

# Índice

1 Vocabulario y Notación .....	1
2 Preliminares .....	3
2.1 El problema de clasificación <sup>1</sup> .....	3
2.2 Estimación de densidad por núcleos .....	5
2.3 Estimación de densidad multivariada .....	8
2.4 Variedades de Riemann .....	14
2.5 Clasificación en variedades .....	30
2.6 Aprendizaje de distancias .....	31
3 Propuesta Original .....	51
3.1 Evaluación .....	52
4 Resultados .....	57
4.1 In Totis .....	57
4.2 Lunas, círculos y espirales ( $D = 2, d = 1, k = 2$ ) .....	59
4.3 Pionono, Eslabones, Helices y Hueveras ( $D = 3$ ) .....	77
5 Conclusiones .....	92
5.1 Trabajo Futuro .....	94
5.2 A incorporar .....	95
6 Listados .....	96
Bibliografía .....	98
7 Apéndice A: Fichas de resultados por dataset .....	101
8 Apéndice B: Código (?) .....	101
8.1 Arenero .....	101

## 1 Vocabulario y Notación

A lo largo de esta monografía tomaremos como referencia enclopédica el excelente *Elements of Statistical Learning* (Hastie, Tibshirani y Friedman, 2009). En la medida de lo posible, basaremos nuestra notación en la suya.

Típicamente, denotaremos a las variables independientes<sup>2</sup> con  $X$ . Si  $X$  es un vector, accederemos a sus componentes con subíndices,  $X_j$ . En el contexto del problema de clasificación, la variable *cualitativa* dependiente<sup>3</sup> será  $G$  (de «G»rupo). Usaremos letras mayúsculas como  $X, G$  para referirnos a los aspectos genéricos de una variable. Los valores *observados* se escribirán en minúscula, de manera que el  $i$ -ésimo valor observado de  $X$  será  $x_i$  (de nuevo,  $x_i$  puede ser un escalar o un vector).

---

<sup>1</sup>adaptado de (Hastie, Tibshirani y Friedman, 2009, §2.4, «Statistical Decision Theory»)

<sup>2</sup>También conocidas como predictoras, o *inputs*

<sup>3</sup>También conocida como variable respuesta u *output*

Representaremos a las matrices con letras mayúsculas en negrita,  $\mathbf{X}$  e.g.: el conjunto de  $N$  vectores  $p$ -dimensionales  $\{x_i, i \in \{1, \dots, N\}\}$  será representado por la matriz  $\mathbf{X}$  de dimensión  $N \times p$ .

En general, los vectores *no* estarán en negrita, excepto cuando tengan  $N$  componentes; esta convención distingue el  $p$ -vector de *inputs* para la  $i$ -ésima observación,  $x_i$ , del  $N$ -vector  $\mathbf{x}_j$  con todas las observaciones de la variable  $X_j$ . Como todos los vectores se asumen vectores columna, la  $i$ -ésima fila de  $\mathbf{X}$  es  $x_i^T$ , la traspuesta de la  $i$ -ésima observación  $x_i$ .

A continuación, algunos símbolos y operadores utilizados a lo largo del texto:

$\mathbb{R}$	los números reales; $\mathbb{R}_+$ denotará los reales estrictamente positivos.
$\mathbb{R}^p$	el espacio euclídeo de dimensión $p$
$[k]$	el conjunto de los enteros positivos del 1 hasta $k$ , $\{1, 2, 3, \dots, k\}$
$\mathcal{M}$	una variedad arbitraria <sup>4</sup>
$d_x$	la dimensión «natural» <sup>5</sup> del elemento $x$
$h$	la ventana ( $h \in \mathbb{R}$ ) en un estimador de densidad por núcleos en $\mathbb{R}$
$\mathbf{H}$	ídем $h$ , para estimadores en $\mathbb{R}^p$ ( $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{p \times p}$ )
$\ \cdot\ $	norma euclídea del elemento $x$
$\mathbf{X}$	una muestra de $N$ elementos $p$ -dimensionales ( $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times p}$ )
$X_{i,j}$	la $j$ -ésima dimensión del $i$ -ésimo elemento de $\mathbf{X}$
$\mathbf{1}(x)$	la función indicadora, $\mathbf{1}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \text{ es verdadero} \\ 0 & \text{si no} \end{cases}$
$\Pr(\cdot)$	función de probabilidad <sup>6</sup>
$\mathbb{E}(\cdot)$	la función esperanza <sup>6</sup>
$\text{Var}(\cdot)$	la función varianza <sup>6</sup>
i.i.d.	independientes e idénticamente distribuidos <sup>7</sup>
$\emptyset$	el conjunto vacío
$\overline{S}$	la <i>clausura</i> de $S$ (la unión de $S$ y sus puntos límites)
$\lambda(x)$	la medida de Lebesgue de $x$ en $\mathbb{R}^d$
$a \mapsto b$	la función que «toma» $a$ y «devuelve» $b$ en notación de flechas

---

<sup>4</sup>típicamente Riemanniana, compacta y sin frontera; oportunamente definiremos estos calificativos

<sup>5</sup>la dimensión de un elemento es su cantidad de componentes, la dimensión de un espacio es la dimensión de cualquiera de sus elementos

<sup>6</sup>en general no hará falta definir el espacio muestral ni la  $\sigma$ -álgebra correspondientes; de hacer falta se indicarán con subíndices

<sup>7</sup>típicamente los elementos aleatorios de  $\mathbf{X}$  son i.i.d.

$y \propto x$	«y es proporcional a x», existe una constante $c : y = c \times x$
«c.s.»	«casi seguramente», re. convergencia de elementos aleatorios

## 2 Preliminares

### 2.1 El problema de clasificación<sup>8</sup>

#### 2.1.1 Definición y vocabulario

El *aprendizaje estadístico supervisado* busca estimar (aprender) una variable *respuesta* a partir de cierta(s) variable(s) *predictora(s)*. Cuando la *respuesta* es una variable *cualitativa*, el problema de asignar cada observación  $X$  a una clase  $G \in \mathcal{G} = \{\mathcal{G}_1, \dots, \mathcal{G}_K\}$  se denomina *de clasificación*. En general, reemplazaremos los nombres o «etiquetas» de clases  $\mathcal{G}_i$  por los enteros correspondientes,  $G \in [K]$ . En esta definición del problema las clases son

- *mutuamente excluyentes*: cada observación  $X_i$  está asociada a lo sumo a una clase
- *conjuntamente exhaustivas*: cada observación  $X_i$  está asociada al menos a una clase.

Definición 2.1.1 (clásificador): Un *clásificador* es una función  $\hat{G}(X)$  que para cada observación intenta aproximar su verdadera clase  $G$  por  $\hat{G}$ <sup>9</sup>.

Para construir  $\hat{G}$ , contaremos con una muestra o *conjunto de entrenamiento*  $\mathbf{X}, \mathbf{g}$ , de pares  $(x_i, g_i), i \in \{1, \dots, N\}$  conocidos.

Para discernir cuán bien se «ajusta» un clásificador a los datos, la teoría requiere de una «función de pérdida»  $L(G, \hat{G}(X))$ <sup>10</sup>. Será de especial interés la función de clasificación  $f$  que minimiza el «error de predicción esperado» EPE<sup>11</sup>:

$$\hat{G} = \arg \min_f \text{EPE}(f) = \arg \min_f \mathbb{E}(L(G, f(X))) \quad (1)$$

---

<sup>8</sup>adaptado de (Hastie, Tibshirani y Friedman, 2009, §2.4, «Statistical Decision Theory»)

<sup>9</sup>pronunciado «ge sombrero»

<sup>10</sup>*loss function* en inglés. A veces también «función de riesgo» - *risk function*.

<sup>11</sup>del inglés *expected prediction error*

<sup>12</sup>Aquí «condicionar» implica factorizar la densidad conjunta  $\Pr(X, G) = \Pr(G|X) \Pr(X)$  donde  $\Pr(G|X) = \Pr(X, G)/\Pr(X)$ , y repartir la integral bivariada de manera acorde.

donde la esperanza es contra la distribución conjunta  $(X, G)$ . Por la ley de la probabilidad total, podemos condicionar a  $X^{12}$  y expresar el EPE como

$$\begin{aligned}\text{EPE}(f) &= \mathbb{E}_{X,G} \left( L(G, \hat{G}(X)) \right) \\ &= \mathbb{E}_X \mathbb{E}_{G|X} \left( L(G, \hat{G}(X)) \right) \\ &= \mathbb{E}_X \sum_{k \in [K]} L(\mathcal{G}_k, \hat{G}(X)) \Pr(\mathcal{G}_k | X)\end{aligned}\tag{2}$$

Y basta con minimizar punto a punto para obtener una expresión computable de  $\hat{G}$ :

$$\begin{aligned}\hat{G}(x) &= \arg \min_f \mathbb{E}(L(G, f(X))) \\ &= \arg \min_{g \in \mathcal{G}} \sum_{k \in [K]} L(\mathcal{G}_k, g) \Pr(\mathcal{G}_k | X = x)\end{aligned}\tag{3}$$

Con la *pérdida 0-1*<sup>13</sup>, la expresión se simplifica a

$$\begin{aligned}\hat{G}(x) &= \arg \min_{g \in \mathcal{G}} \sum_{k \in [K]} \mathbb{1}(\mathcal{G}_k \neq g) \Pr(\mathcal{G}_k | X = x) \\ &= \arg \min_{g \in \mathcal{G}} [1 - \Pr(g | X = x)] \\ &= \arg \max_{g \in \mathcal{G}} \Pr(g | X = x)\end{aligned}\tag{4}$$

Esta razonable solución se conoce como el *clasificador de Bayes*, y sugiere que clasifiquemos a cada observación según la clase modal<sup>14</sup> condicional a su distribución conjunta  $\Pr(G|X)$ . Su error esperado de predicción EPE se conoce como la *tasa de Bayes*. Un aproximador directo de este resultado es el clasificador de «k vecinos más cercanos»<sup>15</sup>

Definición 2.1.2 (clasificador de k-vecinos-más-cercanos): Sean  $x^{(1)}, \dots, x^{(k)}$  los  $k^{16}$  vecinos más cercanos a  $x$ , y  $g^{(1)}, \dots, g^{(k)}$  sus respectivas clases. El clasificador de k-vecinos-más-cercanos - que notaremos **KN** - le asignará a  $x$  la clase más frecuente entre  $g^{(1)}, \dots, g^{(k)}$ . Más formalmente:

$$\hat{G}_{\text{kn}}(x) = g = \arg \max_{g \in \mathcal{G}} \sum_{i \in [k]} \mathbb{1}(g^{(i)} = g)\tag{5}$$

---

<sup>13</sup>que no es otra cosa que la función indicadora de un error en la predicción,  $\mathbb{1}(\hat{G}, G) = \mathbb{1}(\hat{G} \neq G)$

<sup>14</sup>i.e., la de mayor probabilidad

<sup>15</sup>del inglés *k-nearest-neighbors*

<sup>16</sup>que no guarda relación alguna con la cantidad  $K$  del problema de clasificación

### 2.1.2 Clasificador de Bayes empírico

La *Regla de Bayes*,

$$\Pr(G|X) = \frac{\Pr(X|G) \times \Pr(G)}{\Pr(X)} \quad (6)$$

nos sugiere una reescritura de  $\hat{G}$ :

$$\begin{aligned} \hat{G}(x) &= g = \arg \max_{g \in \mathcal{G}} \Pr(g | X = x) \\ &\Leftrightarrow \Pr(g | X = x) = \max_{g \in \mathcal{G}} \Pr(g | X = x) \\ &\Leftrightarrow \Pr(g | X = x) = \max_{g \in \mathcal{G}} \Pr(X = x | g) \times \Pr(g) \\ &\Leftrightarrow \Pr(\mathcal{G}_k | X = x) = \max_{k \in [K]} \Pr(X = x | \mathcal{G}_k) \times \Pr(\mathcal{G}_k), \end{aligned} \quad (7)$$

donde el segundo  $\Leftrightarrow$  vale siempre que  $\Pr(X = x) > 0$  – y dado que *observamos*  $X = x$ , el supuesto es razonable.

A las probabilidades «incondicionales» de clase  $\Pr(\mathcal{G}_k)$  se las suele llamar su «distribución a priori», y notarlas por  $\pi = (\pi_1, \dots, \pi_K)^T$ ,  $\sum \pi_k = 1$ . Una aproximación razonable, si es que el conjunto de entrenamiento se obtuvo por muestreo aleatorio simple, es estimarlas a partir de las proporciones muestrales:

$$\begin{aligned} \forall k \in [K], \quad \hat{\pi}_k &= N^{-1} \sum_{i \in [N]} \mathbb{1}(g_i = \mathcal{G}_k) \\ &= \frac{\#\{g_i : g_i = \mathcal{G}_k, i \in [N]\}}{N} \end{aligned} \quad (8)$$

Resta hallar una aproximación  $\widehat{\Pr}(X = x | \mathcal{G}_k)$  a las probabilidades condicionales  $X | \mathcal{G}_k$  para cada clase.

## 2.2 Estimación de densidad por núcleos

Tal vez la metodología más estudiada a tales fines es la estimación de densidad por núcleos, reseñada en (Hastie, Tibshirani y Friedman, 2009, §6.6). En el caso unidimensional, al estimador resultante se lo conoce por el nombre de Parzen-Rosenblatt, por sus contribuciones fundacionales en el área (Rosenblatt, 1956; Parzen, 1962).

### 2.2.1 Estimación unidimensional

Para fijar ideas, asumamos que  $X \in \mathbb{R}$  y consideremos la estimación de densidad en una única clase para la que contamos con  $N$  ejemplos  $\{x_1, \dots, x_N\}$ . Una aproximación  $\hat{f}$  directa sería

$$\hat{f}(x_0) = \frac{\#\{x_i \in \mathcal{N}(x_0)\}}{N \times h} \quad (9)$$

donde  $\mathcal{N}$  es un vecindario métrico de  $x_0$  de diámetro  $h$ .

Esta estimación es irregular, con saltos discretos en el numerador, por lo que se prefiere el estimador «suavizado por núcleos» de Parzen-Rosenblatt. Pero primero: ¿qué es un núcleo?

**Definición 2.2.1** (función núcleo o *kernel*):

Se dice que  $K(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  es una *función núcleo* si cumple que

1. toma valores reales no negativos:  $K(u) \geq 0$ ,
2. está «normalizada»:  $\int K(u)du = 1$ ,
3. es simétrica en torno al cero:  $K(u) = K(-u)$  y
4. alcanza su máximo en el centro:  $\max_u K(u) = K(0)$

*Observación:* Todas las funciones de densidad simétricas centradas en 0 son núcleos; en particular, la densidad «normal estándar»

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \quad (10)$$

lo es.

*Observación:* Si  $K(u)$  es un núcleo, entonces  $K_h(u) = \frac{1}{h} K(\frac{u}{h})$  también lo es.

**Definición 2.2.2** (estimador de densidad por núcleos):

Sea  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)^T$  una muestra i.i.d. de cierta variable aleatoria escalar  $X \in \mathbb{R}$  con función de densidad  $f$ . Su estimador de densidad por núcleos, KDE<sup>17</sup> o estimador de Parzen-Rosenblatt es

$$\hat{f}(x_0) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{h} K\left(\frac{x_0 - x_i}{h}\right) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N K_h(x_0 - x_i) \quad (11)$$

donde  $K_h$  es un núcleo según [Definición 2.2.1](#). Al parámetro  $h$  se lo conoce como «ventana» de suavizado o *smoothing*.

*Observación:* La densidad de la distribución uniforme centrada en 0 de diámetro 1,  $U(x) = \mathbb{1}(\frac{1}{2} < x \leq \frac{1}{2})$  es un núcleo. Luego,

$$U_h(x) = \frac{1}{h} \mathbb{1}\left(-\frac{h}{2} < x < \frac{h}{2}\right) \quad (12)$$

---

<sup>17</sup>de *Kernel Density Estimator*, por sus siglas en inglés

también es un núcleo válido, y por ende el estimador de Ecuación 9 resulta estrechamente emparentado al estimador de [Definición 2.2.2](#):

$$\begin{aligned}\hat{f}(x_0) &= \frac{\#\{x_i \in \mathcal{N}(x_0)\}}{N \times h} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i \in [N]} \frac{1}{h} \mathbb{1}\left(-\frac{h}{2} < x_i - x_0 < \frac{h}{2}\right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i \in [N]} U_h(x_i - x_0)\end{aligned}\quad (13)$$

con la diferencia de que el estimador de Ecuación 9 fija el *diámetro* del vecindario a considerar, y el de [Definición 2.2.2](#) fija la *cantidad* de vecinos a tener en cuenta<sup>18</sup>.

### 2.2.2 Clasificador de densidad por núcleos

Si  $\hat{f}_k, k \in [K]$  son estimadores de densidad por núcleos de cada una de las  $K$  densidades condicionales  $X|\mathcal{G}_k$  según [Definición 2.2.2](#), podemos construir el siguiente clasificador

[Definición 2.2.3](#) (clasificador de densidad por núcleos): Sean  $\hat{f}_1, \dots, \hat{f}_K$  estimadores de densidad por núcleos según [Definición 2.2.2](#). Sean además  $\hat{\pi}_1, \dots, \hat{\pi}_K$  las estimaciones de la probabilidad incondicional de pertenecer a cada grupo  $\mathcal{G}_1, \dots, \mathcal{G}_k$ . Luego, la siguiente regla constituye un clasificador de densidad por núcleos - lo notaremos KDC :

$$\begin{aligned}\hat{G}_{\text{KD}}(x) = g &= \arg \max_{i \in [K]} \widehat{\Pr}(\mathcal{G}_i \mid X = x) \\ &= \arg \max_{i \in [K]} \widehat{\Pr}(X = x \mid \mathcal{G}_i) \times \widehat{\Pr}(\mathcal{G}_i) \\ &= \arg \max_{i \in [K]} \hat{f}_i(x) \times \hat{\pi}_i\end{aligned}\quad (14)$$

### 2.2.3 Clasificadores duros y suaves

Un clasificador que asigna a cada observación *una clase* - la más probable, se suele llamar *clasificador duro*. Un clasificador que asigna a cada observación *una distribución de probabilidades de clase*  $\hat{\gamma}$ <sup>19</sup> se suele

<sup>18</sup>Al primero se lo conoce como  $\varepsilon$ - nearest neighbors ( $\varepsilon$ -NN) con  $\varepsilon$  denotando el *radio* del vecindario; el segundo es el ya descrito  $k$ -NN.

<sup>19</sup> $\hat{\gamma}$  approximará  $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_K)^T$  con  $\gamma_i = \Pr(G = \mathcal{G}_i)$ ,  $\sum_{i \in [K]} \gamma_i = 1$ .

llamar *clasificador blando*. Dado un clasificador blando  $\hat{G}_{\text{Blando}}$ , es trivial construir el clasificador duro asociado  $\hat{G}_{\text{Duro}}$ :

$$\hat{G}_{\text{Duro}}(x_0) = \arg \max_i \hat{G}_{\text{Blando}}(x_0) = \arg \max_i \hat{\gamma}_i \quad (15)$$

*Observación:* El clasificador de [Definición 2.2.3](#) es la versión dura de un clasificador blando  $\hat{G}_{\text{KD}}(x) = \hat{\gamma}$ , donde

$$\hat{\gamma}_i = \frac{\hat{f}_i(x) \times \hat{\pi}_i}{\sum_{i \in [K]} \hat{f}_i(x) \times \hat{\pi}_i} \quad (16)$$

*Observación:* Ciertos clasificadores sólo pueden ser duros, como  $\hat{G}_{1\text{-NN}}$  (el clasificador de [Definición 2.1.2](#) con  $k = 1$ ), o aquellos derivados de algoritmos clasifican sin estimar probabilidades condicionales, como los basados en SVMs<sup>20</sup>.

Dos clasificadores *blandos* pueden tener la misma pérdida 0 – 1, pero «pintar» dos panoramas muy distintos respecto a cuán «seguros» están de cierta clasificación. Por caso, sea  $\varepsilon > 0$  y arbitrariamente pequeño:

$$\begin{aligned} \hat{G}_{C(\text{onfiado})}(x_0) : \widehat{\Pr}(\mathcal{G}_i \mid X = x_0) &= \begin{cases} 1 - \varepsilon & \text{si } i = 1 \\ \varepsilon/(K - 1) & \text{si } i \neq 1 \end{cases} \\ \hat{G}_{D(\text{udoso})}(x_0) : \widehat{\Pr}(\mathcal{G}_i \mid X = x_0) &= \begin{cases} \frac{1}{K} + \varepsilon & \text{si } i = 1 \\ \frac{1}{K} - \varepsilon/(K - 1) & \text{si } i \neq 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (17)$$

$\hat{G}_C$  está «casi seguro» de que la clase correcta es  $\mathcal{G}_1$ , mientras que  $\hat{G}_D$  está otorga casi la misma probabilidades a todas las clases. Para el entrenamiento y análisis de clasificadores blandos como el de densidad por núcleos, será relevante encontrar funciones de pérdida que recompensen la confianza de un clasificador *cuando ésta esté justificada*<sup>21</sup>.

## 2.3 Estimación de densidad multivariada

### 2.3.1 Naive Bayes

Una manera «ingenua» de adaptar el procedimiento de estimación de densidad ya mencionado a  $X$  multivariadas, consiste en sostener el falso-pero-útil supuesto de que sus componentes  $X_1, \dots, X_p$  son independientes entre sí. De este modo, la estimación de densidad conjunta se reduce a la estimación de  $p$  densidades marginales univariadas. Dada cierta clase  $j$ <sup>22</sup>, podemos escribir la densidad condicional  $X|j$  como

---

<sup>20</sup>«[máquinas de vectores de soporte](#)», del inglés *support vector machines*

<sup>21</sup>y lo penalicen cuando no - es decir, cuando la confianza está puesta en la clase errada. Más al respecto, más adelante.

<sup>22</sup>donde el entero  $j \in [K]$  es la etiqueta de la clase  $\mathcal{G}_j$

$$f_j(X) = \prod_{k=1}^p f_{jk}(X_k) \quad (18)$$

A este procedimiento se lo conoce como «Naive Bayes» (Hastie, Tibshirani y Friedman, 2009, §6.6.3), y a pesar de su aparente ingenuidad es competitivo contra algoritmos mucho más sofisticados en un amplio rango de tareas. En términos de cómputo, permite resolver la estimación con  $K \times p$  KDE univariados. Además, permite que en  $X$  se combinen variables cuantitativas y cualitativas: basta con reemplazar la estimación de densidad para las componentes  $X_k$  cualitativos por su correspondiente histograma.

### 2.3.2 KDE multivariado

Consideremos un *dataset* compuesto por observaciones muestradas de dos círculos concéntricos con algo de ruido:

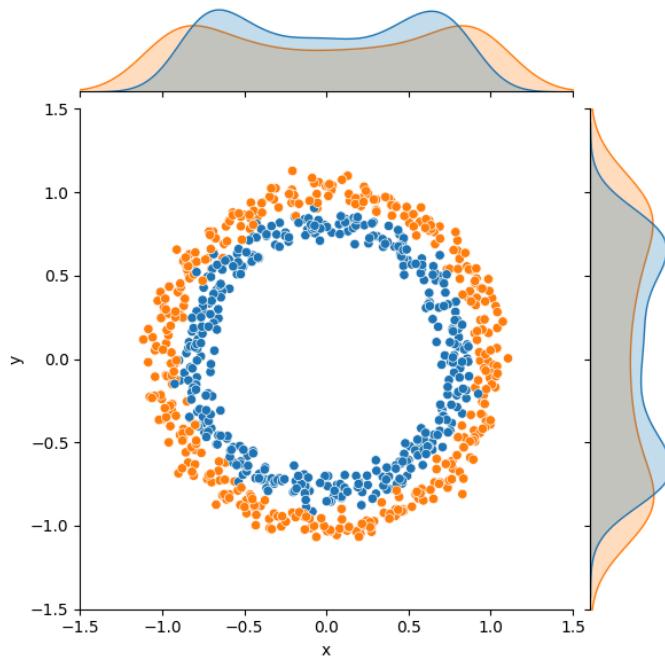


Figura 1: Dos círculos concéntricos y sus KDE marginales por clase: a pesar de que la frontera entre ambos grupos de puntos es muy clara, es casi imposible distinguirlas a partir de sus densidades marginales.

En casos así, el procedimiento de Naive Bayes falla por completo, y será necesario adaptar el procedimiento de KDE unidimensional a  $d \geq 2$  sin basarnos en el supuesto de independencia de las  $X_1, \dots, X_k$ . A lo largo de las cuatro décadas posteriores a las publicaciones de Parzen y Rosenblatt, el estudio de los estimadores de densidad por núcleos avanzó

considerablemente, de manera que ya para mediados de los '90 existían minuciosos libros de referencia como «Kernel Smoothing» (Wand y Jones, 1995), que seguiremos en la presente sección.

Definición 2.3.1 (KDE multivariada, (Wand y Jones, 1995, §4)):  
En su forma más general, estimador de densidad por núcleos  $d$ -variado es

$$\hat{f}(x; \mathbf{H}) = N^{-1} \sum_{i=1}^N K_{\mathbf{H}}(x - x_i) \quad (19)$$

donde

- $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{d \times d}$  es una matriz simétrica definida positiva análoga a la ventana  $h \in \mathbb{R}$  para  $d = 1$ ,
- $K_{\mathbf{H}}(t) = |\det \mathbf{H}|^{-\frac{1}{2}} K(\mathbf{H}^{-\frac{1}{2}} t)$
- $K$  es una función núcleo  $d$ -variada tal que  $\int K(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1$

Típicamente,  $K$  es la densidad normal multivariada

$$\Phi(x) : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} = (2\pi)^{-\frac{d}{2}} \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}\|^2}{2}\right) \quad (20)$$

### 2.3.3 La elección de $\mathbf{H}$

Sean las clases de matrices  $\mathbb{R}^{d \times d}$

- $\mathcal{F}$ , de matrices simétricas definidas positivas,
- $\mathcal{D}$ , de matrices diagonales definidas positivas ( $\mathcal{D} \subseteq \mathcal{F}$ ) y
- $\mathcal{S}$ , de múltiplos escalares de la identidad:  $\mathcal{S} = \{h^2 \mathbf{I} : h > 0\} \subseteq \mathcal{D}$

Aún tomando una única  $\mathbf{H}$  para *toda* la muestra, la elección de  $\mathbf{H}$  en  $d$  dimensiones requiere ajustar

- $\binom{d}{2} = (d^2 - d)/2$  parámetros si  $\mathbf{H} \in \mathcal{F}$ ,
- $d$  parámetros si  $\mathbf{H} \in \mathcal{D}$  y
- un único parámetro  $h$  si  $\mathbf{H} = h^2 \mathbf{I}$ .

La evaluación de la conveniencia relativa de cada parametrización se vuelve muy compleja, muy rápido. (Wand y Jones, 1993) proveen un análisis detallado para el caso  $d = 2$ , y concluyen que aunque cada caso amerita su propio estudio,  $\mathbf{H} \in \mathcal{D}$  suele un compromiso «adecuado» entre la complejidad de tomar  $\mathbf{H} \in \mathcal{F}$  y la rigidez de  $\mathbf{H} \in \mathcal{S}$ . Sin embargo, este no es un gran consuelo para valores de  $d$  verdaderamente altos, en cuyo caso existe aún un problema más fundamental.

### 2.3.4 La maldición de la dimensionalidad

Uno estaría perdonado por suponer que el problema de estimar densidades en alta dimensión se resuelve con una buena elección de  $\mathbf{H}$ , y

una muestra «lo suficientemente grande». Considérese, sin embargo, el siguiente ejercicio ilustrativo de cuánto es «suficientemente grande»:

Sean  $X_i \stackrel{\text{iid}}{\sim} \text{Uniforme}([-1, 1]^d)$ ,  $i \in [N]$ , y consideremos la estimación de la densidad en el origen,  $\hat{f}(\mathbf{0})$ . Suponga que el núcleo  $K_{\mathbf{H}}$  es un «núcleo producto» basado en la distribución univariada Uniforme( $-1, 1$ ), y  $\mathbf{H} = h^2 \mathbf{I}$ . Derive una expresión para la proporción esperada de puntos incluidos dentro del soporte del núcleo  $K_{\mathbf{H}}$  para  $(h, d)$  arbitrarios.

— adaptado de (Wand y Jones, 1995, §4.9 ej 4.1)

El «núcleo producto» multivariado basado en la ley Uniforme( $-1, 1$ ) evaluado alrededor del origen es:

$$K(x - 0) = K(x) = \prod_{i=1}^d \mathbb{1}(-1 \leq x_i \leq 1) = \mathbb{1}\left(\bigcap_{i=1}^d |x_i| \leq 1\right) \quad (21)$$

De la [Definición 2.3.1](#) y el hecho de que  $\det \mathbf{H} = h^{2d}$ ;  $\mathbf{H}^{-\frac{1}{2}} = h^{-1} \mathbf{I}$ , se sigue que

$$\begin{aligned} K_{\mathbf{H}}(x) &= |h^{2d}|^{-\frac{1}{2}} K(h^{-1} \mathbf{I} x) = h^{-d} K\left(\frac{x}{h}\right) \\ &= h^{-d} \mathbb{1}\left(\bigcap_{i=1}^d \left|\frac{x_i}{h}\right| \leq 1\right) = h^{-d} \mathbb{1}(\bigcap_{i=1}^d |x_i| \leq h) \quad (22) \\ &= h^{-d} \mathbb{1}(x \in [-h, h]^d) \end{aligned}$$

De modo que  $\text{sop } K_{\mathbf{H}} = [-h, h]^d$ , y ahora nos resta encontrar la esperanza. Como las componentes de una ley uniforme multivariada son independientes entre sí,

$$\begin{aligned} \Pr(X \in [-h, h]^d) &= \prod_{i=1}^d \Pr(X_i \in [-h, h]) \\ &= \Pr(-h \leq X_1 \leq h)^d \quad (23) \\ &= \left[\frac{h - (-h)}{1 - (-1)}\right]^d = h^d \quad \square \end{aligned}$$

Para  $h = 0.5$ ,  $d = 20$ ,  $\Pr(X \in [-0.5, 0.5]^{20}) = 0.5^{-20} \approx 0.00000095$ , ¡menos de uno en un millón! En general, la caída es muy rápida, aún para valores altos de  $h$ . Si  $X$  representa un segundo de audio muestreado respetando el estándar *mínimo* para llamadas telefónicas<sup>23</sup>, tiene  $d =$

---

<sup>23</sup>De Wikipedia: La tasa [DS0](#), o *Digital Signal 0*, fue introducida para transportar una sola llamada de voz «digitizada». La típica llamada de audio se digitiza a 8 kHz, o a razón de 8.000 veces por segundo.

8000. En tal espacio ambiente, aún con  $h = 0.999$ ,  $\Pr(\cdot) \approx 0.000334$ , o 1:3.000.

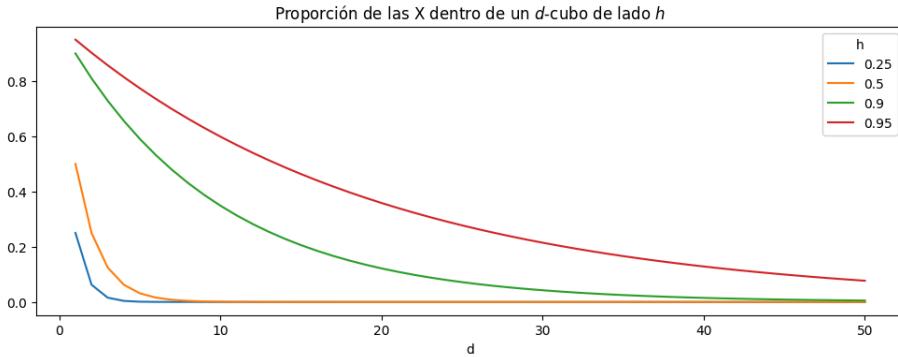


Figura 2: Proporción de  $X_i \stackrel{\text{iid}}{\sim} \text{Uniforme}([-1, 1]^d)$  dentro de un  $d$ -cubo de lado  $h$  para valore seleccionados de  $h$ .

### 2.3.5 La hipótesis de la variedad (*manifold hypothesis*)

Ahora, si el espacio está *tan*, pero *tan* vacío en alta dimensión, ¿cómo es que el aprendizaje supervisado *sirve de algo*? La reciente explosión en capacidades y herramientas de procesamiento (¡y generación!) de formatos de altísima dimensión<sup>24</sup> pareciera ser prueba fehaciente de que la tan mentada *maldición de la dimensionalidad* no es más que una fábula para asustar estudiantes de estadística.

Pues bien, el ejemplo de un segundo segundo de audio antedicho es sesgado: no es cierto que si  $X$  representa un segundo de voz humana digitizada, su ley sea uniforme en 8000 dimensiones<sup>25</sup>. Un segundo de audio generado siguiendo cualquier distribución en la que muestras consecutivas no tengan ninguna correlación, obtiene *ruido blanco*. La voz humana, por su parte, tiene *estructura*, y por ende correlación instantanea a instante. Cada voz tiene un *timbre* característico, y las palabras enumeradas posibles están ceñidas por la *estructura fonológica* de la lengua locutada.

Sin precisar detalles, podríamos postular que las realizaciones de la variable de interés  $X$  (el habla), que registramos en un soporte  $\mathcal{S} \subseteq \mathbb{R}^d$  de alta dimensión, en realidad se concentran en cierta *variedad*<sup>26</sup>  $\mathcal{M} \subseteq \mathcal{S}$  potencialmente de mucha menor dimensión  $\dim \mathcal{M} = d_{\mathcal{M}} \ll d = \dim \mathcal{S}$ , en la que noción de distancia entre observaciones aún conserva signifi-

<sup>24</sup>audio, video, texto y data genómica, por citar sólo algunos

<sup>25</sup>El audio se digitaliza usando 8 bits para cada muestra, así que más precisamente, si  $B = [2^8] = \{1, \dots, 256\}$ , sop  $X = B^{8000}$  o 64 kbps, kilobits-por-segundo.

<sup>26</sup>Término que ya precisaremos. Por ahora,  $\mathcal{M}$  es el *subespacio de realizaciones posibles* de  $X$

cado. A tal postulado se lo conoce como «la hipótesis de la variedad», o *manifold hypothesis*.<sup>27</sup>

La hipótesis de la variedad no es exactamente una hipótesis contrastable en el sentido tradicional del método científico; de hecho, ni siquiera resulta obvio que de existir, sean bien definibles las variedades en las que existen los elementos del mundo real: un dígito manuscrito, el canto de un pájaro, o una flor. Y de existir, es de esperar que sean altamente no-lineales. Más bien, corresponde entenderla como un modelo mental, que nos permite aventurar ciertas líneas prácticas de trabajo en alta dimensión.<sup>28</sup>

---

<sup>27</sup>Para el lector curioso: (Rifai *et al.*, 2011) ofrece un desglose de la hipótesis de la variedad en tres aspectos complementarios, de los cuales el aquí presentado sería el segundo, la «hipótesis de la variedad no-supervisada». El tercero, «la hipótesis de la variedad para clasificación», dice que «puntos de distintas clases se concentrarán sobre variedades disjuntas separadas por regiones de muy baja densidad», y lo asumimos implícitamente a la hora de construir un clasificador.

<sup>28</sup>El concepto de «variedad» para denotar más o menos formalmente un espacio no-euclídeo con ciertas características intuitivas está extendido en literatura no estrictamente matemática. Para el lector ávido, mencionamos dos *papers* interesantes al respecto de potenciales modelos «varietales» de fenómenos como la empatía y la conciencia.

