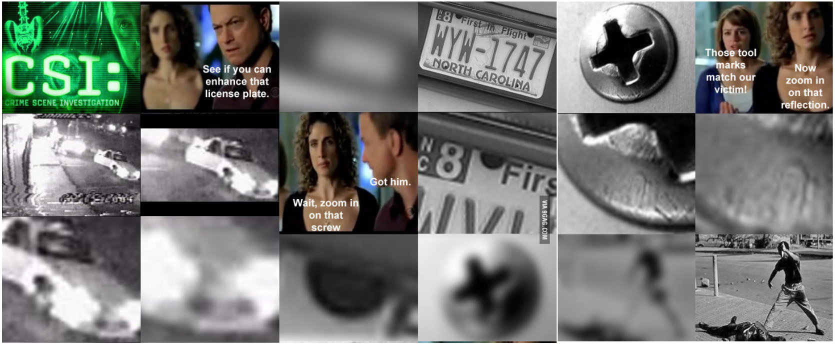
Trabajo Práctico 2
CSI:DC

Métodos Numéricos

Segundo cuatrimestre - 2016



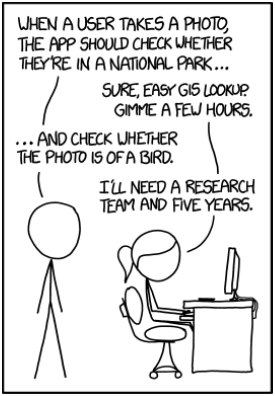
Antes de pasar al TP2...

Donde estamos y qué vimos hasta ahora

- Errores numéricos.
- Resolución de sistema lineales. (TP1: EG, LU, SDP)
- Aplicación de resolución de sistemas (Alto horno).
- *Denoising* aplicado a imágenes.

Subiendonos a la ola: un TP de machine learning

Subiendonos a la ola: un TP de machine learning



IN CS, IT CAN BE HARD TO EXPLAIN THE DIFFERENCE BETWEEN THE EASY AND THE VIRTUALLY IMPOSSIBLE.

Subiendonos a la ola: un TP de machine learning

En realidad ya estabamos en la ola

Reacciones populares

Métodos numéricos

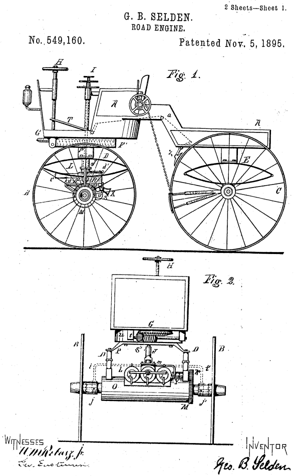
Norma matricial, número de condición, factorización de matrices, distancia de un punto a un subespacio

Machine learning

Data scientist, Big data, Deep learning, Data guru ninja visionary

Trabajo Práctico 2

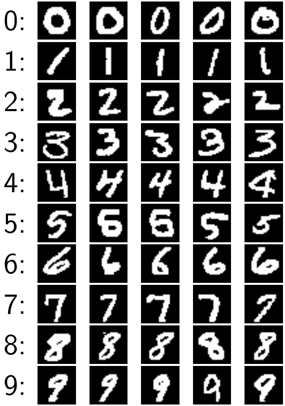
Reconocimiento de dígitos - Aplicaciones



Trabajo Práctico 2

Reconocimiento de dígitos

- Datos: base de datos etiquetada de imágenes de dígitos manuscritos (0-9) tomadas de una forma particular.
- Objetivo: dada una nueva imagen de un dígito, ¿A cuál corresponde?



Problema a resolver

Recibimos un nuevo dígito manuscrito, ¿Podemos determinar automáticamente a cuál pertenece?

Objetivo

Desarrollar (no solo en términos de implementación) un *clasificador* que permita reconocer dígitos manuscritos.

Contexto

- Disponemos de una base de datos etiquetada (train), y un conjunto de datos para los que no conocemos cual es su etiqueta (test). Este último nos permitirá evaluar como se comporta nuestro clasificador.
- Consideramos la base MNIST, en la versión utilizada en *Kaggle*. 42k dígitos en train, 18k dígitos en test.
- Cada dígito es una imagen en escala de grises de 28×28.

