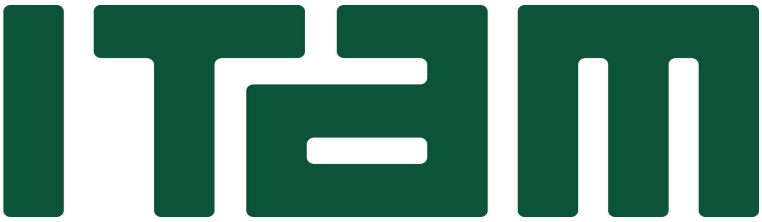
Instituto Tecnológico Autónomo de México



Optimización del cociente de la traza para Máquinas de Aprendizaje

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

Lic. Matemáticas Aplicadas

PRESENTA

Salvador García González

ASESOR

Zeferino Parada García

MÉXICO, D.F. 2016

"Con fundamento en los artículos 21 y 27 de la Ley Federal de Derecho de Autor y como titular de los derechos moral y patrimonial de la obra titulada "**Optimización del cociente de la traza para Máquinas de Aprendizaje**", otorgo de manera gratuita y permanente al Instituto Tecnológico Autónomo de México y a la biblioteca Raúl Baillères Jr., autorización para que fijen la obra en cualquier medio, incluido el electrónico, y la divulguen entre sus usuarios, profesores, estudiantes o terceras personas, sin que pueda percibir por tal divulgación una prestación"

Salvador García González

_____

Fecha

_____

Firma

Índice general

Índice de figuras

Capítulo 1

Introducción

Esta tesis aborda el tema del Análisis Discriminante de Fisher. Este problema busca encontrar la proyección de los datos a un espacio p-dimensional que maximice el cociente de la matriz de dispersión entre-clases y la matriz de dispersión intra-clases. La solución era considerada computacionalmente costosa de encontrar, por lo que era remplazada por versiones simplificadas del problema.

En este texto, se aborda una propuesta de solución que es computacionalmente accesible. El costo es comparable con otros dos problemas de clasificación lineal que son mencionados en la literatura estadística, el análisis discriminante y la regresión logística multinomial. Las bases de datos que se utilizaron para comparar los métodos, fueron JAFFE y MNIST.

El segundo capítulo ubica el problema en el contexto del aprendizaje de máquina. Como primera instancia, se presenta dentro de los métodos de aprendizaje supervisado, para después ubicarlo en los problemas de clasificación lineal. Estos métodos pueden pertenecer a alguino de los siguientes tres grupos: métodos discriminativos, métodos generativos y funciones discriminantes. Al final del capítulo se introducen los criterios de selección, incluyendo el error de clasificación y la pérdida esperada.

El tercer capítulo profundiza en el Discriminante Lineal de Fisher. Se presenta la dispersión interna, la dispersión entre clases y la dispersión total. Después, se encuentra la solución cuando el espacio a proyectar es de dimensión 1 y se

generaliza a p dimensiones. Al final del capítulo, se demuestra que el problema es equivalente a un problema escalar, por lo que se puede expresar en términos de una $f(\rho)$, una ρ unidimensional. Enseguida, se dan las condiciones de existencia de la solución y un intervalo en donde se encuentra el valor óptimo.

El cuarto capítulo introduce el método Newton-Lanczos para encontrar la ρ óptima. Se da una breve presentación de la teoría que sustenta a los métodos de Lanczos, su costo computacional y las ventajas que tienen sobre los métodos tradicionales. En seguida de esto, se presenta la propuesta de solución: El método Newton-Lanczos. Este requiere el cómputo de la derivada de $f(\rho)$, por lo que se se calcula en este capítulo. Al final, se proporcionan las condiciones necesarias de optimalidad.

El quinto capítulo presenta los experimentos numéricos sobre las bases utilizadas. Se da una breve introducción de su preprocesamiento, para después continuar con un ejemplo donde se proyecta a una dimensión de tamaño 20. Al final del capítulo se compara el desempeño con el análisis discriminante lineal y con la regresión logística mulitinomial para diferentes p y se mide el tiempo de cómputo.

Para todo el proyecto se utilizó el lenguaje de programación R y la paquería *ProjectTemplate*, que sirve para gestionar proyectos de análisis. Para asegurar la portabilidad y reproducibilidad del proyecto, se utilizó la paquería *Packrat*. Por último, para los cálculos, se utilizó la librería de *LAPACK (Fortran)* en su versión para OS X 10.11.4 (*liblapack.dylib)*.

Capítulo 2

Máquinas de Aprendizaje

El Aprendizaje de Máquina toma como base dos áreas de investigación: la Ciencia de la Computación y la Estadística. De la primera, retoma las preguntas: ¿Cómo se pueden construir máquinas que resuelvan problemas? Y ¿Qué problemas son tratables o intratables? De la segunda, toma las preguntas: ¿Qué puede ser inferido de los datos? ¿Bajo que supuestos del modelo? Y ¿Con qué confiabilidad? [8]. El esfuerzo por resolver estas preguntas da como resultado una disciplina enfocada a construir teorías estadístico-computacional de los procesos de aprendizaje.

2.1. Procesos de aprendizaje

Se dice que una máquina "aprende"dada una tarea (T), una medición del rendimiento (R) y un tipo de experiencia (E) si el sistema mejora confiablemente su rendimiento (R) en la tarea (T) dada la experiencia (E) [8]. Es decir, se modela una estructura con los datos proporcionados de manera que el rendimiento en la tarea mejora conforme más información recibe. La diversidad de las tareas, así como el campo de aplicaciones es muy diverso, por ejemplo:

- *Clasificación de spam/no-spam*, en el que (E) son los correos, (T) el clasificar correctamente el *spam* y (R) el porcentaje de correos correctamente clasificados.

- *Reconocimiento/Clasificación facial*, en el que (E) son los rostros de distintas personas, (T) el reconocimiento o clasificación de los rostros y (R) el porcentaje de rostros correctamente reconocidos o clasificados.

Los procesos de aprendizaje tienen diversas aplicaciones y distintos supuestos, por lo que han surgido clasificaciones para analizarlos en conjunto. La clasificación que se tomó en este texto es la propuesta por T. Hastie [7], la cual divide a los métodos en dos grupos: aprendizaje supervisado y aprendizaje no supervisado. El primero, asume la presencia de una variable de salida que actúa como guía en la construcción de la estructura. Ejemplos de este es la regresión lineal, los árboles de decisión y las máquinas de soporte vectorial. Por otra parte, el aprendizaje no supervisado solo cuenta con la información de las variables independientes; por ejemplo, análisis de clústers, reglas de asociación y reducción dimensional.

Después de esta primer clasificación, se subclasifica a los métodos de aprendizaje supervisado de acuerdo al tipo de variable de salida (Figura 1.1). [1] Cuando se trata de una variable cuantitativa recibe el nombre de regresión, mientras que en el caso de cualitativas se le llama clasificación. Por otra parte, el aprendizaje no supervisado tiene dos ramas en las que el texto hace énfasis [7]. Clusterización en el caso que se desee asignar un grupo a cada individuo, de manera que los grupos sean homogéneos entre sí; o bien, reducción dimensional cuando solamente se desea proyectar a los individuos en un espacio de menor dimensión, de manera que se cumplan características especiales en dicho subespacio.

En esta tesis se tratarán principalmente problemas de aprendizaje supervisado, haciendo especial énfasis a problemas de clasificación. Al ver el problema a tratar se elige un método para resolverlo; por ejemplo, para problemas de clasificación se utiliza comúnmente la Regresión Logística, el Análisis Discriminante Lineal y las Máquinas de Soporte Vectorial. En cambio, para problemas de regresión son comúnmente usados las regresiones lineales y no lineales. También hay otros métodos que sirven para ambas finalidades, como lo son los bosques aleatorios.

[1] A lo largo del texto se usará indiferentemente variable de entrada como "input" o variable independiente y variable de salida como "output" o variable dependiente

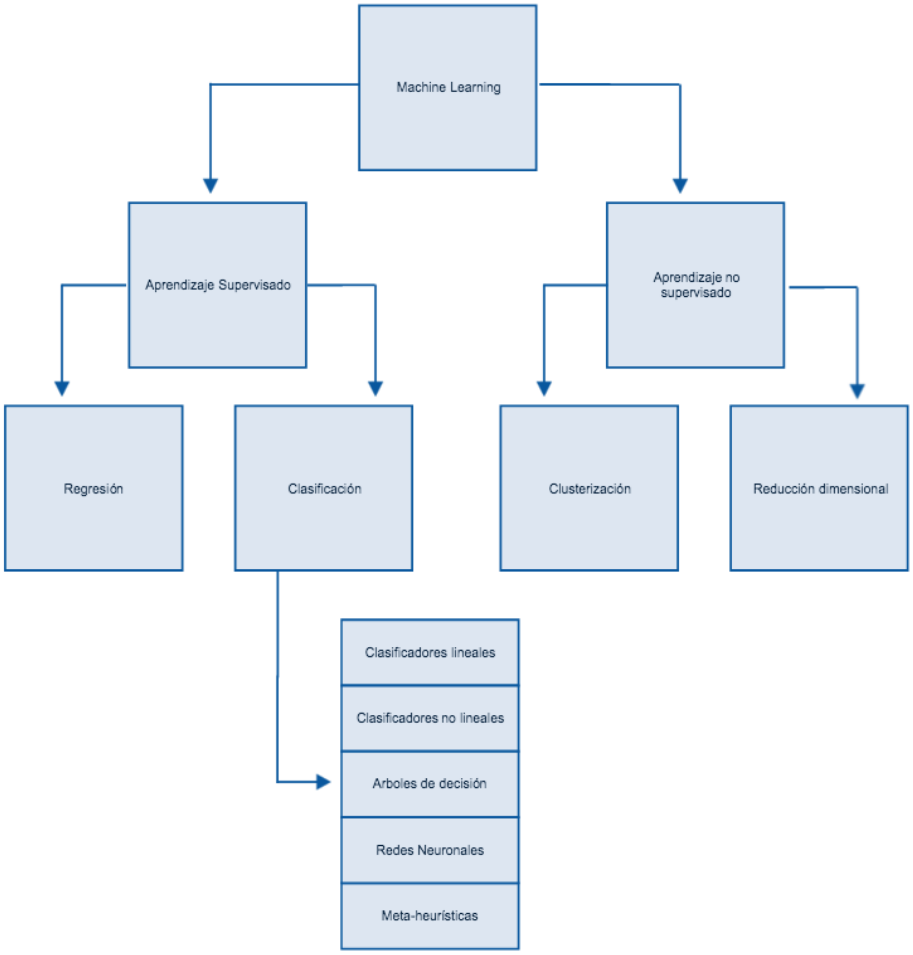


Figura 2.1: Distintos enfoques para resolver problemas de clasificación en el área de Aprendizaje de Máquina.

2.1.1. Fase de inferencia y fase de decisión

Como primer paso, una vez elegido el método, se selecciona el criterio de penalización de los errores. Este debe ser elegido de manera acorde al problema planteado; por ejemplo, en el caso de una regresión lineal se desea que la penalización sea mayor en los datos que queden muy lejos del ajuste lineal, por lo

que se escoge la norma euclidiana [2] $||x||_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + ... + x_n^2}$. En cambio, en un problema de clasificación se escoge una matriz de penalización o matriz de pérdida, en la que se establece el costo por cada tipo de error de clasificación.

Como segundo paso, se procede con la fase de inferencia, en la que se ajustan los estimadores de los parámetros del modelo elegido de acuerdo a los datos que se tienen, esto con el fin de hacer la inferencia de las distribuciones poblacionales. Como tercer y último paso, se procede a la fase de decisión, en la que se busca encontrar un criterio de decisión que minimice la pérdida esperada [1]. Por ejemplo, para los problemas de clasificación es muy claro determinar estas dos fases: la primera, se lleva a cabo al determinar la distribución conjunta de clases de pertenencia e individuos; mientras que la segunda, se realiza al determinar las fronteras de decisión basadas en estas probabilidades. Por otra parte, para los problemas de regresión tradicional, ambas fases se realizan al mismo tiempo, ya que al calcular los estimadores de los parámetros se utiliza el método de mínimos cuadrados que minimiza la penalización cuadrática.

2.2. Clasificación con modelos lineales

Se comenzará definiendo la nomenclatura utilizada en esta tesis. Las clases se denotan con la v.a. $k \in C$, con $C = \{k = k_j : j = 1...K\}$ el conjunto de posibles clases a clasificar y $n(C) = K$ la cardinalidad del conjunto. Para los individuos se define la v.a. $x \in \mathbb{R}^m$. De esta manera, sea $p(x, k)$ [3] la distribución conjunta de individuos x con clases k.

Para la fase de inferencia se utilizan los datos de entrenamiento, en los que se distingue a los individuos y a sus clases de pertenencia $x_i \in \mathbb{R}^m$ y $y_i \in \mathbb{R}$ respectivamente, con $i = 1, ..., N$. Agrupándolos en matrices, sea $X \in \mathbb{R}^{Nxm}$ la matriz de individuos y $Y \in \mathbb{R}^{Nx1}$ el vector de clases de pertenencia asociada a cada individuo en la matriz. Una vez hecha la inferencia, se pueden encontrar clases predichas para los individuos x_i, a las cuales se denotará como $\widehat{y_i}$ y $\widehat{Y}$ a

[2] Además de que las estimaciones hechas a través de mínimos cuadrados bajo ciertos supuestos tienen propiedades deseables de los estimadores: Que sean insesgados y de varianza mínima

[3] Teniendo esta probabilidad se pueden calcular fácilmente las probabilidades condicionales $p(k|x)$ y $p(x|k)$

la respectiva matriz.

Tipo	Definición	Valores	Descripción
Entero	K	$K \in \mathbb{N}$	Número de posibles clases.
Entero	N	$N \in \mathbb{N}$	Número de individuos en los datos.
Entero	N_k	$N_k \in \mathbb{N}$	Número de individuos en la clase k.
Entero	m	$m \in \mathbb{N}$	Dimensión de los individuos.
v.a.	k	$k \in C$	Variable aleatoria de las clases.
v.a.	x	$K \in \mathbb{R}^m$	Variable aleatoria de los individuos.
Conjunto	C	$k_j : j = 1...K$	Conjunto de posibles clases.
Dato	x_i	$x_i : i = 1...N$	Vector columna del individuo i.
Dato	y_i	$y_i : i = 1...N$	Dato de clase real del individuo i.
Dato	$\widehat{y_i}$	$\widehat{y_i} : i = 1...N$	Dato de clase predicha del individuo i.
Dato	X	$X^T = [x_1\|...\|x_N]$	Matriz de individuos.
Dato	Y	$Y^T = [y_1\|...\|y_n]$	Vector de clases reales de infividuos.
Datos	$\widehat{Y}$	$\widehat{Y}^T = [\widehat{y_1}\|...\|\widehat{y_n}]$	Vector de clases predichas de infividuos.
Distribución	$p(x, k)$		Distribución conjunta de individuos y clases

2.2.1. Fase de inferencia

Como se mencionaba antes, en fase de inferencia se busca encontrar la distribución conjunta de la muestra con cada una de las clases, es decir $p(x, k)$. La dificultad en estimar esta distribución aumenta conforme la dimensionalidad

de x crece y conforme el número de clases aumenta [4]. Esto es debido a que se comienza a requerir un conjunto de datos mayor para poder estimar cada punto de $p(x, k)$. Por esta razón, muchas veces es suficiente encontrar directamente $p(k|x)$; es decir, dadas las características del individuo, encontrar que tan probable es que pertenezca a cada clase. Por otro lado, en la fase de decisión se encuentra la asignación óptima dependiendo de la matriz de pérdida que se seleccionó y de las probabilidades calculadas (ya sea la distribución conjunta o las condicionales).

Los modelos propuestos para resolver la fase de inferencia se pueden agrupar de la siguiente manera [1]:

1. **Modelos Probabilísticos Generativos.** Plantean resolver el problema de inferencia con el objetivo de determinar $p(x, k)$; es decir, la distribución conjunta de individuos y clases. Una vez obtenida la distribución, se puede usar para calcular $p(x|k)$, $p(k|x)$, $p(x)$ o $p(k)$. Para este enfoque se tienen que hacer supuestos acerca de la distribución de x o $x|k$, o bien, tener un conjunto de entrenamiento muy grande que permita inferir acertadamente $p(x, k)$.

   Tomando propiedades básicas de probabilidad, se pueden calcular las distribuciones necesarias:

$$p(x, k) = p(x|k)p(k) \tag{2.1}$$

$$p(x, k) = p(k|x)p(x) \tag{2.2}$$

$$p(k|x) = \frac{p(x|k)p(k)}{p(x)} \tag{2.3}$$

$$p(x) = \sum_{k} p(x|k)p(k) \tag{2.4}$$

$$p(k) = \sum_{x} p(k|x)p(x) \tag{2.5}$$

[4] Para poder estimar la distribución conjunta, el número de clases debe ser menor que el conjunto de individuos

En caso de no tener suficientes datos para inferir directamente esta distribución; o bien, de no tener conocimiento de la estructura de la distribución de x, se dan preferencia a los modelos discriminativos o modelos de funciones discriminantes.

Ventajas [1]:

- Puede ser útil para detectar datos atípicos, ya que al asumir una distribución de x, se puede determinar qué puntos son poco probables de suceder. De esta manera, se puede encontrar qué predicciones podrían fallar.

Desventajas [1]:

- Se debe tener información acerca de la distribución de x.
- Inferir directamente de los datos la distribución $p(x, k)$ puede ser muy demandante cuando la dimensionalidad de x es alta.
- Si solo se requiere hacer clasificación, puede ser ineficiente encontrar toda la distribución conjunta.

2. **Modelos Probabilísticos Discriminativos.** Primero, se resuelve el problema de inferencia para determinar $p(k|x)$ con los datos, y después se procede a la fase de decisión para asignar la clase de pertenencia.

   Ventajas: [1]

   - Solo se necesita estimar $p(k|x)$ y no toda la distribución conjunta.

   Desventajas: [1]

   - No se tiene la detección de atípicos presentados por el primer enfoque.

3. **Función Discriminante** Plantea encontrar una función $\widehat{f} : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$, tal que clasifique directamente a cada individuo en una clase k, de esta manera se define $\widehat{Y} = \widehat{f}(x)$.

   Ventajas: [1]

   - Se combina la fase de inferencia y la fase de decisión en una sola función $\widehat{Y} = \widehat{f}(x)$.

   Desventajas: [1]

- Ya no se cuenta con las probabilidades posteriores $p(k|x)$, por lo que ya no se puede analizar una a una la probabilidad de pertenencia del individuo x a cada una de las clases.

2.2.2. Fase de decisión

Para la fase de decisión es conveniente analizar tres definiciones: "Regiones de decisión", "Fronteras de decisión" y "Funciones discriminantes". Las primeras dos reciben este nombre porque buscan dividir el espacio al que pertenecen los datos en regiones distintas y excluyentes. Cada una de estas regiones R_k clasifica al individuo x en una única clase k. En cambio, las fronteras de decisión son las zonas que delimitan una región de las demás; es decir, en ellas (o en sus cercanías) es indiferente qué clase elegir. Por esta razón, es conveniente analizar los datos que quedan cercanos para poder hacer una elección, tomando en cuenta la naturaleza del problema. Por último, las Funciones Discriminantes, nos permiten comparar directamente qué tan verosímil es que un individuo pertenezca a una clase u a otra.

Debido a la finalidad del texto se proponen fronteras lineales [5], ya que al igual que una regresión lineal, es la base que ejemplifica modelos más complejos. Por este motivo, se mostrarán distintas opciones para construir las regiones y fronteras que se adecuan a los tres enfoques distintos: modelos probabilísticos generativos, modelos probabilísticos discriminativos y funciones discriminantes.

Para asegurar la linealidad en las fronteras, se debe hacer un análisis que garantice esta propiedad. Se ejemplificará con un caso de dos clases: k_i y k_j con c_i y c_j constantes mayor que cero que representa los costos asociados a la elección de cada clase, entonces la frontera de decisión es:

$$c_j p(k = k_j|x) - c_i p(k = k_i|x) = 0 \tag{2.6}$$

De otra manera, si $c_j p(k = k_j|x) > c_i p(k = k_i|x)$ o viceversa, entonces se clasificará hacia k_j y k_l, respectivamente. Tomando un resultado presentado por T. Mitchell [8], si se aplica una función monótona de $p(k, x)$, la linealidad

[5] Las fronteras de decisión pueden tomar formas irregulares, pero en general su forma depende del método de clasificación elegido

de las fronteras de decisión se mantiene. En este caso, se toma la función de logaritmo $log()$:

$$log(c_j p(k = k_j|x)) = log(c_i p(k = k_i|x))$$

$$log\frac{c_j p(k = k_j|x)}{c_i p(k = k_i|x)} = 0 \tag{2.7}$$

El lado izquierdo de esta última ecuación es conocido como razón de momios (log odd). Cuando es una función lineal con respecto a x, mantiene la linealidad de la frontera:

$$log\frac{c_j p(k = k_j|x)}{c_i p(k = k_i|x)} = \beta_0 + x^T\beta_1 \tag{2.8}$$

2.3. Métodos de clasificación lineales

En la fase de inferencia se busca construir la distribución $p(x, k)$, la cual será usada en la fase de decisión para tomar un criterio óptimo de clasificación. En la sección 2.2 se mostraron los distintos enfoques que se toman para hacer esta inferencia. Recapitulando, para modelos generativos se escoge $\widehat{Y}(x) = \widehat{f}(p(x, k))$; para modelos discriminativos $\widehat{Y}(x) = \widehat{f}(p(k|x))$ y para funciones discriminantes se escoge $\widehat{Y}(x) = \widehat{f}(x)$. En los dos primeros casos se ve que la función f toma como entrada distribuciones concernientes a x y k, pero en el tercer caso, solamente toma como entrada a x. En esta sección se ejemplificarán los 3 métodos con técnicas sencillas. Para el enfoque Probabilístico Generativo se empleará el Análisis Discriminante Lineal, para el Probabilístico Discriminativo la Regresión Logística y para la función discriminante, el Discriminante Lineal de Fisher.

En los siguientes tres ejemplos se explica cómo se realiza la inferencia de las distribuciones, para después demostrar la linealidad en las fronteras. Como se explica en la sección 2.2.2, si se asegura que (2.8) es lineal con respecto a x, entonces se garantiza la linealidad de estas. En la Regresión Logística se ejemplificará el procedimiento para n clases. Para los demás se supondrá el caso de la frontera entre dos clases.

2.3.1. Modelos Discriminativos: Regresión Logística

Inferencia de la distribución $p(k|x)$

Para la fase de inferencia, se calculan las probabilidades posteriores de pertenecer a cada grupo j, de manera que:

$$\sum_{j=1}^{K} p(k = k_j|x) = 1 \tag{2.9}$$

Linealidad de la frontera

Para obtener la estimación de las K distribuciones de probabilidad $p(k = k_j|x)$,se parte de la ecuación (2.8) y se supone que todas las fronteras son lineales.

$$log\frac{p(k = k_1|x)}{p(k = k_K|x)} = \beta_{1.0} + \beta_1^T x$$

$$log\frac{p(k = k_2|x)}{p(k = k_K|x)} = \beta_{2.0} + \beta_2^T x$$

$$\vdots$$

$$log\frac{p(k = K-1|x)}{p(k = k_K|x)} = \beta_{(K-1).0} + \beta_{(K-1)}^T x$$

Con estas ecuaciones se crea un sistema que cuenta con K variables $p(k = k_j|x)$ y $K - 1$ ecuaciones, lo cual, añadiendo la restricción (2.9) se puede despejar cada probabilidad:

$$p(k = k_1|X = x) = \frac{exp(\beta_{1.0} + \beta_1^T x)}{1 + \sum_{i=1}^{K-1} exp(\beta_{l.0} + \beta_l^T x)}$$

$$p(k = k_2|X = x) = \frac{exp(\beta_{2.0} + \beta_2^T x)}{1 + \sum_{i=1}^{K-1} exp(\beta_{l.0} + \beta_l^T x)}$$

$$\vdots$$

$$p(k = k_{K-1}|X = x) = \frac{exp(\beta_{(K-1).0} + \beta^T_{(K-1)}x)}{1 + \sum_{i=1}^{K-1} exp(\beta_{l.0} + \beta^T_l x)}$$

Para la clase de referencia:

$$p(Y = k_K|X = x) = \frac{1}{1 + \sum_{i=1}^{K-1} exp(\beta_{l.0} + \beta^T_l x)}$$

Para tener la formulación completa, falta estimar las β de cada probabilidad. Esto, comúnmente, se realiza con máxima verosimilitud (a través de métodos iterativos como Newton) [7]

Funciones logit y $logit^{-1}$
Para este modelo es conveniente analizar la función logit y su inversa:

$$logit = log(\frac{p}{1-p}) \tag{2.10}$$

$$logit^{-1} = \frac{exp(x)}{1 + exp(x)} \tag{2.11}$$

Al graficar la función *logit* y la $logit^{-1}$ sobre un plano (Figura 1.1) se observan algunas de sus propiedades. En la gráfica de la izquierda, se realiza un mapeo de valores del rango (0,1) al rango (-ínf,ínf), mientras que a la derecha se transforman valores continuos de (-ínf, ínf) al $(0, 1)$. La transformación realizada por $logit^{-1}$ es de mayor interés ya que su rango es semejante al que toman las probabilidades. Este enfoque nos da una amplia gama de elección para la fase de decisión, ya que deja elegir los puntos de corte para cada clase, dependiendo la penalización que se quiera dar a cada tipo de error [7]:

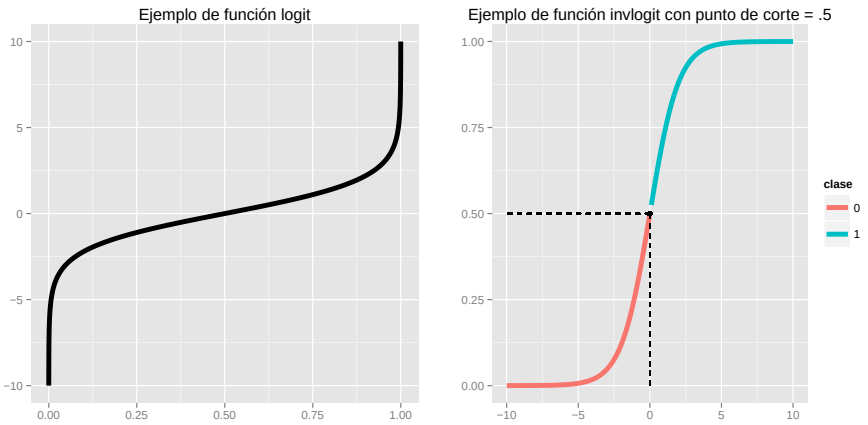


Figura 2.2: En la izquierda se muestra la función logit y en la derecha la función $logit^{-1}$ con punto de corte p = .5; es decir, se escoge la clase 1 en la zona azul y la clase 0 en la zona roja.

2.3.2. Modelos Generativos: Análisis Discriminante Lineal

Inferencia de la distribución $p(x, k)$

Para el caso del Análisis Discriminante Lineal se sigue un enfoque generativo, en el que se realiza inferencia de $p(x, k)$. Primero, se supondrá que $p(x|k)$ sigue una distribución Gaussiana con varianza Σ_k constante para todas las clases y μ_k la media de los individuos pertenecientes a la clase k (ecuación (2.12)). Por otra parte, se estima la distribución $p(k)$ como la proporción de casos que cada clase aparece en los datos (ecuación (2.13)). Usando la ecuación (2.1) se deduce $p(x, k)$:

$$p(x|k) = \frac{1}{(2\pi)|\Sigma|^{1/2}} e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_k)^T \Sigma^{-1}(x-\mu_k)} \tag{2.12}$$

$$p(k) = \frac{N_k}{N} \tag{2.13}$$

Por otro lado, al utilizar el teorema de bayes (2.3) y la ecuación (2.4), se puede calcular $p(k|x)$ directamente.

