Parte II: Capítulo 5

5.3 Aprendizaje de Variedades

(Manifold learning)

6.1 Teoría de Funciones Topológicas - Prólogo

(Topological function theory - Prologue)

Eduardo Velázquez

23 de noviembre de 2023

CIMAT

5.3 Aprendizaje de Variedades

Objetivo: Estudiar una variedad riemanniana M extrayendo información acerca de ella a partir de un conjunto finito de puntos $X = \{x_1, x_2. \cdots, x_N\}$.

Una *cubierta buena* $\mathcal{U} = \{U_i\}$ de un espacio topológico es una cubierta abierta tal que cualquier intersección de un número finito de elementos de $\mathcal{U}$ es vacía o contraible.

Lema 1

Lema de Nerve (Hatcher, Algebraic topology) Sea $\mathcal{U} = \{U_i\}$ una buena cubierta de M. Entonces la homología del correspondiente complejo de Cech de $\mathcal{U}$ es igual al de la variedad:

$$H_*\left(\check{C}\left(\mathcal{U}\right)\right) = H_*\left(M\right).$$

CIMAT

Sea $X \subset M$ un conjunto finito de puntos. Consideremos el complejo de Rips $R_t(X)$ con conjunto de vértices X y símplices σ formados por los subconjuntos de X que tienen diámetro menor a t. Para X suficientemente denso (o t suficientemente grande) la colección $\mathcal{U}_t = \mathcal{U}_t(X) = \{B_{2^{t/2}}(x)\}_{x \in X}$ es una cubierta de M. En este caso consideramos también al complejo de Čech, $\check{C}_t(X)$, asociado a esta cubierta. También sabemos que los módulos de persistencia $V_a = \check{C}_{2^a}$ y $W_a = R_{2^a}$ están 1-entrelazados.

Teorema 5.3.2
Sea M una variedad riemanniana y $X \subset M$ una muestra finita de puntos. Supongamos que existe $\varepsilon_- < \varepsilon_+$ con $\varepsilon_+ - \varepsilon_- > 4$, tal que para cualquier $t \in (\varepsilon_-, \varepsilon_+]$, la colección $\mathcal{U}_t$ es una buena cubierta de M. Entonces para cualquier $k \geq 0$ la k-ésima homología de M puede recuperarse del correspondiente módulo de persistencia de Rips (W, π^W) asociado a X, es decir,

$$\mathrm{im}(\pi^W_{\varepsilon_-+1,\varepsilon_+-1}) \simeq H_k(M) \ \forall\, k \geq 0\,.$$

Demostración.
Sea (V, π) un módulo de persistencia e $I \subset \mathbb{R}$ un intervalo de la forma $(a, b]$, donde $b \leq \infty$. Consideremos el módulo de persistencia truncado $(\bar{V}, \bar{\pi})$, es decir, $\bar{V}_t$ coincide con V_t para $t \in I$ y cero en otro caso, y $\bar{pi}$ se trunca conforme a este criterio.

CIMAT

Teorema 5.3.2 (cont.)

Ejercicio 5.3.4

Sean (V, π) y (W, σ) dos módulos de persistencia δ-entrelazados, y sea $I = (a, b]$ un intervalo fijo tal que $b \leq \infty$. Muestre que los módulos de persistencia truncados respecto I, $\bar{V}$ y $\bar{W}$ también están δ-entrelazados.

Sea $J = (\varepsilon_-, \varepsilon_+]$ y $k \geq 0$ un entero, escribiremos V y W para referirnos sólo a la homología de grado k. Como $\mathcal{U}_t$ es una buena cubierta para cualquier $t \in J$, por el Lema de Nerve tenemos que

$$V_t = H_k(\check{C}(U_t)) = H_k(M)\,,$$

así que la dimensión de V_t es constante en J. Entonces el número de intervalos en $\mathcal{B}(V)$ que contienen a J es exactamente $\dim H_k(M)$.