Uno es (Gallese, 2003), *Las Raíces de la Empatía: La Hipótesis de la Variedad Compartida y las Bases Neuronales de la Intersubjetividad*: la hipótesis sostiene que existe un espacio intersubjetivo que compartimos con los demás. No somos mentes aisladas intentando descifrar a otras mentes aisladas; más bien, habitamos un espacio común de acción y emoción. Este «nosotros» (*we-centric space*) es la condición de posibilidad para la empatía. Reconocemos al otro no como un objeto, sino como otro «yo», porque cohabitamos la misma variedad corporal y neuronal.

El otro es (Bengio, 2019), *El Prior de la Conciencia*, en el que se postula que ante un espacio infinito de estímulos, la conciencia tiene una función evolutiva y computacional específica: actuar como un cuello de botella de información para facilitar el razonamiento y la generalización. La conciencia produce una representación rala y de baja dimensionalidad compuesta por los factores salientes de entre los estímulos recibidos y sus interconexiones - es decir, una cierta variedad de baja dimensión intrínseca.



Figura 3: Ejemplos de variedades en el mundo físico: una bandera flameando al viento, el pétalo de una flor. Ambas tienen dimensión  $d_{\mathcal{M}} = 2$ , están embedidas en  $\mathbb{R}^3$ , y no son lineales.

Antes de poder profundizar en esta línea, debemos plantearnos algunas preguntas básicas:

¿Qué es, exactamente, una variedad?

¿Es posible construir un KDE con soporte en cierta variedad *conocida*?

¿Sirve de algo todo esto si *no conocemos* la variedad en cuestión?

## 2.4 Variedades de Riemann

Adelantando la respuesta a la segunda pregunta, resulta ser que si el soporte de  $X$  es una «variedad de Riemann», bajo ciertas condiciones razonables sí es posible estimar su densidad por núcleos en la variedad (Pelletier, 2005).

A continuación, damos un recorrido sumario e idiosincrático por ciertos conceptos básicos de topología y variedades que consideramos necesarios para motivar la definición de variedades Riemannianas, que de paso precisarán la respuesta a la primera pregunta - ¿qué es una variedad? - en el contexto que nos interesa. A tal fin, seguimos la exposición de la monografía *Estimación no paramétrica de la densidad en variedades Riemannianas* (Muñoz, 2011), que a su vez sigue, entre otros, el clásico *Introduction to Riemannian Manifolds* (Lee, 2018).

### 2.4.1 Variedades Diferenciables

Definición 2.4.1 (espacio topológico (Wikipedia, 2025a)):

Formalmente, se llama espacio topológico al par ordenado  $(X, T)$  formado por un conjunto  $X$  y una *topología*  $T$  sobre  $X$ , es decir una colección de subconjuntos de  $X$  que cumple las siguientes tres propiedades:

1. El conjunto vacío y  $X$  están en  $T$ :  $\emptyset \in T, X \in T$
2. La intersección de cualquier subcolección *finita* de  $T$  está en  $T$ :

$$X \in T, Y \in T \Rightarrow X \cap Y \in T \quad (24)$$

La unión de *cualquier* subcolección de conjuntos de  $T$  está en  $T$ :

$$\forall S \subset T, \bigcup_{O \in S} O \in T \quad (25)$$

A los conjuntos pertenecientes a la topología  $T$  se les llama conjuntos abiertos o simplemente abiertos de  $(X, T)$ ; y a sus complementos en  $X$ , conjuntos cerrados.

Definición 2.4.2 (entorno (Wikipedia, 2025b)): Si  $(X, T)$  es un espacio topológico y  $p$  es un punto perteneciente a  $X$ , un *entorno*<sup>29</sup> del punto  $p$  es un conjunto  $V$  en el que está contenido un conjunto abierto  $U$  que incluye al propio  $p$ :  $p \in U \subseteq V$ .

Definición 2.4.3 (espacio de Hausdorff (Wikipedia, 2024)):

Sea  $(X, T)$  un espacio topológico. Se dice que dos puntos  $p, q \in X$  cumplen la propiedad de Hausdorff si existen dos entornos  $U_p$  de  $p$  y  $U_q$  de  $q$  tales que  $U_p \cap U_q = \emptyset$  (i.e., son disjuntos).

Se dice que un espacio topológico es un espacio de Hausdorff<sup>30</sup> si todo par de puntos distintos del espacio verifican la propiedad de Hausdorff.

En términos coloquiales, un espacio de Hausdorff es aquel donde todos sus puntos están «bien separados».

---

<sup>29</sup>También se los conoce como «vecindarios» - por *neighborhoods*, su nombre en inglés.

<sup>30</sup>o que «verifica la propiedad de Hausdorff», o que «es separado o que es **T<sub>2</sub>**»

Definición 2.4.4 (variedad topológica (Muñoz, 2011, Def. 3.1.1), (Lee, 2018, Apéndice A)): Una variedad topológica de dimensión  $d \in \mathbb{N}$  es un espacio topológico  $(\mathcal{M}, T)$  de Hausdorff, de base numerable, que es localmente homeomorfo a  $\mathbb{R}^d$ . Es decir, para cada  $p \in \mathcal{M}$  existe un abierto  $U \in T$  y un abierto  $A \subseteq \mathbb{R}^d$ , tal que  $p \in U^{31}$  y existe un homeomorfismo  $\varphi : U \rightarrow A$ .

*Observación (Sobre variedades con y sin frontera):* Toda  $n -$  variedad<sup>32</sup> tiene puntos interiores, pero algunas además tienen una *frontera*; esta frontera es a su vez una variedad *sin* frontera de dimensión  $n - 1$ . Por caso: un disco en el plano euclídeo  $\mathbb{R}^2$  es una  $2 -$ variedad *con* frontera, cuya frontera es una variedad de dimensión  $2 - 1 = 1$  *sin* frontera: el círculo  $S^1$ <sup>33</sup> una pelota de tenis es una  $3 -$ variedad *con* frontera dada por su superficie, que es (aproximadamente) la variedad *sin* frontera  $S^2$ . De aquí en más, cuando hablemos de variedades topológicas, nos referiremos a variedades *sin* frontera.

En una variedad topológica, cobra sentido cierto concepto de cercanía pero no necesariamente de *distancia*, y es posible definir funciones continuas y límites.

Un *homeomorfismo*<sup>34</sup> es una función  $\varphi$  entre dos espacios topológicos si es biyectiva y tanto ella como su inversa son continuas. El par ordenado  $(U, \varphi)$  es una *carta*<sup>35</sup> *alrededor de p*.

A un conjunto numerable de tales cartas que cubran completamente la variedad se lo denomina «atlas». Simbólicamente,  $\mathcal{A} = \{(U_\alpha, \varphi_\alpha) : \alpha \in \mathcal{I}\}$  es un atlas sí y sólo si  $\mathcal{M} = \cup_\alpha U_\alpha$ . Al conjunto de entornos  $\{U_\alpha : (U_\alpha, \varphi_\alpha) \in \mathcal{A}\}$  que componen un atlas se lo denomina «cobertura» de  $\mathcal{M}$ .

Cuando un homeomorfismo - y su inversa - es  $r -$ veces diferenciable, se le llama  *$C^r$ -difeomorfismo*, o simplemente difeomorfismo<sup>36</sup>. En particular, un  $C^\infty$  -difeomorfismo es un difeomorfismo *suave*.

---

<sup>31</sup>de modo que  $U$  es un entorno de  $p$

<sup>32</sup>i.e. variedad de dimensión  $n$

<sup>33</sup> $S^n$  denota la  $n -$ esfera: la variedad de los puntos en  $\mathbb{R}^{n+1}$  a distancia unitaria del origen. Así,  $S^1$  es el círculo y  $S^2$  es la superficie esférica.

<sup>34</sup>del griego *homo-*: igual, *-morfo*: forma; de igual forma

<sup>35</sup>*chart* en inglés

<sup>36</sup>Luego, un homeomorfismo es un  $C^0$  -difeomorfismo

**Definición 2.4.5** (cartas suavemente compatibles): Sean  $(\mathcal{M}, T)$  una variedad topológica de dimensión  $d$  y sean  $(U, \varphi), (V, \psi)$  dos cartas. Diremos que son *suavemente compatibles*<sup>37</sup> si  $U \cap V = \emptyset$  o bien si la función cambio de coordenadas restringida a  $U \cap V$  es un difeomorfismo.

La compatibilidad requiere que la transición entre cartas no sea sólo continua, sino también *suave*. El motivo de esta condición es asegurar que el concepto de *suavidad* esté bien definido en toda la variedad  $\mathcal{M}$ , independientemente de qué carta se use: si una función es diferenciable vista a través de una carta, también lo será al analizarla desde cualquier carta compatible.

**Definición 2.4.6** (estructura diferenciable (Muñoz, 2011, Def. 3.1.3)): Un atlas  $\mathcal{A} = \{(U_\alpha, \varphi_\alpha) : \alpha \in \mathcal{I}\}$  es diferenciable si sus cartas son compatibles entre sí. Si un atlas diferenciable  $\mathcal{D}$  es *maximal* lo llamaremos una *estructura diferenciable de la variedad*  $\mathcal{M}$ . Con maximal queremos decir lo siguiente: Si  $(U, \varphi)$  es una carta de  $\mathcal{M}$  que es compatible con todas las cartas de  $\mathcal{D}$ , entonces  $(U, \varphi) \in \mathcal{D}$ <sup>38</sup>

**Definición 2.4.7** (variedad diferenciable (Muñoz, 2011, Def. 3.1.4)): Una variedad diferenciable de dimensión  $d$  es una terna  $(\mathcal{M}, \tau, \mathcal{D})$  donde  $(\mathcal{M}, \tau)$  es una variedad topológica de dimensión  $d$  y  $\mathcal{D}$  una estructura diferenciable.

Una variedad diferenciable entonces, es aquella en la que la operación de diferenciación tiene sentido no sólo punto a punto, sino globalmente. De no poder diferenciar, tampoco podremos tomar integrales, y definir funciones de densidad - ni hablar de estimarlas - resulta imposible.

Sobre una variedad diferenciable, cobra sentido plantear el concepto de *métrica*. En particular, toda variedad diferenciable admite una «métrica de Riemann» (do Carmo, 1992, §1, Proposición 2.10).

---

<sup>37</sup>smoothly compatible según (Lee, 2018, § «Smooth Manifolds and Smooth Maps»). (Muñoz, 2011) lo denomina *compatible* a secas.

<sup>38</sup>i.e., no existe otro atlas diferenciable que contenga propiamente a  $\mathcal{D}$ , lo cual desambigua la referencia.

Definición 2.4.8 («métrica Riemanniana») (do Carmo, 1992, §1, Def. 2.1)): Sea  $T_p\mathcal{M}$  el *espacio tangente* a un punto  $p \in \mathcal{M}$ . Una métrica Riemanniana - o estructura Riemanniana - en una variedad diferenciable  $\mathcal{M}$  es una correspondencia que asocia a cada punto  $p \in \mathcal{M}$  un producto interno  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  (i.e., una forma bilineal simétrica definida positiva) en el espacio tangente  $T_p\mathcal{M}$  que «varía diferencialmente»<sup>39</sup> en el entorno de  $p$ .

A dicho producto interno se lo denomina  $g_p$  e induce naturalmente una norma:  $\|v\|_p = \sqrt{g_p(v, v)} = \sqrt{\langle v, v \rangle}$ . Decimos entonces que  $g_p$  es una métrica Riemanniana y el par  $(\mathcal{M}, g)$  es una variedad de Riemann.

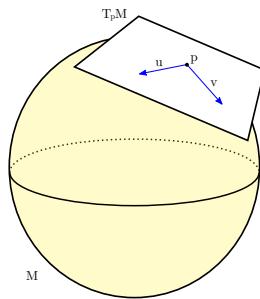


Figura 4: Espacio tangente  $T_p\mathcal{M}$  a una esfera  $\mathcal{M} = S^2$  por  $p$ . Nótese que el espacio tangente varía con  $p$ , pero siempre mantiene la misma dimensión ( $d = 2$ ) que  $\mathcal{M}$

*Observación (según (do Carmo, 1992, Prop. 2.10)):* Toda variedad diferenciable admite una métrica Riemanniana, que se puede construir componiendo las métricas Riemannianas locales a cada carta de su estructura diferenciable según la «partición de la unidad»<sup>40</sup>  $\{f_\alpha : \alpha \in \mathcal{I}\}$  subordinada a su cobertura.

Es claro que podemos definir una métrica Riemanniana  $\langle \cdot, \cdot \rangle^\alpha$  en cada entorno  $U_\alpha$  de la cobertura: la métrica inducida por el sistema de coordenadas locales. Sea entonces:

---

<sup>39</sup>para el lector riguroso, el texto original define precisamente el sentido de esta expresión

<sup>40</sup>La definición formal de «partición de la unidad» se da sin prueba de existencia en (do Carmo, 1992, §0.5, p. 30). A cada entorno  $U_\alpha$  de la cobertura de  $\mathcal{M}$  se le asigna una función  $f_\alpha$  de manera que  $\sum_\alpha f_\alpha(p) = 1 \forall p \in \mathcal{M}$ . Intuitivamente, da una base funcional de  $\mathcal{M}$ , que al ser evaluadas en cualquier punto ponderan con pesos que suman 1 las métricas locales a cada carta para obtener un resultado global coherente.

$$\langle u, v \rangle_p = \sum_{\alpha} f_{\alpha}(p) \langle u, v \rangle_p^{\alpha} \quad \forall p \in \mathcal{M}, u, v \in T_p \mathcal{M} \quad (26)$$

es posible verificar que esta construcción define una métrica Riemanniana en todo  $\mathcal{M}$ .

*Observación:* Cuando  $\mathcal{M} = \mathbb{R}^d$ , el espacio es constante e idéntico a la variedad:  $\forall p \in \mathbb{R}^d, T_p \mathbb{R}^d = \mathbb{R}^d$ . La base canónica de  $T_p \mathbb{R}^d = \mathbb{R}^d$  formada por las columnas de  $\mathbf{I}_d$  es una matriz positiva definida que da lugar al producto interno «clásico»  $\langle u, v \rangle = u^T \mathbf{I}_d v = \sum_{i=1}^d u_i v_i$ .  $\langle u, v \rangle$  es una métrica Riemanniana que induce la norma euclídea  $\|v\| = \sqrt{v^T v}$  y la distancia  $d(x, y) = \|x - y\|$ .

#### 2.4.2 Geodésicas y mapa exponencial

Con las definiciones previas podemos definir algunos conceptos fundamentales como longitud, distancia y geodésica en variedades de Riemann.

Sea  $\gamma : [a, b] \rightarrow \mathcal{M}$  una curva diferenciable en  $\mathcal{M}$ , y  $\gamma'$  su derivada. La longitud de  $\gamma$  está dada por

$$L(\gamma) = \int_a^b \|\gamma'(t)\| dt = \int_a^b \sqrt{g_{\gamma(t)}(\gamma'(t), \gamma'(t))} dt \quad (27)$$

**Definición 2.4.9** (distancia en variedades de Riemann): Sea  $(\mathcal{M}, g)$  una variedad de Riemann, y  $p, q \in \mathcal{M}$  dos puntos. Definimos la distancia entre ellos inducida por la métrica  $g$  como

$$d_g(p, q) = \inf_{\gamma} \{L(\gamma) : \gamma : [0, 1] \rightarrow \mathcal{M}, \gamma(0) = p, \gamma(1) = q\} \quad (28)$$

Una *geodésica* es una generalización de la «línea recta» en la geometría euclídea. Considérese la siguiente analogía<sup>41</sup>: en la física clásica, un objeto que no es sujeto a ninguna fuerza (no recibe *aceleración* alguna) estará o quieto (con velocidad nula) o en movimiento *rectilíneo* uniforme («MRU»). En variedades diferenciables, las geodésicas son exactamente eso: curvas sin aceleración,  $\gamma''(t) = 0 \forall t$ . En particular, una geodésica es localmente minimizante de longitud: la curva  $\gamma$  que realiza la distancia  $d_g(p, q)$  es necesariamente una geodésica.

Sea  $p \in \mathcal{M}$  y  $v \in T_p \mathcal{M}$  un vector tangente en  $p$ , que interpretamos como una *velocidad inicial*: su dirección  $v/\|v\|$  indica hacia dónde partir y su magnitud  $\|v\|$  indica cuán rápido. Por existencia y unicidad de soluciones de ecuaciones diferenciales, existe una única geodésica  $\gamma$  con  $\gamma(0) = p$  y  $\gamma'(0) = v$ . Como  $\gamma''(t) = 0 \forall t$ , la rapidez a lo largo de  $\gamma$  es

---

<sup>41</sup>Este párrafo y el que sigue están adaptados de «El Flujo Geodésico» (do Carmo, 1992, §3.2)

constante:  $\|\gamma'(t)\| = \|v\| \forall t$ , de modo que  $L(\gamma) = \int_0^1 \|\gamma'(t)\| dt = \|v\|$ . Tras una unidad de tiempo, la geodésica alcanza el punto  $\gamma(1) \in \mathcal{M}$ , habiendo recorrido una longitud  $\|v\|$ .

Esta relación, entre vectores de  $T_p\mathcal{M}$  y geodésicas de  $\mathcal{M}$  con origen en  $p$ , nos permite relacionar una «bola» en  $T_p\mathcal{M}$  con su análogo en  $\mathcal{M}$ .

**Definición 2.4.10 (mapa exponencial):** Sean  $p \in \mathcal{M}, v \in T_p\mathcal{M}$ . Se conoce como *mapa exponencial* a la función

$$\exp_p(v) : T_p\mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M} = \gamma_{p,v}(1) \quad (29)$$

donde  $\gamma_{p,v}(t)$  es la única geodésica que en el instante  $t = 0$  pasa por  $p$  con velocidad  $v$ .

**Definición 2.4.11 (bola normal):** Sea  $B_\varepsilon(x) \subset \mathbb{R}^d$  la bola cerrada de radio  $\varepsilon$  centrada en  $x$ :

$$B_\varepsilon(x) = \{y \in \mathbb{R}^d : d_g(x, y) = \|x - y\| \leq \varepsilon\} \quad (30)$$

Si  $\exp_p$  es un difeomorfismo en un vecindario (entorno)  $V$  del origen en  $T_p\mathcal{M}$ , su imagen  $U = \exp_p(V)$  es un «vecindario normal» de  $p$ . Si  $B_\varepsilon(0)$  es tal que  $\overline{B_\varepsilon(0)} \subset V$ , llamamos a  $\exp_p B_\varepsilon(0) = B_\varepsilon(p)$  la *bola normal* – o «bola geodésica» - con centro  $p$  y radio  $\varepsilon$ .

La frontera de  $B_\varepsilon(p)$  es una «subvariedad» de  $\mathcal{M}$  ortogonal a las geodésicas que irradian desde  $p$ . Una concepción intuitiva de qué es una bola normal, es «un entorno de  $p$  en el que las geodésicas que pasan por  $p$  son minimizadoras de distancias». El siguiente concepto es útil para entender «cuán lejos vale» la aproximación local a un espacio euclídeo en la variedad.

---

<sup>42</sup>Basado en (Muñoz, 2011, Def. 3.3.16) Una definición a mi entender más esclarecedora se encuentra en (do Carmo, 1992, §13.2, *The cut locus*), que introducimos aquí informalmente. El *cut locus* o *ligne de partage*  $C_m(p)$  - algo así como la línea de corte - de un punto  $p$  es la unión de todos los puntos de corte: los puntos a lo largo de las geodésicas que irradian de  $p$  donde éstas dejan de ser minimizadoras de distancia. El ínfimo de la distancia entre  $p$  y su línea de corte, es el radio de inyectividad de  $\mathcal{M}$  en  $p$ , de modo podemos escribir

$$\text{iny } \mathcal{M} = \inf_{p \in \mathcal{M}} d(p, C_m(p)) \quad (31)$$

donde la distancia de un punto a una variedad es el ínfimo de la distancia a todos los puntos de la variedad.

Definición 2.4.12 (radio de inyectividad<sup>42</sup>): Sea  $(\mathcal{M}, g)$  una  $d$ -variedad Riemanniana. Llamamos «radio de inyectividad en  $p$ » a

$$\text{iny}_p \mathcal{M} = \sup\{s \in \mathbb{R} > 0 : B_s(p) \text{ es una bola normal}\} \quad (32)$$

El ínfimo de los radios de inyectividad «puntuales», es el radio de inyectividad de la variedad  $\mathcal{M}$ .

$$\text{iny} \mathcal{M} = \inf_{p \in \mathcal{M}} \text{iny}_p \mathcal{M} \quad (33)$$

*Observación:* Si  $\mathcal{M} = \mathbb{R}^d$  con la métrica canónica entonces  $\text{iny} \mathcal{M} = \infty$ . Si  $\mathcal{M} = \mathbb{R}^d - \{p\}$ , con la métrica usual, entonces existe un punto arbitrariamente cerca de  $p$  en el que la geodésica que irradia en dirección a  $p$  se corta inmediatamente: entonces el radio de inyectividad es cero. Si  $\mathcal{M} = S^1$  con radio unitario y la métrica inducida de  $\mathbb{R}^2$ , el radio de inyectividad es  $\pi$ , puesto que si tomamos «el polo norte»  $p_N$  como origen de un espacio tangente  $T_{p_N} S^1$ , todas las geodésicas que salen de él llegan al polo sur  $p_S$  «al mismo tiempo»  $\pi$ , y perdemos la inyectividad.

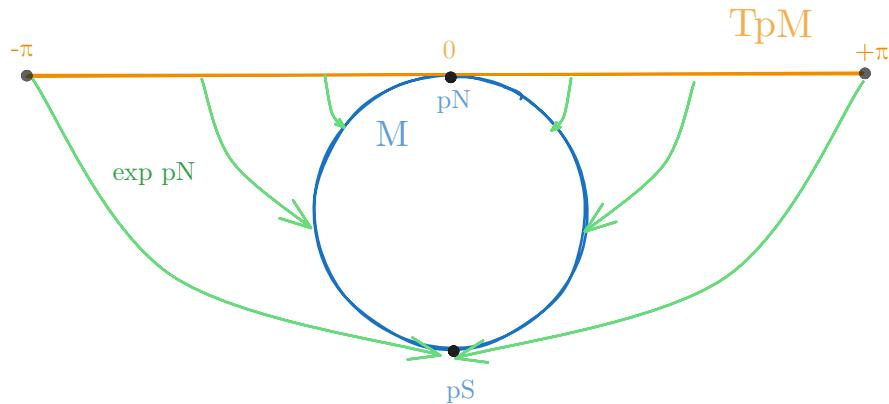


Figura 5: Espacio tangente y mapa exponencial para  $p_N \in S^1$ . Nótese que  $\text{iny } S^1 = \pi$ . Prolongando una geodésica  $\gamma(t)$  más allá de  $t = \pi$ , ya no se obtiene un camino mínimo, pues hubiese sido más corto llegar por  $-\gamma(s)$ ,  $s = t \bmod \pi$ .

Agregamos una última definición para restringir la clase de variedades de Riemann que nos interesarán:

Definición 2.4.13 (punto límite): Un punto  $x$  es límite del conjunto  $S$  si toda vecindad abierta de  $x$  contiene puntos de  $S$  distintos de  $x$ .

**Definición 2.4.14** (variedad compacta): Decimos que una variedad es *acotada* cuando  $\sup_{(p,q) \in \mathcal{M}^2} d_g(p, q) = \bar{d} < \infty$  – i.e., no posee elementos distanciados infinitamente entre sí. Una variedad que incluya todos sus «puntos límite» es una variedad *cerrada*. Una variedad cerrada y acotada se denomina *compacta*.

*Observación:* Un círculo en el plano,  $S^1 \subset \mathbb{R}^2 = \{(x, y) : x^2 + y^2 = 1\}$  es una variedad compacta: es acotada – ninguna distancia es mayor a medio gran círculo,  $\pi$  – y cerrada.  $\mathbb{R}^2$  es una variedad cerrada pero no acotada. El «disco sin borde»  $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : x^2 + y^2 < 1\}$  es acotado pero no cerrado - pues no incluye su frontera  $S^1$ . El «cilindro infinito»  $\{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : x^2 + y^2 < 1\}$  no es ni acotado ni cerrado.

Ahora sí, hemos arribado a un objeto lo suficientemente «bien portado» para soportar funciones diferenciables, una noción de distancia y todo aquello que precisamos para definir elementos aleatorios: la *variedad de Riemann compacta sin frontera*. Cuando hablemos de una variedad de Riemann sin calificarla, nos referiremos a esta.

### 2.4.3 Probabilidad en Variedades

Hemos definido una clase bastante general de variedades - las variedades de Riemann - capaces de soportar funciones de densidad y sus estimaciones (Pelletier, 2005). Estos desarrollos relativamente modernos no constituyen el origen de la probabilidad en variedades. Mucho antes de su sistematización, ciertos casos particulares fueron ya bien estudiados y allanaron el camino para el interés en variedades más generales.

Probablemente la referencia más antigua a un elemento aleatorio en una variedad distinta a  $\mathbb{R}^d$ , se deba a Richard von Mises, en *Sobre la naturaleza entera del peso atómico y cuestiones relacionadas* (von Mises, 1918)<sup>43</sup>. En él, von Mises se plantea si los pesos atómicos - que empíricamente se observan siempre muy cercanos a la unidad para los elementos más livianos - son enteros con un cierto error de medición, y argumenta que para tal tratamiento, el «error gaussiano» clásico es inadecuado:

(...) Pues no es evidente desde el principio que, por ejemplo, para un peso atómico de 35,46 (Cl), el error sea de +0,46 y no de -0,54: es muy posible que se logre una mejor concordancia con ciertos supuestos con la segunda determinación. A continuación, se

---

<sup>43</sup>«Über die “ganzzahligkeit der” atomgewichte und verwandte fragen», en el alemán original

desarrollan los elementos — esencialmente muy simples — de una «teoría del error cíclico», que se complementa con la teoría gaussiana o «lineal» y permite un tratamiento completamente inequívoco del problema de la «enteridad» y cuestiones similares.

— traducido de (von Mises, 1918)

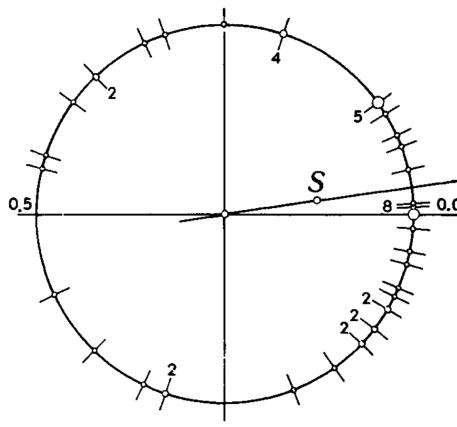


Fig. 6.

Figura 6: Pretendido «error» - diferencia módulo 1 - de los pesos atómicos medidos para ciertos elementos sobre  $S^1$ . Nótese como la mayoría de las mediciones se agrupan en torno al 0.0. Fuente: (von Mises, 1918)

Motivado también por un problema del mundo físico, Ronald Fisher escribe «Dispersiones en la esfera» (Fisher, 1957), donde desarrolla una teoría apropiada para mediciones de posición en una esfera<sup>44</sup> y la ilustra a partir de mediciones de la dirección de la «magnetización termorremanente» de flujos de lava en Islandia.<sup>45</sup>

Dos décadas más tarde, los casos particulares de von Mises ( $S^1$ ) y Fisher ( $S^2$ ) fueron integrados al caso más general  $S^n$  en lo que se conocería como «estadística direccional»<sup>46</sup>. En 1975 se habla ya de *teoría*

---

<sup>44</sup>y como era de esperar del padre del test de hipótesis, también su correspondiente test de significancia, análogo al «t de Student».

<sup>45</sup>Los datos que Fisher usa en la Sección 4 son mediciones de magnetismo remanente en muestras de roca de flujos de lava islandeses, recolectadas por J. Hospers en Pembroke College, Cambridge. Cuando la lava se enfriá y solidifica, los minerales ferromagnéticos (como la magnetita) se alinean con el campo magnético terrestre del momento y quedan «congelados» en esa orientación. Esto se llama magnetización termorremanente. Siglos o milenios después, se puede tomar una muestra de esa roca y medir en qué dirección apunta su magnetización residual, hecho que Fisher utiliza para «testear» si entre «su presente» y el período Cuaternario el campo magnético terrestre se invirtió – cosa que efectivamente sucedió.

<sup>46</sup>la  $n$  – esfera  $S^n$  de radio 1 con centro en 0 contiene exactamente a todos los vectores unitarios – i.e., todas las *direcciones* posibles de un vector – en su espacio ambiente  $\mathbb{R}^{n+1}$

*de la distribución* para la distribución von Mises - Fisher (Mardia, 1975), la «más importante en el análisis de datos direccionales». A fines de los ‘80 Jupp y Mardia plantean «una visión unificada de la teoría de la estadística direccional» (Jupp y Mardia, 1989), adaptando conceptos claves del «caso euclídeo» como las familias exponenciales y el teorema central del límite, entre otros.

Aunque el caso particular de la  $n$ -esfera sí fue bien desarrollado a lo largo del siglo XX, no se alcanzó un tratamiento más general de la estadística en variedades riemannianas conocidas pero arbitrarias.

#### 2.4.4 KDE en variedades de Riemann

Un trabajo sumamente interesante a principios del siglo XXI es el de Bruno Pelletier, que se propone una adaptación directa del estimador de densidad por núcleos de [Definición 2.3.1](#) en variedades de Riemann compactas sin frontera (Pelletier, 2005). Lo presentamos directamente y ampliamos los detalles a continuación

**Definición 2.4.15 (KDE en variedades de Riemann (Pelletier, 2005, Ecuación 1)):** Sean

- $(\mathcal{M}, g)$  una variedad de Riemann compacta y sin frontera de dimensión intrínseca  $d$ , y  $d_g$  la distancia de Riemann,<sup>47</sup>
- $K$  un *núcleo isotrópico* en  $\mathcal{M}$  soportado en la bola unitaria en  $\mathbb{R}^d$
- dados  $p, q \in \mathcal{M}$ ,  $\theta_p(q)$  la *función de densidad de volumen* en  $\mathcal{M}$

Sea  $\mathbf{X}$  una muestra de  $N$  observaciones de una variable aleatoria  $X$  con densidad  $f$  soportada en  $\mathcal{M}$ . Luego, el estimador de densidad por núcleos para  $X$  es la  $\hat{f} : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$  que a cada  $p \in \mathcal{M}$  le asocia el valor

$$\begin{aligned}\hat{f}(p) &= N^{-1} \sum_{i=1}^N K_h(p, X_i) \\ &= N^{-1} \sum_{i=1}^N \frac{1}{h^d} \frac{1}{\theta_{X_i}(p)} K\left(\frac{d_g(p, X_i)}{h}\right)\end{aligned}\tag{34}$$

con la restricción de que la ventana  $h \leq h_0 \leq \text{iny } \mathcal{M}$ , el radio de inyectividad de  $\mathcal{M}$ .<sup>48</sup> El autor prueba la convergencia en  $L^2(\mathcal{M})$ :

---

<sup>47</sup> mantenemos la notación del original;  $d$  es un entero y  $d_g$  un operador, lo que debería evitar la confusión

<sup>48</sup> Esta restricción no es catastrófica. Para toda variedad compacta, el radio de inyectividad será estrictamente positivo (Muñoz, 2011, Prop. 3.3.18). Como además  $h$  es en realidad una sucesión  $\{h_n\}_{n=1}^N$  decreciente como función del tamaño muestral, siempre existirá un cierto tamaño muestral a partir del cual  $h_n < \text{iny } \mathcal{M}$ .

Teorema 2.4.1 (convergencia de  $\hat{f}$  en  $L^2$  (Pelletier, 2005, §3 Teorema 5)): Sea  $f$  una densidad de probabilidad dos veces diferenciable en  $\mathcal{M}$  con segunda derivada covariante acotada. Sea  $\hat{f}_n$  el estimador de densidad definido en [Definición 2.4.15](#) con ventana  $h_n < h_0 < \text{iny } \mathcal{M}$ . Luego, existe una constante  $C_f$  tal que

$$\mathbb{E} \|\hat{f}_n - f\|_{L^2(\mathcal{M})}^2 \leq C_f \left( \frac{1}{nh^d} + r^4 \right). \quad (35)$$

En consecuencia, para  $h \sim n^{-\frac{1}{d+4}}$ , tenemos

$$\mathbb{E} \|\hat{f}_n - f\|_{L^2(\mathcal{M})}^2 = O(n^{-\frac{4}{d+4}}) \quad (36)$$

Nótese que esta formulación sugiere en qué orden comenzar la búsqueda de un  $h$  «óptimo». Guillermo Henry y Daniela Rodríguez prueban la consistencia fuerte de  $\hat{f}$  (Henry y Rodriguez, 2009, Teorema 3.2): bajo los mismos supuestos de (Pelletier, 2005), obtienen que

$$\sup_{p \in \mathcal{M}} |\hat{f}_{n(p)} - f(p)| \xrightarrow{\text{c.s.}} 0 \quad (37)$$

[Definición 2.4.16](#) (núcleo isotrópico): Sea  $K : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$  un mapa no-negativo tal que:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} K(\|x\|) d\lambda(x) &= 1 && K \text{ es función de densidad en } \mathbb{R}^d \\ \int_{\mathbb{R}^d} xK(\|x\|) d\lambda(x) &= 0 && \text{Si } Y \sim K, \mathbb{E}Y = 0 \\ \int_{\mathbb{R}^d} \|x\|^2 K(\|x\|) d\lambda(x) &< \infty && \text{Si } Y \sim K, \text{Var } Y < \infty \\ \text{sop } K &= [0, 1] \\ \sup_x K(x) &= K(0) && K \text{ se maximiza en el origen} \end{aligned}$$

Decimos entonces que el mapa  $\mathbb{R}^d \ni x \mapsto K(\|x\|) \in \mathbb{R}$  es un *núcleo isotrópico* en  $\mathbb{R}^d$  soportado en la bola unitaria.

*Observación:* Todo núcleo válido en [Definición 2.3.1](#) también es un núcleo isotrópico. A nuestros fines, continuaremos utilizando el núcleo normal.

Definición 2.4.17 (función de densidad de volumen (Besse, 1978, §6.2)): Sean  $p, q \in \mathcal{M}$ ; le llamaremos *función de densidad de volumen* en  $\mathcal{M}$  a  $\theta_p(q)$  definida como

$$\theta_p(q) : q \mapsto \theta_p(q) = \frac{\mu_{\exp_p^* g}}{\mu_{g_p}}(\exp_p^{-1}(q)) \quad (38)$$

es decir, el cociente de la medida canónica de la métrica Riemanniana  $\exp_p^*$  sobre  $T_p\mathcal{M}$  (la métrica *pullback* que resulta de transferir  $g$  de  $\mathcal{M}$  a  $T_p\mathcal{M}$  a través del mapa exponencial  $\exp_p$ ), por la medida de Lebesgue de la estructura euclídea en  $T_p\mathcal{M}$ .

*Observación:*

$\theta_p(q)$  está bien definida «cerca» de  $p$ : por ejemplo, es idénticamente igual a 1 en el entorno  $U$  localmente «plano» de  $p$  donde las geodésicas  $\gamma \subset \mathcal{M}$  coinciden con sus representaciones en  $T_p\mathcal{M}$ . Ciertamente está definida para todo  $q$  dentro del radio de inyectividad de  $p$ ,  $d_g(p, q) < \text{iny}_p\mathcal{M}$ <sup>49</sup>. Con  $N$  «suficientemente grande», siempre podremos elegir  $h_N < \text{iny}_p\mathcal{M}$  que mapee «suficientes» observaciones al soporte de  $K$ ,  $[0, 1]$  en las que el cálculo de  $\theta_p(q)$  sea factible, y las más lejanas queden por fuera, de modo que su cálculo *no sea necesario*.