Linealidad de la frontera

Al hablar de la linealidad de la frontera, se tiene que cumplir la ecuación (2.8), enunciada en la sección 2.2.2:

$$log\frac{c_j p(k=k_j|x)}{c_i p(k=k_i|x)} = \beta_0 + x^T\beta_1$$

Sin pérdida de generalidad, se toma $c_j = c_i = 1$, y sustituyendolo en la ecuación (2.3), se tiene que la expresión de arriba es equivalente a:

$$log\frac{p(x|k=k_j)p(k=k_j)}{p(x|k=k_i)p(k=k_i)} = \beta_0 + x^T\beta_1$$

$$log\frac{p(x|k=k_j)}{p(x|k=k_i)} + log\frac{p(k=k_j)}{p(k=k_i)} = \beta_0 + x^T\beta_1 \tag{2.14}$$

La ecuación 2.14 consta de dos sumandos. Al desarrollar el primero:

$$log\frac{p(x|k=k_j)}{p(x|k=k_i)} = -\frac{1}{2}[(x-\mu_j)^T\Sigma^{-1}(x-\mu_j) - (x-\mu_i)^T\Sigma^{-1}(x-\mu_i)]$$

$$\begin{aligned} log\frac{p(x|k=k_j)}{p(x|k=k_i)} = &-\frac{1}{2}[{\mu_j}^T\Sigma^{-1}\mu_j - {\mu_i}^T\Sigma^{-1}\mu_i] + \\ &\frac{1}{2}[x^T\Sigma^{-1}(\mu_j-\mu_i) - (\mu_j-\mu_i)^T\Sigma^{-1}(x) \end{aligned} \tag{2.15}$$

$$log\frac{p(x|k=k_j)}{p(x|k=k_i)} = -\frac{1}{2}[(\mu_j-\mu_i)^T\Sigma^{-1}(\mu_j+\mu_i)] + [x^T\Sigma^{-1}(\mu_j-\mu_i)] \tag{2.16}$$

Sustituyendo 2.16 en 2.14 se tiene como resultado:

$$log\frac{p(k=k_j)}{p(k=k_i)} - \frac{1}{2}[(\mu_j-\mu_i)^T\Sigma^{-1}(\mu_j+\mu_i)] + x^T\Sigma^{-1}(\mu_j-\mu_i) = \beta_0 + x^T\beta_1$$

Del cual se nota que β_0 y β_1 son equivalentes a:

$$\beta_0 = log\frac{p(k=k_j)}{p(k=k_i)} - \frac{1}{2}[(\mu_j-\mu_i)^T\Sigma^{-1}(\mu_j+\mu_i)] \tag{2.17}$$

$$\beta_1 = \Sigma^{-1}(\mu_j-\mu_i) \tag{2.18}$$

Funciones Discriminantes

Ahora, solo falta enunciar las funciones discriminantes de la clase i y j; es decir, $logp(k = k_i|x)$ y $logp(k = k_j|x)$, respectivamente:

$$\delta_j(x) = logp(k = k_j) - \frac{1}{2}\mu_j^T \Sigma \mu_j + x^T \Sigma^{-1} \mu_j$$

$$\delta_i(x) = logp(k = k_i) - \frac{1}{2}\mu_i^T \Sigma \mu_i + x^T \Sigma^{-1} \mu_i$$

2.3.3. Funciones Discriminantes: Discriminante Lineal de Fisher

El Discriminante Lineal de Fisher es similar al Análisis Discriminante Lineal. El primero permite ver una proyección informativa en un espacio de dimensión menor [7]. Este planteamiento fue propuesto por Fisher [4], y hace referencia a un discriminante lineal con menos supuestos [6]. Propone los supuestos de definir una varianza entre clases que es la varianza de las medias de las clases, y una varianza intra-clase, que mide la varianza dentro de las clases con respecto a la media de cada clase. Después, se busca una matriz de proyección V que maximice la dispersión entre-clase al mismo tiempo que minimiza la dispersión intra-clase [9].

Se comenzará definiendo la nomenclatura necesaria para la sección. Sea N_k el número de personas en la clase k, N el número total de personas y $w_i = V^T x_i$; es decir, los datos proyectados con la matriz V. Entonces, se definen las medias de grupo k como μ_k y la media de todos los datos x_i como μ:

$$\mu_k = \frac{1}{N_k} \sum_{\substack{i=1 \\ y_i = k}}^{N} x_i \tag{2.19}$$

$$\mu = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i \tag{2.20}$$

Por otro lado, se definen las medias correspondientes a los datos proyectados

[6] No toma en cuenta la distribución de los datos, ni la igualdad de varianzas entre las clases.

w_i:

$$\widetilde{\mu_k} = \frac{1}{N_k} \sum_{\substack{i=1 \\ y_i=k}}^{N} w_i \tag{2.21}$$

$$\widetilde{\mu} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} w_i \tag{2.22}$$

La matriz de dispersión intra-clase de los datos proyectados:

$$\Phi_I = \sum_{k=1}^{K} \sum_{\substack{i=1 \\ y_i=k}}^{N} ||w_i - \widetilde{\mu}_k||_2^2$$

$$\Phi_I = \sum_{k=1}^{K} \sum_{\substack{i=1 \\ y_i=k}}^{N} Tr(V^T(x_i - \mu_k)(x_i - \mu_k)^T V)$$

$$\Phi_I = Tr(V^T S_I V) \tag{2.23}$$

$$con \quad S_I = \sum_{k=1}^{K} \sum_{\substack{i=1 \\ y_i=k}}^{N} (x_i - \mu_k)(x_i - \mu_k)^T \tag{2.24}$$

La matriz de dispersión entre-clases de los datos proyectados:

$$\Phi_E = \sum_{k=1}^{K} N_k ||\widetilde{\mu}_k - \widetilde{\mu}||_2^2$$

$$\Phi_E = \sum_{k=1}^{K} N_k ||V^T \mu_k - V^T \mu||_2^2$$

$$\Phi_E = \sum_{k=1}^{K} N_k V^T (\mu_k - \mu)(\mu_k - \mu)^T V$$

$$\Phi_E = Tr(V^T S_E V) \tag{2.25}$$

$$con \quad S_E = \sum_{k=1}^{K} N_k (\mu_k - \mu)(\mu_k - \mu)^T \tag{2.26}$$

De este modo, se definen las dos matrices importantes del método: S_I la matriz de dispersión interna y S_E la matriz de dispersión entre clases. Con estas definiciones surge la idea intuitiva de maximizar Φ_E al mismo tiempo que se minimiza Φ_I; es decir, encontrar un espacio de proyección en el que los grupos pertenecientes a la misma clase tengan poca varianza, al mismo tiempo que la varianza entre estas clases sea alta. Se puede plantear esta idea a través del problema de maximización:

$$\max_{\substack{V \in \mathbb{R}^{nxp} \\ V^T V = I}} \frac{Tr(V^T S_E V)}{Tr(V^T S_I V)} \tag{2.27}$$

Este problema de optimización es el principal tema de la tesis, por lo que los detalles acerca de las fronteras y el proceso de maximización que derivan en encontrar la matriz óptima V será analizado en los capítulos siguientes.

2.4. Enfoques para la minimización del error

La teoría de la decisión se aplica para la fase dos, en la que se busca tomar decisiones óptimas dadas las probabilidades calculadas en la fase de inferencia. La motivación de una teoría de la decisión es que las probabilidades, por sí solas, no nos indican que clase elegir, solamente nos dan información del comportamiento de la distribución. Por esta razón, es conveniente saber que decisión tomar basándonos en la penalización de los errores elegidos anteriormente. Puede verse desde dos perspectivas [7]:

- Minimizar el error de clasificación a lo largo de todos nuestros datos.
- Minimizar la pérdida esperada dada una matriz de pérdida L.

2.4.1. Minimizando el error de clasificación

Esta regla dividirá el espacio en regiones R_j en las que cada individuo es asignado a una clase k_j con $j = 1, ..., K$. Recordando la nomenclatura, x_i es el individuo i y y_i es la clase a la que pertenece este sujeto; mientras que $\widehat{y}_i$ es la clase predicha

[7] En realidad el primer enfoque es un caso particular del segundo

del sujeto i. Por otro lado, k_j es la clase j de las K existentes. Para encontrar la decisión óptima de elección se busca minimizar la probabilidad de cometer errores, que está dada por:

$$p(error) = 1 - \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{K} p(x_i \in R_j, y_i = k_j)$$

En la expresión anterior, cuando $x_i \in R_j$ se sabe que $\widehat{y}_i$ esta asociada a la clase k_j. Ocupando la igualdad $p(x \in R_j) = \int_{R_j} p(x)dx$ se tiene que es equivalente a maximizar la probabilidad de no cometer errores:

$$p(noerror) = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{K} p(x_i \in R_j, y_i = k_j)$$

$$p(noerror) = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{K} \int_{R_j} p(x_i, y_i = k_j)dx$$

Es facil deducir que $\int_{R_j} p(x_i, y_i = k_j)dx$ es equivalente a que $p(\widehat{y}_i = k_j, y_i = k_j)$ porque cuando x_i está en la región R_j, entonces $\widehat{y}_i = k_j$. Ocupando esta igualdad se puede deducir:

$$p(noerror) = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{K} p(\widehat{y}_i = k_j, y_i = k_j) \tag{2.28}$$

Es decir, dado que x_i pertenece a la región R_j (y por lo tanto es clasificado en la clase k_j) y la clase original de x_i es $y = k_j$, implica que la clasificación es correcta. La maximización de (2.28) sigue un argumento intuitivo. Al obtener la distribución $p(x, k)$, se selecciona aquella que tiene la probabilidad más alta de ocurrir para cada individuo; es decir, tomar como criterio de decisión la que tenga mayor $p(x_i \in R_j)$.

En los Modelos Probabilísticos Generativos se utiliza la distribución conjunta, en cambio en los discriminativos solamente se utiliza $p(k|x)$. Para extender el resultado anterior a la distribución condicional se ocupa la ecuación 2.2:

$$p(x, k) = p(k|x)p(x)$$

Maximizar $p(x, k)$ es equivalente a maximizar el término de la derecha. Como $p(x)$ es positivo y común a todos los términos, es equivalente a seleccionar la clase con probabilidad $p(k|x)$ más grande para cada individuo.

2.4.2. Minimizando la pérdida esperada

Tomando una matriz de pérdida se puede ver más general el error de clasificación. La motivación de este enfoque es la disparidad en los distintos costos asociados a cada tipo de error de clasificación. Por ejemplo, en un problema en el que se predice si a un paciente le dará un ataque al corazón, es peor predecir que no tendrá un ataque cuando en realidad si le tendrá [7]. Por esta razón, la modelación del error a través de una matriz de pérdida tiene sentido. Sea L la matriz que tiene como característica el tener ceros en la diagonal y pesos no negativos en cualquier otro lado y $L(X, Y)$ el costo asociado a elegir Y cuando la clase verdadera es X. [8]

Tomando el error esperado de predicción de los vectores Y y $\widehat{Y}$ bajo la matriz L:

$$EEP = E[L(Y, \widehat{Y})]$$

En la que Y es el vector de clases de pertenencia verdaderas y $\widehat{Y}$ es el vector de clases de pertenencias predichas. Ambos vectores son de variables categóricas que pueden tomar valores $k_j \in C$ con $j = 1...K$.

Al desarrollar el error esperado de predicción como una sumatoria sobre los N individuos y las K clases, es equivalente a:

$$EEP = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{K} L[y_i = k_j, \widehat{y}_i = k_j] p(x = x_i, k = k_j)$$

Sustituyendo $p(k, x) = p(k|x)p(x)$, se puede calcular la esperanza sobre los individuos x. Lo que se deduce la expresión:

[8] Es fácil notar que la matriz L_{0-1}; es decir, 0 sobre la diagonal (Clasificación correcta) y 1 (Clasificación incorrecta) en cualquier otro lugar, es equivalente al enfoque que minimiza el error de clasificación

$$EEP = E_x \sum_{j=1}^{K} L[y = k_j, \widehat{y} = k_j] p(k_j|x)$$

Como se busca minimizar el error esperado de predicción con respecto a $\widehat{y}$, se obtiene el siguiente problema de minimización:

$$\widehat{y}^* = \underset{\widehat{y}}{\operatorname{argmin}} E_x \sum_{j=1}^{K} L[y = k_j, \widehat{y} = k_j] p(k_j|x)$$

Este problema de minimización es equivalente a minimizar el error esperado de predicción para cada individuo x:

$$\widehat{y}^* = \underset{\widehat{y}}{\operatorname{argmin}} \sum_{j=1}^{K} L[y = k_j, \widehat{y} = k_j] p(k_j|x)$$

Al escoger la función de pérdida $0-1$, cuando $\widehat{y}^* = y$, entonces la pérdida es igual a 0, por lo que la fórmula se simplifica a:

$$\widehat{y}^* = \underset{\widehat{y}}{\operatorname{argmin}} \sum_{\substack{j=1 \\ y \neq \widehat{y}}}^{K} L[y = k_j, \widehat{y} = k_j] p(k_j|x)$$

Por otro lado, cuando $\widehat{y}^* \neq y$ entonces la pérdida es igual a 1:

$$\widehat{y}^* = \underset{\widehat{y}}{\operatorname{argmin}} \sum_{\substack{j=1 \\ y \neq \widehat{y}}}^{K} p(k_j|x)$$

$$\widehat{y}^* = \underset{\widehat{y}}{\operatorname{argmin}} [1 - \sum_{\substack{j=1 \\ y = \widehat{y}}}^{K} p(k_j|x)]$$

Esta expresión es equivalente a maximizar:

$$\widehat{y}^* = \underset{\widehat{y}}{\operatorname{argmax}}\, p(k|x)$$

De esta manera, se escoge $\widehat{y}^*$ como la probabilidad posterior más grande de pertenencia a la clase k dado x. Esta solución es conocida como "Clasificador

de Bayes" y nos dice que hay que clasificar a las clases más probables usando la distribución condicional $p(k|x)$. La tasa de error de este clasificador se le conoce como "Tasa de Bayes" [7].

Capítulo 3

Discriminante Lineal de Fisher

En este capítulo se resolverá el problema del discriminante lineal de Fisher que se introdujo en el capítulo anterior. Se han presentado distintas formulaciones en libros de aprendizaje estadístico y clasificación de patrones, pero muchas veces no se resuelve el problema original debido a su complejidad computacional. [10] [9] Problemas como maximizar la traza de la matriz de dispersión entre clases sujeto a una restricción sobre la matriz de dispersión interna, maximizar la traza del cociente de matrices; o bien, el cociente de determinantes son planteados en distintos textos [3] [7] [8] [5], pero estos resultan ser versiones simplificadas del problema.

En la primer parte del capítulo se enuncia la teoría correspondiente para seguir con facilidad la tesis. En la segunda parte se proporciona los problemas inherentes al planteamiento: la generalización a p dimensiones, las condiciones bajo las cuales tiene solución existe, la conversión a un problema escalar y la localización del óptimo. Como se muestra en capítulos posteriores el problema se resolverá con métodos iterativos que resultan ser computacionalmente accesibles.

3.1. Matrices de dispersión

El problema en cuestión hace amplio uso de las matrices de dispersión, en específico de la matriz de covarianza, la matriz de dispersión de todos los individuos, la matriz de dispersión interna y la matriz de dispersión entre clases. Es importante analizar a profundidad la terminología y las fórmulas que se usarán a lo largo de la tesis para entender la lógica detrás del discriminante de Fisher.

Sea Σ la matriz de covarianza (*Covariance Matrix)* de todos los individuos. Se define como $\widehat{\Sigma}$ al estimador insesgado de Σ el cual está escalada entre $N-1$:

$$\widehat{\Sigma} = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\mu)(x_i-\mu)^T \tag{3.1}$$

Si esta matriz no está escalada por $N-1$ entonces se le conoce como matriz de dispersión (*Scatter Matrix*), en esta tesis se representará como S_T, con el subíndice T que significa que está tomando en cuenta a todos los individuos:

$$S_T = \sum_{i=1}^{N}(x_i-\mu)(x_i-\mu)^T \tag{3.2}$$

Cuando solo se toman a los individuos de una clase particular k, se puede encontrar su correspondiente matriz de dispersión, representada como S_k, con el subíndice k simbolizando que está tomando en cuenta solo a los individuos de la clase k:

$$S_k = \sum_{\substack{i=1\\ y_i=k}}^{N}(x_k-\mu)(x_k-\mu)^T$$

De esta manera se define la matriz de dispersión interna (*Within-class scatter matrix*) como la suma sobre k de todas las matrices de dispersión de cada clase:

$$S_I = \sum_{k=1}^{K}\sum_{\substack{i=1\\ y_i=k}}^{N}(x_i-\mu_k)(x_i-\mu_k)^T \tag{3.3}$$

Ahora solo falta definir la matriz de dispersión entre clases (*Between-class scatter matrix*) como la suma de diferencias al cuadrado de las medias de clase contra

la media de todos los datos multiplicada por el número de individuos en cada clase N_k:

$$S_E = \sum_{k=1}^{K} N_k(\mu_k - \mu)(\mu_k - \mu)^T \tag{3.4}$$

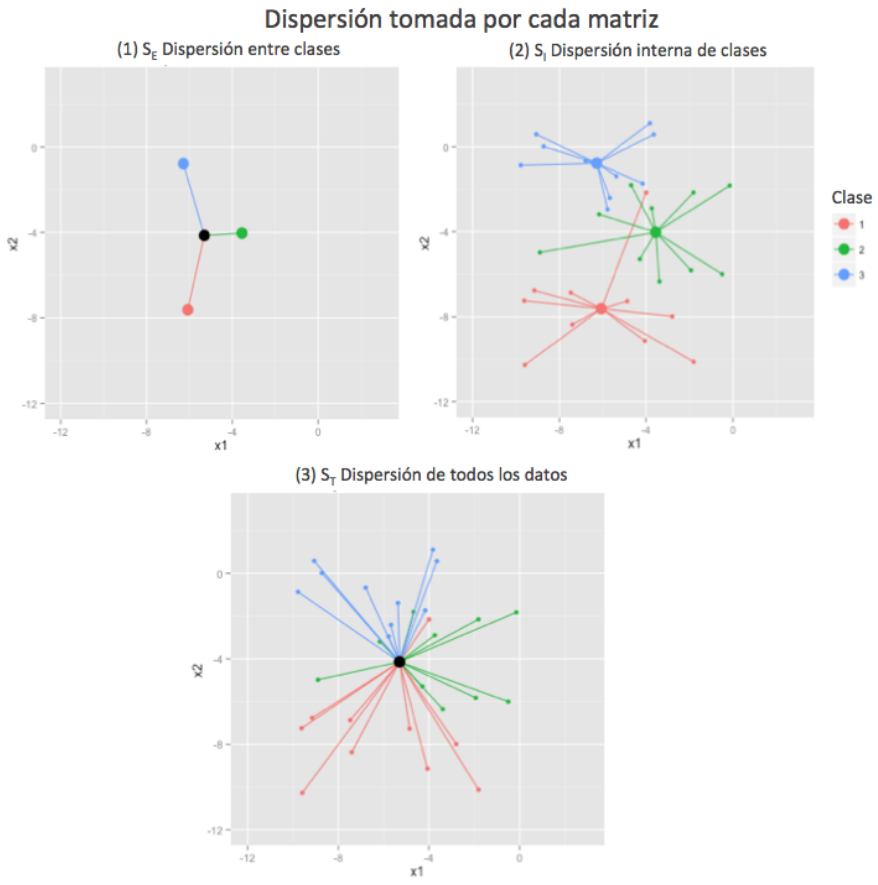


Figura 3.1: En la gráfica (1) se representa la S_E, es decir las distancias al cuadrado entre la media de todos los datos (Punto negro) y las medias de cada clase (Puntos de color gruesos). La gráfica (2) representa S_I; es decir, la distancia al cuadrado de los individuos a la media de su clase. La gráfica (3) representa S_T, la dispersión de los datos con respecto a la media de todos.

Entre la matriz de dispersión interna S_I, la matriz de dispersión entre clases S_E

y la matriz de dispersión total S_T existe una relación importante. Se cumple que $S_T = S_I + S_E$; es decir, la dispersión de las medias de grupos con la media global más la dispersión de cada clase individual es igual a la dispersión de los datos sin la información de las clases. Los datos de la figura (1.1) representan las distancias que toman en cuenta cada una de estas matrices. Para ejemplificar esta relación se generaron 10 datos por clase suponiendo distribuciones normales:

Clase	**Distribución x1**	**Distribución x2**
1	N(-5, 2.5)	N(-8, 2)
2	N(-3, 2.5)	N(-4, 2)
3	N(-7, 2.5)	N(-1, 2)

Calculando las matrices de dispersión de acuerdo a las fórmulas (3.2), (3.3), (3.4):

S_I	S_E	S_T
$\begin{bmatrix} 186.05 & 2.78 \\ 2.78 & 94.58 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 46.13 & -4.15 \\ -4.15 & 234.57 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 232.18 & -1.36 \\ -1.36 & 329.16 \end{bmatrix}$

De este ejemplo numérico se puede ver que al sumar la dispersión interna S_I y la dispersión entre clases S_E da como resultado la dispersión de todos los individuos S_T. En general este resultado se cumple, por lo que a continuación se demuestra esta relación:

Proposición 3.1. *Sea S_E la matriz de dispersión entre clases, S_I la matriz de dispersión interna y S_T la matriz de dispersión de los datos, entonces se tiene que cumplir la siguiente igualdad: $S_T = S_I + S_E$*

Demostración.

$$\begin{aligned}
S_T =& \sum_{i=1}^{N}(x_i-\mu)(x_i-\mu)^T \\
=& \sum_{k=1}^{K}\sum_{\substack{i=1\\ y_i=k}}^{N}(x_i-\mu_k+\mu_k-\mu)(x_i-\mu_k+\mu_k-\mu)^T \\
=& \sum_{k=1}^{K}\sum_{\substack{i=1\\ y_i=k}}^{N}[(x_i-\mu_k)(x_i-\mu_k)^T+2(x_i-\mu_k)(\mu_k-\mu)^T+ \\
& (\mu_k-\mu)(\mu_k-\mu)^T] \\
=& \sum_{k=1}^{K}\sum_{\substack{i=1\\ y_i=k}}^{N}(x_i-\mu_k)(x_i-\mu_k)^T+2\sum_{k=1}^{K}\sum_{\substack{i=1\\ y_i=k}}^{N}(x_i-\mu_k)(\mu_k-\mu)^T+ \\
& \sum_{k=1}^{K}\sum_{\substack{i=1\\ y_i=k}}^{N}(\mu_k-\mu)(\mu_k-\mu)^T
\end{aligned}$$

pero se tiene que $\sum_{k=1}^{K}\sum_{\substack{i=1\\ y_i=k}}^{N}(x_i-\mu_k)(\mu_k-\mu)^T = 0$ ya que $\sum_{\substack{i=1\\ y_i=k}}^{N}(x_i-\mu_k) = 0$. Así que la expresión S_T se simplifica a:

$$\begin{aligned}
S_T =& \sum_{k=1}^{K}\sum_{\substack{i=1\\ y_i=k}}^{N}(x_i-\mu_k)(x_i-\mu_k)^T+\sum_{k=1}^{K}\sum_{\substack{i=1\\ y_i=k}}^{N}(\mu_k-\mu)(\mu_k-\mu)^T \\
=& \sum_{k=1}^{K}\sum_{\substack{i=1\\ y_i=k}}^{N}(x_i-\mu_k)(x_i-\mu_k)^T+\sum_{k=1}^{K}N_k(\mu_k-\mu)(\mu_k-\mu)^T \\
=& S_I+S_E
\end{aligned}$$

□

Un problema muy común que surge en problemas aprendizaje estadístico es que el costo computacional puede volverse intratable conforme la dimensionalidad de los individuos crece. En el Discriminante Lineal de Fisher se requiere hacer el

cómputo de las matrices de dispersión de los individuos constantemente (o bien calcular la inversa de matrices de alta dimensionalidad), cálculos que para grandes dimensiones son sumamente costosos. Existen distintas maneras para hacer frente a este problema, uno de ellos involucra el PCA (Principal Component Analysis). Este método es fácil de calcular y solo requiere computar una vez la de matriz de dispersión [9]. Debido a la finalidad de esta tesis no se profundizará en más técnicas para hacer frente a este problema, pero en textos como [7], [3] aparecen distintos métodos para reducción de dimensionalidad.

Retomando el problema de cociente de trazas, lo que se busca es encontrar la proyección que mantenga juntos individuos de una clase al mismo tiempo que separa las medias de distintas clases. Una vez obtenida esta proyección se puede encontrar un hiperplano separador de los datos, o bien algún criterio para asignar la clase de pertenencia.

$$\max_{\substack{V\in\mathbb{R}^{nxp}\\ V^TCV=I}} \frac{Tr(V^TS_EV)}{Tr(V^TS_IV)} \tag{3.5}$$

La solución a este problema no tiene una forma cerrada, por lo que en la literatura se buscan formulaciones alternas para resolverlo de una manera más sencilla [10] [5], algunos ejemplos de estas formulaciones son:

$$\max_{\substack{V\in\mathbb{R}^{nxp}\\ V^TS_IV=I}} Tr(V^TS_EV) \tag{3.6}$$

$$\max_{\substack{V\in\mathbb{R}^{nxp}\\ V^TCV=I}} Tr\left(\frac{V^TS_EV}{V^TS_IV}\right) \tag{3.7}$$

$$\max_{\substack{V\in\mathbb{R}^{nxp}\\ V^TCV=I}} \frac{|V^TS_EV|}{|V^TS_IV|} \tag{3.8}$$

Con $|\bullet| = det(\bullet)$ y $Tr(\bullet) = Traza(\bullet)$.

En la siguiente parte de este capítulo se resolverá el problema original (3.5) para $p = 1$, para lo cual se introduce el cociente generalizado de Rayleigh. Para la generalización a p dimensiones solo se plantea el problema y se proporcionan los casos en que la solución existe y es única. Seguido de esto se definirá una función $f(\rho)$ la cual sirve para encontrar el óptimo por métodos iterativos. Por

último haciendo uso de los eigenvalores de S_I y S_E se darán cotas inferiores y superiores al óptimo.

3.2. Problema del cociente de trazas (Trace ratio problem)

El problema del cociente de trazas es fácil de ver cuando $V \in \mathbb{R}^{nxp}$ proyecta a un espacio de pocas dimensiones. Por ejemplo, cuando $p = 2$ se desea obtener la mejor proyección sobre un plano y cuando $p = 1$ sobre una recta. Para ejemplificar esta situación se creo un conjunto sintético donde cada $x_i \in \mathbb{R}^3$. Las distribuciones son normales y se proyectan en $\mathbb{R}^2$ y $\mathbb{R}^1$.

3.2.1. Solución cuando p = 1

El problema 3.5 toma la siguiente forma cuando $V \in \mathbb{R}^{nx1}$. Se nombrara v a este proyector a una dimensión ya que resulta ser solo un vector:

$$\max_{v \in \mathbb{R}^{nx1}} \frac{v^T S_E v}{v^T S_I v} \tag{3.9}$$

Se tiene que $x_i \in \mathbb{R}^n$ son los individuos originales con $i = 1, ..., N$. Entonces sean $w_i \in \mathbb{R}^1$ los individuos proyectados por el vector v de manera que $w_i = v^T x_i$. De esta manera es conveniente definir $\widehat{\mu}_k = v^T \mu_k$ y $\widehat{\mu} = v^T \mu$ como la media por clase y la media total de los datos proyectados.

Matriz entre clases Φ_E de los individuos proyectados w_i:

$$\Phi_E = \sum_{k=1}^{K} N_k (\widehat{\mu}_k - \widehat{\mu})^2$$

$$\Phi_E = \sum_{k=1}^{K} N_k (v^T \mu_k - v^T \mu)^2$$

$$\Phi_E = \sum_{k=1}^{K} N_k v^T (\mu_k - \mu)(\mu_k - \mu)^T v$$

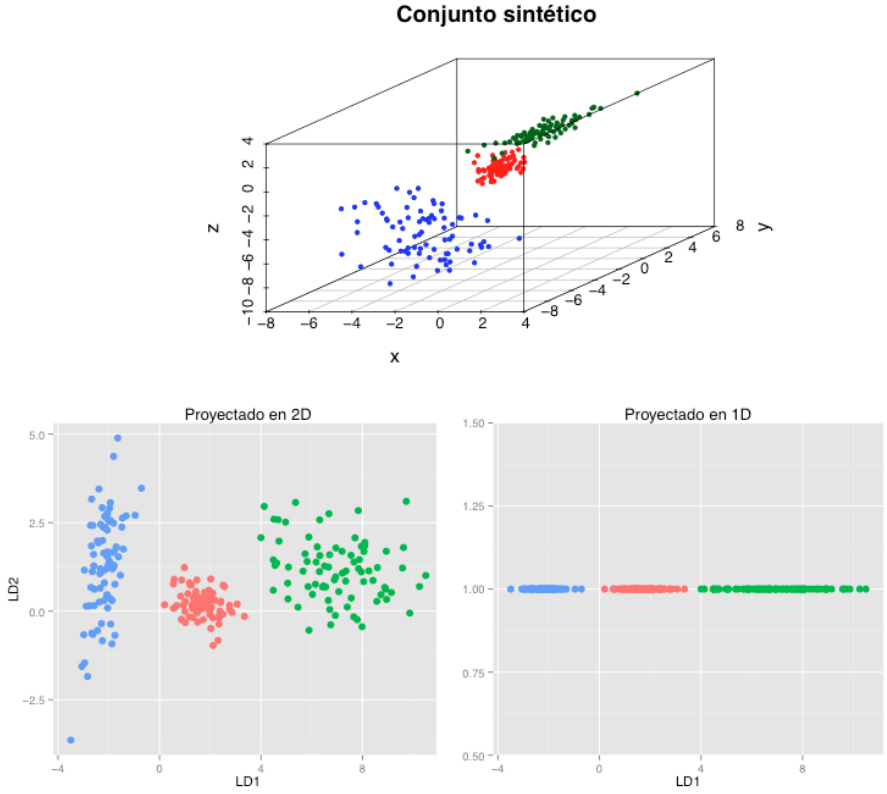


Figura 3.2: En la gráfica de arriba se muestran los datos originales en $\mathbb{R}^3$ los cuales fueron generados a través de distribuciones normales con distintas medias y varianzas. En la gráfica de abajo a la izquierda se muestra la mejor proyección en $\mathbb{R}^2$ y abajo a la derecha la mejor proyección en $\mathbb{R}^1$

Por distributividad en matrices se cumple que $vAv+vBv = v(A+B)v$, entonces:

$$\Phi_E = v^T \Big[\sum_{k=1}^{K} N_k(\mu_k - \mu)(\mu_k - \mu)^T \Big] v \tag{3.10}$$

Matriz intra clase Φ_I de los individuos proyectados w_i:

$$\Phi_I = \sum_{k=1}^{K} \sum_{\substack{i=1 \\ y_i=k}}^{N} (w_i - \widehat{\mu}_k)^2$$

$$\Phi_I = \sum_{k=1}^{K} \sum_{\substack{i=1 \\ y_i=k}}^{N} (v_i^T x_i - v_i^T \mu_k)^2$$

$$\Phi_I = \sum_{k=1}^{K} \sum_{\substack{i=1 \\ y_i=k}}^{N} v^T (x_i - \mu_k)(x_i - \mu_k)^T v$$

Usando de nuevo la distibutividad de matrices:

$$\Phi_I = v^T \big[\sum_{k=1}^{K} \sum_{\substack{i=1 \\ y_i=k}}^{N} (x_i - \mu_k)(x_i - \mu_k)^T \big] v \tag{3.11}$$

Las fórmulas de Φ_I y Φ_E de los individuos w_i se pueden expresar en función de las matrices de dispersión interna y entre clases S_I y S_E de los individuos originales x_i. De esta manera:

$$\Phi_E = f(S_E) = v^T S_E v$$

$$\Phi_I = f(S_I) = v^T S_I v$$

Se tiene que $\Phi_I, \Phi_E \in \mathbb{R}^1$, entonces maximizar el cociente $\frac{\Phi_E}{\Phi_I}$ con respecto a v tiene como resultado una proyección que conserva cerca a los individuos pertenecientes a la misma clase, mientras que aleja a los centros de cada clase. Para el caso de una dimensión se puede encontrar una solución cerrada. La teoría asociada a este problema de maximización esta relacionada con el Cociente de Rayleigh y el Cociente Generalizado de Rayleigh.

