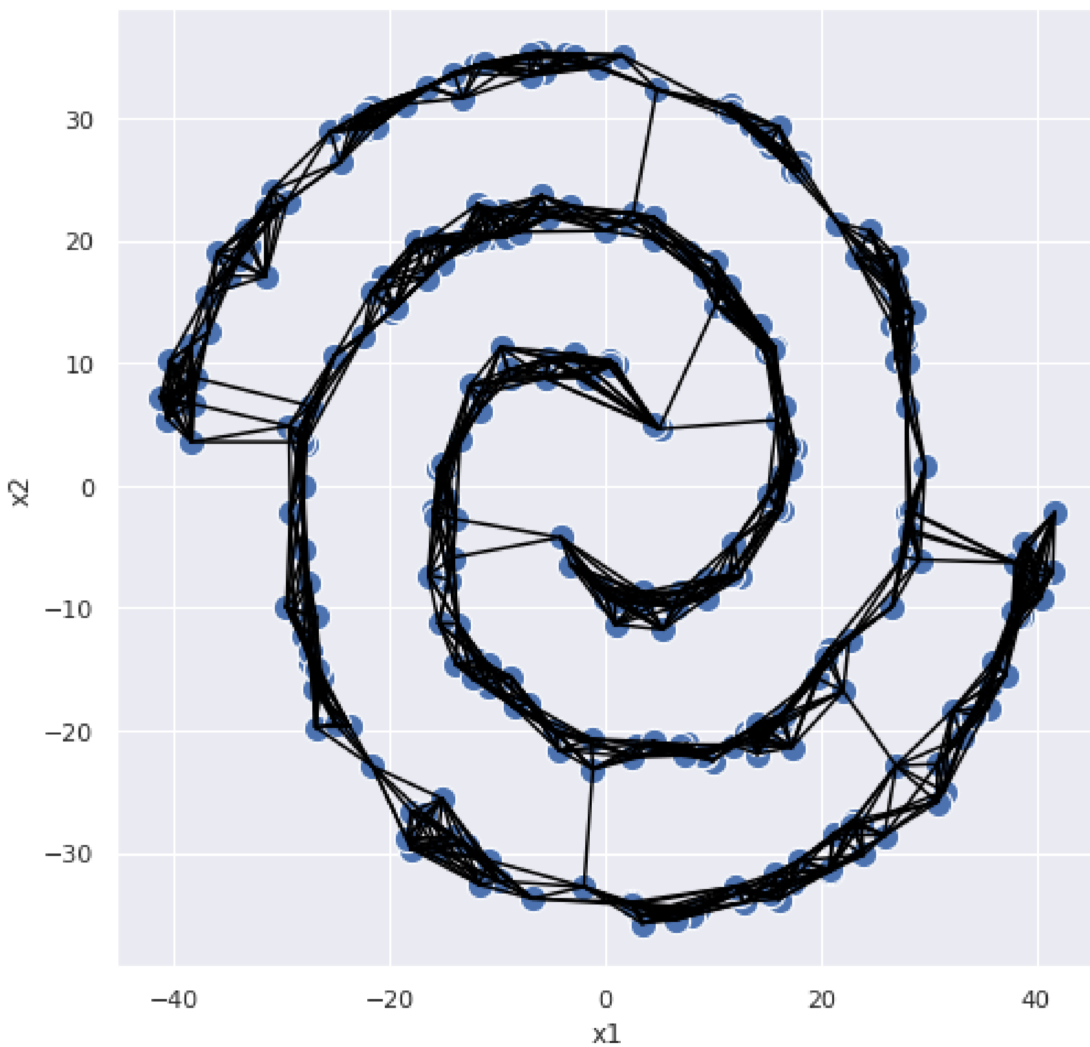
[36]:
```
knn = 10 # k-vecinos cercanos para la construcción del grafo
sigma = 1.5 # sigma del Kernel Gaussiano
lflag = 'rw' # Tipo de Laplaciano
```

1.3.2 Realiza el embedding de los datos según el Laplaciano inducido por el grafo construido

[37]:
```
indices, knn_graph = graph(X,knn,mutual=False)
W = adjacency_matrix(X, knn_graph, sigma, True)
L, D = laplacian(W, flag=lflag)
vals, vecs, vecs_k = eigen_Lap(L,kclust,lflag)
```