El mapa exponencial alrededor de  $p$ ,  $\exp_p : T_p\mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M}$  es un difeomorfismo en cierta bola normal alrededor de  $p$ , así que admite una inversa continua y biyectiva al menos en tal bola; lo llamaremos  $\exp_p^{-1} : \mathcal{M} \rightarrow T_p\mathcal{M}$ . Así,  $\exp_p^{-1}(q) \in T_p\mathcal{M}$  es la representación de  $q$  en las coordenadas localmente euclídeas del espacio tangente a  $p$  (o sencillamente «locales a  $p$ »). De esta cantidad  $x = \exp_p^{-1}(q)$ , queremos conocer el cociente entre dos medidas:

- la métrica *pullback* de  $g$ : la métrica inducida en  $T_p\mathcal{M}$  por la métrica riemanniana  $g$  en  $\mathcal{M}$
- la medida de Lebesgue en la estructura euclídea de  $T_p\mathcal{M}$ .

En otras palabras,  $\theta_p(q)$  representa cuánto se infla/encoge el espacio en la variedad  $\mathcal{M}$  alrededor de  $p$ , relativo al volumen «natural» del espacio tangente. En general, su cómputo resulta sumamente complejo, salvo en casos particulares como las variedades «planas» o de curvatura constante. En un trabajo reciente, por ejemplo, se reseña:

---

<sup>49</sup>su definición global es compleja y escapa al tema de esta monografía<sup>50</sup>.

<sup>50</sup>Besse y Pelletier consideran factible extenderla a todo  $\mathcal{M}$  utilizando *campos de Jacobi* (Besse, 1978, §6.3; Pelletier, 2005, §2)

Un problema restante a esta altura es el de entender cómo la *regularidad*<sup>51</sup> de  $\mathcal{M}$  afecta las tasas de convergencia de funciones suaves (...). Luego, en el caso especial en que la dimensión de  $\mathcal{M}$  es conocida e igual a 1, podemos construir un estimador que alcanza la tasa [propuesta anteriormente]. Así, se establece que en dimensión 1 al menos, la regularidad de la variedad  $\mathcal{M}$  no afecta la tasa para estimar  $f$  aún cuando  $\mathcal{M}$  es desconocida. Sin embargo, la función de densidad de volumen  $\theta_p(q)$  no es constante tan pronto como  $d \geq 2$  y obtener un panorama global en mayores dimensiones es todavía un problema abierto y presumiblemente muy desafiante.

— (Berenfeld y Hoffmann, 2021, §1.2, «Resultados Principales»)

Para ganar en intuición, consideraremos  $\theta_p(q)$  para algunas variedades profusamente estudiadas.

#### 2.4.5 La densidad de volumen $\theta_p(q)$ en variedades «planas»

*Observación:* En el entorno de  $p$  en que el espacio es localmente análogo a  $\mathbb{R}^d$ ,  $\theta_p(q) = 1$ .

En los espacios «planos» la métrica  $g$  es constante a través de toda la variedad  $g_p$ . El espacio euclídeo  $\mathbb{R}^d$  dotado de la métrica habitual tiene por distancia  $d_I(x, y) = \|x - y\| = \sqrt{(x - y)^T \mathbf{I}_d (x - y)}$ . El espacio euclídeo con distancia  $d_{\Sigma}$  de Mahalanobis («Distancia de Mahalanobis», 2024) también es plano, sólo que con distancia  $d_{\Sigma}(x, y) = \sqrt{(x - y)^T \Sigma^{-1} (x - y)} = \|\Sigma^{-\frac{1}{2}}(x - y)\|$ .  $d_{\Sigma}$  no es «isotrópica»: varía a distintas velocidades en distintas direcciones.

El tensor métrico  $g$  es constante y de dimensión finita en ambos casos, así que esta «forma bilinear simétrica positiva definida» se puede representar con única matriz definida positiva  $g = g_{ij}, g \in \mathbb{R}^{d \times d}$  que se conoce como *tensor métrico*. A la distancia «habitual» en  $\mathbb{R}^d$  le corresponde  $g = \mathbf{I}_d^{-1} = \mathbf{I}_d$ , a la distancia de mahalanobis  $g = \Sigma^{-1}$ .

Al tener radio de inyectividad infinito, basta con una única carta para cubrir el espacio euclídeo, de manera que su atlas maximal será de la forma  $A = \{(\mathbb{R}^d, \varphi)\}$ . De todos los homeomorfismos  $\varphi$  posibles, el más «conveniente» es  $\exp_p^{-1} : \mathcal{M} \rightarrow T_p \mathcal{M}$  — el difeomorfismo inverso al mapa exponencial.

Nótese que la distancia cuadrada  $d_{\Sigma}^2(p, q) = \|\Sigma^{-\frac{1}{2}}(q - p)\|^2$  no es más que la norma de  $q - p$  luego de una transformación lineal  $\Sigma^{-\frac{1}{2}}$ , que «manda» los puntos

$$\mathcal{M} \ni (p, q) \mapsto (x, y) = \exp_p^{-1}(p, q) = (0, \exp_p^{-1} q) \in T_p \mathcal{M} \quad (39)$$

---

<sup>51</sup>En este contexto, se entiende que una variedad es más regular mientras menos varíe su densidad de volumen punto a punto.

de la variedad  $\mathcal{M} = \mathbb{R}^d$  a los puntos  $(0, \exp_x y)$  del espacio tangente a  $\mathcal{M}$  en  $p$ ,  $T_p \mathcal{M} = \mathbb{R}^d$ . Usamos  $(p, q)$  para referirnos a los puntos en  $\mathcal{M}$  y  $(x, y)$  para  $T_p \mathcal{M}$ .

$\Sigma^{-\frac{1}{2}}$  no es otra cosa más que el mapa exponencial inverso,  $\forall p \in \mathcal{M}$ ,  $\exp_p^{-1} q = \Sigma^{-\frac{1}{2}}(q - p)$  y su «directo» es, entonces:

$$\exp_x y : T_p \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M} = \Sigma^{\frac{1}{2}}(y - x) \quad (40)$$

Habiendo obtenido  $\Sigma^{-\frac{1}{2}}(q - p) = \exp_p^{-1}(q)$ , reemplazamos en la definición de densidad de volumen y obtenemos

$$\theta_p(q) = \frac{\mu_{\exp_p^* g}(\Sigma^{-\frac{1}{2}}(q - p))}{\mu_{g_p}} \quad (41)$$

Consideremos  $s = q - p$ . El elemento de volumen según la estructura euclídea no es otro más que  $\mu_{g_p}(\Sigma^{-\frac{1}{2}} s) = |\det \Sigma^{-\frac{1}{2}}| \|s\|$ . La medida del *pullback* de  $g$  hacia el espacio tangente, resulta de

1. transportar  $s$  de  $T_p \mathcal{M}$  con el mapa exponencial a  $\mathcal{M}$ , y
2. tomar la medida  $\mu_{g_p}$  de  $\exp s$

$$\mu_{\exp_p^* g}(\Sigma^{-\frac{1}{2}} s) = \mu_{g_p}(\exp_p(\Sigma^{-\frac{1}{2}} s)) = \mu_{g_p}(\mathbf{I}s) = \|s\| \quad (42)$$

de manera que para  $p, q \in \mathcal{M}, s = \Sigma^{-\frac{1}{2}}(q - p)$ ,

$$\theta_p(q) = \frac{\mu_{\exp_p^* g}(s)}{\mu_{g_p}(s)} = \frac{\|s\|}{|\det \Sigma^{-\frac{1}{2}}| \|s\|} = |\det \Sigma|^{\frac{1}{2}} \quad (43)$$

para todo  $p, q \in \mathcal{M}$ . Recordemos de la definición de [Definición 2.3.1](#) que el estimador de densidad por núcleos multivariado con matriz de suavización  $\mathbf{H}$  es

$$\hat{f}(t; \mathbf{H}) = N^{-1} \sum_{i=1}^N |\det \mathbf{H}|^{-\frac{1}{2}} K\left(\mathbf{H}^{-\frac{1}{2}}(t - x_i)\right) \quad (44)$$

consideremos  $\mathbf{H} = h^2 \Sigma$ ,  $h \in \mathbb{R}$ ,  $\Sigma \in \mathbb{R}^{d \times d}$ :

$$\hat{f}(t; \mathbf{H}) = N^{-1} \sum_{i=1}^N h^{-d} |\det \Sigma|^{-\frac{1}{2}} K\left(\frac{\Sigma^{-\frac{1}{2}}(t - x_i)}{h}\right) \quad (45)$$

donde  $|\det \Sigma|^{\frac{1}{2}} = \theta_p(q)$  del espacio euclídeo con métrica de Mahalanobis  $\Sigma$  y usábamos el núcleo normal  $\Phi(x) : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} = (2\pi)^{-\frac{d}{2}} \exp\left(-\frac{\|x\|^2}{2}\right)$  que depende de  $x$  sólo a través de su norma euclídea. Tomando la norma del argumento de  $K(\cdot)$  vemos que

$$\left\| \frac{\Sigma^{-\frac{1}{2}}(t - x_i)}{h} \right\| = \frac{1}{|h|} \|\Sigma^{-\frac{1}{2}}(t - x_i)\| = \frac{d_{\Sigma}(t, x_i)}{|h|} \quad (46)$$

. De manera que  $K$  sólo depende de  $t$  a través de  $d_{\Sigma}(t, x_i)/h$ . Tomemos

$$\tilde{K}\left(\frac{d_{\Sigma}(t, x_i)}{h}\right) = K\left(h^{-1} \Sigma^{-\frac{1}{2}}(t - x_i)\right) \quad (47)$$

y recordemos que además  $\theta_p(q) = |\det \Sigma|^{\frac{1}{2}}$  cuando  $g = \Sigma$ . Luego,

$$\hat{f}(t; \mathbf{H}) = N^{-1} \sum_{i=1}^N \frac{1}{h^d} \frac{1}{\theta_{X_i}(t)} \tilde{K}\left(\frac{d_g(t, x_i)}{h}\right) \quad (48)$$

y resulta que [Definición 2.3.1](#) es una caso especial de [Definición 2.4.15](#).

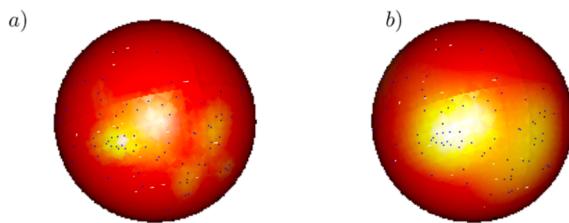
#### 2.4.6 Densidad de volumen en la esfera

Una variedad plana tiene *curvatura*<sup>52</sup> nula en todo punto. De entre las variedades curvas, las  $d$  – esferas son de las más sencillas, y tienen curvatura *positiva y constante*.

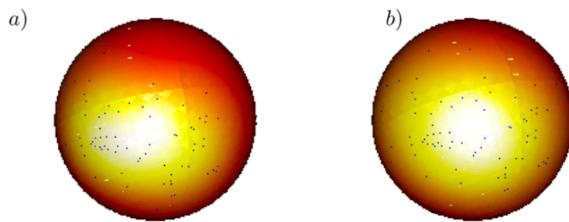
Esta estructura vuelve razonable el cómputo de  $\theta_p(q)$  en  $S^d$ .

En *Kernel Density Estimation on Riemannian Manifolds: Asymptotic Results* (Henry y Rodriguez, 2009), Guillermo Henry y Daniela Rodriguez estudian algunas propiedades asintóticas de este estimador, y las ejemplifican con datos de sitios volcánicos en la superficie terrestre. Para ello, calculan  $\theta_p(q)$  y llegan a que

$$\theta_p(q) = \begin{cases} R^{\frac{|\sin(d_g(p,q)/R)|}{d_g(p,q)}} & \text{si } q \neq p, -p \\ 1 & \text{si } q = p \end{cases} \quad (49)$$



**Fig. 1** The nonparametric density estimator using different bandwidth, **a**  $h = 1500$  and **b**  $h = 3000$



**Fig. 2** The nonparametric density estimator using different bandwidth, **a**  $h = 5000$  and **b**  $h = 7000$

Figura 7: KDE en  $S^2$  para  $X = \text{sth}$  los flujos de lava de Fisher TODO mejorar imagen

---

<sup>52</sup>la *curvatura* de un espacio es una de las propiedades fundamentales que estudia la geometría riemanniana; en este contexto, basta con la comprensión intuitiva de que una variedad no-plana tiene *cierta curvatura*

<sup>53</sup>Recordemos que la antípoda de  $p, -p$  cae justo fuera de  $\text{iny}_p S^d$

## 2.5 Clasificación en variedades

Un desarrollo directo del estimador de [Definición 2.4.15](#) consta en *A kernel based classifier on a Riemannian manifold* (Loubes y Pelletier, 2008), donde construyen un clasificador para un objetivo de dos clases  $\mathcal{G} \in \{0, 1\}$  con *inputs*  $X$  soportadas sobre una variedad de Riemann. A tal fin, minimizan la pérdida 0 – 1 y siguen la regla de Bayes, de manera que su clasificador *duro* resulta:

$$\hat{G}(X) = \begin{cases} 1 & \text{si } \widehat{\Pr}(G = 1|X) > \widehat{\Pr}(G = 0|X) \\ 0 & \text{si no} \end{cases} \quad (50)$$

que está de acuerdo con el estimador del clasificador de Bayes basado en densidad por núcleos para  $K$  clases propuesto [Definición 2.2.3](#).

Una notación simplificada surge de estudiar la expresión que el clasificador intenta maximizar. Para todo  $i \in [K]$ ,

$$\widehat{\Pr}(G = i|X) = \frac{\hat{f}_i(x) \times \hat{\pi}_i}{\underbrace{\left( \sum_{i \in [K]} \hat{f}_i(x) \times \hat{\pi}_i \right)}_{=c}} = c^{-1} \times \hat{f}_i(x) \times \hat{\pi}_i \quad (51)$$

de modo que la tarea es equivalente a maximizar  $\hat{f}_i(x) \times \hat{\pi}_i$  sobre  $i \in [K]$ . Es fácil ver que podemos escribir el estimador de densidad de la clase  $k$  como:

$$\begin{aligned} \hat{f}_k(x) &= N_k^{-1} \sum_{i=1}^N K_h(x, X_i) \\ &= \frac{\sum_{i=1}^N \mathbb{1}(G_i = k) K_h(x, X_i)}{\sum_{i=1}^N \mathbb{1}(G_i = k)} \end{aligned} \quad (52)$$

como además  $\hat{\pi}_k = N_k/N = N^{-1} \sum_{i=1}^N \mathbb{1}(G_i = k)$ , resulta que

$$\begin{aligned} \hat{f}_i(x) \times \hat{\pi}_i &= \frac{\sum_{i=1}^N \mathbb{1}(G_i = k) K_h(x, X_i)}{\sum_{i=1}^N \mathbb{1}(G_i = k)} \times \frac{\sum_{i=1}^N \mathbb{1}(G_i = k)}{N} \\ &= N^{-1} \sum_{i=1}^N \mathbb{1}(G_i = k) K_h(x, X_i) \end{aligned} \quad (53)$$

Y suprimiendo la constante  $N$  concluimos que la regla de clasificación resulta equivalente a:

$$\hat{G}(p) = \arg \max_{k \in [K]} \sum_{i=1}^N \mathbb{1}(G_i = k) K_h(p, X_i) \quad (54)$$

para todo  $p \in \mathcal{M}$  con  $K_{h_n}$  un núcleo isotrópico con sucesión de ventanas  $h_n$  (Loubes y Pelletier, 2008, Ecuación 3.1).

La belleza de esta regla, es que combina «sin costuras» el peso de los *priors*  $\hat{\pi}_i$  - a través de los elementos no nulos de la suma cuando  $\mathbb{1}(G_i =$

$k) = 1$ ) - con el peso de la «evidencia» - vía su cercanía «suavizada» al punto de interés  $K_h(p, X_i)$ .

Los autores toman de (Devroye, Györfi y Lugosi, 1996) el siguiente concepto de *consistencia fuerte*:

Definición 2.5.1 (consistencia de un clasificador (Devroye, Györfi y Lugosi, 1996, §6.1)): Sea  $\hat{G}_1, \dots, \hat{G}_n$  una secuencia de clasificadores<sup>54</sup> de modo que el  $i$ -ésimo clasificador está construido con las primeras  $i$  observaciones de la muestra  $\mathbf{X}, \mathbf{g}$ . Sea  $L_n$  la pérdida  $0 - 1$  que alcanza el  $n$ -ésimo clasificador de la regla, y  $L^*$  la pérdida que alcanza el clasificador de Bayes de Ecuación 4.

Diremos que la regla  $\hat{G}_n$  es (débilmente) consistente - o asintóticamente eficiente en el sentido del riesgo de Bayes - para cierta distribución  $(X, G)$  si cuando  $n \rightarrow \infty$

$$\mathbb{E}L_n = \Pr(\hat{G}_n(X) \neq G) \rightarrow L^* \quad (55)$$

y fuertemente consistente si

$$\lim_{n \rightarrow \infty} L_n = L^* \text{ con probabilidad 1} \quad (56)$$

En el trabajo, se prueba que el clasificador propuesto es fuertemente consistente para  $K = 2$ .

## 2.6 Aprendizaje de distancias

La hipótesis de la variedad nos ofrece un marco teórico en el que abordar la clasificación en alta dimensión, y encontramos en la literatura que la estimación de densidad por núcleos en variedades está estudiada y tiene buenas garantías de convergencia. Por alentador que resulte, nos resta un problema fundamental: no solemos conocer la variedad que soporta las  $X$ . Salvo que los datasets estén generados sintéticamente o el dominio de estudio tenga historia de trabajar con ciertas variedades bien definidas, tendremos problemas tanto para definir adecuadamente la distancia  $d_g$  como en el cómputo de la densidad de volumen  $\theta_p(q)$  de [Definición 2.4.15](#).

---

<sup>54</sup>A veces también llama una *regla* de clasificación



Figura 8: Data espacial con dimensiones bien definidas. Los datos geoespaciales están sobre la corteza terrestre, que es aproximadamente la 2 – esfera  $S^2 \in \mathbb{R}^3$  que representa la frontera de nuestra «canica azul» (izq.), una 3 – bola. La clasificación clásica de Hubble distingue literalmente *variedades* «elípticas», «espirales» e «irregulares» de galaxias (der.).<sup>55</sup>

Considere, por caso, el diagrama de Figura 9, una 1 – variedad - una curva -  $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^2$ . El espacio ambiente ( $\mathbb{R}^3$ ) es también su propio espacio tangente, y las geodésicas que irradian desde el punto verde alcanzan antes al rojo que al amarillo. Sobre la variedad  $\mathcal{U}$ , el punto amarillo está aproximadamente en la dirección del espacio tangente al punto verde, mientras que el rojo está en dirección perpendicular al mismo.

---

<sup>55</sup>Se me perdonará la simplificación; es bien sabido que en realidad la [topología del espacio-tiempo](#) es un tópico de estudio clave en la relatividad general.

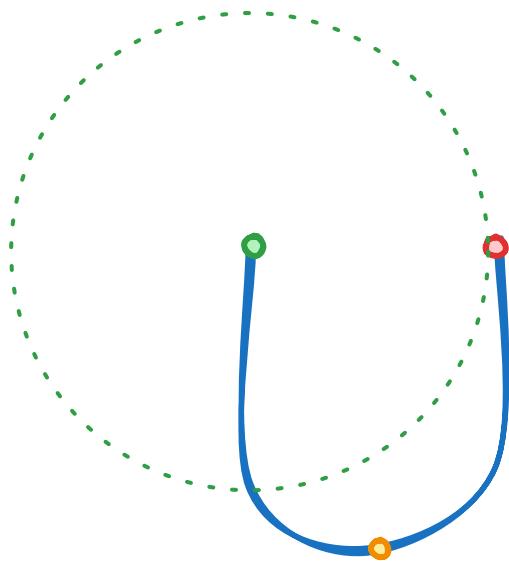


Figura 9: La variedad  $\mathcal{U}$  con  $\dim(\mathcal{U}) = 1$  embebida en  $\mathbb{R}^2$ . Nótese que en el espacio ambiente, el punto rojo está más cerca del verde, mientras que a través de  $\mathcal{U}$ , el punto amarillo está más próximo que el rojo

A los fines de estimar la densidad de  $X$  entonces, lo que nos importa es contar con una noción de *distancia* apropiada en  $\mathcal{M}$ . La distancia entre  $p$  y  $q$  es la longitud de la curva geodésica que los une; la longitud de una curva se obtiene integrándola en toda su extensión; integrarla implica conocer el espacio tangente y la métrica  $g$  en toda su extensión. Por ende, «conocer la variedad»  $(\mathcal{M}, g) = \text{sop } X$  y «computar la distancia  $d_g$  inducida por su métrica  $g$ » son esencialmente la misma tarea.

En este ejemplo con tan solo  $n = 3$  observaciones, es casi imposible distinguir  $\mathcal{U}$ , pero con una muestra  $\mathbf{X}$  «suficientemente grande», es de esperar que los propios datos revelen la forma de la variedad, y por eso hablamos de «aprendizaje de distancias» a partir de la propia muestra.

La distancia nos da entonces una *representación* útil de la similitud entre puntos: a mayor similitud, menor distancia. Y el *aprendizaje de representaciones*, es exactamente otro de los nombres que se le da a la estimación de variedades. En un extenso censo del campo de aprendizaje de representaciones, (Bengio, Courville y Vincent, 2014) así lo explican:

(...) [L]a principal tarea del aprendizaje no-supervisado se considera entonces como el modelado de la estructura de la variedad que sustenta los datos. La representación asociada que se aprende puede asociarse con un sistema de coordenadas intrínseco en la variedad embebida.

— (Bengio, Courville y Vincent, 2014, §8)

### 2.6.1 El ejemplo canónico: Análisis de Componentes Principales (PCA)

El término «hipótesis de la variedad es bastante moderno», pero el concepto está presente hace más de un siglo en la teoría estadística<sup>56</sup>.

El algoritmo arquetípico de modelado de variedades es, como era de esperar, también el algoritmo arquetípico de aprendizaje de representaciones de baja dimensión: el Análisis de Componentes Principales, PCA (Pearson, 1901), que dada  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^p$ , devuelve en orden decreciente las «direcciones de mayor variabilidad» en los datos,  $\mathbf{U}_p = (u_1, u_2, \dots, u_p)$ . Proyectar  $\mathbf{X}$  sobre las primeras  $k \leq p$  direcciones,

$$\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{X}\mathbf{U}_k \in \mathbb{R}^{n \times k}, \hat{X}_i = (\hat{X}_{i1}, \dots, \hat{X}_{ik})^T \quad (57)$$

nos devuelve la «mejor»<sup>57</sup> representación lineal de dimensión  $k$ .

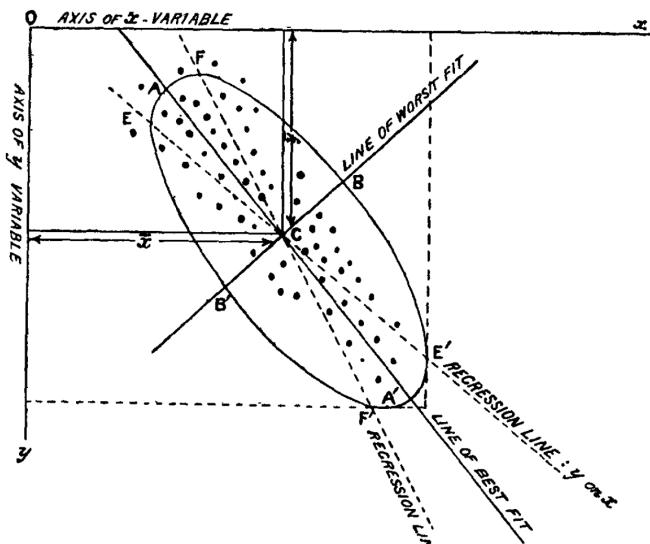


Figura 10: Ilustración de  $\mathbf{X}$  y sus componentes principales en «*LIII. On lines and planes of closest fit to systems of points in space.*» (Pearson, 1901)

Hemos hecho ya hincapié en que las variedades que buscamos seguramente sean fuertemente no-lineales; sin embargo, todavía hay lugar para PCA en esta aventura: cuando el dataset tiene dimensión verdaderamente muy alta, un proceso razonable consistirá en primero disminuir la dimensión a un subespacio lineal casi idéntico al original con PCA, y

---

<sup>56</sup>estas referencias vienen del mismo Bengio [comentando en Reddit sobre el origen del término](#)

<sup>57</sup>cuya definición precisa obviamos.

recién en este subespacio aplicar técnicas más complejas de aprendizaje de distancias Aprovechando que al menos las observaciones de entrenamiento son puntos conocidos de la variedad<sup>58</sup>, y que en la variedad el espacio es *localmente euclídeo* (Vincent y Bengio, 2002) parten del estimador de [Definición 2.3.1](#) pero en lugar de utilizar un núcleo  $K_{\mathbf{H}}$  fijo en cada observación  $x_i$ , se proponen primero hacer análisis de componentes principales de la matriz de covarianza *pesada* estimada en cada punto,

$$\hat{\Sigma}_{\mathcal{K}_i} = \hat{\Sigma}_{\mathcal{K}}(x_i) = \frac{\sum_{j \in [N]-i} \mathcal{K}(x_i, x_j)(x_j - x_i)(x_j - x_i)^T}{\sum_{j \in [N]-i} \mathcal{K}(x_i, x_j)} \quad (58)$$

donde  $\mathcal{K}$  es alguna medida de cercanía en el espacio ambiente (e.g. la densidad normal multivariada  $\Phi$  ya mencionada), con lo cual la estimación de densidad resulta:

$$\hat{f}(x) = N^{-1} \sum_{i=1}^N |\det \hat{\Sigma}_i|^{-\frac{1}{2}} K\left(\hat{\Sigma}_i^{-\frac{1}{2}} t\right) \quad (59)$$

Ahora bien, computar una  $\hat{\Sigma}_{\mathcal{K}_i} \forall i \in [N]$  y su inversa es sumamente costoso, por lo que los autores agregan un refinamiento: si la variedad en cuestión es  $d$  –dimensional, es de esperar que las direcciones principales a partir de la  $d+1$ -ésima sean «negligibles»<sup>59</sup> en lugar computar las componentes principales de  $\hat{\Sigma}_{\mathcal{K}_i}$ , simplemente fijan de antemano la dimensión  $d$  esperada para la variedad, se quedan con las  $d$  direcciones principales<sup>60</sup>, «ponen en cero» el resto y «completan» la aproximación con un poco de «ruido»  $\sigma^2 \mathbf{I}$ . La aproximación resultante  $\hat{\Sigma}_i = f(\hat{\Sigma}_{\mathcal{K}_i}) + \sigma^2 \mathbf{I}$  es mucho menos costosa de invertir, y tiene una interpretación geométrica bastante intuitiva en cada punto. Usando el mismo clasificador basado en la regla de Bayes Ecuación 4 que ya mencionamos, obtienen así resultados superadores a los de [Definición 2.3.1](#) con  $\mathbf{H} = h^2 \mathbf{I}$ . Hemos de notar, sin embargo, dos dificultades:

- todavía no está nada claro cuál debería ser la dimensión intrínseca  $d$  cuando la variedad es desconocida, y
- no es suficiente para computar KDE en variedades según [Definición 2.4.15](#), pues  $\hat{\Sigma}_i$  sólo aproxima el tensor métrico en cada  $x_i$ , y para computar  $\theta_p(q)$  necesitamos conocer  $g$  en todo punto.<sup>61</sup>

<sup>58</sup>módulo el error de medición y/o el efecto de covariables no medidas

<sup>59</sup>la sugerente metáfora que usan en el trabajo, es que en lugar de ubicar una «bola» de densidad alrededor de cada observación  $x_i$ , quieren ubicar un «panqueque» tangente a la variedad

<sup>60</sup>en la práctica, las obtienen usando SVD - descomposición en valores singulares (Hastie, Tibshirani y Friedman, 2009, §3, Eq. 45, p. 64)

<sup>61</sup>El grupo de investigación de Bengio, Vincent, Rifai et ales continuó trabajando estos estimadores, con especial énfasis en la necesidad de aprender una geometría *global* de la variedad para evitar el crecimiento exponencial de tamaño muestral que exigen los métodos locales como KDE en alta dimensión o variedades muy «rugosas»,

En un trabajo contemporáneo a (Vincent y Bengio, 2002), «Charting a Manifold» (Brand, 2002), los autores intentan encarar frontalmente las limitaciones recién mencionadas, en tres etapas:

1. estimar la dimensión intrínseca de la variedad  $d_{\mathcal{M}}$ ; luego
2. definir un conjunto de cartas centradas en cada observación  $x_i \in \mathcal{M}$  que minimicen una *divergencia* global, y finalmente
3. «coser» las cartas a través de una *conexión* global sobre la variedad.

El procedimiento para estimar  $d_{\mathcal{M}}$  es ingenioso, pero costoso. Sean  $\mathbf{X} = (x_1^T, \dots, x_N^T)$  observaciones  $p$ -dimensionales, que han sido muestreados de una distribución en  $(\mathcal{M}, g)$ ,  $\dim \mathcal{M} = d < p$  con algo de ruido *isotrópico*<sup>62</sup>  $p$ -dimensional. Consideremos una bola  $B_r(0)$  centrada en un punto cualquiera de  $\mathcal{M}$ , y consideremos la tasa  $t(r)$  a la que incorpora observaciones vecinas. Cuando  $r$  está en la escala del ruido, la bola incorpora puntos «rápidamente», pues hay dispersión en todas las direcciones. A medida que  $r$  llega a la escala en la que el espacio es localmente análogo a  $\mathbb{R}^d$ , la incorporación de nuevos puntos disminuye, pues sólo habrá nuevas observaciones en las  $d$  direcciones tangentes. Si  $r$  sigue creciendo la bola  $B_r(0)$  eventualmente alcanzará la escala de la *curvatura* de la variedad, momento en el que comenzará a acelerarse nuevamente la incorporación de puntos. Analizando  $\arg \max_r t(r)$  podemos identificar la dimensión intrínseca de la variedad.<sup>63</sup>

---

pero aquí se separan nuestros caminos. Una brevíssima reseña: en (Bengio, Larochelle y Vincent, 2005) agregan restricciones globales a las estimaciones de los núcleos punto a punto que computan simultáneamente con redes neuronales, y en (Rifai *et al.*, 2011) aprenden explícitamente un atlas que luego usan para clasificación con TangentProp (Simard *et al.*, 1991), una modificación del algoritmo de *backpropagation* que se usa en redes neuronales, que busca conservar «las direcciones tangentes» a las observaciones en la representación aprendida.

<sup>62</sup>Del griego *iso-*, «igual» y *-tropos*, «dirección»; «igual en todas las direcciones»

<sup>63</sup>Más precisamente, el *paper* utiliza otra función de  $r$ ,  $c(r)$  que se *maximiza* cuando  $r \approx \frac{1}{d}$ , y considera las dificultades entre estimar  $d$  punto a punto o globalmente.

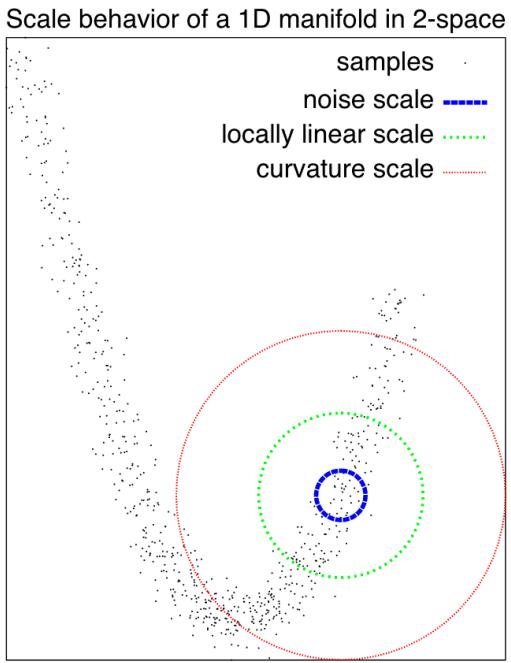


Figura 11: Una bola de radio  $r$  creciente centrada en un punto de una 1-variedad muestreada con ruido en  $\mathbb{R}^2$  *minimiza* la tasa a la que incorpora observaciones cuando  $r$  está en la escala «localmente lineal» de la variedad.

Definido  $d$ , los pasos siguientes no son menos complejos. Por un lado, plantean un sistema ecuaciones para obtener *al mismo tiempo* todos los entornos coordenados (que no son otra cosa más que un GMM - gaussian mixture modelling<sup>64</sup> - centrado en cada observación (o sea que  $\mu_j = x_j$ , y resuelve simultáneamente  $\Sigma_j \forall j \in [N]$ ) minimizando la *divergencia* entre  $\Sigma_j$  vecinos<sup>65</sup>. Finalmente, han de encontrar una *conexión* entre los entornos coordinados de cada observación, de manera que se puedan definir coordenadas para *cualquier* punto de la variedad y con ellas formar un atlas diferenciable.

Una [conexión](#) es otro - y van... - término de significado muy preciso en geometría riemanniana que aquí usamos coloquialmente. Es un *objeto geométrico* que *conecta* espacios tangentes cercanos, describiendo

---

<sup>64</sup>modelo de mezcla de (distribuciones) gaussianas

<sup>65</sup>Aquí «divergencia» tiene un significado preciso que obviamos, pero intuitivamente, representa el «costo» - la variación - que uno encuentra cuando quiere representar un punto  $a$  en el vecindario  $U$  de  $x_i$ , en las coordenadas correspondientes a un vecindario  $V$  de  $x_j$ . Se puede mostrar que el cociente entre las densidad de  $a$  en ambos sistemas coordinados - la [entropía cruzada](#) entre  $\mathcal{N}(x_i, \Sigma_i)$  y  $\mathcal{N}(x_j, \Sigma_j)$  - es la divergencia que se busca minizar.

precisamente cómo éstos varían a medida que uno se desplaza sobre la variedad, y permite entonces *diferenciarlos* para computar  $g_p$  y la métrica inducida en cualquier punto. Desde ya que con tal estructura es posible calcular  $\theta_p(q) \forall p, q \in \mathcal{M}$ , pero a esta altura, hemos reemplazado el problema difícil original - encontrar una buena representación de baja dimensión de una muestra  $\mathbf{X}$  para clasificarla en clases - por uno *muy difícil* sustituto: encontrar la dimensión intrínseca, un atlas diferenciable y su conexión global para una variedad desconocida. El proceso es sumamente interesante, pero complejiza en lugar de simplificar nuestro desafío inicial.

### 2.6.2 El algoritmo más *cool*: Isomap

Recordemos que toda esta aventura comenzó cuando identificamos que

1. en alta dimensión, la *distancia euclídea* «explotaba», y rápidamente dejaba de proveer información útil sobre la similitud entre observaciones de  $\mathbf{X}$  y además
2. de haber una estructura de menor dimensión que represente mejor las observaciones, habría de ser fuertemente no-lineal.

