

# Tesis De Maestría

## Test de Hipótesis Sobre Homología Persistente Utilizando la Distancia de Fermat



Universidad de Buenos Aires - Facultad De Ciencias Exactas y Naturales

Diego Javier Battocchio

Director: Dr. Pablo Groisman

# Contenidos

---

1.	Qué buscamos y qué aprendimos .....	3
2.	Problema y Motivación .....	5
3.	Conceptos Utilizados .....	8
4.	Desarrollo y Métodos Utilizados .....	20
5.	Conjuntos de datos .....	24
6.	Resultados .....	33
7.	Conclusiones y Proximos Pasos .....	54

**Qué buscamos y qué aprendimos**

# Qué buscamos y qué aprendimos

## **Buscamos**

- Aplicar herramientas de pruebas de hipótesis para homología persistente.
- Validar resultados de la bibliografía.
- Comparar esos resultados con los obtenidos usando la distancia de Fermat.

## **Encontramos**

- Fermat es más potente en topologías complejas.
- Los métodos de la bibliografía fallan en ciertas topologías y para  $D > 2$ .
- Fermat es consistente con la inspección visual en datos reales.

## **Mientras tanto aprendimos**

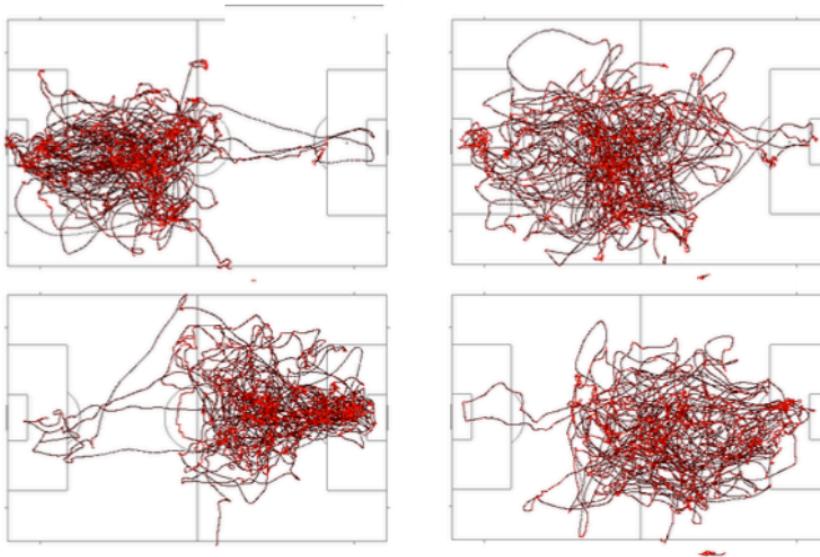
- Topología aplicada a análisis de datos.
- Geometría computacional.
- Publicar un paquete de R en CRAN.

## **Problema y Motivación**

# Problema y Motivación

## Homología Persistente (Análisis Topológico de Datos)

Los “agujeros” en los datos revelan estructura: la homología persistente permite detectarlos y analizarlos de forma confiable.



## Problema y Motivación (II)

---

La distancia de Fermat puede ayudarnos a mejorar los resultados en estas tareas!

### Bot Detection on Social Networks Using Persistent Homology

Minh Nguyen<sup>1</sup>, Mehmet Aktas<sup>1,\*</sup> and Esra Akbas<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Mathematics and Statistics, University of Central Oklahoma, Edmond, OK 73034, USA;

mnguyen3@uco.edu

<sup>2</sup> Department of Computer Science, Oklahoma State University, Stillwater, OK 74078, USA;

eakbas@okstate.edu

\* Correspondence: maktas@uco.edu

### Coverage in sensor networks via persistent homology

VIN DE SILVA

ROBERT GHIRST

### Persistent Homology of Delay Embeddings and its Application to Wheeze Detection

Saba Emrani, Thanos Gentimis and Hamid Krim

February 21, 2014

## **Conceptos Utilizados**

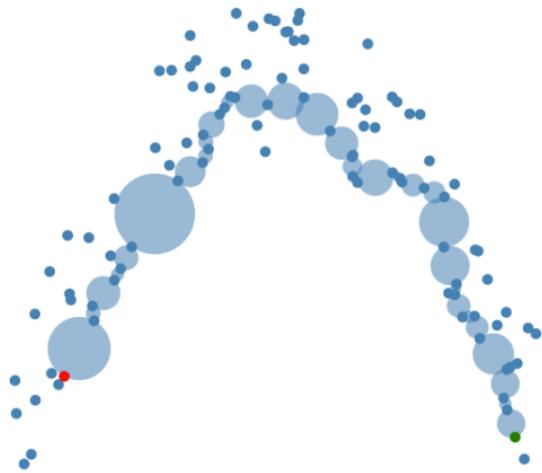
## Distancia de Fermat

---

$$d_F(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \min_K \min_{\mathcal{S}_N^K} \sum_{i=1}^{K-1} l(\mathbf{x}^i, \mathbf{x}^{i+1})^\lambda$$

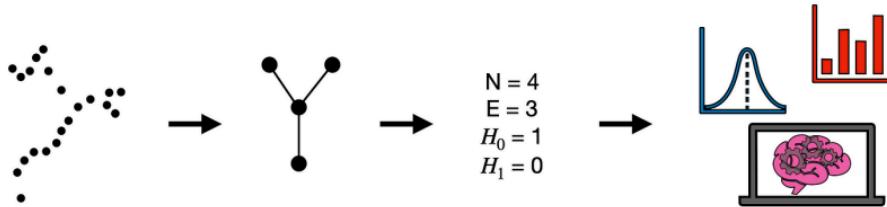
$$\mathbf{x}^1 = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in \mathcal{S}_N} l(\mathbf{p}, \mathbf{x})$$

$$\mathbf{x}^K = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in \mathcal{S}_N} l(\mathbf{q}, \mathbf{x})$$



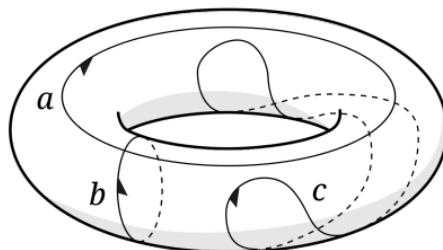
Incorpora información topológica en la definición de distancia entre puntos

# Análisis topológico de datos



## Homología

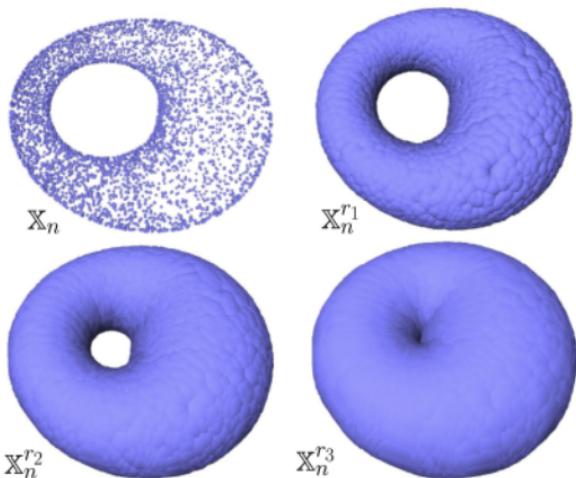
La homología es el área de estudio que clasifica espacios topológicos en términos de agujeros de diferentes dimensiones.



¿Cómo inferir la homología de una variedad  $\mathcal{M}$  a partir de una muestra  $\mathcal{S}_N$ ?

$$B(\mathbf{x}_i, \varepsilon) = \{\mathbf{x} \mid d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) < \varepsilon\}$$

$$\mathcal{S}_N^\varepsilon = \cup_{\mathbf{x} \in \mathcal{S}_N} B(\mathbf{x}, \varepsilon)$$



Calcular la homología  $H(\mathcal{M})$  directamente a partir de  $\mathcal{S}_N^\varepsilon$  es muy difícil.