1.3.3 El grafo creado

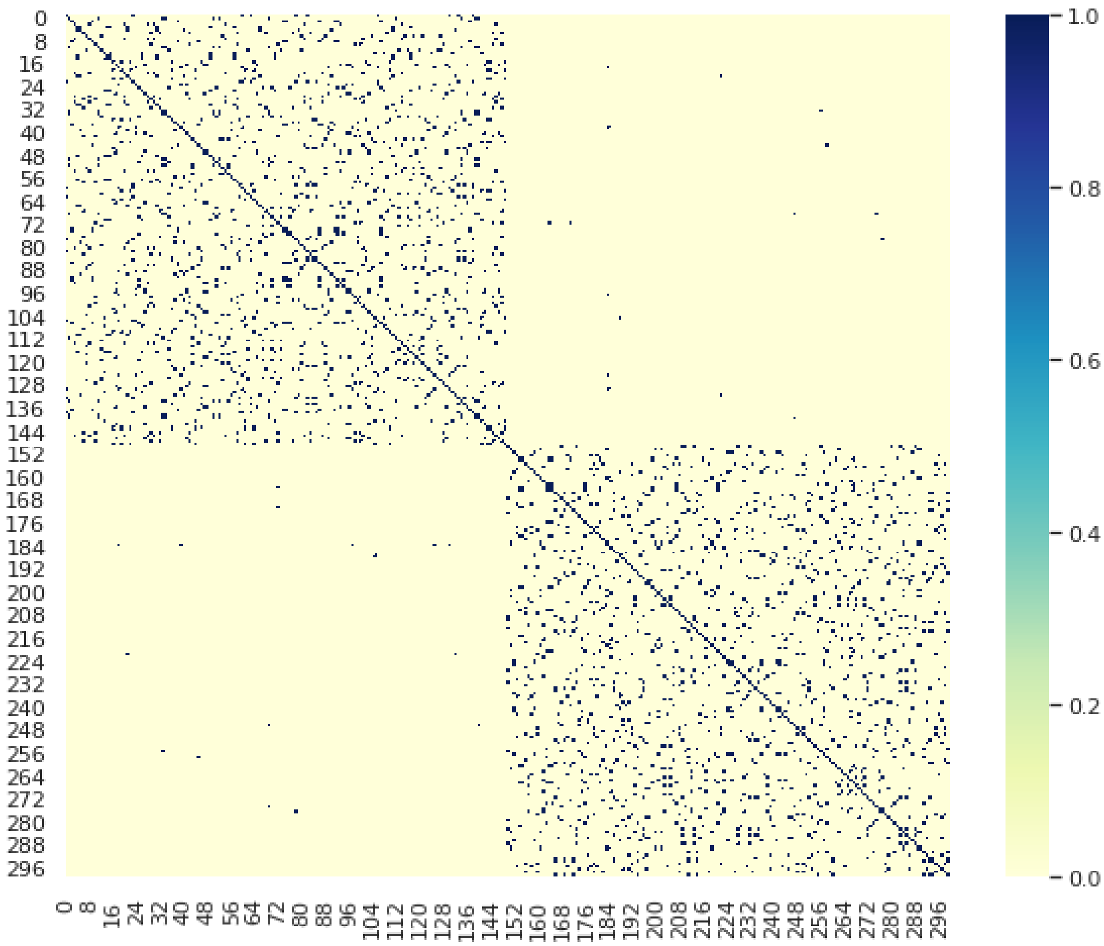
[38]:
```
plot_graph(X,knn_graph)
```



1.3.4 Matriz de Adyacencias o Afinidad

[39]:
```
plt.figure(figsize=(10,8))
sns.heatmap(knn_graph, cmap="YlGnBu")
```

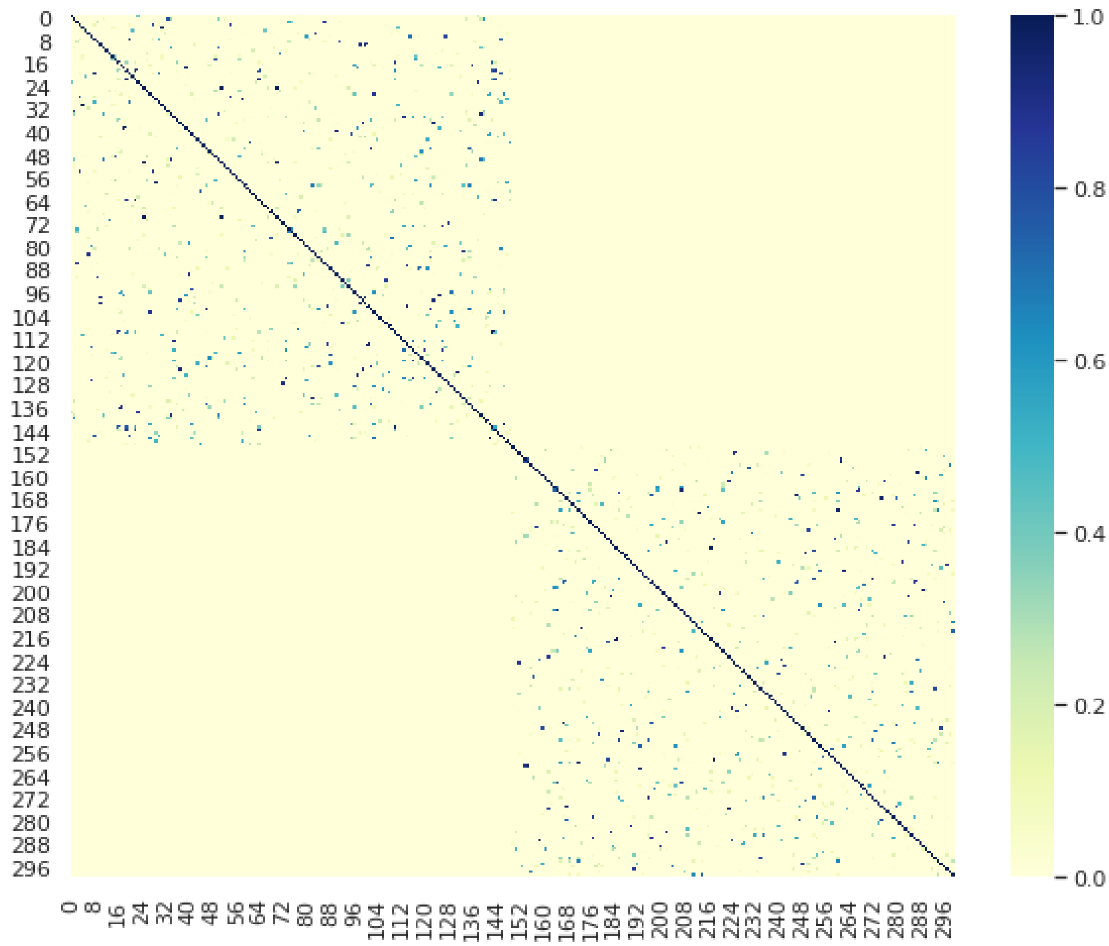
[39]: <AxesSubplot:>



Matriz de adyacencias (afinidad) sin pesos. Solo muestra los componentes están conectados

