UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA

DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA

Análisis de Imagenes tr
nasformadas con Box \mathbf{Cox}

Memoria de Título presentada por

Fabián Castellano Núñez

como requisito parcial para optar al título de

Ingeniero Civil Matemático

Profesor Guía

Dr. Ronny Vallejos S.

Martes XX de Diciembre, 2023.



Capítulo 1

Introducción

A lo largo de la literatura se suele aplicar la transformación a vectores unidimensionales, y no ha sido extendida a matrices d-dimensionales en las que existe corrlaciones de adyacencia, excepto en el trabajo de Bicego y Baldo (Properties of the Box-Cox Transformation for Pattern Classification), y en (MR Image Segmentation Using a Power Transformation Approach), en amdos solo se propone una transformación que lleve las d dimensiones a 1.

Terminar introducción



Capítulo 2

Maximal Information Coeficient

2.1. Introducción

El Coeficiente de Información máxima (conocido como MIC por sus siglas en inglés), es una medida estadística propuesta por Reshef et al. en su trabajo "Detecting Novel Associations in Large Data Sets" [14]. Este coeficiente fue creado en el contexto de la ciencia generadora de hipótesis, en la cual los conjuntos de datos se utilizan para ayudar a los investigadores a formular nuevas hipótesis en lugar de probar las existentes. En este enfoque, se utilizan medidas de dependencia, que son estadísticas empleadas para evaluar pares de variables candidatas. Estos avances en el campo de analisis de datos nos han entregado muchas herramientas, tanto para la comparación de datos en si mismos, junto con formas de evaluar estas medidas en si mismas.

Sea $\hat{\varphi}$ una medida de dependencia, una forma de medir la utilidad de esta es la potencia contra la independencia, i.e., la capacidad de prueba de independencia basada en $\hat{\varphi}$ para detectar varios tipos de relaciones no triviales. Este es un objetivo importante para conjuntos de datos que tienen muy pocas relaciones no triviales, o solo relaciones muy débiles que son difíciles de detectar. Sin embargo, a menudo el número de relaciones declaradas estadísticamente significativas por una medida de dependencia supera con creces el número de relaciones que luego se pueden explorar más a fondo.

Para abordar este problema, se introdujo un segundo método de evaluación de una medida de dependencia llamado equitabilidad [14]. Las estadísticas equitativas asignan puntuaciones similares a relaciones igualmente fuertes, independientemente de su tipo. El objetivo es definir medidas de dependencia que logren una buena equitabilidad con respecto a medidas relevantes de la fuerza de la relación.

La idea de equitabilidad ha motivado el desarrollo de varias medidas de dependencia, con diferentes formalizaciones y enfoques en aspectos específicos de la fuerza de la relación. El desafío radica en definir medidas de dependencia que logren una buena equitabilidad con respecto a medidas importantes de la fuerza de la relación, como se ve en el artículo complementario de Reshef et al (2011) [14]. Esta línea de investigación tiene como objetivo proporcionar un enfoque más poderoso y equitativo para medir la dependencia, lo que permite una identificación y priorización más precisas de las relaciones en conjuntos de datos complejos.

En este contexto, el coeficiente de información máxima (MIC) nos entrega una medida rebusta para encontrar relaciónes no lineales entre variables, para nuestro caso en particular, entre imágenes. Cómo veremos en la sección 5, la transformación de Box-Cox es no lineal, por lo que el coeficiente nos ayudará a cuantificar la relación entre las imágenes transformadas y las originales, y podemos aprovechar la equitabilidad de este para comparar diferentes versiones de la transformación.

En esta secci/'on discuteremos la definición del MIC, algunas de sus propiedades y un par de caracterizaciones que nos ayudarán a llegar al MIC_* y posteriormente al MIC_e , ambos siendo estimadores de MIC que nos harán posible calcular este valor.

2.2. Sobre el coeficiente

El coeficiente de información máxima (Maximal Information Coefficient o MIC) es una medida estadística propuesta por Reshef et al. en su paper "Detecting Novel Associations in Large Data Sets" [14]. Este coeficiente mide la correlación entre dos variables en un conjunto de datos y se basa en la idea de que una relación fuerte entre dos variables debería ser capaz de predecir una variable a partir de la otra de manera precisa.

En este paper, Reshef et al. presentan un enfoque innovador para detectar asociaciones nobles en grandes conjuntos de datos, en lugar de buscar correlaciones fuertes entre dos variables, el coeficiente MIC permite detectar relaciones débiles pero aún importantes que pueden no ser evidentes al simplemente mirar los datos. Esto es posible gracias a que el coeficiente MIC es capaz de capturar no solo la fuerza de la correlación entre dos variables, sino también su precisión.

Para calcular el coeficiente, se comienza de la idea de que la información mutua entre dos variables es una medida de la precisión con la que se puede predecir una variable a partir de la otra. Por lo tanto, el coeficiente se calcula como la información mutua máxima posible entre dos variables, dado un conjunto de datos. Esto se hace a través de un procedimiento iterativo en el que se prueban diferentes particiones de los datos en conjuntos de entrenamiento y prueba, y se selecciona aquella que maximiza la información mutua.

El la siguiente sección estudiaremos las definiciones que nos entrega cada coefi-

ciente.

2.3. Definiciones

Como mencionamos en la parte anterior, debemos primero encontrar la información mutua entre las variables.

Definición 2.1 (Información mutua). Para un vector aleatorio bivariado (X, Y), se define la información mutua como:

$$\mathrm{I}(X;Y) = \int_{\mathcal{Y}} \int_{\mathcal{X}} P_{(X,Y)}(x,y) \log \left(\frac{P_{(X,Y)}(x,y)}{P_{X}(x)P_{Y}(y)} \right) dx dy,$$

donde $P_{(X,Y)}$ es la función de densidad de probabilidad conjunta y P_X , P_Y , las distribuciones marginales de X e Y respectivamente.

Luego, sea D un conjunto finito de pares ordenados, podemos particionar los valores de la primera coordenada en x contenedores, y los valores de la segunda en y de estos. Dado una malla G, sea $D|_G$ la distribución inducida por los puntos de D en las celdas de G, i.e., la distribución en las celdas de G obtenida al dejar que la función de densidad de probabilidad en cada celda sea la fracción de puntos de D que caen en esa celda. Veamos un ejemplo

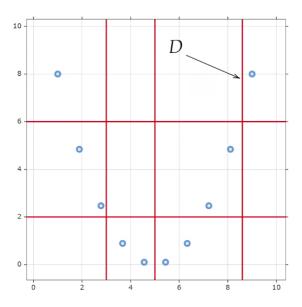


Figura 2.1: Malla G de 4x3 sobre el conjunto de pares ordenados D

Para la Figura 2.1, la función de densidad quedaría de la forma:

$$f_{D|_{G}}(i,j) = \begin{cases} \frac{1}{10} & \text{si } (i,j) \in \{(1,3),(4,1)\} \\ \frac{2}{10}, & \text{si } (i,j) \in \{(1,2),(2,1),(3,1),(3,2)\} \\ 0, & \text{Otro caso.} \end{cases}$$

Notemos que para un D fijo, aunque fijemos el grosor de la malla, la distribución de esta puede variar dependiendo de donde hagamos los cortes, por ejemplo:

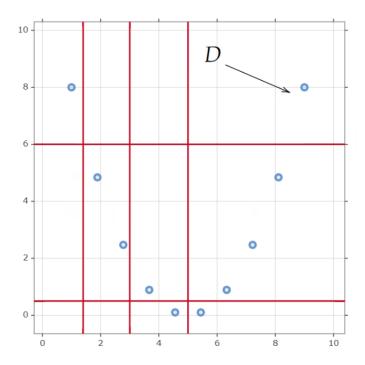


Figura 2.2: Otra malla G de 4x3 sobre el conjunto de pares ordenados D.

Aquí podemos ver que la función de densidad que nos entrega está malla es distinta a la definida para la Figura 2.2. Este es un hecho que explotamos en la siguiente definición:

Definición 2.2. Para un conjunto finito $D \in \mathbb{R}^2$ y enteros positivos i, j, definimos:

$$I^*(D, i, j) = \max I(D|_G),$$

donde el máximo es sobre todas las mallas G con i columnas y j filas, con $I(D|_G)$ denota la información mutua de $D|_G$.

Ya teniendo este valor procedemos a definir la matriz caracteristica del conjunto ${\cal D}.$

Definición 2.3. La matriz caracteristica M(D) de un conjunto de pared ordenados D es una matriz infinita con entradas:

$$M(D)_{x,y} = \frac{I^*(D, x, y)}{\log \min\{x, y\}}.$$

Definición 2.4. El coeficiente de información máxima o MIC de un conjunto bivariado D de tamaño n y una malla de tamaño menor a B(n) esta dado por:

$$\mathrm{MIC}(D) = \max_{xy < B(n)} \left\{ M(D)_{x,y} \right\},\,$$

donde $\omega(1) < B(n) \le O(n^{1-\varepsilon})$ para algún $0 < \varepsilon < 1$.

Observación 2.1. A menos que se especifique de otra forma, al momento de trabajar con esta medida usaremos $B(n)=n^{0.6}$, función de la cuál se encontró que funconá en práctica en el artículo complementario de Reshef et al. (2011) [14], discuteremos la selección de este parámetro más adelante en 2.6.2

2.4. Formas prácticas de calcular el MIC. MIC_* , TIC_e y MIC_e

æ En el artículo "Measuring Dependence Powerfully and Equitably" de Reshef et al. [16], los autores presentan y caracterizan teóricamente dos nuevas medidas de dependencia: MIC_* y MIC_e . MIC_* es una medida de dependencia poblacional, y el artículo presenta tres formas de ver esta cantidad. Los autores demuestran que MIC_* es el valor poblacional del coeficiente de información máxima (MIC), una suavización mínima de la información mutua y el supremo de una secuencia infinita. Estas caracterizaciones simplifican el cálculo y fortalecen los resultados teóricos.

Además, los autores desarrollan algoritmos eficientes para aproximar MIC_* en la práctica y estimarlo de manera consistente a partir de una muestra finita. Introducen MIC_e , un estimador consistente de MIC_* , que es computable de manera eficiente y más rápido en la práctica que el algoritmo heurístico para calcular MIC. A través de simulaciones, demuestran que MIC_e tiene mejores propiedades de sesgo/varianza y supera a los métodos existentes en términos de equitabilidad con respecto a R2 en un amplio conjunto de relaciones funcionales ruidosas.

2.4.1. Definiciones y propiedades de MIC_{*}

En esta sección, abordaremos las definiciones esenciales para el cálculo del MIC_e . El coeficiente máximo de información poblacional puede expresarse de diversas maneras equivalentes, como veremos más adelante. Sin embargo, comenzaremos con la definición más sencilla.

Definición 2.5. Sea (X,Y) un vector aleatorio bivariado. El coeficiente de información máxima poblacional (MIC_*) de (X,Y) se define como:

$$MIC_*(X,Y) = \sup_{G} \frac{I\left(\left(X,Y\right)|_{G}\right)}{\log \|G\|},$$

donde ||G|| denota el mínimo entre el número de filas y el número de columnas de la malla G.

Ya que $I(X,Y) = \sup_G I((X,Y)|G)$ (Cover y Thomas, 2006 [6, Cap. 8]), esto puede interpretarse como una versión regularizada de la información mutua que sanciona las rejillas complejas y garantiza que el resultado esté dentro del rango entre cero y uno.

Previo a continuar, introducimos una definición equivalente y sencilla de MIC_* que resulta útil para los resultados en esta sección. Esta definición considera a MIC_* como el supremo de una matriz denominada matriz característica poblacional, que se define a continuación.

Definición 2.6. Sea (X,Y) una pareja de variables aleatorias conjuntamente distribuidas. Sea

$$I^{*}((X,Y),k,\ell) = \max_{G \in G(k,\ell)} I\left(\left.(X,Y)\right|_{G}\right),$$

la matriz característica poblacional de (X,Y), denotada por M(X,Y), se define como

$$M(X,Y)_{k,\ell} = \frac{I^*((X,Y),k,\ell)}{\log \min\{k,\ell\}}.$$

para k, l > 1.

Es fácil ver lo siguiente:

Proposición 2.1. Sea (X,Y) una vector aleatorio bidimensional de variables aleatorias conjuntamente distribuidas. Tenemos

$$MIC_*(X,Y) = \sup M(X,Y),$$

donde M(X,Y) es la matriz característica poblacional de (X,Y).

La matriz característica poblacional recibe este nombre porque, al igual que el MIC_* , el supremo de esta matriz, captura una noción de la intensidad de la relación, y otras propiedades de esta matriz se relacionan con diferentes características de las relaciones. Por ejemplo, más adelante en este documento presentamos una propiedad adicional de la matriz característica, el coeficiente de información total, que es útil para comprobar la presencia o ausencia de una relación en lugar de cuantificar la intensidad de la relación.

2.4.2. El MIC_* es el valor poblacional del MIC

Con el MIC_* definido, presentamos nuestra primera caracterización alternativa de este, como el límite de muestra grande del estadístico MIC introducido en Reshef et al. [14]. Recordemos la Definiciones del MIC y la matriz característica de muestra. Notemos que para evistar confución denotaremos como MIC al estadístico MIC y como MIC_* al coeficiente de información máxima poblacional.

