Trabajo Práctico 2
Si nos organizamos aprobamos todos...

Métodos Numéricos

Primer cuatrimestre - 2015

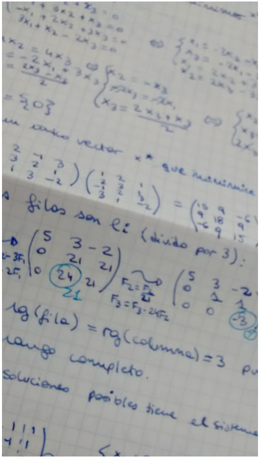
Antes de pasar al TP2...

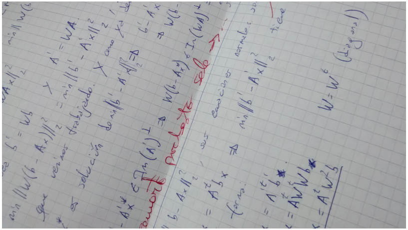
Donde estamos y qué vimos hasta ahora

- Errores numéricos.
- Diferencias finitas aplicado a sistemas complejos (TP1: EG, LU, sistemas banda)
- Refinamiento iterativo, numero de condición.
- *Denoising* aplicado a imágenes (Taller 1: Matriz SDP, Cholesky).

Trabajo Práctico 2

Reconocimiento de dígitos - Aplicaciones

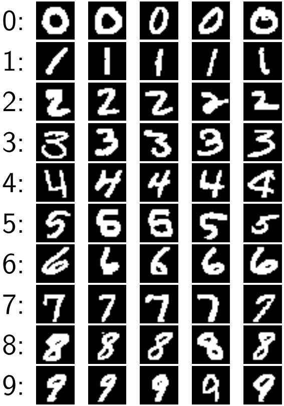




Trabajo Práctico 2

Reconocimiento de dígitos

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



Problema a resolver

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

Objetivo

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

Contexto

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

Idea general (caso particular reconocimiento dígitos)

- Consideramos cada imagen como un vector $x_i \in \mathbb{R}^m$, $m = 28 \times 28$, $i = 1, \ldots, n$. Para las imágenes en la base de datos, sabemos además a que clase pertenece.
- Cuando llega una nueva imagen de un dígito z, con el mismo formato, recorremos toda la base y buscamos aquella que minimice
$$\arg\min_{i=1,\ldots,n} \|z - x_i\|_2$$
Luego, le asignamos la clase del representante seleccionado.

Generalización

Considerar más de un vecino.

Reconocimiento de dígitos

Vecinos más cercanos: *kNN*

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

Reconocimiento de dígitos

kNN: Ejemplo de clasificación y definición de fronteras

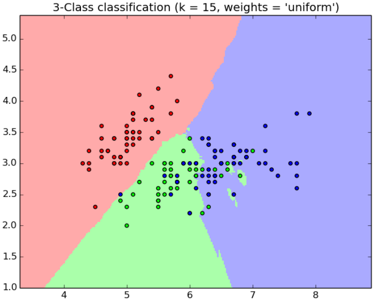


Imagen tomada de SCIKIT-LEARN.ORG

Algunos pros & cons

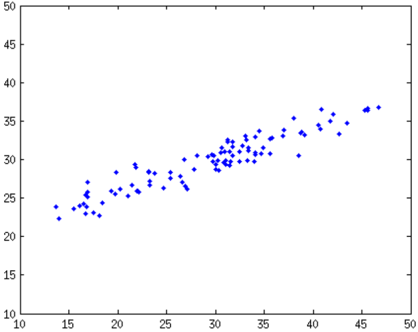
+ Es conceptualmente simple.
+ Funciona bien en general para dimensiones bajas, y puede ser utilizado con pocos ejemplos.
- Sufre de *La maldición de la dimensionalidad.*
- La clasificación puede ser lenta dependiendo del contexto.