[40]:
```
plt.figure(figsize=(10,8))
sns.heatmap(W, cmap="YlGnBu")
```

[40]: <AxesSubplot:>



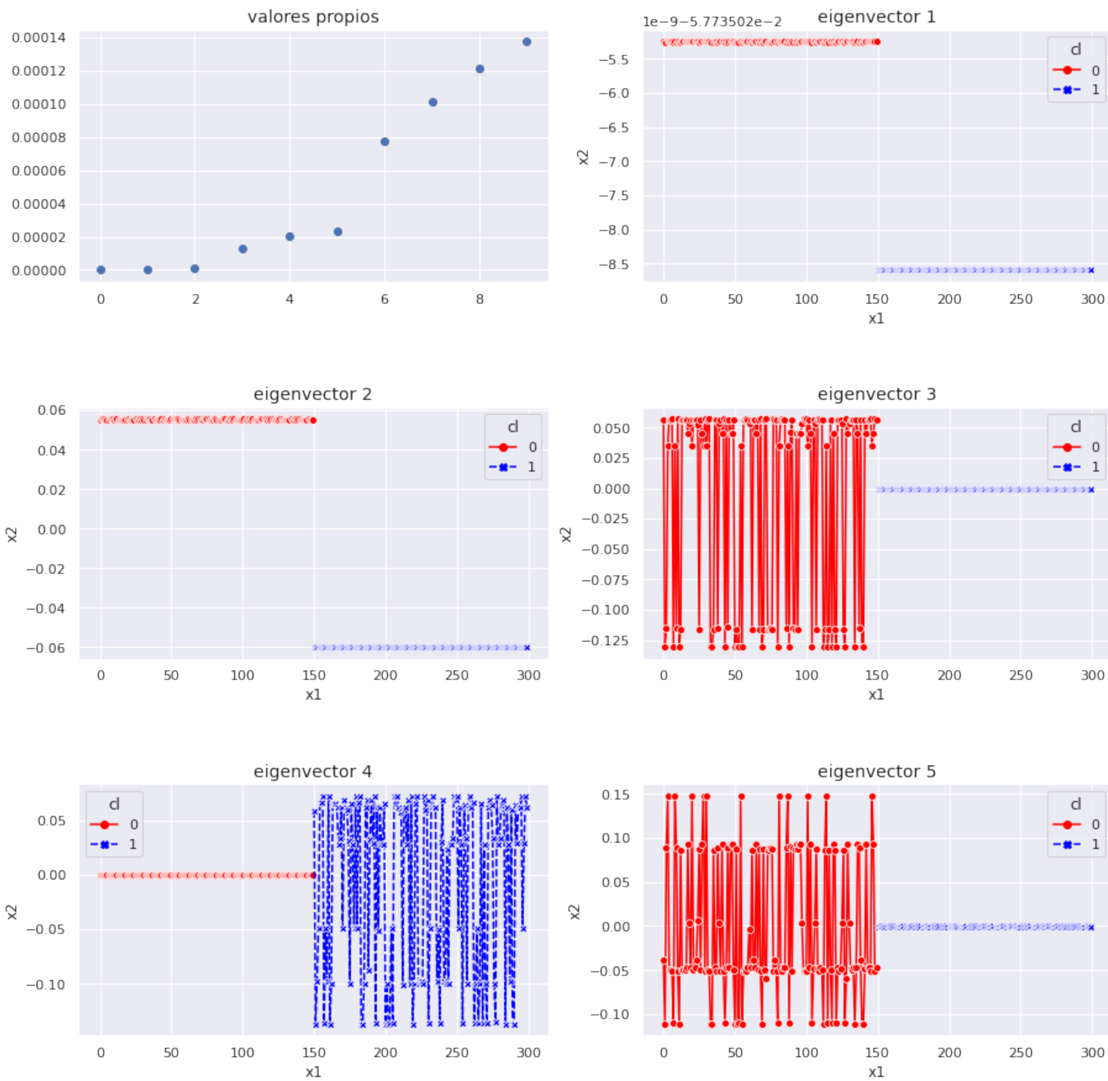
Matriz de adyacencias (afinidad) pesada usando distancia Gaussiana, es decir, con pesos $w_{i,j} = e^{\frac{-\|\mathrm{x}_i - \mathrm{x}_j\|^2}{2\sigma^2}}$ si $\mathbf{x}_i$ y $\mathbf{x}_j$ se conectan.