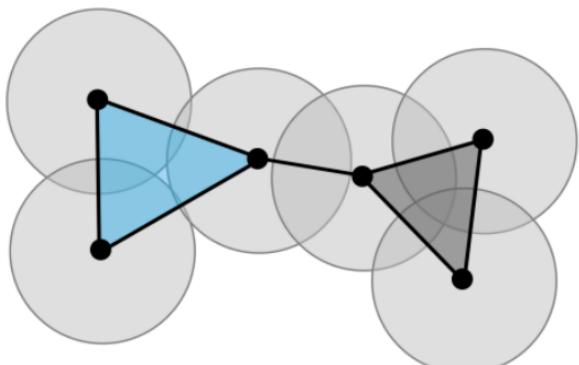
### Complejo de Čech

$\check{\text{C}}\text{ech}(\mathcal{S}_N, \varepsilon)$ : Conjunto de simplices  $\sigma$  con vértices  $v_1, \dots, v_k \in \mathcal{S}_N$  tales que

$$\bigcap_{i=1}^k B(v_i, \varepsilon) \neq \emptyset$$

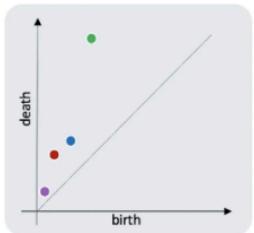
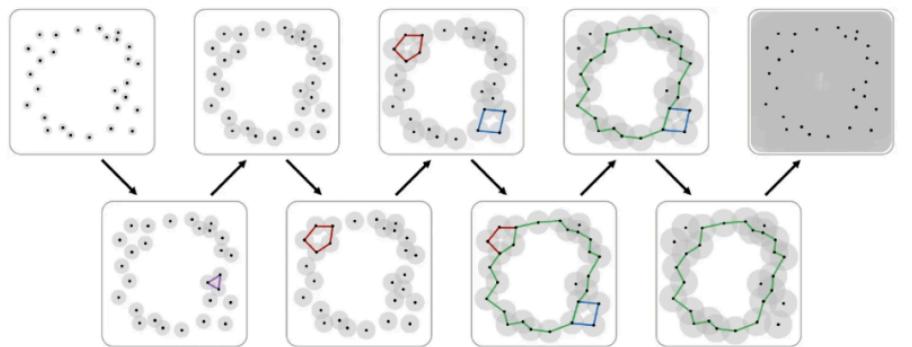
### Complejo de Vietoris-Rips

$V(\mathcal{S}_N, \varepsilon)$ : Simplices con vértices en  $\mathcal{S}_N$  de diámetro máximo  $2\varepsilon$ .



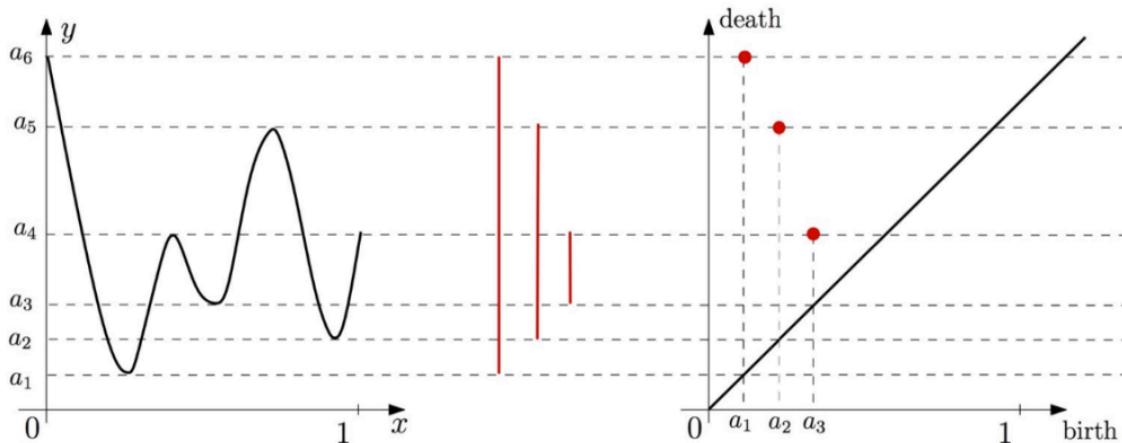
$$\check{\text{C}}\text{ech}(\mathcal{S}_N, \varepsilon) \subset V(\mathcal{S}_N, \varepsilon) \subset \check{\text{C}}\text{ech}(\mathcal{S}_N, \sqrt{2}\varepsilon)$$

Se obtiene aumentando progresivamente el  $\varepsilon$  y evaluando las cualidades topológicas de  $\mathcal{S}_N^\varepsilon$  para cada valor



## Diagramas de persistencia de conjuntos de nivel

$$\mathcal{S}_N^\varepsilon = \cup_{\mathbf{x} \in \mathcal{S}_N} B(\mathbf{x}, \varepsilon) = L_\varepsilon = \left\{ \mathbf{x} \mid \min_{\mathbf{x}_i \in \mathcal{S}_N} d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) < \varepsilon \right\}$$

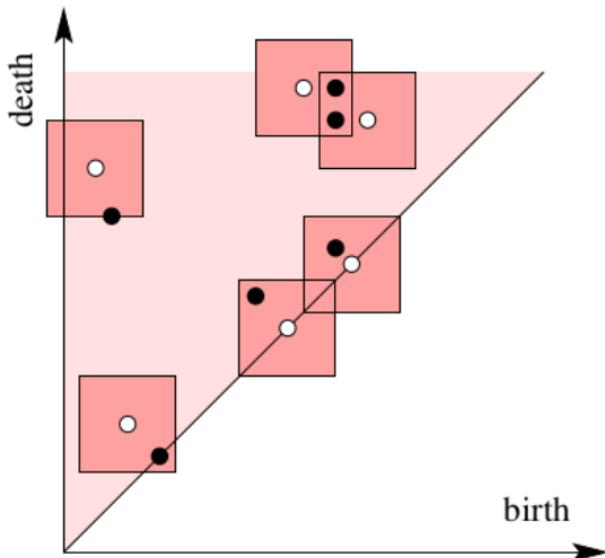


## Distancia entre diagramas de persistencia

$\mathcal{X}, \mathcal{Y}$  : Diagramas de persistencia

$\eta : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$

$$W_\infty(\mathcal{X}, \mathcal{Y}) = \inf_{\eta: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}} \sup_{x \in \mathcal{X}} \|x - \eta(x)\|_\infty$$



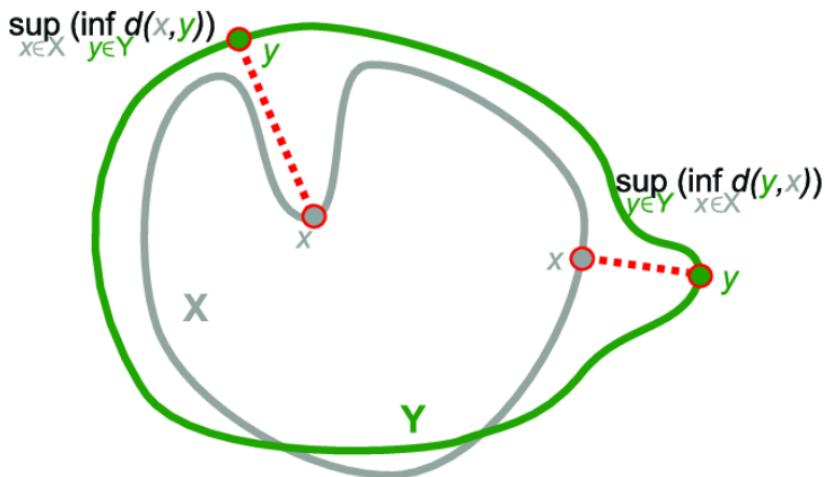
## Distancia de Hausdorff

---

$$d(x, C) = \inf_{c \in C} d(x, c)$$

$$d_H(A, B) = \max \left\{ \sup_{b \in B} d(b, A), \sup_{a \in A} d(a, B) \right\}$$

$$d_H(A, B) = \sup_{x \in M} |d(x, A) - d(x, B)|$$



# Regiones de Confianza

---

## Intervalos de confianza

$$\mathbb{P}\{\theta_L(X) \leq \theta \leq \theta_U(X)\} = 1 - \alpha$$

## Regiones de confianza

$$\mathbb{P}\{\theta \in A(X)\} = 1 - \alpha$$

## Cálculo de regiones de confianza

El cálculo analítico de las regiones de confianza suele ser imposible.

