

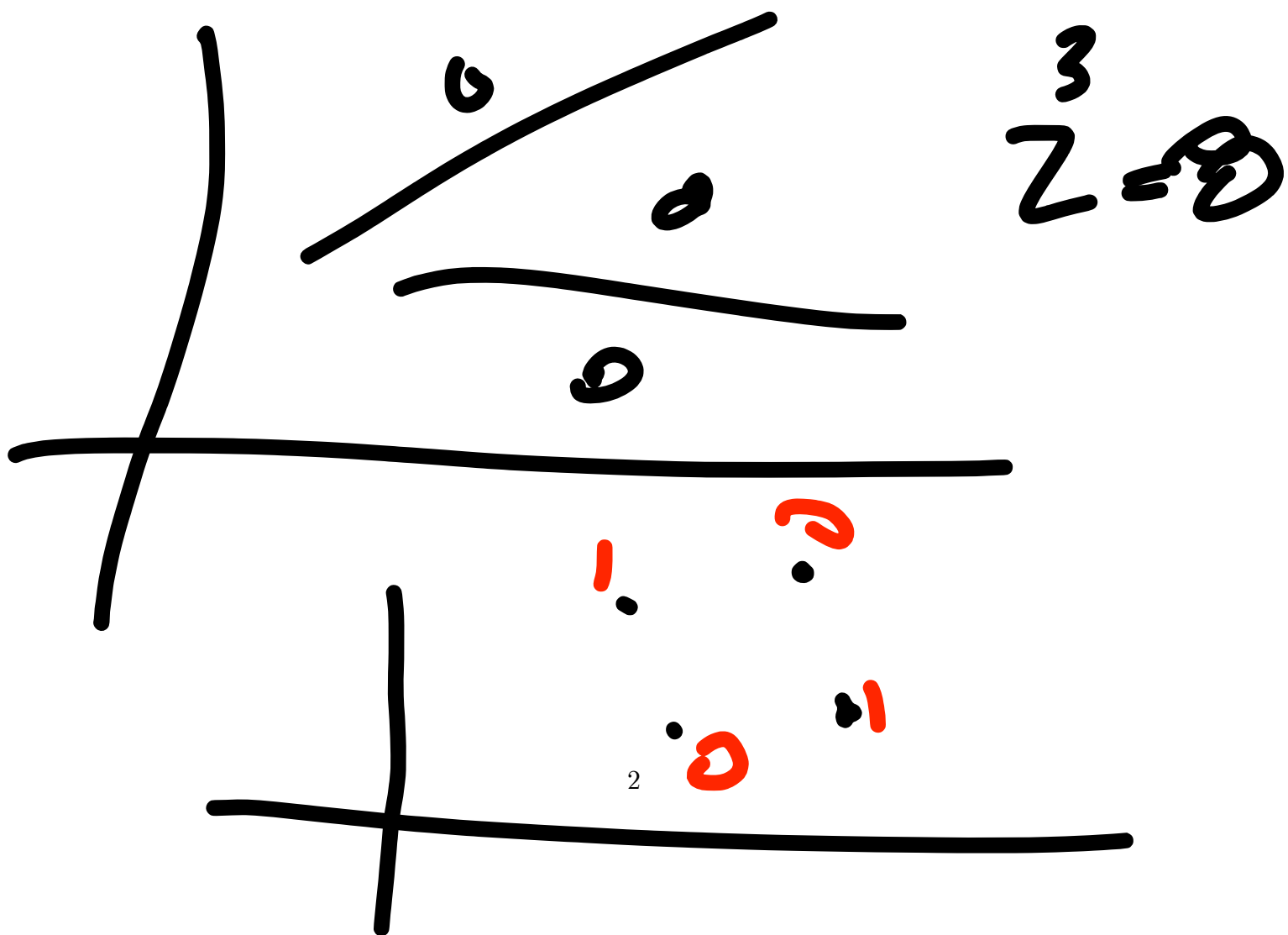
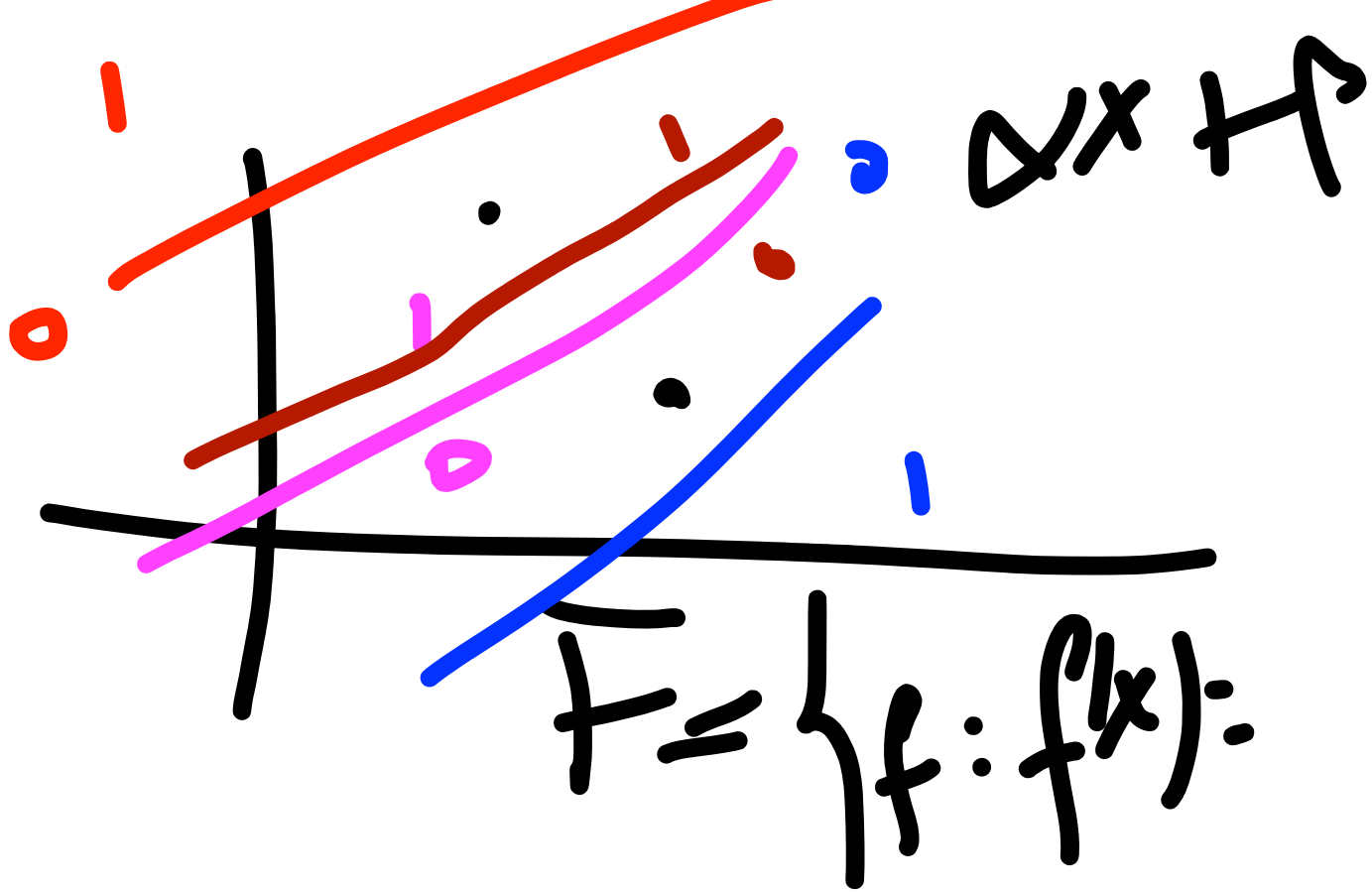
Universidad Nacional del Comahue
Facultad de Economía y Administración
Departamento de Matemática

*“Fundamentos Matemáticos para la
Reducción de Dimensión: de PCA a
Métodos no Lineales”*

Tomás Avila

Director: Dr. Luis Nowak
Co-Directora: Dra. Daniela Montangie

Trabajo final para la Licenciatura en Matemática



Introducción

En este trabajo vamos a abordar los fundamentos matemáticos de la reducción de dimensión, una técnica esencial en el análisis de datos y las ciencias matemáticas para manejar la complejidad de datos en alta dimensionalidad. Estas técnicas son cruciales debido a la conocida maldición de la dimensionalidad, donde el volumen del espacio crece exponencialmente a medida que aumenta el número de dimensiones, dificultando la identificación de patrones y afectando el rendimiento de los algoritmos de aprendizaje automático. Además, facilita la visualización de datos, reduce los requerimientos computacionales y mejora la interpretabilidad de los modelos.

Nuestro objetivo es profundizar en los métodos no lineales, además de los métodos lineales. Entre los métodos lineales, el Análisis de Componentes Principales (PCA) destaca por su capacidad para proyectar datos en subespacios de menor dimensión preservando la varianza. Los métodos no lineales, como Kernel PCA e Isomap entre otros, son particularmente útiles para capturar relaciones complejas en los datos. Kernel PCA utiliza técnicas de kernel para identificar estructuras no lineales, mientras que Isomap preserva las distancias geodésicas para mantener la estructura global y local de los datos.

Es nuestro propósito lograr que este trabajo se transforme una guía exhaustiva para aplicar estas técnicas, destacando sus ventajas, sus fundamentos matemáticos y aplicaciones prácticas.

La reducción de dimensión representa una amalgama de teorías, técnicas y aplicaciones que abordan los desafíos derivados de la alta dimensionalidad en conjuntos de datos. Este campo, arraigado en la teoría de medida, la estadística, el aprendizaje automático y la ciencia de datos, ha experimentado un crecimiento significativo a lo largo de las últimas décadas, impulsado por la necesidad de abordar la maldición de la dimensionalidad y mejorar la eficiencia y efectividad del análisis de datos.

La maldición de la dimensionalidad, conceptualizada por Richard Bellman en 1961, ha sido un punto focal en el desarrollo de técnicas de reducción de dimensión. Este fenómeno describe cómo el volumen del espacio aumenta exponencialmente con el número de dimensiones, lo que conlleva a la dispersión de los datos y la dificultad para identificar patrones significativos. En respuesta a este desafío, los investigadores han desarrollado una variedad de métodos para reducir la dimensionalidad de los datos, permitiendo así un análisis más eficiente y una interpretación más clara de

los resultados.

Entre los métodos más destacados se encuentra el Análisis de Componentes Principales (PCA), propuesto inicialmente por Harold Hotelling en la década de 1930. PCA es un método lineal que busca transformar los datos originales en un conjunto de componentes principales ortogonales, conservando la mayor cantidad posible de varianza. Esta técnica ha sido ampliamente utilizada en una variedad de campos, desde el procesamiento de imágenes hasta la genómica, gracias a su eficiencia y facilidad de interpretación.

Sin embargo, a medida que los conjuntos de datos se vuelven más complejos, los métodos lineales pueden no ser suficientes para capturar relaciones no lineales entre las variables. Aquí es donde entran en juego los métodos no lineales, como Kernel PCA e Isomap. Estas técnicas, que surgieron en las últimas décadas, se basan en principios avanzados de álgebra lineal, geometría y análisis para proyectar los datos en espacios de menor dimensión, preservando relaciones complejas y estructuras intrínsecas.

Kernel PCA, por ejemplo, extiende el PCA tradicional al mapear los datos en un espacio de características de mayor dimensión utilizando funciones de kernel. Esto permite capturar relaciones no lineales entre las variables, lo que lo hace especialmente útil en aplicaciones como el reconocimiento de patrones y la clasificación de datos complejos.

Isomap, por otro lado, se basa en la preservación de distancias geodésicas para construir una representación de baja dimensión que conserve la estructura global de los datos. Esta técnica ha encontrado aplicaciones en campos como la visualización de datos científicos y la reconstrucción de trayectorias en datos de series temporales.

Además de los aspectos prácticos de la reducción de dimensión, existe una sólida base teórica que respalda estas técnicas. El álgebra lineal, la teoría de operadores, la geometría y el análisis armónico desempeñan un papel fundamental en la comprensión y el desarrollo de métodos de reducción de dimensión avanzados. Por ejemplo, la teoría de operadores proporciona un marco matemático sólido para entender cómo las transformaciones lineales y no lineales afectan la estructura de los datos, mientras que la geometría ayuda a entender las propiedades geométricas de los espacios de datos de alta dimensión.

La reducción de dimensión representa un campo dinámico y multifacético que abarca aspectos teóricos y prácticos. A través de una combinación de métodos lineales y no lineales, respaldados por una sólida base teórica en álgebra lineal, teoría de operadores, geometría y análisis armónico, las investigaciones siguen avanzando en nuestra capacidad para manejar y analizar datos de alta dimensionalidad en una variedad de aplicaciones. Por ejemplo, el trabajo de Coifman y Lafón [?] va en esa dirección.

La tesis está diagramada de la siguiente manera:

El Capítulo 1 está dedicado a recordar nociones generales que nos serán de util-

idad durante el resto de la tesis. Más detalladamente, recordamos las definiciones y propiedades básicas de espacios de normados: espacios de Hilbert, espacios de Banach. También revisaremos los siguientes conceptos: sucesiones de Cauchy, convergencia, operadores continuos y acotados, espacios con producto interno, la representación de funcionales de Riesz. Estudiamos algunos conceptos estadísticos necesarios en el desarrollo de la tesis como lo son la varianza, la covarianza y la correlación de datos. También daremos las definiciones y propiedades básicas de variedades de Riemann.

En el Capítulo 2 trabajamos con la descomposición en valores singulares (DVS) de matrices.

En el siguiente capítulo estudiamos el análisis de componentes principales (en español ACP, en inglés, PCA) que es una técnica utilizada para describir un conjunto de datos en términos de nuevas variables no correlacionadas.

En el Capítulo 4 describiremos en términos generales el espacio de Hilbert de funcionales del núcleo reproductor (RKHS) y su núcleo asociado. Estudiando sus propiedades y caracterizaciones, y mostrando ejemplos. Definiremos la funcional evaluación de Dirac. Mostraremos el Teorema de Moore-Aronszajn, el cual proporciona una construcción de un RKHS a partir de un núcleo. Desarrollamos aquí el método Kernel PCA que resuelve algunos casos no lineales.

En el último capítulo, continuando con los casos no lineales, desarrollamos el método Isomap.

Índice general

Introducción	3
1. Nociones Preliminares	8
1.1. Espacios Normados	8
1.2. Covarianza	10
1.3. Variedades	12
1.4. Grafos	22
1.5. Escalamiento multidimensional	23
2. Descomposición en Valores Singulares	24
3. Análisis de componentes principales	32
3.1. Formalizando el análisis de componentes principales	33
3.2. Ejemplos	39
4. Kernel PCA	45
4.1. Notación ket-bra	46
4.2. Espacios de Hilbert Reproductores de Núcleo	48
4.3. Núcleos Reproductores	49
4.4. Espacios de características	52
4.5. Construcción de un RKHS a partir de un núcleo	52
4.6. Kernel PCA	60
4.7. Optimización de mínimos cuadrados	64
4.8. Optimización y PCA	68
4.9. El Problema Dual	74
4.10. Selección de características	75
4.11. Ejemplos	76
5. Isomap	80
5.1. Muestras finitas y subvariedades	81
5.2. La condición de muestreo	82
5.3. Parámetros de la inmersión en una variedad	83

5.4. Límites Probabilísticos	87
5.5. Extensión hacia la regla K	90
5.6. Conclusiones finales	95

Capítulo 1

Nociones Preliminares

1.1. Espacios Normados

En esta sección daremos las definiciones básicas de espacios de Hilbert y también teoremas relevantes de esta teoría como el Teorema de Representación de Riesz. Consideraremos a X e Y como \mathbb{K} -espacios vectoriales normados con sus correspondientes normas $\|\cdot\|_X$ y $\|\cdot\|_Y$. Donde \mathbb{K} representa un cuerpo, en nuestro caso \mathbb{C} .

Definición 1.1.1 *Un **espacio pre-Hilbert** es un \mathbb{K} -espacio vectorial V equipado con un producto interno, esto es, una función*

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{K}$$

que satisface las siguientes propiedades,

- $\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle}$ para todo $x, y \in V$.
- $\langle ax + by, z \rangle = a\langle x, z \rangle + b\langle y, z \rangle$ para todo $x, y, z \in V$ y para todo $a, b \in \mathbb{K}$.
- $\langle x, x \rangle > 0$ para todo $x \in V - \{0\}$.

Definición 1.1.2 *Un **\mathbb{K} -espacio vectorial normado** $(H, \|\cdot\|)$ es un espacio de Hilbert si existe un producto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle : H \times H \rightarrow \mathbb{K}$, tal que para toda $f \in H$ se cumple que $\|f\| = \langle f, f \rangle^{1/2}$ y $(H, \|\cdot\|)$ es completo.*

Proposición 1.1.3 *Sea $(H, \|\cdot\|)$ un espacio de Hilbert y (e_n) una base ortonormal de H , luego para todo $x \in H$ se cumple que*

$$\sum |\langle x, e_n \rangle|^2 = \|x\|^2.$$

*Esta igualdad se conoce como la **igualdad de Parseval**.*

Definición 1.1.4 Una función $\varphi : X \rightarrow Y$ se llama **operador lineal** si

$$\varphi(\alpha f + \beta g) = \alpha \varphi(f) + \beta \varphi(g) \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{K}, \forall f, g \in X.$$

Definición 1.1.5 Una función $\varphi : X \rightarrow Y$ se dice **continua en f_0** si para todo $\epsilon > 0$ existe $\delta > 0$ tal que

$$\|f - f_0\|_X < \delta \text{ implica que } \|\varphi(f) - \varphi(f_0)\|_Y < \epsilon.$$

Definición 1.1.6 Una función $\varphi : X \rightarrow Y$ se dice **acotada** si existe $c \in \mathbb{K}$ tal que $c > 0$ y

$$\|\varphi(f)\|_Y \leq c \|f\|_X \quad \forall f \in X.$$

Teorema 1.1.7 Sea $T : X \rightarrow Y$ un operador lineal, son equivalentes:

1. T es continua en X ,
2. T es continua en algún $f_0 \in X$,
3. T es acotado.

Notaremos con $\mathcal{LB}(X, Y)$ al espacio de los operadores lineales acotados definidos de X en Y .

Definición 1.1.8 La norma de un operador lineal $\varphi : X \rightarrow Y$ se define como

$$\|\varphi\|_{op} = \inf\{c > 0 : \|\varphi(f)\|_Y \leq \|f\|_X, \quad \forall f \in X\}.$$

Teorema 1.1.9 $(\mathcal{LB}(X, Y), \|\cdot\|_{op})$ es un \mathbb{K} -espacio vectorial normado.

Definición 1.1.10 Sea X un \mathbb{K} -espacio vectorial normado. Llamamos espacio dual topológico a $(\mathcal{LB}(X, \mathbb{K}), \|\cdot\|_{op})$ y lo notamos por X' . Los elementos de $\mathcal{LB}(X, \mathbb{K})$ son llamados funcionales.

Teorema 1.1.11 (Representación de Riesz) En un espacio de Hilbert H , para todo funcional lineal acotado φ existe un único vector $g_\varphi \in H$ tal que

$$\varphi(x) = \langle x, g_\varphi \rangle.$$

Definición 1.1.12 Sean H_1 y H_2 espacios de Hilbert y sea $A \in \mathcal{LB}(H_1, H_2)$. Definimos el adjunto de A al único operador $A^* \in \mathcal{LB}(H_2, H_1)$ que satisface

$$\langle Ax, y \rangle_{H_2} = \langle x, A^*y \rangle_{H_1}$$

para todo $x \in H_1$ e $y \in H_2$.

Definición 1.1.13 Sea H un espacio de Hilbert, $A : H \rightarrow H$ un operador acotado, la norma Hilbert-Schmidt se define como

$$\|A\|_{HS}^2 = \sum_{i \in I} \|Ae_i\|_H^2,$$

donde $\{e_i : i \in I\}$ es una base ortonormal de H . Si A tiene norma Hilbert-Schmidt finita se dice que A es un operador de Hilbert-Schmidt.

A partir de esta norma se define su producto interno asociado.

Definición 1.1.14 Sea H un espacio de Hilbert y $A, B : H \rightarrow H$ dos operadores de Hilbert-Schmidt el producto interno de Hilbert-Schmidt se define como

$$\langle A, B \rangle = \text{tr}(A^*B) = \sum_i \langle A^*Be_i, e_i \rangle_H,$$

donde $\{e_i : i \in I\}$ es una base de H y $\text{tr}(A^*B)$ es la traza de A^*B .

Esta definición de traza generaliza la idea de trazas de matrices finitas. Además, si $\text{tr}(A) < \infty$ decimos que A es un operador de clase de traza.

Proposición 1.1.15 Sea H un espacio de Hilbert, $A : H \rightarrow H$ un operador acotado y $T : H \rightarrow H$ un operador de clase de traza, entonces

$$\text{tr}(AT) = \text{tr}(TA).$$

1.2. Covarianza

A continuación mencionamos las definiciones básicas de media muestral y covarianza. Nuestro propósito es entender que representa realmente la covarianza pues nos será útil para comprender los métodos de PCA y KPCA que desarrollaremos más adelante.

Definición 1.2.1 Dadas $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^p$, n observaciones con p variables, su matrix asociada es

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}.$$

Definimos la media muestral como

$$E(X) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i.$$

Definimos su matriz de covarianza muestral como

$$S = E[(X - E(X))(X - E(X))^T].$$

Proposición 1.2.2 Sea $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^p$ observaciones con p variables y X su matriz asociada, entonces

1. $E(k) = k$ para todo $k \in \mathbb{R}$.
2. $E(kX) = kE(X)$ para todo $k \in \mathbb{R}$.
3. $E(X + Y) = E(X) + E(Y)$.
4. $S = \frac{1}{n}XX^T - E(X)E(X^T)$ y si $E(X) = 0$ entonces $S = \frac{1}{n}XX^T$.

Demostración. Nos centraremos en probar 4).

$$\begin{aligned}
 S &= E[(X - E(X))(X - E(X))^T] \\
 &= E(XX^T - XE(X)^T - E(X)X^T + E(X)E(X)^T) \\
 &= E(XX^T) - E(XE(X)^T) - E(E(X)X^T) + E(E(X)E(X)^T) \\
 &= E(XX^T) - E(X)E(X)^T - E(X)E(X^T) + E(X)E(X)^T \\
 &= E(XX^T) - E(X)E(X^T) \\
 &= \frac{1}{n}XX^T - E(X)E(X^T).
 \end{aligned}$$

Si $E(X) = 0$, es claro que ■

$$S = \frac{1}{n}XX^T.$$

Para entender la idea de covarianza es pertinente ver la definición para un par de variables aleatorias.

Definición 1.2.3 Sean X e Y dos variables aleatorias, su covarianza esta dada por

$$Cov(X, Y) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - E(X))(y_i - E(Y)).$$

Lo que nos dice esta fórmula es cuanto cambian dos variables al mismo tiempo. Observamos que si las variables de X y las variables de Y se alejan de su media, de forma positiva o negativa al mismo tiempo, la covarianza nos da positiva. Si cuando las variables de X lo hacen de forma positiva, las de Y lo hacen de forma negativa entonces la covarianza nos dara negativa. En cambio, si las variables van alternando la positividad o negatividad, la covarianza nos dara cerca de 0. Así, la covarianza nos permite establecer si hay una correlación positiva o negativa entre las variables, donde por correlación nos referimos a la intensidad y dirección de la relación lineal entre las variables. Hacemos énfasis en la linealidad de la correlación, ya que nuestro posterior análisis se encargara de ver que sucede si no tenemos esta linealidad entre las variables.

Definición 1.2.4 Sean X una variable aleatoria, su varianza esta dada por

$$\text{Var}(X) = E((X - E(X))^2).$$

1.3. Variedades

En esta sección desarrollaremos las ideas principales de variedades de Riemann, nos enfocaremos en dar las nociones principales y definiciones sin entrar en demostraciones ya que escapan a los propósitos de este trabajo. Utilizaremos estos conceptos para desarrollar el método de Isomap, ya que en este método trabajaremos con el supuesto de que nuestros datos están inmersos en una variedad de Riemann.

Comenzamos con la idea de variedad diferenciable extendiendo la noción de variedad regular.

Definición 1.3.1 Una **variedad diferenciable** de dimensión n es un conjunto M y una familia de funciones inyectivas $x_\alpha : U_\alpha \subset \mathbb{R}^n \rightarrow M$ de conjuntos abiertos U_α de \mathbb{R}^n en M tales que

1. $\bigcup_{\alpha} x_\alpha(U_\alpha) = M$.
2. Para cada par α, β tal que $x_\alpha(U_\alpha) \cap x_\beta(U_\beta) = W \neq \emptyset$, los conjuntos $x_\alpha^{-1}(W)$ y $x_\beta^{-1}(W)$ son abiertos en \mathbb{R}^n y las funciones $x_\beta^{-1} \circ x_\alpha$ son diferenciables.
3. La familia $\{(U_\alpha, x_\alpha)\}$ es maximal respecto a las condiciones 1 y 2.

El par (U_α, x_α) con $p \in x_\alpha(U_\alpha)$ es llamado parametrización de M en p y $x_\alpha(U_\alpha)$, entorno coordenado en p . Una familia $\{(U_\alpha, x_\alpha)\}$ que satisface 1 y 2 se llama estructura diferenciable en M .

Dado una estructura diferencial en M podemos completarla a una maximal, tomando la unión de todas las parametrizaciones que, junto con las parametrizaciones de la estructura, satisfacen la condición 1.

Una estructura diferencial en un conjunto M induce una topología en M . Definiendo $A \subset M$ como un conjunto abierto en M si y sólo si $x_\alpha^{-1}(A \cap x_\alpha(U_\alpha))$ es un conjunto abierto de \mathbb{R}^n para todo α . Notemos que esta topología esta definida de forma tal, que los conjuntos $x_\alpha(U_\alpha)$ son abiertos y las funciones x_α son continuas.

Por otro lado, el interior de una variedad es el conjunto de puntos de dicha variedad que tienen un entorno homeomórfico a cualquier conjunto abierto de \mathbb{R}^n . Además, decimos que una variedad es una variedad con borde si contiene al borde de la variedad, donde el borde de la variedad no es más que el complemento del interior de la variedad.

Ahora extendemos la idea de diferenciabilidad a funciones entre variedades diferenciables.

Definición 1.3.2 Sean M_1^n y M_2^m variedades diferenciables. Una función $\varphi : M_1 \rightarrow M_2$ es **diferenciable en** $p \in M_1$ si dada una parametrización $y : V \subset \mathbb{R}^m \rightarrow M_2$ en $\varphi(p)$ existe una parametrización $x : U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow M_1$ en p tal que $\varphi(x(U)) \subset y(U)$ y la función

$$y^{-1} \circ \varphi \circ x : U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$$

es diferenciable en $x^{-1}(p)$. Además, φ es **diferenciable en un conjunto abierto** de M_1 si es diferenciable en todos los puntos del conjunto abierto.

A continuación buscamos extender la idea de vector tangente a variedades diferenciables. En superficies regulares de \mathbb{R}^3 , un vector tangente en un punto p de la superficie representa la velocidad de una curva en la superficie que pasa por p , ahora buscaremos una propiedad característica del vector tangente que reemplazará la idea de velocidad y motivará nuestra definición.

Sea $\alpha : (-\epsilon, \epsilon) \rightarrow \mathbb{R}^n$ una curva diferenciable en \mathbb{R}^n , tal que $\alpha(0) = p$. Podemos reescribir a α de la siguiente manera:

$$\alpha(t) = (x_1(t), \dots, x_n(t)), \quad t \in (-\epsilon, \epsilon), \quad (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n.$$

Luego $\alpha'(0) = (x'_1(0), \dots, x'_n(0)) = v \in \mathbb{R}^n$. Sea f una función diferenciable en un entorno de p . Podemos restringir a f a la curva α y expresar la derivada direccional con respecto al vector $v \in \mathbb{R}^n$

$$\left. \frac{d(f \circ \alpha)}{dt} \right|_{t=0} = \sum_{i=1}^n \left. \frac{\partial f}{\partial x_i} \right|_{t=0} \left. \frac{dx_i}{dt} \right|_{t=0} = \left(\sum_i x'_i(0) \frac{\partial}{\partial x_i} \right) f.$$

Es decir, la derivada direccional con respecto a v es un operador en funciones diferenciables que depende únicamente de v . Usaremos esta característica para definir el vector tangente en una variedad diferenciable.

Definición 1.3.3 Sea M una variedad diferenciable. Una función diferenciable $\alpha : (-\epsilon, \epsilon) \rightarrow M$ es llamada **curva diferenciable en** M . Supongamos que $\alpha(0) = p \in M$ y sea \mathcal{D} el conjunto de funciones en M diferenciables en p . El vector tangente a la curva α en $t = 0$ es la función $\alpha'(0) : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por

$$\alpha'(0)f = \left. \frac{d(f \circ \alpha)}{dt} \right|_{t=0}, \quad f \in \mathcal{D}.$$

Un vector tangente en p es el vector tangente en $t = 0$ para alguna curva $\alpha : (-\epsilon, \epsilon) \rightarrow M$ tal que $\alpha(0) = p$. El conjunto de todos los vectores tangentes de M en p se notan con $T_p M$.