Idea general (caso particular reconocimiento dígitos)

- Consideramos cada imagen como un vector $x_i \in \mathbb{R}^m$, $m = 28 \times 28$, $i = 1, \ldots, n$. Para las imágenes en la base de datos, sabemos además a que clase pertenece.
- Cuando llega una nueva imagen de un dígito z, con el mismo formato, recorremos toda la base y buscamos aquella que minimice

  $$\arg\min_{i=1,\ldots,n} \|z - x_i\|_2$$

  Luego, le asignamos la clase del representante seleccionado.

Generalización

Considerar más de un vecino.

Reconocimiento de dígitos

Vecinos más cercanos: *kNN*

- Consideramos los k vecinos más cercanos.
- Entre ellos hacemos una votación, eligiendo como clase la *moda* del conjunto. En otras palabras, hacemos una votación y se elige aquella clase con más votos.

Reconocimiento de dígitos

kNN: Ejemplo de clasificación y definición de fronteras

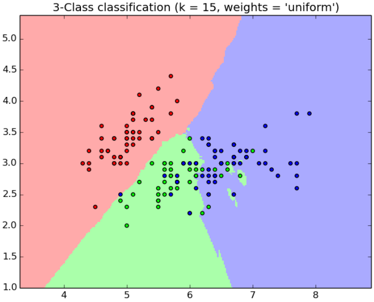


Imagen tomada de SCIKIT-LEARN.ORG

Algunos pros & cons

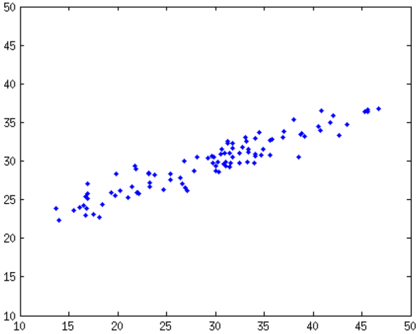
+ Es conceptualmente simple.
+ Funciona bien en general para dimensiones bajas, y puede ser utilizado con pocos ejemplos.
- Sufre de *La maldición de la dimensionalidad.*
- La clasificación puede ser lenta dependiendo del contexto.

Análisis de Componentes Principales

Ejemplo datos en $\mathbb{R}^2$

Sean $x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots, x^{(n)}$ una secuencia de n datos, con $x^{(i)} \in \mathbb{R}^2$.

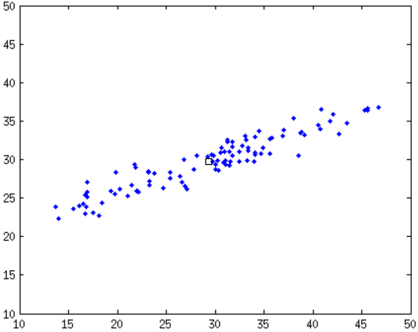
$$X = \begin{bmatrix} {x^{(1)}}^t \\ {x^{(2)}}^t \\ {x^{(3)}}^t \\ {x^{(4)}}^t \\ {x^{(5)}}^t \\ {x^{(6)}}^t \\ \vdots \\ {x^{(n)}}^t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 26.4320 & 27.7740 \\ 26.8846 & 26.5631 \\ 23.3309 & 26.6983 \\ 30.6387 & 31.5619 \\ 30.5171 & 30.8993 \\ 45.6364 & 36.6035 \\ \vdots & \vdots \\ 16.0650 & 24.0210 \end{bmatrix}$$



Análisis de Componentes Principales

Ejemplo datos en $\mathbb{R}^2$

$$X = \begin{bmatrix} 26.4320 & 27.7740 \\ 26.8846 & 26.5631 \\ 23.3309 & 26.6983 \\ 30.6387 & 31.5619 \\ 30.5171 & 30.8993 \\ 45.6364 & 36.6035 \\ \vdots & \vdots \\ 16.0650 & 24.0210 \end{bmatrix}$$



Media:
$\mu = \frac{1}{n}(x^{(1)} + \cdots + x^{(n)})$
$\mu = (29.3623, 29.7148)$