En rigor, *no es necesario conocer  $\mathcal{M}$* , bastaría con conocer una aproximación a la distancia geodésica en  $\mathcal{M}$  que sirva de sustituto a la distancia euclídea en el espacio ambiente. Probablemente el algoritmo más conocido que realiza tal tarea, sea Isomap - por «mapeo isométrico de *features*».

Desarrollado a caballo del cambio de siglo por Joshua Tenenbaum et al. (Tenenbaum, 1997; Tenenbaum, Silva y Langford, 2000), el algoritmo consta de tres pasos:

Definición 2.6.1 (algoritmo Isomap): Sean  $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_N)$ ,  $x_i \in \mathbb{R}^p$   $N$  observaciones  $p$ -dimensionales. El mapeo isométrico de *features* es el resultado de:

1. Construir el grafo de vecinos más cercanos  $\mathbf{NN} = (\mathbf{X}, E)$ , donde cada observación  $x_i$  es un vértice y la arista<sup>66</sup>  $e(a, b)$  que une  $a$  con  $b$  está presente si y sólo si
  - ( $\varepsilon$ -Isomap): la distancia entre  $a, b$  en el espacio ambiente es menor o igual a  $\varepsilon$ ,  $d_{\mathbb{R}^p}(a, b) \leq \varepsilon$ .
  - ( $k$ -Isomap):  $b$  es uno de los  $k$  vecinos más cercanos de  $a$ <sup>67</sup>
2. Computar la distancia geodésica - el «costo» de los caminos mínimos - entre todo par de observaciones,  $d_{\mathbf{NN}}(a, b) \forall a, b \in \mathbf{X}$ <sup>68</sup>.
3. Construir la representación -  $d$ -dimensional utilizando MDS<sup>69</sup> en el espacio euclídeo  $\mathbb{R}^d$  que minimice una métrica de discrepancia denominada «estrés», entre las distancias  $d_{\mathbf{NN}}$  de (2) y sus equivalentes en la representación,  $d_{\mathbb{R}^d}$ . Para elegir el valor óptimo de  $d$  - la dimensión intrínseca de los datos-, búsquese el «codo» en el gráfico de estrés en función de la dimensión de MDS.

---

<sup>66</sup>edge en inglés

<sup>67</sup>O viceversa, pues en un grafo no-dirigido la relación de vecinos más cercanos es mutua

<sup>68</sup>A tal fin, se puede utilizar segón convenga el algoritmo de [Floyd-Warshall](#) o [Dijkstra](#)

<sup>69</sup>«Multi Dimensional Scaling», o [escalamiento multidimensional](#), un algoritmo de reducción de dimensionalidad

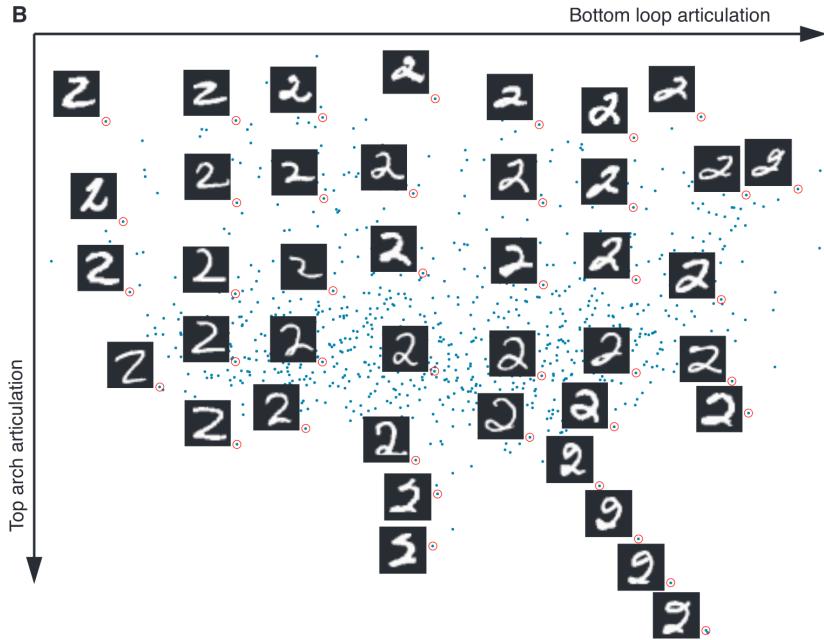


Figura 12: Isomap aplicado a 1.000 dígitos «2» manuscritos del dataset *MNIST* con  $d = 2$  (Tenenbaum, Silva y Langford, 2000). Nótese que las dos direcciones se corresponden fuertemente con características de los dígitos: el rulo inferior en el eje  $X$ , y el arco superior en el eje  $Y$ .

La pieza clave del algoritmo, es la estimación de la distancia geodésica en  $\mathcal{M}$  a través de la distancia en el grafo de vecinos más cercanos. Si la muestra disponible es «suficientemente grande», es razonable esperar que en un entorno de  $x_0$ , las distancias euclídeas aproximen bien las distancias geodésicas, y por ende un «paseo» por el grafo **NN** debería describir una curva prácticamente contenida en  $\mathcal{M}$ . Isomap resultó ser un algoritmo sumamente efectivo que avivó el interés por el aprendizaje de distancias, pero todavía cuenta con un talón de Aquiles: la elección del parámetro de cercanía,  $\varepsilon$  ó  $k$ :

- valores demasiado pequeños pueden partir **NN** en más de una componente conexa, otorgando distancia «infinita» a puntos en componentes disjuntas, mientras que
- valores demasiado grandes pueden «cortocircuitar» la representación - en particular en variedades con muchos pliegues -, uniendo secciones de la variedad subyacente a través del espacio ambiente.

### 2.6.3 Distancias basadas en densidad

Algoritmos como isomap aprenden la *geometría* de los datos, reemplazando la distancia euclídea ambiente por la distancia euclídea en el grafo

$\text{NN}_k$ , que con  $n \rightarrow \infty$  converge a la distancia  $d_g$  en  $\mathcal{M}$ . La distancia de Mahalanobis, por su parte, aprende la *densidad* de los datos.

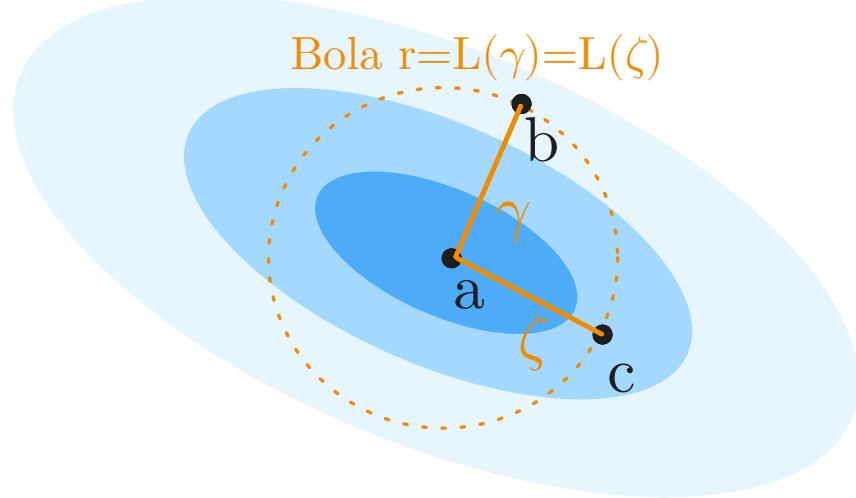


Figura 13: Cuando por ejemplo  $\mathcal{M} = (\mathbb{R}^2, g = \mathbf{I})$ ,  $X \sim \mathcal{N}_d(a, \Sigma)$ , tenemos que  $d_g(a, b) = L(\gamma) = r = L(\zeta) = d_g(a, c)$ , mientras que  $d_\Sigma(a, b) < d_\Sigma(a, c)$ : la normal multivariada tiene distintas tasas de cambio en distintas direcciones, y medir distancia ignorando este hecho puede llevar a conclusiones erróneas.

Combinando estas dos nociones, podemos considerar la categoría de *distancias basadas en densidad* - DBDs -, donde curvas  $\gamma$  que atraviesen regiones de *baja* densidad  $f_X$  en  $\mathcal{M}$  sean más «costosas» de transitar que otras de igual longitud pero por regiones de mayor densidad. Esta área del aprendizaje de distancias vio considerables avances durante el siglo XXI, a continuación del éxito empírico de Isomap, y pavimentó el camino para técnicas de reducción de dimensionalidad basales en el «aprendizaje profundo»<sup>70</sup> como los «autocodificadores»<sup>71</sup>.

Aprender una DBD nos permite saltarnos el problema ya harto descrito de aprender la variedad desconocida  $\mathcal{M}$ , e ir directamente a lo

---

<sup>70</sup>O «deep learning» en inglés. Llamamos genéricamente de tal modo a la pléthora de arquitecturas de redes neuronales con múltiples capas que dominan hoy el procesamiento de información de alta dimensión («Aprendizaje profundo», 2025)

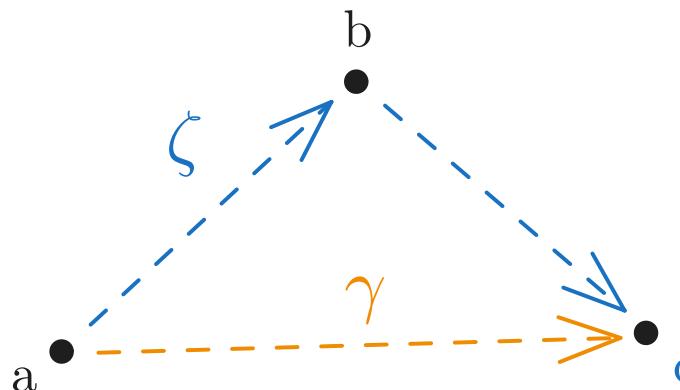
<sup>71</sup>*autoencoders* en inglés, algoritmo que dada  $\mathbf{X}$ , aprende un codificador  $c(x) : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}^d$ ,  $d \ll D$  y un decodificador  $d(-1)(x) : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^D$  tal que  $d(c(x)) \approx x$ . De hecho, uno de los «padres de la IA», Yoshua Bengio, cuyo trabajo ya mencionamos en este área, menciona en [Reddit](#) cómo su grupo de investigación en la U. de Montréal trabajaba en estas ideas: aprendizaje de variedades primero, y autocodificadores posteriormente.

único que necesitamos extraer de la variedad para tener un algoritmo de clasificación funcional: una noción de distancia adecuada.

(Vincent y Bengio, 2003) proveen una de las primeras heurísticas para una DBD: al igual que Isomap, toma las distancias de caminos mínimos pesados en un grafo con vértices  $\mathbf{X}$ , pero

- considera el grafo completo  $\mathbf{C}$  en lugar del de  $k$ -vecinos  $\text{NN}_k$  y
- pesa las aristas del grafo por la distancia euclídea en el espacio ambiente entre sus extremos *al cuadrado*.

Esta noción de distancia «arista-cuadrada»<sup>72</sup> tiene el efecto de «desalentar grandes saltos» entre observaciones lejanas, que es otra manera de decir «asignar un costo alto a trayectos por regiones de baja densidad», por lo cual ya califica - tal vez rudimentariamente - como una DBD.



$$\|a-b\| = \|b-c\| = 2 \quad \|a-c\| = 3$$

Figura 14: En el grafo completo de 3 vértices, hay sólo dos caminos entre  $a$  y  $c$ :  $\zeta = a \rightarrow b \rightarrow c$ , y  $\gamma = a \rightarrow c$

. Bajo la norma euclídea,  $L(\gamma) = 3 < 4 = 2 + 2 = L(\zeta)$  de modo que  $d(a, c) = 3$  con geodésica  $\gamma$ . Con la distancia de arista cuadrada,  $L(\zeta) = 2^2 + 2^2 = 8 < 3^2 = L(\gamma)$ , y por lo tanto  $d(a, c) = 8$  con geodésica  $\zeta$ . La distancia de arista cuadrada cambia las geodésicas, y también cambia la escala en que se miden las distancias.

Hay numerosos algoritmos y estudios comparativos de los mismos en esta era, así que sólo nos detendremos arbitrariamente en algunos. (Cayton, 2005) provee un resumen temprano de algunos de los algoritmos de aprendizaje de variedades más relevantes hasta entonces, y comen-

---

<sup>72</sup>«edge-squared distance» en inglés

ta además sobre el torrente aparentemente inacabable de algoritmos sugeridos: es tan amplio el espectro de variedades subyacentes y de representaciones «útiles» que se pueden concebir, que (a) en el plano teórico resulta muy difícil de obtener garantías «amplias» de eficiencia y performance, y (b) en el plano experimental, quedamos reducidos a «elegir un conjunto representativo de variedades» y observar si los resultados obtenidos son «intuitivamente agradables». Veinte años más tarde, esto mismo seguiremos haciendo en una sección posterior.

(Bijral, Ratliff y Srebro, 2012) ofrece - a nuestro entender - una de las primera formalizaciones «amplias» de qué constituye una DBD. Para abordarla, revisaremos una definición previa. En Ecuación 27 mencionamos sin precisiones que dada una variedad de Riemann compacta y sin frontera  $(\mathcal{M}, g)$ , la longitud de una *curva rectificable*  $\gamma \subset \mathcal{M}$  parametrizada en  $[0, 1]$  es

$$L(\gamma) = \int_0^1 \|\gamma'(t)\| dt = \int_0^1 \sqrt{g_{\gamma(t)}(\gamma'(t), \gamma'(t))} dt \quad (60)$$

**Definición 2.6.2** (curva rectificable): Una *curva rectificable* es una curva que tiene longitud finita. Más formalmente, sea  $\gamma : [a, b] \rightarrow \mathcal{M}$  una curva parametrizada. La curva es rectificable si su longitud de arco es finita:

$$L(\gamma) = \sup \sum_{i=1}^n |\gamma(t_i) - \gamma(t_{i-1})| < \infty \quad (61)$$

donde el supremo se toma sobre todas las particiones posibles  $a = t_0 < t_1 < \dots < t_n = b$  del intervalo  $[a, b]$ .

Equivalentemente, si  $\gamma$  es diferenciable por tramos, entonces es rectificable si y solo si:

$$L(\gamma) = \int_a^b |\gamma'(t)| dt < \infty \quad (62)$$

Las curvas rectificables son importantes porque permiten definir conceptos como la longitud de arco y la parametrización por longitud de arco, que son fundamentales en geometría diferencial y análisis. En particular, sea  $\gamma : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^n$  una curva rectificable parametrizada y diferenciable por tramos y  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  una función diferenciable. La integral de línea de  $f$  sobre  $\gamma$  se define como:

$$\int_{\gamma} f ds = \int_a^b f(\gamma(t)) |\gamma'(t)| dt \quad (63)$$

donde  $ds$  representa el elemento de longitud de arco.

Si  $\gamma$  tiene longitud finita y  $f$  es continua – como en nuestro caso de uso –, el resultado de la integral existe y es independiente de la parametrización.

Sea entonces  $X \sim f$ ,  $f : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}_+$  un elemento aleatorio distribuido según  $f$  sobre una variedad de Riemann compacta y sin frontera – potencialmente desconocida –  $\mathcal{M}$ . Sea además  $g(t) : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$  una función *monótonicamente decreciente* en su parámetro. Consideraremos el *costo*  $J_f$  de un camino  $\gamma : [0, 1] \rightarrow \mathcal{M}$ ,  $\gamma(0) = p$ ,  $\gamma(1) = q$  entre  $p, q$  como la integral de  $g \circ f$  a lo largo de  $\gamma$ :

$$J_{g \circ f}(\gamma) = \int_0^1 g \text{LR}((f(\gamma(t)))) \|\gamma'(t)\|_p dt \quad (64)$$

Y la distancia basada en la densidad  $f$  pesada por  $g$  entre dos puntos cualesquiera  $p, q \in \mathcal{M}$  como

$$D_{g \circ f}(p, q) = \inf_{\gamma} J_{g \circ f}(\gamma) \quad (65)$$

, donde la minimización es con respecto a todos los senderos rectificables con extremos en  $p, q$ , y  $\|\cdot\|_p$  es la  $p$  –norma o distancia de Minkowski con parámetro  $p$ .

*Observación:* La longitud de Ecuación 27 es equivalente a tomar una función constante  $g(t) = 1$  y  $p = 2$

Definición 2.6.3 (norma  $p$ ): Sea  $p \geq 1$ . Para  $x, y \in \mathbb{R}^d$ , la norma  $\ell_p$ <sup>73</sup> se define como:

$$\|x\|_p = \left( \sum_{i=1}^d |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad (66)$$

*Observación:* Cada  $p$  –norma induce su propia distancia  $d_p$ . Algunas son muy conocidas:

- $p = 1$  da la distancia «taxi» o «de Manhattan»<sup>74</sup>:

$$d_1(x, y) = \|x - y\|_1 = \sum_{i=1}^d |x_i - y_i| \quad (67)$$

,

- $p = 2$  da la distancia euclídea que ya hemos usado, omitiendo el subíndice 2:

---

<sup>73</sup>También conocida como « $p$  –norma» o «distancia de Minkowski»

<sup>74</sup>Llamada así porque representa la distancia que recorrería un taxi en una grilla urbana. Una traducción razonable sería *distancia de San Telmo*

$$d_2(x, y) = \|x - y\| = \sqrt{\sum_{i=1}^d (x_i - y_i)^2} \quad (68)$$

- ,
- $p \rightarrow \infty$  da la distancia de Chebyshev,

$$\|x\|_{p \rightarrow \infty} = \max_{1 \leq i \leq d} |x_i - y_i| \quad (69)$$

¿Es posible estimar  $D_{g \circ f}$  de manera consistente? Intuitivamente, consideremos dos puntos  $a, b \in U \subset \mathcal{M}$ ,  $\dim \mathcal{M} = d$  en un vecindario  $U$  de  $a$  lo «suficientemente pequeño» como para que  $f$  sea esencialmente uniforme en él, y en particular en el segmento  $\gamma_{ab} = \overline{ab}$  y tomemos  $g = 1/f^r$ :

$$\begin{aligned} J_r(\gamma_{ab}) &= D_r(a, b) \approx g(\text{alrededor de } a \text{ y } b) \|b - a\|_p \\ &\propto g(\|b - a\|_p^{-d}) \|b - a\|_p \\ &= \|b - a\|_p^{rd+1} = \|b - a\|_p^q \end{aligned} \quad (70)$$

,

donde  $q = r \times d + 1$ . Nótese que como ya mencionamos, tomar  $q = 1$  (o  $r = 0$ ) devuelve la distancia de Minkowski.

Luego, el costo de un paseo de  $k$  pasos por el grafo completo de  $\mathbf{X}$ ,  $\gamma = (\pi_0, \pi_1, \dots, \pi_{i_k}), \pi_j^T \in \mathbf{X} \forall j \in [k]$  por el grafo completo de  $\mathbf{X}$  se puede computar con una simple suma:

$$J_r(\gamma) = \sum_{j=1}^k D_r(\pi_{j-1}, \pi_j) \approx \propto \sum_{j=1}^k \|\pi_j - \pi_{j-1}\|_p^q \quad (71)$$

se puede computar similarmente,

que a su vez nos permite estimar las distancias geodésicas  $D_r$  como los «caminos mínimos» en el grafo completo de  $\mathbf{X}$  con aristas pesadas por  $\|b - a\|_p^q$ ,  $a^T, b^T \in \mathbf{X}$ .

Esta estimación es particularmente atractiva, en tanto no depende para nada de la dimensión ambiente  $D$ , y sólo depende de la dimensión intrínseca  $d$  de  $\mathcal{M}$  a través de  $q = rd + 1$ . De hecho, los autores mencionan que «casi cualquier par de valores  $(p, q)$  funciona», y en particular encuentran que en sus experimentos,  $p = 2, q = 8$  «anda bien en general» (Bijral, Ratliff y Srebro, 2012, 5.1)<sup>75</sup>.

Queda de manifiesto que hay una estrecha relación entre las distancias de caminos mínimos con aristas pesadas por una potencia  $q = rd + 1$  - que sólo está definida entre observaciones de  $\mathbf{X}$ , con la distancia  $D_r = \inf_{\gamma} \left( \int_{\gamma} \frac{1}{f^r} ds \right)$ , que a priori está definida globalmente en  $\mathcal{M}$ .

---

<sup>75</sup>tendremos más para decir al respecto en la sección de Experimentos TODO link experimentos

Un resultado interesante por lo exacto, aparece en (Chu, Miller y Sheehy, 2019). Dado un conjunto de puntos  $P = \{p_1, \dots, p_N\}, p_i \in \mathcal{M} \forall i \in [N]$ , Considérese la «métrica de vecino más cercano»

$$r_{P(q)} = 4 \min_{p \in P} \|q - p\| \quad (72)$$

,

que da lugar a la función de costo

$$J_{r_P}(\gamma) = \int_0^1 r_P(\gamma(t)) \|\gamma'(t)\| dt \quad (73)$$

, que a su vez define la distancia

$$D_{r_P} = \inf_{\gamma} J_{r_P}(\gamma) \quad (74)$$

que llaman distancia de vecino más cercano,  $d_{\mathbf{N}} = D_{r_P}$ .

Considérese además la distancia de arista-cuadrada:

$$d_2(a, b) = \inf_{(p_0, \dots, p_k)} \sum_{i=1}^k \|p_i - p_{i-1}\|^2 \quad (75)$$

donde el ínfimo se toma sobre toda posible secuencia de puntos  $p_0, \dots, p_k \in P, p_0 = a, p_k = b$ . Resulta entonces que la distancia de vecino más cercano  $d_{\mathbf{N}}$  y la métrica de arista cuadrada  $d_2$  son equivalentes para todo conjunto de puntos  $P$  en dimensión arbitraria. (Chu, Miller y Sheehy, 2019, Teorema 1.1)<sup>76</sup>.

Probar la equivalencia para el caso trivial con  $P = \{a, b\} \subset \mathbb{R}^D$  se convierte en un ejercicio de análisis muy sencillo, que cementa la intuición y explica el factor de 4 original:

---

<sup>76</sup>De hecho, la prueba que ofrecen es un poco más general: los elementos de  $P$  no tienen por qué ser puntos en  $\mathcal{M}$ , sino que pueden ser conjuntos compactos, con costo cero al atravesarlos, cf. (Chu, Miller y Sheehy, 2019, Figura 2)

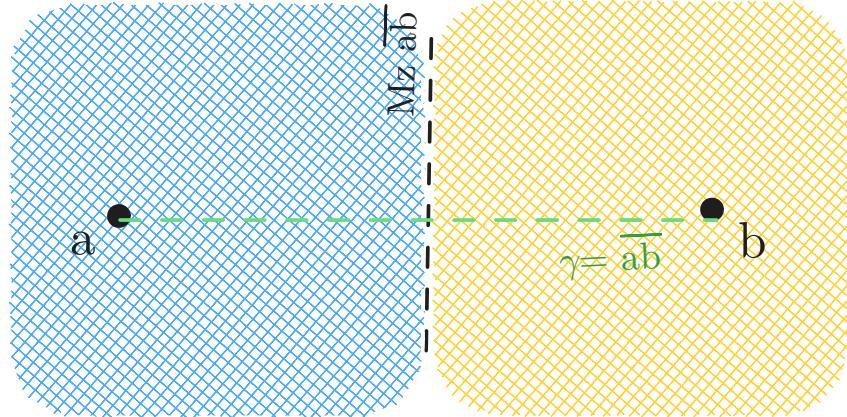


Figura 15: Ejemplo trivial de la equivalencia  $d_N \equiv d_2$  para  $P = \{a, b\}$

En la mitad del segmento  $\overline{ab}$  más cercana a  $a$  (región azul),  $d_N$  es  $\|z - a\|^2$ ; análogamente, en la región naranja  $d_N = \|z - b\|^2$ .

$$\gamma(t) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^D, \gamma(t) = (1 - t)a + tb, \gamma'(t) = b - a \quad (76)$$

$$\begin{aligned}
 d_N(a, b) &= J_{r_P}(\gamma) = \int_0^1 r_{\{a, b\}}(\gamma(t)) \times \|\gamma'(t)\| dt \\
 &= \int_0^1 4 \min_{p \in \{a, b\}} \|(a + (b - a)t) - p\| \|b - a\| dt \\
 &= 4\|b - a\| \left( \int_0^{\frac{1}{2}} \|a + (b - a)t - a\| dt + \int_{\frac{1}{2}}^1 \|a + (b - a)t - b\| dt \right) \quad (77) \\
 &= 4\|b - a\| \left( \int_0^{\frac{1}{2}} \|(b - a)t\| dt + \int_{\frac{1}{2}}^1 \|(a - b)(1 - t)\| dt \right) \\
 &= 4\|b - a\|^2 \left( \int_0^{\frac{1}{2}} t dt + \int_{\frac{1}{2}}^1 (1 - t) dt \right) = 4\|b - a\| \left( \frac{1}{8} + \frac{1}{8} \right) \\
 &= \|b - a\|^2 = d_2(a, b)
 \end{aligned}$$

El grueso del trabajo de Chu et al consiste en una prueba más general de esta igualdad, que se desarrolla en tres partes:

1. Para toda colección finita de puntos  $P = \{p_i : p_i \in \mathbb{R}^D\}$ ,
  - 1.a.  $d_N \leq d_2$
  - 1.b.  $d_N \geq d_2$
2. (1) también es válido para toda colección de compactos  $P$  de  $\mathbb{R}^D$ .

Una utilidad de este resultado, es que permite calcular con precisión para qué valores de  $k$ , estimar  $d_N$  sobre el grafo pesado por aristas cuadradas  $\text{NN}_k(\mathbf{X})$  es «suficientemente buen sustituto» por el más costoso  $\mathbf{C}(\mathbf{X})$ . En (Chu, Miller y Sheehy, 2019, Theorema 1.3), observan que basta  $k = O(2^d \ln n)$

Lo que Chu et al llaman  $d_2$  y figura en (Vincent y Bengio, 2003; Chu, Miller y Sheehy, 2019) como «distancia de arista-cuadrada», es la misma distancia  $D_r$  que (Bijral, Ratliff y Srebro, 2012) considera, con  $p = 2$  (norma euclídea) y  $r = \frac{1}{d}$  (de modo que  $q = rd + 1 = 2$ ). A nuestro entender, no hay pruebas de tal equivalencia para valores arbitrarios de  $p, q$ , pero sí existen resultados asintóticos para casos más generales.

#### 2.6.4 Distancia de Fermat

*We tackle the problem of learning a distance between points, able to capture both the geometry of the manifold and the underlying density. We define such a sample distance and prove the convergence, as the sample size goes to infinity, to a macroscopic one that we call Fermat distance as it minimizes a path functional, resembling Fermat principle in optics.*

— P. Groisman et al (2019)

El trabajo de (Groisman, Jonckheere y Sapienza, 2019) considera la misma familia de distancias basadas en funciones monótonamente decrecientes de la densidad que (Bijral, Ratliff y Srebro, 2012),  $g = \frac{1}{f^r}$ , salvo que en (Groisman, Jonckheere y Sapienza, 2019),

$$p = 2; \quad q = \alpha; \quad r = \beta = \frac{\alpha - 1}{d} \quad (78)$$

y no se limita a sugerir que la distancia en el espacio ambiente,  $D_r = D_{g \circ f}$  se puede aproximar a través de la distancia basada en el grafo completo de  $\mathbf{X}$  con aristas pesadas por  $\|\cdot\|_2^\alpha$ , sino que precisan en qué sentido la una converge a la otra, y a qué tasa.<sup>77</sup>

---

<sup>77</sup>Con respecto a fijar  $p = 2$ , en la «Observación 2.6» los autores mencionan que es posible y hasta sería interesante reemplazar la norma euclídea – 2 –norma – por otra distancia – otra  $p$  –norma, por ejemplo –, reemplazando las integrales con respecto a la longitud de arco, por integrales con respecto a la distancia involucrada. Entendemos de ello que no es una condición *necesaria* para el desarrollo del trabajo, sino sólo *conveniente*.

Definición 2.6.4 (Distancia «macroscópica» de Fermat (Groisman, Jonckheere y Sapienza, 2019, Definición 2.2)):

Sea  $f$  una función continua y positiva,  $\beta \geq 0$  y  $x, y \in S \subseteq \mathbb{R}^D$ . Definimos la *Distancia de Fermat*  $\mathcal{D}_{f,\beta}(x, y)$  como:

$$\mathcal{T}_{f,\beta}(\gamma) = \int_{\gamma} f^{-\beta} ds, \quad \mathcal{D}_{f,\beta}(x, y) = \inf_{\gamma} \mathcal{T}_{f,\beta}(\gamma) \quad (79)$$

... donde el ínfimo se toma sobre el conjunto de todos los «senderos» o curvas rectificables entre  $x$  e  $y$  contenidos en  $\bar{S}$ , la clausura de  $S$ , y la integral es entendida con respecto a la longitud de arco  $ds$  dada por la distancia euclídea como siempre.

Este objeto «macroscópico» se puede aproximar a partir de una versión «microscópica» del mismo, que en límite converge a  $\mathcal{D}_{f,\beta}$ :

Definición 2.6.5 (Distancia muestral de Fermat):

Sea  $Q$  un conjunto no-vacío, *localmente finito*<sup>78</sup> de  $\mathbb{R}^D$ . Para  $\alpha \geq 1$  y  $x, y \in \mathbb{R}^d$ , la *Distancia Muestral de Fermat* se define como

$$D_{Q,\alpha} = \inf \left\{ \sum_{j=1}^{K-1} \|q_{j+1} - q_j\|^{\alpha} : (q_1, \dots, q_K) \text{ es un camino de } x \text{ a } y, K \geq 1 \right\} \quad (80)$$

donde los  $q_j$  son elementos  $Q$ . Nótese que  $D_{Q,\alpha}$  satisface la desigualdad triangular, define una métrica sobre  $Q$  y una pseudo-métrica<sup>79</sup> sobre  $\mathbb{R}^d$ .

Definición 2.6.6 (variedad isométrica): Diremos que  $\mathcal{M}$  es una variedad  $d$ -dimensional *C<sup>1</sup> isométrica* embebida en  $\mathbb{R}^D$  si existe un conjunto abierto y conexo  $S \subset \mathbb{R}^D$  y  $\varphi : S \rightarrow \mathbb{R}^D$  una transformación isométrica<sup>80</sup> tal que  $\varphi(\bar{S}) = \mathcal{M}$ . Como se mencionó con anterioridad, se espera que  $d \ll D$ , pero no es necesario.

---

<sup>78</sup>Es decir, que para todo compacto  $U \subset \mathbb{R}^D$ , la cardinalidad de  $Q \cap U$  es finita,  $|Q \cap U| < \infty$ .

<sup>79</sup>una métrica tal que la distancia puede ser nula entre puntos no-idénticos  $\exists a \neq b : d(a, b) = 0$

<sup>80</sup>Que preserva las métricas o distancias; del griego «isos» (igual) y «metron» (medida)

Definición 2.6.7 (Convergencia de  $D_{Q,\alpha}$ , (Groisman, Jonckheere y Sapienza, 2019, Teorema 2.7)):

Asuma que  $\mathcal{M}$  es una variedad  $C^1$   $d$ -dimensional isométrica embebida en  $\mathbb{R}^D$  y  $f : M \rightarrow R_+$  es una función de densidad de probabilidad continua. Sea  $Q_n = \{q_1, \dots, q_n\}$  un conjunto de elementos aleatorios independientes con densidad común  $f$ . Entonces, para  $\alpha > 1$  y  $x, y \in M$  tenemos:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^\beta D_{Q_n, \alpha}(x, y) = \mu D_{f, \beta}(x, y) \text{ casi seguramente.} \quad (81)$$

Aquí,

- $\beta = (\alpha - 1)/d$ ,
- $\mu$  es una constante que depende únicamente de  $\alpha$  y  $d$  y
- la minimización se realiza sobre todas las curvas rectificables  $\gamma \subset M$  que comienzan en  $x$  y terminan en  $y$ .

*Observación:* El factor de escala  $\beta = \frac{\alpha-1}{d}$  depende de la dimensión intrínseca  $d$  de la variedad, y no de la dimensión  $D$  del espacio ambiente.

La distancia muestral de Fermat  $D_{Q,\alpha}$ :

- se puede aproximar a partir de una muestra «lo suficientemente grande»
- sin conocer ni la variedad  $\mathcal{M}$  ni su dimensión intrínseca; además
- tiene garantías de convergencia a una distancia basada en densidad (DBD) «macroscópica» (la distancia de Fermat «a secas»  $\mathcal{D}_*(f, \beta)$ ) y
- por definición, aprende «a la vez» la geometría del dominio y la densidad de la variable aleatoria objetivo sobre éste.

Es decir, que pareceríamos haber conseguido la pieza faltante para nuestro clasificador en variedades *desconocidas* y estaríamos en condiciones de proponer un algoritmo de clasificación que reúna todos los cabos del tejido teórico hasta aquí desplegado.

Nobleza obliga, hemos de mencionar que los trabajos de (Mckenzie y Damelin, 2019; Little, McKenzie y Murphy, 2021), contemporáneos a Groisman et al, también consideran lo que ellos llaman «distancias de caminos mínimos pesadas por potencias»<sup>81</sup>, y las aplican no a problemas de clasificación, sino de *clustering*<sup>82</sup>. Hay algunas diferencias en

---

<sup>81</sup>«power-weighted shortest-path distances» o PWSPDs por sus siglas en inglés

<sup>82</sup>de identificación de grupos en datos no etiquetados

<sup>83</sup>En particular, la distancias microscópica que plantean Little et al no es la suma de las aristas pesadas por  $q = \alpha$  como hacen Bijral et al y Groisman et al, sino la raíz  $\alpha$ -ésima de tal suma, en una especie de reversión de la distancia de Minkowski.

la minucia del tratamiento<sup>83</sup>, pero no así en la sustancia, por lo cual pasaremos directamente a la próxima sección.

### 3 Propuesta Original

Al comienzo de este sendero teórico nos preguntamos: ¿es posible mejorar un algoritmo de clasificación reemplazando la distancia euclídea por una aprendida de los datos? Habiendo explorado el área en profundidad, entendemos que sí pareciera ser posible, y en particular la distancia muestral de Fermat es un buen candidato de reemplazo.

Para saldar la cuestión, nos propusimos:

1. Implementar un clasificador basado en estimación de densidad por núcleos como el de [Definición 2.4.15](#) (Loubes y Pelletier, 2008), que llamaremos «KDC». Además,
2. Implementar un estimador de densidad por núcleos basado en la distancia de Fermat, a fines de poder comparar la *performance* de KDC con distancia euclídea y de Fermat.

Nótese que el clasificador de  $k$  – vecinos más cercanos de [Definición 2.1.2](#) ( $k$ -NN, Ecuación 9), tiene un pariente cercano,  $\varepsilon$  – NN

**Definición 3.0.1** (clasificador de  $\varepsilon$  – vecinos-más-cercanos): Sean  $B_{\varepsilon(x)}$  una bola normal de radio  $\varepsilon$  centrada en  $x$ , y  $\mathcal{N}_\varepsilon(x) = \mathbf{X} \cap B_{\varepsilon(x)}$  el  $\varepsilon$  – vecindario de  $x$ . El clasificador de  $\varepsilon$  – vecinos-más-cercanos  $\varepsilon$  – NN le asignará a  $x$  la clase más frecuente entre la de sus vecinos  $y \in \mathcal{N}_\varepsilon(x)$

Ecuación 9 es esencialmente equivalente a KDC con un núcleo «rectangular»,  $k(t) = \frac{\mathbb{1}(d(x,t) < \varepsilon)}{\varepsilon}$ , pero su implementación es considerablemente más sencilla. Para comprender más cabalmente el efecto de la distancia de Fermat en *la tarea de clasificación*, y no solamente en *cierto* algoritmo de clasificación, nos propusimos también

3. Implementar un clasificador cual [Definición 2.1.2](#), pero con distancia muestral de Fermat en lugar de euclídea.

#### 3.0.1 Estimación de distancia out-of-sample

- Entrenar el clasificador por validación cruzada está OK: como  $\mathbf{X}_{\text{train}} \subseteq \mathbf{X}$  y  $\mathbf{X}_{\text{test}} \subseteq \mathbf{X}$ , se sigue que  $\forall (a, b) \in \{\mathbf{X}_{\text{train}} \times \mathbf{X}_{\text{test}}\} \subseteq \{\mathbf{X} \times \mathbf{X}\}$  y  $D_{\mathbf{X}, \alpha}(a, b)$  está bien definida. ¿Cómo sé la distancia *muestral* de una *nueva* observación  $x_0$ , a los elementos de cada clase?