Si elegimos una parametrización $x : U \rightarrow M^n$ en $p = x(0)$, podemos expresar la función f y la curva α en esta parametrización,

$$(f \circ x)(q) = f(x_1, \dots, x_n), \quad q(x_1, \dots, x_n) \in U$$

y

$$(x^{-1} \circ \alpha)(t) = (x_1(t), \dots, x_n(t)),$$

respectivamente. Así, restringiendo f a α obtenemos:

$$\begin{aligned} \alpha'(0)f &= \left. \frac{d}{dt}(f \circ \alpha) \right|_{t=0} = \left. \frac{d}{dt}f(x_1(t), \dots, x_n(t)) \right|_{t=0} \\ &= \sum_{i=1}^n x'_i(0) \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \\ &= \sum_{i=1}^n x'_i(0) \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)_0 \end{aligned}$$

En otras palabras, el vector $\alpha'(0)$ puede ser expresado en la parametrización por

$$\begin{aligned} \alpha'(0) &= \sum_{i=1}^n \left. \frac{dx_i}{dt} \right|_{t=0} \frac{\partial}{\partial x_i} \\ &= \sum_{i=1}^n x'_i(0) \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \right)_0. \end{aligned}$$

Esta última expresión muestra que el vector tangente a la curva α en p sólo depende de la derivada de α en el sistema coordenado. También sigue que el conjunto $T_p M$, con las operaciones usuales de funciones, forman un espacio vectorial de dimensión n , y la elección de parametrizaciones $x : U \rightarrow M$ determina una base asociada $\left\{ \left(\frac{\partial}{\partial x_1} \right)_0, \dots, \left(\frac{\partial}{\partial x_n} \right)_0 \right\}$ en $T_p M$. Así, la estructura lineal en $T_p M$ definida anteriormente no depende de la parametrización x .

Definición 1.3.4 *El espacio vectorial $T_p M$ es llamado **espacio tangente de M en p** .*

Proposición 1.3.5 *Sean M_1^n y M_2^m variedades diferenciables y sea $\varphi : M_1 \rightarrow M_2$ una función diferenciable. Para cada $p \in M_1$ y para cada $v \in T_p M_1$, elegimos una curva diferenciable $\alpha : (-\epsilon, \epsilon) \rightarrow M_1$ tal que $\alpha(0) = p$ y $\alpha'(0) = v$. Sea $\beta = \varphi \circ \alpha$. La función $d\varphi_p : T_p M_1 \rightarrow T_p M_2$ dada por $d\varphi_p(v) = \beta'(0)$ es una función lineal que no depende de la elección de α .*

La función lineal $d\varphi_p$ trabajada en la Proposición anterior es llamada **función diferencial de φ en p** .

Definición 1.3.6 Sean M_1 y M_2 variedades diferenciables. Una función $\varphi : M_1 \rightarrow M_2$ es un **difeomorfismo** si es diferenciable, biyectiva y su inversa φ^{-1} es también diferenciable. La función φ es un **difeomorfismo local** en $p \in M_1$ si existe un entorno U de p y V de $\varphi(p)$ tal que $\varphi : U \rightarrow V$ es un difeomorfismo.

La noción de difeomorfismo es la idea natural de equivalencia en variedades diferenciables.

Definición 1.3.7 Sean M^m y N^n variedades diferenciables. Una función lineal $\varphi : M \rightarrow N$ es una **inmersión** si $d\varphi_p : T_p M \rightarrow T_p N$ es inyectiva para todo $p \in M$. Además si φ es un homeomorfismo en $\varphi(M) \subset N$, donde $\varphi(M)$ tiene la topología de subespacio inducida por N , decimos que φ es un **encaje**. Si $M \subset N$ y la inyección canónica $i : M \subset N \rightarrow N$ es un encaje, decimos que M es una **subvariedad** de N .

A continuación desarrollamos el concepto de fibrado tangente. Sea M^m una variedad diferenciable y sea $TM = \{(p, v) : p \in M, v \in T_p M\}$, busquemos darle a este conjunto estructura diferenciable. Con esta estructura TM será llamado **fibrado tangente**.

Sea $\{(U_\alpha, x_\alpha)\}$ una estructura maximal diferenciable en M . Denotamos por $(x_1^\alpha, \dots, x_n^\alpha)$ a las coordenadas de U_α y por $\left\{\frac{\partial}{\partial x_1^\alpha}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n^\alpha}\right\}$ las bases asociadas a los espacios tangentes de $x_\alpha(U_\alpha)$. Para cada α , definimos

$$y_\alpha : U_\alpha \times \mathbb{R}^n \rightarrow TM,$$

dada por

$$y_\alpha(x_1^\alpha, \dots, x_n^\alpha, u_1, \dots, u_n) = \left(x_\alpha(x_1^\alpha, \dots, x_n^\alpha), \sum_{i=1}^n u_i \frac{\partial}{\partial x_i^\alpha} \right), \quad (u_1, \dots, u_n) \in \mathbb{R}^n.$$

Geométricamente estamos tomando las coordenadas de un punto $(p, v) \in TM$, las coordenadas $x_1^\alpha, \dots, x_n^\alpha$ de p junto con las coordenadas de v en la base $\left\{\frac{\partial}{\partial x_1^\alpha}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n^\alpha}\right\}$.

Probaremos a continuación que $\{(U_\alpha \times \mathbb{R}^n, y_\alpha)\}$ es una estructura diferenciable en TM . Como $\bigcup_{\alpha} x_\alpha(U_\alpha) = M$ y $(dx_\alpha)_q(\mathbb{R}^n) = T_{x_\alpha(q)}M$, $q \in U_\alpha$, tenemos que

$$\bigcup_{\alpha} y_\alpha(U_\alpha \times \mathbb{R}^n) = TM,$$

lo que verifica la condición 1 de la Definición 1.3.1. Sea

$$(p, v) \in y_\alpha(U_\alpha \times \mathbb{R}^n) \cap y_\beta(U_\beta \times \mathbb{R}^n).$$

Luego,

$$(p, v) = (x_\alpha(q_\alpha), dx_\alpha(v_\alpha)) = (x_\beta(q_\beta), dx_\beta(v_\beta)),$$

donde $q_\alpha \in U_\alpha$, $q_\beta \in U_\beta$ y $v_\alpha, v_\beta \in \mathbb{R}^n$. Así

$$\begin{aligned} y_\beta^{-1} \circ y_\alpha(q_\alpha, v_\alpha) &= y_\beta^{-1}(x_\alpha(q_\alpha), dx_\alpha(v_\alpha)) \\ &= ((x_\beta^{-1} \circ x_\alpha)(q_\alpha), d(x_\beta^{-1} \circ x_\alpha)(v_\alpha)). \end{aligned}$$

Dado que $x_\beta^{-1} \circ x_\alpha$ es diferenciable, $d(x_\beta^{-1} \circ x_\alpha)$ también lo es. Sigue que $y_\beta^{-1} \circ y_\alpha$ satisface la condición 2 de la Definición 1.3.1. Por lo tanto, $\{(U_\alpha \times \mathbb{R}^n, y_\alpha)\}$ es una estructura diferenciable en TM .

Definición 1.3.8 *Un espacio vectorial X en una variedad diferenciable M es una correspondencia que asocia a cada punto $p \in M$ a un vector $X(p) \in T_p M$. En términos de funciones, X es una función de M en un fibrado tangente TM . Este campo es diferenciable si $X : M \rightarrow TM$ es diferenciable.*

Consideremos una parametrización $x : U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow M$ podemos escribir

$$X(p) = \sum_{i=1}^n a_i(p) \frac{\partial}{\partial x_i},$$

donde cada $a_i : U \rightarrow \mathbb{R}$ es una función en U y $\left\{ \frac{\partial}{\partial x_i} \right\}$ es una base asociada a x , $i = 1, \dots, n$. Es claro que X es diferenciable si y sólo si las funciones a_i son diferenciables para alguna parametrización.

Ahora desarrollaremos la noción de variedad de Riemann. Dada una superficie $S \subset \mathbb{R}^3$, tenemos una manera natural de medir las longitudes de vectores tangentes a S , mediante el producto interno $\langle v, w \rangle$ entre dos vectores tangentes a S en el punto p de S es simplemente el producto interno de estos vectores en \mathbb{R}^3 . La forma de calcular la longitud de arco de una curva es por definición, integrando la longitud del vector velocidad. La definición de $\langle \cdot, \cdot \rangle$ nos permite medir no solo la longitud de las curvas en S sino también el ángulo entre las curvas y todas las demás ideas usuales de la geometría. Estas nociones nos permiten definir en S curvas especiales llamadas **geodésicas**, que tienen la siguiente propiedad: dados dos puntos p y q en una geodésica, la longitud de la curva es menor o igual a la longitud de cualquier curva uniendo p con q . Estas curvas se comportan en muchas situaciones como si se tratasen de rectas en S .

Definición 1.3.9 *Una **métrica de Riemann** en una variedad diferenciable M es una correspondencia que asocia a cada punto $p \in M$ a un producto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle_p$ en el espacio tangente $T_p M$, que varía en forma diferencial en el siguiente sentido: si $x : U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow M$ es un sistema de coordenadas alrededor de p , con $x(x_1, \dots, x_n) =$*

$q \in X(U)$ y $\frac{\partial}{\partial x_i}(q) = dx_q(0, \dots, 1, \dots, 0)$, entonces $\left\langle \frac{\partial}{\partial x_i}(q), \frac{\partial}{\partial x_j}(q) \right\rangle = g_{ij}(x_1, \dots, x_n)$ es una función diferenciable en U .

Es claro que esta definición no depende de la elección del sistema coordenado. La función g_{ij} es llamada **representación local de una métrica de Riemann** en el sistema coordenado $x : U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow M$. Una variedad diferenciable en conjunto con una métrica de Riemann es llamada **variedad de Riemann**.

Otra manera de expresar la diferenciable de una métrica de Riemann es decir que para cada par de campos vectoriales X y Y , que son diferenciables en un entorno V de M , la función $\langle X, Y \rangle$ es diferenciable en V . Esta definición es equivalente a la anterior.

Dada esta nueva estructura matemática debemos decir cuando dos objetos son iguales.

Definición 1.3.10 Sean M y N variedades de Riemann. Un difeomorfismo $f : M \rightarrow N$ (es decir, f es una biyección diferenciable con inversa diferenciable) es llamada **isometría** si para todo $p \in M$ y $u, v \in T_p M$ se cumple que

$$\langle u, v \rangle_p = \langle df_p(u), df_p(v) \rangle_{f(p)}. \quad (\alpha)$$

Definición 1.3.11 Sean M y N variedades de Riemann. Una función diferenciable $f : M \rightarrow N$ es una **isometría local** en $p \in M$ si existe un entorno $U \subset M$ de p tal que $f : U \rightarrow f(U)$ es un difeomorfismo que satisface la condición (α) .

Se suele decir que una variedad de Riemann M es localmente isométrica a una variedad de Riemann N si para cada p en M existe un entorno U de p en M y una isometría local $f : U \rightarrow f(U) \subset N$.

A continuación veamos algunos ejemplos de una variedad de Riemann.

Ejemplo 1.3.1 Sea $M = \mathbb{R}^n$ con $\frac{\partial}{\partial x_i}$ indentificado con $e_i = (0, \dots, 1, \dots, 0)$. La métrica es dada por $\langle e_i, e_j \rangle = \delta_{ij}$ y \mathbb{R}^n es llamado espacio euclideo de dimensión n y la geometría de Riemann de este espacio es la euclidea.

Ejemplo 1.3.2 Sea $f : M^n \rightarrow N^{n+k}$ una inmersión, esto es, f es diferenciable y $df_p : T_p M \rightarrow T_{f(p)} N$ es inyectiva para todo p en M . Si N tiene estructura diferenciable, f induce una estructura de Riemann en M definiendo $\langle u, v \rangle_p = \langle df_p(u), df_p(v) \rangle_{f(p)}$, $u, v \in T_p M$. Como df_p es inyectiva, $\langle \cdot, \cdot \rangle_p$ es definida positiva. Las otras condiciones de la definición de métrica de Riemann se verifican fácilmente. La métrica en M es llamada métrica inducida por f y f es una inmersión isométrica.

Un caso importante ocurre cuando tenemos una función diferenciable $h : M^{n+k} \rightarrow N^k$ y $q \in N$ es un valor regular de h , esto es, $dh_p : T_p M \rightarrow T_{h(p)} N$ es sobreyectiva para todo $p \in h^{-1}(q)$. Es sabido que $h^{-1}(q) \subset M$ es una subvariedad de M

de dimensión n , entonces podemos dar una métrica de Riemann inducida por la inclusión.

Por ejemplo, sea $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ dado por $h(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n x_i^2 - 1$. Luego, el 0 es un valor regular de h y $h^{-1}(0) = \{x \in \mathbb{R}^n : x_1^2 + \dots + x_n^2 = 1\}$ es la esfera unitaria de \mathbb{R}^n . La métrica inducida por \mathbb{R}^n en S^{n-1} es llamada **métrica canónica de S^{n-1}** .

Ejemplo 1.3.3 Sean M_1 y M_2 variedades de Riemann y consideremos el producto cartesiano $M_1 \times M_2 \rightarrow M_2$ con la estructura del producto. Sea $\pi_1 : M_1 \times M_2 \rightarrow M_1$ y $\pi_2 : M_1 \times M_2 \rightarrow M_2$ las proyecciones naturales. Introducimos en $M_1 \times M_2$ una métrica de Riemann de la siguiente manera:

$$\langle u, v \rangle_{(p,q)} = \langle d\pi_1 \cdot u, d\pi_1 \cdot v \rangle_p + \langle d\pi_2 \cdot u, d\pi_2 \cdot v \rangle_q,$$

para todo $(p, q) \in M_1 \times M_2$, $u, v \in T_{(p,q)}(M_1 \times M_2)$.

Es sencillo verificar que esta es una métrica de Riemann en el producto $M_1 \times M_2$. Por ejemplo, en el toro $S^1 \times \dots \times S^1 = T^n$ tiene una estructura de Riemann que se obtiene de inducir la métrica de Riemann de \mathbb{R}^2 en el círculo $S^1 \subset \mathbb{R}^2$ para luego tomar la métrica producto. Con esta métrica, el toro es llamado **toro plano**.

Ahora definimos la manera en cómo la métrica de Riemann puede ser usada para calcular la longitud de curvas.

Definición 1.3.12 Una función diferenciable $c : I \rightarrow M$, de un intervalo abierto $I \subset \mathbb{R}$ en una variedad diferenciable M es llamada **curva parametrizada** o **curva**.

Definición 1.3.13 Un campo vectorial sobre la curva $c : I \rightarrow M$ es una función diferenciable que asocia a cada elemento $t \in I$ un vector tangente $V(t) \in T_{c(t)}M$. Se dice que V es diferenciable es que para cualquier función diferenciable f en M , la función $t \rightarrow V(t)f$ es una función diferenciable en I .

El campo vectorial $dc\left(\frac{d}{dt}\right)$, denotado $\frac{dc}{dt}$, es llamado **campo de velocidad**. La restricción de una curva c a un intervalo cerrado $[a, b] \subset I$ es llamada **segmento**. Si M es una variedad de Riemann, podemos definir la longitud del segmento por

$$\ell_a^b(c) = \int_a^b \left\langle \frac{dc}{dt}, \frac{dc}{dt} \right\rangle^{1/2} dt.$$

La siguiente proposición nos describe la existencia de variedades de Riemann.

Proposición 1.3.14 Una variedad diferenciable (Hausdorff con base contable) tiene una métrica de Riemann.

A continuación veremos que la métrica de Riemann nos permite definir la noción de volumen en una variedad orientada M^n .

Definición 1.3.15 Sea M una variedad diferenciable. Decimos que M es **orientable** si M admite una estructura diferenciable $\{(U_\alpha x_\alpha)\}$ tal que para cada par α, β , con $x_\alpha(U_\alpha) \cap x_\beta(U_\beta) = W \neq \emptyset$, el diferencial del cambio de coordenadas $x_\beta^{-1} \circ x_\alpha$ tiene determinante positivo.

Sea $p \in M$ y sea $x : U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow M$ una parametrización de p que pertenece a la familia de parametrizaciones consistentes con la orientación de M . Consideramos la base ortonormal $\{e_1, \dots, e_n\}$ de $T_p M$ y escribimos $X_i(p) = \frac{\partial}{\partial x_i}$ en la base $\{e_i\}$, $X_i(p) = \sum_{ij} a_{ij} e_j$. Luego

$$g_{ik}(p) = \langle X_i, X_k \rangle(p) = \sum_{j\ell} a_{ij} a_{k\ell} \langle e_i, e_\ell \rangle = \sum_j a_{ij} a_{kj}.$$

Dado que el volumen $\text{vol}(X_1(p), \dots, X_n(p))$ del paralelepípedo formado por los vectores $X_1(p), \dots, X_n(p)$ en $T_p M$ es igual a $\text{vol}(e_1, \dots, e_n) = 1$ multiplicado por la matriz (a_{ij}) , obtenemos que

$$\text{vol}(X_1(p), \dots, X_n(p)) = \det(a_{ij}) = \sqrt{\det(g_{ij})}(p).$$

Si $y : V \subset \mathbb{R}^n \rightarrow M$ es otra parametrización positiva sobre p , con $Y_i(p) = \frac{\partial}{\partial y_i}$ y $h_{ij}(p) = \langle Y_i, Y_j \rangle(p)$, obtenemos que

$$\begin{aligned} \sqrt{\det(g_{ij})}(p) &= \text{vol}(X_1(p), \dots, X_n(p)) \\ &= J \text{vol}(Y_1(p), \dots, Y_n(p)) \\ &= J \sqrt{\det(h_{ij})}(p) \end{aligned}$$

donde $J = \det \left(\frac{\partial x_i}{\partial y_j} \right) = \det(dy^{-1} \circ dx) > 0$ es el determinante de la derivada de cambio de coordenadas.

Sea $R \subset M$ un subconjunto conectado abierto cuya clausura es compacta. Suponemos que R está contenida en un entorno coordenado $x(U)$ con parametrización positiva $x : U \rightarrow M$ y que el borde de $x^{-1}(R) \subset U$ tiene medida nula en \mathbb{R}^n . Definimos el volumen de R como

$$\text{vol}(R) = \int_{x^{-1}(R)} \sqrt{\det(g_{ij})} dx_1 \dots dx_n.$$

Esta expresión está bien definida.

A continuación definiremos las conexiones afines para poder luego definir la derivada covariante. Sea $\mathfrak{X}(X)$ el conjunto de todos los campos vectoriales diferenciables y $\mathcal{D}(X)$ el anillo de todas las funciones reales de clase C^∞ definido en M .

Definición 1.3.16 Una **conexión afín** ∇ en una variedad diferenciable de Reimann M es una función

$$\nabla : \mathfrak{X}(X) \times \mathfrak{X}(X) \rightarrow \mathfrak{X}(X),$$

que es denotada por $(X, Y) \xrightarrow{\nabla} \nabla_X Y$, que satisface las siguientes propiedades para todo $X, Y, Z \in \mathfrak{X}(X)$ y $f, g \in \mathcal{D}(X)$:

1. $\nabla_{fX+gY} Z = f\nabla_X Z + g\nabla_Y Z$.
2. $\nabla_X(Y + Z) = \nabla_X Y + \nabla_X Z$.
3. $\nabla_X(fY) = f\nabla_X Y + X(f)Y$.

Proposición 1.3.17 Sea M una variedad diferenciable con una conexión afín ∇ . Existe una correspondencia única que asocia a cada campo vectorial V a lo largo de la curva diferenciable $C : I \rightarrow M$ a otro campo vectorial $\frac{DV}{dt}$ sobre c , llamado derivada covariante de V sobre c , tal que:

1. $\frac{D}{dt}(V + W) = \frac{DV}{dt} + \frac{DW}{dt}$.
2. $\frac{D}{dt}(fV) = \frac{Df}{dt}V + f\frac{DV}{dt}$, donde W es un campo vectorial sobre c y f es una función diferenciable de I .
3. Si V es inducida por el campo vectorial $Y \in \mathfrak{X}(X)$, es decir, $V(t) = Y(c(t))$, entonces $\frac{DV}{dt} = \nabla_{dc/dt} Y$.

Desarrollaremos a continuación la definición de geodésica.

Definición 1.3.18 Una curva parametrizada $\gamma : I \rightarrow M$ es una **geodésica** en $t_0 \in I$ si $\frac{D}{dt} \left(\frac{d\gamma}{dt} \right) = 0$ en el punto t_0 , si γ es geodésica en t para todo $t \in I$, decimos que γ es **geodésica**. Si $[a, b] \subset I$ y $\gamma : I \rightarrow M$ es una geodésica, la restricción de γ en $[a, b]$ es llamado **segmento geodésico** que une $\gamma(a)$ con $\gamma(b)$.

Es usual referirse a $\gamma(I)$, la imagen de la geodésica γ , simplemente como geodésica.

Si $\gamma : I \rightarrow M$ es una geodésica, entonces

$$\frac{d}{dt} \left\langle \frac{d\gamma}{dt}, \frac{d\gamma}{dt} \right\rangle = 2 \left\langle \frac{D}{dt} \frac{d\gamma}{dt}, \frac{d\gamma}{dt} \right\rangle = 0,$$

es decir, la longitud del vector $\frac{d\gamma}{dt}$ es constante. Asumimos de ahora en adelante que $\left| \frac{d\gamma}{dt} \right| = c \neq 0$, esto es, excluimos las geodésicas que se reducen a un punto. La longitud de arco s de γ , empezando desde un punto fijo $t = t_0$, esta dada por

$$s(t) = \int_{t_0}^t \left| \frac{d\gamma}{dt} \right| dt = c(t - t_0).$$

Así, el parámetro de una geodésica es proporcional a la longitud de arco. Cuando el parámetro es la longitud de arco, es decir, $c = 1$, decimos que la geodésica está normalizada.

Proposición 1.3.19 *Dado $p \in M$, existe un entorno V de p en M , un número $\epsilon > 0$ y un mapeo C^∞ $\gamma : (-2, 2) \times \mathcal{U} \rightarrow M$, $\mathcal{U} = \{(q, w) \in TM : q \in V, w \in T_q M, |w| < \epsilon\}$ tales que $t \rightarrow \gamma(t, q, w)$, $t \in (-2, 2)$ es una geodésica única en M la cual en el instante $t = 0$ interseca al q con una velocidad w , para todo $q \in V$ y para todo $w \in T_q M$ tal que $|w| < \epsilon$.*

Esta proposición nos permite introducir el concepto de mapeo exponencial. Sea $p \in M$ y sea $\mathcal{U} \subset TM$ el conjunto definido en la proposición. Entonces la función $\exp : \mathcal{U} \rightarrow M$ dada por

$$\exp(q, v) = \gamma(1, q, v) = \gamma(|v|, q, \frac{v}{|v|}), \quad (q, v) \in \mathcal{U}$$

es llamado **mapeo exponencial en \mathcal{U}** .

Es claro que \exp es diferenciable, además, en la mayoría de los casos se utiliza la restricción de \exp sobre un subconjunto abierto del espacio tangente $T_q M$, esto es, definimos

$$\exp_p : B_\epsilon(0) \subset T_p M \rightarrow M$$

donde $\exp_q(v) = \exp(q, v)$, donde $B_\epsilon(0)$ es la bola con centro en el origen de $T_q M$ y radio ϵ .

Geométricamente, $\exp_q(v)$ es un punto de M que se obtiene recorriendo una distancia $|v|$, partiendo de q a lo largo de la geodésica que pasa por q con una velocidad igual a $\frac{v}{|v|}$.

Si $\exp_p(v)$ es un difeomorfismo de un entorno V con el origen en $T_p M$, $\exp_p V = U$ es llamado **entorno normal de p** . Si $B_\epsilon(0)$ es tal que $\overline{B_\epsilon(0)} \subset V$, decimos que $\exp_p B_\epsilon(0) = B_\epsilon(p)$ es una **bola normal** o **bola geodésica** con centro en p y radio ϵ .

Mostramos a continuación más definiciones y resultados referidos a las geodésicas.

Definición 1.3.20 *Una curva diferenciable por partes es una función $c : [a, b] \rightarrow M$ en un intervalo cerrado $[a, b] \subset \mathbb{R}$ en M que satisface la siguiente condición: existe una partición $a = t_0 < t_1 < \dots < t_{k-1} < t_k = b$ en $[a, b]$ tal que las restricciones $c|_{[t_i, t_{i+1}]}$, $i = 0, \dots, k-1$ son diferenciables. Decimos que c une a los puntos $c(a)$ y $c(b)$. $c(t_i)$ es llamado **vértice de c** y el ángulo formado por $\lim_{t \rightarrow t_i^+} c'(t)$ con $\lim_{t \rightarrow t_i^-} c'(t)$ es llamado el **ángulo del vértice** a $c(t_i)$, en este caso $\lim_{t \rightarrow t_i^+} c'(t)$ ($\lim_{t \rightarrow t_i^-} c'(t)$) significa que t se acerca a t_i sobre los valores arriba (abajo) de t_i .*

Definición 1.3.21 Un segmento de geodésica $\gamma : [a, b] \rightarrow M$ es llamado **mínimo** si $\ell(\gamma) \leq \ell(c)$, donde c es una curva diferenciable por partes arbitraria que une $\gamma(a)$ con $\gamma(b)$.

Proposición 1.3.22 Sea $p \in M$, U un entorno normal y $B \subset U$ una bola normal de centro p . Sea $\gamma : [0, 1] \rightarrow B$ un segmento geodésico con $\gamma(0) = p$. Si $c : [0, 1] \rightarrow M$ es una curva diferenciable por partes que une $\gamma(0)$ con $\gamma(1)$ entonces $\ell(\gamma) \leq \ell(c)$ y si la igualdad se da entonces $\gamma([0, 1]) = c([0, 1])$.

La proposición anterior nos dice que las geodésicas minimizan localmente la longitud de arco.

Teorema 1.3.23 Para cada $p \in M$ existe un entorno W de p y un número $\delta > 0$ tal que para cada $q \in W$, \exp_q es un difeomorfismo de $B_\delta(0) \subset T_q M$ y $W \subset \exp_q(B_\delta(0))$, es decir, W es un entorno normal de cada uno de sus puntos.

De este último teorema y la proposición anterior, se sigue que dados dos puntos $q_1, q_2 \in W$, existe una geodésica mínima γ de longitud menor a δ que une q_1 con q_2 . Decimos que W es un **entorno totalmente normal de $p \in M$** .

Corolario 1.3.24 Si una curva diferenciable por partes $\gamma : [a, b] \rightarrow M$ con parámetro proporcional a la longitud de arco y γ tiene longitud igual o menor a la longitud de cualquier otra curva diferenciable por partes que une $\gamma(a)$ con $\gamma(b)$, entonces γ es una geodésica. En particular, γ es regular.

Dijimos anteriormente que todo punto $p \in M$ posee un entorno totalmente normal, esto es un entorno W y un número $\delta > 0$ tal que dados $q_1, q_2 \in W$ podemos unirlos con una geodésica mínima de longitud menor que δ . Ahora bien, esa geodésica puede no estar totalmente contenida en W .

Definición 1.3.25 Decimos que un subconjunto $S \subset M$ es **fuertemente convexo** si para todo $q_1, q_2 \in \bar{S}$ existe una geodésica mínima única γ que une q_1 con q_2 cuyo interior está contenido en S .

Proposición 1.3.26 Para todo $p \in M$ existe $\beta > 0$ tal que la bola geodésica $B_\beta(p)$ es fuertemente convexa.

1.4. Grafos

En esta sección damos las definiciones básicas de grafos que nos permitirán realizar el método de Isomap en el último capítulo de este trabajo. Comenzamos presentando grafos no dirigidos y luego grafos dirigidos.

Un **grafo** es una terna $G = (V, U, \Phi)$ que consiste en dos conjuntos no vacíos y disjuntos, V y U , de elementos llamados **vértices** y **aristas**, respectivamente, y de una función Φ , llamada **relación de adyacencia**, que asocia a cada arista de U un par no ordenado de vértices de V . Si extendemos la definición de grafo para cuando $U = \emptyset$, se tiene el **grafo discreto**.

Si u es una arista del grafo G y a y b son vértices tales que $\Phi(u) = (a, b)$ entonces se dice que la arista u tiene extremos en los vértices a y b . Una arista en la que coinciden ambos extremos es llamada **bucle** o **lazo**. Los vértices que son extremos de una misma arista, que no es bucle, se llaman **vértices adyacentes**.

Se aceptan aristas diferentes pero con los mismos extremos, las mismas son llamadas **aristas múltiples**. Decimos que un grafo es **simple** si no tiene aristas múltiples y un grafo simple es **completo** si cada vértice es adyacente a todos los restantes.

Dado $G = (V, U, \Phi)$ en el cual los elementos del conjunto U no son aristas sino que son arcos, es decir pares ordenados, diremos que G es un **grafo dirigido**, y también es llamado **digrafo**. En este caso, Φ es llamada **relación de incidencia**.

Si u es un arco y a y b son vértices tales que $\Phi(u) = (a, b)$ entonces se dice que u tiene **extremo inicial** en a y **extremo final** en b . Si un arco tiene igual extremo inicial que final se denomina **lazo**.

1.5. Escalamiento multidimensional

Para el método de Isomap será necesario conocer el Escalamiento Multidimensional (MDS). Dada una matriz con las distancias entre cada par de objetos en un conjunto, y un número elegido de dimensión, N , el algoritmo MDS coloca cada objeto en un espacio N -dimensional (una representación de dimensiones inferiores) tal que las distancias entre objetos se conservan lo mejor posible. Para lograr este objetivo se utilizan dos métodos: MDS métrico y MDS no métrico. El primero se centra en minimizar una función de estrés que no es más que la norma euclídea de la diferencia entre la distancia original y la distancia buscada, el segundo encuentra una relación monótona entre las distancias originales y las distancias buscadas, y además la ubicación de cada objeto en el espacio de menor dimensión. Las rigurosidades de estos métodos se escapan de los objetivos de este trabajo, pero lo relevante es que a partir de una matriz de distancias podemos ubicar a cada objeto en un espacio de menor dimensión.

Capítulo 2

Descomposición en Valores Singulares

En esta sección desarrollaremos la descomposición de valores singulares y el Teorema Espectral. Estos conceptos nos ayudaran a relacionar nuestro problemas de optimización con autovalores y autovectores.