1.3.5 Análisis espectral. Observa el tipo de Laplaciano que usamos (L, $L_{\mathbf{sym}}$ ó $L_{\mathbf{rw}}$)

[41]:
```
nv = 10
fig = plt.figure(figsize=(15,15))
plt.subplots_adjust(hspace = .5)
fig.add_subplot(321)
plt.title('valores propios', fontsize=14)
plt.scatter(range(nv),vals[:nv])
fig.add_subplot(322)
plt.title('eigenvector 1', fontsize=14)
data_vecs = pd.DataFrame(dict(x1=range(vecs.shape[0]),x2=vecs[:,0],cl=y))
sns.lineplot(x='x1', y='x2', data = data_vecs, hue='cl', palette =␣
↪custom_palette, legend = 'brief',
```

```
                style = 'cl', markers = True)
fig.add_subplot(323)
data_vecs = pd.DataFrame(dict(x1=range(vecs.shape[0]),x2=vecs[:,1],cl=y))
plt.title('eigenvector 2', fontsize=14)
sns.lineplot(x='x1', y='x2', data = data_vecs, hue='cl', palette =␣
 ↪custom_palette,legend = 'brief',
                style = 'cl', markers = True)
fig.add_subplot(324)
data_vecs = pd.DataFrame(dict(x1=range(vecs.shape[0]),x2=vecs[:,2],cl=y))
plt.title('eigenvector 3', fontsize=14)
sns.lineplot(x='x1', y='x2', data = data_vecs, hue='cl', palette =␣
 ↪custom_palette,legend = 'brief',
                style = 'cl', markers = True)
fig.add_subplot(325)
data_vecs = pd.DataFrame(dict(x1=range(vecs.shape[0]),x2=vecs[:,3],cl=y))
plt.title('eigenvector 4', fontsize=14)
sns.lineplot(x='x1', y='x2', data = data_vecs, hue='cl', palette =␣
 ↪custom_palette,legend = 'brief',
                style = 'cl', markers = True)
fig.add_subplot(326)
data_vecs = pd.DataFrame(dict(x1=range(vecs.shape[0]),x2=vecs[:,4],cl=y))
plt.title('eigenvector 5', fontsize=14)
sns.lineplot(x='x1', y='x2', data = data_vecs, hue='cl', palette =␣
 ↪custom_palette,legend = 'brief',
                style = 'cl', markers = True)
```

```
[41]: <AxesSubplot:title={'center':'eigenvector 5'}, xlabel='x1', ylabel='x2'>
```

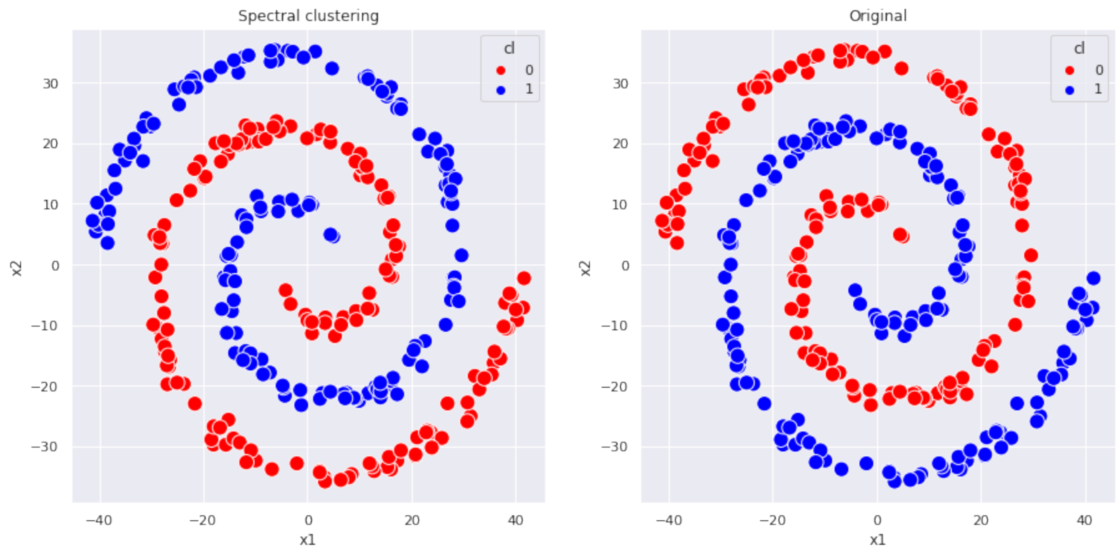


1.3.6 Finalmente, realizamos $k-$means con el embedding obtenido

[42]:
```python
# kmeans
kmeans = cluster.KMeans(n_clusters=kclust, init='random',random_state=0)
y_km = kmeans.fit_predict(vecs_k)
data_km = pd.DataFrame(dict(x1=X[:,0],x2=X[:,1],cl = y_km))

fig = plt.figure(figsize=(15,7))
fig.add_subplot(121)
plt.title('Spectral clustering')
sns.scatterplot(x='x1', y='x2', data = data_km, hue='cl', s=150,
            palette = custom_palette,legend = 'brief')
fig.add_subplot(122)
plt.title('Original')
```

```
sns.scatterplot(x='x1', y='x2', hue = 'cl', data = data_toy,␣
 ↪palette=custom_palette, s=150)
```