Análisis de Componentes Principales

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

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

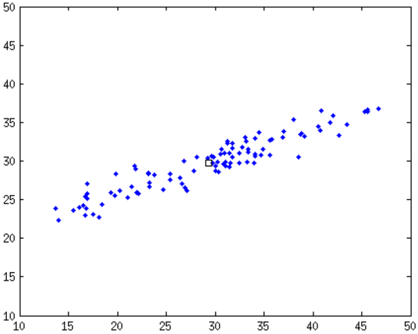
$$X = \begin{bmatrix} {x^{(1)}}^t \\ {x^{(2)}}^t \\ {x^{(3)}}^t \\ {x^{(4)}}^t \\ {x^{(5)}}^t \\ {x^{(6)}}^t \\ \vdots \\ {x^{(n)}}^t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 26.4320 & 27.7740 \\ 26.8846 & 26.5631 \\ 23.3309 & 26.6983 \\ 30.6387 & 31.5619 \\ 30.5171 & 30.8993 \\ 45.6364 & 36.6035 \\ \vdots &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



Análisis de Componentes Principales

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

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



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

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

Análisis de Componentes Principales

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

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

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

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

Análisis de Componentes Principales

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

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

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

Matriz de Covarianza:

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

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

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

¿Cómo expresar mejor nuestros datos?

Objetivo

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

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

Autovalores y Autovectores

Definición

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

Consideramos:

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

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

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

Diagonalización

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

Intuición

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

Observación

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

Teorema

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

Teorema

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

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

¿Cómo expresar mejor nuestros datos?

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

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

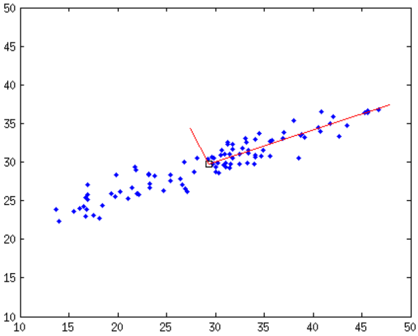
- M_X es simétrica, entonces existe V ortogonal tal que $M_X = VDV^t$.

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

¿Cómo expresar mejor nuestros datos?

Volvemos al ejemplo

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



Análisis de Componentes Principales

Resumen hasta acá

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

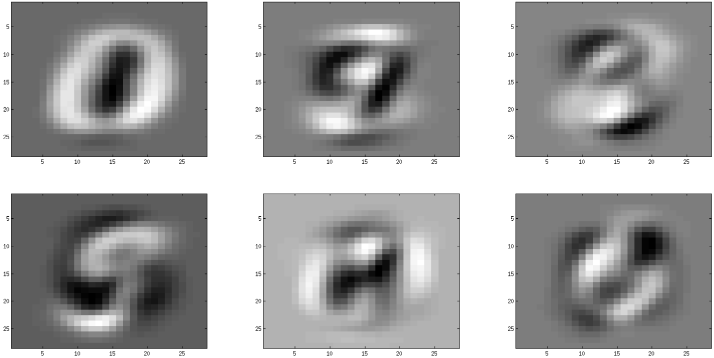
Propiedades del cambio de base

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

Reconocimiento de dígitos

Autodígitos (Eigendigits)

Los primeros 6 autovectores en V.



Reconocimiento de dígitos

Idea

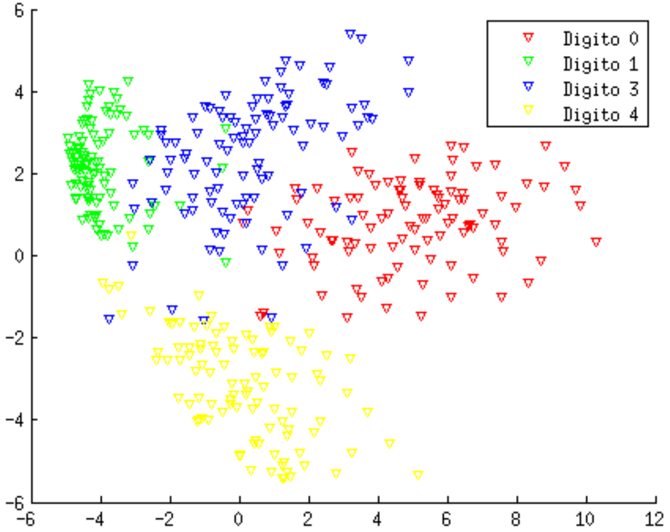
- Utilizar el cambio de base, transformando cada imagen convenientemente.
- Reducir la dimensión de los datos utilizando sólo algunas de las nuevas variables (eligiendo aquellas que capturan una fracción mayor de la varianza).