Definición 2.7. (Reshef et al., 2011 [14]) Sea $D \subset \mathbb{R}^2$ un conjunto de pares ordenados. La matriz característica de muestra $\widehat{M}(D)$ de D se define por

$$\widehat{M}(D)_{k,\ell} = \frac{I^*(D,k,\ell)}{\log \min\{k,\ell\}}.$$

Definición 2.8. (Reshef et al., 2011 [14]) Sea $D \subset \mathbb{R}^2$ un conjunto de n pares ordenados, y sea $B : \mathbb{Z}^+ \to \mathbb{Z}^+$. Definimos

$$MIC_B(D) = \max_{k\ell \le B(n)} \widehat{M}(D)_{k,\ell},$$

donde la función B(n) es especificada por el usuario. En el paper Reshef et al. (2011) [14] se sugirió que B(n) se elija como n^{α} para alguna constante α en el rango de 0.5 a 0.8. (Los estadísticos que presentaremos más adelante tendrán un parámetro análogo; véase la Sección 4.4.1.)

El siguiente resultado, demostrado en el paper de [16], sobre la convergencia de funciones de la matriz característica de muestra a sus contrapartes poblacionales, una consecuencia de lo cual es la convergencia de MIC a MIC_* . (En la declaración del teorema a continuación, recordemos que m_∞ es el espacio de matrices infinitas equipadas con la norma supremo, y dada una matriz A, la proyección ri anula todas las entradas $A_{k,\ell}$ para las cuales $k\ell > i$.)

Teorema 2.1. Sea $f: m^{\infty} \to \mathbb{R}$ uniformemente continua, y suponga que $f \circ r_i \to f$ puntualmente. Entonces, para cada variable aleatoria (X,Y), tenemos

$$(f \circ r_{B(n)}) (\widehat{M}(D_n)) \to f(M(X,Y)),$$

en probabilidad donde D_n es una muestra de tamaño n de la distribución de (X,Y), siempre que $\omega(1) < B(n) \le O(n^{1-\varepsilon})$ para algún $\varepsilon > 0$.

Dado que el supremo de una matriz es una función uniformemente continua en m_{∞} y se puede realizar como el límite de máximos de segmentos cada vez más grandes de la matriz, este teorema genera nuestra afirmación sobre MIC_* como corolario

Corolario 2.2. MIC es un estimador consistente de MIC_{*} siempre que $\omega(1) < B(n) \le O(n^{1-\epsilon})$ para algún $\epsilon > 0$

Con esto podemos trabajar, bajo ciertas condiciones, con el MIC_* como reemplazo del MIC. Pero, ¿Cuál es la ventaja de trabajar con este nuevo estimador?

En pocas palabras, es más fácil de estimar, y esto lo veremos en la en una sección más adelante. Antes de esto debemos revisar una caracterización del MIC_* que nos permitirá contruir un estimador de este.

2.4.3. El MIC_* es el supremo de la matriz característica de muestra

Ahora mostramos la una vista alternativa de MIC_* : que puede definirse de manera equivalente como el supremo sobre un límite de la matriz característica en lugar de como un supremo sobre todas las entradas de la matriz. Esta caracterización de MIC_* servirá como base tanto para nuestro enfoque de aproximación de $MIC_*(X,Y)$ como para el nuevo estimador de MIC_* que presentamos más adelante en este artículo.

Comenzamos definiendo lo que entendemos por límite de la matriz característica. Nuestra definición se basa en la siguiente observación.

Proposición 2.2. Sea M una matriz característica poblacional. Entonces, para $\ell \geq k, M_{k,\ell} \leq M_{k,\ell+1}$.

Demostración. Sea (X,Y) la variable aleatoria en cuestión. Siempre podemos dejar una fila/columna vacía, sabemos que $I^*((X,Y),k,\ell) \leq I^*((X,Y),k,\ell+1)$. Y dado que $\ell,\ell+1\geq k$, sabemos que $M_{k,\ell}=I^*((X,Y),k,\ell)/\log k\leq I^*((X,Y),k,\ell+1)/\log k=M_{k,\ell+1}$.

Dado que las entradas de la matriz característica están acotadas, el teorema de convergencia monótona nos da el siguiente corolario. En el corolario y en adelante, dejamos $M_{k,\uparrow} = \lim_{\ell \to \infty} M_{k,\ell}$ y definimos $M_{\uparrow,\ell}$ de manera similar.

Corolario 2.3. Sea M una matriz característica poblacional. Entonces, $M_{k,\uparrow}$ existe, es finito e igual a $\sup_{\ell>k} M_{k,\ell}$. Lo mismo es válido para $M_{\uparrow,\ell}$.

El corolario anterior nos permite definir el límite de la matriz característica.

Definición 2.9. Sea M una matriz característica poblacional. El límite de M es el conjunto

$$\partial M = \{ M_{k,\uparrow} : 1 < k < \infty \} \bigcup \{ M_{\uparrow,\ell} : 1 < \ell < \infty \}.$$

El teorema siguiente da una relación entre el límite de la matriz característica y MIC_{*}.

Teorema 2.4. Sea (X,Y) un vector aleatorio bivariado. Tenemos

$$MIC_*(X,Y) = \sup \partial M(X,Y),$$

donde M(X,Y) es la matriz característica poblacional de (X,Y).

Demostración. El siguiente argumento muestra que cada entrada de M es, como máximo, sup ∂M : fije un par (k,ℓ) y observe que, o bien $k \leq \ell$, en cuyo caso $M_{k,\ell} \leq M_{k,\uparrow}$, o bien $\ell \leq k$, en cuyo caso $M_{k,\ell} \leq M_{\uparrow,\ell}$.

Por lo tanto,
$$\mathrm{MIC}_* \leq \sup \{M_{\uparrow,\ell}\} \cup \{M_{k,\uparrow}\} = \sup \partial M$$
.

Por otro lado, el Corolario muestra que cada elemento de ∂M es un supremo sobre algunos elementos de M. Por lo tanto, sup ∂M , al ser un supremo sobre supremos de elementos de M, no puede exceder sup $M = \mathrm{MIC}_*$.

2.4.4. Estimando el MIC_* con MIC_e

Como hemos revisado, MIC_* es el valor poblacional del estadístico MIC introducido en Reshef et al. (2011). Sin embargo, aunque es consistente, el estadístico MIC no se conoce por ser eficientemente computable y en Reshef et al. (2011) [14] se calculó en su lugar un algoritmo heurístico de aproximación llamado Approx-MIC. En esta sección, revisaremos un estimador de MIC_* que es tanto consistente como eficientemente computable. El nuevo estimador, llamado MIC_e , tiene una mejor complejidad de tiempo de ejecución incluso que el algoritmo heurístico Approx-MIC y es órdenes de magnitud más rápido en la práctica.

El estimador MIC_e se basa en la caracterización alternativa de MIC_* probada en la sección anterior, si MIC_* puede considerarse como el supremo del límite de la matriz característica en lugar de la matriz completa, entonces solo el límite de la matriz debe estimarse con precisión para estimar MIC_* . Esto tiene la ventaja de que, mientras que calcular entradas individuales de la matriz característica de muestra implica encontrar rejillas óptimas (bidimensionales), estimar las entradas del límite nos requiere solo encontrar particiones óptimas (unidimensionales). Si bien el primer problema es computacionalmente difícil, el segundo puede resolverse utilizando el algoritmo de programación dinámica de Reshef et al.(2011)[14].

En Reshef (2016) [16], esta idea es formalizada a travez de un objeto llamado la matriz equicaracterística, la cual es denominadad [M]. La diferencia entre [M] y la matriz característica M es la siguiente: mientras que la entrada k,ℓ -th de M se calcula a partir de la información mutua máxima alcanzable utilizando cualquier cuadrícula de k-por- ℓ , la entrada k,ℓ -th de [M] se calcula a partir de l información mutua máxima alcanzable utilizando cualquier cuadrícula de k-por- ℓ que equiparticiona la dimensión con más filas/columnas. 2.3 (Ver Figura 1.) A pesar de esta diferencia, a medida que la equipartición en cuestión se vuelve más y más fina, se vuelve indistinguible de una partición óptima del mismo tamaño Esta intuición se puede formalizar para mostrar que el límite de [M] es igual al límite de M, y por lo tanto que sup[M] = sup M = MIC*. Entonces, se deducirá que estimar [M] y tomar el supremo, como lo hicimos con M en el caso de MIC, proporciona una estimación consistente de MIC*.

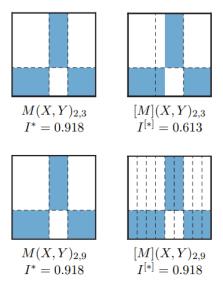


Figura 2.3: Un esquema que ilustra la diferencia entre la matriz característica M y la matriz equicaracterística [M]. (Arriba) Cuando se restringe a 2 filas y 3 columnas, la matriz característica M se calcula a partir de la rejilla óptima de 2 por 3. En contraste, la matriz equicaracterística [M] aún optimiza la partición más pequeña de tamaño 2 pero está restringida a tener la partición más grande como una equipartición de tamaño 3. Esto resulta en una información mutua más baja de 0.613. (Abajo) Cuando se permiten 9 columnas en lugar de 3, la rejilla encontrada por la matriz característica no cambia, ya que la rejilla con 3 columnas ya era óptima. Sin embargo, ahora la matriz equicaracterística utiliza una equipartición en columnas de tamaño 9, cuya resolución es capaz de capturar completamente la dependencia entre X e Y.

2.5. La matriz equicaracterística

Ahora definimos la matriz equicaracterística y mostramos que su supremo es efectivamente MIC^* . Para hacerlo, primero definimos una versión de I^* que equiparticiona la dimensión con más filas/columnas. Observe que en la definición, los corchetes se utilizan para indicar la presencia de una equipartición.

Definición 2.10. Sea (X,Y) variables aleatorias conjuntamente distribuidas. Definir

$$I^*((X,Y),k,[\ell]) = \max_{G \in G(k,[\ell])} I\left(\left.(X,Y)\right|_G\right),$$

donde $G(k,[\ell])$ es el conjunto de rejillas de k por $[\ell]$ cuya partición del eje y es una equipartición de tamaño ℓ . Definir $I^*((X,Y),[k],\ell)$ análogamente.

Definir $I^{[]}((X,Y),k,\ell)$ igual a $I^{(}(X,Y),k,[\ell])$ si $k<\ell$ y $I^{(}(X,Y),[k],\ell)$ en caso contrario.

Ahora definimos la matriz equicaracterística en términos de $I^{[*]}$. En la definición a continuación, continuamos nuestra convención de usar corchetes para denotar la presencia de equiparticiones.

Definición 2.11. Sea (X,Y) variables aleatorias conjuntamente distribuidas. La matriz equicaracterística de población de (X,Y), denotada por [M](X,Y), se define por

$$[M](X,Y)_{k,\ell} = \frac{I^{[*]}((X,Y),k,\ell)}{\log \min\{k,\ell\}},$$

para $k, \ell > 1$.

La frontera de la matriz equicaracterística se puede definir mediante un límite de la misma manera que la matriz característica. Luego tenemos el siguiente teorema.

Teorema 2.5. Sea (X,Y) variables aleatorias conjuntamente distribuidas. Entonces $\partial[M] = \partial M$.

Demostración. Apéndice F de Reshef 2016

Dado que cada entrada de la matriz equicaracterística está dominada por alguna entrada en su frontera, la equivalencia de $\partial[M]$ y ∂M produce el siguiente corolario como una simple consecuencia.

Corolario 2.6. Sea (X,Y) variables aleatorias conjuntamente distribuidas. Entonces $\sup[M](X,Y) = MIC_*(X,Y)$.

2.6. El estimador MIC_e

Con la matriz equicaracterística definida, podemos ahora definir nuestro nuevo estimador MIC_e en términos de la matriz equicaracterística de muestra, de manera análoga a cómo definimos MIC con la matriz característica de muestra.

Definición 2.12. Sea $D \subset \mathbb{R}^2$ un conjunto de pares ordenados. La matriz equicaracterística de muestra $\widehat{M}(D)$ de D se define como

$$\widehat{[M]}(D)_{k,\ell} = \frac{I^{[*]}(D,k,\ell)}{\log \min\{k,\ell\}}.$$

Definición 2.13. Sea $D\subset \mathbb{R}^2$ un conjunto de n pares ordenados, y sea $B:\mathbb{Z}^+\to \mathbb{Z}^+$. Definimos

$$MIC_{e,B}(D) = \max_{k\ell \le B(n)} \widehat{[M]}(D)_{k,\ell}.$$

Con la equivalencia establecida entre la frontera de la matriz característica y el de la matriz equicaracterística, es fácil demostrar que $\mathrm{MIC}e$ es un estimador

consistente de MIC* mediante argumentos similares a los que aplicamos en el caso de MIC. (Ver Apéndice G. Reshef (2016)[16]) Específicamente, mostramos el siguiente teorema, un análogo del Teorema 6.

Teorema 2.7. Sea $f: m^{\infty} \to \mathbb{R}$ uniformemente continua, y suponga que $f \circ r_i \to f$ puntualmente. Entonces para cada variable aleatoria (X,Y), tenemos:

$$(f \circ r_{B(n)})(\widehat{M}](D_n) \rightarrow f([M](X,Y)),$$

en probabilidad donde D_n es una muestra de tamaño n de la distribución de (X,Y), siempre que $\omega(1) < B(n) \le O(n^{1-\varepsilon})$ para algún $\varepsilon > 0$.