Definición 2.0.1 Sea H un espacio de Hilbert y $A \in \mathcal{LB}(H, H)$, decimos que A es:

- *Hermitiano* si $A = A^*$.
- *Unitario* si $AA^* = A^*A = I$.
- *Normal* si $AA^* = A^*A$.
- *Definido positivo* si $\langle Ax, x \rangle > 0$ para todo $x \in H$.
- *Semidefinido positivo* si $\langle Ax, x \rangle \geq 0$ para todo $x \in H$.

Ahora nos centraremos en trabajar con matrices y conservamos estas definiciones, podemos pensar a las matrices de $M_n(\mathbb{C})$ como operadores en \mathbb{C}^n con el producto escalar y la norma usual. Además en este contexto $A^* = \overline{A^T}$.

Definición 2.0.2 Dadas $A, B \in M_n(\mathbb{C})$, se dice que A es **unitariamente semejante** a B y se nota $A \cong B$, si existe $U \in M_n(\mathbb{C})$ unitaria tal que

$$A = U^*BU.$$

Teorema 2.0.3 Sean $A, B \in M_n(\mathbb{C})$ tales que A es unitariamente semejante a B . Entonces,

$$\lambda(A) = \lambda(B), \quad \|A\| = \|B\|.$$

Además A es Hermitiana, normal, definida positiva o unitaria si y sólo si B lo es.

Proposición 2.0.4 Sea $A \in M_n(\mathbb{C})$, luego A es unitaria si y sólo si sus filas o columnas forman una base ortonormal de \mathbb{C}^n .

Teorema 2.0.5 Sea $A \in M_n(\mathbb{C})$ con autovalores $\lambda(A) = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)$, dispuestos en cualquier orden, entonces existen matrices $U \in M_n(\mathbb{C})$ unitaria y $T \in M_n(\mathbb{C})$ triangular superior tal que

$$A = UTU^*.$$

Demostración. Realizaremos inducción sobre la dimensión n . Si $n = 1$, el resultado es trivial. Si $n > 1$ tomemos $x_1 \in \text{Nuc}(A - \lambda_1 I)$ con $\|x_1\| = 1$. A partir del vector x_1 extendemos una *BON* de \mathbb{C}^n con vectores x_1, x_2, \dots, x_n y formamos la matriz U_1 , con estos vectores como columna sabemos que forman una matriz unitaria.

Por como construimos a U_1 , $U_1 e_1 = x_1$ y además U es unitaria entonces $U_1^* x_1 = e_1$, además

$$(U_1^* A U_1)_{i1} = U_1^* A U_1 e_1 = U_1^* A x_1 = U_1^* \lambda_1 x_1 = \lambda_1 e_1.$$

Así,

$$U_1^* A U_1 = \begin{pmatrix} \lambda_1 & * \\ 0 & A_2 \end{pmatrix},$$

donde $A \in M_{n-1}(\mathbb{C})$. Como $U_1^* A U_1$ y A son similares, sus polinomios característicos son iguales, entonces

$$P_A(x) = P_{U_1^* A U_1}(x) = (x - \lambda_1) P_{A_2}(x).$$

Por lo tanto, $\lambda(A_2) = (\lambda_2, \dots, \lambda_n) \in \mathbb{C}^{n-1}$. Luego por hipótesis inductiva, existen $V \in M_{n-1}(\mathbb{C})$ unitaria y $T_2 \in M_{n-1}(\mathbb{C})$ triangular superior tales que $A = V T_2 V^*$, o lo que es equivalente,

$$V^* A V = T_2.$$

Podemos extender a V a otra matriz $U_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & V \end{pmatrix} \in M_n(\mathbb{C})$ unitaria. Sea $U = U_1 U_2$, entonces

$$\begin{aligned}
U^* A U &= U_2^* (U_1^* A U_1) U_2 \\
&= U_2^* \begin{pmatrix} \lambda_1 & * \\ 0 & A_2 \end{pmatrix} U_2 \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & V^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & * \\ 0 & A_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & V \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \lambda_1 & * \\ 0 & V^* A_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & V \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \lambda_1 & * \\ 0 & V^* A_2 V \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \lambda_1 & * \\ 0 & T_2 \end{pmatrix} \\
&= T.
\end{aligned}$$

Donde T es una matriz diagonal superior. Por lo tanto $U^* A U = T$ o lo que es equivalente $A = U T U^*$. ■

Corolario 2.0.6 Sea $A \in M_n(\mathbb{C})$ con autovalores $\lambda(A) = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)$. Entonces,

$$\lambda(A^*) = \overline{\lambda(A)}.$$

Demostración. Sean $U \in M_n(\mathbb{C})$ unitaria y $T \in M_n(\mathbb{C})$ triangular superior tales que $A = U T U^*$. Luego,

$$\begin{aligned}
A^* &= (U T U^*)^* \\
&= U^* T^* U.
\end{aligned}$$

Así, $\lambda(A^*) = \lambda(T^*)$. Pero T^* es triangular inferior, por lo tanto,

$$\lambda(A^*) = \lambda(T^*) = d(T^*) = \overline{d(T)} = \overline{\lambda(A)}.$$

■

Teorema 2.0.7 Sea $A \in M_n(\mathbb{C})$ con autovalores $\lambda(A) = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)$, entonces las siguientes afirmaciones son equivalentes:

1. A es normal.

2. Para todo $x \in \mathbb{C}^n$ se cumple que $\|Ax\| = \|A^*x\|$.
3. A es unitariamente semejante a una cierta matriz diagonal $D \in M_n(\mathbb{C})$.
4. A es unitariamente semejante a la matriz diagonal formada por los autovalores de A .
5. Existe una BON $\mathcal{B} = \{v_1, \dots, v_n\}$ de \mathbb{C}^n tal que $Av_i = \lambda_i v_i$, $i = 1, \dots, n$.
6. $\|A\|^2 = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2$.

Demostración. $1 \implies 2$) Sea $x \in \mathbb{C}^n$, luego

$$\|Ax\|^2 = \langle Ax, Ax \rangle = \langle A^*Ax, x \rangle \underset{A \text{ es normal}}{=} \langle AA^*x, x \rangle = \langle A^*x, A^*x \rangle = \|A^*x\|^2.$$

$2 \implies 3$) Por el Teorema anterior, existen matrices $U \in M_n(\mathbb{C})$ unitaria y $T \in M_n(\mathbb{C})$ triangular superior tal que $T = U^*AU$. Luego, $\|Ty\| = \|T^*y\|$. Aplicando esto a la base canónica se puede aplicar inducción sobre la cantidad de filas de T para demostrar que es diagonal.

$3 \implies 4$) Si A es unitariamente semejante a una cierta matriz diagonal $D \in M_n(\mathbb{C})$, sus autovalores son los mismos, $\lambda(A) = \lambda(D)$, pero como D es diagonal, $\lambda(A) = d(D)$, salvo en orden. Podemos reordenar a la matriz D , conjugandola con una matriz de permutación (que son matrices unitarias), obteniendo así que A es unitariamente semejante a la matriz diagonal formada por $\lambda(A)$.

$4 \Leftrightarrow 5$) Llamamos a $D = \text{diag}(\lambda(A))$. Si existe $U \in M_n(\mathbb{C})$ unitaria tal que $D = U^*AU$, tomamos $\mathcal{B} = U$. Es conveniente notar $\mathcal{B} = \{C_1(U), \dots, C_n(U)\}$, donde $C_i(U)$ representa la columna i -ésima de U . Luego $AU = UD$, entonces

$$C_i(AU) = AC_i(U).$$

Además,

$$C_i(AU) = C_i(UD) = UC_i(D) = U \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ \lambda_i \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \lambda_i C_i(U).$$

Así, $AC_i(U) = \lambda_i C_i(U)$. Recíprocamente, si existe una BON $\mathcal{B} = \{v_1, \dots, v_n\}$ de \mathbb{C}^n tal que $Av_i = \lambda_i v_i$, $i = 1, \dots, n$, basta tomar $U = \{v_1, \dots, v_n\}$, que es una matriz unitaria y la demostración sigue igual que lo anterior.

4 \Rightarrow 6) Si A es unitariamente semejante a la matriz diagonal formada por los autovalores de A , sabemos que sus normas coinciden, así

$$\|A\|^2 = \|\text{diag}(\lambda(A))\|^2 = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2.$$

6 \Rightarrow 1) Por el Teorema anterior, existen matrices $U \in M_n(\mathbb{C})$ unitaria y $T \in M_n(\mathbb{C})$ triangular superior tal que $T = U^*AU$ y $d(T) = \lambda(A)$, entonces

$$\sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 = \|A\|^2 = \|T\|^2 = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 + \sum_{i < j} |t_{ij}|^2.$$

Por lo tanto, $t_{ij} = 0$ para $i < j$, es decir, T es diagonal. Como $T \cong A$, A es normal. ■

Definición 2.0.8 Sea $A \in M_n(\mathbb{C})$ una matriz normal. Decimos que

$$\mathcal{B} = \{v_1, \dots, v_n\} \text{ es una BON adaptada a } \lambda(A)$$

si verifica el ítem 4 del Teorema anterior, esto es, \mathcal{B} es una BON de \mathbb{C}^n y $Av_i = \lambda_i v_i$ para todo $i = 1, \dots, n$.

Proposición 2.0.9 Sea $A \in M_n(\mathbb{C})$, entonces A es Hermitiana si y solo si $\langle Ax, x \rangle \in \mathbb{R}$ para todo $x \in \mathbb{C}^n$, es decir es A es semidefinida positiva.

Demostración. Sea $x \in \mathbb{C}^n$, si A es Hermitiana, entonces $\langle Ax, x \rangle = \langle x, Ax \rangle = \overline{\langle Ax, x \rangle}$. Recíprocamente, si $\langle Ax, x \rangle \in \mathbb{R}$, para todo $x \in \mathbb{C}^n$, entonces

$$\langle Ax, x \rangle = \overline{\langle Ax, x \rangle} = \langle x, Ax \rangle = \langle A^*x, x \rangle, \quad \text{para todo } x \in \mathbb{C}^n.$$

Así $\langle (A - A^*)x, x \rangle = 0$, para todo $x \in \mathbb{C}^n$. Por lo tanto, $A = A^*$. ■

Teorema 2.0.10 Sea $A \in M_n(\mathbb{C})$. Luego, son equivalentes

1. A es Hermitiana.
2. A es normal y $\{\lambda \in \mathbb{C} : \text{Nuc}(A - \lambda I) \neq \{0\}\} \subseteq \mathbb{R}$.
3. $\lambda(A) \in \mathbb{R}$ y existe una base ortonormal \mathcal{B} adaptada a $\lambda(A)$.
4. $\lambda(A) \in \mathbb{R}$ y $A \cong \text{diag}(\lambda(A))$.
5. $\langle Ax, x \rangle \in \mathbb{R}$ para todo $x \in \mathbb{C}^n$.

Demostración. Recordemos que $\lambda(A) = \overline{\lambda(A^*)}$. El resto se deduce del teorema y la proposición anterior. ■

Ahora nos detendremos en la propiedad 3) del teorema anterior, que es una de las propiedades que satisfacen las matrices Hermitianas. Como podemos formar una base ortonormal $\mathcal{B} = \{v_1, \dots, v_n\}$ y con ella una matriz V , tal que $Av_i = \lambda_i v_i$ para todo $i = 1, \dots, n$, podemos diagonalizar a la matriz Hermitiana A con una matriz de autovectores y una matriz diagonal formada por $\lambda(A)$, ya que $A = V^*DV$, donde $D = \text{diag}(\lambda(A))$. Esta descomposición es conocida como **descomposición espectral**.

Teorema 2.0.11 Sea $A \in M_n(\mathbb{C})$, entonces

1. A es semidefinida positiva si y sólo si existe $B \in M_n(\mathbb{C})$ tal que $A = B^*B$.
2. En tal caso, existe una única $B \in M_n(\mathbb{C})$ semidefinida positiva tal que $A = B^*B = B^2$.

Definición 2.0.12 Dada $A \in M_n(\mathbb{C})$ semidefinida positiva, llamaremos $A^{1/2}$ a la única raíz cuadrada de A semidefinida positiva, que existe y es única por Teorema anterior.

Observación 2.0.13 Podemos describir a $A^{1/2}$ de la siguiente manera,

- Si $A = U \cdot \text{diag}(\lambda(A)) \cdot U^*$, con $U \in M_n(\mathbb{C})$ unitaria, se tiene que $A^{1/2} = U \cdot \text{diag}(\lambda(A)^{1/2}) \cdot U^*$.

Definición 2.0.14 Sea $A \in M_n(\mathbb{C})$,

1. Llamamos **módulo de A** , y lo notamos $|A|$, a la matriz

$$|A| = (A^*A)^{1/2}.$$

2. Llamamos **valores singulares** de A a los autovalores de $|A|$ ordenados de forma decreciente, notándolos $s_1(A) \geq \dots \geq s_n(A)$.
3. Llamamos $s(A) = (s_1(A), \dots, s_n(A))$ y $\Sigma(A)$ a la matriz diagonal

$$\Sigma(A) = \text{diag}(s(A)) = \begin{pmatrix} s_1(A) & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & s_n(A) \end{pmatrix}.$$

Teorema 2.0.15 (Descomposición en valores singulares) Sea $A \in M_n(\mathbb{C})$, entonces

1. Existe una matriz unitaria $U \in M_n(\mathbb{C})$ tal que

$$A = U|A|,$$

que es llamada descomposición polar de A , no necesariamente única.

2. Cualquier matriz unitaria $U \in M_n(\mathbb{C})$ que cumpla $A = U|A|$, verifica

$$A^* = U^*|A^*|, \quad AA^* = UA^*AU^*, \quad U|A|U^* = |A^*| \quad \text{y} \quad A = |A^*|U.$$

3. Existen matrices unitarias $V, W \in M_n(\mathbb{C})$ tales que $A = W\Sigma(A)V^*$, donde las columnas de V forman una BON de autovectores de $|A|$ (y de A^*A), y las columnas de W forman una BON de autovectores de $|A^*|$ (y de AA^*)

Demostración. Sólo mostraremos el ítem 3). Como $|A|$ es semidefinida positiva, A es Hermitiana, así A es unitariamente semejante a $\Sigma(A)$, es decir existe $V \in M_n(\mathbb{C})$ unitaria tal que $|A| = V\Sigma(A)V^*$. Tomando $W = UV$ que es una matriz unitaria, tenemos que

$$A = U|A| = UV\Sigma(A)V^* = W\Sigma(A)V^*.$$

Notemos que $\Sigma(A) = V^*|A|V$, por lo que cada columna de V es un autovector de $|A|$, y como V es unitaria sus columnas forman una BON. La prueba es análoga para W , ya que $\Sigma(A)^2 = W^*AA^*W$. ■

Observación 2.0.16 En el caso de que A sea Hermitiana $A^* = (W\Sigma(A)V^*)^* = V\Sigma(A)W^*$, pero $A = A^*$, es decir $W\Sigma(A)V^* = V\Sigma(A)W^*$, por lo tanto $W = V$. Este caso particular de la descomposición por valores singulares es conocida como **Teorema espectral** que enunciaremos a continuación.

Teorema 2.0.17 (Teorema Espectral) Sea $A \in M_n(\mathbb{C})$, entonces existe una base ortonormal de autovectores de A .

Proposición 2.0.18 Dada una matriz $A \in M_n(\mathbb{C})$ Hermitiana, entonces

$$\max_{a: \|a\|=1} a^*Aa = \lambda_1.$$

y el máximo se obtiene en $a = v_1$. Donde λ_1 es el mayor autovalor asociado a A y v_1 su autovalor correspondiente.

Demostración. Como A es Hermitiana podemos tomar su descomposición espectral $A = VDV^*$. Luego, si tomamos $b = V^*a$ entonces

$$a^*Aa = a^*VDV^*a = b^*Db = \sum_{i=1}^n \lambda_i |b_i|^2.$$

Por otro lado,

$$||b||^2 = \sum_{i=1}^n |b_i|^2 = b^*b = a^*VV^*a = a^*a = 1.$$

Luego, como $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_n$ y $||b|| = 1$, el máximo es λ_1 y se obtiene tomando $b = (1 \ 0 \ 0 \ \dots)^T$. Así,

$$\begin{aligned} V^*a &= b \\ VV^*a &= Vb \\ a &= v_1. \end{aligned}$$

Así, el máximo se obtiene cuando $a = v_1$. ■

Capítulo 3

Análisis de componentes principales

Uno de los métodos más utilizados a la hora de reducir la dimensionalidad de un conjunto de datos, es el análisis de componentes principales (PCA). La técnica se basa en la idea de que a partir de un conjunto de datos con ciertas características, se busca extraer solo las características más importantes. Por ejemplo, si estamos evaluando el valor de algunas casas y entre sus características tenemos la cantidad de habitaciones, cantidad de baños, escuelas cercanas, metros cuadrados, material del techo y material de las aberturas, es natural pensar que el material del techo y de las aberturas es menos relevante que la cantidad de metros cuadrados o la cantidad de habitaciones, a la hora de evaluar el valor de una casa. El análisis de componentes principales nos permitirá tomar las características importantes y menospreciar las no importantes, dándonos nuevas características llamadas componentes.

El análisis de componentes principales que nos permite reducir la dimensión de nuestros datos, es una técnica lineal que ayuda a preservar la estructura global de los datos en bajas dimensiones. Es lineal porque solo se ocupa de las relaciones lineales entre las variables. Para ello, PCA se centrará en maximizar la matriz de covarianza de los datos. Veremos los detalles más adelante, pero primero veamos el siguiente ejemplo clásico.

Ejemplo 3.0.1 *Se tienen 150 muestras de la planta iris de tres especies distintas: setosa, versicolor y virginica. Se mide la longitud y el ancho del sépalos y la longitud y el ancho del pétalo, además, cada especie cuenta con 50 muestras. Este conjunto de datos es conocido como el conjunto de datos Iris. Como contamos con 150 plantas y 4 características estamos trabajando con dimensión 600. Apliquemos PCA tomando los dos primeros componentes principales, como puede observarse en la siguiente*

figura:

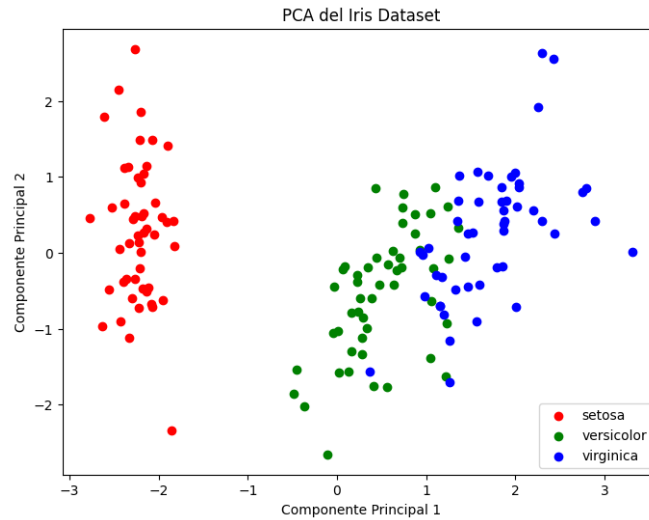


Figure 3.1: Primeros dos componentes principales del dataset Iris.

Notemos que logramos reducir la dimensión de 600 a 300 datos.

3.1. Formalizando el análisis de componentes principales

Para estudiar las relaciones que se presentan en p variables correlacionadas se puede transformar el conjunto original de variables en otro conjunto de nuevas variables incorrelacionadas entre sí, llamado conjunto de **componentes principales**.

Estas nuevas variables son combinaciones lineales de las anteriores y se van construyendo según el orden de importancia en cuanto a la variabilidad total que contenga la muestra. Se buscan $m < p$ variables que sean combinación lineal de las originales y que estén incorrelacionadas, recogiendo la mayor parte de información de los datos.

Como podemos observar, la relación lineal entre las variables es de suma importancia. En el caso de que las variables no estén correlacionadas no tiene sentido realizar este tipo de análisis.

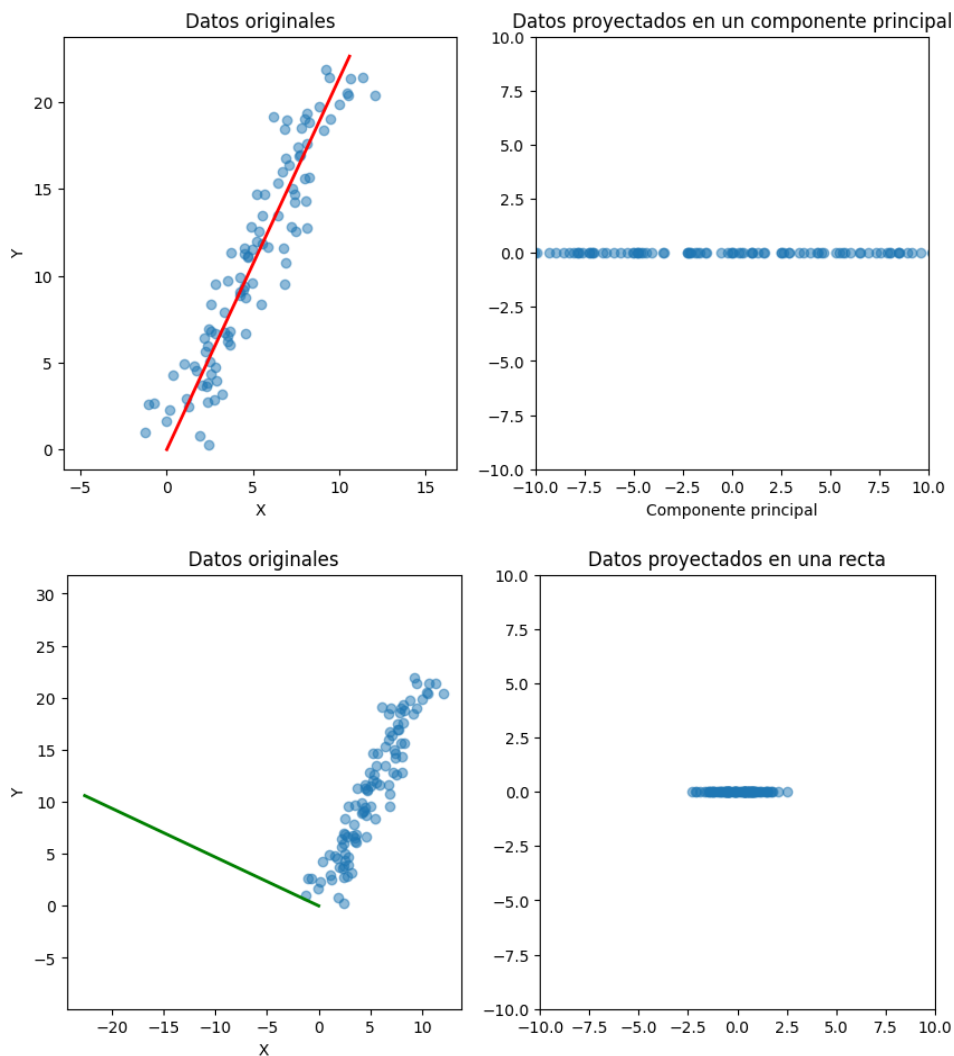
Se considerarán una serie de variables (x_1, \dots, x_p) sobre un grupo de objetos o individuos y se trata de calcular, a partir de ellas, un nuevo conjunto de variables y_1, \dots, y_p incorrelacionadas entre sí, cuyas varianzas vayan decreciendo progresivamente.

Cada y_j , con $j = 1, \dots, p$, es una combinación lineal de las x_1, \dots, x_p originales, es decir

$$y_j = a_{j1}x_1 + a_{j2}x_2 + \dots + a_{jp}x_p \\ = \mathbf{a}'_j \mathbf{x}$$

donde $\mathbf{a}'_j = (a_{j1}, \dots, a_{jp})$ y $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_p \end{pmatrix}$.

Buscamos maximizar la varianza, ya que buscamos explicar la mayor cantidad de variación de los datos.



Si lo que buscamos es maximizar la varianza podríamos simplemente aumentar los coeficientes a_{ij} . Para evitar esto y mantener la ortogonalidad de la transformación, obligamos a que $\|\mathbf{a}'_j\| = 1$, es decir

$$\mathbf{a}'_j \mathbf{a}_j = \sum_{k=1}^p a_{kj}^2 = 1.$$

El primer componente se calcula eligiendo \mathbf{a}_1 de modo que y_1 tenga la mayor varianza posible, sujeto a la restricción $\mathbf{a}'_1 \mathbf{a}_1 = 1$. El segundo componente principal se calcula obteniendo \mathbf{a}_2 de modo que y_2 este incorrelacionada con y_1 manteniendo la condición del módulo.

De la misma manera se obtienen las variables y_1, \dots, y_p , de manera que estas vayan teniendo cada vez menor varianza. Veamos como calcular estos componentes.

Queremos elegir \mathbf{a}_1 de forma tal que maximice la varianza de y_1 , sujeto a la restricción $\mathbf{a}'_1 \mathbf{a}_1 = 1$.

$$Var(y_1) = Var(\mathbf{a}'_1 \mathbf{x}) = \mathbf{a}'_1 \Sigma \mathbf{a}_1,$$

donde Σ es la matriz de covarianzas de \mathbf{x} . Resolveremos este problema de maximización mediante el método usual de los multiplicadores de Lagrange. Así

$$\mathcal{L} = \mathbf{a}'_1 \Sigma \mathbf{a}_1 - \lambda(\mathbf{a}'_1 \mathbf{a}_1 - 1),$$

derivamos e igualamos a 0

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{a}_1} = 2\Sigma \mathbf{a}_1 - 2\lambda I \mathbf{a}_1 = 0.$$

Luego,

$$(\Sigma - \lambda I) \mathbf{a}_1 = 0.$$

Así obtenemos un sistema de lineal de ecuaciones que para que tenga solución distinta de 0 la matriz debe tener determinante igual a 0, es decir

$$|\Sigma - \lambda I| = 0,$$

así, λ es un autovalor de Σ . La matriz de covarianzas Σ es de orden p y si además es definida positiva, tendrá p autovalores distintos, $\lambda_1, \dots, \lambda_p$ que podemos ordenar de forma tal que $\lambda_1 > \dots > \lambda_p$. Desarrollando la expresión anterior se tiene que

$$\begin{aligned} (\Sigma - \lambda I) \mathbf{a}_1 &= 0 \\ \Sigma \mathbf{a}_1 - \lambda I \mathbf{a}_1 &= 0 \\ \Sigma \mathbf{a}_1 &= \lambda I \mathbf{a}_1, \end{aligned}$$

entonces,

$$Var(y_1) = Var(\mathbf{a}'_1 \mathbf{x}) = \mathbf{a}'_1 \Sigma \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}'_1 \lambda I \mathbf{a}_1 = \lambda \mathbf{a}'_1 \mathbf{a}_1 = \lambda.$$

Por lo tanto, para maximizar la varianza de y_1 se tiene que tomar el mayor autovector λ_1 y el autovector asociado \mathbf{a}_1 . El vector \mathbf{a}_1 nos da la combinación de las variables originales que tiene mayor varianza.

El segundo componente principal $y_2 = \mathbf{a}'_2 \mathbf{x}$ se obtiene de forma similar, como buscamos que no esté correlacionado con y_1 , entonces $Cov(y_2, y_1) = 0$. Por lo tanto,

$$Cov(y_2, y_1) = Cov(\mathbf{a}'_2 \mathbf{x}, \mathbf{a}'_1 \mathbf{x}) = \mathbf{a}'_2 E((\mathbf{x} - \mu)(\mathbf{x} - \mu)') \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}'_2 \Sigma \mathbf{a}_1.$$

Como $\Sigma \mathbf{a}_1 = \lambda \mathbf{a}_1$, esto es equivalente a

$$\mathbf{a}'_2 \Sigma \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}'_2 \lambda \mathbf{a}_1 = \lambda \mathbf{a}'_2 \mathbf{a}_1 = 0.$$

Por lo tanto, $\mathbf{a}'_2 \mathbf{a}_1 = 0$, es decir, los vectores son ortogonales.

Así debemos maximizar la varianza de y_2 , es decir maximizar $\mathbf{a}'_2 \Sigma \mathbf{a}_2$ sujetos a las siguientes condiciones:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}'_2 \mathbf{a}_2 &= 1, \\ \mathbf{a}'_2 \mathbf{a}_1 &= 0. \end{aligned}$$

Tomamos el Lagrangiano

$$\mathcal{L} = \mathbf{a}'_2 \Sigma \mathbf{a}_2 - \lambda(\mathbf{a}'_2 \mathbf{a}_2 - 1) - \delta \mathbf{a}'_2 \mathbf{a}_1.$$

Nuevamente derivamos e igualamos a 0,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{a}_2} = 2\Sigma \mathbf{a}_2 - 2\lambda \mathbf{a}_2 - \delta \mathbf{a}_1 = 0$$

Multiplicando por \mathbf{a}'_1 se tiene que

$$2\mathbf{a}'_1 \Sigma \mathbf{a}_2 - 2\lambda \underbrace{\mathbf{a}'_1 \mathbf{a}_2}_{=0} - \delta \underbrace{\mathbf{a}'_1 \mathbf{a}_1}_{=1} = 2\mathbf{a}'_1 \Sigma \mathbf{a}_2 - \delta = 0. -$$

Luego,

$$\delta = 2\mathbf{a}'_1 \Sigma \mathbf{a}_2 = 2\mathbf{a}'_2 \Sigma \mathbf{a}_1 = 0,$$

ya que $Cov(y_2, y_1) = \mathbf{a}'_2 \Sigma \mathbf{a}_1 = 0$. Así, podemos reescribir a \mathcal{L} como

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{a}_2} = 2\Sigma \mathbf{a}_2 - 2\lambda \mathbf{a}_2 = 0,$$

es decir,

$$(\Sigma - \lambda I)\mathbf{a}_2 = 0.$$

Usando argumentos análogos a los anteriores, elegimos a λ como el segundo autovalor de la matriz Σ con su autovector asociado \mathbf{a}_2 .

Podemos ampliar este razonamiento y decir que al j -ésimo componente le corresponde el j -ésimo autovalor.