Para cada una de las  $g_i \in \mathcal{G}$  clases, definimos el conjunto

---

Además, el contexto de *clustering* los lleva a considerar una muestra compuesta de elementos provenientes de variedad disjuntas, una representando a cada *cluster*.

$$Q_i = \{x_0\} \cup \{x_j : x_j \in \mathbf{X}, g_j = g_i, j \in \{1, \dots, N\}\} \quad (82)$$

y calculamos  $D_{Q_i, \alpha}(x_0, \cdot)$

### 3.0.2 Adaptación a variedades disjuntas, elección de $h$ por clase

- El clasificador de Loubes & Pelletier asume que todas las clases están soportadas en la misma variedad  $\mathcal{M}$ . ¿Quién dice que ello vale para las diferentes clases?

¡Nadie! Pero

1. No hace falta dicho supuesto, y en el peor de los casos, podemos asumir que la unión de las clases está soportada en *cierta* variedad de Riemman, que resulta de (¿la clausura de?) la unión de sus soportes individuales.
2. Sí es cierto que si las variedades (y las densidades que soportan) difieren, tanto el  $\alpha_i^*$  como el  $h_i$  \* «óptimos» para los estimadores de densidad individuales no tienen por qué coincidir.
3. Aunque las densidades individuales  $f_i$  estén bien estimadas, el clasificador resultante puede ser malo si no diferencia bien «en las fronteras». Por simplicidad, además, decidimos parametrizar el clasificador con dos únicos hiperparámetros globales:  $\alpha, h$ .

(Hall y Kang, 2005) h óptimo para clasificación con KDEs

## 3.1 Evaluación

Nos interesa conocer en qué circunstancias, si es que hay alguna, la distancia muestral de Fermat provee ventajas a la hora de clasificar por sobre la distancia euclídea. Además, en caso de existir, quisiéramos en la medida de lo posible comprender por qué (o por qué no) es que tal ventaja existe. A nuestro entender resulta imposible hacer declaraciones demasiado generales al respecto de la capacidad del clasificador: la cantidad de *datasets* posibles, junto con sus *configuraciones de evaluación* es tan densamente infinita como lo permite la imaginación del evaluador. Con un ánimo exploratorio, nos proponemos explorar la *performance* de nuestros clasificadores basados en distancia muestral de Fermat en algunas *tareas* puntuales.

### 3.1.1 Métricas de *performance*

En tareas de clasificación, la métrica más habitual es la *exactitud*<sup>84</sup>

---

<sup>84</sup>Más conocida por su nombre en inglés, *accuracy*.

Definición 3.1.1 (exactitud): Sean  $(\mathbf{X}, \mathbf{g}) \in \mathbb{R}^{n \times p} \times \mathbb{R}^n$  una matriz de  $n$  observaciones de  $p$  atributos y sus clases asociadas. Sea además  $\hat{\mathbf{g}} = \hat{G}(\mathbf{X})$  las predicciones de clase resultado de una regla de clasificación  $\hat{G}$ . La *exactitud* (exac) de  $\hat{G}$  en  $\mathbf{X}$  se define como la proporción de coincidencias con las clases verdaderas  $\mathbf{g}$ :

$$\text{exac}(\hat{G} | \mathbf{X}) = n^{-1} \sum_{i=1}^n \mathbb{1}(\hat{g}_i = g_i) \quad (83)$$

La exactitud está bien definida para cualquier clasificador que provea una regla *dura* de clasificación. Ahora bien, cuando un clasificador provee una regla suave, la exactitud como métrica « pierde información »: dos clasificadores binarios que asignen respectivamente 0.51 y 1.0 de probabilidad de pertenecer a la clase correcta a todas las observaciones tendrán la misma exactitud, 100%, aunque el segundo es a las claras mejor. A la inversa, cuando un clasificador erra al asignar la clase: ¿lo hace con absoluta confianza, asignando una alta probabilidad a la clase equivocada, o con cierta incertidumbre, repartiendo la masa de probabilidad entre varias clases que considera factibles?

Una métrica natural para evaluar una regla de clasificación suave, es la *verosimilitud* (y su logaritmo) de las predicciones.

Definición 3.1.2 (verosimilitud): Sean  $(\mathbf{X}, \mathbf{y}) \in \mathbb{R}^{n \times p} \times \mathbb{R}^n$  una matriz de  $n$  observaciones de  $p$  atributos y sus clases asociadas. Sea además  $\hat{\mathbf{Y}} = \hat{G}(\mathbf{X}) \in \mathbb{R}^{n \times k}$  la matriz de probabilidades de clase resultado de una regla suave de clasificación  $\hat{G}$ . La *verosimilitud* (vero) de  $\hat{G}$  en  $\mathbf{X}$  se define como la probabilidad conjunta que asigna  $\hat{G}$  a las clases verdaderas  $\mathbf{y}$ :

$$L(\hat{G}) = \text{vero}(\hat{G} | \mathbf{X}) = \Pr(\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{y}) = \prod_{i=1}^n \Pr(\hat{y}_i = y_i) = \prod_{i=1}^n \hat{\mathbf{Y}}_{(i,y_i)} \quad (84)$$

Por conveniencia, se suele considerar la *log-verosimilitud promedio*,

$$\ell(\hat{G}) = n^{-1} \log(L(\hat{G})) = n^{-1} \sum_{i=1}^n \log(\hat{\mathbf{Y}}_{(i,y_i)}) \quad (85)$$

La verosimilitud de una muestra varía en  $[0, 1]$  y su log-verosimilitud, en  $(-\infty, 0]$ , pero como métrica esta sólo se vuelve comprensible *relativa a otros clasificadores*. Una forma de «normalizar» la log-verosimilitud, se debe a (McFadden, 1974).

Definición 3.1.3 ( $R^2$  de McFadden): Sea  $\hat{G}_0$  el clasificador «nulo», que asigna a cada observación y posible clase, la frecuencia empírica de clase encontrada en la muestra de entrenamiento  $\mathbf{X}_{\text{train}}$ . Para todo clasificador suave  $\hat{G}$ , definimos el  $R^2$  de McFadden como

$$R^2(\hat{G} | \mathbf{X}) = 1 - \frac{\ell(\hat{G})}{\ell(\hat{G}_0)} \quad (86)$$

*Observación:*  $R^2(\hat{G}_0) = 0$ . A su vez, para un clasificador perfecto  $\hat{G}^*$  que otorgue toda la masa de probabilidad a la clase correcta, tendrá  $L(\hat{G}^*) = 1$  y log-verosimilitud igual a 0, de manera que  $R^2(\hat{G}^*) = 1 - 0 = 1$ .

Sin embargo, un clasificador *peor* que  $\hat{G}_0$  en tanto asigne bajas probabilidades a las clases correctas, puede tener un  $R^2$  infinitamente negativo.

Visto y considerando que tanto *f-KDC* como *f-KN* son clasificadores suaves, evaluaremos su comportamiento en comparación con ambas métricas, la exactitud y el  $R^2$  de McFadden<sup>85</sup>

### 3.1.2 Algoritmos de referencia

Además de medir qué (des)ventajas otorga el uso de una distancia aprendida de los datos en la tarea de clasificación, quisiéramos entender (a) por qué sucede, y (b) si tal (des)ventaja es significativa en el amplio abanico de algoritmos disponibles. Pírrica victoria sería mejorar con la distancia de Fermat la *performance* de cierto algoritmo, para encontrar que aún con la mejora, el algoritmo no es competitivo en la tarea de referencia.

Consideraremos a modo de referencia los siguientes algoritmos:

- Naive Bayes Gaussiano (GNB),
- Regresión Logística (LR) y
- Clasificador de Soporte Vectorial (svc)

Esta elección no pretende ser exhaustiva, sino que responde a un «capricho informado» del investigador. GNB es una elección natural, ya que es la simplificación que surge de asumir independencia en las dimensiones de  $X$  para KDE multivariado ([Definición 2.3.1](#)), y se puede computar para grandes conjuntos de datos en muy poco tiempo. LR es «el» método para clasificación binaria, y su extensión a múltiples clases no es particularmente compleja: para que sea mínimamente valioso un nuevo algoritmo, necesita ser al menos tan bueno como LR, que tiene ya más de 65 años

---

<sup>85</sup>de aquí en más,  $R^2$  para abbreviar

en el campo (Bliss, 1935), (Cox, 1958). Por último, fue nuestro deseo incorporar algunos métodos más cercano al estado del arte: un método de *boosting* ((«Gradient boosting», 2025)) y el antedicho clasificador de soporte vectorial, *svc*<sup>86</sup>. Por conocerlo en profundidad y en virtud de su sencillez de uso, la implementación se realizó utilizando `scikit-learn` (Pedregosa *et al.*, 2011), un poderoso y extensible paquete para tareas de aprendizaje automático en Python.

### 3.1.3 Metodología

La unidad de evaluación de los algoritmos a considerar es una *Tarea*, que se compone de:

- un *diccionario de algoritmos* a evaluar en condiciones idénticas, definidas por
- un *dataset* con el conjunto de  $N$  observaciones en  $D$  dimensiones repartidas en  $K$  clases,  $(\mathbf{X}, \mathbf{g})$ ,
- un *split de evaluación*  $r \in (0, 1)$ , que determina las proporciones de los datos a usar durante el entrenamiento ( $1 - r$ ) y la evaluación ( $r$ ), junto con
- una *semilla*  $s \in [2^{32}]$  que alimenta el generador de números aleatorios y define determinísticamente cómo realizar la división antedicha.

### 3.1.4 Entrenamiento de los algoritmos

La especificación completa de un clasificador, requiere, además de la elección del algoritmo, la especificación de sus *hiperparámetros*, de manera tal de optimizar su rendimiento bajo ciertas condiciones de evaluación. Para ello, se definió de antemano para cada clasificador una *grilla* de hiperparámetros: durante el proceso de entrenamiento, la elección de los «mejores» hiperparámetros se efectuó maximizando la log-verosimilitud [Definición 3.1.2](#) para los clasificadores suaves, y la exactitud [Definición 3.1.1](#) para los duros<sup>87</sup> con una búsqueda exhaustiva por convalidación cruzada de 5 pliegos<sup>88</sup> sobre la grilla entera.

### 3.1.5 Estimación de la variabilidad en la *performance* reportada

En última instancia, cualquier métrica evaluada, no es otra cosa que un *estadístico* que representa la «calidad» del clasificador en la Tarea a mano. A fines de conocer no sólo su estimación puntual sino también darnos una idea de la variabilidad de su performance, para cada dataset

---

<sup>86</sup>en dos variantes: con núcleos (*kernels*) lineales y RBF - *radial basis functions*

<sup>87</sup>Entre los mencionados, el único clasificador duro es *svc*. Técnicamente es posible entrenar un clasificador suave a partir de uno duro con un *segundo* estimador que toma como *input* el resultado «crudo» del clasificador duro y da como *output* una probabilidad calibrada (cf. [Calibración](#) en la documentación de `scikit-learn` (Buitinck *et al.*, 2013)), pero es un proceso computacionalmente costoso.

<sup>88</sup>Conocida en inglés como *Grid Search 5-fold Cross-Validation*

y colección de algoritmos, se entrenaron y evaluaron 25 tareas idénticas salvo por la semilla  $s$ , que luego se usaron para estimar la varianza y el desvío estándar en la exactitud ([Definición 3.1.1](#)) y el pseudo- $R^2$  ([Definición 3.1.3](#)).

Cuando el conjunto de datos proviene del mundo real y por lo tanto *preexiste a nuestro trabajo*, las 25 semillas  $s_1, \dots, s_{25}$  fueron utilizadas para definir el split de entrenamiento/evaluación. Por el contrario, cuando el conjunto de datos fue generado sintéticamente, las semillas se utilizaron para generar 25 versiones distintas pero perfectamente replicables del dataset, y en todas se utilizó una misma semilla maestra  $s^*$  para definir el split de evaluación.

### 3.1.6 Regla de Parsimonia

La estrategia de validación cruzada intenta evitar que los algoritmos sobreajusten durante el entrenamiento, evaluando su comportamiento en  $\mathbf{X}_{\text{test}}$  que es MECE a  $\mathbf{X}_{\text{train}}$ . No todas las parametrizaciones son equivalentes: en general, para cada hiperparámetro se puede establecer una dirección en la que el modelo se complejiza, en tanto se ajusta más y más a los datos de entrenamiento: un estimador kNN entrenado con *menos vecinos* cambia sus predicciones más seguido que uno con *más vecinos* - considere 50 – NN y 1 – NN.

*Observación (Navaja de Occam):* «cuando dos teorías en igualdad de condiciones tienen las mismas consecuencias, la teoría más simple tiene más probabilidades de ser correcta que la compleja»

Reformulando, diremos que sujeto a la implementación de *cierto* algoritmo,

- cuando dos teorías - i.e. hiperparametrizaciones  $h_0, h_1$  del algoritmo
- tienen *casi* las mismas consecuencias - alcanzan  $R^2$  tales que  $|R^2(h_0) - R^2(h_1)| \leq \epsilon$

entonces la teoría más sencilla - la de menor *complejidad*  $C(p)$  para cierta función  $C$  a definir.

La validación cruzada de  $k$  pliegos nos provee naturalmente de  $k$  pliegos - realizaciones - de la métrica a optimizar, para la hiperparametrización que minimiza la pérdida de evaluación,  $h^{\text{opt}} = (h_1^{\text{opt}}, \dots, h_k^{\text{opt}})$ ,  $\hat{s}^2(h^{\text{opt}})$ , y sobre ella implementar una regla de sentido común:

Definición 3.1.4 (regla de  $1\sigma$ ): Sea  $\hat{s}^2(L(h))$  una estimación «razonable» de la varianza de la pérdida  $L(h)$  pérdida del modelo parametrizado en  $h$ , y  $h^{\text{opt}}$  la que alcanza la mínima pérdida. De entre todas las hiperparametrizaciones, elíjase  $h^* = \arg \min_{h \in \mathcal{H}} C(h)$ ,

$$\mathcal{H} = \left\{ h : L(h) \leq L(h^{\text{opt}}) + \sqrt{\hat{s}^2(L(h^{\text{opt}}))} \right\}, \text{ la más sencilla.}$$

Para definir una  $C$  factible en modelos con  $\dim(h) > 1$ , definimos el orden de complejidad creciente *para cada clasificador*, como una lista ordenada de 2-tuplas con los nombres de cada hiperparámetro, y una dirección de crecimiento en cada uno. Para  $f\text{-KDC}$ , por ejemplo,  $C(h) = [(\alpha, \text{ascendente}), (h, \text{descendente})]$ . La decisión de ordenar así los parámetros, con  $\alpha$  primero y  $C$  *ascendente* en  $\alpha$ , hace que la evaluación «prefiera» naturalmente a  $\text{KDC}$  por sobre  $f\text{-KDC}$ <sup>89</sup> el mínimo  $\alpha = 1$  estudiado) es mejor. En consiguiente, cuando veamos que  $f\text{-KDC}$  elige un  $\alpha \neq 1$ , sabremos que no es por pura casualidad.

*Observación (complejidad en  $h$ ):* La complejidad es *descendente* en el tamaño de la ventana  $h$  TODO: cambiar nombre hiperparametrizacion a algo  $\neq h$ , algo griego?), en tanto a mayor  $h$ , tanto más grande se vuelve el vecindario donde  $K_h(d(x, x_i)) \gg 0$  y por ende pesa en la asignación. Análogamente,  $k - \text{NN}$  y su primo  $\varepsilon - \text{NN}$  tiene complejidad descendente en  $k, \varepsilon$ .

### 3.1.7 Medidas de locación y dispersión no-paramétricas:

Siendo el «setting» (DBD en variedad de Riemann desconocida) tan poco ortodoxo, parece razonable comparar performance con medidas de locación robustas. Por eso comparamos la performance *mediana* (y no media) por semilla de c/ clasificador, y las visualizamos con un *boxplot*, y no un IC  $\mu \pm n \times \sigma$ .

## 4 Resultados

### 4.1 In Totis

En total, ejecutamos unas 4,500 tareas, producto de 25 repeticiones por dataset y clasificador, sobre un total de 20 datasets y 9 clasificadores diferentes. Recordemos que todos los estimadores se entrenaron con *score neg\_log\_loss* (para optimizar por  $R^2$ ), salvo *svc* que al ser un clasificador duro, se entrenó con *accuracy*. Así, entre los clasificadores blandos la

---

<sup>89</sup> $\text{KDC} = f\text{-KDC}(\alpha = 1)$

distancia de Fermat rindió frutos, con el máximo  $R^2$  mediano en 10 de los 20 experimentos: 7 preseas fueron para  $f\text{-KDC}$  y 3 para  $f\text{-KN}$ .

**GBT** «ganó» en 5 datasets, entre ellos en varios con mucho ruido (`_hi`, y `_12`). **KDC** resultó óptimo en 2 datasets, cementando la técnica del [Definición 2.4.15](#) como competitiva de por sí. Por último, tanto **KN** como **LR** (en su versión escalada, `s-LR`) resultaron medianamente mejores que todos los demás en ciertos dataset, y sólo **GNB** no consiguió ningún podio - aunque resultó competitivo en casi todo el tablero. La amplia distribución de algoritmos óptimos según las condiciones del dataset, remarcan la existencia de ventajas relativas en todos ellos.

clf	cant	datasets
fkdc	7	anteojos, circulos_lo, digitos, espirales_lo, helices_0, lunas_lo, pionono_0
gbt	5	circulos_hi, eslabones_12, lunas_hi, pionono_12, vino
fkn	3	hueveras_0, hueveras_12, iris
kdc	2	espirales_hi, mnist
kn	2	eslabones_0, helices_12
slr	1	pinguinos

El mismo análisis con métrica de exactitud es, desde luego, menos favorable a nuestros métodos entrenados para otra cosa. **svc**, entrenado a tono, resulta algoritmo casi imbatible, con sólidos números en todo tipo de datasets y máximos en 6 datasets. **GBT** vuelve a brillar en datasets con mucho ruido y siguen figurando como competitivos un amplio abanico de estimadores: hasta  $f\text{-KDC}$  retiene su título en 1 dataset, `espirales_lo`.

clf	cant	datasets
svc	6	circulos_lo, eslabones_0, espirales_hi, hueveras_0, mnist, pionono_0
gbt	4	circulos_hi, eslabones_12, hueveras_12, pionono_12
kdc	3	anteojos, digitos, helices_0
fkn	2	iris, lunas_lo
kn	2	helices_12, lunas_hi
slr	2	pinguinos, vino
fkdc	1	espirales_lo

Sólo considerar la performance de  $f\text{-KDC}$  y  $f\text{-KN}$  en los 20 datasets daría unas 40 unidades de análisis, y en el espíritu de indagación curiosa que lleva esta tesis, existen aún más tendencias y patrones interesantes en los 4,500 experimentos realizados. No es mi intención matar de aburrimiento al lector, con lo cual a continuación haremos un paneo arbitrario

por algunos de los resultados que (a) me resultaron más llamativos o (b) se acercan lo suficiente a alguno de la literatura previa como para merecer un comentario aparte. Quien desee corroborar que no hice un uso injustificado de la discrecionalidad para elegir resultados, puede referirse al Apéndice A2 - Hojas de resultados por experimento 7 y darse una panzada de tablas y gráficos.

#### 4.2 Lunas, círculos y espirales ( $D = 2, d = 1, k = 2$ )

Para comenzar, consideramos el caso no trivial más sencillo con  $D > d$ :  $D = 2, d = 1, k = 2$ , y exploramos tres curvas sampleadas en con un poco de «ruido blanco»<sup>90</sup>:

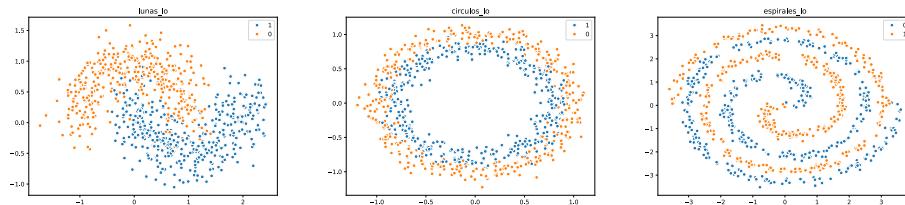


Figura 16: «Lunas», «Círculos» y «Espirales», con  $d_x = 2, d_{\mathcal{M}} = 1$  y  $s = 1075$

**Definición 4.2.1 (ruido blanco):** Sea  $X = (X_1, \dots, X_d) \in \mathbb{R}^d$  una variable aleatoria tal que  $E(X_i) = 0$ ,  $\text{Var}(X_i) = \Sigma \forall i \in [d]$ . Llamaremos «ruido blanco con escala  $\Sigma$ » a toda realización de  $X$ .

En una primera variación con «bajo ruido» (y sufijada «\_lo»)<sup>91</sup>, las observaciones  $\mathbf{X}$  sobre la variedad  $\mathcal{M}$ <sup>92</sup>, se les añadió ruido blanco una normal estándar bivariada escalada por un parámetro de ruido  $\sigma$ ,  $\varepsilon \sim \mathcal{N}_2(0, \sigma^2 \mathbf{I})$  ajustado a cada dataset para resultar «poco» relativo a la escala de los datos.

$$\sigma_{\text{lunas}} = 0.25 \quad \sigma_{\text{circulos}} = 0.08 \quad \sigma_{\text{espirales}} = 0.1 \quad (87)$$

En los tres datasets, el resultado es muy similar:  $f$ -KDC es el estimador que mejor  $R^2$  reporta, y en todos tiene una exactitud comparable a la del mejor para el dataset. En ninguno de los tres datasets  $f$ -KDC tiene

<sup>90</sup>TODO: paper que habla de «sampleo en el tubo de radio  $r$  alrededor de la variedad  $\mathcal{M}$ ».

<sup>91</sup>en inglés, *low* y *high* - baja y alta - son casi homófonos de *lo* y *hi*

<sup>92</sup>TODO: Cómo se generaron los datasets en variedades? R: Sampleo (uniforme) en espacio euclídeo homeomorfo y proyección con la carta exponencial + ruido «blanco»  $\varepsilon$ . Más detalles en el Apéndice «Datasets»

una exactitud muy distinta a la de kdc, pero saca ventaja en  $R^2$  para lunas\_lo y espirales\_lo.

Entre el resto de los algoritmos, los no paramétricos son competitivos: KN, f-KN y GBT, mientras que GNB, s-LR, LR rinden mal pues las *fronteras de decisión* que pueden representar no cortan bien a los datos.

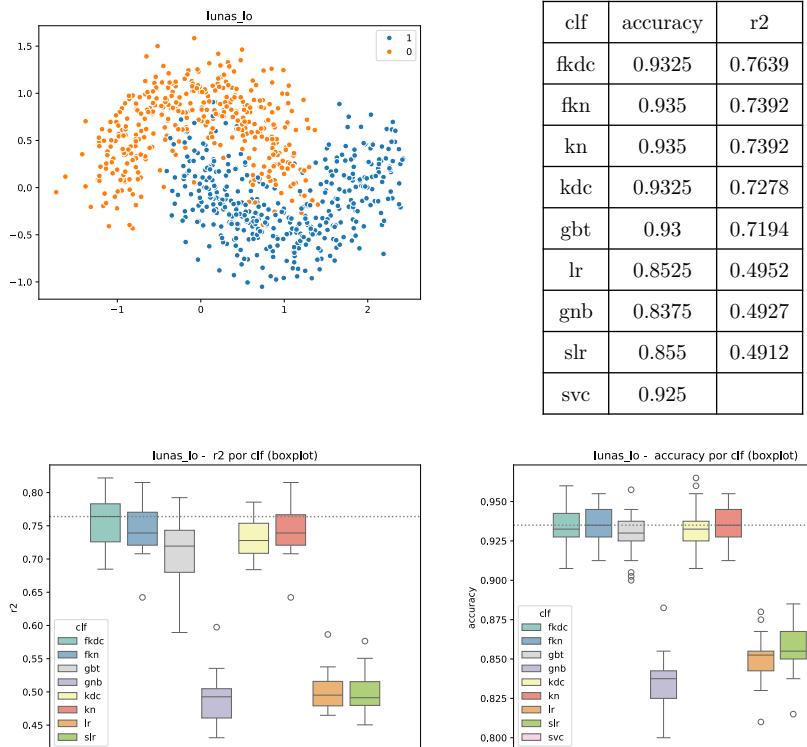


Tabla 1: Resumen para lunas\_lo

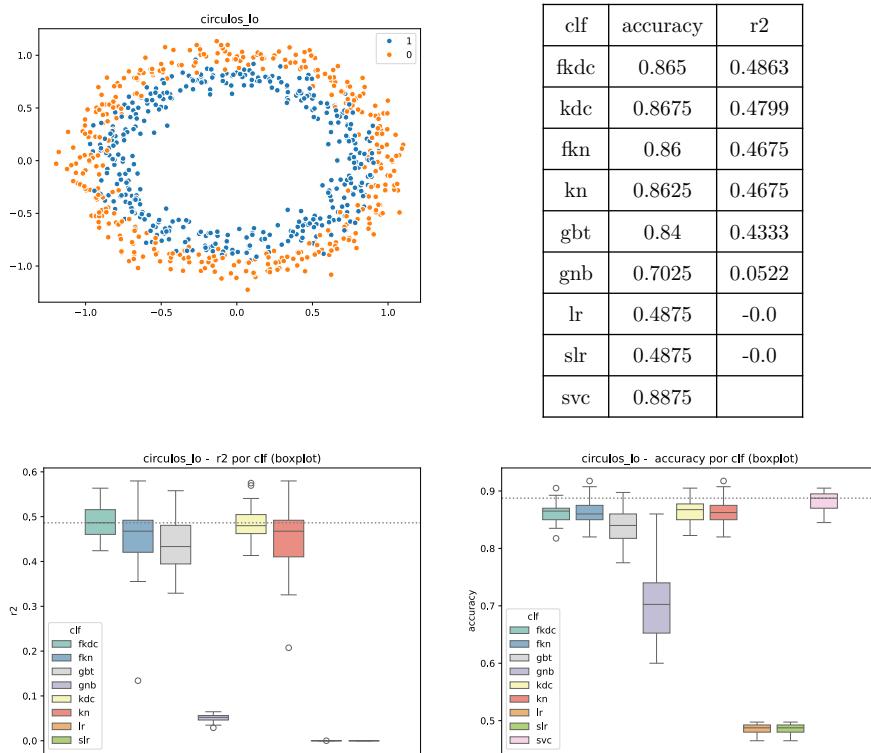
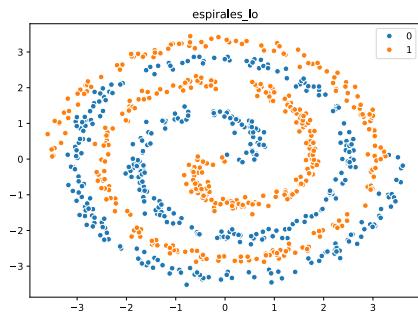


Tabla 2: Resumen para circulos\_lo



clf	accuracy	r2
fkdc	0.9775	0.874
kdc	0.975	0.8303
fkn	0.97	0.7787
kn	0.9625	0.7501
gbt	0.7875	0.2997
gnb	0.5225	0.0024
lr	0.4975	0.0001
slr	0.4975	0.0
svc	0.975	

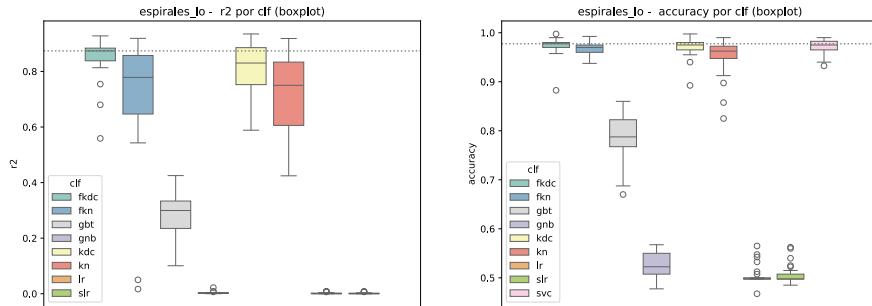


Tabla 3: Resumen para espirales\_lo

*Observación (riesgos computacionales):* Una dificultad de entrenar un clasificador *original*, es que hay que definir las rutinas numéricas «a mano»<sup>93</sup>, y *debugear* errores en rutinas numéricas es particularmente difícil, porque las operaciones casi siempre retornan, salvo que retornan valores irrisorios<sup>94</sup>.

A ello se le suma que el cómputo de  $D_{Q,\alpha}$  es realmente caro. TODO: precisar orden  $O$ . Aún siguiendo «buenas prácticas computacionales»<sup>95</sup>, implementaciones ingenuas pueden resultar impracticables hasta en datasets de pequeño  $n$ .

Por otra parte, es cierto que cuando  $\alpha = 1$  y  $n \rightarrow \infty$ ,  $D_{Q,\alpha} \rightarrow \mathcal{D}_{f,\beta} = \|\cdot\|_2$ , pero esa es una afirmación asintótica y aquí estamos tomando  $k = 5$  pliegos de entre  $n = 800$  observaciones, con  $n_{\text{train}} = n_{\text{eval}} = n/2$  observaciones para un tamaño muestral efectivo de  $\frac{k-1}{k} \frac{n}{2} = 360$ . ¿Es 360 un tamaño muestral «lo suficientemente grande» para que sea válida?

Por todo ello, que la bondad de los clasificadores *no empeore* con el uso de  $D_{Q,\alpha}$  en lugar de  $\|\cdot\|_2$  es de por sí un hito importante.

---

<sup>93</sup>Usando librerías estándares como `numpy` y `scipy`, sí, pero nada más. Confer TODO Apéndice B Código.

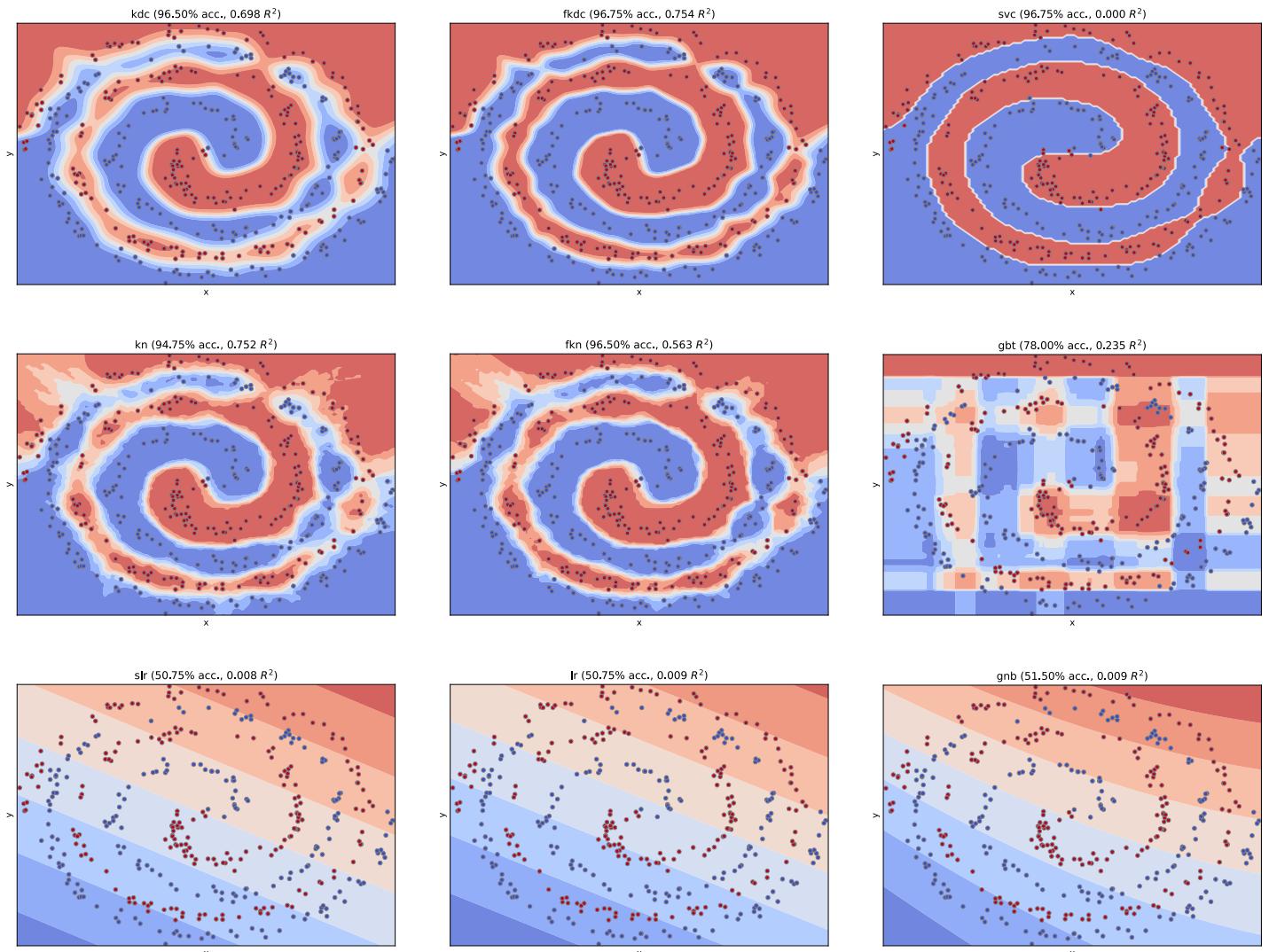
<sup>94</sup>Hubo montones de estos, cuya resolución progresiva dio lugar a la pequeña librería que acompaña esta tesis y documentamos en el anexo TODO ref anexo B código. Todo error de cálculo que pueda persistir en el producto final depende exclusivamente de mí, pero tan mal no parecen haber dado los experimentos.

<sup>95</sup>Como sumar logaritmos de en lugar de multiplicar valores «crudos» siempre que sea posible

#### 4.2.0.1 Fronteras de decisión

Una inspección ocular a las fronteras de decisión revela las limitaciones de distintos algoritmos.

LR, *s*-LR sólo pueden dibujar fronteras «lineales», y como ninguna frontera lineal que corte la muestra logra dividirla en dos regiones con densidades de clase realmente diferentes, el algoritmo falla. GNB falla de manera análoga, aunque su problema es otro - no lidia bien con distribuciones con densidades marginales muy similares.