## Técnicas de Muestreo

Analizar la distribución empírica de  $\hat{\theta}^j = T(\mathcal{S}_N^j)$

### Bootstrap

$\mathcal{S}_N^j$ : muestras de tamaño  $N$  **con reposición**

### Sub-muestreo

$\mathcal{S}_N^j, b$ : muestras de tamaño  $b$  **sin reposición**

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \inf \mathbb{P} \left( 0 \leq W_{\infty} \left( \mathcal{P}, \hat{\mathcal{P}} \right) \leq \theta_n \right) \geq 1 - \alpha$$

$$\mathcal{C}_n = \left\{ \tilde{P} \mid W_{\infty} \left( \tilde{P}, \hat{P} \right) < \theta_n \right\}$$

### Interpretaciones de $\mathcal{C}_n$

Caja de lado  $2\theta_n$  en cada cualidad  
topológica  $p_i = (b_i, d_i)$

Banda de ancho  $\sqrt{2}\theta_n$  alrededor de la  
diagonal del diagrama de persistencia

### Test de Hipótesis basado en interpretación Dicotómica

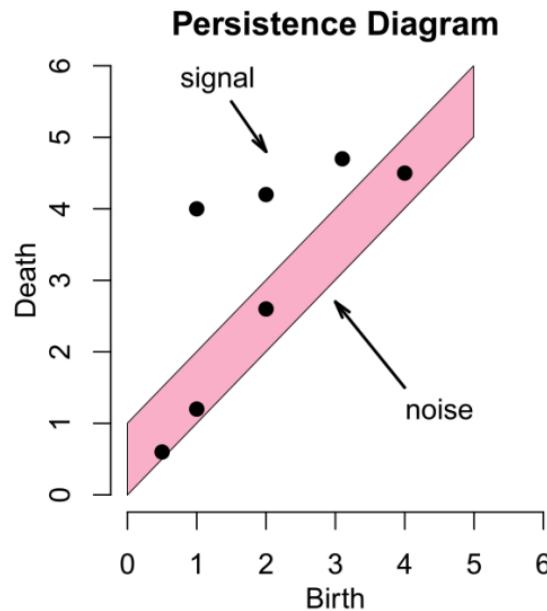
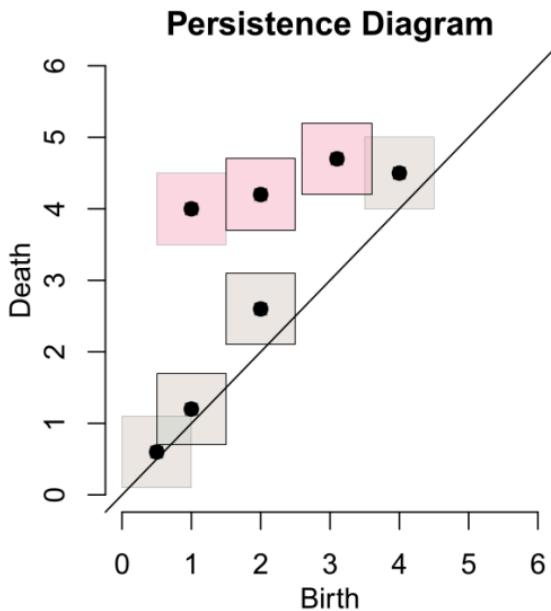
$$l_i = d_i - b_i$$

$$H_0^i : l_i = 0$$

$$H_1^i : l_i > 0$$

## Regiones de Confianza

## Regiones de confianza para diagramas de persistencia (II)



## **Desarrollo y Métodos Utilizados**

# Estimación robusta de distancia de Hausdorff

---

## Distancia de Hausdorff para nubes de puntos

$$d_H(\mathcal{A}_N, \mathcal{B}_N) = \max \left\{ \max_{\mathbf{a} \in \mathcal{A}_N} \min_{\mathbf{b} \in \mathcal{B}_N} d(\mathbf{a}, \mathbf{b}), \max_{\mathbf{b} \in \mathcal{B}_N} \min_{\mathbf{a} \in \mathcal{A}_N} d(\mathbf{a}, \mathbf{b}) \right\}$$

Nuestro caso particular  $\mathcal{A}_N = \mathcal{S}_N$ ,  $\mathcal{B}_N = \mathcal{S}_N^j$

$$d_H(\mathcal{S}_N, \mathcal{S}_N^j) = \max_{\mathbf{a} \in \mathcal{S}_N} \min_{\mathbf{b} \in \mathcal{S}_N^j} d(\mathbf{a}, \mathbf{b})$$

## Estimación robusta de distancia de Hausdorff

$$\hat{d}_H(\mathcal{S}_N, \mathcal{S}_N^j) = \text{percentil}(\gamma) \min_{\mathbf{b} \in \mathcal{S}_N^j} d(\mathbf{a}, \mathbf{b})$$

Valor obtenido mediante experimentación:

$$\gamma = 0.97$$

$$\theta_j = d_H(\mathcal{S}_N, \mathcal{S}_N^j)$$

$$L_{b(t)} = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M I(\theta_j > t)$$

$$c_b = 2L_b^{-1}(\alpha)$$

Se demuestra

$$\mathbb{P}(W_\infty(\hat{\mathcal{P}}, \mathcal{P}) > c_b) \leq \mathbb{P}(d_H(\mathcal{S}_N, \mathcal{M}) > c_b) = \alpha + \mathcal{O}\left(\frac{b}{N}\right)^{\frac{1}{4}}$$

## Algoritmo

INTERVALO SUB-MUESTREO( $\mathcal{S}_N, b, \alpha, M$ ):

```

1    $\theta \leftarrow \text{array}(M)$ 
2   for  $j \leftarrow 0$  to  $M$ :
3        $\mathcal{S}_N^j \leftarrow \text{submuestra}(\mathcal{S}_N, b)$ 
4        $\theta[j] \leftarrow d_H(\mathcal{S}_N, \mathcal{S}_N^j)$ 
5   return 2 quantile( $\theta, 1 - \alpha$ )

```

La distancia utilizada para calcular  $d_H(\mathcal{S}_N, \mathcal{S}_N^j)$  puede ser Fermat o euclídea

Eficiente: No es necesario computar el diagrama de persistencia

$$f_h(x) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{h^D} K\left(\frac{\|x - x_i\|_2}{h}\right)$$

evaluado en una grilla de puntos para construir el diagrama de persistencia.

**Computacionalmente muy costoso**

Puede omitir detalles sutiles de la topología del espacio original

Resulta más estable al ruido y datos atípicos

BOOTSTRAP DENSIDAD( $\mathcal{S}_N, h, \alpha, M$ ):

- 1  $\theta \leftarrow \text{array}(M)$
- 2  $\hat{f}_h \leftarrow \text{estimador de densidad de } f$   
basado en  $\mathcal{S}_N$
- 3  $\hat{\mathcal{P}} \leftarrow \text{diagrama de persistencia de } \hat{f}_h$
- 4 **for**  $j \leftarrow 0$  **to**  $M$ :
- 5      $\mathcal{S}_N^j \leftarrow \text{muestra bootstrap de } \mathcal{S}_N$
- 6      $\hat{f}_h^j \leftarrow \text{estimador de densidad de } f$   
basado en  $\mathcal{S}_N^j$
- 7      $\hat{\mathcal{P}}^j \leftarrow \text{diagrama de persistencia de } \hat{f}_h^j$
- 8      $\theta[j] \leftarrow W_\infty(\hat{\mathcal{P}}, \hat{\mathcal{P}}^j)$
- 9 **return**  $\text{quantile}(\theta, 1 - \alpha)$