[42]: <AxesSubplot:title={'center':'Original'}, xlabel='x1', ylabel='x2'>



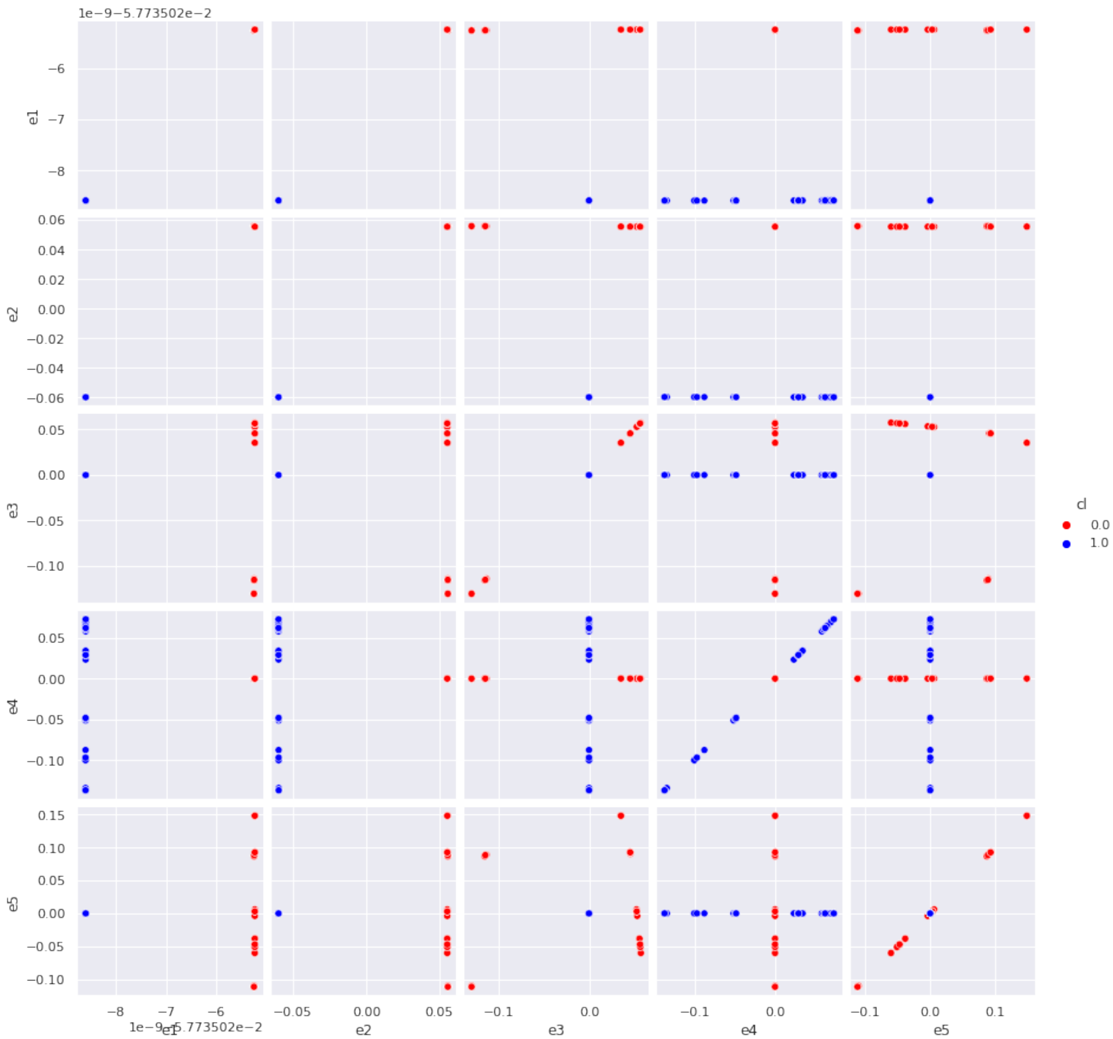
1.4 ¿Cómo es el embedding? La representación de nuestros datos inducido por el Laplaciano.

[43]:
```
data_vecs = pd.DataFrame(np.hstack((vecs[:,:5],y.reshape([y.shape[0],1]))))
data_vecs.columns = ['e1','e2','e3','e4','e5','cl']
```

1.4.1 El embedding está dado por los vectores propios asociados a los valores propios más pequeños...

[44]:
```
sns.pairplot(data_vecs,diag_kind=None, hue='cl', palette = custom_palette,␣
 ↪kind='scatter')
```