Aún con esas limitaciones, LR tiene un rendimiento decente en *lunas\_lo*:

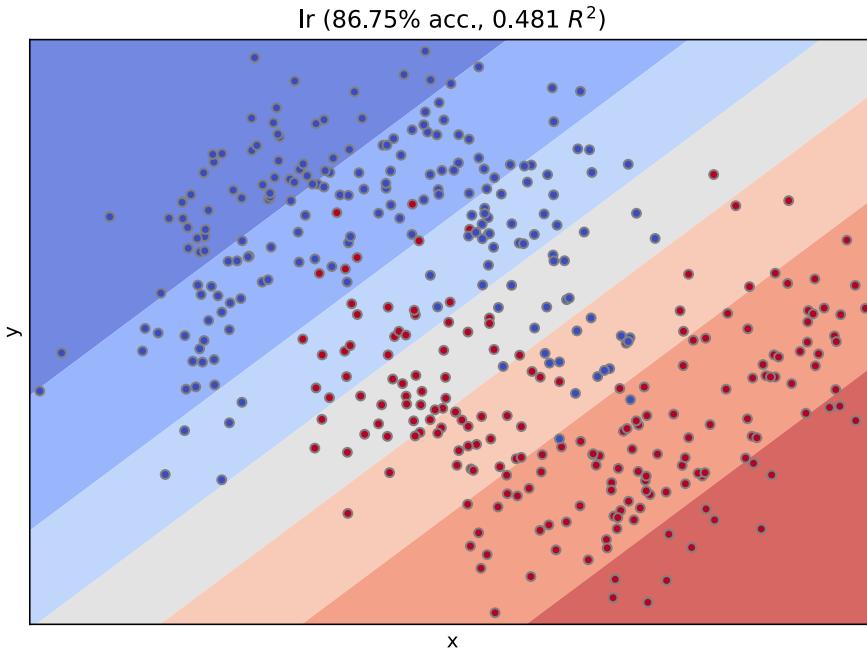


Figura 17: Frontera de decisión para *s-LR* en `lunas_1o`, semilla 1075

Nótese que la frontera *lineal* entre clases (al centro de la banda gris) aprendida por *LR* separa *bastante* bien la muestra: pasa por el punto del segmento que une los «focos» de cada luna, y de todas las direcciones con origen allí, es la que mejor separa las clases. *A grosso modo*, en el tercio de la muestra más cercano a la frontera, alcanza una exactitud de  $\sim 50\%$ , pero en los tercios al interior de cada región, esta virtualmente en 100%, que da un promedio global de  $\frac{1}{3}50\% + \frac{2}{3}100\% = 86.7\%$ , casi exactamente la exactitud observada.

También resulta llamativa la «creatividad» de *GBT* para aproximar unas fronteras naturalmente curvas como una serie de preguntas binarias, que sólo permiten dibujar regiones rectangulares<sup>96</sup>.

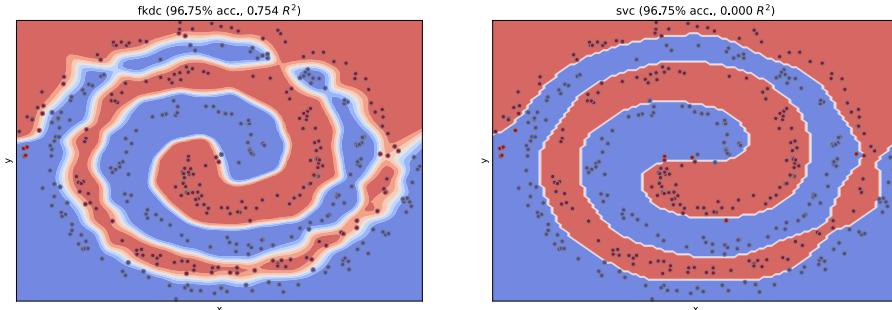
Entre *kN* y *f-kN* casi no observamos diferencias, asunto en el que ahondaremos más adelante. Por lo pronto, sí se nota que se adaptan bastante bien a los datos, con algunas regiones «claras» de incertidumbre que resultan onerosas en términos de *R*<sup>2</sup>: a primera vista los mapas de decisión recién expuestos se ven muy similares, pero las pequeñas diferencias de probabilidades resultaron en una diferencia de 0.19 en *R*<sup>2</sup> *en contra* del modelo más complejo para esta semilla.

*KDC* ofrece una frontera aún más regular que *kN*, sin perder en *R*<sup>2</sup> y hasta mejorando la exactitud. Y por encima de esta ya destacable

---

<sup>96</sup>Quien haya pasado alguna clase no particularmente emocionante pintando espirales en hoja cuadriculada reconocerá este patrón rápidamente.

*performance*, el uso de la distancia de Fermat *incrementa* la confianza en estas regiones -nótese como se afinan las áreas grises y aumenta la superficie de rojo/azul sólido, mejorando otro poco el  $R^2$ .



Por último, observamos las fronteras de svc, que no tienen gradiente de color sino sólo una frontera lineal<sup>97</sup>. Es sorprendente la flexibilidad del algoritmo, que consigue dibujar una única frontera sumamente no-lineal que separa los datos con altísima exactitud. La ventaja que  $f$ -KDC pareciera tener sobre svc aquí, es que la frontera que dibuja pasa «más lejos» de las observaciones de clase, mientras que la svc parece estar muy pegada a los brazos de la espiral, particularmente en el giro más interno.

#### 4.2.1 Estudio de ablación<sup>98</sup>: $R^2$ para KDC/ KN con y sin distancia de Fermat.

Sirvan como panorama para concentrar la atención en esta diferencia, los gráficos de dispersión del  $R^2$  alcanzado en  $\mathbf{X}_{\text{test}}$  para KN y KDC con y sin distancia de Fermat, en las 25 repeticiones de cada Tarea.

---

<sup>97</sup>Como aprendimos: la frontera de una variedad riemanniana de dimensión intrínseca  $d$  es una variedad sin frontera de dimensión intrínseca  $d - 1$ ; la frontera de estas regiones en  $R^2$  es una curva parametrizable en  $\mathbb{R}^1$  embebida en  $\mathbb{R}^2$

<sup>98</sup>Según la [RAE](#), «Del lat. tardío ablatio, -ōnis “acción de quitar”.»; ¿qué se pierde en términos de  $R^2$  al no usar  $D_{Q,\alpha}$  en estos algoritmos?

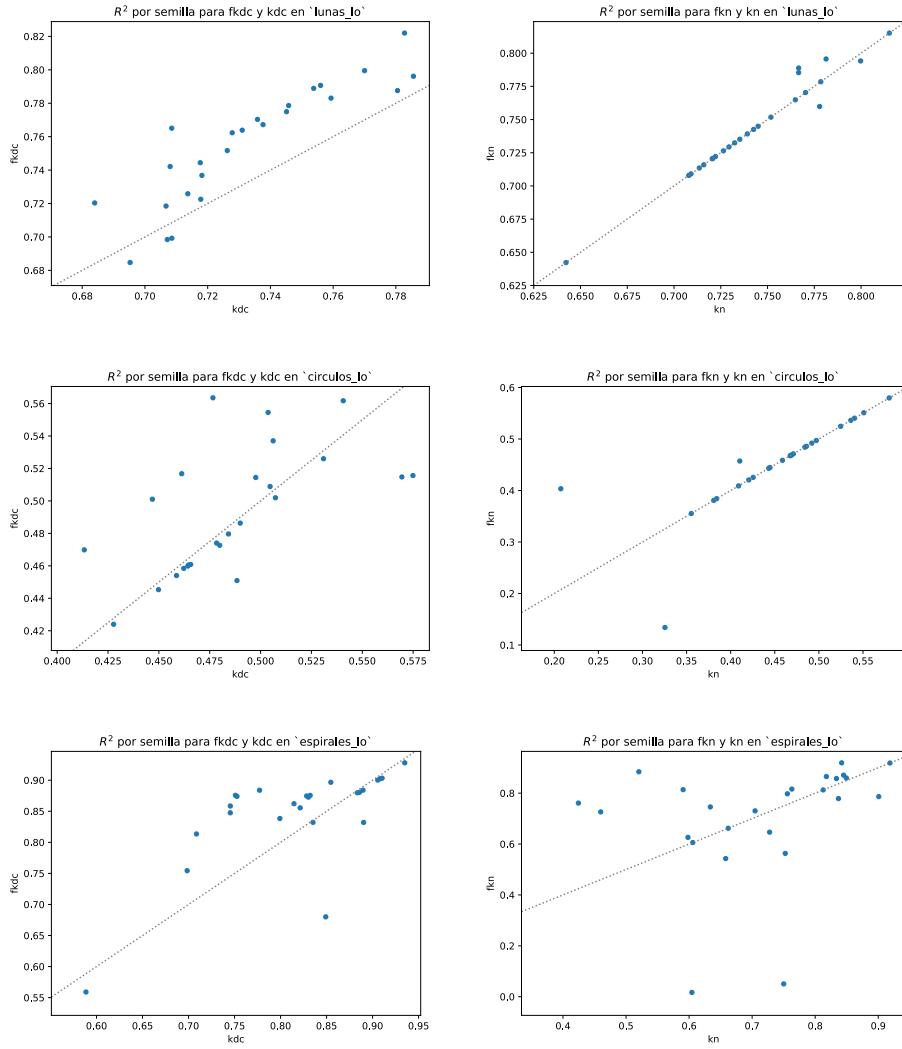


Figura 19: Gráficos de dispersión (*scatterplots*) de  $R^2$  para  $kdc$  (izq.) y  $kn$  (der.) con (eje y) y sin (eje x) distancia de Fermat.

Para  $kn$  y  $f-kn$ , los resultados son casi exactamente iguales para todas las semillas; con ciertas semillas saca ventaja  $f-kn$  en `espirales_lo`, pero también tiene dos muy malos resultados con  $R^2 \approx 0$  que  $kn$  evita.

Para  $f-kdc$ , pareciera evidenciarse alguna ventaja para varias semillas en `lunas_lo`, `espirales_lo`, menos así para `circulos_lo`.

Veamos primero qué sucede durante el entrenamiento para `circulos_lo`: ¿es que no hay ninguna ventaja en usar  $D_{Q,\alpha}$ ? Consideremos la *superficie de pérdida* que resulta de graficar en 2D la pérdida  $L$  usada durante el entrenamiento para cada hiperparametrización considerada:

*Observación (unidades de la pérdida):* Si bien nosotros estamos considerando como *score* (a más, mejor)  $R^2$ , durante el entrena-

miento se entrenó con `neg_log_loss`, que aunque tiene la misma monotonicidad que  $R^2$ , está en otras unidades, entre  $-\infty, 0$

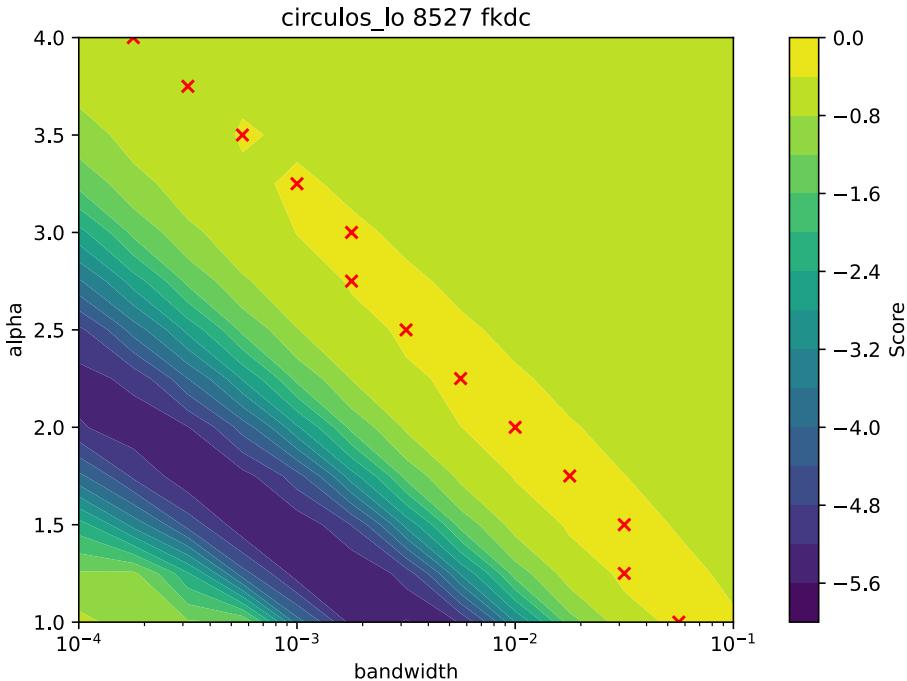


Figura 20: Superficie de *score*: para cada valor de  $\alpha$  considerado, una cruz roja marca el valor de  $h$  que maximizó el *score*.

Nótese que la región amarilla, que representa los máximos puntajes durante el entrenamiento, se extiende diagonalmente a través de todos los valores de  $\alpha$ . Es decir, no hay un *par* de hiperparámetros óptimos  $(\alpha^*, h^*)$ , sino que fijando  $\alpha$ , siempre parecería existir un(os)  $h^*(\alpha)$  que alcanza (o aproxima) la máxima exactitud *possible* con el método en el dataset. En este ejemplo en particular, hasta parecería ser que una relación log-lineal captura bastante bien el fenómeno,  $\log(h^*) \propto \alpha$ . En particular, entonces,  $\text{exac}(h^*(1), 1) \approx \text{exac}(h^*, \alpha^*)$ , y se entiende que el algoritmo *f-kdc*, que agrega el hiperparámetro  $\alpha$  a *kdc* no mejore significativamente su exactitud.

Ahora bien, esto es sólo en *un* dataset, con *una* semilla específica. ¿Se replicará el fenómeno en los otros datasets?

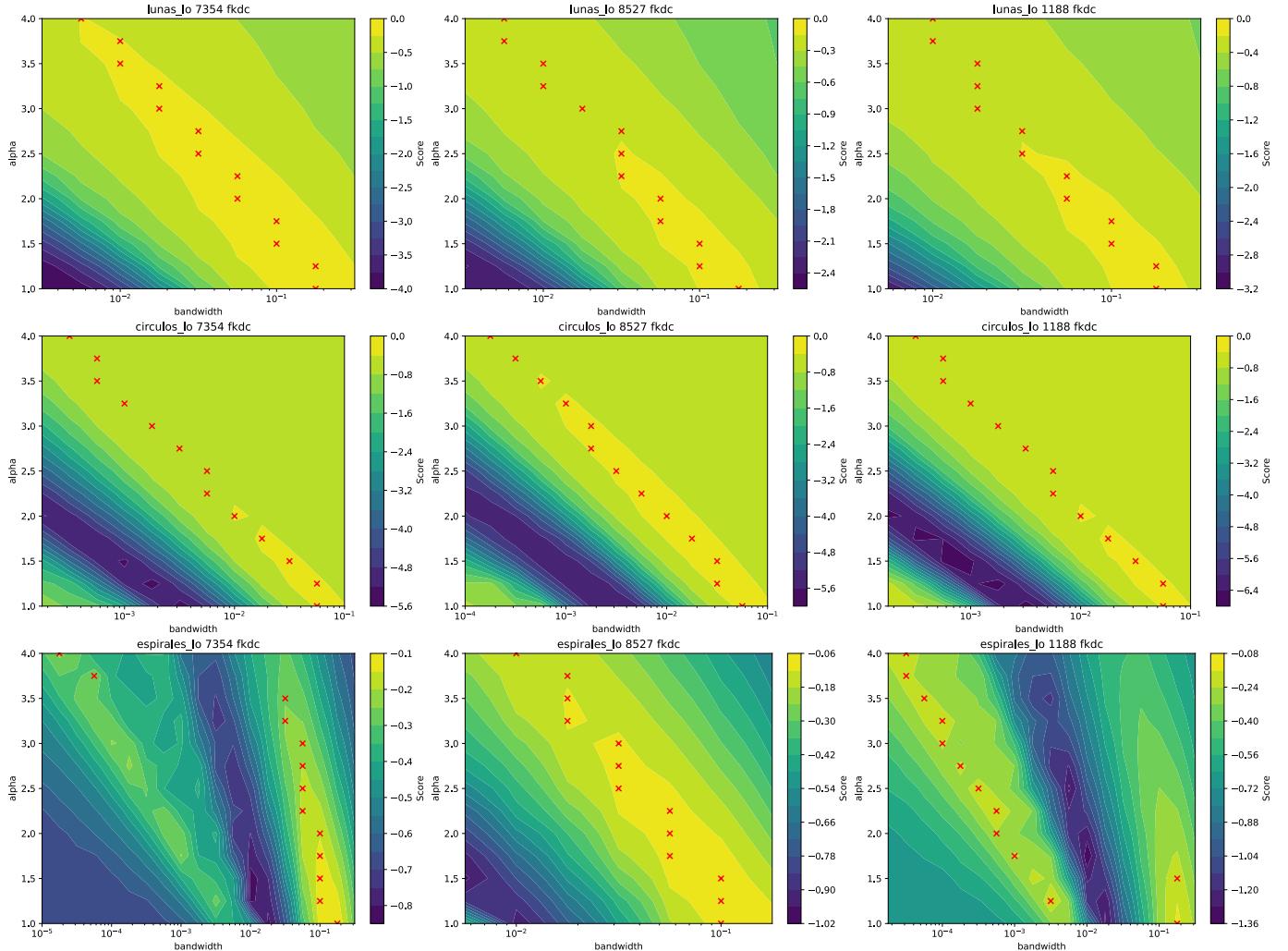


Figura 21: Superficies de pérdida para tres semillas y cada uno de los tres dataset. El patrón log-lineal previamente observado se replica casi perfectamente en todos los casos.

¡Pues sí replica! Podemos observar también en datasets como (`circulos_lo`, 7354), cómo la regla de parsimonia nos ayuda a elegir, dentro de la gran «meseta color lima» en que todas las hiperparametrizaciones alcanzan resultados similares, para cada  $h$  el mínimo  $\alpha$  que no «cae» hacia la región azul de menores scores.

Estamos ahora frente a una contradicción: en la Figura 19 vimos que por ejemplo, para `lunas_lo`,  $f$ -KDC alcanzaba un  $R^2$  consistentemente mejor que KDC mientras que de los paneles superiores de la Figura 21 observamos que los score que se alcanzan limitados a  $\alpha = 1$  son tan altos como los de  $\alpha > 1$ . Es cierto que los resultados de Figura 19 son a través de *todas* las semillas, y en el conjunto de *evaluación*, mientras que en la Figura 21 observamos *algunas semillas* y sobre los datos de

entrenamiento, pero la pregunta es válida: ¿de dónde proviene la ventaja de  $f$ -KDC en estos datasets?

#### 4.2.1.1 Hiperparámetros óptimos en `lunas_lo` para KDC, $f$ -KDC

Hacemos entonces una comprobación fundamental: ¿qué parametrizaciones están siendo elegidas en el esquema de validación cruzada con regla de parsimonia? Hete aquí el detalle para las 25 repeticiones de `lunas_lo`:

clf	alpha	bandwidth	count
fkdc	1.0	0.1778	21
fkdc	1.0	0.3162	4
kdc	1.0	0.2082	3
kdc	1.0	0.2512	17
kdc	1.0	0.303	4
kdc	1.0	0.3656	1

*Observación (mejores corridas de `_test_`):* TODO: aclarar que en `test` a veces el mejor puntaje lo obtienen otros  $\alpha$ , pero la diferencia no es lo suficientemente grande para descartar alguna opción con  $\alpha = 1$ .

param_alpha	param_bandwidth	count
1.0	0.1	5
2.0	0.0031622776601683794	5
3.5	0.0005623413251903491	4
4.0	0.00031622776601683794	4
3.0	0.001	4
2.5	0.0017782794100389228	2
3.0	0.0017782794100389228	2
3.5	0.001	2
3.75	0.0005623413251903491	1
3.75	0.00031622776601683794	1
3.0	0.0031622776601683794	1
3.25	0.0017782794100389228	1
3.25	0.0005623413251903491	1
1.75	0.005623413251903491	1
3.0	0.0005623413251903491	1

2.25	0.005623413251903491	1
4.0	0.001	1

Resulta ser que

- al entrenar  $f\text{-KDC}$  se está eligiendo  $\alpha = 1$  para *todas* las semillas, y
- el ancho de banda seleccionado es ligera pero consistentemente *menor* que el que toma KDC.

Veamos cómo se comparan los valores de  $R^2$  que alcanza cada algoritmo en cada semilla:

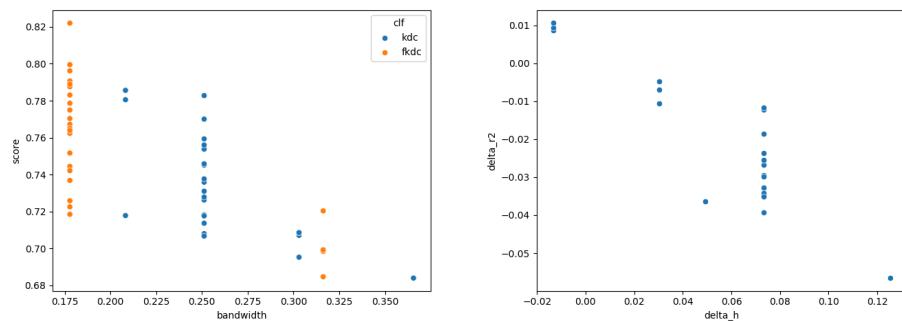


Figura 22: (izq.) Dispersión de  $R^2$  en función de  $h$  por clasificador y semilla en lunas\_lo, para  $f\text{-KDC}$ , KDC (der.) Dispersión de  $\Delta_{R^2} = R^2_{\text{kDC}} - R^2_{f\text{-KDC}}$  en función de  $\Delta_h = h^*_{f\text{-KDC}} - h^*_{\text{kDC}}$  para cada semilla.

En el panel izquierdo se observa una clara tendencia a mejorar ligeramente el  $R^2$  a medida que disminuye el ancho de la ventana  $h$  (en el rango en cuestión). En el panel derecho, para confirmar que la tendencia sucede *en cada repetición del experimento*, comparamos no los valores absolutos sino las diferencias *relativas* en  $R^2$ ,  $h$  para  $f\text{-KDC}$ , KDC, y vemos que a mayor diferencia en  $h$ , peor es la caída en  $R^2$ .

Cabe aquí una crítica al diseño experimental: si  $f\text{-KDC}$  está tomando siempre  $\alpha = 1$ , por qué KDC no puede elegir el mismo  $h$  que  $f\text{-KDC}$  y así «empatar» su performance? ¿Se exploró una grilla de hiperparámetros a propósito desfavorable para KDC? Pues no, todo lo contrario<sup>99</sup>: las grillas de  $h$  para KDC y  $f\text{-KDC}$

- cubren de manera «logarítmicamente equidistante» el mismo rango de  $h : [10^{-5}, 10^6]$  y
  - la grilla de KDC cuenta con  $\approx$  el triple de puntos de  $f\text{-KDC}$  (136 vs. 45).
- Como en el entrenamiento de  $f\text{-KDC}$  se gastaron 13 veces más recursos evaluando 13 valores distintos de  $\alpha$ <sup>100</sup>, consideramos oportuno permitirle a KDC explorar más valores de  $h$ , y la cantidad se eligió para que la grilla

<sup>99</sup>La definición exacta está en `fkdc/config.py`, y es `np.logspace(-5, 6, 45)` para  $f\text{-KDC}$  y `np.logspace(-5, 6, 136)` para KDC

<sup>100</sup> $\alpha \in \{1 + 0.25i, i \in [13]\} \subset [1, 4]$

de  $\text{kDC}$  coincide en lo posible con la de  $f\text{-KDC}$ , y tenga además otros dos valores «entre medio» de dos valores cualesquiera de la grilla de  $f\text{-KDC}$ . En efecto, en el rango de interés, las grillas contaban con los valores:

$$\begin{aligned} f\text{-KDC} : & [0.1, 0.178, 0.316, 0.562] \\ \text{kDC} : & [0.119, 0.143, 0.173, 0.208, 0.251, 0.303, 0.366, 0.441, 0.532] \end{aligned} \quad (88)$$

con lo cual  $\text{kDC}$  *podría* haber encontrado el ligeramente más conveniente  $h^* \approx 0.17$ , pero la convalidación cruzada se inclinó por valores concentrados en el rango  $[0.25, 0.3]$ . De repetir el experimento tomando una grilla más fina en este rango crucial, es posible que  $\Delta_h^* \approx 0$  y por ende  $\Delta_{R^2}$  también, aunque por el mismo argumento de tomar una grilla más fina para  $\alpha \approx 1$  terminaríamos tal vez encontrando un  $\alpha^* > 1$  para  $f\text{-KDC}$ <sup>101</sup>. En cualquier caso, hemos de aceptar que la ventaja de  $f\text{-KDC}$  en `lunas_lo` (y también en `espirales_lo`, aunque de menor magnitud) sobre  $\text{kDC}$  *no* se debe a la inclusión del hiperparámetro  $\alpha$ , sino a una convalidación cruzada aleatoriamente favorable.

#### 4.2.2 Efectos de aumentar el ruido

Consideremos ahora los mismos datasets que hasta ahora, pero sampleando las observaciones sobre la variedad con «más ruido»; i.e., aumentando el valor de  $\sigma$  en el ruido blanco ([Definición 4.2.1](#)) que le agregamos a los  $X \in \mathcal{M}$  según

$$\sigma_{\text{lunas}} = 0.5 \quad \sigma_{\text{circulos}} = 0.2 \quad \sigma_{\text{espirales}} = 0.2 \quad (89)$$

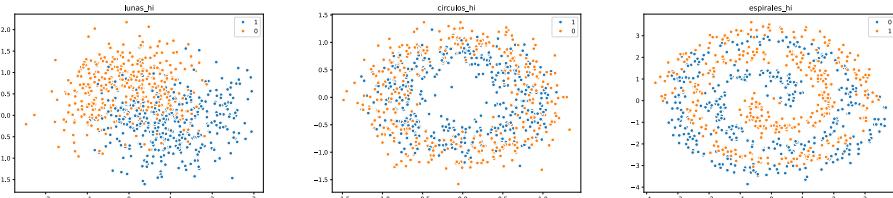


Figura 23: «Lunas», «Círculos» y «Espirales» con «alto ruido»

En general,  $f\text{-KDC}$  y  $f\text{-KN}$  siguen siendo competitivos, pero el «terreno de juego» se ha nivelado considerablemente, y las ventajas antes vistas disminuyen. En particular, en `lunas_hi`, `circulos_hi` observamos que `GBT` alcanza un  $R^2$  marginalmente mejor que el  $f\text{-KDC}$ , y en el segundo también lo supera ligeramente en exactitud. En `espirales_hi` todos los métodos basados en densidad por núcleos ( $f\text{-KDC}$ ,  $\text{kDC}$ ,  $f\text{-KN}$ ,  $\text{KN}$ ) alcanzan un  $R^2$  muy similar mientras todos los demás quedan largamente atrás

---

<sup>101</sup>Hete aquí la dificultad de enunciar propiedades generales a partir de experimentos particulares: siempre hay *un experimento más* para hacer, pero lamentablemente, en algún momento había que culminar la etapa experimental.

(gbt) o no se distinguen del 0, pero svc obtiene la mejor exactitud. Las ventajas de  $f$ -kdc por sobre kdc son casi nulas en este contexto.

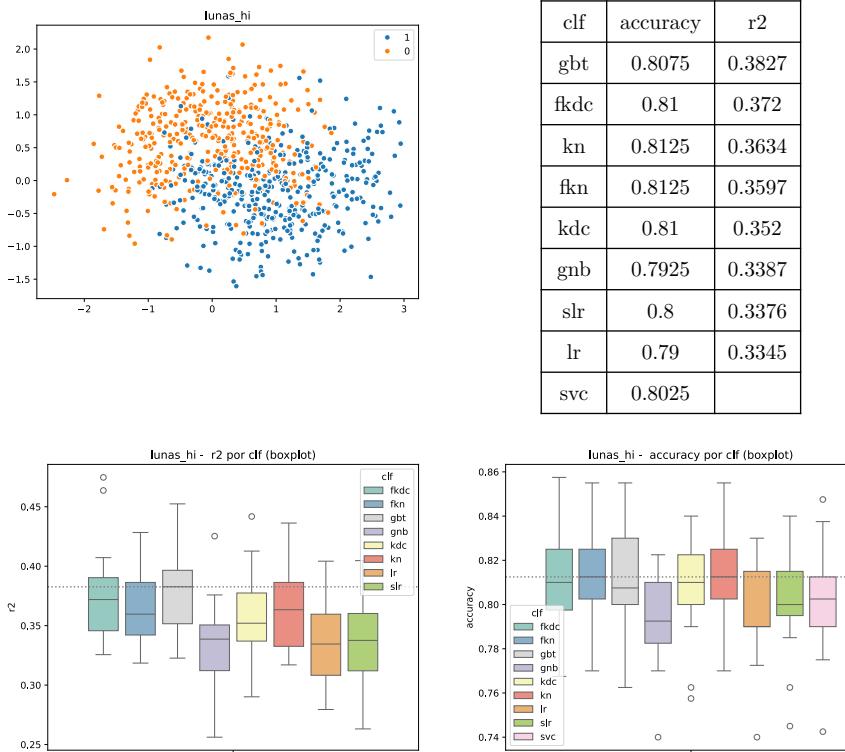
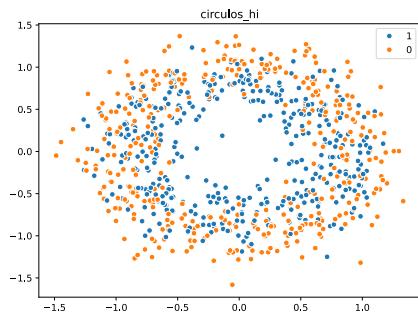


Tabla 5: Resumen para lunas\_hi



clf	accuracy	r2
gbt	0.655	0.0894
fkdc	0.63	0.0711
kdc	0.6175	0.0521
kn	0.6125	0.0515
fkn	0.6125	0.0515
gnb	0.61	0.0344
lr	0.4875	-0.0
slr	0.4875	-0.0
svc	0.655	

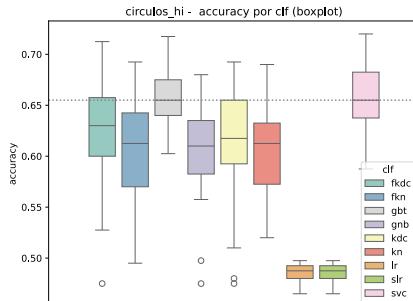
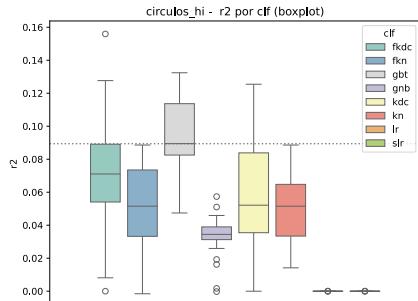


Tabla 6: Resumen para circulos\_hi

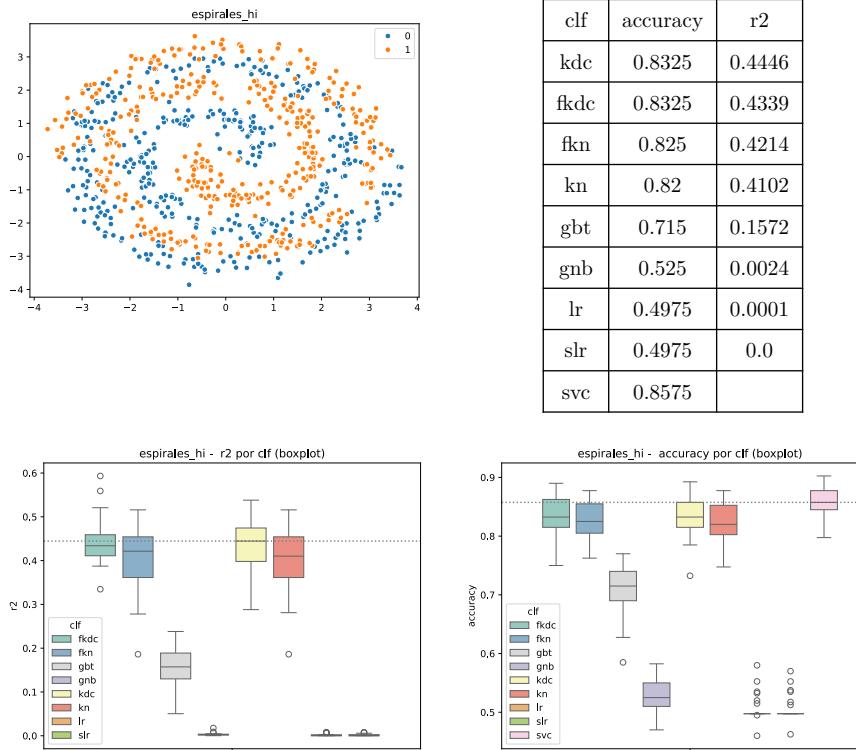


Tabla 7: Resumen para espirales\_hi

El aumento en la cantidad de ruido hace la tarea más difícil para *todos* los estimadores, pero los métodos basados en densidad por núcleos parecen sufrirlo particularmente, aunque sólo sean porque «caen desde más alto», a un nivel de performance similar al de otros métodos.

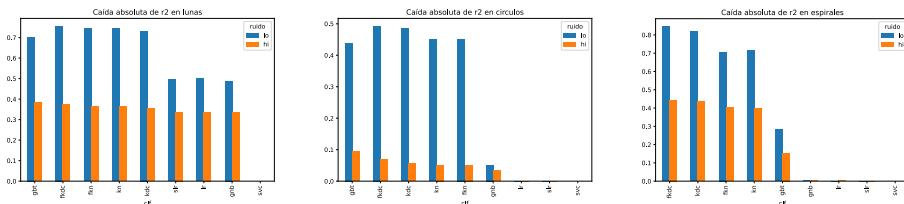


Figura 24:  $R^2$  mediano por clasificador y dataset, comparado entre la variante con bajo (\_lo) y alto (\_hi) ruido en el sampleo.

Por último, veamos las fronteras de decisión que resultan para nuestro método,  $f$ -KDC, y los más competitivos en términos de  $R^2$  (GBT) y exactitud (svc).