# **Conjuntos de datos**

# Datos Sintéticos

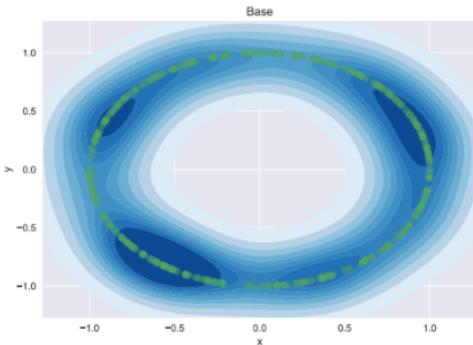
---

## Conjuntos de datos de la literatura

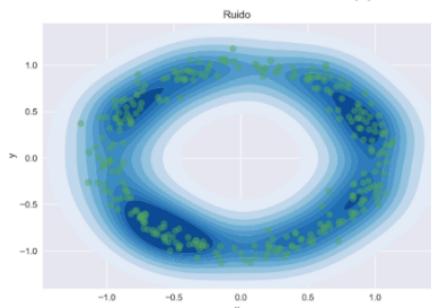
- Circunferencia Uniforme +Ruido +Outliers
- Circunferencia Gaussiana +Ruido +Outliers
- Anteojos +Ruido +Outliers

## Conjuntos de datos adicionales

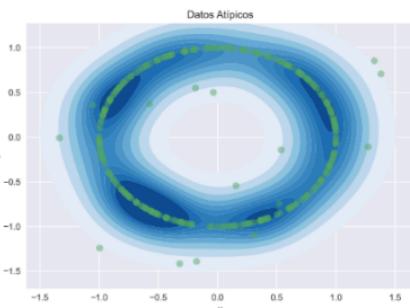
- Circunferencia en 3D
- Círculo Relleno con densidad variable en función de la distancia al centro



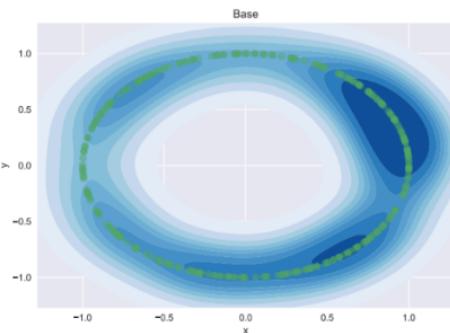
(a) Muestreo uniforme



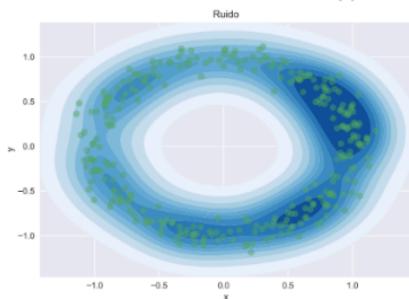
(b) Ruido agregado



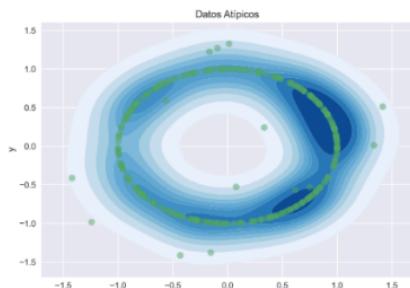
(c) Datos atípicos



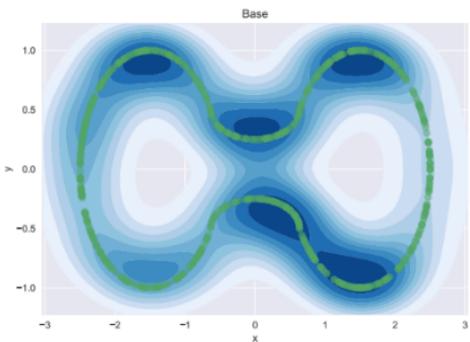
(a) Muestre uniforme



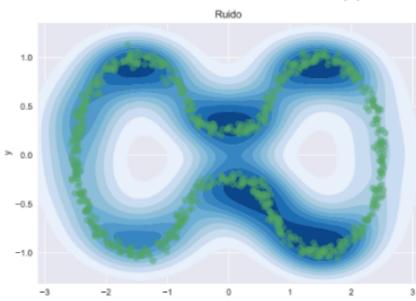
(b) Ruido agregado



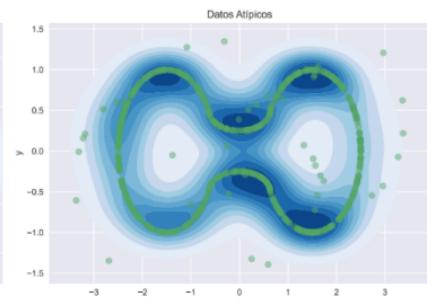
(c) Datos atípicos



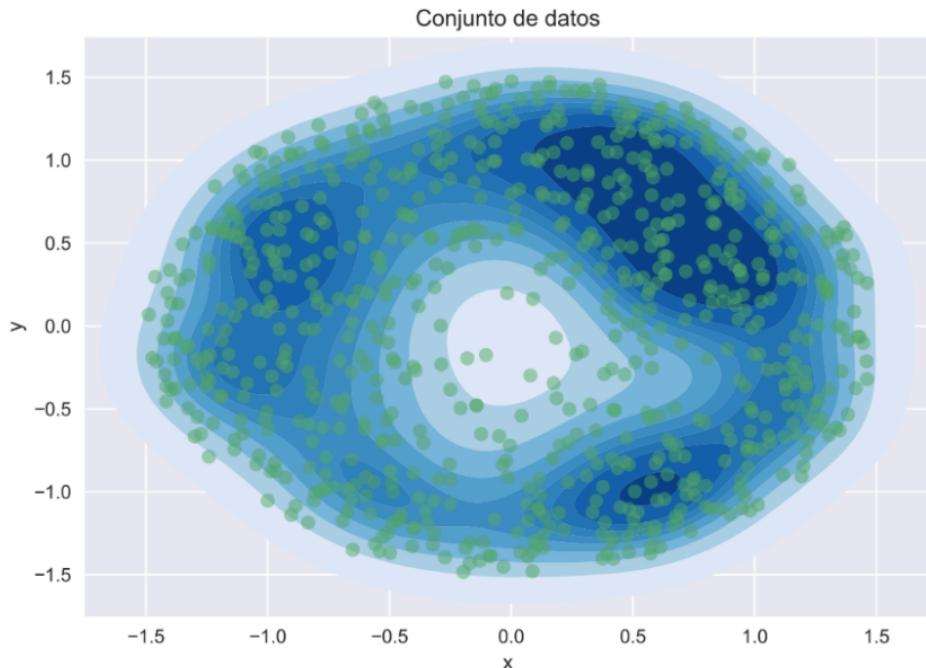
(a) Muestre uniforme



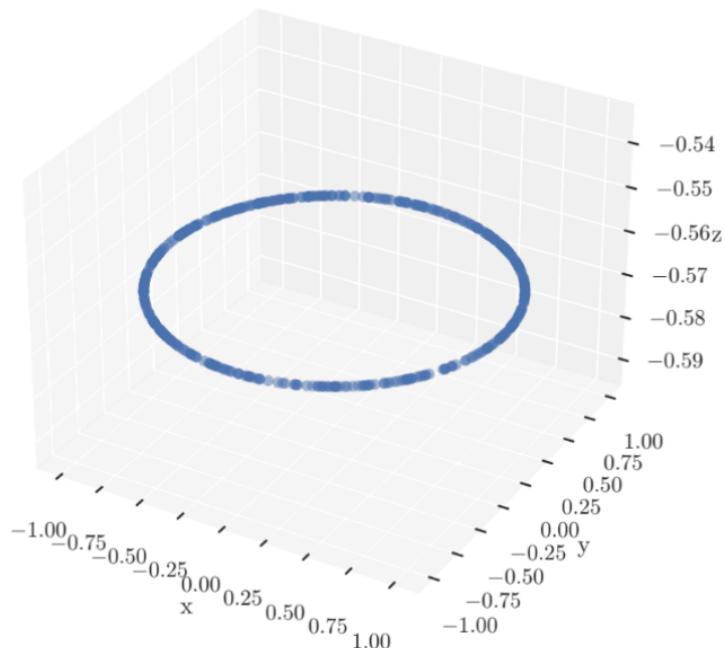
(b) Ruido agregado



(c) Datos atípicos



Circunferencia con  $D = 3$



## Soccer Video and Player Position Dataset

Svein Arne Pettersen<sup>1</sup>, Dag Johansen<sup>1</sup>, Håvard Johansen<sup>1</sup>, Vegard Berg-Johansen<sup>4</sup>,  
Vamsidhar Reddy Gaddam<sup>2,3</sup>, Asgeir Mortensen<sup>2,3</sup>, Ragnar Langseth<sup>2,3</sup>, Carsten Griwodz<sup>2,3</sup>,  
Håkon Kvale Stensland<sup>2,3</sup>, Pål Halvorsen<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>University of Tromsø, Norway