Procedimiento

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

Reconocimiento de dígitos

Transformación + Reducción ($k = 2$)



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

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

Pregunta:

Sugerencias para buscar a qué dígito pertenece?

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

- Como medimos la efectividad del método?

Reconocimiento de dígitos

Metodología de evaluación

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

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

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

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

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

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

Idea

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

Reconocimiento de dígitos

K-Fold Cross Validation

- Particionamos de forma aleatoria nuestra base de training en K conjuntos de igual tamaño.
- Se realizan K experimentos, cada uno de ellos reteniendo uno de los conjuntos para validación y utilizando los restantes $K - 1$ para entrenamiento.
- Suelen realizarse varias corridas para un mismo valor de K.

Reportamos valores promedio de efectividad en el reconocimiento para cada combinación de parámetros.

Sugerencia

Considerar el comando CVPARTITION de MATLAB.

¿Qué hay que hacer en el TP?

Objetivos generales

- Implementar el método *kNN*.
- Implementar el método de Análisis de Componentes Principales, y combinarlo con *kNN*.
- Experimentar variando: k, α, K, Analizar los resultados en términos de la tasa de efectividad aplicando *cross validation* sobre la base de training.
- Para encontrar la transoformación V, utilizar el *Método de la Potencia* + *Deflación*. (Clase teórica Miercoles próximo)

¿Qué hay que hacer en el TP?

Objetivos generales

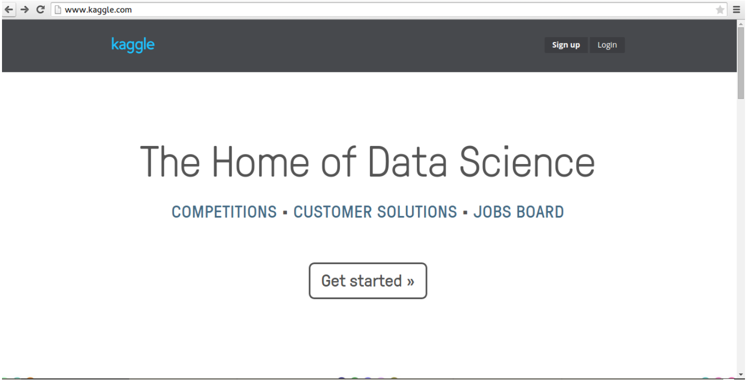
- Implementar el método *kNN*.
- Implementar el método de Análisis de Componentes Principales, y combinarlo con *kNN*.
- Experimentar variando: k, α, K, Analizar los resultados en términos de la tasa de efectividad aplicando *cross validation* sobre la base de training.
- Para encontrar la transoformación V, utilizar el *Método de la Potencia* + *Deflación*. (Clase teórica Miercoles próximo)

Algunas (posibles) preguntas y dificultades

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

Por último...

Competencia activa en KAGGLE.COM



Por último...

Competencia activa en KAGGLE.COM

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

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

Cronograma sugerido

- Viernes 1 de Mayo: Lectura base de training, *kNN*, *cross validation*.
- Viernes 8 de Mayo: Método de la potencia, PCA, primeros experimentos.

Fecha de entrega

- Formato electrónico: Jueves 14 de Mayo de 2015, hasta las 23:59 hs., enviando el trabajo (informe+código) a `metnum.lab@gmail.com`.
- Formato físico: Viernes 15 de Mayo de 2015, de 17:30 a 18:00 hs.