[44]: <seaborn.axisgrid.PairGrid at 0x7f0d4530bfd0>



1.5 Spectral Clustering con sklearn

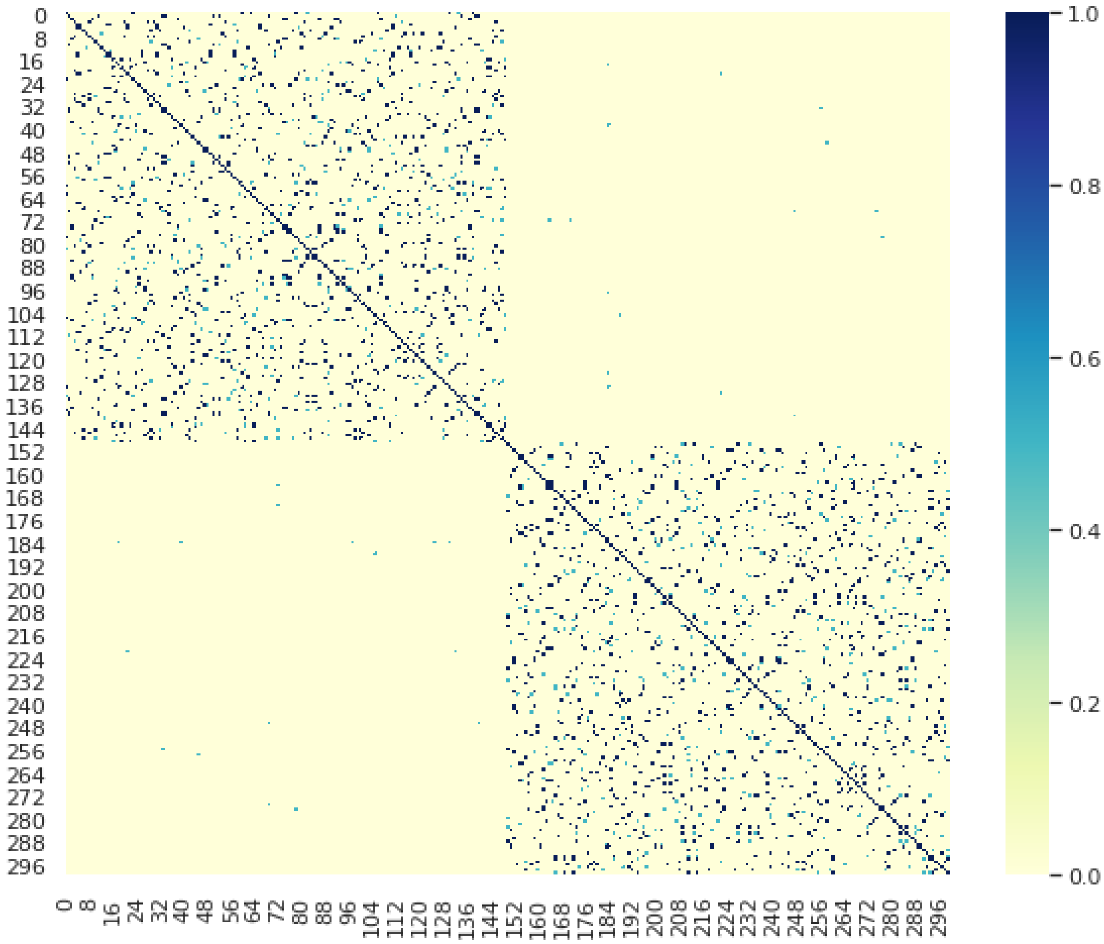
[51]:
```
#aff = 'nearest_neighbors'
aff = 'rbf'
n_neigh = knn
sig = 1./sigma
model = cluster.SpectralClustering(n_clusters=kclust,eigen_solver='arpack',
                                    affinity = aff, gamma = sig, n_neighbors = n_neigh).fit(X)

y_sc = model.labels_
```

La función es `SpectralClustering`, del módulo `cluster` de `sklearn`. Tenemos varias opciones para la matriz de afinidades, principalmente: - nearest_neighbors - rbf - precomputed Checa la ayuda…

1.5.1 Matriz de Afinidades

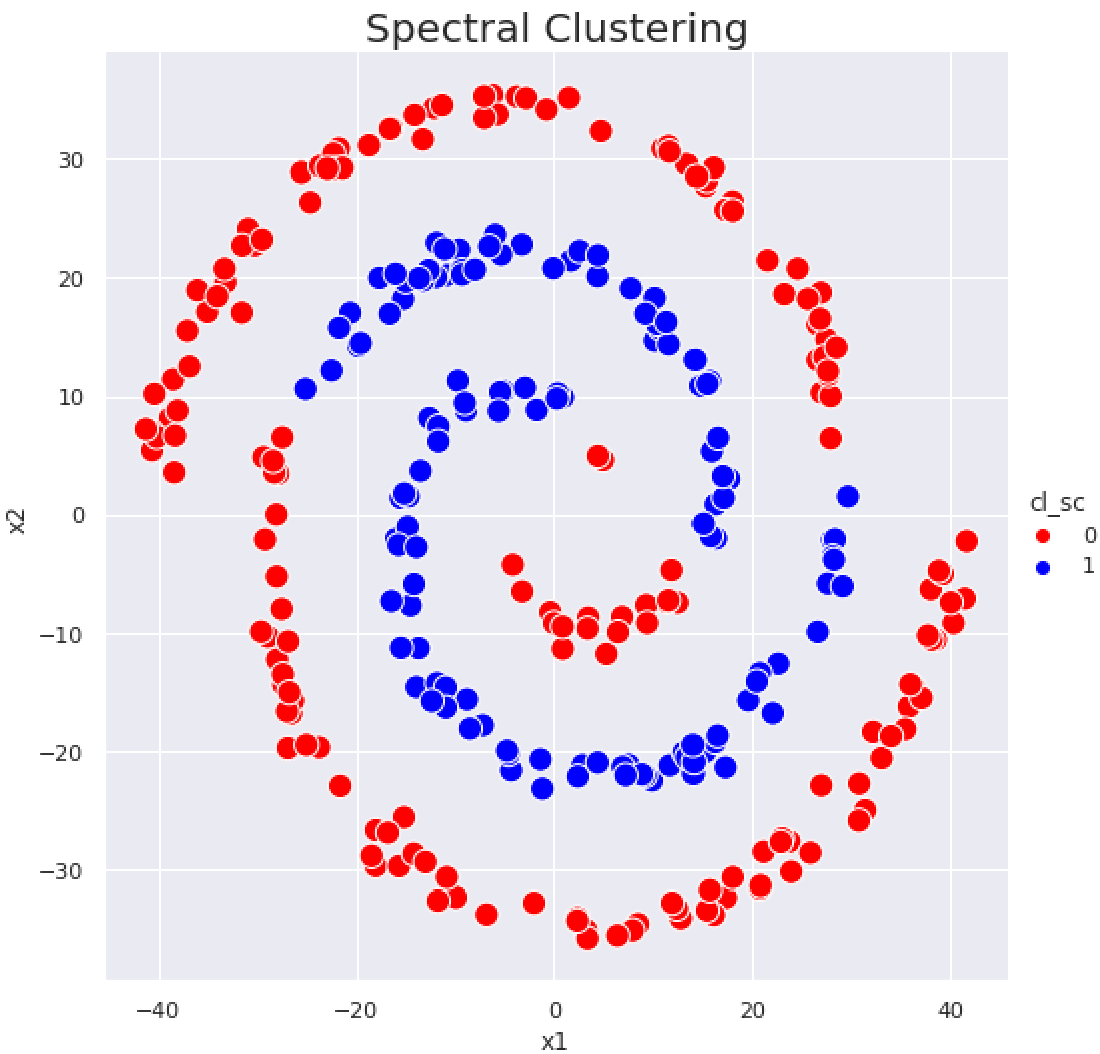
[49]:
```python
if aff == 'nearest_neighbors':
    w = model.affinity_matrix_.toarray()
else:
    w = model.affinity_matrix_

plt.figure(figsize=(10,8))
sns.heatmap(w, cmap="YlGnBu")
```