Demostración. Apéndice A. Reshef (2016) [16]

Al establecer $f([M]) = \sup[M]$, obtenemos como corolario la consistencia de MIC_e .

Corolario 2.8. MIC_B es un estimador consistente de MIC_* siempre que $\omega(1) < B(n) \le O(n^{1-\varepsilon})$ para algún $\varepsilon > 0$.

2.6.1. Computando MIC_e

Tanto el MIC como el MIC_e son estimadores consistentes de MIC_* . La diferencia entre ellos radica en que, mientras que el MIC actualmente solo se puede calcular de manera eficiente a través de una aproximación heurística, el MIC_e se puede calcular de manera exacta y muy eficiente mediante un enfoque similar al utilizado para aproximar MIC_* que involucra la subrutina OptimizeXAxis. Ahora repasaremos los detalles de este enfoque.

Recordemos que, dada una partición fija del eje x Q en ℓ columnas, un conjunto de n puntos de datos, una partición "maestra" del eje y Π , y un número k, la subrutina OptimizeXAxis encuentra, para cada $2 \le i \le k$, una partición del eje y $P_i \subset \Pi$ de tamaño como máximo i que maximiza la información mutua inducida por la cuadrícula (P_i, Q) . El algoritmo realiza esto en un tiempo de $O(|\Pi|^2k\ell)$. Para obtener más detalles sobre OptimizeXAxis, consulte la Sección 3.5 de Reshef el al. (2016) [16]

En el par de teoremas a continuación, se muestran dos formas en que OptimizeXAxis se puede utilizar para calcular eficientemente el MIC_e .

Teorema 2.9. Existe un algoritmo EQUICHAR que, dada una muestra D de tamaño n y algún $B \in \mathbb{Z}^+$, computa la porción $r_{B(n)}(\widehat{M}(D))$ de la matriz equicaracteristica poblacional en tiempo $O\left(n^2B^2\right)$, que es equivalente a $O\left(n^{4-2\varepsilon}\right)$ para $B(n) = O\left(n^{1-\varepsilon}\right)$ con $\varepsilon > 0$.

Demostración. Describimos el algoritmo y simultáneamente acotamos su tiempo de ejecución. Lo hacemos únicamente para las entradas k, ℓ -ésimas de $\widehat{[M]}(D)$

que satisfacen $k \le \ell, k\ell \le B$. Esto es suficiente, ya que por simetría, calcular el resto de las entradas requeridas como máximo duplica el tiempo de ejecución.

Para calcular $\widehat{[M]}(D)_{k,\ell}$ con $k \leq \ell$, debemos fijar una partición equitativa en ℓ columnas en el eje x y luego encontrar la partición óptima del eje y de tamaño como máximo k. Si configuramos la partición maestra Π del algoritmo OptimizeXAxis como una partición equitativa en filas de tamaño n, entonces realiza precisamente la optimización requerida. Además, para un ℓ fijo, puede llevar a cabo la optimización simultáneamente para todos los pares $(2,\ell),\ldots,(B/\ell,\ell)$ en tiempo $O(|\Pi|^2(B/\ell)\ell) = O(n^2B)$. Para un ℓ fijo, este conjunto contiene todos los pares (k,ℓ) que satisfacen $k \leq \ell, k\ell \leq B$. Por lo tanto, para calcular todas las entradas requeridas de $\widehat{[M]}(D)$, solo necesitamos aplicar este algoritmo para cada $\ell = 2, \ldots, B/2$. Hacerlo resulta en un tiempo de ejecución de $O(n^2B^2)$.

El algoritmo mencionado anteriormente, aunque es de tiempo polinómico, no es lo suficientemente eficiente para su uso en la práctica. Sin embargo, una modificación simple resuelve este problema sin afectar la consistencia de las estimaciones resultantes. La modificación se basa en el hecho de que OptimizeXAxis puede usar particiones maestras Π además de la partición equitativa de tamaño n que utilizamos anteriormente. Específicamente, configurar Π en el algoritmo anterior como una partición equitativa en ck "grupos", donde k es el tamaño de la partición óptima más grande que se está buscando, acelera significativamente el cálculo. Esta modificación proporciona una estadística ligeramente diferente, pero que tiene todas las propiedades teóricas de MICe, es decir, una estimación consistente de MIC* y un cálculo exacto eficiente. Estas propiedades se formalizan en el siguiente teorema

Teorema 2.10. Sea (X,Y) un vertor aleatorio bivariado, y sea D_n y sea una muestra de tamaño n de la distribucion (X,Y). Para cada $c \geq 1$, existe una matriz $\{\widehat{M}\}^c(D_n)$ tal que:

1. La función

$$\widetilde{MIC_{e,B}}(\cdot) = \max k\ell \le B(n)\{\widehat{M}\}^c(\cdot)k, \ell,$$

es un estimador concistente de MIC_* dado $\omega(1) < B(n) \le O\left(n^{1-\varepsilon}\right)$ para algún $\varepsilon > 0$. 2. Existe un algoritmo EQUICHARCLUMP para comparar $r_B\left(\{\widehat{M}\}^c\left(D_n\right)\right)$ en tiempo $O\left(n+B^{5/2}\right)$, que equivale a $O\left(n+n^{5(1-\varepsilon)/2}\right)$ cuando $B(n) = O\left(n^{1-\varepsilon}\right)$.

Para un análisis del efecto del parámetro c en el teorema anterior en los resultados del algoritmo EQUICHARCLUMP, consulte el Apéndice H.3 de Reshef el al. (2016) [16]. Estableciendo $\varepsilon=0.6$ en el teorema anterior, obtenemos el siguiente corolario.

Corolario 2.11. MIC_* puede estimarse de manera consistente en tiempo lineal.

Por supuesto, en tamaños de muestra pequeños, establecer $\varepsilon = 0.6$ sería indeseable. Sin embargo, nuestro el artículo complementario (Reshef et al.,(2015a) [15]) demuestra empíricamente que en tamaños de muestra grandes, esta estrategia funciona muy bien en relaciones típicas.

Cabe destacar que el algoritmo EQUICHARCLUMP dado anteriormente es asintóticamente más rápido incluso que el algoritmo heurístico APPROX-MIC utilizado para calcular MIC en la práctica, que se ejecuta en tiempo $O\left(B(n)^4\right)$. Como se demostró en el artículo complementario (Reshef et al., 2015a [16]), esta diferencia se traduce en una diferencia sustancial en los tiempos de ejecución para un rendimiento similar en una gama de tamaños de muestra realistas, que va desde una aceleración de 30 veces en n=500 hasta más de 350 veces en n=10,000.

2.6.2. Eligiendo B(n)

Recordemos que, como fue propuesto en Reshef el al. (2011) [14], utilizamos funciones de la forma $B(n)=n^{\alpha}$. Valores grandes de α conducen a un aumento en el error esperado en regímenes de baja señal (R^2 bajos) debido tanto a un sesgo positivo en esos regímenes como a un aumento general en la varianza que afecta predominantemente a esos regímenes. Por otro lado, valores pequeños de α llevan a un aumento en el error esperado en regímenes de alta señal (R2 altos) al generar un sesgo negativo en esos regímenes y desplazar la varianza del estimador hacia esos regímenes. En otras palabras, valores más bajos de α son más adecuados para detectar señales más débiles, mientras que valores más altos de α son más adecuados para distinguir entre señales más fuertes. Esto concuerda con los resultados observados en el trabajo complementario (Reshef et al., (2015a) [15]), que muestran que valores bajos de α hacen que MICe proporcione pruebas de independencia con mejor potencia, mientras que valores altos de α hacen que MICe tenga una mejor equidad.

2.7. Total Information coefficient (TIC)

Hasta ahora hemos presentado resultados sobre estimadores del coeficiente de información maximal de la población, una cantidad para la cual la equitabilidad es la principal motivación. Ahora introducimos y analizamos una nueva medida de dependencia, el coeficiente de información total (TIC). A diferencia del coeficiente de información maxima(MIC), el coeficiente de información total no está diseñado para la equitabilidad, sino más bien como una estadística de prueba para probar una hipótesis nula de independencia.

Comenzamos dando alguna intuición. Recordemos que el coeficiente de información maximal es el supremo de la matriz característica. Si bien estimar el

supremo de esta matriz tiene muchas ventajas, esta estimación implica tomar un máximo sobre muchas estimaciones de las entradas individuales de la matriz característica. Dado que los máximos de conjuntos de variables aleatorias tienden a aumentar a medida que crece el número de variables, se puede imaginar que este procedimiento puede llevar a un sesgo positivo indeseable en el caso de la independencia estadística, cuando la matriz característica de la población es igual a 0. Esto podría ser perjudicial para las pruebas de independencia, donde la distribución muestral de una estadística bajo una hipótesis nula de independencia es crucial.

La intuición detrás del coeficiente de información total es que si en cambio consideramos una propiedad más estable, como la suma de las entradas en la matriz característica, podríamos esperar obtener una estadística con un sesgo más pequeño en el caso de independencia y, por lo tanto, una mejor potencia. En resumen, si nuestro único objetivo es distinguir cualquier dependencia de ruido completo, entonces ignorar toda la matriz característica de la muestra, excepto su valor máximo, puede descartar una señal útil, y el coeficiente de información total evita esto al sumar todas las entradas.

Cabe destacar que en Reshef et al. (2011)[14] se sugiere que otras propiedades de la matriz característica pueden permitirnos medir otros aspectos de una relación dada además de su fuerza, y se definieron varias de estas propiedades. El coeficiente de información total encaja dentro de este marco conceptual. En la siguiente sección definimos el coeficiente de información total en el caso de la matriz característica (TIC) y la matriz equicaracterística (TIC_e) . Luego demostramos que tanto TIC como TICe producen pruebas de independencia que son consistentes frente a todas las alternativas dependientes. (Al igual que en el caso de MIC y MIC_e , TIC_e es más fácil de calcular que TIC). Finalmente, revisaremos un estudio de simulación sobre la potencia de las pruebas de independencia basadas en TICe realizado en el paper de Reshef (2016)[16] en un conjunto de relaciones elegidas en Simon y Tibshirani (2012)[19], mostrando que TIC_e supera a otras medidas comunes de dependencia en muchas de las relaciones y se a justa estrechamente a su rendimiento en el resto.

2.7.1. Definición y Consistenc/'ia de TIC

Comenzamos definiendo dos versiones del coeficiente. En la siguiente definición notemos qué \widehat{M} denota la matriz caracteristica poblacional y $\widehat{[M]}$ denota la matriz equicaracteristica de poblacional.

Definición 2.14. Sea $D\subset \mathbb{R}^2$ un conjunto de n pares ordenados, y sea $B:\mathbb{Z}^+\to \mathbb{Z}^+.$ Definimos:

$$TIC_B(D) = \sum_{k\ell \le B(n)} \widehat{M}(D)_{k,\ell},$$

у

$$TIC_{e,B}(D) = \sum_{k\ell \leq B(n)} \widehat{[M]}(D)_{k,\ell}.$$

Ahora nos interesa mostrar que estos estadísticos nos entregan test de independencia concistente, para esto debemos detenernos y analizar el comportamiento de las cantidades poblacionales análogas.

Definición 2.15. Para una matriz A y un número positivo B, la B-parcial suma de A, denotada por $S_B(A)$, es:

$$S_B(A) = \sum_{k\ell \le B} A_{k,\ell}.$$

Cuando A es una matriz (equi)caracteristica, $S_B(A)$ es la suma sobre todas las entradas correpondientes a mallas con al menos B celdas totales. Por tanto, si $\widehat{M}(D)$ es una matriz equicaracteristica poblacional de $D, S_B(\widehat{M}(D)) = \mathrm{TIC}_B(D)$, y lo mismo se mantiene cierto para $S_B(\widehat{M}(D))$ and $\mathrm{TIC}_{e,B}(D)$.

Es claro que si X e Y son variables aleatorias estadísticamente independientes, se tiene que ambas matrices caracteristicas M(X,Y) y la matriz equicaracteristica [M](X,Y) son identicamente 0, tal que $S_B(M(X,Y)) = S_B([M](X,Y)) = 0$ para todo B. Sin embargo, también nos interesa como estas cantidades se comportan cuando las variables X e Y son dependietes. Las siguientes proposiciones nos ayudan a entender esto. La primera nos muestra una cota inferior para los valores de las entradas de ambas M(X,Y) y [M](X,Y). La segunda nos muestra una caracterización asintótica de como crecen $S_B(M)$ y $S_B([M])$ como funciones de B. Estas dos proposiciones son el corazón técnico de por qué el coeficiente de información total produce un test de independencia consistente.

Proposición 2.3. Sea (X,Y) un vector aleatorio bivariado. Si X e Y son estadísticamente independientes, entonces $M(X,Y) \equiv [M](X,Y) \equiv 0$. Si no, existe algún a > 0 y algún entero $\ell_0 \geq 2$ tal que:

$$M(X,Y)_{k,\ell,}[M](X,Y)_{k,\ell} \ge \frac{a}{\log \min\{k,\ell\}},$$

ya sea para todo $k \ge \ell \ge \ell_0$, o para todo $\ell \ge k \ge \ell_0$.

Demostración. Apéndice K.1. Reshef (2016) [16] \Box

Proposición 2.4. Sean (X,Y) un vector aleatorio bivariado. Si X e Y independites, se tiene que $S_B(M(X,Y)) = S_B([M](X,Y)) = 0$ para todo B > 0. Si no, tenemos que $S_B(M(X,Y))$ y $S_B([M](X,Y))$ son ambos $\Omega(B \log \log B)$.