Sea A una matriz simétrica, entonces el cociente de Rayleigh y el Cociente Generalizado de Rayleigh tienen las siguientes formulaciones respectivamente:

$$\frac{v^T A v}{v^T v} \tag{3.12}$$

$$\frac{v^T A v}{v^T B v} \tag{3.13}$$

Un problema común que surge en machine learning es la maximización de este cociente con respecto a v. Problemas como PCA, LDA y sus generalizaciones

invocan a las fórmulas 3.12 3.13. Por este motivo se dará la solución cuando $v \in \mathbb{R}^{nx1}$.

Proposición 3.2. *La solución a la maximización del cociente de Rayleigh:*

$$\max_{v \in \mathbb{R}^{nx1}} \frac{v^T A v}{v^T v}$$

cuando A es simétrica, es obtenida cuando v es el eigenvector asociado al eigenvalor más grande de la matriz A.

Demostración. Primero se hace la observación que factorizando c las siguientes dos formulaciones de la maximización son equivalentes cuando $c \neq 0$ y $c \in \mathbb{R}$:

$$\max_{v \in \mathbb{R}^{nx1}} \frac{v^T A v}{(v^T v)}$$
$$\max_{v \in \mathbb{R}^{nx1}} \frac{(cv)^T A (cv)}{(cv)^T (cv)}$$

Sin pérdida de generalidad se supone que $||v|| = 1$. Cuando $v \in \mathbb{R}^{nx1}$ el problema es equivalente a la maximización del numerador sujeta a una restricción de igualdad $v^T v = 1$:

$$\max_{\substack{v \in \mathbb{R}^{nx1} \\ v^T v = 1}} v^T A v$$

Este problema es más sencillo y se puede resolver formulando el lagrangiano asociado, derivando e igualando a 0:

$$\mathcal{L}(v, \lambda) = v^T A v - \lambda (v^T v - 1)$$
$$\frac{\partial \mathcal{L}(v, \lambda)}{\partial v} = (A + A^T) v - 2\lambda v = 0$$

Como A es simétrica, entonces $A + A^T = 2A$, por lo que la solución es:

$$\partial v = Av = \lambda v \tag{3.14}$$

Este es el problema de eigenvalores generalizado. Entonces el máximo es alcanzado cuando v es el eigenvector asociado al eigenvalor más grande de A.

□

Una vez enunciado este resultado, se procede a resolver el cociente generalizado de Raleigh, el cual esta intimamente relacionado con el discriminante lineal de Fisher para un proyector unidimensional.

Proposición 3.3. *Sean S_E y S_I matrices simétricas definidas positivas. La solución óptima al discriminante lineal de Fisher para un proyector unidimensional $v \in \mathbb{R}^1$ es el eigenvector asociado al eigenvalor más grande del problema generalizado de eigenvalores $(S_I)^{-1}S_E v = \lambda v$.*

Demostración. La maximización del discriminante lineal de Fisher de la forma 3.9 es equivalente al Cociente de Rayleigh Generalizado de S_E relativo a S_I. Planteando el problema y suponiendo que v proyecta a un espacio unidimensional se tiene que [7]:

$$\max_{v \in \mathbb{R}^{nx1}} \frac{v^T S_E v}{v^T S_I v}$$

Como S_I es positiva definida entonces se puede encontrar su factorización de Cholesky, de manera que $S_I = P^T P$ y se define $v' = Pv$ y $C = P^{-T} S_E P^{-1}$, entonces el problema de maximización 3.9 se puede escribir como [7]:

$$\max_{v \in \mathbb{R}^{nx1}} \frac{v^T S_E v}{v^T P^T P v}$$

$$\max_{v \in \mathbb{R}^{nx1}} \frac{v'^T P^{-T} S_E P^{-1} v'}{(v'^T)(v')}$$

$$\max_{v \in \mathbb{R}^{nx1}} \frac{v'^T C v'}{v'^T v'}$$

Como v es un vector, se tiene que $||v||_2^2 = v_1^2 + v_2^2 + ... + v_n^2 = v^T v$, con esta igualdad se representa la maximización anterior como:

$$\max_{v \in \mathbb{R}^{nx1}} \left(\frac{v'}{\|v'\|} \right)^T C \left(\frac{v'}{\|v'\|} \right)$$

Es decir, el problema original es equivalente a una forma cuadrática restringida a la esfera unitaria en otro sistema de coordenadas; es decir, es equivalente al problema de maximización:

$$\max_{v \in \mathbb{R}^{nx1}} v^T S_E v \quad sujeto\ a \quad v^T S_I v = 1 \tag{3.15}$$

Maximizar el cociente se puede resolver con la proposition 3.2. Es así como se obtiene que la solución del planteamiento original es la solución del problema de eigenvalores generalizado

$$Cv' = \lambda v'$$

Para encontrar la solución en términos de S_E y S_I se sustituye en la solución obtenida $v' = Pv$ y $C = P^{-T} S_E P^{-1}$

$$Cv' = \lambda v'$$
$$P^{-T} S_E P^{-1} Pv = \lambda Pv$$
$$P^T P^{-T} S_E v = \lambda P^T Pv$$
$$S_E v = \lambda S_I v$$

$$(S_I)^{-1} S_E v = \lambda v \tag{3.16}$$

De donde se obtiene que es equivalente al problema generalizado de eigenvalores de $(S_I)^{-1} S_E$.

□

3.2.2. Generalización a p dimensiones

Para dimensiones más grandes de v la solución planteada en el capítulo anterior no funciona, ya que no es equivalente al problema de maximización planteado. Esto genera la dificultad de no tener una solución cerrada, por lo que se han propuesto métodos iterativos y planteamientos alternos a la solución.

La generalización a p dimensiones implica que los individuos $x_i \in \mathbb{R}^n$ son proyectados ahora por la matriz $V = (V_1|V_2|...|V_p)$, de manera que $w_i = V^T x_i$ con $w_i \in \mathbb{R}^p$ y $V_j \in \mathbb{R}^{nx1}$. De esta manera las matrices Φ_I y Φ_E se definen como sigue:

$$\Phi_E = \sum_{k=1}^{K} N_k ||\widehat{\mu}_k - \widehat{\mu}||_2^2$$

$$\Phi_E = \sum_{k=1}^{K} N_k ||V^T \mu_k - V^T \mu||_2^2$$

$$\Phi_E = \sum_{k=1}^{K} N_k ||V^T (\mu_k - \mu)||_2^2$$

$$\Phi_E = \sum_{k=1}^{K} N_k \big[(V_1^T (\mu_k - \mu))^2 + (V_2^T (\mu_k - \mu))^2 + ... + (V_p^T (\mu_k - \mu))^2 \big] \quad (3.17)$$

De esta expresión hay que destacar que $V_1^T(\mu_k - \mu)$ es un escalar, ya que $V_1^T \in \mathbb{R}^{1xn}$ y $(\mu_k - \mu) \in \mathbb{R}^{nx1}$. Otra formula equivalente y que es comúnmente usada por sus propiedades algebraicas consiste en la siguiente expresión:

$$\Phi_E = \sum_{k=1}^{K} N_k Tr \big[V^T (\mu_k - \mu)(\mu_k - \mu)^T V \big] \quad (3.18)$$

Para ejemplificarla se toma una clase $k = k_1$. Al desarrollar $(\bullet) = V^T(\mu_1 - \mu)(\mu_1 - \mu)^T V$ se tiene una matriz en $\mathbb{R}^{pxp}$ igual a:

$$(\bullet) = \begin{pmatrix} V_1^T(\mu_1 - \mu) \\ V_2^T(\mu_1 - \mu) \\ \vdots \\ V_p^T(\mu_1 - \mu) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\mu_1 - \mu)^T V_1 & (\mu_1 - \mu)^T V_2 & \dots & (\mu_1 - \mu)^T V_p \end{pmatrix}$$

$$(\bullet) = \begin{pmatrix} V_1^T(\mu_1 - \mu)(\mu_1 - \mu)^T V_1 & \dots & V_1^T(\mu_1 - \mu)(\mu_1 - \mu)^T V_p \\ V_2^T(\mu_1 - \mu)(\mu_1 - \mu)^T V_1 & \dots & V_2^T(\mu_1 - \mu)(\mu_1 - \mu)^T V_p \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ V_p^T(\mu_1 - \mu)(\mu_1 - \mu)^T V_1 & \dots & V_p^T(\mu_1 - \mu)(\mu_1 - \mu)^T V_p \end{pmatrix}$$

$$(\bullet) = \begin{pmatrix} (V_1^T(\mu_1 - \mu))^2 & \dots & V_1^T(\mu_1 - \mu)(\mu_1 - \mu)^T V_p \\ V_2^T(\mu_1 - \mu)(\mu_1 - \mu)^T V_1 & \dots & V_2^T(\mu_1 - \mu)(\mu_1 - \mu)^T V_p \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ V_p^T(\mu_1 - \mu)(\mu_1 - \mu)^T & \dots & (V_p^T(\mu_1 - \mu))^2 \end{pmatrix}$$

Por lo tanto al calcular la traza de la matriz de *pxp* desarrollada arriba, se tiene que $Tr(V^T(\mu_1 - \mu)(\mu_1 - \mu)^T V)$ es equivalente a:

$$\begin{aligned} Tr(\bullet) = &(V_1^T(\mu_1 - \mu))^2 + \\ &(V_2^T(\mu_1 - \mu))^2 + \\ &...+ \\ &(V_p^T(\mu_1 - \mu))^2 \end{aligned}$$

Al generalizar a las K clases y usando la propiedad de linealidad en la traza; es decir, $Tr(A + B) = Tr(A) + Tr(B)$, entonces se puede escribir de la siguiente manera:

$$\Phi_E = Tr \sum_{k=1}^{K} N_k \big[V^T(\mu_k - \mu)(\mu_k - \mu)^T V \big]$$

Esta expresión es equivalente a 3.17. Como paso final se factoriza V^T y V sobre todos los sumandos, lo que nos llevaría a lo siguiente:

$$\Phi_E = Tr(V^T \sum_{k=1}^{K} N_k \big[(\mu_k - \mu)(\mu_k - \mu)^T \big] V)$$

o, expresada en términos de $S_E = \sum_{k=1}^{K} N_k \big[(\mu_k - \mu)(\mu_k - \mu)^T \big]$

$$\Phi_E = Tr(V^T S_E V) \tag{3.19}$$

Similarmente se puede llegar a la formulación de $\Phi_I =$

$$\Phi_I = Tr(V^T S_I V) \tag{3.20}$$

3.2.3. Existencia de la solución

Para demostrar la existencia y unicidad de la solución, las matrices S_I y S_E deben cumplir ciertas características. Sean $A = S_E$ y $B = S_I$, la primer condición que se les impone es que sean positivas definidas. La razón que apoya la restricción está relacionada con la forma de la función a maximizar, que es un cociente. Como B se encuentra en el denominador, se tiene que evitar que $Tr(V^T BV) = 0$, ya que con este valor se indetermina la función objetivo [9].

T.T. Ngo propone generalizar el estudio a las matrices positivas semidefinidas. Para esto se deben encontrar los casos en que $Tr(V^T BV)$ toma el valor de 0. Si se diagonaliza a la matriz $B = Q\Lambda_B Q^T$ con Q ortogonal y Λ_B una matriz diagonal con entradas iguales a los eigenvalores de B, entonces $Tr(\Lambda_B) = \lambda_{B_1} + \lambda_{B_2} + ... + \lambda_{B_n}$ con $\widehat{V} = Q^T V$. De este modo $\widehat{V} = (\widehat{V}_1|\widehat{V}_2|...|\widehat{V}_p)$ y cada $\widehat{V}_i^T = (\widehat{V}_{i1}, \widehat{V}_{i2}, ..., \widehat{V}_{in})$ es un vector renglón. De esta manera la matriz $\widehat{V}^T$:

$$\widehat{V}^T = \begin{pmatrix} \widehat{V}_1^T \\ \widehat{V}_2^T \\ \vdots \\ \widehat{V}_p^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{V}_{11} & \widehat{V}_{12} & \dots & \widehat{V}_{1n} \\ \widehat{V}_{21} & \widehat{V}_{22} & \dots & \widehat{V}_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \widehat{V}_{p1} & \widehat{V}_{p2} & \dots & \widehat{V}_{pn} \end{pmatrix}$$

Por lo que la traza que involucra a B tiene la siguiente forma:

$$Tr(V^T BV) = Tr(V^T Q\Lambda_B Q^T V)$$

$$Tr(V^T BV) = Tr(\widehat{V}^T \Lambda_B \widehat{V})$$

$$V^T BV = \begin{pmatrix} \widehat{V}_1^T \\ \widehat{V}_2^T \\ \vdots \\ \widehat{V}_p^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_{B_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_{B_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_{B_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widehat{V}_1|\widehat{V}_2|\dots|\widehat{V}_p \end{pmatrix}$$

Desarrollando la multiplicación de matrices, y calculando la traza resulta en los siguientes sumandos:

$$\begin{aligned} Tr(V^T BV) = &\lambda_{B_1}\widehat{V}_{11}^2 + \lambda_{B_2}\widehat{V}_{12}^2 + \ldots + \lambda_{B_n}\widehat{V}_{1n}^2 + \\ &\lambda_{B_1}\widehat{V}_{21}^2 + \lambda_{B_2}\widehat{V}_{22}^2 + \ldots + \lambda_{B_n}\widehat{V}_{2n}^2 + \\ &\vdots \qquad\quad \vdots \qquad\quad \vdots \qquad\quad \vdots \\ &\lambda_{B_1}\widehat{V}_{p1}^2 + \lambda_{B_2}\widehat{V}_{p2}^2 + \ldots + \lambda_{B_n}\widehat{V}_{pn}^2. \end{aligned}$$

Es fácil de ver que la expresión de arriba tiene pxn sumandos, por lo que se puede expresar en términos de dos sumatorias. La primera de $j = 1, ..., p$ y la segunda de $i = 1, ...n$:

$$Tr(V^T BV) = \sum_{j=1}^{p}\sum_{i=1}^{n} \lambda_{B_i}\widehat{V}_{ji}^2$$

$$Tr(V^T BV) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_{B_i}\sum_{j=1}^{p} \widehat{V}_{ji}^2 \tag{3.21}$$

De la última expresión se separa la sumatoria sobre i. De esta manera, para cada elemento i se tienen dos factores:

$$(i)\lambda_{B_i} \tag{3.22}$$

$$(ii)\sum_{j=1}^{p} \widehat{V}_{ji}^2 \tag{3.23}$$

La idea para que $Tr(V^T BV)$ sea positivo, es que al menos uno de los sumandos sea positivo. Si 3.22 y 3.23 son ambos distintos de cero para al menos una i, entonces se cumple esta condición. Esta idea está expresada en el Lema 3.1.

Lema 3.1. *Sea B positiva semidefinida y $V \in \mathbb{R}^{nxp}$. Si B tiene a lo más $p-1$ eigenvalores iguales a 0, entonces $Tr(V^T BV) = Tr(\widehat{V}^T \Lambda_B \widehat{V}) \neq 0$ para cualquier matriz ortogonal V.*

Demostración. Sea $\widehat{V} = [\widehat{V}_1|...|\widehat{V}_p]$ tal que $\widehat{V}\widehat{V} = V^T QQ^T V = V^T I_n V = I_p$. De esta manera se puede construir una matriz $\widehat{V}' \in \mathbb{R}^{pxp}$ seleccionando p de los n renglones de $\widehat{V}$ tal que $\widehat{V}'$ sea no singular. $\widehat{V}'$ tiene la propiedad de no contener eigenvalores iguales a 0; como consecuencia, sus renglones y columnas

no contienen al vector $\widehat{0}$. Al no contenerlo,se sabe que al menos hay p renglones de $\widehat{V}$ tal que $\sum_{j=1}^{p} \widehat{V}_{ji}^2 \neq 0$ para cada uno de ellos. Por otra parte en el lema se asume que la matriz B tiene a lo más $p-1$ eigenvalores iguales 0 por lo que al menos un elemento de la sumatoria es distinto de cero. □

Analizando a mayor profundidad el resultado anterior, se sabe que hay $n-p+1$ eigenvalores de B positivos ($\lambda_{B_i} \neq 0$) y p renglones de $\widehat{V}$ que tienen norma distinta de cero. Al calcular la sumatoria (3.21), se tiene que al menos una combinación de λ_{B_i} y uno de los p renglones cumplen que su multiplicación tiene signo positivo. Para ejemplificar esta situación sean C_i con $i = 1, ..., n-p+1$ los eigenvalores de B y K_j con $j = 1, ..., p$ la norma de los renglones de $\widehat{V}$ que son distintos de 0.

i	λ_{B_i}	$\sum_{j=1}^{p} \widehat{V}_{ji}^2$	$\lambda_{B_i} \sum_{j=1}^{p} \widehat{V}_{ji}^2$
1	C_1	0	0
2	C_2	0	0
⋮	⋮	⋮	⋮
$n-p$	C_{n-p}	0	0
$n-p+1$	C_{n-p+1}	K_p	$C_{n-p+1}K_p$
$n-p+2$	0	K_{p-1}	0
⋮	⋮	⋮	⋮
$n-1$	0	K_2	0
n	0	K_1	0

Con esta combinación se tiene que al menos hay un sumando de $\sum_{i=1}^{n} \lambda_{B_i} \sum_{j=1}^{p} \widehat{V}_{ji}^2$ distinto de cero, por lo que $Tr(V^T BV) \neq 0$. Bajo estas condiciones se garantiza que el denominador sea mayor a 0, solo falta asegurarse que el numerador sea menor a infinito.

Lema 3.2. *Sea* $U_p = \{V \in \mathbb{R}^{nxp} | V^T V = I_p\}$ *un conjunto compacto con* $V = (v_1, v_2, ..., v_p)$

Demostración. Se tiene que U_p es un conjunto cerrado porque contiene a todos sus puntos límite; por otro lado, U_p también es acotado bajo la norma 2 y la norma de Frobenius:

Tomando la norma-2 y la norma de Frobenius de V:

$$\begin{aligned} ||V||_2 =& Max\{||V_x||_2 \quad | \quad ||x||_2 = 1\} \\ =& ||V_x||_2^2 \\ =& (Vx)^T(Vx) \\ =& x^T V^T V x \\ =& x^T x = 1 \\ ||V||_F =& \sum_F^p ||v_i|| = p \end{aligned}$$

Entonces se tiene U_p es cerrado y acotado, por lo que U_p es compacto. □

Con este resultado se tiene que $Tr(V^T AV)$ toma un valor finito ya que todas sus entradas son finitas.

Lema 3.3. *Sean A y B dos matrices simétricas tales que B es positiva semi-definida con rango mayor que $n - p$; es decir, que tenga al menos $n - p + 1$ eigenvalores distintos de cero. Entonces el cociente* 3.5 *admite un máximo con valor ρ^* [9].*

Demostración. Tomando el resultado del lema 3.1 se tiene que $Tr(V^T BV) \neq 0$; por otra parte, $V \in U_p$ que es un conjunto compacto. Con estas dos observaciones, el valor de 3.5 es distinto de infinito. Entonces el cociente 3.5 admite un máximo con valor ρ^* y que tiene como argumento V^{**}. □

3.2.4. Equivalencia con un problema escalar

Valor en el óptimo. Del lema 3.3 se sabe que existe una matriz $V^{**} \in U_p$ tal que 3.5 alcanza el valor máximo ρ^*. Expresando esta idea se tiene que:

$$\frac{Tr(V^{T**} AV^{**})}{Tr(V^{T**} BV^{**})} = \rho^* \tag{3.24}$$

Entonces para cualquier otra matriz $V \in U_p$:

$$\frac{Tr(V^T AV)}{Tr(V^T BV)} \leq \rho^* \tag{3.25}$$

Como la traza es un operador lineal y por la propiedad distributiva de las matrices entonces (3.25)es equivalente a:

$$Tr(V^T AV) - \rho^* Tr(V^T BV) \leq 0$$

$$Tr(V^T AV - \rho^* V^T BV) \leq 0$$

$$Tr(V^T (A - \rho^* B)V) \leq 0 \tag{3.26}$$

y el resultado equivalente para (3.24):

$$Tr(V^{T**}(A - \rho^* B)V^{**}) = 0 \tag{3.27}$$

Para facilitar la lectura, de aquí en adelante se define la función $G(\rho) = A - \rho B$. Maximizar el lado izquierdo de la desigualdad (3.26) sujeto a $V^T V = I$ es equivalente a maximizar un problema de eigenvalores generalizado. Usando lo establecido en el apéndice A, se sabe que el valor máximo de este problema dado ρ^*:

$$\underset{\substack{V \in \mathbb{R}^{nxp} \\ V^T V = I}}{\text{máx}} Tr(V^T G(\rho^*)V) = \lambda_{G(\rho^*)_1} + \lambda_{G(\rho^*)_2} + ... + \lambda_{G(\rho^*)_p} \tag{3.28}$$

Con $\lambda_{G(\rho^*)_1} \geq \lambda_{G(\rho^*)_2} \geq ... \geq \lambda_{G(\rho^*)_p}$ los p eigenvalores más grandes de $G(\rho^*)$. De esta manera el valor óptimo de 3.28 es simplemente la suma de los p eigenvalores más grandes de esta matriz, y V^{**} el conjunto de correspondientes eigenvectores. Para obtener este valor y la matriz, el primer paso es encontrar a ρ^*, ya que teniéndolo es inmediato calcular V^{**}. Dada esta premisa, se puede ver que el problema a resolver se reduce a buscar el valor óptimo de ρ. Para esto se define la función $f(\rho)$ sobre todo $\mathbb{R}$, tal que $f(\rho)$ es continua sobre su argumento ρ:

$$f(\rho) = \underset{V^T V = I}{\text{máx}} Tr(V^T (G(\rho))V) \tag{3.29}$$

Es conveniente examinar $f(\rho)$ con dos objetivos, el primero es estimar la dificultad de calcular el valor de $f(\rho)$ y el segundo es encontrar la maximización

adecuada para obtener ρ^*. Respecto al primer punto, la manera de calcular $f(\rho)$ en cada punto es equivalente a 3.28, pero en lugar de usar los eigenvalores de $G(\rho^*)$ se usan los de $G(\rho)$. En particular se llamará $V(\rho)^*$ al argumento que resuelve (3.29) [1]. Sean $\lambda_{G(\rho)_1} \geq \lambda_{G(\rho)_2} \geq ... \geq \lambda_{G(\rho)_n}$ los n eigenvalores de $G(\rho)$. Con esta notación $f(\rho)$ toma el valor de:

$$f(\rho) = \lambda_{G(\rho)_1} + \lambda_{G(\rho)_2} + ... + \lambda_{G(\rho)_p} \tag{3.30}$$

Para el segundo punto, la idea es iterar hasta obtener el valor de ρ^*. Por esto, es conveniente analizar como se comporta la función con respecto a su argumento. A continuación se presentan dos propiedades de $f(\rho)$. Para demostrarlas, primero se enuncia el teorema 8.1.5 de [6].

Teorema 3.1. *Sean X y $X+E$ matrices simétricas nxn, y λ_{X_k}, λ_{E_k} los $k-$esimos eigenvalores más grandes de X y E respectivamente. De esta manera λ_{X_1} es el eigenvalor más grande de X y λ_{E_1} el más grande de E. Con estas definiciones se cumple lo siguiente:*

$$\lambda_{X_k} + \lambda_{E_n} \leq \lambda_{(X+E)_k} \leq \lambda_{X_k} + \lambda_{E_1} \tag{3.31}$$

Se procede a enunciar este lema acerca de la función $f(\rho)$

Lema 3.4. *La función $f(\rho) = \text{máx}_{V^TV=I}\, Tr(V^T(A-\rho B)V)$ cumple las siguientes dos propiedades:*

(1) f es una función no creciente de ρ
(2) $f(\rho) = 0$ si y solo si $\rho = \rho^*$

Para probar la parte (1) del lema 3.4 se comparan los valores de $f(\rho)$ para ρ_1 y ρ_2 con $\rho_2 \geq \rho_1$. Como se desea demostrar que f es una función no creciente de ρ, se busca que $f(\rho_2) \leq f(\rho_1)$. Se definen las matrices $Y = X+E$ y $E = Y-X$, para después restarles λ_{X_k}, entonces 3.30 se puede escribir como:

$$\lambda_{(X)_k} + \lambda_{(Y-X)_n} \leq \lambda_{(Y)_k} \leq \lambda_{(X)_k} + \lambda_{(Y-X)_1}$$

[1] Se utilizó la nomenclatura de $V(\rho^*)$ porque estos eigenvectores dependen del valor de ρ en la matriz $A-\rho B$.

$$\lambda_{(Y-X)_n} \leq \lambda_{(Y)_k} - \lambda_{(X)_k} \leq \lambda_{(Y-X)_1}$$

La expresión en el centro de estas desigualdades es la resta del eigenvalor $k-esimo$ de la matriz X y Y, por lo que si se realiza la suma de $k=1$ a $k=p$ se tiene lo siguiente:

$$p\lambda_{(Y-X)_n} \leq \sum_{k=1}^{p} \lambda_{(Y)_k} - \sum_{k=1}^{p} \lambda_{(X)_k} \leq p\lambda_{(Y-X)_1} \tag{3.32}$$

Definiendo $X = A - \rho_2 B$ y $Y = A - \rho_1 B$, entonces 3.32 toma la siguiente forma:

$$p\lambda_{(B(\rho_2-\rho_1))_n} \leq \sum_{k=1}^{p} \lambda_{(A-\rho_1 B)_k} - \sum_{k=1}^{p} \lambda_{(A-\rho_2 B)_k} \leq p\lambda_{(B(\rho_2-\rho_1))_1} \tag{3.33}$$

Retomando el resultado 3.30, y sustituyéndolo en 3.33 la desigualdad queda de la siguiente forma:

$$p\lambda_{(B(\rho_2-\rho_1))_n} \leq f(\rho_1) - f(\rho_2) \leq p\lambda_{(B(\rho_2-\rho_1))_1} \tag{3.34}$$

En la parte izquierda de la desigualdad anterior, se puede a determinar el signo que toman los eigenvalores $\lambda_{(B(\rho_2-\rho_1))_n}$. Si $(\rho_2 - \rho_1) \geq 0$ entonces la matriz $(\rho_2 - \rho_1)B$ es positiva semidefinida; por lo tanto, todos sus eigenvalores son mayores o iguales a 0:

$$0 \leq p\lambda_{(B(\rho_2-\rho_1))_n} \leq f(\rho_1) - f(\rho_2) \leq p\lambda_{(B(\rho_2-\rho_1))_1}$$

$$0 \leq f(\rho_1) - f(\rho_2) \tag{3.35}$$

De esta manera $f(\rho_2) \leq f(\rho_1)$ cuando $\rho_2 \geq \rho_1$

Para probar la parte (2) del lema 3.4, se tiene que demostrar la condición suficiente y la condición necesaria. La demostración de la primera es inmediata, ya que cuando $\rho = \rho^*$, entonces por 3.27, $f(\rho) = 0$. Para la condición necesaria se usará (3.24) y la propiedad que la $Tr(V^T BV) > 0 \ \forall \ V \in U_p$. Se demostrará que, dado $f(\rho^*) = 0$, entonces:

$$(i) \quad f(\rho) < 0 \quad si \quad \rho > \rho^* \tag{3.36}$$

$$(ii) \quad f(\rho) > 0 \quad si \quad \rho < \rho^* \tag{3.37}$$

Caso (i) $\rho > \rho^*$

Se tiene que las siguientes desigualdades se cumplen:

$$\frac{Tr(V^T AV)}{Tr(V^T BV)} \leq \rho^* < \rho$$

Por lo que es equivalente a:

$$Tr(V^T(A - \rho B)V) < 0 \quad \forall V \in U_p$$

De esta manera $f(\rho) < 0$ cuando $\rho > \rho^*$.