Varianza de una variable x_k: Medida para la dispersión de los datos.
$\sigma^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_k^{(i)} - \mu_k)^2$
$\sigma_{x_1}^2 = 66.2134, \ \sigma_{x_2}^2 = 12.5491$

Análisis de Componentes Principales

Ejemplo datos en $\mathbb{R}^2$ - Covarianza

$$X = \begin{bmatrix} 26.4320 & 27.7740 \\ 26.8846 & 26.5631 \\ 23.3309 & 26.6983 \\ 30.6387 & 31.5619 \\ 30.5171 & 30.8993 \\ 45.6364 & 36.6035 \\ \vdots & \vdots \\ 16.0650 & 24.0210 \end{bmatrix}$$

Covarianza: Medida de cuánto dos variables varían de forma similar. Variables con mayor covarianza inducen la presencia de cierta dependencia o relación.

$$\sigma_{x_j x_k} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_j^{(i)} - \mu_j)(x_k^{(i)} - \mu_k)$$

Análisis de Componentes Principales

Ejemplo datos en $\mathbb{R}^2$ - Covarianza

Dadas n observaciones de dos variables x_k, x_j, y $v = (1, \ldots, 1)^t$:

$$\sigma_{x_j x_k} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_j^{(i)} - \mu_j)(x_k^{(i)} - \mu_k) = \frac{1}{n-1} (x_k - \mu_k v)^t (x_j - \mu_j v)$$

Matriz de Covarianza:

$$X = \begin{bmatrix} 26.4320 - \mu_1 & 27.7740 - \mu_2 \\ 26.8846 - \mu_1 & 26.5631 - \mu_2 \\ 23.3309 - \mu_1 & 26.6983 - \mu_2 \\ 30.6387 - \mu_1 & 31.5619 - \mu_2 \\ 30.5171 - \mu_1 & 30.8993 - \mu_2 \\ 45.6364 - \mu_1 & 36.6035 - \mu_2 \\ \vdots & \vdots \\ 16.0650 - \mu_1 & 24.0210 - \mu_2 \end{bmatrix}$$

$$M_X = \frac{1}{n-1} X^t X = \begin{bmatrix} \sigma_{x_1 x_1} & \sigma_{x_1 x_2} \\ \sigma_{x_1 x_2} & \sigma_{x_2 x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{x_1}^2 & \sigma_{x_1 x_2} \\ \sigma_{x_1 x_2} & \sigma_{x_2}^2 \end{bmatrix}$$

$$M_X = \begin{bmatrix} 66.2134 & 27.1263 \\ 27.1263 & 12.5491 \end{bmatrix}$$

¿Cómo expresar mejor nuestros datos?

Objetivo

Buscamos una transformación de los datos que disminuya la redundancia (es decir, disminuir la covarianza).

- Cambio de base: $\hat{X}^t = PX^t$.
- Cómo podemos hacerlo? Diagonalizar la matriz de covarianza. Esta matriz tiene la varianza de cada variable en la diagonal, y la covarianza en las restantes posiciones. Luego, al diagonalizar buscamos variables que tengan covarianza cero entre sí y la mayor varianza posible.

Autovalores y Autovectores

Definición

Sea $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Un *autovector* de A es un vector no nulo tal que $Ax = \lambda x$, para algun escalar λ. Un escalar λ es denominado *autovalor* de A si existe una solución no trivial x del sistema $Ax = \lambda x$. En este caso, x es llamado *autovector asociado a* λ.

Consideramos:

$$A = \begin{bmatrix} 3 & -2 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, u = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}, v = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$Au = \begin{bmatrix} -5 \\ -1 \end{bmatrix}, Av = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \end{bmatrix} = 2 \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} = 2v$$

Gráficamente....A sólo estira (o encoge) el vector v.

Diagonalización

En muchos casos, la presencia de autovectores-autovalores puede ser utilizada para encontrar una factorización $A = PDP^{-1}$, donde D es una matriz diagonal.

Intuición

Podemos encontrar una base donde la transformación lineal A se comporta como si fuese diagonal.

Observación

No toda matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es diagonalizable.

Teorema

Una matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es diagonalizable sí y solo sí A tiene n autovectores linealmente independientes (las columnas de P).

Teorema

Si $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es simétrica, entonces existe una base ortonormal de autovectores $\{v_1, \ldots, v_n\}$ asociados a $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$.