Demostración. Apéndice K.2. Reshef (2016) [16] \Box

Con las proposiciones presentadas, y siguiendo la misma lógica de los argumentos de convergencia presentados anteriormente, podemos mostrar el resultado principal de esta sección, que las estadísticas TIC y TIC_e producen tests de independencia consistentes.

Teorema 2.12. Los estadisticos TIC_B y $TIC_{e,B}$ proporcionan pruebas coherentes de cola derecha de independencia, siempre que $\omega(1) < B(n) \le O\left(n^{1-\varepsilon}\right)$ para algún $\varepsilon > 0$.

Demostración. Apéndice K.3. Reshef (2016) [16]

En la práctica, usualemente se utiliza el algoritmo EQUICHARCLUMP [16, Sección 4.3] para computar la matriz equicaracterística, de donde calculamos TIC_e . Este algoritmo no computa la matriz equicaracterística exactamente. Pero, como es el caso con MIC_e , el uso del algoritmo no afecta las propiedades teóricas de la estadística. Esta demostración se puede encontrar en Reshef el al. (2016) [16, Apéndice H]

2.7.2. Prueba de Poder de independencia basadas en TIC_e

Ya sabemos que ambos, TIC y TIC_e , son consitentes, ahora nos interesa realizar una evalución empírica de la prueba de poder de independencia basado en TIC_e siendo computado usando al algoritmo EQUICHARCLUMP.

En Reshef el at. (2016)[16], para evaluar el poder que tiene esta prueba, se realiza el analisis utilizado por Simon y Tibshirani (2012) [19]. Este corresponde a un conjunto de relaciones definido por:

$$Q = \left\{ (X, f(X) + \varepsilon') : X \sim \text{ Unif, } f \in F, \varepsilon' \sim \mathcal{N}\left(0, \sigma^2\right), \sigma \in \mathbb{R}_{\geq 0} \right\},\,$$

donde F es el conjunto de relaciones definido en Simon y Tibshirani (2012) [19]. Estas corresponden a relacion: Lineal, Cuadrática, Cúbica, Seno (Perido $\frac{1}{8}$), Seno (Periodo $\frac{1}{2}$), $X^{\frac{1}{4}}$, Circular (tratado como dos semicirculos), y Función escalera. Detalles de la métodología que fue utilizada pueden ser encontrados en la seccón 5.2 de Reshef el at. (2016)[16].

Los resultados del análisis se presentan en la Figura 2.4. En primer lugar, la figura muestra que TICe se compara de manera bastante favorable con la correlación de distancia, un método considerado tener un alto poder (Simon y Tibshirani, (2012)[19]). Específicamente, TIC_e supera de manera uniforme a la correlación de distancia en 5 de los 8 tipos de relaciones examinados y se desempeña de manera comparable en los otros tres tipos de relaciones. Cabe destacar que la correlación de distancia tiene muchas ventajas sobre TIC_e , incluyendo el hecho de que se generaliza fácilmente a relaciones de mayor dimensionalidad y viene con un marco teórico elegante y completo.

El análisis también muestra que TICe supera en gran medida al coeficiente de información maximal (MIC) original, y también supera a MIC_e , respaldando la intuición de que la suma realizada por el primero puede, de hecho, conducir a ganancias sustanciales en poder contra la independencia en comparación con la maximización realizada por el último.

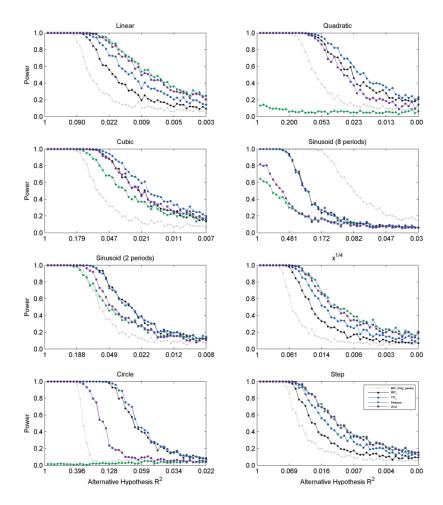


Figura 2.4: Comparación del poder de prueba de independencia basado en TIC_e (azul) con MIC con parámetros predeterminados (gris), MIC_e con los mismos parámetros que TIC_e (negro), correlación de distancia (púrpura) y el coeficiente de correlación de Pearson (verde) en varios tipos de relaciones de hipótesis alternativas elegidos por Simon y Tibshirani (2012 [19]).

2.7.3. Ejemplos

Ahora, con una definición clara de como calcular los coeficientes, podemos procesder a un ejemplo de su uso. Para esto usaremos "The Datasaurus Dozon", un conjutno de datos propuesto por Justin Matejka y George Fitzmaurice (2017) [12]. Este conjunto de datos nos presenta con 13 realciones, visibles en la Figura 2.5, las cuales todas poseen los mismos valores para estadísticos descriptivos comunos (Promedio Marginal, Desviacón Estandar Marginal, y Correlación de Pearson), pero son claramente visualmente distinos.

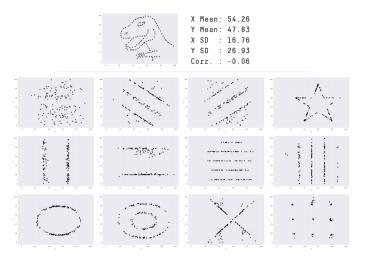


Figura 2.5: The Datasaurus Dozon", a pesar de compartir los mismos estadísticos descriptivos, son visualmente distintos.

De particular interes para nosotros es el valor de la correlación de Pearson de, esta es básicamente cero, lo que nos "debería indicar que las relaciones son independientes. Sin embargo, como podemos ver en la Figura 2.5, esto no es cierto. Es por esto que estos datos nos son de gran ayuda.

Para este ejemplo, tomamos los vectores marginales de cada una de las relaciones, y los colocamos todos en un solo conjunto de datos. Luego de esto utilizamos TIC_e para encontrar los pares que sean más independientes, y finalmente usamos MIC_e para cuantificar la relacion entre estos pares. Los resultados de este analisis se pueden ver en la Figura

Rehacer Figura y terminar sección

2.7.4. Ejemplos

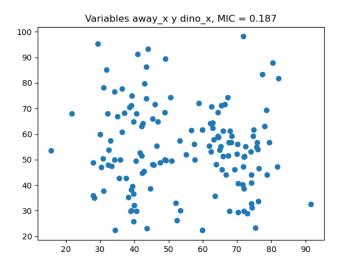


Figura 2.6: MIC = 0.187

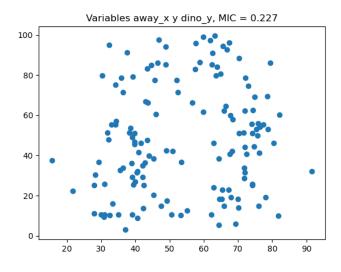


Figura 2.7: MIC = 0.227

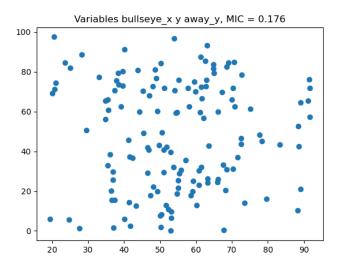


Figura 2.8: MIC = 0.176

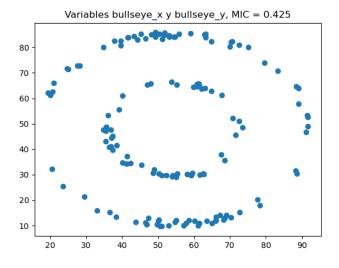


Figura 2.9: MIC = 0.425

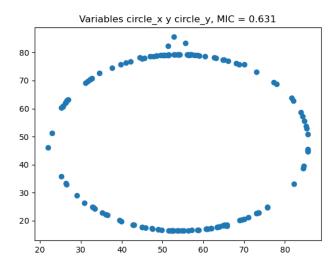


Figura 2.10: MIC = 0.631

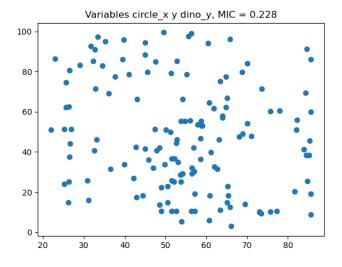


Figura 2.11: MIC = 0.228

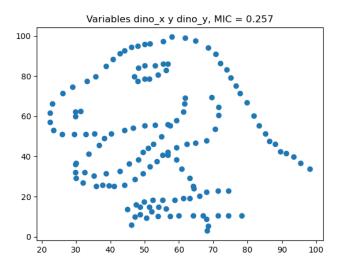


Figura 2.12: MIC = 0.257

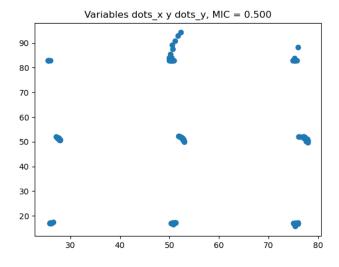


Figura 2.13: MIC = 0.500

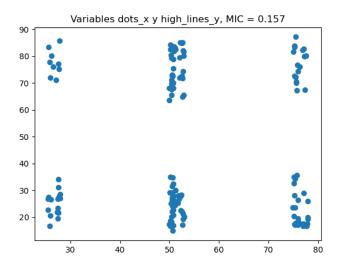


Figura 2.14: MIC = 0.157

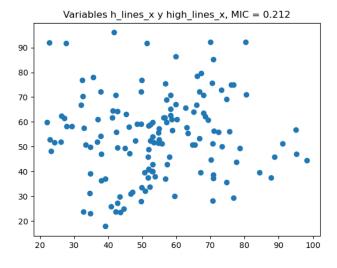


Figura 2.15: MIC = 0.212

Capítulo 3

Otros Métodos de Comparación de Imágenes

3.1. Introducción

En la sección anterior nos enfocamos en describir con detalle el Coeficiente de Información Máxima (MIC), esta medida de correalción es una de las más poderosas al momento de encontrar relaciones entre varibales, y también una de las más complejas, motivo por el cuál una sección fue dedicada a esta. A pesar de eso, tenemos otros coeficientes también poderosos y que nos ayduarán a caracterizar la relación que existe entre las imágenes transformadas y sus primitivas.

En este capítulo estudiaremos 3 medidas de correalción, las que finalmente usaremos en la compración de las imágenes, estas las podemos separar en dos categorías. La primera, que corresponde a la Correlación Máxima Local[4] y la Correlación por Distancia [21], estas son dos medidas avanzados que buscan relaciones no lineales entre conjuntos de datos. La segunda categoría corresponde unicamente a la Correlación de Pearson la cuál es la medida más utilizada para comparar dos conjuntos, pero está limitada a solo encontrar relaciones lineales entre los datos.

Definiremos los coeficientes, revisaremos algunas de sus propiedades y finalmente discutiremos la inefectividad del coeficiente de Pearson para comparar imágenes. Luego en la sección posterior estdiaremos el concepto de Equitatibilidad y lo usaremos para comparar los coeficientes.

3.2. Correlación Máxima local

3.2.1. Introducción

La correlación local, tambíen conodica como coeficiente no paramétrico de Chen, o coeficiente de Chen, es un coeficiente que busca detectar relaciones no lineales basado en la integral de correlación. Este fue propuesto por Chen et al. en su trabajo A Nonparametric Approach to Detect Nonlinear Correlation in Gene Expression (2012) [4]. Este coeficiente es una medida de asociación no paramétrica que puede detectar relaciones no lineales entre dos variables, esto lo hace a través de un método similar al de aproximación lineal por secciónes.

La integral de correlación examina la distribución acumulativa de distancias entre puntos en una serie de tiempo, en base a esto y con algunas modificaciones, se puede utilizar para estimar patrones y asociaciones globales.

3.2.2. Definiciones

Defnimamos primero el corazón del coeficiente, la integral de correlación:

Definición 3.1 (Correlación Integral). Sea z_1, \ldots, z_N una serie de tiempo de N observaciones y sea $r \in \mathbb{R}_{>0}$. Definimos la integral de correlación I(r) una función indicadora definida como:

$$I(r) = \lim_{N \to \infty} \left\{ \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^{N} I(|z_i - z_j| < r) \right\}.$$

La integral de correlación cuantifica el el número promedio de vecinos dentro de un radio r. Notemos que esta definición sigue teniendo sentido cuando los datos no son series de tiempo, solo requerimos de una indexación de los estos.

Para desarrollar una medida de asociación entre vectores, x e y, modificamos la definición de I(r) como sigue. Sean $z_i = (x_i, y_i)$ con i = 1, ..., N las observaciones en el conjunto de datos. Con esto definimos:

Definición 3.2 (Correlación Integral entre vectores). Sean $x = \{x_1, \ldots, x_N\}$ e $y = \{y_1, \ldots, y_N\}$ dos vectores de N observaciones y sea $r \in \mathbb{R}_{>0}$. Definimos la integral de correlación $\hat{I}(r)$ entre x e y como:

$$\hat{I}(r) = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^{N} I\left(\left| \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x_j \\ y_j \end{pmatrix} \right| < r \right)$$

, donde $|\cdot|$ es la norma euclidiana. En adelante, al referirnos a la Integral de Correlación nos referiremos a esta definición, a menos que se indique lo contrario.