Entonces todos los componentes \mathbf{y} se pueden expresar como el producto de la matriz formada por los autovectores, multiplicada por el vector \mathbf{x} que contiene las variables originales x_1, \dots, x_p ,

$$\mathbf{y} = A\mathbf{x},$$

donde

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_p \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1p} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{p1} & a_{p2} & \dots & a_{pp} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_p \end{pmatrix}.$$

Como

$$Var(y_1) = \lambda_1$$

$$\vdots$$

$$Var(y_p) = \lambda_p$$

y recordando que y_1, \dots, y_p no están correlacionadas, la matriz de covarianzas de \mathbf{y} será:

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_p \end{pmatrix}.$$

Además,

$$\Lambda = Var(Y) = A'Var(X)A = A'\Sigma A.$$

Así,

$$\Sigma = A\Lambda A',$$

ya que A es una matriz ortogonal.

Si sumamos todos los autovalores, tenemos la varianza total de los componentes

$$\sum_{i=1}^p Var(y_i) = \sum_{i=1}^p \lambda_i = tr(\Lambda).$$

Utilizando las propiedades de la traza,

$$tr(\Lambda) = tr(A'\Sigma A) = tr(\Sigma A' A) = tr(\Sigma),$$

pues $A' A = I$ al ser A ortogonal, con lo cual

$$tr(\Lambda) = tr(\Sigma) = \sum_{i=1}^p Var(x_i).$$

Es decir, la suma de las varianzas de las variables originales y la suma de las varianzas de las componentes son iguales. Esto nos permite hablar del porcentaje total que recoge un componente principal

$$\frac{\lambda_i}{\sum_{i=1}^p \lambda_i} = \frac{\lambda_i}{\sum_{i=1}^p Var(x_i)}.$$

Esta forma de enunciar el problema de componentes principales es una de las más extendidas y también sencilla de comprender pero posteriormente en este trabajo nos sera útil enunciar el problema de la siguiente manera.

Decimos que en PCA resolvemos el siguiente problema de optimización

$$\arg \max\{\|QX\|_{HS}^2 : \|Q\|_{HS}^2 = k, Q = Q^* = Q^2\}$$

donde Q es una proyección autoadjunta.

Veamos que con este problema se llega al mismo resultado que lo visto anteriormente. Recordemos que en espacios finitos, la norma de Hilbert-Schmidt es equivalente a tomar la traza. Así,

$$\|QX\|_{HS}^2 = tr((QX)^* QX) = tr(X^* Q^* QX) = tr(X^* Q QX) = tr(X^* QX) = tr(QX X^*).$$

Como la matriz de covarianza $\Sigma = \frac{1}{n} X X^T$ tiene descomposición espectral, podemos reescribirla como

$$\frac{1}{n} X X^T = \frac{1}{n} V \Lambda V^*,$$

donde V es la matriz ortogonal que forma una base de autovectores y Λ es una matriz diagonal formada por los autovalores de la matriz de covarianza. Por otro lado, $Q = V_k V_k^*$, ya que Q es una matriz de proyección y V forma una base. Como Q es de dimensión k , tomamos solo los primeros k autovectores. Luego,

$$\begin{aligned}\|QX\|_{HS}^2 &= \text{tr}(QX X^*) = \text{tr}(V_k V_k^* X X^*) = \text{tr}(X^* V_k V_k^* X) = \text{tr}(X X^* V_k V_k^*) = \text{tr}(n \Sigma V_k V_k^*) \\ &= \text{tr}\left(n \frac{1}{n} V \Lambda V^* V_k V_k^*\right) = \text{tr}(V \Lambda V^* V_k V_k^*) = \text{tr}(\Lambda V^* V_k V_k^* V) = \text{tr}(\Lambda_k).\end{aligned}$$

Así obtenemos los k primeros autovalores de la matriz de covarianza.

3.2. Ejemplos

1. En este primer ejemplo veremos un dataset que contiene estadísticas en arrestos por cada 100000 habitantes por asesinato (Murder), asalto (Assault) y asalto agravado (AggAssault). Además del porcentaje de ciudadanos que viven en áreas urbanas (UrbanPop).

	Murder	Assault	UrbanPop	AggAssault
Alabama	13.2	236	58	21.2
Alaska	10.0	263	48	44.5
Arizona	8.1	294	80	31.0
Arkansas	8.8	190	50	19.5
California	9.0	276	91	40.6
Colorado	7.9	204	78	38.7

Figure 3.3: Tabla de los datos

Veamos la media y varianza de los datos.

Murder	Assault	UrbanPop	AggAssault
7.788	170.760	65.540	21.232

Figure 3.4: Media de los datos.

Murder	Assault	UrbanPop	AggAssault
18.97047	6945.16571	209.51878	87.72916

Figure 3.5: Varianza de los datos.

Como podemos observar, tanto la varianza como la media son muy distintas entre las variables. Es claro que debemos estandarizar el dataset. En la siguiente tabla podemos observar qué combinación lineal da origen a cada componente principal.

	PC1	PC2	PC3	PC4
Murder	-0.5358995	0.4181809	-0.3412327	0.64922780
Assault	-0.5831836	0.1879856	-0.2681484	-0.74340748
UrbanPop	-0.2781909	-0.8728062	-0.3780158	0.13387773
AggAssault	-0.5434321	-0.1673186	0.8177779	0.08902432

Figure 3.6: Combinación lineal de cada componente principal.

Por ejemplo,

$$PC1 = 0,535899Murder + 0,583184Assault + 0,278191UrbanPop + 0,543432AggAssault.$$

Observamos que los pesos asignados Assault, Murder y AggAssault son muy similares y más grandes que el asignado a UrbanPop, es decir, este primer componente principal nos da información principalmente de estos tres delitos. En cambio, para la segunda componente principal, la variable UrbanPop es la que tiene un mayor peso asignado, así nos da mayor información sobre como se distribuye la población en Estado. En este ejemplo la interpretación es bastante clara, veremos en otro ejemplo que éste no es siempre el caso.

Además, podemos ver el valor de los componentes principales para cada variable:

	PC1	PC2	PC3	PC4
Alabama	-0.9756604	1.1220012	-0.43980366	0.154696581
Alaska	-1.9305379	1.0624269	2.01950027	-0.434175454
Arizona	-1.7454429	-0.7384595	0.05423025	-0.826264240
Arkansas	0.1399989	1.1085423	0.11342217	-0.180973554
California	-2.4986128	-1.5274267	0.59254100	-0.338559240
Colorado	-1.4993407	-0.9776297	1.08400162	0.001450164

Figure 3.7: Valor de cada componente principal para cada variable.

Por otro lado, podemos observar cuánta de la varianza total es explicada por

cada componente principal

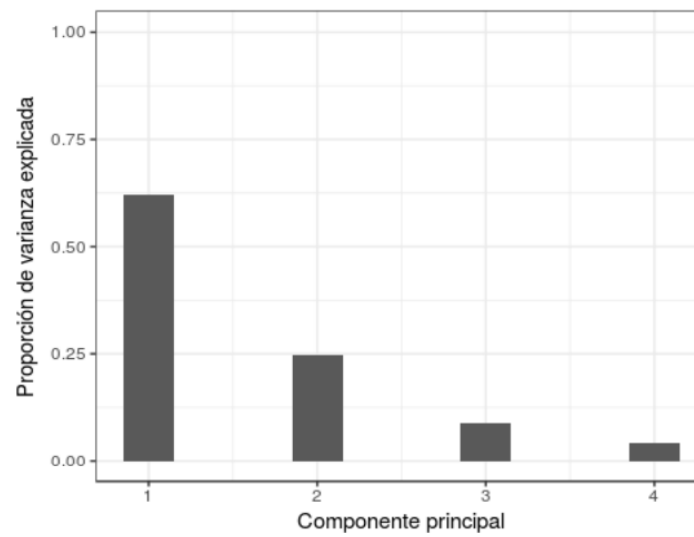


Figure 3.8: Varianza de cada componente.

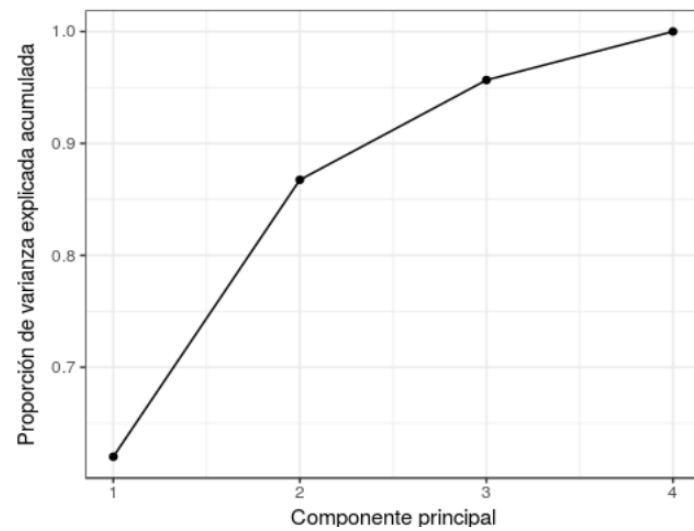


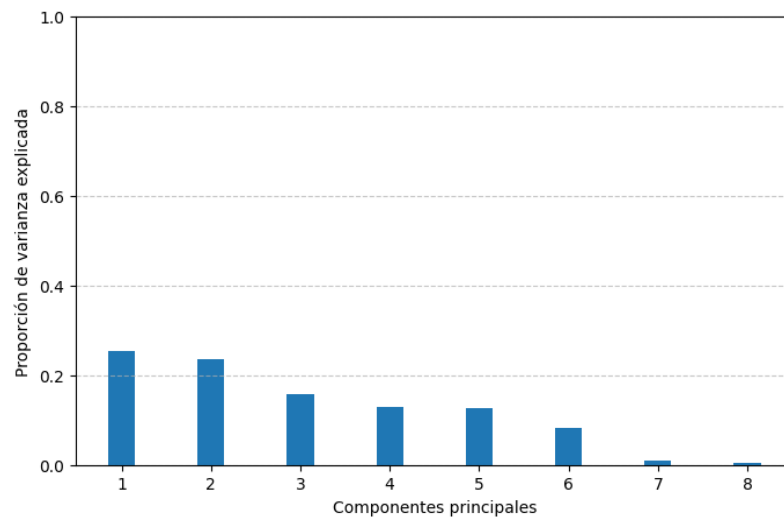
Figure 3.9: Varianza acumulada de cada componente.

En este ejemplo con solo dos componentes principales explicamos el 86,75 % de la varianza observada.

2. Veamos ahora el dataset llamado `fetch_california_housing`, en él se encuentran las siguientes variables:

- MedInc: Mediana del ingreso de los hogares de la cuadra.
- HouseAge: Mediana de la edad de las casas de la cuadra.
- AveRooms: Promedio de habitaciones de las viviendas de la cuadra.
- AveBedrms: Promedio de dormitorios de las viviendas de la cuadra.
- Population: Población total de la cuadra.
- AveOccup: Promedio de habitantes viviendo en cada casa por cuadra.
- Latitude: Latitud geográfica de la cuadra.
- Longitude: Longitud geográfica de la cuadra.

Podemos intentar hacer un análisis similar al del ejemplo anterior:



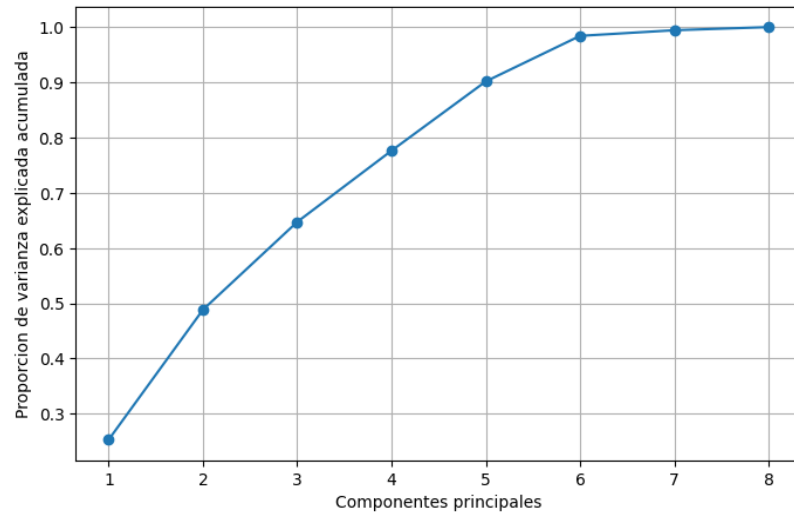


Figure 3.10: Varianza y varianza acumulada de cada componente.

En este caso usaremos los primeros 5 componentes principales, y si vemos las combinaciones lineales, observamos que no es tan clara la interpretación de los pesos.

	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5	PC6	PC7	PC8
0	1.882659	-0.503350	-0.314127	-2.555031	0.128037	0.485165	0.091224	-0.137808
1	1.371086	-0.121403	1.905212	-1.872938	-0.267424	0.605108	0.263080	-0.182216
2	2.086817	-0.501124	-0.937222	-2.100082	0.370023	1.158648	-0.295152	0.169796
3	1.575763	-1.239465	-1.025933	-1.286690	0.318948	0.977878	0.091037	-0.080533
4	1.591167	-1.345231	-1.249141	-0.450767	0.293605	0.865643	-0.159972	0.227923

Figure 3.11: Valor de cada componente principal para cada variable.

Además, si realizamos un gráfico en solo dos componentes principales, la interpretación también es un poco confusa, ya que estamos graficando solo en

dos componentes principales.

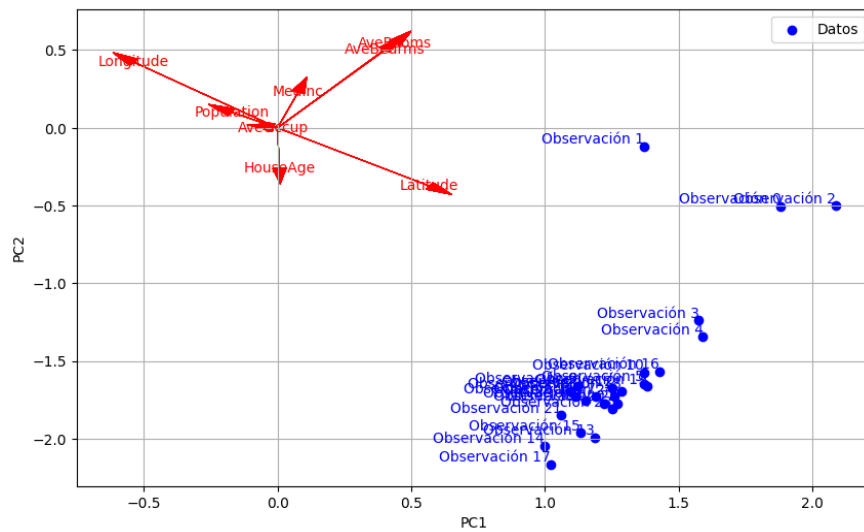


Figure 3.12: Los datos proyectados sobre las primeras dos componentes principales

Con estos ejemplos buscamos ilustrar que no siempre la interpretación del método de componentes principales es clara, mucho más si estamos trabajando con dimensionalidad alta (observemos que en estos ejemplos solo trabajamos con dimensión 8 y ya generó problemas). De todos modos, nos preocuparemos de la reducción de dimensión que no necesita interpretación.

Capítulo 4

Kernel PCA

Durante el capítulo anterior hicimos énfasis en la suposición de relación lineal entre los datos. Recordemos que trabajamos con la covarianza que distingue relaciones lineales entre los datos. Nos preguntamos entonces que sucede si aplicamos Análisis de Componentes Principales a datos no lineales. Veamos primero el ejemplo del rollo suizo.

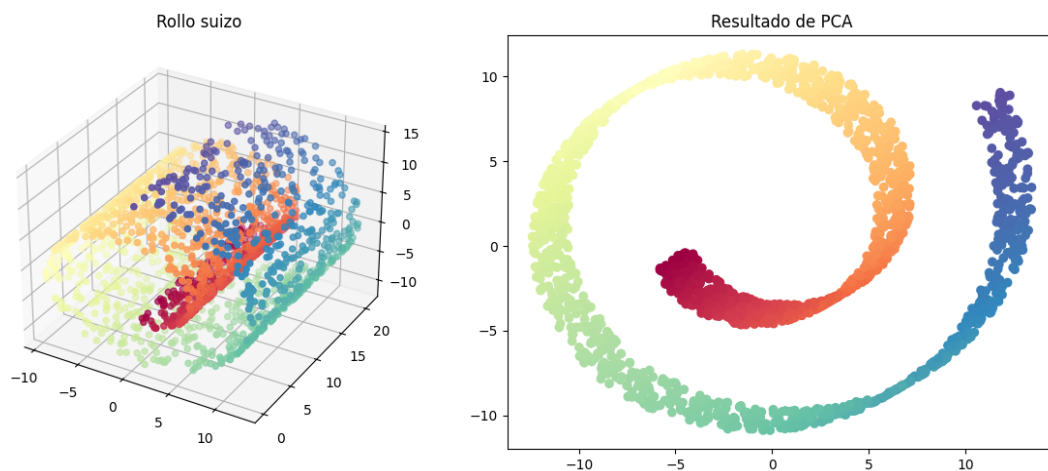


Figure 4.1: Rollo suizo original y PCA aplicado a este objeto.

Observamos que con PCA, simplemente proyectamos los datos sobre un plano, con lo cual no logramos capturar la estructura de los datos. Si nos paramos en un punto rojo del rollo suizo y queremos caminar hacia un punto verde deberíamos recorrer casi medio rollo. En cambio con PCA nos olvidamos de esta estructura interna y de los datos, los puntos rojos están cerca de los punto verdes, en la distancia euclídea. Nos gustaría lograr obtener un método para poder "desenrollar" el rollo.

En la siguiente imagen vemos una idea similar con una hélice.

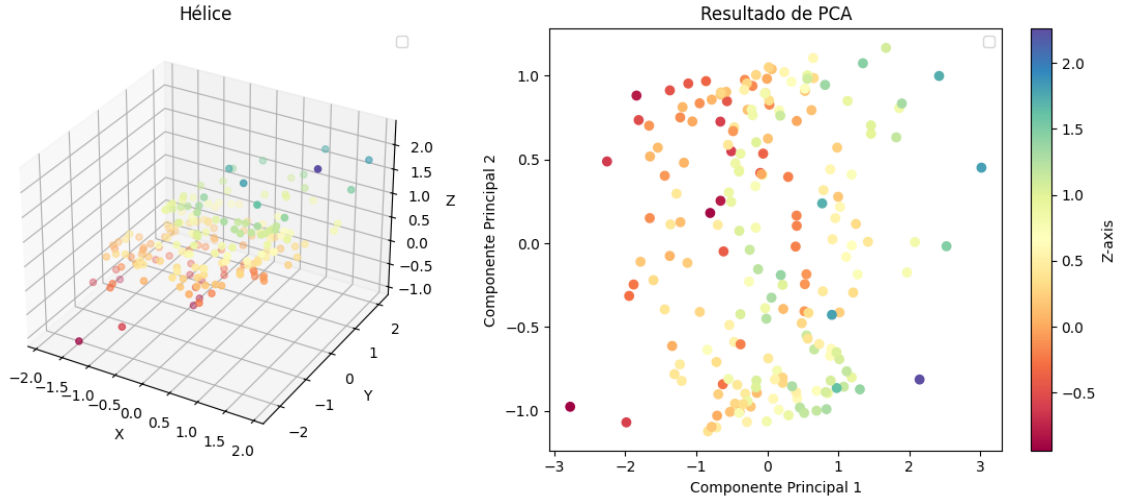


Figure 4.1: Rollo suizo original y PCA aplicado a este objeto

Kernel PCA, o KPCA, se encarga de intentar solventar estos inconvenientes, pero primero necesitamos conocer sobre los Espacios de Hilbert Reproductores de Núcleo, que desarrollaremos en este capítulo. También introduciremos la notación ket-bra para tener mayor facilidad en las operaciones.

4.1. Notación ket-bra

A continuación introducimos la notación de ket-bra que utilizaremos para el método de KPCA. Esta notación es muy extendida en el campo de la física y en esta ocasión nos permitirá manipular operaciones de forma más sencilla.

La idea original de esta notación puede pensarse de la siguiente manera, consideremos $\psi(x)$ una función de onda que describe una partícula cuanto mecánica.

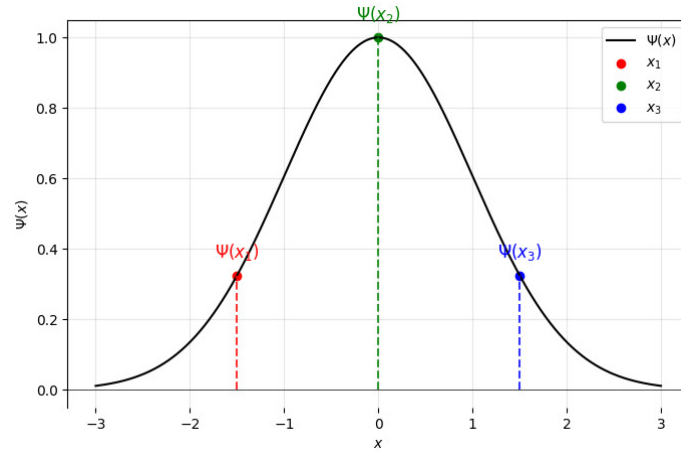


Figure 4.3: Función de onda.

Podemos representar los valores de la función como un vector columna

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \psi(x_2) \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

Lo notamos como $|\psi\rangle$ y es llamado **ket**. Luego $|\psi\rangle^*$ es llamado **bra** y se nota por $\langle\psi|$, es decir,

$$\langle\psi| = (\psi(x_1)^* \quad \psi(x_2)^* \quad \dots \quad \dots).$$

Utilizamos la idea de la función de onda solo con el objetivo de introducir la notación. Podemos tomar vectores de todo tipo y conservar la notación de ket-bra. Observemos que los ket son solo un nuevo símbolo para notar un vector.

Por ejemplo, trabajando en \mathbb{C}^n podemos utilizar esta notación para describir el producto interno. Sean $x, y \in \mathbb{C}^n$

$$\langle x||y\rangle = \langle x|y\rangle = (x_1^* \quad x_2^* \quad \dots \quad x_n^*) \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^n x_i^* y_i.$$

Donde notamos $\langle x||y\rangle$ simplemente por $\langle x|y\rangle$.

También podemos formar un producto externo:

$$|y\rangle\langle x| = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^* & x_2^* & \cdots & x_n^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 x_1^* & y_1 x_2^* & \cdots & y_1 x_n^* \\ y_2 x_1^* & y_2 x_2^* & \cdots & y_2 x_n^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ y_n x_1^* & y_n x_2^* & \cdots & y_n x_n^* \end{pmatrix}.$$

Observemos que $|y\rangle\langle x|$ es un operador de \mathbb{C}^n en \mathbb{C}^n . Además, si tomamos $x \in \mathbb{C}^n$ tal que $\| |x\rangle \| = 1$ entonces

$$|x\rangle\langle x| = \begin{pmatrix} x_1 x_1^* & x_1 x_2^* & \cdots & x_1 x_n^* \\ x_2 x_1^* & x_2 x_2^* & \cdots & x_2 x_n^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_n x_1^* & x_n x_2^* & \cdots & x_n x_n^* \end{pmatrix}.$$

Luego, si le aplicamos este operador a un ket $|y\rangle$, resulta,

$$\begin{aligned} |x\rangle\langle x|y\rangle &= |x\rangle\langle x||y\rangle = \begin{pmatrix} x_1 x_1^* & x_1 x_2^* & \cdots & x_1 x_n^* \\ x_2 x_1^* & x_2 x_2^* & \cdots & x_2 x_n^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_n x_1^* & x_n x_2^* & \cdots & x_n x_n^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} x_1 x_1^* y_1 + x_1 x_2^* y_2 + \cdots + x_1 x_n^* y_n \\ x_2 x_1^* y_1 + x_2 x_2^* y_2 + \cdots + x_2 x_n^* y_n \\ \vdots \\ x_n x_1^* y_1 + x_n x_2^* y_2 + \cdots + x_n x_n^* y_n \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

lo cual no es más que la proyección de y en x .

4.2. Espacios de Hilbert Reproductores de Núcleo

En esta sección desarrollaremos la base teórica de espacios de Hilbert reproductores de núcleo, que luego nos permitirá realizar el método de KPCA. La idea detrás de esta teoría es que a partir de una función definida positiva, que cumplirá determinadas características, poder formar un espacio de Hilbert, donde cada función se puede representar como combinación lineal de la función inicial en el límite.

Comenzamos con la definición de funcional de Dirac y espacio de Hilbert reproductor de núcleo.

Definición 4.2.1 Sea H un espacio de Hilbert de funciones $f : X \rightarrow \mathbb{K}$, donde X es un conjunto no vacío. Para un $x \in X$ fijo, definimos el **funcional de Dirac** en x como $\delta_x : H \rightarrow \mathbb{K}$, $\delta_x(f) = f(x)$.

Notemos que este funcional es lineal, ya que dados $f, g \in H$ y $\alpha, \beta \in \mathbb{K}$

$$\delta_x(\alpha f + \beta g) = (\alpha f + \beta g)(x) = \alpha f(x) + \beta g(x) = \alpha \delta_x(f) + \beta \delta_x(g).$$

Definición 4.2.2 Un espacio de Hilbert H de funciones, $f : X \rightarrow \mathbb{K}$, donde X es un conjunto no vacío, se dice **espacio de Hilbert reproductor de núcleo**, lo abreviaremos con *RKHS*, si δ_x es continua para todo $x \in X$.

En estos espacios, la convergencia en norma nos asegura la convergencia puntual, como vemos en el siguiente resultado.

Proposición 4.2.3 Sea H un *RKHS* y $(f_n) \subset H$ tal que $f_n \rightarrow f$ en H entonces $f_n(x) \rightarrow f(x)$ para todo $x \in X$.

Demostración. Supongamos que $f_n \rightarrow f$ en H . Luego, para todo $x \in X$ se cumple que

$$|f_n(x) - f(x)| = |\delta_x(f_n) - \delta_x(f)| \leq \|\delta_x\|_{op} \|f_n - f\|_H.$$

Así, $f_n(x) \rightarrow f(x)$ para todo $x \in X$. ■

4.3. Núcleos Reproductores

A continuación definimos funciones definidas en espacios de Hilbert con ciertas características especiales, que reciben el nombre de núcleos reproductores, y establecemos una fuerte relación entre estas funciones y los *RKHS*.

Definición 4.3.1 Sea H un espacio de Hilbert de funciones $f : X \rightarrow \mathbb{K}$, donde X es un conjunto no vacío. Una función $k : X \times X \rightarrow \mathbb{K}$ se dice **núcleo reproductor** de H si cumple

1. $\forall x \in X, k(\cdot, x) \in H$.
2. $\forall x \in X, \forall f \in H, \langle f, k(\cdot, x) \rangle = f(x)$ (propiedad reproductora).

En particular, para todo $x, y \in X$,

$$k(x, y) = \langle k(\cdot, x), k(\cdot, y) \rangle_H.$$

Proposición 4.3.2 Los núcleos reproductores son únicos.

Demostración. Supongamos que H tiene dos núcleos reproductores k_1 y k_2 . Entonces,

$$\langle f, k_1(\cdot, x) - k_2(\cdot, x) \rangle = f(x) - f(x) = 0 \quad \forall f \in H, \forall x \in X.$$

En particular, si tomamos $f = k_1(\cdot, x) - k_2(\cdot, x)$,

$$\langle k_1(\cdot, x) - k_2(\cdot, x), k_1(\cdot, x) - k_2(\cdot, x) \rangle = \|k_1(\cdot, x) - k_2(\cdot, x)\|^2 = 0 \quad \forall x \in X.$$

Por lo tanto, $k_1 = k_2$. ■

Teorema 4.3.3 H es un RKHS si y sólo si H tiene un núcleo reproductor.

Demostración. Supongamos que H es un RKHS. Buscamos construir un núcleo reproductor y para ello nos ayudaremos del Teorema de representación de Riesz. Como H es un RKHS, $\delta_x : H \rightarrow \mathbb{K}$ es un funcional lineal continuo para todo $x \in X$. Luego, el Teorema de representación de Riesz nos asegura que existe un único elemento $f_{\delta_x} \in H$ tal que

$$\delta_x(f) = \langle f, f_{\delta_x} \rangle, \quad \forall f \in H.$$

Definimos $k(x', x) = f_{\delta_x}(x')$, para todo $x', x \in X$. Luego $k(\cdot, x) = f_{\delta_x} \in H$ y cumple la propiedad reproductora, ya que

$$\langle f, k(\cdot, x) \rangle = \langle f, f_{\delta_x} \rangle = \delta_x(f) = f(x).$$

Así probamos que k es un núcleo reproductor.

Supongamos ahora que H tiene un núcleo reproductor. Buscamos que la función de Dirac δ_x sea continua, o lo que es equivalente, que esté acotada. Luego,

$$\begin{aligned} |\delta_x| &= |f(x)| = |\langle f, k(\cdot, x) \rangle_H| \\ &\leq \|k(\cdot, x)\|_H \|f(x)\|_H \\ &= \langle k(\cdot, x), k(\cdot, x) \rangle_H^{1/2} \|f\|_H \\ &= k(x, x)^{1/2} \|f\|_H. \end{aligned}$$

Donde en la primer línea utilizamos el hecho de que k cumple con la propiedad reproductora y en la segunda línea aplicamos la desigualdad de Cauchy-Schwarz. Por lo tanto, δ_x está acotada. ■

En la demostración anterior utilizamos el Teorema de representación de Riesz, este nos asegura la unicidad del elemento f_{δ_x} , lo cual se corresponde con la unicidad de los núcleos reproductores.

Definición 4.3.4 Una función $h : X \times X \rightarrow \mathbb{C}$ se dice **definida positiva** si es tal que

$$\sum_{i,j=1}^N \bar{c}_i c_j h(x_i, x_j) \geq 0$$

para todo $(x_i)_{i=1}^N \subset X$, $(c_i)_{i=1}^N \subset \mathbb{C}$ y $N \in \mathbb{N}$.