Sean $\bar{V}$ y $\bar{W}$ los módulos de persistencia truncados respecto J, por el ejercicio 5.3.4, $\bar{V}$ y $\bar{W}$ están 1-entrelazados; y por el Teorema de Isometry sus códigos de barras satisfacen

$$d_{\text{bot}}\left(\mathcal{B}(V), \mathcal{B}(W)\right) \leq 1\,,$$

es decir, existe un 1-apareamiento $\mu : \mathcal{B}(\bar{V}) \to \mathcal{B}(\bar{W})$.
Notemos que $\mathcal{B}(\bar{V})$ contiene exactamente $\dim H_k(M)$ copias de J, cada una de ellas de longitud mayor a 4, por lo que está apareada por μ a una barra de $\mathcal{B}(\bar{W})$ que contiene a $J^1 = (\varepsilon_- + 1, \varepsilon_+ - 1]$. Por otra parte, cada barra $\mathcal{B}(\bar{W})$ que contiene a J^1 es aún de longitud mayor a 2, por lo que está apareada por μ a una barra de $\mathcal{B}(\bar{V})$ que contiene a $J^2 = (\varepsilon_- + 2, \varepsilon_+ - 2]$. Esta barra sólo puede ser de la forma J, por lo tanto, el número de intervalos en $\mathcal{B}(\bar{W})$ que contienen a J^1 es exactamente $\dim H_k(M)$, es decir,

$$\dim \operatorname{im}(\pi^{W}_{\varepsilon_-+1,\varepsilon_+-1}) = \dim H_k(M).$$

$\square$

Observaciones 5.3.5

- En la práctica, barras largas en el código de barras del complejo de Rips contienen más información confiable sobre la homología de M que las barras cortas, las cuales se pueden interpretar como ruido topológico [39]. Por lo que a mayor tamaño $(\varepsilon_-, \varepsilon_+]$, más confiable el cálculo de $H_*(M)$ propuesto en el Teorema 5.3.2.

[39] Robert Ghrist, *Barcodes: the persistent topology of data*, Bull. Amer. Math. Soc. 45 (2008)

CIMAT

Observaciones 5.3.5 (cont.)

- En [73] consideran el caso en el que X es una colección de puntos $\frac{\varepsilon}{2}$-densa muestreada de una subvariedad $M \subset \mathbb{R}^n$. Considere la unión de bolas euclidianas $U = \{\bigcup_{x_i \in X} B_t(x_i)\}$ centrado en los puntos de X. Resulta que al variar t en un cierto intervalo que depende de la geometría de M, la deformación del conjunto U se retrae a M, y en particular sus homologás son iguales. Además, si X consta de un número suficientemente grande de puntos independientes e idénticamente distribuidos muestreados con respecto a la medida de probabilidad uniforme en M, la homología de U es igual a la homología de M.

[73] Partha Niyogi, Stephen Smale, and Shmuel Weinberger,

Finding the homology of submanifolds with high confidence from random samples,

Discrete Comput. Geom. 39 (2008)

CIMAT

Observaciones 5.3.5 (cont.)

- En [60] se obtiene el siguiente resultado: Para una variedad riemanniana cerrada M, existe $\varepsilon_0 > 0$ lo suficientemente pequeña, tal que para cualquier $0 < \varepsilon \leq \varepsilon_0$, existe $\delta_\varepsilon > 0$, para la que si Y es un espacio métrico que tiene una distancia de Gromov-Hausdorff menor que δ_ε a M , entonces su complejo Rips $R_\varepsilon(Y)$ es homotópicamente equivalente a M. En particular se sigue que: si $Y \subseteq M$ es finito y δ_ε-denso en M, entonces $R_\varepsilon(Y)$ y M tienen el mismo tipo de homotopía.

[60] Janko Latschev, *Vietoris-Rips complexes of metric spaces near a closed Riemannian manifold*, Arch. Math. (Basel) 77 (2001)

Estudia características de funciones suaves en una variedad que son invariantes bajo la acción del grupo de difeomorfismo.

- Denotaremos como $||\cdot||_0$ a la norma uniforme, y como $||\cdot||_2$ a la norma L_2.
- Para una función de Morse f, $\nu(f)$ denotará el número de barars en el código de barras de f.
- $\zeta(M)$ es el número de rayos infinitos.
- $\nu(f, c)$ denotará al número de barras finitas de longitud mayor a c.
- $\ell(f) := \text{length}(\mathcal{B}(f) \cap [\min f, \max f])$ mide la longitud total de todas las barras finitas de f y los segmentos de los rayos infinitos en el intervalo $[\min f, \max f]$).