(ii) $\rho < \rho^*$

Retomando el resultado (3.25) y suponiendo que $\rho^* > \rho$ entonces existe una V^* tal que:

$$\rho < \frac{Tr(V^{T*} AV^*)}{Tr(V^{T*} BV^*)} \leq \rho^*$$

$$Tr(V^{T*} AV^* - \rho V^{T*} BV^*) > 0 \quad \Longrightarrow \quad \frac{Tr(V^{T*} AV^*)}{Tr(V^{T*} BV^*)} > \rho$$

En particular:

$$\max_{V^T V} \frac{Tr(V^T AV)}{Tr(V^T BV)} > \rho$$

De esta manera $f(\rho) > 0$ cuando $\rho < \rho^*$.

Las ecuaciones (3.36) (3.37), junto con la continuidad de la funcion f, muestran que $f(\rho) = 0$ implica $\rho = \rho^*$ [9]. De esta manera el problema puede ser visto como encontrar la raíz de la función $f(\rho)$.

Corolario 3.1. *La función* $f(\rho) = \max_{V^T V = I} Tr(V^T(A - \rho B)V)$ *cumple las siguientes condiciones:*

$$f(\rho) > 0 \quad \forall \quad \rho \in (-\text{ínf}, \rho^*)$$
$$f(\rho) < 0 \quad \forall \quad \rho \in (\rho^*, \text{ínf})$$

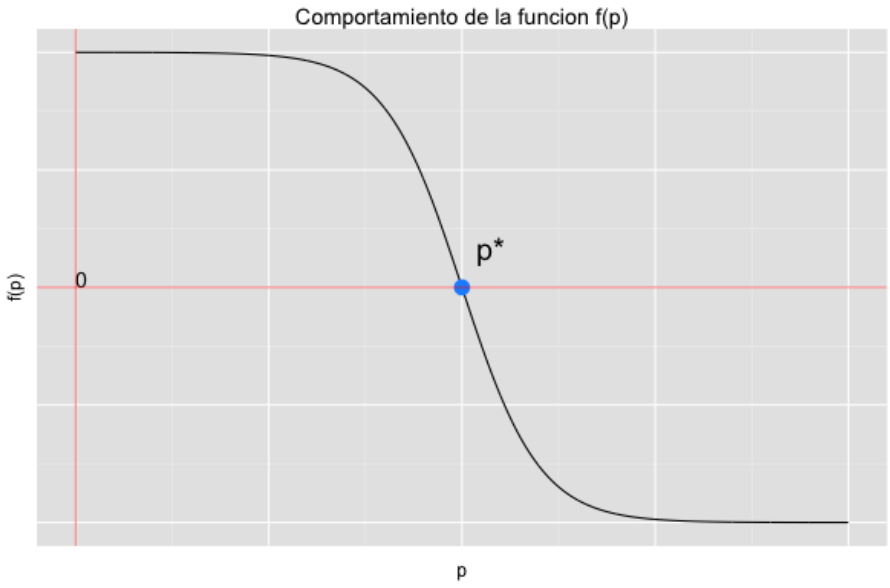


Figura 3.3: La función $f(\rho)$ es no creciente para toda ρ. El valor de $f(\rho) = \lambda_{G(\rho)1} + \lambda_{G(\rho)2} + ... + \lambda_{G(\rho)p}$. $f(\rho^*) = 0$

Ejemplo 3.1. *Para ejemplificar el lema 3.1 se muestran las matrices* $A, B \in \mathbb{R}^{3x3}$. *Para el valor de* $f(\rho)$ *se utiliza la propiedad 3.30:*

$$f(\rho) = \lambda_{G(\rho)1} + \lambda_{G(\rho)2} + ... + \lambda_{G(\rho)p}$$

con p la dimensión a la que se va a proyectar.

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1.5 & 0 & 0 \\ 0 & 2.5 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix}$$

$$G(\rho) = A - \rho B = \begin{pmatrix} 4 - 1.5\rho & 0 & 0 \\ 0 & 6 - 2.5\rho & 0 \\ 0 & 0 & 8 - 5\rho \end{pmatrix}$$

Los eigenvalores de esta matriz son $4 - 1.5\rho$, $6 - 2.5\rho$ *y* $8 - 5\rho$. *Las funciones graficadas de estos eigenvalores son los siguientes:*

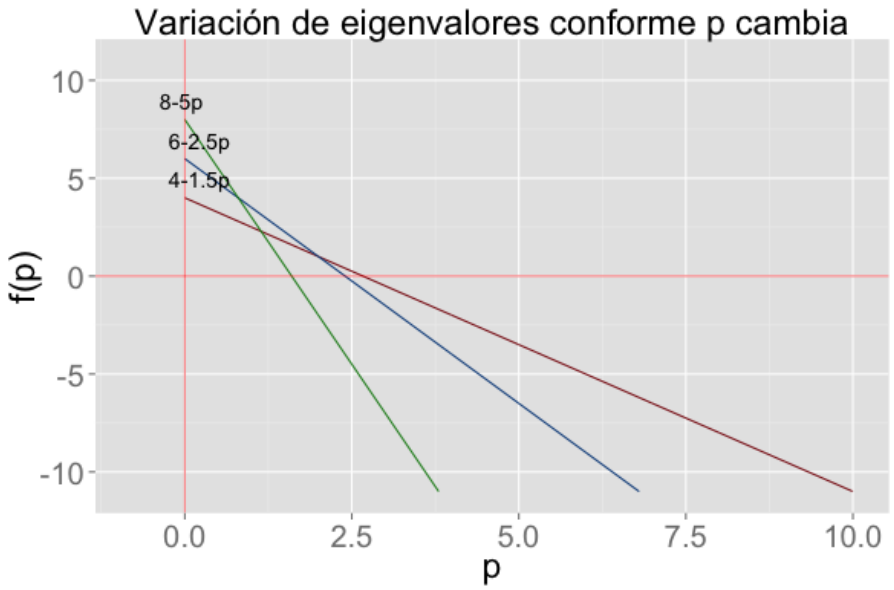


Figura 3.4: Grafica de los eigenvalores en función de ρ

Cuando se desea que el proyector sea de dimensión 1, entonces se tiene que $f(\rho)$ *es el eigenvalor más grande, cuando sea de dimensión 2, la suma de los dos más grandes y así respectivamente. El valor de* $f(\rho)$ *para estos tres casos está representado en las siguientes gráficas:*

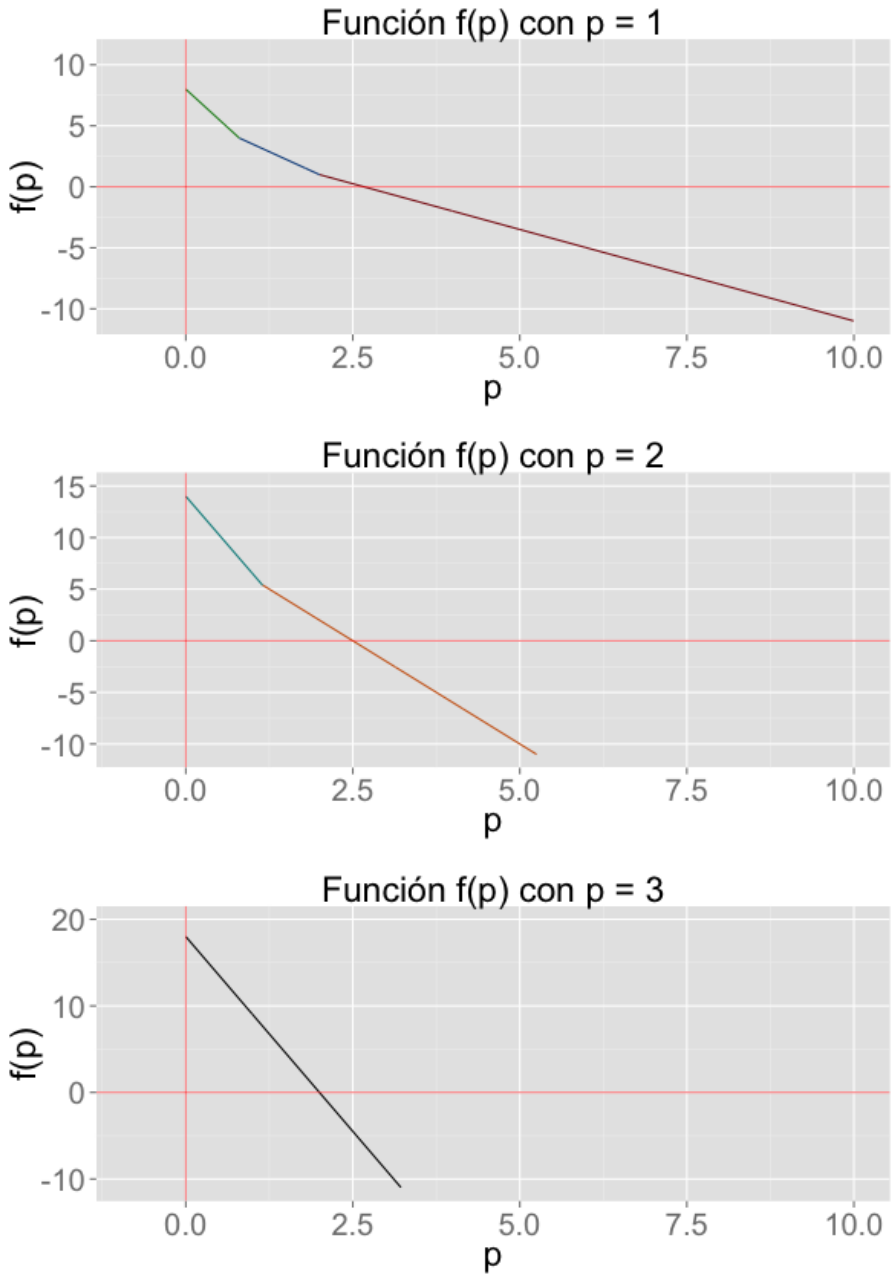


Figura 3.5: f(p) para proyectores de 1,2 y 3 dimensiones

En este ejemplo se puede ver fácilmente que cualquier proyector $f(\rho)$ es estrictamente decreciente.

3.2.5. Localización del óptimo

En la sección anterior se encontró que la maximización al cociente de trazas puede ser visto como el problema de encontrar la raíz de la función $f(\rho) = max_{V^TV=I} Tr(V^T(A - \rho B)V)$. Por esto, encontrar un intervalo (ρ_1, ρ_2) que contenga al valor óptimo ρ^* puede reducir el número de iteraciones del método. Usando el lema 3.4 se sabe que f es una función no creciente de ρ. Por esta razón si se encuentra una ρ_1 y ρ_2 tal que $f(\rho_1) \geq 0$ y $f(\rho_2) \leq 0$ y con la propiedad de continuidad de la funcion $f(\rho)$ entonces se encontró un intervalo que contiene a ρ^*.

En esta tesis se dan cotas para el valor de ρ^*, la primera en función los eigenvalores de una transformación de $B - \rho A$ y la segunda en función de los eigenvalores de B y A [9]. La demostración de cada una requiere del conocimiento del concepto de inercia y del Teorema de la Inercia de Sylvester. Por este motivo se presentan a continuación: [2]

Definición 3.1. *La inercia de una matriz simétrica A es la tripleta de enteros no negativos (m, z, p) donde m, z y p son respectivamente el número de eigenvalores negativos, cero y positivos de A [6].*

Teorema 3.2. *Sea $A \in \mathbb{R}^{nxn}$ una matriz simétrica y $Z \in \mathbb{R}^{nxn}$ no singular. Entonces A y Z^TAZ tienen la misma inercia [6].*

Proposición 3.4. *La raiz ρ^* de $f(\rho)$ está localizada en el intervalo (λ_p, λ_1) donde λ_p es el p-ésimo eigenvalor más grande de $Z^T(A - \rho B)Z$.*

Demostración. Sea Z la matriz que diagonaliza a $A - \rho B$ de manera que[3]:

$$\begin{aligned} Z^TAZ &= \Lambda \\ Z^TBZ &= I \end{aligned} \tag{3.38}$$

[2] La demostración de este teorema puede ser encontrada en [6].
[3] El calculo de esta matriz puede obtenerse en el algoritmo 8.7.1 de [6]

Con Λ una matriz diagonal y $\mu_1, ...\mu_n$ sus respectivos eigenvalores e I la identidad de tamaño n. Entonces por el teorema 3.2 se sabe que $A - \rho B$ y $Z^T(A - \rho B)Z = \Lambda - \rho I$ tienen el mismo número de eigenvalores positivos, negativos y cero. Por lo tanto, la matriz en cuestión es de la siguiente forma:

$$\Lambda - \rho I = \begin{pmatrix} \mu_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mu_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mu_n \end{pmatrix} - \rho \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \tag{3.39}$$

Como la matriz V de 3.5 es de tamaño nxp, solo nos interesa saber el signo de los p eigenvalores más grandes. Tomando $\rho = \mu_p$ entonces los elementos de la diagonal de la matriz $\Lambda - \rho I$ son de la forma:

$$\begin{aligned} \mu_i - \mu_p \geq 0 \quad para \quad i \geq p \\ \mu_i - \mu_p \leq 0 \quad para \quad i \leq p \end{aligned} \tag{3.40}$$

Los primeros p elementos tienen la propiedad de ser no negativos, ya que $\lambda_{(A-\rho B)_1} \geq \lambda_{(A-\rho B)_2} \geq ... \geq \lambda_{(A-\rho B)_p}$. Usando el teorema 3.2 se sabe que los primeros p eigenvalores de $A - \rho B$ también son no negativos. Por ende la suma de ellos es mayor o igual que cero.

Por otro lado si se toma $\rho = \mu_1$. Entonces los elementos de la diagonal de la matriz 3.39 son de la forma:

$$\mu_i - \mu_1 \leq 0 \quad \forall \quad i \tag{3.41}$$

Con $i = 1, ..., p$, cada uno de los elementos de la diagonal tiene la propiedad de ser no positivo por el mismo argumento que el caso pasado. Por lo tanto los p eigenvalores más grandes de $\Lambda - \rho I$ y de $A - \rho B$ son no positivos, por lo que su suma es menor o igual que cero:

$$\rho = \mu_p \Rightarrow \sum_{i=1}^{p} (\mu_i - \mu_p) \geq 0 \Rightarrow f(\rho) \geq 0 \tag{3.42}$$

$$\rho = \mu_1 \Rightarrow \sum_{i=1}^{p} (\mu_i - \mu_1) \leq 0 \Rightarrow f(\rho) \leq 0 \tag{3.43}$$

□

Ejemplo 3.2. *Tomando las matrices A,B iguales que en el ejercicio 3.1, se puede encontrar fácilmente a la matriz Z:*

$$Z = \begin{pmatrix} \sqrt{(\frac{1}{1.5})} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{(\frac{1}{2.5})} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{(\frac{1}{5})} \end{pmatrix}$$

Con la matriz Z definida de esta manera, $Z^T AZ = \Lambda$ y $Z^T BZ = I$ toman la siguiente forma:

$$\Lambda - \rho I = \begin{pmatrix} \frac{4}{1.5} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{6}{2.5} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{8}{5} \end{pmatrix} - \rho \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Entonces se puede encontrar un intervalo talque $\rho^* \in [\rho_1, \rho_2]$:

$$\rho_1 = \mu_p$$
$$\rho_2 = \mu_1$$

Conforme el tamaño de la dimensión a proyectar cambia, las cotas son las siguientes:

$$\begin{aligned} p = 1 \Rightarrow \quad & \rho_1 = \frac{4}{1.5} \quad y \quad \rho_2 = \frac{4}{1.5} \\ p = 2 \Rightarrow \quad & \rho_1 = \frac{4}{1.5} \quad y \quad \rho_2 = \frac{6}{2.5} \\ p = 3 \Rightarrow \quad & \rho_1 = \frac{4}{1.5} \quad y \quad \rho_2 = \frac{8}{5} \end{aligned}$$

Estas cotas se pueden var más facil en las graficas de $f(\rho)$ para distintas p:

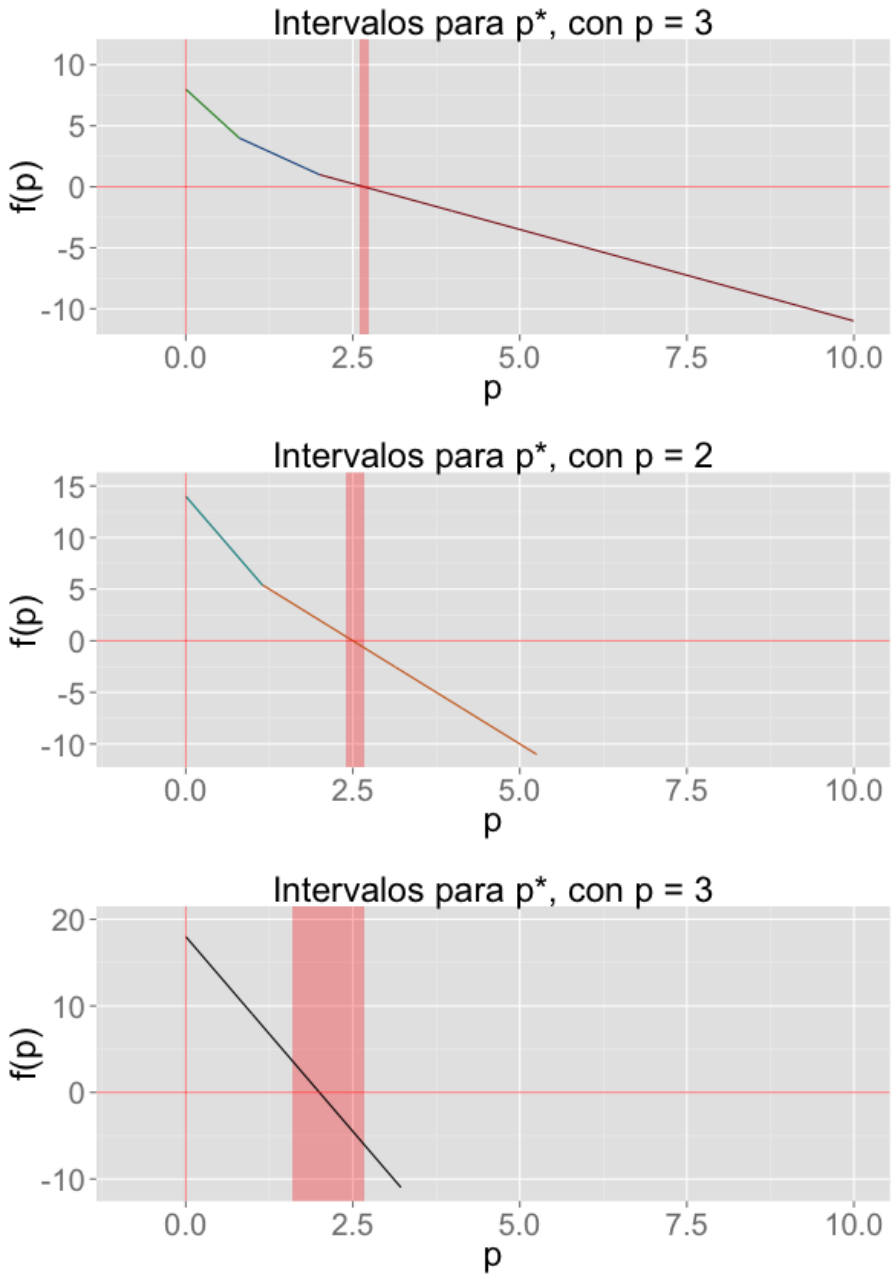


Figura 3.6: Intervalos para ρ^* con p = 1,2,3

Otro intervalo que se ha desarrollado tiene que ver con directamente con los eigenvalores de A y B en lugar de los obtenidos por la matriz $A - \rho B$:

Proposición 3.5. *Sea B positiva definida, entonces la raíz ρ^* de $f(\rho)$ es tal que [9]:*

$$\frac{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{A_i}}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{B_i}} \leq \rho^* \leq \frac{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{(A)_i}}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{(B)_{n-i+1}}}$$

con λ_{A_i} y λ_{B_i} el i-ésimo eigenvalor más grande de la matriz A y B respectivamente [9].

Demostración. Se tiene la propiedad que para una p dada:

$$\max_{V^T V = I} Tr(V^T A V) = Tr(V^{T*} A V^*) = \sum_{i=1}^{p} \lambda_{A_i} \tag{3.44}$$

Con λ_{A_i} los eigenvalores de A. Como esta V^* maximiza la traza sobre A, entonces no necesariamente maximiza la de B. Al sustituirla en $Tr(V^T B V)$ se tiene que:

$$Tr(V^{T*} B V^*) \leq \sum_{i=1}^{p} \lambda_{B_i} \tag{3.45}$$

Con λ_{B_i} los eigenvalores de B. Al hacer el cociente de (3.44) y (3.45) Se puede acotar inferiormente a ρ^*:

$$\frac{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{A_i}}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{B_i}} \leq \frac{Tr(V^{T*} A V^*)}{Tr(V^{T*} B V^*)} \leq \max_{V^T V} \frac{Tr(V^T A V)}{Tr(V^T B V)} = \rho^*$$

Ahora falta acotarlo superiormente. Usando las siguientes propiedades que son derivadas de 3.28:

$$Tr(V^T A V) \leq \sum_{i=1}^{p} \lambda_{A_i} \tag{3.46}$$

$$Tr(V^T B V) \geq \sum_{i=1}^{p} \lambda_{B_{(n-i+1)}} \tag{3.47}$$

La expresión 3.47 es la suma de los p eigenvalores más chicos de B. Dividiendo 3.46 entre 3.47 se tiene que para cualquier matriz ortogonal V:

$$\frac{Tr(V^T AV)}{Tr(V^T BV)} \leq \frac{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{A_i}}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{B_{(n-i+1)}}} \tag{3.48}$$

En particular si se toma $V = V^{**}$ (La matriz con la que se alcanza ρ^*):

$$\rho^* = \frac{Tr(V^{T**} AV^{**})}{Tr(V^{T**} BV^{**})} \leq \frac{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{A_i}}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{B_{(n-i+1)}}} \tag{3.49}$$

□

Ejemplo 3.3. *Para ejemplificar esta cota se usará las matrices A y B de los dos ejemplos anteriores:*

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1.5 & 0 & 0 \\ 0 & 2.5 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix}$$

(i) Para $p = 1$ la cota es la siguiente:

$$\lambda_{A_1} = 8 \qquad \lambda_{B_1} = 5 \qquad \lambda_{B_3} = 1.5$$

$$\rho_1 = \frac{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{A_i}}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{B_i}} = \frac{8}{5} \qquad \rho_2 = \frac{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{A_i}}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{B_{n-i+1}}} = \frac{8}{1.5}$$

(ii) Para $p = 2$ la cota es la siguiente:

$$\sum_{i=1}^{2} \lambda_{A_1} = 14 \qquad \sum_{i=1}^{2} \lambda_{B_1} = \quad 7.5 \qquad \sum_{i=1}^{2} \lambda_{B_{3-i+1}} = 4$$

$$\rho_1 = \frac{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{A_i}}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{(B_i)}} = \frac{14}{7.5} \qquad \rho_2 = \frac{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{A_i}}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{B_{n-i+1}}} = \frac{14}{4}$$

(iii) Para $p = 3$ la cota es la siguiente:

$$\sum_{i=1}^{3} \lambda_{A_1} = 18 \qquad \sum_{i=1}^{3} \lambda_{B_1} = 9 \qquad \sum_{i=1}^{3} \lambda_{B_{n-i+1}} = 9$$

$$\rho_1 = \frac{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{A_i}}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{B_i}} = \frac{18}{9} \qquad \rho_2 = \frac{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{A_i}}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{B_{n-i+1}}} = \frac{18}{9}$$

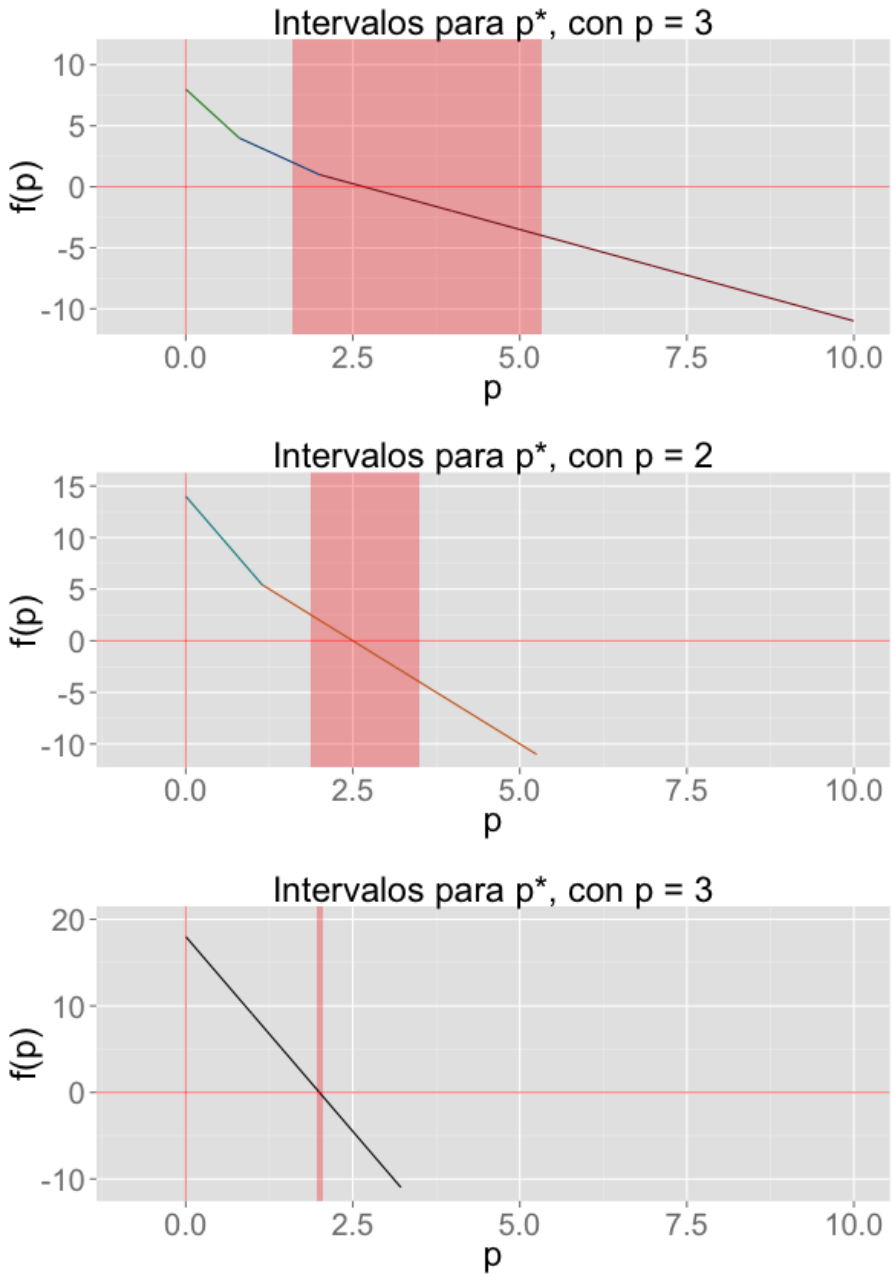


Figura 3.7: Intervalos para ρ^* con p = 1,2,3

Capítulo 4

El Método Newton-Lanczos

En el capítulo anterior se propuso una función no creciente $f(\rho)$ cuya raíz resulta ser la solución óptima para el problema del Discriminante Lineal de Fisher:

$$f(\rho) = \max_{V^T V = I} Tr(V^T(S_E - \rho S_I)V) \tag{4.1}$$

El algoritmo propuesto para encontrar la solución recibe el nombre de Newton-Lanczos [9]. Para entenderlo a profundidad, se explicarán brevemente los métodos de Lanczos que tridiagonalizan una matriz simétrica, para después calcular eficientemente los primeros (últimos) eigenvalores. Después, será implementado junto al método iterativo de Newton, que calcula el nuevo valor de ρ_n para cada paso. Para esto, se requiere el cómputo de la derivada de $f(\rho)$, por lo que se desarrollará su forma analítica. Finalizando, se proporcionarán las condiciones necesarias de optimalidad.

La primera división de los métodos para calcular eigenvectores y eigenvalores que propone J. Demmel [2] depende si la matriz es simétrica o no lo es. Después hace una sub-clasificación dependiendo si el método es iterativo o directo. Para este texto solo se calcularán los eigenvalores de matrices simétricas, por lo que el procedimiento a seguir sera el siguiente:

- Tridiagonalizar la matriz simétrica por un método iterativo
- Encontrar los eigenvalores por medio de la iteración tridiagonal QR (LA-

PACK DSTEVD)

4.1. Métodos de Lanczos

Antes de presentar los métodos de Lanczos, se dará una breve introducción acerca del costo computacional del algoritmo QR y la importancia de tridiagonalizar la matriz [2]. Sea $A \in \mathbb{R}^{nxn}$, entonces su descomposición QR toma $O(n^3)$ flops. Suponiendo el mejor escenario en el que cada eigenvalor se encuentra con una iteración, tomaría $O(n^4)$ flops para calcular todos los eigenvalores de una matriz. Por otra parte, al tridiagonalizar la matriz A se reduce el costo computacional de la descomposición QR a $O(n^2)$ flops. De esta manera, tomaría $O(n^3)$ flops encontrar todos los eigenvalores. Una descripción más detallada del costo computacional de los algoritmos puede encontrarse en [2].