Proposición 4.3.5 Sea H un espacio de Hilbert, X un conjunto no vacío y $\phi : X \rightarrow H$ una función. Sea $h : X \times X \rightarrow \mathbb{C}$ tal que $h(x, y) := \langle \phi(x), \phi(y) \rangle_H$. Entonces h es una función definida positiva.

Demostración. Sean ϕ y h como en el enunciado. Sean $N \in \mathbb{N}$, $(c_i)_{i=1}^N \subset \mathbb{C}$, $(x_i)_{i=1}^N \subset X$ luego

$$\begin{aligned} \sum_{i,j=1}^N \bar{c}_i c_j h(x_i, x_j) &= \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \bar{c}_i c_j \langle \phi(x_i), \phi(x_j) \rangle_H = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle c_i \phi(x_i), \bar{c}_j \phi(x_j) \rangle_H \\ &= \left\langle \sum_{i=1}^N c_i \phi(x_i), \sum_{j=1}^N \bar{c}_j \phi(x_j) \right\rangle_H = \left\| \sum_{i=1}^N c_i \phi(x_i) \right\|_H^2 \geq 0. \end{aligned}$$

■

Corolario 4.3.6 Los núcleos reproductores son definidos positivos.

Demostración. Sea k un núcleo reproductor en un RKHS H , luego $k(x, y) = \langle k(\cdot, x), k(\cdot, y) \rangle_H$, así basta tomar $\phi(x) = k(\cdot, x)$. ■

Veamos algunos ejemplos.

Ejemplo 4.3.1 Sea $\{e_1, \dots, e_n\}$ una base ortonormal en H y definimos

$$k(x, y) = \sum_{i=1}^n e_i(x) \bar{e}_i(y).$$

Luego para todo y en X .

$$k(\cdot, y) = \sum_{i=1}^n \bar{e}_i(y) e_i(\cdot),$$

pertenece a H y para cualquier función

$$\varphi(\cdot) = \sum_{i=1}^n \lambda_i e_i(\cdot)$$

en H , tenemos que para todo $y \in X$

$$\begin{aligned}\langle \varphi, k(\cdot, y) \rangle_H &= \left\langle \sum_{i=1}^n \lambda_i e_i(\cdot), \sum_{i=1}^n \overline{e_i}(y) e_i(\cdot) \right\rangle_H = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_i \overline{e_j}(y) \langle e_i, e_j \rangle_H \\ &= \sum_{i=1}^n \lambda_i e_i(y) = \varphi(y).\end{aligned}$$

Así, cualquier espacio finito de Hilbert de funciones tiene un núcleo reproductor.

4.4. Espacios de características

Definimos la función de características que nos será de gran utilidad a la hora de desarrollar KPCA.

Definición 4.4.1 Sea X un conjunto no vacío. La función $k : X \times X \rightarrow \mathbb{C}$ se dice **núcleo** si existe un espacio de Hilbert H y una función $\phi : X \rightarrow H$ tal que para todo $x, y \in X$

$$k(x, y) = \langle \phi(x), \phi(y) \rangle_H.$$

Esta función ϕ se conoce como **función de características** y el espacio H como **espacio de características**.

La función de características no es necesariamente única, como podemos ver en el siguiente ejemplo.

Ejemplo 4.4.1 Sea $k : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$k(x, y) = xy = \begin{bmatrix} \frac{x}{\sqrt{2}} & \frac{x}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{y}{\sqrt{2}} \\ \frac{y}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}.$$

Podemos tomar $\phi(x) = x$ y entonces el espacio de características es \mathbb{R} o podemos tomar $\tilde{\phi}(x) = \begin{bmatrix} \frac{x}{\sqrt{2}} & \frac{x}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$ y en este caso el espacio de características es \mathbb{R}^2 .

4.5. Construcción de un RKHS a partir de un núcleo

Buscamos mostrar que a partir de una función definida positiva $k(x, y)$, le corresponde un único RKHS H , del cual k es el núcleo reproductor. Para ello partiremos de una función definida positiva k , construiremos un espacio pre-RKHS H_0 , del cual formaremos el espacio RKHS H . El espacio pre-RKHS deberá satisfacer las siguientes propiedades:

1. Los funcionales de Dirac δ_x son continuos en H_0 .
2. Toda sucesión de Cauchy en H_0 que converge puntualmente en 0 también converge en la norma de H_0 en 0.

El último resultado implica que cualquier sucesión de Cauchy $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ en H_0 que converge puntualmente a $f \in H_0$, también converge a f en $\|\cdot\|_{H_0}$, ya que $(f_n - f)_{n \in \mathbb{N}}$ converge puntualmente a 0 y entonces $\|f_n - f\|_{H_0} \rightarrow 0$.

Es natural pensar que el espacio pre-RKHS H_0 estará formado por funciones del tipo

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i k(x_i, x).$$

Más adelante mostraremos que estas funciones cumplen con las condiciones 1 y 2 antes mencionadas.

Luego, definimos a H como el conjunto de funciones $f : X \rightarrow \mathbb{C}$ ($f \in \mathbb{C}^X$) para las cuales existe $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ en H_0 sucesión de Cauchy, que converge puntualmente a f . Notamos que $H_0 \subset H$ ya que los límites de estas sucesiones de Cauchy pueden no estar en H_0 . Nuestro objetivo es probar que H es un RKHS.

Las propiedades 1 y 2 se cumplen si y sólo si

- $H_0 \subset H \subset \mathbb{C}^X$ y la topología inducida por $\langle \cdot, \cdot \rangle$ en H_0 coincide con la topología inducida por H_0 en H .
- H tiene un núcleo reproductor.

Con esto buscamos completar el espacio.

Teorema 4.5.1 *Sea H_0 un subespacio de \mathbb{C}^X , el espacio de las funciones complejas con dominio en X , en el cual se define un producto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle_{H_0}$ con su norma asociada $\|\cdot\|_{H_0}$. Para que exista un espacio de Hilbert H tal que*

- a. $H_0 \subset H \subset \mathbb{C}^X$ y la topología inducida por $\langle \cdot, \cdot \rangle$ en H_0 coincide con la topología inducida por H_0 en H ,
- b. H tiene un núcleo reproductor,

es necesario y suficiente que

1. los funcionales de Dirac δ_x sean continuos en H_0 ,
2. toda sucesión de Cauchy en H_0 que converge puntualmente en 0 también converge en la norma de H_0 en 0.

Demostración. Comenzamos demostrando que a y b implican las condiciones 1 y 2. Si H existe y cumple con las condiciones a y b, los funcionales de Dirac son continuos H y por lo tanto lo son en H_0 . Sea $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ una sucesión de Cauchy en H_0 que converge puntualmente a 0, como H es completo, $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ converge en norma a una $f \in H$. Así tenemos que para todo $x \in X$

$$f(x) = \delta_x(f) = \lim_{n \rightarrow \infty} \delta_x(f_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x) = 0.$$

Por lo tanto, $f = 0$.

Para probar que 1 y 2 implican a y b, seguiremos los siguientes pasos:

1. Definimos el producto interno entre $f, g \in H$ como el límite del producto interno de la sucesiones de Cauchy $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$, $(g_n)_{n \in \mathbb{N}}$ que convergen a f y g , respectivamente. Probaremos que este producto interno está bien definido y que es independiente de las sucesiones elegidas.
2. Probaremos que este producto interno efectivamente cumple con la definición de producto interno.
3. Probaremos que los funcionales de Dirac δ_x son continuos en H .
4. Probaremos que H es completo.

Nos valdremos de las siguientes proposiciones, para culminar en el Teorema de Moore-Aronszajn ■

Comenzemos probando que el producto interno dado anteriormente está bien definido.

Proposición 4.5.2 Sean $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ y $(g_n)_{n \in \mathbb{N}}$ sucesiones de Cauchy con respecto a la norma de H_0 tal que convergen a $f \in H$ y $g \in H$ respectivamente, definimos $\alpha_n = \langle f_n, g_n \rangle_{H_0}$. Entonces $(\alpha_n)_{n \in \mathbb{N}}$ converge y su límite depende solo de f y g . Definimos entonces

$$\langle f, g \rangle_H = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle f_n, g_n \rangle_{H_0}.$$

Demostración. Veamos primero que $(\alpha_n)_{n \in \mathbb{N}}$ converge, para ello veamos que es de Cauchy. Para $n, m \in \mathbb{N}$ se tiene

$$\begin{aligned} |\alpha_n - \alpha_m| &= |\langle f_n, g_n \rangle_{H_0} - \langle f_m, g_m \rangle_{H_0}| \\ &= |\langle f_n, g_n \rangle_{H_0} - \langle f_m, g_n \rangle_{H_0} + \langle f_m, g_n \rangle_{H_0} - \langle f_m, g_m \rangle_{H_0}| \\ &= |\langle f_n - f_m, g_n \rangle_{H_0} + \langle f_m, g_n - g_m \rangle_{H_0}| \\ &\leq |\langle f_n - f_m, g_n \rangle_{H_0}| + |\langle f_m, g_n - g_m \rangle_{H_0}| \\ &\leq \|g_n\|_{H_0} \|f_n - f_m\|_{H_0} + \|f_m\|_{H_0} \|g_n - g_m\|_{H_0}. \end{aligned}$$

Sea $\epsilon > 0$, como toda sucesión de Cauchy es acotada, existen $a, b \in \mathbb{R}$ tal que $\|f_m\|_{H_0} \leq a$, $\|g_n\|_{H_0} \leq b$, para todo $n, m \in \mathbb{N}$.

Tomando $N_1 \in \mathbb{N}$ tal que $\|f_n - f_m\| \leq \frac{\epsilon}{2b}$ para $n, m \geq N_1$, y también tomando $N_2 \in \mathbb{N}$ tal que $\|g_n - g_m\| \leq \frac{\epsilon}{2a}$ para $n, m \geq N_2$, tenemos que $|\alpha_n - \alpha_m| < \epsilon$ para $n, m \geq \max(N_1, N_2)$. Así, $(\alpha_n)_{n \in \mathbb{N}}$ es una sucesión de Cauchy en \mathbb{C} , que como es completo, $(\alpha_n)_{n \in \mathbb{N}}$ converge en \mathbb{C} .

Veamos ahora que el límite es independiente de la sucesión de Cauchy que se elija. Para ello supongamos que existen otras sucesiones de Cauchy $(f'_n)_{n \in \mathbb{N}}$ y $(g'_n)_{n \in \mathbb{N}}$ que convergen puntualmente a f y g , respectivamente, tal que $\alpha'_n = \langle f'_n, g'_n \rangle_{H_0}$. De forma análoga a la anterior tenemos que

$$|\alpha_n - \alpha'_n| \leq \|g_n\|_{H_0} \|f_n - f'_n\|_{H_0} + \|f_n\|_{H_0} \|g_n - g'_n\|_{H_0}.$$

Como $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ y $(f'_n)_{n \in \mathbb{N}}$ convergen puntualmente a f , $(f_n - f'_n)_{n \in \mathbb{N}}$ converge puntualmente a 0 y lo mismo sucede para $(g_n - g'_n)_{n \in \mathbb{N}}$. Pero como definimos al espacio pre-RKHS H_0 de forma tal que toda sucesión de Cauchy en H_0 que converge puntualmente en 0 también converge en la norma de H_0 en 0, tenemos que $(\alpha_n)_{n \in \mathbb{N}}$ y $(\alpha'_n)_{n \in \mathbb{N}}$ tienen el mismo límite. ■

Probemos a continuación que el producto definido cumple con la definición de producto interno. Observamos que la linealidad y simetría son triviales ya que se deducen de que $\langle \cdot, \cdot \rangle_{H_0}$ es un producto interno. Veamos en la siguiente proposición que $\langle f, f \rangle_H = 0$ si y sólo si $f = 0$.

Proposición 4.5.3 *Sea $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ una sucesión de Cauchy en H_0 que converge puntualmente a $f \in H$. Entonces, $\lim_{n \rightarrow \infty} \langle f_n, f_n \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \|f_n\|_{H_0}^2 = 0$ si y sólo si $f(x) = 0$ para todo $x \in X$.*

Demostración. Observamos que para probar que $f = 0$ implica $\langle f, f \rangle_H = 0$, basta tomar la sucesión constante $f_n = 0$ para todo $n \in \mathbb{N}$. Supongamos ahora que $\lim_{n \rightarrow \infty} \langle f_n, f_n \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \|f_n\|_{H_0}^2 = 0$ implica que $f(x) = 0$ para todo $x \in X$.

Para todo $x \in X$ se tiene que

$$|f(x)| = \left| \lim_{n \rightarrow \infty} f_n \right| = \left| \lim_{n \rightarrow \infty} \delta_x(f_n) \right| \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \|\delta_x\| \|f_n\|_{H_0} = 0.$$

Donde, en la desigualdad utilizamos el hecho de que para el espacio pre-RKHS, el funcional δ_x es continuo en H_0 , y en la última igualdad usamos que $\lim_{n \rightarrow \infty} \|f_n\|_{H_0}^2 = 0$. ■

A continuación mostramos que los funcionales de Dirac δ_x son continuos en H_0 , pero antes probaremos el siguiente resultado.

Proposición 4.5.4 *H_0 es denso en H .*

Demostración. Basta probar que dado $f \in H$ y su sucesión de Cauchy asociada $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ con respecto a H_0 que converge puntualmente a f , $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ converge a f en $\|\cdot\|_H$.

Como $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ es Cauchy con la norma de H_0 , tenemos que para todo $\epsilon > 0$, existe $N \in \mathbb{N}$ tal que $\|f_m - f_n\|_{H_0} < \epsilon$ para todo $m, n \geq N$. Tomemos $n' \geq N$, luego $(f_m - f_{n'})_{m \in \mathbb{N}}$ converge puntualmente a $f - f_{n'}$. Luego utilizando la definición de producto interno dada anteriormente

$$\|f - f_{n'}\|_H^2 = \lim_{m \rightarrow \infty} \|f_m - f_{n'}\|_{H_0}^2 \leq \epsilon^2,$$

por lo tanto, $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ converge a f en $\|\cdot\|_H$. ■

Proposición 4.5.5 *Los funcionales de Dirac δ_x son continuos en H .*

Demostración. Probaremos que δ_x es continua en $f = 0$, que por linealidad implica que δ_x es continua en todo f . Sea $x \in X$ y $\epsilon > 0$. Por como construimos a H_0 , tenemos que δ_x es continuo en H_0 . Por lo tanto, existe η tal que

$$\|g - 0\|_{H_0} = \|g\|_{H_0} < \eta$$

entonces

$$|\delta_x(g)| = |g(x)| < \frac{\epsilon}{2}.$$

Ahora, para completar la demostración, debemos probar que hay un $g \in H_0$ cercano, con respecto a la norma de H , para un $f \in H$ con norma pequeña y que esta función está cerca en cada punto.

Obsevamos primero que podemos tomar un $f \in H$ con una norma tan pequeña como querramos, para ello basta con normalizar y luego multiplicar por las constantes necesarias.

Tomamos $f \in H$ tal que $\|f\|_H < \frac{\eta}{2}$, como H_0 es denso en H , existe una sucesión de Cauchy $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ en H_0 que converge puntualmente y en $\|\cdot\|_H$ a f , así existe $N \in \mathbb{N}$ tal que

$$\begin{aligned} |f(x) - f_N(x)| &< \frac{\epsilon}{2}, \\ \|f - f_N\|_H &< \frac{\eta}{2}. \end{aligned}$$

Luego,

$$\|f_N\|_{H_0} = \|f_N\|_H = \|f_N + f - f\|_H \leq \|f\|_H + \|f - f_N\|_H < \eta.$$

Así, que $\|f\|_H < \frac{\eta}{2}$ implica que $\|f_N\|_{H_0} < \eta$. Tomando $g = f_N$, tenemos que $\|f_N\|_{H_0} < \eta$ implica que $|f_N(x)| < \frac{\epsilon}{2}$ y entonces

$$|f(x)| = |f(x) + f_N(x) - f_N(x)| \leq |f(x) - f_N(x)| + |f_N(x)| < \epsilon.$$

En otras palabras, $\|f\|_H < \frac{\eta}{2}$ implica que $|f(x)| < \epsilon$. Por lo tanto δ_x es continua en 0 para la norma $\|\cdot\|_H$. ■

Por último nos resta probar que H es completo.

Proposición 4.5.6 *H es completo.*

Demostración. Sea $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ una sucesión de Cauchy en H . Como los funcionales de Dirac δ_x son continuos en H , para todo $t \in X$, $(f_n(t))_{n \in \mathbb{N}}$ es convergente en \mathbb{C} en algún $f(t) \in \mathbb{C}$, ya que \mathbb{C} es completo. Nos preguntamos ahora si la función $f(t)$ está en H .

Para demostrarlo lo que haremos es definir una sucesión de funciones $(g_n)_{n \in \mathbb{N}}$, donde $g_n \in H_0$, que esta cerca de la sucesión $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$. Probaremos que estas funciones convergen puntualmente a f y que son de Cauchy en H_0 . Así, por como construimos a H , $f \in H$. Finalmente, probaremos que $f_n \rightarrow f$ en la norma de H .

Definimos $f(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x)$. Para $n \in \mathbb{N}$, tomamos $g_n \in H_0$ tal que $\|g_n - f_n\|_H < \frac{1}{n}$, esto lo podemos hacer ya que H_0 es denso en H . Luego,

$$|g_n(x) - f(x)| \leq |g_n(x) - f_n(x)| + |f_n(x) - f(x)| \leq |\delta_x(g_n - f_n)| + |f_n(x) - f(x)|.$$

El primer término tiende a 0, ya que δ_x es continua en H y el segundo término también lo hace ya que $f(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x)$. Así, $(g_n(x))_{n \in \mathbb{N}}$ converge a $f(x)$. Ahora debemos probar que $(g_n)_{n \in \mathbb{N}}$ es de Cauchy en H_0 . Para ello tenemos que

$$\begin{aligned} \|g_m - g_n\|_{H_0} &= \|g_m - g_n\|_H \\ &\leq \|g_m - f_m\|_H + \|f_m - f_n\|_H + \|f_n - g_n\|_H \\ &\leq \frac{1}{m} + \frac{1}{n} + \|f_m - f_n\|_H. \end{aligned}$$

Por lo tanto, $(g_n)_{n \in \mathbb{N}}$ es de Cauchy en H_0 .

Finalmente, como g_n tiende a f en la norma H y consecuentemente f_n converge a f en la norma H ,

$$\begin{aligned} \|f_n - f\|_H &\leq \|f_n - g_n\|_H + \|g_n - f\|_H \\ &\leq \frac{1}{n} + \|g_n - f\|_H. \end{aligned}$$

Luego, H es completo. ■

A continuación mostraremos como construir un espacio pre-RKHS válido.

Teorema 4.5.7 (Moore-Aronszajn) Sea $k : X \times X \rightarrow \mathbb{C}$ definida positiva. Existe un único RKHS $H \subset \mathbb{C}^X$ con un núcleo reproductor k . Más aún, si H_0 es el espacio generado por $(k(\cdot, x)_{x \in X})$ que está dotado del producto interno

$$\langle f, g \rangle_{H_0} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \alpha_i \overline{\beta_j} k(y_j, x_i),$$

donde $f = \sum_{i=1}^n \alpha_i k(\cdot, x_i)$ y $g = \sum_{j=1}^m \beta_j k(\cdot, y_j)$, entonces H_0 es un espacio pre-RKHS válido.

Demostración. Veamos que H_0 satisface las condiciones de espacio pre-RKHS válido, para ello vemos primero que los operadores de Dirac son continuos en el espacio. Sea $t \in X$, para $f = \sum_{i=1}^n \alpha_i k(\cdot, x_i)$ tenemos que

$$\langle f, k(\cdot, t) \rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i k(t, x_i) = f(t).$$

Entonces, para $f, g \in H_0$,

$$\begin{aligned} |\delta_x(f) - \delta_x(g)| &= |\langle f - g, k(\cdot, x) \rangle| \\ &\leq k^{1/2}(x, x) \|f - g\|_{H_0}. \end{aligned}$$

Así, δ_x es continua en H_0 .

Resta ver que toda sucesión de Cauchy en H_0 que converge puntualmente en 0 también converge en la norma de H_0 en 0. Sea $\epsilon > 0$ y sea $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ una sucesión de Cauchy en H_0 que converge puntualmente a 0. Como las sucesiones de Cauchy son acotadas, existe $a > 0$ tal que $\|f_n\| < a$ para todo $n \in \mathbb{N}$. Además, existe $N_1 \in \mathbb{N}$ tal que $\|f_n - f_m\|_{H_0} < \frac{\epsilon}{2a}$ para $n, m \geq N_1$. Tomando $f_{N_1} = \sum_{i=1}^l \alpha_i k(\cdot, x_i)$ y $N_2 \in \mathbb{N}$ tal que $|f_n(x_i)| < \frac{\epsilon}{2k|\alpha_i|}$, para $i = 1, \dots, l$, resulta que para $n \geq \max(N_1, N_2)$:

$$\begin{aligned} \|f_n\|_{H_0}^2 &= \|f_n + f_{N_1} - f_{N_1}\|_{H_0}^2 \\ &\leq |\langle f_n - f_{N_1}, f_n \rangle_{H_0}| + |\langle f_{N_1}, f_n \rangle_{H_0}| \\ &\leq \|f_n - f_{N_1}\|_{H_0} \|f_n\|_{H_0} + \sum_{i=1}^l |\alpha_i f_n(x_i)| < \epsilon. \end{aligned}$$

Por lo tanto, f_n converge a 0 en $\|\cdot\|_{H_0}$.

Veamos ahora que el núcleo reproductor de H es k , para ello notamos que si $f \in H$ y $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ converge puntualmente a f en H_0 , entonces

$$\langle f, k(\cdot, x) \rangle_H = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle f_n, k(\cdot, x) \rangle_{H_0} = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x) = f(x).$$

Como H_0 es denso en H , H es el espacio RKHS único que contiene a H_0 . Pero como $k(\cdot, x) \in H$ para todo $x \in X$, es claro que cualquier RKHS con un núcleo

reproductor k debe contener a H_0 . ■

El Teorema anterior nos dice que toda función definida positiva es un núcleo reproductor. Anteriormente habíamos probado que todo núcleo reproductor es un núcleo y que todo núcleo es definido positivo. Por lo tanto, las nociones son equivalentes. Además, con el siguiente teorema podemos caracterizar a los núcleos reproductores con el producto interno asociado a ℓ^2 .

Teorema 4.5.8 *Una función compleja k definida en $X \times X$ es un núcleo reproductor si y sólo si existe una función $T : X \rightarrow \ell^2(E)$ tal que para todo $(x, y) \in X \times X$*

$$k(x, y) = \langle T(x), T(y) \rangle_{\ell^2} = \sum_{\alpha \in E} (T(x))_{\alpha} (T(y))_{\alpha}.$$

Demostración. Sea H un RKHS de funciones en un conjunto X con un núcleo k . Consideremos la función $\Psi_k : X \rightarrow H$ tal que $\Psi_k(x) = k(\cdot, x)$. Como H es un espacio de Hilbert, es isométrico a un espacio $\ell^2(E)$. Si φ es la isometría de H en $\ell^2(E)$, la función $T = \varphi \circ \Psi_k$ cumple con lo pedido. Para la otra implicación, dada la función $T : X \rightarrow \ell^2(E)$ dada por un conjunto X y un espacio $\ell^2(E)$ sabemos que $k : X \times X \rightarrow \mathbb{C}$ tal que

$$k(x, y) = \langle T(x), T(y) \rangle_{\ell^2}$$

es una función definida positiva. ■

Ejemplo 4.5.1 *Sea $X = [0, 1]$, $H = L^2(-1, 1)$ y $T(x) = \cos(x)$. Por el Teorema anterior, tenemos a k definida en $[0, 1] \times [0, 1]$ por*

$$k(x, y) = \begin{cases} \langle T(x), T(y) \rangle_H = \int_{-1}^1 \cos(xt) \cos(yt) d\lambda(t) = \frac{\sin(x-y)}{x-y} - \frac{\sin(x+y)}{x+y} & \text{si } x \neq y, \\ 1 + \frac{\sin(2x)}{2x} & \text{si } x \neq 0, \\ 2 & \text{si } (x, y) = (0, 0) \end{cases}$$

es un núcleo reproductor.

También podemos probar que una función es un núcleo reproductor utilizando el Teorema anterior.

Ejemplo 4.5.2 *Sea $k : \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ dada por*

$$k(x, y) = \min(x, y).$$

Notemos que para todo $(x, y) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+$

$$k(x, y) = \int_{\mathbb{R}^+} \mathbf{1}_{[0, y]}(t) \mathbf{1}_{[0, x]}(t) d\lambda(t) = \langle T(x), T(y) \rangle_H.$$

Donde $\mathbf{1}_{[0, x]}$ es la función característica del conjunto $[0, x]$, $H = L^2(\mathbb{R}^+, \lambda)$ y $T : X \rightarrow H$ tal que $T(x) = \mathbf{1}_{[0, x]}(\cdot)$.

4.6. Kernel PCA

Comenzamos ahora sí con el método de Kernel PCA. En este método buscamos tomar un conjunto de datos y en lugar de aplicar PCA en el mismo espacio, llevar los datos a un espacio de Hilbert utilizando los núcleos reproductores, para luego allí aplicar PCA y proyectar estos datos en un nuevo espacio. A continuación damos el marco inicial en el cual trabajaremos.

Uno de los problemas con el que nos enfrentaremos es el de minimizar una expresión cuadrática Q con dos términos, el primero mide una función de L^2 aplicada a la diferencia de una función inicial y la función sobre la cual minimizaremos. El segundo término es un término de penalización con respecto a la norma al cuadrado en un RKHS.

Sea X un conjunto y se $K : X \times X \rightarrow \mathbb{C}$ un núcleo definido positivo. Sea $H(K)$ el correspondiente espacio reproductor de Hilbert asociado. Sea \mathcal{B} una sigma álgebra de subconjuntos de X y sea μ una medida positiva en el espacio (X, \mathcal{B}) . Suponemos además que μ es sigma-finita. Sea $T : H(K) \rightarrow L^2(\mu)$ dado por

$$f \xrightarrow{T} (f(x))_{x \in X}$$

tal que T es definido denso y cerrable.

Sea $\beta > 0$, $\psi \in L^2(\mu)$ y sea

$$Q_{\beta, \psi}(f) = \|\psi - Tf\|_{L^2(\mu)}^2 + \beta \|f\|_{H(K)}^2$$

definida en el dominio denso de T .

Como T es definido denso y cerrable, existe su operador adjunto T^*

$$T^* : L^2(\mu) \rightarrow H(K).$$

Damos a continuación un teorema de optimización general con el cual puntualizaremos más adelante.

Teorema 4.6.1 Sea K , μ , ψ , β como se definió anteriormente, entonces el problema de optimización

$$\inf_{f \in H(K)} Q_{\beta, \psi}(f)$$

tiene una única solución F en $H(K)$, donde

$$F = (\beta I + T^*T)^{-1}T^*\psi.$$

Demostración. Sea F en $H(K)$ y sea $f_\varepsilon = F + \varepsilon h$ donde h varía en el dominio denso de T . Luego

$$Q_{\beta, \psi}(f_\varepsilon) = \|\psi - T(F + \varepsilon h)\|_{L^2(\mu)}^2 + \beta\|F + \varepsilon h\|_{H(K)}^2.$$

Desarrollemos las normas una por una, aplicando las propiedades del producto interno.