<sup>3</sup>University of Oslo, Norway

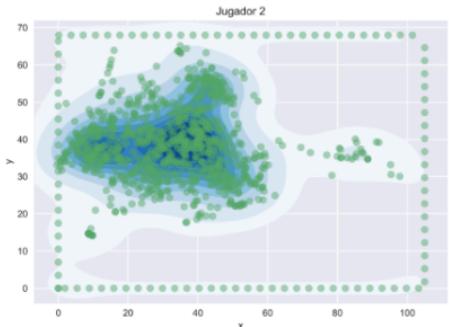
<sup>2</sup>Simula Research Laboratory, Norway

<sup>4</sup>Tromsø Idrettslag, Norway

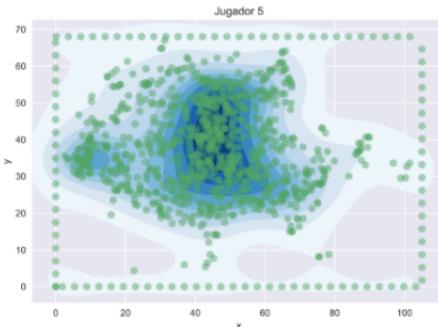
{svein.arne.pettersen, dag, haavardj}@uit.no      vegard.berg-johansen@til.no  
{vamsidhg, asgeirom, ragnarla, griff, haakonks, paalh}@ifi.uio.no

## Jugadores analizados

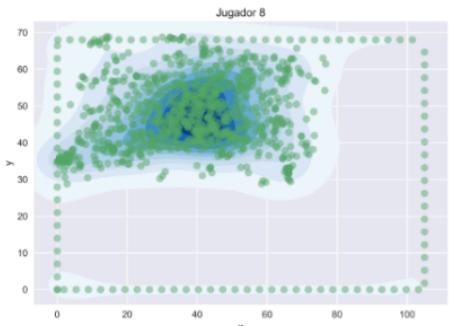
- Defensor Central
- Mediocampista
- Lateral Izquierdo
- Mediocampista



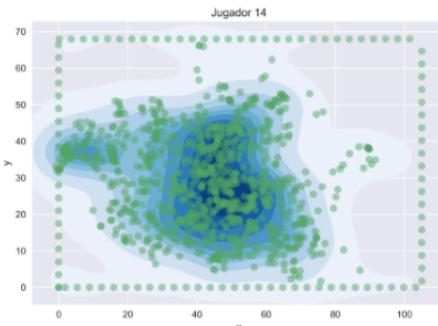
(a) Jugador 2: Defensor Central



(b) Jugador 5: Mediocampista



(c) Jugador 8: Lateral Izquierdo



(d) Jugador 14: Mediocampista

# **Resultados**

# Resultados

---

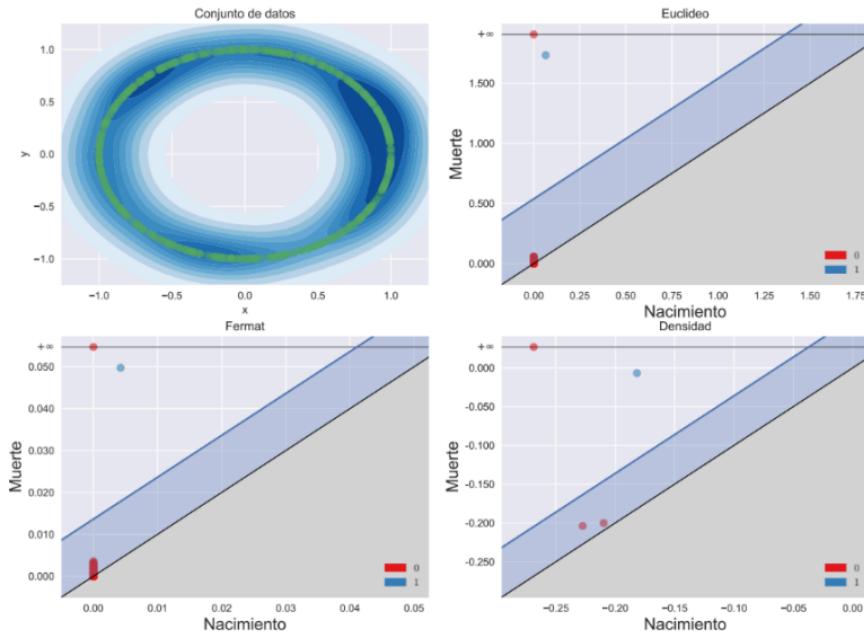
## Diagramas de Persistencia

- Sub-muestreo con distancia euclídea  $\times$  Todos los conjuntos de datos
- Sub-muestreo con distancia de Fermat  $\times$  Todos los conjuntos de datos
- Bootstrap con estimación por densidad  $\times$  Todos los conjuntos de datos

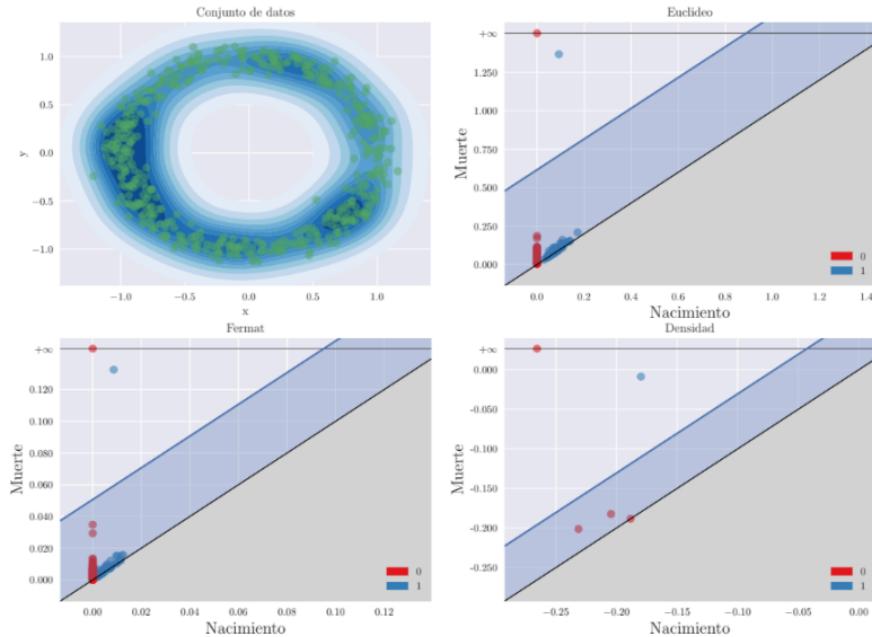
## Potencia

- $M = 50$  repeticiones de detección de agujeros  $\times$  Conjuntos de datos literatura y adicionales