El primer paso, la tridiagonalización, ha sido muy estudiado y existen algoritmos especializados para distintos tipos de matrices simétricas. Si la matriz es de gran dimensión y rala, entonces se recomienda usar el método de Lanczos [6]. En otro caso, existen las transformaciones Householder y las rotaciones de Givens [6]. El método de Lanczos realiza tridiagonalizaciones parciales de la matriz original A, donde cada una es de tamaño pxp con $p \leq n$. Un aspecto interesante es que las matrices parciales van aproximando los eigenvectores extremos antes que la tridiagonalización esté completa. Por este motivo, el algoritmo es usado cuando se requieren solo algunos de los eigenvalores. Con respecto al costo computacional, es del orden $O(n^3)$, por lo que el algoritmo completo se mantiene en el mismo orden.

Lanczos en aritmética exacta tiene muchas ventajas computacionales y converge rápidamente a los eigenvalores reales, pero con aritmética inexacta es difícil usarlo en la práctica [6]. El problema que se presenta es que los eigenvectores van perdiendo la ortogonalidad entre ellos conforme la dimensionalidad y las iteraciones incrementan. Los textos [2] [6] incluyen algoritmos para solucionar este problema.

En la siguiente subsección se presentará el algoritmo original de Lanczos; se ejemplificará como los eigenvalores de la matriz tridiagonal convergen a los originales y se presenta el problema de *ghost eigenvalues* [2], que son los eigenvalores

que surgen al perder la ortogonalidad en aritmética inexacta.

4.1.1. Algoritmo de Lanczos

El algoritmo de Lanczos busca calcular los elementos de esta matriz tridiagonal directamente. Definiendo $Q^T AQ = T$, con $Q = [q_{(1)} \mid q_{(2)} \mid ... \mid q_{(n)}]$ ortogonal, y T_n tridiagonal igual a:

$$T_n = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & & \\ & \beta_3 & \alpha_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} & \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_{n-1} & \beta_n \\ 0 & & & & \beta_n & \alpha_n \end{pmatrix}, \tag{4.2}$$

Como $q_{(1)}$ es una columna de Q, entonces $q_1^T = [q_{11},\ q_{21},\ ...,\ q_{n1}]$. De esta manera, se tiene que $AQ = QT$. Descomponiendo la multiplicación $AQ = [Aq_{(1)} \mid Aq_{(2)} \mid ... \mid Aq_{(n)}]$ e igualándola a cada columna de QT, se tiene que $Aq_{(1)}$ [6]:

$$\begin{aligned} Aq_{(1)} = \ & q_{(1)(1)}\alpha_{(1)} + q_{(1)(2)}\beta_{(2)} + \\ & q_{(2)(1)}\alpha_{(1)} + q_{(2)(2)}\beta_{(2)} + \\ & \vdots \qquad\qquad \vdots \\ & q_{(n)(1)}\alpha_{(1)} + q_{(n)(2)}\beta_{(2)} \\ Aq_{(1)} = \ & \alpha_{(1)}q_{(1)} + \beta_{(2)}q_{(2)} \end{aligned}$$

Ahora, para $i = 2, ..., n-1$

$$\begin{aligned} Aq_{(i)} = \ & q_{(i-1)(i-1)}\beta_{(i)} + q_{(i-1)(i)}\alpha_{(i)} + q_{(i-1)(i+1)}\beta_{(i+1)} + \\ & q_{(i)(i-1)}\beta_{(i)} + q_{(i)(i)}\alpha_{(i)} + q_{(i)(i+1)}\beta_{(i+1)} + \\ & \vdots \qquad\qquad\qquad \vdots \\ & q_{(n)(i-1)}\beta_{(i)} + q_{(n)(i)}\alpha_{(i)} + q_{(n)(i+1)}\beta_{(i+1)} \\ Aq_{(i)} = \ & \beta_{(i)}q_{(i-1)} + \alpha_{(i)}q_{(i)} + \beta_{(i+1)}q_{(i+1)} \end{aligned}$$

Por último, para Aq_n:

$$\begin{aligned} Aq_{(n)} = \quad & q_{(1)(n)}\alpha_{(n)} \quad + \quad q_{(1)(n-1)}\beta_{(n)} \quad + \\ & q_{(2)(n)}\alpha_{(n)} \quad + \quad q_{(2)(n-1)}\beta_{(n)} \quad + \\ & \vdots \qquad\qquad\qquad \vdots \\ & q_{(n)(n)}\alpha_{(n)} \quad + \quad q_{(n)(n-1)}\beta_{(n)} \\ Aq_{(n)} = \quad & \alpha_{(n)}q_{(n)} \qquad + \quad \beta_{(n)}q_{(n-1)} \end{aligned}$$

Si se define $q_{(0)} = 0$, entonces se puede resumir el paso como:

$$Aq_{(i)} = \beta_{(i)}q_{(i-1)} + \alpha_{(i)}q_{(i)} + \beta_{(i+1)}q_{(i+1)} \tag{4.3}$$

para $i = 1, ...n-1$. Multiplicando esta expresión por $q_{(i)}^T$, y usando el supuesto de ortogonalidad, entonces $q_{(i)}^T q_{(j)} = 0$ con $i \neq j$. De esta manera resulta la siguiente expresión:

$$q_{(i)}^T Aq_{(i)} = q_{(i)}^T \alpha_{(i)} q_{(i)} \quad = \alpha_{(i)} \tag{4.4}$$

Por otra parte, despejando $\beta_{(i+1)}q_{(i+1)}$ de 4.3, se tiene que

$$\begin{aligned} \beta_{(i+1)}q_{(i+1)} =& Aq_{(i)} - \beta_{(i)}q_{(i-1)} - \alpha_{(i)}q_{(i)} \\ =& (A - \alpha_{(i)}I)q_{(i)} - \beta_{(i)}q_{(i-1)} = r_{(i)} \end{aligned} \tag{4.5}$$

Con la ecuación 4.5, $q_{(i+1)} = \frac{r_{(i)}}{\beta_{(i+1)}}$. Calculando la norma de $r_{(i)}$, se tiene que

$$\begin{aligned} ||r_{(i)}||_2 =& |\beta_{(i+1)}|||q_{(i+1)}||_2 \\ =& |\beta_{(i+1)}| \end{aligned} \tag{4.6}$$

Cuando $r_k = 0$ entonces la iteración se detiene. [6]

Implementación en aritmética exacta

Sea $A \in \mathbb{R}^{nxn}$ una matriz simétrica y $q_i \in \mathbb{R}^{nx1}$. Entonces el algoritmo que se presenta a continuación produce una matriz $T_k \in \mathbb{R}^{kxk}$ tridiagonal tal que los eigenvalores de T_k convergen a los de la matriz original A [6].

$q_0 \leftarrow 0$;
$r_0 \leftarrow$ vector aleatorio;
$\beta_1 \leftarrow ||r_0||_2$;
$q_1 \leftarrow r_0/\beta_1$;
$\alpha_1 \leftarrow q_1^T A q_1$;
$eps = 0.0000001$;
$k = 1$;
while *($\beta_k > eps$)* **do**
    $r_k \leftarrow Aq_k - \alpha_k q_k - \beta_k q_{k-1}$;
    $\beta_{k+1} \leftarrow ||r_{k-1}||_2$;
    $q_{k+1} \leftarrow r_{k+1}/\beta k + 1$;
    $\alpha_{k+1} \leftarrow q_{k+1}^T A q_{k+1}$;
    $k \leftarrow k + 1$;
end

Algorithm 1: Algoritmo de Lanczos

Ejemplo 4.1. *Se usará la iteración 4.3 y las formulas 4.4, 4.6 para calcular α_i y β_i. La matriz del ejemplo es de dimensión 10 generada con cada elemento generado aleatoriamente entre los valores $(0, 1)$. A continuación se muestra la matriz, pero esta se encuentra redondeada a dos dígitos decimales. Se tomó un ejemplo pequeño para que no aparezcan los ghost eigenvalues, pero se mostrará también como aparecen al modificar el tamaño de la matriz de $10x10$ a $30x30$.*

$$A = \begin{pmatrix} 0.11 & 0.62 & 0.62 & 0.01 & 0.69 & 0.84 & 0.3 & 0.83 & 0.2 & 0.5 \\ 0.62 & 0.61 & 0.86 & 0.23 & 0.54 & 0.29 & 0.16 & 0.05 & 0.26 & 0.68 \\ 0.62 & 0.86 & 0.64 & 0.67 & 0.28 & 0.27 & 0.04 & 0.46 & 0.99 & 0.48 \\ 0.01 & 0.23 & 0.67 & 0.51 & 0.92 & 0.19 & 0.22 & 0.27 & 0.81 & 0.24 \\ 0.69 & 0.54 & 0.28 & 0.92 & 0.29 & 0.23 & 0.81 & 0.3 & 0.55 & 0.77 \\ 0.84 & 0.29 & 0.27 & 0.19 & 0.23 & 0.32 & 0.53 & 0.51 & 0.65 & 0.07 \\ 0.3 & 0.16 & 0.04 & 0.22 & 0.81 & 0.53 & 0.91 & 0.18 & 0.31 & 0.31 \\ 0.83 & 0.05 & 0.46 & 0.27 & 0.3 & 0.51 & 0.18 & 0.76 & 0.62 & 0.72 \\ 0.2 & 0.26 & 0.99 & 0.81 & 0.55 & 0.65 & 0.31 & 0.62 & 0.33 & 0.5 \\ 0.5 & 0.68 & 0.48 & 0.24 & 0.77 & 0.07 & 0.31 & 0.72 & 0.5 & 0.15 \end{pmatrix},$$

Los eigenvalores originales de esta matriz con una epsilon de 0.0000001 son:

4.65	*1.17*	*1.02*	*0.78*	*0.38*	*-0.09*	*-0.45*	*-0.62*	*-0.93*	*-1.27*

Ahora, para esta matriz se aplicó el algoritmo de Lanczos con distintas k, por lo que se generaron tridiagonalizaciones parciales de distintos tamaños. Los eigenvalores generados en cada una de estas matrices son los siguientes.

$It.$	$Val1$	$Val2$	$Val3$	$Val4$	$Val5$	$Val6$	$Val7$	$Val8$	$Val9$
3	*4.65*	*0.43*	*-1.18*						
6	*4.65*	*1*	*0.6*	*-0.07*	*-0.65*	*-1.27*			
9	*4.65*	*1.12*	*0.98*	*0.74*	*0.35*	*-0.1*	*-0.58*	*-0.91*	*-1.27*

Como se observa, los eigenvalores comienzan a converger a los originales conforme las iteraciones aumentan. En la décima iteración, el método alcanza los eigenvalores originales. Como la literatura menciona [6], los eigenvalores más grandes en valor absoluto comienzan a aparecer desde antes de que el método acabe la iteración. Por ejemplo, el eigenvalor 4.65, aparece desde la segunda iteración; el eigenvalor más chico, -1.27, converge desde la quinta iteración y así se van aproximando cada uno. Ahora, los eigenvectores se pueden encontrar multiplicando los eigenvectores de T_k por la matriz $Q = [q_1, q_2, ..., q_k]$. De esta manera, $Q \in \mathbb{R}^{nxk}$ y $Q^T T_K \in \mathbb{R}^{nxk}$.

En el segundo ejemplo, cuando la matriz es de $30x30$*, los primero 10 eigenvalores de la matriz original son:*

15.45	*2.8*	*2.48*	*2.39*	*1.77*	*1.71*	*1.24*	*1.13*	*0.93*	*0.9*

Mientras que los 10 primeros eigenvectores encontrados por el método de Lanczos son:

15.45	*15.45*	*15.43*	*2.8*	*2.48*	*2.39*	*1.77*	*1.71*	*1.24*	*1.12*

En este ejemplo, el primer eigenvector, producto punto el ultimo tienen el valor 0.6648781*, por lo que se claramente que se ha perdido la ortogonalidad*

Para hacer frente a la pérdida de ortogonalidad entre los vectores, se han creado distintos métodos, los cuales se basan en la reortogonalización de la base de vectores. Esta puede realizarse en $O(n^2)$ operaciones, por lo que no afecta el orden de $O(n^3)$ flops.

4.2. Derivada de $f(\rho)$

La fórmula analítica de la derivada de $f(\rho)$ se puede obtener con cálculo multivariado. Para encontrarla, sea $V(\rho) \in \mathbb{R}^{nxp}$ una función diferenciable con respecto a ρ. Esta cumple la característica de ser una matriz ortogonal con columnas:

$$V(\rho) = (v_1(\rho) \mid v_2(\rho) \mid ... \mid v_p(\rho))$$

Antes de calcular la derivada de $f(\rho)$, es conveniente examinar la derivada de $V(\rho)^T V(\rho)$ con respecto a ρ. Sea $V(\rho)$ una matriz ortogonal; es decir, que cumpla $V^T(\rho)V(\rho) = I$, entonces [9]:

$$\frac{d}{d\rho}V(\rho)^T V(\rho) = \left(\frac{d}{d\rho}V(\rho)^T\right) V(\rho) + V(\rho)^T \left(\frac{d}{d\rho}V(\rho)\right)$$

la derivada de $V(\rho)$ no se conoce explícitamente, pero se puede derivar componente a componente. De esta manera:

$$V(\rho)^T V(\rho) = \begin{pmatrix} v_{11}(\rho) & v_{21}(\rho) & \dots & v_{n1}(\rho) \\ v_{12}(\rho) & v_{22}(\rho) & \dots & v_{n2}(\rho) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ v_{1p}(\rho) & v_{2p}(\rho) & \dots & v_{np}(\rho) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{11}(\rho) & v_{12}(\rho) & \dots & v_{1p}(\rho) \\ v_{21}(\rho) & v_{22}(\rho) & \dots & v_{2p}(\rho) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ v_{n1}(\rho) & v_{n2}(\rho) & \dots & v_{np}(\rho) \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} v_1(\rho)^T \\ v_2(\rho)^T \\ \vdots \\ v_p(\rho)^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1(\rho) & v_2(\rho) & \dots & v_p(\rho) \end{pmatrix}$$

Entonces la entrada (i, j) de $V(\rho)^T V(\rho)$ es:

$$[V(\rho)^T V(\rho)]_{ij} = v_i(\rho)^T v_j(\rho)$$

Calculando la derivada:

$$\frac{d}{d\rho}[V(\rho)^T V(\rho)]_{ij} = \left(\frac{d}{d\rho} v_i(\rho)^T\right) v_j(\rho) + v_i(\rho)^T \left(\frac{d}{d\rho} v_j(\rho)\right)$$

En específico para el caso $i = j$:

$$\frac{d}{d\rho}[V(\rho)^T V(\rho)]_{ii} = 2\left(\frac{d}{d\rho} v_i(\rho)^T\right) v_i(\rho) \tag{4.7}$$

Lema 4.1. *Sea $V(\rho) \in \mathbb{R}^{nxp}$ una matriz ortogonal y ρ su parámetro. Entonces [9]:*

$$(i) \quad \frac{d}{d\rho} V(\rho)^T V(\rho) = \left(\frac{d}{d\rho} V(\rho)^T\right) V(\rho) + V(\rho)^T \left(\frac{d}{d\rho} V(\rho)\right) = 0$$
$$(ii) \quad Diag\left(\left(\frac{d}{d\rho} V^T\right) V(\rho)\right) = 0$$

Demostración. (i) Para demostrar la primer propiedad se hace uso de que $V(\rho)^T V(\rho) = I_p$, entonces:

$$\frac{d}{d\rho}[V(\rho)^T V(\rho)] = 0$$

(ii) Se parte de la ecuación 4.7, y se usa el punto (i):

$$\frac{d}{d\rho}[V(\rho)^T V(\rho)]_{ii} = 2\left(\frac{d}{d\rho}v_i(\rho)^T\right)v_i(\rho) = 0$$

Como cada elemento i es cero, entonces en particular $Diag\left(\left(\frac{d}{d\rho}V(\rho)^T\right)V(\rho)\right) = 0$. □

Del lema 4.1 se tiene que $\left(\frac{d}{d\rho}V(\rho)^T\right)V(\rho)$ tiene diagonal igual a 0. Ahora, para derivar $f(\rho)$, primero se deriva la expresión $\frac{d}{d\rho}\left[V^T(A-\rho B)V\right]$:

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\rho}\left[V^T(A-\rho B)V\right] &= \frac{d}{d\rho}\left[V^TAV\right] - \frac{d}{d\rho}\left[V^T\rho BV\right] \\ &= \frac{dV^T}{d\rho}AV + V^TA\frac{dV}{d\rho} - \frac{dV^T}{d\rho}\rho BV - V^T\left[BV + \rho B\left(\frac{dV}{d\rho}\right)\right] \\ &= \frac{dV^T}{d\rho}\left[A-\rho B\right]V + V^T\left[A-\rho B\right]\frac{dV}{d\rho} - V^TBV\end{aligned} \tag{4.8}$$

Sea V la matriz que diagonaliza $(A-\rho B)$, de manera que $V^T(A-\rho B)V = D$. Entonces 4.8:

$$\frac{d}{d\rho}\left[V^T(A-\rho B)V\right] = \frac{dV^T}{d\rho}VD + DV^T\frac{dV}{d\rho} - V^TBV \tag{4.9}$$

Al calcular la traza de 4.9 y usando del lema 4.1, se tiene que:

$$\begin{aligned}Tr\left[\frac{d}{d\rho}\left[V^T(A-\rho B)V\right]\right] &= Tr\left[\frac{dV^T}{d\rho}VD + DV^T\frac{dV}{d\rho} - V^TBV\right] \\ &= 2Tr\left[DV^T\frac{dV}{d\rho}\right] - Tr\left[V^TBV\right] \\ &= -Tr\left[V^TBV\right]\end{aligned} \tag{4.10}$$

4.3. Método Newton-Lanczos

El método de Newton, establece que la iteración está dada por:

$$x_{(n+1)} = x_{(n)} - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

con $f'(x_n)$ la derivada de $f(x_n)$

Con esta fórmula y con 4.10, se puede calcular explícitamente ρ_{n+1} para la iteración de Lanczos [9]:

$$\begin{aligned}\rho_{n+1} =& \rho_n - \frac{Tr\left[V^T(A-\rho_n B)V\right]}{-Tr\left[V^T BV\right]} \\ =& \frac{\rho_n Tr\left[V^T BV\right] + Tr\left[V^T(A-\rho_n B)V\right]}{Tr\left[V^T BV\right]} \\ =& \frac{\rho_n Tr\left[V^T BV\right] + Tr\left[V^T AV\right] - \rho_n Tr\left[V^T BV\right]}{Tr\left[V^T BV\right]} \\ =& \frac{Tr\left[V^T AV\right]}{Tr\left[V^T BV\right]}\end{aligned} \tag{4.11}$$

Una vez calculado el paso de la iteración, se enuncia el método de Newton-Lanczos para maximizar el cociente de trazas. El método recibe como entrada la matriz A, B y la dimensión a la cual se desea proyectar p [9]:

i = 1;
ρ_1 un número aleatorio;
ρ_0;
$f(\rho_1) = \sum_{j=1}^{p} \lambda_{(A-\rho_1 B)_j}$;
V = primeros p eigenvectores de $A - \rho_1 B$;
$tol = 1e-10$;
while *($i < 50$, $abs(\rho_i - \rho_{i-1})> tol$)* **do**
    $i = i + 1$;
    V = primeros p eigenvectores de $(A - \rho_i B)$;
    $\rho_i = Tr(V^T AV)/Tr(V^T BV)$;
    $f(\rho_i) = \sum_{j=1}^{p} \lambda_{(A-\rho_i B)_j}$;
end

Algorithm 2: Algoritmo de Newton-Lanczos

4.3.1. Condiciones necesarias de optimalidad

Considerando el problema de maximizar las trazas:

$$\max_{\substack{V\in\mathbb{R}^{nxp} \\ V^T V = I}} \frac{Tr(V^T S_E V)}{Tr(V^T S_I V)} \tag{4.12}$$

La función lagrangiana asociada a este problema es la siguiente [9]:

$$L(V,\Gamma) = \frac{Tr(V^T S_E V)}{Tr(V^T S_I V)} - Tr[\Gamma(V^T V - I)]$$

Con $\Gamma \in \mathbb{R}^{pxp}$, la matriz de multiplicadores de Lagrange de la forma:

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \gamma_{(1)(1)} & \gamma_{(1)(2)} & \cdots & \gamma_{(1)(p-1)} & \gamma_{(1)(p)} \\ \gamma_{(2)(1)} & \gamma_{(2)(2)} & \cdots & \gamma_{(2)(p-1)} & \gamma_{(2)(p)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \gamma_{(p-1)(1)} & \gamma_{(p-1)(2)} & \cdots & \gamma_{(p-1)(p-1)} & \gamma_{(p-1)(p)} \\ \gamma_{(p)(1)} & \gamma_{(p)(2)} & \cdots & \gamma_{(p)(p-1)} & \gamma_{(p)(p)} \end{pmatrix},$$

Ya que al multiplicar esta matriz por $[V^T V - I]$ (con $V = (v_1 \mid v_2 \mid ... \mid v_{p-1} \mid v_p)$) se tiene que:

$$V^T V - I = \begin{pmatrix} v_1^T v_1 - 1 & v_1^T v_2 & \ldots & v_1^T v_{p-1} & v_1^T v_p \\ v_2^T v_1 & v_2^T v_2 - 1 & \ldots & v_2^T v_{p-1} & v_2^T v_p \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ v_{p-1}^T v_1 & v_{p-1}^T v_2 & \ldots & v_{p-1}^T v_{p-1} - 1 & v_{p-1}^T v_p \\ v_p^T v_1 & v_p^T v_2 & \ldots & v_p^T v_{p-1} & v_p^T v_p - 1 \end{pmatrix},$$

entonces, la diagonal de $(\Gamma(V^T V - I))$ contiene p elementos que son los siguientes:

$$\begin{pmatrix} \gamma_{(1)(1)}(v_1^T v_1 - 1) & +\gamma_{(1)(2)}(v_2^T v_1) & +\ldots & +\gamma_{(1)(p)}(v_p^T v_1) \\ \gamma_{(2)(1)}(v_1^T v_2) & +\gamma_{(2)(2)}(v_2^T v_2 - 1) & +\ldots & +\gamma_{(2)(p)}(v_p^T v_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \gamma_{(p-1)(1)}(v_1^T v_{p-1}) & +\gamma_{(p-1)(2)}(v_2^T v_{p-1}) & +\ldots & +\gamma_{(p-1)(p)}(v_p^T v_{p-1}) \\ \gamma_{(p)(1)}(v_1^T v_p) & +\gamma_{(p)(2)}(v_2^T v_p) & +\ldots & +\gamma_{(p)(p)}(v_p^T v_p - 1) \end{pmatrix},$$

Para calcular la traza se suman estos elementos de la diagonal. De esta forma, se tienen p restricciones de la forma $v_i^T v_i = 1 \quad i = 1, ..., p$ y $p(p-1)$ restricciones de la forma $v_i^T v_j = 0 \quad i \neq j, \quad i, j = 1, ..., p$, cada una con su multiplicador lagrangiano.

Como la ecuación a maximizar tiene un maximizador global V^*, entonces existe un multiplicador matricial lagrangiano tal que en el óptimo:

$$\frac{\partial \mathcal{L}(V^*, \Gamma^*)}{\partial V} = 0 \qquad con \qquad V^{T*}V^* = I \tag{4.13}$$

Para encontrar (V^*, Γ^*) de 4.13, primero se debe conocer la derivada de $\frac{\partial Tr(V^T MV)}{\partial V}$, con M cualquier matriz:

$$\frac{\partial Tr(V^T MV)}{\partial V} = (M^* + M)V \tag{4.14}$$

Derivando el lagrangiano 4.13 y utilizando 4.14 se tiene que:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{L}(V,\Gamma)}{\partial V} = \quad & \left[\frac{\partial Tr(V^T AV)}{\partial V}\right]\left[Tr(V^T BV)^{-1}\right] \quad + \\
& \left[Tr(V^T AV)\right]\left[\frac{\partial (Tr(V^T BV))^{-1}}{\partial V}\right] \quad - \\
& \left[\frac{\partial Tr[\Gamma(V^T V - I)]}{\partial V}\right] \\
\frac{\partial \mathcal{L}(V,\Gamma)}{\partial V} = \quad & [2AV]\left[Tr(V^T BV)^{-1}\right] \quad + \\
& \left[Tr(V^T AV)\right]\left[\frac{2BV}{Tr(V^T BV)^2}\right] \quad - \\
& [V(\Gamma^* + \Gamma)] \\
\frac{\partial \mathcal{L}(V,\Gamma)}{\partial V} = \quad & \left[\frac{2AVTr(V^T BV) - 2BVTr(V^T AV)}{(Tr(V^T BV))^2}\right] \quad + \\
& [V(\Gamma^* + \Gamma)]
\end{aligned} \tag{4.15}$$

Igualando 4.15 a cero y acomodando la expresión, resulta:

$$\left[A - \frac{Tr(V^{T*}AV^*)}{Tr(V^{T*}BV^*)}B\right]V^* = \left[\frac{Tr(V^{T*}BV^*)}{2}V^*(\Gamma^{T*} + \Gamma^*)\right]$$

$$\left[A - \rho^* B\right]V^* = \left[\frac{Tr(V^{T*}BV^*)}{2}V^*(\Gamma^{T*} + \Gamma^*)\right] \tag{4.16}$$

Con $\rho^* = \frac{Tr(V^{T*}AV^*)}{Tr(V^{T*}BV^*)}$. Sea Q la matriz ortogonal que diagonaliza $\Gamma^{T*} + \Gamma^*$, entonces se puede escribir la expresión $(\Gamma^{T*} + \Gamma^*)$ como:

$$\left(\Gamma^{T*} + \Gamma^*\right) = Q\Sigma^* Q^T \qquad con \qquad Q^T Q = I$$

Con Σ^* una matriz diagonal. Multiplicando 4.16 por V^{T*} y calculando la traza de ambos lados de la ecuación y se tiene que:

$$Tr\left[V^{T*}(A-\rho^*B)V^*\right] = \left[\frac{Tr(V^{T*}BV^*)}{2}\right] Tr(\Gamma^{T*}+\Gamma^*)$$

$$Tr(\Gamma^{T*}+\Gamma^*) = 2\frac{Tr(V^{T*}(A-\rho^*B)V^*)}{Tr(V^{T*}BV^*)} = 0$$

$$Tr(Q\Sigma^*Q^T) = 2\frac{Tr(V^{T*}(A-\rho^*B)V^*)}{Tr(V^{T*}BV^*)} = 0 \tag{4.17}$$

Como $Tr(V^{T*}(A-\rho^*B)V^*) = 0$ entonces $Tr(Q\Sigma^*Q^T) = 0$, por lo que $Tr(\Sigma^*) = 0$. Definiendo $U^* = V^*Q$, con $U^*U = I$, la expresión 4.16 se puede escribir como:

$$\begin{aligned}
[A-\rho^*B]\,V^* &= \left[\frac{Tr(V^{T*}BV^*)}{2}V^*(Q\Sigma^*Q^T)\right] \\
[A-\rho^*B]\,U^* &= \left[\frac{Tr(V^{T*}BV^*)}{2}U^*Q^{T*}(Q\Sigma^*Q^T)Q\right] \\
[A-\rho^*B]\,U^* &= \left[\frac{Tr(V^{T*}BV^*)}{2}U^*\Sigma^*\right]
\end{aligned}$$

Definiendo $\Lambda_* = \frac{Tr(V^{T*}BV^*)}{2}\Sigma^*$, entonces:

$$\begin{aligned}
[A-\rho^*B]\,U^* &= U^*\Lambda_* \\
U^{T*}\,(A-\rho^*B)\,U^* &= \Lambda_* \\
Tr(U^{T*}\,(A-\rho^*B)\,U^*) &= Tr(\Lambda_*) = 0
\end{aligned} \tag{4.18}$$

De esta manera se tiene que la ecuación 4.18 es la condición necesaria para que U^*, ρ^* sean las óptimas

Capítulo 5

Experimentos numéricos

Para probar el desempeño del algoritmo Newton-Lanczos se utilizarán dos conjuntos de datos que se pueden descargar libremente de internet bajo una licencia no comercial. El algoritmo se comparará con otros dos métodos, donde los criterios para elegir al mejor serán la tasa de reconocimiento y el tiempo de cómputo.

En el primer experimento se usará la base de datos MNIST (*Mixed National Institute of Standards and Technology*), la cual contiene datos de 70,000 dígitos escritos a mano que se usan comúnmente para probar códigos de procesamiento de imágenes. Esta base de datos surge de la colaboración de Yann LeCun del Instituto Courant (NYU), de Corinna Cortes de Google Labs (NY) y de Christopher J.C. Burges de Microsoft Research en Redmond. Puede descargarse de la página Web *yann.lecun.com/exdb/mnist*, cuyo link sigue vigente al 13 de marzo del 2016.

La segunda será la base JAFFE *Japanese Female Facial Expression*, que consta de 213 fotos provenientes de 10 personas distintas. Este conjunto de datos fue creado inicialmente para clasificar emociones, pero se usa comúnmente para probar otros tipos de algoritmos de clasificación. Fue creado por Michael Lyons, Miyuki Kamachi y Jiro Gyoba en el departamento de psicología de la universidad de Kyushu. La base de datos puede descargarse de la página Web *www.kasrl.org/jaffe.html*, cuyo link sigue vigente al 13 de marzo del 2016.