Veamos primero $\|\psi - T(F + \varepsilon h)\|_{L^2(\mu)}^2$:

$$\begin{aligned} \|\psi - T(F + \varepsilon h)\|_{L^2(\mu)}^2 &= \|\psi - T(F) - \varepsilon T(h)\|_{L^2(\mu)}^2 \\ &= \langle \psi - T(F) - \varepsilon T(h), \psi - T(F) - \varepsilon T(h) \rangle_{L^2(\mu)} \\ &= \langle \psi - T(F), \psi - T(F) - \varepsilon T(h) \rangle_{L^2(\mu)} - \langle \varepsilon T(h), \psi - T(F) - \varepsilon T(h) \rangle_{L^2(\mu)} \\ &= \langle \psi - T(F), \psi - T(F) - \varepsilon T(h) \rangle_{L^2(\mu)} - \langle T(h), \psi - T(F) - \varepsilon T(h) \rangle_{L^2(\mu)} \\ &= \langle \psi - T(F), \psi - T(F) \rangle_{L^2(\mu)} - \langle \psi - T(F), \varepsilon T(h) \rangle_{L^2(\mu)} \\ &\quad - \langle \varepsilon T(h), \psi - T(F) \rangle_{L^2(\mu)} - \langle \varepsilon T(h), \varepsilon T(h) \rangle_{L^2(\mu)} \\ &= \langle \psi - T(F), \psi - T(F) \rangle_{L^2(\mu)} - \overline{\langle \varepsilon T(h), \psi - T(F) \rangle_{L^2(\mu)}} \\ &\quad - \varepsilon \langle T(h), \psi - T(F) \rangle_{L^2(\mu)} - \langle \varepsilon T(h), \varepsilon T(h) \rangle_{L^2(\mu)} \\ &= \|\psi - T(F)\|_{L^2(\mu)}^2 - \overline{\varepsilon \langle T(h), \psi - T(F) \rangle_{L^2(\mu)}} \\ &\quad - \varepsilon \langle T(h), \psi - T(F) \rangle_{L^2(\mu)} + \|\varepsilon T(h)\|_{L^2(\mu)}^2 \\ &= \|\psi - T(F)\|_{L^2(\mu)}^2 - \varepsilon \langle \psi - T(F), T(h) \rangle_{L^2(\mu)} \\ &\quad - \varepsilon \overline{\langle \psi - T(F), T(h) \rangle_{L^2(\mu)}} + \|\varepsilon T(h)\|_{L^2(\mu)}^2 \\ &= \|\psi - T(F)\|_{L^2(\mu)}^2 - 2\varepsilon \operatorname{Re}(\langle \psi - T(F), T(h) \rangle_{L^2(\mu)}) + \varepsilon^2 \|T(h)\|_{L^2(\mu)}^2. \end{aligned}$$

Desarrollemos ahora $\beta\|F + \varepsilon h\|_{H(K)}^2$:

$$\begin{aligned}
\beta\|F + \varepsilon h\|_{H(K)}^2 &= \beta\langle F + \varepsilon h, F + \varepsilon h \rangle_{H(K)} \\
&= \beta\langle F, F + \varepsilon h \rangle_{H(K)} + \beta\langle \varepsilon h, F + \varepsilon h \rangle_{H(K)} \\
&= \beta\langle F, F + \varepsilon h \rangle_{H(K)} + \beta\varepsilon\langle h, F + \varepsilon h \rangle_{H(K)} \\
&= \beta\langle F, F \rangle_{H(K)} + \beta\langle F, \varepsilon h \rangle_{H(K)} + \beta\varepsilon\langle h, F \rangle_{H(K)} + \beta\varepsilon\langle h, \varepsilon h \rangle_{H(K)} \\
&= \beta\|F\|_{H(K)}^2 + \beta\overline{\langle \varepsilon h, F \rangle_{H(K)}} + \beta\varepsilon\langle h, F \rangle_{H(K)} + \beta\varepsilon^2\|h\|_{H(K)}^2 \\
&= \beta\|F\|_{H(K)}^2 + \beta\overline{\varepsilon\langle h, F \rangle_{H(K)}} + \beta\varepsilon\langle h, F \rangle_{H(K)} + \beta\varepsilon^2\|h\|_{H(K)}^2 \\
&= \beta\|F\|_{H(K)}^2 + \beta\varepsilon\overline{\langle h, F \rangle_{H(K)}} + \langle h, F \rangle_{H(K)} + \beta\varepsilon^2\|h\|_{H(K)}^2 \\
&= \beta\|F\|_{H(K)}^2 + 2\beta\varepsilon\operatorname{Re}(\langle h, F \rangle_{H(K)}) + \beta\varepsilon^2\|h\|_{H(K)}^2
\end{aligned}$$

Sumando ambos términos, resulta:

$$\begin{aligned}
&\|\psi - T(F + \varepsilon h)\|_{L^2(\mu)}^2 + \beta\|F + \varepsilon h\|_{H(K)}^2 \\
&= \|\psi - T(F)\|_{L^2(\mu)}^2 - 2\varepsilon\operatorname{Re}(\langle \psi - T(F), T(h) \rangle_{L^2(\mu)}) + \varepsilon^2\|T(h)\|_{L^2(\mu)}^2 \\
&+ \beta\|F\|_{H(K)}^2 + 2\beta\varepsilon\operatorname{Re}(\langle h, F \rangle_{H(K)}) + \beta\varepsilon^2\|h\|_{H(K)}^2
\end{aligned}$$

Derivamos respecto de ε :

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\varepsilon}Q_{\beta,\psi}(f_\varepsilon) &= -2\operatorname{Re}(\langle \psi - T(F), T(h) \rangle_{L^2(\mu)}) + 2\varepsilon\|T(h)\|_{L^2(\mu)}^2 \\
&+ 2\beta\operatorname{Re}(\langle h, F \rangle_{H(K)}) + 2\beta\varepsilon\|h\|_{H(K)}^2.
\end{aligned}$$

Evaluable en $\varepsilon = 0$:

$$\frac{d}{d\varepsilon}\big|_{\varepsilon=0}Q_{\beta,\psi}(f_\varepsilon) = -2\operatorname{Re}(\langle \psi - T(F), T(h) \rangle_{L^2(\mu)}) + 2\beta\operatorname{Re}(\langle h, F \rangle_{H(K)}).$$

Luego, igualando esta derivada a 0, tenemos que

$$\begin{aligned}
-2\operatorname{Re}(\langle \psi - T(F), T(h) \rangle_{L^2(\mu)}) + 2\beta\operatorname{Re}(\langle h, F \rangle_{H(K)}) &= 0 \\
\operatorname{Re}(\langle \psi - T(F), T(h) \rangle_{L^2(\mu)}) - \beta\operatorname{Re}(\langle h, F \rangle_{H(K)}) &= 0 \\
\operatorname{Re}(\langle \psi - T(F), T(h) \rangle_{L^2(\mu)}) - \beta\operatorname{Re}(\langle h, F \rangle_{H(K)}) &= 0
\end{aligned}$$

Utilizando la adjunta de T en el producto interno, obtenemos,

$$\begin{aligned}
\operatorname{Re}(\langle T^*(\psi - T(F)), h \rangle_{H(K)}) - \beta\operatorname{Re}(\langle h, F \rangle_{H(K)}) &= 0 \\
\operatorname{Re}(\langle T^*(\psi - T(F)), h \rangle_{H(K)}) - \beta\operatorname{Re}(\langle \overline{F}, h \rangle_{H(K)}) &= 0 \\
\operatorname{Re}(\langle T^*(\psi - T(F)), h \rangle_{H(K)}) - \beta\operatorname{Re}(\langle F, h \rangle_{H(K)}) &= 0 \\
\operatorname{Re}(\langle T^*(\psi - T(F)), h \rangle_{H(K)}) - \beta\langle F, h \rangle_{H(K)} &= 0 \\
\operatorname{Re}(\langle T^*(\psi - T(F)) - \beta F, h \rangle_{H(K)}) &= 0.
\end{aligned}$$

Esto se cumple para todo $h \in H(K)$ y como T varía en un dominio denso de $H(K)$, existe una sucesión $(h_n)_{n \in \mathbb{N}}$ en $Dom(T)$ tal que $h_n \rightarrow T^*(\psi - T(F)) - \beta F$. Tomando $h = T^*(\psi - T(F)) - \beta F$ se tiene,

$$\begin{aligned} 0 &= \operatorname{Re}(\langle T^*(\psi - T(F)) - \beta F, h_n \rangle_{H(K)}) = \operatorname{Re}(\langle h, h_n \rangle_{H(K)}) \\ &= \frac{1}{2}(\langle h, h_n \rangle_{H(K)} + \overline{\langle h, h_n \rangle_{H(K)}}) = \langle h, h_n \rangle_{H(K)} + \overline{\langle h, h_n \rangle_{H(K)}} \end{aligned}$$

Tomando límite cuando $n \rightarrow \infty$, obtenemos

$$\begin{aligned} 0 &= \lim_{n \rightarrow \infty} (\langle h, h_n \rangle_{H(K)} + \overline{\langle h, h_n \rangle_{H(K)}}) \\ &= \langle h, \lim_{n \rightarrow \infty} h_n \rangle_{H(K)} + \overline{\langle h, \lim_{n \rightarrow \infty} h_n \rangle_{H(K)}} \\ &= \langle h, h \rangle_{H(K)} + \overline{\langle h, h \rangle_{H(K)}} \\ &= \|h\|_{H(K)}^2 = \|T^*(\psi - T(F)) - \beta F\|_{H(K)}^2. \end{aligned}$$

Por lo tanto, $\|T^*(\psi - T(F)) - \beta F\|_{H(K)}^2 = 0$. Consecuentemente,

$$\begin{aligned} T^*(\psi - T(F)) - \beta F &= 0 \\ T^*(\psi) - T^*T(F) &= \beta F \\ T^*(\psi) &= \beta F + T^*T(F) \\ T^*(\psi) &= (\beta I + T^*T)F. \end{aligned}$$

Veamos ahora que el operador $\beta I + T^*T : H(K) \rightarrow H(K)$ es inversible. Para ello primero veamos que es un operador inyectivo. Supongamos que $Nuc(\beta I + T^*T) \neq \{0\}$, entonces existe $f \neq 0$ tal que

$$(\beta I + T^*T)f = 0.$$

Luego, como $0 = \langle 0, f \rangle_{H(K)} = \langle (\beta I + T^*T)f, f \rangle_{H(K)}$,

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \beta f, f \rangle_{H(K)} + \langle T^*Tf, f \rangle_{H(K)} \\ &= \beta \|f\|_{H(K)}^2 + \langle Tf, Tf \rangle_{L^2(\mu)} \\ &= \beta \|f\|_{H(K)}^2 + \|Tf\|_{L^2(\mu)}^2. \end{aligned}$$

Por lo tanto, $\|f\|_{H(K)} = 0$, es decir, $f = 0$, pero esto es una contradicción. Luego, el operador $\beta I + T^*T : H(K)$ es inyectivo.

Ahora probemos que el operador es sobreyectivo, pero antes nos será útil mostrar que es autoadjunto. Primero observamos que para todo g en $H(K)$,

$$\langle T^*Tf, g \rangle_{H(K)} = \langle Tf, Tg \rangle_{L^2(\mu)} = \langle f, T^*Tg \rangle_{H(K)}.$$

Por lo tanto, el operador es autoadjunto. Por otro lado, observamos que para todo operador autoadjunto $A : H \rightarrow H$ se cumple que $Rg(A)^\perp = Nuc(A)$. Esto se

debe a que si $z \in Rg(A)^\perp$, $\langle z, y \rangle = 0$ para todo $y \in Rg(A)$, así $\langle z, T(x) \rangle = 0$ para todo $x \in H$. Como A es autoadjunto, $\langle T(z), x \rangle = 0$ para todo $x \in H$. Por lo tanto $T(z) = 0$, es decir, $z \in Nuc(A)$.

Luego, $\beta I + T^*T$ es autoadjunto, así,

$$Rg(\beta I + T^*T)^\perp = Nuc(\beta I + T^*T) = \{0\}.$$

Por lo tanto, $\overline{Rg(\beta I + T^*T)} = H$. Así, $\beta I + T^*T$ es inversible.

Teniendo en cuenta que $T^*(\psi) = (\beta I + T^*T)F$, como $\beta I + T^*T$ es inversible tenemos que

$$F = (\beta I + T^*T)^{-1}T^*(\psi)$$

como queríamos demostrar. ■

4.7. Optimización de mínimos cuadrados

Para facilitar la comprensión del Teorema 4.6.1, veamos una aplicación. Tomamos nuevamente la norma al cuadrado en L^2 de la diferencia y un término de penalización en el espacio RKHS, pero en este caso la norma L^2 es simplemente la suma finita de las diferencias al cuadrado.

Sea X un conjunto arbitrario y K un núcleo definido positivo en $X \times X$. Sea $H(K)$ el correspondiente espacio de Hilbert reproductor de núcleo. Sea $m \in \mathbb{N}$. Consideremos $(t_j)_{j=1}^m \subset X$, los puntos de la muestra, y $(y_i)_{i=1}^m \subset \mathbb{R}$, o equivalentemente, un punto de \mathbb{R}^m .

Sea $\beta > 0$ y consideremos $Q = Q_{\beta, t, y}$ definida por

$$Q(f) = \sum_{i=1}^m |f(t_i) - y_i|^2 + \beta \|f\|_{H(K)}^2.$$

mínimos cuadrados
termino de penalización

Sea $T : H(K) \rightarrow \mathbb{R}^m \simeq \ell_m^2$ tal que

$$Tf = (f(t_i))_{i=1}^m.$$

Y su operador adjunto $T^* : \ell_m^2 \rightarrow H(K)$ definido por

$$T^*y = \sum_{i=1}^m y_i K(\cdot, t_i),$$

donde $y = (y_i)_{i=1}^m$.

Observamos que, efectivamente, este es el operador adjunto de T , ya que

$$\begin{aligned}\langle y, Tf \rangle_{\ell_m^2} &= \langle (y)_{i=1}^m, (f(t_i))_{i=1}^m \rangle_{\ell_m^2} \\ &= \sum_{i=1}^m y_i \overline{f(t_i)}.\end{aligned}$$

Y además

$$\begin{aligned}\langle T^*(y), f \rangle_{H(K)} &= \left\langle \sum_{i=1}^m y_i K(\cdot, t_i), f \right\rangle_{H(K)} \\ &= \sum_{i=1}^m y_i \langle K(\cdot, t_i), f \rangle_{H(K)} \\ &= \sum_{i=1}^m y_i \overline{\langle f, K(\cdot, t_i) \rangle_{H(K)}} \\ &= \sum_{i=1}^m y_i \overline{f(t_i)}.\end{aligned}$$

Donde en la última igualdad utilizamos la propiedad reproductora del núcleo K . Por otro lado,

$$\begin{aligned}T^*Tf &= T^*((f(t_i))_{i=1}^m) \\ &= \sum_{i=1}^m f(t_i) K(\cdot, t_i)\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}TT^*y &= T\left(\sum_{i=1}^m y_i K(\cdot, t_i)\right) \\ &= \sum_{i=1}^m y_i K(t_j, t_i) \\ &= K_m y,\end{aligned}$$

donde K_m denota la matriz $m \times m$:

$$K_m = (K(t_j, t_i))_{i,j=1}^m = \begin{pmatrix} K(t_1, t_1) & \cdots & K(t_1, t_m) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K(t_m, t_1) & \cdots & K(t_m, t_m) \end{pmatrix}.$$

Antes del Teorema próximo damos la siguiente identidad de matrices que nos ayudará a hacer la demostración.

Proposición 4.7.1 Sea $A \in M_n(\mathbb{C})$ y $\beta > 0$, entonces

$$I - (\beta I + A)^{-1}A = \beta(\beta I + A)^{-1},$$

donde $I = I_n$, la matriz identidad de orden n .

Demostración. Consideremos $B = (\beta I + A)^{-1}$, entonces $B(\beta I + A) = I$. Luego, si distribuimos B resulta,

$$\begin{aligned}\beta B + BA &= I \\ BA &= I - \beta B\end{aligned}$$

Luego,

$$\begin{aligned}I - (\beta I + A)^{-1}A &= I - BA \\ &= I - (I - \beta B) \\ &= \beta B \\ &= \beta(\beta I + A)^{-1}.\end{aligned}$$

■

Teorema 4.7.2 Sea K , X , $(t_i)_{i=1}^m$, $(y_i)_{i=1}^m$ y K_m como definimos anteriormente. Sea $\beta > 0$. El problema de optimización

$$Q_{\beta,t,y}(f) = \sum_{i=1}^m |f(t_i) - y_i|^2 + \beta \|f\|_{H(K)}^2, \quad f \in H(K)$$

tiene una solución única F , dada por

$$F(\cdot) = \sum_{i=1}^m (K_m + \beta I_m)^{-1} \vec{y} K(\cdot, t_i).$$

Demostración. Por Teorema 4.6.1 sabemos que tenemos una única solución $F \in H(K)$ dada por

$$\beta F + T^*TF = T^*y.$$

Así,

$$\begin{aligned}\beta F(\cdot) &= (T^*y - T^*TF)(\cdot) \\ &= \sum_{i=1}^m y_i K(\cdot, t_i) - \sum_{i=1}^m F(t_i) K(\cdot, t_i) \\ &= \sum_{i=1}^m (y_i - F(t_i)) K(\cdot, t_i).\end{aligned}\tag{4.1}$$

Luego, evaluando en los puntos de la muestra $(t_i)_{i=1}^m$, tenemos que

$$\begin{aligned}\beta F(t_j) &= \sum_{i=1}^m (y_i - F(t_i))K(t_j, t_i) \\ &= \sum_{i=1}^m y_i K(t_j, t_i) - \sum_{i=1}^m F(t_i)K(t_j, t_i).\end{aligned}$$

Detengámonos en esta última expresión. Si nos concentramos sólo en la fila j -ésima de la siguiente matriz observamos que

$$\begin{aligned}(K_m y)_{(ji)} &= \left[\begin{pmatrix} K(t_1, t_1) & K(t_1, t_1) & \dots & \dots & \dots & K(t_1, t_m) \\ K(t_2, t_1) & K(t_2, t_2) & \dots & \dots & \dots & K(t_2, t_m) \\ \vdots & \vdots & & & & \vdots \\ K(t_j, t_1) & K(t_j, t_2) & \dots & \dots & \dots & K(t_j, t_m) \\ \vdots & \vdots & & & & \vdots \\ K(t_m, t_1) & K(t_m, t_2) & \dots & \dots & \dots & K(t_m, t_m) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} \right]_{(ji)} \\ &= y_1 K(t_j, t_1) + y_2 K(t_j, t_2) + \dots + y_m K(t_j, t_m) \\ &= \sum_{i=1}^m y_i K(t_j, t_i),\end{aligned}$$

donde $\vec{y} = (y_i)_{i=1}^m$.

Ocurre lo mismo si calculamos $K_m F$, donde $\vec{F} = (F(t_i)_{i=1}^m)$,

$$(K_m \vec{F})_{(ji)} = \sum_{i=1}^m f(t_i)K(t_j, t_i).$$

Por lo tanto,

$$\beta \vec{F} = K_m (\vec{y} - \vec{F}).$$

Despejemos \vec{F} :

$$\begin{aligned}\beta \vec{F} &= K_m \vec{y} - K_m \vec{F}, \\ \beta \vec{F} + K_m \vec{F} &= K_m \vec{y}, \\ (\beta I_m + K_m) \vec{F} &= K_m \vec{y}, \\ \vec{F} &= (\beta I_m + K_m)^{-1} K_m \vec{y}.\end{aligned}$$

Entonces ahora sabemos como se comporta la función para los puntos $(t_i)_{i=1}^m$. Cada vez que evaluamos a F en uno de ellos obtenemos la fila correspondiente de

matriz $(\beta I_m + K_m)^{-1} K_m \vec{y}$. Por lo tanto, reemplacemos en (1) y simplifiquemos la notación. Observando la fila i -ésima con el subíndice i resulta,

$$\begin{aligned}\beta F(\cdot) &= \sum_{i=1}^m (y_i - ((\beta I_m + K_m)^{-1} K_m \vec{y})_i) K(\cdot, t_i) \\ &= \sum_{i=1}^m (I_m - (\beta I_m + K_m)^{-1} K_m)_i \vec{y} K(\cdot, t_i) \\ &= \sum_{i=1}^m \beta (\beta I_m + K_m)_i^{-1} \vec{y} K(\cdot, t_i),\end{aligned}$$

donde en la última igualdad utilizamos la Proposición anterior. Así,

$$F(\cdot) = \sum_{i=1}^m (\beta I_m + K_m)_i^{-1} \vec{y} K(\cdot, t_i).$$

■

4.8. Optimización y PCA

Buscamos relacionar ahora el análisis clásico de PCA con nuestro marco previo y así resolver el problema de optimización de KPCA. Fijemos un núcleo $K : \mathbb{C}^m \times \mathbb{C}^m \rightarrow \mathbb{C}$ definido positivo y su correspondiente $H(K)$, su espacio de Hilbert reproductor de núcleo.

En PCA, resolvemos el siguiente problema de optimización

$$\arg \max \{ \|QX\|_{HS}^2 : \|Q\|_{HS}^2 = k \},$$

donde Q es una proyección autoadjunta

En cambio en KPCA, resolvemos un problema similar

$$\arg \max \{ \|Q\Phi(X)\|_{HS}^2 : \|Q\|_{HS}^2 = k \},$$

donde

$$\Phi(X) = (\Phi(x_1) \quad \dots \quad \Phi(x_n)).$$

Es decir, aplicamos primero una función a nuestros datos y después aplicamos el análisis de componentes principales.

Introducimos los siguientes operadores que nos serán de utilidad para el desarrollo.

Sea $L : H(K) \rightarrow \mathbb{C}^n$ definido por

$$L(f) = \sum_{i=1}^n \langle f, \Phi(x_i) \rangle_{H(K)} \delta_i,$$

donde δ_j es la base ortonormal estándar de \mathbb{C}^n . Su operador adjunto $L^* : \mathbb{C}^n \rightarrow H(K)$ está dado por

$$L^*(c) = \sum_{i=1}^n \Phi(x_i) \overline{c_i}$$

Comprobemos que efectivamente este es el operador adjunto.

$$\begin{aligned} \langle L(f), c \rangle &= \left\langle \sum_{i=1}^n \langle f, \Phi(x_i) \rangle_{H(K)} \delta_i, c \right\rangle \\ &= \sum_{i=1}^n \langle f, \Phi(x_i) \rangle_{H(K)} c_i \\ &= \sum_{i=1}^n c_i \langle f, \Phi(x_i) \rangle_{H(K)}. \end{aligned}$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned} \langle f, L^*(c) \rangle_{H(K)} &= \left\langle f, \sum_{i=1}^n \Phi(x_i) \overline{c_i} \right\rangle_{H(K)} \\ &= \sum_{i=1}^n \overline{c_i} \langle f, \Phi(x_i) \rangle_{H(K)} \\ &= \sum_{i=1}^n c_i \langle f, \Phi(x_i) \rangle_{H(K)}. \end{aligned}$$

Así, utilizando la notación bra-ket obtenemos

$$\begin{aligned}
L^*L(f) &= L^* \left(\sum_{i=1}^n \langle f, \Phi(x_i) \rangle_{H(K)} \delta_i \right) \\
&= \sum_{i=1}^n \Phi(x_i) \overline{\langle f, \Phi(x_i) \rangle_{H(K)}} \\
&= \sum_{i=1}^n \Phi(x_i) \langle \Phi(x_i), f \rangle_{H(K)} \\
&= \sum_{i=1}^n |\Phi(x_i)\rangle \langle \Phi(x_i)| f \rangle \\
&= \sum_{i=1}^n |\Phi(x_i)\rangle \langle \Phi(x_i)| f \rangle.
\end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$L^*L = \sum_{i=1}^n |\Phi(x_i)\rangle \langle \Phi(x_i)| = \Phi(X)\Phi(X)^*.$$

Lema 4.8.1 Sea L^*L como lo definimos anteriormente, y sea

$$G = L^*L = \sum_{j=1}^n \lambda_j^2 |\phi_j\rangle \langle \phi_j|$$

la correspondiente representación espectral, con $\lambda_1^2 \geq \lambda_2^2 \geq \dots \lambda_n^2$. Entonces,

$$\begin{aligned}
|\phi_1\rangle \langle \phi_1| &= \arg \max \{ \|Q_1 \Phi(X)\|_{HS}^2 : \|Q_1\|_{HS}^2 = 1, Q_1 = Q_1^* = Q_1^2 \} \\
&= \arg \max \{ \|Q_1 G\|_{HS}^2 : \|Q_1\|_{HS}^2 = 1 \}.
\end{aligned}$$

O lo que es equivalente, la mejor aproximación de rango 1 a G es

$$\lambda_1^2 |\phi_1\rangle \langle \phi_1|.$$

Demostración. Notemos que

$$\begin{aligned}
\|Q_1 \Phi(X)\|_{HS}^2 &= \text{tr}((Q_1 \Phi(X))^* Q_1 \Phi(X)) \\
&= \text{tr}(\Phi(X)^* Q_1^* Q_1 \Phi(X)) \\
&= \text{tr}(\Phi(X)^* Q_1 Q_1 \Phi(X)) \\
&= \text{tr}(\Phi(X)^* Q_1^2 \Phi(X)) \\
&= \text{tr}(\Phi(X)^* Q_1 \Phi(X)) \\
&= \text{tr}(\Phi(X) \Phi(X)^* Q_1) \\
&= \text{tr}(Q_1 \Phi(X) \Phi(X)^*) \\
&= \text{tr}(Q_1 G).
\end{aligned}$$

Sea w un vector unitario en $H(K)$, y sea $Q_1 = |w\rangle\langle w|$. Luego,

$$\begin{aligned} \text{tr}(Q_1 G) &= \text{tr}(|w\rangle\langle w|G) \\ &= \sum \langle e_i, (|w\rangle\langle w|G)e_i \rangle \end{aligned}$$

donde (e_i) es una base ortonormal de $H(K)$. Por otro lado,

$$\begin{aligned} (|w\rangle\langle w|G)e_i &= |w\rangle\langle w|Ge_i \\ &= |w\rangle\langle w||Ge_i\rangle \\ &= |w\rangle\langle w|Ge_i \end{aligned}$$

Así, reescribiendo la expresión de $\text{tr}(Q_1 G)$, resulta

$$\begin{aligned} \text{tr}(Q_1 G) &= \sum \langle e_i ||w\rangle\langle w|Ge_i \rangle \\ &= \sum \langle e_i |w\rangle\langle w|Ge_i \rangle \\ &= \sum \langle w|Ge_i \rangle\langle e_i |w \rangle \\ &= \sum \langle w|G|e_i \rangle\langle e_i ||w \rangle \\ &= \langle w|GI|w \rangle \\ &= \langle w|Gw \rangle. \end{aligned}$$

Donde utilizamos el hecho de que $\sum |e_i\rangle\langle e_i| = I$. Luego,

$$\begin{aligned} \text{tr}(Q_1 G) &= \langle w|Gw \rangle \\ &= \langle w| \left(\sum_{j=1}^n \lambda_j^2 |\phi_j\rangle\langle\phi_j| \right) w \rangle \\ &= \langle w| \sum_{j=1}^n \lambda_j^2 |\phi_j\rangle\langle\phi_j||w \rangle \\ &= \langle w| \sum_{j=1}^n \lambda_j^2 |\phi_j\rangle\langle\phi_j|w \rangle \\ &= \sum_{j=1}^n \lambda_j^2 \langle w||\phi_j\rangle\langle\phi_j|w \rangle \\ &= \sum_{j=1}^n \lambda_j^2 \langle w|\phi_j\rangle\langle\phi_j|w \rangle \\ &= \sum_{j=1}^n \lambda_j^2 \overline{\langle w|\phi_j\rangle} \langle w|\phi_j\rangle \\ &= \sum_{j=1}^n \lambda_j^2 |\langle w|\phi_j\rangle|^2. \end{aligned}$$

Como (ϕ_j) son los vectores resultantes de la descomposición espectral, estos forman una base ortonormal, así podemos aplicar la identidad de Parseval

$$\sum_{j=1}^n |\langle w | \phi_j \rangle|^2 = \|w\|^2 = 1.$$

Por lo tanto, la traza de $Q_1 G$ no es más que una combinación convexa de λ_j^2 , entonces

$$\sum_{j=1}^n \lambda_j^2 |\langle w | \phi_j \rangle|^2 \leq \lambda_1^2.$$

La igualdad se cumple si $|\langle w | \phi_1 \rangle|^2 = 1$ y $|\langle w | \phi_j \rangle|^2 = 0$ para todo $j > 1$. Como $|\langle w | \phi_1 \rangle| = 1$ y (ϕ_j) es base ortonormal, $w = \phi_1$, es decir $Q_1 = |\phi_1\rangle\langle\phi_1|$. ■

Observamos que este Lema visto nos da una solución al problema de optimización que presentamos anteriormente. El siguiente Teorema nos brinda un resultado aún más general.

Teorema 4.8.2 Sea $T : H \rightarrow H$ un operador Hilbert-Schmidt y sea

$$TT^* = \sum \lambda_j^2 |\phi_j\rangle\langle\phi_j|,$$

con $\lambda_1^2 \geq \lambda_2^2 \geq \dots$, con $\lambda_j \rightarrow 0$ cuando $j \rightarrow \infty$. Entonces,

$$\sum_{j=1}^n |\phi_j\rangle\langle\phi_j| = \arg \max \{ \|Q_n T\|_{HS}^2 : \|Q_n\|_{HS}^2 = n, Q_n = Q_n^* = Q_n^2 \}.$$

Demostración. Notemos que

$$\begin{aligned} \|Q_n T\|_{HS}^2 &= \text{tr}((Q_n T)^* Q_n T) \\ &= \text{tr}(T^* Q_n^* Q_n T) \\ &= \text{tr}(T^* Q_n T) \\ &= \text{tr}(TT^* Q_n) \\ &= \text{tr}(Q_n TT^*) \\ &= \text{tr}(Q_n G). \end{aligned}$$

donde $G = TT^*$.

Como T es un operador Hilbert-Schmidt, es compacto y T^* también lo es. Así TT^* posee una descomposición espectral en la cual los autovalores solo tienen un punto de acumulación, el 0.

Sea $Q_n = \sum_{j=1}^n P_j$ donde cada P_j es de rango 1 y $P_i P_j = 0$ para $i \neq j$. Entonces,

$$\|Q_n T\|_{HS}^2 = \sum_{j=1}^n \|P_j T\|_{HS}^2, \quad \text{con } \|P_j\|_{HS}^2 = 1.$$

Sea \mathcal{L} el correspondiente Lagrangiano, es decir,

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} &= \sum_{j=1}^n \|P_j T\|_{HS}^2 - \sum_{j=1}^n \mu_j (\|P_j\|_{HS}^2 - 1) \\
&= \sum_{j=1}^n \langle P_j T, P_j T \rangle_{HS}^2 - \sum_{j=1}^n \mu_j (\langle P_j, P_j \rangle_{HS}^2 - 1) \\
&= \sum_{j=1}^n \langle P_j T, P_j T \rangle_{HS}^2 - \sum_{j=1}^n \mu_j (\langle P_j, P_j \rangle_{HS}^2 - 1) \\
&= \sum_{j=1}^n \langle P_j, T T^* P_j \rangle_{HS}^2 - \sum_{j=1}^n \mu_j (\langle P_j, P_j \rangle_{HS}^2 - 1).
\end{aligned}$$

Observemos que utilizando propiedades del operador adjunto,

$$\begin{aligned}
\langle P_j T, P_j T \rangle_{HS}^2 &= \|P_j T\|_{HS}^2 \\
&= \|(P_j T)^*\|_{HS}^2 \\
&= \|T^* P_j^*\|_{HS}^2 \\
&= \|T^* P_j\|_{HS}^2 \\
&= \langle T^* P_j, T^* P_j \rangle_{HS}^2 \\
&= \langle P_j, T T^* P_j \rangle_{HS}^2.
\end{aligned}$$

Luego,

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} &= \sum_{j=1}^n \langle P_j T, P_j T \rangle_{HS}^2 - \sum_{j=1}^n \mu_j (\langle P_j, P_j \rangle_{HS}^2 - 1) \\
&= \sum_{j=1}^n \langle P_j, T T^* P_j \rangle_{HS}^2 - \sum_{j=1}^n \mu_j (\langle P_j, P_j \rangle_{HS}^2 - 1).
\end{aligned}$$

Ahora busquemos derivar el Lagrangiano respecto de P_k , para ello aplicamos la derivada respecto de P_k e igualamos a 0,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial P_k} = 2(T T^* P_k - \mu_k P_k) = 0.$$

Entonces,

$$T T^* P_k = \mu_k P_k, \quad \mu_k = \lambda_k^2.$$

Así, P_k es la proyección espectral de $T T^*$. Luego, la conclusión del Teorema se sigue de esto.