Consecuencia: Existe P, y $P^{-1} = P^t$. Luego, $A = PDP^t$.

Cálculo de autovalores/autovectores

- Vamos a necesitar calcular los autovectores v de una matriz para poder calcular las transformaciónes de los métodos que estamos viendo.
- Consideremos A^tA, y supongamos $\lambda_1 > \lambda_2 > \cdots > \lambda_k$. A^tA es simétrica y semidefinida positiva.
- Podemos considerar el Método de la Potencia para calcular λ_1 y v_1.
  1. MetodoPotencia(B,x_0,niter)
  2. $v \leftarrow x_0$.
  3. Para $i = 1, \ldots, niter$
  4. $v \leftarrow \frac{Bv}{||Bv||}$
  5. Fin Para
  6. $\lambda \leftarrow \frac{v^tBv}{v^tv}$
  7. Devolver λ, v.

Cálculo de autovalores/autovectores

Una vez que tenemos λ_1 y v_1, como seguimos?

Deflación

Sea $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ una matriz con autovalores distintos $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n|$ y una base ortonormal de autovectores. Entonces, la matriz $B - \lambda_1 v_1 v_1^t$ tiene autovalores $0, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ con autovectores asociados $v_1, \ldots, v_n$.

- $(B - \lambda_1 v_1 v_1^t) v_1 = B v_1 - \lambda_1 v_1 (v_1^t v_1) = \lambda_1 v_1 - \lambda_1 v_1 = 0 v_1$.
- $(B - \lambda_1 v_1 v_1^t) v_i = B v_i - \lambda_1 v_1 (v_1^t v_i) = \lambda_i v_i$.

Observación

En nuestro caso, no hace falta que todos los autovalores tengan magnitudes distintas.

¿Cómo expresar mejor nuestros datos?

- Cambio de base: $\hat{X}^t = PX^t$.
  Sea P ortogonal y $M_{\hat{X}}$ la matriz de covarianza de $\hat{X}$.

$$\begin{aligned} M_{\hat{X}} &= \frac{1}{n-1}\hat{X}^t\hat{X} \\ &= \frac{1}{n-1}(PX^t)(XP^t) \\ &= P\frac{X^tX}{n-1}P^t \\ &= PM_XP^t \end{aligned}$$

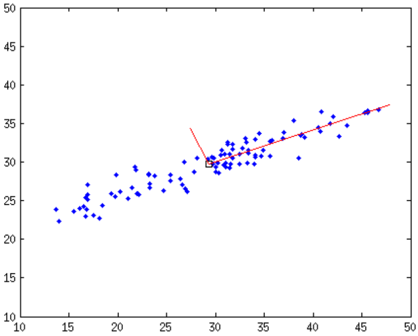
- M_X es simétrica, entonces existe V ortogonal tal que $M_X = VDV^t$.

$$\begin{aligned} M_{\hat{X}} &= PM_XP^t \\ &= P(VDV^t)P^t \qquad \text{tomamos } P = V^t \\ &= (V^tV)D(VV^t) = D \end{aligned}$$

¿Cómo expresar mejor nuestros datos?

Volvemos al ejemplo

$$\begin{aligned} M_X &= \begin{bmatrix} 66.2134 & 27.1263 \\ 27.1263 & 12.5491 \end{bmatrix} \\ &= \underbrace{\begin{bmatrix} 0.9228 & -0.3852 \\ 0.3852 & 0.9228 \end{bmatrix}}_{V} \underbrace{\begin{bmatrix} 77.5362 & 0 \\ 0 & 1.2263 \end{bmatrix}}_{D=M_{\hat{X}}} \underbrace{\begin{bmatrix} 0.9228 & 0.3852 \\ -0.3852 & 0.9228 \end{bmatrix}}_{V^t} \end{aligned}$$



Análisis de Componentes Principales

Resumen hasta acá

- Tenemos n muestras de m variables.
- Calculamos el vector μ que contiene la media de cada de una las variables.
- Construimos la matriz $X \in \mathbb{R}^{n \times m}$ donde cada muestra corresponde a una fila de X y tienen media cero (i.e., $x^{(i)} := (x^{(i)} - \mu)/\sqrt{n-1}$).
- Diagonalizamos la matriz de covarianzas M_X. La matriz V (ortogonal) contiene los autovectores de M_X.