Notemos que las distancias obsevadas son además linealmente transformadas para que se encuentren entres 0 y 1 antes de calcular \hat{I} . Es importante destacar

que \hat{I} a tiene las propiedades de una función de distribución acumulativa. Es no decreciente entre 0 y 1 y continua por la derecha. La función $\hat{I}(r)$ descrive el patrón global de distancias entre vecinos.

El interés principal es la definición de una metrica para cuantificar la asosiación no lineal estudiando patrones locales. Dado esto, definimos la densidad de vecinos D de forma similar a la derivada de \hat{I} :

Definición 3.3 (Densidad de Vecinos). Dados $x = \{x_1, \dots, x_N\}, y = \{y_1, \dots, y_N\}$ y su respectiva Integral de correalción $\hat{I}(r)$

$$\hat{D}(r) = \frac{\triangle \hat{I}(r)}{\wedge r},$$

donde $\triangle \hat{I}(r)$ denota un cambio en $\hat{I}(r)$ y $\triangle r$ la magnitud de este.

La densidad de vecinos observada es evaluada en radio distreto r, con $r=0,1/m,2/m,\ldots,1$, con m es un grosor de malla arbitrario que determina Δ $r=\frac{1}{m}$. Una función de suavizado automático es usado para suavizar D(r), en su propuesta original se usó el algoritmo propuesto por Videla et al. (2007) [22], nosotros utilizaremos filtros Savitzky-Golay [18], también haciendo uso de validación cruzada para elegir los mejores hiperparametros. En el paper, el tamaño predeterminado m se establece como N, el número de observaciones y en este trabajo usaremos el mismo m. El estadístico \hat{D} es una aproximación discreta de $d\hat{I}(r)/dr$, la cual tiene las propiedades formales de una probabilidad función de densidad. Por lo tanto, con un ligero abuso de terminología nos referimos a $\hat{D}(r)$ como una distribución.

En base a esto definimos la correlación local. Intuitivamente, las distancias entre los puntos de datos entre dos variables correlacionadas diferirían de las distancias entre dos variables no correlacionadas.

Definición 3.4 (Correlación Local). Sea $\widehat{D_0}(r)$ la estimación de una distribución nula, que se compone de dos vectores sin asociación. Definimos la correlación local $(\ell(r))$ como la desviación de D de la de la distribución nula a una distancia vecina dada r:

$$\ell(r) = \widehat{D}(r) - \widehat{D}_0(r),$$

donde $\widehat{D}(r)$ es la distribución asociada a los vectores que queremos comparar.

Este enfoque no asume ninguna distribución paramétrica. La flexibilidad de este método facilita el cambio de la distribución nula a cualquier distribución de interés.

Por ultimo, definimos el coficiente como de correlación local máxima, o coeficiente de Chen como:

Definición 3.5. Sea $\ell(r)$ la función de correlación local entre dos vectores, definimos el coeficiente de correlación local máxima como:

$$M = \max_r \{|\ell(r)|\}$$

con $r \in [0, 1]$. Recordemos que las distancias fueron nom
ralizadas.

La interpretación de $\ell(r)$ como la diferencia de dos distribuciones implica que M puede interpretarse como la distancia bajo la norma del supremo entre \widehat{D} y $\widehat{D_0}$. En otras palabras, definimos el estadístico M como la desviación máxima entre dos densidades vecinas subvacentes.

3.3. Distance Covariance & Distance Correlation

3.3.1. Introducción

La Covarianza por Distancia y la Correlación por distancia fueron propuestas por Székely, Rizzo, y Bakirov en su trabajo "Measuring and testing independence by correlation of distances" (2007) [20], posteriormente también propusieton la Covarianza por Distancia Browniana en su trabajo "Brownian Distance Covariance" (2009) [21], en donde también se demostró que esta coincide con la Covarianza por Distancia tradicional.

De la misma forma que las medidas que hemos visto anteriormente, estas son medidas de asociación no paramétricas que buscan encontrar relaciones no lineales entre dos conjuntos de datos, en particular establecer una forma de caracterizar independencía entre dos distribuciónes. Dado esto es importante recalcar que, para distribución de primer momento finíto, la Correlación por distancia (\mathcal{R}) generaliza la idea de correalción en dos formas:

- 1. $\mathcal{R}(X,Y)$ está definido para X,Y de dimensión aleatoria.
- 2. $\mathcal{R}(X,Y) = 0$ caracteriza la independencá de X e Y.

La primera de estas afirmaciones es importante, ya que nos permite utulizar esta medida para comparar imágenes sin mayor problema, de todas formas en la sección 5 estudiaremos como adaptar estás medidas para imágnes. En esta sección definiremos estos 3 coeficientes, la relación entre ellos y verificaremos la afirmaciones realizadas más arriba, para esto comenzaremos con las definiciones.

3.3.2. Definiciones

Sean X en \mathbb{R}^p y Y en \mathbb{R}^q vectores aleatorios, donde p y q son enteros positivos. Las funciones en minúscula f_X y f_Y se utilizarán para denotar las funciones características de X y Y, respectivamente, y su función característica conjunta se denota como $f_{X,Y}$.

Definición 3.6 (Covarianza por distancia). La Covarianza por distancia (dCov) entre los vectores aleatorios X e Y con primeros momentos finitos es el número no negativo $\mathcal{V}(X,Y)$ definido por:

$$\mathcal{V}^{2}(X,Y) = \|f_{X,Y}(t,s) - f_{X}(t)f_{Y}(s)\|^{2}$$

$$= \frac{1}{c_{p}c_{q}} \int_{\mathbb{R}^{p+q}} \frac{|f_{X,Y}(t,s) - f_{X}(t)f_{Y}(s)|^{2}}{|t|_{p}^{1+p}|s|_{q}^{1+q}} dt ds.$$

Similarmente, la Varianza por distancia (dVar) se define como la raiz cuadrada:

$$V^{2}(X) = V^{2}(X, X) = ||f_{X,X}(t, s) - f_{X}(t)f_{X}(s)||^{2}.$$

Por definición de la norma $\|\cdot\|$, es claro que $\mathcal{V}(X,Y) \geq 0$ y $\mathcal{V}(X,Y) = 0$ si y solo si X e Y son indepentes.

Definición 3.7 (Correlación por distancia). La correlación por distancia (dCor) entre los vectores aleatorios X e Y con primer momento finito es el núnero no negtivo $\mathcal{R}(X,Y)$ definido por:

$$\mathcal{R}^{2}(X,Y) = \begin{cases} \frac{\mathcal{V}^{2}(X,Y)}{\sqrt{\mathcal{V}^{2}(X)\mathcal{V}^{2}(Y)}}, & \mathcal{V}^{2}(X)\mathcal{V}^{2}(Y) > 0\\ 0, & \mathcal{V}^{2}(X)\mathcal{V}^{2}(Y) = 0 \end{cases}.$$

Algunas propiedades de \mathcal{R} análogo a ρ serán revisadas más adelante.

Ahora, para el caso muestral, definimos los estadísticos de distancia de la siguiente forma. Para una muestra aleatoria $(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) = \{(X_k, Y_k) : k = 1, \dots, n\}$ de n ventores aleatorios (X, Y) i.i.d., calculamos las matrices de distancia euclideana $(a_{kl}) = (|X_k - X_l|_p)$ y $(b_{kl}) = (|Y_k - Y_l|_q)$. Definimos:

$$A_{kl} = a_{kl} - \bar{a}_{k.} - \bar{a}_{.l} + \bar{a}_{..}, \quad k, l = 1, ..., n,$$

donde

$$\bar{a}_{k.} = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^{n} a_{kl}, \quad \bar{a}_{.l}, = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} a_{kl}, \quad \bar{a}_{..} = \frac{1}{n^2} \sum_{k.l=1}^{n} a_{kl}.$$

De forma similar, definimos $B_{kl} = b_{kl} - \bar{b}_{k.} - \bar{b}_{.l} + \bar{b}_{..}$, para k, l = 1, ..., n.

Definición 3.8 (Covarianza y Correlación por distancia muestral). La no negativa Covarianza por distancia muestral $\mathcal{V}_n(\mathbf{X}, \mathbf{Y})$ y la Correlación por distancia muestral $\mathcal{R}_n(\mathbf{X}, \mathbf{Y})$ estan definidas por

$$\mathcal{V}_n^2(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) = \frac{1}{n^2} \sum_{k,l=1}^n A_{kl} B_{kl},$$

у

$$\mathcal{R}_n^2(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) = \begin{cases} \frac{\mathcal{V}_n^2(\mathbf{X}, \mathbf{Y})}{\sqrt{\mathcal{V}_n^2(\mathbf{X})\mathcal{V}_n^2(\mathbf{Y})}}, & \mathcal{V}_n^2(\mathbf{X})\mathcal{V}_n^2(\mathbf{Y}) > 0\\ 0, & \mathcal{V}_n^2(\mathbf{X})\mathcal{V}_n^2(\mathbf{Y}) = 0 \end{cases},$$

respectivamente. Además la Varianza por distancia muestral $\mathcal{V}_n(\mathbf{X})$ está definida por

$$V_n^2(\mathbf{X}) = V_n^2(\mathbf{X}, \mathbf{X}) = \frac{1}{n^2} \sum_{k,l=1}^n A_{kl}^2.$$

3.3.3. Covarianza Browniana

Para introducir la noción de covarianza browniana, comenzaremos considerando la covarianza cuadrada del producto-momento. Recordemos que una variable prima X' denota una copia independiente e idénticamente distribuida (i.i.d.) del símbolo no prima X. Para dos variables aleatorias continuas de valores reales, el cuadrado de su covarianza clásica es:

$$E[(X - E(X))(Y - E(Y))] = E[(X - E(X))(X' - E(X'))(Y - E(Y))(Y' - E(Y'))]$$

Ahora generalizamos la covarianza al cuadrado y definimos el cuadrado de la covarianza condicional, dadas dos procesos estocásticos de valores reales, $U(\circ)$ y V(*). Obtenemos un resultado interesante cuando U y V son procesos de Wiener independientes.

Primero, para centrar la variable aleatoria X en la covarianza condicional, necesitamos la siguiente definición. Sea X una variable aleatoria de valores reales y $\{U(t): t \in \mathbb{R}\}$ un proceso estocástico de valores reales, independiente de X. La versión centrada de X respecto a U se define por:

$$X_U = U(X) - \int_{-\infty}^{\infty} U(t)dF_X(t) = U(X) - \mathbb{E}[U(X)|U],$$

siempre que la esperanza condicional exista. Notemos que, si id es la identidad, $X_{id} = X - \mathbf{E}[X]$.

Ahora, sea \mathcal{W} un movimiento Browniano/Wiener de una dimensión en ambos lados con esperanza cero y función de covarianza.

$$|s| + |t| - |s - t| = 2\min(s.t) \tag{3.1}$$

Esto es dos veces la covarianza estandar para un proceso Wiener. Pero en adelante el factor de dos nos simplificará algunos calculos, por lo que en el resto de la sección asumiermos esta funcion de covarianza 3.1 para \mathcal{W} . Ya con esto, podemos definir la Covarianza Browniana

Definición 3.9 (Covarianza Browniana). La Covarianza Browniana (o covarianza Wiener) de dos variables aleatorias con valores reales X e Y, con segundos monetos finítos es el número no negativo definido por su cuadrado:

$$W^{2}(X,Y) = Cov_{W^{2}}(X,Y) = \mathbb{E}[X_{W}X'_{W}Y'_{W'}Y'_{W'}], \tag{3.2}$$

donde (W, W') no dependen de (X, X', Y.Y').

Tomemos en cuenta que si W en Cov_{W^2} es reemplazada por la función identidad (no aleatoria) id, entonces $Cov_{id}(X,Y) = |Cov(X,Y)| = |\sigma_{X,Y}|$, el valor absoluto de la covarianza del producto-momento de Pearson. Mientras que la covarianza del producto-momento estandarizada, la correlación de Pearson (ρ) , mide el grado de relación lineal entre dos variables con valores reales, veremos que la covarianza estandarizada de Brownian mide el grado de todos los tipos posibles de relaciones entre dos variables aleatorias con valores reales.

La definición de Cov_{W^2} se puede extender a procesos aleatorios en dimensiones superiores de la siguiente manera. Si X es una variable aleatoria con valores en \mathbb{R}^p y U(s) es un proceso aleatorio (campo aleatorio) definido para todos los $s \in \mathbb{R}^p$ e independiente de X, define la versión centrada en U de X como

$$X_U = E(X) - E[U(X)|U]$$

siempre que la expectativa condicional exista.

Definición 3.10. Si X es un vector aleatorio con valores en \mathbb{R}^p y Y es un vector aleatorio con valores en \mathbb{R}^q , y U(s) y V(t) son procesos aleatorios, definamos para todo $s \in \mathbb{R}^p$, $t \in \mathbb{R}^q$, entonces la covarianza (U,V) de X e Y es el número no negativo definido por su cuadrado:

$$Cov_{(U,V)}^2(X,Y) = \mathbb{E}[X_U X_U' Y_V Y_V'],$$

siempre que el lado derecho sea positivo y finito.