Ambos conjuntos presentan una dimensionalidad muy alta, ya que son imágenes

y cada píxel se convierte en una variable. Por ejemplo, las imágenes de los rostros tienen un tamaño de 256x256 píxeles, por lo que cada individuo consta de 65,536 columnas. Para este conjunto, se tiene la ventaja que son pocas imagenes a analizar, entonces es computacionalmente accesible para ordenadores de uso doméstico. En cambio, los números tienen una dimensionalidad de 784 columnas (28x28 pixeles), pero 70,000 individuos.

El lenguaje de programación usado es R en su versión 3.2.2 *Fire Safety*. Los cálculos fueron realizados en una iMac 3.2 Ghz Intel Core i3 con 12 GB de RAM.

5.1. Desempeño del método de Lanczos

Antes de realizar los experimentos numéricos, se evaluará el desempeño del algoritmo de Lanczos comparado con el cálculo original de los eigenvectores (Singular Value Decomposition, SVD). La matriz con la que se evaluó el algoritmo fue $A - \rho B$ con A y B las matrices de dispersión intra clase y entre clase de la base de datos MNIST y con $\rho = 3$. Debido a que se aplicó una fase de reducción dimensional en primera instancia (*Principal Component Analysis, PCA*), la dimensión de estas matrices es de 193 x 193.

Es importante recordar que los algoritmos de Lanczos en aritmética inexacta presentan el problema de *Ghost eigenvalues* (eigenvalores que se repiten, pero que son espurios) [6]. Estos se originan porque la ortogonalidad entre los eigenvectores se pierde conforme el número a calcular aumenta. Este problema ha dado origen a algoritmos modificados como: Lanczos con reortogonalización completa y Lanczos con ortogonalización selectiva. En esta tesis se probó la reortogonalización completa.

Para encontrar el tiempo que tarda el método de Lanczos en calcular los primeros k eigenvectores [1], se realizaron 30 repeticiones para cada k propuesta, después se calculó el tiempo promedio de cómputo. Para el caso de la descomposición en valores singulares, se realizaron 30 repeticiones para encontrar el tiempo promedio de la factorización (en teoría, debe tardar lo mismo todas las repeticiones, pero por cuestiones inherentes al procesador, estas llegan a tener

[1] Esto se realizó con la función DSTEV de LAPACK

una diferencia minúscula). Los resultados se presentan en la siguiente figura:

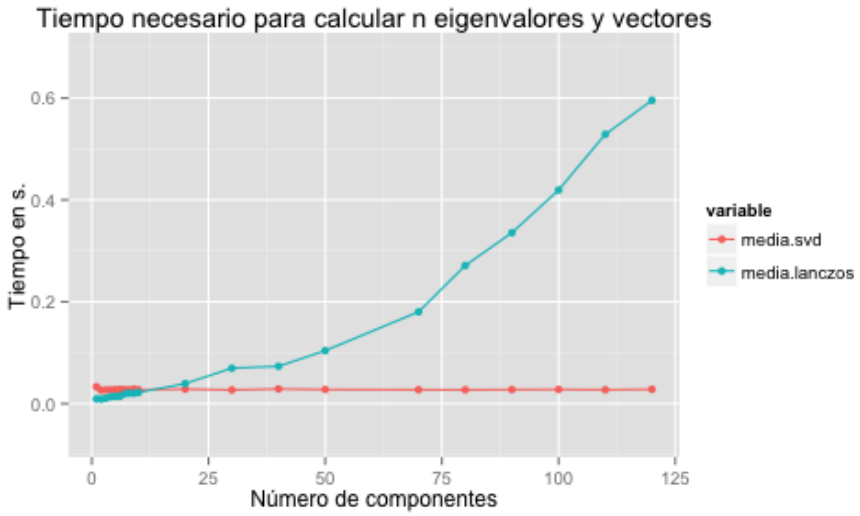


Figura 5.1: Comparación entre Lanczos y SVD

En la figura se observa que el algoritmo de Lanczos es más rápido que la factorización SVD de la matriz completa, por lo que, para proyecciones menores a 10, conviene usar Lanczos. Los datos puntuales (en segundos) están en la siguiente tabla:

$Comp$	$Lanczos(s)$	$SVD(s)$	$Comp$	$Lanczos(s)$	$SVD(s)$
1	0.007	0.021	11	0.038	0.021
2	0.008	0.021	12	0.047	0.021
3	0.010	0.021	13	0.069	0.021
4	0.011	0.021	14	0.093	0.021
5	0.014	0.021	15	0.148	0.021
6	0.014	0.021	16	0.193	0.021
7	0.015	0.021	17	0.262	0.021
8	0.018	0.021	18	0.309	0.021
9	0.018	0.021	19	0.384	0.021
10	0.020	0.021	20	0.450	0.021

5.2. Preprocesamiento de las bases y modelos comparados.

El primer paso es encontrar un conjunto de entrenamiento y uno de prueba. No existe un tamaño óptimo predefinido, por lo que en la práctica se prueban distintas combinaciones. En el ejemplo de MNIST, se usaron 400 muestras de cada clase; es decir, cerca del 6 % del total de datos. En cambio, para el ejemplo de JAFFE se utilizaron 5 individuos de cada clase, es decir el 23 % del total.

Una vez seleccionados los conjuntos de entrenamiento y de prueba, se realizó un paso de reducción de dimensionalidad con el fin de eficientar el tiempo en cada método. Para esto, se calcularon las componentes principales (PCA) de las variables originales del conjunto de entrenamiento. En el ejemplo de MNIST, con 193 de las 784 componentes se alcanza a explicar el 95 % de la varianza total; en cambio, con la base de datos de JAFFE, con 50 de las 65536 componentes se alcanza el 95 % de la varianza. Ya con estas bases reducidas se procedió a comparar los métodos.

Los métodos empleados para comparar el desempeño con el Análisis Discriminante Lineal de Fisher iterativo fueron 2. El primero fue una regresión logística multinomial; el segundo, el método original del Análisis Discriminante Lineal Para el primero, se usó la función *multinom* del paquete *nnet*. Esta fue desarrollada por Brian Ripley, profesor de estadística aplicada de la Universidad de Oxford. Para el segundo, el LDA original, se utilizó una modificación de la función *lda* [2] del paquete *MASS*, también fue desarrollada por Brian Ripley.

5.3. MNIST database

Estas imágenes están en un formato especial llamado IDX. Para poderlas convertir en un archivo leíble para R, se utilizó la función *readMNIST* del paquete *darch*. Esta paquetería convierte los archivos a objetos *.RData* (leíbles por *R*). Una vez leída la base de datos, se exploró para verificar la forma de los números. La siguiente figura contiene una extracto de tamaño 225 de todo el conjunto.

[2] La modificación está presentada en los códigos del apéndice B

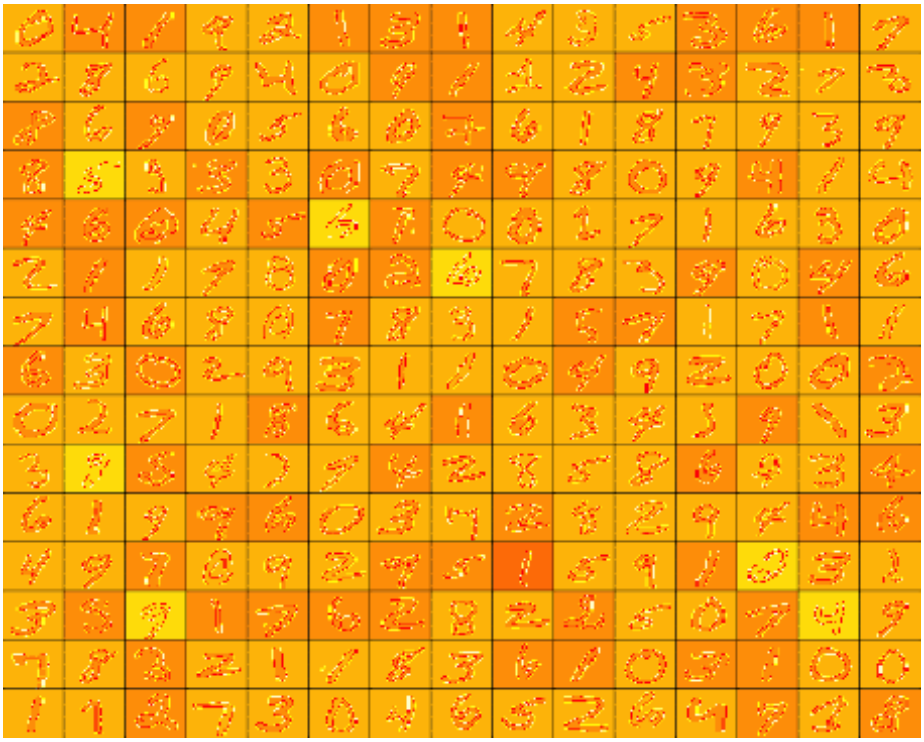


Figura 5.2: Ejemplo de números de la base de datos (MNIST).

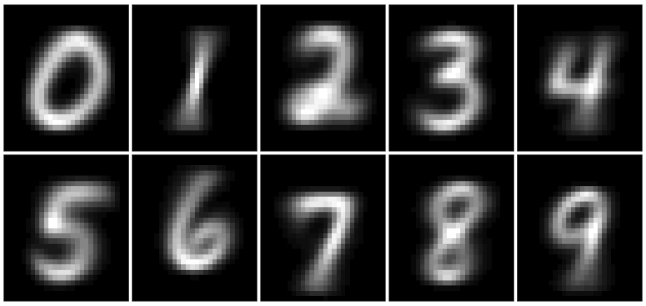


Figura 5.3: Medias de los digitos (MNIST)

Una vez calculadas las componentes principales de los datos del conjunto de entrenamiento, se computaron las matrices de dispersión interna y dispersión entre clases que se necesitan para el discriminante de fisher iterativo [3]. Con

[3]Estas matrices requieren el cómputo de las medias por clase y media total, mostradas en la figura 1.3

estos datos ya es posible ejecutar el programa.

Para analizar el método a mayor detalle, se propone un ejemplo en particular. Este experimento proyectará los datos a un espacio de dimensión 20, se encontrarán las cotas para ρ^*, se mostrará como converge $f(\rho)$ al valor óptimo y al final se mostrará como se comienzan a formar los clústers conforme las iteraciones aumentan. Al terminar el experimento, se probarán distintos valores del espacio de proyección y así, se dará la comparación de resultados y el tiempo que tarda cada uno de los métodos expuestos.

5.3.1. Prueba con espacio de proyección de tamaño 20

Para encontrar un intervalo de la solución, se deben calcular los eigenvalores de la matriz intraclase (B) y de la matriz entre clases(A). Por simplicidad, solo se ejemplificará la segunda cota mencionada en el capítulo 2. Los 20 eigenvalores más grandes y más pequeños de la matriz intraclase (B) son [4]:

12694	10367	7822	6793	6013	5887	5269	4704	4474	3969
3833	3428	3124	3015	2978	2627	2535	2353	2232	2150

73	72	72	71	71	70	70	69	68	68
67	67	66	66	65	64	64	63	63	62

Mientras que los 20 eigenvalores más grandes de la matriz entre clases (A) son:

12865	9821	7408	4736	3558	2312	1879	885	631	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Sustituyendo estos valores en la fórmula de las cotas de la raíz, se tiene que:

$$\frac{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{A_i}}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{B_i}} \leq \rho^* \leq \frac{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{(A)_i}}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{(B)_{n-i+1}}}$$

$$\frac{44099.28}{96277.31} \leq \rho^* \leq \frac{44099.28}{1364.54}$$

[4] los eigenvalores menores a $1e^{-10}$ se consideraron numéricamente como 0

$$0.4580443 \leq \rho^* \leq 32.31806$$

Para el punto inicial de este ejemplo se utilizará el punto medio del intervalo. Los criterios de paro se fijaron con una tolerancia de $1e^{-10}$ y que las iteraciones sean menor a 50. Con este ejemplo, se obtienen los siguientes resultados para ρ y $f(\rho)$:

iter	ρ	$f(\rho)$
1	16.38805180	$-22,326.51$
2	0.03121373	$42,841.16$
3	1.11003833	$15,197.50$
4	2.05957127	$3,926.463$
5	2.50843464	444.8128
6	2.57388828	9.007894
7	2.57526971	.004008613
8	2.57527033	$7.891856e^{-10}$
9	2.57527033	$5.371703e^{-12}$

Para ver gráficamente la función y los pasos en cada iteración, se muestran $(\rho, f(\rho))$ en la siguiente figura. En esta, se parte del punto inicial, que en el ejemplo es $\rho = 16.3880$. La función f, en este punto, toma el valor de $-22,326.51$, por lo que se sabe que en la primer iteración el punto óptimo está a la izquierda del valor actual. Tras la primer iteración, ρ toma el valor de 0.0312, donde f toma el valor de $42,841.16$. Efectivamente ρ se movió a la izquierda. Se puede ver que el valor óptimo estará entre estos dos valores de ρ, ya que un $f(\rho)$ es positivo y uno negativo.

En la gráfica siguiente se puede ver que conforme hay más iteraciones, el cambio de ρ disminuye, hasta converger a un óptimo. En el ejemplo resulta ser 2.57527033. Con esta ρ, $f(\rho)$ debe tomar el valor de 0, pero toma el valor de $5.371703e^{-12}$, ya que nuestro nivel de tolerancia para detener el algoritmo es $1e^{-10}$.

Hay que recordar que se utilizaron las primeras 193 componentes principales de las 784 originales cuando se ejecutó el algoritmo de Newton-Lanczos. Al correrlo, se proyectaron los individuos a un espacio de 20 dimensiones. Es decir,

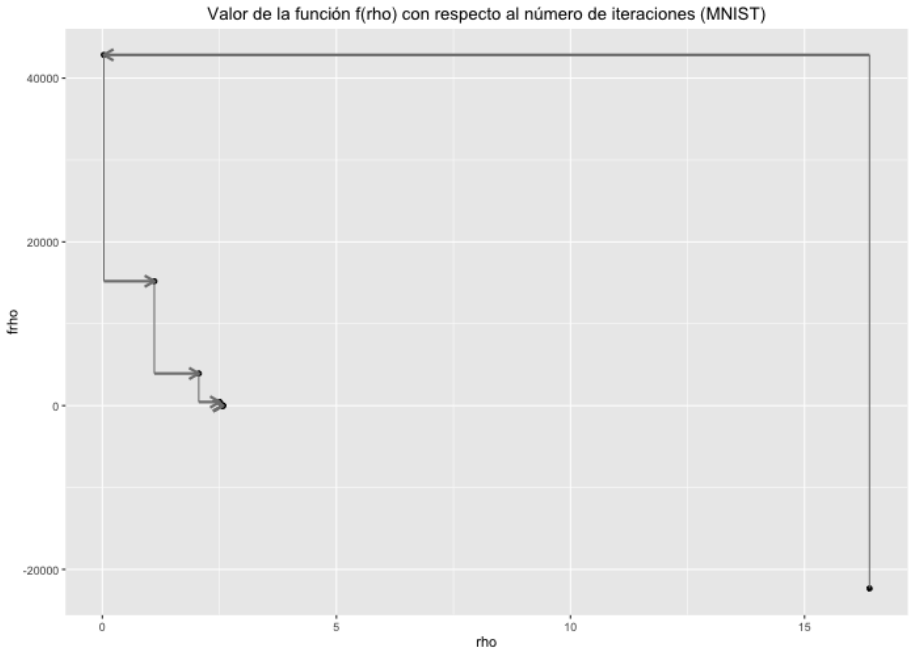


Figura 5.4: Valores de ρ y $f(\rho)$ para distintas iteraciones (MNIST).

cada individuo en lugar de tener 193 componentes, ahora tienen 20. En este espacio, es donde se maximiza la traza de cociente; es decir, se debe ver que los individuos ahora se encuentran agrupados por clases. Se grafic\'o el conjunto de entrenamiento sobre las primeras 4 componentes para las iteraciones 1, 3 y 9. La siguiente figura tiene 6 cuadros. En los dos superiores se ven los datos de la primer iteración proyectados sobre las 4 primeras componentes. La del lado izquierdo en el eje x está la componente 1 y en el y la componente2. Del lado derecho la tercer y cuarta componente en el eje x y y, respectivamente. Los 2 cuadros de en medio presentan la iteración 3, y las dos de abajo la novena iteración.

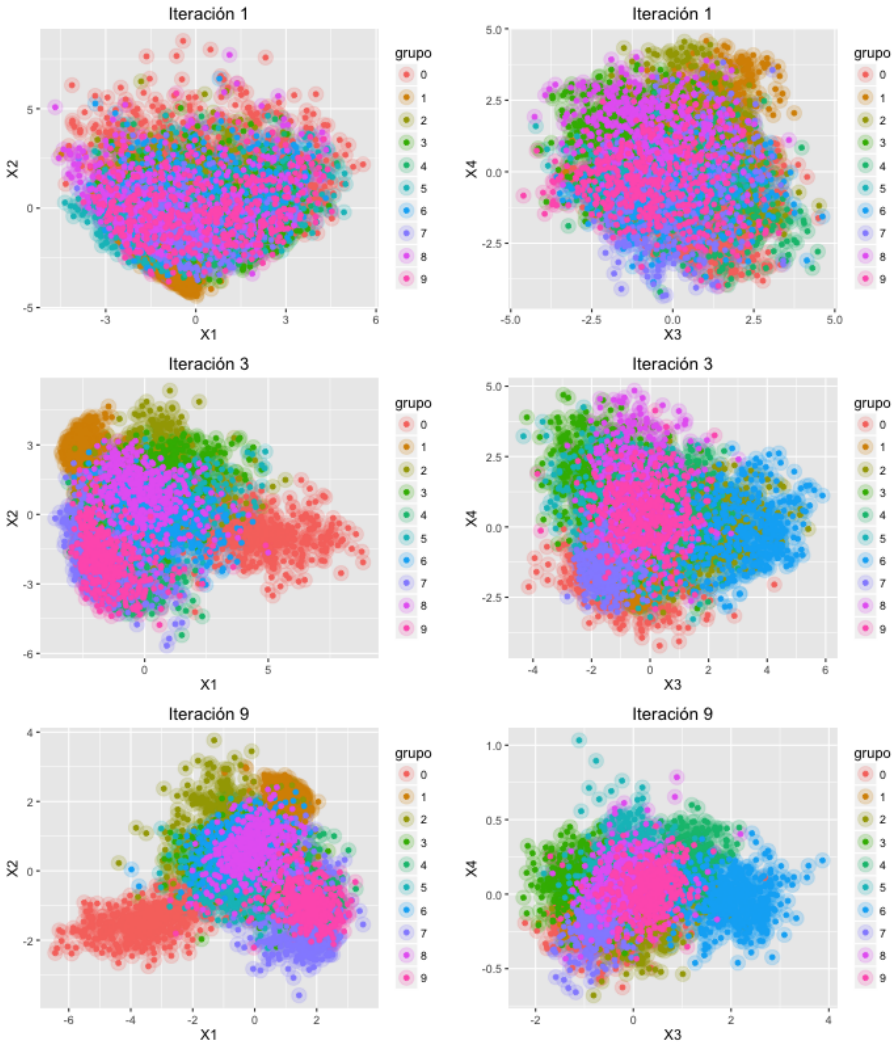


Figura 5.5: Ejemplo de proyección en 20 dimensiones (MNIST)

5.3.2. Comparación con otros métodos

Para comparar los métodos justamente, el número de variables que entran en cada modelo siempre es igual. Para esto, se pueden dividir a los métodos que se propusieron en dos grupos. El primero serían el LDA iterativo y el LDA original. El segundo solo contiene a la regresión logística multinomial.

Para la etapa de entrenamiento, se tomará solamente dicho conjunto de datos.

La idea para el primer grupo de métodos es tomar las primeras 193 componentes principales y calcular un espacio de proyección menor o igual a 193. Para esto, los dos métodos encontrarán las matrices de proyección, de manera que los datos estén un espacio de 2, 5, 10, 15, 20, 40, 60, 80, 100, 120, 140, 160, 180 y 193 dimensiones. Después, se tendrá que asignar a cada individuo un grupo al que se clasificará. Esta selección se realizará con el método de k-vecinos más cercanos y k = 3. Para el caso de la regresión logística multinomial se tomarán como input las primeras 2, 5, 10, 15, 20, 40, 60, ..., 193 componentes principales. De esta manera, se elegirá la clase que tenga una mayor probabilidad posterior de selección.

En la fase de test, se encontrará el error de clasificación y su complemento, la tasa de reconocimiento. Para el primer grupo de métodos, se proyecta el conjunto de prueba con la matriz de proyección encontrada en el entrenamiento. Después de esto se clasifica con 3-vecinos más cercanos. En el caso de la regresión logística multinomial, se toman los coeficientes de la regresión estimados en la fase de entrenamiento y de acuerdo a las fórmulas del capítulo 2, se calculan las probabilidades posteriores de pertenencia. Con esto, se elige aquella clase que tenga probabilidad más alta. El desempeño de los métodos sigue el siguiente comportamiento:

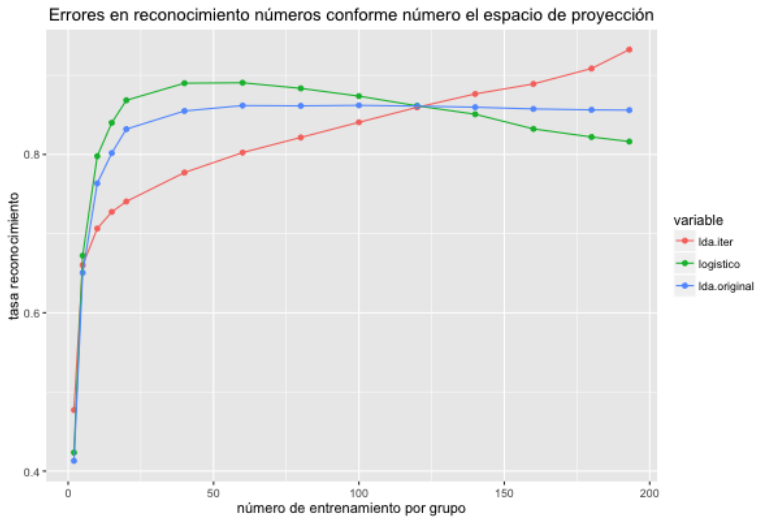


Figura 5.6: Comportamiento de los 3 métodos comparados (MNIST)

5.3.3. Tiempo de ejecución

A continuación, se comparan los tiempos de ejecución de cada método. Para comparar los tiempos de ejecución justamente, se tomaron 3 distintos:

- 1) (PCA) Tiempo para calcular los componentes principales del conjunto de entrenamiento
- 2) (Proyectar) Tiempo para calcular la proyección del conjunto de test
- 3) (Modelo) Tiempo necesario para hacer las operaciones de cada método

PCA(s)	Proyectar(s)
11.728	21.680

Comp	lda.iter	logístico	lda.orig	Comp	lda.iter	logístico	lda.orig
2	0.9092	0.2712	0.01	80	0.9222	4.3186	0.2684
5	0.8576	0.5188	0.0466	100	0.8764	5.6474	0.3572
10	0.864	1.0646	0.025	120	0.8952	8.1026	0.4942
15	0.8768	1.103	0.0372	140	0.9016	9.2944	0.7902
20	0.8886	1.2888	0.0524	160	0.8782	10.1534	0.908
40	0.886	2.5528	0.1004	180	0.898	12.0426	1.0596
60	0.8728	3.2034	0.1744	193	0643	14.2512	1.2186

El tiempo está en segundos (s).

Para cada iteración del método de Newton-Lanczos, se calcularon todos los eigenvalores ya que al no calcular todos, solo se tendrá una aproximación a sus valores y sus eigenvectores. Por este motivo, se decidió sacrificar tiempo de cómputo por precisión.

5.4. JAFFE database

La base de datos JAFFE consiste en rostros de personas con 7 expresiones faciles distintas. Estas se encuentran en un formato *.tiff*, por lo que se requirió la función *readTIFF* del paquete $tiff$ el cual te permite leer y convertirlas en un formato *.RData*. Una vez leída la base de datos, se exploró para verificar la forma de los rostros. La siguiente figura contiene un extracto de tamaño 35 de la base original.

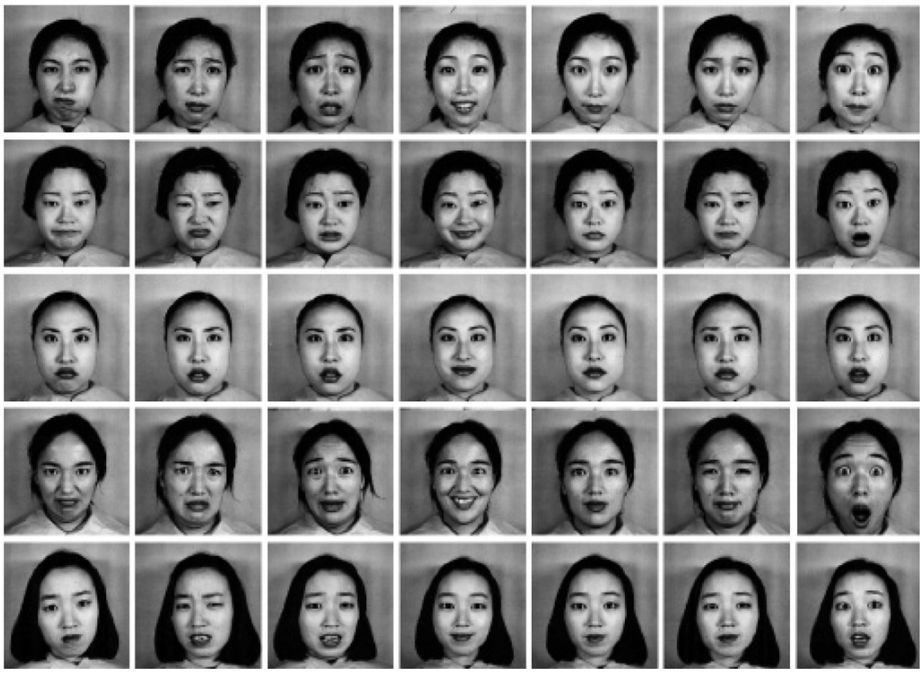


Figura 5.7: Ejemplo de la base de datos (JAFFE).

Para calcular las matrices de dispersión interna y dispersión entre clases, se computaron el rostro promedio por clase y el rostro promedio de todos los individuos. En este ejemplo, contrario al de MNIST, se pueden visualizar ambas medias. Estas se muestran en las siguientes figuras.

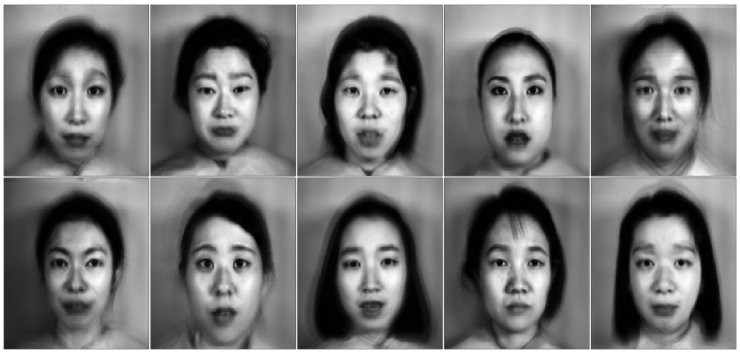


Figura 5.8: Rostros promedio por clase (JAFFE).

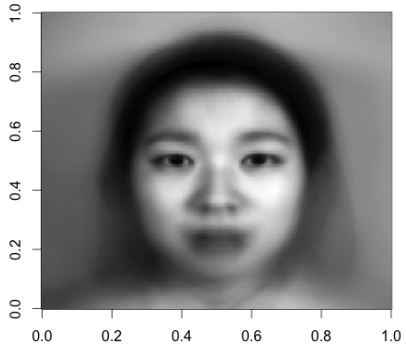


Figura 5.9: Rostro promedio de todas las clases (JAFFE).

Al igual que en el ejemplo de MNIST, se propondrá un ejemplo en particular. En este se proyectará a un espacio de dimensión 20 y se repetirá el ejercicio de la subsección anterior. Al final se realizará la comparación de resultados y de tiempo de cada método. El conjunto de entrenamiento contiene solo 5 rostros de cada persona, por lo que en total son 50 imágenes.