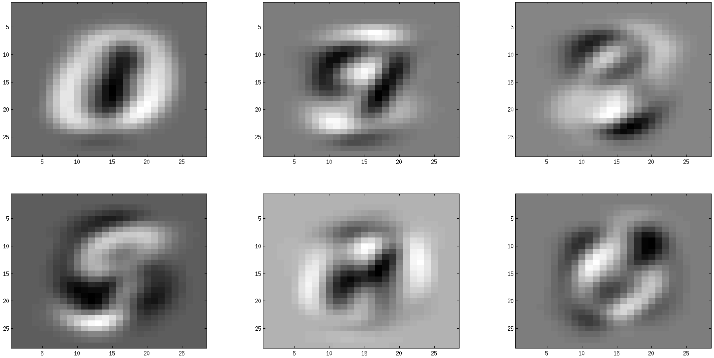
Propiedades del cambio de base

- Disminuye redundancias.
- El cambio de base $\hat{X}^t = PX^t = V^t X^t$ asigna a cada muestra un nuevo *nombre* mediante un cambio de coordenadas.
- Las columnas de V (autovectores de M_X) son las componentes principales de los datos.
- En caso de m grande, es posible tomar sólo un subconjunto de las componentes principales para estudiar (i.e., aquellas que capturen mayor proporción de la varianza de los datos).

Reconocimiento de dígitos

Autodígitos (Eigendigits)

Los primeros 6 autovectores en V.



Reconocimiento de dígitos

¿Cómo reconocemos un dígito?

Idea

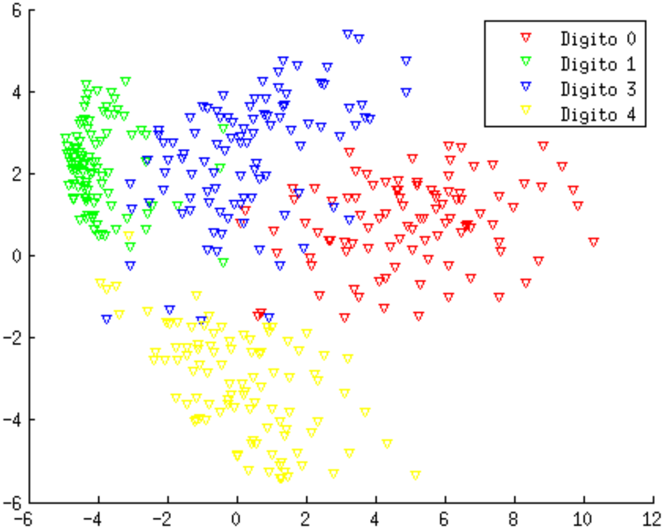
- Utilizar el cambio de base, transformando cada imagen convenientemente.
- Reducir la dimensión de los datos utilizando sólo algunas de las nuevas variables (eligiendo aquellas que capturan una fracción mayor de la varianza).

Procedimiento

- Reducción de la dimensión: parámetro de entrada que indica cuántas componentes principales considerar, α. Es decir, tomaremos $\bar{V} = [v_1 \ v_2 \ \dots \ v_\alpha]$.
- Tranformación característica: Aplicamos el cambio de base a cada muestra $x^{(i)}$, definimos $tc(x^{(i)}) = \bar{V}^t x^{(i)} = (v_1^t x^{(i)}, \dots, v_\alpha^t x^{(i)})$.

Reconocimiento de dígitos

Transformación + Reducción ($k = 2$)



Finalmente, dada una imagen de un dígito que no se encuentra en la base:

- Vectorizamos la imagen en $x^* \in \mathbb{R}^m$.
- Definimos $\bar{x}^* = (x^* - \mu)/\sqrt{n-1}$.
- Aplicamos la transformación característica, $tc(\bar{x}^*)$ y buscamos (de alguna manera) a que dígito pertenece.

Pregunta:

Sugerencias para buscar a qué dígito pertenece?

PLS-DA

Aplicando una transformación diferente.

La transformación realizada por PCA reorganiza el espacio para conseguir las propiedades que ya mencionamos.