[49]: <AxesSubplot:>



[52]:
```python
data_sc = pd.DataFrame(dict(x1=X[:,0], x2=X[:,1], cl_sc = y_sc))
sns.relplot(x='x1', y='x2', data = data_sc, hue='cl_sc', height=7, palette =␣
↪custom_palette,
            s = 150)
plt.title('Spectral Clustering', fontsize=20)
```

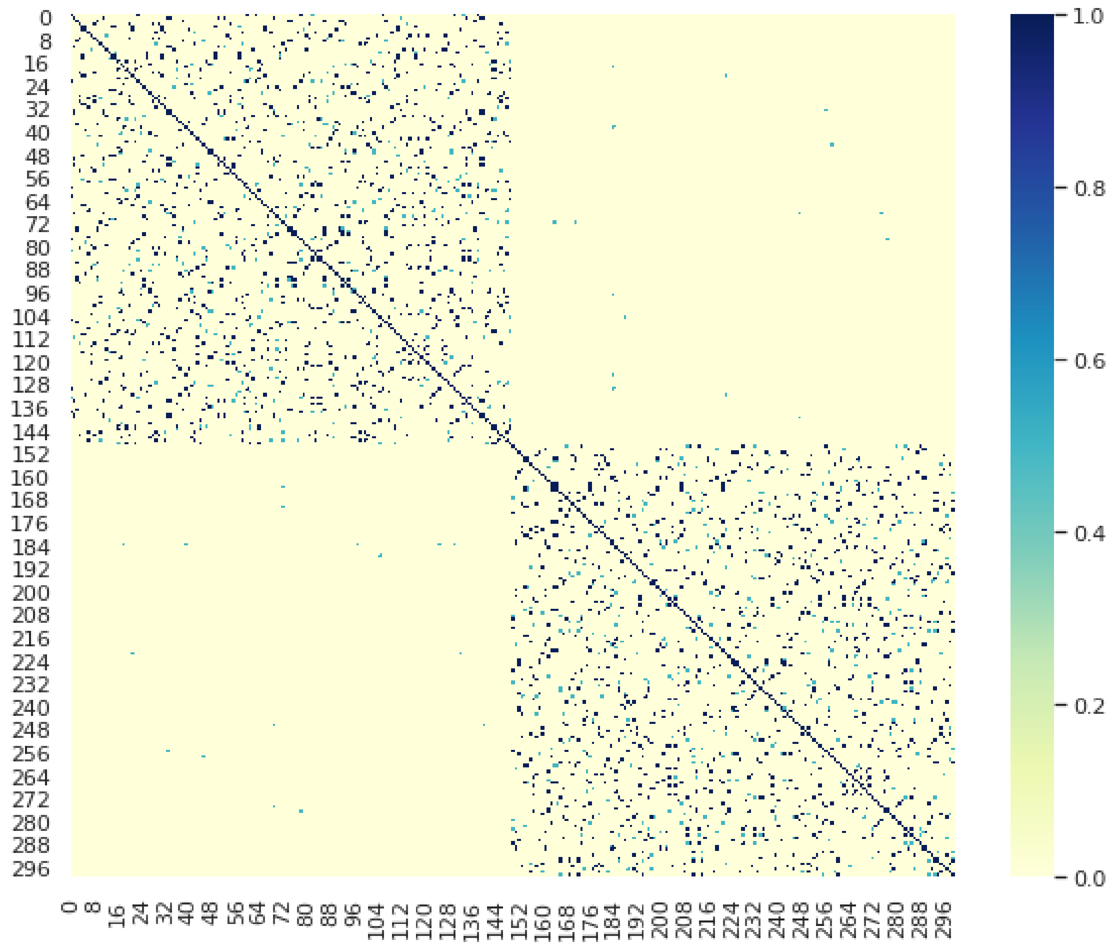
[52]: Text(0.5, 1.0, 'Spectral Clustering')