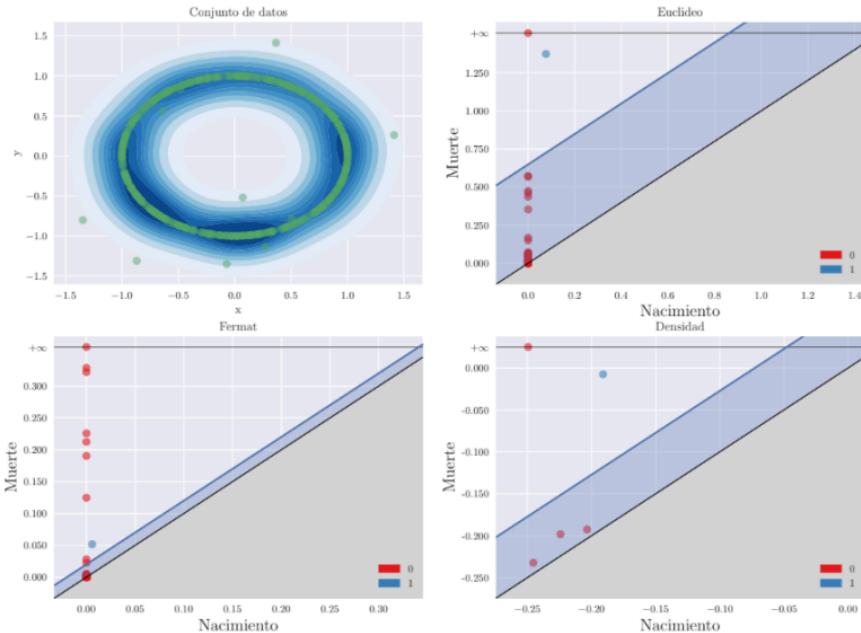
### Original



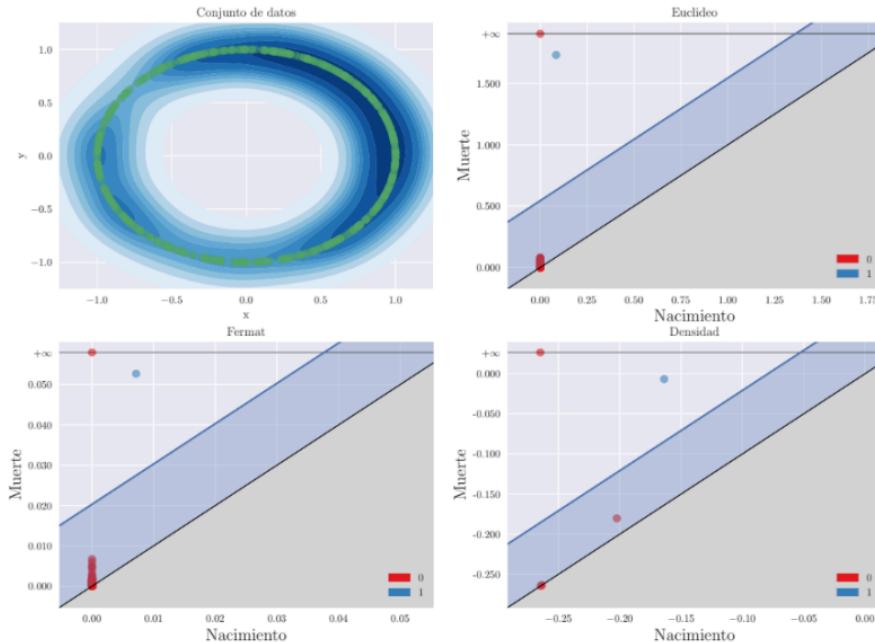
### Ruido



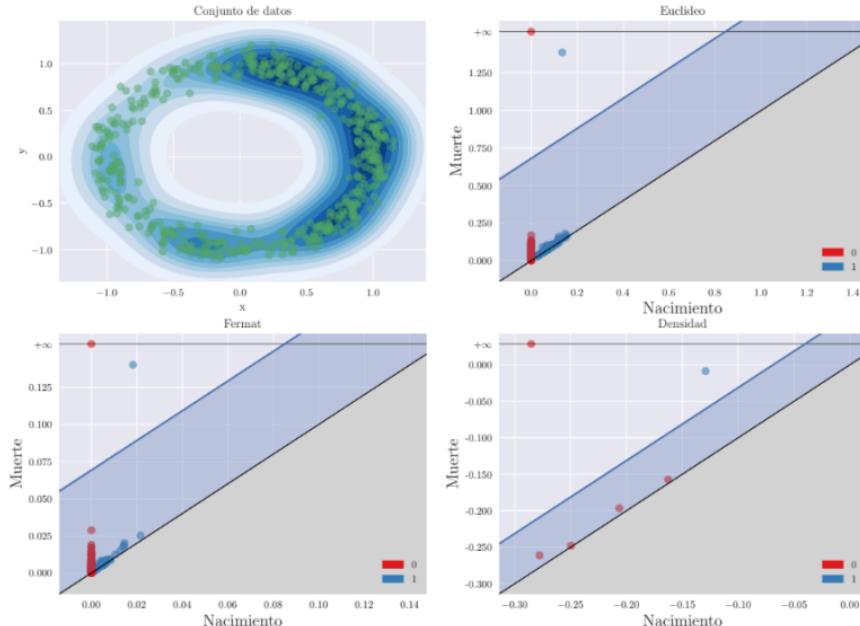
### Datos Atípicos



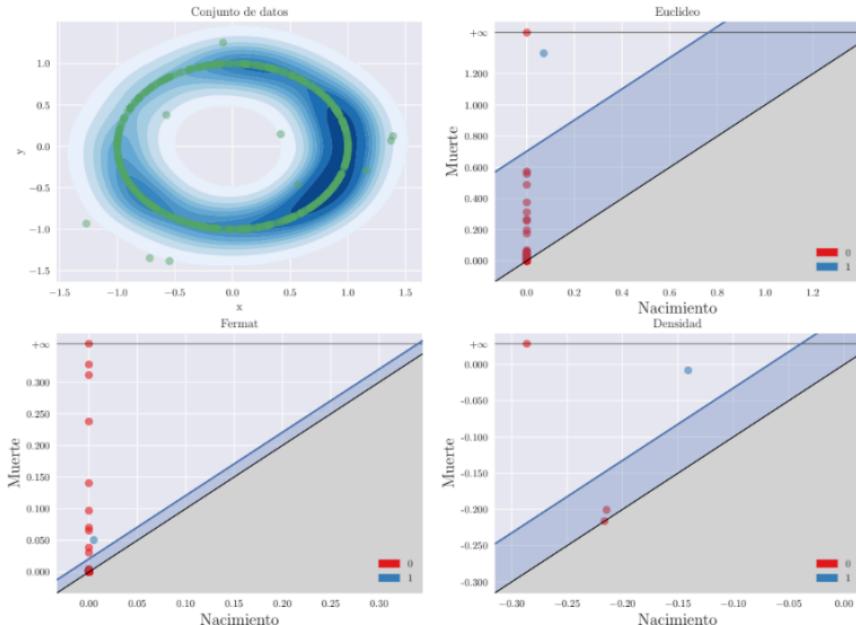
## Original



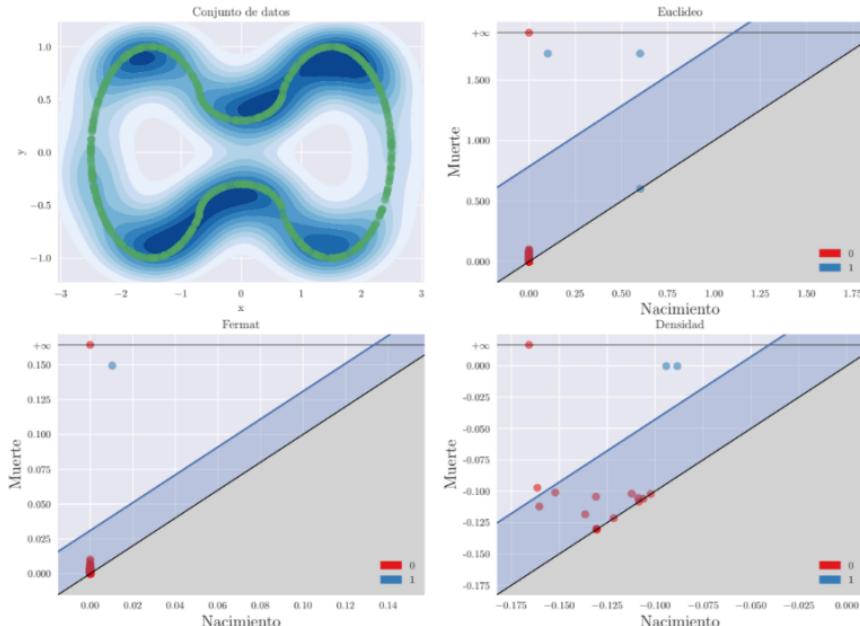
### Ruido



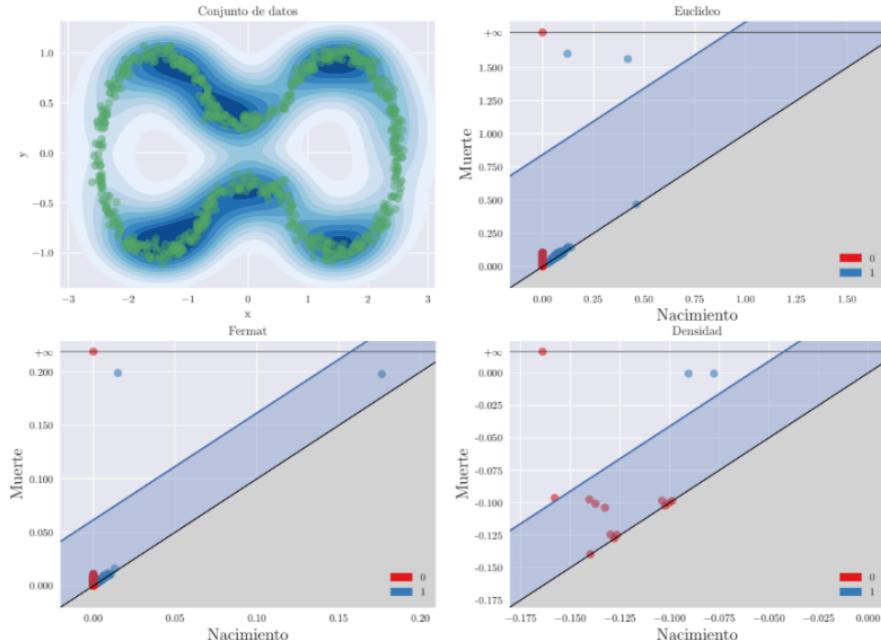
## Datos Atípicos



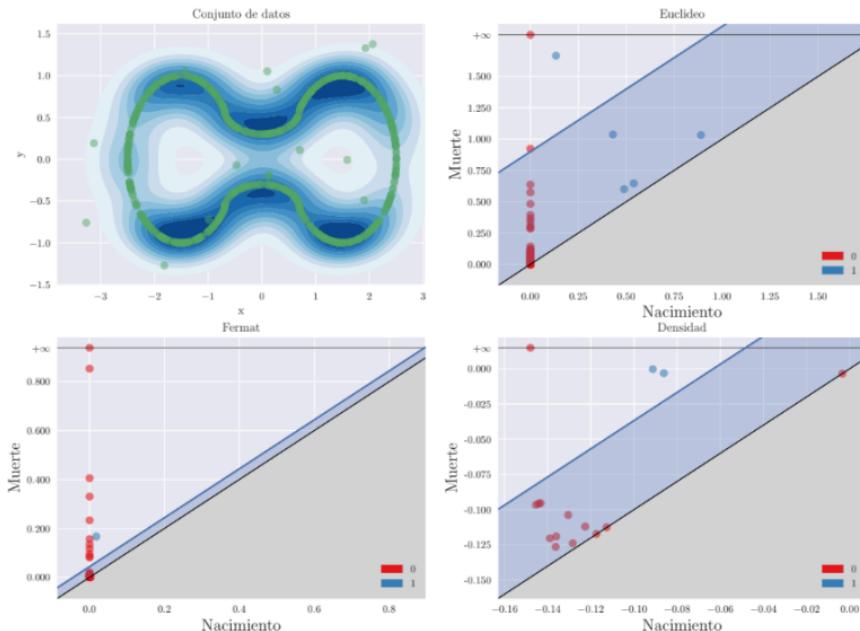
## Original



### Ruido

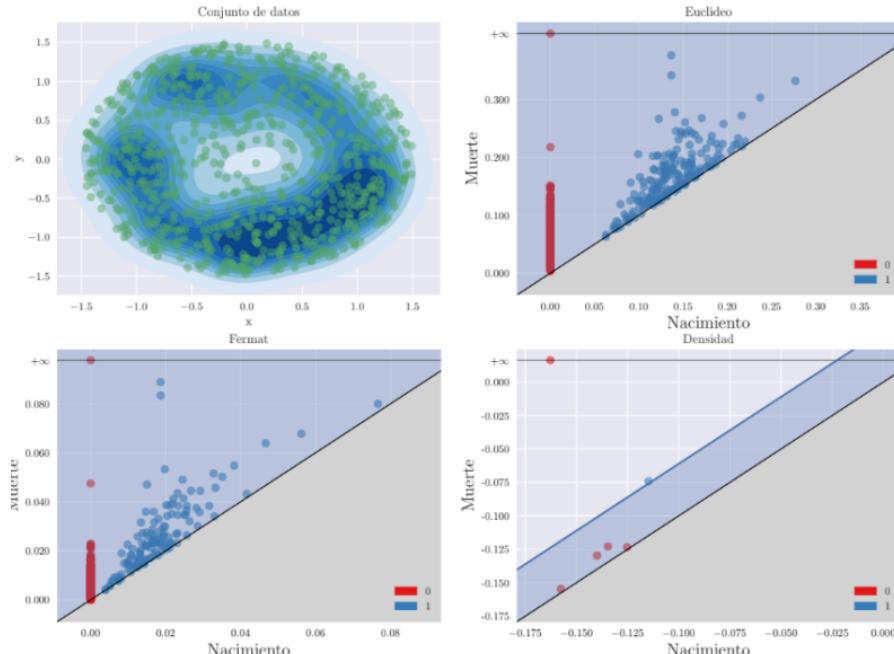


### Datos Atípicos

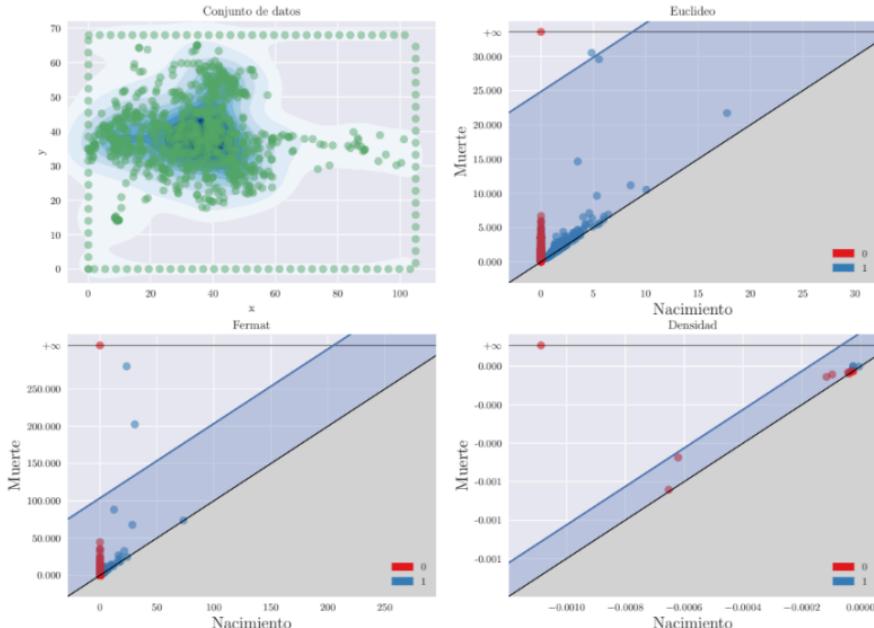


# Diagramas de Persistencia

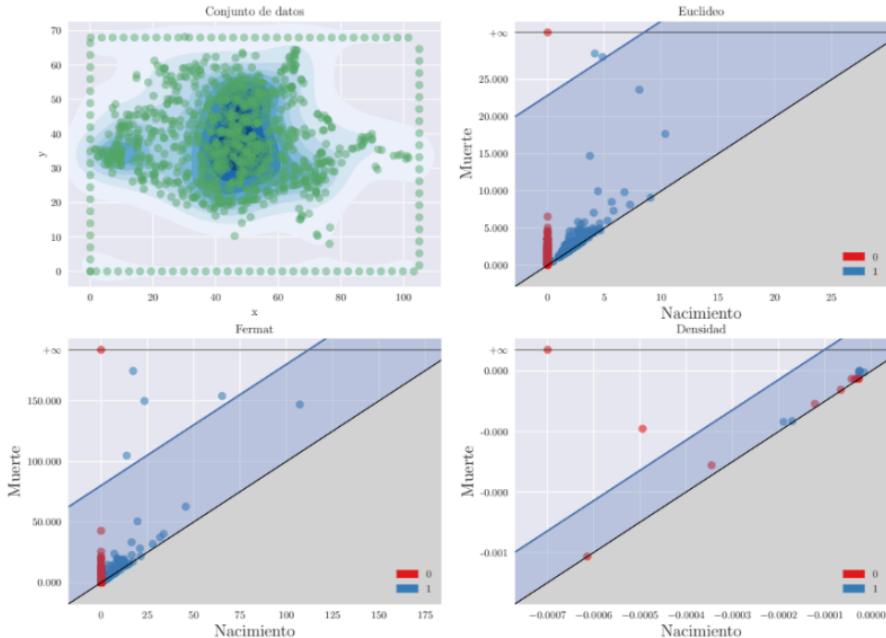
## Círculo Relleno



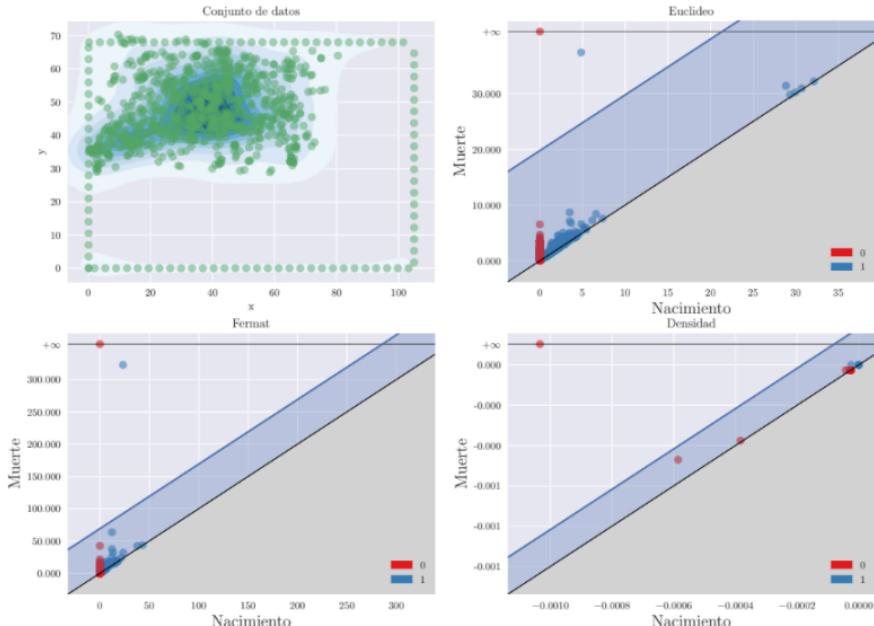
## Defensor Central (2)



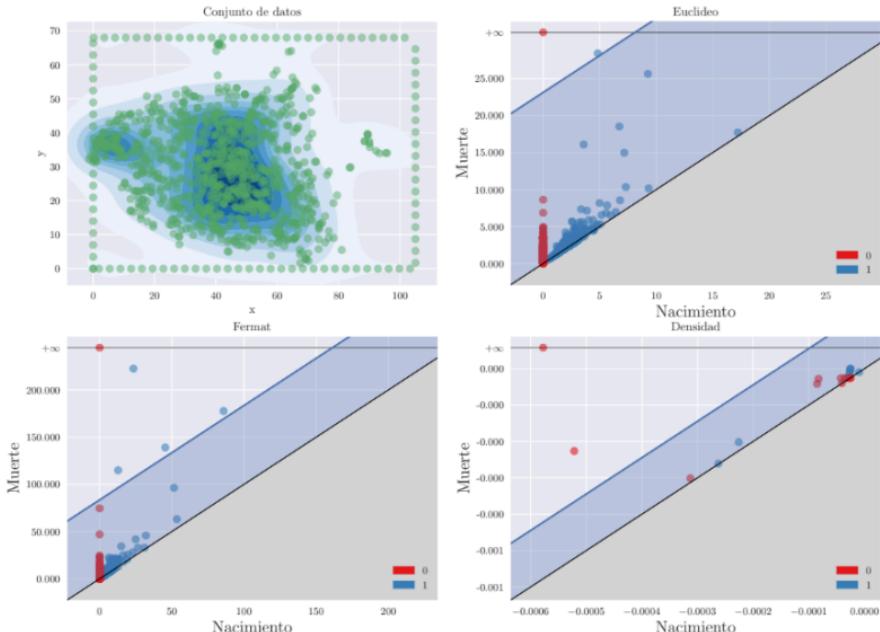
## Mediocampista (5)



## Lateral Izquierdo (8)



## Mediocampista (14)



## Dimensiones Superiores

---

	Método		
Dimensiones $D$	Euclídeo	Fermat	KDE
2	8.99	8.07	2.28
3	8.43	8.00	31.65
4	9.06	8.37	1501.22