En particular, si W y W' son procesos brownianos con función de covarianza 3.1 en \mathbb{R}^p y \mathbb{R}^q respectivamente, la Covarianza Browniana de X e Y esta definida por:

$$W^{2}(X,Y) = Cov_{W}^{2}(X,Y) = Cov_{W,W'}^{2}(X,Y).$$
(3.3)

De la misma forma, para variables aleatorias con varianza finita podemos definir la Varianza Browniana:

$$W(X) = Cov_W(X) = Cov_W(X, X). \tag{3.4}$$

Y con esto, podemos definir la correlación Browniana:

Definición 3.11 (Correlación Browniana). Definimos la correalción Browniana de dos variables aleatorias con valores reales X e Y con segundos momentos finitos como:

$$Cor_W(X,Y) = \frac{W}{\sqrt{W(X)W(Y)}},$$
 (3.5)

siempre que el denominador no sea 0; otro caso $Cor_W(X,Y) = 0$.

Ahora, solo nos queda probar que $Cov_W(X,Y)$ existe para vectores aleatorios de segundos momentos finitos, y con esto derivar la Covarianza Browniana. Para esto, tenemos el siguiente teorema:

Teorema 3.1. Si X es un vector aleatorio con valores en \mathbb{R}^p , e Y es un vector aleatorio con valores en \mathbb{R}^q , $y \to \mathbb{E}(|X|^2 + |Y|^2) > \infty$, entonces $\to \mathbb{E}[X_W X_W' Y_{W'} Y_{W'}']$ es no negativo y finito, y:

$$\begin{split} \mathcal{W}^2(X,Y) &= \mathrm{E}[X_W X_W' Y_{W'} Y_{W'}'] \\ &= \mathrm{E}\,|X - X'||Y - Y'| + \mathrm{E}\,|X - X'|\,\mathrm{E}\,|Y - Y'| - \\ &- \mathrm{E}\,|X - X'||Y - Y''|\,\mathrm{E}\,|X - X''||Y - Y'|, \end{split}$$

 $donde\ (X,Y),\ (X',Y'),\ y\ (X'',Y'')\ son\ iid.$

revisar la demostración del teorema

3.3.4. Equivalencia entre covarianzas

repasar la sección de convergencia

3.4. Correlación de Pearson

3.4.1. Introducción

donde se publicó, pequena intro.

3.5. Definiciones

El coef. se define como:

$$\rho_{X,Y} = \frac{cov(X,Y)}{\sigma_X \sigma_Y} \tag{3.6}$$

Para una muestra de tamaño N, tenemos:

$$r = \frac{\sum_{i}^{N} (x_{i} - \bar{x}) (y_{i} - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i}^{n} (x_{i} - \bar{x})^{2}} \sqrt{\sum_{i}^{n} (y_{i} - \bar{y})^{2}}}$$
(3.7)

Con x_i, y_i elementos de la muestra y \bar{x}, \bar{y} sus respectivos promedios.

on w_t, g_t diementen de la maestra j w, g das l'especti. es plemea

Hablar de The Ineffectiveness of the Correlation Coefficient for Image ComparisonsS

usar datasaurus para mostrar los coeficientes

3.6. Ejemplos

Equitabilidad

4.1. Introducción

La equitabilidad ha sido descrita de manera informal por Reshef et al. como la capacidad de una estadística para .ªsignar puntuaciones similares a relaciones igualmente ruidosas de diferentes tipos" [14]. Aunque útil, esta definición informal es imprecisa en el sentido de que no especifica lo que se entiende por ruidoso.º "similar", y no especifica para qué relaciones debe cumplirse la propiedad mencionada.

En su trabajo posterior "Equitability, interval estimation, and statistical power", Reshef et al. (2015) [17], se formalizó la idea de Equitabilidad a travez del concepto del intervalo interpretativo, que funciona como estimación en intervalos de la cantidad de ruido presente en una relación de tipo desconocida.

En el contexto de este trabajo, nos interesa que las medidas de dependencia sean equitativas puesto que esto nos asegura que la medida de dependencia no está sesgada hacia un tipo de relación en particular, y por lo tanto, nos será útil para comprar comparar las distintas versión de la transformación Box-Cox que definiremos en la sección 6.

En esta sección se presentará la definición de Intercalo Interpretativo formal, y para luego poder definir equitabilidad y equitabilidad con respecto a R^2 . Posteriormente, recrearemos el experimento realizado por Reshef et al. (2016) [16] sobre la equitabilidad del MIC_e , y junto con esto se estudiará la equitabilidad de las otras medidas propuestas en la Sección 4.

4.1.1. Intervalos interpretativos.

Sea $\hat{\varphi}$ una estadístico que toma valores en el intervalo [0,1], sea \mathcal{Q} un conjunto de distribuciones, y sea $\Phi: \mathcal{Q} \to [0,1]$ una medida de la fuerza de la relación. Nos referimos a \mathcal{Q} como el conjunto de relaciones estándar y a Φ como la pro-

piedad de interés. Para construir los intervalos interpretables de $\hat{\varphi}$ con respecto a Φ , primero debemos preguntar cuánto puede variar $\hat{\varphi}$ al ser evaluado en una muestra de alguna \mathcal{Z} en \mathcal{Q} con $\Phi(\mathcal{Z}) = x$. La siguiente definición nos proporciona una forma de medir esto. (En esta definición y en las definiciones en el resto de este trabajo, asumimos implícitamente un tamaõ de muestra fijo de n.)

Definición 4.1 (Fiabilidad de un estadístico). Sea $\hat{\varphi}$ una estadístico que toma valores en [0,1], y sean $x,\alpha\in[0,1]$. El intervalo α -fiable de $\hat{\varphi}$ en x, denotado como $R^{\hat{\varphi}}_{\alpha}(x)$, es el intervalo cerrado más pequeño A con la propiedad de que, para todas las \mathcal{Z} en \mathcal{Q} con $\Phi(\mathcal{Z})=x$, tenemos

$$\mathbf{P}(\hat{\varphi}(Z) < \min A) < \alpha/2 \text{ and } \mathbf{P}(\hat{\varphi}(Z) > \max A) < \alpha/2,$$

donde Z es una muestra de tamaõ n de \mathcal{Z} .

El estadístico $\hat{\varphi}$ se dice $\frac{1}{d}$ -fiable con respecto a Φ en \mathcal{Q} en x con una probabilidad de $1 - \alpha$ si y solo si el diámetro de $R^{\hat{\varphi}}_{\alpha}(x)$ es como máximo d.

Ver la Figura 4.1a para una ilustración. El intervalo confiable en x es una región de aceptación de una prueba de tamaño α de la hipótesis nula $H_0: \Phi(\mathcal{Z}) = x$. Si solo hay un \mathcal{Z} que satisface $\Phi(\mathcal{Z}) = x$, esto equivale a un intervalo central de la distribución de muestreo de $\hat{\varphi}$ en \mathcal{Z} . Si hay más de un \mathcal{Z} que satisface esta condición, el intervalo confiable se expande para incluir los intervalos centrales relevantes de las distribuciones de muestreo de $\hat{\varphi}$ en todas las distribuciones \mathcal{Z} en cuestión. Por ejemplo, cuando \mathcal{Q} es un conjunto de relaciones funcionales ruidosas con varios tipos de funciones diferentes y Φ es R^2 , el intervalo confiable en x es el intervalo más pequeño A tal que, para cualquier relación funcional $\mathcal{Z} \in \mathcal{Q}$ con $R^2(\mathcal{Z}) = x$, $\hat{\varphi}(\mathcal{Z})$ cae en A con alta probabilidad en la muestra \mathcal{Z} de tamaño n de \mathcal{Z} .

Dado que el intervalo confiable $R_{\alpha}^{\hat{\varphi}}(x)$ se puede ver como la región de aceptación de una prueba de nivel α de $H_0: \Phi(\mathcal{Z})=x$, la equivalencia entre las pruebas de hipótesis y los intervalos de confianza proporciona estimaciones de intervalos de Φ en términos de $R_{\alpha}^{\hat{\varphi}}(x)$. Estos intervalos son los intervalos interpretables, definidos a continuación.

Definición 4.2 (Interpretabilidad de un estadístico). Sea $\hat{\varphi}$ un estadístico que toma valores en [0,1], y sean $y,\alpha\in[0,1]$. El intervalo α -interpretable de $\hat{\varphi}$ en y, denotado por $I_{\alpha}^{\hat{\varphi}}(y)$, es el intervalo cerrado más pequeño que contiene el conjunto:

$$\{x \in [0,1] : y \in R^{\hat{\varphi}}_{\alpha}(x)\}.$$

El estadístico $\hat{\varphi}$ es 1/d-interpretable con respecto a Φ en \mathcal{Q} en y con una confianza de $1-\alpha$ si y solo si el diámetro de $I_{\alpha}^{\hat{\varphi}}(y)$ es a lo sumo d.

Ver la Figura 4.1 para una ilustración. La correspondencia entre pruebas de hipótesis y estimaciones de intervalos [20] nos proporciona la siguiente garantía sobre la probabilidad de cobertura del intervalo interpretable, cuya prueba omitimos.

Proposición 4.1. Sea $\hat{\varphi}$ un estadístico que toma valores en [0,1], y sea $\alpha \in [0,1]$. Para todo $x \in [0,1]$ y para todo $z \in Q$,

$$\mathbf{P}\left(\Phi(\mathcal{Z}) \in I_{\alpha}^{\hat{\varphi}}(\hat{\varphi}(Z))\right) \geq 1 - \alpha$$

Las definiciones recién presentadas tienen contrapartes no estocásticas naturales en el caso límite de muestras grandes, que resumimos a continuación.

Definición 4.3 (Confiabilidad e interpretabilidad en el límite). Sea $\varphi: \mathcal{Q} \to [0,1]$ una función de distribuciones. Para $x \in [0,1]$, el intervalo cerrado más pequeño que contiene el conjunto $\varphi\left(\Phi^{-1}(x)\right)$ se llama el intervalo confiable de φ en x y se denota como $R^{\varphi}(x)$. Para $y \in [0,1]$, el intervalo cerrado más pequeño que contiene el conjunto $\{x:y\in\mathbb{R}^{\varphi}(x)\}$ se llama el intervalo interpretable de φ en y y se denota como $I^{\varphi}(y)$.

Mira la Figura 4.1b para una ilustración.

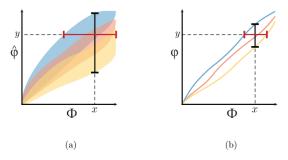


Figura 4.1: Una ilustración esquemática de intervalos confiables e interpretables. En ambas partes de la figura, $\mathcal Q$ consiste en relaciones ruidosas de tres tipos diferentes representados en tres colores distintos. (a) La relación entre un estadístico $\hat{\varphi}$ y Φ en $\mathcal Q$ en un tamaño de muestra finito. Los límites inferior y superior de cada región sombreada indican los percentiles $(\alpha/2) \cdot 100 \%$ y $(1-\alpha/2) \cdot 100 \%$ de la distribución de muestreo de $\hat{\varphi}$ para cada tipo de relación en varios valores de Φ . El intervalo vertical (en negro) es el intervalo confiable $R_{\alpha}^{\hat{\varphi}}(x)$, y el intervalo horizontal (en rojo) es el intervalo interpretable $I_{\alpha}^{\hat{\varphi}}(y)$. (b) En el límite de muestra grande, reemplazamos $\hat{\varphi}$ por una cantidad poblacional φ . El intervalo vertical (en negro) es el intervalo confiable $R^{\varphi}(x)$, y el intervalo horizontal (en rojo) es el intervalo interpretable $I^{\varphi}(y)$.

4.2. Definiendo Equitabilidad

La proposición 4.2 implica que si los intervalos de interpretabilidad de $\hat{\varphi}$ con respecto a Φ son pequeños, entonces $\hat{\varphi}$ dará buenos intervalos de estimacón de Φ . Hay variadas formas de resumir si los intervalos de interpretabilidad son pequeños; nos enfocaremos en dos formas simples de hacerlo.

Definición 4.4 (α -fiabilidad y α -interpretabilidad). La α -fiabilidad (resp. α -interpretabilidad) en caso peor de $\hat{\varphi}$ es 1/d si es 1/d-fiable (resp. interpretable) para todo x (resp. y) \in [0, 1]. Se dice que $\hat{\varphi}$ es 1/d-fiable (resp. α -interpretable) en caso peor con probabilidad (resp. confianza) $1 - \alpha$.

La α -fiabilidad (resp. α -interpretabilidad) en caso promedio de $\hat{\varphi}$ es 1/d si su fiabilidad (resp. interpretabilidad), promediada sobre todo x (resp. y) \in [0, 1], es al menos 1/d. Se dice que $\hat{\varphi}$ es 1/d-fiable (resp. α -interpretable) en caso promedio con probabilidad (resp. confianza) $1 - \alpha$

Con este vocaculario, podemos definir equitabilidad.

Definición 4.5. La Equitabilidad en caso promedio/peor es simplemente interpretabilidad en caso promedio/peor con respecto a un Φ que refeleje la fuerza de la relación.

Observación 4.1. Notemos que Equitabilidad es un caso en particular de interpretabilidad donde Φ cumple un rol en especifico. Es posible definir un Φ que mida otras propiedades y resalte otro tipo de relaciónes. En este trabajo usaremos R^2 para medir fuerza entre relaciones, ahondaremos más en esto en la siguiente sección.