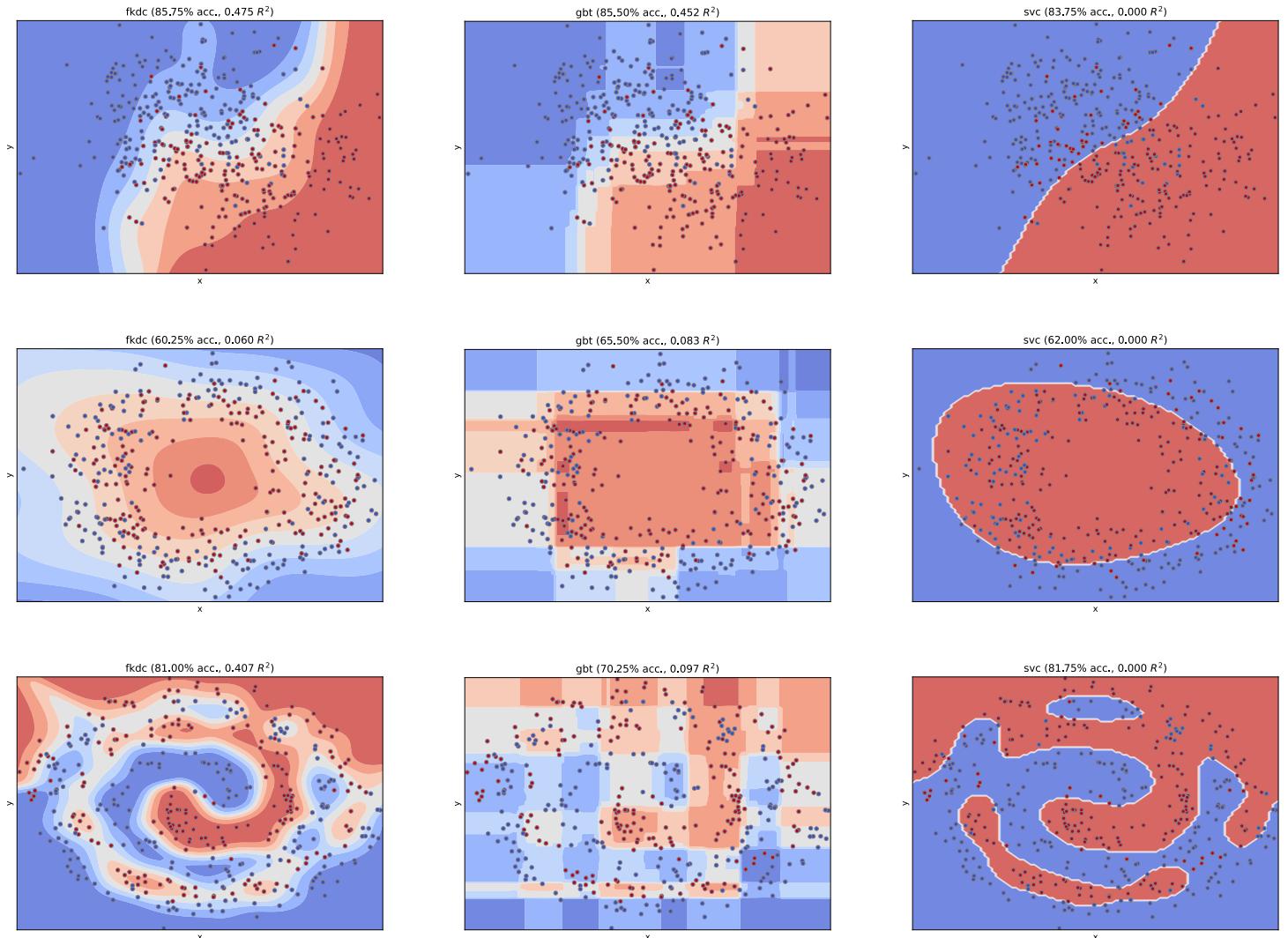


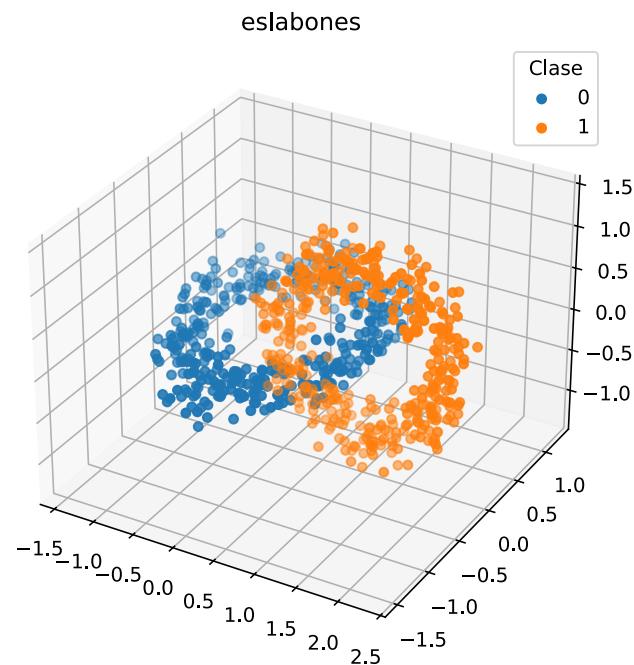
Figura 25: Fronteras de decisión para  $f$ -KDC, GBT, SVC en regímenes de alto ruido,  $s = 1075$

Al ojo humano, queda claro que las fronteras y regiones de confianza que «dibuja»  $f$ -KDC se alinean «en espíritu» con la forma de las variedades que buscamos descubrir: la «región de indiferencia» gris en `lunas_hi` es una especie de curva casi-cúbica que efectivamente separa las lunas, el «huevo frito» de `circulos_hi` efectivamente tiene máxima confianza a favor de la clase interna en el centro de ambos círculos (y se va deformando progresivamente a medida que nos alejamos de él), y en `espirales_hi` casi logra dibujar la espiral. Sin embargo, esta deseable propiedad no es fácilmente reducible a una métrica en  $\mathbb{R}$ , y se desdibuja en las comparaciones puramente numéricas.

## 4.3 Pionono, Eslabones, Helices y Hueveras ( $D = 3$ )

Consideraremos a continuación datasets sintéticos embebidos en 3 dimensiones ( $D = 3$ ), con variedades de dimensión intrínseca 1 (eslabones, helices) y 2 (pionono, hueveras).

### 4.3.1 Eslabones



TODO poner scatter 3D en highlight por dataset para  $D = 3$

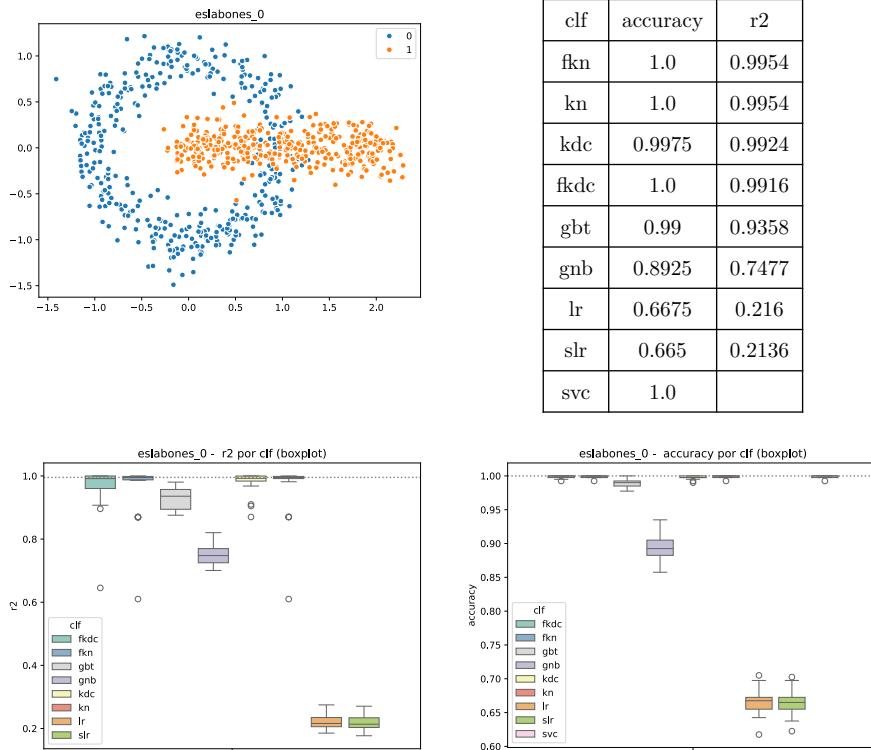


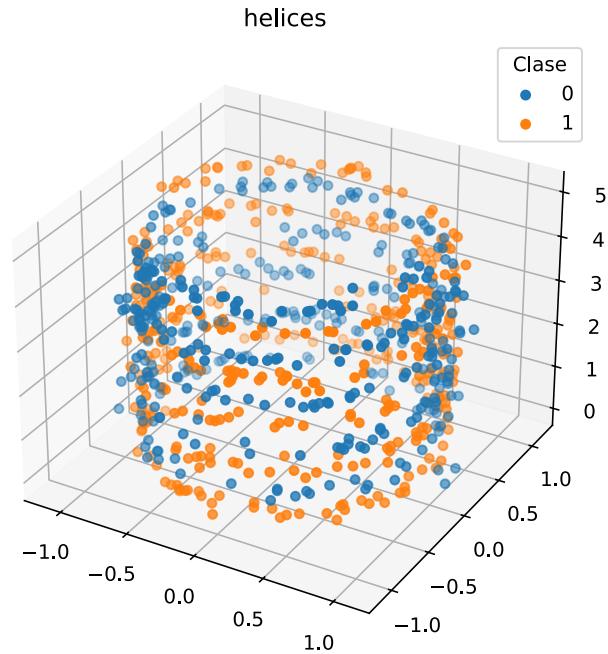
Tabla 8: Resumen para eslabones\_0

Toda la familia de estimadores de densidad por núcleos alcanza un  $R^2 \approx 1$ , y aún Naive Bayes tiene una performance aceptable: con este nivel de ruido blanco en el sampleo, el «margen de separación» entre ambos anillos es tan amplio que el problema resulta sencillo. Dicho esto, este dataset resulta ser particularmente fácil para (casi) todos los clasificadores.

Un punto en contra de  $f\text{-KDC}$  aquí, es que el boxplot de  $R^2$  - no así el de exactitud - revela un fuerte outlier de  $\approx 0.65$  para la semilla 2411, que no corresponde a una parametrización particularmente extraña.

clf	alpha	bandwidth	r2
kdc	1.0	0.0464	0.9099
fkdc	1.0	0.0178	0.6455

#### 4.3.1.1 Hélices



Este dataset consiste en dos hélices del mismo diámetro y «enroscadas» en la misma dirección, una de ellas empezando a «media altura» entre dos brazos consecutivos de la otra. El dataset es particularmente desafiante para *s-LR*, *LR*, y Naive Bayes, que no logran diferenciarse en nada de un clasificador trivial que prediga siempre la misma clase.

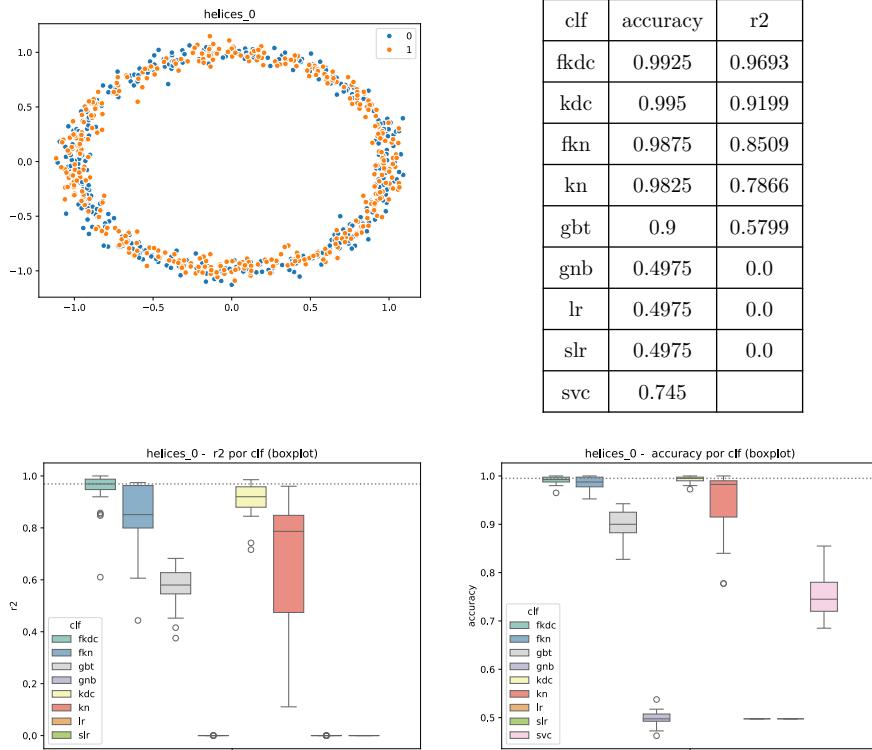
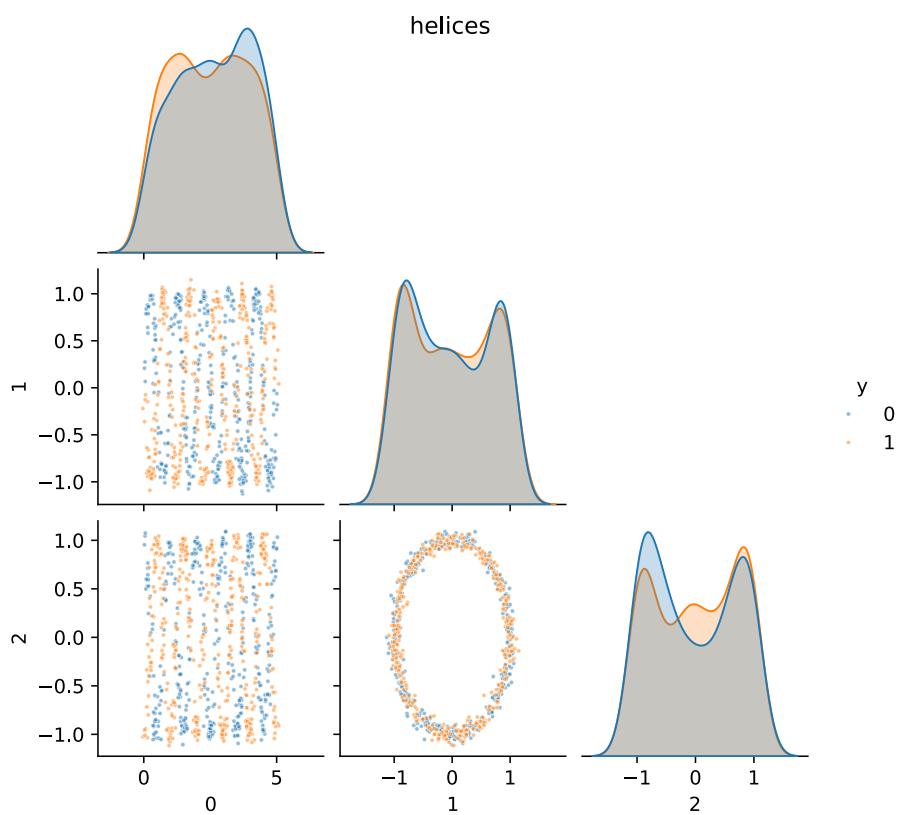
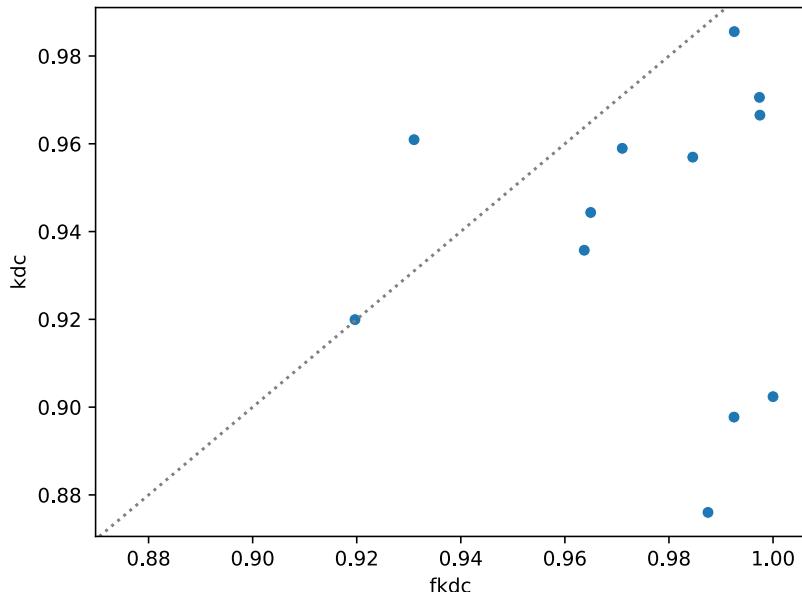


Tabla 9: Resumen para helices\_0

Que a gnb le resulte complejo no es sorprendente, ya que las distribuciones marginales son prácticamente idénticas:



La clasificación dura con estimación de densidad por núcleos - con distancia de Fermat o sin ella resulta ser superior a todas las alternativas en términos de exactitud, pero encima de ello,  $f$ -KDC saca una diferencia significativa en términos de  $R^2$ , que ya es visible en un boxplot pero se ve aún más claramente en el gráfico de dispersión de los  $R^2$  alcanzados por semilla:



En prácticamente todas las semillas el  $R^2$  de  $f$ -KDC es estrictamente mejor al «control» de KDC. ¿Con qué parámetros sucede?

clf		fkdc	fkdc	fkdc	kdc	kdc	max_score_alpha_test
	delta_r2	alpha	band-width	r2	band-width	r2	
semilla							
4286	0.236	1.25	0.006	0.953	0.208	0.716	[3. 3.5 4.]
1188	0.227	2.5	0.001	0.969	0.208	0.742	[3.]
1182	0.111	1.0	0.01	0.988	0.143	0.876	[3.5]
7974	0.108	2.0	0.003	0.988	0.173	0.88	[2.]
5640	0.103	1.25	0.006	0.948	0.173	0.845	[3.5 4.]
6610	0.098	1.0	0.01	1.0	0.173	0.902	[1.75]
2411	0.095	1.0	0.01	0.993	0.173	0.898	[3.]
8527	0.091	1.25	0.006	0.98	0.173	0.889	[3.25 3.75]
7060	0.084	1.25	0.006	0.98	0.173	0.896	[2.5]
7074	0.083	1.75	0.003	0.968	0.173	0.884	[3. 3.5 4.]

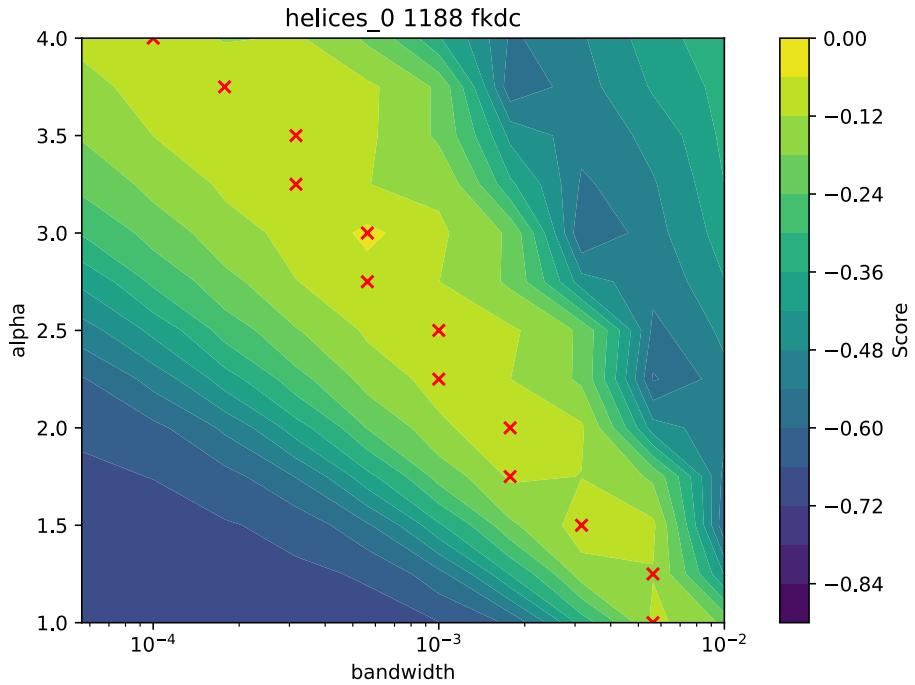
8591	0.031	1.0	0.01	0.997	0.143	0.967	[3. 3.5]
1434	0.029	2.0	0.003	0.988	0.143	0.958	[2.]
7354	0.028	1.0	0.1	0.964	0.143	0.936	[2.]
7837	0.028	1.0	0.1	0.985	0.143	0.957	[1.]
8443	0.027	1.0	0.1	0.997	0.143	0.971	[3.]
8988	0.021	1.0	0.1	0.965	0.143	0.944	[1.]
2694	0.012	1.0	0.1	0.971	0.143	0.959	[1.]
3046	0.007	1.0	0.1	0.993	0.119	0.986	[1.]
1338	0.003	1.75	0.003	0.965	0.143	0.962	[2.]
2048	-0.0	1.0	0.1	0.92	0.143	0.92	[1.]
1075	-0.011	1.5	0.006	0.858	0.173	0.868	[3.75]
9975	-0.014	2.5	0.002	0.848	0.173	0.862	[2.5 3. 3.5 4. ]
1193	-0.03	1.0	0.01	0.931	0.143	0.961	[3.25 4. ]
8096	-0.098	1.25	0.006	0.853	0.143	0.951	[2.]
8578	-0.33	1.25	0.01	0.61	0.143	0.94	[2.25 3. ]

Ordenados por  $\Delta_{R^2} = R_{f\text{-kdc}}^2 - R_{\text{kdc}}^2$ , la semilla con mayor diferencia a favor del resultado con distancia de Fermat, es para un no-trivial ( $\alpha = 1.25, h = 0.006$ ) que resulta en un  $R^2 .237 (= 0.953 - 0.716)$  puntos *en términos absolutos* (<sup>102</sup> por encima de kdc con  $h = 0.208$ , usando una ventana unas 35 veces más ancha. Salta a la vista también que tales parametrizaciones tienen muy variada performance «out-of-sample», pues para  $s = 8096$  también se eligió ( $\alpha = 1.25, h = 0.006$ ) contra  $h_{\text{kdc}} = 0.143 \approx 25h_{f\text{-kdc}}$  y se dió la segunda diferencia *negativa* más amplia en contra de  $f\text{-kdc}$  ( $\Delta_R^2 = -0.098$ ) .

Gracias a la regla de parsimonia, sabemos con cierta seguridad que no hay, por ejemplo, que para  $s = 1188$  - con el segundo mayor  $\Delta_R^2 = 0,227$  - parametrizaciones con un  $\alpha < 2.5$  a menos de 1SD de la mejor parametrización en test - con  $\alpha = 3$ .

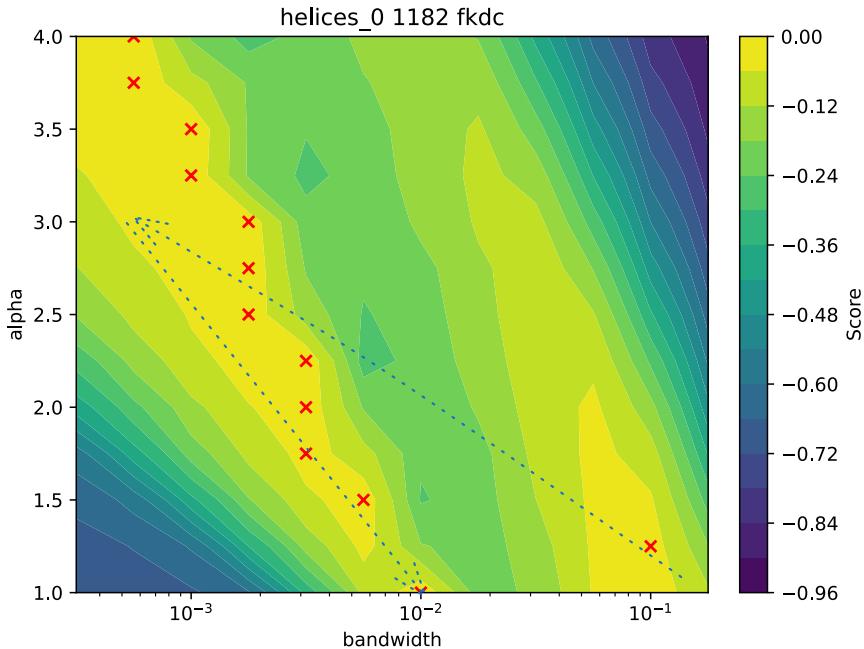
---

<sup>102</sup>I.e., «un montón»



Nótese la mínima isla alrededor de  $\alpha = 3; h = 0,000562$ .

Lo tercero, es que en unos cuantos casos en que  $\alpha_{f\text{-KDC}} = \alpha_{\text{KDC}} = 1$ ,  $f\text{-KDC}$  todavía performance un poco mejor que  $\text{KDC}$  al elegir anchos de banda mucho más pequeños. Ya hemos visto que aún ligeras diferencias en la ventana  $h$  podían llevar a mejoras en  $R^2$  a favor de  $f\text{-KDC}$  por el detalle fino de la búsqueda en grilla que se definió. Sin embargo, aquí se encuentran sustanciales diferencias de  $R^2$  como la tercera más alta ( $\Delta_R^2 = 0.111$ ,  $\alpha_{f\text{-KDC}} = \alpha_{\text{KDC}} = 1$ ;  $\frac{h_{f\text{-KDC}}}{h_{\text{KDC}}} \approx 14$ ), o la séptima ( $\Delta_R^2 = 0.111$ ,  $\frac{h_{f\text{-KDC}}}{h_{\text{KDC}}} \approx 17$ ), que cuesta explicar como una ligera discrepancia en la grilla de  $h$ . Nuestra hipótesis, es que el dominio ampliado de hiperparámetros de  $f\text{-KDC}$  junto con la regla de parsimonia trabajan en tandem:

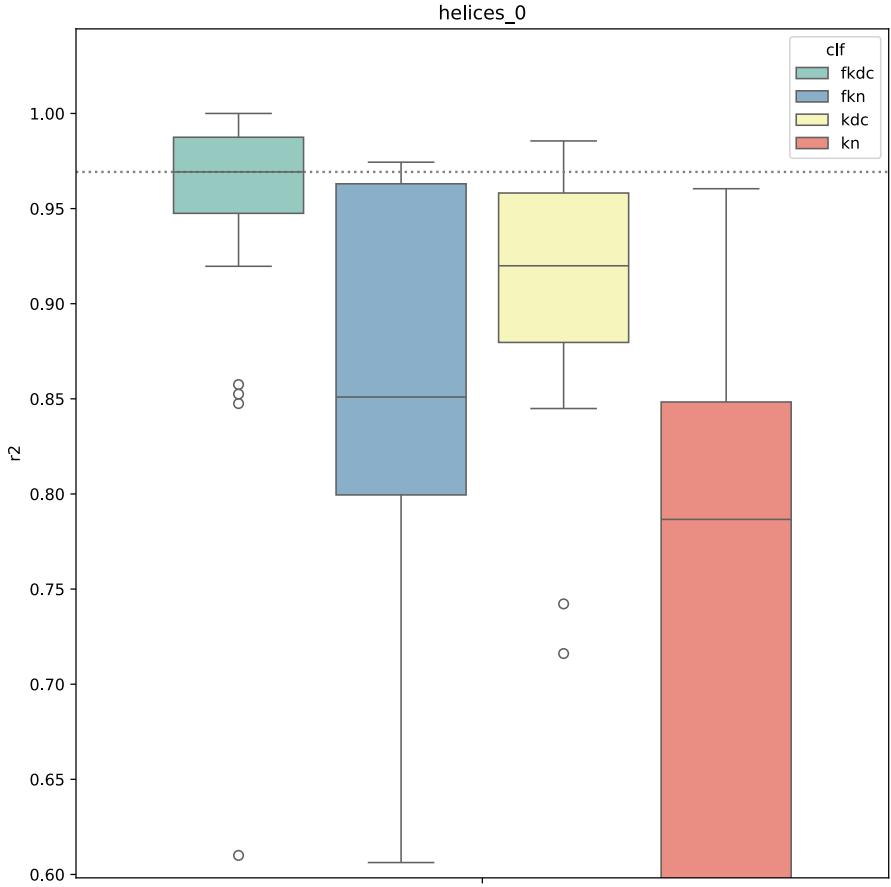


Nuestro control,  $\text{kdc}$  encuentra durante su entrenamiento y posterior testeo con R1SD la solución  $h = 0.143$  (cf. posición (1) del diagrama). Presumiblemente, la varianza de la performance en testeo para dicha solución fue tal que ningún punto en el entorno de  $h = 0.01$  (cf. (3)) estaba a menos de 1SD de (1). Cuando entrenamos  $f\text{-kdc}$  y ampliamos el dominio de la parametrización a  $\mathbb{R}^2$  con  $(h, \alpha)$ , la validación cruzada alcanza un máximo en  $\alpha = 3; h = 0,000562$  (cf. (2)). Esta nueva solución, potencialmente «sobreparametrizada» con un  $R_{\text{train}}^2 = R_{\text{test}}^2 = 0.988$ , también tiene más varianza en sus resultados a través de cada pliego de CV, por lo que de repente ahora la cota inferior para ser considerada dentro de  $\mathcal{H}$  de [Definición 3.1.4](#) se vuelve más permisiva, en tanto se contrae menos por el aumento en el  $R^2$  óptimo que lo que se relaja por el incremento en su varianza. En ese rango ampliado de parametrizaciones «suficientemente buenas», ahora sí se encuentra  $\alpha = 1; h = 0.01$ , y la CV «se mueve» de (2) a (3), encontrando un óptimo en el espacio reducido de  $\text{kdc}$  que éste no llegó a considerar.

Es de hecho este fenómeno que se repite en muchas semillas, el que termina corriendo la mediana del  $R^2$ , que se repite con las semillas 4286, 1182, 6610, 2411, 8527, 7060, 8591 de  $\alpha \leq 1.25$  el que termina desplazando la mediana de la distribución de  $R^2$  hasta 0.97 *por fuera de la «caja» de<sup>103</sup>  $R_{\text{kdc}}^2$* .

---

<sup>103</sup>el rango intercuartil en el boxplot



#### 4.3.1.2 Efecto de $D_{Q_i,\alpha}$ en la vecindades óptimas de kn.

Si recordamos  $\hat{f}_{K,N}$  según Loubes & Pelletier, al núcleo  $K$  se lo evalúa sobre

$$\frac{d(x_0, X_i)}{h}, \quad d = D_{Q_i,\alpha} \quad (90)$$

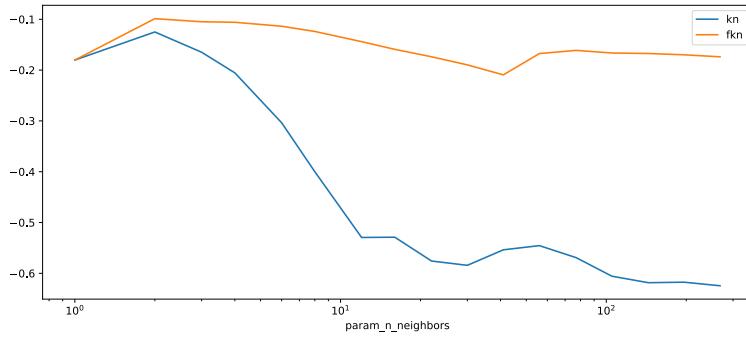
Lo que  $\alpha$  afecta a  $\hat{f}$  vía  $d$ , también se puede conseguir vía  $h$ .

Si  $D_{Q_i,\alpha} \propto \|\cdot\|$  (la distancia de Fermat es proporcional a la euclídea), podemos escribir

$$D_{Q_i,\alpha}(x_0, X_i) \approx \frac{c_\alpha \|\cdot\|}{h} = \frac{\|x_0 - X_i\|}{h'} \quad (91)$$

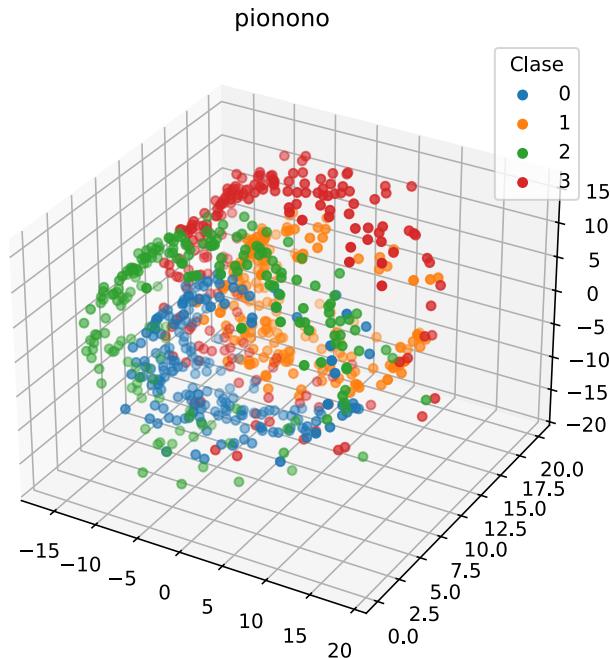
con  $h' = h/c_\alpha$  y efectivamente los parámetros se solapan en sus funciones. Lamentablemente, sabemos que localmente esto *es* cierto. Por ejemplo, la serie  $k_n$  que minimiza el error cuadrático medio cuando  $n \rightarrow \infty$  es  $k \propto n^{\frac{d}{d+4}}$ , que para nuestro problema resulta en  $(400 * \frac{4}{5})^{\frac{3}{3+4}} = 320^{\frac{3}{7}} \approx 12$ . Pues bien, cuando miramos el mejor rendimiento en test por `n_neighors` para `kdc` y `f-kdc`, vemos que elegir  $\alpha$  le permite a `f-kdc`

mantener una óptima performance en términos de «score» ( $-\ell$ ) para cualquier valor de  $k^{10^4}$



Por otra dirección, llegamos a la misma conclusión que antes: si un clasificador depende de distancias extremadamente locales, salvo que la muestra esté muy escasamente sampleada, el efecto de la distancia de Fermat aprendida de los datos no será muy notorio. TODO en trabajos posteriores estudiar efecto de alpha con  $n$  fijo?

#### 4.3.2 Pionono




---

<sup>10^4</sup> $n_{neighbors}$  en la parametrización de scikit-learn.

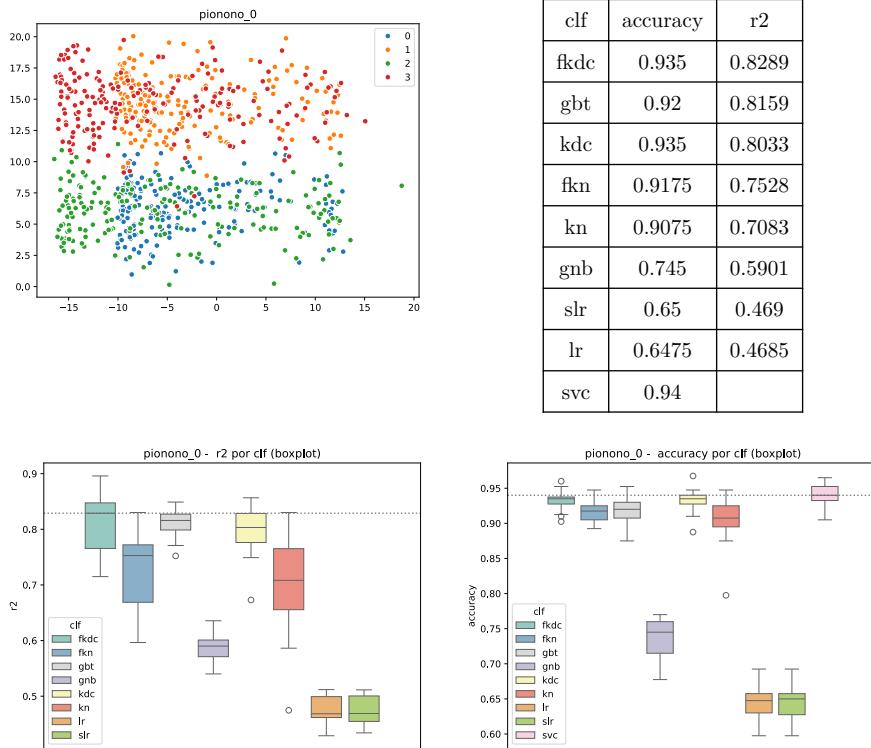


Tabla 10: Resumen para pionono\_0

Este dataset «clásico» para testear algoritmos de *clustering* no-lineales (Sapienza, Jonckheere y Groisman, 2018), así que decidimos incluirlo en la serie experimental como «benchmark». El trabajo citado no hace *clasificación* con densidad por núcleos, sino *clustering* basado en el algoritmo  $k$  –medoides, pero provee una gráfico de exactitud<sup>105</sup> que compara con la obtenida por otro «primo» algorítmico ya citado, Isomap. Los autores encuentran que

existe un amplio rango de  $d^{106}$  para los que la  $d$  – distancia se porta significativamente mejor que Isomap. [...] para la exactitud esta región está limitada a  $1.7 \leq d \leq 2.2$

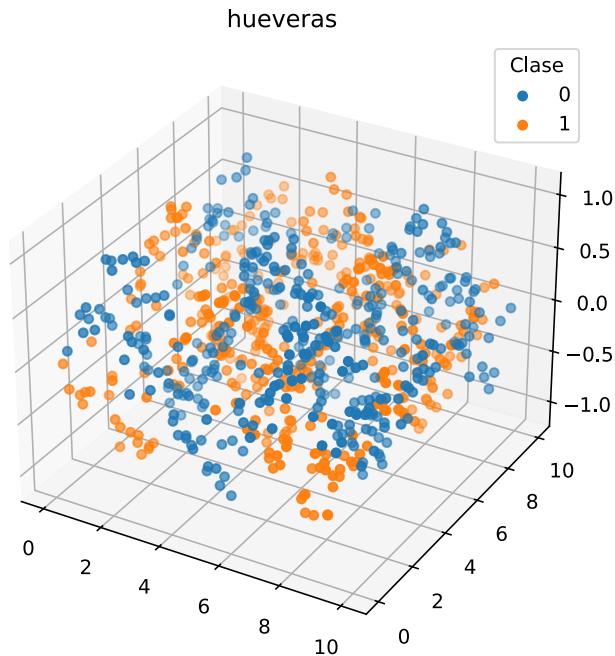
Por nuestra parte, en un ambiente ligeramente distinto, no encontramos diferencia significativa con la performance «cruda» de kdc., que a su vez no se distingue de los métodos estado-del-arte en exactitud (svc) ni  $R^2$  (GBT).