Los detalles de la derivación del Lagrangiano respecto de P_k escapa a los objetivos de este trabajo. Decimos que podemos utilizar el argumento de la derivada

direccional a la forma sesquilineal $(x, x) \rightarrow \langle x, Tx \rangle_H$ en cualquier espacio de Hilbert H y obtener

$$\frac{d}{dx} \langle x, Tx \rangle_H = Tx + T^*x, \quad \text{con } x \in H.$$

En particular, si T es autoadjunto

$$\frac{d}{dx} \langle x, Tx \rangle_H = 2Tx.$$

Para más detalles ver [13]. ■

4.9. El Problema Dual

Ahora, tomamos nuestro conjunto de datos y nos ayudamos de la descomposición en valores singulares para luego lograr proyectarlos en los componentes principales.

Fijemos un conjunto de datos $X = (x_j)_{j=1}^n$, $x_j \in \mathbb{C}^m$. Sea $\Phi : X \rightarrow H(K)$ la función característica dada en la sección anterior, es decir

$$\Phi(X) = \begin{pmatrix} \Phi(x_1) & \dots & \Phi(x_n) \end{pmatrix}.$$

Sean L, L^* como las definimos anteriormente y

$$L^*L : H(K) \rightarrow H(K), \quad L^*Lf = \sum_{i=1}^n \Phi(x_i) \langle \Phi(x_i), f \rangle_{H(K)}.$$

Vimos que

$$L^*L = \Phi(X)\Phi(X)^*.$$

En vista del Teorema anterior L^*L contiene las principales direcciones que tiene la mayor varianza de $\Phi(X)$. En las aplicaciones es más conveniente encontrar primero la base de autovalores de LL^* , donde

$$LL^* = \Phi(X)^*\Phi(X) = (K(x_i, x_j))_{i,j=1}^n$$

es una matriz de $M_n(\mathbb{C})$.

Así $LL^* : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ es la matriz dada por

$$\begin{aligned} LL^* &= \Phi(X)^*\Phi(X) \\ &= \left(\langle \Phi(x_i), \Phi(x_j) \rangle_{H(K)} \right)_{i,j=1}^n \\ &= (K(x_i, x_j))_{i,j=1}^n. \end{aligned}$$

Aplicando descomposición en valores singulares $L^* = WDU^*$ y consecuentemente, $L = UDW^*$. Luego

$$\begin{aligned} LL^* &= UDW^*WDU^* \\ &= UDDU^* \\ &= UD^2U^*. \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} L^*L &= WDU^*UDW^* \\ &= WDDW^* \\ &= WD^2W^*, \end{aligned}$$

donde $D = \text{diag}(\lambda_j)$ consiste de los autovalores de $(LL^*)^{1/2}$. Como $L^* = WDU^*$, podemos reescribirlo como

$$L^* = \sum_{j=1}^n \lambda_j |w_j\rangle \langle u_j|.$$

Además, como $L^*L = WD^2W^*$, siendo $W = (w_j)$ la base que diagonaliza L^*L , resulta

$$L^*L = \sum_{j=1}^n \lambda_j^2 |w_j\rangle \langle w_j|.$$

Como $L^* = WDU^*$, se tiene que

$$W = L^*UD^{-1}.$$

4.10. Selección de características

Finalmente estamos en condiciones de dar un resultado que nos permitirá realizar las proyecciones necesarias en los componentes principales: la selección de características, también llamada selección de variables o de atributos, las cuales son relevantes para los datos. Presentamos a continuación una herramienta que nos permitirá encontrar estas características.

Sea $x \in \mathbb{C}^n$ un ejemplo de prueba. La imagen de $\Phi(x)$ puede ser proyectada en las componentes principales de $H(K)$ vía

$$\Phi(x) \longmapsto WW^*\Phi(x).$$

El mapeo $x \mapsto WW^*\Phi(x)$ es en general no lineal, como veremos en los próximos ejemplos. Nos centramos a continuación en el resultado principal del método.

Corolario 4.10.1 *Sea $L^* = WDU^*$ como los definimos anteriormente, suponiendo además que D es rango completo. Para todo $x \in \mathbb{C}^n$, los coeficientes de la proyección $WW^*\Phi(x)$ son*

$$WW^*\Phi(x) = \begin{pmatrix} \lambda_1^{-1} \sum_{j=1}^n \overline{u_{j1}} K(x_j, x) \\ \vdots \\ \lambda_1^{-1} \sum_{j=1}^n \overline{u_{jn}} K(x_j, x) \end{pmatrix}.$$

Demostración. Como $L^* = WDU^*$ vimos que $W = L^*UD^{-1}$, entonces $W^* = D^{-1}U^*L$. Luego

$$\begin{aligned} W^*\Phi(x) &= D^{-1}U^*L\Phi(x) \\ &= D^{-1}U^* \begin{pmatrix} \langle \Phi(x_1), \Phi(x) \rangle_{H(K)} \\ \vdots \\ \langle \Phi(x_n), \Phi(x) \rangle_{H(K)} \end{pmatrix} \\ &= D^{-1}U^* \begin{pmatrix} K(x_1, x) \\ \vdots \\ K(x_n, x) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \lambda_1^{-1} \sum_{j=1}^n \overline{u_{j1}} K(x_j, x) \\ \vdots \\ \lambda_1^{-1} \sum_{j=1}^n \overline{u_{jn}} K(x_j, x) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

■

Notamos que este corolario nos permite operar con el núcleo K , en lugar de tener que realizar los productos internos en $H(K)$, esto es gracias a la propia estructura de los núcleos.

4.11. Ejemplos

Consideremos el conjunto de datos X formado por dos clases, la clase "0" que consiste de 867 puntos uniformemente distribuidos en $\{x \in \mathbb{R}^3 : 0,6 < \|x\|^2 < 1\}$ y la clase "1" de 126 puntos en $\{x \in \mathbb{R}^3 : \|x\|^2 < 0,2\}$. Así X tiene dimensión 3×993 donde cada columna x_j de X corresponde a un punto de la muestra.

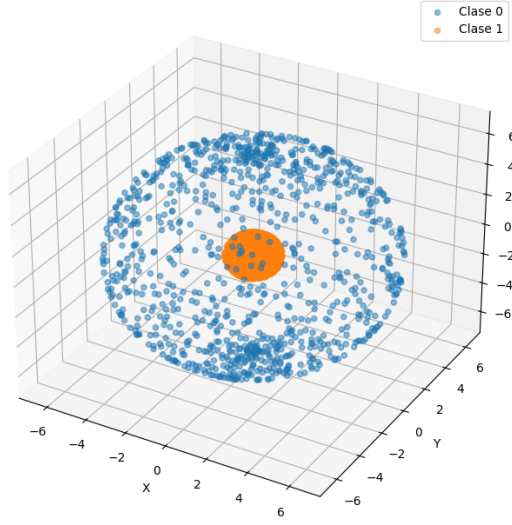


Figure 4.4: Datos en 3 dimensiones.

Elegimos el núcleo Gaussiano $K(x, y) = e^{-\|x-y\|^2/\sigma}$ con $\sigma = 0,05$, de forma tal que x_j está inmerso en el RKHS asociado por

$$x_j \rightarrow \Phi(x_j) = e^{-\|\cdot - x_j\|^2/\sigma}.$$

Proyectando $\Phi(x_j)$ en los dos primeros componentes principales, podemos representar a cada punto $x_j \in \mathbb{R}^3$ en dos dimensiones vía la función

$$x_j \rightarrow \Phi(x_j) \rightarrow \begin{pmatrix} \lambda_1^{-1} \sum_{k=1}^n \overline{u_{k1}} K(x_k, x_j) \\ \lambda_2^{-1} \sum_{k=1}^n \overline{u_{k2}} K(x_k, x_j) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2.$$

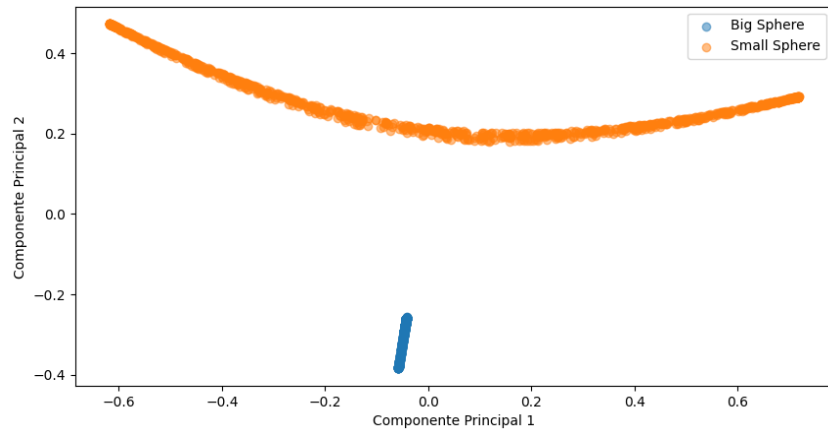
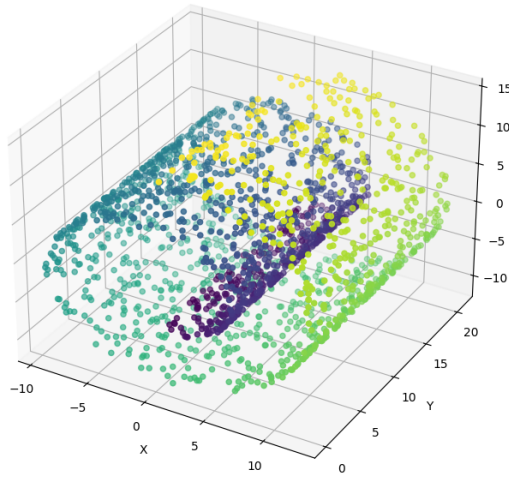


Figure 4.5: KPCA aplicado a los datos.

Así partimos de puntos en $x \in \mathbb{R}^3$, asociamos a cada punto en el espacio de Hilbert reproductor de núcleo con la función $\Phi(x)$, en esta ocasión conocemos a la función Φ pero esto no es siempre necesario ya que sólo con un núcleo definido positivo el Teorema de Moore-Aronszajn (Teorema 4.5.7) nos asegura un RKHS con una función característica correspondiente.

Consideremos el ejemplo del rollo suizo visto anteriormente y apliquemos Kernel PCA.



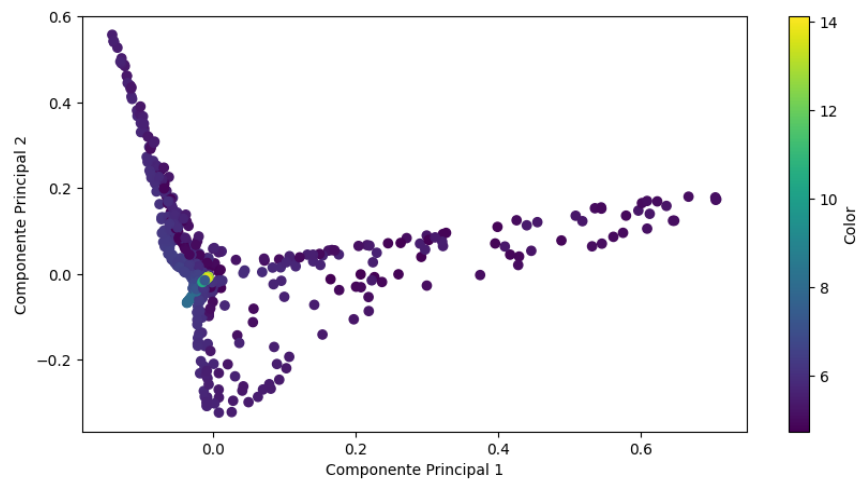


Figure 4.6: El rollo suizo original y la aplicacion de KPCA a este objeto.

Observamos que no siempre el método nos dará los resultados esperados.

Capítulo 5

Isomap

En vista de que no siempre el método de KPCA es efectivo, como pudimos observar en el último ejemplo del capítulo anterior, nos proponemos nuevamente descubrir estructuras de baja dimensión inmersas en conjuntos de datos de alta dimensión.

En Isomap tratamos con un conjunto de datos de \mathbb{R}^n y suponemos que están inmersos en una variedad suave M^d con $d < n$. Isomap intenta recuperar M solo con nuestro conjunto de datos. Una de las claves del algoritmo es estimar una distancia geodésica en M en términos de una distancia de grafo con respecto a un grafo G construido en base a los datos.

En el primer paso determina que puntos son vecinos en una variedad M basado en las distancias $d_X(i, j)$ entre los puntos i, j del espacio de entrada X . Esto se puede lograr conectando cada punto a todos los puntos en un radio ϵ o a sus K vecinos más cercanos. Estas relaciones son representados en un grafo ponderado G sobre los datos, con aristas de peso $d_X(i, j)$ entre los puntos vecinos.

En el segundo paso se estima la distancia geodésica $d_M(i, j)$ entre los pares de puntos de la variedad M computando los caminos más cercanos $d_G(i, j)$ en el grafo G .

En el último caso se aplica MDS a la matriz de distancias del grafo $D_G = \{d_G(i, j)\}$, construyendo una inmersión de los datos en un espacio Euclídeo d -dimensional Y que preserva de la mejor manera la geometría intrínseca de la variedad.

Más adelante veremos que, con la suficiente cantidad de datos, Isomap garantiza recuperar asintóticamente la verdadera dimensionalidad y estructura geométrica de variedad no lineales de mayor dimensión. Nos centraremos en la justificación matemática de por qué es posible realizar este algoritmo.

5.1. Muestras finitas y subvariedades

Sea $M = M^d$ una subvariedad compacta y suave d -dimensional del espacio Euclideo \mathbb{R}^n . La frontera y esquinas de frontera están permitidas, así que, por ejemplo, M puede ser un cubo d -dimensional.

La estructura de Riemann de M resulta en la métrica de la variedad d_M dada por

$$d_M(x, y) = \inf_{\gamma} \{L(\gamma)\},$$

donde γ varía sobre el conjunto de los arcos suaves por partes que conectan x con y en M , y L denota la longitud del arco. Notemos que $d_M(x, y)$ es generalmente distinta a la distancia Euclídea.

Sea $\{x_i\} \subset M$ un conjunto finito, que es nuestro conjunto de datos o conjunto muestral. Isomap intenta recuperar las distancias de la variedad $d_M(x_i, x_j)$, a partir de los puntos $\{x_i\} \subset \mathbb{R}^n$. Por supuesto, esto se hace de forma aproximada.

El algoritmo hace uso del grafo G formado por el conjunto de datos. Dado este grafo podemos definir dos métricas en el conjunto de datos. Sean $x, y \in \{x_i\}$, definimos

$$\begin{aligned} d_G(x, y) &= \min_P (||x_0 - x_1|| + \dots + ||x_{p-1} - x_p||), \\ d_S(x, y) &= \min_P (d_M(x_0, x_1) + \dots + d_M(x_{p-1}, x_p)), \end{aligned}$$

donde $P = (x_0, \dots, x_p)$ varía sobre todos los caminos sobre el borde de G que conectan x (x_0) con y (x_p).

Observamos que en la distancia d_G no es más que conectar los puntos mediante las aristas del grafo buscando el camino más corto. En cambio en la distancia d_S hacemos esta misma idea pero nos conectamos a los distintos puntos mediante la métrica de la variedad.

Así, dado el conjunto de datos y el grafo G podemos calcular d_G sin necesidad de conocer la variedad M . Por lo tanto, debemos probar que d_G es una buena aproximación de d_M . Para ello probaremos que $d_M \approx d_S$ y que $d_S \approx d_G$.

Proposición 5.1.1 *Dadas d_M , d_G y d_S como las definimos anteriormente, para todo $x, y \in \{x_i\}$ se cumple que*

$$\begin{aligned} d_M(x, y) &\leq d_S(x, y), \\ d_G(x, y) &\leq d_S(x, y). \end{aligned}$$

Demostración. Sean $x, y \in \{x_i\}$, por la desigualdad triangular sabemos que

$$d_M(x, y) \leq d_M(x, x_1) + d_M(x_1, x_2) + \dots + d_M(x_{p-1}, y),$$

donde $P = (x_0, \dots, x_p)$ es un camino sobre el borde de G que conecta $x = x_0$ con $x_p = y$. Esto se cumple para todos los caminos, por lo tanto tomando el mínimo entre ellos tenemos que

$$d_M(x, y) \leq d_S(x, y).$$

Por otro lado como las distancias Euclídeas $\|x_i - x_{i+1}\|$ son menores que las longitudes de arco $d(x_i, x_{i+1})$, se obtiene que

$$d_G(x, y) \leq d_S(x, y).$$

■

5.2. La condición de muestreo

Podemos dar algunas condiciones sobre el conjunto de datos $\{x_i\}$ y el grafo G que nos garantizan que d_S es una buena aproximación de d_M .

Teorema 5.2.1 *Sean $\epsilon, \delta > 0$ tales que $4\delta < \epsilon$. Si se cumple que*

1. *El grafo G contiene todas las aristas xy para las cuales $d_M(x, y) \leq \epsilon$.*
2. *Para cada punto m en M existe un dato x_i para el cual $d_M(m, x_i) \leq \delta$.*

Entonces para todo los datos x, y

$$d_M(x, y) \leq d_S(x, y) \leq (1 + 4\delta/\epsilon) d_M(x, y).$$

Nos referimos a la condición 2 como la δ -condición de muestreo o condición δ de muestreo.

Demostración. Sea γ un arco suave a partes que conecta x con y de longitud ℓ , es decir $d_M(x, y) = \ell$. Como ya vimos anteriormete, $d_M(x, y) \leq d_S(x, y)$. Buscamos encontrar un camino desde x a y sobre las aristas de G cuya longitud $d_M(x_0, x_1) + d_M(x_1, x_2) + \dots + d_M(x_{p-1}, x_p)$ es menor que $(1 + 4\delta/\epsilon) \ell$. La desigualdad del lado derecho surgirá de tomar el mínimo sobre γ .

Si $\ell \leq \epsilon - 2\delta$, entonces $\ell + 2\delta \leq \epsilon$, así, por la primer condición, x e y están conectadas por una arista, la cual podemos utilizar para nuestro camino.

Si $\ell > \epsilon - 2\delta$, podemos escribir $\ell = \ell_0 + (\ell_1 + \dots + \ell_1) + \ell_0$, donde $\ell_1 = \epsilon - 2\delta$ y $\epsilon - 2\delta \geq \ell_0 \geq (\epsilon - 2\delta)/2$. Si ℓ es pequeño, ℓ_1 no es necesario.

Ahora dividimos al arco γ en partes de acuerdo a esta descomposición, lo que nos da una serie de puntos $\gamma_0 = x, \dots, \gamma_p = y$ sobre γ .

Por la segunda condición, cada punto γ_i , con $i = 1, \dots, p-1$ está a una distancia δ de un punto de la muestra x_i . Aseguramos que el camino $xx_1x_2 \dots x_{p-1}y$ satisface lo pedido. Estimamos la longitud de cada arista de la siguiente manera

$$\begin{aligned} d_M(x_i, x_{i+1}) &\leq d_M(x_i, \gamma_i) + d_M(\gamma_i, \gamma_{i+1}) + d_M(\gamma_{i+1}, x_{i+1}) \\ &\leq \delta + \ell_1 + \delta \\ &= \epsilon \\ &= \epsilon \ell_1 / \ell_1 \\ &= \ell_1 \epsilon / (\epsilon - 2\delta). \end{aligned}$$

Y de modo similar

$$\begin{aligned} d_M(x, x_1) &\leq \ell_0 \epsilon / (\epsilon - 2\delta) \\ d_M(x_{p-1}, y) &\leq \ell_0 \epsilon / (\epsilon - 2\delta). \end{aligned}$$

Como $\ell_0 \epsilon / (\epsilon - 2\delta) \leq (\epsilon - 2\delta) \epsilon / (\epsilon - 2\delta) \leq \epsilon$, cada arista tiene de máximo longitud ϵ , entonces, por la primera condición, pertenece a G . Sumando las desigualdades obtenemos

$$\begin{aligned} d_M(x, y) &\leq d_M(x_0, x_1) + d_M(x_1, x_2) + \dots + d_M(x_{p-2}, x_{p-1}) + d_M(x_{p-1}, x_p) \\ &\leq \ell_0 \epsilon / (\epsilon - 2\delta) + \ell_1 \epsilon / (\epsilon - 2\delta) + \dots + \ell_1 \epsilon / (\epsilon - 2\delta) + \ell_0 \epsilon / (\epsilon - 2\delta) \\ &= (\ell_0 + \ell_1 + \dots + \ell_1 + \ell_0) \epsilon / (\epsilon - 2\delta) \\ &= \ell \epsilon / (\epsilon - 2\delta) \\ &< \ell / (1 + 4\delta/\epsilon). \end{aligned}$$

Donde en el último paso utilizamos que $1/(1-t) < 1+2t$ para $0 < t < 1/2$, y así

$$d_S(x, y) \leq (1 + 4\delta/\epsilon) d_M(x, y),$$

ya que $d_S(x, y)$ está definido tomando el mínimo entre los caminos.

Por la Proposición 5.1.1, $d_M(x, y) \leq d_S(x, y)$. ■

Así, d_S aproxima a d_M tan bien como querramos, suponiendo que ambas condiciones se cumplen.

5.3. Parámetros de la inmersión en una variedad

Para probar que $d_S \approx d_G$ debemos antes introducir algunos parámetros de la variedad inmersa.

Definición 5.3.1 *El mínimo radio de la curvatura $r_0 = r_0(M)$ se define como*

$$\frac{1}{r_0} = \max_{\gamma, t} \{ \|\ddot{\gamma}(t)\| \},$$

donde γ varía sobre todas las geodésicas de velocidad 1 en M y t pertenece al dominio D de γ . La segunda derivada es computada tomando a γ como un mapeo $D \rightarrow \mathbb{R}^n$.

Cualquier esfera Euclídea de radio r_0 tiene mínimo radio de curvatura igual a r_0 . La idea intuitiva es que las geodésicas se enrollan de forma "menos ajustada" que una esfera de radio r_0 .

Definición 5.3.2 *La separación mínima en ramas $s_0 = s_0(M)$ se define como el mayor número positivo para el cual $\|x - y\| < s_0$ implica que $d_M(x, y) \leq \pi r_0$, para $x, y \in M$.*

Notemos que la definición de rama puede interpretarse como un control o condición sobre la cantidad de puntos o datos que necesitaremos para que la distancia Euclídea sea comparable con la distancia en la variedad. En efecto, a mayor r_0 el s_0 debe ser más pequeño.

La existencia de r_0 y s_0 está asegurada por la compacidad de M .

Lema 5.3.3 *Si γ es una geodésica en M que conecta los puntos x e y , y $\ell = L(\gamma) \leq \pi r_0$ entonces*

$$2r_0 \sin(\ell/2r_0) \leq \|x - y\| \leq \ell.$$

Demostración. La desigualdad del lado derecho se deduce del hecho de que el segmento de línea que conecta x con y es más pequeño en longitud que el arco que conecta x con y . No incluiremos la demostración de la otra igualdad ya que escapa los objetivos de este trabajo, se puede encontrar en [5]. ■

Como $\sin(t) \geq t - t^3/6$ para todo $t \geq 0$, podemos escribir una versión débil del Lema anterior de la siguiente manera:

$$(1 - \ell^2/24r_0^2)\ell \leq \|x - y\| \leq \ell.$$

Así, es más fácil ver que cuando ℓ es pequeño los términos se aproximan a la igualdad.

También tenemos una aproximación de primer orden

$$(2/\pi)\ell \leq \|x - y\| \leq \ell,$$

que es válida para $\ell \leq \pi r_0$.

La desigualdad de la izquierda del Lema 5.3.3 proviene de la siguiente estimación.

Lema 5.3.4 (Lema de la longitud mínima) Sea $\gamma : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^n$ un arco suave que es parametrizado por la longitud de arco

$$||\dot{\gamma}(t)|| = 1,$$

que satisface

$$||\ddot{\gamma}(t)|| \leq \frac{1}{r},$$

para todo t en $[0, T]$. Entonces, para todo $0 \leq t \leq \pi r$ se cumple que

$$||\gamma(t) - \gamma(0)|| \geq 2r \sin(t/2r).$$

Corolario 5.3.5 Sea $\lambda > 0$, supongamos que $x_i, x_{i-1} \in M$ satisfacen lo siguiente,

$$||x_i - x_{i-1}|| < s_0,$$

$$||x_i - x_{i-1}|| \leq (2/\pi)r_0\sqrt{24\lambda}.$$

Supongamos también que existe un arco geodésico de longitud $d_M(x_i, x_{i-1})$ conectando x_i con x_{i-1} . Entonces

$$(1 - \lambda)d_M(x_i, x_{i-1}) \leq ||x_i - x_{i-1}|| \leq d_M(x_i, x_{i-1}).$$

Demostración. La desigualdad de la derecha se deduce de que el segmento de recta que une x_i con x_{i-1} tiene menor longitud que el arco que los une, $\ell = d_M(x_i, x_{i-1})$. Para la desigualdad de la izquierda, la primera condición nos dice que $\ell = d_M(x_i, x_{i-1}) \leq \pi r_0$, ya que así definimos a s_0 . Como asumimos que esta distancia es representada por un arco geodésico, podemos aplicar el Lema 4.14.3. Así, utilizando la aproximación de primer orden resulta

$$\ell \leq (2/\pi)||x_i - x_{i-1}||.$$

Como supusimos que $||x_i - x_{i-1}|| \leq (2/\pi)r_0\sqrt{24\lambda}$, tenemos que

$$\ell \leq (\pi/2)||x_i - x_{i-1}|| \leq r_0\sqrt{24\lambda}.$$

Luego, $\ell \leq r_0\sqrt{24\lambda}$, y consecuentemente,

$$\begin{aligned} \ell^2 &\leq r_0^2 24\lambda, \\ \ell^2/r_0^2 24 &\leq \lambda, \\ -\ell^2/r_0^2 24 &\geq -\lambda, \\ 1 - \lambda &\leq 1 - \ell^2/r_0^2 24. \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$(1 - \lambda)\ell = (1 - \lambda)d_M(x_i, x_{i-1}) \leq ||x_i - x_{i-1}||.$$

■

Observamos que las condiciones del Corolario nos describen como debe comportarse la variedad. Además, este Corolario se relaciona con la desigualdad $(1 - \lambda)d_S \leq d_G \leq d_S$, ya que d_S y d_M están definidas en términos de geodésicas y longitudes de segmentos de rectas, respectivamente. No obstante, debemos asegurarnos de que todos las aristas relevantes del grafo tengan un arco geodésico correspondiente.

Esta última suposición no es siempre válida. Si M es un dominio convexo en \mathbb{R}^n con un agujero en su interior, puntos de lados opuestos al agujero no están conectados por la geodésica más corta.

Para ello podemos poner la condición de que M sea convexa geodésicamente, es decir, para todo x, y en M estos están conectados por una geodésica de longitud $d_M(x, y)$.

Por ejemplo, los dominios convexos de \mathbb{R}^n son convexos geodésicamente, como lo son las variedades compactas de Riemann sin bordes. En general, si M es una variedad compacta de Riemann, entonces M es convexa geodésicamente si y sólo si su borde es convexo.

Esta noción puede ser plasmada en el siguiente teorema.

Teorema 5.3.6 *Sean ϵ_{\min} , ϵ_{\max} y δ números reales positivos, M una subvariedad compacta en \mathbb{R}^n , $\{x_i\}$ un conjunto de datos finito en M . Dado el grafo G en $\{x_i\}$ y $\lambda_1, \lambda_2 < 1$ números reales positivos. Supongamos que*

1. *El grafo G contiene a todas las aristas xy de longitud $\|x - y\| \leq \epsilon_{\min}$.*
2. *Todas las aristas de G tienen longitud $\|x - y\| \leq \epsilon_{\max}$.*
3. *El conjunto de datos $\{x_i\}$ satisface la δ -condición de muestreo en M .*
4. *La subvariedad M es geodésicamente convexa.*
5. *$\epsilon_{\max} < s_0$, donde s_0 es la separación mínima de ramas.*
6. *$\epsilon_{\max} \leq (2/\pi)r_0\sqrt{24\lambda_1}$, donde r_0 es el mínimo radio de curvatura de M .*
7. *$\delta \leq \lambda_2 \epsilon_{\min}/4$.*

entonces se cumple que para todo x, y en M

$$(1 - \lambda_1)d_M(x, y) \leq d_G(x, y) \leq (1 + \lambda_2)d_M(x, y).$$

Observamos que el Teorema nos permite asegurar que $d_G \approx d_M$ con el grado de precisión que nosotros querramos.

Demostración. Como $\|x - y\| \leq d_M(x, y)$, la primera condición implica que G contiene todas las aristas xy para las cuales $d_M(x, y) \leq \epsilon_{\min}$. Así podemos aplicar el Teorema 4.13.1, entonces

$$d_M(x, y) \leq d_S(x, y) \leq (1 + 4\delta/\epsilon_{\min}) d_M(x, y).$$

Como por la Proposición 4.12.1, $d_G(x, y) \leq d_S(x, y)$ y además $\delta \leq \lambda_2 \epsilon_{\min}/4$, tenemos que

$$d_G(x, y) \leq d_S(x, y) \leq (1 + 4\delta/\epsilon_{\min}) d_M(x, y) \leq (1 + \lambda_2) d_M(x, y),$$

lo que nos prueba la desigualdad de la derecha.