Las definiciones correspondientes de interpretabilidad/fiablidad en caso promedio/peor son posibles para φ in el caso de límite para muestras grandes. En este caso, es posible que todos los intervalos de interpretabilidad de φ con respecto a Φ tengan tamanõ 0, esto es, que el valor de $\varphi(Z)$ determina únicamente el valor de $\Phi(Z)$. En este caso, la interpretabilidad/fiablidad en caso promedio/peor de φ es ∞ , y se dice que φ es perfectamente interpretable/fiable, o perfectamente equitativo dependiendo del contexto.

Antes de seguir con la siguiente sección, con el objetivo de construir intuición, vamos a presentar dos ejemplos de estadiísticos que son perfectamente interpretables en el caso límite para muestras grandes. Primero, la Información Mútua [5][8] es perfectamente interpretable con respecto a la correlación ρ^2 en el conjunto $\mathcal Q$ de vectores normales bivariados. Esto es dado que para normales bivariadas tenemos que $1-2^{-2I}=\rho^2$ [11]. Adicionalmente, el Teorema 6 de [21] muestra que para normales bivariadas, la correlación por distancia es también es una función completamente determinada por ρ^2 . Por lo tanto, la correlación por distancia también es perfectamente interpretable y perfectamente fiable con respecto a ϕ^2 en el conjunto normales bivariadas $\mathcal Z$.

La interpretabilidad perfecta con respecto a ρ^2 en bivariadas normales exhibida en ambos ejemplos es de hecho equivalente a una de las "propiedades fundamentales" introducidas por Rényi en su método para evaluar las propiedades ideales de medidas de dependencia [13]. Esto contiene un compromiso: Por un lado garantiza interpretabilidad perfecta, pero por el otro, solo aplica en un conjunto de relaciones relativamente pequenõ. Uno de los objetivo de la Equitabilidad es relajar el requermiento de "perfección" a cambio de la habilidad de aplicar a un conjunto de relaciones más amplio, por ejemplo, un conjunto de funcionales ruidosos. Por tanto, es posible ver la equitabilidad como una generalización de

los requermiento de Rényi que nos permite hacer un intercambio entre la precisión con la que nuestro estadístico nos informa sobre Φ y el conjunto $\mathcal Q$ sobre el cuál actúa.

4.3. Interpretabilidad sobre R^2

Durante este capítulo hemos mencionado el concepto de relaciones funcionales ruidosas y de \mathbb{R}^2 , ahora los definimos de forma formal. Comenzemos primero con \mathbb{R}^2

Definición 4.6 (R^2) . Sea $y = [y_1, \dots, y_n] \in \mathbb{R}^n$ un vector de muestras de una variable aleatoria y sea $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ una función que modela la variable aleatoria, definamos $f_i := f(y_i)$. El coeficiente de determinación o R^2 se define como:

$$R^{2} = 1 - \frac{\sum_{i} (y_{i} - f_{i})^{2}}{\sum_{i} (y_{i} - \bar{y})^{2}},$$

donde $\sum_i (y_i - f_i)^2$ corresponde a la suma del cuadrado de los residuales, $\sum_i (y_i - \bar{y})^2$ es la suma total de cuadrados (proporcional a la varianza), e \hat{y} es el promedio de la muestra.

En palabras simples, R^2 es la proporción de variación en la variable dependiente que puede ser explicado por la variable independiente. Notemos que al momento de hacer el análisis de equitabilidad, tenemos total claridad de cual es nuestra función f, dado que nosotros definimos la relación. Veamos ahora la siguiente definición.

Definición 4.7 (Relación Funcional Ruidosa). Una variable aleatoria distribuida sobre \mathbb{R}^2 es llamada una relación funcional ruidosa si, y solo si, puede ser escrita en la forma $(X + \epsilon, f(X) + \epsilon')$, donde $f : [0,1] \to \mathbb{R}$, X es una variable aleatoria distribuida sobre [0,1], y ϵ y ϵ' son (posiblemente nulas) distribuciones aleatorias. Denotamos el conjunto de todas las relaciones funcionales ruidosas como \mathcal{F}

Ya con esto, tenemos todo lo que necesitamos para definir la equitabilidad que usaremos para los análisis de la siguiente sección: Equitabilidad sobre \mathbb{R}^2

Definición 4.8 (Equitabilidad en relaciones funcionales sobre R^2). Sea $Q \in \mathcal{F}$ un conjunto de relaciones funcionales ruidosas. Una medida de dependencia es 1/d-equitativa en Q con respecto a R^2 si es 1/d-interpretable sobre R^2 en Q

Es necesario destacar que esta definición aun depende del conjunto \mathcal{Q} en cuestión. El método generalmente utilizado en la literatura ha sido fijar un conjunto F de funciones tales que sean lo suficientemente grandes como para ser representativo de las relaciones encontradas en datos reales, pero que por otro lado

sean lo suficientemente pequenños tal que permitan análsis empírico. Discutiremos el F a ultilizar en la siguiente sección, donde realizaremos un anaálisis de equitabilidad sobre los estadísticos definidos en este trabajo.

Tan importante como la eleccíon de funciones a incluir en F, es la elección de distribuciones marginales y el ruido, los cuales fueron no son especificados en la definición 4.7. Varias posibilidades han sido propuestas por Reshef et al. [15], pero la más utilizada en la literatura, y la que usaremos en la siguiente sección, continua siendo la más simple con $X \sim Unif$, $\epsilon t \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ con σ variable y $\epsilon \equiv 0$.

4.3.1. Equitabilidad de las medidas

Como se mencionó previamente, una de las principales motivaciones para la introducción de MIC fue la equidad, es decir, hasta qué punto una medida de dependencia captura útilmente alguna noción de la fuerza de una relación en un conjunto de relaciones estándar. En esto contexto en Reshef et al. (2016) [16] se realizõ un análisis empírico de la equidad de MIC_e con respecto a R2 y su desempeño fue comparado con la correlación de distancia (Székely et al., (2007)[20]; Székely and Rizzo, (2009)[21]), la estimación de la información mutua (Kraskov et al., 2004) y la estimación de la correlación máxima (Breiman and Friedman, 1985).

Se comenzó evaluando la equidad en el conjunto de relaciones Q definido anteriormente, un conjunto que ha sido analizado en otros trabajos previos (Reshef et al., 2011, 2015a; Kinney and Atwal, 2014). Los resultados, mostrados en la Figura 4.2, confirman la superior equidad del estimador MIC_e en este conjunto de relaciones.

Para evaluar la equidad de manera más objetiva sin depender de un conjunto de funciones curado manualmente, se analizaron 160 funciones aleatorias extraídas de una distribución de proceso Gaussiano con un kernel de función radial con una de ocho posibles anchuras en el conjunto $\{0,01,0,025,0,5,0,1,0,2,0,25,0,5,1\}$ para representar una variedad de complejidades de relaciones posibles. Los resultados, mostrados en la Figura 4.3, muestran que MIC_e supera a los métodos existentes en términos de equidad con respecto a R^2 en estas funciones también. También se examinó el efecto de las relaciones atípicas en los resultados al muestrear repetidamente subconjuntos aleatorios de 20 funciones de este gran conjunto de relaciones y medir la equidad de cada método en promedio sobre los subconjuntos; los resultados fueron similares.

Una característica del desempeño de MIC_e en estas relaciones elegidas al azar, como se muestra en la Figura 4.3, es que parece ser mínimamente sensible a la anchura del proceso Gaussiano del cual se extrae una relación dada. Esto contrasta, por ejemplo, con la estimación de la información mutua, que muestra una sensibilidad pronunciada a este parámetro que le impide ser altamente equitativa cuando hay relaciones con diferentes anchuras en el mismo conjunto de datos.

esta sección está extraida de la sección en el paper, la idea es hacer un análisis similar para todas medidas propuestas

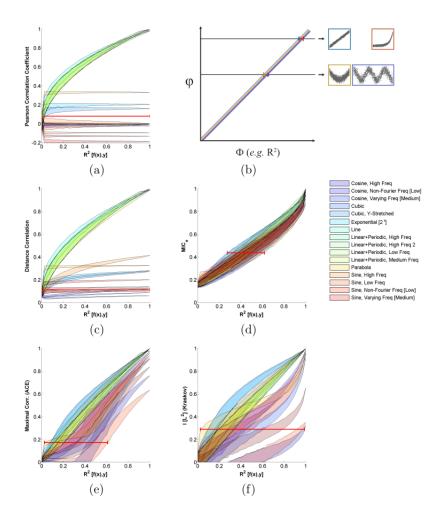


Figura 4.2: Equitabilidad con respecto a R^2 en un conjunto de relaciones funcionales ruidosas de (a) el coeficiente de correlación de Pearson, (b) una medida hipotética de dependencia φ con equitabilidad perfecta, (c) la correlación de distancia, (d) MIC $_e$, (e) estimación de correlación máxima y (f) estimación de información mutua. Para cada relación, una región sombreada denota los valores estimados en el percentil 5 y 95 de la distribución muestral de la estadística en cuestión en esa relación en cada valor de R^2 . El gráfico resultante muestra qué valores de R^2 corresponden a un valor dado de cada estadística. El intervalo rojo en cada gráfico indica el rango más amplio de valores de R^2 que corresponden a un valor de la estadística; cuanto más estrecho sea el intervalo rojo, mayor será la equitabilidad. Un intervalo rojo con ancho 0, como en (b), significa que la estadística refleja solo R^2 sin depender del tipo de relación, como se demuestra en los pares de miniaturas de relaciones de diferentes tipos con valores idénticos de R^2 .

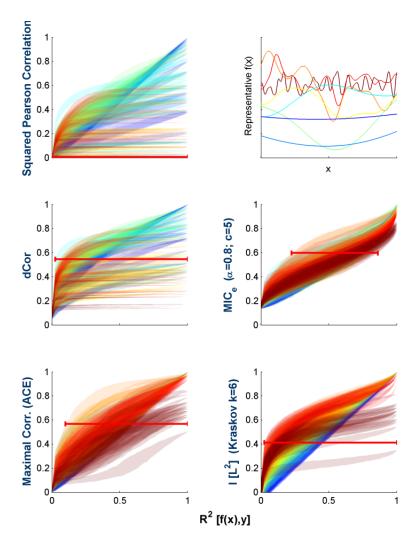
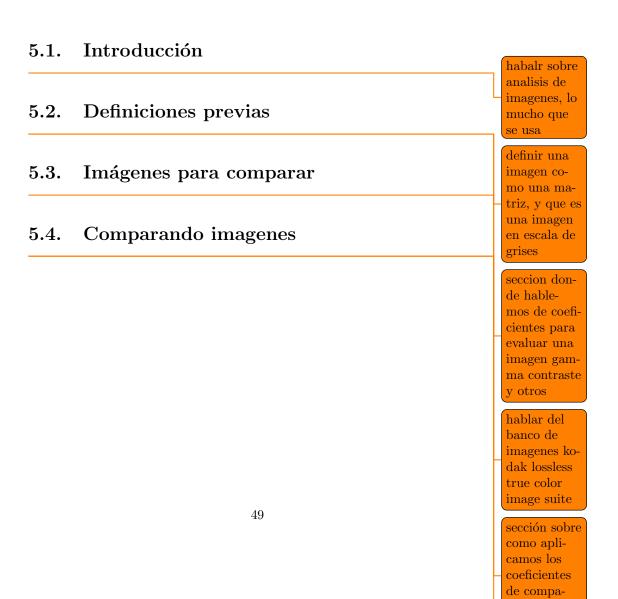


Figura 4.3: Equitabilidad de los metodos examinados en funciones extraídas al azar de una distribución de proceso gaussiano. Cada metodo se evalúa como se muestra en la Figura 4.2, con un intervalo rojo que indica el rango mas amplio de valores de \mathbb{R}^2 correspondiente a cualquier valor de la estadística; cuanto mas estrecho sea el intervalo rojo, mayor será la equitabilidad. Cada región sombreada corresponde a una relación, y las regiones están coloreadas según el ancho de banda del proceso gaussiano del que se muestraron. Las relaciones de muestra para cada ancho de banda se muestran en la esquina superior derecha con colores correspondientes.

Sea d

Análisis Estadistico y Procesamiento de Imagenes



racion obre imagenes

La transformación de Box y Cox

6.1. Introducción

La transformación de Box y Cox, conocida como Box-Cox, es una técnica de transformación no lineal que fue propuesta por George Box y David Cox en 1964 en su trabajo "An Analysis of Transformations" [2]. Cuenta la historia que el Profesor cox estaba visitando al doctor Box en Wisconsin, y decidieron que deberían escribir un artículo juntos dada la similitud de sus nombres, y que ambos eran británicos [9]. Muchos importantes resultados y técnicas en el análisis estadístico de datos toman el supuesto de que los datos poseen una distribucón normal, en los casos cuando este supuesto no se sostiene, una de las alternativas es transformar los datos para que se acerquen a una distribución normal. En este contexto la transformación de Box-Cox fue propuesta para convertir un conjunto de datos en una distribución que se asemeja a la normal, dejando una distribución con menos sesgo que es un poco más simétrica, esto suele ser determinado en base a un test de máxima verosimilitud, más adeltante discutiremos el motivo de esto. La transformación de Box-Cox pertenece una familia de técnicas conocidas como transformaciones de potencia. Estas transformaciones buscan modificar los datos de entrada elevándolos a una potencia determinada, identificada por el parámetro λ .