1.6 El embedding con SpectralEmbedding de sklearn.manifold

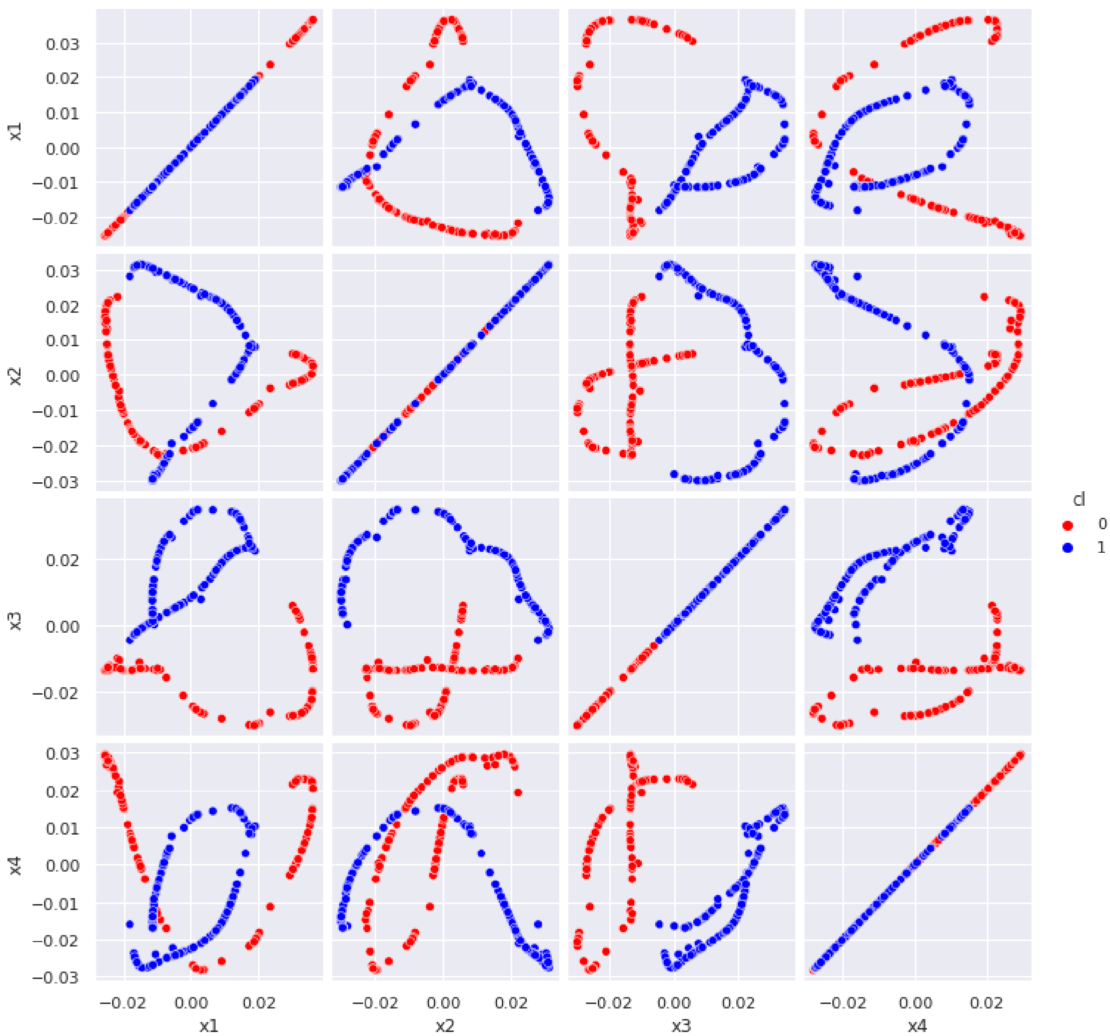
[53]:
```
from sklearn.manifold import SpectralEmbedding

model2 =␣
↪SpectralEmbedding(n_components=4,affinity='nearest_neighbors',gamma=sigma,eigen_solver='arp
                        n_neighbors=knn).fit(X)

plt.figure(figsize=(10,8))
w2 = model2.affinity_matrix_.toarray()
sns.heatmap(w2, cmap="YlGnBu")
```

[53]: <AxesSubplot:>



[54]:
```
data_vecs_se = pd.DataFrame(dict(x1=model2.embedding_[:,0],x2=model2.
↪embedding_[:,1],
                                    x3=model2.embedding_[:,2],x4=model2.
↪embedding_[:,3],cl=y))
sns.pairplot(data_vecs_se,diag_kind=None, hue='cl', palette = custom_palette,␣
↪kind='scatter')
```

[54]: <seaborn.axisgrid.PairGrid at 0x7f0d458e4d30>



x1
x2
x3
x4
cl
0
1