<sup>105</sup>presuntamente fijando  $k = 4$  y comparando las asignaciones contra los clusters verdaderos

<sup>106</sup> $\alpha$  en nuestra notación

### 4.3.3 Hueveras ( $D = 3, d = 2, k = 2$ )

Este dataset sumamente sintético consiste de dos clases con idénticas distribuciones pero signo opuesto en la dirección de la coordenada vertical.<sup>107</sup>, pero que se puede conceptualizar aproximadamente bien imaginando dos cartones de maple de huevos, uno invertido respecto al otro, intentando ocupar el mismo lugar en el espacio.



La exactitud de la familia  $\mathcal{K} = \{f\text{-KDC}, \text{KDC}, f\text{-KN}, \text{KN}\}$  es competitiva contra la de svc, que parece ser ligera y significativamente mejor. En términos de  $R^2$ , la familia  $\mathcal{K}$  es la única en alcanzar valores no-nulos, y  $D_{Q,\alpha}$  parece resultar en mejoras significativas, sobre todo para  $f\text{-KN}$ .

---

<sup>107</sup>Cf. `fkdc/datasets.py` para ver el detalle de las fórmulas

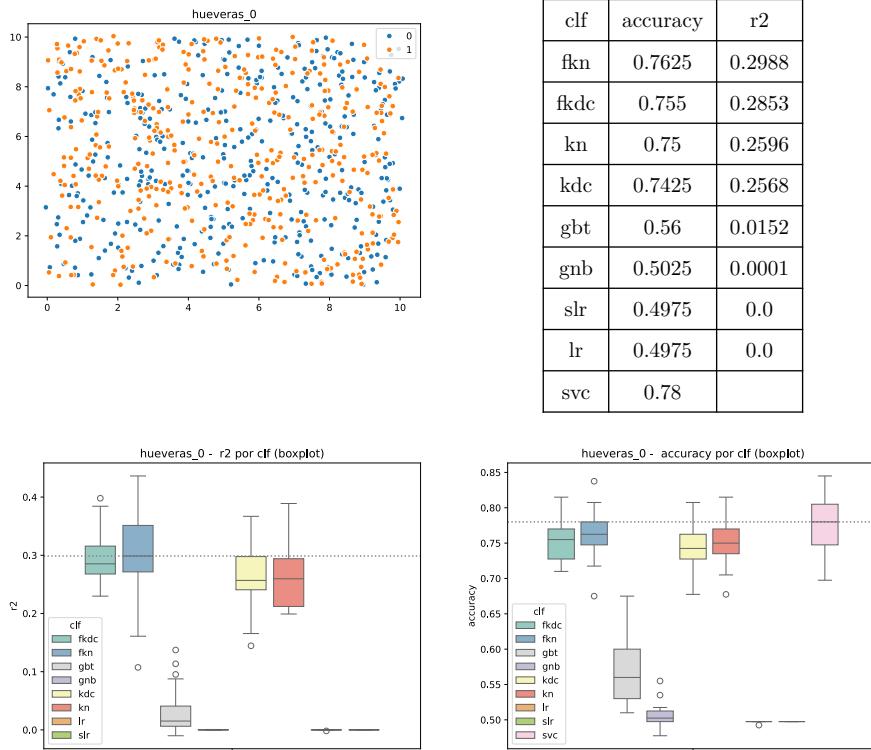


Tabla 11: Resumen para hueveras\_0

En efecto, observando los parámetros comparados de  $f$ -KDC v. KDC, se repite que

- la mejor hiperparametrización  $(\alpha_{\text{opt}}, h_{\text{opt}})$  en la grilla de CV tiene  $\alpha > 1$ ,
- hay una parametrización  $(\alpha_0, h_0)$  con  $\alpha_0 = 1$  que cumple la regla de un desvío estándar,
- con  $h_0$  «significativamente distinto» a  $h_{\text{opt}}$ <sup>108</sup>.

clf		fkdc	fkdc	fkdc	kdc	kdc	max_score_alpha_test
	delta_r2	alpha	band-width	r2	band-width	r2	
semilla							
1434	0.109	1.0	0.562	0.281	0.774	0.171	[1.25]
8443	0.102	1.0	0.562	0.268	0.774	0.166	[1.25]
8578	0.101	1.0	0.562	0.246	0.774	0.144	[1.25]
7974	0.075	1.0	0.316	0.398	0.532	0.323	[1.75]

<sup>108</sup>Por ello nos referimos a que durante el entrenamiento de kdc existió un  $h_{\text{alt}} \approx h_0$ , que la R1SD + kdc no eligió, y la R1SD +  $f$ -kdc sí.

2048	0.054	1.0	0.562	0.355	0.642	0.301	[1.25]
6610	0.053	1.0	0.562	0.307	0.642	0.254	[1.5]
7354	0.05	1.0	0.562	0.321	0.642	0.271	[1.75]
3046	0.049	1.0	0.562	0.306	0.642	0.257	[1.5]
1188	0.047	1.0	0.562	0.316	0.642	0.269	[1.5]
1193	0.046	1.0	0.562	0.282	0.642	0.236	[1.25]
8527	0.04	1.0	0.562	0.283	0.642	0.242	[1.5]
8591	0.04	1.0	0.562	0.268	0.642	0.228	[1.5]
2411	0.04	1.0	0.562	0.264	0.642	0.224	[1.25]
8096	0.038	1.0	0.562	0.29	0.642	0.252	[1.25]
4286	0.035	1.0	0.562	0.285	0.642	0.25	[1.5]
7060	0.017	1.25	0.562	0.384	0.532	0.367	[1.75]
7074	0.016	1.25	0.562	0.289	0.532	0.272	[1.5]
9975	-0.011	1.0	0.562	0.23	0.532	0.241	[1.5]
2694	-0.013	1.0	0.562	0.243	0.532	0.256	[1.5]
7837	-0.013	1.0	0.562	0.27	0.532	0.283	[1.]
8988	-0.015	1.0	0.562	0.296	0.532	0.311	[1.75]
1338	-0.016	1.0	0.562	0.243	0.532	0.26	[1.5]
5640	-0.017	1.0	0.562	0.281	0.532	0.298	[1.5]
1182	-0.019	1.0	0.562	0.323	0.532	0.342	[1.75]
1075	-0.031	1.25	0.562	0.322	0.441	0.354	[1.5]

Esta «sinergia» virtuosa, no alcanza para explicar lo que observamos al observar el efecto de la distancia de Fermat en kn:

clf		fkn	fkn	fkn	kn	kn	max_alpha_test
	delta_r2	alpha	n_neighboor2s	n_neighboor2s			
semilla							
7354	0.102	1.0	8.0	0.379	16.0	0.277	[2.25]
2411	0.098	1.25	16.0	0.299	22.0	0.201	[2.75]
7074	0.096	1.5	16.0	0.322	16.0	0.226	[1.75]
7060	0.086	1.5	12.0	0.436	12.0	0.35	[1.75]
3046	0.077	1.25	12.0	0.348	16.0	0.271	[2.25]
8096	0.067	1.25	12.0	0.332	16.0	0.266	[2.5]
8443	0.063	1.25	22.0	0.275	22.0	0.212	[2.5]

1434	0.061	1.25	22.0	0.268	22.0	0.207	[3.]
1075	0.059	1.5	16.0	0.354	12.0	0.295	[1.75]
1193	0.056	1.25	16.0	0.304	16.0	0.248	[2.]
7837	0.053	1.25	16.0	0.298	16.0	0.245	[1.75]
9975	0.046	1.25	16.0	0.249	16.0	0.203	[2.5]
8591	0.044	1.0	16.0	0.247	22.0	0.203	[1.75]
2048	0.041	1.0	12.0	0.351	16.0	0.31	[2.25]
2694	0.037	1.5	22.0	0.298	12.0	0.261	[3.]
1188	0.035	1.0	12.0	0.323	16.0	0.288	[2.]
8527	0.032	1.0	12.0	0.271	16.0	0.239	[1.75]
4286	0.029	1.0	12.0	0.288	16.0	0.26	[2.]
8578	0.025	1.0	12.0	0.233	16.0	0.208	[1.75]
1182	0.0	1.0	8.0	0.389	8.0	0.389	[1.5]
7974	0.0	1.0	8.0	0.354	8.0	0.354	[1.75]
6610	0.0	1.0	12.0	0.294	12.0	0.294	[1.5]
8988	-0.0	1.0	8.0	0.37	8.0	0.37	[2.25]
1338	-0.073	1.0	8.0	0.161	12.0	0.234	[2.75]
5640	-0.092	1.25	8.0	0.107	8.0	0.199	[2.5]

A primera vista, se observan unas cuantas semillas para las cuales la elección de un  $\alpha > 1$  resultó en una diferencia de  $R^2$  bastante positiva. Pero mejor aún, en 5 de 25 semillas ( $s \in \{7074, 7060, 8443, 1434, 1193\}$ ),  $f\text{-KN}$  y  $\text{KN}$  maximizaron el objetivo con la *misma* cantidad de vecinos, ¡y sin embargo  $f\text{-KN}$  eligió un  $\alpha > 1$ !

## 5 Conclusiones

A priori, nuestras tres propuestas de estimación:

- una implementación de la propuesta de (Loubes y Pelletier, 2008) para clasificación suave en variedades con Ecuación 4 y [Definición 2.4.15](#);
- el reemplazo de la distancia euclídea por distancia de Fermat muestral en algoritmos de clasificación por núcleos (KN, KDC) y
- extender la estimación de la distancia de Fermat «microscópica»  $\mathcal{D}_f, \beta$ ) a partir de la distancia de Fermat macroscópica  $D_{Q,\alpha}$ , a puntos por fuera de la muestra

funcionaron, por separado y en conjunto, a la par de métodos de primera línea, paramétricos (svc) y no paramétricos (gbt). Al evaluarlos por «exactitud», a pesar de estar entrenados para maximizar la log-verosimilitud, los métodos resultaron competitivos aunque sin mejoras

significativas. Al evaluarlos por  $R^2$ , sí se observaron excelentes rendimientos para toda la familia de métodos basados en densidad por núcleos  $\mathcal{K}$ , y en ciertas ocasiones la distancia de Fermat se destaca por encima de la euclídea.

Ya existía una implementación previa de la Distancia de Fermat [como librería de Python](#) orientada a «clustering» (Sapienza, Jonckheere y Groisman, 2018), tarea que tiene la particularidad de entrenar y predecir sobre los mismos datos. El problema de clasificación se evalúa, para ser justos, en observaciones que *no* se usaron para entrenar, lo cual nos llevó a escribir una librería nueva, con menos opciones de parametrización, pero capacidad de estimación «out-of-sample» y una implementación mínimamente performante sobre métodos bien optimizados que nos permitan ejecutar una suite extensa de experimentos que pudiésemos refinar iterativamente.

Poner a legos a implementar algoritmos numéricos complejos no suele terminar bien, pero milagrosamente llevamos el invento a buen puerto. También podía ser que el método tuviese una performance *decente* pero no *competitiva* con el estado del arte; no fue el caso.

TODO el que dice que basta con aprender alpha que junta  $d$  y  $\beta$  en uno solo tiene razón

En ninguno de los datasets estudiados (casos con bajo  $D \in \{2, 3\}$ ) se vieron modos «catastróficos» donde la performance de  $f - [\text{kDC}|\text{KN}]$  fuese muchísimo peor que la de sus pares euclídeos. En los datasets en que se comprueba una ventaja sistemática de  $f\text{-kDC}$  (resp.  $f\text{-KN}$ ) sobre kDC (resp. KN), se puede explicar por dos efectos:

- En todos los casos examinados, una parte importante de la ventaja se da por una «símbiosis» positiva entre el mecanismo de selección de modelos de [Definición 3.1.4](#), y el espacio de parámetros ampliado por la dimensión de  $\alpha$ . Ésta resulta en parametrizaciones de  $f\text{-kDC}$  (resp.  $f\text{-KN}$ ) con  $\alpha = 1$  y ligeramente mejor  $R^2$  que kDC (resp. KN) ignora.
- En ciertos casos (como  $f\text{-KN}$  en `hueveras_0`), acontece que parte de la mejora se debe a la elección de parametrizaciones de  $f\text{-KN}$  que coinciden en el  $k$  elegido con KN, pero además registran un  $\alpha > 1$  - i.e., una mejora *netamente gracias a* el uso de la distancia de Fermat muestral.

El «caso general», en el que  $f\text{-kDC}$  anda tan bien o mal como kDC, observamos una relación log-lineal,

$$\log(h) \propto \alpha \tag{92}$$

que se discierne en la *superficie de pérdida* de entrenamiento como un «riesgo» de parametrizaciones equivalentes en bondad. Entendemos que esto sucede porque

- los datasets están «bien sampleados» y

- para todo  $p \in \mathcal{M}$  una variedad de Riemann, siempre existe un vecindario dentro del radio de inyectividad de  $\text{iny}_p \mathcal{M}$  en el que  $\mathcal{D}_{f,\beta} \propto \|\cdot\|$ . En estas circunstancias existe un  $h \leq \text{iny}_p \mathcal{M}$  tal que el efecto de  $\alpha$  «(des)inflando» la distancia euclídea puede ser sustituido completamente por una parametrización con distinto  $h$ , y no hay ventaja alguna que obtener usando distancia de Fermat ( $f\text{-KN}$  o  $f\text{-KDC}$ ) en lugar de euclídea.

Los métodos de estimación por densidad de núcleos son «altamente locales», y por ende sólo vemos mejoras no-triviales de  $R^2$  en circunstancias extraordinarias, como en los datasets de `espirales`, `helices` o `hueveras` en que aún los vecindarios locales son altamente no-euclídeos.

Con respecto a los tiempos de cómputo, no se hizo un análisis exhaustivo esencialmente porque no hizo falta: corrimos 25 repeticiones de 20 datasets para 9 clasificadores en unas 12 horas en mi computadora personal<sup>109</sup> media docena de veces hasta tenerlo todo a punto, y en general ni siquiera  $D_{Q,\alpha}$  el algoritmo más problemático. Es cierto que el cómputo de  $D_{Q,\alpha}$  - que implica calcular geodésicas en grafos completos - puede requerir varios órdenes de magnitud mayores recursos que el de la distancia euclídea, pero

- para datasets «moderados» (en el desarrollo se consideraron  $n_k \leq 1000$ ,  $p \leq 90$ ) el tiempo de cómputo de base es pequeño, y aunque crezca por órdenes de magnitud no afecta significativamente la experiencia del científico; además
- con estrategias básicas de «cacheo»<sup>110</sup>, se puede computar una única vez las distancias de Fermat, y reutilizarlas en todas las evaluaciones posteriores de distancias de entrenamiento.

## 5.1 Trabajo Futuro

En el presente trabajo hemos desarrollado una librería y un marco teórico sumamente riguroso para intentar identificar condiciones en las cuales estimadores de densidad entrenados con distancia de Fermat muestral son estrictamente mejores que sus versiones euclídeas.

Es *infinita* la cantidad de circunstancias en las que podemos poner a prueba una técnica de clasificación, y en los experimentos ejecutados y presentados no hemos hecho más que rasgar la superficie. Así y todo, pareciera ser que en espacios ralamente sampleados o altamente curvos, donde «no quede otra» que tomar una ventana  $h > \text{iny } \mathcal{M}$  para tener una densidad «viable», el uso de la distancia de Fermat mejora, sino la exactitud de los algoritmos, sí su  $R^2$  y por ende la capacidad de discernimiento «relativo» de estos estimadores.

---

<sup>109</sup>Macbook Air M1 2020, 8GB RAM, 256GB SSD

<sup>110</sup>Confer el uso del decorador `joblib.Memory.cache` en `fkdc/fermat.py`

Sería interesante entonces investigar si existen condiciones reales en las que sepamos «a priori» que las variedades intrínsecas son altamente no-euclídeas, y en ese contexto probar si en ciertos tamaños muestrales  $n$  (y por cada clase,  $n_1, \dots, n_k$ ) pequeños relativos a la dimensión ambiente es particularmente conveniente el uso de la distancia de Fermat.

## 5.2 A incorporar

### 5.2.1 Otros datasets: 15D

pionono_12 (acc: 91.07%)		estabones_12 (acc: 98.48%)		helices_12 (acc: 53.15%)		hueveras_12 (acc: 53.55%)		
delta_acc r2		delta_acc r2		delta_acc r2		delta_acc r2		
clf		clf		clf		clf		
gbt	0.00	78.96	gbt	0.00	91.66	fkn	-0.99	0.20
gnb	-20.78	54.30	gnb	-8.67	75.24	kn	-0.99	0.20
slr	-28.42	42.42	fkdc	-22.66	24.58	gnb	-1.01	0.13
lr	-28.56	42.22	fkn	-21.98	24.43	base	-3.40	0.00
fkdc	-46.30	10.18	kdc	-22.40	24.32	lr	-3.40	0.00
kdc	-41.83	10.05	kn	-22.52	24.11	slr	-3.40	0.00
fkn	-44.47	9.99	lr	-31.16	21.01	gbt	0.00	-0.37
kn	-44.15	9.95	slr	-30.98	20.69	fkdc	-3.41	-2.69
base	-68.32	0.00	base	-48.73	0.00	kdc	-3.45	-6.01
svc	-29.07	NaN	svc	-19.20	NaN	svc	-2.92	NaN

### 5.2.2 Otros datasets: multiclasificación

iris (acc: 96.27%)		vino (acc: 97.3%)		pinguiños (acc: 99.13%)		anteojos (acc: 97.68%)		
delta_acc r2		delta_acc r2		delta_acc r2		delta_acc r2		
clf		clf		clf		clf		
lr	0.00	88.64	gbt	-0.85	89.80	slr	0.00	96.22
slr	-0.53	87.99	slr	0.00	89.72	lr	-0.77	95.51
gbt	-1.49	85.88	gnb	-2.70	84.59	gbt	-1.80	91.85
gnb	-4.05	80.93	lr	-10.92	67.06	gnb	-4.68	84.81
fkdc	-0.96	79.30	fkn	-27.55	45.22	fkn	-22.67	49.42
kdc	-1.17	78.02	kn	-27.55	45.22	kn	-22.67	49.36
kn	-0.48	74.39	fkdc	-30.56	42.44	fkdc	-26.55	41.60
fkn	-0.64	73.21	kdc	-30.92	39.42	kdc	-26.50	40.49
base	-65.87	0.00	base	-58.83	0.00	base	-56.16	0.00
svc	-1.65	NaN	svc	-8.94	NaN	svc	-3.67	NaN

### 5.2.3 Otros datasets: digitos y mnist

digitos (acc: 98.41%)		
delta_acc r2		
clf		
fkdc	0.00	97.67
kdc	-0.10	96.80
gbt	-2.43	94.17
lr	-2.24	93.38
slr	-2.33	93.10
fkn	-1.98	92.22
kn	-2.91	90.62
gnb	-8.42	85.67
base	-89.43	0.00
svc	-0.16	NaN

## mnist (acc: 87.07%)

	<b>clf</b>	<b>delta_acc</b>	<b>r2</b>
kdc	-4.04	76.38	
lr	-4.32	76.10	
fkdc	-4.38	73.38	
gbt	-10.11	66.57	
slr	-12.33	61.43	
gnb	-19.10	56.91	
fkn	-16.28	54.02	
kn	-19.10	50.40	
base	-76.57	0.00	
svc	0.00	NaN	

## 6 Listados

### Listado de Figuras

Figura 1	Dos círculos concéntricos .....	9
Figura 2	Proporción de $X$ dentro de un $d$ -cubo de lado $h$ .....	12
Figura 3	Ejemplos de variedades en el mundo físico .....	14
Figura 4	Espacio tangente en $S^2$ .....	18
Figura 5	Espacio tangente y mapa exponencial para $p_N \in S^1$ .....	21
Figura 6	Pesos atómicos «módulo 1» sobre $S^1$ .....	23
Figura 7	asdf .....	29
Figura 8	Data espacial con dimensiones bien definidas. ....	32
Figura 9	Variedad $\mathcal{U}$ .....	33
Figura 10	Ilustración de $\mathbf{X}$ y sus componentes principales en « <i>LIII. On lines and planes of closest fit to systems of points in space.</i> » (Pearson, 1901) .....	34
Figura 11	Una bola de radio $r$ creciente centrada en un punto de una 1-variedad muestrada con ruido en $\mathbb{R}^2$ minimiza la tasa a la que incorpora observaciones cuando $r$ está en la escala «localmente lineal» de la variedad. ....	37
Figura 12	Isomap aplicado a 1.000 dígitos «2» manuscritos del dataset <i>MNIST</i> con $d = 2$ (Tenenbaum, Silva y Langford, 2000).	

Nótese que las dos direcciones se corresponden fuertemente con características de los dígitos: el rulo inferior en el eje $X$ , y el arco superior en el eje $Y$ .....	40
Figura 13 Cuando por ejemplo $\mathcal{M} = (\mathbb{R}^2, g = \mathbf{I})$ , $X \sim \mathcal{N}_d(a, \Sigma)$ , tenemos que $d_g(a, b) = L(\gamma) = r = L(\zeta) = d_g(a, c)$ , mientras que $d_\Sigma(a, b) < d_\Sigma(a, c)$ : la normal multivariada tiene distintas tasas de cambio en distintas direcciones, y medir distancia ignorando este hecho puede llevar a conclusiones erróneas .....	41
Figura 14 En el grafo completo de 3 vértices, hay sólo dos caminos entre $a$ y $c$ : $\zeta = a \rightarrow b \rightarrow c$ , y $\gamma = a \rightarrow c$ .....	42
Figura 15 Ejemplo trivial de la equivalencia $d_{\mathbf{N}} \equiv d_2$ para $P = \{a, b\}$ .....	47
Figura 16 «Lunas», «Círculos» y «Espirales» .....	59
Figura 17 Frontera de decisión para $s\text{-LR}$ en <code>lunas_lo</code> , semilla 1075 ..	65
Figura 18 .....	66
Figura 19 Gráficos de dispersión ( <i>scatterplots</i> ) de $R^2$ para $kDC$ (izq.) y $kNN$ (der.) con (eje $y$ ) y sin (eje $x$ ) distancia de Fermat. ....	67
Figura 20 Superficie de <i>score</i> : para cada valor de $\alpha$ considerado, una cruz roja marca el valor de $h$ que maximizó el <i>score</i> . ....	68
Figura 21 Superficies de pérdida para tres semillas y cada uno de los tres dataset. El patrón log-lineal previamente observado se replica casi perfectamente en todos los casos. ....	69
Figura 22 (izq.) Dispersión de $R^2$ en función de $h$ por clasificador y semilla en <code>lunas_lo</code> , para $f\text{-KDC}$ , $kDC$ (der.) Dispersión de $\Delta_{R^2} = R_{kDC}^2 - R_{f-KDC}^2$ en función de $\Delta_h = h_{f-KDC}^* - h_{kDC}^*$ para cada semilla. ....	71
Figura 23 «Lunas», «Círculos» y «Espirales», alto ruido .....	72
Figura 24 $R^2$ mediano por clasificador y dataset, comparado entre la variante con bajo ( <code>_lo</code> ) y alto ( <code>_hi</code> ) ruido en el sampleo..	75
Figura 25 Fronteras de decisión para $f\text{-KDC}$ , GBT, SVC en regímenes de alto ruido, $s = 1075$ .....	76

## Listado de Tablas

Tabla 1 .....	60
Tabla 2 .....	61
Tabla 3 .....	62
Tabla 4 .....	64
Tabla 5 .....	73
Tabla 6 .....	74
Tabla 7 .....	75
Tabla 8 .....	78

Tabla 9 .....	80
Tabla 10 .....	88
Tabla 11 .....	90

## Bibliografía

- Bengio, Y. (2019) «The Consciousness Prior». arXiv.
- Bengio, Y., Courville, A. y Vincent, P. (2014) «Representation Learning: A Review and New Perspectives». arXiv.
- Bengio, Y., Larochelle, H. y Vincent, P. (2005) «Non-Local Manifold Parzen Windows», en *Advances in Neural Information Processing Systems*. MIT Press.
- Berenfeld, C. y Hoffmann, M. (2021) «Density Estimation on an Unknown Submanifold», *Electronic Journal of Statistics*, 15(1), pp. 2179-2223. Disponible en: <https://doi.org/10.1214/21-EJS1826>.
- Besse, A.L. (1978) *Manifolds All of Whose Geodesics Are Closed*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. Disponible en: <https://doi.org/10.1007/978-3-642-61876-5>.
- Bijral, A.S., Ratliff, N. y Srebro, N. (2012) «Semi-Supervised Learning with Density Based Distances». arXiv. Disponible en: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1202.3702>.
- Bliss, C.I. (1935) «THE CALCULATION OF THE DOSAGE-MORTALITY CURVE», *Annals of Applied Biology*, 22(1), pp. 134-167. Disponible en: <https://doi.org/10.1111/j.1744-7348.1935.tb07713.x>.
- Brand, M. (2002) «Charting a Manifold», en *Advances in Neural Information Processing Systems*. MIT Press.
- Buitinck, L. et al. (2013) «API Design for Machine Learning Software: Experiences from the Scikit-Learn Project». arXiv. Disponible en: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1309.0238>.
- do Carmo, M.P. (1992) *Riemannian Geometry*. Birkhäuser Boston.
- Cayton, L. (2005) «Algorithms for Manifold Learning».
- Chu, T., Miller, G.L. y Sheehy, D.R. (2019) «Exact Computation of a Manifold Metric, via Lipschitz Embeddings and Shortest Paths on a Graph», *Proceedings of the 2020 ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms (SODA)*. Society for Industrial and Applied Mathematics (Proceedings). Disponible en: <https://doi.org/10.1137/1.9781611975994.25>.
- Cox, D.R. (1958) «The Regression Analysis of Binary Sequences», *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, 20(2), pp. 215-242.
- Devroye, L., Györfi, L. y Lugosi, G. (1996) *A Probabilistic Theory of Pattern Recognition*. Repr. New York Berlin Heidelberg: Springer (Applications of Mathematics).

- Fisher, R.A. (1957) «Dispersion on a Sphere», *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 217(1130), pp. 295-305. Disponible en: <https://doi.org/10.1098/rspa.1953.0064>.
- Gallese, V. (2003) «The Roots of Empathy: The Shared Manifold Hypothesis and the Neural Basis of Intersubjectivity», *Psychopathology*, 36(4), pp. 171-180. Disponible en: <https://doi.org/10.1159/000072786>.
- Groisman, P., Jonckheere, M. y Sapienza, F. (2019) «Nonhomogeneous Euclidean First-Passage Percolation and Distance Learning». arXiv.
- Hall, P. y Kang, K.-H. (2005) «Bandwidth Choice for Nonparametric Classification», *Ann. Statist.*, 33(1). Disponible en: <https://doi.org/10.1214/009053604000000959>.
- Hastie, T., Tibshirani, R. y Friedman, J. (2009) *Elements of Statistical Learning Data Mining, Inference, and Prediction*. Springer London, Limited.
- Henry, G. y Rodriguez, D. (2009) «Kernel Density Estimation on Riemannian Manifolds: Asymptotic Results», *J Math Imaging Vis*, 34(3), pp. 235-239. Disponible en: <https://doi.org/10.1007/s10851-009-0145-2>.
- Jupp, P.E. y Mardia, K.V. (1989) «A Unified View of the Theory of Directional Statistics, 1975-1988», *International Statistical Review / Revue Internationale de Statistique*, 57(3), pp. 261-294. Disponible en: <https://doi.org/10.2307/1403799>.
- Lee, J.M. (2018) *Introduction to Riemannian Manifolds*. Cham: Springer International Publishing (Graduate Texts in Mathematics). Disponible en: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-91755-9>.
- Little, A., McKenzie, D. y Murphy, J. (2021) «Balancing Geometry and Density: Path Distances on High-Dimensional Data». arXiv.
- Loubes, J.-M. y Pelletier, B. (2008) «A Kernel-Based Classifier on a Riemannian Manifold», *Statistics & Decisions*, 26(1), pp. 35-51. Disponible en: <https://doi.org/10.1524/stnd.2008.0911>.
- Mardia, K.V. (1975) «Distribution Theory for the Von Mises-Fisher Distribution and Its Application», en G.P. Patil, S. Kotz, y J.K. Ord (eds.) *A Modern Course on Statistical Distributions in Scientific Work*. Dordrecht: Springer Netherlands (NATO Advanced Study Institutes Series), pp. 113-130. Disponible en: [https://doi.org/10.1007/978-94-010-1842-5\\_10](https://doi.org/10.1007/978-94-010-1842-5_10).
- McFadden, D. (1974) «Conditional Logit Analysis of Qualitative Choice Behavior», *Frontiers in econometrics* [Preprint].
- Mckenzie, D. y Damelin, S. (2019) «Power Weighted Shortest Paths for Clustering Euclidean Data». arXiv.
- von Mises, R. (1918) «Über Die "Ganzzahligkeit" Der Atomgewicht Und Verwandte Fragen», *Physikal. Z.*, 19, pp. 490-500.

- Muñoz, A.L. (2011) *Estimación no paramétrica de la densidad en variedades Riemannianas*. Doctoral dissertation.
- Parzen, E. (1962) «On Estimation of a Probability Density Function and Mode», *The annals of mathematical statistics*, 33(3), pp. 1065-1076.
- Pearson, K. (1901) «LIII. On Lines and Planes of Closest Fit to Systems of Points in Space». Disponible en: <https://doi.org/10.1080/14786440109462720>.
- Pedregosa, F. et al. (2011) «Scikit-Learn: Machine Learning in Python», *Journal of Machine Learning Research*, 12(85), pp. 2825-2830.
- Pelletier, B. (2005) «Kernel Density Estimation on Riemannian Manifolds», *Statistics & Probability Letters*, 73(3), pp. 297-304. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.spl.2005.04.004>.
- Rifai, S. et al. (2011) «The Manifold Tangent Classifier», en *Advances in Neural Information Processing Systems*. Curran Associates, Inc.
- Rosenblatt, M. (1956) «Remarks on Some Nonparametric Estimates of a Density Function», *The Annals of Mathematical Statistics*, 27(3), pp. 832-837.
- Sapienza, F., Jonckheere, M. y Groisman, P. (2018) «Weighted Geodesic Distance Following Fermat's Principle», en.
- Simard, P. et al. (1991) «Tangent Prop - A Formalism for Specifying Selected Invariances in an Adaptive Network», en *Advances in Neural Information Processing Systems*. Morgan-Kaufmann.
- Tenenbaum, J. (1997) «Mapping a Manifold of Perceptual Observations», en *Advances in Neural Information Processing Systems*. MIT Press.
- Tenenbaum, J.B., Silva, V. de y Langford, J.C. (2000) «A Global Geometric Framework for Nonlinear Dimensionality Reduction», *Science*, 290(5500), pp. 2319-2323. Disponible en: <https://doi.org/10.1126/science.290.5500.2319>.
- Vincent, P. y Bengio, Y. (2002) «Manifold Parzen Windows», en *Advances in Neural Information Processing Systems*. MIT Press.
- Vincent, P. y Bengio, Y. (2003) «Density Sensitive Metrics and Kernels», en *Proceedings of the Snowbird Workshop*.
- Wand, M.P. y Jones, M.C. (1993) «Comparison of Smoothing Parameterizations in Bivariate Kernel Density Estimation», *Journal of the American Statistical Association*, 88(422), pp. 520-528. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/01621459.1993.10476303>.
- Wand, M.P. y Jones, M.C. (1995) *Kernel Smoothing*. Boston, MA: Springer US. Disponible en: <https://doi.org/10.1007/978-1-4899-4493-1>.
- Wikipedia (2024) «Espacio de Hausdorff», *Wikipedia, la enciclopedia libre* [Preprint].
- Wikipedia (2025b) «Entorno (matemática)», *Wikipedia, la enciclopedia libre* [Preprint].

Wikipedia (2025a) «Espacio topológico», *Wikipedia, la enciclopedia libre* [Preprint].

«Aprendizaje profundo» (2025) *Wikipedia, la enciclopedia libre* [Preprint].

«Distancia de Mahalanobis» (2024) *Wikipedia, la enciclopedia libre* [Preprint].

«Gradient boosting» (2025) *Wikipedia, la enciclopedia libre* [Preprint].

## 7 Apéndice A: Fichas de resultados por dataset

## 8 Apéndice B: Código (?)

### 8.1 Arenero

TODO: revisar forma de citar bibliografía, corregir autores y formato en textos enciclopédicos y otros

	$\ell$	$R^2$	exac
$f$ -KDC	-0.0	1.0	1.0
KDC	-0.0	1.0	1.0
GNB	-0.0	1.0	1.0
KN	-0.0	1.0	1.0
$f$ -KN	-0.0	1.0	1.0
LR	-4.5678	0.9589	1.0
SVC			1.0
LSVC			1.0
base	-111.1567	0.0	0.4625

clf	$R^2$	exac
$f$ -KDC	1.0	1.0
KDC	1.0	1.0
GNB	1.0	1.0
KN	1.0	1.0
$f$ -KN	1.0	1.0
LR	0.99994	1.0
$s$ -LR	0.99952	1.0
GBT	0.9995	1.0

<b>clf</b>	<b><math>R^2</math></b>	<b>exac</b>
SVC	—	1.0
<b>clf</b>	<b><math>R^2</math></b>	<b>exac</b>
FKDC	1.0	1.0
KDC	1.0	1.0
GNB	1.0	1.0
KN	1.0	1.0
FKN	1.0	1.0
LR	0.99994	1.0
SLR	0.99952	1.0
GBT	0.9995	1.0
SVC	—	1.0