5.4.1. Prueba con espacio de proyección de tamaño 20

Para este conjunto de datos se calcularon los eigenvalores y eigenvectores de la matriz intraclase (B) y la matriz entre clases (A). A continuación se muestran

los 20 eigenvectores más grandes y más pequeños de la matriz B.[5]

5303	4627	2083	1556	1370	1177	851	781	740	705
629	596	562	520	498	466	453	403	397	382

250	245	231	223	219	203	198	192	176	147
141	0	0	0	0	0	0	0	0	0

De la misma manera, se calculan los eigenvalores más grandes de la matriz entre clases (A):

14051	12922	7775	3247	3138	2849	1918	1336	1317	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Usando las formulas del capítulo 2, se tienen las siguientes cotas para ρ^*:

$$\frac{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{A_i}}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{B_i}} \leq \rho^* \leq \frac{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{(A)_i}}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{(B)_{n-i+1}}}$$

$$\frac{48553}{24099} \leq \rho^* \leq \frac{48553}{2225}$$

$$2.0147 \leq \rho^* \leq 21.8216$$

De la misma manera, se utilizará el punto medio del intervalo como punto inicial. Los criterios de paro se fijaron de la misma manera que el ejemplo pasado (tol: $1e^{-10}$ y menos de 50 iteraciones). Con el ejemplo de la base de datos de JAFFE, se pueden calcular los siguientes resultados para ρ y $f(\rho)$ para cada iteración:

$iter$	ρ	$f(\rho)$
1	11.88493	6093.742
2	14.33840	80.44169
3	14.37160	$.01093739e$
4	14.37161	$1.873559e^{-10}$

[5] los eigenvalores menores a $1e^{-10}$ se consideraron numéricamente como 0

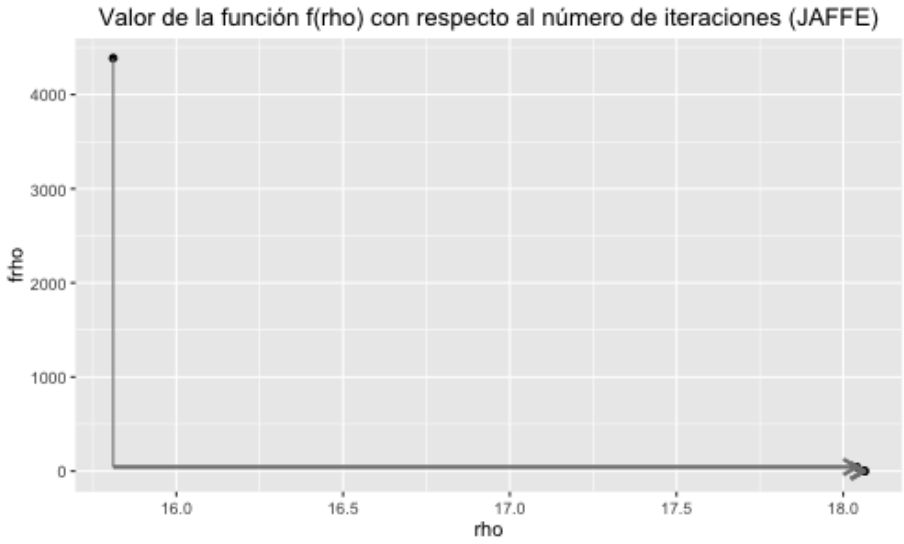


Figura 5.10: Valores de ρ y $f(\rho)$ para las iteraciones (JAFFE).

Se puede ver que la convergencia cuadrática del método de Newton ayuda a que el método en pocas iteraciones alcance el óptimo. Si se observa en la tabla de arriba, en la tercer iteración $f(\rho)$ ya toma el valor de 0.0109, muy cercano a 0.

A continuación se muestra una gráfica equivalente a la figura de la subsección pasada. Esta gráfica muestra como se ven los datos en la iteración 1,2 y 4.

5.4.2. Comparación con otros métodos

De la misma forma que se comparan los métodos para el ejemplo pasado, se compararán en este caso. Lo único distinto que se realizará, será el espacio a proyectar. En este caso de proyectarán a 10, 13, 16, 19, 22, 25, 28, 31, 34, 37, 40, 43, 46 y 49 dimensiones. La siguiente figura contiene la tasa de reconocimiento conforme el número de componentes aumenta:

Se observa que el método de lda iterativo no tiene ningún error de clasificación para espacios de proyección menor a 40 dimensiones, reduciéndose en espacios de proyección con dimensión más alta. Esto puede deberse en parte a que las últimas componentes son las menos discriminadoras, pero el método de k-vecinos más cercanos pondera igual a todas las componentes. Una posible modifica-

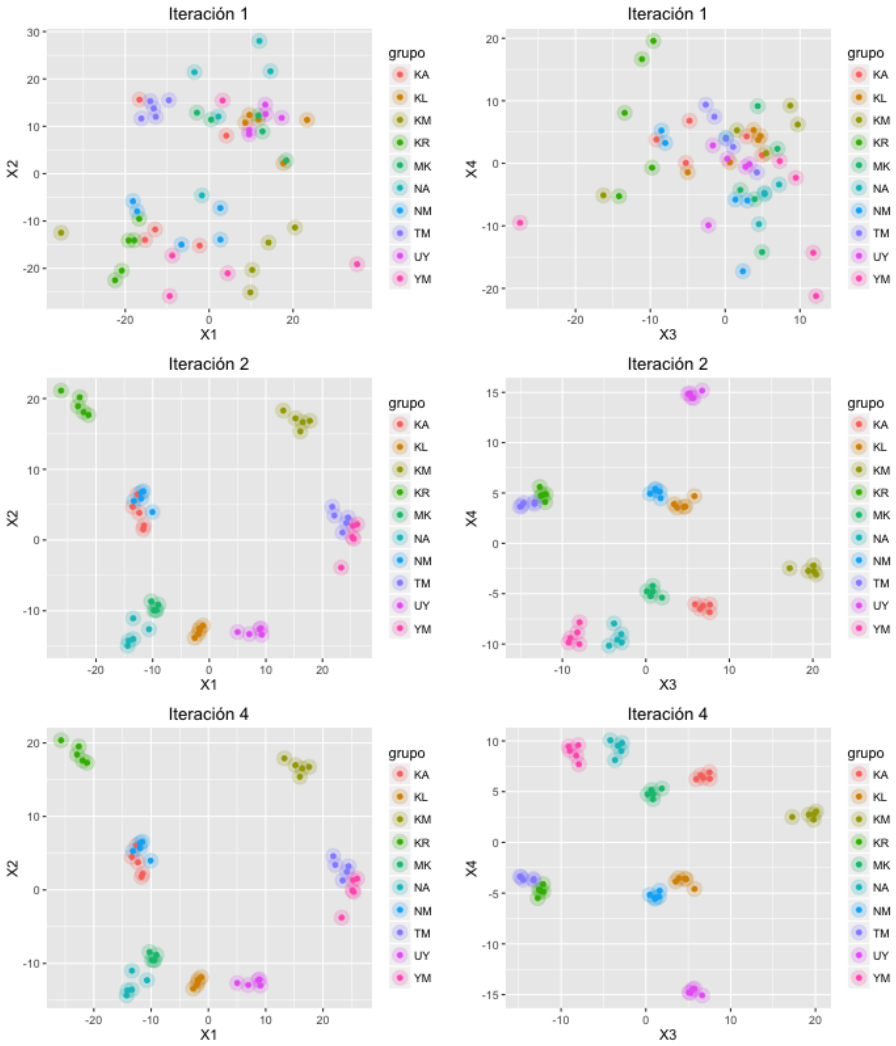


Figura 5.11: Individuos del conjunto de entrenamiento por iteración (JAFFE).

ción que se puede realizar, es ponderar cada componente de acuerdo al poder discriminativo del correspondiente eigenvector.

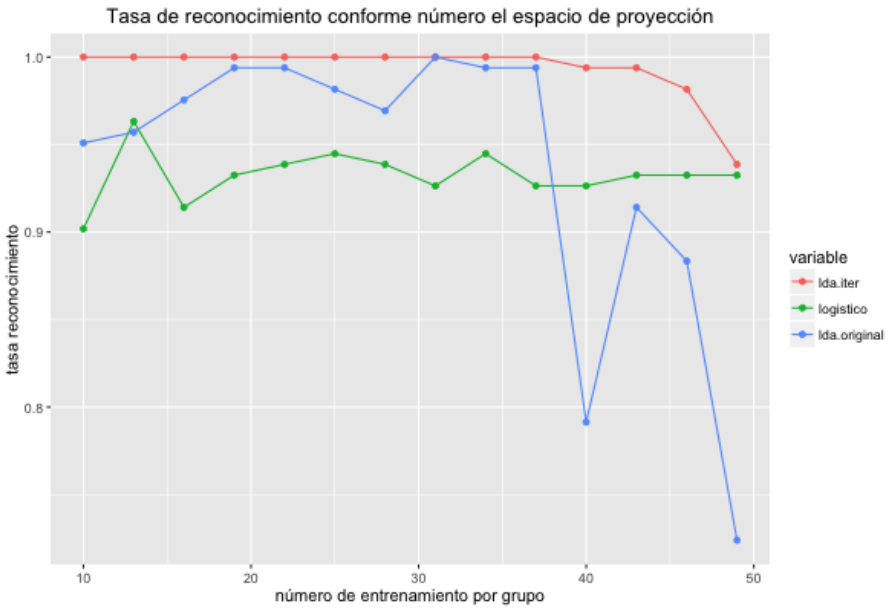


Figura 5.12: Comportamiento de los 3 métodos comparados (JAFFE).

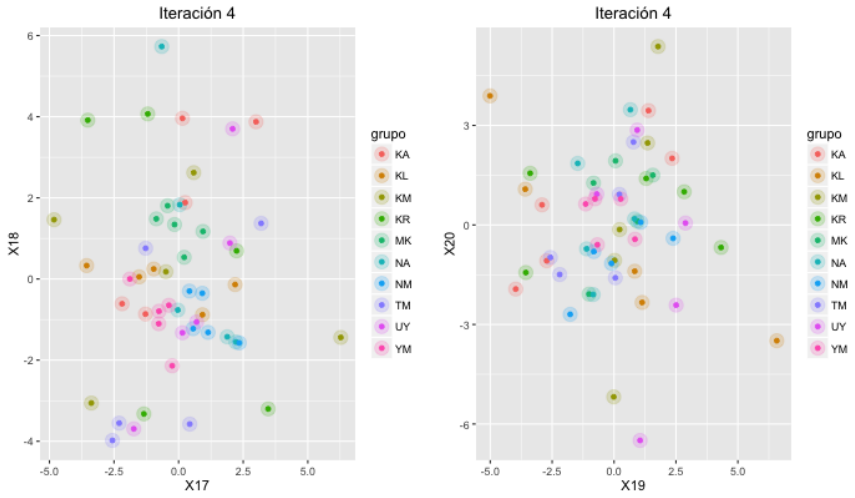


Figura 5.13: Comparación de los métodos en la componente 17,18,19 y 20 (JAFFE).

5.4.3. Tiempo de ejecución

A continuación, se comparan los tiempos de ejecución de cada método. Para compararlos justamente, se tomaron 3 fases distintas y se comparó solamente el tiempo del modelo.

- 1) (PCA) Tiempo para calcular los componentes principales del conjunto de entrenamiento
- 2) (Proyectar) Tiempo para calcular la proyección del conjunto de test
- 3) (Modelo) Tiempo necesario para hacer las operaciones de cada método

PCA(s)	Proyectar(s)
4.666	4.801

Comp	lda.iter	logístico	lda.orig	Comp	lda.iter	logístico	lda.orig
10	0.0352	0.0098	0.0068	31	0.0312	0.0436	0.0136
13	0.0324	0.0146	0.0074	34	0.0314	0.0176	0.0134
16	0.0378	0.018	0.0082	37	0.0314	0.0224	0.0144
19	0.031	0.0114	0.0104	40	0.0312	0.0266	0.0152
22	0.0308	0.0128	0.0112	43	0.0294	0.0248	0.0164
25	0.0326	0.0136	0.0102	46	0.03	0.0228	0.0188
28	0.0318	0.0158	0.0112	49	0.0204	0.0594	0.0176

El tiempo está en segundos (s).

Para cada iteración del método de Newton-Lanczos, se calcularon todos los eigenvalores ya que al no calcular todos, solo se tendrá una aproximación a sus valores y sus eigenvectores. Por este motivo, se decidió sacrificar tiempo de cómputo por precisión.

Capítulo 6

Conclusión

En esta tesis se analizó el desempeño del discriminante lineal de Fisher; con el cual, se obtuvieron resultados muy similares a los otros dos métodos con los que se comparó. En términos de tasa de reconocimiento fue el mejor método, pero en tiempo de cómputo, el análisis discriminante original tuvo un mejor desempeño. El método resulta interesante para aplicaciones prácticas, ya que no hace ningún supuesto de los datos, por lo que es una buena opción en caso que los datos no provengan de una distribución normal.

Contrario a lo que se pensaba anteriormente, el análisis discriminante de Fisher, convertido en un problema escalar, se realiza en un tiempo equiparable a otros modelos de clasificación lineal. Este resultado ya se había observado en distintos textos [9] y [10], pero en esta ocasión se realizó una implementación eficiente con las funciones de LAPACK.

El trabajo realizado tiene muchas mejoras que hacer, ya que está diseñado para un problema muy específico, pero el cociente de trazas es un problema muy utilizado en estadística por lo que explorar otras opciones es recomendable. Hay distintos métodos de triagonalización y reortogonalización, asi como distintas técnicas para encontrar los eigenvalores de la matriz original. Por estos motivos, se pueden recomendar ciertas áreas de estudio para el tema.

Para la fase de tridiagonalización, el método presentado es eficiente para el caso de matrices ralas. Si la matriz en cuestion es densa, entonces los textos

recomiendan usar las transformaciones Householder o las rotaciones de Givens. En esta tesis se realiza una ortogonalización completa, pero el texto de Demmel [2] presenta otras aproximaciones como la ortogonalización selectiva.

Para encontrar los eigenvalores y eigenvectores de la matriz tridiagonal, pueden explorarse otras opciones además de la función DSTEV de la librería LAPACK, ya que la literatura menciona que aproximaciones como divide-and-conquer han presentado menores tiempos de cómputo. LAPACK tiene una implementación de este método para matrices tridiagonales (DSTEVD).

En la tesis no se exploró más acerca de la convergencia de las matrices tridiagonales parciales, por lo que se prefirió usar la tridiagonalización completa. Es reelevante al tema explorar a partir de que momento los eigenvalores se encuentran lo suficientemente cerca del valor original, para así poder trabajar sobre matrices de menor dimensión.

Apéndice A

Apéndice A: Optimización de $Tr(V^T AV)$

Sea $A \in \mathbb{R}^{nxn}$ una matriz simétrica cuya factorización espectral es:

$$\begin{aligned} A =& U^T \Lambda U = I_n \\ \Lambda =& diag(\lambda_{A_1}, ..., \lambda_{A_n}) \end{aligned}$$

donde $\lambda_{A_1} \geq \lambda_{A_2} \geq ... \geq \lambda_{A_n}$ son los valores propios de A y U una matriz ortogonal. En este apéndice se demostrará que:

$$\max_{\substack{V^T V = I \\ V \in \mathbb{R}^{nxp}}} Tr(V^T AV) = \lambda_{A_1} + \lambda_{A_2} + ... + \lambda_{A_p} \tag{A.1}$$

A.1. Problema relajado

Sean $\mathcal{U}_p$ y $\mathcal{V}_p$ dos conjuntos de matrices en $\mathbb{R}^{nxp}$ tales que:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_p =& \{V \in \mathbb{R}^{nxp} | V^T V = I_p\} \\ \mathcal{V}_p =& \{V \in \mathbb{R}^{nxp} | diag(V^T V) = I_p\} \end{aligned}$$

El conjunto $\mathcal{V}_p$ contiene a todas las matrices donde que cada columna tiene norma euclidiana igual a 1.

Lema A.1. *El conjunto $\mathcal{V}_p$ es compacto en $\mathbb{R}^{nxp}$*

Demostración. Por definición, si $V \in \mathcal{V}_p$ entonces $||V||_F = \sqrt{(}p)$. Más aún, $\mathcal{V}_p$ contiene todos sus puntos límite. □

Si se relaja el problema original como:

$$\max_{V \in \mathcal{V}_p} Tr(V^TAV) \tag{A.2}$$

Como $\mathcal{V}_p$ es un conjunto compacto, la función continúa $Tr(V^TAV)$ alcanza su valor máximo (o mínimo) en este conjunto. Ahora, como $\mathcal{U}_p \subset \mathcal{V}_p$, se tiene inmediatamente la desigualdad:

$$\max_{V \in \mathcal{U}_p} Tr(V^TAV) \leq \max_{V \in \mathcal{V}_p} Tr(V^TAV) \tag{A.3}$$

Por lo tanto, se se procede a establecer el siguiente resultado:

Teorema A.1.

$$\max_{V \in \mathcal{V}_p} Tr(V^TAV) = \lambda_{A_1} + \lambda_{A_2} + ... + \lambda_{A_p}$$

Demostración. Para $V \in \mathcal{V}_p$ con $V = (v_1 \ v_2 \ ... \ v_p)$ y v_j la j-ésima columna de V. Se define el vector:

$$\mathbf{v} = (v_1^T \ v_2^T \ ... \ v_p^T)^T \ \in \ \mathbb{R}^{np}$$

o lo que es equivalente:

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_p \end{pmatrix}$$

Entonces la $Tr(V^TAV) = v_1^TAv_1 + v_2^TAv_2 + ... + v_p^TAv_p$ y el problema A.2 puede ser formulado como sigue:

$$\max_{\substack{\mathbf{v}^T\mathbb{B}_j\mathbf{v}=1 \\ j=1,...,p}} \mathbf{v}^T\mathbb{A}\mathbf{v} \tag{A.4}$$

con las matrices $\mathbb{A}$ y $\mathbb{B}_j$:

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} A & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & A & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & A & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & A \end{pmatrix}$$

$$\mathbb{B}_j = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & I_n & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

En ambas matrices hay p bloques en los renglones y p bloques en las columnas. Para $\mathbb{B}_j$ el bloque (j, j) es I_n y todos los demás son matrices cero. De esta manera, la función lagrangiana asociada al problema es:

$$\mathcal{L}_j(\mathbf{v}, \eta) = \mathbf{v}^T \mathbb{A}\mathbf{v} - \sum_{j=1}^{p} (\eta_j(\mathbf{v}^T \mathbb{B}_j \mathbf{v} - 1))$$

Las condiciones de primer orden para la solución óptima son (considerando que A es simétrica:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{v}} \mathcal{L}(\mathbf{v}, \eta) = &\quad 2\mathbb{A}\mathbf{v} - 2\sum_{j=1}^{p} (\eta_j(\mathbf{v}^T \mathbb{B}_j \mathbf{v})) = \quad 0 \\ \nabla_{\eta_j} \mathcal{L}(\mathbf{v}, \eta) = &\quad \mathbf{v}^T \mathbb{B}_j \mathbf{v} = 1 \quad con \quad j = 1, ..., p \end{aligned} \tag{A.5}$$

De la primera ecuación de A.5, se tiene que:

$$\left(\mathbb{A} - \sum_{j=1}^{p} \eta_j \mathbb{B}_j \right) v = 0$$

Donde la matriz $(\mathbb{A} - \sum_{j=1}^{p} \eta_j \mathbb{B}_j)$ es diagonal a bloques. De hecho, el bloque (j, j) es:

$$(A - \eta_j I_n)v_j = 0 \quad \Rightarrow \quad Av_j = \eta_j v_j$$

Entonces, η_j debe ser un eigenvalor de A y v_j su correspondiente eigenvector. Tomando de nuevo la ecuación de arriba, y multiplicándola por v^T se obtiene:

$$v^T \mathbb{A} v = \sum_{j=1}^{p} (\eta_j)(v^T \mathbb{B}_j v)$$

Ahora, usando la segunda ecuación de A.5, se tiene que:

$$v^T \mathbb{A} v = \sum_{j=1}^{p} \eta_j$$

Por lo tanto, con el fin de maximizar la función $v^T \mathbb{A} v$ en $\mathcal{V}_p$, se deben escoger los primeros p eigenvalores de la matriz A. Esto es:

$$\eta_j = \lambda_{A_j}, \qquad j = 1, ..., p$$

□

Ahora, se tienen todas las piezas para demostrar el resultado principal.

Teorema A.2.

$$\max_{\substack{V^T V = I_p \\ V \in \mathbb{R}^{nxp}}} Tr(V^T AV) = \lambda_{A_1} + \lambda_{A_2} + ... + \lambda_{A_p}$$

Demostración. Se ha mostrado que:

$$\max_{V \in \mathcal{U}_p} Tr(V^T AV) \leq \lambda_{A_1} + \lambda_{A_2} + ... + \lambda_{A_p}$$

□

Considerando la matrix $U \in \mathbb{R}^{nxn}$ de la factorización espectral de A, tal que $U = (u_1 \ u_2 \ ... \ u_n)$. Tomando las primeras p columnas de U se define U^*:

$$\begin{aligned} U^* &= (u_1 \ u_2 \ ... \ u_p) \quad con \quad U^* \in \mathcal{U}_p \quad y \\ Tr(U^* AU) &= \lambda_{A_1} + \lambda_{A_2} + ... + \lambda_{A_p} \end{aligned}$$

A.2. Observaciones finales

Se toman los resultados de la sección anterior para hacer las siguientes observaciones:

Observacion A.1. *Se puede extender el último teorema, usando el mismo conjunto $\mathcal{V}_p$ y cambiando la maximización a minimización para obtener que:*

$$\min_{V \in \mathcal{U}_p} Tr(V^T AV) \leq \lambda_{A_n} + \lambda_{A_{n-1}} + ... + \lambda_{A_{n-(p-1)}} \tag{A.6}$$

Observacion A.2. *Cuando $p = 1$, se pueden obtener las bien conocidas propiedades del cociente de Raleigh:*

$$\begin{aligned} \left(\min_{v^v v=1} v^T Av\right) &= \lambda_{A_n} \\ \left(\max_{v^v v=1} v^T Av\right) &= \lambda_{A_1} \end{aligned} \tag{A.7}$$

Apéndice B

Apéndice B: Codigos en R

B.1. Experimentos numéricos

B.1.1. 01_*Prueba*20*comp*

```
library(ProjectTemplate)
reload.project()

# Jaffe.20 & Mnist.20  are 5 element lists:
# 1) iterative model
# 2) data frame with \rho, f\rho values
# 3) projection matrix V
# 4) test error
# 5) knn model

Jaffe.20 <- prueba.20comp(JAFFE.train, JAFFE.test, "JAFFE")
Mnist.20 <- prueba.20comp(MNIST.train, MNIST.test, "MNIST")

Jaffe.20$modelo.iterativo
Mnist.20$modelo.iterativo
```

B.1.2. 02_*Models_comparisons*

```
# 1) Data y proyeccion size ----------------------------------
```

```
library(ProjectTemplate)
reload.project()

numComp.Jaffe <- c(10,13,16,19,22,25,28,31,
                   34,37,40,43,46,49)
numComp.Mnist <- c(2,5,10,15,20,40,60,80,
                   100,120,140,160,180,193)

comp.error.MNIST<-comparacion.modelos(train.p = MNIST.train,
                                      test.p = MNIST.test,
                                      dataset = "MNIST",
                                      numComp = numComp.Mnist,
                                      fortran = FALSE)

comp.error.JAFFE<-comparacion.modelos(train.p = JAFFE.train,
                                      test.p = JAFFE.test,
                                      dataset = "JAFFE",
                                      numComp = numComp.Jaffe,
                                      fortran = FALSE)
# 2) Graphs ------------------------------------------------------

graficar.comparacion(datos = comp.error.MNIST,
                     numComp = numComp.Mnist,
                     label = "MNIST")

graficar.comparacion(datos = comp.error.JAFFE,
                     numComp = numComp.Jaffe,
                     label = "JAFFE")
```

B.1.3. 03_*Profiling*

```
# 1) Data y proyeccion size --------------------------------------
library(ProjectTemplate)
reload.project()

# 1) Componentes -------------------------------------------------
numComp.Jaffe <- c(10,13,16,19,22,25,28,31,
                   34,37,40,43,46,49)
```

```
numComp.Mnist <- c(2,5,10,15,20,40,60,80,
                   100,120,140,160,180,193)
# 2) Profiling ------------------------------------------
prof.Mnist <- prolifiling.model(train.p = MNIST.train,
                                test.p = MNIST.test,
                                dataset = "MNIST",
                                numComp = numComp.Mnist)
prof.Jaffe <- prolifiling.model(train.p = JAFFE.train,
                                test.p = JAFFE.test,
                                dataset = "JAFFE",
                                numComp = numComp.Jaffe)

# 3) Graphs ---------------------------------------------
graficar.profiling(times.profiling = prof.Mnist,
                   numComp = numComp.Mnist,
                   dataset = "MNIST")
graficar.profiling(times.profiling = prof.Jaffe,
                   numComp = numComp.Jaffe,
                   dataset = "JAFFE")
```