Para realizar dicha transformación, se hace de una forma completamente *no supervisada*. Nunca se utiliza a que clase pertenece cada muestra para realizar la transformación.

Veamos entonces otra transformación con fundamentos parecidos a PCA, pero en este caso utilizando los valores de las clases para influenciar el traspaso al nuevo espacio de variables. Es decir, utilizaremos un método *supervisado*.

PLS

Descomponiendo la entrada

Definimos X de la misma manera que en PCA. Es decir una matriz que tiene una muestra en cada fila, centradas con respecto a la media.

Además, definimos Y como un vector columna que en cada posición tiene la clase a la que pertenece la correspondiente muestra.

Vamos a buscar transformar las matrices a las formas $X = TP' + E$ y $Y = UQ' + F$ de tal manera de maximizar la covarianza entre las muestras y las clases en el nuevo espacio.

Si estamos buscando un solo vector para realizar la transformación (t y u), vamos a utilizar el siguiente resultado.

$$Cov(t,u)^2 = Cov(Xw, Yc)^2 = max_{||r||=||s||=1} Cov(Xr, Ys)^2$$

El w que cumple esto es el autovector asociado al mayor autovalor de la matriz $X^t YY^t X$.

Una vez que obtenemos el primer vector para realizar nuestra transformación al nuevo espacio, se genera un esquema iterativo en el que vamos sacando la información que ya obtuvimos para obtener el siguiente vector de la transformación característica.

PLS

Pseudocódigo del método

1. PLS(X,Y,γ)
2. Para $i = 1, \ldots, \gamma$
3. definir M_i como $X^t YY^t X$
4. calcular w_i como el autovector asociado al mayor autovalor de M_i
5. normalizar w_i
6. definir t_i como Xw_i
7. normalizar t_i
8. actualizar X como $X - t_i t_i^t X$
9. actualizar Y como $Y - t_i t_i^t Y$
10. Fin Para
11. Devolver w_i para $i = 1, \ldots, \gamma$

De PLS a PLS-DA

Realizar el método con la matriz Y tal como fue definida no tiene mucho sentido con una medición categórica.

Para utilizar el método con variables categóricas como el caso del trabajo práctico, redefinimos Y para que cada columna simbolice la información de una categoría particular.

Nuevamente, dada una imagen de un dígito que no se encuentra en la base:

- Vectorizamos la imagen en $x^* \in \mathbb{R}^m$.
- Definimos $\bar{x}^* = (x^* - \mu)/\sqrt{n-1}$.
- Aplicamos la transformación característica, $tc(\bar{x}^*)$ y buscamos (de alguna manera) a que dígito pertenece.

La única diferencia entre los métodos es la transformación característica a utilizar.

Elegimos un numero de vecinos k (adicionalmente un número α o γ de componentes). Como evaluamos si el método funciona?

- Como medimos la efectividad del método?

Elegimos un numero de vecinos k (adicionalmente un número α o γ de componentes). Como evaluamos si el método funciona?

- Como medimos la efectividad del método?
- Tiene sentido probarlo sobre la base de training?

Elegimos un numero de vecinos k (adicionalmente un número α o γ de componentes). Como evaluamos si el método funciona?

- Como medimos la efectividad del método?
- Tiene sentido probarlo sobre la base de training?
- De alguna forma defino una instancia, pruebo todas las combinaciones de parámetros sobre la misma. Es correcto? Puede surgir algún problema?

Elegimos un numero de vecinos k (adicionalmente un número α o γ de componentes). Como evaluamos si el método funciona?

- Como medimos la efectividad del método?
- Tiene sentido probarlo sobre la base de training?
- De alguna forma defino una instancia, pruebo todas las combinaciones de parámetros sobre la misma. Es correcto? Puede surgir algún problema?

Idea

Utilizar la base de entrenamiento convenientemente para estimar y proveer suficiente evidencia respecto a la efectividad del método.

¿Qué hay que hacer en el TP?

Objetivos generales

- Implementar el método *kNN*.
- Implementar el método de PCA y PLS-DA, y combinarlos con *kNN*.
- Experimentar variando: k, α, γ, K, Analizar los resultados en términos de diferentes métricas (mirando al menos la tasa de efectividad) aplicando *cross validation* sobre la base de training.
- Para encontrar los autovectores necesarios, utilizar el *Método de la Potencia* + *Deflación*.