Observaciones

- $c\nu(f, c)$ es decreciente en c y $c\nu(f, c) \leq \ell(f)$.
- ℓ es discontinua bajo perturbaciones en la norma uniforme: Se pueden generar un conjunto arbitrariamente grande de barras cortas mediante perturbaciones; sin embargo, para cualquier par de funciones de Morse f y h tenemos

$$\ell(f) - \ell(g) \leq (2\nu(f) + \xi(M))||f - h||_0$$

y

$$\nu(f, c) \geq \nu(h, c + 2||f - h||_0) \, .$$

Estas desigualdades se siguen de que los códigos de barras de f y g admiten un δ-apareamiento con $\delta = ||f - h||_0$.

CIMAT

Observaciones

- Sea f una función de Morse en $\mathbb{S}^1$, todos los puntos críticos de f son mínimos locales o máximos locales, más aún, si hay N mínimos locales $x_1, \cdots, x_N$ también hay N máximos locales $y_1, \cdots, y_N$ que pueden ordenarse como

$$x_1, y_1, x_2, y_2, \cdots, c_N, y_N, x_1.$$

- El código de barras de f contiene $N-1$ barras finitas de grado 0 cuyos extremos del lado izquierdo son mínimos y cuyos extremos del lado derecho son máximos; así como dos barras infinitas de grado 1 y 0 comenzando en el máximo global y el mínimo global,respectivamente. De esto se sigue:

$$\ell(f) = \sum_{i=1}^{N} (f(y_i) - f(x_i)).$$

CIMAT

Observaciones (cont.)

- Por otra parte,

$$\ell(f) = \frac{1}{2}\int_0^{2\pi} ||f'(t)||\, dt.$$

En consecuencia,

$$\nu(f, c) \leq \pi ||f'||_0 / c\,.$$

Teorema 6.1.1 (Teorema de Chebyshev)

Sea $\mathcal{T}_n$ el conjunto de polinomios trigonométricos de grado menor o igual a n en $\mathbb{S}^1$ y sea $p \in \mathcal{T}_{n-1}$. Entonces p es la mejor aproximación uniforme en $\mathcal{T}_{n-1}$ a una función f si y sólo si existen $2n$ puntos $0 \leq x_1 \leq \cdots \leq x_{2n} \leq 2\pi$ tales que las diferencias $f(x_i) - p(x_i)$ alcanzan el valor máximo $||f - p||_0$ con signos alternantes.

A la existencia de estos puntos extremos se le llama *alternancia*.

Proposición 6.1.2

Sean h, q dos funciones de Morse en una variadad cerrada M tal que para alguna $c > 0$ q tiene estrictamente menos de $2\nu(h,c) + \zeta(M)$ puntos críticos. Entonces

$$||h - q||_0 \geq c/2.$$

Demostración.

Supongamos lo contrario, i.e. $||h - q||_0 < (c - \varepsilon)/2$ para alguna $\varepsilon > 0$ suficientemente grande. Sea N el número de puntos críticos de q. Exactamente $\zeta(M)$ de ellos contribuyen a los rayos infinitos del código de barras. Entonces el número de barras finitas en el código de barras de q no puede ser mayor a $(N - \zeta(M))/2$. Por tanto, $\nu(q,\varepsilon) < \nu(h,c)$; sin embargo por la ec. 24:

$$\nu(q,\varepsilon) \geq \nu(h, \varepsilon + 2||h - q||_0) \geq \nu(h,c),$$

lo cual es una contradicción. $\square$

Demostración Teorema de Chebyshev ($\Rightarrow$)

Sea $h = f - p$ y $c = ||h||_0$. Por la propiedad de alternancia, el código de barras de h consiste en dos rayos infinitos y $\nu(h, 2c - \varepsilon) = n - 1$ para $\varepsilon > 0$ suficientemente pequeña (Ejercicio).

Por otra parte, todo polinomio trigonométrico q no constante de grado menor o igual a $n - 1$ tiene a lo más $2n - 2$ puntos críticos. Por la proposición 6.1.2,

$$||h - q||_0 \geq c,$$

pero

$$h - q = f - (p + q) \Rightarrow ||f - r||_0 \geq c$$

para cualquier polinomio trigonométrico $r \in \mathcal{T}_{n-1}$. Sin embargo como $||f - p||_0 = c$, p es la mejor aproximación polinomial de grado menor o igual a $n - 1$.