KDE demora exponencialmente más tiempo para dimensiones superiores a  $D = 2$

		Circunferencia Uniforme	Circunferencia Gaussiana	Anteojos
Métodos	Agujeros			
Euclídeo	1	100%	100%	0
	2	0	0	100%
Fermat	1	100%	100%	100%
	2	0	0	0
Kde	1	100%	100%	0
	2	0	0	100%

		Circunferencia Uniforme	Circunferencia Gaussiana	Anteojos
Métodos	Agujeros			
Euclídeo	1	100%	100%	0
	2	0	0	100%
Fermat	1	100%	100%	98%
	2	0	0	2%
Kde	1	100%	100%	0
	2	0	0	100%

		Circunferencia Uniforme	Circunferencia Gaussiana	Anteojos
Métodos	Agujeros			
Euclídeo	0	0	0	8%
	1	100%	100%	80%
	2	0	0	12%
	3	0	0	0
Fermat	0	0	0	0
	1	98%	100%	84%
	2	2%	0	14%
	3	0	0	2%
Kde	0	0	0	0
	1	100%	100%	0
	2	0	0	100%
	3	0	0	0

Métodos	Agujeros	Detecciones	
		0	1
Euclídeo	0	100%	0
	1	0	0
Fermat	0	100%	0
	1	0	0
Kde	0	50%	50%
	1	50%	50%

El método KDE falla en detectar la ausencia de agujeros para el 50% de las corridas.

## **Conclusiones y Proximos Pasos**

## Conclusiones

---

- La distancia de Fermat demuestra ser una métrica robusta y efectiva para inferir la topología subyacente en conjuntos de datos, superando a los métodos propuestos en la bibliografía.
- El método de Fermat es menos sensible a problemas como la no uniformidad en la densidad de muestreo y el ruido gaussiano.
- Fermat detecta componentes conexas adicionales en presencia de datos atípicos, potencial uso como herramienta de detección de outliers.
- Fermat logra resultados consistentes con la inspección visual en conjuntos de datos reales.

## Próximos pasos

---

- Investigar el impacto de la varianza del ruido en los resultados.
- Explorar el comportamiento de los hiperparámetros, en particular para  $\lambda$  en la distancia de Fermat.
- Extender el estudio a conjuntos de datos reales más diversos.
- Profundizar en el uso de Fermat como herramienta de detección de datos atípicos.

**Preguntas?**