B.2. Funciones

B.2.1. *load_libraries*

```
# 1) Load libraries -------------------------------------
set.seed(12345)
library(plyr) # Tools for split, applying and combine data
library(dplyr) # package of grammar of data manipulation
library(tidyr) # package to efficiently "tidy" data
library(FactoMineR) # Package for multivariate analysis
library(ggplot2) # Graphing package "Grammar of Graphics"
library(gridExtra) # Package to work with grid graphics
library(class) # Functions for classification, including knn
library(nnet) # Software for multinomial linear models
library(MASS) # "Applied Statistics with S"
```

```
# 1) Fisher eficiente ----------------------------------
lda.iter.ef <- function (test.p,
                         train.p,
                         espacio.proy,
                         prior = proportions,
                         tol = 1e-10) {

  # Prepare matrix of data
  x <- train.p %>% dplyr::select(-grupo)
  x <- as.matrix(x)

  # Get dimensions
  n <- nrow(x)
  p <- ncol(x)

  # Get number of groups and the levels
  g <- as.factor(train.p$grupo)
  lev <- lev1 <- levels(g)

  # Get the number of images per class
  counts <- as.vector(table(g))
  proportions <- counts/n
  ng <- length(proportions)
  names(prior) <- names(counts) <- lev1

  # Group means and total mean
  group.means <- tapply(c(x), list(rep(g, p), col(x)), mean)
  all.means <- as.matrix(colMeans(x)) %>% t()

  # Scatter Matrices
  #Intra class
  B <- t(x - group.means[g, ]) %*%(x - group.means[g, ])
  # Between class
  A <- (t(group.means)-matrix(rep(all.means,10),ncol=10))%*%
    diag(counts) %*%
    t(t(group.means)-matrix(rep(all.means,10),ncol=10))
```

```
# Initialization
rhoAnt = -1000000
iter=1
dimension = espacio.proy
# rho = (cota.inf + cota.sup)/2
rho = 0
frho = sum(eigen(A-rho*B)$values[1:dimension])
V = eigen(A-rhoAnt*B)$vectors[,(1:dimension)]

# list of results
a=list()
a[[1]] <- list(iter = 1, rho = rho, frho = frho, V = V)

# Iterative method (use of efficient irlba method)
while(iter < 50 & abs(rho-rhoAnt)>tol){
  print(paste("iteracion: ",as.character(iter)))
  rhoAnt = rho
  iter=iter+1
  V = eigen(A-rhoAnt*B)$vectors[,(1:dimension)] # Lanczos
  rho = sum(diag(t(V) %*%A %*%V)) /
  sum(diag(t(V) %*%B %*%V))
  frho = sum(eigen(A-rho*B)$values[1:dimension])
  a[[iter]] <- list(iter = iter, rho = rho,
                    frho = frho, V = V)
}

# Getting the projection matrix
scaling <- V
dimnames(group.means)[[2L]] <- colnames(x)
cl <- match.call()
cl[[1L]] <- as.name("lda.iter")
structure(list(iteraciones = a,
               prior = prior,
               counts = counts,
               means = group.means,
               scaling = scaling,
```

```
                    lev = lev,
                    N = n,
                    call = cl,
                    class = "lda.iter"))
}

# 2) Fisher para pruebas ----------------------------------
lda.iter <- function (test.p,
                      train.p,
                      espacio.proy,
                      prior = proportions,
                      tol = 1e-10) {

  # Prepare matrix of data
  x <- train.p %>% dplyr::select(-grupo) %>% as.matrix()

  # Get dimensions
  n <- nrow(x)
  p <- ncol(x)

  # Get number of groups and the levels
  g <- as.factor(train.p$grupo)
  lev <- lev1 <- levels(g)

  # Get the number of images per class
  counts <- as.vector(table(g))
  proportions <- counts/n
  ng <- length(proportions)
  names(prior) <- names(counts) <- lev1

  # Group means and total mean
  group.means <- tapply(c(x), list(rep(g, p), col(x)), mean)
  all.means <- as.matrix(colMeans(x)) %>% t()

  # Scatter Matrices
  #Intra class
  B <- t(x - group.means[g, ]) %*%(x - group.means[g, ])
```

```
  # Between class
  A <- (t(group.means)-matrix(rep(all.means,10),ncol=10))%*%
    diag(counts) %*%
    t(t(group.means)-matrix(rep(all.means,10),ncol=10))

  # [not run] Intra class + Between class = Total variance
  diag(A+B)
  diag(49*(as.matrix(x) %%cov))

  # [not run] EigenValues Time
  (eigen(B))$values
  (eigen(A))$values

  # [not run] Boundaries
  cota.inf <- sum((eigen(A))$values[1:espacio.proy])/
    sum((eigen(B))$values[1:espacio.proy])
  cota.sup <- sum((eigen(A))$values[1:espacio.proy])/
sum((eigen(B))$values[(dim(A)[1]+1-espacio.proy):dim(A)[1]])

  # Initialization
  rhoAnt = -1000000
  iter=1
  dimension = espacio.proy
  rho = (cota.inf + cota.sup)/2

  frho = sum(eigen(A-rho*B)$values[1:dimension])
  V = eigen(A-rhoAnt*B)$vectors[,(1:dimension)]

  # list of results
  a=list()
  a[[1]] <- list(iter = 1, rho = rho, frho = frho, V = V)

  # Iterative method (use of efficient irlba method)
  while(iter < 50 & abs(rho-rhoAnt)>tol){
    print(paste("iteracion: ",as.character(iter)))
    rhoAnt = rho
    iter=iter+1
```

```
    V = eigen(A-rhoAnt*B)$vectors[,(1:dimension)]
rho = sum(diag(t(V) %*% A %*% V)) /sum(diag(t(V) %*% B %*% V))
    frho = sum(eigen(A-rho*B)$values[1:dimension])
a[[iter]] <-list(iter = iter, rho = rho, frho = frho, V = V)
  }

  # Getting the projection matrix
  scaling <- V
  dimnames(group.means)[[2L]] <- colnames(x)
  cl <- match.call()
  cl[[1L]] <- as.name("lda.iter")
  structure(list(iteraciones = a,
                 prior = prior,
                 counts = counts,
                 means = group.means,
                 scaling = scaling,
                 lev = lev,
                 N = n,
                 call = cl,
                 cota.inf = cota.inf,
                 cota.sup = cota.sup,
                 class = "lda.iter"))
}

# 3) LDA original ------------------------------------------
lda.original <- function (x,
                          grouping,
                          prior = proportions,
                          tol = 1e-04,
                          nu = 5) {

  # Prepare matrix of data
  x <- as.matrix(x)
  n <- nrow(x)

  # Get dimensions
  p <- ncol(x)
```

```
g <- as.factor(grouping)

# Get number of groups and the levels
lev <- lev1 <- levels(g)
counts <- as.vector(table(g))

# Get the number of images per class
proportions <- counts/n
ng <- length(proportions)
names(prior) <- names(counts) <- lev1

# Group means
group.means <- tapply(c(x), list(rep(g, p), col(x)), mean)
f1 <- sqrt(diag(var(x - group.means[g, ])))
scaling <- diag(1/f1, , p)

# Calculate and project
fac <- 1/(n - ng)
X <- sqrt(fac) * (x - group.means[g, ]) %*% scaling
X.s <- svd(X, nu = 0L)
rank <- sum(X.s$d > tol)
scaling <- scaling %*% X.s$v[, 1L:rank] %*%
  diag(1/X.s$d[1L:rank], , rank)
xbar <- colSums(prior %*% group.means)
fac <-1/(ng - 1)
X <- sqrt((n * prior) * fac) * scale(group.means,
      center = xbar, scale = FALSE) %*% scaling
X.s <- svd(X, nu = 0L)
rank <- sum(X.s$d > tol * X.s$d[1L])
scaling <- scaling %*% X.s$v[, 1L:rank]

# Export
dimnames(scaling) <- list(colnames(x), paste("LD",
        1L:rank, sep = ""))
dimnames(group.means)[[2L]] <- colnames(x)
cl <- match.call()
cl[[1L]] <- as.name("lda")
```

```
  structure(list(prior = prior, counts = counts,
                 means = group.means,
                 scaling = scaling, lev = lev,
                 svd = X.s$d[1L:rank], N = n,
                 call = cl), class = "lda")
}

# 4) Lanczos Fortran ----------------------------------
# Give r0, A
lanczos.iter <- function(A){
  Dim = dim(A)[2]
  r0 = matrix(rep(0,Dim), ncol = 1)
  for(i in 1:Dim){
    r0[i] = runif(1, 0, 1)
  }
r0 = r0 / sqrt(sum(r0^2))
r = list()
b = list()
a = list()
q = list()

q[[1]] = 0 # q0
r[[1]] = r0 #r0
b[[1]] = sqrt(sum(r[[1]]^2)) # b1
q[[2]] = as.matrix(r[[1]]/b[[1]], ncol =D) #q1
a[[1]] = t(q[[2]]) %*%A %*%q[[2]] #a1
q[[1]]
j <- 2
q = cbind(q[[1]], q[[2]])
while(b[[j-1]] > .0000001 | j < Dim+1){
  z = A %*%q[,j]
  z = z - q %*%(t(q) %*%z)
  z = z - q %*%(t(q) %*%z)
  b[[j]] = sqrt(sum(z^2))
  q.temp = z/b[[j]]
  q <- cbind(q, q.temp)
  a[[j]] = t(q[,j+1]) %*%A %*%q[,j+1]
```

```
  j = j+1
  print(j)
}

dyn.load("/usr/lib/liblapack.dylib")

Jobz <- as.character('V')#Get The eigenval and Eigenvector
N <- as.integer(Dim)#Matrix Dimension
D <- unlist(a)[1:Dim]#Diagonal
E <- unlist(b)[2:(Dim)]#Upper (and lower) diagonal
Z <- array(0.0,N*N)#storage for eigenvectors
Ldz <- N#Leading dimension of Z (in our case number of rows)
Work <- array(0.0,2*N)#Storage for processing
info <- as.integer(0)#Info flag

res<-.Fortran("dstev", Jobz, N, D, E, Z, Ldz, Work, info)

evalues <- res[[3]]
evectors <- matrix(res[[5]],N,N)
list(evalues, evectors)
}

# 5) Fisher eficiente ----------------------------------
lda.iter.fortran<- function (test.p = test.p,
                             train.p = train.p,
                             espacio.proy,
                             prior = proportions,
                             tol = 1e-10) {

  # Prepare matrix of data
  x <- train.p %>% dplyr::select(-grupo)
  x <- as.matrix(x)

  # Get dimensions
  n <- nrow(x)
  p <- ncol(x)
```

```
# Get number of groups and the levels
g <- as.factor(train.p$grupo)
lev <- lev1 <- levels(g)

# Get the number of images per class
counts <- as.vector(table(g))
proportions <- counts/n
ng <- length(proportions)
names(prior) <- names(counts) <- lev1

# Group means and total mean
group.means <- tapply(c(x), list(rep(g, p), col(x)), mean)
all.means <- as.matrix(colMeans(x)) %*% t()

# Scatter Matrices
#Intra class
B <- t(x - group.means[g, ]) %*%(x - group.means[g, ])
# Between class
A <- (t(group.means)-matrix(rep(all.means,10),ncol=10))%*%
  diag(counts) %*%
  t(t(group.means)-matrix(rep(all.means,10),ncol=10))

# Initialization
rhoAnt = -1000000
iter=1
dimension = espacio.proy
# rho = (cota.inf + cota.sup)/2
rho = 0
frho = sum(eigen(A-rho*B)$values[1:dimension])
V = eigen(A-rhoAnt*B)$vectors[,(1:dimension)]

# list of results
a=list()
a[[1]] <- list(iter = 1, rho = rho, frho = frho, V = V)

# Iterative method (use of efficient irlba method)
while(iter < 50 & abs(rho-rhoAnt)>tol){
```

```
    print(paste("iteracion: ",as.character(iter)))
    rhoAnt = rho
    iter=iter+1

  V = lanczos.iter(A-rhoAnt*B)[[2]][,(1:dimension)]#Lanczos
    rho = sum(diag(t(V) %*%A %*%V)) /
      sum(diag(t(V) %*%B %*%V))
    frho = sum(lanczos.iter(A-rhoAnt*B)[[1]][1:dimension])
    a[[iter]] <- list(iter = iter, rho = rho,
                      frho = frho, V = V)
  }

  # Getting the projection matrix
  scaling <- V
  dimnames(group.means)[[2L]] <- colnames(x)
  cl <- match.call()
  cl[[1L]] <- as.name("lda.iter")
  structure(list(iteraciones = a,
                 prior = prior,
                 counts = counts,
                 means = group.means,
                 scaling = scaling,
                 lev = lev,
                 N = n,
                 call = cl,
                 class = "lda.iter"))
}
```

B.2.2. *functions_comparison*

```
comparacion.modelos <- function(train.p, test.p,
                                dataset,numComp,
                                fortran = FALSE){
  # lda iterativo
  print(paste("==Corriendo el modelo con la base",dataset))

  lda.iter <- sapply(1:14, function(x){
    print(paste("Iteracion con: ",
```

```
                numComp[x],
                "componentes."))

  # Run model with different number of components
  if(fortran == FALSE){
  modelo.iterativo <- lda.iter.ef(train.p = train.p,
                                  test.p = test.p,
                                  espacio.proy = numComp[x])
  }else{
    modelo.iterativo <- lda.iter.fortran(train.p = train.p,
                                  test.p = test.p,
                                  espacio.proy = numComp[x])
  }
  # Data.frame with information of  (\rho and f(\rho))
  iter <- sapply(1:length(modelo.iterativo$iteraciones),
                 function(x){
        data.frame(modelo.iterativo$iteraciones[[x]]$rho,
                   modelo.iterativo$iteraciones[[x]]$frho)%>%
                setNames(c("rho", "frho")) %>% data.frame()
                  }) %>% t() %>% data.frame() %>%
    mutate(iter = 1:nrow(.),
           rho = unlist(rho),
           frho = unlist(frho))
  iter <- iter %>% data.frame() %>%
    dplyr::mutate(frho2 = c(iter$frho[2:nrow(.)],NA ),
                  rho2 = c(iter$rho[2:nrow(.)], NA))

  # Projected data into a 20-dimensional space
  V <- modelo.iterativo$iteraciones[[
    length(modelo.iterativo$iteraciones)]]$V

  train.proyectados <- data.frame(as.matrix(train.p %>%
                          dplyr::select(-grupo)) %*%V) %>%
    mutate(grupo = train.p$grupo)

  test.proyectados <- data.frame(as.matrix(test.p %>%
                          dplyr::select(-grupo)) %*%V) %>%
```

```
    mutate(grupo = test.p$grupo)

  # K-nn model

  print("Iniciando modelo knn")
modelo <- knn(train = train.proyectados[,c(1:numComp[x])],
              test = test.proyectados[, c(1:numComp[x])],
                cl = train.proyectados$grupo, k = 3)
  pred <- data.frame(original = test.proyectados$grupo,
                     predicho = modelo)

  pred <- pred %>% mutate(verdad = original != predicho)
  sum(pred$verdad)/nrow(pred)
})

modelo.logistico <- lapply(1:14, function(x){
  modelo <- multinom(grupo~.,
        data = train.p[,c(1:numComp[x], dim(train.p)[2])],
                     MaxNWts = 10000)
  predichos <- predict(modelo,
                       newdata = test.p[,c(1:numComp[x])])
  pred <- data.frame(original = test.p$grupo,
                     predicho = predichos)
  pred <- pred %>% mutate(verdad = original != predicho)
  sum(pred$verdad)/nrow(pred)
})

lda.original <- lapply(1:14, function(x){
  modelo<- lda(grupo ~ .,
               train.p[,c(1:numComp[x],
                          dim(train.p)[2])],
               prior = c(1,1,1,1,1,1,1,1,1,1)/10)
predichos <- predict(modelo, test.p[,1:numComp[x]])$class
  pred <- data.frame(original = test.p$grupo,
                     predicho = predichos)
  pred <- pred %>% mutate(verdad = original != predicho)
  sum(pred$verdad)/nrow(pred)
```

```
  })

  data.frame(lda.iter = unlist(lda.iter),
             logistico = unlist(modelo.logistico),
             lda.original = unlist(lda.original))
}

graficar.comparacion <- function(datos, numComp, label){
  plot1 <- datos %>%
    #write.table(sep = ';', pipe('pbcopy'), row.names= F)
    mutate(numComp = numComp) %>%
    gather(variable, value, lda.iter:lda.original) %>%
    ggplot(aes(x = numComp , y = 1-value,
      group = factor(variable), color = factor(variable))) +
    geom_point() + geom_line()+
    labs(title = "Tasa de reconocimiento conforme
          numero el espacio de proyeccion",
         x = "numero de entrenamiento por grupo",
         y="tasa reconocimiento")

  png(filename =paste(getwd(), "/graphs/Chapter4_comp_",
        label, ".png", sep =""), width = 600,  height = 400)
  grid.arrange(plot1, ncol =1)
  dev.off()
}
```

B.2.3. *functions_prueba20comp*

```
# funciones prueba 20 componentes

plot.comp <- function(V1, label, train.p, test.p){
  train.proyectados <- data.frame(as.matrix(train.p %>%
                            dplyr::select(-grupo)) %*%V1) %>%
    mutate(grupo = train.p$grupo)

  test.proyectados <- data.frame(as.matrix(test.p %>%
                            dplyr::select(-grupo)) %*%V1) %>%
    mutate(grupo = test.p$grupo)
```

```
  a1 = ggplot(train.proyectados) +
    geom_point(aes(x=X1, y=X2,
                   group = grupo, color = grupo),
               size=5, alpha = .2) +
    geom_point(aes(x=X1, y=X2,
                   group = grupo, color = grupo))+
    labs(title = label)
  a2 = ggplot(train.proyectados) +
    geom_point(aes(x=X3, y=X4,
                   group = grupo, color = grupo),
               size=5, alpha = .2) +
    geom_point(aes(x=X3, y=X4,
                   group = grupo, color = grupo))+
    labs(title = label)
  list(a1,a2)
}
plot.ult <- function(V1, label, train.p, test.p){
  train.proyectados <- data.frame(as.matrix(train.p %>%
                          dplyr::select(-grupo)) %*%V1) %>%
    mutate(grupo = train.p$grupo)

  test.proyectados <- data.frame(as.matrix(test.p %>%
                          dplyr::select(-grupo)) %*%V1) %>%
    mutate(grupo = test.p$grupo)
  a7 =  ggplot(train.proyectados) +
    geom_point(aes(x=X17, y=X18,
                   group = grupo, color = grupo),
               size=5, alpha = .2) +
    geom_point(aes(x=X17, y=X18,
                   group = grupo, color = grupo))+
    labs(title = label)

  a8 =  ggplot(train.proyectados) +
    geom_point(aes(x=X19, y=X20,
                   group = grupo, color = grupo),
               size=5, alpha = .2) +
```

```
    geom_point(aes(x=X19, y=X20,
                   group = grupo, color = grupo))+
    labs(title = label)
  list(a7,a8)
}
prueba.20comp <- function(train.p, test.p, dataset){
  # Iterative LDA, projected to a 20-dimentional space
  modelo.iterativo <- lda.iter(train.p = train.p,
                               test.p = test.p,
                               espacio.proy = 20)
  # Data.frame with information of (\rho and f(\rho))
  iter <- sapply(1:length(modelo.iterativo$iteraciones),
                 function(x){
          data.frame(modelo.iterativo$iteraciones[[x]]$rho,
                 modelo.iterativo$iteraciones[[x]]$frho)  %>%
                     setNames(c("rho",
                                "frho")) %>% data.frame()}) %>%
    t() %>% data.frame() %>%
    mutate(iter = 1:nrow(.),
           rho = unlist(rho),
           frho = unlist(frho))
  iter <- iter %>%
    dplyr::mutate(frho2 = c(iter$frho[2:nrow(.)],NA),
                  rho2 = c(iter$rho[2:nrow(.)], NA))

  # f(\rho) graph. It contains the iterations of the algorit
  plot <- iter %>% ggplot() +
    geom_point(aes(x = rho, y = frho)) +
    geom_segment(aes(x = rho, y = frho,
                     xend = rho, yend = frho2),
                 color = "gray50") +
    geom_segment(aes(x = rho, y = frho2,
                     xend = rho2, yend = frho2),
                 arrow = arrow(length = unit(.3, "cm")),
                 size = 1,
                 color = "gray50") +
    labs(title = paste("Valor de la funcion f(rho) con
```

```
␣␣␣␣␣␣respecto␣al␣numero␣de␣iteraciones␣", dataset,sep =""),
          ylab = "f(rho)",
          xlab = "rho")
  # Save the image into a *.png file
  png(paste(getwd(), "/graphs/Chapter4_iteraciones_",
      dataset, ".png", sep =""),width = 500, height = 500)
  grid.arrange(plot, ncol = 1)
  dev.off()

  # Projected data into a 20-dimensional space
  V <- modelo.iterativo$iteraciones[[
    length(modelo.iterativo$iteraciones)]]$V

  r1 <- 1
  r2 <- round(length(modelo.iterativo$iteraciones)/3*1)
  r3 <- round(length(modelo.iterativo$iteraciones))

  # iteration1
  V1 <- modelo.iterativo$iteraciones[[r1]]$V
  plot1 <- plot.comp(V1, paste("Iteracion␣",r1, sep=""),
                     train.p, test.p)

  # iteracion3
  V2 <- modelo.iterativo$iteraciones[[r2]]$V
  plot2 <- plot.comp(V2, paste("Iteracion␣",r2, sep=""),
                     train.p, test.p)

  # iteracion9
  V3 <- modelo.iterativo$iteraciones[[r3]]$V
  plot3 <- plot.comp(V3, paste("Iteracion␣",r3, sep=""),
                     train.p, test.p)

  png(paste(getwd(),"/graphs/Chapter4_ejemplo20componentes_",
        dataset, ".png", sep =""),width = 700, height = 800)
  grid.arrange(plot1[[1]],plot1[[2]],plot2[[1]],
               plot2[[2]],plot3[[1]],plot3[[2]],
               ncol = 2)
```

```
  dev.off()

  # last components
  V4 <- modelo.iterativo$iteraciones[[r3]]$V
  plot4 <- plot.ult(V4, "Ultimas componentes",
                    train.p, test.p)
  png(paste(getwd(),"/graphs/Chapter4_ultimasComponentes_",
        dataset, ".png", sep =""),height = 400, width = 700)
  grid.arrange(plot4[[1]],plot4[[2]], ncol = 2)
  dev.off()
  # knn model ------------------------------------------------
  V <- modelo.iterativo$iteraciones[[
    length(modelo.iterativo$iteraciones)]]$V

  train.proyectados <- data.frame(as.matrix(train.p %%
                              dplyr::select(-grupo)) %*%V) %%
    mutate(grupo = train.p$grupo)

  test.proyectados <- data.frame(as.matrix(test.p %%
                              dplyr::select(-grupo)) %*%V) %%
    mutate(grupo = test.p$grupo)

  train.proyectados %% head
  knn.model <- knn(train = train.proyectados[,c(1:20)],
                   test = test.proyectados[, c(1:20)],
                   cl = train.proyectados$grupo, k = 3)

  pp <- data.frame(original = test.proyectados$grupo,
                   predicho = knn.model)

  pp <- pp %% mutate(verdad = original != predicho)

  error <- sum(pp$verdad)/nrow(pp)
  list(modelo.iterativo=modelo.iterativo,iter = iter, V = V,
       error = error, knn.model = knn.model)
}
```

B.2.4. *functions_profiling*

```
prolifiling.model <- function(train.p, test.p,
                                    dataset,numComp){

print(paste("====Realizando profiling de la base",dataset))
lda.time <- lapply(1:14, function(x){
  print(paste("Iteracion con:",
              numComp[x], "componentes."))

  lda.iter <- sapply(1:5, function(y){
    system.time(modelo.iterativo <-
                  lda.iter.ef(train.p = train.p,
                              test.p = test.p,
                              espacio.proy = numComp[x]))
  }) %>% data.frame() %>% t() %>% data.frame() %>%
    dplyr::select(elapsed) %>%
    dplyr::summarise(mean = mean(elapsed))

  logistico <- sapply(1:5, function(y){
    system.time(modelo <- multinom(grupo~.,
          data = train.p[,c(1:numComp[x], dim(train.p)[2])],
                                   MaxNWts = 10000))
  }) %>% data.frame() %>% t() %>% data.frame() %>%
    dplyr::select(elapsed) %>%
    dplyr::summarise(mean = mean(elapsed))

  lda.original <- sapply(1:5, function(y){
    system.time(modelo <- lda(grupo ~ .,
                train.p[,c(1:numComp[x], dim(train.p)[2])],
                          prior = c(1,1,1,1,1,1,1,1,1,1)/10))
  }) %>% data.frame() %>% t() %>% data.frame() %>%
    dplyr::select(elapsed) %>%
    dplyr::summarise(mean = mean(elapsed))

  list(lda.iter, logistico, lda.original)
})
```

```
data.frame(unlist(lda.time)) %>%
  mutate(var = rep(c("lda.iter", "logis", "lda.orig"), 14),
         ID = rep(1:(nrow(.)/3), each = 3)) %>%
  setNames(c("time", "var", "ID")) %>%
  spread(var, time)
}


graficar.profiling <- function(times.profiling, numComp,
                               dataset){
plot1 <- times.profiling %>%
  mutate(numComp = numComp) %>%
  gather(variable, value, lda.iter:logis) %>%
  ggplot(aes(x = numComp , y = value,
             group = variable, color = variable)) +
  geom_point() + geom_line()+
  labs(title = "Tiempo de los modelos",
       x = "Espacio de proyeccion",
       y="Tiempo en (s)")
png(filename = paste(getwd(), "/graphs/Chapter4_profiling",
      dataset, ".png", sep =""), width = 600, height = 400)
grid.arrange(plot1, ncol = 1)
dev.off()
}
```

B.3. Preprocesamiento

B.3.1. *MNIST_munge*

```
# 1) Load libraries ------------------------------------------------
set.seed(12345)
library(plyr) # Tools for split, applying and combine data
library(dplyr) # package of grammar of data manipulation
library(tidyr) # package to efficiently "tidy" data
library(FactoMineR) # Package for multivariate analysis
library(ggplot2) # Graphing package "Grammar of Graphics"
library(gridExtra) # Package to work with grid graphics
```

```
# 1) Generate train and test from MNIST (run once) ----------
# darch::readMNIST("data/MNIST/")

# 2) Read MNIST data ----------------------------------------
# Original datasets
load("data/MNIST/train.RData")
load("data/MNIST/test.RData")

# Matrix with images in the rows and the variable in columns
numeros.ind.pix = rbind(data.frame(trainData,
                    grupo = factor(apply(trainLabels[,], 1,
                        function(x){ which(x == 1)-1 }))),
                    data.frame(testData,
                        grupo = factor(apply(testLabels[,], 1,
                        function(x){ which(x == 1)-1 })))) %%
  mutate(ID = 1:nrow(.))
base.mnist <- numeros.ind.pix
cache("base.mnist")
rm(testData, testLabels, trainData, trainLabels)

# 3) Train and test sets ------------------------------------
# Size of images per class
n.train <- 400

# Sample $n.train$ imager per class
train.id <- numeros.ind.pix %%
  group_by(grupo) %%
  sample_n(n.train) %%
  data.frame()

# Train and Test data.frames
train <- numeros.ind.pix[train.id$ID, ]
test <- numeros.ind.pix[-train.id$ID, ]

# Percentaje of images in train dataset
nrow(train)/(nrow(train)+nrow(test))
```

```
# 4) PCA ----------------------------------------------------------
# PCA of MNIST dataset (each row is an image)
# 193 colums contains ~95% of the total variance
system.time(pca.train <- PCA(train %>%
                               dplyr::select(-grupo, -ID),
                             graph = F,
                             scale.unit = F,
                             ncp = 193))

# Matrix of loadings: 784 rows, 193 columns
loadings <- sweep(pca.train$var$coord,2,  # 784 x 193
        sqrt(pca.train$eig[1:ncol(pca.train$var$coord),1]),
        FUN="/")

# Principal components
train.p <- pca.train$ind$coord %>% data.frame() %>%
  dplyr::mutate(grupo = train$grupo)

# [Revision] reconstuyendo primer componente
as.matrix(scale(train %>% dplyr::select(-grupo, -ID),
                center = apply(train %>%
                      dplyr::select(-grupo, -ID), 2,mean),
                scale = F)) %*%loadings[,1] %>% head

pca.train$ind$coord[,1] %>% head

# Projection of the test dataset with the train loadings
# (centered with mean of train dataset)
system.time(test.p <- as.matrix(scale(test %>%
            dplyr::select(-grupo, -ID), # 69,000 x 193

            center = apply(train %>%# centers of train
                    dplyr::select(-grupo, -ID), 2,mean),
                         scale = F)) %*%loadings %>%
              data.frame() %>%
              mutate(grupo = test$grupo))
```

```
dim(test.p)
dim(train.p)
MNIST.test <- test.p
MNIST.train <- train.p
cache("MNIST.test")
cache("MNIST.train")
```

B.3.2. *JAFFE_munge*

```
# 1) Load libraries ------------------------------------------
set.seed(12345)
library(tiff) # package that reads *.tiff images
library(tidyr) # package to efficiently "tidy" data
library(dplyr) # package of grammar of data manipulation
library(ProjectTemplate) # Template data analysis project
library(FactoMineR) # Package for multivariate analysis

# 2) Read databases ------------------------------------------
# Get the names of the files
files <- (Sys.glob("data/Jaffe/*.tiff"))

# Create an array that contains all the images paths
nombres.personas <- apply(as.matrix(files),1,function(x){
  gsub("data/Jaffe/","",x)
})

# Data.frame with info about each image (ID, name, class)
guia.personas.df <- data.frame(nombres.personas,
                               nombres.personas) %%
  separate(nombres.personas.1, c("persona",
                                 "postura",
                                 "ID",
                                 "extension")) %%
  dplyr::select(-extension,
                -ID) %%
  mutate(ID = 1:213,
         nombres.personas = as.character(nombres.personas),
         persona = factor(persona),
```

```
          postura = factor(postura))

# List of length 213 that contains an image in each element
lista.completa.imagenes <- lapply(files, function(x){
  imagen <- readTIFF(x)
  if(length(dim(imagen)) == 3){
    matrix <- as.vector(imagen[,,1])
  }else{
    matrix <- as.vector(imagen)
  }
})

# Data.frame, each column is an image
base.imagenes <- data.frame(lista.completa.imagenes)
names(base.imagenes) <- guia.personas.df$nombres.personas

# 2 matrices: In base.pix.ind.1, the columns are the images
#             In base.ind.pix.1, the rows are the images
base.pix.ind.1 <- data.frame(base.imagenes)
base.ind.pix.1 <- data.frame(t(base.imagenes)) %>%
  mutate(grupo = names(base.imagenes)) %>%
  separate(grupo, c("grupo",
                    "postura",
                    "ID",
                    "extension")) %>%
  dplyr::select(-postura,
                -ID,
                -extension) %>%
  mutate(ID = 1:nrow(.))

# 3) Explorar bases de datos ----------------------------------
# sizes of the matrices
dim(base.pix.ind.1) # 65,536 rows and 213 columns
dim(base.ind.pix.1) # 213 rows and 65,536 columns

# save in cache the data.base
base.jaffe <- base.ind.pix.1
```

```
cache("base.jaffe")

# 4) Train and test ------------------------------------------
# Size of images per class
n.train <- 5

# Sample $n.train$ imager per class
train.id <- base.jaffe %>%
  group_by(grupo) %>%
  sample_n(n.train) %>%
  data.frame()

# Train and Test data.frames
train <- base.jaffe[train.id$ID, ]
test <- base.jaffe[-train.id$ID, ]

# Percentaje of images in train dataset
nrow(train)/(nrow(train)+nrow(test))

# 5) PCA -----------------------------------------------------

# PCA of JAFFE dataset (each row is an image)
# 52 colums contains ~95% of the total variance
system.time(pca.train <- PCA(train %>%
                               dplyr::select(-grupo, -ID),
                             graph = F,
                             scale.unit = F,
                             ncp = 49))

# Matrix of loadings: 65,536 rows, 49 columns
loadings <- sweep(pca.train$var$coord,2,
         sqrt(pca.train$eig[1:ncol(pca.train$var$coord),1]),
         FUN="/")

# Principal components
train.p <- pca.train$ind$coord %>% data.frame() %>%
  dplyr::mutate(grupo = train$grupo)
```

```
# [Revision] Reconstuyendo primer componente
as.matrix(scale(train %>% dplyr::select(-grupo, -ID),
                center = apply(train %>%
                          dplyr::select(-grupo, -ID), 2,mean),
                scale = F)) %*%loadings[,1] %>% head

pca.train$ind$coord[,1] %>% head

# Projection of the test dataset with the train loadings
# (centered with mean of train dataset)
system.time(test.p <- as.matrix(scale(test %>%
                     dplyr::select(-grupo, -ID),
                     center = apply(train %>%
                        dplyr::select(-grupo, -ID), 2,mean),
                     scale = F)) %*%loadings %>%
                data.frame() %>%
                mutate(grupo = test$grupo))

JAFFE.test <- test.p
JAFFE.train <- train.p
cache("JAFFE.test")
cache("JAFFE.train")

rm(list = ls())
```

Bibliografía

[1] Christopher M Bishop. *Pattern recognition and machine learning*. springer, 2006.

[2] J.W. Demmel. *Applied Numerical Linear Algebra*. Miscellaneous Bks. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1997.

[3] Richard O Duda, Peter E Hart, and David G Stork. *Pattern classification*. John Wiley & Sons, 2012.

[4] Ronald A Fisher. The use of multiple measurements in taxonomic problems. *Annals of eugenics*, 7(2):179–188, 1936.

[5] Keinosuke Fukunaga. *Introduction to statistical pattern recognition*. Academic press, 2013.

[6] Gene H Golub and Charles F Van Loan. *Matrix computations*, volume 3. JHU Press, 2012.

[7] Trevor Hastie, Robert Tibshirani, Jerome Friedman, T Hastie, J Friedman, and R Tibshirani. *The elements of statistical learning*, volume 2. Springer, 2009.

[8] Tom Michael Mitchell. *The discipline of machine learning*. Carnegie Mellon University, School of Computer Science, Machine Learning Department, 2006.

[9] Thanh T Ngo, Mohammed Bellalij, and Yousef Saad. The trace ratio optimization problem. *SIAM review*, 54(3):545–569, 2012.

[10] Huan Wang, Shuicheng Yan, Dong Xu, Xiaoou Tang, and Thomas Huang. Trace ratio vs. ratio trace for dimensionality reduction. In *Computer Vision and Pattern Recognition, 2007. CVPR'07. IEEE Conference on*, pages 1–8. IEEE, 2007.