¿Qué hay que hacer en el TP?

Objetivos generales

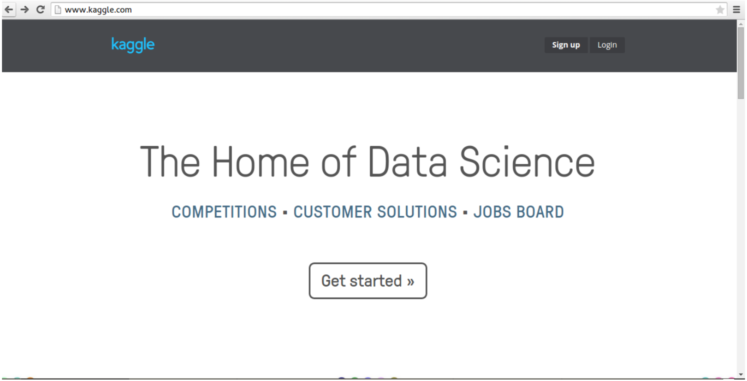
- Implementar el método *kNN*.
- Implementar el método de PCA y PLS-DA, y combinarlos con *kNN*.
- Experimentar variando: k, α, γ, K, Analizar los resultados en términos de diferentes métricas (mirando al menos la tasa de efectividad) aplicando *cross validation* sobre la base de training.
- Para encontrar los autovectores necesarios, utilizar el *Método de la Potencia* + *Deflación*.

Algunas (posibles) preguntas y dificultades

- *kNN* y 42k imágenes de 28×28?
- Tolerancia de corte Método de la Potencia? Se cumplen las condiciones para aplicar deflación?
- Cuántas componentes principales tomar?
- Que combinación de parámetros (modelo) da los mejores resultados?

Por último...

Competencia activa en KAGGLE.COM



Por último...

Competencia activa en KAGGLE.COM

categories			
Bag of Words Meets Bags of Popcorn Use Google's Word2Vec for movie reviews	Knowledge	383	2 months
Digit Recognizer Classify handwritten digits using the famous MNIST data	Knowledge	571	8 months
Titanic: Machine Learning from Disaster Predict survival on the Titanic (using Excel, Python, R, and Random Forests)	Knowledge	2562	8 months
Facial Keypoints Detection Detect the location of keypoints on face images	Knowledge	79	8 months
First Steps With Julia Identify characters from Google Street View Pictures + tutorial with Julia.	Knowledge	80	8 months
limited **15.071x - The Analytics Edge (Spring 2015)** Test your analytics skills by predicting which New York Times blog articles will be the most popular	Private	1399	11 days

174	↓25	max777alex	0.97486	2
175	↓25	Ye Han	0.97471	14
176	↓25	Subkhan - Denis	0.97457	1
177	new	AIX1	0.97457	3
178	↓26	Ohad Zadok	0.97414	3
179	↓25	JJMB	0.97400	2
180	↓25	Qizhen	0.97400	8
181	↓25	Rangudu Venkata Pavan Kumar	0.97386	6
182	↓25	Alexander Vasyuk	0.97371	4
183	↓25	Muhammed Miah	0.97371	2
184	↓25	Laurent Van Winckel	0.97357	4
185	↓25	Chi-Ming Chang	0.97357	4
186	new	Vignesh Panneerselvam	0.97357	5
187	↓26	Prashant Dheeraj	0.97343	9
188	↓26	bowen	0.97329	2
189	↓18	Constant	0.97314	3

Cronograma sugerido

- Viernes 23 de Septiembre: Lectura base de training, *kNN*.
- Viernes 30 de Septiembre: Método de la potencia, PCA, PLS-DA.
- Viernes 7 de Octubre: Desarrollo de experimentos, hipótesis y primeras discusiones.

Fecha de entrega

- Formato electrónico: Jueves 13 de Octubre de 2016, hasta las 23:59 hs., enviando el trabajo (informe+código) a `metnum.lab@gmail.com`.
- Formato físico: Viernes 14 de Octubre de 2016, de 17:30 a 18:00 hs.