Para la otra desigualdad, elegimos un camino $x_0 x_1 \dots x_p$ que conecte x ($= x_0$) con y ($y = x_p$) a lo largo de las aristas del grafo que minimice la longitud total del grafo.

Observamos que entonces estamos en condiciones de aplicar el Corolario 4.14.8, ya que supusimos que $\|x - y\| \leq \epsilon_{\min} < s_0$ y $\|x - y\| \leq \epsilon_{\max} \leq (2/\pi)r_0\sqrt{24\lambda_1}$. Luego

$$\begin{aligned} d_M(x, y) &\leq d_M(x_0, x_1) + \dots + d_M(x_{p-1}, x_p) \\ &< (1 - \lambda_1)^{-1} \|x_0 - x_1\| + \dots + (1 - \lambda_1)^{-1} \|x_{p-1} - x_p\| \\ &= (1 - \lambda_1) d_G(x, y). \end{aligned}$$

Lo que prueba la desigualdad. ■

5.4. Límites Probabilísticos

En esta sección consideraremos que sucede cuando los puntos de muestra $\{x_i\}$ son elegidos de forma aleatoria y el grafo G es determinado explícitamente de acuerdo con una regla ϵ o regla K , las cuales veremos más adelante. En particular, queremos mostrar que las condiciones del Teorema 4.14.9 se cumplen con alta probabilidad cuando hay una cantidad suficientemente densa de puntos. Damos por conocidas nociones básicas de probabilidad, en caso contrario ver [2].

Primero discutiremos el proceso aleatorio. Sea $\alpha : M \rightarrow \mathbb{R}^+$, una función a valores reales positivos en M .

Suponemos que el conjunto de muestra $\{x_i\}$ es elegido de acuerdo a un proceso de Poisson con una función densidad α , es decir, que para cualquier conjunto medible $A \subseteq M$,

$$\Pr(A \text{ contiene exactamente } k \text{ puntos en } \{x_i\}) = \frac{e^{-a} a^k}{k!},$$

donde $a = \int_A \alpha$.

Bajo esta suposición, el número esperado de puntos en A es a . Notamos α_{\min} y α_{\max} como el mínimo y máximo valores de α en la variedad compacta M , respectivamente.

La elección de este proceso aleatorio no es muy significativa, los argumentos que utilizaremos son lo suficientemente generales. El proceso de Poisson es construido de forma tal que las regiones disjuntas se comportan de forma independiente unas de otras. Otra opción es tomar N puntos independientes, de una distribución de probabilidad fija $\hat{\alpha}$. Lo que sucede es que si N es lo suficientemente grande, es aproximado por una distribución de Poisson con densidad $\alpha = N\hat{\alpha}$.

Definimos a continuación las dos construcciones del grafo.

Definición 5.4.1 *La regla ϵ incluye las aristas xy en G cuando $\|x - y\| < \epsilon$, para algún $\epsilon > 0$.*

Definición 5.4.2 *La regla K incluye las aristas xy en G cuando y es uno de los K vecinos mas cercanos de x (o viceversa), donde el mas cercano se toma en la métrica Euclídea.*

Claramente las condiciones 1 y 2 del Teorema 4.14.9 se cumplen para la regla ϵ cuando $\epsilon_{\min} < \epsilon < \alpha_{\max}$. Más adelante probaremos que las condiciones 1 y 2 también se cumplen con alta probabilidad para la regla K . Ahora nos concentramos en la condición 3, la δ -condición de muestreo.

Lema 5.4.3 (Lema de muestreo) *Sean $\mu, \delta > 0$ y supongamos que $\{x_i\}$ es un conjunto de muestra elegido de forma aleatoria con una función de densidad α . Entonces la δ -condición de muestreo se satisface con probabilidad $1 - \mu$, siempre y cuando*

$$\alpha_{\min} > \log(V/\mu V_{\min}(\delta/4)) / V_{\min}(\delta/2).$$

Donde V es el volumen de M y $V_{\min}(r)$ es definida como el volumen de la bola mas pequeña de radio r con respecto a d_M ,

$$V_{\min}(r) = \min_{x \in M} \text{Vol}(B_x(r)).$$

Notemos que el límite inferior $V_{\min}(r)$ es de valores positivos por la compacidad de M .

Demostración. Comenzamos cubriendo a M con una familia finita de bolas de radio $\delta/2$. Tomamos la secuencia de centros p_1, p_2, \dots de modo tal que

$$p_{i+1} \notin \bigcup_{j=1}^i B_{p_j}(\delta/2).$$

Cuando esto ya no es posible, nos detenemos. Podemos realizar este recubrimiento ya que M es una variedad compacta es claro que la unión infinita de estas bolas

cubre a M por lo tanto existe un cubrimiento finito. Notemos que las bolas $B_{p_j}(\delta/4)$ son disjuntas, ya que ningún p_i esta a distancia $\delta/2$ de otro. Sigue que como máximo una cantidad $V/V_{\min}(\delta/4)$ de puntos pueden ser elegidos antes de que el proceso termine. Detengámonos en esta afirmación, el volumen de cada bola $B_{p_j}(\delta/4)$ es al menos $V_{\min}(\delta/4)$, además el volumen V será mayor a la suma de los volúmenes de estas bolas, entonces la cantidad de puntos que podemos elegir hasta que el proceso termine es $V/V_{\min}(\delta/4)$. Es decir, si N es la cantidad de puntos que podemos elegir hasta que el proceso termine,

$$\begin{aligned} NV_{\min}(\delta/4) &= \underbrace{V_{\min}(\delta/4) + \dots + V_{\min}(\delta/4)}_{N\text{-veces}} \\ &\leq V(M). \end{aligned}$$

Por lo tanto, $N \leq V(M)/V_{\min}(\delta/4)$.

Notemos que todo x en M pertenece a una bola $B_i = B_{p_j}(\delta/2)$. Si probamos que cada bola B_i contiene un dato, entonces la condición δ de muestreo se debe cumplir, ya que el diámetro de B_i es como máximo δ .

Luego,

$$\begin{aligned} \Pr(\text{la condición } \delta \text{ de muestreo se cumple}) &= \Pr(\text{ninguna bola } B_i \text{ es vacía}) \\ &= 1 - \Pr(\text{alguna bola } B_i \text{ es vacía}) \\ &\geq 1 - \sum_i \Pr(B_i \text{ es vacía}). \end{aligned}$$

Además,

$$\begin{aligned} \Pr(B_i \text{ es vacía}) &= \exp\left(-\int_{B_i} \alpha\right) \\ &\leq \exp(-V_{\min}(\delta/2)\alpha_{\min}), \end{aligned}$$

dado que $V_{\min}(\delta/2)\alpha_{\min} \leq V_{\min}(B_i)\alpha_{\min} \leq \int_{B_i} \alpha$. Así,

$$-\alpha_{\min}V(B_i) \geq -\int_{B_i} \alpha.$$

Como hay como máximo $V/V_{\min}(\delta/4)$ bolas, podemos estimar:

$$\Pr(\text{la condición } \delta \text{ de muestreo se cumple}) \geq 1 - \frac{V}{V_{\min}(\delta/4)} \exp(-V_{\min}(\delta/2)\alpha_{\min}).$$

Si α_{\min} satisface la condición del lema, entonces la expresión de la derecha debe ser mayor o igual a $1 - \mu$. ■

Un resultado similar puede ser derivado en la situación que tomemos un muestreo de N puntos independientes, de una distribución de probabilidad fija $\hat{\alpha}$. En este caso la condición

$$N\hat{\alpha}_{\min} > \log(V/\mu V_{\min}(\delta/4)) / V_{\min}(\delta/2)$$

nos asegura que la condición δ de muestreo se cumple con probabilidad $1 - \mu$ y la demostración es idéntica a la anterior.

En este trabajo, por simplicidad, ignoraremos los efectos de borde ya que se escapa de los objetivos de este trabajo (para mayor detalle ver [5]). Se pueden hacer modificaciones a las demostraciones usando $V_{\min}(r)$ en lugar de $\eta_d r^d$.

Teorema 5.4.4 *Sea M una subvariedad compacta en \mathbb{R}^n isométricamente equivalente a un dominio convexo en \mathbb{R}^d . Dados $\lambda_1, \lambda_2, \mu$ y sea $\epsilon > 0$ elegido de forma tal que $\epsilon > s_0$ y $\epsilon \leq (2/\pi)r_0\sqrt{24\lambda_1}$. Un conjunto de datos $\{x_i\}$ es elegido de forma aleatorio mediante un proceso de Poisson con función densidad α y la regla ϵ es utilizada para construir un grafo G en $\{x_i\}$.*

Supongamos que

$$\alpha_{\min} > \frac{\log(V/\mu\eta_d(\lambda_2\epsilon/16)^d)}{\eta_d(\lambda_2\epsilon/8)^d}.$$

Entonces, con probabilidad de al menos $1 - \mu$ y ignorando los efectos del borde, se cumple que para todo x, y en M

$$(1 - \lambda_1)d_M(x, y) \leq d_G(x, y) \leq (1 + \lambda_2)d_M(x, y).$$

Demostración. Observemos que estamos en condiciones de aplicar el Teorema 20.9, ya que por como definimos a la regla ϵ se cumplen la condición 1 y 2, la condición δ de muestreo se cumple con probabilidad de al menos $1 - \mu$ por el Lema de muestreo (Lema 5.4.3), además M es una subvariedad compacta en \mathbb{R}^n isométricamente equivalente a un dominio convexo en \mathbb{R}^d y el resto de condiciones no son más que nuestras hipótesis. ■

5.5. Extensión hacia la regla K

En esta sección buscamos ampliar los resultados para cubrir la regla K . Ahora las condiciones 1 y 2 del Teorema 4.14.9 no se cumplen automáticamente. Encontraremos con alta probabilidad que se cumplen ambas condiciones. Recordemos estas condiciones

1. El grafo G contiene a todas las aristas xy de longitud $\|x - y\| \leq \epsilon_{\min}$.

2. Todas las aristas de G tienen longitud $\|x - y\| \leq \epsilon_{\max}$.

La idea es la siguiente. Consideremos una distribución de Poisson en \mathbb{R}^d con una función de densidad constante α . Así, el número esperado de puntos en una bola de radio ℓ es $\alpha \eta_d \ell^d$, dado que el volumen de la bola es $\eta_d \ell^d$. Esto es, si $K + 1 = \alpha \eta_d \ell^d$ y construimos el grafo de acuerdo a la regla K , entonces podemos esperar que la máxima longitud de un arista en cualquier vértice sea cercana a ℓ (en la métrica de la variedad). Así podemos elegir ℓ para obtener la cantidad de K puntos vecinos que nosotros querramos.

Si elegimos $\ell_{\min} < \ell < \ell_{\max}$ entonces es probable que el entorno $B_x(\ell_{\min})$ del punto x contenga menos de K otros puntos y también es probable que el entorno $B_x(\ell_{\max})$ del punto x contenga más de K otros puntos. Si ambas cosas suceden, entonces las K aristas vecinas más cercanas:

1. incluirán a todas las aristas xy donde $\|x - y\| \leq \epsilon_{\min} = (2/\pi)\ell_{\min}$,
2. no incluirán a todas las aristas donde $\|x - y\| > \epsilon_{\max} = \ell_{\max}$.

Estas son las condiciones que deseamos probar con alta probabilidad para los todos los puntos de muestra. Entonces buscamos acotar el número de puntos en $B_x(\ell_{\min})$, $B_x(\ell_{\max})$ menor a $K + 1$ y mayor a $K + 1$, respectivamente.

Para una valor fijo pequeño de α , estas acotaciones no son efectivas. Sin embargo, podemos hacer que α tienda a infinito. Para mantener la escala de longitud ϵ fija, preservamos la relación $(K + 1)/\alpha$, así K también tiende a infinito. Bajo esta circunstancia, la ley fuerte de los grandes números prevalece y la probabilidad de que $B_x(\ell_{\min})$ contenga demasiados puntos o que $B_x(\ell_{\max})$ contenga muy pocos, se hace cada vez más pequeña.

Teorema 5.5.1 (Teorema de ℓ_{\min}) *Sea ℓ_{\min} tal que*

$$\alpha_{\max} V_{\max}(2\ell_{\min}) < \frac{K + 1}{2},$$

donde $V_{\max}(r)$ es el volumen de la bola en M de radio r más grande. Entonces, con probabilidad no menor a $1 - \mu$, ninguna bola de radio $B_x(\ell_{\min})$ contiene más de $K + 1$ puntos de muestra, donde

$$\mu = (e/4)^{(K+1)/2} \frac{V}{V_{\min}(2\ell_{\min})}.$$

Teorema 5.5.2 (Teorema de ℓ_{\max}) *Sea ℓ_{\max} tal que*

$$\alpha_{\min} V_{\min}(\ell_{\max}/2) > 2(K + 1),$$

Entonces, con probabilidad no menor a $1 - \mu$, ninguna bola de radio $B_x(\ell_{\text{máx}})$ contiene menos de $K + 1$ puntos de muestra, donde

$$\mu = e^{-(K+1)/4} \frac{V}{V_{\text{mín}}(\ell_{\text{máx}}/4)}.$$

Para probar estos teoremas nos ayudamos del siguiente resultado cuya demostración puede verse en [8].

Lema 5.5.3 (Cotas de Chernoff) *Si X es una variable aleatoria con distribución de Poisson de media m , entonces para todo $t > 0$*

$$\Pr(X > (1+t)m) < \left(\frac{e^t}{(1+t)^{1+t}} \right)^m$$

y

$$\Pr(X < (1+t)m) < e^{-mt^2/2}.$$

En particular, podemos deducir que si $t = 1$:

$$\Pr(X > 2m) < (e/4)^m.$$

Y si $t = 1/2$:

$$\Pr(X < m/2) < e^{-m/8}.$$

Veamos ahora la demostración de los Teoremas previos al Lema anterior.

Demostración. Para probar el teorema de $\ell_{\text{mín}}$, primero cubrimos a M con bolas de radio $\ell_{\text{mín}}$. Como vimos anteriormente, esto requiere como máximo $V/V_{\text{mín}}(\ell_{\text{mín}}/2)$ bolas. Sea p uno de los centros de estas bolas. Consideremos la bola $B_p(2\ell_{\text{mín}})$, el número esperado de puntos en esta bola es como máximo $\alpha_{\text{máx}} V_{\text{máx}}(2\ell_{\text{mín}})$ que por hipótesis es menor que $(K+1)/2$. Aplicando el Lema anterior tenemos que

$$\Pr(B_p(2\ell_{\text{mín}}) \text{ contiene } > K+1 \text{ puntos de muestra}) < (e/4)^{(K+1)/2}.$$

Como cada punto x en M está a distancia $\ell_{\text{mín}}$ de uno de los centros p , se sigue que cada bola $B_x(\ell_{\text{mín}})$ está contenida en alguna bola $B_p(2\ell_{\text{mín}})$. Ya que hay como máximo $V/V_{\text{mín}}(\ell_{\text{mín}}/2)$ centros, podemos estimar el error de la probabilidad:

$$\Pr(\text{Alguna } B_p(\ell_{\text{mín}}) \text{ contiene } > K+1 \text{ puntos}) \leq (e/4)^{(K+1)/2} \frac{V}{V_{\text{mín}}(2\ell_{\text{mín}})}.$$

De forma similiar, para probar el teorema de $\ell_{\text{máx}}$, cubrimos a M con bolas de radio $\ell_{\text{máx}}$. Como vimos anteriormente, esto requiere como máximo $V/V_{\text{mín}}(\ell_{\text{máx}}/4)$ bolas. Sea p uno de los centros de estas bolas y consideremos la bola $B_p(\ell_{\text{máx}}/2)$. El

número esperado de puntos en esta bola es como mínimo $\alpha_{\min} V_{\min}(\ell_{\max}/4)$ que, por hipótesis, es mayor que $2(K+1)$. Aplicando la cota de Chernoff resulta,

$$\Pr(B_p(\ell_{\max}/2) \text{ contiene } < K+1 \text{ puntos de muestra}) < (e/4)^{-(K+1)/4}.$$

Como cada punto x en M pertenece a $B_p(\ell_{\max}/2)$ para algún p , $B_p(\ell_{\max}/2) \subset B_p(\ell_{\max})$ y además, hay como máximo $\alpha_{\min} V_{\min}(\ell_{\max}/4)$ centros. Estimamos el error de probabilidad,

$$\Pr(\text{Alguna } B_p(\ell_{\max}) \text{ contiene } < K+1 \text{ puntos}) < (e/4)^{-(K+1)/4} \frac{V}{V_{\min}(\ell_{\max}/4)}.$$

Esto prueba los teoremas de ℓ_{\min} y ℓ_{\max} . ■

Podemos combinar estos resultados para formar un teorema de acuerdo a la regla K :

Teorema 5.5.4 *Sea M una subvariedad compacta de \mathbb{R}^n isométricamente equivalente a un dominio convexo de \mathbb{R}^d . Sean $\lambda_1, \lambda_2, \mu$ y $\epsilon > 0$ tal que $\epsilon < s_0$ y $\epsilon \leq (2/\pi)r_0\sqrt{24\lambda_1}$. Un conjunto de datos $\{x_i\}$ es elegido aleatoriamente de una distribución de Poisson con función densidad α , que tiene una variación acotada $A = \alpha_{\max}/\alpha_{\min}$. Fijando la relación*

$$\frac{K+1}{\alpha_{\min}} = \frac{\eta_d(\epsilon/2)^d}{2}$$

y usando la regla K para construir un grafo G en $\{x_i\}$.

Suponiendo que

$$\begin{aligned} \alpha_{\min} &> \frac{4 \ln(8V/\mu\eta_d(\lambda_2\epsilon/32\pi)^d)}{\eta_d(\lambda_2\epsilon/16\pi)^d}, \\ e^{-(K+1)/4} &\leq \frac{\mu\eta_d(\epsilon/4)^d}{4V}, \\ (e/4)^{(K+1)/2} &\leq \frac{\mu\eta_d(\epsilon/8)^d}{16AV}. \end{aligned}$$

Entonces con probabilidad de al menos $1 - \mu$ y no teniendo en cuenta los efectos de los bordes, se cumple que para todo $x, y \in M$

$$(1 - \lambda_1)d_M(x, y) \leq d_G(x, y) \leq (1 + \lambda_2)d_M(x, y).$$

Demostración. Sea $\epsilon_{\max} = \ell_{\max}$ y $\epsilon_{\min} = \ell_{\min}$. Notemos que por la aproximación de primer orden del Lema 20.3, para todo $p \in M$, la bola euclídea de centro p y radio ϵ_{\min} en el espacio ambiente \mathbb{R}^n contiene como máximo tantos puntos $\{x_i\}$ como en $B_p(\ell_{\min})$, siempre y cuando $\epsilon_{\min} < s_0$. De forma análoga, la bola euclídea de centro

p y radio ϵ_{\max} en el espacio ambiente \mathbb{R}^n contiene al menos tantos puntos $\{x_i\}$ como en $B_p(\ell_{\max})$, siempre y cuando $\epsilon_{\max} < s_0$.

Así, podemos reemplazar los teoremas de ℓ_{\min} y ℓ_{\max} por teoremas de ϵ_{\min} y ϵ_{\max} , esto lo hacemos ya que regla K y la regla ϵ están definidas en términos de las distancias Euclídeas, no en la distancia de la variedad. Por la primera parte de los teoremas de ℓ_{\min} y ℓ_{\max} obtenemos las siguientes condiciones:

$$\begin{aligned} 2\eta_d(\pi\epsilon_{\min})^d &\leq \frac{(K+1)}{\alpha_{\max}} \\ \frac{\eta_d(\epsilon_{\max}/2)^d}{2} &\leq \frac{(K+1)}{\alpha_{\min}}. \end{aligned}$$

Podemos tomar la igualdad en ambas condiciones,

$$\begin{aligned} 2\eta_d(\pi\epsilon_{\min})^d &= \frac{(K+1)}{\alpha_{\max}} \\ \frac{\eta_d(\epsilon_{\max}/2)^d}{2} &= \frac{(K+1)}{\alpha_{\min}}. \end{aligned}$$

Como $\alpha_{\max} = A\alpha_{\min}$, tenemos que

$$\begin{aligned} \alpha_{\max} &= \frac{(K+1)}{2\eta_d(\pi\epsilon_{\min})^d} \\ \alpha_{\max} &= \frac{2(K+1)}{A\eta_d(\epsilon_{\max}/2)^d}. \end{aligned}$$

Así,

$$\frac{1}{\eta_d(\pi\epsilon_{\min})^d} = \frac{1}{4A\eta_d(\epsilon_{\max}/2)^d}$$

Despejando ϵ_{\min} obtenemos que

$$\epsilon_{\min} = \frac{\epsilon_{\max}}{2\pi(4A)^{1/d}}.$$

Ahora basta combinar el Lema de muestreo con los teoremas de ℓ_{\min} y ℓ_{\max} . Obtenemos una cota inferior en α_{\min} que garantiza la condición de muestreo con probabilidad de al menos $1 - \mu_1/2$ a partir del Lema del muestreo romando $\delta = \dots$ y cotas inferiores en K para obtener un error de probabilidad de como máximo $\mu_2/4$ en los teoremas de ℓ_{\min} y ℓ_{\max} . Así estamos en condiciones de aplicar el Main Theorem A, las primeras dos condiciones son aseguradas por los teoremas de ℓ_{\min} y ℓ_{\max} , la condición de muestreo se verifica por el lema de muestreo y $\delta \leq \lambda_2\epsilon_{\min}/4$. El resto de condiciones se verifican por las hipótesis del Teorema. Además, podemos escribir estas acotaciones en términos de $\epsilon = \epsilon_{\max}$. El error de probabilidad total es entonces como máximo $\mu/2 + \mu/4 + \mu/4 = \mu$, donde elegimos como μ al máximo entre μ_1 y μ_2 . ■

5.6. Conclusiones finales

Al principio de este Capítulo mencionamos que d_G converge asintóticamente a d_M , y por lo tanto, Isomap recupera asintóticamente la estructura de los datos que es isométrica a un dominio convexo del espacio Euclídeo.

El hecho de que d_G converge asintóticamente a d_M no es más que una aplicación de los Teoremas 4.15.4 y 4.16.4. Que Isomap recupere asintóticamente la estructura de los datos de estructura intrínsecamente Euclídea, es en realidad una afirmación sobre como la inmersión Euclídea d -dimensional producida por Isomap se relaciona a una hipotética configuración Euclídea. Imaginamos que los datos fueron generados primero tomando la muestra de una región convexa Euclídea d -dimensional V , y luego mapeando esos puntos isométricamente (no necesariamente de forma lineal) en un espacio de dimensión mayor X . Los puntos observados en X son la entrada de Isomap y el objetivo del algoritmo es invertir este mapeo isométrico no lineal $V \rightarrow X$. Notemos por v_i a las coordenadas de un punto i en el espacio Euclídeo original V , que buscamos recuperar, y sean y_i las coordenadas i en la inmersión generada por Isomap. Afirmamos que en el límite de infinitos puntos muestrales, las coordenadas $\{y_i\}$ producidas aplicando MDS en una cantidad finita de puntos converge asintóticamente a las coordenadas originales $\{v_i\}$, hasta un isomorfismo Euclídeo.

Esta afirmación resulta de propiedades del algoritmo de escalamiento multidimensional, que se aplica en el último paso de Isomap. MDS toma como entrada la distancia de pares entre un conjunto de puntos y construye una inmersión d -dimensional Euclídea que captura esas distancias de la mejor manera posible. Cuando MDS recibe como entrada distancias euclídeas de una configuración de puntos d -dimensional, construirá una inmersión d -dimensional que captura estas distancias perfectamente, de este modo recupera exactamente la configuración de puntos, hasta un isomorfismo. En general, cualquier inmersión de menor dimensión no captura las distancias perfectamente, así es fácil detectar que d es la verdadera dimensión de los datos. Más aún, MDS es continuo, pequeñas variaciones en los datos de entrada conllevan a pequeñas variaciones en la inmersión de salida.

El segundo paso de Isomap produce distancias estimadas d_G que convergen a las verdaderas distancias geodésicas d_M . Si las coordenadas originales $\{v_i\}$ fueron tomadas de un espacio Euclídeo convexo V , entonces las coordenadas geodésicas serán las mismas a las distancias euclídeas en V . Estos dos hechos garantizan que MDS (y por lo tanto Isomap) recuperara asintóticamente la configuración euclídea original de los datos. Podemos obtener cotas de cuan rápido las coordenadas de la inmersión $\{y_i\}$ convergen a las coordenadas originales $\{v_i\}$ combinando los Teoremas 4.15.4 o 4.16.4 con el análisis de perturbación de MDS que se puede encontrar en [9].

Apliquemos ahora el método al rollo suizo.

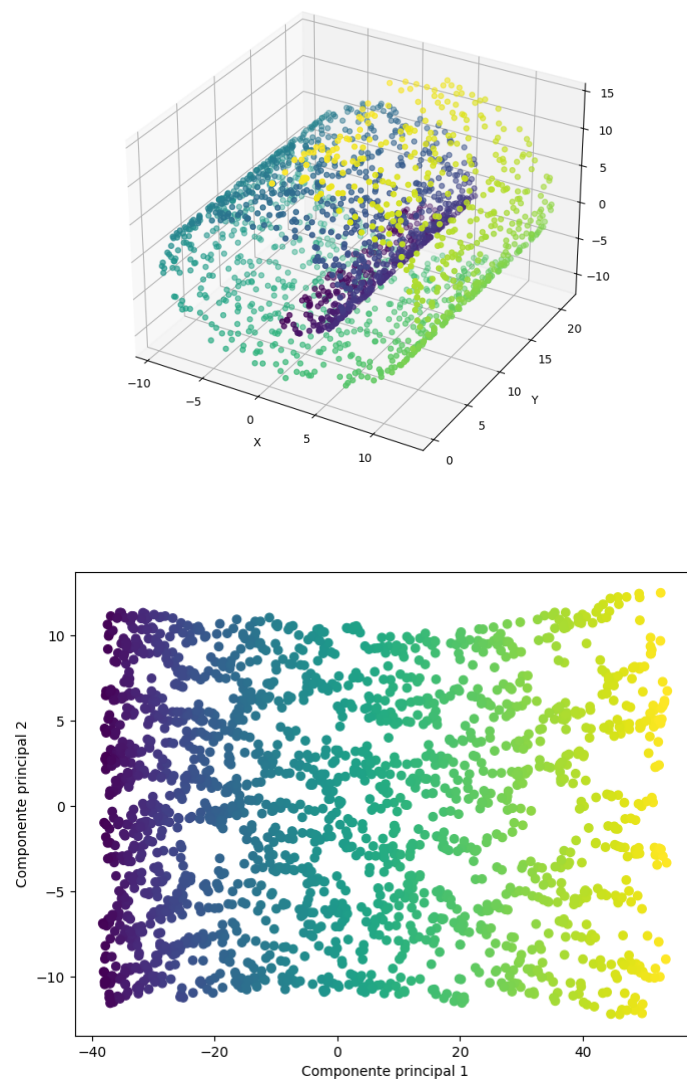


Figure 4.7: El rollo suizo original y la aplicacion de Isomap a este objeto.

Observamos que a diferencia de KPCA, isomap logra "desenrollar" el objeto.

Bibliografía

- [1] J. ANTEZANA Y D. STOJANOFF, **Análisis Matricial**; (2021).
- [2] G. AYALA Y F. MONTES, **Probabilidad básica**, (2020), Universidad de Valencia.
- [3] A. BERLINET AND C. THOMAS-AGNAN, **Reproducing Kernel Hilbert Spaces in Probability and Statistics**, (2004), Springer.
- [4] A. BERLINET Y C. THOMAS-AGNAN, **Reproducing Kernel Hilbert Spaces In Probability and Statistics**, (2004), Springer.
- [5] M. BERNSTEIN, V. DE SILVA, J.C. LANGFORD Y J.B. TENENBAUM, **Graph approximations to geodesics on embedded manifolds** (2020).
- [6] I. BORG Y P.J.F. GROENEN, **Modern Multidimensional Scaling: Theory and Applications**, (2005), Springer.
- [7] J. CERDÀ, **Linear Functional Analysis**, (2010), American Mathematical Society.
- [8] H. CHERNOFF, **A measure of asymptotic efficiency for test of a hypothesis based upon the sum of observations**, (1952), Annals of Mathematical Statistics 23.
- [9] T. F. COX Y M. A. A. COX, **Multidimensional Scaling**, (1994), Chapman and Hall.
- [10] P.A.M. DIRAC, **The Principles of Quantum Mechanics**, (1958), Oxford University Press.
- [11] M.P. DO CARMO, **Riemannian Geometry**, (1992), Birkhäuser.
- [12] M.P. DO CARMO, **Differential Geometry of Curves and Surfaces**, (1976), Prentice-Hall.
- [13] P.E.T. JORGENSEN, S. KANG, M.S. SONG, Y J. TIAN, **An infinite dimensional analysis of kernel principal components**, (2022).

- [14] P.E.T. JORGENSEN Y M.S. SONG, **Entropy encoding, Hilbert space and Karhunen-Loève transform**, (2007).
- [15] P.E.T. JORGENSEN, M.S. SONG Y J. TIAN, **Positive definite kernels, algorithms frames and approximations**, (2021).
- [16] J.M. LEE, **Riemannian Manifolds: An Introduction to Curvature**, (1991), Springer.
- [17] M. REED Y B. SIMON, **Methods of Modern Mathematical Physics**, (1980), Academic Press.
- [18] J.A. RODRIGO, **Análisis de Componentes Principales (Principal Component Analysis, PCA) y t-SNE**, (2017).
- [19] W. RUDIN, **Functional Analysis**, (1991), McGraw-Hill, Inc.
- [20] .D. SEJDINOVIC AND A. GRETTON, **What is an RKHS?**; (2012)
<https://api.semanticscholar.org/CorpusID:6969172.1>.
- [21] R. WILKINSON, **Multivariate Statistics**, (2024), University of Nottingham.