Box y Cox desarrollaron este método con la intención de crear una técnica de transformación flexible que pudiera adaptarse a diversas distribuciones de datos, esto permite adaptar el coeficiente para funcionar en distintos contextos, y de nuestro interes particular es en el contexto de imágenes. En general la transformación solo es utilizada sobre vectones 1-dimensional. En 2020 Abbas Cheddad público "On Box-Cox Transformation for Image Normality and Pattern Classification" [3], donde se discutío el coeficiente como un paso de preprocesamiento de imágenes, tanto para mejoramiento visual, como para mejorar el desempeño

de algoritmos de clasificación. En este trabajo se propuso una nueva forma de aplicar la transformación, que consiste en utilizar el histograma de la imagen como proxy comprimido de la matriz de datos, y así poder aplicar la transformación de forma rápida.

En este capítulo vamos a discutir la transformación de Box-Cox, presentaremos su definición, y discutiremos el motivo de su uso. Luego vamos a discutir el trabajo de Cheddad[3], y como este puede ser aplicado sobre imagenes. Finalmente discutiremos alternativas para calcular λ sobre imágenes.

6.2. Definiciones

Para un $\lambda \in \mathbb{R}$ dado, la transformación de Box-Cox se define como:

$$y^{(\lambda)} = \begin{cases} \frac{y^{\lambda} - 1}{\lambda} & (\lambda \neq 0) \\ \log y & (\lambda = 0) \end{cases}$$
 (6.1)

 $\forall y \in \mathbb{R}_{>0}$. En la práctica los valores de λ se restringen a un intervalo, normalmente [-2,2] o [-5,5], notemos además que en la practica se toma la segunda forma cuando $|\lambda| < 0.01[3]$.

Además existe una versión para datos no positivos dada por:

$$y^{(\lambda)} = \begin{cases} \frac{(y+\lambda_2)^{\lambda_1} - 1}{\lambda_1} & (\lambda_1 \neq 0), \\ \log(y+\lambda_2) & (\lambda_1 = 0). \end{cases}$$

Esta versión es menos utilizada en la práctica, dado que se suelen realizar otros pasos de preprocesamiento que dejan los datos entre 0 y 1.

Cabe notar que Bicego y Baldo (2016)[1] demostraron que, dado un vector $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n) \in \mathbb{R}^n_{>0}$, la transformación no cambia dado el orden de los elementos en el vector, por lo tanto al momento de aplicar la transformación sobre una imagen, o en general una matriz d-dimensional, se puede aplicar la cualquier ordenamiento sobre los datos, y luego aplicar la transformación sobre el vector unidimensional resultante. Dado esto también cabe notar que al ser agnóstica con respecto al orden de los datos, la transformación no altera la relación espacial entre los datos.

Este no es el caso para la definición de lambda, que es lo que discutiremos en la siguiente sección.

6.3. Elguiendo λ

Como mencionamos anteriormente, el objetivo de la transformación es encontrar el valor de λ que proporciona el mejor ajuste a una distribución normal. Para esto, Box y Cox proponen un criterio de máxima verosimilitud, el cual se define como:

$$\mathcal{L}(\lambda) \equiv -\frac{n}{2} \log \left[\frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} \left(x_j^{\lambda} - \overline{x^{\lambda}} \right)^2 \right] + (\lambda - 1) \sum_{j=1}^{n} \log x_j$$
 (6.2)

donde $\overline{x^{\lambda}}$ es el promedio muestral del vector transformado.

La verosimilitud juega un papel crucial en el proceso de transformación de Box-Cox. En términos simples, la verosimilitud se refiere a la probabilidad de que un conjunto de datos observados se derive de una distribución estadística particular. En este caso, la verosimilitud se utiliza para medir qué tan bien una distribución normal se ajusta a los datos transformados para diferentes valores de λ . El valor de λ que maximiza esta verosimilitud es el que se selecciona para la transformación.

La transformación de Box-Cox persigue un objetivo esencial en el análisis estadístico: garantizar el cumplimiento de los supuestos necesarios para la aplicación de modelos lineales. Esta garantía posibilita el uso de técnicas de análisis de varianza estándar en los datos transformados. En este sentido, Bicego y Baldó [1] resaltan que esta transformación no altera el ordenamiento de los datos, manteniendo intacta la relación inherente entre ellos.

Es importante aclarar, sin embargo, que no todos los conjuntos de datos pueden ser transformados de tal manera que resulten en una distribución normal perfecta. A pesar de esta limitación, Draper y Cox [7]
argumentan que la transformación de potencia puede ser efectiva en muchos casos. Incluso en situaciones donde la transformación no logra una normalidad exacta, las estimaciones habituales del parámetro λ pueden desempeñar un papel vital en la regularización de los datos.

Este proceso de regularización conduce a una distribución que cumple con ciertos criterios deseables, como la simetría o la homocedasticidad. Esta última característica, que se refiere a la constancia de la varianza a lo largo del conjunto de datos, es especialmente útil en campos como el reconocimiento de patrones y el aprendizaje automático. Por ejemplo, en el análisis discriminante lineal de Fisher, la homocedasticidad facilita la diferenciación entre diferentes clases de datos, potenciando la eficacia de este tipo de técnicas de aprendizaje automático.

6.4. Box-Cox sobre imagenes

En su artículo del 2020 [3], Abbas Cheddad resalta una notable brecha en la aplicación de la transformación de Box-Cox a imágenes digitales. Según Cheddad, existe una carencia significativa de estudios en este ámbito, destacando el trabajo de JD Lee en 2009 como una excepción[10]. En el estudio de Lee, se presentó un método de segmentación para imágenes de resonancia magnética cerebral a través de una técnica de transformación de distribución. En este enfoque, la transformación de Box-Cox se aplicó a las imágenes de resonancia magnética cerebral para normalizar la distribución de intensidad de los píxeles.

Es relevante señalar que, en este estudio, las imágenes se trataron como un vector de datos en lugar de una matriz, lo que implica un enfoque unidimensional en la manipulación y análisis de la imagen.

Cabe destacar que el proceso de aplicar la tranformación es iterativo, en el cual se ha de buscar un parametro λ , esto hace que aplicar esta la transformación en grandes bancos de imagenes sea demoroso. Una alternativa propuesta por A. Cheddad [3] es utilizar el histograma como proxy comprido de la matriz de datos, dado que este refleja la probabilidad estimada de que un pixel esa de un tono en particular. En lo que continua de la sección discutiremos este método.

Dada una imagen en el espacio de color RGB, como fue defininda en el capítulo 5, definimos:

$$\mathcal{F}(u,v) = \{R(u,v), G(u,v), B(u,v)\}$$

donde (u, v) son las coordenadas en el espacio de pixeles que cumplen $u = 1, \ldots U, v = 1, \ldots V$ y (U, V) son las dos dimensiones de la foto. Notemos que cada elemento de la imagen es vector de tres dimensiones con los canales rojo, verde, y azul, pero en la literatura se suele trabajar con imagenes en escala de grises, para esto utilizaremos la siguiente formula.

$$\mathcal{F}' = (0.299R + 0.587G + 0.114 B)$$

Que corresponde al canal de escala de grises como está definido por el espacio de color YC_bC_r lo calcula. En la figrua

Ahora, antes de pasar a la siguiente sección, podemos ver algunos ejemplos de como afecta a una imagen la aplicación de la transformación a lo largo de un rango de valores para *lambda*. En la figura

mostrar una imagen

6.5. Propuestas de λ para imagenes.

6.5.1. Box-Cox sobre dates completes

6.5.2. Box Cox sobre histograma

En base a esto definimos la función de probabilidad de imágen, i.e., el histograma como:

$$\chi(i) = \sum_{i=0}^{255} \mathcal{F}'_i,$$

donde i es el nivel de gris.

Ahora, denotemos por $\hat{\lambda}_{\chi}$ al parametro de la transformación Box-Cox seleccionado usando el histograma, y de forma analoga definamos $\lambda_{\mathcal{F}'}$ al seleccionado

reescribir esta parte de la sección y agregar las propuestas de lambda usando los datos completos. Fue obserado por Cheddad que estos no coinciden (de hecho la correlación entre estos es $r^2=-0{,}3022$) pero aun así este calculo se ha desmostrado util en problemas de clasificación.

Ahora definimos $\mathcal{F}'(u,v)^{\lambda_{\chi}}$ como los datos siendo aplicada la transformación Box-Cox definida en (6.1), y por ultimo vamos a definir Box-Cox para imagenes o BCI como:

$$BCI = \frac{\left(\mathcal{F}''(u, v) - \min\left(\mathcal{F}''(u, v)\right)\right)}{\left(\max\left(\mathcal{F}''(u, v)\right) - \min\left(\mathcal{F}''(u, v)\right)\right)}$$

$$\operatorname{con} \mathcal{F}''(u, v) = \mathcal{F}'(u, v)^{\hat{\lambda}_{\chi}}$$

Notemos que este ultimo paso se realiza para que los datos esten entre 0 y 1, y así poder ser representados en una imagen. En la Figura se puede ver un ejemplo de la transformación aplicada sobre una imagen, con ambas versiones de λ .

6.5.3. Box-Cox Ventana Movil

mencionar la idea de $\lambda(x,y)$?

Comprarando una Imgaen con su tranformada

- 7.1. Introducción
- 7.2. Imágenes para comparar
- 7.3. Comparando imagenes
- 7.4. Concluciones

volver a mencionar el banco, mencionar que se mostraran algunas y el resto de los resultados en un anexo

mostrar imagenes a utilizar y sus coeficientes inportantes

mostrar
imágenes
con sus
transformadas, sus
coeficiente
individuales
y sus coeficientes de
comparacion

concluir

Consideraciones Finales

dificultades
de trabajar
en imagenes

todo lo que
hacemos es
una dimension

trabajos futuros y continuaciones

Apéndice A

Demostraciones

En este apéndice se presentan demostraciones omitidas en al texto principal.

Apéndice B

Resultados Para todo el banco de imágenes

Bibliografía

- [1] Manuele Bicego y Sisto Baldo. «Properties of the Box–Cox transformation for pattern classification». En: *Neurocomputing* 218 (2016), págs. 390-400.
- [2] George EP Box y David R Cox. «An analysis of transformations». En: Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological) 26.2 (1964), págs. 1518-1524.
- [3] Abbas Cheddad. «On box-cox transformation for image normality and pattern classification». En: *IEEE Access* 8 (2020), págs. 154975-154983.
- [4] Y. Ann Chen et al. «A Nonparametric Approach to Detect Nonlinear Correlation in Gene Expression». En: *Journal of Computational and Graphical Statistics* 19.3 (2012), págs. 552-568.
- [5] T. Cover y J. Thomas. «Elements of Information Theory.» En: (2006).
- [6] Thomas Cover y Joy Thomas. *Elements of Information Theory*. New York: John Wiley & Sons, Inc, 2006. Cap. 8.
- [7] Norman R Draper y David R Cox. «On distributions and their transformation to normality». En: *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological)* 31.3 (1969), págs. 472-476.
- [8] I. Csiszár. «Axiomatic characterizations of information measures.» En: 10.3 (2008), págs. 261-273.
- [9] David M Lane. Introduction to Statistics. Online Statistics Education: An Interactive Multimedia Course of Study, 2003. Cap. 16: Transformations. URL: https://stats.libretexts.org/Bookshelves/Introductory_Statistics/Introductory_Statistics_(Lane)/16%3A_Transformations/16.04%3A_Box-Cox_Transformations.
- [10] Juin-Der Lee et al. «MR image segmentation using a power transformation approach». En: *IEEE transactions on medical imaging* 28.6 (2009), págs. 894-905.
- [11] E. Linfoot. «An informational measure of correlation.» En: 1.1 (1957), págs. 85-59.
- [12] Justin Matejka y George Fitzmaurice. «OSame Stats, Different Graphs: Generating Datasets with Varied Appearance and Identical Statistics through Simulated Annealing.» En: (2017).

- [13] A. Rényi. «On measures of dependence.» En: Acta mathematica hungarica 10.3 (1959), págs. 441-451.
- [14] David N Reshef et al. «Detecting novel associations in large data sets». En: *science* 334.6062 (2011), págs. 1518-1524.
- [15] David N. Reshef et al. «An empirical study of leading measures of dependence.» En: arXiv preprint (2015).
- [16] Yakir A Reshef et al. «Measuring dependence powerfully and equitably». En: The Journal of Machine Learning Research 17.1 (2016), págs. 7406-7468.
- [17] Yakir A. Reshef et al. «Equitability, interval estimation, and statistical power.» En: arXiv preprint (2015).
- [18] Abraham. Savitzky y M. J. E. Golay. «Smoothing and Differentiation of Data by Simplified Least Squares Procedures». En: American Chemical Society (1964).
- [19] Noah Simon y Robert Tibshirani. «Comment on "Detecting novel associations in large data sets".» En: (2012). URL: https://arxiv.org/pdf/1401.7645.pdf.
- [20] Gábor J. Székely, Maria L. Rizzo y et al. «Measuring and testing dependence by correlation of distances.» En: The Annals of Statistics (6).35 (2012), págs. 2769-2794.
- [21] Gábor J. Székely y Maria L. Rizzo. «Brownian distance covariance». En: *MThe Annals of Applied Statisticsl.* (4).3 (2009), págs. 1236-1265.
- [22] Marco Vilela et al. «Automated smoother for the numerical decoupling of dynamics models». En: *BMC Bioinformatics* 8.305 (2007).